



Materials Studio 4.1 リリースノート

ご注意

本リリースノートを印刷物やCDから直接に、あるいはローカルディスクにロードしたものからお読みの場合は、より新しい情報をアクセルリスのウェブサイトから入手できる場合がありますのでそちらもご参照ください。

内容

[新規事項](#) | [ライセンス](#) | [システム要件](#) | [インストール](#) | [修正バグと既知事項](#) | [Accelrysへの連絡](#)

Materials Studio 4.1 での新機能

Materials Studio™ はバージョン4.1 のリリースにより大幅に強化されました。このバージョンで多くの重要な新しい機能や強化が実現されています。特に、4.1ではインフラストラクチャー、シミュレーション、分析などの分野での新しいツールや、メソスケール、ドッキング、シミュレーション、ナノテク、量子科学分野での強化がされています。

4.0以降の新しいプロダクト

Scripting. Perlスクリプティング機能が導入され、Materials Studioのいくつかの特徴や機能をコントロール出来るようになりました。スクリプティングにより3D Atomistic documentsやCollection documents、trajectories、study tableなどの作成や操作ができます。スクリプティングが使えるようになった最初のモジュールはForcite Plusで、全タスクおよび解析機能が対象となります。新しいスクリプト開発環境がMaterials Studioに実装され、サーバーにサブミットする前にクライアント側で文法のチェックやバグ修正が出来る機能をふくむ、広範囲の有用な機能が提供されます。

Conformers. 新しくコンフォーメーションサーチと解析機能がMaterials Studioに追加され、系統的なグリッドスキャンやランダムサーチ、Boltzman jump法を含む、分子系の配座空間をサーチする手法が利用できます。Conformerはサーチファイル中の一つ、あるいは数個から全てにわたる配座を、配座番号、エネルギー、慣性半径、双極子モーメント、ねじれ角、クラスターに基づき解析することが出来ます。

ConQuest. ケンブリッジ結晶データセンター(Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC) のケンブリッジ構造データベース(Cambridge Structural Database, CSD)との連携統合が出来ました。ConQuestにより、CSDサブストラクチャー、化学名、refcodeでの検索が他のCSDインターフェースを使うことなく、Materials Studioから直接に出来るようになりました。さらに、Materials Studioで作成されたサブストラクチャーのクエリーを、引き続きのデータベースサーチのために自動的にCCDC ConQuestデスクトップアプリケーションに転送することが出来ます。

GULP. GULP3.0の最初のリリースがMaterials Studio 4.1に登場。ナノテクノロジーコンソーシアムメンバー外の方のご利用が可能になりました。クラスター、表面、3D周期系などを含め、広範囲な材料のエネルギーの一点計算、構造最適化、モレキュラーダイナミクス計算がGULPで実行できます。GULP3.0サーバーでは金属に対するEAM法やBrenner、 Tersoffポテンシャルを含む多くのポテンシャルライブラリーを提供します。GULPから出力されるトラジェクトリーファイルはForciteを使い解析することが出来ます。

Nanotechnology Consortium. このリリースではナノテクノロジーコンソーシアムのメンバー限定として、以下の機能を搭載しています : Adsorption Locator、ONETEP、QMERA、GULP力場フィッティング、GULP光学物性解析。ナノテクノロジーコンソーシアムに関する詳しい情報は下記から入手できます。
http://www.accelrys.com/materials/nano/nano_consortium/index.html

NanoBiology Initiative. このリリースではナノバイオロジーイニシアティブのメンバー限定として、以下の機能を搭載しています : Adsorption Locator、DPD構造ビルダー。ナノバイオロジーイニシアティブに関する詳しい情報は下記から入手できます。
<http://www.accelrys.com/info/initiatives/nanobio/index.html>

Materials Studio モジュールの強化点

CASTEP. 金属やウルトラソフト擬ポテンシャルで計算した系のフォノン振動数が計算できるようになりました。拘束内部座標法を使うことで構造最適化機能が改良されました。

DMol3. COSMO溶媒和法が周期系に拡張され、またその性能が大幅に改善されました。ユニットセルの最適化が出来るようになり、大きな（トリプル）基底系がサポートされました。また、多重K点の周期系での電荷密度の3D表示が可能になりました。

DPD. カスタマイズ可能な、ボンド伸縮および新しい変角の相互作用が、非柔軟分子のシミュレーションを強化するために導入されました。

Forcite Plus. Forcite Plusの全てのタスクと解析機能がPerlスクリプティングでアクセス出来るようになりました。凝集エネルギー密度、濃度プロファイル、結合長/結合角/ねじれ角の分布、力学物性、慣性半径、ズリ粘度など、多くの拡張されたトラジェクトリー解析機能が追加されました。さらに、グループベースのカットオフやEwald非結合計算法に対し、性能の最適化がされました。

MesoDyn. Debye-Huckel静電理論が導入され、水系のモデル化が出来るようになりました。

QSAR. 距離、結合、角度が記述子として使えるようになりました。配列ベースのデータを、配列をスプリットしないで扱える新しい分布チャートが加わりました。スタディテーブル中の構造の全原子に対して、Fukui関数や電荷などの原子レベルの物性を計算できます。平均、最小および最大値を取りだす新しい関数モデルキーワードが使えるようになりました。

Reflex. Rigakuの粉末回折実験ASCIIファイルフォーマットのサポートが追加されました。

Sorption. シミュレートドアニーリング法によるグローバルミニマムの決定が出来るようになり、この機能は、骨格中のカチオンの位置を予測するために荷電系にも拡張されました。

VAMP. Cu、ZnのAM1*パラメーターが加わり、三重項-三重項励起がZINDOで扱えるようになりました。d-軌道を持つ系の静電ポテンシャルの3D可視化が出来るようになりました。

Materials Visualizer の強化点

Gateway security. HTTPSを利用した安定したゲートウエーが実装されました。

Miller planes. 個々のミラー面および面群を作成し、結晶および表面上に表示できます。

Nanocluster builder. ナノテクノロジーコンソーシアムの成果による2回目の強化改訂として、ナノクラスタービルダー機能がナノ構造ビルダーから使えるようになりました。このツールにより、周期構造から種々のクラスター構造を作成できます。

Supported file formats. XTL構造ファイルのインポートが可能になり、またMOLインポーターは強化され、MOL V3000ファイルをサポートするようになりました。

Usability. プロジェクトのデフォルト設定値がMaterials Studio 全モジュールとMaterials Visualizerの幾つかのツールに対して設定できるようになりました。オブジェクトの色の設定がProperties Explorerからコントロールできるようになりました。

プラットフォームサポート

Materials Studio サーバーサポートに関して以下の構成が追加されました：

- Windows® 2003 Server, all editions - R2
- Intel® IA32-compatible x86 processors (including clusters) running Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 3.0 (update 8) and 4.0 (updates 3 and 4)
- Intel IA32-compatible x86-64 processors (including clusters) running Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 4.0 (updates 3 and 4) and 5.0
- Intel IA64-compatible Itanium® 2 processors running Red Hat Enterprise Linux AS and WS - 4.0 (updates 3 and 4) and 5.0
- Intel IA32-compatible processors (x86, x86-64) running SuSE™ Linux Enterprise Server - 9 (SP3) and 10
- Intel IA64-compatible Itanium 2 processors running SuSE Linux Enterprise Server (for standalone execution of CASTEP, Discover, DMol3, and ONETEP only) - 9 (SP3) and 10
- SGI® IRIX® running OS versions 6.5.29 and 6.5.30

Note. AccelrysではMaterials Studio4.1 serversをRed Hat Enterprise Linux 5.0 Beta2リリース下、実行テストを実施しましたが特別の問題は見いだしていません。Red Hat Enterprise Linux 5.0環境下でMaterials Studio4.1 serversが正常に動作することを鋭意確認してきておりますが、Red Hat Enterprise Linux 5.0のフルリリース版が公開されるまでは保証しかねることはご了承下さい。

PBS Pro - version 7.1 およびLSF ver.6.2のキューイングシステムサポートが追加されました。

Windows XP Professional - SP1のクライアントサポートは終了しました：

以下のサーバーサポートが終了しました：

- Windows 2003 Server, all editions - Retail
- Windows XP Professional - SP1
- Intel IA32-compatible x86 processors (including clusters) running Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 3.0 (updates 4 and 5) and 4.0 (Retail and update 1)
- Intel IA32-compatible x86-64 processors (including clusters) running Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 4.0 (Retail and update 1)
- Intel IA64-compatible Itanium 2 processors running Red Hat Enterprise Linux AS and WS - 3.0 and 4.0 (Retail and update 1)
- Intel IA32-compatible x86 processors running SuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP1 and SP2)
- Intel IA32-compatible x86-64 processors running SuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP2)
- Intel IA64-compatible Itanium 2 processors running SuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP2)
- SGI IRIX running OS versions 6.5.24 and 6.5.25

PBS Pro ver. 7.0.0 および LSF ver. 6.0キューイングシステムのサポートが終了しました。

ライセンス

Materials Studio の本バージョンではAccelrys License Packの最新バージョン、version7.2、が適用されます。インストール中に、既存のバージョンのライセンスパックが検出された場合、自動的に新しいものに更新されます。

License Pack 7.2 の新規事項

New Accelrys Licensing Wizard. Accelrys License Pack version 7.2 から、Windows および Linux 上でサポートされるライセンス管理機能をもつウィザード インターフェースが加わります。この使い易いウィザードは Materials Studio のインストーラーと統合され、Windows スタートメニューの Programs | Accelrys Materials Studio 4.1 | Configure Licensing 空アクセスできます。またライセンスエラーが発生した時に Accelrys Licensing Wizard が立ち上がるようにオプション設定することが出来ます。ウィザードではライセンス設定手順を暗にするオプションメニューを利用できます。

Linux 64 support. 64-bit Linux プラットフォームで実行できるアプリケーションのサポートが追加されました。ライセンスサーバー、あるいはライセンス管理ツールの実行をサポートするために、32-bit 互換のライブラリをインストールしなければならないことにご注意下さい。より詳しくは、Accelrys License Pack ヘルプ中の "Operating systems supported" トピックスを参照下さい。

Wait functionality. Materials Studio 4.1 から、ゲートウェイコンソールにウェイト機能が加わりました。ウェイト機能を動作させるオプションが備わり、実行を停止しエラーを返す代わりに、ライセンスが有効になるまでサーバーコードをウェイト状態にすることが出来ます。ライセンスウェイト機能を有効にする手順のより詳しい情報は、Materials Studio のヘルプ中の "Gateway administration" トピックス、あるいは Accelrys License Pack ヘルプ中の "Materials Studio licensing" トピックスを参照下さい。

Multicore licensing. ゲートウェイコンソールにマルチコアハードウェアのサポートが追加されました。CPU 辺りのコア数を設定することが出来、この情報はパラレル処理時のライセンス数を正しく計算するために使われます。マルチコアハードウェア向けにゲートウェイを設定する方法については、Materials Studio のヘルプ中の "Gateway administration" トピックスを参照下さい。

システム要件

クライアントシステム 要件

クライアント PC 最小構成要件：

- サポート OS:
 - ✧ Windows 2000 Professional - SP4 Rollup 1
 - ✧ Windows XP Professional - SP2
- Intel® Pentium® III or compatible processor running at 1 GHz or greater
- Standard Microsoft® 2-button mouse (3-button mouse or 2-button wheel mouse strongly recommended)
- 800 x 600 display resolution (1024 x 768 recommended)
- 256 MB RAM (512 MB recommended)
- 500 MB disk space for a complete installation
- 16-bit / 65536 colors

必要なハードディスクスペースは、インストールする構成により、Windows OS 上で 380 ないし 500 MB となります。システムの更新が必要な時はさらにディスクスペースが要求されます。

より使い勝手を良くするには、特にクライアント側では上記の最小構成よりかなり十分なスペックのシステムをお使いになることを強くお勧め致します。サーバーソフトを、同じ PC 上でクライアントソフトと同じようにローカルで走らせる場合は特にこの点にご留意ください。

下記の点への対処で、より快適なソフトウェアのご利用が可能となります：

- Memory – RAM は多ければ多いほど。

- CPU スピード - 速ければ速いほど、快適な操作環境となります。
- 高品質 OpenGL グラフィックカードにより大きなグラフィック性能に差が出ます。
- ディスプレイの解像度が高いほど、ドキュメントやダイアログウィンドウの操作性が向上します。
- 必ずしも必須ではありませんが、3 ボタンマウス、あるいは2 ボタンホイールマウスを推奨します。複雑な構造の操作が容易になり、Materials Studioでの作業効率と快適性を高めます。

一例として、1 GB RAM、2.0 GHz CPU、解像度 1024 x 768、高性能 OpenGL グラフィックカードを備えたPCで良好なパフォーマンスが得られます。PC ハードウェアの性能は日々急速に向上していますので、最近の新しい普通のデスクトップPCでもこれらより遙かに高い性能を持っているはずです。

サーバープラットフォーム

Materials Studio の柔軟なclient-server アーキテクチャはWindows 2000/XP のみならず、UNIX や Linux での運用を可能にしています。

サポートプラットフォームは下記の通りです：

- Windows サーバー：
 - ✧ Windows 2000 Professional - SP4 Rollup 1
 - ✧ Windows 2000 Server, all editions - SP4 Rollup 1
 - ✧ Windows 2003 Server, all editions - SP1 and R2
 - ✧ Windows XP Professional - SP2
- UNIX (含、Linux) サーバー：
 - ✧ HP AlphaServer™ ES and GS running HP Tru64 UNIX® version 5.1B
 - ✧ SGI® IRIX® running OS version 6.5.26 to 6.5.30
 - ✧ Intel IA32-compatible x86 processors (including clusters) running:
 - Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 3.0 (update 8) and 4.0 (updates 3 and 4)
 - SuSE™ Linux Enterprise Server - 9 (SP3) and 10
 - ✧ Intel IA32-compatible x86-64 processors (including clusters) running:
 - Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 4.0 (updates 3 and 4) and 5.0
 - SuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP3) and 10
 - ✧ Intel IA64-compatible Itanium® 2 processors running:
 - Red Hat Enterprise Linux AS and WS - 4.0 (updates 3 and 4) and 5.0
 - SuSE Linux Enterprise Server (for standalone execution of CASTEP, Discover, DMol3, and ONETEP only) - 9 (SP3) and 10

Note. AccelrysではMaterials Studio4.1 serversをRed Hat Enterprise Linux 5.0 Beta2リリース下、実行テストを実施しましたが特別の問題は見いだしていません。Red Hat Enterprise Linux 5.0環境下でMaterials Studio4.1 serversが正常に動作することを鋭意確認してきておりますが、Red Hat Enterprise Linux 5.0のフルリリース版が公開されるまでは保証しかねることはご了承下さい。

追加情報

Windows 2000/XP, UNIX, および Linux 系でのシステム要件に関してのより詳しい情報は、Materials Studio ヘルプシステム中の"System requirements and recommendations" トピックスにあります。この情報はまた Materials Studio CD-ROM、あるいは Materials Studio ホームページ <http://www.accelrys.com/products/mstudio/index.html> にある README_Materials_Studio.htm ファイルから入手できます。

インストール

Materials Studio の柔軟なclient/server 構成は、単にグラフィカルクライアントのMaterials Visualizer をPCにインストールするか、Materials Studio のサーバーコンポーネントを別のWindows 2000/XP,

UNIX,あるいはLinux サーバー機にインストールするかによって幾つかの異なったインストールが出来るようにしています。

単一のWindowsベースのPCにインストールするには、単にMaterials StudioのCD-ROMをCDまたはDVDドライブに入れ指示に従って操作するだけです。全てのインストール手順、特に複雑なインストールの場合にはMaterials Studio のCD-ROMのREADME_Materials_Studio.htmファイルからリンクされた詳細な手順書を参照してください。

Note. もし他のバージョンのMaterials Studio が既にインストールされている場合は、新しいバージョンをインストールする前に実行中の全てのライセンスサーバーを停止させてMaterials Studio を削除してください。Materials Studio のCD-ROMの README_Materials_Studio.htmファイルからリンクされている"Removing Materials Studio "トピックを参照してください。

Tip. Materials Studio クライアントはハイパースレディング機能を有するマシンで実行するように構成されています。もしハイパースレディング機能マシンにマニュアルで別々のサーバー構成をインストールする場合は、インストールの前にハイパースレディングを停止しておくことをAccelrys は強くお勧めします。

ワークロード管理システム

Accelrys は、Linux OS上のAltair® のPBS Professional™ ワークロード管理システムをサポートします。PBS Professional の製造元である Altair Engineering は、Materials Studio インストール CD-ROM に 30 日間の試用版を搭載し、Materials Studio ユーザーへの大幅な割引を提供します。

PBS Professional 7.1は、OpenPBS にあった、実行中のJOB について終了報告をするような幾つかのバグを修正した、商用版の製品です。さらに、PBS Professional 7.1では下記のような幾つかの優位点があります。

- 進んだ柔軟なキューシステムを伴う、工業をリードするスケーラビリティ
- リソースベースのスケジューリング – 全リソース使用可能時のJob実行
- サーバソフトフェイルオーバー – プライマリーサーバー停止時の、実行中やキュー上のJob、ユーザーなどを中断しないセカンダリーサーバーによる交代
- 自動Jobリカバリー – ネットワーク上のどこにおける破壊Jobもリスケジュール

PBS Professional インストーラーは、Materials Studio インストールCD-ROMの \PBS Pro フォルダー中にあります。また、PBS Professional のQuick Start, User Guide および Administrator Guid PDF ファイルもそこにあります。

PBS Professional 7.1 の試用版の利用には下記のパスワードが必要です：

T-00128-08001-1045-fFXGn470nY-p8H-agt-Accelrys

PBS Professional 7.1 の購入の場合は、下記にご連絡ください。

日本窓口：アルテアエンジニアリング株式会社
エンタープライズコンピューティング事業部 担当：中村
TEL: 03-5396-1341 FAX: 03-5396-1851
Email: pbs@altairjp.co.jp

バグ修正点 および 既知事項

CASTEP default pseudopotentials

Materials Studio4.1より、CASTEP 計算時のウルトラソフト擬ポテンシャルのデフォルトは、選択された交換—相関汎関数に従い選択されます。これは、可能な限り、固体の計算や擬ポテンシャル作成に用いられた交換—相関汎関数が使われるということで、計算の整合性がより高まる事を意味します。以前のバージョンでは、常にLDA汎関数で作成された擬ポテンシャルの選択になりました。この結果、version4.1からのCASTEP GGA計算の結果は、以前のversionのMaterials Studioでの同じ計算と比べると若干の違いが出る事になります。

Accelrys への連絡

バグやコメントは詳細な情報とともにe-mailで直接 Accelrys サポートへご連絡ください。 アジア地区は support-japan@accelrys.com へ、US 地区は support-us@accelrys.com、Eu 地区は support-eu@accelrys.com へお願いします。