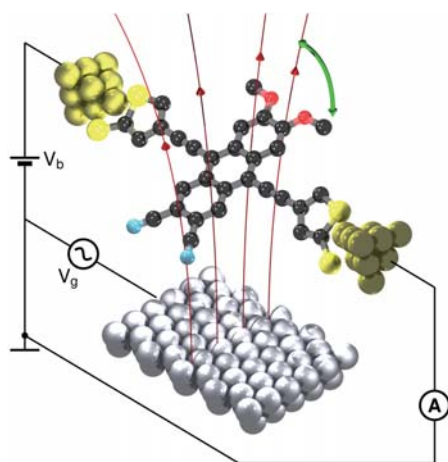


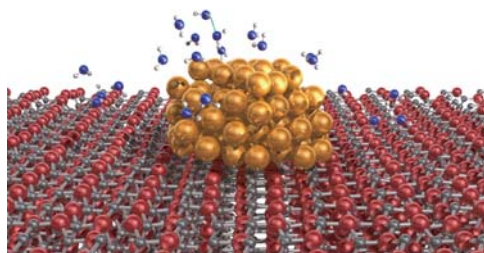
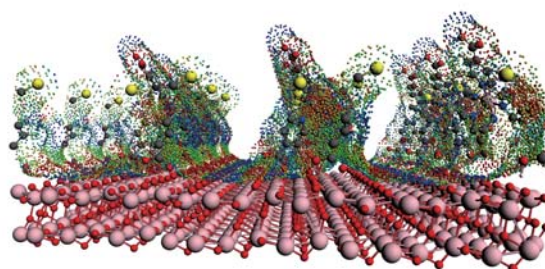
量子化学計算ソフトウェア

ADF2012.01リリース



ADF2012.01 では、分子系のプログラムにおいて、周辺環境の効果を考慮できる計算機能が大幅に拡張されています。non-self-consistent Green's function 法の採用により、二つの電極に挟まれた単一分子のバリスティック伝導の計算が可能になりました。また、SCRf 法の拡張により溶媒効果を 3 層モデルで取り入れることが可能になり、溶液中のタンパク質環境などが再現できるようになりました。

周期系のプログラムでは、格子ベクトルの最適化計算やフォノン分散スペクトルの計算が可能になりました。また、スピン軌道相互作用を考慮した計算や溶媒効果を取り扱うための COSMO 法の計算コストが大幅に削減されており、各種高速化が達成されています。



今回、新製品としてリリースする高速 tight binding DFT 計算プログラム「DFTB」のほか、MOPAC, ReaxFF, COSMO-RS モジュールについても多くの機能追加・改良がなされています。

詳細については 2, 3 ページをご覧ください。

Contents

新製品情報

量子化学計算ソフトウェア	ADF2012.01 リリース	2
詳細化学反応解析支援ソフトウェア	CHEMKIN-PRO 新バージョンリリース	4
化学データ可視化・解析ソフトウェア	CIMPL 2.03 リリース	5
電子ノートブック	E-WorkBook Suite 新バージョンリリース予定	6
遺伝子ネットワーク解析ソフトウェア	新商品 Partek Pathway 発表	7

技術情報

統合計算化学システム	MOE: 3D-RISM 法による溶媒解析の応用事例	8
技術計算プログラム開発環境	Wolfram Mathematica8 によるアプリケーション開発	10

セミナー情報

計算化学セミナー	計算化学セミナー「熱力学物性予測の最先端」	11
体験&紹介セミナー	製品紹介セミナーの案内	12

量子化学計算ソフトウェア

ADF2012.01リリース

Scientific Computing & Modelling社製 ADF (Amsterdam Density Functional Software)の新バージョン ADF2012.01がリリースされました。新バージョンでは、分子系では開設分子のゼロ磁場分裂や常磁性NMR化学シフトなど磁気物性関連の機能が強化されたことに加え、non-self-consistent Green's function法の搭載やSCRf法の機能が拡張されるなど、これまでは取り扱えなかった複雑な周辺環境を考慮した計算が可能になっています。また、周期系では格子ベクトルの最適化計算やフォノン分散スペクトル、調和振動子近似に基づく熱力学物性の計算ができるようになりました。今回新製品としてリリースする高速tight binding DFT計算プログラム「DFTB」のほか、MOPAC, ReaxFF, COSMO-RSモジュールについても多くの機能追加・改良がなされています。

■ADFソフトウェアパッケージ

ADF は、オランダAmsterdam 自由大学のBaerends教授とカナダCalgary大学のZiegler教授の両グループが中心になって開発された、30年以上の歴史を持つ密度汎関数法 (DFT) を用いた量子化学計算ソフトウェアです。現在、ADFソフトウェアパッケージは下記の7製品からなります。

- ADF: 様々なプロパティ計算が可能な分子系のDFT計算
- BAND: 結晶・表面を対象とした周期系のDFT計算
- DFTB^{new}, MOPAC: 半経験的な手法に基づく高速量子化学計算(分子系および1~3次元の周期系に対応)
- ReaxFF: 反応分子動力学計算
- COSMO-RS: 熱力学物性計算
- GUI: 計算設定・実行、結果の可視化・解析に対応したグラフィカルユーザーインターフェース

以下では、各製品の新機能についてご紹介します

■ADF (分子系) の新機能

ADFの新バージョンでは、図1のような両端が電極で挟まれた分子の状態密度 (DOS) と透過係数が計算できるようになりました。本機能では、半無限の電極部分をクラスターモデルで近似計算し、続いてnon-self-consistent Green's function法に基づいて電極の効果を取り込んだ状態で中央にある分子の計算が実行されます。透過係数の計算から、ナノ領域におけるバリスティック伝導のコンダクタンスやI-V曲線を求めることができます。また、新バ

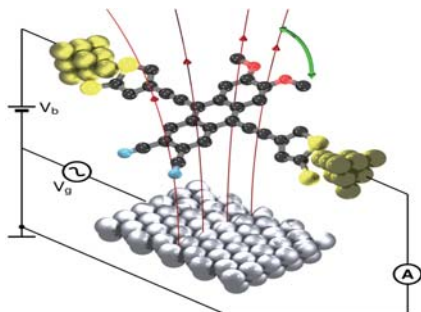


図1: 両端が金電極に挟まれた共役骨格を有する分子。ゲート電圧の印加により分子モーターとして駆動することが計算結果から指摘されている。J. S. Seldenthuis et al., ACS Nano, 4, 6681 (2010).

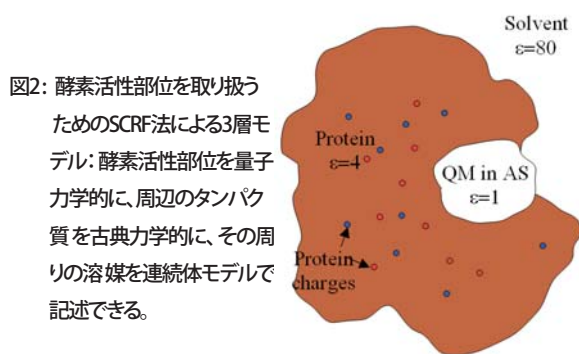


図2: 酵素活性部位を取り扱うためのSCRf法による3層モデル: 酵素活性部位を量子力学的に、周辺のタンパク質を古典力学的に、その周りの溶媒を連続体モデルで記述できる。

ージョンでは、溶媒効果を考慮するためのSCRf (self-consistent reaction field)法に酵素活性部位周辺のタンパク質のような巨大分子環境を古典的に記述する機能が追加されました(図2)。

その他のADFの主な新機能は以下のとおりです。

■機能追加

- スピン軌道相互作用によって誘起される基底状態のゼロ磁場分裂
- 摂動論によるスピン軌道相互作用を考慮したESR gテンソルとAテンソル
- 常磁性NMR化学シフト
- 状態指定による励起エネルギーを求めるための新しい最適化方法
- VSCRf(vertical excitation self-consistent reaction field)
- 交換相関汎関数の追加: revTPSS, HTSB, Grimme-D3-BJ, dDsC

■解析オプション

- MetaGGAおよびMetaHybrid汎関数によるエネルギー分割解析
- Hybrid汎関数使用時のエネルギー分割解析の改善
- AIM理論による定常点と結合の道筋の算出と描画
- 開設系のNBO解析

■精度の改善

- 新しいSCFの収束法 LISTiの搭載
- 改善された構造最適化ルーチン(遷移状態探索を含む)



Scientific Computing & Modelling

Ryoka Systems Inc. News Letter

■ BAND(周期系)の新機能

BANDの新バージョンでは、格子ベクトルの最適化計算とフォノン分散スペクトルの計算ができるようになりました。また、それに伴い、調和振動子近似の範囲内で分配関数の計算、および比熱や自由エネルギーといった各種熱力学物性が計算できるようになっています。さらに、新バージョンでは各種高速化が達成されており、特に、スピン軌道相互作用や溶媒効果を考慮したときの計算速度が大幅に改善されています(図3)。その他のBANDの主な新機能は以下のとおりです。

- スピン軌道相互作用を考慮した構造最適化計算
- AIM理論による定常点と結合の道筋の算出と描画
- 解析微分によるNMR遮蔽テンソルの計算
- 一様な静電場をかける機能の追加(1~2次元に対応)
- 交換相関汎関数の追加: Grimme-D3-BJ, GGA+U, HTBS, revTPSS, TB-mBJ

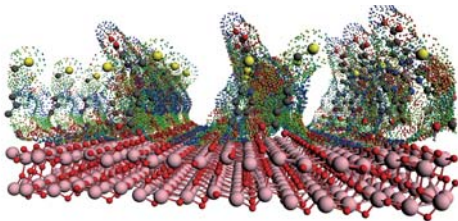


図3: 色素増感太陽電池に使用されるN3色素分子の酸化チタン表面上での吸着モデル。溶媒効果をCOSMO法で考慮し、色素分子の表面電荷密度を描画した。

■ ReaxFF(反応分子動力学計算)

ReaxFFはペンシルベニア州立大学のvan Duin教授らによって開発された反応分子動力学計算プログラムです。ReaxFFは、既存の古典分子動力学計算プログラムとは異なり、結合の生成と解裂を記述することができる反応力場を搭載しています。ReaxFFの新バージョンでは、対応する反応力場の種類が増えたことに加えて、各種高速化や並列計算の効率化が行われています。図4は、石炭チャーの燃焼反応をReaxFFで取り扱った事例です。系は約35,000の原子数からなりますが、250 ps(時間刻み 0.25 fs)のシミュレーションが36コアの並列計算により約6週間の計算時間で達成されています。

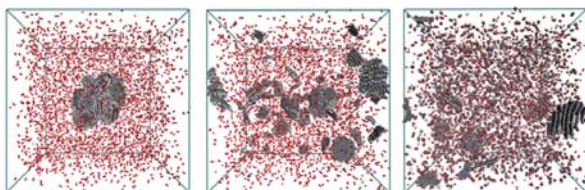


図4: 石炭チャーの燃焼反応($C_{5748}H_{151}O_{151}N_{61}S_{12} + 14,000O_2$ at 3000 K)の反応分子動力学シミュレーション: 0 ps(左)、75 ps(中央)、250 ps(右)のスナップショット。

F. Castro-Marciano et al., *Combustion and Flame*, **159**,1272(2012).

■ DFTB(高速tight binding DFT計算)

DFTBは、タイトバインディング近似に基づく高速DFT計算プログラムです。DFTBでは、積分計算をパラメータ化することで高速かつ精度の高い計算が実現されており、通常のDFT計算では取り扱えない大規模な系にも適用することが可能です。DFTBのハミルトニアンでは、荷電系の正確な取り扱いを可能にするためのSelf-consistent charge (SCC)法の搭載や、長距離相互作用を記述するための分散力補正などがなされています。DFTBの主な機能は以下のとおりです。

■ DFTBの基本機能

- 分子系と周期系の両方に対応(図5)
- 周期系における格子定数の最適化
- 分子動力学: Velocity Verlet法、Berendsen法またはスケーリング法による温度制御
- 状態密度とバンド構造
- 振動解析とフォノン分散スペクトル

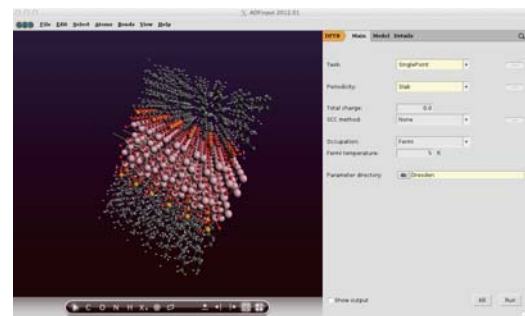


図5: GUIを使った周期モデルの構築: DFTBでは大規模かつ複雑な系を取り扱うことができる。

■ COSMO-RS(熱力学物性計算)

COSMO-RS モジュールは、COSMO-RS(Conductor like Screening MOdel for Realistic Solvents) 法を搭載したADFのポスト計算プログラムで、純物質および混合物の液体状態の各種熱力学物性が計算可能です。COSMO-RSの新バージョンでは、3成分系の物性計算(図6)、組成・物性値の内挿補間、引火点の計算に対応しました。また、COSMO-SAC法の実装やMOPACのPM6法を用いたCOSMOファイルの作成に対応するようになりました。

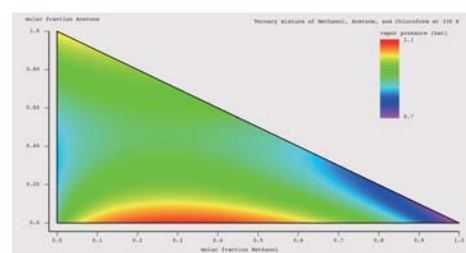


図6: 3成分からなる混合系(メタノール、アセトン、クロロホルム)の気液平衡ダイアグラム