

Cresset 产品介绍

墨灵格，懂你的分子

2014 年 10 月

广州市墨灵格信息科技有限公司

关于 Cresset

Cresset 公司成立于 2002 年，在创始人 Andy Vinter 博士的基础研究上引进新的虚拟筛选技术，是一家世界领先的计算化学软件和咨询服务供应商。过去十年里，Cresset 的技术被新药研发和农业化学工业广泛采用。它帮助研究人员在制药，生物技术，农用化学品，香料，香精和学术界等领域设计和发现更好的化合物。世界上前二十的制药公司绝大多数都在使用它的软件和服务。

产品简介

Cresset 的计算化学软件提供了一个优化化学、为计算与合成/药物化学家的研究项目增加有价值的洞察力的综合工作平台。这些软件得到 Cresset 独一无二的拥有专利的场技术的支持，以化学的“蛋白质眼光”将分子设计和发现进行转化。Cresset 的计算化学软件可以在 Windows、Mac 和 Linux 及其上使用，能够被许多平台包括桌面应用、命令行和 Pipeline Pilot 方案与 KNIME 节点访问。

主要软件

Torch	分子形状与静电场相似性地比较、叠合、虚拟筛选、结构改造。
TorchLite	免费的 3D 分子显示、编辑与绘制，展示分子形状场与静电场。
Forge	生物活性构象确定，SAR 解释与分子设计
Spark	生物电子等排体识别
Blaze	基于配体的高效虚拟筛选
XedTools	创新的分子力学力场，用于结构优化、构象分析

购买前试用

您可以在购买前试用 Cresset 的计算化学软件工具。

请联系我们，索取试用：访问 <http://www.molcalx.com.cn>，点联系我们。

集成 Cresset 产品

Cresset 为产品提供直观的图形用户界面，但许多客户更喜欢将它的创新科学整合到他们现有的 workflow 当中以及定制应用软件。为此，Cresset 发展了 KNIME 和 Pipeline Pilot 组件，让 Forge、Spark 和 Blaze 的所有功能都整合到这些 workflow 解决方案中。同时为流行可视化软件提供插件以使得这些应用软件能够显示 Cresset 独有的场点。请联系我们讨论您的需求。

学术软件补助

为了让学术研究者、教师和学生能用上非常好的计算化学软件，Cresset 提供了一系列低价或免费使用软件的学术授权书。请联系我们了解如何申请。

Cresset 咨询服务

Cresset 的咨询服务团队为满足您项目需求提供灵活的合作研究方案。

Cresset 软件简介

TorchLite, 免费的 3D 分子显示、编辑和绘制软件

TorchLite 是免费的分子显示软件，为您提供一个信息丰富的视角，展示分子在生物系统中的状态。这个强大的分子显示、编辑和创建工具将显示分子的 3D 结构（覆盖有分子场）、2D 结构以及它们的理化性质，让您理解化合物的活性、ADME 和毒理性质是如何与分子场关联起来的。您可以根据您所需的属性的具体组合来筛选分子。复制和粘贴功能使您能在不同的应用中转移分子，以及与其他团队成员分享您的结果。

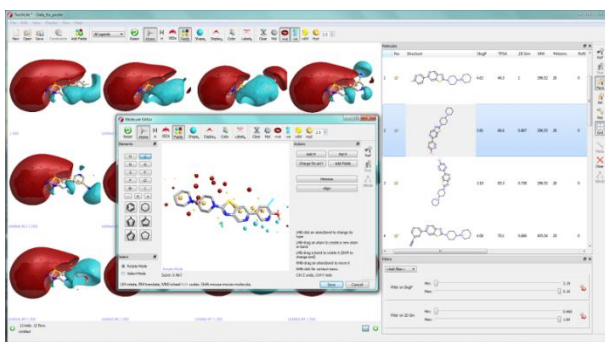


图 1. 与一个先导化合物系列不同成员相联系的变化场和属性。分子所需的理化和实验性质，如 IC50 数据，可以使用过滤器进行选择。

Torch, 药物化学家强大的分子设计和 3D SAR 分析工具

Torch 是一个强大的设计与 3D 构效关系（SAR）软件工作平台。合成/药物化学家使用 Torch 来设计下一个要合成的化合物或者去理解 SAR。Torch 让您能够：

- 通过生物活性将分子关联起来，从而获得对活性更深的理解以及更好的分子设计；
- 从相同或不同系列中比较分子，然后使用比较的结果来去掉虚构的设计或跳跃到新的结构系列。

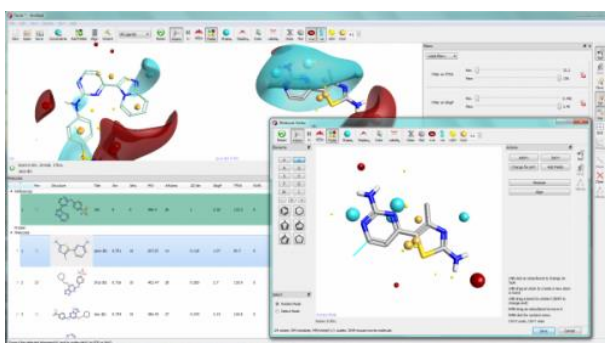


图 2. 给定一个活性分子的 3D 结构和一系列 2D 化合物，Torch 会比较分子的场，为您的化合物产生最好的 3D 叠合。使用 Activity Miner 模块，您能够快速浏览复杂的 SAR，突出关键活性变化。

Spark, 使用电子等排体为您的项目发现新的方向

Spark 是为您的项目产生全新和多样性结构的一个令人振奋的强大方式。它被合成/药物化学家和计算化学家所使用。Spark 使用 Cresset 的场技术寻找分子中关键部分的生物等同替换,让您在新的化学空间中寻找新的结构。使用 Spark 计算化学软件可优化您的先导化合物和提高您的知识产权位置,或者在保持活性并减少 ADME 与毒性问题的同时完全转变骨架。



图 3. Spark 有一个易于使用的界面,能够从一个初始 2D 结构产生一系列先导化分子,并且帮助您根据需要的性质选择最为新颖而易于操控的先导化合物。

Forge,生物活性构象确定, SAR 解释与分子设计

Forge 是一个为理解 SAR 与设计的强大的计算化学套件。Forge 使用分子形状和静电特征,产生定性和定量的 3D 活性模型。采用 Cresset 专利的配体比较方法以生物学的视角叠合、打分和比较分子,经过计算获得这些活性模型。这项技术已经在上百个从虚拟筛选到化合物设计的项目中尝试和测试过。Forge 让这些科学技术在您的研究中唾手可得。

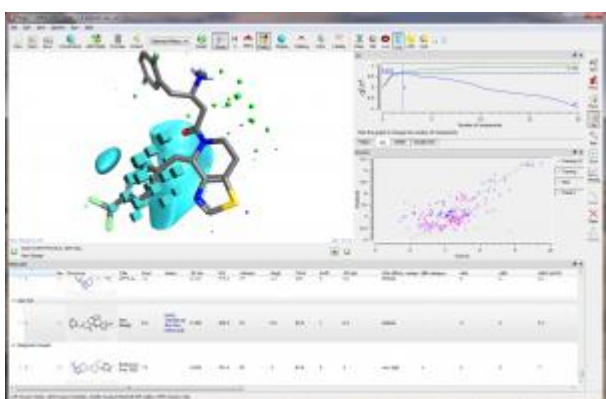


图 4. 仅从一些已知活性配体的 2D 结构开始,Forge 产生在生理条件下配体可能采取的一系列构象。分析这些构象以寻找高度相似的形状和结合性质,从而找到生物活性构象。通过使用 Activity Miner 模块,您可以快速浏览复杂的 SAR,突出关键活性变化。

Blaze , 基于配体的有效虚拟筛选显著提高筛选命中率

Blaze 使用已知配体的形状和静电特征在大型化学集合中快速地搜索性质相似的分子。非常适合于从已知活性化合物中寻找全新的类先导化合物、以非肽取代多肽或以非甾体取代甾体类化合物。对大型化学数据库的生物学智能虚拟筛选能够显著提高您在一定成本下的实验筛选命中率。使用 Blaze 您将提高先导化合物的多样性，跳入新的化学空间区域，大量改进苗头化合物的性质。Blaze 可以在 CPU 或 GPU Linux 集群中使用。Blaze Cloud 使得在一个完全门户网站上可以通过使用 Cresset 的硬件来使用 Blaze。Cresset 的科学家们已经使用 Blaze 执行过上百个项目，命中率高达 30%，且超过 80% 的客户已经报道了他们满意的结果。

XedTools , 迄今最具创新的分子力学力场之一

XedTools(包含 XedeX 和 XedMin 两个模块) 提供了获取一个迄今最具创新的分子力学力场的使用权。XED 使用负电原子的偏离原子电荷更为准确地表示原子周围的电荷密度，做出改进的分子相互作用描述。XedTools 现在包含构象生成和配体最小化。

XedeX

XedeX 是一个使用我们独有的 XED 力场的力场构象探索工具。它用来在少量构象中产生各种各样的能量优化配体构象。XedeX 的性能是超常的，在大多数类药配体中在 100 个构象内重现了

配体的活性构象。使用 XedeX 能给您：

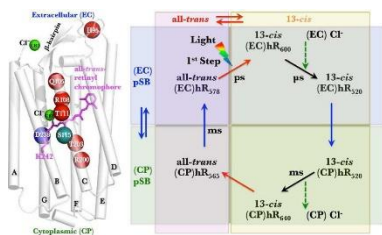
- 多样性构象总体
- 能量可及的和真实的构象总体
- 极好地控制您的构象生成实验
- 在 XED 力场中充分优化构象

XedMin

XedMin 使用 XED 力场优化配体。使用 XedMin 能给您：

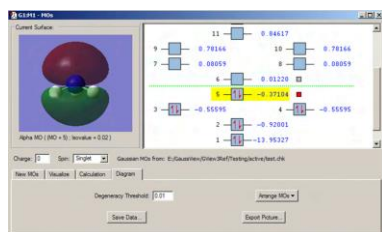
- 准确的、实验上有效的分子间相互作用
- 正确优化 pi-pi 相互作用
- 正确预测阳离子-pi 相互作用
- 各向异性电荷和极化性
- 改进的分子静电力

产品目录



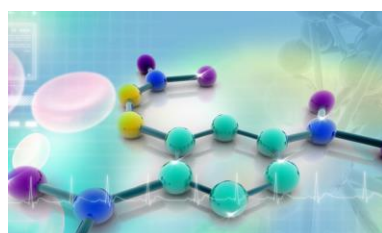
Gaussian 09

著名的量化计算软件，用于模拟气相、液相、固相以及多相等复杂环境下的化学反应机理、弱相互作用、激发态反应、预测各种光谱以辅助化学物结构确证以及预测分子性质。



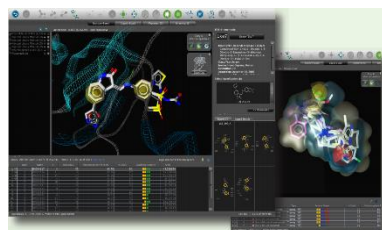
GaussView 5

量化计算视图软件，可以用来展示分子结构、反应、表面、分子轨道、电荷以及自旋多态性等；还可用来输入、搭建分子；创建、提交、监控 G09 计算；获取、分析计算结果。



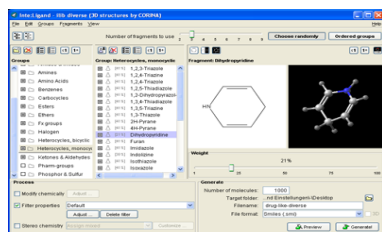
CONFLEX 7

可以快速、准确、自动进行构象搜索和分析，通过穷举搜索找到有化学意义的构象；还用于预测振动频率、热力学性质、CD/UV-Vis 光谱、3JHH NMR 耦合常数、晶体结构。



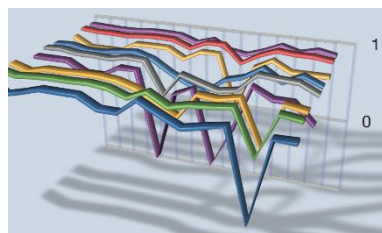
LigandScout 3

基于 3D-药效团模型进行精确虚拟筛选的集成平台，支持基于配体或基于结构的药效团建模；还包含了一个全新的高性能叠合算法，具有前所未有的筛选速度与高质量预测能力。



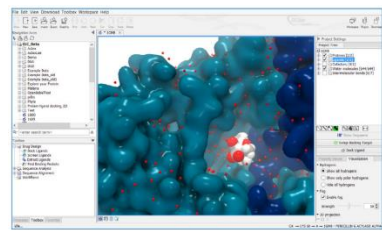
Inte:Ligand Diverse

Inte:Ligand 公司推出的一款虚拟化合物库设计软件，可以帮助科研人员设计多样、高质量的虚拟化学物库。



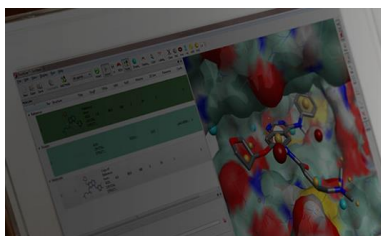
PharmacophoreDB

该药效团数据库是一个化合物靶点预测工具，可以从小分子的化学结构出发，全自动、非常方便地推导出药物的作用谱，是老药新用、副作用预测的理想工具。



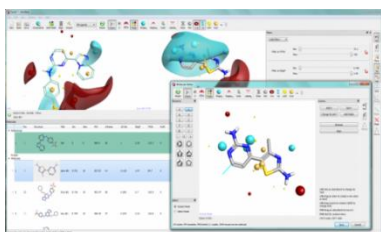
CLC Drug Discovery Workbench

原名 Molegro，是一款用于高精度结合模式预测的分子对接软件，支持从 2D 或 SMILES 代码生成小分子 3D 结构、序列比对、结合位点分析以及基于结构的药物发现等。



TorchLite

TorchLite 是免费的分子显示软件。这个强大的分子显示、编辑和创建工具将显示分子的 3D 结构（覆盖有分子场）、2D 结构以及它们的理化性质，让您理解化合物的活性、ADME 和毒理性质是如何与分子场关联起来的。



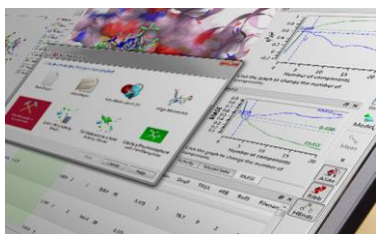
Torch

Torch 是一个强大的设计与 3D 构效关系 (SAR) 软件工作平台。合成/药物化学家使用 Torch 来设计下一个要合成的化合物或者去理解 SAR。



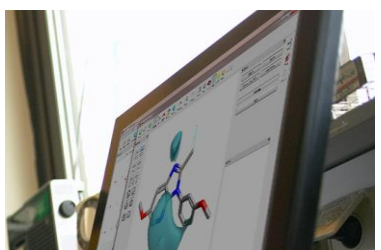
Spark

Spark 是产生全新和多样性结构的强大软件。它使用 Cresset 的场技术寻找分子中关键部位的生物等同替换，让您在新的化学空间中寻找新的结构。Spark 可用来优化先导化合物和提高你的知识产权位置，或者在保持活性并减少 ADME 与毒性问题的同时完全转变骨架。



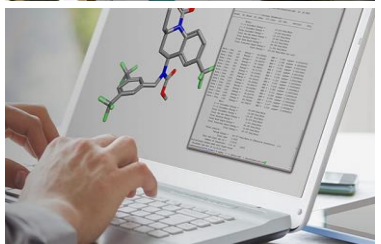
Forge

Forge 是专为理解 SAR、进行药物设计而开发。它用分子形状和静电特征来生成定性和定量的 3D 模型。这个 Cresset 专有的配体比较方法以经被几百个成功的虚拟筛选项目所验证，现在可触手可得。



Blaze

Blaze 是一个大型化合物库智能虚拟筛选软件。它用形状和静电特征相似比较技术在大型的数据库中快速地搜索出性质相似的分子。适合于骨架替换、以非肽取代多肽或以非甾体取代甾体类化合物的等骨架跃迁项目。



XedTools

XedTools 为您提供了最具创新的分子力学力场。XED 使用偏心原子电荷模型，能够准确地描述原子周围的电荷密度，进而获得分子相互作用描述。XedTools 可以用来进行 3D 构象生成和配体能量最小化。



Molecular Conceptor

《Molecular Conceptor》是一个基于计算机的电子教学课程，该课程由五个学习模块组成，每个模块专门为药物发现领域的学生和教授们提供面临哪怕最难的药物设计挑战所需要的综合训练。适合于药学院、课题组用来进行药物设计、药物化学的教学与培训，或自学使用。

服务

智能化合物管理系统

ACER 上海交大自主开发的实验室信息管理系统，适合于课题组项目管理、化学品管理、实验进度(化学、生物学)跟踪以及电子实验记录。支持 Safari, FireFox, IE, Chrome 等主流浏览器，支持 PC、智能手机等终端操作。

Molcalx Docking

分子对接技术是常用的药物设计手段，但是分子对接计算需要繁琐的靶点结构与小分子结构准备过程。墨灵格提供了在线的虚拟筛选系统，只需选择对接靶点以及输入需要对接的化合物结构，就可以轻松完成对接计算。

Target Fishing

墨灵格提供靶点预测服务。靶点预测采用反向分子对接与分子化学结构相似性比较来实现，包含了 2900 个蛋白靶点。

培训服务

全年提供定制培训服务，包括 ECD 计算、QM/MM 模拟、3D-QSAR 建模、药效团建模与虚拟筛选等等。

技术交流与服务

我们提供了在线交流方式，为大家提供技术服务。请访问我们的技术交流平台，注册提交您的问题。我们鼓励用户们互相交流、互相帮助。

<http://www.molcalx.com.cn/forum>

广州市墨灵格信息科技有限公司

关于我们

广州墨灵格信息科技有限公司是美国 Gaussian 公司、奥地利 Inte:ligand 公司、以色列 Synergix 公司以及日本 CONFLEX 公司、英国 Cresset 公司在中国与香港等地区的软件代理商。除了软件，我们还提供培训让您快速上手解决您的问题。

联系我们

地 址：广州市龙口东路 34 号龙口科技大厦 2002 室

邮 编：510630

电 话：020-38261356, 38915003

邮 件：info@molcalx.com

网 站：<http://www.molcalx.com.cn>

新浪微博：<http://www.weibo.com/molcalx>

腾讯微博：<http://t.qq.com/molcalx>