

＜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、2021年6月現在)

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE Ver4.1	アドバンスソフト	アドバンスソフト	密度汎関数理論と擬ポテンシャルを用いた平面波展開による第一原理計算ソフトウェア。量子力学に基づき電子状態を求めるので、精度の高い計算結果を得ることが出来る。既存材料の分析だけでなく、新規材料の設計にも活用できる。新バージョンでは、材料データベース (Materials Project) と連携したMI (Materials Informatics) 機能を搭載	Windows版: 64bit, 8.1, 10 Linux版: Red Hat Enterprise Linux6以上 (AMD64, Intel64のみ) Mac版: GUIのみ (10.12以降)	お問合せ下さい	2021年3月	—
ナノ材料解析統合GUI Advance/NanoLabo Ver2.0	"	"	Advance/PHASE, Quantum ESPRESSO, LAMMPSなどの各種計算ソルバーをグラフィカルに操作できる統合GUI。Materials Project等の代表的な材料データベースを検索し、モデリングおよび計算条件設定が極めて容易に行える。ソルバーで計算された結果は各種のグラフィック表示が可能	Windows10 (64bit) CentOS7 (64bit) macOS 10.13 クラウド	"	2020年11月	"
ニューラルネットワーク分子力学システム Advance/NeuraMD Ver1.3	"	"	Neural Network Potential に基づいた分子力学計算ソフトウェア。Quantum ESPRESSO にて出力された第一原理計算の結果を教師データとして、分子力学を作成する。この力場を利用して、LAMMPS にて分子力学計算が実行できる	Windows10 (64 bit) CentOS 7 (64 bit)	"	2021年2月	"
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
LigandScout	アフィニティサイエンス	オーストリア インテリガンド (InteLigand)	ファーマコフォアベースのin-silicoスクリーニング用プラットフォーム。独自アライメント機能による高い予測精度、3Dファーマコフォアのモデリング・評価機能(ROC)、高速スクリーニング、ドッキング機能、アボタンパク対応、KNIME用エクステンションなど多くの機能を搭載	Windows, MacOS, Linux	お問合せください	—	—
PharmacophoreDB	"	"	化学的な特徴に基づいた高品質の3Dファーマコフォアを多数収録。各エントリのメタデータは、医学的適応、薬効分類、標的タンパク質、相互作用部位、生物活性リガンド、文献情報をカバーし、効果的なリガンドプロファイルが可能	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
YASARA	"	オーストリア ヤサラ・バイオサイエンス (YASARA Biosciences)	Windows, Linux, Mac OS X, Android上で利用可能な分子の可視化・モデリング・シミュレーションのためのソフトウェア。タンパク質を対象としたMD計算、ドッキング、ホモロジーモデリングなどが可能。PVL言語による多様なマクロ利用可	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
alvaDesc	"	伊アルバサイエンス (Alvascience)	最大5,666種の分子記述子計算とフラグメント計算 (MACCS166, ECFP, PFP) が可能なプログラム。GUI/CUI対応。構造活性相関、構造物性相関、類似性解析、スクリーニング、機械学習など多くの分野で利用可能	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
alvaBuilder	"	伊アルバサイエンス (Alvascience)	de novo分子設計用ソフトウェアツール。学習用化合物ライブラリを読み込み、指定した分子特性 (MW, LogP, Sascore, QEDなど) を持つ新規化合物を簡便に生成可能	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
alvaModel	"	伊アルバサイエンス (Alvascience)	定量的構造活動/特性関係 (QSAR / QSPR) モデルを作成するためのソフトウェアツール。alvaDescで計算された記述子とフィンガープリントと外部変数を読み込み、OLS・kNNIによる回帰モデルを構築可能	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
alvaRunner	"	伊アルバサイエンス (Alvascience)	一連の分子に定量的構造活性/特性関係 (QSAR / QSPR) 回帰モデルを適用するソフトウェアツール。alvaRunner単独でインポートした分子セットをalvaModelで作成された回帰モデルに適用することが可能。	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
alvaMolecule	"	伊アルバサイエンス (Alvascience)	分子データセットの可視化、キュレート及び標準化のためのソフトウェア。エラー構造の特定や構造フィルタリング、分子構造のキュレーションが可能	Windows, MacOS, Linux	"	—	—
CzeekS	"	インテージヘルスケア (日本)	相互作用マシニング法 (OGBVS) 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	"	—	—
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	"	—	—
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, MacOS, Linux	"	—	—
Spartan	"	米ウエイブファンクションインク (Wavefunction, Inc.)	全世界の数百の企業・政府系研究機関、また数千を超える大学などアカデミックサイトで使用されている分子モデリングソフトウェア。洗練されたUIと強力な計算エンジンを搭載。アフィニティサイエンスでは、Linux版ソフトウェアの販売とサポート及び各種ソリューションを提供	Windows, MacOS, Linux, iOS	"	—	—
EMPIRE	"	独セボスインシリコ (CEPOS INSILICO GmbH)	最新の半経験的分子軌道法計算プログラム。分子系の規模に応じて数千コアまでの高効率の並列計算が可能	Windows, Linux	"	—	—
ParaSurf	"	独セボスインシリコ (CEPOS INSILICO GmbH)	分子表面を構築し局所特性と記述子を計算可能な基本モジュール	Windows, Linux	"	—	—
Advance/NanoLabo	"	アドバンスソフト株式会社	第一原理計算によるナノ材料解析ソフトウェアに対応した統合GUIプログラムパッケージ。LAMMPS及びQuantum ESPRESSOの実行ファイルがビルトインされており、古典MDや第一原理DFT計算をすぐに実行可能	Windows, MacOS, Linux	"	2019年10月	—
CrsytalMaker	"	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, MacOS	"	—	—
PeakTrace	"	"	サンガー法によるDNAシーケンス・トレースの読み取り品質と配列長を改善するために新しく開発されたベースコーラー	Windows, Mac OS	"	—	—
QualTrace	"	豪ニュークレイクス (Nucleic Pty Ltd)	精密なデータ管理とリアルタイムの品質コントロールを備えた遺伝子解析ソフトウェア	Windows	"	—	—

ChromasPro	"	濃テクネリウム (Technelysium Pty Ltd)	操作性に優れたDNAシーケンスのアライメント・アセンブリ用ソフトウェア	Windows	"	-	-
ACEMD Platform	"	英アクセララ (Acellera ltd)	分子動力学シミュレーションのために設計された、完全で高速なソリューションパッケージ。MDエンジンACEMD、力場パラメータ化ツールParameterize、各種支援用PythonパッケージHTMDから構成	Linux	"	-	-
PlayMolecule	"	"	ドラッグデザインに特化した創薬のための分子動力学計算と機械学習アプリケーションを提供するプラットフォーム	Linux	"	-	-
AQCC	"	アフィニティサイエンス	量子化学計算などの計算科学手法を用いた課題解決のための実践的コンサルティングサービス	-	-	-	-
ACISS	"	"	インシリコ創薬支援(受託研究)サービス。創薬やその他関連分野における計算科学支援を目的として、アフィニティサイエンスとインテジヘルスケア、理論創薬研究所が共同で提供する受託研究・解析サービス	-	-	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
原子スケール材料シミュレーター matelier	アズムス	アズムス (PHASEシステム研究会など)	バンド構造図、状態密度、誘電率、スピン分極、電荷密度分布、仕事関数、内殻電子励起を伴う現象などを検討できる。対象は、半導体、誘電体、磁性体、有機物、ナノカーボン、遷移金属カルコゲナド、セラミックス、アモルファス、金属(合金)、鉱物など。密度汎関数法による第一原理バンド計算ソフトウェアPHASE-0を中心に構成。実験結果との比較・解釈、新規材料の物性値予測に。サポートサービスに力を入れており、初めて材料シミュレーションに取り組む方も安心してご利用。Webで事例を紹介。体験セミナーを随時、紹介セミナーをオンデマンドで開催	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	-
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
<品質管理および規制管理>							
BIOVIA QUMAS	ダッソー・システムズ、その他代理店2社	Dassault Systemes	文書管理やプロセス管理にまつわる一般的な機能を、統合されたユーザーインターフェースで提供。適切なタイミングでの研修を可能にする教育管理機能や、統合されたレポート作成・ダッシュボード機能を提供することで、規制遵守を促し、業績向上を図る	Windows	お問い合わせ下さい	-	-
<プロセス製造オペレーション>							
BIOVIA Discoverant	"	"	独自のデータモデリング技術と特定目的のための研究的な解析を行う強力なツールを統合した、バリデートされた製造プロセスインテリジェンスアプリケーション。このソフトウェアでは、データへのリアルタイムかつオンデマンドのアクセスと、エンドユーザー自身による製造データやプロセス開発データの分析およびレポート作成が可能	Windows	お問い合わせ下さい	-	-
<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 Complete	"	"	Discovery Studioの全ての機能が同時1名、ジョブ数無制限に利用できるパッケージライセンス	Windows	お問い合わせ下さい	-	-
<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、perlをベースにしたスクリプトによる自動処理	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, PGFF, 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	"	"	DMol ³ の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 PhaseField	"	"	Pipeline Pilotのプロトコルを使ってPhase Field法によるミクロレベルでの凝固および粒成長予測が可能	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio FlexTS	"	"	DMol ³ またはDFTB+を使って化学反応の遷移状態および反応経路を計算するための追加機能。複数の遷移状態を持つ反応や、反応障壁がないもしくは非常に低い反応などに適用可能	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio QMERA	"	"	DMol ³ /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)相関モデルの作成、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相関手法によりレポートユニットの構造情報からボ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	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Cantera	"	"	活性化エネルギーなどに基づき、平衡状態、連続槽型反応器、1次元火炎モデルなどのシミュレーションが可能	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Kinetix	"	"	動的モンテカルロ法に基づいて触媒表面上での化学反応シミュレーションを行うことで、触媒表面での分子の反応メカニズムについての知見を得ることが可能	"	"	-	-
<予測ソリューションツール>							
BIOVIA Cosmothem	"	"	量子化学と熱力学を独自の方法で組み合わせた、液体の特性予測計算向けツール。ほぼすべての純粋な液体や混合液のほとんどの分子について、温度を変えて化学ポテンシャルの計算が可能				
BIOVIA Cosmobase	"	"	COSMO-RS 計算に必要な計算済みの化合物情報の高品質なコレクション。COSMOthemX の設定に追加するだけで、グラフィカル・ユーザー・インターフェースで研究用の化合物を使用可能				
BIOVIA Cosmoconf	"	"	配座異性体生成用の柔軟なツールボックス。独自の計算アプローチに基づき、膨大な立体配座空間を削減して、関連性のある小さな立体配座をセット。他の立体配座ジェネレーターとは異なり、気相および極性/非極性溶媒中での関連する立体配座を見つけるように設計				
BIOVIA Cosmoplex	"	"	不均質系の領域まで COSMO-RS を拡張した独自の手法により、物理化学特性にアクセス可能。量子力学的 DFT 計算から液体の熱力学的挙動を導き出す COSMO-RS 理論がベース。				
BIOVIA Cosmoquick	"	"	COSMO-RS ベースの強力なツールボックス。液相ベースの多くの特性、正確な溶解度予測、共結晶と溶媒和化合物の高速スクリーニング、多様な分子記述子、定量的構造物性相関(QSPR)、機械学習モデルなどを提供				
<処方作成、管理、製品ラベル作成、製品化向けツール>							
BIOVIA Enginity	"	"	複雑な性質を備えた実際の調合品(シャンプー、口紅、ゴム加工品、高性能コーティングなどの)作成、管理、製品ラベル作成、発売に携わる処方担当者を支援。リアルタイムの規制コンプライアンスもサポートし、現在および過去の製品開発データを提供して効率を大幅に向上				
<データサイエンス向けツール>							
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 Pipeline Pilot Server	"	"	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CentOS	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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(EGFP/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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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	"	"	-	-

BIOVIA Pipeline Pilot 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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot Next Gen Sequencing Collection (NGS)	"	"	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 CentOS のみ	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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)、実力学計算 (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 CentOS	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot Analytics and Machine Learning 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に可能。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)、クラスターリングを提供。統計ソフトRに特化したコンポーネントも多数搭載	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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・クラスターリングが可能。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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot Lab Analytics Collection	"	"	マイクロプレートリーダー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	"	"	-	-
BIOVIA Pipeline Pilot 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>							
BIOVIA Insight	ダッソー・システムズ、その他代理店2社	"	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	お問い合わせ下さい	-	-
BIOVIA 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、デスクトップの計算、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	"	-	-
BIOVIA Registration	"	"	BIOVIA Foundation上に構築された化合物・バイオリ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>							
BIOVIA ScienceCloud	ダッソー・システムズ、その他代理店4社	"	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。またGMPにも対応した文書管理、品質イベント管理、教育管理システムを提供	IE11以降、Firefox、Chrome	お問い合わせ下さい	-	-
BIOVIA Pipette Sketcher API	ダッソー・システムズ、その他代理店2社	"	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	"	"	-	-
<データベースコンテンツ製品>							
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・バイオリア株式会社と 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 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、RTECSにNLMのGENETOXやCCRISが加わり、約17万化合物。創業初期での毒性、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ー情報を収録。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のサプライヤー	"	"	-	-
BIOVIA Screening Compounds Directory (SCD)	"	"	スクリーニング用化合物サプライヤーのカatalog情報を収録。2,100万化合物	"	"	-	-
<Unified Lab Management(統合型ラボ情報管理ソリューション)>							
BIOVIA Workbook	"	"	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	ダッソー・システムズ、その他代理店4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、改訂防止もできるため、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, ブラウザー: Internet Explorer11以上, Safari, Chrome, and Firefox	"	-	-
BIOVIA Compose	ダッソー・システムズ	"	SOP、手順書を電子的に作成・レビュー・管理するWebアプリケーション。レシピや手順書を電子的に管理することで現場での作業手順を常に最新のものにでき、レシピそのものの標準化も図れる。Part 11、GxPの規制に対応した電子記録・電子署名の機能を有する	"	"	-	-
BIOVIA Capture	"	"	BIOVIA Composeで作成した電子的なSOPをもとに、実施記録を入力するためのWebアプリケーション。タブレット端末に対応したデザインになっており、現場のペーパーレス化に寄与し、手順書違反を防止。実施記録のレビューをReview by Exceptionにより効率化できるレビューツールを含む	"	"	-	-
BIOVIA Instrument	"	"	分析機器・各種装置から、BIOVIA Workbook、BIOVIA Captureへのデータ取り込みを行うモジュール。シリアル、出力ファイル、データベース等の各種の機器からデータを半自動的に取得できる。機器や装置のメンテナンス記録、使用ログの機能も持つ	"	"	-	-
BIOVIA Lab Service	"	"	ラボで扱われる各種のサンプルを登録でき、サンプルに対する小分け、移動、取得、廃棄などの記録を残すことができるWebアプリケーション。BIOVIA Task Planner等と連携する	"	"	-	-
BIOVIA Inventory	"	"	試薬、サンプルの入手、保管、移動、廃棄などの記録、残量管理、ハザードや法規制情報の表示ができる試薬管理Webアプリケーション	"	"	-	-
BIOVIA Task Planner	"	"	ラボの試験依頼、タスク管理、進捗管理を扱うWebアプリケーション。定型化した一連のタスクを登録でき、依頼に応じて個別のタスクを担当者にアサイン、進捗状態を把握できる	"	"	-	-
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
MolDesk Screening	バイオモデリングクリサチ	情報数理バイオ	myPrestoを使った創薬計算支援用GUIソフトウェア。MolDesk Basicの機能に加え、薬物探索スクリーニング計算、MPI/GPUを使ったMD計算等が行える。(Mac版はMPI/GPU非対応)	Windows (64bit版のみ対応)、MacOSX, Linux	お問い合わせください	2015年10月	非公開
MoDesk Basic	"	"	myPrestoを使った創薬計算支援用GUIソフトウェア。分子動力学計算、タンパク質と低分子化合物とのドッキング計算等を行える	Windows (64bit版のみ対応)、MacOSX, Linux	お問い合わせください	2015年1月	非公開
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
Arxspan Notebook	フルカージャパン	米フルカー	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。合成、生物等標準テンプレートに加えユーザー定義のフォーム作成可能。API保有	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
Arxspan 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。API保有	"	"	"	"
Arxspan 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。IC50、EC50等計算機能やカーフフィッティング機能も備える。API保有	"	"	"	"
Arxspan 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。動物管理等にも適応可能。API保有	"	"	"	"
Arxspan Search	"	"	Arxspanクラウドシステム内に登録されたデータをアプリケーションを跨り任意のビューを作成し解析するツール。社内システム内データベースとの統合も可能	"	"	2015年6月	"
Arxspan Workflow	"	"	合成、試験、分析等社内内外への依頼管理システム。業務フローに合わせた依頼をユーザーにて自在に設定管理できる管理者機能を搭載	"	"	2019年1月	"
Arxspan Publisher	"	"	Arxspanクラウドシステム内に登録された任意のデータをレコード更新のタイミングでリアルタイムに顧客指定サーバー、フォルダーにデータをアップロードするツール。AI等のシステム連携可能	"	"	2019年1月	"
Arxspan BioDrive	"	"	核酸、ペプチド、抗体、遺伝子治療等様々なModality領域に対応した描画ツール。多様なファイルフォーマットをサポートしており、機器データをドラッグアンドドロップして入力し、様々な表示形式と編集機能を持つ	クラウド、各種ブラウザ デスクトップ版を別途リリース予定	"	2021年1月	"
Mdrive	"	西メストレラボ	ネットワーク上の指定分析機器よりデータの回収。Arxspan内該当Experimentにアップロード。対応分析機器はベンダフリー。NMR、LC、GC、MSデータについては、Mestrelab社Mnova製品による各種データ解析が可能	Mgearはオンプレミスとなります。詳細はお問合せ下さい	"	2021年1月	"
Mgear	"	"	Mdriveで回収する機器データワークフローを定義設定	Mgearはオンプレミスとなります。詳細はお問合せ下さい	"	2021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

D360	サターラ合同会社	米サターラ (Certara)	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	"	"	-	-
Phoenix WinNonlin	"	"	40年の歴史を有する業界標準の薬物動態解析ソフトウェア。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。バリエ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	-
CDISC Navigator	"	"	PhoenixにおけるPK解析に関するCDISC標準SDTMおよびSENDへの対応機能を強化	"	"	2017年	-
Phoenix IVIVC Toolkit	"	"	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	-
Phoenix Autopilot Toolkit	"	"	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 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 WinNonlin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 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	"	"	-	-
Simcyp Animal	"	"	ラット、イヌ、マウスのPK予測に対応した生理学的薬物動態モデリングツール	"	"	-	-
Simcyp Pediatrics	"	"	小児集団のPK/PD予測に特化した生理学的薬物動態モデリングツール	"	"	-	-
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	-
Simcyp In Vitro Data Analysis (SIVA) Toolkit	"	"	In vitro実験で発生するデータのモデル解析を支援するツール。IVIVE等を、使い易い操作画面を通じて実施可能	"	"	2015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	船津公人教授	データ分析(PCA,ICA)、クラスターリング(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トリックスソフトウェア。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)、サイト・コーポレート(インストールフリー)	Windows 7/8/10	ノードロック 10万円/年(税別) ~、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)、サイト・コーポレート(インストールフリー)	"	ノードロック 7万円/年(税別) ~、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(税別) ~、アカデミック価格あり	2004年	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Web of Science Core Collection	クラリベイト・アナリティクス・ジャパン	米クラリベイト	厳選された約21,000(2020年4月現在)の国際的学術雑誌に加え、専門書、会議録、さらにはより地域性の高いジャーナルまで、多様かつ重要な学術文献の書誌情報を提供する引用索引データベース。文献の被引用回数や引用文献をたどり、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。◆EndNoteオンライン(文献管理ツール)、Publons(研究者プロファイリングツール)を無料提供	ウェブ環境があれば利用可	個別見積	1997年	-
InCites	"	"	引用文献に基づく研究評価・分析ツール。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と、世界の主要研究所・大学の教員数、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を、様々な切り口でベンチマークできる。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、多彩なグラフィックレポート機能で使い勝手を向上させている	"	"	2009年	-
Derwent Innovation	"	"	世界最大級の特許データベース。世界75か国のフルテキストを収録(2020年秋予定)、59か国のファミリー単位・独自抄録、独自特許分類を収録した独自データベース(Derwent World Patent Index)を収録。世界の特許をより漏れなく、包括的に検索可能。2020年に新しいユーザーインターフェースに刷新し、使い勝手を向上。最新のAI技術と組み合わせた価値指標やイベント予測指標も搭載し、特許データへのより深い洞察が可能	"	"	2008年	-

Derwent 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。複数のデータベ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、また、AIを活用した自動分類、類似特許検索を搭載。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に効率化	"	"	2005年	-
Cortellis Drug Discovery Intelligence	"	"	生理活性物質、実験データ、創薬ターゲットなど、創薬研究に不可欠な様々な領域、分野にまたがる情報を研究者の視点で収集、統合した創薬のための情報プラットフォーム。医薬品の研究開発を成功に導くために必要不可欠な生物学的、化学的、薬理学的データを統合することにより、創薬研究および開発研究における様々なワークフローをサポート	"	"	-	-
Drug Research Advisor	"	"	創薬研究の3つの主要なステップを単一のクラウドベースのワークフローに統合するアプリケーションスイート。今日の複雑な市場において、適応症とその可能性について、信頼性が高く、迅速かつ包括的な視点を提供。Drug Research Advisorスイートの一つ、Target Druggabilityは、IntegrityとMetaCoreに由来する医薬品情報、生物学的情報、実験データ、競合情報を1つのインタラクティブな検索ツールに統合することで、ターゲット同定とその選択を促進	"	"	2016年	-
Cortellis Generics Intelligence	"	"	最先端のジェネリック医薬品情報データベース。製品ターゲットインテグレーション、グローバルなビジネス展開、API調達に必須な情報を簡単に入手可能。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、低分子医薬品・生物学的製剤の両方について、新たな製品開発と、競争前のライセンシング機会を識別、評価する上で役立つ	"	"	2005年	-
SequenceBase	"	"	世界56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であるGENESEQを搭載。専門家が作成し注釈を付けた、すべての生物学的配列を網羅する包括的な情報を利用でき、かつ豊富な検索アルゴリズムのラインナップにより、配列検索の効率化を実現	"	"	-	-
CMR Factbook	"	"	製薬企業の R&D、企業金融、事業戦略、マーケティング企画やコーポレート・コミュニケーション等のための最新のビジネスプランニング・ツール。製薬 R&D の膨大に関する統計情報を提供する業界指標の権威ある情報源として、製薬企業における戦略的な意思決定と将来予測プロジェクトの計画・管理を支援	"	"	-	-
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。最も網羅的かつ最新の医薬品パイプライン情報を中心に多面的な競合情報を提供。医薬品開発の各ステージで戦略的な意思決定ができ、正確かつタイムリーなグローバル情報を活用して、選択した治療分野の競合状況の全体像の把握が可能	"	"	2012年	-
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。最も網羅的な規制文書のアーカイブに加え、規制変更の監視、承認プロセスと各国における慣行の把握、各国の規制要件の比較など、独自の高付加価値な規制情報の分析を提供	"	"	2012年	-
Cortellis Clinical Trials Intelligence	"	"	臨床戦略において最適な意思決定を行うための判断材料を提供する確かなグローバル臨床試験情報。世界中の医薬品・メディカルデバイス・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	-
Cortellis CMC Intelligence	"	"	世界中の低分子医薬品についてのCMC薬事法規制要件を詳細に分析・収録。薬剤承認の遅滞を回避し、医薬品の市場導入を成功に導く。薬事申請プロセスを単純化し、最適な当局による審査の成算を向上させる	"	"	2017年	-
MetaCore	"	"	専門家により手作業で収集・整理された高品質な、分子間相互作用、パスウェイ、疾患関連遺伝子、化学物質代謝及び毒性情報などを収録。コンテンツを参照するための検索機能と、パスウェイ解析・ネットワーク解析などオミックス解析機能を搭載し、生物学的メカニズムや疾患の理解、バイオマーカー研究、創薬ターゲット同定など、科学研究を促進	"	"	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システム薬理学的解析ツール。各種代謝物予測機能、ADME/Tox 特性予測機能、QSAR モデルを応用した化合物の代謝・毒性予測機能を搭載。化合物情報をパスウェイ解析へと展開して分子生物学的知見から化合物の薬効/代謝/毒性を予測することが可能	"	"	2010年	-
Cortellis Deals Intelligence	"	"	業界で最も包括的なディール分析を有するプラットフォーム。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パイプライン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)	"	"	市場規模、疾患研究および臨床試験計画のための疫学情報。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	-
BioWorld	"	"	疾患治療法に取り組むビジネスを推進する、最も革新的な創薬科学に関する実用的な情報を提供。論説や集計、引用はせず。調査対象者へのインタビューが、情報の起点となっている。業界に精通したジャーナリストらが、開発中の何百もの医薬品、開発品の背後にある企業、市場を進化させる事業開発取引、そして開発プロセスを改善すべく規制し、かつ保護する規制上のハードルに関する最新ニュースおよび見解を提供	"	"	-	-
BioWorld MedTech	"	"	医療技術の進歩に関する実用的な情報を提供。人の健康を改善する革新的科学技術を進歩させる先進的企業の経営層の意思決定に役立つ。論説や集計、引用はせず。調査対象者へのインタビューが、情報の起点となっている	"	"	-	-

Key Pathway Advisor	"	"	遺伝子発現データの包括的な解釈を可能にするワークフローツール。OMICsデータの生物学的パスウェイ解析を簡単に行うことができるウェブアプリケーション。専門家が収集した分子生物学および疾患の情報をベースにした最先端の解析機能は、すべての生物学者が操作できるようにシンプルでインターフェースを通じて提供され、解析結果をビジュアルに提示することにより、疾病を引き起こす遺伝子、潜在的なバイオマーカーおよび有望な創薬ターゲットを視覚的かつ直観的に発見できる	"	"	2016年	-
SERION			70カ国以上の医薬品名利用状況 (Pharma In-Use) が検索可能なデータベース、SAEGISとTM go365を搭載したプラットフォーム。Pharma In-Useに加え、世界186の国・地域の商標を一括検索が可能。TM go365は、AIベースの画像認識技術による、図形商標、意匠のイメージマッチ検索も行える。SAEGIS、TM go365共に、検索結果ではDarts-ipの訴訟情報の一部を閲覧可能。同じプラットフォーム上で、薬品名と商標の一括スクリーニングを行うことことで、業務を大幅に効率化できる		定額制、または、従量課金制	1997年	
BioWorld Science	"	"	創薬科学のためのニュースサービス、企業発表、学会、文献などを情報源に、早期開発段階における研究開発の意思決定をサポートするディスカバリー、前臨床研究に関する最新のインテリジェンスを毎日配信。記事からは「創薬のための情報プラットフォーム Integrity」にリンク	"	"	-	-
Disease Landscape & Forecast	"	"	100以上の疾患において主要7カ国および中国市場を対象とした市場分析と将来予測レポートを発行。「ランドスケープ & フォアキャスト」ド「ニッチ & 希少疾患」シリーズに加え、中国市場の分析も「China in Depth」シリーズにおいて市場分析および予測を詳細に行う。DRGでは、全世界で最も信頼され、活用されている疾患ごとの市場分析および市場分析レポートで、最新の疾患市場に関して、新規の治療薬と開発品を分析、アンメットニーズ調査、治験情報の評価を専門のアナリストが実施、今後10年間の患者数データ、詳細な市場予測を提供	"	"	-	-
MedTech 360 Report	"	"	戦略策定、成長機会の特定、常に変化する市場環境への対応をサポートします。医療機器市場に特化し、ビジネスを先に進めるためのタイムリーで関連性の高い、実行可能性のある洞察を提供。さらに執筆アナリストと直接関わることが出来るため、データの背後を理解し、戦略計画立案に役立てることが可能	"	"	-	-
Epidemiology data	"	"	ボトムアップ方式の疫学予測データは将来アクセス可能な潜在患者市場を明らかに。詳細な調査と分析から今後治療対象となりえる患者動向を把握、クライアントが自信を持って成長機会と投資価値を導き出すことを可能にする	"	"	-	-
Darts-ip	"	"	世界最大のグローバル知財判例データベース。洗練された検索インターフェイスを通じて、様々な知財特有の検索条件や論点に基づいて、世界中の判例を検索できる。有効成分等の検索フィルタを備え、「リスク評価」から「訴訟」に至るまで、効果的に活用可能	"	"	-	-
特許調査・分析サービス	"	-	弊社のエキスパートによる特許調査サービス(常監視 SDI、無効資料調査・特許性調査・有効性調査、クリアランス調査・FTO・侵害可能性調査)、特許分析サービス(技術動向分析、新規用途探索調査)をご提供。弊社独自のテキスト情報(DWPI抄録)、特許分類(Manual Code、Polymer index、Fragmentation Code)、配列情報(SequenceBase)等を組合せて最適な提案を行う。調査実績:ゲノム編集、抗体・核酸医薬、CAR-T、塗料、繊維強化樹脂、生体適合ポリマー、ガラス・セラミックス、構造タンパク質、化粧品、衣類・繊維、食品など	-	"	-	-
特許調査・分析サービス	"	-	弊社のエキスパートによる特許調査サービス(常監視 SDI、無効資料調査・特許性調査・有効性調査、クリアランス調査・FTO・侵害可能性調査)、特許分析サービス(技術動向分析、新規用途探索調査)をご提供。弊社独自のテキスト情報(DWPI抄録)、特許分類(Manual Code、Polymer index、Fragmentation Code)、配列情報(SequenceBase)等を組合せて最適な提案を行う。調査実績:ゲノム編集、抗体・核酸医薬、CAR-T、塗料、繊維強化樹脂、生体適合ポリマー、ガラス・セラミックス、構造タンパク質、化粧品、衣類・繊維、食品など	-	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CONFLEX 9 & Interface Rev.A - Basic Version - Pro Version	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、倒鎖の回転、環のFlip・Flipにより探索し、化学的に重要な配座異性体の最適構造をもれなく見つけ出す。それにより、最安定構造も特定することが可能になる。また、分子性結晶計算では、分子構造データと空間群の対称性を入力することで、自動的に結晶構造を作成して構造最適化を行ない、エネルギー極小に位置する結晶構造を網羅的に算出する	Windows、Linux、Mac	アカデミック:10万円～ 官公庁:32万円～ 企業:40万円～	2021年5月	-
Parallel CONFLEX 9 & Interface Rev.A - Basic Version - Pro Version	"	"	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PCI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	Windows、Linux、Mac	アカデミック:15万円～ 官公庁:48万円～ 企業:60万円～	2021年5月	-
Amber20 / AmberTools21	"	米UCSF	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	Source code	Non-Profit:9万円 For-Profit:300万円	2021年4月	-
Gaussian16 (Rev. C.01) GaussView6 (6.1.1) TCP Linda9.2	"	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IRC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	Windows、Linux、Mac	お問い合わせ	2019年7月	-
ChemDraw Prime v20 ChemDraw Professional v20 ChemOffice+ Cloud v20	"	米PerkinElmer	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	2020年11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	-	20万円～	-	-

技術サポート、講習会、インストール	"	"	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		
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
E-WorkBook ELN/E-WorkBook Advance	伊藤忠テクノソリューションズ	英IDBS	電子実験ノートシステム	サーバー: Windows Werver 2012 R2, 2016, RedHat Linux, Oracle Web Client: FireFox, Chrome, Edge (*E-Workbook v10.5.11における構成。その他バージョンについてはお問い合わせください)	費用はお問い合わせください	-	-
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 2012 R2, 2016 / クライアント: Windows 8.1, 10 Citrix + Office 2013, 2016, 2019 (詳細はお問合せください)	"	-	-
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, 10 Citrix + Office 2010, 2013, 2016, 2019	"	-	-
RAKTIS	"	伊藤忠テクノソリューションズ	試験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験管理を実現	APサーバー: Windows Server 2012R2/2016, .NET Framework 4.5.2以上 DBサーバー: Windows Server 2012R2/2016, Oracle Database 12c/12cR2, BIOVIA Direct 2017R2/2017R2HF1/2018SP2/2019 クライアント: Windows 10, Internet Explorer 11 / Google Chrome 83 / Microsoft Edge 83, BIOVIA Draw / Chem Draw	"	-	-
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力に支援	DBサーバー: Windows Server 2012R2/2016, Oracle Database 12c/12cR2, BIOVIA Direct 2017/2017R2/2017R2HF1/2018SP2/2019 APサーバー: Windows Server 2012R2/2016, .NET Framework 4.5.2 以上 クライアント: Windows 10, Internet Explorer 11, Microsoft Edge 83, Google Chrome 83, BIOVIA Draw 2017R2/2017R2SP1/2018/2019HF2, ChemDraw 17/18/19 一括チェックシステム Client: Windows Server 2012R2/2016, Windows 10, .NET Framework 4.5.2 以上	"	-	-
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	Webサーバー: Windows Server 2008 R2/2012 R2 + Accelrys Draw 4.0 / DBサーバー: Windows Server 2008 R2/2012 R2, Unix, Linux + Oracle + BIOVIA Direct / クライアント: Windows 8.1, Windows 10 + IE8,9,11	"	-	-
Medchem Database / Target Inhibitor Databases (GPCR, Kinase, Protease, NHR, Ion-Channel, Phosphatase, Transporter, HYDROLASE, OXIDOREDUCTASE, TRANSFERASE)	"	印Excelra	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	Internet経由	"	-	-
Drug Database	"	"	FDA/EMA/PMDA承認済薬について、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	Internet経由	"	-	-
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	Internet経由	"	-	-
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	Internet経由	"	-	-
GOBIOM+	"	"	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経由	"	-	-
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	"	英インステム (Instem)	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 / クライアント: Windows 7, Windows 10	"	-	-
Leadscope Toxicity Database	"	"	詳細な毒性情報が付随した160,000以上の化合物を取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 7, Windows10	"	-	-
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)	"	"	-	-
Leadscope 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	"	"	-	-
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 10 64bit	年間ライセンス(費用はお問い合わせください。)	-	多数
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	Windows 10 64bit	"	-	多数
Vitic	"	"	詳細な毒性情報が付随した20,000件以上の化合物を収録したデータベース	クライアント: Google Chrome, Firefox, IE 11、 in-house版サーバ: Windows Server 2012ほか ※推奨スペックはお問い合わせください。	"	-	多数
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 10 64bit	"	-	多数
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	Windows 10 64bit	"	-	多数
Mirabilis	"	"	API合成過程に推定される変異原性不純物の Purge Factor を計算するエキスパートシステム	アプリケーションサーバ: Windows 2016 64bit, Windows 2012 (Standard) 64bit, Tomcat 8.5.20, Java 1.8 JRE or JDK, MySQL 5.6.32 or later、 クライアント: Windows10/8.1 64bit, Windows 7、 ブラウザ: IE 11 Firefox, Chrome	"	-	-
Setaria	"	"	プロジェクトベースで化合物の毒性知見を管理するプラットフォーム	アプリケーションサーバ: Windows, Oracle Database ほか / クライアント: Windows、 Webブラウザ ※各対応OSや推奨スペック、対応ブラウザはお問い合わせください	"	-	-
Axway B2Bi	"	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に伝送するEDIツール。日欧米の当局で採用されており、長年EDIツールのデファクトスタンダードとして利用されている	Windows 2016 Server + Oracle12c Windows 2019 Server + Oracle19c	通信先によりライセンスが異なるため、お問い合わせください	2018年	多数
Axway Activator	"	"	治験・市販後の安全性情報レポートを当局やパートナーに伝送するEDIツール。機能的にはAxway B2Biと同様であるが、小規模向けのパッケージ	Windows 2016 Server Windows 2019 Server	"	2018年	多数
BIOVIA Workbook	"	仏ダッソーシステムズ(旧 QUMAS)	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	サーバ: WindowsServer2012R2, 2016, 2019、 Oracle / クライアント: Windows 8.1、 Windows 10	費用はお問い合わせください	-	-
Science Cloud Experiments	"	"	Mac から利用できるシンプルな電子実験ノートシステム。欧州の大学や化学・食品メーカーで多数採用され、気軽に使い始められることを特徴とする	Internet経由でアクセス	"	-	-
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: WindowsServer2012R2, 2016, 2019、 クライアント: Windows 8.1、 10	"	-	-
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: WindowsServer2012R2, 2016, 2019系、 Sun、 RedHatLinux、 SUSE Linux、 Oracle	"	-	-
BIOVIA Draw	"	"	化学構造式・反応式から核酸・アミノ酸配列までをカバーするサイエンティフィックデータ描画ツール	Windows 8.1、 Windows 10	"	-	-
BIOVIA Chemical Registration	"	"	化合物管理にフォーカスした化学構造式登録 Web アプリケーション	サーバ: WindowsServer 2012 R2、 2016、 2019、 RedHatLinux、 Oracle / クライアント: Windows 10、 IE11、 Edge、 Firefox、 Chrome	"	-	-
BIOVIA Biological Registration	"	"	生物製剤や細胞管理にフォーカスした生物製剤の登録 Web アプリケーション	サーバ: WindowsServer 2012 R2、 2016、 2019、 RedHatLinux、 Oracle / クライアント: Windows 10、 IE11、 Edge、 Firefox、 Chrome	"	-	-
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	WindowsServer2012R2, 2016, 2019、 Red Hat Linux、 SUSE Linux	"	-	-
SDTool	"	伊藤忠テクノソリューションズ	SDファイル(化学構造式情報)の参照・更新ツールで、クライアントアプリのため大量データを軽快に取り扱うことが可能	Windows 8.1、 Windows 10 / BIOVIA Drawまたは ChemDraw	"	-	-

Quid	"	米NetBase	Quid 人工知能 (AI) を用いたテキスト情報分析プラットフォーム	Internet経由でのアクセス	"	-	-	
Quid Social	"	"	NetBaseのソーシャルメディアデータについてQuid上で分析可能にするツール	Internet経由でのアクセス	"	-	-	
NetBase	"	"	ソーシャルメディア (SNS) データの分析ツール	Internet経由でのアクセス	"	-	-	
QUMAS DocCompliance	"	仏ダッソー・システムズ (旧 QUMAS)	様々な品質文書を適切に管理するための統合ソフトウェアソリューションであり、豊富な導入実績に基づいたベストソリューションを装備。文書管理プロセス、業務プロセスの効率化を実現	Windows Server 2012 R2/2016、Oracle12c(またはSQLServer 2012/2014、Documentum 7.1/7.2	"	-	-	
QUMAS ProcessCompliance	"	"	適切な品質マネー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ージメントレビュー機能を装備	Windows Server 2012 R2、Oracle12c(またはSQLServer 2012/2014)	"	-	-	
QUMAS ComplianceSP	"	"	Microsoft社SharePoint2013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 2012、SQL Server 2014、SharePoint 2013 SP1	"	-	-	
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ORO、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)	"	-	-	
Box	"	米Box	一般的な「オンラインストレージサービス」とは一線を画す、容量無制限、7段階のセキュリティ設定、豊富なLog種類、120種以上の拡張子に対応したプレビュー機能を持つ、エンタープライズ・コンテンツ・コラボレーションツール。各種コンプライアンス基準に準拠した高セキュリティな製品であり、IT部門から営業部門まで幅広く使うことのできるツール	Internet経由 マルチOS、マルチデバイス	"	-	-	
ta-Scan	"	米Anju Software	セマンティック技術を用いて構築された臨床試験データベースと治験シミュレーションツールを統合したシステム。フィジビリティスタディレポートの作成、競合分析、治験計画シミュレーションの支援を通じて、臨床開発期間の短縮が図れる	Internet経由でのアクセス	"	-	-	
Mosaic	"	英Titian	サンプル管理に特化したプラットフォーム。化合物ライブラリ以外に細胞、DNAなどサンプル管理機能を中核とし、サンプル在庫依頼や試験依頼など各種業務ワークフローを効率化する機能も提供。また要望に応じて、他社メーカーの分注機や自動倉庫の連携機能の開発にも対応可	サーバー: Windows Server 2012 R2、2016 x64 / Oracle 12c R1(12.1.0.1以上)、12c R2(12.2.0.1以上) / クライアント: IE11, Chrome	"	-	-	
Sinequa	"	仏Sinequa	コグニティブ検索・アナリティクスプラットフォーム。高度な自然言語処理 (NLP) と機械学習アルゴリズムを使用して、構造化/非構造化データから知見を抽出	お問い合わせください	"	-	-	
Exabyte.io	"	米EXABYTE.IO	材料設計プラットフォーム。DFT、MD、MO計算をクラウドコンピューティングで高速に計算。さらに、生成された計算科学データから機械学習による物性予測、材料探索(マテリアルズ・インフォマティクス)ができるプラットフォーム	Internet経由でのアクセス	"	-	-	
	商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Chemistry 4-D Draw 9.0	デジタルデータ管理	米ケムインベーションソフトウェア	構造式の作図機能のほか、構造式からIUPAC名を作成、IUPAC名から構造式を作成、構造式と文書や物性のテーブルを作成して部分構造式などから検索	Windows Vista、7、8、8.1、10 (32/64ビット)	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	
ChemDoodle, 11.0	"	米アイケムラボ	化学構造式の作図と3D構造への変換、反応式の描画、構造式からIUPAC名の作成とその逆、ルイス構造の自動作成、ニューマン投影式の作成、カーボン/オキシジェンの作成ツール、主要雑誌のスタイルシートでのドキュメントの作成、クリップアートのテンプレート	Windows 8、8.1、10(64ビット)、Mac OS 10.11+以上、Linux	9万8千円	2020年4月(国内)	-	
Molecular Modeling Proplus, 8.0	"	米ノルギンモンゴメリソフトウェア	3Dの化学構造を描画、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 2000、XP、Vista、7、8、8.1、10	6万円	2005年3月	国内約50本	
Sequence-4D	"	米ケムイン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、読み取り検索実行	Windows Vista、7、8、8.1、10 (32/64ビット)	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
Platform	ドットマティクス、シーエーシー、モルシス	英ドットマティクス	Pinpointを含め主要ケミカルカートリッジと連携が可能な生物・化合物情報管理統合プラットフォーム	Webブラウザ (IE、Firefox) Linux, Windows, Mac	お問い合わせください	2009年10月	国内外400社以上	
Browser	"	"	競合他社の主要ケミカルカートリッジと連携が可能な完全Web版生物・化合物情報管理統合ブラウザ	"	"	"	国内外400社以上	
Vortex	"	"	化学・生物・遺伝子発現及び一般評価データ可視化ツール。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現	"	"	"	国内外400社以上	
Pinpoint	"	"	ドットマティクス社製Oracleケミカルカートリッジ、非常に高速でSSS、Similarity、Exact Matchが可能	Linux, Windows	"	"	国内外400社以上	
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の自動登録が可能	Webブラウザ (IE、Firefox) Linux, Windows, Mac	"	"	国内外300社以上	
Gateway	"	"	創薬プロジェクト情報共有ツール(ドットマティクス版SharePoint)	"	"	"	国内外300社以上	
Cascade	"	"	業務依頼・業務管理アプリケーション、InventoryやStudies Notebookと連携して各部署に試験依頼が来、プロジェクトの進捗状況等が把握が可能	"	"	"	国内外200社以上	
Inventory	"	"	バイアル・ミューチャアツープ・プレート等のサンプル管理アプリケーション。登録画面のカスタマイズ、残量及びビジネスルールなど細かい設定が可能	"	"	"	国内外200社以上	
Register	"	"	化合物データ登録アプリケーション。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、Inventoryと連携してサンプル管理が可能	"	"	"	国内外300社以上	
Bioregister	"	"	抗体、タンパク質、核酸、RNA等の生物由来データ登録アプリケーション。登録画面のカスタマイズ及びビジネスルールなど細かい設定が可能、Inventoryと連携してサンプル管理が可能	"	"	"	国内外200社以上	

Studies	"	"	生物評価データ登録アプリケーション。HCSを含む各種Plateアッセイ試験、PKPD試験等の標準プロトコールが組み込まれInventoryと連携して効率的に実験してデータベース登録が可能。更にVortexと連携してQC等が簡単に可能。拡張機能「Screening Ultra」ではUltra HTSや用量反応、kineticを含む様々なアッセイをサポートし、アッセイデータ処理の自動化を実現	"	"	"	国内外250社以上
Studies Notebook	"	"	化合物合成実験・生物評価実験等に対応する完全Webベースの電子実験ノート。Windows,Mac, iPad, Android端末で利用可能。21 CFR Part 11準拠の監査証跡と電子署名機能付きで知的財産の保護に役立つ	"	"	"	国内外400社以上
Reaction Workflows	"	"	Gold Standard各種反応式ベース・低分子エニュレーション・ツール。Windows,Mac, iPad, Android端末で利用可能	"	"	2017年5月	国内外100社以上
Chemselector	"	"	今までのPinpoint (構造式検索エンジン)よりも100倍以上超高速検索エンジンMinpointを搭載したSureChEMBL、e-Moleculeの試薬及びSCGが利用可能な超高速検索構造式検索システム (ChemSelector)	"	"	2018年5月	国内外50社以上
D4O	"	"	Microsoft Office(PowerPoint, Word, Excel,Outlook)上で化学構造式を取り扱うためのアドイン。Browserと連携してOracleデータベースを検索可能	Office 2010, 2013, 2016, 2019 and 365	"	2009年10月	国内外300社以上
Elemental	"	"	JavaScriptベースの化学構造式描画ツール。弊社の全製品をはじめChemSpider, Reaxysや多数のお客様のWebアプリケーションで利用されている	Webブラウザ (IE,Firefox) Linux, Windows, Mac	"	"	国内外25000人以上
Dotmatics AWS Cloud	"	"	D4Oを除くDotmatics 全製品をお客様のご要望に従って弊社側で事前にセットアップしてご利用可能。従って大学やCRO様との共同研究や社内インフラなしで利用可能	"	"	2010年10月	国内外250社以上
Blueprint	"	"	低分子創薬のための可視化と分析アプリケーション。R-group分析やMMP分析等が可能で、他のアプリケーションと連結してシームレスな化合物設計ワークフローが実現できる	"	"	2020年10月	-
Reaction Explorer	"	"	構造式のExact Matchで、1000万以上の化合物の反応式を超高速で検索して複雑な反応式ネットワークを構築できる。その上、実験メタデータ(収率・純度・触媒作用、反応経路、反応条件など)のマイニング、およびレポート作成を合理化するための反応式超高速検索アプリケーションで、特に特許申請レポート作成にとても便利なツール	"	"	2021年10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
MolFeat	フィアラックス	フィアラックス	蛋白質のイメージ編集ソフト。論文に添付するような綺麗な画像や動画を簡単に作成可能。MolFeatの操作画面をPowerPointのスライドショーに貼り付けマウス操作することもできる。Pythonスクリプトでのアニメーション・自動処理に対応	Windows 8.1.10/OS X 10.9以降	9万8,000円(税別)	2004年1月	510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。MF myPrestoを使ってmyPrestoのプログラムによる分子動力学(MD)計算、ドッキングシミュレーション、In-silicoスクリーニングが簡単に実行される	Windows 8.1.10/OS X 10.9以降/ CentOS 6.7/ RedHatEnterprise Linux6.7	年間ライセンス使用料5ライセンス9万円~(税別)	2010年8月	50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。Amberを使用するのにコマンド等の操作を覚える必要がなく、GUI上からMD計算に必要な一通りの作業が簡単に実行される	Windows XP,VISTA.7/OS X 10.5以降 (Intel Mac)/ CentOS/ RedHatEnterprise Linux5	年間ライセンス使用料1ライセンス12万円~(税別)	2011年1月	15サイト以上
Mol造	"	"	3Dプリンタで作る蛋白質の立体模型。ご希望の構造ファイルから石膏・ナイロン素材の模型を作成するサービス	-	4万8,500円~(税別)	2009年11月	60サイト以上
MolCrystal	"	"	蛋白質の立体構造を刻んだクリスタルガラスを製作するサービス。ご希望の構造ファイルからデザイン可能	-	4万5,000円~(税別)	2006年6月	50サイト以上
MolCollabo	"	"	タンパク質や核酸等の生体分子をヘッドマウントディスプレイに立体表示し、VR体験できるソフトウェア。VR空間をネットワーク通信でつなぐことで、表示された分子構造を遠隔地を含め複数人で共有して見ることができ、構造解析や分子シミュレーションの研究者とのコミュニケーションを円滑化する	Windows 8.1,10	25万円(税別)	2017年2月	20サイト以上
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
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, QUANTUM ESPRESSO, 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、QUANTUM ESPRESSO連携には第一原理 I/Fも必須	Windows 8.1/10(各64bit)	お問合せ下さい	2009年9月	-
SCIGRESS QSPR	"	"	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。Bicerano法によるポリマーの物性計算が可能	"	"	"	-
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する研究者の方に最適。Basicに追加できるオプション製品	Windows 8.1/10(各64bit), 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「LAMMPS」、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 第一原理 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/0」と「Quantum ESPRESSO」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/0」と「Quantum ESPRESSO」の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 Ultra	"	"	SCIGRESSの基本パッケージと全オプションを含んだパッケージ	"	"	"	-

ChemOffice Professional v19.1 / ChemDraw Professional v19.1 / ChemDraw Prime v19.1	"	バーキンエルマー	世界標準の化学構造式 / 反応式作図ソフトウェアで、構造式・反応式等を簡単に作図可能	Windows10(64 bit)、Mac OS X 10.14、10.15	"	2020年4月	-
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	Windows Server 2016,2019 Standard (64-bit)	"	-	-
ACD/Spectrus Processor	"	加アドバンスドケミストリーデベロップメント (ACD/Labs)	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	Windows 10(x64)	"	-	-
ACD/ChemAnalytical Workbook	"	"	ACD/Spectrus Processor ヘデータベース構築機能を追加。化学構造、スペクトルデータ、テキストデータを、メーカーや分析機器の種類を問わず、同一のデータベースで管理可能	"	"	-	-
ACD/MS Fragmenter	"	"	構造式から、イオン化学法に従いフラグメント構造式とその派生経路を予測	"	"	-	-
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。化学構造から MSフラグメントを予測して実測スペクトルと比較、LC/MS、GC/MS 中の成分抽出、MSデータベース検索を用いた化合物同定等	"	"	-	-
ACD/MS Structure ID Add-on	"	"	MS Workbook Suite用アドオン。スペクトルから得られた質量数を基に、約1億件の化合物データベースを探索し、候補構造式を判別。更に検索された構造式から指定条件のクロマトグラフ保持時間を予測し、絞り込み	"	"	-	-
ACD/MetaSense	"	"	代謝物データ自動管理システム。・代謝物の同定・解析処理ワークフローに沿って操作し、一連のデータ管理を自動実行 ・質量数での判別に加え、代謝物予測機能により、網羅的な検出が可能 ・代謝マップに連動した解析結果の管理・共有が可能 ・装置に依存しない解析データ管理環境を提供	"	"	-	-
ACD/NMR Workbook	"	"	ACD/Spectrus ProcessorのNMR専門家向け機能強化版バック製品。1D/2DNMR を連携・同時解析させる project 機能を搭載、NMRデータベース検索による化合物同定、2DNMRの原子間関係の情報を化学構造にのせてスペクトルデータとの一致度を精密に比較等	"	"	-	-
ACD/NMR Predictor Suite	"	"	化合物の構造式から、1H, 13C, 15N, 19F, 31P, 2DNMスペクトルを予測	"	"	-	-
ACD/NMR Workbook Suite	"	"	NMR Workbook と NMR Predictor Suite を統合した、お得な Suite 製品	"	"	-	-
ACD/Know Structure Search Add-on	"	"	約1億件の化合物を収録したデータベースを、13CNMR + 分子式の情報から検索可能にする Add-on データベース	"	"	-	-
ACD/NMR Expert	"	"	化合物のNMRデータと化学構造を比較して一致度を判定する作業を、数千単位でバッチ処理可能	"	"	-	-
ACD/Structure Elucidator Suite	"	"	ACD/Labs が提供する MS, NMR データ解析支援機能を全て搭載し、化合物同定及び未知構造解析を強力に支援する事が可能	"	"	-	-
ACD/Luminata	"	"	不純物データ解析管理のための統合システム。・不純物データを効率的かつ包括的に管理するための検索可能なリソースを作成 ・不純物の生成、分解および除去を容易に追跡 ・プロセス化学チームとより効果的なコラボレーションを計ることが可能 ・QbDアプローチによる効果的なプロセスおよび不純物管理戦略を確立することが可能	"	"	-	-
ACD/Katalyst D2D	"	"	研究チームが抱える様々な実験機器を統合管理し、実験計画から、実施、最終的な意思決定までのプロセスを単一のWEBインターフェイスから確認できる環境を提供	"	"	-	-
ACD/LC Simulator	"	"	実験データを基に、LC, GCの最適な分離条件をシミュレーション	"	"	-	-
ACD/ChromGenius	"	"	実験データを基に、特定のクロマトグラフィー実験条件における任意の化合物のリテンションタイムを予測	"	"	-	-
ACD/Method Selection Suite	"	"	ChemAnalytical Workbook, LC Simulator, Chrom Genius, PhysChem Suite を統合した、お得な Suite 製品	"	"	-	-
ACD/AutoChrom	"	"	分析機器と連動し、メソッド開発の計画と目的を設定する事で、シミュレーションに必要な実験のシーケンスの作成、データ処理、シミュレーションによるメソッド最適化といった一連の作業を支援	"	"	-	-
ACD/Name	"	"	化学構造式からIUPAC, CAS Index ルールに基づく化学名を生成。また、化合物名から化学構造を出力するツールも搭載	"	"	-	-
ACD/Name Batch	"	"	化学構造式から化学名をバッチ生成	"	"	-	-
ACD/Name to Structure Batch	"	"	化合物名から化学構造をバッチ生成	"	"	-	-
ACD/Percepta Suite	"	"	化合物の化学構造から、各種物性、ADME特性、毒性を予測 (LogP, pKa, LogD, 水溶解度、沸点、蒸気圧、血液脳幹門の透過性、CYP450基質特異性/阻害性、CYP450及びヒト肝ミクロソームによる代謝部位、ヒト腸管吸収、CaCo-2細胞の膜透過性、ヒト血漿タンパク結合性、分布容積、薬物の推奨1日最大投与量、P-糖タンパク質基質特異性/阻害性、経口バイオアベイラビリティ、PK Explore、急性毒性、水性毒性、内分泌かく乱作用、健康への影響、hERG阻害性、AMES試験の陽性/陰性、目/皮膚刺激性 等)	"	"	-	-
ACD/PhysChem Suite	"	"	化合物の化学構造から、各種物性 (LogP, pKa, LogD, 水溶解度、沸点、蒸気圧等) を予測する機能。化合物が目的の物性を持つように、化学構造をデザインする機能を搭載	"	"	-	-

ACD/ADME Suite	"	"	化合物の化学構造から、各種ADME特性を予測(血液脳関門の透過性、CYP450基質特異性/阻害性、CYP450及びヒト肝ミクロソームによる代謝部位、ヒト腸管吸収、Caco-2細胞の膜透過性、ヒト血漿タンパク結合性、分布容積、薬物の推奨1日最大投与量、P-糖タンパク質基質特異性/阻害性、経口バイオアベイラビリティ、PK Explorer)	"	"	-	-
ACD/Tox Suite	"	"	化合物の化学構造から、各種毒性を予測(急性毒性、水性毒性、内分泌かく乱作用、健康への影響、hERG阻害性、AMES試験の陽性/陰性、目/皮膚刺激性等)	"	"	-	-
ACD/Impurities Suite	"	"	Genotoxicity, Carcinogenicity(発がん性、染色体異常、DNA損傷、変異原性等)をプロファイル	"	"	-	-
ACD/PhysChem Profiler	"	"	対象となる化合物のLogP, LogD, pKa, 水溶解度等の簡易的な予測を実施	"	"	-	-
ACD/Percepta Profiler	"	"	PhysChem Profiler の各種物性簡易予測機能と、いくつかのADME特性及び毒性(Caco-2細胞の膜透過性、血漿タンパク結合性、ヒト腸管吸収、CNS活性、ヒト肝ミクロソームによる代謝安定性、P-糖タンパク質基質特異性、CYP450基質阻害性、AMES試験の陽性/陰性、hERG阻害性等)の簡易予測機能を搭載	"	"	-	-
ACD/Percepta Batch	"	"	各種物性、ADME特性、毒性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	"	アカデミックフリー版	-	-
Patcore/CRAIS Checker Personal(JChemBase, MarvinJS込) 2018	"	パトコア	CRAIS Checkerは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。※CRAIS Checker PersonalはWebServiceAPIを利用できない	お問い合わせ下さい	お問い合わせ下さい	-	-
Patcore/CRAIS Checker(JChemBase, MarvinJS別) 2018	"	"	CRAIS Checkerは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。※JChemBase, MarvinJSが別途必要	"	"	-	-
Patcore/CRAIS Checker セットアップツール 2018	"	"	CRAIS Checker導入時に必要な設定ツールを提供する	"	"	-	-
Patcore/PatRegi Server license 2018	"	"	化合物登録処理を司るWebサービスを中心とした化合物登録ソリューション。Webサービスでは構造データチェック、正規化、脱塩、法規制チェック、重複チェック、化合物ID・サンプリングID発版など化合物登録の一連の処理が行える。主な機能 ・WebサービスAPIによる化合物登録機能 ・Instant JChem Enterpriseによる化合物登録機能、SDFバッチ登録・Standardizer、StructureChecker、CRAIS Checker連携機能	"	"	-	-
Patcore/Standardizer Server license 2018	"	"	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	"	"	-	-
Patcore/StructureChecker Server license 2018	"	"	Structure Checker化学構造のパリテーションツールで、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	"	"	-	-
Patcore/Reactor Server license 2018	"	"	Reactorはジェネリックな反応を用いてバーチャルライブラリーを作成するためのソフトウェア。単にバーチャルな分子を作るのではなく、化学的に意味があり、合成できる可能性の高い化合物を生成するユニークなアプローチを採用している	"	"	-	-
Patcore/カタログ公開用JCBパッケージ(JChemBase & MarvinJS:1Server) 2018	"	"	カタログ公開用ライセンス。 ※試薬会社向けの試薬カタログWEB公開用専用ライセンス。社内の業務には利用できない	"	"	-	-
Patcore/カタログ公開用JPCパッケージ(JChem Postgres Cartridge & MarvinJS:1Server) 2018	"	"	カタログ公開用ライセンス。 ※試薬会社向けの試薬カタログWEB公開用専用ライセンス。社内の業務には利用できない	"	"	-	-
Patcore/Marvin Beans 2018	"	"	化学者のデスクトップツールやソフトウェア開発者向けMarvin関連製品の包括パッケージ。Marvin Beansパッケージには、MarvinSketchとMarvinView modulesが含まれている。Marvin Beansは、他のアプリケーションに統合されていない場合、デスクトップでの非営利目的での使用は無料	"	"	-	-
Patcore/Marvin JS 2018	"	"	一切のプラグインが不要なWeb対応構造エディタMarvin JS(JavaScript)。様々なWebアプリケーションにMarvin JSを組み込むだけで、あらゆるデバイス上に構造エディタ機能を提供できる。MarvinJSは軽量な為、迅速に起動し、構造式や反応式をスピーディーに編集できる。JavaRuntimeプラグインなどが不要な為、企業や学内のネットワークからもスムーズに利用することが可能	"	"	-	-
Patcore/Marvin Live 2018 (Design Hub)	"	"	研究チームのメンバーとその協力が、アイデアをシェアし、ディスカッションを交わすことができる遠隔会議のプラットフォーム。ケミスト、バイオロジスト、プロジェクトリーダーなどが協働して取り組めるバーチャル会議室を提供する。ちょっとしたプレストや合同のデザイン会議、あるいは長期に渡るプロジェクトディスカッションのトラッキングにもお使いいただける。システムに組み込まれている会議アシスタント機能が、関連データの準備や重要なアイデアの保存、議事録の作成などにかかる時間を短縮する	"	"	-	-
Patcore/JChem Base 2018	"	"	JChem Baseは高速な検索アルゴリズムを搭載し、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、反応検索、マーカッシュ(Markush)構造のハンドリングをサポート。 ※Marvin Beansは含むが、Marvin JSは含まない	"	"	-	-
Patcore/JChemWebService Option for JChemBase 2018	"	"	JChemBaseの機能をWeb Serviceから利用するためのオプション	"	"	-	-

Patcore/JChem Oracle Cartridge 2018	"	"	JChem Cartridge for ORACLEを用いると、ユーザーはオラクルで様々な検索が出来るようになる。SQLのSELECT文において構造条件に加え、Calculator Pluginsを組み合わせて利用するとLogPなどの予測物性値などの条件を指定して検索ができるようになる。JChem Cartridgeは化学知識をORACLEに与えSQLによって化学構造式や化学反応式の検索や構造式に基づく化学的な計算を可能にする。 ※JChem BaseとMarvin JSは含まれていない	"	"	-	-
Patcore/JChem PostgreSQL Cartridge 2018	"	"	簡単に実装できる化学データベース管理および検索のエンジン。ネイティブSQL言語を用いたPostgreSQLリレーショナルデータベース上に構築され、化学データセットをハンドリングするには非常に対費用効果が高い手段となる。そのスケーラビリティは、個人・グループはもちろんのことエンタープライズレベルでのデータ管理も可能にする。 ※JChem BaseとMarvin JSは含まれていない	"	"	-	-
Patcore/JChemBase add-on Option for JChem Cartridge 2018	"	"	JChemCartridgeにJChemBaseを追加する為のライセンス。 ※Marvin JSは含まれていない	"	"	-	-
Patcore/Instant JChem Enterprise 2018	"	"	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、サーバー上の共有データベースに対するフロントエンドの機能も提供する	"	"	-	-
Patcore/Instant JChem Standard 2018	"	"	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。個人用デスクトップの場合、サーバーまたはリモートデータベースへのアクセスはない	"	"	-	-
Patcore/Instant JChem Viz add-on 2018	"	"	Instant JChem Standard と Instant JChem Enterpriseのアドイン。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ト(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	"	"	-	-
Patcore/Plexus Connect 2018	"	"	Plexus Suiteで中心となるコンポーネント。Instant JChem(IJC)データベースに、マルチユーザーがウェブアクセスする環境を提供する	"	"	-	-
Patcore/Plexus Connect add-on Option for Instant JChem Enterprise 2018	"	"	既存IJCユーザーがIJCとPlexusConnectの両方を使えるようにするためのライセンス。同一のユーザーがIJCとPLXCの両方を利用できる	"	"	-	-
Patcore/Instant JChem add-on Option for Plexus Connect 2018	"	"	既存PlexusユーザーがIJCとPlexusConnectの両方を使えるようにするためのライセンス。同一のユーザーがIJCとPLXCの両方を利用できる	"	"	-	-
Patcore/JChem for Office 2018	"	"	ロングセラー化学アドインJChem for Excelが、ExcelのほかにWord、PowerPoint、OneNote、Outlookメールにも対応するJChem for Officeとしてリニューアルした。これまでのEXCEL化学アドインは、重く、安定性も不十分だったが、JChem for Officeを用いるとより軽快に大容量の化学データを便利に扱える。Microsoft Office 2010、2013、2016に対応	"	"	-	-
Patcore/Structure to Name 2018	"	"	構造式から慣用名または2004年のIUPAC nomenclature recommendations (International Union of Pure and Applied Chemistry、国際純正・応用化学連合)に基づく化学名を生成する	"	"	-	-
Patcore/Name to Structure 2018	"	"	IUPAC名、CAS番号、一般名などから化学構造式を生成する。本ツールは、名称から構造式に一括変換する方法を複数提供している。 ※Structure to Nameを包含	"	"	-	-
Patcore/Document to Structure 2018	"	"	ドキュメント中からあらゆる化学情報を簡単に抽出するためのツール。特許文書の解析、文献の解析、ウェブサイトの解析、その他MS Officeドキュメントの解析などの用途に利用できる	"	"	-	-
Patcore/Japanese Naming 2018	"	"	Document to StructureまたはName to Structureに追加することで、日本語化学名と構造式の相互変換が行える。Structure to Name に追加することで構造式から日本語化学名への変換が行える。 ※本製品単独では利用できないので注意	"	"	-	-
Patcore/Chinese Name to Structure 2018	"	"	Document to StructureまたはName to StructureまたはStructure to Name に追加することで、中国語化学名から構造式への変換が行える。 ※構造式から中国語名への変換は行えないので注意	"	"	-	-
Patcore/ChemCurator 2018	"	"	公開特許からマーカーカッシュ構造や実施例構造を迅速・効率的に抽出、解析を大幅に効率化する	"	"	-	-
Patcore/ChemLocator 2018	"	"	社内のファイルサーバーやSharePoint、クラウド上のドライブに置かれたファイルに対し、構造式などの化学的情報とフリーテキスト検索を組合わせた検索を可能にしたエンタープライズサーチエンジン	"	"	-	-
Patcore/MadFast 2018	"	"	最新の超高速インメモリ類似構造検索エンジン。大量の構造に対して極めて高速に類似構造検索を行う。 ※EOPF、MACCS fingerprintsのライセンスは含まれていない。製品本体にはChemical fingerprintが付属する	"	"	-	-
Patcore/BioEddie + Biomolecule Toolkit 2018	"	"	Biomolecule ToolkitとBio Eddieをバンドルして廉価にご提供	"	"	-	-
Patcore/Markush Search 2018	"	"	特許出願などに用いられるマーカーカッシュ構造をデータベースに登録し、エミュレーションすることなく、部分構造検索や完全一致検索を実現するJChem Base、JChem CartridgeおよびInstant JChem用のアドオン。Markush SearchはJChem BaseとMarkush Enumeration pluginを包含している	"	"	-	-
Patcore/Calculator Plugins 1 Bundle 2018	"	"	各種物性計算ツール製品。予測対象グループから1つ選択した時の製品	"	"	-	-
Patcore/Calculator Plugins 2 Bundles 2018	"	"	各種物性計算ツール製品。予測対象グループから2つ選択した時の製品	"	"	-	-
Patcore/Calculator Plugins 3 Bundles 2018	"	"	各種物性計算ツール製品。予測対象グループから3つ選択した時の製品	"	"	-	-
Patcore/Calculator Plugins 4 Bundles 2018	"	"	各種物性計算ツール製品。予測対象グループから4つ選択した時の製品	"	"	-	-
Patcore/Calculator Plugins 5 Bundles 2018	"	"	各種物性計算ツール製品。予測対象グループから5つ選択した時の製品	"	"	-	-

Patcore/Calculator Plugins 6 Bundles 2018	"	"	各種物性計算ツール製品。予測対象グループから6つ選択した時の製品	"	"	-	-
Patcore/Discovery Tool Kit 1 2018	"	"	下記のツールの中から1つを利用できる。 - ECFP/FCFP(円形フィンガープリント) - Molecular descriptors (pharmacophore fingerprints,BCUT) - MACCS-166 fingerprint (MACCS KEY) - JkIustor(クラスタリングツール) - Library MCS (MCS計算ツール) - 2D Screen(2Dバーチャルスクリーニングツール) - 3D Screen(3Dバーチャルスクリーニングツール)	"	"	-	-
Patcore/Discovery Tool Kit 2 2018	"	"	下記のツールの中から2つを利用できる。 - ECFP/FCFP(円形フィンガープリント) - Molecular descriptors (pharmacophore fingerprints,BCUT) - MACCS-166 fingerprint (MACCS KEY) - JkIustor(クラスタリングツール) - Library MCS (MCS計算ツール) - 2D Screen(2Dバーチャルスクリーニングツール) - 3D Screen(3Dバーチャルスクリーニングツール)	"	"	-	-
Patcore/Discovery Tool Kit 3 2018	"	"	下記のツールの中から3つを利用できる。 - ECFP/FCFP(円形フィンガープリント) - Molecular descriptors (pharmacophore fingerprints,BCUT) - MACCS-166 fingerprint (MACCS KEY) - JkIustor(クラスタリングツール) - Library MCS (MCS計算ツール) - 2D Screen(2Dバーチャルスクリーニングツール) - 3D Screen(3Dバーチャルスクリーニングツール)	"	"	-	-
Patcore/Discovery Tool Kit 4 2018	"	"	下記のツールの中から4つを利用できる。 - ECFP/FCFP(円形フィンガープリント) - Molecular descriptors (pharmacophore fingerprints,BCUT) - MACCS-166 fingerprint (MACCS KEY) - JkIustor(クラスタリングツール) - Library MCS (MCS計算ツール) - 2D Screen(2Dバーチャルスクリーニングツール) - 3D Screen(3Dバーチャルスクリーニングツール)	"	"	-	-
Patcore/Discovery Tool Kit 5 2018	"	"	下記のツールの中から5つを利用できる。 - ECFP/FCFP(円形フィンガープリント) - Molecular descriptors (pharmacophore fingerprints,BCUT) - MACCS-166 fingerprint (MACCS KEY) - JkIustor(クラスタリングツール) - Library MCS (MCS計算ツール) - 2D Screen(2Dバーチャルスクリーニングツール) - 3D Screen(3Dバーチャルスクリーニングツール)	"	"	-	-
Patcore/Discovery Tool Kit All(7) 2018	"	"	下記のツールすべて(7つ)を利用できる。 - ECFP/FCFP(円形フィンガープリント) - Molecular descriptors (pharmacophore fingerprints,BCUT) - MACCS-166 fingerprint (MACCS KEY) - JkIustor(クラスタリングツール) - Library MCS (MCS計算ツール) - 2D Screen(2Dバーチャルスクリーニングツール) - 3D Screen(3Dバーチャルスクリーニングツール)	"	"	-	-
Patcore/CRAIS Reagent 2018	"	"	試薬情報や在庫情報に対し、メーカーカタログや商用試薬データベース、法規制物質チェックシステムCRAIS Checkerと連携し、最新の法規制情報を容易に管理することができる	"	"	-	-
Patcore/Chemical Design Ver.6 2018	"	"	特別パッケージとしての化学物質安全管理支援システム。簡単な操作で、だれでも試薬の管理が行える。全機能がウェブブラウザ上で利用可能。バーコードを利用して、試薬1ビン1ビンを個別に管理できる。電子天秤と連動した使用量管理が可能。試薬メーカーのカタログデータを利用して簡単に在庫登録ができる。危険物の指定数量の管理が可能。色々な条件を組み合わせで在庫の検索が行える	"	"	-	-
Patcore/リスクアセスメントモジュール 2018	"	"	Chemical Designのオプション機能	"	"	-	-
PKI/TIBCO Spotfire Analyst	"	パーキンエルマー (TIBCO)	TIBCO Spotfire Analystを使用すると、純粋なアドホック分析を実行したり、他のユーザーが提供する分析アプリケーションやダッシュボードを作成したりすることが容易になる	Windows8.1, 10(各64bit)	"	2018年2月	-
PKI/TIBCO Spotfire Business Author	"	"	Webブラウザを使用してセルフサービス分析を可能にする、ビジネスユーザーのための使いやすい、簡単な展開環境を提供。このクライアントには、Web環境を通じてアナリストクライアントで利用できる機能のサブセットが含まれている	"	"	"	-
PKI/TIBCO Spotfire Consumer	"	"	TIBCO Spotfire Analystで作成された定義済みのアナリティックアプリケーションとダッシュボードをユーザーベースで提供する	"	"	"	-
PKI/Lead Discovery powered by TIBCO Spotfire	"	"	TIBCO Spotfireが提供するLead Discoveryは、テキストと数値データとともに化学構造を探索するための視覚的でインタラクティブな環境を提供する	"	"	"	-
PKI/Lead Discovery for Web powered by TIBCO Spotfire	"	"	Lead Discovery powered by TIBCO Spotfireで作成された定義済みのアナリティックアプリケーションとダッシュボードをユーザーベースで提供する	"	"	"	-
PKI/TIBCO Spotfire Analyst with Lead Discovery	"	"	Lead Discovery Personal Subscriptionを使用するTIBCO Spotfire Analystは、TIBCO SpotfireプラットフォームとLead Discoveryを組み合わせ、クライアントインストールのみを必要とし、PerkinElmerサーバーを認証に使用する。このオプションは分析機能を制限しないため、強力な視覚化、データマッシュアップ、および従来のインストールで利用可能な分析すべてにアクセスできる	"	"	"	-
PKI/TIBCO Spotfire Server	"	"	Spotfire分析ソフトウェアプラットフォームの構成、統合、展開、管理、セキュリティ、および拡張を組織が完全に制御できるように、スケラブルで集中管理された一連のサービスを提供する	Windows Server 2012, 2012R2, 2016, 2019(各64bit)	"	"	-
PKI/TIBCO Spotfire Automation Services	"	"	TIBCO Spotfireオートメーションサービス、TIBCO Spotfireプラットフォームを自動化するジョブの実行のためのWebサービス	"	"	"	-
PKI/TIBCO Spotfire Statistics Services	"	"	TIBCO Spotfire S +およびRプログラミング言語のような統計エンジンで実行されるTIBCO Spotfireクライアントを使用して、予測分析機能を使用することで、技術およびビジネスの専門家はTIBCO Spotfire Statistics Servicesを使用して、確信のある意思決定が行える	"	"	"	-
PKI/SciStream	"	"	TIBCO Spotfireソフトウェアを搭載したSciStreamは、科学機器データとメタデータのインポートとアレンジを容易にするように設計されている	"	"	"	-

PKI/TIBCO Spotfire Desktop	"	"	サーバー不要のパーソナル利用を目的としたSpotfireを利用するための製品	-	"	"	-
Nanome	"	Nanome Inc.	仮想空間会議システムをもつ、化学構造式の描画に優れた創薬研究 (Drug Discovery) 用VRアプリケーション。専門領域の異なる創薬研究者 (結晶化学、構造解析学、分子設計学等) に3次元可視化された化学構造を見ながらリモートで議論する場を提供する製品。PluginサービスによりMDなどを含むシステム連携が可能	Oculus Rift S, Quest2 と Win10 (GPU必須) (オンプレ環境は Windows ServerとLinux)	"	2020年9月	-
Arxspan Notebook	"	ブルカー (Bruker)	自社実験情報に加え、近年増加傾向にある外部研究機関との共同研究情報管理に最適化したWebベースの電子実験ノートシステム (クラウドサービス)。直観的に利用できる簡易なインターフェイスを備え、別途ソフトウェアを必要としないため、お手持ちの Windows、MacやAndroid、iOS等モバイル端末よりBrowser経由で簡単に利用可能。効率的に研究情報の管理、研究情報の検索や共有が可能であり、データの散財を防止し、柔軟に研究ワークフローを管理できる	ChromeまたはEdge推奨	"	2020年10月	-
Arxspan Registration	"	"	ユニークな生物/化学物質を登録管理する信頼性の高いWebベースのシステム (クラウドサービス)。一つのシステムで物質の同一性、クロスリファレンス等を管理し、登録全データに対し化学構造式検索を含む検索機能を有している	"	"	"	-
Arxspan Assay	"	"	Webベースのアッセイデータ管理システム (クラウドサービス)。必須入力データ、任意入力データ、データタイプ、レンジの指定その他の機能を使い、LTS、HTS等新規アッセイの作成を支援する。共同研究データ管理に優れており、複数の研究サイトのアッセイデータを一元管理する事ができる。機器データの自動計算、カーブヒートマップ作製、ポイントノックアウト機能を備えており、機器からの生データをArxspan Assay内ユーザが設定したテーブルに最適化した状態で登録する事ができる	"	"	"	-
Arxspan Inventory	"	"	サンプル、原料、試薬、プレート、実験機器、測定機器等管理対象物をユーザにて簡単に定義し、一元管理できるWebベースのアプリケーション (クラウドサービス)。入庫管理、使用履歴、残量、保管場所、貸出管理、プレート管理、Doughther Plate作成等豊富な機能を備えている	"	"	"	-
Arxspan Search	"	"	ディジショナルサポートツールとして、Arxspan Notebook、Registration、Inventory、Assayシステム内データの横断検索、可視化、レポート作成が可能。化合物、マテリアル、アッセイ、在庫データのリアルタイムな検索、ソーティングを行い、検索結果レイアウトのカスタマイズが行える。その他、検索/フィルタリング条件の保存、数学的計算、化学構造式表示、構造活性解析、Excelへのデータ出力、その他の機能がある	"	"	"	-
ADMEWORKS/Predictor	富士通	富士通	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 Explorer 8.0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、変異原性、CYP阻害、CYP代謝、発癌性、生分解性、蓄積性、PGPトランスポーター、BBB、HIA、皮膚感受性、HERG阻害、染色体異常予測モデルを提供。V7では、変異原性予測モデルをリニューアル。変異原性予測モデルは、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/VII デーションに対応。さらに、国立医薬品食品衛生研究所で推進している変異原性予測向上のための国際共同研究にも参加し、そこで作成したAmesモデル式も利用可能。2019年7月には5種類のCYP (1A2, 3A4, 2C9, 2C19, 2D6) の阻害予測モデルを新たにリリース	-	"	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モデル式受託サービス	"	"	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ー、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情報収集が可能。約136千件のデータを収載。	データコンテンツの販売	"	2005年8月	-
DDI Simulator	"	"	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、トランスポーターの阻害、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。2018年10月にV2.5をリリースし、消化管における阻害薬/誘導薬濃度が経時変化するモデルを採用することで、より実際の体内動態を表現することが可能となった。また、消化管における自己阻害・誘導にも対応。DDI Simulatorで使用する薬物動態パラメータの算出から設定、シミュレーションまでの一連の操作を簡単にこなせるフィッティングツールも提供。2019年7月V2.6をリリースし、相互作用時の内在性基質の血中濃度変動の予測も含め、肝臓OATPsを介した薬物相互作用の程度をより精緻に予測可能なモデルを搭載	Windows7/8/10 (スタンドアロン)	詳細はお問合せ下さい	2010年2月	-

FUJITSU Digital Laboratory Platform AI創薬基盤 SCIQUIK	〃	〃	化合物の安全性や実用化の可能性を研究開発初期段階において適切に評価することが可能。例えば、医薬品分野においては、上市された製品が市場からの撤退を余儀なくされる理由は、主に薬物動態・心毒性・肝毒性である。これらの特性を研究段階より適切に評価することが重要。さらに、薬物動態、心毒性、肝毒性等を予測するだけでなく、自社データを使用した独自モデルの作成や、予測モデルの精度改良にも取り組むことができる。これにより、医薬品以外の幅広い分野においても利用が可能	Windows 10(64bit)	【一般向け価格】 年間ライセンス 80万円～ 永久ライセンス 200万円～	2021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
Screener Core	シーンデータ	スイス・シーンデータ	Screenerはプレートアッセイを主とした複数機器対応のスクリーニング向けソフトウェアソリューション。様々な機器で測定された生データの取込から解析・管理・報告書出力までのワークフローを実現。製薬会社やCRO等世界のユーザーからの要望を基に改良を重ねており、HTSでのベストプラクティスと評価されている。CoreはScreenerの基本ライセンスとして、Endpointアッセイ向けにQC、Hit List作成、Curve Fitting、IC/EC計算機能を標準実装。その他各種専門的な解析 (Kinetics, Ion Channel, SPR, Thermal Shift, HGS, Cell Population, Combination Screening, Epitope binning等) は追加ライセンスにより可能となる。Web上で利用可能	Linux Server (SuSE Enterprise, Red Hat Enterprise, CentOS) / Client: Google Chrome, Firefox, Edge等	お問い合わせください	2001年4月	国内外 50社強 (Screener)
Screener Time Series Extension	〃	〃	FLIPRやFDSS等時系列データ解析向けソリューション。Screener Core に時系列データの取込・数値計算・波形表示の機能を追加。波形描画と結果を同時に表示することで解析効率・精度の向上を実現する	〃	〃	2008年11月	〃
Screener High Content Extension	〃	〃	High Content Screening向けソリューション。Screener Coreに解析済みの画像データへのアクセス・表示機能を追加。パラメーターのデータと画像データを紐づけて表示することで、フェノタイプの変化や生物学的事象と照らし合わせた効率的なQC、Curve Fitting、Hit Selectionが可能となる	〃	〃	2009年5月	〃
Screener Hit Profiler	〃	〃	対象の化合物に対して解析済みの複数のアッセイ結果を表示し横断的に、Hit SelectionやReport作成を行う。化合物の情報以外に、Screenerで解析済みのDose response curvesやIC/EC50等の値を表示し対象の化合物に対して総合的な解析を行う	〃	〃	2007年9月	〃
Screener Cell Population Extension	〃	〃	High Content ScreeningやFlow Cytometryなどに由来する1細胞解析に対応。UI上で目的のPopulationを作成し、FractionやMean等の解析を実施	〃	〃	2012年3月	〃
Screener Compound Synergy Extension	〃	〃	コンビネーションスクリーニング向けソリューション。単一ウェルに対して2つの化合物を入れ、シナジー効果を計測する実験に対応。標準的に使用されるSynergy Score (HSA, BLISS, Loewe) をデフォルトで搭載	〃	〃	2013年4月	〃
Screener Reference Assay Extension	〃	〃	実施済みの複数のアッセイを比較することでアッセイの評価検証を行う。単一のアッセイで捉えることの難しい化合物の選択性や毒性等について、クロスアッセイした結果を用いたHitリストの作成、パラメータ変更による再解析が可能	〃	〃	2015年11月	〃
Screener Real-Time Extension	〃	〃	測定が終了したデータを随時取り込み、リアルタイムにデータの推移の確認が可能。一定の閾値を設け異常プレート等検出とメール通知機能を持つ。アッセイの自動化によりコスト削減やリスク管理を促進する	〃	〃	2018年2月	〃
Screener APC Package	〃	〃	Automated Patch Clamping アッセイ (Ion Works, Nanion 他) 向け解析。標準的に使用されるアルゴリズム (Time constant等) をデフォルトで搭載。Time constant等の値と波形を同時に表示することにより、解析の精度を上げる事が可能	〃	〃	2014年7月	〃
Screener TSA Package	〃	〃	Thermal Shift Assay向け解析。標準的に使用されるアルゴリズム (midpoint, first derivative Boltzman fit) を標準で搭載。算出されたTm等の値と一緒に波形をすることにより、迅速に精度の高い解析が実施可能	〃	〃	2014年7月	〃
Screener SPR Package	〃	〃	Surface Plasmon Resonance (Biacore他) 向け解析。KD, Kon, koff等、標準的に算出するアルゴリズム、またSensorgramsを前処理するアルゴリズムも標準で搭載。データ取り込みと同時にSensorgramsの前処理とKD値等の計算を実施し、即座に解析が可能。KD値の値と一緒にSensorgramsを表示可能。またBLIにも対応しており、Epitope binning解析にも対応し自動的にBinningが可能	〃	〃	2014年7月	〃
Screener DMPK Package	〃	〃	DMPK向け解析。Lipophilicity, solubility等のアルゴリズムを標準で搭載	〃	〃	2015年10月	〃
Screener Mechanistic Package	〃	〃	モダリティ等、化合物・ターゲット間の反応速度アッセイ向け解析。このパッケージではmodality of inhibition, Slow binding, Jump dilution, two- or one-step binding, kPCA 等のアルゴリズムを標準で搭載	〃	〃	2018年2月	〃
Profiler	〃	〃	患者臨床データの統合・管理・有効活用を可能にするプラットフォームソリューション。患者層別化による効果的な臨床試験デザイン、トランスレーショナルリサーチによる疾患メカニズム解析、創薬ターゲット探索など、プレジジョンメディシン時代の製薬R&Dに必須のデータ運用をサポート。大容量で多面的な臨床データの統合解析に最適な高機能データベース機能に加え、ゲノム等のオミクスデータ、病理画像 (Digital Pathology) の処理・解析モジュールを有する。データガバナンス維持のための緻密な設計により、患者由来データの安全管理、複数ユーザーによる解析利用が可能。大規模データの保管管理、統合データベース構築と解析利用にはData Lakeを採用。クラウド対応、Computer System Validation (CSV) 対応。各種社内・社外システムとの連携可能	〃	〃	2000年 (Expressionist)	国内外 20社弱

Expressionist	"	"	質量分析(MS)によるバイオ医薬品特性解析・QC、プロテオミクス、メタボロミクス、化合物同定をHigh Throughputにサポート、独自のワークフローシステム採用により、MS生データファイルからのアラート、ノイズ除去、ピーク検出、同位体検出、分析、解析・可視化、レポート作成に至る工程をカスタマイズ、自動化、他ユーザとの共有を可能にし、安定した再現性確保を実現。主要全ベンダーのMSデータ解析に対応。バイオ医薬品特性解析アプリケーション: Intact Protein Mass, Peptide Mapping, Host Cell Protein Analysis, Released Glycans, ADC他をサポート、MAM (Multi Attribute Methods)対応。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、スクリーニングデータ解析・管理製品、抗体製造管理システムなど、社内システム・製品等との連携も可能	Recent distribution of 64-bit Linux(CentOS, RedHat), Windows Server 64-bit minimum version 2012R2. Note that we will drop the testing and verification of Expressionist with Windows Server 2012R2 in 2019 and will use a more recent variant.	"	2000年	国内外 約70強 (Expressio nist)
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、医薬品、食品、バイオマス、マイクロバイオーム研究、製品の安全性試験 (Biosafety) 等への豊富な利用実績。バイオ医薬生産に関しては、CHO細胞株構築・ゲノム情報管理から、GMP環境下での製品のウイルス混入評価試験まで、データの解析と管理をトータルでサポート可能	同上またはASPサービス	"	2010年	国内外十数社
Biologics	"	"	主に抗体薬などのバイオリジクス研究開発におけるScreening, Engineering, Protein Production特許申請等をサポートするデータ統合管理ソリューション。欧米でのバイオリジクス研究データ管理システムのスタンダード。すべてのバイオリジクス、研究プロセス関連データを統合管理する事を可能とし、バイオリジクス関連情報 (分子、バッチ、シーケンス、アッセイ、分析情報等) を追跡可能にする。また、直接に研究機器と接続しデータやサンプルの管理を容易にする。クロウニングや機器操作等の困難な手作業のプロセスを簡素化・合理化することにより研究の効率化・高品質化が図れる	Linux Server with Windows PC	"	2011年	欧米20社 弱 UCB, Morphosys Bayer-Schering, Pfizer, Takeda, 他
Biologics Screening	"	"	スクリーニングの多様なデータ・プロセスを管理し、ハイスループットな抗体スクリーニングプロセスを実現する。プレート管理、クローントラッキング、シーケンス管理、アノテーション自動付与、ヒット選抜等の機能がある。多様な実験機器とインテグレーションし、様々なアッセイデータを取り扱える	"	"	2011年	-
Engieneering	"	"	抗体のプロテインエンジニアリング (affinity maturation, germlining, humanization, murinization, antibody reformatting / isotype switching, directed engineering等) をサポートする。コンストラクト/抗体タンパク質配列データの作成・変換、アノテーション付与を自動的に行う	"	"	2011年	-
Protein Production	"	"	抗体タンパク質生産のプロセス (molecular biology, cell line development, expression, purification, and analytics) のデータ (proteins, vectors, plasmids, cell lines, batches, analytics, QC data 等) を管理する。多様な抗体フォーマット (IgG, Fab, scFv, next-gen formats, multi-chain proteins) や修飾 (PEGylations, glycosilations, ADCs) を取り扱うことが可能	"	"	2011年	-
Cell Line Development	"	"	抗体産生細胞株のスクリーニング、各種培養条件、培地最適化等をサポートする。培養機器とインテグレーションし、培養データ解析を行う	"	"	2016年	-
Patent Application	"	"	抗体薬の特許申請をサポートする。特許申請に必要な多様な抗体データ (配列情報、ID、名称等) を管理し、特許申請の効率化、人的エラーの減少を可能とする	"	"	2015年	-
Imagence	"	"	High Content Screening (HCS) の画像解析にDeep Learningを組込んだ画期的な新ソリューション。2018年Bio-IT Worldでの Best Practices Award受賞。HCSのワークフローを加速化し、解析プロセスの標準化により再現性が向上。また、従来のアプローチで検出困難だった複雑なフェノタイプへの応用を実現する。洗練された Screener HCSのワークフローとシームレスに統合することで相乗効果を発揮する	Linux Server (SuSE Enterprise, Red Hat Enterprise, CentOS)	"	2019年	-
Bioprocess Bioreactor Module	"	"	マイクロバイオリアクター (ambr®, DasGip®等) の大規模データの統合化、計算処理の自動化、グラフによる視覚化、細胞株・バイオプロセスの複数パラメータ解析による評価を行う	Linux Server with Windows PC	"	2016年	-
Bioprocess Clone Selection Module	"	"	抗体薬などのバイオ医薬品製造の細胞株選抜におけるバイオプロセス関連データの統合管理・共有、クローン追跡、レポート・ヒットリスト作成、在庫管理等を行う。また、困難な手作業プロセスを自動化したり、研究機器と直接接続することにより、データ管理の効率化・高品質化が図れる	Linux Server with Windows PC	"	2016年	-
Bioprocess Product & Quality Module	"	"	バイオ医薬品製造の開発評価におけるバイオプロセス関連データの統合、バッチ・プロセスデータ管理、開発可能性評価サポート等を行う	Linux Server with Windows PC	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GENETYX Ver.15	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 10/8.1	お問い合わせ下さい	1996年4月	-
GENETYX-MAC (Ver.21)	"	"	Macintosh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	Macintosh(Mojave 以上)	"	1991年12月	-
ATGC (Ver.9) 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。次世代シーケンサー対応	Windows 10/8.1	"	1998年10月	-
ATGC(Ver.7) 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。次世代シーケンサー対応	Macintosh (Sierra 以上)	"	1998年10月	-
GENETYX NGS Ver.3	"	"	次世代シーケンス解析ソフトウェア	Windows 10/8.1	"	2018年4月	-
GENETYX NGS-MAC Ver.3	"	"	次世代シーケンス解析ソフトウェア	Macintosh(Mojave 以上)	"	2018年4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	-
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 (macOSは32bitのみ)	Windows、macOS(32bit)、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、macOS、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、macOS	"	-	-
CrystalKit	"	米トータルレソリューション	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	Windows、macOS	"	-	-
Crystal Studio	"	英・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	"	-	-
ChemDraw Professional, ChemDraw Prime	"	米パーキンエルマー	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、macOS	"	-	-
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ングの編集、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、macOS	"	-	-
ChemOffice+ Cloud	"	米パーキンエルマー	化学構造式描画ツール (ChemDraw Professional)、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 (Chem3D Ultra)、化学構造式を含むデータベース構築ツール (ChemFinder Ultra) で構成されたパワフルなソフトウェアパッケージ	Windows	"	-	-
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	Windows、macOS	"	-	-
EnzFitter	"	英バイオソフト	酵素反応動力学の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、macOS	"	-	-
GaussView	"	"	Gaussian用グラフィカルユーザーインターフェイス。数年ぶりの最新バージョンリリースに伴い大幅に機能強化。専用の外部モジュールGMMXを追加することで、チャレンジングな配座探索が可能	Windows、UNIX、Linux、macOS	"	-	-
(GaussView)GMMXモジュール	"	"	GaussView専用の、配座探索用モジュール。使用にはGaussViewが必要	Windows、UNIX、Linux、macOS	"	-	-
Gene Construction Kit	"	米テキストコバイオソフトウェア	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・クロニング・ツール (macOSは32bitのみ)	Windows、macOS(32bit)	"	-	-
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 (macOSは32bitのみ)	Windows、macOS(32bit)	"	-	-
Igor Pro 日本語版	"	米ウェブメトリックス	グラフ作成、データ解析、プログラミングツールを統合した科学者・技術者向けのパワフルなツール。表現力に富む高品質な2D・3Dグラフ機能に加え、カーブフィッティング、ピークフィッティング、画像解析をはじめ豊富な解析機能を搭載。プレゼン&解析を強力にサポート	Windows、macOS	"	-	-
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、macOS(32bit)	"	-	-
Tempas	"	米トータルレソリューション	マルチスライスシミュレーションと動的な電子線回折パターン、ユニットセルの自動計算等の機能を搭載したTEMイメージシミュレーションソフト	Windows、macOS	"	-	-
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、構造式表記の取り扱い可能	Windows、macOS、Linux	"	-	-
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	Windows、macOS、Linux	"	-	-
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ヤナ (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 (macOSは32bitのみ)	Windows、macOS(32bit)、Linux	"	-	-
SigmaPlot	"	米シナット	パワフルなカーブフィッティング、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	"	英オプティリアム	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、構造式-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、macOS、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	Windows	"	-	-
VIBRATZ	"	米シエイソフト 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 (macOSは32bitのみ)	Windows、macOS(32bit)、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ノード群。ChemAxonが提供するケムインフォマティクス機能の90%以上を実装	Windows XP or later、Linux、OS X 10.5 and 10.6 or later	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 8、10	"	2000年	-
Debra ADME LIMS	"	英ラボロジックシステムズ (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。タンパク結合、土壌・環境動態にも対応	Windows 8、10 Oracle	"	2003年	-
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	-
Drug Interaction Database:DIDB Platform	"	米ワシントン大学 (University of Washington)	ヒトでの薬物相互作用及び薬理遺伝学に関する論文情報(1966年以降)をFDAガイダンスに添って精査されたデータベース	Webブラウザ利用	"	2004年	-
AntiBase	"	米ワイリー (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 8、10	"	-	-
NIST 2020	"	"	NISTの大規模なGC/MSライブラリ	"	"	2020年	-
Wiley Registry 12	"	"	Wileyの大規模なGC/MSライブラリ	"	"	2020年	-
Designer Drugs 2021	"	"	麻薬・毒薬・合成薬物などのGC/MSライブラリ	"	"	2021年	-
FFNSC 3	"	"	フレーバーや香気成分のGC/MSライブラリ	"	"	2017年	-
PESTOCODES 2	"	"	農薬化合物関連のGC/MSライブラリ	"	"	2017年	-
LIPIDS 2017	"	"	脂質関連化合物のGC/MSライブラリ	"	"	2017年	-
METLIN	"	"	スクリプス研究所が構築した、メタボローム関連の大規模LC/MSライブラリ	"	"	2017年	-
KnowItAll	"	"	IR・Ramanスペクトル同定・管理ソフトウェア	Windows10	"	2020年	-
MODDE	"	スウェーデン Sartorius Stedim Biotech	実験計画と最適化のソフトウェア。ウイザードにより統計知識がなくても実験計画と結果分析が簡単にできる。MLRおよびPLSでモデリング。デザインスペース、QbDのスタンダードソフトウェア	Windows 8、10	"	1998年	-
SIMCA	"	"	多変量解析ソフトウェア。PCA、PLS、OPLS/O2PLS、OPLS-DA、マルチブロック解析(MOCA)、HCA等を搭載。分析データ解析のスタンダード。プロセス解析(PAT/QbD)でもスタンダード	"	"	1998年	-
SIMCA-Online	"	"	QbD/PATを実現するオンライン工程管理システム。SIMCAで作成した工程の多変量モデルを使ってリアルタイムに工程を管理します。バッチ工程だけでなく、連続工程にも対応	Windows。詳細はお問合せください	"	2015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。バケツ積分にも対応	Windows 8,10, Mac OS X 10.x, Linux x86	"	2006年	-
Chenomx受託サービス	"	"	1H-NMRの代謝物同定/比較定量受託サービス	"	"	2008年	-
PEAKS	"	加バイオインフォマティクスソリューションズ (Bioinformatics Solutions)	de novo、蛋白同定、翻訳後修飾解析、Mutation解析までをカバーする、トータルプロテオームソフトウェア	Windows 8、10	"	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 IM	"	"	PEAKSのオプションツール。Bruker社のtimsTOFデータ専用オプション	"	"	2018年5月	-
PEAKS Online	"	"	PEAKSをWebサーバー & クライアントで利用が可能	お問い合わせください	"	2006年	-
PEAKS ABサービス	"	"	モノクローナル抗体の実験から配列解析までを行う受託サービス	"	"	2016年	-
BioNumerics	"	ベルギー アプライドマths (Applied Maths)	微生物・細菌などを対象とした系統分類・解析ソフトウェア。PFGE/RFLP/TFLP/VNTR/MLST/MLVAなど各種実験データに対応し、系統樹解析やNGSデータの解析まで対応可能	Windows 8、10	"	2000年	-
AnalyzerPro	"	英スペクトラルワークス (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(成分抽出)、NISTライブラリ検索、独自ライブラリ作成・検索、定性解析(ノンターゲット含む)、定量解析、統計解析、多変量解析が可能	Windows 8、10	"	2009年12月	-
AnalyzerPro XD	"	"	通常のGCMS、LCMSだけでなく、GCxGCやLCxLCの2次元クロマトグラフィやDirect MS(DART)までサポートしたデータ処理ソフトウェア	"	"	2020年4月	-
KNIME	"	KNIME(スイス)	ワークフロー型データ分析プラットフォーム	Windows XP or later、Linux、OS X 10.5 and 10.6 or later	"	2010年	-
KNIME Server	"	"	Enterprise向け、ワークフロー型データ分析プラットフォームサーバー	Windows Server 2016, 2019、Ubuntu 16.04 LTS, and 18.04 LTS and derivatives、RHEL/CentOS 7.x and 8 64bit、32GB RAM、8 CPU cores	"	2010年	-

KNIMEサポートサービス	"	インフォコム	KNIME Analytics Platformに関するご質問に対してメールにて回答を行うサービス	"	"	2019年7月	-
ViewContacts Standalone	"	豪デザートサイエンティフィックソフトウェア (Desert Scientific Software)	Protein-Ligand 複合体の非共有結合性相互作用解析ツール	サーバー: Linux (RHEL7以降) クライアント: Windows, Linux, Mac OS X	"	2012年4月	-
Viper Standalone	"	"	リガンド設計ソフトウェアスイート。ViewContactsとScorpion(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)を含む	"	"	2012年4月	-
Proasis 4	"	"	Protein-Ligand複合体の立体構造及び周辺情報を格納するRDB、視覚化、解析プラットフォーム	"	"	2012年4月	-
CASE Ultra	"	米マルチケース (MultiCASE)	2次元構造から 遺伝毒性、発癌性、肝毒性など様々な毒性の予測を行う。変異原性不純物評価のICH M7ガイドラインにも対応し、相補的なルール・統計モデル、エキスパートレビュー支援機能あり	Windows 8.x, 10	"	2009年12月	-
META Ultra	"	"	2次元構造から化合物の代謝反応および代謝物の予測を行う	"	"	2016年10月	-
Elements for Metabolomics	"	米プロテオーム・ソフトウェア	大規模なMSメタボロミクスデータを効率的に処理・可視化・ライブラリ検索する解析プラットフォーム	Windows 8, 10の64bit版	"	2016年5月	-
ToxPlanet	"	米Timberlake Ventures	化学物質の毒性・有害性情報を包括した統合検索プラットフォーム	Webブラウザ利用	"	2017年	-
msRepeatFinder	"	日本電子	高分解能質量分析計で取得された合成ポリマーのマススペクトルをKendrick Mass Defect法を用いて視覚化・解析するソフトウェア。Fraction base KMD, Remainder of KM (RKM) など最新手法も搭載	Windows 10	"	2019年1月	-
MiXCR	"	米MILaboratories	TCR/BCRレバア解析用ソフトウェア	Windows, Linux, Mac OS X (Java8以降が必要)	"	2020年4月	-
MIGEC	"	"	レバアシーケンスデータ用エラー修正ソフトウェア	"	"	2020年4月	-
VDJTools	"	"	レバアシーケンスデータ事後解析・可視化ソフトウェア	"	"	2020年4月	-
Pirouette	"	米InfoMetrix	ケモトリックス用ソフトウェア	Windows 8, 10	"	2020年4月	-
AILANI	"	独Biomax Informatics	セマンティックモデリング、オントロジー、自然言語処理技術、AIアルゴリズムを組み合わせた高度なセマンティックサーチシステム	お問い合わせください	"	2019年12月	-
BioXM	"	"	社内外の研究データ(論文、実験データ、化合物データ、遺伝子データ等)を検索・抽出・解析し、データ間の因果関係を視覚的に表現し知識として活用するデータ解析プラットフォーム	お問い合わせください	"	2019年12月	-
NICARA	"	"	コネクトーム解析ソフトウェア	お問い合わせください	"	2020年10月	-
Chemical Analyzer	"	米ViridisChem	グリーンケミストリーの概念を元に開発された世界最大規模のデータベースと独自のディープラーニング技術による化学物質の毒性予測プラットフォーム	お問い合わせください	"	2020年5月	-
KNIME 機械学習自動化パッケージ	"	インフォコム	機械学習の知識がない方でも、画面のガイドに従って設定するだけで手軽に予測モデルを構築可能とするKNIME Serverのオプションパッケージ	お問い合わせください	"	2021年5月	-
KNIME 日本語スターターパック	"	"	KNIME Analytics Platformをご利用いただく際に便利な日本語ガイドや日本語サンプルワークフロー、初心者向けトレーニング動画等をまとめて提供	お問い合わせください	"	2021年5月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Deep Quartet	インテージヘルスケア	インテージヘルスケア 理論創薬研究所 アフィニティサイエンス	深層強化学習の技術である(1)Deep Reinforcement Learning, ファーマコフォアモデルを用いるソフトウェア(2)LigandScout, 網羅的なターゲット予測を可能とする機械学習ベースの技術(3)CzeekSを組み合わせた一連のフローによるサービス提供を行う	Linux	詳細問い合わせ	2019年10月	-
CzeekS	"	インテージヘルスケア	ビッグデータを利用した相互作用マシンラーニング法(GGBVS)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であり、標的予測などにも利用可能である	"	"	2012年10月	-
CzeekD Pro	"	"	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GGBVS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となっている	"	"	2015年6月	-
ReCGEN	"	"	ECFPフラグメントを用いた構造生成ツール。フラグメントDB作成、DBマージ、構造生成の3つの機能を提供している。ECFPフラグメントを用いた構造生成の特徴は次の通り(RECAP法と比較)。(1)新規性の高い化学構造を発生できる (2)緻密な構造変化が可能であり、参照化合物周辺の構造を限らず発生できる	"	"	2018年5月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GSD-Core	化学情報協会	英The 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(110万件以上)。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、統計解析機能も充実。GSD Python APIに加え、一部機能についてはPipeline PilotやKNIMEにも対応。創薬、製剤、材料開発に幅広く活用可能。2020年12月にGSD-Systemから改名	Windows PC, Linux, 一部 Mac	定額制(詳細はお問い合わせください)	-	-
GSD-Discovery	"	"	定番のGSD-Coreに加え、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GOLD、実験データに基づくConformer Generator、Ligand Overlay、Ligand ScreenerなどLBDD向けの新機能も充実。GSDおよびPDBのデータに対し、ファーマコファー検索可能なGSD-CrossMinerは、2018年4月にリリース。GSD Python APIを使ったワークフローの構築も可能	Windows PC, Linux, 一部 Mac	"	-	-

CSD-Materials	"	"	定番のCSD-Coreに加え、粉末X線回折パターンからの結晶構造解析ソフトDASHやCSD由来のSolid Formツールをセットで提供(DASHは、2021年まで付属予定)。110万件の実験データに基づくMachine Learningの手法を用いたHydrogen Bond PropensityやMulti-Component Screeningは、CCDCならではのツールである。Hydrate & Solvate Analyserは結晶構造の理解に役立つ。結晶成長、材料設計、製剤開発に活用可能	Windows PC, Linux, 一部 Mac	"	-	-
CSD-Enterprise	"	"	CSD-Core、CSD-DiscoveryとCSD-Materialsを合わせたスーパーセット。Drug Discovery、Drug Development、材料設計のための総合ツール	Windows PC, Linux, 一部 Mac	"	-	-
ICSD	"	独FIZ Karlsruhe	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(24.2万件以上)。全てのレコードに3次元原子座標データを収録。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。リート解析の初期構造としての利用に有効。検索、結晶構造表示ソフト、原子間距離分布のヒストグラム機能付き。2020年2月にオプションのAPIサービスが開始され、マテリアルズ・インフォマティクスへの活用に便利に	Windows PC, 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(19.0万件以上)。含有元素、組成式、検索、結晶構造表示ソフト付。粉末X線回折パターンのピーク位置より検索が可能。合金の収録に定評あり	Windows PC	"	-	-
ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams	"	米The American Ceramic Society (ACerS)、米 NIST	セラミックスやガラスなど、無機材料の状態図データベース(3万件以上)。全てのレコードに、セラミックスの専門家による解説と応用例の記載あり。モル比と質量比の間で軸の変換が可能な状態図解析ソフト付き	Windows PC (USB), web	USB買収、web定額制(詳細はお問い合わせください)	2021年3月	-
ASM Alloy Phase Diagram Database™	"	米ASM International	二元系および三元系合金の状態図データベース(4万件以上)。各相の結晶学データや反応に関するデータも収録。含有元素のドロップダウンリストからの選択により簡単に検索可能。合金の製造管理、新素材の開発に活用可能	web	定額制(詳細はお問い合わせください)	-	-
NIST20	"	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、タンデム質量スペクトル(MS/MSスペクトル)のライブラリも付属。NIST17の後継版。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	DVD買収(詳細はお問い合わせください)	2020年6月	-
Wiley Registry	"	米Wiley	Wiley社が独自に収集した、電子イオン化質量スペクトルデータベース。NIST20と比べ、約2倍のスペクトル・化合物を収録し、データの充実度は世界最大級。NIST20との統合版あり	Windows PC	"	2020年9月	-
天然物辞典シリーズ	"	英・米Taylor & Francis Group / 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 Registry Number [®] 、生物学的起源、安全性情報などを収録したデータベース。1つのレコードに誘導体や立体異性体の情報も併せて収録。天然物辞典(化合物32.3万件以上)の他に、分野ごとに特化した5種類の辞典と統合版の化合物大辞典がある	Windows PC, web	定額制(詳細はお問い合わせください)	-	-
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	web	"	-	-
GENBANK	"	National Center for Biotechnology Information (NCBI) (STN経由)	米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	web	"	-	-
ICSD	"	FIZ Karlsruhe (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	web	"	-	-
REGISTRY	"	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)	web	"	-	-
Biosequence Search	"	CAS (STNNext経由)	3つの配列検索プログラム、BLASTホモロジー検索、相補性決定領域(CDR)配列検索、モチーフ配列検索、が利用可能。CASが独自に収集した配列データに加え、7つの主要特許発行機関の特許から抽出した配列データから検索可能	web	"	-	-
DGENE	"	Clarivate Analytics (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	web	"	-	-
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	web	"	-	-
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	web	"	-	-
CAS SciFinder [®]	"	CAS	世界中の大学・企業で利用される化学研究者向け検索ツールのスタンダード。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構造の検索が可能。新機能として、配列検索機能のほか、化学構造の類似性により解析したマップを作製するChemscape [®] が追加された	web	定額制(詳細はお問い合わせください)	-	-
CAS Analytical Methods	"	"	膨大な文献コレクションから分析手法を収録した世界最大の実験プロトコルデータベース。分析手法に関する物質の詳細、使用機器、手順などを簡単に検索できる	web	"	-	-
CAS ChemZent	"	"	世界最古のドイツ語の化学抄録誌であるChemisches Zentralblatt(1830-1969)をCAS SciFinder [®] から検索可能。化学史上重要な1800年代の論文・特許の情報をコンテンツに加えることで、より包括的な化学データベースとしてSciFinder [®] nを利用できる。※CAS SciFinder [®] のオプション契約として提供	web	"	-	-

CAS Formulus	"	"	日常的に製剤設計や配合関連業務に従事する専門家向けにCASが開発した、製剤・配合情報に特化した検索サービス。FDA Orange Bookをはじめとする世界中の規制情報も掲載。新機能 Formulation Designer が追加された	web	"	-	-
CAS Scientific Patent Explorer	"	"	化学物質情報と広範な特許情報を組み合わせた特許調査ツール。化学特許にはCASが保有する概念語・化学物質の索引、製剤配合情報、反応情報などの付加価値情報が付与されている	web	"	-	-
JAICI AutoTrans	化学情報協会	日本特許翻訳、化学情報協会	海外特許・文献抄録・論文・技術文書などを日本語でスムーズに内容把握できる機械翻訳サービス。JAICI 開発の化合物表記翻訳技術を組み入れた高精度な機械翻訳で、化学系をはじめとする特許や文献翻訳を短納期で提供。複数あるメニューから文書の種類やファイル形式に応じて、希望のメニューを選択可能	web	詳細はお問い合わせください	2018年1月	-
JAICI ProTranslator	"	"	高品質の機械翻訳を下訳として利用し、翻訳文書の仕上げを簡便に行えるサービス。化学系をはじめとする海外特許・文献抄録・論文・技術文書などの機械翻訳も可能。翻訳支援ツールとの連携、対訳を学習させた翻訳エンジン、蓄積した用語集の使用などで、さらに品質向上が図れる。翻訳言語方向が多岐で、しかも双方の翻訳が可能	web	"	2020年9月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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:9万円(税別)	-	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:6万円(税別)	-	1,000社以上
SDSライブラリ	"	"	労働安全衛生法、毒物及び劇物取締法、PRTR法のそれぞれの法令において指定される化学物質に関して、定められた形式のSDSの作成・配布が義務付けられている。SDSの配付に活用できるだけでなく、SDSの管理も役立つ機能を搭載した化学情報ポータルサービスを提供	インターネットブラウザ	無料	2017年	-
LOLIデータベース	"	米UL	世界130ヶ国以上を対象にした6,000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	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	-	-
Universal GATE	"	日本ケミカルデータベース	国内・海外の化学品管理に必要な各種データベース、システム製品、サービス、専門研究員によるノウハウを結集した海外向けSDS作成支援システム ●対応国:東アジア、東南アジアを含む8カ国 EU、US、カナダ(追加オプション)	Windows Server Oracle	"	2016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	スタンドアロンのノートPC	月額利用料:12万円(税別)※要詳細問合せ	2008年	-
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での出力、英語SDS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	クラウド(インターネット環境)、ブラウザ(IE7~10)、MS/Excel	月額利用料:6万円~(税別)※要詳細問合せ	2014年	50社以上
法規制データパッケージ	"	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	-	-
e-CMS Online	"	韓国TO21	・韓国における化学物質の登録、評価(K-REACH)に関する法律など主要13法規を掲載。・CAS番号、化学物質名から検索ができます。化学物質名は日本語でも検索可能。各法規の詳細は、日本語で表示。・WEBベースのため、随時更新。常に最新情報を提供	インターネットブラウザ	年間利用料金:5万円(税別)	2016年	-
ExESS	日本ケミカルデータベース/江守情報	(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	-	御問合せ下さい	-	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。PBSなどのジョブ管理システムとのインターフェイスも有しており、J-OCTAから計算サーバにダイレクトにジョブを投入することができる	・Windows8.1(64bit)、Windows10(64bit) ・マルチコアCPU推奨・メモリ16GB以上推奨 ・HD200GB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)、2015年3月(V1.9)、2016年3月(V2.0)、2017年3月(V3.0)、2018年3月(V4.0)、2019年5月(V5.0)、2020年4月(V6.0)	-

SIESTAモデラー	"	"	第一原理ソフトウェアSIESTAを用いて、種々の計算を行うためのGUI、一点計算、構造最適化、バンド、DOS、NEB (Nudged Elastic Band)、EOS (Equation Of State)、振動解析、フォノン解析などが可能	"	"	2020年5月	-
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。CIFやPDB形式などの外部のモデルデータに加え、SMILES表記の読み込みも可能。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。COGNACモデラー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。外部の分子動力学ソルバー(LAMMPS、GROMACS、HOOMD-blue等)とのインタフェースも含まれる。分子動力学で得られた結果を、STL等の形式で出力し、FEMソフトウェアで読み込むこともできる。COGNAC並列計算に対応している。COGNACの計算結果を解析するためのポスト機能も含まれる	"	"	"	-
PASTAモデラー	"	"	高分子材料のレオロジー特性(粘性、粘弾性)を予測するための、レプテーションダイナミクス法に対応するモデラー。分子量分布を有する高分子の粘性、粘弾性について予測できる	"	"	"	-
NAPLESモデラー	"	"	高分子材料のレオロジー特性(粘性、粘弾性)を予測するための、プリミティブチェーンネットワークモデルに対応するモデラー。高分子鎖の複雑な形状(直鎖状、分岐、楕円形、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。NAPLES並列計算に対応している	"	"	"	-
SUSHIモデラー	"	"	動的・静的平均場法に対応するモデラー。高分子材料を混合する場合の相分離の予測、ミセルの形態など、高分子の相互作用による相構造などを予測できる。また、化学構造式をもとに、相互作用パラメータ(χ パラメータ)を推算する機能もある。SUSHI並列計算に対応している。SUSHIの計算結果を解析するためのポスト機能も含まれる	"	"	"	-
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。相分離構造をボクセルメッシュで出力し、材料や計算条件を付加した上で、LS-DYNAをダイレクトに実行することも可能。MUFFINの計算結果を解析するためのポスト機能も含まれる	"	"	"	-
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KRI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。本機能を用いて高速にアモルファス構造を作成する機能も提供される	"	"	2011年3月(V1.5)	-
相図からの χ 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 χ 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)	-
SIESTA界面エネルギーインタフェース	"	"	第一原理ソフトウェアSIESTAとのインタフェース。J-OCTAでモデリングした無機材料の表面構造と有機分子の間の界面エネルギー曲線を、簡単に計算することが可能となる	"	"	2018年3月(V4.0)	-
機械学習による物性推算機能(QSPR)	"	"	SMILES表記で記述された化合物の分子構造を入力として、密度、ガラス転移温度、特性比などの物性値を、機械学習を用いて推算する。実験などで得られた物性値を与えることで、独自に学習させることも可能	"	"	2019年5月(V5.0)	-
分子モデリングAPI	"	"	GUIを使わずに、Pythonスクリプトのインタフェースを用いて、分子動力学用のモデルファイルを作成することができる。SMILESやMOL形式のモデルを読み、力場のアサイン、ポリマー化、バルクモデルの作成などが可能	"	"	2019年9月(V5.1)	-
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クラスターなどのマシン環境を想定	OS : Red Hat Linux 6.7 (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)、2015年3月(V1.9)、2016年3月(V2.0)、2017年3月(V3.0)、2018年3月(V4.0)、2019年5月(V5.0)、2020年4月(V6.0)	-

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: Windows8.1 (64bit)、 Windows10(64bit) MPI: MPICH2、MS-MPI	"	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)、2015 年3月 (V1.9)、2016 年3月 (V2.0)、2017 年3月 (V3.0)、2018 年3月 (V4.0)、2019 年5月 (V5.0)、2020 年4月(V6.0)	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
J-GLOBAL(日化辞)	科学技術振興機	科学技術振興機	科学技術振興機構(JST)が作成する日本化学物質辞書(日化辞)を無料で公開するデータベース。約375万の有機化合物およびその混合物の、物質の名称、分子量、構造情報、各種法規制番号等を収録。化学物質名称や分子式などからの文字列検索、および化学構造検索が無料で可能。2016年3月に日化辞WebとJ-GLOBALが統合。 (https://jglobaljst.go.jp/#%7B%22category%22%3A%227%22%7D)	●Windowsをお使いの場合 <推奨OS>・Windows 8/10 <推奨ブラウザ>・Microsoft Internet Explorer 11.x、Edge・Mozilla Firefox 最新版・Google Chrome 最新版 ●Macintoshをお使いの場合 <推奨OS>・MacOS X <推奨ブラウザ>・Safari 最新版	-	2016年3月	-
NBDC NikkajiRDF	科学技術振興機構バイオサイエンスデータベースセンター	科学技術振興機構バイオサイエンスデータベースセンター	外部データベースの化合物のマッピング情報などを付加したJ-GLOBAL化学物質(日化辞)のRDFデータ。生命科学系データベースアーカイブ(https://doi.org/10.18908/lsdba.nbdc01530-02-000)からデータのダウンロード、NBDC RDF Portal(https://integbio.jp/rdf/?view=detail&id=nikkaji)からデータのダウンロードとSPARQL検索が可能	各種ブラウザ	-	2015年5月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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」。構造、振動、伝熱、流体、電磁気、化学(電気化学を含む)といった、さまざまな分野から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、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によりバリエーションの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自身で行える。2018年10月リリースのバージョン5.4では新製品のCOMSOL Compiler(オプション品)が追加された。これによりApplication Builderで作成したCAE解析アプリを、Windows / Linux / macOSの各OS上で単独動作できる実行形式ファイルに変換できる。この実行形式アプリの配布ライセンスは無料で、COMSOL製品がインストールされていないPCや、ネットワークにつながらないオフラインのPCでも動作できる。これにより組織内での様々な開発段階においてCAEアプリの共有が容易になった	OS: Windows/Linux/macOS (いずれも64bitOSが必要)、メモリ:最低限1GB(実用上はCPUコア数×4GBまたはそれ以上の搭載を推奨。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	-
COMSOL Compiler	"	"	COMSOL Multiphysicsに添付のApplication Builderで作成した解析アプリを、Windows/Linux/macOSの各OS(64bit版)上で動作可能な実行形式ファイルに変換する、COMSOL Multiphysicsへのアドオン製品。(オプション品) 本製品で変換された実行形式ファイルは、起動時のライセンス認証が不要、保有しているCOMSOL Multiphysicsのライセンス数に関わらず複製可能、無償配付可能、またオフラインのPC上でも動作可能なため、解析アプリの利用環境の選択肢が広がる	動作要件はCOMSOL Multiphysicsと同じ	1年間のタムライセンスを提供。アカデミック/コーポレート同価格。	2018年10月	-
COMSOL Server	"	"	COMSOL Multiphysicsに添付のApplication Builderで作成した解析アプリをWebアプリとしてネットワーク経由で配信するためのWebアプリケーションサーバソフトウェア。(オプション品、クラウド環境にも設置可能) 本製品を利用して配信されるデータの閲覧、操作は、WebGL対応のブラウザを搭載した端末であれば、シンクライアントPCだけでなく、iPadやAndroid、Windowsタブレットも利用可能。端末でパラメータ変更して、再計算し、結果を3D画面表示やレポートとして取り出すことができ、CAEモデルの社内共有や外出先でのプレゼンなどが、CAE用機材とモデルを持ち出さなくても活用できる。計算はホスト側のCOMSOL Serverおよび連携するHPCで行うので、通信データ量が少なく、モバイルルータ等で接続して運用できる	OS: Windows/Linux/macOS (いずれも64bitOSが必要)、メモリ:最低限1GB(実用上はCPUコア数×4GBまたはそれ以上の搭載を推奨。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)	2014年11月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
KeyMolnet	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。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・利用した検索も可能	Linux(サーバ)、Windows(クライアント)	詳細お問い合わせ	2003年4月	-
KeyMolnet Lite	"	"	ノードロック版(アカデミアのみ)	Windows	"	2007年2月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NMRPipe	エルエイシステムズ	米NIH	高速多次元NMRデータ処理および解析プログラム。代表的なNMR装置のFIDファイルに対応する	Linux,MacOSX	御問合わせ下さい	-	-
PCA/HSQC	"	"	NMRPipeシリーズのモジュールの一つで、測定実験などの2D-NMRスペクトルによる評価をサポートし、ドラックデザインなどで効力を発揮するツール	"	"	-	-

DYNAMO	"	"	NMRPipeシリーズ、シミュレーテッドアニーリング法を使いNMRデータからマクロ分子や複合体の立体構造の計算が可能	"	"	-	-
1D STD SYSTEM	"	"	NMRPipeシリーズ、自動 1D バッチプロセスおよびSTD(飽和移動差スペクトル)分析用のツール	"	"	-	-
CYANA	"	Peter Guntert 他(スイス)	NOE掃蕩を考慮した、タンパク質構造解析・計算ソフトウェア	Linux,MacOSX	200万円(コマmercial)、8万円(アカデミック)	-	-
Mnova NMR	"	スペイン Mestrelab Research	NMRの1D,2Dプロセッシング、解析などを行うソフト。印刷イメージのままNMRプロセッサができ、PowerPoint的なレポート作成機能を持ち、自動プロセス機能が優れているので、初心者にも使いやすい。5ライセンス以上の割引引き。サイトライセンスもある	Windows, MacOSX, Linux	御問合わせ下さい	-	-
Mnova NMRPredict Desktop	"	"	MnovaNMRのプラグイン。化学構造式から1D および2D NMRスペクトルを予測する	"	"	-	-
Mnova MS	"	"	Massスペクトル解析ソフトウェア	"	"	-	-
Mnova qNMR	"	"	MnovaNMRの定量NMR(qNMR)用プラグイン製品	"	"	-	-
Mnova Verify	"	"	Mnovaデータ上での構造検証用プラグイン製品	"	"	-	-
Mnova qNMR	"	"	MnovaNMRの定量NMR(qNMR)用プラグイン製品	"	"	-	-
Mnova RM	"	"	MnovaNMRでの反応の経時変化監視用(RealtimeMonitoring)用プラグイン製品	"	"	-	-
Nuts	"	米AcornNMR	NMRデータ処理。1Dおよび2Dのデータ処理が可能。2D データ処理を高速に行えるアレイドモード・モジュール付属。ほぼ全てのスペクトルメータに対応する	Windows,MacOSX	"	-	-
ChemSketch	"	加ACD	化学構造式、図形を描写するドローソフトウェアの単体製品。化合物の名称から構造を検索できる Dictionary 機能付属。ほとんどのデータ処理製品に付属する	Windows	"	-	-
Name	"	"	構造式からIUPAC/OAS Index ルールに基づき化合物名を命名、化合物名から構造式を検索・出力が可能	"	"	-	-
Aldrich NMR Library	"	"	NMR Manager プラグイン。約35,000件のAldrich試薬の 1D C/H NMR スペクトルデータを収録が可能	"	"	-	-
Polymer Database	"	"	NMR Manager プラグイン。約430件の高分子化合物の 1D C/H NMR スペクトルデータを収録が可能	"	"	-	-
Spectrus Processor	"	"	NMR, LC/GC/UV/MS, IRのスペクトル解析	"	"	-	-
NMR Predictors	"	"	構造式から1H, 13C, 15N, 19F, 31PのNMRスペクトルを予測	"	"	-	-
NMR Workbook Suite	"	"	1D、2D NMRのプロセス、予測、DB作成のセット製品	"	"	-	-
Structure Elucidator Suite	"	"	NMR, MSから統合的な未知化合物の構造決定をおこなうためのセット製品	"	"	-	-
Automated Structure Verification	"	"	各種スペクトル等の情報から未知化合物の自動構造決定をおこなうためのセット製品	"	"	-	-
MS Manager Suite	"	"	クロマトピークとMS、IR-UVなどの連携解析が可能な、MS Manager、ChromManager、UV-IR Manager のセット製品	"	"	-	-
MS Fragmenter	"	"	構造式からMSのフラグメント分布を予測	"	"	-	-
MS Workbook Suite	"	"	MSデータのプロセス、構造解析のセット製品	"	"	-	-
AutoChrom	"	"	シミュレーションと実測データからクロマトグラフィー分離条件を最適化	"	"	-	-
ChromGenius	"	"	構造式からクロマトグラフィーによる分離条件を予測	"	"	-	-
Percepta Physchem Suite	"	"	構造式からlogD、pKa、溶解度、沸点などの物性値を予測するセット製品	"	"	-	-
ADME Suite	"	"	Percepta Physchem Suiteに加え製薬企業向けにADME特性を予測	"	"	-	-
Percepta Ecotox Suite	"	"	Percepta Physchem Suiteに加え毒性、環境リスクを予測	"	"	-	-
Percepta impurities Suite	"	"	Percepta Physchem Suiteに加え不純物、分解産物を予測	"	"	-	-
Percepta Suite	"	"	構造式から物性値、毒性などを予測するすべてのセット製品	"	"	-	-
LCModel	"	加LCMODEL Inc.	MRIの1H MRスペクトルからカーブフィットにより脳内の代謝物(クレアチン、コリン、Nアセチルアスパラギンなど)の自動定量解析を行うソフトウェア。オプション設定で、肝脂肪、筋細胞脂肪、乳腺脂肪などの解析も可能	Linux	"	-	-
Analyze/Analyze Pro	"	米Mayo Clinic	バイオメディカルイメージングソフトウェア。MRI、CTなどのさまざまな医療画像の読み込みに対応しており、ボリュームレンダリング、サーフェスレンダリング、セグメンテーション、ムービー作成など3D画像の高速表示、加工、データ作成に優れている	Windows,MacOSX,Linux	"	-	-
Myrian®ImagingLayer	"	仏イントラセンス (Intrasense)	マルチモダリティワークステーション。最高の読影効率を目指したカスタマイズできるプロトコルでワークスペースを自動的に整理。MPR、MIP、MinIP、オブリック、複数シリーズの連動表示機能などを搭載。PACSと連携できる新世代のワークステーション	Windows	"	-	-
Myrian®Studio	"	"	Myrian platformをベースとしたユーザーカスタマイズ可能な開発キット	"	"	-	-
Myrian®XL-Onco	"	"	癌フォローアップ用の理想的なソフトウェア。放射線科だけでなく、全ての診療科でご利用可能。フォローアップの必要ステップ(ベースライン作成、検査比較、レポート作成)の自動化で読影医の負担軽減。前のエピソードを自動的にPACSから読み込み、新しいエピソードと高速比較するために非剛体レジストレーションを実行。また、指定された国際評価基準に沿って(RECISTなど)、治療のレスポンスも自動的に計算。フォローしている患者の情報を確認では、全てのエピソードの測定結果、グラフや主要画像などを数秒で表示する	"	"	-	-

Myrian®XP-Liver	"	"	世界的な実績と評価を得ている肝臓解析と手術計画用ソフトウェア。独自アルゴリズムで肝血管、肝実質、腫瘍などを数秒で抽出。抽出された領域の測定結果は3D画面に表示され色と透明さを調整することで目で患者の解剖を把握。複数の手術シナリオを容易に作成可能	"	"	-	-
Myrian®XP-Prostate	"	"	MRI前立腺検査に必要なすべてのツールを搭載。ESUR国際ガイドラインに沿った多重パラメータによる画像解析。シリーズの自動選択や同期機能。新規サブトラクションやADCシリーズ作成可。すべてのシリーズにおいて同じピクセルの表示機能や時間強度曲線などを搭載。腫瘍を一目で発見し組織の性状を評価。Myrianマルチモダリティ環境により別モダリティのシリーズと比較することも容易。連携したレポートを自動生成可能	"	"	-	-
Myrian®XP-Breast	"	"	MRI乳腺検査読影に最適なソフトウェア。術前化学療法準備、診断又はインプラント評価などに、ACRガイドラインに沿った読影レイアウトが順次表示され効率的なシリーズの比較可能。また、Myrianのマルチモダリティ環境により異なるモダリティのシリーズ(マンモグラフィ、超音波など)をワークスペースヘッダラッグ アンド ドロップでロード可能	"	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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、蛋白質質量解析機能装備	Windows、Linux	お問合せ下さい	1999年	-
Mascot Cluster	"	"	Mascot Server のクラスターシステム版。高速、大量データ処理が可能	"	"	1999年	-
Mascot Distiller	"	"	質量分析装置のRAWデータより、独自アルゴリズムで、モノアイソピックピークを生成。DeNovo解析、ラベルフリーをはじめとする定量解析も可能	Windows	"	2005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 5	"	米プロテオームソフトウェア	蛋白質同定検索エンジンの結果を取り込み、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	Windows、Linux、Mac	お問合せ下さい	2010年	-
Scaffold Q+S	"	"	蛋白質同定検索エンジンの結果を取り込み、定量解析を行うソフトウェア	"	"	2012年	-
Scaffold PTM	"	"	蛋白質同定検索エンジンの結果を取り込み、翻訳後修飾解析を行うソフトウェア	"	"	2011年	-
Scaffold LFQ	"	"	大規模解析における、Scaffold解析結果の一覧表示とフィルタリングを行うソフトウェア	"	"	2013年	-
Scaffold Elements	"	"	アンターゲットド・メタボロミクス解析ソフトウェア。グラフィカルな解析環境を提供	Windows	"	2015年	-
Scaffold DIA	"	"	DIA手法による定性/定量プロテオミクス解析において、RAWデータ読込から、統計解析・グラフ表示までの一連作業が行えるソフトウェア	"	"	2018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
Homology Modeling Professional for HyperChem (with Gaussian Interface for HyperChem and ONIOM Interface for Receptor)	分子機能研究所	分子機能研究所	統合分子設計支援システム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、溶媒と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。最新版ではGaussian用ONIOMインターフェイスが大幅機能強化され、複雑な生体高分子システムのジョブファイルが全自動で準備でき、QM/MM計算で構造最適化の後に全系量子化学計算用初期構造が準備できる。さらに、フラグメント分子軌道計算プログラムABINIT-MP (BioStationViewer) /GAMESS(Fu/Facio)および分子動力学計算プログラムNAMD (VMD)と互換性を確保し、シームレスにこれら外部プログラムと連携して最先端インシリコ創薬を支援できる	OS: Windows (Windows10 最新バージョンで正常動作を確認済み); HyperChem for Windows (必須)、Gaussian (任意: 全機能を利用する場合のみ必要)	アカデミック: 10万円(税別)~/年、詳細はお問い合わせください	2005年12月 最新版H11は2018年2月 出荷開始(マイナーアップデート版は2019年11月出荷開始)	本製品を使用した査読論文、特許などの成果複数あり
Docking Study with HyperChem (with AutoDock Vina In Silico Screenings Interface) 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: パーチャルスクリーニングシステム)	"	"	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、パ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リガン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。高精度リガンド結合部位予測技術に基づく予測構造ベース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、標準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、シミュレーション中で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、リスト機能、溶媒と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。最新版ではAutoDock Vinaを用いた化合物無制限インシリコスクリーニングのための全機能(化合物データベース整備-ファイル準備-スクリーニング-ヒット絞り込み-閲覧解析)を搭載したインターフェイスが利用でき、また、rDockなどSDFファイル形式で実行するドッキングソフトとの互換性も追加し、Docking Studyモジュールが搭載する各種ドッキング・スクリーニングアルゴリズムと組み合わせ、高精度ドッキング・パーチャル・インシリコスクリーニングが実施できる	OS: Windows (Windows10 最新バージョンで正常動作を確認済み); HyperChem for Windows (必須)	アカデミック: 10万円(税別)~/年、詳細はお問い合わせください	2006年6月 最新版H11は2018年2月 出荷開始(マイナーアップデート版は2019年11月出荷開始)	本製品を使用した査読論文、特許などの成果複数あり

HyperChem	"	米ハイパーキューブ	費用対効果の高いデファクトスタンダード統合分子設計支援システム。あらゆる分子種を表現可能な平面分子作図機能、自動三次元化機能、自動水素付加機能、自動力場設定機能、アミノ酸(タンパク質)・核酸・糖・ポリマーエディタ・クリスタルビルディング機能など卓越した分子モデリング機能。各種の分子力学計算、半経験分子軌道法、量子力学計算、密度汎関数法、分子動力学計算、モンテカルロ法、様々な種小化アルゴリズムが利用できる網羅的計算化学環境。10万原子を超える複雑系モデリング・シミュレーションが可能。600以上の内部コマンドを制御してアプリケーション開発できるスクリプト機能、豊富なレンダリング機能、ユーザーによる機能拡張性、各種ファイルフォーマットに対応した互換性などが特徴	OS: Windows(Windows10 最新バージョンで正常動作を確認済み), Mac, Linux	複数のライセンス形式があります。詳細はお問い合わせください	2007年6月最新版は2011年出荷開始	本製品を使用した査読論文、特許、書籍などの成果多数あり
MFDD-インシリコ創薬受託研究サービス	"	分子機能研究所	独自開発した構造ベース創薬システム及び国内外オープンソースプログラムと商用プログラムを使用したインシリコ創薬受託研究サービス: タンパク質二次構造予測、ホモロジーモデリング、立体構造予測、生体高分子システムモデリング、分子動力学シミュレーション、リガンド結合部位予測、精密ドッキングスタディー、バーチャルスクリーニング、インシリコスクリーニング、化合物データベース整備、ドラッグデザイン、リード最適化、類似化合物探索、リガンドベーススクリーニング、分子設計、生体高分子システム全系量子化学計算、生体高分子システムONIOM(QM/MM)計算、低分子計算化学、その他メカニズム解析など、各手法を個別または組み合わせた受託研究。その他、個別テーマに対する依頼講演、セミナー、出張講演などにも対応	-	アカデミック: 10万円(税別)〜、一般: 20万円(税別)〜、詳細はお問い合わせください	2003年7月から提供開始	Science, 319, 624, 2008を筆頭に、査読論文公開、特許取得事例複数あり
受託計算サービス	"	"	計算化学の初心者、計算化学に時間を取られないウエット実験者、高価なソフトウェアと計算機のインフラ整備でお悩みの方に代わって分子量1000程度までの中低分子について比較的単純な計算をリーズナブルな費用で代行するサービス。主に協会の米Gaussian社のGaussian、GaussViewと米Hypercube社のHyperChemを使用。構造最適化計算、分子動力学計算、分子軌道計算、コンフォメーション探索、励起状態計算、ケミカルシフト予測、赤外吸収波長予測、紫外吸収波長予測、溶解効果、LogP計算、イラスト素材作成など	-	1万円(税別)〜、詳細はお問い合わせください	2019年12月から提供開始	複数の実施例あり
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	モルシス	加ケミカルコンピューティンググループ(CCG)	創薬、生命科学研究のための統合計算化学プラットフォーム。多様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/QSPR解析、ファーマコフォア解析、タンパク質・抗体・ペプチド・核酸モデリング/デザイン、Structure-Based Drug Design、Fragment-Based Drug Designなどの解析機能を持ち、計算化学者から実験研究者まで様々なユーザーが利用可能	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、類似二次構造検索、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二次元表示、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	-
Chemotargets Clarity	"	西ケモターゲツ	薬理活性・安全性予測プラットフォーム。既存医薬品の薬理情報と安全性情報の検索、FAERSデータ検索、医薬品の母核置換支援、新規候補化合物の薬理活性・安全性予測	Windows、Linux	-	2017年5月	-
OFF-X	"	西バイオインフォゲート	医薬品のターゲット(分子作用機序)と有害事象で分類された包括的な医薬品安全性アラートサービス。潜在的な安全性の問題を未然に防ぐことを支援	Webサービス	-	2016年10月	-
FlexX	"	独バイオソルブアイティ	ドッキングスタディソフトウェア。結合部位中でリガンド結合構造を高速に構築。ファーマコフォア、テンプレートをを用いたドッキングも可能。	Windows、Linux、Mac	-	2018年3月	-
FTrees	"	"	官能基の物理化学的特性とそれを結合した木構造(Feature Trees)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を用いて類似構造をデノボ構築。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	Windows、Linux	-	2007年11月	-
FlexS	"	"	リガンドの重ね合わせ とバーチャルスクリーニングを行う分子ライメントソフトウェア	"	-	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ンメントされた仮想化合物ライブラリを構築する。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二次元ダイアグラムを自動生成	"	-	2012年2月	-
SeeSAR	"	"	メジナルケミストのためのSBDD統合ツール。リガンド結合部位中で化合物の結合自由エネルギーや物性値等のプロパティ、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。ドッキング、ファーマコフォア、FBDDなど、創薬ツールを統合	Windows、Linux、Mac	-	2014年10月	-
ModelRunner	"	"	SeeSAR に読み込まれた化合物に対してOptibrium/StarDrop のADME プロパティを計算。SeeSAR のオプションモジュール	"	-	2015年12月	-
infiniSee	"	"	数百億分子を超えるケミカルスペースから目的分子とファーマコフォアが類似する実際に合成可能な構造を高速に提案。化合物ライブラリからのリガンドのFeature Treesを用いた類似構造検索	"	-	2019年7月	-
SciMAPS Classical	"	仏サイエ/ミクス	力場計算およびメソスケールシミュレーションを行うためのパッケージ。相溶性、拡散、機械物性など様々な界面、バルクの性質を系の構築、シミュレーションの実行、解析まで対応。LAMMPS、GROMACS、Towhee等を計算エンジンとして利用	Windows、Linux	-	2008年7月	-
SciMAPS Quantum	"	"	量子化学計算や第一原理バンド計算を行うためのパッケージ。量子力学を基に気体、固体、界面・表面での構造、電子状態、物性を予測。NWChem、ABINIT、Quantum Espresso等を計算エンジンとして利用	"	-	2008年7月	-

SciMAPS Engineering	"	"	構造活性相関や状態方程式のSaf法による熱力学物性推算を行うためのパッケージ。分子記述子を利用した構造活性相関モデルの構築による物性スクリーニングやSaf法による混合物の物性や相平衡の推算に利用	"	-	2008年7月	-
ADF	"	簡ソフトウェア フォーケムスト リー&マテリア ルズ(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、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	-
DFTB	"	"	密度汎関数法に基づくタイトバインディング計算プログラム。電子間相互作用の積分計算をパラメータ化することで高速かつ精度の高い計算が実現されており、通常の密度汎関数法計算では取り扱えない大規模な系にも適用することが可能	"	-	2014年9月	-
BIOVIA COSMOtherm	"	仏ダッソー・シス テムズ	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	-
BIOVIA COSMObase	"	"	約12,000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	-
BIOVIA 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ため、量子化学計算を行わずに物性推算が可能	"	-	2012年9月	-
BIOVIA COSMOplex	"	"	ミセル・分子膜等の自己組織化構造のシミュレーション、およびそれらの中での低分子の分布予測	"	-	2018年4月	-
BIOVIA COSMOperm	"	"	分子膜・細胞膜透過性予測ソフトウェア	"	-	2018年4月	-
BIOVIA COSMOconf	"	"	配座解析ソフトウェア	"	-	2009年1月	-
BIOVIA 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	"	-	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ムストリーツール	"	-	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	-
Pearson's Crystal Data	"	"	金属、無機結晶構造データベース	"	-	2007年8月	-
Gaussian 16	"	米ガウシアン	Ab initio法分子軌道計算プログラム	NEC、IBM、Fujitsu、Intel-Linux、Windows、Mac	-	1998年10月	-
GaussView 6	"	"	Gaussian 16のグラフィカルユーザインターフェース	Intel-Linux、Windows、Mac	-	1998年10月	-
Molpro	"	独ディーデー アイ	各種CI法、CASOFC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	Intel-Linux、Mac	-	2004年11月	-
Direct Force Field	"	米イオンテ 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	-
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、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	Webサーバー(Windows Server)/Webブラウザ(Windows、Linux、Mac)	-	2002年8月	-

ODD VAULT	"	米コロボレー ディスカバリー	化合物や抗体、細胞などの実験材料のカタログおよび在庫、アッセイデータの管理および電子実験ノートクラウドサービス。インターネット上で情報を共有できるため、他の研究機関との共同研究のプラットフォームに最適	Webブラウザ（Windows、Linux、Mac）	-		2014年7月	-
Thor/Merlin	"	米ディライト	SMILES言語をベースとする効率的な化合物データ管理および高速検索システム	Linux	-		2005年4月	-
DayCart	"	"	Oracle/PostgreSQL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	Oracle Database、PostgreSQL	-		2005年4月	-
Daylight Database Content	"	"	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	-	-		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	Linux	-		2005年4月	-
Daylight Toolkits	"	"	SMILES、SMARTSなどの機能をユーザー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 Genomics Suite	"	米パーテック	マイクロアレイとNGSのデータ解析機能を搭載したゲノムデータ解析用パッケージ	Windows、Intel-Linux、Mac OS X	-		2005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	"	"	NGSのデータ解析用パッケージ	Intel-Linux (Server) / Webブラウザ（Windows、Linux、Mac）	-		2013年4月	-
MOPAC2016	"	米スチュワート コンピューターシ ョナルケミストリ	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	-
GENEVESTIGATOR	"	瑞ネビオン	GEQやArrayExpressの遺伝子発現データをキュレーションして比較できるようにしたオンライン解析サービス	Webブラウザ（Windows、Linux、Mac）	-		2014年4月	-
Scilligence ELN	"	米サイリジェ ンス	低分子・ペプチド・抗体・ADCなど多様な創薬モダリティに対応し、化学合成実験・生物学的試験から処方・製剤検討までの幅広いフェーズの実験データと関連ファイルを管理できる電子実験ノート。キーワード・構造式・塩基配列/アミノ酸配列などによる検索が可能	Webブラウザ（Windows、Linux、Mac）	-		2016年4月	-
Scilligence RegMol	"	"	実験資料のライブラリーの登録、アッセイプロトコルおよびアッセイデータの管理、データ解析の3モジュールからなるデータベース。化合物・ポリマーから生物学的製剤・ADC、細胞株・組織などに至るまで、実験資料と実験データを一元管理	"	-		2016年4月	-
Scilligence Inventory	"	"	実験に用いる各種サンプルを、保管場所・残量・試験成績書（CoA）などの情報と合わせて管理。化合物、ペプチド・タンパク質、オリゴヌクレオチド・遺伝子、siRNA、抗体・ADC、細胞株・組織などさまざまな種類のサンプルを一元的に取り扱い可能	"	-		2016年4月	-
Scilligence PMF	"	"	プロジェクトの進捗管理・コスト管理およびワークフロー・データフローの管理。化合物の登録後にアッセイ担当者に通知など、他のScilligence社製品と連携して研究の円滑化を支援	"	-		2016年4月	-
Scilligence SDMS	"	"	測定機器等の出力や電子ファイルを取り込み、データを抽出して一元管理。分子構造、反応式、生物学的配列およびキーワードでの検索でデータの探索を支援	"	-		2016年4月	-
TouchMol4Office	"	"	Microsoft Excel・Word・PowerPointに構造式や配列情報、フィッティングカーブなどの入力・編集機能を追加するアドオン。社内データベースやPubChem、Medlineなど外部データベースからのデータ取得も可能	Microsoft Office製品	-		2016年4月	-
Chrawler	"	"	共有フォルダ内のファイルやデータベース内のデータに対する構造検索・キーワード検索システム。各種形式のファイルから分子構造や化合物名を認識	Webブラウザ（Windows、Linux、Mac）	-		2016年4月	-
CORINA Classic	"	独モレキュラ ネットワークス	有機化合物の三次元分子構造を、パッチ計算により、高速かつ高精度に生成	Windows、Linux	-		2017年7月	-
CORINA Symphony	"	"	有機化合物の分子構造標準化、三次元化、記述子計算、ToxPrint計算が行え、それら分子データセットの管理を行うGUIを備える	Windows	-		2017年7月	-
SONNIA	"	"	自己組織化ニューラルネットワーク手法に基づいて低分子化合物のクラスター解析とQSA(P)R解析を行う	Windows、Linux	-		2017年7月	-
SYLVIA	"	"	分子構造の複雑さや参照構造との類似度から合成の容易さを評価するスコアを算出し、優先順位付けを行う	"	-		2017年7月	-
ChemTunes	"	"	化合物の安全性評価とリスク評価のための毒性・安全性に関連するデータベース	Webブラウザ（Windows、Linux、Mac）	-		2017年7月	-
ToxGPS	"	"	化合物の安全性評価とリスク評価のための毒性予測・ワークフローシステム	"	-		2017年7月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績	
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。最近ではポリマー分野に注力し、ポリマー発泡解析、GHz粘弾性解析、SSカーブ解析、誘電緩和解析を実現。最新のSS解析は、ゴム弾性の再現に成功し更に破断現象の解明に迫るなど大きな成果を挙げている。また誘電緩和解析はGHz域低誘電正接材料の分子設計に関わり、更なる高周波域ではテラヘルツ分光への応用を視野に捉えている	Xeon、Core i 等 Intel CPU および互換機。OSはLinuxおよびUnix	標準機能版300万円（基本機能版120万円）。カ場、オプション機能別売	1998年4月	20サイト	
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績	

GastroPlus	ノーザンサイエンスコンサルティング	米 Simulations Plus	ヒト、各種動物の薬物体内挙動をシミュレーション。吸収モデルとして ACAT モデル、最新の Dynamic Fluid モデルも搭載。創薬の初期から開発まで広く利用可能。研究用途に応じたオプションモジュールの組み合わせにより、PBPM 解析、PBPK/PD 解析、薬物間相互作用 (DDI) 予測、IVIVC 解析、製剤評価、薬物動態解析、パーチャルポピュレーション解析等を実現	Windows	お問い合わせください	1998年8月	-
GastroPlus-Optimization Module	"	"	モデル構築のために血中濃度曲線や溶出試験プロファイルなどのシミュレーションで得られたパラメータ(複数可)を実測値にフィッティング	"	"	1999年5月	-
GastroPlus-Metabolism & Transporter Module	"	"	小腸、肝臓、PBPK 組織に CYP やトランスポーターの影響を加えることで、より精密なシミュレーションを実現。in vitro データを in vivo データに変換するツールや、代謝物生成を経時的に追う代謝物トラッキング機能を搭載	"	"	2001年7月	-
GastroPlus-PDPlus	"	"	薬物のPKとその治療作用・副作用との関係から、in vivo での薬理作用プロファイルを予測。Cell Killing, Bacterial Killing, Precursor-dependent を含む、標準的な薬力学 (PD) モデルを実測データにフィッティングさせ、投与量、剤形、投薬計画の変化による PD 効果の変化を予測	"	"	2002年8月	-
GastroPlus-PKPlus	"	"	静脈注射 (IV) データから 1-, 2-, 3- コンパートメント、ノンコンパートメント (NCA) による薬物動態学パラメータを計算。適切なコンパートメント PK モデルの選択を行い、算出されたパラメータを GastroPlus にエクスポート。投与量の異なるデータを複数入力することで、より複雑な非線形モデルにも精度よく対応。IV データに加え経口投与データを入力することでバイオアベイラビリティも算出	"	"	2000年8月	-
GastroPlus-PBPK	"	"	生理学的薬物動態モデル (Physiologically-based Pharmacokinetic Model) を用いて、化合物の全身への分布と排泄を簡単にシミュレートし、各組織中の薬物濃度を追跡。欧米人、日本人、中国人モデル、高齢者・乳幼児モデル、病態モデル (肝硬変、腎障害、肥満)、妊婦 (胎児) モデルの設定可能	"	"	2005年12月	-
GastroPlus-IVIVCPlus	"	"	従来手法の Wagner-Nelson, Loo-Riegelman, Numerical Deconvolution または最新の吸収過程を考慮させる Mechanistic Absorption モデルにより、in vitro の溶出と in vivo の PK プロファイルから相関を計算し、溶出が異なる類似製剤の血中濃度プロファイルから in vitro 溶出データのみで予測。統計的検証を行い、FDA ガイダンスに記載の相関式の予測性評価に使用可能	"	"	2000年8月	-
GastroPlus-DDI Module	"	"	定常状態または動的状態での薬物間相互作用予測。関連するすべてのパラメータ (Ki 値等) が定義されている標準化合物データベースにより、自社化合物の必要な情報を入力し DDI 予測	"	"	2010年9月	-
GastroPlus-ADR Module	"	"	メガファーマや米国 FDA と協力して開発された、経口、静脈投与以外の皮膚 (局所、皮下)、口腔内、肺 (鼻腔内、呼吸器)、眼、筋肉、関節内投与における薬物吸収モデル	"	"	2010年9月	-
GastroPlus-ADMET Predictor Module	"	"	GastroPlus のシミュレーションに必要な物理化学、薬物動態、CYP 代謝動態パラメータを化学構造から予測・入力。解析に参考となる BBB 透過性や EOCSS 分類などの予測も可能	"	"	2010年9月	-
GastroPlus-Biologics Module	"	"	モノクローナル抗体 (mAb)、抗体-薬物複合体 (ADC) の全身吸収と薬物動態シミュレーション。急速静注、点滴静注、皮下注 (SQ)、筋肉 (IM) 注射 (急速、コントロールリリース) 投与での抗体をモデル化	"	"	2015年5月	-
ADMET Predictor-PCB Module	"	"	化学構造から、数多くの物理化学的プロパティ (溶解度、脂溶性、pKa 等) や生物薬理的プロパティ (膜透過性、タンパク結合、分布容積等) を高速・高精度に予測。内蔵スケッチングツールによる描画構造のダイレクト予測	Windows Linux	"	2005年5月	-
ADMET Predictor-Toxicity Module	"	"	化学構造から発がん性、心毒性、腎毒性、肝毒性、感作性、生物濃縮、魚毒性など、食品、医薬品、環境物質に関連する毒性を予測	"	"	2005年5月	-
ADMET Predictor-Modeler Module	"	"	ユーザー独自の構造-物性予測モデル構築。モデリング手法は、ANNE、SVM、KPLS、MLR から選択。得られたモデルは ADMET Predictor で使用可能	"	"	2005年5月	-
ADMET Predictor-Metabolism Module	"	"	代表的な CYP アイソフォームの基質、基質阻害、代謝される構造部位の予測。各アイソフォームの Km 値、Vmax 値の予測。UGT による代謝予測モデルも搭載。内蔵スケッチングツールによる代謝物構造予測	"	"	2008年1月	-
ADMET Predictor-Transporters Module	"	"	各国の審査当局から求められている主要なトランスポーターの基質分類、阻害剤分類、親和性を予測	"	"	2020年10月	-
ADMET Predictor-AIDD Module	"	"	一つ以上のシード化合物から、構造変換による化合物生成と複数の標的プロパティに対する評価を繰り返し、多目的最適化された候補化合物を提示	"	"	2020年10月	-
ADMET Predictor-MedChemStudio Module	"	"	データの可視化、化合物分類、ハイスループットスクリーニング分析、リードの同定や優先順位付け、新規構造デザイン、スキャホールドホッピング、リード最適化などを行うケムインフォマティクスプラットフォーム	"	"	2016年9月	-
ADMET Predictor-HTPK Simulation Module	"	"	GastroPlus の ACAT モデルと ADMET プロパティ予測を合わせ、ラットとヒトの「吸収率 (Fa)」、「経口バイオアベイラビリティ (F)」、「分布容積 (Vd)」、「ユーザーが定義した血しょう中濃度 (Ceff) に達するのに必要な投与量 (D)」、「血漿中薬物濃度時間曲線 (Cp)」を予測	"	"	2017年11月	-
PKPlus	"	"	ノンコンパートメント解析 (NCA)、コンパートメント解析による Pharmacokinetic (PK) パラメータの計算を容易に行える直感的なワークフローをコンセプトに設計。複数回・複数経路での投与シミュレーションや Nonparametric Super position (NPS) 等のシミュレーション機能を搭載。申請利用のために 21 CFR Part 11 に対応しており、CDISC SEND パッケージをインポートして解析も可能	Windows	"	2016年9月	-

DDPlus	"	"	酸剤、錠剤、カプセル剤、コーティング剤、コートベース剤、膨潤性/非膨潤性ポリマーマトリックス製剤、二層錠、持続性注射剤の医薬品成分、添加剤の in vitro 溶出試験を様々な実験条件や試験法 (バドル法、バスケット法、フロースルー法、回転ディスク法、 μ Diss Profiler) でシミュレーション。Artificial Stomach and Duodenum モデル、Biphasic Dissolution モデル、Membrane Dissolution モデルも搭載	"	"	2005年5月	-
MembranePlus	"	"	in vitro 膜透過試験シミュレーション。膜透過過程・細胞内濃度の予測、実験ばらつきの影響評価が可能。GastroPlus とのコンビネーションにより、IVIVE の予測精度を向上。肝代謝試験 (サンドイッチ培養肝細胞、浮遊肝細胞) にも対応	"	"	2014年12月	-
ChartSpect	"	ノーザンサイエンスコンサルティング	研究開発過程で得られる各種機器分析データを機器の種類やメーカーを問わず、生データのまま画像データや構造、物性値などの数値データ、テキストデータと関連付けて統合管理するデータベースシステム。メーカーや機種異なるチャートの比較、複数種類の機器の同時比較など、比較解析に役立つ機能が豊富に搭載。定型レポートに必要なデータの選択だけで作成することも可能	Windows、Linux	"	2007年5月	-
ChartSpect-Personal	"	"	小規模でのデータ管理・解析を行いたいと言うユーザーからの声に対応しリリースした、ChartSpectの全機能を手軽に利用できるスタンドアロン版	"	"	2017年3月	-
BioSpect	"	"	共焦点レーザー顕微鏡や蛍光顕微鏡等で撮影したイメージング画像、画像解析ソフトで処理を行ったデータを関連する実験データと共に管理するデータベースシステム。メーカーや機種を問わずイメージングデータと関連データを一覧表示し、効率的なデータ管理を実現	"	"	2016年4月	-
HPLCluster	"	"	医薬品等の保存安定性試験において得られる、各条件下での HPLC (あるいは GC) のピーク面積比をスプレッドシート上に表示して比較解析。得られたデータを手作業でエクセルなどに張り付けて解析をする手間や入力ミスを削減	Windows、Linux、MacOS	"	2008年10月	-
OrangeReaders	"	"	新薬、ジェネリック薬を含む全ての FDA 認可薬を掲載している、OrangeBook (Approved Drug Products with Therapeutic Equivalence Evaluations) の情報を効率的に利用するためのインターフェイス。毎月の更新にも対応し、常に正確な情報を取得できる。知財管理部門での利用の他、大学や専門学校等でも利用可能	Windows	"	2009年11月	-
DILIsym	"	米 DILIsym Services	個々の分子によって引き起こされる潜在的な薬物誘因性肝障害 (DILI) の危険性指標を示し、DILI の原因となるメカニズムの深い洞察を得ることができる、定量的システム毒性 (QST) ソフトウェア	"	"	2019年1月	-
NAFLDsym	"	"	非アルコール性脂肪肝 (NAFLD)、非アルコール性肝炎 (NASH) 治療の有効性を予測。臨床試験デザイン最適化、臨床開発の意思決定をサポート	"	"	2019年1月	-
Molegro Virtual Docker	"	デンマーク Molexus	蛋白質-リガンド相互作用を予測する統合プラットフォーム。分子のプレバレーションからターゲット蛋白質のポテンシャルバインディングサイトの決定、リガンドのバインディングモードの予測まで、全てのドッキングプロセスを取扱う。2D コンフォメーションから外部プログラム (Balloon) を用いて3次元リガンドコンフォメーションが生成可能	Windows、Linux	"	2019年1月	-
Molegro Molecular Viewer	"	"	蛋白質-リガンド相互作用を予測するための統合プラットフォームである Molegro Virtual Docker から得られたドッキング計算結果の詳細を表示	"	"	2019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
PatRegi SM	ハトコア	ハトコア	化合物登録システム。「クレンジング」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	Windows	お問い合わせください	-	-
PatRegi Bio	"	"	バイオ分子登録システム。抗体、ペプチド、核酸、ADC等コンジュゲートの登録をサポート。HELMネイティブのプラットフォームをベースとしており、モノマーの管理機能を搭載。柔軟な発番ルールと外部システムインテグレーション機能。	Windows	お問い合わせください	-	-
CRAIS Chceker	"	"	法規制物質判定システム。輸出貨品管理令、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	Windows/Linux	"	-	-
ChemTS	"	"	構造式から、HSコード(統計品目番号)を瞬時にHSコード特定し確認できます。EU、US (HTS)、スイスに対応。日本、中国は2021年に対応予定	Windows/Linux	"	-	-
Transformer2	"	"	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変更案を提示。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	Windows	"	-	-
QuickPat	"	"	電子実験ノートのデータを利用し、特許明細書実験項の作成に必要な多岐に渡る作業時間を約3分の1以下に削減	"	"	-	-
SMARTS	"	"	国内主要試薬ベンダー14社のカタログデータベース。化学構造式、国内法規制情報、SDSリンク等今日の化学物質管理に必須となるキーデータを提供。年4回のアップデート	Windows/Linux	"	-	-
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と連動する。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	"	"	-	-
Marvin Sketch	"	ハンガリー・ケムアクション	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/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	"	-	-

Design Hub	"	"	オンライン化合物デザインプラットフォーム。描画中の構造に関する計算結果、所内外DBの検索結果をリアルタイムで表示し、情報に基づく意思決定をサポート。化合物の優先順位をカンバンボードでわかりやすく整理可能	"	"	-	-
Madfast	"	"	超高速化学類似性検索のためのハイエンドツールキット。最適化されたマルチスレッド実装とメモリ内データストレージにより、億単位の構造セットに対しリアルタイムの類似構造検索を実現する。コマンドライン、REST API、Web UIなど、多用途のインタフェースを介して利用できるJavaアプリケーション	"	"	-	-
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する。JChem for EXCEL、JChem for PowerPoint、JChem for Work、JChem for Outlookで構成される	Windows (Office2007,2010,2013,2016)	"	-	-
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/Mac	"	-	-
Instant JChem Personal edition	"	"	化学情報をローカルデータベースで管理するため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 Enterprise 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	"	"	Webベースの統合検索・参照ツール。社内データベースの情報を統合・検索し、様々なフォームでのブラウジングやビジュアライゼーションが可能	"	"	-	-
Plexus Design	"	"	Webベースのライブラリデザインツール。骨格ベース及び反応ベースの分子エミュレーションと物性計算機能を提供	"	"	-	-
JChem Microservices	"	"	JChem Microservicesは、第2世代のJChem化学エンジンの機能をWマイクロサービスとして提供する	"	"	-	-
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	"	"	-	-
JChem Oracle Cartridge	"	"	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)	"	"	-	-
JChem Choral	"	"	第2世代のJChem化学エンジンを用いたOracleカートリッジ	"	"	-	-
JChem PostgreSQL Cartridge	"	"	Postgre SQLネイティブのSQL環境で、構造/反応の検索を可能に。(本製品はJChem Baseの機能を包含する)	"	"	-	-
Biomolecule Toolkit	"	"	抗体や核酸、ADCといったマクロ分子を扱うためのAPI群を提供。マクロ分子の標準規格であるHELMIに対応し、マクロ分子の登録、検索、変換、表示などの機能をWeb Serviceとして提供	"	"	-	-
BioEddie	"	"	簡単に特殊ペプチドやADCなど複雑なバイオ分子をスケッチするJavaScriptベースのシステムで配列と化学構造式の橋渡しをする	"	"	-	-
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	"	"	-	-
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	"	"	-	-
Jkluster	"	"	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	"	"	-	-
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ツール	"	"	-	-
Structural Calculation	"	"	水素結合ドナー・アクセプター、チャージ、コンフォメーション生成、3D分子重ね合わせ、分子動力学、ジオメトリカルパラメータ、局在エネルギー、分子屈折率等、MCS、Bernis-Murco Frameworkの計算	"	"	-	-
Protonation Plugin	"	"	pKa、Major Microspecies、Isoelectric Pointの計算	"	"	-	-
Partitioning Plugin	"	"	logP、logD、HLBの計算	"	"	-	-
Isomers Plugin	"	"	Tautomer、Resonance、Stereoisomersの生成	"	"	-	-
Solubility Plugin	"	"	水への溶解度を予測	"	"	-	-
ADMET Plugin	"	"	hERGチャネル阻害(pActivity)を予測	"	"	-	-
NMR Predictor	"	"	構造式から1H及び13C NMRのスペクトルを予測	"	"	-	-
Structure to Name	"	"	構造式 → IUPAC名、トラディショナルネーム変換	"	"	-	-
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(OSRAKLIDE、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	"	"	-	-
ChemCurator	"	"	特許文書からマーカッシュ構造及び実施例構造や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	"	"	-	-
ChemLocator	"	"	構造検索できるエンタープライズサーチエンジン。Document to Structureの技術を応用し、社内LAN配下のドキュメントをフルテキスト検索と構造検索式を組み合わせた検索が簡単に行える	"	"	-	-
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	"	"	-	-
MarkushEditor	"	"	強力な化学物質特許の作成をサポート。マーカッシュ構造をわかりやすくエディットし、特許明細のクレーム文書を自動作成できる。また、構造式からマーカッシュ構造を自動生成できます。任意の構造がマーカッシュ構造の範囲に入るかどうかを瞬時に確認できる	"	"	-	-
Zosimos	"	"	インタラクティブな問題やチュートリアルを作成、答え合わせなどをオンライン上で実現し、化学や生化学の授業をより効果的に行えるようにする	"	"	-	-
ChemAxon Assay	"	"	柔軟なアッセイデータのアップロードツールで、マニュアルアップロードから自動アップロードに対応する	"	"	-	-
SARvision SM	"	米アルトリス (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ラクティブに解析が可能	"	"	-	-
SARvision Biologics	"	"	ペプチド、抗体、核酸配列と活性の相関解析ツール。ユニークな解析機能により、どんな変異が活性を左右するか、素早く解析可能	"	"	-	-
AMEDEO	"	"	構造活性相関や配列活性相関に機会学習テクニックを簡単に適用。目的とする活性やプロパティを有する構造や配列を、実験データに基づき予測・提示	"	"	-	-
Automated HTS	"	米マイアイランドビーチ (My Island beach LLC.)	構造式やCAS番号、名称から迅速かつ高精度で有機化学品の輸出入統計品目番号(米国(HTS)及びEUのHSコード)を特定し、HSコードの確認作業を効率化します。Pipeline Pilotのプロトコルとして提供	"	"	-	-
CRIMSON Inventory	"	バトコア	構造検索をサポートしたクラウドベースの試薬管理アプリです。カタログ検索～発注・納品～在庫管理～廃棄までをトータルに管理できる。あらかじめ用意された数千万件の試薬マスターが搭載されており、契約後短期間で本稼働可能。国内主要試薬ベンダーのカタログが搭載され、製品情報や法規制情報は自動的にアップデートされる	SaaSサービス	"	-	-
CLIMSON RI Management	"	"	法令に準拠した従事者管理(被ばく量、健康診断、教育受講履歴)が行える。実験計画書、実験報告書、従事者申請の承認フローを実装し、RI化合物の購入、適正な在庫管理をサポートする	"	"	-	-
Smart Purchase	"	"	研究所に特化したクラウドベースの間接購買システム。試薬、RI、実験動物、消耗品に対応	"	"	-	-
CRAIS Chceker Cloud	"	"	CRAIS Checkerのクラウドサービス。契約直後からご利用頂ける、廉価で便利な法規制チェックシステム	"	"	-	-

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
ChemOffice+Cloud	大学生協、富士通、コンプレックス、パーキンエルマー ご注意・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	ChemDraw、Chem3D、ChemFinder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。ChemDrawにはChemDraw Professionalの全ての機能が含まれ、さらにChemAXC Explorerの機能とPubChem Laboratory Chemical Safety SummaryおよびGoogle Scholar/Patentsとの連携が含まれる。クラウド電子実験ノートSignals Notebook Individual Editionの1年間ライセンスとMnova ChemDraw Editionのライセンスも含まれる	Windows/Mac	要問合せ	2021年5月	-
ChemDraw Professional	"	"	化学および生物学分野における標準描画ソフトウェアパッケージ。ChemDraw Primeの全ての機能が含まれ、さらに構造式からNMRスペクトルの予測、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、2D構造式から3D構造式に変換など、化学・生物学関連研究者必携の機能を装備。ChemDrawにはSciFinder、SciFindern、Reaxysとの連携機能が含まれる。一年間のChemDraw Cloudのライセンスが含まれる	"	"	2021年5月	-
ChemDraw Prime	"	"	エントリーレベルの化学構造式・反応式描画の標準プログラム。構造式描画に必要な環構造、官能基などのツールを含む。構造式から特性の計算が可能。ラボ機器テンプレートとTLCおよびゲル電気泳動プレート描画ツールが含まれている	"	"	2021年5月	-
ChemACX	"	"	約700社の試薬販売会社、およそ1,127万件の化合物と2,394万件の試薬を網羅し、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	Windows	"	2021年5月	-

E-Notebook	富士通、ヒューリス、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	"	"	2021年5月	-
Registration Enterprise	"	"	Web上で化合物データベースの構築および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	"	"	2021年5月	-
Inventory Enterprise	"	"	Web上で試薬データベースの構築および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	"	"	2021年5月	-
Signals Notebook Standard/Enhanced Enterprise Edition/Private Cloud	パーキンエルマーインフォマティクス事業部	"	研究者のためのコミュニケーションツールで、研究分野を問わずに利用でき、全ての研究情報を一元管理できるクラウド電子実験ノート。化学者向けにはChemDrawJSが付属しており量論計算も行える。またパラレル合成のサポート、実験機器などの情報管理、サンプルおよび試薬の管理などの機能も含まれる。医薬品、診断薬、農業、化学、素材、食品などの企業やアカデミアへの導入実績がある	Windows/Mac、スマホ、タブレットに対応	要問合せ	2021年5月	-
TIBCO Spotfire Analyst	富士通、CACクローア、パーキンエルマーインフォマティクス事業部	米TIBCO Software Inc.	IT部門に依存せずに様々なデータを可視化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	"	2021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。	"	"	2021年5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やMS-パワーポイントへの書き出しもサポート。	"	"	2021年5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	"	"	2021年5月	-
Lead Discovery Premium powered by TIBCO Spotfire	"	"	従来のLead Discovery(LD)の機能に更なるパワフルなビジュアライゼーション機能が追加。フォームレイアウト、リーダーチャート、3次元構造の表示、配列データの表記などをサポート。	"	"	2021年5月	-
SciStream	"	"	プレートリーダーやフローサイトメトリー、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	"	"	2021年5月	-
High Content Profiler	"	"	細胞個々の挙動を評価するHCSデータ解析を支援するSpotfire用アドオンで、顕微鏡画像を表示する機能とともに、多変量データから正規化、プロファイリング、ヒット選択などの高度なワークフローを提供	"	"	2021年5月	-
TIBCO Spotfire Analyst with Lead Discovery Personal Subscription	"	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 Analyst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	"	"	2021年5月	-
TIBCO Spotfire Analyst for MMD Personal Subscription	"	"	Multi Mode Detection (MMD)データ解析のための、TIBCO Spotfire AnalystとSciStream、解析用テンプレート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	"	"	2021年5月	-
PerkinElmer Signals Lead Discovery	"	"	化合物や生体分子および評価データなどの様々なデータを統合して、TIBCO Spotfireの動的なデータビジュアライゼーション機能を活用し直感的に検索、可視化および解析が行える統合プラットフォーム	"	"	2021年5月	-
PerkinElmer Signals Screening	"	"	HTS/HCS/SPRなど日々の実験から得られる多変量データの高度な解析プロトコルを構築・定型化・管理する実現する仕組みを搭載したクラウド/オンプレミス型プラットフォーム	"	"	2021年5月	-
PerkinElmer Signals for Translational	"	米パーキンエルマーインフォマティクス事業部	トランスレーショナル研究における社内外の探索研究及び臨床研究データの統合と横断的解析を可能にするクラウド/オンプレミス型プラットフォーム	"	"	2021年5月	-
PerkinElmer Signals Medical Review	"	"	臨床試験における安全性に関するシグナルの検出を可能にするクラウド型サービス。機械学習によるCDISC(SDTM)データへの自動マッピング機能を提供	"	"	2021年5月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<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	-
AutoQSAR	米Schrodinger LLC(窓口:シュレーディングー株式会社)	米Schrodinger LLC	自動QSAR解析支援プログラム	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	2016年	-
Canvas	"	"	ケムインフォマティクス解析ツール	"	"	2008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	-
CovDock	"	"	共有結合ドッキングシミュレーション	"	"	2012年	-
Desmond	"	"	生体高分子向け分子力学プログラム	Linux	"	2008年	-
Epik	"	"	pKa予測/イオン化モデル・互変異性体自動発生プログラム	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	"	2005年	-
FEP+	"	"	タンパク質・リガンド間結合自由エネルギーを高精度に予測	"	"	2015年	-
FF Builder	"	"	力場パラメータ自動作成ツール:入力構造中の二面角パラメータの不足を自動的に検出し、量子化学計算(Jaguar)により正確なパラメータを自動発生	"	"	2015年	-

Glide	"	"	高速高精度ドッキング計算プログラム	"	"	2001年	-
Induced Fit Docking	"	"	誘導適合を考慮したドッキングシミュレーション	"	"	2003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	-
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	"	"	-	-
OPLS3	"	"	従来の力場よりケミカルスペースの網羅性を格段に向上させた高精度力場パラメータ	"	"	2015年	-
Phase	"	"	Pharmacophore/3D-QSAR解析プログラム	"	"	2005年	-
Filed-Based QSAR	"	"	3次元QSAR解析プログラム	"	"	2011年	-
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	-
Protein Preparation Wizard	"	"	計算化学用タンパク質構造調整ワークフロー	"	"	-	-
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	-
QM-Polarized Docking	"	"	QM/MM計算パラメータ利用ドッキングシミュレーション	"	"	-	-
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	-
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	Linux	"	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	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	"	2007年	-
<Biologics Suite> バイオロジクスソフトウェアパッケージ						-	-
BioLuminate	"	"	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	2013年 2012年	- -
Desmond	"	"	生体高分子向け分子動力学プログラム	Linux	"	2008年	-
Epik	"	"	pKa予測/イオン化モデル・互変異性体自動発生プログラム	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	"	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	"	"	蛋白質-蛋白質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						-	-
AutoQSAR	"	"	自動QSAR解析支援プログラム	"	"	2013年 2016年	- -
Canvas	"	"	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	Linux	"	2008年	-
Genetic Algorithm	"	"	遺伝的アルゴリズムを用いた新規化合物創成プログラム	Linux, Windows, Mac OSX (詳細はお問い合わせください)	"	2016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	-
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	-
MS-Maestro	"	"	マテリアルシミュレーション用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	"	"	-	-
Quantum Espresso Interface	"	"	Quantum Espressoインターフェース(固体結晶・表面・界面のDFT計算)	"	"	2017年	-
<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	"	"	ケムインフォマティクス解析ツール	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	2008年	-
LiveDesign	"	"	化合物を対象としたコミュニケーションツール。機械学習可	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	-
PLDB	"	"	PDBの全データを含むタンパク質・リガンド複合体構造データベース: 高度なタンパク質・リガンド相互作用検索機能および自社構造データの管理検索機能も搭載	"	"	2015年	-
<PyMOL>分子描画ソフトウェア PyMOL	"	"	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, PowerPoint (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	米ダッソー・システムズ・ハイオピオ	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 (サーバー部分のみLinux可)	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 Cantera	"	"	化学反応速度論に基づき、複雑な系の反応モデル、熱力学、輸送プロセスを解析する。既知でない反応経路に関しては第一原理計算 (DMol3・CASTEP) で得られる反応速度係数を適用可能	"	"	2016年12月	-
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	"	"	2008年12月	-
MS COMPASS	"	"	COMPASSはバルク状態の高精度な分子計算を目的として最適化された第3世代力場。正確な構造、配座、振動と熱物性の予測が可能	"	"	"	-
MS Conformers	"	"	コンフォメーション空間の網羅的な探索データを集め、分析する手法を提供する。単純なものから複雑な系まで、種々の系のコンフォメーション解析へ応用できる	"	"	"	-
MS DFTB	"	"	密度汎関数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能	"	"	"	-
MS DMol3	"	"	密度汎関数法に基づいた第一原理計算プログラムで数値局在基底関数を使用。分子系と周期系双方の電子状態計算が可能	"	"	"	-
MS 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 Forcite Plus	"	"	MS Forciteを分子力学に機能拡張した最新の古典力学計算ツール	"	"	"	-
MS Gaussian Interface	"	"	Gaussian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ベ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	"	"	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 Reflex Plus	"	"	MS Reflexの機能に、分子フラグメントの配置やコンフォメーションを検索し実験データに近い粉末解析パターンをランク付けする機能を追加	"	"	"	-
MS Reflex QPA	"	"	混合物の粉末回折パターンから、各相の相対量を決定する	"	"	"	-
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 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、DeIPhi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 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 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 De Novo Evolution	"	"	一元的、進化的、またはそれらを組み合わせる手法で、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	"	"	"	-
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メントする。さらに機能的に重要な残基の判別のために、系統学的解析およびEvolutionary Trace解析を実行	"	"	"	-
DS Protein Health	"	"	Profiles-3D verification法を使ってタンパク質構造の質を評価し、タンパク質の構造妥当性のチェックおよび解析を行う	"	"	"	-
DS Protein Refine	"	"	CHARMM法に基づき、タンパク質の側鎖およびループ部分のエネルギー精密化を行う	"	"	"	-
DS QSAR	"	"	定量的構造活性相関を計算する	"	"	"	-
DS Sequence Analysis	"	"	ウェブ上(NCBI)およびローカルコンピュータ上にインストールされたデータベースをBLASTおよびPSI-BLAST法を用いて検索することにより、ユーザーが検討中のタンパク質配列のホモログを判別する。機能的に重要な残基の判別のために、系統学的解析およびEvolutionary Trace解析を実行	"	"	"	-
DS TOPKAT	"	"	QSARIに基づいたシステムで、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	"	"	"	-
Pipeline Pilot Professional Client	"	"	Pipeline Pilot のコンポーネントを組み合わせてプロトコールを作成可能なGUI	"	"	2008年4月	-

Pipeline Pilot ADMET Collection	"	"	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 Chemistry Collection	"	"	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 (RP法)とMulti-objectivePareto Optimization法を提供。RP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バイブ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 Data Modeling Collection	"	"	フィンガープリントを利用したベイジアン、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りに引用されており、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 Web Port	"	"	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 Integration Collection	"	"	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 Reporting Collection	"	"	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パッケージを選択し、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 Sequence Analysis Collection	"	"	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 Imaging Collection	"	"	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 Collection (Synthia)	"	"	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	"	"	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	"
Touchmol for Office std	"	米サイリジェンス	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可能なMedChem Suiteという化合物テーブルソフトが付属。アカデミック無料版あり。詳細については米国Scilligence社にお問い合わせ下さい	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	
QuantumATK	日本シノプシス	Synopsys Inc.	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プロブ系系の非平衡電子状態を第一原理的、半経験的に計算するナノデバイスシミュレーター。電圧印加時の表面反応のシミュレーションも可能。Electron Phonon相互作用も対応	Windows/Linux	詳細問い合わせ	-	-	
QuantumATK DFT	"	"	QuantumATKからNEGFの機能を除き、結晶、分子のみの計算に対応した廉価版。様々な結晶構造の物性値推算に対応。5本ライセンス版と20本ライセンス版あり。半導体メカ向け	"	"	-	-	
QuantumATK ForceField	"	"	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、熱伝導度の計算にも対応。DREADINGやOPLS力場を使用したポリマーのシミュレーションにも対応	"	"	-	-	
QuantumATK DP	"	"	MPICH2の並列を実現。QuantumATK、QuantumATK DFT、QuantumATK ForceFiledと共に使用する。16並列、64並列、256並列など	"	"	-	-	
QuantumATK NanoLab	"	"	QuantumATKによる計算を効率的に行うためのGUI。モデルのセットアップから計算の実行、結果の表示を簡便に操作可能	"	"	-	-	
QuantumATK NanoLab Links	"	"	QuantumATK NanoLabの機能にVASP GUIを加えたもの	"	"	-	-	
Sentaurus Material Workbench	"	"	複雑な操作が必要な物性推算法をパッケージ化し簡単なGU操作で実現するツール。半導体不純物準位、半導体内の不純物拡散、多結晶界面作成など。半導体メカ向け	"	"	-	-	
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	
キネティクス(反応速度)シミュレーション	TSテクノロジー	TSテクノロジー	理論計算(量子化学計算)による解析より得られた ΔG^\ddagger (活性化自由エネルギー) 及び、 ΔG_{rxn} (反応自由エネルギー) により、反応速度定数を計算し、反応速度定数による基質の濃度比変化を時間積分することで、反応の減衰及び基質の最終濃度比を計算するシミュレーションが可能。従来は、特に、多段階反応や競合反応が絡み合う反応系の場合、系中の平衡関係は複雑となり、反応時間や最終生成比を正しく求めることは困難だった。本シミュレーションでは、理論計算結果を適用することにより、逆反応を含めた各反応の速度差を精密に計算することができ、反応時間や最終生成比を正しく求めることを実現している。このシミュレーションにより、反応物の半減期、反応平衡化までの反応時間、生成物の最終生成比や選択率、反応時間や生成比の温度依存性などを明らかにすることができる	-	研究受託システムのご利用頂いております	2015年	10以上、化学・製薬・国内研究機関等(2020年11月)	

EasyDiagram2	"	"	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	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[m]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、ユーザフレンドリーな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[m]stra Solo	"	"	遠隔の計算機上でGaussianジョブを実行する簡単なソフトウェア	"	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/MG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⇒ http://tstcl.jp/quick/	-	14,000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。200以上の受託実績。反応解析、物性推算、触媒開発、分子設計、反応速度シミュレーション等、テーマ単位で柔軟に対応	-	お問い合わせ下さい	2009年	230以上、化学・製薬・国内研究機関等 (2020年11月)
Log2Crd	"	"	Gaussianの出カアークイブ(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	-	-
Winmostar	"	クロスアビリティ	Winmostarは、分子モデリングから量子化学計算・分子動力学計算・固体物理計算の実行、および計算結果の表示・可視化までをPC上で実現するソフトウェア	対応OS: Windows7/8/10	シングルライセンス (民間企業・官公庁150,000~、教育機関50,000~)、年間サイトライセンス (民間企業・官公庁600,000~、教育機関100,000~)	2012年	化学・製薬・国内研究機関等 (2020年11月)
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Spartan'20 for Windows Parallel Suite Gt16	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17スレッド以上の並列処理が可能。そのほかの機能はParallel Suiteと同等	Windows版: 7/8.1/10(64bit)	パッケージ定価: 108万円、大学: 36万円から。詳細お問い合わせ	2021年4月	-
Spartan'20 for Windows Parallel Suite	"	"	マルチコア対応の16スレッドまでの並列処理が可能。バンドルDBに35000件の天然物を格納 並列化の性能向上、2Dスケッチ機能拡張、Single Core版は廃止	"	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	2021年4月	-
Spartan'20 for MacOS Parallel Suite Gt16	"	"	マルチコア対応の17スレッド以上の並列処理が可能。そのほかの機能はParallel Suiteと同等	Macintosh版: OS X 10.10/10.11/macOS10.12/10.13/10.14 /11.x IntelMac限定	パッケージ定価: 108万円、大学: 36万円から。詳細お問い合わせ	2021年5月	-
Spartan'20 for MacOS Parallel Suite	"	"	マルチコア対応の16スレッドまでの並列処理が可能。バンドルDBに35000件の天然物を格納 並列化の性能向上、2Dスケッチ機能拡張、Single Core版は廃止	"	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	2021年5月	-
Spartan'18 for Linux	"	"	Spartan'18 for Windows/MacOS Parallel Suiteと同じ機能。Parallel Suite Gt16と同等の機能以外に、クラスター機などにも対応	Red Hat EL 7、CentOS 7、Ubuntu 16.04、18.04 LTS	要お問い合わせ	2018年11月	-
Spartan Spectra and Properties Database (SSPD)	"	"	分子量500までの低分力約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 Parallel Suiteには添付	-	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 Parallel Suiteには添付	-	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 V8	"	"	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	Windows版: Windows Vista/7/8/10 Macintosh版: MacOS X OS X 10.10/10.11/macOS10.12/10.13/10.14 IntelMac限定	大学/短大: 7万2千円、高専/高校: 2万4千円、学生個人: 8千円。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、2017年5月V7	-
Odyssey Instructor's Edition V6	"	"	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/日本語の他いくつかの言語に対応)	"	大学/短大: 9万円、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	2018年11月	-
Odyssey Student Edition V6	"	"	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: 8千円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスカウントあり	2018年11月	-

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	詳しくはApple Storeにて	2012年7月	—
Odyssey Common Substances	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:身近な物質編	iPad	詳しくはApple Storeにて	2014年7月	—
Odyssey VSEPR Theory	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:VSEPR編	〃	〃	2014年5月	—
Odyssey Atomic Orbitals	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:原子軌道編	〃	〃	2014年4月	—
Odyssey Multipol Bonds and Resonance	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:多重結合と共鳴編	〃	〃	2014年5月	—
Odyssey Chemical Elements	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:周期表と元素編	〃	〃	2014年7月	—
Odyssey Basic Crystal Lattices	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:結晶格子編	〃	〃	2014年7月	—
Odyssey Electron Sharing	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:電子共有編	〃	〃	2014年5月	—
Odyssey Ionic Solids	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:イオン結晶編	〃	〃	2014年7月	—
Odyssey Polar Bonds and Molecules 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	〃	〃	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	〃	〃	2014年7月	—
Odyssey Water at the Molecular Level	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:分子レベルでの水の紹介編	〃	〃	2016年12月	—
Odyssey Crystal Surfaces	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:結晶表面構造編	〃	〃	2016年12月	—
Odyssey Ionic Bonding	〃	〃	iPadで使用する教材コンテンツApp:イオン性結合編	〃	〃	2017年1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
LSKB (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。9千万件以上の化合物は様々なアノテーションの着いた辞書を搭載し、Mole.Framework検索や Target Predictionをはじめ 多彩な解析が可能	Linux or Windows10 / 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	—	—
Metagenome@KIN	〃	〃	次世代シーケンサーデータを利用した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 (64 bit)	〃	—	—
メタトランスクリプトーム解析ソフトウェア	〃	〃	次世代シーケンサーデータから自動でメタトランスクリプトーム解析を行うソフトウェア。解析結果は、タンパク質名やその機能分類ごとに円グラフ、棒グラフなどで表示し、タンパク質が関係するパスウェイ情報も表示する	クラウド	〃	—	—
CLC Genomics Workbench	〃	Qiagen	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 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	〃	〃	—	—
Omixon HLA Explore	〃	米Omixon	既知のHLAアレル型を高速に判定するソフトウェア 次世代シーケンサーにより読み取られたリードデータから、HLA遺伝子領域についてマッピング、HLAタイピングを実施し、IMGT HLAデータベースに登録されたHLA型のコールを実行する。Illuminaや Ion Torrentなどのショートリード、PacBioやOxford Nanoporeからのロングリードデータの解析に対応	Windows/Mac/Linux (64 bit)	〃	—	—
Omixon Holotype HLA	〃	〃	Illumina Miseqを用いたNGS出力データからHLAタイピングを行う試薬と型判定ソフトウェアからなるパッケージ。アッセイ手法はフィラデルフィア小児病院からライセンスされており、複数のHLA lociをカバーする包括的な遺伝子増幅とライブラリ調製試薬を提供。タイピング用のソフトウェアとしてOmixon HLA Twinを含む	Windows/Mac/Linux (64 bit)	〃	—	—
NEXUS copy number	〃	米バイオディスカバリー	【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	〃	—	—
Chemotargets Clarity	〃	西 ChemoTargets	化合物のターゲット予測と副作用予測。さらに代謝物の構造プロファイルが可能。使い易いGUIで計算以外の分野の方での利用可能。自社データによる独自モデル作成も可能	Windows/Mac/Linux (64 bit)	〃	—	—
Exemplar LIMS	〃	米 SAPIOSCIENCE	電子実験ノート(ELN)とラボトラインフォメーションマネージメントシステム(LIMS)機能を備えた新しいシステム。サンプル管理から次世代シーケンサーのデータコントロールまでを一元管理し、フレキシブルにワークフローを構成することが可能。医療・ゲノミクス分野で利用できるよう設計されたシステムとなっている	Linux (64 bit)	〃	—	—
LaboServer	〃	ワールドフュージョン	マルチオミクス対応のデータ管理ソフトウェア。NGS解析データ向け、自社結晶情報管理向けがある。NGS解析データ向けではそれぞれの遺伝子や変異のアノテーション、実験のメタ情報、サンプル情報を管理。自社結晶情報管理向けはプロジェクト、結晶化など実験情報と関連ファイルなどを管理する	Linux/ Oracle	〃	—	—

COMA (Clinical Oral Metagenome Analysis Software)	"	"	COMAは、メタゲノム解析ソフトMetagenome@Kinを歯科専用で改良したソフトウェアで、口腔内細菌をNGSでシーケンスした16Sメタゲノムデータを元に解析する	Windows (64 bit)	"	-	-	
ADPKD Target	"	"	腎臓の希少疾病である常染色体優性多発性嚢胞腎(ADPKD)の病原性変異を解析するソフトウェアとして開発。ADPKDの病態を引き起こす2つの遺伝子"PKD1"および"PKD2"の変異を検出する	Windows10(64 bit)	"	-	-	
FLUGAS (インフルエンザ型判定)	"	"	インフルエンザウイルスのゲノムシーケンスデータから、A型インフルエンザについてはHAとNAの亜型判定を自動的にを行い、B型インフルエンザの場合はB型インフルエンザを検出を報告する。さらにA型B型いずれの場合も8分節のコンセンサス配列を自動的に作成して出力する。AB両方のウイルスや、異なった亜型のインフルエンザウイルスが単一の検体に混入している場合も、最大3株までの混入ウイルスを検出する	Windows10 (64 bit)	"	-	-	
CoVGAS	"	"	COVID-19ゲノム解析ソフトウェア。ゲノム配列解析に利用する高速シーケンスから出力された"COVID-19"の配列データの解析をGUI上での簡易な操作のみで利用可能。解析結果として類似株の同定、S型、L型などの型判定、clade(系統群)表示を実行し、近縁株の情報も同時に表示する	Windows10 (64 bit)	"	-	-	
Nano Tools 2.0	"	"	オックスフォード・ナノポア(Oxford Nanopore)社製シーケンサから出力されたLong sequence readをWindows上での簡単操作で解析することが可能。機能として、Fast5 Fastq Convert, Reference Mapping, De Novo assembly, Structure Variant Analysis を組み込んでいる	Windows10 (64 bit)	"	-	-	
S-KIN Pro	"	"	肌研究を支援するキット。皮膚の常在菌を顔から収集し、疾患や症状と関係する菌、またスキネケに強く関連する菌などを分析してレポートする。常在菌のモニターで、医薬品、サプリメント、化粧品による効果の検証に、さらに特定の機能を持った菌の探索研究に利用できる	-	-	-	-	
	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
Winmostar V10プロフェッショナル版	クロスアビリティ	クロスアビリティ	量子化学計算、バンド計算、分子動力学計算の初期構造の作成からの結果解析まで一貫して実行できるGUIソフトウェア。GAMESS, Gaussian, Gromacs, LAMMPS, Quantum ESPRESSOなど世界的に使われるソルバに対応。40種以上の豊富なチューリアルで即戦力となる技術を短時間で習得可能。また、アカデミアで開発された最先端のアルゴリズムにも対応。詳細は https://winmostar.com/	Windows7/8/10	・特定ユーザーライセンス レギュラーサポート付き プレミアム 民間企業・官公庁 年間使用権:36万円、レギュラーサポート付き エコノミー 民間企業・官公庁 年間使用権:18万円、教育機関 プレミアム 永久使用権:12万円、教育機関 エコノミー 永久使用権:6万円 ・サイトライセンス レギュラーサポート付き プレミアム 民間企業・官公庁 年間使用権:144万円 その他ライセンスはお問い合わせ	2008年3月	特定ユーザーライセンス(旧イングリッドライセンス)の累計販売数は1336、サイトライセンスの累計導入先は50(2021年3月31日現在)	
Winmostar V10学生版	"	"	学生向けの機能制限版Winmostar。無償版の機能に加え、量子化学計算、バンド計算、分子動力学計算の基礎的な操作が可能。詳細は https://winmostar.com/	"	学生は無償	2017年10月	2021年3月31日現在、毎日平均30のダウンロード	
Winmostar V10無償版	"	"	機能制限版Winmostar。MOPACによる半経験的量子化学計算の習得、各種分子構造ファイルの可視化、分子のモデリング、簡易的な分子形状解析が可能。詳細は https://winmostar.com/	"	無償	2015年10月	2021年3月31日現在、毎日平均20のダウンロード	
Winmostar V10 DCDFTBMD	"	早稲田大学中井教授のグループ	Winmostarのアドオンの一つで、中井教授のグループで開発された高速な電子状態計算手法のソルバート、そのGUIを提供。京コンピュータなどの大型計算機での運用実績もあるアルゴリズムを採用。詳細は https://winmostar.com/	"	9万円~	2017/4/1	-	
Winmostar V10 Fragment ER	"	東レ・大阪大学松林教授のグループ	Winmostarのアドオンの一つで、松林教授のグループと東レ株式会社が共同開発した、タンパクリガンド間の相対自由エネルギーの計算モジュールと、そのGUIを提供。従来手法よりも計算コストあたりの計算精度が高いことが特徴。詳細は https://winmostar.com/	"	40万円~	2017/4/1	-	
透明樹脂3Dプリンティングサービス	"	クロスアビリティ	3次元分布するスカラー量、ベクトル量(密度、温度、電場、流速など)を透明樹脂中にフルカラーで表現する3Dプリンティングサービス。シミュレーションデータだけでなく実験データの可視化にも適用可能。視認性に優れた3Dモデルを生成するための独自技術(特許出願中)を使用。詳細は https://winmostar.com/	-	お問い合わせ	-	-	
XA-CUDA-QM	"	"	GPUを用いてGAMESS, Gaussianを高速化するライブラリ。詳細は https://x-ability.co.jp/	WindowsおよびLinux	"	2010年10月	国内外の化学・製薬メーカー	