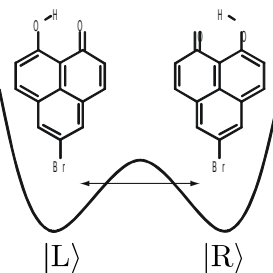
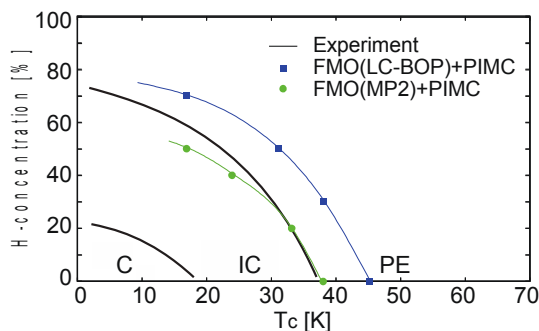


誘起双極子を取り入れた量子モンテカルロ法による 水素結合性分子結晶の誘電相転移と同位体効果

大滝大樹(長崎大院・医歯薬)、安藤耕司(京大院・理)

5-ブromo-9-ヒドロキシフェナレノン(BHP)は分子内に O-H...O 水素結合を有する π 電子系である。この物質は重水素体では常誘電-反強誘電相転移を起こす一方、水素体では相転移を起こさないことが知られている[1]。本研究では、同位体効果を加味した BHP のモデル化を行った。双極子モデルにトンネル項を導入することで水素の量子効果を取り入れた。さらに、フラグメント分子軌道法を用いた相互作用解析から分子間水素結合による双極子モーメントの誘起効果を定量化し、この効果を効率的に取り込んだ量子モンテカルロ法を開発した[2]。水素体と重水素体の混合比を変えて行った計算結果は実験で得られた相図をよく再現しており、本手法が(重)水素の配置に起因する双極子の秩序化の効果と水素のトンネル効果の競合をよく記述できていることが分かる。



[1] T. Mochida et al., J. Chem. Phys. **101**, 7971 (1994)

[2] H. Otaki, K. Ando, Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 10719 (2011); H. Otaki, K. Ando, Int. J. Quantum Chem. **113**, 386 (2013); H. Otaki, K. Ando, Chem. Phys. **446**, 118 (2015)