

研究タイトル：

MD を利用した AFM 挙動のシミュレーション



| | | | |
|-----------------|--|---------|----------------------------|
| 氏名： | 岩本 仁志 / IWAMOTO Hitoshi | E-mail： | iwamoto@wakayama-nct.ac.jp |
| 職名： | 准教授 | 学位： | 博士(工学) |
| 所属学会・協会： | 日本化学会, 日本分析化学会, 日本コンピュータ化学会 | | |
| キーワード： | 分子シミュレーション, 分子動力学, 祖視化ソリューション | | |
| 技術相談 提供可能技術： | <ul style="list-style-type: none"> ・分子の状態シミュレーション ・分子の機能性予測 ・ | | |

計算機科学計算を利用したシミュレーション

新規の機能異分子を設計、合成しその物性を評価するには、莫大な時間や費用が必要となる。しかし、予め必要とされる機能を想定し、そのための分子構造をある程度予測しその物性をコンピュータ上でシミュレーションし再現することができれば、開発にかかる時間や費用を大幅に削減することができる。また、実験により得られた有益なデータをコンピュータ上で再現することができれば、実験結果を裏付ける大きな証拠とすることができる。分子や原子についての計算は以前から多くの手法で行われてきたが、その多くは周囲の影響を殆ど受けない真空中を想定し、理想的な分子の形やエネルギーを導くものが殆どである。しかし現実には、周囲の分子や原子の影響を受け、熱運動しながら刻々とその姿を変化させながら運動している。

分子動力学(Molecular Dynamics)計算は、周囲の環境に考慮しながらニュートンの運動方程式に従い時々刻々と変化する分子の動きを追いかけて、その時々におけるエネルギー等の様々な物性を求めることができるツールである。

本研究は、双極性分子で、フォトクロミック分子であるスピロベンゾピランと包摂化合物であるクラウンエーテルの2つの機能性を持つ新規化合物を合成(クラウン化 SP)し、それを原子間力顕微鏡(AFM)の基盤および探針に付け、アルコール中における付着力を測定したところ、開環体(MC 体)において、アルコール中における金属イオンの有無により付着力に大きな差が生じた。この現象を理論的に証明するために分子動力学計算で同様のシミュレーションを行っている。

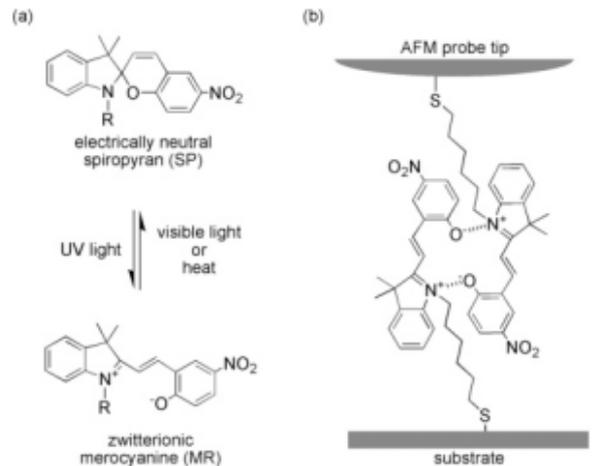


図1 スピロベンゾピランのフォトクロミズム(a)と AFM に導入したモデル図 (b)

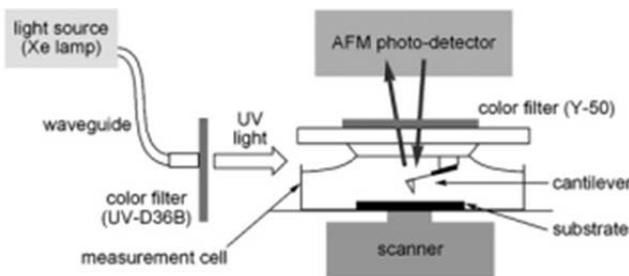


図2 原子間力顕微鏡(AFM)での測定方法

提供可能な設備・機器：

| 名称・型番(メーカー) | |
|---|--|
| JSOL J-OCTA 1.7 | |
| Fujitsu SCIGRESS V2 | |
| Aeon Technology Inc. Direct Force Field 7.1 | |
| | |
| | |