

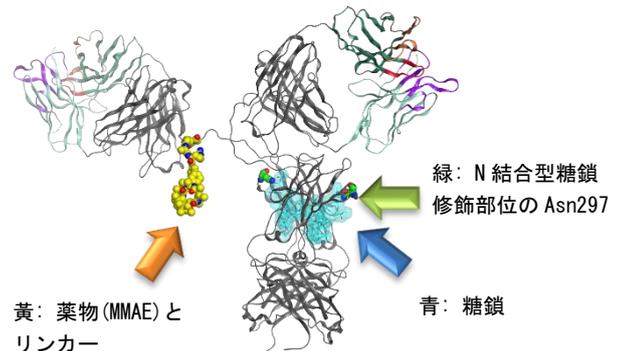
バイオ医薬品開発用カスタムアプリケーション

Bio-MOE

Bio-MOE は、抗体・タンパク質・ペプチド医薬品開発を支援するための MOE のカスタムアプリケーションです。抗体の自動/連続モデリング、ハイスペシフィック抗体の構築、タンパク質の物性値の計算、配列と構造に基づいた化学的修飾部位の検出や Liability の予測など、より高度なモデリングと物性評価を簡単な操作で行えます。MOE の標準アプリケーションと Bio-MOE を組み合わせて使用することで、生物学的製剤の開発における問題や課題を明確にし、合理的な分子設計が可能です。Bio-MOE は保守契約中であれば無償でご利用いただけます。

抗体/タンパク質モデリング

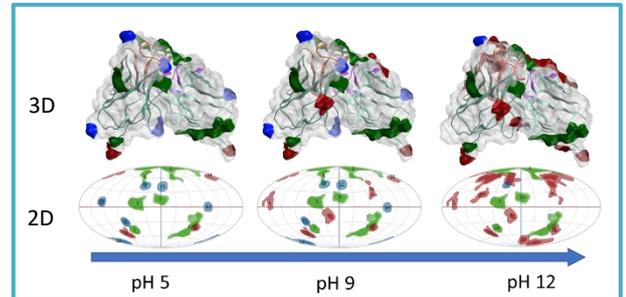
- 重鎖と軽鎖の配列からの抗体の自動モデリング
- 抗体の各領域 (Fv, Fab, F(ab)2, rlg, Ig) のモデリング
- シングルドメイン抗体 (VHH, VLL)、一本鎖抗体 (scFv)、ヒト化抗体、ハイスペシフィック抗体のモデリング
- ループ、リンカーモデリング
- 抗原-抗体複合体モデリング
- 抗体薬物複合体 (ADC) モデリングや糖鎖修飾部位の検討
- 複数の配列を入力とした連続計算



モノクローナル抗体 cAC10 の ADC である Brentuximab vedotin のモデリング例

Developability の評価

- タンパク質間相互作用、凝集、溶解性に関連する表面パッチ (疎水/正電荷/負電荷) の検出
- 様々な pH 条件下での表面パッチの計算
- タンパク質プロパティの評価と記述子計算
 - タンパク質全体/CDR における表面パッチの強さと表面積
 - Hydrophobic Imbalance, DRT, 接触表面積
 - 原子接触、パッキングスコア、側鎖のアウトライヤー
 - 抗体の粘度、クリアランス率、安定性の予測
- 構造変化を考慮したプロパティのアンサンブル平均の算出



各 pH 条件下での 3D/2D 表面パッチ解析 (緑: 疎水性、青: 正電荷、赤: 負電荷)

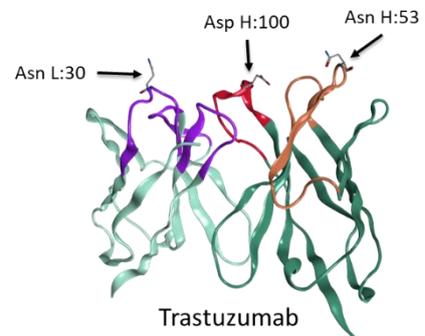
化学的修飾部位の検出

- 配列と立体構造から以下の潜在的な化学的修飾部位を検出

Met, Cys, Trp の酸化	N末端の Glu の環化	Asp の異性化
Asn の脱アミド化	Lys の糖化	Cys のジスルフィド結合
N結合型糖鎖修飾	細胞接着活性モチーフ	抗体の凝集性モチーフ
ペプチド結合切断モチーフ (35種のタンパク質分解モチーフ)		

その他解析機能

- 分子間接触表面積の計算と表面形状と電荷的な相補性の可視化
- アミノ酸突然変異部位の可視化



抗体医薬品における異性化しやすい Asp と脱アミド化しやすい Asn の表示

Bio-MOE プログラムの入手方法は弊社までお問い合わせください。