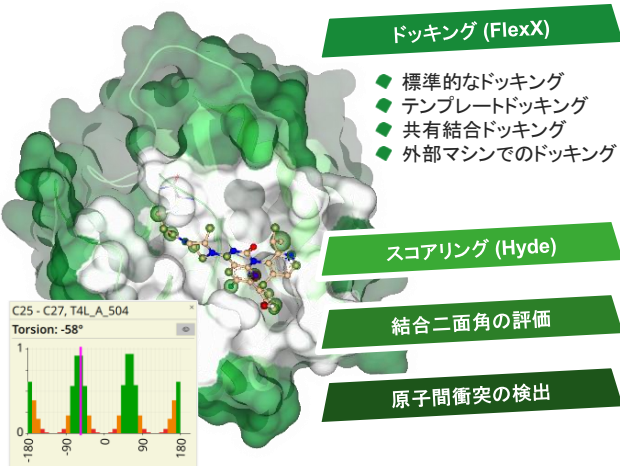


## Hydeによるスコアリング 脱溶媒和効果を考慮した $\Delta G$ の推定

リガンドの全体的な結合親和性に対する各原子の寄与を定量的に解析し、構造最適化に向けた改善点を直感的に把握できます。



### 分子の視覚的な評価

結晶構造データベース内の低分子の厳密な統計解析に基づき、分子の結合二面角を信号色表示で直感的に把握しながら、安心して作業を進められます。

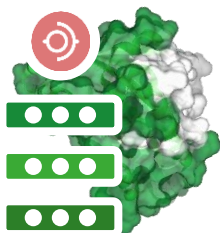
### 操作が容易な共有結合ドッキング

標準的なドッキングに加え、テンプレートドッキングや共有結合ドッキングも利用可能で、プロジェクトごとのニーズに対応できます。

高度な共有結合ドッキング機能は、分子ライブラリー内で最もよく使用される36種類の共有結合性反応基(covalent warhead)を自動検出し、ドッキング実行時にターゲット結合形態へ変換します。

### 大規模処理に対応

SeeSARの外部ドッキングモードは、大規模化合物ライブラリーのドッキングやバーチャルスクリーニングの実行を容易にします。ドッキング計算を別のハードウェア上で実行し、得られたスコア上位の化合物をローカルマシンに取り込み、視覚的に評価できます。



BioSolveIT

# SeeSAR

fast • visual • easy



創薬課題の克服を支援する、  
洗練されたインタラクティブプラットフォーム

SeeSARは直感的かつ視覚的に分子設計を支援する創薬プラットフォームです。バーチャルスクリーニングからフラグメント創薬まで、創薬プロセスのあらゆるステップをカバーし、アイデア創出を効率的かつ直感的に支援します。

### SeeSARが提供する機能

- ◆ ターゲット分子とリガンドの複合体を視覚的かつ対話的に評価
- ◆ モデリングの核となる機能群: ドッキング、スコアリング、優先順位付け
- ◆ アイデア創出、スキヤフォールドホッピング、化合物最適化の情報源

### SeeSARが選ばれる6つの理由

- 1 効率的で創造性あふれる研究プロセス**  
迅速な計算処理と直感的な入力機能により、研究者が最も創造性を発揮できる形で問題解決を支援します。
- 2 誰にでも使いやすい設計**  
SeeSARは、その革新的なシンプルさにより、創薬の経験豊富な研究者からモデリング初心者まで、誰もが満足できる操作体験を提供します。
- 3 すべてを自在にコントロール**  
情報豊富な色分けと充実したアイコンにより、解析結果を一目で把握し、的確な判断を下すことができます。
- 4 すぐに使える簡単なセットアップ**  
SeeSARは主要なプラットフォームに対応しており、インストールも簡単です。ソフトウェアをダウンロードすれば、すぐに作業を開始できます。
- 5 時間とリソースを節約**  
SeeSARは、精度を損なうことなく、高精度な結果を瞬時に提供します。
- 6 大規模な処理にも対応**  
大規模なバーチャルスクリーニングも容易に実行でき、不要なデータで作業スペースを圧迫することはありません。



## MOLSIS

Molecular Simulation and Informatics Systems



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。

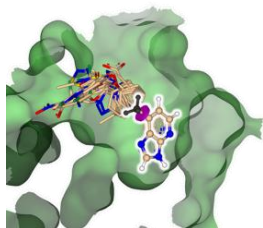
(2025/10)

## 創造的な解決策を生み出す強力なツール

SeeSARIは、化合物アイデアの創出や設計プロセスを支援するために開発されました。豊富な機能群により、現代の創薬課題に対して画期的な発見を見出す手助けをします。

### FastGrowによる結合部位にフィットするリガンド設計

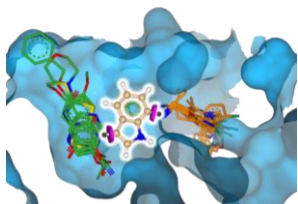
数百万種類に及ぶフラグメントコンフォメーションを検索し、結合部位を補完するためのアイデアをわずか数秒で見つけることができます。リガンドの伸長方向を選択するだけで、すぐにアイデア創出を開始できます。



有望な化合物を探索するため、化学的に多様なFastGrowライブラリーを複数利用できます。このライブラリーには、医薬化学的な化合物セット、sp<sup>3</sup>炭素に富むフラグメント、ヒンジ結合部位に適したモチーフなどが含まれています。

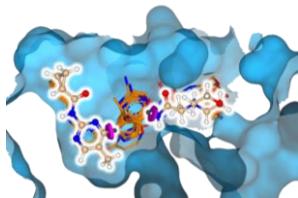
### フラグメント創薬を推進する出発点

SeeSARIには、最小分子を用いた化合物設計を支援するさまざまな機能が搭載されています。



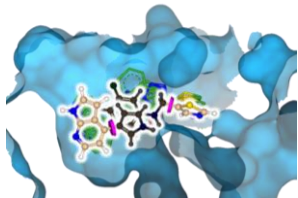
#### フラグメントの伸長

結合部位を補完するようにフラグメント結合分子を伸長させます。ファーマコフォア拘束と組み合わせることで、設計を的確にガイドできます。



#### フラグメントの連結

異なるフラグメントの三次元的な配置を考慮しながら、結合ベクトルと幾何学的に一致する最適なスキヤフォールドを特定します。



#### フラグメントの統合

結合部位で重なり合う部分構造を統合することで、統合後の化合物における活性を相乗的に向上させます。

## 搭載機能の概要

SeeSARIには、化合物とターゲット構造の取り扱いに不可欠なあらゆるツールが網羅されています。これらは、医薬化学者や計算化学者はもちろん、一般的な創薬研究者のニーズに合わせて最適化されています。



### Proteinモード

タンパク質のファイルドラッグ&ドロップするか、オンラインデータベースから検索するだけで簡単に読み込めます。わずか数秒でターゲット構造が準備され、すぐに作業を開始できます。



### Protein Editorモード

目的に応じてタンパク質構造を修正できます。側鎖配座の探索、変異導入、側鎖のカスタマイズなどを行うことができます。



### Binding Siteモード

SeeSARIは、リガンドの結合部位を自動的に検出します。また、残基を個別に加えて結合部位を拡張したり、ワンクリックでタンパク質中の空の結合部位を見つけたりすることもできます。



### Molecule Editorモード

分子を2Dまたは3Dで自由に編集できます。編集が完了した分子は、そのまま次のタスクに利用できます。



### Analyzerモード

可視化されるHydeスコアを活用して結合親和性を評価し、結果を解釈できます。化合物を関連パラメーターでフィルタリングし、ADME特性を計算し、さらにリガンドとターゲット分子の相互作用を完全に制御することができます。



### Inspiratorモード

自由な発想で化合物設計を行うことができます。新しいスキヤフォールドの探索、空の結合部位へのフラグメント伸長、フラグメントライブラリーを用いた分子連結により、洗練された化合物設計を実現します。



### Dockingモード

標準的なドッキング、テンプレートドッキング、共有結合ドッキングなどの多様な計算をワンクリックで実行できます。ライブラリーから活性化合物をスクリーニングし、結果を直感的に評価できます。



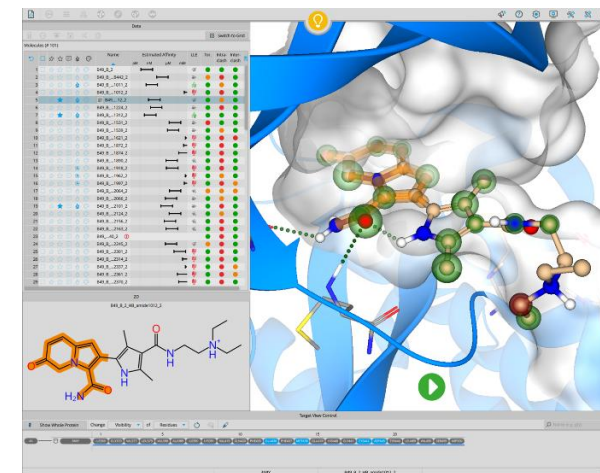
### Similarity Scannerモード

FlexSアルゴリズムを用いて、ターゲット構造がなくても分子類似性に基づいて化合物を重ね合わせるすることができます。

## すべての研究者に向けた創薬支援

Fast (高速)、Visual (視覚的)、Easy (簡単操作)の相乗効果により、ユーザーはその場で思いついたアイデアをすぐに設計に反映でき、画期的な成果につながる洗練された創薬体験が得られます。

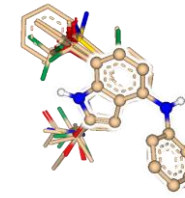
一方、SeeSARIは非常に使いやすく、創薬研究のベテランから初心者まで、シンプルなソフトウェア環境の中で迅速かつ効率的に目標を達成できます。



## 専門知識を活かして成果を最大化

画面上の操作はすべてあなたの制御下にあります。SeeSARのサポートを活用し、専門知識を活かしながら結果を的確に評価し、どの化合物を優先的に検討するか判断できます。

Inspiratorモードのアナログ生成機能 (MedChemesis)は、一般的に用いられる290種類の化学反応を適用し、化合物周辺の化学空間を探索します。これにより、小規模な修飾や生物学的等価体への変換を容易に行うことができます。



### 計算化学者のための豆知識

以下のコンポーネントは、ローカルPC、サーバー、またはクラウド環境で、コマンドラインから実行できます:  
FlexX • Hyde • FlexS • FastGrow

