

Amber 22

Tools for Molecular Simulations

コンフレックス株式会社
〒108-0074

東京都港区高輪3-23-17
品川センタービルディング6F

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

Email : info@conflex.co.jp

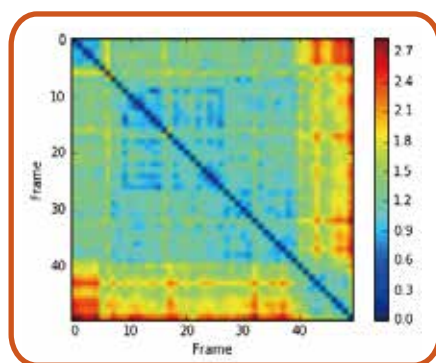
<https://www.conflex.co.jp/>

CONFLEX Global

Email : cust-info@conflex.net

<https://www.conflex.net/>

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は、Amber22とAmberTools22から構成されており、これらを組み合わせて使用します。

プログラム概要

主なプログラムは、下記のとおりです。

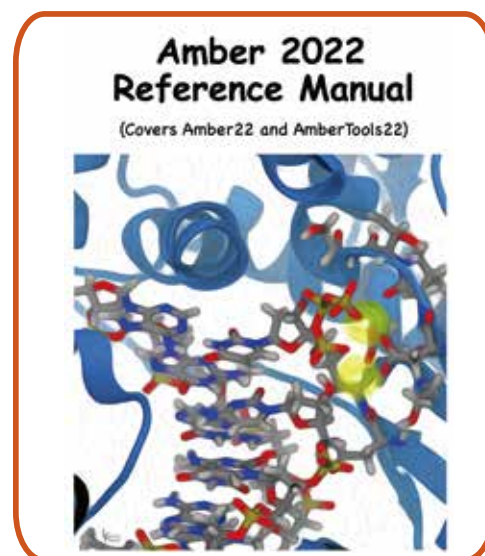
sander: 分子動力学計算を行うための最新機能が導入された、メインプログラムです。NMRのNOE測定から得られる距離拘束、ねじれ角拘束、化学シフトとNOESY強度などから得られるペナルティ関数を基にしたNMR構造の精密化が可能です。また、レプリカ交換法、熱力学積分法、PMF (Potential of Mean Force) 計算などが使用できます。さらに、QM/MM機能も導入されています。新機能を研究するための役割を担っています。

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。NVIDIA GPU, Intel Xeon Phiによる高速化も可能になっています。sanderで頻繁に使用されたテストされたコードを高速化して実装しており、本番のMD計算で使用されます。

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。

NAB: 分子構造を操作する事に特化したプログラムを書くための言語環境です。分子力場計算やDistance Geometryを基としたモデリングを行えます。

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, MCPB: 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、PDB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。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、それらを組み合わせたシミュレーションが可能になります。MCPBコードでは、金属中心を含む力場を作成するために利用できます。

cpptraj: 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。

MMPBSA.py: 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たり、コンフォメーション間の自由エネルギー差を見積もれたりします。

pytraj: トラジェクトリー解析プログラムcpptrajへのPython言語バインディングです。Jupyter電子ノートブックと組み合わせて、対話型データ解析を実現します。また、解析結果のグラフィック表示も可能です。ノートブックはWebアプリケーションなので、文書の共有も可能になります。

Amber利用例

【NMRリファインメント】

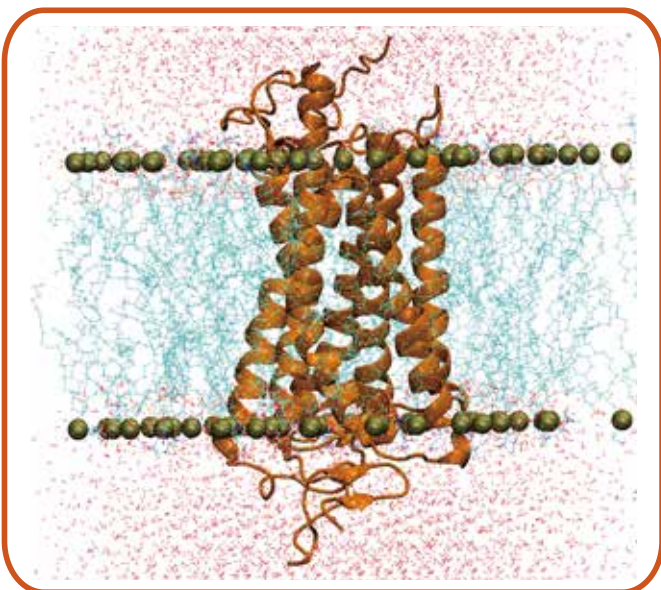
・NMRのNOEやJ-カップリングの測定から得られる距離やねじれ角の情報を基に、シミュレーション中に拘束を加えた上で構造最適化や分子動力学計算を行うことができます。

【QM/MM/MD】

・量子力学計算と分子力場計算を組み合わせたQM/MM法を、効率的に精度よく実行できます。内蔵のQM計算では、半経験的手法、ab-initio、DFTなどが利用できます。また、外部プログラム(Gaussian等)と組み合わせる事による、QM/MM計算も可能です。

【NEB (Nudged Elastic Band) 法】

・ポテンシャル・エネルギー表面上で、コンフォメーション変化の道筋を複数の構造でたどり、エネルギー変化の様子を見積もります。パス上の各構造間はポテンシャルで結ばれ、ある程度の距離を保つように設定されます。そのため、Elastic Band(ゴムバンド)法と名付けられています。

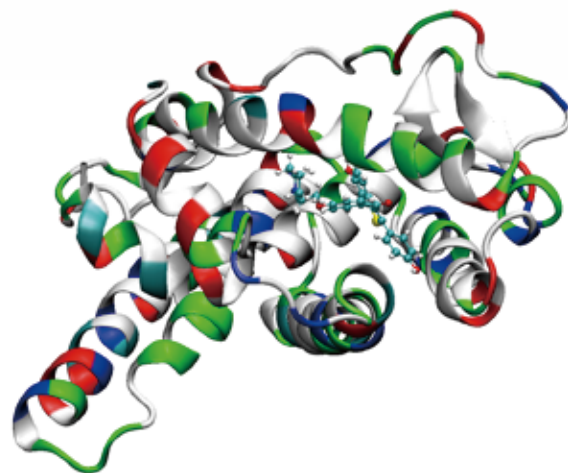


【MM-PBSA】

・分子力場とポアソン・ボルツマンあるいは一般化ボルン溶媒接触表面の手法を組み合わせ、2状態間の自由エネルギー差を求める手法です。レセプターとリガンドの結合自由エネルギーの算出等に用いられています。

【TI (Thermodynamic Integration) 法】

・状態Aと状態Bの自由エネルギーをパラメーター λ を使ってカップリングさせることにより、自由エネルギー差を算出する手法です。異なるリガンドがタンパク質に結合する際の結合自由エネルギー差を推算する際に用いられています。



【脂質二重膜】

・脂質のパラメーターを用いて、膜のシミュレーションを行う事が可能です。タンパク質のパラメーターを併用する事により、膜中にタンパク質が埋め込まれた構造もシミュレートできます。

【アンブレラ・サンプリング】

・ある特定の反応座標に沿って複数の位置を定め、それぞれ別々にある狭い範囲内をサンプリングし最後に組み合わせる事によって、自由エネルギー変化の様子を求める手法です。遷移状態、中間体の探索などに有効です。

【定pHシミュレーション】

・溶媒のpHはタンパク質中の非中性側鎖に影響を及ぼし、タンパク質自体の機能や構造に大きな影響を与えます。この手法は、分子動力学とモンテカルロ法を組み合わせ、分子内の様々な側鎖のプロトン化の状態やコンフォメーションをサンプリングします。

これらの利用例の詳細は、以下を参照してください：

<https://ambermd.org/tutorials/>

https://www.confex.co.jp/product_amber_tutorial.html

