

化合物デザイン支援ソリューション Cresset社製品

Cresset社製品は、世界の製薬企業トップ10のうち8社に採用されており、製薬業界以外にも、香料や農薬、ファインケミカル等、様々な化学分野の研究開発にご利用いただけます。



Cresset社（イギリス）は、計算化学者や創薬化学者による化合物デザインを支援する計算化学ソフトウェアを提供します。

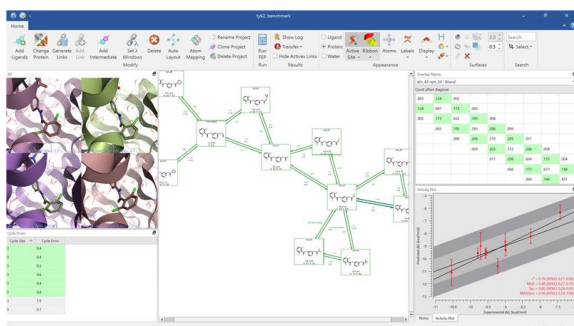


**リガンドベースおよび構造ベースのアプローチを統合した
ドラッグデザインのための包括的な分子設計ソフトウェア**

Flare™は、豊富なドラッグデザイン機能により、効率的かつ効果的な新規化合物の設計を実現します。

各種シミュレーションの実行

分子動力学計算や量子力学計算、ドッキング、Water analysis、リガンド結合親和性の予測（FEP計算）といった複雑な計算を簡単にセットアップ・実行できます。



ファーマコフォアの構築

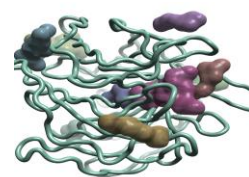
タンパク質の結晶構造がない場合も、数個の活性リガンドから生理活性コンフォメーションを生成し、**ファーマコフォア**を構築できます。**リガンドアライメント**により、共通の活性を持つリガンドを整理させることで、信頼性の高い結果が得られます。

SARへのアプローチ

QSARモデルを構築することで、合成すべき分子の優先順位付けが可能です。また、**Activity Atlas™**により、特徴分布を空間1つにまとめ、SARの主要素を可視化できます。**Activity Miner™**は、重要な活性・選択性の変化を強調して表示します。

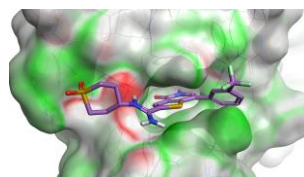
ポケットの検出と解析

薬物結合部位や水結合部位、チャネル等、タンパク質中の**ポケットの検出と解析**が可能です。分子動力学計算の結果に対してポケットの探索を行い、ポケットの開閉頻度を調べることもできます。

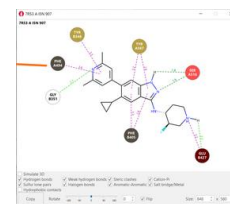


視覚的な情報提供

タンパク質とリガンドの静電的な相性を色で表現する機能（**Electrostatic Complementarity™**）や、相互作用のネットワークを2Dで要約する機能（**2D Interaction Maps**）等により、視覚的に理解しやすい情報を提供します。



静電的に有利(緑)・不利(赤)な部位



ライブラリの生成

Library Enumerationは、使いやすいインターフェース上で50以上の一般的な合成化学反応からライブラリを作成できます。

作業のカスタマイズと自動化

Python APIを使用すると、ワークフローの作成や作業の自動化、PythonモジュールによるFlareの拡張等が可能になります。

化合物デザイン支援ソリューション Cresset社製品

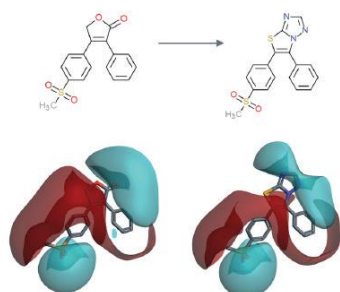
分子の相互作用を精度良く再現する独自のXED力場をはじめとした、豊富な計算科学的アプローチを直感的な操作で利用でき、結果を視覚的に分かりやすい形で提供します。



Spark™は、Scaffold hoppingおよびR-group置換により、初期構造から多様で新規性の高いBioisostereを素早く生成します。

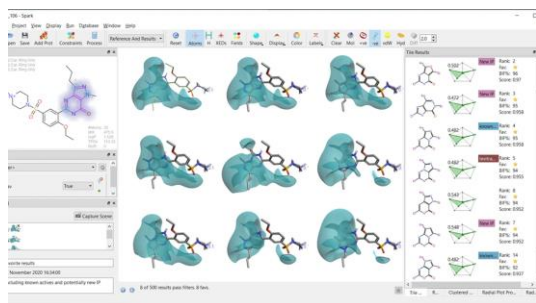
Scaffold hoppingおよびR-group置換

Sparkには、690万以上のフラグメントデータや市販の試薬データ等、豊富なデータベースが予め用意されています。これらのデータベースを使用して多様なbioisostereを生成します。



最適なリード化合物の選択

プロファイリングやスコアリングにより、出力された候補分子からプロジェクトに必要な特性を備えた分子を見つけられます。



複雑な分子操作の簡略化

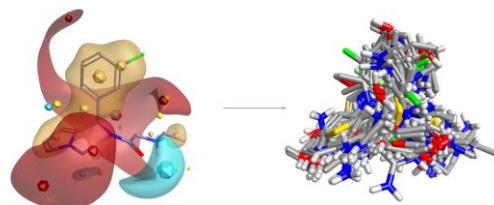
フラグメントの連結、リガンドの成長、マクロ環化、結晶水置換といった複雑な分子操作をどなたでも簡単に利用できます。



Blaze™は、大規模な化合物コレクションから検索し、既知リガンドと類似した性質を持つリードライクな化合物を高速に発見します。

静電特性や形状特性の考慮

既知リガンドを入力すると、静電特性や形状特性を考慮して、大規模な化合物コレクションから類似した性質を持つ化合物を検索します。既知のA2Cアドレナリン作動薬をクエリーとした検索では、多くの既知活性分子を含む化合物が見つかりました。

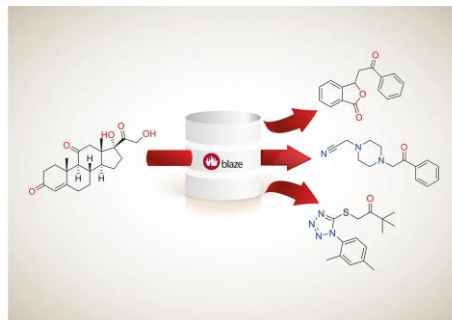


スクリーニングの効率向上

ウェットスクリーニングと並行してBlazeを活用することで、効率の良いスクリーニングを実現します。Blazeは、1000万構造のバーチャルスクリーニングを数時間で実行します。

高いヒット率と多様性

何百ものプロジェクトで利用されたヒット率は30%に達し、お客様からはヒットの多様性を評価いただいています。



富士通株式会社

Digital Solution事業本部 ラボラトリーイノベーション事業部
<https://www.fujitsu.com/jp/cresset/>

お問い合わせ先

富士通コンタクトライン（総合窓口）0120-933-200
受付時間 9時～17時30分（土曜・日曜・当社指定の休業日を除く）