

QMERA

QMERA は、密度汎関数理論 (DFT) に基づく量子力学計算の精度と、分子力学計算の速さを兼ね備えた、効率的なシミュレーションを可能にするモジュールです。QMERA では量子力学計算 (QM) と、分子力学計算 (MM) を合わせた手法を使うので、大規模なモデルに対し、高精度な計算を短時間で行うことが可能になります。この手法は、活性部位が化学的に局在しているようなモデル、例えば化学反応性の問題などに対して特に適しており、ナノチューブやナノクラスタ、非晶質体におけるこのような問題にも活用することができます。QMERA をコンピュータ上の仮想実験として使用すれば、コストのかかる実験を大幅に削減し、開発サイクルの短縮を図ることができます。QMERA は Materials Studio® (MS) の統合環境の一部であるため、対象とする系の解明をさらに進める場合、他の高機能なモジュールや分析ツールを使用することもできます。

概要

ナノテクノロジー、薬品、石油化学、触媒、ファインケミカルと特殊化学品などの分野において、多くの原子を持つ系の化学的性質を理解することは、製品とプロセスの改善のために非常に重要です。たとえば触媒の分野では、金属表面の特定部位あるいはゼオライトの細孔で、反応がどのように進むかを理解することが重要です。同様に薬物の開発では、薬物の代謝につながる反応経路を理解することが重要になります。これらの種類の系(反応性に影響を与えることができる多くの原子で囲まれた局所的な活性部位を持つ系)は、QM/MM のハイブリッド法を使用した QMERA の最適な適用分野と言えます。この方法は量子力学の精度と力場計算の速さを兼ね備えています。

QMERA のメリット - ハイブリッド QM/MM

Materials Studio の QMERA モジュールでは、MS DMol³ の DFT 計算と MS GULP² の力場計算を組み合わせることでシミュレーションを行います。

QMERA では、何百、何千の原子からなる、以下のような系のモデリングに使用できます。

- 有機分子
- ポリマー
- 有機金属
- 酸化金属クラスタ
- ナノチューブ
- ナノクラスタ

また、以下のようなさまざまな物性の予測に使用できます。

- 構造
- 反応熱力学
- 反応速度
- 電子物性

DMOL³: DFT 計算プログラム

Materials Studio DMol³ は優れた商用アプリケーションとして長い実績を持つ DFT 計算プログラムです。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、数ある DFT 計算プログラムの中でも最も高速な手法の1つとなっています。大規模系に対して特にその特長が明確に現れます。

GULP: 力場計算プログラム

Materials Studio GULP は、無機物質と有機物質の両方に対し、幅広い力場を実装しています。ポテンシャルモデルには、シェルモデル、埋め込み原子法 (EAM、金属向け)、結合次数、反応力場などがあります。GULP では、DFT 計算には含まれないファンデルワールス相互作用も計算に含まれ、いくつかの反応 (ゼオライトなど) ではこれが重要になることから、そのような系においては、純粋な DFT 計算の結果を改善する場合があります。

QMERA の主要な用途

不均一触媒および均一触媒

QMERA を使用すると、不均一触媒および均一触媒の反応を非常に速く、しかも信頼性の高い計算でスクリーニングすることができます。これは DFT 計算を系の一部だけに使用して計算するためです。QMERA で構造最適化を完全に行うために必要な時間は、純粋な DFT 計算で同じ計算に必要な時間の約 1/8 です。さらに、QMERA で計算される反応エネルギーの精度は純粋な DFT 計算の結果とほぼ同等です。

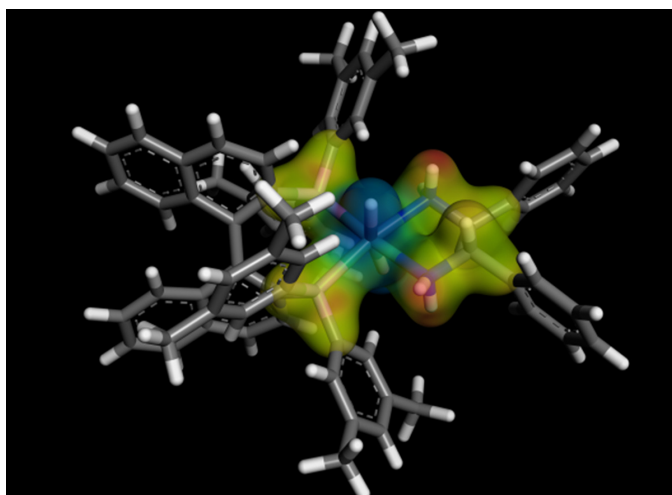


図 1: QMERA で計算した Ru(H)₂ (ジホスフィン) (ジアミン) 複合体。QMERA では、この系を効率良く計算できます。ごくわずかな原子だけを量子力学で処理するため、高速かつ正確な計算ができます。

候補物質の仮想的スクリーニング

QMERA は、候補物質の仮想的なスクリーニング実験を行うときに使用できます。この高速な QM/MM のハイブリッド法を使用すると、候補物質を高速にスクリーニングして実際に実験すべき主要な候補だけを挙げることができます。このため、可能性のあるすべての候補に対して実験を行うのに比べ、低コストで必要な情報を得ることができます。QMERA は以下の処理に使用できます。

- 複数の試薬のスクリーニング
- 合成経路の改良の提案
- 触媒作用に対するさまざまな組成のナノクラスタの試験
- カーボンナノチューブの複数の欠陥部位の精査(図2を参照)

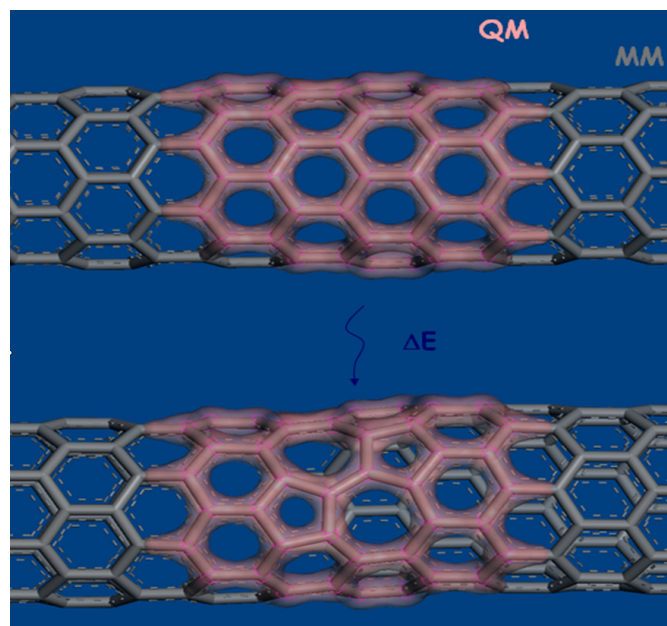


図 2: QMERA を使用した、カーボン ナノチューブにおける Stone-Wales 欠陥形成エネルギーの調査

QMERA を有効に使用する方法

QMERA は、ChemShell 環境を利用することで、ハイブリッド QM/MM 計算を非周期系で実行できるプログラムです。³ ChemShell は、ハイブリッド QM/MM 計算のデータ処理とプログラム間の通信用に Tcl インタプリタを採用した計算化学環境です。時間のかかるエネルギー評価は MS DMol³ と MS GULP のような専用の外部コードに任せます。

ハイブリッド QM/MM 計算における重要な点は、系を以下の 2 つの部分に分けることです。

- 中央の“化学的に活性な” QM 領域
- 周辺の“外部” MM 領域

系の“化学的に活性な”部分のみを量子力学で処理することにより、最小限の計算資源で電子構造とその変化 (たとえば、化学反応の結合破壊と結合生成) について計算することができます。系の残りの部分は分子力学を使用して表現され、2 つの部分は互いに影響を与えます。この QM 法 (重要な反応部で使用) の多様性および正確さと、MM 法 (系の大部分で使用) の速度と効率性を組み合わせる方法は、大規模系の反応を調べる場合

に、単独で QM または MM のどちらかを使用する場合に比べ、より現実的な方法と言えます。

QMERa は QM/MM の連動を処理するために、機械的および電子的な埋め込みスキーム (Embedding scheme) を提供します。QM と MM 領域間のダングリング ボンドは、水素原子で終端されるため (Link atom)、どのような種類の化学結合でも処理ができます。QMERa では、構造最適化および遷移状態の最適化を、線形スケールリングの非局在座標アルゴリズムを含む、幅広い最適化アルゴリズムを使用して実行できます。

QMERa が実行できる計算の種類

Materials Studio の QMERa モジュールでは、DFT と力場を使用してハイブリッド計算を行うことができます。QMERa では、現在以下の異なる3つの計算を行うことができます。

- 一点エネルギー計算
- 構造最適化
- 遷移状態の最適化

これらの各計算では、あらかじめ指定することにより、以下の化学および物理特性を計算できます。

- 原子のポピュレーション解析 (Hirshfeld, Mulliken ESP 電荷)
- 基準振動解析
- 分子軌道 (MO)
- 電荷密度
- 静電ポテンシャル

GULP で利用可能な力場とポテンシャルの完全なリストは、Materials Studio GULP のホームページから入手できます。

MATERIALS STUDIO のメリット-QMERa を補完するツール

QMERa は Materials Studio 統合ソフトウェア環境の一部です。Materials Studio は Windows 上で動作し、非常に使いやすいインタフェースを提供しています。このため、簡単な基礎トレーニングを受講していただくだけで、容易に習得でき、自身を持って使用していただくことが可能です。さらに Materials Studio では、QMERa の補完に使用できる豊富なモデリング・シミュレーションツールを提供します。

たとえば、Materials Visualize (Materials Studio のコア製品) 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と表示ツールを提供し、容易に QM 領域を選択して、QM/MM 計算を実行できます。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、単層、多層ナノチューブ、およびその束を作成できます。また、ナノクラスタビルダでは結晶構造から球体、四面体などの形状を切り出す方法でナノクラスタを作成することができます。

Materials Studio は QMERa を補完する分析ツールも提供しています。たとえば、ポピュレーション解析の結果から電荷、スピン、および結合次数をモデル中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、電荷密度、静電ポテンシャルの 3D 表示が可能です。

さらに、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。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。構造、グラフ、ビデオクリップなどのその他のデータを、簡単に他の PC アプリケーション用に変換できるため、他の研究者と共有したり、表計算ソフトなどを使って結果を分析したりすることも容易に行うことができます。

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/>

参考文献

1. Accelrys Materials Studio DMol³ module. Find details at: <http://www.accelrys.com/products/materials-studio/modules/dmol3.html>
2. Accelrys Materials Studio GULP module. Find details at: <http://www.accelrys.com/products/materials-studio/modules/GULP.html>
3. P. Sherwood, A. H. de Vries, M. F. Guest, G. Schreckenbach, C. R. A. Catlow, S. A. French, A. A. Sokol, S. T. Bromley, W. Thiel, A. J. Turner, S. Billeter, F. Terstegen, S. Thiel, J. Kendrick, S. C. Rogers, J. Casci, M. Watson, F. King, E. Karlsen, M. Sjøvoll, A. Fahmi, A. Schäfer and Ch. Lennartz. J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 2003, 632, 1.