

有機分子含有リン酸カルシウムの電子・原子構造の計算解析

名古屋大学大学院工学研究科 氏名 松永克志

目的 リン酸八カルシウム結晶は、アパタイト層と水和層が層状に積層したリン酸カルシウム結晶である。この結晶の特性の一つが、水和層中への多様な有機分子の取込みである。しかし取り込まれた有機分子の配向やアパタイト層との結合状態には不明な点が多い。本研究ではDFT計算を用いて、鎖状ジカルボン酸分子イオンの固溶状態を解明することを目的とした。

内容 計算解析にはDFT計算を用いた。リン酸八カルシウム結晶の水和層に、マロン酸などの鎖状ジカルボン酸イオンを置換固溶させ、最安定構造を求めた。

結果 リン酸カルシウム中に置換固溶した、異なる分子長の鎖状ジカルボン酸分子について系統的に検討したところ、実験格子定数をよく再現することができた。ただし、従来実験結果に基づき類推された結晶構造モデルとは異なることが判明し、その起源が分子の立体構造に由来するものであることを明らかにした。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

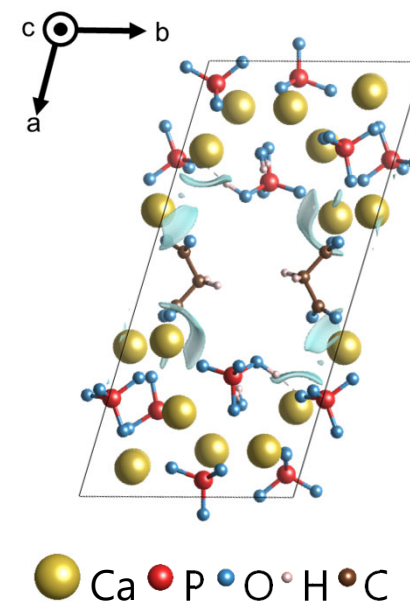


図 マロン酸含有リン酸八カルシウム結晶の最安定構造の計算結果