

# MS-DISCOVER

Discoverは広範囲な分子や素材に使えるMM・MDが組み込まれており、触媒作用、分離、結晶化学とポリマー化学の分野でのリサーチなどの手助けをします。構造と分子の性質の関係、分子間相互作用の理解、それと固体、液体、気体の性質予測などができます。

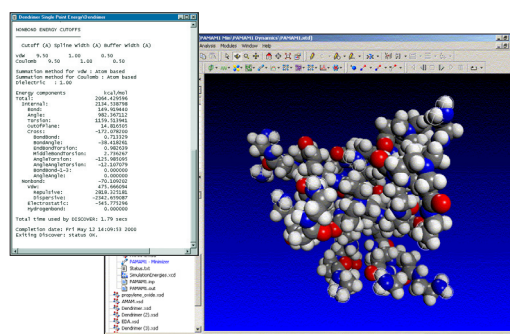
検証された力場をベースに最小エネルギー配座や構造グループと分子のダイナミクス・トラジェクトリーなど信頼性の高い計算が可能です。

DiscoverはAmorphous Cellなどの製品のバックグラウンド計算をこなします。周期境界条件により結晶や非結晶構造の解析、溶媒和問題のシミュレーション等ができます。多彩な解析オプションにより適切なシミュレーション結果を引き出す事もできます。

## 力場

- PCFFとCVFF等の検証されたパラメーター
- バルク状態の高精度シミュレーションができる力場であるCOMPASSのサポート

Discoverは、 dendrimer などのような複雑な構造も計算可能です。



## 計算

- 柔軟な幾何構造のエネルギーの極小化
  - ミクロカノニカル(NVE)、カノニカル(NVT)、Constant Pressure[一定圧] (NPT)と一定エンタルピー(NPH)のMDシミュレーション
  - 対称性をサポートした周期境界条件を使い、境界をこえた結合とエネルギーの極小化を計算
  - 外部電界が存在する環境でのシミュレーション
  - 原子を拘束したシミュレーション
  - MDシミュレーション中のポリマーコンホメーションの分析、動径分布、配向相関関数と散乱曲線の計算
  - 距離、角度と回転半径の分布の測定
  - 濃度計算
  - スクリプトによる計算のカスタマイジング
- 上記以外にも様々な分析機能があります。

## 性質

- バルク分子の凝集エネルギー密度と溶解度プロフィール
- 内部原子価エネルギーの分解
- 非平衡システムの温度のプロフィール
- マテリアル弾性定数
- 時空対比機能
- 双極分子対比機能
- 回転時間対比機能
- 平方置換機能と速度対比機能
- 振動強度と基準分析の計算
- 熱膨張係数の計算

上記以外にも様々な分析機能があります。

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/>