



アクセルリス 株式会社
〒105-0003 東京都港区西新橋 3-3-1
西新橋 TS ビル 11F
Tel: 03-3578-3861 Fax: 03-3578-3873
<http://accelrys.co.jp/>

Materials Studio 4.3 リリースノート

注意事項

このインストール ノートを印刷物でお読みにになりたい方は、直接 CD-ROM またはローカル ディスクから取得してください。さらに詳細な情報については、以下の Accelrys の Web サイトから入手できます。
<http://accelrys.com/products/materials-studio/>.

目次

[はじめに](#)
[Materials Studio 4.3 の新機能](#)
[ライセンス](#)
[システム要件](#)
[インストール](#)
[ワークロード管理システム](#)
[既知の問題](#)
[Accelrys サポートとの連絡](#)

はじめに

Materials Studio 4.3 は、今まで以上に大規模で複雑な系に対してモデリングおよびシミュレーション機能の適用を拡大する、一連のツールを提供しています。量子力学、メソスケールのモデリング、および多形体の予測を行う分野にツールを使用すると、モデリングが可能となる系を、ナノ材料、分子結晶、ポリマー、および有機化学分野の複雑な系に広げることができます。

Materials Studio 4.3の新機能

新製品

Mesotek — Mesotek は、ブロック コポリマー、分枝ポリマー、溶液、および拡散のモデリングに利用できる場ベースのメソスケール法です。ポリマー系の相図および応力分布は、擬スペクトル法を利用したメソスケール自己無撞着場法を使用して計算できます。流動可能な固体包埋物 (solid inclusions) と場の情報を結合すると、ナノ粒子分散やナノ複合材を研究できます。Mesotek では、非等方性 box 緩和と組み合わせて、高速で明示的な Euler 法と半陰解 Seidel 緩和法を使用します。Early Adopters Program の一部として利用できます。

ONETEP — ONETEP は、ナノテクノロジー コンソーシアムで初めて実装された、線形スケーリングによる密度汎関数理論 (DFT) のシミュレーション エンジンです。何千もの原子からなる系で計算ができ、マルチプロセッサやマルチコアのアーキテクチャで非常に効率よく計算できます。ONETEPは、構造、エネルギー、電荷密度、分子軌道、および状態密度の計算に使用できます。また、遷移状態探索や Mulliken 解析の実行にも使用できます。ナノ粒子、金属酸化物表面、ゼオライト、ポリマー、たんぱく質などの研究に利用できます。

QMERa — QMERa は、ナノテクノロジー コンソーシアムから生まれた製品で、量子力学法 (QM) と分子力学 (MM) 法を 1 回の計算の中で組み合わせて使用するものです。純 DFT 法より高速な上に、それに匹敵する精度で平衡構造と遷移状態構造を予測します。QMERa では、量子力学計算には DMol³ を、分子力学計算には GULP を使用します。有機金属、ナノチューブ系、ゼオライト、有機分子などのモデリングに適しています。

Motif Search — 新しい探索ツールがケンブリッジ結晶データ センタ (CCDC) との連携で開発されました。結晶格子内のアクセプタとドナー部位間の結合トポロジを解析することで、結晶構造を水素結合モチーフにより分類できます。Motif Search は、Polymorph 計算の解析、共結晶と塩の選択、および溶媒の選択に役立ちます。

Materials Studio モジュールの拡張項目

CASTEP — Hubbard U パラメータ (LDA+U および GGA+U) を持つ局所密度近似 (LDA) および一般化勾配近似 (GGA) を追加し、開殻系のバンドギャップの再現性を改善しました。これらの方法によりバンドギャップと有効電子質量は大幅に改善され、標準 Hubbard U パラメータまたはユーザ定義値のいずれかを使用できます。新しいハイブリッド関数 PBE0 も追加されました。Screened ex changeを指定して SCF 計算を実行できるようになりました。

COMPASS — Fuel Cells Special Interest Group によって開発された、サルフェートおよびスルホン酸塩用のパラメータが新たに追加されました。

DMol³ — 新しい Triple Numerical plus Polarisation (TNP) 基底セットがユーザ インタフェースに追加され、より正確な結果を得ることができます。

Forcite Plus — 力場ドキュメントでは、Dreiding 力場の一連の関数形式からエネルギー項目と力場パラメータを編集することができます。新しい力場のタイプを定義できます。また、新しい Forcefield Manager で力場を管理できます。MaterialsScript API は拡張され、新しい力場ドキュメントを編集できます。

GULP — 表面および表面付着エネルギー (attachment energy) を計算し、表面の化学的および熱力学的な安定性を予測します。

Gaussian Interface — 追加基底セット、遷移状態探索、および熱力学特性の解析など、多くの機能がインタフェースに追加されました。

ナノテクノロジー コンソーシアム — ナノテクノロジー コンソーシアムのメンバー用に、mechanical embedding scheme 法が QMERa に追加されました。

Sorption — ソルビン酸塩の配置を、分離された場から得られる特定領域の空間に限定します (下記「場の分

離」を参照)。このため、Sorption 計算の柔軟性が増し、潜在的なパフォーマンスを引き出すことができます。

Polymorph — 分子フラグメントのねじれ角は、パッキング アルゴリズムの一部として自由に変更できます。試行構造の事前最適化を行うことで、多自由度ケースでの効率が向上しました。「Forcite Plus」セクションで記述された力場ドキュメントは Polymorph でも有効です。

Materials Visualizer の拡張項目

場の分離 — 場の分離は、容積測定場情報の定量化、自由体積分布の決定、およびミセル サイズ分布の計算に使用できます。

メソスケール ビルダー — 一連の新規および拡張されたビルダーは、直線、ブロック、樹枝状、星型、くし状、その他の複雑なトポロジを持つ、分子のビーズ-バネ モデルの作成に使用できます。メソスケール分子は、メソ構造テンプレートを利用すると、粒子法 (DPD) およびフィールド法 (Mesotek) のシミュレーション方式用に構造化され、カスタマイズされた構造入力の作成に使用できます。

パフォーマンスの改善 — メモリ要件の緩和により、大きなドキュメントが効率的な処理されます。

チュートリアルの新規作成と更新

メソスケール分子の作成 (Materials Visualizer)

メソスケール ビルダーを利用して分子のビーズ表示を作成します。

場の分離と分析 (Materials Visualizer)

Atom Volumes Field で場の分離を実行します。

ヒダントインの可能性がある多形体の水素結合の分析 (CCDC)

水素結合モチーフに基づき、Polymorph の結果を分類します。

Materials Studio による力場の編集 (Forcite Plus)

Dreiding の力場パラメータの編集により、結晶構造の計算データと経験データの適合を改善するためのワークフローについて説明します。

ONETEP および CASTEP での Li_2O 状態密度 (DOS) (ONETEP)

ONETEP および CASTEP の計算結果を比較します。

カーボン ナノチューブの SW1 欠陥形成エネルギーの QM/MM 計算

$\text{Ru}(\text{H})_2$ (ジホスフィン)(ジアミン)複合体の QM/MM 構造最適化 (QMERA)

構造を作成して、さまざまな系に適した埋め込みスキームを選択する方法を説明します。

強磁性鉄のフォノン スペクトルの計算 (CASTEP)

CASTEP を使用して有限差分法でフォノン スペクトルを計算します。

DPD シミュレーションの初期開始条件の設定 (DPD)

新しいメソスケール ビルダー ツールを使用するチュートリアルに更新されました。

プラットフォームのサポート

サポート プラットフォームの追加

Materials Studio クライアントでは、以下のプラットフォームが新たにサポートされました。

- Windows Vista (Business および Enterprise エディション) - SP1

Materials Studio サーバでは、以下のプラットフォームが新たにサポートされました。

- Windows Vista (Business および Enterprise エディション) - SP1
- Red Hat Enterprise Linux WS、ES、AS - 4.6 および 5.1 (x86、x86-64、IA64 プロセッサとそのクラスタ)
- SUSE Linux Enterprise Server 9 SP4 (x86 および x86-64 プロセッサとそのクラスタ)

キューイング システムは PBS Pro バージョン 9.1 でサポートされました。

LSF を用いて Windows でサーバを並列実行する機能がサポートされました。

プラットフォームのサポート中止

Materials Studio サーバでは、以下のプラットフォームのサポートが中止されました。

- Red Hat Enterprise Linux WS、ES、および AS 4.0 (Update 4)
- SUSE Linux Enterprise Server 9 SP3

ハードウェア要件

クライアントおよびサーバとも最小メモリ要件は、512 MB RAM (推奨は 1 GB) に増加し、ハード ディスク容量は 730 MB に増加しました。

License Pack 7.5

このバージョンの Materials Studio は、Accelrys License Pack の最新バージョン 7.5 に同梱されています。インストール中に前のバージョンのライセンス パックが検出された場合、新バージョンに自動的に更新されます。

ライセンス

オフラインでの利用

Materials Studio 4.3 の使用を開始すると、一定の期間 Materials Visualizer をオフラインで使用できます。オフライン ライセンスの詳細については、Accelrys License Pack のヘルプを参照してください。

マルチコアの自動検出

マルチコアのハードウェアを自動的に検出する機能のサポートが、ライセンス ソフトウェアに追加されまし

た。ゲートウェイを自動的に構成してこの新機能を使用します。ライセンス使用量の計算方法の詳細については、**Accelrys License Pack** ヘルプの「並列処理のライセンス使用量」トピックを参照してください。自動検出がサポートされていない場合にマルチコアのハードウェア用にゲートウェイを構成する方法については、**Materials Studio** ヘルプの「ゲートウェイ管理」トピックを参照してください。

最新のメンテナンス ライセンスを所有するユーザ

製品の追加がない場合 — **Accelrys** ソフトウェア メンテナンスが最新で、既に対応するライセンス ファイルがインストールされている場合、新しいライセンスは必要ありません。**Materials Studio** ソフトウェアが既にインストールされたライセンスを使用するように構成されている限り、前にインストールしたこのソフトウェアを使用できます。**Accelrys** では、最新版ライセンス マネージャ プログラムの使用の確認をお勧めします。確認は、ご利用のライセンス サーバで **Accelrys License Pack** をアップグレードした後に、ライセンス サーバ マシンで動作する **FLEXlm** ライセンス マネージャを再起動して行います。ライセンス マネージャ プログラムを再起動する方法は、**Accelrys License Pack** ヘルプに記載されています。

一時的なライセンスをインストールする場合 — 今回のリリース版に含まれる新しい製品を試す場合、ソフトウェアに添付されたパスワードか **Accelrys Support** から取得したパスワードを使用して、一時的なライセンスをインストールする必要があります。一時ライセンスのインストール方法の詳細は、**MS 4.3** オンライン ヘルプの「一時ライセンスのインストール」トピックに掲載されています。

新規ユーザ、または今回のリリース版の新製品を追加するユーザ

一時的なライセンスをインストールする場合 — 今回のリリース版に含まれる製品を有効にするには、ソフトウェアに添付された一時パスワードか **Accelrys Support** から取得したパスワードを使用して、一時的なライセンスをインストールする必要があります。パスワードを持っていない場合、**Materials Visualizer** の自動トライアルを開始してもかまいません。**30** 日間、この機能を使用できます。**Materials Studio** のその他の機能を使用するには、ライセンス ファイルが必要です。自動トライアルを開始するには、**MS 4.3** オンライン ヘルプの「**Materials Visualizer** 自動トライアル ライセンス」トピックの説明を参照してください。**30** 日のトライアル期間が経過した後に、再度トライアル版を開始できないことに注意してください。トライアルの延長をご希望の場合は、**Accelrys** の販売担当者にご相談ください。

ライセンス ファイルを要求する場合 — 購入するソフトウェアに適したライセンス ファイルを要求するには、適切なライセンスが作成できるように具体的なマシン情報を **Accelrys Support** に送る必要があります。詳細情報については、**Accelrys License Pack** ヘルプを参照してください。

ライセンス ファイルをインストールする場合 — **Accelrys** のソフトウェア ライセンス ファイルを入手した後は、正しく設定する必要があります。詳細情報については、**Accelrys License Pack** ヘルプを参照してください。

リモート ライセンス サーバを利用する場合 — **NFS** がサポートされていない **Linux** および **PC** では、**TCP/IP** 接続経由でリモート ライセンス サーバにアクセスするように設定する必要があります。詳細情報については、**Accelrys License Pack** ヘルプを参照してください。

システム要件

PC クライアントのシステム要件

ハードウェアの最小構成

- 1 GHz 以上で動作する Intel® Pentium® III または互換プロセッサ
- Standard Microsoft® の 2 ボタン マウス (3 ボタン マウス、または 2 ボタンのホイール マウスを推奨)

- 800 × 600 表示解像度 (1024 × 768 を推奨)
- 512 MB RAM (1 GB を推奨)
- 730 MB ディスク容量 (完全インストール時)
- 16 ビット/65536 色

インストールに必要なハードディスク容量は、インストール時に選択するコンポーネントによって、**Windows** オペレーティング システムで **450 MB** から **730 MB** まで変化する場合があります。システムのアップデートが必要な場合は、さらに容量が必要となります。

Materials Studio、特にクライアント ソフトウェアを快適に動作させるには、上記の最低限の仕様よりも大幅に良いシステムの使用をお勧めします。これは、クライアント ソフトウェアと同じ **PC** でローカルにサーバ ソフトウェアを実行する場合は、特に重要です。

以下のことに注意すると、全体的なユーザの実感とソフトウェアの快適さを大きく改善することができます。

- メモリ - コンピュータに搭載する **RAM** が多いほど快適に動作します。
- **CPU** 速度 - 速ければ速いほど快適に動作します。
- 適切な **OpenGL®** グラフィック カードを使用すると、グラフィック性能に大きな差が出ます。
- 表示解像度が高いほど、より柔軟にドキュメントおよびダイアログ ウィンドウの表示と管理ができます。
- マウス - 必須ではありませんが、**3 ボタン** マウスまたはホイール付き **2 ボタン** マウスを強くお勧めします。これらのマウスを使用すると、複雑な構造の操作が容易になり、**Materials Studio** の効率や快適さが増加します。

たとえば、**1 GB RAM**、**CPU** 速度が **2.0 GHz**、**1024 × 768** の画面解像度、および有効な **OpenGL** グラフィック カードを搭載した **PC** は快適に動作します。現在 **PC** ハードウェア性能は急速に向上しているため、新しい汎用デスクトップ **PC** であれば、上記の仕様よりかなり良い仕様となります。

オペレーティング システム

- **Windows® 2000 Professional – SP4 Rollup 1**
- **Windows XP Professional - SP2**
- **Windows Vista (Business および Enterprise) - SP1**

いずれの場合も、**32 ビット**版のオペレーティング システムだけがサポートされています。

サーバ システム要件

Windows

ハードウェアの最小構成

- 1 GHz 以上で動作する Intel® Pentium® III または互換プロセッサ
- 512 MB RAM (1 GB を推奨)
- 730 MB ディスク容量

これはお勧めする最小構成の仕様です。Materials Studio を最大限に活用するための推奨構成の詳細については、「[PC クライアントのシステム要件](#)」セクションを参照してください。Materials Studio を Windows サーバで動作する場合、グラフィックに関する要求事項はありません。

オペレーティング システム

- Windows 2000 Professional - SP4 Rollup 1
- Windows 2000 Server のすべてのエディション - SP4 Rollup 1
- Windows 2003 Server のすべてのエディション - SP2 および R2
- Windows XP Professional - SP2
- Windows Vista (Business および Enterprise) - SP1

いずれの場合も、32 ビット版のオペレーティング システムだけがサポートされています。

Linux

ハードウェアの最小構成

- 1 GHz 以上で動作する Intel® Pentium® III または互換 (x86、x86-64) プロセッサ
- 512 MB RAM
- 730 MB ディスク容量

これはお勧めする最小構成の仕様です。負荷のかかる作業を行う場合は、性能、速度、およびメモリを、最小構成より良い仕様にするをお勧めします。Materials Studio を Linux サーバで動作する場合、グラフィックに関する要求事項はありません。

プロセッサおよびオペレーティング システム

- x86 (32 ビット)
 - o Red Hat Enterprise Linux AS、ES、および WS - 4.5 および 4.6
 - o SuSE[™] Linux Enterprise Server - 9 (SP4) および 10 (base および SP1)
- x86-64 (64 ビット)
 - o Red Hat Linux AS、ES、および WS - 4.5 および 4.6
 - o Red Hat Enterprise Linux - 5.0 および 5.1
 - o Red Hat Enterprise Linux Desktop - 5.0 および 5.1

- o SuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP4) および 10 (base および SP1)
- Itanium
 - o Red Hat Enterprise Linux - 5.0 および 5.1
 - o Red Hat Enterprise Linux Desktop - 5.0 および 5.1
 - o SuSE Linux Enterprise Server - 10 (base および SP1)

x86-64 プロセッサの場合、Accelrys では Materials Studio 4.3 の 32 ビット サーバ アプリケーションは、64 ビット版の Red Hat Enterprise Linux 4.5 と 4.6、および SuSE Linux Enterprise Server 9 (SP4) と 10 のオペレーティング システムで正常に動作することを確認しました。CASTEP、DMol³、GULP、ONETEP、および VAMP は Intel EM64T および AMD64[™] プロセッサでは 64 ビット拡張機能を利用する Accelrys 専用のバイナリです。

詳細情報

Windows 2000/XP/Vista、UNIX、および Linux のシステム要件の詳細については、Materials Studio CD-ROM の README_Materials_Studio.htm ファイルでリンクされた「システム要件と推奨事項」トピックか、Materials Studio のホームページ <http://www.accelrys.com/products/mstudio/index.html> を参照してください。

インストール

Materials Studio は柔軟なクライアント/サーバ型の構成であるため、グラフィック クライアントである Materials Visualizer を PC に単にインストールするか、または Materials Studio のサーバ コンポーネントを別々の Windows 2000/XP/Vista、UNIX、または Linux サーバ マシンに選択してインストールするかによって、さまざまなインストールが可能です。

1 台の Windows PC にインストールする場合は、Materials Studio CD-ROM を CD または DVD ドライブに挿入して指示に従ってください。すべてのインストール シナリオ、特に複雑なインストールを行う場合は、Materials Studio CD-ROM の README_Materials_Studio.htm ファイルからリンクされた詳細手順を参照してください。ESD で Materials Studio をダウンロードする場合、ダウンロード ページの accelrys.subscribenet.com の手順を参照してください。

注意

Materials Studio の別のバージョンがすでにインストールされている場合、動作しているライセンス サーバを停止し、新しいバージョンをインストールする前に現在の Materials Studio をアンインストールする必要があります。Materials Studio CD-ROM の README_Materials_Studio.htm ファイルからリンクされたインストール手順書の「Materials Studio の削除」トピックを参照してください。

Materials Studio は、ハイパースレッド機能を搭載したマシンで動作するように構成されています。ただし、ハイパースレッド機能を搭載するマシンに別々のサーバ コンポーネントを手動でインストールする場合、Accelrys ではインストールを実行する前にハイパースレッド機能を無効にしておくことを、強くお勧めします。

ワークロード管理システム

Accelrys では Altair® PBS Professional™ ワークロード管理システムを Linux および Windows のオペレーティング システムでサポートしています。PBS Professional の製造元である Altair Engineering は、Materials Studio ユーザに PBS Professional の 30 日間無料トライアル版を提供しています。さらに、30 日間のトライアル期間に永久ライセンスを購入する Accelrys のお客様には、PBS Professional を 20 % オフで購入する権利が与えられます。

PBS Professional は、OpenPBS に比べて多くの拡張項目を持ち、100 人年を超える開発を行った商用製品です。さらに、以下の多くのメリットがあります。

- 業界トップの拡張性。柔軟性がある高度なキューを持ちます。
- サーバ ソフトウェアのフェイルオーバー。プライマリ ホストが障害を起こすと、セカンダリ サーバが実行中または待ち行列に入れられたユーザやジョブを介入なしに引き継ぎます。

トライアル版の PBS Professional を要求するには、以下の情報を記述して、sales@pbspro.com に電子メールを送る必要があります。

- 企業名
- お名前
- 住所
- 電子メール アドレス
- 必要な PBS ライセンス数 (CPU コアごとに 1 PBS ライセンスが必要であることに注意)

専用コード : 9t9TvPBP7i-5IL-PBP-Accelrys

既知の問題

Mesotek

Mesotek のユーザ インタフェースは Materials Studio のデフォルトのインストールには含まれていません。Mesotek は、モジュールを評価するお客様が利用できる Early Adopters Program の一部としてリリースされています。このため、お客様が少人数で密接に協力し、広範囲な系の計算をパラメータ化する方法の知識を向上することができます。

Mesotek Early Adopters Program を検討される方は、担当のアカウント マネージャまたは電子メール earlyadopters@accelrys.com へ連絡をしてください。

計算のファイル アクセス エラー (Windows)

計算によっては、エラー終了することがありました。多くの場合、「アクセス拒否 (Access denied)」または「ファイルにアクセスできませんでした (Could not access file)」などのエラーが発生します。このようなファイル アクセス エラーは、インストールされたアンチウイルス ソフトウェアによって発生する可能性があることが分かりました。この種のエラーが頻発する場合、ご使用のアンチウイルス ソフトウェアの設定値を調べる必要があります。

QSAR ジョブの実行中にスタディ テーブルに報告されたエラー

スタディ テーブルに "Save As" 操作を行った後に QSAR ジョブ を実行すると、スタディ テーブルのセルに偽りのエラーが報告される場合があります。報告されるエラーの詳細は、「この構造は SD file ファイルに出力できません... (The structure could not be output to the SD file...)」または「この構造を読み込めません... (The structure cannot be loaded...)」となる場合があります。"Save As" 操作の後にスタディ テーブルを閉じて再度開いてから QSAR ジョブをサブミットすると、これらのエラーは発生しません。他の方法として、"Save As" 操作ではなく Project Explorer を使用してスタディ テーブルの名前を変更すると、偽りのエラーを回避できます。

Accelrys サポートとの連絡

ヘルプまたは Web サイト <http://accelrys.com/products/materials-studio/> で本製品の問題が解決しない場合は、Accelrys Support に連絡をしてください。

Tel: 03-3578-3861

Fax: 03-3578-3873

E-mail: support-japan@accelrys.com

AccelrysとAccelrysロゴはAccelrys Software Inc.の登録商標です。

その他の企業名、製品名ならびにサービス名は各所有企業の商標あるいは登録商標です。