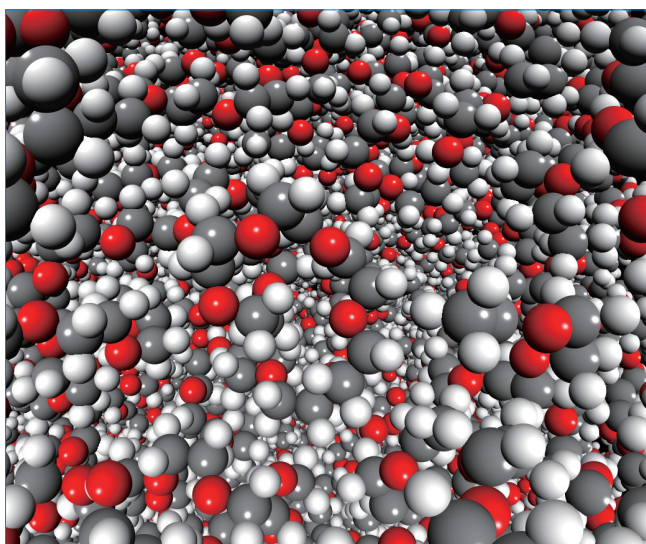


COMPASS

データシート

COMPASS (Condensed-phase Optimized Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies) は、バルク状態の高精度な分子計算を目的として最適化された第3世代力場です。これは、第一原理計算と孤立分子の実験データに加え凝縮相の性質をも使ってパラメータ化・検証された初めてのものです。COMPASSを使う事で、正確な構造、配座、振動と熱物理の性質の予測を、広範囲な環境におかれた様々な分子に同時に行うことができます。(孤立分子や凝縮相にある分子、温度、圧力等) 最新のCOMPASS力場の機能強化は45もの無機酸化物と有機物や無機界面などを含んだ混合物のパラメータ化を中心に行われました。

COMPASSの開発目標は高い信頼性のある予測を得る事と、実験から得られる孤立分子と凝縮相中の分子の両方の性質に近いデータの予測を得る事です。結合のパラメータは第一原理計算データから決定され、分子液体と結晶の熱力学データと分子動力学シミュレーションを使って、非結合パラメータを決定しました。



非常に広範囲な適用性

有機化合物一般、ハロゲン、低分子ガスなど幅広い分子につき、孤立状態およびバルク状態の両状態にて検証されています。

さらにゼオライト、金属酸化物などへ拡張もなされており、バルク物性、有機/無機界面の計算など、御望みのモデルでご利用頂くことが可能です。

力場	実験値からの誤差 NPT計算によるバルク状態 の液体の密度	特長
Universal	-	汎用力場 周期律表の全原子に対応。 バルク・クラスター計算には不向き
Dreiding	> 20%	汎用力場 有機、生体、無機分子のバルクおよびクラスターに向く 第2世代力場に比べると精度は落ちる
PCFF	~ 10%	第2世代力場 有機化合物一般、ゼオライト等無機化合物向き。 量子化学計算と実験データによる検証により、精度と適用原子タイプを拡張した。
COMPASS	~2%	[第3世代力場]

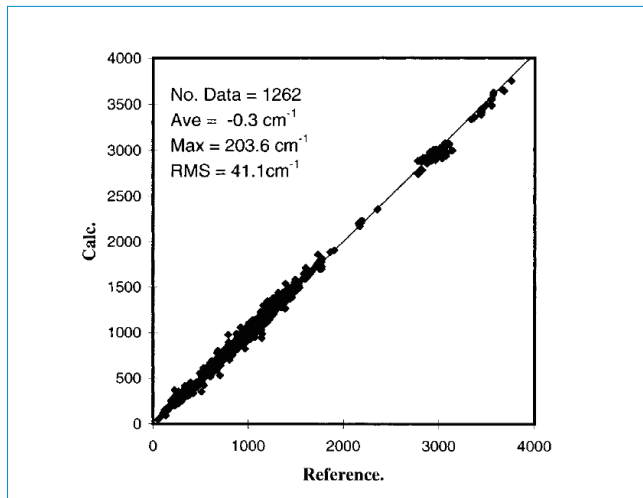
バルクモデルでの高精度シミュレーション

温度や圧力の異なる条件での計算値と実験値がよく一致します。

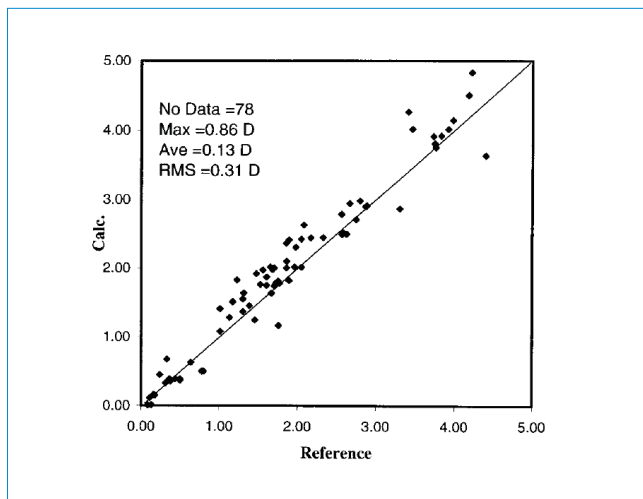
COMPASSは、孤立分子の立体構造、振動スペクトルのみならず、バルク状態の密度、圧力まで、高精度な計算結果を出せることが検証されています。

参考文献

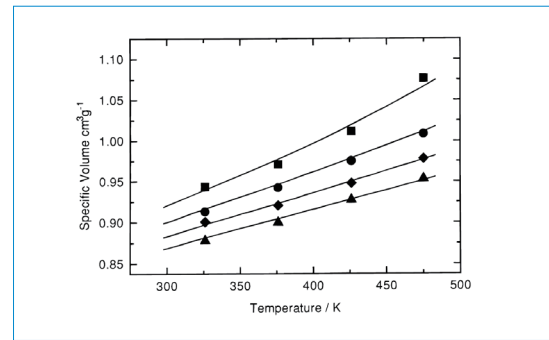
1. H. Sun, J. Phys. Chem. B 102, 7338 (1998).
2. D. Rigby et al., Polymer International 44, 311 (1997).



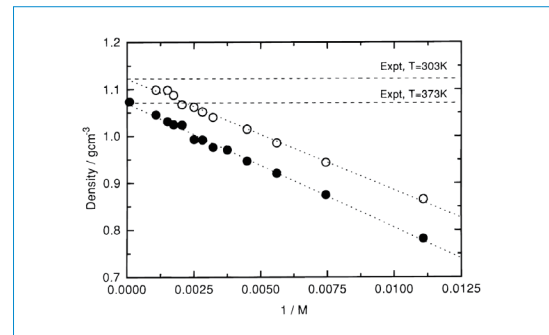
50種類の異なる分子の固有振動数の計算値と実験値。



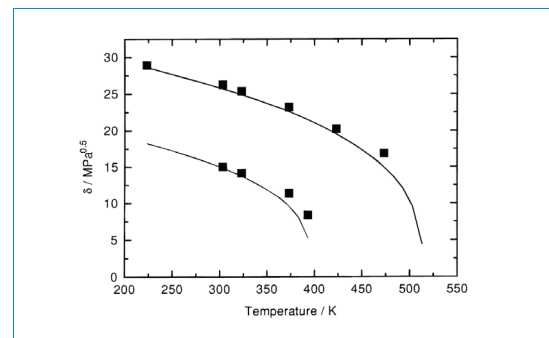
78種類の異なる分子の双極子モーメント(デバイ単位)の計算値と実験値。



HO(CH₂CH₂O)₇OCH₃の比容積の実験値と計算値。実線: 実験値, ■: P = 0 MPa, ●: P = 60 MPa, ◆: P = 120 MPa, ▲: P = 180 MPa。



H₂C(OCH₂CH₂O)_xOCH₃の鎖長の逆数に対する密度の計算値。○: 303 K, ●: 373 K, 点線: 最小二乗法による回帰直線, 破線: PEO (分子量 10₅)の密度の実験値。



ジメチルエーテルおよびエタノールの溶解度パラメータの比較。実線: 気化熱の実験値からの推定値。

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。



©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTER, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および CINETWORKS はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の商標です。その他のブランド名や製品名は、各所有者の商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の承認が必要である場合があります。