

BIOVIA MATERIALS STUDIO AMORPHOUS CELL

データシート

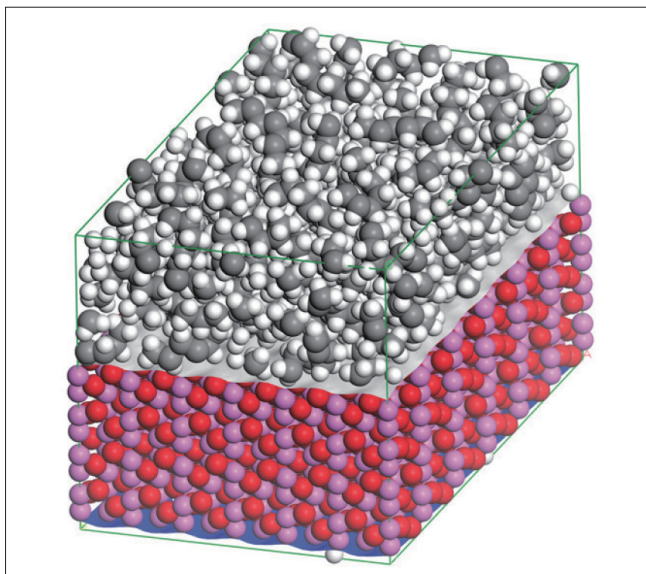
BIOVIA Materials Studio Amorphous Cellは幅広い非晶質（アモルファス）材料の構造を作成するためのツールです。力場によるエネルギーの評価と複数の異なる構造作成方法を組み合わせて、ポリマー、ガラス、ナノ構造などの幅広いアモルファス状態の構造を作成することができます。さらに、界面のシミュレーションのための層状構造を作成することもできます。

AMORPHOUS CELLの概要

アモルファス材料の特性は、プラスチック、ガラス、食品、化学品などの製品にとって非常に重要です。アモルファスポリマーの力学的特性の最適化、系の中の分子拡散、さらにそれらの表面や界面の相互作用は非常に興味深い研究テーマです。これらの特性は、分離プロセス、パッケージング、ドラッグデリバリーなどの応用におけるポリマーの性能に影響を与えます。

ポリマー

ポリマーの現実的なモデルを構築することは、ポリマーの物性とを予測するために非常に重要です。BIOVIA Materials Studio Amorphous Cellは、アモルファスポリマーの密度、力学的特性、拡散性などの物性を高精度にシミュレーションするための初期構造となる、より現実的な構造を構築するために設計されたプログラムです。異なる材料の親和性を予測するために、医薬品などの低分子とポリマーを混合した構造を構築することもできます。



Amorphous Cellは、任意の格子系のモデルの自由空間に分子をパッキングできます。切り出した無機物の表面と溶媒分子の相互作用などのシミュレーションが可能です。

無機ガラス

Amorphous Cellでは様々な力場が利用可能ですので、無機ガラス材料の初期構造を作成することができます。作成した構造は、BIOVIA Materials Studio Forcite PlusやBIOVIA Materials Studio GULPを使って、より現実的な構造に平衡化し、さまざまな物性を予測することができます。

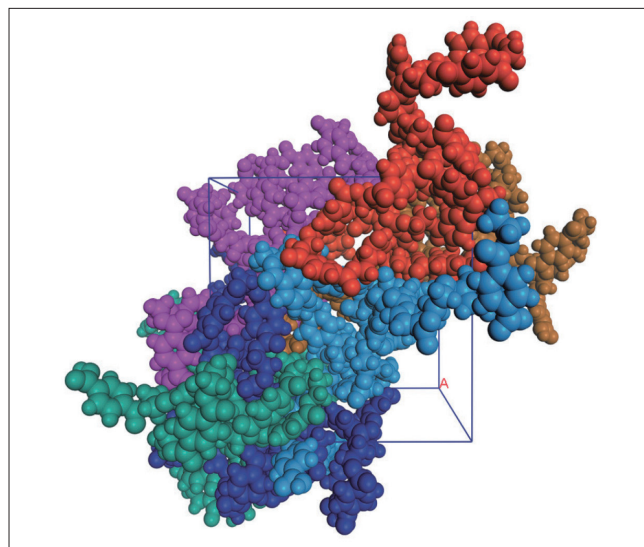
溶媒和構造

Packingタスクを使用すると、分子や表面を溶媒中に浸したモデルを作成することができ、古典シミュレーションモジュールを使ってそれらの間の相互作用エネルギーを予測できます。

AMORPHOUS CELLの特徴

Amorphous Cellでは、3次元周期境界条件を課した単位格子の中に、既に存在する原子との相互作用を考慮し、分子鎖の配座を確認しながら、セグメントごとに分子を成長させていきます。それぞれの分子鎖の最初のセグメントを配置したら、次のセグメントを候補となる配置から選択して主鎖を成長させていきます。環状構造の中を主鎖が通ったり、原子同士が近づきすぎたりしないように確認しながら、候補となる配置を発生させます。発生させた複数の候補は、セグメントを付加するときのエネルギーに基づいて確率を計算します。この確率を乱数と比較しその候補を採用するかどうかを決めます。

このような方法を採用することで、低エネルギー配置をより取りやすくなり、分子鎖を含むアモルファス材料の現実的な安定構造を生成することができます¹。



ポリエチレンテレフタレートのような剛直な主鎖を持つポリマーを密度の実験データに合わせてパッキングできます。

