

密度汎関数法によるタンパク質全電子波動関数計算

ProteinDF

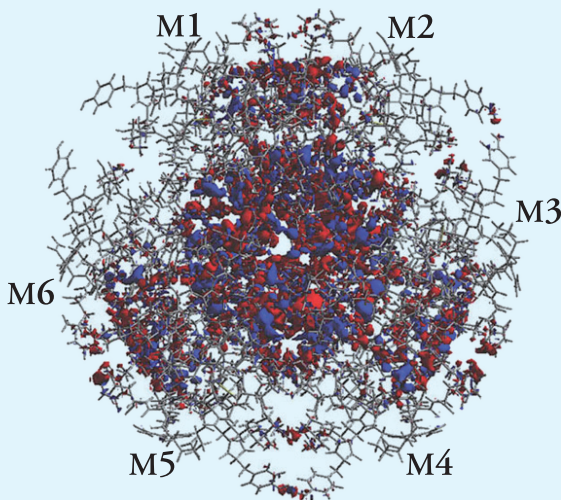
ProteinDF System 2013

生体分子の電子構造モデリングにおいて、
我々が現時点で到達した最新機能を提供!

PCクラスタからスパコンまでカバー
ガウス型基底関数を用いる量子化学標準の密度汎関数法プログラム

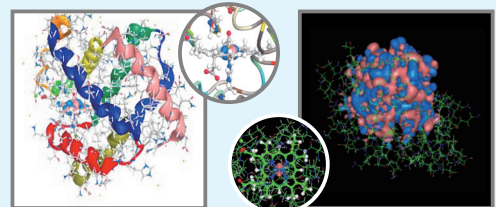
実証事例

大規模並列計算

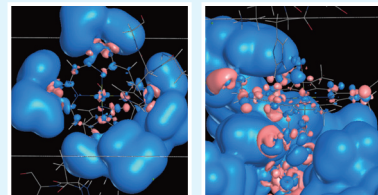


インスリン6量体と単量体の差電子密度分布図
✓6量体形成を安定化する電子の流出入

(金属)タンパク質全電子計算

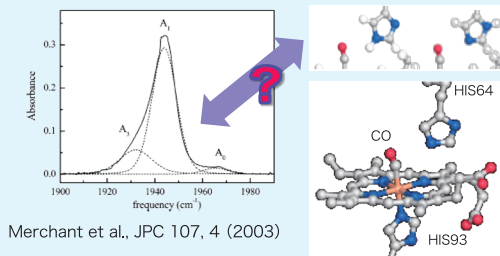


ヘムタンパク質の分子軌道。(左) MbCO、(右) Cyt. c
✓タンパク質の機能を反映



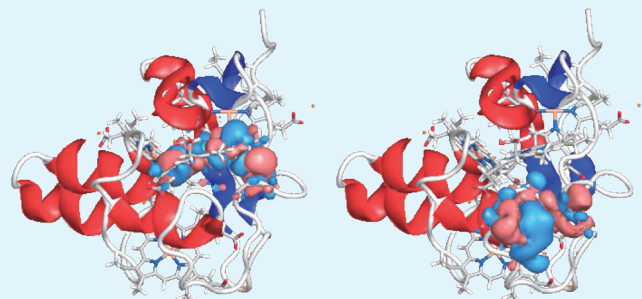
差電子密度分布図
(左) 側鎖置換 (ポルフィン → プロトポルフィン)
(右) ペプチドサイズ増加 (3残基 → 14残基)
✓タンパク質が持つ電子の実態

分子特性解析

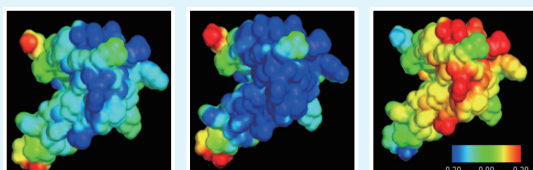


Merchant et al., JPC 107, 4 (2003)
MbCOのCO伸縮IRスペクトル同定
✓実験値の解析・予測

複雑金属タンパク質



Cyt. c₃の分子軌道
(左) HOMO、(右) LUMO
✓4つのヘムを持つ複雑金属タンパク質の
全電子計算が可能



インスリンの静電ポテンシャル (ESP) 分布
(左) 全電子計算、(中) 古典計算、(右) これらの間の差
✓正しいESP

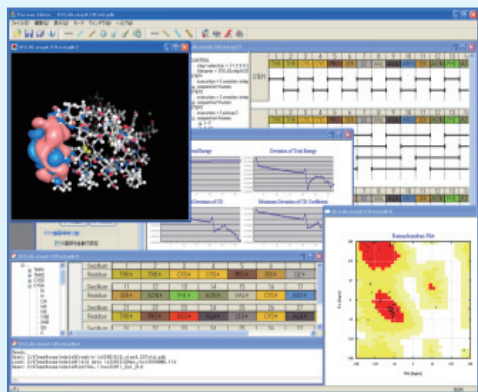


ちなみに…
Cyt. c₃はProteinDFのロゴ

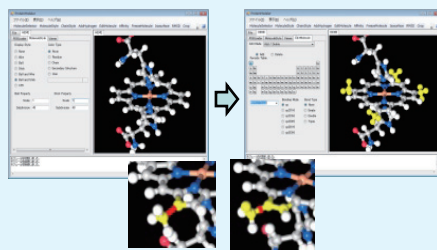


詳しくはこれらの本をご参照ください。
ISBN-13: 978-4627241411, ISBN-13: 978-4627879119

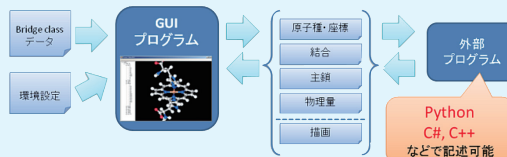
プリ・ポスト環境



ProteinEditor画像例



分子モデリング(開発中)



プリ・ポスト環境カスタマイズ概念図

タンパク質全電子計算のデータ量は膨大で、シミュレーションもまた大変複雑です。

ProteinEditorはタンパク質量子化学計算達成を補助するための、プリ・ポスト環境です。

2011バージョンから、データ構造をプラットフォーム非依存へと変更しました。将来、対話型環境としても、また、C++、C#、Pythonなどのコード記述によって、自分なりの外部プログラムとして使用することもできます。

機能一覧

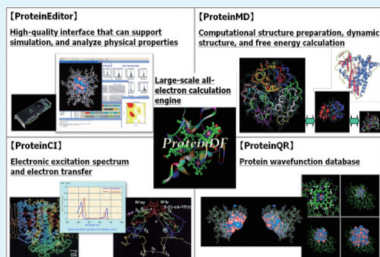
機能項目	サポート内容(開発中を含む)
全電子正準波動関数計算エンジン	ダイレクトSCF 標準法、RI(Resolution of Identity)法
計算方法	SVWN/BLYP/B3LYP/DFT+D/LC/CAM-B3LYP、 HF、Dual-level DFT
収束(加速)法	Simple/Anderson/DIIS Projection法/Level-shift法/MO重なり法
分子特性	分子軌道、電子密度、静電ポテンシャル、 EDA、IR/Raman エネルギー(基底状態/勾配/励起状態) 構造最適化、NMR
基底関数	DZV/DZVP/DZVP2、最適化Fe用セット、他

モジュール	先進的特徴(開発中を含む)
ProteinDF	10,000コアで並列性能を発揮 分子特性計算
QCLO	ペプチドタンパク質の半自動正準波動 関数計算ソルバ
ProteinMD	DFT-MD/DFT-MC、 構造最適化(IRC)
ProteinCI	Grimme DFT-CI、 HF-CIS
ProteinEditor	生体分子全電子計算のためのプリ・ポスト / モデリング機能 グラフィカル・ユーザ・インターフェース 外部プログラムとしてカスタマイズ可能
ProteinQR	タンパク質波動関数データベース

動作環境

OS : UNIX/Linux (Redhat, SuSE, Ubuntu)、
C++ コンパイラ : gcc/intel/PGI ライブラリ : MPI, LAPACK/ScaLAPACK
スパコン : SGI Altix, Cray XT, Fujitsu PRIMERGY、東京大学HA8000 (T2K)
フロントエンド (ProteinEditor): WindowsXP/Vista

ProteinDFパッケージ



ProteinDFシステムは ProteinDF /QCLO、ProteinMD、ProteinCI、ProteinQR、および ProteinEditor /ProteinModelerの各モジュールで構成されています。

各モジュール間の連携計算が実行できます。

ドキュメント

インストールマニュアル / ユーザーズマニュアル / チュートリアルガイド、例題数十種。

今後の開発予定

(新規機能) CD法、NMR計算、構造最適化計算
(性能改良) エネルギー勾配、DFT-MD法、
DFT-CI法、EDA



ProteinDFは、文部科学省「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発 (RISS)」ならびに「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 (ISLiM)」の各プロジェクトにおいて支援を受けました。ProteinDFは国立大学法人東京大学の登録商標です。その他の会社名、製品名等は、各社等の登録商標または商標です。



ProteinDF導入、機能カスタマイズなどのコラボレーションが可能です。お気軽にお問い合わせ下さい。
東京大学生産技術研究所 (IIS) 佐藤文俊研究室
<http://satolab.iis.u-tokyo.ac.jp/>



2013年3月