

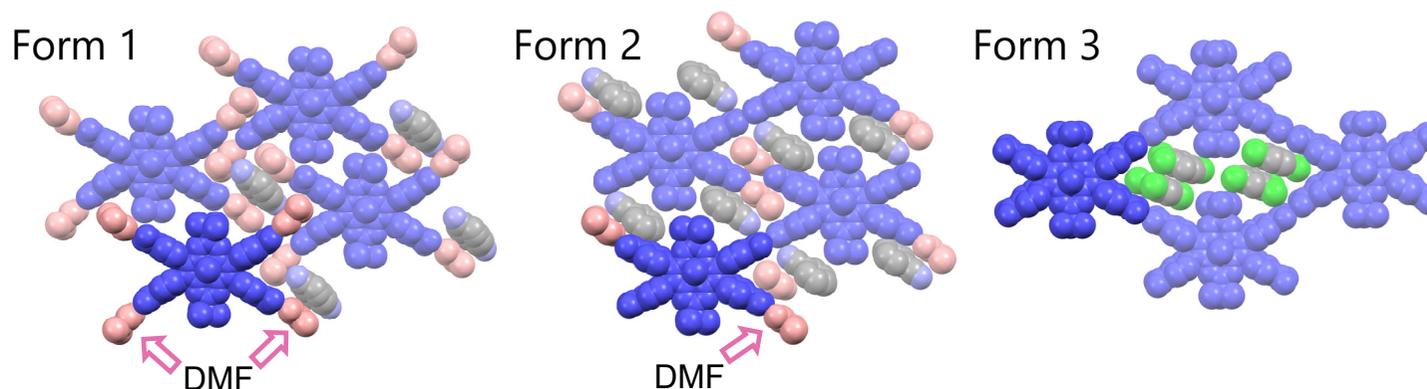
有機分子性結晶における分子間相互作用の解析

大阪大学大学院基礎工学研究科 桶谷 龍成

目的 有機分子の間に働く弱い分子間相互作用を理論計算によって定量化すること

内容 量子化学計算ソフトウェアGaussianを用いて、有機分子性結晶の構造データに基づき、分子間相互作用エネルギーを解析した。

結果 水素結合性有機フレームワーク（HOF）において水素結合による分子間相互作用を評価した。低温で結晶化を行ったときに得られる構造体では溶媒分子がカルボン酸と水素結合と形成し、HOFが得られない（下図 Form 1）。溶媒分子とカルボン酸との分子間相互作用の計算から、この構造体は低温でのみ存在することを示唆する結果を得た。



利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間：2000 時間 使用メモリ：200 GB