

QMERA

データシート

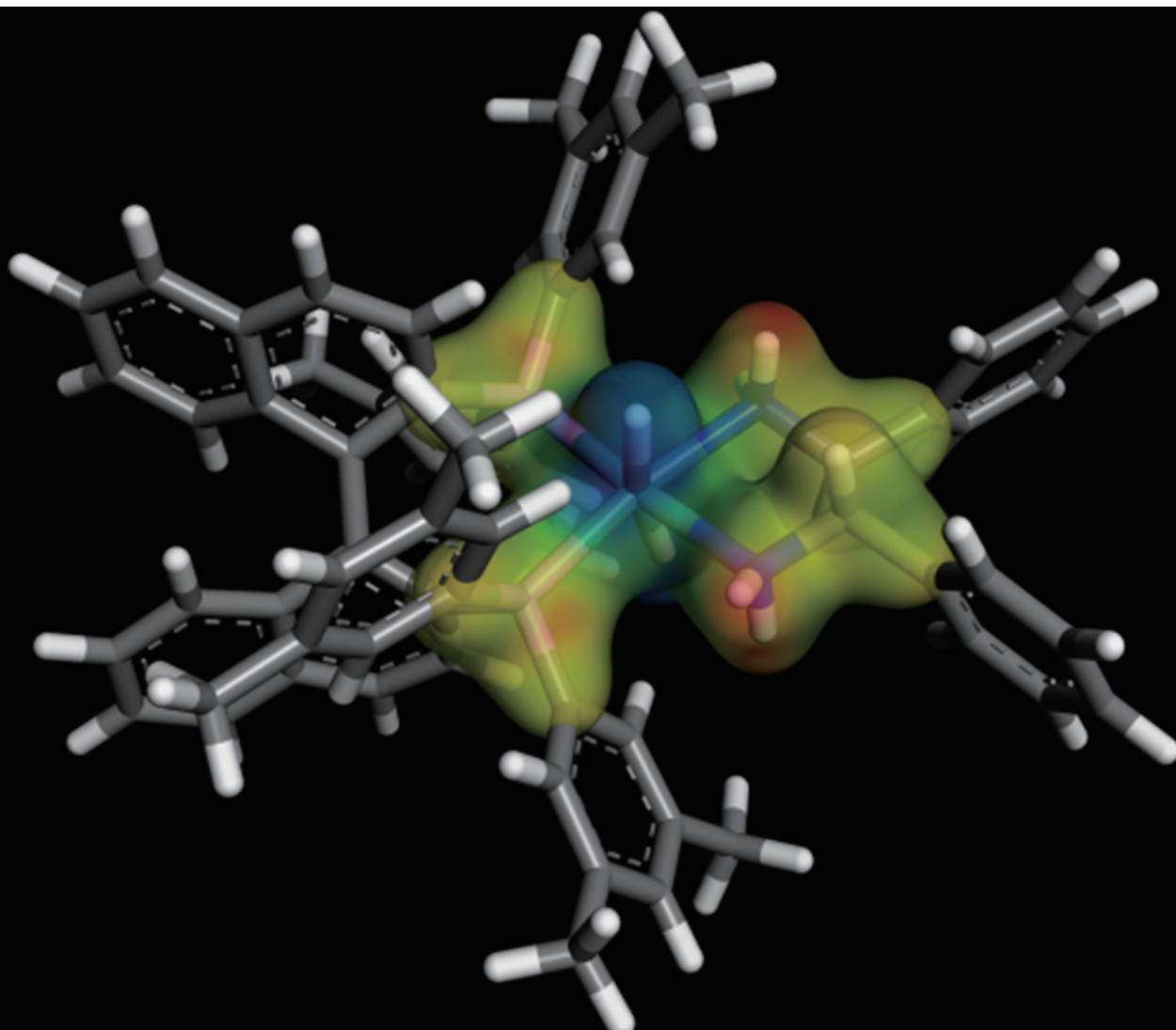


図 1: QMERAで計算した
Ru(H)₂ (ジホスフィン) (ジアミン)
複合体。ごくわずかな原子だけを
量子力学で処理するため、高速
かつ正確な計算ができます。

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BIOVIA Materials Studio®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、ファインケミカルおよび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

BIOVIA Materials StudioのQMERAモジュールでは、MSDMol³のDFT計算とMSGULP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。^{1,2} 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

BIOVIA 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

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、原子挿入法(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ですみます。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。

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することができます。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)

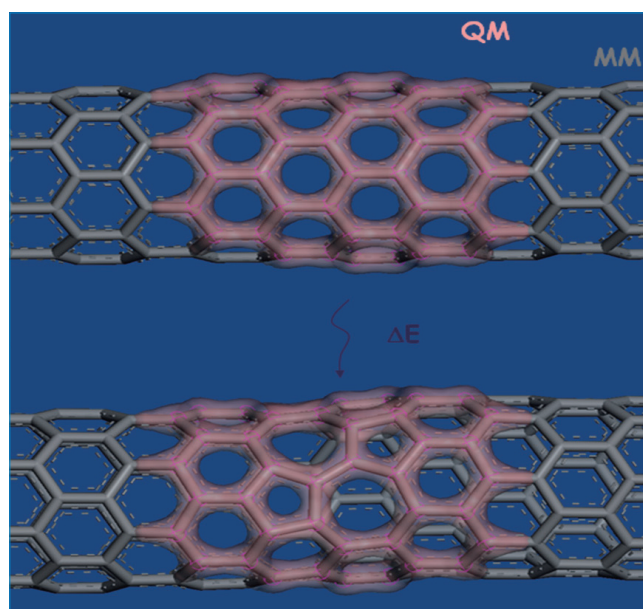


図2: QMERAを使用した、カーボンナノチューブにおけるStone-Wales欠陥形成エネルギーの調査

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。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³。時間のかかるエネルギー評価はMS DMol³とMSGULP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。

QMER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(Embeddingscheme)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(Linkatom)、どのような種類の化学結合でも処理ができます。QMERでは、構造最適化および遷移状態の最適化を、線形スケ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。

QMERが実行できる計算の種類

BIOVIA Materials StudioのQMER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。QMER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。

- エネルギー一点計算
- 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, MullikenESP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、GULPのホームページ(<http://nanchemistry.curtin.edu.au/gulp>)から入手できます。

BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット—QMERを補完するツール

QMERはBIOVIA Materials Studio統合ソフトウェア環境の一部です。BIOVIA Materials StudioはWindows上で動作し、非常に使いやすいインター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BIOVIA Materials Studioでは、QMER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 Visualizer (MaterialsStudio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。

BIOVIA Materials StudioはQMER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、ネットワーク上のサーバでも計算を行うことができます。使用するPCに結果を送信して、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。

BIOVIA 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.com.jp/products/materials-studio/>

参考文献

Accelrys BIOVIA Materials Studio DMol1. 3 module. Find details at:

<http://www.accelrys.com/products/materials-studio/modules/dmol3.html>

Accelrys BIOVIA Materials Studio GULP module. Find details at:

2. <http://www.accelrys.com/products/materials-studio/modules/GULP.html>

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. 3. Turner, S. Billeter, F. Terstegen, S. Thiel, J. Kendrick, S. C. Rogers, J. Casci, M. Watson, F. King, E. Karlsen, M. Sjøvøll, A. Fahmi, R. Schäfer and Ch. Lennartz. J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 2003, 632, 1.

©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALERD, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および 3DEXPERIENCE はアメリカ合衆国、またはその他の国における、Dassault Systèmes またはその子会社の登録商標または商標です。Dassault Systèmes またはその子会社の商標を使用する際には、書面による許可の承認が必要です。

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語)をご参照ください。



3DEXPERIENCE®