

사례 연구 | Cortellis Drug Discovery Intelligence™

# 데이터에서 시작되는 탐색 연구

모스크바의 한 교수가 선도물질을 찾기 위해 정교한 검색과 분석으로 눈을 돌렸습니다.

**현재 모스크바의 IBMC(Institute of Biomedical Chemistry) 교수로 재직 중인 Vladimir Poroikov** 교수는 오래 전부터 컴퓨터 활용 신약개발을 위한 리간드 기반 방법의 개발 및 검증에 연구를 집중했습니다.

Vladimir Poroikov 교수는 세계 최초로 Cortellis Drug Discovery Intelligence에서 나온 데이터를 자신의 계산 방법에 통합한 연구원입니다. 생물학적 데이터, 화학적 데이터 및 약리학적 데이터는 이 방법을 통해 사용하기 쉬운 단일 플랫폼에 통합됩니다.

Proikov교수는 초기에 Cortellis Drug Discovery Intelligence를 통해 특정 생물학적 활성을 나타내는 약제에 대한 정보 검색하는 데 집중했습니다.

Vladimir Poroikov 교수는 신약 선도물질 역할을 수행할 특이적이고 강력한 분자를 만들겠다는 희망을 품었지만, 화합물의 화학 구조와 생물학적 활성 간 관계성을 통계적으로 모델링하는 (Q) SAR[(Quantitative) Structure- Activity Relationship]의 계산 모델을 구축하려면 데이터가 필요했습니다.

# 새로운 분야에서 연구를 시작한다면 [Cortellis Drug Discovery Intelligence] 를 이용해 이 분야의 전반적인 상황에 대한 '첫 인상'을 파악할 겁니다.

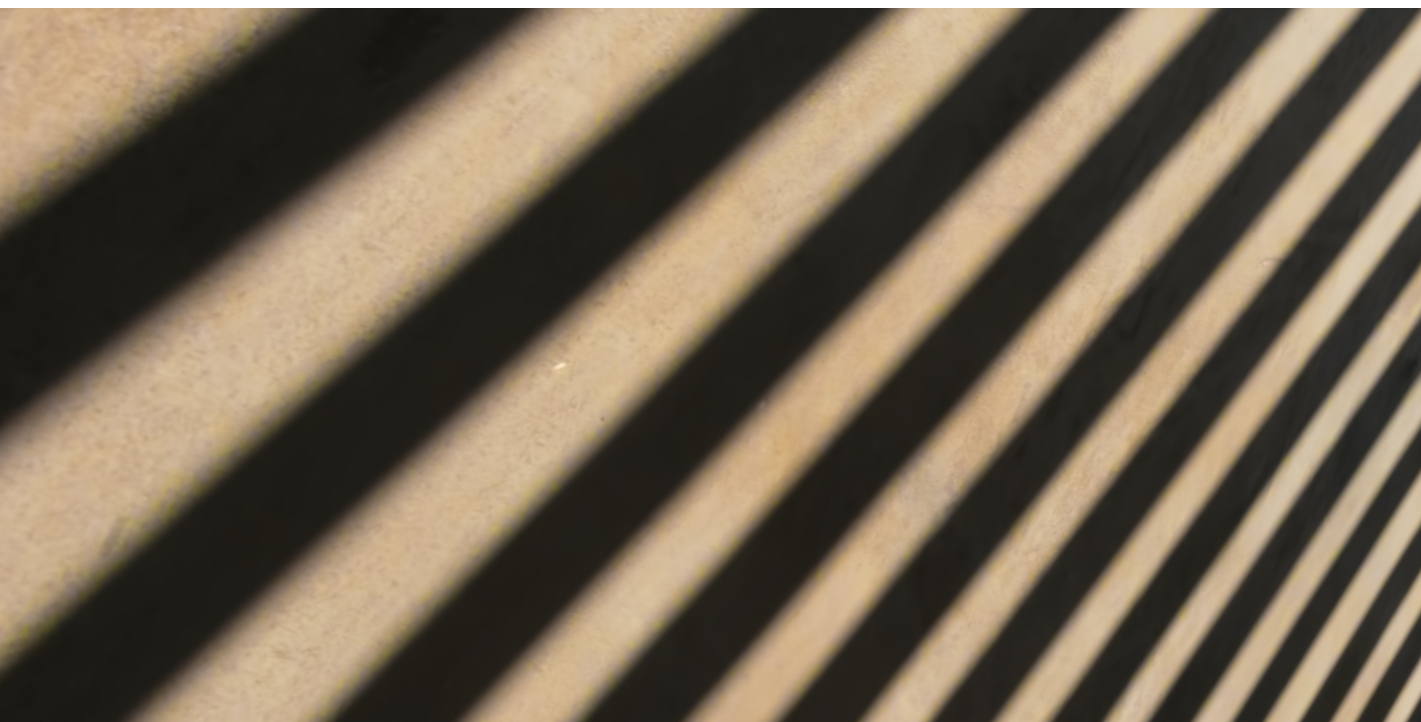
Vladimir Poroikov 교수  
Institute of Biomedical Chemistry, 모스크바

## 일체형 도구

기존 약물에 대한 새로운 생물학적 활성을 찾는 것도 Poroikov 교수의 연구에서 또 하나 중요한 부분이었습니다. 일체형 도구라고 부른 Cortellis Drug Discovery Intelligence도 이러한 연구에서 중요한 역할을 담당했습니다. 본 솔루션은 조사를 시작할 때 전반적인 상황을 완벽하게 파악할 수 있게 지원할 뿐 아니라, 과학적 데이터 저장소가 이를 뒷받침하고 있어 연구를 심화시킬 수 있습니다. Poroikov 교수는 "새로운 분야에서 연구를 시작한다면 [Cortellis Drug Discovery Intelligence]를 이용해 이 분야의 전반적인 상황에 대한 '첫 인상'을 파악할 겁니다."라 말합니다.

Poroikov 교수는 Cortellis Drug Discovery Intelligence를 수년동안 확장하여 사용했는데, 이는 본 솔루션의 생물학 및 화학 데이터베이스가 지속적으로 업데이트 되었기 때문이었습니다.

Cortellis Drug Discovery Intelligence 콘텐츠의 확장과 새로운 분석, 그리고 점점 정교화 되는 검색기능은 그의 연구에 도움이 되었습니다. Poroikov 교수는 "전반적으로 화학적-생물학적 상호 작용을 보다 심도있게 이해하는 등 개인적인 발전을 이룰 수 있었습니다."라 덧붙였습니다.





## 보다 복잡한 검색

Vladimir Poroikov 교수는 복잡한 과학적 질문을 위해 보다 복잡한 검색법을 사용한다고 말합니다. 그는 본 솔루션을 통해 분자의 구조나 하위 구조를 사용해 분자 그룹에 대한 정보를 검색할 수 있었다고 말합니다. Cortellis Drug Discovery Intelligence에 추가된 필드는 화학적-생물학적 상호 작용에 대한 보다 심도있는 해석을 가능케했습니다.

그는 또한, "때로는 특정 요구에 대해 정보 검색 결과를 제한하기 위해 보다 복잡한 쿼리를 사용하기도 합니다." 말합니다. Vladimir Poroikov 교수는 Cortellis Drug Discovery Intelligence를 이용해 가장 유익한 결과를 얻었던 쿼리를 하나 꼽아달라는 질문에 잠시 머뭇거리더니 "저는 관심이 가는 특정 연구 분야에 따라 다양한 쿼리를 사용합니다. 그리고 이 모든 쿼리들이 특정 사례에서 '가장 유용'합니다."라고 답했습니다.

Vladimir Poroikov 교수는 이해를 돕기 위해 Cortellis Drug Discovery Intelligence를 많이 활용했던 연구를 예시로 들었습니다.

"2001년에 우리는 상위 200개 약물 목록에서 8개 약물에 대해 새로운 약물 치료 효과를 예측한 결과를 발표했습니다.<sup>1</sup> 특히, Sertraline은 코카인 의존 치료에 적용할 수 있고, Amlodipine은 antineoplastic enhancer로 사용할 수 있으며, Oxaprozin은 interleukin-1 antagonist가 될 수 있고, 라미프릴은 항관절염 작용을 나타낼 수 있을 것으로 예측했습니다."

Poroikov 교수는 출판된 문헌에 대한 최근 분석 결과에서 이러한 모든 예측이 실험이나 임상 연구로 확인되었다고 말합니다.<sup>2-5</sup>

그는 다른 데이터베이스들도 사용해봤지만, Cortellis Drug Discovery Intelligence는 "다양한 측면으로 확장된 정보를 담고있다"는 점에서 경쟁제품을 능가한다고 말합니다. Poroikov 교수와 그의 동료들은 공개 도메인의 데이터베이스를 포함해 다른 연구 데이터베이스들을 사용해보기도 했지만, 결국 Cortellis Drug Discovery Intelligence를 다시 쓰게 되었습니다. "제 생각에 [Cortellis Drug Discovery Intelligence]는 보다 신중하게 선별된 의약품 관련 정보를 제공합니다."라 말합니다.

Vladimir Poroikov 교수는 클래리베이트가 Cortellis Drug Discovery Intelligence를 통해 최대 결과를 도출할 수 있도록 지속적인 지원과 지도를 아끼지 않았다는 점을 가장 높게 평가했습니다. 그는 "무료 교육 웨비나 덕분에 Cortellis에서 정보를 검색할 수 있는 최적의 방법을 명확하게 이해할 수 있었고, 클래리베이트의 지원 인력을 통해 질문에 대한 답을 매우 빨리 받았다."고 말합니다.

Poroikov교수는 Cortellis Drug Discovery Intelligence의 애용자로 러시아 및 해외에 있는 많은 과학계 동료들에게 본 솔루션을 추천했습니다. Vladimir Poroikov 교수는 러시아 국립 의학 연구 대학(Russian National Medical Research University) 대학원생을 대상으로 한 프레젠테이션을 비롯해 과학 컨퍼런스 프레젠테이션에서도 본 솔루션을 활용했습니다. 그는 연구 중인 의약품에 대해 가장 신뢰할 수 있는 다면적 정보를 단일 소스에서 제공한다는 것이 Cortellis Drug Discovery Intelligence의 가장 큰 장점이라고 강조합니다.

<sup>1</sup> Poroikov V. et al. Top 200 Medicines: Can New Actions Be Discovered Through Computer-Aided Predictions? SAR and QSAR Environ Res, 2001, 12: 327-344

<sup>2</sup> Mancino M.J. et al. Clinical Efficacy of Sertraline Alone and Augmented with Gabapentin in Recently Abstinent Cocaine-Dependent Patients with Depressive Symptoms. J Clin Psychopharmacol, 2014, 34: 234-239

<sup>3</sup> Takara K. et al. Differential Effects of Calcium Antagonists on ABCG2/BCRP-Mediated Drug Resistance and Transport in SN-38-Resistant HeLa Cells. Mol Med Rep, 2012, 5: 603-609

<sup>4</sup> Rainsford K.D. et al. Recent Pharmacodynamic and Pharmacokinetic Findings on Oxaprozin. Inflammopharmacology, 2002, 10: 185-239

<sup>5</sup> Shi Q. et al. Ramipril Attenuates Lipid Peroxidation and Cardiac Fibrosis in an Experimental Model of Rheumatoid Arthritis. Arthritis Res Ther, 2012, 14: R223

## 클래리베이트 소개

클래리베이트™ 는 혁신을 가속하는 솔루션을 제공하는 글로벌 선도 기업입니다. 당사의 기업 사명은 과학 및 지식재산 분야에서 새로운 아이디어가 삶을 변화시키는 발명품으로 빠르게 탄생할 수 있도록 실용적인 정보와 인사이트를 제공함으로써 고객들이 세상에서 가장 복잡한 문제를 해결할 수 있도록 돕는 것입니다. 발명의 시작부터 보호 그리고 상업화까지 전 과정에서 신뢰할 수 있는 정보를 간편하게 구독하고 첨단 기술을 기반으로 솔루션을 활용하며 모든 과정에서 분야별 전문가들까지 함께 최고의 결과를 얻을 수 있습니다. 자세한 정보는 [clarivate.com/ko](https://clarivate.com/ko)를 참조하시기 바랍니다.

Cortellis Drug Discovery Intelligence가 신약 개발 가속화에 어떻게 도움이 되는지 자세히 알아보려면 아래 웹사이트를 방문하십시오.

**[clarivate.com/ko/products/biopharma/](https://clarivate.com/ko/products/biopharma/)**