

アドバンスソフトの材料設計統合システム (Advance/MaterialDesignSystem)

新製品！

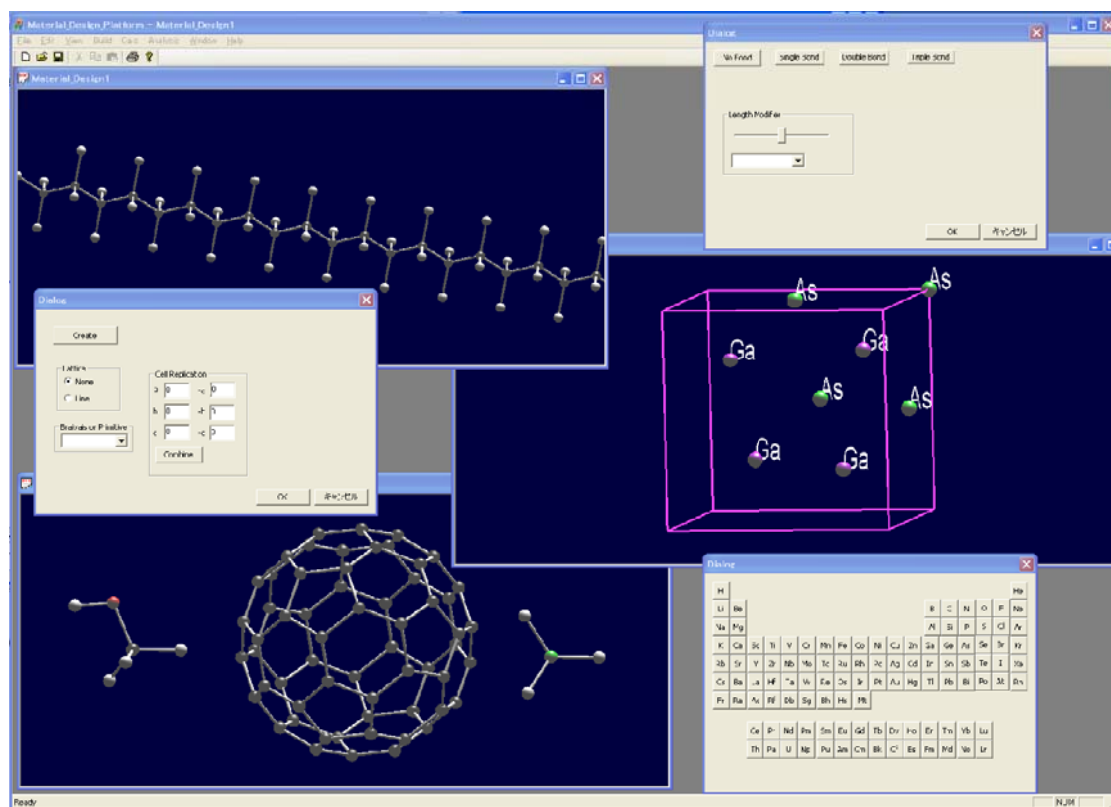
Advance/MaterialDesignSystem は、材料設計に必要な、

①量子化学計算、②第一原理計算、③分子動力学計算、④粗視化動力学計算、⑤数値基底密度汎関数計算等を、1つのプラットフォームで行うことができる「材料設計統合システム」です。

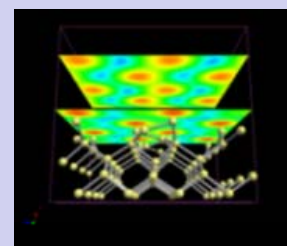
Advance/MaterialDesignSystemは、モデル作成・計算の入出力や実行・結果解析等を担うMaterial Design Platformと複数の材料解析計算ソルバー群から構成されます。Material Design Platformは、分子・結晶・ポリマー等の3次元構造の作成を担うビルダー、構造表示等の結果解析を担うビジュアライザ、シミュレーションソルバーへの入出力やジョブ管理を担うインターフェイスから構成されます。

Advance/MaterialDesignSystem Ver.1.0のプラットフォームとソルバー

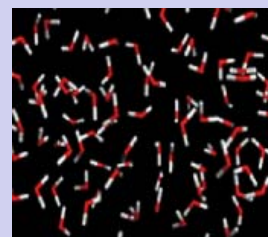
材料設計統合プラットフォーム Advance/MaterialDesignPlatform



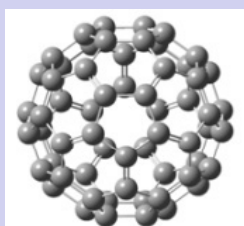
**第一原理バンド計算
Advance/Phase**



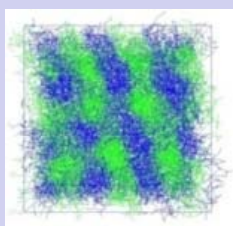
**分子動力学計算
Modylas**



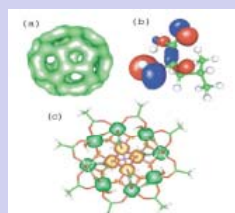
**量子化学計算
Advance/BioStation**



**粗視化・分子
動力学計算
Advance/OCTA**



**数値基底密度
汎関数計算 OpenMX**



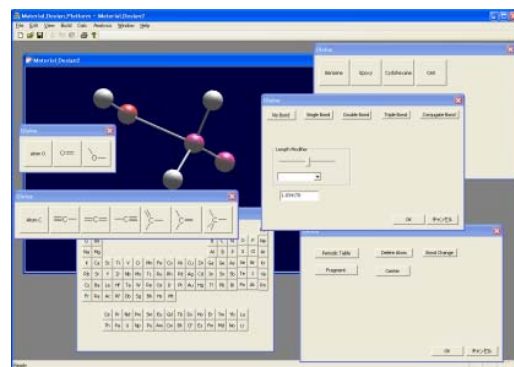
Advance Soft

アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階

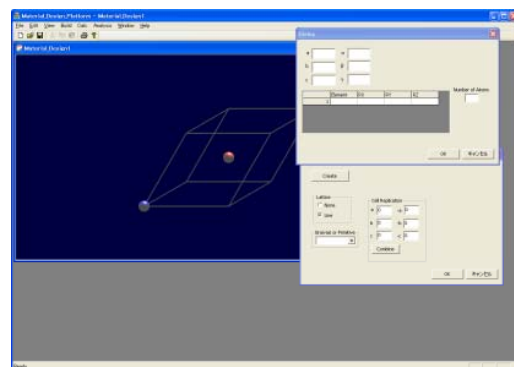
TEL: 03-5570-1689 FAX: 03-5570-1684

URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

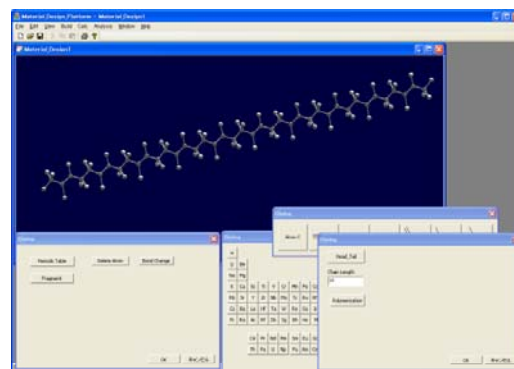
分子ビルダー： マウスクリック操作による3次元分子構造の構築機能、水素を付加した原子やフラグメント単位での分子構築機能、結合距離や原子位置のクリック操作での容易な変更機能、3次元分子構造の拡大・縮小・並進・回転による容易な構造確認機能



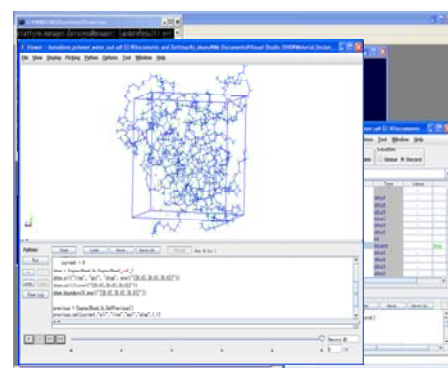
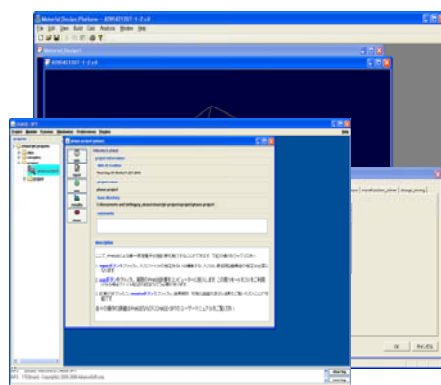
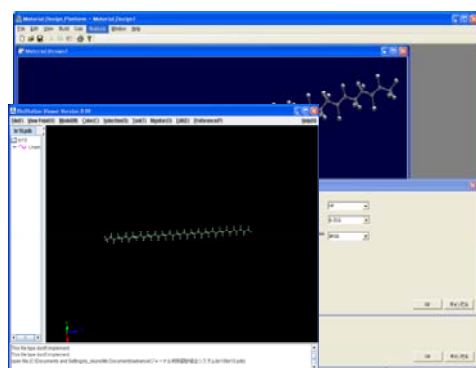
結晶ビルダー： 格子定数や座標入力による結晶構造構築機能、構造データベースから入手できるCIFファイル形式の読込によるブラベー格子での結晶構造表示機能、ブラベー格子から基本格子への自動変換機能、SuperCell の容易な構築機能



高分子ビルダー： モノマーからポリマーの構築機能（ホモポリマー・ブロックコポリマー等に対応）、高分子のフラグメント分子軌道計算に必要なフラグメント分割機能



各種計算ソルバーとのインターフェイス： 分子ビルダー・結晶ビルダー・高分子ビルダーで構築した分子構造で計算条件を指定する機能、計算入力ファイルの構築機能、計算入力ファイルによる計算の実行機能、計算の出力ファイルから構造を読み取り3D構造を表示させる機能



動作環境

Windows XP, Windows Vista, Windows7

アドバンスソフト株式会社

〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階

TEL: 03-5570-1689 FAX: 03-5570-1684

URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

