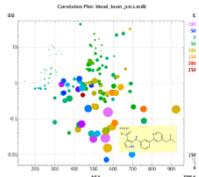


MOE 2022.02 新機能

Chemical
Computing
Group

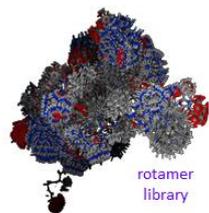
MOE
2022.02

バージョン 2022.02で追加された主な新機能



プロットとデータベースビューアーのUI拡張

- プロット機能拡張（最大4つのプロパティを分析、対数プロット）
- プロットのマウスオーバーによってリガンドの2D構造を表示
- DBVの分子表示の2D/3D切り替え、タンパク質配列の表示



GPUによる高速化

- 側鎖のパッキングのUQOアルゴリズムにおいてGPU計算の実装（Protein Design, Homology Model等を高速化）
- タンパク質-タンパク質ドッキングにおいて、相互作用エネルギー計算、ポーズ生成を高速化
- HPCキューの登録において、GPUの使用数を指定

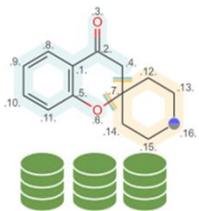
糖鎖構造の検出と表示

- インターフェイスの改良による操作性の向上
- 炭水化物データベース（74種類の単糖類をfuranose, pyranose, α/β , D/L型で収録）
- 糖構造を自動認識し、NCBI SNFG記号による表示（メチル化、アセチル化糖に対応）

	code	mol
1	7NWF	
4	6TYN	

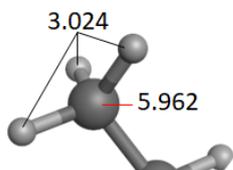
コンビナトリアルライブラリ生成ツール

- MOE/webベース新たなアプリケーション
- 化学反応を基にバーチャル化合物ライブラリを生成。
- 内蔵のスケッチャーによる反応式描画、反応式の閲覧



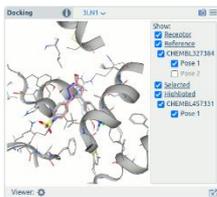
Hydrogen Mass Repartitioning (HMR) の適用

- AMBER Thermodynamic integration, MD, LowModeMDでのHMRの適用
- タイムステップを2 fsから4 fsに増やすことで、計算時間を半減



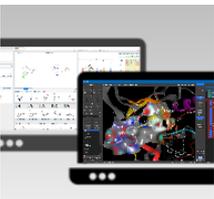
MOEsaicのアップデート

- MOEsaicからオン・ザ・フライでドッキング計算を実行
- ウィンドウ内にドッキングしたリガンド配座を表示する枠を追加
- Sketchモードにおいて分子が変更されると、ドッキング配座も動的に更新



ハードウェアとOSのサポートを拡張

- 新たにApple Silicon M1に対応
- Oracle JavaとOpenJDKを公式にサポート



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

