

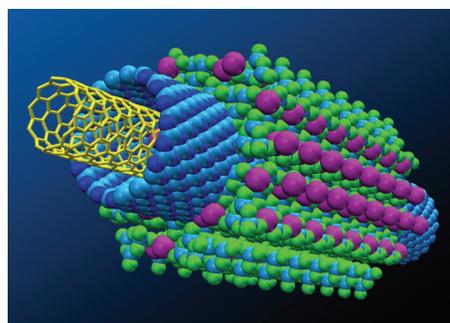
MATERIALS STUDIO 6.0の 新機能

Materials Studio 6.0 はアクセルリスが提供する最新の総合モデリング・シミュレーション環境です。材料科学や化学の研究において重要となる、材料の原子・分子レベルでの構造と材料の物性や挙動との関係性についてその予測と理解をお手伝いします。Materials Studio 6.0 は製薬、触媒、高分子複合材料、金属、二次電池、燃料電池、ナノテクノロジーなど、さまざまな産業における材料開発に適用することができます。

Materials Studio 6.0 は、多くの新機能を搭載し、物性予測や候補材料の仮想スクリーニングについてその性能をさらに高めました。

新機能によるメリット:

- ・ 金属、有機材料、希土類、磁性材料に対する、より高速で高精度な物性予測
- ・ 塩、結晶、高分子、金属酸化物、電子機器、半導体材料に対する、より広範囲の物性予測
- ・ グラフィックス性能の向上
- ・ スクリプト機能の向上による繰り返し作業の効率化
- ・ 量子力学的手法の高い精度と古典力学的手法の高速性を兼ね備えた新しいDFTB+モジュール搭載による、より大規模で現実的なモデルのシミュレーション



「ナノスケール」の科学がもたらす 大きなインパクト

- ・ 新しいDFTB+モジュールを用いることにより大規模なナノマテリアルのシミュレーションもこれまでにない速い計算速度で実行できます。
- ・ B3LYPを用いることにより分子の化学反応メカニズムについてより高精度な予測ができます。
- ・ DMol³のラマンスペクトル予測機能により例えば有機太陽電池のような系の研究で重要となるスペクトルデータの予測をより一層広く行えるようになります。
- ・ Forciteの分子動力学計算において新しいサーモスタット・アルゴリズムを導入することにより、温度についてのより高速な平衡化、より安定したシミュレーションが可能になりました。

材料モデリング機能

量子力学および触媒分野

新モジュール "DFTB+"

密度汎関数理論(DFT)に基づくタイトバインディング法プログラム: ナノクラスターのように第一原理DFT計算を行うには計算コストがかかりすぎるような大規模な系を扱う場合にも、DFT計算の精度と半経験的手法の効率性を併せ持つことにより実用的なシミュレーションを行います。

タスクの範囲: エネルギー1点計算、構造最適化計算、分子動力学計算を行うことができます。

パラメータ: すぐに使用できるパラメータセットもありますが、半自動的にパラメータを作成するツールによって新規にオリジナルのパラメータを作成して使用することもできます。

電子物性: バンド構造、状態密度のグラフ作成、電子密度分布や電子軌道の3Dプロットが可能です。

CASTEPの新機能

線形応答理論の金属系への適用: 高精度な格子振動計算が金属に対しても可能になりました。これにより絶縁体や半導体に加え、金属系に対しても、相転移の研究や、中性子線散乱、非弾性X線散乱で測定されるフォノンの研究における解析手段としてCASTEPを利用することができます。

計算精度の向上: 最新のOTFG(on the fly generated)擬ポテンシャルが希土類元素に対しても適用できるようになりました。これを適用することにより、従来の擬ポテンシャルを用いた場合に比べて高精度に計算することができます。

LDA+U法とFinite Displacement法を組み合わせた格子振動計算: 強相関係に対する格子振動計算の精度を向上させました。

ONETEPの機能強化

電場: 外部電場を課した計算が可能になりました。

分散効果: タンパクや分子結晶などの有機系について構造やエネルギーの計算精度が向上します。

DMol³の機能強化

B3LYP(孤立系): 分子のような孤立系について結合エネルギーや遷移状態の精度が向上します。

ラマンスペクトル: 分子のラマンスペクトル予測が可能になりました。これにより、分子構造の解明や大量の候補分子モデルからのスクリーニングなどに応用することができます。

TD-DFTの開殻系への対応: これまでのTD-DFTによる光学スペクトル予測を開殻系に対しても行えるようになりました。

古典力学シミュレーション

Forcite PlusとMesocite

PCFFとCVFFの編集が可能に: PCFFとCVFFをカスタマイズしてオリジナルの新しい力場を作成できるようになりました。また、Mesociteの粗視化分子動力学に対しては力場についてより多くの関数形が使用できるようになりました。

Shearing(せん断条件下のMDシミュレーション): せん断力を課した分子動力学計算が可能になり、さらにその結果からせん断粘性を見積もることができるようになりました。

NHLサーモスタット: より安定的でNoseよりも早く平衡化できるサーモスタットを搭載しました。

Parinelloバロスタット: セル形のうち格子定数だけでなく格子角まで変化させられるバロスタット。等方圧力下での相転移現象の研究などに応用できます。

トラジェクトリ出力: MD計算中に一部の原子セットについてより頻繁に出力させることや、計算中のトラジェクトリデータを追うことが可能になるなど、トラジェクトリデータの出力についてより細かな設定ができるようになりました。

Amorphous Cell

Confined Layer タスクにおける Ramp Density: 従来の Constructionタスクに加え、Confined Layerタスクでも Ramp Densityが使用できるようになりました。これにより、ある程度剛直なポリマーに対しても Confined Layer モデルを作成できるようになりました。

GULP

分子動力学計算: MD計算において新しくNPHアンサンブルが設定可能になり、安定性も向上しました。

REAXFF力場パラメータの拡充: REAXFF反応力場について適用できる系の範囲が広がりました。

可視化と自動化

Materials Visualizer

メニューバーからのスクリプト起動: メニューバーからスクリプトを起動させることが可能になりました。これにより作業効率を高めたり、精査された計算プロセスを共有したりすることが可能になります。

MaterialsScript API: 新たに Reflex Plus、Sorption、Adsorption Locator、メソ構造モデルの構築機能、ChargeGroupの計算機能がMaterialsScript内で利用可能になりました。

CPKスタイル: 大きな系におけるCPKやBallの描画において、その質と性能が向上しました。

スケールバー: モデル中にスケールバーを表示させる機能が新たに搭載されました。これにより一目でモデルの大きさが分かるようになりました。

分析装置

Reflex Plus

Powder Solve: 指定した箇所の距離や角度を固定させる条件下での構造解析が可能になりました。これにより、特に塩やフレキシブルな分子について、より早くその結晶構造を見つけることが可能になりました。

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/>