

創薬支援ツール

SeeSAR 4.2リリース



独BioSolveIT社のSeeSARは、メディシナルケミスト向けのリード化合物最適化ツールです。SeeSARは、リガンド原子の結合自由エネルギー寄与や結合二面角の妥当性、物性値等を同時に評価しながら受容体の結合部位内での分子設計が可能です。BioSolveIT社は、StarDropの開発元である英Optibrium社とメディシナルケミスト向けのツールの開発において提携しました。その成果として、StarDropのADME特性を計算する機能がSeeSARに搭載されました。ここではこのADME特性の計算機能と併せて、SeeSAR 4.2で追加された機能について紹介いたします。

■StarDropのADME特性計算

新規リガンド構造の探索において、活性値だけでなくADME特性を確認しながら分子設計を行うことは創薬研究の効率化につながります。SeeSARは、リガンド候補構造に対して、以下のStarDropのADME特性の計算が可能です。

- logP (Octanol/Water)
- logD (Octanol/Buffer at pH 7.4)
- Aqueous Solubility, Solubility at pH 7.4
- Cytochrome P450 Affinities (CYP2C9, CYP2D6)
- Blood Brain Barrier Penetration
- Human Intestinal Absorption
- P-glycoprotein substrate
- Plasma Protein Binding

SeeSARは、これらのADME特性とあわせて、分子量やTPSAなどの物性値、IC50やLigand Efficiency(LE)、Lipophilic LE(LLE)などの受容体との親和性を総合的に評価しながら分子設計が可能です。

■その他のSeeSAR 4.2の新機能

以下のような機能が追加されました。

■結合自由エネルギー計算機能の制御

結合自由エネルギー寄与の自動計算をオフにすることが可能になりました。受容体構造を読み込まない場合でも、化合物データベースに対してADME特性を計算できます。

■分子フィルタ機能

受容体との親和力やADME特性、物性値等で分子

のフィルタリングが可能です。

■各種情報の表示/非表示の切替

原子毎の結合自由エネルギー寄与や結合二面角の妥当性、タンパク質・分子表面・非占有空間・溶媒の表示/非表示をボタン操作で簡単に切替できます。

■コマンドラインの対応

バッチ処理や他ツールとの連携が可能になりました。

■リガンドアノテーション機能

化合物毎にメモを残せます。日本語にも対応しています。

SeeSARは、リガンド構造の評価機能に加え、利用者がより直感的に操作できるようにインターフェースに工夫がなされています(図1)。ぜひ一度体験ください。

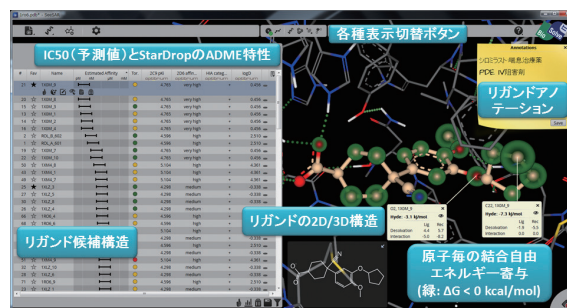


図1 SeeSAR 4.2インターフェース

■SeeSAR動画

BioSolveIT社のウェブサイトにてSeeSARの紹介とチュートリアル動画がありますのでご覧ください¹⁾。

1) <http://biosolveit.de/SeeSAR/tutorials/index.html>

- 弊社Webサイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- 電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバーは下記URLをご利用ください。
<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/news/newsletter.html>
- 本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトのご担当者様にお送りしています。その他に発送のご希望がございましたら弊社までご連絡ください。
- 記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

RSI ニュースレター

Vol. 23, No. 3, 2016

2016年7月1日発行

発行人 後藤 純一

発行所 株式会社菱化システム

Copyright © 2016 Ryoka Systems Inc.

Ryoka
Systems
Inc.

株式会社 菱化システム
科学技術システム事業部

URL: <http://www.rsi.co.jp/>

TEL: 03-6830-9724 FAX: 03-5610-1161 E-mail: support@rsi.co.jp