

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: FTrees 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から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即座に発見でき、創薬研究を加速させます。

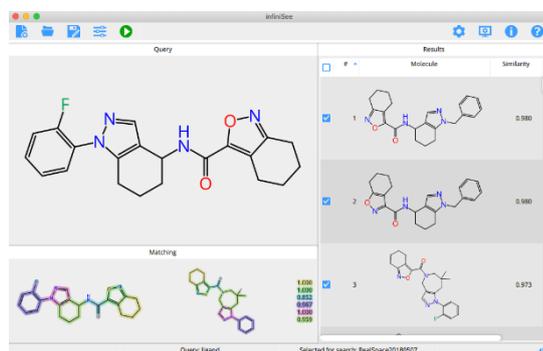
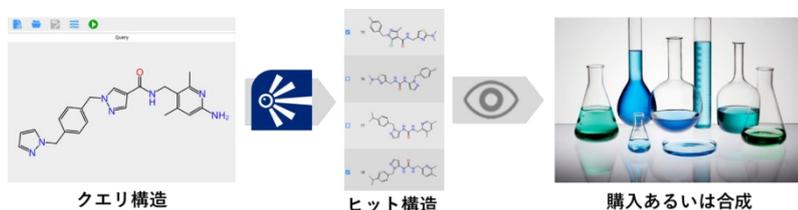
巨大なケミカルスペースに対応した超高速探索ツール

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 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、創薬研究を加速し、低コスト化を実現します。



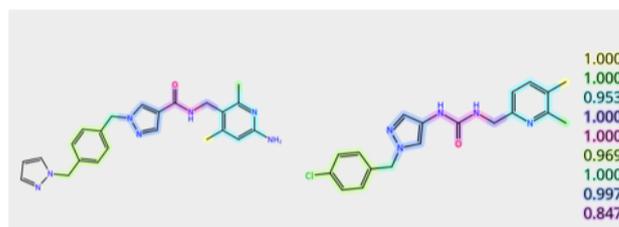
infiniSee の解析の流れ

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、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 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。より高速な ECFP4 フィンガープリントを用いた検索にも対応しています。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 ファイルとして出力でき、試薬ベンダーから購入できます。



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 フィーチャーに類似した化学的な特徴によって類似度が評価されます。類似の官能基を同じ色で表現することで、ヒット構造から適切な分子の選択を支援します。



対応ケミカルスペース

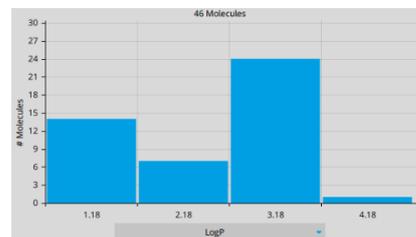
infiniSee は、以下のケミカルスペースからの検索に対応しています。ヒット構造を SDF ファイルとして出力し試薬ベンダーに送付することで目的の構造の在庫の確認や見積もりも行えます。

- **Enamine REAL Space**
360 億通りの購入可能な構造からなるケミカルスペース。80%以上の確率で合成ならびに納品可能。
- **eMolecules eXplorer**
7 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。
- **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。
- **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**
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: https://www.biosolveit.de/infiniSee/#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。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

- **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。
- **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。
- **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

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

FAX: 03-3553-8031

E-mail: support@molsis.co.jp