

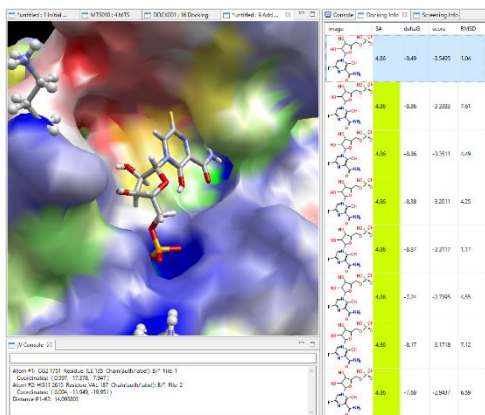


# MolDesk Basic ver.1.1

インシリコ創薬による **ドラッグデザイン パッケージ ソフトウェア** [www.moldesk.com](http://www.moldesk.com)

## なんでもMD どこでもドッキング

全自動で、ほとんどのPDBの構造最適化、MD計算、ドッキング計算ができます。計算エンジンとして、myPresto(※)を使っています。



ドッキング計算によるドッキングポーズの一覧を、スコア順にリスト表示します。結合自由エネルギー $\Delta G$ 、RMSD（入力構造に対する）も表示します。

リスト上で、 $\uparrow\downarrow$ キーをマウスでクリックすると、ドッキングポーズを順番に表示します。

### 溶液 NMR 実験シグナルによるドッキング構造補正

溶液 NMR の化合物のシグナル（水素原子のスピン緩和時間）の実験データを入力して、タンパク質 - 化合物複合体構造を予測します。

## MolDesk Basic 機能一覧

内容	機能
動作OS	Windows XP / Vista / 7 / 8 / 8.1 / 10 (32bit/64bit) Linux (64bit) macOS ver.10.11 以上
入力ファイル	mmCIF pdb mol2 sdf mol SMILES ( mol2 / SMILES は multi も可) mmCIF (pdb) と 化合物ファイル はインターネット入力可
出力ファイル	mmCIF pdb mol2 tplファイル MD 計算設定ファイル ドッキング計算設定ファイル MD計算、ドッキング計算結果ファイルなど (以上、myPresto 仕様) 3D画面のpng画像ファイル (ピクセルサイズ変更可能)
外部分子入力	すでにある系に、任意の mmCIF pdb mol2 sdf mol SMILES ( mol2 / SMILES は multi も可) をマウスクリック点、またはファイル座標で読み込み可
化合物 (リガンド) 編集	2Dエディター (JChemPaint)、2D化学構造と合成容易性のリスト表示、 H 原子削除・付加、原子 (複数) 削除・置換・付加、構造置換、 結合削除・次数置換・回転、構造最適化 (Clean Geometry) 電荷計算 ( Gasteiger または MOPAC7 AM1 / PM3 / AM1-BCC )
溶媒・イオン付加	TIP3P群の直方体、球(Cap) を分子からのマージンで生成、 または、マウスクリック点中心に任意サイズで付加 イオン(Na / Cl) を中和した生理食塩水濃度、濃度/個数指定で付加
構造最適化 (Clean Geometry)	Amber99力場、GAFF2力場、マウス選択原子の位置拘束、 タンパク質主鎖の位置拘束、リガンドと周辺だけの高速な構造最適計算
MD 計算	Amber99力場、GAFF2力場、マウス選択原子の位置拘束可、 タンパク質主鎖の位置拘束、NVT, NPT, NVE アンサンブル、 クーロン力:FMM (溶媒水が球) /PME (溶媒水が直方体) リスタート機能、再計算時の境界条件自動読み込み
MD 計算結果解析	トラジェクトリの動画 (GROMACS, AMBERなども可)、各種エネルギー、温度、 任意2点間原子距離、任意2面角の動画と時間連動した時間変化グラフ GROMACS のほぼすべてのトラジェクトリ解析結果の動画と連動したグラフ表示
手動ドッキング計算	タンパク質のポケット (と推定される所) の近くに、リガンドを配置しただけで、 ドッキングポーズの構造最適化 結合自由エネルギー $\Delta G$ をリスト表示

※ myPresto は、AMED・経済産業省・NEDOの支援によって産業技術総合研究所・JBIC・大阪大学蛋白質研究所等によって開発された次世代天然物化学技術研究組合のソフトウェアです。

## MolDesk Basic 機能一覧

内容	機能
タンパク質のリガンド結合ポケット探索	タンパク質の構造だけから予測する高速・簡易な方法による探索 (ドッキング計算による高精度な Molsite による手法は、MolDesk Screening でサービス)
化合物の合成容易性	化合物の合成容易性 (Synthetic Accessibility) の計算、リスト表示
ドッキング計算	ドッキング計算で得られたドッキングポーズと各種特性値をリスト表示 リスト表示で、ドッキングポーズの3D図の↑↓キーによる切り替え ポケット側は、ユーザ指定のタンパク質・イオン・金属・水分子の複合体が可 ポケット中心原子のマウス選択、ポケットのプロープ点の削除、 候補構造数の指定、複数の候補構造の構造クラスタリング、 多数のリガンドをドッキングする際の高速計算 (グリッドポテンシャル再利用)
溶液 NMR 実験シグナルを使ったドッキング計算	溶液 NMR 実験シグナルによるドッキング構造予測
プロジェクト管理	新規作成、既存のプロジェクトを開く、コピー、エクスポート、インポート
UNDO REDO	回数制限なし、全工程の保存・復元可 各工程でのユーザが作成した3D表示は、原子単位で完全に保存可能
分子表示	ワイヤーフレーム、スティック、ボールスティック、スペースフィル、 タンパク質のバックボーン表示、チューブ表示、リボン表示、 カートゥーン表示、サーフェス表示 (ポリゴン表示)、Cavity表示、ラベル表示、 スラブ表示 (zクリッピングプレーン機能)、センターリセット3種類、 水素結合表示、静電ポテンシャル面表示、アナグリフによるステレオ表示、 投影モードの perspective (透視投影) または parallel (平行投影) 切り替え
色指定	モノクローム表示、CPK表示、シェイプリー表示、グループ表示、 チェーン表示、温度表示、構造表示、電荷表示、残基表示、ポリゴン透明度指定
分子操作	マウスホイールによる拡大・縮小、マウスによる回転・移動・削除

## ライセンス

製品名	価格 (税別)
MolDesk Basic	お問い合わせください。 永年 + 1年保守 1ノード
	2年目以降の保守については別途契約が必要です。 保守にはバージョンアップ、不具合対応が含まれます。

詳しくは、MolDesk のホームページをご覧ください [www.moldesk.com](http://www.moldesk.com)



株式会社 情報数理バイオ

○お問合せ先 (株)情報数理バイオ 営業部  
〒170-0013 東京都豊島区東池袋4-21-1 アウルタワー6F  
TEL 03-6907-0315 FAX 03-6907-0316  
EMAIL: info@imsbio.co.jp URL: http://www.imsbio.co.jp