

АНАЛИЗ ВИРТУАЛЬНЫХ БИБЛИОТЕК:

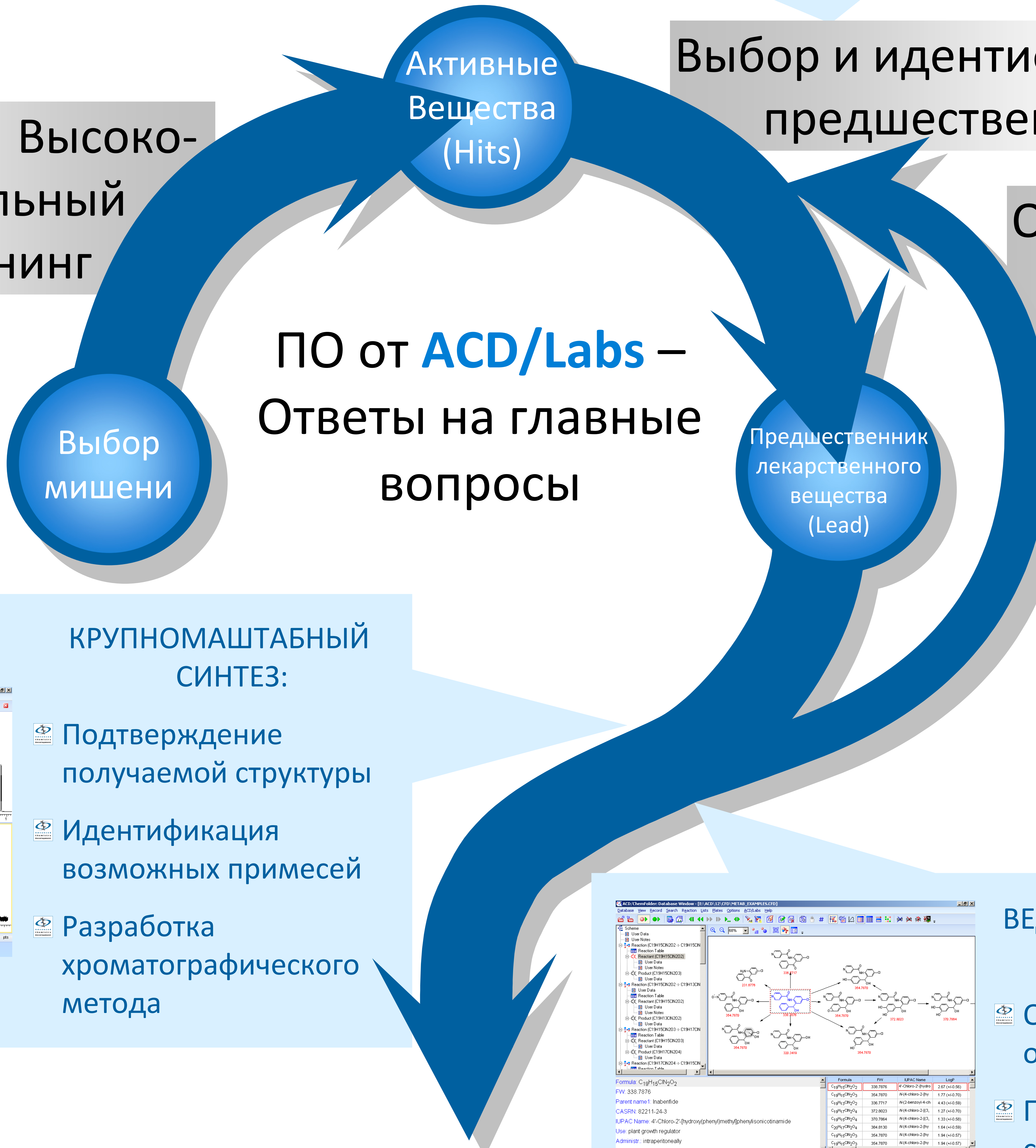
Выявление неблагоприятных свойств (растворимость, блокирование hERG, токсичность)

Structure	logP	logS	Molecular Weight	No. of H-bond	No. of Rot.	TPSA	No. of H-bond	Case 2 Categories	LogP Categories	LogS Categories	Load the categories
<chem>C1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2</chem>	5.0	5.0	107.04	0	0	0.00	1	High	High	Average	Average
<chem>C1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2C3=CC=CC=C3</chem>	5.0	5.0	226.26	0	0	0.00	1	High	High	Average	Average
<chem>C1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2C3=CC=CC=C3C4=CC=CC=C4</chem>	5.0	5.0	352.48	0	0	0.00	1	High	High	Average	Average
<chem>C1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2C3=CC=CC=C3C4=CC=CC=C4C5=CC=CC=C5</chem>	5.0	5.0	477.70	0	0	0.00	1	High	High	Average	Average

РАНЖИРОВАНИЕ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ:

- ADME/Tox профилирование
- Оптимизация важнейших свойств (абсорбция, преодоление BBB)

Высоко-производительный скрининг



ПО от **ACD/Labs** – Ответы на главные вопросы

Выбор мишени

Активные Вещества (Hits)

Выбор и идентификация предшественника

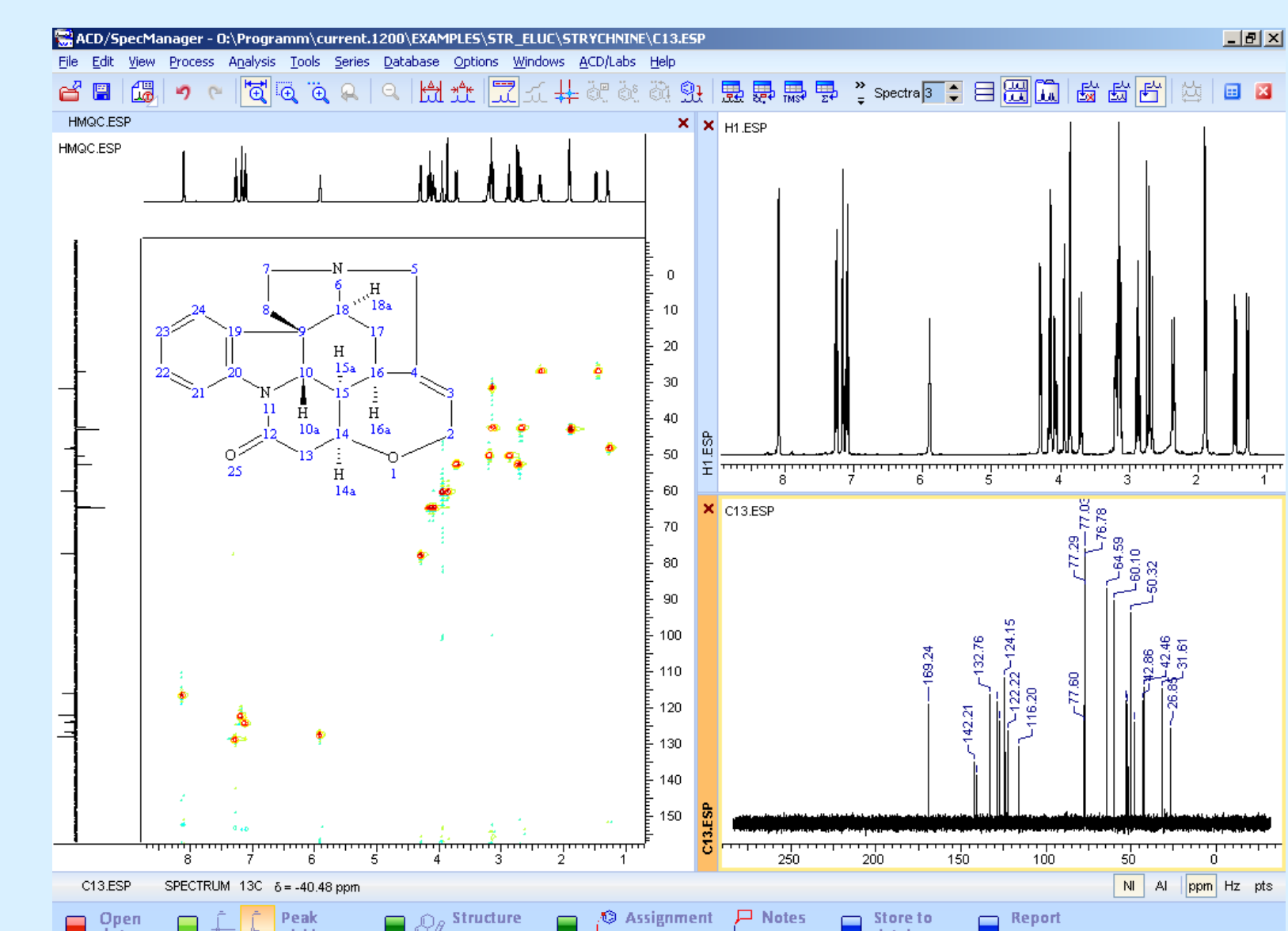
Предшественник лекарственного вещества (Lead)

Оптимизация предшественника

- Обучение модулей полученными экспериментальными данными - повышение точности прогнозов
- Подбор структурных аналогов с оптимальными свойствами в Structure Design Suite

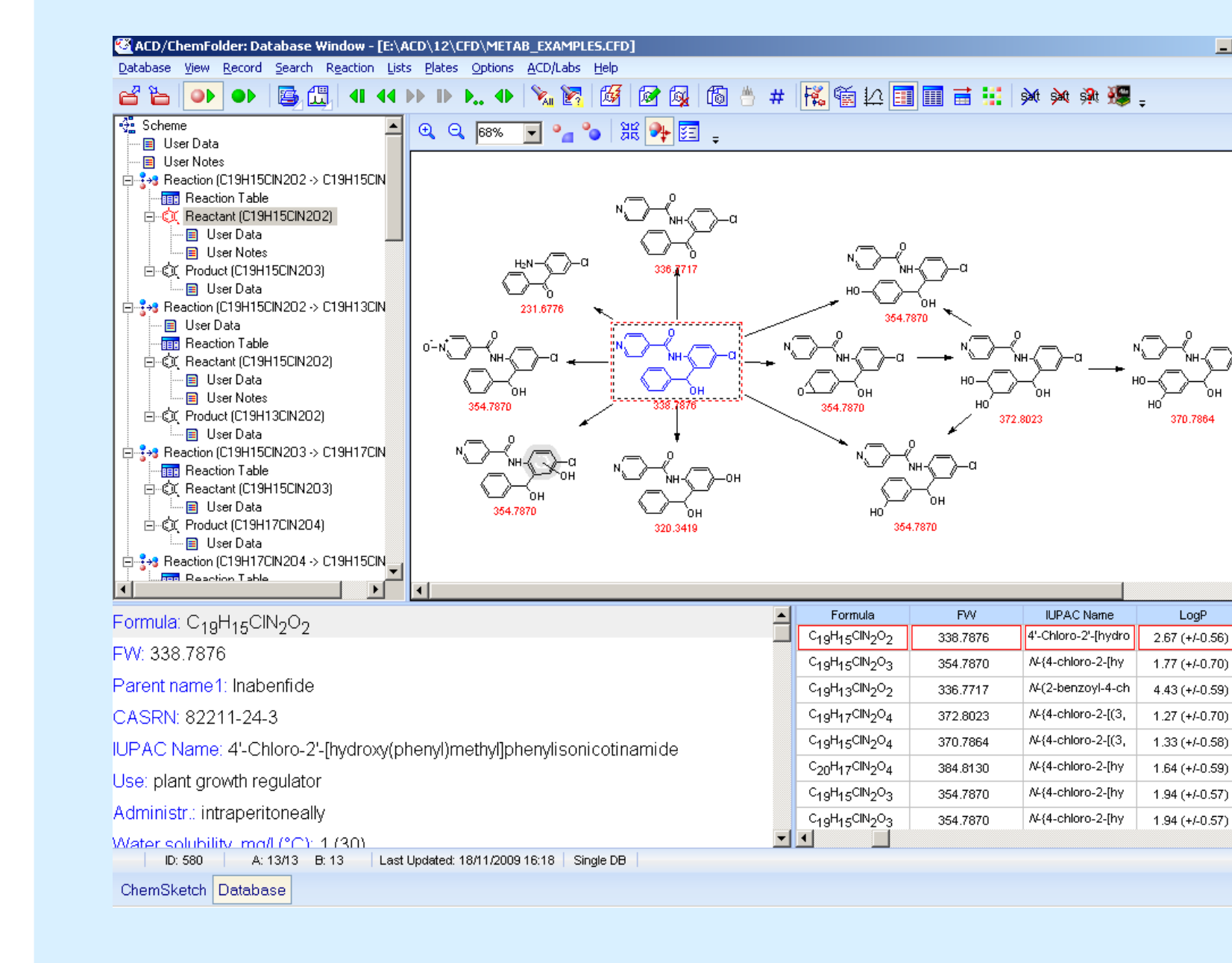
КРУПНОМАСШТАБНЫЙ СИНТЕЗ:

- Подтверждение получаемой структуры
- Идентификация возможных примесей
- Разработка хроматографического метода



ВЕДЕНИЕ И ДОКУМЕНТАЦИЯ ПРОЕКТА:

- Объединение данных в одной программе
- Присвоение номенклатуры соединению

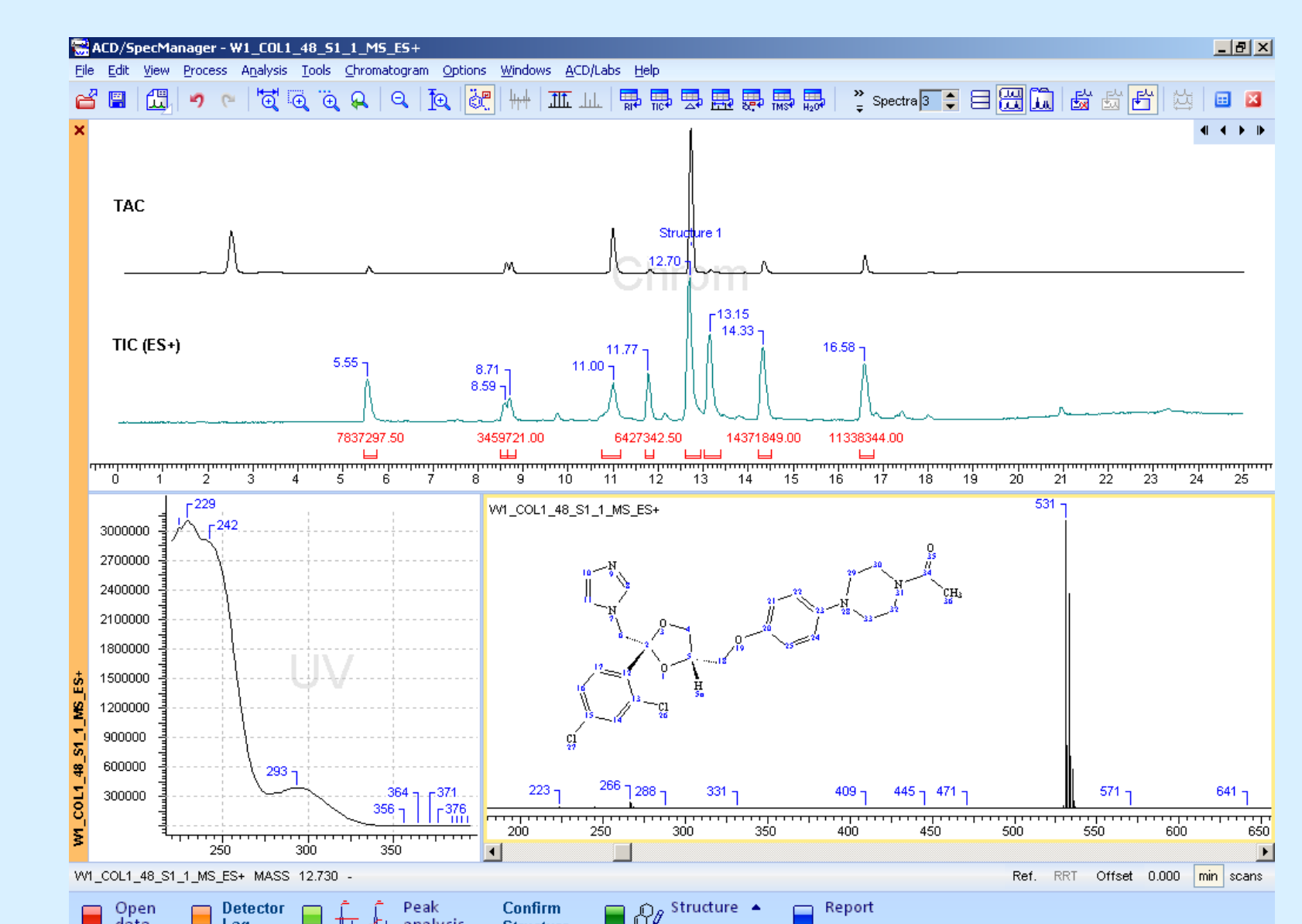


Поддача заявления о новом лекарстве на рассмотрение уполномоченной организации

Кандидат на лекарство

Клинические испытания

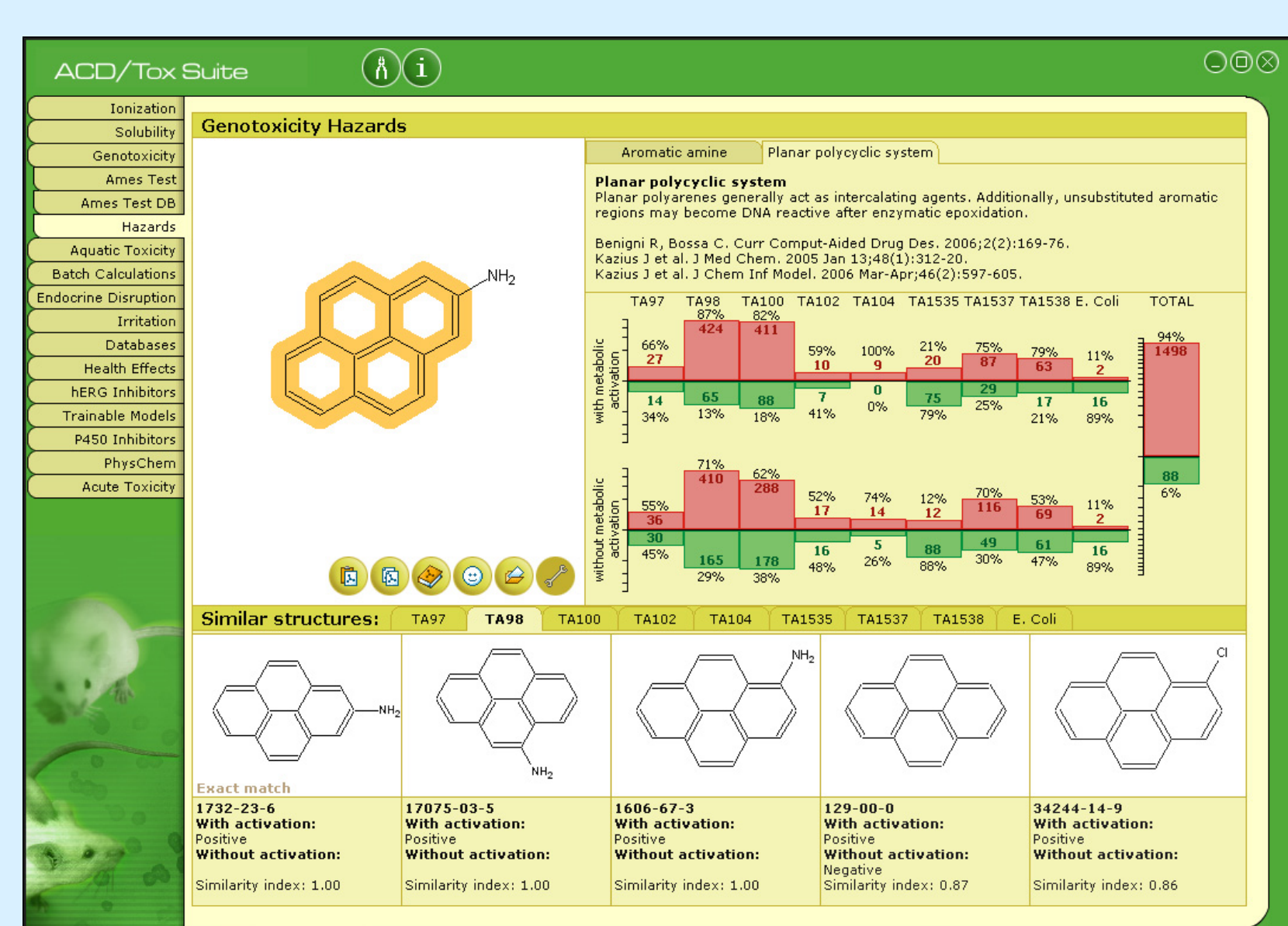
Доклиническая разработка



Идентификация всех возможных метаболитов лекарственного вещества

ОТЧЁТ ПО БЕЗОПАСНОСТИ:

- Определение генотоксичности примесей (AMES тест и др.)



СРЕДИ НАШИХ КЛИЕНТОВ

Pfizer, Bayer AG, GlaxoSmithKline, Abbott, Akzo Nobel, AstraZeneca, Bristol-Myers Squibb, Eli Lilly, Merck, Novartis, Sanofi-Aventis, Takeda