

両新媒性ジアリールエテン誘導体における分子会合体の挙動に対する理論的研究

筑波大学 計算科学研究センター 氏名 佐藤 竜馬

目的: 両新媒性ジアリールエテン誘導体の会合体の構造予測および挙動を明らかにする。

内容: 両新媒性ジアリールエテン誘導体に光を照射すると異なる会合体を作ることが示されている。本研究ではそれぞれの会合体の構造予測および挙動の違いを分子動力学(MD)計算と量子化学計算を用いて解析した。

結果: 各MD計算から得た構造に対してSAXSを計算した結果、それぞれ異なる位置にピークがあることがわかった。このことから、会合した際の隣り合うジアリールエテン同士のパッキングに違いがあることが、それぞれの会合体の挙動の違いを生じさせていることを明らかにした。

利用した計算機

ノード時間

使用メモリ

OCTOPUS

26.7時間

15GB