

MOE

タンパク質 変異体解析

タンパク質デザイン

MOE のタンパク質デザイン機能は、タンパク質立体構造データをもとに網羅的に変異体モデルを構築し、さらに変異による物性値への影響を予測します。タンパク質の熱安定性の向上やリガンドとの親和性の改変など、目的の物性を示す変異体やペプチドの設計を行えます。変異するアミノ酸残基は天然のアミノ酸に加え、非天然アミノ酸にも対応しています。更にループ/リンカーモデリング機能により、生物学的製剤などのタンパク質の設計をサポートします。

Alanine Scan

- タンパク質の各残基を網羅的にアラニンに変異
- タンパク質の熱安定性やリガンド親和性のホットスポットを検出

Disulfide Scan

- ジスルフィド結合を形成可能な残基ペアを探索
- タンパク質の熱安定性の向上を図る Cys 変異候補残基を探索

Resistance Scan

- 1 塩基変異による変異体モデルを網羅的に構築
- 進化上起こりやすい 1 塩基変異に注目したタンパク質変異体の特性変化予測

Residue Scan

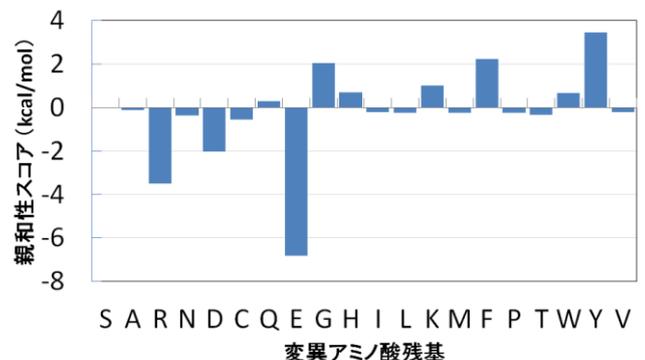
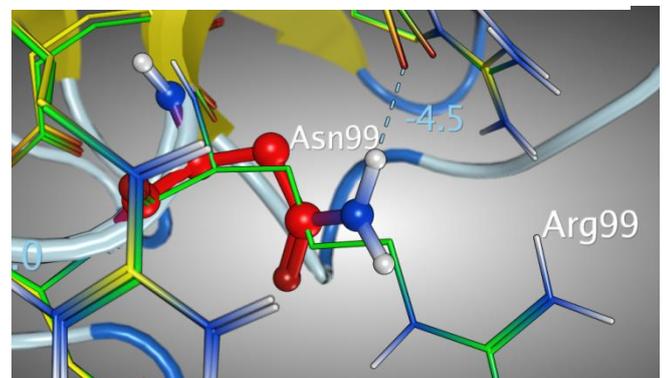
- タンパク質変異体モデルを網羅的に作製
- 任意の変異残基を複数個所に指定可能
- 研究の目的に沿う性質をもつ変異体を探索

Sample Sequence

- 無作為な配列空間のサンプリングによるフォーカスライブラリー構築
- 好ましい物性や活性を有する突然変異の出現頻度を解析

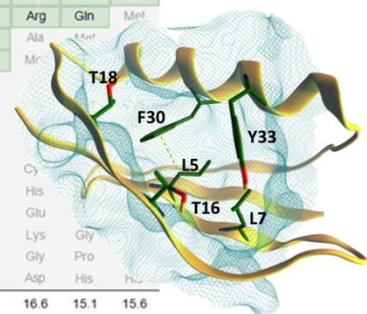
Sequence Design

- 主鎖構造と周辺的环境分子を考慮し、膨大な側鎖候補の組み合わせから効率的に最適な配列を予測



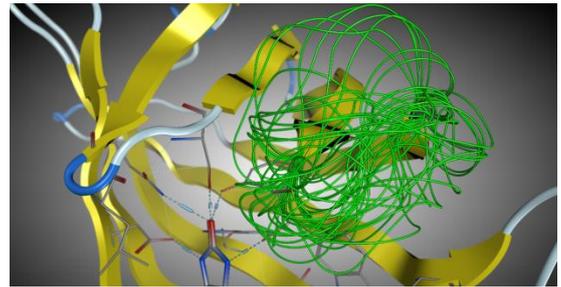
Rank	1:Leu5	1:Leu7	1:Thr16	1:Thr18	1:Phe30	1:Tyr33
1	Trp	Trp	Trp	Trp	Trp	Trp
2	Phe	Tyr	Phe	Tyr	Phe	Tyr
3	Tyr	Phe	Ile	Ile	Tyr	Phe
4	Leu	Leu	Tyr	Phe	Val	Val
5	Val	Val	Met	Leu	Ile	Arg
6	Met	Cys	Val	Thr	Leu	Ser
7	Thr	Ile	Leu	Val	Thr	Gln
8	Gln	Pro	Thr	Arg	Gln	Met
9	Cys	Asn	Arg	Ala	Met	
10	Ile	Ala	Asn	Met		
11	Ser	Met	Cys			
12	Glu	Thr	Ser			
13	Asp	Gln	Ala			
14	Arg	Arg	Gln			
15	Ala	Glu	His	Cy		
16	Lys	Ser	Gly	His		
17	His	Lys	Pro	Glu		
18	Gly	Gly	Glu	Lys	Gly	
19	Asn	Asp	Lys	Gly	Pro	
20	Pro	His	Asp	Asp	His	h

Entropy Count 16.0 14.0 17.1 16.6 15.1 15.6



ループ/リンカー構造構築

- 経験的探索法、または *de novo* 探索法により任意の残基長のループ/リンカー構造を構築
- リンカー導入後の各ドメインの最適な配置を、剛体の構造最適化により予測



タンパク質解析

統合計算化学システム MOE には、タンパク質解析の為に様々な機能が搭載されており、簡単にタンパク質の特性解析が行えます。タンパク質の物性推算や、ラマチャンドランプロットによる主鎖構造の妥当性の評価などが行えます。また、表面パッチ解析機能、接触表面積解析により、タンパク質の相互作用に重要な分子表面の特徴づけを行えます。

物性推算

- 代表的な物性値（配列・構造由来の等電点、ヘリックス含有率、親水性・疎水性表面積など他 20 種の物性値）を計算

- pH 変化による物性値変化の推算機能も搭載

表面パッチ解析

- 標的タンパク質の分子表面における疎水性、負電荷、正電荷の特徴付け
- 変異による分子表面の特性変化を解析

- タンパク質の溶解性や相互作用部位の予測

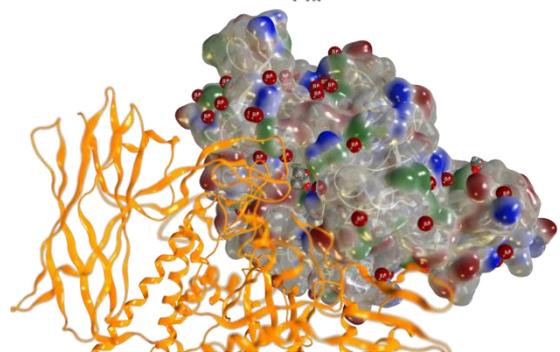
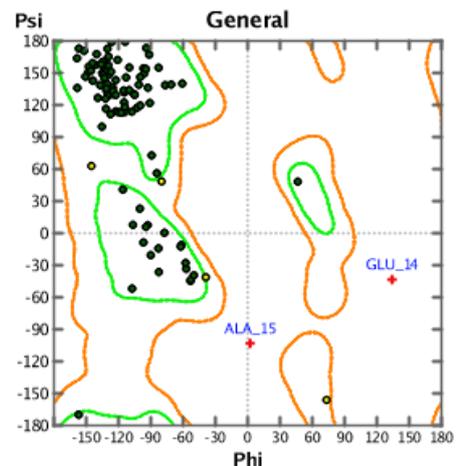
ラマチャンドランプロット解析

- 異常構造をもつアミノ酸を検出、エネルギー最適化による構造修正も可能

- 構造的に異常な残基をプロット上から選択

接触表面積解析

- タンパク質間の相互作用や、低分子化合物との相互作用に与える表面を検出



統合計算化学システム MOE ではその他さまざまなタンパク質関連機能（類似タンパク質検索、アライメント、モデリングなど）を搭載しております。



CCG 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

TEL: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

E-mail: sales@molsis.co.jp

URL: <https://www.molsis.co.jp/>