

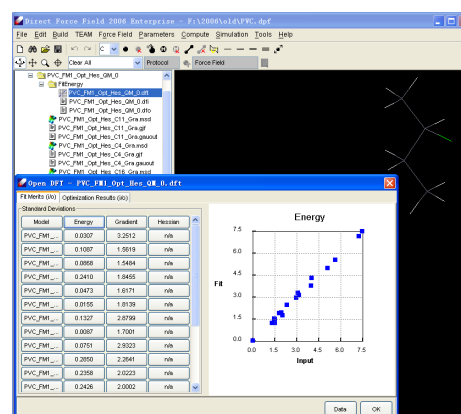
Direct Force Field™

Direct Force Field™ とは？

「力場パラメータが足りなくて計算できない」、「化学的に誤った構造を結果として与える」。これらは、分子シミュレーションソフトウェアに付属する力場パラメータを利用して計算を行うと、しばしば直面する問題です。このような問題は、力場パラメータを自作するか、論文からデータを探し出してそれを利用することでしか、解決できません。

パラメータを自作するにはノウハウが必要で一部の専門家にしかできません。また、論文のパラメータデータの精度は、目的が同じでない限り、保証されません。

Direct Force Field は、「さまざまな分子シミュレーションソフトウェアに高精度な力場パラメータを提供すること」を目的に開発され、このような力場パラメータの問題を解決します。



Direct Force Field™ の特長

◆ 最も高い精度を持つ力場パラメータ

Direct Force Field では、独自の手法によりパラメータの代用の問題を解決し、分子系に最適な力場パラメータをアサインすることが可能です。また、登録されている力場パラメータは、開発者の COMPASS*1 等の力場開発における経験と知識に基づいて、作成、検証されています。そのため、Direct Force Field では現在考えられる最も高い精度を持つ力場パラメータが提供されています。

◆ 他の分子シミュレーションソフトウェアで直接利用できるファイル

力場データベース*2 による目的分子への力場パラメータのアサインはコマンド1つで自動的に行われ、サポートしている分子シミュレーションソフトウェアに対応したフォーマットで、直ちに保存することができます。力場パラメータの情報はすべてテキストファイルで出力されますので、必要に応じて変換していただくことでサポート外の分子シミュレーションソフトでもご利用いただくことが可能です。

◆ 用途に応じた力場データベース

材料設計向けまたはライフサイエンス向けの力場 DB いずれかが付属します。いずれも有機低分子、合成高分子、薬物分子等の有機分子全般に対応できるようパラメータを作成しています。材料設計向け力場 DB は関数形に Aeon 社オリジナルの TEAM を採用し、ライフサイエンス向け力場 DB には関数形に AMBER を採用しています。また、特定の目的に対して利用できるよう、材料設計向けにはゼオライトに対応した力場、ライフサイエンス向けには AMBER95 を基にした力場が追加されています。

◆ 力場パラメータの作成

量子化学計算の結果から力場パラメータの作成が可能です。非常に複雑なポテンシャル面に、力場のポテンシャル関数を効率よくフィットするパラメータ決定手法を備えており、量子化学計算のデータから信頼性の高い力場パラメータを高速に開発できます。

1. Sun, H. *J. Phys. Chem. B*, **1998**, 102, 7338-7364

2. 一般の力場パラメータのデータは原子タイプ割付ルールとパラメータデータが一組となっています。これに対し、Direct Force Field では複数組のデータを同時に取り扱えるようにするため、そのデータはデータベースの形式で管理されています。このデータベースを「力場データベース」と呼びます。

Direct Force Field パッケージ

Direct Force Field では、目的に応じてご利用いただけるようパッケージ化して提供しています。パッケージは Standard、Professional の 2 種類が用意されています。いずれのパッケージにも Aeon 社オリジナルのカ場 DB、材料設計向け TEAM_Family(関数形 TEAM)、生命科学向け AMBER_Family(関数形 AMBER)の内の1つが付属します。

● Standard

LAMMPS、AMBER、GROMACS などの分子動力学計算ソフトウェアで、最高精度のカ場パラメータを、手軽に利用したい方のための製品です。既存の分子動力学計算ソフトウェアが提供するパラメータセットでは十分な精度が得られない場合に有用です。

● Professional

広範な分子をカバーしている Aeon 社提供のカ場データベースでも、目的分子によってはカ場パラメータが不足して計算が実行できない場合やパラメータの精度をより高くしたい場合があります。Professional には、新たにカ場パラメータを作成して、データベースに登録する機能があるので、このような場合に有用です。予め用意されたテンプレートの関数項を自由に組み合わせた、ユーザオリジナルのカ場タイプの定義も可能です^{*3}。一般的なカ場タイプ同様、ユーザ定義のカ場タイプに対しても同じようなパラメータ作成法が利用できますので、カ場ポテンシャル関数の開発に役立てることができます。



<<< モジュール構成 >>>

3. ユーザオリジナルのカ場に対応したカ場データベースは構築できません。ユーザオリジナルのカ場を利用する場合は、目的分子ごとにパラメータセットを作成し、1つのファイルとして保存することとなります。

主な機能

◆カ場データベース TEAM_FAMILY、AMBER_FAMILY

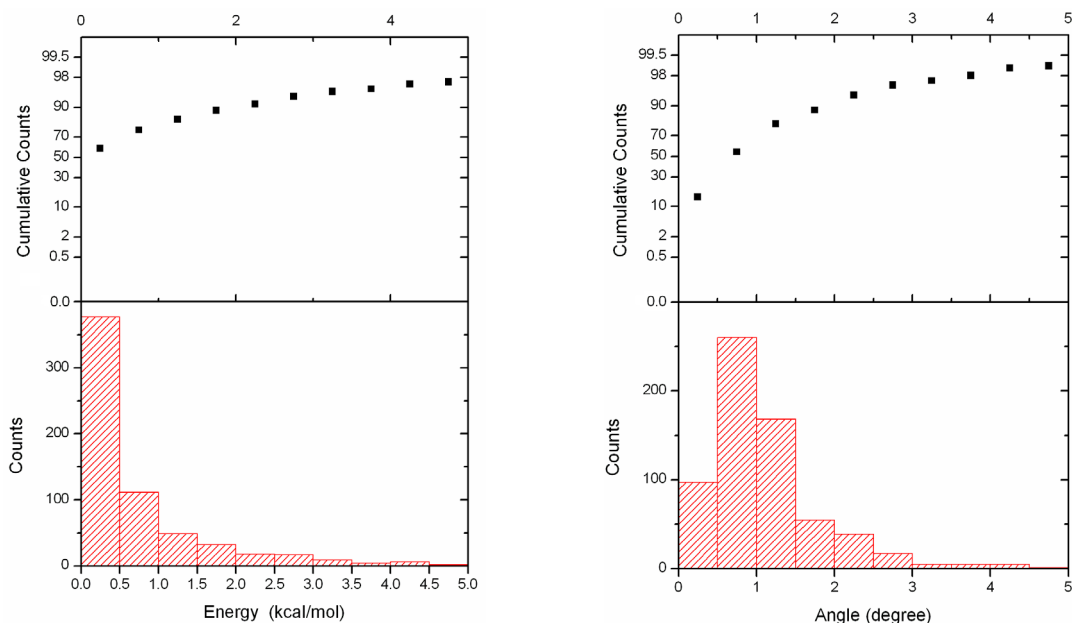
Standard

Professional

一般的なカ場では、原子タイプ割付ルールとカ場パラメータは一組のみ取り扱われますが、カ場データベース(以下カ場 DB)では、異なる原子タイプ割付ルールとカ場パラメータをもつカ場を、複数同時に整合性を保ちながら統合し、利用する機能を備えています。この機能により、カ場タイプが同一であれば、一部をユーザオリジナルのカ場、他の部分を DFF の提供するカ場というようにして、別々に開発されたカ場パラメータを矛盾なく1つのパラメータセットとして利用することが可能です。また、原子タイプ割付ルールを簡単に編集する機能を備えているので、デフォルトより詳細なユーザ独自の割付ルールを作成することも可能です*4。これらにより、カ場パラメータ代用の問題と原子タイプの重複による矛盾を解決しながら、カ場パラメータの精度と拡張性を同時に向上させています。

製品付属するカ場 DB には、TEAM_Family、AMBER_Family の 2 つが用意されており、用途に応じていずれかのカ場 DB を選択していただくことになります。材料設計向けカ場 DB、TEAM_Family は関数形に Aeon 社オリジナルの TEAM を採用し、有機低分子、合成高分子、イオン液体、ゼオライト用のパラメータが登録されています。ライフサイエンス向けカ場 DB、AMBER_Family は関数形に AMBER を採用し、TEAM_Family 同様、有機低分子、合成高分子、イオン液体のパラメータが登録されており、さらに公開されている AMBER95 のパラメータが登録されています。

4. Professional のみの機能です。



カ場データベースにおけるデータフィッティングの信頼性: 量子化学計算とのコンフォメーションのエネルギ誤差(左)と最適化構造の結合角の誤差(右)の分布のグラフとその積算率。コンフォメーションのエネルギ誤差が3kcal/mol以下のものが95%、結合角の誤差は3度以下のものは約98%と、サンプリングに利用した量子化学計算と同程度の精度が望めます。

◆ GUI 機能

Standard

Professional

分子構造の構築、可視化、さまざまな分子フォーマットの読み込みを可能にします。さらに、力場の開発だけでなく、一般的な分子モデリングのツールとしても利用できます。低分子液体モデリング機能、自動電荷グループアサイン機能等が搭載されています。

◆ シミュレーション機能

Standard

Professional

DFF の力場データベースで得られた力場パラメータや開発された力場パラメータを、DFF の分子シミュレーションエンジンやサードパーティの分子シミュレーションエンジンで利用するための機能です。DFF の分子シミュレーションエンジンは力場パラメータの検証や VDW パラメータ作成に必要な分子動力学計算データを用意するのに利用されます。サードパーティの分子シミュレーションエンジンに対しては座標データ、トポロジーデータ、原子タイプデータ等、計算に必要なデータの作成を行います。

◆ 力場パラメータ開発機能

Professional

量子化学計算の結果から力場パラメータの作成するための機能です。非常に複雑なポテンシャル面に、力場のポテンシャル関数を効率よくフィットするパラメータ決定手法を備えており、量子化学計算のデータから信頼性の高い力場パラメータを高速に開発できます^{*5}。

本機能には、力場パラメータを作成するのに必要な部分構造(フラグメント)に対して、量子化学計算データを作成、読み込みをするためのインターフェースが含まれています^{*6}。力場パラメータ作成には、フラグメントに対して、最安定構造の探索、基準振動解析、パラメータフィッティングに利用する配座の一次微分の計算を行います。本来、これら手順は、全てユーザが一つ一つコマンドを実行して行う手間のかかる作業ですが、簡単な操作で自動的に行うことも可能です^{*7}。

凝集系のシミュレーションで高い精度を要求される van der Waals (VDW)パラメータについては、系の密度と蒸発熱の実験値から自動的に VDW パラメータをフィッティングする独自の手法が搭載されています^{*8}。

さらに、予め用意されている力場のポテンシャル関数でよく利用されるさまざまな項のテンプレートを自由に組み合わせることで、ユーザオリジナルの関数による力場パラメータ開発も可能です。

これにより、ライフサイエンスから材料サイエンスまで、さまざまな分子シミュレーションに対応できます。

5. Sato, F.; Hojo, S.; Sun, H. *J. Phys. Chem. A*, **2003**, *107*, 248-257
6. Gaussian に対応。量子化学計算ソフトウェア Gaussian が別途必要です。
7. Gaussian が DFF の起動できる PC にインストールされている必要があります。
8. Sun, H. *Fluid Phase Equilibria*, **2004**, *217*, 59-76.

対応プラットフォーム

Windows10、11 および Linux に対応しています。



<Aeon Technology 日本総代理店>

株式会社 モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀 3-19-9 ジオ八丁堀 7階

Tel: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

E-mail: sales@molsis.co.jp

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

●詳細はお問い合わせください。●記載の社名および商品名は各社の商標または登録商標です。●本カタログの仕様は予告なく変更することがあります。(2024.03 改訂)