

MOE-ASEDock 新バージョンリリース

ドッキングシミュレーションプログラムASEDockの新バージョンをリリースいたしました。新バージョンでは、MOE 2009.10に追加された配座解析法LowModeMDを利用できるほか、MOE/smpへの対応や、ドッキング結果のブラウジング機能、より簡単にMOE/batch上での計算を行えるバッチプログラム出力機能が実装されました。また、ドッキングポーズとその周辺の受容体環境に応じてイオン化状態などを再評価するオプションなども追加されています。

ASEDock概要

ASEDockはMOEの検出するAlpha Siteとその周辺の原子を利用したASEモデルに対してリガンドの配置を最適化することにより精度の高いドッキングシミュレーションを行います^[1]。MOEの追加機能として2004年のリリース以来、MOEのバージョンアップにあわせて改良を重ねてきました。この度、MOE 2009.10への対応に加え機能の追加や更新を行いましたので概要をご紹介します。

主な改良点

◆LowModeMD配座解析法の追加

MOE 2009.10から追加された大環状分子やペプチドなどの配座解析に適したLowModeMD法をASEDockから利用できます。

◆MOE/smpへの対応

MOEの分散処理機能MOE/smpに対応し、複数の入力リガンド分子が自動的に別マシン上や別CPU上のMOE/smpノードに分散され高速に処理されます。1ノードのMOE/smpにつき1トークンのライセンスを必要としますが、MOE/batchを利用することでライセンスを効率よく活用した分散処理が行えます。

[1] J. Goto, R. Kataoka, H. Muta, N. Hirayama, *J. Chem. Inf. Model.*, 2008, 48, 583-590.

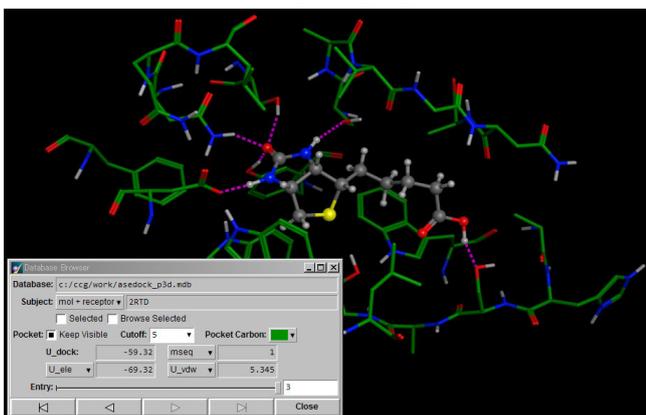


図1 ドッキング結果の表示例 (Protonate3Dオプション適用時の入力分子とイオン化状態が異なる結果例)

◆MOE/batch用プログラム出力機能の改良

受容体やリガンドの構造情報を内包したバッチプログラムが出力されるようになりました。1つのファイルにドッキング計算の条件全てが含まれるので、ファイル管理や別マシン上での計算が容易になります。

◆Protonate3Dオプションの追加

MOEのProtonate 3D機能をドッキング計算に組み込むオプションを追加しました。このオプションを有効にして計算を実行すると、構造最適化計算の前にリガンドと周辺の受容体ポケットの重原子の配置に応じてイオン化状態や互変異性体が再評価されます。計算結果には入力とは異なる状態のリガンドや受容体も得られます。

◆ドッキング結果ブラウザーの改良

受容体構造や各種ドッキングスコアを同時に表示する機能が追加され、結果を容易に閲覧できるようになりました (図1)。

お問い合わせ

MOEの保守契約をされている方を対象に、無償でASEDockプログラムをご提供します。ご希望の方は弊社までお問い合わせ下さい。

MOEフォーラム2010 開催のご案内

■日時： 7月7日 (水) 10:00-17:00

■会場： 大手町サンケイプラザ

■プログラム

- ・MOE 新規機能の応用事例紹介
- ・PSILO (MOE関連製品) 新規機能の紹介
- ・招待講演 (MOEユーザー様)

■参加費用：無料

■申込：5月中旬より弊社Webサイトにて受付

詳細が決まり次第、ご案内申し上げます。