



# REAL Space Navigatorリリース

この度、BioSolveIT社とEnamine社とのコラボレーションにより開発された「REAL Space Navigator」の販売を開始しました。REAL Space Navigatorは、38億構造にもおよぶ巨大なケミカルスペース (REAL Space) の中からクエリー化合物に類似した構造を驚異的な速度で検索するツールです。REAL Space Navigatorのシンプルなインターフェースを用いて、ユーザーは現在注目されているEnamine社の化合物ライブラリーの活用範囲を大きく飛躍させることができます。

## REAL Space Navigator

Enamine社<sup>1)</sup>は、世界最大のスクリーニング化合物 (240万構造) とユニークな Building Blocks (15万構造) の在庫保有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社は、在庫がありかつ合成できる確率の高い (スコアの高い) 58,706件の Building Blocks と139種類の化学反応を用いて、1ないし2ステップで新規構造を効率的に化学合成できます。得られた目的の構造は、4週間程度の期間でEnamine社によって80%以上の確率で合成できます。

REAL Space Navigatorは、Enamine社が持つ独自の化合物ライブラリーとBioSolveIT社の高速検索技術のコラボレーションにより誕生したライブラリー検索ツールです。Enamine社の Building Blocks から合成可能な38億通りのバーチャル化合物 (図1中の REAL Space) の中から、クエリー構造に類似の構造を高速に探索します。REAL Space Navigatorは、以下のような特徴を有しています。

- 合成可能なバーチャル化合物を探索
- 検索はローカルPC内で実行
- 典型的な検索時間は2~4分
- 膨大なEnamineライブラリーからの優れた Scaffold Hoppingを実行

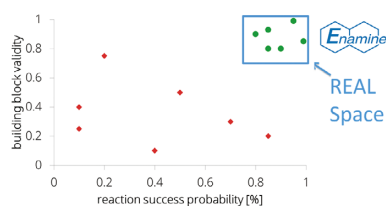


図1. Building Blocksと合成可能性によるREAL Spaceの分布。58,706構造の高スコアのBuilding Blocksと139種類の高スコアの化学反応から38億構造のREAL Spaceが導出される。

## BioSolveIT社のテクノロジー

REAL Space Navigatorによる検索は、BioSolveIT社の FTrees-FSの類似構造構築手法 (図2) に基づいて行なわれます。FTrees-FSは、クエリー化合物を化学的な特徴とその繋がりを持つ木構造 (Feature Tree) に変換し、その Feature Treeと類似した構造を Fragment Feature Treeが持つリンカー原子 (図2の L#) の組み合わせによって高速に構築します。Fragment Feature Treeの結合ルールは実際の化学反応を用いて定義されています。REAL Space Navigatorは、Enamine社の独自の Building Blocksと化学反応ルールを用いて、FTrees-FSによりバーチャル化合物を構築します。

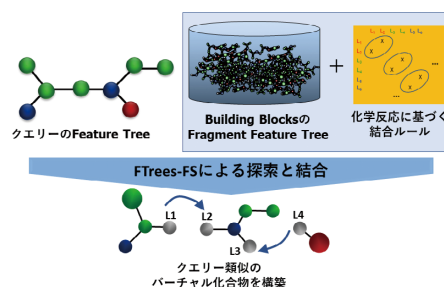


図2. FTrees-FSによる化合物探索の概念図

## REAL Space Navigatorによる検索の流れ

ユーザーは、以下の手順で REAL Space Navigatorによりクエリー構造の類似構造を検索できます (図3)。ヒットした構造はEnamine社に合成依頼が可能です。

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、Scaffold Hoppingの実行 (More Surprise) をスライダーバーで選択します。
3. 検索を実行します。
4. ヒットした構造をSDファイルで保存します。また、そのSDファイルをEnamine社に送ることで合成の依頼が可能です。



図3. REAL Space Navigatorの検索画面

## ソフトウェアの評価

REAL Space Navigatorは3日間無償で評価可能です。BioSolveIT社ウェブサイト<sup>2)</sup>よりダウンロードしてお試しください。より長い期間での使用は有償ライセンスが必要です。詳細は弊社までお問い合わせください。

- 1) 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。
- 2) <https://www.biosolveit.de/REALSpaceNavigator/>