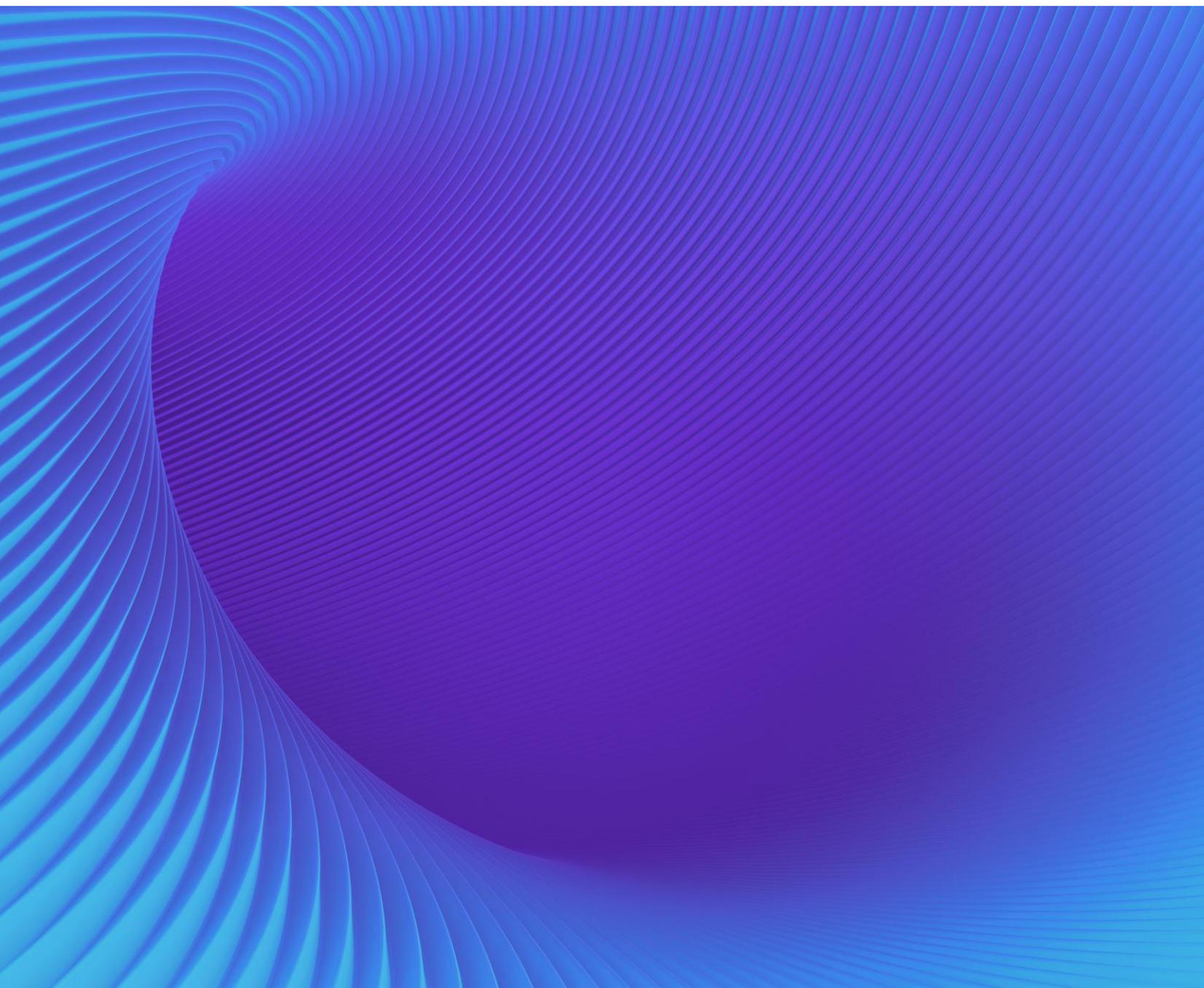


Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)

ユーザーガイド

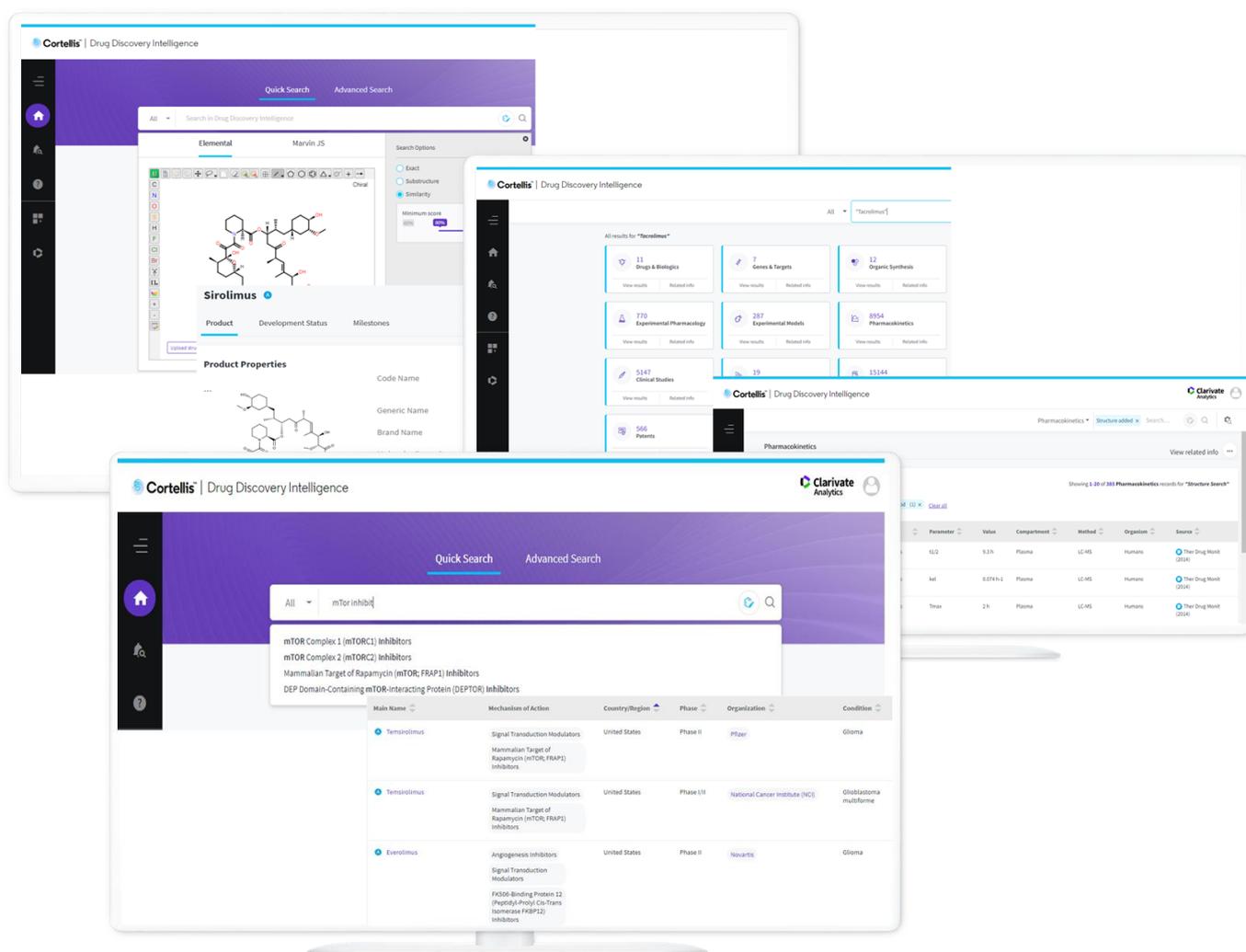
2020年1月版



Cortellis Drug Discovery Intelligence (CDDI)

世界中の製薬企業などで現在および過去に研究開発された生理活性物質に関する情報の統合データベースです。生理活性物質に関連する情報は、12の知識分野（Knowledge Area）に分類され格納されています。各々の知識分野にある関連情報は相互にリンクされており、簡単な操作で入手することができます。

<https://www.cortellis.com/drugdiscovery> からアクセスしてください。



目次

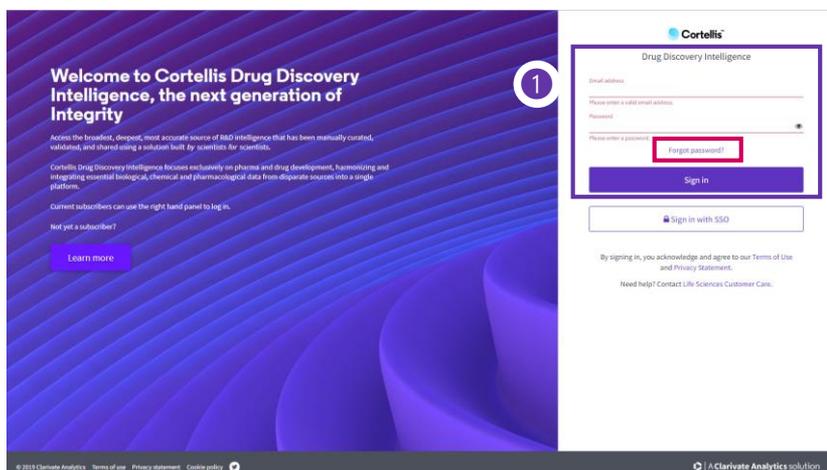
1.	CDDIの概要	3
2.	CDDIへのアクセス	4
3.	ホームページ	4
4.	Quick Search	5
5.	Advanced Search	5
6.	化合物構造検索	7
7.	検索結果ページ－結果リスト	8
	検索結果ページ－フルレコード	9
8.	Export－検索結果一覧の出力	10
9.	Alert－特定検索式にアラートを設定	11
	Alert－特定のレポートの更新状況を監視	12
	Alert－検索式・アラートの管理	13

1. CDDIの概要

Knowledge Area	情報のカバー開始年	内容
Drugs & Biologics	1988	生理活性物質：医薬品名、構造、作用機序、対象疾患、開発段階、開発企業等の情報を提供。約90%のレコードに化学構造式が存在。
Genes & Targets	2004	遺伝子・ターゲット：遺伝子に関連した研究情報をvariantやstudy type、疾患で分類すると共に、生理活性物質の標的となるタンパク質や遺伝子の情報を提供
Organic Synthesis	1970s	合成経路：生理活性物質の合成スキームと反応中間体/試薬情報を提供。
Experimental Pharmacology	1998	薬理実験：生理活性物質を用いたin vitro, in vivoの実験結果を数値で収載。
Experimental Models	2012	動物モデル：薬理実験で使用する動物モデル(種, 遺伝子改変, 等)に関する情報を提供。
Pharmacokinetics	2000	薬物動態：薬物動態の各種パラメーターを数値で収載。
Biomarkers (Add-on module)	2007	バイオマーカー：roleやvalidityを付与したバイオマーカー情報、バイオマーカーの用途情報を提供。(要追加契約)(2020年4月より利用開始予定)
Clinical Studies	2000	臨床試験：臨床試験中・上市済薬剤の臨床試験レポートに関する情報を提供。
Organizations	2000	開発機関：医薬品の研究開発を行っている企業/研究機関に関する情報を提供。
Literature	1988	文献：学術雑誌等の書誌事項とオリジナル文献へのリンクを提供。
Patents	1988-WO,EP,JP,US 2010-CN,KR,IN	特許：特許の書誌事項を提供。明細書のPDFダウンロードが可能。
Disease Briefings	2000	疾病の解説：患者数・疾患要因・予防方法・診断方法・治療方法に関する情報を提供。

情報源	内容	
文献	医薬品化学、有機合成、実験薬理学、臨床薬理学、バイオマーカー、ゲノミクスの分野で毎年レビューされている1,500以上のジャーナル。	
学術会議	医薬品化学、有機合成、実験薬理学、臨床薬理学、バイオマーカー、ゲノミクスの分野で毎年開催されている160以上の学術会議。	
企業からの情報	製薬企業、バイオ技術系企業のプレスリリースや会社情報。	
規制文書	FDA(US), EMA(EU), PMDA(Japan), TGA(Australia)による規制文書。	
ClinicalTrials.gov	ClinicalTrials.govの臨床試験情報。	
特許	国	収載までの期間
	WO, EP	1-2日
	JP	5-6日
	US	7-8日
	CN, KR, IN	25日

2. CDDIへアクセス <https://www.cortellis.com/drugdiscovery>



① Email addressとPasswordを入力し、Sign inをクリックしてCDDIに接続します。

注意

既に以下のクラリベイト製品にユーザ登録がある場合、Passwordはすべて共通です。

Cortellis, Drug Research Advisor, Key Pathway Advisor, Web of Science, ResearcherID, Derwent Innovation, InCites, EndNote

3. ホームページ

サブメニュー

ホーム画面への移動や、保存したアラートの確認、別のCortellisファミリーへのリンクが可能です。

検索機能

- ① Quick Search
- ② Advanced Search

* 各検索機能の説明は、8ページ以降でご確認ください。

Today's News

疾患・生理活性物質に関する本日の最新のニュースを確認できます。

Today's Featured Patents

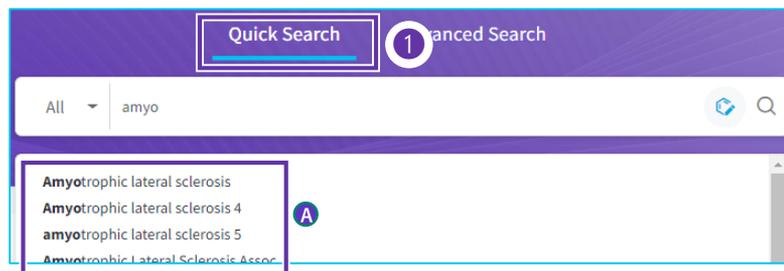
CDDIに収録された最新の特許情報を確認できます。

Conferences

疾患・生理活性物質に関する学会・文献における最新の報告を確認できます。

4. Quick Search

すべてのKnowledge Areaを一括してテキスト検索することができます。



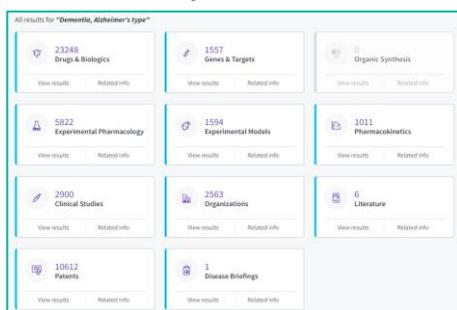
① 検索ウィンドウにテキストを入力して、「Q」をクリックします。

Ⓐ 統制語のサジェスト機能を利用可能

- ・論理演算子：AND、OR、NOTをサポート
- ・ワイルドカードを利用可能
 - ・*(アスタリスク)：任意の文字列
 - ・?(クエスチョンマーク)：1文字
- ・フレーズ検索の場合は" "で囲んでください。

Quick Searchのメリット

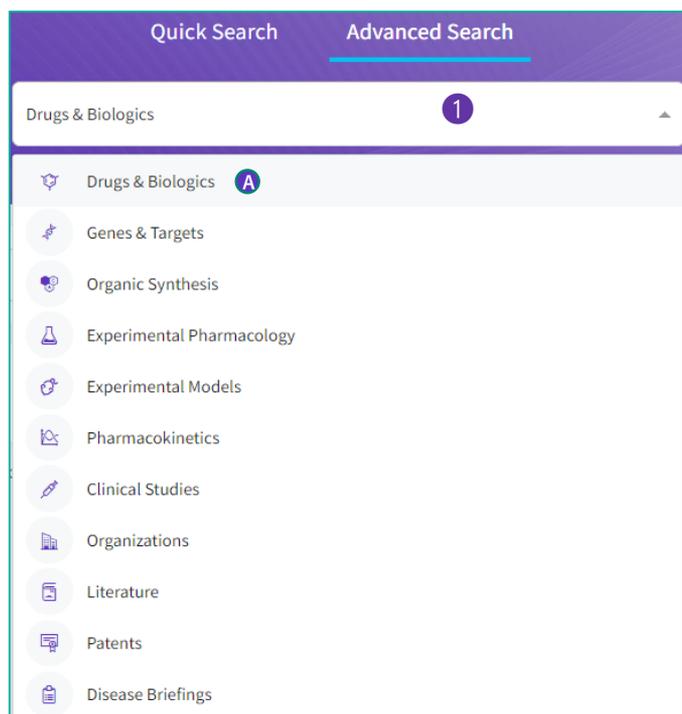
- すべてのKnowledge Areaを対象に一括検索するので、結果を見て、最も調査目的にあったKnowledge Areaや、ヒット件数が多いKnowledge Areaから調査を始めることができます。



- 統制語となっていない疾患名などの検索が可能です。

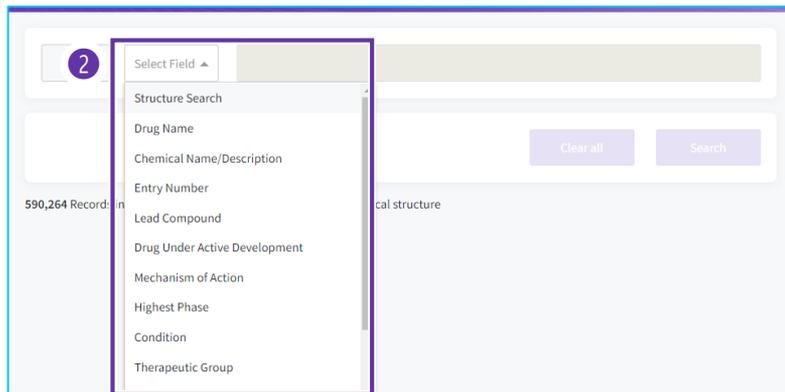
5. Advanced Search

Knowledge Areaごとに、複数の条件を組み合わせたより具体的な目的に応じた検索することができます。

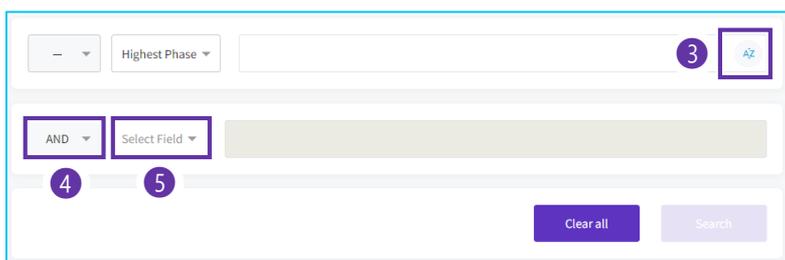


① 検索したいKnowledge Areaを選択します。

Ⓐ ここではDrugs & Biologicsを例に説明します。



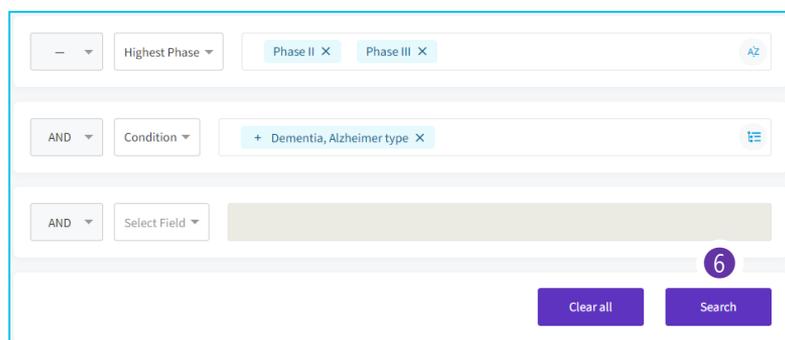
② Select Fieldをクリックすると項目の一覧が表示されますので、検索したい項目をクリックします。



③ 検索窓の一番右のIndexボタンをクリックして、検索タームを選択します。

④ 検索条件を複数設定する場合は、AND/OR/NOTで検索条件を組み合わせることができます。

⑤ 検索条件を複数選択する場合は、Select Fieldをクリックし検索したい項目一覧を表示させて、②、③と同じ操作を行います。



⑥ 指定した検索条件を確認して、[Search] をクリックすると、検索結果の一覧が表示されます。

Entry Number	Highest Phase	Code Name	Generic Name	Brand Name	Product Category	Therapeutic Group	Mechanism of Action	Organization
1016257	Phase II	AR-1001				Alzheimer's Dementia, Treatment of Vascular Dementia, Treatment of	Phosphodiesterase PDE5A Inhibitors Signal Transduction Modulators	Aribio (Originator)
1005110	Phase II	N-831 NA-831	Traneurocin			Alzheimer's Dementia, Treatment of Cognition Disorders, Treatment of		NeuroActiva (Originator)
992305	Phase II	AKST-6019 ALK-6019 GRF-6019			Natural Products Plasma-Derived Proteins Polypeptides, from 41 AA	Alzheimer's Dementia, Treatment of Antiparkinsonian Drugs		Alkahest Grifols (Originator)
990667	Phase II	[18F]MNI-960			Fluorine-Radiolabeled	Diagnosis of Alzheimer's Disease	Drugs Targeting Microtubule-Associated	AC Immune (Originator)

6. 化合物構造検索

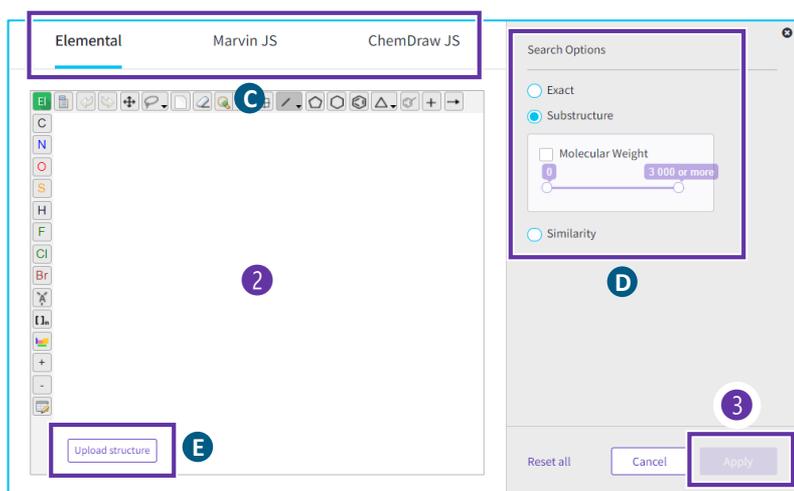
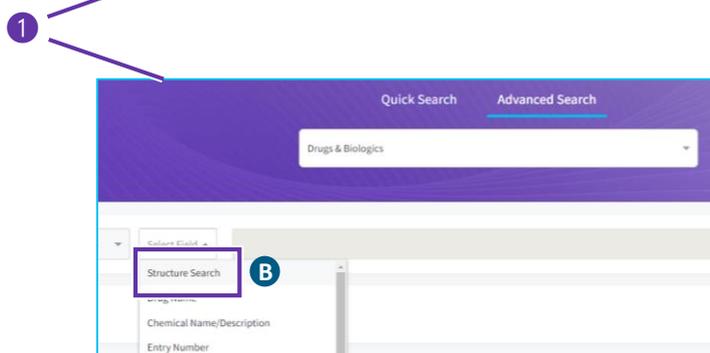
Quick Search、Advanced SearchのすべてのKnowledge Areaで化合物構造検索ができます。



① 構造ウィンドウを開きます。

A [Quick Search]
検索ウィンドウの右にある構造ボタンをクリックします。

B [Advanced Search]
Select Fieldのドロップダウンリストの中から「Structure Search」を選びます。



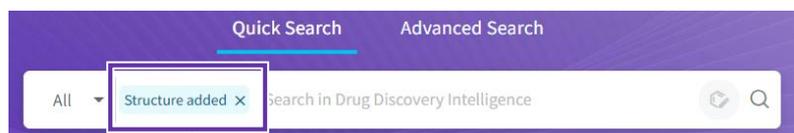
② Structure Editor画面が開きます。検索したい化合物構造を描画します。

C 3種類の構造描画ソフトから選択できます。

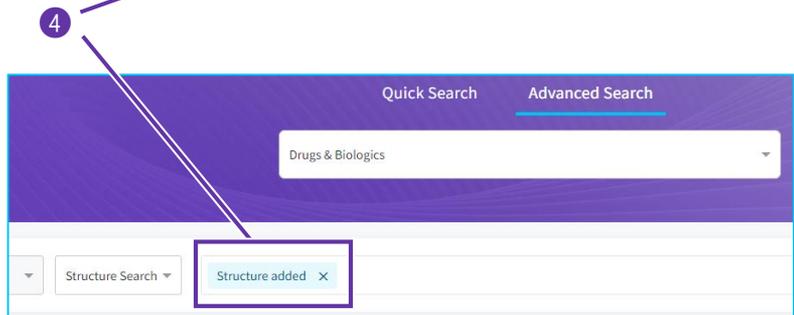
D [Exact][Substructure][Similarity]の3種類の検索方法を選択できます。

E molファイルをアップロードすることも可能です。

③ 構造を入力したらApplyをクリックします。



④ Quick Search、Advanced Searchのそれぞれ検索窓に「Structure added」の項目が入力され、検索に反映させることができます。



7. 検索結果ページ – 結果リスト

Entry Number (Drugs & Biologicsの場合)

検索結果の各 [Entry Number] をクリックすると、Drug Reportが開きます。

[Entry Number] の左横に **A** が付いているレコードは、“Under Active Development” = 最大過去18か月間以内に学会や企業プレスリリース等で開発中であることを表す情報があつた化合物であることを示しています。

Entry Number	Highest Phase	Code Name	Generic Name	Brand Name	Product Category	Therapeutic Group	Mechanism of Action	Organization
1016257	Phase II	AR-1001				Alzheimer's Dementia, Treatment of Vascular Dementia, Treatment of	Phosphodiesterase PDE5A Inhibitors Signal Transduction Modulators	Aribio (Originator)
1005110	Phase II	N-831 NA-831	Traneurocin			Alzheimer's Dementia, Treatment of Cognition Disorders, Treatment of		NeuroActiva (Originator)
992305	Phase II	AKST-6019 ALK-6019			Natural Products Plasma-Derived Proteins	Alzheimer's Dementia, Treatment of Antiparkinsonian Drugs		Alkahest Grifols (Originator)

Apply Filter

検索結果を様々な項目で絞り込みや分析することができます。

Option機能

クリックするとAlertの設定、Exportなどのメニューが表示されます。

Save & Alert
Keep Me Posted
Hide structures
Export

View related info

このリストに関連する他のナレッジエリアの情報にリンクします。

7. 検索結果ページ - フルレコード

情報切り替えタブ

Product、Development Status、Milestonesそれぞれの情報はタブを切り替え確認できます。
 [Development Status]：国や開発会社ごとに開発情報の詳細、投与方法、剤形などを閲覧可能。
 [Milestones]：開発上の主だった出来事の履歴を確認できます。

Atorvastatin calcium
View related info ...

Product
Development Status
Milestones

Product Properties

Standard InChI InChI=1S/2C33H35FN2O5.Ca/c2*1-21(2)31-30(33(41)35-25-11-7-4-8-12-25)29(22-9-5-3-6-10-22)32(23-13-15-24)34(16-14-23)36(31)18-17-26(27)19-27(38)30-28(39)40;h2*3-16,21,26-27,37-38H,17-20H2,1-2H3,(H,35,41)(H,39,40);q;+2/p-2/t2*26-,27-;/m11,/s1

Standard InChIKey FQCKMBLYCEJJB-MNSAWQCSA-L

Code Name	YM-548 CI-981 OXP-003
Generic Name	Atorvastatin calcium
Brand Name	Sortis Torvast Lipitor Lipibec Show 5 more
Molecular Formula	C66H68CaF2N4O10
Molecular Weight	1155.342
Chemical Name/Description	7-[2-(4-Fluorophenyl)-5-isopropyl-3-phenyl-4-(N-phenylcarbamoyl)-1H-pyrrrol-1-yl]-3(R),5(R)-dihydroxyhepta noic acid calcium salt (2:1)
CAS Registry Number*	134523-03-8 134523-00-5 (free acid) 110862-48-1 (free acid (R*,R*)-isomer)

Product Information

Entry Number	180072	Therapeutic Groups	Alzheimer's Dementia, Treatment of Antiarrhythmic Drugs Asthma Therapy Breast Cancer Therapy Show 16 more
Highest Phase	Launched - 1997	Organization	Yamanouchi (Astellas Pharma) Almirall Astellas Pharma Baylor College of Medicine (BCM) Show 14 more
Molecular Mechanism	3-Hydroxy-3-Methylglutaryl-Coenzyme A Reductase (HMGCR) Inhibitors Dipeptidyl Peptidase IV (CD26; DPP-IV; DP-IV) Inhibitors TNFSF6 Expression Inhibitors	Record Creation Date	Jun 14, 2002
Cellular Mechanism	Signal Transduction Modulators	Last Updated Date	Dec 20, 2019
Prescription/Designation Type	Pediatric		

Development Status Summary

Phase	Condition	Organization
Launched - 2005	Coronary artery disease	Pfizer
Launched - 2005	Lipoprotein disorders	Pfizer
Launched - 2004	Angina pectoris, unstable	Pfizer
Launched - 2000	Hypercholesterolemia	Astellas Pharma Pfizer
Launched - 1997	Hyperlipidemia	Pfizer
Launched	Dyslipidemia	Almirall
Launched	Hypercholesterolemia, familial	Pfizer

Regulatory Information

Lipitor approval (NDA 020702)
 Drugs@FDA Web Site 2012, October 31
[Drugs & Biologics 1](#)

Lipitor approval information
 Drugs@FDA Web Site 1996, December 17
[Drugs & Biologics 1](#)

Product Summary

Atorvastatin calcium is an HMG-CoA reductase and TNFSF6 expression inhibitor originally launched in 1997 as Lipitor(R) as an adjunct to diet to treat hyperlipidemia and in 2000 for hypercholesterolemia. In 2004, the FDA approved a new indication for atorvastatin calcium: the treatment of adult patients without clinically evident coronary heart disease (CHD), but with multiple risk factors for CHD, to reduce the risk of myocardial infarction and to reduce the risk of revascularization procedures and angina. The following year, the FDA approved the compound to reduce the risk of stroke and heart attack in people with type 2 diabetes without evidence of heart disease but with other risk factors. An additional indication was approved in 2007: to reduce the risk of nonfatal heart attacks, fatal and non-fatal strokes, certain types of heart surgery, hospitalization for heart failure, and chest pain in patients with heart disease. In 2006, atorvastatin calcium was approved for the primary prevention of cardiovascular events in high coronary heart disease risk patients without established CAD. In 2009, Pfizer submitted phase III data to the EMA seeking approval of both regular tablets and chewable tablets for the treatment of pediatric familial hypercholesterolemia. In 2010, approval was granted in the E.U. Pfizer is currently evaluating the potential of atorvastatin calcium in phase II/III trials for the prevention of atrial fibrillation and for the treatment of systemic lupus erythematosus. The company is also conducting phase II clinical trials to improve graft patency after coronary bypass and phase III trials for the treatment of retinal vein occlusion. Stanford University is developing Phase II studies for the treatment of non-Hodgkin's lymphoma. Phase II clinical trials are ongoing at The National Institute of Allergy and Infectious Diseases (NIAID) for multiple sclerosis (MS). Phase II clinical trials have been conducted at the Children's Hospital of Philadelphia in combination with insulin therapy in children and young adults with newly diagnosed disease, however, no recent developments have been reported for this research. National Institute of Arthritis and Musculoskeletal and Skin Diseases (NIAMS) is testing the compound in phase II clinical studies for the treatment of early diffuse systemic sclerosis. Pfizer had been developing the compound for the treatment of Alzheimer's type dementia. The National Heart, Lung, and Blood Institute completed phase II clinical trials for the treatment of pulmonary sarcoidosis. Baylor College of Medicine (BCM) is conducting phase II clinical studies at Baylor College of Medicine (BCM) for the treatment of traumatic brain injury. Ohio State University is conducting phase II clinical trials for the prophylaxis of acute graft versus host disease (GVHD) in patients with hematological malignancies undergoing human leukocyte antigen (HLA)-matched related donor hematopoietic stem cell transplant (HSCT). Phase II trials have been underway at Queen's University and at Grenoble University Hospital for the treatment of asthma and for the treatment of obstructive sleep apnea, respectively; however, recent progress reports are not available at present. According to a 1993 license agreement, Yamanouchi and Pfizer copromote Lipitor(R) in Japan. Pfizer acquired the rights to Lipitor(R) in 2000 following the company's acquisition of Warner-Lambert. Lipitor(R) has been commercialized in several countries worldwide.

Related Content

Drugs & Biologics	50
Genes & Targets	3
Organic Synthesis	67
Experimental Pharmacology	553
Experimental Models	269
Pharmacokinetics	4293
Clinical Studies	2599
Organizations	13
Literature	6572
Patents	609
Disease Briefings	4

Related Content

レコードの生体活性物質に関連する他のナレッジエリアの情報にリンクします。

Product Properties

生体活性物質の構造情報、名前、分子量などの情報を確認できます。Aをクリックすると構造情報のMolfileやSMILESをExportできます。

Product Information

生体活性物質の最高開発段階や作用機序、開発企業などの情報を確認できます。

Regulatory Information

FDA、EMAによる承認情報を確認できます。

Development Status Summary

臨床開発情報のサマリーを確認できます。詳細な情報についてはページ上部の情報切り替えタブからDevelopment Statusに切り替えることで確認できます。

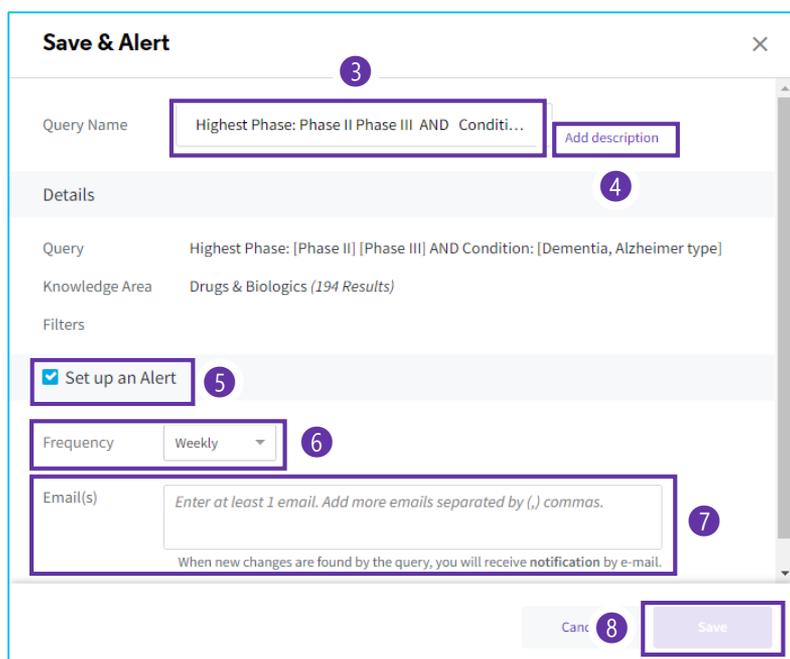
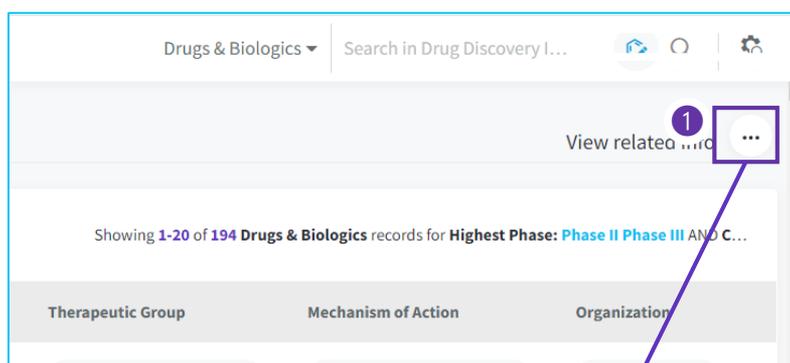
Product Summary

生体活性物質に関する様々な情報を文章としてまとめられたものを確認できます。

© 2019 Clarivate Analytics

9

9. Alert – 特定検索式にアラートを設定



① 検索結果画面の右上のオプションボタンをクリックしてメニューを表示します。

② オプションメニューから [Save & Alert] をクリックして設定画面を開きます。

③ ファイルの名前を必要に応じて変更します。

④ 必要に応じてクリックしてDescriptionを記入します。

⑤ Alert設定を行う場合は、[Set up an Alert]の左のボックスにチェックを入れます。

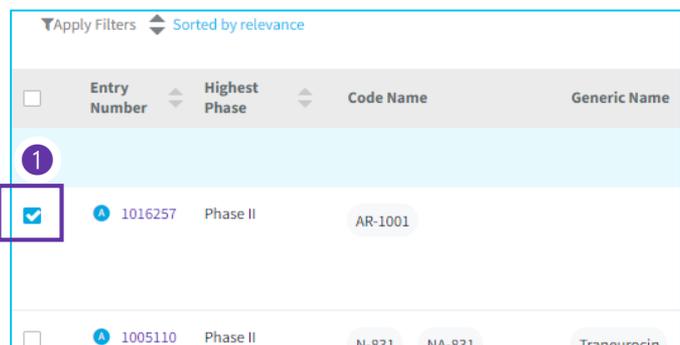
⑥ プルダウンメニューからアラートの実行頻度を設定します。
実行頻度は、以下のとおりです。

- ・毎日 (Daily)
- ・週に一度 (Weekly)
- ・4週間に一度 (Every 4 weeks)

⑦ アラートを他のユーザと共有したい場合は、こちらにメールアドレスを入力します。デフォルトでは自身のメールアドレスのみが入力されています。

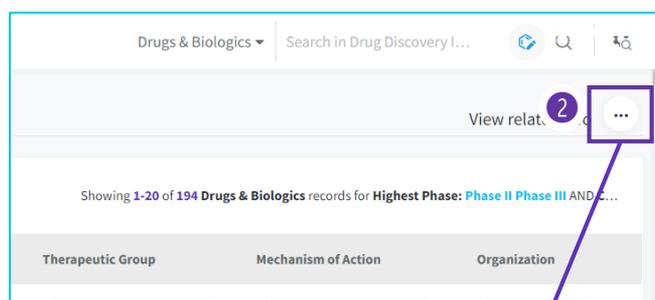
⑧ [Save]をクリックします。

9. Alert – 特定のレポートの更新状況を監視



- 更新状況を監視したいレコードについて、Entry Numberの左のボックスにチェックを入れます。

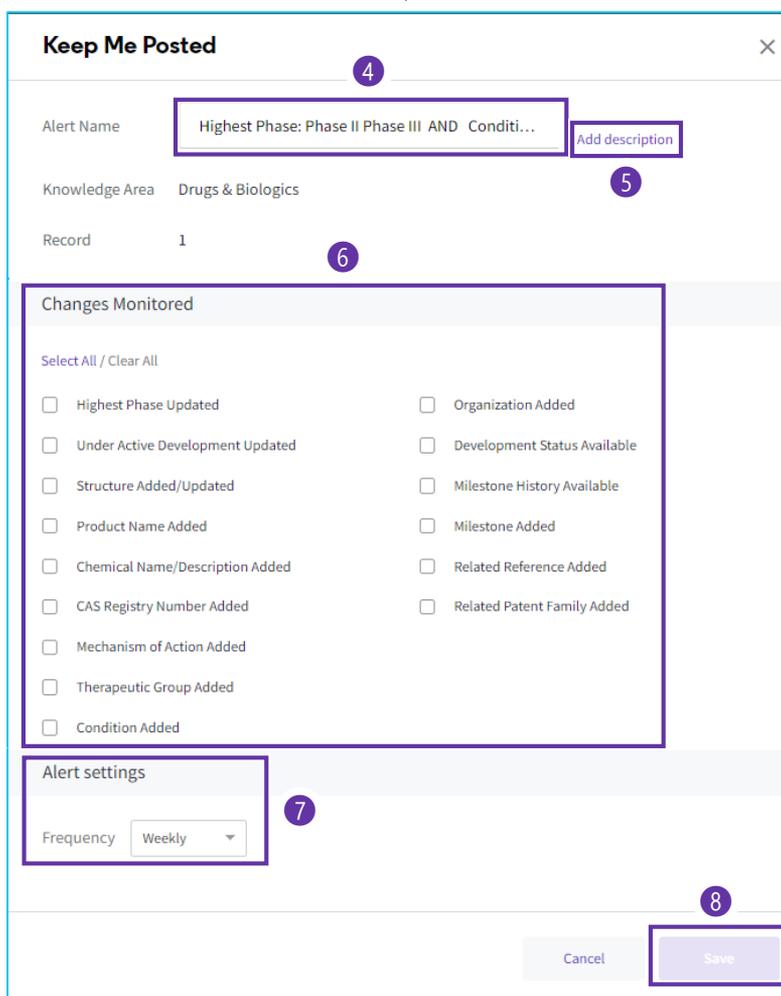
複数のレコードも対象にできます。何もチェックを入れない場合、検索結果の全てのレコードを対象とします。



- 検索結果画面の右上のオプションボタンをクリックしてメニューを表示します。



- オプションメニューから「Keep Me Posted」をクリックして設定画面を開きます。



- ファイルの名前を必要に応じて変更します。

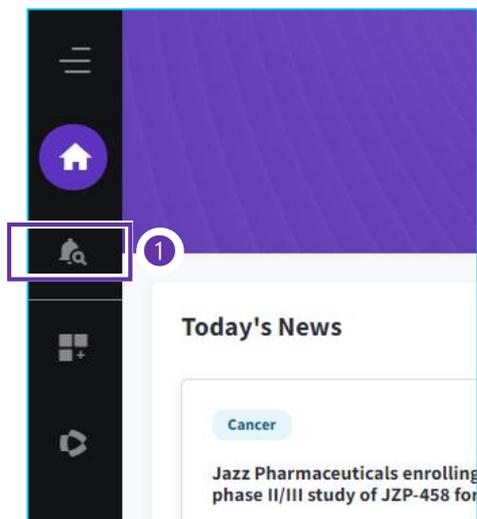
- 必要に応じてクリックしてDescriptionを記入します。

- 監視したい項目を選択します。

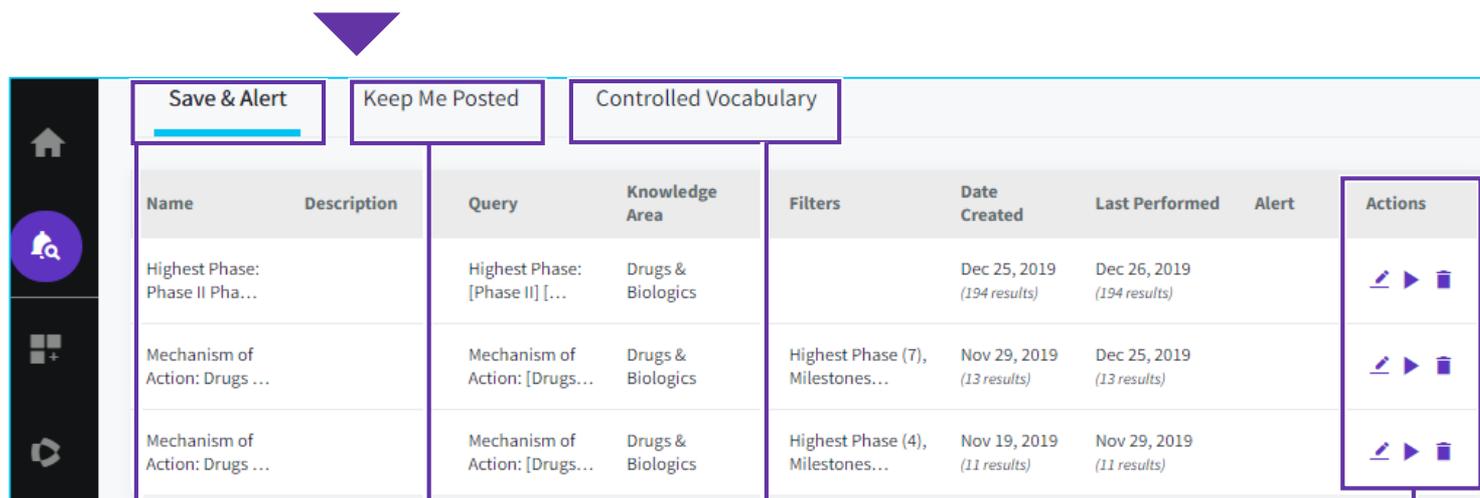
- プルダウンメニューからアラートの実行頻度を設定します。実行頻度は、以下のとおりです。
 - ・毎日 (Daily)
 - ・週に一度 (Weekly)
 - ・4週間に一度 (Every 4 weeks)

- [Save]をクリックします。

9. Alert – 検索式・アラートの管理



① 画面左端のメニューから  をクリックします。



Name	Description	Query	Knowledge Area	Filters	Date Created	Last Performed	Alert	Actions
Highest Phase: Phase II Pha...		Highest Phase: [Phase II] [...	Drugs & Biologics		Dec 25, 2019 <i>(194 results)</i>	Dec 26, 2019 <i>(194 results)</i>		  
Mechanism of Action: Drugs ...		Mechanism of Action: [Drugs...	Drugs & Biologics	Highest Phase (7), Milestones...	Nov 29, 2019 <i>(13 results)</i>	Dec 25, 2019 <i>(13 results)</i>		  
Mechanism of Action: Drugs ...		Mechanism of Action: [Drugs...	Drugs & Biologics	Highest Phase (4), Milestones...	Nov 19, 2019 <i>(11 results)</i>	Nov 29, 2019 <i>(11 results)</i>		  

Keep Me Posted

Keep Me Posted機能で保存したアラートが格納されています。

Save & Alert

Save & Alert機能で保存した検索式・アラートが格納されています。

Controlled Vocabulary

"Browse Index"中に新たに登場した作用機序、治療領域グループ、疾患や機関名を表す統制語の通知を受け取るために使用します。

[Actions]から以下のことが行えます。

- Edit：検索式・アラートの追加・修正
- Execute：保存条件の再実行
- Delete：検索式・アラートの削除

お困りの際は、

カスタマーサービス

9:30～17:30（土日祝日を除く）

TEL: 0800-170-5577（フリーダイヤル）
03-4589-3107

Email: ts.support.jp@clarivate.com



クラリベイト サイエンス事業部

〒107-6119
東京都港区赤坂5-2-20 赤坂パークビル19階

TEL: 03-4589-3103
Email: marketing.jp@clarivate.com

© 2019 Clarivate Analytics. All rights reserved. Republication or redistribution of Clarivate Analytics content, including by framing or similar means, is prohibited without the prior written consent of Clarivate Analytics. Cortellis and its logo, as well as all other trademarks used herein are trademarks of their respective owners and used under license.