

MOE2006.08 -新機能のご紹介-

昨秋リリースされましたMOE2006.08では、多くの機能向上や新機能の追加が行われました。今回は、MOE2006.08で追加されたRECAP[®] (Retrosynthetic Combinatorial Analysis Procedure)と、タンパク質の官能基ごとのpKaを予測し、適切な水素付加状態にするProtonation Stateについて紹介します。

RECAP Analysis

RECAP Analysisは、データベースに保存している化合物に対してフラグメント分割を行う機能です。化合物は、アミド結合、エステル結合などの良く知られている結合で分割されます(図1)。フラグメントは、平面構造の化合物をSMILES表記として保存します。MOE2006.08のSMILES表記では、結合の種類を表現できるように拡張されています。

RECAP Analysisによって作られたフラグメントは、活性化合物に含まれていた回数、不活性化合物に含まれていた回数、活性化合物に含まれる割合などの統計情報と共に、データベースに保存されます。

RECAP Synthesis

RECAP Synthesisは、RECAP Analysisによって作られたフラグメントデータベースから、フラグメント同士を再合成することによって、新しい化合物のデータベースを作成する機能です。化合物を作る際には、MOEで作成したQuaSARモデル、フィンガープリントモデル、Model Composerによって作成した複合モデルなどの条件を指定し、ユーザのニーズに応じたライブラリを作ることができます。

作成したライブラリには、基本的な化合物の属性(lead-like, drug-like、分子量、logPなど)も書き出されます。フラグメントデータベースについては、MOEの開発元であるCCG社により、約75万件のlead-like化合物に対してRECAP Analysisを行って作成したフラグメントデータベースが用意されています。

Protonation State

Protonation Stateは、PROPKA[®]の手法に基づいた方法でタンパク質のイオン性官能基ごとのpKa

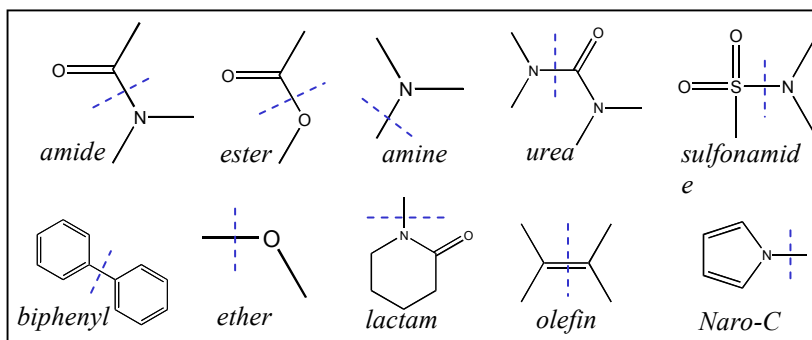


図1 フラグメント分割の際に切断する結合の例

を予測し、指定したpHに従って適切に水素原子の付加状態を調整するプログラムです。タンパク質の構造最適化計算や、ドッキングシミュレーションの分子構造の前処理に非常に便利な機能です。

パネルと分子構造の表示が連動しており、活性部位周辺など、対象とする官能基のpKaの値を即座に、原子にラベル付けすることができます。

1. Lewell, X.Q., Judd, D.B., Watson, S.P., Hann, M.M., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 38 (1998) 511-522
2. Li, H., Robertson, A.D., Jensen, J.H. *Proteins* 61 (2005) 704-721

17インチ3D液晶モニター販売開始

立体視が可能な液晶モニターの販売を開始しました。MOEの画面表示に対応しており、今お使いのマシンに接続するだけですぐに使用することができます。フリッカーレスの画像で、長時間使用しても目に優しいという特長があります。価格は、立体メガネ2個付属で、¥262,500(税込)です。資料請求、テスト使用のご要望などありましたら、support@rsi.co.jpまでご連絡ください。

