

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



2. De novo generative pocket filling



3. De novo generative optimization



1. 分子リガンド



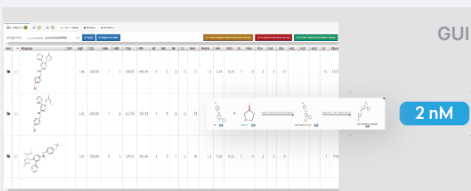
2. De novo generative optimization



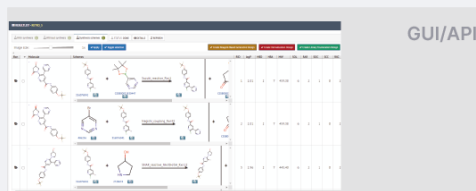
3. Scaffold hopping
1クリックシンプル、3Dオーバーラップ

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



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

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 ^{T3151} GI ₅₀ (nM)	2390	11
hERG(μM, %@30μM)	3.7μM	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)