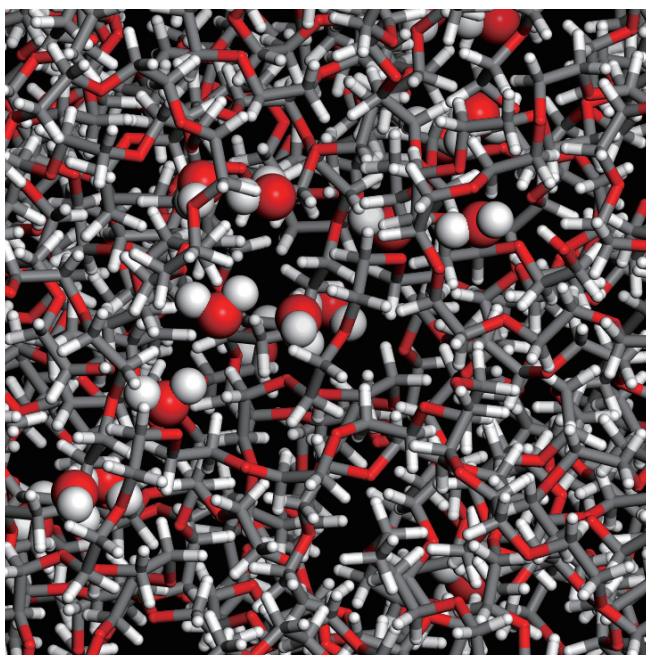


BIOVIA MATERIALS STUDIOの概要

データシート

次世代材料向けモデリングとシミュレーション。総合的なモデリング/シミュレーション環境であるBIOVIA Materials Studio®は、原子構造や分子構造のもつ特性と挙動の関係を予測することにより、材料科学や化学分野の研究者が新しい材料を開発できるよう支援します。BIOVIA Materials Studioを使用することで、さまざまな業界の研究者は、医薬品、触媒、ポリマーや混合物、金属や合金、電池や燃料電池、ナノマテリアルなどのあらゆる種類の材料に対して、より優れた性能を持つ材料を設計することができます。



BIOVIA Materials Studioは、材料の性能と挙動をモデリングし評価する環境としては世界最先端のソフトウェアであり、非常に簡単に利用できます。BIOVIA Materials Studioを用いることによって、材料科学者には次のようなメリットがあります。

- 候補材料のさまざまなバリエーションに対して「バーチャル・スクリーニング」を実行することにより、物理的なテストや実験に関わる費用や時間を削減します。
- 技術革新プロセスを加速します。より新しく、高性能で、持続性が高く、費用対効果の高い材料を、物理的なテストや実験を行わずに短時間で開発することができます。
- 原子構造や分子構造のもつ物性と挙動の関係について基本的理解を深めることができます。
- 実験を補完する計算材料科学の導入により、強力なマテリアル・インフォマティクス機能を提供します。

- BIOVIA Materials Studio Collection for BIOVIA Pipeline Pilot およびMaterialsScript API間の処理の自動化とベストプラクティスの共有を実現します。

可視化

BIOVIA Materials Studio Visualizerは、材料のモデリングやシミュレーションを行う上で最も使いやすく完成度の高いグラフィカルなユーザー環境を備えており、化学者や高分子科学者、その他の材料科学の研究者たちは、少ない労力で迅速に生産性を高めることができます。BIOVIA Materials Studio 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の作成/操作/表示機能を提供しています。また、BIOVIA Materials Studioのすべてのシミュレーションに対応しており、結果を画像、アニメーション、グラフ、図、表、テキストデータとして表示できます。Materials Visualizerのツールの大半はMaterialsScript APIからアクセスでき、エキスパート・ユーザーによる機能のカスタマイズや反復作業の自動化が可能です。BIOVIA Materials Studio VisualizerのMicrosoft Windowsクライアントは多くのWindowsやLinuxのサーバー・アーキテクチャに対応しており、応答性の高いユーザー・エクスペリエンスを提供します。

ソリューションテクノロジー

BIOVIA Materials Studioでは、量子力学、古典力学、メソスケール、統計、分析/結晶化ツールなど、総合的なシミュレーション機能を提供しています。この幅広いソリューションにより、研究者はさまざまなサイズやタイムスケールで材料を評価でき、より正確な物性予測と最短時間でのパフォーマンスの評価が可能となります。

量子力学シミュレーションツール

BIOVIA Materials Studioでは、密度汎関数理論、線形スケーリング、QM/MM、半経験的手法を含む量子力学に基づく、分子構造や周期構造のシミュレーションのためのツールを幅広く備えています。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、構造、熱物性、電気特性、光学特性などの高精度な計算を可能にします。

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。
DMol³	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。
DFTB⁺	DFTB ⁺ は、材料の電子物性シミュレーションを行う半経験的モジュールです。密度汎関数理論(DFT)に基づくタイトバインディング法を使用して、大型の系において高精度な量子力学計算を実現します。
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計算法を採用しています。この方法により、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

BIOVIA 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らかにするための、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。

古典的シミュレーションツール (続く)

製品	説明
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、ユーザー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一定数といった、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

BIOVIA 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。

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、化合物を素早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BIOVIA 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)を使用して単独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。

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、比較的剛直な非イオン性またはイオン性の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求めます。
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。水素結合トポロジーの定性分析と定量分析ができます。BIOVIA Materials Studio Polymorph Predictorの結晶構造予測機能と組み合わせて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ー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。

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、**12**の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語)をご参照ください。



3DEXPERIENCE®

 **DASSAULT SYSTEMES** | The **3DEXPERIENCE**® Company

Dassault Systèmes Corporate
Dassault Systèmes
10, rue Marcel Dassault
CS 40501
78946 Vélizy-Villacoublay
Cedex France

BIOVIA Asia Pacific
ダッソー・システムズ・バイオビア株式会社
141-6020
東京都品川区大崎 2-1-1
ThinkPark Tower

BIOVIA Americas
BIOVIA
5005 Wateridge Vista Dr.,
San Diego, CA
92121 USA