

Docking Study with HyperChem

マニュアル

辻 一徳

Docking Study with HyperChem マニュアル

分子機能研究所

埼玉県三郷市高州 2-105-1-14

本マニュアルの内容については正確な記述に努めましたが、著者は本マニュアルおよびここで使用されるソフトウェアに対して、なんらかの保証をするものではなく、また、本マニュアルの内容によるいかなる結果についても、一切の責任を負いません。

本マニュアルに記載のソフトウェアは指定されたライセンスによってのみ入手できます。

本マニュアルに記載の内容は、予告なく変更する場合があります。

本マニュアルの全部または一部を無断で複製、転載、磁気媒体へ入力することを禁じます。

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。

Copyright © 2006-2010, Institute of Molecular Function

All Rights Reserved.

ISBN: 978-4-9902513-1-8

Printed in JAPAN

Docking Study with HyperChem マニュアル

本マニュアルはソフトウェアプログラム、*HyperChem* 上でドッキングシミュレーションおよび複合体解析を可能にする *Docking Study with HyperChem* の参考書として役立ちます。ここでの内容は *Docking Study with HyperChem* リビジョン E1 以降に対して記載されています。Windows の概念やダイアログボックスなどの基本操作はすでに周知のものとして記載されます。これらに関して補助を必要とする場合は、Windows のマニュアル等を参照してください。*HyperChem* の特徴、オプション、操作方法についての補助を必要とする場合は、*HyperChem* のユーザーリファレンスを参照してください。

目次

概要	7
推奨最小システム構成	11
必要なソフトウェア	12
パッケージ構成	13
モジュールプログラム	13
パッケージグレード	13
追加オプション	14
インストール	15
<i>TelPro1.2</i> (Windows 版) のインストール	15
<i>Docking Study with HyperChem</i> のインストール	16
ライセンスキーのインストール	18
各モジュールの説明	19
<i>HyperChem8</i> での注意点	21
<i>HyperChem</i> 各バージョンでの注意点	22
初期設定	23
<i>HyperChem</i> レンダリング初期設定	26
操作手順	28
準備	28
標的生体高分子システムの準備	28
起動	40
試行化合物の準備	40
生体高分子立体構造からのファーマコフォア点予測	51
フレキシブルドッキングシミュレーション	66
パラメータの調整	83
複合体構造の閲覧	84
相互作用解析と構造活性相関解析準備	90

二次元化合物データベースに対するバーチャルスクリーニング	94
化合物 3D データベースの準備	94
化合物 3D データベースの閲覧	99
バーチャルスクリーニング	99
ヒット化合物の確認作業とその後の作業	104
References	108