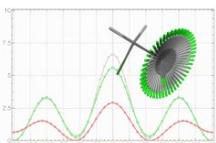


MOE 2024.06 新機能

分子力場のアップデート



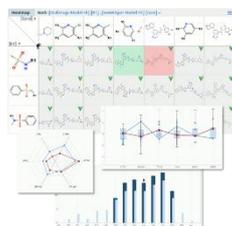
- 新しいAmber:EHTおよびAmber:EHTo力場
- 結合角と二面角のパラメーター化の新しい手法
- 非天然核酸（特殊塩基、修飾糖、リン酸基）をサポート

リガンドの二面角の妥当性の評価



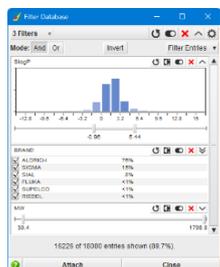
- CSDの統計情報に基づく二面角の妥当性の評価
- MOEウィンドウ上で、緑 (良好)、オレンジ (警告)、赤 (不良)の色分け表示

MOEsaicのアップデート



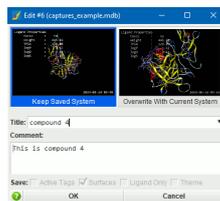
- R-Group Analysisによるフラグメントを組み合わせた構造を列挙してヒートマップとして表示
- QSARモデルのサポート
- レーダープロットなどの新しいプロットの追加

データベースのフィルター機能



- フィールドの値を使用してデータベースの内容を対話的にフィルタリング
- ANDやORを組み合わせた複数の条件によるフィルタリング
- 数値フィールドのヒストグラム表示や文字フィールドによる分類と割合の表示

キャプチャー機能



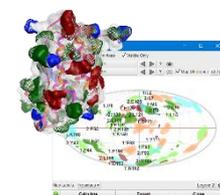
- MOEに読み込まれている情報をキャプチャーとして保存
- タイトルやコメントの追加や、リガンドプロパティ、分子表面、特性マップ、表示テーマの保存も可能

量子化学計算インターフェースの強化



- OpenMOPACをMOEにバンドル
- Fukuiインデックスの計算と可視化
- GaussianによるECDスペクトルとORDスペクトルの計算および計算されたスペクトルの可視化

その他の機能強化



- タンパク質アラインメント機能の改善
- 複数のタンパク質表面パッチを考慮した2Dマップ表示
- 生物製剤に対してファーマコフォア検索が実行可能

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ー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



MOLSIS
Molecular Simulation and Informatics Systems