

実験研究者のための MOE/web アプリケーション

((株)モルシス) ○池上貴史, 神谷謙太郎, 片岡良一

実験研究者が、計算化学による解析を簡単な操作で実行し、速やかに結果を得ることは研究を円滑に行う上で重要である。MOEは、低分子、ペプチド、核酸、タンパク質、抗体などの広範な分子モデリングとシミュレーションが可能なモダリティ研究に対応した統合計算プラットフォームである。MOE/webは、コマンドラインによるMOEの計算(MOE/batch)をインターネットブラウザから実行するためのウェブインタフェースである。特定の計算を簡単なボタン操作で実行できるようにアプリケーションは作られており、ユーザーは少ないステップで結果を得ることができるため、実験研究者の利用に適している。各自のPC(MOE/webクライアント)にはMOEのプログラムを個別にインストールする必要がなく、MOE/webサーバーにCPUや記憶媒体などの計算資源を集中させることが可能である(Figure 1)。MOEの使用頻度の高いユーザーはGUIを中心に利用し、使用頻度の低いユーザーはMOE/webを利用するなどの運用にあわせた計算環境を構築できる。

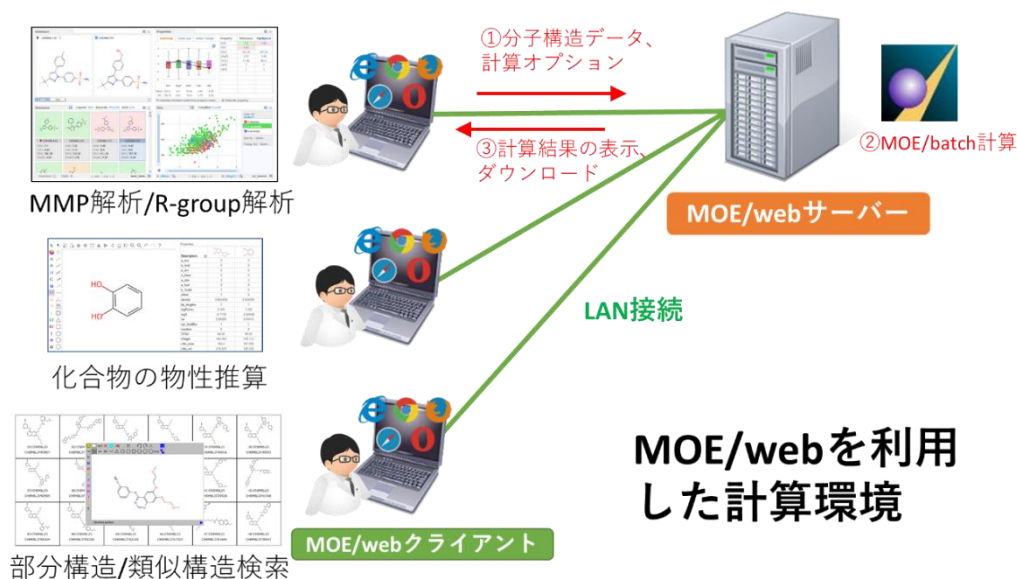


Figure 1. MOE/web の活用イメージ

MOE/web アプリケーションとして、化合物の物性推算、SAR 解析、SD ファイルフィルター、タンパク質類縁配列検索、抗体自動モデリングなどが標準搭載されている。またドッキングシミュレーションや配座解析、低分子の重ね合わせといったユーザー独自のMOE/webアプリケーションの実装も可能である。ここでは、数あるMOE/webアプリケーションの中から、メディシナルケミストが簡単にMatched Molecular Pair (MMP)解析やR-group解析を行うためのアプリケーション「MOEsaic」と、数千万件の化合物群の中から部分構造や類似構造を超高速に検索するためのアプリケーション「MOE-QFSS」を中心に実際の操作も交えて紹介する。

MOE/web Applications for All Medicinal Chemists

Takashi Ikegami*, Kentaro Kamiya, Ryoichi Kataoka
MOLSIS Inc.

MOE/web is a browser-based interface of MOE for medicinal chemists. We here describe two MOE/web applications, namely MOEsaic and MOE-QFSS. MOEsaic enhances typical medicinal chemistry workflows aimed at interrogating the SAR/SPR data through the application of interactive Matched Molecular Pair (MMP) analysis and R-group profiling. MOE-QFSS, the Quick Federated Substructure Search, is an ultra-fast substructure and similarity search application for several huge compound databases. Using these MOE/web applications, medicinal chemists can immediately acquire knowledge to find new lead compounds from large chemical spaces.