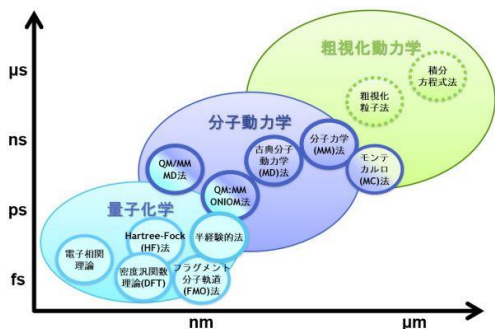


計算化学に関する兵庫県立工業技術センターの試み

つながる兵庫の技

計算化学



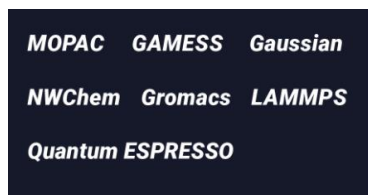
https://www.hpc.co.jp/chem/library/c_select_software/

- ✓ コンピューターを用いて材料の構造・物性を計算する分野
- ✓ 材料・現象のスケールによって計算手法が異なる

ソフトウェアの紹介

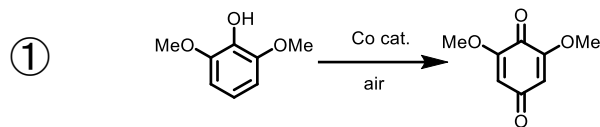


- ✓ (株)クロスアビリティが開発したGUI
- ✓ 量子化学計算・分子動力学計算・固体物理計算のシミュレーション業務が可能
- ✓ 下記の汎用性の高いソフトウェアを網羅している

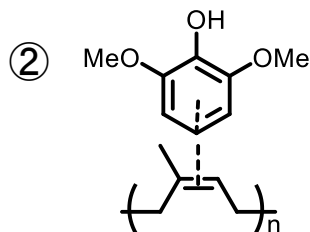


<https://winmostar.com/jp/>

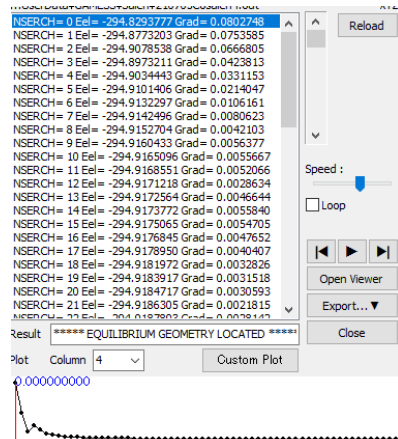
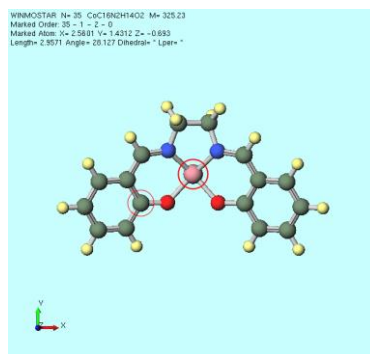
取組内容



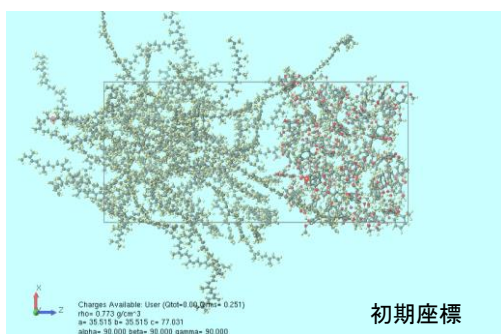
① 燻煙処理された天然ゴム (Ribbed Smoked Sheet, RSS) から発生する2,6-dimethoxyphenolの臭気を軽減する触媒を実験科学的および計算化学的アプローチにより選定する。



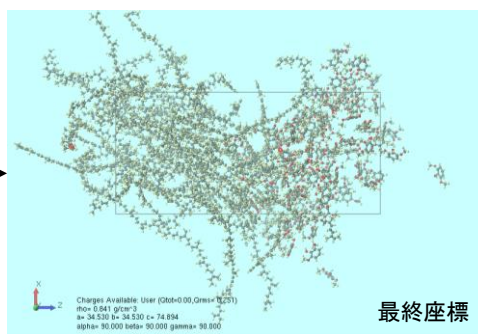
② RSSが2,6-dimethoxyphenolをどのようにして吸着しているのかを分子動力学シミュレーションで明らかにする。



GAMESSによる触媒の構造最適化計算 (長崎県工業技術センターとの共同研究にて実施中)



20万fs後

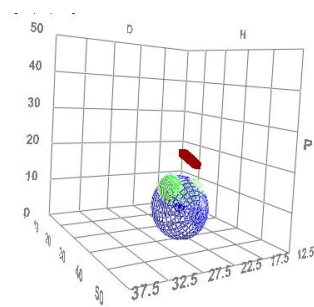


LAMMPSによるcis-1,4-polyisopreneと2,6-dimethoxyphenolとの間に界面を形成した系のNPTアンサンブル (兵庫県立大学大学院情報科学研究科の保有している計算機を使用してシミュレーション)

Hansen Solubility Parameter in Practice (HSPiP)



- ✓ 溶解度パラメータは凝集エネルギー密度の平方根で定義される物性値であり、溶媒の溶解挙動を示す数値です。このSP値を分散力項 (δD)、極性項 (δP)、水素結合項 (δH) の3成分に分割して物質の極性を考慮したパラメータがHSP値 (Hansen溶解度パラメータ) である。
- ✓ このソフトウェアを用いると材料の溶解性・浸透性などを評価することが可能である。



cis-1,4-polyisopreneのHansen球