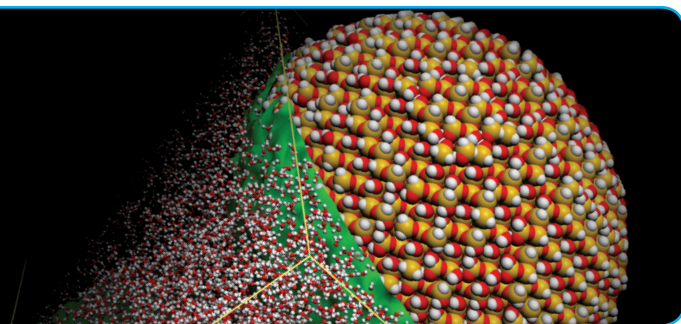


Materials Studio Materials Science Modeling and Simulations

Materials Studio® は、世界で最も先進的かつ評価の確立したマテリアルシミュレーション技術をデスクトップで活用できるソフトウェア環境です。Materials Studio を活用することにより、研究開発プロセス全般にわたって鍵となる重要な課題に役立ちます。



Materials Studio により、あらゆる材料計算科学の手法をデスクトップ計算で実行できます。このソフトウェア環境は、専門家レベルのモデリングやシミュレーションの技術を簡単に修得でき、かつ高度に活用したい化学、材料 R&D 分野の研究者向けにデザインされたものです。結晶構造や結晶化プロセスのモデリング、分子、ポリマー物性、触媒などの物性予測を行うツール、そして構造活性相関解析などのツール群を提供します。また、高度な API により、ユーザが自由にスクリプトを作成してカスタマイズしたり、計算を自動化することができます。Materials Studio のクライアントは多くの Windows や Linux のサーバへの接続に対応しており、計算処理を効率よく行うことができます。

可視化

Materials Visualizer では、分子、結晶、表面、ポリマー、メソスケール構造のモデル作成に必要な全てのグラフィカルツールを提供します。Visualizer 内でこれらのモデルを操作し、表示観察し、解析することができます。MaterialsScript API からこれらの殆どのツールへアクセスでき、処理の自動化やエキスパートユーザによる高度な機能拡張が可能で、また、Materials Visualizer ではグラフ、表、テキストを扱う機能があり、すべての Materials Studio 製品群をサポートするインフラストラクチャと解析ツールを提供します。

量子力学シミュレーションツール

Materials Studio では、量子力学に基づいて電子状態をはじめとして高精度にいろいろな物性や現象を解明する計算手法を取り揃えています。量子力学シミュレーションツールは、分子、ポリマーなどの有機材料、半導体、金属、セラミックスなどの無機材料、ナノチューブや金属クラスターなどのナノ材料、そして各種の触媒材料など、さまざまな材料に対し適用することができます。

製品	説明
CASTEP	CASTEP では、平面波基底を用いた密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算により、セラミックス、半導体、金属など、さまざまな材料の固体、界面、表面の物性をシミュレートします。
DMol ³	DMol ³ では、有機 / 無機分子、分子性結晶、共有結合結晶、固体金属、またそれらの表面周期モデルにおける電子構造や物性について、DFT を使用したシミュレーションを行います。
Materials Studio User Interface to Gaussian®	Gaussian® Interface を使用すると、ハートリーフォック法、密度汎関数理論 (DFT)、および MP2、CCSD、G3 などの洗練された手法を含む Gaussian の幅広い ab initio モデリング手法に、Materials Studio のグラフィカルインタフェースからアクセスできるようになります。
NMR CASTEP	NMR CASTEP では、NMR 化学シフトおよび電場勾配テンソルを第一原理から予測します。この手法は、分子、固体状態のどちらにも対応できるので、有機分子、セラミックス、半導体など、幅広い材料に対する NMR シフト計算に適用できます。
ONETEP	ONETEP は、線形スケーリングの DFT コードです。数千個の原子で構成されるような系に対して高精度な第一原理計算を実現します。
QMERA	QMERA では、量子力学計算の精度と古典力場計算のスピードを併せたハイブリッド QM/MM 計算法を利用しています。このアプローチにより、非常に大型の系の高精度計算を非常に少ない計算負荷で実行できます。
VAMP	VAMP では、有機 / 無機分子のさまざまな物理的、化学的物性を、半経験的分子軌道法を利用してすばやく予測できます。VAMP は、力場と第一原理の中間的手法として理想的なアプローチです。

古典的シミュレーションツール

Materials Studio では、原子間や分子間の古典的な相互作用に基づいて計算する幅広いシミュレーション手法を提供しています。その中には、分子動力学、格子力学、さまざまなモンテカルロベースの手法などが含まれ、さらにその中で利用できる数種類の力場パラメータセットが準備されています。

製品	説明
Conformers	Conformers では、分子のコンフォメーションと柔軟性を明確化するコンフォメーション探索アルゴリズムおよび分析ツールを提供します。
Amorphous Cell	Amorphous Cell は、複雑なアモルファス構造を表現するモデルを構築したり、重要な物性を予測するための計算科学ツールです。
COMPASS	COMPASS は、孤立状態および凝集状態にあるさまざまな分子について、構造、コンフォメーション、振動、熱物性などを、幅広い温度と圧力の下で、正確に予測できるようにする力場です。
Discover および Forcite Plus	Discover および Forcite Plus では、孤立分子モデルや周期系モデルに対して、分子力学法や分子動力学法による計算ができます。本ツールでは、機械特性、拡散性、局所構造、密度変化、凝集エネルギー密度、双極子自己相関関数などを予測する広範な分析機能が提供されています。COMPASS、CVFF、PCFF、Dreiding、Universal の各力場が利用可能です。
GULP	GULP では材料の構造最適化計算、物性計算、分子動力学計算が行えます。有機分子用の力場のほか、金属、酸化物、鉱物、半導体用のさまざまな力場が使用できます。また、ユーザ自作の材料モデルに適用させる力場パラメータを作成するための力場フィッティングツールも用意されています。
Blends	Blends では、液体-液体、ポリマー-ポリマー、ポリマー-添加剤などの系における、混合、相平衡、および分離技術のための相図や相互作用パラメータを予測します。
Equilibria	Equilibria は、単一種類および混合状態の分子相における相図を、ギブスアンサンブルモンテカルロ法 (GEMC) を使用して決定するプログラムです。
Adsorption Locator	Adsorption Locator は、周期的 / 非周期的な基板上において分子の低エネルギー吸着サイトを探索します。
Sorption	Sorption では、吸着等温線やヘンリー定数といった、吸着や分離現象の研究に必要な基本的特性を予測する手段を提供します。

メソスケールシミュレーションツール

Materials Studio のメソスケール手法は、一群の原子をビーズに置き換える粗視化アプローチに基づいています。この手法により、古典的なツールでの取り扱い範囲を超えるような空間的な大きさや時間のスケールで分子の振舞いをモデリングすることが可能となります。

製品	説明
MesoDyn	MesoDyn では、古典的な密度汎関数法を使用して、複雑なポリマー系の相分離や構造など、複雑な流体系の作用について、長さや時間のスケールの大きな研究ができます。
Mesocite	Mesocite は、ナノメートルからマイクロメートルの長さ、ナノ秒からマイクロ秒の時間のスケールで物質を研究する、粗視化シミュレーションモジュールです。Mesocite を使用すると、せん断応力下や構造に制限があるような条件下での平衡状態における流動性材料について構造特性や動的特性を把握できます。

分析 / 結晶化ツール

分析 / 結晶化ツールは、結晶構造や結晶成長の調査、予測、改良に利用します。

製品	説明
Morphology	Morphology を使用すると、結晶の単位胞とその内部の原子配置から結晶が成長した際の結晶形態を予測できます。Morphology では、結晶形状の予測、結晶表面の安定性の分析、独自の添加物の開発、溶媒と不純物の影響の制御等への応用が可能です。
Polymorph Predictor	Polymorph Predictor を使用すると、化合物の分子構造から直接その結晶多形を予測できます。Polymorph Predictor は、主に炭素、窒素、酸素、水素で構成された、非イオン性またはイオン性の剛体的な分子を対象として開発されました。このアプローチは、可能な充填配置をすべての妥当な空間群で生成することで、格子エネルギーの最小値を探索します。
Motif	Motif は分子結晶内の水素結合情報を分析するツールです。水素結合トポロジの定性分析と定量分析ができます。Materials Studio Polymorph Predictor の結晶構造予測機能と組み合わせることで使用することにより、予測された結晶構造について水素結合トポロジによる分類と統計学的なスコアリングができます。Motif は、Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) の Mercury 機能を利用してケンブリッジ結晶構造データベース (CSD) と連動します。
Reflex	Reflex は、結晶構造に基づいて X 線、中性子、電子の粉末回折パターンをシミュレートします。Reflex Plus は、実験で得られる中～高品質の粉末回折データから結晶構造を特定するための完全なパッケージを提供します。
Reflex QPA	Reflex QPA は Reflex の機能を拡張し、定量的な位相分析を可能にしたもので、粉末回折データを使用して、有機系 / 無機系を含め、混合物中の異なる相の相対比率を特定できます。
X-Cell	X-Cell は、中～高品質の粉末回折データ向けの、効率的な指数付けアルゴリズムです。X-Cell では、Extinction-specific dichotomy procedure によりパラメータ空間を網羅的に検索し、可能性のある単位格子をすべてリストアップします。

統計ツール

統計ツールは、分子の特性を実験で観測される物性値に直接関連付けることで、化合物をすばやくスクリーニングできます。

製品	説明
QSAR	QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships: 定量的構造活性相関) の Materials Studio への統合により、さまざまな記述子と高度な解析機能が利用できるようになり、これにより、高品質な構造活性相関を生成できます。QSAR では、Chi、Kappa、e-state keys などのトポロジカル記述子を含む FAST 記述子を使用できます。また、溶媒表面上の電荷分布を検査する Jurs 記述子、3D 記述子を電子的相互作用などに拡張する VAMP 記述子、QSAR の計算に高度な遺伝的アルゴリズムを適用する GFA が実装されています。
QSAR Plus	QSAR Plus は、QSAR に、反応性指数や正確なエネルギーを計算する DMol ³ 記述子の機能を加えたものです。また、非線形モデルや、他のモデル作成手法によるものよりノイズの多いデータセットに対し強いモデルを構築するための、Neural Networks も含まれています。Neural Networks は欠落値のあるデータセットに対して使用したり、複数の物性を予測するための重み付けモデルの構築に使用することもできます。
Synthia	Synthia では、高度な QSPR (Quantitative Structure-Property Relationships: 定量的構造物性相関) を使用して単体重合体および共重合体の物性を計算します。これにより、研究者はさまざまな物性について、候補となるポリマーをすばやくスクリーニングできます。

