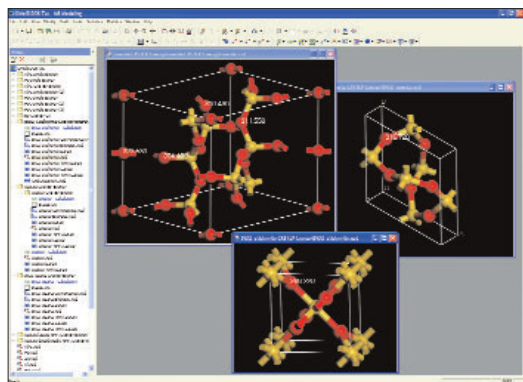


MS-NMR CASTEP

NMR CASTEP

NMR CASTEPは分子や固体材料において重要な磁気共鳴特性を第一原理に基づいて予測します。NMR CASTEPを用いれば、NMRの化学シフトや電場勾配テンソルを密度汎関数理論(DFT)に基づき、かつてない精度で計算することができます。この手法は有機分子からセラミック、半導体に至るまでのあらゆる材料において、分子/固体/界面/表面のNMRシフトの計算に適用可能です。第一原理計算を活用すれば、実験値等の経験的パラメータを必要とせずに系の磁気共鳴特性の本質や起源を研究することが可能です。ゆえにNMR CASTEPは、コンピューターシミュレーションを活用した仮想実験によって、実験的なNMR技術を単独で活用した場合と比較して格段に大きな利益が得られるような分野、例えば固体物理、物質科学、化学の分野における課題の研究に大きな威力を発揮します。



原子のNMR化学シフトは分子と固体、いずれの状態に関しても予測可能です。この例は、 SiO_2 の3つの異なる構造(quartz, coesite, stishovite)における ^{17}O シフトを示しています。

NMR CASTEPは何をするのか?

NMR CASTEPは、NMR化学シフトテンソル、等方性シフト、ならびに電場勾配を、あらゆる材料において高い信頼性をもって予測可能なツールを提供します。例えば、相対的等方性シフトならわずか数ppmのオーダーで予測可能です。

Cambridge大学およびParis et Marie Curie大学で開発されたこのNMR CASTEPは、分子系および周期系の双方に適用できる初のabinitioNMRメソッドです。この手法は有機分子、有機結晶、無機結晶、そしてアモルファス化合物のいずれに対しても適用可能でMR化学シフトを予測できます。相対論的な影響を組み込んだことにより、重元素を含む系においてさえも正確な結果を得ることが可能となっています。

NMRIは構造予測を支援する分析ツールとしてしばしば利用されています。固体状態では比較的複雑な構造をとるため、このような構造の予測は困難を極めます。結晶構造の一般的な特徴が解明されている場合においてさえ、幾何構造の詳細な分析は解釈しにくいということが数多くあります。NMR CASTEPを用いれば、一連の関連構造に対して計算上の結果と実測上の結果が一致するまでNMRスペクトルをシミュレーションすることが可能です。このようにして理論は実験を補足し、かつ構造決定に貢献いたします。

計算された化学シフトを用いて、実測されたNMRスペクトルの帰属が可能です。NMR CASTEPの正確な計算値と実測値を比較すれば、化学シフトの元素への明確な帰属、結晶多形体の識別、放射性崩壊により構造欠損を生じる鉱物結晶(メタミクト材料)における不規則度の度合いの分析等が可能となります。

NMR CASTEPは二十面体型 B_4C の構造決定、ゼオライト中の ^{17}O の化学シフトの帰属、多形グルタミン酸の比較、 ^{29}Si のNMRスペクトルの分析による非周期的 ZrSiO_4 の構造分析など、あらゆる領域の課題の研究に活用されてきました。 ^{77}Se や ^{125}Te に関する研究成果もすでに公開されています。より詳細な適用事例については、アクセルリスのホームページをご参照下さい。

MATERIALS STUDIOの利点

NMR CASTEPはMaterial Studio MS Modelingソフトウェア環境内で使用されます。MS ModelingはWindows®標準の使い勝手が良く習得し易いインターフェースを提供します。MS Modelingの中核であるMaterials Visualizerは、Windows 2000もしくはXP上で作動し、モデル構築および視覚化のあらゆるツールを提供します。関心の対象である系について速やかにモデルを構築し、NMRモジュールを選択し、先進の量子力学シミュレーションを実行することが可能です。

クライアント・サーバーには柔軟性があるので、Windows 2000もしくはXP、Red Hat Linux(Intel)、SGI Irix、HP Tru64等、ネットワーク上あらゆる所に存在するサーバー上で計算を実行することが可能です。計算結果はPCへ自動的に戻され、そこで表示や解析が可能です。分子構造、材料構造、分子軌道、静電ポテンシャル、電荷密度等の高品質画像を容易に作成することが可能です。

NMR CASTEPからの出力は直ちにMS Modelingユーザーのインターフェースに表示することができますので、これらの情報を同僚と共有することにより、結果の解析効率向上に貢献することが期待できます。

NMR CASTEPはどのように機能するのか?

NMR CASTEPはCASTEP¹⁻³密度汎関数プログラムの枠組みに基づいて実装されました。CASTEPは平面波一疑ポテンシャル法を使用しています。疑ポテンシャルと平面波の一連の原理を組み合わせることにより、原子に作用する力の計算が非常に容易になります。これにより分子/固体/表面/界面のイオン配置の効率的な最適化を実現します。CASTEPがこれほどまでに有効なツールとなり得た最大の理由は、電子状態を決定する方程式を解く数値計算方法の効率性と正確さにあります。

NMR CASTEPはGIPAW法⁴(gauge-included projector augmented-wave)に基づいて磁場存在下の波動関数を算出します。GIPAW法は局在基底によるアプローチ⁵を用いるGIAO法に類似したもので、磁場存在下における並進不変性を保持するためには不可欠です。

化学シフトテンソル σ は、外部磁場 B_{ext} と核において誘発された磁場 B_{in} の比、つまり $B_{\text{in}} = -\sigma B_{\text{ext}}$ で定義されます。NMRCASTEPは密度汎関数摂動理論⁴により σ を計算します。相対論的効果⁶を組み込むことにより、このメソッドはTeのような重元素に対しても正確な結果が得られています。等方性化学シフトとは単に σ のトレース(対角和)であり、これらはMS Modelingユーザー・インターフェース上に表示することが可能です。

特徴および性能

性能

- 化学シフトテンソル、等方性化学シフト、電場勾配の計算
- 一般的な同位体に対しては核四重極モーメントがデフォルトで設定されています。新規な核を研究する際には、インターフェースにおいてデフォルト値を変更することが可能です。
- 等方性シフトおよび電場勾配の視覚化
- NMR CASTEPはCASTEP DFTプログラムに基づいています。CASTEPの性能に関する全記述は www.accelrys.com/mtstudio/ms_modeling/castep.html をご参照下さい。

システム要件

NMR CASTEPはWindows 2000もしくはXP上のMaterials Studio®ソフトウェア環境下で作動するMS Modelingの製品です。計算はWindows 2000、XP、SGI Irix、RedHat Linux (Intel)、もしくはHP Tru64オペレーティングシステム上のNMR CASTEPサーバーにおいて実行されます。ハードウェアおよびオペレーティングシステムの構成の詳細については、www.accelrys.com/mtstudio/sys_reqs.html をご参照下さい。

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. V.Milman, B.Winkler, J.A.White, C.J.Pickard, M.C.Payne, E.V.Akhmatskaya, and R.H.Nobes, *Int.J.Quant.Chem.* **77** (2000) 895.
2. M.C.Payne, M.P.Teter, D.C.Allan, T.A.Arias, and J.D.Joannopoulos, *Rev.Mod.Phys.* **64** (1992) 1045.
3. M.D.Segall, P.J.D.Lindan, M.J.Probert, C.J.Pickard, P.J.Hasnip, S.J.Clark, and M.C.Payne, *J.Phys.:Cond.Matt.*, **14** (2002) 2719.
4. C.J.Pickard and F.Mauri, *Phys.Rev.B* **63** (2001) 245101.
5. J.L.Dodds, R.McWeeny, and A.J.Sadlej, *Mol.Phys.* **41** (1980) 1419; K.Wolinski, J.F.Hilton, and P.Pulay, *J.Am.Chem.Soc.* **112** (1990) 8251.
6. J.R.Yates, C.J.Pickard, M.C.Payne, and F.Mauri, *J.Chem.Phys.* **118** (2003) 5746.