

## ケミカルスペース高速探索ツール

# infiniSee

infinite accessibles.



- 超高速ケミカルスペースナビゲーション: 分単位で  $10^{20}$  構造を探索
- 容易なスキヤフォールドホッピング: FTreesFS アルゴリズムを用いた構造構築
- 構造類似性の可視化: 分かりやすい表示による候補構造の決定

infiniSee は、既存の化合物ライブラリー、あるいは、 $10^{20}$  個を超えるバーチャル化合物群の中より類似構造を高速に探索するソフトウェアです。新規構造、SAR 展開、特許を回避した構造など、目的に応じた候補構造を簡単な操作で発見できます。

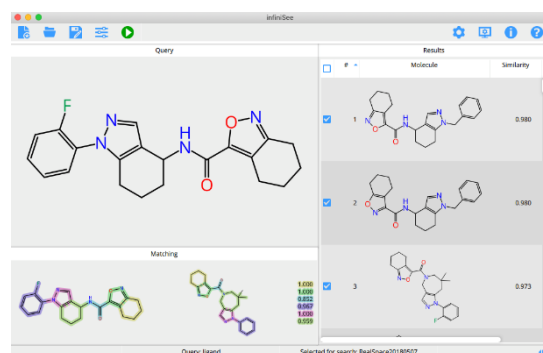
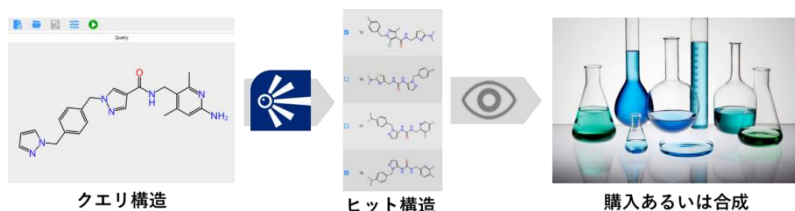
## 巨大なケミカルスペースに対応した超高速検索ツール

医薬品の探索における新しい知的財産 (IP) の取得は緊急を要します。新しい化合物の発見は、ケミカルスペースの大きさに関連しており、従来の方法では  $10^9$  程度のケミカルスペースからの探索が限度でした。infiniSee は  $10^{20}$  を超える実際に購入可能な化合物群からの探索を可能にし、創薬における加速化と低コスト化を実現します。



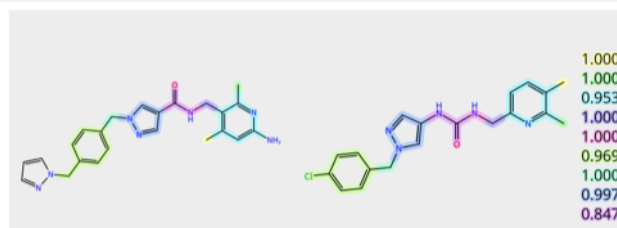
## infiniSee の解析の流れ

infiniSee は、クエリ構造の読み込み、ライブラリーの指定、類似度の指定、拘束の有無等の簡単な操作で検索が可能です。探索アルゴリズムは、BioSolveIT 社の FTrees と FTrees-FS アルゴリズムを採用しています。infiniSee は、クエリ構造が持つ化学的な特徴と結合位置を再現する構造を探索します。ビルディングブロックと化学反応を組み合わせ、膨大な組み合わせの中から類似度の高いバーチャル構造をオンデマンドで構築します。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を提案します。ヒット構造を SDF ファイルに出力でき、その SDF ファイルを用いて試薬ベンダーから購入可能であるかを確認できます。



## 構造類似性の可視化

クエリ構造とヒット構造の類似度は、官能基ごとに評価されます。官能基はファーマコフォアに類似した化学的な特徴を以て評価されます。類似の官能基を同じ色で表現することで、研究者によるヒット構造からの適切な選択を支援します。



## 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 ファイルで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も行えます。

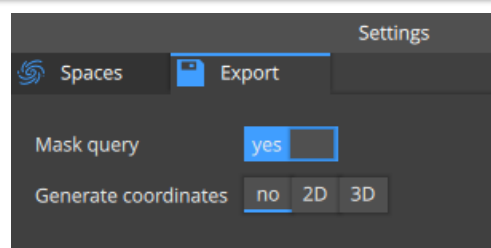
- **Enamine REAL Space™**  
Enamine 社が提供する 130 億通りの購入可能なバーチャル構造からの探索。  
80%以上の確率で合成でき約 1 ヶ月間で納品可能。
- **GalaXi™**  
WuXi AppTec 社が提供する 20 億通りのバーチャル構造からの探索。
- **KnowledgeSpace™**  
BioSolveIT 社が独自に収集した  $6 \times 10^{15}$  通りのバーチャル構造からの探索。
- **インハウスライブラリー**  
既存の化合物ライブラリーからの検索に対応。独自のバーチャルライブラリーの構築には BioSolveIT 社の CoLibri を用いて構築可能。



ケミカルスペースの詳細: <https://www.biosolveit.de/CoLibri/spaces.html>

## データ漏洩対策

すべての計算は、infiniSee を使用しているマシン上で行われます。ソフトウェアの新しいバージョンのチェック以外は、情報をインターネット上から取得したり、情報をインターネット上に出したりしません。クエリ構造の情報の SDF ファイルへの出力の有無は設定できます。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

- **CoLibri**  
BioSolveIT 社が提供するケミカルスペース作成ツール。
- **SeeSAR**  
インタラクティブな操作で行える 3D リガンドデザインツール。
- **FTrees、FTrees-FS**  
infiniSee の検索エンジン。コマンドラインによる検索に対応。
- **KNIME、Pipeline Pilot I/F**  
各ツールの KNIME と Pipeline Pilot 用のインターフェースを提供。

## 対応プラットフォーム

Windows 64bit、 Linux x86 64bit、 Mac OS X 64bit (メインメモリー 4 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

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

FAX: 03-3553-8031

E-mail: [support@molsis.co.jp](mailto:support@molsis.co.jp)