

ADSORPTION LOCATOR

吸着現象を理解することは、コーティング開発において、また触媒反応、ガスセンサー、および一般的な材料の開発においても重要な鍵となります。堆積プロセス、情報記録装置、腐食問題、および微細孔材料における触媒反応は、吸着現象をより深く理解することが役に立つプロセスの例です。

Adsorption Locator は、広範な材料において最安定吸着サイトを見つけるのに役立ち、それら材料のほんの一部の例としては、ゼオライト、カーボンナノチューブ、シリカゲル、および活性炭が挙げられます。このシミュレーションから、表面層上で腐食を最も受けそうな点、原子層堆積における最も安定なサイト、特定の有機合成に最も有効なゼオライト、および特定の吸着物によるナノチューブ活性化の可能性など、取り扱う系について更なる知見が得られる可能性もあります。手元にあるこのような知識を用いれば、その後のスクリーニング実験を、時間と予算の両方を節約して、より効率的に導くことができます。

表面現象をより深く理解するために

Adsorption Locator は、図 1 に示すように、単一、あるいは複数分子の基板への吸着をシミュレートすることができます。吸着分子が、気体分子であるか液体であるかは問いません。このアプリケーションは、周期基板と非周期基板の両者において低いエネルギー吸着サイトを見つけ出すように設計されています。Adsorption Locator を Materials Studio のモデルリングとシミュレーション環境の他の高性能ツールと組み合わせて利用することで、次のことが可能になります。

- 広範な材料について最安定吸着サイトを予測
- 何千もの配置をスクリーニングして、最も安定なものを特定
- ナノ触媒上の活性サイトの特定
- 原子層堆積プロセスにおいて表面層上で最も安定な位置を決定
- さまざまな分子と分子篩（例えば、ゼオライト）との相互作用の研究
- 基板上への複数の添加物のドッキング

- 吸着プロセスの原子レベル（構造や添加物による影響など）での理解
- 吸着エネルギーの予測

Adsorption Locator のシミュレーションによって入手した基礎知識は、実験だけからは容易に推論することができない、重要な表面現象のより深い理解をもたらします。例えば、評価した原子および分子の相互作用は、界面での結合を理解する上で重要な側面であり、このことは、原子/分子堆積だけでなく、コーティング開発において

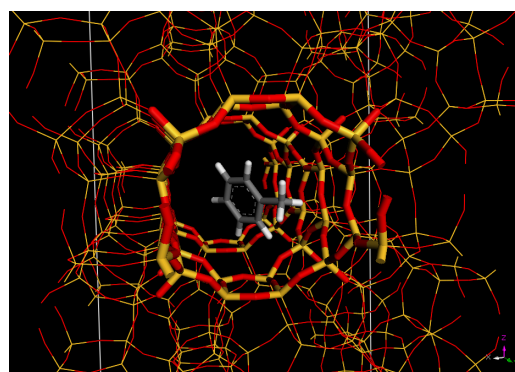


図 1: Adsorption Locator は、広範な材料について最も安定な吸着サイトを見つけ出すのに利用することができます。ここに示す画像は、BEA - ゼオライトの孔の中に吸着されたトルエンの最も安定な配置を表しています。

も重要です。形状選択的触媒反応の理解には、ゼオライトに関する Adsorption Locator のスクリーニング研究が役に立ちます。また、カーボンナノチューブに関する計算は、センサーや情報記録装置の設計に役立てることができます。

ADSORPTION LOCATOR の機能

Adsorption Locator は、温度をゆっくりと下げながら (Simulated Annealing) 基板一吸着系の相対的な配置のモンテカルロ探索を行うことで、可能性のある吸着配置を明らかにします。この過程を繰り返すと、更なる局所エネルギー最小値が明らかになります。吸着分子は通常は気体分子または液体であって、基板は通常、固体表面 (結晶性もしくは非晶質)、多孔質材料、または巨大分子 (例えば、カーボンナノチューブ、ナノ触媒) です。力場・精度レベルの指定、および電荷と非結合相互作用の計算方法の選択ができます。

	A	B	C	D	E	F
Structures	Total energy	Adsorption energy	Rigid adsorption energy	Deformation energy	toluene : dEad(dH)	
1	Substrate	0.00000000				
2	Toluene	82.55016241				
3	BEA - 1	-15.81677590	-98.36695831	-27.51929474	-70.84766357	-98.36695831
4	BEA - 2	-15.60161110	-98.15179350	-27.29258133	-70.85921217	-98.15179350
5	BEA - 3	-15.26063623	-97.81082064	-26.93141378	-70.87940686	-97.81082064
6	BEA - 4	-15.01063892	-97.56082133	-26.72404399	-70.83677734	-97.56082133
7	BEA - 5	-14.67703353	-97.22721594	-26.35127583	-70.87594011	-97.22721594
8	BEA - 6	-14.42141784	-96.97160024	-26.08479261	-70.88680763	-96.97160024
9	BEA - 7	-14.19731023	-96.74749263	-25.88994915	-70.85754348	-96.74749263
10	BEA - 8	-13.89172589	-96.44190829	-25.58335872	-70.87854957	-96.44190829
11	BEA - 9	-13.54609430	-96.09627671	-25.21321255	-70.88306416	-96.09627671
12	BEA - 10	-13.31938746	-95.87016987	-25.01596859	-70.85420128	-95.87016987
13	BEA - 11	-13.07749100	-95.62767340	-24.74501231	-70.88266109	-95.62767340
14	BEA - 12	-12.22314472	-94.77332713	-23.91491703	-70.85841010	-94.77332713
15	BEA - 13	-11.77655717	-94.32673957	-23.48643270	-70.86030687	-94.32673957
16	BEA - 14	-11.51786627	-94.06804868	-23.17492568	-70.89312300	-94.06804868

図 2: Adsorption Locator の計算から得られたこの調査報告表は、幾つかのエネルギー範囲における最も安定な基材一吸着配置を示しており、多くの配置を簡単にモデル化して比較することができることを示しています。

Adsorption Locator は、調査したいと考えている基板の範囲を限定する際に驚異的な柔軟性を発揮します。この柔軟性によって、系の最も化学的に重要な範囲に焦点を合わせることができます。グラフィカル・ユーザー・インターフェース (GUI) から、次に挙げる幾つかの異なる方法をとることができます。

- **Bounding box:** 吸着物を添加することができる領域を限定する方法
- **Set of atoms:** 基板構造内の原子群を特定して、探索をその周囲に限定する方法
- **3D field values:** 例えば溶媒到達表面のように、フィールドデータの指定した範囲の領域に探索範囲を限定する方法；吸着領域はフィールドデータの表示範囲を変えることで調節可能

シミュレーションを行った後、Adsorption Locator は、図 2 に示すような、低エネルギー配置を含む調査報告表を出力します。最も安定な基材一吸着物配置を出力するのか、あるいは広範囲な配置パターンから代表的な配置を返すかを選択することが可能です。

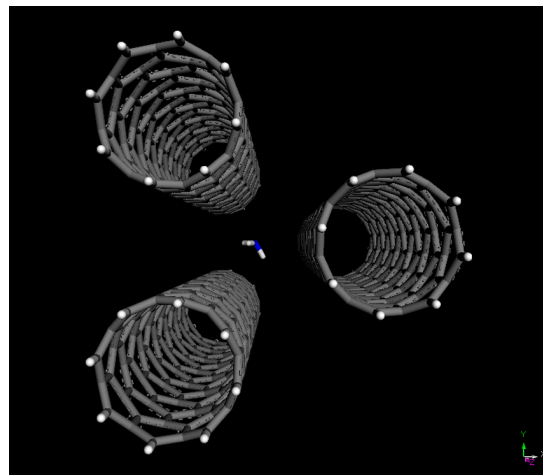


図 3: Materials Studio Visualizer の最新の構築および視覚化ツールを用いて、Adsorption Locator において基板として使用するための構造を作り出すことができます。ここでは、アンモニア分子が 3 本の炭素ナノチューブ間の溝に吸着されています。

モデリングとシミュレーション・ワークフローの統合

Materials Studio のモデリングおよびシミュレーション環境の一部として、Adsorption Locator は、いくつかの最新の構築ツール、および視覚化ツールとの統合によって使い易くなっています。例えば、Materials Studio Visualizer のナノビルダーは、カーボンナノチューブだけでなく、様々な形状のナノクラスターも構築し易く、まとめ易くします。これらの構造は、図3に示すように、Adsorption Locator において基板として使用することができます。

同様に、Adsorption Locator からのスクリーニング結果は、簡単に自動探索および最適化ワークフローの入力ファイルにすることができます。例えば、Adsorption Locator 計算によって得られた配置は、より精度の高い吸着エネルギーを求めるために、量子力学に基づく計算ソフトであるDMol3用の入力データとして利用することができます。更には、調査したあらゆる基板の結果の QSAR 統計解析を行うことで、それらの基板を迅速にスクリーニングし、特定のコーティング、センサー装置、または触媒反応経路などの設計に利用できるかどうかを調べることも可能です。

Materials Studioに関する詳細については、下記URLを参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>