

有機分子の結晶構造予測シミュレーション  
(豊橋技術大学<sup>1</sup>, 産総研・ナノシステム<sup>2</sup>)  
小畑繁昭<sup>1,2</sup>, 下位幸弘<sup>2</sup>, 三浦俊明<sup>2</sup>, 後藤仁志<sup>1</sup>

**Prediction of Crystal Structures for Organic Molecules**  
(Toyohashi University of Technology<sup>1</sup>, NRI-AIST<sup>2</sup>)  
**Shigeaki Obata<sup>1,2</sup>, Yukihiro Shimoi<sup>2</sup>, Toshiaki Miura<sup>2</sup>, Hitoshi Goto<sup>1</sup>**

【はじめに】

有機分子性結晶の性質は、構成要素となる分子の種類やその分子のパッキング様式に大きく依存する。そのため、分子構造の情報からその分子の結晶構造を予測するシミュレーション技術[1]は、新規医薬品開発や新規機能性材料開発などにおける分子設計や結晶構造設計に有用な理論的指針を与えると期待できる。そこで我々は、分子構造情報から結晶構造を予測するシミュレーション技術を開発した[2-4]。本研究では、14種類の有機分子の結晶構造を予測しX線結晶構造と比較することで、予測技術の有用性について検討した。

【方法】

本研究では、ケンブリッジ結晶構造データセンター (CCDC) の構造予測に関するブラインドテスト[1]内で利用された14種類の有機化合物 (I, II, IV, V, VI, VII, VIII, IX, X, XII, XIII, XIV, XVI, XVII) (Figure 1)を用いた。

結晶構造予測では、まず、気相中における単分子の配座解析、および構造最適化を行った。その後、得られた配座異性体について、*x*軸、*y*軸、*z*軸それぞれで分子を回転させ、複数の配向を生成し、それらを非対称単位として、空間群の対称操作により試行結晶構造を構築した。試行結晶構造は、空間群の対称性の下、分子の並進、回転、および格子の大きさを最適化し、得られる最適化結晶構造の結晶エネルギーに基づいて、予測される結晶構造を考察した。なお、VI, X, XIV, XVIIに関しては、結晶構造最適化において分子構造も最適化パラメータとして加えた。結晶構造予測計算には分子力場 MMFF94s[5]を用いた。

【結果と考察】

14種類の有機分子について結晶構造予測を行ったところ、すべての分子においてX線結晶構造に対応する予測構造を創出できた。例として、Figure 2に、I, II, VIIIのX線結晶構造と予測結晶構造とを重ね合わせた図を示す。Figure 2において、Iの予測構造は2番目に安定な準安定構造として、IIとVIIIの予測構造は、最安定構造として創出された。一方、他の分子については、X線結晶構造に対応する予測構造は得られたものの、それら予測構造のエネルギー値は高く、使用する分子力場の検討が示唆される。

当日は、ペンタセンやルブレソ、ベンゾビスベンゾチオフェン等の有機半導体分子に関する結晶構造予測の結果についても議論する。

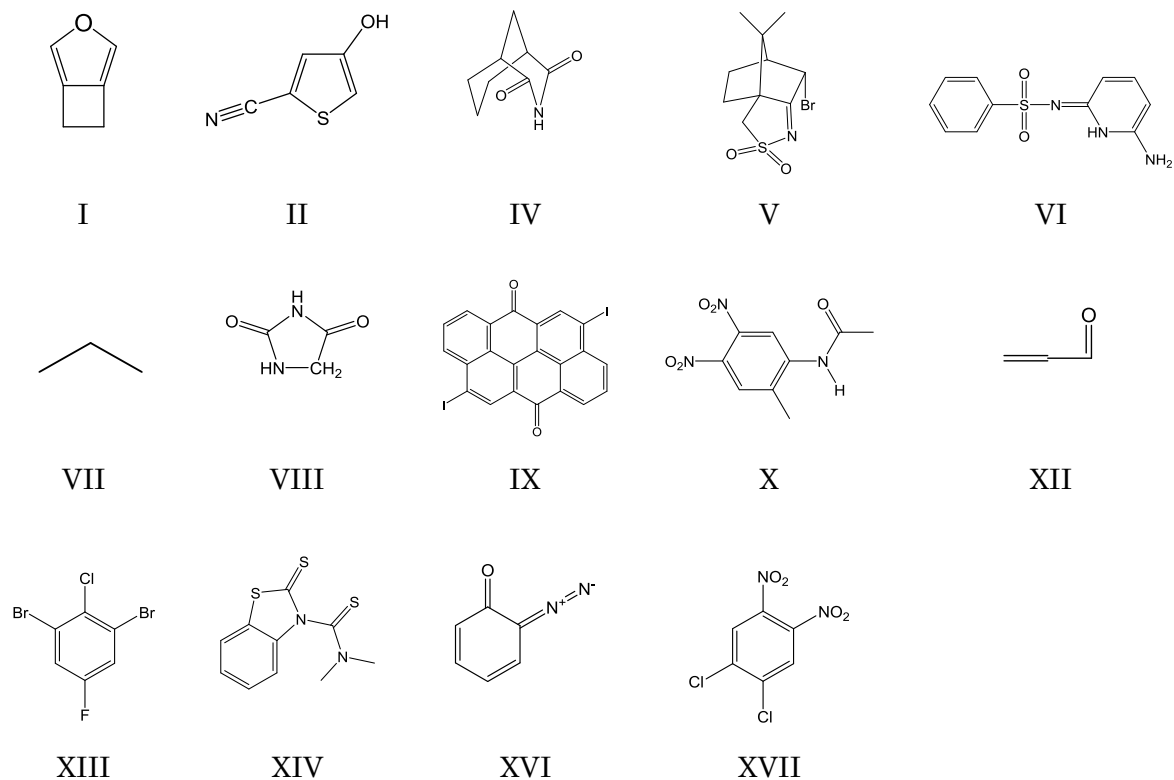


Figure 1. Structural formulae of fourteen candidate molecules. The roman figures of each molecule are defended in the blind test organized by CCDC.

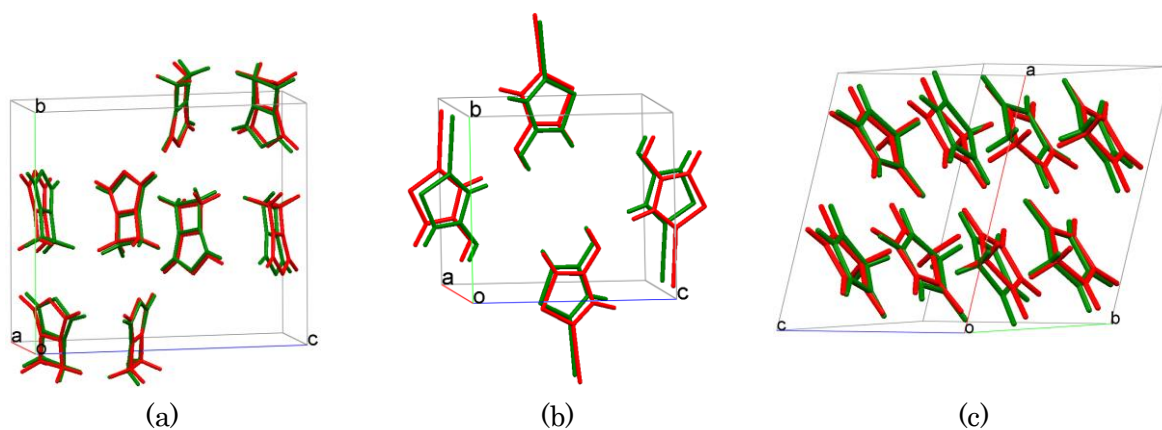


Figure 2. Superposition of the molecules in a unit cell on the predicted (red) and observed (green) crystal structures of I (a), II (b), and VIII (c).

#### 【参考文献】

- [1] D. A. Bardwell et al., *Acta Cryst. B*67, 535, 2011.
- [2] S. Obata, H. Goto, in preparation.
- [3] S. Obata, T. Miura, Y. Shimoi, submitted.
- [4] H. Goto, S. Obata, N. Nakayama, K. Ohta, CONFLEX 7; Conflex: Tokyo, Japan, 2012.
- [5] T. A. Halgren, *J. Comp. Chem.* 17, 490, 1996.