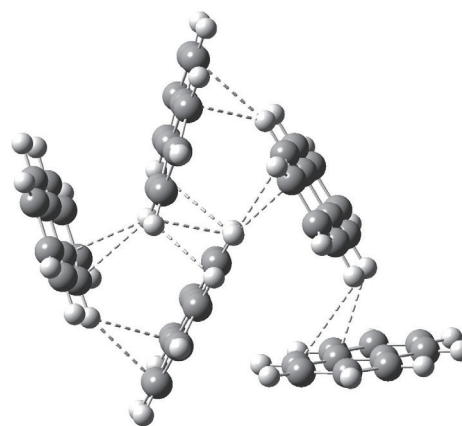


結晶成長のシミュレーションと結晶多形の解析・制御

研究の概要

計算機実験の進歩により多数の分子が扱えるようになりました。そこで我々の研究グループでは結晶を対象として計算機実験を行っています。化合物を扱っていく上で、結晶粒径や多形の制御は重要な事柄です。その鍵は結晶ができる初期段階にあると考え、10分子程度までのクラスターレベルでの計算を行い、どのように結晶が成長していくのかにアプローチできるようになりました。分子間相互作用には異方性があるため、結晶外形も様々です。シミュレーションでは1次元から2次元、3次元へと成長する過程もわかるようになってきました。現状では、分子間相互作用が比較的単純で、サイズの小さい分子に限られますが、シミュレーションにより多形形成の原因もわかってきました。

将来的には溶解度曲線などもシミュレーションできると思います。再結晶などの純度向上過程の溶媒選択にも、本研究は生きてくると思っています。



ナフタレン5分子での計算機シミュレーション

研究の特徴

近似精度の高い計算を行うことも可能ですが、それには莫大な計算コストが必要です。しかし典型的な相互作用をもつ種々の化合物での計算結果の蓄積をもとに、近似レベルを下げても正解に近づけるようになりました。その結果、多数の分子が存在する結晶を扱えるようになりました。現状では低周期元素からなる分子量200程度の分子からなる結晶であればシミュレーション可能です。

実用化が想定される分野

化学工業，製薬業

研究者からのメッセージ

合成対象の化合物や副生成物の結晶成長過程を理解しておく、化合物の精製や粒径・多形の制御に有用であると思います。

研究分野：有機化学，結晶化学，計算機シミュレーション

研究者の所属部局・職位・氏名：和歌山大学システム工学部 応用理工学領域・教授・奥野恒久

本件に関するお問い合わせ：liaison@ml.wakayama-u.ac.jp