

## コンピュータグラフィックスを用いた化学反応の可視化とそれを用いた新規反応・物質の開発

研究代表者 工学部 堀 憲次

### 研究の目的

化学反応機構の解析、それを用いた新規反応や化合物の開発には、分子軌道(MO)計算の助けなしには正確な答えが得られない。そのため専門家以外の研究者でもこの理論計算を利用できるように、近年多くの分子モデリングソフトウェアが開発された。しかしながら、機能の制限から反応を解析する目的には、それらソフトウェアは有用ではない。

化学反応を理論的に解析するとき、極限的反応座標(IRC)計算を行い、IRCに沿った一連の分子構造の座標を得ることがよく行われている。計算された構造全てを用いた動画として化学反応の詳細を表現できれば、より深い化学反応への理解が得られる。これは、研究者が新たな反応を設計するのに有用であるばかりでなく、新規物質創造にも利用できると思われる。そこで本研究では、化学反応を可視化するとともに、新規反応や物質の創造をサポートするシステムの構築を目的とした。

### 研究成果

化学反応の可視化のためには、精度よく化学反応の遷移状態を探索し、IRC解析を行い、IRCに沿った構造変化を得ることが必要である。この化学反応の様子を可視化するためには、a)計算の出力ファイルから必要な部分を自動的に抜き出すプログラム、b)計算された分子をコンピュータの画面上で、回転、拡大・縮小する機能により分子の持つ立体構造の把握を容易にさせるプログラム、c)抜き出された反応座標に沿った一連の構造(分子の内部座標またはXYZ座標群として与えられる)を動画として表示するプロ

グラム、d)解析結果を有効に利用するためのデータベースプログラム。本年度の研究により、a)~c)の機能については、OpenGLとVisual C++言語を用いてWindows98マシン上でプログラムの開発が完了した。また、いくつかの化学反応について極限的反応座標の計算を行った。

### 産業技術への貢献

新規物質創造に適用可能

### 研究発表

- (1) Kenzi Hori, Yasuhiro Nagosi and Suzuko Yamazaki: A System Searching Transition State Geometries, J. Computer Aided Chemistry, 1, 89-97(2000).
- (2) 堀憲次: 遷移状態データベースの構築、2000計算化学討論会、2000年6月、東京
- (3) 名越康浩、堀憲次: 遷移状態探索システムII、2000計算化学討論会、2000年6月、東京

### グループメンバー

氏名	所属	職(学年)
山崎 鈴子	理・応用工学	助教

### 連絡先

電話 0836-85-9238 (ダイヤルイン)  
FAX 0836-85-9201 (学科事務室)  
E-mail:kenji@sparklx.chem.yamaguchi-u.ac.jp

## リソグラフィーにより導入する磁束ピンニングセンターの研究

研究代表者 工学部 原田 直幸

### 研究の目的

超伝導現象を工学的に応用するときの重要な性質の一つは、大電流を無損失に流すことができることである。このためには、図1に示すように超伝導体内部でローレンツ力を受ける磁束線をピン止めする必要がある。これまでに常伝導金属を超伝導体に埋め込んで塑性加工によって人工的にピンニングセンターを金属系超伝導線材に導入する方法が行われてきた。一方、このようなピンニングセンターは塑性加工によるため、十分に期待通りの形状や配置を得るには自ずと限界がある。そこで、本研究では効率良く磁束線をピン止めする方法として、フォトリソグラフィーによりピンニングセンターを超伝導膜に導入する方法を提案し、検討を行った。

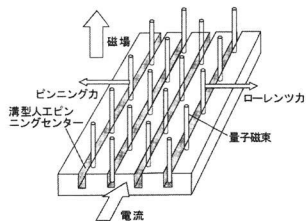


図1 溝型の人工磁束ピンニングセンター

### 研究成果

電子ビーム蒸着装置を用いて、MgO単結晶基板上に厚さ0.22 $\mu$ mのNb膜を作製し、図2に示すような2種類のピンニングセンターを導入した。磁化測定を行った結果、

図3に示すようにTc近傍において、未加工のNb膜に比べて溝型のピンニングセンターの磁化が増加した。また、加工深さに対する依存性も明らかにし、これらの結果から、導入したピンニングセンターが有効に作用していることを確認した。

### 産業技術への貢献

超伝導材料へのピンニングセンターの導入による臨界電流密度特性の向上は、現在線材化の研究が行われている酸化物超伝導線材などの開発に寄与し、液体窒素温度で使用する超伝導機器の実用化につながると考えられる。

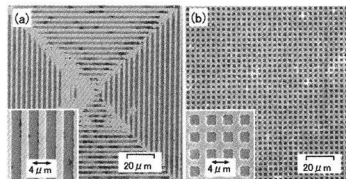


図2 微細加工したNb膜のSEM写真(a)溝型(b)ホール状のピンニングセンター

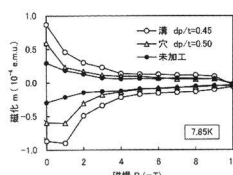


図3 磁化特性の比較

### 研究発表

- [1] H. Yamada, N. Harada, T. Iwamoto, M. Tsuda, T. Hamajima, "Periodic Micron-size Flux Pinning Centers on Superconducting Nb Films by Lithographic Techniques", IEEE Trans. Superconductivity, to be published.

### グループメンバー

氏名	所属	職(学年)
濱島 高太郎	工・電気電子	教授
原田 直幸	工・電気電子	講師
津田 理	工・電気電子	助手
山田 博	理工・物質	D 2
岩本 忠司	理工・物質	M 1

### 連絡先

TEL : 0836-85-9476 FAX : 0836-85-9401  
E-mail : naoyuki@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp