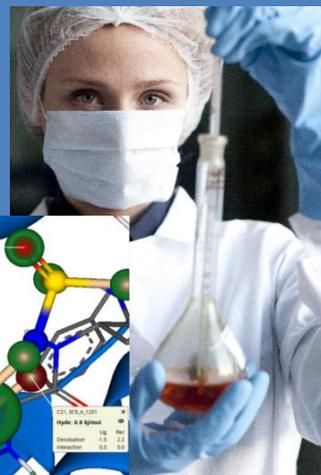


CBI 学会 2016 年大会 メディシナルケミストのための 創薬支援ソフトウェア紹介



日時: 10月26日(水) 16:00~17:30

会場: タワーホール船堀 4F(402)

メディシナルケミストが、日常の研究業務で計算化学的な手法を活用する機会は年々増えてきています。化合物の物性推算や SAR 解析、構造解析、リガンド受容体間の相互作用解析など、様々な場面で活用されています。メドケム志向のソフトウェアとして重要視されている点として、化学構造を取り扱えること、優れた可視化機能を備えていること、直感的に操作が行えること、インハウスや公共データを活用できることなどが挙げられます。本セッションでは、メドケム志向のソフトウェアの特徴と活用事例をご紹介します。



インシリコ創薬にご興味のある方や、実験研究者用のソフトウェアにご興味ある方のご参加をお待ちしております。

演者:

株式会社菱化システム 科学技術システム事業部 池上貴史、小林誠一

プログラム:

16:00 ~ 16:25 MOE を用いたメドケムのための分子設計環境の構築

16:25 ~ 16:50 SeeSAR を用いた SBDD 解析事例

16:50 ~ 17:15 CIMPL を用いた ChEMBL データベースの活用事例

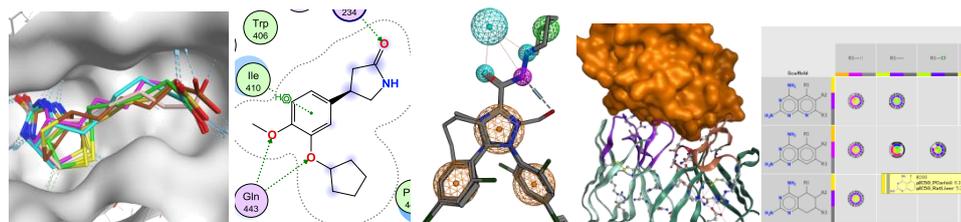
17:15 ~ 17:30 質疑応答

ソフトウェアの概要:

統合計算化学システム



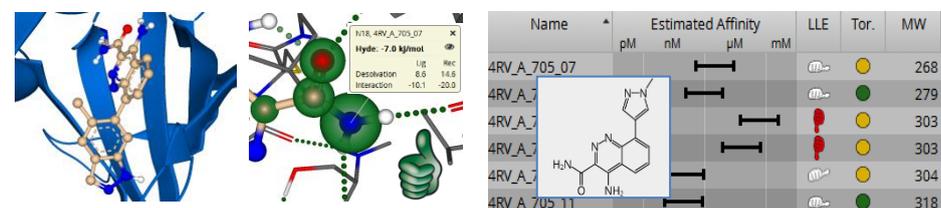
MOE は、創薬・生命科学研究のための統合計算化学プラットフォームです。ドッキングシミュレーション、SAR 解析、ファーマコフォア解析、母核置換、タンパク質モデリング/デザインなどの様々なアプリケーションを搭載しています。MOE に搭載された開発環境を用いることで、MD 用インターフェースの開発やウェブアプリケーションの開発、サードパーティソフトウェアとの連携、ワークフローへの組み込みができ、MOE をシステムの中核とした創薬支援環境を構築できます。本セッションではメディシナルケミストのニーズに応じた MOE のカスタマイズ例をご紹介します。



対話型 SBDD ツール



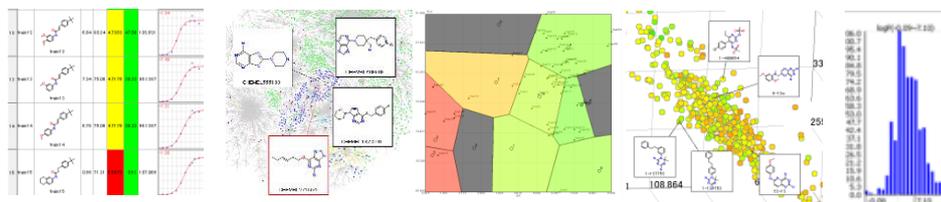
SeeSAR は、複合体の立体構造を用いてリガンド-タンパク質間相互作用解析や新規リガンド設計を行うためのソフトウェアです。SeeSAR は、直感的な操作と結果の分かりやすさを重視しています。原子毎の結合自由エネルギーの寄与、ドッキング、母核置換、結合二面角の妥当性、物性や ADME 特性計算と組み合わせて分子設計が可能です。本セッションでは SeeSAR を用いたリード最適化事例をご紹介します。



化学データ可視化・解析ソフトウェア



CIMPL は、ケムインフォマティクスの統合プラットフォームです。化学データの可視化、ライブラリー解析、SAR 解析、データベース/Web サービスのアクセス機能を搭載しています。ChEMBL データベースを内部に組み込み、化学構造や標的タンパク質、アッセイ情報での検索や ChEMBL のデータを活用したネットワーク解析や活性傾向の評価が可能です。本セッションでは CIMPL を用いた ChEMBL データベースの活用事例についてをご紹介します。



お問い合わせ: 株式会社菱化システム 科学技術システム事業部

〒131-0045 東京都墨田区押上一丁目 1 番 2 号 東京スカイツリーイーストタワー

Tel: 03-6830-9724 E-mail: support@rsi.co.jp

ウェブページ: <http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/index.html>