



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 4.4 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 4.4 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 4.4 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 4.4の新機能

新製品

Mesocite — Mesocite は、粗粒子ベースの古典的シミュレーションツールで、ポリマー、脂質、ならびにナノ構造物質のシミュレーションに適しております。Mesociteはビーズモデルに基づいて分子動力学や構造最適化計算ができます。Mesociteには生体分子系の粗粒子シミュレーションに適したMARTINI力場のMaterials Studio版が含まれています。Lennard-Jones、Morse、および Buckingham ポテンシャルのような関数系も Mesociteを用いた計算のために力場に加えられました。

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。

Nanotechnology Consortium —今回のリリースではナノテクノロジーコンソーシアムメンバーのために次の機能が加われました：タイトバインディング法モジュール DFTB+ のインターフェイス。このモジュールは量子力学計算において計算可能なモデルサイズと時間スケールを飛躍的に向上させることができます。QMERAのいくつかの機能増強で、これには周期系モデルへの対応や制約条件設定、および振動数計算が含まれます。ナノテクノロジーコンソーシアムに関する詳細情報は以下をご参照下さい。

<http://accelrys.com/innovation/consortia/nanotechnology/>.

Materials Studio モジュールの拡張項目

Forcite —Lennard-Jones、Buckingham、および Morse van der Waals ポテンシャルが編集可能になりました。

CASTEP —内殻励起スペクトルおよび electron localization function の計算/解析機能が加われました。また表面スラブモデルを用いての仕事関数が容易に計算できるようになりました。ハイブリッド functional の B3LYP が実装されました。擬ポテンシャルの on-the-fly 生成機能と LDA+U 計算機能が増強されました。

QMERA —UFF 力場が利用可能になりました。Mechanical additive embedding scheme が加われました。

VAMP —PM6ハミルトニアンが加わり、広範囲の元素に対応できるようになりました。

Gaussian Interface —途中まで生成された（あるいは不完全な）トラジェクトリファイルをインポートできるようになりました。

DMol³ — MIN、DN、DND、DNP、および TNP 基底関数が更新されました。これまでの基底関数も基底関数ファイル (ver.3.5) を選択することにより利用可能で下位互換性は保たれています。表面スラブモデルを用いての仕事関数計算機能が加われました。

ONETEP —表面スラブモデルを用いての仕事関数計算が加われました。

Materials Visualizer の拡張項目

Coarse Grainer —ビーズベースの粗粒子モデル。粗粒子は分子、表面、および3D周期系モデルに適用できます。カスタムビーズは、構造パターン、サブユニットおよびモーショングループを用いて定義することができます。

Core Holes —任意の原子において内殻空孔を生成することができます。これらは CASTEP の内殻励起スベ

クトル計算に用いられます。

Performance — ファイル数が多いプロジェクトを開く時間が短縮されました。

チュートリアルの新規作成と更新

Coarse-graining atoms to beads (Materials Visualizer)

粗視化ツールの使用方法を示しております。

Exploring the phase diagram of a polyisoprene/styrene diblock copolymer (Mesotek)

ジブロックコポリマーの異なるメソ相を計算するための Mesotek の使用方法を説明。

Simulating a nanocomposite using solid inclusions (Mesotek)

金属ナノ粒子を固体包有物として含んだナノ複合体ブロックコポリマーのシミュレーション。

Coarse-grained molecular dynamics of a lipid bilayer (Mesocite)

脂質2分子層の粗視化モデルの分子動力学計算。

Predicting the core level spectra of BN from first principles (CASTEP)

内殻励起スペクトルの第一原理シミュレーション。

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 XP Professional – SP3

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 XP Professional – SP3
- Windows Server 2008 (すべてのエディション)
- Red Hat Enterprise Linux WS、ES、AS - 4.7 および 5.2

キューイング システムは PBS Pro バージョン 9.2 および LSF 7.0 アップデート 3 で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 クライアントでは、以下のプラットフォームのサポートが中止されました。

- Windows 2000
- Windows XP Professional – SP2

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。

- Windows 2000 サーバ(すべてのエディション)
- Windows XP Professional – SP2

- Red Hat Enterprise Linux WS、ES、AS – 3.0、4.5 および 5.0

キューイング システムは Windows システム以外のPBS Pro バージョン 8.0 でサポートが中止されました。

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 1 GB に増加しました。

License Pack 7.6

このバージョンの Materials Studio は、Accelrys License Pack の最新バージョン 7.6 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

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 FLEXIm 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 4.4 オンライン ヘルプの「Installing a temporary license (一時ライセンスのインストール)」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 4.4 オンライン ヘルプの「Materials Visualizer auto trial licensing (Materials Visualizer 自動トライアル ライセンス)」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® 4 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)
- 1 GB 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 380 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 XP Professional – SP3
- 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® 4 または互換プロセッサ
- 512 MB RAM (1 GB を推奨)
- 1 GB 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 2003 Server のすべてのエディション - SP2 および R2
- Windows 2008 Server のすべてのエディション
- Windows XP Professional – SP3
- 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。

IA32 Linux

ハードウェアの最小構成

- 1 GHz 以上で動作する Intel® Pentium® 4 または互換 (x86、x86-64) プロセッサ
- 512 MB RAM
- 1 GB 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 – 4.6 および 4.7
 - o SuSE[®] Linux Enterprise Server - 9 (SP4) および 10 (SP1 および SP2)
- x86-64 (64 ビット)
 - o Red Hat Linux AS、ES、および WS - 4.6 および 4.7
 - o Red Hat Enterprise Linux - 5.1 および 5.2
 - o Red Hat Enterprise Linux Desktop – 5.1 および 5.2
 - o SuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP4) および 10 (SP1 および SP2)
- Itanium
 - o Red Hat Linux AS、WS – 4.6 および 4.7
 - o Red Hat Enterprise Linux - 5.1 および 5.2
 - o Red Hat Enterprise Linux Desktop – 5.1 および 5.2
 - o SuSE Linux Enterprise Server - 10 (SP1 および SP2)

x86-64 プロセッサの場合、Accelrys では Materials Studio 4.4 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 4.6 と 4.7、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、Mesotek、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 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 ファイルの「システム要件と推奨事項」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 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、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 ファイルの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 ファイルからインストール手順書の「Materials Studio の削除」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 Linux のオペレーティング システムで稼動する Altair® PBS Professional™ ワークロード管理システムをサポートしています。PBS Professional の製造元である Altair Engineering は、Materials Studio インストール CD-ROM に 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、Materials Studio のお客様には、PBS Professional を 特別割引価格で提供しています。

PBS Professional は、OpenPBS にある、Materials Studio がレポートした「稼働中にジョブが止まった」などを含む、いくつかのバグを修正している商用製品です。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。
- リソーススペースのスケジューリング - すべてのリソースが利用可能であるときに始められたジョブ。
- 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。
- 自動ジョブリカバリ - ネットワークのどこかで破壊的なジョブが起こった場合、時期変更します。

PBS Professional インストーラは Materials Studio インストール CD-ROM の /PBS Pro フォルダに含まれています。また、PBS Professional のクイックスタート、ユーザガイド、および管理者ガイドの PDF ファイルが含まれています。PBS Professional のトライアル版を使用するには、以下のパスワードが必要です。

パスワード : T-00128-09315-4033-rvRq2aZlnl-bDg-agt-Accelrys_SMF

PBS Professional のご購入希望の場合は、sales@pbspro.com にメールするか、または +1-248-614-2400 にお電話下さい。

既知の問題

Forcite 能勢サーモスタットデフォルト値

Materials Studio 4.3 での Forcite の能勢サーモスタットにおける有効緩和時間は小さすぎました。この結果、温度が指定された値に過度に積極的に維持されるようになり、非現実的なダイナミクスとなりました。有効緩和時間は Materials Studio 4.4 で更新されました。Materials Studio 4.3 で作成した既存のプロジェクトにおいて Materials Studio 4.3 を用いた場合の結果を再現したい場合は能勢のQ比に 10^{-6} のアジャストファクターを用いることで対応できます。ただし、NVT アンサンブルを用いる場合は更新されたQ比を用いることを強くお勧めします。平衡化の後、ユーザは温度ゆらぎがそのアンサンブルにおいてつじつまが合うことをチェックすべきです。

QSAR VAMP PM6 モデル

QSAR の計算を含む旧プロジェクトを開いた場合、VAMP PM6 モデルは見えません。旧プロジェクトにおいてこの新モデルを使いたい場合、以下のようにリネームする必要があります。

<Project Files> \Modules \Models \VAMPElectrostaticsModel.xmd

を

VAMPElectrostaticsModel_old.xmd.

へ。

Materials Studio を起動したとき新モジュールがプロジェクトに加わります。旧モデルからのセッティングを再利用したい場合、インポートモデルボタンをクリックし旧モデルを選択することによりこれらをQSAR モデルダイアログにインポートできます。

CASTEP 非局所交換相関汎関数を用いた計算

非局所交換相関汎関数（たとえばB3LYP やHF など）を用いた場合、フォノンや LDA+U を指定した計算はできません。

CASTEP

MS4.4 CASTEP を用いて LDA(GGA)+U 計算を実行した際、MS4.3 のときと同一の計算条件（MS4.3 で用いた入力ファイルを使用）で実行したにもかかわらず計算結果がMS4.3 のそれとは異なり、明らかに不合理な結果が得られるといった問題があることが分かりました。これは、各原子に関して初期スピンを明示的に指定しない場合は、Hund の規則から期待される電子配置に収束する仕様に変更した結果です。

そのため、MS4.4 を用いた LDA(GGA)+U 計算において、各原子に初期スピンを明示的に指定しないでMS4.3 と同等の結果を得るためには CASTEP のメインの入力ファイル seedname.param^(注)の任意の位置に次の行を加えて下さい。

```
devel_code : charge_jump_u=25
```

これによりMS4.3と同じ結果が得られることは弊社（日本法人）でも確認しております

DMol³

MS4.4 において構造最適化計算実行時における SCF 反復計算が発散する問題が見つかりました。この問題はエネルギー一点計算では生じません。また、構造最適化計算においても必ず発生するということではなく、発生する場合は、初期構造における SCF 反復計算の収束後、構造最適化の反復 2 回目の構造において SCF 反復計算が発散致します。この問題が発生する場合、回避のために DMol3 の入力ファイル (*.input) の任意の行に以下のキーワードを加えて下さい。

use_diis_restart off (デフォルトは on)

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。