

## 芳香族化合物 2 量体の相対配置の探索

(和歌山大院システム工<sup>1</sup>, 和歌山大システム工<sup>2</sup>, 量子化学探索研究所<sup>3</sup>, 東北大院理<sup>4</sup>)

○勝野 直也<sup>1</sup>, 高田谷 吉智<sup>1</sup>, 山門 英雄<sup>2</sup>, 大野 公一<sup>3,4</sup>

[序]  $\pi$  電子系を持つ化合物の相対配置を自動的に探索可能となることで、 $\pi$  電子系を持つ化合物の結晶構造予測の実行に近づくと考えられる。今回、エネルギー計算に `dftb+[1,2]` を用いて、一般化した SHS 法[3]によってベンゼン、ナフタレン、アントラセンの 2 量体の相対配置を探索した。

[方法] ベンゼン、ナフタレン、アントラセンの各単量体を `dftb+` を用いて構造最適化した後、片方の分子の分子面から  $z$  軸方向に  $5.0 \text{ \AA}$  平行移動させた部分にもう 1 つの分子を配置したものを初期構造とした。`dftb+` のパラメータはいずれも `matsci-0-3` を用いた。得られた初期座標をもとに、計算速度の向上のため、分子形状を固定し、片方の分子の重心の位置をオイラー角の回転と並進移動によって最適化した。

[結果] 図 1 に、探索されたベンゼン 2 量体の EQ(平衡構造)とエネルギーを示す。現在までに 335 個の EQ が得られている。

得られた相対配置は 5 種類の構造に分けることができる。DFT-D 法を用いた報告[4]では、10 個の EQ が得られており、今回の探索と比較することができる。得られた相対配置は、2 つの分子が重なるスタック型(EQ19, EQ43, EQ286)、片方がずれてスタックするずれスタック型(EQ4)、分子面に対して垂直、または垂直に近い角度でもう一方の分子が交わる T 字型(EQ92, EQ248, EQ31)、分子どうしが縁どうして接するサイドスタック型(EQ93, EQ281, EQ237, EQ128)の 5 種類の配置に分類できる。サイドスタック型の相対配置は、DFT-D 法では 1 種類のみが報告されている[4]のに対し、今回の探索では少なくとも 4 種類が見つかった。

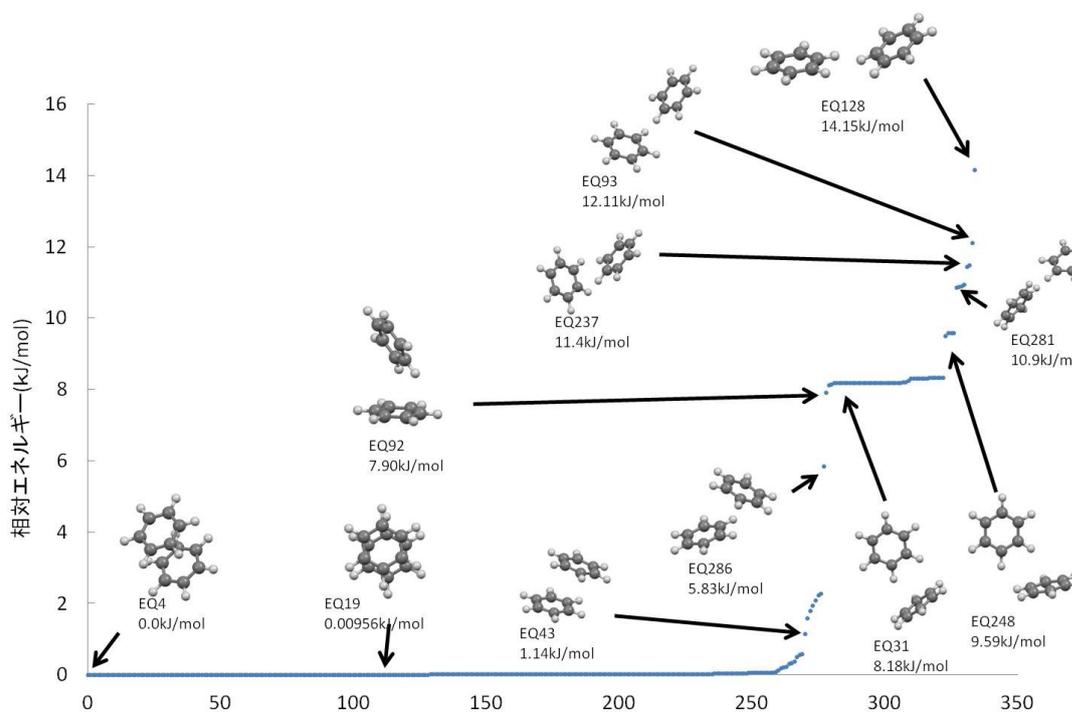


図 1 ベンゼン 2 量体の相対配置とエネルギー

[1] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, T. Frauenheim, S. Suhai, and G. Seifert, *Phys. Rev. B* **58**, 7260 (1998).

[2] B. Aradi, B. Hourahine and T. Frauenheim, *J. Phys. Chem. A* 2007, 111(**26**), 5678

[3] 大野公一、長田有人、前田理、分子科学討論会 2010、1E15

[4] Karol Strutyński, Manuel Melle-Franco, and José A. N. F. Gomes, *J. Phys. Chem. A*, 2013, 117 (**13**), 2844