

2009  
7/22



## アドバンスソフト技術セミナー 材料設計支援システムの現状と開発計画

ソフトマテリアル解析シミュレータAdvance/OCTAについて

アドバンスソフト株式会社  
技術第1部 主任研究員  
奥野 好成

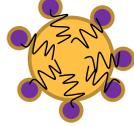
2.

### セミナーの主な内容

- Advance/OCTAとは？
- 当社におけるAdvance/OCTAの位置づけ
- 当社が提供しているサービス
- Advance/OCTAの構成
- Advance/OCTAが扱う対象
- 適用事例
- 当社での適用事例
- 材料設計支援システムにおけるAdvance/OCTAの位置づけ



# Advance/OCTAとは？

- 大学連携型産業科学技術研究開発プロジェクトにて土井名古屋大学教授(現東大)をリーダーとしてOCTAを開発
  - 2006年にOCTAの商用利用の権利をアドバンスソフト株式会社がOCTA管理委員会より取得、Advance/OCTAとしてリリース
  - **高分子, コロイド, ゲル, 界面活性剤, 液晶などのソフトウェアに対するシミュレータ**
- |        |   |                        |
|--------|---|------------------------|
| 高分子    |  | 繊維、ゴム、プラスチック、フィルム、生体組織 |
| コロイドゲル |  | おむつ、塗料、化粧品、バター、牛乳、インク  |
| 界面活性剤  |  | 石鹸、洗剤、泡、シュービングクリーム     |
| 液晶     |  | 液晶ディスプレイ、液晶シャッター、液晶レンズ |



3

# 当社におけるAdvance/OCTAの位置づけ

- 量子化学
  - Advance/ABINIT-MP (分子軌道法)
  - Advance/BioStation (分子軌道法/生体分子)
  - Advance/ProteinDF (密度汎関数法/タンパク質)
- ナノシミュレーション
  - Advance/Phase(バンド計算/結晶・表面)
- 構造解析
  - Advance/FrontSTR(有限要素構造解析)
- 流体解析
  - Advance/FrontFlow Red
  - Advance/FrontFlow Blue
- ナノ・メソスケールシミュレーション
  - Advance/OCTA

当社ソフトウェアの  
主なラインアップ

- ・ソルバ部に特化したカスタマイズの提供
- ・アドバンスソフトの既存の商品とリンクの提供



4

# 当社が提供しているサービス

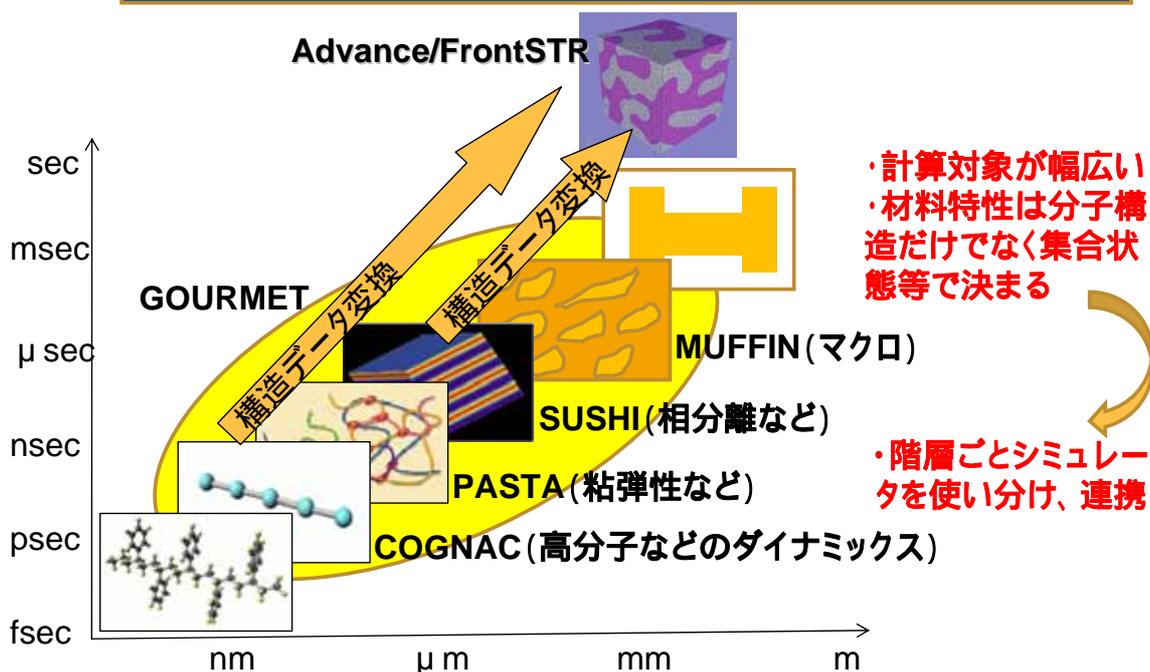
- ナノ・メソ領域のシミュレーションの受託解析  
材料解析、粗視化ポテンシャルの作成等
- ナノ・メソの材料系ソフトの利用に関するコンサルティング  
メソシミュレーション、量子化学計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算
- Advance/OCTAのサポートサービス  
(2006年にOCTAの商用利用の権利をOCTA管理委員会より取得)
- ナノ・メソ領域の材料系ソフトのカスタマイズ  
OCTAのソルバ部に特化したカスタマイズの提供、アドバンスソフトの既存の商品とリンクの提供、Advance/OCTAおよび個別カスタマイズの購入をされたお客様に、Q&Aを中心にしたサポートの提供



5

# Advance/OCTAの構成

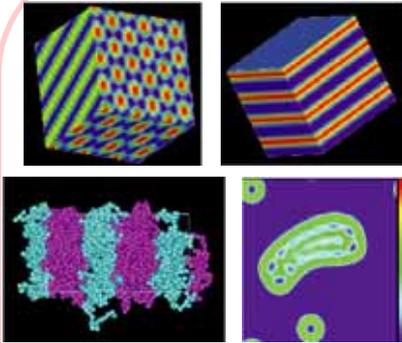
OCTA = グラフィックインターフェースGOURMET + 4つの計算エンジン



6

# Advance/OCTAが扱う対象例

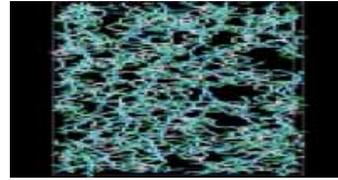
## マイクロ相分離構造



OCTA HP(<http://octa.jp>)より掲載

- ・積層構造と弾性的性質の関係解析  
繊維材料
- ・ナノパターン形成解析  
レジスト、高密度メモリ
- ・水分保湿に有利な構造予測  
化粧品

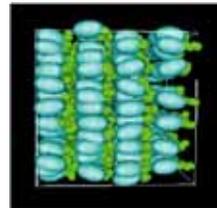
## 高分子ゲル



OCTA HP  
(<http://octa.jp>)  
より掲載

- ・水分吸収機能解析 おむつ、化粧品
- ・体積相転移現象の解析 人工筋肉や  
ドラッグデリバリーへの応用

## 液晶



OCTA HP  
(<http://octa.jp>)  
より掲載

- ・電場による構造変化解析  
液晶ディスプレイ、液晶レンズ



7

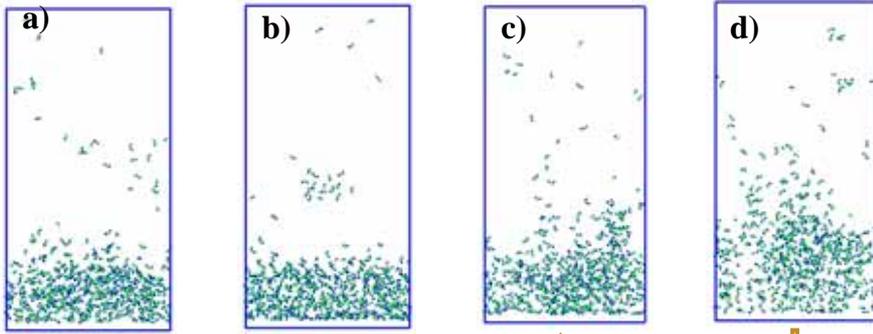
# 適用事例

- 応力 歪み解析
- ガス拡散解析
- 相分離構造の解析
- 光学特性評価
- 体積弾性率評価
- ガラス転移温度 (T<sub>g</sub>) 評価
- 透過膜解析
- 溶媒蒸発の解析
- 電界紡糸シミュレーション



8

# 当社での適用事例：電場印加時の溶媒蒸発

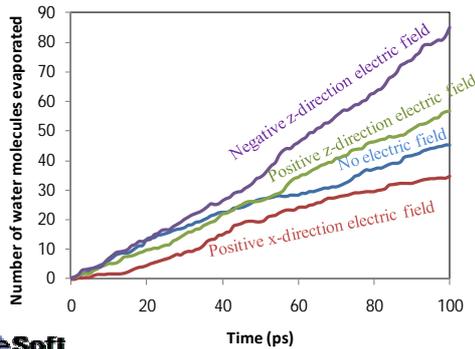


電場印加方向

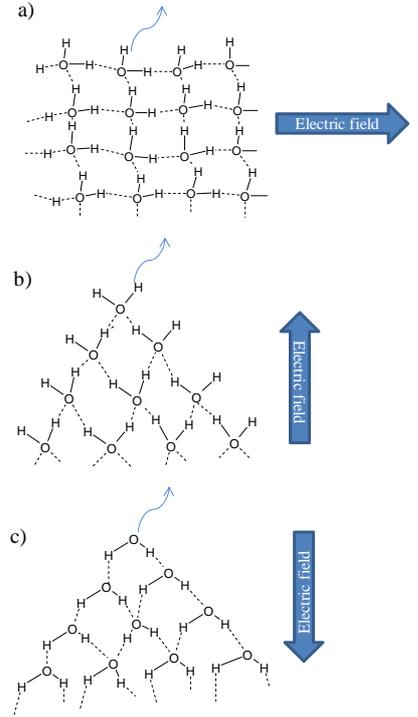
蒸発抑制

蒸発促進

蒸発促進



溶媒蒸発数の時間発展



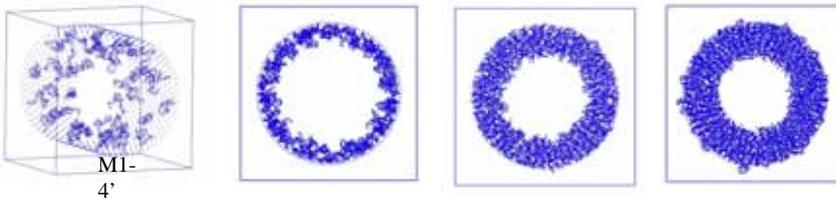
< 参考文献 > Y. Okuno, M. Minagawa, H. Matsumoto, A. Tanioka, *J. Mol. Struct. THOECHEM*, **2009**, 904, pp.83-90.

9

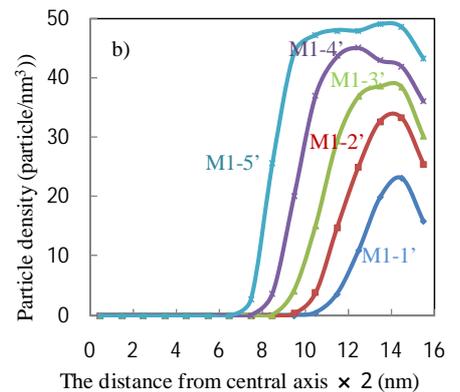
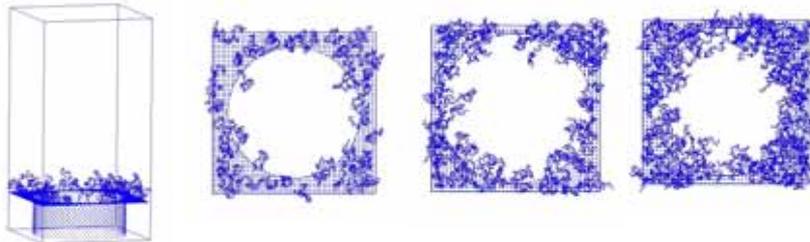


# 当社での適用事例：透過膜中のグラフトポリマーの解析

透過膜細孔内部にグラフトされた場合



透過膜細孔出入口にグラフトされた場合



細孔中心からの距離と粒子密度の関係

< 参考文献 > Y. Okuno, S. Zhang, K. Saito, H. Matsumoto, M. Minagawa, and A. Tanioka, *Computational Materials Science*, submitted.



10

## 材料設計支援システムにおけるAdvance/OCTA

- 高分子モデリング、計算条件設定、計算経過管理、計算結果解析は材料設計統合プラットフォームで行う。
- 計算の実行は、Advance/OCTAで実行する。
- 粗視化ポテンシャルは、材料設計統合プラットフォーム内に粗視化ポテンシャルデータベースを整備するとともに、新規なポテンシャルが必要な場合は、他のソルバー (Advance/PHASEや Advance/ABINIT-MP等) を用いて作成する。

