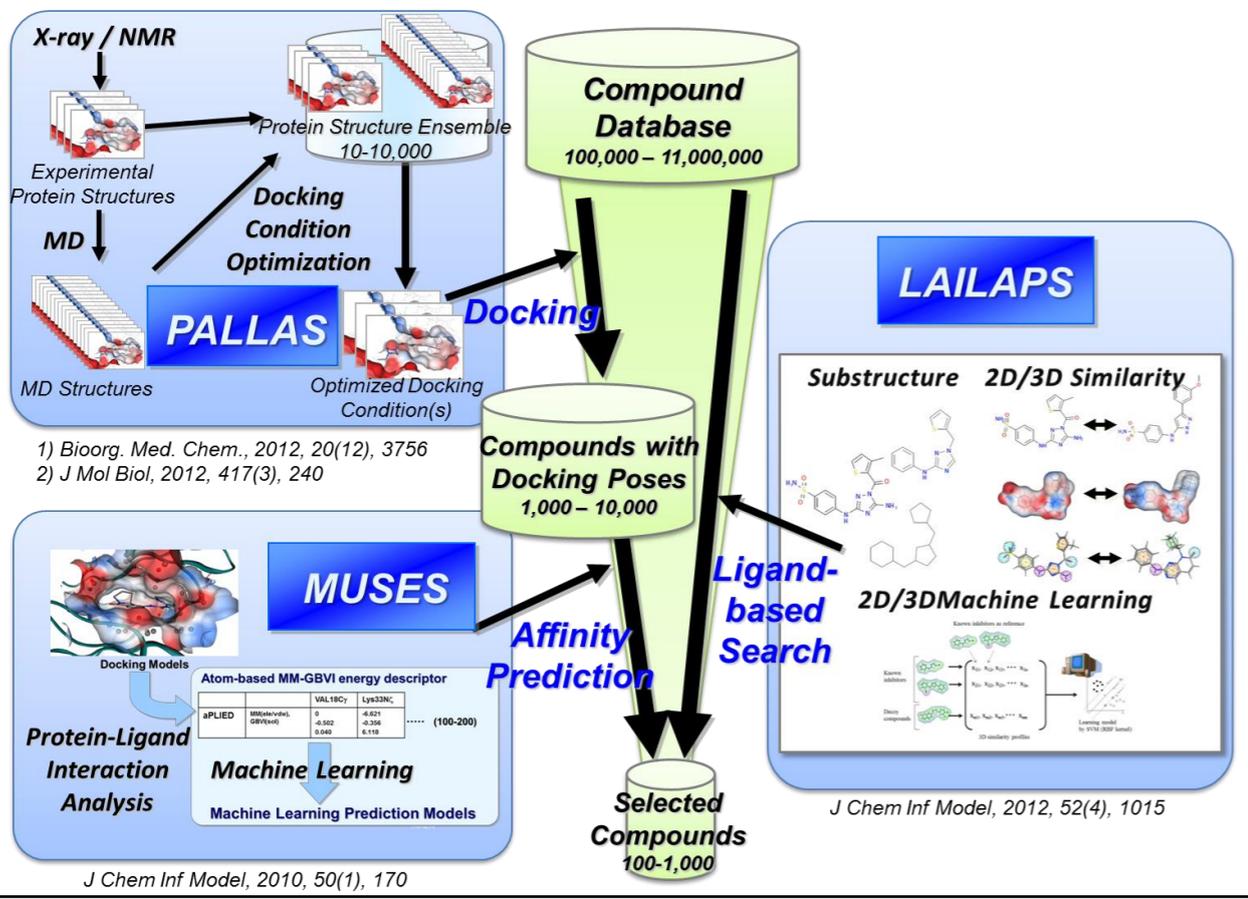


PALLAS/MUSES/LAILAPSによる インシリコスクリーニングと最適化設計

[技術の概要]

以下の3種類のシステムを組み合わせることでインシリコスクリーニングとヒットした化合物の活性向上などの設計を行うものです。

- 半自動ドッキング条件最適化 PALLAS
- 相互作用記述子による機械学習活性予測 MUSES
- 多面的類似・機械学習予測 LAILAPS



[技術の利用例]

以下の代表例を含めて、20以上のターゲットへの適用例があります。

Hck

Sci Trans Med, 5:181ra52, (2013).

AdipoR

LAILAPS

Nature, 503, 493-499, (2013).

Pim1

J Med Chem, 55(11), 5151, (2012)
J Mol Bio, 417(3), 240, (2012)

DHOD

IC₅₀: 30-100 μM
IC₅₀: 0.15 μM

DOCK2

連絡先

[所属] 理化学研究所
制御分子設計研究チーム

[名前] 本間光貴

[E-mail] honma.teruki@riken.jp