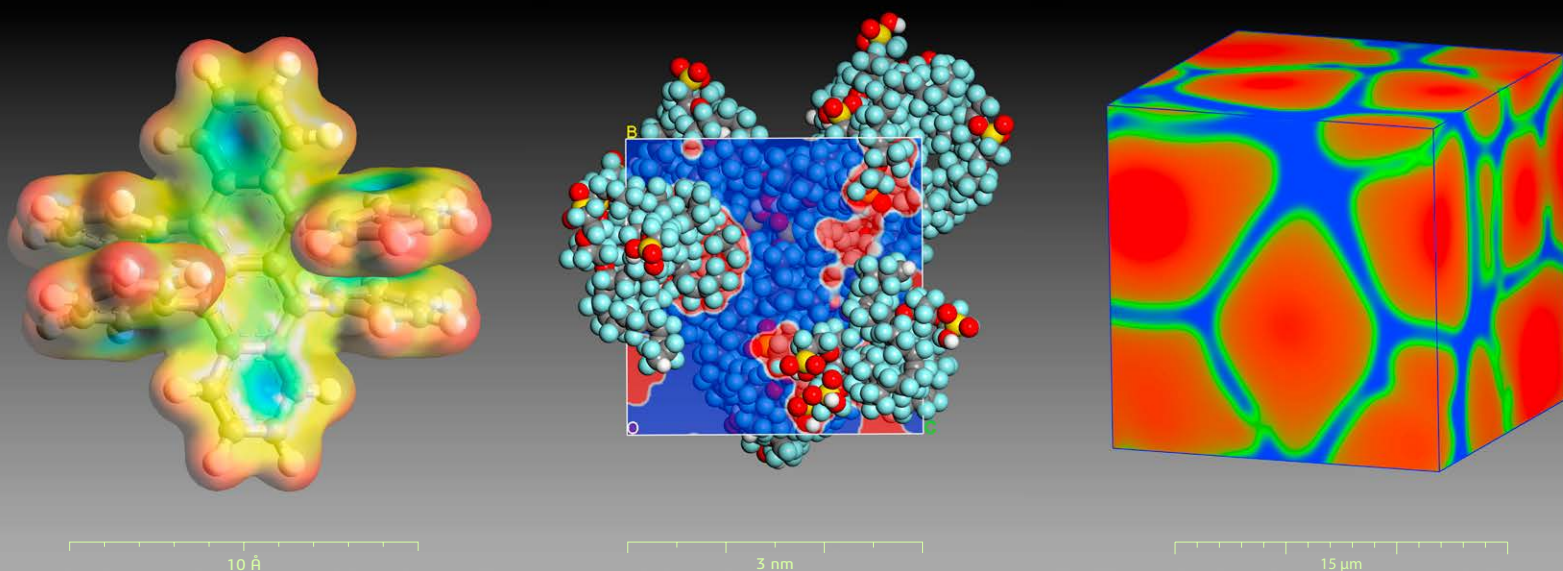


# BIOVIA MATERIALS STUDIO

## 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、分子構造や結晶構造の持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解析する環境として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かか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。よりあたらしく、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期間で開発することができます。
- 分子構造や結晶構造の持つ物性と挙動の関係について、基本的な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との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整えており、化学者や高分子化学者、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。

## 量子ツール

BIOVIA Materials Studioでは、密度汎関数理論、オーダーN法、QM/MM、半経験的手法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。

BIOVIA Materials Studio Visualizerでは、分子、決勝、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・ユーザーによる昨日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Windowsクライアントは多くのWindowsやLinuxのサーバー・クライアント構成に対応しており、応答性の高い環境を提供します。

## ソリューション技術

BIOVIA Materials Studioでは、量子力学、古典力学、メソスケール、統計解析、結晶解析ツールなど、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系の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性能の評価が可能となります。

製品	説明
Materials Studio CANTERA	CMaterials Studio antera [www.cantera.org]は化学速度式のソルバーです。Materials Studio Canteraは、熱力学入力を設定し、計算を実行するための環境を提供します。Cantera Reaction Editorは、既存の実験的に決定された熱力学データを持つ複雑な反応スキームに、Materials Studio DMol3から決定された反応速度を持つ新しい化学種や反応を導入することができます。
Materials Studio CASTEP	Materials Studio CASTEPは、セラミックス、半導体、金属などの幅広い材料の固体、表面、界面などの状態での特性を密度汎関数理論に基づいて予測します。
Materials Studio DMol <sup>3</sup>	Materials Studio DMol <sup>3</sup> は、有機および無機分子、分子性結晶、共有結合性結晶、金属、表面などの電子状態および特性を密度汎関数理論に基づいて予測します。
Materials Studio DFTB+	Materials Studio DFTB+は、材料の電子状態を半経験的手法で予測します。密度汎関数理論に基づく強束縛近似により、量子力学的手法での大規模系の計算を可能にします。
Materials Studio FlexTS	Materials Studio FlexTS モジュールは、反応物と生成物の間の最小エネルギー経路（遷移状態の位置）を特定するためのツールです。化学反応における反応体と生成物の間の最小エネルギー経路を特定するための強力なツールです。FlexTSは、各配置の系エネルギーを供給するためにDMol3またはDFTB+を必要とします。
Materials Studio KINETIX	Materials Studio KINETIXは、表面で起こる競合する化学的・物理的吸着、脱離、拡散プロセスをシミュレートするための汎用プログラムです。これにより、触媒活性や被毒における化学種の拡散の役割や、マイクロスケールまでの化学種の表面被覆など、ユニークな洞察が得られます。
Materials Studio NMR CASTEP	Materials Studio NMR CASTEPは、第一原理に基づき、NMR化学シフトおよび電場勾配テンソルを予測します。セラミックスや半導体を含む幅広い分子や固体に適用できます。
Materials Studio ONETEP	Materials Studio ONETEPは、オーダーN法に基づき、数千原子からなる系の高精度な第一原理計算を可能にします。
Materials Studio QMERA	Materials Studio QMERAは、量子力学的手法の精度と力場計算の速度を兼ね合わせたQM/MM法に基づくプログラムです。大規模系の高速な計算を可能にします。
Materials Studio VAMP	Materials Studio VAMPは、分子系の多くの特性を半経験的手法に基づき高速に予測できます。力場と第一原理計算の中間に位置する理想的な手法です。

## 古典力学シミュレーションツール

BIOVIA Materials Studioは、非常に広範囲な古典力学的手法に基づく製品を提供しています。これには、分子動力学法やモンテカルロ法に基づく製品や、結晶関係のツールなどが含まれます。

製品	説明
Materials Studio Adsorption Locator	Materials Studio Adsorption Locatorは、周期系および非周期系の表面上での、分子の低エネルギー吸着サイトを探索することができます。
Materials Studio Amorphous Cell	Materials Studio Amorphous Cellは、複雑なアモルファス状態の現実的なモデルを作成し、その後の物性予測につなげるためのツールです。
Materials Studio Blends	Materials Studio Blendsは、液体-液体、ポリマー-ポリマー、ポリマー-添加剤など系におけるの混合、層平衡、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。
Materials Studio Conformers	Materials Studio Conformersは、分子の配座と柔軟性を解析するための配座探索アルゴリズムとツールを提供します。
Materials Studio COMPASS	Materials Studio COMPASSは、幅広い温度および圧力条件下での、孤立および凝集状態にある分子の構造、配座、振動、熱物性などを精度よく予想します。これには最新のCOMPASSIIIパラメーター( <a href="https://doi.org/10.1080/08927022.2020.1808215">https://doi.org/10.1080/08927022.2020.1808215</a> )へのアクセスも含まれる。
Materials Studio Forcite Plus	Materials Studio Forcite Plusは分子や周期系の分子力学および動力学法を提供します。このツールには、力学的特性、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ための幅広い解析機能が含まれています。サポートされている力場は、Materials Studio COMPASS、CVFF、PCFF、Dreiding、Universalです。また、Forcite PlusはGPUでの実行もサポートしており、パフォーマンスを加速します。
Materials Studio GULP	Materials Studio GULPは、材料の構造最適化、物性計算、分子動力学計算が可能です。有機物用の力場だけでなく、金属、酸化物、鉱物、半導体用の様々な力場が利用可能です。力場パラメータを自作するための力場フィッティングツールも搭載しています。
Materials Studio Sorption	Materials Studio Sorptionは、吸着等温線やヘンリー定数などの吸着や分離現象の解析に必要な基本的な物性を予測できます。

## 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、原子のまとまりをビーズとして粗視化します。この手法により、古典的な手法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スケールで系の振る舞いを解析することが可能です。

製品	説明
Materials Studio MesoDyn	Materials Studio Mesodynは、古典的な密度汎関数理論に基づき、複雑なポリマー系の相分離や構造などの、長さや時間スケールの大きな複雑な流体系の振る舞いを解析します。
Materials Studio Mesocite	Materials Studio Mesociteは、ナノからマイクロオーダーでの長さおよび時間スケールで材料を研究するための粗視化シミュレーションが可能です。平衡状態や構造にせん断応力や拘束が適用されている状態での流体の構造や動的物性を解析します。
Materials Studio PhaseField	Materials Studio PhaseFieldは、凝固と結晶粒成長のシミュレーションを通じて、複雑な金属合金の結晶粒構造などの硬質材料の微細構造を予測するモジュールです。このモジュールは、Pipeline Pilot Materials Studio Collectionが提供するプロトコルを使用して実行されます。

## 統計解析ツール

統計解析ツールは、実験で観測される物性値と、それと相関のある分子の特性を関連付けて相関式を構築することで、化合物を素早くスクリーニングできます。

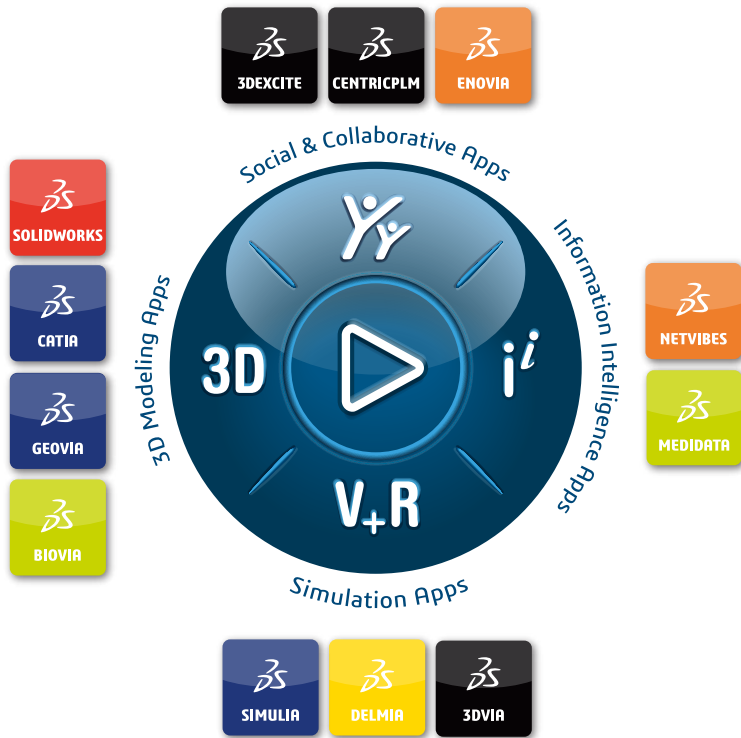
製品	説明
Materials Studio QSAR	Materials Studio QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships : 定量的構造活性相関) は Materials Studio に統合されており、幅広い記述子と高度な解析機能を利用することで、高品質な構造活性相関の生成を支援します。QSAR には、トポロジカル記述子やエレクトロトポロジカル記述子を含む、幅広い記述子が含まれています。また、Jurs記述子により、溶媒表面の電荷分布を調べることができます。VAMP記述子は、3D記述子の範囲を電子の相互作用を含むものへとさらに拡張し、GFAは洗練された遺伝的アルゴリズム法を適用して定量的な構造活性相関を計算します。
Materials Studio QSAR Plus	Materials Studio QSAR Plusには、反応性指標と正確なエネルギーを計算するためのDMol3記述子の機能がQSARに追加されています。また、非線形モデルを構築するためのニューラルネットワークや、他のモデル構築手法よりもノイズの多いデータセットに強いモデルも含まれています。また、欠損値のあるデータセットにも使用でき、複数の物性を予測するための重み付けモデルを構築することもできます。
Materials Studio Synthia	Materials Studio Synthiaは、ポリマーの物性計算に特化したBiceranoの相関式を使用して、単独重合体やランダム共重合体の物性を計算し、候補材料をすばやくスクリーニングできます。

## 結晶解析ツール

結晶解析ツールは、結晶構造の予測や結晶成長の解析および改良に利用できます。

製品	説明
Materials Studio Morphology	Materials Studio Morphologyを使用すると、結晶の単位格子と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。また、結晶表面の安定性の解析、添加物の開発、溶媒や不純物の結晶形態への影響の制御などへの応用が可能です。
Materials Studio Polymorph Predictor	Materials Studio Polymorph Predictor は、主に炭素、窒素、酸素、水素から構成される、かなり剛直な非イオン性またはイオン性分子を対象として開発されました。このアプローチは、格子エネルギーにおける低位極小値を探索するために、すべての妥当な空間群における可能なパッキング配置の生成に基づいています。
Materials Studio Motif	Materials Studio Motifは分子結晶の結合情報を解析し、水素結合トポロジーの定性的・定量的な解析手法を提供します。Polymorphの予測機能と組み合わせることで、Motifは提案された構造を分類し、統計的にスコアリングすることができます。Cambridge Crystallographic Data CentreのMercury機能を利用し、Cambridge Structural Databaseとのインターフェイスを提供する。
Materials Studio Reflex	Materials Studio Reflexは、結晶材料のモデルに基づいて粉末X線、中性子、電子回折パターンをシミュレートします。Reflex Plus は、中～高品質の粉末回折データから結晶構造を決定するための完全なパッケージを提供します。
Materials Studio Reflex QPA	Materials Studio Reflex QPAは、Reflexの定量相分析機能を拡張したもので、粉末回折データに基づいて混合物中の無機系と有機系を含む異なる相の相対比率を決定することができます。
Materials Studio X-Cell	Materials Studio X-Cellは、中～高品質の粉末回折パターンの実験データに対する効率的な指数付けアルゴリズムです。格子定数の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。

詳細はこちら



**Our 3DEXPERIENCE® platform powers our brand applications, serving 12 industries, and provides a rich portfolio of industry solution experiences.**

Dassault Systèmes, the 3DEXPERIENCE Company, is a catalyst for human progress. We provide business and people with collaborative virtual environments to imagine sustainable innovations. By creating ‘virtual experience twins’ of the real world with our 3DEXPERIENCE platform and applications, our customers push the boundaries of innovation, learning and production.

Dassault Systèmes’ 20,000 employees are bringing value to more than 270,000 customers of all sizes, in all industries, in more than 140 countries. For more information, visit [www.3ds.com](http://www.3ds.com).

**Europe/Middle East/Africa**  
 Dassault Systèmes  
 10, rue Marcel Dassault  
 CS 40501  
 78946 Vélizy-Villacoublay Cedex  
 France

**Asia-Pacific**  
 Dassault Systèmes K.K.  
 ThinkPark Tower  
 2-1-1 Osaki, Shinagawa-ku,  
 Tokyo 141-6020  
 Japan

**Americas**  
 Dassault Systèmes  
 175 Wyman Street  
 Waltham, Massachusetts  
 02451-1223  
 USA



©2021 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, the Compass icon, the 3DS logo, CATIA, BIOVIA, ENOVIA, NETVIBES, MEDIDATA, CENTRIC PLM, 3DEXCITE, SIMULIA, DELMIA, and 3DVIA are commercial trademarks or registered trademarks of Dassault Systèmes, a French “société européenne” (Versailles Commercial Register # B 322 306 440), or its subsidiaries in the United States and/or other countries. All other trademarks are owned by their respective owners. Use of any Dassault Systèmes or its subsidiaries trademarks is subject to their express written approval.