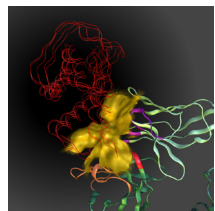


MOE 2018.01 新機能

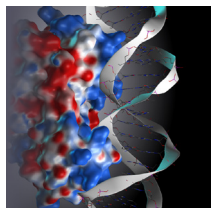
バージョン 2018.01で追加されたおもな新機能

エピトープマッピングと解析



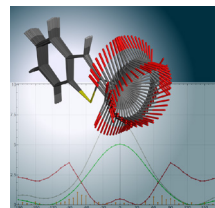
- タンパク質-タンパク質ドッキングを用いたエピトープの自動同定
- タンパク質-タンパク質相互作用に基づくフィンガープリント解析とクラスタリング
- アノテーション付けされたエピトープ配列の可視化と関連するタンパク質ポーズの閲覧

RNA/DNA モデリング



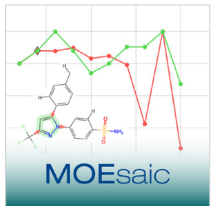
- DNAとRNAの構築、編集、アラインメント、重ね合わせ
- 塩基変異に伴う最適な核酸配座の探索
- ポリヌクレオチドデザインのための修飾核酸の導入

Torsion Scanとその解析機能



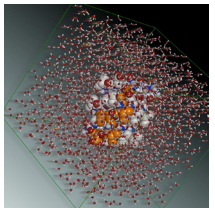
- MMならびにQMによる結合二面角の計算とエネルギープロファイル
- リガンド配座の生成と、最適な配座と結合二面角の特定
- QM計算による結合二面角のエネルギープロットとMogulの統計データとの比較

MOEsaic – SAR解析とMMP解析



- Rグループの寄与と分子プロパティの計算とプロット
- 活性クリフ探索のためのMatched Molecular Pair解析とフィルター
- よりわかりやすくプロット機能の改善

AMBERインターフェイス



- MOEから直接AMBERのMDシミュレーションを実行
- MOEを使用してパラメータを自動的に生成しAMBER計算用に変換
- 並列クラスタPCまたはGPU上でMDを実行した結果をMOEでトラジェクトリー解析可能

MOE/web 機能の拡張



- クライアントマシンのSVLアプリケーションのアップデート
- クライアントマシン間のカスタムプロジェクトやユーザープロファイルの構築と展開
- リモートサーバーにある膨大なフラグメントデータベースを用いた母核置換の実行

MOEについて

MOEはアプリケーションの実行環境と開発環境を一体化した統合計算化学システムです。創薬研究のための多様な機能と、柔軟性の高い分子モデリング環境を提供します。ユーザーフレンドリーなインターフェースと高度なデータ処理機能を搭載し、実験研究者から計算化学者まで幅広いニーズをサポートします。さらにMOEは幅広いプラットフォームに対応しており、Windows, MacOS, Linuxで動作します。

主なアプリケーション

- 構造ベース創薬
- フラグメントベース創薬
- ファーマコフォア解析
- メドケムアプリケーション
- バイオロジクスアプリケーション
- タンパク質および抗体モデリング
- 分子モデリングとシミュレーション
- ケモインフォマティクスと QSAR

Chemical Computing Group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3-19-9

ジオ八丁堀

Tel: 03-3553-8030

Fax: 03-3553-8031

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

e-mail: sales@molsis.co.jp