

統合計算化学システム

MOE 新バージョンリリース速報

本年もMOEの新バージョンのリリースが予定されています。現在のところ明らかになっている新機能の中から主なものを紹介します。

◆ 基本機能

基本機能では、ファイルの入出力、分子エディット機能、クリップボードやテンポラリファイルを利用した機能が改善強化される予定です。これらの機能により、データの読み書きやコピーペーストが格段に使いやすくなります。

ファイルの保存と対応フォーマット

Save、Save As、Save Imagesコマンドが1つに統合されます。分子の任意の原子をグループ化できるサブセットの概念も同時に保存可能になります。画像ファイルはBMP、GIF、JPG、PNG、EPSフォーマットで保存できるようになり、WindowsではクリップボードにBMP画像を保存することができます。また、XTL、ISIS/Draw、ChemDraw、AEON社のmsd、ppf、msfなど新しいファイルフォーマットにも対応できるようになります。

分子エディット機能

エディットメニューが再構成されます。ポテンシャルエネルギー、キラリティやクリップボードに関する機能が追加されます。コピーペースト機能が追加され、メインウィンドウ上の構造をMOE、XTL、BMP、MOL、EPS、PDBフォーマットでクリップボードに保存できるようになります。それとともに様々なフォーマットをメインウィンドウ上にペーストする機能が追加されます。更にISIS/Drawなどのスケッチもメインウィンドウにペーストできるようになります。

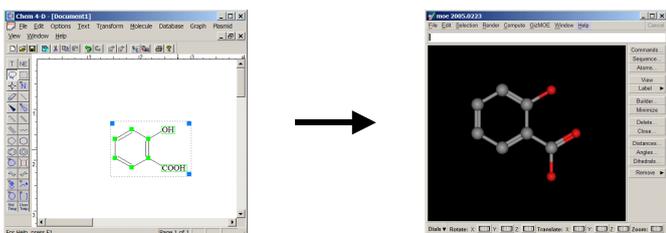


図 1 他のソフトウェア上で分子のコピーを行いMOEで分子をペースト

(上図ではChemInnovation社Chemistry4-D Drawを使用)

キーボード設定変更

全てのテキストフィールドでのコピー、ペーストに、CTRL+C、CTRL+Vキーの組み合わせが働くようになり、Windowsと同じ感覚で操作できるようになります。

◆ 力場関連の機能拡張

ポテンシャルの壁を考慮した計算や対応する力場の変更にあわせ、GUIを整理すると同時に、いくつかの機能拡張が予定されています。

ポテンシャルエネルギーモデルについて

新たに力場として、AEON社のTEAM力場をはじめAMBER99、CHARMM27等が取り扱えるようになります。溶媒和モデルは、これまでのHawkins-Cramer-Truhlarらの方法にかわりその改良であるOnufriev-Bashford-Caseらの方法を採用しました。この方法は特に高分子系において精度が改善されています。拘束力として、ポテンシャルの壁による拘束機能が追加されます。この機能は、SVL言語レベルでサポートしているため様々な計算と共に利用できます。電荷パラメータの作成法としては、低分子向けにJakalian-Jack-BaylyらのRESP電荷を求めるAM1-BCC法が新たに追加されます。

ポテンシャル設定コマンド類の統合

Potential Setupパネルが大幅に改良されます。力場設定に関する情報がページ形式で管理され、力場の選択、パラメータのチェック、拘束力の設定、ポテンシャルの壁の設定がすべて1つのコマンドにまとめられます。これに伴い、GUI上にあったParameter Report、Restrained Managementのコマンドはなくなる予定です。

分子動力学計算

ホロノーム拘束下でのエネルギー保存がよくなります。また、エネルギーとビリアルに対する遠距離の相互作用の補正機能を追加します。内部でのMD単位系がSI単位系に変更されます。

◆ 低分子・データベース機能追加

ご要望の多い記述子や水溶解度モデルを追加し、さらに有効な分子の選択を行うことができます。また低分子の2次元化機能と表示パネルの追加を行い、見やすさが向上しています。

低分子2次元化機能の追加

データベースエネルギー極小化のパネルに2次元化の機能が追加されます。フラグメント毎に2次元構造を持ち、それを割り当てる方法を採用し、3次元分子の高速な2次元化が可能です。SMILESから分子への変換にも利用できます。また、分子を2次元表示するパネルが新たに追加されます。

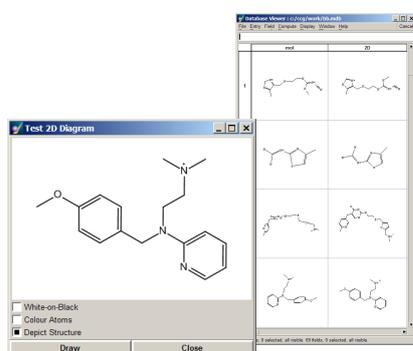


図 2 2次元化したデータベースと2次元表示ウィンドウ

カ場パラメータ開発プログラム

Direct Force Field 2005 リリース速報

カ場パラメータ開発プログラム Direct Force Field 2005 (以下DFE2005) がAeon Technology社よりリリースされます。主な新機能の2つを紹介します。

◆ カ場関数形の定義機能

以前のバージョンではTEAM、DREIDING、CHARMM、AMBER、CFFの5つのカ場関数形を利用してきましたが、DFE2005では、予め用意されているカ場関数の各項のテンプレートから、利用する関数項を選択し、自由にカ場関数形を設定できるようになります^{注)}。

テンプレートの関数は、結合5つ、結合角8つ、二面角7つ、Improper Torsion7つ、面外角3つ、UB1つ、非結合項5つ、交差項7つと豊富なものになっています。テンプレートの関数形は現在よく利用されているものが採用されており、様々な関数形に対応可能になります。

注) カ場データベースでは現在のところ、決まった関数形を使う必要があるため、ユーザ定義のカ場はカ場データベース機能に対応していません。

記述子の追加

以下の記述子・モデルが追加されます。

- 分子の回転可能結合数、環構造数など分子の剛さに基づくOpreaのlead-like記述子
- 水素結合供与体・受容体、分子量、logPに基づくLipinskiのdrug-like記述子
- BCUT、GCUT記述子
- X.J.Xuらの水溶解度モデルlogS¹⁾

◆ タンパク質関連

付属するPDBデータが2005年2月までのものに更新されると同時に、非冗長データベース、構造ファミリーデータベースなどのデータも更新されます。今回はContact Statisticsのマッピングデータも更新されます。

Contact Statisticsマッピングデータの更新

Contact Statisticsの相互作用密度マッピングは2005年2月までのPDBのX線構造のうち、2.0 Åより高解像度の約11,500 構造を用いて再フィッティングされました。

1) T. J. Hou, K. Xia, W. Zhang, X.J. Xu, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 44, 266 (2004).

◆ カ場データベースの改良

パラメータ情報関連機能が充実し、パラメータが作成されたときのフィッティング情報、設定情報、検証結果情報の入力やその確認ができるようになり、ユーザが利用するパラメータの信頼性をカ場データベース上で直接確認することができるようになっていきます。

カ場データベースでは、セキュリティやバックアップ機能が強化されます。パスワードロックすることができるようになり、管理者以外が無断で書き換えができないように制御できるようになります。またデータベースが、いつ、どのように利用されたかを記録したログファイルが自動的にログ保存用のディレクトリに保存されます。定期的に自動バックアップができる機能も追加されます。