

SpaceMACS は、数兆規模のオンデマンド合成型 (make-on-demand) のケミカルスペースから、特定の部分構造を持つ化合物を検索します。わずか数秒で検索を完了し、最も関連性の高い化学構造を提示します。

SpaceMACS の仕組み

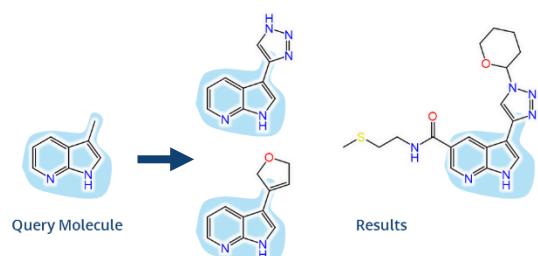
SpaceMACS は、入力された分子構造に基づき、コンビナトリアルなケミカルスペースから指定された数の化合物を抽出します。部分構造のマッチングプロセスは、単純な部分構造検索を上回る、最大共通部分構造 (Maximum Common Substructure, MCS) の類似性に依拠しています。

SpaceMACS は、ケミカルスペースから指定した部分構造を正確に含む化合物を取得するだけでなく、それに類似した候補化合物も同時に抽出するため、厳密に一致する候補が存在しない場合でも関連性の高い選択肢を提示します。

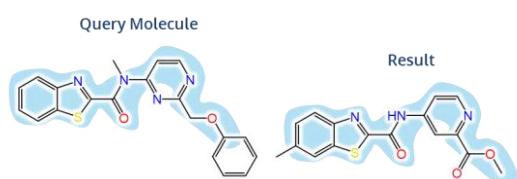
モチーフ駆動型創薬の加速

創薬プロジェクトを推進するうえで、利用可能なすべての分子へのアクセスを確保することは極めて重要です。SpaceMACS は、合成可能な化合物を提供する強力なツールであり、BioSolveIT 社のパートナーによるケミカルスペースの場合には、商業的に入手可能な化合物にもアクセスできます。

特にフラグメント創薬のプロジェクトでは、SpaceMACS の手法が大きな力を発揮します。既知のフラグメントバインダーを部分構造として含む、より小さな化合物と、修飾されたより大きな化合物の両方を探索することができるためです。



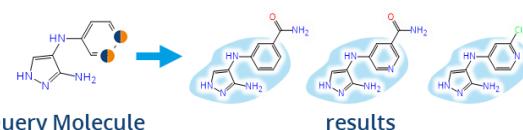
SpaceMACS のユーザーは、ケミカルスペース内に完全に一致する分子モチーフが見つからなかった場合でも、手ぶらで終わることはありません。このアルゴリズムは、従来の単純な部分構造検索の枠を超えて、わずかな差異を持つ類似分子を見つけ出すことができます。



ケミカルスペースは、新規の知財 (IP) を持つ分子や多様な置換パターンを有する分子の魅力的なリソースとなります。これらの分子を活用することで、親和性の向上やより優れた ADME 特性を示す潜在的な代替化合物の探索が可能となります。

SMARTS による多目的探索

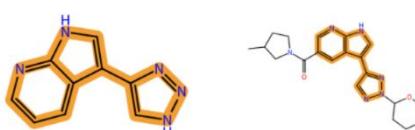
SpaceMACS は、SMARTS 定義を用いた検索を行える点で、他の手法に対して大きな優位性を持ちます。この機能により、ユーザーは特定の分子構造や官能基の配置によって特徴づけられる多様な化合物クラスの取得に本手法を活用できます。



ユーザーは、分子内のファーマコフォアを含む部分をクエリーとして利用することで、プロジェクトの要件に応じてアプローチをカスタマイズできます。これにより、入手可能な化合物を取得し、構造活性相関を探索するための創薬ツールボックスを拡張することができます。

分子探索のパワーツール

SpaceMACS は、一連のクエリー分子群 (SD 形式または SMILES 形式) が提供されると、1 回の実行で各クエリーにつき最大 100 万件の化合物を抽出できます。1 分子の検索はわずか数秒で完了するため、数兆規模のケミカルスペースのスクリーニングも、BioSolveIT ならではの圧倒的な速度で実行可能です。



視覚的なハイライト機能により、モチーフの一致を一目で把握できます。

参考文献

Schmidt, R.; Klein, R.; Rarey, M. Maximum Common Substructure Searching in Combinatorial Make-on-Demand Compound Spaces. *J. Chem. Inf. Model.* 2022, 62 (9), 2133–2150.

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00640>.

Schmidt, R.; Krull, F.; Heinzke, A. L.; Rarey, M. Disconnected Maximum Common Substructures under Constraints. *J. Chem. Inf. Model.* 2021, 61 (1), 167–178.

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00741>.



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: sales@molsis.co.jp