

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 Mathematica 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, Katsuhiro Kusaka, Seiki Baba, Nobuhiro Mizuno, and Tsunehisa Kimura, Acta Cryst. (2016). D72, 823–829.