

実験研究者のための MOE/web アプリケーション

株式会社モルシス

実験研究者が、計算化学による解析を簡単な操作で実行し、速やかに結果を得ることは研究を円滑に行う上で重要である。MOE/web は、コマンドラインによる MOE の計算 (MOE/batch) をインターネットブラウザから実行するためのウェブインターフェースである。特定の計算を簡単なボタン操作で実行できるようにアプリケーションは作られており、ユーザーは少ないステップで結果を得ることができるため、実験研究者の利用に適している。各自の PC (MOE/web クライアント) には MOE のプログラムを個別にインストールする必要がなく、MOE/web サーバーに CPU や記憶媒体などの計算資源を集中させることが可能である。MOE の使用頻度の高いユーザーは GUI を中心に利用し、使用頻度の低いユーザーは MOE/web を利用するなどの運用にあわせた計算環境を構築できる。

MOE/web アプリケーションとして、化合物の物性推算、SAR 解析、SD ファイルフィルター、タンパク質類縁配列検索、抗体モデリングなどが標準搭載されている。またユーザー独自の MOE/web アプリケーションの実装も可能である。ここでは、数ある MOE/web アプリケーションの中から、メディシナルケミストが簡単に Matched Molecular Pair 解析や R-group 解析を行うためのアプリケーション「MOEsaic」や、膨大な化合物ライブラリーから高速に部分構造や類似構造を検索するためのアプリケーション「MOE-QFSS」を中心にデモも交えて紹介する。

