

CONFORMERS

データシート

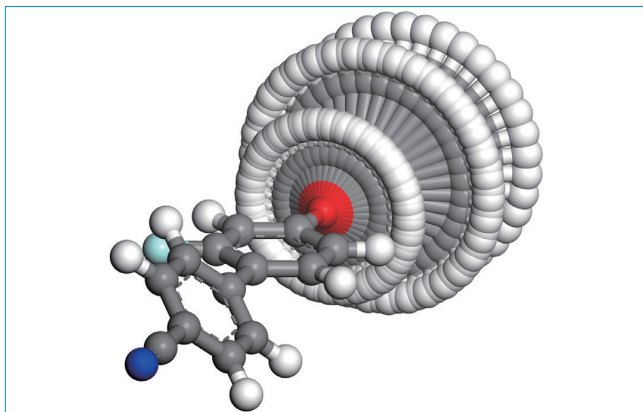
コンフォメーション探索は分子特性—構造間の関係を調べる際の重要な応用技術の一つです。強力な解析機能との連携により、分子のコンフォメーション空間に関する貴重な情報を提供し、低エネルギーコンフォメーションの同定を支援します。

Conformersはコンフォメーション空間の網羅的な探索データを集め、分析する手法を提供します。単純なものから複雑な系まで、種々の系のコンフォメーション解析への応用が可能です。Conformersはまた、QSARにおける3D構造に依存する記述子の平均値をとる方法としても活用できます。

CONFORMERS の活用分野は？

Conformersは分子のポテンシャルエネルギー表面を探索する簡単な手法を提供するために開発されました。小さな分子でさえポテンシャルエネルギー表面は非常に複雑なものとなり得ます。Conformersでは特定の二面角を変化させることが出来るので、ポテンシャルエネルギー表面の重要な領域にのみ焦点を当てた解析が出来ます。二面角をサンプリングする方法として下記の3手法があります。

1. 系統的グリッドスキャン—二面角を設定した値ずつ系統的に変化させます。これにより、いくつかの重要な二面角に関するエネルギーマップを作成することが出来ます。
2. ランダムサンプリング—特定二面角を確率的に変え探索します。複数の二面角に関係した低エネルギーコンフォーマーの探索に使います。
3. Boltzmannジャンプ—Metropolis基準に基づき、特定のコンフォーマーでのランダム変化による確率的探索をします。複数の調査対象の二面角があるときに適用します。



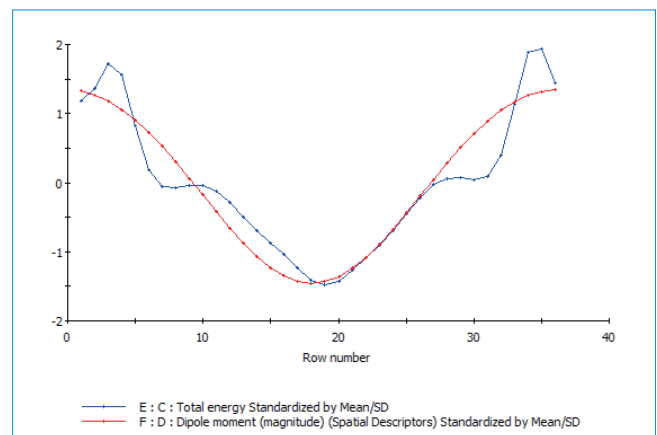
系統的グリッドサーチにより発生させた構造を重ね合わせて表示。コンフォメーション空間を示す。

Conformersは分子の種々のコンフォメーションを発生させる機能の他、発生させたコンフォメーションの特性解析の為にツール群を備えています。解析ツールにより、双極子モーメントなどの分子特性を予測したり、デカルト座標のRMS差に基づくクラスター分割をすることが出来ます。

BIOVIA MATERIALS STUDIOの優位点

Conformersは BIOVIA Materials Studioの中核機能の一つであるスタディテーブルを使用し、結果をその中に出力するとともに、VAMPやDMol³等の他の物性予測ツールとのシームレスな統合環境を提供します。Fukui関数や正確な双極子モーメントなどの広範囲の電子的物性を、VAMPやDMol³等のモジュールを使って簡単に計算することが出来ます。スタディテーブルは BIOVIA Materials Studioの中心機能でもあり、コンフォメーション発生から、記述子作成までの直接連携を実現します。

BIOVIA Materials Studioでは構造作成とその編集機能が良く連携されているため、あらかじめ作成した部分構造やポリマー、あるいは簡単なスケッチにより、素早くほめる構造を作成できます。計算で得られたコンフォメーションは、Collectionドキュメント上で重ね合わせたり整列させたりすることができ、構造の変化をビジュアルに比較することが出来ます。



三面角を変化させた時のエネルギーと双極子モーメントの変化。(縦軸は適当にスケールされています。)ここでは、エネルギー極小は双極子モーメントの極小に対応しています。

CONFORMERSはどのようにあなたの研究に役立つでしょうか？

Conformersは、分子の多数のコンフォメーションを素早く、簡単にサンプリングする方法を提供します。これにより、物性の予測時に重要なエネルギー最小構造の決定ができ、簡単な構造—物性相関の解析や分子物性への洞察を得ることが出来ます。

Conformersでは最低エネルギー配座の特定のために、簡単な探索セットアップ機能を使います。セットアップ機能はエキスパートユーザー向けの特別な設定も出来ます。例えば、グリッドスキャンやランダムサンプリング、Boltzmannジャンプ法などのコンフォーマーション発生技法のよい点を組み合わせて使うことが出来ます。Conformersは小分子向けのDreiding力場や、ポリマーあるいは材料科学向けのCOMPASS力場などの複数の力場を使えるForciteモジュールのエネルギー計算エンジンをベースにしています。

CONFORMRESの機能

コンフォーマーション発生

- 分子中の回転可能な二面角の自動検出
- 選択した二面角周りの系統的スキャン
- 二面角のランダムサンプリング
- Boltzmannジャンプサンプリング
- 閉環機能 (ring closure) による環配座の探索
- トラジェクトリおよびスタディテーブルファイルへの出力
- 分散性保持のためのフィルター機能
- コンフォーマーの構造最適化機能

エネルギー表現の自動セットアップ機能

- Universal, Dreiding, COMPASS, COMPASS II, pcff, cvff力場の選択
- ユーザー定義の電荷、あるいは GasteigerまたはQE q 法電荷の使用
- 解析機能
- デカルト座標のRMSによるクラスタリング
- デカルト座標または二面角のRMS差の計算
- 構造-物性相関解析のための双極子モーメント、慣性半径の計算
- 力場の比較のための、特定力場での全エネルギー計算
- 構造の最適化
- コンフォーマーション中の特定原子群の動径分布関数差の計算

BIOVIA Materials Studioに関する詳細については、下記URLを参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>

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、**12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。



3DEXPERIENCE®

©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTD, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および 3DEXPERIENCE はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、書面による承認が必要です。