

CoLibri

CoLibri は、反応式をもとにフラグメントライブラリーとバーチャルライブラリーを作成するツールです。ライブラリーは化学反応式に基づいて作成されるため、より現実的なバーチャル化合物を得ることができます。BioSolveIT 社のソフトウェアは、サードパーティとの連携に優れており、KNIME と CoLibri との連携によって反応式の定義、フラグメントライブラリーの出力、生成物のバーチャルライブラリーの出力処理を KNIME 上で簡単に行うことができます。



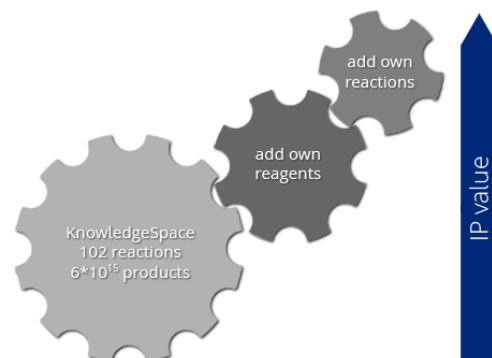
CoLibri の概要

CoLibri は、化学反応に基づき試薬構造の一部を反応点で置き換えたフラグメントライブラリーとフラグメント同士をつなげるルールの情報を出力します。フラグメントライブラリーのもとなる化合物は、試薬ベンダーから提供される試薬データベースを用いることができます。試薬データベース内で指定した化学反応に適合する化合物が自動的に選択されます。CoLibri は次の 2 つのツールで構成されています。

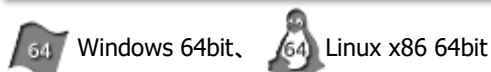
- reaction synthesizer
定義された化学反応を入力として個別のフラグメントスペースを生成するコマンドラインツールです。反応によって生成される化合物を列挙することもできます。
- fragment space merger
reaction synthesizer の出力(複数の個々のフラグメントスペース)を取り出し、それらを単一の簡潔なフラグメントスペースにマージするコマンドラインツールです。

BioSolveIT 社ではあらかじめ文献から得た 120 の化学反応と信頼できる試薬ベンダーの化合物データを元に作成されたフラグメント空間 (Knowledge Space)を提供しています。FTrees-FS(別ツール)を用いて登録されているフラグメントを結合しクエリー化合物との類似構造を高速に *de novo* 構築可能です。このフラグメント空間の規模は 6×10^{15} 分子の探索に相当します。

さらに CoLibri を活用してユーザーの化学合成の知見に基づく独自の化学反応ルールと試薬構造データを追加することで、より豊富なケミカルスペースを作成することが可能になります。これにより、より知的財産価値の高い化合物の構築に繋がります。



対応プラットフォーム



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