

## AMS 2020 リリース

AMS (Amsterdam Modeling Suite) は、量子化学計算プログラムの ADF をはじめとする計算化学統合パッケージです。昨年末にリリースされた AMS の新バージョン 2020 では、マルチレイヤーでの QM/MM 計算を可能にする新しい計算エンジン Hybrid が搭載されました。AMS パッケージ内の任意の QM エンジン、MM エンジンを組み合わせた計算が可能で、分子系だけでなく、周期系 (1~3 次元) の取り扱いにも対応しています。また、新製品として、機械学習ポテンシャルを用いた構造最適化、分子動力学計算などを可能にする ML Potential をリリースしました。本稿ではこれら新モジュールの他、AMS の各計算エンジン (ADF・BAND・DFTB・ReaxFF・COSMO-RS) の主な新機能について紹介します。

### ■ 新しい計算エンジン Hybrid

Hybrid エンジンでは、AMS 内の下記の QM エンジン、MM エンジンを組み合わせたハイブリッド計算 (QM/MM, QM/QM', MM/MM') が可能です。

#### ■ QM エンジン

ADF, BAND, DFTB, MOPAC

#### ■ MM エンジン

ReaxFF, ML Potentials,  
Force Field (UFF, GAFF, Amber, Tripos に対応)

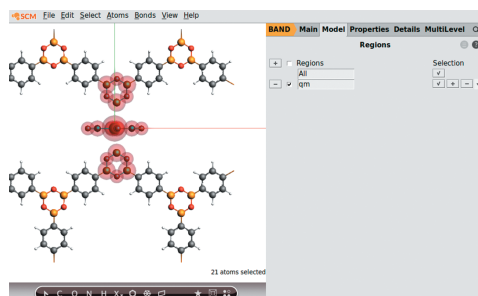


図 1. 共有結合性有機構造体 (COF) の 2 次元周期系モデル。全体を高速な DFTB で、中心の無機リンカー部分を高精度な BAND で計算。

Hybrid エンジンはマルチレイヤーでの QM/MM 計算を可能にし、分子系だけでなく、1~3 次元の周期系の取り扱いにも対応しています (図 1)。また、2 レイヤーの QM/MM 計算では Electrostatic Embedding 法をサポートしています。

### ■ 新製品 ML Potential

新製品として、機械学習ポテンシャルを用いた構造最適化、分子動力学計算などを可能にする「ML Potential」をリリースしました (図 2)。ML Potential は以下の特長をもちます。

- 複数のポピュラーなバックエンドに対応: SchNetPack, sGDML, PiNN, TorchANI
- パラメータ化されたニューラルネットワークポテンシャルとして ANI-1ccx (H, C, N, O, F, S, Cl) と ANI-2x (H, C, N, O) のデータセットを搭載
- 機械学習ライブラリとして CUDA 対応の PyTorch と Tensorflow が利用可能

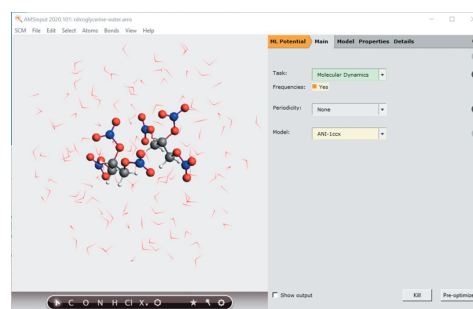


図 2. ML Potential による MD 計算の設定例 (ANI-1ccx を使用)

### ■ AMS の各計算エンジンの主な新機能

#### ■ ADF (分子系 DFT)

- 多体摂動論に基づく GW 近似 ( $G_0W_0$  による一点計算に対応)
- AMS driver への完全対応 (構造最適化や MD など、構造の変化を伴う計算が全て AMS driver 経由で実行)

#### ■ ADF & BAND (周期系 DFT)

- 相対論の Scalar ZORA の利用がデフォルト
- Hybrid エンジンによる QM/MM, QM/QM' 計算に対応

#### ■ DFTB (タイトバインディング DFT)

- GFN1-xTB モデルの利用がデフォルト
- 複数 k 点を用いた場合の GFN1-xTB 計算の高速化

#### ■ ReaxFF (反応分子動力学)

- AMS driver 経由での ReaxFF 利用がデフォルト (スタンドアロン版の ReaxFF の多くの機能が AMS driver 側に移植)
- 1~2 次元の周期系に対応

#### ■ COSMO-RS (熱力学物性計算)

- 配座異性体や解離した化合物、二量体の考慮など、複数種を取り込んだ計算に対応 (図 3)

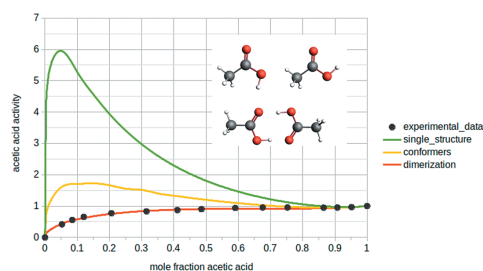


図 3. COSMO-RS による溶液中の酢酸の活量係数の計算: 単一構造、配座異性体、2 量体のそれぞれを考慮