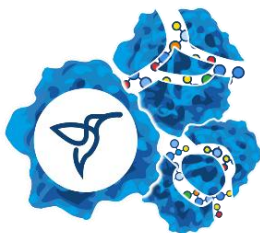


Bigger is Better! 創業のための最大規模の探索領域

ケミカルスペース探索において、探索アルゴリズムが推進力となります。そして、個々のケミカルスペースが、その探索を機能させるための重要な要素です。



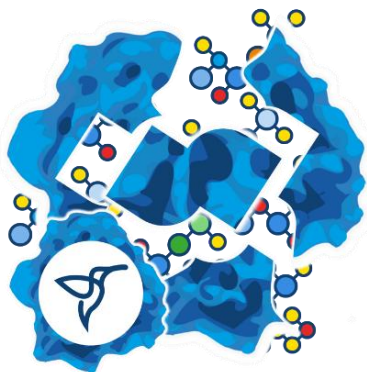
ケミカルスペースにおける組み合わせの多様性により、数十億以上の化合物コレクションも瞬時にスクリーニングすることができます。

複数の化合物メーカーとの提携により、幅広い化学領域をカバーしています。化合物発注の際には、最も適したメーカーを柔軟に選定できます。

BioSolveIT社のパートナーとその利用可能なケミカルスペース

- | | |
|-----------------|------------------|
| ◆ REAL Space | Enamine社 |
| ◆ AMBrosia | Ambinter社 |
| ◆ CHEMriya | OTAVACHemicals社 |
| ◆ eXplore | eMolecules社 |
| ◆ Freedom Space | Chemspace社 |
| ◆ GalaXi | WuXi LabNetwork社 |
| ◆ Synple | Synple Chem社 |

自分だけのケミカルスペースを創造しよう



最も望ましい化合物は、自社の化合物ライブラリー内に存在する可能性があります。実際には、多くがまだ活用されていないケースがあり得ます。

自社で蓄積した知識とリソースを活用することで、独自のケミカルスペースを設計できます。実際に、多くの大手製薬企業が独自のケミカルスペースを構築し、コストや時間の削減に役立っています。



infiniSee

unlimited accessibles



数十億あるいは数兆に及ぶ合成可能な化合物の中から、最適なものを見つけ出す。その探索の課題に、もう悩む必要はありません。

infiniSeeは、ケミカルスペース探索のためのナビゲーションプラットフォームです。プロジェクトのニーズに応じて、類似性に基づき、ほぼ無限のサイズのケミカルスペースの中から目的の分子を効率的に取得できます。

infiniSeeが提供する機能

- ◆ 前例のない速度で広大なケミカルスペースを探索
- ◆ 類似性を瞬時に把握する直感的な色分け
- ◆ ドラッグ操作だけで使用できる直感的なインターフェイス

infiniSeeが選ばれる6つの理由



検索速度

infiniSeeは検索速度において他に類を見ません。標準的なハードウェアでも、10¹⁴分子規模のケミカルスペースを数分で探索できます。

入手可能な結果
REAL Spaceのような商用ケミカルスペースを検索することで、購入可能な化合物を見つけ出せます。これらの化合物は数週間以内に入手可能です。



サイズの重要性

infiniSeeは、ほぼ無限のサイズのケミカルスペースを探索できる唯一のツールです。探索領域を広げることで、最適な分子を見つけ出す可能性を大幅に高めます。

特許の回避
数回のクリック操作で、医薬品や特許化合物の非規スキヤフォールドを探索できます。infiniSeeは、構造的には遠く離れているものの関連性の高い分子を提示します。



誰もが安全に使える環境

infiniSeeは、巨大な化合物リソースを探索する際にも、最小限のハードウェアで動作し、ファイアウォールの内側で安全に利用できます。グラフィカルインターフェイスは、初心者から専門家まで直感的に操作可能です。

最適化された検索結果
プロジェクトのニーズに応じて、さまざまな検索手法やアルゴリズムを選択できます。これにより、研究の進展に役立つ最適な化合物を見つけることができます。



BioSolveIT社日本総代理店

株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031

Email: sales@molsis.co.jp

URL: <https://www.molsis.co.jp>

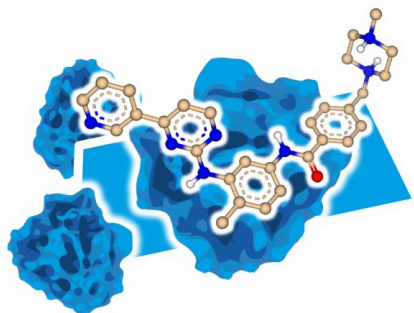
- 詳細につきましては、お問い合わせください。
- 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。
- 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。

(2025/10)

次世代の大規模分子クラスター

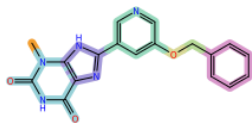
10¹⁴構造以上というこれまでにない規模のケミカルスペースから分子を探索できます。また、社内のライブラリーから活性分子を探索することも可能です。

通常の列挙型の分子ライブラリーとは異なり、エントリーを明示的にリスト化するのではなく、組合せ的なケミカルスペースとして動的に化合物を生成します。これにより、合成可能性と関連性の高い化合物を迅速かつ効率的に取得できます。

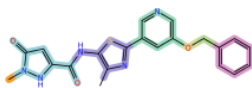


隠れた類似性の発見

クエリー分子とヒット分子の類似性をわかりやすく可視化し、直感的に候補化合物を選択できます。infiniSeeは、どのような理由で分子同士が類似しているかという根拠を明確に示します。



さらに、ファーマコフォア、フィンガープリント、最大共通部分構造、完全部分構造一致などさまざまな類似性の評価手法に対応しており、目的に応じた分子探索を行うことができます。



新規IPの創出

ケミカルスペースは、新規な知的財産(IP)を生み出す無限の可能性を秘めています。その膨大な規模により、低分子創薬において、最大の機会を提供します。

計算化学者のための豆知識

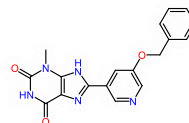
すべての探索アルゴリズムは、コマンドラインツールとしても利用可能で、ワークフローに簡単に組み込むことができます。

ケミカルスペースを自在に探索： ニーズに応じた検索

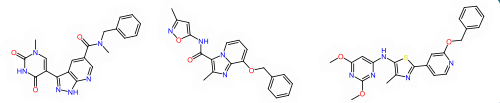
infiniSeeの検索手法は、クエリーに類似した化合物をケミカルスペースからの確に取得できます。これにより、創薬プロジェクトにおける特定の課題に応じて、最適な結果を得ることができます。

クエリー化合物

infiniSeeによる検索は、関心のある化合物を起点に行われます。

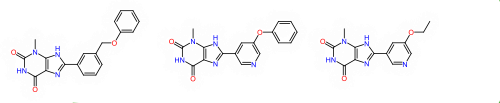


Scaffold Hopper (FTrees)



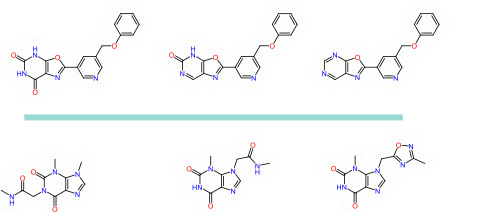
ファーマコフォアの類似

Analog Hunter (SpaceLight)



化学構造の類似

Motif Matcher (SpaceMACS)



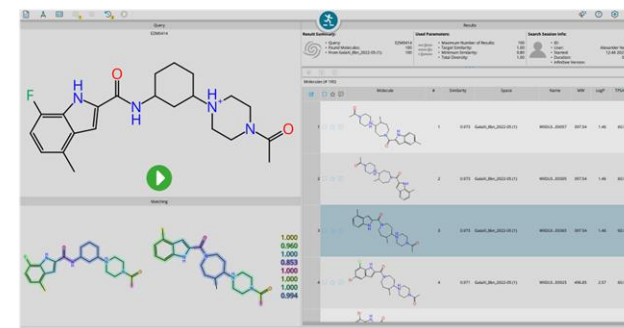
部分構造の一致

クエリー分子のファーマコフォアの特徴を維持しつつ、高い新規性と知的財産(IP)の可能性を持つ分子を発見できます。また、フィンガープリントの類似性に基づいて関連する化合物を検索し、構造活性相関(SAR)の解明に役立てることも可能です。さらに、フラグメント創薬プロジェクト向けに最大共通構造(MCS)を共有する候補分子を見つけ出せます。

ユーザーフレンドリーなインターフェイス

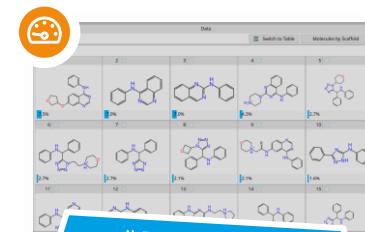
infiniSeeは、操作が直感的で分かりやすいグラフィカルユーザーインターフェイスを備えています。高度な技術的知識がなくても、効率的に操作できます。

関心のある分子を読み込むか描画するだけで、ワンクリックで類似化合物の探索を開始できます。

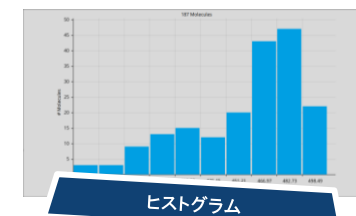


Analyzerモードによるデータの理解

infiniSeeのAnalyzerモードは、検索で取得した結果や自社のライブラリーの内容を直感的に把握できる機能です。このモードを活用することで、データを効率的に管理し、重要な情報に集中して、次のステップへ進むための最良の候補を選び出せます。



Bemis-Murckoスキヤフォールドやスケルトン、ベンダー、試薬に基づいて化合物をクラスタリングし、化学的多様性に基づいた意思決定を行うことができます。



取得した結果を、物理化学的性質に基づくヒストグラムとして可視化し、探索可能なセグメントごとに確認できます。