

BIOVIA MATERIALS STUDIO FORCITE PLUS

データシート

Forcite Plusは古典力学計算ツールであり、エネルギー計算、構造最適化、分子動力学シミュレーションが可能です。単純な分子から二次元表面、結晶などの三次元周期性構造に至るまで、広い適用性を備えています。幅広い解析ツールにより密度変化のような基本物性の解析から双極子自己相関関数のような高度な物性の計算に至るまであらゆる物性を予測できます。これらの機能の全てはBIOVIA Materials Studioの環境で操作でき、直観的かつ短時間で習得し利用できます。

FORCITE PLUSの概要

Forcite Plusは、分子力学もしくは分子動力学に基づく古典シミュレーションのツールで、エネルギー計算、構造最適化、分子動力学計算が可能です。解析ツールを使用して、拡散性のような時間依存性の物性を解析したり、ヤング率などの力学的特性、凝集エネルギー密度、溶解度パラメータなどの特性を計算することができます。

FORCITE PLUSの適用範囲

古典シミュレーションはさまざまな種類の材料の物性や構造を解析するために幅広く用いられています。

ポリマー

Forcite PlusとCOMPASS力場を組み合わせることで、系の密度、拡散性、力学的性質などを高精度に予測できます。これにより、ポリマーと分子、異なるポリマー同士、ポリマーと表面などの親和性などの問題に取り組むことができます。

触媒

量子力学的手法でさらに高精度な計算を行う前に、Forcite Plusを使って、アニーリングなどを行って、触媒表面上でのより安定な吸着サイトを探索することができます。

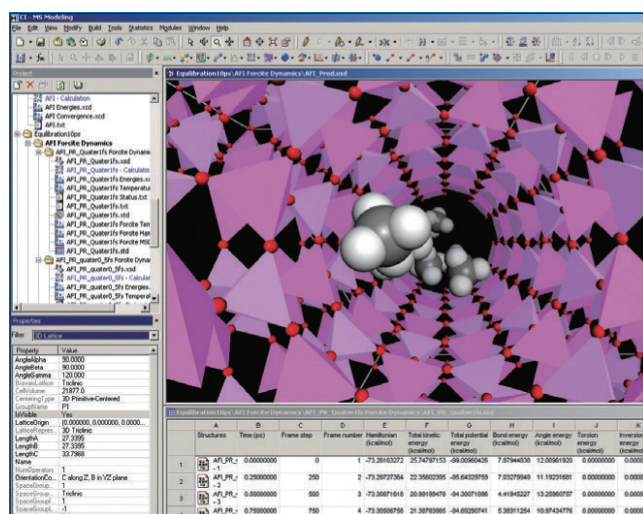
分子結晶

COMPASSなどの高精度な力場を使用して、さまざまな分子結晶の物性や構造を解析することができます。

BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット

BIOVIA Materials Studioは使い易く習得の容易な分子モデリング・シミュレーション環境です。Forcite Plus の操作を行うユーザーインターフェース BIOVIA Materials Studio Visualizer はWindows® に対応しており、構造作成および可視化のための広範なツールを備えています。マウスを数回クリックするだけで、興味のある系のモデルを簡単に構築し、Forcite Plus の設定を選択して計算を実行することが可能です。

構造、図表、およびその他のデータはPCの他のアプリケーションと即座にやりとりでき、同僚とこれらの情報を共有したり、スプレッドシートや他のパッケージを使用して解析することが可能です。



Forcite Plusはさまざまな系の動的振る舞いを研究することが可能です。上図では、有機-無機構造の研究対象の典型である、メタンがゼオライト細孔から拡散する様子が示されています。トラジェクトリファイルをアニメーション化することにより拡散の道筋を視覚化し、エネルギーや粒子定数など時間変化を解析できます。

Forcite Plusを活用する際には、研究対象の系のうち分子、二次元、三次元周期性構造の構築から始めます。これらの材料は全てMaterials Visualizerのさまざまなツールを使って構築することが可能です。

次に計算タスク（エネルギー、構造最適化、分子動力学）を選択します。さらに要求されるタスクの精度と力場を順に選択します。分子動力学シミュレーションを選択した場合には、ステップ数、アンサンブル、温度などのより詳細なオプションを選択します。最後に“Run”ボタンをクリックすれば計算が開始されます。計算の途中で、構造がアップデートされ、テキストおよび図表によりエネルギー、温度、圧力などのデータが逐次出力されます。

計算が完了すると、すべてのファイルは自動的にクライアントPCへ送り返され、解析が可能です。ツールの適用範囲は分子動力学シミュレーション中の密度変化やハミルトニアンなどの単純な物性から、平均二乗変位のようなより複雑な構造的物性の解析まで多岐にわたります。全ての解析ツールは簡単なインターフェース上で操作でき、トラジェクトリファイルからスタディーテーブルへのデータ出力し、物性をグラフにプロットすることができます。

さらに、MaterialsScriptのAPIからForcite Plusを呼び出すこともできます。これにより、複数回の計算や複雑な解析などを自動処理することができます。

FORCITE PLUSの機能

エネルギー計算

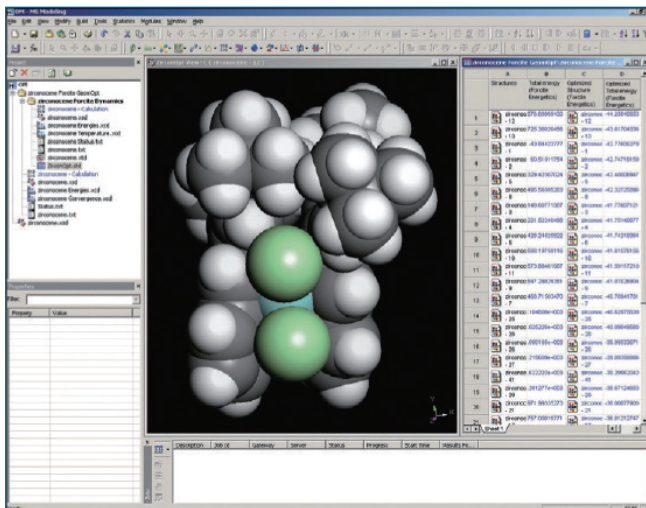
- 分子、表面、結晶構造のエネルギー計算
- COMPASS、Dreiding、Universal、cvff、pcff、およびカスタマイズした力場への対応
- 電荷平衡法もしくはGasteiger法による電荷の計算
- 計算スピードと精度のバランスのよい設定
- Atom based、Group based、Ewald、PPPMを使った非結合相互作用の評価
- 電場の適用
- 結合、結合角、二面角の拘束

構造最適化

- エネルギー最小構造への最適化
- 構造最適化アルゴリズムの選択：最急降下法、準ニュートン法、共役勾配法、ABNR法、またはスマートアルゴリズム
- 周期系の格子定数の最適化：全てもしくは一部の格子定数を最適化可能
- 外部応力を周期系に適用可能
- 原子位置の固定が可能
- 分子内部の自由度の制限が可能

分子動力学

- 構造の時間変化のシミュレーション
- NVE、NVT、NPT、NPHアンサンブル
- Nose、Velocity Scale、Andersen、Berendsen、NHLなどの温度制御法



上図の有機金属錯体、ジルコノセンの構造は複雑なエネルギープロファイルを有します。Forcite Plus はスタディーテーブルと連携することによりこの構造における最低エネルギーを計算します。

- Andersen、Berendsen、Parrinello、Souza-Martinsなどの圧力制御法
- ランダムおよびユーザ指定の初期速度
- 原子位置の固定が可能

クエンチ

- 構造最適化と分子動力学計算の組み合わせによる低エネルギー構造の探索

アニーリング

- 指定した温度範囲での分子動力学計算
- 温度範囲および温度サイクルの指定
- 各サイクル後の構造最適化

Confined Shear

- せん断力をかけた2つの表面に挟まれた流体のシミュレーション
- せん断速度の指定

Shear

- せん断応力をかけた分子動力学計算
- せん断速度の指定

凝集エネルギー密度

- トラジェクトリファイルに含まれる凝集エネルギー密度および溶解度パラメータの計算
- 分子内エネルギーの計算

力学的性質

- 微小歪みに対する応答に基づく力学的性質の計算
- 弾性スティフネスおよびコンプライアンス定数の計算
- 体積弾性率、せん断弾性率、ヤング率、圧縮率、音速、ラメ定数

溶媒和自由エネルギー

- 溶媒中に溶質が溶解するときの自由エネルギーを結合定数法もしくは熱力学的積分法を用いて計算

解析ツール

- 分子動力学計算のアニメーション表示
- 系のエネルギーを各要素ごとに分割して表示
- 温度、圧力、体積、応力、格子定数などの時間変化
- 任意の方向での密度、温度、速度などの分布の統計平均
- 結合長、結合角、二面角の時間変化や分布の解析
- 動径分布関数と構造因子
- 平均二乗変位
- 双極子自己相関関数とそのパワースペクトル
- 熱容量などの熱力学特性の解析
- 回転半径、回転時間相関関数
- X線および中性子線散乱解析
- 空間時間相関関数、速度自己相関関数
- 応力自己相関関数、せん断粘性
- スタディーテーブルへのデータ出力
- スタディーテーブルの任意の物性値に対する並べ替え

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com（英語）、www.3ds.com/ja（日本語）をご参照ください。



3DEXPERIENCE®