

2003年2月28日(金) 14:10~14:35

計算化学による創薬支援 ----- MOE の SBDD 関連機能を中心に -----

株式会社菱化システム
計算科学部
後藤 純一

ハードウェアの高速化に伴い、多くのソフトウェアベンダーが安価な Windows, LINUX 機への対応を進めた結果、現在では、通常のノートパソコンですら手軽に高度な分子化学計算を行うことが可能となりました。中でも、CCG 社の開発による MOE は、各種 UNIX 系ワークステーションと Windows 系 PC、LINUX 機で全て同じ操作性を提供するばかりか、ポストゲノム時代の創薬研究において必要とされるさまざまなアプリケーションを同一 GUI 上で利用することができる唯一のシステムとなっています。創薬支援ソフトウェアとして MOE は、他にも下記のようなさまざまな特長があり、計算化学の専門家から実験研究者まで、幅広く活用されています。

1. 計算科学と情報科学の融合

独自のデータベース機能により、僅かなメモリーで膨大なデータを扱うことが可能です。このコンパクトなファイル形式を使用することにより、MOE は、Protein Data Bank に登録されている全立体構造をわずか 800MB 程度におさめて提供しています。さらに、このデータをもとに、CCG 社が独自に作成したタンパク質ファミリーデータベース、ロータマライブラリを搭載し、ホモロジー検索からモデリングまで、MOE の環境下で一貫して検討することができます。また、低分子化合物を対象とする機能の一つとして、MOE には 6 種類のフィンガープリントを利用した類似構造検索機能がありますが、このデータベース機能により、100 万件以上の化合物ライブラリを一覧表示することも可能です。さらに、ここで利用可能なコンテンツとして、ナミキ商事様、住商ファーマ様のご協力による MOE 版試薬カタログも無償で入手することができます。

2. アルゴリズムの公開

ほとんど全てのアプリケーションは、MOE 独自の言語 SVL で記述され、ソースコードのまま提供されていますので、ユーザーが内容を参照し、改変することも容易です。弊社では、SVL の入門コースを毎月開催しており、プログラミング経験のない方でも、1 日でその基礎を習得することができます。

3. ユーザーニーズへの迅速な対応

日本のユーザーのニーズに合わせたモジュールの改良やカスタマイズまで国内で対応可能なため、迅速できめの細かいサポートを提供します。また、MOPAC、AMBER 等、サードパーティ製品への GUI も無償で公開しています。

このような MOE の特長の中から、今回は、活性部位の探索、ドッキング、ファーマコフォアモデルを利用したスクリーニングなど、SBDD 関連機能を中心に、弊社独自開発のアプリケーションも含めてご紹介させていただきます。