

Ideation SAR Slides

SARレポートを迅速に生成・可視化・更新
SAR; Structure-Activity Relationship, 構造活性相関



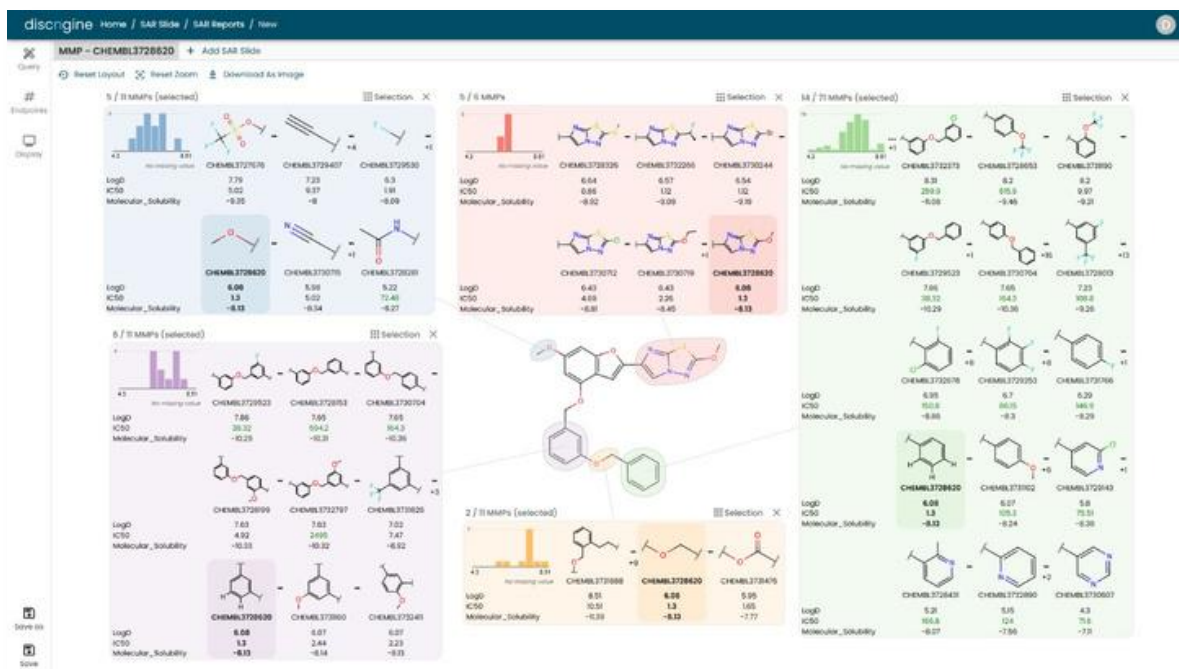
Matched Molecular Pairs (MMP) 解析および R-group 解析を用いた自動SARレポートの生成



新規化合物の創出に
取り組むすべての
研究部門に
最適なツール



既存のソフトウェアや
IT環境との
シームレスな統合



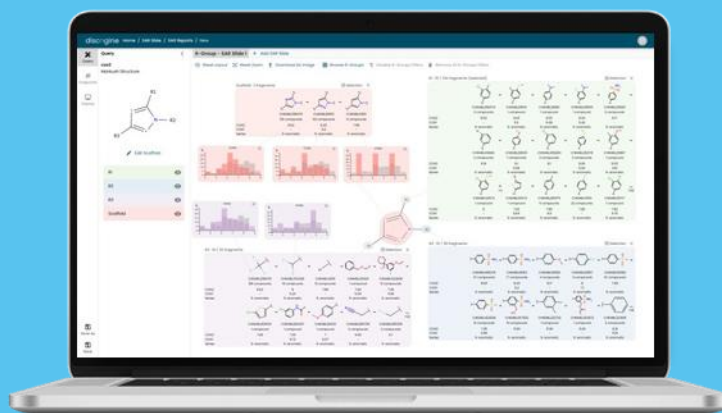
今すぐデモを確認！

高品質なSARレポートの生成

- データセットを素早くインポートし、プロジェクトデータを常に最新に維持
- 視覚的に整理されたSARレポートと関連メタデータを自動生成
- フォントサイズ、スタイル、配置の一貫性を自動で確保
- 手作業でのコピーペーストの操作を排除し、ヒューマンエラーを最小化

解析とコラボレーション

- データセット内の傾向を把握し、新たな洞察を発見
- レポートをシームレスに共有し、化合物設計に向けてコラボレーションを支援
- フィルター機能によりレポートを絞り込み、科学的議論に合わせた形式に調整
- **MOE**をはじめとする様々なサードパーティ製品（例：**Spotfire**、**LiveDesign**）との連携



1. データのインポート

サポートしているデータ形式:

・ファイル(.sdf, .csv, .mdb)

・カスタム連携

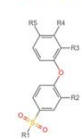
・サードパーティ製品との連携:

- ・ Schrödinger
- ・ LiveDesign® Spotfire®
- ・ Certara D360™



2. 母核あるいは化合物を指定

R-Group 分解
(母核の指定)

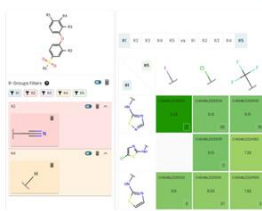


Matched Molecular
Pairs (化合物の指定)

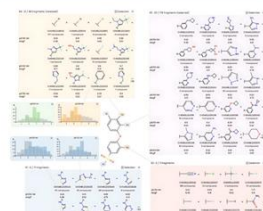


SAR Slidesの生成

3. データセットを探索



4. 調整、ダウンロード、レポートの共有



ユーザーのサクセスストーリー



15分

でほとんどのユースケース
のSARレポートを作成



80%

のユースケースでは、
さらに短時間でレポート
を作成

“このツールは、時間短縮という点でまさに画期的です。プロジェクトデータを自動で要約し、複数のエンドポイントにわたるSAR解析を即座に強化してくれます。しかも、非常に使いやすく、カスタマイズ性にも優れています。”

Aurelie Mallinger, Laboratory and Project Leader at Bayer Crop Science

Discngine は Chemical Computing Group ULC のグループ会社です。記載の商品名は各社の商標または登録商標です。本カタログの仕様は予告なく変更することがあります。(2026.04)

Discngine社日本総代理店

株式会社 モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀三丁目19番9号 ジョ八丁堀

Phone: 03-3553-8030 E-mail: sales@molsis.co.jp

URL: <https://www.molsis.co.jp/>



MOLSIS
Molecular Simulation and Informatics Systems