

# MOE ペプチド解析

MOE はペプチド解析のための機能を多数搭載しております。変異体解析として、自動的な変異体モデルの構築と、各種物性値の推算などが可能です。相互作用解析では、ドッキング計算によるペプチド-受容体複合体の構造予測などが行えます。表面解析機能により分子表面の特徴づけも行えます。配列を指定しペプチドを構築することも可能です。ペプチドの解析、改変、構築を行える多彩な機能により研究をサポートします。

## 変異体解析

- 網羅的な変異体モデルの自動構築
- 変異体モデルの熱安定性・各種物性値の推算
- 標的タンパク質との親和性の推算
- 修飾アミノ酸のモデリングに対応

## 相互作用解析

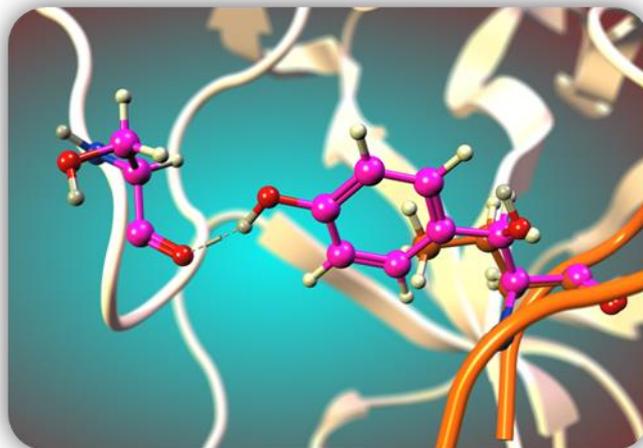
- タンパク質の推定リガンド結合部位の自動検出
- ペプチドのドッキング計算
- 重要相互作用残基の自動検出
  - 相互作用の特性を反映したドッキング

## 表面解析

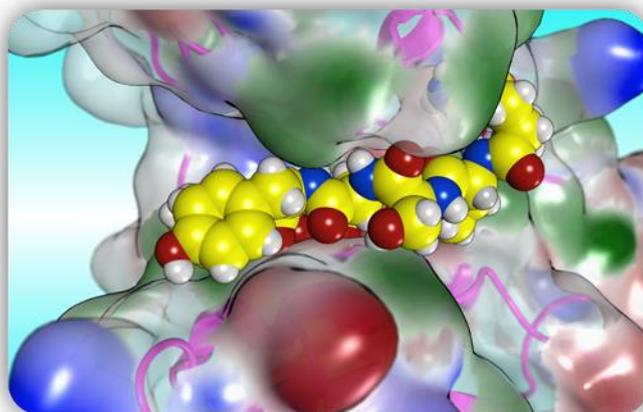
- タンパク質やペプチドの特徴的な分子表面  
(疎水性/正電荷/負電荷) の検出

## 構造解析

- 配列指定によるペプチド構築
- 配座解析や構造最適化による安定構造の予測



変異体解析例 (紫:Tyr 変異体、橙:Thr 野生体)



ペプチド 6 残基のドッキング結果例