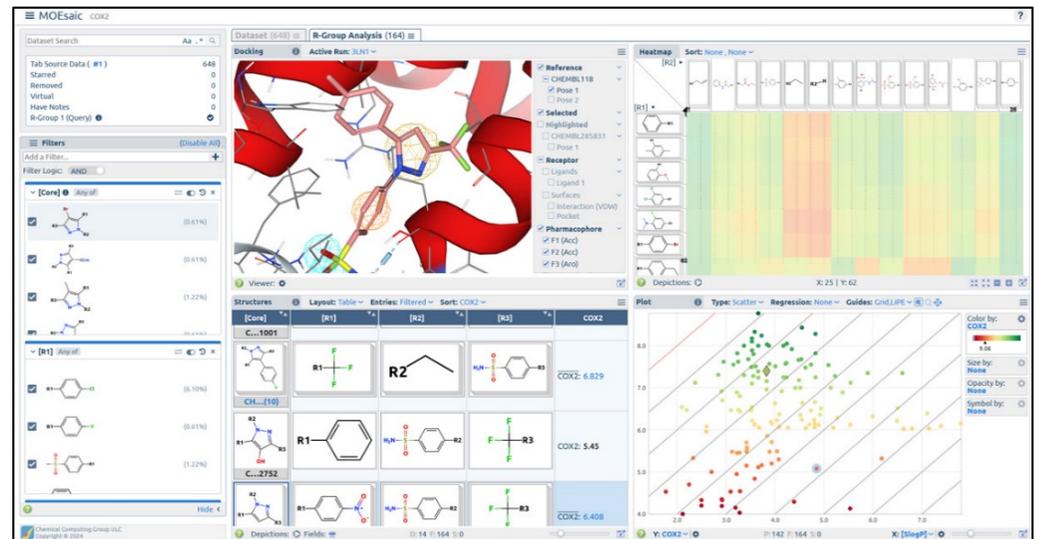
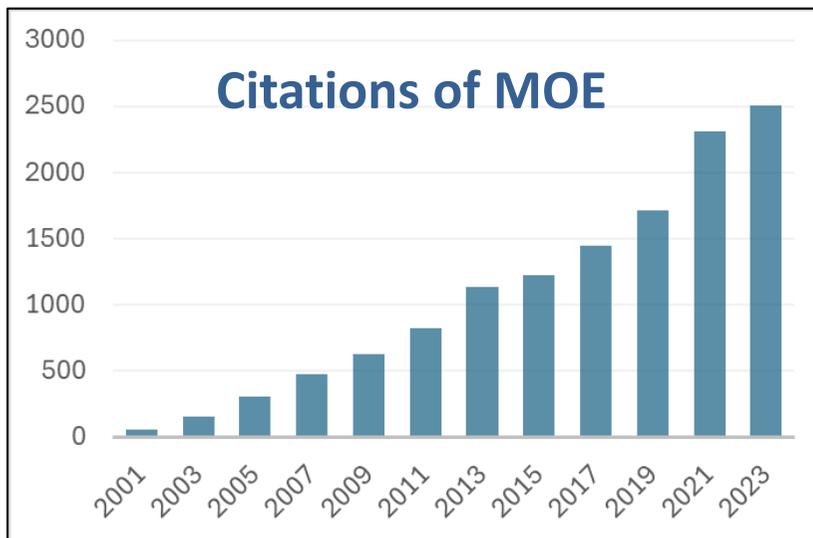
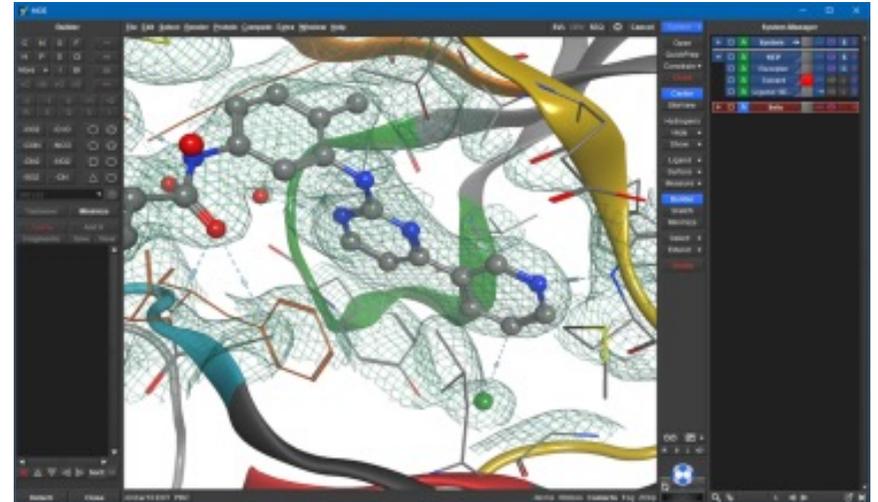


MOE Molecular Operating Environment

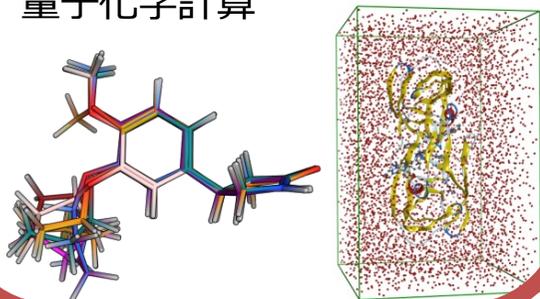
- **創薬・生命科学研究のための統合計算化学環境**
 - 幅広い研究分野を対応するアプリケーション群
 - 豊富なデータコンテンツ
 - 低分子、フラグメント、タンパク質など
 - 使いやすいGUI
 - マルチプラットフォーム
 - Windows, Mac, Linux
- **25年以上の実績**
- **年間2,500報を超える論文引用**



MOEのアプリケーション群

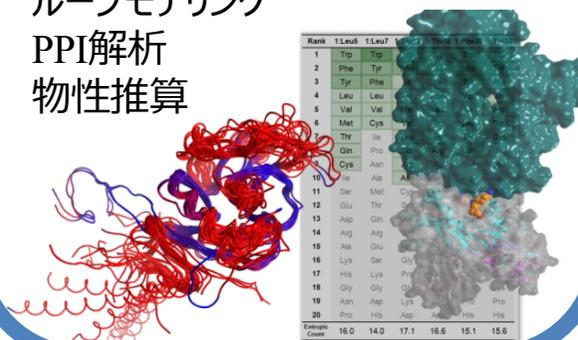
分子モデリング/ 分子シミュレーション

分子力学・動力学計算
分子間相互作用
配座解析
量子化学計算



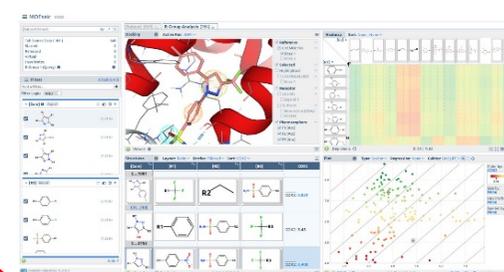
タンパク質モデリング/ タンパク質デザイン

タンパク質/抗体モデリング
変異体解析
ループモデリング
PPI解析
物性推算



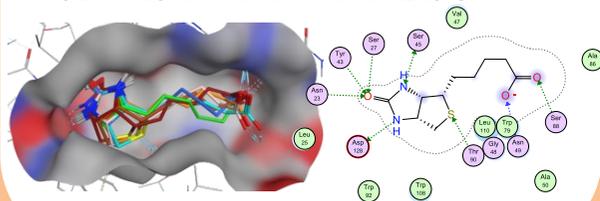
ケムインフォマティクス

記述子計算
QSAR、QSPR
ライブラリーデザイン
類似構造検索
ワークフローとの連携



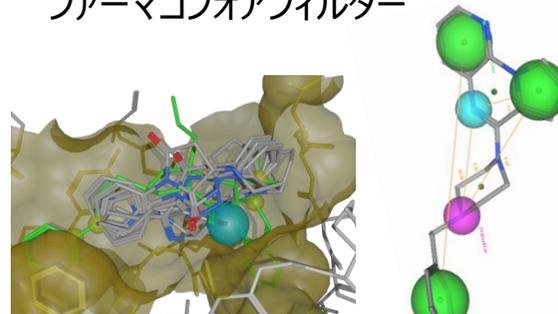
Structure-Based Drug Design

ドッキングシミュレーション
リガンド相互作用解析
受容体ポケットの特徴づけ
サイト探索
結合部以内での分子設計



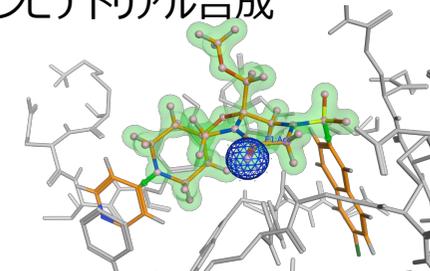
ファーマコフォア解析

ファーマコフォアモデル構築
共通ファーマコフォアの検出
バーチャルスクリーニング
ファーマコフォアフィルター

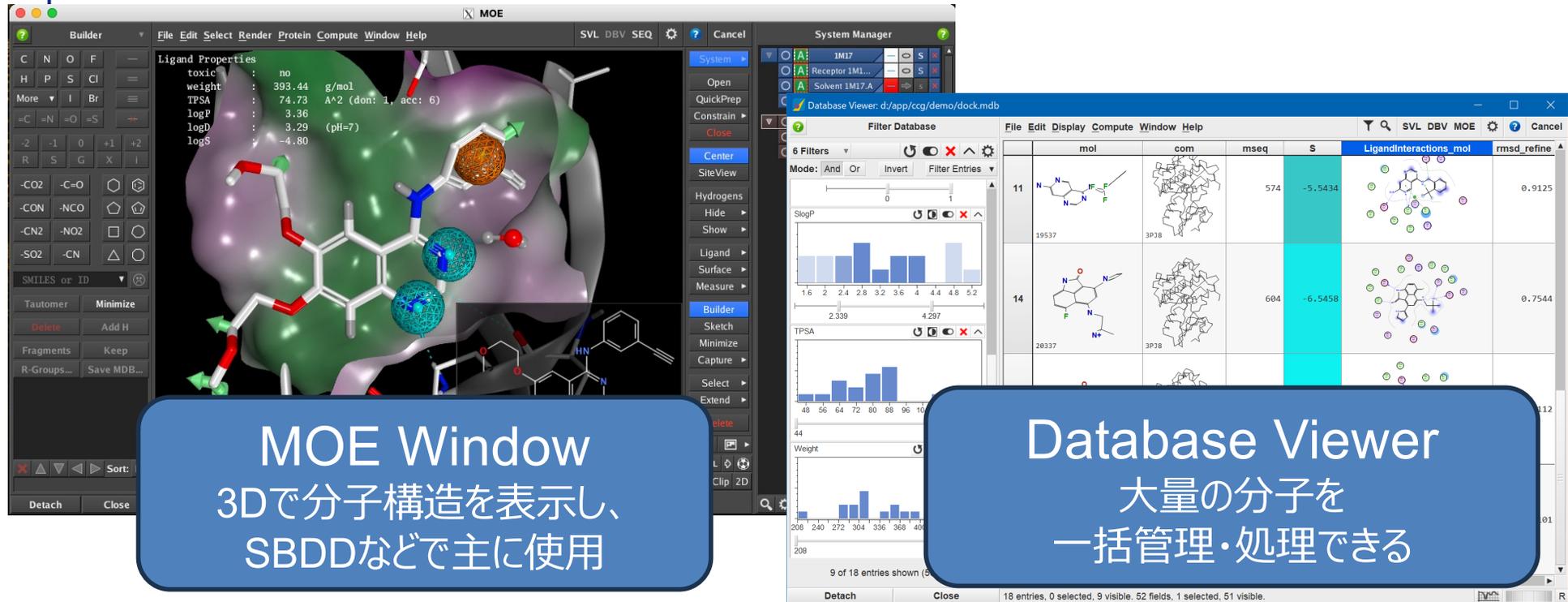


分子フラグメントに基づく 分子設計

母核構造置換
リンカー探索
官能基付加
ルールに基づく構造変換
コンビナトリアル合成



MOEの主要なウィンドウ



The screenshot displays the MOE software interface. On the left is the MOE Window, showing a 3D molecular model of a ligand bound to a protein. On the right is the Database Viewer, displaying a table of search results with columns for molecule ID, compound name, molecule sequence, score, and interaction details. Two callout boxes provide descriptions for these windows.

mol	com	mseq	S	LigandInteractions_mol	rmsd_refine
11	19537	3P38	574	-5.5434	0.9125
14	28337	3P38	604	-6.5458	0.7544

MOE Window
3Dで分子構造を表示し、SBDDなどで主に使用

Database Viewer
大量の分子を一括管理・処理できる



The screenshot shows the Sequence Editor window, which displays a sequence alignment of two protein chains. The top chain is labeled '1:3GRD.I' and the bottom chain is '2:3CGD.H'. The sequences are shown with various annotations, including arrows and colored blocks, indicating specific residues and structural elements.

Sequence Editor
配列でタンパク質やDNA、RNAを操作