MOLSIS ニュースレター

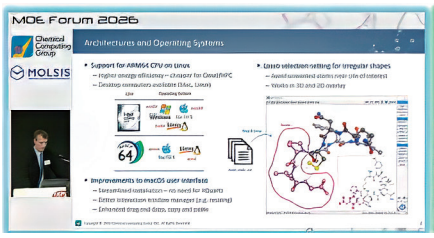
株式会社モルシス　　第 39 号 2026.10

統合計算化学システム　MOE

MOEフォーラム 2026開催報告

MOE (Molecular Operating Environment) は、低分子、ペプチド、抗体、タンパク質、核酸など多様な創薬モダリティに対応した統合計算化学システムです。分子モデリング、シミュレーション、ドッキング、ファーマコフォア解析などの幅広い機能を備え、創薬・生命科学研究を総合的に支援します。

9 月 10 日、11 日の 2 日間にわたって「MOE フォーラム 2026」を開催しました。1 日目は、MOE の基本的な操作や創薬設計に有用な機能について学べるワークショップを行いました。2 日目は、現地参加とオンライン配信を組み合わせたハイブリッド形式で開催し、日本語・英語・中国語の同時通訳を実施しました。講演会では、MOE の開発元である Chemical Computing Group (CCG) 社から MOE とタンパク質立体構造データベースシステム PSILO の次期リリース情報と Protein Degrader 創薬に関する技術情報が紹介され、研究現場で MOE を活用されている先生方から MOE および PSILO の活用事例が発表されました。弊社からは MOE を用いた AI 創薬ワークフローの構築事例を報告しました。講演後のネットワーキングやポスター展示では、参加者間で活発な情報交換と研究交流が行われました。CCG 社の講演と招待講演の詳細は、2、3 ページの記事をご覧ください。



CONTENTS

セミナー情報

統合計算化学システム　MOE
MOE フォーラム 2026 開催報告 ・・・・・・・ 2

技術情報

BioSolveIT 社製創薬支援ツール　SeeSAR、Chemical Space Docking　無料体験キャンペーンのご案内 ・・・・・・・ 4
遺伝子・疾患関連情報を統合した創薬知識プラットフォーム　DISGENET　遺伝子・バリアント - 疾患関連性の多角的評価 ・・・・・・・ 5
Lhasa 社製毒性・安全性評価支援製品群　ICH Q1A(R2) に対応した強制分解試験設計支援 ・・・・・・・ 6
医薬品開発の意思決定支援ツール　Beacon　Beacon CVRM リリース ・・・・・・・ 7
マテリアルサイエンス製品紹介：量子化学計算ソフトウェア　BIOVIA COSMOlogic 製品：BIOVIA TURBOMOLE ・・・・・ 8, 9

新製品情報

創薬研究情報共有クラウドシステム　CDD Vault　異なる創薬モダリティのサンプルの統合的な管理 ・・・・・・・ 10
材料設計支援プラットフォーム　SciMAPS　SciMAPS 5.1 リリース（1）（2） ・・・・・ 11, 12

統合計算化学システム　MOE

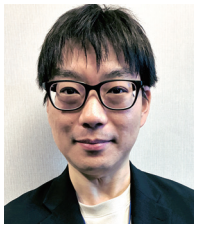
MOE フォーラム 2026 開催報告

本フォーラムでは、生命科学・創薬研究分野の最先端で活躍されている国内外の 6 名の先生方に MOE や PSILO を活用した研究事例をご講演いただきました。本稿では、招待講演と開発元の Chemical Computing Group（CCG）社の講演の内容を紹介します。

招待講演

「機械学習による結合親和性予測の今までとこれから：複合体構造データの重要性」

第一三共株式会社　岡田 晃季 先生



機械学習を用いたタンパク質・リガンド間の結合親和性予測の現状と課題についてご講演いただきました。AI ベースの親和性予測モデル Boltz-2 を、PSILO を用いて作成した社内データセットで評価した結果、一定の予測性能を示す一方で、類似構造データが少ない領域では精度が大きく低下することを報告されました。また、結合部位情報を利用して構造予測を改善しても、その改善が親和性予測精度の向上には必ずしもつながらないことも示されました。さらに、新規ターゲットへの適用に向けた手法として、グラフニューラルネットワークの活用事例を紹介されました。プロジェクト初期の限られた SAR データを追加学習することで予測性能が向上し、高活性化合物の効率的な絞り込みに有効であることを示されました。講演を通じて、機械学習モデルの性能向上には、アルゴリズムの改善に加え、複合体構造や SAR 情報を蓄積したデータ基盤の整備が重要性であると強調されました。

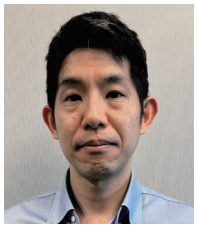
「抗体医薬品の開発適合性・製造適合性の研究」

徳島大学　鬼塚 正義 先生

創薬段階からの Quality by Design の実現に向け、難発現性の二重特異性抗体を対象とした Developability および Manufacturability に関する研究についてご講演いただきました。MOE を活用した抗体設計では、分子表面の疎水性残基を荷電性アミノ酸へ置換することでコロイド安定性の向上を図り、抗原結合能を維持したまま可溶性凝集体の形成を大幅に低減できることを示されました。また、培養中に生じる抗体凝集の抑制を目的として、トレハロースとトランスポーター導入細胞を組み合わせた培養系や、医療用輸液を活用した抗凝集条件の探索についても紹介されました。さらに、灌流培養と機械学習を組み合わせた培養条件の最適化による抗体生産量向上の取り組みや、MOE を用いた新規抗 C-kit 抗体のエピトープ解析および変異体設計についても紹介されました。本研究では、MOE を抗体設計だけでなく製造プロセス開発にも活用することで、バイオ医薬品開発のさらなる高度化につながる可能性が示されました。

「抗体医薬品の創薬段階における物性評価への MOE 活用事例」

アステラス製薬株式会社　下村 拓也 先生



抗体医薬品の創薬段階における Developability 評価への MOE 活用事例についてご講演いただきました。配列ベースの解析では、MOE の翻訳後修飾（PTM）予測機能を用いて PTM リスクを評価するとともに、SVL や KNIME-MOE による解析の自動化によって、多数の候補抗体を効率的にスクリーニングしている事例を紹介されました。また、予測結果だけでなく、実測値や活性への影響を踏まえて評価するとともに、PTM リスクを Tier 分類して分子改変の要否を判断している事例も示されました。さらに、MOE による抗体表面の疎水性・電荷パッチ解析を活用し、実験だけでは把握しにくい凝集や高粘度化の要因を可視化する取り組みも紹介されました。高濃度製剤の検討では、低濃度で測定可能な拡散相互作用パラメーターが高濃度粘度と相関することを示されるとともに、MOE による表面パッチ解析を組み合わせることで、高粘度化の要因となる分子表面の特徴を推定できることを報告されました。講演を通じて、MOE を実験の代替ではなく、候補分子の選択や実験結果の解釈、分子設計を支援する有用なツールとして活用されていることが示されました。

「アカデミア創薬を加速させる MOE の活用とノウハウ」

東京科学大学　清水 秀幸 先生

アカデミア創薬における MOE の活用法と、研究室における MOE を用いた研究・教育体制についてご講演いただきました。清水研究室では、MOE の技術サポートやオンデマンドトレーニングコースを活用し、計算創薬の経験が少ない学生でも短期間で基礎技術を習得できる環境を整備していることを紹介されました。研究面では、Structure-Based Drug Design や抗体モデリングなどに MOE を活用し、計算化学の専門家が常駐していない環境でも創薬研究を推進していることを示されました。また、独自開発した AI を用いた抗菌ペプチド（AMP）の探索・設計研究では、機能未知のペプチドから新規 AMP を発見するとともに、計算機上で進化的設計を行うことで高活性な候補分子を創出した事例を紹介されました。さらに、生体組織の三次元解析を可能にする Cell Cloud Technology の開発では、MOE による低分子 – 抗体相互作用モデリングを活用して抗体浸透を促進する添加剤を探索した事例が報告されました。研究室

Chemical Computing Group

内での技術情報や利用ノウハウの共有体制についても紹介され、AI と計算化学を融合したアカデミア創薬の実践的な取り組みが示されました。

▌「Mastering Water Molecules: From 3D-RISM to HydraMap」

Fudan University　Yan Li 先生

創薬研究において重要な役割を果たす水分子の解析手法とその創薬応用についてご講演いただきました。水分子はタンパク質とリガンドの結合に大きく寄与しており、保存された架橋水分子や高エネルギー水分子の置換がリガンドの活性および選択性向上に重要であることを、多数の創薬事例を交えて解説されました。水和部位予測手法として、WaterMap や WATsite、MOE に実装されている 3D-RISM を紹介されました。3D-RISM は分子動力学計算を必要とせず、水分子の分布や自由エネルギーを予測できることから、創薬研究で広く活用されていることが示されました。さらに、講演者らが開発した高速予測手法 HydraMap について紹介されました。HydraMap は、結晶構造由来の統計ポテンシャルを利用して水和部位を高速に予測でき、大規模解析への適用を可能にします。また、脱溶媒和エネルギー評価や SAR 解析への応用事例についても紹介され、水分子情報を活用したリード最適化の有用性が示されました。最後に、深層学習を活用した次世代の水和解析技術と今後の展望についても紹介されました。

▌「MOE を用いた分子シミュレーションデータの解析および RNA G4 構造標的創薬への取り組み」

筑波大学　広川 貴次 先生

MOE の Protein-Ligand Interaction Fingerprint (PLIF) 解析を活用した分子シミュレーションデータの解析と、RNA G-quadruplex (RNA G4) を標的とした創薬研究についてご講演いただきました。前半では、メタダイナミクスや MD シミュレーションから得られるトラジェクトリーデータを PLIF で解析し、GPCR を標的とした研究に応用した事例が紹介されました。スフィンゴシン-1-リン酸受容体アンタゴニストの作用機序解析では、PLIF の Significance 解析により持続的薬効に関与するメチオニン残基を同定し、変異体実験によってその重要性が検証されました。また、オレキシン 2 受容体では、PLIF と主成分分析を組み合わせることで、リガンド選択性に関与する受容体ダイナミクスの違いを明らかにした研究成果を紹介されました。後半では、RNA G4 構造を対象とした創薬プラットフォーム開発について紹介されました。G4-Sniper による標的探索、MOE-AutoQuaSAR を用いたヒット化合物探索、さらに AlphaFold と MOE を活用した G4 構造モデリング、SINCHO-G4 によるリード最適化など、実験と計算を統合した創薬基盤の構築が進められています。MOE を活用した作用機序解析から新規創薬モダリティの開拓まで幅広い展開が可能であることが示されました。

▌Chemical Computing Group 社講演

▌「In Silico Modeling of Protein-Degrader Mediated Ternary Complexes and Screening of Bifunctional Degrader Designs」

Chemical Computing Group　Alain Ajamian

標的タンパク質分解誘導薬（Protein Degrader）の設計を支援する三元複合体モデリング手法について発表しました。Protein Degrader は、標的タンパク質と E3 リガーゼを近接させることで標的タンパク質の分解を誘導する新たな創薬モダリティであり、その作用発現に重要な三元複合体の構造予測は容易ではありません。講演では、MOE の Protein–Protein Docking と LowModeMD を組み合わせ、タンパク質間相互作用とリンカーの柔軟性を考慮した三元複合体のモデリング手法を紹介しました。また、複合体構造の特徴を利用したスコアリングにより、候補化合物を効率的に評価する方法について説明しました。複数の公開データセットを用いた検証では、リンカー長や結合様式の異なる Protein Degrader に対して良好な順位付け性能を示し、有望な候補化合物の選択だけでなく優先度の低い候補化合物の除外にも有効であることが示されました。

▌「MOE and PSILO Next Release Overview」

Chemical Computing Group　Markus Kossner

MOE および PSILO の次期リリースで追加される新機能と機能強化について紹介しました。MOE では、計算速度や操作性が向上し、核酸・ペプチド創薬を支援する機能が大幅に拡充される予定です。新しい Oligonucleotide Builder では、修飾核酸やミスマッチを含む DNA・RNA の三次元構造構築が可能となり、核酸モデリングの活用範囲が広がります。また、非天然アミノ酸や修飾残基への対応強化、Protein Design、ペプチドドッキング、タンパク質ループモデリング機能の拡張、記述子の追加などにより、ペプチド・核酸の設計・解析環境が強化されます。このほか、機械学習手法として XGBoost の追加、GROMACS との連携、SIMD 最適化による力場計算の高速化なども紹介しました。PSILO では、モデリング用構造の管理機能や cryo-EM データの品質評価機能が強化されるほか、AlphaFold や Boltz などの AI 予測構造を用いた検索・解析機能も実装されます。創薬モダリティの多様化に対応するため、設計から解析、データ管理に至るまで幅広い機能の進化が進められていることを紹介しました。