

SciMAPS 3.0 リリース

SciMAPSは、量子化学計算からメソスケール計算まで、様々な計算化学手法に対応した材料設計支援プラットフォームです。その適用分野は、高分子の物性推算をはじめ、低分子・高分子の凝集状態や挙動の解析、化学反応の解析、固体・表面・界面の電子状態の解析等、多岐にわたります。ここでは、本年2月リリース予定のバージョン3.0の新しい計算コードについて紹介します。

はじめに

SciMAPSでは、量子化学計算からメソスケール計算まで、さまざまな計算手法に対応した計算コードをサポートしています。量子化学計算のTURBOMOLE、MNDO、ABINIT、力場計算を基にした分子動力学計算のLAMMPS、NAMD、メソスケール計算では分子をビーズで近似する散逸粒子動力学法のSciDPDが用意されています。

バージョン3.0では、新たにモンテカルロ法プログラムのTowheeとQM/MM計算プログラムのQmPotが加わり、SciMAPSによる分子シミュレーションの適用範囲が大きく広がります。

モンテカルロ法プログラムTowhee

Towheeは、米国サンディア国立研究所が提供する力場を使ったモンテカルロ法の計算コードです。モンテカルロ法では、経時変化を調べることはできませんが、大きく異なる分子の配座を発生させることができるため、初期依存性のない構造分布を調べることができます。また、エネルギー的に安定な構造分布を与えますので(図1)、量子化学計算や分子動力学計算などの初期構造としても最適です。さらに、分子動力学計算では対応できないアンサンブルにも対応できます。

Towheeは以下のような特長があります。

- 種々のポテンシャル関数をサポート
- 効率のよい配座サンプリング法の搭載

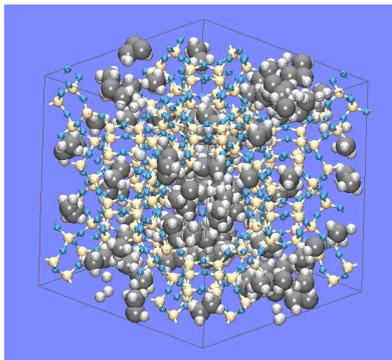


図1 μ VTアンサンブルによるゼオライト中の炭化水素のスナップショット

- 定温 (NVT)、定温定圧 (NPT)、グランドカノニカル (μ VT)、ギブスの各種アンサンブルへの対応

Towheeは、CFF, AMBER, OPLS, CHARMM等をはじめさまざまな力場に対応可能です。また、2種類のConfigurational Bias Monte Carlo (CBMC) 法により、効率のよい配座を発生させることができるため、一般的なモンテカルロ法では難しい比較的大きな分子に対しても、対応が可能です。

各種アンサンブルの適用例としては、以下のものが挙げられます。

◆NVTアンサンブル

- 密度が既知の系に対する構造分布

◆NPTアンサンブル

- バルク系の相転移現象の解明

◆ μ VTアンサンブル

- 吸着等温線の計算
- 吸着構造の検討による触媒設計

◆ギブスアンサンブル

- 液液、気液平衡の二相共存曲線の決定

μ VTやギブスアンサンブルは、分子動力学計算では、取り扱うことができない吸着等温線の計算¹(図2)や相平衡の予測が可能となります。

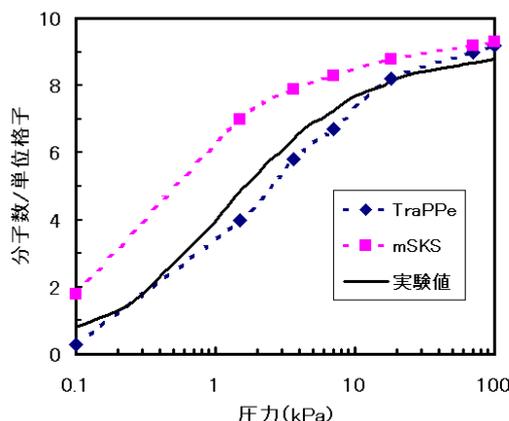


図2 n-ブタンのシリカライトに対する吸着等温線の力場(TraPPE, mSKS)による計算値と実験値を比較

QM/MM計算プログラムQmPot

QmPotはフンボルト大学のSauer教授のグループが開発したQM/MM法の計算コードです。

QM/MM計算は、分子系の本質的に重要な部位に対して、高精度な電子状態計算 (QM) を行い、それ以外の部分に対しては無視するのではなく、より計算コストのかからない分子力場計算 (MM) を行う手法です。これにより、計算コストがかかりすぎてQM計算だけでは対応不可能な系に対しても適用できるため、材料科学から生命科学まで、さまざまな分野で利用されています。

QmPotでは、QMとMMの組み合わせのみならず、孤立分子系を対象とした量子化学計算と周期系を対象とした第一原理バンド計算の組み合わせ (QM/QM) にも対応でき、今までにない計算手法を提供します。

◆応用事例

Tuma²らはQmPotを利用して、ゼオライトであるferrierite中のイソブテンの水素付加反応の中間体を解析しました。

ゼオライト細孔と炭化水素の相互作用では分散力が重要な相互作用となるため、ferrieriteとイソブテンの反応中間体の相対エネルギーを正しく見積もるには分散力の考慮が不可欠となります。

このような系を計算するには分散力を正しく見積もることのできるMP2法を利用すれば良いのですが、これを周期境界条件下で計算できるソフトウェアは存在しません。一方、周期境界条件下での計算には、DFT法に基づく第一原理バンド計算が適していますが、現在利用できる交換相関汎関数では、分散力を精度良く計算できません。

そこで、彼らは、QmPotを利用して、反応部位に分散力を正しく見積もることのできるMP2法を利用し、その他の部分にDFT法に基づく第一原理バンド計算を利用して計算を行いました。

彼らは、MP2/DFTのQmPot計算とDFTのみの計算を行い、各中間体の安定性を評価しました。そして、DFTのみの計算と比較して、その安定性が大きく異なることを示しました (図3)。このことから、彼らは、ゼオライト細孔中の炭化水素の反応エネルギーの評価には、分散力のより正確な評価が重要であり、DFTのみの計算の危険性を指摘しました。

今後の予定

ここで紹介した新規計算コードに加え、今後も続々と機能拡充が計画されています。その一例として、本年1月からスタートした新しいコンソーシアムのDEDICATESがあります。そこでは、欧州のREACHのような化学物質規制法への対応を考慮し、安全性を基にした化合物の絞込みや安全性試験の最適化のためのシステムを開発することを目的としています。また、本年後半には、データベース機能の追加やプロセスエンジニアリングとの連携も予定されています。これら機能の充実により、SciMAPSは、分子シミュレーションからプロセスエンジニアリングまで、材料設計を幅広くサポートする計算化学システムへと発展していきます。

1. Chandross et. al., *J. Phys. Chem. B*, 2001, 105, 5700-5712
2. Tuma et. al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2006, 8, 3955-3965

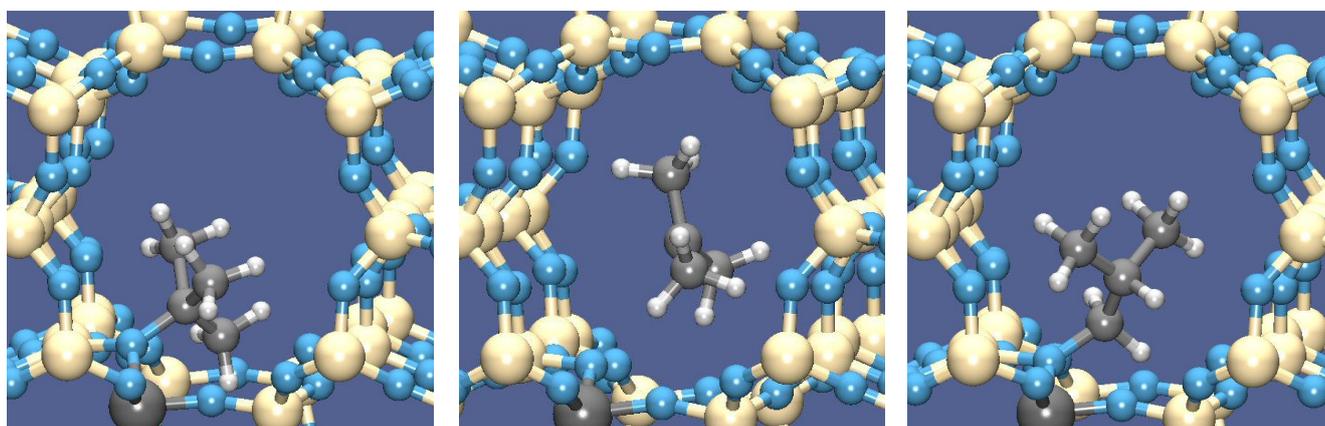


図 3 ferrierite中のイソブテンの反応の主な中間体：
tert-butoxide (左)、*tert*-butyl carbenium ion (中央)、*isobutoxide* (右)