

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2006-282929

(P2006-282929A)

(43) 公開日 平成18年10月19日(2006. 10. 19)

(51) Int. Cl. F I テーマコード (参考)
C08G 85/00 (2006.01) C O 8 G 85/00 4 J O 3 1
G06F 19/00 (2006.01) G O 6 F 19/00 6 O O

審査請求 未請求 請求項の数 1 O L (全 11 頁)

(21) 出願番号	特願2005-107361 (P2005-107361)	(71) 出願人	000231235
(22) 出願日	平成17年4月4日(2005. 4. 4)		大陽日酸株式会社
			東京都品川区小山一丁目3番26号
		(71) 出願人	301023238
			独立行政法人物質・材料研究機構
			茨城県つくば市千現一丁目2番1号
		(74) 代理人	100064908
			弁理士 志賀 正武
		(74) 代理人	100108578
			弁理士 高橋 昭男
		(74) 代理人	100089037
			弁理士 渡邊 隆
		(74) 代理人	100101465
			弁理士 青山 正和

最終頁に続く

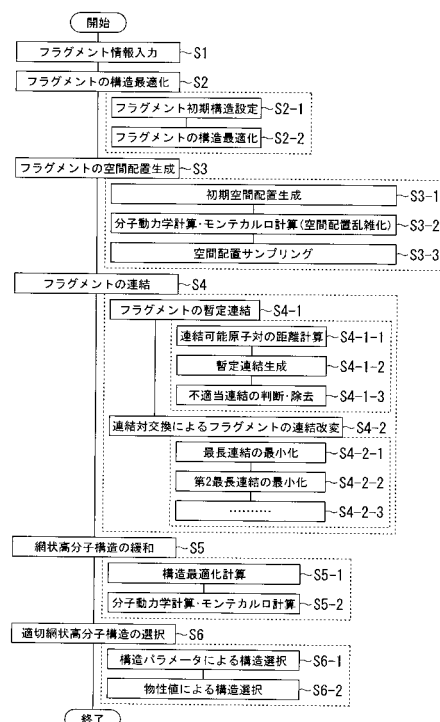
(54) 【発明の名称】 分子構造予測方法

(57) 【要約】

【課題】 試行錯誤的探索によりアモルファス網状高分子モデリングを行う際、適切な分子構造モデルが迅速に得られるよう試行構造を生成する方法を提供する

【解決手段】 高分子のフラグメントの個々の構造最適化を行うステップS2と分子動力学法によりフラグメントの乱雑な空間的配置を生成するステップS3とこの空間的配置を構成するフラグメントを暫定的に化学結合で連結するステップS4-1とフラグメントの連結結合のうちの2組の間で連結原子対を交換して絡み合いを持たないようにネットワークを変更するステップS4-2とネットワークに対して構造最適化と分子動力学計算を行うステップS5と上記ステップで得られる試行構造から、微視的な構造パラメータが適切な値を取っているものを分子構造モデルとして選択するステップとS6と実験的物性値を再現することを条件に適切な分子構造モデルを選択するステップを備える。

【選択図】 図1



【特許請求の範囲】

【請求項 1】

与えられた構成原子団に基づいて、アモルファス網状高分子の分子構造モデルを予測する方法であって、

1) アモルファス網状高分子を構成する構成原子団の個々の構造の最適化を行うステップと、

2) 分子動力学法あるいはモンテカルロ法を使用して構成原子団の乱雑な空間的配置を決めるステップと、

3) 与えられた空間的配置を構成する構成原子団を暫定的に化学結合により連結するステップと、

4) 構成原子団の連結結合のうちの 2 組の間で連結原子対を交換することによって、絡み合いを持たないように連結結合のネットワークを変更するステップと、

5) 出来上がったネットワークの分子構造に対して構造最適化計算と分子動力学計算およびモンテカルロ計算を行うステップと、

6) 上記 5 つのステップによって得られるアモルファス網状高分子の試行構造から、結合長、結合角などの微視的な構造パラメータが適切な値を取っているものを分子構造モデルとして選択するステップと、

7) 実験的に得られる物性値を再現することを条件に、アモルファス網状高分子の分子構造モデルとしてより適切な分子構造モデルを選択するステップを備えることを特徴とする分子構造予測方法。

10

20

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、アモルファス網状高分子のモデリングのための分子構造予測方法に関する。ここでモデリングとは、現実の網状高分子の特徴を有する分子構造モデルを予測することを意味する。

【背景技術】

【0002】

近年、高分子の物性研究の手段として、分子動力学法、モンテカルロ法、量子化学計算法等の分子シミュレーションの手法がしばしば用いられるようになっている。

これらの手法は原子、電子の運動を古典力学、量子力学の方程式に従って計算する方法で、物質の性質を分子レベルに遡って求めるために使用される手法である。

【0003】

シミュレーションによって、着目している物性値が正しく算出されるためには、適切な分子構造モデルに対して計算がなされることが必要である。

ここで、適切な分子構造モデルとは、現実の高分子の特徴を有する分子構造のことを意味し、具体的には原子や原子団の組成および密度等の巨視的な構造パラメータが実物とほぼ等しく、結合長、結合角、二面体角、非結合原子間距離等の微視的な構造パラメータが実物のものに近い値をとる構造のことを意味する。以下では、この意味で適切な分子構造モデルを予測することをモデリングと言う。

40

【0004】

高分子の興味ある物性の多くはアモルファス相の物性であるが、線状高分子については、アモルファス構造のモデリングは比較的簡単で、これまで多くシミュレーションが行われてきた。

一方、網状高分子に関してはアモルファス構造の適当なモデリングの方法が無いために、これまで分子シミュレーションが実施されていない。

【0005】

網状高分子のアモルファス構造のモデリングができないのは、網状高分子が剛直であるために、雑に作成した出発構造を分子動力学シミュレーション等を用いて適切な分子構造

50

へ構造緩和させる方法（この方法は、線状高分子をはじめとする複雑分子や、分子集合体のモデリングに常套的に使用される方法である。）が効果的でないためである。

【0006】

したがって、人為的にある程度適切なアモルファス網状高分子の試行構造を作成することが必要で、このための手法が今のところ開発されていない。

なお、高分子材料の形態予測に関しては、以下の文献がある。

【特許文献1】特開2003-105090号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

網状高分子においては、図9に示すように、網目を構成する直鎖部分が他の直鎖部分と多重的に交差して端点Aを共有しているので、網状高分子の適当な分子構造モデルを作成する際には、端点共有の制約の下で結合や結合角が適切な値を取る分子構造を求めることが必要となる。従って、アモルファス網状高分子のモデリングは、試行構造の生成と取捨選択のステップを経るものとなる。

【0008】

また、アモルファス網状高分子では、原子や原子団の組成だけが判明していて、それらの結合の仕方(トポロジー)が具体的に判明していないのが通常であるため、モデリングにおいては可能なトポロジーをも試行錯誤的に探索する必要がある。

このような試行探索において、モデリングの対象とする高分子の架橋の度合いが高い場合、失敗試行の割合が多くなるために相当数の試行構造を作成する必要がある。

【0009】

本発明の課題は、上記の試行錯誤的探索によりアモルファス網状高分子モデリングを行う際、適切な分子構造モデルが迅速に得られるように試行構造を生成する方法を提供することである。また、この試行構造生成法を利用したアモルファス網状高分子のモデリング方法を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0010】

前記課題を達成するために、

請求項1記載の発明は、次に挙げる7個のステップを含む方法である。

1)アモルファス網状高分子の構成原子団（以下、フラグメントと言うことがある。）の個々の構造最適化を行うステップと、

2)分子動力学法あるいはモンテカルロ法を使用してフラグメントの乱雑な空間的配置を生成するステップと、

3)与えられた空間的配置を構成するフラグメントを暫定的に化学結合により連結するステップと、

4)フラグメントの連結結合にうちの2組の間で連結原子対を交換することによって、絡み合いを持たないように連結結合のネットワークを変更するステップと、

5)出来上がったネットワークの分子構造に対して構造最適化計算と分子動力学計算およびモンテカルロ計算を行うステップと、

6)上記5つのステップによって得られるアモルファス網状高分子の試行構造から、結合長、結合角などの微視的な構造パラメータが適切な値を取っているものを分子構造モデルとして選択するステップと、

7)実験的に得られる物性値を再現することを条件に、アモルファス網状高分子の分子構造モデルとしてより適切な分子構造モデルを選択するステップを備えるものである。

【0011】

本発明の特徴は、生成する試行構造が高分子の分子シミュレーションに使用されることを想定して、周期境界条件を満足するような構造を生成することである。これに関係して、ステップ4)の分子動力学法と構造最適化計算は、格子定数も変数とする分子動力学法と構造最適化計算である。

10

20

30

40

50

【0012】

本発明では、考察対象のアモルファス網状高分子をフラグメントへ分割するステップを含んでおらず、適当に分割されたフラグメントが与えられていることを前提とする。

網状高分子をフラグメントへ分割する仕方は、モデリング対象の網状高分子の可能なネットワークトポロジーが網羅されるという条件で、これ以上分割する必要のない原子団のまとまりとすれば良い。

【0013】

本発明では、与えられたネットワークからネットワークに適合する分子構造を生成する試行を回避するために、はじめにフラグメントの空間配置を適当に与え、次にこれに対して適当なネットワークを作成する手順を取っている。

10

【0014】

以下に、ステップ1)ないしステップ7)の意味、目的を簡単に説明する。

ステップ1)では、アモルファス網状高分子のフラグメントの個々の構造最適化を行うが、これは高分子中における構成原子団の構造が高分子の種類によらずほぼ一定で、孤立の構成原子団の構造が大部分保持されているからである。

【0015】

ステップ2)では、分子動力学法またはモンテカルロ法を使用してフラグメントのユニットセルにおける乱雑な空間的配置を生成するが、ここで分子動力学法やモンテカルロ法を使用するのは、構成原子団が相互に大きな重なりを持たない空間的配置を生成するためで、現実の高分子においては確かに構成原子団が相互に大きく重なっていない。

20

【0016】

本発明では、ステップ3)とステップ4)によって与えられたフラグメントの配置に対して絡み合を持たないネットワークを決定している。これは、ネットワークで連結した構造が、後の構造緩和のステップによって適切な分子構造へと緩和されやすくなるようにするためである。与えられたフラグメントの配置に対して絡み合を持たないネットワークを決める為に、フラグメントの結合価不飽和原子で互いに近いもの同士を連結するがその方法は、詳細に後述する。

【0017】

ステップ5)では、出来上がったネットワークの分子構造に対して構造最適化計算と分子動力学計算およびモンテカルロ計算を行うが、このことは現実の高分子がエネルギー的に安定な構造を取っているという事実に基づいている。

30

このように、ステップ5)までの手法により、多数のアモルファス網状高分子の試行構造が得られる。

【0018】

ステップ6)では、ステップ5)までの手順によって得られた多数の試行構造から、微視的な構造パラメータが適切な値を取っているものを分子構造モデルの候補として選択するが、このことは、微視的な構造パラメータには結合の種類毎に標準的な値が存在するという事実に基づいており、高分子においても構造パラメータが標準値のごく近傍の値を取ることを前提にしている。

【0019】

ステップ7)では、実験的に物性値が測定されている場合に、この測定値が計算によってよく再現されるような構造を選択するが、これにより、アモルファス網状高分子の特徴をよりよく取り込んだ分子構造モデルを得ることができる。

40

なお、ステップ6)、ステップ7)の手順において、将来、物性値を予測することができ理論的な方法や経験的な法則が開発された場合には、その物性値をこれらのステップ6)、7)の選択に利用することが可能である。

【発明の効果】

【0020】

本発明の方法を使用することにより、指定された原子団組成を持つアモルファス網状高分子の試行構造を迅速に得ることができ、この試行構造から分子構造モデルを速やかに得

50

ることができる。こうして生成される分子構造モデルを使用すれば、これまで出来なかった網状高分子の分子シミュレーションが可能になる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0021】

以下、図面を参照して、本発明の実施形態について説明する。

図1は、与えられた網状高分子のフラグメントから分子構造モデルを得るまでの一連のデータ処理のフローチャートである。上述のステップ1)ないし7)はそれぞれフローチャートのS2, S3, S4-1, S4-2, S5, S6-1およびS6-2に該当する。

【0022】

図2は、このフローチャートによる一連の処理を視覚的に表現した図であり、この図では、図2-1)に示した5種のフラグメントをSi...O間で結合してSi₅O₈C₂H₈をユニットとするポリシロキサンを作る場合を例に取っている。

10

図2-1)ないし-5)はそれぞれ、図1のフローチャートの各ステップS1, S3, S4-1, S4-2, S5の処理を視覚的に表現するものである。

【0023】

・フローチャートのステップS1では、網状高分子のフラグメントの種類と個数が与えられる(図2-1))。

・ステップS2は、フラグメントの種類ごとに単独フラグメントの構造最適化を行う部分である。

・ステップS2-1では、フラグメントの構造最適化のための初期構造(仮構造)を与える。構造最適化に使用するソフトウェアの入力書式に従って初期構造を指定する。

20

【0024】

・ステップS2-2では、ステップS2-1で与えた初期構造を出発にフラグメントの構造を最適化する。

・ステップS3は、フラグメントの乱雑な空間的配置を複数個発生させる部分である(図2-2))。

・ステップS3-1では、ステップS-2で決定したフラグメントの最適化構造を、必要な個数だけ複製し適当に空間的に配置する。

【0025】

・ステップS3-2では、ステップS3-1で決定したフラグメントの空間的配置を初期構造にして、フラグメントの空間配置を乱雑化するための分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算を行う。分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算は、周知のものである。

30

【0026】

・ステップS3-3では、分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算で得られる構造から、ステップ4)以降の処理に使うものを記録する。すなわち、分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算では構造の微少変化を逐次的に計算するので、定期的な間隔をおいたステップの構造(スナップショット)のみを記録して、類似構造の処理をしないようにする(空間配置サンプリング)。

【0027】

こうして記録された構造がステップS1で与えられたフラグメントの乱雑空間配置である。

40

なお、分子動力学計算法あるいはモンテカルロ計算法は、巨大分子や分子集合体の構造を乱雑化するための手段としてしばしば使用される。このことは、例えば参考文献1に記載されている。

【0028】

・ステップS4は、フラグメントの連結を決定する部分である。このステップが本発明の重要な部分である。

・ステップS4-1では、フラグメントを暫定的に連結する(図2-3))。

・ステップS4-1-1では、連結される可能性のある原子対の距離を計算しテーブル化する。図2の例においては、異なるフラグメント上にある不飽和のSi原子とO原子の任

50

意の対が連結される可能性がある。

【0029】

・ステップS4-1-2では、ステップS4-1-1で得られた距離テーブルを参照に、距離の短いものから順に不飽和原子対を連結する。この時、途中で原子価が飽和した原子には新たに連結を作成しないようにする。

・ステップS4-1-3では、ステップS4-1-2での操作によって全ての不飽和原子価を飽和させられない場合を判断する。ステップS4-1-2のように連結を決定し不飽和原子価を飽和させられない場合として、たとえば最後に連結する原子対が同一フラグメント上にあるという場合がある。

【0030】

・ステップS4-2では、後のステップの構造緩和の操作の後に適切な構造が得られるように、ステップS4-1で決定した連結のネットワークを改変する。すなわち、ステップS4-1で決定したネットワークは、往々にして結合が不自然に絡まった構造を与え易いのでこれを回避する。

このために、長距離の連結が出来るだけなくなる様に連結原子対の組み合わせを交換する(図2-4))。

【0031】

・ステップS4-2-1では、最長の連結が短くなるように連結の対を交換する。具体的な交換方法は、最長の連結を含む2個の連結で連結原子対の交換を試行して、長い方の連結が交換の後に短くなるならこの交換を採用する。改めて連結の距離を調べ、最長の連結に対してこの操作を行い、最長の連結が変わらなくなるまで繰り返す。

【0032】

・ステップS4-2-2では、最長の連結対は変更しないことにしておいて、2番目に長い連結が短くなるように、ステップS4-2-1の連結交換の操作を行う。同様に1, 2, ... k番目に長い連結対を変更しないことにしておき、k+1番目に長い連結対を最小化するための連結交換を行う。

ステップS4-2-1からステップS4-2-4の操作を5回繰り返す。

・ステップS4-2の上述の一連の処理は、図3に示したフローチャートのように整理して示すことができる。

【0033】

・ステップS5では、構造緩和のための構造最適化と分子動力学計算を行う(図2-5))。

・S5-1では、次ぎに行う分子動力学計算に使う初期構造を得るための構造最適化を行う。

【0034】

・ステップS5-2では、ステップS5-1で得られた最適化構造を初期構造にし、アニーリングのための分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算を行う。

・ステップ6は、ステップ5)までに得られた分子構造から分子構造モデルとして適切なものを選択する部分である。

【0035】

・ステップS6-1では、結合長、結合角などの微視的な構造パラメータが標準値付近の適当な範囲内に収まっているものを選択する。

・ステップS6-2では、実験的に物性値が測定されている場合には、この測定結果が計算によって良く再現されるような構造を選択する。

【0036】

図4は、以上の計算に必要なソフトウェア構成と、それぞれのソフトウェアでのデータ授受を可視化して描いた図である。

手作業以外の処理は、4種の独立したプログラム(分子構造最適化プログラム、分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算のプログラム、ネットワーク生成プログラム、物性計算プログラム)で処理され、これらのプログラムはパーソナルコンピュータやワークステ

10

20

30

40

50

ーション上で稼動する。ネットワーク生成プログラムは上記のステップ3)と4)の操作(フローチャートではS4の操作)を行う。物性計算プログラムが使用されない場合もある。また、分子動力学計算あるいはモンテカルロ計算が物性計算を兼ねる場合もある。

【0037】

以下に、本件発明の予測法を用いて、具体的に有機シロキサン膜のモデリングを行った例を説明する。

この例のシロキサン膜モデルは、ユニットセル内に図5に示した5種のフラグメントを持ち、これらの結合価不飽和のSi原子とO原子を連結することによって作成される。

【0038】

こうして作成されるシロキサン膜モデルは、7個の CH_3SiO_3 と3個の HSiO_3 と1個の SiO_4 を持つ網状構造になり、原子組成としては $\text{Si}_{11}\text{O}_{17}\text{C}_7\text{H}_{24}$ (原子個数比は $\text{Si}:\text{O}:\text{C}:\text{H}=1:1.54:0.67:2.14$)を持つことになる。

【0039】

このモデリングの対象となっている実物の有機シロキサン膜は、テトラメチルシクロテトラシロキサン分子を原料としてプラズマCVD法によって生成されたもので、その物性値に関しては表1に示したような実験観測の結果が得られている。上述のフラグメントの種類と組成は、実験観測の結合種と原子組成が再現されるように選んだものである。

【0040】

【表1】

物性	値	分析法
密度	1.38g/cm^3	XRR
原子組成	$1:1.54:0.67:2.14$ ($\text{Si}:\text{O}:\text{C}:\text{H}$)	RBS
結合	Si-O, Si-C, Si-H, C-H	IR
ヤング率	12-17 GPa	nanoindentation
誘電率	2.9	Hg probe

【0041】

この例においては、フラグメントの乱雑構造生成(ステップ2))のために分子動力学法を使用した。1フェムト秒の時間刻みで550ピコ秒間の構造変化を求め、1ピコ秒毎の構造を記録する(空間配置サンプリング)ことにより500個(初めの50ピコ秒分を除く)のフラグメントの乱雑空間配置を得た。

【0042】

この分子動力学計算は、温度が298.15Kで圧力が10000atmの定温定圧分子動力学計算(参考文献2)である。なお、ステップ3)とステップ4)を経てフラグメントを連結し、不適当な連結を持つものを除去した結果、得られた試行構造は343個となった。

【0043】

構造緩和の分子動力学計算(ステップ5))では、温度が298.15Kで圧力が1atmの定温定圧の条件で、1フェムト秒の時間刻みで10ピコ秒の構造変化を求めた。

ステップ1)と5)の構造最適化計算およびステップ2)と5)の分子動力学計算にはMM3分子力場(参考文献3)を使用した。また、構造最適化計算および分子動力学計算にはプログラムパッケージTinker(参考文献4)を使用した。

【0044】

図6に本発明方法を使用して生成した343個の試行構造の密度の分布を表した。図6から実験値(1.38g/cm^3)に近い密度を有する試行構造がいくつか得られていることがわかる。

10

20

30

40

50

表 2 に、上記 3 4 3 個の試行構造のなかで、結合長の偏差の小さい構造 (S i - O、S i - H、S i - C、C - H の結合種それぞれに関して最大値と最小値との差が 0. 0 5 オングストローム以下の構造) を 6 種選択し、リストとした。実際には、S i - H、S i - C、C - H は結合長偏差が小さく、表の値は S i - O 結合のものである。なお、シロキサン高分子では、結合がイオン結合的であるので、結合角、二面角がかなり大きな範囲に分布するので、分子構造モデル選定の参照にはしていない。表 2 から結合長が、標準値の近傍に分布する構造が得られたことがわかる。

【0 0 4 5】

【表 2】

構造	結合長偏差 (Å)	密度 (g/cm ³)
1	0.033	1.434
2	0.039	1.360
3	0.044	1.323
4	0.044	1.368
5	0.044	1.570
6	0.046	1.414

10

【0 0 4 6】

図 7 には、これら多数の試行構造から得られた分子構造モデルの一つ (表 2 における構造 2 のもの) を示す。この構造は、実測の有機シロキサン膜と近い密度を示す構造である。

20

【0 0 4 7】

図 8 は、この構造に対して量子化学的手法を用いて計算された赤外吸収スペクトル b) と、実測の有機シロキサン膜の赤外吸収スペクトル a) を示す。実測のスペクトルが良く再現されていることがわかる。このことは、この構造が適切なものであることを (原子や原子団の組成が実物とほぼ等しく、結合長、結合角、二面体角の構造的パラメータの分布が実物とほぼ等しいこと) を示している。

【0 0 4 8】

この例は、本発明の方法を使用して、化学結合のネットワークと立体的分子構造を生成した結果、網状高分子の構造を良く表現する分子構造モデルが得られたことを示している。

30

上述の 3 4 3 個の試行構造を得るのに費やした時間は 2 日の程度である。本発明の方法を使用しない場合、図 7 に示した構造のようにアモルファス網状高分子の構造を良く表現する分子構造モデルをこの時間の範囲で得ることは容易ではない。

【0 0 4 9】

(参考文献)

- [1] F.Nardi and R.C.Wade,in Molecular Dynamics:From Classical to Quantum Method, ed.P.B.Balbuena and J.M.Seminario,Elsevier,1999,pp.859-898
- [2] H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. R. Haak, J. Chem. Phys., 81, 3684 (1984).
- [3] N. L. Allinger, Y. H. Yuh, and J.-H. Lii, J. Am. Chem. Soc., 111, 8551 (1989)., J.-H. Lii and N. L. Allinger, J. Am. Chem. Soc., 111, 8566 (1989)., J.-H. Lii, and N. L. Allinger, J. Am. Chem. Soc., 111, 8576 (1989).
- [4] Ponder, J. W. TINKER: Software Tools for Molecular Design, 3.9 ed.; Washington University School of Medicine: Saint Louis, MO, 2001.

40

【図面の簡単な説明】

【0 0 5 0】

【図 1】網状高分子構造モデルを得るためのデータ処理のフローチャートである。

50

【図2】シロキサン高分子 ($\text{Si}_5\text{O}_8\text{C}_2\text{H}_8$)_n を例にして、図2のフローチャート処理を視覚的に表現した図面である。

【図3】ステップS4-2における結合対の交換を行うアルゴリズムのフローチャートである。

【図4】発明の実施に必要なソフトウェアとソフトウェア間のデータの授受を示す図面である。

【図5】具体例で作成したシロキサン網状高分子モデル $\text{Si}_{11}\text{O}_{17}\text{C}_7\text{H}_{24}$ を構成するフラグメントを示す図面である。

【図6】本発明の方法を使用して生成した343個の試行構造の密度の分布を示すグラフである。

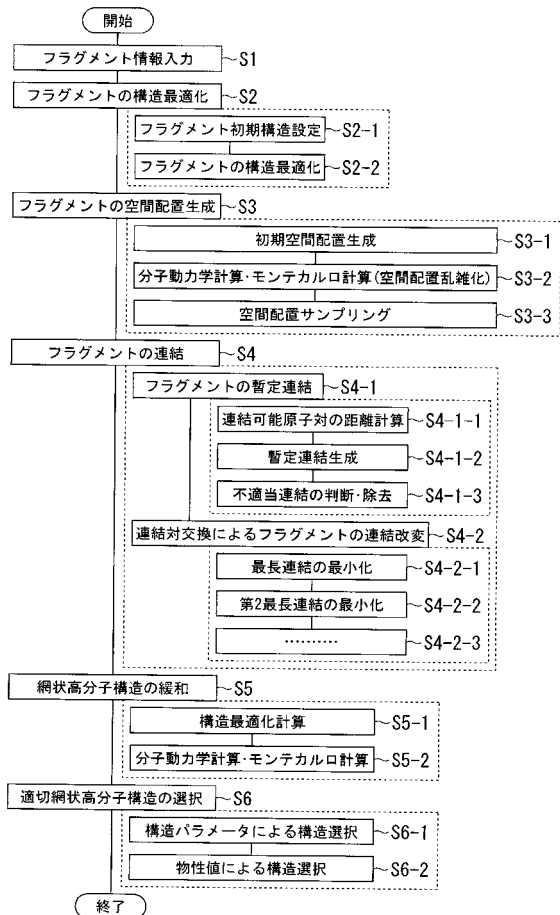
【図7】本発明の方法を使用して生成した343個の試行構造の中で実測に近い密度を持つ分子構造モデルの立体的な構造を示す図面である。

【図8】実測の有機シロキサン膜の赤外吸収スペクトルと図7の分子構造モデルの赤外吸収スペクトルを示すグラフである。

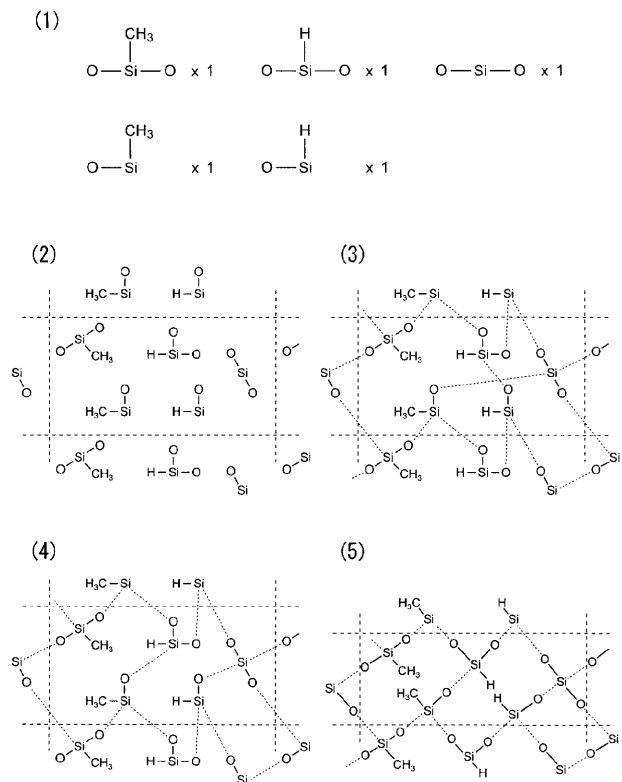
【図9】網状高分子の構造を模式的に表現した図面である。

10

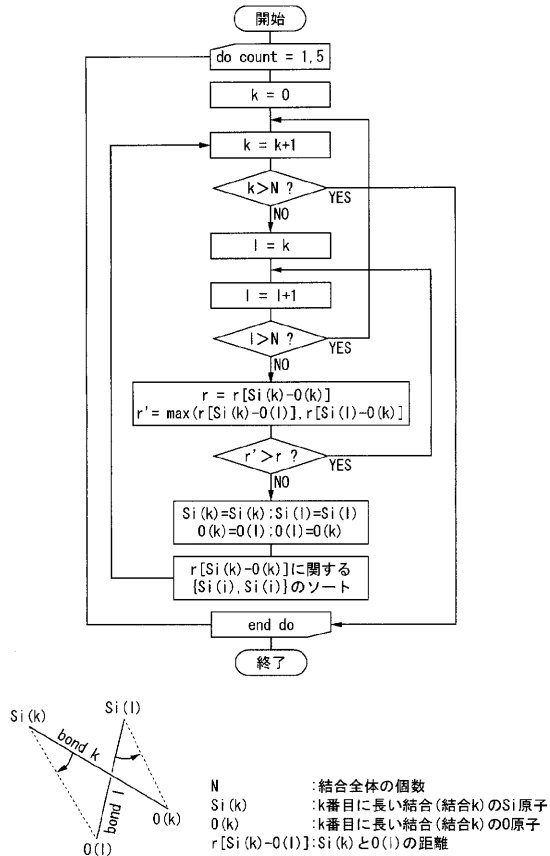
【図1】



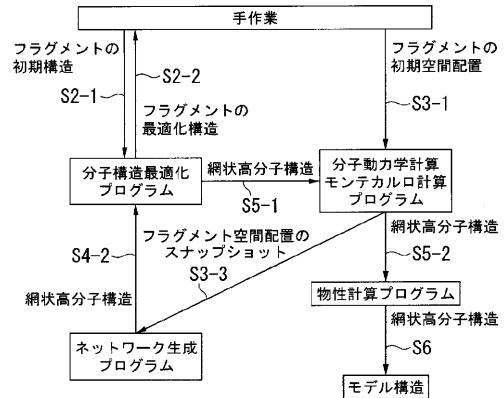
【図2】



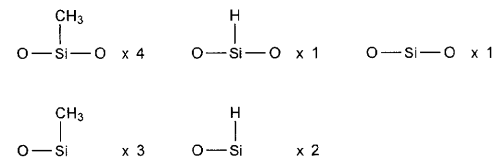
【図 3】



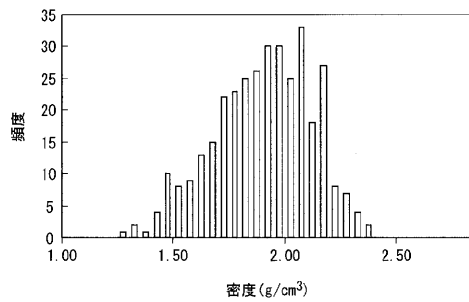
【図 4】



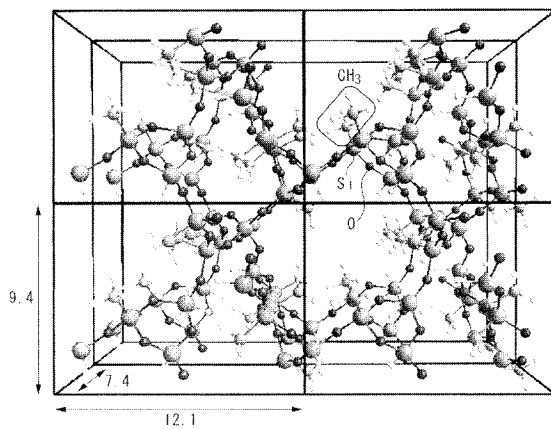
【図 5】



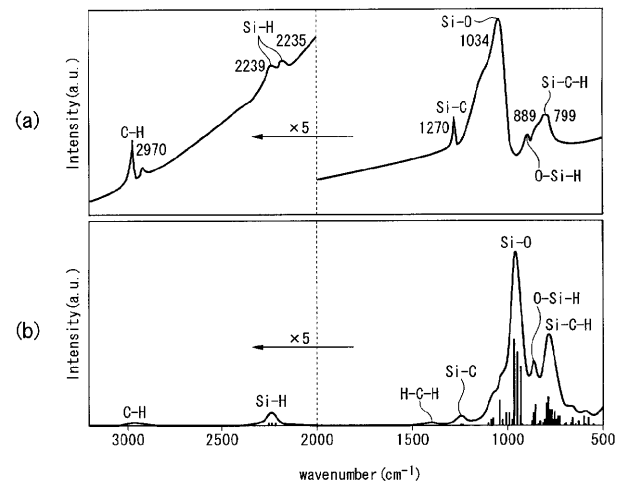
【図 6】



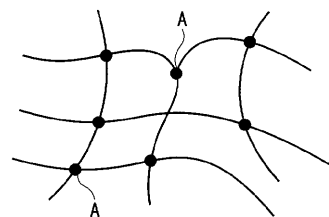
【図 7】



【図 8】



【図 9】



フロントページの続き

- (74)代理人 100094400
弁理士 鈴木 三義
- (74)代理人 100107836
弁理士 西 和哉
- (74)代理人 100108453
弁理士 村山 靖彦
- (72)発明者 大野 隆央
茨城県つくば市千現一丁目2番1号 独立行政法人物質・材料研究機構内
- (72)発明者 田島 暢夫
茨城県つくば市千現一丁目2番1号 独立行政法人物質・材料研究機構内
- (72)発明者 濱田 智之
千葉県千葉市稲毛区稲毛台町25-11
- (72)発明者 井上 實
東京都品川区小山一丁目3番26号 太陽日酸株式会社内
- (72)発明者 羽坂 智
東京都品川区小山一丁目3番26号 太陽日酸株式会社内
- (72)発明者 杉森 由章
東京都品川区小山一丁目3番26号 太陽日酸株式会社内
- (72)発明者 宮澤 和浩
東京都品川区小山一丁目3番26号 太陽日酸株式会社内
- Fターム(参考) 4J031 CA17 CG48