

企業セッション 10月27日 13:00~14:30 Ch3

① 化合物デザインのプラットフォーム Design Hub

今あるべき、化合物デザインの環境とは何だろうか？
 テレワーク中の研究者、共同研究先などグローバルに広がる研究チームが、仮説から検証までのサイクルを支援するセキュアな「知のプラットフォーム」
 デザイン中の化合物について、入手可能なあらゆる情報が提示され、データに基づく合理的なディスカッションと意思決定がスムーズに進む



集合知

Collective Intelligence
 By Design Hub 

g-secretase
 PDB:3R2F
 Ligand:BMS-693391
 di-F-Phe in hydrophobic pocket
 H-bond with T232
 cationic interaction with D228

Hypothesis

Analyze

Design

Synthesis

Priority

② 合成展開ナレッジ活用プラットフォーム Transformer 2

突 破 力

ブレークスルーを加速する為の環境整備

- ✓ 課題解決の行きづまりを突破したい
- ✓ 社内知識・過去の経験などを有効活用したい
- ✓ 若手ケミストを早期に戦力化したい

化学物質適正管理ソリューション

安全で適法な研究推進をより確実・簡単に！

- 頻繁に改正される規制法令等を迅速にオペレーションに反映
- 主要試薬ベンダーの最新統合カタログで試薬の購買・適正管理を実施
- 試薬の発注～廃棄までを適法・簡単・効率的に

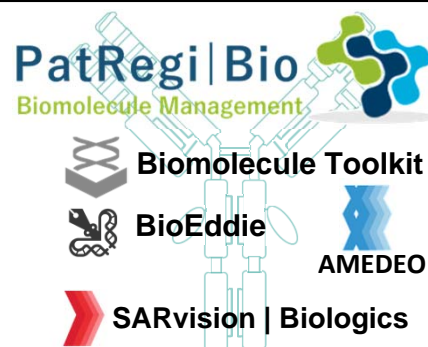
COMPLIANCE

CRAIS Checker
SMARTS
CRAIS Reagent

バイオモダリティ情報プラットフォーム

複雑なバイオ分子をHELMネイティブなプラットフォームで確実に管理

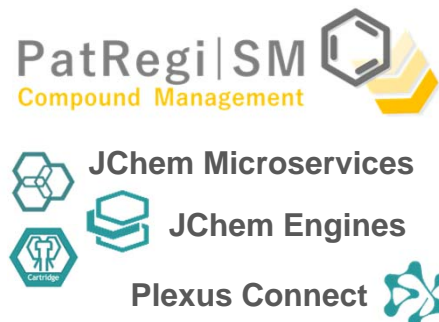
- ADCや化学修飾された核酸・ペプチドなど複雑なバイオ分子を正確に表現
- 長期間の相互運用性、組織外とのデータの互換性を維持
- 最先端の配列-活性相関解析・機械学習で創薬サイクルを改善



化学情報プラットフォーム

急速に増大する化合物データを最新のITで軽快に利活用

- バイオ分子登録系とも連携できる、フレキシブルな化合物登録システム
- サーバーレス、Docker技術を用いたスケーラブルなケムインフォ基盤
- 化学を熟知したITサービス



ナレッジに基づく構造転換アイデアの提示

イマジネーションを刺激し、セレンディピティーを引き寄せる

- 社内外の実験データをナレッジベースして合成展開に活用
- MMP解析結果と実験結果を統合し、狙った特性を持つアイデア構造を提示
- 社内データベースと連携して、ナレッジの活用をオートメーション化



化学物質特許の強力な実験項とクレームの作成

化学物質特許の強力な実験項とクレームをスピーディー且つ正確に作成

- 電子ノートや化合物・活性データベースの情報を利用し、正確で「強い」実験項を迅速に作成
- 属人性を低下させ、人材の流動化に対応
- 例示化合物群の情報から、マーカッシュ構造及びクレーム文書を自動作成

国際特許申請中

Quick Pat



Markush Editor