

A highly regarded
and widely used
simulation
package

Classical
empirical energy
calculations

Molecular
mechanics,
dynamics, and
more

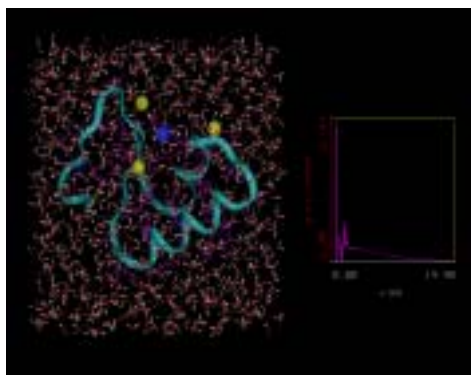
CHARMm Datasheet

CHARMm

CHARMm® (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics)は、標準的な最小化および動力学の機能と、基準振動計算、相関分析、量子力学および分子力学の複合的手法(QM/MM)等の高度な機能を統合した、高い評価と幅広い支持を得ているシミュレーションパッケージです。

一般的に、シミュレーションは、分子レベルの構造、相互作用およびエネルギーに関する情報を与えてくれます。

とくに、ハーバード大学のMartin Karplus 教授の研究室で開発されたこのプログラム¹は、古典的な経験的エネルギー計算を低分子化合物からタンパク、核酸、炭水化物といった高分子化合物にまで実行することが可能です。また、最新のアルゴリズムと手法を用いることで、対象系の動力学と熱力学を詳細に検討することが可能であるため、実験結果に対する洞察を深めるとともに、新たな方向性を見出すことができるはずです。



水中でのクランピン分子 (Na⁺ + Cl⁻ によって総荷電を調整) に関する分子動力学計算 (0.20 ps)

Insight II 2005の新機能であるParticle Mesh Ewald法を用いることで、遠距離の静電相互作用の正確な取り扱いが可能となりました。

タンパクの放射状分布関数の計算には DeCipher module を用いました。

www.accelrys.com

エネルギー特性と動力学の検討

CHARMm は、力場エンジンであるだけでなくそれ自身が力場でもあります。

つまり、CHARMmの力場は、分子内の原子に関する力場パラメータを量子化学によって作成した力場エンジンを用いています。

したがって、CHARMm に使用されている評価の高い力場²⁻⁹とその手法は、以下に示す様々な計算を可能にしてくれます。

- 相互作用エネルギー、コンフォメーションエネルギー
- 局所極小値
- 回転障壁
- 時間依存性動力学的挙動
- 振動数

CHARMmの機能は、タンパク質シミュレーション等の生命科学研究支援ツールとして Accelrysが提供している直感的に理解しやすいユーザーインターフェースを有する Insight II®やQUANTA®に組み込まれています。

そのため、誰でも簡単に、CHARMmの強力なシミュレーション機能を使って分子モデルや複雑な計算を実行することが可能です。

また、CHARMmの経験と知識が増せば、スタンドアロンでの使用により、さらに高度なシミュレーションが可能になります。

さらにCHARMmは、他のAccelrysソフトウェアモジュールとの連携が可能であるため、分子構造や分子動力学の高度なシミュレーション解析のための「DeCipher」や、複数のコンフォメーションを利用したDockingシミュレーションのための「MCSS」などの計算を併用することが可能です。

タンパク質の動力学、タンパク質 - 薬剤間相互作用をはじめ、あらゆる生体分子化合物の構造にご関心をお持ちの方にとって、CHARMmは、理論的分析を補完し拡張させてくれるツールです。

分子力学と分子動力学

• エネルギー最小化:

アルゴリズム (steepest descents, conjugate gradient, Powell, Newton-Raphson, adopted basis-set Newton-Raphson)

収束判定基準 (RMS勾配、ステップサイズ、エネルギー変化)

• 分子動力学:

Langevin Dynamics、Stochastic boundary Dynamics、等温や等圧のDynamics

積算手法 (Verlet, leapfrog, velocity Verlet)

Multiple time step algorithms

温度調整 (Velocity scaling, Berendsen temperature bath, Nose-Hoover dynamics)

NVT, NPT, NVEなどのアンサンブル

• 拘束条件:

fixed atom, harmonic atom, dihedral, internal coordinate, distance, SHAKE, quartic droplet constraints

• Non-Bond計算:

switching/shifting function

グループベースカットオフ設定

• 周期境界条件:

• 極性を持つ水素を含むすべての原子モデルをサポート

• 特異な分子や残基に対するパラメーターセットおよびポロジファイル修正

• 分子構造への水素付加

解析オプション

構造

• 強力な座標操作コマンド:

剛体RMS比較、再配置、質量重み、回転半径の計算、スケーリング

• 内部座標分析のための強力なコマンド

• 分子体積と分子表面の計算

• 溶媒平滑化プロパティ計算

• 分子軌跡を用いた相関関数分析

• コンフォメーション変化のような与えられた

• 軌跡に対する反応座標の特定

エネルギー特性

• あらゆる2原子間の相互作用エネルギー

• 水素結合エネルギー

基準振動解析

• 原子や内部座標 (internal coordinates) のゆらぎの分析

• 1つないし2つのモードでのエネルギー表面の探索

• あらゆる対象性の空間群をもつ結晶の解析

必要なシステム

• IBM, Windows, SGI, LINUX

推奨ソフトウェア

• Insight II

• QUANTA 3D

補完ソフトウェア

• DeCipher

• MCSS

References

1. Brooks *et al.*, *J. Comp. Chem.*, 1983, 4, 187-217.
2. MacKerell, Jr. *et al.*, *J. Phys. Chem b*, 1998, 102, 3586-3617.
3. MacKerell, Jr. *et al.*, *J. Amer. Chem. Soc.*, 1995, 117, 11946-11975.
4. Pavelites *et al.*, *J. Comp. Chem.*, 1996, 18, 221-239.
5. Feng *et al.*, *J. Amer. Chem. Soc.*, 1996, 118, 11265-11277.
6. Schlenkrich *et al.*, in *Biological Membranes: A Molecular Perspective from Computation and Experiment*. Merz, K.M. and Roux, B., Eds., Birkhauser, Boston, 1996, 31-81.
7. Feller *et al.*, *Biophys. J.* 1997, 73, 2269-2279.
8. Neria *et al.*, *J. Chem. Phys.*, 1996, 105, 1902-21.
9. Momany, F.A. and Rone, R., *J. Comp. Chem.*, 1992, 13, 888-900.



Accelrys Corporate Headquarters
10188 Telesis Court, Suite 100
San Diego, CA 92121, USA
Tel: +1 858 799 5000

Accelrys European Headquarters
334 Cambridge Science Park
Cambridge, CB4 0WN, UK
Tel: +44 1223 228500

Accelrys Asia Headquarters
Nishi-Shinbashi TS Bldg.11F,
3-3-1 Nishi-Shinbashi, Minato-Ku,
Tokyo 105-0003 JAPAN
Tel: +81 3 3578 3860

Is ds 115 0305

■お問い合わせ先

ダイキン工業株式会社 電子システム事業部 第二部 SCグループ

108-0075 東京都港区港南2-18-1 JR品川イーストビル TEL:03-6716-0460 URL: <http://www.comtec.daikin.co.jp/SC/>