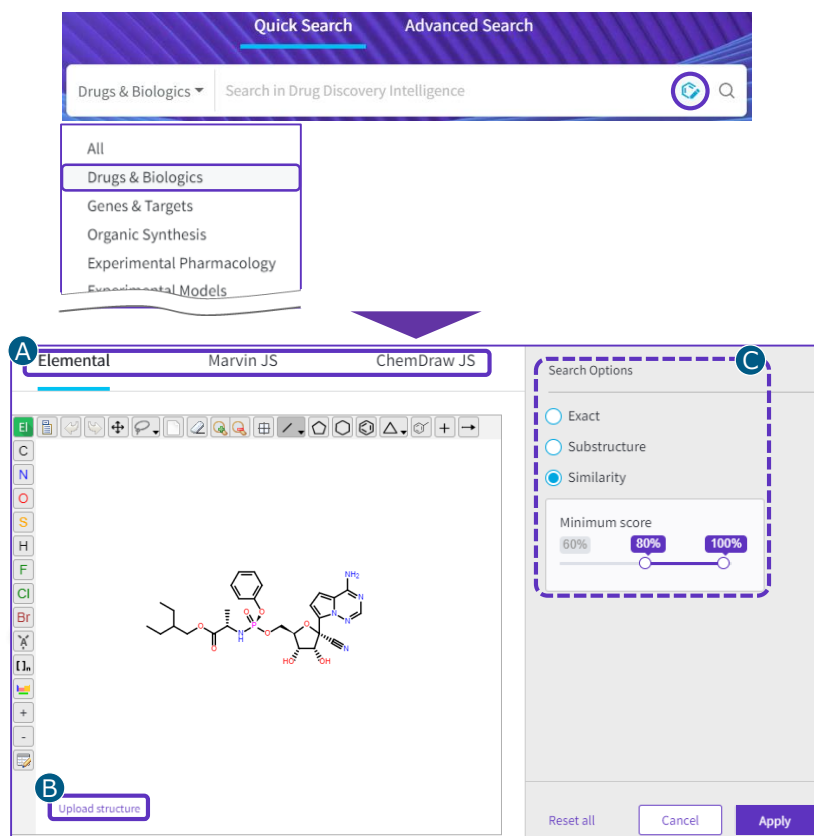


化学構造情報から類似の化合物の情報を調査する

CDDIでは、化合物の構造情報を用いて類似化合物の情報を得ることができます。例として、Remdesivirと類似の構造を持つ化合物の開発情報を調査します。



<Quick Searchを使う場合>

- ①Quick Searchで検索窓の左側から▼をクリックして、【Drugs & Biologics】を選択します。
- ②検索窓の右側の アイコンをクリックすると、構造入力画面が立ち上がります。

③構造を作図、もしくはアップロードします。

作図：Elemental、Marvin JS、ChemDraw JSの3種類から選べます(Ⓐ)。特別な初期設定は不要です。

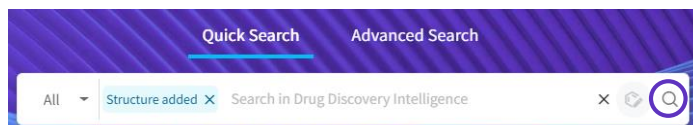
アップロード：目的の構造をmolファイルでお持ちの場合、左下の【Upload structure】(Ⓑ)から該当するmolファイルを読み込ませることができます。

④検索様式を右側から選び(Ⓒ)、右下の【Apply】をクリックします。

- Exact:完全一致
- Substructure:部分一致。分子量範囲を指定することも可能
- Similarity:類似度（60%~100%の範囲で指定）

⑤検索ボックスに Structure added × と表示されます。さらに検索語を追加することもできます。Q をクリックして検索を実行します。

(次ページへ)



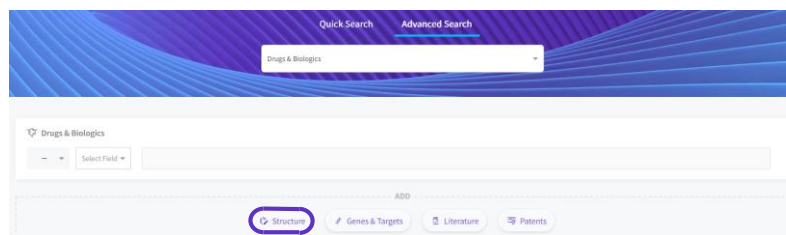
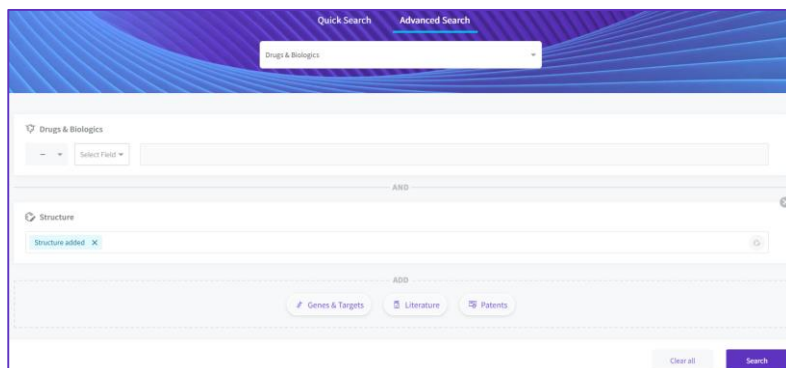
<Advanced Searchを使う場合>

①Knowledge Areaを1つ選択し（ここでは【Drugs & Biologics】を選択）、Select Fieldの下に表示される「Structure」をクリックします。構造入力画面が立ち上がります。

②上記のQuick Search同様に構造式の作図やアップロード、検索様式の選択を行い、【Apply】をクリックします。

③[Structure]の検索ボックスに Structure added × と表示されます。必要ならさらにクエリを追加して、右下の【Search】で検索を実行します。

(次ページへ)

Product List

Development Status

Milestones

Overview

▼ Apply Filters

Sorted by relevance

Showing 1-20 of 39 Drugs & Biologics records for "Structure Search"

Entry Number	Similarity	Highest Phase	Code Name	Generic Name	Brand Name	Product Category	Therapeutic Group	Mechanism of Action	Organization
1096540	100.0 %	Biological Testing				Deuterated Compounds Nucleosides Prodrugs	Anti-Coronavirus (CoV) Drugs	RNA-Directed RNA Polymerase (RdRp) (Ebola Virus) Inhibitors RNA-Directed RNA Polymerase (RdRp) (MERS-CoV) Inhibitors RNA-Directed RNA Polymerase (RdRp) (SARS)	Chengdu Aqi Biopharma Technology (Originator)
1013760	97.47 %	Preclinical	GS-2			Nucleosides Prodrugs	Anti-Hepatitis C Virus Drugs	RNA-Directed RNA Polymerase (RdRp) (NS5B) (HCV) Inhibitors Viral Replication Inhibitors	Gilead (Originator)
755888	97.47 %	Biological Testing				Nucleosides Prodrugs	Anti-Hepatitis C Virus Drugs	RNA-Directed RNA Polymerase (RdRp) (NS5B) (HCV) Inhibitors Viral Replication	Gilead (Originator)

<Quick/Advanced Search共通>

検索結果のリストが表示されます。

この例では、Remdesivirの構造に対して Similarity80~100%の薬剤を検索しています。

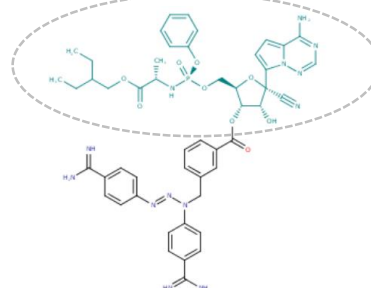
検索様式を「Similarity」で検索した場合、リストにはSimilarityが高い順に表示されます。

Similarityはリスト中の[Similarity]列に青いバーで示されます。

例) 80.18 %

検索様式を「Substructure」で検索した場合、クエリに用いた化学構造と一致した構造部分が色付けされた状態で結果のリストに表示されます。

例)



✓ 気になる薬剤の化学構造をエクスポート

CDDIでは、低分子化合物の Drugs&Biologicsレコード (【Product】タブページ) の[Product Properties]において、化学構造が示されます。

化学構造の左上の (...) をクリックすると、化学構造を【Molfile】形式もしくは【SMILES】形式でエクスポートすることが可能です。

気になる低分子化合物の構造をエクスポートしておけば、化学構造検索の際に、uploadすれば済むので便利です。

✓ Excelへの化学構造エクスポートについて

CDDIでは、Drugs&Biologics、PatentsなどのレコードリストをExcelにエクスポートする際、エクスポート項目に化学構造 (Structure)を含めることが可能です。

その際、化合物イメージはExcelのセルに固定されるようになりました。

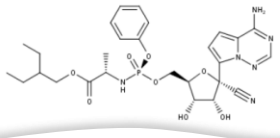
(Exportについて : See P.3)

Remdesivir

Product Development Status Milestones

Product Properties

...



Code Name

GS-5734 3QK137EEHE RDV

Generic Name

Remdesivir

Brand Name

Veklury

Molecular Formula

C27H35N6O8P

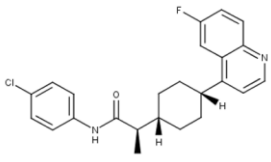
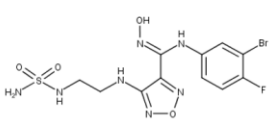
Molecular Weight

602.576

Export Molfile

Export SMILES

Remdesivir.mol

A	B	C	D	E
Cortellis Drug Discovery Intelligence - Drugs & Biologics Search Results				
Entry Number	Structure	Code Name	Brand Name	Generic Name
910778		0A7729F42K BMS-986205 F-001287 ONO-7701		Linrodostat
686486		71596A9R13 INCB-024360 INCB-24360		Epacadostat

© 2019 Clarivate Analytics

10