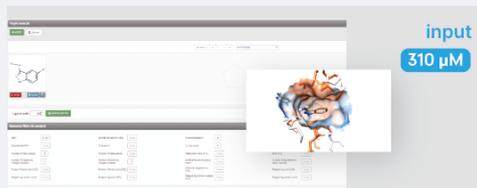




# 合成可能な化学空間を探索する唯一のリードディスカバリーソフトウェア

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。



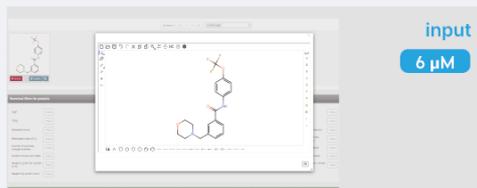
**1. タンパク質に結合したリガンド**



**2. De novo generative pocket filling**



**3. De novo generative optimization**



**1. 分子リガンド**



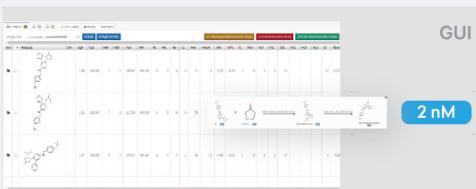
**2. De novo generative optimization**



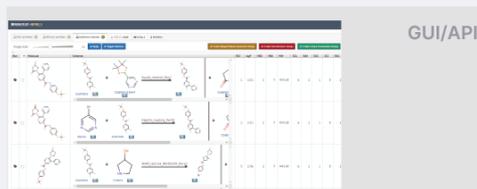
**3. Scaffold hopping**  
1クリックシンプル、3Dオーバーラップ

## 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 <sub>50</sub> (nM)	550	0.7
Luc-BA/F3 BCR-ABL1 <sup>wt</sup> GI <sub>50</sub> (nM)	250	0.6
Luc-BA/F3 BCR-ABL1 <sup>T3151</sup> GI <sub>50</sub> (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 : support@filgen.jp URL : https://filgen.jp/

代理店

(Mar.2024)