

Docking Study with HyperChem

Essential, Premium Essential, Professional, Advanced, Ultimate, and Cluster
with **AutoDock Vina In Silico Screenings Interface**

Compatible to rDock Docking Simulations, NAMD Molecular Dynamics, and ABINIT-MP / GAMESS Fragment Molecular Orbital Quantum Mechanics Calculations for Entire Molecular System

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

Docking Study with HyperChem (DSHC) では、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インシリコ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。*AutoDock Vina* インシリコスクリーニングに必要な全作業をサポートし、グレードに関係なく化合物数無制限でスクリーニングが実施できます。⁸
Homology Modeling Professional for HyperChem (HMHC) と連携し、最先端のインシリコ創薬をサポートします。

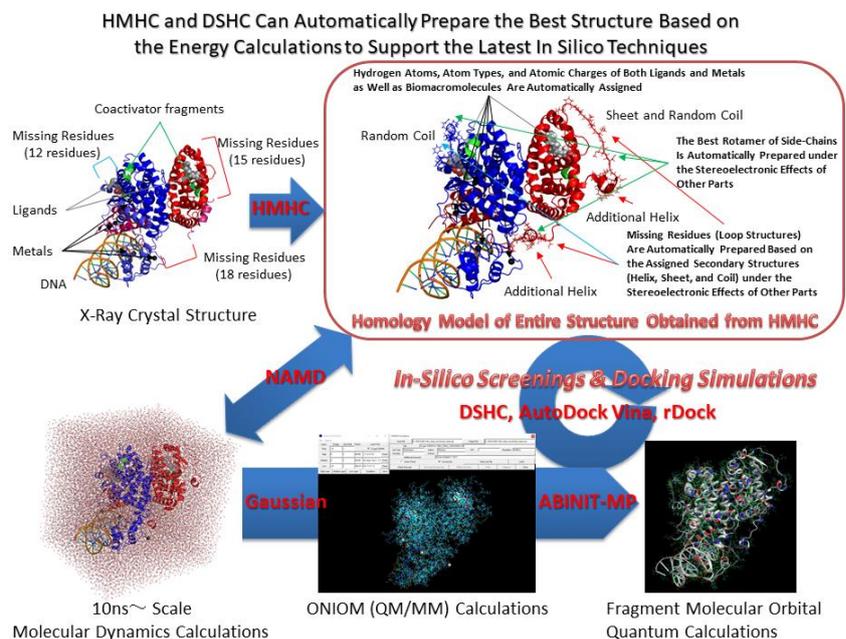
Revision H1

- ドッキング・インシリコ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）
- 抜群の費用対効果

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。

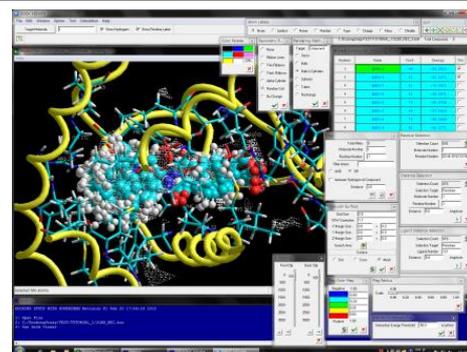
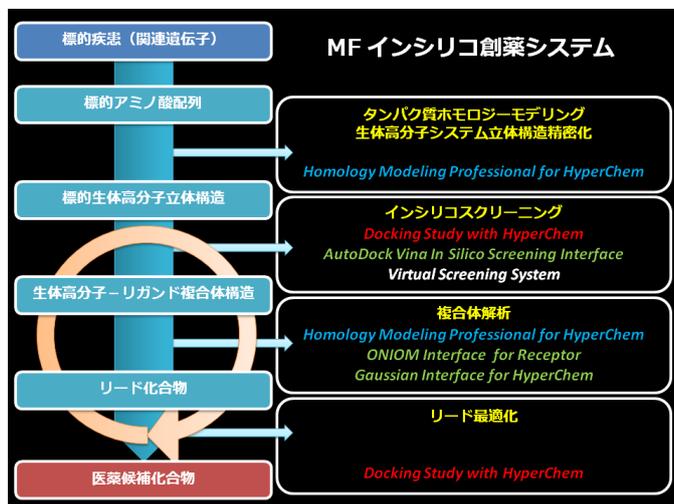
³ ヘテロ分子、金属原子からの立体電子効果を正しく評価するには、あらかじめ *Homology Modeling Professional for HyperChem* でパラメータ等の準備が必要になります。



- 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 Automatic Conformation Search 法を利用するか、複数の初期構造をあらかじめ用意しておくか、あるいは特定の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。リモートデスクトップ機能を利用して PC クラスターで化合物データベースを全自動で分散処理できます。⁹
- 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 *AutoDock Vina* および *rDock* は *Docking Study with HyperChem* とは無関係なプログラムであることに注意してください。*AutoDock Vina* および *rDock* を用いたインシリコスクリーニングやドッキングシミュレーションは *Docking Study with HyperChem* の優れた GUI 環境を利用しているだけです。
- ⁹ マルチコア対応ではありませんが、CPU コア数分のスレッドを同時実行できるため、1 台の PC で分散処理し、結果をまとめて解析できます。

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・インシリコ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、AutoDock Vina Interface などが利用できます。



推奨システム構成

OS : Windows 10 及び 11 (64 ビットまたは 32 ビット版)
 CPU : マルチコア Intel Core または Xeon (2 GHz 以上)
 メモリ : 8 GB 以上
 グラフィックスカード : OpenGL 対応ボード
 ハードディスク : 512 GB 以上

必要なソフトウェア*

HyperChem (Windows 版プロフェッショナルエディション) : 7.5.2 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。
OpenBabel (Windows 版) : 必須ではありませんが、*AutoDock Vina* インシリコスクリーニングを実施する場合および HIN または PDB 形式から SDF、MOL2、AutoDock PDBQT 形式で出力する場合に必要です。
AutoDock Vina (Windows または Unix 版) : 必須ではありませんが、*AutoDock Vina* でインシリコスクリーニングまたはドッキングシミュレーションを実施する場合に必要です。
rDock (Unix 版) : 必須ではありませんが、*rDock* ドッキングシミュレーション用入力ファイル作成、化合物三次元ライブラリ作成及びシミュレーション結果の閲覧、解析、ヒット絞り込みのためのインターフェイス機能が利用できます。
NAMD および *VMD* (Windows または Unix 版) : 必須ではありませんが、ナノ秒スケールの分子動力学計算と連携する場合に必要です。
ABINIT-MP (Unix 版) および *BioStationViewer* (Windows 版) または *GAMESS* および *Fu* あるいは *Facio* (Windows 版 または Unix 版) : 必須ではありませんが、全系量子力学計算と連携する場合に必要です。

* 本パッケージは、これらのソフトウェアを含みません。

参考文献

Motonori Tsuji, Int. J. Mol. Sci. 23, 11009, 2022.
 Motonori Tsuji, FEBS Open Bio. 10, 995-1004, 2020.
 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: <https://www.molfuction.com/jp>
 電子メール: sales@molfuction.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。