



Virtual Quantum Laboratory

Quantemol-N

会社概要

クオンテモル社はユニバーシティ・カレッジ・ロンドンに拠点を置き、ジョナサン・テニソン教授とダニエル・ブラウン博士によって設立されました。我が社は独自で開発したソフトウェア Quantemol-N を使い、electron polyatomic molecule interactions の解析に必要な数理モデル UK molecular R-Matrix codes への完全なアクセサビリティを備えています。

企業の基本理念

クオンテモルでは産業界から学識者まで幅広い顧客層に、実験より効率的、安全、堅実、正確、そして経済的な quantum process の計算方法を提供することで科学や技術の発展・促進に寄与することを目指しています。

弊社の役割

- 他に類を見ない精密な電子の相互作用の数理的モデル化。
- 分子物理学の専門家によって構成されたクオンテモル・チームの技術的なアドバイス。
- 量子科学の基礎知識が無くとも扱える立証されたデータの提供。
- 反応断面積データの速やかな提供。
- 細かな対応サポート。

それでは、弊社が皆様にどのようにお役に立てるかをご紹介します。

ダニエル・ブラウン (Ph. D) 会長



ブラウン会長は13歳の時にすでにコンピュータのソフトウェア会社を設立、5年間その運営に従事しました。その後、化学、物理、哲学を専攻。特に確立とネットワーク理論に情熱を持ちました。これまでに取得した特許は多数に上り数々の著書があります。これまでの30年間はロンドン大学 (UCL) で客員講師および在籍の企業家として活躍。世界各地で情報システムに関する講演活動や論説活動にかかわる。ソーシャル・ネットワークを手がけるメガネクス社の取締役も兼務。

ジョナサン・テニソン教授, 主席サイエンティスト



テニソン教授は物理学部の教授を務める傍ら量子物理の分野でのさまざまな研究活動の指導者として活躍。教授はケンブリッジ大学の自然科学部門で学び、後にサセックス大学で博士号を取得。その後オランダの研究機関に勤務の後、ロンドン大学に移籍。原子・粒子に関する理論物理および宇宙物理研究グループ (TAMPA) をスタートさせ、現在25名の研究員を擁している。これまで、教授は400を超える学術論文を発表。今年には著書を上梓の予定。過去20年にわたり教授は電子の衝突の研究手法を開発。この間プラズマエッチング、プラズマの融合、宇宙物理、ニュートリノの質量計算、放射能の生態系への被害に関する計算手法を編み出した。彼の研究グループは地球の大気や宇宙物理にとって重要とされる量子による光の放出や吸収に関する研究手法を手がけている。

多原子による電子干渉の相互作用の数理的モデル化

クオンテモルとは

電子の衝突の様々な観測値の計算：

- 総合反応断面積、励起電子・解離反応断面積
- 共鳴の媒介変数
- **BEB** イオン化反応断面積
- 解離的 **attachment** 反応断面積

Quantemol-N の利点

- 世界の最先端にある「UK molecular R-matrix code」に基づくシステム。（最近の CF₃ radical の研究 ([stacks.iop.org.1367-2630/5/155](http://stacks.iop.org/1367-2630/5/155))の実験をご参照ください)
- 使い易い画像インターフェイス
- 柔軟、且つユーザーフレンドリーな試算結果の表示

クオンテモルの応用範囲

- Closed 電子殻の解析
- Open 電子殻、ラジカルの解析
- 電荷的に中性、プラスなケースの分析
- 原子数 17 個までの分子は解析済み

Quantemol-N の精度

指標的存在である水の分子に対して最近研究を行ったところ、実験では得られない正確なデータ得ることに成功しました。（[Faure et al, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys 37, 801-807 (2004)]を参照）。

実験では低角度で大きな反応断面積を測定することが困難です。この分析手法は双極子モーメントが大きいいかなる分子にも応用できます。

モデルの背景

低エネルギーの電子による粒子との衝突は環境や近代のテクノロジーにさまざまな影響を及ぼしています。例を挙げると、

- 「プラズマエッチング」の開始。
- レーザーの制御
- 内燃機関に必要な燃焼の制御
- 原子核融合時のエッジ効果の測定
- 放射線による生体組織へのダメージ
- 地球の電離層の動き

などがあります。

こういった現象の測定は困難なうえ莫大な費用を要します。さらに科学的な理論付けには高度な量子力学の応用が必要になります。

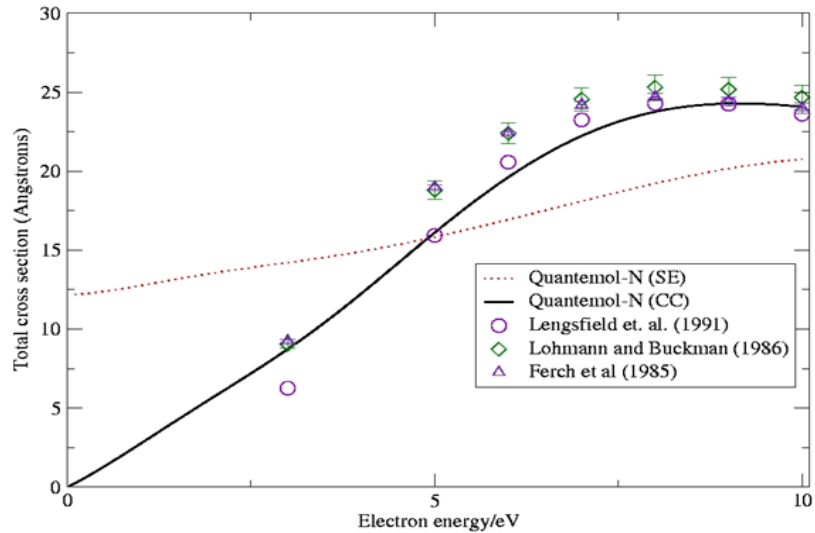
クオンテモル N は利用者に極めて高度な「UK molecular R-matrix code」を使用するためインターフェイスを提供します。簡単な分子のパラメーターの入力によりユーザーは様々な衝突、励起の反応断面積、そして電子の衝突の頻度を得ることが可能です。

Quantemol-N の製品

Quantemol-N は「standard edition (SE)」、
「enterprise edition (EE)」の二つのタイプを提供しています。「enterprise edition (EE)」はスタンダードエディション (SE) の持つすべての機能に加えて、「バッチ処理機能 Batch job facility」が搭載されており、複数の計算をまとめて自動処理する事が可能です。さらにスタンダードエディション (SE) より幅広い分子数 (~40 程) に対応しており、購入後直ちに使用可能です。

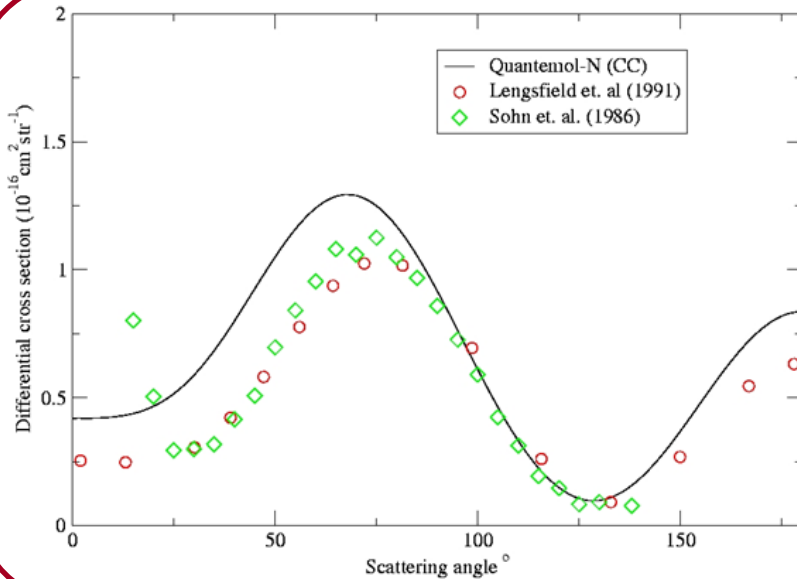
図表 1

CH₄のCross Sectionです。
Quantemol-N (黒と赤の折れ線)、理論値(Lengsfeld et. Al. 紫の○)そして実験値 (Lohmann&Buckham緑, Ferch et.al. 紫△)に基づいたデータを比較したグラフです。



図表 2

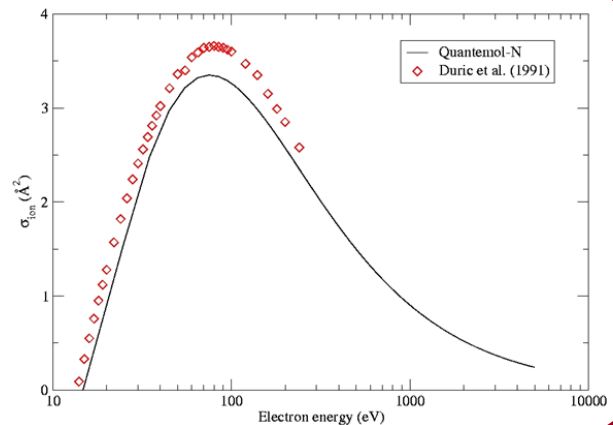
CH₄のCross SectionのQ-N data より導かれた微分値です。この図ではQuantemol-N (黒) の推定値、理論値(Lengsfeld et. al., 赤の丸) および実験値(Sohn et.al., 緑の四角)が示されています。

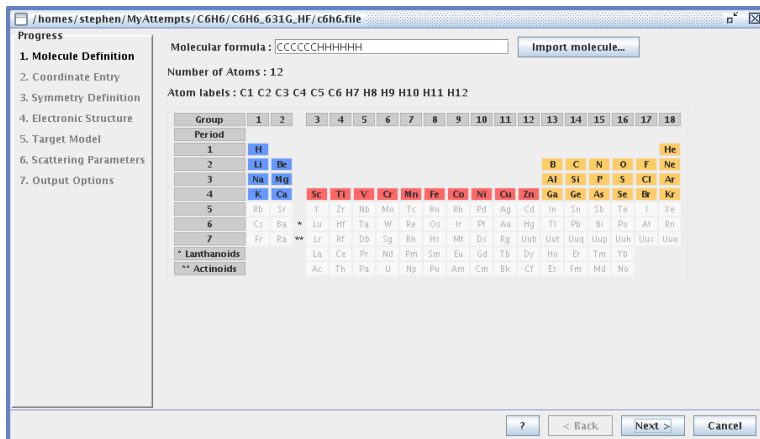


注: これらの数値はユーザーへのコンサルテーションでQNモデルを使用して計算可能です。

図表 3

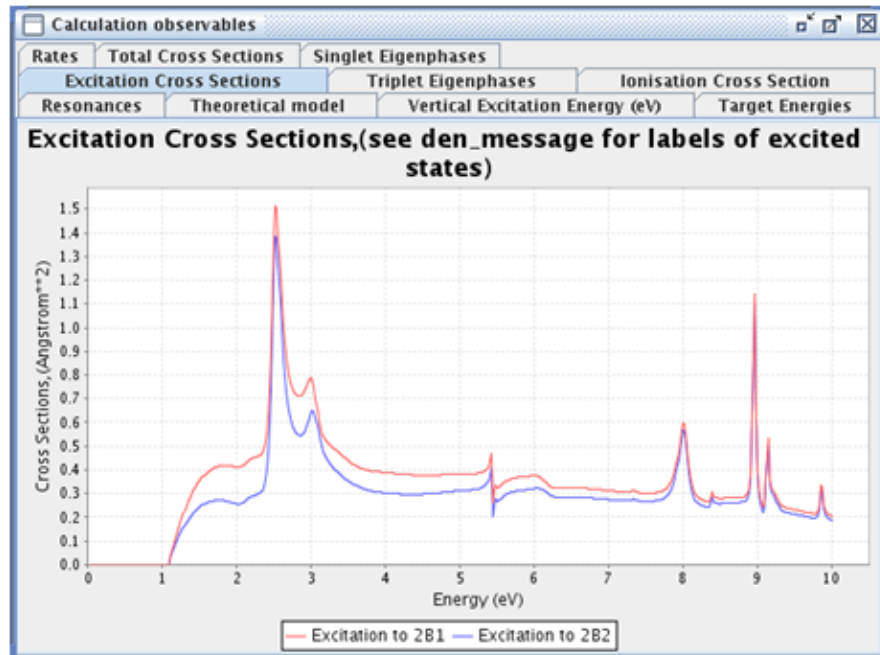
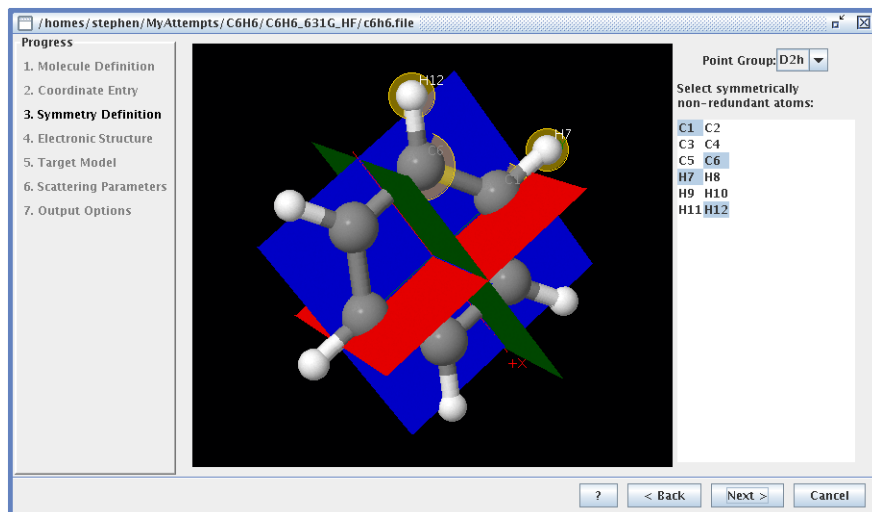
CH₄のBEB イオン化 cross-sectionです。ここでは Quantemol-N のデータが実験値 (Duric et.al., 赤の四角)と比較されています。





Quantemol-N のシンプルで使いやすいインターフェイス。

データ入力時にはプログラムがユーザーを簡単なステップを踏みながらガイドします。自習システム、ステップ・バイ・ステップウィザードによるサポートも用意されています。



計算結果は自動的に結果ウインドウに表示されます。データは分析用にテキストファイルとしても保存可能であり、また後で同じ状態でウインドウに表示することも可能です。

お問い合わせ先

Quantemol では初期のコンサルテーションからご購入後のアフターケアまで、お客様との関係を大切にしています。こういったサービスを元に、Quantemol 製品のお客様の様々なご意見、ご希望を取り入れてより新しいプログラムの開発が常に行われています。Quantemol ではお客様のご要望をお待ちしております、御不明な点、ご質問がございましたら Quantemol のメールアドレス (sales@quantemol.com) までお問い合わせください。



Quantemol-N ではお客様からのご要望に応じて、以下のデータ・プログラムを提供させていただきます。

- 束縛状態の電子による散乱データ
- 運動量移動時の反応 Cross Section
- 微分 Cross Section



Quantemol-N ではウェブ上でのデモンストレーションを用意しております。製品について詳しい情報、またデモンストレーションを御希望の場合は弊社までお問い合わせください。



Quantemol のお問い合わせ先:

Quantemol Ltd
Department of Physics and Astronomy
University College London
London WC1E 6BT

Tel: (+44) 0207679 3476

Website: www.quantemol.com

Email: sales@quantemol.com

Please note all Quantemol software requires at least: Linux x86 or Windows XP operating system, 1 GB RAM (2GB for large calculations), 10 GB free disk space, Installation of the official Java virtual machine and JRE v.1.6.0, Quantemol-D requires the HPEM codes