

MOE 核酸モデリング

統合計算化学システム MOE は柔軟な核酸モデリングが可能です。二本鎖および一本鎖核酸を容易にモデリングでき、修飾核酸にも対応しています。塩基配列のセンス、アンチセンス表示や塩基配列のアライメント、核酸構造の重ね合わせも可能です。また、構築した核酸の物性推算や、ドッキング計算による核酸-タンパク質複合体の構造予測ができます。核酸の配列・立体構造・相互作用・物性を相互に関連付けて解析することで、核酸創薬の現場を強力に支援します。

DNA/RNA Builder

- 核酸の構築、伸長、修正のための専用パネルを搭載

Amber14:EHT 力場

- 核酸用パラメーターの改良

DNA/RNA モデリング

- 一本鎖および二本鎖の構築、伸長、編集
- 一般的な二重らせん構造 (A、B、C、Z ヘルックス) をサポート
- リボースとデオキシリボースの変換 (DNA \leftrightarrow RNA)
- 修飾核酸を使用したモデリングに対応
- ヌクレオチド塩基の構造最適化と再パッキング
- ローター配座の探索
- 相補塩基対ヌクレオチドの充填

アンチセンス対応

- 塩基配列のセンス・アンチセンス表示

核酸のアライメント・重ね合わせ

- 塩基配列の類似性や RMSD の算出、その他測定値による配色が可能

相互作用解析

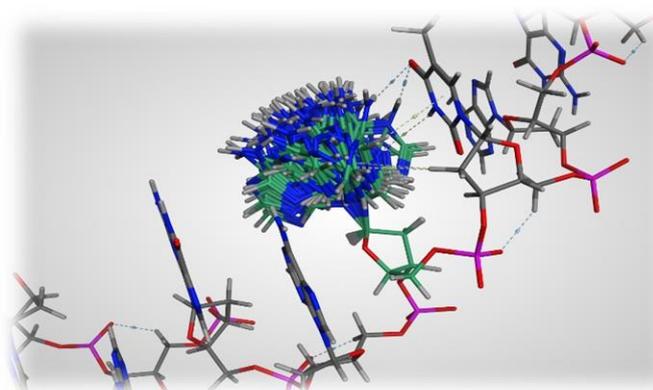
- 拡張ヒュッケル法を用いた定量的な相互作用表示

核酸-タンパク質ドッキング

- 核酸-タンパク質複合体の構造予測

物性推算

- 構築した核酸の物性値の推算



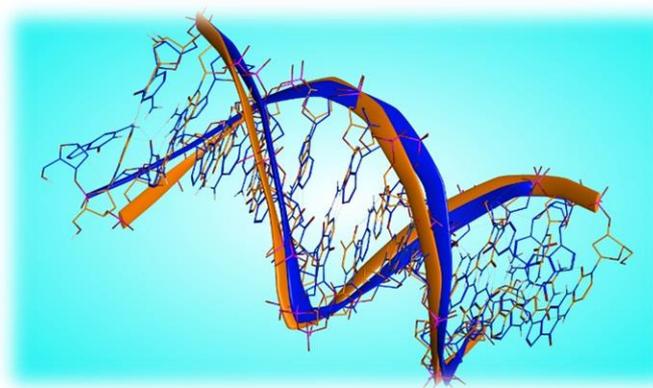
核酸塩基のロータマー配座の探索

アンチセンス表示に切替

Tag	Chain	1	5	10	Tag	Chain	1	5	10			
101D	1: 101D.A	c	g	c	a	a	t	t	r	g	c	g
	2: 101D.B	c	g	c	a	a	t	t	r	g	c	g

アンチセンスインジケーター

塩基配列のアンチセンス表示



核酸の重ね合わせ