

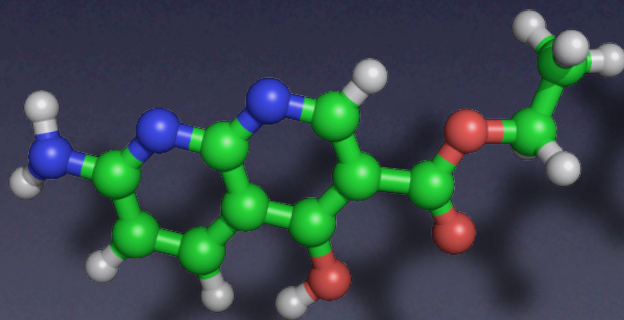
SMILES記法を利用した薬物設計ソフトウェアの開発

—MolSmile—

開発代表者：藤 秀義（千葉大学大学院医学薬学府）

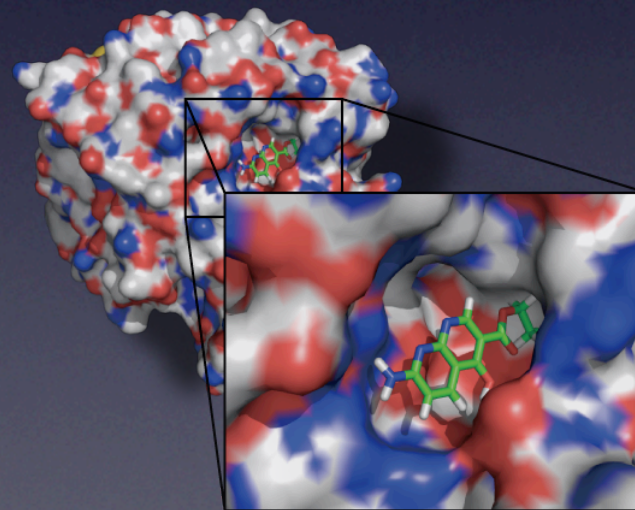
共同開発者：辰巳 絢子（千葉大学大学院医学薬学府）

分子の化学構造を表記する方法に、SMILES記法 (Simplified Molecular Input Line Entry Specification syntax) という方法がある。SMILES記法を用いると、1行の文字列で化合物の原子種とそれらの結合情報を表記することが出来るため、化合物のデータベースを作成するのに広く用いられている。医薬品をコンピュータ上で設計するためには、化合物の3次元立体構造が必要である。しかしながら、SMILES記法からは化合物中の原子の座標情報を得ることが出来ない。そこで、本プロジェクトではSMILES文字列から化合物の3次元立体構造を構築するプログラムを開発した。さらに、治療標的タンパク質との親和性評価を行うことの出来るプログラムも開発した。



CCOC(=O)C1=CN=C2N=C(N)C=CC2=C1O

SMILES文字列から化合物の
3次元立体構造を作成



治療標的タンパク質との親和性評価も
SMILES文字列から直接可能