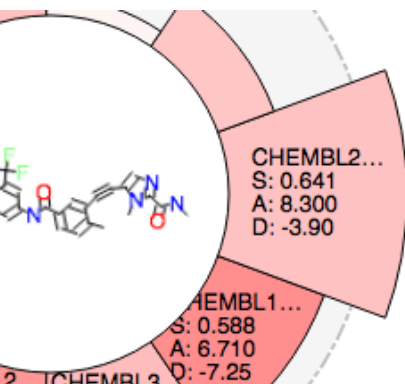




「タンパク質の視点」による 新たな分子の開発とデザイン

Cresset (クレセット) とは？

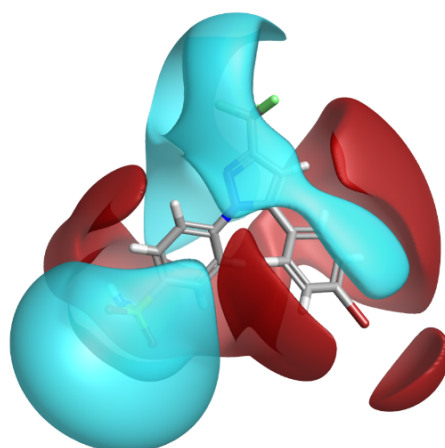
英国の計算化学関連企業です。分子間相互作用にフォーカスした詳細な計算モデルによる低分子のデザインと各研究ニーズに最適されたソフトウェアは、創薬のみならず化学・農薬・香料・香水等の分野にも採用されています。



XED(eXtended Electron Distribution)とは？

CressetのコアテクノロジーであるXEDは、化合物の3次元静電ポテンシャルが、どのように標的に作用するのかを精密かつ短時間で計算することができます。この技術により、構造活性相関の合理的な解釈が可能になります。

**無料でのオンサイトデモ
& 講習会受付中！**



スキaffォールド
ホッピング

アクティビティ
クリフ解析

バーチャル
スクリーニング

3D-QSAR
予測モデル

- ❖ 計算化学者だけでなく合成化学者やメディシナルケミストにも使いやすい新しい分子設計ツールです。
- ❖ 「ターゲット情報の有無」に関わらず、生物活性をもつ「新規」かつ「多様な」化合物構造のデザインを可能にします。
- ❖ 「アクティビティクリフ（活性の絶壁）」の可視化によるSAR（構造活性相関）の合理的解釈を支援いたします。
- ❖ 簡単操作で、且つ、数分から数時間での結果提供により、合成実験との連携が可能になります。

ランチョンセミナー
Cresset社ソフトウェア &
ソリューションのご紹介

27日(木) 3日目 12:00-13:00
タワーホール船堀4階研修室

プログラム

- | | |
|------------------|---|
| 12:00~12:35 | 「Cressetソフトウェア&テクノロジーのご紹介」 |
| Giovanna Tedesco | Cresset, Cambridgeshire, United Kingdom |
| 12:35~12:50 | 「Cressetの導入と創薬への活用とサポートについて」 |
| 池田 和由 | 株式会社レベルファイブ |

A picture tells a thousand words – using activity cliffs maps to understand SAR.

Giovanna Tedesco, Tim Cheeseright, Susana Tomasio, Paolo Tosco, Mark Mackey

ABSTRACT:

Summarizing and understanding the Structure-Activity Relationships (SAR) for a series of compounds can be a difficult and time-consuming exercise. A method capable of quickly identifying and deciphering the most relevant features underlying the biological activity of small and large data sets, even in those cases where limited structural information is available about ligand-target interaction, would be of invaluable help during the early stages of drug discovery projects.

Activity Atlas¹ is a novel, qualitative method available in Forge², Cresset's powerful workbench for ligand design and SAR analysis. Activity Atlas is a probabilistic method for analyzing the SAR of a set of aligned compounds as a function of their 3D electrostatic, hydrophobic and shape properties, calculated with Cresset's proprietary XED force field³. The method uses a Bayesian approach to take a global view of the data in a qualitative manner, taking into account the probability that a molecule is correctly aligned. Results are displayed using Forge visualization capabilities as highly visual 3D maps that inform the design and optimization of new compounds.

In this presentation, Activity Atlas and Activity Miner⁴, a module of Forge enabling rapid navigation of activity cliffs, will be used to analyze the SAR of a few example data sets of different size and complexity taken from the literature.

Activity Atlas activity cliffs summary maps will be used to get an overview of the SAR landscape, focusing on the prevalent SAR signals. Activity Miner will be used to drill down into the Activity Atlas maps to understand subtle molecule-to-molecule structure-activity changes and identify potential outliers.

The information derived from this analysis can be of invaluable help for drug discovery projects to inform design decisions and help prioritize molecules for synthesis.

1. <http://www.cresset-group.com/activity-atlas/>
2. <http://www.cresset-group.com/products/forge/>
3. J. G. Vinter, Journal of Computer Aided Molecular Design 8 (1994) 653-668
4. <http://www.cresset-group.com/products/activityminer/>