

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 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。

内容 GaussianおよびQuantumESPRESSOを用いて、種々の結晶構造中における分子間相互作用および結晶の格子エネルギーを計算した。

結果 我々の見出したアキラル結晶からキラル結晶への構造転移現象が、熱力学的に準安定な相から安定な相への転移であ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 3000 時間
	使用メモリ 240 GB