

BIOVIA DISCOVERY STUDIO®を 使用した分子シミュレーション データシート

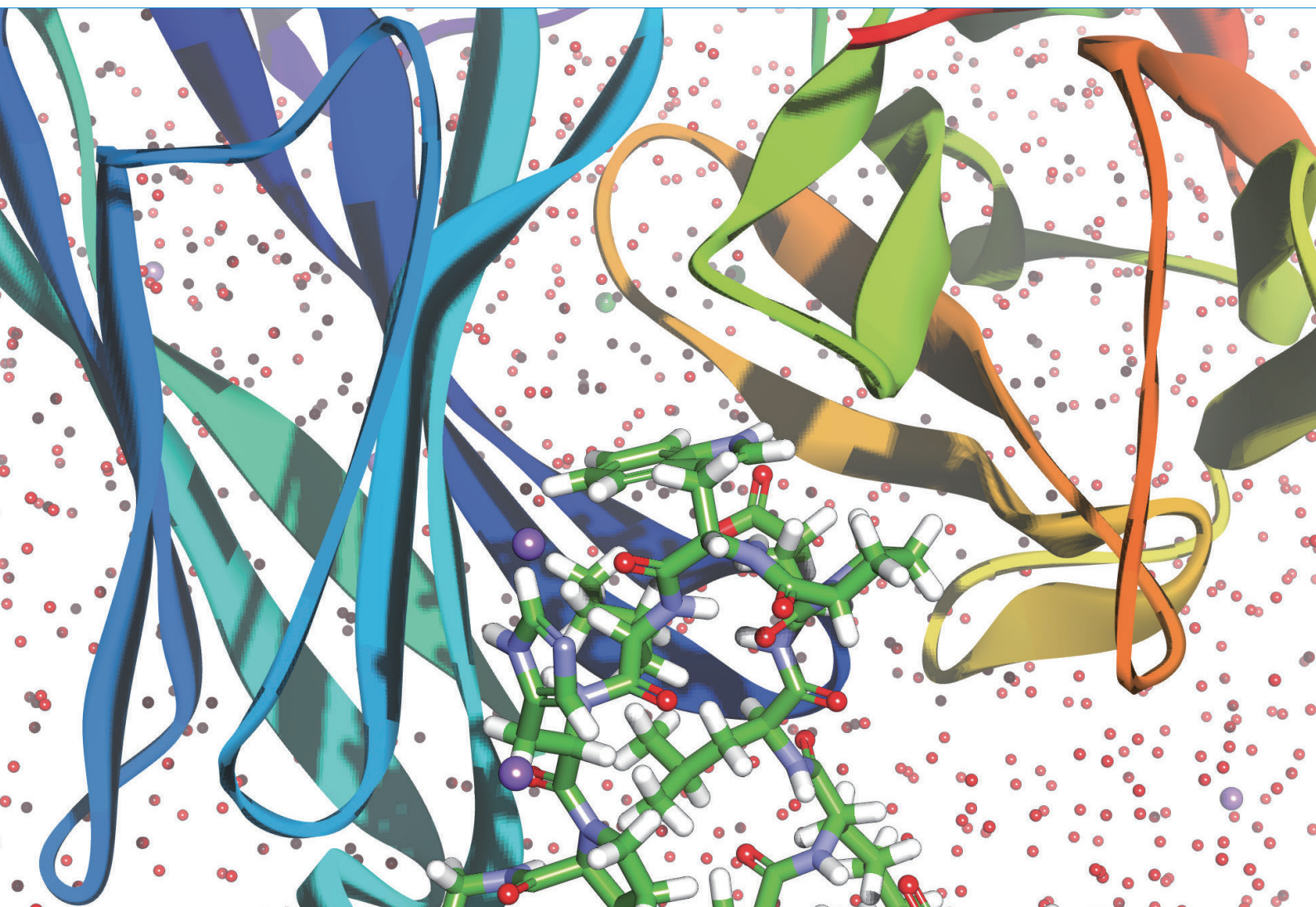


図. 1: Anti-TAT (転写活性化タンパク質) HIV 11H6H1 Fabと 15-mer Tat ペプチド複合体の、陽溶媒による水溶液モデル [PDB ID 306L]

タンパク質、リガンド、イオンなどの分子間の相互作用は、すべての生体分子プロセスの基礎となるものです。たとえば、タンパク質に結合する低分子や、抗原に結合する抗体のシミュレーションを実施することで、これらのプロセスの原因となるエネルギー特性についての知見を得る事ができます。BIOVIA Discovery Studioにおけるシミュレーションは、科学者のレビューと検証を経て 30 年以上にわたり提供され続けている HARMm の分子力学および分子動力学力場エンジンを基盤としています。業界標準の高分子設計ツールおよびリガンド設計ツールの両方を統合した BIOVIA Discovery Studio は、包括的でスケーラブルな分子シミュレーションツールです。

BIOVIA DISCOVERY STUDIO (DS) と CHARMM

BIOVIA Discovery Studio では、CHARMM* 分子力学シミュレーションプログラムにより、クラス最高級の力場シミュレーションを実現しています。

- CHARMM: バージョン 42b1
- DSでは、charmm36、charmm27、charmm22、CHARMM、CHARMM-polarH、CFF、MMFFなど、さまざまな種類の力場をサポートしています。
- 低分子、ペプチド、および酵素や受容体、抗体、DNA、RNA などの高分子の原子タイプを自動的にアサインする機能が組み込まれています。
- シミュレーション手法には、エントロピー推定を含むエネルギーの一点計算、分子力学(MM)最小化、分子動力学(MD)があります。

量子力学(QM)シミュレーション

BIOVIA Discovery Studioはab initio の DFT に基づくQM、半経験的および QM / MM ハイブリッド計算に対応しています。

- QM 密度汎関数理論: DMol³
- QM 半経験的シミュレーション: VAMP

マルチプロセッサおよびグリッドエンジンのサポート

- シミュレーションおよびドッキング・プロトコルではマルチプロセッサおよびグリッド・コンピュータによる並列計算および並行計算をサポートしています。

モデルの準備と精密化

BIOVIA Discovery Studio では、CHARMMとMODELER を組み合わせて、クラス最高級の高分子モデリング・ツールセットを実現しています。

- LOOPER により欠損ループのコンフォメーションを生成し、CHARMM でランク付けを行います。
- CHARMM に基づく Chi-Rotor を使用して、互換側鎖コンフォメーションを系統的に探索します。
- CHARMM Generalized-Born (GB)溶媒モデルを使用して、迅速かつ正確にタンパク質イオン化および残基 pK を計算します。
- 非常に大きい高分子系にも対応できる、高速な陽溶媒による水和法が搭載されており、オプションでカウンターイオンを置く事も可能です。

力場に基づくシミュレーション

受容体-リガンド複合体形成やタンパク質-タンパク質結合など、さまざまなシミュレーションを実行することができます。

- 受容体-リガンド複合体形成のシミュレーション
 - 座標を固定した、あるいはフレキシブルな受容体の中

で、複数のリガンドのポーズを最適化します。

- CHARMM ベースの堅牢な CDOCKER 法によって、リガンド・ドッキングを実行します。
- CHARMM に基づく MM-PBSA または MM-GBSA により、結合相互作用のスコアリングを行います。
- ハイブリッド QM / MM を使用して、受容体-リガンド複合体のエネルギー点計算または構造最適化を行います。
- 高分子構造のシミュレーション
 - 陽溶媒または GB による陰溶媒のいずれかを用いて、分子力学による構造最適化を実行します。
 - 陽溶媒または GB による陰培養溶媒のいずれかを用いて CHARMM による分子動力学シミュレーションを実行します。
 - 陽溶媒を用いて NAMD* による MD シミュレーションを実行することも可能です。
 - タンパク質構造に Implicit membrane を追加して、シミュレーションのための膜結合モデルを作成します。
- 分子動力学解析
 - 複数の DCD ファイルにわたってフレームを選択し、解析対象となる原子のサブセットを選択する事ができます。
 - 計算のチェックのため温度-時間およびエネルギー-時間のグラフが作成され、CSV ファイルにエネルギーのデータが保存されます。
 - 参照構造に対する RMSD の計算や、全フレームまたは選択したフレーム内での RMS ゆらぎ(RMSF)の計算が可能です。

* CHARMM の詳細については、<http://www.charmm.org> を参照して下さい。

+ NAMD はイリノイ大学アーバナ・シャンペーン校より提供されているもので、以下のページから入手できます。

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、11の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語)をご参照ください。

