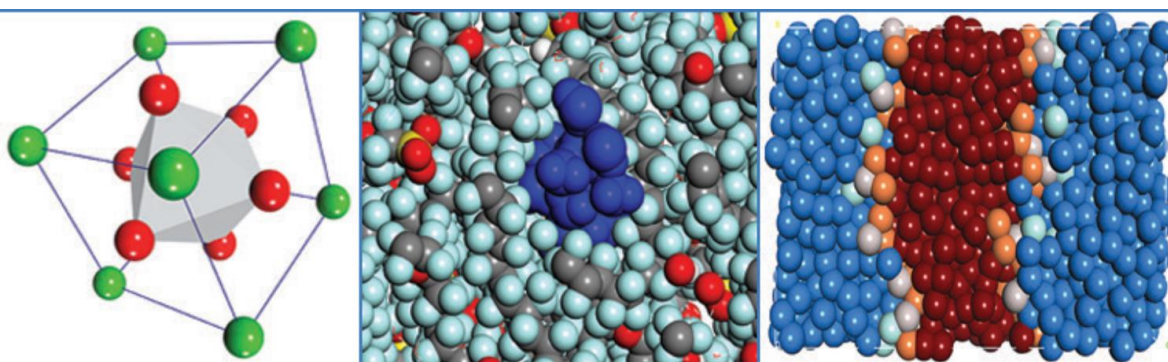


# BIOVIA MATERIALS STUDIO

## 概览

### 产品手册



面向新一代材料的建模与仿真。BIOVIA Materials Studio®是一个全面的材料科学建模与仿真平台，通过预测材料原子和分子结构与其属性和行为之间的关系，助力材料和化学研究人员开发新材料。不同行业的研究人员均能借助 Materials Studio 开发各类性能更优异的新型材料，包括药物、催化剂、高分子和复合材料、金属与合金、电池与燃料电池、纳米材料等。

Materials Studio 是迄今最先进、易用的一体化材料虚拟建模和仿真平台。Materials Studio 能够帮助材料科学家获取：

- 虚拟筛选，节省实际测试与实验的相关成本和时间。
- 助力创新加速，与实际测试和实验相比，能够更快地开发性能更优异、可持续性更强且成本更低材料。
- 加深理解，从根本上加深对原子和分子结构与材料属性和行为间关系的理解。
- 材料信息学，一体化整合实体实验与计算材料学。
- 高通量计算和知识管理，通过 BIOVIA Pipeline Pilot 中的 Materials Studio Collection 和 MaterialsScript API 落实领域最佳实践。

## 可视化

Materials Visualizer 是材料虚拟建模和仿真领域最易用、最完善的图形化用户环境，能够帮助化学家、高分子科学家和其他材料科学家提高工作效率，减轻工作量。Materials Visualizer 提供构建、操作和查看分子、晶体材料、表面结构、聚合物和介观结构模型的能力。此外，它还完全支持 Materials Studio 的各种仿真结果查看，并能通过图像、动画、图形、图表、表格和文本数据可视化结果。Materials Visualizer 中的大部分工具可通过 MaterialsScript API 调用，以便专家级用户创建自定义工具并实现重复性工作自动化。Materials Visualizer 的 Microsoft Windows 客户端能配合多种 Windows 和 Linux 服务器运行，为用户提供即时的使用体验。

## 跨尺度解决方案

Materials Studio 内置量子力学，分子力学，介观模拟，机器学习，统计分析和结晶学等门类齐全的仿真功能。它拥有丰富多样的不同尺度仿真能力，让研究人员能够在各种粒子大小尺度和时间尺度预测材料性能，有效平衡计算时间与计算效率。

## 量子力学工具

产品	介绍
Materials Studio CANTERA	Cantera [www.cantera.org]是一种化学反应速率方程求解器。Materials Studio Cantera 为化学反应速率的求解提供热力学输入和运行环境。通过 Cantera Reaction Editor, 用户能够创建新的反应物种和反应类型, 并基于 Materials Studio DMol <sup>3</sup> 获取反应相关信息, 并将反应类型、物种、反应速率等信息加入已有反应机理文件中。
Materials Studio CASTEP	Materials Studio CASTEP 基于平面波-赝势密度泛函方法, 能够模拟包括陶瓷、半导体和金属材料在内的多种材料的固体、界面和表面性质。
Materials Studio DMol <sup>3</sup>	Materials Studio DMol <sup>3</sup> 基于原子轨道线性组合密度泛函方法, 能够模拟有机/无机分子、团簇、分子晶体、共价键晶体、金属晶体和无限表面的电子结构和材料性质。
Materials Studio DFTB+	Materials Studio DFTB+基于紧束缚的半经验密度泛函方法, 融合了密度泛函方法准确性和紧束缚方法高效性, 能够在较大系统规模上实现量子力学精度的模拟。
Materials Studio NMR CASTEP	Materials Studio NMR CASTEP 依据第一性原理模拟 NMR 化学位移和电场梯度张量。能够进行分子核磁和固体核磁的计算, 适用于陶瓷和半导体等多种材料体系。
Materials Studio ONETEP	Materials Studio ONETEP 是一款线性标度的密度泛函程序, 能在对多达数千个原子的体系进行第一性原理计算。
Materials Studio QMERA	Materials Studio QMERA 采用 QM/MM 量子力学与分子力学杂化的方法, 兼具量子力学计算的准确性与经典力学计算的高效率。这种方法能够处理超大体系的关键位点精确计算, 大幅度节省计算量。
Materials Studio VAMP	Materials Studio VAMP 使用半经验分子轨道方法, 能够快速预测分子有机/无机系统的众多物理/化学特性。Materials Studio VAMP 是一种理想的居于经典力场方法和第一性原理方法之间的折中。

## 经典模拟工具

Materials Studio 提供极为丰富的基于原子和分子间经典相互作用的模拟工具, 包括分子动力学、晶格动力学和多种蒙特卡洛方法, 并提供多种可选择力场。

产品	介绍
Materials Studio Adsorption Locator	Materials Studio Adsorption Locator 是一款采用蒙特卡罗模拟退火方法搜索吸附质在基底材料上的最低能量吸附构象的工具。
Materials Studio Amorphous Cell	Materials Studio Amorphous Cell 是一款采用蒙特卡洛方法搭建复杂无定形模型的工具。
Materials Studio Blends	Materials Studio Blends 采用扩展的 Flory-Huggins 模型估算二元混合物体系相容性, 能够处理溶剂-溶剂、聚合物-溶剂以及聚合物-聚合物等体系。
Materials Studio Conformers	Materials Studio Conformers 提供构象搜索算法和分析工具, 用于表征化分子构象和柔性。
Materials Studio COMPASS	Materials Studio COMPASS 是一个功能强大的第一性原理力场, 能够精确预测单分子和凝聚态体系的结构, 构象, 震动和热力学性质, 并适用于广大的温度和压力区间。

## 经典仿真工具 (续)

产品	介绍
Materials Studio Forcite Plus	Forcite Plus 为周期性和非周期性体系提供分子力学和动力学方法。该工具具备丰富的分析功能,能够预测力学性能、扩散率、局部结构、密度变化、内聚能密度、偶极自相关函数等材料属性。支持力场包括 Materials Studio COMPASS、CVFF、PCFF、Dreiding 和 Universal 等。
Materials Studio GULP	GULP 是一款用于材料优化、属性计算和动力学模拟的工具。它包含众多针对金属、氧化物、矿物,半导体和共价键系统的专用力场。并提供了专有的力场拟合工具,方便进行力场开发。
Materials Studio Sorption	Sorption 为研究吸收和分离现象提供基本属性预测方法,能够模拟吸附等温线和亨利常数。

## 介观模拟工具

Materials Studio 内的介观模拟基于粗粒化模型,将经典模型中的若干原子视为一个基本结构单元,等效为一个珠子。这类方法能在比经典模拟更大的体系和更长的时间尺度上进行模拟仿真。

产品	介绍
MesoDyn	MesoDyn 基于动态平均场密度泛函方法,能够在尺度度和长周期范围内研究尤其适用于复杂聚合物系统的相位分离和结构。
Materials Studio Mesocite	Mesocite 基于粗粒化模型,能够处理长度尺度从纳米到微米,时间尺度从纳秒到微秒的材料体系。Materials Studio Mesocite 能够提供流体在剪切,限制剪切和平衡条件下的结构和动力学特性。

## 统计学工具

统计学工具将分子特性直接与实验观测量联系起来,是快速筛选化合物的理想方法。

产品	介绍
Materials Studio QSAR	Materials Studio 内集成的构效定量关系 (QSAR) 功能可调用大量描述符和高级分析功能,有助于生成高质量的结构-活性关系,它通过构建材料的实验信息 (“性质”) 和分子水平特征 (“描述符”) 之间的统计回归模型,进而预测未知材料的性质。QSAR 包含有拓扑描述符和电子结构-拓扑描述符在内的多种描述符。并且,内置的 Jurs 描述符能够评价溶剂表面的电荷分布;内置的 VAMP 描述符进一步扩大 3D 描述符的范围,使之能表达电子相互作用。还支持 GFA 算法,采用先进的基因算法能计算结构-活性间的定量关系。
Materials Studio QSAR Plus	QSAR Plus 增添 DMol <sup>3</sup> 描述符,能够为 QSAR 计算反应性指数和基于量子力学的高精度能量指标。此外,还提供神经网络算法,可用于构建非线性模型,并能够提高模型对噪声数据的耐受度,也可用于有缺值的数据集,和用于构建预测多种物理属性的加权模型。
Materials Studio Synthia	Synthia 使用先进的构效定量关系 (QSPR) 方法计算均聚物和共聚物的属性。能够快速筛选具有某些特性的聚合物种类或共聚物配比。

## 谱图分析和结晶工具

谱图分析和结晶工具用于研究、预测和修订晶体结构和晶体生长。

产品	介绍
Materials Studio Morphology	Morphology 基于晶体的原子结构预测晶体形貌。Morphology 能够预测晶体形状，分析晶面稳定性，开发定制添加剂以及控制溶剂和杂质对晶体形貌的影响。
Materials Studio QSAR Plus	QSAR Plus 增添 DMol <sup>3</sup> 描述符，能够为 QSAR 计算反应性指数和基于量子力学的高精度能量指标。此外，还提供神经网络算法，可用于构建非线性模型，并能够提高模型对噪声数据的耐受度，也可用于有缺值的数据集，和用于构建预测多种物理属性的加权模型。
Materials Studio Polymorph Predictor	Polymorph Predictor 是一个以力场为基础，采用蒙特卡洛模拟退火法，由给定化合物的分子结构预测其多晶型的工具。能够用于主要由碳、氮、氧、氢构成的有足够刚性的非离子分子或离子分子，在选定空间点群内基于晶格能量极小来搜索可能的分子堆积排列。
Materials Studio Motif	Motif 分析分子晶体中的连接信息，为氢键拓扑提供定性定量分析方法。与 Polymorph 的预测功能结合，Motif 能够为预测结构进行结构分类和打分。与剑桥晶体学数据中心的 CSD 剑桥结构数据库对接后，它能调用 Mercury 功能。
Materials Studio Reflex	Reflex 用于根据晶体材料模型仿真 X 射线、中子和电子粉末衍射谱图。Reflex Plus 为根据中高质量粉末衍射数据判定晶体结构提供了一整套完整软件包。
Materials Studio Reflex QPA	Reflex QPA 扩展了 Reflex 的功能，能够进行物相分析，可根据粉末衍射数据，确定混合物中各个单相（包括无机系统和有机系统）的相对比例。
Materials Studio X-Cell	X-Cell 是一种用于中高质量粉末衍射数据的高效率索引算法。X-Cell 使用优化的两分法流程穷举搜索参数空间，为所有可能的单位晶格解建立完整列表。

如需了解有关 Materials Studio 的更多信息，敬请访问：

[www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/](http://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/)

## 我们的 3DEXPERIENCE® 平台能为各品牌应用注入强大动力，服务于 11 个行业，并提供丰富多样的行业解决方案体验。

作为一家为全球客户提供 3DEXPERIENCE 解决方案的行业领导者，达索系统致力于为企业和客户 提供虚拟空间，助力打造可持续创新。其全球领先的解决方案改变了产品在设计、生产和技术支持上的方式。达索系统的协作解决方案更是推动了社会创新，扩大了通过虚拟世界来改进真实世界的可能性。达索系统为 140 多个国家超过 17 万个不同行业、不同规模的客户带来价值。如欲了解更多信息，敬请访问：[www.3ds.com](http://www.3ds.com)。



 DASSAULT SYSTEMES | The 3DEXPERIENCE® Company



 ACQTEC  
研索仪器

研索仪器科技（上海）有限公司

上海市盈港东路7799号虹桥宝龙中心A座2101A室

<http://www.3dsbiovia.com.cn>

[info@acqtec.com](mailto:info@acqtec.com)

+86 (21) 3412 6269

400-050-5810