

課題名 (タイトル) :

結晶中のハロゲン結合エネルギー計算

利用者氏名 : 山本 浩史

所属 : 和光研究所 基幹研究所 加藤分子物性研究室

-
- | | |
|--|--|
| <p>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
近年 Crystal Engineering の新しいツールとしてハロゲン結合が注目を集めている。既に実験系で得られた新しい結晶構造に基づき、ハロゲン結合のエネルギーを計算し、その特性を議論する。ハロゲン結合には静電引力が深く関与していると考えられているので、そのメカニズムを説明するには計算機による静電ポテンシャルの解析が欠かせない。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法
ガウシアン 05 により含ヨウ素分子表面の静電ポテンシャルを計算する。</p> <p>3. 結果
まだアカウントを取ったばかりで、使用法を習得中。</p> <p>4. まとめ
来年度以降に本格使用の予定。</p> <p>5. 今後の計画・展望
類似の分子をこれからどんどん合成していく予定なので、結晶構造が得られたものから計算をしていく。</p> <p>6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容
しばらく UNIX を使ってなかったのですが、まだこれから自分の PC に X サーバーをインストールするところです。</p> | <p>7. 利用研究成果が無かった場合の理由
まだ計算するところまでたどり着いていないため。</p> |
|--|--|

