

SORPTION

データシート

工業用ガスやユーティリティ ガス、石油化学製品および機能性触媒を生産する人たちは、吸着に左右されるプロセスを改良することによって、巨大な商業的利益を得ます。ゼオライト、アルミノリン酸塩、あるいはポリマーなどの微孔構造への分子の吸着は、気体分離、炭化水素の分解蒸留やイオン交換など多種多様の応用を行う際に重要です。

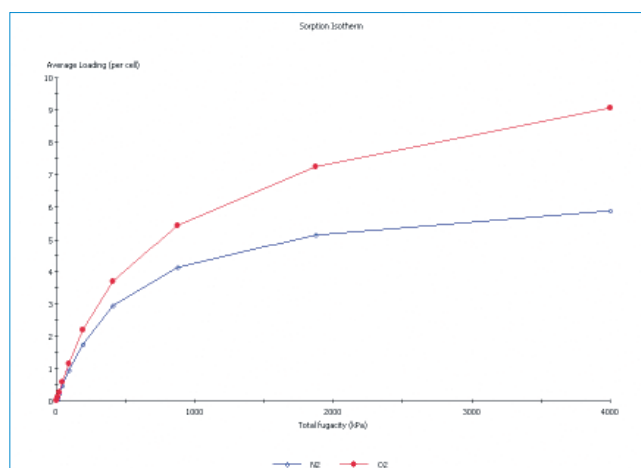
Sorptionは、吸着等温線（あるいは供給-loading-曲線）やヘンリー定数などの基本的特性を予測する手段を提供しますが、これは分離現象の研究に必要です。さらに、モデル化を用いて、分子レベルのプロセスによる吸着特性を合理的に説明することができます。たとえば、孔のサイズ、分子量や酸性部位の密度はどのようにしてゼオライトの分子分離機能に影響を与えるのでしょうか。一般的に、実験的に特性を決定する場合は合成を行い、その後で吸着等温線やその他の物理的特性を測定することが必要になります。シミュレーションを行うと、最適化されたシステムを開発するまでのリードタイムが大幅に短縮され、実験による試みを合理的設計によって導くことができます。

SORPTIONの利点

Sorptionは、結晶性物質中の分子の吸着を予測するためのソリューションを提供します。先進的なシミュレーションは、Biovia Materials Studioのデスクトップ環境で、高度な構造モデル化ツールと組み合わせることにより次のようなことができますようになります。

- 吸着等温線の予測
- 構造変化、イオン交換、電荷分布の変化や置換型ディスオーダーの吸着特性に対する効果のモデル化
- 分子篩（ふるい）の中での純成分または混合物の挙動の研究
- システムに対する温度や圧力による影響の定量化
- 優先的吸着部位を特定し、その部位における結合エネルギーを計算することによる、原子レベルでの吸着メカニズムの基礎についての理解
- 効果的なグラフ表示と分析による結果の解釈

これらの基本的な特性に関する知識は、工業に関連する多くの問題を説明する際に不可欠な場合が多くあります。たとえば、吸着等温線は膜を介した分子の拡散を説明するのに必要ですが、実験データはたいいていの場合不足しています。さらに、分子モデリングによって得られる結果からは洞察が得られますが、これは実験からは容易に得られません。たとえば、水素化分解におけるゼオライトの形状選択性は、微細孔の中の優先的吸着部位によって理解できます。



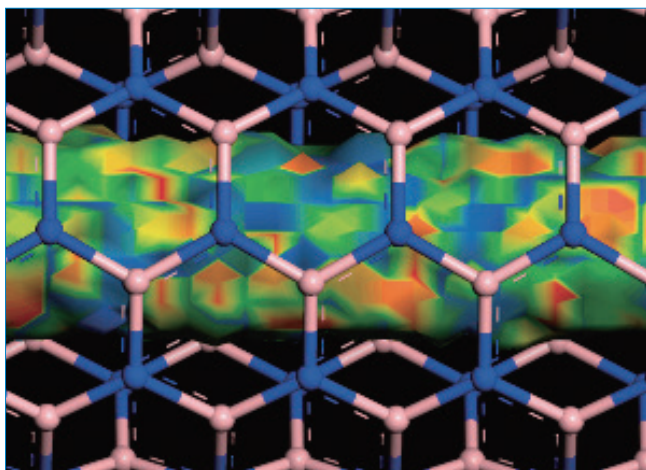
300Kのモルデナイト中の酸素と窒素の吸着等温線をSorptionでコンピュータ計算したものです。吸着物の混合物を処理する能力は、分離および拡散のプロセスをモデル化する場合に重要です。

SORPTIONの機能

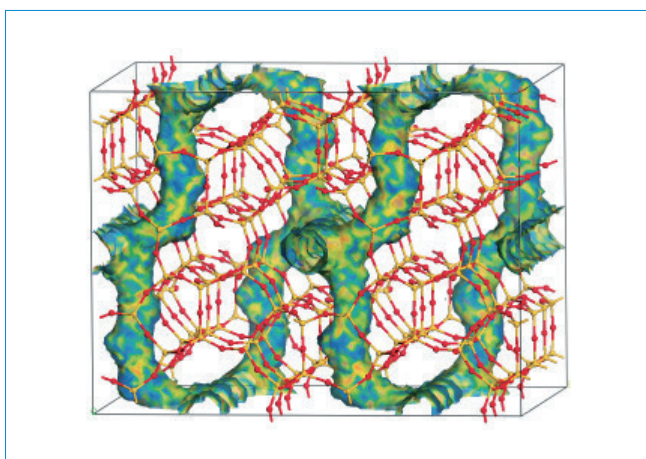
Sorptionを利用すると、ゼオライトのような微孔構造の結晶が典型例であるような、吸着剤の骨格に吸着された純吸着物（あるいは吸着成分の混合物）をシミュレートできます。Sorptionは、吸着平衡をシミュレートする次のような3つの方法を提供します。

- ロード一定の方法（カノニカル アンサンブル）：この一定数の吸着物分子に対する優先的結合部位はどこにあるか。
- 圧力一定の方法（グランドカノニカル アンサンブル）：一定の条件でどのくらいの数の分子が吸着されるのか。
- ヘンリー定数の方法（ユニフォーム アンサンブル）：圧力がゼロに近づくにつれてロードはどのように変化するのか。

Sorptionは2つのモンテカルロシミュレーション方式、すなわちMetropolis Monte Carlo方式とConfigurational bias Monte Carlo方式をサポートします。Metropolis方式は従来から使われているMonte Carlo方式であり、ここでは吸着物の構造を固定したものとして扱い、剛体の並進と再配向のみを取り入れます。Configurational bias方式では、さらにねじれの自由度も取り入れます。Configurational bias方式は大きくて柔軟性のある吸着物に有用であり、この場合Metropolis方式は適切ではありません。



Sorption は、ナノチューブ内でのガス貯蔵を研究する場合に利用できます。この図は、窒化ホウ素ナノチューブ内の水素の吸着を表しています。窒素原子はブルーでホウ素はピンクです。表面は、ナノチューブ内で水素密度が同密度の表面を示します。表面はポテンシャルエネルギーによって色をつけており、レッドは低いエネルギー（強い結合）を、ブルーは高いエネルギーを示します。



100 k Pa、300 K の条件でゼオライトMFI 中のメタンの吸着を表したものの、CHの予測位置の任海都度表面を、結合エネルギーで色づけして表示。エネルギーの低い（結合力は強い）エリアはレッドで、エネルギーの高いエリアはブルーで示されています。このような図によって、孔の中の優先的結合部位とともに、吸着物が高濃度に存在するエリアが示されます。

BIOVIA MATERIALS STUDIOの長所

SorptionはBIOVIA Materials Studio®の製品です。BIOVIA Materials Studioは、Windows®標準のユーザ フレンドリなインターフェイスを提供しています。Materials VisualizerはBIOVIA Materials Studio の中心的な製品であり、モデル構築や視覚化のツールを広範囲にわたって提供しているため、興味のあるシステムのモデルを迅速に構築することができ、2回のマウスクリックでSorptionを選択して、モンテカルロシミュレーションを実行できます。

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、**12の業界を**対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com（英語）、www.3ds.com/ja（日本語）をご参照ください。



© 2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTED, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および INETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、画面による明示の承認が必要ですが、画面による明示の承認は、画面による明示の承認が必要です。