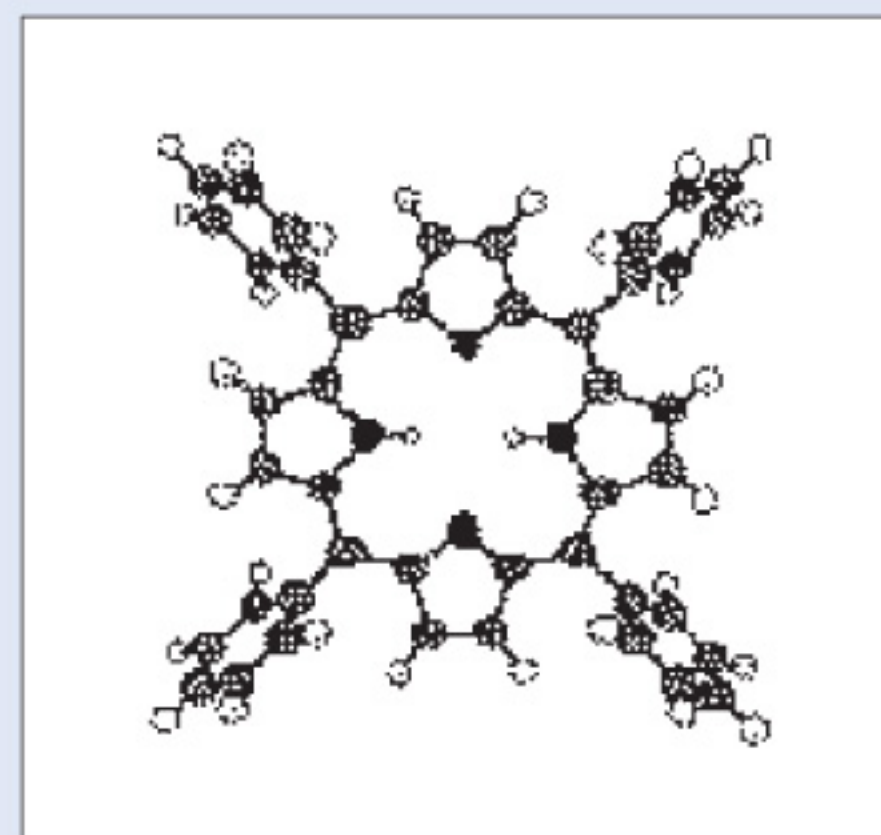


伝導体モデルによる金属表面吸着分子等の解析プログラム、及び装置

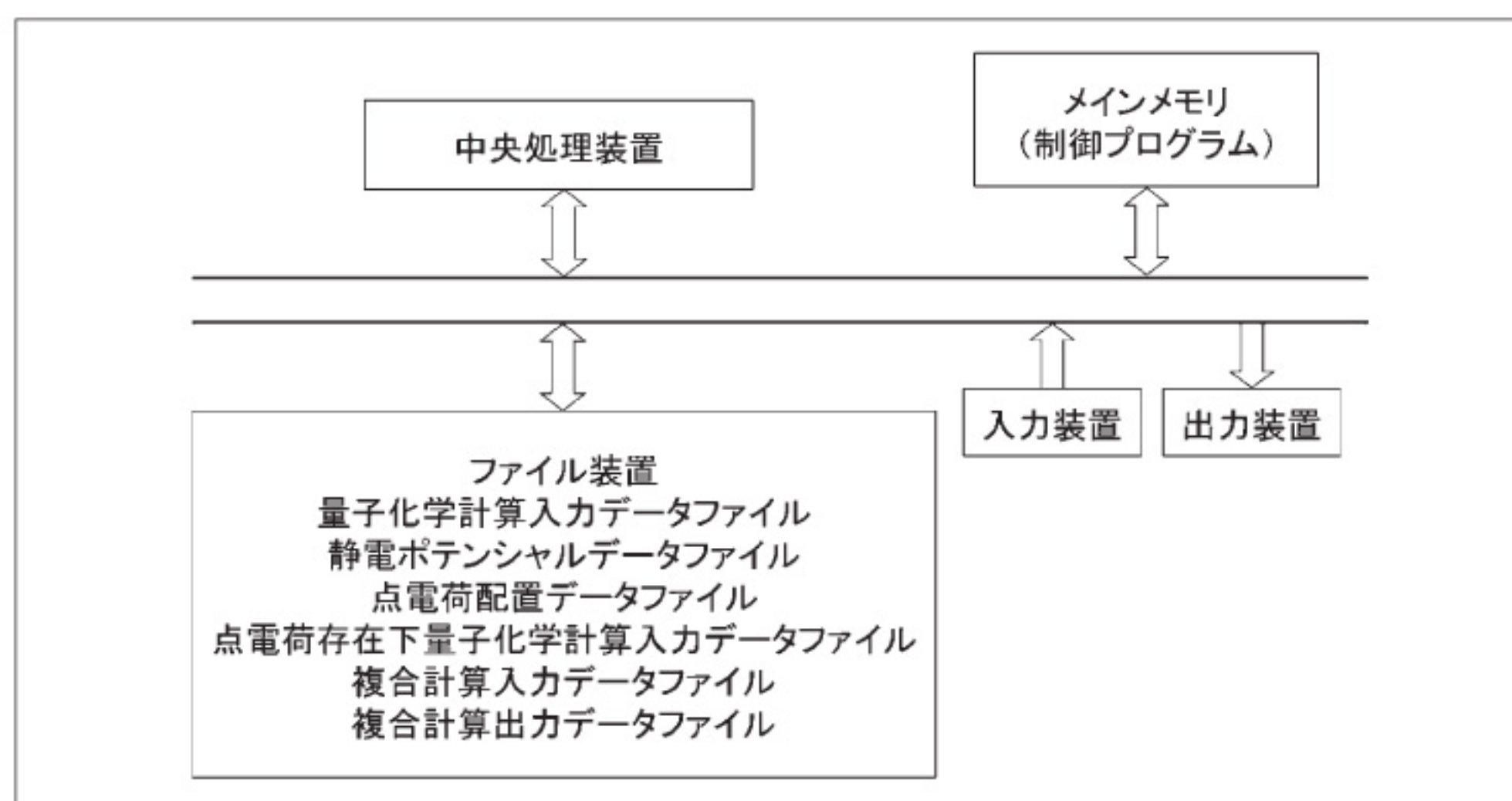
発明者

おくの よししげ ましこ しんろう
奥野 好成、益子 信郎

分子モデル

技術の概要

本発明は、従来法に比べ合理的で適用範囲の広い数値解析方法を提供します。その概要は、従来の問題点を解決すべく、金属表面に吸着した分子又は分子集合体の物性値及び安定構造を明らかにすることのできる、より合理的・正確で、適用範囲の広い、コンピューターによる解析方法を提供します。実際には、吸着分子と金属表面間の誘起相互作用の評価に際し、金属を伝導体として取り扱い、吸着物によって伝導体表面に誘起される電荷を伝導体表面を分割した微小領域の各点での点電荷で近似しています。そして、この決定した点電荷存在下の量子化学計算と反発及び分散相互作用を表す経験的原子間解析ポテンシャル関数の計算を組み合わせることにより、金属表面に吸着した分子や分子集合体の各種物性値や安定構造の算出を実用的にしたものです。したがって、この発明によれば、従来の方法では算出が困難であった、凹凸のある金属表面に吸着した分子等の解析が可能になるだけでなく、平面の金属表面に吸着した分子等の物性値や安定構造が、従来の方法よりも、より正確に得られるという効果があります。



構成図

分子化学シミュレーション解析

分子化学シミュレーション解析とは、計算化学分野 (computational chemistry) の一つで、複雑系である化学の問題は計算機の力を利用しなければ解けない問題が多いため、現在注目されている技術です (図 1)。近年のコンピュータの処理能力の発達に伴い、実験、理論と並ぶ第三の研究手段と考えられるまでに発展しています。分子軌道法 (MO 法) や分子動力学法 (MD 法) などを利用してコンピュータ上で数値計算により、分子や化合物の反応・合成、相互作用などを予測することができます。分子化学シミュレーション解析を使う有名な例としては、LSI の誘電率を予測する場合、医薬品の分子設計やコンピュータで医薬候補化合物と特定のタンパク質とのドッキング試験などのインシリコスクリーニングなどがあります。

本特許は、シミュレーション解析の中でも、物質表面に分子が吸着した場合の、導電性や安定性などを試験研究する表面化学等の分野関連の技術であり、ナノデバイスや MEMS の製造や金属表面などの固体表面における分子の挙動 (局所構造や電子状態など) の検討などに使われています。固体表面における化学反応は、液中での反応とは異なるものであり、最近の化学研究でも注目されている分野です。本特許は、実際にはコンピュータプログラムのアルゴリズムという形で数値演算として実行されます (図 2)。

企業化

本特許は、類似の発明、プログラムとともに、株式会社シミュラティオにライセンスし、同社ではこれをシミュレーション受託解析サービスとして提供しています。

(文責：研究推進部門 知財推進グループ 主幹 澤田史武)

NICTが取得した特許は有償で利用できます。
特許権の実施及び技術情報についてのお問い合わせは
情報通信研究機構 研究推進部門 知財推進グループ
Tel. 042-327-7464 E-mail: ip1@ml.nict.go.jp
までお願いいたします。

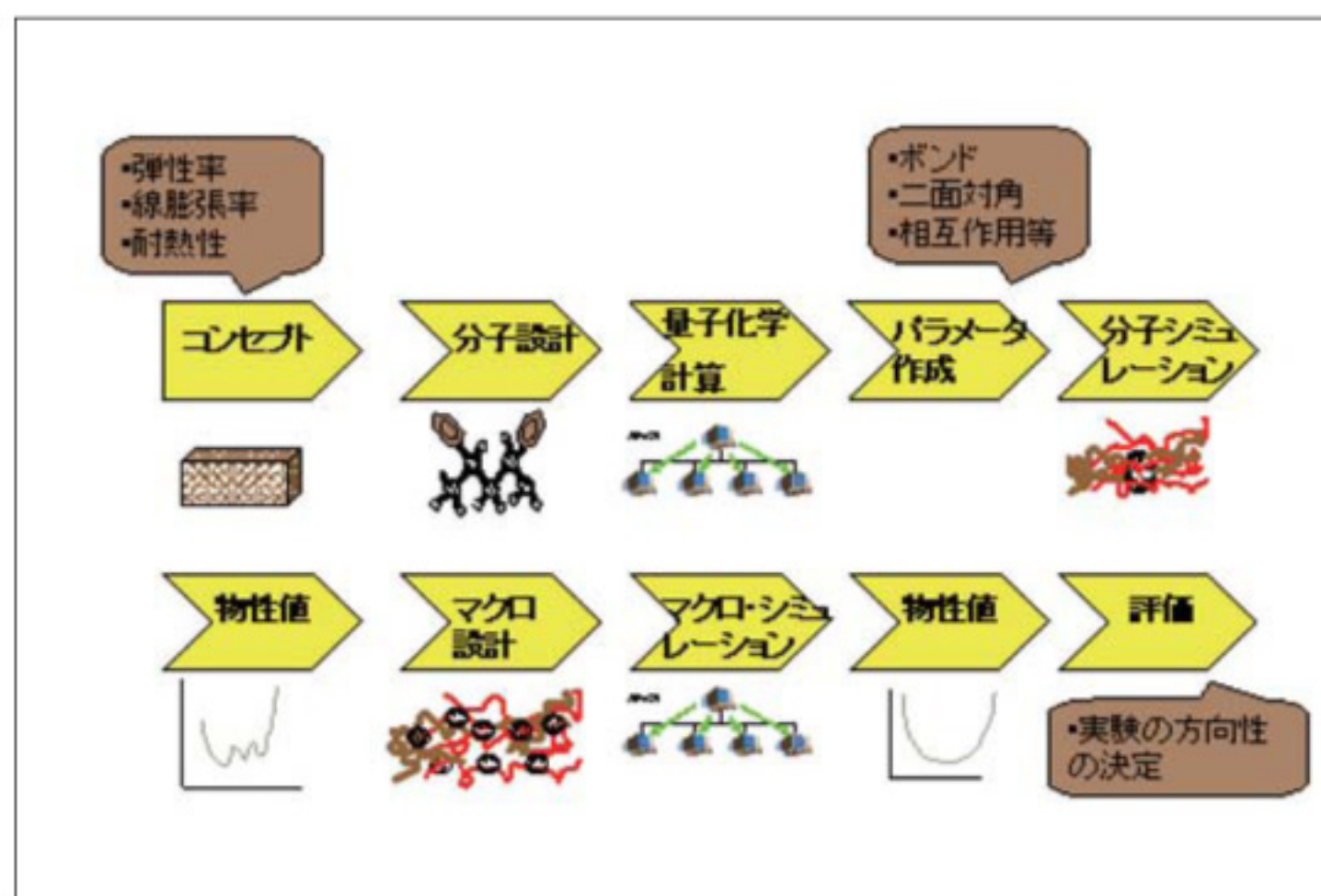
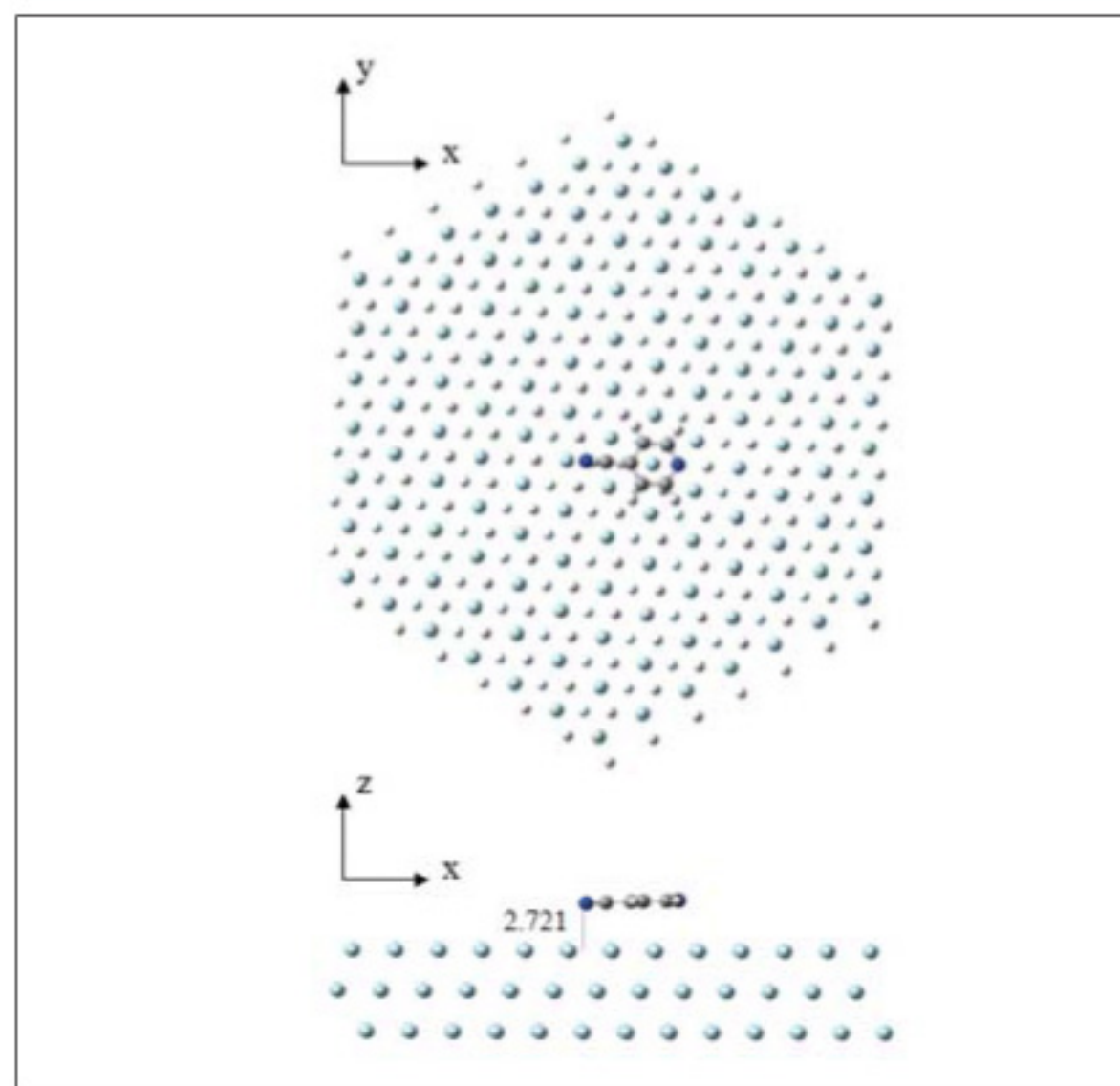


図1 解析の流れ図



金属表面上に分子が吸着した構造を計算した例。金(111)表面 (水色多数の球状は金原子を表す) 上に吸着したベンゾニトリル分子 (上図中央) の安定構造を示す。金表面とベンゾニトリル分子の距離の計算値は 2.721 オングストローム (下図上中央) であった。

図2 計算結果の例