

課題名 (タイトル) :

分子性結晶の低周波数振動モードに関する量子化学計算

利用者氏名 : 神原 大

所属 : 光量子工学研究領域 テラヘルツイメージング研究チーム

---

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

テラヘルツ分光法を用いて測定される有機分子結晶や小型の生体分子などの低振動モードはそれらの構造や機能との相関を明らかにする上で非常に重要な情報を与えることが知られている。テラヘルツスペクトル上に現れる試料由来の個別の低振動モードの帰属には、量子化学計算による理論的解釈が必要不可欠である。そこで、本研究課題では、結晶の周期境界条件を取り入れた DFT 計算ソフトウェアである CRYSTAL シリーズを導入し、様々な分子性結晶試料の帰属解明を行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

低振動モード解析に必要な利用環境の整備を行っている。具体的には CRYSTAL という DFT 計算ソフトの導入を実施している。

3. 今後の計画・展望

計算環境が整ったのち、順次分子性結晶の振動数計算を実施する。

4. 利用がなかった場合の理由

本課題は 2016 年 1 月末に審査終了されたものである。現在は計算環境を整えている段階であるため、実際の計算は行っていない。