

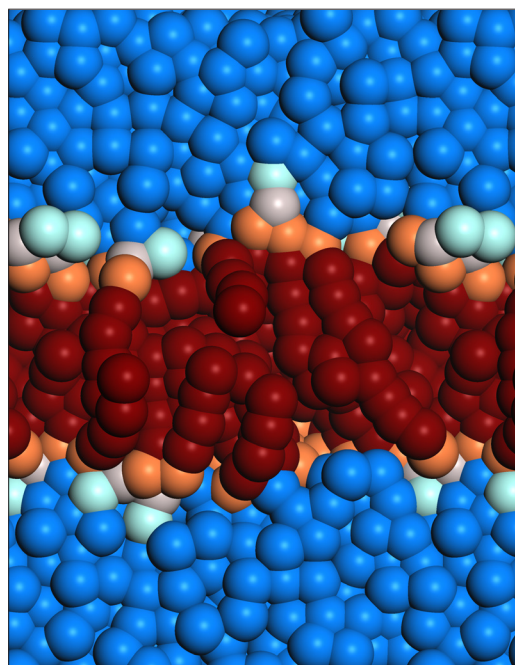
MESOCITE

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

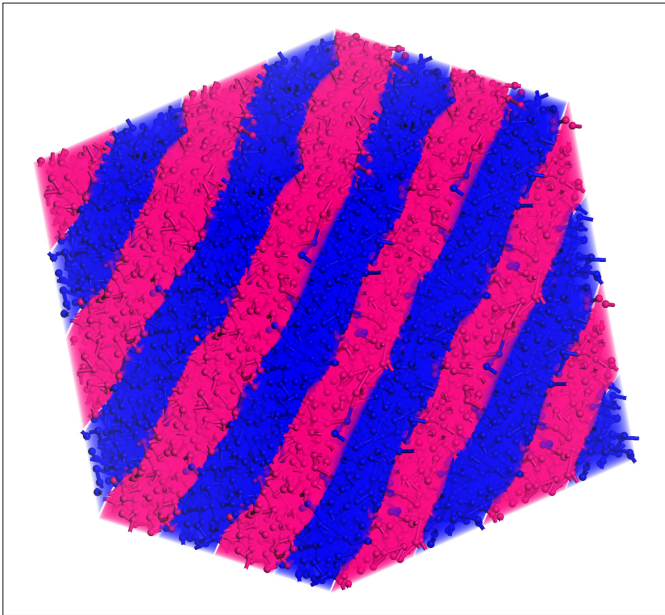
Mesocite は、粗視化分子動力学 (CGMD) 法または散逸粒子動力学 (DPD)¹ 法のいずれかを利用してソフトマテリアルズを研究するための手法です。Mesocite の基本は、原子のグループをニュートン力学を再現するように相互作用するビーズに置き換える事が出来るという考えに基づいています。結合振動など系の原子レベルの詳細は積分時に消滅するために時間スケールと長さスケールを大きく取ることができます。ビーズ間の相互作用に原子レベルの情報を取り込むことは、粗視化を行っても系の基本的な化学的性質は失われないことを示します。長さと時間のスケールを広げることで、ミセルやベシクル形成、ブロック共重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



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。

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、およびデンドリマー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。

MATERIALS STUDIO のメリット

Mesocite は Materials Studio® 環境で動作します。Materials Studio には、使い易く、分かりやすい統合ユーザーインターフェースが備わっています。Materials Visualizer は 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。分子やメソスコピック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。力場の複雑が増すと、必要なパラメータの数も増えます。力場に適切な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。

特長と機能

	DPD	CGMD
入力構造の指定		
メソスケール分子構築ツールを使用した分子トポロジーの作成	最大 20 ビーズタイプ、100 分子タイプ	制限なし
原子表記からの粗視化による分子トポロジーの作成	最大 10 ビーズタイプ、100 分子タイプ	制限なし
メソ構造テンプレートツールによる、ミセル、スラブ、ロッドなどの初期構造の作成	✓	✓
ランダムな開始条件の使用	✓	✓
ビーズのデカルト位置の固定	✓	✓
ビーズの電荷定義		✓
種々のビーズ間相互作用をもつ剛体壁の定義	✓	
計算用設定値		
タスク	ダイナミクス	エネルギー点計算、構造最適化、ダイナミクス
熱制御	DPD サーマostat	能勢、速度スケール、Andersen、およびBerendsen 法
圧調整	該当なし	Andersen 法、Berendsen 法
アンサンブル	NVT	NVE、NVT、NPT
ポテンシャル	ソフト線形ポテンシャル	原子価: 非結合: Buckingham、Morse、ソフト調和型、 Lennard Jones 9-4, 12-4, 9-6
カ場	該当なし	MS-MARTINI
計算のリスタート	✓	✓
非結合処理	直接カットオフ	ビーズベース、Ewald
せん断の適用	Lees-Edwards (Sliding Brick) 境界条件	
解析		
トラジェクトリのアニメーション	✓	✓
密度場の表示	✓	
鎖状分子の末端間距離	✓	慣性半径
鎖状分子の結合長分布	✓	距離モニタの利用による
任意の距離、角度、ねじれ角		
応力テンソル	✓	
表面張力	✓	
濃度プロファイル	Z 方向のみ	すべての方向
動径分布関数と構造因子		✓
ビーズの平均二乗変位、	✓	✓
回転相関時間		✓
X線および中性子散乱データ		✓
時空相関関係		✓
空間配向相関関数		✓
応力自己相関関数およびせん断粘度		✓
速度自己相関関数		✓
その他		
計算のスクリプト制御		MaterialsScript

注意: DPDから作成したトラジェクトリは、変換してCGMDのすべての機能で解析できますが、その逆はできません。

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/>

参考文献

1. Hoogerbrugge, P. J.; Koelman, J. M. V. A. 'Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics', Europhys. Lett., 1992, 19, 155-160. Groot R.D.; Warren, P. B. 'Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation', J. Chem. Phys., **1997**, 107, 4423-4435.
2. <http://md.chem.rug.nl/~marrink/coarsegrain.html>
3. S.J. Marrink, H.J. Risselada, S. Yefimov, D.P. Tieleman, A.H. de Vries. "The MARTINI forcefield: coarse grained model for biomolecular simulations." J. Phys. Chem. B, 111:7812-7824, **2007**.