分子動力学における各種汎用力場の評価

2024年1月5日

概要

分子動力学計算を用いると、液体・ポリマー・固体など様々な状態の熱物性を取得することが可能です。取得した熱物性はそのまま材料開発の指標に使用されたり、実験値が既知の場合は計算の妥当性の検証に使用されます。

分子動力学計算では選択した力場の種類に結果が依存することが知られており、様々な種類の力場を簡単に使える環境が重要です。Winmostarを使うと、世界中の研究者が十分に検証して利用している様々な力場を簡単に使用することができます。Winmostar V11は**Universal Force Field (UFF)**, **Dreiding**, **GAFF**, **GAFF2**, **OPLS-AA/L+GAFF**[1)], **OPLS-AA**に対応しており、比較的低精度ながら様々な分子に適用可能なものから、適用対象は少ないものの高精度な力場まで揃っています。

本書では、Winmostar上で各種の力場を用いていくつかの物質に対し熱物性を計算した例を示します。

計算条件

電荷はAM1-BCC、力場はGAFF、Dreiding、UFF、GAFF2としました。初期構造は密度0.6 g/cm^{3}で生成し、分子数は1024としました。本書の計算にはGromacs 5.0.7を使用し、系の作成から熱物性の取得までの全ての操作はWinmostar上で実行されました。温度、圧力は293.15 K、1 barとし、計算時間は10 nsとしました。また、本書の計算は以下の手順で実行されました。

①平衡化: Preset=Minimizeで計算を実行

②平衡化: Preset=NVTで計算を実行

③平衡化: Preset=NPTからref-t=400、ref-p=100、rcoulomb-switchおよびrvdw-switch=1、rcoulombおよびrvdw=1.1、nsteps=200000に変更して計算を実行

④平衡化: Prset=NPTからref-t=293.15、ref-p=1、nsteps=800000に変更して計算を実行

⑤本計算: Prset=NPTからref-t=293.15、ref-p=1、nsteps=20000000に変更して計算を実行

計算した物質を図1に示します。

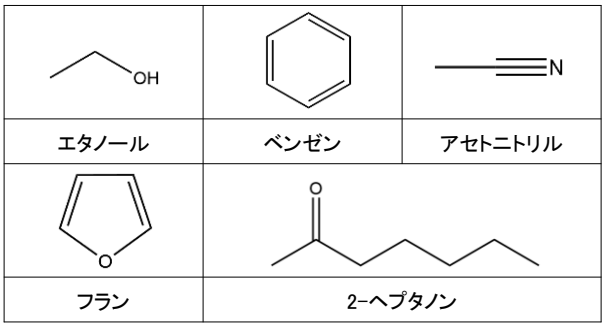

図1 計算した物質

1) 分子間にOPLS-AA/L、分子間にGAFFを利用したacpype独自の力場

計算結果

図2に、各物質に対し各力場を用いて取得した密度と比誘電率を示します。実験値は文献[1]から取得しました。

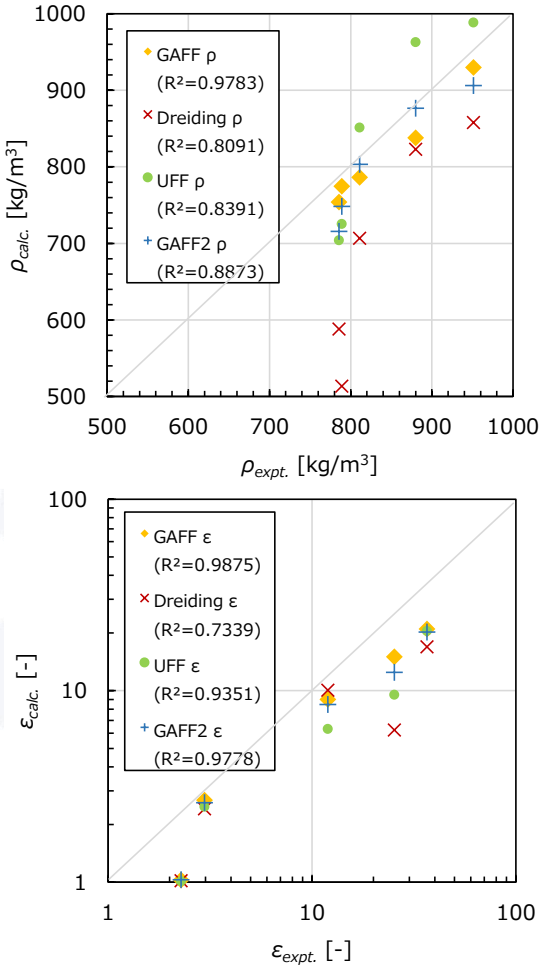

図2 実験値と計算値の比較(上:密度、下:比誘電率)

図2で各力場のデータに着目すると、実験値と計算値との間である程度相関が見られることが分かります。計算値の絶対値の解釈についてはその都度注意が必要となります。また、図2で各物質のデータに着目すると、力場ごとの実験値の再現性の傾向が見えます。ただし、ここで計算していない物質や物性に対する傾向についてはより詳細な検証が必要です。(例えばGAFF、OPLSのより多数の物質での比較については文献[1]を参照のこと)。

通常、力場の検証作業は煩雑で大きな作業コストを伴いますが、Winmostarを用いるとマウス操作のみで手軽に実行でき、作業を大幅に効率化できます。Winmostar V11以降では力場の種類の拡充と処理の更なる自動化を予定しています。

Winmostarバージョン: 10.7.0

対応ソルバ: Gromacs、LAMMPS

引用: [1] J. Chem. Theory Comput. 8, 61, (2012).

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.