



Pharmacophore Modeling & Screening Service

LigandScout 3.1 を利用したファーマコフォアモデルによる活性予測計算サービス



(株)京都コンステラ・テクノロジーズ(以下、コンステラ社)の提供するワンストップ計算サービスに、**ファーマコフォア(薬理作用団)モデル**によるバーチャルスクリーニングを追加しました。

ファーマコフォアによる化合物探索では対象化合物の三次元的な配座に基づいて活性を予測します。本サービスでは inteligand 社の開発したファーマコフォアモデル用の統合プラットフォーム **LigandScout 3.1 (*)**を用いて、**精度の高い活性予測計算やインシリコスクリーニング**を実現します。

【ファーマコフォアモデルを用いた受託計算サービスの特徴】

●構造ベースとリガンドベースの2通りでファーマコフォアモデリング可能

タンパク質-リガンドの複合体立体構造データを利用することで、構造ベースのモデル構築が可能です。複合体の構造データが無い場合には、複数の既知リガンド情報を用いる事でリガンドベースのモデル構築も可能です。

●高精度の活性予測計算を提供

構築したファーマコフォアモデルに基づいて、1万個規模までの化合物データベースを対象に精度の高い活性予測計算の実施が可能です。

●CGBVS との組み合わせにより高速・高精度のスクリーニングを実現

CGVBS による高速スクリーニングとファーマコフォアモデルを組み合わせる事により、数 100 万化合物からの大規模スクリーニングのパフォーマンスを向上させ、効率的に化合物探索を行います。

【計算実施例と参考価格・納期】

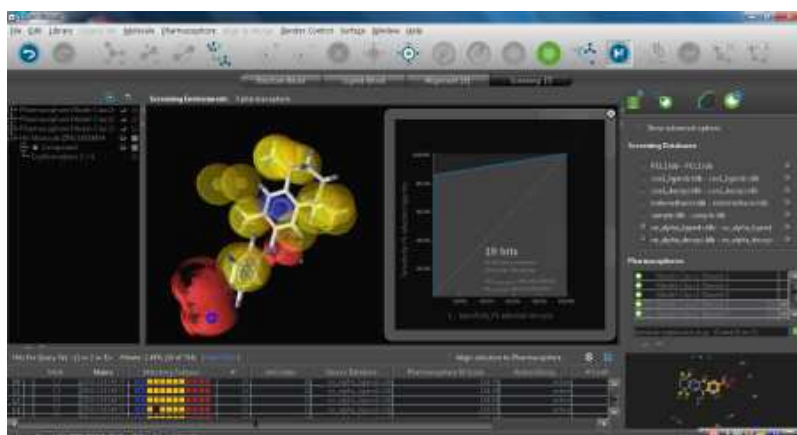
CGBVS 150 万化合物 24 万円 ・ 3 営業日 + **ファーマコフォア計算** 35 万円 ・ 3 営業日 → **高速・高精度スクリーニング** 59 万円 ・ 6 営業日

(例) ENAMINE 社の在庫化合物約 150 万個について、まず CGBVS で数万個に絞り込み、そこからファーマコフォア計算を実施します。

【お客様からの提供情報】

既知リガンド構造データ 数個程度(SD ファイル)

複合体立体構造データ(PDBID) (構造ベースのモデリングの場合に必要)



(*) LigandScout 3.1 はオーストリアの inteligand 社が開発したファーマコフォアモデリング用の統合プラットフォームで、日本での販売は(株)アフィニティサイエンス (www.affinity-science.com/) が総代理店として取り扱うものです。コンステラ社は両社との契約により同ソフトウェアを利用した受託計算サービスを提供します。

【リファレンス】

- Efficient overlay of small organic molecules using 3D pharmacophores. J. Comput. Aided Mol. Des. ; 2007; 20(12); 773-788.
- 3-D Pharmacophores Derived from Protein-Bound Ligands and Their Use as Virtual Screening Filter. J. Chem. Inf. Model; 2005; 45(1); 160-169.



(株)京都コンステラ・テクノロジーズは、京都大学発ベンチャー企業として 2008 年 3 月に設立されました。京都大学薬学研究科・奥野恭史教授の技術をコア技術とし、製薬企業・研究所の創薬研究支援事業、医薬品の副作用情報などのデータベース検索システムの開発など、最先端の計算科学技術を用いて独自のサービス・製品を提供しています。
【連絡先】TEL: 075-241-9672 customer@k-ct.jp URL: <http://www.k-ct.jp/>