

## 統合計算化学システム

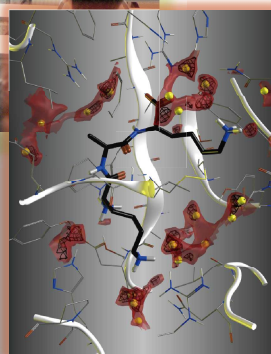
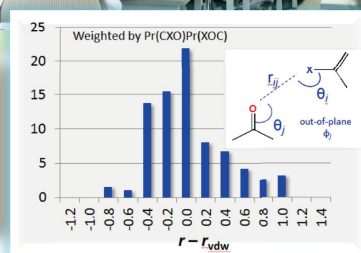
## MOE フォーラム 2011 開催報告

MOE は、カナダ CCG 社が開発した統合計算化学システムです。MOE はタンパク質構造解析、化合物ライブラリ設計、*in silico* スクリーニング等、生命科学・創薬研究に必要とされる様々なアプリケーションを包括的に搭載し、計算化学の専門家から実験研究者まで幅広くご利用いただいています。

去る7月13日、「MOE フォーラム 2011」を開催しました。生命科学・創薬研究の最先端で活躍されている先生方に MOE を使用した研究事例についてご講演いただきました。また CCG 社から次期バージョンに搭載予定の新機能が発表されました。それぞれ活発な議論が交わされ、参加された多くの方々にご好評頂きました。詳細については9ページの記事をご覧ください。



1LR4_1197	197: 1LR4A	SPNIVKLLDQADQHSKTPSLIEYV
1LUF_1198	198: 1LUF.A	KEASADMDQDFQREALNAEFDNPV
1M14_1199	199: 1M14.A	CRLLSICLTSVQLITQLMPPGCLLD
1M17_1200	200: 1M17.A	CRLLSICLTSVQLITQLMPPGCLLD
Tag	Chain	
1A06_1001	1: 1A06.A	PSVSLSTAEGPGVVAPEVLKQKPYG
1A9U_1002	2: 1A9U.A	KPSNLAVNEOCELKILDFELRRHTDD



## Contents

## 新製品情報

材料設計支援統合システム	MedeA 2.7 構造構築機能のご紹介	2
分子類似度評価ソフトウェア	COSMOlogic 社新製品 COSMOsim3D	4
GMP 対応環境微生物モニタリングデータ管理システム	AQS Environmental Monitoring 販売開始	6
電子ノートブック	E-WorkBook Suite 新バージョンリリース	8

## セミナー情報

統合計算化学システム	MOE フォーラム 2011 開催報告	9
------------	---------------------	---

## 技術情報

統合計算化学システム	MOE Extensions for KNIME Ver. 2.0.0 リリース	10
創薬支援ツール	BioSolveIT KNIME Extensions リリース	11
ADME/Tox 特性・薬理活性予測ソフトウェア	MolCode ToolBox 評価版の配布について	12



# MOE フォーラム 2011 開催報告

去る7月13日に東京大手町サンケイプラザにてMOEフォーラム2011を開催いたしました。開発元のCCG社よりCEOのPaul Labuteらを招聘し、次期バージョンのMOEに搭載される新機能やその有効性を紹介しました。また、さまざまな分野で活躍されている先生方に最新のMOE活用事例をご紹介いただき、来場されたユーザーの方々と活発な議論が交わされました。

## ■招待講演

### 1. 「病原性ウイルス研究と計算科学」

国立感染症研究所 佐藤 裕徳 先生

MOEを中心とした*in silico*解析の視点から、ウイルス学研究の進展に関して概論も交えながらご講演いただきました。ウイルス感染症の検査・予防・診療法の開発においては、ウイルス分子の構造・機能とともにウイルスの特徴である「変化」の情報を解析することが重要です。分子進化の規則性や構造的基盤を探索する*in silico*解析として、MOEを利用した易変異性病原体の構造、機能、進化の統合的な解析が有効であることを示されました。



### 2. 「2-5A アナログを使った RNase L の活性相関解析」

名古屋大学 伊藤 康友 先生

2本鎖RNAウイルスに対する防御機構2-5Aシステムの解析についてご講演いただきました。防御機構の基点であるRNase Lを効率よく活性化するリガンド開発のため、2-5Aアナログとのドッキング計算や分子動力学計算による相互作用解析の事例をご紹介いただきました。その結果からは、相互作用には2-5A構造のうち特定の2つの位置にアデニンが必須であることが示唆されました。今後、この知見に基づくウイルス感染症治療薬の開発が期待されています。



### 3. 「抗体創薬と MOE」

アステラス製薬株式会社 白井 宏樹 先生

抗体創薬におけるプロテインインフォマティクスの役割について、現状・問題点・将来の展望に分けてご講演いただきました。抗体や抗原のモデリング・シミュレーションやエピトープ・パラトープの予測といったプロテインインフォマティクスの様々な分野に対して、MOEが中心的な役割を果たしていることについてご紹介いただきました。



## ■新機能の紹介

### 1. Rationalization and Visualization of

Nonbonded Interactions  
Chemical Computing Group Inc.  
Elizabeth Sourial

非共有結合の検出機能が刷新され、ハロゲン結合を加えたより詳細な相互作用解析が可能になります。拡張Hückel理論 (E-Hückel) を取り入れることで電子状態が考慮され、これまでの力場に基づく計算では取り扱いの難しかったハロゲン結合や、S...O=Cなど硫黄を含む相互作用が検出されるようになります。また、E-Hückel電荷に基づく新しい相互作用エネルギーは、実験値や分子軌道計算の結果と高い相関を示しており、より高い精度での相互作用解析が期待されます。強化された非共有結合の検出機能は、今まで同様に立体構造の読み込みや変化に応じてリアルタイムで検出・更新されます。



### 2. Applying Integral Equation Theory to

Structure Based Design  
Chemical Computing Group Inc.  
Paul Labute

相互作用に様々な形で関わる水分子の分布を解析する3D-RISM法が搭載されます。3D-RISM法は、溶媒分子の平均的な分子座標の分布とポテンシャルを考慮した理論で、分子動力学計算などの長時間シミュレーションを行わずに溶質の溶媒和構造を算出できます。リガンド-受容体間で重要な相互作用を形成する水分子の配置や、受容体ポケット構造の親水性・疎水性の好まれる空間の評価、リガンド分子の溶媒和構造や溶媒和エネルギーの予測など様々な局面で利用できます。発表では3D-RISM解析結果と結晶水の座標の一致や、ポテンシャルマップ様の脱溶媒和マップの構築例も報告されました。そのほか、次期バージョンで予定されているSequence Editorの刷新や、ドッキングスコアの追加などもあわせて紹介されました。

