

統合計算化学システム

MOE 2005.06リリースセミナー
-ASEDock 2005, MolFilter 2005リリース-

MOE 2005.06のリリースに合わせ、7月12日（大阪）と14日（千葉）に、開発元のCCG社より開発責任者兼CEOのPaul Labuteらを招聘し、MOE 2005.06 リリースセミナーを開催しました。本セミナーではMOEの新機能や改良点などを中心に紹介し、弊社におけるSVLアプリケーション開発事例の紹介も行いました。

◆ MOE 2005.06 リリースセミナー

・Overview of Release 2005.06

Elizabeth Sourial CCG社

MOE 2005.06新機能の概要説明を行いました。

新機能の詳細については弊社ニュースレター第12巻2号、3号をご覧ください。

・Automatic 2D Depiction of Molecules

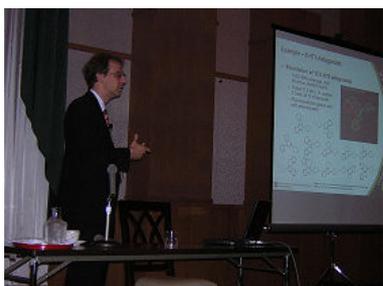
Paul Labute CCG社

分子二次元描画の機能を説明しました。この機能は3次元構造の低分子を表示と同時に2次元に変換したり、データベース中の分子を連続的に変換し出力することができます。

・Pharmacophore Elucidation and Shape Searching

Paul Labute CCG社

共通ファーマコフォアの抽出機能や、分子形状フィンガープリントを用いたデータベース検索のアルゴリズムや応用事例を紹介しました。



CCG社 Paul Labute氏

・RSIIにおけるSVLアプリケーション開発事例ご紹介

株式会社 菱化システム

弊社にて開発したアプリケーション（ASEDock、MolFilter、AutoQuaSAR）やDaylight社、Spotfire社のソフトウェアとのインターフェースなどを事例を交えながら紹介しました。

本セミナーで紹介しましたASEDock 2005、MolFilter 2005をリリースしました。

◆ ASEDock 2005

高速ドッキングプログラムの最新版「ASEDock 2005」を8月にリリースしました。弊社では昨年リリースしたASEDockについて、PDBから選んだ50件のテストセットを使用して精度の検証を行い、アルゴリズムの改良を続けて参りました。その結果、ASEScoreの算出法を見直すことにより、受容体ポケットとリガンドの形状の相補性をさらに精密に定量化することが可能になりました。この新しいASEScoreをもとにしてPoseのアルゴリズムを改訂することにより、速度と精度の大幅な向上を達成しています。

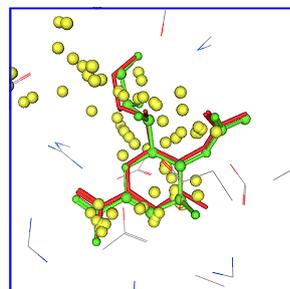


図1 ダミー原子とタンパク質原子の一部から成るASEモデル (PDB ID: 1N1Tから作成。Stick表示がPDBに登録されたリガンド (DAN) 構造。Ball and Stick表示がPoseされた初期配置。)

◆ MolFilter 2005

MolFilterは、一昨年のリリース以来、分子記述子による簡便な分子フィルタリングツールとして多くの方にご利用頂いてきました。最新版では、従来のand検索のみからand/or/not、さらには()、(())を使い複数の条件を組み合わせ、高度な条件設定にも対応できるようになりました。また、一般的な部分構造の名称についてはリストをパネルに表示し、部分構造条件の設定が容易になりました。

SVLソースコードのご請求は弊社までお問い合わせください。