

生物学的製剤向け新機能

完全長: 免疫グロブリン G 抗体の完全なホモロジーモデルを、IgG1 および IgG2 のテンプレートに基づいて構築します。

フレームワーク: L 鎖および H 鎖テンプレートを、2 つの鎖の相対的な空間的定位を決定する任意のテンプレート構造に重ね合わせることで、抗体フレームワーク構造のホモロジーモデルを構築します。

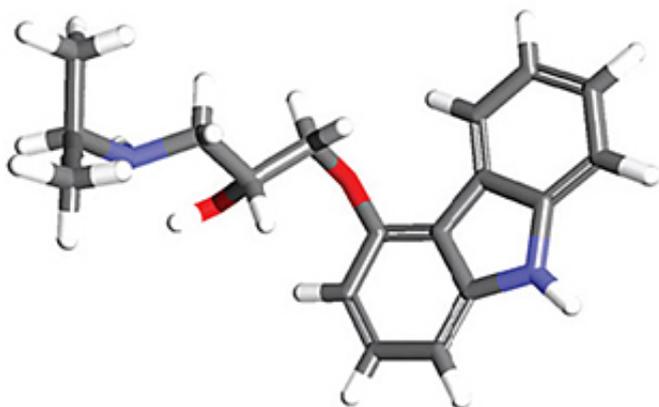
強化された抗体の配列と構造の評価: 抗体のアミノ酸配列にある領域や可変ループ領域を特定し注釈を付けます。

アミノ酸のスキャンによる結合親和性分析: タンパク質複合体の結合親和性における Point Mutation の効果を計算します。並列計算処理をサポートしています。

アミノ酸のスキャンによるタンパク質安定性分析: タンパク質の安定性における Point Mutation の効果を計算します。並列計算処理をサポートしています。

安定した変異の予測: 任意のタンパク質構造における最も安定した 2 または 3 部位の変異を、指定した変異リストから予測します。

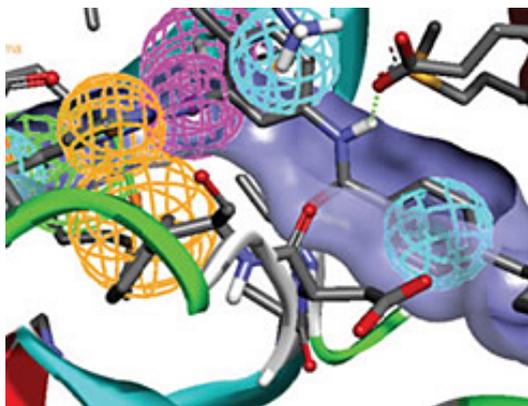
リガンド設計向け新機能



新しく自動化されたファーマコフォア生成ツール

受容体-リガンド複合体: 受容体-リガンド複合体から、一連の選択的なファーマコフォアモデルを生成。このモデルは受容体とリガンドの相互作用に対応する特性から生成されます。

リガンドに基づく処理: 自動的に予測された一連の特性から一連のファーマコフォアモデルの候補を列挙し、さらに遺伝的アルゴリズム(GFA) モデルを使用してモデルを精選。



新たなリガンドを生成するための新しいライブラリ設計ツール

公開されている BREED 手法 [Pierce et al., 2004] を使用して、一連の重複するリガンドの一致する結合を入れ替え、新しい混成リガンドを生成。対象となる一連のリガンドを特定して簡単に複数のリガンドセットを生成できるようになりました。

た。

強化された QSAR ワークフロー

水素の付加やケクレ構造化などさまざまな手順で QSAR 分析向けにリガンド構造を自動整形

トレーニングやテスト用のデータの生成: データセットをトレーニング用やテスト用に分割。トレーニング用のデータセットは QSAR モデルの構築に使用でき、テスト用のデータセットはモデルのパフォーマンス評価に使用できます。

一部の QSAR モデルに求められる要件に応じて、値のスケーリングや、連続値を離散的な値に変換したりできます。

エコシステム

リガンドのドッキング (GOLD)

最新版のCCDC GOLD 5.0 をサポートするため、プロトコルを更新しました。このプロトコルを使用すると、タンパク質集団にドッキングする機能やドッキングにおける高度な水分子処理といった GOLD の新機能を使用できます。

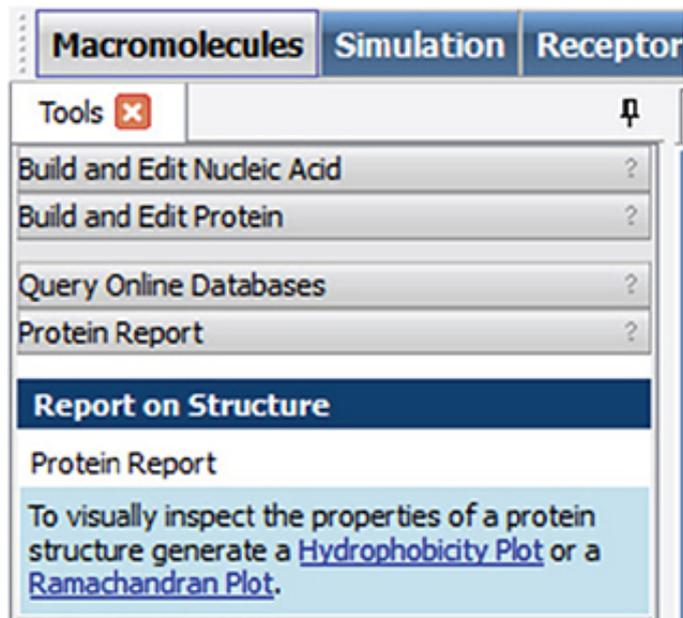
NAMD

新しいサンプルプロトコルにより、イリノイ大学アーバナシャンペーン校ベックマン研究所の TCB グループが開発した NAMD コード、[Phillips et al, 2005]を使用して、ユーザーがシミュレーションを行えます(使用には、ライセンス取得と設定が必要です)。

コラボレーション

向上したクライアントの操作性

Discovery Studio の各機能へのアクセス方法を、現実的な研究ワークフローに合わせて再編成しました。また、プロトコルの処理を簡素化しました。これにより、Discovery Studio 3.0.の科学技術機能のアクセス性と「発見性」が大幅に向上しました。



新しい「Storyboard」モード

Graphics View における構造の可視化時に、オブジェクトの表示状況を個別にキャプチャして .dsv ファイル内に保存し、あとで閲覧することができます。



新しい無料クライアントの提供

Discovery Studio をスタンドアローンクライアントとして、ユーザーに無料でご利用頂けます。Pipeline Pilot やライセンスサーバーに接続する必要はありません。この新しい DS「Visualizer モード」は旧来の DS Visualizer クライアントに代わるものであり、より優れた性能を備えています。このDS「Visualizer モード」では、有償版クライアントの機能の大部分を提供しています。

3D による分子の可視化

パフォーマンス: 向上したグラフィック、シェーダーの追加にハードウェアアクセラレーションを使用

新しい効果: 周辺的な影と直接的な影、被写界深度、原子の輪郭調整、カスタム背景