

生体分子シミュレーションのための強力なコンポーネント

タンパク質、タンパク質-リガンド複合体、低分子の分子力学と分子動力学のシミュレーション

カスタムコンポーネントを備えた完全独立型 CHARMM 機能

CHARMm Component Collection

CHARMm® Component Collection は、有効性が広く認められている CHARMM エンジンを使用した生体分子シミュレーションのための強力なコンポーネントが提供されています。このコンポーネントコレクションによって、Pipeline Pilot™ の標準機能を拡張し、タンパク質、核酸、低分子、タンパク質-リガンド複合体に対する安定した分子力学計算と分子動力学シミュレーションができるようになりました。

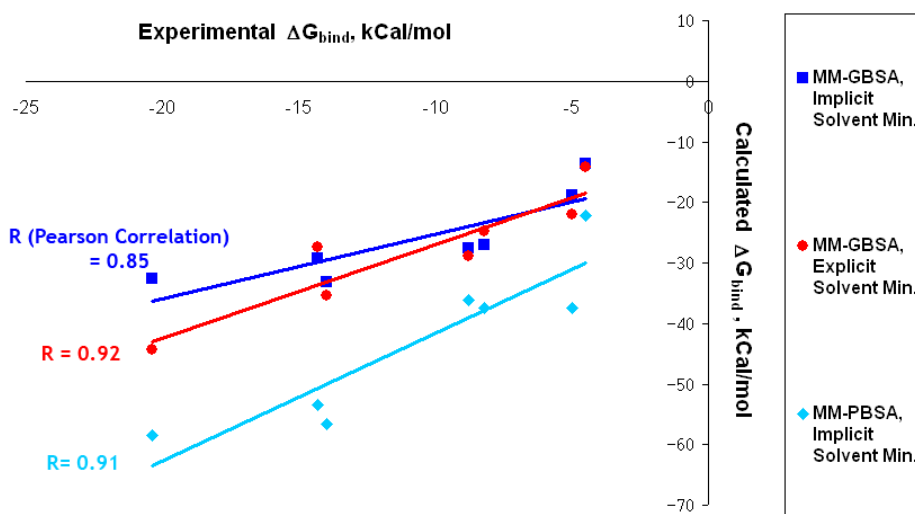
次の機能拡張により、様々な手法が組み込まれたシミュレーションワークフローを独自に作成することができます。

- ・ カ場タイプおよびパラメーターの割当て
- ・ Molecular Mechanics-Poisson Boltzmann with Surface Area (MM-PBSA) 法、または Molecular Mechanics-Generalized Born with Surface Area (MM-GBSA) 法を使用した、リガンドドッキング ポーズのスコアリング
- ・ CDOCKER を使用した、リガンドのドッキング
- ・ CHARMM スクリプトで作成された、カスタム スクリプトの実行
- ・ 様々なカ場、手法、溶媒モデルを使用した、タンパク質、タンパク質-リガンド複合体に対する、分子力学と分子動力学シミュレーションの実行

CHARMm Component Collection のアプリケーションワークフロー

CHARMm Component Collection では、計算化学を用いた創薬研究環境で重要なアプリケーションとワークフローをすべて使用できます。

- ・ CHARMM を使用したカ場ベース スコアリングの実行による、より正確な vHTS 結果の順位付け
- ・ 単一プロトコルでの、完全に自動化されたリガンドの調整と仮想スクリーニング
- ・ 複雑な CHARMM スクリプトの知識を必要としない、洗練されたプロトコルの作成
- ・ 専門家ではないユーザーへの、電子メールによるプロトコルの公開と共有
- ・ 化合物ライブラリーの既存プロトコルへのポイントや、コンポーネントの置換による、真の「プラグ アンド プレイ」機能の実現



様々な溶媒モデルを使用した、ヒオチン類似体(アビジンにドッキングしたもの)のカ場ベース スコアリング

コンポーネント

力場タイプの割り当て:

CHARMm でサポートされているほとんどの力場を使用できます (CHARMm、CHARMm-polarH、cff、charm22、charm、charm27)

明示的な溶媒和:

周期境界条件、または調私振動子控促条件を境界球に適用します。周期境界条件では、立法晶・斜方晶・切頂八面体の格子条件がサポートされています。

CDOCKER:

CDOCKER は、受容体結合部位内でのリガンド ドッキングを行う CHARMm の MD シミュレーション スキームです。高温 MD から生成されたランダムなリガンドの配向性が、まず結合部位に配置されます。その後、ランダムな剛体回転を使用して結合ポーズが検索され、格子ポテンシャルを使用したアニーリング シミュレーションが行われます。最後に、力場のフルポテンシャルを用いた最小化による、リガンドポーズの緻密化が行われます。

結合エネルギー:

MM-PBSA 法または MM-GBSA 法を利用して、リガンドと受容体間の結合自由エネルギーを計算することができます。Generalized Born approximation、Generalized Born with molecular volume (GBMV)、Generalized Born with simple switching (GBSW)など、様々な GB 溶媒モデルを使用することができます。

CHARMm 標準タスク:

個々のコンポーネントを、エネルギー計算、最小化、昇温、平衡、ダイナミクス計算、水素の最適化 (HBUILD) に使用することができます。

CHARMm スクリプトファイルの実行:

CHARMm スクリプトに精通しているユーザーは、カスタムコンポーネントを使用して CHARMm スクリプトを実行することができます。

マシネーター:

コンポーネントを使用して、分子システムから特定の鎖、水、ヘテロ原子を除去することができます。選択範囲に基づいた分子や鎖の幾何学的中心を計算することができます。

必要条件

- Discovery Studio® 1.7 CHARMm
- Pipeline Pilot Server 6.0 (Windows版またはLinux 版)
- Pipeline Pilot Professional Client 6.0 のライセンスおよび Chemistry Collection
- Integration collection (推奨)
- DS Visualizer Pro (推奨)

