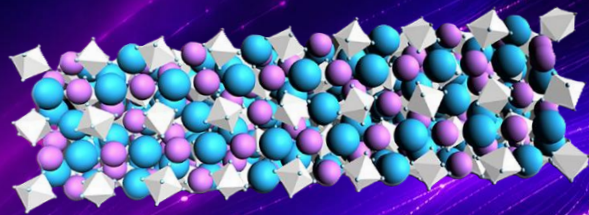


BIOVIA Materials Studio

「流れる・変形する」 の背景を、分子から。



Materials Studioとは？

原子・分子レベルの構造から材料の物性・挙動を検討するための統合モデリング・シミュレーション環境です。

モデル作成から量子力学・分子動力学計算、解析・可視化まで、研究目的に応じた計算手法を同一環境で活用できます。



モデル
作成



計算
設計・実行



解析・
可視化



結果
活用

こんな研究課題はありませんか？

粘度や応力応答の違いを、分子構造・分子運動から考察したい



高分子・液体系の構造、拡散、相互作用を詳しく調べたい



界面・混合系における分子の挙動や相互作用を評価したい



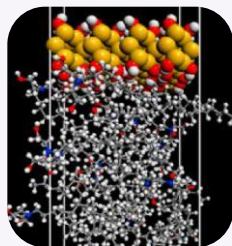
実験では直接捉えにくい分子レベルの機構を、計算から補いたい



分子構造から、材料物性の理解へ 研究テーマに応じた計算アプローチ

分子の動き・ 時間変化を調べる Forcite

分子力学・分子動力学（MD）計算を用いて、材料中の原子・分子の構造や時間変化を解析します。



ゲータイトで構成された壁を用いた拘束せん断シミュレーション

構造
最適化

MD

分子
運動

拡散

応力

物性
解析

DFTより大きなスケールのMDへ MACE 機械学習 ポテンシャル

量子力学計算データを学習した機械学習ポテンシャルをForcite上で利用。

従来の古典力場では扱いにくい系の検討や、DFTでは計算負荷が大きい構造探索・MDなどに、新たな計算選択肢を提供します。



量子力学
データ



MACE
学習



Forcite
MD

相互作用の起源を 量子力学から調べる CASTEP / DMol³

第一原理・量子化学計算から、材料・分子の構造、エネルギー、電子状態を評価します。

界面・吸着・分子間相互作用など、材料挙動の背景にある原子・電子レベルの要因を検討できます。

エネルギー

電子状態

相互作用

吸着・界面

液体・溶液・配合系を、 熱力学から評価

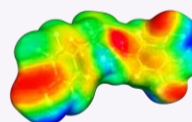
COSMOtherm

量子化学由来の分子記述子を用いて分子間相互作用を評価し、液体・溶液・混合系の熱力学的な物性・相挙動を予測。

溶解度

相平衡

活量係数



Materials Studio 2026 注目機能

複数MDを活用した粘度計算 **NEW !**

複数のMD軌跡の応力自己相関解析から得られる粘度を平均化・フィッティングし、粘度計算を支援。

複数
MD

応力
自己相関

粘度

MACEをさらに拡張

特定の材料・分子系に合わせたMACE Fine Tuningに対応。

さらに、ForciteでMACEにD3分散補正を利用できます。

