

# <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、2014年12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
Advance/PHASE V3.3	アドバンスソフト	アドバンスソフト	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。Effective Screening Medium(ESM)法のほか、新バージョンにてEELS(電子エネルギー損失分光)のスペクトルの計算機能及び3D-RISM-SCF法を実装	お問い合わせください	100万円/年間より	2014年8月予定	—
Advance/Flecs V1.1	"	"	Advance/PHASEと親和性の高い古典分子動力学計算ソフトウェア。アモルファス構造の初期原子配置作成に最適	"	50万円/年間より	2009年1月	—
Advance/GIAO V1.0	"	"	擬ポテンシャル作成ソフトウェア。密度汎関数理論のもとで原子の全電子状態を第一原理計算し、その結果得られた全電子ポテンシャルから擬ポテンシャルを計算する	"	50万円/年間より	2009年9月予定	—
Advance/OCTA	"	"	ソフトマテリアル統合シミュレーターで、マイ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 V2.0.1	"	"	3次元デバイス解析ソフトウェアで、3次元高速解析(電流連続、エネルギー輸送、ポアソン等)、物理モデルの充実(トラップ、衝突電離、量子効果補正等)、マスク利用による立体構造を容易に作成、フレキシブルな3次元最適メッシュ生成機能、形状・不純物のパラツキや変形の信頼性解析—などの特徴がある	"	250万円/年間より	2013年4月	—
Advance/FrontFlow/red V5.1	"	"	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。自由表面解析、キャビテーション解析等高度なテーマにも適用可能	"	100万円/年間より	2013年4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。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/FrontFlow/FOCUS V1.1	"	"	従来のメッシュレス流体ソルバでは対応できなかった細部の形状を計算に反映しつつ、格子生成の必要がない新しいメッシュレス流体ソルバ。構造ソルバとの連成により、燃焼・爆発が構造物に及ぼす現象をトータルに解析可能。燃焼モデルにおける複数化学種の取り扱いも可能	"	100万円/年間より	2014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 V5.0	"	"	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、梁要素等も対応。接触並列計算、局所座標系の導入、材料異方性、粘弾性材料の温度依存性、その他(追従力など)に加え、最新バージョンにてシェル・ビーム要素とソリッド要素が混在したモデル(混在自由度)の解析にも対応	"	100万円/年間より	2013年12月	—
Advance/FrontNoise V4.3	"	"	流体騒音・音響解析ソフトウェア。空力騒音・吸排気系等の音場予測、家電分野における電子機器の騒音予測、産業機械分野におけるコンプレッサ・バルブ・ポンプ等の騒音予測や、その他、環境の騒音予測のための大規模解析が可能。流体、構造ともに連成解析オプションあり。新バージョンにて固有値を利用した構造音響連成機能、多孔質媒体の音響伝播解析機能、マルチグリッド前処理の適用、時間領域の解析機能が追加	"	150万円/年間より * 連成オプション 50万円/年	2014年4月	—
Advance/REVOCAP V3.2	"	"	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。新バージョンにて音響解析ソフトウェア、高速流解析ソフトウェアにも対応	"	100万円/年間より	2014年1月	—
Advance/FrontNet/Ω V1.0	"	"	配管内の液体の流量と圧力を計算する「管路系液体解析ソフトウェア」。例えば、弁が急に閉じると急激な圧力上昇が起こる水撃現象や、減圧により気化したガスがつぶれて急激な圧力上昇が起こるキャビテーション現象が解析できる。弁の制御は時間遅れやPID要素を考慮し、圧力や流量制御弁の開度変化も解析可能	"	130万円/年間より * サポートなし95万円/年	2009年5月	—
Advance/FrontNet/Γ V1.4	"	"	配管内のガスの圧力・温度・流量・密度を計算する「管路系ガス解析ソフトウェア」。例えば、都市ガス、空調設備、自動車吸排気系の解析やブロウ、弁などの流体機器誤作動時や配管システムの起動・停止時の安全解析、配管太さの変更や流体機器の条件変更の設計解析、流体機器の性能評価解析、等々が可能	"	180万円/年間より	2012年2月	—
Advance/FrontNet/TP	"	"	1次元気液二相流解析ソフトウェアであり、二相流の状態を持つ流体の管路ネットワーク内での時系列の解析が可能。管路ネットワークは、圧縮器、膨張弁、配管等の流体機器から構成される。ソフトウェア内では、質量保存、運動量保存、エネルギー保存を解き、状態方程式はp-h線図で与える。GUIでは、計算するネットワーク網の作成、計算の実行、および、ポスト処理が可能	"	180万円/年間より	2009年5月	—
Advance/MaterialDesignSystem	"	"	材料設計に必要な、・量子化学計算、・第一原理計算、・分子動力学計算、・粗視化動力学計算、・数値基底密度汎関数計算等を、1つのプラットフォームで行うことができる「材料設計統合システム」	"	300万円/年間より	2011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
LigandScout	アフニティサイエンス	オーストリア インテリガンド (InteLigand)	ファーマコフォア・リサーチ向け統合プラットフォーム。独自アライメント機能、構造ベースおよびリガンドベースのファーマコフォアモデリングからバーチャルスクリーニングまで実施一連の処理が可能	Windows、Mac OS X、Linux	お問合せください	—	—
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2,000超収録。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、文献情報をカバーし、効果的なリガンドプロファイルが可能	Linux	"	—	—
ilib diverse	"	"	フラグメント構造からdrug-likeなバーチャル化合物ライブラリを生成可能なツール。Oral bio-availabilityやBBB permeability等のフィルタリング機能を搭載。Molecular Networks社製CORINAと併用することで、3D構造を発生させることも可能	Windows	"	—	—

OzeekS	"	京都コンステラ・テクノロジーズ (日本)	相互作用マシナラーニング法 (CGBVS) によるスクリーニングプログラム。自社内に蓄積された独自アッセイデータを用いた、医薬品候補化合物の高速かつ高精度なインシリコスクリーニングが可能	Linux	"	-	-
DRAGON	"	伊タレッタ (Talete)	最大4,885種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	"	-	-
dProperties	"	"	最大62種の物理化学特性およびドラッグライク指数を計算可能なアプリケーション	"	"	-	-
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マルチメディア教材。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	"	オーストリア 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・高効率なバンド構造計算が可能	Linux	"	-	-
SIESTA	"	マドリード自治大学 (Universidad Autonoma de Madrid)	数千原子の電子構造計算を目的に開発されたDFTプログラム。Numerical LCAO基底と各種リニアスケールリング法により、大規模なAb initio MD計算が可能	"	"	-	-
DL_POLY_4	"	英国科学技術施設会議 (Science and Technology Facilities Council)	デアズベリー研究所のI.T. Todorov氏ならびにW.Smith氏によって開発された汎用古典分子動力学 (MD) シミュレーションソフト。単一プロセッサを搭載したワークステーションから高性能な並列コンピュータまでスケラブルな性能向上を実現	"	"	-	-
Q-Chem	"	米キューケム (Q-Chem, Inc.)	包括的な ab initio 量子化学パッケージ。高速なDFT/HF計算から高レベルのポストHF相関法まで最先端の手法が採用されており、分子構造、反応性、振動および電子やNMRスペクトルを高い精度で予測することが可能	Windows、Linux	"	-	-
CrystalMaker	"	英クリスタルメーカーソフトウェア (CrystalMaker Software)	洗練されたGUIをもつ結晶・分子構造のモデリング・可視化ソフトウェア。オプションプログラムの追加でX線粉末回折、X線/中性子線/TEM回折パターンシミュレーションが可能	Windows、Mac OS X	"	-	-
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
ArxLab Notebook	アークスパン	米アークスパン	クラウドベース電子実験ノートシステム。自社データの管理共有はもとより、CROや社外パートナーとのコラボレーションにおいて迅速なシステムの運用展開の開始、契約満了後のデータ回収、撤収が可能	クラウド、各種ブラウザ	お問合せ下さい	2014年5月	お問合せ下さい
ArxLab Registration	"	"	低分子化合物の登録管理のみならず、抗体医薬、薬物複合体、細胞、タンパク質等創薬研究において取り扱われる全ての物質の管理登録が可能なクラウドベースのリポジトリシステム	"	"	"	"
ArxLab Assay	"	"	Excel上で管理されている異なる系やプロトコルの多くのアッセイデータについて、研究現場で容易にテンプレートを定義、データをアップロードしデータベース化できるクラウドベースのアッセイシステム	"	"	"	"

ArxLab Inventory	"	"	試薬、中間体や外部購入ライブラリー等の入荷から廃棄までの管理に加えて、サンプルやプレート情報を一元管理できるクラウドベースのインベントリシステム	"	"	"	"
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
原子スケール材料シミュレーター matelier	アスムス	アスムス (PHASEシステム研究会)	原子スケールのシミュレーションにより、材料開発を支援。平面波基底を採用した密度汎関数法による第一原理擬ポテンシャルバンド計算ソフトウェアPHASE/0を中心に構成されている。実験結果の解釈に役立つのはもちろんのこと、新規材料の物性値予測にも利用できる	Windows, Linux	年間ライセンス80万円から(教育機関向け割引あり)	2015年3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
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・リガンド相互作用や蛋白質・核酸複合体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
MolWorks Ver3.1	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への出力インタフェースを備えている。ダウンロード先: <a href="http://www.molworks.com/">http://www.molworks.com/</a>	Windows 2000/XP/7 Linux, MacOS, MacOSX	基本モジュール(無償) 一部機能(有償)	2011年8月	—
Pallas	"	ハンガリー・コンピュドラッグ	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、UV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。混合物スペクトルの検索機能も新たに追加された	Windows Vista, Core 2以上	19万8千円から、詳細問い合わせ	2001年10月	—
ハブ・イットオール ライセンス	"	"	サドラーのスペクトルデータベースすべてを1年間制限なく検索利用することのきるプライスシステム。IRにはカテゴリ別のサブセットも提供	"	IR27万円から、Raman37万8千円、NMR98万円、MS56万円、UV30万円/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。2012年からは高分解(0.96cm <sup>-1</sup> )で提供	—	詳細問い合わせ	2000年4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、UV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	—
IDエキスパート	"	"	スペクトルファイルを開くだけで、煩わしいパラメーター指定などの操作をせずに最新テクノロジーによる圧倒的なスピードで解析結果を提供。検索機能付きデータベース	"	IR99万5千円、Raman37万8千円/1年	2014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
<ライフサイエンス モデリング & シミュレーション>							
BIOVIA Discovery Studio Simultaneous User Science Complete	ダッソー・システムズ・バイオビア	Dassault Systemes Biovia Corp.	BIOVIA Discovery Studioの機能をほぼ全てを使用できる。Protein、SBD、Pharmacophore、QSAR&Library Design、ADMET、Aggregationの機能を全て含む	Windows, Linux	お問い合わせ下さい	—	—

BIOVIA Discovery Studio Proteins Bundle	"	"	BLASTIによる配列検索、シーケンスアライメント、系統樹解析、ホモロジーモデリング、ペプチドや核酸分子の構造構築など、生体高分子の構造作成に関連する機能がパッケージ化されている	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio SBD Bundle	"	"	Discovery Studioで利用できるすべてのドッキングプログラムにアクセスできる。また、ドッキング前のリガンドデータの前処理、レセプター構造の前処理を自動的に実行する機能を含む。また、ドッキング後のリガンドのレセプター内でのエネルギー最適化、De Novoデザイン、Fragment Based Drug Design等、タンパク質の構造に基づくドッキングデザインの全ての機能が含まれる	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Pharmacophore	"	"	ファーマコフォアモデリングに必要な全ての機能(コンフォメーション解析、ファーマコフォア検索、三次元化合物データベースの作成など)を全て含む。ファーマコフォア・フィーチャー以外に、形状に基づくリガンド検索(Shape検索)、Shapeとファーマコフォア・フィーチャーの組み合わせによる検索も実行可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio QSAR & Library Design Bundle	"	"	QSARモデルの構築と化合物のスコアリング、化合物群のクラスタリング、化合物群同士の比較解析、MMP、化合物ライブラリの構築など、化合物ライブラリ、および、QSAR解析に関連する機能がすべて含まれるパッケージライセンス	"	"	-	-
BIOVIA ADMET Bundle	"	"	低分子化合物の代謝と毒性の予測(TOPKAT)ができる	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio CHARMM	"	"	エネルギー計算、構造最適化、分子動力学計算等のCHARMMの機能を利用できる他、CDOCKERを用いたドッキングシミュレーションを実施できる。オプションでMMFF、CFF力場を追加可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Analysis	"	"	回転運動半径、動径分布関数、主成分分析等MDトラジェクトリの解析が可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Dmol3-Molecular	"	"	密度関数理論に基づく量子科学計算が可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio QUANTUMM	"	"	Dmol3とCHARMMを組み合わせて、QM/MM計算を行うために必要なモジュール	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Sequence Analysis	"	"	配列の相同性検索や系統学的解析、アノテーションが可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Biopolymer	"	"	タンパク質や核酸等の生体分子の構築、静電場ポテンシャル計算(DelPhi)、解離乗数やpH滴定曲線の計算等が可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Modeler	"	"	タンパク質構造予測、配列や構造に依るアラインメント、mutation導入に依る安定性および結合親和性変化の予測を行うツール	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Protein Refine	"	"	ab initioにタンパク質ループ領域構造の最適化や側鎖構造の最適化を実施可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Protein Health	"	"	Profiles-3D Verify法を用いてタンパク質構造の妥当性を評価	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Protein Docking	"	"	ZDOCKプログラムによるタンパク質タンパク質ドッキングが使用できるようになる	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Protein Aggregation	"	"	抗体など、タンパク質の凝集サイトを予測できる	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio X-Ray	"	"	X線構造解析の機能を追加する	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Catalyst Search	"	"	ファーマコフォアモデルや分子形状、部分構造を含むクエリーを用いてデータベース検索が可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Catalyst DB Build	"	"	ファーマコフォアモデルの検索に利用する3D データベースを構築する	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Catalyst Conformation	"	"	多数の化合物の配座解析を迅速に行う	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Catalyst Hypothesis	"	"	定性的または定量的なファーマコフォアモデルを自動的に作成する	"	"	-	-

BIOVIA Discovery Studio Catalyst SBP	"	"	受容体の形状を基にファーマコフォアモデルを作成する	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Catalyst Score	"	"	データベース検索から得られた化合物を迅速に評価し、優先順位を付ける	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Catalyst Shape	"	"	同様の形状を持つ分子を3Dデータベースから検索する	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio CDOCKER	"	"	CHARMmを活用した格子ポテンシャルによるドッキングを行う	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Flexible Docking	"	"	受容体の構造変化を考慮に入れた低分子化合物のドッキングが可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio LibDock	"	"	受容体結合サイトの極性/非極性スポットをガイドとする高速ドッキングが可能	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Ligand Score	"	"	種々のスコア関数が計算可能で、Consensus Scoreの計算も実施できる	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Library Design	"	"	クラスタリング、パレート最適化等を用いて類似性及び多様性の計算が可能で、化合物ライブラリの設計を支援	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio MCSS	"	"	Multiple Copy Simultaneous Search法により、タンパク質の活性サイト中でフラグメントが結合しそうな場所を予測できる	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio Ludi	"	"	受容体結合サイトの構造を基に、結合するフラグメントの同定、リンカーの検索等in silico FBDDを行う	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio De novo Evolution	"	"	受容体結合サイト中で骨格やフラグメントの伸長を自動的に行う	"	"	-	-
BIOVIA Discovery Studio De novo Ligand Builder	"	"	Ludi等で提案されたフラグメント同士を結び付け、組み合わせ的にリガンドを発生、Catalyst形式のDBの自動構築も可能	"	"	-	-
BIOVIA QSAR Workbench Super User	"	"	QSARモデルの構築、検証、および公開ができるWeb Baseのワークフロー環境において、モデルの構築、公開、及びプロトコルの編集が可能	"	"	-	-
BIOVIA QSAR Workbench Professional User	"	"	QSARモデルの構築、検証、および公開ができるWeb Baseのワークフロー環境において、公開されたモデルの更新、公開が可能	"	"	-	-
BIOVIA QSAR Workbench Prediction User	"	"	QSARモデルの構築、検証、および公開ができるWeb Baseのワークフロー環境において、公開されたモデルを用いて予測をすることができる	"	"	-	-
BIOVIA Biotherapeutics Workbench User	"	"	容易に多数の抗体の配列と付随するデータを管理、解析できるウェブ・アプリケーション	"	"	-	-
<マテリアル モデリング & シミュレーション>							
BIOVIA Materials Studio Visualizer	"	"	構造モデルの作成とシミュレーションへの入力、計算結果、グラフ、表等の表示・作成	Windows	お問い合わせ下さい	-	-
BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell	"	"	低分子の液体やアモルファスポリマーの構造モデルを作成	Windows, Linux	"	-	-
BIOVIA Materials Studio COMPASS	"	"	凝縮系の再現にも優れた高精度力場。有機物、無機、無機酸化物、金属などへの適用可	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Forcite	"	"	分子力学ソフト。分子系、周期系の構造最適化が可能。COMPASS, COMPASS II, PCFF, CVFF, Universal, Dreiding力場	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Forcite Plus	"	"	Forciteに分子動力学の機能を追加。各種の分子動力学を応用したタスクと解析ツールを備える	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Blends	"	"	ポリマー、溶媒、添加剤混合系の混合エネルギー、相図、相互作用パラメーターなどを算出	"	"	-	-
BIOVIA 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	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Sorption	"	"	モンテカルロ法による低分子の多孔質体への吸収・吸着シミュレーションソフト。吸着等温線などを計算	"	"	-	-

BIOVIA Materials Studio Conformers	"	"	分子のコンフォメーションと柔軟性を明確化するコンフォメーション探索アルゴリズムと分析ツール	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio MesoDyn	"	"	低分子液体、ポリマー流体、ブレンドなどの複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio DMol3 Molecular	"	"	数値基底関数を使い高速、高精度を実現した密度汎関数理論(DFT)に基づくab initio量子化学計算ソフト	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio DMol3 Solidstate	"	"	3D周期境界条件への拡張版。各種物性値予測、固体表面における反応性の解析	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio CASTEP	"	"	DFTに基づいた平面波基底・擬ポテンシャルを使用した第一原理計算コードで、分子性結晶・金属・半導体・絶縁体の結晶、表面、界面に対する各種物性・スペクトル予測が可能	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio NMR CASTEP	"	"	CASTEPによる分子、結晶などのNMR化学シフトとその関連物性を計算するモジュール	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio VAMP	"	"	MNDO近似による半経験的分子軌道法。MNDO(/C、d)、AM1、PM3、ZINDOハミルトニアンなど。溶媒効果、励起状態計算などが可能	"	"	-	-
BIOVIA 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。生体分子などの計算に有効	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio QMERA	"	"	DMol <sup>3</sup> /GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的計算が可能	"	"	-	-
BIOVIA 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	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Reflex Plus	"	"	粉末X線結晶回折データから結晶構造を精度良く計算予測するツール	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio ReflexQPA	"	"	有機、無機結晶の粉末回折データから結晶相組成を決定	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio X-Cell	"	"	新規なアルゴリズムによりパラメータ空間を網羅的に探索し結晶構造の指数付けを行う	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Polymorph	"	"	分子構造から有力な結晶多形を予測	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Morphology	"	"	結晶の形態を結晶の原子構造から予測。BFDH、付着エネルギー法、平衡形態法を実装	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio QSAR	"	"	化学品、材料の構造活性(物性)関連モデルの作成、解析。多数の記述子を完備	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Synthia	"	"	グラフ理論に基づく構造物性関連手法によりポリマーの種々の物性値を推算	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Mesocite	"	"	原子スケールモデルを粗視化し、各ビーズについて力場パラメータを割り当てて古典力学を用いることによって、原子スケールよりも大きなメソスケールの計算を行う	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Adsorption Locator	"	"	モンテカルロ法と力場を用いたエネルギー評価によりゼオライトやカーボンナノチューブ、シリカゲル、活性炭素など広範囲の材料に対して分子の安定な吸着サイトを探索	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio DFTB+	"	"	密度汎関数理論(DFT)に基づくタイトバインディング法プログラム。大規模なナノマテリアルのシミュレーションも速い計算速度で実行可能	"	"	-	-
<データ解析とレポートングプラットフォーム>							

BIOVIA Pipeline Pilot	"	"	アイコン(コンポーネント)を並べるだけで、視覚的にデータの収集・処理・出力を可能にした、ビジュアルプログラミング・ソフトウェア。研究活動で生じるデータ(数字、文字、化合物、機器データ、配列、NGSなど)を、簡単に収集処理を行い、WebページやPDF、Officeドキュメント(Word、Excel、PowerPoint)でレポートを出力。日常の繰り返し作業を自動化することで、大幅な時間短縮を実現。プログラミングが不要なので、IT開発者でなくても様々な処理が構築可能	Windowsのみ	お問い合わせ下さい	-	-
BIOVIA Foundation	"	"	OracleなどODBC/JDBCで接続可能なSQLデータベース、MongoDB、CSV、XML、Excelなどのファイルからデータの抽出・加工・出力(ETL)やサイエンティフィックな計算エンジンを搭載したサーバ機能を提供。処理フロー(プロトコル)をPipeline Pilotで構築し、Pipeline Pilot、Web Portなどの専用クライアントから実行、もしくはSOAP/RESTといったWebサービス、Java/JavaScript/.NETのAPI、コマンドラインを介して他のアプリケーションからシームレスに実行可能	Windows、Red Hat Enterprise LinuxもしくはSUSE Linux	"	-	-
Chemistry Collection	"	"	ケムインフォマティクス研究や化合物ライブラリ管理の業界スタンダード。部分構造や類似性の検索、Matched Molecular Pairs(MMP)の算出、SARテーブルの作成、ライブラリデザイン、記述子やフィンガープリント(ECFP/FCFP)を使ったフィルタなどを高速に行い、数千万件の化合物セットから目的の化合物の抽出を短時間で処理可能	"	"	-	-
ADMET Collection	"	"	溶解性をはじめCYP2D6や膜タンパク結合性、30を越す毒性予測の計算モデル(TOPKAT)を含み、創薬段階の合成候補化合物の最適化や、ベンダーライブラリに含まれる大量の化合物からの有用化合物のスクリーニングに利用	"	"	-	-
Gene Expression and Mass Spec for Proteomics Collection	"	"	マイクロアレイなどの遺伝子発現データの解析や、LC/MSなどのデータを収集処理し可視化。R BioConductorの機能をコンポーネント化し、大量のマイクロアレイデータの自動処理が可能。大量のスペクトルデータからの特定スキャンの抽出やピークの判定、XCMS、X! Tandemをコンポーネントから実行しペプチドの特定が可能	"	"	-	-
Sequence Analysis	"	"	塩基配列、アミノ酸配列の解析やアノテーションをするバイオインフォマティクス向けのコンポーネントを提供。各種配列を入出力するためのReader/Writer、表示するためのViewer、ローカルやオンラインでBLASTを実行、EBIやEntrezに接続するためのコンポーネントを実装	"	"	-	-
Next Generation Sequencing (NGS) Collection	"	"	Illumina、Ion Torrent、SOLiDなどの次世代シーケンサからのデータを入力し、BWA、Bowtie、Mapreadsなどのアラインメントツールの実行、SNP、コピー数多型、RNA-Seq、ChIP-Seqなど様々な分析がコンポーネントから実行	Red Hat Enterprise LinuxもしくはSUSE Linuxのみ	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Collection	"	"	材料系シミュレーションで定評があるMaterials Studioの機能をPipeline Pilotから実行。量子力学計算(CASTEP、DMol3、VAMP)、古典力学計算(Forcite Plus、Amorphous Cell)、結晶多形予測(Polymorph Predictor)などを自動化することで、大量のシミュレーションをワンクリックで実行可能	Windows、Red Hat Enterprise LinuxもしくはSUSE Linux	"	-	-
Polymer Properties Collection (Synthia)	"	"	ポリマーの繰り返し単位、分子量、および温度に基づいて、バルク状非晶質ホモポリマーやランダムコポリマーの物性を推定。J. Bicerano の Prediction of Polymer Properties (Marcel Dekker、NY、2002年)に含まれる計算手法に加え、自社データを追加し拡張可能な学習モデルを提供	"	"	-	-

Imaging Collection	"	"	画像処理のためのコンポーネント一式を提供し、幅広いフォーマット(BMP/JPG/TIFF/RAW/DICOM)に対応した画像の入出力、分析(統計処理、学習モデルなど)が可能。Webベースのインタラクティブなツールをコンポーネント化しており、幅広いユーザー層向けに解析手法を公開・共有	"	"	-	-
Data Modeling Collection	"	"	データセットにGood/Badのラベルをつけるだけで、文書なら単語、化合物なら部分構造の出現頻度からベイズ学習モデルを構築、新規データを入力すると分類予測が瞬時で可能。他にも部分最小二乗法(PLS)、主成分分析(PCA)、決定木(Recursive Partitioning)、遺伝的アルゴリズムを使った数式最適化(GFA)、クラスタリングを提供。統計ソフトRに特化したコンポーネントも多数提供	"	"	-	-
Documents and Text User Collection	"	"	様々なデータソース(ローカル、FTP、HTTP)からのPDF、Word、PowerPointなどドキュメントの収集(Webクローリングも可)、情報の抽出、文書の数値化やパターン検出、トレンドや相関性・分類・クラスタリングが可能。文書からの化合物名の特定を実装し、Chemistry CollectionのName to Structureと組み合わせることで、文書と化合物構造の紐付けも実現	"	"	-	-
Thomson Reuters Cortellis Collection	"	"	トムソン・ロイターが提供するCortellis APIを利用(別途ライセンスが必要)し、通常のWeb画面から手入力で行っている検索をコンポーネントから自動実行。競合他社情報、低分子やバイオロジクスの特許情報、臨床試験の情報などを定期的に自動取得、更新分データの把握に活用可能	"	"	-	-
Lab Analytics Collection	"	"	マイクロプレートリーダからの出力ファイルを読み込み、プレートデータとして統計演算、Dose-Responseの計算、計算結果の表示が可能。粉末X線、NMRなどスペクトルデータを入力し、ピークの判定や面積の計算、波形の類似度からクラスタリングなどを実行	"	"	-	-
Mobile Collection	"	"	iPhone/iPad向けにApp Storeで提供しているScienceCloud Taskから、Pipeline Pilotのプロトコルをモバイル環境で実行可能。タッチパネルに特化した化学構造描画ツールや、モバイルデバイスならではの音声入力、カメラ、GPS機能を活用したプロトコルを構築可能。HTML5のチャートやレポートを出力。	Windows、Red Hat Enterprise LinuxもしくはSUSE Linux、およびiPhoneまたはiPad	"	-	-
<インフォマティクス>							
Insight	"	"	Oracleの表やビューをドラッグ・アンド・ドロップで接続することで、Webクライアントでデータベースを横断的に検索し、取得した化合物などのサイエンティフィックなデータにリアルタイムで計算し、高度な解析が簡単に実現。BIOVIA Foundationでプロトコルを構築することで、MongoDBなど様々なデータベースやExcelなどのファイルに接続し解析可能	Windows 2008 R2 SP1、Windows 2012またはRHEL5.x 64-bit版、Oracle 11g R2、IE8/9/10	"	-	-
Insight for Excel	"	"	Microsoft Excel用のアドイン。使い慣れたExcelのスプレッドシート環境で化学構造の読み込み、構造検索、デスクリプタの計算、Rグループ分析がクライアントPCだけで可能。BIOVIA Foundationを使うと、化学構造だけでなく数値文字、配列、画像など様々なサイエンティフィックなデータ分析機能を提供	Excel 2010または2013(32/64両対応)、IE8/9/10/11、Java 7 Update 51以降	"	-	-
Registration	"	"	BIOVIA Foundation上に構築された化合物・バイオロジクス登録システム。化合物登録に必要な処理(ID発番、塩やフラグメントの認識、描画の正規化、重複チェック、キュレーターを置いたワークフローへの対応、バッチ登録)をパッケージ製品として実装。RESTサービスに対応し、他の研究システムインテグレーションにも対応可能	Windows 2008 R2 SP1、Windows 2012またはRHEL5.x 64-bit版、Oracle 11g R2、IE8/9/10	"	-	-

BIOVIA Draw	"	"	BIOVIA製品標準の化学構造、反応式、バイオリジクスに対応した化学構造式描画ツール。BIOVIA Foundationと組み合わせることで、様々な計算ツールを展開可能。Javaと.NETアプリケーションへの組み込み、XMLによる機能の拡張・制御が容易	Windows 7または8/8.1(64-bit版にネイティブ対応)	"	-	-
BIOVIA Direct	"	"	Oracle Data Cartridgeテクノロジーを用いた、SQL文による化学構造、反応式登録検索が可能。BIOVIA全製品と共通したデータモデルを採用し、化合物だけでなく各種配列や修飾配列、抗体薬剤複合体(ADC)など幅広いバイオリジクスに対応	Windows 2008 R2 SP1、Windows 2012またはRHEL6.2以降、SUSE 11、Solaris 10	"	-	-
<クラウド>							
ScienceCloud	"	"	他社との共同研究やCROへの業務委託の際のデータ・情報交換に特化したクラウド型システム。化学構造とアッセイ・解析データ、ロジスティクス情報を登録し、複数拠点での解析データの共有やモノの管理が可能。電子実験ノート機能を実装し、最終結果に辿り着いた過程も記録。蓄積したデータはPipette Analysisで高度な解析に活用。Pipeline Pilotを活用することで、インハウスのデータベースとシームレスに同期し、共同研究の最新データを社内にリアルタイムでフィードバック可能。ポータル画面ではSNS機能を実装しコラボレーションを加速化	IE8以降、Firefox、Chrome	"	-	-
Pipette Analysis	"	"	クラウドとオンプレミスに対応したWebブラウザベースの解析システム。データをファイル感覚でドラッグ・アンド・ドロップで扱い、BIOVIA Foundationを使ったサイエンティフィックな解析や、多次元散布図など様々なビジュアライズが簡単に実現	IE9以降、Firefox、Chrome	"	-	-
Pipette Sketcher API	"	"	タッチパネルデバイスに対応したインストール不要の化合物描画ソフト。ScienceCloudおよびPipette Analysisには同梱	IE9以降、Firefox、Chrome	"	-	-
<データベースコンテンツ製品>							
BIOVIA DiscoveryGate	ダッソー・システムズ・バイオビ ア、その他代理 店2社	"	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 SP4以上/XP SP1以上/Vista、Java Runtime Environment 1.5.0_12、Internet Explorer 6.1 SP1以上 :MacOS X 10.4以上、Safari 2.0以上	お問い合わせ下さい	-	-
BIOVIA MDDR	"	"	生理活性化合物とその誘導体が 150,000 以上収録。データベースの更新によって毎年約 10,000 の物質が追加。ダッソー・システムズ・バイオビ ア株式会社と Prous Science 社が共同開発した MDDR は、特許関連の文献、学術誌、学術会議をカバー	ISIS/Host, Isentris, Insight またはDiscoveryGateと同環 境	"	-	-
BIOVIA Comprehensive Medicinal Chemistry (CMC)	"	"	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、約9,000化合物	"	"	-	-
BIOVIA Metabolite	"	"	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。約95,000の代謝反応、約57,000化合物の情報を網羅。Toxicityとの相互参照が可能	"	"	-	-
BIOVIA Toxicity	"	"	医薬、農業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17万化合物。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	"	"	-	-
BIOVIA Available Chemicals Directory (ACD)	"	"	世界中の市販化学物質を構造検索できる価格とサプライヤ情報を収録。700万以上の固有化学物質(3Dモデル含む)、1500万以上の製品、4100万以上のパッケージ、940のサプライヤ	"	"	-	-
BIOVIA Screening Compounds Directory (SCD)	"	"	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。2,100万化合物	"	"	-	-
<電子実験ノート(ELN)>							

BIOVIA Electronic Lab Notebook (旧Symyx Notebook by Accelrys)	ダッソー・システムズ・バイオビ ア、その他代理 店2社	"	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。柔軟なフォーム設計が可能。強力な文書管理機能により21CFR Part11に対応。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:Windows 2003 server, Oracle10g.11g / クライアント: Windows XP/Vista	お問い合わせ下さい	—	—
BIOVIA Notebook (旧Contur ELN)	ダッソー・システムズ・バイオビ ア、その他代理 店2社	"	実験や研究の記録をPC上で記録でき、メンバー間で簡単に共有できる電子実験ノート。操作も導入も簡単に低コストです。様々なタイプの電子記録に対応でき、変更や参照の記録も残せ、改竄防止もできるため、情報共有化、業務効率化、知的財産の保護を支援する	クライアントOS:Windows, Mac ブラウザ: Internet Explorer9以上, Safari, Chrome, and Firefox	お問い合わせ下さい	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Muse Invent	サターラ合同会 社	米Certara	計算化学と合成化学を融合させた最先端の分子設計ソフトウェア。カスタマイズ可能なスコアリングを基準としたde novoの分子設計に対応するだけでなく、予測された分子構造を合成するために必要な合成経路を提案することで、より現実的な分子デザインを実現	お問い合わせください。	お問い合わせください。	—	—
D360	"	"	トランスレーショナルサイエンスを促進する総合的解析・連携ツール。創薬から医薬品開発までの全研究データベースに、単一アプリケーションからのアクセスを実現。エンドユーザーごとのインターフェースのカスタマイズや、ドラッグアンドドロップによる容易なクエリー構築と共有機能を提供	"	"	—	—
Preclinical Safety Store (PCSS)	"	"	D360のコンパニオン製品。CDISC-SEND対応のデータベース上で、前臨床試験データの収集およびバリデーションが可能。リアルタイムの試験モニタリングおよび横断的試験データ解析を実現	"	"	2014年4月	—
Phoenix WinNonlin	"	"	40年の歴史を有する業界標準の薬物動態解析用ソフトウェア。各種申請資料への豊富な採用実績を有する。PK/PDモデルやノンコンパートメント解析、生物学的同等性解析など多様な機能を提供するだけでなく、Phoenixプラットフォームを通して、各種ソフトウェア、データベースとの連携を実現	Windows	"	1974年	—
Phoenix NLME	"	"	Phoenixプラットフォームで動作する次世代の母集団薬物動態解析専用のソフトウェア。バリデートされたグラフィカルな環境における、母集団モデルの構築をサポート。高品質かつ必要十分な解析結果を出力可能	"	"	2009年	—
Phoenix Connect	"	"	CDISC SDTMおよびSENDへの対応機能を強化。Phoenixプラットフォーム上におけるPharsight Knowledge Serverなどの各種データベースとの接続や、SASやNONMEMなどサードパーティーソフトウェアの動作を支援。また、Phoenix上における解析結果を自動的にMicrosoft Wordの報告書に出力する機能を搭載。	"	"	2009年	—
IVIVC toolkit for Phoenix WinNonlin	"	"	Phoenix WinNonlinのアドインアプリケーション。In vitroおよびin vivoデータの相関性を説明するモデル構築を支援し、生物学的同等性試験の成功確率の向上を支援	"	"	2011年	—
Autopilot toolkit for Phoenix	"	"	Phoenix WinNonlinのアドインアプリケーション。PK試験の解析結果の報告書全自動作成ツール。各社のSOPに従ったビジネスルールの容易な共有を可能にする機能を提供	"	"	2012年	—
Trial Simulator	"	"	数学的な薬物モデルに基づく臨床試験シミュレーション用ソフトウェア。臨床試験の成功確率や試験デザインの妥当性など多彩なシナリオの容易な検証を実現	"	"	—	—
Phoenix QT+	"	"	Phoenixプラットフォームで動作する心臓安全性データ専用の解析ツール。ICH E14ガイドラインで定められたQT間隔延長を評価するために必要な全ての解析機能を提供し、グラフィカルインターフェース上での操作機能を提供	"	"	2014年	—

Pharsight Knowledgebase Server (PKS)	"	"	21 CFR Part 11 Complianceに準拠した臨床試験データ管理専用のデータベースシステム。Phoenixプラットフォームと連携し、あらゆるPK/PDデータの管理を実現。CDISCデータのインポートおよびエクスポート機能を提供	Windows Server	"	—	—
PKS Online	"	"	Pharsight Knowledge Serverのオンデマンドバージョン。従来のPKSと同一の機能を提供しながら、システムの導入および保守に必要なITコストを大幅に削減	Windows	"	—	—
Phoenix Validation Suite	"	"	Phoenixプラットフォーム上のクライアントアプリケーション (WinNonlin, NLME, およびConnect)の完全自動化バリデーションツール。全ての機能を1クリックでバリデートし、報告書を自動出力可能	"	"	—	—
PKS Validation Suite	"	"	PKSの完全自動化バリデーションツール。全ての機能を1クリックでバリデートし、報告書を自動出力可能	"	"	—	—
Simcyp Population-based Simulator	"	"	業界標準の生理学的薬物動態モデリングツール。in vivoおよびin vitroデータから仮想被験者集団におけるPK/PDの予測を実現	"	"	—	—
Cardiac Safety Simulator	"	"	心臓安全性データ専用のM&Sツール。in vitroおよびin vivoデータからQT間隔延長リスクの早期予測を実現	"	"	2013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
ChemInTool - Chemish Pro	ケムインフォナビ	東京大学・船津研究室	データ分析(PCA,ICA)、クラスタリング(階層型,SOM,CP)、モデリング(MLR,PLS,BP)、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(インストール1台)、コーポレート(インストールフリー)	Windows XP/Vista/7/8	ノードロック 8万円/年(税抜) ~、アカデミック価格あり	2004年	—
ChemInTool - Chemish Standard	"	"	Chemish Proの機能限定版。機能比較はHP参照 [http://www.cheminonavi.co.jp] ライセンス種類:ノードロック(インストール1台)、コーポレート(インストールフリー)	"	ノードロック 5万円/年(税抜) ~、アカデミック価格あり	2007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	"	ノードロック 200万円/年(税抜) ~、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:Windows XP/Vista/7	60万円/年(税抜) ~、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	"	30万円/年(税抜) ~、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	"	24万円/年(税抜) ~、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	Windows XP/Vista/7	50万円/年(税抜) ~、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	Windows XP/Vista/7、UNIX (Linux、Solaris)	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: Windows XP/Vista/7, UNIX (Linux, Solaris)、サーバー: Linux	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	Windows XP/7, Linux	"	—	—
ADRIANA.Code	"	"	分子構造記述子計算ソフトウェア	"	"	—	—
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)	"	"	—	—
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	"	"	—	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
CONFLEX 7 & Interface	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。溶媒効果も配座探索に適用可能であり、それを応用してLogP値の算出も可能となっている。また、結晶構造の最適化や安定構造の探索、NMRの3JHH値の算出も可能	Windows, Linux, Mac	企業・官公庁価格:200万円、大学価格:20万円	2012年10月	—
Parallel CONFLEX 7	"	"	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 Windows	お問い合わせ	2012年10月	—
AMBER 14	"	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	Linux, Mac, Windows	お問い合わせ	2012年4月	—
Gaussian09(Rev. D.01), GaussView5(5.0.9), TCP Linda 8	"	米Gaussian, Inc.,	分子や分子集合体の構造・物性を、電子状態計算により算出。高次の電子相関を取り入れた高精度ab initio分子軌道計算から、リーズナブルな半経験的分子軌道計算、さらには分子力場計算まで幅広く網羅。ONIOM法がより強化され、巨大分子の計算がより効率化した。また、遷移状態計算やIRCIにも対応した。その他、振動解析・IRC・旋光度の計算が並列環境下で、より高速化された	UNIX, Windows, Mac	お問い合わせ	2012年5月	—
ChemBioDraw/Officeシリーズ version14	"	米PerkinElmer Informatics	化学・生物学分野で必要とされる様々なツールが装備された世界標準のソフトウェア。化学構造式描画から各種計算プログラムのクライアントツール、データベースの構築まで可能にした様々なパッケージが用意されている	Windows, Mac	お問い合わせ	2012年9月	—
受託計算サービス	"	コンプレックス	高効率配座創出アルゴリズムと並列計算システムを応用した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	—	10万円～	2009年4月	—
各種サポートサービス、インストール・トレーニング (CONFLEX, Gaussian, AMBER, GAMESS, 他)	"	"	計算化学用ハードウェアから各種ソフトウェアのインストール・トレーニング・技術サポートまで、トータルでソリューションを提供する。技術サポートは、初心者から使い慣れた方まで幅広く対応。トレーニングは、実習形式で初級編から応用編まで顧客のニーズに合わせて行う	—	お問い合わせ	2009年4月	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
Nanoveats	伊藤忠テクノロジーソリューションズ	伊藤忠テクノロジーソリューションズ	第一原理計算、分子動力学などのナノシミュレーションソフトと連携したマイクロ・ナノスケールにおける物性評価を行うソフト	Windows	お問い合わせください	—	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>システム構成</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>

Genomatix Suite	CTCライフサイエンス(旧社名・シーティーシー・ラボラトリーシステムズ)	独Genoematrix	制御因子を解析するための統合システム。Genomatix社の“Genes & Genomes”, “Gene Regulation”, “Literature & Pathways”の統合パッケージ	Internet経由またはLinux Server	要問い合わせ	—	—
ChipInspector	〃	〃	マイクロアレイデータの統計解析ソフトウェア	〃	〃	—	—
Genomatix Mining Station	〃	〃	高速シーケンサーから出てくる膨大な塩基配列を独自の手法をもとにリファレンスゲノムにマッピングする装置	1U 19” server、2 × DualCore Opteron 2000、64GB ECC RAM、4 × 1TB HD	〃	—	—
Genomatix Genome Analyzer	〃	〃	高速シーケンサーから出てくるデータを解析するための統合システム装置Genomatix社の“NGS Analysis”, “Genes & Genomes”, “Gene Regulation”, “Literature & Pathways”を搭載	Processing Unit and RAID storage system、1 × DualCore AMD Athlon 64-X2 5600 Processor、8GB ECC RAM、4X1 TB HD	〃	—	—
NGS Analysis	〃	〃	ChIPSeq解析ワークフロー、RNASeqや、CNV解析の解析ツールパッケージ	Processing Unit and RAID storage system、1 × DualCore AMD Athlon 64-X2 5600 Processor、8GB ECC RAM、4X1 TB HD	〃	—	—
Genes & Genomes	〃	〃	独自に作成したトランスクリプト、プロモーターのアノテーション情報を含んだ統合DB。bam fileなど実験データを視覚化したり、DBのデータと比較するためのツールも搭載。	Internet経由またはLinux Server	〃	—	—
Gene Regulation	〃	〃	転写因子、その結合サイトに関する包括的な情報を取得可能。制御因子解析のトータルパッケージを搭載	〃	〃	—	—
Literature & Pathways	〃	〃	論文をキュレーションしたパスウェイDB。遺伝子セットのエンリッチメント解析や、キーワードによる文献検索が可能なツールパッケージも搭載。	〃	〃	—	—
MatBase	〃	〃	転写因子情報のデータベース	〃	〃	—	—
MatInspector	〃	〃	インプットした塩基配列から制御因子結合サイトを検索するツール	〃	〃	—	—
GeneGrid	〃	〃	次世代シーケンサーデータの変異解析ツール	〃	〃	—	—
BIOBASE Knowledge Library	〃	独BioBase	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	〃	〃	—	—
Human Gene Mutation Database	〃	〃	ヒト疾患と遺伝子の変異を関連付けた情報を収録したキュレーションデータベース	Internet経由またはLinux ServerまたはWindows Server	〃	—	—
FGENEシリーズ	〃	米Softberry	遺伝子領域予測ツール	UNIX	〃	—	—
E-WorkBook/BioBook	〃	〃	生物評価試験用電子実験ノートシステム	サーバー: 2008R2, Sun Solaris, RedHat Linux / クライアント: Windows 7, Windows 8, Citrix + Office 2007, 2010 / Web Client: Firefox, Internet Explorer, Safari (Mac OS)	〃	—	—

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	サーバー: Windows 2003, 2008R2, Sun Solaris, RedHat Linux / クライアント: Windows XP, Vista, 7, Citrix + Office 2003, 2007, 2010 / Web Client: Firefox, Internet Explorer	"	—	—
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 7,8 Citrix + Office 2007, 2010,2013	"	—	—
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, Vista, 7, Citrix + Office 2003, 2007, 2010	"	—	—
RAKTIS	"	CTCライフサイエンス	試薬管理ソフトウェアパッケージ。在庫検索・入出庫管理・発注・棚卸等に対応。法規制チェックシステムとも連携し、コンプライアンスを遵守した試薬管理を実現	Webサーバー: Windows Server 2008 R2/2012 R2 / DBサーバー: Windows Server 2008 R2/2012 R2, Unix, Linux + Oracle + Accelrys Direct / クライアント: Windows 7, Windows 8.1 + IE8,9,11	"	—	—
RegSys	"	"	化学構造式、CAS番号、化合物名称等から法令に抵触する化合物かどうかチェックするソフトウェアパッケージ。法令変更時にもスピーディに法規制化合物辞書を更新し、コンプライアンス遵守を強かに支援	Webサーバー: Windows Server 2008 R2/2012 R2 / DBサーバー: Windows Server 2008 R2/2012 R2, Unix, Linux + Oracle + Accelrys Direct / クライアント: Windows 7, Windows 8.1 + IE8,9,11	"	—	—
Lapris	"	"	ラベルプリンタと連携をして、構造式をバーコードラベルとして出力可能な機能	サーバー: WindowsServer2008R2 クライアント: Windows7	"	—	—
Medchem Database / Target Inhibitor Databases (GPCR, Kinase, Protease, NHR, Ion-Channel, Phosphatase, Transporter, HYDROLASE, OXIDOREDUCTASE, TRANSFERASE)	"	印GVK Biosciences	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	"	"	—	—
Clinical Biomarker Database	"	"	Clinical Trialで評価されたBiomarkerに関して、治験情報、薬物情報、疾患情報等を網羅的にキュレーションしたデータベース	Internet Explorer version 7.0 or higher	"	—	—

Clinical Trial Outcome Database	"	"	主要疾患(がん、糖尿病、C型肝炎など)毎に収集された治験情報(治験デザイン、患者情報、投薬情報、有効性/副作用など)データベース	Microsoft Excel	"	-	-
Leadscope Enterprise / Personal	"	米Leadscope	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 Personal版は10万化合物の制限あり	サーバー: Linux - RedHat Enterprise, Solaris 8+ / クライアント: Vista or Windows 7	"	-	-
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	"	"	-	-
Marketed Drugs Database	"	"	FDAおよび他の政府系研究機関が収集した約6000もの薬剤化合物とそれに付随する適応症に関する情報を収録したデータベース	Windows Vista or Windows 7	"	-	-
Leadscope FDA CDER/CFSAN databases	"	"	FDA CDER/CFSANがCRADA契約を通じて製薬・食品会社から収集した毒性情報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 / Carcinogenicity 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Genotoxicity / Carcinogenicityデータベース(それぞれ8400個、1600個以上の化合物)	"	"	-	-
Model Applier	"	"	フラグメントキーおよびプロパティを用いて構築されたQSARモデルに基づく、新規化合物の毒性予測ソフトウェア。FDAとのコラボレーションにより開発された	"	"	-	-
ToxWiz	"	英Cambridge Cell Networks	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、クラスターや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 Nexus	"	英Lhasa Limited	構造活性相関に基づく、化合物の定性的毒性予測ソフトウェア	Windows XP, Vista, Windows7	"	-	-
Meteor Nexus	"	"	構造活性相関に基づく、化合物の定性的代謝産物・代謝経路予測ソフトウェア	"	"	-	-
Vitic Nexus	"	"	詳細な毒性情報が付随した13000件以上の化合物を収録したデータベース	Internet経由でのアクセス、あるいはin-house構築(Windows Server 2008)	"	-	-
Zeneth	"	"	構造活性相関に基づく、化合物の分解生成物・分解反応予測ソフトウェア	Windows XP, Vista, Windows7	"	-	-
Sarah Nexus	"	"	定量的(統計的)構造活性相関に基づく、化合物のDNA反応性(変異原性)予測ソフトウェア	"	"	-	-
PK-Sim/MoBi	"	独Bayer Technology Services	生理学モデルを用いた薬物動態シミュレーションソフトウェア	Windows7	"	-	-
CORINA	"	独Molecular Networks	大規模な3次元Chemicalデータベース構築を目的とした高精度な3次元構造自動生成プログラム	Windows XP/ 7 (win32)、Linux Kernel 2.6.32 and higher (32 and 64 bit)	"	-	-
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	"	"	-	-
SONNIA	"	"	ADRIANA.Codeなどによって計算された記述子データを用いてモデル作成を行うケモメトリックスソフトウェア。KohonenやCounterPropagationのニューラルネットワークを用いてデータ解析(クラスタリングやクラス分け)を行うことが可能	"	"	-	-

SYLVIA	"	"	有機化合物の合成容易性を迅速に評価するソフトウェア。de novo デザインやバーチャライブラリーから抽出した数千の構造を合成の複雑さにしたがって優先順位づけをすることができる。有機化合物の合成容易性スコアは、構造の複雑さ、出発物質の入手性、反応データベースに存在する結合の頻度などの要素に基づいて、1から10の数値で算出される	"	"	-	-
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	"	-	-
Definiens XD	"	独Definiens	人間による認知・判断の仕組みをモデル化した特許技術により、解析対象を柔軟かつ正確に分類し、定量化するソフトウェア	Windows	"	-	-
TissueStudio	"	"	人間の認知・判断を学習する機能を備えた、バーチャルスライド等の組織画像を高精度高スループットに解析するソフトウェア	"	"	-	-
Provantis	"	英Instem	国内外のGLPに準拠した安全性試験支援システム。一般毒性試験、生殖試験、がん原性試験などに対応。SENDやIACUC等に完全対応しており、欧米当局の要求事項にもいち早く対応し、且つ日米欧重16か国以上のGLP施設で運用実績がある唯一のシステム	サーバ: Windows 2008 Server、Oracle	"	-	-
Submit	"	"	CDISCのSEND形式のデータセットを容易に作成が可能で、且つ優れたビューア機能も完備されており、SENDに完全対応したソフトウェア	"	"	-	-
LogBook	"	"	GLPにおける機器管理や施設管理において大量に発生する紙データを電子化し管理することで、記載漏れやQC作業の最小化を実現するソフトウェア	"	"	-	-
ARISg/j	"	米Aris Global	治験・市販後の安全性情報をトータル管理を支援する。標準機能で国内要件に対応しているのに加え、同一システムで国内、欧米当局の3極対応での運用実績もあるシステム	Windows Server 2008	"	-	-
agOnDemand	"	"	ARISg/jを用いたクラウド型サービス	Internet接続環境が必要	"	-	-
agSignal	"	"	安全性情報のシグナル検出用のデータマイニングツール。自社のDBやFDA、WHOのDBをデータマート化し、BIツールで表・グラフなど分析可能。複数の解析アルゴリズムが実装されており、複数の当局でも利用実績あり	Windows Server 2008	"	-	-
Register	"	"	薬事申請情報管理DB。各薬剤に関する申請情報や変更情報を全体または各国単位で管理可能。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。PIM,SPL作成ツールとも統合可能	"	"	-	-
BizConnect	"	"	治験・市販後の安全性情報レポートを当局やパートナー伝送するEDIツール。欧米は勿論日本当局が定めるグリーブックでも認定されており、ARISg/j以外のシステムとの連携実績もあり	"	"	-	-
agInquirer	"	"	製薬企業における市販後の医薬品情報を一元管理するシステム	"	"	-	-
Axway Gateway Interchange	"	米Axway	治験・市販後の安全性情報レポートを当局やパートナー伝送するEDIツール。欧米は勿論日本当局が定めるグリーブックでも認定されており、日本当局自身でも採用され、現在稼働中	Windows 2003 Server	"	-	-
STARLIMS V10	"	米StarLIMS	研究・開発、品質管理において実施されるラボ業務に対応する完全Webベースのラボ情報管理のためのLIMS(Laboratory Information Management System)統合プラットフォーム。ISOやGMPなどの法・規制に準拠し業界標準を遵守する為の基本機能を備えている	サーバ: Windows Server 2008、利用PC: Windows Vista、Windows 7	"	-	-
STARLIMS SDMS	"	"	ラボで利用されているデータの統合管理システムSDMS (Scientific Data Management System)。表やチャートを含む各種分析機器から出力される記録データの管理や、記録データから取り出した値やグラフの利用等、データの統合管理・利用に対応	"	"	-	-

STARLIMS ELN	"	"	品質試験記録の電子化、ERES対応が可能な電子ノート(ELN: EElectronic Notebook)システム。SOP連携とワークフローによる試験手順の厳格化や電子署名、監査証跡機能による記録の厳格化に対応	"	"	-	-
Isentris	"	米ダッソー・システムズ・バイオピア(旧 Accelrys)	化学構造式を含む化合物情報の登録、検索が可能。実験計画の立案やデータの解析、情報共有などが可能で創薬プロセスにおける統合型の意思決定支援システム	サーバ: WindowsServer2008R2(64bit)、SUN、RedHatLinux、Oracle /クライアント: WindowsVista、Windows 7	"	-	-
BIOVIA Electronic Lab Notebook	"	"	化合物の探索研究から分析、アッセイ、プロセスR&D、製剤までをサポートする電子実験ノートシステム。コンプライアンスにも準拠しており、社内資産の知的財産としての活用を支援	"	"	-	-
BIOVIA Insight	"	"	サイエンスデータの収集・表示・分析、社内のチームや外部とコラボレーション、データの的確な把握、研究プロジェクトを次の段階に進めるうえでの適切な情報にもとづいた迅速な意思決定を支援するシステム	サーバ: WindowsServer2008R2 クライアント:Windows7	"	-	-
BIOVIA Direct	"	"	化学データカートリッジで構造式および反応式の検索および保存が可能で、独自開発ツールとの連携が容易に可能	サーバ:Windows Server 2003/2008系、Sun、RedHatLinux、SUSE Linux、HP、Oracle	"	-	-
BIOVIA Draw	"	"	化学構造式描画ツール	WindowsVista、Windows 7	"	-	-
BIOVIA Chemical Registration	"	"	化学構造式を含む情報の登録ツール	サーバ: WindowsServer2003、2008R2(64bit)、SUN、RedHatLinux、Oracle /クライアント: Vista、Windows 7	"	-	-
BIOVIA PipelinePilot	"	"	サイエンティフィックなデータ処理、解析、レポート作業を自動化するためのサービスを迅速に構築、テスト運用が可能	Windows Server2008SP2(64bit)、Windows Server2008R2(64bit)	"	-	-
Aspera	"	米Aspera	高速ファイル転送ツール。Asperaは、特許技術 faspTM テクノロジーを採用し、FTP、HTTPやSCPなどのレガシー通信プロトコルに代わる次世代の高速ファイル転送ソフトウェアです。従来はネットワークでは送れなかった大容量ファイルの受け渡しを可能にする	あらゆるプラットフォームをサポート (Windows、Mac、Linux、Solaris)	"	-	-
BIOVIA QUMAS EDMS(旧 QUMAS DocCompliance)	"	米ダッソー・システムズ・バイオピア(旧 QUMAS)	医薬品開発工程での様々な品質文書(製造法、SOP、申請文書など)を、定義済みの業務フローとともに提供。全てのGMP/GCP要求事項に対応	Windows2003/2008、Oracle10g/11g、SQLServer、Documentum	"	-	-
BIOVIA QUMAS Process Management(旧: QUMAS ProcessCompliance)	"	"	適切な品質マネジメントに最適なワークフロー管理パッケージであり、品質管理を効率化するとともに経営陣を含むマネジメントレビュー機能を装備	"	"	-	-
BIOVIA QUMAS for SharePoint(旧ComplianceSP)	"	"	Microsoft社SharePoint2010プラットフォーム上で21 CFR Part11に対応した文書管理と品質管理を実現	Windows Server 2008、SQL Server 2008 R2/SP1/SP3 SharePoint2010	"	-	-
BIOVIA QUMAS iX	"	"	インハウスの文書管理システムに管理された文書をQUMAS Cloud(SaaSサービス)を介してCRO、CMO、受託会社等の社外提携先とセキュアに共有する	DocCompliance(インハウス)+ ComplianceSP(QUMAS Cloud)	"	-	-

CIRX(ChemInform Reaction Library)	"	独Wiley Information Services GmbH	低分子に関する有機合成反応を収録した反応データベースで、実用的な反応情報と新しく発見された合成法を中心に収録。国内外を通して20社以上で利用されており、実用的な反応情報による合成業務支援と、新規合成法発見のサポートを行えるため、企業・アカデミック双方のニーズに応える事ができる。インストール版とオンライン版での提供が可能	●インストール版 サーバ: WindowsServer2003SP2、2003SP2R2、2008R2(64bit)、SUN、RedHatLinux、Oracle クライアント: WindowsVista、Windows 7 ●オンライン版 InternetExplorer8、GoogleChrome19以上、Firefox3以上、Java1.6.0.20以上	"	—	—
SPORE	"	"	有機反応の多様な内容をデータベース化した反応データベース。固相反応の範囲・制限等は詳細なコメントと高分子足場、リンカー、リンケージタイプ、保護基、反応常動に関連するデータフィールドで説明している。インストール版とオンライン版での提供が可能	"	"	—	—
GATK (Genome Analysis Toolkit)	"	米国Broad Institute・Appistry社	ゲノム配列解析ソフトウェア。エクソームシーケンスや全ゲノムシーケンスによって得られたデータからSNP、INDELを高精度に検出が可能	LinuxOS	"	—	—
CGA (Cancer Genome Analysis Suite)	"	"	癌ゲノムNGS解析ソリューション。がん細胞中に低頻度で存在する体細胞変異を高精度に検出が可能	LinuxOS	"	—	—
NorthStar	"	米Humedica社	製薬企業向けに、米国の医療機関のElectronic Health Recordより抽出した、薬剤の処方情報、患者背景因子、現病歴や既往歴、重症度、治療情報、処方変更・変更理由、処方後の経過や効果、さらに希少疾患に関する臨床情報、既存薬の薬効、副作用、併用薬、QOL等の情報をデータをWeb上で可視化し提供するリアルワールドデータベース。製薬企業の研究開発戦略、製品ブランド戦略、マーケティング戦略の支援ツールとして提供	Internet経由	"	—	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>システム構成</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
DiscoveryStudio DS Standalone	ダイキン工業	米アクセルリス(BIOVIA)	DiscoveryStudioのモジュール群の統合環境として、生体高分子、化合物のデータを可視化、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	GUI: Windows、Linux 計算: Windows、Linux	要問合せ	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Sequence Analysis	"	"	BLASTあるいはPSIBLASTを用い、興味のあるアミノ酸配列についてローカルのデータベースあるいはNCBIのWEBサーバに検索を行い、相同性のある配列を探す	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Protein Families	"	"	配列と構造情報を用いて、複数のアミノ酸配列からマルチプルアライメントを行う。またアライメント結果から進化系統解析を行う	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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メント、タンパク質のミュータントの構築を行う	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Protein Refine	"	"	CHARMmのテクノロジーを用いて、タンパク質の側鎖、ループ領域の最適構造を発生させる	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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する。また、静電ポテンシャルおよび溶媒とエネルギーを計算することも可能	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS CHARMm	"	"	タンパク質および複合体の分子動力学シミュレーションエンジン。機能に含まれるCDOCKERを用いて、リガンド分子を高精度にドッキングする。すでにあるドッキング結果に対してCHARMmのリガンド構造最適化をレセプター側の原子も含めて実施	"	"	2002年11月	—

DiscoveryStudio 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)である。CHARMmで利用することが可能	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS CHARMm Lite	"	"	CHARMmの幅広い機能のうち、ドッキング効果の最適化(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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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、可視化する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Analysis	"	"	ドッキングシミュレーションの結果から、RMSDを可視化したり、close contact、水素結合数の解析を高速に実施する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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できる	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Catalyst Structure BasedPharmacophore	"	"	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する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Catalyst Build&DS 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することが可能	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS ADME	"	"	薬物体内動態の予測	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Protein Docking	"	"	ZDOCKアルゴリズムを用いたタンパク-タンパクドッキング	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS QSAR	"	"	構造活性相関モデルの作成、解析	"	"	2002年11月	—
MaterialsStudio MS Visualizer	"	"	マテリアルサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。MaterialsStudioの各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	GUI: Windows、計算: Windows、Linux	"	2000年9月	—
MaterialsStudio MS Discover	"	"	分子力場シミュレーション。分子、材料系の構造最適化、分子動力学など	"	"	2000年9月	—
MaterialsStudio MS AmorphousCell	"	"	ポリマー、低分子化合物の非晶構造セルを作成。分子動力学シミュレーションにより物性を推算	"	"	2000年9月	—
MaterialsStudio MS COMPASS	"	"	凝縮系の再現にも優れた高精度力場。有機物、無機、無機酸化物、金属などへの適用	"	"	2000年9月	—
MaterialsStudio MS Forcite	"	"	分子力学ソフト。分子系、周期系の構造最適化が可能	"	"	2000年9月	—
MaterialsStudio MS ForcitePlus	"	"	Forciteに分子動力学の機能を付加。分子、材料系の動力学解析ツール	"	"	2000年9月	—
MaterialsStudio MS Blends	"	"	ポリマー、溶媒、添加剤混合系の混合エネルギー、相図、相互作用のパラメータなどを算出	"	"	2000年9月	—

MaterialsStudio MS Equilibria	"	"	モンテカルロ-ギブスアンサンブルに基づき1~3成分分子系の相図を決定	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Sorption	"	"	モンテカルロ法吸着シミュレーションソフト。吸着等温などを計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS MesoDyn	"	"	ポリマー流体、ブレンドなどの複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Mesocite	"	"	ナノメートルからマイクロメートルの長さ、ナノ秒からマイクロ秒の時間のスケールで物質を研究する、粗視化シミュレーション	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS DMol3 Molecular	"	"	数値基底関数を使い、高速、高精度を実現した密度汎関数法(DFT) ab initio量子化学計算ソフト	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS DMol3 Solidstate	"	"	3D周期境界条件への拡張版。固体、表面などの反応性、バンド構造、状態密度計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS CASTEP	"	"	平面波基底密度汎関数法による分子、固体、表面等の第一原理計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS NMR CASTEP	"	"	固体のNMR、電磁勾配テンソルを計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS VAMP	"	"	MNDO近似による半経験的分子軌道法。MNDO(/C,d)、AM1、PM3、ZINDOハミルトニアンなど	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS ReflexPlus	"	"	Reflexに粉末図形解析機能の付加	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Reflex QPA	"	"	有機、無機結晶の粉末回折データから結晶相組成を決定	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS X-Cell	"	"	新規なアルゴリズムよりパラメータ空間を網羅的に探索し指数を付ける	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Polymorph	"	"	分子構造から有力な結晶多形を予測	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Morphology	"	"	結晶の形態を結晶の原子構造より予測。BFDH、付着エネルギー法、平衡形態法を実装	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS QSAR Plus	"	"	QSAR Plus は、QSAR に、反応性指数や正確なエネルギーを計算する DMol3 記述子の機能を加えたもの	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS 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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Synthia	"	"	グラフ理論に基づく構造物性相関手法によりポリマーの種々の物性値を推算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Conformers	"	"	コンフォーマ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	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Gaussian I/F	"	"	Gaussianにアクセスするためのグラフィカルユーザインタフェース(GUI)	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Adsorption Locator	"	"	周期的/非周期的な基板上において分子の低エネルギー吸着サイトを探索する	"	"	2000年9月	-

iLabber	"	"	電子実験ノート。フレキシブルでシンプルな操作性により誰でも簡単に使え、様々なタイプの電子記録に対応できるため、情報共有に大きな力を発揮する。さらに、記録内容の保護機能やアクセス記録機能により、記載内容の正確性を維持しつつ記録の共有・再利用が可能となり、知的財産の保護にも役立てる事ができる	Windows	"	2012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
Chemistry 4-D Draw 9.0	デジタルデータマネジメント	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	Windows 95、98、Me、NT4.0、2000、XP、Vista、7、8、8.1(32/64ビット) 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2千本
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	Windows 95、98、Me、NT4.0、2000、XP、Vista、7、8、8.1、Macintosh(Classic)	9万9千円(一般)、6万3千円(アカデミック)	2005年3月	国内数十本
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	Windows 95、98、Me、NT4.0、2000、XP、Vista、7、8、Macintosh(Classic)	8万8千円(一般)、5万2千円(アカデミック)	2003年10月	国内20本
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
PharmaPendium	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	米国FDAおよび欧州EMAの医薬品承認文書を全文検索可能な形で収録(FDA:1992年～、EMA:1995年～)。マニュアルインデキシングにより、毒性・副作用の事例がまとめられているため、特定の毒性・副作用の先例を薬剤横断的に閲覧可能。FDA文書は最初の承認薬まで遡って、Classic Collectionとしてオプション提供。薬物動態データを素早く入手可能なPK Moduleや薬剤と代謝酵素・トランスporterとの相互作用データのためのMetabolizing Enzymes and Transporters Moduleも提供。そのほかのオプションも開発中	◆OS: Windows 7、Mac OS X 10.4以上 ◆ウェブブラウザ: IE8以上、Firefox 3以上、Safari 4.0以上	-	-	-
Reaxys	"	"	化学反応情報と実測物性値を収録した世界最大級の反応・化合物データベース。有機化学から無機化学、有機金属、錯体化学まで幅広くカバーし、化学者のワークフローに合わせた効率的な検索性を提供。約16,000の定期刊行物および特許から情報を収録。収録反応数約3,700万、収録化合物数約2,500万、実測物性値5億件以上	◆OS: Windows Vista/7、Mac OS X 10.4以上 ◆ウェブブラウザ: IE8/9/10/11、Firefox 3以上、Google Chrome 10以上、Safari 4.0以上 ◆Java環境: JRE1.6.0 Update11以上	-	-	-
Reaxys Medicinal Chemistry	"	"	約32万点の出版物・特許を情報源とした、創薬化学向けデータベース。化合物とそれに関連したアッセイや生物活性データを収録。コンテンツ数は、約540万化合物、2,600万件の生物活性データ、11,000以上のターゲット情報。ヒートマップ機能により、異なるソースや分析情報から得られた生物活性データの比較結果を可視化し、新薬候補とターゲット分子の関係性を効率的かつ網羅的に閲覧可能	"	-	-	-
Pathway Studio Web	"	"	自然言語処理アルゴリズム(MedScan)を使用し、PubMedアブストラクトおよびライフサイエンス分野1300タイトルのfull-textから、分子間相互作用情報を抽出したデータベースを有するパスイツール。対応データは、Mammal、Plantの他に、薬剤情報、疾患情報もオプション追加可能	Internet Explorer 9.x、10.x / Google Chrome 26以上 / Mozilla Firefox 17以上 / Safari 5.1 以上 ※ソフトウェアインストール版は別途お問い合わせください	-	-	-

Pathway Studio Enterprise	"	"	PathwayStudioのクライアントサーバー型システム(in-house)。自然言語処理アルゴリズム(MedScan)を使用し、PubMedアブストラクトおよびライフサイエンス分野1300タイトルのfull-textから、分子間相互作用情報を抽出したデータベースを有するパスウェイツール。対応データは、Mammal、Plantの他に、薬剤情報、疾患情報もオプション追加可能。同梱のMedScanを用いて、ユーザー自身が文献テキストから相互作用情報の抽出も可能。また、本製品購入者のみAPIの提供も行う	◆サーバー:Linux、Windows 2003/2008 ◆クライアント:Windows 7 以上、メモリ2GB以上 ※サーバーOSおよびご利用いただくライセンス数によって必要となる3rd Party SQLおよびサーバースペックが異なります。詳細はお問い合わせください	—	—	—
Elsevier Text Mining(旧: TargetInsights)	"	"	論文情報からターゲット分子候補やバイオマーカー候補の情報を収集するための検索ツール。化合物や受容体、遺伝子、病名などのキーワードや語彙集(taxonomy)から、探索研究に必要な文献を素早くかつ効率的に検索可能。full-textからインデックスを作成しているため、Discussion中にある新規性の高い情報を得ることも可能。また、自然言語アルゴリズムを用いることで、分子や疾患の関連性や分子間相互作用情報をベースにしたセマンテック検索も可能	Internet Explorer8x、9.x、10.x/Google Chrome 26以上/Mozilla Firefox 17以上/Safari 5.1 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
MolFeat	フィアラックス	フィアラックス	蛋白質モデルのビューワ。論文に添付するような綺麗なイメージを簡単に作成可能。編集したイメージを、パワーポイント上でスライドを実行しながら3次元的に操作可能。スクリプト対応	WinXP,VISTA,7.8/Mac10.6以降	9万8,000円(税別)	2004年1月	470サイト以上
MF myPresto	"	"	分子シミュレーションプログラムmyPrestoのインタフェースソフトウェア。MF myPrestoにより分子動力学(MD)計算、ドッキングシミュレーションが簡単に行える	WinXP,VISTA,7/OS X 10.5以降(Intel Mac)/CentOS5以降/RedHatEnterprise Linux5以降	年間ライセンス18万円~(税別)	2010年8月	25サイト以上
MF Amber	"	"	分子動力学(MD)計算エンジン Amber用インタフェースソフトウェア。Amberを使用するのにコマンド等の操作を覚える必要がない。GUI上からMD計算に必要な一通りの作業が簡単に行える	WinXP,VISTA,7/OS X 10.5以降(Intel Mac)/CentOS5以降/RedHatEnterprise Linux5以降	年間ライセンス12万円~(税別)	2011年1月	15サイト以上
Mol造	"	"	蛋白質の立体模型。石膏モデルとナイロン樹脂モデルがある	—	4万8,500円~(税別)	2009年11月	—
MolCrystal	"	"	蛋白質のクリスタル模型	—	4万5,000円~(税別)	2006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
ADMEWORKS/Predictor	富士通九州システムズ	富士通九州システムズ	Predictorでは、膨大な化合物の薬効、薬物動態、毒性、物性の高速同時予測を行い、容易に新薬候補化合物の絞り込みや優先順位を決めるための統合的な高速インシリコスクリーニングシステム。V7では、化合物の分類や予測モデルを組み合わせた予測フローチャート機能を搭載。この機能により、予測する化合物に最適な予測モデルを自動的に判別できる予測フローチャートを、ユーザが容易かつ柔軟に設定することが可能	サーバー:Windows7 クライアント:Internet Explorer8.0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、CYP阻害、CYP代謝、発癌性、生分解性、蓄積性、PGPTランスポータ、BBB、HIA、皮膚感作性、hERG阻害、染色体異常予測モデルを提供。V7では、Ames変異原性モデルをリニューアル。Ames変異原性モデルは、様々な化合物構造の多様性に対応するために、約2,000件のトレーニング化合物を利用。ICH-M7(医薬品不純物の評価、管理ガイドライン)で要求されているOECDバリデーションに対応	—	"	2004年4月	—

ADMEWORKS/ModelBuilder	"	"	ModelBuilderでは、化学性に基づいた化合物群の解析と自社化合物ライブラリ等をもとに、簡単かつ高精度な新規モデルの構築が可能な「化学データ解析支援/予測モデル作成」システム。500を超える化学パラメータと部分構造/パラメータ、高度なQSAR解析機能を利用可能。V7では、全元素に対応可能なデスクリプタを16種類取り揃え、金属系原子等に対応したモデルの作成/予測が可能。特に金属系原子を多く含む開発化合物への適用が拡大	Windows7(スタンドアロン)	"	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モデル受託サービス	"	"	ADMEWORKS/Predictorを利用したモデル予測受託サービスを提供。ADMEWORKS/ModelBuilderを利用したカスタムモデル式の構築受託サービスを提供	—	"	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、ヒトトランスポータ、薬物代謝酵素と化合物との代謝、阻害、誘導及び臨床薬物相互作用情報を収録。自社化合物と同一カテゴリーの薬物、類似薬物、併用薬等の薬物動態情報について、網羅的かつ効率よくデータベースから収集することが可能。年4回リリースアップ。最新のV37では、約430件の文献から約1,900件の非臨床薬物代謝データと、約120件の臨床薬物相互作用データを追加、合計で約110,000件のデータを収載	インターネットによるオンラインサービス (InternetExplorer8.0以降)	100万円～(企業)、50万円～(教育機関)	2005年8月	—
LiqCryst 5.2	"	独LCIパブリッシャー	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12.6万件の文献から得られた約10.7万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の相転移温度をグラフィック表示可能	Windows Vista/7	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	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、イオントフォレシスの効果、PK-PD関連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	Windows Vista/7/8/8.1	150万円～(企業)、50万円～(教育機関)	2005年5月	—
DDI Simulator	"	富士通九州システムズ	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。実際の臨床で起こる競合阻害とMBIの同時阻害、トランスポータの阻害、小腸阻害の影響を加味した薬物相互作用シミュレーションが可能。2014年8月にV2.4をリリースし、厚労省より公表された薬物相互作用ガイドラインを受け、代謝酵素の誘導による相互作用の予測(誘導モデル)機能を追加	Windows Vista/Windows7/8(スタンドアロン)	詳細はお問合せ下さい	2010年2月	—
DataScooper	"	"	Webデータの自動収集ソフト。利用者が注目しているデータを登録すれば、自動で欲しい情報を収集する。過去に収集した履歴と比べることで、データがどのように変わったか違いを確認する事ができ、メールで通知する。Webサイトの形式が変更された場合でも、ユーザ自身が自由にプログラムを修正できる柔軟性を持つ。リスク評価のための化学物質の有害性情報を複数サイトから収集するDataScooper ChemicalRISKもリリース	"	20万円	2012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

SCIGRESS Basic	富士通	富士通	計算化学統合プラットフォームSCIGRESSの基本パッケージ。SCIGRESS共通のGUI環境と基本的な計算エンジン(Mechanics, Dynamics, Extended Huckel, ZINDO, DGauss)が組み込まれている。その他外部計算プログラムであるGaussian, GAMESS, LAMMPS, CONFLEX7とのインターフェースも有する。※Gaussian, CONFLEX7は、別途購入が必要。LAMMPS連携にはMD I/Fも必須	Windows XP/Vista/7/8	お問合せ下さい	2009年9月	—
SCIGRESS Spreadsheet	"	"	複数計算の一括実行と結果整理がスプレッドシート上で容易に行える。Basicに追加できるオプション製品	"	"	"	—
SCIGRESS MO I/F、SCIGRESS MOエンジン	"	"	汎用的な半経験的分子軌道法プログラム「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」ならびにそれらの計算設定・結果解析を行うGUI。分子構造最適化、反応経路探索、各種物性予測など、電子状態に関連した物性に関心のある研究者の方に最適。Basicに追加できるオプション製品	Windows XP/Vista/7/8, Linux	"	"	—
SCIGRESS MD I/F、SCIGRESS MDエンジン	"	"	分子動力学法プログラム「MD-ME」とその計算設定・結果解析を行うGUI。金属、半導体、溶液、ポリマーなどの動的挙動と各種物性値に関心のある研究者に最適。Basicに追加できるオプション製品	"	"	"	—
SCIGRESS ADF I/F	"	"	SCM社製の密度汎関数法ソフトウェア「ADF」をSCIGRESS上から計算・解析するためのインターフェースオプション ※「ADF」計算エンジン本体は、別途購入が必要	"	"	"	—
SCIGRESS PHASE I/F	"	"	文科省RSS21プロジェクトで開発された密度汎関数法ソフトウェア「PHASE」をSCIGRESS上から計算・解析するためのインターフェースオプション ※「PHASE」計算エンジン本体は公開サイトからのダウンロードが必要	"	"	"	—
SCIGRESS MO Compact Std/Pro	"	"	分子軌道法ソフトWinMOPACの後継製品。SCIGRESS MOと同じ半経験的分子軌道法プログラム「MO-G」と「MO-S」を搭載。分子構築から計算の実行、結果の可視化までをシームレスに実現する。Std版は、原子数が200まで計算可能。Proは原子数に制限はない	Windows XP/Vista/7/8	"	—	—
SCIGRESS ME、SCIGRESS ME Compact	"	"	分子動力学法ソフトMaterials Explorerの後継製品。SCIGRESS MDと同じ分子動力学法プログラム「MD-ME」を搭載。結晶、溶液、ポリマー等の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する。Compactは機能限定版	"	"	2011年1月	—
ChemBioDraw Ultra / ChemDraw Pro / ChemDraw Std	"	パーキンエルマー	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	Windows7(32 bit,64 bit)、8.1(32 bit,64 bit)Mac OS X 10.9	"	2014/9月	—
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。MOPAC2009は別売	Windows7(32 bit,64 bit)、8.1(32 bit,64 bit)	"	—	—
ChemACX Personal Internet Edition	"	"	海外大手試薬販売会社680社以上、600万件を超える化合物のWeb版カタログ情報データベース	Windows7(32 bit,64 bit)、8.1(32 bit,64 bit)Mac OS X 10.9	"	—	—
ChemBioOffice Ultra	"	"	ChemBioDraw Ultra、ChemBio3D Ultra/Pro、ChemBioFinder Ultra/Pro、化学データベースのバンドル製品	Windows7(32 bit,64 bit)、8.1(32 bit,64 bit)	"	—	—
ChemOffice Enterprise	"	"	電子ノートシステムを中心とした化学情報管理システム。化合物登録システム、アクセス管理、在庫管理など各種業務アプリのオプションがある	Windows2008Server	"	—	—
ACD/Spectrus Processor	"	加アドバンストケミストリーデベロップメント	様々なメーカーの各種分析機器(NMR, MS, UV-IRなど)からの実測データを化学構造式と関連させて波形処理・解析、レポート作成、を行うスペクトル処理スタンダードツール	Windows7, 8.1	"	—	—
ACD/Chrom Workbook	"	"	ACD/Spectrus Processorのクロマトグラフデータ専門家向け機能強化版	"	"	—	—
ACD/Curve Workbook	"	"	ACD/Spectrus Processorの一般波形解析向け機能強化版	"	"	—	—

ACD/MS Workbook Suite	"	"	ACD/Spectrus ProcessorのMSスペクトル専門家向け機能強化版 バック製品	"	"	-	-
ACD/NMR Workbook	"	"	ACD/Spectrus ProcessorのNMR専門家向け機能強化版	"	"	-	-
ACD/Optical Workbook	"	"	ACD/Spectrus ProcessorのIR, UV専門家向け機能強化版	"	"	-	-
ACD/ChemAnalytical Workbook	"	"	ACD/Spectrus Processorのクロマトグラフデータ専門家向け機能 強化版	"	"	-	-
ACD/NMR Expert	"	"	NMRを利用した定量解析、構造検証をバッチ処理する	"	"	-	-
ACD/Structure Elucidator	"	"	スペクトルからの構造同定をデータベースや予測機能を用いた一 タールに支援	"	"	-	-
ACD/NMR Predictors	"	"	<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, <sup>15</sup> N, <sup>19</sup> F, <sup>31</sup> P核の1D/2DNMRスペクトルを構造式から予 測	"	"	-	-
ACD/MS Fragmenter	"	"	構造式から、イオン化手法に従いフラグメント構造式を予測	"	"	-	-
ACD/IXCR	"	"	GC/MSデータから自動で成分を判別し、DBから成分を照合しレ ポート化	"	"	-	-
ACD/LC & GC Simulator	"	"	実験データを基にLC, GCシミュレーション	"	"	-	-
ACD/ChromGenius	"	"	対象の化合物の初期分離条件を提案	"	"	-	-
ACD/AutoChrom MDS	"	"	分析装置と連動し、分離メソッドを最適化	"	"	-	-
ACD/Name	"	"	化学構造式から化学名を生成する	"	"	-	-
ACD/Name Batch	"	"	化学構造式から化学名をバッチ生成	"	"	-	-
ACD/Labs Percepta Predictors	"	"	物理化学プロパティ、ADMEプロパティ、毒性エンドポイント(Absolv, Aqueous Solubility, Boiling Point, LogD, LogP, pKa, Sigma, Other PhysChem Descriptors, Blood Brain Barrier Permeation, Cytochrome P450 Inhibitors, Cytochrome P450 Substrates, Distribution, Maximum Recommended Daily Dose, Oral Bioavailability, Passive Absorption, P-gp Specificity, PK Explorer, Regioselectivity of Metabolism, Acute Toxicity, Aquatic Toxicity, Endocrine System Disruption, Genotoxicity, Health Effects, hERG Inhibition, Irritation)を構造式から予測、判別	"	"	-	-
ACD/Drug Profiler	"	"	対象となる化合物のP-gp Specificity, Oral Bioavailability, Passive Absorption, Blood Brain Barrier Penetration, Distribution, Cytochrome P450 Inhibition, hERG Inhibition, Genotoxicity, Metabolic Stability, Absolvを確認	"	"	-	-
ACD/PhysChem Profiler	"	"	対象となる化合物のLogP, LogD, pKa, Solubilityを確認	"	"	-	-
ACD/Structure Design Engine	"	"	対象とするプロパティを向上/減少させるようにするリードを創出	"	"	-	-
ACD/Percepta Batch	"	"	物理化学プロパティ、ADMEプロパティ、毒性エンドポイントを構造 式からバッチ予測、判別	"	"	-	-
ACD/Spectrus Portal	"	"	Web上でスペクトル検索、閲覧環境を提供する	"	"	-	-
ACD/Percepta Portal	"	"	Web上で各種物理プロパティ、ADME、毒性パラメータを提供する	"	"	-	-
ACD/ChemSketch Freeware	"	"	化学構造式作図ツール	"	"	-	-
ACD/NMR Processor Academic Edition	"	"	実測NMRスペクトル処理ツール	Windows2008 Server	"	-	-
Instant Jchem	"	パトコア (ChemAxon)	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。また、サーバーのJChemBaseに対するフロントエンド の機能も提供する	"	"	お問い合わせ下さい	-
Instant JChemViz Add-on	"	"	ヒストグラム、散布図、レーダーチャート、ボックスプロット、コンディ ショナルフォーマッティング(値に応じたセルの着色)の表示、 Spotfireとの連携機能を提供する	"	"	-	-
JChem Base	"	"	化学構造を格納、検索するための化学情報アプリケーションの開 発ツール	"	"	-	-
JChem Cartridge for Oracle	"	"	JChem Cartridge for ORACLEを用いると、ユーザーはオラクルで 様々な化学情報検索が出来るようになる	"	"	-	-

JChem for Office	"	"	JChem for OfficeはMicrosoft EXCELに「化学」のハンドリング機能を付加するアドインソフトウェアで、Microsoft Office 2003、2007、2010に対応している	"	"	—	—
Standardizer	"	"	Standardizerは構造式標準化のモジュールで、様々な表記方法の構造式をルールに基づき標準的な表記方法に変換する。データベースに登録された構造式を標準化することで確実に効率的な検索が可能になる	"	"	—	—
Structure Checker	"	"	Structure Checker化学構造のバリデーションツールで、潜在的な問題の原因となり得る構造式のエラーを検出し、修復を行う	"	"	—	—
CRAIS Checker	"	"	化学構造式から迅速に各種法規制への該非判定が行えるチェックシステム	"	"	—	—
JChemBaseSerch MarvinJS, JChemWebService	"	"	Web対応構造エディタMarvin JS(JavaScript) とインターネットに拡張するためのJChem Web Servicesを提供する	"	"	—	—
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
Screeener Analyzer	ジーンデータ	スイス ジーンデータ	Plate Screeningデータ向け解析ツール。世界中の製薬会社からの要件を基にQC/HitList作成/CurveFitting/IC計算機能を実装。プレート数枚分のデータ解析からHTS/uHTSまで対応。別途Extension/Packageを導入することで先進的で複雑な系の解析を実現(Kinetics/Ion Channel/SPR/Thermal Shft/HCS/Cell Population/Combination Screening等)	Linux/Solaris Server with Windows PC	要 お問い合わせ	2014年7月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener Time Series Extension	"	"	Kinetics Assay向け High ThroughPut Solution。Screeener AnalyzerにFLIPR,FDDS, EPIC, Cell Key等の波形(時系列データ)の取込・数値計算・Visualize機能を追加。Plate Screeningデータ解析時に波形を利用することで解析効率・精度の向上を実現する	"	"	2009年1月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener High Content Extension	"	"	High Content Assay向け High ThroughPut Solution。Screeener Analyzerに画像データへのアクセス・表示機能を追加。QCやCurveFitting, Hit Selectionを行う中で、任意のデータポイントに紐づく画像の表示を可能にし、Hith Content Assayデータ解析特有のボトルネックを解消	"	"	2009年5月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener Hit Profiler	"	"	簡単・High Throughputな Hit Selection/Campaign Report 作成ツール。対象の化合物に紐づくデータをExcel Likeな表に取込みデータ評価を行う。複数実験結果のデータ(IC50,DRC図)を取込ことでCampaignを通したHit Selection/ Campaign Report作成が可能。別途、設定作業またはExtension導入により 化学構造式/各種物性データ/イメージ/波形の取込が可能	"	"	2008年3月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener Cell Population Extension	"	"	HCSや、Flow Cytometry などから生成される大規模データによるセルポピュレーション解析を可能にする	"	"	2008年3月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener Compound Synergy Extension	"	"	コンビネーションスクリーニング向けSolution。単一ウェルに対して複数の化合物を使用したAssayデータの解析に対応。複数の化合物によるシナジー効果の有無を評価するSynergy Scoreの算出が可能	"	"	2013年4月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener APC Package	"	"	Screeener Analyzer + Time Series ExtensionにAutomated Patch Clamping アッセイ(Ion Works 他)向け解析機能を追加するPackage	"	"	2014年7月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener TSA Package	"	"	Screeener Analyzer + Time Series ExtensionにThermal System analysis(RT-PCR)向け機能を追加するPackage	"	"	2014年7月	国内外 30社強 (Screeener)
Screeener SPR Package	"	"	Screeener Analyzer + Time Series ExtensionにSurface Plasmon Resonance (Biacore他)向け解析機能を追加するPackage	"	"	2014年7月	国内外 30社強 (Screeener)

openBIS	"	CISD at Swiss Federal Institute of Technology Zurich	各種生物系データのデータベース化を図ります。また、HCS等による多種・大量のイメージデータの管理も担い、Screenerともシームレスな連携を可能にする	Linux/Solaris Server with Windows PC	"	2011年	国内外多数
Expressionist for Genomic Profiling	"	"	次世代シーケンシング(NGS)、マイクロアレイ、リアルタイムPCR、等、ゲノムデータの解析・可視化ツール。Cross-Omics解析、Gene Regulation、Copy Number、SNPs、ChIP-Seq、Splice Junction解析等を提供。他社に類のない最速、高パフォーマンスのソリューション。また、トランスレーショナルリサーチのデータ管理システム、社内システム等とのシステム連携も可能	"	アカデミア/コマーシャル向エントリーモデルあり	2000年	国内外 約70強 (Expressionist)
Expressionist for Mass Spectrometry	"	"	MSデータのアライメント、解析・可視化ツール。各機器メーカーのデータに対応。High ThroughPut 且つ、正確なアライメント、ノイズ除去～Peak抽出、同定、データベース化を通しプロテオミクス、メタボロミクス、バイオ医薬品のQC、化合物同定等に対応。バイオ医薬品研究開発向けアプリケーション: Intact Mass, Peptide Mapping, Post translational Modifications, Glycosylation studies, Disulphide Bridges, Batch Quality Control, ADC study 他。また、トランスレーショナルリサーチのデータ管理システム、社内システム等とのシステム連携も可能	"	アカデミア/コマーシャル向エントリーモデルあり	2000年	国内外 約70強 (Expressionist)
Analyst	"	"	High ThroughPutな統計解析、Visualization及びデータベースシステム。各種Omicsデータ、臨床検査値、HTS等でのPlate Assayデータ等、多種データに対応	"	要 お問い合わせ	2000年	国内外 約70強 (Expressionist)
Selector	"	"	次世代シーケンスデータを始めとし、多種多様な オミクス実験データ、アノテーション、パテント情報等を統合化し、新しい知見を得る。バイオテクノロジー(含 バイオ医薬品)、食品、バイオマス等	同上またはASPサービス	"	2010年	国内外十数社
Biologics	"	"	主に抗医薬などのバイオロジクス研究開発におけるScreening、Protein Production、Engineering等へのデータレジストレーション・解析・統合管理ソリューション。モジュール構成により、必要な機能を必要なだけ提供し、且つ、欧米でのスタンダードとなっている	"	"	2011年	欧米20社弱 UCB、Morphosys、Bayer-Schering、Novartisほか
Expressionist MSX	"	"	Expressionist for Mass Spectrometry のデスクトップソフトウェアと位置づける簡易版。買取ライセンスとし、簡便な操作性で、スループットの高いProteomics、MetabolomicsのMS解析を行える。 <a href="http://www.expressionist-msx.com/">http://www.expressionist-msx.com/</a>	Windows パソコン	アカデミア向 約40万円	2012年	アカデミア、バイオテクノロジー企業などへ販売開始
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
GENETYX Ver.12	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。核酸・アミノ酸配列解析、配列データベース、次世代シーケンサー対応機能、シーケンスアセンブラー等	Windows 8/7/Vista	お問い合わせ下さい	1996年4月	—
GENETYX-MAC (Ver.18)	"	"	Windows版遺伝子解析ソフトウェア。核酸・アミノ酸配列解析、配列データベース、シーケンスアセンブラー等	Macintosh (10.9 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 8/7/Vista	"	2004年4月	—
ATGC(Ver.7)Windows版	"	"	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	Windows 8/7/Vista	"	1998年10月	—
ATGC(Ver.5) Macintosh版	"	"	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	Macintosh (10.9 以上)	"	1998年10月	—

GENETYXネットワーク版	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ、MACのみ、WIN、MAC混在	"	2003年4月	—
ATGCネットワーク版	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	"	"	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
生物種同定シリーズ DNASIS Taxon V3.5	日立ソリューションズ	日立ソリューションズ	微生物、魚、肉、穀類などの品種判別や、ウイルスをはじめとする多様な生物種において、検体の遺伝子情報(波形ファイルまたは配列ファイル)を用いた相同性検索により生物種の推定・判定を行う生物種同定統合解析ソフトウェア。生物種、遺伝子保存領域の違いに関わらず、お客様が独自にデータベースを構築することも可能	Windows Vista/7	28万5千円～	2011年3月	—
SEQUENCHER V5.3	"	米ジーンコード	キャピラリーシーケンサー、次世代シーケンサー(NGS)に対応した簡単に使いやすいDNA統合解析ソフトウェア。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ほか、Blast検索、プライマー設計、マルチプルアライメント機能も搭載。V5.3ではCufflinks関連ツールを使用したRNS-Seqの発現解析機能をサポート	Mac OS10.6.8以上、Windows Vista/7/8	68万円(Mac版)、88万円(Win版)	2015年2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)。新規のアミノ酸配列から立体構造を予測し、美しいグラフィックで表示が可能。ビューワと連動した操作性の優れた配列編集機能により、簡単にターゲットタンパク質のアミノ酸置換体の構造変化を予測でき、機能解析や機能改変研究を強力にバックアップ。高精度なドッキングシミュレーションにより、ターゲットタンパク質に対する抗原/アゴニスト/アンタゴニスト探索に最適。バーチャルリガンドスクリーニング機能(オプション)による独自スコアリングを用いて、新薬候補のin Silico探索が可能	Windows Vista/7、8、Mac OS10.2以降、Red Hat9.0、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	"	英バイオソフト	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	"	—	—
CLiDE	"	英キーモジュール	化学構造式OCRツール。画像や文書内の化学構造式を認識し、ChemDrawなどの化学系ソフトで編集できる形式に変換する	Windows、Macintosh、Linux	"	—	—
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・マルチアンドウ対応。オプションにより粉末回折、電子線回折パターンシミュレーションが可能	Windows、Macintosh	"	—	—
CrystalKitX	"	米トータルソリューション	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機能、多機能な結晶構造解析ソフト。Professional版は3500種、Enterprise版・Quantum版は6000種の結晶構造データを持つ	Windows	"	-	-
ChemBio3D Ultra	"	米パーキンエルマー	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の各インターフェイス(別売)及び拡張モジュールが使用できる。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	"	"	-	-
ChemBioDraw Ultra, ChemDraw 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	"	-	-
CodonCode Aligner	"	米コドンコード	シーケンスのアセンブリやコンティグの編集、突然変異の検出に役立つプログラム。難しいコマンドライン・オプションやPerlプログラミングを学ばなくても、ベース・コーリング(塩基判定)やシーケンス・アセンブリのための最新アルゴリズムを利用可能	Windows、Macintosh	"	-	-
Cresset torch	"	英クレセット	創薬の現場において、3D活性構造探索を支援するソフトウェア。参照する既知活性分子とフィールド(正・負電荷、形状、疎水性)情報が一致する、3D構造を自動探索する	Windows、Linux	"	-	-
Cresset forge	"	"	創薬の現場において、ドッキング時の3D活性構造を予測するソフトウェア。複数の活性リガンド3D構造から、フィールド情報に着目し、新規リガンドの3D活性構造を予測する。Activity Cliffs解析	"	"	-	-
Cresset spark	"	"	創薬の現場において、多様性のある類似活性化合物探索を支援するソフトウェア。既知活性化合物の骨格構造を変化させながら、同様のフィールド情報を有する化合物を探索する	"	"	-	-
Cresset blaze	"	"	創薬の現場において、多様性のある類似活性化合物を大規模DBから探索するソフトウェア。既知活性化合物のフィールド情報と一致する化合物を、数百万化合物から探索する	Linux	"	-	-
ChemBioOffice Ultra	"	米パーキンエルマー	化学構造式描画ツール(ChemBioDraw Ultra)、立体構造の描画と各種計算プログラムのクライアントツール(ChemBio3D Ultra)、化学構造式を含むデータベース構築ツール(ChemBioFinder)で構成されたパワフルなソフトウェアパッケージ	Windows	"	-	-
E-Notebook Enterprise/ChemBioOffice Enterprise	"	"	電子実験ノートシステムを中心とする研究開発に関わるデータの一元管理システム。化合物登録や試薬データベースなどのオプション機能	"	"	-	-
TIBCO Spotfire Lead Discovery	"	"	化学構造式の取り扱いも可能なデータビジュアライゼーションツール。大量のデータを素早くし、正確に可視化し検索	"	"	-	-
Delta2D	"	独デコドン	2次元電気泳動ゲル画像解析ソフト。優れたワーキング、ワークフローガイド機能を持ち、統計機能もワンパッケージに実装	"	"	-	-
Design-Expert	"	米スタットイーズ	実験計画法(DOE)ソフトウェア。重要な因子の選別、応答曲面法(RSM)を使用した理想的なプロセス設計、混合計画による最適な製造工程の発見などに利用可能	"	"	-	-
eHits, eHits Score, eHits Tune	"	加シムパイオニス	コンピュータによる活性化合物の選別。たんばく質とリガンドの活性を評価するスコアリングツール。スコアツールのニューラルネットワーク学習ユーティリティ	Linux	"	-	-
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	Windows	"	-	-
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 イオソフトウェア	グラフィカルな操作体系と高度なドロー機能で DNA 配列の取り扱いを飛躍的に容易にした、代表的なデスクトップ・クローニング・ツール	Windows、Macintosh	"	-	-
Gene Inspector	"	"	研究用電子ノートブックに、DNA 配列の総合的解析機能と、パワフルなイラストレーション機能を組み合わせたユニークなツール	"	"	-	-
HyperChem	"	米ハイパー キューブ	機能性、カスタマイズ性、操作性の高さで定評のある分子モデリングソフトウェア。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などをサポート	Windows、Macintosh、Linux	"	-	-
HyperProtein	"	"	分子モデリングとバイオインフォマティクスの2つの機能を組み合わせたタンパク質解析ツール。タンパク質モデリング機能に加え、配列アライメントやタンパク質ファミリーの系統樹作成機能を装備	Windows	"	-	-
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、カープフィッティング、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。プレゼン&解析を強力にサポート	Windows、Macintosh	"	-	-
KaleidaGraph 日本語版	"	米シナジーソ フトウェア	非常に簡単な操作で「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」までを実現可能なグラフ作成ソフト	Windows、Macintosh	"	-	-
MacTempasX	"	米トータルレ ビューション	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	広範にわたる分野において世界で数百万ものユーザーの厚い信頼に支えられている、パワフルな数式処理ソフト。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、構造型表記の取り扱い可能	Windows、Macintosh、Linux	"	-	-
NeuroneSimulator	"	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	最新の非経験的電子構造計算プログラム。分子の基底状態や励起状態の第一原理計算を可能にし、1つの統合された ab initio ソフトウェアパッケージとして、数多くの計算手法とツールを提供	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 (TWIN 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、双晶およびエピ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	パワフルなカープフィッティング、高品質なグラフ作成の機能を搭載した生化学者向けソフト。酵素反応速度分析モジュール (Enzyme Kinetics Module) が標準装備され、さらに充実した統計解析機能を提供	Windows	"	-	-
StarDrop	"	英オブティブ リアム	創薬の現場において、薬となり得る化合物探索を支援するソフトウェア。各種物性予測、ケミカルスペース解析、スコアリング、構造型-物性値の相関解析機能、毒性予測、生物学的等価体変換などを搭載	Windows、Macintosh、Linux	"	-	-
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

JChem Extensions	インフォコム	インフォコム	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	PC-Linux, Windows Vista, 7	お問い合わせ下さい	2008年	-
SKIN-CAD	"	バイオコム・システムズ	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	Windows Vista, 7	"	2000年	-
Debra ADME LIMS	"	英LabLogic Systems	ADME試験用のラボ情報管理システム。プロトコル作成から最終報告書までサポート。GLP, Part 11に準拠	Windows Vista, 7, Oracle	"	2003年	-
Sara Soil Metab LIMS	"	"	土壌代謝試験用のラボ情報管理システム。プロトコル作成から最終報告書までサポート。GLP, Part 11に準拠	"	"		
SeeScan	"	"	定量的全身オートラジオグラフィ(QWBA)の画像解析、レポート作成。GLP, Part 11に準拠	"	"	2009年	-
Pallas Combi	"	米CompuDrug	2次元構造から pKalc、PrologP、PrologDを予測するプログラム	Windows Vista, 7	"	1999年	-
Pallas HazardExpert	"	"	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 MetabolExpert	"	"	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・農薬品の膨大な構造を元にリード化合物から効果的にアナログ構造を発生させるライブラリーデザインツール	"	"	2000年	-
Metabolism & Transport Drug Interaction Database (DIDB)	"	米University of Washington	ヒトでの薬物相互作用に関する論文情報(1966年以降)をFDAガイドラ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Wiley	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	Windows Vista以降	"	-	-
MODDE	"	Umetrics(スウェーデン)	実験計画と最適化のソフトウェア。MLRおよびPLSでモデリング。デザインスペース、QbD/PATもサポート	Windows Vista, 7, 8.x	"	1998年	-
SIMCA	"	"	多変量解析ソフトウェア。PCA, PLS, OPLS/O2PLS, OPLS-DA等を搭載。PAT/QbD, 多変量プロセス管理も可能	"	"	1998年	-
Chenomx NMR Suite	"	加Chenomx	1H-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。別途受託解析も可能	Windows Vista以降	"	2006年	-
PEAKS	"	加Bioinformatics Solutions	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	Windows Vista, 7, 8	"	2003年5月	-
PEAKS Q	"	"	PEAKSのオプションツール。各種ラベルに対する定量解析ツール	"	"	2009年4月	-
PEAKS Online	"	"	PEAKSをWebサーバー&クライアントで利用が可能	お問い合わせください	"	2006年	-
BioNumerics	"	Applied Maths (ベルギー)	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	Windows Vista以降	"	2000年	-
GelComarII	"	"	系統分類・解析・データベース化ソフト:1次元の電気泳動画像実験データ入力。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	Windows Vista以降	"	"	-
Browser	"	英Dotmatics	各種ケミカルカートリッジが使用可能な完全Web対応型生物・化合物情報管理統合プラットフォーム	Webブラウザ	"	2009年10月	-
Vortex	"	"	化学、生物及び一般数値データ視覚化ツール。Browserとの連携により、データベースから情報検索、データ解析をシームレスに実施	Webブラウザ、または、Windows, Linux, Mac	"	2009年10月	-
Pinpoint	"	"	ドットマティクス社製Oracleケミカルカートリッジ	"	"	2009年10月	-
Nucleus	"	"	ETLツール。生物試験、化合物情報とデータベースのマッピング及びデータベースへの自動登録が可能	Webブラウザ	"	2009年10月	-
Gateway	"	"	創薬プロジェクト情報共有ツール。Browser等他のツールとの連携が可能	"	"	2009年10月	-

Register	"	"	化合物データ登録ツール。登録画面のカスタマイズ及びビジネスルールや塩の取り扱いなど細かい設定が可能	"	"	2009年10月	-
Studies	"	"	生物試験データ管理ツール	"	"	2009年10月	-
Studies notebook	"	"	完全Webベースの電子実験ノートシステム。windows、Mac、Linux等あらゆるプラットフォームで動作し、登録された実験データへのアクセスが簡単、高速に行える	"	"	2010年	-
D40	"	"	Microsoft Office上で化学構造を取り扱うためのプラグインツール	Office2007,2010	"	2012年5月	-
AnalyzerPro	"	英SpectralWorks	GCMSやLCMSのスペクトルデータを処理するソフトウェア。デコンボリューション、NISTライブラリ検索、定量など可能	Windows 8.x, 7, Vista	"	2009年12月	-
RemoteAnalyzer	"	"	複数種類のMS機器にアクセスし、サンプル取扱が可能なツール	Webブラウザ	"	2009年12月	-
KNIME	"	KNIME.COM(スイス)	ワークフロー型プラットフォーム	Windows Vista, 7	"	2010年	-
Scorpion	"	豪Desert Scientific Software	ネットワークモデルを使ったProtein-Ligandの相互作用解析ツール	Windows 7, Linux	"	2012年4月	-
ViewContacts	"	"	Protein-Ligand 複合体の非共有結合性相互作用解析ツール	"	"	2012年4月	-
Proasis2, Proasis3	"	"	Protein-Ligand 複合体の立体構造及び周辺情報を格納するリレーショナルデータベース	"	"	2012年4月	-
CASE Ultra	"	米MultiCASE	2次元構造から 遺伝毒性、発癌性、神経毒性といった化合物の異なる毒性の予測を行う	Windows Vista, 7	"	2009年12月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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(71.5万件以上)。結晶構造から抽出した分子ジオメトリー、分子間相互作用のライブラリも充実	Windows PC, Linux, Mac	お問い合わせください	-	-
GOLD Suite	"	英CCDC、Sheffield大学、GlaxoSmithKline	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	Windows PC, Linux	"	-	-
DASH	"	英CCDC、Prof.W.I.F.David(英STFC)、Dr.K.Shankland(英Reading大学)	粉末X線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)	"	-	-
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(17.3万件以上)。検索した結晶構造から粉末X線回折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, web	"	-	-
CRYSTMET	"	加Toth Information Systems	金属(合金、金属間化合物など)の結晶構造データベース(16.1万件以上)。含有元素、組成式、粉末X線回折パターンのピーク位置より検索が可能	Windows PC	"	-	-
NIST14	"	米NIST、米EPA、米NIH	電子イオン化質量スペクトルデータベース(化合物24万件、スペクトル27万件)。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	Windows PC	"	-	-
化合物辞典	"	米Taylor&Francis Group、米CRC Press	論文等に報告された化合物の名称や分子式、化学構造、各種物性、CAS登録番号、安全性情報などを収録したデータベース。5種類の化合物辞典がある	Windows PC, web	"	-	-

Science of Synthesis	"	独Thieme Chemistry	有機及び有機金属化合物の合成手法について、一般性の高い手法を収録。反応や化合物で検索可能(合成方法2.6万件、反応の解説3.0万件、化学反応26万件、化合物124万件)	web	"	—	—
USGENE in-house version	"	米 SequenceBase Corporation	米国の公開特許・登録特許のタンパク質・核酸の配列情報を収録したデータベース。データのみで構成	—	"	—	—
ReaxysFile	"	Elsevier Information Systems GmbH (STN経由)	有機化合物、有機金属化合物、無機化合物、特許中に記載されていた化合物の物性と合成・反応情報、および参考文献情報(特許情報を含む)を収録	Windows PC, Mac	従量制または定額制	—	—
GENBANK	"	National Center for Biotechnology Information (NCBI) (STN経由)	米国国立衛生研究所作成の核酸配列を収録。核酸配列に関する説明、起源生物、文献等を収録	"	"	—	—
ICSD	"	FIZ Karlsruhe, The National Institute of Standards and Technology (NIST) (STN経由)	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	"	"	—	—
REGISTRY	"	Chemical Abstracts Service (CAS) (STN経由)	化学物質の CAS 登録番号、名称、構造、分子式、物性値(実測および予想物性値)、各種スペクトルデータ、タンパク質・核酸の配列情報を収録(CAplus、CA ファイル収録の雑誌論文および特許に索引された化学物質や既存化学物質リスト掲載化学物質などさまざまな出典から化学物質を収録)	"	"	—	—
DGENE	"	Thomson Reuters (STN経由)	世界中の特許に収録されている核酸・タンパク質の配列、特許情報、抄録、特徴表、対応特許情報を収録。法的状況も表示可能	"	"	—	—
PCTGEN	"	World Intellectual Property Organization (STN経由)	世界知的所有権機関(WIPO)に電子的に出願された特許の核酸・タンパク質配列および特許情報を収録(一部明細書本文から OCR 処理で抽出された配列も含む)。特許ファミリーと法的状況も表示可能	"	"	—	—
USGENE	"	SequenceBase Corporation (STN経由)	米国特許商標庁(USPTO)が発行した公開特許・登録特許中のタンパク質・核酸の配列、特許情報、抄録を収録。特許ファミリーと法的情報も表示可能	"	"	—	—
SciFinder	"	Chemical Abstracts Service (CAS)、National Library of Medicine (NLM) (MEDLINE データ)	化学を中心とする医薬、生化学、物理、工学等の科学情報を必要とする研究者が、自ら利用することを想定したオンライン検索サービス。過去 200 年間に発表された科学関連文献(論文、特許)や化学物質(化学構造検索を含む)の検索のほか、反応検索、特許明細書中の Markush 構造、物性値の検索が可能	"	定額制(詳細はお問い合わせください)	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

ezADVANCE	日本ケミカルデータベース	日本ケミカルデータベース	国内法規制のみならず、GHS分類情報、海外インベントリー情報の検索が可能。また、検索結果が以下の3つの目的に合わせて閲覧できる。1. SDS及びラベルやイエローカードの作成ツールとなる情報 2. 化学品の輸出入業務に関わる実務者を支援する情報 3. 含有化学物質の調査を支援する情報	インターネットブラウザ	年間利用料金:87,150円(価格83,000円 消費税4,150円)	—	300社以上
ezCRIC	〃	〃	化学物質名やCAS番号を入力するだけで、日本の化学品に関する主要30法規制を検索することができ、該当・非該当をチェックするコンプライアンスツール。化学業界のデファクトスタンダード	インターネットブラウザ	年間利用料金:36,750円(価格35,000円 消費税1,750円)	—	1,000社以上
LOLIデータベース	〃	米 ChemADVISOR	世界115カ国を対象にした4,400以上の法規制リストとEHS (Environmental, Health and Safety) リストやナショナルインベントリーを搭載し、検索・参照・出力できるデータベース。日本ケミカルデータベースは、2009年より販売代理契約をケムアドバイザー社と締結すると共に、保有する法規制データを相互に供給し合う技術提携を開始。ユーザーが一元化されたデータベースを利用するための共同事業を推進。日本に拠点を持つ唯一の海外法規制データベース	インターネットブラウザ、またはデスクトップ導入利用型	御問合せ下さい	—	—
GHSロジスト	〃	日本ケミカルデータベース	GHS対応SDS作成作業の軽減・効率化を目的としたシステム。オプション機能により、SDSの配布管理やラベル要素出力も可能。 ・日本で唯一の各種データを標準搭載したデータベース提供型システム ・法規制データやGHS分類情報等のデータベースの更新、またSDSに関連するGHSルール(JISや国連のパープルブック)や法規制の変更に適合させた機能変更を行い、陳腐化せず常に最新のシステムとして利用してもらおう保守更新型システム ・SDS作成のための化学や法規制の専門家集団による保守サポート	Windows Server  Oracle	〃	2006年	—
MSDSnavi	〃	HTKエンジニアリング	「かんたんて手軽なSDS作成」をモットーにしたレンタル方式のSDS作成支援システム。SDS作成担当者にとって大きな負担となっている作成作業を大幅軽減。<以下の費用を全て含むオールインワンのレンタル・システム> ・アプリケーション・ソフトウェア利用費用 ・データベース利用費用 ・ソフトウェア・バージョンアップ費用 ・データ更新費用 ・サポート費用 ・PCレンタル費用 ・PC障害対応費用	スタンドアロンのノートPC	月額利用料:120,000円(税別)※ ※要詳細問合せ	2008年	30社以上
ezSDS	〃	富士通九州システムズ	GHS分類の自動類推機能、日本国内法規制の該当判定機能、JIS規格に準拠したフォーマット出力機能などを備えたクラウド型SDS作成システム。クラウドなので、運用管理、バックアップを行う必要がなく、サーバー購入等の初期投資を抑えられるなどの特長を持つ利用システム。	クラウド(インターネット環境)、ブラウザ(IE7~10)、MS/Excel	月額基本料:60,000円(税別) + 従量制※要詳細問合せ	2014年	—
法規制物質リスト	〃	日本ケミカルデータベース	国内30法規に規制された化学物質をCAS番号で整理(総称名・化合物も物質展開)して、規制条項、適用条件、規制の概要などを整理したデータベース。物質管理システムなど、社内システムへのデータソースとしてご利用いただくことを前提に提供	—	御問合せ下さい	—	—
The WERCS	〃	米WERCS	46言語に対応したグローバル対応SDS作成システム。お客様の運用にあわせて、フレキシブルなルール設定も可能なパワフルなシステム。25年間にわたるノウハウを蓄積し、すでに世界中で200社以上の導入実績がある	—	〃	—	世界中で200社以上の導入実績
ExESS	日本ケミカルデータベース / 江守商事	(ベルギー) Lisam Systems	企業内の各部門や各システムに分散していた重要なデータ・情報をデータベースで一元管理、REACH規制への対応、SDS作成支援、法令チェックなど、全社レベルで総合的な化学物質マネジメントを実現する	—	〃	—	世界中で500社以上の導入実績
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	JSOL(旧社名:日本総研ソリューションズ)	JSOL	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、外部の分子動力学ソルバー(LAMMPS等)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。また、COGNAC、SUSHI、MUFFINの計算結果を解析するためのポスト機能も含まれる	・Windows7/Vista(32bit/64bit)・マルチコアCPU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推奨	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)、2008年11月(V1.4)、2011年3月(V1.5)、2012年3月(V1.6)、2013年3月(V1.7)、2014年3月(V1.8)	-
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。平均場法によって得られた成分分布を用いて分子構造を作成することも可能。化学反応計算のためのモデル作成にも対応している。V1.7搭載の新システムモデラを利用することにより、原子・分子の構造編集、複数の系の結合などが可能。V1.7SP1以降でCOGNAC並列計算に対応している	"	"	"	-
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、レブ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、楕形、星形など)に対応するほか、架橋構造をもつ高分子も扱える	"	"	"	-
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( $\chi$ パラメータ)を推算する機能もある。V1.7SP1以降でSUSHI並列計算に対応している	"	"	"	-
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	"	"	"	-
構造物性相関機能(QSPR)	"	"	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	"	"	2009年6月(V1.4SP1)	-
KRI-NIWA法(新しい原子団寄与法)	"	"	株式会社KRIIにより開発された手法で、従来のFedors法と比較し、高精度な物性予測が可能	"	"	2012年5月(V1.6SP1)	-
リバースマッピング機能	"	"	粗視化分子動力学によって得られた分子構造を用いて、全原子分子動力学の構造を作成することが出来る。全原子モデルのみでは困難な、緩和された分子構造を作成することが可能	"	"	2011年3月(V1.5)	-
相図からの $\chi$ パラメータ推算機能	"	"	相図(実験結果)を用いて、Flory Huggins理論に基づいて $\chi$ パラメータ(温度、濃度依存)を推算することができる	"	"	2011年3月(V1.5)	-
溶解度係数推算機能	"	"	分子動力学計算によって得られた高分子のバルク構造に対して低分子を挿入することによって、自由体積と溶解度係数を評価することができる	"	"	2011年3月(V1.5)	-

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	OS : Red Hat Linux 5, 6 (32bit/64bit) MPI : openMPI/intelMPI/MPICH1.2.7p1	"	2006年12月(V1.0)、2007年4月(V1.1)、2007年11月(V1.2)、2011年3月(V1.3)、2012年3月(V1.4)、2013年3月(V1.7)、2014年3月(V1.8)	—
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、複数並列計算に対応	OS : Windows7 (32bit/64bit) MPI : MPICH2	"	2007年4月(試供版)、2007年11月(V1.2)、2011年3月(V1.3)、2012年3月(V1.4)、2013年3月(V1.7)、2014年3月(V1.8)	—
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無料で公開するもの。約333万の有機低分子化合物及びその混合物を収録。化学物質名称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安衛法の番号も収録 ( <a href="http://nikkajweb.jst.go.jp/">http://nikkajweb.jst.go.jp/</a> )	推奨=Windows Vista(32bit):Internet Explorer 7.x Windows 7(32bit):Internet Explorer 8.x Mac OS 10.x : Safari 4.0.x 及び 5.0.x(32bit)、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	—	2005年3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
COMSOL Multiphysics	計測エンジニアリングシステム	瑞COMSOL AB	有限要素法(FEM)ベースの汎用物理シミュレーションソフトウェア。最大の特徴は「マルチフィジックス(連成)解析に対する柔軟性とソフトウェアのオープン性」。3種類以上の物理現象や専門分野モジュールをGUI上で無制限に組み合わせて、モデリング、初期値/境界値等条件設定、ソルバー、ポスト処理までの流れを1つのソフトウェアのみでシームレスに、無制限かつ強連成の解析を可能にした、この種のシミュレーションソフトウェアでは最先端とも言えるマルチフィジックス機能を持つ。たとえば燃料電池のように、伝熱-構造力学-流体-化学反応工学-電気といった多種の物理現象を連成する必要があり、今まで一括して解析するのが困難と考えられていたシミュレーションも、COMSOL Multiphysicsに「バッテリー&燃料電池モジュールを追加すれば、解析が驚くほど容易になる。非常に高いオープン性として、通常はブラックボックス化されているソフトウェア内部の設定(方程式、物性値を含む)をユーザーが編集可能で、カスタマイズを外部に依存せずに自身で行える。2014年11月リリースのバージョン5.0では新製品のApplication Builderが添付された。これによりCAE解析のGUIや入出力項目などのインタフェースと、解析実行のためのスクリプトを自由にカスタマイズでき、組織内での様々な開発段階においてCAEソリューションの共有が容易になった	OS: Windows/Linux/Mac OS X (いずれも64bit版の使用を推奨)、メモリ: 最低限1GB/実用上はCPUコア数×4GBまたはそれ以上を推奨。詳細はお問い合わせください	目的とする解析に必要なオプションの構成により変わりますので、お問い合わせください(アカデミック価格設定あり)	2001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

KeyMolnet for Enterprise	KMデータ	KMデータ	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命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示すネットワーク検索が可能。次世代シークエンサー、DNA chip、プロテオーム、メタボローム等のデータ解析や、ユーザー独自データを統合・利用した検索、開発中の医薬品に関する情報の詳細な検索・閲覧も可能。(企業向け製品)	Linux(サーバ)、Windows(クライアント)	詳細問い合わせ	2003年4月	—
KeyMolnet Lite for Enterprise	"	"	KeyMolnet for Enterpriseのサーバー機能を省いた新パッケージ。ユーザー独自データを統合・利用した検索、開発中の医薬品に関する情報の詳細な検索は出来ないが、それ以外のデータ解析機能は全て備えている。(企業向け製品)	Windows	"	2013年6月	—
KeyMolnet for Academic	"	"	アカデミック向け製品の最高峰。サーバー機能まで含めたKeyMolnetの全機能を利用可能。(アカデミック向け製品)	Linux(サーバ)、Windows(クライアント)	"	2003年4月	—
KeyMolnet Lite for Group	"	"	共通機器室向け製品。Linuxサーバーを用意することなく、複数の研究室からKeyMolnet Liteを利用可能。(アカデミック向け製品)	Windows	"	2013年5月	—
KeyMolnet Lite for Personal	"	"	固定PC1台でKeyMolnet Liteを利用できるスタンドアロン版。(アカデミック向け製品)	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
CzeekS	京都コンステラ・テクノロジーズ	京都コンステラ・テクノロジーズ	相互作用マシンラーニング法(CGBVS)によるスクリーニングプログラム。自社内に蓄積された独自アッセイデータを用いた、医薬品候補化合物の高速かつ高精度なインシリコスクリーニングが可能	Linux	詳細問い合わせ	2012年10月	—
CzeekD	"	"	メディシナルケミストによるシード・リード化合物の最適化を支援するシステム。フラグメントベースの化合物発生、CGBVSによる化合物スコアリングに加え、最適化アルゴリズムを採用し、効率的な化合物デザインを実現	ASPサービス等	"	2014年5月	—
CzeekD	"	"	化合物の最適化支援ツールCzeekDをCADD担当者向けに機能拡張したコマンド版。化合物評価関数としてCGBVS以外の手法(docking, QSARなど)も利用可能となり、より自由度の高い化合物デザインが可能	Linux	"	2015年3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
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 V2.4	"	"	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 Insight	"	"	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	"	2014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 4	"	米プロテオームソフトウェア	蛋白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	2010年	—
Scaffold Q+	"	"	蛋白同定検索エンジンの結果を取込、定量解析を行うソフトウェア	"	"	2010年	—
Scaffold Q+S	"	"	蛋白同定検索エンジンの結果を取込、SILAC定量解析を行うソフトウェア	"	"	2012年	—
Scaffold PTM	"	"	蛋白同定検索エンジンの結果を取込、翻訳後修飾解析を行うソフトウェア	"	"	2011年	—
Scaffold perSPEctives	"	"	大規模解析における、Scaffold解析結果の一覧表示、フィルタリングを行うソフトウェア	"	"	2013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

CrossPath	三井情報	三井情報	膨大なメタボロミクスデータの中から変動している代謝パスウェイを自動的に抽出し、各代謝物の変動量をパスウェイ上に視覚的にマッピングするソフトウェア。代謝物の数と変動の大きさを加味した新たな指標に基づいて、“動きのある”代謝パスウェイを自動的に選出する機能と、測定データの生理学的意味の解釈を支援することを重視して開発されたインターフェイスを備えているのが特徴	Windows7/Windows Server 2008以降、LinuxOS(RedHat, CentOS等)	180万円(税抜き)、別途有償にてカスタマイズに応じます	2011年6月	約5サイト
2DICAL	"	"	超低流速の液体クロマトグラフィーと質量分析計から経時的に得られるスペクトラムをデジタル処理し、質量電荷比(M/Z)、保持時間(R.T)の2軸で特定されるペプチド等の生体分子を多数検体間で定量比較するシステム。ダイナミックプログラミングによる保持時間の自動補正や価数判定、分子量推定機能により正確なピーク対応を実現。少数検体間での比較実験から100データ以上の大規模解析まで幅広く対応可能	Windows 7 64bit/Windows Server 2008 64bit以降	300万円(税抜き)、別途有償にてカスタマイズに応じます	2010年1月	約20サイト
LipidSearch	"	"	東京大学田口研究室と共同開発された生体内脂質の自動同定システム。生体試料を測定した大量の質量分析データを直接読み込み、試料中に含まれる脂質を独自のin silicoデータベースにより一括して同定、解析する。データベースには150万種以上の脂質が登録されており、既知の脂質だけではなく未知の脂質まで同定することが可能となっている。さらにサンプル間の変動解析、プロファイル分析まで一連の脂質解析を一括して実施する機能が実装されている。2013年度よりグローバル販売開始	Windows 7 64bit/Windows Server 2008 64bit以降	1.基本ライセンス 民間:400万円 2.保守 民間:60万円(〃) アカデミック:40万円(〃) 3.年間ライセンス 民間:130万円(〃) アカデミック:90万円(〃) ※金額は全て税抜き	2010年4月	国内約40サイト 海外約30サイト
糖鎖微量迅速解析システム用検索ソフト	"	"	産業技術総合研究所と共同開発された糖鎖同定システム。糖鎖質量分析スペクトルと測定者のスペクトルとの照合により糖鎖構造を推定する。測定者はソフトウェアから提示されたピークを順次測定することで簡単に糖鎖構造解析を行うことができる。従来の解析法では難しかった異性体の区別を含む糖鎖構造解析が可能。海外販売中	Windows 7 島津製作所製糖鎖微量迅速解析システム用クライアント	400万円(税抜き)	2010年1月	約10サイト
Xome	"	"	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。エーザイおよび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	Windows7/Windows Server 2008以降	300万円(税抜き)、別途有償にてカスタマイズに応じます	2005年下半年期	約20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。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	Windows7/Windows Server 2008以降	200万円(税抜き)、2本目以降値引きあり	2005年下半年期	約25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	約50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

Homology Modeling Professional for HyperChem	アフィニティサイエンス	分子機能研究所	最強の論理的分子設計ツールHyperChemとGaussianで生体高分子モデリング、解析、シミュレーション。様々な状態の生体高分子システム(タンパクおよび核酸分子システム)に対応。HyperChem、Gaussian計算エンジンによるエネルギーベースの最先端手法。ホモロジーモデリング過程での、挿入配列モデリング、主鎖モデリング、側鎖モデリング、共有結合低分子モデリング、ヘテロ分子・金属原子影響下モデリング、ホモ・ヘテロ会合状態モデリング、溶媒和条件下モデリングなど従来製品では利用できない最先端手法がエネルギーベースで実施できる	HyperChem5.x/6.x/7.x/8.x (必須): Gaussian98 RevA9以上、Gaussian03、Gaussian09: Windows95/98/NT/2000/XP/Vista/7/8	お問い合わせください	2005年12月	—
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)、Cluster(クラスター版)	''	''	統合分子設計支援システムHyperChemで全自動生体高分子-リガンドフレキシブルドッキングシミュレーション、バーチャルスクリーニング。様々な状態の生体高分子システム(タンパクおよび核酸分子システム)に対応。従来製品にはない非グリッドアルゴリズムを採用し、HyperChem高信頼性高速計算エンジンによる全系を対象とした高精度手法。構造ベース予測ファーマコフォア点情報を利用する独自のドッキングアルゴリズムPIEFIIIによる高信頼性を誇る安定複合体構造探索手法。ドッキング・スクリーニングに要求される各種従来機能に加え、生体高分子システムの誘導適合効果を考慮したフレキシブルドッキング機能、アポ体へのドッキングなど誘導適合効果を超えた大きな構造変化にも対応したフレキシブルドッキング機能、標的生体高分子以外の高分子、低分子、水分子、金属原子、共有結合置換基などからの立体電子影響下でのフレキシブルドッキング機能、試行化合物のコンフォメーション毎に任意半経験分子軌道法による電荷アサイン機能、United AtomおよびAll Atom条件の様々な組み合わせ機能、リスタート機能、溶媒和条件下ドッキング機能、分散処理機能など従来製品では未踏の最先端手法を駆使でき、精密なドッキングシミュレーションからin silicoスクリーニングをサポートする。さらに、プロフェッショナルユーザーは分子力学計算・量子力学計算パラメータからドッキング・スクリーニングパラメータに至る全パラメータをGUIベースで詳細に自由に調整できる	HyperChem6.x/7.x/8.x (必須): Windows98/NT/2000/XP/Vista/7/8	お問い合わせください	2006年6月	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
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	合成高分子、液晶、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。最近の成果は、ポリマーのGHz粘弾性解析、ポリマー発泡初期過程、潤滑油の高圧固化シミュレーションなど	Xeon、Core2、Opteron等 Intel CPU および互換機。OSはLinuxおよびUnix	標準機能版350万円(基本機能のみ120万円)。カ場、オプション機能別売	1998年4月	20サイト
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
GastroPlus	ノーザンサイエンス	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モデルがベース。モデリング&シミュレーションでは世界で最も利用されているソフトウェア。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 Module	''	''	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 Module	''	''	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パラメータ算出、経口投与データがあればBAを算出する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)のオプションモジュール。乳幼児の解析も可能。	"	"	2005年12月	-
GastroPlus-IVIVCPlus	"	"	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オプションモジュール	"	"	2000年8月	-
GastroPlus-DDI Module	"	"	薬物間相互作用を予測するオプションモジュール。Steady-stateおよびDynamicのDDIを計算。標準化合物のデータベースも搭載。	"	"	2010年9月	-
GastroPlus-ADR Module	"	"	眼投与(点眼、注射、インプラント)および経肺投与(経鼻、吸入)のシミュレーションを行うモジュール。欧米のメガファーマ2社と共同開発。	"	"	2010年9月	-
GastroPlus-ADMET Predictor Module	"	"	高精度の物性予測ソフトウェアADMET Predictorのモデル式を使ってGastroPlusに必要な物性を構造から予測。バーチャルFaスクリーニングに最適。	"	"	2010年9月	-
ADMET Predictor-Physicochemical & Biopharmaceutics Module	"	"	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、P-gp、OATP1B1 活性:	"	"	2005年5月	-
ADMET Predictor-Toxicity Module	"	"	化合物構造から毒性にかかわる物性値を予測するソフトウェア。AMES、発がん性(Rat/Mouse)、変異原性、魚毒性、急性毒性、hERG Affinity、肝毒性・腎毒性、Rat急性毒性、経皮刺激性、ヒト肝毒性。	"	"	2005年5月	-
ADMET Predictor-Descriptor & Modeler Module	"	"	化合物構造からDescriptorを発生。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式を構築し、ADMET PredictorをカスタマイズするModeler機能。予測値がどのDescriptorに影響を受けているか評価できるDescriptor Sensitive Analysis機能も搭載	"	"	2005年5月	-
ADMET Predictor-Metabolism Module	"	"	CYP 1A2, 2A6, 2B6, 2C8, 2C19, 2C9, 2D6, 2E1, 3A4による基質阻害モデルおよび代謝構造部位予測。CYP 1A2, 2C9, 2D6, 2D19, 3A4でのKm値、Vmax値を予測。UGTモデル	"	"	2008年1月	-
ADMET Predictor-Simulation Module	"	"	GastroPlusのACATモデルをベースに吸収率および最適薬物投与量を予測	"	"	2009年8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	-
MedChem Studio-Basic Module	"	"	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	"	"	2010年7月	-
MedChem Studio-SAR Module	"	"	類似構造を持ちながら活性値が大きく異なる分子のペアを同定するPair SAR機能、分子のクラスター(ネットワーク)を閲覧したり複雑なパターンを抽出するSAR Network機能	"	"	"	-
MedChem Studio-Design Module	"	"	Virtual Libraryの生成、リード化合物の構造的代替物を生成、de-novoデザインのビルディングブロックを取得	"	"	"	-

MedChem Designer	"	"	分子構造描画機能とADMET物性予測機能を備えた画期的なフリーのソフトウェア。ADMET物性予測は、最も精度の高いADMET Predictor™の機能を使い、迅速に正確に計算。ADMET Predictorと組み合わせることで代謝物構造の予測も可能	"	"	2011年3月	—
MembranePlus	"	"	in vitroでの膜透過試験シミュレーションソフトウェア。膜透過仮定の予測、細胞内濃度の推算、実験ばらつきの影響評価を行う。GastroPlusとのコンビネーションにより、IVIVEの予測精度向上。	"	"	2014年12月	—
Modern Biopharmaceutics_J	"	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。ユーザ待望の日本語版リリース	"	"	2009年3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、Linux	"	2007年5月	—
Orange-Reader	"	"	FDAのOrange Bookの情報を効率よく効果的に利用するためのインターフェース	Windows	"	2009年11月	—
HPLCluster	"	"	医薬品などの保存安定性試験において得られる各条件下でのHPLCのピーク面積比をグリッド上に表示して比較解析を行うツール	"	"	2008年10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
<アプリケーション>							
SZMAP	米オープンアイ(窓口:オープンアイ・ジャパン)	米オープンアイ・サイエンティフィック・ソフトウェア	タンパク質-リガンド間の相互作用における水分子の役割を予測するソフトウェア。分子表面に近接する溶媒エネルギーの大きさと分布を高速にマッピング	Linux、Windows、MacOS X	ホームページ(www.eyesopen.com)をご参照下さい	2011年6月公開	—
FastROCS	"	"	GPGPU技術により超高速化したROCS。最大で1000倍の高速化を実現	"	"	2011年11月公開	—
ROCS	"	"	化合物の分子形状を高速に比較するソフトウェア。バーチャルスクリーニングやリードホッピングを強力に支援するツール。クエリー作成、クエリー評価を効率的に実施するGUI「vROCS」を同時に提供	"	"	2011年6月更新	—
AFITT	"	"	X線結晶構造解析用ソフトウェア。リガンド構造を電子密度に完全自動フィッティング可能。作業手順を組み込んだGUIが付属	"	"	2011年7月更新	—
BROOD	"	"	バイオアイソスター検索ソフトウェア。形状、化学特性、静電ポテンシャル、結合点の幾何学的類似性を用いて化合物フラグメントを比較。柔軟なクエリー作成GUI、「vBROOD」を同時に提供。ベンチケミストの方にも好評	"	"	2010年4月更新	—
EON	"	"	静電ポテンシャル比較のためのソフトウェア。リードホッピングとライブラリーのデザインに有効	"	"	2011年6月更新	—
OEDocking	"	"	「蛋白質の活性部位内で全てのリガンド配置を計算し、スコアで順位付けするドッキング・ソフトウェアFRED」、「蛋白質の活性部位内でのドッキングの際に、既知の結合分子との形状・化学性の類似性比較を行うHYBRID」、「蛋白質・リガンド両方の構造情報を有効に活用し、リガンドのポーズ予測を行うPOSIT」の三つのソフトウェアを含んだパッケージ。バーチャルスクリーニングを、高精度・高速に実施	"	"	2011年11月公開	—
OMEGA	"	"	化合物のコンフォメーション群を迅速に作成するソフトウェア。活性構造の再現に有効で、信頼性の高いマルチコンフォーマーデータベースを作成し、ドッキングプログラム(FRED)、形状比較ソフト(ROCS)などのアプリケーションに利用できる。二次元情報より化合物の特性計算を行い、適切な化合物を選抜するソフトウェア「FILTER」を同時提供	"	"	2010年8月更新	—

QUACPAC	"	"	互変異性体の作成と電荷の設定を行うソフトウェア。分子間相互作用の最大要因である分子形状と静電ポテンシャルを精度よく計算するため、正確なプロトン状態の情報を算出	"	"	2011年11月更新	-
SZYBKI	"	"	MMFF94力場を用いた分子構造最適化ソフトウェア。溶媒効果の有/無の両方の場合について構造最適化を行い、高精度の三次元構造を生成。様々な環境下におけるリガンドのエントロピー計算も可能	"	"	2010年10月更新	-
VIDA・VIVANT	"	"	VIDAは分子モデリングの結果を可視化し、解析するためのソフトウェア。さらにVIVANTを用いると、VIDAで可視化されたコンテンツをPowerPointやインターネット等の様々な媒体で公開する事が可能	"	お問い合わせください	2011年8月更新	-
<ツールキット>	"	"	アプリケーションをカスタマイズするためのオブジェクト指向のプログラミング・ライブラリー	全てのToolkit使用にはOEChem Toolkitのライセンスが必要	-	-	-
OEChem Toolkit	"	"	化学および化学情報のための高速で柔軟なプログラミング・ライブラリー。多くのexample programを同時に提供。オープンアイ製品のコアとなるツールキットで、他の全てのツールキットは使用時にOEChemが必要	"	お問い合わせください	2011年10月更新	-
Grapheme Toolkit	"	"	三次元構造から得られる様々な情報を化学構造式の二次元描画に投影するためのツールキット	"	"	2011年10月公開	-
OEDepict Toolkit	"	"	化学構造の二次元描画を行うツールキット。SMILES表記のコネクション・テーブルや三次元構造から、描画に適した二次元座標の構造式を作成	"	"	2011年10月更新	-
GraphSim Toolkit	"	"	化合物類似性を算出するためのプログラミングライブラリー:3種のフィンガープリント機能と多種の類似度算出アルゴリズムが提供される	"	"	2009年11月公開	-
Lexichem Toolkit	"	"	化学構造(SMILES表記のコネクション・テーブルなど)から化合物名、及び化合物名から化学構造への変換を行うツールキット。様々な国の言語に対応	"	"	2011年9月更新	-
MolProp Toolkit	"	"	化合物の二次元特性(分子量、XlogP、XlogS、PSA、ドナー・アクセプター数など)を計算し、それに基づいた分別を行うツールキット。既成のフィルターとして、ADMEフィルターを提供	"	"	2009年11月公開	-
Omega Toolkit	"	"	化合物のコンフォメーション群を高速に生成するソフトウェア「OMEGA」と同様の機能を含むツールキット	"	"	2009年11月更新	-
Quacpac Toolkit	"	"	Quacpacアプリケーションと同様に、互変異性体の作成、電荷の設定を行うツールキット	"	"	2009年11月更新	-
Shape Toolkit	"	"	分子形状を高速に比較するソフトウェア「ROCS」の基本となっているツールキット。最適化の方法、分子の取扱い、クエリーのタイプなどの微調整が可能	"	"	2009年11月更新	-
Zap Toolkit	"	"	Poisson-Boltzmann静電ポテンシャルの計算ツールキット。溶媒移動エネルギー、結合エネルギー、pKaシフト、溶媒力、静電的記述子、表面ポテンシャル、有効比誘電率などの生物学的に有用な特性を計算	"	"	2009年11月更新	-
Szybki Toolkit	"	"	MMFF94力場を用いた様々なレベルの最適化計算に使用可能なツールキット	"	"	2009年11月更新	-
Spicoli Toolkit	"	"	分子表面、及びこの表面で囲まれた体積を算出するツールキット。分子表面に物性値(水素結合性、極性/疎水性、電荷など)を付与することも可能	"	"	2009年11月更新	-
Docking Toolkit	"	"	新規Dockingツールの開発を行うツールキット。Hybrid Dockingにも対応	"	"	2010年公開	-

Cheminformatics Toolkit Bundle	"	"	OEChemTK, OEDepictTK, GraphemeTK, GraphSimiTK, LexichemTK, MolPropTK, QUACPAC TKを含むパッケージ	"	"	2011年公開	—
All Toolkit bundle	"	"	OEChemTK, DockingTK, GraphemeTK, GraphSimiTK, LexichemTK, MolPropTK, OEDepictTK, OmegaTK, QuacPacTK, ShapeTK, SpicoliTK, SzybkiTK, ZapTKを含むパッケージ	"	"	2011年公開	—
<データベース>							—
pKa Database	"	"	IUPAC冊子を基に、水溶液中での有機酸及び有機塩基のpKa実験値をまとめた4種類のデータベース。SMILESに変換された構造、引用文献、実験方法、及び、logD計算によるイオン状態を収録。pKaData社と提携し提供を開始	お問い合わせください	お問い合わせください	2011年9月更新	—
pKa Prospector	"	"	上記データベースを内蔵したpKa値の予測ツール。入力した化合物構造のイオン化状態を自動認識	お問い合わせください	お問い合わせください	2013年公開	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
CRAIS創薬基幹システムパッケージ	パトコア	パトコア	創薬研究所の基幹業務をサポートするトータルシステム。登録システム、アッセイデータ管理システム、化学生物情報統合検索参照システム、法規制物質チェックシステム、電子実験ノートの各アプリケーションを互いに連携。完成度の高いパッケージにより低コスト、短期間で最新の創薬情報基盤を構築	Windows	お問合せ下さい	—	—
CRAIS Registration	"	"	化合物登録システム。「クリーン」な自社化合物データベースの構築のために様々なエラーチェックメカニズム、構造正規化機構を有している。電子実験ノートからの登録を可能にするWebサービスを実装	"	"	—	—
CRAIS Assay	"	"	アッセイ情報登録システム。広範なアッセイプロトコルに対応し、IT部門の手を借りることなくプロトコル変更などへの対応が可能	"	"	—	—
CRAIS Browser	"	"	化学情報統合ブラウジングシステム。アッセイデータと構造などの化学情報との統合検索を行うWebアプリケーション。Spotfire、EXCELなどとの連携が可能	"	"	—	—
CRAIS Chceker	"	"	法規制物質判定システム。輸出貿易管理令、麻薬、向精神薬、指定薬物、毒劇法、薬事法、消防法、労安法等に定められた物質を構造式から迅速に判定	"	"	—	—
Compliance Chceker	"	"	海外向け法規制物質判定システム。欧米、アジア諸国の規制物質を化学構造式から迅速に判定	"	"	—	—
CRAIS Board	"	"	化合物デザインの協創ツール。オンラインで同時編集しながら化合物改変案を討議・記録可能。自社化合物DBや評価結果DB、各種予測システムとの連携が可能	"	"	—	—
CRAIS Outsourcing	"	"	合成依頼～検収までのアウトソーシング管理を自動化。競合見積やCROの評価機能を搭載し、コストダウンを促進。法規制チェックの自動化によりコンプライアンスレベルを向上	"	"	—	—
CRAIS Transformer	"	"	構造変換アイデア提示ツール。変換ルールに基づき入力構造の構造改変案を提示。自社データのMMP解析で得られた知見をルールとして取り込み、構造最適化に活用できる。また、EMIL (Example-Mediated-Innovation-for-Lead-Evolution、標準添付)、Bioster (オプション)等の生物学的同等性知識ベースをルールとして提供	"	"	—	—
CRAIS Reagent	"	インフォグラム	法規制対応機能の充実した試薬管理システムで、CRAIS Checkerと連動します。最新の法規制情報を容易に管理することができ、コンプライアンス対応を改善する	"	"	—	—
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	"	—	—

Marvin for Javascript	"	"	Javascriptで開発された、ブラウザ向け構造及び反応の描画・表示ツール。JAVAプラグインが不要で迅速に起動	HTML5対応ブラウザ	"	-	-
JChem for Office	"	"	MSOfficeの化学機能アドインで、構造式や反応式のハンドリング、物性計算などを可能にします。JChem for EXCEL,JChem for PowerPoint, JChem for Work,JChem for Outlookで構成される	Windows (Office2003,2007,2010,2013)	"	-	-
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	Windows/Linux/Sun/Mac	"	-	-
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 Personal edition	"	"	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。ローカルデータベースでありながら、大容量の構造・反応データの処理が可能	"	"	-	-
Instant JChem Enterprizel edition	"	"	ローカルデータベースに加え、サーバーデータベース(JChem Cartridge)のフロントエンドとして大規模な展開が可能。社内データウェアハウスの検索参照系の構築が可能	"	"	-	-
Plexus connect	"	"	直感的にアクセスできる新世代のWeb化学情報プラットフォーム	"	"	-	-
Plexus discovery	"	"	直観的で洗練されたインターフェースを通じて、分子エニュメレーションやクラスタリングをはじめとするChemAxonの様々なケムインフォーマティクス機能が利用可能。	"	"	-	-
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、反応検索をサポート	"	"	-	-
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)	"	"	-	-
Compound Registration	"	"	混合物や製剤の取扱いも可能な、次世代の自社化合物登録システム	"	"	-	-
JChem for SharePoint	"	"	Share Point上に保管したドキュメントの構造情報(構造式、化学名、CAS番号など)から構造インデックスを生成し、ドキュメントの構造式検索を可能に。SharePoint上に化学用のWebパーツを提供し、構造式を扱えるカスタムリストやブログの構築が容易に可能	"	"	-	-
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	"	"	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	"	"	-	-
Metabolizer	"	"	ヒトP450Iによる予測代謝産物を生成	"	"	-	-
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	"	"	-	-
Structure Checker	"	"	構造式のエラー検出及び修正を行うAPI群	"	"	-	-
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	"	"	-	-
Confirmation Plugin	"	"	コンフォメーション生成、分子動力学計算	"	"	-	-
Chemistry Framework Plugin	"	"	MCS、Bermis-Murco Framewok等のクラスタリング	"	"	-	-
NMR Predictor	"	"	構造式から1H及び13C NMRのスペクトルを予測	"	"	-	-
Structure to Name Plugin	"	"	構造式 → IUPAC名変換	"	"	-	-
Name to Structure	"	"	IUPAC名 → 構造式変換	"	"	-	-
Chinese Name to Structure	"	"	中国語体系名、一般名から化学構造式に変換	"	"	-	-
Japanese Name to Structure	"	"	日本語体系名、一般名から化学構造式に変換	"	"	-	-
Document to Structure	"	"	あらゆる文書から構造情報を自動抽出。画像化された文書(未OCR)にも対応。強力なOCRエラー補正機構を搭載し、高精度な構造抽出が可能。構造抽出の対象となる情報は、CAS番号、一般名、体系名、自社附番コード、SMILES、InChi、及びOLE埋め込み構造式、画像の構造式(OSRA,Klide、Imagoと連携)抽出箇所の前後の文字列なども抽出可能で、テキストマイニングに利用可能。特許の迅速な分析が可能に	"	"	-	-
Document to Database	"	"	社内の文書リポジトリ(Documentum、ファイルサーバー等)のコンテンツに含まれる構造式、化合物ID番号、化学名、CAS番号などから化学構造を抽出し、構造式による文書検索を可能にします。また、コンテンツには化学構造アノテーションを付加し、ID番号などへマウスを合わせると構造式をポップアップして参照可能	"	"	-	-
ChemCurator	"	"	特許文書からマーカッシュ構造及び実施例構造とその関連情報等を効率的に抽出する為のユニークなツール。	"	"	-	-
MarkushSearch	"	"	マーカッシュ形式で記述された構造式のDBへの蓄積とそれに対する構造検索を実現します。Derwent World Patents Indexで用いられるDARCフォーマットに対応	"	"	-	-
MarkushEnumeration	"	"	一般化されたマーカッシュ形式で表現される構造ライブラリの全体あるいは部分集合をの個別構造を生成することができる。また、マーカッシュ形式で表現される化合物の総数をカウントすることが可能	"	"	-	-
SAR>vision SM	"	米Altoris Inc.	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。充実した視覚化機能によりインターラクティブに解析が可能	"	"	-	-
SAR>vision Biologics	"	"	バイオロジックスのSAR解析ツール	"	"	-	-
BIOSTER	"	英Digital Chemistry	1970年迄の選別された論文およびそれ以降の体系的な調査によりエキスパートが収集した生物学的活性が同等な類縁化合物のペア(バイオアナログ)を納めたデータベース。2万4千件以上のバイオアナログペアを収録しており、毎年約2千件が追加される。活性、Transformation、リプレース可能なフラグメント構造、代替フラグメント構造、logP、出典文献のデータが収録されている	"	"	-	-
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

ChemBioOffice Ultra	大学生協、ヒューリンクス、富士通、パーキンエルマー ご注文・受付センター	米パーキンエルマー インフォマティクス事業部	ChemBioDraw, ChemBio3D, ChemBioFinder/ChemBioViz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。ChemBioDrawにSciFinderとの連携機能が追加された	Windows/Mac	要問合せ	2014年6月	—
ChemBioDraw Ultra	"	"	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。構造式からNMRスペクトラの予測、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装備。ChemBioDrawにSciFinderとの連携機能が追加された	"	"	2014年6月	—
ChemBio3D Ultra	"	"	3D分子モデル描画ソフト。高品質の3次元的表现が直感的に得られ、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ウェア。タンパク質など表面表示にも優れる	Windows	"	2014年6月	—
ChemACX Ultra Subscription	"	"	約680社の試薬販売会社、およそ601万件の化合物と1,113万件の試薬を網羅し、日々アップデートするPerkinElmerインフォマティクス独自の試薬カタログ情報データベース	"	"	2014年6月	—
E-Notebook	富士通、パーキンエルマーインフォマティクス事業部	"	業界第一位の実績を持つ電子実験ノート。世界中の数多くの企業および大学・研究機関において、研究の効率化・知的財産保護およびコンプライアンス遵守を目的として運用されている。業務に則った柔軟な設定が可能で、有機合成(プロセス化学を含む)、生物学的評価、製剤研究、各種分析研究など多種多様な業務に適用可能。研究者にとって日々の業務における必須ツール	"	"	2012年9月	—
ChemOffice Enterprise	富士通、パーキンエルマーインフォマティクス事業部	"	Web上で化学構造・反応情報のデータベース構築・検索可能な化学情報管理システム。製薬・化学研究機関に最適	"	"	2012年9月	—
ChemDraw for iPad	AppleStore	"	いつでもどこでも正確な化学構造式や反応式を簡単に作画可能で、研究者間で簡単に共有可能なiPad用構造式作画ツール	iOS 7	1,000円	2013年9月	—
Chem3D for iPad	"	"	分子構造を3次元で表示する iPad用アプリケーション	iOS 7	無料	2013年9月	—
Elements	パーキンエルマーインフォマティクス事業部	"	クラウドベースの電子実験ノートブック。記入したい項目欄を自由に追加・レイアウトが出来るのでバイオリジスト、化学研究者など、研究分野を問わずに利用可能。化学者向けにはChemDraw Directが使用でき量論計算も行える	PC、スマホ、タブレットに対応	要問合せ	2014年9月	—
TIBCO Spotfire Analyst	"	米TIBCO Software Inc.	IT部門に依存せずに様々なデータにアクセスすることができるセルフサービスの解析環境を提供。優れたGUIを最大限に活用し、大量、多変量なデータをリアルタイムに表示・解析可能	Windows	"	2013年5月	—
TIBCO Spotfire Business Author	"	"	Webブラウザの環境にて、Spotfireの基本ビジュアライズの作成、編集、共有などが可能。各種ビジュアライズ結果のPDFやMS-パワーポイントへの書き出しもサポート。	"	"	2013年9月	—
TIBCO Spotfire Consumer	"	"	Webブラウザの環境にて、Spotfireの基本ビジュアライズの閲覧、絞り込みなどが可能。各種ビジュアライズ結果のPDFへの書き出しもサポート。	"	"	2013年9月	—
Lead Discovery powered by TIBCO Spotfire	"	米パーキンエルマー インフォマティクス事業部	化学構造式と評価データを組み合わせて、Spotfireの強力なビジュアライズ機能により評価・解析を行うSpotfire用アドオン。化学構造式の分解、部分構造検索も可能	"	"	2013年5月	—
SciStream	"	"	プレートリーダーやイメージングといった実験機器からのデータをSpotfireへインポートするためのアドオン	"	"	2014年7月	—

High Content Profiler	"	"	ハイコンテンツスクリーニング実験のデータ解析を支援するSpotfire用アドオン。 多変量の表現型データを考慮した解析手法により、複雑な微小応答に対しても検出が可能。Columbusイメージデータベースシステムと高い親和性	"	"	2014年7月	—
Omics Office	"	"	オミックス実験データの統合解析と生物学的解釈のためのSpotfire用アドオン。 マイクロアレイ、qPCR、NGSのデータファイルに対応したワークフローを搭載し、QCおよび発現解析、機能解析の効率を大幅に向上	"	"	2014年11月	—
TIBCO Spotfire Analyst with Lead Discovery Personal Subscription	パーキンエルマー ご注文・受付センター、パーキンエルマーインフォマティクス事業部	米TIBCO Software Inc.および米パーキンエルマー インフォマティクス事業部	TIBCO Spotfire ProfessionalとLead Discovery powered by TIBCO Spotfireをパッケージにしたサーバー不要のパーソナル利用を目的とした1年間使用ライセンス	"	"	2014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
Atomistix ToolKit – Density Funct	QuantumWise Japan	クオオタムワイズ(デンマーク)	密度汎関数理論(DFT)と非平衡グリーン関数(NEGF)の手法に基づき、バイアス電圧が印加された2プローブ系の非平衡電子状態を第一原理的に計算するナノデバイスシミュレーター	Windows/Linux/Mac、PCクラスター対応	詳細問い合わせ	2004年2月	—
Atomistix ToolKit – Semi-Empirical	"	"	半経験的手法によりナノデバイスの電子輸送特性を算出するナノデバイスシミュレーター。ATK-DFTより大規模な系を高速に計算可能	Windows/Linux/Mac、PCクラスター対応	"	2009年7月	—
Atomistix ToolKit – Classical	"	"	古典的なポテンシャルを使用したナノスケールデバイスシミュレーター。フォノン輸送係数にも対応。	Windows/Linux/Mac、PCクラスター対応	"	2014年9月	—
Virtual NanoLab	"	"	AtomistixToolKitによる計算を効率的に行う為のGUI。モデルのセットアップから計算の実行、結果の表示を簡単に操作可能	Windows/Linux/Mac	"	2004年2月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MOE	変化システム	加ケミカルコンピューティンググループ(CCG)	創薬、生命科学研究に最適な分子設計ソフトウェア。多彩なアプリケーション、豊富な分子構造データベース、アプリケーション開発環境を統合。分子シミュレーション、QSAR解析、ファーマコフォア解析、タンパク質モデリング、タンパク質デザイン、タンパク質立体構造に基づく分子設計、フラグメントに基づく分子設計などの機能を搭載	Windows、Mac、Linux	—	1997年9月	—
PSILO	"	"	タンパク質立体構造データベースシステム。タンパク質の類似ポケット検索や、類似2次構造検索、分子間相互作用検索など独自の検索機能を搭載。タンパク質の重ね合わせや、リガンド結合部位の2次元表示、アミノ酸配列の自動アノテーションなどの解析機能を持つ。公共データ、社内データを統合管理	Linux (Server) / Windows、Mac、Linux (Client)	—	2008年4月	—
Prous Institute SYMMETRY	"	Prous Institute for Biomedical Research (スペイン)	創薬研究・医薬品開発のための包括的支援システム。各種ADMET物性、作用機序、治療の適応症、経路解析、ケモゲノミクスを予測する多数のモデルを搭載し、探索段階から開発研究、承認までのプロセスの各段階において意思決定を支援	Windows Server	—	2013年4月	—
CimplSoft	"	米シンプルスソフト	メディスナルケミストを対象とした化学データ可視化・解析ツール。ChEMBLデータベース検索やMMPs解析、活性クリフ解析、SAR解析、クラスタリング等の様々な化学データの解析がグラフィカルに行える	Windows	—	2010年7月	—
FlexSIS	"	独バイオソルヴアイティー	ドッキングスタディソフトウェア。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	—	2007年11月	—
FlexSIS-Ensemble	"	"	リガンドと受容体の誘導適合を行う。FlexSISのオプションモジュール	"	—	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。FlexSISのオプションモジュール	"	-	2007年11月	-
ReCore	"	"	母核構造置換、フラグメント結合やフラグメント伸張を容易な操作で行えるFragment Based Designソフトウェア	Windows、Linux	-	2007年11月	-
Hyde	"	"	水素結合エネルギーと脱溶媒和エネルギーの和として結合自由エネルギーを推算。原子毎の寄与をカラー表示で確認しながらリガンドを対話的に修正・最適化可能	Windows、Linux	-	2012年2月	-
FTrees	"	"	官能基の物理化学的特性とそれを結合した木構造を用いて類似構造を検索	"	-	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。FTreesのオプションモジュール	"	-	2007年6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ソフトウェア	Linux x86 32bit、Linux x86 64bit	-	2007年11月	-
FlexS	"	"	リガンドの重ね合わせとパーチャルスクリーニングを行う分子アライメントソフトウェア	Windows、Linux x86 32bit、Linux x86 64bit	-	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アライメントされた仮想化合物ライブラリーを構築する。FlexSのオプションモジュール	"	-	2007年7月	-
PoseView	"	"	化合物-タンパク質複合体の2次元ダイアグラムを自動生成	Windows、Linux	-	2012年2月	-
CORINA_F	"	"	環構造の配座解析を行うFlexSISやFlexSの拡張モジュール	Windows、Linux	-	2008年12月	-
SeeSAR	"	"	リガンド結合部位中で化合物の活性値や物性値、二面角の妥当性をモニタリングしながら、対話的にリガンド候補構造を設計。誰にでも利用できる直感的なGUIを搭載	Windows、Linux、Mac	-	2014年10月	-
SciMAPS Platform	"	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	"	-	2008年7月	-
Amorphous Builder Plug-in	"	"	CBMC (Configurational Bias Monte Carlo)法を採用したアモルファス構造構築Plug-in。複雑な系でも現実に近い密度で自然なモデルを構築可能。界面構造構築も可能	"	-	2008年7月	-
LAMMPS-Atomistic Plug-in	"	"	分子動力学計算プログラムLAMMPSを利用するPlug-in。LAMMPSの計算実行から結果の解析まで行うことが可能	"	-	2008年7月	-
Cross-Link builder	"	"	系を構成するモノマーからなるアモルファス構造から、LAMMPSの分子動力学計算を行いながら反応点が近づくと結合を生成させ、架橋構造を作成	"	-	2012年7月	-
ReaxFF analysis	"	"	LAMMPSのReaxFF計算結果の解析ツール	"	-	2012年7月	-
Elastic properties	"	"	高分子、固体などに対して機械物性を計算するためモジュールで、計算入力の作成および出力の解析	"	-	2012年7月	-
ABINIT Plug-in	"	"	第一原理バンド計算プログラムABINITを利用するPlug-in。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	"	-	2008年7月	-
NAMD Plug-in	"	"	分子動力学計算プログラムNAMDを利用するPlug-in。NAMDの計算実行から結果の解析まで行うことが可能	"	-	2008年7月	-
Towhee Plug-in	"	"	汎用モンテカルロ計算プログラムTowheeを利用するPlugin。分子動力学計算では取り扱うことの難しい液液、気液平衡などの相平衡状態の研究やゼオライトへの吸着現象の研究に利用	"	-	2008年7月	-
QmPot Plug-in	"	"	QM/MM計算の計算プログラムを利用するPlug-in。LAMMPS、ABINIT、TURBOMOLE、MNDOを連携させることが可能	"	-	2008年7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。(TURBOMOLEの計算プログラムは含まれない)	"	-	2006年6月	-

LAMMPS-DPD Plug-in	"	"	LAMMPSによる散逸粒子動力学計算のためのPlug-in。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	"	-	2012年6月	-
FHMixing Plug-in	"	"	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LAMMPS-DPDの相互作用パラメータの推算に利用	"	-	2008年7月	-
Database	"	"	ユーザが作成したプロジェクトをネットワーク上のデータベースに保存検索書き込みを行うツール	"	-	2010年7月	-
QSAR Plug-in	"	"	SciMAPS上で得られる様々な情報や実験値(活性値)から関連モデルを構築	"	-	2010年7月	-
MNDO Plug-in	"	"	半経験的分子軌道法プログラムMNDOを利用するPlugin。分子軌道や基準振動解析の結果を表示可能	"	-	2008年7月	-
SciTherm	"	"	SAFT/PC-SAFT/ePC-SAFT状態方程式による相平衡推算に利	"	-	2009年1月	-
NWChem Plug-in	"	"	量子化学計算NWChemを利用するPlug-in。TD-DFT計算など様々な計算が可能。	"	-	2014年5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(SCM)	分子系を対象とした密度汎関数法ソフトウェア。Slater型軌道を採用することで効率的かつ精度の高い計算を実現。各種スペクトルをはじめ様々なプロパティの計算が可能	Windows、Linux、Unix、Mac	-	1998年11月	-
BAND	"	"	周期系を対象とした密度汎関数法ソフトウェア。基底関数として原子軌道(Slater型+数値型)を使用。周期系におけるNMR/ESR計算など、原子軌道の特徴を活かしたプロパティの計算が可能	"	-	1998年11月	-
ReaxFF	"	"	化学反応を取り扱うことのできる分子動力学計算プログラム。結合の生成と解離を記述することのできる反応力場を搭載しており、金属元素を含む周期表の多くの元素に対応	"	-	2010年12月	-
COSMOtherm	"	独コスモロジック	COSMO-RS法に基づく熱力学物性推算ソフトウェア	Linux、Windows、Mac	-	2001年9月	-
COSMObase	"	"	約8000化合物を収録した分子表面電荷情報データベース	"	-	2001年9月	-
COSMOquick	"	"	医薬品の研究開発で重要な熱力学物性をCOSMO-RS法で推算するソフトウェア。フラグメントベースの分子表面電荷情報作成機能を搭載しているので、量子化学計算を行わずに物性推算が可能	"	-	2012年9月	-
COSMOmic	"	"	分子膜・ミセル内分子分布シミュレータ	"	-	2007年7月	-
COSMOconf	"	"	配座解析ソフトウェア	"	-	2009年1月	-
TURBOMOLE	"	"	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、Windows、Mac	-	2001年9月	-
MedeA	"	米マテリアルズデザイン	材料設計支援統合システム	Windows、Linux	-	1999年1月	-
MedeA-VASP	"	"	第一原理電子状態計算プログラム	"	-	2001年5月	-
MedeA-MT	"	"	弾性特性・熱力学物性評価ツール	"	-	2003年4月	-
MedeA-Phonon	"	"	格子振動特性・熱力学物性評価ツール	"	-	2003年4月	-
MedeA-GIBBS	"	"	モンテカルロ計算プログラム	"	-	2006年8月	-
MedeA-UnCLE	"	"	クラスター展開法プログラム	"	-	2014年10月	-
Electronics	"	"	電子状態解析・熱電特性推算ツール	"	-	2008年8月	-
Combi	"	"	コンビナトリアルケミストリーツール	"	-	2001年5月	-
Transition State Search	"	"	遷移状態探索ツール	"	-	2009年12月	-
Interface Builder	"	"	界面モデル構築ツール	"	-	2010年1月	-
Amorphous Materials Builder	"	"	アモルファスモデル構築ツール	"	-	2012年4月	-
LAMMPS-EAM	"	"	分子動力学用EAMポテンシャル	"	-	2012年4月	-
LAMMPS-Diffusion	"	"	拡散係数算出ツール	"	-	2012年4月	-
LAMMPS-CED	"	"	凝集エネルギー密度算出ツール	"	-	2012年4月	-

LAMMPS-Thermal Conductivity	"	"	熱伝導性評価ツール	"	—	2010年11月	—
LAMMPS-Viscosity	"	"	粘性評価ツール	"	—	2010年11月	—
LAMMPS-Surface Tension	"	"	表面張力算出ツール	"	—	2014年10月	—
Force Field Optimizer	"	"	力場パラメータフィッティングツール	"	—	2014年10月	—
Inorganic Crystal Structure Data	"	"	無機結晶構造データベース	"	—	1999年1月	—
NIST Crystal Data	"	"	無機、有機、金属等の固体のデータベース	"	—	1999年1月	—
Pauling File Binaries Edition	"	"	二元系無機結晶構造データベース	"	—	2008年4月	—
Pearson's Crystal Data	"	"	金属、無機結晶構造データベース	"	—	2007年8月	—
Gaussian 09	"	米ガウシアン	Ab initio法分子軌道計算プログラム	SUN、NEC、IBM、Fujitsu、Intel-Linux、Windows、Mac	—	1998年10月	—
GaussView 5	"	"	Gaussian 09のグラフィカルユーザインターフェース	SUN、IBM、HP、SGI、Intel-Linux、Windows、Mac	—	1998年10月	—
Molpro	"	英University College Cardiff Consultants Limited	CI法などの配置間相互作用の取り扱いを得意とした量子化学計算ソフトウェア	Fujitsu、Cray、Intel-Linux、Mac	—	2004年11月	—
QuantumCube	"	米パラレルクアント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、Intel Mac	—	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力場パラメータを提供。力場データベースや力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	—
CULGI	"	蘭シュルギ	マルチスケールシミュレーションのための計算科学統合ライブラリ	Windows、Linux	—	2009年4月	—
CBIS	"	米ケムイノベーションソフトウェア	化合物・細胞株・プレートなどの実験材料、アッセイ結果や機器分析結果などの実験データ、報告書や参考文献などの関連文書、その他試薬在庫や製品レシピなど、研究開発に関わるあらゆるデータを統合して管理できるWebシステム	Windows Server	—	2002年8月	—
CLISS	"	菱化システム	Web画面で実験レポートの作成や閲覧、管理ができる、大学や企業の研究者向けのクラウドサービス。ノウハウの利用による研究の効率化に有効	Windows、Linux、Mac	—	2015年2月	—
CDD VAULT	"	米コラボレーティブドラッグディスカバリー	化学、バイオ、科学計算の分野の研究者が互いに情報を出し合い研究を行うための場を提供するクラウドシステム。他の研究機関と共同研究を進めるときの情報共有に最適	Windows、Linux、Mac	—	2014年7月	—
E-WorkBook Suite	"	英IDBS	幅広い分野の研究・開発業務におけるデータの記録・管理・共有に対応した電子実験ノート。あらゆるデータファイルの登録に対応し、耐改竄性やデジタル署名による本人確認など厳重なデータ管理を実現	Windows Server、Solaris、RedHat	—	2011年4月	—
CHEMKIN	"	米リアクションデザイン	素反応データを用いた化学反応シミュレーションを実行するソフトウェア	Windows、Linux	—	2005年4月	—
CHEMKIN-PRO	"	"	CHEMKINの高機能版製品。ソルバーが高速化・堅牢化され、反応経路解析機能・不確実性解析機能・粒子生成解析モジュールなどの機能も搭載されている	"	—	2008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	Linux	—	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	Windows、Linux	—	2005年4月	—

DAYLIGHT Database	"	"	Daylight社のデータベースシステムで使用するのことができる化合物データベースコンテンツ	Linux	—	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	Windows, Linux	—	2005年4月	—
Partek Genomic Suite	"	米パーテック	マイクロアレイと次世代DNAシーケンサーのデータ解析機能を搭載した遺伝子データ解析用パッケージ	Windows, Intel-Linux, Mac OS X	—	2005年8月	—
Partek Express	"	"	マイクロアレイの遺伝子発現解析に特化した解析パッケージ	"	—	2010年8月	—
Partek Pathway	"	"	Partek Genomics SuiteでKEGGのパスウェイデータを利用したパスウェイ解析を行うアドオンパッケージ	"	—	2013年4月	—
Partek Flow	"	"	次世代シーケンサーのデータ解析用パッケージ	Intel-Linux	—	2013年4月	—
Colors	"	東北大学宮本研究室	高速化量子分子動力学計算プログラム	Intel-Linux	—	2002年1月	—
MOPAC2012	"	米スチュワートコンピューテーションケミストリ	高精度のハミルトニアンPM7を搭載したMOPAC最新版	Windows, Linux, Mac	—	2007年10月	—
Carbon Analyzer	"	藤本宏之	人造黒鉛の結晶子サイズ、網面サイズ、積層サイズの測定プログラム	Windows	—	2002年5月	—
Crystal Profiler	"	菱化システム	分子構造と粉末X線回折パターンから結晶構造を解析するソフトウェア。名古屋大学で開発された独自のアルゴリズムHybridGA法を探索手法として採用することで、従来構造決定が困難であった高い自由度を持つ分子や共結晶にも適用可能	Windows	—	2010年10月	—
Mathematica	"	米ウルフラムリサーチ	豊富な数値処理、数式処理機能、優れたグラフィックス機能に加え、多様なデータの利用が可能で、高度な計算を必要とするあらゆる分野で効率的なプログラム開発・利用を行うことのできる統合処理環境	Windows, Linux x86, Mac OS X intel	—	2010年12月	—
GENEVESTIGATOR	"	ネビオン(スイス)	キュレーションされた遺伝子発現データベースのオンライン解析サービス	Windows, Linux, Mac	—	2014年4月	—
PHA_Organizer	"	三菱化学株式会社	三菱化学独自のシナリオ抽出法HAZchartに基づき、化学プラントのリスクを定量的に評価するソフトウェア	Windows	—	2014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
<Small-Molecule Drug Discovery Suite> 低分子創薬分子設計支援ソフトウェアパッケージ				—	—	2013年	—
Canvas	米Schrodinger LLC(窓口:シュレーディングー株式会社)	米Schrodinger LLC	ケムインフォマティクス解析ツール	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	お問い合わせ下さい	2008年	—
Cloud Service	"	"	Amazonクラウドを利用したSchrodinger製品利用オプション				
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	"	"	2005年	—
ConfGen	"	"	高速活性配座探索プログラム	"	"	—	—
Core Hopping	"	"	SBDDおよびLBDDによる母骨格の置換が可能	"	"	2010年	—
Desmond	"	"	生体高分子向け分子動力学プログラム	"	"	2008年	—
Desmond GPU	"	"	GPGPU対応のDesmond	"	"		
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	—
Glide	"	"	高速高精度ドッキング計算プログラム	"	"	2001年	—
Impact	"	"	生体高分子(タンパク、核酸等)向け分子力学、動力学プログラム	"	"	2001年	—
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用オプションモジュール: ab-initio法によるpKa予測プログラム	"	"	1999年	—
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	—

Liaison	"	"	Linear Response法によるBinding自由エネルギー計算プログラム	"	"	2001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、鏡像異性体、Tautomer自動発生機能も搭載	"	"	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ソフトウェア。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	"	"	1999年	—
Maestro	"	"	Schrodinger Suite総合インターフェース	"	"	—	—
MINTA	"	"	MacroModel用オプションモジュール: 高速かつ高精度に自由エネルギーを算出	"	"	1999年	—
Phase	"	"	Pharmacophore/3D-QSAR解析プログラム	"	"	2005年	—
Phase Filed-Based QSAR	"	"	3次元QSAR解析プログラム	"	"	2011年	—
Phase Shape Screening	"	"	3次元構造と化学特性に基づく重ね合わせと類似性検索	"	"	2008年	—
Prime	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム。強力なリファインメント機能によりループ構造や側鎖の配座を高精度予測。Glideと組み合わせた利用でInducedFitドッキング解析が可能	"	"	2003年	—
PrimeX	"	"	蛋白質X線結晶構造精密化プログラム	"	"	2007年	—
QikProp	"	"	3次元構造を利用した薬物物性予測ソフトウェア	"	"	2000年	—
QSite	"	"	Jaguarを用いたQM/MM計算プログラム	"	"	2001年	—
SiteMap	"	"	蛋白質活性部位予測プログラム	"	"	2006年	—
Strike	"	"	統計解析/化合物類似性評価プログラム	"	"	2005年	—
WaterMap	"	"	リガンド結合部位における溶媒和水の自由エネルギー計算モジュール	"	"	2008年	—
XP Visualizer	"	"	Glide用オプションモジュール: XP Glide Scoreに基づき、リガンド/レセプター間相互作用をMaestro上でハイライトし、視覚的に表示	"	"	2007年	—
<Biologics Suite> バイオロジクスソフトウェアパッケージ			—	—	—	2013年	—
BioLuminate	米Schrodinger LLC(窓口:シュレーディングガー株式会社)	米Schrodinger LLC	抗体モデリングソフトウェア・バイオロジクス統合プラットフォーム	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	お問い合わせ下さい	2012年	—
Desmond	"	"	生体高分子向け分子動力学プログラム	"	"	2008年	—
Desmond GPU	"	"	GPGPU対応のDesmond	"	"		
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	—
MacroModel	"	"	Prof. Stillらにより開発された分子力学系分子設計支援ソフトウェア。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	"	"	1999年	—
Maestro	"	"	Schrodinger Suite総合インターフェース	"	"	—	—
Prime	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム。強力なリファインメント機能によりループ構造や側鎖の配座を高精度予測。Glideと組み合わせた利用でInducedFitドッキング解析が可能	"	"	2003年	—
QSite	"	"	Jaguarを用いたQM/MM計算プログラム	"	"	2001年	—
SiteMap	"	"	蛋白質活性部位予測プログラム	"	"	2006年	—
PIPER	"	"	プロテイン-プロテインドッキング計算プログラム	"	"	2012年	—
<Materials Science Suite> マテリアルサイエンスソフトウェアパッケージ			—	—	—	2013年	—
Canvas	米Schrodinger LLC(窓口:シュレーディングガー株式会社)	米Schrodinger LLC	ケムインフォマティクス解析ツール	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	お問い合わせ下さい	2008年	—
Desmond	"	"	分子動力学プログラム	"	"	2008年	—
Desmond GPU	"	"	GPGPU対応のDesmond	"	"		

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	-
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	-
MacroModel	"	"	Prof. Stillらにより開発された分子力学系分子設計支援ソフトウェア。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	"	"	1999年	-
Maestro	"	"	Schrodinger Suite総合インターフェース	"	"	-	-
MS-Combi	"	"	マテリアルシミュレーション用、コンビナトリアルケミストリツール	"	"	-	-
<Discovery Informatics Suite>	データマイニングソフトウェアパッケージ			-	-	2013年	-
Canvas	米Schrodinger LLC(窓口:シュレーディングー株式会社)	米Schrodinger LLC	ケムインフォマティクス解析ツール	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	お問い合わせ下さい	2008年	-
Seurat	"	"	化合物ライブラリーデータ共有・解析・視覚化ツール	Linux, Windows (詳細はお問い合わせください)	"	2010年	-
LiveDesign	"	"	創薬研究コミュニケーションツール	WEBブラウザによるマルチプラットフォーム (詳細はお問い合わせください)	"	2014年	-
<PyMOL> 分子描画ソフトウェア				-	-	-	-
PyMOL	米Schrodinger LLC(窓口:シュレーディングー株式会社)	米Schrodinger LLC	分子描画ソフトウェア	Linux, Windows, Mac OS X (詳細はお問い合わせください)	お問い合わせ下さい	2010年	-
AxPyMOL	"	"	Microsoft社製PowerPoint上でPyMOL機能を利用可能にするオプションツール	Windows XP, Vista, 7, PowerPoint 2003, 2007 (詳細はお問い合わせください)	"	2010年	-
Mobile PyMOL	"	"	iPad用分子描画ソフトウェア	iOS(詳細はお問い合わせください)	"	2012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
MS Adsorption Locator	サイエンステクノロジーシステムズ	仏ダッソー・システムズ・バイオピア	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	お問い合わせください	2008年12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収集、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 DFTB	"	"	密度汎関数法タイトバインディング法(DFTB)によって、より長いシミュレーション時間やより大きなサイズの系に対する量子計算が可	"	"	"	-

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。ブロックコポリマー、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 Mesocite	"	"	粗視化分子動力学法 (CGMD) と散逸粒子動力学法(DPD) を搭載した新しいモジュール。ポリマーのメソ相や脂質二重層など構造化した液体のビーズモデリングが可能。CGMD では立体障害、環状構造、電荷が入ったメソスケールモデルの計算をすることが可能。生体分子系に使用できる粗視化 MARTINI 力場を搭載	"	"	"	—
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	"	"	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	"	"	"	—
Pipeline Pilot Client	"	"	Pipeline Pilot のコンポーネントを組み合わせ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	—
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	"	"	"	—
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	"	"	"	—
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	"	"	"	—
Pipeline Pilot Plate Data Analytics Component Collection	"	"	Pipeline Pilot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を活用できる。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	"	"	"	—
Pipeline Pilot Modeling Collection	"	"	インガ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	"	"	"	—
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	"	"	"	—
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	"	"	"	—

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を提供。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	"	"	"	—
Pipeline Pilot Webport	"	"	Pipeline Pilotプロトコ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	"	"	"	—
Pipeline Pilot クライアント SDKs	"	"	Pipeline Pilotのプロトコルは、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	"	"	"	—
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	"	"	"	—
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のプロトコルにもつなぐことができる	"	"	"	—
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	"	"	"	—
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	"	"	"	—
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	"	"	"	—
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	"	"	"	—

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	"	"	"	—
Pipeline Pilot Polymer Properties (Synthia) Collection	"	"	ポリマー研究のためのプロパティ探索コレクション。柔軟にカスタム化できる新しいSynthiaという位置づけ	"	"	2009年5月	—
Pipeline Pilot Cheminformatics Collection	"	"	ケミスト向け高機能探索コレクション。List Management and Query Services機能、web I/F、SOA対応	"	"	"	—
Tibco Spotfire Server	"	米タイプコ	Spotfire解析データの集積・連携・配信機能を有するServer	"	"	"	—
TIBCO Spotfire Professional	"	"	ビジネスアナリストや専門家は、説得力のある特殊な分析を実行できるだけでなく、分析のワークフローと優良事例が詰め込まれたGuided Analytic アプリケーションを迅速に取得、作成、および共有できます。これらのデータを Spotfire Analytics Library に保存するだけで、TIBCO Spotfire Enterprise Player または TIBCO Spotfire Web Player を使用する他の TIBCO Spotfire Professional ユーザーや「情報の消費者」が、全社的にこれらのデータを瞬時に利用可能	"	"	2009年4月	—
TIBCO Spotfire Enterprise Player	"	"	ユーザーが洞察力や発見のヒントとなる既知の場所へアクセスすると同時に、同じユーザーが自由にデータを検索して、オンデマンドで質問事項を探ることが可能。オフラインでも作業できるため、出先でも簡単に分析を行うことが可能	"	"	"	—
Touchmol for Office std	"	米サリジェンス	Microsoft Officeアドインとして動作する化学構造式エディタで、Word、Excel、PowerPoint、OneNoteに化学構造式の描画、閲覧機能を付加する。IUPAC名、SMILES、薬品名等から構造に変換する名前構造変換機能や、外部データベースへの検索機能、化合物プロパティの計算機能等を有する。数十万化合物の取り扱いが可能なTouchMol.Tableという化合物テーブルソフトが付属	Windows	"	2013年5月	—
Touchmol for Office Pro	"	"	TouchMol for Officeの上位版。追加要素として社内化合物データベースとの連携機能等が追加されている。追加機能例：社内化合物IDを一括で構造に変換する機能、社内化合物データベースからのアッセイデータ取得、Excel VBAインターフェース用TouchMol API等	"	"	"	—
Chrawler	"	"	PC上のローカルディスクやネットワーク接続されているディスク、接続しているDB等に至るありとあらゆるメディアから、化学構造や反応式に関する情報を網羅的に検索するソリューション。テキスト化されていないイメージファイルとして保存されている化学構造式やIUPAC名にも対応している。論文のpdf中に描かれている化合物を認識(OSR: Optical Structure Recognition)し、検索対象とする事が可能	"	"	"	—
Chem4SharePoint	"	"	Chem4SharePointはMicrosoft SharePoint上にChrawlerと同様のパワフルな構造検索機能と構造エディタの機能を提供するアドイン。SharePoint上に記載した社内化合物IDに対し構造をポップアップ表示させる機能や、SharePoint上のディスカッションボード内で化学構造式を取り扱う事が可能となる	"	"	"	—
DevSuite	"	"	構造描画、表示、検索機能を用いたwebアプリケーションや.Netアプリケーション開発のためのツールキット	"	"	"	—
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

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Derwent World Patents Index と引用特許情報データベース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。化学・電気・電子・機械工学分野の特許および引用文献情報を迅速かつ正確に検索可能	WEB環境があれば利用可	個別見積	2003年6月	—
Web of Science Core Collection	"	"	高品質な約12,000(2014年5月現在)の学術雑誌、および専門書からの書誌情報を提供する学術文献引用データベース。文献の被引用回数・引用文献をたどり、研究の発展や経過の調査が可能。検索結果のメールによるアラート機能、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンク機能も有している。◆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1,000,000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。◆2008年には、地域ジャーナル1,200誌を追加し、地域の需要に即したよりきめ細かい検索が可能に。120,000余の会議情報・論文情報もWeb of Science上に統合された ◆EndNoteオンライン(文献管理ツール)、ResearcherID(研究者のセルフプロモーションサイト)を無料提供	"	"	1997年	—
InCites	"	"	引用文献に基づく研究評価ツール。3つのモジュールから成る。Research Performance Profiles™ (RPP) は、Web of Science(R)より、特定の大学・研究機関、テーマごとに所属著者の論文書誌データをまとめた、完全カスタマイズのデータ。Global Comparisons™ (GC) は、世界の主要大学・研究機関における学術論文の出版数や被引用数などの研究パフォーマンスをまとめることができる、統計データ。Institutional Profiles™ (IP) は、世界47カ国の主要研究所・大学を網羅し、教員数、学生数、学術的な評判、資金、論文・引用データなどを収録した統計データ。2013年にリリースされたInCites Benchmarking and Analysisでは、RPP(Address set)、GC、IPの分析が可能。出力条件の設定を自由に行えるほか、各種条件で相対的指標を表示させたり、多彩なグラフ・レポート機能で使い勝手を向上させている	"	"	2009年	—
Book Citation Index	"	"	Web of Science Core Collectionの追加データセットとして提供される、世界唯一の専門書情報および引用データ	"	"	2011年	—
Data Citation Index	"	"	統計データ、遺伝子情報など、学術論文が引用対象としているもののうち、論文以外の様々なグローバルデータリポジトリの検索を可能にするツール	"	"	2012年	—
Thomson Innovation	"	"	世界90カ国以上の特許情報を包括した技術情報データベースDWPIを含む世界中の特許情報、学術文献、ニュース情報をワンストップで提供し、研究開発に伴う検索・分析を支援します。一つの言語、一つの基準で標準化した発明内容や技術分類、独自に編集したタイトル・抄録により、効率的で漏れのない検索を可能とします。アジア、南米コンテンツも強化され、より幅の広い調査が可能	"	"	2008年	—
Thomson Data Analyzer	"	"	様々な角度からデータを分析し、知的財産戦略におけるチャンスとリスクを見極めるための解析ツール。複数のデータソースから必要な情報だけを抽出し、多彩なレポート形式で分析結果をわかりやすく表示できるため、市場動向・技術動向、知財ポートフォリオなどのデータ分析を大幅な効率化が可能	"	"	2005年	—

Thomson Reuters Integrity	"	"	医薬品開発についてのポータルサイト。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	"	"	—	—
Biomarkers Module	"	"	主要な治療分野で活発に研究され、使用されているバイオマーカーを収録したバイオマーカーに特化したデータベース	"	"	2008年	—
Newport Premium (for Generics)	"	"	ジェネリック医薬品企業、OTC メーカー、API メーカーの厳しい専門家向けに特別に作成されたこの製品は、低分子とそれに続く生物学的製剤の両方について、新たな製品開発と、競争前のライセンスリング機会を識別、評価する上で役立つ	"	"	2005年	—
Newport Premium (for Innovators)	"	"	創薬メーカー、バイオテクノロジー企業、ニッチブランド製薬企業の厳しい専門家向けに特別に開発されたこのシステムを活用すると、自社の販売に影響を及ぼす可能性があるジェネリック競合他社の動向を早期に察知し、自社の強みを生かすライセンス契約や、自社の生産力の制限を解放するアウトソーシング機会を確実に捉えることができる	"	"	2005年	—
GENESEQ	"	"	世界 41 特許発行機関が発行する特許情報から、核酸・アミノ酸に関する配列情報を包括的に収録したデータベース	"	"	—	—
CMR Factbook	"	"	製薬 R&D の膨大な統計情報を提供する、業界指標の権威ある情報源	"	"	—	—
Custom Information Service(CIS)	"	"	ご希望に合わせてカスタマイズした情報を製薬会社やバイオテクノロジー企業に提供するサービス。お客様から指定された検索語とプロフィールを使用して、弊社の専門スタッフが複数の情報源から専門記事を探し出し、集めた情報から索引と抄録を作成する	"	"	—	—
SAEGIS	"	"	世界200以上の国/地域/機関の商標情報、企業情報、17か国の意匠情報と、70か国以上の医薬品利用状況 (Pharma In-Use) を搭載したデータベース。商標、医薬品名とドメイン名、企業名を同時に検索可能。また、Reverse WHOISで所有者名からドメイン名取得状況を逆引き確認できる	"	検索数に応じた従量課金	2000年	—
Thomson Reuters Cortellis Competitive Intelligence	"	"	医薬品研究開発における競争環境全体を把握するために必要な全てのデータを収録した最新のデータベースサービス	"	個別見積	2012年	—
Thomson Reuters Cortellis Regulatory Intelligence	"	"	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世界各国の規制要件について、常に最新情報を把握することが可能	"	"	2012年	—
Thomson Reuters Cortellis Clinical Trials Intelligence	"	"	世界中の医薬品・医療デバイス・バイオマーカーの臨床試験データを収録し、希少疾患を含む全領域を網羅した臨床試験情報ソリューション	"	"	2013年	—
MetaCore	"	"	オミックスデータの体系的な把握およびその分子基盤の理解をサポートするパスウェイ解析ツール。信頼性の高い情報に基づいて構築されており、お客様の様々なオミックスデータから、容易な操作で多面的にパスウェイ解析をすることが可能	"	"	2010年	—
MetaDrug	"	"	化合物および代謝物に関する幅広い情報や解析を提供し、得られる化合物および代謝物の化学的知見から、生物学的検討へと導く解析ツール	"	"	2010年	—
Thomson Reuters RECAP	"	"	1973年以降のディール情報・コントラクト・ロイヤリティレート等のアライアンス一つ一つの詳細情報のほか、アライアンスの実績がある企業に関する企業情報、そして欧米のバイオテック企業のバイブライニング情報やベンチマーク情報を分析機能とともに提供	"	"	2013年	—
Incidence and Prevalence Database (IPD)	"	"	4,500以上の 疾病と術式について、罹患率、有病率、死亡率、患者の傾向、合併症、診断率、コスト、リスクファクター等を提供する網羅的な疫学データベース	"	"	2013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

EasyDiagram	TSテクノロジー	TSテクノロジー	計算結果・反応解析データのまとめ・ダイアグラム作成が「簡単に」「素早く」できる。論文用のダイアグラム作成が楽にできる。社内報告書を素早く作成できる。単位変換機能を備え、単位変換を間違いないくスムーズにできる。Gaussian等の計算結果から、エネルギー値を自動抽出する機能も備えている。詳しくは⇒ <a href="http://www.tstcl.jp/software/easydiagram/">http://www.tstcl.jp/software/easydiagram/</a>	Microsoft Office 2003以上 (Windows版、MacOS版)	アカデミック: 24,800円 コーポレート: 49,800円、アカデミック(サイト): 99,200円 コーポレート(サイト): 199,200円 (税込)	2012年	学術機関、化学会社等
スマートジョブスケジューラ Orche[mi]stra: オーケストラ	"	TSテクノロジー、山口大学・堀研究室	科学技術計算ソフト(Gaussian/GAMESS/MOPAC)に対応したクラウド型ジョブ管理スケジューラ。計算サイズに応じたスケジューリング機能、ユーザフレンドリなGUI、計算サーバ管理機能を搭載。計算サーバへのインストールは不要で、システム管理が容易。計算資源がフル活用できる	サーバ: Linux、クライアント: Windows, Linux, MacOSX	標準構成: 120万円(税込) 1ジョブノード:5万円～	2011年	"
Orche[mi]stra Solo	"	"	遠隔の計算機上でGaussianジョブを実行する簡単ソフトウェア	"	無償	2009年	—
PowerMC 3.0	"	"	量子化学計算を用いたモンテカルロシミュレーションソフト。QM/MC法、QM/MC/FEP法を実装。化学反応の溶媒中における自由エネルギー挙動が計算できる	Linux	サイトライセンスのみ。コーポレート: 790万円(税込)、290万円(税込)	2011年	"
理論物性計算クイックオーダーサービス	"	TSテクノロジー	化学物質の物性や反応性などの様々な理論値を、物質1個単位から素早く分析委託できるサービス。機器分析などのデータと組み合わせ、ハイスループットスクリーニング等にご利用いただける。ご注文は⇒ <a href="http://tstcl.jp/quick/">http://tstcl.jp/quick/</a>	—	3,000円/1物質～	2012年	"
研究受託システム	"	"	計算化学に関わる各種受託研究を承ります。40以上の受託実績。反応解析、物性推算、触媒開発、分子設計等、テーマ単位、FTE等で柔軟に対応	—	お問い合わせ下さい	2009年	50以上、化学・製薬・国内研究機関等(2012年3月)
Log2Crd	"	"	Gaussianの出カアーカイブ(log)を、入力ファイル形式に変換するソフトウェア。Webから簡単操作。インストール不要	ブラウザ上で実行可能。 WindowsXP/Vista, UNIX(Linux, Solaris), J2SDK5.0以上必要	無償	2010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	WindowsXP/Vista, UNIX(Linux, Solaris), J2SDK5.0以上必要	無償	—	—
TS Search Professional	"	"	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	—	—
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 Natural Products on DVD-ROM	ユサコ	CRC Press	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	Windows	詳細問い合わせ	—	—
The Combined Chemical Dictionary on DVD-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ヵ月毎に更新	"	"	—	—
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	"	—	—
CHMISTRYnetBASE	"	"	Handbook of Chemistry and Physicsを始め、同社の出版する化学系辞書類、書籍 900タイトル以上を提供する電子書籍サービス。新たなタイトルも続々追加される	"	"	—	—

ChemicalENGINEERINGnetBASE	"	"	CHMISTRYnetBASEの内、化学プロセス工学、取扱い安全性などに関するタイトルを集めたサブセット。バイオプロセスに関するタイトルも収録	"	"	—	—
POLYMERSnetBASE	"	"	ポリマー辞典“Polymers:A Property Database”を始めポリマー関連書籍を集めたCHMISTRYnetBASEのサブセット	"	"	—	—
CLEANTECnetBASE	"	"	エコジカルで対費用効果の高い、クリーンで新規性の高い技術、ビジネスに関するタイトルを集めた電子書籍。230 タイトル以上収録	"	"	—	—
EnvironmentalENGINEERINGnetBASE	"	"	環境工学に関連する書籍を集めた電子書籍。160タイトル以上収録	"	"	—	—
Index Chemicus Database for ISIS	"	米Thomson Reuters	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	"	"	—	—
Current Contents Connect / 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。毎日更新	Windows、Mac	"	—	—
Web of Science Core Collection (旧 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。引用文献情報も搭載しているため、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。	"	"	—	—
Thomson Reuters 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	"	—	—
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 X7	"	米Thomson Reuters	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。またX7からはWindows版とMac版をバンドルして提供開始。	Windows Vista, Windows7, 8.X, Mac OS X 10.6.8/10.7x / 10.8x	53,784円(新規、税込)、2万790円(アップグレード、税込)、複数購入割引あり	—	—
<b>商品名</b>	<b>国内販売会社</b>	<b>開発会社</b>	<b>機能・特徴</b>	<b>動作環境</b>	<b>ソフト価格</b>	<b>出荷年月</b>	<b>販売実績</b>
Spartan'14 for Windows/Macintosh Parallel Suite	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	マルチコア対応の並列処理が可能。そのほかの機能はStandardと同等、他にSMD、SSPDそれぞれの完全版をバンドル、iSpartanのクライアントを同時に2ユーザ接続可能	Windows版: Vista/7/8/8.1(32/64bit)、 Macintosh版: OS X 10.7/10.8/10.9/10.10、 IntelMac限定	パッケージ定価: 68万4千円、大学: 22万8千円から。詳細お問い合わせ	2013年10月	—

Spartan'14 for Windows/Macintosh Standard	"	"	Spartan'14 for Windows/Macintosh 並列処理非対応版。64bitアーキテクチャに対応、タッチパネルに対応した(Windows版のみ)フルカスタマイズ可能なGUIを装備。2Dスケッチによる分子描画機能を装備。MM/Hartree-Fock/Semi-Empirical(PM6導入)/DFT/MPIによる平衡/遷移構造最適化、配座解析、エネルギープロファイル計算。分子軌道/電子密度/スピン密度/静電ポテンシャル/局所イオン化ポテンシャル(マップ)の作成と表示。溶媒中における構造最適化(HF/DFT)、励起状態計算(RI-CIS/TDDFT)、類似性解析。IR、ラマン、NMR、UV/Visスペクトル計算。1D( <sup>1</sup> H/ <sup>13</sup> C/DEPT)、2D(COSY/NOESY/HSQC/HMBC)NMRの描画。NMRは <sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, <sup>19</sup> Fについて経験的補正を加え精度向上	"	パッケージ定価: 52万2千円、大学: 17万4千円から。詳細お問い合わせ	2013年10月	-
Spartan'10 for Linux Parallel Edition	"	"	Spartan'10 for Windows/Macintosh Parallel Edition と同じ機能。クラスター機などにも対応	Red Hat EI 6.5, CentOS 6.5, Fedora 20, SUSE Linux Enterprise 11 SP3, openSUSE 13.1, Ubuntu 12.04 LTS	要お問い合わせ	2011年2月	-
Spartan Spectra and Properties Database (SSPD)	"	"	分子量500amuまでの低分子約280,000件について、IR、NMRスペクトルデータ(計算)を有し、QSARで使用する各種プロパティを内包。Spartanにはサンプルセット(約5,000件)が収められていて、完全版は別にライセンスが必要	-	SMDとセットで定価: 18万円、大学: 6万円 Parallel Suiteには標準装備	2011年1月	-
Spartan Molecular Database (SMD)	"	"	約15万件の分子について、最大10通りの手法で予め構造最適化した低分子データベース。内、3万分子についてIRスペクトルデータを有し、分光器から得られたスペクトルを検索できる。約30万件の分子については、MMFFにより予め配座ライブラリを発生済みで、類似性解析に使用可能。Spartanにはサンプルセット(約5,000件)が収められていて、完全版は別にライセンスが必要	-	SSPDとセットで定価: 18万円、大学: 6万円 Parallel Suiteには標準装備	2011年1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* B3LYP 6-31G* によって平衡/遷移構造最適化、反応座標解析、振動解析が可能。電子密度/分子軌道/IR振動などを可視化して、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。V6でSpartan'14と同様のスケッチによる分子描画機能が追加	Windows版: Windows Vista/7/8、Macintosh版: MacOS X 10.7/10.8/10.9/10.10、IntelMac限定	大学/短大: 7万2千円、高専/高校: 3万円、学生個人: 7千8百円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスカウントあり	2003年10月V1、2009年7月V4、2012年1月V5、2014年2月V6	-
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。マニュアルの他に「分子モデリング演習 初歩の初歩(挿絵を多用した操作説明書)」が付いている	"	1回インストール権(アクセスコード)。教育機関にのみ販売。定価: 6千円	2006年10月	-
Odyssey Instructor's Edition	"	"	MDシミュレーションによる一般化学の発見型学習システム。作業画面と問題文(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/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。また、オリジナルケース(分子)の構築も可能。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する。講師用であるInstructor's Edition には設問の解答や解説などが付いている(英語のみ)	Windows版: Windows Vista/7/8、Macintosh版: MacOS X 10.7/10.8/10.9/10.10、IntelMac限定	大学/短大: 7万2千円、高専/高校: 3万円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスカウントあり	2004年7月2014年12月V5リリース	-
Odyssey Student Edition	"	"	Odyssey Instructor's Edition から、設問の解答や解説を省略した学生バージョン	"	大学~高等学校までネットワークライセンスで販売 詳細お問い合わせ、学生個人: 7千800円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスカウントあり	2004年7月2014年12月V5リリース	-

iSpartan	Apple Store	"	iPad, iPhoneで分子構造をスケッチし3次元モデルに変換、配座解析を行うほか、iSpartan Serverを使用してデータベース検索やその結果の表示を行うクライアント。付属のデータベース(SSPDのサブセット)には5700件の分子構造、IR、NMRスペクトルチャートを内蔵、表示ができる	iPad, iPhone, iPod Touch	2,000円 詳しくはApple Storeにて	2012年7月	—
Odyssey Atomic Orbitals	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:原子軌道編	iPad	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年4月	—
Odyssey Electron Sharing	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:電子共有編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年5月	—
Odyssey VSEPR Theory	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:VSEPR編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年5月	—
Odyssey Multipul Bonds and Resonancve	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:多重結合と共鳴編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年5月	—
Odyssey Substances	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:身近な物質編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年7月	—
Odyssey Elements	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:周期表と元素編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年7月	—
Odyssey Lattices	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:結晶格子編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年7月	—
Odyssey Functional Groups	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:主要な官能基と代表的な化合物編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年7月	—
Odyssey Property	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:化合物のプロパティ編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年7月	—
Odyssey Ionic Solids	"	"	iPadで使用する教材コンテンツApp:イオン結晶編	"	400円 詳しくはApple Storeにて	2014年7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】>							
SYBYL-X Suite	ワールドフュージョン	米Certara	SYBYL-Xでのほぼ全てのモジュールが利用可能なライセンスで、含まれないライセンスもアラカルトとして追加可能	Linux(RHEL5, 6:64 Bit)、Windows7(64bit)、Mac(OS10.6)	お問い合わせください	—	—
SYBYL/Base	"	"	グラフィックス、分子動力学、エネルギー計算、スプレッドシート等を含むSYBYL-Xの基本モジュール	Linux(RHEL5, 6:64 Bit)、Windows7(64bit)、Mac(OS10.6)	"	—	—
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	"	"	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	"	"	ダイバーシティー評価・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ー評価、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	"	"	—	—

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するモジュール	"	"	-	-
Tuplets	"	"	活性化化合物における複数のファーマコフォア間の距離をFingerprint化し、活性のHypothesisを作成します。このHypothesisを基に、データベース検索から活性候補構造を選択し、コンビナトリアルライブラリーの適否を判断するモジュール	"	"	-	-
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	"	"	-	-
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	"	"	-	-
VolSurf Plus	"	"	Vorsurfの機能拡張版。より精度の高いモデル構築をサポートするための様々な機能が追加。構造解析用、スクリーニング用、モデル作成用と機能毎に適したGUIを用意	"	"	2009年12月	-
Predict FX	"	"	Target/Activity パネルから構造を検索条件として活性予測を行うTool	"	"	2012年1月	-
Surflex-QMOD	"	"	構造活性相関の新しいアプローチ。リガンド構造から、結合するタンパク質のActive Siteの特徴を予測し、活性予測モデルを構築する。結晶構造(リガンドおよびタンパク質)を入力して、Active Siteの特徴抽出に利用させることも可能	Linux(RHEL5, 6: 64 Bit), Windows	"	2014年1月	-
<デスクトップ製品>							
Benchmark 3D Explorer	"	米Certara	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。また、PowerPoint上で立体構造の操作が可能なので、研究者間で構造情報を共有する事が更に簡潔	Windows	"	-	-
Muse	"	"	既存化合物を基に新規化合物/Scaffoldを設計支援するためのde novoデザインツール。搭載された形状・Pharmacophoreに基づくスコア関数だけでなく、外部スコア関数と連携した解析も可能	Windows / Linux	"	2009年8月	-
<システムバイオロジー・ゲノミクス製品>							

LSKB Bio-Knowledge (LSKB : Life Science Knowledge Bank)	ワールドフュージョン	ワールドフュージョン	【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 or Windows7 / Oracle または、Webアクセスによる利用 (お問い合わせください)	お問い合わせください	-	-
LSKB Chem-Knowledge	''	''	【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	同上 : クライアントに Benchware 3D Explorerを利用可能(詳細はお問い合わせください)	''	-	-
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	''	-	-
NEXUS copy number	''	米バイオディスプレイ	【CNV解析】CGHおよびSNPアレイのデータから染色体上のコピー数異常領域を独自のアルゴリズムに基づき迅速に検出するソフトウェア。アレイデータのゲノム上へのマッピングと可視化、統計処理によるコピー数変化領域の検出と領域に存在する遺伝子の機能解析までを1つのソフトで実行できる。発現マイクロアレイの結果を取り込むことで遺伝子の発現変動情報とコピー数変化領域を統合した解析が可能	Windows / Mac	''	-	-
CLC Genomics Workbench	''	CLCBio(デンマーク)	デスクトップ版ソフトウェア。様々なシーケンサーからのデータのアセンブル、マッピングに対応。de novo、reference mapping、miRNA解析、変異同定、RNA-seq、ChIP-seq解析などに対応し、現バージョンではワークフローツールが付属し、煩雑であった解析処理の工程をスムーズに行えるようになっている。また、多種多様なプラグイン(一部有料)は解析をバックアップしている	Windows/Mac/Linux	''	-	-
CLC Cancer Research workbench	''	''	癌研究に特化した次世代シーケンスデータ解析用デスクトップ版ソフトウェア。当製品は、次世代シーケンスデータのQCチェック、マッピング、変異検出、アミノ酸置換の有無などを解析可能とし、デフォルトでは癌研究の一般的な解析の流れに沿って利用いただける半自動の解析ワークフローが組み込まれている。また、変異解析のために、dbSNP、COSMIC、HapMap、1000ゲノムなどのデータの取り込みと比較解析が可能となっている	''	''	-	-
CLC Genomics Server	''	''	大量のデータ処理、複数のプロジェクト、データの共有化を行う場合に最適化されているサーバー型ソフトウェア。Genomics Workbenchから操作可能。さらに、Developerキットにより作成した個別インターフェースやコマンドスクリプトなどの組み込みも可能となっている	''	''	-	-
CLC Assembly Cell	''	''	De novo アセンブルやマッピングおよびDIPディテクションをコマンドで処理したい方に最適のコマンドラインパッケージ。ルーチンで行うデータ処理や、様々なパラメータで解析および分析を行いたい場合に最適	''	''	-	-
CLC MLST Module	''	''	バクテリア、酵母などについてDNA配列に基づいた細菌の株タイピング。MLST(Multi Locus Sequencing Typing)解析を行うプラグインモジュールである。Housekeeping gene等の遺伝子セットが既に用意されており、アセンブルや配列のトリミングなどの従来手作業だった各ステップが自動化されている。簡便かつ短時間で細菌の株タイピングが可能となる	''	''	-	-

CLC Microbial Genome Finishing Module	"	"	微生物ゲノムまたはそれと同程度のサイズの全ゲノム決定のための支援ツールとして設計されたプラグインモジュール。このモジュールは、コンテイングの整理やアセンブリに問題がある部分の検証を実施することができ、ゲノムのFinishing工程を自動的に進めることが可能	"	"	-	-
Blast2GO	"	"	塩基配列からBLASTIによってGOアノテーションを行うことが可能なツールとして近年注目されている "Blast2GO" が、CLC Genomics Workbenchのプラグインモジュールとしてリリース。Genomics WorkbenchのGUIを介してローカルPC上でBlast2GOが実行可能になり大変解析しやすくなっている	"	"	-	-
Omixon Target Standard edition	"	米Omixon	次世代シーケンスデータを利用した分子診断用ソフトウェア。HLAタイピングに特化した解析と、ターゲット遺伝子の変異解析のためのソフト	Windows/Mac/Linux (64 bit)	"	-	-
Omixon Target HLA edition	"	"	HLA タイピング業務用のエディションで、タイピング用の機能のみ付属	Windows/Mac/Linux (64 bit)	"	-	-
Omixon Target Pro	"	"	データ解析用外部プログラムとの連携を設定可能	Linux (64 bit)	"	-	-
Metagenome@KIN	"	ワールドフュージョン	次世代シーケンスデータを利用した16S rRNAゲノム解析ツール。リード配列のBLAST実行後データを、弊社のソフトにドラッグ & ドロップするだけで菌種のグルーピングおよび階層分類を実行できます。さらに、分類された結果を各種統計表示機能で比較することが可能	Windows	"	-	-
Clarity LIMS	"	米GenoLogics社	ゲノミクス分野における次世代シーケンサやマイクロアレイ機器のプロトコルやデータを管理するLIMSシステム。サンプルトラッキングからシーケンスデータ管理の効率化を実現	Linux (64 bit)	"	-	-
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
Winmostar™ V5 無償版	クロスアビリティ	クロスアビリティ	分子のモデリングから分子軌道計算、計算結果の表示までを実現するGUI。原子数制限したMOPACの入出力インターフェースを持つ。MOPAC, Balloon(簡易配座探索), CNDO/Sを内蔵している。商用版の機能制限版。 機能比較表: <a href="http://winmostar.com/">http://winmostar.com/</a>	WindowsXP/Vista/7/8 VMWare Fusion上にてOSXの動作確認済	無償	2014年10月	アカデミックを中心に延べ5万以上のダウンロード
Winmostar™ V5 商用版	"	"	分子のモデリングから分子軌道計算、計算結果の表示までを実現するGUI。GAUSSIAN, MOPAC, GAMESS/Firefly, NWChem, Gromacs, LAMMPS, Amberへの出力インターフェースを持つ。MOPAC6, Balloon(簡易配座探索), CNDO/Sを内蔵している。構造最適化、原子電荷、双極子モーメント、エネルギー順位、分子軌道、分子体積・表面積などの計算や紫外・可視吸収、ラマン/赤外吸収、NMRなどのスペクトルシミュレーションも可能。 機能比較表: <a href="http://winmostar.com/">http://winmostar.com/</a>	WindowsXP/Vista/7/8 VMWare Fusion上にてOSXの動作確認済	シングルライセンス(ベーシック、MDオプションそれぞれ): 民間企業・官公庁(国研) 90,000円(永久使用権+1年保守)、サイトライセンス(年間使用権+年間保守) 400,000円 ※教育機関・個人は半額、学生版は1/10 詳細は、以下URLをご参照ください。 <a href="http://winmostar.com/jp/purchase_jp.html">http://winmostar.com/jp/purchase_jp.html</a>	2008年3月	シングルライセンスは自動車・電機・化学・素材・医薬品メーカーなど250社以上、サイトライセンスは14社
XA-CUDA-QM	"	"	NVIDIA GPUを用いて汎用量子化学計算ソフトウェア(GAMESSなど)を加速するソルバ	"	以下URLのカタログご参照ください。 <a href="http://x-ability.jp/xasci.html">http://x-ability.jp/xasci.html</a>	2010年10月	国内外の複数の製薬メーカー