

MS-COMPASS

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、第一原理計算と単離された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。(単離された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。

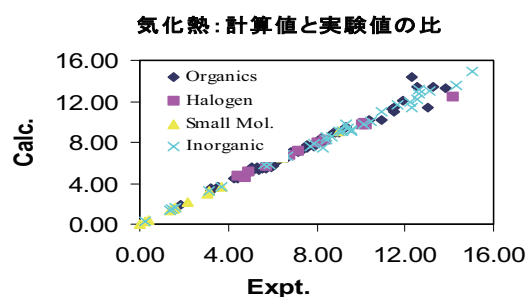
COMPASSの開発目標は高い信頼性のある予測を得る事と、実験から得られる単離と凝縮相分子の両方の性質に近いデータの予測を得る事です。パラメータはほとんど第一原理計算データからで特に、分子液体と結晶の熱物理データとMDを使って、非結合パラメータを調整しました。

| 力場 | 実験値からの誤差 | 特長 |
|--------------|----------|---|
| Universal FF | - | 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 FF | > 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] |

適用原子は、非常に広範囲

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。

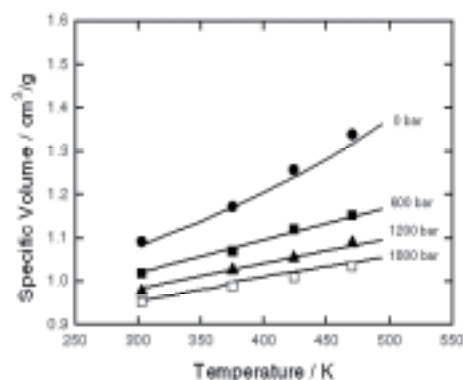


バルクモデルでの高精度シミュレーション

温度や圧力の異なるモデルでも計算値(点)と実験値(実線)がよく合致します。

- 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。

V-T 曲線：PDMS オリゴマー



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/>