

VR 分子構造共有ソフトウェア

MolCollabo

紹介資料

コラボレーションできるVR対応の分子ビューワーです。

下記3つの特徴があります。

1. VR対応の分子ビューワー

- ・各種ヘッドマウントディスプレイで**分子構造をVR表示**できます。
- ・**PC画面での操作**も可能です。

2. コラボレーション機能

- ・ソフトウェア上の通信機能を使い、**同じ分子構造を複数のユーザーで共有**して見られます。
- ・遠隔地の場合、**ボイスチャット機能**で会話ができます。

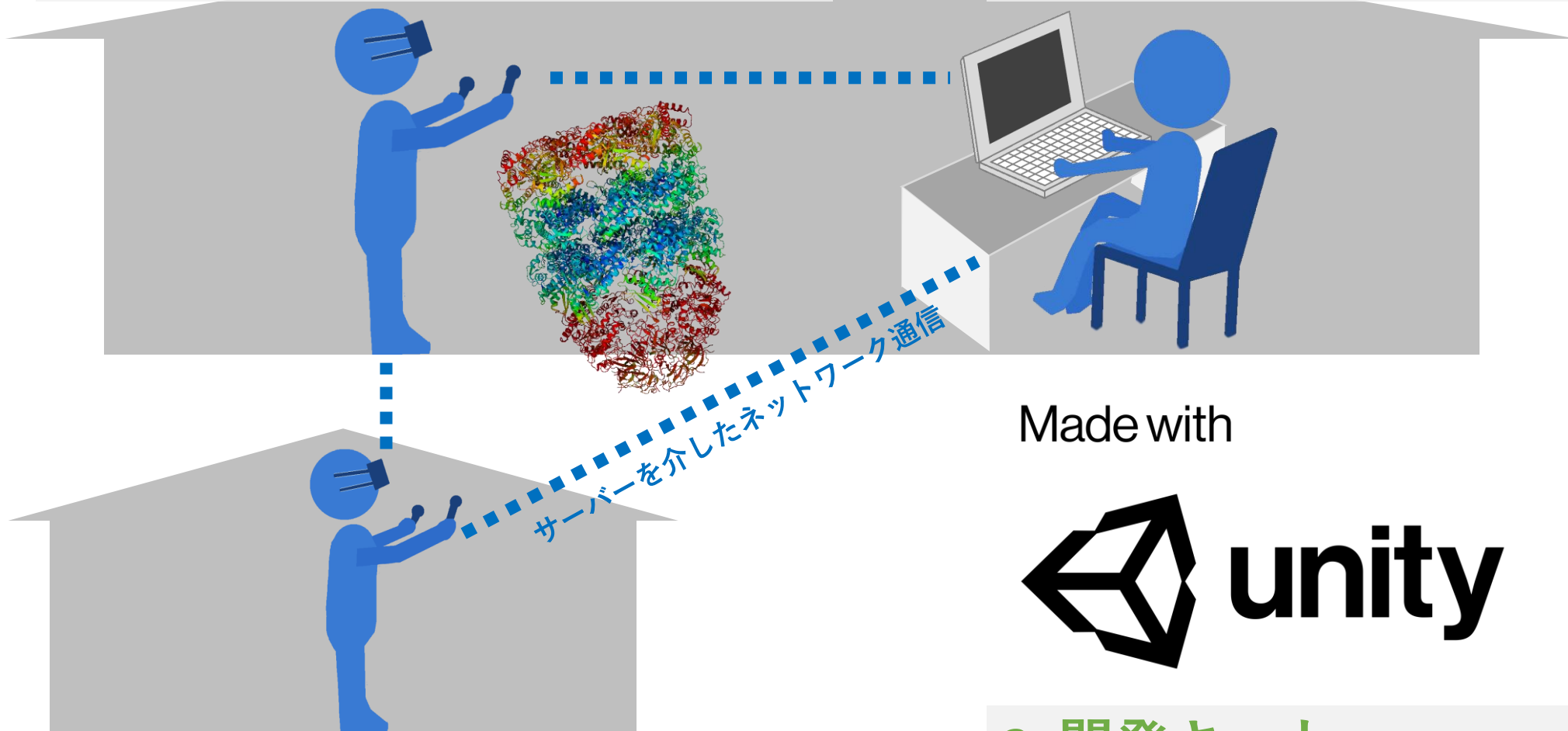
3. 開発キット

- ・Unity用の開発キットが付属しており、**ユーザーサイドで機能拡張が可能**です。

1. VR対応の分子ビューワー

各種ヘッドマウントディスプレイで**分子構造**を**VR表示**できます。

デスクトップ画面での操作も可能です。



2. コラボレーション

遠隔地と会話をしながら、**同じ分子構造を共有**して見られます。

Made with



3. 開発キット

Unity用の開発キットが付属しており、**ユーザーサイドで機能拡張が可能**です。

ヘッドマウントディスプレイとPC画面の両方で同じ機能が使えます。

ファイルのサポート

- **分子データの読み込み：**
.cif(mmCIF)/.pdb/.mol/.mol2(Tripes)/
.sdf/.xyz(XYZ file format)
- **トラジェクトリデータの読み込み：**
Amber形式(txt/netcdf) /
CHARMM, NAMD形式(.dcd) /
GROMACS形式(.trr)
- **電子密度の読み込み：**
.cube(Gaussian)/.ccp4
- **分子軌道の読み込み：**
.cube(Gaussian)
- **3Dモデルの読み込み：**
.fbx/.dae/.3ds/.obj/.ply/.dxf/.stl
- **原子毎のRGB色を指定するCSVの読み込み**
- **分子データの書き出し**
.pdb/.mol2/FASTA

表示

- **表示形状の編集(分子データ)：**
ワイヤースケルトン/VDWボール/スティック/
リボン/サーフィスなど
- **カラーの編集(分子データ)：**
原子別/残基別/分子鎖別/2次構造別/B-factor値/
電荷/静電ポテンシャル(サーフィスのみ)
- **Quest3S/3/2によるパススルー表示**
- **水素結合/ジスルフィド結合の表示**
- **ワイヤースケルトン/スティックによる結合の
多重度の表示**
- **分子/分子軌道/電子密度のクリッピング表示**
- **移動操作前の分子の座標軸の表示**
- **PC/HMDのアバターの表示/非表示**
- **シーケンス(ChainID/残基名/原子名)の
可視化/原子選択**

分子の編集機能

- VRコントローラー/マウスによる編集対象の選択
- VRコントローラー/マウスによる選択原子や系全体の平行/回転移動
- 分子構造の重ね合わせ
- 分子構造の複製/分離/マージ
- アミノ酸/核酸/リガンドへの水素の付加
- リガンドの結合と原子の追加/削除/種類変更
- リガンドの電荷計算/構造最適化
- アミノ酸の置換/追加
- 分子鎖名/残基名/原子名/元素名の編集
- アミノ酸の簡易的な極小化計算

分子シミュレーション

- タンパク質-低分子のドッキングシミュレーション
- リガンドの合成容易性予測

注釈の表示機能

- 原子名/残基名/分子鎖名/距離/角度/2面角などの注釈の表示

アニメーション機能

- MDの座標トラジェクトリのアニメーション表示(複数の同時再生が可能)
- 主鎖ドライブ(アミノ酸や核酸の主鎖原子に沿って視点を移動する機能)

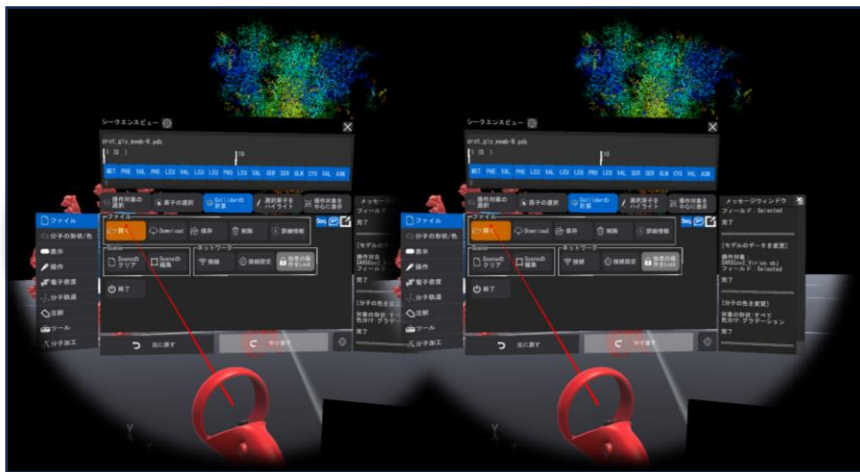
コラボレーション機能

- ソフトウェア上のネットワーク通信で、同じ表示の分子構造やモデルを複数人で共有する機能(LANのみの通信も可能)
- ユーザーが遠隔地にいても会話ができるボイスチャット機能
- 他のユーザーと視点を共有する機能
- 他のユーザーの視点操作以外の操作をLockする機能

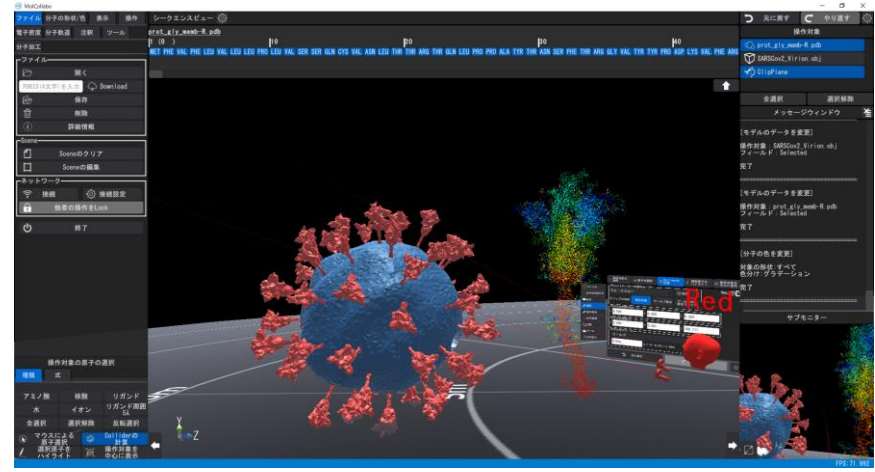
開発キット

- MolCollaboにユーザー独自のGUIを追加し、機能追加が可能
- 任意のデータの読込/書き出し機能を作成可能
- 他のUnity Assetを使った機能拡張も可能

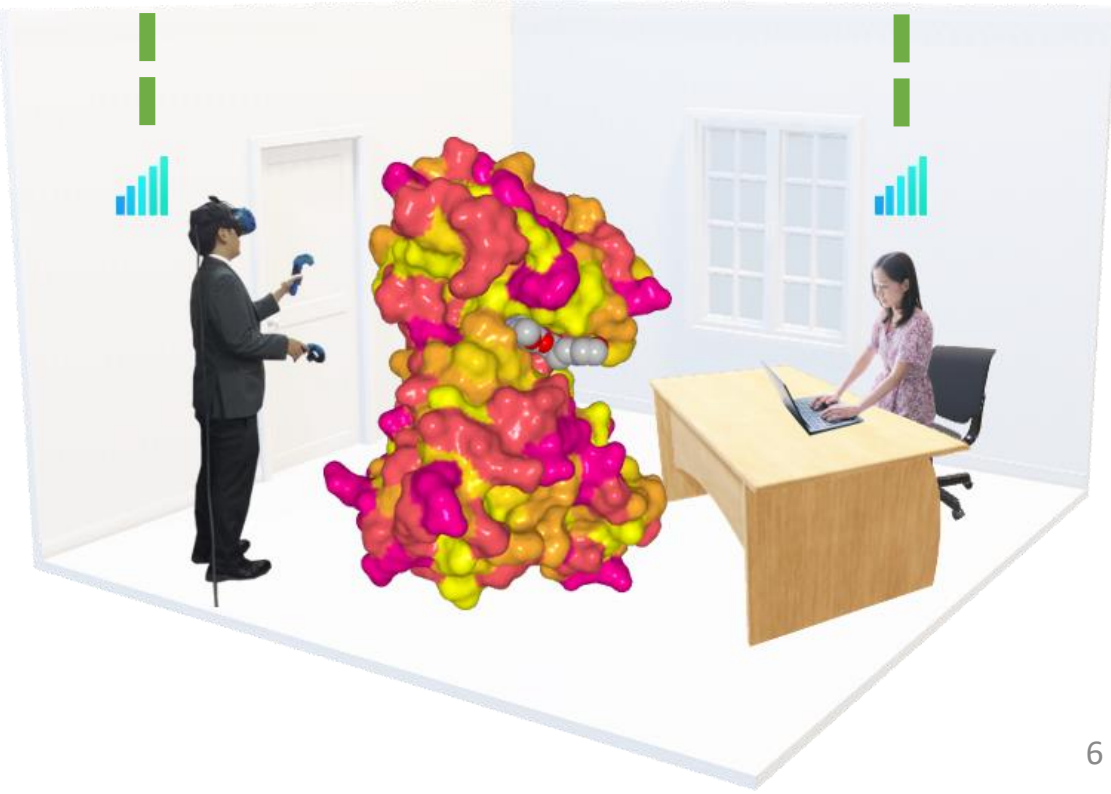
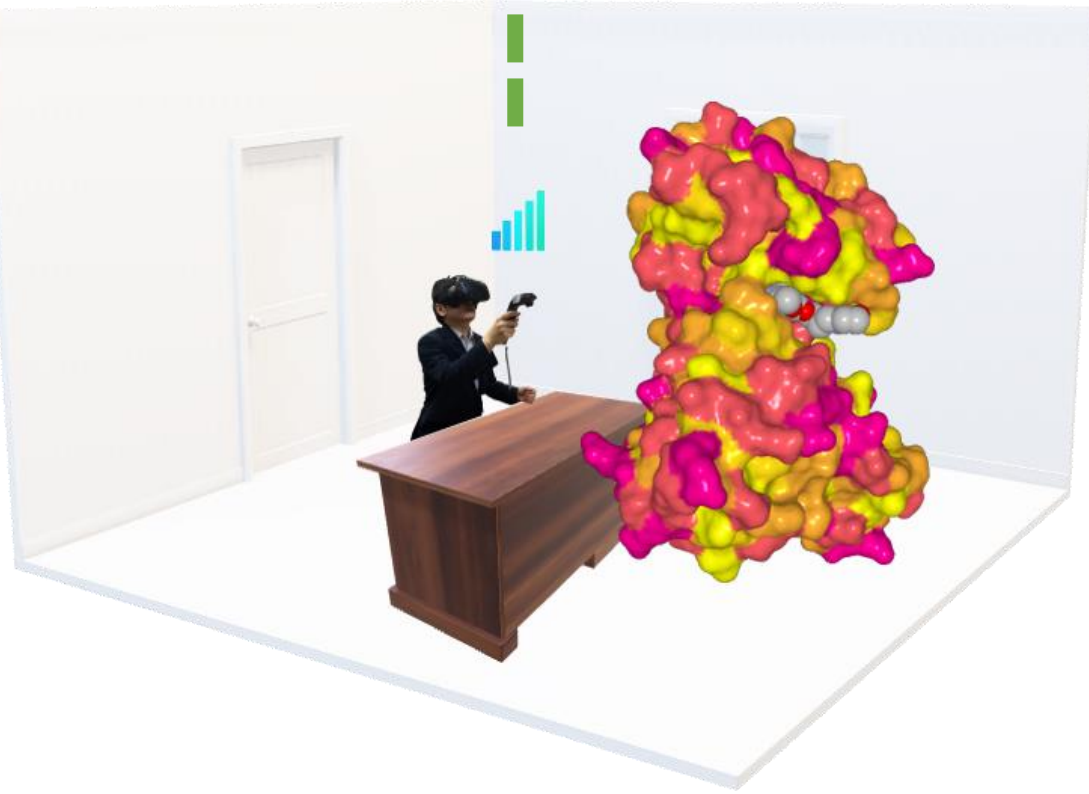
ヘッドマウントディスプレイの操作画面



デスクトップの操作画面

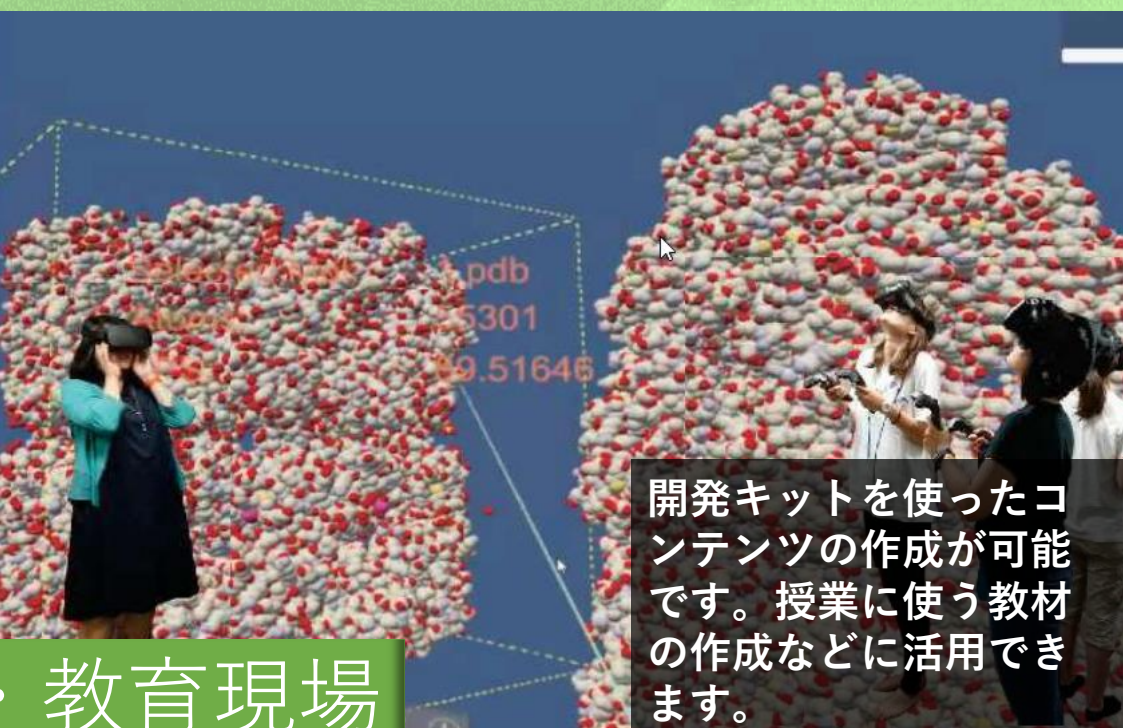


Server



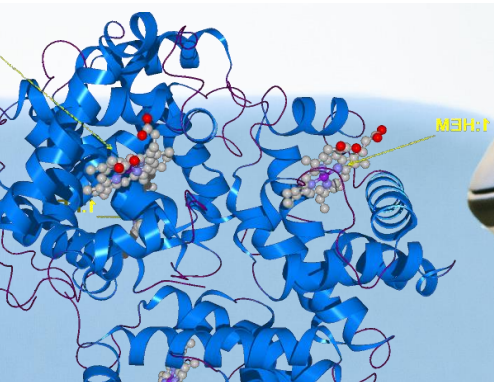


分子構造の奥行きが認識しやすくなり、構造やシミュレーションの担当者とのやりとりを円滑化します。



開発キットを使ったコンテンツの作成が可能です。授業に使う教材の作成などに活用できます。

研究開発・教育現場における活用事例



開発キットにより独自の研究に沿った機能追加が可能です。データの読込/書き出し機能の追加や、描画のカスタマイズも行えます。



対外向けの展示会や研究発表等、VRを使い、よりわかりやすく、他とは違った研究成果の発表や展示が行えます。

価格とライセンス形態



定価：教育機関 **キャンペーン価格** 1ライセンス ¥98,000 (税別)

公的研究機関/民間企業 1ライセンス ¥250,000 (税別)

VRデバイスのシリアル番号、またはPCのMACアドレスに固定されたライセンスです。
サイトライセンスをご希望の場合はご相談ください。

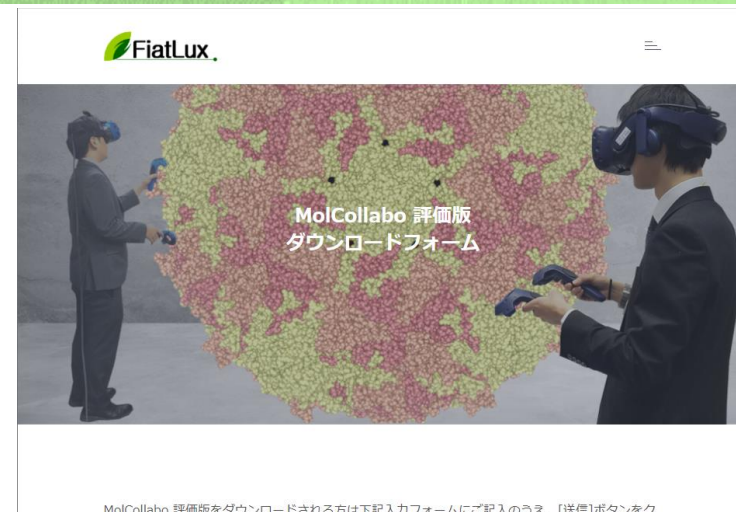
- ※ コラボレーション機能を使用する場合は2ライセンス以上が必要です。
- ※ 開発キットをご利用の場合、Unityの有償ライセンスが必要になる場合がございます。
詳細は本資料注意事項1をご確認ください。
- ※ ライセンスは買取です。無償保守がご購入後1年間付属します。保守期間中のバージョンアップと電話やメールのサポートは無料です。無償保守期間終了後の保守は有償 (教育機関は1ライセンス税別¥30,000/年、公的研究機関/民間企業は1ライセンス税別¥62,500 /年)となります。

評価版

製品と同じ機能を30日間無料で使える評価版を配布しています。下記URLから申請できます。

<https://www.fiatlux.co.jp/download/index.html>

- ※ 評価版はWindowsのPC接続型のHMD(ヘッドマウントディスプレイ)に対応したものをご用意しております。詳細は次ページのPC接続型HMDをご確認ください。
- ※ 開発キットは評価版の対象外となります。



評価版 申請フォーム

MolCollaboのご利用に当たり、ソフトウェアライセンスとは別に、実際に表示するHMD(ヘッドマウントディスプレイ)が必要です。表示可能なHMDは下記がございます。なお、下記を既にお持ちであれば、新たにご購入頂く必要ございませんが、これらの周辺機器を新たに調達される場合は、弊社にご相談ください。

「PC 接続型 HMD」

- **Meta Quest 3S/3/2**(※Quest Linkで利用可能)
- **PICO PICO 4**(※Streaming Assistantで利用可能)
- **HTC VIVE Focus Vision/3**(※VIVE Hub等で利用可能、パススルーは非対応)
- **HTC VIVE Cosmos/VIVE Pro 2**



- ※ HMD1台につきPC 1台(後述)が必要です。複数人数でコラボレーションをする場合等、複数台のHMDをご利用の場合、各HMDそれぞれに、個別にPCとの接続が必要です。
- ※ 旧型のHMD(Meta Quest、Oculus Rift S、VIVE、VIVE Pro)でも使用できます。
- ※ 上記HMDの利用には、事前にドライバーソフトウェアのインストールと、WEBから無料ユーザーアカウントの作成が必要です。
- ※ Quest 3S/3/2、PICO 4、VIVE Focus Vision/3、VIVE CosmosはHMD内蔵のカメラでヘッドトラッキングを行います。VIVE Pro 2は赤外線センサーで頭の動きの検知(ヘッドトラッキング)を行います。

「独立型HMD」

- **Meta Quest3S/3/2**
- **HTC VIVE Focus Vision/3**

- ※ 独立型HMDはPC接続型に比べCPU/GPUの処理速度やメモリに制限があります。
- ※ Quest3S/3/2は開発者モードで使用する事が前提となります。

「PC接続型HMDの接続用PCについて」

推奨スペック

CPU	Intel Core i5-4590以上 または AMD FX 8350以上
GPU	NVIDIA GeForce GTX 1060以上 または AMD Radeon RX 480以上
メモリ	8GB以上
OS	Windows 10/11
映像/USB ポート	使用するHMDによって異なります。

スペックを満たすPCがない場合はお問合せください。
ご予算に合わせたPCを御見積します。



ワークステーション



ゲーミングノートPC

※ PC接続型HMDは電源や配線の配慮が必要です(詳細後述)

• ご利用条件

1. コラボレーション機能を使う場合、ネットワークのセキュリティの環境によっては、サーバーに正常に接続できない場合がございます。接続切れ防止のため固定回線での利用をおすすめします。
2. HTC社のVIVE等のHMD(ヘッドマウントディスプレイ)を、対外向けに利用する場合、HMDとは別に、商用保証の購入が必要になります。
詳細は<https://enterprise.vive.com/jp/product/bws/>をご参照ください。
3. 開発キットをお使い頂く場合、Unityのライセンスが必要です。
非商用の場合は無料でUnityを使用できますが、
その他の場合は <https://unity.com/ja/pricing> をご参照ください。

• 運用上の注意点

1. HTC VIVE Pro 2は赤外線センサの設置が必要です。
Pro 2には壁に固定する治具が付属していますが、
壁に穴をあけて使用する治具のため、必要に応じて、
ライトスタンド/三脚/クランプ等の用意が必要になります。
2. 赤外線センサーを使うHMDは、部屋の環境や遮蔽物と、赤外線が干渉し、トラッキングが正常に動かなくなる場合がございます。正常に動かない場合、暗幕などで赤外線の干渉を防ぐ、または遮蔽物を除去する等の工夫が必要です。



• PC接続型HMD利用時の設置条件

1. VIVE CosmosはHMD用の電源のコンセント1口が必要です。 VIVE Pro2/Pro/
VIVEは電源のコンセント3口(HMD1口+赤外線センサ2口)が必要です。
コンセントの形状に横幅があるため、差込口が干渉し辛い電源タップのご用意をお勧めします。(その他のHMDはUSBポートによる給電式、または充電式です)
2. PC接続型HMDのヘッドトラッキング可能な空間の広さは機種に依存します。
各HMDのトラッキングの最大範囲は下記の通りです。
 - Meta Quest3S/3/2(Quest Link時)、PICO 4、 VIVE Focus Vision/3、 VIVE Cosmos :
ケーブル長に依存します。
 - VIVE Pro/Pro2 : 7m x 7m
 - VIVE : 5m x 5m



電源タップの例

「官公庁/公的研究機関」

- 産業技術総合研究所
- 物質・材料研究機構 等

「教育機関」

- 神奈川工科大学
- 近畿大学
- 慶應義塾大学
- 東京工業大学
- 東京大学
- 長崎大学
- 弘前大学
- 広島市立大学
- 創価大学 等