

＜最新CCS一覧表＞

(国内で市販されている主なパッケージソフトならびにサービス、2008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製品＞ | 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 ForcitePlus | 〃 | 〃 | Forciteに分子動力学の機能を追加。分子、材料系の動力学解析ツールを備える | 〃 | 〃 | — | — |
| 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 COMPASS | 〃 | 〃 | 擬縮系の再現にも優れた高精度力場。無機、無機酸化物、金属などへの適用可 | 〃 | 〃 | — | — |
| Materials Studio Equilibria | 〃 | 〃 | 鎖状炭化水素分子の相平衡状態を計算 | 〃 | 〃 | — | — |
| Materials Studio GULP | 〃 | 〃 | 無機、有機格子シミュレーションソフト。30種近いポテンシャルを内蔵 | | | | |
| Materials Studio Sorption | 〃 | 〃 | モンテカルロ法吸着シミュレーションソフト。吸着等温線などを計算 | 〃 | 〃 | — | — |
| 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 | 〃 | 〃 | — | — |
| Mesoprop | 〃 | 〃 | メソシミュレーションの結果を使用し機械物性などのマクロ物性を有限要素法で計算 | 〃 | 〃 | — | — |
| 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 ONETEP | " | " | 数千原子レベルのO(N)-DFT計算を高効率パラレル計算で実行。触媒、生体分子の計算などに有効 | " | " | — | — |
| Materials Studio QMERA | " | " | DMol3/GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的計算が可能 | " | " | — | — |
| Materials Studio Reflex | " | " | 結晶の粉末回折像を高速にシミュレート。実験データとのリアルタイム比較が可能 | " | " | — | — |
| 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 ReflexQPA | " | " | 結晶混合相の定量的な相分析ソフト。最も総合的な最新アルゴリズムを採用しており、有機、無機系に適用可能 | " | " | — | — |
| X-Cell | " | " | 特許保有の、強力で使い易い、中～高品質粉末回折パターンの指数付けソフト。電子線、中性子線回折にも適用可 | " | " | — | — |
| 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 | " | " | — | — |
| Materials Studio QSAR | " | " | 化学品、材料の構造活性(物性)相関モデルの作成、解析。多数の記述子を完備 | " | " | — | — |
| Materials Studio FastDescriptor | " | " | QSARにおける種々の2D分子記述子を計算。トポロジカル記述子、熱力学的記述子、構造記述子など | " | " | — | — |
| Materials Studio GeneticAlgorithm | " | " | 遺伝子アルゴリズムに基づくQSARモデル構築時の関数近似手法 | " | " | — | — |
| <ライフサイエンス製品> | | | | | | | |
| Discovery Studio Visualizer | " | " | 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ツール | Windows | 無料 | — | — |
| Discovery Studio Sequence Analysis | " | " | BLASTあるいはPSIBLASTを用い、興味あるアミノ酸配列についてローカルデータベース又はNCBIのWEBサーバにアクセスし、相同性のある配列を検索。また系統樹の描画、Evolutionaly Trace解析を行い、タンパク質の機能に対して重要な残基を推定 | Windows, Linux | お問い合わせ下さい | — | — |
| Discovery Studio Protein Families | " | " | 配列と構造情報を用い、複数のアミノ酸配列からマルチプルアラインメントを行う。またアラインメント結果から進化系統解析を行う | " | " | — | — |

| | | | | | | | |
|---------------------------------|---|---|--|---|---|---|---|
| Discovery Studio MODELER | " | " | 自動ホモロジーモデリング、ループのモデリング、アミノ酸配列の構造に対するアラインメント、タンパク質のミュータントの構築 | " | " | - | - |
| Discovery Studio Protein Refine | " | " | CHARMmのテクノロジーを用い、タンパク質の側鎖、ループ領域の最適構造を発生させる | " | " | - | - |
| Discovery Studio Protein Health | " | " | Profiles-3Dのアルゴリズムを用いて、タンパク質構造の評価を行い、構造が適正かどうかを評価する指標を与える | " | " | - | - |
| Discovery Studio Biopolymer | " | " | タンパク質、ペプチド、DNA、RNA等の生体高分子のモデルを簡単に構築し、コンピュータ上で取扱うことができるようにする。また、静電ポテンシャルおよび溶媒和エネルギーを計算することも可能 | " | " | - | - |
| Discovery Studio CHARMm | " | " | 非常によく検証された、タンパク質および複合体のシミュレーションエンジン | " | " | - | - |
| CFF | | | 非常に広範囲(タンパク質、核酸、脂質、炭水化物、低分子化合物)の分子に対応可能な、非常に精度の高い力場(force field)。CHARMmで利用可能 | " | | | |
| Discovery Studio CHARMm Lite | " | " | CHARMmの幅広い機能のうち、ドッキング結果の最適化(リガンド構造をレセプターの一部の原子を含めて最適化)のみの機能に限定したバージョン | " | " | - | - |
| Discovery Studio Analysis | " | " | タンパク質およびタンパク質/リガンド複合体のシミュレーション結果であるトラジェクトリーファイルの情報を解析、可視化。RMSD計算、close contact、水素結合数の解析をドッキング結果に対して実行することも可能。また、Delphilによって、分子の静電場計算を行うことも可能 | " | " | - | - |
| Discovery Studio LigandFit | " | " | 標的タンパク質の活性部位にリガンドをドッキングさせる | " | " | - | - |
| Discovery Studio LigandScore | " | " | 検証済みのデータセットを用いて構築されたスコアリングファンクションにより、リガンド-タンパク質の相互作用を評価 | " | " | - | - |
| Discovery Studio LigandFit/CAP | " | " | DS LigandFitでのドッキングシミュレーションを行うように用意されたCAP(Chemicals Available for Purchase)データベース。CAPは市販試薬、スクリーニング化合物のデータベース | " | " | - | - |
| Discovery Studio Ludi | " | " | タンパク質の活性部位の構造的、化学的特徴を元にして、リード化合物をde novoデザインするためのツール | " | " | - | - |
| Discovery Studio AutoLudi | " | " | DS Ludiにおけるde novoドラッグデザインの過程を自動化するツール。Evolutionary、Quick、Combiの3つのモードを備え、より確からしい構造、より合成しやすい構造といった視点から解析を行うことが可能 | " | " | - | - |
| Ludi/CAP | " | " | CAPのデータから厳密な規則に基づいて生成された、DS Ludi、DS AutoLudiのためのフラグメントライブラリ | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|--|---|---|---|---|---|---|---|
| Discovery Studio Catalyst Hypothesis | " | " | 低分子化合物の、ターゲット生体高分子に対する結合親和性に関する一般化された特性について、詳細な根拠に基づく包括的なファーマコフォア仮説を作成 | " | " | — | — |
| Discovery Studio Catalyst Conformation | " | " | 潜在的な薬物活性に基づいて分子のフレキシビリティを考慮しつつ、取りうる3Dコンフォメーションを広範囲に構築するモジュール | " | " | — | — |
| Discovery Studio Catalyst Shape | " | " | 分子を3次元構造で表現し、生理活性のある無しにかかわらず、類似の3次元構造を示す分子を識別 | " | " | — | — |
| Discovery Studio Catalyst Structure Based Pharmacophore | " | " | 既知の、あるいは予測されたターゲット分子の活性部位構造から、Ludi(de novo)ドラッグデザインツールの技術を用いてファーマコフォアモデルを自動的に作成 | " | " | — | — |
| Discovery Studio Catalyst Score | " | " | それぞれの化合物に対し、適合性、活性のスコアを計算 | " | " | — | — |
| Discovery Studio Catalyst Build & Discovery Studio Catalyst Search | " | " | 化合物の構造データベースを独自に構築し、多種多様なオプションを用いて検索可能 | " | " | — | — |
| Discovery Studio ADMET Descriptors | " | " | 研究対象の化合物に対して、解析の初期の段階からあらかじめ体内における呼吸、分布、代謝、排出、および毒性といった、薬物体内動態 (ADMET) を予測することにより、合成化合物の検討、市販ライブラリの導入、スクリーニングにおいて有用な情報を得ることができる | " | " | — | — |
| Discovery Studio TOPKAT | " | " | 化合物の構造情報のみから、毒性および環境への影響を予測することが可能 | " | " | — | — |
| Discovery Studio Visualizer Pro Enterprise Version | " | " | Discovery Studioのモジュール群の統合環境として、生体高分子、化合物データを可視化、解析を行い、その結果を他の研究者と共有することができる使いやすいユーザーインターフェース。ネットワーク上の解析サーバにアクセスし、それぞれの研究領域における解析プロトコールを実行可能。さらに、Pipeline Pilotを用いて作成された独自の解析プログラム、解析プロトコールにアクセスすることも可能 | " | " | — | — |
| Discovery Studio Visualizer Pro | " | " | タンパク質および低分子化合物のデータについて、非常に高精度なグラフィックスで可視化、解析、結果の共有を行うことが可能 | " | " | — | — |
| <データ解析とレポートングプラットフォーム> | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|----------------------------|---------------|-------------|---|-------------|--------------|-------------|-------------|
| Scitegic Enterprise Server | " | " | バイオインフォマティクス、ケムインフォマティクス、モデリングシミュレーションをカバーする、大量のデータとその解析手順を視覚的なプロセスフローとして構築するプラットフォームを提供。機能単位であるコンポーネントを組合わせて、効率的にデータを統合。解析手順の構築は、データの収集、統計的解析、レポート、ダッシュボードまで、コンポーネントの組合わせで視覚的にこなせる | " | " | — | — |
| <ケムインフォマティクス製品> | | | | | | | |
| 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。コンビナトリアルケミストリー・ADMET解析にも対応 | " | " | — | — |
| Accord Draw | " | " | 化学構造式を描画するツール | " | " | — | — |
| 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 | " | " | — | — |
| 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 /BioStation V3.1 | アドバンスソフト | アドバンスソフト | 大規模分子の高精度計算を効率よく実行するための2つのソルバーを統合。・ABINIT-MP: 非経験的フラグメント分子軌道計算(FMO)法と・ProteinDF: 密度汎関数法による全電子計算。これらにより、生体高分子(タンパク質、DNA、糖)のフラグメント間相互作用、および、タンパク質の全電子計算が可能 | お問い合わせください | 100万円/年間より | 2008年7月 | — |
| Advance /PHASE V2.5 | " | " | 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 | " | 100万円/年間より | 2008年8月 | — |
| Advance /TFLAGS | " | " | 薄膜成長プロセスシミュレーション。MBEやCVD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 | " | 19万8000円 | 2004年12月 | — |

| | | | | | | | |
|--------------------------------|---|---|---|---|------------|-------------------|---|
| Advance /DayStar | " | " | Advance/DayStarは、色素増感型太陽電池における荷電体の生成、再結合、輸送などを考慮した電子移動素過程を定式化した微分方程式系を適切な物質パラメータを入力して解くことで、電池の電気化学性能を評価するソフトウェア | " | 100万円/年間より | 2006年3月 | — |
| Advance /OCTA | " | " | ソフトマテリアル統合シミュレータのAdvance/OCTAは、ミクロからマクロ領域向けに4つのエンジンで構成される。 ・Muffin: マクロ問題専門プログラム群(相分離流動やマイクロリアクタ、他シミュレータ)、 ・SUSHI: 高分子材料のメソスコピック構造予測シミュレータ、 ・PASTA: 高分子溶融体レオロジー特性予測シミュレータ、 ・COGNAC: 租視化分子動力学シミュレーションプログラム | " | お問い合わせ下さい | 2006年10月 | — |
| Advance /DESSERT | " | " | 3次元デバイス解析ソフトウェア | " | お問い合わせ下さい | 2008年10月(デリバリー予定) | — |
| Advance /FrontFlow/red V2.70RC | " | " | 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 | " | 100万円/年間より | 2008年4月 | — |
| Advance /FrontFlow/blue V2.0 | " | " | 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 | " | 100万円/年間より | 2007年2月 | — |
| Advance /FrontFlow/MP V1.0 | " | " | 非構造格子系三次元気液二相流解析ソフトである Advance/FrontFlow/MPは、気相と液相が共存する状態の流動特性や伝熱特性を解析することが可能 | " | 200万円/年間より | 2007年2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 | " | 100万円/年間より | 2007年2月 | — |
| Advance /FrontSTR V2.0 | " | " | 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 | " | 100万円/年間より | 2007年2月 | — |

| | | | | | | | |
|---------------------|-----------------------|--|---|--------------------------|------------|---------|------|
| ADAP V1.2 | '' | '' | 構造・流体・電磁場解析に対応した汎用プリポスト。直感的な操作でモデリング・メッシュ作成・境界条件の設定。結果の可視化といった解析の一連の流れを簡単な操作にて行なうことが可能 | '' | 100万円より | 2007年2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 |
| LigandScout | アフィニティサイエンス | オーストリア インテル・リガンド (Inte:Ligand) | 構造ベースの3Dファーマコフォアを作成可能なツール。優れたGUIを備え、簡単なマウス操作でモデルの作成、重ね合わせが可能 | Windows, Mac OS X, Linux | お問い合わせください | — | — |
| PharmacophoreDB | '' | '' | 化学的な特徴に基づいた高品位の3Dファーマコフォアを多数収録。各エントリのメタデータは、医学的適応、薬効分類、標的タンパク質、相互作用部位、生物活性リガンド、文献情報に関する情報をカバー | Linux | '' | — | — |
| DRAGON/dragonX | '' | 伊タレッタ (Talete) | 数多くの分子記述子を計算可能なプログラム。求めた分子記述子は、構造活性相関、構造物性相関、類似性解析、スクリーニング等に利用可能 | Windows, Linux | '' | — | — |
| MobyDigs | '' | '' | 変数選択に遺伝アルゴリズム (VSS-GA法) を採用した回帰モデル計算・解析プログラム。求めたモデルの追加検証・解析ツールが搭載されており、信頼性の高い回帰モデルを構築可能 | Windows | '' | — | — |
| Molecular Conceptor | '' | イスラエル シナジックス (Synergix) | 医薬品化学、薬物設計、分子モデリングおよびケムインフォマティクスをコンピュータを用いて学習・指導するための革新的なコースウェア。2800ページ、1500以上の3Dイラストからなるコンテンツは、70時間超の講義に相当 | Windows | '' | — | — |
| WIEN2k | '' | ウィーン工科大学 (Vienna University of Technology) | 密度汎関数法による固体の電子構造計算プログラム。(L)APW+lo法を採用しており、高精度なバンド構造計算が可能 | Unix, Linux | '' | — | — |
| 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 | Linux | 要問い合わせ | — | — |
| BioInfo Bank | '' | アドバンスドテクノロジーインスティテュート、九州工業大学 | 我が国独自の蛋白質・核酸に関するバイオ情報データベース群。国際的な利用に応えるように全文英文で開発 | インターネット利用 | '' | — | — |
| 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 |

| | | | | | | | |
|---|-----------------|------------------------|---|--|-------------------------------|----------|------|
| OmicBrowse(オミックブラウザ) | アクシオヘリックス | 独立行政法人理化学研究所、アクシオヘリックス | 全てFlashベースで表示される、超高性能ゲノムブラウザ。大学や製薬企業などの内部で所有する膨大な研究データを複数のデータサーバに分散配置させることができ、その情報を公開ゲノム情報と統合化して組織内のみで活用する事が可能 | Web環境があれば利用可 | 98万円～ | 2008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 |
| MolWorks Ver2.0 | ビヨンド・コンピューティング | ビヨンド・コンピューティング | 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、Q-Chemへの入出カインタフェースを備えている。ダウンロード先: http://www.molworks.com/ | Windows98/Me/NT/2000/XP, Linux, MacOS, MacOS X | 無償 | 2000年9月 | — |
| Pallas | — | ハンガリー・コンピュータドレッジ | 化合物の構造情報を元に、物性(pKa, logP, logD)、薬物代謝、毒性、rule of 5 (医薬品候補の指標)、TPSA (Topological Polar Surface Area)、HPLCの各種設定条件を予測 | Windows、UNIX、Web、SDK版 | 別途問い合わせ | 2005年 | — |
| EMIL | — | — | 京都大学の藤田稔夫名誉教授らが開発した、リード化合物の構造進化データベース及びデータ処理エンジンを持つ医農薬開発支援システム | Windows、Web | — | — | — |
| 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) インフォマティクスシステム | 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る購入することができる | Windows2000以上 | 19.8万円から、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。あらたにSDBS NMRデータベースが加わった | — | IR 99.5万円、NMR 98万円、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。2006年新たに19分野のデータベースが追加された | — | 詳細問い合わせ | 2000年4月 | — |
| KnowItAll インフォマティクスシステムADME/Toxファミリー | — | — | KnowItAllの持つ広範な機能にin silico ADME/Toxで使用されるプロパティ推定モデルと各種ユーティリティを組合せたアプリケーションソフト。利用するプロパティモデルを任意で選択でき、複数のモデルからコンセンサスモデルも作成できる | Windows2000以上 | — | 2006年4月 | — |
| KnowItAll インフォマティクスシステムMetabolomicsエディション | — | — | NMRスペクトルの処理からバイオマーカーの同定までのNMRデータによるメタボロミクスリサーチをカバー。主成分解析によるデータ分類、ローディングプロットとメタボライトデータベースの比較、推定バイオマーカーの表示、KEGGへのリンク | — | — | 2006年10月 | — |

| KnowItAll U | '' | '' | 大学を対象としたライセンス形態。総数130万件におよぶIR、Raman、NMR、MSスペクトルをユーザー数の制限無く利用できるプログラム | '' | '' | 2007年8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。ライセンス種類:ノードロックまたはコンカレント | Windows2000/XP/Vista | 年間ライセンス8万4000円(税込)、アカデミック価格あり | 2004年 | — |
| ChemInTool - Chemish Standard | '' | '' | Chemish Proの機能限定版。モデリング(MLR,PLS,BP)、クラスタリング(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。ライセンス種類:ノードロックおよびコンカレント | '' | 年間ライセンス5万2500円(税込)、アカデミック価格あり | 2007年 | — |
| ChemInTool - Chemish Free | '' | '' | Chemish Proの機能限定無償版。PCA、MLR機能が使用可能。HP(http://www.cheminfornavi.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。また、構造活性相関モデルを基準に新規薬物候補構造を創出する機能を持つ。ライセンス種類:ノードロックおよびコンカレント | Windows2000/XP | 年間ライセンス210万円(税込)~、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有機合成経路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 | 年間ライセンス84万円(税込)~、アカデミック価格あり | 2004年 | — |
| ChemInTool - AIPHOS/KOSP | '' | '' | 有機合成経路設計支援システムAIPHOSのサブセット版。知識ベースから合成ルートを提案する | '' | 年間ライセンス31万5000円(税込)~、アカデミック価格あり | 2006年 | — |
| ChemInTool - AIPHOS/TOSP | '' | '' | 有機合成経路設計支援システムAIPHOSのサブセット版。Transformと呼ばれるデータベースから合成ルートを提案する | '' | 年間ライセンス25万2000円(税込)~、アカデミック価格あり | 2006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。また、候補構造に対する予測NMRスペクトルを実測値と比較することでランク付けを行える | Windows2000/XP | 年間ライセンス63万円(税込)～、アカデミック価格あり | 2004年 | — |
| TS Search | — | 山口大学・堀研究室 | 化学反応の遷移状態探索に特化した、MOPAC, Gaussian, GAMESS用の計算インターフェイス。Minimum energy path法、Saddle法、等高線図法、置換基法等による遷移状態探索が可能 | Windows2000/XP/Vista, UNIX(Linux, Solaris), J2SDK5.0以上必要 | 無償 | — | — |
| TS Search Professional | ケムインフォナビ | 〃 | TS Searchの高機能版。複数の反応を同時に解析することが可能。遠隔の計算機を透過的に使用できる機能あり | 〃 | お問い合わせ下さい | — | — |
| Gauss Telecom | — | 〃 | 遠隔の計算機上でGaussianジョブを実行する | 〃 | 無償 | — | — |
| Gauss Grid | ケムインフォナビ | 〃 | MOPAC, Gaussian, GAMESS用のGrid計算エンジン。多数の並列計算機が混在する環境で、ジョブのスケジュール管理、並列計算機の管理、計算結果の自動バックアップなどを行なう | クライアント: Windows2000/XP/Vista, UNIX(Linux, Solaris), J2SDK5.3以上必要 サーバ: Linux(J2SDK5.3以上必要) | お問い合わせ下さい | — | — |
| CORINA | 〃 | 独モレキュラーネットワークス | 3D分子構造生成ソフトウェア | UNIX(x86 Linux, Sun Solaris, SGI IRIX)、MS Windows | 〃 | — | — |
| ADRIANA.Code | 〃 | 〃 | 分子構造記述子計算ソフトウェア | Windows2000/XP、x86 Linux | 〃 | — | — |
| SONIA | 〃 | 〃 | 自己組織化ニューラルネットワークソフトウェア(Kohonen, Counter-propagation neural network) | UNIX(Linux, Sun Solaris, SGI IRIX)、MS Windows | 〃 | — | — |
| ROTATE | 〃 | 〃 | 利用者指定によるコンフォメーション・セット発生ソフトウェア | UNIX(x86 Linux, Sun Solaris, SGI IRIX, DEC AlphaStation) | 〃 | — | — |

| 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 |
|----------------------------------|---------|------------|--|------------------------|----------------------|--|------|
| CONFLEX ver.6.2 | コンプレックス | コンプレックス | フレキシブルな分子の配座空間を、側鎖の結合回転・環のFlap・Flipにより探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけだす。それにより、最安定構造も特定することが可能になる。単純な構造最適化プログラムでは、初期構造に依存した局所構造しか求めることができない。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。CONFLEXはこれらの問題を解決するための配座探索プログラム。最新版では、溶媒効果も配座探索に適用可能になり、結晶構造の最適化も可能になった | Windows、Linux、Mac | 企業価格:200万円、大学価格:20万円 | 2008年2月 | — |
| BARISTA | 〃 | 〃 | 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。これまでジョブを1つずつ投入する必要があったが、バッチ処理機能により複数のジョブを投入する事が可能になった。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をコンピューターグラフィックスで表示することができ、計算結果を容易に解析することが可能になる | Windows | 企業価格:50万円、大学価格:5万円 | 2008年2月 | — |
| Parallel CONFLEX ver.6.2 | 〃 | 〃 | CONFLEXのアルゴリズムにより発生する複数の出発構造の最適化を、複数のコンピューターに分散させ並列で配座探索を行う。扱う系のサイズが非常に大きい場合はPC1台で配座探索計算を行うことはできないため、多配座分子の立体構造を素早く解析するために有効 | Linux | サイトライセンスのみ、問い合わせ | 2008年2月 | — |
| CONFLEX.NET | 〃 | 〃 | イントラネット環境下におけるCONFLEXの共有利用が可能。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ーに蓄積されるため、配座データベースの再利用が容易にできる | Linux | 問い合わせ | 2008年2月 | — |
| AMBER 10 | 〃 | 米カリフォルニア大学 | カリフォルニア大学のKollman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、モデリングおよび分子力学と分子動力学計算のパッケージ。様々な溶媒モデルやQM/MM機能も持つ。基準振動解析、トラジェクトリー解析、エネルギー解析などを行うモジュールも含まれる | UNIX、Linux、Mac、Windows | 問い合わせ | 2008年4月 | — |
| Gaussian03 Rev.E GaussView4.0 | 〃 | 米ガウシアン | J.A.Popleらによって開発された、実験データから導き出される経験的パラメーターを一切用いない非経験的分子軌道法プログラム。ONIOM法により、巨大分子についても適用可能にした。励起状態を扱う手法に、新しくSAC-CI法が追加された。GaussView4により、2変数以上のScan結果を3次元表示できるようになった。UV/Vis.スペクトルの表示が可能に。面のスライス表示も可能となった | UNIX、Windows、Mac | 問い合わせ | Gaussian03 Rev.E: 2007年10月 GaussView 4.0: 2007年7月 | — |

| | | | | | | | |
|--|--|------------|---|-------------|-------|----------|------|
| 受託計算サービス | 〃 | コンプレックス | 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(グリッド環境を含む)を応用したCONFLEX法を使用して配座探索を行う。取り得る可能な配座異性体を徹底的に調べて、最安定配座を特定。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物性値の予測を実施する。また、AMBERによる分子動力学計算も行う | — | 5万円～ | 2008年1月 | — |
| 各種サポートサービス、インストラクション、トレーニング (CONFLEX, Gaussian, AMBER, GAMESS, 他) | 〃 | 〃 | 計算化学のプログラムを使いこなすには、高度な専門的知識が必要とされ、限られた研究時間で多くの結果を出すことは難しいのが現状。このような、計算化学を利用したいものの計算できる環境や人員が不足している企業や大学の研究者のために、各種サポートサービスを提供し、研究開発の時間短縮や経費節減に協力 | — | 問い合わせ | 2008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 |
| ChemBioDraw Ultra | 大学生協、ヒューリンクス、富士通、ケンブリッジソフトジャパン(ご注文・受付センター) | 米ケンブリッジソフト | 化学および生物学分野における事実上の標準描画ソフトウェアパッケージ。陽子NMRのピーク分割と強調表示、アミノ酸およびDNA配列ツール、TLCプレート描画ツール、Name=Struct機能など、化学・生物学関連研究者必携の機能を満載 | Windows/Mac | 要問合せ | 2007年11月 | — |
| ChemDraw Ultra/Pro/Std | 〃 | 〃 | 化学構造式・反応式描画の定番ソフトウェアパッケージ。化学量論的組成の表示、NMRスペクトル予測、立体化学式表記、Name=Struct機能など、化学関連研究者必携の機能を満載 | 〃 | 〃 | 2007年11月 | — |
| BioDraw Ultra | 〃 | 〃 | 生物学用描画ソフト。膜、DNA、酵素、tRNA、リボゾーム、らせん状蛋白質など、出版品質のグラフィックを作成できます。Ver.10からChemDrawと統合され、さらにパワフルに | 〃 | 〃 | 2007年11月 | — |
| ChemBio3D Ultra | 〃 | 〃 | 3D分子モデル描画ソフト。分子の豊かで高品質の3次元表現が直感的に得られ、生成エネルギー、遷移状態最適化などの計算機能・インタフェースを備えた包括的なソフト。タンパク質など表面表示にも優れる | Windows | 〃 | 2007年11月 | — |
| BioAssay Ultra | 〃 | 〃 | プレートを使用して行うIC50実験分析ツール。大量の assay データを処理・分析・視覚化・保存できるスマートなソリューションを提供 | 〃 | 〃 | 2007年11月 | — |
| ChemBioOffice Ultra | 〃 | 〃 | ChemBioDraw, ChemBio3D, ChemFinderに加えて BioAssay, BioViz, Inventory, E-Notebookを統合した、化学・生物学へのトータルソリューションパッケージ | 〃 | 〃 | 2007年11月 | — |

| | | | | | | | |
|-----------------------|---------------------|-----------|---|--|-------|----------|------|
| ChemOffice Ultra/Pro | " | " | ChemDraw, Chem3D, ChemFinderに加えてE-Notebookを統合した、化学関連研究者へのトータルソリューションパッケージ | " | " | 2007年11月 | — |
| ChemOffice Enterprise | " | " | Web上で化学構造・反応情報をDB構築・検索を可能にする、化学情報管理システムを提供。化学研究機関に最適 | " | " | 2006年4月 | — |
| BioOffice Ultra | " | " | 分子生物学と化学の両方を扱う研究者に最適な統合製品。BioDraw,BioAssay,BioViz,Inventory,E-Notebookを同梱 | " | " | 2007年11月 | — |
| E-Notebook Ultra | " | " | 実験・反応記録などが容易に管理・共有できる、研究機関必携のソフト。強力な検索機能で研究をパワフルにサポート | " | " | 2007年11月 | — |
| Inventory Ultra | " | " | 研究機関で使用する化学薬品・試薬を調達から使用・廃棄段階まで追跡・管理が可能なソフト。監査記録やEH&Sデータ管理も可能 | " | " | 2007年11月 | — |
| ChemACX Ultra | " | " | 約500社の大手試薬販売会社、100万件を超えるケンブリッジソフト独自のカタログ情報データベース | " | " | 2007年11月 | — |
| The Merck Index | " | " | 国際的に名声を得ている化学物質・医薬・生体物質の辞典The Merck Indexのオンライン版。物質名、CAS番号などから検索可能 | " | " | 2007年11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 |
| SRS | シーティーシー・ラボラトリーシステムズ | 米バイオウイスタム | 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、Linux、 クライアント: Webブラウザ | 要問合せ | — | — |
| SRS WS Objects | " | " | SRSと様々なツールを統合するAPI | 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 | " | " | — | — |
| Genomatix Suite | " | 独ジェノマティクス | EIDorado、Gene2Promoter、GEMS Launcher、BiblioSphereを含む制御領域解析トータルパッケージ | Internet経由またはLinux Server | " | — | — |
| EIDorado | " | " | ヒト、マウス、ラット、イヌ、チンパンジー等複数の生物種の転写制御領域アノテーションデータベース | " | " | — | — |
| Gene2Promoter | " | " | EIDoradoに対して複数のプロモーター領域を検索するEIDoradoのオプションモジュール | " | " | — | — |
| GEMS Launcher | " | " | 制御領域の解析ツールパッケージ | " | " | — | — |
| BiblioSphere | " | " | 文献から遺伝子-遺伝子、遺伝子-転写因子間の相関関係情報をマイニングしたデータベース | " | " | — | — |

| | | | | | | | |
|---|---|--------------------|--|---|---|---|---|
| BioKnowledge Library | " | 独バイオベース | タンパク質のマニュアルキュレーションデータベース | " | " | - | - |
| TRANSFAC | " | | 転写因子情報のマニュアルキュレーションデータベース | " | " | - | - |
| TRANSPATH | " | " | シグナル伝達パスウェイのマニュアルキュレーションデータベース | " | " | - | - |
| FGENEシリーズ | " | 米ソフトペリー | 遺伝子領域予測ツール | UNIX | " | - | - |
| BioExpress, Custom DB | " | 米ジーンロジック | 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を統計解析した、遺伝子発現データベース。Bioinformaticianでなくとも簡単に利用可能 | Internet経由 | " | - | - |
| ToxExpress | " | " | Toxicogenomicsデータベース | SUN | " | - | - |
| InforSense KDE | " | 英インフォセンス | ダイナミックでビジュアルなデータの統合と分析のプラットフォーム | Windows、Linux | " | - | - |
| InforSense BioSense/ InforSense BioSense Grid | " | " | 遺伝子配列解析、遺伝子発現解析およびテキストマイニング等、Bioinformatics分野にフォーカスしたソフトウェアパッケージ | " | " | - | - |
| InforSense ChemSense | " | " | 各種の構造式データベースへの問い合わせと、化学式の処理、SAR・ADME-Toxなど生物学的なデータと化合物データソースの統合にフォーカスしたパッケージ | " | " | - | - |
| InforSense Spotfire Connector 1.0 | " | " | InforSenseのWorkflowに基づく強力なデータ統合・分析機能と、SpotfireのVisualizationを結合するためのモジュール | " | " | - | - |
| InforSense TextSense | " | " | 非構造化データの代表であるテキストデータを、InforSenseの優れたAnalyticsにより解析するためのテキストマイニングモジュール | " | " | - | - |
| BioBook | " | 英アイディービジネスソリューションズ | 実験ノートスタイルの生物評価試験データ管理システム | Server : Windows XP, 2003, Sun Solaris / Client : Windows XP | " | - | - |
| ActivityBase | " | " | 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 | Server : Windows, UNIX, Linux / Client : Windows XP + Office XP, 2003 | " | - | - |
| 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 | Windows 2000, XP + Office 2000, XP, 2003 | " | - | - |
| SARView | " | " | 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 | Windows XP + Office XP, 2003 | " | - | - |

| | | | | | | | |
|---|---|---------------------|---|---|---|---|---|
| AIM (Activity Base Inventory Manager) | " | " | Activity Baseとリンクするサンプル/プレート管理システム | Server : Windows, UNIX, Linux / Client : Windows XP + Office XP, 2003 | " | - | - |
| ChemXtra | " | " | 化学構造式をOracleデータベースとして取り扱い、一般的な技術でデータベース構築メンテナンスを行うことを可能にするOracleデータカートリッジ | Windows, Sun Solaris, Red Hat Linux | " | - | - |
| ChemIQ | " | " | 化学構造式を用いたシステムを構築する際に、Chemical Intelligenceを提供する開発Toolkit | Windows XP | " | - | - |
| PredictionBase | " | " | 様々な生物活性データ、物性データから薬効・薬理/代謝/毒性などの予測ルールを構築する予測支援システム | サーバー: WindowsXP、 2003/クライアント: WindowsXP | " | - | - |
| CoRM、SIMS | " | 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 | Symyx社ISISの動作する環境に対応 | " | - | - |
| 法規制化合物チェックシステム | " | シーティーシー・ラボラトリーシステムズ | 化学構造をベースに法令に抵触する構造かどうかチェックするシステム | IE6.0(クライアント) | " | - | - |
| Target Informatics Platform (TIP) | " | 米アイトジェン・サータンティ | Structure-based Drug Discoveryを支援するソリューション | Internet経由 | " | - | - |
| Eidogen Visualization Environment (EVE) | " | " | 配列、構造、サイトおよびサイト-リガンド相互作用の類似性の表示、比較解析システム | " | " | - | - |
| ARK Kinase Knowledgebase | " | " | Kinase gene familyにフォーカスした化合物データをキュレーションしたデータベース | " | " | - | - |
| ChIP | " | " | 遺伝的アルゴリズムに基づいた新規化合物の探索システム | " | " | - | - |
| Medchem Database/Target Inhibitor Databases | " | 印ジーブイケー・バイオサイエンス | 各種ターゲットやバクテリアなどに対する阻害化合物情報、バイオアッセイ・生物活性情報を中心にキュレーションしたデータベース | Windows、 Linux、SUN | " | - | - |
| Drug Database | " | " | FDA承認既存薬について、代謝物を含むChemicalな情報、Clinical情報、副作用情報およびPK/ADMET情報を中心にキュレーションしたデータベース | " | " | - | - |
| Clinical Candidate Database | " | " | IND申請された治験薬及び承認された医薬品(治験薬のうちで開発中止となったもの、及び上市后販売中止されたものを含む)について、代謝物を含むChemicalな情報、Clinical情報およびPK/ADMET情報を中心にキュレーションしたデータベース | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|-----------------------------------|---|------------------|---|--|---|---|---|
| Mechanism Based Toxicity Database | " | " | 化合物の毒性発現について、その化合物情報、毒性メカニズム情報ならびに未変化体・代謝物における毒性試験情報を中心にキュレーションしたデータベース | " | " | - | - |
| Leadscope Enterprise | " | 米リードスコープ | 構造的特徴と読込んだ活性値や自動計算される物性・プロパティ値に対する相関をグラフィカル表示するデータマイニング・意思決定支援プログラム | サーバー: Linux /クライアント: Windows | " | - | - |
| Leadscope Toxicity Database | " | " | 詳細な毒性情報が付随した160,000以上の化合物を収録したデータベース | " | " | - | - |
| Leadscope Known Drugs Database | " | " | 詳細な薬効分類情報が付随した13,000以上の医薬品化合物を収録したデータベース | " | " | - | - |
| Leadscope Predictive Data Miner | " | " | フラグメントキーおよびプロパティを用いたQSARモデルの構築とQSARモデルによる新規化合物の活性・毒性予測を行なうLeadscopeのオプションモジュール | " | " | - | - |
| FDA SAR Genetox Database | " | " | QSARモデル構築ためのリソースとしてLeadscopeで利用できる高品質なGenetic Toxicityデータベース(2400以上の化合物) | " | " | - | - |
| Leadscope Personal | " | " | Leadscopeのパーソナル版(10万化合物の制限あり) | Windows | " | - | - |
| ToxWiz | " | 英ケンブリッジセルネットワークス | 毒性エンドポイントやメカニズムの予測を行うためのソフトウェア。様々な分子間相互作用を考慮した予測をする。独自のデータベースを保有し関連するパスウェイ、クラスタや18種類の生物種のオーソログ遺伝子のデータが参照可能。 | サーバー: Linux/SUN クライアント: Windows 2000/XP | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| PK-sim | " | 独バイエルテクノロジーサービス | 生理学モデルを用いた薬物動態/薬物動力学シミュレーション・ソフトウェア | " | " | - | - |
| MoBi | " | " | 生理学モデル構築ツール | " | " | - | - |
| 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 | Windows、Linux、SUN | " | - | - |
| CONVERT | " | " | 入力した複数の異なるファイルフォーマットを自動認識し、ユーザー指定のファイルフォーマットに自動変換するソフトウェア | " | " | - | - |
| CHECK | " | " | 化学構造式を標準化するソフトウェア | " | " | - | - |
| STERGEN | " | " | 化学構造式から自動的に立体中心を識別し、立体異性体を自動生成するソフトウェア | " | " | - | - |
| TAUTOMER | " | " | 数十万の化学構造データセットをもとに、化学構造式から予測できる互変異性体を自動生成するソフトウェア | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|-----------------------|---|-----------|---|--|---|---|---|
| 2DCOOR | " | " | 数十万の化学構造データセットをもとに2次元の化学構造式を整形し、それぞれの構造式の方向を一致させるソフトウェア | " | " | - | - |
| ADRIANA.Code | " | " | 2次元の自己相関やRadial distribution functionなど分子に対して様々な記述子を計算するソフトウェア | " | " | - | - |
| ADRIANA | " | " | ADRIANA.CodeとSONNIAの両機能を持ち合わせたソフトウェア | " | " | - | - |
| SONNIA | " | " | ADRIANAによって計算された記述子データやモデリングを行うケモメトリックスソフトウェア | " | " | - | - |
| IMAGE | " | " | mol,SDファイルからイメージファイルを生成するソフトウェア | " | " | - | - |
| ChemCart | " | 米デルタソフト | Webブラウザをインターフェイスとした化学構造式を含む研究データ参照登録システム。フォームが自由に作成・編集できるタブ形式のフォームが利用可能 | サーバ: SUN、Windows、Oracle、Tomcat、Java/ クライアント: Windows、Java 構造sketcher | " | - | - |
| e-cognition | " | 独ディフィニス | 画像から解析対象となる目的物(イメージオブジェクト)を極めて正確に分類し、イメージオブジェクトから得られる様々な情報を数値結果としてアウトプットする、新しいイメージ解析ツール | Windows | " | - | - |
| SIMS | " | 米バイオイメージン | イメージデータ管理システム | サーバ: SUN、Windows、Oracle/ クライアント: Webブラウザ | " | - | - |
| Classification System | " | 米リールツウ | Semi-automaticにテキストを関連のあるカテゴリーに分類するclassificationエンジン | Windows、Linux、SUN | " | - | - |
| Document Router | " | " | 指定したカテゴリーに新しい情報が追加された場合にお知らせするアラート機能モジュール | " | " | - | - |
| Entity Extractor | " | " | テキスト内の目的とするエンティティを抽出するソフトウェア | " | " | - | - |
| SureGene | " | " | Classification Systemを使用し、文献を関連する遺伝子別にカテゴリー化したデータベース | Internet経由、Windows、Linux | " | - | - |
| SureChem | " | " | Entity extractorを使用したシステムで、テキストからChemical情報を効率的に検索するソフトウェア | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|-------------------------------------|---|---------------|---|--|---|---|---|
| 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/2000、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 | " | " | - | - |
| PROVANTIS | " | 米インステム | GLP対応、安全性試験支援ツール。各種設計をライブラリ化することで、追加開発等を行うことなく、導入・運用が可能。 | Windows | " | - | - |
| PKS(Pharsight Knowledgebase Server) | " | 米ファーサイト | PK/PDデータ管理システム。各種データ解析の履歴と合わせて、関連するデータやファイルを統合的に管理することが可能。 | Windows | " | - | - |
| PKS Reporter | " | " | 標準化もしくはカスタマイズされたレポートと文書の作成ツールで、更新、チェック/承認機能も提供。PKSにリンクし、各種データやモデル解析結果をPKSに保存することが可能。 | " | " | - | - |
| PKS Validation Suite | " | " | PKS製品の効率的なバリデーションツール | " | " | - | - |
| Pharsight Trial Simulator | " | " | 臨床試験デザインのためのシミュレーターソフトウェア | " | " | - | - |
| WinNonlin AutoPilot | " | " | PK解析レポートに必要な解析結果の図表、テキストデータを自動的に生成するアプリケーション。PKS(Reporter)と連携することでWORDレポートの自動作成までが可能。 | " | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| Oracle TMS | " | " | MedDRA、自社辞書などGCP・GPMSPiにおける辞書の統合管理を可能にする | " | " | - | - |
| 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対応のファンクションが充実 | サーバー: SUN、NT/2000 クライアント: Windows | " | - | - |

| | | | | | | | |
|--|--------|------------------|--|---|-------|------|------|
| agSignals | " | " | 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 | " | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| Documentum | " | 米ドキュメンタム(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 | " | - | - |
| STARLIMS | " | 米スターリムス | 日々創出される素材や製品の多岐にわたる分析・評価技術に柔軟に対応することで、研究情報を蓄積し有効活用するための研究情報システムソリューション | Windows Xp, Oracle | " | - | - |
| Symyx Software 【Lab Notebook】 | " | 米シミックステクノロジーズ | 化合物の探索からプロセス、製剤・調合、分析までをサポートする電子実験ノートシステムで電子署名やGMPなどの各種規制に対応し知的財産の活用を支援。Discovery, Process, Formulation, Analytical Notebook の4製品を展開 | サーバ: Windows Server2003、Oracle / ク ライアント: Windows2000、XP | " | - | - |
| Symyx Software Lab Notebook 【Discovery Notebook】 | " | " | データベースと過去の実験ノートを活用し新規化合物の合成実験のプランニングおよび実験記録を作成する電子実験ノート | " | " | - | - |
| Symyx Software Lab Notebook 【Process Notebook】 | " | " | プロセス検討の実験ノート作成、マルチステップ合成のシナリオ・コスト検討、製造指示書・製造記録書を作成する電子実験ノート | " | " | - | - |
| Symyx Software Lab Notebook 【Formulation Notebook】 | " | " | 製剤検討の実験ノート作成、コスト検討、製造指示書・製造記録書を作成する電子実験ノート | " | " | - | - |
| Symyx Software 【Lab Execution】 | " | " | 自動/半自動/手動装置の制御/モニタ/管理を行うソフトウェアでSymyx の装置だけでなく他社製の装置の制御も対応する Library Studio, Automation Studio の2製品を展開 | " | " | - | - |
| Symyx Software 【Experiment Analysis】 | " | " | リアルタイムでのデータ保存と化学式や文書で検索・閲覧しレポートを作成する機能を提供 PolyView, Spetra Studio, Data Browser の3製品を展開 | " | " | - | - |
| Symyx Software 【Vault Platform】 | " | " | Lab Notebook をはじめとした Symyx Software の基礎となる文書管理システムで、情報の保管、検査、閲覧、アクセス管理、履歴管理機能を提供 | " | " | - | - |
| 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 |

| <ライフサイエンス製品> | サイバネットシステム | | | | | | | |
|---------------------------------|------------|------------|---|----------------------------------|---------|---------|---|--|
| ClogP | " | 米バイオバイト | Hansch・Leo によるLogP/CMR 推算ソフトの最新Windows版。No Missing Fragment | Unix、Linux、Windows、MacOS X | 詳細問い合わせ | 1997年1月 | — | |
| Bio-Loom | " | " | Hansch・Leo によるLogP/CMR 推算ソフトの最新Windows版 No Missing Fragment | Windows | " | 2004年4月 | — | |
| BL QSAR | " | " | QSAR式へのアクセス | " | " | 2004年4月 | — | |
| BL Master | " | " | Hansch・Leo Biobyteデータベースへのアクセス | " | " | 2004年4月 | — | |
| CQSAR | " | " | 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 | " | 1997年1月 | — | |
| Clustering Toolkit (basic) | " | 英デジタルケミストリ | Ward法、K-Means法、Divisive K-Means法の各種クラスタリングツールキット | Windows、Linux、Sun上のC、Python、Java | " | 2004年9月 | — | |
| Clustering Toolkit | " | " | Toolkit(basic)に最適クラスタ数の算出機能を追加 | " | " | " | — | |
| Markush Toolkit | " | " | Markush(マーカッシュ)構造取扱いを可能にするケイムインフォーマティクスツールキット | " | " | " | — | |
| Diversity Toolkit | " | " | 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ツールキット | " | " | " | — | |
| Fingerprinting Toolkit (basic) | " | " | 辞書ファイルを基にフラグメントベースのFingerprintを作成。ユーザ定義の辞書作成も可能なツールキット | " | " | " | — | |
| Fingerprinting Toolkit | " | " | basic機能に加え、ユーザ定義辞書の分析機能が加わったツールキット | " | " | " | — | |
| MolSmart Toolkit | " | " | 二次元描画のクエリーからDaylight クエリーのSmarts を生成するツールキット | " | " | " | — | |
| Clustering Mainprog (basic) | " | " | Ward法、K-Means法、Divisive K-Means法の各種クラスタリングアプリケーション | Windows、Linux、Sun | " | " | — | |
| Clustering Mainprog (basic) | " | " | basicに最適クラスタ数の算出機能が加わったクラスタリングアプリケーション | " | " | " | — | |
| Clustering Mainprog (parallel) | " | " | Divisive K-Means法とWard's法をマルチCPU対応化 | " | " | " | — | |
| Diversity Mainprog | " | " | 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アプリケーション | " | " | " | — | |
| Fingerprinting Mainprog (basic) | " | " | 辞書ファイルを基にフラグメントベースのFingerprintを作成。ユーザ定義の辞書作成も可能 | " | " | " | — | |
| Fingerprinting Mainprog (basic) | " | " | basic機能に加え、ユーザ定義辞書の分析機能が加わったアプリケーション | " | " | " | — | |
| MolSmart Mainprog | " | " | 二次元描画のクエリーからDaylight クエリーのSmarts を生成する | " | " | " | — | |

| | | | | | | | |
|--------------------------|---|---------------|---|----------------------------|---------|----------|---|
| Clustering Web Service (| " | " | DigitalChemistry Clusteringをweb利用するためのツールキット | " | " | " | — |
| Clustering Web Service | " | " | Web Service basicに最適クラスタ数の算出機能が加わったツールキット | " | " | " | — |
| Fingerprinting Web Servi | " | " | DigitalChemistry Fingerptintをweb利用するためのツールキット | " | " | " | — |
| Torus: Server | " | " | OracleDBでMarkush(マーカッシュ)構造を取り扱うためのカートリッジ | " | " | 2007年11月 | — |
| Torus: Navigator | " | " | Torusクライアントから、Markush(マーカッシュ)構造化合物のDB登録や検索が可能なGUIアプリケーション | " | " | 2008年内予定 | — |
| AFITT | " | 米オープンアイ | 電子密度マップへの構造のフィッティングとリファインメント | Unix、Linux、Windows、MacOS X | " | 2006年6月 | — |
| Flynn(コマンド版AFITT) | " | " | 電子密度マップへの構造のフィッティングとリファインメント | " | " | 2007年11月 | — |
| BROOD | " | " | バイオイソスターフラグメント探索 | " | " | " | — |
| EON | " | " | 静電ポテンシャル類似度の検証 | " | " | 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 | " | " | " | — |
| 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 | " | " | " | — |
| Lexichem Toolkit | " | " | 化合物名-構造式相互変換 | " | " | " | — |
| OEChem Toolkit | " | " | ケムインフォーマティクス及び3D化合物DB管理 | " | " | " | — |
| Ogham Toolkit | " | " | 構造のレンダリングツール | " | " | " | — |
| Omega Toolkit | " | " | コンホメーション発生ツール | " | " | " | — |
| 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 | " | " | " | — |
| Szybki Toolkit | " | " | 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・VIVANT | " | " | 化合物のGUI、及び計算結果の解析(VIDA)とVIDA画像のパワーポイントオブジェクト機能(VIVANT) | " | " | 2007年12月 | — |
| <ナノテク製品> | | | | | | | |
| Virtual NanoLab | " | デンマーク・アトムティクス | 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 | — |

| | | | | | | | |
|-----------------------|--------|------------|---|---|---------|----------|------|
| Nt_STM | 〃 | 仏ナノタイムズ | STMのシミュレーションツール。 チップ-試料間の電流を計算し、STM像を描画する | Windows、Linux | 〃 | 2007年7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、Linux 計算: Windows、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、Linux 計算: Windows、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 | 〃 | 〃 | - | - |
| 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 | - |
| KeyMolnet Lite | 〃 | 〃 | 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 | Windows | 〃 | 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 8.0 | デジタルデータ管理 | 米ケムイノ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、Vista、Macintosh(Classic) | 2万4千円～8万8千円(一般)、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 |
| Molecular Modeling Pro | " | 米ノルギンモンゴメリーソフトウェア | 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 | " | 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 |
| Sequence-4D | " | 米ケムイノベーションソフトウェア | 公開されたソースのシーケンスからラベル付けされた線形／環形マップ作成、タンパク質コードとマップを視覚化、制限解析、読み取り枠検索実行 | " | 8万8千円(一般)、5万2千円(アカデミック) | 2003年10月 | 国内10本 |
| Tencube/WM, Winmoster | " | テンキューブ研究所 | 最適化構造、原子電荷、双極子モーメント、エネルギー順位、構造最適化などの計算や分子軌道、紫外・可視吸収スペクトル、赤外吸収スペクトルのシミュレーション | Windows NT4.0/2000/XP | 9万9千円(一般) | 2008年5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 |
| Patent Chemistry Database | エルゼビア・ジャパン | 独エルゼビアインフォメーションシステムズ | 研究者のための特許(1976年以降のWO、US、EPの3特許庁)をソースとする有機化合物(450万化合物以上)、有機合成反応(450万反応以上)並びに薬理活性と物性のデータベース。ペーパー実施例とも言われるProphetic化合物も収録 | オンライン版と社内設置版の両方を用意 | — | — | — |
| 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、1000万以上の化合物に対する精選された1000万以上の反応、物性、薬理活性と環境毒性データを収録 | オンライン版と社内設置版の両方を用意 | — | — | — |
| CrossFire Gmelin | " | " | 無機化合物(合金、セラミックス、酸化物等)・有機金属化合物の物性・構造・合成法を収録。250万以上の化合物、190万以上の反応 | オンライン版と社内設置版の両方を用意 | — | — | — |
| CrossFire Commander | " | " | 上記CrossFire Beilstein、Gmelin並びにPatent Chemistry Databaseの検索用クライアントソフトウェア | Windows XP SP2またはWindows Vista | — | — | — |

| | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|----------------------|---|--|------------|----------|------|
| xPharm | // | 蘭エルゼビア B.V. | 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、一般知識に分類し、第一線の研究者が概説する電子参考書。 ScienceDirect上で利用 | 推奨Webブラウザ (Windows版): IE 5.0以上、Netscape Navigator 7.0以上、Mozilla Firefox 1.0.7以上 (Macintosh版): Netscape Navigator 7.0以上、Mozilla Firefox 1.0.7以上 | - | - | - |
| PharmaPendium | // | 独エルゼビアインフォメーションシステムズ | FDAに提出された新薬承認申請(NDA)文書の全文検索を可能にするなど、薬剤の安全性情報を効率的に取得することができる。NDA文書はFDA公開分よりも古い1992年から収録 | Windows: Windows 2000 SP3以上、Windows XP SP2、IE 6.0SP1以上、Adobe Reader 7.0以上 Macintosh: MacOS 10.4、Safari 2.0、Adobe Reader 7.0以上 | - | - | - |
| 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。今回、新たに温度、暴露量などの外部パラメータを取り入れたモデルを組み込むことで、温度や暴露量に応じた予測が可能 | サーバー: Windows2000/XP/2003、クライアント: InternetExplorer 6.0以降 | 詳細はお問合せ下さい | 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、生分解性、蓄積性、PGPTランスポータ、BBB、HIA皮膚感受性モデル式に加え新しくhERG阻害モデルを提供 | - | 詳細はお問合せ下さい | 2004年4月 | - |
| ADMEWORKS/ModelBuilder | " | " | 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。また、モデル式の受託サービスも請負可能。今回新たに構造以外の外部パラメータ(温度、暴露量など)を取り入れた予測モデルの構築が可能 | Windows2000/XP (スタンドアロン) | 詳細はお問合せ下さい | 2004年3月 | - |
| 薬物動態・毒性「ADME/Tox」のIn Silico予測受託サービス、ADMEWORKS/ModelBuilderモデル式受託サービス | " | " | ADMEWORKS/Predictorを利用したモデル予測受託をサービスする ADMEWORKS/ModelBuilderを利用したカスタムモデル式の構築受託をサービスする | - | 詳細はお問合せ下さい | 2006年12月 | - |
| ADME Database | " | " | 薬物の吸収、分布、代謝、排泄情報のデータベース。クロアチアのProf.Slobodan Rendicにより収集されたヒトP450、ヒトランスポータ、薬物代謝酵素を収録。薬物の開発研究などへの有用な情報をデータベースとして、柔軟性の高い検索ツールとともに提供。今回新たに動物データを追加 | インターネットによるオンラインサービス (Internet Explorer 5.X以降) | 100万円～(企業)、50万円～(教育機関) | 2005年8月 | - |
| Protein Adviser/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っ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 | " | 詳細はお問合せ下さい | 2003年11月 | - |
| SPRESI | " | 独インフォケム | 旧ソビエト連邦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。610万件の化合物データ、385万件の反応情報を含み、汎用Webブラウザで検索が可能 | JavaAppletが動作可能なブラウザ (Internet Explorer、Netscapeなど) | 37万5千円～(企業)、18万7千円～(教育機関): マルチユーザーライセンス、コーポレートライセンスあり | 2000年7月 | - |

| | | | | | | | |
|-------------------------|---------------|-------------------|---|---|------------------------|---------------|-------------|
| LiqCryst 4.7 | 〃 | 独LCIパブリッシャー | LiqCryst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。約9.5万件の文献から得られた約93,100の液晶化合物に関する情報を収集。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 | Windows2000/XP | 詳細はお問合せ下さい | 1995年6月 | — |
| SKIN-CAD | 〃 | バイオコム・システムズ | SKIN-CADは、経皮吸収モデル(皮膚透過・体内動態モデル)に基づいて開発した薬物の皮内・体内動態解析ソフトウェア。薬物の皮膚透過性や体内動態に関するパラメータをもとに、皮膚透過量や血中濃度を予測可能。また、皮膚代謝・結合の影響、血流への吸収、イオンフォレシスの効果、PK-PD相関など経皮治療システムに関わる種々の問題の解析も可能 | Windows98/Me/2000/XP | 150万円～(企業)、50万円～(教育機関) | 2005年5月 | — |
| ADMEWORKS/DDI Simulator | 〃 | 富士通九州システムエンジニアリング | DDI Simulator)は、薬物併用時における副作用の原因となる薬物相互作用の程度を、実際の薬物体内動態のシミュレーションを行うことで定量的にシミュレーションするシステムです。本システムは、特定非営利活動法人 HAB 研究機構の薬物相互作用データベースプロジェクトの成果をもとに開発され、Mechanism-Based Inhibitionの機能を新たに追加して製品化。東京大学の杉山教授による監修 | Windows2000/XP (スタンドアロン) | 詳細はお問合せ下さい | 2008年7月 予定 | — |
| 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 |
| Materials Explorer | 富士通 | 富士通 | 幅広い材料に適用可能な分子動力学ソフトウェアで、WinMASPHYCの後継製品。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している。クライアント・サーバー連携でLinux並列ソルバー(ノード内2CPUまで)とも連携可能 | Windows XP/Vista | お問合せ下さい | — | — |
| Materials Explorer /MD | 〃 | 〃 | Linuxサーバ上で動作する並列化専用エンジン。Windows版Materials Explorerと連携することでより大きな系での計算や高速計算が可能となる。計算実行・結果のダウンロード等はすべてWindows版Materials Explorerから行なう事ができるため、Linux環境を意識することなく使用することができる。※Windows版Materials Explorerが必要 | Red Hat Linux 9.0、Red Hat Enterprise Linux 3 ES、AS、SUSE Linux Professional 9.2 | 〃 | — | — |

| | | | | | | | |
|--------------------------------|---|---|--|------------------|---|---|---|
| SCIGRESS MO Compact Std | " | " | パソコン版分子軌道計算ソフトで、WinMOPAC 3.9 Stdの後継製品。半経験的分子起動計算プログラムMO-Gと紫外・可視吸収スペクトルなどの励起状態の計算に適したMO-Sを搭載している。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。計算可能原子数は200まで | Windows XP/Vista | " | - | - |
| SCIGRESS MO Compact Pro | " | " | 巨大分子対応パソコン版分子軌道計算ソフトで、WinMOPAC 3.9 Proの後継製品。半経験的分子起動計算プログラムMO-Gと紫外・可視吸収スペクトルなどの励起状態の計算に適したMO-Sを搭載している。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。計算可能原子数に制限なし | " | " | - | - |
| Scigress Explorer Ultra | " | " | 分子力学法、分子動力学法、配座探索、半経験的分子軌道法(MO-G)および密度汎関数法(DGauss)の各種計算エンジンがパッケージされたScigress Explorerシリーズの最上位製品。連続計算、QSAR/QSPR解析への応用も可能です。MO-Gの計算可能原子数は300まで | Windows XP | " | - | - |
| Scigress Explorer Professional | " | " | 分子力学法、分子動力学法、半経験的分子軌道法(MO-G)の各種計算エンジンがパッケージされたScigress Explorerシリーズの上位製品。連続計算、QSAR/QSPR解析への応用も可能。MO-Gの計算可能原子数は300まで | " | " | - | - |
| Scigress Explorer Standard | " | " | 分子力学法、分子動力学法、半経験的分子軌道法(MO-G)の各種計算エンジンがパッケージされたScigress Explorerシリーズの中位製品。MO-Gの計算可能原子数は300まで | " | " | - | - |
| DGauss(Add-onオプション) | " | " | Scigress Explorerシリーズのオプション機能。密度汎関数法(DFT)計算による高精度な計算が可能。NMRや振動スペクトルを算出できる | " | " | - | - |
| CONFLEX3(Add-onオプション) | " | " | Scigress Explorerシリーズのオプション機能。配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の後藤先生により開発)による、配座異性体の最適化構造の計算が可能。拡張MMと組み合わせて使用する。※CONFLEXは、コンプレックス社の登録商標 | " | " | - | - |
| MO-G 原子数拡張(Add-onオプション) | " | " | Scigress Explorerシリーズのオプション機能。半経験的分子軌道法プログラムMO-G計算の原子数制限を解除する | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|----------------------------|---|-----------------------|--|---|---|---|---|
| SynthPath Explorer | " | " | 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 | サーバー: Windows2000/XP、クライアント: Windows2000/XP | " | - | - |
| ACD/Spectroscopy | " | 加アドバンスド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 | Windows2000/XP/Vista | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| ACD/Chromatography | " | " | 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 | " | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| ACD/Structure Elucidator | " | " | 様々なスペクトルから情報を集約し、構造同定作業を支援する | " | " | - | - |
| ACD/AutoChrom | " | " | 装置と連動して、LC/MS, LC/DADのデータ収集と解析を自動で行い、最適な分離メソッドを提案する | " | " | - | - |
| ACD/Structure Design Suite | " | " | リード化合物を目的の物性値(logP, logD, pKa, Solubility)を示す為に構造的にどのように変更したらよいか提案する | " | " | - | - |
| ACD/Automation Server | " | " | 様々なスペクトルの情報管理、処理作業を完全自動化、デスクトップ製品から拡張するイメージでエンタープライズ向けシステムが構築可能 | " | " | - | - |
| ChemBioDraw 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・反応式等を簡単に作画可能 | Windows2000/XP/Vista、MacOS 10.3/10.4 | " | - | - |
| ChemBio3D 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をバンドルしている | Windows2000/XP/Vista | " | - | - |
| E-Notebook Ultra | " | " | 合成実験ノートの記録をパソコンで簡単に管理できるソフト。部分構造、反応、プロジェクト名などによるデータ検索が可能 | " | " | - | - |
| The Merck Index | " | " | 化学の百科事典「The Merck Index」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 | " | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|-------------------------|---------|-------------------|--|--|-----------|----------|------|
| ChemBioViz Ultra | " | " | 化学情報データベース(ChemFinder)に含まれるデータを簡単に統計解析、グラフ化するためのソフトウェア | " | " | - | - |
| ChemBioOffice Ultra/Pro | " | " | ChemBioDraw Ultra/Pro、Chem3D Ultra/Pro、ChemFinder Ultra/Pro、化学データベースのバンドル製品 | " | " | - | - |
| 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がある | Windows2000Server/2003Server | " | - | - |
| ADMEWORKS/Predictor | " | 富士通九州システムエンジニアリング | WEB上で化合物の種々の特性(薬理活性、ADME、毒性、物性)を予測することが可能。適用分野は創薬/化合物デザイン/環境研究分野であり、予測モデルを多数用意している(予測モデルはオプション)。パターン認識手法を基本とし、極めて高速に予測可能で、多数の化合物に関して多種類の特性を同時計算する「パラレルインシリコスクリーニング」の実施が可能。簡単な操作で仮想化合物を創出可能であり、「バーチャルインシリコスクリーニング」にも最適 | サーバー: Windows2000/XP、クライアント: Windows2000/XP InternetExplorer 6.0以降 | " | - | - |
| 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のルーツであるADAPTを計算エンジンに採用している。強力なパラメータ自動創出機能と柔軟なパラメータ選択機能を保有しており、手法の誤解・誤用による解析ミスが起こらないようなデータ解析手法を厳選しているため、初心者でも安心してデータ解析を実施可能。本システムで作成・カスタマイズしたモデル式はADMEWORKS/Predictorにおいて使用することができ、両アプリを連携させることにより効果的な予測をすることが可能 | 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 |
| GENETYX Ver.9 | 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 | WindowsVista/XP/Server2003/2000 | お問い合わせ下さい | 1996年4月 | - |
| GENETYX-MAC(Ver.14) | " | " | 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 10.4.8以上) | " | 1991年12月 | - |
| G-MAP(Ver.2) | " | " | 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.6) | " | " | プライベートデータベースソフトウェア 構築したDBIに対してBLAST、FASTホモロジーサーチや高速キーワードサーチ、NCBI BLAST、Entrezサーチも可 | Windows/MacOSX + JAVA2 | " | 2000年5月 | - |

| | | | | | | | |
|----------------------|--|------------------|---|---|-------|----------|------|
| ATGC(Ver.5)(Ver.4.2) | " | " | 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 | WindowsVista/XP/Server20038/2000 Macintosh(OS10.4.8以上) | " | 1998年10月 | — |
| G-Probe1(Ver.1) | " | " | cRNAプローブ検索ソフトウェア。遺伝子発現解析用cRNA プローブを検索 | WindowsXP/Server2003/2000 | " | 2005年9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 | " | " | 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 | " | " | 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 | " | 1994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 | " | " | 1994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 | " | " | 1999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 | " | 1991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 V2.10 | タカラバイオ、池田理化、日立ハイテクフィールドینگ、和研薬、理科研、DNAチップ研究所 | 日立ソフトウェアエンジニアリング | DNASIS Proは直感的かつ洗練された操作性を持つ配列編集機能に、ホモロジー検索、マルチプルアライメント、配列連結(Phred/Phrap)機能など、必要なオプションを追加していくことができる、拡張性の高いバイオインフォマティクスソフトウェア | Windows98/2000/XP/Vista | 45万円～ | 2008年7月 | — |

| | | | | | | | |
|-------------------------|---|------------------|--|--|-----------------------|-------------|-------------|
| DNASIS ReportPad V1.5 | " | " | DNASIS ReportPadは、研究情報の管理、日々進化する多様な情報解析手法の追加機能、解析結果を保存するためのノートブック機能、最先端の情報解析を支援するガイダンス機能等を搭載し、研究に最適なバイオインフォマティクスの統合環境を創ることができる | Windows98/2000/XP/Vista | 45万円 | 2007年3月 | — |
| Luminex200システム | 池田理化、日立ハイテックフィールドینگ、日立ハイテクノロジー、和研薬、理科研 | 米ルミネックス | 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 | — | 980万円 | 2001年3月 | — |
| Multiplex Antibody Kits | " | 米インビトロジェン バイオソース | Luminexシステム用試薬キット。サイトカイン・ケモカイン・グロースファクター定量試薬キット、シグナル伝達タンパク質測定キットなどがある | — | — | — | — |
| DNASIS Plex | " | 日立ソフトウェアエンジニアリング | Luminexシステムのマルチプレックスデータを短時間で解析することを目的に開発されたソフトウェア。定量解析や発現解析に対応している | Windows98/2000/XP/Vista | 30万円 | 2006年10月 | — |
| DNASIS Call | " | " | Luminexシステムから得られたマルチプレックスデータから、遺伝子型の同定やグラフ解析等、大量データ解析を強力にサポートするソフトウェア | Windows98/2000/XP/Vista | 30万円 | 2006年5月 | — |
| Masterplex PT | " | " | ELISA等の定量解析を強力にサポートするプレートリーダー用解析ソフトウェア。Luminexシステムでご好評の定量解析ソフトDNASIS Plexの基本機能をそのままに、プレートリーダーの出力ファイルに対応している | Windows98/2000/XP | お問い合わせください | 2008年1月 | — |
| SEQUENCHER V4.8 | タカラバイオ、池田理化、日立ハイテックフィールドینگ、和研薬、理科研、DNAチップ研究所 | 米ジーンコード | 簡単に使いやすいDNAシーケンスアセンブルツール。シーケンストリミング・塩基読み上げ・Phredなどのシーケンススコア値のサポート・SNP領域探索支援などの機能も充実している | Macintosh OS X 10.3.9以上。SEQUENCHER V4.8はMac OS X 10.5 (Leopard)に対応します。Windows2000/XP/Vista | 68万円(Mac版)、88万円(Win版) | 2007年12月 | — |
| BioPackage | " | 米モルソフト | タンパク質立体構造シミュレーションソフトウェア。(米国内商品名 ICM: Internal Coordinate Mechanics) | WindowsNT/2000/XP/Vista、MacOS10.2以降、RedHat9.0、IRIX6.5.x | お問い合わせください | 2007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 |
| AssayZap | ヒューリンクス | 英バイオソフト | RIA、ELISA、IRMA、比色分析やその他の評価分析に利用できる汎用分析ツール | Windows | 要問合せ | — | — |

| | | | | | | | |
|--|---|------------------|---|-------------------------|---|---|---|
| ATOMS | " | 米シェイプソフトウェア | 結晶、高分子、分子等さまざまなタイプの原子構造を3Dで描画 | Windows、Macintosh、Linux | " | - | - |
| CalcuSyn | " | 米バイオソフト | 投薬効果解析のためのソフト。薬の組み合わせによる効果を定量化し、解析の自動化が可能 | Windows | " | - | - |
| CrystalMaker | " | 英クリスタルメーカーソフトウェア | 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・マルチアンダウ対応。オプションにより粉末回折、電子線回折パターンシミュレーションが可能 | Windows、Macintosh | " | - | - |
| Crystal KitX | " | 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、軸等を設定することで、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・中クリスタルソフト | 強力なデータベース機能を搭載した高性能、多機能な結晶構造解析ソフト。Professional版は3500種、Enterprise版は6000種の結晶構造データを持つ | Windows | " | - | - |
| CS ChemBio3D Ultra | " | 米ケンブリッジソフト | 分子表面、軌道、静電位、電荷密度、スピン密度を視覚化して表示。分子特性を計算するため、MOPAC、Gaussian、GAMESS、Jaguarの各インターフェイス(別売)及び拡張ヒュッケルが使用できる。ChemPropはコノリー表面積、分子体積、またClogP、モル屈折度、臨界温度、圧力などを含めた特性を計算可能 | " | " | - | - |
| CS ChemBioDraw Ultra, ChemDraw Ultra/Pro/Std | " | " | Struct<=>Name、ChemDrawExcel、ChemNMRなどの機能が含まれている。化学名に基づいて立体化学を含めた正しい構造式を描き出し、構造式の正確なIUPAC名を取得可能。原子とスペクトルの直接的相関によって、ChemDraw構造式をもとにNMRスペクトルを予測。ChemDraw ActiveX/Pluginは、化学インテリジェンスをブラウザに追加して、データベースクエリと情報表示を可能にする | Windows、Macintosh | " | - | - |
| 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 ChemBioOffice Ultra, ChemOffice Ultra/Pro | " | " | 化学研究者向けのChemDraw、ChemBio3D、ChemFinder、ChemACX、生物学者向けのBioAssay、BioViz、BioDraw、研究用のInventory、E-Notebookで構成されたパワフルなソフトウェアパッケージ | " | " | - | - |
| EnzFitter | " | 英バイオソフト | 酵素反応動力学的実験解析のために開発された回帰分析ソフト | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|-----------------------|---|---------------|--|------------------------------|---|---|---|
| Gaussian | " | 米ガウシアン | 汎用量子化学計算プログラム。量子力学の基本法則から、エネルギー、分子構造、分子系の振動数を予測可能。また、これらの基本的な計算の種類から導かれる様々な分子特性も予測可能 | Windows、UNIX、Linux、Macintosh | " | - | - |
| GaussView | " | " | Gaussian用グラフィカルユーザーインターフェイス | " | " | - | - |
| Gene Construction Kit | " | 米テキストコ | 電気泳動予測による制限酵素の選択から制限酵素地図の描画、コピー&ペーストによる遺伝子組み換え操作により、プロジェクト全体の管理が可能 | Windows、Macintosh | " | - | - |
| Gene Inspector | " | " | ペプチドの等電点などの基本物理性質や側鎖の疎水性傾向、抗原性、ホモロジー検索、二次構造予測、コード領域の探索など約60種の解析機能が備わった遺伝子配列、アミノ酸配列の解析ツール | " | " | - | - |
| HyperChem | " | 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。分子力学・動力学法、モンテカルロ法、半/非経験的分子軌道法サポート | " | " | - | - |
| IGOR Pro 日本語版 | " | 米ウエーブメトリックス | グラフ作成、データ解析、プログラミングツールを統合した科学者・技術者向けのパワフルなツール。表現力に富む高品質な2D・3Dグラフ機能に加え、カーブフィッティング、ピークフィッティング、画像解析をはじめ豊富な解析機能を搭載しており、プレゼン&解析を強力にサポート | " | " | - | - |
| KaleidaGraph 日本語版 | " | 米シナジーソフトウェア | 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現可能なグラフ作成ソフト | " | " | - | - |
| KELL | " | 英バイオソフト | 加重非直線回帰・反復回帰技術を用い、飽和・拮抗の平衡を解析。結合や非結合の定数率を決定することが可能 | Windows | " | - | - |
| Mac TempasX | " | 米トータルレゾリューション | マルチスライスシミュレーションと動的な電子線回折パターン、ユニットセルの自動計算等の機能を搭載したTEMイメージシミュレーションソフト | Macintosh | " | - | - |
| Mathematica 日本語版 | " | 米ウルフラムリサーチ | 数式処理ソフト。最新版Ver. 6.0より開発元のデータベースにアクセスすることで、化学データ表示、構造式表記の取り扱い可能 | Windows、Macintosh、UNIX、Linux | " | - | - |
| Neurone Simulator | " | 英バイオソフト | 神経生理学の分野の研究に非常に有益な洞察を提供することのできるシミュレーションソフト | Windows | " | - | - |
| Q-Chem | " | 米キューケム | 大規模分子計算を可能にする高速量子化学計算プログラム。高速化、高精度化のため"COLD PRISM"、"CFMM"、"Coupled-Cluster"など先進的な手法を搭載 | UNIX、Linux、Macintosh、Windows | " | - | - |
| QuantiScan | " | 英バイオソフト | ポリアクリルアミドゲルやアガロースゲル電気泳動のゲル等をスキャナ(TWAIN対応)で読み込み、バンドの濃さをグラフ化、数値化するソフト | Windows | " | - | - |

| | | | | | | | |
|----------------------------------|-----------|-------------|---|----------------------------|-----------|---------|------|
| SHAPE | " | 米シェイプソフトウェア | 単結晶、双晶およびエビタキシャルやその他の連晶の形態と対称性を計算し表示するプログラム | Windows、Macintosh、Linux | " | — | — |
| SigmaPlot | " | 米シスタット | 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 | Windows | " | — | — |
| 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 | " | " | — | — |
| 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、解析することが可能 | " | " | — | — |
| UnGraph | " | 英バイオソフト | 紙に描かれたグラフをスキャナーで読み込み、X、Y 座標データを任意の精度で認識し、数値化を行うソフト | " | " | — | — |
| VIBRATZ | " | 米シェイプソフトウェア | 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プログラム | Windows、Macintosh、Linux | " | — | — |
| 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 |
| KeyMolnet | 医薬分子設計研究所 | 医薬分子設計研究所 | 生体分子・遺伝子・疾患・医薬に関する情報を分子ネットワークを軸に統合した生物情報プラットフォーム。文献調査に基づく高信頼の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や、ユーザー独自データを利用した検索も可能 | Linux(サーバ)、Windows(クライアント) | 詳細問い合わせ | 2003年4月 | — |
| KeyMolnet Lite | " | " | ノードロック版(アカデミアのみ) | Windows | " | 2007年2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 | 米シュレーディンガー | 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、WindowsXP | お問い合わせ下さい | 2001年 | — |
| XP Visualizer | " | " | Glideモジュール(オプション): XP Glide Scoreを構成する各項に強く関与するリガンド/レセプター間相互作用をハイライトして表示 | " | " | 2007年 | — |
| CombiGlide | " | " | コンビナトリアルライブラリ自動ドッキングプログラム | PC-Linux | " | 2005年 | — |
| Prime | " | " | 蛋白質立体構造予測プログラム。強力なりファイ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、WindowsXP | " | 1999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 | " | " | 1996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 | " | " | 1999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 | " | " | 1999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 | PC-Linux、SGI、IBM、WindowsXP | " | 2003年 | - |
| Epik | " | " | pKa予測/イオン化モデル・互変異性体自動発生プログラム | " | " | 2005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 | PC-Linux、SGI、IBM | " | 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 | PC-Linux、SGI、WindowsXP | " | 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。LogPo/w, Caco-2 Cell permeability, Blood-Brain barrier permeability, 溶解度などを予測 | PC-Linux、SGI、IBM、WindowsXP | " | 2000年 | - |
| SiteMap | " | " | 蛋白質活性部位予測プログラム | PC-Linux、SGI | " | 2006年 | - |
| PrimeX | " | " | 蛋白質X線結晶構造精密化プログラム | PC-Linux | " | 2007年 | - |
| MCPRO+ | " | " | 生体分子向けモンテカルロシミュレーションプログラム | " | " | 2007年 | - |
| Demond | " | " | 生体高分子向け分子動力学プログラム | " | " | 2008年 | - |
| WaterMap | " | " | 自由エネルギー算出モジュール | " | " | 2008年 | - |
| Schrodinger Knime Extensions | " | " | ワークフロー構築プログラムKnime上で利用できるSchrodinger製品との連携拡張ノード群 | " | " | 2008年 | - |
| J-STRIKE | " | インフォコム | Webベース化合物データ管理システム | お問い合わせください | " | 2007年 | - |
| Jchem Extensions | " | " | ワークフロー構築プログラムKnime上で利用できるChemAxon社Jchemノード群 | Windows 2000/XP, PC-Linux | " | 2008年 | - |
| ADME Boxes | " | カナダ・ファーマアルゴリズムス | 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 | お問い合わせください | " | 2005年 | - |

| | | | | | | | |
|--|---|------------------|---|-------------------------|---|---------|---|
| 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 | お問い合わせください | " | 2005年 | — |
| 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 | — |
| SKIN-CAD | " | バイオコム・システムズ | 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試験用情報管理システム | お問い合わせください | " | 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 pKalc、PrologP、PrologDを予測するプログラム | Windows98、NT、2000 | " | 1999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Rs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 (pKa/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 | — |
| 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 | — |
| Chenomx NMR Suite | " | カナダ・ケノミックス | ¹ H-NMRスペクトルから、代謝化合物を同定、定量解析を行うソフトウェア | " | " | 2006年 | — |
| PEAKS | " | カナダ・パ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 | — |
| PEAKS Online | " | " | PEAKSをWebサーバー&クライアントで利用が可能 | お問い合わせ下さい | " | 2006年 | — |
| 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・高感度な相同姓領域検索を実現 | Windows2000、XP、UNIX全機種（詳細はお問合せ下さい。） | " | 2003年5月 | — |
| BioNumerics | " | ベルギー・アプラインドマス | 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、マトリックスデータ、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 | — |
| GeneMathsXT | " | " | 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 | " | " | " | — |
| 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分子間相互作用情報を収録したパスウェイ解析ツール | 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クスプラットフォーム | " | " | 2005年 | — |
| MetaCore/MetaDrug Discovery Platform | " | " | MetaCoreとMetaDrugを統合したパスウェイ/薬剤代謝予測ツール | " | " | 2007年 | — |
| CLC DNA workbench | " | デンマーク・シーエルシーバイオ | DNA配列解析ソフト。プライマーデザイン、配列データのコンテイング、アセンブルも可能 | Windows2000、XP、Vista、MacOS X、Linux | " | 2007年1月 | — |

| | | | | | | | |
|-----------------------------------|---------------|---|--|---|--------------|-------------|-------------|
| CLC RNA workbench | " | " | RNA配列解析ソフト。2次構造予測、および自由エネルギーの計算も可能 | " | " | 2007年1月 | — |
| CLC Protein workbench | " | " | タンパク質配列解析ソフト。2次構造/膜貫通領域/シグナル配列の予測、PDBファイルの読み込みも可能 | " | " | 2007年1月 | — |
| CLC Combined workbench | " | " | 全workbenchの機能を搭載したソフトウェア | " | " | 2007年1月 | — |
| CLCbio Bioinformatics Cell & Cube | " | " | 高速配列解析用システム。BLAST、Smith Waterman に対応。PCにUSB接続することで利用可能 | " | " | 2007年1月 | — |
| CLC Free workbench | " | " | 無償配列解析ソフト。系統樹解析、制限酵素部位部位検索など基本的な配列解析が可能 | " | フリーウェア | 2007年1月 | — |
| 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。PCアルゴリズムによる遺伝子間のネットワーク推定も可能 | Windows 2000、XP、Linux | お問い合わせ下さい | 2005年 | — |
| MicrobiotaProfiler | " | " | T-RFLPデータ編集・解析ソフト。細菌叢に含まれる候補微生物を同定 | Windows2000、XP | " | 2006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 |
| CSD | 化学情報協会 | 英Cambridge Crystallographic Data Centre(CCDC) | ケンブリッジ結晶構造データベース:X線・中性子線で解析した有機化合物・有機金属化合物の結晶構造データベース(423,000件)。分子間相互作用のデータベースも充実 | Windows PC, Linux, UNIX | お問い合わせ下さい | — | — |
| GOLD | " | 英CCDC, Sheffield大学, GlaxoSmithKline社 | 遺伝的アルゴリズムに基づいたタンパク質とリガンドとのドッキングプログラム。コンフォメーションの情報はCSDのデータを活用 | " | " | — | — |
| DASH | " | 英CCDC, 英CCLRC, Prof.B.David | 粉末回折パターンからの結晶構造解析ソフト。初期構造決定から構造精密化までの一連の機能を持つ、未知構造解析用の統合パッケージ | Windows PC | " | — | — |
| Relibase+ | " | 英CCDC, Prof.G.Klebe | Protein Data Bank(PDB)の結晶構造を検索できるWebベースのRelibaseの改良版。蛋白質-リガンド間、及び蛋白質-蛋白質相互作用の検索可能。さらに類似リガンドの検索も可能 | サーバ(Linux), クライアント(Windows PC, Linux, UNIX) | " | — | — |
| ICSD | " | 独FIZ Karlsruhe, 米NIST | 無機化合物(セラミックス、金属間化合物など)の結晶構造データベース(100,000件)。検索した結晶構造から粉末パターンの計算可能。リートベルト解析の初期構造としての利用に有効 | Windows PC, Linux, UNIX | " | — | — |
| CRYSTMET | " | 加Toth Information Systems | 金属(合金、金属間化合物など)結晶構造データベース(115,000件)。含有元素、組成式、粉末パターンより検索が可能 | Windows PC | " | — | — |

| | | | | | | | |
|---|---------------|-------------------------|--|-----------------------------|-------------------------------|----------|------|
| NQRS | " | 核四極共鳴スペクトル委員会、(社)化学情報協会 | 固体の核四極共鳴スペクトル周波数のデータベース(14,000件)。超伝導に関するデータも収録 | " | " | - | - |
| NIST05 | " | 米NIST, 米EPA, 米NIH | イオン化質量スペクトルデータベース(163,000化合物, 190,000スペクトル)。化合物名, 分子式のほかスペクトルデータからも検索が可能 | " | " | - | - |
| 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 |
| ALICE2 for Windows | 日本電子、日本電子データム | 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 | " | 詳細はお問い合わせ下さい | 1994年 | - |
| ALICE2 for Metabolome | " | " | ALICE2 for Windowsを基礎としてこれに全自動メタボローム解析機能を特化し新規開発した。多検体FIDをバッチで読み込み、スペクトル処理、バケット積分を行い、多変量解析(PCA, SIMCA)を1つのインターフェイスで行う。混合物サンプルのグループ分けや経時変化などを可視化できる | " | " | 2005年10月 | - |
| KnowItAll NMR(ノウ・イット・オールエヌエムアール)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394,000件, 1Hを31,000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 | " | 初期価格176万円(1年ライセンス付 次年度DB88万円) | 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 | 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 | - |
| CAChe 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/2D-NMR | " | 加アドバンスドケミストリデベロップメント | 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13C、1H各々15,000件(年間ライセンス)。2D-NMRスペクトルの処理、スペクトルの予測 | Windows2000/XP | 80万円～ | 2003年 | — |
| ACD MASS | " | " | MASSスペクトルの読み込み、構造フラグメントに対するピーク分析等の解析 | " | 80万円～ | 2003年 | — |
| GRAMS32/V6 | " | 米ギヤラクティック | 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 | " | 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なう | " | お問い合わせください | 1998年6月 | — |
| MS-MSEQ | " | CIGB(キューバ) | アミノ酸一次構造解析支援プログラム | " | " | 1997年9月 | — |
| MS-MSEQ/PSD | " | " | 蛋白質同定支援プログラム | " | " | 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 | " | " | 2001年3月 | — |
| MS-46030W7 | " | Palisade | 第7版マス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 | " | " | 2002年3月 | — |
| MS-46030W7N | " | " | 第7版NIST付きマススペクトルライブラリーデータベース(Wiley's Registry of Mass Spectral Database with NIST)と検索ソフト | " | " | 2002年3月 | — |
| 商品名 | 国内販売会社 | 開発会社 | 機能・特徴 | 推奨環境 | ソフト価格 | 出荷年月 | 販売実績 |
| J-OCTAプラットフォーム | 日本総研ソリューションズ(旧社名:日本総合研究所) | 日本総研ソリューションズ | シミュレーションシステムのプラットフォーム。解析プロセス、繰り返し作業、およびモデル作成など、解析作業に必要なツールを雛形として集めた「解析事例データベース」や、分子軌道計算プログラムとの連携を可能にするインターフェイスを搭載する。 高分子材料の弾性挙動、低分子の拡散性、配向複屈折性、ガラス転移温度、ナノコンポジット材料、架橋ポリマーなどの計算に必要なツール群を備える。新たなツール群も随時追加される | Windows2000/XP、Pentium4以降のIntel製CPU、Core™ 2 Duo 1.8GHz以上推奨、メモリ2GB以上推奨、HD80GB以上推奨、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 | 2005年4月(V1.0)／ 2005年11月(V1.1)、 2006年12月(V1.2)、 2007年11月(V1.3) | — |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|------------|---|---|---|
| COGNACモデラー(DPDモデラー内蔵) | " | " | (粗視化)分子動力学法に対応するモデラー。化学構造式をGUI操作により作成し、分子動力学計算を行う作業を強力にサポートする。散逸粒子動力学法(DPD)にも対応する。高分子材料の力学特性、熱特性、ガス透過性など、幅広い物性を予測できる | " | " | " | — |
| PASTAモデラー | " | " | 高分子材料のレオロジー特性(粘性、粘弾性)を予測するための、レプテーションダイナミクス法に対応するモデラー。分子量分布を有する高分子の粘性、粘弾性について予測できる | " | " | " | — |
| NAPLESモデラー | " | " | 高分子材料のレオロジー特性(粘性、粘弾性)を予測するための、プリミティブチェーンネットワークモデルに対応するモデラー。高分子鎖の複雑な形状(直鎖状、分岐、樹形、星形など)に対応するほか、ゴム・エラストマーなど、架橋構造をもつ高分子材料も扱える | " | " | " | — |
| SUSHIモデラー | " | " | 動的・静的平均場法に対応するモデラー。高分子材料を混合する場合の相分離の予測、ミセルの形態など、高分子の相互作用による相構造などを予測できる。また、化学構造式をもとに、相互作用パラメータ(χ パラメータ)を推算する機能もある | " | " | " | — |
| MUFFINモデラー | " | " | 多相構造法に対応するモデラー。海一島構造など、相分離構造を有する高分子材料の弾性挙動および流動場を予測できる | " | " | " | — |
| オプション: VSOP(高速分子動力学エンジン) Linux版 | " | " | (粗視化)分子動力学エンジンであるCOGNACエンジンに対応した、並列計算が可能な分子動力学エンジン。マルチCPUで並列計算を行うことで、高速に分子動力学計算を行うことができる。※Linuxクラスタなどのマシン環境を想定 | Linux MPI版 | " | 2006年12月(V1.0) 2007年4月(V1.1) 2007年11月(V1.2) | — |
| オプション: VSOP(高速分子動力学エンジン) Windows版 | " | " | マルチコアCPUを搭載するWindows機上での並列計算を可能にした、VSOPのWindowsバージョン。J-OCTAがインストールされたマシンで、4並列までの並列計算に対応 | Windows | " | 2007年4月(試供版) 2007年11月(V1.2) | — |
| MDシステムモデラー(仮称) | " | " | 分子動力学(MD)計算を行うために必要な初期構造の作成を支援するツール群。無機結晶を壁面として計算セルに配置したり、ナノ粒子を原子モデルで作成したりするツールのほか、界面構造を作成するツールなどが含まれる | — | — | 今秋発売予定 | — |
| 構造物性相関(QSPR)法ソフトウェア(仮称) | " | " | 分子構造を基本情報とし、そこから高分子のさまざまな物理物性を推算するソフトウェア。密度、線膨張係数、ポアソン比、誘電率など、多岐にわたる物性値が予測できる | — | — | 今秋発売予定 | — |

| 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 |
|---------------------|----------------|---------|--|--|-----------------------|---------|------|
| 日化辞Web | 科学技術振興機 | 科学技術振興機 | インターネット上でJSTが作成し提供している日本化学物質辞書を公開するもの。約258万の有機低分子化合物及びその混合物を収録。化学物質や分子式などからの文字列検索、及び化学構造検索が無料で可能。化審法の既存化学物質の番号や労安法の番号も収録 (http://nikkajweb.jst.go.jp/) | 推奨=Windows 2000,XP : Internet Explorer 6.x及び Netscape 7.x ／MacOS 10.x : Safari 1.x, Netscape 7.x ／MacOS 9.x : Internet Explorer 5.x及び Netscape 7.x 化学構造検索を行うには ChemDrawPlugin(無料ダウンロード可)をあらかじめインストールしておく必要あり | — | — | — |
| 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 |
| COMSOL Multiphysics | 計測エンジニアリングシステム | 瑞COMSOL | FEMにもとづいた一般偏微分方程式(PDE)ソルバをコアとしたシミュレーションソフトウェア。化学反応・流体・伝熱・電磁場・構造などPDEで記述できる工学現象に分野を問わず対応可能。またマルチフィジックス機能は物理(フィジックス)の組み合わせの数やパターンには制限がなく、複雑な化学工学プロセスも実現象に即した高精度のモデリング／シミュレーションがシームレスに実行可能。物理モデルはソフトウェア搭載の既定モデルのほかユーザ定義モデルをGUIから構築できる。既定物理モデルのカスタマイズも同様にGUIで行える | Windows, Linux, Solaris, Mac | お問い合わせ下さい(アカデミック価格あり) | 2001年8月 | — |

| COMSOL Reaction Engineering Lab | " | " | 素反応ベースでCVDや燃焼・触媒反応などの本格的な化学反応系モデリング／シミュレーションのためのソフトウェア。反応系の物質・エネルギー・運動量収支を定義するほか空間非依存(0次元)系の化学組成・温度変化を求める(非定常)。形状に依存する、たとえばリアクタ内部における流れ／伝熱／反応が強く相関する反応系に対してはCOMSOL Multiphysicsとの密接な連携により対応。また実験値を元にパラメータ推定で反応速度定数を決定することができる。CAPE-OPENインタフェース対応予定 | " | お問い合わせ下さい(アカデミック価格あり) | 2006年2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 |
| NMRPipe | エルエイシステムズ | 米NIH | 高速多次元NMRデータ処理および解析プログラム。代表的なNMR装置のFIDファイルに対応 | LINUX (UNIX)、MacOSX、Windows (Windows Server for Linux 経由) | 300万円 | — | — |
| PCA/HSQC | " | " | NMRPipe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、ドラックデザインなどで効力を発揮するツール | " | 100万円 | — | — |
| DYNAMO | " | " | NMRPipeシリーズ。シミュレーテ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 | " | 240万円 | — | — |
| 1D STD SYSTEM | " | " | NMRPipeシリーズ。自動 1D バッチプロセスおよびSTD(飽和移動差スペクトル)分析用のツール | " | 210万円 | — | — |
| CYANA | " | Peter Guntert 他(スイス) | NOE帰属を考慮した、タンパク質構造解析・計算ソフトウェア | Linux | 200万円 | — | — |
| KUJIRA | " | 理化学研究所 | タンパク質のNMR構造解析でピークピッキングから構造決定までの処理を自動または手動でGUIからおこなう。NMRViewを利用。NMRPipe、CYANAとの連携が可能 | " | 300万円 | — | — |
| Mnova | " | スペイン Mestrelab Research | NMRの1D,2Dプロセッシング、解析などを行うソフト。印刷イメージのままNMRプロセスができ、PowerPoint的なレポート作成機能を持ち、自動プロセス機能が優れているので、初心者にも使いやすい。5ライセンス以上の割り引き。サイトライセンスもあり。 | Windows、 Mac OSX、 Linux | 35万円 | — | — |
| NMRPredict Desktop | " | " | Mnovaのプラグイン 化学構造式から1D 1H,13CNMRスペクトルを予測 | " | 30万円 | — | — |
| Mnova Lite | " | " | Mnovaの1D専用版 | " | 20万円 | — | — |
| PERCH | " | フィンランド PERCH Solutions Ltd. | 測定1D NMRのデータ処理、解析とともに立体化学構造の分子モデリング計算とスピン系計算により1D NMRスペクトル予測を行うソフトウェア | Windows | 140万円 | — | — |

| | | | | | | | |
|------------------------|---|---------------------|---|------------------------------------|-----------------|---|---|
| Nuts | " | 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 | 20万円 | — | — |
| CH-NMR-NP | " | NMRDBTech・エルエイシステムズ | Web経由で利用可能な有機天然物NMRデータベース 部分化学構造式、NMRピーク値等から検索が可能 2005年8月現在 7,426件の天然物の1H、13Cスペクトルデータを収録 | Windows、UNIX、LINUX、Mac OSX(ブラウザ経由) | 年間ライセンス 30万円 | — | — |
| ChemSketch | " | 加ACD | 化学構造式、図形を描写するドローソフトウェアの単体製品。化合物の名称から構造を検索できる Dictionary 機能付属。ほとんどのデータ処理製品に付属 | Windows | 80万円 | — | — |
| ChemFolder | " | " | 化学構造式、反応経路、物性値、実験データ等、様々な化合物データを管理できるデータベースソフトウェア | " | 40万円 | — | — |
| Name | " | " | 構造式からIUPAC/CAS Index ルールに基づき化合物名を命名、化合物名から構造式を検索・出力 | " | 62万4,000円 | — | — |
| Name Chemists' Version | " | " | IUPAC 命名と主要機能に限定したNameの廉価バージョン | " | 16万円 | — | — |
| 1D NMR Processor | " | " | 1D NMR測定データを読み込み、FT、フェーズ合わせ、ピークピック、積分、アサインメントなどのプロセス、解析処理をおこない、レイアウトに合わせたレポートを作成。ほとんどのメーカーのNMR FIDデータを読み込み可能 | " | 24万円 | — | — |
| 2D NMR Processor | " | " | 1D、2D NMR測定データNMR測定データを読み込み、FT、フェーズ合わせ、ピークピック、積分、アサインメントなどのプロセス、解析処理をおこない、レイアウトに合わせたレポートを作成。。ほとんどのメーカーのNMR FIDデータを読み込み可能 | " | 40万円 | — | — |
| 1D NMR Manager | " | " | 1D NMRデータプロセス(1D NMR Processorの機能)と、NMR解析データと構造式、化学情報を組み合わせた1D NMRデータベースの構築機能。化学情報、NMRスペクトルパターン、部分構造式から検索可能。UV,IR,MASSなどのManagerと連携可能 | " | 78万4,000円 | — | — |
| 2D NMR Manager | " | " | 1D/2D NMRデータプロセス(2D NMR Processorの機能)と、NMR解析データと構造式、化学情報を組み合わせた1D,2D NMRデータベースの構築機能。化学情報、NMRスペクトルパターン、部分構造式から検索可能。UV,IR,MASSなどのManagerと連携可能 | " | 120万円 | — | — |
| Aldrich NMR Library | " | " | NMR Manager プラグイン。約35,000件のAldrich試薬の1D C/H NMR スペクトルデータを収録 | " | 24万円 | — | — |
| Polymer Database | " | " | NMR Manager プラグイン。約430件の高分子化合物の1D C/H NMR スペクトルデータを収録 | " | お問い合わせ下さい | — | — |

| | | | | | | | |
|----------------------------|---|---|---|---|------------|---|---|
| Chenomx Metabolite Library | " | " | NMR Manager プラグイン。Chenomx社製、約300件の代表的な生体代謝物の 1D HNMR スペクトルデータを収録 | " | " | — | — |
| HNMR Predictor | " | " | 構造式から1H NMRスペクトルを予測。内部DBにある20万件的化合物から部分構造を検索し、166万件的化学シフト値からスペクトルを予測 | " | 104万円 | — | — |
| CNMR Predictor | " | " | 構造式から13C NMRスペクトルを予測。内部DBにある19万件的化合物から部分構造を検索し、243万件的化学シフト値からスペクトルを予測 | " | 104万円 | — | — |
| HNMR DB add-on | " | " | HNMR Predictor の内部DB参照用 Add-on データベース。20万件的のアサインされた化合物の構造、1H 化学シフト、カップリング定数情報を参照可能 | " | 158万4,000円 | — | — |
| CNMR DB add-on | " | " | CNMR Predictor の内部DB参照用 Add-on データベース。19万件的のアサインされた化合物の構造、13C 化学シフト、カップリング定数情報を参照可能 | " | 158万4,000円 | — | — |
| CNMR Predictor & DB | " | " | CNMR Predictor と Add-on DB のパッケージ製品 | " | 184万4,000円 | — | — |
| HNMR Predictor & DB | " | " | HNMR Predictor と Add-on DB のパッケージ製品 | " | 184万円 | — | — |
| FNMR Predictor | " | " | 入力された化合物の構造式から、化学シフトと結合定数を予測。内部DBにある16,780件の化合物から部分構造を検索し、35,014件の化学シフト値情報を組み合わせて、19F NMR スペクトル(化学シフト、カップリング定数)を予測。(FNMR DB add-on、パッケージ製品も有) | " | 62万4,000円 | — | — |
| PNMR Predictor | " | " | 入力された化合物の構造式から、内部DBにある9,000件の化合物から部分構造を検索し、21,400件の化学シフト値情報を組み合わせて、31P NMR スペクトル(化学シフト、カップリング定数)を予測。(PNMR DB add-on、パッケージ製品も有) | " | 62万4,000円 | — | — |
| NNMR Predictor | " | " | 入力された化合物の構造式から、内部DBにある28,670件の化合物から部分構造を検索し、33,690件の化学シフト値情報を組み合わせて、15N NMR スペクトル(化学シフト、カップリング定数)を予測。(NNMR DB add-on、パッケージ製品も有) | " | 62万4,000円 | — | — |
| 2D NMR Predictor | " | " | 入力された化合物の構造式から、1H, 13CのCOSY, TOCSY, HSQC, HMBCなどの同種核、異種核2D NMRスペクトルを予測 | " | 238万4,000円 | — | — |
| NMR software suite | " | " | 1D/2D NMR Manager, C/H/F/N/P/2D NMR Predictorをパックにし、価格を抑えたセット製品 | " | 286万4,000円 | — | — |

| | | | | | | | |
|------------------------|---|---|--|---|------------|---|---|
| 1D NMR Expert | " | " | 1D NMR Manager, H/C Predictorの連携で、自動でNMRデータセットの評価がおこなえる、NMRハイスルーブットプロセス用ソフトウェア。プレート(ラック)を使用した自動測定NMRデータセットをプレート番号と対応して管理し、バッチ処理で定形プロセス、反応評価(予測スペクトルとの一致度、アサインメントRMS(二乗平均)、純度など)、データベース登録をおこなう。反応進行度の比較評価、品質評価レポート作成などもおこなえる。384 ウェルプレートまで対応 | " | 318万4,000円 | — | — |
| 2D NMR Expert | " | " | 1D/2D NMR Manager, H/C Predictorの連携で、自動でNMRデータセットの評価がおこなえる、NMRハイスルーブットプロセス用ソフトウェア。プレート(ラック)を使用した自動測定NMRデータセットをプレート番号と対応して管理し、バッチ処理で定形プロセス、反応評価(予測スペクトルとの一致度、アサインメントRMS(二乗平均)、純度など)、データベース登録をおこなう。反応進行度の比較評価、品質評価レポート作成などもおこなえる。384 ウェルプレートまで対応 | " | 478万4,000円 | — | — |
| Structure Designer | " | " | ドラッグデザインにおけるバーチャルADME(薬物体内動態)用に、リード化合物へ官能基を導入した誘導体を自動生成し、logP, pKa, logD, 溶解度などの物性値を予測 | " | 78万4,000円 | — | — |
| Structure Design Suite | " | " | Structure Designerに外部アプリケーション連携、実験データベース、ユーザプロトコルなどを追加した物性値統合解析用セット製品 | " | 270万4,000円 | — | — |
| Structure Elucidator | " | " | 1D,2D NMR、MS、UV-IR、GCなどのデータベース機能と1H, 13C, 2D NMR Predictor機能を組み合わせて、化学構造解析をおこなう統合ツール。1D/2D NMR スペクトル(HM/SQC,HMBC,13C必須)、分子量、分子組成(元素分析)等の情報から構造式を推定 | " | 792万円 | — | — |
| SpecManager Enterprise | " | " | スペクトルデータベース(NMR/ MS/ UVIR/ Curve/ Chrom Manager)のデータベースエンジンとして、サーバー内のOracle 9iまたはOracle 10gを使用してデータ共有、同時作業が可能な企業向けDB連携製品 | " | 120万円 | — | — |
| ChemFolder Enterprise | " | " | 化合物データベース(ChemFolder)のデータベースエンジンとして、サーバー内のOracle 9iまたは Postgre SQL 8.1.4を使用してデータ共有、同時作業が可能な企業向けDB連携製品 | " | 60万8,000円 | — | — |

| | | | | | | | |
|---------------------|---|---|---|---|------------|---|---|
| Automation Server | " | " | ACDソフトウェアでの測定後のデータ解析、データベース登録、レポート作成、ファイル操作を自動化するためのサーバソフトウェア。スクリプト作成やAPIを使用したアプリ作成でカスタマイズが可能。 | " | 400万円 | — | — |
| Workflow Manager | " | " | スペクトルデータベースと連携し、化合物単位での分析進捗状況(ワークフロー)を管理するマネージメントソフトウェア。実験フロー、クライアント入力フォーム等をカスタマイズ可能。 | " | お問い合わせ下さい | — | — |
| Web Librarian | " | " | LAN内のWebサーバーにスペクトルデータベース、化合物データベースなどを構築して、クライアントPCのWebブラウザをユーザ・インターフェースとして用い、DB選択、検索、閲覧、レポート作成などを可能にするWebツール製品。各データベース製品毎に対応した製品有り。 | " | " | — | — |
| MS Processor | " | " | Massスペクトルデータ処理 | " | 62万4,000円 | — | — |
| UV-IR Processor | " | " | UV/IR/Vis/Raman などのスペクトルデータ処理 | " | 16万円 | — | — |
| Chrom Processor | " | " | HPLC, LC/UV (DAD または PDA), GC, CE(キャピラリー電気泳動)などのクロマトグラムデータ処理 | " | 16万円 | — | — |
| Curve Processor | " | " | DSC, DTA, TGAなどの熱分析、X線、ESRなどのスペクトル、カーブデータ処理 | " | 16万円 | — | — |
| IntelliXtract | " | " | LC/MSのデータからコンポーネントを抽出し、各コンポーネント中のフラグメントの[M+H] ⁺ または[M-H] ⁻ アサインを自動またはマニュアルで行える | " | 78万4,000円 | — | — |
| MS Manager | " | " | Massスペクトルデータ処理・データベース構築 | " | 78万4,000円 | — | — |
| UV-IR Manager | " | " | UV/IR/Vis/Raman スペクトルデータ処理・データベース構築 | " | 78万4,000円 | — | — |
| Chrom Manager | " | " | HPLC, LC/UV (DAD または PDA), GC, CE(キャピラリー電気泳動)などのクロマトグラムデータ処理・データベース構築 | " | 78万4,000円 | — | — |
| Curve Manager | " | " | DSC, DTA, TGAなどの熱分析、X線、ESRなどのスペクトル、カーブデータ処理・データベース構築 | " | 78万4,000円 | — | — |
| MS Manager Suite | " | " | クロマトピークとMS、IR-UVなどの連携解析が可能な、MS Manager, ChromManager, UV-IR Manager のセット製品 | " | 158万4,000円 | — | — |
| FDM FT-IR Databases | " | " | UV-IR Manager への Add-on DB。Fiveash Data Management Inc.製 FT-IR スペクトルデータ | " | お問い合わせ下さい | — | — |
| NIST IR Database | " | " | UV-IR Manager への Add-on DB。FT-IR スペクトルデータを約 6,000 件収録 | " | 40万円 | — | — |

| | | | | | | | |
|--------------------------------------|---|---|--|---|------------|---|---|
| LC Simulator | " | " | 液体クロマトグラフィーの保持時間の予測およびグラディエント、溶媒濃度、温度、pH、カラムなど実験条件の最適化。データ処理用のChromProcessorとガスクロマトグラフィー用のGC Simulatorが付属 | " | 78万4,000円 | — | — |
| MS Fragmenter | " | " | 化合物の構造から任意のイオン化法におけるMSフラグメントを予測 | " | 40万円 | — | — |
| Chromatography Applications Database | " | " | HPLC, GC, CE(キャピラリー電気泳動)での化合物分離における約8,100件のクロマトグラムと溶媒、グラディエント、pH、カラムなどの実験適用例データベース | " | お問い合わせ下さい | — | — |
| ChirBase | " | " | HPLCでのキラル分離における30,000件の化合物の100,000件の実験適用例データベース。化合物の構造から最適な分離条件を予測 | " | " | — | — |
| ChirBase/GC | " | " | GCでのキラル分離における8,000件の化合物の24,000件の実験適用例データベース。化合物の構造から最適な分離条件を予測 | " | " | — | — |
| ChirBase/CE | " | " | キャピラリー電気泳動(CE)でのキラル分離における2,000件の化合物の8,000件の実験適用例データベース。化合物の構造から最適な分離条件を予測 | " | " | — | — |
| ChromGenius | " | " | LC/MSでの選択スクリーニングにおいて、構造式から内部DBを参照して分解能、保持時間を予測し、最適な分離条件を予測 | " | 62万4,000円 | — | — |
| Method Development Suite for LC/UV | " | " | LC/UVを中心に、HPLC,GC,CEなどのプロセス、データベース、シミュレーションからの分離条件最適化などをおこなうツールと、化合物構造と蓄積情報から合理的な分離方法を探索するツールの統合製品。ChromManager (Chrom Processor; Chromatography Applications Database)、LC Simulator、GC Simulatorが付属 | " | 158万4,000円 | — | — |
| Method Development Suite for LC/MS | " | " | Method Development Suite for LC/UV製品にMSでの分析機能を追加した統合製品。LC/UVのセット製品に加えて、MS Processor、IntelliXtractが付属 | " | 238万4,000円 | — | — |
| LogD | " | " | イオン性官能基をもつ有機化合物の構造から、各pHでのオクタノール/水系への分配係数(LogD値)を予測 | " | お問い合わせ下さい | — | — |
| LogP DB | " | " | 中性有機化合物の構造から、オクタノール/水系への分配係数(LogP値)を予測。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 | " | 40万円 | — | — |
| pKa DB | " | " | 酸・塩基有機化合物の構造から、酸解離定数(pKa)を予測。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付属 | " | 104万円 | — | — |
| Solubility DB | " | " | 化合物の構造から各pHでの水系への溶解度を予測 | " | 104万円 | — | — |
| Boiling Point Predictor | " | " | 化合物の構造から沸点を予測 | " | 24万円 | — | — |

| | | | | | | | |
|-------------------------|---|---|---|---|------------|---|---|
| Sigma Predictor | " | " | 芳香族反応におけるHammett則の置換基定数(σ 値)を、置換基の構造式から予測 | " | 24万円 | — | — |
| LogD Suite | " | " | 化合物の構造から LogP/pKa/LogD値を予測。生物濃縮係数(BCF)、土壌吸着係数(Koc)、Rule of 5などの薬物動態の予測、評価も可能。pKa DB, LogP DB, Sigma Predictorが付属 | " | 158万4,000円 | — | — |
| LogD Sol Suite | " | " | LogD SuiteにSolubility DB が付属したセット | " | 238万4,000円 | — | — |
| Name Batch | " | " | 構造式からIUPAC/CAS Index ルールに基づき化合物名を命名。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 478万4,000円 | — | — |
| Name-to-Structure Batch | " | " | IUPAC/CAS Index ルールの化合物名からChemFolder DB, sdfファイル形式などで構造式を出力。最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 318万4,000円 | — | — |
| LogD Batch | " | " | イオン化官能基をもつ有機化合物の構造から、各pHでのオクタノール/水系への分配係数(LogD値)を予測。生物濃縮係数(BCF)、土壌吸着係数(Koc)の薬物動態の評価も可能。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 633万6,000円 | — | — |
| LogP Batch | " | " | 中性有機化合物の構造から、オクタノール/水系への分配係数(LogP値)を予測。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 160万円 | — | — |
| Solubility Batch | " | " | 化合物の構造から各pHでの水系への溶解度を予測。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 416万円 | — | — |
| LogD Sol Batch | " | " | LogD BatchとSolubility Batchのセット製品 | " | 953万6,000円 | — | — |
| pKa Batch | " | " | 酸・塩基有機化合物の構造から、酸解離定数(pKa)を予測。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 416万円 | — | — |
| Boiling Point Batch | " | " | 化合物の構造から沸点を予測。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 96万円 | — | — |
| Sigma Batch | " | " | 芳香族反応におけるHammett則の置換基定数(σ 値)を、置換基の構造式から予測。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 96万円 | — | — |

| | | | | | | | |
|-----------------------|---------------|-------------------------|--|------------------------------|--------------|-------------|-------------|
| PhysChem Batch | " | " | バッチ物性値予測の統合製品。化合物の構造からLogP/pKa/LogD/各pHでの水系への溶解度/沸点/ σ /土壌吸着係数(Koc)/生物濃縮係数(BCF)/極性表面積(PSA)/自由回転結合(FRB)/蒸気圧/蒸発エンタルピー/引火点などの物性値を予測。ChemFolder DB, sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能 | " | 104万円 | — | — |
| 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 | — | — |
| LCModel | " | 加 Stephen Provencher | MRIの1H MRスペクトルからカーブフィットにより生体内の代謝産物(クレアチン、コリン、Nアセチルアスパラギンなど)の定量解析を行うソフトウェア | UNIX(SUN、SGI)、LINUX (RedHat) | お問合せ下さい | — | — |
| nordicICE | " | ノルウェー NordicImagingLab社 | 汎用MRI画像解析ソフトウェア。汎用のMRIイメージ処理(画像変換、閲覧、ROI解析、DICOMクライアント)をおこなうBasis Moduleと、臨床的な用途を重視した各脳機能画像法(Diffusion, Perfusion, fMRI, Penguin Stroke Perfusion)用の解析ツールが追加Moduleとしてある | Windows | " | — | — |
| Analyze | " | 米 Mayo Clinic | バイオメディカルイメージングソフトウェア。MRI、CTなどのさまざまな医療画像の読み込みに対応しており、ボリウムレンダリング、サーフェスレンダリング、セグメンテーション、ムービー作成など3D画像の高速表示、加工、データ作成に優れている | Windows, Linux | " | — | — |
| 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、蛋白質定量解析機能装備。 | 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 | " | " | 1999年 | — |
| Mascot Distiller V2.1 | " | " | 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解析、定量解析も可能。 | Windows | " | 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 | " | 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 Mascot用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 | " | " | 1999年 | — |
| Scaffold | " | 米プロテオームソフトウェア | 蛋白質同定検索エンジンの結果を取込、各検索結果の比較表示、データマイニングを行うソフトウェア | " | お問合せ下さい | 2007年 | — |
| 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 |

| | | | | | | | |
|----------------|------|------------|--|--|--|----------|---------|
| Xome | 三井情報 | 三井情報 | 質量分析データを用いたタンパク質の同定・定量・アノテーションを自動で行うことを目的としたプロテオミクス・プラットフォームです。エーザイ(株)シーズ研究所との共同開発により、ユーザーの立場に立ったインターフェースや、機器に依存しない統一された操作など、経験豊富な研究者のノウハウで、MS測定後のデータ解析をサポート。高速同定エンジンの採用や、スピードを重視したピーク検出、および定量アルゴリズム、それらの実行状態を管理する負荷分散機能により、ハイスループットなデータ処理を実現する | WindowsXP/2003 | 300万円(税抜き)、別途有償にてカスタマイズに応じます | 2005年下半期 | 国内15サイト |
| Mass Navigator | 〃 | 〃 | 主要な質量分析器のデータフォーマットに対応した、ユニバーサルMSスペクトル解析ソフトウェアです。LC-MSの3DViewやMALDI用のGel Viewなどの種々のViewer、スペクトルやクロマトグラムのオーバーラップ機能などユーザーフレンドリーなインターフェースを用いて効果的なスペクトルの解析が可能。また、機器の特性に応じたピーク検出、同位体クラスターの検出、スムージングやキャリブレーションなどの補正、目的MSピークの定量等、様々な解析を行うためのアルゴリズムを実装している。さらに、プロテオーム用機能としてXomeと連携しており、タンパク質同定、定量結果を生データレベルで検証することも可能 | WindowsXP/2003 | 200万円(税抜き)、2本目以降値引きあり | 2005年下半期 | 国内18サイト |
| 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 580万円(税抜き)～、年間ライセンス250万円(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい | 2003年上半期 | 国内3サイト |
| 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ダンベル型タンパク質の判別プログラムもある | Sun Solaris、 RedHat Linux、 AIX | V1.5 50万円(税抜き)、V2.0 80万円(税抜き)、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい | 1999年11月 | 国内46サイト |

| | | | | | | | |
|-------------|--------|------------|---|---|--|----------|--------|
| 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(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい | — | 国内5サイト |
| TRANSFAC | " | 独バイオベース | 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 | 企業規模により年間使用料が変化します。詳細並びに教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい | 1999年7月 | — |
| TRANSCOMPEL | " | " | Composite element(複合シスエレメント)に関するデータベース | " | " | " | — |
| 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 | " | " | 2001年上半期 | — |
| TRANSPLORER | " | " | 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 | " | 2003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 |

| | | | | | | | |
|--|---------|---------|---|--|---------------------------------|----------|----|
| Homology Modeling Professional for HyperChem | 分子機能研究所 | 分子機能研究所 | 分子力学計算はもとよりab initio量子化学計算、分子動力学シミュレーションを網羅的に実施して、巨大分子モデリング、機能解析、シミュレーションできる、HyperChemをコアとする最先端分子モデリングプログラムパッケージ。HyperChemとGaussian03をシームレスに制御、計算結果をリアルタイムにフィードバックでき、巨大分子システム全体を量子化学的に処理して、更なるモデリング、機能解析、およびシミュレーションに利用できる。すべての操作が完全自動化・GUI化され、構造ベース創薬からライフサイエンス研究におけるあらゆる論理的分子設計、未踏研究をロジカルに支援できる。さらに、画期的コストパフォーマンスをも達成 | HyperChem5.x/6.x/7.x/8.03 (必須): Gaussian98 RevA9以上あるいは Gaussian03: Windows95/98/NT/2000/XP/Vista | アカデミック: 24万円、一般: 48万円 | 2005年12月 | 有り |
| Homology Modeling for HyperChem | " | " | HyperChem上でホモロジーモデリング、タンパクモデリング、機能解析、シミュレーションを一貫して実施するために必要な全機能を提供するプログラムパッケージ。Gaussian Interface for HyperChemの全機能が利用できる | " | 学生: 9万5千円、アカデミック: 19万円、一般: 38万円 | 2005年8月 | 有り |
| ONIOM Interface for Receptor | " | " | タンパク質分子と低分子からなる分子システムに特化したONIOMインターフェイス。Gaussian Interface for HyperChemの全機能に加え、HyperChem上に表示した分子システムに対するGaussian03の2-layerおよび3-layer ONIOM計算用入力ファイルを自動生成して起動し、その計算結果をフィードバックすることで巨大タンパク分子システム全体を量子化学的に処理して、更なるモデリング、機能解析、シミュレーションに利用できる | " | アカデミック: 5万5千円、一般: 11万円 | 2005年12月 | 有り |
| Gaussian Interface for HyperChem | " | " | HyperChem上に表示した複雑な分子システムにおける個々の分子の分子モデリング、分子エディタ用プログラム。生体高分子以外のあらゆる分子種に関してGaussian入力ファイルを自動生成して起動し、計算結果をリアルタイムにフィードバックして、更なる分子モデリングに生かすことができる | " | アカデミック: 3万5千円、一般: 7万円 | 2005年12月 | 有り |

| | | | | | | | |
|--|------------|------------|---|---|--------------------------------------|-------------------------------|-------|
| Docking Study with HyperChem Essential(単一化合物)、Premium Essential(10化合物)、Professional(100化合物)、Advanced(1,000化合物)、Ultimate(10,000化合物) | '' | '' | HyperChemの優れた計算化学環境上でタンパク・リガンド、核酸・低分子フレキシブルドッキングシミュレーションを可能にするプログラムパッケージ。HyperChemに搭載されるすべての力場、あらゆる原子条件の組み合わせをサポート。生体高分子に対しては主鎖や側鎖のインデューズドフィット効果が明示的に取り扱え、化合物に対しては網羅的なコンフォメーションサーチが可能。インデューズドフィット効果を超えた大きな構造変化に対応する新たなフレキシブルドッキングアルゴリズムも搭載。完全自動化、GUI化され、パラメータファイル等の編集作業やコマンドライン作業が一切不要。1タスクあたり最大1万化合物までのin silicoスクリーニングに必要な全機能を搭載したマルチ化合物対応版も利用可能。二次元化合物データベースに対する全自動化化合物2D-3D構造変換プログラムMol Dimension、洗練されたヒット化合物閲覧、解析準備用多機能ビューアDock Viewer、生体高分子の複合体形成部位、リガンドのファーマコフォア、およびスキヤッフオールドまでも高精度に予測するPIEFII制限版を搭載 | HyperChem6.x/7.x/8.03(必須): Windows98/NT/2000/XP/Vista | お問い合わせください | 2006年6月(マルチ化合物対応版は2006年11月中旬) | 有り |
| 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 |
| 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、低分子混合系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。多成分系の化学ポテンシャルが計算可能。液晶では世界最高峰のソフト | Xeon、Core2、Opteron等 Intel CPU および互換機。OSはLinuxおよびUnix | 標準機能版300万円(基本機能のみ120万円)。力場、オプション機能別売 | 1998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 |
| BioPrism(バイオプリズム) | NEC | NEC | プロテオミクス研究向けLIMSとして、MSデータ等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: WindowsXP | 300万円~(詳細はお問い合わせください) | 2005年 | 非公開 |
| BioPrism Sample Assistance(バイオプリズム サンプルアシスタンス) | '' | '' | 生体組織や植物組織などの試料サンプルについて、保管場所への登録(受け入れ処置)や出庫(取り出し)に、二次元バーコードシールの活用による取り違えのない確実な管理が可能。受け入れ元、管理者等の由来情報の他、画像ファイル、文書ファイル等の関連情報をサンプルに対応付けて保存することができる | サーバ: LINUX、クライアント: WindowsXP | 150万円~(詳細はお問い合わせください) | 2006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 |

| | | | | | | | |
|-------------------------------------|-------------------|---------------|--|---------------------|---------|----------|---|
| Molegro Virtual Docker | ノーザンサイエンスコンサルティング | デンマーク・モレグロ | 蛋白質-リガンド相互作用を予測するための統合プラットフォーム。分子のプレパレーションからターゲット蛋白質のポテンシャルバインディングサイトの決定、そして、リガンドのバインディングモードの予測まで、ドッキングプロセスの全てを現在トップレベルの精度で行うことができる | Windows, Mac, Linux | お問合せ下さい | 2006年9月 | — |
| Molegro Data Mining | '' | '' | データモデリング、データマイニングのためのソフトウェア。スプレッドシートにまとめられたデータをインポートし、クラスタリング、回帰モデリングなどの統計解析の結果を得るまで、マニュアル不要で操作できる大変使いやすいGUIが特徴。最先端の解析アルゴリズムを随時、追加搭載予定 | Windows, Mac, Linux | お問合せ下さい | 2007年12月 | — |
| GastroPlus | '' | 米シミュレーションズプラス | ミシガン大学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。経口投与製剤の消化管内の挙動、薬物の血中移行を解析・予測。製剤設計支援、Virtual Trialにも有効 | Windows | '' | 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12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 | '' | '' | 化合物構造からADMET物性値を予測するソフトウェア。物理化学性状:pKa、LogP、LogD、溶解度、拡散係数、生物学的性状:ヒト膜透過性、MDCK膜透過性、BBB透過性、動態的性状:分布容積、血漿タンパク結合率、吸収率、MRTD、毒性:AMES、発がん性、変異原性、魚毒性、hERG Affinity、活性:HIV。自社のデータセットからニューラルネットワークやサポートベクターマシンで新しいモデルを構築し、ADMET PredictorをカスタマイズするModelerも搭載 | '' | '' | 2005年5月 | — |
| ADMET Predictor-Ensein Metabolism Module | '' | '' | CYP 1A2, 2C9, 2D6, 2D19, 3A4でのKm値、Vmax値を予測するADMET PredictorのOption Module | '' | '' | 2008年1月 | — |
| DDDPlus | '' | '' | 米国薬局方(USP)のパドル法、バスケット法、フロースルー法での試験によるin vitroでの製剤の崩壊および溶出をシミュレーションする世界唯一のソフトウェア。新規有効成分であれば1回の検量試験を行えば、剤形の変更や実験条件の変更による溶出への影響を予測 | '' | '' | 2005年5月 | — |
| ClassPharmer | '' | '' | 研究者の視点でケミカルスクリーニングデータの可視化、体系化、検索、解析をシンプルにかつ高機能に行うソフトウェア。SDおよびSMILESファイルを出発とした内容の可視化や閲覧、クラスタリング、クエリー検索、ディスクリプター生成、QSARモデル作成、構造類似性解析が可能。Virtual Libraryを発生させる機能も追加 | '' | '' | 2006年1月 | — |
| 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 | '' | 2004年12月 | — |
| HTPro for ADMET Predictor | '' | ノーザンサイエンスコンサルティング | ADMET Predictorのインプット・アウトプットを簡易にできるツール。ADMET Predictorで計算可能な物性値の中から必要な物性を定義し、構造を選択するだけでADMET Predictorが計算を開始、Microsoft Excelで読み込み可能なファイルに物性値が出力 | '' | '' | 2005年9月 | — |
| ChartSpect | '' | '' | 実験データハンドリングシステム。各種の分析装置から得られるデータを装置の種類やメーカーを問わず相互に関連付けて一元管理。 | Windows, Linax | '' | 2007年5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 |
| SDCheckerEnterprise | パトコア | Patcore&Phastec | 全社規模の法規制物質判定システム。SOA採用し電子ノートなどの外部システムとの連携が容易。麻薬、向精神薬、指定薬物、毒劇法等に定められた物質を構造式から迅速に判定する | Windows/Linux | お問合せ下さい | — | — |
| SDClean | '' | '' | 構造式標準化ソリューション | '' | '' | — | — |
| SDFilter | '' | '' | 物性計算および物性等に基づく化合物フィルタリングツール | '' | '' | — | — |

| | | | | | | | |
|---------------------------|---|--------------|--|-----------------------|---------------------|---|---|
| SDSearch | " | " | 類似度等に基づくライブラリ比較・構造絞込みツール | " | " | - | - |
| SDStation | " | " | SDファイルの表示、マージ、分割ツール | " | " | - | - |
| SDCounter | " | " | 任意のフラグメント数カウントツール | " | " | - | - |
| SD3D | " | " | 高精度3D構造の生成ツール | " | " | - | - |
| SMILESviewer for EXCEL | " | " | EXCEL上のSMILES文字列の構造式表示・埋め込み | Windows | " | - | - |
| SMILESviewer for Spotfire | " | " | Spotfire上のSMILES文字列の構造表示 | " | " | - | - |
| J-S Connectorer | " | " | JChemBaseとSpotfireの統合化ソリューション | " | " | - | - |
| J-E Connectorer | " | " | JChemBaseとEXCELの統合化ソリューション | " | " | - | - |
| CRAIS | " | " | 化合物登録管理システム。アッセイデータとの統合検索が可能な化合物登録システムパッケージ | " | " | - | - |
| Marvin Sketch | " | ハンガリー・ケムアクソン | Javaベースの構造描画ツール。直感的な操作で、構造・反応・クエリーの描画が可能。スタンドアロンの描画ツールとしての利用はもちろん、Webアプリケーションからも利用できる | Windows/Linux/Sun/Mac | 条件により無償。詳細はお問合せください | - | - |
| Marvin View | " | " | SDファイルやSmiles、InChiなど様々な構造フォーマットのファイルを読み込み、テーブル形式やグリッド形式で表示が行える | " | " | - | - |
| Marvin Space | " | " | Javaベースの高品位分子グラフィックス表示ツール。低分子からタンパク質などの巨大分子までスムーズな三次元グラフィックスの表示を行う。また、Calculator Pluginsの計算結果に基づき分子モデル上に着色することができる | " | " | - | - |
| Instant JChem | " | " | 化学情報をローカルデータベースで管理する為のデスクトップアプリケーション。フォームの作成なども容易に可能で、サーバーのJChem Baseに対するユーザーインターフェースとしての役割も担う | " | " | - | - |
| JChemBase | " | " | 高速な検索アルゴリズムを搭載した構造検索エンジン。完全一致検索、部分構造検索、類似構造検索、スーパーストラクチャー検索、Rグループ検索、反応検索、さらに業界初のマーカッシュ検索をサポートしている | " | お問合せ下さい | - | - |
| JChemCartridge | " | " | OracleネイティブのSQL環境で、構造および反応の検索ができる。SQLのSELECT文において構造条件に加えCalculator Pluginsを組み合わせて予測物性値を検索条件に指定することも可能。(本製品はJChem Baseの機能を包含する) | " | " | - | - |
| Screen | " | " | ファーマコフォア解析とバーチャルスクリーニングのためのツール群。ファーマコフォア認識、ケミカルフィンガープリントおよびファーマコフォアフィンガープリントの生成、化合物ライブラリに対するバーチャルスクリーニングが可能 | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|--------------------------|---|----------------|--|---------|---|---|---|
| Jklustor | " | " | クラスタリング、ダイバシティ計算、分子フィンガープリント、MCS解析、ディスクリプター等に基づくライブラリの評価を行うことができる。コンビケム、ドラッグデザイン、その他化合物ライブラリの解析が必要な場面で活用可能 | " | " | - | - |
| Reactor | " | " | ジェネリックな反応を用いてバーチャルライブラリーを作成するためのソフトウェア。単にバーチャルな分子を作るのではなく、化学的に意味があり、合成できる可能性の高い化合物を生成するユニークなアプローチを採用している | " | " | - | - |
| Fragmenter | " | " | ドラッグデザインに用いるビルディングブロックを作成するためのソフトウェア。フラグメントに分解する際、切断に関する情報を保持するので、これらのフラグメント情報を用いてバーチャルライブラリーを作成する事ができる | " | " | - | - |
| Standardizer | " | " | 構造標準化のモジュールで、様々な表記の構造式を設定されたルールに基づいて正規化する。データベースに登録する構造式を予め標準化することなどに利用でき、確実に効率的な検索を可能にする | " | " | - | - |
| Charge Plugin | " | " | Charge Distribution, Polarizabilityの計算 | " | " | - | - |
| Protonation Plugin | " | " | pKa, Major Microspecies, Isoelectric Pointの計算 | " | " | - | - |
| Partitioning Plugin | " | " | logP, logDの計算 | " | " | - | - |
| Geometry Plugin | " | " | Topological Polar Surface Area (TPSA), Refractivityの計算 | " | " | - | - |
| HBDA Plugin | " | " | Hydrogen Bond Donor/Acceptor数の計算 | " | " | - | - |
| Isomers Plugin | " | " | Tautomer, Resonance, Stereoisomersの列挙 | " | " | - | - |
| Name to Structure Plugin | " | " | IUPAC名から構造式を生成 | " | " | | |
| Structure to Name Plugin | " | " | 構造式からIUPAC名を生成 | " | " | | |
| Confirmation Plugin | " | " | コンフォメーション生成、分子動力学計算 | Windows | " | - | - |
| SAR>vision | " | 米アルトリス | 骨格抽出(MCS)・分類に基づくSAR解析ツール | " | " | - | - |
| SAR>vision+PLUS | " | " | 大容量のデータに対応した骨格抽出・分類に基づくSAR解析ツール | " | " | - | - |
| ChemASP | " | " | サーバーベースの大規模な骨格抽出(MCS)・分類ツール | " | " | - | - |
| ChemSABRE | " | " | 詳細な置換基の解析ツール。R×Rテーブルの作成が行える | " | " | | |
| DMax Chemistry Assistant | " | ベルギー・PharmaDM | 仮説創生ツール | " | " | - | - |
| MassWorks | " | 米Cernoバイオサイエンス | 質量分析計の精度を100倍迄改善、革新的な組成式決定支援ツールを提供。四重極質量分析装置で容易に組成式の決定ができる | " | " | - | - |
| DDIPredict | " | 仏・AureusPharma | 薬物相互作用予測システム | " | " | - | - |
| AurSCOPE GPCR | " | " | GPCRリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |

| | | | | | | | |
|--|-----------|-----------|--|---|----------------------|------|------|
| AurSCOPE Kinase | " | " | Kinaseリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE Ion Channel | " | " | Ion Channelリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE Nuclear Receptor | " | " | Nuclear Receptorリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE Protease | " | " | Proteaseリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE Transporter | " | " | Transporterリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE Phosphatase | " | " | Phosphataseリガンドの包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE Global Pharmacology Space | " | " | AurSCOPEシリーズ全体を包含した包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE ADME/DDI | " | " | 薬物相互作用の包括的ナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE hERG | " | " | 低分子リガンドの心毒性に関するナレッジベース | " | " | - | - |
| AurSCOPE HepatoTox | " | " | 低分子リガンドの肝毒性に関するナレッジベース | " | " | - | - |
| 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 |
| RIAS(Remixpoint Interactive Archive Service) | 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実験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やパスウェイデータからPDF形式での学术论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する | 【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 | 300万円～ (CPUライセンス) | - | - |

| | | | | | | | |
|------------------|--------------------|--------------------|--|--|------------------------------------|----------|-----------------------|
| CorporateCAST | 富士ソフト、NTTAT、ダイキン工業 | 〃 | CorporateCAST®は動画を含むデジタルコンテンツ共有サイトを構築するためのシステム。高い操作性によってビデオや写真、音声などのコンテンツを専門の知識がほとんど無いユーザでも登録ができ、Webブラウザを使い、自由に検索・閲覧・共有することが可能。またダイレクトに目的のコンテンツに到達するリンクURLや社内Blogなどへコンテンツを埋め込めるHTMLタグ提供機能もサポートし、さらに広がりのある情報共有を可能にする。誰でも気軽に高度な情報を共有・発信をすることができる新たな情報プラットフォームを実現する | [サーバ]【OS】RedHat Enterprise Linux 4.0以上 もしくは Windows Server 2003 standard Edition 以上、【CPU】Pentium4 2.8GHz以上、もしくは同等性能以上のCPU 【クライアント】【OS】Windows XP, Windows Vista、【CPU】PentiumⅢ 1GHz以上、もしくは同等性能以上のCPU | 200万円～(サーバライセンス/専用アップローダ10ライセンス含む) | 2008年1月 | 4サーバライセンス(2008年5月末時点) |
| 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 | Windows、MacOS X、Linux、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX、IBM AIX | — | 1997年9月 | — |
| PSILO | 菱化システム | 加ケミカルコンピューティンググループ | タンパク質立体構造情報データベースシステム。WEBインターフェースによるタンパク質-リガンドの相互作用解析とアノテーション | Linux | — | 2008年4月 | — |
| FlexSIS | 〃 | 独バイオソルヴアイティー | ドッキングスタディツール。Single Interaction Scanアルゴリズムを使用し、結合部位中でリガンド結合構造を構築 | Windows、Linux x86、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX Itanium2 | — | 2007年11月 | — |
| FlexSIS-Ensemble | 〃 | 〃 | リガンドと受容体の誘導適合を行うモジュール | 〃 | — | 2007年11月 | — |
| FlexSIS-Pharm | 〃 | 〃 | ファーマコフォアを使ってFlexSISの結果を絞り込むためのモジュール | 〃 | — | 2007年11月 | — |

| | | | | | | | |
|--|---|----------------|---|---|---|----------|---|
| FlexSIS-C | " | " | リガンド結合部位中で、リガンド候補構造をコンビケム合成 | " | — | 2007年11月 | — |
| FlexSIS-Screen | " | " | FlexSISの精度を保持しつつスクリーニングを数倍から10倍高速化させるモジュール | " | — | 2007年11月 | — |
| Recore | " | " | リガンド構造の母核やリンカーを置き換えるモジュール | " | — | 2007年11月 | — |
| FTrees | " | " | 官能基の物理化学的特性と結合情報から成るトポロジカルな分子記述子による類似構造検索 | Windows、Linux x86、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX Itanium2 | — | 2007年6月 | — |
| FTrees-FS | " | " | 化合物フラグメントデータベースに対して FTrees で デノボ検索 | " | — | 2007年6月 | — |
| FTrees - Added Value Package (FTreesXL, HTSview, MTrees) | " | " | FTreesのGUIや、FTreesを使ってHTSデータの解析を行うための追加モジュール | Linux x86、SGI IRIX | — | 2007年11月 | — |
| CoLibri | " | " | FTrees-FSやコンビケムで使用するためのフラグメントライブラリを作成するモジュール | Linux x86、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX Itanium2 | — | 2007年11月 | — |
| FlexS | " | " | リガンドの重ね合わせ とバーチャルスクリーニングを行う創薬支援ツール | " | — | 2007年6月 | — |
| FlexS-C | " | " | FlexS にコンビケムのルールを加えてテンプレートに整列する仮想化合物ライブラリを構築するモジュール | " | — | 2007年7月 | — |
| 2Ddraw | " | " | 化合物を2次元表示したり FTrees のフィーチャで整列するモジュール | Windows、Linux x86 | — | 2007年6月 | — |
| MED-SuMo | " | 仏メディット | タンパク質のリガンド結合部位表面の官能基の配置を2次元のグラフに抽象化し、タンパク質構造データベースから高速に類似表面特性を持つ標的タンパク質を探索する | Linux (Server)、Windows (Client) | — | 2008年4月 | — |
| GVK Database | " | 印GVKバイオサイエンス | 下記のようなさまざまな化合物データベースを MOE/Daylight/CBISの各フォーマットで提供 Kinase Inhibitor, GPCR Inhibitor, Protease Inhibitor, Ion Channels Inhibitor, Transporters, NHR., Phosphatase Inhibitor, Pre-Clinical Candidate, Pre-Clinical Candidate, Drug, MedChem, Mechanism Based Toxicity | Windows、Linux x86 | — | 2006年7月 | — |
| NetPro | " | 印モレキュラーコネクションズ | タンパク質-タンパク質間およびタンパク質-低分子間相互作用の総合的なマニュアルキュレーションデータベース | — | — | 2006年4月 | — |
| BioEpisteme | " | 西ブロウスインスティテュート | 10万件以上の学習データを利用して構築した独自の予測モデルにより予測を行う薬理機序予測システム | Windows、Linux | — | 2006年4月 | — |

| | | | | | | | |
|--------------|---|---------------------------|---|--|---|----------|---|
| SciMAPS | " | 仏サイエノミクス | 量子化学からメソスケールシミュレーションにまで対応する材料設計支援統合計算化学システム。低分子から複雑な高分子のバルクモデルまで簡単に構築でき、ABINIT、LAMMPSなど、著名なシミュレーションプログラムを各インターフェースを利用して統合利用可能 | " | — | 2006年6月 | — |
| LAMMPS IF | " | " | 分子動力学計算ソフトウェアLAMMPSを利用するインターフェース。LAMMPSの計算実行から結果の解析まで行うことが可能 | " | — | 2006年6月 | |
| ABINIT IF | " | " | 第一原理バンド計算ソフトウェアABINITを利用するインターフェース。ABINITの計算実行からバンド構造の表示等の解析まで行うことが可能 | " | — | 2006年6月 | |
| NAMD IF | " | " | 分子動力学計算ソフトウェアNAMDを利用するインターフェース。NAMDの計算実行から結果の解析まで行うことが可能 | " | — | 2006年6月 | |
| TURBOMOLE IF | " | " | TURBOMOLEの計算の実行から計算結果の解析を行うインターフェース。分子軌道や基準振動解析の結果を表示可能 | " | — | 2006年6月 | |
| SciDPD | " | " | 散逸粒子動力学ソフトウェア。液体や高分子の相変化など、分子動力学計算では対応の難しいメソスケールのシミュレーションが可能 | " | — | 2006年10月 | |
| SciDPD IF | " | " | SciDPDを実行、解析するためのインターフェース。メソスケール用ビルダーによる構造構築や等値面表示などさまざまな機能有 | " | — | 2006年10月 | |
| FHMixing | " | " | Molecular Silverware法による二元混合物のためのモンテカルロシミュレーションソフトウェア。高分子や液体の熱力学物性やSciDPDの相互作用パラメータの推算に利用 | " | — | 2006年10月 | |
| MNDO | " | " | 独Max-Planck-Institut für KohlenforschungのWalter Thiel教授のグループで開発された半経験的分子軌道法のソフトウェア | " | — | 2006年6月 | |
| MNDO IF | " | " | MNDOの計算の実行から計算結果の解析を行うインターフェース。分子軌道や基準振動解析の結果を表示可能 | " | — | 2006年6月 | |
| ADF | " | 蘭サイエンティフィックコンピュティング&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 | Linux、Windows | — | 2001年9月 | — |
| COSMOthermCO | " | " | プロセスシミュレータ用COSMOthermインターフェース | Windows | — | 2007年4月 | |
| COSMOmic | " | " | 分子膜・ミセル内分子分布シミュレータ | Linux、Windows | — | 2007年7月 | |
| COSMO UI | " | 菱化システム | COSMOthermユーザーインターフェース | " | — | 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 励起状態の構造最適化や振動計算が可能 | HP、IBM、 Linux、Sun、 Windows | — | 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 | — |
| MedeA-VASP | " | " | 第一原理バンド計算プログラム | Windows、Linux | — | 2001年5月 | — |
| MedeA-MT | " | " | 弾性率・熱理学物性評価ソフトウェア | Windows | — | 2003年4月 | — |
| MedeA-Phonon | " | " | 格子振動・熱力学物性評価ソフトウェア | " | — | 2003年4月 | — |
| MedeA-GIBBS | " | " | モンテカルロ法計算プログラム | Windows、Linux | — | 2006年8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インターフェース | " | — | 1998年10 月 | — |
| AMPAC | " | 米セメケム | 構造最適化や遷移状態探索を高速で実行することのできる半経験的分子軌道法プログラム。付属のGUIは、 GaussViewの全機能も包含 | " | — | 2005年11 月 | — |
| CODESSA | " | " | 豊富な分子記述子計算機能をもつ構造物性関連ソフトウェア | SGI、HP、SUN、 IBM、Intel- Linux、Windows | — | 2005年11 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 | — |
| QuantumCube | " | 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 | — |
| PQS ab initio program | " | " | 並列化効率と構造最適化に長けた量子化学計算ソフト ウェア | Windows、Intel- Linux | — | 2004年9月 | — |
| Direct Force Field | " | 米イーオンテク ノロジー | 高精度分子シミュレーション支援ソフトウェア。さまざまな 分子シミュレーションソフトに高精度のカ場パラメータを提 供。カ場データベースやカ場パラメータ開発機能を搭載。 テンプレートを利用したユーザ独自の力場関数系の作成 も可能 | Windows、Linux | — | 2001年12 月 | — |
| CBIS | " | 米ケムイノベー ションソフトウェ ア | 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 | Windows | — | 2002年8月 | — |
| LabCollector | " | 仏アジャイルバ イオ | 生物学系実験研究におけるさまざまな情報を一元管理す る簡易なシステム | Windows | — | 2006年11 月 | — |

| | | | | | | | |
|----------------------------|--------|------------------------|---|-------------------------|-------|----------|------|
| InforSense | " | 英インフォセンス | 解析ワークフロー管理と多様なリソースの統合を特徴とするインフォマティクスプラットフォーム | Windows、MacOS X、Linux | — | 2002年8月 | — |
| CHEMKIN | " | 米リアクションデザイン | 燃焼や触媒反応、CVDなどの複雑な化学反応プロセスにおけるキネティクスを詳細に解析するソフトウェア | Unix、Linux、Windows | — | 2005年4月 | — |
| CHEMKIN Particle Tracking | " | " | CHEMKIN GUI上で、すずやカーボンブラックなどの核生成反応や粒子サイズ分布などを解析するためのプラグインモジュール | " | — | 2006年7月 | — |
| CHEMKIN-CFD | " | " | CHEMKINの入力形式で作成された化学反応式を数値流体力学計算ソフトウェア(CFD)上に組み込むためのプラグインモジュール | " | — | 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 | " | — | 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とのできる化合物データベースコンテンツ | " | — | 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 | " | — | 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 | " | — | 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 | — |
| Partek Discovery Suite | " | 米パーテック | 高度なデータ可視化機能を搭載し、大規模なデータの取り扱いが可能な統計解析ソフトウェア | Windows、Intel-Linux、Mac | — | 2005年8月 | — |
| Partek Genomic Suite | " | " | Discovery Suiteに、Affymetrix、Illuminaデータの読み込み、NCBI、UCSC Genome Browserなどの外部データベースへのリンク、アノテーション機能を搭載した遺伝子発現解析用パッケージ | " | — | 2005年8月 | — |
| Partek QSAR Soluion | " | " | ISISとの連携機能などを搭載したQSAR解析用パッケージ | " | — | 2005年8月 | — |
| Partek Screener's Solution | " | " | HTSプレートデータの読み込み機能を搭載したHTSデータ解析用パッケージ | " | — | 2005年8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 | — |
| MOPAC2007 | " | 米スチュワートコンピュータショナルケミストリ | 高精度の新しいハミルトニアンPM6を搭載したMOPAC最新版 | Windows、Linux | — | 2007年10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・特徴 | 動作環境 | ソフト価格 | 出荷年月 | 販売実績 |

| | | | | | | | |
|-----------------------|--------------------|---------|---|----------------|--------------|---------|----|
| Olivia | サイエンス・テクノロジー・システムズ | 北海道大学 | 北海道大学稲垣研究室が中心となって開発したNMRスペクトルを解析するための本格的なワークフローツール。また、経済産業省地域新生コンソーシアム研究開発事業における研究成果では、Oliviaテクノロジーは、タンパク質構造解析のハイスループット化を実現した | Linux | 別途お問い合わせください | 2007年9月 | あり |
| MS Adsorption Locator | " | 米アクセルリス | 広範な材料において最安定吸着サイトを見つけるのに役立つ。堆積プロセス、情報記録装置、腐食問題、および微細孔材料における触媒反応などを扱うことができる | Windows, Linux | " | 2008年4月 | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS COMPASS | " | " | COMPASSはバルク状態の高精度な分子計算を目的として最適化された第3世代力場。正確な構造、配座、振動と熱物性の予測が可能 | " | " | " | — |
| MS Conformers | " | " | コンフォメーション空間の網羅的な探索データを集め、分析する手法を提供する。単純なものから複雑な系まで、種々の系のコンフォメーション解析へ応用できる | " | " | " | — |
| MS Discover | " | " | 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 | " | " | " | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS DPD | " | " | 一定の原子群をひとつのビーズと設定し、高分子を調和バネで繋がれた鎖と捉えることで、複雑な流体の構造と動的特性を予測する。原子レベルのシミュレーションでは不可能であった大きさ、時間スケールでの予測が可能 | " | " | " | — |
| MS Equilibria | " | " | 鎖状炭化水素分子の相平衡状態を計算 | " | " | " | — |
| MS Forcite | " | " | 分子力学計算エンジン。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 | " | " | " | — |
| MS Gaussian Interface | " | " | Gaussian 03の多様なab initioプログラムとMaterials Studioのモデリング シミュレーション環境内のプログラムとの間で、分子構造およびプロパティデータに関してに互換性を持たせることができる。Windowsのダイアログで、直感的に数回クリックをするだけで理論レベル、基底関数、収束オプションの設定が可能 | " | " | " | — |

| | | | | | | | |
|------------------------|---|---|---|----------------|---|---------|---|
| MS GULP | " | " | 結晶構造のフォノン計算が可能 | " | " | " | — |
| MS Mesodyn | " | " | 混合ポリマーや融解ポリマーなどの複雑な流体の密度とポテンシャルをメソスケールで動力学シミュレーションする。メソスケールに特化したアルゴリズムは、世界的に広く文献や企業レベルで認められている | " | " | " | — |
| MS MesoProp | " | " | マルチコンポーネントで形成されているナノ構造のバルクの性質を予測する | " | " | " | — |
| MS Mesotek | " | " | 自己無撞着場ベースのメソスケールモデリングツール。ブロックポリマー、分枝ポリマー、溶液、分散系のナノスケールモデリングや次世代型擬スペクトル法を利用したメソスケール自己無撞着場法による、ポリマー相図と応力分布の計算が可能。 | " | " | " | — |
| MS Morphology | " | " | 分子構造から結晶の形態を計算予測 | " | " | " | — |
| MS NMR CASTEP | " | " | NMRのケミカルシフトを予測する | " | " | " | — |
| MS Onetep | " | " | DFT計算をDMOL3より高速に行う | " | " | " | — |
| MS Polymorph Predictor | " | " | ゼロから結晶の多形を計算予測 | " | " | " | — |
| MS QMERA | " | " | QMおよびMM法を統合したハイブリッドQM/MM計算により、純DFT計算に比べて、精度低下なく、10倍におよぶ計算速度での構造計算と遷移状態予測が可能 | " | " | " | — |
| MS QSAR | " | " | 定量的構造活性相関を計算 | " | " | " | — |
| MS Reflex | " | " | 粉末X線解析データから結晶構造を計算予測する | " | " | " | — |
| MS Sorption | " | " | 吸着等温線やヘンリー定数などの基本的特性を予測する手段を提供。工業用ガスの生産など、吸着に左右されるプロセスを最適化する | " | " | " | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS 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 | " | " | " | — |
| MS X-Cell | " | " | X線データの指数付けを行う | " | " | " | — |
| DS CFF | " | " | タンパク質から核酸・脂質・糖質・低分子まで幅広くカバーし、極めて最適化およびパラメータ化されたDS CHARMM計算用の力場 | Windows, Linux | " | 2008年5月 | — |
| DS ADMET Descriptors | " | " | 腸内吸収・水溶解度・血液-脳関門透過性・血漿タンパク結合性・チトクロームP450 2D6酵素阻害・肝毒性に関するモデルが予め用意されており、これらを用いることで新薬開発を効率よく行うことができる | " | " | " | — |

| | | | | | | | |
|---------------------|---|---|---|---|---|---|---|
| DS Analysis | " | " | タンパク質およびタンパク質-リガンド複合体の分子動力学結果のトラジェクトリーを解析および視覚化する。RMSD・原子近接・ドッキングした結合様式での水素結合数を計算し、DelPhiを用いて分子系の静電的な性質を調べる | " | " | " | - |
| DS Biopolymer | " | " | ペプチド・タンパク質・核酸 (DNAおよびRNA) の構造の迅速な構築および修飾が可能 | " | " | " | - |
| DS 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 | " | " | " | - |
| DS CHARMM | " | " | 巨大分子や複合体のエネルギー論の検討を行う妥当性が確立されているアプリケーション。分子力学・分子動力学計算が可能 | " | " | " | - |
| DS CHARMM Lite | " | " | リガンド構造の最適化計算 (in situ Ligand Minimization) を CHARMMを用いて行うことにより、ドッキング実験の結果を精密化する | " | " | " | - |
| DS LibDock | " | " | ホットスポットに高速にドッキングさせるプログラム | " | " | " | - |
| DS Library Design | " | " | 化合物ライブラリによるデザインに特化した類似性と多様性のあるクラスタリング手法を提供する | " | " | " | - |
| DS LigandFit | " | " | 巨大分子の標的受容体の活性部位にリガンドをドッキングする、有効性が認められているプログラム | " | " | " | - |
| DS LigandScore | " | " | 十分に評価・検証されたスコアリング関数とその個々の記述子を用いて、リガンド-タンパク質相互作用を評価する | " | " | " | - |
| DS Ludi | " | " | 受容体の構造特性や化学特性を利用して、リード化合物の de novo 設計のためのテンプレートを作成する | " | " | " | - |
| DS MODELER | " | " | タンパク質ホモロジーモデリング・ループモデリング・配列および構造に基づくアラインメント・配列プロファイルスキャン・タンパク質変異の構築・タンパク質の検証を自動的に行う | " | " | " | - |
| DS Protein Docking | " | " | タンパク質同士の相互作用を高速かつ正確に予測するツール | " | " | " | - |
| DS Protein Families | " | " | 配列および構造情報を用いてマルチプルシーケンスアラインメントを実行し、複数のタンパク質をアラインする。さらに機能的に重要な残基の判別のために、系統学的解析および Evolutionary Trace 解析を実行 | " | " | " | - |
| DS Protein Health | " | " | Profiles-3D verification法を使ってタンパク質構造の質を評価し、タンパク質の構造妥当性のチェックおよび解析を行う | " | " | " | - |

| | | | | | | | |
|--|---|---|--|--------------------------|---|---------|---|
| DS Protein Refine | " | " | CHARMm法に基づき、タンパク質の側鎖およびループ部分のエネルギー精密化を行う | " | " | " | - |
| DS QSAR | " | " | 定量的構造活性相関を計算する | " | " | " | - |
| DS Sequence Analysis | " | " | ウェブ上(NCBI)およびローカルコンピュータ上にインストールされたデータベースをBLASTおよびPSI-BLAST法を用いて検索することにより、ユーザーが検討中のタンパク質配列のホモログを判別する。機能的に重要な残基の判別のために、系統的解析およびEvolutionary Trace解析を実行 | " | " | " | - |
| DS TOPKAT | " | " | QSARに基づくシステムで、試薬の分子構造から迅速かつ正確に化学毒性を算出する | " | " | " | - |
| DS Visualizer | " | " | 分子の視覚化を行うことができるGUIの基本ツール | " | " | " | - |
| DS De Novo Evolution | " | " | 一元的、進化的、またはそれらを組み合わせた手法で、scaffold上のフラグメントを連結させたり構築したりすることにより、完全な新規分子を作成。これにより、リード化合物の発見にかかる時間を短縮可能 | " | " | " | - |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Client | " | " | Pipeline Pilot のコンポーネントを組み合わせてプロトコルを作成可能なGUI | Windows (サーバー部分のみLinux可) | " | 2008年4月 | - |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection ADMET | " | " | 合成候補物、ベンダーライブラリ、スクリーニング化合物のような分子コレクションに対して吸収・分布・代謝・排泄の特性予測するコンポーネントを提供。これら薬物動態の特性を創薬過程において最適化することは後段の臨床開発における問題を低減するために非常に重要。ADMET collectionにはヒト腸管吸収、水溶性、脳関門透過性、血漿タンパク結合、チトクロームP450 2D6阻害性、肝毒性の6つの予測モデルコンポーネントが含まれている | " | " | " | - |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Chemistry | " | " | 125を超える機能が80もの部品にモジュール化されており、分子的な物性計算・フィルタリング・分子構造の自動操作、など様々なケムインフォマティクス特有のジョブが可能 | " | " | " | - |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Advanced Modeling Component Collection | " | " | recursive Partitioning (PR法)とMulti-objectivePareto Optimization法を提供。PR法ではsingle treeとforest of treeの学習モデルのコレクションが利用でき、Random Forestメソッドを含む。Pareto Optimization componentは、多目的最適化問題に対する手法を含んでおり、部分的に矛盾する目標間で、トレードオフする基準を解決する方法を提供 | " | " | " | - |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Plate Data Analytics Component Collection | " | " | SciTegic Enterprise Server内でマイクロプレートデータのデータ解析を可能にし、プレートデータの読み書き、レポート作成、表示、編集、計算が可能。またプレートやウェルの情報をデータパイプライン上で扱うことができ、様々な操作が可能。さらにSciTegic Pipeline PilotのGUIを使うことで、プログラムを書くことなく、スクリーニング結果の分析に必要な複雑なデータ解析手法が使えます。Integration Collectionを使うことで、プレートデータをデータベースに登録したり、呼び出しが可能 | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Modeling Collection | " | " | インナープリントを利用したベジアン、PLSモデリングによる構造活性相関モデルの構築、化合物のクラスタリング、Maximal Common Substructureの抽出といった、実在する大規模なデータを効果的に取り扱う手法を提供するコンポーネントコレクション | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Gene Expression Collection | " | " | 個別の標的遺伝子も含めた遺伝子発現解析実験において、解析から可視化、アノテーション、レポートまでのプロセス。コアとなる機能はオープンソースのR言語で実装された、ゲノム解析向けのBioConductorに基づく | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Catalyst Collection | " | " | ファーマコフォアおよび三次元データベース管理に対する、総合的なソリューション。Catalystのテクノロジーは知名度が高く、同種のツールの中では専門家による学術論文などでもっとも頻繁に引用されており、Scitegicのプラットフォーム上に構築されていることにより、自動化された使いやすいワークフローの作成が可能になり、ファーマコフォアの作成や解析を合理化することが可能。Catalystの洗練されたアルゴリズムを使用した、コンフォメーションの概算、3Dデータベースの作成、ファーマコフォア仮説の作成、仮想スクリーニングなどを実行することが可能 | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)CHARMm Collection | " | " | 信頼性の高いCHARMmエンジンを使用した、生体分子シミュレーションのための強力なコンポーネントが提供。このコンポーネントコレクションによって、Pipeline Pilot™の標準機能を拡張し、タンパク質、核酸、低分子、タンパク質-リガンド複合体に対する、安定した正確な分子力学計算および分子動力学シミュレーションを行うことが可能 | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Webport | " | " | Pipeline Pilotプロトコールを外部のアプリケーションから呼び出すための開発ツール。 .Net SDK, Java SDK, Java Script SDKの3種類があり、独自に開発したアプリケーションからPipeline Pilotのプロトコールを利用できる仕組みを提供。クライアントSDKにより自社で開発したアプリケーションに Pipeline Pilotを組み込むことが可能 | " | " | " | — |

| | | | | | | | |
|--|---|---|---|---|---|---|---|
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)クライアント SDKs | " | " | Pipeline Pilotのプロトコールは、ウェブサービスとして公開し、共有することが可能。WebPortは公開されたプロトコールをウェブブラウザから利用するためのインターフェースを提供。ブラウザからインタラクティブにプロトコールのパラメータを変更したり、実行結果をPDFなどのレポートとして参照したりすることが可能 | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Decision Trees | " | " | 再起的分割モデル (Recursive Partitioning) の構築や検証に特化したコンポーネントコレクション | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Integration | " | " | 外部アプリケーションやデータベースとシームレスにリンクして、どのPipeline Pilotのプロトコールにもつなぐことができる | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Reporting | " | " | カスタムレポートを作成する一連のコンポーネント集。複数のテーブル、チャート、イメージを適切に一枚のレポートに表示することにより、様々な視点からデータを見ることができ、例えば別の手法によって得られたデータとの比較をside-by-sideで見ることにより、一段と深い考察が容易となる。多くの標準的なレポートがサンプルとして含まれており、そのまま使用することも可能だが、これらをテンプレートとして独自のカスタムレポートを作成することもできる | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection R-Statistics | " | " | 知見に富んだ解析、情報に富むグラフ表示、そしてデータ裏づけされた意思決定が行える。データ操作・クラスタリング・モデル学習・データ解析といった様々な統計手法を実行するコンポーネントを持っている。統計解析エンジンとしては、パブリックドメインとして広く使用されているRパッケージを選択。これによりR統計解析およびデータ操作の手法を、Pipeline Pilotのデータフローに対して適用することが可能となり、またRからの出力をPipeline Pilotを使用した更なる解析へと直接投入することも可能 | " | " | " | — |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Sequence Analysis | " | " | 基本的なバイオインフォマティクスのツールおよびアルゴリズムをもち、研究業務を補完する実践的配列解析ワークフローを作ることができる。50以上もの異なるコンポーネントを用い、DNA・タンパクの配列を、広く受け入れられているバイオインフォマティクス手法を使用して、解析ならびにアノテーションの付与が可能 | " | " | " | — |

| | | | | | | | |
|---|----|------------|--|-------------------------------|----|---------|---|
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Text Analytics | '' | '' | 文献検索とテキストマイニングの機能をPipelinePilotに加えるもの。デフォルトで様々な文献データベースや検索エンジンのコンポーネントを実装しており、単独で使用しても非常に強力なテキストマイニングのツールだが、ChemistryあるいはBioinformaticsの解析フローと統合するときに、最も大きな効果を発揮する。インタラクティブなキーワード検索、大量の文献情報に対するテキストマイニングなど、どちらにも対応可能 | '' | '' | '' | - |
| Scitegic Enterprise Server(Pipeline Pilot)Collection Imaging | '' | '' | 実験機器や顕微鏡などから出力される画像データと研究データをシームレスに結びつけ、画像データを有効に活用する環境を提供する。画像データに含まれるあいまいな情報や、解析者による結果のばらつきを均一化、明確化して画像データから効率的に情報を抽出する作業を支援する | '' | '' | '' | - |
| LSKB (LifeScienceKnowledgeBank) | '' | ワールドフェーション | 遺伝子名やシンボル、キーワードなど、遺伝子に関する情報をデータベース化したシノニム辞書と、相同性検索により同定された遺伝子、関連するタンパク質の機能辞書を搭載。シノニム辞書を利用して行った文献マイニングのデータを保持。遺伝子と疾患、化合物との関連性を検索表示することが可能。 | Windows, Linux | '' | 2008年2月 | - |
| 記きroku録 | '' | '' | プライベートデータ管理ソフト。デスクトップ上で70000件までの配列データを管理できる。アノテーション編集、検索機能を利用したグループ分け、プライベートデータベース作成、PC上でのBlast検索可能。PC版、サーバー版と用途に合わせて選択可能 | Windows(クライアントサーバー部分のみLinux可) | '' | '' | - |
| 菌KIN | '' | '' | 独自に検証した18S、ITS、156Sデータに対し配列をBLASTし、その結果からFAMILYやGENUSを判別する菌種推定システム。配列間のアライメントおよび系統樹作成まで行うことが可能 | Windows | '' | '' | - |
| PathwayExpert | '' | '' | パスウェイ解析統合環境。PathwayExpertはパスウェイ解析ツールで定評のあるAriadneGenomics社の文献情報と、発現実験データからネットワークおよび分子相互作用を推定するシステム。MedScanの自然言語解釈アルゴリズムに基づき、文献中の様々な生物学的情報を自動的に抽出しDB化した後、パスウェイを描画。Medlineの全アブストラクトに対して遺伝子名等でのキーワード検索を実行し、関連する文献から生物医学情報を抽出することが可能 | Windows, Linux | '' | '' | - |

| | | | | | | | |
|--------------------------------|---|---|---|----------------|---|---|---|
| GenomeViewer | " | " | UCSCのゲノムデータベースおよびNCBIのRefSeqのヒト、マウス、およびラットゲノムデータを取り込み可能なゲノムビューワ。各染色体ごとに指定した部位の配列およびアノテーション情報を参照できる | " | " | " | — |
| Genowiz | " | " | マイクロアレイ結果の解析、表示に優れたデスクトップ型発現解析ソフト。多様なデータフォーマットに対応。フィルタリング機能で、データをより解析しやすい形にまとめ、ノーマライズや、ソートさらには様々な階層、非階層のクラスタリングアルゴリズムによる解析が可能 | Windows | " | " | — |
| MedScan Reader | " | " | PubMedアブストラクトやドキュメントなどからAriadneGenomics社が開発した自然言語解釈アルゴリズムを利用して文章中に存在する因子（たんぱく質、化合物、疾患など）とその関連情報を抽出することで、すばやく文献の内容を理解するためのソフトウェア | " | " | " | — |
| GenomeViewer Expression Option | " | " | ゲノムビューアー・発現オプションは、ゲノムデータベース上に遺伝子やSNPなどの機能情報をマップするのと同様に、DNAチップで実験した発現データをゲノム情報と同時に染色体上に遺伝子単位で表示するためのソフトウェアで、現ゲノムビューアーのオプション。ゲノムデータベース上に発現実験データを遺伝子ごとに整理して表示することで、染色体の位置情報を含んだ遺伝子のアノテーションと発現との関連が明らかになる。つまり同一染色体上で生じるさまざまな現象を発現実験データとゲノムアノテーションを同時に利用して把握することを目的としたソフトウェア | Windows, Linux | " | " | — |
| GenomeViewer 微生物 Option | " | " | ヒト・マウス・ラット用に開発し導入実績の多いゲノムビューアーに、微生物版が誕生しました。公共データベースから取得した微生物ゲノム情報の表示およびそのアノテーションの管理を行えるほか、独自にアセンブルしたゲノム情報をデータベースとして構築できる | Windows, Linux | " | " | — |
| Kiroku-Expression | " | " | 「Kiroku-Expression」は発現実験データを管理するためのデータ共有型ソフトウェア。小規模から大規模までの実験をサポートし、生データの管理から解析結果データの管理までが可能。さまざまなデータフォーマットに対応しているため、LIMS代わりに利用できる。実験に利用した遺伝子のアノテーションは、配列データとともに「Kiroku」で管理できる。豊富な検索機能は、必要なデータの抽出が可能 | Windows | " | " | — |

| | | | | | | | |
|---|---|------------------------|---|----------------|---|---------|---|
| BLAST Servers | " | " | バッチでのBLASTサーチ実行が可能な汎用BLASTサーバーで、クエリーや結果をリレーショナル・データベース (Oracle) で完全管理していることが特徴。BLAST結果から高スコアのデータを抽出するだけでなく、低スコアでもしっかりとエレメントがマッチしているようなデータをマイニングするような、高度なデータマイニングをリレーショナル・データベースに保存された検索結果を利用して容易に行えるようになっている。また、BLAST結果から遺伝子を分類するといった高度なデータマイニングに対応することもできる | Windows, Linux | " | " | — |
| LaboServer | " | " | 大量のデータおよび様々な分析機器からのデータ、さらには実験結果ファイルやプロトコルなどのドキュメント管理までトータルに行える本格的なデータ管理システム。すでに多くの実績をもっている。文書往来は特に医薬品生産技術開発時に発生する文書およびデータ類のデータベース管理に特化して開発された | Windows | " | " | — |
| BioElephant | " | " | 三菱スペース・ソフトウェア、ワールドフュージョン、ARIADNE GENOMICSのバイオインフォマティクステクノロジーを結集した創薬研究のプラットフォーム | Windows, Linux | " | " | — |
| Spotfire DecisionSite | " | 米ティブソフトウェア (スポットファイアー) | データウェアハウスなどの整備により、データは日々増大している。重大な意思決定を行う際には、以前とは比較にならない程、膨大なデータをふるいにかけて分析しなければならぬ。今後もITの技術革新は益々加速して、意思決定プロセスはより一層、重要かつ複雑になっていくことが予想される。スポットファイアーのDecisionSiteは、研究開発、製品開発、生産および経営戦略において、一連のビジネス・プロセスをより速くより正確な意志決定を支援するシステムを提供する | Windows | " | 2008年3月 | — |
| Spotfire DecisionSite for Lead Discovery | " | " | IDBS社ActivityBaseを利用したデータ・スクリーニング、MDL社ISIS利用によるリードの選定および化合物のスクリーニング、Current Drugs社Iddb3をに対するキーワードの及び構造式検索、また企業独自のISISデータベースの構造式に関するSAR解析等、創薬研究に関する様々なデータに対応する | " | " | — | — |
| Spotfire DecisionSite for Functional Genomics | " | " | 膨大なデータからの重要な遺伝子の探索、カテゴリズを迅速に行う。遺伝子発現解析において、統合されたデータを取得することはとても重要。DS for FG はデータの場所を意識せずに研究者の方は統合されたデータを取得することが可能。またデータのマージやリンクも簡単に行うことができる | " | " | — | — |

| | | | | | | | |
|----------------------------------|---------------|----------------|---|---|-------|---------|------|
| Spotfire DecisionSite Statistics | " | " | DecisionSiteの強力なVisualization環境に統計解析機能を提供する。大量かつ多次元のデータからより迅速な意思決定を可能とする。主な機能は、基本統計の計算(mean, median, normality testing, etc), 基本統計のBox Plot表示, Anova(analysis of variance), PCA(principal component analysis), K-means cluster, Hierarchical cluster (UPGMA, WPGMA, Word's method etc), Decision Tree | " | " | — | — |
| Spotfire DecisionSite Posters | " | " | 膨大なデータからの重要な遺伝子の探索, カテゴリズを迅速に行う。遺伝子発現解析において, 統合されたデータを取得することはとても重要。DS for FG はデータの場所を意識せずに研究者の方は統合されたデータを取得することが可能。またデータのマージやリンクも簡単に行うことができる | " | " | — | — |
| Marvin | " | 米ケムアクソン | Webベースの構造式描画・表示ソフト。化学構造式, 反応式, 検索クエリーの描画が可能で, 表形式の表示, 構造の3次元化なども可能 | " | " | 2008年1月 | — |
| JChemBase | " | " | 化学構造データベースエンジン。高速に部分構造検索, 類似構造検索, スーパーストラクチャー検索が可能 | " | " | — | — |
| JChemCartridge | " | " | Oracle®用化学構造データベースカートリッジ。SQLでの構造式のハンドリングが可能 | " | " | — | — |
| CalculatorPlugin | " | " | 各種物性計算ソフト。化学構造式に基づきLogP, PKaなどのプロパティ計算が可能 | " | " | — | — |
| Standadizer | " | " | 化学構造式の標準化ソフト。データベース登録などの際に構造の標準化が可能 | " | " | — | — |
| Reactor | " | " | バーチャル化学反応エンジン。合成できる可能性の高いバーチャルライブラリーの生成が可能 | " | " | — | — |
| Frangenter | " | " | 構造のフラグメント化ソフト。ドラッグデザインの為のビルディングブロックの生成が可能 | " | " | — | — |
| Screen | " | " | ファーマコフォアスクリーニングソフト。ファーマコフォア解析とバーチャルスクリーニングが可能 | " | " | — | — |
| SARvision | " | CHEMAPPS | 構造活性相関の検討を支援する。化学構造データを骨格ごとに分類することができ, SARの検討を容易にする | Windows, Linux | " | 2008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 |
| <プラットフォーム製品> | シミックス・テクノロジーズ | 米シミックス・テクノロジーズ | | | | | |
| Symyx Isentris | " | " | 多様な研究データ・システムを統合する事を可能とする、新世代の3層構造アーキテクチャに基づく創薬研究IT基盤の総称 | Windows 2003/XP, SUN Solaris & Oracle | — | — | — |

| | | | | | | | |
|------------------------|---|---|--|--|---|---|---|
| Symyx Isentris Client | " | " | 一つのインターフェイスで簡単に化学構造式・化学反応式の検索・参照を多様な形で行うことができるSymyx Isentrisの一コンポーネント。社内・社外両方のデータの統合も可能 | クライアント: WindowsXP(近日リリース予定の新バージョンにてVistaをサポート) | — | — | — |
| Symyx Isentris Control | " | " | Isentrisの各機能(ログイン・セッション管理、データ表示、クエリ作成、検索履歴、フォーム作成等)をMicrosoft .NETコントロール化したSymyx Isentrisの一コンポーネント。これらを使用して独自クライアントを作成可能 | " | — | — | — |
| Symyx Draw | " | " | 新世代のより高度な構造式描画に対応した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による機能の拡張・制御が容易 | " | — | — | — |
| Symyx Core Interface | " | " | ユーザ・セッション管理、多様なデータ操作を行うことを目的とした、Symyx Isentrisの一コンポーネント(中間層)。J2EEを利用して、独自機能の追加が可能 | Windows 2003, SUN Solaris & Oracle | — | — | — |
| Symyx Cheshire | " | " | 化学構造式データを操作するソフトウェア開発ツール。構造式や反応式の表記を修正したり、Enumerationや特性値計算を行う | サーバー: Windows 2003/SUN Solaris クライアント: Windows XP | — | — | — |
| Symyx 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 2000/2003 server, SUN Solaris, Linux(Red Hat) & Oracle | — | — | — |
| Symyx ISIS/Host | " | " | 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)にアクセスする | Windows 2000 server/2003 server, SUN Solaris & Oracle | — | — | — |
| Symyx 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 2000/XP/Vista | — | — | — |
| Symyx 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 | " | — | — | — |

| | | | | | | | |
|----------------------------|---|---|---|--|---|---|---|
| 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は更に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/Vista, Macintosh | — | — | — |
| <アプリケーション製品> | | | | | | | |
| Symyx Notebook 6 | " | " | 研究開発全般をカバーできる電子実験ノート。テンプレートを利用して、実験を記録。柔軟な設定が可能。今後、様々な研究分野の実験に特化したコンポーネントを順次提供していく予定 | サーバー: Window 2003 server, Oracle10g / クライアント: Windows XP(詳細はお問い合わせ下さい) | | | |
| Symyx Process Notebook 5.5 | " | " | プロセス合成向けの電子実験ノート。マルチステップ合成のシナリオ・コスト検討、製造指示書・製造記録書などの機能を持つ | サーバー: Window 2003 server, Oracle10g / クライアント: Windows XP(詳細はお問い合わせ下さい) | | | |
| Symyx Logistics | " | " | Isentris環境上に構築された試薬管理システム。Symyx ACD、社内在庫試薬、独自の試薬データソースに対して高度な検索、注文ができる。化合物法規制、他の研究システム・購買システムとのインテグレーションにも対応可能 | サーバー: Windows 2003 Server, Sun Solaris / Oracle: Symyx Directと同環境 / クライアント: Windows XP | — | — | — |
| Symyx Registration | " | " | Isentris環境上に構築された化合物データ登録システム。化学物質、バッチデータの登録の際に必要な処理(塩・混合物の認識、化合物表記規格化、化合物データ一括登録、化合物重複チェック、ID発行)を自動化。他の研究システムインテグレーションにも対応可能 | " | — | — | — |

| | | | | | | | |
|----------------------------|---|---|---|---|---|---|---|
| Symyx 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 2003 Server, Sun Solaris/ Oracle: ISIS/Hostと同環境/ クライアント: Windows XP | — | — | — |
| Symyx 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Oracle上に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 2003 Server, Windows XP Pro /Oracle: 8.1.7.4、9.2.0.1/ クライアント: Windows XP | — | — | — |
| Symyx 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 | — | — | — |
| Symyx ISIS for Excel | " | " | MS ExcelからISISリモートデータベースを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 | — | — | — |
| Symyx Isentris for Excel | " | " | MS ExcelからIsentrisリモートデータベースを参照可能にするアドイン。高度なIsentrisの検索・参照機能を使用してデータを加工した後に、Excelにデータを読み込むことが可能 | Windows 2003/XP, MS Office 2003 (近日リリース予定の新バージョンにて Vista/Office2007をサポート) | — | — | — |
| Lab automation & Execution | " | " | 実験機器と連動して、実験手順の設定・実行、データ収集・解析を行うためのソフトウェア製品群。詳細はお問い合わせ下さい | 詳細はお問い合わせ下さい | | | |
| <データベースコンテンツ製品> | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|--|--------|------|---|--|-------|------|------|
| DiscoveryGate | " | " | 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、MacOS X 10.4 | — | — | — |
| Cheminform Reaction Library | " | " | FIZ Chemie社(独)の反応情報誌ChemInformの電子版で新規合成法を中心に収録。Symyx Reference Library of Synthetic Methodologyの内容を加え、1946年以降の文献から140万反応以上を収録 | ISIS/Host, Isentris又はDiscoveryGateと同環境 | — | — | — |
| Symyx 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 | " | — | — | — |
| Symyx 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。31,000反応 | " | — | — | — |
| Derwent Journal of Synthetic Methods | " | " | Derwent社のJournal of Synthetic Methods(1980年～)を収録。89,000反応 | " | — | — | — |
| ORGSYN | " | " | Wiley&SonsのOrganic Synthesesの電子版(1921年～)。確立された反応(5,900)を収録 | " | — | — | — |
| Symyx 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。780,00の代謝反応、48,000化合物の情報を網羅。Toxicityとの相互参照が可能 | ISIS/Host又はDiscoveryGateと同環境 | — | — | — |
| Symyx 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、RTECSI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との相互参照が可能 | ISIS/Host, Isentris又はDiscoveryGateと同環境 | — | — | — |
| Symyx 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、8,800化合物 | " | — | — | — |
| Symyx Drug Data Report | " | " | Prous社の医薬開発情報誌 Drug Data Reportを元に、約173,000以上の開発医薬品情報を収録。2D/3D構造式検索可 | " | — | — | — |
| Symyx 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518,000試薬に関する2D/3D構造式、サプライヤー並びに価格などの情報を持つ | " | — | — | — |
| Symyx 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。468万化合物 | " | — | — | — |
| 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 Innovations Index | トムソン・ロイター | 米トムソン・ロイター | 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、引用間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 | Internet Explorer 5.0以上 または Netscape 6.0以上 | 個別見積 | 2003年6月 | - |
| Thomson Data Analyzer | " | " | 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 や他の社内・外のデータを取り込み、特許マップなどを作成したり、グラフや表を作成したりすることが可能なツール | Windows 2000、XP (128MB RAM以上) | " | 2006年4月 | - |
| Web of Science | " | " | 高品質な約9,200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る。◆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る。さらに、41特許発行機関からも最新化学反応を収録している。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。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。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いる。データは、毎日アップデートされており、医薬品情報のモニタリングが可能 | " | " | 2004年 | - |
| IDRC | " | " | 世界各国の薬事規制情報データベース。めまぐるしく変わる薬事法に特化した情報を配信することで、顧客企業の世界市場参入のスピードアップを助ける。世界55の国と地域の薬事法や規制上の問題に対応するあらゆる情報をひとまとめにしてお届け、また薬事規制情報の収集、編集、索引付け、相互参照、更新、分析など手間のかかる作業を代わりに行う | " | " | 2005年 | - |
| Thomson Message Mapping System SM | " | " | The Thomson Message Mapping System SM (TMMS) 製薬企業向けの戦略分析ツール。TMMSは、学術文献に発表された対象医薬品に関する記述と競合製品の記述を、処方する医師の観点から評価する。そして、治療・処方に関する記述に的を絞ることにより、エビデンスに基づく信頼性評価を行い、薬剤に関する主要記述を集計してSWOT分析をはじめとした60以上の図表・統計データを提供 | " | " | 2005年 | - |
| Newport Horizon Premium | " | " | ジェネリック医薬品ビジネスを考える開発医薬品メーカー、ジェネリック医薬品メーカー、戦略的なAPIメーカー向けに特別に開発された、医薬品にターゲットしたグローバル・ビジネス・デベロップメント・システム。ジェネリック品開発の可能性をすばやく見出し、新たなビジネス・パートナーやマーケット、独占的なAPI供給元を探し出すことが可能。また、競合に先立ち、グローバルな製品ライセンス、買収の可能性などの情報も提供。新機能として、現行年度と前年度のAPI消費データが、地域別、剤型別にキログラムおよび国際単位もあわせて提供 | " | " | 2005年 | - |
| Newport Vision Premium | " | " | 新薬・専門領域メーカー、ニッチブランド製薬メーカー向けに特別に開発された、競合戦略、ライフサイクル管理に有効なグローバル・ビジネス・デベロップメント・システム。ジェネリック競合他社の開発状況を早期に見極め、企業の戦略的事業計画に反映されるとともに、ライセンスングや倍主の可能性をすばやく見出し、世界中から新たなビジネス・パートナーを探し出すことが可能。また新機能として、現行年度と前年度のAPI消費データが、地域別、剤型別にキログラムおよび国際単位で提供 | " | " | 2005年 | - |

| | | | | | | | |
|--|---------------|-------------|---|------------------------------|--------------|-------------|-------------|
| Liquent Insight Manager | " | " | 新薬申請に関わる情報、文書を管理する統合ソリューションです。申請情報、製品情報、申請文書情報を全社で一元管理化し、これまで困難であった社内情報にセキュアに容易にアクセスできる環境を提供します。これにより、迅速な経営判断、意思決定が可能 | Windows2000Server、2003Server | " | 2004年 | - |
| Liquent Insight Publisher | " | " | Insight Managerと統合した新薬申請のためのパブリッシングソリューション。eCDTはもちろんペーパーCTD、レポートパブリッシングもサポート | " | " | 2004年 | - |
| Liquent RenderPerfect | " | " | 各種レポートのPDF化をサポートするレンディションサーバです。Microsoft Officeはもちろん、多くのソフトウェアフォーマットに対応しており、MS Wordでのレンディションではしおりの自動作成が可能。また、Windowsファイル環境だけでなく、ドキュメントに格納されている文書を直接PDF化することができます。文書間リンクのPDF化もおこなえるため、eCTD申請文書の作成に効果を発揮 | " | " | 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 | 米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 | 詳細問い合わせ | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| 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辞書中の全エントリー、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 | " | " | - | - |
| 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 | " | - | - |

| | | | | | | | |
|--|---|-------------------|--|-------------------------------|----------------------|---|---|
| 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 | " | " | - | - |
| Index Chemicus Database for ISIS | " | 米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 | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| 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 | " | - | - |
| 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:53万円～、抄録なし:31万円～ | - | - |
| Current Contents Connect / Physical, Chemical & Earth Sciences | " | " | 上記製品の Web 版。毎日更新 | " | 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) | " | " | - | - |
| 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 | " | - | - |
| 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 | " | " | - | - |
| Pharmaceutical Substances | " | 独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 | " | - | - |

| | | | | | | | |
|------------------------------|-------------------|-----------------|---|--|--|--|------|
| Science of Synthesis | '' | '' | 650名以上の化学合成方研究者が最適な合成方法を精査し、それらを収録した合成反応データベース。化学構造式からの検索も可能。叢書"Science of Synthesis"、Houben-Weylも初版から収録。化学構造式からも検索可能 | '' | '' | — | — |
| EndNote X2 | '' | 米トムソンISIリサーチソフト | 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 OS X | 5万2,290円(新規)、2万790円(アップグレード)、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/XP、Mac OS X | 4万9,800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'06 Full Edition | 米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 | MM、Hartree-Fock、Semi-Empirical、DFT、MPなどの各種計算エンジンによって、構造最適化、配座解析などが可能。NMR、IR、UV/Visスペクトルを計算。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。ChemDrawからの直接のビルディング機能などさらに使いやすく、またNISTなど外部データベースへのWEBアクセス機能やTridentで導入された分子の類似性解析機能などを搭載 Spartan'08リリース時期を考慮し1年のバージョンアップ権付がお勧め | Windows版：Windows XP、VISTA Macintosh版：MacOSX 10.4.6以上 IntelMac限定 | 大学：22万8000円、定価：60万円。詳細要問い合わせ | Windows版：2006年11月／ Macintosh版：2008年3月 | — |
| Spartan'06 Essential Edition | '' | '' | "Spartan'06 Full Edition"からDFT、MP、CIなどの高次計算エンジン、NMR、UV/visなどを省略した機能限定廉価版。取り扱い可能分子サイズは"Full Edition"と全く同じ。学生実習の講師用にお勧め | '' | 大学：13万8000円、定価：35万円。詳細要問い合わせ | Windows版：2006年12月／ Macintosh版：2008年3月 | — |
| Spartan Student Edition | '' | '' | 学生実習向け分子モデリングソフトウェア。取り扱える分子サイズは制限されるが、MM、PM3、HF/3-21G、6-31G*によって構造最適化、反応座標解析、振動解析など、基本的な分子モデリング環境を提供。有機化学をより直感的に学習できる | '' | 大学、短大：4万円、高専、高校：2万円、学生個人：1万2000円ポ、リユームディスカウント、共同購入価格あり | 2003年10月 | — |

| | | | | | | | |
|---|----|----|--|---|--|----------|---|
| Spartan Student Edition 1年ライセンス 分子モデリング教育キット「学生用」 | '' | '' | Spartan Student Editionを1年間使用できるライセンス マニュアルと分子モデリング演習初歩の初歩のセット | '' | 教育機関のみ購入可1回インストール権ライセンス 1本 6000円 | 2006年10月 | — |
| SpartanModel 書籍「ヒーリー SpartanModelによる有機化学演習」 | '' | '' | 分子模型ソフトウェア。従来のプラスチック製の分子模型の代わりに、デスクトップ上で分子模型を構築し、バンドルされているデータベース(SMD)から、エネルギーや電荷、双極子モーメント、IRチャートなどを参照できる。電子雲や分子軌道などのグラフィクスも表示可能、ファイルの書き出しはできない。マニュアルを日本語化して書籍扱いで販売 | '' | 1回インストール権(アクセスコード):5000円 | 2005年6月 | — |
| Spartan'06 for Linux | '' | '' | シンプルな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、Hartree-Fock、Semi-Empirical、DFT、MPなどの各種計算エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。 | Linux Kernel 2.6以上、Redhat Enterprise 4以上、SLSE 9以上 | 大学:23万円から。詳細要お問い合わせ | 2007年11月 | — |
| Odyssey Student Edition | '' | '' | MDシミュレーションによる一般化学の学習システム。作業画面とテキストが一体化しているGUIはインタラクティブに学習を進めることができる。作業並びにテキスト画面上には各種プロパティの値を入力したり、ヒストグラムなどの作成も可能。トピックス毎に設問が用意されていて(印刷可)、授業をトータルサポート、V2.3から日本語、英語両コンテンツをボタンでの切り替機能が導入 | Windows XP Vista Macintosh 10.4.6以降 | 大学:4万円、学生個人:1万2000円。ボリュームディスカウント、共同購入価格あり。詳細要問い合わせ | 2004年7月 | — |
| Odyssey Student Edition 1年ライセンス | '' | '' | Odysseyの年間使用権 | '' | 6000円 | 2007年11月 | — |
| Odyssey Instructor's Edition | '' | '' | Odysseyの講師用バージョン。設問の解答や解説などの情報が追加 | '' | 大学:4万8000円、ボリュームディスカウントあり。詳細要問い合わせ | 2004年7月 | — |
| Odyssey Instructor's Edition 1年ライセンス | '' | '' | Odysseyの年間使用権 | '' | 7000円 | 2007年11月 | — |

| | | | | | | | |
|---------------------------|------------|--------|--|---------------------------------------|------------------------------|---------|------|
| Trident | " | " | メディシナルケミスト向けモデリングツール新登場！ Spartanライクのシンプルな操作画面から、3つの機能を使って効率よく新薬探索:1) PM3、Hartree-Fock などによる構造最適化やプロパティ計算、2) MMIによる配座解析、3) 構造、化学特性ディスクリプター(水素結合性や排除体積他)、ファーマコフォアとの類似性解析。SMD、Maybridgeを含む4種のデータベースをバンドル。PDBやCSDとのインターフェースもあり | " | 大学:13万8000円、定価:35万円。詳細要問い合わせ | 2006年6月 | — |
| Trident DB Option | " | " | Spartan Full EditionでTrident固有のデータベースを使用する際のオプション、Maybridgeや薬剤化合物、PDBLigandファイルなど | " | 大学:6万円、定価17万円 | 2008年2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 |
| <統合型分子設計モデリングシステム【SYBYL】> | ワールドフュージョン | 米トライポス | | | | | |
| SYBYL/Base | " | " | 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、モレキュラスプレッドシートが含まれるSYBYLの基本モジュール | IRIX(6.5.29m以降)、Linux(RHEL4.0:32Bit版) | お問い合わせください | — | — |
| 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 | " | " | — | — |
| DISCOtech | " | " | ファーマコフォア探索プログラム | " | " | — | — |
| 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 | " | " | — | — |
| Biopolymer | " | " | タンパク質・DNAなどの分子構築やアミノ酸辞書を搭載した生体高分子用モジュール。また、Genetic Algorithmを用いて、リガンド及びタンパク質の側鎖を動的に考慮したFlexible Ligand Dockingも実施可能。 | " | " | — | — |
| CONCORD | " | " | 低分子化合物の2次元構造を高速に3次元構造に変換するモジュール | " | " | — | — |
| 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モジュール | " | " | — | — |
| 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実施可能 | " | " | — | — |

| | | | | | | | |
|---------------------------|---|---|---|---|---|---|---|
| ClogP/CMR | " | " | ClogP計算モジュール | " | " | — | — |
| 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、コンセンサススコアで評価 | " | " | — | — |
| Distill | " | " | 分子の最大共通部分構造を用いたクラスター化、構造上の特徴を可視化しながら解析するモジュール | " | " | — | — |
| VolSurf | " | " | ADME関連予測QSARモジュール | " | " | — | — |
| 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 | " | " | — | — |
| Tuplets | " | " | 活性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するモジュール | " | " | — | — |
| 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・検討するモジュール | " | " | — | — |
| StereoPlex | " | " | 分子データベース構築において、各分子の立体異性体 (Stereoisomer)を自動生成するモジュール | " | " | — | — |
| EA-Inventor | " | " | 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リガンドの候補構造自動発生 (de novo design) モジュール | " | " | — | — |
| GALAHAD | " | " | Tupletsの技術とパレット・フィットネス関数を組み合わせた遺伝的アルゴリズムを用いて、分子の重ね合わせとPharmacophoreモデルを構築するモジュール | " | " | — | — |
| Surflex-Dock | " | " | 3種類のプローブ原子で構成される"Protomol"を活性部位と見立てて、低分子の重ね合わせを行うユニークな手法を採用したドッキングモジュール | " | " | — | — |
| Surflex-Sim | " | " | 分子表面形状の類似性と分子形状から考えられる受容体の「サイトポイント」を考慮して重ね合わせパターンを探索するモジュール | " | " | — | — |
| Advanced Protein Modeling | " | " | 予めファミリー・プロファイル化したHOMSTRADデータベースを使用して、Query配列と相同性の高い構造の抽出・アライメントを行う相同性検索ツール(FUGUE)とその結果を利用して、SCR・ギャップ・ループ構造を構築するホモロジーモデリングツール(ORCHESTRAR)を組み合わせたパッケージ製品。精度の良いモデル構造の構築が可能 | " | " | — | — |

| | | | | | | | |
|-------------------------------------|---|----------|---|------------------------------------|------------|---------|---|
| Topomer Search | " | " | TRIPOS社独自のテクノロジーであるChemSpaceのエンジンを用いて、形状とファーマコフォアの類似性から、Lead Hoppingを実現。高速な検索エンジンを搭載 | " | " | - | - |
| Topomer CoMFA | " | " | TRIPOS社独自のテクノロジーを用いて、CoMFA解析を利用した高速なLead Optimizationが実現。Topomerのアライメントルールにより、CoMFAに必要であったアライメントを自動化。更に、得られた活性予測式から、高活性化化合物を検索・予測が可能 | " | " | - | - |
| hint! | " | 米eduSoft | 各種パラメータ(Hint Score)や分子間相互作用フィールドの計算と表示を行うモジュール。3D-QSARの記述子としても利用可能 | " | " | 2008年4月 | - |
| Molconn-Z | " | " | 各種分子パラメータ計算モジュール。数百種の記述子の計算、各原子の電子的な状態を反映するE-State値の計算を実施。また、計算される記述子を用いてOptiSim™法による『Diversityを考慮した分子選択』にも利用可能 | " | " | " | - |
| <デスクトップ製品> | | | | | | | |
| Benchware 3D Exproler | " | 米トライポス | 分子設計研究者とメディシナルケミスト間の情報共有ツール。従来の分子Viewer機能に加え、分子エディターやVBAを利用したアプリケーションの実行が可能。新Ver.では、PowerPoint上で立体構造の操作が容易となったため、研究者間で構造情報を共有する事が更に簡潔に！ | WindowsPC | " | - | - |
| Benchware DataMiner: Base/HTS/HQSAR | " | " | HTSデータ解析用ツール。クラスタリングやPCA/NLMによる化合物mapの作成・視覚的解析、化合物セットにおける部分構造のルール提示などのSAR解析をサポート | " | " | - | - |
| Bewnchware NoteBook | " | " | TRIPOS社がScheringAG社との共同開発を基に製品化した「電子実験ノート」。進捗管理、プロジェクト管理、化合物ID管理、各種分析機器の結果データの蓄積/管理が可能。ユーザの要求に合わせたカスタマイズも可能 | " | " | - | - |
| <システムバイオロジー・ゲノミクス製品> | | | | | | | |
| Life Science Knowledge Bank (LSKB) | " | " | 【ナレッジデータベース】遺伝子名やシンボル、キーワードなど、遺伝子に関する情報をデータベース化、関連するタンパク質、疾患、化合物、組織との関連性をまとめたデータベース。化合物は約120万のシノニム用語搭載 | Linux / Oracle または、Webアクセスによる利用 | お問い合わせください | - | - |

| | | | | | | | |
|---|----|-----------------------------|---|--|-------|---------|---|
| LSKB Chemical Extension | '' | '' | 【化合物検索】化合物構造から文献情報・類似市販化合物などを取得するためのLSKB用アドオンモジュール。PubChem, Drugbankなどを収録。化合物の類似性評価にFingerprintによるTanimoto IndexとSYBYLモジュールであるTopomerSearchが利用可能。 | Linux / Oracleベースのサーバ、クライアント側はBenchware 3D Explorerを採用 | '' | 2008年8月 | — |
| LaboServer: Genotyping System | '' | '' | 【ジェノタイピングシステム】PGx向けシステム。大量のデータ管理とさまざまな統計的アルゴリズム搭載 | Linux / Windows 2003 Server | '' | — | — |
| GenomeViewer | '' | '' | 【ゲノム解析】ヒト、マウス、ラット、微生物などのゲノム情報を登録。独自のアノテーション情報追加機能、配列解析(BAST)機能付属 | Linux | '' | — | — |
| BioElephant | '' | ワールドフュージョン、三菱スペースソフトウェア共同開発 | 【総合解析ポータルシステム】社内データと公共データの連携をスムーズに行うと同時に、社内実験データ、配列データと公共データとの連携も行います。柔軟性の高いソフトウェアモジュールで構成変更、お客様の要望に応じてフレキシビリティにシステムの構成や、モジュールの追加可能 | Linux | '' | — | — |
| Pathway Studio Enterprise / PathwayExpert | '' | 米アリアドネジエノミクス社 | 【パスウェイ解析】文献情報から、または発現実験データからネットワークおよび分子相互作用を推定するシステム。ユーザーフレンドリーなインターフェースとビューワーには定評あり | Linux版/Windows版 または Webアクセスによる利用 | '' | — | — |
| MedScan Reader | '' | '' | 【論文文脈解釈ソフトウェア】PubMedアブストラクトやドキュメントなどから文章中に存在する因子(タンパク質、化合物、疾患など)とその関連情報を抽出することで、すばやく文献の内容を理解するためのソフトウェア | WindowsPC | 18万円～ | — | — |