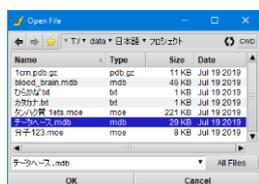


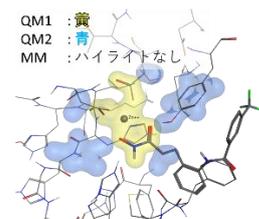
MOE 2020.09 新機能

バージョン 2020.09で追加された主な新機能



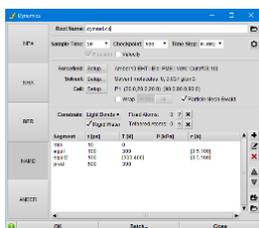
日本語などの多言語のサポート

- UTF-8をサポートし、日本語など多言語に対応。
- ファイル名、GUI、データベースなどで様々な言語を利用可能。
- カスタマイズによりメニューバーなどを様々な言語に変更可能。



Gaussian ONIOM法によるQM/MM計算

- QM領域をMOEのSelection LanguageやSMARTSなどで指定。
- 領域の分割はONIOM法のルールに準拠するように自動調整。
- 各領域について各種QM手法や分子力場の選択が可能。
- QM/MM領域をMOEウィンドウで可視化。



MDシミュレーションインターフェイスの強化

- インターフェイスの改良による操作性の向上。
- 昇温、平衡化などのプロトコルの管理機能の向上。
- トラジェクトリーの再生プレイヤーが新たに追加。

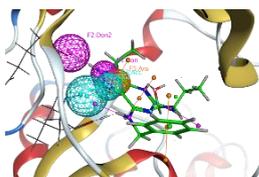


HPCフレームワークの強化

- 外部のキューイングシステムへのジョブの送信機能が追加。
- ジョブを直接送信して計算/一旦ローカルに保存して後で計算。
- 送信したジョブのステータスを専用のインターフェイスで監視。

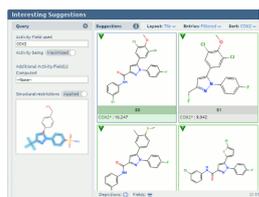
HTSに向けたドッキング計算の最適化

- 様々な形式のリガンド配座データに対応 (MDB、SDF、OEB、ディレクトリー内のファイル等)。
- ファーマコフォアによる配座のフィルタリングと初期ポーズの発生。
- 中断したドッキング計算の再開が可能。



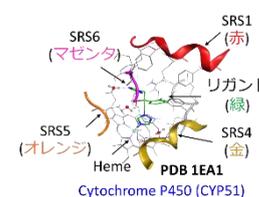
MOEsaicのアップデート

- 既存のデータセットにない新規化合物の提案。
- Free-Wilson解析による新規化合物の活性/物性値の予測。
- 各プロパティモデルへの適合度を数値化した記述子の追加。



その他の機能強化

- 全てのメインウィンドウとパネルにヘルプボタンを追加。
- タンパク質の化学修飾に関連する記述子の追加。
- 抗体モデリング関連機能の強化。
- Project DatabaseにシトクロムP450などが追加。



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