



NEW
プロトコルの
カスタマイズ機能

Discovery Studio 1.6 の新機能

Discovery Studio 1.6では、ユーザーインターフェース、タンパク質モデリング、シミュレーションと分析、ストラクチャーベースデザイン、プラットフォームの各部分で機能が強化されました。

ユーザーインターフェース

Discovery Studio Visualizer Proの新機能

- ・ 力場ファイルを保存し、再利用できます
- ・ プロパティ計算を行えるようになりました
- ・ Dreidingによるミニマイズができます
- ・ ファイルをデスクトップやExplorerウィンドウからドラッグ・ドロップして表示できます
- ・ ウィンドウを分割・合体・ドラッグして、作業領域を大きくできます*
- ・ 3D構造の表面を、メタルやゴムなどのマテリアライズ表示で図示できます*
- ・ データテーブルのAttributeを編集して、オリジナルな数値・文字列データを、分子・残基・原子等に追加できます*
- ・ H-Bond、bumpsなどのモニターは、3D構造とテキストウィンドウの両方に表示されます*

Discovery Studioは、強力な創薬研究プラットフォームです

プロジェクトのコンセプト立案からリード最適化まで、必要なソフトウェアのすべてを提供します

簡単に使って、レイアウトやセッティングもカスタマイズできるインターフェース (PDBデータのダウンロード場所等)

プロトコルを共有・再利用して、チームの連携を強化し、お互いの結果のフィードバックの交換も容易

新しいプロファイル・アライメント

- ・ MODELER 8.2の新しいプロファイル・アライメントで、配列のプロファイルを用いたアライメントを実行できます。相同性の低い配列同士のアライメント結果を改善します。

BiopolymerのX線機能の改善

- ・ X-LIGANDでリガンドを電子密度マップにFitします。
- ・ X-BUILDで電子密度マップからタンパク質モデルを作成します

タンパク質モデリング、シミュレーションと分析

サーバープログラムのアップデート

- ・ MODELER 8.2による自動ホモジーモデル作成
- ・ CHARMM 32b1によるエネルギー最小化、分子動力学計算

ストラクチャーベースデザイン

新しい低分子ドッキング

- ・ CHARMMに基づくドッキング最適化ア

* この新機能はDiscovery Studio Visualizerでも実装されます。Discovery Studio Visualizerは、製品版と同等のタンパク質・モデリングデータの表示、共有、解析機能を持つツールです。

下記のプラットフォームをサポート

Linux:

Red Hat Enterprise Linux WS
3.0 (updates 4-7)
Red Hat Enterprise Linux WS
4.0 (updates 1-3)
GNOME desktop on Linux

Windows:

Windows 2000 Professional
SP4 Rollup 1
Windows XP Professional
SP1/SP2
Windows Server 2003 SP1

Graphics Cards:

Nvidia Quadro FX 1100
Nvidia Quadro FX 1400
Nvidia Quadro FX540
ATI Fire Mobility GL (IBM
T42p Thinkpads)

ログラムCDOCKERでドッキング結果を解析できます。

- Cambridge Crystallographic Data Centerの、遺伝的アルゴリズムに基づくドッキングプログラムであるGOLDを起動することができます (GOLDは別にライセンスが必要です)

- Linuxクラスタをサポートし、集中化した計算資源が利用できます。

一般的なストラクチャーベースデザインの改善

- LigandFitドッキング実験の後、Rigid-Bodyエネルギー最小化が実行できます。
- ドッキング・ジョブに対して、相互作用フィルタがかけられます (LigandFitとGOLD)。
- GOLDの結果は、フレキシブルなレセプター水素でポーズを解析できます。
- パーティションサイトは、組み合わせて連結することができます。

プラットフォーム

Pipeline Pilotとの統合

- Discovery Studioのタンパク質モデリング、レセプター-リガンド・インタラクションとシミュレーションのプロトコルは、Discovery Studio、Pipeline Pilotのどちらのインターフェースでもアクセスできます。
- Pipeline Pilotで編集したプロトコルに、Discovery Studioの「user」プロトコルフォルダから簡単にアクセスできます。
- Discovery Studioを使用して、プロトコル実行後の結果を表示、分析し、別のファイル形式で結果をエクスポートできます。