

統合計算化学システム

MOE SVL プログラム集のご紹介



創薬・生命科学分野の研究に広くご利用いただいている MOE には様々なアプリケーションが搭載されています。これらは CCG 社独自の科学計算向けプログラム言語 Scientific Vector Language(SVL) によって開発されており、ユーザーもまた SVL を利用してアプリケーションの追加や MOE のカスタマイズを行うことができます。弊社 Web サイト内のサポートページでは、MOE の機能を強化する様々な SVL プログラムを提供しています。

■SVL概要

MOEに搭載されている多彩なアプリケーションは独自のプログラム言語SVLで開発されています。ユーザーはMOEに搭載されているSVLプログラムを自由に閲覧して実際の計算内容を具体的に把握し、またSVLプログラムの追加やカスタマイズによってMOEの機能をさらに強化できます。世界中のユーザーが様々なプログラムを発表しており、弊社からも独自のプログラム集を提供しています。

■SVLプログラム集

弊社Webサイト内MOEサポートページで公開しているSVLプログラムをご紹介します。

■ドッキングツールASEDock

MOEのSite Finderの認識する結合サイトと周辺の受容体ポケット構造からなるASEModelに基質を適切に配置するアルゴリズム(JP4688467)により高い精度を実現したドッキングプログラムです。ASEDockを使用した論文リストもWebサイトに掲載しています。

■3D-QSARツールAutoGPA

活性化化合物群から良好な3D-QSARモデルを自動的に構築します。3D-QSARによる空間的な活性相関プロファイルに加え、配置の基準となった共通特性からなるファーマコフォアモデルが得られます。大規模化合物配座ライブラリから直接スクリーニングすることも可能です。

■ドッキングスコア算出ツール

ドッキング結果や複合体構造に対して複数のドッキングスコアを一括して計算します。既知の複合体構造のリドッキング結果からスコアの適性を評価したり、ドッキング結果を複数のスコアで評価できます。

■静電ポテンシャル計算ツール

Poisson-Boltzmann方程式に基づく分子系の静電ポテンシャルを算出するツールです。MOE標準機能に比べて時間がかかりますが、タンパク質などの分子表面や空間の厳密な静電ポテンシャルを計算して描画できます。

■体積差分計算ツール

分子同士あるいは分子と結合サイトとの重なりから、体積差分を計算します。複合体中の結合サイトと基質から、ポケット構造の空間的な余裕を評価できます(図1)。

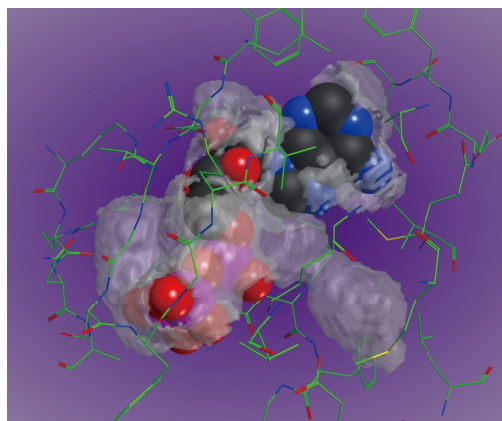


図1: 結合サイトとATPの体積差分(灰色)

■SVLプログラムの入手について

弊社ウェブサイト内MOEサポートページのSVLプログラム集では上記の他にも様々なツールを提供しています。ご希望の方は各ツールの紹介ページからプログラムをダウンロードいただくか、MOEサポートリクエスト窓口までご請求ください。

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/ccg/support/svl.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 をご利用下さい。
<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担当者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. 18, No. 3, 2011

2011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 © 2011 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: 03-3553-9205 FAX: 03-3553-9207 E-mail: support@rsi.co.jp