材料設計支援システム　SciMAPS

SciMeeting2021

SCIENOMICS
delivering science

SciMAPS の開発元である Scienomics 社は去る 10 月 27–29 日の 3 日間、SciMeeting をウェブ上で開催いたしました。SciMeeting は、企業研究でのシミュレーション活用事例やシミュレーション手法の最新の研究等について専門家から講演いただくことで、マテリアルサイエンス分野のシミュレーション技術を紹介することを目的としています。2019 年までは海外で現地開催されておりましたが、昨今の事情を鑑みて本年はウェブ開催となりました。本稿では 4 つの講演の内容について紹介します。

Refrigerants and Ionic Liquids with Materials Modeling

University of Notre Dame
Prof. Edward Maginn

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、モンテカルロ法と分子動力学法を組み合わせることで、イオン液体含侵膜中のガス分子の透過性を評価し、混合ガスから二酸化炭素を分離させるのに最適なイオン液体の組み合わせを調べる応用事例を紹介しました。含侵するイオン液体がアミノ酸イオン液体［P4444］［Gly］の場合には、二酸化炭素とアミノ酸陰イオンが反応することでより多くの二酸化炭素を吸収しますが、生成するカルバミン酸基が水素結合ネットワークを形成し粘性が極度に上昇するため、高い透過性能を発揮できないことを分子動力学計算により示しました。この知見を活かし二酸化炭素を吸収してもカルバミン酸基を生成しない非プロトン性複素環陰イオン（AHA）を導入することで、高い吸収性を持ちかつ反応後も粘性がほとんど変わらないイオン液体を考案しました。他に、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、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を行い、冷媒の回収、再利用に関するイオン液体の事例を紹介しました。

Materials simulations at Freudenberg Technology Innovation（FTI）

Freudenberg Technology Innovation
Dr. Daniele Savio

LAMMPS による分子シミュレーションを利用して原子レベルでのポリエーテルエーテルケトン（PEEK）高分子表面間の摩擦についての研究事例を紹介しました。アスペリティ接触部における摩擦工程や構造変形、局所摩擦に対する物理吸着流体層の影響について調べるために凸凹な表面、平坦な表面、水分子を含まないドライなモデルとウェットなモデルを用意し、さまざまな圧力でシミュレーションを行いました。ドライなモデルでは、大きくサインカーブを描くような凸凹な表面であっても、20 nm 程表面をスライドすると平坦から開始したモデルと構造的には同じにようになることが示され、圧力が強いほど平坦化する速度は速くなりました。せん断応力 – 圧力を調べると、ウェットなモデルでは、表面にせん断方向に整列した水によるナノチャネルが生成し、高分子界面の距離が保たれ、せん断応力は低減されますが、プロットの傾きから得られるナノスケールでの摩擦係数はほとんど変化しないことが示されました。ここで得られたナノスケールでの摩擦係数と連続体接触力学シミュレーションを組み合わせたモデル式を考案し、実験で得られる数値と比較してその傾向の再現性と有用性を示しました。

Parameterizing chemically-specific coarse-grain models of polymer melts: Structure and dynamics

NIST
Dr. Lilian Johnson and Dr. Fred Phelan

ポリマーの粗視化モデルのパラメータ作成についてはボトムアップ的なアプローチを通常行いますが、ポテンシャル面の粗視化に伴うエネルギー表面の平滑化により、粒子の運動が不自然に加速されるという問題があります。この問題を解決するために、化学的な挙動を再現しながら動的に正しいモデルを得る方法として、Langevin サーモスタットの摩擦をあらわすファクター Γ を利用する手法を考案しました。モノマーの拡散、分子鎖の拡散、末端間ベクトルの自己相関、粘性に着目して、全原子モデルの挙動とメソスケールの挙動で、Γ を評価し、どのような Γ を選択すべきかを検討した事例を紹介しました。

Molecular engineering for environment friendly industrial processes and materials design

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

分子シミュレーションによる細孔内の分子の挙動についての研究を中心に環境にやさしいプロセスと材料デザインに関する研究を紹介しました。ゼオライト様イミダゾレート骨格材料として知られる ZIF-8 ついては、細孔径の大きさと拡散速度に基づく分離および吸着に基づく分離の 2 つについての事例を紹介しました。前者については、ZIF-8 のヒンジ部分の金属原子イオンと有機リンカー部分に置換基を導入することで、分離するガス種や拡散速度を調整し、商用的に期待される今までにない分離能を持つ骨格構造の候補を示しました。後者については、イオン液体を細孔内に導入することで二酸化炭素の選択的な分離に最適なイオン液体の ZIF-8 に対する質量比をイオン種の組み合わせと共に示し、分子シミュレーションの有用性を示しました。