

# BIOVIA MATERIALS STUDIO

## DMol<sup>3</sup>

### データシート

DMol<sup>3</sup>は、密度汎関数理論 (DFT) に基づいて、材料の特性を高速かつ正確に予測する、第一原理計算プログラムです。DMol<sup>3</sup>は気相、溶液、表面、および固体に適用可能であるため、化学、薬学、材料科学、化学工学、さらには固体物理学での課題の研究に幅広く応用できます。実験値に基づいたパラメータを必要とせず、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。DMol<sup>3</sup>を使用して仮想実験を実施すると、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期待できます。

#### DMol<sup>3</sup>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、より効果的な触媒やより効き目の高い薬などの新しい材料の開発があります。また、より効率的な合成経路を特定することで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る場合もあります。DMol<sup>3</sup>は、これらのすべての課題に対応することができます。

DMol<sup>3</sup>は成功した商用アプリケーションとして長い実績を持つ第一原理計算プログラムです。DMol<sup>3</sup>では、独自のアルゴリズムを採用しており、最も高速なプログラムの1つです。500原子を超える大規模系に対して特にその長がはつきりします。DMol<sup>3</sup>は分子と固体の両方を取り扱えるため、

幅広い課題の研究をすることができ、金属面の触媒反応や、小さい分子の立体配座分析にも最適です。

DMol<sup>3</sup>は、薬品開発ではリガンド結合や結晶多形の理解に使用できます。DMol<sup>3</sup>を使用して、重合のために新しいメタロセン触媒を設計したり、担持された金属触媒の作用を解析できます。また、バンドギャップの予測や新しい固体材料の設計にも使用できます。

DMol<sup>3</sup>は、均一触媒、不均一触媒、半導体、分子反応、燃焼技術など、幅広い研究課題に適用されてきました。応用例としては、化学気相蒸着プロセスの研究、自動車触媒反応の理解、重合反応の仕組みの解明、極端な状況下での燃焼技術調査などがあります。

#### BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット

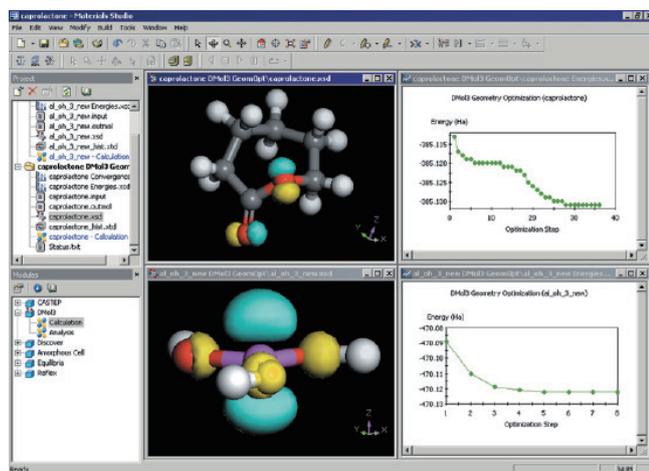
DMol<sup>3</sup>はBIOVIA Materials Studio®のソフトウェア環境の一部です。BIOVIA Materials Studioは使い勝手の良いインターフェースを提供し、Windows®規格に準拠しています。Materials VisualizerはBIOVIA Materials Studioの中核製品で、モデルの作成と表示を行う幅広いツールを提供します。このツールを使用すると、対象とする系のモデルを簡単に作成したり、DMol<sup>3</sup>の計算の設定を選択したり、高度な量子力学計算を実行することができます。BIOVIAのトレーニングプログラムに加えて、扱いやすいユーザーインターフェースにより、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。DMol<sup>3</sup>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ため、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。

#### DMol<sup>3</sup>の効率性

DMol<sup>3</sup>は、数値基底関数として、原子を中心とするグリッド上での原子軌道の重ね合わせで1電子軌道を表現することでその速度と精度を実現します<sup>1,2</sup>。原子軌道は、それぞれの孤立原子に対するKohn-Sham方程式を解くことで求めます。原子軌道を基底関数とすることにより、基底関数重なり誤差の影響を最小限に抑えられます。

DMol<sup>3</sup>は、各原子を中心とする部分密度の多重極展開で電子密度を表現します。効率よく高精度に密度を表現できるため、大規模な系にも十分に対応できます。DMol<sup>3</sup>の数値積分のアルゴリズムは、非常に効率的に並列化されています。また、全電子と擬ポテンシャルの計算を行うことができます。従来のEffective Core Potentials (ECP)<sup>3,4</sup>、または精度の高いDFT Semi-core Pseudopotentials (DSPP)<sup>5</sup>を使用できます。



DMol<sup>3</sup>で最適化された2つの分子の最高占有分子軌道 (HOMO)。上の分子はカプロラクトンで、人工皮膚の生産時に使用されるモノマーです。下の分子はAl(OH)<sub>3</sub>で、カプロラク톤を開環できます。DMol<sup>3</sup>は開環および重合作の予測に使用できます。

