

MS Modeling version 3.0 の新機能

MS Modeling version 3.0 には幾つか重要なアップグレードと4つ新しいモジュールが追加されました。

■ MS Modeling 2.2 移行の新モジュール

Polymorph: 結晶多形を予測するツールです。エネルギー値等から予測した多形を定性的にランキングします。

QSAR: 分子レベルの特性や情報、配合データ、実験やプロセス条件等と、測定した物性値の統計的な関連を計算します。既存の実験データを検証し、見過された、あるいは隠れた相関関係を探し出し、また、実験の多様性を調べます。将来の開発を十分検証された範囲で行うか、全く新しい範囲で行うかを決めるのに有用です。材料物性への分子レベルや他のレベルのファクターの影響を探します。

Genetic Function Approximation: QSAR パッケージの一部で、遺伝アルゴリズムを使い多変量回帰を行うツールです。

Reflex: 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。

■ Materials Studio モジュールの改良

DMol³: 精度 (Quality) と計算速度のトレードオフをユーザが更に柔軟に指定可能になりました。パラメータのデフォルト値を改善しパフォーマンスと信頼性が向上しました。

VAMP: 逐次計算のパフォーマンスと計算中のメモリ利用効率を改善し、今まで以上に大きな構造が計算できるようになりました。AM1* Hamiltonian に新しいパラメータを追加しました。Intel ItaniumR 64-bit processor のサポートを追加しました。

Forcite: CVFF と PCFF 力場の追加、計算効率の改良、client-server のサポートが追加されました。このバージョンでは、自動的に Trajectory ファイルや一群のモデルを計算することができます。

DPD: Intel Itanium[®] 64-bit processor へのサポートを追加しました。

Discover: Intel Itanium[®] 64-bit processor へのサポートを追加しました。

MesoDyn: Pseudo-dynamics と electrostatics の使い方を説明する新しいチュートリアルを追加しました。Intel Itanium[®] 64-bit processor へのサポートを追加しました。

CASTEP: Dynamics が低温・定圧アンサンブル(NPT)で実行可能になりました。linear response の計算速度が対称性を考慮することで大幅に向上しました。Γ点における LO-TO splitting がフォノン計算で行えます。非局在化内部座標を使うことで構造最適化の計算速度が大幅に向上しております。他に screened および exact exchange functionals によるバンドギャップや光学的性質の改良、Born の有効電荷、静的誘電率における格子からの寄与が計算できるようになった事などがあります。

Queuing systems: 全てのモジュールでサードパーティーの queuing ソフトを使用した連続 job の計算がサポートされています。DMol³ と CASTEP の MPI 並列計算が PBS 使用の Linux クラスター、および PBS または LSF 使用の SMP マシンでサポートされています。

Visualizer に加わった新機能

Study Tables: 新しい QSAR モジュール用のドキュメントタイプとそれに付属した分子モデルの表示機能と計算ツール。今後 high-throughput モデリングを実現するための基礎になります。

Import from SD file format: SD ファイルから自動的に複数の構造を Materials Visualizer に入力。

Accelrys Accord Chemistry Cartridge への対応: 現在進行中の全アクセルリス商品を統合する計画の一環として新しく (.acx) ファイルに対応しました。このフォーマットは最も新しいバージョンの Accord Chemistry Cartridge で読み込みます。

Graphing: 新しいヒストグラム表示と樹状図への対応。

Server interactions: サーバーサイドジョブフォルダの remote view を改良。

Installation: InstallShield を使用することでパッチリリースが出し易くなります。

Tutorials: 新しいチュートリアルを追加と既存のチュートリアルの改善。

■ 対応プラットフォームの変更

新しいプラットフォームの追加

- DPD、MesoDyn、Discover、COMPASS、Reflex+ の **Intel Itanium 64-bit processor** への対応。

プラットフォームサポートの中止

- Microsoft Windows 98 と Me。

ライセンスの変更

このバージョンの MS Modeling は最も新しい Accelrys License Pack, version 6.2 を使用しています。インストール時に現在使われている古いバージョンの License Pack が確認されれば、自動的に更新されます。

以上