

創薬モダリティの多様性に対応した製品のご紹介

＜企業セッション＞ ES-06 10月28日（水）13:00-14:30

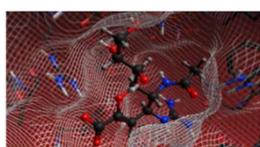
創薬モダリティの多様化に伴い、創薬研究支援ソフトウェアにはモダリティに対応した機能が求められています。弊社取り扱い製品の中から、「統合計算化学システム MOE」、「研究情報管理統合プラットフォーム Sciligence」、「医薬品安全性情報ポータル OFF-X」の3製品について創薬モダリティ関連の機能をご紹介します。

「統合計算化学システム MOE」

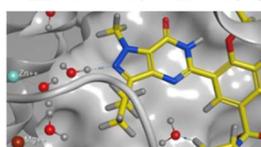
池上貴史（株式会社モルシス）

MOE は低分子、ペプチド、タンパク質、抗体、核酸のデザインとシミュレーションに対応した創薬モダリティ研究を支援する統合計算化学プラットフォームです。MOE には、Structure/Fragment/Ligand-Based Drug Design、QSAR/QSPR 解析、ファーマコフォア解析、バーチャルスクリーニング、タンパク質モデリング、タンパク質デザイン、分子シミュレーションを目的とする最新の計算化学アプリケーションが搭載されています。計算化学者、メディシナルケミスト、バイオリジスト、X線結晶構造解析者は、共通の分子モデリング環境である MOE を用いて創薬研究の加速化・効率化を図れます。本セッションでは、化学構造と活性値を用いた SAR/MMP 解析、ペプチドと受容体の相互作用解析、抗体の分子設計と Developability の評価、核酸モデリングを中心に MOE を用いた応用事例を紹介します。

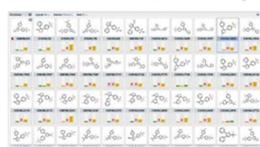
MOE ー全ての研究者に柔軟な分子モデリング環境を提供ー



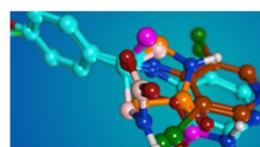
立体構造の可視化



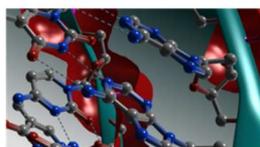
Structure-Based Design



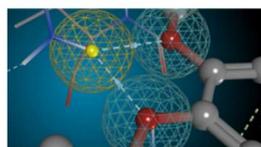
MOEsaic – SAR, MMP



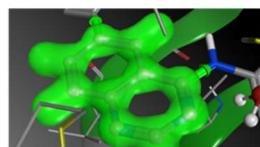
Ligand-Based Design



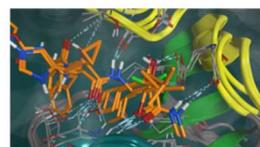
核酸モデリング



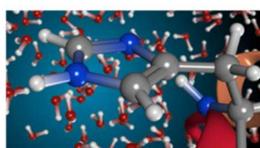
バーチャルスクリーニング



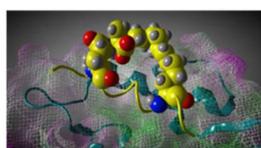
Fragment-Based Design



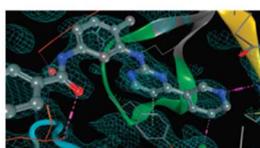
構造生物学



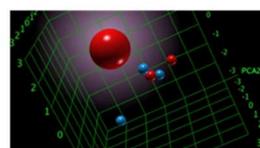
分子シミュレーション



ペプチド・抗体デザイン



X線結晶構造解析



ケイオインフォマティクス/QSAR



株式会社モルシス ライフサイエンス部
TEL: 03-3553-8030 E-mail: sales@molsis.co.jp
<https://www.molsis.co.jp/>

「研究情報管理統合プラットフォーム Scilligence」 篠崎康裕（株式会社モルシス）

Scilligence 製品は多様な創薬モダリティの研究データに対応した研究情報管理統合プラットフォームです。生体高分子を表現する HELM や、HELM と構造式を統合的に扱える分子描画ツール JSDrawなどを基盤として、低分子化合物からペプチド/タンパク質・核酸・糖鎖・抗体といった生体高分子や ADC（抗体-薬物複合体）、組織切片や細胞株まで、幅広い創薬モダリティをシームレスに扱うことができます。登録されたデータは構造式、配列、HELM 表記、キーワードなどで検索できるので、必要な研究データを簡単に参照できます。これにより、チーム内での情報共有が進み、研究業務の効率化に繋がります。Scilligence 製品は、電子実験ノート ELN、物質登録・アッセイデータ管理 RegMol、在庫管理 Inventory、機器出力データ収集・管理 SDMS、プロジェクト・ワークフロー管理 PMF で構成されています。



「医薬品の安全性情報ポータル OFF-X」

東田欣也（株式会社モルシス）

創薬モダリティの多様化が進む中、医薬品開発において、その安全性を統一的に評価することは、非常に重要です。BioInfoGate 社の OFF-X は、規制機関、学術論文、学術会議、企業などの多くの情報源から収集された前臨床試験の毒性情報と臨床試験および市販後の安全性情報を統合し、更に高度な解析機能を組み合わせ情報提供する、医薬品の安全性情報ポータルです。2020年7月現在、専門家によりマニュアルキュレーションされた 796,363 の安全性アラート、14,923 のターゲット、18,219 の医薬品および生物製剤、8,969 の有害事象が登録されており、データベースは日々更新されています。

ターゲット、有害事象、ドラッグをクエリーとして、安全性情報を検索することができ、全ての情報に対して、ドラッグアラート/クラスアラートの区別、情報の信頼性の評価が行われています。

解析機能としては、タンパク質のインタラクトームをベースにした SAFETY MAP 解析により、タンパク質-タンパク質相互作用マップから、関連性の高いターゲットに対する医薬品の安全性情報を、モダリティを区別することなく、統一的に調べることができます。

