

＜最新CCS一覧表＞

(国内で市販されている主なパッケージ、2005年6月現在)

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
マテリアルサイエンス	アクセルリス	米アクセルリス					
Materials Studio Visualizer	"	"	MS Modeling各モジュールの入出力プラットフォーム。化学構造モデリングに必要な高度な機能を完備	Windows	お問い合わせ下さい	-	-
Materials Studio Discover/Forcite	"	"	分子力学・分子動力学計算エンジン。COMPASS力場との組み合わせで高精度のシミュレーションが可能	"	"	-	-
Materials Studio Amorphous Cell	"	"	低分子やポリマーの非晶構造を作成。周期境界条件による分子動力学計算から各種物性を計算予測	"	"	-	-
Materials Studio Equilibria			鎖状炭化水素分子の相平衡状態を計算	"	"	-	-
Materials Studio Blends			高分子、溶媒系の相互作用エネルギーの計算から相図、相互作用パラメーターなどを計算	"	"	-	-
Materials Studio DPD & MesoDyn	"	"	メソスケールシミュレーションソフト。ポリマーブレンドやブロックポリマーのメソ構造を予測	"	"	-	-
Materials Studio Synthia	"	"	グラフ理論に基づき、ポリマー構造から各種物性を一瞬で予測。ポリマーハンドブックに代わる座右のツール	"	"	-	-
Materials Studio CASTEP			密度汎関数法 (Density Functional Theory) に基づいた第一原理平面波・擬ポテンシャルコードで、金属・半導体・絶縁体の結晶、界面、ならびに表面に対する計算を行うツール	"	"	-	-
Materials Studio NMR/CASTEP	"	"	CASTEPによる分子、結晶などのNMRケミカルシフトなどの計算モジュール	"	"	-	-
Materials Studio DMol3	"	"	密度汎関数法に基づいた第一原理計算プログラムで数値局在基底関数を使用。分子系と周期系双方の電子状態計算が可能	"	"	-	-
Materials Studio VAMP			半経験的分子軌道法プログラム。MINDO,MNDO,AM1,PM3法を含む。溶媒効果、励起状態計算などが可能	"	"	-	-
Materials Studio ReflexPlus	"	"	粉末X線結晶回折データから結晶構造を精度よく計算予測するツール	"	"	-	-
Materials Studio Morphology			分子構造から結晶の形態を計算予測	"	"	-	-
Materials Studio Polymorph			結晶の多形を計算予測	"	"	-	-
ライフサイエンス							
Discovery Studio	"	"	創薬プラットフォーム (基本環境)	"	"	-	-
Discovery Studio ViewerPro	"	"	分子の3Dモデル表示と簡単なモデル解析のデスクトップ	"	"	-	-
Discovery Studio Modeling	"	"	Windows PC上でのタンパクホモロジーモデリングと動力学シミュレーションツール	"	"	-	-
Discovery Studio MedChem Explorer	"	"	医薬合成化学者むけファーマコファーマ解析/DB検索のためのWindows Client-Serverソフトウェア	SGI, Linux	"	-	-
Catalyst	"	"	ファーマコフォアベースの分子アラインメント、形状ベースの三次元サーチ、SAR データに基づくファーマコフォア仮説の自動作成、コンフォメーション空間を幅広くカバーした複数コンフォメーションの発生といった相補的機能を提供するツール	SGI, Linux	"	-	-
Cerius2/ADME	"	"	社内保有化合物ライブラリーやコンビナトリアルライブラリーなど、非常に多くの化合物を取り扱う場合に適したADME特性の解析及び予測のための高速計算ツール	"	"	-	-
Cerius2/LigandFit	"	"	タンパクリガンドの親和性評価 (バーチャルスクリーニング)	"	"	-	-
Cerius2/SBF	"	"	タンパク3D構造に基づく3Dファーマコフォアクエリーの構築と3D検索	"	"	-	-

Cerius2/CombiChem	"	"	コンビナトリアルケミストリーにおけるライブラリーデザインツール	"	"	-	-
Cerius2/AutoLudi	"	"	自動De novoデザイン&スコアリング	"	"	-	-
Insight II	"	"	生体高分子系分子モデリング、シミュレーション	SGI, Linux	"	-	-
QUANTA	"	"	高分子X線結晶学者向けの高度なツール	"	"	-	-
ZDOCKpro	"	"	タンパク-タンパクのドッキングシミュレーション	"	"	-	-
CNX	"	"	X線およびNMR構造解析用の構造精密化エンジン	SGI, Linux, AIX	"	-	-
Felix	"	"	全タイプのNMRデータに対応する業界標準のオフラインのデータ処理、スペクトル・ヴィジュアルライゼーションおよび解析を行なうソフトウェア	Windows, SGI	"	-	-
ケムインフォマティクス							
Accord	"	"	クライアント/サーバープラットフォーム上での化学薬品データ管理ツール	Windows	"	-	-
Accord for Excel	"	"	化学計算、完全一致や部分構造一致によるフィルタリング、構造の類似度によるソートなど、化学者が日常的に用いているMicrosoft Excel上で自在に化学を取り扱うことのできる化学スプレッドシート。立体化学も認識する化学者必携のツール	"	"	-	-
Accord for Excel Combi Chem	"	"	化学スプレッドシートのAccord for Excelにコンビケムのエミュレーションツールを統合し、一般反応式の入力、SDファイルなどから試薬リストを読み込んでボタンを押すだけで化合物ライブラリーを作成するツール	"	"	-	-
Failed Reaction	"	"	Accelrys監修、30余りの化学学会誌から、「不良反応」の実例を集めたユニークなデータベース	"	"	-	-
Method in Organic Synthesis	"	"	英国RSC刊の学会誌"Method of Organic Synthesis"より、重要な有機化学合成反応を収録したデータベース	"	"	-	-
TOPKAT	"	"	化学物質の毒性や環境的影響を分子構造のみから計算し、自動的に評価を確認するソフトウェアシステム	"	"	-	-
TSAR	"	"	統計的およびビジュアル分析ツールを使用してデータの傾向を調べる、完全統合された2D QSARパッケージ	"	"	-	-
DIVA	"	"	化学および生物学データを処理するデスクトップ・アプリケーション	"	"	-	-
バイオインフォマティクス							
Wisconsin Package (GCG)	"	"	多様な研究ニーズに対応する配列解析ツール	SGI, Alpha, Linux	"	-	-
SeqWeb	"	"	Wisconsin Packageに対応するwebインターフェース	Windows	"	-	-
SeqStore	"	"	Oracleベースの配列情報管理DBMS	SUN, AIX	"	-	-
MacVector	"	"	Macintoshにおける配列解析ツールのデファクトスタンダード	Mac	"	-	-
Discovery Studio Gene	"	"	極めて優れた操作性を実現した配列解析デスクトップ	Windows	"	-	-
Discovery Studio GeneAtlas	"	"	HTM (High Throughput Modeling) を活用した高品質アプリケーションサーバ	SUN, Linux	"	-	-
Discovery Studio AtlasStore	"	"	リレーショナルデータベースによるプロテオミクスデータ管理システム	SUN, Windows	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MAAT	ACRONET	ACRONET	マイクロアレイ発現解析ソフト、発現率をガンマ分布と仮定した手法と複数実験データにより解析精度を向上させる調整P値法をモデル化	Windows98/Me、2000/NT	要問い合わせ	-	-
MUGEN Extractor	"	"	バイオ文献テキストマイニングツール。PubMed検索結果のabstractからキーワードに関連する遺伝子名や化合物名を抽出しキーワードとの関連性の強さ、シグナルパスウェイなどを調査することができる。その他、研究を効率化・高速化するための機能を備える	Windows2000/XP	要問い合わせ	-	-

ARCS+	"	"	治験データに対して、症例登録から症例報告書の出力まで、データを効率的に収集・管理する電子CRFシステム。豊富なデータチェック機能により、高品質な治験データが迅速に得られる	サーバー例: Windows2000 サーバー、クライアント例: WindowsXP、2000、98SE、MacOS9以上	要問い合わせ	-	-
SMO+Helper(仮称)	"	"	治験施設支援機関(SMO)のための業務支援アプリケーション。症例の進捗管理、被験者来院管理、提供・受領文書情報管理などの機能をもつ	サーバー例: Windows2000 サーバー、クライアント例: WindowsXP、2000、98SE、MacOS9以上	要問い合わせ	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Advance/ProteinDF	アドバンスソフト	アドバンスソフト	大規模タンパク質を解析する次世代量子化学計算。新薬の開発における精密なタンパク質の機能・反応解析に有効。金属タンパク質物性研究における精密な全電子計算が可能(バイオサイエンス学術研究)	計算部:Linux、GUI部: Windows、Linux (Java2、Java3D、jpeg対応のgnuplotが必要)	お問い合わせください	2004年12月	-
Advance/BioStation	"	"	バイオ創薬を支える タンパク質と化学物質相互作用解。タンパク質と低分子化合物との相互作用を高精度に予測でき、医薬品等の分子設計の効率化に有効。環境ホルモン等の低分子化合物の人体への影響の予測に役立つ。1000残基規模のタンパク質の電子密度の量子計算が可能で、タンパク質の機能解析に有効	Windows 2000/XP Professional、 RedHat Linux (IA32) 7.3、8.0、9.0 (これら以外の環境についてはお問い合わせください)	お問い合わせください	2004年12月	-
Advance/PHASE	"	"	ナノデバイス開発を支援するナノシミュレーション。電子論に基づいた固体の材料設計・解析ツールとして利用できる。誘電率計算機能により、次世代半導体素子の開発に必要な高誘電率材料や太陽電池 材料の光学特性の解析に有効。走査トンネル顕微鏡や光電子分光などの表面分析、触媒などの表面反応の理論的解析に有効	Linux、Unix (LAPACK、MPIライブラリが必要)	お問い合わせください	2004年12月	-
Advance/FrontFlow/red	"	"	複合連成やマイクロスケール問題を解析する次世代流体解析。新幹線、空調機器、自動車体周りなどの流体音の解析に有効で騒音の低減化が図れる。ガスタービン燃焼器、自動車エンジン内の燃焼反応の解析に有効。台風など強風のビルなど構造物への影響を解析、ゆれ具合の評価、強度設計などに有効	燃焼、混相流解析: IRX(Ver6.4、Ver6.5)、ターボ機械、流体音解析:加えて OSF1(Ver5.1)、HI-UX/ MPP(Ver03.07)、 SunOS(Ver5.9)、 UnixSystemV、 Linux(Ver2.4.19)	お問い合わせください	2004年12月	-
Advance/FrontFlow/blue	"	"	Advance/ FrontFlowは、複合連成やマルチスケール問題を解析する次世代流体解析ソフトウェア。/blueはラージ・エディ・シミュレーション(LES)を用いた大規模渦の高精度な乱流シミュレーションを実現。乱流音、キャビテーション解析が可能であり、水力機械の性能評価、空力騒音予測等になどに有効	OS:AIX、HP-UX、HI-UX/MPP、IRIX、SUPER-UX(地球シミュレータ)、Linux	お問い合わせください	2004年12月	-
Advance/PSE Workbench	"	"	複雑・大規模な解析シミュレーションを効率化する統合プラットフォーム。複雑で大規模なソフトウェア開発のワークベンチ。流体、構造、熱などの総合解析システムの構築に有効。タスクフローという新しい概念に基づくソフトウェア	Linux、Windows 2000、Windows XP、Unix (Java2 が必要)	-	-	-
Advance/pSAN	"	"	大規模・複雑な系に適する構造解析ソフトウェア。静解析、幾何学非線形、固有値解析など。独自入力フォーマットのほか、NASTRAN形式の入出力にも対応。使用できる要素は平面、4面体、6面体要素の他にシェル	Linux、Windows 2000、Windows XP	お問い合わせください	2004年12月	-

Advance/TFLAGS	"	"	薄膜成長プロセスシミュレーション。MBE、CVD、スパッタ法などによる薄膜成長プロセスを原子レベルでシミュレート可能。結晶粒サイズ分布や表面の凹凸が堆積速度や基盤温度などの成長条件によってどのように変化するか解析可能。エピタキシャル成長、ガラス基板上の多結晶膜の成長など様々な薄膜成長様式に対応。PCで動作	OS:Windows、Linux、Mac OS X、UNIX、CPU: Pentium4 1GHz以上推奨、メモリ: DDR-SDRAM 512MB以上推奨	お問い合わせください	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GENIE	アドバンスドテクノロジーインスティテュート	アドバンスドテクノロジーインスティテュート	DNA・たん白質情報の統合解析システム。とりわけ、独自開発によるホモロジーモデリングに基いたたん白質の立体構造予測システムは、予測した構造の局所的な予測精度を推定することができるという独特の機能を備えている	サンSPARC (インターネットによる利用が可能)	150万円	94年1月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MolWorks Ver1.7	ベストシステムズ	ベストシステムズ	分子設計のためのビルダーを備え、物性値の推算およびGAUSSIAN、MOPAC、GAMESSへの入出力インターフェースを備えている。ダウンロード先: http://www.molworks.com/	Windows98、WindowsNT/2000、MacOS、Linux	無償	2000年9月	-
Q-Chem	"	米キューケム	オーダーNアルゴリズムを適用した大規模分子系ab initio分子軌道計算プログラム	Linux、IBM、SGI、Compaq Alpha、SUN	別途問い合わせ	1993年3月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
KnowItAll (ノウ・イットオール) インフォマティクシステム	日本バイオ・ラッドラボラトリーズ	米バイオ・ラッドラボラトリーズ	IR、Raman、NMR、MSスペクトルを1つのアプリケーションで扱うことのできる画期的なソフト。ユーザーが必要なツールを組み合わせで購入することができる	Windows2000以上	22万円から、詳細問い合わせ	2001年10月	-
ハブ・イットオール ライセンスキー	"	"	サドラーのスペクトルデータベースすべてを1年間制限なく検索利用することのきるプライスシステム	"	IR 98万円、NMR 97万円、MS56万円/1年間	2003年4月	-
IRパッケージデータベース ver.5	"	"	世界最大規模のIRスペクトルデータベースを用途、分野に分けて収録。ユーザーの利用形態に合わせて選択可能	-	詳細問い合わせ	2000年4月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Computational Chemistry Total Solutions	分子	分子	Gaussian 03 などの量子化学計算を中心とした総合的コンサルティングを展開中。Linux、Unix の分子計算システム構築を受注している	SUN、RS/6000、HP、IRIS、Windows、Fedora Core	10万~300万円 (アカデミック価格あり)	1987年7月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ChemInTool - Chemish Pro	ケムインフォナビ	東京大学 船津研究室	モデリング(MLR,PLS,BP,CP)、クラスターリング(階層型 Kohonen)、変数選択(GA-PLS)機能を有する統合的ケモメトリクスソフトウェア。モデル式を用いた予測、逆解析および原子団寄与法機能がある。さらに要求特性を満たす化学構造式を自動的に生成する機能もある	Windows2000/XP	年間ライセンス 84,000円(税込)、アカデミック価格あり	2004年	-
ChemInTool - Chemish Free	"	"	Chemish Proの機能限定無償版。PCA、PLS、MLR機能が使用可能。HP(http://www.cheminonavi.co.jp)よりダウンロードできる	"	無償	2005年	-
ChemInTool - ToMoCo	"	"	分子設計、構造活性相関解析を行うためのトータルシステム。Hopfieldニューラルネットワークによる分子構造重ね合わせ手法により、基本骨格が異なる分子でも重ね合わせが可能	"	年間ライセンス 525,000円(税込)から、アカデミック価格あり	2004年	-
ChemInTool - AIPHOS	"	"	反応知識ベースを用いて化学反応設計を支援するシステム。合成したい目的化合物を入力することにより、合成ルートを提案する	サーバー: Linux、クライアント: Windows2000/XP	お問い合わせ下さい	2004年	-
ChemInTool - SEoN	"	"	NMRスペクトルから、その化学構造を自動推定する構造解析システム。分子式から構造を自動的に生成する機能を用いて、可能性が高い構造を推定できる	Windows2000/XP	お問い合わせ下さい	2004年	-
FIND-TSINFO	"	山口大学 堀研究室	構造検索や反応検索を行うことが可能な遷移状態データベースシステム	"	お問い合わせ下さい	-	-
TSLB	"	"	遷移状態データベース。現在までに収集されているデータを集めたライブラリについては近日中に公開予定	"	お問い合わせ下さい	-	-

TS_Search	"	"	遷移状態データベースと連携して遷移状態探索をアシストするシステム	"	無償	-	-
hag98	"	"	多数のコンピュータが存在する環境でGaussian03のジョブのスケジュール管理を行うシステム	"	お問い合わせ下さい	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CONFLEX5	コンプレックス	コンプレックス	CONFLEX5は、フレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造を洩れなく見つけた。今までの構造最適化プログラムでは、ユーザが入力した初期構造に依存した、局所的な最適化構造しか求めることができなかった。最安定構造でさえも、特定することが困難だった。これでは、フレキシブルな分子の性質や挙動に関して、限られた情報しか得ることができない。これらの問題を解決するための配座探索プログラムが、バージョンアップされたCONFLEX5である	Mac、Linux、Windows、SGI	企業価格: 200万円、大学価格: 20万円	2001年4月	-
Parallel CONFLEX	"	"	並列化された CONFLEXは、鎖状部分の結合の回転・環を構成する原子のFlap・Flipにより、初期構造を変形させる微小変形により発生する複数の出発構造を複数のコンピュータに分散させて構造最適化を行う。ポストゲノム研究、新機能材料開発などで扱う系は非常にサイズが大きい場合が多くPC1台で手軽に配座探索計算を行うことはできない。特に最近のポストゲノム研究で注目されるタンパク質やDNA、RNAなどの生体高分子はさまざまな三次元構造を有する多配座分子であり、これらの立体構造を分子計算で解析する皆様のためにもParallel CONFLEXは有効	Mac、Linux、Windows、SGI	企業価格: 200万円、大学価格: 20万円	2001年4月	-
AMBER8	"	米カリフォルニア大学	AMBERは、カリフォルニア大学の故コールマン教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよびモлекуラールメカニクスとダイナミクス計算シミュレーションのパッケージ。モデリングではparm96やOPLSなどの構造データベースをもち、溶媒水分子の配置やチャージのフィッティングを行なうなどのビルダーモジュールが多数用意されている	UNIX、Linux、MDGRAPE-2、Windows	企業価格: 300万円、大学価格: 20万円(日本語チュートリアル付ソースのみ)	2000年4月	-
Gaussian03 GaussView3.0	"	米ガウシアン	Gaussian 03は、1999年に実験データから導き出される経験的パラメータを一切用いない非経験的分子軌道法の普及の功績によりノーベル賞を受賞したJ.A.Popleらによって開発された。新たに追加されたONIOM法により、電子構造理論を巨大分子についても現実的なものとし、分子特性の予測範囲を拡張した	UNIX、Linux、Windows、Mac	企業価格: 43万円~、大学価格: 20万5000円~	2003年4月	-
BioBook	"	コンプレックス	BioBookは、バイオ研究者向けのポピュラーなツールをノートPCにセットアップ済みでお届けする、研究者個人向けバイオインフォマティクス支援システム。バイオインフォマティクスと計算生物学は急速に発展する科学分野で、今日ではコンピュータベースのツール無しに、研究開発分野の情報で優位に立つことは不可能。一年間のサポート付きなので、初心者の方も安心して研究開発のツールとして研究時間短縮にご利用いただける	Mac、Windows	問い合わせ	2003年4月	-
配座創出コンサルティング	"	"	DNAや蛋白質などに代表される生体高分子の三次元立体構造は、それらの活性や物性を研究する上で欠くことのできない情報である。配座創出コンサルティングは新たに開発された、シーケンス型配座創出アルゴリズムと並列計算システムを応用することによって、数千原子分子程度の有機化合物(数百塩基対相当)の立体配座を短時間で創出するサービス	-	10万円~	2003年4月	-
BARISTA	"	"	BARISTAは、独自の多配座解析機能に加えて、分子構造解析・分子軌道解析・基準振動解析・動力学的解析機能を有する解析支援のためのプラットフォーム。BARISTAは、分子計算プログラムにより計算された結果をもとに分子構造のコンピュータグラフィックスを作成・表示することができ、その結果を容易に解析することができるように支援することを目的としている	Windows	企業価格: 50万円、大学価格: 10万円	2002年4月	-

MDGRAPE-2	"	高速計算機研究所	MDGRAPE-2は、分子シミュレーションや天体シミュレーションに代表される多粒子系での2粒子間力を高速に求めるためのアクセラレータボード。例えば、分子動力学シミュレーションにおいてその計算時間を劇的に短縮します。MDGRAPE-2は1枚あたり理論値で64GFlops、実効値で50GFlopsの計算能力を有する	Linux	企業価格:225万円、大学価格:165万円	2003年4月	—
CONFLEX.NET	"	コンプレックス	CONFLEX.NETはイントラネット環境下におけるCONFLEXの共有利用を可能とする。また、CONFLEXの計算結果はネットワーク上のデータベースサーバに蓄積されるため、配座データベースの再利用が容易	Linux	問い合わせ	2004年4月	—
受託計算サービス	"	"	受託計算サービスでは、弊社独自に開発したシーケンス型配座創出アルゴリズムと並列計算システム(グリッド環境)を応用したCONFLEX法を使用して配座探索を行います。取り得る可能な配座異性体を徹底的に調べて、もっとも安定な配座を特定します。さらにab initio計算等の精度の高い計算により、探索した各配座異性体についてお客様の要求される物性値の予測を実施いたします	—	10万円～	2004年4月	—
計算化学サービス	"	"	計算化学のプログラムを使いこなすには、熟練した職人芸的要素が必要とされ、限られた研究時間で多くの計算を行うことは難しいのが現状です。弊社ではこのような計算化学を利用したいが計算化学を勉強する時間のない企業や大学の研究者の皆様のために、計算化学サービスをご提供し、研究開発の時間短縮や経費節減に協力させていただきます	—	企業価格:100万円、大学価格:20万円(年間サービス)	2004年4月	—
CONFLEXデータコンバータ	"	"	CONFLEXで出力される大量の配座データをGaussian03のインプット形式に変換する	Mac Linux	10万円～	2004年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ChemReact	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	独インフォケム	VINIT(旧ソ連)とZIC(独)から収集された330万件の化合物データから同一反応タイプを排除したデータベース	SGI, Sun, NT	要問合せ	—	—
ChemSynth	"	"	ChemReact中から著名なジャーナルに発表されており、収率が50%以上の反応のみを抜粋したデータベース	"	"	—	—
CoRM	"	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	試薬管理、発注システム	"	"	—	—
Activity Base	"	英アイディービジネスソリューション	HTS、マニュアルアッセイの双方に対応したクライアントサーバー型のアッセイ情報管理システム	IBM RS/6000、SGI IRIS、DECAAlphaVAX、WindowsNT、Sun	"	—	—
XLFit	"	"	アッセイデータの解析を支援するMS-Excelのアドオンソフト	WindowsNT、Windows95、2000	10万5,000円	—	—
SARGen	"	"	ISIS上の構造式とアッセイデータをリンクして表示するレポートツール	WindowsNT、Windows2000	要問合せ	—	—
DEREK for Windows	"	英ラーサ	ルールベースに基づく化合物毒性予測プログラム	"	"	—	—
METEOR	"	"	ルールベースに基づく代謝予測システム	"	"	—	—
CORINA	"	独モレキュラーネットワークス	大規模3D-Chemical-Database構築を目的としたAutomatic 3D-Structure Generatorプログラム	SGI, IBM, Sun	"	—	—
SRS	"	"	生物データベースマネジメントシステム	サーバー: SUN, SGI, Compaq、クライアント: Webブラウザ	"	—	—
Genomatix Suite	"	独ジェノマティクス	Genomatix社トータルソリューションパッケージ	Internet経由 or Linux Server	"	—	—

PromoterInspector	"	シーティー シー・ラボラ トリーシステ ムズ	哺乳類のプロモータ予測ソフト	Internet経由 Linux Server	or "	-	-
MatInspector	"	"	転写因子サイト予測ソフト	Internet経由 Linux Server	or "	-	-
GEMSLauncher	"	"	プロモータ領域解析パッケージ	Internet経由 Linux Server	or "	-	-
EIDorado	"	"	プロモータ領域アノテーション付、遺伝子デ ータベース (ヒト、マウス、ラット、アラビド)	Internet経由 Linux Server	or "	-	-
Chip2Promoter	"	"	発現解析時のプロモータ解析ツール	Internet経由 Linux Server	or "	-	-
BiblioSphere	"	"	遺伝子-遺伝子間、遺伝子-転写因子間の文 献マイニングデータベース	Internet経由 Linux Server	or "	-	-
SIMS	"	米サイマジ ックス	イメージデータ管理システム	サーバー: Sun, Win, Oracle ク ライアント: web	"	-	-
SRS Objects	"	"	SRSと様々なツールを統合するインターフェ ース	SGI, Compaq, SUN, Linux	"	-	-
SRS Prisma	"	"	SRSで管理されているデータベースをアップ デートするモジュール	"	"	-	-
DIP	"	米プロテイン パスウェイ	タンパク-タンパク相互作用データベース	"	"	-	-
FGENEシリーズ	"	米ソフトベリ ー	遺伝子領域予測ツール	UNIX	"	-	-
BioExpress, Custom DB	"	米ジロジック	ヒト疾患サンプルからの遺伝子発現デー タベース	Sun	"	-	-
ASCENTA	"	"	BioExpressをベースにした、遺伝子発現デー タベース Bioinformaticianでなくとも簡単に利 用可能	Webブラウザ	"	-	-
ToxExpress	"	"	Toxicogenomicsデータベース	UNIX	"	-	-
TOX staff 21	"	シーティー シー・ラボラ トリーシステ ムズ	安全性試験の統合的な支援システム。一般 毒性、病理、臨床病理、生殖毒性、統計解析	サーバー: WindowsNT, SUN, クライ アント: Windows	"	-	-
ADME staff	"	"	薬物動態試験の総合的な支援システム。臨 床、非臨床PK, TK試験、濃度計算、LA	"	"	-	-
SQL*Stability	"	米アプライ ドバイオシ ステム	製剤、安定性試験支援システム。プロトコ ル作成、スケジュール管理、LA	サーバー: WindowsNT/20 0, SUN, クラ イアント: Windows	"	-	-
SQL*QA	"	"	治験薬GMP、GMP向け品質保証システム。 ロットQA、QC、ロットアナロジー管理、LA	"	"	-	-
SQL*LIMS	"	"	ラボラトリー情報管理システム。QC、分析、 LAのコアシステム	"	"	-	-
Documentum	"	米イーエ ムシー	エンタープライズ・コンテンツ管理用プラ ットフォーム。申請文書管理の他、多様な業務 コンテンツの共有やプロセス管理、コラボレ ーション環境を実現する	サーバー: SUN, HP, NT, クライアント: Windows	"	-	-
ARISg/j	"	米アリス グローバル	グローバル安全性情報管理システム。安全 性情報のグローバル管理を実現、 Pharmacovigilance対応の機能が充 実	サーバー: SUN, NT/2000, ク ライアント: Windows	"	-	-
SafetyMart	"	"	安全性情報のデータマイニングツール。 BusinessObjectsの機能を利用して、安全 性情報管理DBのデータを様々な角度から分 析し、表・グラフ化が可能	サーバー: SUN, NT/2000, ク ライアント: Windows	"	-	-
Register	"	"	プロダクト情報管理DB。各プロダクトに関 する申請時期や用法用量、添付文書情報等 を各国単位で管理可能で、複数国向けに プロダクト管理が必要となる欧州では特 に有効。EVMPD対応	サーバー: SUN, NT/2000, ク ライアント: Windows	"	-	-

Oracle Clinical	"	米オラクル	グローバル治験へ対応可能な臨床データ管理システム。各種データのライブラリ化により、業務の効率化やStudy SetUpの期間を大幅に短縮する	サーバー: SUN、HP、NT、 クライアント: Windows	"	—	—
Remote Data Capture	"	"	Oracle ClinicalとリンクしたEDCシステム。実際のCRFと同等の画面イメージ(PDF形式)でのデータエントリーが可能	サーバー: SUN、HP、NT、 クライアント: Windows	"	—	—
Oracle TMS	"	"	MedDRA、自社辞書などGCP・GPMSPにおける辞書の統合管理を可能にする	サーバー: SUN、HP、NT、 クライアント: Windows	"	—	—
Renaissance Software	"	米シミックステクノロジーズ	コンビケムの技術を用いて材料開発を支援するソフトウェア	WindowsNT、 Oracle	"	2001年1月	—
Discovery Tools Polyolefins Systems	"	"	ハイスループットでポリマー重合用触媒の開発を行う装置	WindowsNT、 Oracle(ソフトに関して)	"	—	—
Discovery Tools Heterogeneous Catalysis Systems	"	"	ハイスループットで固体触媒の開発を行う装置。1次及び2次スクリーニング装置が含まれている	"	"	—	—
Discovery Tools Polymer Properties Systems	"	"	ポリマー自体の特性評価を微量サンプルからハイスループットで行うことが可能	"	"	—	—
Discovery Tools Pre-Formulations Systems	"	"	医薬品候補化合物の物性評価時における塩及び結晶多形のスクリーニングを行うシステム	"	"	—	—
コラボレーション(マテリアルサイエンス)	"	"	合成用触媒、重合用触媒、化粧品原料、顔料などの受託研究や共同開発を行う	—	"	—	—
コラボレーション(ファーマシューティカル)	"	"	塩、結晶多形のスクリーニングやプロセス研究などの分野において、受託研究や共同開発を行う	—	"	—	—
ARTHUR SUITE	"	"	合成実験のプランニングやレポートの作成ツール	Windows2000、 XP	"	—	—
iELN	"	米シミックスインテリケム	実験ノートの電子化とドキュメントマネージメントを行うツール	Windows2000、 XP	"	—	—
SSCI	"	米エスエスシーアイ	化合物の物性についてのコンサルティングや受託研究を行う	Windows2000、 XP	"	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ライフサイエンスプロダクト							
DayCart	サイバネットシステム	米デイライト	新製品、オラクル+Daylight化学情報管理システム	SGI、SUN、 Linux	詳細問い合わせ	2000年9月	—
Daylight DBMS	"	"	複雑なクエリーによる高速検索可能な化合物、反応のデータベース管理システム	"	"	92年1月	—
Clustering Package	"	"	Daylight Fingerprint 使用のクラスタリングソフト	"	"	"	—
Rubicon	"	"	Smiles から3D構造、コンホメーション発生ソフト	"	"	"	—
PCModels	"	"	2D構造からClogP、CMRを推算するソフト	"	"	"	—
Smiles Toolkit	"	"	SD、RD、Mol、Mol2 各ファイルとSmilesファイルとの相互変換ツール。TPSAの計算可能。	"	"	"	—
Smarts Toolkit	"	"	複雑な検索クエリーの作成ツール、バーチャルスクリーニングのプログラムに最適	"	"	"	—
Reaction Toolkit	"	"	反応ルールに基づいてパーチャルライブラリーを構築するツール	"	"	"	—
Fingerprint Toolkit	"	"	独自のFingerprint 作成ツール、Fingerprintにより類似度計算	"	"	"	—

Daylight Java Tools	"	"	Jaba によるDaylight プログラムへのGUI	"	"	98年10月	-
DayCGI Tool	"	"	Web によるDaylightデータベースへのアクセス	"	"	"	-
TCM	"	"	新製品、中国3000年の歴史を誇る漢方薬の化学構造データベース	"	"	2002年1月	-
Medchem データベース	"	米バイオバイト	LogP実測値データベース(約34,000件)	"	"	92年1月	-
WDIデータベース	"	英ダウエント	ダウエントWorld Drug Index データベース	"	"	"	-
Spresi React データベース	"	独インフォケム	化学反応データベース(250万反応)	"	"	"	-
CCR データベース	"	米ISI	化学反応データベース(25万反応)。年々3万件追加	"	"	"	-
Index Chemicus データベース	"	"	有機化学のジャーナルから抽出された最新化合物データベース(60万構造)	"	"	"	-
Maybridge データベース	"	英メイブリッジ	試薬カタログ。5万件全てMaybridge社から供給可能	"	"	"	-
ACD データベース	"	米MDL	Available Chemical Directory 約25万試薬	"	"	"	-
NCI データベース	"	米NCI研究所	国立癌研究所データベース約12万化合物	"	"	92年1月	-
QSAR	"	米バイオバイト	Hansch による過去20年にわたるQSAR関連データベースを含む構造活性相関モジュール	Alpha/OpenVM S	"	97年1月	-
BioLoom	"	"	Hansch・Leo によるLogP/CMR 推算ソフト(Mac版、Win版)No Missing Fragment	Mac、Windows、SGI	"	2004年4月	-
BL-Master	"	"	Hansch・Leo Biobyteデータベースへのアクセス	Mac、Windows、SGI	"	2004年4月	-
DockIt	"	米メタフォリックス	ターゲット蛋白とデータセットのドッキングで、コンホメーションを考慮する。コンビケムでパーチャライブラリのスクリーニングに最適	SGI、SUN	"	2000年1月	-
LUNA	"	"	蛋白質-リガンド データベース	"	"	2002年1月	-
Fingerprint Generation Package	"	英BCI	Dictionary をもとにFingerprintを作成	UNIX、PC	"	97年1月	-
Clustering Package	"	"	Ward法、K-Means法、J-P法など各種クラスタリングパッケージ	"	"	97年1月	-
Diversity Analysis Package	"	"	構造のDiversityを計算しデータセットを評価し、また特異構造を選抜する	"	"	97年1月	-
Molsmart	"	"	二次元描画のクエリーからDaylight クエリーのSmarts を生成する	"	"	2003年4月	-
EON	"	米オープンアイ	静電ポテンシャル類似度の検証	Unix、Linux、Windows、MacOS X	"	2004年9月	-
Filter	"	"	物性、官能基による化合物のスクリーニングツール	"	"	"	-
Fred	"	"	高速ドッキングツール	"	"	"	-
Ogham	"	"	化合物命名、構造のレンダリングツール	"	"	"	-
Omega	"	"	システムティックな3Dコンホマー生成ツール	"	"	"	-
Quacpac	"	"	低分子、たんぱく質のpKa計算	"	"	"	-
Rocs	"	"	3D分子形状(Shape)の類似度検証ツール	"	"	"	-
Smack	"	"	DBクエリーの最適化、MDLクエリーのSmarts への変換	"	"	"	-
SZYBKI	"	"	リガンドの気相、溶液中、たんぱく質活性部位における構造最適化	"	"	"	-

VIDA	"	"	化合物のGUI,及び計算結果の解析	"	"	"	-
WABE	"	"	リードエポリユーション及び静電ポテンシャル検証	"	"	"	-
Case Toolkit	"	"	構造最適化のための拡張プログラミングライブラリ	"	"	"	-
OEChem Toolkit	"	"	ケムインフォマティクス及び3D化合物DB管理	"	"	"	-
Shape Toolkit	"	"	3D重ね合わせによる分子形状比較	"	"	"	-
Zap Toolkit	"	"	ポアッソナーポルツマン静電ポテンシャル計算	"	"	"	-
ナノテクノロダクト							
Virtual NanoLab	"	デンマーク・Atomistix	ナノ電極間の電子輸送と電子状態計算により電流電圧特性を算出。孤立系・バルク系の計算も可	Windows/Linux、PCクラスター対応	詳細問い合わせ	2004年2月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Space Finder	ダイキン工業	ダイキン工業	Webブラウザから分子モデリング、及びGaussian、MOPACへの計算起動と計算結果の可視化	Windows、LinuxPC、SGI、Compaq、SUN、HP、IBM	別途問い合わせ	2001年3月	-
ComputerChemistryFarm	"	"	Gaussian,Amber,Accelrysソフト等の計算最適化、付加分散、計算スケジューリングシステム	Windows、LinuxPC、SGI、Compaq、SUN、HP、IBM	"	2002年12月	-
DiscoveryStudio	"	米アクセルリス	ライフサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。DiscoveryStudioの各種モジュールを組み合わせることで目的にあわせた高度なシミュレーションが可能	GUI: Windows、計算: Windows、IBM、Linux	"	2002年11月	-
MaterialsStudio	"	"	マテリアルサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。MaterialsStudioの各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	GUI: Windows、計算: WindowsHP、Linux	"	2000年9月	-
Insight II	"	"	ライフサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。Insight II 配下の各種モジュールを組み合わせることで目的にあわせた高度なシミュレーションが可能	SGI、Linux	"	-	-
Cerius2	"	"	統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。Cerius2の各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	"	"	-	-
QUANTA	"	"	蛋白質X線構造解析、フィッティングソフトウェア	"	"	-	-
MOPAC2002、WinMOPAC	"	富士通	高分子向けにDistanceCutoff法を用いた局在化分子軌道計算プログラム、Windows版MOPAC	Windows他	"	1999年4月	-
PDFAMS	"	インシリコサイエンス	タンパク質ホモロジーモデリングソフトウェア	RedHatLinux、IRIX	"	2003年6月	-
KeyMolnet	"	医薬分子設計研究所	生体分子・遺伝子・疾患・医薬の情報戦略プラットフォーム。文献調査に基づく信頼度の高いコンテンツを搭載し、任意の項目間の関係をネットワーク検索可能。DNA chip、プロテオーム等のデータ解析にも対応	Linuxサーバー&Windowsクライアント	"	2004年6月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Chemistry 4-D Draw 7.0	デジタルデータマネジメント	米ケムインベーションソフトウェア	構造式の作図機能のほか、構造式からIUPAC名を作成、IUPAC名から構造式を作成、構造式と文書や物性のテーブルを作成して部分構造式などから検索	Windows3.1、95、98、Me、NT4.0、2000、XP、Macintosh(Classic)	2万4千円～8万8千円、1万5千円～5万2千円(アカデミック)	2002年7月	国内1,950本
Merck Index 13th CD-ROM	"	米ケンブリッジソフト	10300j化合物部の識別情報、商標名、CAS番号、物性、毒性、構造式、薬学的作用、処方、特許情報などを集めた化学者必携の書籍のCD-ROMデータベース	Windows3.1、95、98、Me、NT4.0、2000、XP	9万1千円(一般)、4万円(アカデミック)	2001年9月	弊社扱い80本
Visual Cloning 3	"	加レダソフト	Web環境から取り込んだシーケンスからラベル付けされたマップを作成。制限解析および読み取り枠検索も実行	Windows98、Me、2000、XP	20万1千円(一般)、10万円(アカデミック)	2003年7月	世界290本(国内4本)

Molecular Modeling Pro	"	米ノルギンモンゴメリーソフトウエア	3Dの化学構造を描図、3-D構造の最適化、半経験的量子化学計算、物性値の推算他	Windows98、Me、2000、XP	9万9千円(一般)、6万3千円(アカデミック)	2005年3月	国内数本
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ADMEWORKS/Predictor	富士通九州システムエンジニアリング	富士通九州システムエンジニアリング	膨大な化合物の薬効、薬物動態、毒性、物性の高速予測を行い、容易に候補新薬を特定する「インテグレートド高速/仮想インシリコスクリーニング」システム。多量の化合物に対し、統合的な同時高速スクリーニングをサポートする。解析結果(予測モデル)をADMEWORKSにインポートする事で、ユーザー独自の予測モデルと標準提供予測モデルを連携し利用できる。また、ネットワークでつながる他の研究者と最新の予測モデルを用いた予測の共有が可能	サーバー: Windows2000/XP/2003、クライアント: Internet Explorer 6.0以降	5ユーザ250万円～、教育機関向け300万円(別途年間サポート費必要、2004年3月価格改定)	2003年10月	—
ADMEWORKS/Predictor用予測モデル式	"	"	ADMEWORKS用の標準提供モデル式。溶解性、Ames変異原性、CYP3A4阻害、発癌性に続き、生分解性、蓄積性、PGPトランスポータ、BBB、HIAが新たに追加	—	1モデル式60万円～	2004年4月	—
ADMEWORKS/Model Builder	"	"	化学性に基づいた化合物群の解析と予測モデルを構築するための「化学データ解析支援/予測モデル作成」システム。科学性を失わずに高度な予測性をもつ予測モデルを構築できる。500を超える化学パラメータと高度なQSAR解析機能を利用可能。ユーザーの化合物データを分類・解析し独自のADME-T予測モデル式を作成できる。また、作成したモデルをADMEWORKSへインポート可能	Windows2000/XP/2003(スタンドアロン)	500万円、教育機関向け250万円(別途年間サポート費必要)	2004年3月	—
Crystal T.B.	"	丸和栄養食品、富士通九州システムエンジニアリング	タンパク質の結晶作成にとつて重要なタンパク質の結晶化に関する情報を、専門家の手により網羅的かつ体系的に収集したデータベース。本データベースを用いることで、過去のタンパク質結晶化条件を基に、現在ターゲットとしているタンパク質の結晶化条件の検討に大きく役立てることができ、タンパク質立体構造解析をさらにスピードアップすることができる	サーバー: RedHat Linux 7.3以上、クライアント: Internet Explorer 5.5sp2以降相当	1000万円～、教育機関向け95万円～	2003年11月	—
SPRESI	"	独インフォコム	ロシアVINIT研究所、ドイツZIC研究所の共同プロジェクトの成果をベースに作成された化学情報データベース。400万件の有機化合物・有機金属化合物情報、300万件の反応情報を含み、汎用Webブラウザで検索が可能	Windows95/98、Mac	民間13万円、教育機関6万5千円: マルチユーザーライセンス(10パスワード)、プレミアムユーザーライセンス(25")あり	2000年7月	—
LiqCryst 4.1	"	独LCIパブリッシャー	LiqCryst4は現在知られている全種類のサーモトロピック液晶化合物を網羅している。約8万件の文献から得られた約85,000の液晶化合物に関する情報を収集しており、単なる情報検索のみならず検索結果の統計分析や一部物理特性値の予測や、検索された化合物の同族列についてその相転移温度をグラフィック表示可能	Windows95、98、ME、NT4.0、2000	民間160万円、教育55万円(年間サポート含む)	1995年6月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
WinMOPAC 3.9	富士通	富士通	パソコン版分子軌道計算ソフト。MOPAC2002とMOS-Fを搭載。分子構築から計算の実行、結果の可視化までをシームレスに実現	Windows2000/XP	25万円(企業)、15万円(教育機関)	2004年3月	—
WinMOPAC 3.9 Pro	"	"	高分子対応パソコン版分子軌道計算ソフト。MOPAC2002とMOS-Fを搭載。分子構築から計算の実行、結果の可視化までをシームレスに実現	"	60万円(企業)、30万円(教育機関)	2004年3月	—
MOPAC2002 ver.1.5	"	"	巨大分子系の分子軌道を高速計算。たん白質、核酸、高分子材料等の電子構造もスピーディに解析。MOS-Fも添付	Fujitsu/PrimePower、SGI、HP、IBM、Linux等	60万円～(企業)、30万円～(教育機関)	2003年8月	—
ChemFrontier V1.0	"	"	化学構造式/反応式作画ソフト。フリーハンド作画、自動整形機能、3D変換機能など多彩な機能装備。WinMOPACの入力データ作成支援	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	5万円(企業)、2万5千円(教育機関)、1万3,800円(学生)	99年3月	—

ChemLib	"	"	分子情報を取り扱う(座標整形、3D化など)Fortranで開発されたライブラリ群。C++やFortranからライブラリを利用し、独自のモデリングプログラムを開発する事が可能	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP、Sファミリ(Sun)、SGI	600万円	2000年1月	-
BioFrontier/P450	"	"	P450の代謝反応(構造)を収めたDBと代謝物予測機能を持ち合わせた薬物代謝研究支援システム。データは年3回更新	Windows2000/NT/XP	システム300万円、データ200万円(年間)	2002年12月	-
AIPHOS/KOSP	"	"	事実反応データの構造特徴を収めた知識ベースを用いて前駆体を推定する合成経路設計支援システム	Windows2000/XP	200万円~	2004年1月	-
ChemDraw Ultra/Pro/Std	"	米ケンブリッジソフト	世界標準の化学構造式/反応式作画ソフトウェアで、構造式・反応式・反応機構等を簡単に作画可能	Windows2000/XP、MacOS	12万円~(企業)、5万1千円~(教育機関)	95年1月	-
Chem3D Ultra	"	"	操作性の優れた分子モデリングシステムで、3次元立体構造への容易なアクセスを実現。CS MOPAC Proをバンドル	Windows2000/XP	24万1千円~(企業)、10万1千円~(教育機関)	95年1月	-
E-Notebook Ultra	"	"	合成実験ノートの記事をパソコンで簡単に管理できるソフト。部分構造、反応変換、プロジェクト名などによるデータ検索が可能	"	24万1千円~(企業)、10万1千円~(教育機関)	2002年3月	-
The Merck Index	"	"	化学の百科事典「The Merck Index 13th Edition」の電子データ版。10,000件を超える化合物から、名称・CAS番号・構造式などをキーに素早い検索が可能	"	12万円~(企業)、5万1千円~(教育機関)	2002年3月	-
ChemACX Ultra	"	"	海外大手試薬販売会社約330社の50万件を超える化合物のカタログ情報データベース	"	24万1千円~(企業)、10万1千円~(教育機関)	2003年8月	-
ChemINDEX Ultra	"	"	一般的な化合物について、構造式、名称、分子量、CAS番号、別名、および物性データ(融点、沸点、蒸気圧など)に関する一般情報を調べるための化学参考文献データベース	"	6万7千円~(企業)、4万4千円~(教育機関)	2003年8月	-
ChemOffice Ultra/Pro	"	"	ChemDraw Ultra、Chem3D Pro、ChemFinder Pro、化学データベースのバンドル製品	"	41万5千円~(企業)、25万8千円~(教育機関)	95年1月	-
ChemOffice Enterprise	"	"	Web対応の化学情報管理システム。化学構造情報や反応情報を容易にDB構築でき、ブラウザから簡単に検索することが可能。各種業務アプリのオプションあり	Windows2000サーバー	300万円~(企業)、200万円~(教育機関)	99年1月	-
Materials Explorer (WinMASPHYCシリーズ)	"	富士通	Materials Explorerは、パソコンで世界初の本格的分子動力学システムWinMASPHYCの後継アプリ。有機物だけでなく金属、無機物の計算も行うことが可能。二次解析機能も充実。C/S連携でLinux並列ソルバー(ノード内2CPUまで)とも連携可	Windows2000/XP	Ultra: 240万円(教育機関90万円)、Master: 120万円(教育機関60万円)Pro: 60万円(同30万円)、Std: 10万円(同5万円)	2003年12月	-
CACheワークシステム	"	"	三次元(立体)分子計算モデリングシステム。三次元分子モデルの入力/編集およびMOPAC、ZINDO、拡張MM2およびMM3等の計算ができ、反応性の予測、遷移状態探索、QSARへの応用等幅広く使用できる	PowerMacシリーズ、Windows2000、XP	60万円~	91年4月	-
パーソナルCAChe	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、拡張MM2およびMM3/拡張ヒュッケル計算、計算結果の視覚化(立体視)ができる。計算化学の入門編	"	20万円~	"	-
CACheサテライト	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、計算結果の視覚化ができる。計算はネットワーク上のCACheグループサーバー上で実行できる。CAChe ProjectLeaderを装備	"	25万円~	"	-
Quantum CAChe	"	"	CACheワークシステムのProjectLeader以外のすべてのソフトウェアが使用可能。MOPAC、ZINDO、拡張MM2/MM3等の計算ができる	"	40万円~	97年4月	-
配座探索CAChe	"	"	安定な分子の配座構造を自動探索するための様々な機能を装備。精度の高い計算手法(DFT、ab initio)の初期配座の発生に使用できる	"	35万円~	2000年11月	-

Ab initio CAChe	"	"	分子力場法、分子動力学法、半経験的分子軌道法さらに密度汎関数法までをパッケージした精度の高い計算ができる	Windows2000、XP	60万円～	2000年11月	—
CAChe Worksystem Pro	"	"	分子力場法、分子動力学法、半経験的分子軌道法および密度汎関数法までをパッケージし、さらにQSAR、QSPRの解析に応用できる	"	80万円～	2000年11月	—
CONFLEX	"	"	配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の澤先生、後藤先生により開発)、拡張MMと組み合わせて使用(オプション)	PowerMacシリーズ、Windows2000、XP	15万円～	99年9月	—
CACheグループサーバー	"	"	各CACheシステムの計算サーバーとして、UNIXワークステーション上で拡張MM2およびMM3、MD、MOPAC、ZINDO、Dgauss等が実行できる	SGIワークステーション	100万円～	92年4月	—
DGaussサーバー	"	"	各CACheシステムの計算サーバーとして、UNIXワークステーション上でDFT密度汎関数法が実行できる	"	40万円～	98年4月	—
CONFLEXサーバー	"	"	各CACheシステムの計算サーバーとして、UNIXワークステーション上で配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の澤先生、後藤先生により開発)が実行できる	"	25万円～	"	—
CAChe Project Leader	"	"	計算値と実験値等とのキャリブレーションをCACheシステム上で自動化できる。QSAR、QSPRの解析に最適。スプレッドシート形式で入力操作も簡単に行える。複数分子の自動連続計算の可能	PowerMacシリーズ、Windows2000、XP	—	94年1月	—
Bio CAChe	"	"	たんぱく質構造を簡易的に解析する為の計算化学ツール。分子力学計算による構造最適化や配座構造の自動探索が行える	Windows2000/XP	30万円～	2003年5月	—
BioMed CAChe	"	"	医薬分野に役立つ計算手法をそろえた計算化学ソリューション。安定な分子の配座構造を自動探索するための様々な機能を装備し、さらにQSAR、QSPRの解析に応用できる	"	70万円～	2003年5月	—
BioMed CAChe ActiveSite	"	"	医薬分野に役立つ計算手法をそろえた計算化学ソリューション。たんぱく質分子に対して分子軌道法計算が実行できるだけでなく、活性部位とリガンドの親和性のスコアリングやドッキングスタディが可能です	"	100万円～	2003年9月	—
CAChe LocalSCF	"	"	たんぱく質向け超高速半経験的な分子軌道計算プログラム。新アルゴリズムにて、少ないメモリでかつ超高速な計算を可能にしました	"	250万円～	2003年11月	—
CAChe Protein MD	"	"	BioMedCAChe シリーズのオプション機能。BioMedCAChe GUIから分子動力学計算が実行可能となる。AMBERパラメタ使用	"	45万円～	2004年6月	—
ACD/Spectroscopy	"	加アドバンストケミストリーデベロップメント	分析機器(NMR,MS,UV-IRなど)からのデータを加工し、化学構造式と関連させてデータベース化を行う。また、構造式からNMRシフトを予測することもできる。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意されている	"	78万4,000円～	2002年3月	—
ACD/Physchem	"	"	化学構造式から物性値(LogD,LogP,Pka,Solubility,Boiling Point)を予測する。ChemDrawやISISとの連携モジュールや一括計算用バッチプログラムも用意されている	"	30万4,000円～	2002年3月	—
ACD/Cromatography	"	"	HPLC、GCの測定条件をシミュレート、HPLC,GCのデータを加工、データベース化する	"	78万4,000円～	2002年3月	—
ACD/Name	"	"	化学構造式から化学名を生成する。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意されている	"	78万4,000円～	2002年3月	—
Genesphere	"	富士通	遺伝子・たんぱく質関連性探索支援システム。LocusLink、UniGeneをベースに独自に作製した遺伝子辞書から遺伝子間の関連性をマイニングするソフト。パスウェイ解析は2004年春サポート予定	"	200万円～	2003年8月	—

ADMEWORKS/Predictor	"	富士通九州システムエンジニアリング	予測モデル式を用いて薬物動態/毒性/物性の良好な化合物を絞り込むWebシステム	サーバー: Windows2000/XP、クライアント: Windows2000/XP Internet Explorer 5.5以降	200万円～	2003年9月	—
ADMEWORKS/ModelBuilder	"	"	多変量解析及びパターン認識による化学データ解析支援システム。ADMEWORKSで使用するモデル式を利用者の化合物データを使って作成	Windows2000/XP	500万円～	2004年3月	—
Accord Enterprise Informatics	"	アクセルリス	Oracleに高性能の化学構造式検索ルーチンを組み込んだOracleベースの学情報管理システム	Windows2000/XP、Sun	ご相談下さい	96年1月	—
Accord BioStore Accord HTS	"	"	HTSデータを含むアッセイデータ管理システム。HTSやマニュアルアッセイ試験業務を効果的に支援	"	ご相談下さい	96年10月	—
Accord for Excel Enterprise	"	"	Accord for ExcelとRS3 for Excelを一体化させたAccord Enterprise Informaticsのクライアントソフトウェア	Windows2000/XP	ご相談下さい	2001年4月	—
Hi-perBLASTシステム構築サービス	"	富士通	NCBI-BLASTをPCクラス上で高速処理を実現する機能の構築サービス。NCBIのオリジナルの検索結果と互換があると同時に、使用するCPU数相当もしくはそれを超える性能向上が期待出来る(32CPU PCクラスで、1CPU時の約60倍の高速処理の実績)	RedHatLinux	10万円/CPU～(8CPU以上)	2003年6月	—
Hi-perHMMERシステム構築サービス	"	"	モチーフ検索ツールHMMERをPCクラス上で高速処理を実現する機能の構築サービス。オリジナルの検索結果と互換があると同時に、使用するCPU数相当もしくはそれを超える性能向上が期待できる	"	10万円/CPU～(8CPU以上)	2004年8月	—
公共バイオデータベースダウンロードシステム構築サービス	"	"	世界中のWebサイトから公開されている公共バイオデータベースのRelease/Newデータのダウンロード及び自動更新を実現。利用者はWebから更新状況が確認出来ると共に、管理者による諸設定もWebを介して簡単に実施可能	RedHatLinux、Solaris8	300万円～(個別見積り)	2003年9月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GENETYX Ver.7	ゼネティックス	ゼネティックス	Windows版遺伝子解析ソフトウェア。マルチアライメント、分子進化系統樹作成、機能モチーフ検索核酸配列自動結合など	WindowsXP/Server2003/Me/98/2000/NT4.0	お問い合わせ下さい	96年4月	—
GENETYX-MAC (Ver.12)	"	"	Macintosh版遺伝子解析ソフトウェア。マルチアライメント、分子進化系統樹作成、機能モチーフ検索、核酸配列自動結合など	Macintosh (OS 10.3以上)	"	91年12月	—
G-MAP(Ver.1)	"	"	ゲノムマップビューワーソフトウェア	Windows XP/2000	"	2004年4月	—
GENETYX-PDB (Ver.5)	"	"	プライベートデータベースソフトウェア構築したDBに対してBLAST、FAST検索エンジンや高速キーワード検索、NCBI BLAST、Entrez検索も可	Windows/Mac OS X + JAVA2	"	2000年5月	—
ATGC (Ver.4)	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェア。大量のフラグメント配列の結合処理。波形の信頼度を考慮したコンセンサス配列の決定	WindowsXP/Server2003/Me/98/2000/NT4.0 Macintosh (OS 10.3以上)	"	98年10月	—
GENETYXネットワーク版	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ、MACのみ、WIN、MAC混在	"	2003年4月	—
ATGCネットワーク版	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ、MACのみ、WIN、MAC混在	"	2003年4月	—
GENETYX-PDBネットワーク版	"	"	プライベートデータベースソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ、MACのみ、WIN、MAC混在	"	2003年4月	—

G-MAPネットワーク版	"	"	ゲノムマップビューワーソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ	"	2003年4月	—
GENETYX-SV/R	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのクライアント/サーバー版	サーバー: UNIX/Linux、クライアント: Macintosh/Windows	"	94年3月	—
GENETYX-SV/DB	"	"	核酸配列/蛋白質データベース検索ソフトウェアのクライアント/サーバー版	"	"	94年2月	—
ATGC-SV	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェアのクライアント/サーバー版	"	"	99年3月	—
GENETYX-SQ/EX	"	"	ゲノム核酸配列自動結合ソフトウェア。大量のフラグメント配列の結合処理。波形の信頼度を考慮したコンセンサス配列の決定	UNIX	"	91年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
DNASIS Pro	宝酒造、日立計測器サービス、DNAチップ研究所、ステラ	日立ソフトウェアエンジニアリング	パソコンの初心者でもすぐに使える分かりやすいインターフェイスと、データベース検索機能や制限酵素サイト探索機能などの豊富な機能を兼ね備え、20年間多くのユーザーに親しまれ、世界中で1万本以上の販売実績を持つ。SNP解析支援機能等の新たな解析機能を追加。以下、各種オプション有。(1)ホモロジー検索(2)マルチプルアラインメント(3)DNASpace(4)Phred/Phrap	Windows	30万円～	2001年11月	—
SPBIO	DNAチップ研究所	"	バイオチップ作成装置	WindowsNT	1200万円	99年8月	—
CRBIO II e	"	"	バイオチップ読取装置	Windows2000	800万円	2002年4月	—
CHBIO+	"	"	バイオチップハイブリダイゼーション反応用恒温槽	Windows98	70万円	2000年1月	—
HyperGeneシリーズ	"	"	汎用DNAチップ。Human,Human HouseKeeping Gene,Rat -Liver-,Yeast chip有	—	—	2002年3月	—
AceGeneシリーズ	"	"	汎用オリゴDNAチップ。Human, Mouseの全遺伝子それぞれ約30,000個を1枚のスライドガラスのスポット	—	62,790円/1枚(税込標準価格)	2002年12月	—
DNASIS Array	"	"	DNAチップ画像解析ソフトウェア	Windows	80万円	2001年12月	—
FMBIO III	日立ソフトウェアエンジニアリング	"	蛍光バイオイメージアナライザー。蛍光物質で標識されたDNAやたんぱく質を直接読み取り、解析を行うシステム	Windows2000/XP	—	2002年3月	—
Luminexシステム	"	ルミネックス	蛍光マイクロビーズアレイシステム。それぞれ異なる色に着色された100種類のポリスチレン製微粒子を使用し、1本のマイクロチューブ内で最大100件の解析を同時に行うシステム。Luminex 100,Luminex XYP,Luminex SDのセット	Windows98/2000/XP	980万円	2000年10月	—
Multiplex Antibody Kits	"	バイオソース	Luminex用サイトカインアッセイキット。ヒト、マウス各種有	—	—	2001年9月	—
MasterPlex QT	"	ミライバイオ	Luminex専用定量解析ソフトウェア	Windows98/Me、NT/2000/XP	—	2002年3月	—
SEQUENCHER	"	米ジーンコード	DNAシーケンスアセンブリソフトウェアでデファクトスタンダードとなっている。各社のDNAオートシーケンサに対応	Macintosh、Windows	68万円(Mac版)、88万円(Win版)	95年9月	—
Avadis	"	インドStrand Genomics社	DNAチップ統計解析ソフトウェア。様々な統計解析アルゴリズムを搭載。アフィメトリックス社をはじめ各社のDNAチップに対応	Windows, Mac、Linux	198万円～、80万円～(アカデミック)	2004年12月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
BioSearcher	日本ヒューレット・パッカード	日本ヒューレット・パッカード	独自に開発したMitakeSearchを全文検索エンジンとして用い、大量のゲノムDBの高速な検索を可能にした完全64bit対応ソフトウェア	サーバー: Alpha、Tru64UNIX V5.1以上	480万円から(アカデミック向け価格設定あり)	2001年1月	—

BioFinder	"	"	ブラウザからBLASTのパラメータを簡単に設定・起動し、その結果を配列毎のアライメントとして見られるだけでなく、直感的な画像として見る事が可能なビューアー	サーバー: Alpha、 Tru64UNIX V5.0a以上	無償	2000年12月	—
BioCollector	"	"	インターネット上のバイオデータを自動的にローカルサイトに取得、更新するソフトウェア	AlphaServer/Tru64UNIX5.1a以上、またはProliant/Redhat 7.2以上(マルチCPUを推奨)	98万円から(アカデミック向け価格設定あり)	2002年6月	長浜バイオ大学、独立行政法人製品評価技術基盤機構他
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
almaKnowledge Server	ヒューリンクス	西アルマバイオインフォマティクス	バイオインフォマティクス専用テキストマイニング。遺伝子やタンパク質の機能や疾病との関係、創薬候補分子との関連性を文献のテキスト情報から掘り起こし、インタラクティブに図示する	Linux(サーバー)、Windows、Macintosh、Linux(クライアント)	要問合せ	—	—
almaZenSYSTEM	"	"	DNAチップ/マイクロアレイのデータ解析、管理システム	Linux(サーバー)、Windows、Macintosh、Linux(クライアント)	"	—	—
ATOMS	"	米シェイブ	分子、高分子、結晶を含むあらゆるタイプの原子構造を3Dで描画する。日本語マニュアル付	Windows、Macintosh	7万8,750円	—	—
AssayZap	"	米バイオソフト	Assazyから生成されたデータの分析および蓄積を自動化するソフトウェア	"	9万300円	—	—
Atlantis 2000	"	米シグマソフト	グラフ機能と計算機能を兼ね備えたプレゼンテーションツール。2D/3Dのグラフ作成など	Windows	3万7,800円	—	—
CalculationCenter2日本語版	"	米ウルフラムリサーチ	強力な演算機能と簡単に直感的なユーザインターフェースを結び付けた演算ソフトウェアで、技術的な問題に素早い回答を求めるプロフェッショナルに最適のツール	Windows、Macintosh	4万5,150円より	—	—
CalcuSyn	"	米バイオソフト	治療薬の組み合わせや投薬量など投薬治療にとって非常に重要な解析を行う	Windows	9万300円	—	—
CART	"	米サルフォードシステム	この2進木解析ソフトを使用すれば、経験的な分類と予測を統計モデルにした分類や予測が簡単にできる	Windows、UNIX、Linux	要問合せ	—	—
ChemBrain	"	瑞エキスパートソフト	三次元分子構造を扱うことが可能な化学データベース	Windows	"	—	—
Chemical WorkBench	"	露キンテック	熱力学と運動特性、基本的な反応速度定数などの運動のスキームを、データ・ベースとしてユーザが定義、追加することが可能であり、また内蔵しているデータ・ベースを使用し、プロセスシミュレーションを行うことが可能	Windows	"	—	—
CrystalMaker	"	英クリスタルメーカー	写真並みのカラー画像で結晶構造を生成、表示、操作可能な結晶構造解析ソフト。マルチウィンドウ・マルチアンドウ対応。オプションにより粉末回折、電子線回折/パターンのシミュレーションが可能。待望のWindows版リリース	Windows、Macintosh	"	—	—
Crystal Kit	"	米トータルレゾリューション	粒子間の結合関係や接触面、軸等を設定すれば、非常に短時間であらゆる結晶体の構造を作成できるソフト	Macintosh	"	—	—
Crystal Studio	"	豪クリスタルソフト	操作性のよいWindows版結晶構造解析ソフト。強力なデータベース機能を搭載し、Professional版は2000種類、Enterprise版は3000種類の収録データを持つ	Windows	"	—	—
CS Chem3D Ultra	"	米ケンブリッジソフト	高品質な3D分子描画。Gaussian との統合により、半経験的な特性のモデリングも可能	Windows、Macintosh	"	—	—

CS ChemDraw Ultra/Pro/Std	"	"	化学構造式描画ソフト。構造式の描画以外にも研究者が必要とする、NMR スペクトルの予測、複数のドキュメントの作成、立体化学式表示、Name=Struct機能、ポリマー描画などの機能が搭載されている	"	"	-	-
CS E-Notebook Ultra	"	"	電子実験ノート。画像データやMS Excel、MS Word等のファイルをまとめて管理でき、化学構造式による過去のノートへの検索が可能	Windows	"	-	-
CS ChemOffice Ultra/Pro	"	"	化学者のニーズを満たすChemDraw、Chem3D、E-Notebookを統合した製品。描画した構造式の3D変換やDBの作成、Webへの発行を行える	Windows、Macintosh	"	-	-
CS ChemOffice Enterprise	"	"	化学構造式を含むデータベースを構築するためのアプリケーション。クライアントは、webブラウザから、ChemDrawのプラグインにより、部分構造検索等の検索が行える他、Additional Serverにより、webブラウザからデータベースの管理も可能に	Windows	"	-	-
The Merck Index	"	"	電子版メルクインデックス	-	"	-	-
DESIGN-EXPERT for Windows	"	米スタートアップ	Windows対応の実験計画(DOE)用ソフトウェアは、プロセスに影響を及ぼす致命的要因をスクリーニング・応答曲面法(RSM)のスクリーニング・応答曲面をビジュアル化。12の応答までの最大妥当性を同時に見いだす計算能力最適化機能が特長	Windows	"	-	-
DIAMOND	"	独クリスタラインパクト	可視的な結晶構造情報システムとして機能し、結晶構造データに関する日常的な作業、主に結晶構造データの可視化を可能にする多数の機能を統合する。大量のデータ処理、分子の生成から複雑な無機構造フレームワークの構築にわたる幅広い機能を備えるDIAMONDは、界面および材料科学者だけでなく、分子および固体化学者のための唯一のツール	Windows	"	-	-
ENDEAVOUR	"	独クリスタラインパクト	結晶構造を粉末回折データから解析するソリューション。回折パターンの計算値と実測値の差と系の位置エネルギーの、統合された大域的最適化を実現。上記DIAMONDの可視化技術に基づいており、解析過程において完全乱配置の原子から最終モデルへと結晶構造が発展していく様子を確認可能	Windows	"	-	-
FlexPro6.0日本語版	"	独ヴァイサン	大規模データ解析・ビジュアライズソフト。計測機器で測定した大規模データを解析し、データ収集からプレゼンまでを一連の流れとしてこなす	"	5万400円より	-	-
Gaussian 03 & 03W & 03M	"	米ガウシアン	汎用量子化学計算プログラムGaussianの最新バージョン	Windows、UNIX、Linux、MacOSX	要問合せ	-	-
GaussView 3.0	"	"	Gaussian 用グラフィカルユーザーインターフェイス	Windows、UNIX、Linux、MacOSX	"	-	-
Gene Construction Kit 2.5	"	米テキストコ	複雑なクローニング プロジェクトを立案し、遂行するソフトウェア	Windows、Macintosh	23万6,250円より	-	-
Gene Inspector	"	"	研究者用電子ノートブック、配列解析パッケージおよびイラストレーション ツールを兼ね備えるソフトウェア	Macintosh	20万7,900円より	-	-
HyperChem 7.5	"	米ハイパーキューブ	多くの計算手法をサポートする統合型分子設計支援システム	Windows	要問合せ	-	-
IGOR Pro 5.0 日本語版	"	米ウエーブメトリックス	高速にインタラクティブに大量データを解析し、視覚化、ドキュメント化する究極の解析ツール。分光機器や電子顕微鏡などとの連携も可能。	Windows、Macintosh	5万8,800円より	-	-
KaleidaGraph 日本語版	"	米シナジー	シンプルなグラフの作成から回帰曲線やエラーバーを適用するような複雑なグラフの作成まで、非常に簡単な操作で実行できるグラフ作成ソフト	"	4万8,300円	-	-

KELL	"	米バイオソフト	加重非直線回帰、反復回帰を用い飽和、拮抗の平衡を解析あるいは、結合や非結合の定数率を決定する放射線配位子の結合解析パッケージ	Windows	11万5,500円	—	—
Khimera	"	露キンテック	量子エレクトロニクスや材料化学分野に特化したプログラム。Gaussian、Gamess、Jaguar、Q-Chemなどの量子化学計算プログラムの結果をCHEMKINなどの化学反応シミュレータに受け渡すことが可能	HP-Unix、Linux	要問合せ	—	—
Linda	"	米サイエンティフィックコンピューティングアソシエイツ	仮想共有メモリによる並列計算を可能とする協調型言語	UNIX、Linux、MacOSX	"	—	—
Mac Tempas	"	米トータルソリューション	マルチスライス計算、回折パターン、任意の方向に対するセルユニットの自動計算他の機能を搭載するTEMイメージシミュレーションソフト	Macintosh	"	—	—
MolFeat	"	日フィアラックス	分子構造3次元イメージ編集ソフト。蛋白質などの高分子の立体構造をMS PowerPointのスライドショー上で操作可能。電子密度データの読み込み、原子間距離、二面角の計測等、豊富な機能を搭載	Windows	"	—	—
Mathematica 5.1 日本語版	"	米ウルフラムリサーチ	あらゆる分野で使用できる汎用の数学処理ソフトウェア。電気、機械、化学、金融・証券等のパッケージあり	Windows、Macintosh、UNIX、Linux	"	—	—
webMathematica	"	"	webサイト上で科学技術計算ができるソフト※1年間のサイトライセンス契約の価格	"	"	—	—
gridMathematica	"	"	マルチCPUやクラスタ環境でMathematicaの並列処理を実現	"	"	—	—
Miner3D	"	米ディメンションファイブ	Oracle、Access、Excel、ISIS等と連携し、2D&3Dデータの可視化とデータマイニングを行うアドイン。立体空間上にさまざまな形状や豊富な表現でデータを描写しWeb上の直感的な検索アプリやリアルタイムモニタリングシステム等を3D表示で美しく再構築する	Windows	"	—	—
MolecularConceptor	"	以シナジクス	ゲノム創薬を含む現代創薬の理論・実践的概念、サクセスストーリー、具体的な手法等についてのべられた世界標準のコースウェア	Windows	"	—	—
NeuroSim	"	米バイオソフト	神経生理学の分野の研究に非常に有益な洞察を提供できるシミュレーションソフト	"	8万1,900円	—	—
Paradise	"	米サイエンティフィックコンピューティングアソシエイツ	仮想共有メモリによる並列計算を可能とする協調型言語(複数VSMをサポート)	UNIX、Linux、MacOSX	要問合せ	—	—
Peak Fit	"	米シスタット	分光器やクロマトグラフィーの重なったピークを簡単なクリック操作で複数のガウス関数に分離するソフト	"	13万6,500円	—	—
PiSystems	"	瑞エキスパートソフト	有機分子の色や電子スペクトルの計算に特化したユーザフレンドリーな量子化学計算プログラム	Windows	要問合せ	—	—
PrecisionTree	"	米バリセード	既存のスプレッドシートで判断ツリーと影響図の作成を初めて実現。実績ある意思決定解析技術を用いて最良の進路を確認。また、スプレッドシートを意思決定モデルに直接統合。影響図は不確実性を含めた問題の構成要素間の関係の検討に使用。Proは意思決定アナリストに必要とされる最もクリティカルな機能を組み込んで拡張されている	Windows	"	—	—
Q-Chem	"	米キューケム	大規模分子計算を可能とする高速量子化学計算プログラム。最新バージョン2.1では、高速化、高精度化のために、“COLD PRISM”、“CFMM”、“Coupled-Cluster”など多くの先進的な手法が取り入れられている	UNIX、Linux、MacOSX	"	—	—

QuantiScan	"	米バイオソフト	電気泳動ゲルをスキャナーで読み込み、解析。その他、TCLプレート解析、オートラジオグラム解析も可	"	11万5,500円	—	—
SHAPE	"	米シェイプソフト	結晶の表面組織や結晶断面を描画する。多くの単結晶、双晶を描画できる。	Windows、Macintosh	要問合せ	—	—
SigmaPlot	"	米エスピーエスエス	生化学者向け機能が豊富なカーブフィッティング&グラフ作成ソフト。日本語PDFマニュアル付	Windows	10万2,900円より	—	—
SigmaPlot Enzyme Kinetics Module	"	"	酵素反応の阻害形式を素早く決定、詳しくレポートする回帰分析、グラフ作成用のSigmaPlot 専用マクロパッケージ	"	9万2,400円	—	—
SigmaScan Pro	"	"	特殊な認識機能を用いて、デジタル画像を高速かつ正確に測定、解析する	"	18万4,800円より	—	—
SigmaStat 3	"	"	データの取扱いから実行すべきテストの推奨、仮説検証、適切なテストの実行と結果の解釈まで	"	9万8,700円より	—	—
Stat-200	"	"	記述統計、パラメトリック&ノンパラメトリック検定、グラフ作成、画像およびデータ変換を行う総合統計解析パッケージ	"	9万300円	—	—
SynTree	"	米トリニティソフトウェア	複雑な合成を探索する独自のツール。データベースから可能性のある全ての先駆物質を表示	Windows、Macintosh	4万6,200円	—	—
SYSTAT	"	米SYSTAT	探索的なデータ解析が行える科学者、研究者、エンジニア必携の統計解析ソフト	Windows	18万9,000円	—	—
TableCurve 2D	"	"	1つの製品でパワフルな計算機能と回帰分析機能を合せ持つソフト	"	11万5,500円	—	—
TableCurve 3D	"	"	パワフルな計算機能と回帰分析機能を合せ持つソフト。3Dのグラフィカルなプロットの作成が可能	"	11万5,500円	—	—
UnGraph	"	米バイオソフト	スキャナーで読み込んだグラフを解析し、XY座標のデータを任意の精度で認識する	"	9万300円	—	—
UNISTAT	"	米ユニスタット	ノンパラ検定、回帰、分散、クラスタ、判別、因子分析、時系列、QC、生存分析、フーリエ解析など様々な解析を備えた統計解析ソフト	"	15万5,400円より	—	—
VIBRATZ	"	米シェイプソフト	原子価力定数や Urey-Bradley 力場定数を利用して、分子や結晶の基準座標計算をする	Windows、Macintosh	7万8,750円	—	—
WAFERMAP Professional Version	"	独ポイン	クリーン・ルーム外での計測データ分析・編集をパソコンベースで実現。半導体ウエハ上の正確な物理パラメータを分析して可視化。データ読み込み後、ラインスキャン、等高線図、2D、3Dプロット、又はヒストグラム等の可視化・印刷、またデータの複雑な演算操作も可能。基本仕様として、手動計測機器でのマップ生成や、異なる自動計測機器間(同fab内で別機種)の4点プローブ等の統合的な可視化が可能	Windows	"	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GREEN	医薬分子設計研究所	医薬分子設計研究所	対話的ドッキングシステム。結合部位環境の表示、リアルタイムの相互作用エネルギー計算、リガンド構造モデリングなどの機能を搭載	SGL	お問合せください	1995年4月	—
LEGEND	"	"	de novoリガンド設計プログラム。蛋白質結合部位に適合するリガンド分子を、乱数と力場に基づき自動生成	SGL、Linux	"	1995年4月	—
MOLEDIT	"	"	分子モデリングプログラム	SGL	"	1995年4月	—
Key3D	"	"	化学構造式からの三次元構造生成プログラム。MMFF力場に基づく高精度な構造生成と高い変換率が特徴。ライブラリデータの連続処理も可能	SGL、Linux	"	1999年12月	—

KeyMolnet	"	"	生体分子・遺伝子・疾患・医薬の情報戦略プラットフォーム。文献調査に基づく信頼度の高いコンテンツを搭載し、任意の項目間の関係をネットワーク検索可能。DNA chip、プロテオーム等のデータ解析にも対応	Linux(サーバー)、Windows(クライアント)	"	2003年4月	—
KeyRecep			分子重ね合わせ法に基づくHTSヒット化合物の解析システム。分子形状・水素結合性・疎水性等に基づく高精度な分子重ね合わせが可能。化合物分類・構造活性相関解析・データベース検索などの機能も搭載	SGI、Linux	"	2005年4月	—
Bluto	"	"	蛋白質ーリガンド複合体の連続最適化とエネルギー解析。ドッキングスタディー、バーチャルスクリーニング等での結合性スコア解析に最適	SGI、Linux	"	2005年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Glide	インフォコム	米シュレーディング	レセプターに対するリガンドのフレキシブルサイトドッキング計算プログラム	PC-Linux、SGI、IBM	お問い合わせ下さい	2001年	—
Prime	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム。強力なリファインメント機能によりループ構造や側鎖の配座を高精度予測。Glideとの利用でInducedFit解析が可能	PC-Linux、SGI	"	2003年	—
MacroModel	"	"	Prof. Stillらにより開発された分子力学系分子設計支援システム。低分子から生体高分子までの対応が可能な各種力場パラメータ、配座解析アルゴリズムを搭載	PC-Linux、SGI、IBM	"	99年	—
JAGUAR	"	"	Pseudospectralアルゴリズムによる高精度かつ高速な計算を実現した新世代ab-initio量子化学計算プログラム	"	"	96年	—
JAGUAR pKa Predictor	"	"	JAGUARモジュール(オプション) : Ab-initio法によるpKa予測プログラム	"	"	99年	—
MINTA	"	"	MacroModelモジュール(オプション)。高速かつ高精度に自由エネルギーを算出	"	"	99年	—
LigPrep	"	"	2次元分子構造からの3次元構造自動発生プログラム。構造最適化計算の他、イオン化モデル、鏡像、トートマー自動発生機能も搭載	"	"	2003年	—
Impact	"	"	生体高分子(タンパク、核酸等)向け分子力学、動力学プログラム	"	"	2001年	—
Liaison	"	"	Linear Response法によるBinding自由エネルギー計算プログラム	"	"	2001年	—
Qsite	"	"	JAGUARとOPLS-AA力場によるQM/MMプログラム	"	"	2001年	—
Phase	"	"	Pharmacophre/3D-QSAR解析プログラム	PC-Linux、SGI	"	2005年	—
Strike	"	"	統計解析/化合物類似性評価プログラム	"	"	2005年	—
QikProp	"	"	3次元構造を利用したの薬物物性予測ソフトウェア。LogP o/w, Caco-2 Cell permeability, Blood-Brain barrier permeability, 溶解度などを予測	PC-Linux、SGI、IBM	"	2000年	—
ADME Boxes	"	カナダ・ファーマアルゴリズム	2次元構造を利用した薬物物性予測(Solubility, Ionization, Stability, Passive absorption, First-pass metabolism, P-gp efflux)からHuman Bioavailabilityを予測。各物性データベース機能も装備。予測結果の他、入力構造に類似した化合物のリファレンスも併せて表示	WindowsNT/2000、XP	"	2003年5月	—
ADME Boxes WEB	"	"	ADME BoxesのWEBブラウザ版	お問い合わせ下さい	"	2005年予定	—
Tox Boxes	"	"	2次元構造からの毒性予測(AMES、AcuteTox、Health Effect)およびAMESデータベース機能を持つパッケージプログラム	WindowsNT/2000、XP	"	2005年	—
Tox Boxes WEB	"	"	Tox BoxesのWEBブラウザ版	お問い合わせ下さい	"	2005年予定	—

DMSO Solubility	"	"	DMSO溶解度予測プログラム	WindowsNT/2000	"	2003年5月	-
QSAR Builder	"	"	物性や活性の解析に化合物の構成を説明する各種フラグメンテーションを利用することが可能。統計モデルには、定量的及び定性的手法を組み合わせるにより予測精度を高めることが可能	"	"	2003年5月	-
Algorithm Builder	"	"	定量的構造活性相関(QSAR)、定量的構造物性相関(QSPR)及び構造活性相関(SAR)のモデルを構築し、これら手法をユーザ独自の予測アルゴリズムに変換させるソフトウェアシステム	"	"	2003年5月	-
Algorithm Launching Pack	"	"	AlgorithmBuilderで作成した予測モデル式をWEBブラウザから利用することが可能	Windows2000他	"	2003年	-
AurSCOPE	"	仏オーレファーマ	GPCR/hERG/Ion Channel/ADME Drug-Drug Interactionsの4種類のデータベース・コンテンツ群	お問合せください	"	2005年	-
AurQUEST	"	"	WEBブラウザにて利用するAurSCOPEの検索・解析ツール	お問合せください	"	2005年	-
AurSTORE	"	"	AurSCOPEに適したデータベース構築・管理ソフトウェア	お問合せください	"	2005年	-
AurTAG	"	"	配列相同性検索をベースとした未知蛋白質の機能推定プログラム	お問合せください	"	2005年	-
SKIN-CAD	"	イーハイブ・コミュニケーション	経皮治療システム開発用薬物動態ソフトウェア	Windows98、Me、NT、2000、XP	"	2000年	-
Debra 5	"	英ラボロジック	FDA 21 CFR Part 11に準拠したADME試験情報管理システム	"	"	2003年	-
Pallas Combi	"	ハンガリー・コンピュータドラッグ	2次元構造から pK _a 、PrologP、PrologDを予測するプログラム	Windows95/98、NT/2000	"	99年	-
Pallas EluEx	"	"	C18逆相カラムを使用する研究者に最適な測定条件を予測。2回の測定結果の入力により、溶媒混合比に対するR _s 値の変化プロットを表示	"	"	"	-
Pallas Hazard Expert	"	"	発癌性、変異原性、催奇形成、膜刺激性、神経毒性といった化合物の異なる毒性の影響予測を行う	"	"	"	-
Pallas Metabol Expert	"	"	哺乳類および植物内での反応ルールに基づくDB搭載。哺乳類や植物の代謝物の構造を予測	"	"	"	-
Pallas plug-in for ISIS	"	"	ISIS/BaseからPallas Combi(pK _a /logP/logD)の計算を行う、ISIS/BaseへのAdd-Inソフトウェア	"	"	2000年	-
EMIL for Windows	"	"	医・農薬品の膨大な構造を元にリード化合物から効果的にアナログ構造を発生させるライブラリーデザインツール	"	"	2000年	-
The ADME INDEX	"	米ライトハウスデータソリューション	高精度な薬物動態関連試験データベース。統一プロトコルでCaco2、MetabolicStability、ProteinBinding、BBB試験を行い、FDA承認薬を中心とした約350化合物から構成	Windows2000、XP	"	2004年	-
Metabolism & Transport Drug Interaction Database	"	米ワシントン大学	ヒトでの薬物相互作用に関する論文情報(1966年以降)をFDAガイダンスに添って精査されたデータベース	Webブラウザ利用	"	2004年	-
AntiBase	"	米ワイリー	微生物・酵母・かび等から抽出された天然化合物データベース	Windows2000、XP	"	-	-
MODDE	"	スウェーデン・ユーメトリックス	実験のデザインと最適化を行う実験科学者向けのソフト。多変量解析手法のMLRおよびPLS法を用いて実験条件と結果の最適化を行う。混合物の配合条件とプロセスの条件を同時に最適化	"	"	1998年	-

SIMCA-P	"	"	科学者・技術者のためのデータマイニングツール。多変量解析手法は主成分分析およびPLS法が利用可能。多変量解析を利用したプロセス診断も可能	"	"	1998年	-
PEAKS	"	カナダ・バイオインフォマティクスソリューションズ	Massスペクトルデータからタンパク質、アミノ酸配列、翻訳後修飾を予測する、de novoシーケンシング/データベースサーチソフトウェア	"	"	2003年5月	-
PatternHunter	"	"	高速・高感度のホモロジーサーチソフトウェア。独自のアルゴリズムを使用し、高速・高感度な相同性領域検索を実現	Windows2000、XP、UNIX全機種(詳細はお問合せ下さい。)	"	2003年5月	-
RAPTOR	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム Linear programming 法に基づいたthreadingプログラムで、foldクラスが認識できる蛋白質の予測に最適	"	"	2003年5月	-
PROSPECT Pro	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム。Dynamic programmingに基づいたthreadingで、同じfamily/superfamilyが存在する蛋白質の予測に最適	"	"	2003年5月	-
GeneData	"	スイス・ジーンデータ	ゲノムからプロテオームまでトータルにサポートする、大量/ハイスループット処理対応のシステム。RDB環境をもち、トータルでのゲノム/プロテオームデータの管理が可能	サーバー: Unix-OS、クライアント: 全機種(Javaサポート)	"	2000年	-
GeneData: Phylosopher	"	"	比較ゲノム解析システム: 完全長ゲノム情報をもとに、ターゲットタンパク質の絞り込み、未知領域の機能予測が可能。パスウェイ解析、発現データとの連携など、各種の解析機能をもつ	"	"	2000年	-
GeneData: Expressionist Pro	"	"	遺伝子発現/蛋白質発現データ解析システム: マイクロアレイ、DNAチップ、フィルター、2次元電気泳動などの各種発現データを規格化した上で、各種統計手法による統一的な解析が可能	"	"	2000年	-
GeneData: Screener	"	"	化合物スクリーニングデータ解析システム	"	"	2003年	-
BioNumerics	"	ベルギー・アブライドマス	系統分類・解析・データベース化ソフト: 電気泳動、RFLP画像、ガスクロ、HPLC、分光光度計曲線等の波形データ、塩基/アミノ酸配列データ、マトリクスデータ、酵素/代謝反応実験のプロファイリングなど、各種実験データ入力。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの各種統計手法。RDB対応	Windows2000以降	"	2000年	-
GeneMaths	"	"	遺伝子発現データ(DNAチップ・マイクロアレイ)解析システム。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの豊富な各種統計手法。RDB対応	"	"	"	-
Geneseq	"	英ダウエント	全世界の公開特許、登録特許中の核酸、たん白質の配列を独自にコレクションしたDB	PC: 全シリーズ、サーバー: 全シリーズ	"	1995年	-
Geneseq FASTAlert	"	"	全世界の公開特許、登録特許中の核酸、たん白質の配列を独自にコレクションしたDBの速報版	"	"	2000年	-
OmniViz	"	米オムニビズ	可視化によるデータマイニング、テキストマイニング、統合型意思決定支援システム	Windows 2000/XP、SUN、PC-Linux	"	2003年5月	-
PathwayAssist	"	米アリアドネジェノミクス	パスウェイ情報描画可視化編集ソフトウェア	Windows2000、XP	"	2003年2月	-
MedScan	"	"	PubMed等科学文献情報から相互作用情報を自然言語処理にて自動抽出するプログラム	"	"	"	-
ResNet	"	"	MedScanプロセッサをPubMed及びBINDIに適用し、相互作用情報等を収集したデータベース	"	"	"	-

Auto Net Finder	"	インフォコム	多変量解析手法Graphical Gaussian Modelingと階層的クラスタリングとを組み合わせた新しい関連ネットワーク推定システム	Windows 2000/XP、Linux	"	2005年	-
MetaCore	"	米ジーンゴー	マニュアルキュレートで文献から得られた蛋白-蛋白などの相互作用情報を収録したパスウェイデータベース	Webブラウザ利用もしくは、サーバー利用(Linux)	"	2005年	-
MetaDrug	"	"	薬物候補化合物から代謝構造予測を経てパスウェイ解析を行う統合型トキシコゲノミックプラットフォーム	Webブラウザ利用もしくは、サーバー利用(Linux)	"	2005年	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NM-SPEC2 (SpecMan, NMR-SAMS)	日本電子	米スペクトラムリサーチ	NMRのスペクトルから平面構造を解析する作業を補助するソフトウェア。1D、2Dのスペクトルを読み込みピーク検出を行うSpecManと、ピークテーブルから部分構造を作り、この組み合わせで全体構造を提起するNMR-SAMSとの組み合わせで使う	Windows98/NT4/2000/XP	お問合せ下さい	2000年6月	-
ALICE2 for Windows	"	日本電子データム	NMRデータ処理(1,2次元対応)プログラム。自動処理機能が充実し、簡単にNMRチャートを得ることができる。処理結果を他のアプリケーションの引渡し、レポート作成や統計解析が容易。新たにJ couple、2D correlation等の解析機能が追加された	Windows98/Me/NT4.0/2000/XP	詳細はお問い合わせ下さい	1994年	-
KnowItAll NMR(ノウ・イット・オールエヌエム・アル)アナリティカルシステム	日本電子データム	米バイオ・ラッドラボラトリーズ	サドラーの保有するNMRスペクトルデータ13Cを350,000件、1Hを18,000件を検索することができるデータベースは年間契約。ユーザーデータベース構築機能もオプションでつけられる	Windows98/Me/NT4/2000/XP	初期価格196万円(D/B 1年ライセンス付、次年度D/B 80万円)	2001年	-
CACheワークシステム	"	富士通	三次元(立体)分子計算モデリングシステム。三次元分子モデルの入力/編集およびMO PAC、ZINDO、拡張MM2およびMM3等の計算ができ、反応性の予測、遷移状態探索、QSARへの応用等幅広く使用できる	PowerMacシリーズ、Windows98/NT/2000/XP	210万円	1993年4月	-
パーソナルCAChe	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、拡張MM2およびMM3/拡張ヒュッケル計算、計算結果の視覚化(立体視)ができる。計算化学の入門編	"	70万円	1993年4月	-
Quantum CAChe	"	"	CACheワークシステムのProjectLeader以外のすべてのソフトウェアが使用可能。MOPAC、ZINDO、拡張MM2/MM3等の計算ができる	"	140万円	1993年4月	-
CONFLEX	"	"	配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の澤先生、後藤先生により開発)、拡張MMと組み合わせて使用(オプション)	"	50万円	1999年	-
CAChe Project Leader	"	"	計算値と実験値等とのキャリブレーションをCACheシステム上で自動化できる。QSAR、QSPRの解析に最適。スプレッドシート形式で入力操作も簡単に行える。複数分子の自動連続計算の可能	"	CACheワークシステムに含む	1994年	-
ACD/1D-NMR	"	加アドバンスドケミストリデベロップメント	1D-NMRのデータを加工し、ケミカルシフトの予測をする。化学構造式と関連させてデータベース化を行い、構造式からNMRシフトを予測できるプログラム。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意されている。Aldrich NMRスペクトルデータ付き、13C、1H各々15,000件。	Windows98/NT/2000/XP	330万円~	2003年	-
ACDオプションモジュール ・2DNMR Predictor ・Combi NMR ・C-NMRデータベース ・H-NMRデータベース ・Name	"	"	1D-NMRの追加モジュール ・2D-NMRのスペクトルの予測、及び処理 ・スペクトル処理の自動化 ・186万件のケミカルシフト等 ・132万件のケミカルシフト等 ・名前と構造の変換	Windows98/NT/2000/XP	お問合せ下さい	2003年	-
GRAMS32/V6	"	米ギャラクティック	主に、IR、UV、RAMANなどのスペクトルデータを対象とし、豊富なパラメータを持って、波形分離を特長とする各種スペクトル処理が出来ます。主要メーカーのスペクトルおよびテキスト形式のものデータ変換が可能	Windows98/NT4/2000/XP	25万円~	1995年	-
MS-DXNQNT(DioK)	日本電子	日本電子	高分解能SIM法で測定されたダイオキシンなどの異性体を含むクロマトグラムデータから定量演算を行う	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせください	1998年6	-

MS-MSEQ	"	CIGB(キューバ)	アミノ酸一次構造解析支援プログラム	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせ下さい	1997年9月	-
MS-MSEQ/PSD	"	"	蛋白質同定支援プログラム	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせ下さい	2000年3月	-
MS-DECONV	"	日本電子	ESIモードで測定された多価イオンマスペクトルに対してデコンボリューション演算を行ない、親イオンのプロファイルを求め、その質量を推定する。	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせ下さい	2001年3月	-
MS-QUANT/20	"	"	マスペクトル一般定量プログラム	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせ下さい	1997年3月	-
MS-46030W7	"	Palisade	第7版マスペクトルライブラリーデータベース(Wiley's Registry of Mass Spectral Database)と検索ソフト	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせ下さい	2002年3月	-
MS-46080N02	"	NIST	NISTマスペクトルライブラリー検索プログラム	Windows98/NT4/2000/XP	お問い合わせ下さい	2003年6月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
J-OCTAプラットフォーム	日本総合研究所	日本総合研究所	メソ領域におけるソフトマテリアルの構造、物性、挙動を予測する統合シミュレーションプラットフォーム。粗視化分子動力学法、レオロジー法、動的平均場法、多相構造法の4つのエンジンの連携によりナノ複合構造設計、燃料電池設計、コーティング設計、バイオMEMS設計などに適用できる。エンジン連携のための共通基盤機能のほか、解析ノウハウ共有のためのシナリオ編集・ナビゲーション機能、プロジェクト管理機能、事例データベース機能などを装備している	Windows2000/XP、Pentium3-700MHz以上、メモリ256MB以上、HD1.5GB以上、OpenGLに対応したドライバソフト、グラフィックカードが必要	お問い合わせ	2003年4月	-
J-OCTA粗視化分子動力学モデラー	"	"	粗視化分子動力学法エンジンのためのモデラーで、化学式を基にした分子構造から任意の粗視化モデルを作成し、粗視化パラメータフィッティングによる粗視化分子モデリングまでを行う。(簡易な分子力学・分子軌道法内蔵)	"	お問い合わせ	2005年4月	-
J-OCTA動的平均場モデラー	"	"	動的平均場法エンジンのためのモデラーで、化学式を基にした分子構造から、動的平均場の粗視化単位であるセグメントを定義し、物性値データベースおよび分子の配位などからχパラメータを推算する機能を有している	"	お問い合わせ	2005年4月	-
J-OCTA多相構造法モデラー	"	"	多相構造法エンジンのためのモデラーで、エンジン間連携を考慮したメッシュ構造生成や境界条件設定などを行う	"	お問い合わせ	2005年4月	-
J-OCTA並列版分子動力学エンジン	"	"	粗視化分子動力学エンジンの並列版で、日本原子力研究所の並列版分子動力学ライブラリーをベースに粗視化分子動力学エンジン機能を実装したもの	Linux MPI版	お問い合わせ	2005年4月	-
J-OCTAその他オプション	"	"	上記以外に、分子軌道法汎用エンジンインターフェース(GAUSSIAN,MOPAC解析用データを生成し、解析結果から最適構造や電荷を取得する機能)、事例データベース(過去の解析例を収めたもので、解析入出力データのほか解析プロセスを表現したシナリオも内蔵)	"	お問い合わせ	2005年4月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CNMR Predictor	エルエイシステムズ	加ACD	13CNMRスペクトルの予測。200万件の化学シフト値を基にスペクトルを予測。MDL社ISIS/Base、ISIS/Drawと連携可能(ISIS Integrationが必要)	Windows	104万円	-	-
HNMR Predictor	"	"	1HNMRスペクトルの予測。138万件の化学シフトと44万件の結合定数からスペクトルを予測。ISISと連携可能	"	104万円	-	-
LogP DB	"	"	中性分子のオクタノール/水の分配係数(LogP値)予測。約18,400件の化合物の構造と実験LogP値を登録した内部データベース付属。ISISと連携可能	"	46万4000円	-	-

pKa DB	"	"	弱酸の解離定数の予測。16,000件の構造と31,000件に及ぶ実験値の内部データベースを付属。ISISと連携可能	"	110万4000円	-	-
Solubility DB	"	"	溶解度の予測。約 5,000件の実験値データベース付属	"	94万4000円	-	-
LogD Suite	"	"	部分解離状態の分子の分配係数値 (LogD) 予測。他にLogP DB、pKa DBが付属。ISISと連携可能	"	158万4000円	-	-
LogD Sol Suite	"	"	LogD Suiteに溶解度計算機能 (Solubility DB) が付属。ISISと連携可能	"	238万4000円	-	-
Name	"	"	IUPACルール・CAS Index ルールに基づく分子の命名。また化合物名から構造式を表示する Name to Structure 機能を付属。ISISと連携可能	"	78万4000円	-	-
NMR Manager	"	"	NMR実験データ処理、処理データと構造とを組み合わせたデータベースの構築機能。ほとんどのNMRデータ読み込み可能	"	78万4000円	-	-
MS Manager	"	"	MS 実験データ処理、処理データと構造とを組み合わせたデータベースの構築機能。LC/MS データも読み込み可能	"	120万円	-	-
Aldrich DB for NMR Manager	"	"	NMRManager Add-onモジュール。AldrichのFT-NMRスペクトルの電子版。構造、スペクトル、沸点など様々な条件で検索	"	42万円	-	-
Structure Elucidator	"	"	¹³ Cスペクトルから構造式の推測。CNMR Predictor、NMR Manager等の製品が付随。 ¹³ CNMRに加え、 ¹ HNMR、IR、分子量などの情報を入れると推測精度向上	"	792万円	-	-
Combi NMR	"	"	コンビナトリアルNMRの結果の自動判定。HNMR、NMRManagerが付随。実測NMRデータバッチ処理結果と予測スペクトルの比較など	"	398万4000円	-	-
Nuts Pro	"	米AcornNMR	NMRデータ処理。1Dおよび2Dのデータ処理が可能。2D データ処理を高速に行えるアレイドモード・モジュール付属。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	Windows、Macintosh	19万円	-	-
NMRPCPS	"	米NIH	高速多次元NMRデータ処理および解析プログラム。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	UNIX、(UNIX)、MacOSX	300万円	-	-
PCA/HSQC	"	"	NMRPieシリーズのモジュールの一つで、滴定実験などの2D-NMRスペクトルによる評価をサポートし、ドッキングデザインなどで効力を発揮するツール	"	100万円	-	-
DYNAMO	"	"	シミュレートッドアニーリング法を使いNMRデータからマクロ分子や複合体の立体構造の計算が可能	"	400万円	-	-
TURBO-FRODO	"	仏AFMB-CNRS	分子設計支援・分子表示プログラム。多様な分子、X線回折の電子密度マップの読み込み・表示が可能	SGI、LINUX	300万円	-	-
MRVision	"	米エム・アール・ビジョン	MRI、CTなどの医療画像解析。DICOM3フォーマットにも対応。Diffusion、Perfusion、Functional MRI、緩和時間の解析等	SUN、LINUX (RedHat)	150万円	-	-
MEDx	"	米センサーシステムズ	医療画像解析。ユーザーフレンドリーなSPM解析環境を提供。3次元化も容易に行え、多様な画像モダリティで得られる多次元データ画像処理ルーチンにより解析に最適な可視化をもたらす医療画像処理・解析プログラム	SUN、LINUX (RedHat)、(SGI、IBM)	150万円	-	-
Analyze	"	米MAYOファウンデーション	3Dバイオメディカル画像表示/解析。多様な画像モダリティに対応した、多次元のバイオメディカル画像のインタラクティブな表示・マニピュレーション・測定のための総合プログラム	Windows、UNIX、LINUX	150万円	-	-

EMSE	"	米ソースシグナルイメージング	研究者向けに開発したEEG/MEG Source Estimation、Multimodel Functional Imagingのためのソフトウェアツール	Windows	お問合せ下さい	-	-
Ostergaard	"		Perfusion解析のためのプログラム	Windows	120万円	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Mascot Server	マトリックスサイエンス	英マトリックスサイエンス	質量分析データによる蛋白質同定を行う代表的ソフトウェア。各種検索機能を装備したWebサーバー	Windows、Linux	お問合せ下さい	1999年	-
Mascot Cluster	"	"	Mascot Server のクラスターバージョン 高速、大量データ処理が可能	Windows、Linux	お問合せ下さい	1999年	-
Mascot Distiller V2.0	"	"	質量分析装置のRAWデータより、独自アルゴリズムで、モノアイソトピックピークを生成。DeNovoも可能	Windows	お問合せ下さい	2005年	-
Mascot Integra	"	"	プロテオミクス解析で発生する各種データマネジメントソフトウェア。小規模版LIMS。拡張可能	Windows、Linux	お問合せ下さい	2005年	-
Mascot Wizard	"	"	ペプチドマスフィンガープリント法検索を簡便に行うインターフェースソフトウェア	Windows	無償	2003年	-
Mascot Daemon	"	"	検索作業のデータハンドリングを自動化するためのソフトウェア	Windows	無償	1999年	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MDL ISIS Host	Elsevier MDL	米Elsevier MDL	ISIS/Baseをフロントエンドとして、サーバー上のさまざまなデータベース(2D/3D化学構造式、反応式、生物活性データなど)にアクセス	Windows 2000 server, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL Direct	"	"	Oracle Data Cartridgeテクノロジーを用いた、SQL文による化合物構造式や反応式の登録および検索可能なオープンアーキテクチャ対応製品	Windows 2000 server, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL ISIS/Base	"	"	小グループでの化合物、反応式ならびに関連データ管理を目的としたデスクトップソフト。ISIS/Hostのクライアントソフトの機能も併せ持つ	Windows 98/NT/2000/XP	-	-	-
MDL ISIS/Draw	"	"	化合物構造式描画ソフト。化合物、反応式の登録ならびにプレゼンテーション資料の作成に使用	Windows 98/NT/2000/XP	-	-	-
MDL ISIS for Excel	"	"	ISISリモートデータベースにMS Excelから参照可能にするアドイン。SDFfileをExcelに表示し、加工することも可能	Windows 2000/XP, MS Office 2000/Office XP/Office 2003	-	-	-
MDL Isestris	"	"	新世代の3層構造のアーキテクチャに基づく創薬における業界標準技術で構築された開発プラットフォーム。MDL Base、MDL Draw、MDL Core Interface、MDL Directの4製品から構成される開発環境の総称	Windows 2000/XP, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL Base	"	"	MDL Isestrisのクライアント。エンドユーザ向けの操作性の向上、開発者向けの.NETを使用可能なオープンな開発環境を提供する	クライアント: Windows 2000/XP	-	-	-
MDL Draw	"	"	新世代の化学構造式描画ツール。JavaやVBのアプリケーションへの組み込みや、XMLによる機能のコントロールが容易	クライアント: Windows 2000/XP	-	-	-
MDL Core Interface	"	"	MDL Isestrisの中間層。J2EEによる開発が可能。ユーザ、MDL Baseのアプリケーション、データベースの管理およびデータベースのインテグレーションを行う	Windows 2000, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL Cheshire	"	"	構造式からディスクリプターを得たり、構造式や反応式をビジネス・ルールに基づき修正するプログラムツール	Windows 2000/XP/SUN Solaris	-	-	-
Chemscape	"	"	WebブラウザーからISIS/Hostを利用するための製品群。Chime、ChimePro、Chemscape Serverから構成される	Windows 2000, SUN Solaris	-	-	-

Chime/ChimePro	"	"	Netscape Navigator、Internet Explorerなどブラウザに構造式を表示するためのプラグイン。Chime ProはISIS/Hostの構造式検索、スペクトル表示などの機能を持つ	Windows 2000/XP、Macintosh	-	-	-
MDL Central Library	"	"	化合物ライブラリー情報を管理するためのクライアント/サーバー型システム	ISIS/Hostと同環境	-	-	-
MDL Afferent	"	"	コンビナトリアルライブラリー合成の計画、プロトコル、解析など一連の作業を支援する。自動合成機器、分析機器と連動するモジュールもある。スタンドアロン版とネットワーク版がある	サーバー： WindowsXP professional/2003 server/2000 professional or server クライアント： Windows 2000/XP、MS Office 2000/XP/2003	-	-	-
MDL Reagent Selector	"	"	コンビナトリアルケミストリーにおける試薬を、官能基や種々の物性値、価格などさまざまな基準を基に選択する	サーバー：Sun Solaris、Windows 2000 Server クライアント： Windows 2000/XP	-	-	-
MDL Elan	"	"	化学反応式を含む合成化学情報をデータベースで保存管理する電子ノートアプリケーション	サーバ： ISIS/Hostと同環境 クライアント： Windows 2000/XP	-	-	-
MDL LitLink	"	"	MDL提供のファクトデータベースの書誌データをもとに、Science Directなど種々のオンラインジャーナルにシームレスにアクセスする仕組み	クライアント： Windows2000/XP、サーバー： SUN Solaris、Windows2000 server & Oracle など	-	-	-
MDL Assay Explorer	"	"	アッセイのプロトコル作成、データ入力・管理、結果解析を行いオラクルDB化する統合ソフト。自由度が高く、HTSからマニュアルアッセイ、探索薬物動態までサポート	サーバー： Windows 2000 Server、Windows XP Pro Oracle：8.1.7.4、9.2.0.1 クライアント： Windows 2000/XP	-	-	-
MDL Report Manager	"	"	Assay ExplorerのアッセイデータやISISの化合物データ及び遺伝子発現データ等のオラクルDBにまたがる検索ができ、構造活性相関(SAR)レポートが作成可能。Excel、Word、HTML 及びPDFフォーマットをサポート	Windows 2000/XP	-	-	-
MDL PlateManager	"	"	サンプル管理・プレート管理システム。96、384および1536穴プレートのすべてのプレートフォーマットやミックスプレートにも対応、Assay Explorerとのリンクにより、アッセイ結果からチェリーピックプレートの作成が可能。HTSロボット対応	サーバー： Windows 2000 Server、Sun Solaris Oracle： ISIS/Hostと同環境 クライアント： Windows 2000/XP	-	-	-
MDL QSAR	"	"	構造活性相関解析ソフト。PCA、クラスターリング、回帰分析、判別分析等の解析機能を持つ。遺伝的アルゴリズムなどによるモデル自動作成機能を持ち初心者も簡単に使用できる。約400種以上の分子記述子を持つ	Windows 2000/XP	-	-	-
MDL Cacinogenicity module	"	"	FDAとMDLとの共同開発プロジェクトにより開発された発ガン性予測モデル。このモデルはFDA所有のげっ歯類発ガン性データを元に作成され、そのデータに加えてFDAの判別ロジックも合わせて提供される	Windows 2000/XP	-	-	-

Partek	日本MDLインフォメーションシステムズ	米 Partek	QSAR、遺伝子など多方面の科学データについて、可視化機能を併せ持つ統計解析ソフト。クライアント・サーバー版もある	Windows 2000/XP	—	—	—
DiscoveryGate	''	MDLインフォメーションシステムズ	化合物や反応ファクトデータベース、電子雑誌、電子参考図書など、化合物に関する総合的な情報をシームレスに得るためのインターネット上コンテンツサービス。下記すべてのデータベースが利用可能	Windows 2000/XP	—	—	—
Integrated Major Reference Works	''	''	COFGGT, SOS, CACなど有機化学における参考図書を電子化し、さらにMDL 反応データベースとのリンクにより有機化学の包括的な知識をDiscoveryGate上で提供。InfoChemとElsevier, Springer, Thiemeなど3出版社ならびにMDLとの協力	DiscoveryGateと同環境	—	—	—
Patent Chemistry Database	''	''	研究者および情報担当者のための、特許(1976年以降のWO, US, EPの3特許序)をソースとする有機化合物(150万化合物)および有機合成反応(150万反応)データベース。Prophetic化合物も収録。CrossFire Commanderあるいは、DiscoveryGateで利用	サーバー: AIX 4.3, 5.1, 5.2, solaris 8, 9 Windows 2000, 2003 Server, Windows NT4 SP6a	—	—	—
CrossFire Beilstein	''	''	有機化合物の最も大きなファクトデータベースの一つで、900万化合物に対する精選された947万反応、および物性データを収録した信頼高いデータベース検索システム	サーバー: AIX 4.3, 5.1, 5.2, solaris 8, 9 Windows 2000, 2003 Server, Windows NT4 SP6a	—	—	—
CrossFire Gmelin	''	''	無機化合物(合金、セラミックス、酸化物等)・有機金属化合物の特性・構造・合成法を収録したデータベース検索システム。209万化合物、163万反応	サーバー: AIX 4.3, 5.1, 5.2, solaris 8, 9 Windows 2000, 2003 Server, Windows NT4 SP6a	—	—	—
MDL CrossFire Commander	''	''	上記CrossFire BeilsteinおよびGmelinシステムを構成するクライアントソフトウェア	クライアント: Windows 2000 Professional SP4/Windows XP SP1/Windows NT SP6	—	—	—
Cheminform Reaction Library	''	''	FIZ Chemie社(独)の反応情報誌Cheminformから採録される総合的反応データベースに、MDL Reference Library of Synthetic Methodologyの内容を加え、1946年以降の文献から112万反応以上を収録	ISIS/Hostと同環境	—	—	—
MDL Reference Library of Synthetic Methodology	''	''	TheilheimerやCOREなど1991年以前に個々に収録された5つのデータベースを一つに統合した反応データベース。21万反応	''	—	—	—
MDL Solid-Phase Organic Reactions	''	''	コンビナトリアルケミストリーで注目の低分子固相合成反応データベース。反応に加えてポリマーやリンカーなど最適反応条件情報が得られる。23,000反応	''	—	—	—
Derwent Journal of Synthetic Methods	''	''	Derwent社のJournal of Synthetic Methods(1980年~)の電子版。82,000反応	''	—	—	—
ORGSYN	''	''	Wiley&SonsのOrganic Synthesesの電子版(1921年~)。汎用的な反応(5,700)を中心に収録	''	—	—	—
MDL Metabolite Database	''	''	代謝物構造式や代謝経路、スキームなどの薬物代謝情報データベース。69,000の代謝反応、430,00化合物の情報を網羅。Toxicityとリンク	''	—	—	—

MDL Toxicity Database	"	"	医薬、農薬など化学物質の毒性データベース。データソースは、RTECSにNLMのGENETOXやCCRISが加わり、約16万化合物。創薬初期での毒性、代謝研究を支援。Metaboliteとリンク	"	-	-	-
MDL Comprehensive Medicinal Chemistry	"	"	Pergamon Press社のComprehensive Medicinal Chemistryを元に収録した医薬治験薬化合物データベース、8,600化合物	"	-	-	-
MDL Drug Data Report	"	"	Prous社の医薬開発情報誌 Drug Data Reportを元に、約147,000以上の開発医薬品情報を収録。2D/3D構造式検索可	"	-	-	-
MDL Available Chemicals Directory	"	"	600社(国内約30社)を超える試薬化合物カタログから収録される約296,000化合物に関する2D/3D構造式、サプライヤー並びに価格などの情報を持つ	"	-	-	-
MDL Screening Compounds Directory	"	"	スクリーニング用化合物サプライヤーのカタログ情報を集録。361万化合物	"	-	-	-
xPharm	"	"	創薬に必要な不可欠な最新のライフサイエンスを、薬剤、標的因子、疾病、作用機序に分類し、第一線の研究者が概説する電子参考書。DiscoveryGate上で利用	DiscoveryGateと同環境	-	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
薬師-Xsi	みずほ情報総研	みずほ情報総研	三次元配座生成のXsi-Conf、三次元構造活性相関解析を行うXsi-SDQSAR、たん白質とのドッキングシミュレーションを行うXsi-Dock、ウェブユーザーインターフェースのXsi-Web、JavaベースのユーザーインターフェースであるXsi-WS、XML専用化学データベース管理システムのXsi-DB、ホモロジーモデリングツールのXsi-Homologyから構成される。Xsi-DB用のデータコンテンツとして医薬とペプチド、コンビナトリアルケミストリーのデータが用意されている	Linux	-	2003年3月	-
商品名	販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
BLABS	三井情報開発	三井情報開発	バーコードを用いた検体の管理から、情報の管理まで行なシステム(LIMS)。効率的に試料を管理し、情報を共有することで、大規模なバイオサイエンス研究を強力に支援する	Windows2000、Solaris8	800万円	2000年下半期	国内10サイト
SCTS21	"	"	平成13年に施行された三省合同の倫理指針である「ヒトゲノム・遺伝子解析研究に関する倫理指針」に準拠した、個人情報の登録、検体の匿名化から研究側への匿名化された個人情報の受渡しまでといった、匿名化業務をサポートするパッケージソフト	Windows2000/XP	200万円	2001年上半期	国内20サイト
GenomicProfiler Enterprise	"	"	大量に得られる遺伝子発現プロファイルデータをデータベースで管理するパッケージ。WebインターフェースによりPCA、クラスタリング等による各種解析手法、公共データベースからの自動アノテーション収集機能を搭載した。DNAマイクロアレイ・GeneChipの両方に対応している	Windows2000、Redhat Linux Advanced Server、Solaris8	577万5千円(税込)、非営利機関価格別途お問合せ	2002年上半期	国内6サイト
GenomicProfiler	"	"	大量に得られる遺伝子発現プロファイルデータをデスクトップ上で解析するパッケージ。JAVAアプリケーションによりPCA、クラスタリング等による各種解析手法を搭載した。DNAマイクロアレイ・GeneChipの両方に対応している	Windows2000	94万5千円(税込)	2002年上半期	国内5サイト
RoboSNP	"	"	遺伝子・SNPを相互に着目する情報を効率よく調べる事が可能なシステム。ゲノム、遺伝子、SNPのマッピングをグラフィカルに参照できる。別途、システムを用いないデータ加工・提供のみのサービスも提供	Solaris8、Windows2000/XP、Redhat Linux	500万円～、データ更新サービス150万円～	2002年上半期	-
VoyaGene	"	"	DNAマイクロアレイ等で得られた遺伝子発現プロファイルデータから遺伝子間の相互作用(遺伝子ネットワーク)を推定するシステム。性質の異なる4つの遺伝子ネットワーク推定モデルを搭載しており、実験データに応じたモデルの選定や組み合わせが可能。また、ネットワーク表示機能や推定結果検証機能も充実しており、煩雑かつ難易度の高いネットワーク推定を効率よく行うことができる	サーバ: Solaris8、Redhat Linux、クライアント: Redhat Linux、Windows2000/XP	永久ライセンス580万～、年間ライセンス250万～、アカデミックプライス別途問い合わせ	2003年上半期	-

GenomeGambler	"	"	微生物ゲノム配列解析に必要な各種解析プログラム、PhredPhrap、GeneHacker、CRITICA、Glimmer、BLAST等を自動実行し、WEBインターフェースから結果を参照、編集でき、シーケンスデータの取り込みから配列決定、アノテーションまでをカバーするパッケージソフトウェア	Redhat Linux、Tru64 Unix、Solaris8	150万円～、非営利機関価格別途お問合せ	2001年上半期	国内20サイト
波平	"	"	シーケンサから出力された波形データから高精度にSNP候補領域を同定する解析ツール。SNPの検出には独自手法を用いている。一般的によく使用されているPolyPhredの問題(擬陽性が多い、塩基の挿入と欠失にうまく対応できていない)を改良している	Solaris、RedHatLinux	150万円～、教育機関価格別途お問合せ	2003年下半期	—
XanaGenome	"	ザナジェン	最新の微生物ゲノム情報を収集し、再アノテーションとオーソログ解析を実施。ゲノム、遺伝子情報の閲覧と検索を行うリファレンスデータベースとして、また比較ゲノムのための簡便な解析ツールとして構築して。また別途ユーザー独自の配列を解析してデータベースに搭載するサービスも提供しており、ゲノムプロジェクトにおいて、容易に情報の整理と共有を行うことが可能	インターネット経由でのアクセスサービス。別途専用サーバレンタルの形態もあり	年間100万円～、非営利機関価格は別途お問合せ。サーバ買取(永久ライセンス)も可能	2001年下半期	国内外20サイト
GCG Wisconsin Package	"	米アクセルリス	約140のコマンド群から成る配列解析パッケージソフトウェア。約20年の歴史を持ち、世界中の研究者に愛用され続け、高い信頼性を誇っている。オプションのウェブインターフェースSeqWebを使用することで、UNIXユーザーでなくても簡単に解析を行ったり、プロジェクト単位でのデータ管理も可能	Compaq Tru64、IRIX、Solaris、Red Hat Linux	317万6千円(初年度使用料)、104万8千円(次年度以降)、SeqWebオプション106万円～、アカデミックライセンス別途問い合わせ	2001年3月	国内66サイト
SeqMerge	"	"	高速かつ強力なアセンブル機能とGUIを備えたDNAフラグメントアセンブルツール	"	176万4千円～、アカデミックライセンス別途問い合わせ	2000年6月	—
DS SeqStore	"	"	DBMSとしてOracleを使用し、膨大に増加を続ける配列及びその解析データを公共データ、プライベートデータ共に管理するデータマイニングのためのパッケージソフトウェア	Sun Solaris 8 or 9、IBM AIX 5.1	別途問い合わせ	2001年1月	—
DS Gene	"	"	アクセルリス社が提案する創薬プラットフォームDiscovery Studioシリーズで核酸及びアミノ酸配列解析を担うWindows用デスクトップ配列解析ソフトウェア。使いやすさ、表示の美しさに定評がある	Windows2000/XP	80万円～、非営利機関価格別途お問い合わせ	2002年上半期	—
MacVector	"	"	Macintosh用配列解析ソフトウェアとして、今なお世界中の研究者に愛用されつづけている。十分な機能と誰にでもわかりやすい操作性に定評があり、Discovery Studio Geneの元になった	MacOS9.0以降	80万円～、非営利機関価格別途お問い合わせ	—	—
DS GeneAtlas	"	"	従来法(PSI-BLAST、HMMs等)に加えて、二次構造評価(SeqFold)および三次立体構造自動構築(HTM:High Throughput Modeling)による生化学機能予測を行なうことにより、機能予測の難しい遺伝子に対しても独自の高信頼性アノテーションを付加する解析システム	Solaris8、Linux、IRIX	別途お問い合わせ	2003年上半期	—
DS AtlasStore	"	"	33生物種の公知ゲノムに対し70%～99%の遺伝子について、配列/構造/機能などの高品質アノテーション(370万アラインメント、170万3D構造)を提供し、機能の情報、3D構造情報、活性部位情報及びSCOPファミリー情報等により検索可能なプロテオミクスデータ管理システム	サーバ: Solaris8、Redhat Linux、WindowsNT/2000、IRIXクライアント: Windows98/NT/2000/XP	別途お問い合わせ	2003年上半期	—
SOSui	"	名古屋大学美宅研究室	膜タンパク質判別および膜貫通ヘリックス予測システム。Kyte-Doolittleの疎水性指標と、新規に定義した両親媒性および非電荷指標などを用いて、従来の手法と比べて高速かつ高精度な予測を実現している。他にシグナルペプチドやタンベル型タンパク質の判別プログラムもある	Sun Solaris、RedHat Linux	50万円～、アカデミックライセンス別途問い合わせ	99年11月	国内33サイト

TRANSFAC	"	BIODBASE	真核生物の転写因子およびその結合部位に関するデータベース。分子生物学者のグループにより校閲されているため高い信頼性を持つ。データベースに含まれる位置特異的重み行列を用いた転写因子結合部位予測ツールMATCHなどが含まれる。目的別にオプションデータベースが用意されている	Compaq Tru64 UNIX, SGI IRIX, Sun Solaris, HP-UX	年間使用料158万3千円～、アカデミックプライス別途問い合わせ	99年7月	国内34サイト
TRANSCOMPEL	"	"	Composite element (複合シスエレメント)に関するデータベース	"	年間使用料33万3千円～、アカデミックプライス別途問い合わせ	"	国内6サイト
TRANSPATH	"	"	転写因子のトランス活性化制御機構に関するデータベース。手書きのグラフィカルマップや、検索条件によって動的に生成されるネットワーク表示などにより、複雑な制御機構をわかりやすく表示できる。分子生物学者のグループにより校閲されているため高い信頼性を持つ	"	年間使用料158万3千円～、アカデミックプライス別途問い合わせ	2001年上半期	国内5サイト
TRANSPLOERER	"	"	遺伝子制御領域の解析を行うためのデスクトップツール。脊椎動物の遺伝子に関する転写開始部位や哺乳類の遺伝子の最初のエクソンの予測、ならびに転写因子結合部位の同定のためのツールを備える。簡単に使える操作性とわかりやすい画像表示により、PC上で手軽に利用できる	WindowsNT/2000/XP, Linux	25万円～、非営利機関価格別途お問い合わせ	2003年上半期	国内3サイト
Phred/Phrap/Conced	"	米コドンコード	最も標準的に使用されているゲノム配列アセンブルソフトウェア。Phredは精度の高いベースコール結果を配列の品質情報と共に出力する。PhrapはPhredのクオリティ情報を加味し、精度の高いアセンブルを実現する	WindowsMe/2000/XP, Linux, MacOS, Tru64 UNIX, Solaris8	別途問い合わせ	—	—
GeneFIS	"	名古屋大学本多研究室	ファジィニューラルネットワークを用いて、検体のマイクロアレイ解析結果や病態に関するデータ(疾患の有無、予後の良し悪しなど)から疾患や治療法に関連する原因遺伝子を自動的に絞り込み、高精度の病態推定モデルを構築するソフトウェア。さらに、ファジィ推論を使って、疾患や治療法に関連する因子がどのように組み合わせられると疾患がある、もしくは予後が悪いなどと推定されるかについてのルールを、構築した推定モデルから抽出し、わかりやすく表示することが可能	WindowsNT/2000/XP	80万円～、教育機関価格別途お問い合わせ	—	—
PDFAMS	"	インシリコサイエンス、SGI	既知の立体構造情報を用いてアミノ酸配列からタンパク質の立体構造を自由に予測するソフトウェア	SGI IRIX, RedHat Linux	150万円～、教育機関価格別途お問合せ	2003年下半期	—
PubGene	"	米パブジーン	MediLineで同時に出現する遺伝子シンボルの組み合わせや、遺伝子シンボルに対応する遺伝子・タンパク質の配列類似性から算出されたネットワーク構造を調べるためのデータベース	Windows, UNIX, Linux, MacOSX	30万円～、非営利機関価格別途お問い合わせ	2004年上半期	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NanoBox(ナノボックス)	ナノシミュレーション	ナノシミュレーション	液晶、合成高分子のシミュレーションで実績のある分子材料設計用分子動力学ソフトウェア。溶解度、蒸気圧等、自由エネルギー計算が可能。液晶では世界最高峰のソフト	Pentium4, Xeon, Alpha等 Linux機, SGI 等 Unix機	120万円(大学75万円)。カカデミック、サイトライセンス:40万円～(有償保守サービスあり)	98年4月	20サイト
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MolStudio	NEC	NEC	分子軌道計算プログラムGaussianの入力データの作成(分子座標、キーワード)や計算結果の3次元的可視化が簡単に行える。また、Windows版Gaussianおよびネットワーク接続されたUNIXサーバ上のGaussianの実行を、マウス操作により手軽に行うことが可能。レポート掲載用の画像データの作成にも便利。PDBデータの読み込みや、電荷分布・軌道エネルギー準位図・反応経路の解析表示を新たにサポートし、ポートフォワーディングによるSSH対応や、データ送受信の詳細制御機能など実行制御機能も強化	Windows98/98SE/Me/XP, 2000 Pro/NT4.0WS	シングルライセンス:9万8千円、8万円(アカデミック)、サイトライセンス:40万円～(有償保守サービスあり)	2004年10月	—
NEC Homology Searcher	"	"	BLAST/PSI-BLASTの高速並列検索と柔軟な運用が可能で、大規模ユースに最適。また、BLAST結果の解析・可視化機能、ClustalW、DB自動更新機能も標準添付し、研究者の様々なニーズに対応	サーバ: LINUX, クライアント: Windows	30万円～(詳細はお問い合わせください)	—	—

BioCompass (バイオコンパス)	"	"	バイオ文献・バイオ情報のマイニングツール。同義語・多義語処理や、関連情報(生理現象、遺伝子機能、疾患、化合物など)の一括検索が可能。また、マイクロアレイ等の大量データも一括処理し、関連情報をグラフィカルに表示。クラスタ内、クラスタ間での比較が可能	ASP形式の場合 クライアント: Windows98、Windows2000、WindowsXP、MacOS X ブラウザ: Internet Explorer 5.5以上、Netscape 6.2以上、Safari 1.2以上	100万円～(詳細はお問い合わせください)	2004年	—
BioPrism(バイオプリズム)	"	"	プロテオミクス研究向けLIMSとして、あらゆる実験データを確実に管理。さらにヒトサンプル等の倫理規定を遵守すると同時に、取り違いを予防するためにバーコードを活用したサンプル管理機能も提供。ICカードによるログイン・ログアウト、タッチパネルインターフェース等、実験中の操作を簡易化するオプションも各種用意	サーバ: LINUX、クライアント: Windows	300万円～(詳細はお問い合わせください)	2005年	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SemanticObjects	NECソフト	NECソフト	新製品のバイオ情報統合プラットフォーム。複数のデータベースを統合的に扱えるだけでなく、その中からルールを抽出して知識を取り出し、その知識を統合していくこともできる。また、BLASTなどの解析ツールを組み込むためのインターフェース機能も備えている	Windows、Linux	詳細問合せ	2003年4月	—
BioCollabo	"	"	1 代表的バイオインフォマティクスツール群を提供。2 バイオインフォマティクスツール間の連携を容易に。3 Webインタフェースで簡単な操作を実現。4 バイオインフォマティクスの可能性を広げるGrid Computing技術に対応。5 Grid Computingシステムのスループットを最大にする最適化スケジューラを搭載	Linux	詳細問合せ	2004年6月	—
BioWorkbench	"	"	以下の特徴を持ったバイオ研究支援システム。スクリプトにより思いついた手順(ワークフロー)を早期に試して結果を確認したり、以前試した手順を変更して再試行することが可能。スクリプトはお客様が自由に記述、実行可能。公共ツール/公共データベースとの連携が容易。InterProScan、HMMER、BLAST(NECのHomologySearcher あるいは通常のBLAST)、ClustalWなどの主要な公共ツールを標準でサポート。複雑で大量の実験データをわかりやすく分類し、安全に管理。ユーザ/グループ単位でアクセス権を個別に設定可能	Windows、Linux	詳細問合せ	2004年7月	—
ProteoFinder	"	バイオソリューション	複数の異なる質量分析計からMascot(※英国 Matrix Science社開発のタンパク質データベース検索ソフト)により出力される膨大なデータを一元管理できる、タンパク質解析ソフト。ピークリスト作成からMascot検索・データの格納まで自動実行。タンパク質情報を階層的、多面的に一覧表示することにより必要なデータを一画面に集約。キャリブレーション機能やスコアのカスタマイズ機能、MSMSのスペクトル表示などにより偽陽性データを排除	Windows	詳細問合せ	2004年11月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GastroPlus	ノーザンサイエンスコンサルティング	米シミュレーションズプラス	ミンガン大学Amidon教授らのグループが開発したCATモデルを発展させたACATモデルをベースとしたソフトウェア。経口投与と製剤の消化管内の挙動、薬物の血中移行を解析・予測	Windows	お問合せ下さい	1998年8月	—
GastroPlus-Optimization	"	"	吸収率、BA、Cp-time、PK Parameterなどの実測値とシミュレーション値が一致するようパラメータを最適化するGastroPlusのオプションモジュール	"	"	1999年5月	—
GastroPlus-Metabolism & Transporter	"	"	トランスポーターや代謝を考慮して動態解析を行うGastroPlusのオプションモジュール	"	"	2001年7月	—
GastroPlus-PDPlus	"	"	薬効と血中濃度の関係を解析し、最適な投与量や投与間隔を予測するGastroPlusのPharmacodynamics解析オプションモジュール	"	"	2002年8月	—
GastroPlus-PKPlus	"	"	静注によるCp-timeデータから1-, 2-, 3-コンパートメントモデルでのPKパラメータを求めるGastroPlusのオプションモジュール	"	"	2000年8月	—

GastroPlus-PBPK	"	"	体内に入った薬物が、どのように吸収され、各部分に分布、蓄積あるいは排泄されていくのを時間的に予測する生理学的薬物動態モデル(Physiologically-based Pharmacokinetic Model)のGastroPlusオプションモジュール	"	"	2005年5月	—
GastroPlus-IV/IV Correlation	"	"	in vitroでの溶出実験データとGastroPlusで解析したin vivoでの溶出を比較し相関を確認するGastroPlusオプションモジュール	"	"	2000年8月	—
ADMET Predictor	"	"	化合物の構造情報から経口吸収に関わるADMET物性値を予測するソフトウェア。pKa、LogP、LogD、溶解度、拡散係数、ヒト膜透過性、MDCK膜透過性、BBB透過性、分布容積、血漿タンパク結合率、吸収率、6種類の毒性予測	"	"	2005年5月	—
ADMET Modeler	"	"	自社のデータセットから新しいモデル式を構築し、ADMET Predictorをカスタマイズするプロフェッショナル用ソフトウェア	"	"	2005年5月	—
DDPlus	"	"	米国薬局方の溶出試験をシミュレーションするソフトウェア	"	"	2005年5月	—
MembranePlus	"	"	化合物の膜透過試験をシミュレーションするソフトウェア。Caco2、MDCKのみならず人工膜にも対応	"	"	2005年12月予定	—
Modern Biopharmaceutics	"	米TSRL	製剤学、薬物動態学の解説と簡易計算ツールが含まれている、生物薬剤学教育用ソフトウェア	Windows, Mac	1万8000円から	2004年12月	—
Reaction Database	"	ハンガリー・コムジェネックス	化合物ライブラリー欧州最大手のコムジェネックス社のウェブベースの合成反応データベース。コムジェネックス社の合成のノウハウ入りプロトコルも参照可能	Web	年間400万円	2004年12月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Galapagos DB for Gene	リミックスポイント	リミックスポイント	画像変換エンジンとデータベース機能を直感的なインターフェースでまとめあげ、画像データやアノテーション情報の管理をより簡単にする画像コンテンツ管理システム。遺伝子機能解析のためのプロテオーム実験データからPDF形式での学術論文データの管理まで、研究機関におけるさまざまなコンテンツの管理機能を提供	【OS】Solaris 8以降、RedHat Linux 7.2以降、【RDB】PostgreSQL 7.2以降、Oracle 10g以降、【その他環境】Apache 1.3.x or 2.0.x、Tomcat4.x、J2SE 1.4.x	200万円～(CPUライセンス)	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MOE	菱化システム	加ケミカルコンピューティンググループ	ソフトウェアの開発環境と実行環境を一体化させた統合計算化学システム。分子シミュレーション、ドラッグデザイン、コンビケム、蛋白質モデリングの機能を搭載	SGI、SUN、HP、IBN、Windows、Intel-Linux、Mac	—	1997年9月	—
Kinase ChemBioBase	"	米ジュビラントバイオシス	20万化合物が登録されたキナーゼ阻害剤データベースのMOE版	SGI、SUN、HP、IBN、Windows、Intel-Linux、Mac	—	2004年1月	—
ADF	"	蘭サイエンティフィックコンピューティング&モデリング	密度汎関数法分子軌道計算プログラム	SGI、IBM、SUN、HP、Intel-Linux、Windows、Mac	—	1998年11月	—
COSMOtherm	"	独コスモロジック	第一原理計算による熱力学物性推算プログラム	SGI、Intel-Linux、Windows	—	2001年9月	—
COSMO UI	"	菱化システム	COSMOthermユーザーインターフェース	Windows	—	2003年6月	—
Turbomole	"	独コスモロジック	Ab initio法分子軌道計算プログラム 高速な密度汎関数法およびCOSMO法計算機能	SGI、HP、IBM、Intel-Linux	—	2001年9月	—
MedeA	"	米マテリアルズデザイン	Material Informatics/Quantum統合型材料設計支援システム	Windows	—	1999年1月	—
Gaussian 03	"	米ガウシアン	Ab initio法分子軌道計算プログラム	SGI、HP、SUN、IBM、Intel-Linux、Windows、Mac	—	1998年10月	—
GaussView	"	"	Gaussian98のグラフィカルユーザーインターフェース	"	—	1998年10月	—

Molpro	"	英University College Cardiff Consultants Limited	CI法などの配置間相互作用の取り扱いを得意とした量子化学計算ソフトウェア	SGI、HP、SUN、IBM、Intel-Linux	—	2004年11月	—
Virtual NanoLab	"	(デンマーク) アトミスティックス	非平衡グリーン関数法を基に、量子細線、分子デバイスなどナノスケール材料のI-V特性、電子透過特性などのシミュレーションを行うソフトウェア	Linux、Windows	—	2005年4月	—
QuantumStation	"	米パラレルクアンタムソリューションズ	並列化効率がよく構造最適化に長けた独自量子化学ソフトウェアを搭載した高速計算サーバ	Intel-Linux	—	2004年9月	—
Direct Force Field	"	米イーオンテクノロジー	力場パラメータ開発プログラム	Windows	—	2001年12月	—
CBIS	"	米ケムインベーション	化合物情報、アッセイ情報、レポート等、化学・薬学・生物学研究におけるデータや情報を一括管理する統合情報管理システム	"	—	2002年8月	—
KDE	"	英インフォセン	ワークフロー管理とリソースの統合を特徴とするデータマイニングシステム	"	—	2002年8月	—
CHEMKIN	"	米リアクションデザイン	燃焼や触媒反応、CVDなど、さまざまな化学反応を伴うプロセスにおける詳細なキネティクスを解析するソフトウェア	Windows	—	2005年4月	—
DAYLIGHT Thor/Merlin	"	米デイライト	SMILES言語をベースとする効率的な化合物データ管理システム	Unix、Linux、Windows	—	2005年4月	—
DAYLIGHT DayCart	"	"	Oracleデータベースに化合物情報を取り扱う機能を追加するためのデータカートリッジ	Unix、Linux、Windows	—	2005年4月	—
DAYLIGHT Database	"	"	Daylight社のデータベースシステムで使用するこのできる化合物データベースコンテンツ	Unix、Linux、Windows	—	2005年4月	—
DAYLIGHT Applications	"	"	clogpなどの記述子やフィンガープリントを算出するプログラム群	Unix、Linux、Windows	—	2005年4月	—
DAYLIGHT Toolkit	"	"	SMILES、SMARTSなどの機能をユーザ独自のプログラムに組み込むためのライブラリ	Unix、Linux、Windows	—	2005年4月	—
Sentient Desktop	"	米IO-Informatics	分散する各種研究データの統合、比較、解析を行うことのできる統合型電子ノートブック	Windows	—	2005年4月	—
Colors	"	東北大学宮本研究室	高速化量子分子動力学計算プログラム	SGI、Intel-Linux	—	2002年1月	—
MOPAC2002、WinMOPAC	"	富士通	高分子向けにDistanceCutoff法を用いた局在化分子軌道計算プログラム、Windows版MOPAC	Unix、Linux、Windows	—	1999年4月	—
Carbon Analyzer	"	藤本宏之 & 恵子	人造黒鉛の格子定数および結晶子の大きさ測定プログラム	Windows	—	2002年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SYBYL/Base	住商エレクトロニクス	米トライボス	SYBYL基本モジュールでグラフィックス、分子動力学、エネルギー計算、QCPEとのインターフェース、モレキュラースプレッドシートが含まれる	IRIX、Linux	お問い合わせください	1988年5月	—
QSAR/CoMFA	"	"	構造活性相関、3次元構造活性相関CoMFA、クラスター解析	"	"	"	—
Advanced CoMFA	"	"	CoMFAのパワーアップモジュール	"	"	"	—
HQSAR	"	"	ホログラムフィンガープリントを用いて、大量の化合物に対して構造活性相関を行う	"	"	1997年8月	—
Leapfrog	"	"	de novo design リガンドの候補構造自動発生	"	"	"	—
DISCOtech	"	"	ファーマコフォア探索プログラム	"	"	2001年12月	—

Advanced Computation	"	"	立体配座解析、ディスタンスマッピング、レセプターマッピング	"	"	1988年5月	-
Recepter	"	"	高速アクティブアナログアプローチ	"	"	"	-
Biopolymer	"	"	生体高分子構築、アミノ酸辞書。ループサーチGenetic Algorithmを用いてリガンド及び相手のたん白質の側鎖をすべてまたは部分的に動かしてFlexible Ligand Dockingを高速に行う	"	"	"	-
Composer	"	"	ホモロジーモデリング	"	"	"	-
MatchMaker	"	"	InverseFoldingの手法によりたん白質の構造を構築する	"	"	"	-
Protable	"	"	各残基毎に蛋白質の立体構造の妥当性を評価	"	"	"	-
CONCORD	"	"	2次元構造を高速に3次元化する	"	"	"	-
MM3/MM4	"	"	アリンジャー教授の分子力場計算プログラム	"	"	"	-
MOLCAD	"	"	3次元分子表面特性可視化プログラム	"	"	"	-
Legion/CombiLibMaker	"	"	ヴァーチャルなコンビナトリアルライブラリー作成プログラム	"	"	"	-
Selector	"	"	ダイバーシティ評価・フィルタリング用プログラム(記述子の相対距離評価法)	"	"	"	-
Diverse Solutions	"	"	BCUT記述子によるダイバーシティ評価、フォーカスト・ライブラリーデザインツール	"	"	"	-
UNITY	"	"	分子データベース検索システム。2次元、3次元での検索以外に、分子の柔軟性を考慮した3次元フレキシブルサーチが行える	"	"	"	-
GeneFold	"	"	立体構造未知のたん白質のFoldingPatternを高速計算。HomologyModelingの手法と組み合わせる3次元構造を決定	"	"	2001年12月	-
GASP	"	"	GAを用いた自動重ね合わせツール	"	"		
ClogP/CMR	"	"	ClogP計算プログラム	"	"		
CScore	"	"	たん白質/リガンド複合体の結合エネルギーを4つのスコアで計算(G-Score、D-Score、PMF-Score、Chem_Score)し、コンセンサスコアで評価	"	"	1999年12月	-
Site ID	"	"	たん白質構造の活性ポケットを探索	"	"	"	-
Distill	"	"	分子の最大共通部分構造を用いたクラスタ化、構造上の特徴を可視化しながら解析するツール	"	"	"	-
FlexS	"	"	分子重ね合わせプログラム。対象分子を一度フラグメントに分解して結合情報を元に再構築。多量の分子を高速に重ねあわせが可能	"	"	"	-
Confort	"	"	ダイバーシティの高い安定コンフォメーションを高速に発生	"	"	2000年12月	-
VolSurf	"	"	ADME関連予測QSARツール	"	"	2001年12月	-
CombiFlexX	"	"	コンビナトリアルライブラリー専用ドッキングツールFlexXの拡張プログラム	"	"	2001年12月	-
OptDesign	"	"	Dissimilarity による試薬選択、Product, ReagentのMW, ClogP, etcによるFiltering、価格などルーレット法によるBiased Selection,各種機能により最適な反応Matrixの提案を行う	"	"	2002年12月	-

RACHEL	"	"	structure-based lead optimization Toolで、タンパク質の活性サイトの情報から、SBDDでコンビナトリアル構造を自動で最適化させるモジュール	"	"	2003年4月	-
hint!	"	"	logPや各種パラメータ(Hint Score)計算や分子間相互作用フィールドの計算と表示を行います。3D-QSARの記述子としてもお使いいただける	"	"	"	-
Molconn-Z	"	"	各種分子パラメータ計算モジュールです。数百種の記述子を計算可能各原子の電子的な状態を反映するE-State値の計算が可能です。また、計算される記述子を用いてOptiSimTM法による『Diversityを考慮した分子選択』にも利用することができる	"	"	"	-
ZAP	"	"	分子の electrostatic potential を計算するソフトウェアパッケージです。ZAPでは electrostatic potentialを用いた各種パラメータや、3D QSAR fieldsを計算することが可能	"	"	"	-
FUGUE	"	"	HOMSTRADデータベースを使用したタンパク質の構築のための新しいホモログ認識・アライメントtool	"	"	2003年7月	-
Tuplets	"	"	活性化化合物における複数のファーマコフォア間の距離をFingerprint化し、活性のHypothesisを作成します。このHypothesisを基に、データベース検索から活性候補構造を選択し、コンビナトリアルライブラリーの適否を判断します	"	"	2004年6月	-
Almond	"	"	GRINDと呼ばれる記述子を用いた新しいQSARツール。MIFと呼ばれるリガンド周囲の距離・相互作用情報と活性の相関をPLS,PCA等で解析検討する	"	"	2004年6月	-
Protoplex	"	"	Protonation状態の異なる構造、あるいはTautomerを自動生成する。Dockingの前処理に必須のツール。	"	"	2005年5月	-
StereoPlex	"	"	分子データベース構築などの際に、各分子の立体異性体(Stereoisomer)を自動生成する	"	"	2005年5月	-
EAIinventor	"	"	任意の評価関数・評価ソフトウェアを組み合わせ、任意の基準で生成した分子の良否判定を行うことが可能なりガンドの候補構造自動発生 (de nove design) ソフトウェア	"	"	2005年5月	-
GSSI	"	"	Solutie-Solvent Interactionを考慮しながら Solution-Phaseでの分子の状態を解析する。分配係数や膜透過性の予測に有効なツール	"	"	2005年5月	-
HSCF	"	"	QSPR特にADMETデータ解析に有効な半経験的分子軌道法計算エンジン。他のソフトウェアと連携して計算を行うよう設計されている	"	"	2005年5月	-
Savol	"	"	分子表面積や体積に基づいたQSAR/QSPR計算のためのソフトウェア。原子の属性(Polar/Non-polar)を認識し、分子表面の様子を解析	"	"	2005年5月	-
StructureFilter	"	"	Lipinski-RuleやSearchを利用した『分子のフィルタリング・ソフトウェア』。重複除去や塩の除去機能も持つ	"	"	2005年5月	-
Orchestrar	"	"	蛋白質分子の構築ツールキット。蛋白質分子のシーケンスAlignment、ギャップ・ループ部位の構築などの機能を含む、最新のタンパク質構造モデリングツール	"	"	2005年末発売予定	-
LibraryMaker	"	"	バーチャル・コンビナトリアルライブラリー作成ツール。試薬および生成物のフィルタリング機能などを装備したデスクトップツール	WindowsPC	お問い合わせください	2005年5月	-
LibraryDesigner	"	"	コンビナトリアルライブラリーを作成する際の試薬選択、活性化化合物からフォーカスト・ライブラリーを作成するデスクトップツール	"	"	2005年5月	-
Desk Top プロダクト							

SARNavigator/Base	"	米トライボス	HTSデータ解析のためのケミカルスプレッドシート	WindowsPC	お問い合わせください	2003年7月	-
SARNavigator/HTS	"	"	HTSデータ解析のためのケミカルスプレッドシート、クラスタリング用モジュール	"	"	"	-
SARNavigator/HQSAR	"	"	HTSデータ解析のためのケミカルスプレッドシート、HQSAR解析モジュール	"	"	"	-
LITHIUM Base	"	"	Windows上で動作する分子設計研究者、メデイナルケミスト間のコミュニケーションツール。直感的な分子エディターで新しいアイデアの創出、各種分子フォーマットの読み込み、各種表示に加えCoMFAの解析結果の共有が可能	"	"	2004年6月	-
LITHIUM Developer	"	"	LITHIUMのための、VBAのInteractive Development Environment(IDE)	"	"	2004年6月	-
LeadScope	"	米リードスコープ	化合物ライブラリ解析・視覚化・マイニングツール	"	170万円～	2000年10月	-
Nugenesis SDMS	"	米ウォーターズ	研究データ統合管理システム。FDA 21CFR Part11に準拠	"	お問い合わせください	-	-
Watson LIMS	"	米サーモエレクトロン	PK/TK試験に特化した薬物動態向けLIMS。FDA 21CFR Part11に準拠	Windows	"	-	-
Galileo LIMS	"	"	In Vitro試験に特化した創薬研究向けLIMS。FDA 21CFR Part11に準拠	Windows	"	-	-
MolStudio	"	NEC	Gaussianプリ・ポストシステム(PCデスクトップ)リモート計算サーバーに接続してデスクトップクライアントからGaussian計算の入力データ作成、出力可視化、解析を行う	PC	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
EsTerra Bio Informatics Ware	サイエンス・テクノロジー・システムズ	メディアフュージョン	テラバイト級のネイティブXMLストレージを核に、膨大なBioDataに対応する柔軟で拡張性の高いXMLインターネットシステムを構築するための、サーバ及びクライアントアプリケーション基盤ソフトウェア	Linux/Solaris	別途お問い合わせください	2003年11月	-
Reatop(リートップ)	"	サイエンス・テクノロジー・システムズ	研究開発領域における試薬の統合的な管理を実施したいというユーザー要望にお答えして開発した試薬管理システム。受入・貸出・返却・廃棄という運用フローに合わせて履歴管理、帳票出力機能を持ち、バーコード操作による業務の簡略化を実現している。また、電子天秤からの秤量値自動取り込み、既存機器の利用により低コスト導入を実現。カスタマイズや運用環境整備により21CFR Part11にも対応が可能	Windows2000/XP	別途お問い合わせください	2003年8月	あり
TDAMS(ティーダムス)	"	"	検体試験の工程を簡単な操作で設定し、進捗を管理することができるシステム。検体管理にはバーコードを使用し、試験工程をグラフィカルにデザインすることができる。また、試験別・試験内検体別・工程別検体毎の管理を可能にするとともに、一括表示・個別表示が可能。アドオン開発により解析データとの連携を実現し、インフォメーション・マネジメント・システムとしての運用も可能になる	Windows2000/XP	別途お問い合わせください	2004年4月	あり
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Derwent Discovery	トムソンサイエンティフィック	米トムソンサイエンティフィック	Derwent Drug File とDerwent World Drug Alerts Plusの二つのデータベースからなる、ウェブで検索可能な製薬および薬剤関連特許・文献情報データベース製品	Internet Explorer 5.0以上 または Netscape 6.0以上	"	2003年3月	-
Derwent Innovations Index	"	"	特許情報データベースのDerwent World Patents Index と引用特許情報データベースのDerwent Patents Citation Indexを、引用リンクの技術で統合したWebベースの特許情報データベース製品	"	"	2003年6月	-
Derwent Analytics powered by VantagePoint	"	"	特許情報データベース Derwent World Patents Index、Delphion、Derwent Innovations Index、学術文献情報データベース Web of Science のデータを取り込み、分析可能なツール	Windows95、98、2000、ME、WindowsNT4.0 (128MB RAM以上)	"	2003年6月	-

Web of Science	"	"	高品質な約8,700の学術雑誌からの書誌情報を提供する。2005年にCentury of Science が完成し、1900年～1944年の厳選された85万件の論文情報が追加収録。さらに、Index ChemicusとCurrent Chemical Reactionsを収録し、化学構造式を利用した引用ナビゲーション検索(文献の被引用回数、引用文献をたどり研究の発展や経過を調査)が可能。検索結果のメールによるアラート、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンクの機能もあります。◆Index Chemicus(新規化合物検索)-化学構造式、立体化学、生物活性情報の検索。1993年から現在までの約230万件の新規有機化合物へのアクセスを提供。◆Current Chemical Reactions(新規反応検索)-反応構造および条件の検索。1986年以降に発見された800,000以上の化学反応が収録され、毎月3,000件の反応が新たに収録されます。さらに、39特許発行機関からも最新化学反応を収録しています。オプションでINPI(Institut National de la Propriete Industrielle)のアーカイブ(1840-1985年)へのアクセスを提供	WEB環境があれば利用可。検索ソフトは無償提供(インターネット)	"	1997年	-
Thomson Pharma	"	"	製薬・バイオ業界のための統合情報サービス。医薬品・特許・学術文献&ニュース・企業・ドラッグターゲット・化学・核酸&アミノ酸配列などのコンテンツを統合し、業界のあらゆる職種の方が必要とする情報をWeb上でアクセス可能に	WEB環境があれば利用可	"	2005年1月	-
Delphion	"	"	データベース検索機能と全文特許明細書取り寄せ機能、さらには特許情報解析ツールを併せもったウェブサービスです。さらにオプションとして、世界41特許発行機関からの特許を英語で収録した Derwent World Patents Indexの検索も可能	"	"	1977年	-
IDdb	"	"	医薬品開発のあらゆるステージをサポートするデータベースです。研究ターゲットの決定から申請および上市まで、医薬品開発におけるあらゆるステージに必要な情報を収録しております。データは、毎日アップデードされており、医薬品情報のモニタリングが可能	"	"	2004年	-
SDdb	"	"	The Strategic Drug database. SDdbのソリューションは製薬企業の戦略的計画、販売、市場調査、事業開発、競合情報におけるエグゼクティブの意志決定をサポートします。SDdbは現在の市場をリードする主要薬剤と将来マーケットに登場する新規医薬品のインパクトをタイムリーに分析します。このデータベースは医薬品の成功・不成功を根底から分析、統合して評価する専門家の知識を集めた市場分析ツール	"	"	2004年	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Dictionary of Organic Compounds on CD-ROM	ユサコ	CRCプレス	有機化合物約26万件を収録する辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	Windows	97万円～(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-
Dictionary of Inorganic and Organometallic Compounds on CD-ROM	"	"	無機、有機金属化合物を合わせて10万1千件を収録する辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	69万円～(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-
Dictionary of Natural Products on CD-ROM	"	"	天然物質約15万件を収録する天然物辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	139万円～(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-
Dictionary of Drugs on CD-ROM	"	"	薬物約4万件を収録する辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	35万円～	-	-
The Combined Chemical Dictionary on CD-ROM	"	"	Dictionary of Organic Compounds, Dictionary of Inorganic and Organometallic Compounds, Dictionary of Natural Products, Dictionary of Drugs, Dictionary of Carbohydrates の5辞書の全エントリ、50万件以上の化合物を収録。テキスト・構造の両方から検索可能。6か月毎に更新	"	167万円～(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-

CHEMnetBASE (Web Version)	"	"	The Combined Chemical Dictionary, The Handbook of Chemistry & Physics, Polymers-A Property Database をインターネット経由で提供する Web 版の新製品。テキスト・構造検索機能あり。検索結果のテーブル表示、化学構造式へのリンク機能等あり	Windows、Mac	詳細問い合わせ	-	-
Dictionary of Commonly Cited Compounds on CD-ROM	"	"	化学文献に頻出する約2.5万件の化学物質に関するデータベース	"	14万円～	-	-
Index Chemicus Database for ISIS	"	トムソンサイエンティフィック	新規化合物の速報／索引誌で世界の主要な約110誌の有機化学専門雑誌をカバー。1993年より収録され、部分構造検索ができる	Open VMS or UNIX	詳細問い合わせ	-	-
Current Chemical Reactions (CCR)	"	"	世界の有機化学専門誌に発表される新規合成反応の抄録誌で、約350誌の有機化学および製薬学の学術誌より採録	Open VMS or UNIX	詳細問い合わせ	-	-
ChemPrep on CD	"	"	Current Chemical Reaction の Subset 版であり、1985 年以降の反応情報を収録しており、更新データ数は年間35,000件	Windows	詳細問い合わせ	-	-
Current Contents on Diskette / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	重要学術雑誌の目次速報誌。著者抄録が付加されているので、いち早く学術誌に掲載される論文の内容を正確に把握可。著者へ直接reprint請求(著社側の好意で送付される)可。毎週発行	Windows、Mac	抄録付:30万円～、抄録なし:19万円～	-	-
Current Contents Connect / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	上記製品の Web 版。毎日更新	Windows、Mac	詳細問い合わせ	-	-
Web of Science	"	"	1945年からの8,500以上の重要学術雑誌から書誌情報を収録している文献のデータベースです。引用文献情報も搭載しているので、文献の引用回数を調べたり、引用文献をたどって研究の発展や経過を調べたりすることができます。検索結果のメールによるアラート、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンクの機能もあります。最新版の Web of Science v6で、Current Chemical Reactions(反応データベース)とIndex Chemicus(化合物データベース)が含まれ、構造式の検索と表示が可能になりました(要契約)	Windows、Mac	詳細問い合わせ	-	-
Synthline on the Web	"	ブロウサイエンス	臨床段階中の反応合成経路データベース。約9,700件以上の合成経路情報とこれらの約49,000件以上の合成中間体データ及び6,000件以上の医薬品データを提供(Jun,2003)。隔月更新。CD-ROM版及び Web 版あり	Windows98/2000/XP	88万円～	-	-
Ensemble on the Web	"	"	前臨床段階から上市後までの過去の医薬品開発に関わった化合物に付いての開発段階情報、特許、関連文献を収録。毎月更新。DVD-ROM版及び Web 版あり	"	196万円～	-	-
DailyDrugNews .com	"	"	医薬品開発のニュース速報サービス、企業発表、特許情報、学会発表など幅広い情報源からニュースを採択。Internet版にてリリース	Windows、Mac	55万円～	-	-
R&D Backgrounders	"	"	病気から、関連医薬品、学会情報、関連文献などをレポート。同じ作用機序を持つ医薬品についての開発状況などをレポート。Internet版にてリリース。各レポート毎に契約可能	"	詳細問い合わせ	-	-
Integrity	"	"	医薬品開発についてのポータルサイト、過去から最新まで16万以上の化合物を収録。化合物を中心に、特許、文献、関連データなどの関連情報を簡単に利用可能。データは毎日更新	"	詳細問い合わせ	-	-
Pharmaceutical Substances	"	Thieme Chemistry	1957年以降から現在までに市場に出た医薬品の有効薬剤成分(API: Active Pharmaceutical Ingredients)のみを網羅した化学物質データベース。年2回更新	Windows NT 4.0/95/98/2000/XP	詳細問い合わせ	-	-

EndNote 9	"	Thomson ISI ResearchSoft	インターネット上での文献検索によって得られたデータを取り込んでデータベースを作成し、さらに論文原稿の文中引用文献と参考文献リストを自動的に作成することが可能	Windows 2000/XP (Mac 版は2004年秋 頃リリース予 定)	52,290円(新 規)、20,790 (アップグレイ ド)、複数購入 割引あり	-	-
RefViz	"	"	電子的な文献情報を分析し、文献中の語句の出現傾向や相関関係を視覚的に解析するためのソフトウェアです。大量の文献情報から文献の検索と参照を効率よく行い、重要な文献の見落としを防ぎ、さらには新たな知識の獲得を支援	Windows NT/2000/ME/X P、Mac OS X	49,800円、複数 購入割引あり	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Spartan '04 (Full Edition)	ウェイブファンク ション日本支店	米ウェイブファンク ション	シンプルなお操作画面が特長の分子モデリングパッケージソフトウェア。MM、Ab Initio、Semi-Empirical、DFTなどの各種エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。事前に構造最適化された低分子データベース(SMD)を標準装備	Windows版: Windows2000以 上 P3以上、 Macintosh版: MacOSX10.3.5 以上 G4以上	大学19万8000 円、定価55万 円。詳細要問 い合わせ(授業 用価格は応相 談)	2003年10 月	-
Spartan '04 (Essential版)	"	"	"Spartan'04 Full Edition"からDFTや励起状態の計算ソルバーを省略した機能限定版。教育システムに最適。事前に構造最適化された低分子データベース(SMD)を標準装備	Windows版: Windows2000以 上 P3以上、 Macintosh版: MacOSX10.3以 上 G4以上	大学12万8000 円、定価32万 円。詳細要問 い合わせ(授業 用価格は応相 談)	2003年10 月	-
Spartan Student Edition	"	"	Spartan'04 の機能を限定した学生実習専用バージョン	Windows版: Windows2000/X Pを推奨、 Macintosh版: MacOSX10.3.5 以上 G3 400MHz以上	大学、短大:4万 円、高専、高 校:2万円、学 生個人用1万2000 円:ボリューム ディスカウント、 共同購入価格 あり	2003年10 月サンプル 販売開始 2004 年6月出荷 開始	-
Spartan Model	"	"	教育用分子模型 Spartanファイルの閲覧と分子モデルの構築	Windows版: Windows2000/X Pを推奨、 Macintosh版: MacOSX10.3.5 以上 G3 400MHz以上	学生価格5000 円(予価)	2005年6月 英語版リ リース開始	-
SpartanView for Windows	"	"	Spartanのデータブラウザ。教科書やデータ集とのバンドルが可能	Windows98/NT/ Me/2000/XP	応相談(単品販 売は不可)	1998年	-
Spartan '02 for Unix/Linux	"	"	シンプルなお操作画面が特長の分子モデリングパッケージソフトウェア。MM、Ab Initio、Semi-Empirical、DFTなどの各種エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。B3LYP、LMP2、MP3、MP4やG2、G3、CIS、CIS(D)など導入	SGI IRIX 6.5、 Compaq Tru 64 Unix V.5、Red Hat 6.2以上	Unix大学向け40 万円、Linux大 学向け28万円。 詳細要問 い合わせ	2002年1月 (Unix)、 2001年8月 (Linux)	-
ODYSSEY Student Edition for Windows	"	"	分子動力学法を使用した教育用パッケージソフト。インターフェイスをInternet Explorerに表示する	Windows2000/X P	大学4万円、学 生個人用1万 2000円	2004年7月 サンプル 販売開始	-
ODYSSEY Instructor's Edition for Windows	"	"	分子動力学法を使用した教育用パッケージソフト。インターフェイスをInternet Explorerに表示する	Windows2000/X P	大学4万8000円	2004年7月 サンプル 販売開始	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
XanaGenome	ザナジェン	ザナジェン	微生物ゲノムの統合データベース。公的なデータベースではアノテーションの基準がそれぞれ異なるが、XanaGenomeでは統一した基準で再アノテーションを実施。使いやすいインタフェースに加え、ゲノム比較、遺伝子翻訳効率予測、自己組織化地図による分類などの独自の機能を備えている。また、プライベートなゲノムデータを追加して閲覧・比較解析を行うことも可能	インターネット経 由でのアクセ ス、あるいは専 用サーバ機との 組み合わせ	年間100万円~ (アカデミック ディスカウントあ り)	2002年2月	国内外の 約20の機 関で使用
XanaMine	"	"	非常に強力なデータマイニングアルゴリズムであるSOM(自己組織化地図法)を改良し、ゲノム解析に応用したシステム。ザナジェンで独自に作成した、あるいは解析を受託して作成したデータ(マップ)とそのビューフを合わせて販売。更に解析プログラム自身も単体で販売	データのビュー フはJDK1.1以 上のバージョン のJAVA実行環 境で動作	解析プログラム 30万円、ビュー フ20万円、マッ プ30万円~	2002年1月	国内数箇 所の研究 機関にて 評価利用 中

GenomeGambler	"	海洋科学技術センター、三井情報開発、ザナジェン	微生物の全ゲノム配列決定プロジェクトを支援するシステム。ベースコール、アセンブル、ORF抽出、ホモロジーサーチ、アノテーション、DDBJ登録といった一連のデータ処理を自動化	SUN Solaris2.6(Ultra SPARCII CPU)以上、あるいはTru64-UNIX 4.0G(Alpha 21264 CPU)以上のワークステーション。PC クラスタによる高速化にも対応	150万円	1999年12月	国内外の約20の機関で使用
Phred/Phrap/Consed	"	米コドンコード	米国University of Washingtonで開発された、ショットガンシーケンシングに必要なベースコール、アセンブラ、コンティグエディタのソフトウェア。世界中の数多くの研究機関で利用されており、非常に高い精度で配列決定を行うことができる	SUN、Compaq、Linuxワークステーション、Windows-PC、Macintosh(詳細はお問合せください)	112万円 (Phred、Cross_match、RepeatMasker、Phrapのサイトライセンスの場合)	—	全世界で1000サイト以上