

Excelra社 オンライン統合データベース



Global Online Structure Activity Relationship Database



GOSTAR (Global Online Structure Activity Relationship) は、低分子医薬系化合物情報をWeb上で検索、閲覧、取得することのできる統合データベースです。GOSTARはExcelra社のScientist達が医学・薬学文献、特許、学会等から得られる情報をマニュアルで収集し、情報を取捨選択することによって作成されました。Excelra社は医薬系データベースの開発における世界のリーディングカンパニーであり、医薬品研究開発を強固に支援致します。



検索条件指定画面

Welcome, CTC You are in Search mode | Search | Advanced Search

Wild Card Search?

Structure

Draw Structure OR Enter SMILES/SMARTS

Search Type

Sub-Structure Exact % Similarity % Min Search in Metabolites Toxic Str

Filter By Mol Wt --Select--

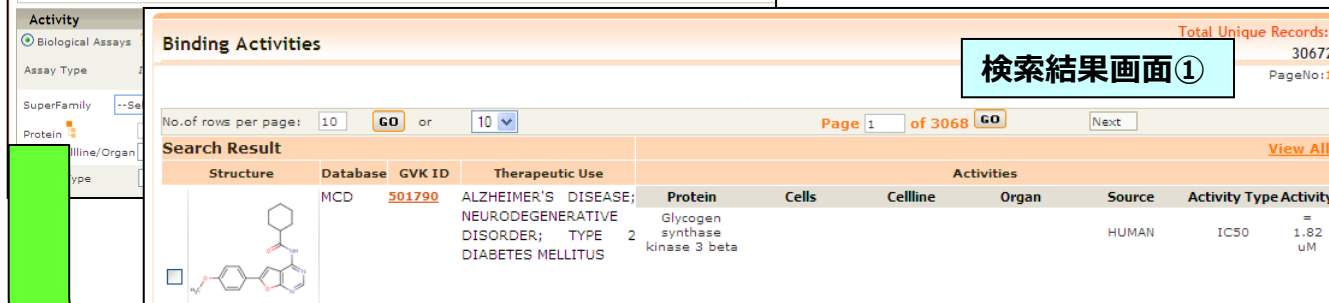
Compound Name CAS No Highest Phase

Indications Lipinski Property -- Select --

[Click here](#) to search by GVKIDs or Structure or Reference IDs or SMILES or SD File

■ 検索機能

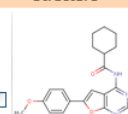
GOSTARは化合物名等の単純な検索だけでなく、タンパク質ファミリー、Assay情報、薬理情報、毒性パラメータ等のより詳細な条件での化合物の検索が可能です。

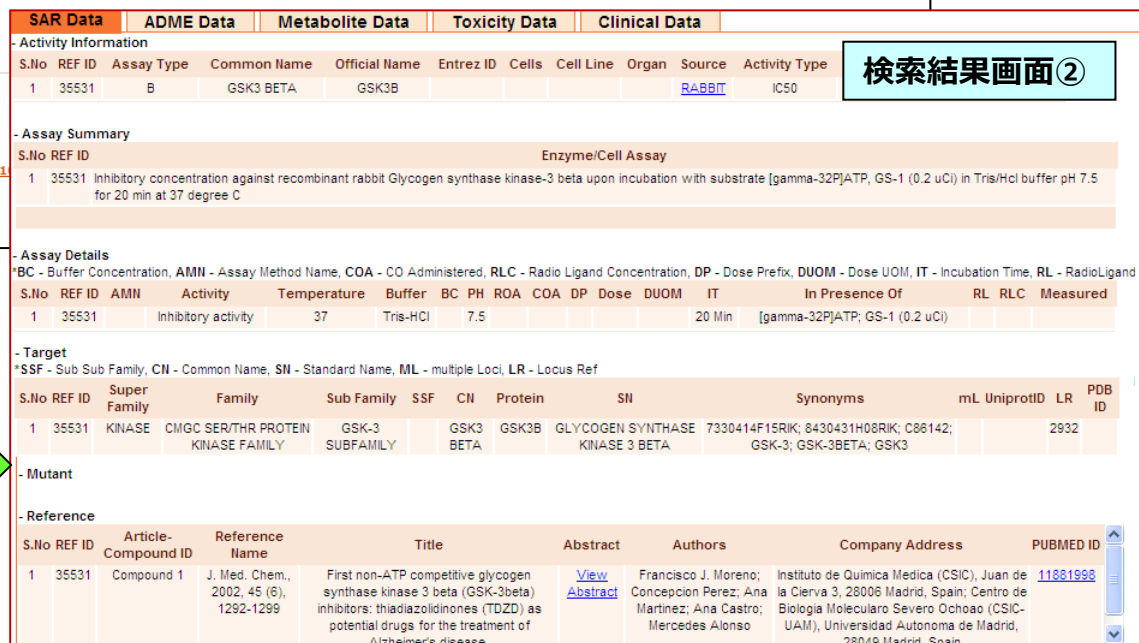


検索結果画面①

Total Unique Records: 30672 PageNo: 1

No. of rows per page: 10 GO or 10 Page 1 of 3068 GO Next

Structure	Database	GVK ID	Therapeutic Use	Activities						
	MCD	501790	ALZHEIMER'S DISEASE; NEURODEGENERATIVE DISORDER; TYPE 2 DIABETES MELLITUS	Protein	Cells	Cellline	Organ	Source	Activity Type	Activity
				Glycogen synthase kinase 3 beta				HUMAN	IC50	= 1.82 uM



検索結果画面②

SAR Data	ADME Data	Metabolite Data	Toxicity Data	Clinical Data													
- Activity Information																	
S.No	REF ID	Assay Type	Common Name	Official Name	Entrez ID	Cells	Cell Line	Organ	Source	Activity Type							
1	35531	B	GSK3 BETA	GSK3B					RABBIT	IC50							
- Assay Summary																	
S.No	REF ID	Enzyme/Cell Assay															
1	35531	Inhibitory concentration against recombinant rabbit Glycogen synthase kinase-3 beta upon incubation with substrate [gamma-32P]ATP, GS-1 (0.2 uCi) in Tris/Hcl buffer pH 7.5 for 20 min at 37 degree C															
- Assay Details																	
*BC - Buffer Concentration, AMN - Assay Method Name, COA - CO Administered, RLC - Radio Ligand Concentration, DP - Dose Prefix, DUOM - Dose UOM, IT - Incubation Time, RL - RadioLigand																	
S.No	REF ID	AMN	Activity	Temperature	Buffer	BC	PH	ROA	COA	DP	Dose	DUOM	IT	In Presence Of	RL	RLC	Measured
1	35531		Inhibitory activity	37	Tris-HCl		7.5					20 Min		[gamma-32P]ATP; GS-1 (0.2 uCi)			
- Target																	
*SSF - Sub Family, CN - Common Name, SN - Standard Name, ML - multiple Loci, LR - Locus Ref																	
S.No	REF ID	Super Family	Family	Sub Family	SSF	CN	Protein	SN	Synonyms	mL	UniprotID	LR	PDB ID				
1	35531	KINASE	CMGC SER/THR PROTEIN KINASE FAMILY	GSK-3 SUBFAMILY	GSK3 BETA	GSK3	GSK3B	GLYCOGEN SYNTHASE KINASE 3 BETA	7330414F15RIK; 8430431H08RIK; C86142; GSK-3; GSK-3BETA; GSK3				2932				
- Mutant																	
- Reference																	
S.No	REF ID	Article-Compound ID	Reference Name	Title	Abstract	Authors	Company Address	PUBMED ID									
1	35531	Compound 1	J. Med. Chem., 2002, 45 (6), 1292-1299	First non-ATP competitive glycogen synthase kinase 3 beta (GSK-3beta) inhibitors: thiazolidinones (TDZD) as potential drugs for the treatment of Alzheimer's disease	View Abstract	Francisco J. Moreno; Concepcion Perez; Ana Martinez; Ana Castro; Mercedes Alonso	Instituto de Quimica Medica (CSIC), Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, Spain; Centro de Biologia Molecular Severo Ochoao (CSIC-UAM), Universidad Autonoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain	11881998									

【特徴】

- 迅速で簡単なWebアクセス。
- 化合物名、構造式、ターゲット名、活性情報等からの検索。
- 検索条件の保存・参照が可能。
- 検索した化合物の活性による分類・ヒートマップ等の解析ツールが充実。
- 最新情報の月次アップデート

■ 解析機能

検索したデータを元に活性値をHeat Map表示する機能や、化合物の構造に対して物性値の散布図の描画機能、LE vs LLEの分布図を作成できる各種データ分析機能を搭載しています。化合物構造と活性値の相関や活性値同士の相関関係の解析に活用できます。



図1: IC₅₀値ごとに色分けされた、EGFRをターゲットとする化合物の分布図

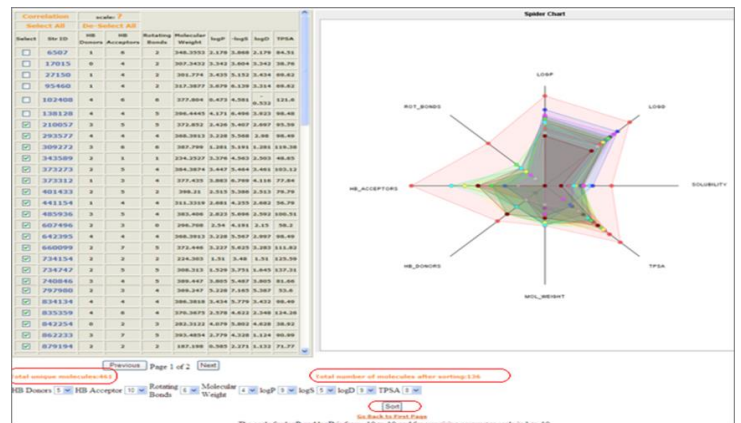


図2: 検索された化合物に対する、LipinskiパラメータのSpider chart

<収録されている主なデータベース>

◎ MedChem DB

100種類以上のMedicinal Chemistry関連の文献を元におよそ5600種以上のユニークなターゲットに対する阻害剤情報を収録。

収録化合物数：90万件以上
 定量的活性情報：580万件以上 (Binding, ADME, Toxicity等)

◎ Target DB

医学・薬学文献、特許、学会情報等を元に10種のターゲットに対する阻害剤情報（活性、ADME/Toxicityなど）を包括的に収録。

収録化合物数：300万件以上
 ターゲットの種類：
 GPCR, Protease, Ion Channel, NHR
 Transferases, Hydrolase, Kinase,
 Phosphatase, Ligase, Transporters,
 Oxidoreductase, Cytokine, Integrin,
 Isomerase, Transfactor

◎ Drug DB/Clinical Candidate DB

上市された医薬品、または治験薬（開発中止になったもの含む）の情報を収録。

収録化合物数：それぞれ、約4,700件/約24,000件
 収録情報：Cmax, Tmax, AUC、代謝物、CYP阻害等

◎ Mechanism Based Toxicity DB

メガファーマとの共同開発により既存医薬品、医薬品候補化合物、毒性化合物等の毒性発現についてその化合物情報、毒性メカニズム情報を収録。

収録化合物数：約26,000件
 収録情報：毒性と障害の種類、代謝酵素、代謝経路図、毒性メカニズム情報、臓器特異的情報