Fiche logiciel n° 2 bis*

MAD

Auteurs et/ou diffuseurs : Oxford Molecular SA

RESSOURCES

MAD est opérationnel sur les stations Unix suivantes :
- Silicon Graphics tous modèles
- Hewlett-Packard 9000 série 700
- IBM RISC/6000 (avec bibliothèque Phigs et run-time Fortran)

Pour toutes ces stations de travail, une carte graphique 24 bits/Z-buffer est recommandée

RÉALISATION

Auteurs :

Dr R. Lahana (Centre de Recherche Pierre Fabre et Oxford Molecular), Prof. G. Grassy (Centre de Biologie Structurale de Montpellier), Dr J.M. Lefour (École polytechnique - Palaiseau), Prof. J.L. Rivail (Laboratoire de chimie théorique - université de Nancy), Dr R. Lavery (Laboratoire de biochimie théorique, IBPC - Paris), Dr K. Woods (Oxford Molecular - Oxford), Dr B. Bigot (ENS - Lyon), Dr P. Sautet (CNRS - Lyon)

Langage utilisé : Fortran et Phigs

Volume des instructions : supérieur à 200000 lignes

Org. ayant participé au financement : CNRS, IBM, CRPF, OML

Date de la dernière version : juillet 1993

Etat du logiciel : progiciel

Version de démonstration : version bridée

Dév. prévus : interfaces avec divers produits-niche d'Oxford Molecular

DIFFUSION

Oxford Molecular SA - Tél. : (1) 69.33.35.90

Nature de la diffusion : commerciale

Support de diffusion : cartouche 150 MB ou DAT 4 mm

Format : binaire

Suivi du produit : assistance, maintenance et formation assurées. Télémaintenance possible par réseau. Une version majeure par an + une version intermédiaire par trimestre. Collaborations envisageables

Conditions financières : les prix sont fonction de la machine. Conditions spéciales pour les sites académiques (universités, CNRS, INSERM, écoles, etc.)

Obligations de l'acquéreur : licence d'utilisation

Particularités techniques de l'installation : installation assurée par la société ou par l'utilisateur. La bande contient un utilitaire d'installation automatique

Références d'installation : - France : Servier, Fabre, IBESIS, etc., plusieurs dizaines d'universités - Etranger : ENI, Rotta Pharma, Dow Lepetit, Himont, IQS, plusieurs dizaines d'universités...

Nombre d'installations : supérieur à 100

DOCUMENTATION

Manuel d'utilisation, plaquette de présentation, jeux de tests

ADRESSES

Oxford Molecular SA - X-Pole, École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex. Tél. : (1) 69.33.35.90. Fax : (1) 69.33.30.41.

Oxford Molecular Ltd - The Magdalen Centre, Oxford Science Park, Sandford on Thames, Oxford OX4 4GA, UK. Tél. : +44 865.784.600. Fax : +44 865.784.601.

Oxford Molecular GmbH - Am Sportplatz 8, D-6108 Weiterstadt, Allemagne. Tél. : +49 6150.52.654. Fax : +49 6150.52.654.

Oxford Molecular Inc - 744 San Antonio Road, Suite 27, Palo Alto, CA 94 303, USA. Tél. : +1 415.494.6274. Fax : +1 415.494.7140.

Fiche logiciel n° 2 bis - *suite*

MOTS CLÉS

Modélisation moléculaire
Cristallographie
Mécanique moléculaire
Propriétés physico-chimiques
Analyse conformationnelle

MAD

DÉFINITION

Développé à partir de collaborations impliquant des laboratoires privés et universitaires, MAD est un programme modulaire de modélisation moléculaire. Le module de base permet la construction et la manipulation de molécules (petites molécules, macromolécules, ADN, mailles cristallines), ainsi que des outils permettant la réalisation d'analyses conformationnelles et le calcul de propriétés telles que la lipophilie et les surfaces de potentiels électrostatiques.

DESCRIPTION

Plusieurs types de model-builders permettent la construction ou la modification de toutes sortes de molécules.

Un menu particulièrement développé est consacré aux calculs d'énergie par mécanique moléculaire et à l'analyse conformationnelle. Plusieurs champs de force sont disponibles (MM2, Amber, Cosmic). L'utilisateur peut créer ou ajuster autant de champs de force qu'il le désire. L'équation de l'énergie est elle-même modifiable interactivement. En particulier, trois types de potentiels stériques sont disponibles : Buckingham, Lennard-Jones et Morse. Deux minimiseurs peuvent être mis en œuvre (Newton Raphson Block Diagonal et Fletcher-Reeves), ainsi qu'une grande variété de stratégies d'exploration de l'espace conformationnel (grilles rigides ou minimisées, Monte-Carlo-Métromolis, etc.)

Deux techniques d'évaluation de charges partielles sont proposées : la méthode de Gasteiger et celle d'Abraham (Charge), qui est une combinaison de l'effet inductif (charges sigma) et de calcul Hückel (charges pi)

Diverse cartes de distribution d'une propriété peuvent être générées. Les cartes sont de type isolignes, surfaces d'accessibilité ou grilles. Les propriétés sont le potentiel électrostatique, le potentiel de lipophilie ou toute fonction définie par l'utilisateur

Il est également possible de construire et/ou d'étudier des édifices cristallins grâce à un menu consacré à l'état solide et la catalyse. La maille élémentaire peut être répétée à volonté dans les trois directions h, k, l. Les surfaces sont définissables soit par un jeu d'atomes définissant un plan, soit par une sphère, soit par leurs indices de Miller. Les calculs d'adsorption se font par Extended Hückel ou par un calcul ab initio (Crystal). On peut également afficher le diagramme de poudre correspondant à un cristal, avec n'importe quelle longueur d'onde et plusieurs types de chambres simulées

MAD est interfacé avec ASP (Automated Similarity Package), le logiciel de calcul de similitude moléculaire écrit par le Prof. Graham Richards et son équipe (université d'Oxford), également distribué par Oxford Molecular

De nombreuses fonctions d'analyse graphique sont applicables à tout affichage, en particulier aux protéines. Le menu Movie permet de rejouer un phénomène dynamique quelconque (modes de vibration, dynamique moléculaire, Monte-Carlo, etc.). Enfin, la compatibilité avec un grand nombre de formats de fichiers est fournie (PDB, CSSR, Cambridge, MDL Maccs et Isis, Tripos molfile, PCModel, MM2, Mopac, Gaussian, etc.), ce qui rend facile l'échange des données avec d'autres systèmes

Autres produits complémentaires diffusés par Oxford Molecular :

- COBRA : analyse conformationnelle automatique par intelligence artificielle. Conversation 2D/3D d'une chaîne SMILES
- ASP : similitude moléculaire quantitative
- ANACONDA : comparaisons de propriétés de surfaces par projection gnomonique
- PROQUANTUM : package de mécanique quantique complet, permettant entre autres l'évaluation de la réactivité et des caractéristiques spectroscopiques d'une molécule. Interfaces avec MOPAC V6, EHPROP et CADPAC
- PROEXPLORE : prédiction de structure secondaire, alignements multiples de séquence et homologie
- PROSIMULATE : simulation par dynamique moléculaire de macromolécules ou de petites molécules. Très nombreuses fonctionnalités. Les moteurs interfacés sont GROMOS et AMBER
- TSAR : progiciel de relations structure-activité, incluant un tableur moléculaire, un générateur de descripteurs moléculaires, topologiques et de forme, un ensemble de méthodes statistiques uni- et multivariées et des bases de données de substituants
- IDITIS : base de données relationnelle de structures de protéines
- AMB : modélisation d'anticorps (de la séquence à la structure tridimensionnelle)
- NEMESIS : logiciel de modélisation pour Macintosh et PC/Windows

* Nouvelle version (juillet 1993) de la fiche logiciel n° 2 (*L'Actualité Chimique*, **1993**, 2, 33-34). A noter que la diffusion du logiciel MAD est maintenant confiée à Oxford Molecular SA.