



QEX Suite ver.1.0



化合物の drug likeness “薬らしさ” 評価ツール

<http://www.imsbio.co.jp/products/qexsuite/>

QEX Suiteとは

医薬品候補化合物の効率的なスクリーニングを実現する drug likeness (薬らしさ) 評価ソフトウェアです

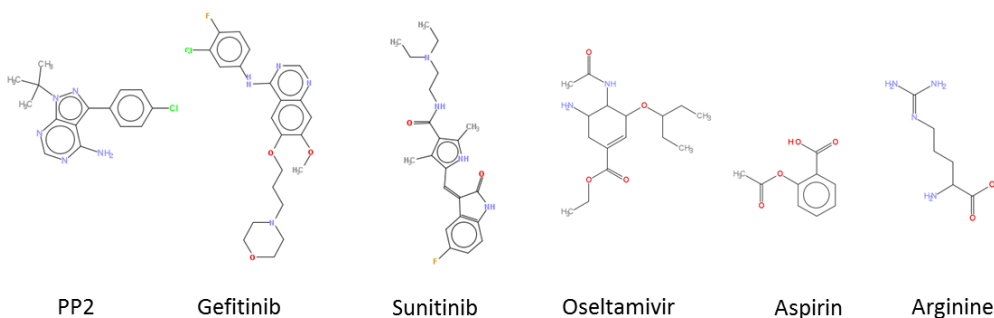
1. 当社グループがIT創薬コンテストで2部門同時受賞した際に使用した技術を商品化しました。
2. ユーザが興味のある任意のターゲットについてモデル作成して drug likenessを 評価します。
3. 2次元構造の SDF / SMILES 形式の化合物データだけから、モデル作成が可能です。3次元構造データは使用しません。
4. チロシンキナーゼSrc阻害剤をターゲットとしたモデルと、QED法相当のモデルが付属しています。
5. ご要望に応じて、秘密保持契約の上、モデル作成のサービスも承ります。

ターゲットに特化した drug likeness 評価の効果

QEX Suite は経口薬を想定した drug likeness 評価手法である QED (quantitative estimate of drug likeness)法 ※ をベースとしていますが、QED法とは異なり任意の化合物セットを用いて評価モデルを構築することができます。従って、特定のターゲットタンパク質の既知阻害剤を用いて構築したモデルを使用すれば、ターゲットに特化したより精密な drug likeness の評価が実現できます。

なお、付属の評価モデルを用いることで、オリジナルの QED に相当する評価も可能です。

Src阻害剤を従来法よりも効率的に分離



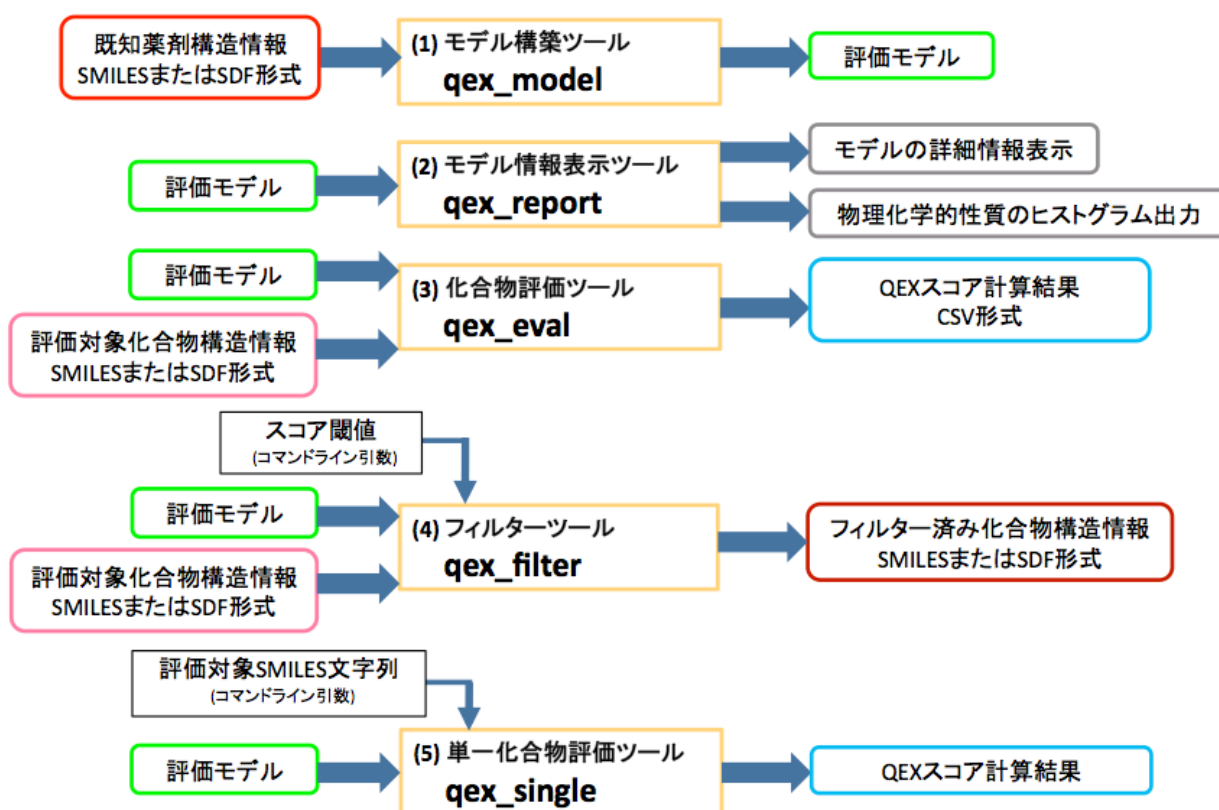
阻害活性	○	○	○	×	×	×
特化したスコア	0.75	0.7	0.39	0.26	0.16	0.05
従来法 (QED相当)	0.74	0.51	0.62	0.69	0.55	0.23

※ Quantifying the chemical beauty of drugs, G. Richard Bickerton, Gaia V. Paolini, Jeremy Besnard, Sorel Muresan, Andrew L. Hopkins, Nature Chemistry, Vol. 4, No. 2. (24 January 2012), pp. 90-98, doi:10.1038/nchem.1243

QEX Suite を構成するツールの概要

QEX Suiteは、5種類のCUIプログラムから構成されています。
始めに(1)のツールで用途に合ったモデルを構築し、次にこのモデルを用いて(3)、(4)のツールで化合物のスコア評価、スコアに基づく化合物のフィルタリングを行うのが標準的な手順です。
(5)はコマンドライン引数にSMILES文字列を指定することで、簡易的に単一化合物を評価する際に用います。

QEX Suiteに含まれる各種ツールの入出力



動作環境

機種・OS	Linux 64 bit Mac Intel CPU、OS X 10.10 以上
必要メモリ	4 GB
価格	お問い合わせください。

詳しくは、QEX Suite のホームページをご覧ください <http://www.imsbio.co.jp/products/qexsuite/>



株式会社 情報数理バイオ

○お問合せ先 (株)情報数理バイオ 営業部
〒170-0013 東京都豊島区東池袋4-21-1 アウルタワー6F
TEL 03-6907-0315 FAX 03-6907-0316
EMAIL: info@imsbio.co.jp URL: <http://www.imsbio.co.jp>