

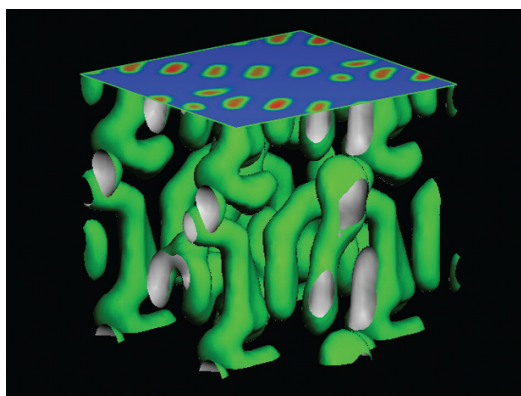
# MESOPROP

Meso Prop は多成分ナノ構造体のバルク物性を予測するための新しい研究ツールです。Meso Prop の応用はポリマー、界面活性剤の研究および表面コーティング剤や接着剤、充填剤、エラストマー、セメント、複合材、ゲル、ラミネート材などの開発の基礎となる連続相の研究応用領域にわたります。

MesoProp は純成分と複合ブレンド間の物性を関係づける高度にインテグレートされたツールです。配合設計研究やブロックポリマー、ポリマー界面活性剤、ナノ構造化ポリマーブレンド、膜などの界面物理効果のシミュレーション研究に適用されます。

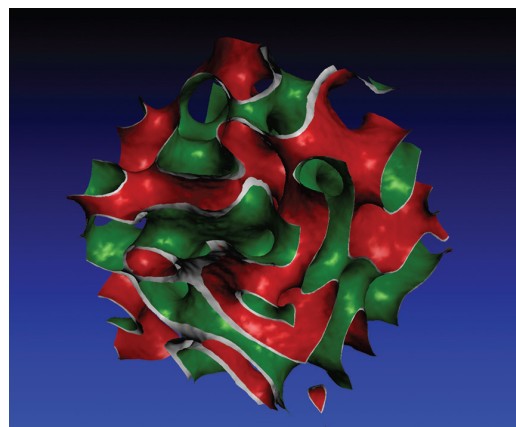
MesoProp が提供するもの：

- ・ 合理的な研究とコスト削減へ向けての予測的研究。
- ・ 迅速な製品開発と短期の市場導入。
- ・ コスト工学面でのビジネスツール。例えば原材料の最適化と配合コストの削減など。
- ・ プロセスや製品開発での系統的なアプローチ。広範囲な入力、出力情報の集積と、将来の活用や検討に活用。



## MESOPROP の動作

MesoProp は入力情報として、複雑流体系のメソスケールレベルの動的シミュレーションを実行する MS Modeling モジュール MesoDyn、DPD から得られる複雑な相形態データを使います。次に純成分のデータを MesoProp データベースから選択します。そして MesoProp は有限要素法に基づく物性計算に入り、可視化モデルと出力データを返します。



基本アルゴリズムと入力データベースは下記を含みます：

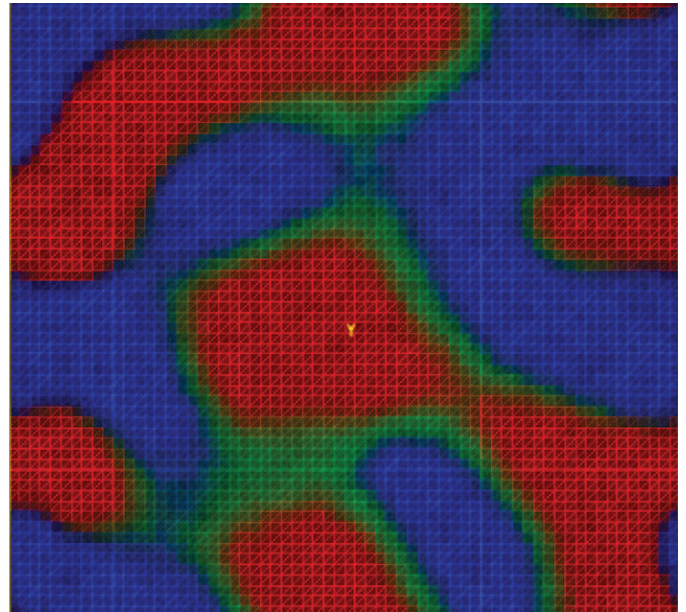
- ・ 弾性率 (剛性およびコンプライアンス)
- ・ 熱膨張係数
- ・ 熱伝導度
- ・ 電気伝導度
- ・ 誘電定数
- ・ ガス拡散定数

もし MesoProp データベースに物性値が無い場合は MS Modeling のポリマー物性予測モジュール Synthia で下に示すような物性を計算することができます :

- ・ 屈折率
- ・ 磁気モーメント
- ・ 溶媒膨潤
- ・ 液体の拡散係数
- ・ 液体の透過係数

## 特徴と機能

- ・ 技術者、エンジニア、配合化学者向けの実践ツール
- ・ 新製品、プロセス開発でのコスト削減解決手段の提供
- ・ オフィス環境でのIT機器の活用・・・ウエット実験室やクリーンルームでの実際の実験の必要性を削減
- ・ 10 種までの化学成分に適用可能な多用途ソフトパッケージ
- ・ 素早い結果と複数のプロジェクトの同時処理。結果はプレゼンテーションに表示でき、メール送付可能



- ・ 要求が厳しく、良く管理されたプロセス工業向けに開発
- ・ MesoProp と製造あるいはプロセスエンジニアリングソフトとの連携能力

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/>

## 参考文献

以下は MesoProp で使われている方法と幾つかの応用例に関する科学論文のリストです :

1. A.A.Gusev, "Representative Volume Element Size for Elastic Composites: A Numerical Study," J. Mech. Phys. Solids 45 (9), 1449-1459 (1997).
2. O.A.Goussev, P.Richner, M.G.Rozman, A.A. Gusev, "Void-containing materials with tailored Poisson's ratio," J. Appl. Phys. 88 (7), 4013-4016 (2000).
3. A.Gusev, P.J.Hine, I.M.Ward, "Fiber packing and elastic properties of a transversely random unidirectional glass/epoxy composite," Comp. Sci. Techn. 60, 535-541 (2000).
4. A.A.Gusev, J.J.M.Slot, "Non-Additive Morphology Effects in Thermal Expansion of Three-Phase Materials," Adv. Eng. Mater. 3 (6), 427-427 (2001).
5. A.A.Gusev, H.R.Lusti, "Rational Design of Nanocomposites for Barrier Applications," Adv. Mater. 13 (21), 1641-1643 (2001).
6. M.Wissler, H.R.Lusti, C.Oberson, A.H. Widmann- Schupak, G.Zappini, A.A. Gusev, "Non-additive effects in the elastic behavior of dental composites," Adv. Eng. Mater. 5 (3), 113-116 (2002).
7. A.A.Gusev, "Finite Element Mapping for Spring Network Representations of the Mechanics of Solids," Phys. Rev. Lett. 93 (3), 034302-1-4 (2004).
8. O.Guseva, H.R.Lusti, A.A.Gusev, "Matching thermal expansion of mica-polymer nanocomposites and metals," Modelling Simul. Mater. Sci. Eng 12, 101-105 (2004).