

CoLibri, Recore, FTrees Added Value Package 販売開始

BioSolveIT社はFlexSIS、FlexS、FTreesなどのSBDDまたはLBDDを支援するためのユニークかつ強力なツール群を開発しています。昨年末より弊社ではCoLibri、Recore、FTrees Added Value Packageの販売を開始しましたのでご紹介します。

CoLibri

CoLibriはバーチャルライブラリ作成ツールです。大きく分けて次のような2つの機能を搭載しています。

1. 化合物ライブラリ設計

膨大な化合物ライブラリに対して、化合物の物理化学的な特性（分子量、logP、水素結合ドナー/アクセプタ数など）の閾値や分子名、SMARTSによる部分構造の有無で化合物の選択や絞り込みを行います。また化合物の重複チェックも可能です。

2. フラグメントライブラリの作成

RECAP法(Lewell, X.Q., *et al.*, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1998, 38, 511-522)に基づいてデータベース中の分子をフラグメントに分割します。複数のフラグメントライブラリは統合できますので、社内の全データベースから巨大な非重複フラグメントライブラリを構築することができます。作成したフラグメントライブラリは別モジュールのFTrees-FSを使って*de novo*設計に利用することができます。フラグメントをCoLibriを使って官能基特性と反応点を持つFeature Treeに変換し(図1)、これをFTrees-FSの検索対象として利用することで、テンプレートと類似した分子を高速に構築します。

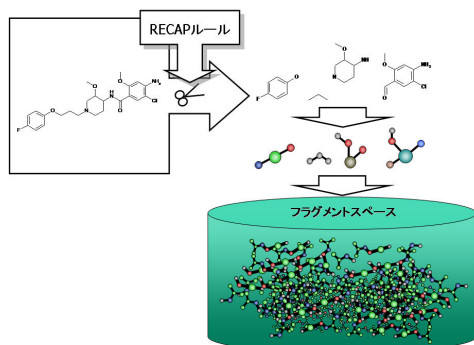


図1 フラグメントライブラリ作成の概念図

Recore

置き換え可能な母核構造を探索するためのツールです。テンプレートを読み込み、切断する結合とファーマコフォア拘束をGUI上でマウスクリッ

クにより設定し計算することで、妥当な母核構造を高速に予測します(図2)。得られた構造はmol2ファイルとして出力します。検索対象のリンカーデータベースもRecoreを使って作成できます。

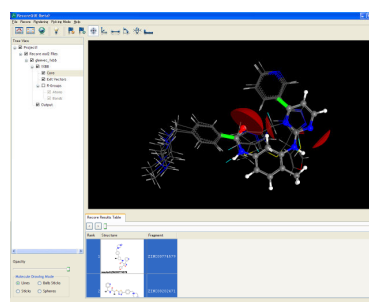


図2 Recore GUIのメインパネル

FTrees Added Value Package

FTreesのGUIであるFTreesXLとHTSViewがセットになったパッケージです。FTreesXLを利用することで、通常コマンドで行うFTreesによる類似構造検索をGUI上で簡単に行うことができます。入力分子と結果分子はスプレッドシート状に表示され、類似度により化合物をクラスタリングすることも可能です。HTSViewはハイスループットスクリーニングのデータを解析するためのGUIです。数万件のデータに対して網羅的な組み合わせで類似度を計算し、マトリックスの作成とそれを使用したクラスタリングが可能です。類似度により色分けすることができ、膨大なデータの中から類似分子を一目で見分けることができます(図3)。また活性値の情報があれば、類似度から活性値予測を行うことができます。Added Value Packageをご使用いただくには、ベースとなるFTreesモジュールが必要となります。

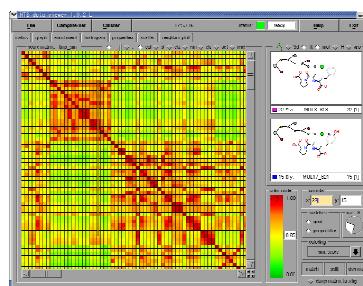


図3 HTSViewのメインパネル