

ONETEP

ONETEP は、大規模系(原子数 500 以上)の計算用に特に設計された、量子力学ベースの革新的なプログラムです。蛋白質-リガンド複合体、結晶粒界、ナノクラスタなどの系において密度汎関数理論(DFT)による計算精度を実現します。過去には、このような系は精度の低い近似法によってしか処理できませんでした。ONETEP は総合的な Materials Studio® ソフトウェア環境の一部であるため、対象とする系の解明にさらに役立つ高機能なモデリングおよび分析ツールで補完することができます。

概要

化学、薬学、および物質科学の研究者は、新しい化合物の開発や製造プロセスの改善など、数多くのやりがいのある目標に立ち向かう場合があります。研究者は、ナノテクノロジー分野の課題など、より高度な課題を扱うため、大規模な分子モデルを使用して、量子力学的精度と信頼性が得られる計算を実行する必要があります。

これまで、大規模モデルは難問と見なされてきました。計算にかかるコストが高すぎて、第一原理計算では研究することができないためです。その結果、ハードウェアとソフトウェアの制限により、研究者は妥協した判断を余儀なくされてきました。量子力学的な結果を得るために現実的ではない小さいモデルを使用するか、現実的なサイズのモデルではあるが近似計算しか行えない、かのいずれかを判断する必要がありました。

現在では、ONETEP で大規模系に対して量子力学的な精度が実現できるため、このような妥協をする必要はありません。

ONETEP は線形スケールリング法(オーダー N 法、O(N)法)であるため、計算に必要な時間は原子の数でリニアに増えます。この独自のスケールリングの結果、これまでより大規模な系のモデル化に使用できます。

ONETEP を使用した第一原理量子力学計算の代表的な適用例には、以下の研究があります。

- 表面化学
- 大規模分子系の構造特性
- 蛋白質-リガンド複合体の自由エネルギー
- ナノチューブの構造およびエネルギー論
- 半導体およびセラミック材の欠陥特性(空孔、格子、代替不純物、粒界、転位など)

ONETEP のメリットーリニアスケールリング

図1で示す例のように、ONETEP の主要な利点はそのリニアスケールリング性です。すなわち、全エネルギーの計算に必要な時間が、原子数に関してリニアに増加します。リニアスケールリング法は従来の DFT に比べて格段に進歩を遂げています。従来の方法では、計算に必要な時間は N^3 (N は原子の合計数) に比例して増加します。

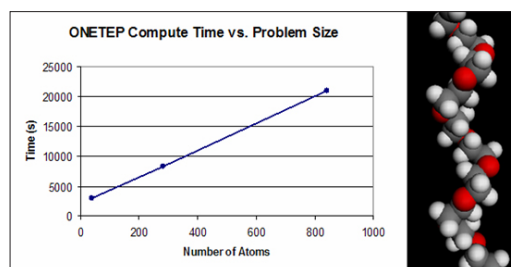


図 1: ポリエチレン オキシド(PEO)ポリマー鎖の合計エネルギー計算での、ONETEP のリニアスケールリング性。16 台のデュアルコア 2.8 GHz プロセッサ(1 MB キャッシュ、プロセッサあたり 8 GB)で計算を実行しました。

ONETEP は、超並列コンピュータ(プロセッサを何百台まで拡大)でも非常に効率的に実行できます。結果的に、Materials Studio の ONETEP モジュールを使用すると、非常に大規模な系(数千原子系)の DFT 計算を行うことができます。

ONETEPの主要な用途

絶縁体、半導体、ガラス、およびゼオライト

ONETEP では電子密度の局在性を利用しているため、絶縁体または半導体のシミュレーションに主要な用途があります。大きな単位格子を適切に記述することが必要な非晶質ガラス面やゼオライトにも ONETEP が最適です。

触媒

ONETEP は触媒の分野にも適用されます。触媒作用の担持体の影響を調査するために使用できます。アクティブなナノクラスターと一緒に担持体をモデル化するには、何百、何千もの原子が必要です。このため、計算に量子力学的作用を考慮したい場合、ONETEP などのリニアスケール DFT コードが必須です。

ナノテクノロジー

ONETEP は、ナノテクノロジーのモデリングの分野で新しい可能を開きます。例えば、センサーに応用するためのカーボン ナノチューブの電子状態研究に使用できます。特にバイオセンサーの開発に応用できます。多くの場合、バイオセンサーは、金属ナノワイヤーとそれに付着する抗体で構成されます。これらの抗体は特定の蛋白質を選択します。蛋白質の反応性を理解するには量子力学的計算が必要であり、大規模な系であるためにリニアスケールコードが必須です。

工業材料

ONETEP では重要な工業用途の材料の電子状態を解明することもできます。例えば、図2 で示すシリコンのスーパーセルの例のように、ONETEP では欠陥、破碎、およびドーパントをモデル化することができます。これらの材料の特性をより理解すると、最終製品の性能の向上に寄与することができます。実験に加えてこの種のモデリングを行うと、実験単独より低コストで成果を挙げる事が実証されました。

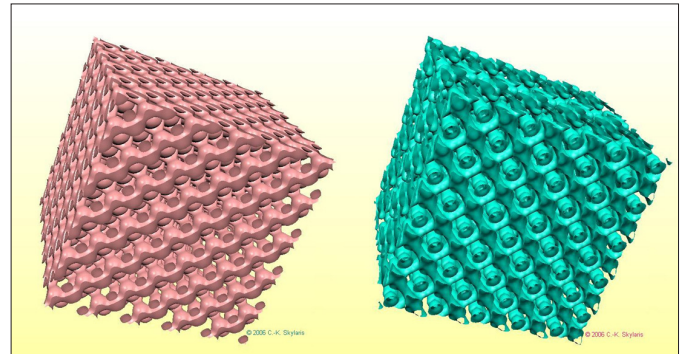


図2: 1000 の原子を含むシリコンのスーパーセルの最高被占軌道(右)および最低空軌道(左)。このような大きな構造を調べる機能は、低濃度で欠陥、破碎、およびドーパントをモデル化する上で重要です。

ONETEP の有効利用法

ONETEP は密度行列法に基づいた DFT を実装しています。密度行列は絶縁体に指数関数的に局在化された量であり、その対角線要素は電子電荷密度に等しくなります。密度行列の要素が空間的に局在化されているため、分子軌道が分子全体に非局在化された従来の DFT プログラムに比べて、ONETEP では小サイズの対角化計算を数多く実行します。

ONETEP では密度行列は非直交一般化 Wannier 関数 (NGWF) という、局在化関数の基本セットで表現されます。この関数にはメリットが 2 点あります。初めに、NGWF の数を増やして精度の高い完全な基本セットを簡単に提供することができます。次に NGWF はかなり局在化できるため、可能な限り計算作業を減らすことができます。線形スケールは、NGWF の局在性の直接の帰結です。

ONETEP が実行できる計算の種類

Materials Studio の ONETEP モジュールを使用すると、DFT を利用して大規模系で第一原理量子力学計算を実行できます。現在 ONETEP では、以下の異なる 3 つの計算を行えます。

- 単一点のエネルギー計算
- 構造最適化
- 遷移状態探索

これらの各計算では、指定された化学および物理特性(特に以下の特性)が得られるように、設定することができます。

- 電子密度
- 静電ポテンシャル
- Mulliken 電荷
- Mulliken スピン
- 結合電子数
- 状態密度(DOS)
- 分子軌道(MO)

MATERIALS STUDIO のメリット – ONETEP を補完するツール

ONETEP は、モデリング シミュレーションのソフトウェア環境を提供する総合的な Materials Studio の一部です。Materials Studio は Windows® 基準に準拠する使い勝手の良いインターフェースを提供しています。このため、さまざまなトレーニング オプションを合わせて活用することで、Materials Studio を容易に習得でき、自身を持って適用することができます。さらに、Materials Studio では、ONETEP の補完に使用できる豊富なモデリングおよびシミュレーション ツールを提供します。

たとえば Materials Visualize(r Materials Studio の中核製品)では、対象とする系のモデルを構築できる幅広いモデルの作成および表示ツールを提供します。特に、ナノチューブビルダはナノテクノロジーの研究者にはメリットがあり、ナノチューブの単層、多層、および束を作成でき、さらに球体、四面体などの形状を作成することができます。Materials Visualizer から ONETEP を容易に選択して、高度な量子力学計算を実行できます。

Materials Studio では ONETEP を補完する分析ツールも提供しています。例えばポピュレーション解析の制御を行うと Mulliken 分析から得られた電荷、スピン、および結合次数を ONETEP の計算で得られた最終構造に割り当てることができます。一方、他のツールを使用すると分子軌道の 3D レンダリングを表示できます。

さらに、柔軟なクライアント/サーバ構造であるため、企業の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 に送信して、そこで表示や分析を行ってもかまいません。分子や物質の構造や分子軌道の高品質な図を簡単に作成できます。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、同僚と共有したり、表計算ソフトなどで分析するときに有効です。

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/>