

医薬品設計のための

化合物デザイン支援ソリューション

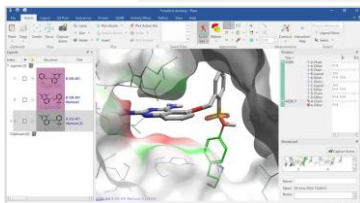
Cresset

Cresset は医薬品の新しい分子の発見、設計、最適化を支援する計算化学ソフトウェアです。独自の「XED (eXtended Electron Distribution) 力場」を用いることで、分子の電荷分布や分子間の相互作用を従来の計算手法よりも正確にモデル化します。Cresset製品はSBDDやLBDDの機能を搭載した「Flare」、多様なバーチャライブラリを効率的に生成する「Spark」、リガンドとタンパク質の結合自由エネルギーを正確に予測する「Flare FEP」を提供しています。医薬品の新規分子発見、設計、最適化を強力に支援します。

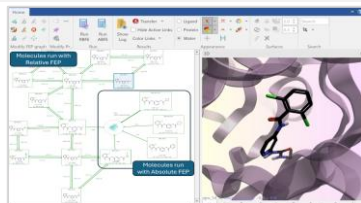


Cresset Flareはリガンドベースおよび構造ベースのアプローチを統合したドラッグデザインのための包括的な分子設計ソフトウェアです。Absolute FEPにも対応しています。

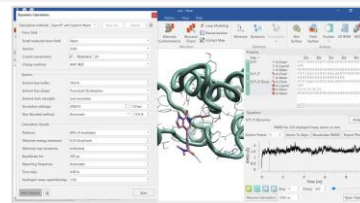
Structure-based drug design software components



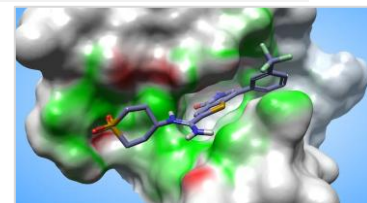
ドッキングシミュレーション



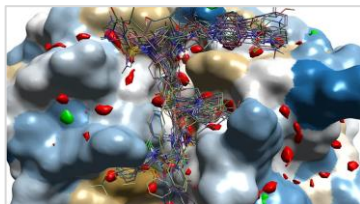
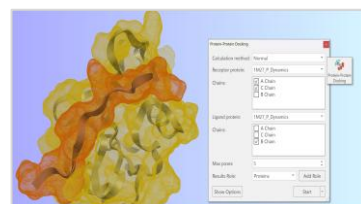
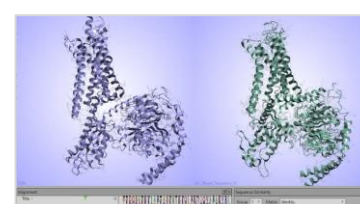
結合自由エネルギー計算 (FEP)



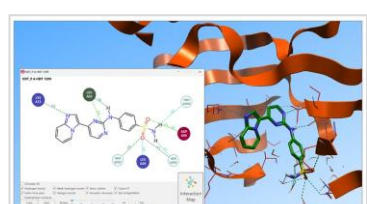
分子動力学計算



Electrostatic Complementarity

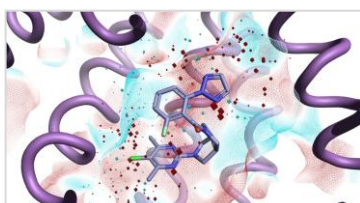
水安定性解析
(GIST / 3D-RISM)タンパク質-タンパク質
ドッキングシミュレーション

ホモロジーモデリング

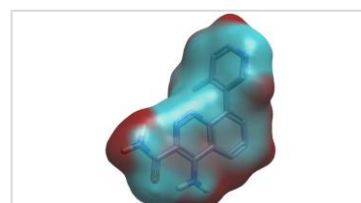


2次元相互作用マップ

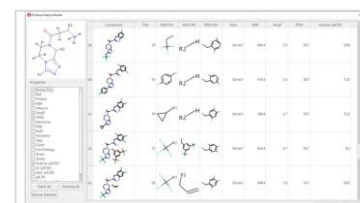
Ligand-based drug design software components



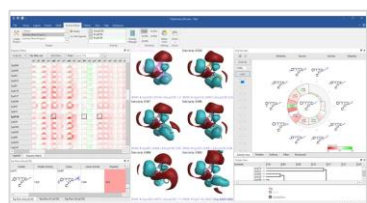
構造活性相関 (QSAR)



量子力学計算 (QM)



Rグループ解析

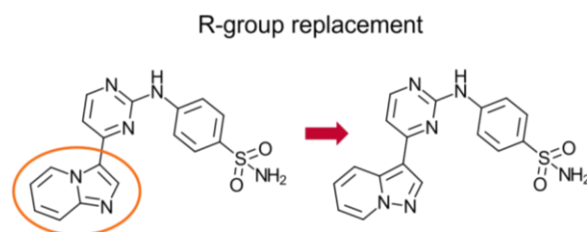
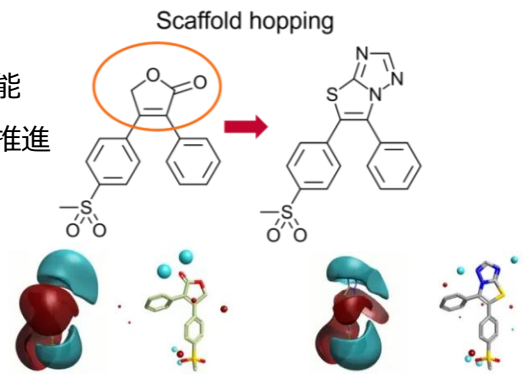


アクティビティマイナー

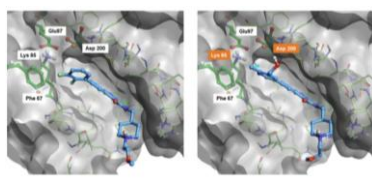


Cresset Spark は scaffold hopping や bioisosteric置換してバーチャルライブラリを発生するソフトウェアです。Cresset社製品における人気ソフトウェアで、特許問題やADMETを回避するための革新的なリード化合物を生み出します。

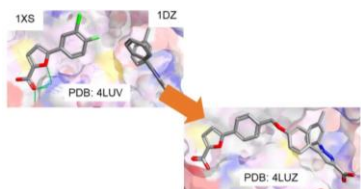
- Sparkは「最高のScaffold Hoppingソフトウェア」とのユーザー評価
- 静電ポテンシャルと分子形状空間を考慮して、分子特性を高精度に捕捉可能
- 特許密集分野での特許抵触回避または自社特許資産拡大による研究開発の推進
- 結合に不可欠でありながら代謝安定性に課題をもつ官能基の置換により、開発後期リスクを低減
- 多変数最適化機能による下記要素に基づく化合物の迅速な選定
 - ・ バイオアイソスターとしての「適合性」
 - ・ LogP (最適な吸収性)
 - ・ TPSA (細胞透過性)
 - ・ 分子量
- 豊富なフラグメントデータベース
 - ・ 690万以上のフラグメント
 - ・ 市販のスクリーニング化合物、文献、特許データ、試薬
 - ・ 定期的に更新するデータベース
 - ・ 自社化合物を用いた独自データベースを作成可能



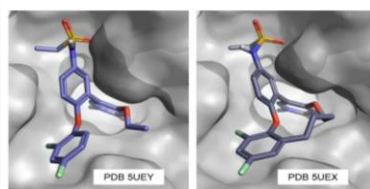
複雑なScaffold Hopping と bioisosteric置換を簡単に実現



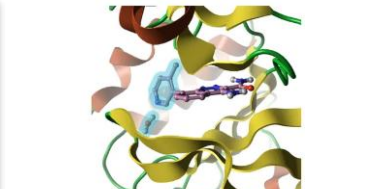
活性部位の未探索部分へのリガンド成長



フラグメントの連結



マクロ環化



結晶水置換によるリガンド成長

Cresset開発元



Cresset BioMolecular Discovery Limited
<https://cresset-group.com/>

お問い合わせ先

富士通株式会社

クロスインダストリーソリューション事業本部 Healthy Living事業部 Life Scienceグループ

contact-cresset@cs.jp.fujitsu.com

