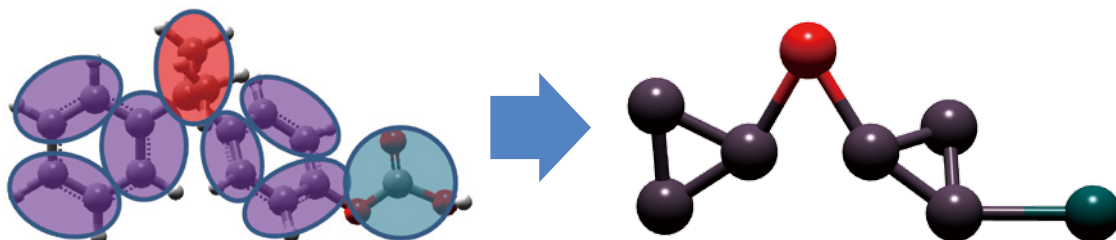


## 材料設計支援プラットフォーム SciMAPS 4.1.1リリース

仏 Scienomics 社から材料設計支援プラットフォーム SciMAPS の新バージョン 4.1.1 が 2018 年 2 月にリリースされました。

新バージョンでは、全原子モデルから粗視化モデルを構築する新機能 AtoMeso Converter が GUI である Platform に追加されました。Amorphous Builder や Polymer Builder 等既存の分子構築ツールの粗視化モデル対応が図られ、LAMMPS Plug-in や新たに加わった GROMACS Plug-in を利用した粗視化分子動力学計算が可能となりました。これに伴い Platform も Martini、SDK (Shinoda-DeVane-Klein) 力場をサポートするようになり、リン脂質膜を中心にさまざまなシミュレーションが可能になっております。詳細については 2 ページの記事をご覧ください。



AtoMeso Converter による全原子モデルの粗視化モデルへの変換

### CONTENTS

#### 新製品情報

材料設計支援プラットフォーム	SciMAPS 4.1.1 リリース	2
タンパク質立体構造データベースシステム	PSILO 2018 新機能紹介	3
統合計算化学システム	MOE-QFSS バージョンアップ紹介	4
ターゲット・作用機序予測プラットフォーム	Chemotargets CLARITY v2.0 リリース	6
創薬支援ツール	SeeSAR 7.2 リリース	7
材料設計支援統合システム	MedeA 2.22 リリース	12

#### 技術情報

ニューラルネットワーク手法に基づくデータ解析	SONNIA 製品紹介	8
医薬品安全性情報サービス	BioInfoGate 社 OFF-X の利用事例	9
遺伝子発現データベース	TCGA データの収載	10
材料設計支援統合システム	MedeA-VASPI による遷移金属酸化物表面の反応性評価	11

材料設計支援プラットフォーム

## SciMAPS 4.1.1リリース

SCIENOMICS  
delivering science

材料設計支援プラットフォームSciMAPSの各計算プログラムは、計算プログラム本体とそれに対するインターフェースから構成されるプラグインとして提供されます。基本環境であるPlatformに各プラグインを追加することにより研究に最適な環境を取り揃えることができます。本稿では、2018年2月にリリースされました最新版の4.1.1の概要について紹介します。

### ■新機能AtoMeso Converter

Platformの新機能AtoMeso Converterは、全原子モデルの分子を基に、分子を構成する原子を粗視化粒子に対応付けることで、分子を粗視化モデルに変換するツールです。

ポリカーボネートのモノマーユニットの粗視化(表紙の図参照)では、分子を8つの粗視化粒子に近似しています。AtoMeso Converterでは画面上で選択した部分構造を粗視化粒子に帰属します。基本的には部分構造と粗視化粒子は1対1で定義しますが、ベンゼン環のように等価とみなしてよい複数の粗視化粒子からなる構造の場合は構造をいくつに分割するかを指定することで、一度に粗視化粒子を指定することができます。分子を構成する全原子を粗視化粒子に帰属させて、変換を実行すると、新しいモデルウィンドウに変換後の粗視化モデルが表示されます。得られたモデルは全原子モデルと同様、モノマーユニットとして保存して、Polymer Builderで高分子構築に利用することが可能です。

### ■構造構築機能の粗視化モデル対応

3次元スケッチャー、Polymer Builder、Amorphous Builder、Crystal Builderの各構造構築ツールは粗視化モデルを取り扱うことができるようになりました。3次元スケッチャーでは定義した粗視化粒子を直接描画することができるため、単純な分子や仮想的な粒子を取り扱うのに便利です。Polymer BuilderはAtoMeso Converterや3次元スケッチャーで構築した粗視化粒子を繰り返し単位として取り扱うことができるようになり、全原子モデルと同じように自由に高分子鎖を構築することが可能になりました。Amorphous Builderも粗視化粒子の取り扱いが可能になりましたので、系を構成する粗視化分子の個数と密度を指定して初期構造を構築することができます。Amorphous Builderには指定した空間に分子を配置する機能がありま

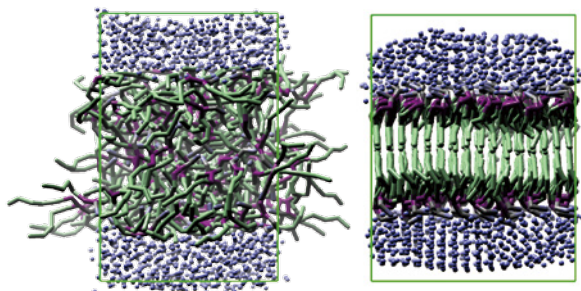


図1. 構造構築ツールによる初期構造作成例

すので、油層、水層というように、あらかじめ分布を分けた構造を作成してシミュレーションを行うことで平衡構造を得るまでの時間を削減することが可能です(図1左)。他にも、Crystal Builderで小さなセルに簡単な層構造を作成し、これを拡張することで、初期構造を得る(図1右)など、さまざまな初期構造作成ができます。

### ■新製品とシミュレーションの粗視化対応

Martini力場のサポートに伴い、新製品としてフローニンゲン大学で開発されているGROMACS Plug-inが新たに製品として加わりました。GROMACS Plug-inはGROMACSの粗視化モデルだけでなく全原子モデルの計算にも対応しております。全原子モデルでは、AMBERとDREIDINGの2つの力場に対応しています。粗視化モデルによる計算はGROMACS Plug-inのみならずLAMMPS Atomistic Plug-inのユーザーにも利用が可能となりました。粗視化モデル計算ではMartini、SDKの力場をサポートしています。

LAMMPS Atomistic Plug-in、Amorphous Builderを利用して水(3分子の $H_2O$ で1粒子：青)、 $H_3O^+$ (2分子の $H_2O$ と1分子の $H_3O^+$ で1粒子：赤)、高分子電解質膜(空色)からなる系の計算例を示します(図2)。ランダムな初期構造から極小化、定温定圧の分子動力学(20 ns)により、水分子と電解質膜の境界に $H_3O^+$ が分布するチャンネル構造が得られていることがわかります。

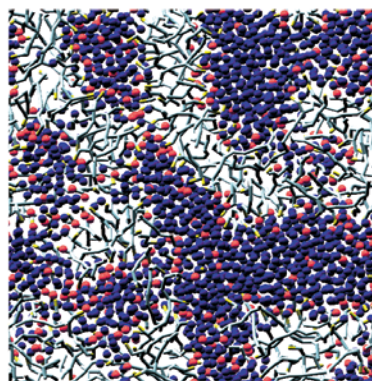


図2. 粗視化MDによる高分子電解質膜の層分離構造

今回紹介した計算はPlatform、Amorphous Builder、LAMMPS Atomistic Plug-in(またはGROMACS Plug-in)で行うことができます。全原子モデル、粗視化モデルの両方を用いた研究を検討されている方は是非ご検討ください。