

# SORPTION

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。

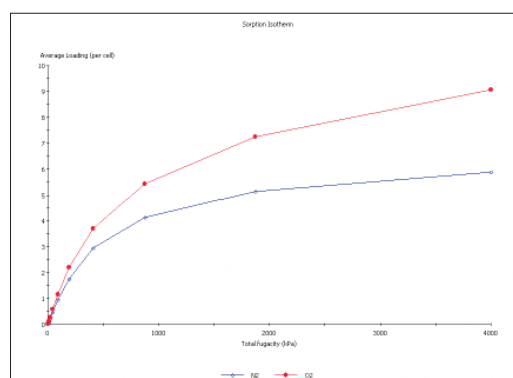
Sorption は、吸着等温線（あるいは供給-loading-曲線）やヘンリー定数などの基本的特性を予測する手段を提供しますが、これは分離現象の研究に必要です。さらに、モデル化を用いて、分子レベルのプロセスによる吸着特性を合理的に説明することができます。たとえば、孔のサイズ、分子量や酸性部位の密度はどのようにしてゼオライトの分子分離機能に影響を与えるのでしょうか。一般的に、実験的に特性を決定する場合は合成を行い、その後で吸着等温線やその他の物理的特性を測定することが必要になります。シミュレーションを行うと、最適化されたシステムを開発するまでのリードタイムが大幅に短縮され、実験による試みを合理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

- 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収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
- 優先的収着部位を特定し、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。



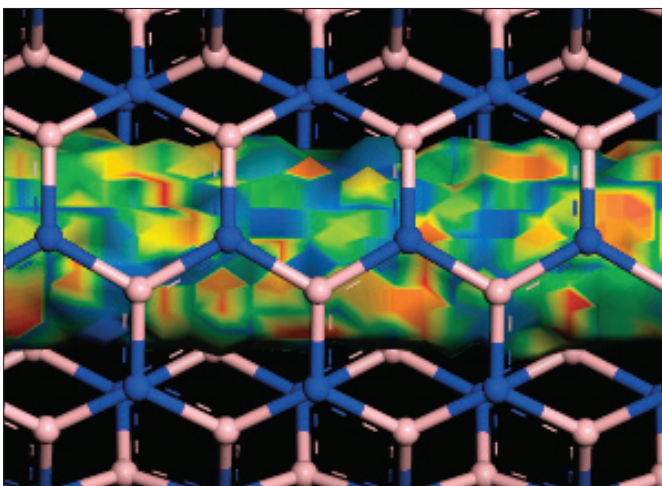
300 K のモルデナイト中の酸素と窒素の収着等温線を Sorption でコンピュータ計算したもの。吸着物の混合物を処理する能力は、分離および拡散のプロセスをモデル化する場合に重要です。

## SORPTION の機能

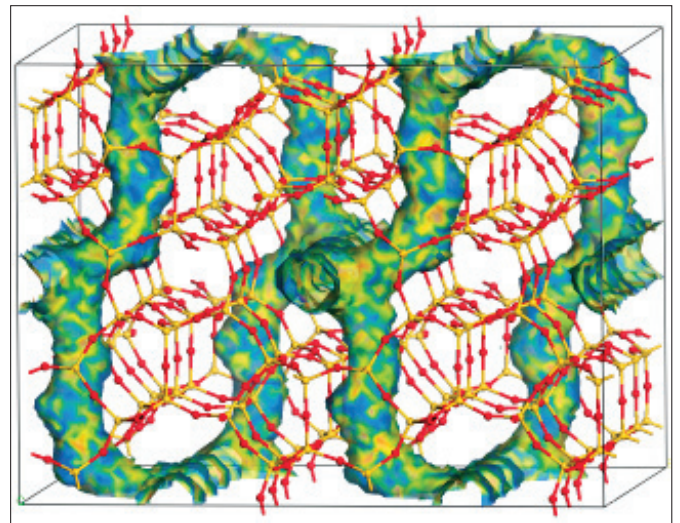
Sorption を利用すると、ゼオライトのような微孔構造の結晶が典型例であるような、吸着剤の骨格に吸着された純収着物（あるいは収着成分の混合物）をシミュレートできます。Sorption は、吸着平衡をシミュレートする次のような 3 つの方法を提供します。

- ・ 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。
- ・ ヘンリー一定数の方法(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、ここでは収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収着物に有用であり、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 kPa、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 の予測位置の任海密度表面を、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。

## MATERIALS STUDIO の長所

Sorption は Materials Studio® の製品です。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 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。

柔軟なクライアント サーバ アーキテクチャであるため、Intel 32 ビットの互換システム上の Windows XP や Linux 環境や、ネットワーク上に位置する IRIX サーバ上で計算を実行することができます。結果はユーザの PC に送られ、PC に表示して分析することができます。密度とポテンシャルについての高品質なグラフも簡単に作成できます。構造、グラフおよび画像を他の PC アプリケーションと即座に交換することもでき、それらのデータを社内で共有したり、スプレッドシート、あるいは他のパッケージを用いて分析する時の支援をします。

Materials Studio に関する詳細については、下記 URL を参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>