

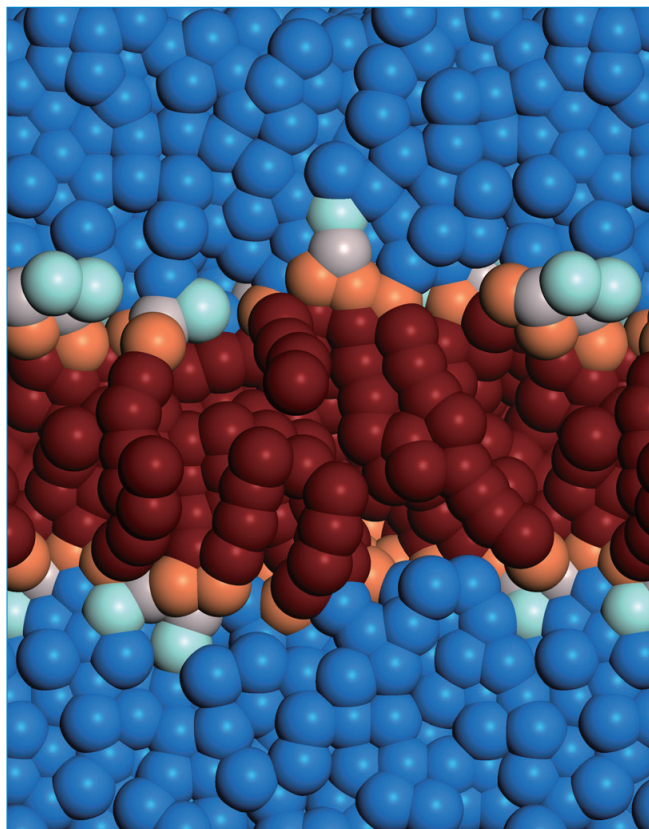
MESOCITE

データシート

Mesociteは、ナノメートルからマイクロメートルの長さで時間スケールがナノ秒からマイクロ秒の物質を研究するための最新の粗視化シミュレーション モジュールです。このような物質については複合材料、コーティング、化粧品、制御放出などの分野で産業的研究が広く行なわれています。Mesociteを使用すると剪断下あるいは拘束構造条件下の平衡状態における流体の構造、動的特性を得ることができます。

MESOCITEの機能

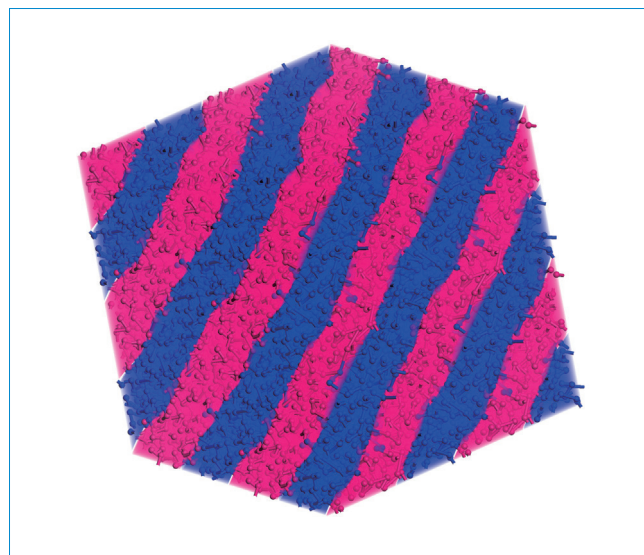
Mesociteは、粗視化分子動力学 (CGMD) 法または散逸粒子動力学 (DPD)1法のいずれかを利用してソフトマテリアルズを研究するための手法です。Mesociteの基本は、原子のグループをニュートン力学を再現するように相互作用するビーズに



CGMD法シミュレーションによる、水などの極性溶媒中のリン脂質二重層。CGMDは、親水性ヘッドグループのコリン基やリン酸基のモデル化時に電荷が適用できるような系の研究に最適です。

置き換える事が出来るという考えに基づいています。結合振動など系の原子レベルの詳細は積分時に消滅するために時間スケールと長さスケールを大きく取ることができます。ビーズ間の相互作用に原子レベルの情報を取り込むことは、粗視化を行なっても系の基本的な化学的性質は失われないことを示します。長さや時間のスケールを広げることで、ミセルやベシクル形成、ブロック共重合体の相形成などの課題を研究することができます。

Mesociteでは物質の複数の原子、あるいは複数の分子さえを表現するビーズを基本粒子としています。ビーズは、CGMD法またはDPD法で相互に作用することができます。CGMD法ではニュートン力学を用いて系の相互作用を表し、原子価および非結合項を含みます。帯電した系をシミュレーションでき、DPDモデルに比べて構造の制御が容易です。ただし、このことは系を記述するために多くのパラメータの生成が必要になると言うことも意味します。Mesociteでは、DPD法は流体の流体力学を全体として再現する場合に使用されます。DPD法では互いのビーズがどのように作用するかについてFlory-Huggins相互作用パラメータを使用し、また流体の再現にはソフトポテンシャルを使用します。このパラメータは実験で測定するか、原子レベルのモデリングで得ることができます。



DPD計算による、ブロック長が等しいジブロック共重合体によるラメラメソ相。DPDのソフトポテンシャルモデルにより大きなポリマー系のメソ相を高速にシミュレーションできます。

MESOCITEの主な用途

ポリマー

Mesociteによる時間と長さのスケールの拡張により、ポリマーのメソ相のシミュレーションができます。このため、ホモポリマー、ブロック共重合体、ランダム共重合体、および dendritic などでのメソ相の形成における添加物、溶媒、モノマーの比率などの影響を研究できます。ソフトDPDポテンシャルにより、古典的な手法に比べてはるかに速くポリマー大規模系を平衡化することができます。また、より詳細なCGMD法によるアプローチで、粘度などの時間依存性をさらに正確に求めることができます。

構造化された物質

メソ相の構造を持つ材料のダイナミックな特性を評価することができます。たとえば、脂質二重層の形成におけるヘッドとテイルの比や溶媒の効果を検討できます。電荷の効果は、このような系の計算へのCGMD法の適性をより高めます。

ナノテクノロジー

電子特性にポリマーマトリクス中のカーボンナノチューブの配列が影響を及ぼすようなナノテクノロジー分野の問題に対して、メソスケール法は有用な洞察知見を与えます。このようなナノチューブの運動シミュレーションでは、完全に原子論的な手法では到達できない時間スケールが必要になり、このような分野の特性予測にはメソスケール方法が最適な手法となります。

BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット

MesociteはBIOVIA Materials Studio®環境で動作します。BIOVIA Materials Studioには、使い易く、分かりやすい統合ユーザインターフェイスが備わっています。Materials VisualizerはBIOVIA Materials Studioの中核製品で、モデルの作成・表示を行う広範囲のツールを提供します。このツールを使用すると、対象とする系のモデルを素早く作成し、メソスケールシミュレーションのパラメータ化に必要な分子レベルの情報を計算したり、CGMDやDPDの機能を選択し、複雑な流体の動的シミュレーションを実行することができます。

ビーズのデータモデルと剛体ポテンシャル関数はMaterialsScript APIから参照でき、ワークフローの自動化や計算のカスタマイズにも能力を発揮します。

柔軟なクライアント/サーバ構造であるため、ネットワーク上のどのサーバでも計算を行うことができます。使用するPCに結果を返して、そこで表示や分析ができます。分子やメソスケールの物質構造の高品質なグラフィックス画像を簡単に作成できます。Mesociteから出力された構造、グラフ、ビデオクリップなどのデータを、他のPCのアプリケーションへすぐに転送できます。

MESOCITEの動作

Mesociteは、CGMDとDPDの2つの補完的な粗視化シミュレーション法を提供しています。

CGMD法では互いに貫入できない硬質粒子に古典分子力学のアルゴリズムを適用します。それぞれのビーズ間の相互作用は、さまざまな組み合わせの相互作用のすべてに対するパラメータを含む力場で定義されます。その相互作用は、結合伸縮や角度項などの原子価相互作用と、ファンデルワールスや静電相互作用などの非結合相互作用を表現する種々の関数形式で定義されます。力場は対象の系の正確な記述に必要なだけの種々の関数形式を含むことができます。力場の複雑さが増すと、必要なパラメータの数も増えます。力場に適したパラメータを作成することが、MesociteのCGMDモデルで物質をシミュレーションする上でのポイントとなります。Marrink et al³が生体分子系向けに作成したMARTINI2力場のバージョンが提供されます。MARTINIには、無極、無極性、極性、および帯電の主要な4つの力場タイプがあり、その各タイプには、MARTINIをさまざまな有機分子に適用するための複数のサブタイプがあります。

DPD法は、互いに透過できる流体液滴の概念を基本にしています。この考えは、DPD法ではブラウン運動に関連した熱制御機構とソフトポテンシャルによって反映されます。DPDでは密度は均一ですが組成ゆらぎを示すような液相をシミュレーションします。組成依存性は、構成ビーズ間のペア反発作用から生じます。この反発力は衝突するビーズの性質に依存します。異種ビーズは同種のビーズに比べてしばしば互いに強い反発を示します。ビーズ間の力の差が小さいと、めずらしい形態を持つ極めて複雑な系になることがあります。このような系は、熱的ノイズを含んでいるために急速に平衡に達します。ポリマー種は、連続するビーズを調和ばねで接続するビーズ鎖として表示されます。鎖には、例えばブロック共重合体などのように複数のビーズタイプを含むことができ、また鎖構造は分岐点や複雑な接続部を含むことができます。力はすべて短距離力であるため、アルゴリズムは高速であり、現実の系のサイズで計算できます。

ダッソー・システムズの3DEXPERIENCE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、3DEXPERIENCE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。

