

# ONETEP

## データシート

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BIOVIA 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性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生じます。

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法の結果、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法

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法です。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。

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、BIOVIA 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。

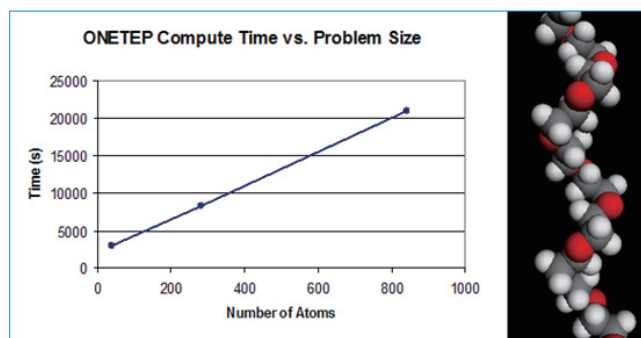


図1: ポリエチレン オキシド (PEO) ポリマー鎖の合計エネルギー計算での、ONETEP のリニアスケール法性。16台のデュアルコア2.8 GHzプロセッサ (1MBキャッシュ、プロセッサあたり8GB) で計算を実行しました。

### 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法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性を開きます。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法コードが必須です。

