

高速ドッキングシミュレーションツール

FlexX

FlexXは、タンパク質のリガンド結合部位に、医薬候補化合物をフラグメント単位で配置することで高速に化合物のドッキング構造を予測するプログラムです。SBDDプラットフォーム SeeSAR から簡単な操作で計算を実行できます。結合部位に化合物群を順次配置しリガンド候補を絞り込むバーチャルスクリーニングや、リガンド-受容体間の相互作用解析に利用できます。

FlexX

FlexX は、様々な論文で引用されているタンパク質-リガンドのドッキングツールです。数百の論文で引用され、薬剤開発の分野において多数の成功事例があります。FlexX は、ポケット中で化合物配座をフラグメント単位で再構築 (Incremental Construction¹ アルゴリズム) することでリガンドと受容体の結合構造を高速に求めます。ユーザーは、リガンド-受容体間の相互作用解析や化合物ライブラリーを用いたバーチャルスクリーニングに FlexX を活用できます。

特徴

- ✓ **多様な分子系に対応**：受容体を持つ相互作用点を満足するように化合物を配置します。水素結合、配位結合、疎水相互作用等に対応しています。
- ✓ **高速ドッキング**：毎分数分子のドッキングを行うことができます。複数コアを指定した並列計算に対応しています。
- ✓ **ファーマコフォアフィルター**：ファーマコフォアを用いてドッキングポーズを絞れます。水素結合ドナー/アクセプター、疎水性、環構造等、様々なファーマコフォアに対応しています。SMARTS を用いた指定も可能です。
- ✓ **テンプレートドッキング**：指定した部分構造あるいは化合物間の MCS (Maximum Common Structure) をテンプレートとしたドッキングが可能です。1分子当たり数秒で処理します。
- ✓ **SeeSAR との連携**：受容体構造の前処理、ファーマコフォア拘束、ドッキング計算の実行は SeeSAR を用いて簡単にできます。FlexX によるドッキングシミュレーションの結果を SeeSAR に読み込み、結合自由エネルギー Hyde スコアを用いてドッキングポーズの評価ができます。

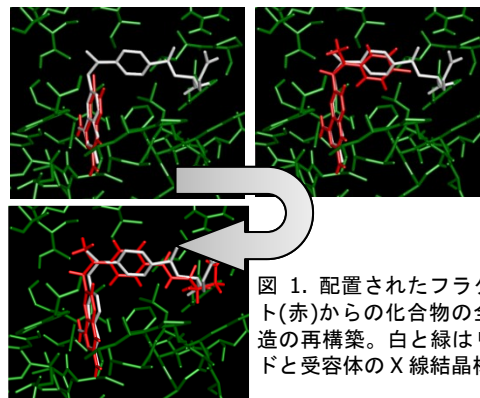


図 1. 配置されたフラグメント(赤)からの化合物の全体構造の再構築。白と緑はリガンドと受容体の X 線結晶構造。

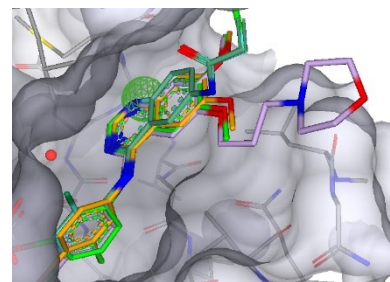


図 2. EGFR と 5 つの阻害剤とのドッキングシミュレーション結果。結合自由エネルギーが強いと判定されたドッキングポーズを表示。

対応プラットフォーム

Windows 64bit, Linux x86 64bit, MacOS 64bit

- 詳細につきましては、お問い合わせください。
 - 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。
 - 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。
- 1) Matthias Rarey, et al., A Fast Flexible Docking Method using an Incremental Construction Algorithm, J. Mol. Biol. (1996) 261, 470-489.
 - 2) Nadine Schneider, et al., Substantial improvements in large-scale redocking and screening using the novel HYDE scoring function, J Comput Aided Mol Des (2012) 26, 701-723.



BioSolveIT 社日本総代理店

株式会社 モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀三丁目 19 番 9 号 ジオ八丁堀

Phone: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

E-mail: sales@molsis.co.jp