

## AMS 2021 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。今夏リリースされた AMS の新バージョン 2021 では、各計算エンジンに対して構造最適化や MDなどを統一に行うためのツール『AMS driver』に新たに反応経路自動探索機能が追加されました。ポテンシャルエネルギー曲面 (PES) 上の局所最適化構造からはじめて、隣接する遷移状態構造、別サイドの安定構造を求めるといったタスクを繰り返し行うことで、周辺のエネルギー地形を求めていきます。また、周期系に対して Basin Hopping 法と組み合わせることで、表面上の分子の解離吸着に関する PES の探索を行うことも可能です。本稿では今回追加された PES の自動探索機能の他、AMS の各計算エンジン (ADF・BAND・DFTB・ReaxFF・COSMO-RS)、その他ツールの主な新機能について紹介します。

### ■ AMS driver による反応経路の自動探索

AMS driver に下記の新しい PES 探索機能が追加されました。これにより、遷移状態構造や局所最適化構造の自動探索ができるようになります。

- Process Search: 与えられた局所最適化構造 (反応物) からの脱出を試みて、隣接する遷移状態構造と別サイドの局所最適化構造 (生成物) を探索
- Basin Hopping: モンテカルロ法を用いて大域的な最適化構造を探索
- Landscape Refinement: 予め低コストの計算エンジンでエネルギー地形を求めた後に、再度、高コストの計算エンジンで局所最適化構造と遷移状態構造を最適化し、より高精度なエネルギー地形を効率的に求める
- Binding Sites: 金属表面上の原子吸着など、事前に計算したエネルギー地形の情報から原子の結合サイトを計算して描画

図 1 に、プロペンへの塩化水素の付加反応を対象にした、AMS driver の Process Search で求めたエネルギー地形を示します。付加反応の生成物である 1-クロロプロパンと 2-クロロプロパンの構造からはじめて、隣接する遷移状態構造、関連する局所最適化構造が自動的に探索されます。求めたエネルギー地形は、事前に高速な DFTB で計算し、その後、Landscape Refinement で ADF の DFT 計算で再最適化したものです。今回の付加反応ではマルコフニコフ則により 2-クロロプロパンが主要な生成物となりますが、計算したエネルギー地形からもそのことが確かめられます。

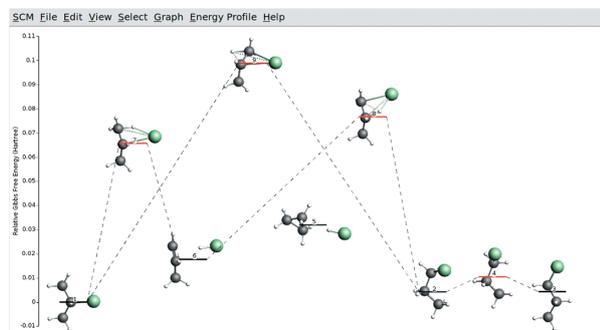


図 1. プロペンへの塩化水素の付加反応に関するエネルギー地形。黒色のエネルギー準位は局所最適化構造、赤は遷移状態構造に対応。

図 2 は、ZnO 表面上の水分子の解離吸着過程に関するエネルギー地形を ReaxFF (反応力場計算) で求めたものです。Basin Hopping により、金属酸化物表面上での水分子の複数の吸着状態 (分子吸着、2 分子解離、1 分子

解離) を探索した後、1 分子解離した状態を初期構造として選び、Process Search で隣接する遷移状態構造を求め反応のエネルギー地形を計算しました。

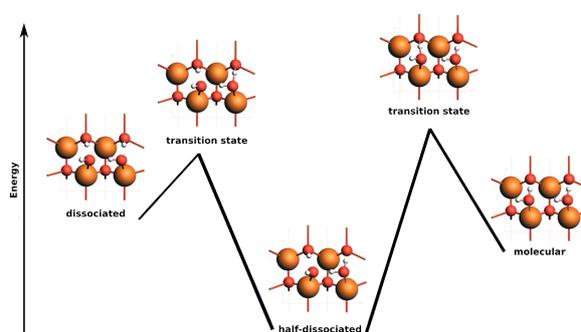


図 2. ReaxFF で求めた ZnO 表面上の水分子のエネルギー地形

### ■ AMS の各計算エンジン・ツールの主な新機能

- ADF (分子系 DFT)
  - 分極力場に基づく QM/FQ (Quantum Mechanics/Fluctuating Charges) 法
  - 励起状態間の遷移双極子モーメント
  - 励起スペクトルの高速計算法である POLTDDFT 用に補助基底関数を追加
  - r2SCAN-D4 汎関数 (BAND にも対応)
  - 多体摂動論に基づく GW 近似の追加: Eigenvalue-only self-consistent GW (evGW)
  - 多体摂動論の計算用に TZ3P と QZ6P の基底関数を追加
  - Ligand-Field DFT (LFDFT) 法に基づく新しいスペクトル計算: ESR g テンソル (二重項のみ), X 線領域の MCD
- AMS driver (MD などの計算を統一に行うためのツール)
  - 球状の Wall ポテンシャル
  - 分散力補正 D4 (周期系の BAND と DFTB にも対応)
  - 反応を加速させるための force bias Monte Carlo 法 (各計算エンジンに対応)
- Force Field (力場計算)
  - 力場計算に対して 2~3 桁の高速化を達成: 力分割法による MPI 並列、粒子・メッシュ・エバルト (PME) 法、非結合相互作用のカットオフ距離を 15 Å に短縮
- COSMO-RS (熱力学物性計算)
  - 異なるプロトン化/解離状態の考慮など、複数種を取り込んだ熱力学物性計算の改良