

効率的な薬剤創出の手助けをします

## タンパク質立体構造評価システム

# QAEmap

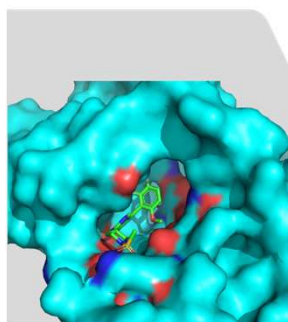


- 低解像度の電子密度マップから作られたタンパク質立体構造の評価
- 評価スコアに基づく**不正確な構造の検出や修正**が可能

- 深層学習により高解像度の電子密度マップの特徴を抽出
- 低解像度のマップから**高解像度のマップを推定**し、両マップ間の相関を算出

## タンパク質リガンド活性値予測システム

# KASSAY

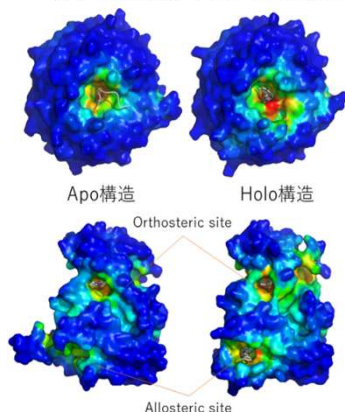


- タンパク質とリガンドの複合体座標に基づくリガンド活性値の予測
- エネルギーベースの従来手法とは異なる指標での**深層学習**による結合親和性の予測を実現
- ドッキングやMDなどで生成された複合体構造に基づく空間的な原子の相対位置や構造情報の予測
- **新規化合物の探索**や**リード化合物の最適化**を支援

## タンパク質リガンド結合領域予測システム

# DeepSeeker

ペプチド結合構造 低分子化合物結合



- タンパク質の立体構造を入力値とし、リガンドが結合可能な**ポケットをAIを用いて予測**
- 短時間で精度の高いポケットの予測が可能
- ペプチド等が結合する中分子ポケットへの低分子リガンドの結合可能性の判定 (**ペプチドリガンドの低分子化**に応用可)
- MDのスナップショット構造を評価し、**バーチャルスクリーニング**に用いる構造の選出にも適用可能