

MFDDインシリコ創薬受託研究サービス

構造ベース創薬 (SBDD) やリガンドベース創薬 (LBDD) 技術を駆使して
お客様の課題解決を支援するサービスです

- ・ホモロジーモデリング
- ・立体構造予測/精密化

アミノ酸配列さえ用意できればタンパク質分子の立体構造を予測し、精密化まで実施できます。
 生体高分子 (タンパク質や核酸) の安定性や着目残基の情報が予測できます。
 精密化した立体構造を用いて、分子ドッキングやインシリコ/バーチャルスクリーニングが実施できます。

- ・分子ドッキング
- ・結合部位予測/結合様式予測
- ・親和性予測

結合部位を予測して、分子ドッキングを実施することで着目化合物 (医薬品、農薬、食品成分など) の結合様式や生体高分子との親和性が予測できます。
 生体高分子-低分子ドッキングだけでなく、タンパク質-タンパク質ドッキングやタンパク質-ペプチドドッキングにも対応しています。

- ・インシリコスクリーニング
- ・バーチャルスクリーニング

標的タンパク質に対する活性化合物 (医薬品、農薬、食品成分など) をコンピュータ上で予測します (ヒット化合物といいます)。
 数百万化合物から探索することも可能です。
 ヒット化合物を生物評価することで偶然に頼るより実際に目的の活性が認められる可能性が格段に高くなります。

- ・定量的構造活性相関解析
- ・化合物デザイン/分子設計

分子ドッキングで構造活性相関解析を実施し、目的化合物 (医薬品、農薬、食品成分など) の活性を予測します。
 化合物デザイン/分子設計で活性向上を図ります。
 シード/リード最適化に利用できます。
 合成ルートデザインなども承っています。

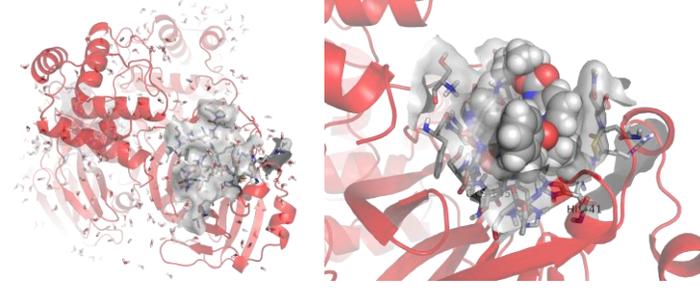
金属タンパク質、複雑な四次構造やキメラ構造も予測できます。
 鋳型がなくてもAlpha Foldと組み合わせで高精度モデルが予測できます

2005年 国産初
 構造ベース創薬システム開発

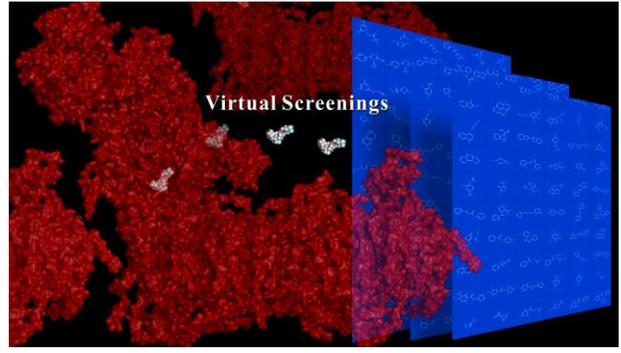
- 生体高分子立体構造精密化
- ホモロジーモデリング
- リガンド結合部位予測
- ドッキングシミュレーション
- バーチャルスクリーニング
- 三次元化合物データベース構築
- 生体高分子量子化学計算



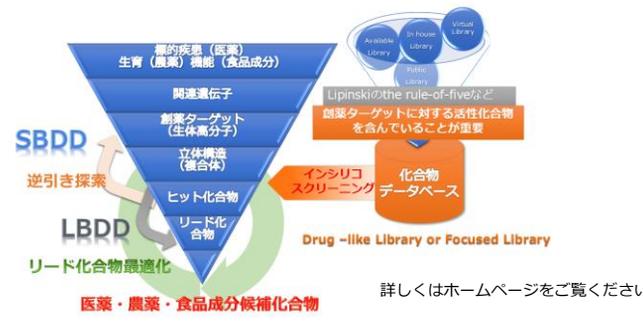
複合体形成部位が既知のサイトドッキングだけでなく、生体高分子全体構造からアロステリックサイトを予測するなど、ブライントドッキングにも対応しています



インハウスデータベース、公共データベース、市販化合物データベースなど様々なデータベースを用いてスクリーニングできます



活性化合物の構造から標的タンパク質を予測してSBDDを実施できます
 構造ベース創薬 (SBDD) とリガンドベース創薬 (LBDD)、逆引き探索



リガンドベース創薬 (LBDD)、ファーマコフォアベース創薬、分子動力学計算、量子化学計算による創薬も取り揃えています

