

バーチャルスクリーニングサービス

ー ヒット化合物探索コストを削減・効率化 ー



バーチャルスクリーニングは、標的タンパク質の立体構造や既知リガンドの構造・物性情報を基に、ドッキングシミュレーションや化学構造の類似性解析などを用いて、標的に作用する可能性のある化合物を予測する *in silico* 技術です。MedChemExpress 社では、創薬研究用化合物サプライヤーとして保有する豊富な化合物データベースを活用し、ヒット化合物候補を迅速かつ低コストで探索するためのバーチャルスクリーニングサービスを提供しています。

特長

- 1,600 万以上の購入可能な化合物データベース
- バイオアッセイにかかるコストや時間を削減
- タンパク質の結合ポケットモデルを構築
- 毒性、ADME 予測等の関連サービスもご提供可能

納品物

- スクリーニング結果上位約 200 化合物のリスト
- 2D/3D 結合パターンマップを含む総合レポート

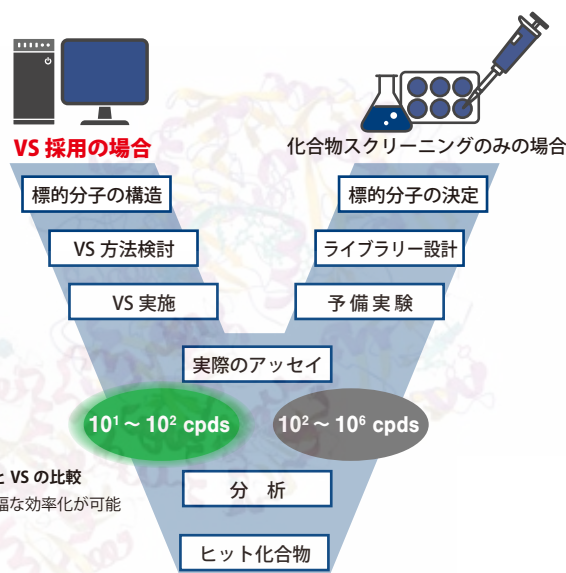


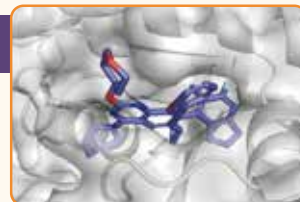
図1：通常のスクリーニングとVSの比較
スクリーニングプロセスの大幅な効率化が可能

プロジェクトに応じた最適なスクリーニングアプローチ

ターゲットの性質や利用可能なデータに応じて、効果的なシミュレーションをご提案

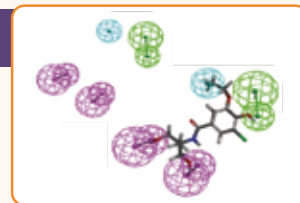
構造ベースバーチャルスクリーニング (SBVS)

入力情報：標的タンパク質の立体構造データ
評価方法：分子ドッキングのシミュレーション
標的との高い結合親和性が期待される化合物を予測可能



リガンドベースバーチャルスクリーニング (LBVS)

入力情報：リガンド構造
評価方法：化合物構造と活性の定量的相関関係（QSAR）等で評価
標的タンパク質の構造が不明でも活性のある化合物を予測可能



AI スクリーニング (GeminiMol, RTMScore 等)

MedChemExpress 社では、ディープニューラルネットワーク等の機械学習アルゴリズムと、分子ドッキングなどの手法を組み合わせた AI スクリーニングサービスを提供しています。

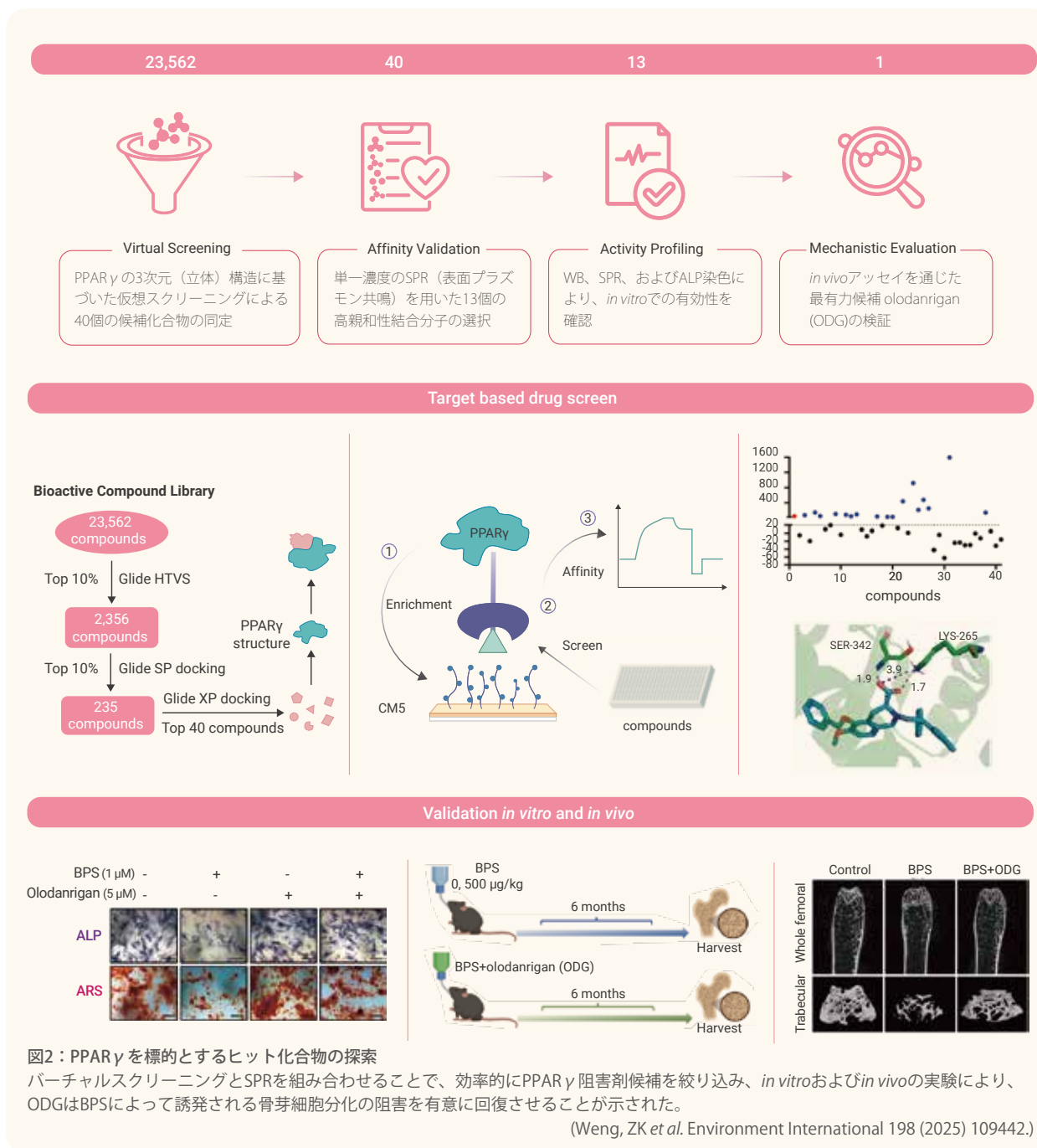
- 膨大なデータを AI に学習させた「データ駆動型」の高精度予測
- 標的タンパク質、化合物の化学構造と生物活性の関係性を総合的に評価
- 数百万規模の化合物をかつてないスピードでスクリーニング可能



人と科学のステキな未来へ

コスモ・バイオ株式会社

バーチャルスクリーニング活用事例



詳しい情報は、コスモ・バイオ Web サイトへ

記事 ID 検索 47055

コスモ・バイオ Web サイトのトップページ「記事 ID 検索」を使うと、ダイレクトにページに行くことができます。
上記の数字を検索窓に入力して検索してください。

取扱店

お願い / 注意事項

記載の社名・商品名等の名称は、弊社または各社の商標または登録商標です。

使用範囲 記載の商品およびサービスは全て、「研究用」です。人や動物の医療用・臨床診断用・食品用等としては使用しないよう、十分ご注意ください。



人と科学のステキな未来へ

コスモ・バイオ株式会社

— お問い合わせ先：創薬・受託サービス部 —

本サービスの詳細につきましては、
当社 創薬・受託サービス部 までお問合せください。

TEL：03-5632-9615

FAX：03-5632-9614

E-mail：jutaku_gr@cosmobio.co.jp

本社所在地 〒135-0016 東京都江東区東陽 2-2-20 東陽駅前ビル