

DMOL³

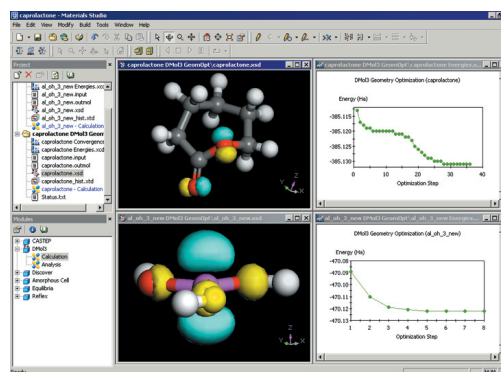
DMol³ は、密度汎関数理論 (DFT) に基づいて化学プロセスをシミュレートし、物質の特性を高速で正確に予測する、モデリングプログラムです。DMol³ は気相、溶液、および固体におけるプロセスの予測が可能であるため、化学、薬学、物質科学、化学工学、さらには固体物理学での課題の研究に幅広く応用できます。研究者は実験値に基づいたパラメータを用いなくとも、このプログラムを使用して、系の電子、光学、および構造の特性に関する本質と起源を調べることができます。DMol³ を使用して仮想実験を実施すると、実験のコストを大幅に削減し、開発サイクルの短縮を図ることが期待できます。

DMOL³ の機能

化学や物質科学の研究者は、数多くのやりがいのある仕事を担っています。たとえば、より効果的な触媒やより効き目の高い薬などの新しい化学物質の開発があります。また、より効率的な合成経路を特定することで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る場合に、これらすべての課題に対応することができます。DMol³ はまさにこのような手法です。

DMol³ は成功した商用アプリケーションとして長い実績を持つ DFT プログラムです。DMol³ では、Kohn-Sham 方程式を解くために独自の方式を採用しており、最も高速な手法の1つとなっています。原子が 500 を超える大規模系に対して特にその長がはつきりします。DMol³ は分子と固体の両方の課題をモデル化できるため、1つのパッケージで幅広い課題の研究をすることができます。この方法は、金属面の触媒のモデリングと同様に、小さい分子の立体配座分析によく適しています。

このプログラムは、調剤薬の発見などの分野ではリガンド結合のモデル化に、薬物開発では結晶多形体の理解に使用できます。DMol³ を使用



DMol³ で最適化された2つの構造体の最高被占分子軌道 (HOMO)と構造。上の構造体はカプロラクトンで、人工皮膚の生産時に使用されるモノマーです。下の構造体は Al(OH)₃ で、開環を開始できます。DMol³ は開環および重合の作用の予測に使用できます。

して、重合用に新しいメタロセン触媒を設計したり、支持された金属触媒の作用を理解したりします。DMol³ はバンドギャップの予測や新しい固体物質の設計にも使用できます。

DMol³ は、均一触媒、不均一触媒、半導体、分子反応、燃焼技術など、幅広い研究課題に適用されてきました。応用例としては、化学気相蒸着プロセスの研究、自動車触媒反応の理解、重合反応の仕組みの解明、極端な状況下での燃焼技術調査などがあります。

DMol³ が重視していることは、量子力学的精度を損なうことなく速度を上げることです。効率的な構造最適化アルゴリズムを使用すると、最小

エネルギー構造を短期間に予測することができます。遷移状態の調査に LST/QST アルゴリズムを組み合わせると、障壁エネルギーの評価が容易に行えます。DMol³ コードの並列版を適用すると、大きな課題に対応できます。

MATERIALS STUDIOのメリット

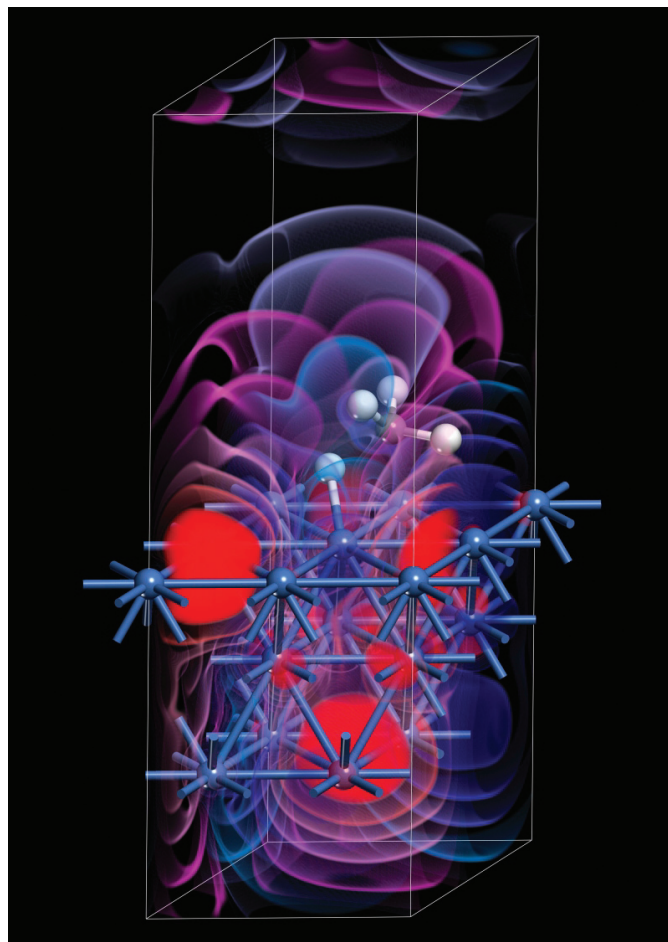
DMol³ は Materials Studio® ソフトウェア環境の一部です。Materials Studio は使い勝手の良いインタフェースを提供し、Windows® 規格に準拠しています。Materials Visualizer は Materials Studio の中核製品であり、モデルの作成と表示を行う幅広いツールを提供します。このツールを使用すると、対象とする系のモデルを短期間に作成したり、DMol³ を容易に選択したり、高度な量子力学計算を実行することができます。Accelrys のトレーニングプログラムに加えて、扱いやすいユーザ インタフェースによって、初心者ユーザであっても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/サーバー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。結果を使用する PC に転送して、そこで表示や分析を行ってもかまいません。分子および物質の構造、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。DMol³ 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 アプリケーションにすぐに変換できるため、同僚と共有したり、表計算ソフトなどを使用して分析するときに有効です。

表計算の設定を行うと、高いスループットでこの方法を適用でき、複数の繰り返し計算を簡単にを行い、その結果を表に格納できます。続いて統計分析では、新しい物質の設計や分子レベルの動作の説明に容易に利用できる構造と特性の隠れた関係を明らかにすることができます。

DMOL³を有効に使用する方法

DMol³ は、原子基底^{1,2} として原子を中心とするグリッド上に数値関数を使用することでその速度と精度を実現します。原子基底関数は、それぞれの原子に対する DFT 方程式を解くことで求められるため、かなり正確です。これらの基底関数セットの品質が高いため、基底関数重なり誤差の影響を最小限に抑え、分子分極率³ の記述を改善できます。



DMol³ で計算されたニッケル(III)面上のメタンの分離。最高被占分子軌道は、金属面に化学吸着された解離生成物とともに表示されます。

DMol³ の電子密度は、各原子に中心を持った部分密度の多重極展開により表現されます。コンパクトだが精度の高い密度表示が行えるため、系のサイズが大きくなっても十分に対応できます。その結果、クーロンポテンシャルの評価は系のサイズにリニアに増減します。Hamiltonian 行列要素は、リニアに増減する高度な数値積分法を使用して計算されます。

DMol³ のアルゴリズムは、数値積分法の非常に効率的な並列化に対応しています。

DMol³ は全電子と擬ポテンシャルの両方の計算を行うことができます。精度の高い、DFT Effective Core Potentials (ECP)^{5,6} またはより確立された semilocal pseudo-potentials (DSPP)⁴ を使用できます。

構造および遷移状態の最適化は、非局在化された内部座標を使用して、分子⁷ および周期⁸ 計算の両方に対して行われます。これには、内部座標軸で最適化を行う間に制約を設定する機能が含まれます。遷移状態の探索スキームは、従来の LST/QST 法⁹ の組み合わせを基本に開発されてきました。この新しい堅牢で高速なスキーム¹⁰ は遷移状態の高速な同定が可能です。

溶媒効果は、連続体をシミュレーションする COSMO モデルを使用することで得られます。特にこのモデルには、ポリマーの溶媒和または溶液の不均一触媒のモデル化が可能となる周期ケースが含まれます。

特長と機能

計算処理

- スピン制限および非制限 DFT 計算
- 構造最適化
- LST/QST/共役勾配法を組み合わせた遷移状態の探索
- 固有ベクトル追跡法 (eigenvector following) による遷移状態の最適化
- 反応経路の同定とグラフ表示
- 完全あるいは部分 (partial) Hessians を用いた振動数計算
- COSMO¹¹ による溶媒和

Functionals

- Local DFT functionals: PWC、VWN
- GGA-DFT functionals: PW91、BLYP、BP、BOP、PBE、VWN-BP、RPBE、および HCTH
- 高速計算のための Harris functional

基底関数セット

- 数値原子軌道(AO)基底セット: Minimal、DN、DND、DNP、および TNP
- 全電子またはコア ポテンシャル: 相対論的有効コア ポテンシャル、有効コア擬ポテンシャル、DFT semi-core 擬ポテンシャル
- スカラー相対論的なすべての電子計算

再開始およびジョブ制御のオプション

- 並列計算のための CPU 数の選択
- 計算サーバの指定
- 出力モニタリングとステータス レポート (構造の最適化を行う際のエネルギーや原子間力のテキストまたはグラフなど)
- 構造のリアルタイム更新
- Materials Visualizer からリモートサーバのジョブを中止

特性

- Mulliken、Hirshfeld、および静電ポテンシャル電荷
- 静電モーメント
- Fukui 指数
- Nuclear electric field gradients
- 結合次数解析
- 生成熱、自由エネルギー、エンタルピー、エントロピー、熱容量、零点振動

Materials Studio Visualizer を使用したグラフ表示

- 分子軌道、電荷、スピン、および変形密度
- Fukui 関数
- 三次元等高線および二次元スライス
- 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
- 通常モードの動画

その他のオプション

- 多重 k 点
- 実空間とカットオフ
- 点群と空間群の完全対称性
- 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. B. Delley, J. Chem. Phys., 1990, 92, 508; *ibid.*, 1991, 94, 7245; *ibid.*, 2000, 7756.
2. B. Delley, J. Phys. Chem., 1996, 100, 6107.
3. N. Matsuzawa, J. Seto, and D. A. Dixon, J. Phys. Chem. A, 1997, 101, 9391.
4. B. Delley, Phys. Rev. B. 2002, 66, 155125.
5. M. Dolg, U. Wedig, H. Stoll, and H. Preuss, J. Chem Phys., 1987, 86, 866.
6. A. Bergner, M. Dolg, W. Kuechle, H. Stoll, and H. Preuss, Mol. Phys., 1993, 80, 1431.
7. J. Baker, A. Kessi, and B. Delley, J. Chem. Phys., 1996, 105, 192.
8. J. Andzelm, R. D. King-Smith, and G. Fitzgerald, Chem. Phys. Lett., 2001, 355, 321.
9. T. A. Halgren and W. N. Lipscomb, Chem. Phys. Lett., 1977, 49, 225.
10. N. Govind, M. Petersen, G. Fitzgerald, D. King-Smith, and J. Andzelm, Computational Materials Science, 2003, 28, 250.
11. B. Delley, Molecular Simulation, 2006, 32, 117.