

平成 30 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

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 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 Mathematica を用いて、異方性磁気エネルギーを計算し、種々の磁場印加方法で 3 次元配向させる条件の最適を行い、実験条件の最適化を行った。

3次元配向体と単結晶の構造を比較するため、ケンブリッジデータベースを用いた。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

Determination of the Anisotropic Rotational Diffusion Constant of Microcrystals Dispersed in Liquid Medium

Fumiko Kimura, Shigeru Horii, Itsuki Arimoto, Toshiya Doi, Masato Yoshimura, Masahisa Wada, and Tsunehisa Kimura

J. Phys. Chem. A 2018, 122, 9123–9127.