



合成化学を考慮した最先端 CADD ソフトウェアソリューション

## Muse<sup>®</sup> Invent<sup>®</sup> のご紹介

情報計算化学生物学会 2014 年大会 ランチョンセミナー

日時： 2014 年 10 月 30 日 12:00 - 13:30

会場： タワーホール船堀 2 階 平安

講演者：

**Dr. Brian Masek**

Product Manager and Lead Scientist,  
Certara



ブライアン マセク (Brian Masek) 博士は、サターラ社のプロダクトマネジャー兼主任研究員です。マセク博士は、カリフォルニア工科大学 (Caltech) において物理有機化学の博士号を取得後、サターラ社に入社するまでの 15 年間、Optive Research や AstraZeneca といった製薬企業において、Computer-Aided Drug Design (CADD) の最先端技術の開発に貢献してきました。現在は、サターラ社において、分子デザインや多基準薬物設計に焦点を当てたソフトウェアソリューションの開発に取り組んでいます。

Muse<sup>®</sup> Invent<sup>®</sup> は、トライポス社 (Tripos) が開発した Muse<sup>®</sup> に合成化学の概念を統合させることで新しい価値を付加した、サターラ社 (Certara<sup>®</sup>) の提供する、最先端の分子設計ソフトウェアソリューションです。

本製品は、Computer-Aided Drug Design (CADD) に合成化学のコンセプトを組み合わせることで、合成可能なリード化合物の同定・最適化を支援するだけでなく、さらにその合成経路を予測するという特徴を持っています。

Muse Invent は、合成化学と計算科学分野を画期的なアプローチで橋渡しすることにより、それぞれの分野の研究者に新しい価値を提供します。

Muse Invent は、既存のデータベースに依存しない新規化合物のデザインを支援し、仮想の合成経路候補を高い精度で予測します。さらに、多基準設計や複数の化合物特性の評価を組み合わせることにより、候補化合物の最適化を強力に支援します。

本ランチョンセミナーでは、Muse Invent を始めとする創薬ソフトウェアの考案・開発を担当する、サターラ社のブライアン マセク博士を演者として、Muse Invent の概要やお客様にとっての利点を、製品のデモンストレーションを交えながら紹介致します。

※ 講演は英語によるプレゼンテーションになります。質疑応答や補足などは、必要に応じて通訳させていただきます。

## サターラ社 (Certara®) について

サターラ社は、最先端の科学技術による医薬品開発および医薬品安全性のコンサルタント会社として医薬品業界を牽引し、世界中の数千社におよぶ医薬品企業から信頼を集めています。2007年以降、サターラ社は、創薬研究向けソフトウェアを開発するトライポス社 (Tripos) の買収を皮切りに、戦略的な企業統合を繰り返すことで成長してきました。現在では、創薬研究の早期段階から臨床開発まで、医薬品の製品化過程全体に及ぶ広範な科学コンサルティングサービスおよびソフトウェアソリューションを一社で提供する、業界で最も包括的なソリューションプロバイダです。

サターラ社の詳細については、[www.certara.com](http://www.certara.com) / [www.certara.co.jp](http://www.certara.co.jp) をご参照ください。

## Muse® Invent® の詳細

Muse Invent は、トライポス社 (現サターラ社) が開発した Muse をベースに合成化学の概念を統合させた、全く新しい最先端の CADD ソフトウェアソリューションです。Muse Invent は、以下の特徴的な機能を持ちます。

- 合成可能な医薬品化合物候補の同定に加えて、必要となる合成経路を予測します。
- 複数の設計基準を満たす新規化合物のデザインを、支援します。
- リード化合物構造の形状やフォーマコフォアの特徴を踏まえて、新規化合物を設計します。
- 並列計算や、リモートおよびグリッド環境における計算機能によって、複数の設計基準のスコアリングを短時間で完了させます。

### 革新的なアイデアの創出

既存のデータベースに依存しない新規化合物のデザインを可能にするだけでなく、「仮想」の合成化学によって、実験室における合成経路を予測します。

### 既存の技術の活用と投資利益率の向上

オープンアーキテクチャ構造の活用により、既に導入されている CADD ソフトウェアを Muse Invent と組み合わせることができます。その結果、これまでに蓄積されてきた知見と新たな技術とを統合し、投資利益率を最大化することができます。

### 研究開発への貢献と競争優位性の実現

多基準医薬品設計に合成化学のコンセプトを組み合わせることにより、最適化が求められる全てのパラメーターに関する知見を提供します。

### ソフトウェアの操作性の高さ

操作が直感的かつ平易であるため、創薬化学部門全体を利益をもたらします。その結果、革新的なアイデアの創出を促進し、プロジェクトの問題点の克服に貢献します。

Synthetic chemistry + CADD  
= Muse Invent  
Drug design ideas you can synthesize!  
Muse Invent は、合成可能な化合物デザインを実現します。

サターラ合同会社

〒105-0001 東京都港区虎ノ門 4-2-12 虎ノ門 4 丁目 MT ビル 2 号館 9F

Tel: 050-3786-9898 / Fax: 050-3156-2152

Email: [japan.sales@certara.com](mailto:japan.sales@certara.com)

