

統合計算化学システム

CCG社とAEON社 力場技術で提携

Chemical Computing Group社（以下CCG社）とAeon Technology社（以下AEON社）は力場技術で提携することに合意しました。これにより、統合計算化学システムMOE上の分子に対して、AEON社が開発中の高精度力場TEAM force fieldを簡単に利用できるようになり、分子シミュレーションの精度、応用範囲が格段に広がります。

AEON社は、力場パラメータ開発ソフトウェアDirect Force Fieldを開発して、その高精度力場パラメータの開発力で世界的に評価されてきました（アメリカ化学工学会主催のThe Second Industrial Fluid Properties Simulation Challengeで混合熱の予測部門で優勝：詳細は<http://www.freelists.org/archives/fluidsim/11-2004/msg00001.html>を参照）。CCG社はAEON社の持つ力場パラメータを取り込むことで、高精度のシミュレーションのみならず、ポテンシャルエネルギー計算や分子記述子などの力場計算を利用するMOEの機能を発展させることができます。特に、標準機能として搭載予定のMOE BM&S機能と連携することで一連のシミュレーションに対応できることが期待されます。

◆ TEAM force field

TEAM (Transferable, Extensible, Accurate and Modular) force fieldは、分子シミュレーションの鍵となる力場の精度を飛躍的に向上させる技術のひとつです。従来の力場計算では原子の環境に基づく原子タイプが用いられています。この手法は一般的ではあるものの、原子タイプを結合次数や隣接する原子の元素から決定するため、置換基の組み合わせによっておこる構造変化にはうまく対応できず、力場計算精度の低下を引き起こしていました。

TEAM force fieldでは、この問題を解決するために構造フラグメントベースの力場タイプという画期的な概念を用いています。フラグメントベースの力場タイプでは、置換基と原子タイプを同時に考慮することで、置換基の組み合わせによる構造変化に対応できるようになるため、高精度の力場計算が期待できます。また、置換基の概念を同時に取り入れた結果、原子タイプの重複がほとんど起こらないため、パラメータの追加の際に起こる不整合がなくなり、力場パラメータライブラリを容易に拡張できます。

TEAM force fieldは図1のような流れで力場パラメータを割り付け、力場計算を実行します。

1. 目的分子データを引き渡す
2. 目的分子を分子フラグメントに分解
3. 分子フラグメントをフラグメントデータベースで検索
4. 検索されたフラグメントの力場パラメータから目的分子に対する力場パラメータを作成
5. 得られた力場パラメータを利用して力場計算エンジンでシミュレーション

◆ 製品構成と今後のリリース予定

AEON社が提供するTEAM force fieldは基本版、マテリアルサイエンス (MS)版、ライフサイエンス (LS)版の3種類を予定しています。

基本版	低分子向け	標準搭載
MS版	一般的な合成高分子向け	有償
LS版	生体分子向け	有償

基本版はMOEに標準搭載される予定で、既存の力場と同様に選択するだけで利用できます。同時に、WEB上より無償公開の予定となっており、TEAM force fieldの関数系に対応できるプログラムであれば、MOE以外のソフトでも利用可能です。一方、MS版、LS版は有償提供となります。

基本版は2005年2月に公開予定し、有償版は、MS版を3月末のアメリカ化学会（サンディエゴ）で公開後、7月頃にリリースする予定です。LS版についての詳細は未定です。今後、情報がわかり次第、順次紹介しますのでご期待ください。

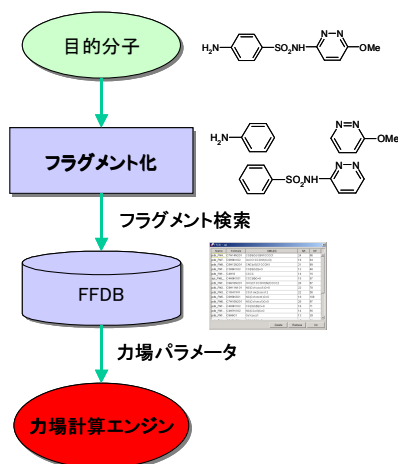


図1 TEAM force fieldのパラメータ割付の流れ