

キシダ化学株式会社 企業セミナー要旨

Title: MCE-18 - a novel molecular descriptor to reveal current medicinal chemistry trends in Big Pharma.

Author:

Dr. Bogdan Zagribelny, Senior Medicinal Chemistry at ChemDiv.Inc.

Dr. Yan Ivanenkov, Head of CADD at ChemDiv.Inc.

Summary:

The paradigm of “drug-like-ness” dramatically altered the behavior of the medicinal chemistry community for a long time. In recent years, scientists have empirically found a significant increase in key properties of drugs that have moved structures closer to the periphery or the outside of the rule-of-five “cage”. Herein, we show that for the past decade, the number of molecules claimed in patent records by major pharmaceutical companies has dramatically decreased, which may lead to a “chemical singularity”. New compounds containing fragments with increased 3D complexity are generally larger, slightly more lipophilic, and more polar. A core difference between this study and recently published papers is that we consider the nature and quality of sp³-rich frameworks rather than sp³ count. We introduce the original descriptor MCE-18, which stands for medicinal chemistry evolution, 2018, and this measure can effectively score molecules by novelty in terms of their cumulative sp³ complexity.

ご存知ですか…？

キシダ化学の創薬支援事業

- ・キシダオリジナル
ビルディングブロック(K-BB)
- ・キシダオリジナルライブラリー(K-LB)
- ・合成化学(ライブラリー合成事業)
- ・非天然アミノ酸(合成研究・製造販売)

創薬支援商品

- ・海外サプライヤー代理店事業
⇒ライブラリー化合物
⇒ライフサイエンス商材
⇒海外CROへの委受託業務の仲介

商社事業

- ・化合物BANKシステム
(ケミカルバンク、ライブラリーバンク)
- ・化合物管理サポート(各種小分け、プレート作成)
- ・ラボ・サポート
(お客様研究所内で創薬支援)
- ・輸入代行、法規制チェック



創薬支援サービス

ChemDiv 新規トピック・トレンド2020



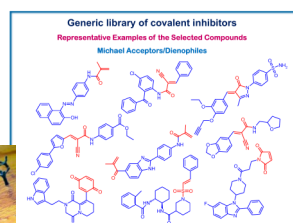
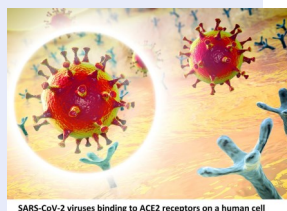
・ Focused & Targeted Libraryに新デザイン追加！

2020年度 新デザイン追加！

- *General Antiviral library *MCL1 library
- *Covalent inhibitors library *Ion Channels library *HDAC library
- *PTPN library *Lipid metabolism library *F atom library

☆コロナウイルス研究関連ライブラリー

- *PLpro library *3CLpro library *ACE2 library
- *Sting agonist library *Coronavirus library



・ Annotated Libraryが16品目に増加！

生物活性やターゲットに対する**実際の活性値付きライブラリー**です。

