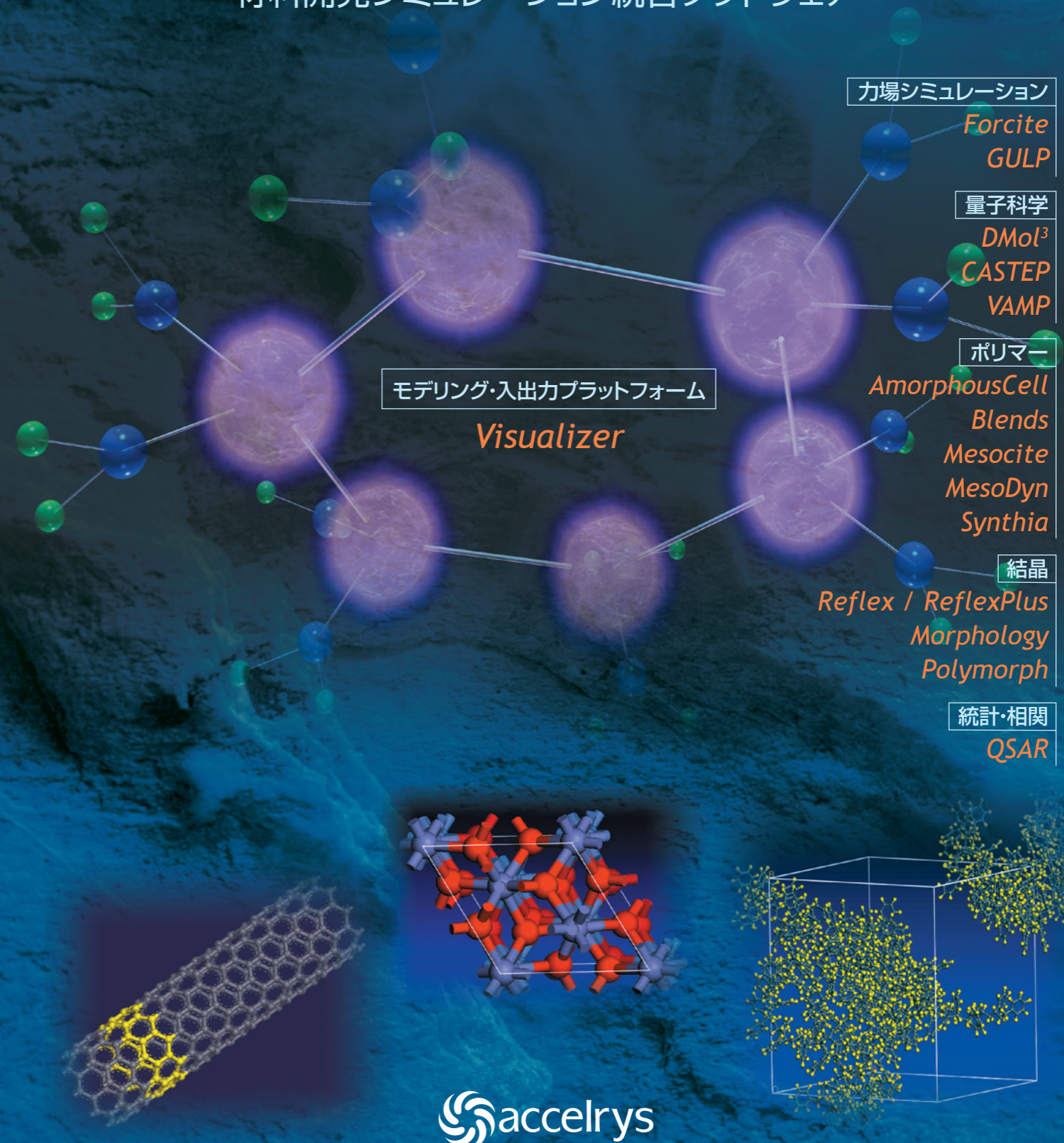


モジュール一覧

▼ モジュール名	▼ 主な機能
MS Visualizer	構造モデルの作成とシミュレーションへの入力、計算結果、グラフ、表等の表示・作成。
<b>Quantum Simulations</b>	<b>量子力学手法による分子や触媒、固体の諸物性シミュレーションツール群</b>
MS DMol <sup>3</sup> Molecular	数値基底関数を使い高速、高精度を実現した密度汎関数法(DFT) ab initio量子化学計算ソフト。
MS DMol <sup>3</sup> Solidstate	3D周期境界条件への拡張版。固体、表面などの反応性、バンド構造、状態密度計算。
MS CASTEP	平面波基底密度汎関数法による分子、固体、表面等の第一原理計算。
MS NMR CASTEP	固体のNMR、電場勾配テンソルを計算。
MS VAMP	MNDO近似による半経験的分子軌道法。MNDO(/C, d), AM1, PM3, ZINDO/ハミルトニアンなど。
MS ONETEP	数千原子レベルのO(N)-DFT計算を高効率パラレル計算で実行。触媒、生体分子の計算などに有効。
MS QMERA	DMol <sup>3</sup> /GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的計算が可能。
MS DFTB+	DFTに近似を加えてタイトバインディング法で扱えるようにしたソフト。数100~数1000という大規模モデルも扱える。
<b>Classical Simulations</b>	<b>ポリマー、有機、無機材料などの古典力学シミュレーションと物性解析ツール群</b>
MS AmorphousCell	ポリマー、低分子化合物の非晶構造セルを作成。分子動力学シミュレーションにより物性を推算。
MS COMPASS	凝縮系の再現にも優れた高精度力場。有機物、無機、無機酸化物、金属などへの適用可。
MS Forcite	分子力学ソフト。分子系、周期系の構造最適化が可能。COMPASS, Universal, Dreiding力場。
MS ForcitePlus	Forciteに分子力学の機能を付加。分子、材料系の動力学解析ツールを備える。
MS Blends	ポリマー、溶媒、添加剤混合系の混合エネルギー、相図、相互作用パラメーターなどを算出。
MS GULP	無機、有機格子シミュレーションソフト。30種近いポテンシャルを内蔵。
MS Sorption	モンテカルロ法吸着シミュレーションソフト。吸着等温線などを計算。
MS Adsorption Locator	結晶や大きな分子の表面において、指定した分子が物理吸着しやすいサイトをモンテカルロ法により探索する。
MS Conformers	分子のコンフォメーションと柔軟性を明確化するコンフォメーション探索アルゴリズムと分析ツール。
<b>Mesoscale Simulations</b>	<b>メゾマクロ領域の粗視化シミュレーションと物性予測ツール群</b>
MS MesoDyn	ポリマー流体、ブレンドなどの複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション。
MS Mesocite	粗視化分子動力学法による古典力学的シミュレーション。DPDも機能の一部に含む。
MS DPD	散逸粒子ダイナミクス法による複雑流体の粗視化メソスケールシミュレーションモジュール。
<b>Analytical &amp; Crystalization</b>	<b>結晶材料の構造解析、結晶形態、多形の予測ツール群</b>
MS Reflex	結晶の粉末回折像を高速にシミュレート。実験データとのリアルタイム比較が可能。
MS ReflexPlus	Reflexに粉末図形解析機能を付加。
MS Reflex QPA	有機、無機結晶の粉末回折データから結晶相組成を決定。
X-Cell	新規なアルゴリズムによりパラメーター空間を網羅的に探索し指数付ける。
MS Polymorph	分子構造から有力な結晶多形を予測。
MS Morphology	結晶の形態を結晶の原子構造から予測。BFDH、付着エネルギー法、平衡形態法を実装。
<b>Statics</b>	<b>統計・相関手法による実験データの整理と新材料の設計、性能予測ツール群</b>
MS QSAR	化学品、材料の構造活性(物性)相関モデルの作成、解析。多数の記述子を完備。
MS Synthia	グラフ理論に基づく構造物性相関手法によりポリマーの種々の物性値を推算。



材料開発シミュレーション統合ソフトウェア



アクセルリス株式会社

〒100-0013 東京都千代田区霞が関3-7-1霞が関東急ビル17階  
TEL.03-5532-3800 FAX.03-5532-3801

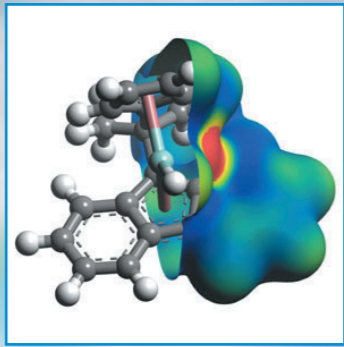
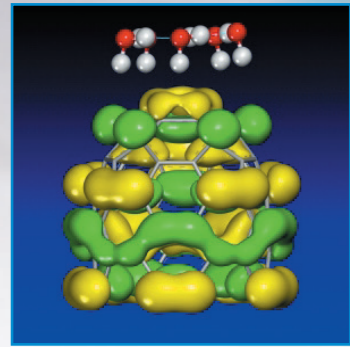
URL: <http://accelrys.co.jp>

Mail to: [info-japan@accelrys.com](mailto:info-japan@accelrys.com)



# 世界の最先端を行くマテリアルズ・シミュレーション技術があなたのPCの中に!

計算科学のエキスパートから初めてお使いになる実験化学者の皆様まで、一つのプラットフォームから種々のシミュレーションエンジンに敷居無くアクセスできる、非常に使い易く高度な環境をAccelrysは日々進化させ続けています。Accelrysの製品群は世界のトップ企業で活躍しています。シミュレーションがもたらすサイエンスへの深い洞察と新しい発想への刺激は、皆様の研究活動に明日のイノベーションをもたらすことでしょう。Accelrysの200名を超すPhD技術者が皆様を支え続けます。

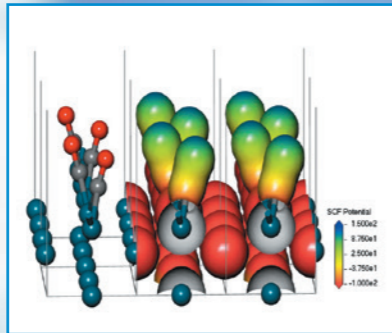
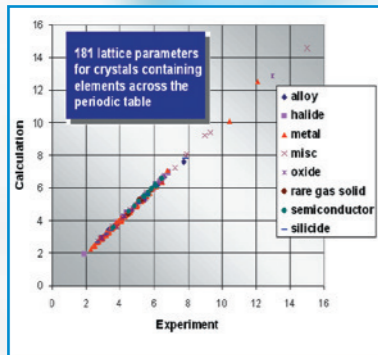


## DMol<sup>3</sup>, VAMP

### 分子、固体の高速量子化学計算

DMol<sup>3</sup>は密度汎関数理論(DFT)に基づく非常にユニークなab initio量子力学プログラムです。その高速性と高い精度、信頼性により化学・製薬企業のみならず固体材料科学の分野の研究においても高く評価され、活用されています。

VAMPは有機、無機分子向けの半経験的分子軌道法パッケージです。力場計算と第一原理計算の中間に位置する理想的なモジュールで、多くの物理的・化学的分子物性を手軽に、高速に計算することができます。

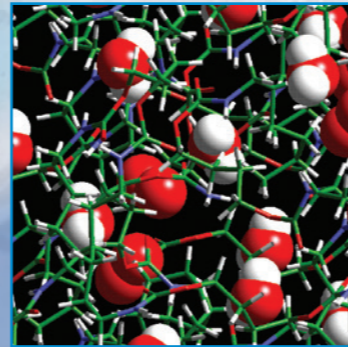


## CASTEP, NMR CASTEP

### 触媒、電子材料などの固体第一原理計算

CASTEPは密度汎関数法(DFT)による第一原理量子力学計算プログラムです。セラミックス、半導体、金属を含む広範囲な材料の固体、界面、表面の物性をシミュレートします。

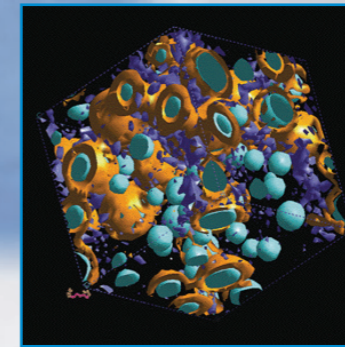
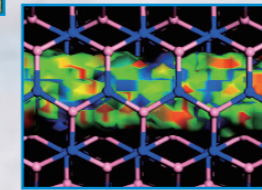
NMR CASTEPはCASTEP理論に基づき分子や固体材料の磁気共鳴特性を第一原理計算で予測します。これまでに無い精度でNMR化学シフト値と電場勾配テンソルを算出します。



## Forcite, ForcitePlus

分子、ポリマーなどの古典的分子力場・分子動力学計算  
 広範囲の分子、材料に適用可能で強力な原子論的シミュレーションソフトです。高精度ab initio力場であるCOMPASSの併用により、触媒や分離、結晶化、ポリマーなどの分野で構造と分子物性の間の関係を説明し、鍵となる分子間相互作用への洞察、固、液体の重要な物性の予測を可能にします。

## Sorption



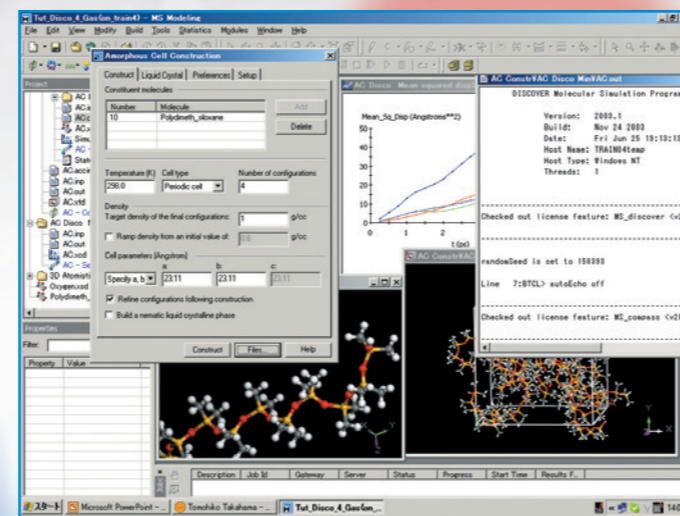
## MesoDyn, DPD, Mesocite

### メソスケールシミュレーションとマクロ物性の計算

従来の原子論的シミュレーションの範囲を超えた時間、空間スケールでのポリマー流体やブレンド物などの複雑流体の動的シミュレーションモジュールです。塗料から医薬あるいは化粧品から徐放医薬品にわたる工業的に重要なメソスケールの構造と動力学的の検討を目的とした、科学的に洗練されたアルゴリズムとして文献上あるいは市場で高く評価されています。

## Visualizer

### 高度な構造作成機能を備えたモデリング・入出力プラットフォーム



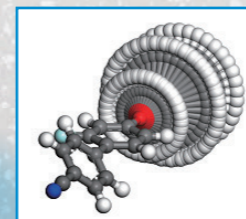
分子、結晶材料、ポリマーなどの三次元構造の作成から分子軌道図やダイナミクスの動的表示、表形式での解析などの高度な機能を持ち、すべてのMaterials Studioシミュレーションエンジン群への共通の入出力インターフェースプラットフォームとなります。

### MS Visualizerの主な機能

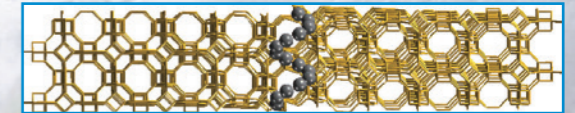
- ・ 色々な表示スタイルでの、モデルの3次元可視化、ラベリング、計測
- ・ 有機金属化合物を含む分子モデルのスケッチと編集
- ・ 結晶構造の作成
- ・ ポリマー構造の作成
- ・ 表面、層、真空スラブ構造の作成
- ・ 分子および周期構造での対称性の探索と編集
- ・ グラフ、チャート、数値データを表示するスプレッドシート形式の表作成
- ・ Materials Studioプロジェクトを通じたデータ管理
- ・ 高品質の印刷出力
- ・ サーバーで実行する計算の管理とモニタリング

## Conformers

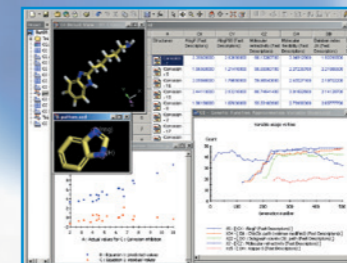
分子のコンフォメーションと柔軟性を明確化するコンフォメーション探索アルゴリズムおよび分析ツールを提供します。



## GULP



材料の構造最適化計算、分子動力学計算、物性計算が行えます。有機分子用の力場のほか、金属、酸化物、鉱物、半導体用の様々な力場が使用できます。



## QSAR, Synthia

### 統計、相関技法による物性推算

QSAR(構造活性/物性相関技法)は高性能な化学品や材料のより早い創成を支援する環境を提供します。Materials Studioに統合されているため、FAST記述子、Jurs記述子、VAMP記述子などの多くの記述子群と遺伝アルゴリズムを適用するGFA手法などの高度な解析機能を容易に活用することができます。

Synthiaはポリマーの構造から基本物性値を迅速に推算。ポリマー物性ハンドブックのようにポリマー研究者の座右のツールとして活用いただけます。

## Reflex, ReflexPlus, X-Cell, Morphology, Polymorph

### 結晶構造解析から結晶形態、多形の予測

結晶材料の回折像のシミュレーション、粉末回折像による結晶構造決定、独自の特許技術に基づく指数付け、結晶形態・多形予測などの強力な結晶性材料解析ツール群です。医薬、農薬、食品科学、石油化学、セメント、日用および特殊化学品分野などでの結晶制御用添加剤の開発、溶媒や不純物の影響の制御の研究などに適用できます。

# Materials Studio

量子力学	古典力学	結晶	多	相関統計
DMol <sup>3</sup> , CASTEP, VAMP, ONETER, QMERA, DFTB+	Amorphous Cell	Reflex, ReflexPlus, Polymorph, Reflex QPA, Morphology	DPD, MesoDyn, Mesocite	QSAR, Synthia
COMPASS				
GULP / Forcite				
<b>Visualizer</b>				