

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

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。
2. 具体的な利用内容、計算方法  
ガウシアンにより含ヨウ素分子表面の静電ポテンシャルや分子軌道を計算する。
3. 結果  
電子不足ヨウ素を複数含む分子とハロゲン化物イオンとの錯体について、X線構造解析から得られた座標データを元に分子軌道計算を行った。ハロゲン結合はヨウ素原子上に現れる $\sigma$ -hole という正電荷集中部位が原因となって形成されると言われているが、実際今回の計算でそのような静電ポテンシャルが形成されていることが明らかとなった。また、このような予想した結果の他に、ヨウ素とハロゲン化物イオンの間には p 結合が形成されていることも明らかとなった。
4. まとめ  
含ヨウ素分子によるハロゲン結合形成のメカニズムについて計算を行い、当初予想していた静電引力や $\sigma$ - $\sigma^*$ 結合の他に、 $\pi$  結合が関与していることが明らかとなった。
5. 今後の計画・展望  
今後は他の分子系に計算範囲を拡げる。
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  
現在はいくつかの孤立した錯体分子について計算を行ったが、こうした相互作用を元にネットワークを作った場合の電子状態については計算出来ていない。継続利用時は、超分子ネットワーク系の計算を行う予定。
7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由
8. 利用研究成果が無かった場合の理由  
現在論文執筆中