

CASTEP

CASTEP は密度汎関数理論(DFT)に基づいた ab initio(第一原理)量子力学プログラムで、セラミック、半導体、金属などの幅広い材料区分に対して、固体、界面、および表面の特性をシミュレートします。第一原理計算を利用すると、研究者は実験に基づいたパラメータを入力しなくても、系の電子、光学、および構造の特性に関する本質と起源を調べることができます。このため CASTEP は、経験パラメータや、実験データに乏しい固体物理学、物質科学、および化学工学の分野で起こる課題の研究に非常に適しています。これらの分野では、コンピュータによるシミュレーションを行って仮想実験をすることができるため、実験のコストを大幅に削減し、開発サイクルの短縮を図ることができます。

CASTEP の機能

化学および物質科学分野の研究者は、数多くのやりがいのある仕事を担っています。たとえば、コンピュータチップの高速化を実現する半導体や丈夫な軽量合金などの、新しい化合物の開発があります。また、原子層堆積を利用する製造プロセスの改善が必要な場合があります。さらに、単に基本プロセスの理解と説明を行い、ある特定の物質が他の物質より優れている理由の説明に向き合っている場合もあります。モデル化は、その方法が高速で正確であり、原子スケールで機能する場合に、これらのすべての課題に対応することができます。CASTEP はまさにこのような手法です。

CASTEP は、英国ケンブリッジ大学の Theory of Condensed Matter Group でその初期バージョンが開発された、量子力学計算に基づいて化学および物質科学分野の研究を支援するプログラムです。研究機関や民間の多くのパートナーは、CASTEP には最新の技術が含まれ、前に説明した分野の研究者が直面するある種の課題に有効であることを確信しています。

CASTEP では、物質の構造や多くの基本特性を予測することができます。特に、電子特性(バンドギャップやショットキー障壁など)、光学特性(フォノン分散曲線、分極率、誘電率など)、または物理特性(弾性定数など)を予測することができます。in silico で新しい物質を速く正確に設計するために、すべてを1つのツールにまとめています。

主要機能の一つとして遷移状態の探索アルゴリズムがあります。このアルゴリズムを利用すると、反応の理解に必要な反応プロファイルおよびエネルギー障壁の決定に大いに役立ちます。周期的構造に対して、弾性係数の 6x6 のフルテンソルを予測できます。最近のフォノン振動の計算性能向上により、物質の自由エネルギーや熱容量など、熱力学特性の予測が可能になりました。さらに、固体系の熱力学的な予測能力により、構造的変化の相安定性など、多くの擬縮物質特性のシミュレーションを実行できます。

CASTEP は全エネルギー擬ポテンシャル法に基づいており、系に含まれる原子の数と種類しか入力する必要がなく、格子定数、分子構造、弾性定数、バンド構造、状態密度、電荷密度と波動関数、光学特性などの特性を予測します。CASTEP の基本となる擬ポテンシャル平面波法は非常に有効であり、毎年出版される何百もの科学的刊行物に、コードを用いた新しい研究成果が掲載されます。このコードの並列版は、数百原子からなる大規模系でも有効です。

CASTEP は、界面化学、物理吸着と化学吸着、不均一触媒作用、半導体の欠陥、粒界、積層欠陥、ナノテクノロジー、分子結晶、多形研究、拡散構造、液体の分子力学など、幅広い研究課題に適用されてきました。

MATERIALS STUDIO のメリット

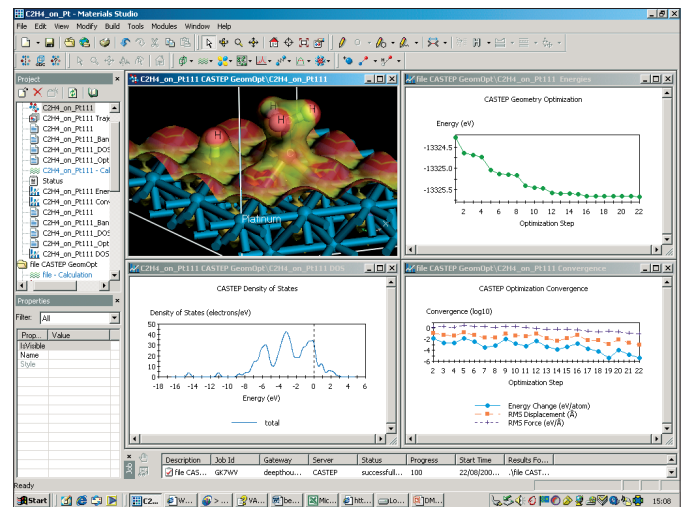
CASTEP は Materials Studio® のソフトウェア環境の一部です。Materials Studio は使い勝手の良いインタフェースを提供し、Windows® 規格に準拠しています。Materials Visualizer は Materials Studio の中核製品で、モデルの作成と表示を行う幅広いツールを提供します。このツールを使用すると、対象とする系のモデルを短期間に作成したり、CASTEP モジュールを容易に選択したり、高度な量子力学計算を実行することができます。Accelrys のトレーニング プログラムに加えて、扱いやすいユーザインタフェースにより、新しいユーザであっても自信を持ってこのプログラムを使用することができます。

クライアント/サーバ構造が柔軟であるため、ネットワーク上のどのサーバでも計算を行うことができます。計算結果を、使用するクライアント PC に転送して、そこで表示や解析をすることができます。幾何構造、分子軌道、静電ポテンシャル、または電荷密度の高品質な図を簡単に作成できます。CASTEP の出力から作成されるビデオクリップなどの構造、図、およびデータを、他の PC アプリケーションですぐに変換できるため、計算結果を同僚と共有したり、表計算ソフトなどを利用して分析するときに有効です。

CASTEP を有効に使用する方法

CASTEP¹⁻³ は、全エネルギーの平面波擬ポテンシャル法を採用しています。物質の数学的モデルでは、CASTEP は系の価電子にのみ作用する有効ポテンシャルで内殻電子を置き換えます。電子波動関数は平面波基底関数系によって展開されます。交換相関相互作用は、局所密度近似(LDA)または一般化勾配近似(GGA)のいずれかに含むことができます。擬ポテンシャルおよび平面波基底セットを組み合わせることで、分子、固体、表面、および界面の構造最適化を非常に効率的に行うことができます。CASTEP が強力であるのは、基本的な量子力学計算を解くために使用する数値計算が効率良く、かつ非常に精度の高いことが第一の理由です。

CASTEP は、線形応答理論としても知られる密度汎関数摂動論(DFPT)を使用して、多くの電子的および光学的特性の計算を行うことができます。この手法によって、いわゆる有限差分法(FD)を使用して計算可能となる特性よりも、さらにさまざまな特性を得ることができます。FD は、格子に微小変形を加えて計算を繰り返すことが必要になります。フォノン状態密度、フォノン分散、光学分極、IR スペクトル、誘電関数など、様々な物理量を予測することが可能です。



静電ポテンシャルを示す Pt(111)面のC2H4 吸収が、電子密度の等値面を示します。状態密度、全エネルギー、およびエネルギー収束のグラフも表示されます。

CASTEP の今後

ここ十年に渡り、QM 技術の物質科学への適用は、信じられないほどの進歩を遂げてきました。これらのコードは幅広く日常的に使用されており、何千の科学者のデスクトップ型 PC からアクセスできます。CASTEPは、研究者のこのグループの中で、独自の位置を占めています。CASTEP は業務に対応できるソフトウェアとして使用でき、幅広い科学者から支持を得ています。また、定期的にソフトウェア リリースを行ってその高品質を維持し、幅広いモデル構築およびシミュレーションツールとシームレスに統合が可能です。

特長と機能

計算処理

- 合計エネルギー、力、および圧力
- B3LYP を含む多くの交換相関汎関数
- 構造最適化(単位セル パラメータなど)
- NVE、NVT、NPH、および NPT 集団を使用する分子力学
- 線形および二次的同期トランジット法(LST/QST)に基づいた遷移状態探索
- 弾性定数
- 有限差分あるいは線形応答に基づいたフォノン振動数

一般的な機能

- 交換相関相互作用を近似する local、gradient-corrected、および screened-exchange functional の選択
- 周期表全体に対するウルトラソフトおよびノルム保存(型)擬ポテンシャル

ジョブ制御オプション

- 計算効率を最適化する並列化方式の選択
- CPU 数の選択
- サーバの指定
- 出力監視とステータスレポート(構造の最適化を行う際のエネルギーと傾きのテキストまたはグラフなど)
- モデルの構造とジョブのステータスをリアルタイムで更新
- Materials Visualizer からリモートサーバのジョブを中止

特性

- 光学特性: 周波数依存の誘電関数分極率、反射率、屈折率、UV スペクトルなど
- IR スペクトル
- EELS または XES のような内殻励起スペクトル
- 原子および結合の Mulliken population 分析
- 静的弾性定数
- フォノン分散
- バンド構造
- 全体および局所フォノン状態密度
- 準調和近似に基づいた熱力学特性(自由エネルギー、エンタルピー、エントロピー、熱容量、Debye 温度)

MS Visualizer を使用したグラフ表示

- 電荷、スピン、および変形密度
- 三次元等高線および二次元スライス
- シミュレートした走査型トンネル顕微鏡 (STM) イメージ
- 特性マップによる複数のプロットとカラー面のオーバーレイ

その他のオプション

- 実空間または逆格子空間の擬ポテンシャル表現
- 空間群の対称性の完全使用
- SCF収束の DIIS、density mixing、smearing、収束を速めるための複数のオプション

Materials Studioに関する詳細については、下記URLを参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>

参考文献

1. Milman, V., Winkler, V., White, J. A., Pickard, C. J., Payne, M. C., Akhmatkaya, E. V., and R. H. Nobes, *Int. Quant. Chem.*, **2000**, 77, 895.
2. Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A., and Joannopoulos, J. D., *Rev. Mod. Phys.*, **1992**, 64, 1045.
3. M. D. Segall, P. J. D. Lindan, M. J. Probert, C. J. Pickard, P. J. Hasnip, S. J. Clark, M. C. Payne, *J. Phys.: Cond. Matt.*, **2002**, 14, 2717.
4. Halgren, T. A. and Lipscomb, W. N., *Chem. Phys. Lett.*, **1997**, 49, 225.
5. Bell, S. and Crighton, J. S., *J. Chem. Phys.*, **1984**, 80, 2464.
6. Fischer, S. and Karplus, M., *Chem. Phys. Lett.*, **1992**, 194, 252.
7. N. Govind, M. Petersen, G. Fitzgerald, D. King-Smith, and J. Andzelm, *Computational Materials Science*, **2003**, 28, 250.