

平成 28 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

変調磁場 による微結晶の三次元配向

Three dimensional alignments of microcrystals under modulated magnetic fields

京都大学 農学研究科 森林科学専攻 生物繊維学分野

木村 史子

#### 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの **Mathimatica** を用いて、異方性磁気エネルギーを計算し、3 次元配向させる条件の最適を行った。最適化条件で作製した 3 次元配向体による単結晶構造解析結果をケンブリッジデータベースのデータと比較し、3 次元配向体作製法の有用性を示した。

#### 発表論文(謝辞あり)

Chiaki Tsuboi, Fumiko Kimura, Tatsuya Tanaka, and Tsunehisa Kimura, *Cryst. Growth Des.* 2016, 16, 2810–2813.

#### 発表論文(謝辞なし)

Shu Tsukui, Fumiko Kimura, Katsuhiko Kusaka, Seiki Baba, Nobuhiro Mizuno, and Tsunehisa Kimura, *Acta Cryst.* (2016). D72, 823–829.