

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ  
株式会社アフィニティサイエンス  
株式会社理論創薬研究所

3社連携で革新的な候補化合物創出を強力サポート  
「インシリコ創薬戦略コンサルティングサービス」を提供開始  
～各社が保有する技術とノウハウを効果的に組み合わせた戦略立案が可能に～



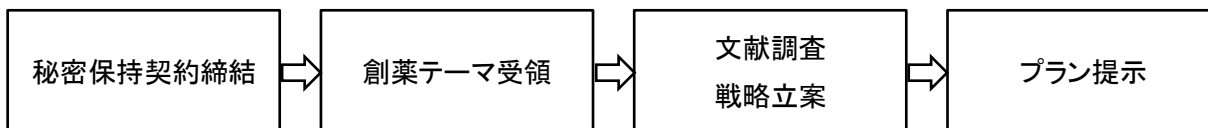
株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ(本社:京都市中京区、代表取締役社長:村上竜太、以下「京都コンステラ・テクノロジーズ」)と株式会社アフィニティサイエンス(本社:東京都品川区、代表取締役社長:田坂友彦、以下「アフィニティサイエンス」)、株式会社理論創薬研究所(本社:神奈川県横浜市、代表取締役社長:吉森篤史、以下「理論創薬研究所」)は、2018年2月14日より3社連携による「インシリコ創薬戦略コンサルティングサービス」の提供を開始します。

京都コンステラ・テクノロジーズは、2008年の設立時よりビッグデータ・AI創薬にかかわる相互作用予測や de novo デザインなどのコア技術を活用した製薬企業への受託計算サービスを展開しています。2015年からは海外の研究支援ソフトウェアを輸入・販売するアフィニティサイエンスと連携し、より幅広い計算科学技術を用いて、製薬企業をはじめ、農薬・食品・化粧品などの研究機関を対象に、受託計算サービス(ACISS・エイシス)を展開しています。

一方、理論創薬研究所は、タンパク質間相互作用を標的としたペプチドミメティック(※1)による創薬支援技術や医薬品候補化合物の超高速探索技術(特許第4895689号)をはじめとするケモインフォマティクス関連技術(※2)を保有し、これまで大手製薬企業を中心に、創薬戦略の調査・立案などの業務を行ってきました。

「インシリコ創薬戦略コンサルティングサービス」では、各社が持つ計算科学技術・ノウハウ等の強みを効果的に組み合わせることで、1社では対応が困難な幅広いニーズや課題に対応した戦略立案・プランを提供。お客様から提示いただいた創薬テーマや重点領域などの情報をもとに、標的情報や関連論文の文献調査を行った後、医薬品等の候補化合物探索プロセスにおけるインシリコ創薬技術の利活用に関する戦略立案を行い、およそ1か月で2～4件程度のプランを提案します。サービスの価格は1案件につき100万円から。プラン設計については化合物の調達・合成も含めた計算戦略、その後の業務請負や共同研究などプロジェクトの内容に合わせたステップの選択が可能です。

<サービスイメージ図>



※1: ペプチドミメティック…ペプチドの生理活性や機能を模倣した有機低分子のこと

※2: ケモインフォマティクス関連技術…コンピュータと情報化学を用いて、化学領域の問題に適用する技術

【株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ (Kyoto Constella Technologies Co.,Ltd)】

住 所: 京都府京都市中京区蟠螂山町 481 京染会館 4 階

資本金: 4,075 万円

設 立: 2008 年 3 月

概 要: 京都大学発ベンチャーとして設立、機械学習や de novo デザインなどのビッグデータ創薬関連の技術をコア技術とし、最先端の計算科学技術を用いて製薬企業や農薬・食品などの研究所の研究支援・計算サービスを行っている。2016年12月には医薬品開発のCROである(株)アスクレップの子会社としてインテージグループ入り。創業より行っている受託計算サービスでは、50社以上からの受注実績がある。

<http://www.k-ct.jp/>

【株式会社アフィニティサイエンス (Affinity Science Corporation)】

住 所: 東京都品川区西五反田 1-11-1 アイオス五反田駅前

資本金: 950 万円

設 立: 2007 年 10 月

概 要: アフィニティサイエンスは、研究支援ソフトウェアの輸入販売や受託研究サービスを中心に、研究者・開発者向けの各種サービスを提供しています。特に、事象や現象をモデル(定式)化し、コンピュータを用いて演算処理を行い、得られたデータを解析、特性や作用機序を系統的に研究する学問「計算科学 (Computational Science)」に注力し、事業を展開しています。

<http://affinity-science.com/>

【株式会社理論創薬研究所 (Institute for Theoretical Medicine, Inc.)】

住 所: 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259-3 東工大横浜ベンチャープラザ W101

資本金: 1,200 万円

設 立: 2004 年 2 月

概 要: インシリコ創薬を専門とするベンチャー企業。コンピュータシミュレーション技術を用いた、新しい創薬理論に基づくソフトウェアの開発を通じて、医薬品リード化合物の研究開発を行います。

<http://www.itmol.com/>

<本件に関する連絡先>

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ

担当: 村上 竜太      Mail: murakami@k-ct.jp      Tel: 075-241-9672