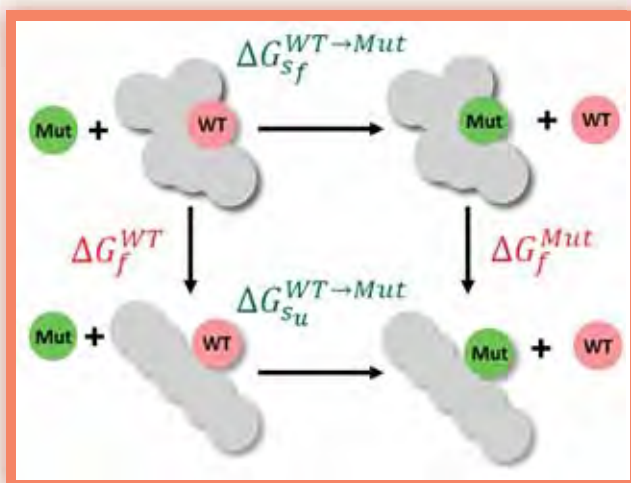


統合計算化学システム

MOE フォーラム 2012 開催報告

MOEは創薬・生命科学研究のために必要なアプリケーション、豊富なデータコンテンツ、アプリケーション開発環境を備えた分子シミュレーションソフトウェアです。様々な機能を使いやすいインターフェースから利用できるため、計算化学の専門家のみならず、実験研究者まで幅広くご利用頂いています。

去る7月11日、「MOEフォーラム2012」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を活用した研究事例についてご講演頂き、また開発元のCCG社からは次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、2ページの記事をご覧ください。



Contents

セミナー情報

統合計算化学システム	MOE フォーラム2012 開催報告	2
------------	--------------------	---

技術情報

化学データ可視化・解析ソフトウェア	CIMPL解析事例の紹介	3
詳細化学反応解析支援ソフトウェア	CHEMKIN-PRO: CVD法による薄膜成長反応の解析	4
密度汎関数法ソフトウェア	ADFによる有機分子結晶の移動度計算:ホッピング伝導とバンド伝導	6
材料設計支援統合システム	MedeA Flowchart機能の活用例	8
電子実験ノート	E-WorkBook Suite: 導入事例ご紹介	9
技術計算プログラム開発環境	Mathematica8によるExcelファイルのデータ処理	10
ゲノムデータ解析ソフトウェア	Partek Genomics Suite: RNA-seqデータ解析	11
タンパク質立体構造データベースシステム	PSILO 2012リリース情報	12

統合計算化学システム

MOE フォーラム 2012開催報告



去る7月11日に大手町サンケイプラザにてMOEフォーラム2012を開催しました。創薬、計算化学分野で活躍されている先生方から最新のMOE活用事例をご紹介します。また開発元のCCG社よりCEOのPaul Labuteらを招聘し、次バージョンのMOEに搭載される予定の新機能やその有用性を紹介しました。

■招待講演

1.「*in silico* screening を利用した抗感染症の探索研究」

大阪大学 川下 理日人 先生

MOEを活用した阻害剤探索研究について、2つの具体例をご講演して頂きました。デング熱を発症させる原因である、デングウイルスの増殖に係わるNS3/NS2Bプロテアーゼの阻害剤や、HIV-1の増殖阻害を指向したシクロフィリンAなどの設計についてMOEの定量的構造活性相関(QSAR)モデル構築やドッキングシミュレーションなどの機能を応用された例をご発表頂き、それぞれの機能がスクリーニングに効果的であることを示されました。



2.「核内受容体およびウイルス表面タンパク質を

ターゲットとした理論創薬」

立教大学 常盤 広明 先生

核内受容体リガンドの解析やウイルス感染症の薬剤、新規抗インフルエンザ薬の設計の事例をご紹介します。弊社開発のドッキングアドオンプログラムのASE-Dockを用いて受容体-リガンド複合体構造を作成し、高速なフラグメント分子軌道法(FMO法)計算プログラムPAICS*を用いた構造最適化が行われていました。FMO法を用いることでより正確な複合体構造が得られるとともに、残基毎の相互作用の評価が可能とのことでした。PAICSへのMOEインターフェースも開発中で、将来的には公開できるようにしたいとの展望も述べられました。



3.「共同研究におけるMOEの活用事例」

産業技術総合研究所 広川 貴次 先生

リガンド-受容体間の相互作用様式をプロファイリングする、MOEのProtein Ligand Interaction Fingerprint (PLIF) 機能を中心に、共同研究の事例をご講演頂きました。立体構造が解かれていない標的タンパク質や、立体構造が既知でも、分子認識に大きな構造変化を伴うケースについて、MDシミュレーションやAutoGPAといった機能をPLIFと併用することで、分子設計のキーとなる重要な相互作用を見いだせることを示されました。



■MOE 2012搭載予定機能の紹介

1.A uniform framework for Protein Engineering

Chemical Computing Group Inc.

Elizabeth Sourial

タンパク質工学のための様々な評価機能と、それらを使いやすく統合したインターフェースを紹介しました。変異体モデリングや、より精密な側鎖構造モデリングのための側鎖配座ライブラリーの更新、新機能としてタンパク質の熱安定性の評価予測機能、タンパク質-リガンド間およびタンパク質間の親和性評価機能などが発表されました。これらの新機能はタンパク質工学用に構成されたワークフローに統合されて提供されます。ユーザーは目的に合わせて、アラニンスキャニングなどあらかじめ用意されたフローを指定して容易に変異体解析を行えます。この機能により、実験の前段階での変異体候補の絞り込みや、変異実験の結果に対する計算値に基づく考察など、様々な実験の効率化が期待されます。



2.The End of Atom Types? Forcefield Developments in MOE

Chemical Computing Group Inc.

Paul Labute

力場によるエネルギー計算には原子の置かれている環境を反映した力場パラメータの割り当てが必要です。従来力場では、原子の結合状態や形式電荷などで定義される原子タイプを基に割り当てを行います。共鳴構造や双性イオンのように複数の構造式が存在する分子の場合、同一の分子であっても、分子構築時に定義する原子の性質によって割り付けられる原子タイプが異なることがあります。その結果、得られる安定構造が異なったり、適切な安定構造が得られない場合があります。新しい力場では、拡張Hückel法による量子化学計算の結果を利用することで、原子タイプを利用することなく力場パラメータを導き出す方法論を採用しました。発表では、拡張Hückel法で求められる電荷に対する σ および π 軌道の寄与と、結合次数の情報から力場パラメータを推算するQSPRモデルの構築、またその精度について既存のMMFF94x力場との比較検証が報告されました。この力場の利用法として、従来力場が対応できない構造にのみ新しい力場パラメータを補完的に適用する実装方針も提案されました。



* <http://www.paics.net/>