

ケミカルスペース高速探索ツール

infiniSee

infinite accessibles.



- ケミカルスペースナビゲーション: 10^{20} 分子におよぶ組み合わせ空間からの超高速探索
- 類似構造あるいは部分構造検索による新規化合物を出力
- 購入可能性あるいは合成可能性の高い構造を提案

infiniSee は、既存の化合物ライブラリー、あるいは、 10^{20} 分子を超える組み合わせ空間(ケミカルスペース)の中から目的構造を高速に探索するソフトウェアです。母核置換、SAR 展開、バーチャルスクリーニング等に使用でき、簡単な操作で創薬研究プロセスを大きく加速させます。

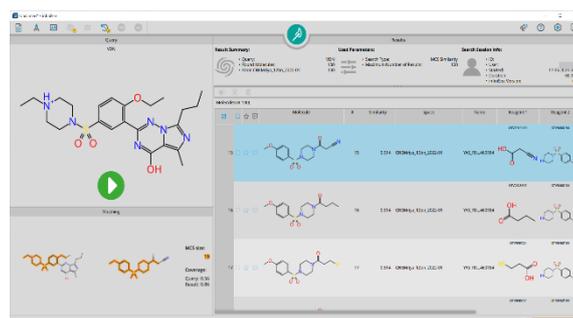
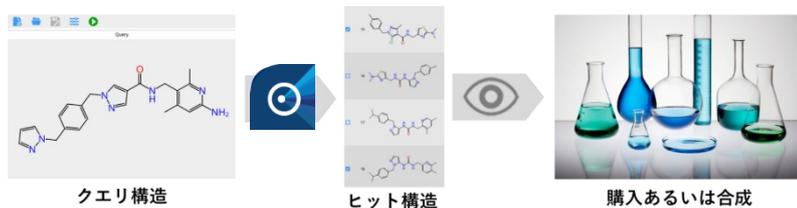
超巨大なケミカルスペースに対応した高速探索ツール

医薬品の探索において、新規化合物の知的財産 (IP) の取得は緊急を要します。新規化合物の発見は、ケミカルスペースの大きさと関連しており、従来の方法では 10^9 程度のケミカルスペースからの検索が限度でした。infiniSee は、実際に購入可能な分子で構成される巨大なケミカルスペースからの検索を、一般的な PC でも可能にし、創薬研究の加速化と低コスト化を実現します。



infiniSee の解析の流れ

infiniSeeは、クエリ構造の読み込み、ライブラリーやケミカルスペースの指定、出力数やオプション設定、拘束の有無等の簡単な操作のみで目的構造の検索が可能です。検索モードとして、ファーマコフォアプロファイルあるいはフィンガープリントを用いた類似構造検索や、部分構造や最大共通部分構造 (Maximum Common Substructure; MCS) の検索に対応しています。ヒット構造は、合成の容易性も考慮されており、実際に購入可能な構造が提案されます。ユーザーは、即座に試薬ベンダーにヒット構造の合成依頼を行うことができます。



目的にあわせた3種類の検索モード

3つの高速な検索モードが搭載されています。目的別にモードを切り替えて実行できます。各種検索モードに対応したコマンドラインツールも用意されています。

- ◇ **Scaffold Hopper** モード: ファーマコフォアプロファイル (Feature Tree) が類似の化合物を検索。母核置換や新規構造を提案。
- ◇ **Analog Hunter** モード: ECFP4 を用いた類似構造検索。SAR 解析のための化合物を提案。
- ◇ **Motif Matcher** モード: 部分構造検索と MCS 検索。化合物の伸長、縮小、FBDD に利用可能。



対応ケミカルスペース

infiniSee は、以下のケミカルスペースからの検索に対応しています。ヒット構造を SDF ファイルとして出力し試薬ベンダーに送付することで目的の構造の在庫の確認や見積もりを行えます。

■ Enamine REAL Space

480 億通りの購入可能な構造からなるケミカルスペース。Enamine 社により合成され短期間で納品。

2024 年 4 月現在



■ eMolecules eXplorer

5 兆構造を超える最大の商用ケミカルスペース。ヒット化合物の合成を依頼する他に、ビルディングブロックを注文し自社での合成も可能。

eMolecules

■ Chemspace Freedom Space

検証された化学反応を使用した 51 億構造のケミカルスペース。



■ WuXi LabNetwork GalaXi

120 億通りの購入可能な構造からなるケミカルスペース。



■ OTAVACHemicals CHEMriya

化学的多様性を持つ母核を含む 120 億構造のケミカルスペース。



■ AMBINTER AMBrosia

1,100 億通りのドラッグライク分子からなるケミカルスペース。



■ BioSolveIT KnowledgeSpace

論文から独自に収集した試薬と反応からなる 290 兆通りの合成可能な分子からなるバーチャルケミカルスペース。



■ インハウスライブラリーと独自ケミカルスペース

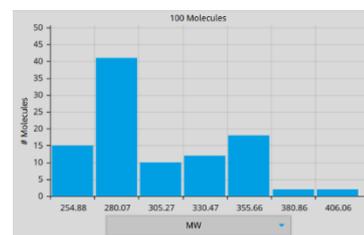
既存の化合物ライブラリーからの構造検索に対応。

独自のケミカルスペースの構築には BioSolveIT 社の CoLibri が利用可能。

ケミカルスペースの詳細は URL を参照: <https://www.biosolveit.de/chemical-spaces/>

ヒット構造の解析

infiniSee によりヒットした化合物を解析するための Analyze モードが搭載されています。分子量、logP、TPSA などの一般的な分子記述子や ADME プロパティなどの様々な指標で化合物を評価できます。母核、分子骨格、ビルディングブロックの出現頻度を確認できます。検索履歴は遡って確認でき、オプションやケミカルスペースの違いによるヒット条件の検討に使用できます。ヒット構造を 2D あるいは 3D 構造に変換して出力できます。



関連ソフトウェア

- **FTrees** infinisee の検索エンジン。Feature Tree を用いた類似構造検索が可能。
- **SpaceLight** infinisee の検索エンジン。フィンガープリントによる類似構造検索が可能。
- **SpaceMACS** infinisee の検索エンジン。部分構造検索と MCS 検索が可能。SMARTS や R グループでの検索に対応。
- **ModelRunner** Optibrium 社の ADME プロパティを計算させるためのオプションモジュール。
- **CoLibri** 社内の化学反応とビルディングブロックから独自のケミカルスペースを作成。

対応プラットフォーム

Windows 64bit, Linux x86 64bit, macOS 64bit (メインメモリー 16 GB 以上必要)

詳細はウェブページをご参照ください。

infiniSee



BioSolveIT 社日本総代理店

株式会社 **モルシス** ライフサイエンス部

〒104-0032 東京都中央区八丁堀三丁目 19 番 9 号 ジオ八丁堀

Phone: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

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

E-mail: support@molsis.co.jp