

粗視化分子動力学シミュレーションによるスラリーの粘弾性解析

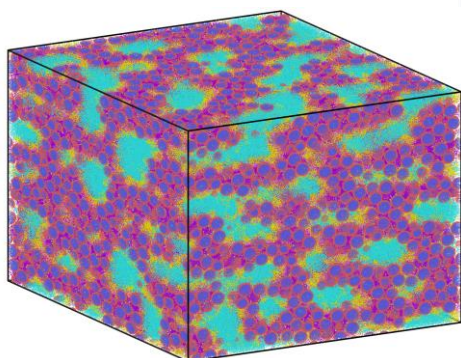
2022年1月8日

本資料では、Winmostar有償サポートを利用してスラリーの粘弾性解析を行われた、京セラ株式会社先進マテリアルデバイス研究所中田浩弥様の事例を紹介いたします。

Winmostar有償サポートでは、シミュレーションを始めたばかりの方から本格的に使用されている方まで全ての方にご満足頂けるよう、メール質問、講習会、計算のプランニング、論文のトレースなど様々なユーザサポートを提供しています。詳しくは<https://winmostar.com/jp/paid-supports/>にてご確認頂けます。

今回中田様にご利用頂いたWinmostar有償サポートでは、半導体微粒子が有機溶媒中に分散したスラリー系の粗視化分子動力学計算を実行する手順を構築し、提供させて頂きました。粗視化計算は長時間・大空間スケールを扱うための強力な手法ですが、研究目標の設定とアルゴリズム・パラメータの設計を適切に連携させないと全く意味がない解析になってしまう危険性を持っています。そのため、ソフトウェアWinmostarの提供のみならず、物理化学および各種計算手法に関する豊富な研究経験を持つスタッフによるサポート・コンサルティングも同時に提供しています。

本サポートを利用された中田様の研究成果の詳細については、文献[1][2]にて一部ご確認頂けます。



図：実際にLAMMPSでの計算に使用したせん断を掛けている最中の大規模粗視化スラリーモデル(約490万粒子)

以下に中田様にWinmostar有償利用サポートをご利用頂いた動機、活用方法などをお聞きしたインタビューの内容を紹介させて頂きます。(2021年12月インタビュー実施)

今回の研究は社内の開発現場のどのようなニーズに基づいてテーマアップされましたか？

(中田様) 有機高分子材料と半導体微粒子(無機粒子)との複合材料では、無機粒子に、有機高分子が複雑に絡み合うことで、高性能な機能発現をしています。材料の性質を調べる場合、有効な実験手法が限定されており、しばしば高価な解析費がかかってしまう問題がありました。シミュレーションで安価に短時間で材料の機械的性質を調べる方法が必要でした。

WinmostarおよびWinmostar有償サポートをどのようにご利用されましたか？

(中田様) LAMMPSを用いた全原子MDから粗視化ポテンシャルを作成する手順の調査・構築においてWinmostar有償サポートを利用しました。全原子MDの実行にはWinmostarを使用しました。曖昧だった研究計画や計算検証方法などを開始前に丁寧に相談させて頂き、迅速な課題解決が可能となりました。またWinmostarを使うことで、引継ぎや社内における展開が容易で、非常に効率よく粗視化MD計算の技術導入を進めることが可能でした。

京セラ株式会社 先進マテリアルデバイス研究所
中田浩弥 博士

2015年東京工業大学生命工学科博士課程修了
同年 京セラ株式会社に入社
専門は量子化学、マルチスケールシミュレーション
2020年度HPCI利用研究課題優秀成果賞受賞
2021年度分子シミュレーション学会産業奨励賞受賞



参考文献：

- [1] Nakata, H., Kiguchi, T. and Hino, O., Investigation of the effect of surface phosphate ester dispersant on viscosity by coarse-grain modeling of BaTiO3 slurry, J. Am. Ceram. Soc., (2021). <https://doi.org/10.1111/jace.18274>.
- [2] 中田, 木口, 日野, 第35回分子シミュレーション討論会, (2021), 岡山.