

SYNSPACE

リード化合物発見・最適化ソフトウェア

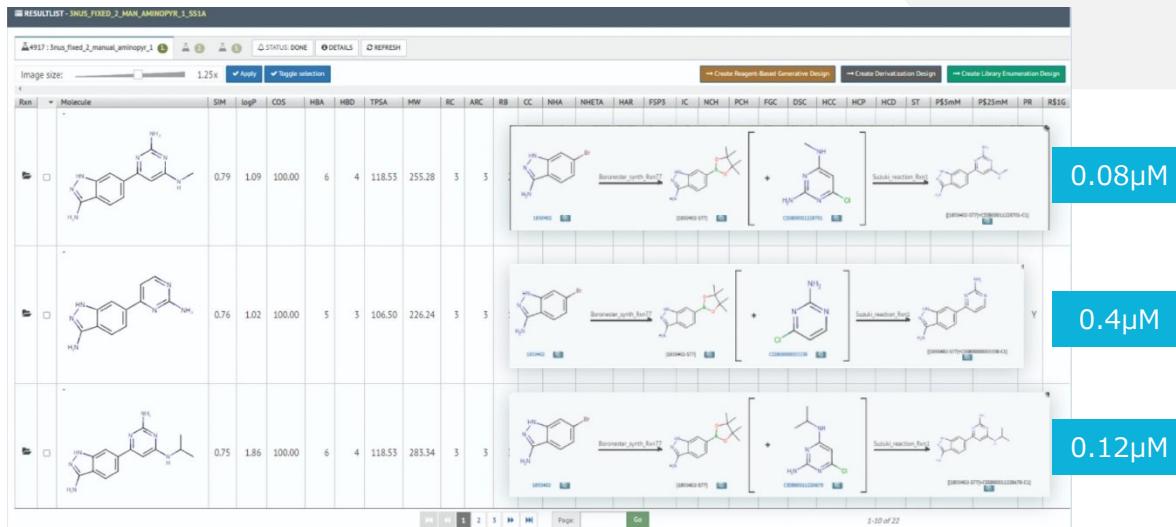
医薬品化学および計算化学者向けに作成された、
AIを活用したリードディスカバリーで
リード化合物最適化タスクを解決



リード最適化タスクに関連する多種多様な機能を搭載

- ・2つの異なるde novo generative デザインアプローチ
- ・2つのScaffold hoppingアプローチ
- ・自動化されたタンパク質ポケット内のfragment/lead growing
- ・選択したポジションでlead growing
- ・マルチステップに焦点を当てたlibrary enumeration
- ・逆合成解析

- ・コーディングスキル不要
- ・すべての分子は合成経路と試薬データを持っています
- ・Macrocyclicデザイン能力



| 分子 | IC ₅₀ |
|----|------------------|
| 1 | 0.08 μM |
| 2 | 0.4 μM |
| 3 | 0.12 μM |

De novo generative design解析の結果ページ：結合活性をさらに向上させた3つの分子が表示されている

合成可能な化学空間を探索する唯一のリードディスカバリー・ソフトウェア

SynSpaceは、de novoデザインやScaffold Hopping、ポケット内のfragment-growing、ライブラリ検索、逆合成解析などの解析ツールを使用してリード化合物最適化タスクを解決することができます。

1. タンパク質に結合したリガンド
input: 310 μM

2. De novo generative pocket filling
GUI/API: 7 μM, 3 μM, 14 μM

3. De novo generative optimization
GUI/API: 0.08 μM, 0.4 μM, 0.12 μM

1. 分子リガンド
input: 6 μM

2. De novo generative optimization
GUI/API: 33 nM

3. Scaffold hopping
1クリックシンプル、3Dオーバーラップ
GUI/API: 24 nM

リードディスカバリー ソフトウェアライセンス

- GUIでスムーズに解析
- 組み込み自動分子設計用APIも販売可
- クラウドによるコスト効率の高いダイナミックアーキテクチャ
- ChemPassによるホスティングまたはオンプレミスインストール

4. Focused Libraries
マルチステップ(1-9)生成
GUI: 2 nM

5. Retrosynthesis
シングルまたはバッチモード、簡単な表形式
GUI

In silico lead optimization case study: Asciminib



- シンプルで完全自動化された5つの設計ステップ
- 合計14,193個の構造体を生成
- すべての構造が合成可能
- 3つの自動化されたSynSpaceモジュール
- 合計1.25時間の計算時間

| DATA | HIT | PCC |
|---|--------|-------|
| ABL1IC ₅₀ (nM) | 550 | 0.7 |
| Luc-BA/F3 BCR-ABL1 ^{WT} GI ₅₀ (nM) | 250 | 0.6 |
| Luc-BA/F3 BCR-ABL1 ^{T315I} GI ₅₀ (nM) | 2390 | 11 |
| hERG(μM, %@30μM) | 3.7 μM | 15% |
| Docking score | -8.2 | -10.1 |

製品紹介ページ
(フィルジェンHP)



フィルジェン 株式会社 **Filgen®**
biosciences & nanosciences

【お問い合わせ】バイオインフォマティクス部

TEL : 052-624-4388 FAX : 052-624-4389

E-mail : biosupport@filgen.jp URL : <https://filgen.jp/>

代理店

(Mar.2024)