材料設計支援プラットフォーム　SciMAPS

Scienomics 社ウェビナーのご紹介

SCIENOMICS
delivering science

SciMAPS は量子化学計算からメソスケール計算まで時間的にも空間的にも異なるさまざまなスケールの計算科学手法に対応した材料設計支援プラットフォームです。開発元である Scienomics 社では、SciMAPS の各パッケージの機能やその応用事例を紹介するための月に 1 度ウェビナーを開催しております。本稿では最近開催されたウェビナーの内容を紹介いたします。

Thermophysical properties and phase behavior of industrially relevant systems

University of Notre Dame
Prof. Edward Maginn

新たに Classical パッケージに追加されたモンテカルロ法計算プログラム CASSANDRA の開発者である演者は、その基本機能と応用事例を紹介しました。ギブスアンサンブルモンテカルロ法により、アルコール類やハイドロフルオロカーボン類の気液共存曲線を推算し、その精度について言及しました。臨界点の予測の難しいハイドロフルオロカーボン類については、機械学習を利用した独自の手法による力場パラメータの改良事例を紹介しました。他に、ゼオライトに対するガス分子の吸着、MC 法と MD 法を組み合わせたイオン液体含浸液膜中の混合ガスの透過性等の研究について紹介がありました。

Molecular simulations of tribological systems using MAPS and LAMMPS

Imperial College London
Dr. James Ewen

LAMMPS による分子シミュレーションを利用したトライボロジー研究について紹介しました。酸化鉄表面同士が最も近い状態である境界潤滑領域での有機摩擦調整剤の検討では、被膜を形成する添加剤分子の表面密度が高いと動力により移動する酸化鉄表面とほとんど変わらない速度で、表面分子が移動するのに対し、表面密度が低い場合は典型的な平面クエット流のようなふるまいをすることが、LAMMPS を利用した非平衡分子動力学により示されました。他にも摩擦調整剤の極性末端基の違いや弾性潤滑流体領域における潤滑油のベースオイルとなる分子種による挙動の解析事例、表面材料や表面温度による温度分布の研究など紹介しました。

Clean, high quality low emission fuels with Fischer–Tropsch polymerization: a mesoscale study of transport processes in confined systems

Texas A&M University at Qatar
Prof. Ioannis G. Economou

GROMACS と SciMAPS を利用した事例として、Fischer–Tropsch 法で用いられる材料を模したグラフェン及びその誘導体に挟まれた金属ナノ粒子と混合液体の挙動の研究を紹介しました。グラフェンおよび酸化グラフェンに挟まれた金属ナノ粒子と混合液体（ワックス、水、ドデカン-1-オールからなる）の挙動の、粗視化レベルでの分子動力学を用いた研究について講演しました。この研究は、CO_2 を原料とする液体燃料の製造で注目される Fischer−Tropsch 法で重要とされる細孔内の物質移動プロセスの検討に役立つことが期待されています。

過去のウェビナーの視聴

過去のウェビナーは、ウェビナーオンデマンド（https://www.scienomics.com/recorded-webinars/）にて動画配信されていますので、興味のある方はご登録の上、是非ウェブサイトへアクセスしてみてください。また、今後開催されるウェビナーにつきましては、開発元のホームページ（https://www.scienomics.com/）の LATEST News & EVENTS にリストアップされますので合わせてご覧ください。

- 弊社ウェブサイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- 電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバー（RSI ニュースレターを含む）は、弊社ウェブサイトをご覧ください。
- 本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトのご担当者様にお送りしています。その他に発送のご希望がございましたら弊社までご連絡ください。
- 記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

MOLSIS ニュースレター
No. 18, 2021.07
2021 年 7 月 1 日 発行
発行所 株式会社モルシス
Copyright © 2021 MOLSIS Inc.

MOLSIS 株式会社モルシス
URL: https://www.molsis.co.jp/
TEL: 03-3553-8030　FAX: 03-3553-8031　E-mail: sales@molsis.co.jp