

MATERIALS STUDIO GAUSSIAN INTERFACE

Materials Studio® Gaussian Interface® は、Gaussian の多様な ab initio 法 (Hartree-Fock、密度汎関数理論 (DFT)、ならびに MP2、CCSD、G3 のような高度な電子相関法など) にアクセスするための直感的に理解容易なグラフィカルユーザインタフェース (GUI) です。このインタフェースを使用すると、Gaussian の計算条件設定や結果の可視化表示が簡単にできる上に、Gaussian の ab initio プログラムと、Materials Studio のモデリング シミュレーション環境内のプログラム (力場プログラム・半経験的プログラム・統計的プログラム) との間で分子構造およびプロパティデータ (原子電荷やヘッセ行列を含む) に関して互換性を持たせることが可能になりました。このような機能を使ってユーザーはモデリングワークフローを合理化し拡張することができます。

GAUSSIAN—高速な近似計算から高度な精密計算まで実現する量子力学 (QM) 法

化学、製薬、材料科学の分野で活躍している研究者には、多くの難しい目標が課せられています。それはより効率的な触媒の開発であるとか、製造プロセスの向上であるとか、あるいは単純に分子、反応、素過程についてより深く理解することでもあり得ます。モデリングを使用してこれらの難しい課題に取り組むには、高速な近似法から高度な高精度な計算法まで、一定の幅でのアプローチが必要となります。

Gaussian を使用すると、ab initio の幅広い機能が提供され、効率的で信頼性のある計算が可能になります。つまり、計算コストを掛けて結果の正確さをできる限り追求するアプローチと、コンピュータの性能に見合った概算結果で妥協するアプローチの二者択一を迫られるジレンマは解消され、ユーザーの目標達成に一役買うことになるでしょう。

Gaussian, Inc. の Web サイト (www.gaussian.com/home.htm) には次のように記載されています。「量子力学の基本原則から始めて、Gaussian は、

エネルギー、分子構造、分子構造の振動数を予測します。また、これらの基本的な計算タイプから導かれる数多くの分子特性も予測します。これらの情報は、短命な中間体や遷移状態構造など、実験では観察が難しい、または観察不可能な安定化学種や安定化合物の両方を含む、幅広い条件下での分子や反応の研究に使用することができます。」

使いやすいインタフェースによるワークフローの効率化

Gaussian Interface は、結晶構造、結晶化プロセス、ポリマー特性、触媒作用、構造活性相関など、化学薬品や物質を研究するためのモデリングおよびシミュレーションツールセットである Materials Studio ソフトウェア環境の一部となっています。Materials Studio のツールはすべて、Windows® の標準操作に則った、直感的に使いやすいインタフェースを経由してアクセスすることができます。したがって、初めて操作するユーザーでも自信を持ってプログラムを使用することができます。たとえば、Materials Studio のコア製品である Materials Visualizer が提供するさま

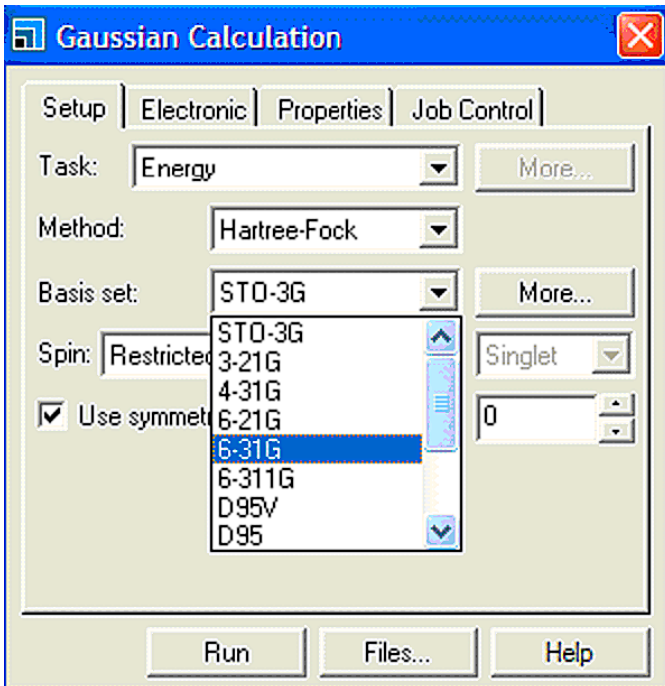


図 1: 多数の入力パラメーターの指定が可能な、Materials Studio Gaussian Interface の「Setup」タブ。この例では、さまざまな基底関数が表示されています。

さまざまなモデル構築および視覚化ツールによって、研究対象のモデル系を迅速に構築し、高度な量子化学計算を簡単に実行することができます。構造体の構築または解読後は、図 1 および図 2 のような使いやすいダイアログから、理論レベル、基底関数、収束オプションを設定することができます。

解析能力の向上と高品質なグラフィック

Materials Studio の柔軟なクライアント - サーバーアーキテクチャーでは、ネットワーク上のどのサーバー上でも計算が実行できます。計算結果は使用している PC に自動的に転送され、この PC 上で表示したり解析したりすることができます。図 3 で説明されているように、分子構造、分子軌道、静電ポテンシャル、または電荷密度の高品質なグラフィックを簡単に作成することができます。Gaussian Interface によって生成された構造、グラフ、その他のデータは、即座に他の PC アプリケーションに受け渡すことができ、結果を同僚と共有したり、スプレッドシートやその他のソフトを使用して分析したりすることができます。ファイルの手渡し、デカルト座標の編集、コマンドラインからの実行という時代は終わったのです。

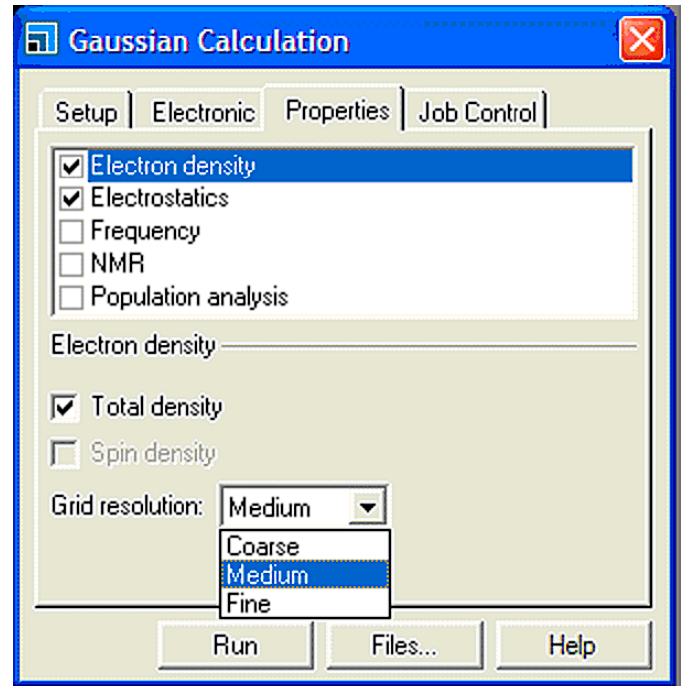


図 2: Materials Studio Gaussian Interface による、電子密度などのさまざまな数値的および 3 次元立体特性の容易な設定。この例は、3 次元立体表示のレンダリングに使用する解像度の設定方法を表したものです。

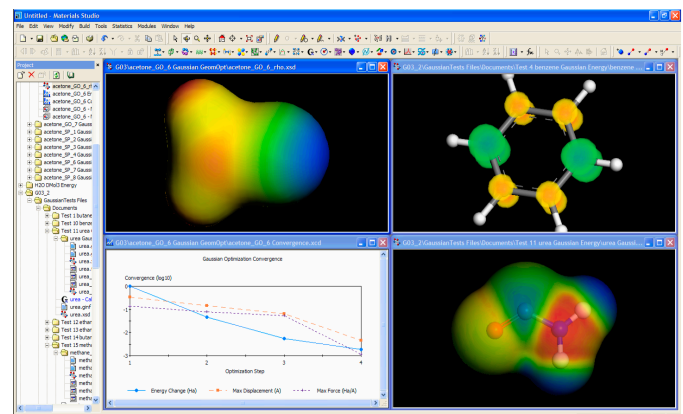


図 3: Materials Studio Gaussian Interface による 3 次元立体表示。左上から時計回りに、1) 静電ポテンシャルで色分けされた H₂CO の電荷密度、2) ベンゼンの LUMO、3) 静電ポテンシャルで色分けされた H₂NCO の半透明な電荷密度、4) 構造最適化に対するエネルギーおよび力の収束のグラフ

QM を超えるモデリングプロジェクト

Gaussian Interface は Materials Studio 環境に完全に統合されたコンポーネントであることから、Gaussian プログラムとその他の Materials Studio モジュール間でデータを交換することができます。これにより、単一のユーザー インターフェイスを使用して、力場、半経験的、ab initio、統計のメソッドが組み

込まれた、洗練されたモデリングプロジェクトを実行することが可能になります。たとえば、Gaussian で原子電荷を計算し、Materials Studio COMPASS などの力場に割り当て、Materials Studio Polymorph Predictor で有機結晶の構造を探索することができます。

GAUSSIAN とアクセルリスの相乗効果

Gaussian Interfaceは、Gaussian とアクセルリスの協業による成果物です。強力で柔軟な Gaussian 03 プログラムは Gaussian, Inc. から入手可能ですが、アクセルリスでは Materials Studio のモデリングおよびシミュレーション環境の一部として、このグラフィック・ユーザー・インタフェースを提供しています。

GAUSSIAN INTERFACE で使用可能な GAUSSIAN の機能

以下に示されているとおり、数多くの Gaussian の機能を Gaussian Interface 経由で使用することができます。Gaussian サーバープログラム機能の完全なリストについては、Gaussian, Inc. の Web サイト (www.gaussian.com) をご覧ください。

計算タスク

- エネルギー一点計算
- 構造最適化

メソッド

- DFT (including SVWN, x-Alpha, BLYP, B3LYP, B3PW91, PBE, PBE, BB95, BP86)
- MP2, MP4, CID, CISD, QCISD, QCISD(T), CCD, CCSD, CCSD(T), BD, BD(T), G1, G2, G3, CBS-4M, CBS-QB3

基底関数

- Split valence: STO-3G, 3-21G, 4-31G, 6-21G, 6-31G, 6-311G
- Huzinaga-Dunning: D95 D95V
- Correlation consistent: cc-pVDZ, cc-pVTZ, cc-pVQZ, cc-pV5Z, cc-pV6Z
- diffuse および分極関数

ジョブ制御オプション

- サーバマシンの指定
- Materials Visualizer からの、リモートサーバー上のジョブの停止
- 入力ファイルの自動アップロードおよび出力ファイルの自動ダウンロード

プロパティ

- 電子密度
- 静電
- 振動数
- NMR 分子磁化率およびスピン-スピン結合
- ポピュレーション解析

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/>