

化合物ライブラリー超高速検索プログラム

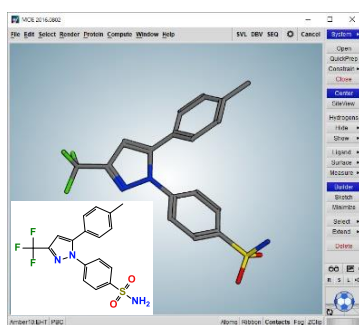
# MOE-QFSS

MOE-Quick Federated Structure Search

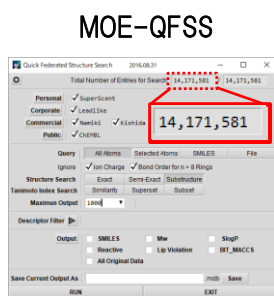
MOE-QFSS (Quick Federated Structure Search, QFSS) は、複数の巨大な化合物ライブラリーから、高速かつ横断的に構造検索を行うための MOE のアドオンツールです。リレーショナルデータベースを使用することなく、ユーザーは MOE のみで高速な分子構造検索が可能です。

## MOE-QFSS による超高速検索

QFSS は、MOE の GUI に表示した分子をクエリーとして、膨大な化合物ライブラリーに対して完全一致・部分構造・類似構造による検索が可能です。クエリー構造に対して、数千万件からの部分構造検索を数秒で行えます。公共、試薬、in-house などの化合物データを MOE の MDB ファイルに登録して横断的に検索します。検索結果からの ChEMBL や PDB などのサイトへのアクセスの他、MOE を用いて SAR 解析やドッキングシミュレーション、ファーマコフォア検索などの 2D/3D 解析にシームレスに実行できます。QFSS は、高速な化合物検索を通して、分子設計やバーチャルスクリーニングの現場を強力に支援します。

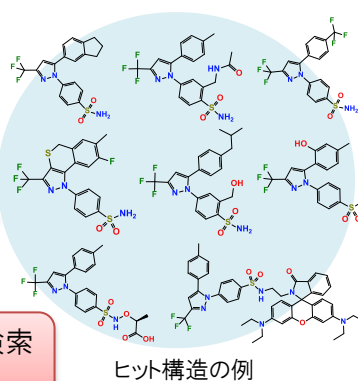


MOE にクエリー分子を読み込み  
クエリー: Celebrex (CHEMBL118)



1417 万構造からの部分構造検索  
検索時間 1.2 秒 ※

※CPU: Core i7-5500U 2.4GHz, Memory: 8GB, Disk: SSD

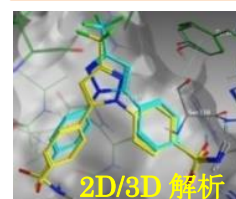


ヒット構造の例

化合物の詳細情報  
ChEMBL、PDB、  
試薬情報の閲覧



MOE アプリケーション  
による構造解析  
SBDD、SAR 解析、  
ファーマコフォアなど



2D/3D 解析

## MOE-QFSS の検索の流れ

### 独自のフィンガープリントとインデクシング技術を採用

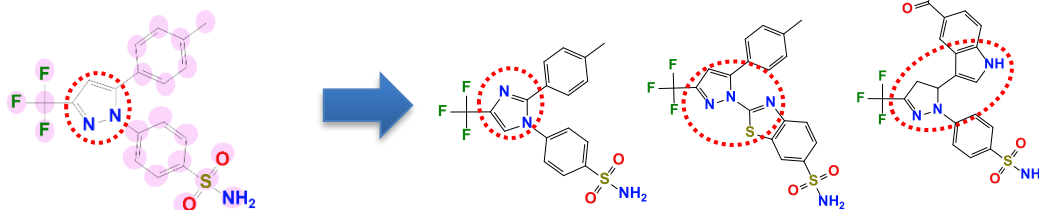
QFSS による超高速検索は、既存の化合物ライブラリーから定義された独自のフィンガープリントを使用することにより実現しています。試薬ベンダーと ChEMBL から約 1100 万件の化合物データを収集し、コア構造の種類とその出現頻度から計 117,227 種のフィンガープリントを定義しています。

ユーザーは、あらかじめ検索対象の MDB ファイルをフィンガープリントでインデクシングしておき、QFSS の検索に利用します。公共 (ChEMBL、SureChEMBL、ZINC、PubChem 等)、試薬ベンダー (ナミキ商事株式会社、キシダ化学株式会社等)、in-house の化合物ライブラリーなどを自由に登録でき、複数の化合物ライブラリーから数千万から 1 億以上の横断的な構造検索が可能です。



## QFSS の特徴

- ✓ **部分構造の超高速検索**  
部分検索速度はクエリーが持つコア構造の出現頻度に依存します。ユニークな構造を使用するほど高速になります。
- ✓ **Exact マッチ（完全一致）と Semi-exact マッチ（部分完全一致）による構造検索**  
Exact マッチはクエリーと完全に一致する構造を検索します。Semi-exact マッチはクエリーの一部が完全一致する構造を検索します。例として Semi-exact マッチを適用すると、通常クエリーにカルボン酸を用いた時にヒットするカルボン酸とカルボン酸エステルを、区別して検索できます。
- ✓ **類似構造検索に対応**  
MOE の MACCS キーを用いて高速な類似構造検索が可能です。類似度による検索と、共通部分構造を持つ Superset（上位集合）あるいは Subset（部分集合）の抽出が可能です。
- ✓ **分子記述子フィルター**  
ヒット構造を分子量、log P、反応性、Lipinski ルールによって絞ります。
- ✓ **化合物ライブラリーの追加**  
検索対象ライブラリーとして、公共(ChEMBL, SureChEMBL, ZINC, PubChem 等)、試薬ベンダー（ナミキ商事株式会社、キシダ化学株式会社等）、in-house の化合物ライブラリーを自由に登録できます。
- ✓ **連続検索に対応**  
分子データベースを入力とした連続検索が可能です。
- ✓ **MOE アプリケーションとシームレスに連携**  
MDB で得られたヒット構造は、MOE のアプリケーションをデータの変換を行うことなくそのまま利用できます。
- ✓ **2D-Scaffold Hopping**  
クエリーの一部を選択することで、母核を入れ替えた構造を検索できます。



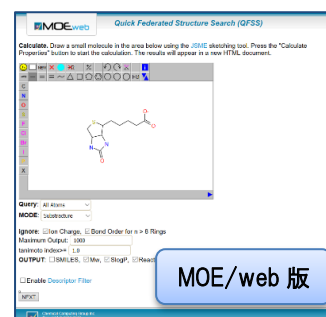
2D-Scaffold Hopping 例: ピンクの原子を選択し部分構造検索。非選択のピラゾール環(赤丸)を持たない分子を出

ヒット構造の例: 赤丸の部分が置き換えられた構造

## MOE/web アプリケーション

ウェブブラウザから QFSS を利用できる“MOE/web 版”も用意しています。MOE/web 版では、研究者の PC に MOE をインストールせずに利用できます。スケッチャーで分子を描画して検索できるので、研究者はより直感的な操作が可能です。MOE/web 版では、バッチ処理(moebatch)により計算が実行されるので、トークンの効率的な利用にも繋がります。

膨大な化合物ライブラリーを MOE/web サーバーに集約して、MOE GUI から操作する“MOE/web SOAP 版”もあります。MOE/web SOAP 版では、各種化合物ライブラリーを PC 毎に保存する必要がなく、化合物ライブラリーを一元管理できます。



## 利用条件

MOE-QFSS は、株式会社モルシスで開発された MOE のアドオンプログラムです。MOE の保守契約を締結中の方にはプログラムを無償でご提供いたします。



Chemical Computing Group 社日本総代理店  
株式会社モルシス

〒104-00332 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/>

※ 本紙内の PDB データは日本蛋白質構造データバンク(PDB)から引用しました。  
※ 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。  
※ 本カタログの使用は予告なく変更する場合があります。

2019.04