

Materials Studio 6.1新機能(2012年11月リリース)

Materials Studio 6.1は、アクセルリスが提供する最新の総合モデリングおよびシミュレーション環境です。材料科学や化学分野の研究・開発において、これを利用することによって、材料の原子・分子レベルの構造と、材料の特性や挙動との関係性を予測し理解することが可能になります。MaterialsStudio 6.1 はさまざまな業界の研究に対応しており、医薬品、触媒、ポリマーや複合材料、金属や合金、二次電池や燃料電池、ナノテクノロジーをはじめとするあらゆる分野にわたって、より性能の高い各種材料の設計に役立てることができます。

材料研究・開発をサポートする優れた機能

- Pipeline PilotプロトコルをMaterials Studioから起動することで、複雑なシミュレーション・ワークフローの自動化や、サードパーティ製品のVisualizerへの統合が可能です。
- CASTEPのHSE汎関数により、半導体のバンドギャップの精度が向上しました。
- Forcite Plusで用いるチャージ・グループが簡単に定義できるようになり、電気的に中性な系の計算がよりスムーズにできるようになりました。
- 原子間の距離・角度・二面角などの構造情報を時間的に解析することにより、構造と物性との相関についてより深い理解が得られます。
- CASTEPにおいて、注目する振動数領域にのみラマンスペクトル計算を行うことが可能になり、これによって計算時間を短縮できるようになりました。
- DFTB+ において、いくつかの新しいSKFパラメータ・セットが追加されました。これらを使用することで、より広範な系の研究が可能になります。
- DFTB+において既存のSKFパラメータ・セットを拡張する機能が追加され、それにより新しいパラメータ・セットを生成する時間を短縮できます。

Pipeline PilotおよびAccelrys Enterprise Platformモデリング機能との統合※

MS VisualizerをPipeline PilotおよびAccelrys Enterprise Platformと統合
繰り返し使用可能なプロトコルの作成とMaterials Studioからの実行
Materials Studioからサード・パーティ・コードへのアクセス
Pipeline Pilotプロトコルの使用によるデータベースへのアクセス

※ アカデミック・ユーザー・ライセンスにはこの機能は含まれません。

Pipeline Pilot コレクション

この統合により、以下のコレクションがご利用になれます。
Materials Studio Collection、Polymer Properties Collection、Lab Analytics Collection、Reporting & Integration

新機能・機能強化 - 量子力学シミュレーションおよび触媒分野

■ DFTB+ の機能強化

DFTB+ は密度汎関数理論 (DFT) に基づいた Tight Binding 法であり、DFT計算の精度と半経験的量子力学計算の効率性を併せ持つ計算手法です。これにより、ナノクラスターのようにDFT計算を用いるにはコストがかかりすぎるような大型の分子系を扱う場合でも、実用的なシミュレーションを行います。

より幅広い対象をカバーする新しいSKFパラメータ・ライブラリ

— 硫黄やリンを含む有機化合物

- 無機材料表面上への有機分子の吸着
- ゼオライトやカルコゲン化物ガラス中の欠陥

価電子に f 軌道を持つ元素を新たにサポート。

既存のSKFパラメータライブラリに新しい元素を追加することが可能。モデルの一部に既存のSKFパラメータライブラリで対応できる部分がある場合、系全体を再パラメータ化する必要がなくなり、パラメータ化にかかる時間を短縮できます。

■ CASTEP の機能強化

ラマンスペクトル計算を指定した振動数範囲に制限することで、計算時間の短縮が可能に。

表面スラブモデルで発生してしまう人工的な双極子モーメントを逆向きの一様電場でキャンセルするスラブ双極子補正機能を用いることで、表面計算の精度を向上できるようになりました。

HSE汎関数により電子材料のバンド構造計算における精度を高めることができます。

ファンデルワールス力補正の適用可能な元素をより多くの金属元素に拡大。

■ DMol3

Diffuse関数を追加して基底関数を強化することで、荷電した系の計算精度を向上。

大規模な(4Gメモリ/ノードを超える)計算の安定性が向上。

ファンデルワールス力補正の適用可能な元素をより多くの金属元素にも拡大。

新機能・機能強化 - 古典力学シミュレーション

■ Forcite と Mesocite

分子構造や周期構造についてチャージ・グループの定義を自動的に行う新しい手法の導入により、非結合エネルギーの評価にチャージ・グループを用いる計算の設定が簡便かつ高速に行えるようになりました。

部分的な構造情報の時間発展解析により、動的な構造変化の把握が可能に。

- 角度、距離、ねじれの変化
- 慣性半径の変化

■ Mesocite

部分的な構造情報の時間発展解析により、動的な構造変化の把握が可能に。

- 角度、距離、ねじれの変化
- 慣性半径の変化

新機能・機能強化 - 可視化と自動化

■ Materials Visualizer

シリンダー形状に対するシェーダー・モデルをサポートすることで、CPKだけでなく、Stick表示やBall and Stick表示におけるレンダリングの性能と速度を向上。

プロジェクト内のファイルについてProject Explorer上で右クリックで指定することにより、自動的にWindows Explorerが立ち上がり、そのファイルが含まれるフォルダを表示させる機能が追加されました。

チャージ・グループの定義するためのダイアログが使いやすくなり、新規に作成した分子のチャージ・グループをより簡単に定義できるようになりました。