Cortellis Drug Discovery Intelligence トレーニング ショートセミナー

創薬ターゲット・遺伝子の役割と疾患情報の効率的な調査方法

| Clarivate Life Sciences & Healthcare | 2023/9/21 14:00-14:30

© 2023 Clarivate

アジェンダ

- Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)とは?

- 活用事例
  1. 創薬ターゲットに関する競合情報を確認
  2-1. 創薬ターゲットと疾患の関連性を整理
  2-2. Pathway MAPからターゲットの優先順位付けの参考情報を取得
  3. Disease Briefingsを活用し研究テーマの疾患情報を再整理

- 基本操作の補足

- サポートのご案内

Clarivate™

© 2023 Clarivate

Cortellis Drug Discovery Intelligenceとは？

※データベースの詳細解説はこちら

© 2023 Clarivate

Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)とは？

生理活性物質とその**関連する情報**の**統合データベース**

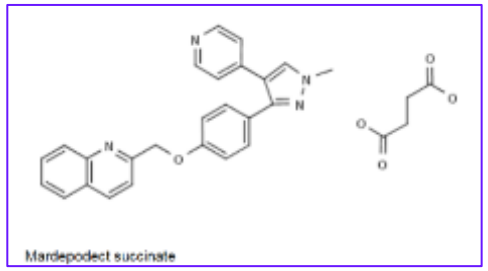
Clarivate™

© 2023 Clarivate

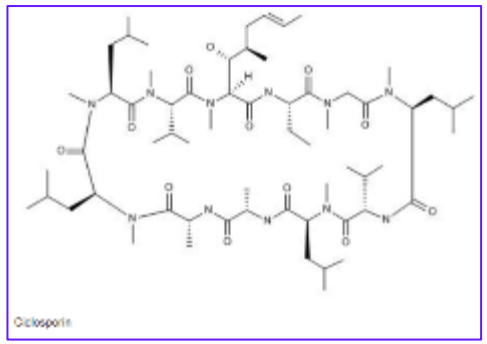
生理活性物質とその関連する情報の統合データベース

世界中の製薬企業や研究機関等で現在、及び過去に研究開発されている何らかの活性を有する物質

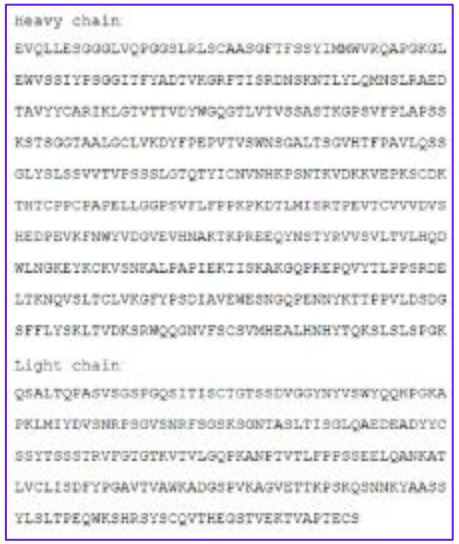
低分子化合物



ペプチド



抗体



細胞

Kymriah

Human autologous **T cells** transduced with a replication-deficient lentiviral vector comprising the CTL019 transgene encoding a second-generation chimeric antigen receptor (CAR) consisting of a single chain variable fragment (scFv) targeting CD19 fused to 4-1BB costimulatory domain and CD3 zeta signaling domain; under the control of the EF-1 alpha promoter

核酸

TCACTTTCATAATGCTGG

様々な**Modality**

特許や論文で公知～臨床開発、上市まで開発段階を問いません。

Clarivate™

Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)とは？

生理活性物質

© 2023 Clarivate

生理活性物質とその**関連する情報**の統合データベース

Knowledge Area	件数	内容 (indexの例)
Drugs & Biologics	72.7万	生理活性物質：**医薬品名、構造、作用機序、対象疾患、開発段階、開発企業**等の情報を提供。約90%のレコードに化学構造式が存在。
Genes & Targets	50,300	遺伝子・ターゲット：遺伝子に関連した研究情報を**variant**や**study type**、**疾患**で分類すると共に、生理活性物質の**標的となるタンパク質**や**遺伝子**の情報を提供。
Organic Synthesis	32,600	合成経路：生理活性物質の**合成スキーム**と反応中間体/試薬情報を提供。
Experimental Pharmacology	352.0万	薬理実験：生理活性物質を用いたin vitro, in vivo**の実験**結果を**数値**で収載。
Experimental Models	232,000	動物モデル：薬理実験で使用する動物モデル(**種**, **遺伝子改変**, 等)に関する情報を提供。
Pharmacokinetics	162.0万	薬物動態：薬物動態の各種**パラメーター**を**数値**で収載。
Drug Metabolism	54,500	薬物の代謝情報（酵素、反応、代謝物など）を提供。
Drug-Drug Interactions	67,600	薬物（またはその代謝物）が別の薬物の薬物動態プロファイルに及ぼす影響に関する情報を提供。
Clinical Studies	508,000	臨床試験：臨床試験中・上市済薬剤の臨床試験レポートに関する情報を提供。
Organizations	51,700	開発機関：医薬品の研究開発を行っている企業/研究機関に関する情報を提供。
Literature	331.0万	文献：学術雑誌等の書誌事項とオリジナル文献へのリンクを提供。
Patents	61.3万	特許：特許の書誌事項を提供。明細書のPDFダウンロードが可能。
Disease Briefings	170	疾病の解説：患者数・疾患要因・予防方法・診断方法・治療方法に関する情報を提供。
Biomarkers	48,200	バイオマーカー：**role**や**validity**を付与したバイオマーカー情報を提供。(要追加契約)

生理活性物質に関連する情報は、14*の
Knowledge Areaに分類されています。

Clarivate™

Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)とは？

関連する情報エリア

As of late August 2023, 件数は概数
Biomarkersは追加でご契約が必要な
Optionモジュール

© 2023 Clarivate

生理活性物質とその**関連する情報**の統合データベース

主な情報源

- 国内外の特許庁（WO, US, EP, JP, CN, KR, IN)からの**特許情報**
- 1,500誌の**学術雑誌**
- 毎年400以上の科学や医薬の**学術会議**
- 製薬企業、バイオ技術系企業のプレスリリースや**会社情報**
- **規制当局**の規制文書 (FDA, EMA)

提供開始年

- 1970 年代 : [Organic Synthesis]
- 1988年（主に） : [Drugs & Biologics], [Patents], [Literature]
- 1998年 : [Experimental Pharmacology]
- 2000年 : [Pharmacokinetics/Metabolism], [Clinical Studies], [Disease Briefings], [Companies & Research Institutions]
- 2001年 : [Genomics]
- 2004年 : [Targets & Pathways]
- 2007年 : [Biomarkers]
- 2012年 : [Experimental Models]
- 2013年 : [Drug-Drug Interactions]

Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)とは？

データの収録と情報源

新着情報 ソース別収録ラグ

※目安になります。

- プレスリリース：発行日から2日
- 企業PR：平均3日
- Clinicaltrial.gov：2～3日
- 規制当局のウェブサイト：2日
- 学会： 25-55日
- 特許：特許当局により異なるが、2～20日
- 文献：引用の受領から25日

© 2023 Clarivate

50K+
ターゲット

3.3M+
文献

51K+
企業・機関

720K+
生理活性化合物

170
疾患レビュー

3.5M+
薬理データ

32K+
合成経路

創薬研究を加速する情報とアナリティクス

1.5M+
PKデー

590K+
特許

2.2M+
バイオマーカー＆
利用例

490K+
臨床試験

232K+
実験モデル

※数値は2023年4月時点の集計

将来医薬品となりうる生理活性物質を対象に収録し、医薬品開発に焦点を絞った情報収集・分析が可能

科学者による科学者のためのソリューションが、研究開発の意思決定を裏打ちし、開発後期での失敗を回避

生物学、化学、薬理学データを統合した単一のプラットフォームで、情報取得の時間を節約しユニークなインサイトを得る

超早期の段階から各医薬品の開発状況を俯瞰的に把握し、競合他社をいち早く特定

重要な研究開発データを活用して、迅速に開発の成否を判断し、医薬品を効率的に市場へ投入

Clarivate™

Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)とは？

生物学・化学・薬理学データの統合プラットフォーム

代表的活用シーン

- 新規ターゲット探索と評価
- バイオマーカー同定
- サイエンスに基づく競合分析
- リード化合物の最適化
- アッセイ方法特定

and more…

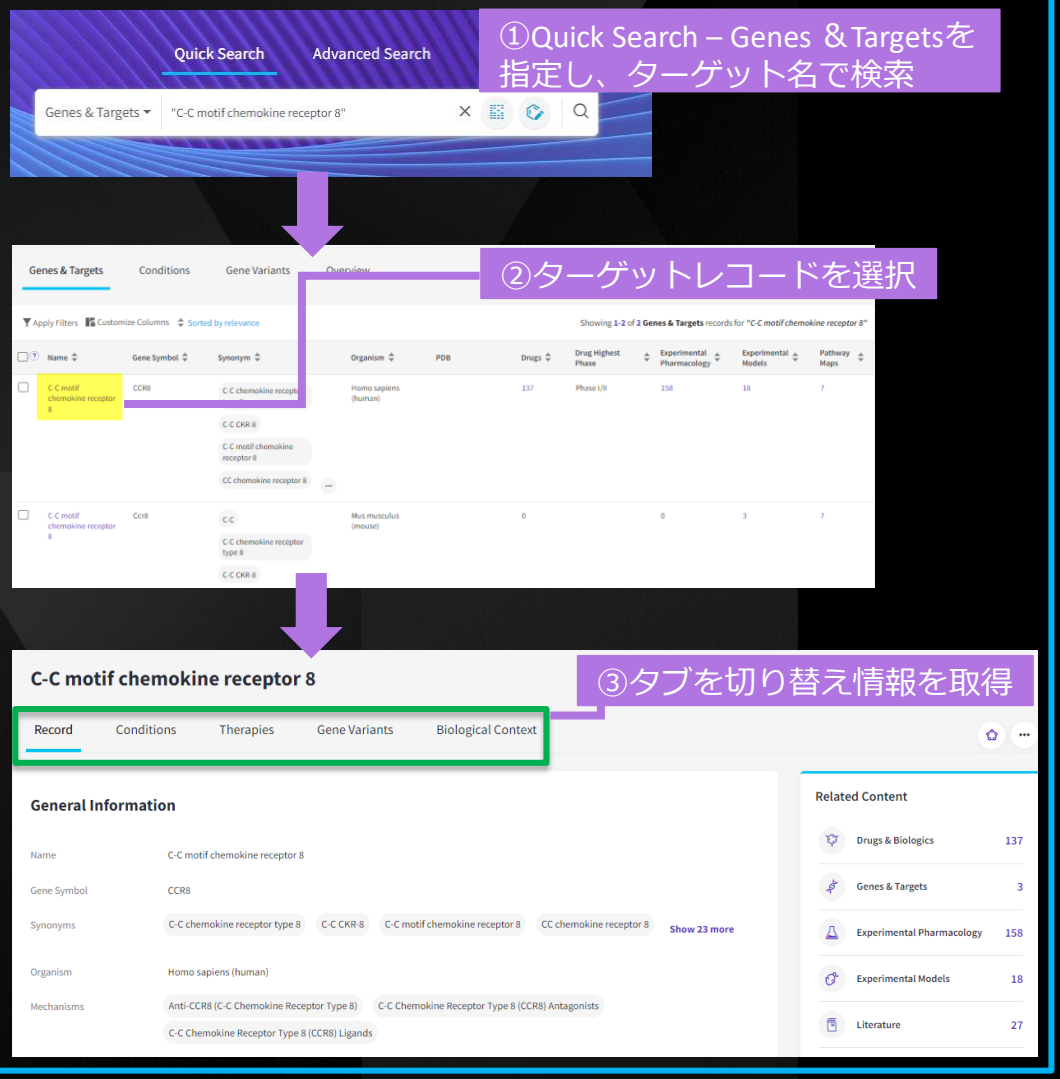
© 2023 Clarivate

活用事例

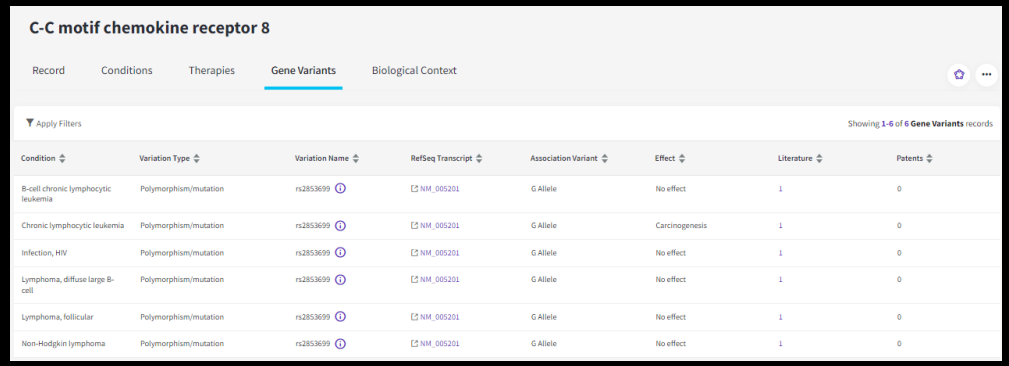
© 2023 Clarivate

創薬ターゲットに関する競合情報を確認

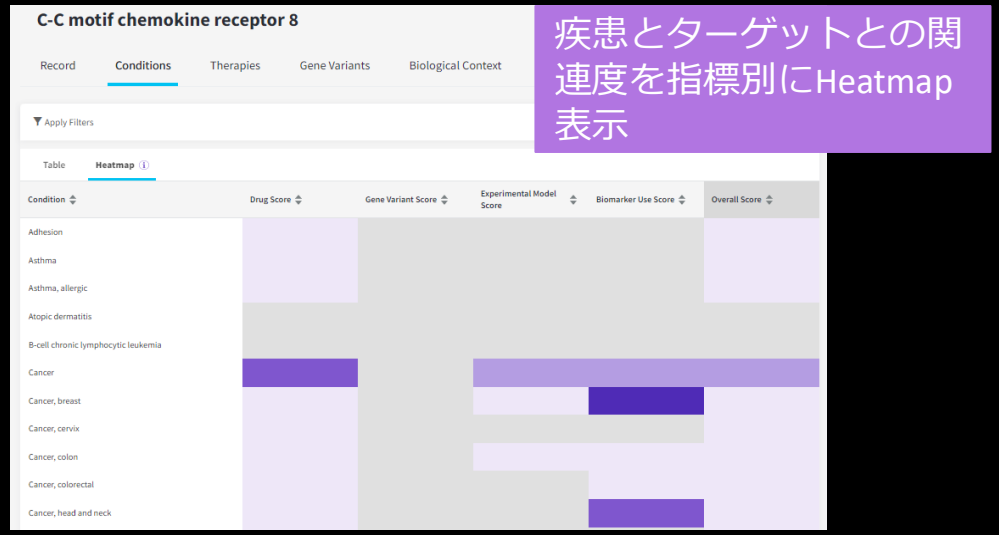
Quick Search - Genes ＆Targetsレコード



Gene Variantsタブ



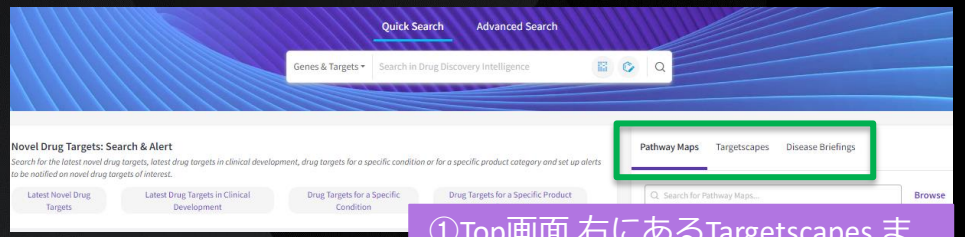
Conditionタブ



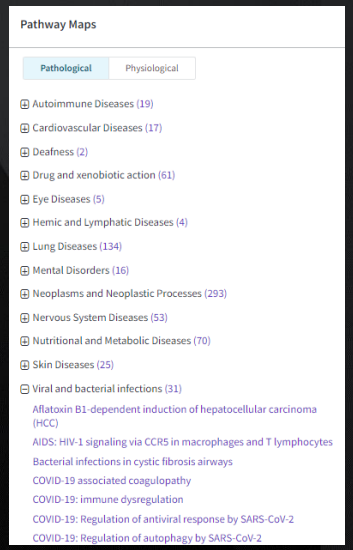
© 2023 Clarivate

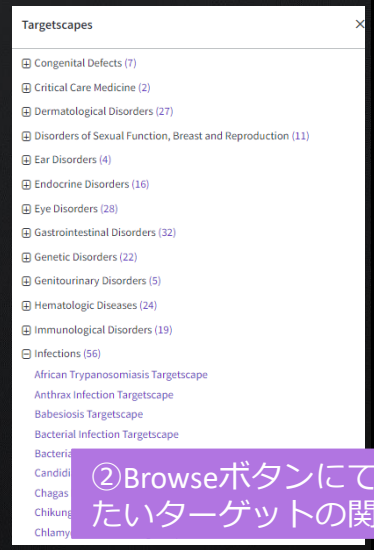
創薬ターゲットと疾患の関連性を整理
Pathway MAPからターゲットの優先順位付けの参考情報を取得

- Top Page –Targetscapes/Pathway Maps
- Quick search - Genes ＆Targets

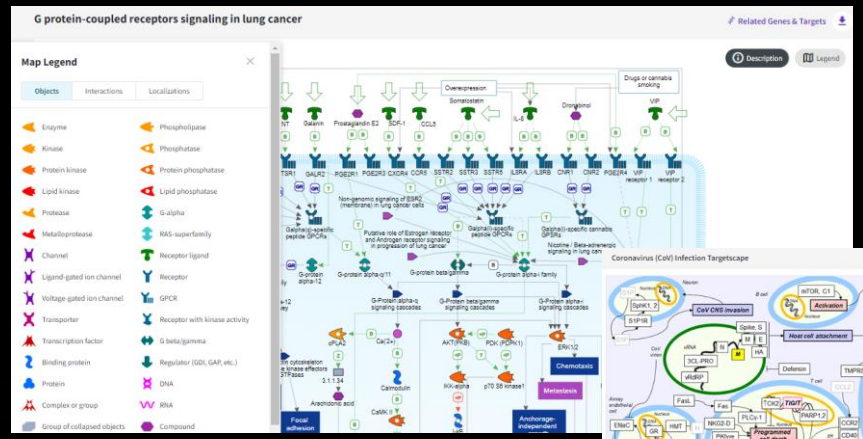


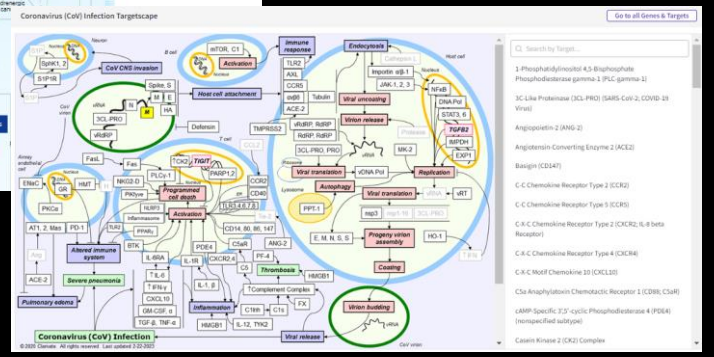
①Top画面 右にあるTargetscapes またはPatheway Mapsを選択





②Browseボタンにて、可視化したいターゲットの関連性を指定





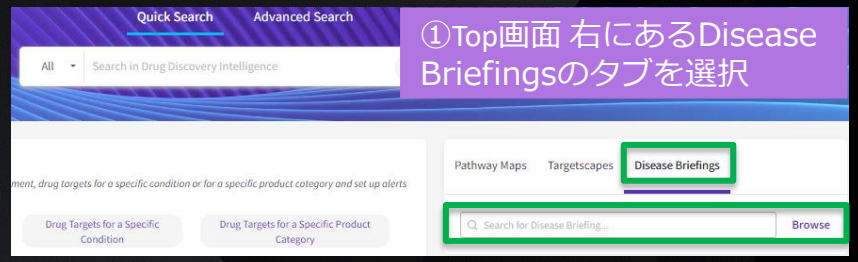
③ Target RecordからBiological Contextを選択して表示することも可能

Clarivate™

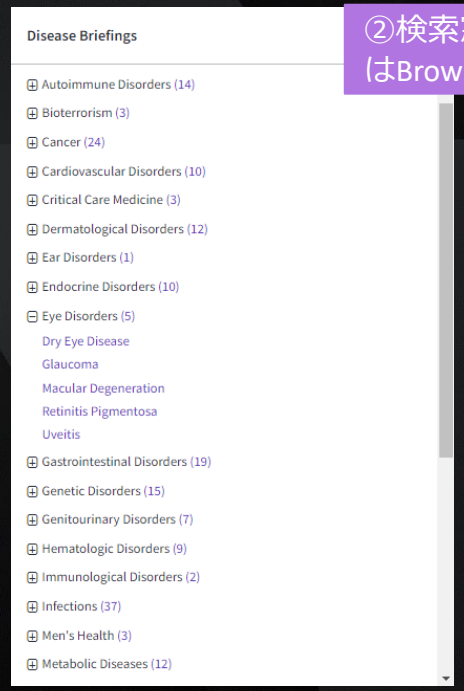
© 2023 Clarivate

Disease Briefingsを活用し研究テーマの疾患情報を再整理

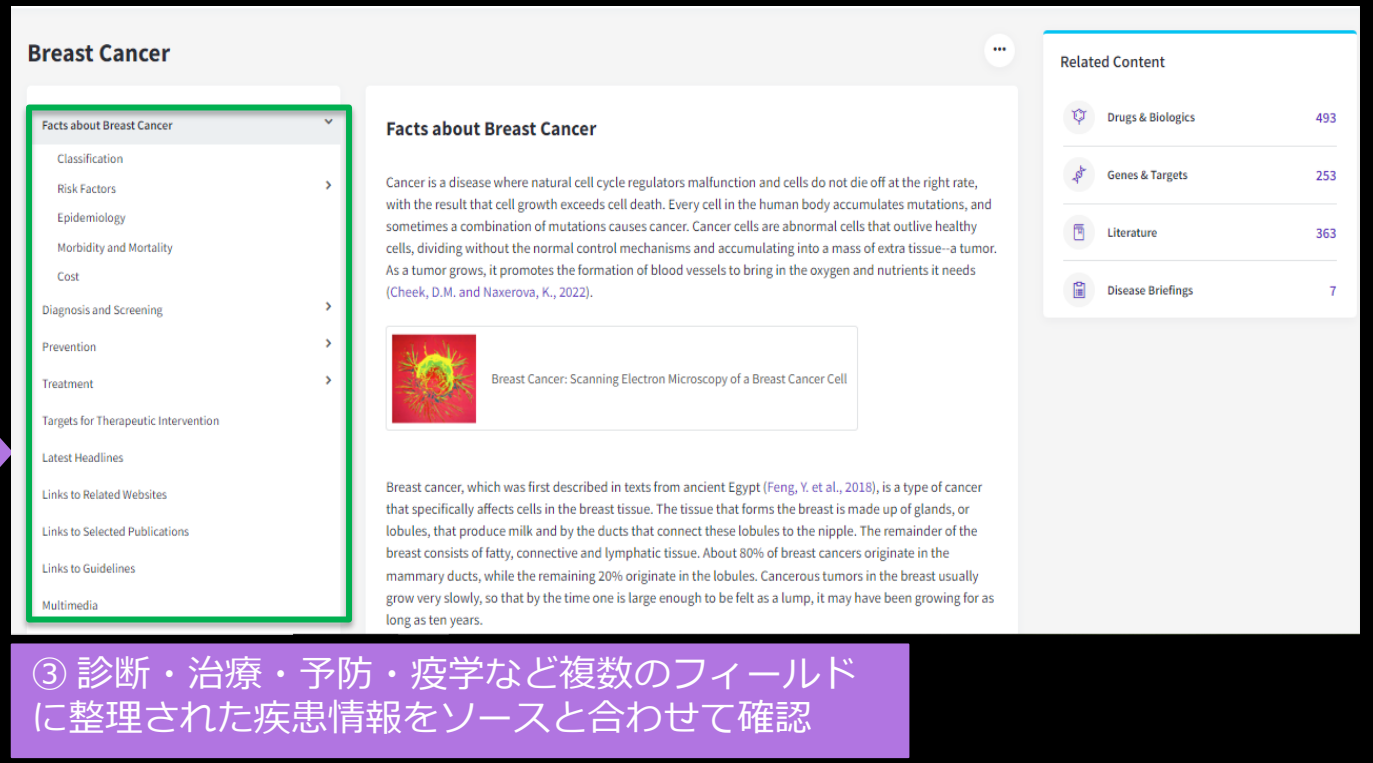
Top Page –Disease Briefings



①Top画面 右にあるDisease Briefingsのタブを選択



②検索窓に疾患名を入力、またはBrowseボタンから選択

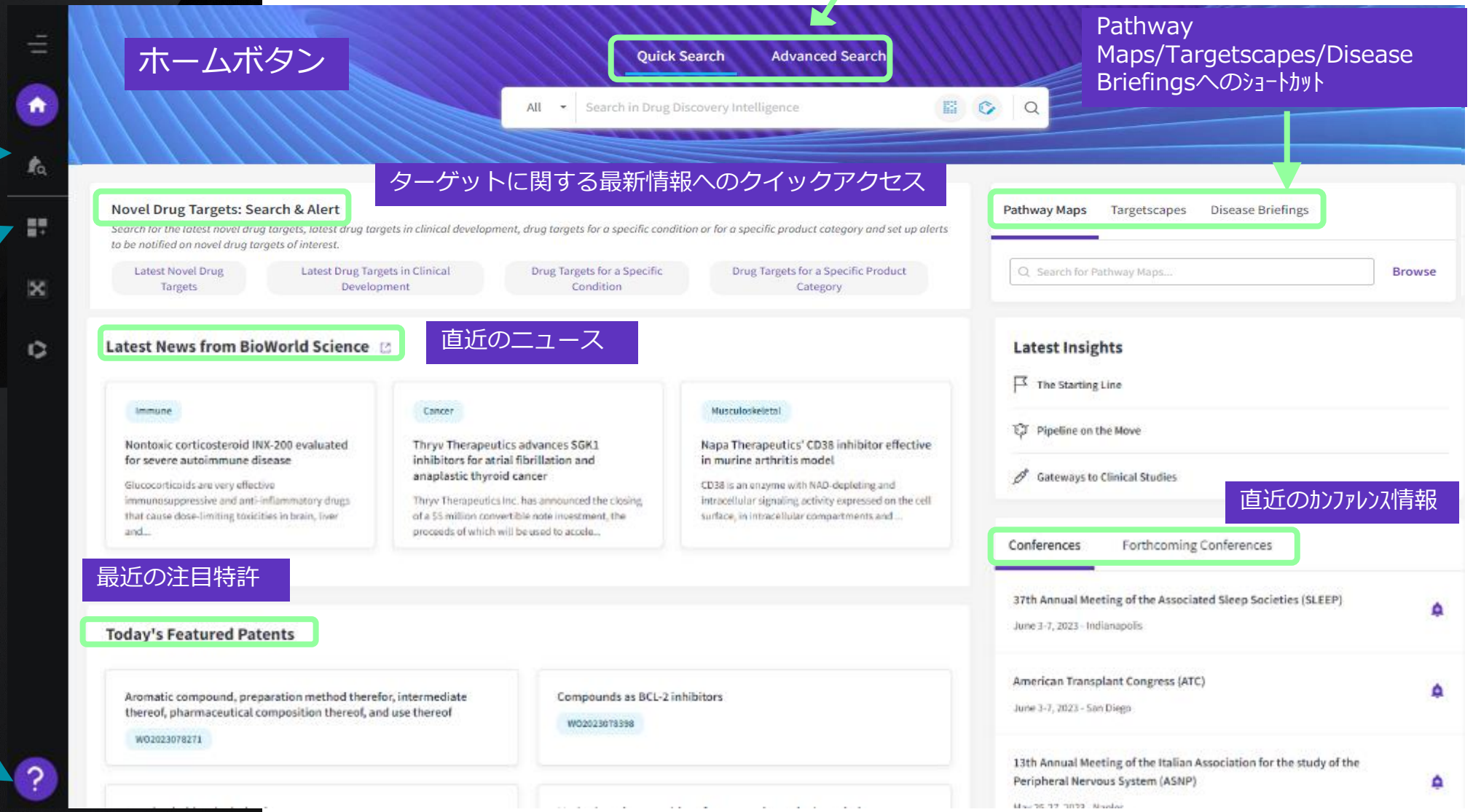


③ 診断・治療・予防・疫学など複数のフィールドに整理された疾患情報をソースと合わせて確認

© 2023 Clarivate

© 2023 Clarivate

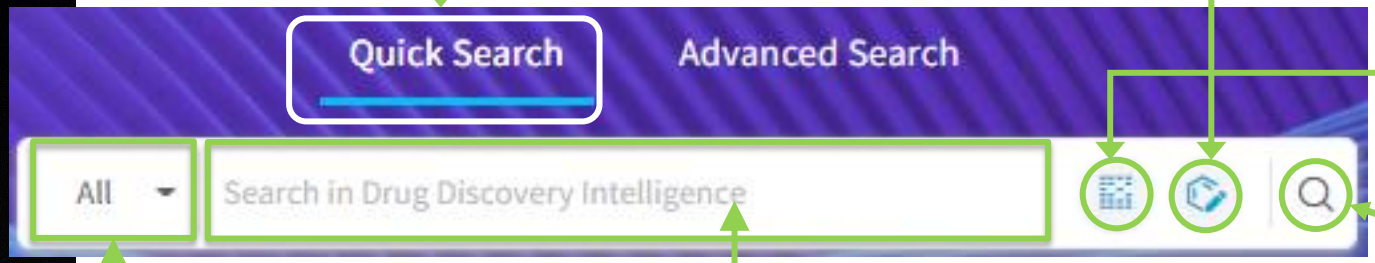
CDDI
ホーム画面



Clarivate™

© 2023 Clarivate

基本検索
Quick Search



Quick Searchが選ばれた状態です（青い下線）

化学構造検索の画面が開きます
(See P. 17)

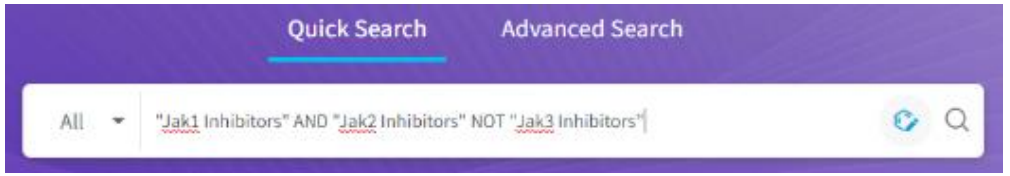
配列検索の画面が開きます
(See P. 18)

検索を実行します

“All”にすると、全Knowledge Area横断的な検索が行えます。

- All
- Drugs & Biologics
- Genes & Targets
- Organic Synthesis
- Experimental Pharmacology
- Experimental Models
- Pharmacokinetics
- Drug Metabolism
- Drug-Drug Interactions
- Clinical Studies
- Organizations
- Literature
- Patents
- Disease Briefings
- Biomarkers

・Durg名、開発番号、ターゲット名、作用機序、疾患名etc.
フリーテキスト検索（See also P.16）
・AND/OR/NOTの検索演算子の使用可
例）



Quick Seaerchでも “All”以外に特定の Knowledge Areaを選択しての検索もできます。
（Biomarkersは別途ご契約が必要です。）

Clarivate™

© 2023 Clarivate

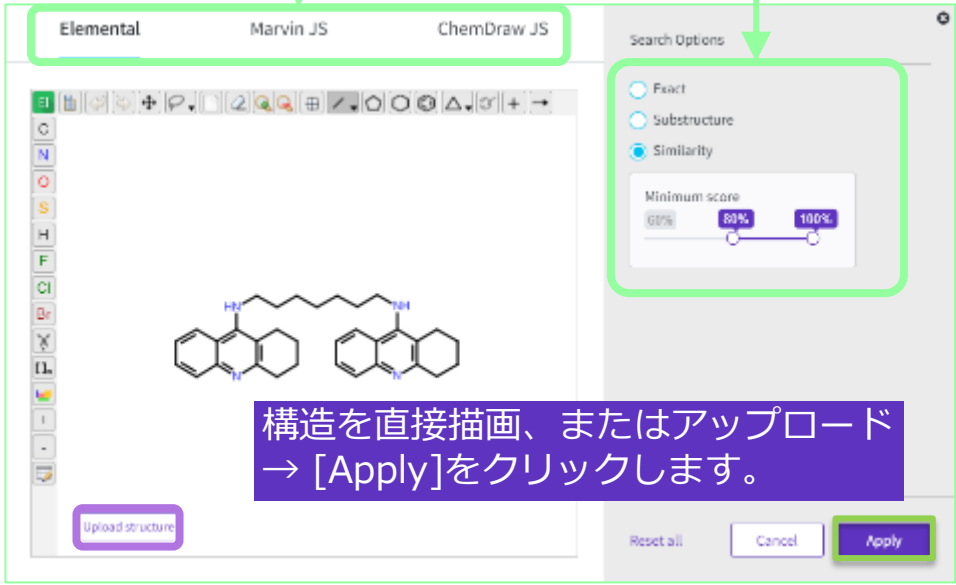
化学構造からの検索

化学構造情報から検索したい
<Quick Searchの場合>

検索窓右側の
ボタンをクリック。

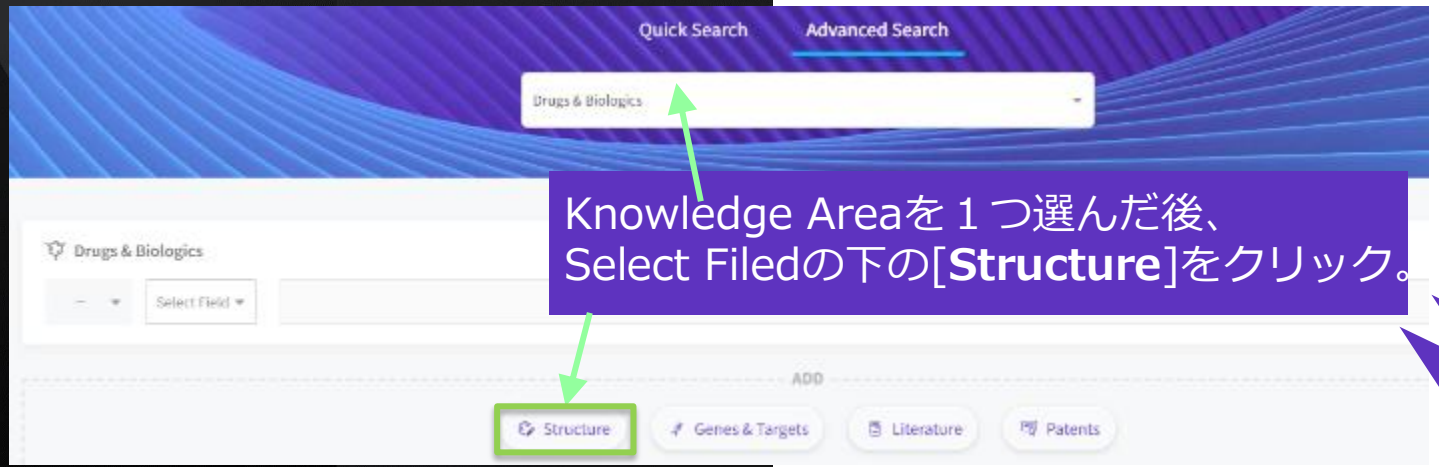
検索オプション：Exact Search、Substructure Search、Similarity Searchから選択できます。

構造描画：3種類の構造描画ソフトを選択できます。



構造を直接描画、またはアップロード→ [Apply]をクリックします。

<Advanced Searchの場合>



Knowledge Areaを１つ選んだ後、
Select Filedの下の[**Structure**]をクリック。

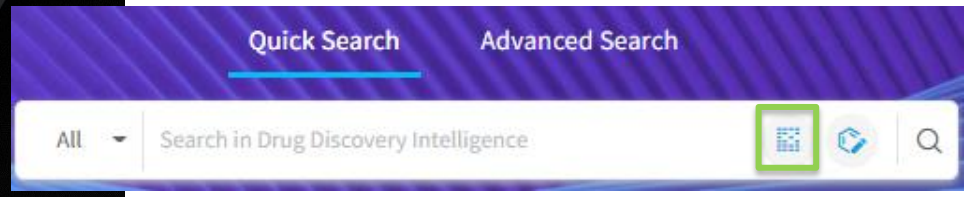
Clarivate™

© 2023 Clarivate

生物配列検索
(塩基/アミノ酸)

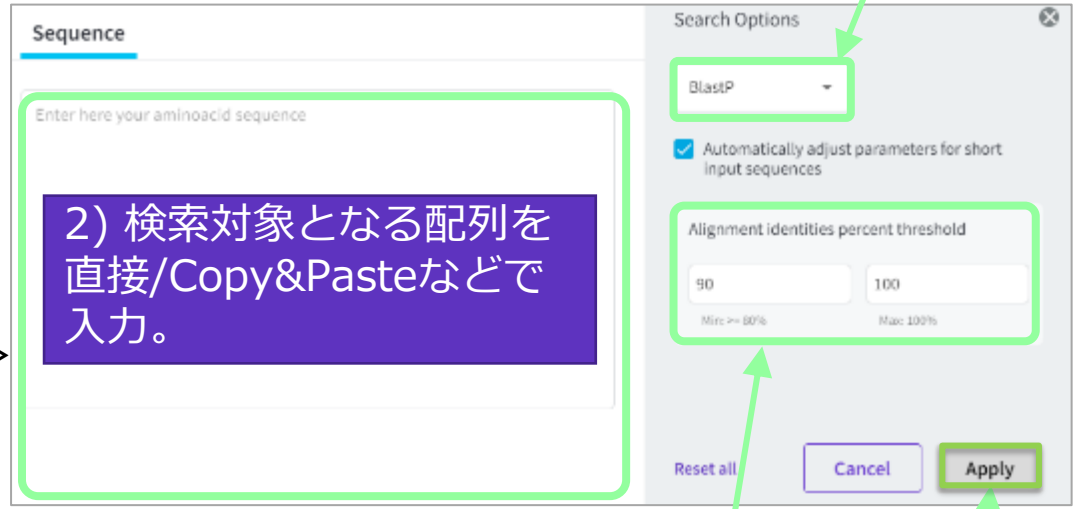
塩基/アミノ酸配列の情報から生理活性物質を検索したい

<Quick Searchの場合>



検索窓右側の ボタンを
クリック。

1) [BlastP](Protein)もしくは
[BlastN](nucleotide)を選びます。



2) 検索対象となる配列を
直接/Copy&Pasteなどで
入力。

3) 入力配列と、検索結果の一致度を
80~100%の範囲で指定できます。

4) [Apply]をクリックします。

<Advanced Searchの場合>

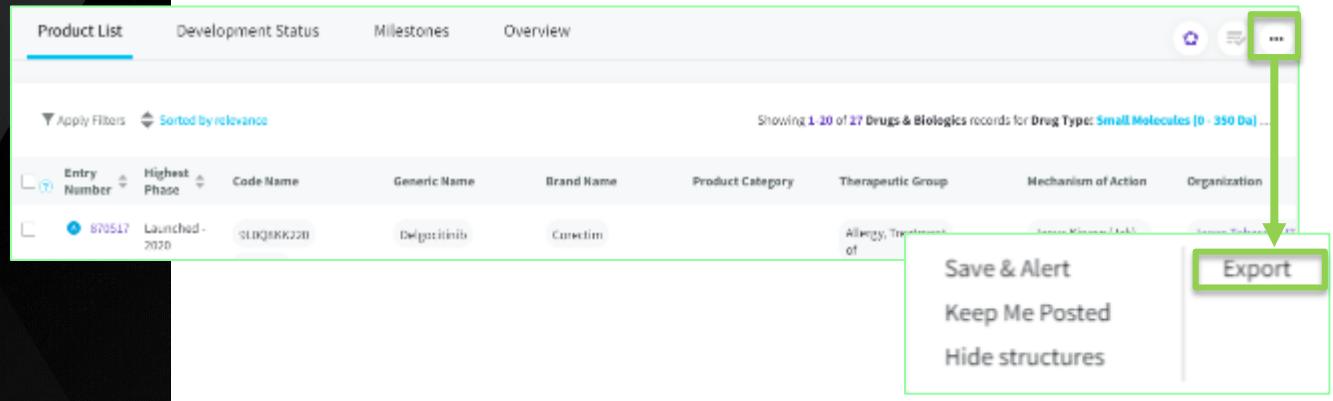
Knowledge Areaを１つ選んだ後、
Select Filedの下の[**Drug Sequence**]をクリック。

Clarivate™

© 2023 Clarivate

検索結果のエクスポート

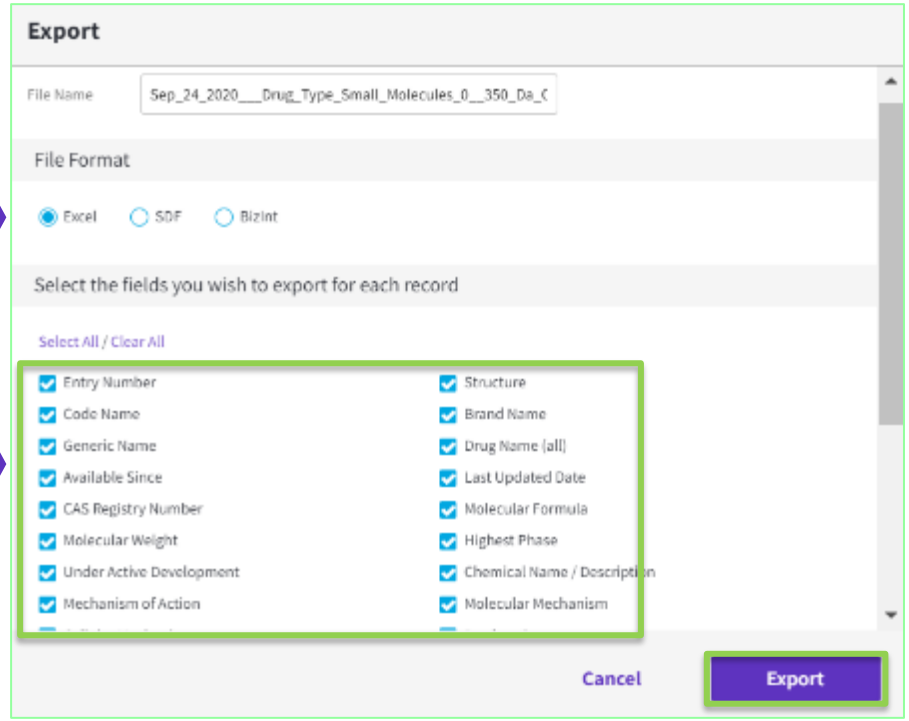
検索結果の
Export



画面右上の[…]をクリックし、
[Export]を選択します。

File Format
を選択します。
※選択可能な
ファイル形式
はKnowledge
Areaごとに異
なります。

エクスポート
したい項目に
チェックをい
れます。
※項目は
Knowledge
Areaごとに異な
ります。

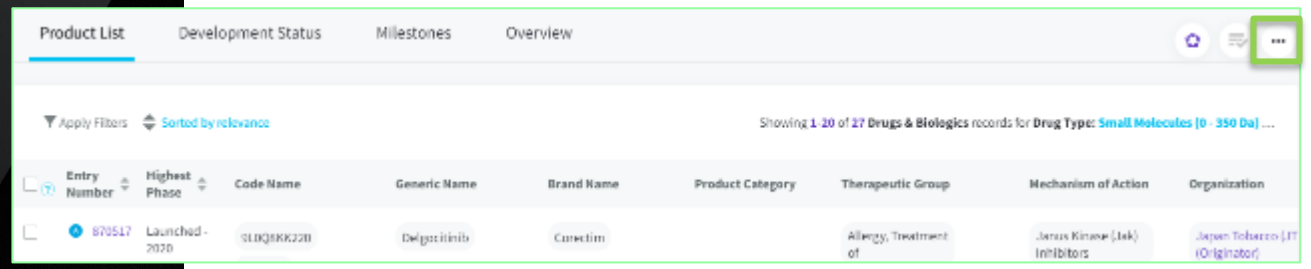


[Export]をクリック
しExportを実行します。

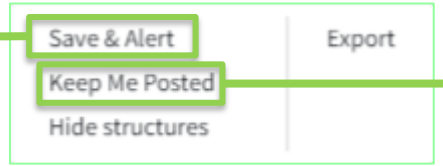
※一度にExportできるレコードは2,000件です。

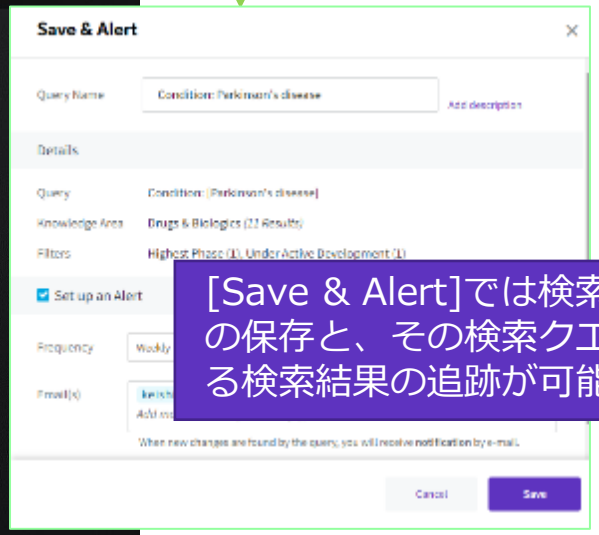
© 2023 Clarivate

検索結果の Save & Alert
クエリの保存と アラート設定

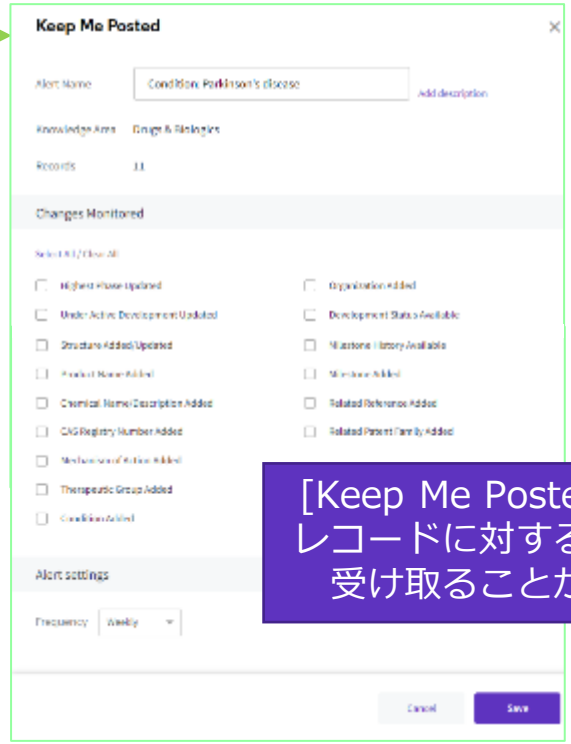


画面右上の[…]をクリックし、目的に応じて[Save & Alert]または[Keep Me Posted]を選択します。





[Save & Alert]では検索クエリの保存と、その検索クエリによる検索結果の追跡が可能です。

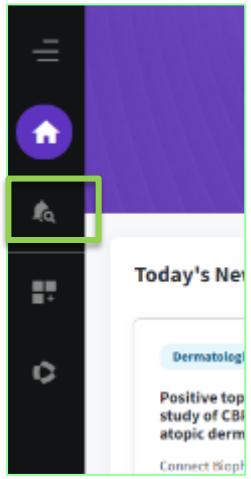


[Keep Me Posted]では既存のレコードに対する更新の通知を受け取ることが可能です。

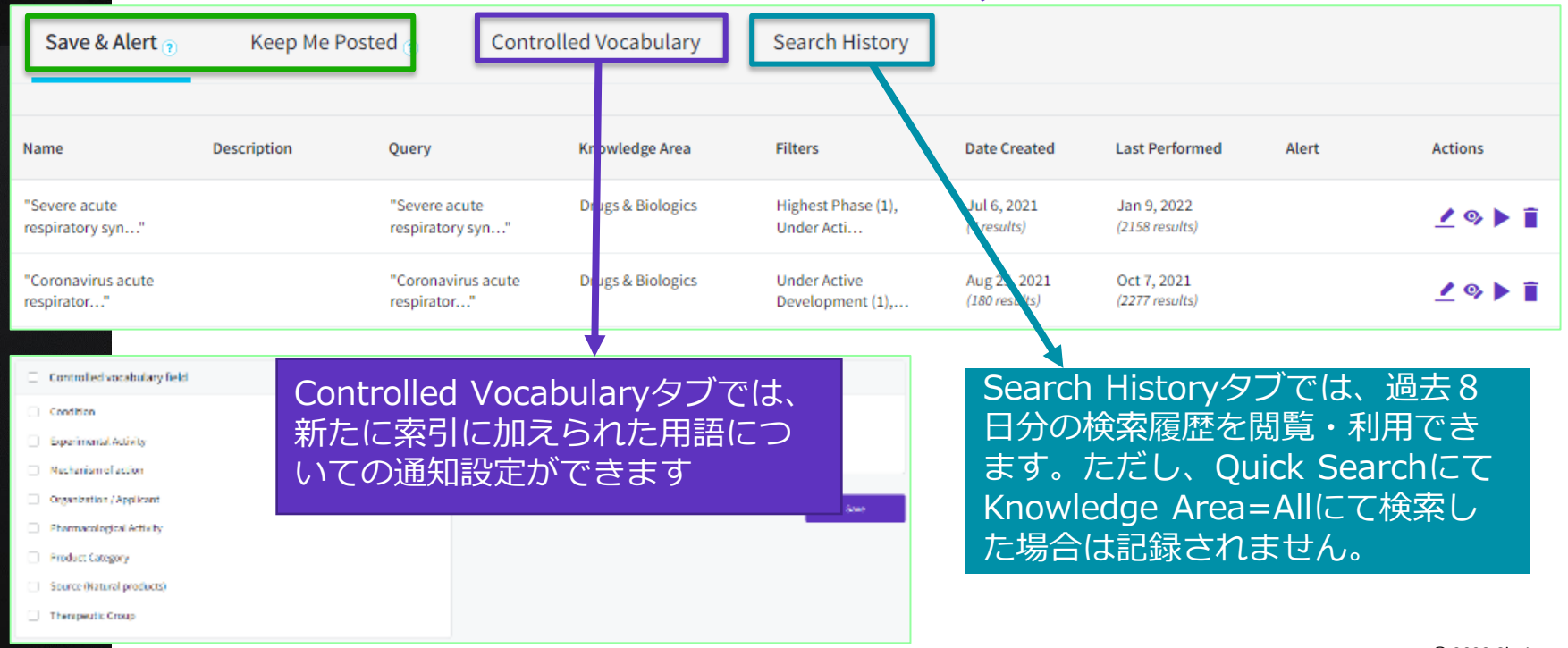
© 2023 Clarivate

検索結果の Save & Alert
保存クエリとアラートの管理

画面左側の をクリックします。→



Save & Alert、Keep Me Posted の各タブで、保存したアラートを確認することが可能です。



Controlled Vocabularyタブでは、新たに索引に加えられた用語についての通知設定ができます

Search Historyタブでは、過去８日分の検索履歴を閲覧・利用できます。ただし、Quick Searchにて Knowledge Area=Allにて検索した場合は記録されません。

Clarivate™

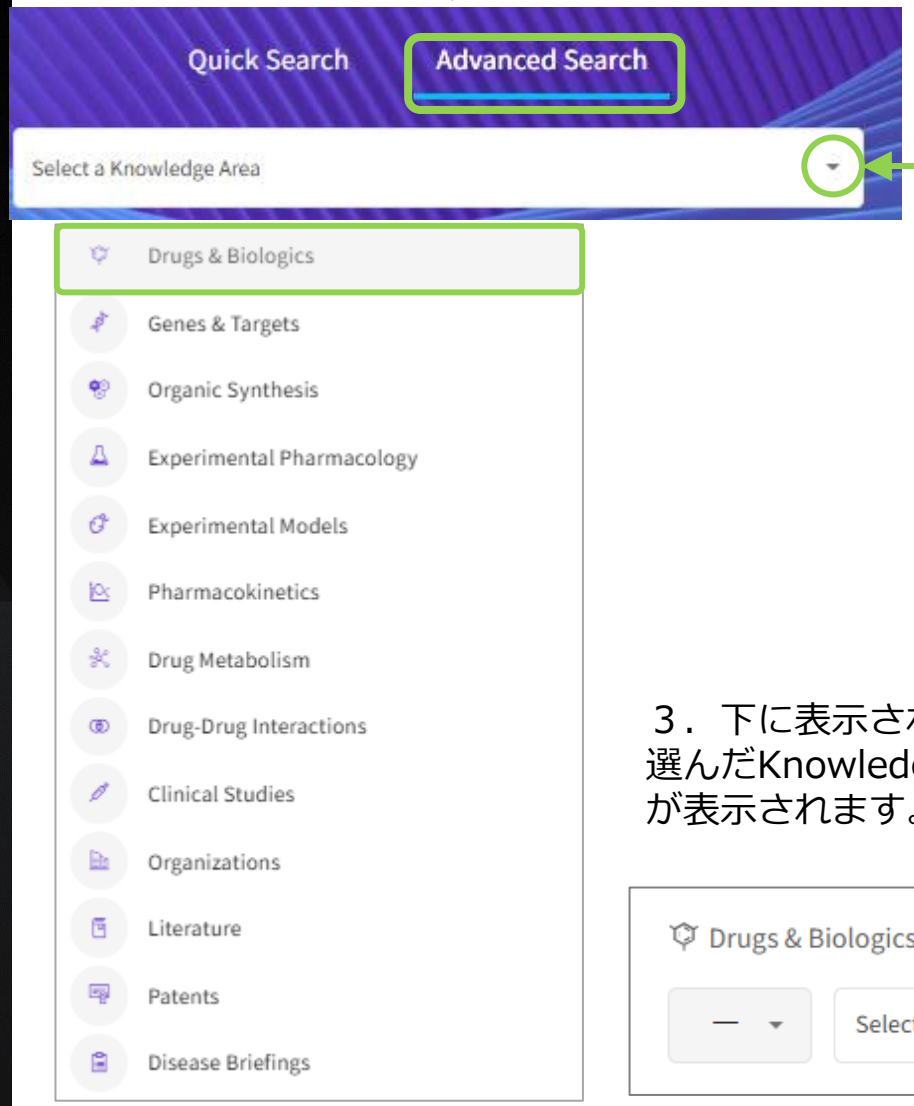
© 2023 Clarivate

Advanced Search

Advanced Searchのメリット

- Knowledge Areaごとに、複数の条件を組み合わせ、より具体的な目的に応じた検索を実行することができます。
- ノイズの少ない検索結果を得たい場合にお勧めです。

1．画面上部で[Advanced Search]をクリックします。



2．▼をクリックし、表示されるKnowledge Area一覧から目的に応じて１つをクリックで選びます。

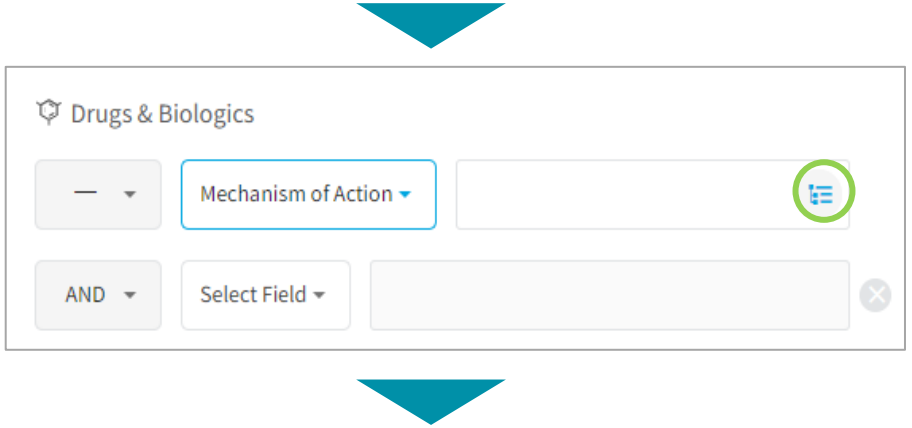
医薬品レコードを検索する場合は[Drugs & Biologics]を、特許を検索する際には[Patents]を選びます。

※ここでは例として[Drugs & Biologics]を選ぶものとします。

3．下に表示される[Select Filed]をクリックすると、２で選んだKnowledge Areaに応じて検索条件となり得る項目が表示されます。

© 2023 Clarivate

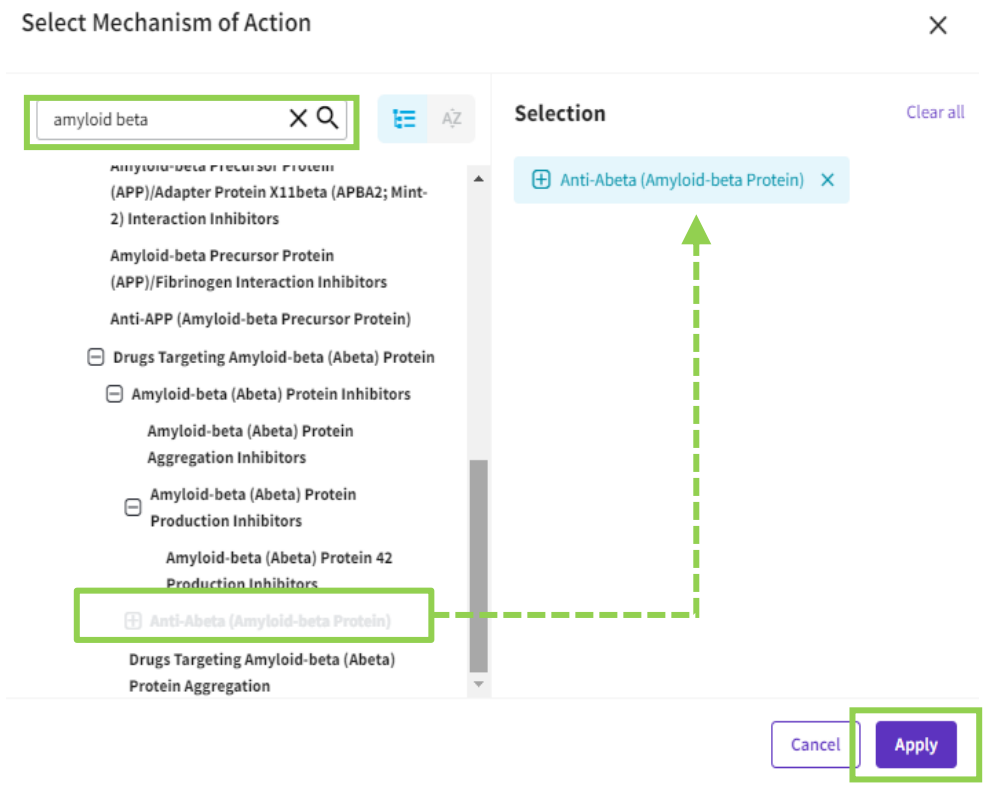
Advanced Search



４．左は３で、[Select Filed]として[Mechanism of Action]を選んだ場合です。

１つ[Select Filed]を選ぶと自動的に2つ目の検索ボックスが下に表示されますので、検索条件を重ねたい場合に使用します。

[Mechanism of Action]の条件を設定するために、右端のアイコンをクリックします。



５．立ち上がったポップアップウィンドウの左上検索窓から目的の作用機序を探します。検索窓に例として[amyloid beta]と入力して検索します。

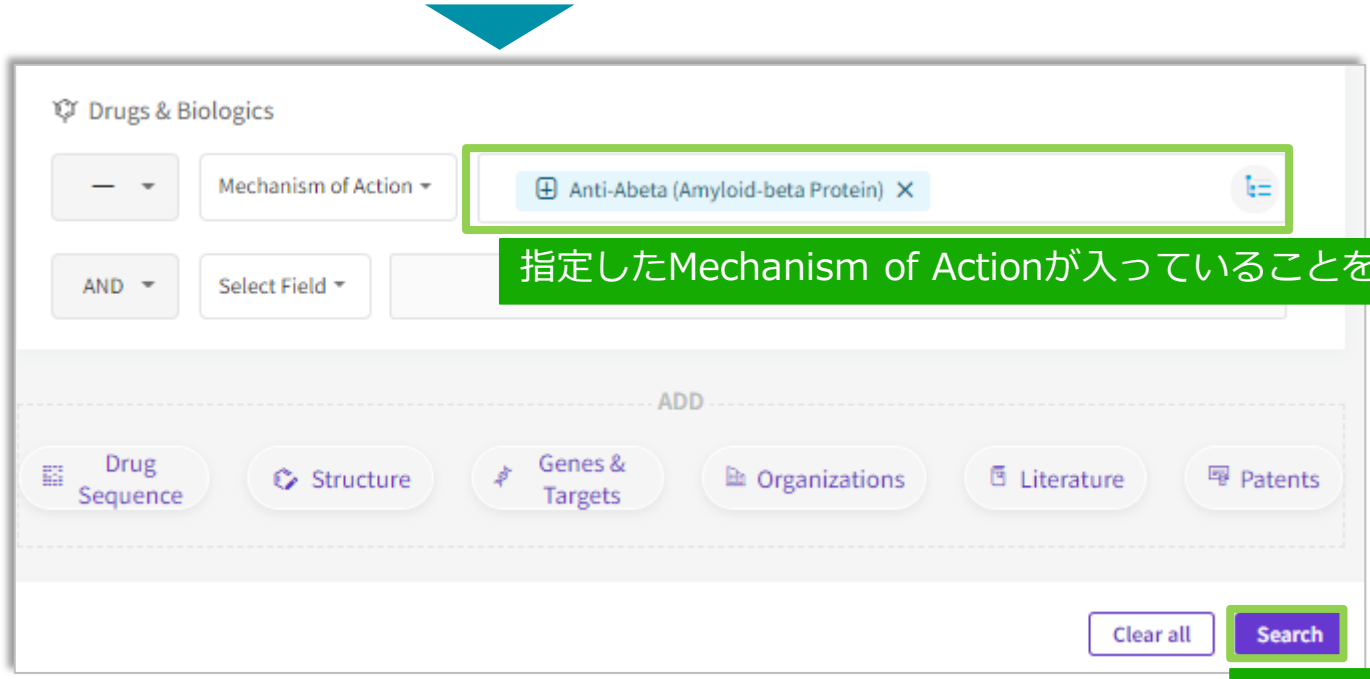
候補となる作用機序が太文字ハイライト表示されますので、目的に応じてクリックで選択します。

左の例では”Anti-Abeta(Amyloid-beta Protein)”を選択しています。選択された項目は右の【Selection】に移動します。

複数選択したい場合は、１つずつ選択してください。最後に右下の[Apply]をクリックし確定します。

© 2023 Clarivate

Advanced Search



指定したMechanism of Actionが入っていることを確認。

[Search]をクリックして検索開始

Clarivate™

© 2023 Clarivate

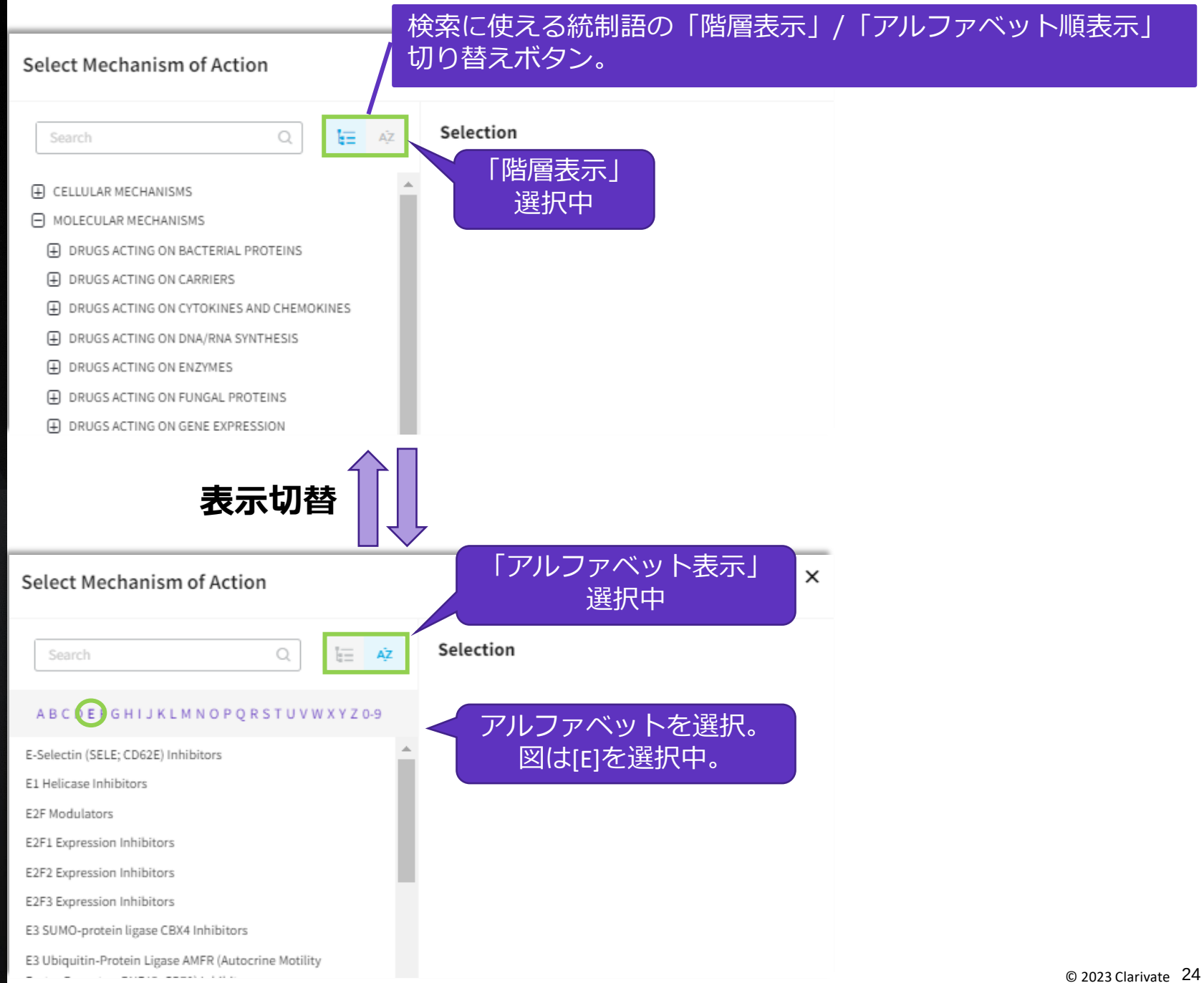
Advanced Search

Advanced Searchで使う、検索語（統制語）リストについて説明します。

Advanced Searchでは、Knowledge Areaを1つ選び、検索語を入れるために[Select Field]を選択すると、選んだFieldに応じた統制語リストが開きます。

右は[Select Field]= Mechanism of Actionを選んだ場合の例です。

※ [Select Field]によってはリストから統制語を選ぶのではなく、検索窓に直接入力するタイプもあります。



© 2023 Clarivate

検索についての補足

Quick SearchとAdvanced Searchの検索の違い

検索結果	検索例
Quick Search ・フリーテキスト検索 検索語が**<u>レコードのどこか</u>**にあればhit 検索語の入力ミスに注意	“Bortezomib” >>20 hit “Bortezomib”が登場した項目 ・Generic Name, ・Product Summary
Advanced Search ・Index検索 検索語が**<u>指定したフィールド</u>**にあればhit 検索語は辞書から指定	Drugs & Biologics Drug Name = Bortezomib >>2 hit “Bortezomib”が登場した項目 ・Generic Name

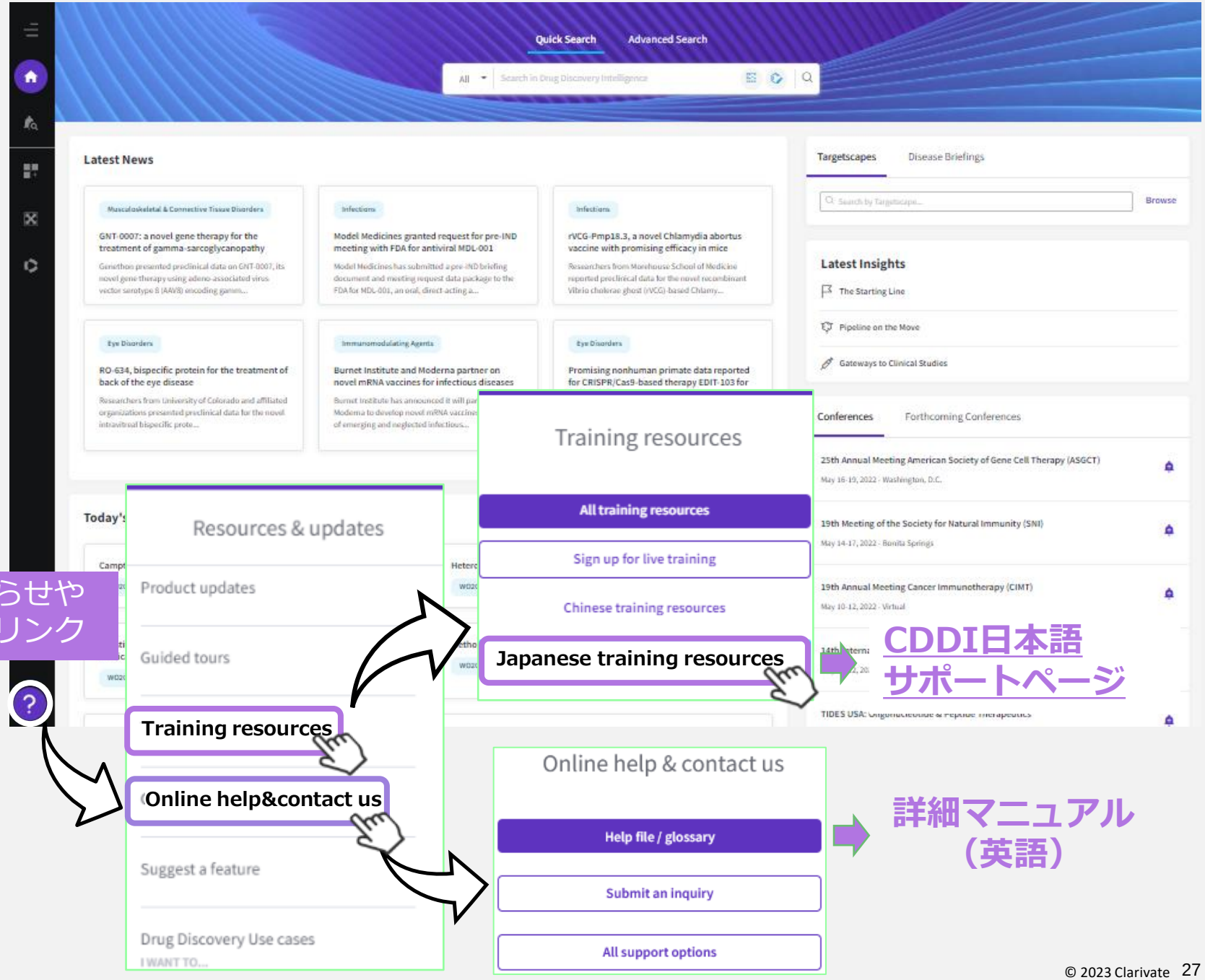
Clarivate™

© 2023 Clarivate

© 2023 Clarivate

Drug Discovery Intelligence

“?”のご活用



各種お知らせや
資料へのリンク

CDDI日本語
サポートページ

詳細マニュアル
（英語）

ユーザーサポートご案内

日本語サポートサイト
https://clarivate.com/cortellis/ja/learning/cortellis-training-home-1564/

日本スタッフによる**日本語マニュアル・資料**をご用意。

ご活用ください！

パブリックWebセミナー
https://clarivate.com/cortellis/ja/training-webinars/
ユーザ様なら**どなたでも**参加できる**Webセミナー**を**年間を通じて**開催。参加できなくても**録画版を視聴**できます。

顧客別・部署別講習会の提供

画一的な利用説明会ではなく、事前のヒアリングを経た**ユーザニーズに沿ったデータベース講習会**を開催しています。

製品内ガイドツアー

データベースの基本ワークフローの各ステップを解説するツアーで**スムーズに使い始め**ていただけます。

カスタマーケア

☎ 0800-170-5577(フリーダイヤル)
（土日祝日を除く）9:30~17:30
✉ ts.support.jp@clarivate.com

専門スタッフが対応。使い方、アクセスなどにお困りの際は、気軽に**日本語**で**問合せ**が可能。

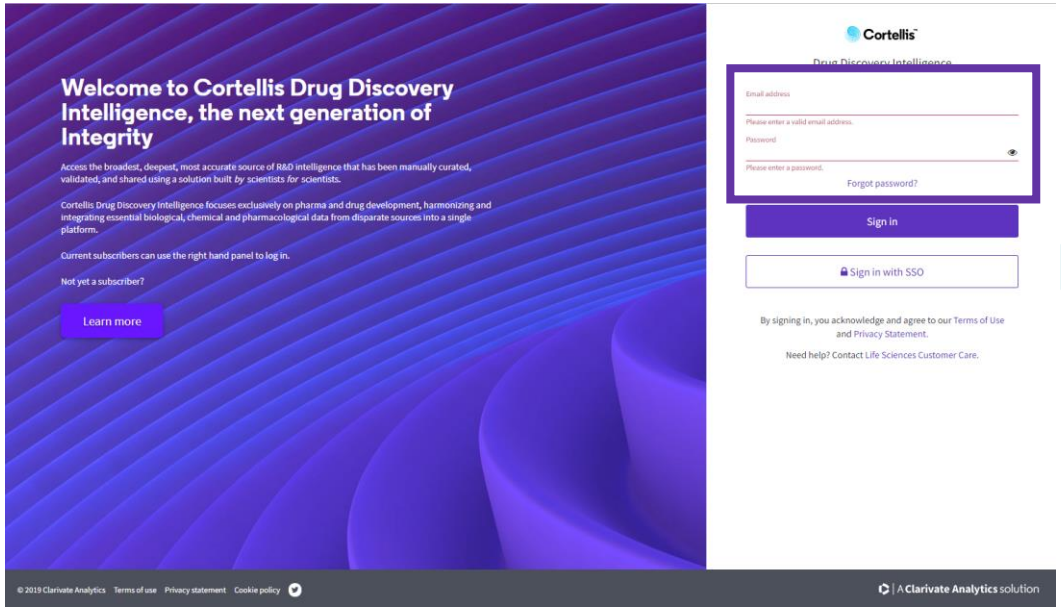
使い方やアクセスに関するご質問はこちらに。

© 2023 Clarivate

Cortellis Drug Discovery Intelligence アクセス方法

https://www.cortellis.com/drugdiscovery

上記URLからアクセスください。



注意

Email address(ID)とPasswordを入力し、Sign inをクリックして CDDIに接続します。

既に以下のクラリベイト製品にユーザ登録がある場合、ID/Passwordはすべて共通です。

Cortellis, Drug Research Advisor, Key Pathway Advisor, Web of Science, ResearcherID,Derwent Innovation, InCites, EndNote

※初めてユーザー登録する際には、ご所属先のデータベースご担当者様にご確認ください。

© 2023 Clarivate

About Clarivate

Clarivate is the leading global information services provider. We connect people and organizations to intelligence they can trust to transform their perspective, their work and our world. Our subscription and technology-based solutions are coupled with deep domain expertise and cover the areas of Academia & Government, Life Sciences & Healthcare and Intellectual Property. For more information, please visit clarivate.com

© 2023 Clarivate

Clarivate and its logo, as well as all other trademarks used herein are trademarks of their respective owners and used under license.