

# MOTIF

アクセルリスは結晶工学への取り組みを広げる新しいツール「Motif」を開発しました。これは、分子結晶における水素結合トポロジの情報を分析するために開発されたツールで、水素結合トポロジの定性分析法および定量分析法を提供します。Motif を Polymorph の結晶多形予測機能と組み合わせると、Polymorph で予測された分子のパッキング配列を水素結合トポロジによって分類でき、ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)で関連構造との類似性を測定することができるため、推定構造に対し統計学的なスコアリングを行うことができます。

多形は、溶解度、バイオアベイラビリティ、機械的安定性、製造可能性など、幅広い材料特性に影響を与えます。凝固過程を扱う研究者の場合、最適な形状を選択することで課題と機会の両方がもたらされます。Motif では、水素結合トポロジから得られる有益な情報を提供することにより、これらの科学的な取り組みを支援します。この情報は、膨大な数の多形だけでなく、塩、溶媒、共結晶にまで、非常に複雑な設計空間の分類に役立ちます。

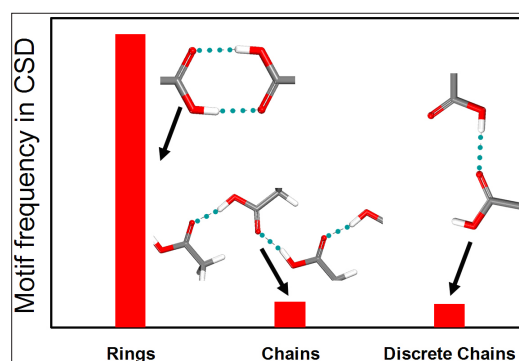
## MOTIF の機能

Motif とケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)とのインターフェース[1]は、Cambridge Crystallographic Data Centre(CCDC)の Mercury 機能[2]を利用しています。Motifは、類似の構成を持つ分子が類似の結合様式に結晶化し、新しい構造となるか、という重要な問題に答えを出すものです。

Motif では、分子結晶の分子間結合に関する情報を抽出することと、この情報を既知の構造のものと比較することの、2つの主要なワークフローをサポートしています。

最初のワークフローでは、あらかじめ定義されたコンタクトポイント(通常はアクセプタ/ドナーまたはイオンコンタクト)を使用して、リング、無限および有限連鎖、不連続なモチーフ、および分子間コンタクトなどの結合モチーフを検索します。

2番目のワークフローでは、ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)に対し、類似または関連構造とその結合モチーフに関する検索を行います。Motifでは、類似性測定(Tanimoto 係数に基づく)を利用し、CSDの結合モチーフと分析された構造の結合モチーフが一致しているかどうかを評価します。その結果、類似性のスコアが分析された構造に割り当てられます。このため、提案された新しい多形を、類似分子構造を持つ既知の構造と統計的に比較できます。



カルボキシル基の水素結合モチーフとその統計的発生

## MOTIF の活用方法

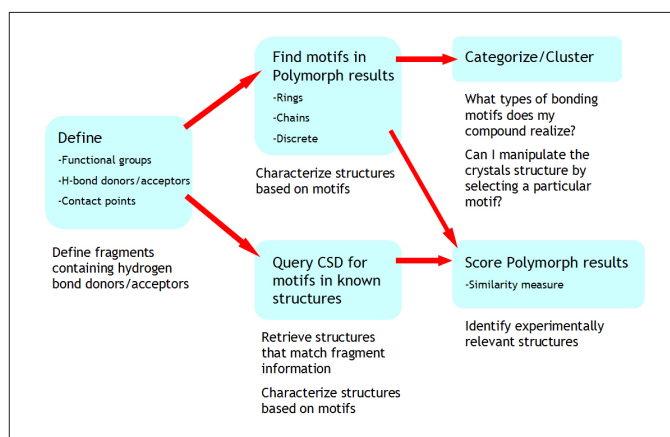
Motif は結晶工学の取り組みを支援するために設計されたツールです。Polymorph (Accelrys の結晶パッキング予測ツール)と Motif を一緒に使用すると、さらなる分析やランキング機能が利用

できます。Polymorph のパッキング予測に対し、Motif の統計的なランキング / スコアリングによって、Polymorph の結果に対する信頼性をより高めることができます。さらにこの分類によって、結晶工学的な取り組み(たとえば、選択的結晶化戦略[3])の際に利用できる価値ある知識を得ることができます。

## 特長

水素結合トポロジ(モチーフ)の検索は、対話形式で設定する方法で行うことができ、可能性のあるモチーフの部類、水素結合、ドナーおよびアクセプタ部位に含まれる官能基の化学的な情報を CSD に送ることができるクエリに変換します。Motif ではこの設定を以下のような方法で簡単に行うことができます。

- Materials Studio の “Set” コンセプトを使用して、対話形式により官能基を定義
- ドナー / アクセプタ原子の完全な構成リストを使用した自動処理、または手動選択によるコンタクトポイントを作成
- 塩選択調査用にイオンコンタクトポイントをサポート



Motif のワークフロー

## Motif の機能

- クエリを作成するためのモチーフの簡単な選択
- Taminoto 係数に基づくスコアリング関数
- CSD 登録情報や入力リスト(Polymorph の出力結果)のスコアリング
- CSD における過去の検索結果の再利用
- 社内や研究所内の異なる組織間で CSD へのアクセスを可能にするクライアント/サーバ構造

## MATERIALS STUDIO のメリット

Motif は Material Studio のモデリング・シミュレーション パッケージを通して使用できます。Material Studio はモデリング・シミュレーションの総合的なソフトウェアとツールを提供します。柔軟なクライアント/サーバ コンピューティングによって簡単にサーバへのアクセスができ、計算化学と物質科学の先進的なシミュレーションをサーバで実行した後、使用するデスクトップに直接結果を返すことができます。

Motif で作成された結果は、Materials Studio にある表形式のスタディテーブル環境を使用して分析できます。スタディテーブルでは、結果の要約表示、結晶構造とモチーフ式の関連付け、検出されたモチーフ数、スコアリング情報、さらに CSD から取得された関連構造の収集が可能になります。Materials Studio を使用すると、関連するモデリング・シミュレーション機能を統合的に利用できるため、得られた構造情報の質をさらに高めることができます。そのような Materials Studio の機能には、結晶形態予測、分子力学、量子力学に基づく格子エネルギー評価、高度な可視化機能、粉末X線パターンの予測、統計分析などがあります。

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/>

## 参考文献

1. F. H. Allen, *Acta Cryst.*, 2002, B58, 380-388.
2. C. F. Macrae, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, G. P. Shields, R. Taylor, M. Towler and J. van de Streek, *J. Appl. Cryst.*, 2006, 39, 453-457.
3. Cross, W., Blagden, N., Davey, R., Pritchard, R., Neumann, M., Roberts, R., and Rowe, R., *J. Crystal Growth & Design*, 2003, 3(2), 151-158.