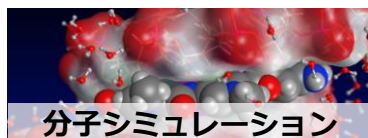


MOE (Molecular Operating Environment) は、低分子、ペプチド、タンパク質、抗体、および核酸などの多様な創薬モダリティに対応した分子設計とモデリングソフトウェアです。多彩なアプリケーションと豊富なデータコンテンツを搭載しており、計算科学者だけでなく、合成研究者、バイオロジスト、X線結晶構造解析者などの研究活動を強力に支援します。グラフィックス、コマンドライン、ウェブアプリケーション、ワークフローの各種使用モードと柔軟なカスタマイズにより、ユーザーの研究目的にあわせて最適な分子モデリング環境を構築できます。



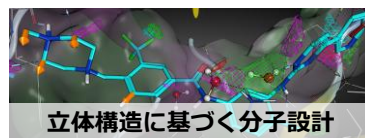
分子モデリング機能

- 分子構築
- 分子構造の表示と出力
- 分子表面の描画と特性解析
- 相互作用表示
- アミノ酸/塩基配列表示
- 分子構造データベース



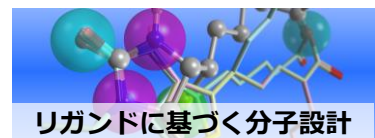
分子シミュレーション

- 分子構造の自動前処理
- 分子力学計算
- 分子動力学計算
- 分子アラインメント
- 配座解析
- スペクトル解析



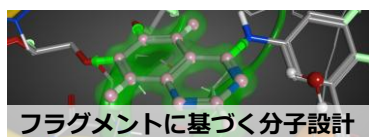
立体構造に基づく分子設計

- ドッキングシミュレーション
- リガンド結合部位の特徴付け
- 結合部位での分子設計
- 3D-RISM法による溶媒解析
- Protein Ligand Interaction Fingerprints
- リガンド結合部位の探索



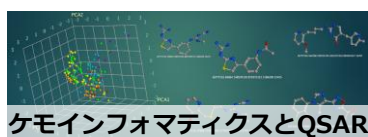
リガンドに基づく分子設計

- ファーマコフォアモデルの構築/編集
- 化合物群に共通するフィーチャーの抽出
- ファーマコフォアモデルによる絞り込み
- 結合二面角の解析
- フィンガープリントによる類似構造検索
- コンビナトリアルライブラリー設計



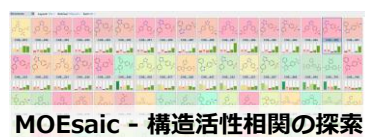
フラグメントに基づく分子設計

- 母核置換
- フラグメント連結と伸長
- メディシナルケミストの知見を反映した構造変換
- フラグメント結合位置検索
- フラグメント交換(BREED)
- フラグメントライブラリーの作成



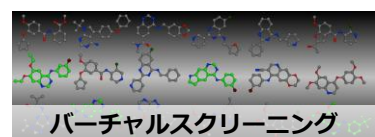
ケモインフォマティクスとQSAR

- 分子記述子
- pKa予測とプロトマー生成
- 線形のQSAR/QSPR
- 機械学習
- データ解析
- フィンガープリントによる類似構造検索



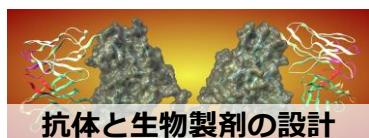
MOEsaic - 構造活性相関の探索

- 構造活性相関/構造物性相関解析
- Matched Molecular Pair解析
- R-group解析
- Free-Wilson解析による新規化合物の提案
- アミノ酸/塩基配列表示
- プロット



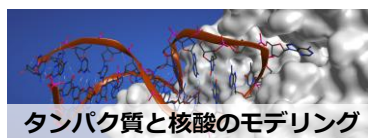
バーチャルスクリーニング

- ドッキングシミュレーション
- ファーマコフォア検索
- フィンガープリントによる類似構造検索
- コンセンサスモデル
- 化合物配座解析データベースの準備
- 化合物ライブラリー



抗体と生物製剤の設計

- 抗体モデリング
- タンパク質工学
- タンパク質-タンパク質ドッキング
- 表面パッチ解析
- 開発可能性の評価
- 生物製剤のバーチャルスクリーニング



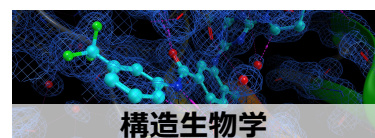
タンパク質と核酸のモデリング

- ホモロジーモデリング
- ループリンカーモデリング
- 翻訳後修飾モデリング
- 生体高分子の複合体の解析
- 変異体と回転異性体の探索
- DNA/RNAモデリング



ペプチドモデリング

- 直鎖状ペプチドと環状ペプチドのモデリング
- ペプチド-タンパク質相互作用の特定
- 配座探索
- 非天然ペプチドの構築
- 構造に基づくペプチド設計
- ペプチド特性の最適化



構造生物学

- 複数の配列や構造のアラインメント
- 配列へのアノテーション付け
- タンパク質ファミリーデータベースの作成と検索
- 保存残基の解析
- ドメインモチーフ検索
- ホモロジー検索

## アプリケーション

分子シミュレーション、ケモインフォマティクス、タンパク質・抗体モデリング、リガンドや受容体構造に基づく分子設計、ファーマコフォア解析などのさまざまな解析機能が搭載されています。また、それらの機能を連携させて、多角的な解析を行うことができます。

## データベースコンテンツ

リードライク化合物、分子フラグメントおよびタンパク質ファミリーなどの目的別に整理された分子構造データベースを搭載しています。分子構造データの収集や整理に時間をかける必要がなく、導入後すぐにバーチャルスクリーニングなどに利用できます。

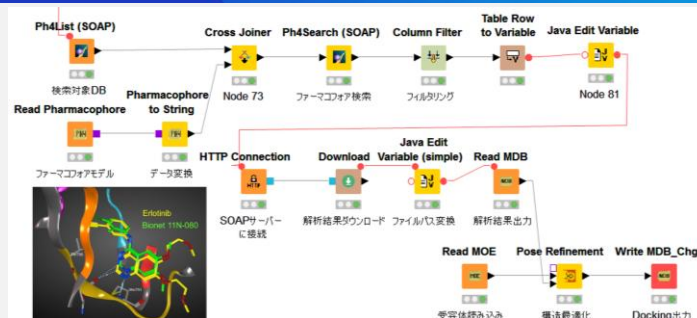
## 開発環境

計算化学に特化した独自の開発言語 SVL(Scientific Vector Language)を用いて、効率的な新機能開発やカスタマイズが可能です。公開されているカスタムプログラムをダウンロードして利用することもできます。ユーザーや研究目的にあわせて最適な分子モデリング環境を構築できます。

## サードパーティソフトウェアとの連携

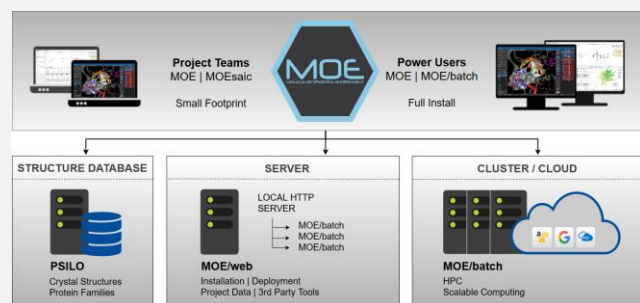
MOE(はNAMD\*)、AMBER\*)、Gaussian\*)、MOPAC、Mogul\*)などへのソフトウェアインターフェースを搭載しており、MOEを介してそれらのソフトウェアを使用した計算を行い、MOEで結果を解析することができます。また、KNIME\*)で使用するためのMOEノードを提供しており、化合物処理やドッキング、母核置換、タンパク質デザインなどMOEを用いたさまざまなワークフローをKNIME上で構築できます。

\* 別途入手が必要



## 創薬支援システム

ユーザーはMOEのさまざまな起動モードやオプション製品を組み合わせて、最適な創薬支援システムを構築できます。例えば、使用頻度の低い実験研究者は、最小構成のMOE/GUIやMOEsaicを使用した簡単な解析を行い、一方で計算化学者はクラスターマシンやクラウドサービスを使用した大規模計算をMOE/smpによる分散処理で行える環境が構築できます。さらに、PSILOを導入することで、生体高分子の立体構造の管理/共有が効率化でき、創薬研究をより加速化できます。



MOE開発元



Chemical Computing Group ULC  
<https://www.chemcomp.com/>

Chemical Computing Group社日本総代理店



株式会社モルシス  
<https://www.molsis.co.jp/>

お問い合わせ先

富士通株式会社

クロスインダストリーソリューション事業本部 Healthy Living事業部 Life Scienceグループ

[contact-moe@cs.jp.fujitsu.com](mailto:contact-moe@cs.jp.fujitsu.com)