



MATERIALS
STUDIO™

Materials Studio **Version 2.2**

Materials Studio Version 2.2 の新機能

Materials Studio version 2.2 では幾つかの量子力学ツールが強化されました。また、新しいメゾスケールモジュール、古典力学用の計算エンジン、並びにインフラストラクチャーとVisualizer の新機能が加わりました。

新製品

- MesoDyn

MesoDyn はメゾスケールの構造に対して動力学シミュレーションによる形態予測や物性予測をするツールです。Materials Studio バージョンの MesoDyn は以前の Cerius2 バージョンに比べ重要なアップグレードが幾つかあります。新しい MesoDyn では初めて静電的相互作用を使ったシミュレーションができるようになりました。新しい数値積分オプションや MPI を使った並列計算によるパフォーマンスの改良、並びに、Materials Studio の高性能 Visualization 機能により以前に比べ容易に魅力的な静止画像やアニメーションをメゾスケールシミュレーションの結果から作成できます。

- Forcite

Forcite は、Materials Studio の新しい原子レベルシミュレーションツールです。現在 Forcite では、エネルギー計算と構造の最適化を分子や周期境界条件の系に対して行えます。Forcite は、Dreiding、UFF (Universal Forcefield) と COMPASS が使えます。Forcite は、周期境界条件の系を最適化する際に対称性を考慮に入れて計算できます。現在、Forcite は、Client のみで計算されます。

- X-Cell

X-Cell は、新しい粉末 X-線データの Indexing ツールです。X-Cell は、最も新しい画期的な Indexing テクノロジーです。従来の Indexing ツールでは解析が難しかった粉末データに対して、より柔軟に対応することによって解析できる可能性を高めます。X-Cell は 2003 年 7 月に一般販売されます。

Materials Studio モジュールの改良

- DMol³

Windows と Linux IA32 システム上でのパフォーマンスが最高 3 から 4 倍向上し、全てのプラットフォームで並列計算のパフォーマンスが向上しました。新しく加わった Handy-Tozer 機能により水素結合を持った系のシミュレーションを可能にしました。水素結合を持った分子の構造や熱力学の計算が正確にできるようになった事によって、DMol³ は製薬企業にも重要なツールになります。

[お問い合わせ先]

〒104-0033 東京都中央区新川 2-8-4 ナカリンオートビル 5F

TEL 03-3206-3575

EMAIL info-japan@accelrys.com

FAX 03-3206-3572

URL www.accelrys.com/jp





MATERIALS
STUDIO™

- VAMP

二つ半経験的 MO 法 - MNDO/d と AM1* が新しく加われました。AM1* は遷移金属元素を扱うことを意図して開発されております。また、遷移状態の探索機能が強化されました。

- CASTEP

CASTEP は今回のバージョンで線形応答理論 (linear response theory) によるフォノン振動数の計算機能が加わり、フォノンの分散関係と状態密度を計算できるようになりました。これによって、自由エネルギーやデバイ温度等の熱力学的な性質を予測する事ができるようになりました。又 CASTEP のユーザーは、Mulliken charge を計算することによって Population 解析が行え、各軌道角運動量成分と Bond Population の部分電荷も計算できます。

- DPD

OS が Compaq Tru64 UNIX の Compaq Alpha server がサポートされました。

- Reflex

Pawley と Rietveld refinement で実験と計算した粉末パターンを表示する時に特別バックグラウンドを表示するオプションが加われました。

- Visualizer **に加わった新機能**

- Queuing systems 他社 queuing ソフトによる serial job 計算を全モジュールでサポートしました。
2.2 では以下の他社 queuing ソフトがサポートされています：

Generic NQS (Network Queuing System), version 3.50.9 <http://www.gnqs.org>

OpenPBS (Portable Batch System), version 2.3.16 <http://www.openpbs.org>

LSF (Load Sharing Facility) <http://www.platform.com>

NQS は、現在 SGI マシンの IRIX OS 上のみでサポートされています。

DMol³、CASTEP、と MesoDyn は MPI 並列計算も、PBS を使った Linux クラスタと、PBS か LSF を使った SMP、で起動できます。

Windows での LSF を使った MPI 並列計算はサポートしていません。

- Charging tools Gasteiger と QEQ の二つが Visualizer の機能として加われました。
- Close contacts 新しく close contact を表示するツールが加われました。
- Client-side autosave : クライアントが落ちた時にファイルを完全に無くさないためのツール。
- Polymer builder 操作性を改良。
- Gateways Proxy サーバーによるゲートウェーへのコネクションを可能にしました。
- Tutorials 新しいモジュールのチュートリアルと新しい機能のチュートリアルが追加されました。
又、幾つかのチュートリアルは強化されました。

[お問い合わせ先]

〒104-0033 東京都中央区新川 2-8-4 ナカリンオートビル 5F

TEL 03-3206-3575

EMAIL info-japan@accelrys.com

FAX 03-3206-3572

URL www.accelrys.com/jp



プラットフォーム

CASTEP と DMol³ は Intel の Itanium[®] 64 ビットチップをサポート。

全てのモジュールが Red Hat Linux cluster をサポート。

DMol³、CASTEP と MesoDyn 以外は PBS が必須。

- **新しく加わったプラットフォーム**

SGI IRIX 最新バージョン ? 6.5.15 と 6.5.16

Red Hat Linux 最新バージョン ? 7.3

Red Hat Linux Advanced Server

Red Hat Linux 7.2 for Intel Itanium[®]

- **サポートから外れるプラットフォーム**

Windows NT Workstation 4.0 SP4 と SP5

Windows NT Server 4.0 SP4 と SP5

Windows NT Server, Enterprise Edition 4.0 SP4 と SP5

SGI IRIX 6.5.4 と 6.5.9

Red Hat Linux 6.2, 7.0 と 7.1

- **システムライブラリー変更**

IRIX では SCSL Scientific Library 3.5 が必要になりました。SCSL Scientific Library 3.5 は Materials Studio Installation CD に入っていますが、通常インストールとは別にインストールが必要です。

- **ハードウェア必要条件変更**

クライアントは最低でも Intel Pentium[®] II 以上が必要になりました。

- **ライセンス変更**

License Pack, version 5.2 は、Windows と UNIX の両方で自動的にインストールされるようになりました。もし古い License Pack がインストール時に見つかった場合、自動的にアップグレードされます。