

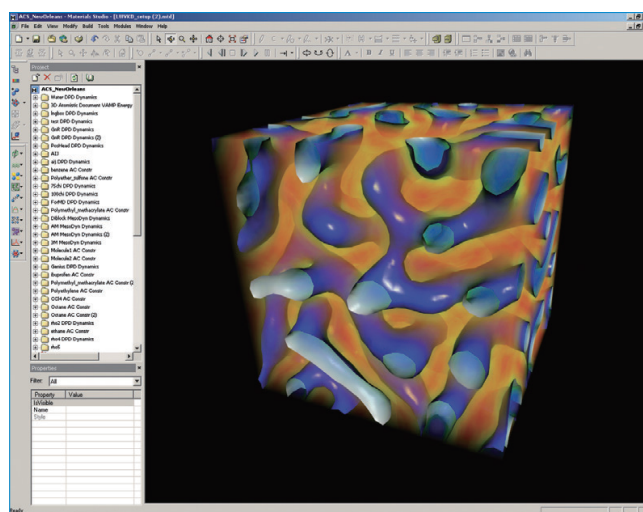
# BIOVIA MATERIALS STUDIO VISUALIZER

データシート

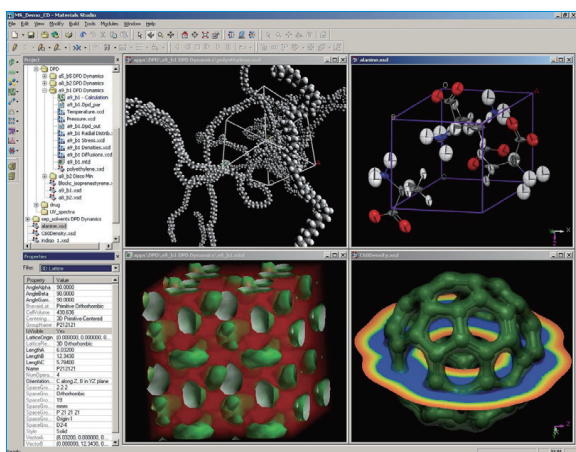
BIOVIA Materials Studio Visualizerは、分子や結晶、ポリマーなどのグラフィカルなモデルを作成するのに必要なすべてのツールを備えています。Visualizer内でこれらのモデルを操作し、表示観察し、解析することができます。またBIOVIA Materials Studio Visualizerにはグラフ、表、テキストを扱う機能があり、すべてのBIOVIA Materials Studio®製品群をサポートするインフラ環境と解析ツールを提供しています。

BIOVIA Materials Studio Visualizerは、BIOVIA Materials Studioソフトウェアスイートの中核となる製品であり、材料モデリングを必要とする化学および材料業界のニーズに応えることを目的に設計されています。BIOVIA Materials Studioを使用すると、世界最先端の研究機関によって検証された計算手法をデスクトップPC上で利用できるようになります。

BIOVIA Materials Studio Visualizerは、計算材料科学のサポートに不可欠なモデル作成機能を備えており、分子や材料に関する特性やプロセスの理解に役立ちます。BIOVIA Materials Studio Visualizerを利用すれば、研究対象となる系のモデルをWindowsデスクトップに表示することができ、モデルの可視化、操作、解析を通して研究対象をより的確に理解することができます。さらに、構造データへのアクセスを活用し、化学情報をわかりやすく表現できるほか、問題点や解決方法について他の研究者と話し合う際にも役立ちます。



ジブロック共重合体融液における相分離の初期フェーズのイメージ。青い面は2つの成分の界面を示しています。空間は一つのブロックの密度によって色分け表示され、赤が高密度、青が低密度を表します。このような構造再配列の観察などに必要とされる、長期的なタイムスケールでの大規模系の研究には、MesoDynモジュールが利用されます。



BIOVIA Materials Studioの中核製品BIOVIA Materials Studio Visualizerのスクリーンショット。BIOVIA Materials Studioは、バルクの非晶質ポリマーから有機/無機結晶にいたるまで幅広い材料を表示できます。BIOVIA Materials Studioスイートのモジュールを利用することで、量子レベルからメソスケールにわたるサイズスケールに対応したツールを使用でき、多様な特性の計算が可能になります。

## BIOVIA MATERIALS STUDIO VISUALIZERの導入で可能になること

BIOVIA Materials Studio Visualizerは、モデリング、解析、可視化のためのツールを提供するとともに、わかりやすく直感的なグラフィカル・ユーザー・インターフェースを備えています。BIOVIA Materials Studio Visualizerが提供する高品質な環境上でBIOVIA Materials Studioのあらゆる製品が利用できます。さまざまな目的で使用可能なこの包括的モデリング/可視化システムでは、以下のことが可能になります。

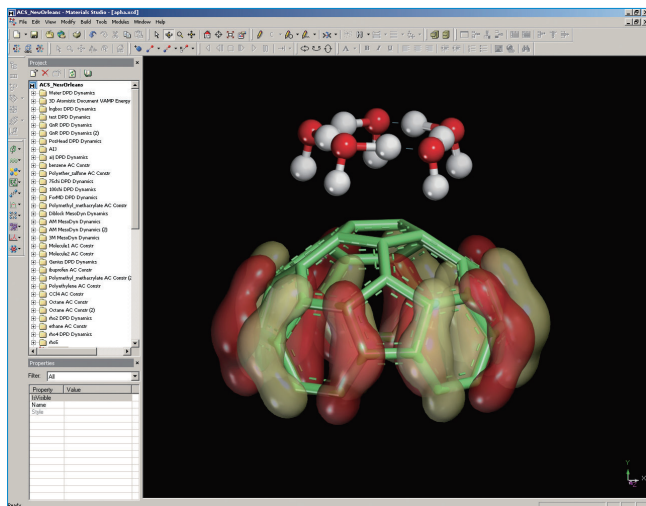
- 材料をより的確に理解する
- 化学情報をよりわかりやすく伝える
- 化学データベースから得た構造を可視化、モデル化する
- 高速かつインタラクティブなスケッチ、ビルダー、編集ツールを使用して、独自の分子や材料を構築する
- 主要な構造パラメータを計算、表示する
- 計算結果を表示する（アニメーション化された分子動力学シミュレーション、グラフデータ、分子モデル）
- スクリプトを使用してBIOVIA Materials Studio Visualizerを最大限活用する
- モデルに画像や図を付加し、きわめて高品質な文書を作成する

BIOVIA Materials Studio Visualizerは、ユーザーのネットワーク上のどのPCでも実行できるため、研究者は時間や場所を制限されずに必要なときに使用できます。BIOVIA Materials Studioの一連のモジュールを実行するために使用する場合でも、あるいは、スタンドアロンのモデリングシステムとして使用する場合でも、BIOVIA Materials Studio Visualizerの計算技術とグラフィック機能を活用して、科学分野での問題解決に取り組むことができます。

## 機能

### グラフィカル・ユーザー・インターフェース

- Microsoft®標準準拠の使いやすいユーザー インターフェース
- 主要機能のチュートリアルを含む、コンテキストに応じたフル検索可能な包括的オンラインヘルプ
- 複数回の元に戻す(Undo)/やり直し(Redo)機能
- Project Explorerによって、標準的な階層構造のファイル・エクスプローラ・ビューでプロジェクト データに素早くアクセス
- 他のBIOVIA Materials Studio製品にツール バーおよびメニューバーからアクセス
- リモートまたはローカルのサーバー上での計算を管理、監視するためのツールが用意されており、BIOVIA Materials Studio Visualizerと他のBIOVIA Materials Studio製品の併用をサポート
- プロジェクトのデフォルト設定の管理



カーボンナノチューブ (CNT)の先端にある水の分子の配列。さらに、HOMOがCNT上に表示されています。含水率が単層CNTの伝導性にもたらす影響について実験結果を的確に理解するのに、このような量子力学的計算が役に立ちます。

### 構造やグラフの表示と他アプリケーションとの連携

- 材料や分子構造の高品質な3Dグラフィカル モデルの表示、操作、重ね合わせ (後述の説明を参照してください)
- 1次元および2次元のグラフ データとして結果をインタラクティブに表示
- モデルや結果データをテキスト形式や表形式で表示
- 構造、画像、表、テキスト データを他のPCアプリケーションにカット、コピー、ペースト
- 社内および商用の構造データベースとファイルをやり取り
- 構造、画像、テキスト、実験データに関して幅広い業界標準ファイル形式をサポート
- 利用可能な構造ファイルの形式: xsd (ネイティブ)、xtd (ネイティブ)、xod (ネイティブ)、msi、car/mdf、cif、mol、sdf、sd、mdl、skc、arc/mdf、his/mdf、acx、trj/msi、.res/.ins (Shelx)、pdb、xyz
- 利用可能なチャート ファイルの形式: xcd (ネイティブ)

- csv、tbl
- 利用可能な表/グリッド ファイルの形式: xgd (ネイティブ)、csv、tbl、std (ネイティブ)
- 利用可能なテキスト ファイルの形式: txt、htm、pl

### 分子モデルの作成と編集

- ユニークな3Dスケッチャーにより、分子モデルを迅速に作成
- Adjust Hydrogenツールにより、分子モデルに水素原子を迅速にスケッチ
- フラグメント スケッチャーにより、有機金属化合物などの複雑な分子を迅速に作成。広範なフラグメント ライブラリと、ユーザー定義のフラグメントを利用可能にするツールを用意
- Cleanツールで分子構造を適切に整理
- 座標および原子のプロパティの編集と入力が容易
- 精密な原子/オブジェクト移動および回転ツール
- 精密な原子配置ツール
- 結合次数と混成のユーザー定義と編集
- 周期表表示機能などを備え、あらゆる元素のプロパティを表示、編集
- モデルの全体および一部分のカット、コピー、ペーストが容易
- 多様な目的で使用可能な結合計算ツール
- 対称性ファインダー
- 分子、結晶、アモルファスの広範な構造ライブラリ
- 特定の方向に分子を配列

### 高度なポリマー作成ツール

- ポリマー ビルダーにより、ホモポリマー、ブロック共重合体、ランダム共重合体、 dendromerの作成が可能
- 広範なモノマーライブラリ
- ユーザー定義のモノマーを利用可能にするツール
- 分岐生成ツール

### 高度な結晶、表面、多層構造作成ツール

- 結晶ビルダーにより、格子定数、原子座標、対称性を入力して周期モデルの作成が可能
- 包括的な空間群データを備え、対称性情報の入力と編集が容易
- 対称性ファインダーにより、周期モデルを解析し、対称性の詳細情報を表示
- 使いやすいスーパーセル作成ツール
- 表面ビルダーにより、面群の対称性を使用して非周期構造から、あるいは劈開手法を使用して結晶から、表面を簡単に作成可能
- 表面ビルダーにより、結晶構造から真空層を含む3次元表面モデルを作成可能
- レイヤー ビルダーにより、結晶またはアモルファスのいずれか、あるいは両者の組み合わせから多層構造を作成

### アナログ作成ツール

- マーカッシュ形式でのライブラリのエニュメレーション
- 3D構造の維持
- 複数のコアの指定
- フラグメント ライブラリからのRグループの定義

### ナノテクノロジー作成ツール

- 単層および多層ナノチューブに対応した構造作成ツール
- カーボンまたは窒化ホウ素チューブの指定
- ナノロープの作成
- 結晶からのナノクラスターの作成

### メソスケール構造のためのテンプレート作成ツール

- 作成したテンプレートにビーズを充填してメソスケール計算の初期構造を作成
- 液滴、ロッド、スラブ、シェル、チューブなどの多様な形状のフォーマーを追加可能

- ・フォーマーのサイズ、配置、位置、プライオリティを設定可能
- ・異なる材料のビーズをフォーマーに割り当てる
- ・ミセルや二重層などの規則構造の作成

### メソスケール分子作成ツール

- ・分子のビーズモデルを作成する強力なツール
- ・単純な直鎖、およびデンドリマーなどの複雑な分岐構造の作成
- ・ランダムなビーズ構造の作成

### 粗視化ツール

- ・分子または原子群をビーズに変換
- ・モノマー単位でのポリマーの粗視化
- ・サブユニット データなしで分子を粗視化するためのパターンの定義
- ・粗視化する前のプレビュー機能
- ・新しいビーズ タイプの自動生成

### 一般的な可視化ツール

- ・多様な表示スタイル (Line、Stick、Ball and Stick、空間充填型の球(CPK)、多面体)
- ・マウスによるリアルタイムでのモデルの回転とズーム
- ・モデルの平行投影表示または遠近表示の選択
- ・モデルのオブジェクトの色や背景色の完全カスタマイズ
- ・背景のテキストチャや画像を幅広く選択可能。ユーザー作成のビットマップ イメージを背景画像として追加可能
- ・「Fast render on move」機能によるモデル操作の高速化を含む、レンダリングの品質制御
- ・周期モデルで表示する単位格子数の指定 (非整数範囲を含む)
- ・熱振動楕円体の表示
- ・量子力学およびその他の計算により出力される、3次元グリッド データの柔軟かつ高品質なグラフィックス表示 (電荷密度、ポテンシャル、軌道)
- ・Morphologyモジュールの計算結果に基づいて、結晶の晶癖を色分けや透過表現などを用いて表示
- ・複数の光源、色や位置の変更機能などを用いた、モデルの明るさの調節
- ・座標軸および3D/2D格子の表示とラベル付け
- ・あらゆるオブジェクトの色をカスタマイズ

### モデルの測定と解析

- ・距離、角度、二面角の測定と表示 (操作中にリアルタイムに数値を更新)
- ・主モーメント、重心、平面などの構造オブジェクトの作成と可視化
- ・原子の近接を示すClose Contactオブジェクトや水素結合の計算と表示
- ・Solvent SurfaceやConnolly Surfaceの計算と表示 (占有体積、利用可能体積、占有表面積、露出表面積など)
- ・結晶や表面のミラー面の可視化
- ・原子、モーメント、または電荷分布やポテンシャル分布などのグリッド データについて行うことができるフィッティング機能を用いて、ターゲット構造または共通構造にフィッティングさせ、複数のモデルをなるべく一致させるように重ね合わせる
- ・Properties Explorerにより、原子や他のオブジェクトのプロパティを柔軟にテキスト表示
- ・トラジェクトリ ファイルのアニメーション化 (分子力学計算の出力ファイルなど)
- ・遷移状態探索タスクの入力ファイルを作成する、Reaction Previewツールおよび原子マッピング ツール
- ・基本振動モードとスペクトルの表示およびアニメーション化する振動解析ツール
- ・分子モデルのラベル付け

### 3次元グリッドデータの可視化と解析

- ・ドット表示または立体図形表示でグリッド データを可視

化

- ・スクリプトを使用してカスタマイズしたグリッド データを作成
- ・グリッド データの分布を描画
- ・グリッド データの値を指定して等値面を生成
- ・グリッド データを等値面上にわかりやすく表示
- ・複数のスライスを作成し、各スライス上にグリッド データを可視化
- ・スライスに垂直な方向に沿ったビューの配置
- ・グリッド データにより空間を孤立した、複数の領域 (セグリゲート) に分割
- ・分割されたセグリゲートのサイズ、半径、セパレーション分布を解析

### スクリプトの作成

- ・構文チェックやデバッグ ツールを含む、Perlスクリプト開発環境
- ・行番号、ブックマーク、構文の色分けを使用したPerlスクリプト ドキュメント作成
- ・3Dモデル ドキュメントを制御するためのMaterialsScript API
- ・Properties Explorerのあらゆる項目にアクセス
- ・モニターや重心などの構造オブジェクトの操作
- ・原子や結合の操作
- ・結合、水素結合、Close Contactオブジェクトの計算
- ・Connolly SurfaceやSolvent Surfaceの計算
- ・ポリマー、結晶、表面、多層構造の作成
- ・SuperCellなどの対称性ツールの使用
- ・グリッド データの作成と操作
- ・MaterialsScript APIを使用して、スタディ テーブルの内容を制御
- ・APIの包括的なオンライン ドキュメンテーション

### 統計ツール

- ・単変量解析により、平均、標準偏差、分布データなどを計算
- ・データ変換ツール
- ・データ標準化ツール
- ・色分けされた相関マトリックスの生成

### プレゼンテーション

- ・Windows標準のページ設定とプリンターへの出力
- ・ビットマップ イメージのエクスポートにより、レポートおよびプレゼンテーション向けの高品質な画像を作成
- ・トラジェクトリ ファイルをMicrosoft .avi形式のビデオ ファイルとしてエクスポート

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、[www.3ds.com](http://www.3ds.com)（英語）、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja)（日本語）をご参照ください。



©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTER, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および INETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の商標です。また、またはその子会社の商標を使用する際には、書面による許可の承認が必要です。