pharmaco-net.org | 日本語版

Ver 3.6

Empowering Discovery for Life

Pharmaco-Net®

CALICI

簡単かつ迅速なAI新薬／機能性物質の探索

タンパク質をアップロードするだけ!

● Pharmaco-Net®ならではの強み！

最先端のAIモデル

第三者により
検証された商用AIモデルを
提供します。

実験検証完了

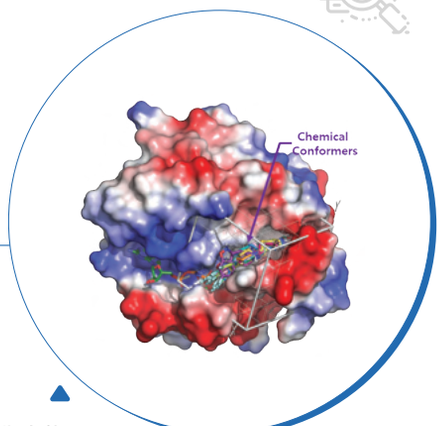
多数の予測結果が、
タンパク質・細胞・
マウス実験を通じて検証されました。

医薬品開発プロセスの主導

革新的なUI/UXにより、
ユーザーが直接
創薬をリードします。

● 20年の経験を持つ
タンパク質構造専門家による分析・結果レポート

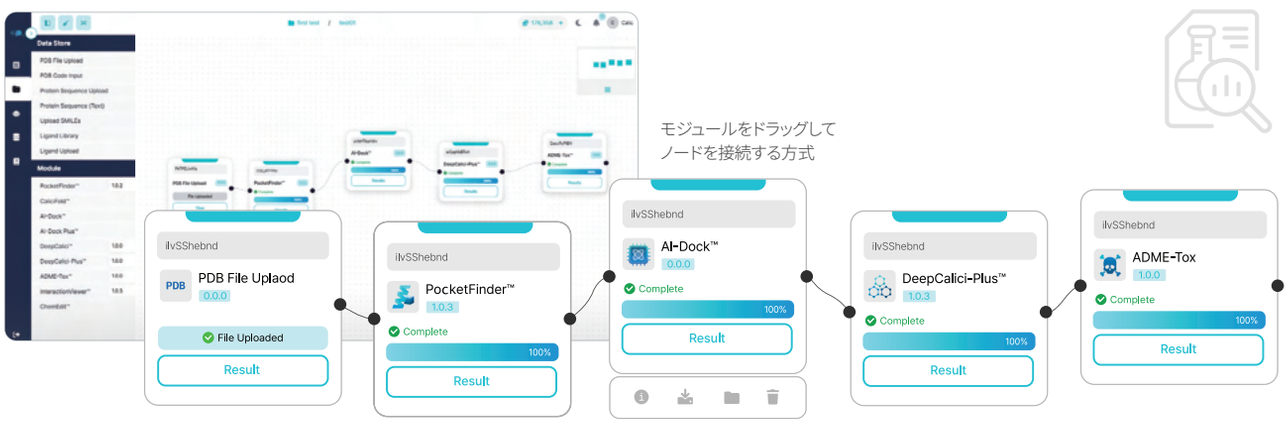
*セキュリティ上の理由により、一部のコンテンツが非表示になっています。



タンパク質ー化合物間の
結合イメージを提供

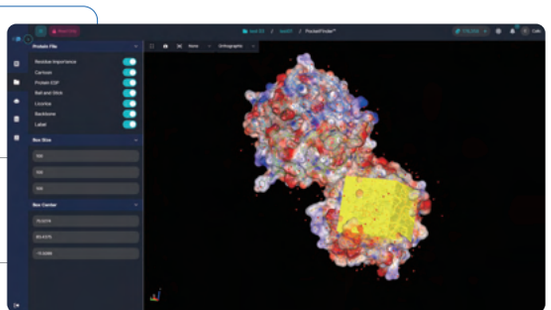
Serverless
AI Solution Platform

● 複数のノードを活用し、創薬プロセスを直感的に構築。



● PocketFinder™ が提供するサービス（ドッキング領域設定）

1. タンパク質ファイル内のエラーを修正
   (Missing residues, Alternative conformation,
   or Non-standard Amino Acids)
2. タンパク質の活性部位の特定および阻害部位の決定
   （ドッキング領域設定）
3. ドッキング領域のサイズおよび位置をユーザーが直接調整可能



● AI-Dock™, DeepCalici™ が提供するサービス（実測結合エネルギー、薬物濃度データ）

Binding Energy (kcal/mol)	Binding Affinity (μM)
−5.11	0.0049

他社　候補物質かどうかの判定のみ
Yes or No

Pharmaco-Net®　具体的な数値を提供
Binding Energy (kcal/mol)・Binding Affinity (μM)

Q. 薬物濃度値 はどのように計算されますか？

タンパク質の3D構造と薬物の実験値に基づいて、
薬物の結合ポーズを学習し、μM単位で計算します

Q. 良い結合親和性(μM) の値とは何ですか？

追加の計算過程なしで、直接バイオ実験に適用可能です

利用可能なリガンド数

Ligand Library

Enamine	mcule	TargetMol
最大で380億 (30以上のカテゴリー)	± 40,827,022 ↑	± 4,950,045 ↑

AIによるインシリコスクリーニング、ADME-Tox予測、リード最適化の統合

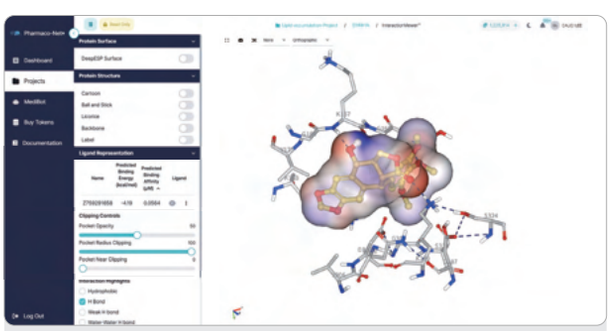
1 AIベースのインシリコスクリーニング

- Small MoleculesおよびPeptidesの Binding Affinity(μM) を予測
- 購入可能な化合物ライブラリと連携

2 Lead Optimization

- Chemical Editorベースの構造最適化
- Binding EnergyおよびAffinityの改善戦略を提示

InteractionViewer



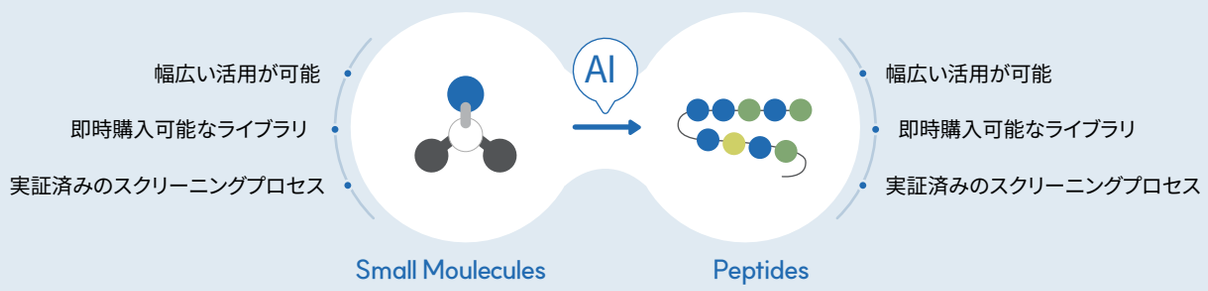
- ターゲットタンパク質とリガンド間の相互作用を可視化
- AIモデルに基づいてリガンドのESPを確認

ADMET

- マルチタスクAIモデルを活用し 88種類のADMET特性を一度に予測可能

AIベースのペプチドディスカバリー 結合親和性(Binding Affinity)まで予測可能

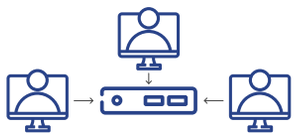
AIが提案し、ドッキング解析で検証された候補物質を **μM単位の結合親和性で** 確認可能



Pharmaco-Net® 利用方法:トークン制度

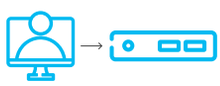
● サービス利用サーバーの種類・プラン紹介

共有サーバー



- 1台のサーバーを複数ユーザーで共同利用
- 1万件以下の利用に適しています
  (FDA承認ライブラリ)
- ユーザー直接利用方式

カスタム専用サーバー



- 1台のサーバーを単独で利用
- 20万件以上の化学候補物質に対応
  (ZINCまたはカスタムライブラリ)
- マイルストーン方式

料金

1ドル = 5トークン

平均使用トークン量 T 100,000 トークン

※モジュールごとの分析機能に応じて、必要なトークン数が異なります。

料金

見積もり依頼

低い初期デポジット/手数料

タンパク質構造に関する専門家による解析および結果報告

B2P–AIが切り拓く製薬の新たなパラダイム

● 共同研究の機会

専門知識の融合 + **資源の共有** + **研究効率の向上とコスト削減**

多様な分野の知識を結集し、洞察力を強化

研究機器やデータを共有することで効率性を最大化

データやインフラを共同活用し、個別研究に比べてコストと時間を削減

進行中のプロジェクト				
	がん	感染症	家畜	化粧品
	膵臓がん	COVID-19	メタン削減飼料	化粧品開発

主要指標 (2026年時点)				
	登録特許数	新薬探索プロジェクト	搭載モデル数・機能数	搭載モデルの精度
	合計13件(韓国9件)	57件	合計55件	81~97%

How To Use

わずか数クリックで高品質な結果を取得!

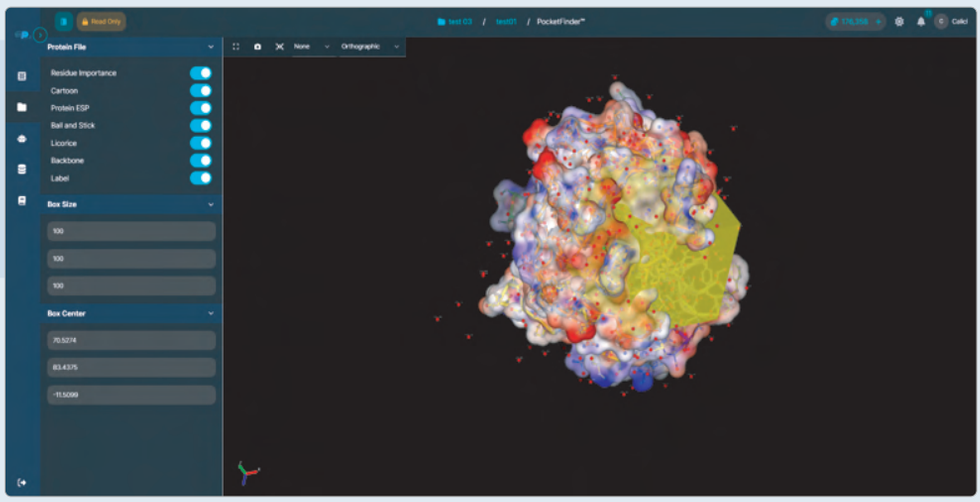
1 「アップロード」をクリック

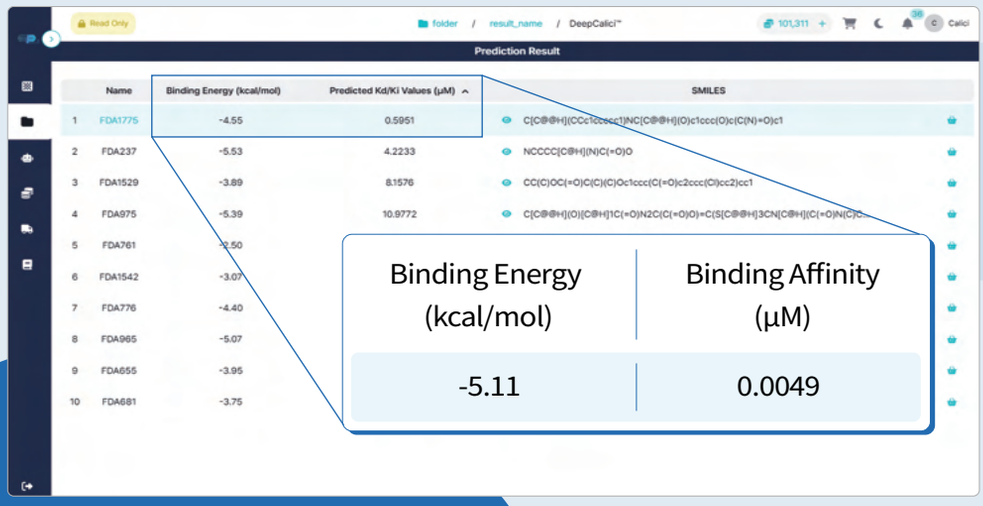
- タンパク質構造をアップロードします。
  (pdbファイル、fastaファイル、またはPDBコード)

2 「実行」をクリック

- モジュールを実行すると、以下の結果が得られます。

最適なドッキング
領域設定





ドッキングサイト
(Kcal/mol・μM)
の値

詳細な資料や方法については、以下のリンクからご確認ください。

pharmaco-net.org

https://www.youtube.com/@calici-pharmaco-net

CALICI

USE CASES

1. がん | 膵臓がんなど。
2. 代謝性疾患 | イオンチャネルタンパク質 など。
3. 中枢神経系（CNS）| アルツハイマー病 など。
4. 感染症 | パンデミック関連ウイルスタンパク質 など。
5. 動物疾患 | 細菌タンパク質 など。
6. 昆虫産業 | ウイルスタンパク質 など。
7. 化粧品産業 | 老化関連酵素タンパク質 など。

Valued Clients

アメリカ

HARVARD UNIVERSITY
MAYO CLINIC
Stanford University
RUTGERS
THE UNIVERSITY OF TEXAS MD Anderson Cancer Center
HOUSTON Methodist LEADING MEDICINE
UTHealth The University of Texas Health Science Center at Houston
BCM Baylor College of Medicine
THE OHIO STATE UNIVERSITY
UNIVERSITY OF HOUSTON
COLUMBIA UNIVERSITY IN THE CITY OF NEW YORK
Mizzou University of Missouri

日本

愛媛大学 EHIME UNIVERSITY
北里大学 KITASATO UNIVERSITY
YOKOHAMA CITY UNIVERSITY
CFS Cellfree Sciences
NIID 国立感染症研究所 NATIONAL INSTITUTE OF INFECTIOUS DISEASES

韓国

LigaChem
Osteogenic Core Technologies
inVIRUStech
KT&G
MarkHerz Global Gene-therapy CDMO
한국생명공학연구원 Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology
KRICT 한국화학연구원
KMEDIhub 대구경북첨단의료산업진흥재단
CUREVERSE
Value Creating University POSTECH POHANG UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
KIT 국가독성과학연구소 Korea Institute of Toxicology
국립암센터 NATIONAL CANCER CENTER
서울대학교 SEOUL NATIONAL UNIVERSITY
CAU CHUNG-ANG UNIVERSITY
경북대학교 KYUNGPOOK NATIONAL UNIVERSITY
충남대학교 Chungnam National University
고려대학교 KOREA UNIVERSITY
한양대학교 HANYANG UNIVERSITY
경상국립대학교 GYEONGSANG NATIONAL UNIVERSITY
한림대학교 HALLYM UNIVERSITY
영남대학교 Yeungnam University
전북대학교 JEONBUK NATIONAL UNIVERSITY
가천대학교 Gachon University
제주대학교 JEJU NATIONAL UNIVERSITY
전남대학교 CHONNAM NATIONAL UNIVERSITY

ご不明点がございましたら、お気軽にお問い合わせください。

本社（韓国）	301, 81 Gungdong-ro 2beon-gil, Yuseong-gu, Daejeon 34138	pharmaco-net.org	
企業附設研究所	A415, Techno 4-ro 17, Yuseong-gu, Daejeon 34013		
海外拠点（米国）	3003 N First St, San Jose, CA 95134 | 1 Broadway, Cambridge, MA 02142, US		
E-mail	info@calici.co	Company	www.calici.co

Empowering Discovery for Life

CALICI E | info@calici.co H | www.calici.co T | +82-42-714-3419

本社 (韓国)

- 301, 81 Gungdong-ro 2beon-gil, Yuseong-gu, Daejeon 34138
- A415, Techno 4-ro 17, Yuseong-gu, Daejeon 34013

海外拠点 (米国)

- 3003 N First St, San Jose, CA 95134
- 1 Broadway, Cambridge, MA 02142

Pharmaco-Net®