

低分子創薬を加速させるメドケムソフトウェアの紹介

＜スポンサーセッション＞ SS-03 10月26日（火）13:00–14:30

抗体、ペプチド、核酸等の医薬品開発の多様化と共に、低分子医薬品の開発も加速しています。低分子創薬をさらに加速化させるために、ソフトウェアの新しい活用法が期待されています。本セッションでは、リード化合物探索、リード最適化、データ共有による効率化の観点から、メディシナルケミストが、簡単にアクセスでき、目的の結果を即座に得ることが可能なソフトウェアを紹介します。

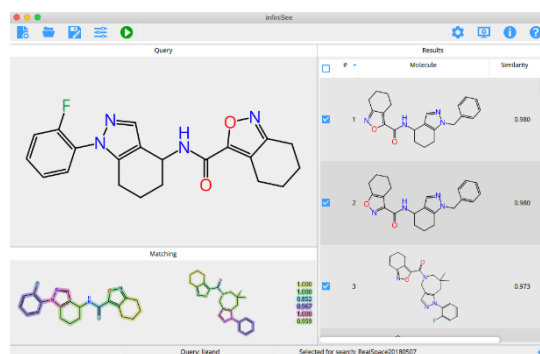
「ケミカルスペース高速探索ツール infiniSee」 池上貴史（株式会社モルシス）

infiniSee は、無限に近いサイズの化合物空間（ケミカルスペース）の中から目的分子を高速に探索することができます。クエリー分子あるいはテンプレート構造を指定して、バーチャル化合物群から形成されるケミカルスペースあるいは既存の化合物ライブラリーの中より、化学的特徴の一致する分子構造を出力します。infiniSee は以下のような機能を有しています。

- 巨大なケミカルスペースからの超高速検索
- Scaffold Hopping された興味深い化合物の探索
- 既存のフィンガープリントによる類似性は低い化学的に関連する化合物の発見
- 合成可能あるいは購入可能な構造の提案

品質の高いビルディングブロックと化学反応ルールからケミカルスペースは成り立ちます。Enamine 社の REAL Space (200 億分子)、WuXi LabNetwork 社の GalaXi (20 億分子)、OTAVA Chemicals 社の CHEMriya (110 億分子) から購入可能な化合物を検索でき、BioSolveIT 社の KnowledgeSpace (数千億分子) から合成可能な化合物を検索できます。CoLibri を使用することで、独自のケミカルスペースを構築可能です。

infiniSee は、新規構造、SAR 展開、特許を回避した構造などを簡単な操作で即座に発見でき、創薬研究を加速させます。



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/>

「SAR/MMP 解析ウェブアプリケーション MOEsaic」 阿部紘一（株式会社モルシス）

新規化合物の設計には、目的とする薬理活性向上の他に、様々な物性や薬物動態などのパラメータを最適化する必要があります。MOEsaic は、統合計算化学システム MOE に搭載されているウェブベースのアプリケーションであり、化合物データセットの整理、化合物の探索、構造活性相関 (SAR) 解析、新規化合物の設計を簡単な操作で実行できます。具体的には、化合物の構造検索/アラインメント、Matched Molecular Pair (MMP) 解析、R-group 解析、物性モデルによる評価、物性プロット、Free-Wilson 解析による新規化合物の提案を行う機能が直感的なインターフェースで実装されており、多数のパラメータの最適化を効率良く行えます。また、プロジェクトグループ間のデータの設定、標準化、共有も容易に行えます。MOEsaic は統合されたリガンドベースの設計環境を提供し、低分子創薬研究を強力に支援します。



「創薬研究情報共有クラウドシステム CDD Vault」 篠崎康裕（株式会社モルシス）

CDD Vault は低分子をはじめとするサンプルとアッセイデータの管理、および電子実験ノート (ELN) の機能を持つクラウドサービス (SaaS = Software as a Service) です。低分子サンプルとバイオアッセイデータの一元管理、あらゆる実験を記録できる柔軟な ELN、利用場所を限定しないクラウドサービスの利点により、化学/生物学の分野や組織の壁・所在地の距離の壁を越えて研究者間のコラボレーションを強力に支援します。また、新規登録されたサンプルやアッセイデータの通知機能や、研究者間の業務連絡やディスカッションを促すメッセージボード機能により、研究のサイクルを滞りなく進められます。

リード化合物の登録から、合成実験の記録、アッセイ実験の記録と結果の登録、結果の分析まで、創薬研究の全場面で CDD Vault をご活用いただけます。

