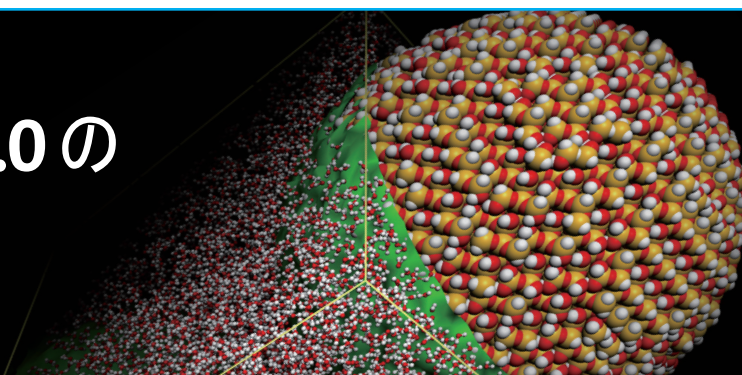


Materials Studio 5.0 の 新機能



Materials Studio により、化学、物理学、材料科学の研究者は、新しい方法で画期的な成果を挙げることができるようになりました。高い並列化効率を誇るコードを採用した Materials Studio 5.0 は、高度なモデリングタスクにおいて業界最速で問題解決策を見出します。この最新版では、科学者がより広い設計空間を利用できるようになり、触媒作用、ポリマー、特殊化学品、先端材料分野の研究におけるより良い意思決定（インフォームドディシジョン）を支援します。

また、Materials Studio 5.0 には、ユーザを迅速な問題解決に導く新しい強力なツールが用意されています。中核となる古典的シミュレーションツールである Forcite Plus と Mesocite を並列化することにより、計算にかかる時間を劇的に短縮します。リニアスケーリング DFT モジュールである ONETEP のパフォーマンスも大幅に向上しました。新しい Amorphous Cell ツールを使用すると、さまざまな系を柔軟に構築できます。CASTEP では、ラマンスペクトルを測定できるようになりました。ナノテクノロジーコンソーシアムでの開発では、DFTB 法やキネティックモンテカルロ法などを利用した、より長いタイムスケールで、より大きなモデルを計算できるようにする機能拡張に重点を置いています。

新機能はすべて MaterialsScript からアクセスでき、タスクの自動化や計算設定の所要時間短縮が可能です。

画期的な成果を より早く実現

- Forcite Plus と Mesocite の並列化
- MaterialsScript と Amorphous Cell を使用したポリマーワークフローの合理化
- ONETEP のパフォーマンスが飛躍的に向上

量子力学および触媒分野

CASTEP の機能強化

ラマン分光法

固体材料および分子のラマン振動数と密度を予測します。コンピュータで材料の特性を明確化し、*in situ* スペクトルと比較して、対象の材料を特定します。

MaterialsScript の統合

MaterialsScript を使用すると、CASTEP 計算の自動化や別の Materials Studio モジュールとの統合が可能です。触媒、電子、光学特性を持った材料の最適化を行う、複雑なワークフローを実行できます。

VAMP の機能強化

強化された AM1* パラメータ

適用領域の機能を強化し、V、Cr、Mn、Fe、Co、Au、Br、I など、より多くの AM1* ハミルトニアン元素のカバーしました。

QMERA の機能強化

QMPot アプローチを利用した周期系のサポートにより、ゼオライトのような不均一系触媒の周期境界条件下でのシミュレーションを実現しました。また、QMERA には振動数計算機能が追加されました。

DMol3 の機能強化

並列処理のパフォーマンス

粗視化並列処理アプローチの利用により、振動数計算の並列処理のパフォーマンスが向上しました。

ONETEP の機能強化

パフォーマンスの改善

計算速度が 3 倍から 10 倍に向上したことにより、解決時間が大幅に短縮されました。

古典的なシミュレーション

Amorphous Cell の機能強化

新しい Amorphous Cell モジュールを使用すると、複雑な凝縮相モデルをすばやく簡単に構築できます。

力場サポートの強化

あらゆる素材の非晶質セルを、Forcite でサポートしている任意の力場を使用して作成します。

新しいパッキングタスク

分子を、任意の形のセル、構造を持つセル、またはナノチューブ内部のような等値面にパッキングして、複雑に構造化された系を構築します。

柔軟なねじれの適用

この機能を使用すると、管理された効率的な方法でポリマーをパッキングできます。バックボーン、すべて、またはカスタマイズしたねじれを使用して、たとえば分岐ポリマーをセルにパッキングするなど、分子に柔軟性を持たせることができます。

自動計算

MaterialsScript を使用して Amorphous Cell の構築やパッキングのタスクを自動化できます。Forcite Plus と組み合わせて使用することで、ポリマーワークフロー全体を構築することもできます。

Forcite Plus と Mesocite

並列処理および 64 ビット Linux のサポート

ジョブの並列実行パフォーマンスを飛躍的に高めました。64 ビット Linux のサポートにより、高速インターコネクトをフル活用でき、さらにパフォーマンスが向上します。

MaterialsScript を使用して Forcite と Mesocite の機能を並列計算することにより、計算に要する時間を劇的に短縮できます。

Mesocite

DPD サーモスタット

Mesocite への DPD サーモスタットの導入により、DPD 計算の並列化が可能になります。また、MaterialsScript を使用して DPD ワークフローを自動化することもできます。

単位を換算して計算し、物理単位で結果を取得します。

GULP

フォノン分散および状態密度計算を設定して分析します。新しいブリルアンゾーンの可視化により、逆格子空間経路を可視化して特定します。

可視化

ブリルアンゾーンの可視化

ブリルアンゾーンを表示することにより、固体特性計算の設定と分析を合理化します。k 空間に経路を作成して、高対称線と高対称点を強調します。

MaterialsScript の拡張機能

MaterialsScript でトラジェクトリを作成し、プロジェクトのドキュメントの削除や名前の変更を行います。

ストレスなどの新しいトラジェクトリのプロパティにアクセスし、構造の対称性を見つけて強制する新しいツールを使用できます。

ナノテクノロジーコンソーシアム

Kinetix (*新規モジュール*)

Kinetix は、触媒、接着剤、皮膜剤分野における原子論的シミュレーションと反応工学のギャップを埋める役割を果たします。このモジュールでは、キネティックモンテカルロ法を利用して、最大で分単位のタイムスケールで、不均一触媒などの表面処理をシミュレートします。

QMERA の機能強化

遷移状態探索—ゼオライトのような大規模な系の反応遷移状態を、この QM/MM 法で NEB (Nudged Elastic Band) 法を利用して特定できるようになりました。

周期的 QM 領域のサポート— 横方向周期の QM および MM 領域を持つインタフェースと階層をモデル化できるようになり、自己組織化単分子層 (SAM) やセンサーシステムへの応用が可能です。

DFTB+ の機能強化

DFTB+ を使用してバンド構造計算の設定と分析を行います。