

課題名 (タイトル) :

分子論的アプローチに基づいた分子性結晶における誘電物性の理論研究

利用者氏名 : 大滝 大樹

所属 : 杉田理論分子科学研究室

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

分子内に O-H...O 型の分子内水素移動部位を持つ 5-ブromo-9-ヒドロキシフェナレノン¹は、水素の同位体効果が誘電相転移の有無として観測されているが、これまでは定性的な説明に留まっていた。利用者は前年度までに、結晶中の周囲の分子による双極子モーメントの誘起効果を取り込み、さらに、プロトンの量子効果を経験項として取り入れた量子モンテカルロ法を開発した。これにより、任意の水素体・重水素体の混合率で相転移シミュレーションが可能になり、相図の定量的な説明に成功した。本課題では、上記成果の論文発表に至るまでの追加計算、および、他の水素結合性分子性結晶の研究のための計算を行う。

2. まとめ

本年度の利用は無い。

3. 利用がなかった場合の理由

上記成果は大規模な追加計算を行うことなく論文発表に至った。また、他の系に対する計算は個人所有の計算機で済ませられる程度の規模にとどまり、当該期間において RICC を用いた計算は行われなかった。

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Hiroki Otaki and Koji Ando, “Path Integral Monte Carlo Study of Hydrogen Tunneling Effect on Dielectric Properties of Molecular Crystal 5-Bromo-9-hydroxyphenalenone”, Chem. Phys., **446**, 118-126 (2015).