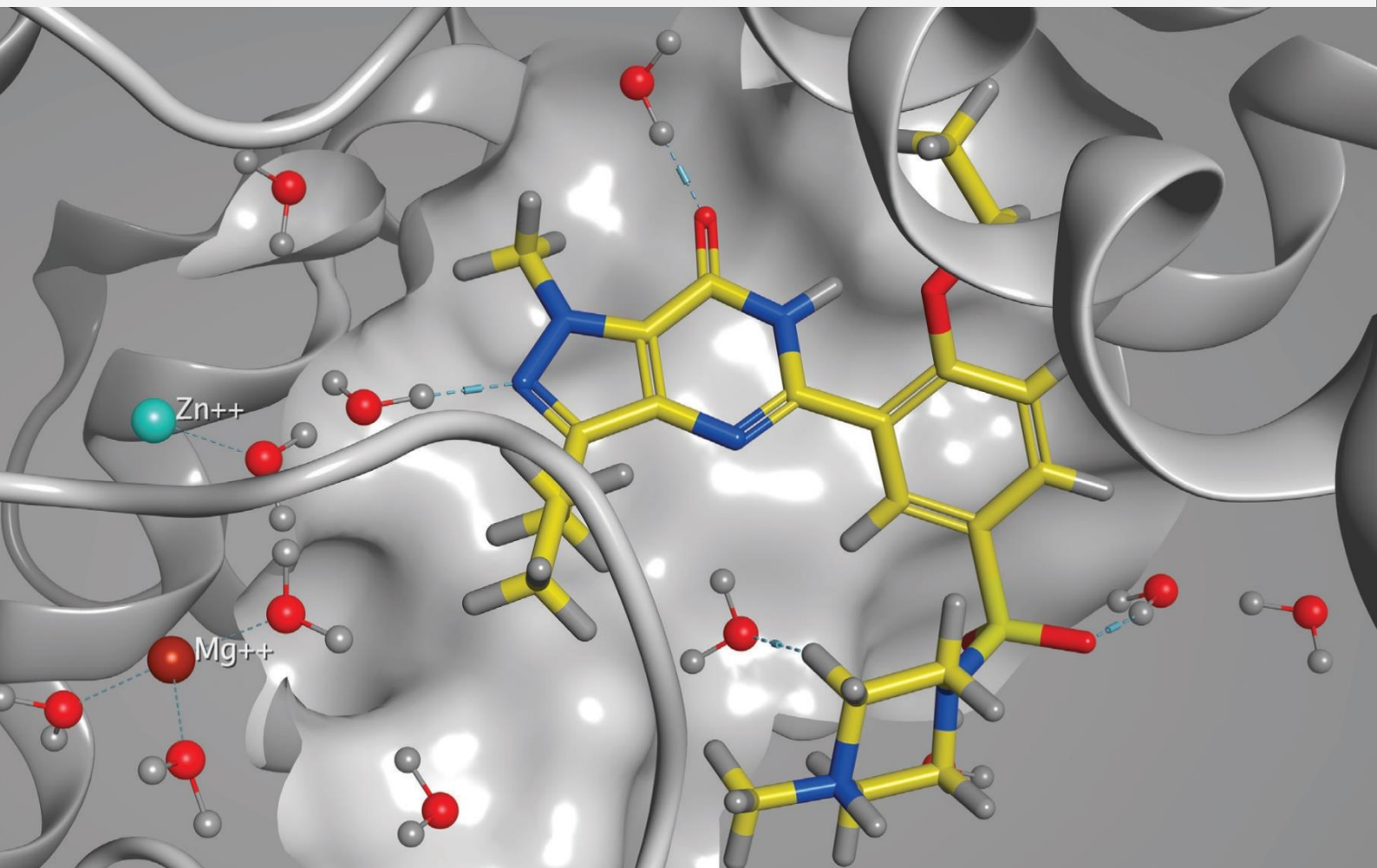


# MOE

Molecular Operating Environment



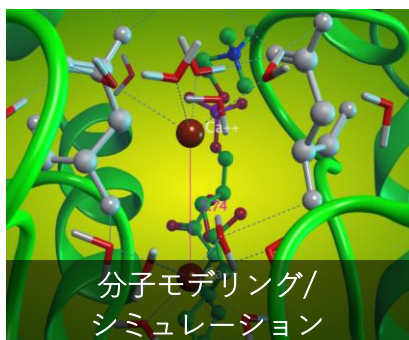
## 統合計算化学プラットフォーム MOE

創薬モダリティに対応するアプリケーション

- 分子モデリング/シミュレーション
- タンパク質/ペプチド/核酸モデリング
- ケモインフォマティクス
- 立体構造に基づく分子設計
- ファーマコフォア解析
- データコンテンツ/開発環境/連携

MOEは、創薬・生命科学研究のための統合計算化学プラットフォームです。操作性の優れたインターフェースから SBDD、LBDD、FBDD などの多彩なアプローチでの分子設計が可能です。リガンド設計、SAR 解析、バーチャルスクリーニング、タンパク質デザイン、分子間相互作用解析など様々な場面に適用できます。

# 全ての研究者に柔軟な分子モデリング環境を提供



- ・ 2D/3D 分子表示
- ・ 拡張ヒュッケル法を用いた分子力場
- ・ 分子力学計算、動力学計算、配座解析、結合自由エネルギー計算、3D-RISM
- ・ 量子化学計算 IF、スペクトル解析

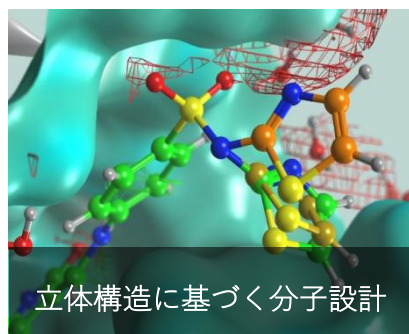


- ・ タンパク質/抗体モデリング
- ・ タンパク質/ペプチドデザイン
- ・ 核酸モデリング
- ・ 非天然アミノ酸/塩基
- ・ 分子間相互作用解析
- ・ タンパク質/核酸物性推算

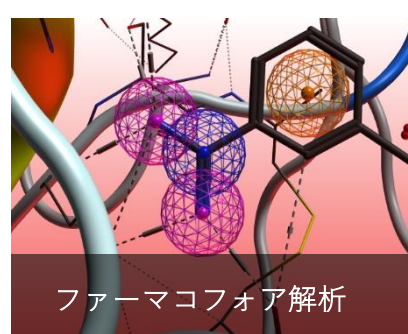
CHEMBL28599 COX2 : 7.16 COX1 : 4.47 [HBA] : 3	CHEMBL28636 COX2 : 7.3 COX1 : 4.44 [HBA] : 4	CHEMBL28662 COX2 : N/A COX1 : 6.01 [HBA] : 1	CHEMBL28664 COX2 : 5.58 COX1 : N/A [HBA] : 3
CHEMBL29083 COX2 : 7.55 COX1 : 4.47 [HBA] : 3	CHEMBL29133 COX2 : 7.66 COX1 : 6.47 [HBA] : 4	CHEMBL29136 COX2 : 6.12 COX1 : 8.3 [HBA] : 3	CHEMBL29204 COX2 : 6.12 COX1 : 8.3 [HBA] : 3

ケモインフォマティクス

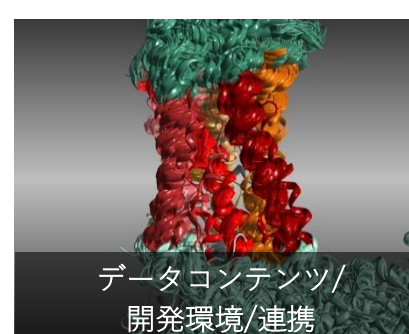
- ・ 数百万以上の分子データの一括管理と高速処理
- ・ 記述子計算と SAR 解析
- ・ MMP 解析、R-グループ解析
- ・ ライブラリーデザイン
- ・ 統計解析



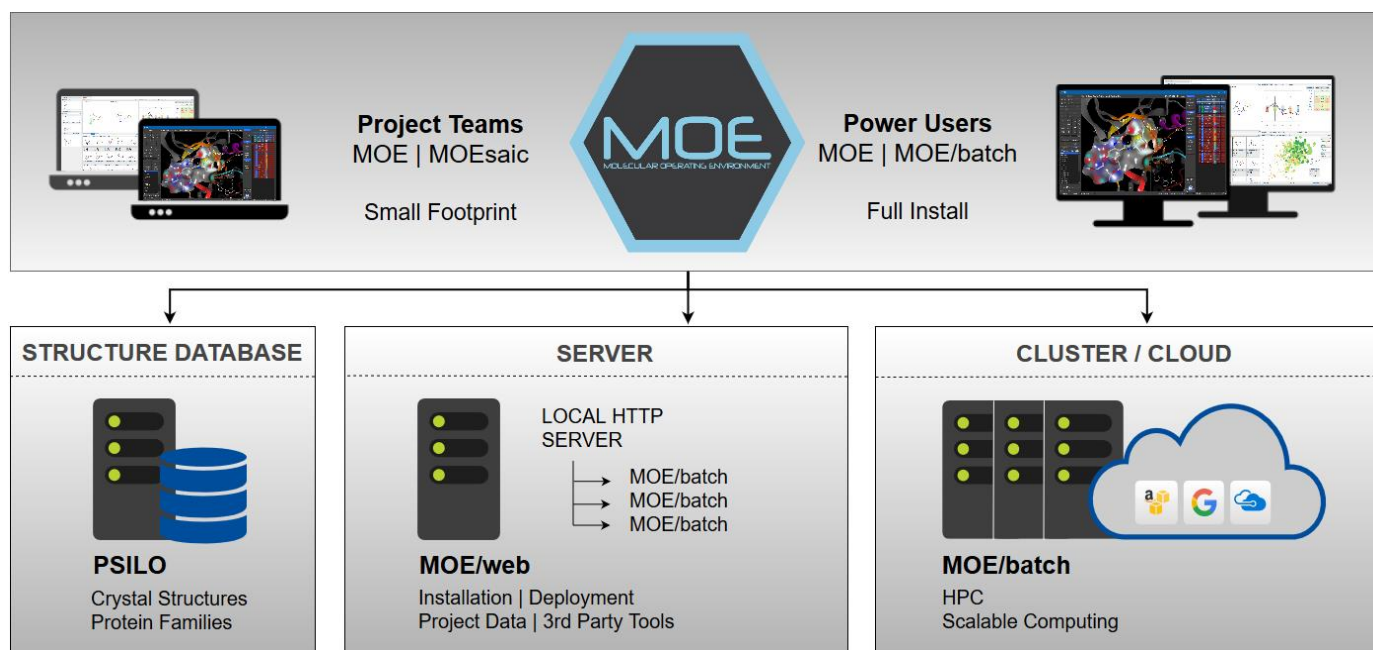
- ・ ドッキングシミュレーション
- ・ リガンド結合部位の特徴付け
- ・ SBDD プロジェクトデータベース
- ・ 母核置換、フラグメント付加/連結
- ・ 反応ルールによる構造変換



- ・ ファーマコフォアモデルの構築
- ・ 共通ファーマコフォアの自動検出
- ・ リガンド/受容体/溶媒からモデル構築
- ・ パーチャルスクリーニング
- ・ ファーマコフォアフィルター



- ・ 低分子/フラグメント/タンパク質データベース
- ・ カスタマイズと新機能開発
- ・ Web システム、ワークフロー、3rdパーティソフトウェアとの連携



Chemical Computing Group 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/

※記載の商品名は各社の商標または登録商標です。