

2006年11月16日

報道関係者各位

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function) がコンピュータ上で医薬候補化合物をスクリーニングできるシステムを国産としては初めて国内外の一般市場で販売開始する。

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function)

分子機能研究所 (<http://www.molfunction.com/jp/>) は、本年6月に販売開始したタンパク・リガンドドッキングシミュレーションプログラムパッケージ、Docking Study with HyperChem、に1タスクあたり最大1万化合物を処理するのに必要な全機能を搭載したマルチ化合物対応版を新たに導入し、国内および海外の一般市場で販売開始すると発表した。

今回導入されるパッケージには、最大10化合物、最大100化合物、最大1,000化合物、および最大10,000化合物にそれぞれ対応した4グレードがあり、これまでの単一化合物版をあわせた計5種類のパッケージグレードが出揃うことになる。なお、無制限、クラスター対応のin silicoスクリーニング(バーチャルスクリーニング)システムはこれまでどおり個別に対応する。

分子機能研究所は自社製品の全世界での広範な普及を目指しており、すでに販売されている単一化合物版 Docking Study with HyperChem は現在流通している他の既存システムのトータルの年間使用料の数十分の一あるいは数百分の一という画期的なコストパフォーマンスを達成している。今回新たに導入されるマルチ化合物対応版でもこのスタンスには変わりはなく、さらに、2パッケージ以上を同時に注文する場合には最大で50%のディスカウントが適用されるボリュームライセンス制度も導入する。なお、一般市場で流通している国産のin silicoスクリーニングシステムは皆無である(当社調べ)。

Docking Study with HyperChem はタンパク・リガンドフレキシブルドッキングが可能なほかにも、他の既存システムではいまだに利用できない様々な最先端機能が搭載されている。さらに、全世界の国家プロジェクトでも開発できていない、タンパク質の立体構造のみから医薬候補化合物などが作用するタンパク質上の作用部位を正確に予測し、かつその作用部位に作用して効果を発揮する医薬候補化合物の骨格形状および化学的特徴をも高精度に予測して視覚化する革新創薬支援技術(特許出願中)を搭載しており、マルチ化合物対応版でもこれら全ての機能が利用できる。

本システムの発注は分子機能研究所で直接受け付けているとともに、国内販売代理店である株式会社ヒューリンクスからも受け付けている。

会社名：分子機能研究所 (Institute of Molecular Function)

代表者名：辻 一徳

連絡先：〒341-0037

埼玉県三郷市高州 4-8-1 木下コーポ 202

TEL : 048-956-6985 FAX : 048-956-6985

E-Mail : [motonori@molfunction.com](mailto:motonori@molfunction.com)

担当者：辻 一徳 (ツジ モトノリ)

関連 URL : <http://www.molfunction.com/jp/>

<http://www.hulinks.co.jp/>