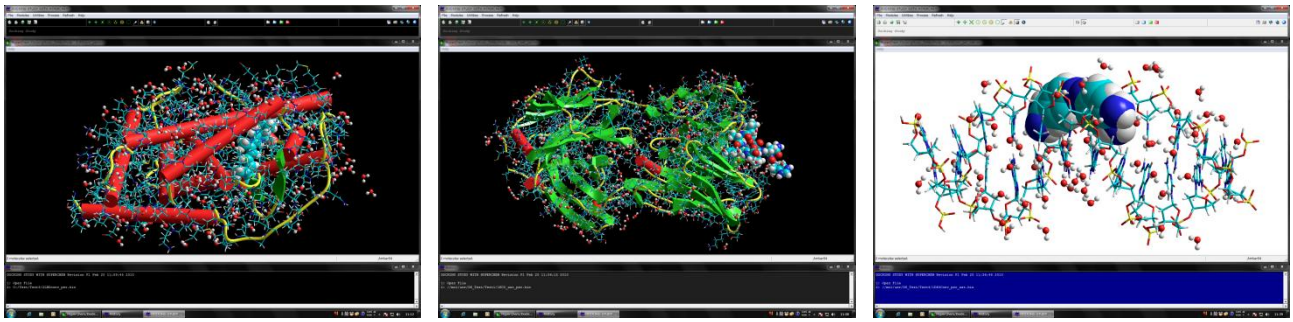
INSTITUTE OF MOLECULAR FUNCTION

Docking Study with HyperChem

統合分子設計支援システム *HyperChem* で全自動生体高分子–リガンド**フレキシブルドッキング**シミュレーション、バーチャルスクリーニング
様々な状態の生体高分子システム（タンパクおよび核酸）に対応
従来製品にはない**非グリッドアルゴリズム**を採用し、*HyperChem* 高信頼性高速計算エンジンによる全系を対象とした高精度手法 [1]
構造ベースファーマコフォア点情報を利用する独自のドッキングアルゴリズム *PIEFII* [2] による高信頼性を誇る安定複合体構造探索手法

ドッキング・スクリーニングに要求される各種従来機能に加え、生体高分子システムの誘導適合効果を考慮したフレキシブルドッキング機能、アポ体へのドッキングなど誘導適合効果を超えた大きな構造変化にも対応したフレキシブルドッキング機能、標的生体高分子以外の高分子、低分子、水分子、金属原子、共有結合置換基などからの立体電子影響下でのフレキシブルドッキング機能 [3]、試行化合物 [4] のコンフォメーション毎に任意半経験分子軌道法による電荷アサイン機能 [5]、United Atom および All Atom 条件の様々な組み合わせ機能、溶媒和条件下ドッキング機能、リスタート機能、分散処理機能 [6] など従来製品では未踏の最先端手法を駆使でき、精密なドッキングシミュレーションから in silico スクリーニングをサポートします [7]。さらに、プロフェッショナルユーザーは分子力学計算・量子化学計算パラメータからドッキング・スクリーニングパラメータに至る全パラメータを GUI ベースで詳細に調整できます。

Revision G1



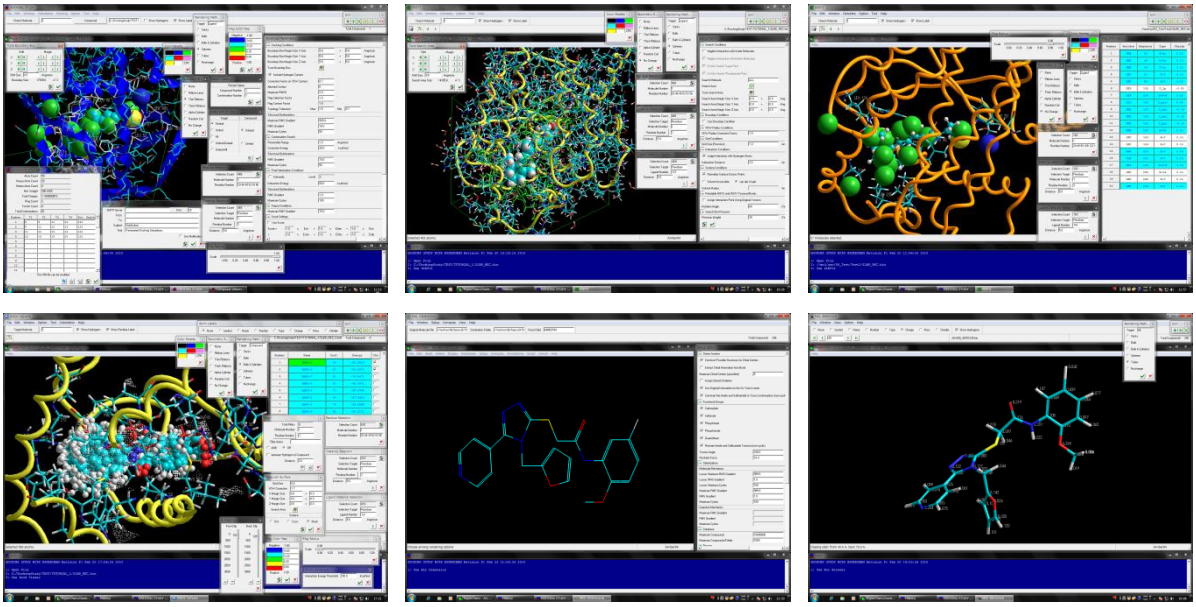
- ドッキング・in silico スクリーニングに特化した直観的なユーザーインターフェイス（研究者は本質的な思考に集中できます）
- 大幅な作業時間の短縮（特殊な作業知識、テキストベースのパラメータ設定等が不要）
- 分子力学計算（MM+, Ambers, Amber2, Amber3, Amber94, Amber96, Amber99, OPLS, BIO+83, BIO+85, CHARMM19, CHARMM22, CHARMM27）、量子化学計算を網羅 [8]
- 抜群の費用対効果
- 開発元による日本語での技術サポート [9]
- 受託研究、導入時検証事例、ユーザーサポートからのフィードバックなどに対応し、操作性、安定性、信頼性を確保、細部に行渡る多数のユーザー支援機能が利用できます。

Copyright 2017, Institute of Molecular Function. All Rights Reserved.

INSTITUTE OF MOLECULAR FUNCTION

モジュールプログラム

パッケージはドッキングシミュレーション・in silico スクリーニングに特化した複数のモジュールプログラムで構成されています。ドッキングスタディーモジュールを始め、生体高分子システム（タンパクおよび核酸分子システム）立体構造からリガンド結合部位並びにリガンドファーマコフォアを高精度に予測する PIEFII モジュール、多彩なレンダリング機能など洗練されたヒット化合物閲覧・解析のための Dock ビューアモジュール、試行化合物の三次元構造並びにドッキングに必要な全パラメータを自動的に準備でき、平面構造データベースから三次元構造データベースの構築にも利用できる Mol 次元モジュール、準備した試行化合物の三次元構造閲覧のための Mol ブラウザーモジュールなどが利用できます。



[1] *HyperChem* バックエンド力場計算エンジンを使用するドッキングシミュレーション自体は七万（70,000）原子弱（約 50 万 Da）までしか利用できません。
[2] 特許取得済です。
[3] ヘテロ分子、金属原子からの立体電子効果を正しく評価するには、あらかじめ Homology Modeling Professional for HyperChem でパラメータ等の準備が必要になります。
[4] ペプチドドッキングでのペプチドのコンフォメーション探索は低分子と同じ方法のみとなり、現実的には複数の初期構造をあらかじめ用意しておくか、特定ねじれ結合のみ考慮（編集機能が利用できます）して実施することになります。
[5] 条件によっては利用できない場合があり、その場合はあらかじめアサインされている電荷が利用されます。
[6] 分散処理機能はクラスターバージョンのみの対応です。
[7] クラスターバージョン以外のバージョンには簡易スクリーニングオプションが追加利用できます。ただし、オプション有効時にはフレキシブルドッキングは実施できません。また、分散処理機能は付与されません。
[8] Homology Modeling Professional for HyperChem の Gaussian インターフェイスを用いることでドッキング用力場に最適な低分子用電荷を割り振れます。
[9] 詳細はお問い合わせください。

推奨システム構成

OS: Windows XP、Vista、7、8.x または１０（32 ビットまたは 64 ビット版）
CPU: Core2Duo または Dual Core Xeon 以降（2 GHz 以上）
メモリ: 1024 MB 以上
グラフィックスカード: OpenGL 対応ボード

必要なソフトウエア*

HyperChem（Windows 版プロフェッショナルエディション）: 7.52 以降
TclPro1.2（Windows 版）: Web（http://www.tcl.tk/software/tclpro//eval/1.2.html）より無料で入手できます。

* 本パッケージは、これらのソフトウエアを含みません。

参考文献

Motonori Tsuji, J. Comput. Aided Mol. Des. 31, 577–585, 2017.
Motonori Tsuji, et.al., FEBS Open Bio. 7, 391–396, 2017.
Motonori Tsuji, J. Mol. Graph. Model. 62, 262–275, 2015.
Motonori Tsuji, et.al., J. Comput. Aided Mol. Des. 29, 975–988, 2015.
Motonori Tsuji, J. Struct. Biol. 185, 355–365, 2014.
Motonori Tsuji, Mol. Sci. 1, NP004, 2007.

お問い合わせ

URL: http://www.molfunction.com/jp
電子メール: sales@molfunction.com

HyperChem は Hypercube 社の登録商標です。
その他の商品名は各社の商標または登録商標です。
本カタログの内容は予告なく変更する場合があります。

2017/07/03

Copyright 2017, Institute of Molecular Function. All Rights Reserved.