

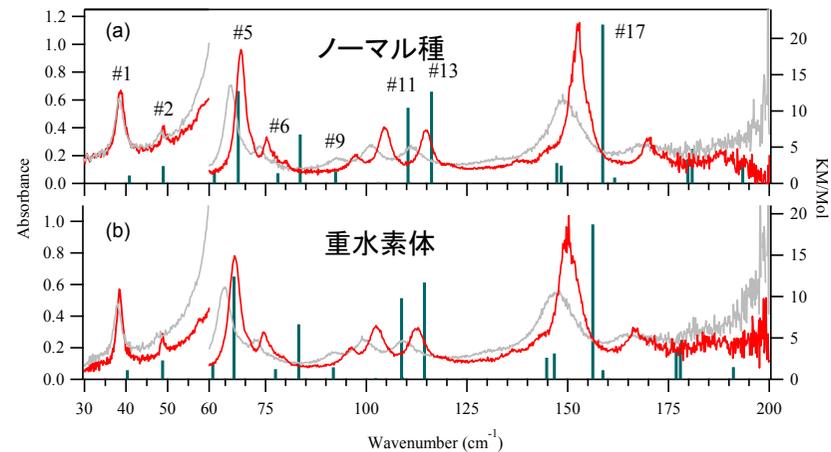
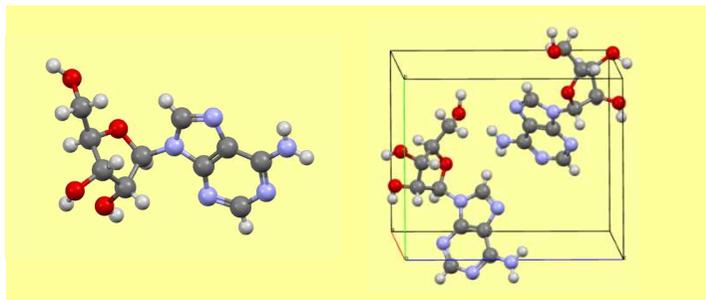
## 10. 分子性結晶のテラヘルツスペクトルの精密量子化学計算

有機分子による、結晶性の固体物質であれば、テラヘルツ帯のスペクトルの精密量子化学計算が可能です。ソフトウェアパッケージCRYSSTAL14を使います。最適の汎関数、基底関数を提案します。分子性結晶、結晶性高分子などがその対象です。

薬剤の結晶多形の識別の問題等に応用することができます。

注) 計算には、X線解析のデータ(全構成原子の3次元座標)が必要です。

例: アデノシン



発展: 得られた低振動モードを三つの寄与(分子間振動、ライブラーション、分子内振動)に分離することも可能です。

