

BIOVIA MATERIALS STUDIO CASTEP

データシート

CASTEPは密度汎関数理論 (DFT) に基づいた *ab initio* (第一原理) 量子力学プログラムです。セラミックス、半導体、金属などの幅広い材料に対して、それらの固体、界面、および表面などでの特性を計算します。第一原理計算を利用すると、研究者は実験に基づいたパラメータを入力しなくても、系の電子的、光学的、および構造の特性に関する本質と起源を調べることができます。このためCASTEPは、固体物理学、材料科学、および化学工学の分野で起こる経験パラメータや実験データに乏しい課題の研究に非常に適しています。これらの分野では、コンピュータによるシミュレーションを行って仮想実験をすることができるため、実験のコストを大幅に削減し、開発サイクルの短縮を図ることができます。

CASTEPの概要

化学および材料科学分野の研究者は、数多くのやりがいのある課題に取り組んでいます。たとえば、コンピュータチップの高速化を実現する半導体や丈夫な軽量合金などの、新しい化合物の開発があります。また、原子層堆積を利用する製造プロセスの改善が必要な場合があります。さらに、ある特定の材料が他の材料より優れている理由を明らかにする必要があります。原子レベルでの材料のモデリングは、高速かつ高精度な計算手法が利用できる場合には、これらのすべての課題に対応することができます。CASTEPはまさにこのようなプログラムです。

CASTEPは、英国ケンブリッジ大学の物性理論グループでその初期バージョンが開発された、量子力学計算に基づいて化学および材料科学分野の研究を支援するプログラムです。CASTEPを使うと、材料の構造や多くの基本特性を予測することができます。特に、電子的特性 (バンドギャップやショットキー障壁など)、光学的特性 (フォノン分散曲線、分極率、誘電率など)、または力学的特性 (弾性定数など) を予測することができます。シミュレーションで新しい物質を短時間で精度良く設計するために、すべてを1つのツールにまとめています。

主要機能の一つとしてLST/QST法に基づく遷移状態探索があります。このアルゴリズムを利用すると、反応の理解に必要な反応経路および活性化エネルギーの決定に大いに役立ちます。周期的構造に対して、弾性スティフネステンソルを予測できます。フォノン計算により、材料の自由エネルギーや熱容量などの熱力学特性の予測が可能です。さらに、固体の相変化による構造安定性など、多くの凝集系の特性のシミュレーションを実行できます。

CASTEPは擬ポテンシャル平面波法に基づいており、系に含まれる元素の位置と種類のみを入力すれば、格子定数、分子構造、弾性定数、バンド構造、状態密度、電子密度と波動関数、光学的特性などの特性を予測します。CASTEPの基礎となる擬ポテンシャル平面波法は非常に有効であり、毎年出版される何百もの学術誌に、CASTEPを用いた新しい研究成果

が掲載されています。並列化効率にも優れているため、数百原子からなる大規模系でも有効です。

CASTEPは、界面化学、物理吸着と化学吸着、不均一触媒作用、半導体の欠陥、粒界、積層欠陥、ナノテクノロジー、分子結晶、結晶多形、拡散構造、液体の分子力学など、幅広い研究課題に適用されてきました。

BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット

CASTEPはBIOVIA Materials Studio®のソフトウェア環境の一部です。BIOVIA Materials Studioは使い勝手の良いインタフェースを提供し、Windows®規格に準拠しています。Materials VisualizerはBIOVIA Materials Studioの中核製品で、モデルの作成と表示を行う幅広いツールを提供します。このツールを使用すると、対象とする系のモデルを簡単に作成したり、CASTEPの計算の設定を選択したり、高度な量子力学計算を実行することができます。BIOVIAのトレーニングプログラムに加えて、扱いやすいユーザーインタフェースにより、新しいユーザーであっても自信を持ってこのプログラムを使用することができます。

クライアント・サーバー構造が柔軟であるため、ネットワーク上のどのサーバーでも計算を行うことができます。計算結果を、使用するクライアントPCに転送して、そこで表示や解析をすることができます。結晶構造、分子軌道、静電ポテンシャル、または電子密度の高品質な図を簡単に作成できます。CASTEPの出力から作成される構造のビデオクリップ、図、およびデータを、他のアプリケーションですぐに変換できるように、計算結果を同僚と共有したり、表計算ソフトなどを利用して分析するときにも有効です。

CASTEPの有用性

CASTEP¹⁻³は、擬ポテンシャル平面波法を採用しています。擬ポテンシャル法では、系の内殻電子を価電子にのみ作用する有効ポテンシャルで置き換えます。1電子波動関数は平面波基底関数系によって展開されます。交換相関相互作用は、局所密度近似 (LDA) または一般化勾配近似 (GGA) などで近似できます。擬ポテンシャルおよび平面波基底を組み合わせることで、分子、固体、表面、および界面の構造最適化を非常に効率的に行うことができます。CASTEPが強力であるのは、基本的な量子力学計算を解くために使用する数値計算が効率良く、かつ非常に精度の高いことが第一の理由です。

CASTEPは、線形応答理論としても知られる密度汎関数摂動論 (DFPT) を使用して、多くの電子的および光学的特性の計算を行うことができます。この手法によって、有限差分法 (FD) よりも効率的にさまざまな特性を得ることができます。

フォノン状態密度、フォノン分散、分極率、IRおよびラマンスペクトル、誘電関数などのさまざまな物性を予測することが可能です。

