

# MS-VISUALIZER

Materials Studioは、低分子化合物、有機・無機材料、結晶、ポリマー、金属、半導体、触媒などさまざまな分野の研究に役立つ幅広いモジュール群から構成されています。その中のMaterials Visualizerは、モデルの構築、各種シミュレーションの実行、データやモデルの表示、シミュレーションデータの解析などMaterials Studioの全てを操作するためのグラフィカルユーザインターフェース(GUI)です。

Materials Visualizerは、すべてのモジュールの使いやすさを追求して設計された3-D GUIに基づく統合環境を作り上げることによって、ほとんどの作業を簡単なマウス操作で行えます。また、オンラインヘルプやオンラインチュートリアルなどもあり、いっそう使いやすくなっています。Microsoftの標準仕様に基づいて作成されているため、Materials Studioのモジュール同士以外にも他のWindowsアプリケーションと簡単にデータ、表、画像などの交換をカット・アンド・ペーストで行えます。

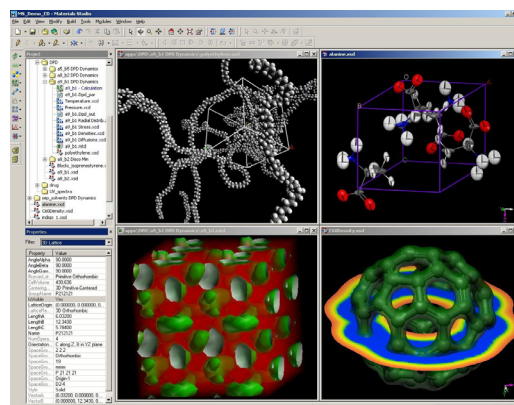
## グラフィカルユーザインターフェース(GUI)

- オンラインヘルプ
- Project Explorerを用いてプロジェクト内のデータに素早く体系的にアクセスできます。
- Module ExplorerはMaterials Studioの各モジュールに素早くアクセスできます。
- サーバ上で実行されているMaterials Studio上の各モジュールの管理と監視をするツール

## ディスプレイとコミュニケーション

- 結晶と分子構造の3-Dグラフィカルモデリング
- 一次元と二次元のグラフデータの表示と操作
- 分子構造やグラフィカルモデルの、他のPCへのコピー&ペースト機能

構造、グラフィカル、テキストと実験データの業界基準ファイルフォーマットを広範囲にサポートしています。



Materials Visualizerで見る画面表示MS Visualizerではバルクのアモルファスポリマーから有機および無機結晶の表示までできます。

## 分子モデルの構築と編集

- 3-D sketcherを用いた分子モデルの素早い構築
- 自動的に水素を加えるツール
- Fragment sketcherによる有機金属化合物などの複雑な分子の素早い構築
- 大規模な分子、結晶、非結晶構造ライブラリー
- 座標や分子の特性の簡単な編集や入力機能
- 分子結合次数の編集
- 周期表表示を含めたあらゆる元素の表示や編集
- 分子モデルのcopy&paste機能
- 多目的用途に使用できる結合計算ツール
- 非周期系における対称性の探知
- 分子、結晶やamorphous構造のライブラリー

## Polymer Building ツール

- Polymer Builderはホモポリマー、ブロックポリマー、ランダム共重合体や dendrimer を構築できます。
- 繰り返し構造(repeat unit)を持った広範囲のライブラリー
- ユーザー定義が可能なrepeat unitツール
- Branch generation ツール

### Crystal, Surface, Layer 構築ツール

- Crystal builderは格子パラメーター、原子座標と対称性(空間群)に基づいて周期系構造を作ります。
- 広範囲の空間群情報を含む対称性の入力や編集機能。
- Symmetry finderは周期系モデルを解析し対称性の詳細情報を表示します。
- 簡単に使えるSupercellcreation ツール。
- Surface builderは対称性に基づいて非周期構造から簡単に表面構造を作ります。
- Surface builderは真空スラブと共に結晶構造から簡単に表面構築を作ります。
- Layer builderは結晶または非結晶材料から、あるいはそれらの組み合わせから層状構造を構築できます。

### 一般的なVisualizationツール

- 多彩な表示スタイル(線、棒、球と棒、空間充填型の球[CPK]、多面体)
- Real-timeでのマウスによる回転とスケールリング
- 分子モデルの正規あるいは遠近効果を持たせた表示・モデルやバックグラウンドの色のカスタマイゼーション
- バックグラウンド構造やイメージの幅広い範囲での選択機能
- Thermal ellipsoid(熱振動によるぼかし)表示
- 量子力学その他の計算に基づいた電荷密度などの3次元データの高品質表示
- 量子力学その他の計算に基づいた電荷計算などのコンター図
- モデルの明るさ調節
- 軸のラベリングと3次元や2次元格子の表示

### 測定と解析

- 距離、結合やねじれ角度の測定と表示。表示は構造操作中もアップデートされます。
- 接触接点や水素結合の表示や計算
- Properties explorerを用いた原子や構造に関する数々の情報表示
- トラジェクトリファイルのアニメーション化(例: Molecular dynamicsデータ)

- Reaction previewとAtom matchingツールは遷移状態探索のインプットとして使われます。
- ノーマルモードを表示しアニメーション化するたもの振動解析ツール
- 分子モデルのラベリング。

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/>