

OCTAを活用して、基礎的な物理化学を。

過去

以前に以下のものを出版されている。

[物理仮想実験室](#)

この本は、物理にフォーカスして、

- 数式で描けるものを可視化
- UDFによるデータ処理

なお、ネットには同様な観点でのサイトもある。

[ネットから](#)

今考えていること

化学出身の人が高分子シミュレーションを理解するための手助けとして、物理化学を対象として現象をミクロに理解するおもちゃを作りたい。

なお、牧野さんが以前に気体のシミュレーションを行っている。

このアプローチに習って、まずは気体のシミュレーションでできそうなことをCognacで始めたい。

- 物理量の導出方法を明確に。
 - 圧力、比熱、
- Gourmetの有効利用

というような提案に対して、アトキンスの物理化学の第一章（以下の目次）のようなものですねというお話があった。

- 完全気体
 - 状態変数
 - 状態方程式
- 気体の運動論モデル
 - モデル
 - 衝突
- 実在気体

- 完全気体の振舞いからのずれ
- ファンデルワールス方程式

残念ながらこの本は会社にはないので、詳細はよくわかりません。

また、気体だけではなくて溶液も考えたいと思っている。

- 正則溶液のシミュレーションは？
 - 拡散係数により、動きを見る
 - 粘度（Andrade） \Leftrightarrow 自由体積？（Doolittle）
 - 畝山先生のサイトで可視化したものがあるとのこと。

このアプローチに対しては、以下の本が役立つかもしれませんが、今読み解く根性が出ませんので、誰か知見があれば教えていただけるとありがたい。

Computer Simulation of Liquids

ポリマーについても単純な事項についてまとめ直したい。

- OCTAマニュアルに載っているものの説明を詳しく。
- 他のエンジンも活用して
- 導出方法も明確に。