

分子性結晶中の弱い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

目的と目的

多くの有機結晶は分散力や弱い分極に基づく静電相互作用によってその結晶構造を形成している。この分子間相互作用を正確に見積り、結晶構造の成り立ちを理解するためには、大きな基底関数系を用いた量子化学計算が必要である。本研究は水素結合性有機構造体をはじめとする有機結晶中の分子間相互作用を計算し、定量的に分子間相互作用を理解することを目指した。

結果

ナフタレンとベンゾチアジアゾールを母骨格にもつカルボン酸から成る二成分水素結合性フレームワークが任意の割合で結晶構造を与えることを見出し、その積層分子間の分子間相互作用を計算し、異種間の積層構造がわずかに好ましい構造であることを示した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 1000 時間

使用メモリ 240 GB