

# CONFORMERS

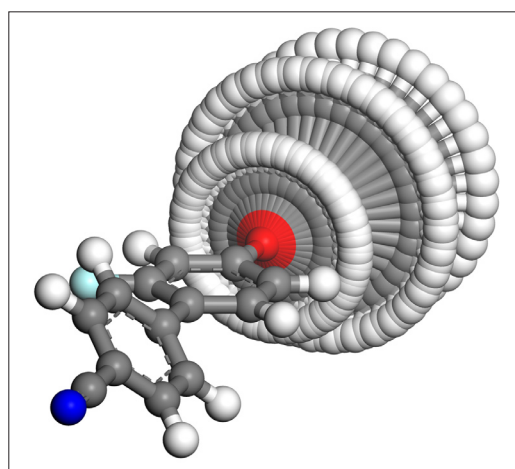
コンフォーメーション探索は分子特性—構造間の関係を調べる際の重要な応用技術の一つです。強力な解析機能との連携により、分子のコンフォーメーション空間に関する貴重な情報を提供し、低エネルギーコンフォーメーションの同定を支援します。

Conformers はコンフォー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ー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。

## CONFORMER 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 では特定のねじれ角を変化させることができるので、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。ねじれ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. 系統的グリッド探索 — ねじれ角を設定した値ずつ系統的に変化させます。これにより、いくつかの重要なねじれ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 — 特定ねじれ角を確率的に変え探索します。複数のねじれ角に関係した低エネルギーコンフォーマーの探索に役立ちます。
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。複数の調査対象のねじれ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。コンフォーメーション空間を示す。

Conformers は分子の種々のコンフォーメーションを発生させる機能の他、発生コンフォーマー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。

## MATERIALS STUDIO の優位点

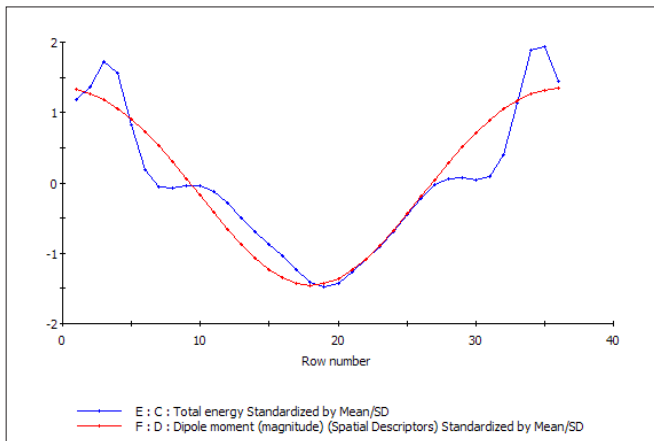
Conformers は Materials Studio の中核機能の一つ・・・スタディテーブルを使用し、結果をその中に蓄積するとともに、VA MPや Dmol3 等の他の物性予測ツールとのシームレスな統合環境を提供します。Fukui 関数や正確な双極子モーメントなどの広範囲の電子的物性を、これらや他のモジュールを使って簡単に計算することが出来ます。スタディテーブルは Materials Studio の中心機能でもあり、Conformer 発生から、記述子作成までの直接連携を実現します。

Materials Studio では構造作成とその修飾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、素早くほしい構造を作成できます。計算で得られたコンフォーマーは、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。

## 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ー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メ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 エネルギー計算サーバーをベースにしています。



ねじれ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。

## CONFORMRES の機能

### Conformer 発生

- 分子中の回転可能なねじれ角の自動検出
- 選択したねじれ角周りの系統的スキャン
- ねじれ角のランダムサンプリング
- // Boltzmann Jump サンプリング
- 閉環機能 (ring closure) による環配座の探索
- 軌跡 (trajectory) データ、スタディテーブルへの出力
- 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, pcff, cvff 力場の選択
- 現状電荷、あるいは Gasteiger または QEq 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ねじれ角の 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、特定力場でのトータルエネルギー計算
- 構造の最適化
- コンフォーマー中の特定原子群の動径分布関数差の計算

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/>