

創薬を成功に導くためのソフトウェア

StarDrop のご紹介



Matthew Segall PhD
CEO and Company Director, Optibrium, Ltd.



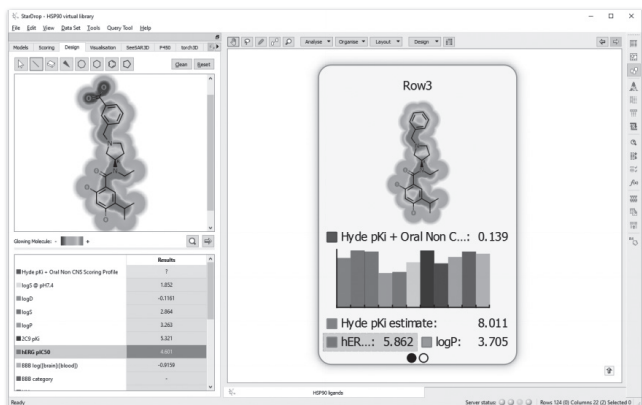
田島 澄恵
株式会社ヒューリンクス プロダクト事業部

- 日時：2017年10月4日 12:00-13:30
- 会場：タワーホール船堀 4階 研修室

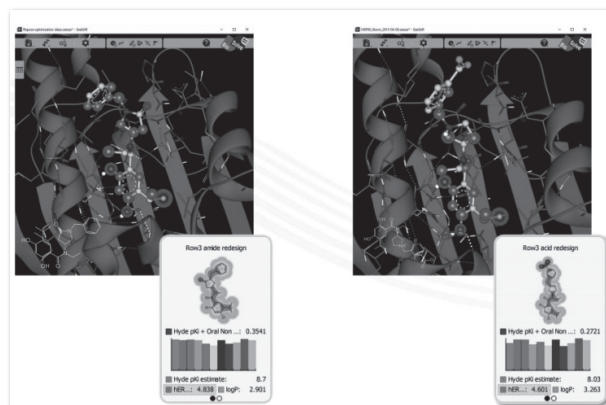
StarDrop は、創薬プロセスにおいて根拠に基づいた決断を導き、プロジェクトチームを支援し、優れた化合物を素早く特定するためのソフトウェアスイートです。実験誤差や物性予測誤差を加味しながら化合物を評価し、最適なバランスを持つ化合物を効率的に見出します。

ランチョンセミナー冒頭では、StarDrop の基本コンセプトであるマルチパラメータスコアリングおよび5つの製品特徴 (Card View, Probabilistic Scoring: 確率的な評価, Chemical Space, Glowing Molecule, Interactive Visualization) について解説します。続いて、開発元 CEO である Segall 氏より、「Guided Multi-parameter Optimisation of 2D and 3D SAR」と題して、StarDrop 独自のマルチパラメータスコアリング評価による戦略的なアプローチを、ライブデモンストレーションを交えてご紹介いたします。StarDrop の2D 構造情報に基づいた解析 (Glowing Molecule、ADME QSAR、Activity Cliff 解析、Matched Molecular Pair 解析) と、SeeSAR モジュールによる 3D 構造に基づいた解析機能を、シームレスに融合させる利点を実感していただける内容となっております。また、主要なドッキングシミュレーションとの連携インターフェイスである Pose Generation Interface についてもご紹介いたします。

ご参加いただいた皆様には、StarDrop のトライアル版 (2週間のデモライセンス) およびセミナーで利用する Worked Example ファイルを提供させていただく予定です。この機会に、是非、StarDrop の魅力に触れてみてください。



▲ Glowing Molecule / Card View / マルチパラメータスコアリング



▲ SeeSAR モジュール / Card View / マルチパラメータスコアリング



分子設計から ADMET までをカバーするビジュアルなソフトウェア

StarDrop™

スタードロップ 英語版

創薬における決断を導き、プロジェクトチームを助け、優れた化合物を早く特定します

StarDrop は最適なバランスを持つ効果的な薬品を素早く提供することを支援するソフトウェアスイートです。多様性を持つ優れた化合物を素早く抽出することにより、効果的なリード化合物の探索にかかる時間を劇的に減少させ、それらを成功の可能性の高い候補薬物に変換します。

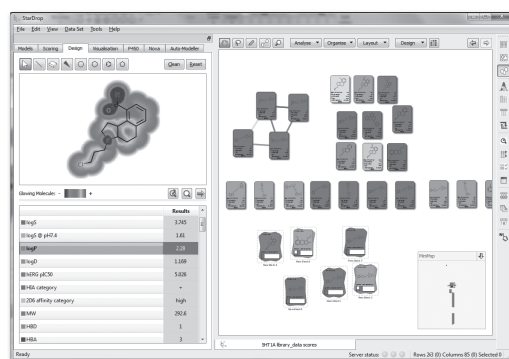


Card View

– 化合物データセットの新しい表示方法 –

○結果をだれもが直感的に解釈することが可能に

Card View は、化合物とそれらの関係性を直感的にわかりやすく表す画期的で新しい化合物データセットの表示方法です。構造やさまざまな物性値を集約したカードは、自由に動かしたり、結びつけてグループを作成することができ、既存のスプレッドシートよりも最適な構造や重要な構造活性相関 (SAR) を見つけやすくします。



- StarDrop をフロントエンドとして、化合物データベースのアクセスを可能にするデータベースの構築、ワークフローシステムとの連携等の相談も受け付けております。



開発元：Optibrium, Ltd.



HULINKS

株式会社ヒューリンクス

TEL: 03-5642-8380

FAX: 03-5642-8381

お問い合わせ: soft.sales@hulinks.co.jp

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

※記載された会社名およびロゴ、製品名などは各社の商標または登録商標です。