

ファーマコフォアの作成や解析を合理化

最先端の3D ファーマコフォアモデリングと3D データベース管理ツール

3D データベースの作成、ファーマコフォア仮説の作成、仮想スクリーニングなど

Catalyst Component Collection

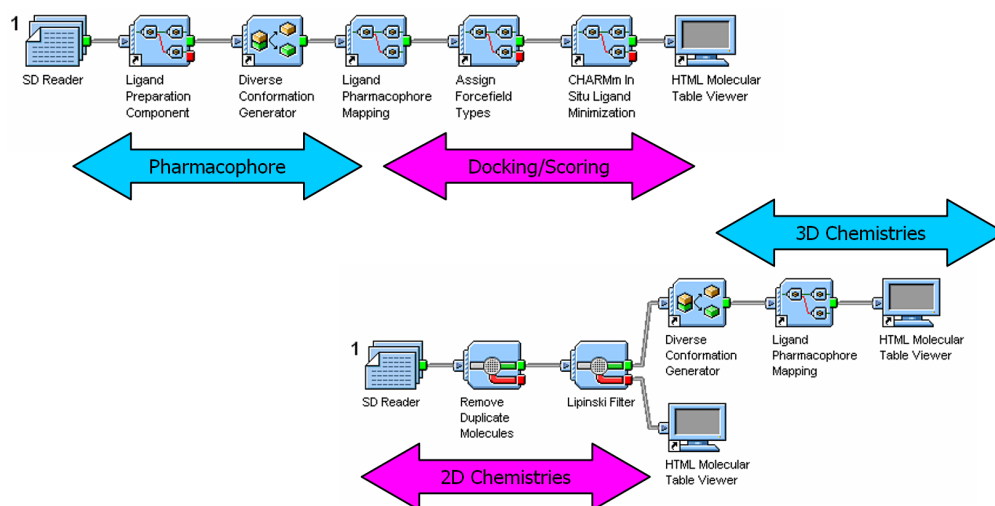
Catalyst® Component Collection は、ファーマコフォアと三次元データベース管理の総合的なソリューションです。Catalyst のテクノロジーは知名度が高く、同種のツールの中では専門家による学術論文などでもっとも頻りに引用されています。そのCatalyst が、Pipeline Pilot™ プラットフォームに組み込まれました。これにより、自動化された使いやすいワークフローの作成が可能になり、ファーマコフォアの作成や解析を合理化することができます。Catalyst 三次元化学構造を Pipeline Pilot のワークフロースキームにドラッグ アンド ドロップするだけで Catalyst の洗練されたアルゴリズムを使用したコンフォメーションの概算、3D データベースの作成、ファーマコフォア仮説の作成、仮想スクリーニングなどを実行することができます。これらのタスクは、現在お使いの Windows や Linux マシンから使用できます。Pipeline Pilot との統合によって、その有効性が広く認められている Catalyst のアルゴリズムは、以前よりさらに使いやすくなりました。

世界中のユーザとの共同作業が可能に

Pipeline Pilot Web Port と併用すると Web インターフェースからアクセスできるように Catalyst を設定できます。また、遠隔地での研究が可能になり、他の場所にいる同僚と結果を共有したり、他のユーザがアクセスできるようにモデリングの手順をカスタマイズできます。Web 経由で Catalyst ツールへアクセスすることで、研究プロセスを効果的に統合し、全体的な生産性を向上させることができます。

Catalyst Component Collectionの利点

- ・ 最適化されたアルゴリズムとコードレベルの改良によるパフォーマンスの向上
- ・ Pipeline Pilot にシームレスに統合された 2D と 3D の化学構造
- ・ 解析およびレポートを直接作成
- ・ 新しい技術の統合によってもたらされた、最先端ツールを使用したさまざまなタスクの実行-例えばコンフォメーションの高速解析(CAESAR)、*de novo* fragment linkerを使用したライブラリ作成など



掲載プロトコルとコンポーネントの例

3D QSAR ファーマコフォアの作成:

三次元仮説の自動作成機能を使用して、活性化化合物の候補を同定します。平面構造と既知の生物活性だけを基に、三次元での相互作用の仮説を作成し、一連の分子における活性の変化を説明および予測することができます。

3Dデータベースの構築:

企業内、プロジェクト独自の、またはベンダーのデータを使用して、大規模な3D化合物データベースを作成します。このデータベースでは、ファーマコフォアモデル、分子形状、または部分構造で検索することができます。

共通特徴ファーマコフォアの作成:

特徴を基準にした化合物アライメントからファーマコフォアを作成し、3Dデータベースの検索に使用します。

多様なコンフォメーションの生成:

コンフォメーションモデルを網羅的に計算し、総合的かつ多様な化合物のコンフォメーション空間を概算します。これらのモデルを使用して作成した仮説に分子を当てはめ、コンフォメーションを3Dデータベースに格納します。

特性のマッピング:

分子をすべてのファーマコフォア特性について検証します。これにより、重要なタンパク質-リガンドの相互作用を容易に同定することができます。

相互作用の解析:

受容体活性部位から直接、相互作用マップを生成し、ファーマコフォア特性を発生します。既得の情報を使用してこれらの活性部位マップを編集、クラスター化し、必要な情報だけを取り出して3D化合物データベースの仮想スクリーニングを行うことができます。

リガンド ファーマコフォアのマッピング:

仮説に対して分子を正確に比較、適合させ、相互作用の適合率を計算します。

ファーマコフォアの比較:

2つのファーマコフォア仮説を比較、また相互に適合させ、最適な RMSD 値を計算します。

ライブラリーのスクリーニング:

さまざまな順序のファーマコフォアモデルで、ライブラリー内の化合物コレクションをスクリーニングします。ヒットリストのサイズに基づいて、各分子が満たす必要のある化学特性の数を指定することにより、スクリーニング結果を増やしたり減らしたりすることができます。

3Dデータベースの検索:

大規模な3Dデータベースを、ファーマコフォアモデル、分子形状、または部分構造で、すばやく検索します。

形状による検索:

特定のコンフォメーションから作成された分子の3D形状表現を使用し、形状に基づいてデータベースを検索します。これによって、より厳密に活性部位の立体形状に似ている化合物を同定することができます。

排除体積による立体の緻密化:

不活性分子から収集された情報を基に、ファーマコフォアの最適化のための排除体積を自動生成します。これにより、モデルに立体の制約を反映させ、正確さを向上し、選択の幅を広げることができます。

必要条件

- Catalyst Discovery Studio® 1.7 のライセンス
- Pipeline Pilot Client 6.0 のライセンスと Chemistry Collection (Reporting Collection と Integration Collection 推奨)