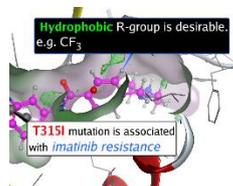


MOE 2019.01 新機能



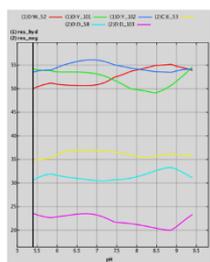
バージョン 2019.01で追加された主な新機能

自由なラベル表示



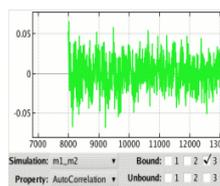
- HTML形式対応。太字、斜体、上付き文字、下付き文字、フォント、および色分けをサポート。
- 原子・残基・分子鎖の特性ラベル。値は自動的に変更。
- ラベルの座標、文字色、背景色の設定。複数行に対応。

pH変化を伴うタンパク質の物性推算



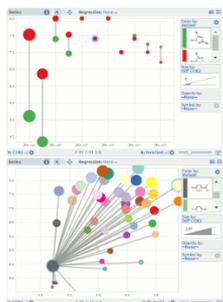
- LowModeMDとMonte Carlo Protonate3Dを組み合わせて、pHの範囲での立体配座依存性プロトン化状態をサンプリング。
- アミノ酸残基ごとの物性値の出力。残基毎のパッチ表面積等。
- MOE databaseの分子に対して連続処理。

Amber TIによる結合自由エネルギー計算



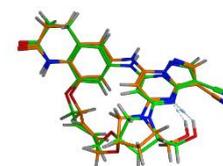
- 受容体と異なるリガンド間の相対的結合自由エネルギーの推算。
- 熱力学積分の微分値や平均/自己相関などをグラフで可視化。

SAR解析ツールMOEsaicの機能拡張



- セッションの共有。解析結果を研究者間で共有。
- 解析済みのデータに新規データを追加して解析の続行が可能。
- カスタマイズ機能。ユーザー定義のカスタムデモファイル、カスタムプロジェクト、カスタム特性モデルの追加。
- 操作性の向上。インターフェイス改良による操作性・結果表示機能の向上。

NMR立体配座分布解析



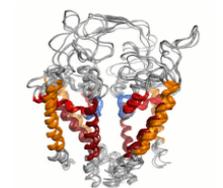
- 実験値に近い配座の選出。
- 利用可能な実験値 - NOE距離、NMRシフト、J-カップリング。

PSILOとの連携



- MOEからPSILOの様々なクエリーを用いて検索しダウンロード。
- テキスト検索、ポケット検索、3D相互作用検索。

その他の機能強化



- Project Databaseにイオンチャネル(Na⁺, K⁺, Ca²⁺)を追加。
- 実験値に重み付けしたエピトープマッピング機能。
- バイスペシフィック抗体のモデリングに対応。
- MOE/webにDatabase Browserのビューワーが追加。

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イ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7階

Tel: 03-3553-8030

Fax: 03-3553-8031

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

e-mail: sales@molsis.co.jp

