

AMBER 12

Mechanics Simulation of Biomolecules

コンフレックス株式会社

〒141-0021

東京都品川区上大崎2-15-19

アイオス目黒駅前ビル6F

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

Email : info@conflex.co.jp

<http://www.conflex.co.jp/>

Conflex USA

5631 Palmer Way,

Suite C, Carlsbad, CA

92010 USA

TEL : +1-760-930-9277

USA : 800-298-0054

FAX : +1-509-692-4541

Email : info@conflex.us

<http://www.conflex.us/>

AMBERは、カリフォルニア大学のコールマン教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよび分子力学と動力学計算シミュレーションのパッケージです。



AMBER 12は、AMBER 12とAmberTools 12から構成されており、これらを組み合わせて使用します。

AMBERプログラム概要

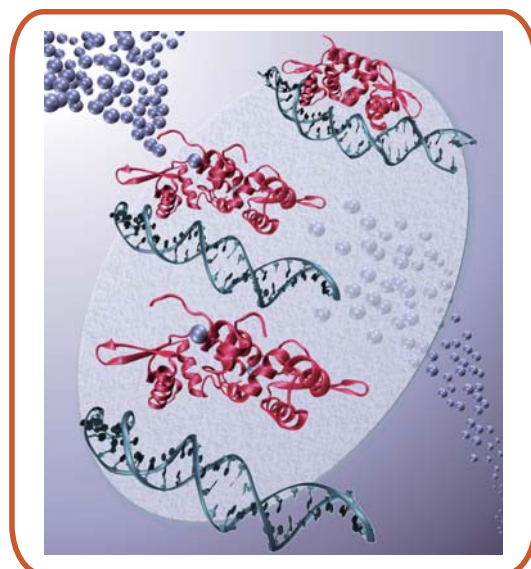
AMBER 12の主なプログラムは、下記のとおりです。

sander: 分子動力学計算を行うための最新機能が導入された、メインプログラムです。NMRのNOE測定から得られる距離拘束、ねじれ角拘束、化学シフトとNOESY強度などから得られるペナルティ関数を基にしたNMR構造の精密化が可能です。また、レプリカ交換法、熱力学積分法、PMF (Potential of Mean Force) 計算などが使用できます。さらに、QM/MM機能も導入されています。

pmemd: sanderプログラムを、機能を限定して大幅に修正したバージョンです。周期系、PMEシミュレーション、GBシミュレーションに最適化されています。sanderに比べ、計算速度が速く並列化効率も向上しています。pmemdでサポートされていない機能が必要であれば、動力学計算を行う際の"標準の"プログラムとなります。NVIDIA GPUによる高速化も可能になっています。

LEaP: 基本的なモデルを構築し動力学計算用の座標およびトポロジー入力ファイルを作成する機能を持ちます。簡単な分子エディターを内蔵し、新しい残基を作成・操作できます。

モデリングでは、核酸やアミノ酸のデータを用い構造を構築したり、溶媒水分子の配置や系の中和などを行うためのモジュールが多数用意されています。実験データを用い、NMR構造の精密化を行うこともできます。また、動力学計算のトラジェクトリーを解析するツールも用意されています。



antechamber: 一般有機分子の力場パラメーターセットの作成プロセスを自動化します。通常、Mol2形式の構造ファイルから始めて、LEaPで読み込めるファイルを作成します。これにより、一般有機分子をLEaPで読み込み、分子モデリングに使用できるようになります。出力されるパラメーターは、タンパク質や核酸用のものと同時に使用できるようにデザインされていますので、タンパク質や核酸と一般有機分子を組み合わせたシミュレーションが可能になります。

ptraj: MDトラジェクトリーを解析し、様々な計算を行えます。基準構造からのRMS偏差の計算、水素結合の解析、時間相関関数、動径分布解析など多数の解析が行えます。

mm_pbsa: MDトラジェクトリーの後処理を自動化するスクリプトで、連続体溶媒モデルでのエネルギー解析を行えます。エネルギーを、別々の残基からのエネルギー断片に分解し、コンフォメーション間の自由エネルギー差を見積もれます。

AMBER12新機能

【力場】

- 新しい固定電荷パラメーターff12SBが導入され、分極性ポテンシャルのサポートが強化されました。
- 新しい分子脂質力場Lipid11が導入されました。他のAMBER力場と互換性がありますので、組み合わせて利用できます。

【溶媒モデル】

- 数値的Poisson-Boltzmann溶媒和計算のオプションが拡張されました。膜系や周期系のモデルがサポートされています。
- Kovalenko-HirataらのClosure近似による3D-RISM積分方程式モデルが強化され、水性電解質のより良い処理ができるようになりました。

【自由エネルギー計算】

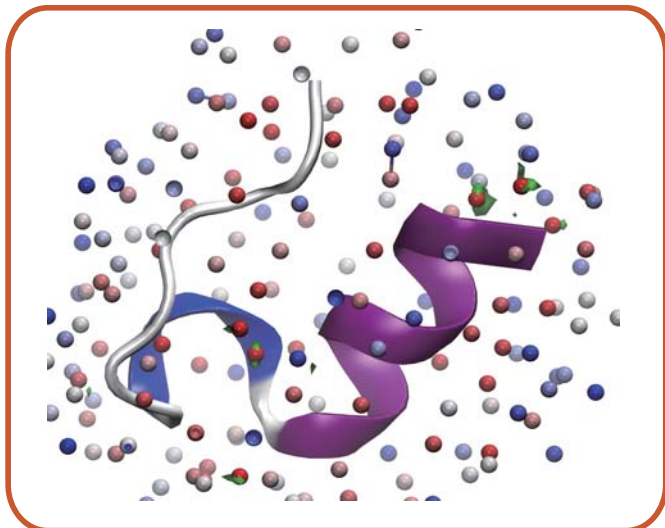
- 自由エネルギーを計算する手法が拡張されました。ハミルトニアンモデルの変更や、出現及び消滅する原子群を扱うより良い手法が利用できます。また、レプリカ交換シミュレーションとの統合も、より強化されました。

【計算手法】

- Self-guided Langevin dynamicsとaccelerated molecular dynamicsのアイデアを改良し、柔軟な自由度に沿ったサンプリングを高速化しました。
- cryo EM/ET実験などで得られる電子密度マップを、拘束条件として利用できるようになり、そのシミュレーション中でグループを固定したり一部を自由にしたりできるようになりました。

【QM/MM】

- 半経験的量子計算において、AM1/dとPM6/ハミルトニアンモデルを使用して、d軌道も扱えるようになりました。
- 様々な外部の量子化学計算プログラムと連携して、QM/MM計算を行えるようになりました。これにより、使用できる量子モデルのタイプが広がりました。
対応ソフト: ADF, GAMESS-US, NWChem, Gaussian, Orca and TeraChem



AmberTools 13

AmberToolsには、生体分子のシミュレーションと解析を行うプログラム群が含まれています。これらはお互いに、またAMBER本体のプログラムとも、うまく連携して使用できるように作成されています。

これらのプログラムは主に、GNU General Public License (GPL)で配布されています。いくつかのプログラムは、パブリック・ドメインあるいは他のライセンスとなっています。

【AmberTools 13】

AmberToolsの主なプログラムは、以下のようになります。

NAB: 分子の構築; generalized Born, Poisson-Boltzmann, 3D-RISMの仮想溶媒を使用した動力学計算やdistance geometry計算

antechamber, MCPB: 一般の有機分子および金属中心を計算する力場パラメーターの作成。

ptraj, cpptraj: AMBERのトラジェクトリーの解析。

tleap, xleap: AMBERシミュレーションを行うための、基本的な座標およびトポロジーファイルの作成を行えます。

sqm: 半経験的およびDFTB量子化学計算プログラム

mdgx: 実溶媒の分子動力学シミュレーションを行えます。

pbsa: Poisson-Boltzmannモデルを数値的に計算

MMPBSA.py, amberlite: MDトラジェクトリーのエネルギー解析を行えます。

