

MS-MESODYN

MesoDynは、混合ポリマーや融解ポリマー等の複雑な流体をメソスケールで動力学的シミュレーションを行うプログラムです。このプログラムは、工業的に重要なメソスケールでの構造や動力学を解明する為のアルゴリズムで、広く文献や企業レベルで認められています。メソスケールでの構造は、バルクでの物性を決定的に左右します。系のダイナミクスは、Langevin関数によって求められ、これは、構成密度を系のノイズを考慮に入れて計算する拡散方程式です。均一な混合物の初期構造からスタートし、構成密度の時間発展を数値計算によって求めます。通常は、100–1000nm程度の立方体の周期的境界条件の基で計算されます。

MESODYNは何をするか？

MesoDynは、複雑な流体構造を粗粒子で表現し、系の密度とポテンシャルのダイナミクスを計算します。分子間力が十分に阻害されていれば偏析(demixing)により達成される自由エネルギーの最小値を探します。系を粗粒子化することは、ポリマー鎖をGaussian鎖と同じ応答関数で表現することを意味し、実効外部ポテンシャルによって系の非理想状態を考慮に入れます。ポテンシャルの大きさは、系を構成する様々な二成分Flory-Huggins相互作用パラメーターで決定されます。静電効果は、Flory-Hugginsパラメーターによって表すことが出来ますが、個々のビーズに対してチャージを入力することも出来ます。

MESODYNはどのように機能するか？

MesoDynは、組成は変化するが密度が均一な液相を計算します。系の構造とポテンシャルエネルギーは、ポテンシャル勾配とLangevinノイズの影響により時間と共に変化します。ノイズ項は、系の自由エネルギー曲面にあるローカルミニマムから脱出するために重要です。自由エネルギーの時間発展を観察することによって系の平衡化過程を追跡することが出来ます。層の分離度を定量化することによってオーダーパラメーターも計算することが出来ます。

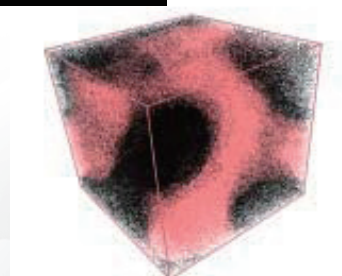
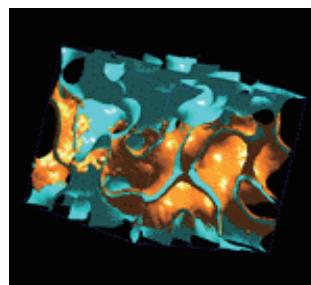
疑似動的アルゴリズムを算入することによって、シミュレーションを高速化し、静電パラメーターを直接組み込むことによって、MesoDynで計算できる

系の範囲を大きく広げることができました。任意の制限(限界)を加えた設定機能(例：球の配列、平面状の壁、楔)によって、Materials Studio上で、限界のある系を計算することが出来ます。ユーザは密度場の無い状態において制約条件を初めて表示することが可能になりました。

【特徴・能力】

計算タスク

- 10個までの化学種を定義できます。
- 10個までのメソスケール分子を定義できます。(1つのビーズあるいは任意の連結性を持ったビーズ鎖によって表された構造)



- 化学種間の相互作用エネルギーをすべての対に定義でき、このエネルギーは、Flory-Huggins相互作用パラメーター χ (カイ) に比例し、これによって種々の成分が相分離します。
- 温度、セルの組成、セルの大きさ、シミュレーション時間、出力間隔を設定できます。
- 壁や他の制限を組み込むことができます。(特定の化学種が選択的に吸着する設定を入力することも出来ます)
- 特定の制限を定義できます。(球の配列、楔形のセル等)
- 系の剪断シミュレーション
- ポテンシャル空間内で自由エネルギーの積分のみを行うことによって計算速度を上げることが出来ます。
- 系にチャージを割りあてる。
- 組成をリスタート時に変えることができることによって、滴定、溶媒蒸発、化学平衡のシフト等のシミュレーションができます。
- 前回のシミュレーションをリスタートし、ビーズ間の相互作用を変えることができます。(pHの変化や、薬物の制御された放出をモデリングする)

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/>