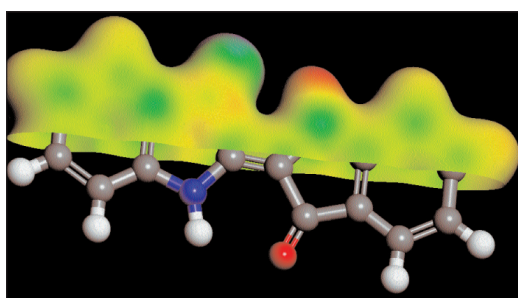


MS-VAMP

VAMPは有機ならびに無機分子を対象とした半経験的分子軌道法に基づいたプログラムです。VAMPは力場と第一原理(abinitio)との中間的な役割を果たす理想的なモジュールで、多種の物理的・化学的性質を素早く計算することができます。VAMPは非常に速く数値的に安定しているため、ほとんどの計算をPCと対話形式で実行できます。

VAMPは、MINDO/3[1]、MNDO[2]、AM1[3]ならびにPM3[4]の半経験的軌道分子軌道法を用いて、様々な分野の研究者を対象に、速くかつ信頼できる計算を大きな系に対して実行可能にしました。

構造最適化、遷移状態の探索、ならびに多くの物理的・化学的性質の計算がVAMPによって実行できます。研究者は、DFT計算を行う前に安定状態および遷移状態の良い初期構造を得ることができます。DFT計算で最適化された構造を用いてプロパティ計算やスペクトル、ならびにポテンシャルエネルギーのスキャンと反応経路等を素早く計算することができます。また、モノマーやオリゴマーの最適化、分子動力学計算、UV/Visスペクトル計算、力場のパラメータを得るためのポテンシャルエネルギー面、力場が適用できない時のIRスペクトル計算等がVAMPで行えます。



インディゴ色素は電子密度上にマッピングされた静電ポテンシャルでisosurface部分を示している。(VAMPによって計算された分子静電ポテンシャルおよび全電子密度)

- VAMPは、NAO-PC(Natural Atomic Orbital/Point Charge)モデルに基づいて分子の静電的性質の計算ができます。正確な双極子、四重極子、およびそれ以上の多重極子と質の高い分子の静電ポテンシャル(MEPs)を他の同等な方法と比較して何倍も速く計算できます。

NAO-PCは、標準的な半経験的方法のMNDO、AM1とPM3に利用できます。NAO-PCによる分配多重極子解析は、通常のポピュレーション解析より正確な分子の電子状態がわかります。MNDO、AM1あるいはPM3に基づいた分子四重極子計算は、少なくともMP2/6-31G*レベルでのab initio計算と同じ精度で実験値と比較できます。

- VAMPは、他の半経験的プログラムでは安定構造を探すことができない系に対しても首尾よく構造最適化計算ができます。またプログラムは、固有ベクトル追跡法(eigenvector following)とパウエル法(Powell's method)の二つの遷移状態最適化法を有しています。
- VAMPは、基底状態および励起状態のためのSCRf(Self-Consistent Reaction Field)計算と基底状態のためのCOSMO(Conductor-like Screening Model)で溶媒効果のシミュレーションを行います。SCRf計算は、Tomasiによる数値計算法に溶媒を除外した空洞境界を用いて行います。
- VAMPは、ESRにおける水素の超微細結合定数と¹³C化学シフトの両方を計算できる唯一のプログラムです。現在の精度は(実験値との標準偏差)ESR結合定数で約0.5Gauss、¹³C化学シフトで6-8ppmです。
- VAMPは、イオン化ポテンシャル、多重極モーメント、正確な分子分極率、原子分極率、並びにポテンシャルから導出した電荷等の様々な分子的性質や、PropGenおよびProphetによって計算するための基礎的な出力が可能です。

特徴および機能(Features and Capabilities)

*印でマークされている物は現在GUIでアクセスできません。入力ファイルを変更することによってアクセスできます。

1. 計算タスク

- Open-and Closed-shell Hartee-Fockmethods : Restricted (RHF), Unrestricted (UHF) and spin-Annihilated Unrestricted Hartee-Fock, (A-UHF)
- 構造最適化
- 遷移状態とその最適化
- 振動数計算
- 溶媒効果: Self-consistent Reaction Field¹(SCRF) and COnductor-likeScreening MOdel(COSMO).
- CI 計算: Full, CIS, CISD and PECL.

2. Hamiltonians

- MNDO[H, Li Be, B, C, N, O, F, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ga, Zn, Ge, Br, Sn, I, Hg, Pb]
- MNDO/C[H, C, N, O]
- AM1[H, B, C, N, O, F, Al, Si, P, S, Cl, Zn, Ge, Br, Sn, I, Hg]
- PM3[H, Li Be, B, C, N, O, F, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ga, Ge, As, Se, Br, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Tl, Pb, Bi]

3. Job コントロールオプション

VAMPのジョブはサーバー上においてバックグラウンドで実行することも、PC上において対話的に実行することも可能です。

4. 性質

- 電子密度
- 分子軌道(canonical), or Localized orbitals
- 静電ポテンシャル
- 原子電荷: NAO-PC, Coulson and Mulliken.
- 分子と原子多極子
- Static first order polarizabilities(*)
- 水素のESP超微細結合定数(*)
- ¹³C NMR シフト
- 光学スペクトル(*)
- 生成熱、エントロピーと熱容量

5. VAMPでの計算結果の解析

- 3次元表示: total electronic density, spin density, electrostatic potential, molecular orbitals, localized orbitals.
- 熱力学性質(enthalpy, entropy and heat capacity).
- Atomic charges and bond orders

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/>