

REAL Space Navigator

REAL Space Navigator (RSN) は、Enamine 社における 51 億構造におよぶバーチャル化合物群の中からクエリー化合物に類似の構造を高速に探索するツールです。ヒットした構造は Enamine 社により実際に合成できる可能性が高く、ユーザーはスキファールドホッピングされた新規化合物をオンデマンドに入手することができます。

Enamine 社と REAL Space Navigator

Enamine 社は、世界最大のスクリーニング化合物とユニークな Building Block の在庫数を誇る業界をリードするウクライナのサプライヤーです。Enamine 社に在庫がありかつ合成できる確率の高い 58,706 件の Building Block の構造データと 139 種類の化学反応ルールに基づき得られる、51 億通りのバーチャル化合物の中から、RSN はまだ発見されていない新規リガンド候補を超高速に探索します。



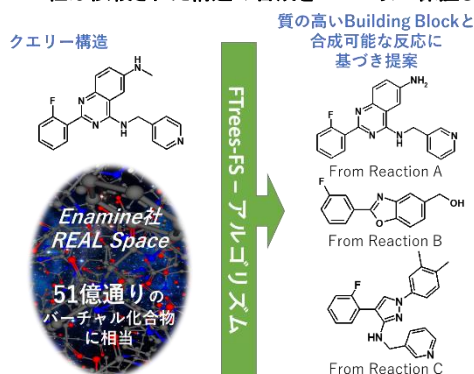
51 億化合物の中からリガンド候補を超高速検索

RSN による検索は、BioSolveIT 社の FTrees-FS の類似構造構築手法に基づいて行われます。クエリー化合物をその化学的な特徴と繋がりを持つ木構造 (Feature Trees) に変換します。その Feature Trees を再現するように、膨大なフラグメントライブラリーの中から適切なフラグメントを選択し、化学反応ルールに基づいて組み合わせ類似構造を高速に構築します。ユーザーは、51 億構造のバーチャル化合物群の中より、クエリー化合物が持つ化学的な特徴とその 2 次元的位置が類似する構造を簡単かつ効率的に得ることができます。類似構造検索は以下の手順で行われ、ヒット構造を Enamine 社に合成依頼できます。

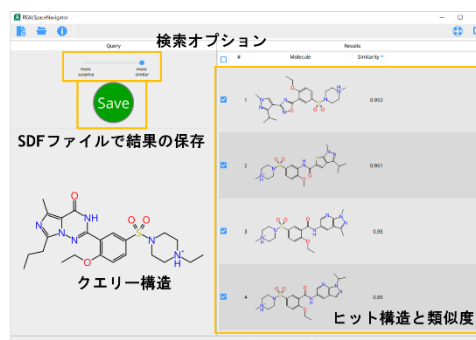
1. クエリー構造をドラッグ & ドロップで読み込みます。
2. 検索オプションとして、より類似した構造の検索 (More Similar)、あるいは、スキファールドホッピングの実行 (More Surprise) を選択します。
3. 検索を実行します。平均の検索時間は 2~4 分です。
4. ヒットした構造を SDF ファイルで保存し Enamine 社 (*) に送ることで合成依頼が可能です。

*Enamine 社の製品については日本総代理店のナミキ商事株式会社にお問い合わせください。

Enamine 社は依頼された構造の合成を 80% 以上保証しており、4 週間程度で納品が可能です。



REAL Space Navigator による類似構造検索



REAL Space Navigator のメイン画面

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)

評価版を BioSolveIT 社ウェブページよりダウンロード可能です。

REALSpaceNavigator



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