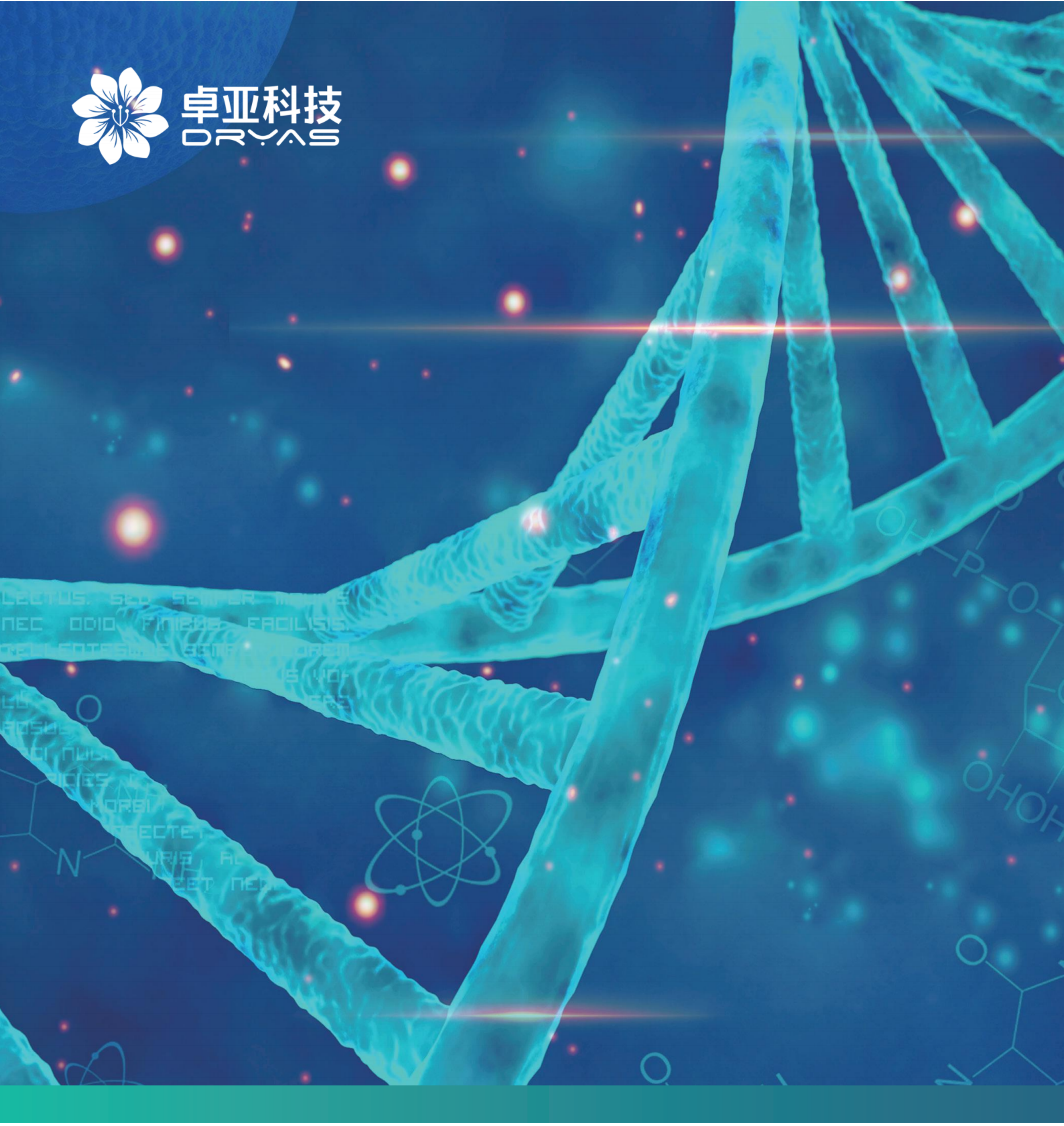


BIOVIA Materials Studio™

强大的材料模拟

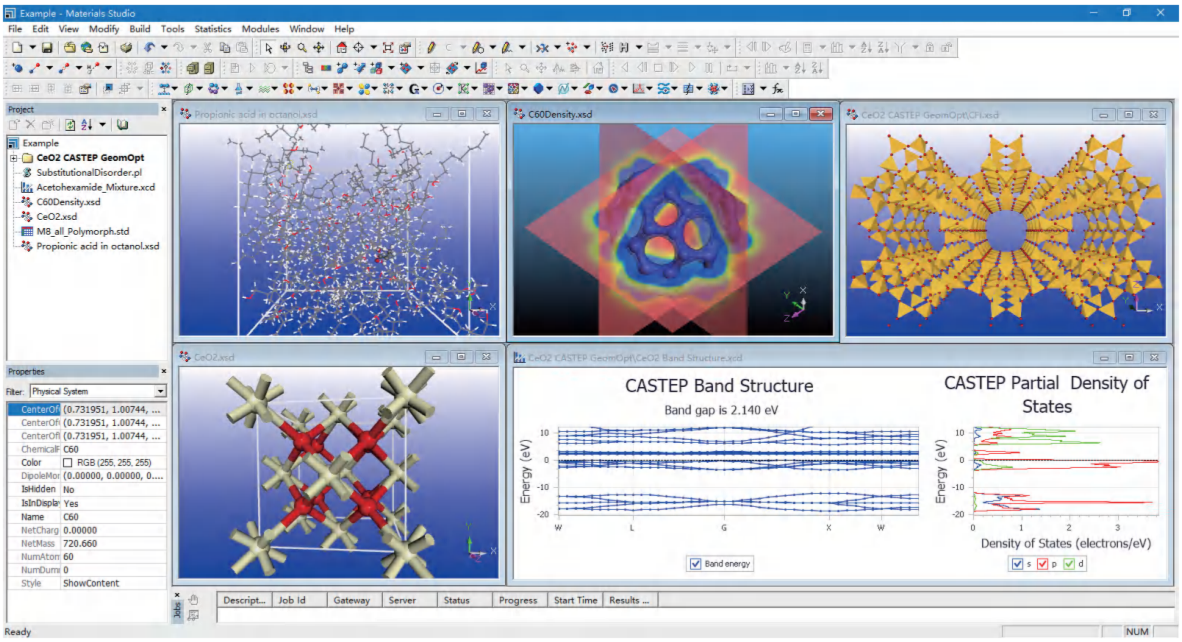
计算整合平台

Materials Studio是多尺度多功能分子模拟软件平台。它不仅拥有优异的操作界面，快捷实现模型搭建、参数设定以及结果的可视化分析，而且融合多种模拟方法，整合多达23个功能模块，实现从电子结构解析到宏观性能预测的全尺度科学研究。历经20多年的发展，Materials Studio变得更加完善，更加灵活，多种应用程序接口以及脚本编写功能的添加，使其能够更好的满足各类用户的研究需求。其所拥有国内用户700多家涵盖材料、物理、化学、化工等多个领域，相关的研究工作在各类权威期刊上发表论文近两万篇。

Materials Studio模块介绍

Visualizer

Materials visualizer是Materials Studio的图形化界面,也是整个平台的核心。



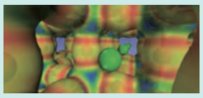
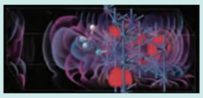
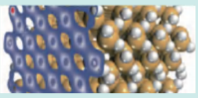
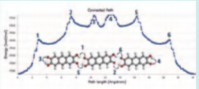
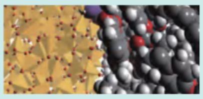
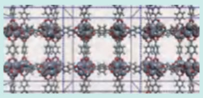
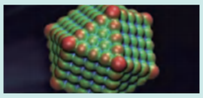
Visualizer的功能:

- 搭建、调整各类三维可视的结构模型，包括晶体、小分子、聚合物、纳米材料、团簇、 表界面以及各种缺陷结构；
- 提供模块参数设置、结果分析的视窗界面；提供结构文件、参数文件以及结果文件的管理界面;提供计算进程的监控界面；
- 对模拟结果进行各种分析，可与结构模型相结合进行数据的二维、三维显示，可以给出数据的图表，可以对特定的结果进行动画演示或给出矢量图；

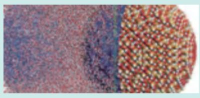
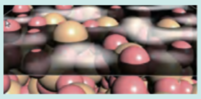
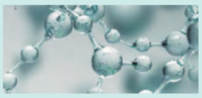
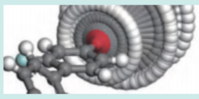
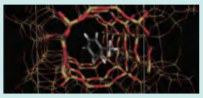
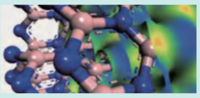
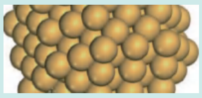
Visualizer的特点:

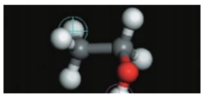
- 支持多种结构、图形、文本文件格式的输入和输出；
- 支持不同功能模块间结构数据的共享；
- 提供Perl语言环境，以及脚本编写；
- 提供不规则多面体表面积、体积的计算工具。

量子力学工具

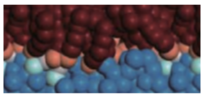
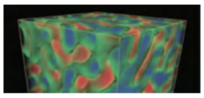
Materials Studio CASTEP	源于剑桥凝聚态理论研究组，是一款基于密度泛函理论的先进量子力学程序，也被称为平面波赝势方法。适于解决固体物理，材料科学、化学以及化工等领域中的各类问题。研究对象包括半导体、陶瓷、金属等各类晶体材料，以及掺杂、位错、表界面等各种缺陷结构。	
Materials Studio DMol3	一款基于密度泛函理论的先进量子力学程序，也被称为原子轨道线性组合方法。除了可以预测材料的电子学、光学、热力学性能外，还能够细致地研究气相、溶液、表面及固态环境中的化学反应，适合解决化学、化工、生物、材料、物理等领域中的各类问题，尤其是化学反应机理及催化剂设计的问题。	
Materials Studio DFTB+	一款融合了密度泛函方法(DFT)准确性和紧束缚方法(TB)高效性的半经验量子力学程序，可对数千个原子体系进行模拟研究，为解决电子、催化、化工等领域中各种复杂过程的相关问题提供了一种新的模拟方法。所涉及的研究对象包括有机分子、团簇、绝缘体、半导体、金属，甚至是生物大分子等各类非周期性和周期性体系。	
Materials Studio FlexTS	源于剑桥大学开发的OPTIM软件，集成在DMol3和DFTB+中的“Minimun Energy Path task”中，提供复杂过渡态自动化搜索的功能，极大简化过渡态搜索工作量，大大提高反应研究效率和过渡态搜索的准确性。支持离子迁移路径，多步协同反应，中间产物不确定的反应路径的计算。可广泛应用于煤化工、石油、天然气等复杂反应领域。	
Materials Studio Cantera	一款高速求解化学反应动力学的程序，其于求解化学反应速率方程，通过给定反应混合物的起始组分，可以预测产物混合物的组分。已应用于燃烧、石油裂解、爆炸反应、酿造、抗生素等诸多的化学反应领域。	
Materials Studio QMERA	一款将量子力学方法的精确性与经典模拟方法的高效性有机结合的程序，也被称为QM\MM的杂化方法。提供了多种方式解决两个区域间的耦合问题。可研究包含上千个原子的体系，在充分考虑周围原子影响的条件下，得到其核心部分的电子结构、可能的化学反应机理、紫外可见光谱、红外光谱等信息。这一方法在非均相催化、表界面吸附、聚合物间的相互作用、生物分子活性的研究中相比于传统量化方法更具优势。	
Materials Studio ONETEP	源于剑桥凝聚态理论研究组，是一款专门针对大体系(>500原子)研究的量子力学程序，其关键技术是采用非正交的广义万尼尔(Wannier)函数替代平面波函数进行计算，并采用FFT box技术和处理电荷密度的Density kernel稀疏矩阵方法，使模拟计算的时间与体系的大小成线性关系，因此也被称为线性标度量子力学方法。应用范围包括表面化学、大分子体系(蛋白质、DNA、抗体)及其它复合材料、纳米材料以及半导体、陶瓷材料缺陷等。	

经典模拟工具

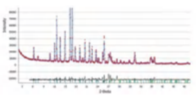
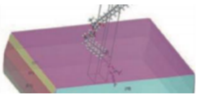
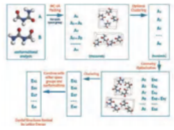
Materials Studio Amorphous Cell	一款以力场为基础，采用蒙特卡洛方法搭建无定形模型的工具。可用于搭建具有多种组分及不同配比的高分子共混模型、溶液模型、复合材料模型、固液/固气界面模型、孔道填充模型、向列型液晶模型等，对塑料、玻璃、食品、化工以及复合材料等领域的模拟工作具有重要的辅助作用。	
Materials Studio Forcite Plus	一款分子力学和动力学模拟程序。可对分子、表面或三维周期性材料体系进行快速的能量计算、几何优化以及各种系综下的动力学模拟研究，可以分析材料体系的各种结构参数、热力学性质、力学性质、动力学性质以及统计学性质。应用于有机、无机小分子、有机金属络合物、高分子聚合物、纳米及多孔材料、部分金属、金属氧化物晶体及晶体表界面结构的研究。	
Materials Studio COMPASS	一款基于量子力学方法，且能够对凝聚态体系进行原子尺度模拟研究的高精度力场。对参数有效性的考察，不仅包括了单分子(气态)的量子力学计算结果以及实验结果，还充分考虑了其凝聚态性能。因此，COMPASS可在一个很大的温度、压力范围内，精确地预测多种单分子及其凝聚态的结构、构象、振动及热物理性质。	
Materials Studio Conformers	一款以力场为基础，搜寻分子最低能量构象的程序。包含多种方法，多种判据以及多种可控条件，能够高效地探索各类分子的构象，包括环状结构的分子。还具有一定的分析功能，可以建立分子构象与其能量、偶极距、回转半径之间的关系。	
Materials Studio Adsorption Locator	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程序，可以给出吸附质的稳定吸附位点、混合吸附质的优先吸附成分、纳米级催化剂的活性位、原子层沉积过程的最稳定位置，帮助研究人员从原子水平上了解吸附过程。在涂料开发、表面腐蚀研究、催化剂设计以及晶体结晶形貌等领域具有理论指导意义。	
Materials Studio Sorption	一款基于巨正则蒙特卡洛(GCMC)方法预测单一或混合组分在微孔材料和介孔材料中吸附的程序。所涉及的体系包括分子筛、铝磷酸盐、粘土、纳米管、聚合物膜、硅胶、活性炭和金属-有机骨架材料等。可直接给出吸附等温线(载荷曲线)、亨利常数等性质，可应用于气体分离、烃类裂解、气体传感器以及离子交换等诸多领域的研究。	
Materials Studio GULP	一款分子力学和分子动力学模拟程序。可对零维、一维、二维、三维结构的各种材料体系的多种性质进行计算、解释和预测。具有多种针对性较强的势函数，还提供拟合和编辑势函数的工具。对于有机小分子、金属单质、合金、金属氧化物、碳、硅纳米材料、硅铝多孔材料、铀、镎、钚的混合氧化物以及粘土矿物，均可做较高精度的研究。	
Materials Studio Blends	一款以力场为基础，采用扩展的Flory-Huggins模型估算二元混合物体系相容性的程序，可以有效的缩短工艺探索周期。这种模拟技术能够直接从二元混合物的化学结构预测出混合物的热力学性质。在粘结剂、医药品、化妆品、金属特种表面涂层、眼镜和塑胶等材料制备领域具有重要作用。	

Materials Studio Synthia	一款以美国陶氏公司Jozef Bicerano博士的工作为基础，使用先进的定量结构–性能关系方法(QSPR)预测聚合物性质的程序。使用聚合物的拓扑信息，特别是源于图论的连接指数，建立原子和化学键与聚合物性质的关联，可预测由C、H、O、N、Si、S、F、Cl和Br组成的所有聚合物的性质，而不受基团贡献数据库的限制。Synthia的预测结果在实际工作中得到了广泛的验证。	

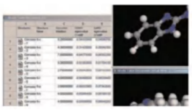
介观模拟工具

Materials Studio Mesocite	一款包含粗粒化分子动力学以及耗散粒子动力学两种方法，并以软凝聚态材料为主要研究对象的介观模拟工具。可以更加快捷的研究添加剂、溶剂、单体类型、比例对各种均聚、嵌段、枝状聚合物结构、性能的影响；大分子的扩散；纳米复合材料中纳米管的分散性等。在复合材料、涂料、化妆品以及药物的控释领域具有重要应用。	
Materials Studio MesoDyn	一款基于动态平均场密度泛函方法的介观模拟程序，主要用于复杂流体，包括聚合物熔体和混合体系在介观尺度的动力学研究。可以模拟100–1000nm的体系，方便研究复杂流体、聚合物共混的动力学过程和稳定拓扑形貌。在涂料、化妆品、混合材料、表面溶剂、复杂药物传输以及相关领域具有广泛应用。	

谱图分析和结晶工具

Materials Studio Reflex Plus	一款由材料粉晶X射线、同步辐射X射线、中子或者电子衍射图谱获取其晶体结构、结晶度的工具包。增加Powder Solve基于蒙特卡洛模拟退火法或者平行回火法，可在材料密度、化学式、晶胞参数、空间群确认的基础上，得到原子各种可能的堆积排列方式，并依据其衍射图谱与实测衍射图谱的差异，对各种堆积方式作出取舍，可用于全新晶体结构的研究。	
Materials Studio Morphology	一款通过材料晶体结构预测其晶粒形貌的工具。它可对特定添加剂、溶剂以及杂质存在下的晶体形貌研究提供帮助。其主要应用领域包括医药品、农用化学品、食品科学、石油化工、水泥、日用品以及特殊化学品等。	
Materials Studio Polymorph Predictor	一款以力场为基础，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。晶体材料在制药、农药、染料、炸药以及专用化学品工业中有着非常普遍的应用，然而，由于晶体结构的多样性，即使具有相同的分子结构，这些晶体材料在贮存期、生物药效、溶解性、形貌、蒸汽压、密度、颜色和冲击感度等方面往往具有明显差异，因此，对材料各种可能晶型的预测和性质研究显得非常重要。	

定量构效关系

Materials Studio QSAR Plus	Materials Studio内集成的构效定量关系（QSAR）是化学、化工以及材料领域中的一种重要研究手段。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。所涉及的体系包括分子晶体、无机晶体、分子筛、高聚物、表面活性剂等。QSAR的应用可以极大的提升高性能材料的研发速率。	

产品效益

加快创新进程

能够更快地开发性能更优异、可持续性更强且成本更低的材料；

降低研发成本

通过虚拟筛选，节省实际测试与实验的相关成本和时间；

提高研发效率

在Pipeline Pilot内实现自动化并分享最佳实践，以减少非增值任务；

促进数据驱动的决策

用强大的材料信息学补充实验室实验的不足。

关于达索系统

作为一家为全球客户提供3DEXPERIENCE解决方案的行业领导者，达索系统致力于成为人类发展进程的催化剂，为客户提供可协同的3D虚拟空间来推动可持续创新。利用达索系统的3DEXPERIENCE平台和行业解决方案，我们的客户对真实世界进行数字孪生，从而突破创新、学习和生产的界限。达索系统为140多个国家超过27万个不同行业、不同规模的客户带来价值。

关于 BIOVIA

BIOVIA是达索系统(Dassault Systems)的子品牌，其整合了达索系统在生物制药、生命科学、化工、材料科学等领域的应用,是目前全球范围内唯一能够提供分子模拟、化学信息学和生物信息学全面软件解决方案及相关服务的最大供应商。

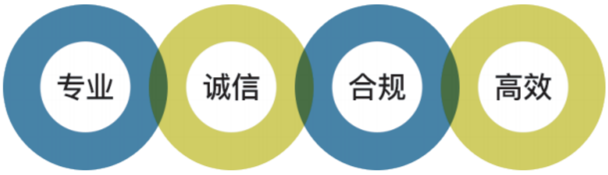
关于卓亚科技

北京卓亚医药科技有限公司（以下简称“卓亚科技”）致力于为生命科学行业提供最佳信息化及数据科学解决方案。

自2015年成立以来，卓亚科技已成功为中国大陆及香港、台湾地区超过100家客户提供信息化建设服务，其中包括行业内知名的生物制药企业、CRO企业，研发中心、高校、医院临床试验机构等。

卓亚科技分别在北京与上海设有办公室，已在全国范围内建立了成熟稳定的销售及服务网络。公司核心团队均在生命科学行业信息化建设及合规咨询、数据科学、分子建模与仿真方面拥有超过10年以上的丰富经验。卓亚科技技术团队具备专业的项目管理与质量管理能力，并获得ISO9001质量管理体系认证。卓亚科技能够为客户提供生命科学行业从早期研发到生产制造的端到端解决方案，包含信息化产品实施、电子数据备份及IT基础架构建设、计算机化系统验证等服务，以及一流的分子模拟与仿真软件的销售与技术支持。

作为生命科学行业信息化建设与咨询服务的领导者，卓亚科技与世界一流的信息化产品供应商携手合作。在专业、诚信、合规、高效的价值观引领下，卓亚科技将坚持不渝的为生命科学行业客户提供完善且高质量的服务。



卓亚科技
DRYAS

北京办公室

北京|海淀区西四环北路158号1幢七层7-106

上海办公室

上海|浦东新区张江盛荣路88弄盛大源创谷1号楼208室

电话/TEL

010-53656003（北京）

021-50460325（上海）

网址/WEB

www.dryas.com.cn