

Materials Studio 4.4

Materials Studio 4.4 では新しいツールを搭載することにより、さまざまな材料に対しモデリングやシミュレーションの適用可能な範囲がさらに広がりました。半経験的量子化学計算モジュールでは新しいハミルトニアンが周期律表のほぼ全ての元素で使えるようになりました。また新しいメソスケールツールにより、電荷、環状構造、立体効果をメソスケールモデル中に取り入れることが可能になりました。粗視化ツールを使えば、原子を単位としたモデルからビーズを単位とするモデルへの変換が可能になり、メソスケール計算で使用するビーズモデルが簡単に作成できます。ナノテクノロジー・コンソーシアムでは QMERA の開発に重点を置き、周期境界条件を課したモデルの取り扱いや Universal 力場の使用を可能にすることにより、計算の適用範囲がより広がりました。

・ より多くの材料への適用が可能に

- ・ 環状構造、電荷を取り入れたメソスケールモデル
- ・ 70 元素に対応した半経験的量子化学計算
- ・ 全元素に対応した QM/MM 計算

イギリスの CASTEP 開発グループとの共同開発により、内殻励起分光の計算が Materials Studio で可能になりました。また量子力学モジュールにおいて仕事関数の計算が簡便になり、表面電子物性に対するモデリングの可能性が広がりました。

量子力学および触媒分野

が難しいような QM 領域でも計算可能になりました。

- ・ Universal 力場により、様々な種類の物質に対してシミュレーションが可能になりました。

CASTEP の機能強化

内殻励起スペクトル

- ・ EELS/ELNES スペクトルを予測し、実験スペクトルにおけるピークの帰属、化学結合パターンの解析、伝導帯物性に関する知見を得ることができます。

B3LYP ハイブリッド汎関数

- ・ 遷移状態やバンドギャップの計算結果を改善します。

Electron localisation function (ELF)

- ・ 化学結合について直感的な理解を助ける描像を提供します。

CASTEP、DMol³、ONETEP

- ・ 仕事関数の計算により金属表面の物性理解を助けます。

VAMP の機能強化

- ・ 新しい PM6 ハミルトニアンの適用範囲が拡張され、原子番号 70 番までの元素について使用可能になりました。

QMERA の機能強化

- ・ Additive mechanical embedding: 力場で表現すること

メソスケールモデリング

Mesocite メソスケールビーズモデル



- ・ 粗視化分子動力学法 (CGMD) と散逸粒子動力学法 (DPD) を搭載した新しいモジュールです。
- ・ ポリマーのメソ相や脂質二重層など構造化した液体のビーズモデリングができます。
- ・ CGMD では立体障害、環状構造、電荷が入ったメソスケールモデルの計算をすることができます。
- ・ 生体分子系に使用できる粗視化 MARTINI 力場を搭載しています。

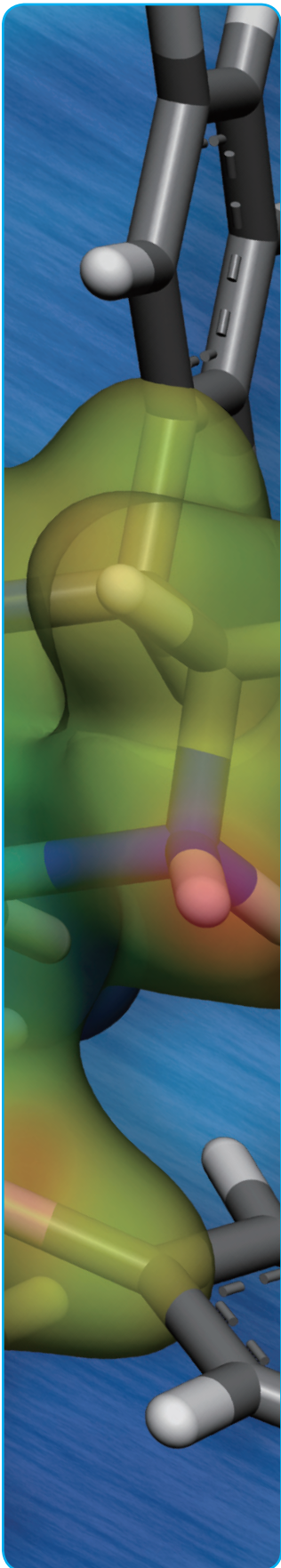
Visualizer 新機能

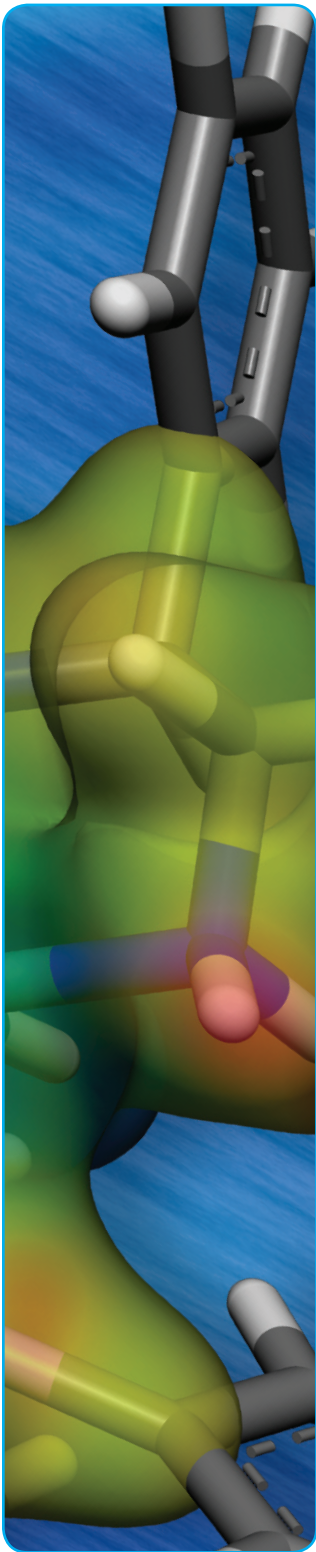
原子からビーズへの変換: 粗視化

- ・ 原子を単位とするモデルからサブユニットやポリマーの繰り返し単位で区切ったビーズを単位とするモデルへの変換ができます。
- ・ フラグメントのライブラリを作ることができます。
- ・ 分子、表面、および結晶の粗視化ができます。

パフォーマンスの改善

- ・ 膨大な数のファイルを含んだプロジェクトを開く際の時間を短縮。これまで数分間かかっていたものが数秒で可





能になります。

力場ドキュメントで使用可能な式の追加

- ・ 編集可能な非結合項用の式が追加されました。
- ・ 数種類の Lennard-Jones ポテンシャルや軟調和ポテンシャルの式を含んでいます。

ナノテクノロジーコンソーシアム

QMERA の機能強化

- ・ 周期境界条件を MM 部分に対して課すことにより、大きなユニットセルでのシミュレーションが可能になりました。
- ・ 原子位置座標の固定が可能になりました。
- ・ 基準振動数計算が可能になりました。

DFTB: DFTB+ 計算コードへのインターフェース

- ・ 密度汎関数タイトバインディング法(DFTB)によって、より長いシミュレーション時間やより大きなサイズの系に対する量子計算が可能になりました。