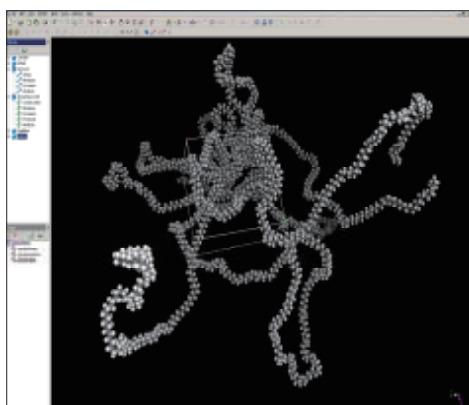


MS-AMORPHOUS CELL

Amorphous Cellは広範囲の非晶質系の性質を予測するためのモデルの構成、計算、と分析に用いられるソフトです。非晶質の性質はプラスチック、ガラス、食品、や化学製品開発にとっても重要です。

例えば、非晶質ポリマーの研究者は力学的性質、分子輸送、そして界面相互作用の最適化を求めます。こういった性質は、分離のプロセス、パッケージングやドラッグデリバリーなどのアプリケーションに使われるポリマーの性能に影響します。組織構成と性質の関係を観測することによって、重要な分子構造についてより完全な知識を得る事ができます。それによって、より良い化合物のデザインや新しい調合に役立てられます。計算できる性質の中には凝集エネルギー密度、状態方程式の性質、チェインパッキング、局在鎖動作などがあります。

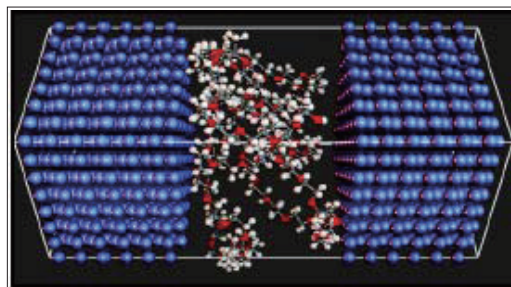
他の特色として小さい分子からポリマーまで自由に混ぜた混合物系を作り出すツール、ネマチックメソフェーズの作成能力、接着や潤滑の研究に必要な非晶質物のスラブモデルを作り出すツールも組み込まれています。



Amorphous Cellで作られた非結晶ポリマー

計算

- バルクモデルのエネルギー極小化
- 一定の温度、密度あるいは一定の温度、圧力といった他の一般的に考えられる状態下でのPVT関係を予測するための分子力場シミュレーション
- 最先端技術のCOMPASSフォースフィールドをサポート
- 潤滑の研究用のずれシミュレーション
- 分極と誘電作用の研究のためのポーリング
- 加熱や冷却サイクルに対応する温度サイクルプロトコール



2つの鉄表面間に挟まれたPolyoxyethyleneオリゴマーのモデルです。ポリマー構造や物性とせん断の影響を計算するために使われます。

性質

- 凝集エネルギー密度・溶解パラメーター
- X線、中性子散乱曲線
- ガス・小分子の拡散率(平均二乗原子置換か速度自己相関関数によって)
- 赤外線スペクトルと双極子相関関数
- 弾性ステフネス係数
- 表面性質

上記以外にも様々な分析機能があります。

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/>