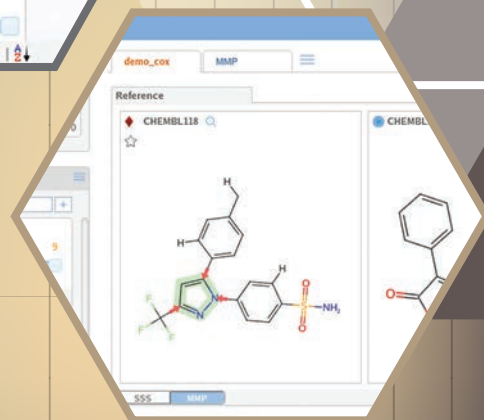


# SARとリガンド解析のためのウェブアプリケーション



## MOEsaic

MOEsaicは、SARデータを解析したり、トレンドの可視化、新しい仮想リード化合物作成のためのMOE/webのアプリケーションです。MMP解析とR-groupプロファイリング、新規構造デザインのためのスケッチ、プロパティ予測を特徴としており、合理的なインターフェースによりプロパティ・クリフやフラグメントのSAR可搬性を素早く評価することが可能です。



## SARとリガンド解析のためのウェブアプリケーション ■ ■ ■

MOEsaicは典型的なメディシナルケミストのワークフローを合理化します。そして、柔軟な構造視覚化、データフィルタ、プロット機能を提供することにより、プロジェクト・データを簡単に解析することができます。MMP解析とR-グループ・プロファイリングにより、重要なSARトレンドの素早い識別、リード化合物の設計と最適化を可能にします。

### 構造-活性、属性の関係の探索

- SAR解析を合理化するウェブベースのアプリケーション
- 柔軟で統合化されたワークフロー指向のインターフェース
- 系統的な解析のための化合物とデータの統合的な可視化

### SARデータとトレンドの可視化

- 多次元プロットを用いた活性ドライバーとアウトライアーの特定
- トレンドを理解するためのプロパティ軸によるデータのソート
- 柔軟なマルチビューによる化合物のフォーカス探索

### 部分構造探索と類似構造探索

- 特定の向きに合わせた分子構造のアライメント
- 構造一致やSMARTS表現による化合物のフィルタリング
- 類似性評価によるコアとフラグメントの検索

### R-groupのプロファイリングと解析

- 複雑な構造のR-groupフラグメンテーション
- SARランドスケープ評価のための、R-groupフラグメントグリッド
- R-groupプロファイルによるプロパティクリフ、活性クリフの解析

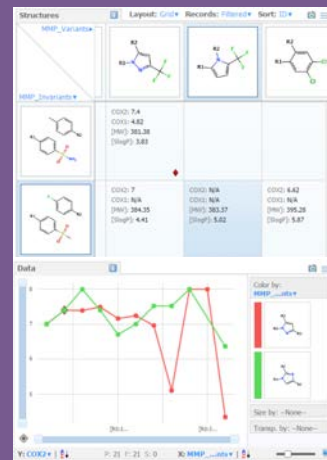
### Matched Molecular Pair解析 (MMPs)

- SARにおける一点置換のインパクトを評価
- ローカルな構造変化の影響を調査
- 系列の比較と生物学的等価体の識別

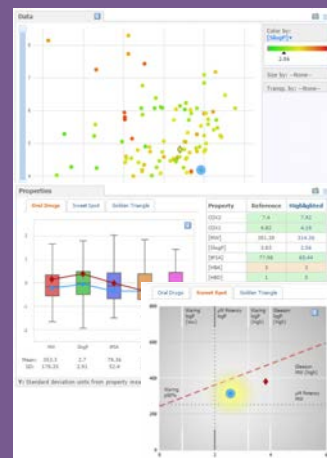
### 新規の仮想リガンドのデザイン

- スケッチャーを統合したリガンドの修正・編集
- プロパティモデルを用いたリガンドデザインの最適化

# MOEsaic



Matched molecular pair profiles of COX-2 inhibitors. Comparison of pyrazole- and imidazole-based inhibitors shows an activity cliff for pyrazole-based structures with a substitution at the meta-position of the 3-substituted phenyl group on the pyrazole ring.



The plotted COX-2 data set shows Celebrex and Vioxx to have similar selectivity against COX-1. Property comparison of the two compounds against oral drug properties shows that both compounds fall within an acceptable range of Lipinski type descriptors. However, Vioxx displays more favorable properties in terms of the sweet spot model (blue dot = Vioxx and red diamond = Celebrex).

 Chemical  
Computing  
Group  
www.chemcomp.com



CCG 社日本総代理店  
株式会社モルシス

TEL : 03-3553-8030 FAX : 03-3553-8031

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

E-mail: [ccg@molsis.co.jp](mailto:ccg@molsis.co.jp)