

FORCITE PLUS

Forcite Plus は最新の古典力学計算ツールであり、エネルギー計算／構造最適化／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、結晶に代表される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。包括的な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提供します。これらの機能の全ては Materials Studio の環境で操作でき、直観的かつ速やかに習得し利用できます。

FORCITE PLUS は何をするのか？

Forcite Plus は Forcite モジュールを性能向上したものです。Forcite の機能を全て受け継ぎ、分子動力学と解析に機能拡張しました。Forcite Plus に分子動力学を導入したことにより、拡散性のような時間依存性の物性を研究することが可能となりました。Forcite の機能を包含することにより、一点エネルギー計算から構造最適化、分子動力学に至るまで、一連の力場ツールを得ることが可能です。

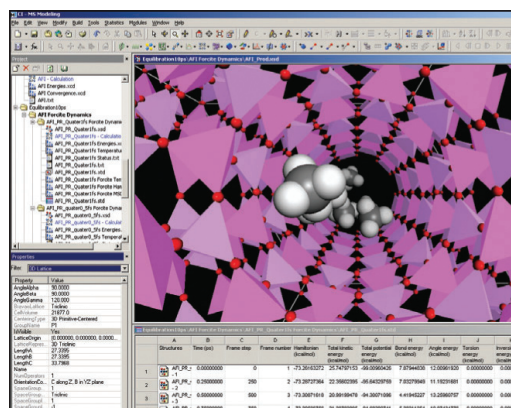
Forcite Plus は孤立系の分子、二次元表面、三次元周期系に対して有効です。したがって、分子動力学を有機金属錯体から触媒表面、さらにはバルク非晶質ポリマーにさえ適用できます。

Forcite Plus は分子力学の方法を用いるため、操作には力場に関連したパラメーターが必要となります。Forcite Plus は様々な力場に適応するように設計されており、周期表を可能な限りカバーしています。

FORCITE PLUS の活用

Forcite は Materials Studio 環境で作動する MS Modeling 製品です。Materials Studio は Windows(R) 標準の使い易く、良く習得し易いインターフェースを提供します。

Materials Studio の中核である Materials Visualizer は Windows 2000 もしくは XP 上で作動し、モデル構築および視覚化のあらゆるツールを提供します。マウスを数回クリックするだけで、関心の対象である系について速やかにモデルを構築し、Forcite Plus を選択して実行することが可能です。



Forcite Plus は多様な系において分子動力学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の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、エネルギーやセルパラメーター等のトラジェクトリデータはスタディテーブルで参照できます。

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 を活用にあたっては、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。これらの材料タイプは全て Materials Visualizer の最新のビルディングツールで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、時間、アンサンブル、温度等のより詳細なオプションを選択します。最後に“Run”をクリックすればクライアントサーバーを活用した双方向的な計算が開始されま

す。Forcite Plus はアクティブな構造ドキュメントをアップデートし、テキストおよび図表によりレポート文書を作成します。

計算が完了すると、すべてのファイルは自動的に MS Modeling プロジェクトへ送り返され、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、スタディテーブルで視覚化やトラジェクトリファイルからの物性のプロットができます。

MS Modeling 上で操作する Forcite Plus はデスクトップ上に最新の分子力学ツールを実現します。

FORCITE PLUS の機能

Forcite Plus — 動力学

- 分子、周期性、結晶構造に対する時間依存性挙動のシミュレーション
- 多種多様な力場を用いたあらゆる化学系のシミュレーション
- 表面上および溶液中の分子の容易なシミュレーション
- 様々な動力学メソッド
 - 一定体積、一定エネルギー (NVE)
 - 一定圧力、一定エンタルピー (NPH)
 - 一定圧力、一定温度 (NPT)
 - 一定体積、一定温度 (NVT)
 - 態勢、速度スケール温度制御

- Berendsen 圧力制御
- 計算を実行している最中に対応する物性をアップデート
- 結果を解析用にトラジェクトリファイルに保存

Forcite Plus — 解析

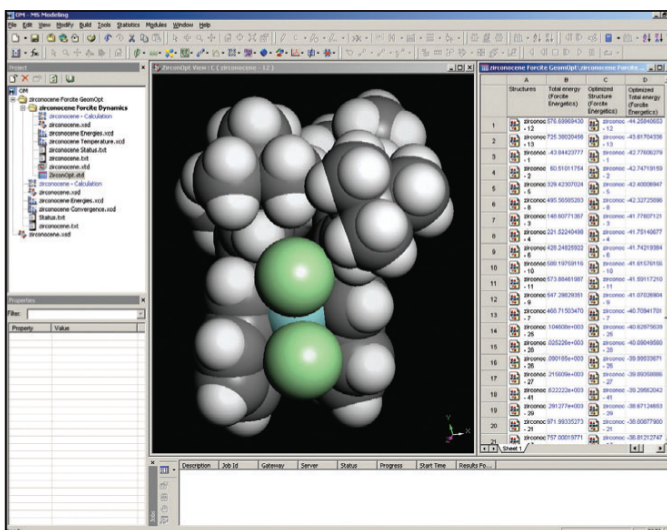
- 動力学の実行内容のアニメーション化
- 実行最中に系のエネルギーをブレイクダウン
- 温度、圧力、体積、応力、セルパラメータのプロットおよび解析
- 動径分布関数および構造因子の計算
- 平均二乗変位の計算
- 双極子自己相関関数およびパワースペクトルの計算
- スタディテーブル上でのトラジェクトリデータの閲覧
 - スタディテーブルから直接トラジェクトリデータをプロット
 - あらゆる物性ごとに分類(エネルギーで分類することにより最低エネルギー構造を探索など)

Forcite

- 分子、周期性、結晶構造のエネルギー計算
- 結晶対称を有する分子、周期性、結晶構造の構造最適化
- COMPASS、Dreiding、Universal、CVFF、PCFF、力場のサポート
- 電荷平衡法もしくは Gasteiger 法による電荷の計算
- 構造最適化のアルゴリズムの選択：Steepest Decent、Quasi-Newton、Conjugate Gradient、ABNR、またはスマートアルゴリズム
- 周期性の系におけるセル最適化のオプション：全てもしくは一部の格子パラメータを最適化可能
- 外部応力を周期性モデルに適用可能
- 計算パラメータは様々な精度や個別のカスタマイズが容易に設定可能
- 収束パラメータ、エネルギー、格子パラメータ、密度は必要に応じて図表としてアウトプット可能

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/>



上記の有機金属錯体、ジルコノセンの構造は複雑なエネルギープロフィールを有します。Forcite Plus はスタディ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。