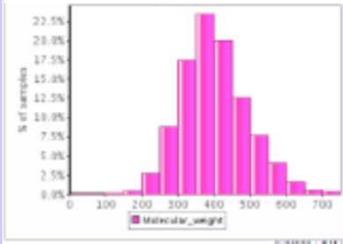


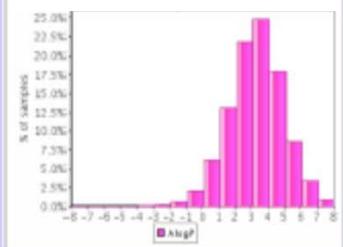
DISCライブラリー化合物の多様性

会員企業数： 22社
化合物総数：約20万

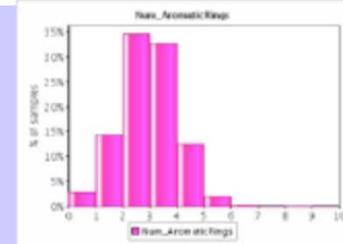
平均分子量：404



平均 ALogP：3.3

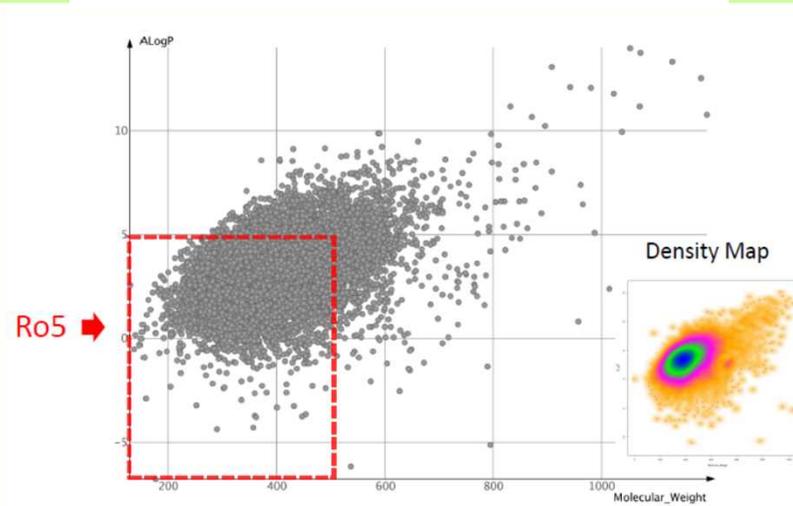


平均芳香環含有数：2.5



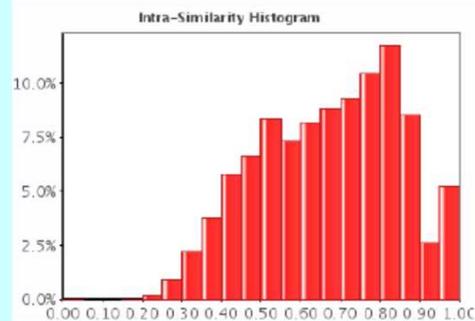
シーズとして適した物性

Rule of 5をすべて満たす化合物が74%

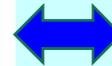
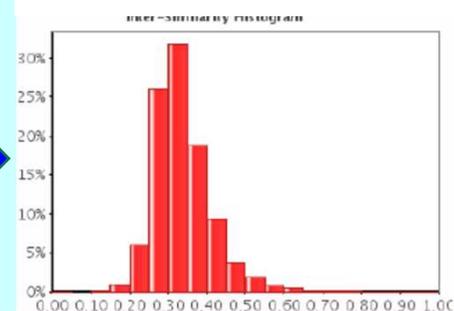


医薬品としての適正が高い化合物で構成されている

自社内化合物類似性：0.67



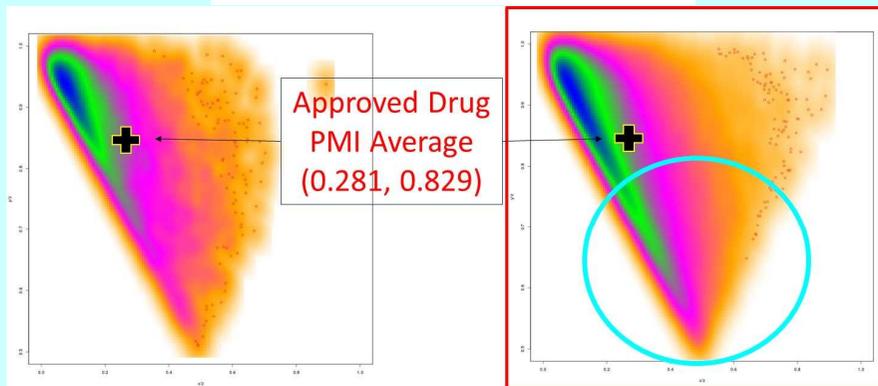
他社間化合物類似性：0.34



会員企業間の化合物の重複が少なく多様性に富んでいる

DISCライブラリーと他のライブラリーとの比較

分子形状 (PMI) 密度マップ



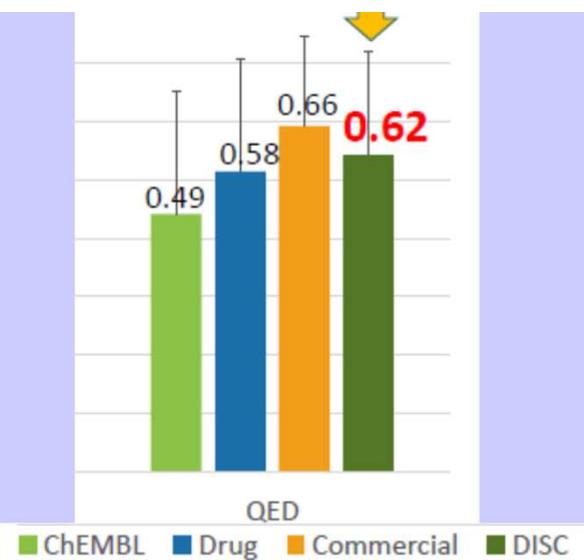
商用ライブラリー

DISCライブラリー

DISCライブラリーは、他の商用ライブラリーには見られないケミカルスペースを有している

QED
(Quantitative Estimate of Drug-Likeness)

分子量などの分配係数等によって算出される定量的なdrug-likenessのスコア

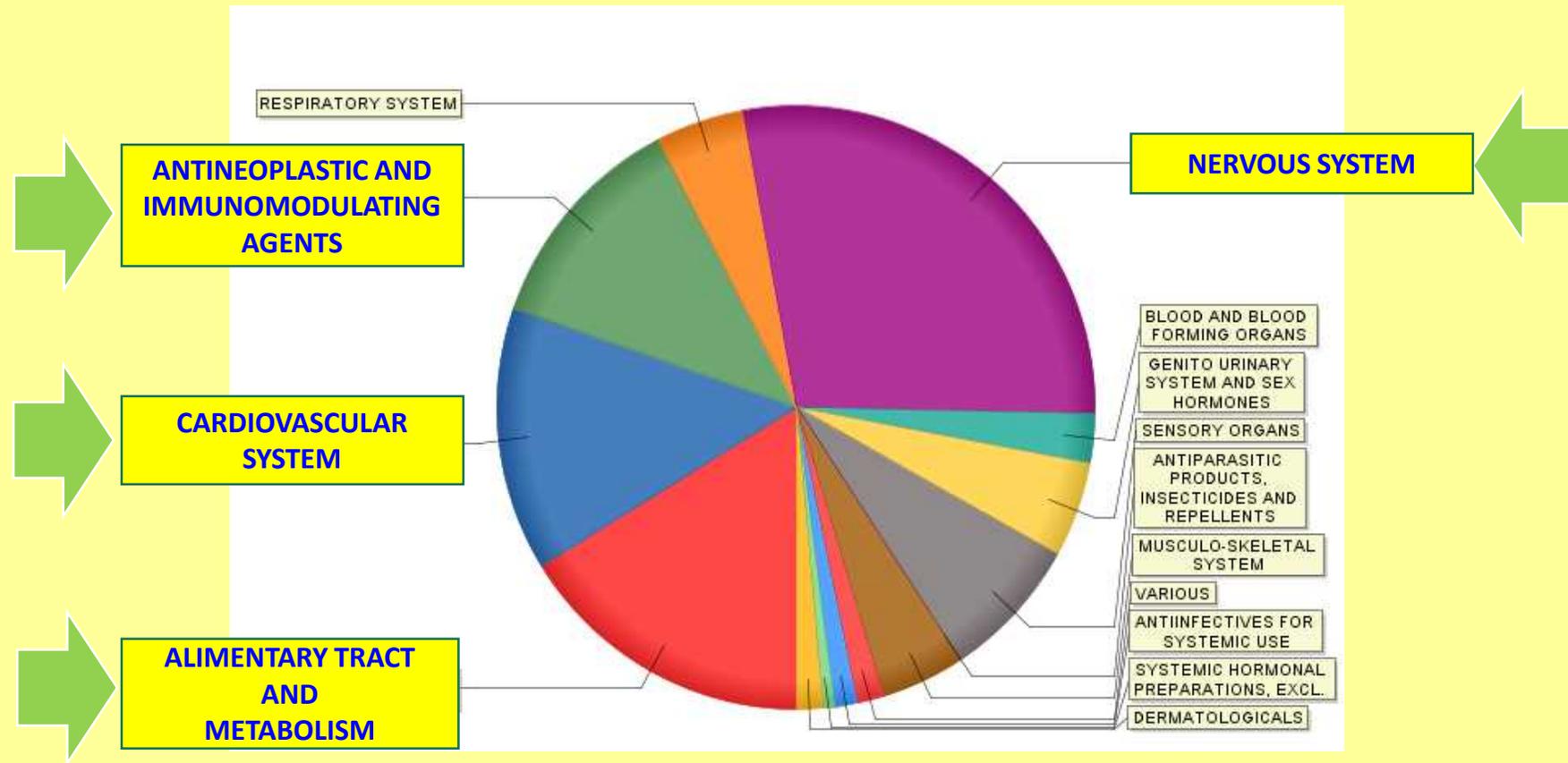


医薬品特性は高い

	MW	SD	ALogP	SD	aRings	SD	QED	SD
ChEMBL	441.93	226.74	3.30	2.70	2.34	1.33	0.49	0.24
Drug	370.33	156.33	2.27	2.52	1.67	1.17	0.58	0.22
Commercial	363.56	74.18	2.66	1.74	2.07	0.99	0.66	0.17
DISC_All	404.24	97.78	3.34	1.70	2.47	1.10	0.61	0.20

- ✓ DISCライブラリーは、他のライブラリーとの比較において医薬品特性が高く、例えば商用ライブラリーには見られないケミカルスペースを有している

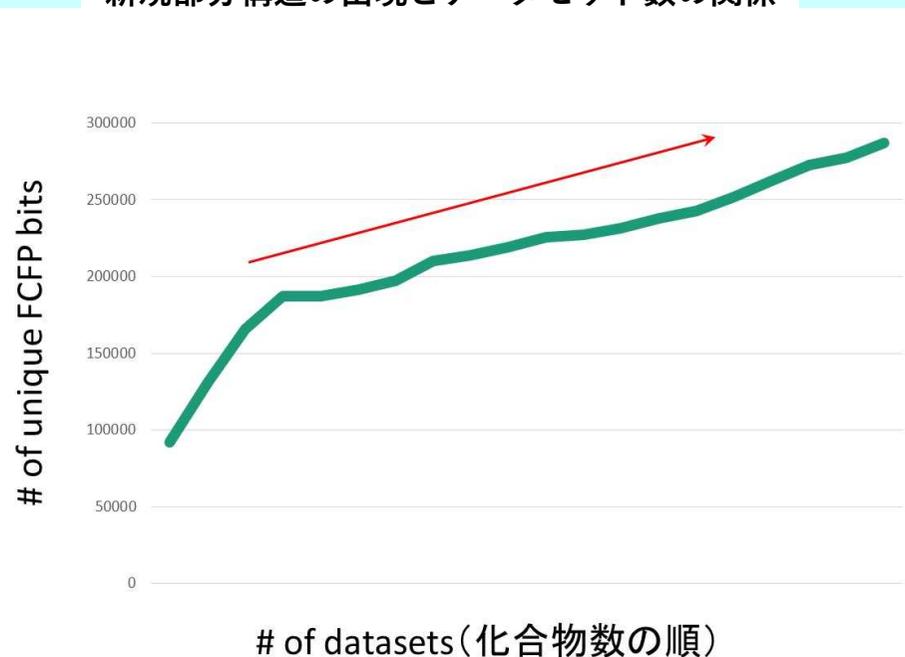
DISCライブラリーの生物活性予測に基づく創薬標的多様性



- ✓ 既知の創薬標的（ヒト）の総数591のうち175(約30%)をカバー
- ✓ 分類された治療・疾患領域は、神経系・代謝系・循環器・抗腫瘍領域など様々

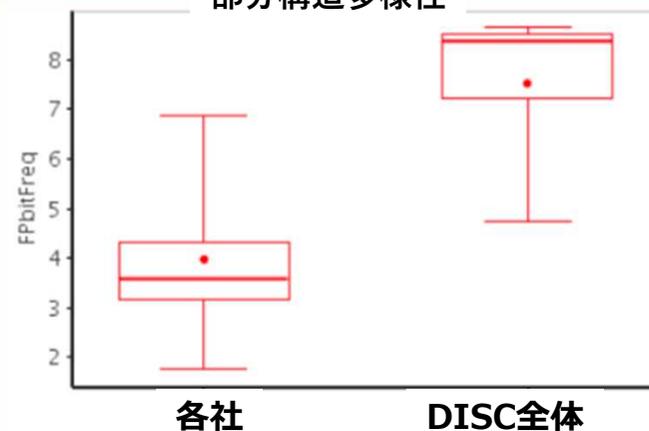
DISCライブラリー拡充・改善： 会員企業からの化合物追加提供・化合物購入

新規部分構造の出現とデータセット数の関係



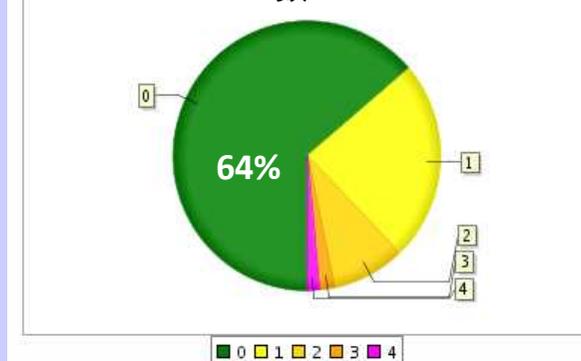
ライブラリーの追加に伴ない、新規な部分構造を持つ化合物が出現し続けている

部分構造多様性



全DISCライブラリー化合物の方が、各社だけのものより部分構造の多様性が高い

忌避構造：構造アラート数



構造アラートを全てパスする化合物 (SA=0) の割合は64%

- ✓ 各社ライブラリーのケミカルスペースの重複は低く化合物補充によるライブラリー拡充の余地は高い
- 2018年度に約7万化合物の追加提供及び
- 2018-19年度に約3万化合物を購入し拡充を実施
- 現在、約30万化合物ライブラリーとして運用中