

<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、2024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 Ver4.3	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、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、10、11 Linux版: Red Hat Enterprise Linux 7以上 (AMD64, Intel64のみ)、またはその互換ディストリビューション Mac版: GUIのみ (10.12以降)	お問合せ下さい	2023年5月	-
ナノ材料解析統合GUI Advance/NanoLabo Ver3.0	"	"	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。Open Catalyst Project の汎用GNN力場も利用可能。また、NanoLaboの使い方を解説できる、ChatGPTをベースにしたChatbotシステムを公開。AIによる材料モデリング機能"Autopilot"を世界に先駆けて開発搭載	Windows10/11(64bit)、AlmaLinux 8 (64 bit)、macOS Ventura(13)以降 (64 bit)(Intel/Apple M1対応)クラウド	"	2024年7月	-
ニューラルネットワーク分子力学システム Advance/NeuralMD Ver1.9	"	"	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場を作成する。この力場を利用して、LAMMPS にて分子力学計算が実行できる。自己学習ハイブリッドモンテカルロ法 (SLHMC) が利用可能。Advance/NanoLaboのGUIにて操作可能	Windows10/11 (64bit)、AlmaLinux 8 (64 bit)	"	2023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
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 (Inte.Ligand)	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、アポタンパク対応、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ィールが可能	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/macOS/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。生体高分子を対象としたMD計算/低分子ドッキング/AIベースタンパクモデリングなどが可能。PVL言語によるマクロ機能、Python API対応	Windows、macOS、Linux	"	-	-
alvaDesc	"	イアルバサイエンス (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	"	"	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) や QSAR/QSPRモデル (alvaRunnerプロジェクト形式) を満たす新規化合物を簡便に生成可能	Windows、macOS、Linux	"	-	-
alvaModel	"	"	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、回帰・分類モデルを構築可能	Windows、macOS、Linux	"	-	-
alvaRunner	"	"	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	"	"	分子データセットの可視化、分析、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、スクャフォールド分析、分子構造のキュレーションが可能	Windows、macOS、Linux	"	-	-
VEGA Toolkit	"	イコデクモインフォマティクス (Kode Chemoinformatics)	in silico評価支援ツールVEGAの組み込み向けソリューション。中毒学・生態毒性・環境特性、物理化学特性など、多様なエンドポイント予測のQSARモデルを多数搭載	Windows、macOS、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法関連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ナル (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	"	独セボスインリコ (OEPOS 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	"	"	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	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	"	-	-

CrystalMaker	"	英クリスタルメーカーソフトウェア (CrystalMaker Software)	インタラクティブな操作性と洗練されたGUIを持つ、複雑な結晶・分子構造でも効率のよい可視化が可能な結晶・分子構造のモデリング・可視化ソフトウェア	Windows, macOS	"	-	-
CrystalDiffract	"	"	X線/中性子粉末回折の様子を画面上に表示し、インタラクティブな操作により実験データの特徴付けを行うことができる分析シミュレーションプログラム	Windows, macOS	"	-	-
SingleCrystal	"	"	結晶回折プロパティの可視化や理解に最適なX線・中性子線・TEM回折パターンシミュレーションパッケージ	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	"	添ニュークレイクス (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	"	添テクネジウム (Technesium 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。制限酵素マッピング、オープンリーディングフレーム検索、BLASTなどの一般的な配列解析も可能	Windows	"	-	-
ACEMD Platform	"	英アクセラレー (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。ACEMDおよびOpenMMエンジン、力場パラメータ化ツールParameterize、各種支援用PythonパッケージHTMD、PyTorchベースのディープラーニングフレームワークTorchMD、グラフニューラルネットワーク(GNN)と同変性変換ニューラルネットワーク(Equivariant Transformers NN)に基づくポテンシャルTorchMD-NET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	"	-	-
Multi-Sigma	"	エイソス	プログラミング不要で、ブラウザからディープラーニングによる予測と、遺伝的アルゴリズムによる多目的変数最適化、ペイズ最適化を行うことができるノーコードAI解析プラットフォーム	Webブラウザ (Windows, Linux, Mac)	"	-	-
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	アスムス	アスムス (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イド、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, Linux	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, PCFF, CVFF, Universal, Dreiding力場	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Forcite Plus	"	"	Forciteに分子動力学の機能を追加。各種の分子動力学を応用したタスクと解析ツールを備える	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Blends	"	"	ポリマー、溶媒、添加剤混合系の混合エネルギー、相図、相互作用パラメーターなどを算出	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio GULP	"	"	無機、有機格子シミュレーションソフト。30種近いポテンシャルを内蔵	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Sorption	"	"	モンテカルロ法による低分子の多孔質体への吸収・吸着シミュレーションソフト。吸着等温線などを計算	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Conformers	"	"	分子のコンフォメーションと柔軟性を明確化するコンフォメーション探索アルゴリズムと分析ツール	"	"	-	-

BIOVIA Materials Studio MesoDyn	"	"	低分子液体、ポリマー液体、ブレンドなどの複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio DMol3 Molecular	"	"	数値基底関数を使い高速、高精度を実現した密度汎関数理論(DFT)に基づくab initio量子化学計算ソフト	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio DMol3 Solidstate	"	"	DMol3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ハミルトニアンなど。溶媒効果、励起状態計算などが可能	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio ONETEP	"	"	数千原子レベルのO(N)-DFT計算を高効率パラレル計算で実行。生体分子などの計算に有効	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio 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	"	"	DMol3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	"	"	DMol3/GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的計算が可能	"	"	-	-
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リピートユニットの構造情報からポリマーの種々の物性値を推算	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Mesocite	"	"	原子スケールモデルを粗視化し、各ビーズについて力場パラメータを割り当てて古典力学を用いることによって、原子スケールよりも大きなメソスケールの計算を行う	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Adsorption Locator	"	"	モンテカルロ法と力場を用いたエネルギー評価によりゼオライトやカーボンナノチューブ、シリカゲル、活性炭素など広範囲の材料に対して分子の安定な吸着サイトを探索	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio DFTB+	"	"	密度汎関数理論(DFT)に基づくタイトバインディング法プログラム。大規模なナノマテリアルのシミュレーションも速い計算速度で実行可能	"	"	-	-
BIOVIA Materials Studio Cantera	"	"	活性化エネルギーなどに基づき、平衡状態、連続型反応器、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 COSMOtherm	"	"	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	Windows, Linux, Mac OS	お問い合わせ下さい	-	-
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。COSMOthermX の設定に追加するだけで、グラフィカル・ユーザー・インターフェイ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	"	"	-	-
BIOVIA TURBOMOLE	"	"	σプロファイル、励起状態、遷移状態などの計算に使用される一般的な量子化学計算コード。計算速度が早く、DFTおよび高レベルのポストHartree-Fock法の計算が特徴。COSMOthermで使用するCOSMOファイルの作成に利用可能	"	"	-	-
<処方作成、管理、製品ラベル作成、製品化向けツール>							

BIOVIA Engenuity	ダッソー・システムズ	"	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)の配合、それに含まれる原材料・物質情報の管理を中心に、法規制情報を確認しながら配合設計を行う機能を保持。配合設計者が、過去から現在までの複数の配合を比較しながら製品開発ができるため、配合設計の効率アップをサポート	Windows, OpenJDK	お問い合わせ下さい	-	-
<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	"	-	-
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(ECFP/FCFP)を使ったフィルタなどを高速に行い、数千万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、創薬段階の合成候補化合物の最適化や、ベンダーライブラリに含まれる大量の化合物からの有用化合物のスクリーニングに利用	"	"	-	-
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	"	-	-
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)、古典力学計算(Forcite Plus、Amorphous Cell)、結晶多形予測(Polymorph Predictor)などを自動化することで、大量のシミュレーションをワンクリックで実行可能	Windows, Red Hat Enterprise Linux	"	-	-
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(特徴量の抽出、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で可能。他にも部分最小二乗法(PLS)、主成分分析(PCA)、決定木(Recursive Partitioning)、遺伝的アルゴリズムを使った数式最適化(GFA)、クラスターリングを提供。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タ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、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/SQL Server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リアルタイムで計算し、高度な解析が簡単に実現。BIOVIA Pipeline Pilot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 2016、Windows 2019またはRHEL8.2以降、Oracle 19c、Chrome、Edge、Firefox	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のスパreadsシート環境で化学構造の読み込み、構造検索、デスクリプタの計算、Rグループ分析がクライアントPCだけで可能。BIOVIA Pipeline Pilot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 2016または2019(32/64両対応)、最新のChrome、Edge、Firefox	"	-	-

BIOVIA Registration	"	"	BIOVIA Pipeline Pilot 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 2016、Windows 2019またはRHEL 8.1以降、Oracle 19c、最新の Chrome、Edge、FireFox and Safari	"	-	-
BIOVIA Draw	"	"	BIOVIA製品標準の化学構造、反応式、バイオリジクスに対応した化学構造式描画ツール。BIOVIA Pipeline Pilot と組み合わせてすることで、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 10/11 (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 2016、Windows 2019またはRHEL8.1以降	"	-	-
<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にリアルタイムでフィードバック可能。ポータル画面ではSNS機能を実装しコラボレーションを加速。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	Firefox、Chrome、Edge	お問い合わせ下さい	-	-
BIOVIA Pipette Sketcher API	ダッソー・システムズ	"	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 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CCORISが加わり、約17万化合物。創薬初期での毒性、代謝研究を支援	"	"	-	-
BIOVIA Available Chemicals Directory (ACD)	"	"	世界中の市販化学物質を構造検索できる価格とサプライヤ情報を収録。1,500万以上の固有化学物質 (3Dモデル含む)、4,700万以上の製品、1億1,700万以上のパッケージ、780のサプライヤ	"	"	-	-
BIOVIA Screening Compounds Directory (SCD)	"	"	スクリーニング用化合物サプライヤーのカタログ情報を集録。2,300万化合物	"	"	-	-
<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 2019 server、Oracle19c / クライアント: Windows 10	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	"	実験や研究に関わる全てのデータをPC上で記録・管理でき、メンバー間で簡単に共有できる電子実験ノート。幅広い業務に対応可能で非常に使いやすく、また導入も簡単で低コストです。様々なタイプの電子記録に対応でき、変更や参照の記録も残せ、改竄防止もできるため、情報共有化、業務効率化、知的財産の保護を支援する	クライアントOS: Windows、Mac、ブラウザ: Safari、Chrome、Edge 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。レンビ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、レンビ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 Equipment	"	"	分析機器・各種装置から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、データシステム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 Samples	"	"	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、進捗管理を担う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	"	"	-	-
<3DEXPERIENCE Platform, Cloud>							
Generative Therapeutics Design	ダッソー・システムズ	"	類似化合物構造の生成、機械学習モデルによる評価、選定のサイクルを繰り返すことにより、複数のプロパティの同時最適化をクラウド上で自動実行するシステム	Chrome and Firefox	お問い合わせ下さい	-	-
Computational Chemist	"	"	3DEXPERIENCE Platform (cloud) 版 Discovery Studioを中心とした計算化学者向けのロールで、他にScientific Notebook (電子実験ノート) やMaterial Registration等のアプリが含まれる。Generative Therapeutics Designを契約した場合、このアプリも本ロールに含まれる	Chrome and Firefox、Windows	"	-	-
Computational Structural Biologist	"	"	3DEXPERIENCE Platform (cloud) 版 Discovery Studioを中心とした構造生物学者向けのロールで、他にScientific Notebook (電子実験ノート) やMaterial Registration等のアプリが含まれる	"	"	-	-
Materials Modeler	"	"	3DEXPERIENCE Platform (cloud) 版 Materials Studioを中心とした計算化学者向けのロールで、他に Materials Modeler (Web版 3D構造式エディタ) やMaterial Registration等のアプリが含まれる	"	"	-	-

Formulation Designer	"	"	3DEXPERIENCE Platform (cloud) 版 Engenuityを中心とした配合設計者向けのアプリケーションが搭載されたロールで、配合設計に必要な計算機能の他、物質・原材料情報管理、法規制チェックを行うことができる	Chrome and Firefox	お問い合わせ下さい	-	-
Research Scientist	"	"	3DEXPERIENCE Platformにて利用可能なソリューション。電子実験ノートを使った研究情報の記録・管理、さらに試薬や原料の管理、化合物の登録等が可能。さらに研究活動に関わる様々な情報を横断的に検索することができ、研究開発のDX基盤として活用可能	"	"	-	-
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
MolDesk Screening	バイオモデリングリサーチ	情報数理バイオ	分子シミュレーションプログラム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、GPUを使ったMD計算等が行える	Windows 10, MacOSX 10.11以降, Linux 64bit	お問い合わせください	2015年10月	-
MolDesk Basic	"	"	分子シミュレーションプログラムmyPrestoを使った創薬計算支援用GUIソフトウェア。タンパク質と低分子化合物とのドッキング等を行える	Windows 10, MacOSX 10.11以降, Linux 64bit	お問い合わせください	2015年1月	-
MF myPresto	"	フィアラックス	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スクリーニングが行える	Windows 10, MacOSX 10.13以降, CentOS 7/8, Red Hat Enterprise Linux 7/8	年間ライセンス使用料5ライセンス9万円(教育機関向け)~(税別)	2010年8月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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システムの運用開始が可能。電子ノートのリソースを自由に設定することも可能	クラウド、各種ブラウザ	お問合せ下さい	2014年5月	お問合せ下さい
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	"	"	"	"
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等計算機能やカーブフィッティング機能も備える	"	"	"	"
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ベントリシステム。動物管理等にも適応可能	"	"	"	"
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(ELN,Registration,Assay,Inventory)を跨り任意のビューを作成するツール	"	"	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にて自在に設定管理できる管理者機能を搭載。サードパーティーのツールと連携して分析データファイルを自動取得させることも可能	"	"	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転送をするツール。これによりバンダーフリーのデータ活用を促進	"	"	2019年1月	"
Arxspan BioDrive	"	"	電子ノート内で核酸、ペプチド、抗体、遺伝子治療等様々なModality領域に対応したシーケンス描画ツール。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、複数の表示形式と編集機能を持つ	クラウド、各種ブラウザ BioDrive デスクトップ版も同時リリース	"	2021年8月	"
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
D360	サターラ合同会社	米サターラ (Certara USA)	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用ソフトウェア。各種申請資料への豊富な採用実績を有する。PK/PDモデルやノンコンパートメント解析、生物学的同等性解析など多様な機能を提供するだけでなく、Phoenixプラットフォームを通して、各種ソフトウェア、データベースとの連携を実現	Windows	-	1974年	世界トップ20の大手製薬企業全社と11か国の規制当局を含む2600の
Phoenix NLME	"	"	Phoenixプラットフォームで動作する母集団薬物動態・薬力学解析専用のソフトウェア。グラフィカルな環境における、スムーズな母集団モデルの構築をサポートし、承認申請用の解析にも対応	Windows	-	2010年	-
PK Submit	"	"	PhoenixのPK解析結果に基づいてCDISC承認申請データパッケージを作成するPhoenix WinNonlinのアドインソフトウェア	Windows	-	2018年	-
Validation Suite	"	"	Phoenix WinNonlinおよびNLME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	Windows	-	-	-
Phoenix IVIVC Toolkit	"	"	Phoenix WinNonlinのアドインソフトウェア。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、製剤設計を支援	Windows	-	2008年	-
Trial Simulator	"	"	母集団モデルや曝露反応モデルなどに基づく臨床試験シミュレーション用ソフトウェア。臨床試験の成功確率や試験デザインの妥当性など多彩なシナリオの容易な検証を実現	Windows	-	-	-
Certara Integral	"	"	21 CFR Part 11 Compliance準拠解析データ管理専用のクラウド型データベース。Phoenix WinNonlinやSASなど臨床薬理や生物統計業務で用いられるあらゆる解析データの管理に対応	-	-	2018年	-
Pinnacle 21 Enterprise	"	"	米国FDAや日本のPMDAの承認申請に用いられるCDISCデータのバリデーションツール。企業間のコラボレーションや業務ノウハウの蓄積と共有を促進し、電子データ申請業務の生産性を大幅に向上	-	-	-	-
CODEx	"	"	各治療領域で販売もしくは開発中薬剤の公開臨床試験結果を蓄積するデータベース。モデルに基づくメタ解析などに活用	-	-	-	-

Global Submit	"	"	米国FDAや日本のPMDAなど各国の承認申請に用いられるeCTDパッケージの作成やバリデーション、レビューを支援するクラウド型アプリケーション	-	-	-	-
Basecase	"	"	市場投入された医薬品や医療機器のマーケットアクセスやメディカルアフェアーズ業務を支援するデジタルコンテンツの作成ツール。インタラクティブなコンテンツによってフィールドチームによるステークホルダーとのコミュニケーションをサポート	-	-	-	-
Simcyp Simulator	"	"	業界標準の生理学的薬物速度論モデリングツール。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	Windows	-	-	-
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	Windows	-	-	-
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	Windows	-	-	-
Simcyp Discovery	"	"	創薬やトランスレーショナル研究向けの生物学薬物速度論ツール	Windows	-	-	-
Vyasa Layer	"	"	データファブリックによるデータ統合、分析プラットフォーム	-	-	-	-
Vyasa Axon	"	"	自然言語処理による相関マップ・視覚化	-	-	-	-
Vyasa Cortex	"	"	データファブリックの管理を行うプラットフォーム	-	-	-	-
Vyasa Synapse	"	"	非構造情報のスプレッドシート化	-	-	-	-
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メ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 10/11	ノードロック 15万円/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 12万円/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
COMSOL Multiphysics	計測エンジニアリングシステム	スウェーデン 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、化学反応工学(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、最先端とも言えるマルチフィジクス機能を持つ。化学反応工学におけるシミュレーションでは、攪拌槽や反応器、触媒などにおける反応熱を考慮した流体流れや反応場の計算に適している。反応速度論を考慮したプロセス解析として抽出や分離、蒸留、発酵など医薬品や食品加工などにも適用できる。環境技術や石油化学、半導体におけるCVD、ポリマー製造プロセスなども対象。電気化学の分野では、電池の材料からスタックまでマルチスケールの解析に適用でき、腐食や電気メッキも計算対象となる。併せて流体や構造、電気や磁場、光学など複数の物理と連成解析が可能。豊富な材料物性を持つ材料ライブラリや最適化計算のためのモジュールも併用可能	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の標準機能Application Builderで作成した解析アプリを実行形式の単体可動できるファイルに変換できる。Windows/Linux/macOSの各OS(64bit版)上で動作可能な実行形式ファイルを作成し再配布が可能とする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、コンパイル時に作成するランタイムで実行形式ファイル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。無償配布可能。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を拡げられる	動作要件はCOMSOL Multiphysicsと同じ。	アカデミック/コーポレート同価格。	2018年10月	-
COMSOL Server	"	"	COMSOL Multiphysicsの標準機能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。端末でブラウザを変更して、再計算し、結果を3D画面表示し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
CONFLEX 9 & Interface Rev.C - Basic Version - Pro Version	コンフレックス	コンフレックス	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化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~	2023年6月	-
Parallel CONFLEX 9 & Interface Rev.C - 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~	2023年6月	-

Amber24 / AmberTools24	"	University of California San Francisco	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、トランジェクトリー解析、エネルギー解析などを行うモジュールも含まれる	Source code	お問い合わせ	2024年4月	-
Gaussian16 (Rev. C.02) GaussView6 (6.1.1) TCP Linda9.2	"	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	2022年3月	-
ChemDraw Prime v23 ChemDraw Professional v23 Signals ChemDraw v23	"	Revvity Signals Software, Inc.	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な様々なパッケージが用意されている	Windows, Mac	お問い合わせ	2024年2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、インストラクション	"	"	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、トータルソリューションを提供する。技術サポートは、初心者から使い慣れた方まで幅広く対応。トレーニングは、実習形式で初級編から応用編まで顧客のニーズに合わせて行う	-	お問い合わせ	-	-
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
ActivityBase	伊藤忠テクノソリューションズ	伊藤忠テクノソリューションズ	HTS、マニュアルアクセスの双方に対応したクライアントサーバー型のアクセス情報管理システム	サーバー: Windows 2012 R2, 2016, 2019 / クライアント: Windows 8.1, 10 Citrix + Office 2013, 2016, 2019, 365 (詳細はお問合せください)	"	-	-
XLfit	"	"	アクセス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, 365	"	-	-
RAKTIS	"	"	試薬管理ソフトウェアパッケージ。在庫検索・入出庫管理・発注・棚卸等に対応。法規制チェックシステムとも連携し、コンプライアンスを遵守した試薬管理を実現	DBサーバー: Windows Server 2016/2019, Oracle Database 12cR2/19c, BIOVIA Direct 2019/2020/2021SP1 APサーバー: Windows Server 2016/2019, .NET Framework 4.6.2以上 クライアント: Windows 10, Google Chrome / Microsoft Edge, 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 2016/2019, Oracle Database 12cR2/19c, BIOVIA Direct 2019/2020/2021SP1 APサーバー: Windows Server 2016/2019, .NET Framework 4.6.2 以上 クライアント: Windows 10, Google Chrom/Microsoft Edge, BIOVIA Draw / Chem Draw 一括チェックシステム Client: Windows Server 2016/2019, Windows 10/11, .NET Framework 4.6.2 以上	"	-	-
Lapris	"	"	ラベルプリンタと連携して、構造式をバーコードラベルとして出力可能な機能	DBサーバー: Windows Server 2019 Oracle Database 19c, BIOVIA Direct 2021SP1 APサーバー: Windows Server 2019, .NET Framework 4.6.2 以上, BIOVIA Draw 2021 クライアント: Windows 10, Chrome/Microsoft Edge, BIOVIA Draw	"	-	-
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、バイオアクセス・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承認既存薬について、代謝物を含むChemicalな情報、Clinical情報、副作用情報およびPK/ADMET情報を中心にキュレーションしたデータベース	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、及び上市後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 Advanced Desktop/Enterprise	"	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。Desktop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, Windows10	"	-	-
Leadscope Toxicity Database	"	"	詳細な毒性情報が付随した160,000以上の化合物を収録したデータベース	Windows 7, Windows10	"	-	-
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	"	"	-	-
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	"	"	-	-
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 2022 Server + Oracle19c Windows 2019 Server + Oracle19c	通信先によりライセンスが異なるため、お問合せください	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	サーバー: Windows Server 2016/2019/2022, Red Hat Enterprise Linux 8.x(DBサーバーのみ)、Oracle 19c /クライアント: Windows 11/10	費用はお問い合わせください	-	-
BIOVIA Notebook	"	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	サーバー(AP): Windows Server2016/2019/2022、サーバー(DB): Windows Server2016/2019/2022、Red Hat Enterprise Linux 8.1 or later、データベース: Microsoft SQL Server 2019/2022、Oracle 19c Release Updates 7 and later/12c R2 クライアント: Windows 10/11、Edge、Firefox、Chrome	"	-	-
ScienceCloud Experiments	"	"	Mac からも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	サーバー: Windows Server2016/2019/2022、Red Hat Enterprise Linux 8.1 or later、Red Hat Enterprise Linux 7.9 or later、クライアント: Windows10/11、Edge、Firefox、Chrome	"	-	-
BIOVIA Direct	"	"	化学データカートリッジで構造式および反応式の探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	サーバー(OS): Windows Server2016/2019/2022、Red Hat Enterprise Linux or Oracle Linux 8.5 or higher、サーバー(Oracle): Oracle 19c Release Update 7 and later	"	-	-
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 10、11(Enterprise・Pro/64bit/English or Japanese)	"	-	-
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	サーバー: Windows Server 2016/2019/2022、Red Hat Enterprise Linux 8.x、クライアント: Windows 10/11、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	サーバー: Windows Server 2016/2019/2022、Red Hat Enterprise Linux 8.x、クライアント: Windows 10/11、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	サーバー: Red Hat® Enterprise Linux® 8.x、Windows Server 2019/2016/2022	"	-	-

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	"	"	SNSデータベース、SNS分析プラットフォーム	Internet経由でのアクセス	"	-	-
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、サンプル出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	データベース: Oracle 19c サーバー: Windows Server 2019 ブラウザ: Chrome/Microsoft Edge/IE11 ※SaaSにも対応	"	-	-
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。データソースからのデータ取込用コネクタが多数用意されており、社内外の情報を串刺し検索するエンタープライズサーチが実現	サーバー: Windows Server 2019	"	-	-
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	"	-	-
Tetrascience Data Platform	"	米Tetrascience社	実験機器ごとに出力される実験データを自動集約し、汎用的なデータフォーマットに変換・統合することにより、データの高度解析の実現を強力に支援するAWSネイティブのデータプラットフォーム	AWS	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Chemistry 4-D Draw 9.0	デジタルデータマネジメント	米ケムイ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、11 (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、カーボンナノチューブの作成ツール、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、11 (64ビット)、Mac OS 10.11+以上、Linux	9万8千円	2020年4月(国内)	国内約20本
Molecular Modeling Propius, 8.0	"	米ノルギンモンゴメリーソフトウェア	3Dの化学構造を描画、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 7、8、8.1、10、11	9万円	2005年3月	国内約50本
Molecular Modeling Propius Flavor Plus	"	"	香りと臭いのシミュレーターにMMPP(上記)の機能を統合したバージョン	Windows 7、8、8.1、10、11	18万円	2021年9月	国内約20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/環状マップ作成、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、11 (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出来、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・ミニチュアツープ・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・低分子エミュレーション・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SC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	お問い合わせください
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っても便利なツール	"	"	お問い合わせください	"
BioBright (Darwin Sync)	"	BioBright	様々な実験装置 (Mass-Spec, High Content Imaging, Plate Reader 等) から、データを暗号化してクラウドにTB級のデータを転送することができる。ドットマティクス製の製品と連携し、データベース化してVortexやBioBrightのAI/MLで解析することも可能	"	"	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
EAGLYS ALOHEMISTA	EAGLYS	EAGLYS	次世代マテリアルズ・インフォマティクスソリューション。秘密計算を利用し、複数社間のデータを利用したMIを実現	Webブラウザでの動作	年間500万円～	2024年4月	大塚化学他
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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	520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できる	Windows 10, 11/OS X 10.13以降/CentOS 7.8/RedHatEnterprise Linux 7.8	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できる	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
Mol3D	"	"	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	70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 10,11	9万8000円～(税別)	2017年2月	30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 10/11 (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 10/11(各64bit)、RedHat Enterprise Linux 7、CentOS 7 Ubuntu	"	"	—
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	"	"	"	-
Signals ChemDraw / ChemDraw Professional / ChemDraw Prime	"	Revvity (旧/パーキンエルマー)	世界標準の化学構造式/反応式作画ソフトウェアで、構造式・反応式等を簡単に作画可能	Windows10、11(64 bit)、Mac OS 13.6、14.2	"	"	2021年9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、アクセイ管理、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 8.1、10、11(x64)	"	"	-
ACD/Spectrus JS	"	"	クラウド版NMR解析ソフトウェア。Webブラウザ経由で1Dおよび2D NMRデータを解析が可能	Chrome, Safari, Edge	"	"	-
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	Windows 8.1、10、11(x64)	"	"	-
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パック製品。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パック製品。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の原子間相関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1億件の化合物を取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/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に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/Method Selection Suite	"	"	物理化学的特性の予測とメソッド最適化ツールを組み合わせて、分離を効率的に生成することにより、メソッド開発の合理化(クロマトグラムのシミュレーションや保持時間予測)	"	"	"	-
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、経ロ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、水溶性、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/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(JChemBase、MarvinJS別)	"	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当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	"	"	CRAIS Checker導入時に必要な設定ツールを提供する	"	"	-	-
Patcore/Standardizer Server license	"	"	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	"	"	Structure Checker化学構造のバリデーションツールで、潜在的な問題の原因となり得る構造式のエラーを検出し、修復を行う	"	"	-	-
Patcore/Reactor Server license	"	"	Reactorはジェネリックな反応を用いてバーチャ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)	"	"	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)	"	"	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	"	"	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	"	"	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/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、バイオリジスト、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	"	"	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/JChem Oracle Cartridge	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	Instant JChem Standard と Instant JChem Enterprise のアドイン。ヒストグラム、散布図、リーダーチャート、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	"	"	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	"	"	既存 IJC ユーザーが IJC と Plexus Connect 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	"	"	既存 Plexus ユーザーが IJC と Plexus Connect 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	"	"	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	"	"	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	"	"	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 を含む	"	"	-	-
Patcore/Document to Structure	"	"	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/ChemCurator	"	"	公開特許からマーカーシミ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/Markush Search	"	"	特許出願などに用いられるマーカーシミュ構造をデータベースに登録し、エnumeration 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	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	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/CRAIS Reagent	"	"	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	"	"	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ピ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	"	"	-	-
TIBCO Spotfire Analyst	"	Revvity (旧パーキンエルマー) (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	Windows 8+、10、11 (各 64bit)	"	2018年2月	-
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	"	"	"	-
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	"	"	"	-
Lead Discovery Premium powered by TIBCO Spotfire	"	"	TIBCO Spotfire が提供する Lead Discovery Premium 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	"	"	"	-
Lead Discovery Premium powered by TIBCO Spotfire Personal	"	"	Lead Discovery Premium Personal Subscription を使用する TIBCO Spotfire Analyst は、TIBCO Spotfire プラットフォームと Lead Discovery Premium 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	"	"	"	-

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、スケー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 2016, 2019, 2022 (各64bit)	"	"	-
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	"	"	"	-
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	"	"	"	-
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	"	"	"	-
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etc.) 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	VR機器 (Meta, HTC, HP など)	"	2020年9月	-
ADME Database	"	富士通	薬物の吸収、分布、代謝、排泄情報のデータベース。クオアチアの Prof.Slobodan Rendic により収集されたヒトP450、ヒトトランスポート、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録	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、トランスポートの阻害、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実行でき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。2023年12月より静脈内急速投与/持続投与でのシミュレーションも可能となった	Windows 10(64bit)/11 (スタンダード)	"	2010年2月	-
FUJITSU Digital Laboratory Platform AI創薬基盤 SCIQICK	"	"	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	-
Signals Notebook Standard/Enhanced Enterprise Edition	"	Revvity (旧バークンエルマー)	実験に関するすべての情報を一元管理できるシンプルなクラウド型電子実験ノート。製薬、化学、素材、食品メーカーなどの様々な研究分野で使われており、すべての研究開発プロセスのデータを蓄積、共有できる。Webブラウザベースのシステムのため、簡単かつ迅速に低コストで導入でき、インターネット接続とブラウザがあれば、いつでもどこからでも利用可能。また、誰にでも使いやすいインターフェースで直感的に操作でき、レスポンスは高速でストレスなく利用可能	Google ChromeまたはMicrosoft Edge推奨	お問合せ下さい	2022年9月	-
Torx Design	"	Cresset Biomolecular Discovery Ltd./ Torx Software	Torxは、創薬プロジェクト全体の業務管理やチームによる共同作業を支援するコラボレーションプラットフォーム。Torx Designでは、プロジェクトに必要なデータを画面に配置する環境を提供し、十分な情報に基づいた分子デザイン的意思決定を支援する	お問合せ下さい	お問合せ下さい	2022年8月	-
Torx Make	"	"	Torx Makeでは、各化合物の合成に関する概要 (担当者や優先順位、ステータス、予定日等) を可視化し、プロジェクト全体の合成状況を一括で管理する	"	"	2022年8月	-
Torx Test	"	"	Torx Testでは、合成チームとアッセイチームを1つのプラットフォームで結び、テストプロセスの管理負担を軽減する	"	"	2022年8月	-
Torx Analysis	"	"	Torx Analysisでは、得られたデータを分析し、立てた仮説に対する重要な結果を記録することで、次のデザインにインスピレーションを与える	"	"	2022年8月	-
Cresset Flare	"	"	リガンドベース (QSAR、ファーマコフォアモデルの構築など) および構造ベース (ドッキング、結合自由エネルギー計算など) の豊富なドラッグデザイン機能が搭載された分子設計ソフトウェア	"	"	2022年8月	-
Cresset Spark	"	"	Scaffold hopping および R-group 置換により、初期構造から多様で新規性の高い Bioisostere を素早く生成するパーチャラルライブラリ発生ツール	"	"	2022年8月	-
Cresset Blaze	"	"	大規模な化合物コレクションから検索し、既知リガンドと類似した性質を持つリードライクな化合物を高速に発見するリガンドベースのパーチャラルスクリーニングツール	"	"	2022年8月	-
Biodrug Design Accelerator	"	富士通	ペプチド医薬品の候補として抽出された数千種類の化合物を、数十種類にまで絞り込む過程において、研究プロセスの可視化やデータの一元管理、研究者間のコラボレーションを可能にすることで、DMTAサイクルを加速し、候補化合物選定の飛躍的な効率化を実現する	"	"	2023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

Screener Core	ジーンデータ	スイス ジーンデータ	Screenerは創薬研究における多様なアッセイに対応したソフトウェアプラットフォーム。様々な機器で測定された生データの取込から解析・管理・報告書出力までのオートメーション化を実現。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、また経時変化アッセイ向けに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, HCS, 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: Red Hat Enterprise, Amazon Linux 2 Client: Chrome, Firefox, Edge	お問い合わせください	2001年4月	国内外 60社強 (Screener)
Screener High Content Extension	"	"	High Content Screening向けソリューション。Screener Coreに解析済みの数値パラメ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	"	"	2009年5月	"
Screener Hit Profiler	"	"	対象の化合物に対してScreenerで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。化合物の情報も表示可能	"	"	2007年9月	"
Screener Flow Cytometry Extension	"	"	Flow Cytometry由来する1細胞解析に対応。UI上でゲーティングを行い目的のPopulationを作成。その後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	"	"	データの解析中に、同じサンプルで実施された別の実験 (毒性やカウンタアッセイ) の結果を表示しこれらの結果を参考にしながら解析ヒットリストの作成を行う	"	"	2015年11月	"
Screener Real-Time Extension	"	"	アッセイ機器出力のデータファイルをリアルタイムに取り込み、測定状況の監視を行う。QC基準としてRZ'値等の閾値を設定することで、異常プレート等を検出し、メール通知が可能。測定エラーの早期発見、早期対応ができるため、試薬等実験コストや労働時間の大幅な節約につながる	"	"	2018年2月	"
Screener Ion Channel Extension	"	"	イオンチャンネル実験に特化した解析が可能。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	"	"	2023年3月	"
Screener Auto Load Extension	"	"	実験データが特定のフォルダーに保存され次第自動的にファイルを取り込み、解析、最終結果出力を実施	"	"	2023年3月	"
Screener Mass Spectrometry Screening Extension	"	"	質量分析 (MS) スクリーニング解析用モジュール。多重反応モニタリング (MRM)、アフィニティー選択質量分析 (ASMS)、共有結合アッセイに適用可。MSスペクトルのデータ取込から解析のためのワークフローが組込まれており、Hitのデコンボリューションや、検出ピークやクラスターを含むMSスペクトルの可視化をサポートする	"	"	2023年3月	"
Screener Result Uploader	"	"	外部リソースからアッセイデータ (エンドポイント?) をScreenerに取り込むことが可能。タブ形式、Screener変換形式に対応	"	"	2023年3月	"
Screener TSA Package	"	"	Thermal Shift Assay向け解析モジュール。標準的に使用されるアルゴリズム (midpoint, first derivative, Boltzman fit) を搭載。Tm等の値と波形を合わせ、迅速かつ精度の高い解析が可能になる	"	"	2014年7月	"
Screener SPR Package	"	"	Surface Plasmon Resonance (Biacore他) 向け解析。KD, Kon, koff等、標準的に算出するのアルゴリズム、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 Mechanistic Analysis 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, kPCA等のアルゴリズムを標準で搭載	"	"	2018年2月	"
Screener Transcriptomic Screening Package	"	"	qPCRとQuantiGene Plex技術を使用したトランスクリプトーム解析が可能。デフォルトで必要な解析アルゴリズムが搭載されており、例えばCytotoxicity等を出力し、またHGKのFold Changeも可視化可能	"	"	2020年5月	"
Screener Assay Catalog	"	"	アッセイに関する情報 (ターゲット、算出項目、ELN番号等) を登録・管理し、それらとAssayの解析結果と結びつける。登録情報は、Hit Profilerや他のシステムに出力可能	"	"	2020年5月	"
Profiler	"	"	創薬研究や臨床試験のデータ、RWDなど、製薬企業の研究開発サイクルで得られる貴重なデータ資源を、部署や開発ステージ横断的に活用するためのプラットフォームソリューション。データ統合、マネジメント、解析可視化機能が一体となった設計により、研究者が安全かつ効率的にデータや解析ツールにアクセスできる環境を提供。研究開発全体の効率化、成功率向上、スピードアップに向け、各ステップでデータに基づいた意思決定をサポート。Bio-IT World 2022にてInnovative Practices Awards受賞	"	"	2000年 (Expressionist)	国内外30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ライメント、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、他ユーザーとの共有を可能にし、安定した再現性確保を実現。主要ベンダーの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 (Expressionist)

Selector	"	"	次世代シーケンスデータを始めとし、多種多様な オミクス実験データ、アノテーション、パテント情報等を統合し、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。バイオ医薬品に関しては、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	"	"	抗体、リコンビナントタンパク質、核酸、CGTなどの高分子バイオロジクス研究開発における分子設計、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。欧米でのバイオロジクス研究データ管理システムのスタンダード。すべてのバイオロジクス関連情報(分子、サンプルバッチ、シーケンス、アッセイ、分析情報等)を追跡可能にする。また、in silico クローニングや研究機器との接続を可能とし、データやサンプルの管理を容易にする。複雑で繰り返しの多いワークフローを、より簡素化・標準化・合理化することにより研究の効率化・データ品質の向上・意思決定の迅速化を図る。複数拠点のデータのシェアリング、リユースを高セキュリティで実現するとともに、将来のML/AIを見据えた構造化したデータ蓄積プラットフォームを提供	Linux Server with Windows PC	"	2011年	国内外40社強 Pfizer、Janssen、Sanofi、gsk、Novartis、Takeda、UCB、Morphosys、Bayer、Schering他
Bioprocess	"	"	抗体、リコンビナントタンパク質、核酸、CGTなどの高分子バイオプロセス開発(CLD、USP、DSP、Formulation)をサポートするデータ統合管理ソリューション。すべてのバイオプロセス研究の過程で生産されるデータを統合管理し、関連情報(発現ベクター、cell line、lineage、培養・精製条件、アッセイ、分析情報等)を追跡可能にする。オンライン・オフラインデータの経時データの統合・解析、CLDレポートを始めとするオートメーションにも対応。複雑で繰り返しの多いワークフローを、より簡素化・標準化・合理化することによりバイオプロセス研究の効率化・データ品質の向上・意思決定の迅速化を図る。複数拠点のデータのシェアリング、リユースを高セキュリティで実現するとともに、将来のML/AIを見据えた構造化したデータ蓄積プラットフォームを提供	Linux Server with Windows PC	"	2011年	国内外40社強 Pfizer、Janssen、Sanofi、gsk、Bayer、Schering、Sartorius、Ajinomoto他
Imagene	"	"	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	欧米製薬会社
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.17	日本サーバ	日本サーバ	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 11/10	お問い合わせ下さい	2023年11月	—
GENETYX-MAC (Ver.22)	"	"	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 (Ventura 以上)	"	2022年11月	—
ATGC (Ver.11) 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 11/10	"	2023年4月	—
ATGC (Ver.9) 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 (Ventura 以上)	"	2023年4月	—
GENETYX NGS Ver.5	"	"	次世代シーケンス解析ソフトウェア	Windows 11/10	"	2023年4月	—
GENETYX NGS-MAC Ver.5	"	"	次世代シーケンス解析ソフトウェア	Macintosh (Ventura 以上)	"	2023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
GRRM20 with Matlantis	HPCシステムズ	HPCシステムズ / Preferred Computational Chemistry / ENEOS	非調和下方歪み追跡法(ADDF法)と人工力誘起反応法(AFIR法)を実装し、反応物の情報から、量子化学計算に基づいて、中間体、遷移状態、生成物、副生成物などを自動探索するソフトウェア。深層学習モデルを用いることで、量子化学計算に匹敵する精度の結果を従来の数万倍高速に得られる原子レベルシミュレータ「Matlantis」上でGRRMが動作し、結晶系・分子系の両方の反応経路探索を極めて高速に行う。従来のオンプレミスのGRRM環境では困難であった、百〜数百原子系での反応経路探索が現実的な計算時間で実施可能となり、これは反応経路探索における新たな可能性を切り拓く	PFCC社提供のMatlantis上で動作します。ご利用いただくには、GRRM20 with Matlantis本体 および GRRM20 with Matlantis連携パッケージの年間ライセンスが必要です。GRRM20 with Matlantis本体はHPCシステムズから、GRRM20 with Matlantis連携パッケージはPFCCから提供します。また、これらにはMatlantis自体のライセンスは含まれていません。そのため、ユーザー組織は別途Matlantisの契約締結が必要です	お問い合わせ下さい	2024年3月	—
GRRM23	"	量子化学探索研究所北海道大学	たった1つの分子をインプットするだけで、そこから生成されるすべての生成物やそれを生成しうるすべての反応物、そしてそれらすべての反応経路を自動的に探索できる。触媒設計、材料スクリーニングなどさまざまな分野で活用可能。Rate Constant Matrix Contraction法と呼ばれる反応速度論的解析手法に基づいて、反応経路ネットワーク上の他の化学種から出発するすべての反応について、目的生成物の収率を予測する。この機能を速度論ナビゲーションツールとして用いることで、量子化学的逆合成解析(QCaRA)が実施される。生成物の構造を唯一の入力として受け取るQCaRAは、小さな天然生成物の合成を含む、様々な既知の反応に対して正しい反応物を同定する能力を実証した。また、ユーザーが開発した外部モジュールを用いて構造最適化や探索を制御する機能を提供する。これらのモジュールは、局所最小値付近の探索順序を変更したり、局所最小値から探索される経路を変更したり、システムに外部バイアスポテンシャルを適用したりすることができる	Red Hat Enterprise Linux 7.x または CentOS 7.x、Red Hat Enterprise Linux 8.x または CentOS 8.x または AlmaLinux 8.x、(Red Hat Enterprise Linux 6.x および CentOS 6.x は非対応)※ Gaussian16 または Gaussian09が必要	"	2023年5月	国内外40超の企業・大学に実績あり。シリーズ累計では309組織に利用実績あり。

GRRM20	"	"	たった1つの分子をインプットするだけで、そこから生成されるすべての生成物やそれを生成しうるすべての反応物、そしてそれらすべての反応経路を自動的に探索できる。触媒設計、材料スクリーニングなどさまざまな分野で活用可能。複雑な反応経路ネットワークに適用可能な、速度定数行列収縮法(RCMC)と呼ばれる速度論解析手法が利用できる。RCMCは、SC-AFIR探索の速度論ナビゲーションとして、または、SC-AFIR探索で得られた反応経路ネットワークの解析法として、利用される。周期境界条件下での構造最適化、反応経路計算、および、反応経路自動探索を行える。その際、並進ベクトルと原子位置の両方を同時に最適化可能。多数の構造変数を含む巨大系のための構造最適化アルゴリズムが用意されており、半経験的な量子化学計算法と組み合わせ、最大1000原子を含む系で確認されている	Red Hat Enterprise Linux 7.x または CentOS 7.x, Red Hat Enterprise Linux 8.x または CentOS 8.x または AlmaLinux 8.x, (Red Hat Enterprise Linux 6.x および CentOS 6.x は非対応)※ Gaussian16 または Gaussian09が必要	"	2021年6月	-
GEAR-V™	"	HPCシステムズ	化学反応経路の理論的自動探索を世界ではじめて可能にし、触媒設計、材料スクリーニングなどさまざまな分野で活用できるGRRM、結晶や無機固体の非経験的(ab initio)量子分子動力学計算で計算結果に定評のあるVASP(Vienna Ab initio Simulation Package)、GEAR-V™はGRRMの量子化学計算エンジンとしてVASPを使用可能にする、GRRM用インタフェースプログラム	Red Hat Enterprise Linux 7.x または CentOS 7.x, Red Hat Enterprise Linux 8.x または CentOS 8.x または AlmaLinux 8.x, (Red Hat Enterprise Linux 6.x および CentOS 6.x は非対応)※GRRM23 または GRRM20が必要※VASP 5.4.x または VASP 6.x が必要	"	2022年4月	-
Gaussian16	"	米ガウシアン (Gaussian, Inc.)	量子化学計算のデフォルト・スタンダードといわれる、米Gaussian社の電子構造モデリングの先端技術を持った量子化学計算プログラム。実験データから導き出される経験的パラメータを一切用いない非経験的(ab initio)分子軌道法(MO法)の普及の功績により1998年にノーベル化学賞を受賞したJ. A. Popleらによって開発された	Linux, Windows, Mac OS	詳しくはHPCシステムズのWebサイトにて	2017年1月	-
Reaction plus Pro 2 / Express 2	"	HPCシステムズ	反応物と生成物を指定するだけで自動的に反応経路が求まる反応経路・遷移状態計算ソフトウェア。ONIOM法を用いた酵素反応、不均一触媒反応、開裂系の反応など、様々な反応系の計算に対応している	Red Hat Enterprise Linux 6 / 7 / 8, CentOS 6 / 7 / 8, Windows 10 / 8.1 / 7, Windows Server 2012 R2 / 2012 ※Reaction plus Pro 2では別途Gaussian 16, Gaussian 09 Rev. D. 01以降が必要	"	2018年6月	-
Chempark	"	"	手元のパソコンと好奇心さえあればだれでも手軽にGaussian 16の計算を始められる化学シミュレーションクラウド。インターネットブラウザからアクセスするため、スマホでも利用可能。GUIによる簡単操作で反応計算、有機合成、分析化学に役立てられる	WEBブラウザ	"	2018年6月	-
サイエンスクラウド	"	"	セットアップ不要ですぐにGaussianなどの計算科学ソフトを利用できる計算化学クラウド。触媒・材料・創薬・高分子等の研究開発に活用いただける。ハードウェアの調達不要、ソフトウェアの初期投資不要、システム運用管理のアウトソース化など、手軽に計算化学を行なえる環境を提供する	SSHクライアントでリモートログインして利用できます。Red Hat Enterprise Linuxと互換性のあるOSを使用しています	"	2019年10月	-
M-EVO®	"	"	開発実験担当者が一人で実験・計算・データサイエンスの3役をこなして、研究開発を効率的に行うためのGUIを備えたツール。M-EVO®は、当社オリジナルのアルゴリズムにより所望の物性を有する多様な分子構造を探索し、提案する。複数の目的物性を考慮でき、合成の可能性や溶剤溶解性等の指標も含めたスコアを算出し、実用的な分子構造の探索が可能。また、ベイズ最適化により組成物、製造条件等の最適化もできる	WEBブラウザ	お問い合わせ下さい	2022年5月	-
受託サービス	"	"	受託計算や受託開発、コンサルティング、計算サポート、計算化学セミナーなど、計算化学に関する様々な受託サービスを行っている。化学シミュレーションのアウトソーシングはもちろん、計算化学導入のためのテスト運用や購入する計算機構成の判断など、お客様のご利用目的に合わせてご利用いただける	-	"	-	-
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
ATOMS	ヒューリンクス	米シエイブソフトウェア	結晶、高分子、分子等さまざまなタイプの原子構造を3Dで描画	Windows, Linux	"	-	-
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(32bit), 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	"	豪・中クリスタルソフト	強力なデータベース機能を搭載した高性能、多機能な結晶構造解析ソフト。Professional版は3500種、Enterprise版・Quantum版は6000種の結晶構造データを持つ	Windows	"	-	-
ChemDraw Prime	"	米レビティンギナルズソフトウェア(旧パーキンエルマー)	構造式描画ソフトのゴールドスタンダード製品。環・結合・鎖・原子・官能基といった基本要素のフルセットがあり、ホットキーやショートカットキーを用いて迅速に描画可能。豊富な種類の化学物質、および実験器具のテンプレートも利用可能	Windows, macOS	"	-	-
ChemDraw Professional,	"	"	Structure<->Name、NMR推算、化合物データベースとの連携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。立体構造式描画ツールのChem3D Professionalと、化学構造式を含んだデータベース構築ツールのChemFinder Standardを含む。※Chem3DとChemFinderは、Windows版のみ利用可能	Windows, macOS	"	-	-

Signals ChemDraw	"	"	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)、MS Officeファイル内の構造式・反応式に対し検索およびデータをクラウド上にCollectionとして保存する(ChemDraw Collections)で構成されたパワフルなソフトウェアパッケージ。 ※Chem3DとChemFinderは、Windows版のみ利用可能	Windows, macOS	"	-	-
Signals Notebook	"	"	ChemDraw構造式描画機能を有した唯一のクラウド版電子実験ノートシステム。実験に関する情報の一元管理ができ、情報共有の促進や、改ざん防止、知的財産保護を支援します。研究DXを促進する基盤環境として、研究データの利活用に貢献	Google Chrome, Mozilla Firefox, Microsoft Edge, Apple Safari	"	-	-
CodonCode Aligner	"	米コドンコード	シーケンスのアセンブリやコンティグの編集、突然変異の検出に役立つプログラム。難しいコマンドラインオプションやPerlプログラミングを学ばなくても、ベース・コーリング(塩基判定)やシーケンス・アセンブリのための最新アルゴリズムを利用可能	Windows, macOS	"	-	-
Stat-Ease 360	"	米スタートイーズ	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	"	-	-
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。専用の外部モジュールGMMXを追加することで、素早く簡単に配座探索が可能	Windows, 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, 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	"	米ウエーブメトリックス	グラフ作成、データ解析、プログラミングツールを統合した科学者・技術者向けのパワフルなツール。表現力に富む高品質な2D・3Dグラフ機能に加え、カーブフィッティング、ピークフィッティング、画像解析をはじめ豊富な解析機能を搭載。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	簡単な操作でシンプルなグラフ作成からエラーバーを適用するような複雑なグラフ作成、カーブフィッティングや統計解析を実現可能なグラフ作成・データ解析ソフトウェア	Windows, macOS	"	-	-
Tempas	"	米トータルレゾリューション	マルチスライスシミュレーションと動的な電子線回折パターン、ユニットセルの自動計算等の機能を搭載したTEMイメージシミュレーションソフト	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	"	-	-
NanoDCAL / NanoDCAL+	"	加ナノアカデミク	非平衡グリーン関数法(NEGF)と密度汎関数理論(DFT)を組み合わせた最先端の汎用第一原理量子輸送パッケージ	Windows, macOS, Linux	"	-	-
RESCU / RESCU+	"	"	応用数値解析と並列化実装をベースにした最新鋭の汎用コンシューマ DFT パッケージ	Windows, macOS, Linux	"	-	-
QTCAD	"	"	スピン量子ビットの性能を予測するための有限要素法シミュレーター。k _p 理論の枠内で包絡関数とナノ構造に閉じ込められた電子またはホールエネルギーレベルを計算する際に、非線形ポアン、シュレーディンガー、多体ソルバーを使用	Windows, macOS, Linux	"	-	-
Q-Chem	"	米キューケム	最新手法を取り入れた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	"	-	-
SHAPE	"	米シェイプソフトウェア	単結晶、双晶およびエビタキシャルやその他の連晶の形態と対称性を計算し表示するプログラム	Windows, Linux	"	-	-
SigmaPlot	"	米グラフィティ	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	"	英オプティリウム	創薬や農業の現場において、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、ドッキングシミュレーションなどを搭載	Windows, macOS, Linux	"	-	-
VIBRATZ	"	米シェイプソフトウェア	原子価力定数や Urey-Bradley 力場定数を利用して、分子や結晶の基準座標計算をするプログラム	Windows, 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 8 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	"	ハイオコム・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, Oracle データベース	"	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	-
Wiley Identifier of Natural Products (AntiBase+ChemWindow)	"	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 10, 11	"	2022年	-
NIST 2023	"	"	NISTの大規模なGC/MSライブラリ 2023年版	"	"	2023年	-
Wiley Registry 2023	"	"	Wileyの大規模なGC/MSライブラリ 2023年版	"	"	2023年	-
Wiley Registry/NIST 2023	"	"	WileyとNIST2023がセットになった大規模なGC/MSライブラリ 2023年版	"	"	2023年	-
Designer Drugs 2024	"	"	麻薬・毒薬・合成薬物などのGC/MSライブラリ 2024年版	"	"	2024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	-
KnowItAll IR Identification Pro	"	"	IRスペクトル同定・管理ソフトウェア	"	"	2020年	-
KnowItAll Raman Identification Pro	"	"	Ramanスペクトル同定・管理ソフトウェア	"	"	2020年	-
KnowItAll IR/Raman Identification Pro	"	"	IR・Ramanスペクトル同定・管理ソフトウェア	"	"	2020年	-
KnowItAll Wiley MS Identification Pro	"	"	GC-MSスペクトル(Wiley)同定・管理ソフトウェア	"	"	2023年	-
KnowItAll Wiley MS Identification Pro + NIST	"	"	GC-MSスペクトル(Wiley+NIST)同定・管理ソフトウェア	"	"	2023年	-
MODDE	"	スウェーデン Sartorius Data Analytics	実験計画と最適化のソフトウェア。ウィ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	Windows10, 11	"	1998年	-
SIMCA	"	"	多変量解析ソフトウェア。PCA, PLS, OPLS, OPLS-DA, マルチブロック解析(MOCA), HCA, Pythonによる定型操作の自動化機能を搭載した分析データ解析ならびにプロセス解析(PAT/QbD)のスタンダード	Windows10, 11	"	1998年	-
SIMCA-Online	"	"	QbD/PATを実現するオンライン多変量プロセス監視システム。多変量解析のSIMCAで作成したプロセスモデルを使ってリアルタイムに工程を監視し、逸脱検知・予知・制御・最終品質予測などを行います。バッチ製造と連続製造の両方に対応	Windows Server 2012以降、Windows 10以降	"	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。パケット積分にも対応	Windows 10,11 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	-
BENCHTOP Pro	"	"	Chenomx NMR Suiteの低周波NMR(60,80,90,100,125MHz)特化型ソフトウェア	Windows 10,11 Mac OS X 10.x, Linux x86	"	2024年7月	-
PEAKS	"	加バイオインフォマティクスソフトウェア (Bioinformatics Solutions)	de novo, 蛋白同定、翻訳後修飾解析、Mutation解析、糖鎖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 10, 11	"	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やThermo社FAIMSデータなどIon Mobility専用オプション	"	"	2018年5月	-
Glycan Finder	"	"	タンパク質の糖鎖解析 (de novo, 同定、定量)を行うソフトウェア	"	"	2023年10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・ポリクローナル(4つまで)の実験から配列解析までを行う受託サービス	"	"	2016年	-
AnalyzerPro XD	"	英スペクトラワークス (SpectralWorks)	MSデータ処理ソフトウェア。各社MSデータ形式サポート、デコンボリューション、ライブラリ検索、サンプルのアライメント、統計・多変量解析、DARTなどの直接MSや、GCxGCなどの2DクロマトMSもサポート。「AnalyzerPro」の後継	Windows 10, 11	"	2020年4月	-
KNIME Analytics Platform	"	スイス KNIME	ワークフロー型データ分析プラットフォーム	Windows 8 or later, Linux, OS X 10.5 and 10.6 or later	"	2010年	-
KNIME Business Hub	"	"	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	Ubuntu Server 20.04 LTS, 22.04 LTS or RHEL 8.1, 8.2, 8.3, 8.4, 8.5, 8.6, 8.7 or Amazon Linux 2, 32GB RAM, 8 CPU cores, CPU 16Core~, 32GB MEM~	"	2023/4/1	-
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	"	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, 11	"		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	—
QSAR Flex	"	"	アナログ検索や機械学習、QSARアプローチにより、化合物の物理化学特性の予測や複雑な毒性を推定する。ニトロアミン類不純物のサロゲート検索やCPCAカテゴリの自動判定、生態毒性の推定をサポート。順次、毒性エンドポイントを追加予定	"	"		2023年5月	—
Scaffold Elements	"	米プロテオームソフトウェア (Proteome Software)	LC-MS (MS1, MS/MS)による低分子スペクトルデータ解析ソフトウェア。Thermo, Sciex, Agilent などの主要ベンダー機器から生データをロードし、NIST, HMDB, LIPID MAPS を含む複数のスペクトルライブラリを検索できます。個人用ライブラリも作成可能	Windows 64bit版	"		2016年5月	—
ToxPlanet	"	ベルギー エンヘサ (Enhesa)	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, 11	"		2019年1月	—
MiXCR	"	米ミラボラトリーズ (MiLaboratories)	TCR/BCRレパア解析用ソフトウェア	お問い合わせください	"		2020年4月	—
Pirouette	"	米インフォメトリックス (InfoMetrix)	ケモメトリックス用ソフトウェア	Windows 10, 11	"		2020年4月	—
AILANI	"	独ラボヴァン デーゼンバイオマックス (Labvantage-Biomax GmbH)	LLM, オントロジー、キーワードマッチングを組み合わせた検索システム。標準で組み込まれている各種公的データベースだけではなく、自社データ/非標準的公的データベース/商用データベースの組み込みも可能。論文検索だけではなく、化合物やKOL検索も実現	お問い合わせください	"		2019年12月	—
NICARA	"	"	脳コネクトーム解析ソフトウェア	"	"		2020年10月	—
Chemical Analyzer	"	米ビリディス・ケム (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	"	"		2020年5月	—
Labstep	"	イギリス Labstep	クラウド型の電子実験ノート (ELN) プラットフォーム。ラボで生成された実験データの記録、プロトコルの作成、サンプル・在庫の出入、機器との連携を管理	Webブラウザ利用	"		2024年7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ワークフロー	"	"		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	"	"		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ニング法 (CGBVS) によるスクリーニングプログラム。自社内に蓄積された独自アッセイデータを用いた、医薬品候補化合物の高速かつ高精度なインシリコスクリーニングが可能であり、標的予測などにも利用が可能である	"	"	2012年10月	—	
ReOGEN	"	"	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	
CSD-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・中性子線で作成した有機化合物・有機金属化合物の結晶構造データベース(129万件以上)。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。創薬、製剤、材料開発に。CSD Python APIにより、ワークフローへの組み込みやMIへの活用が広がりました。2020年12月にCSD-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)	—	—	
CSD-Discovery	"	"	定番のCSD-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。CSDおよびPDBのデータに対し、ファーマコフォー検索可能なCSD-CrossMinerに加え、CSDとPDBの結合部位を同時に検索可能なMacromolecule Hubが追加されました	Windows PC, Linux, 一部 Mac	"	—	—	
CSD-Materials	"	"	定番のCSD-Coreに加え、CSDの結晶構造データを活用したの Solid Form ツールをセットで提供。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ちます。材料設計、製剤開発、共結晶作成に活用可能	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(29.9万件以上)。検索、結晶構造表示ソフト付き。全てのレコードに3次元原子座標データを収録しており、リートベルト解析の初期構造として活用可能。検索した結晶構造の粉末X線回折パターン計算表示あり。追加オプションのICSD APIで、大量のデータダウンロードが可能。マテリアルズ・インフォマティクスや第一原理計算の大規模計算に	Windows PC, web	"	-	-
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、無機材料の相図データベース(3.3万件以上)。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。各組成比軸の配置変更や単位(モル比・質量比)の変換が可能な相図表示ソフト付き	Windows PC (USB), web	USB買取、web定額制(詳細はお問い合わせください)	2024年5月	-
ASM Alloy Phase Diagram Database™	"	米ASM International	二元系および三元系合金の相図データベース(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。合金の製造管理から新素材の開発まで幅広く活用可能	web	定額制(詳細はお問い合わせください)	-	-
NIST23	"	米NIST、米 EPA、米NIH	電子イオン化(EI)、タンデム(MS/MS)の質量スペクトルデータベース。NIST20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買取(詳細はお問い合わせください)	2023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。NIST23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。NIST23との統合版あり	Windows PC	USB買取(詳細はお問い合わせください)	2023年10月	-
CHEMnetBASE	"	英・米Taylor & Francis Group / CRC Press	化学・薬学の研究現場で活用されている9種類のオンライン辞典が利用できる化合物データベース。論文等に報告された化合物の名称や分子式、化学構造、各種物性、CAS登録番号(CAS RN [®])、生物学的起源、安全性情報などを収録。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。各辞典は個別利用が可能。特に、天然物辞典(化合物35.5万件以上)は、天然物研究者から稀少な情報源として定評あり	web	定額制(詳細はお問い合わせください)	-	-
ReaxysfileSub / ReaxysfileBib	"	Elsevier Information Systems GmbH (CAS STNext 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) (CAS STNext 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	"	-	-
REGISTRY	"	CAS (CAS STNext 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	"	-	-
CAS Sequences	"	CAS (CAS STNext 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、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	"	-	-
GENESEQ	"	Clarivate (CAS STNext 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、特微表、対応特許情報を収録	web	"	-	-
PATGENE	"	FIZ Karlsruhe (CAS STNext 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)	web	"	-	-
USGENE	"	SequenceBase Corporation (CAS STNext 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	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。化学構造の類似性により解析したマップを製作する Chemscape Analysis を搭載	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	"	-	-
ChemZent	"	"	世界最古のドイツ語の化学抄録誌である Chemisches Zentralblatt (1830-1969)の英語版コンテンツ。CAS SciFinder から検索可能。 *CAS SciFinder のオプション契約	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。目的、形状、有効成分に基づいた配合テンプレート作成機能 Formulation Designer を搭載	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	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。化学系など自然科学系全般の特許・文献翻訳を短納期で提供 ・一般的な機械翻訳が苦手とする化学物質表記(化合物名)を、独自技術により適切に翻訳 ・文字が画像化された PDF(イメージ PDF)ファイルの高精度 OCR 変換	web	詳細はお問い合わせください	2018年1月	あり

JAICI ProTranslator EXPRESS-Light	"	"	翻訳文書の作成を効率化できる機械翻訳サービス。組織内で保つる用語集・対訳集を利用した、翻訳環境のカスタマイズが可能 ・英・中・韓の主要言語に加え、欧州言語・アジア言語など多言語に対応 ・文字が画像化されたPDF(イメージPDF)ファイルの高精度OCR変換 ・文書作成をより高度化できる、生成AIを利用したオプションサービス	web	"	2020年9月	あり
JAICI Science Dictionary (JSD) Pro	"	"	化学・ライフサイエンスを中心とした、科学技術用語のシソーラス付日英/英日辞書。協会内業務を通し、国内外の論文・特許情報から集めた専門用語を収録。化合物名の大部分に中国語同義語情報あり ・翻訳者、特許/文献調査担当者向け。Webブラウザ上で利用できる、対訳検索や同義語・分野調査などに活用できる	web	"	2021年10月	あり
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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、日本の化学用品に関する主要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: 5万円(税別)	—	1,000社以上
ezMONITOR	"	"	国内の化学用品に関する法規制情報に更新があった際、メールで通知するPush型のモニタリングサービス。モニタリングしたい製品、化学物質、法規区分を登録することで法改正による変更を受動的に入手でき、変更の詳細はブラウザ上で確認が可能	インターネットブラウザ	年間利用料金: 30万円(税別) ※お問合せ下さい	—	—
ChemADVISOR 法規制データベース (IBLOLIデータベース)	"	米UL Solutions	世界130ヶ国以上を対象にした7,500以上の規制リストと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、利用型	御問合せ下さい	—	—
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、規制条件、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	—
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	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)、MS/Excel	御問合せ下さい	2014年	70社以上
ExESS	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1000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鑑形として集めた「解析事例データベース」や、分子軌道計算プログラムとの連携を可能にするインターフェイスを搭載する。高分子材料の弾性挙動、低分子の拡散性、配向複屈折性、ガラス転移温度、ナノコンポジット材料、架橋ポリマーなどの計算に必要なツール群を備える。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	・Windows 10/11(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	初版: 2005年4月(V1.0) 最新版: 2023年10月(V9.1)	—
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	"	"	初版: 2020年5月	—
SIESTAモデラー-IET	"	"	第一原理計算ソフトウェア SIESTA を用いて、表面と分子の相互作用を計算できます。表面吸着エネルギーなどの評価に適用可能	"	"	初版: 2022年6月(V8.0)	—
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。フリーの分子動力学ソルバー(GENESIS、LAMMPS、GROMACS、HOOMD-blue等)とのインターフェイスも含まれる。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	"	"	初版: 2005年4月(V1.0)	—
GENESISモデラー	"	"	生体分子のモデリングや創薬のための分子動力学計算をサポート。タンパク質の分子構造をPDBなどで読み込み後、構造編集、生体分子用の力場設定、MD計算までの一連の流れが可能。理化学研究所を中心に開発されている分子動力学エンジンGENESISとのインターフェイスを有しており、大規模モデルの高速計算が可能	"	"	初版: 2022年4月(V8.0)	—
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	"	"	初版: 2005年4月(V1.0)	—

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、橋形、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	"	"	初版:2005年4月(V1.0)	-
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	"	"	初版:2005年4月(V1.0)	-
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、Ansys 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	"	"	初版:2005年4月(V1.0)	-
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	"	"	初版: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	"	"	初版: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	"	"	初版: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	"	"	初版: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	"	"	初版:2011年3月(V1.5)	-
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	"	"	初版: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込み、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	"	"	初版: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 7/8 (64bit) MPI: OpenMPI/IntelMPI/MPICH3	"	初版:2006年12月(V1.0)	-
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: Windows10/11(64bit) MPI: MPICH2、MS-MPI	"	2007年4月(試供版) 初版:2007年11月(V1.2)	-
VSOP-PS(粒子法シミュレーションエンジン) Linux版	"	"	粒子法シミュレーションのためのエンジン。微粒子が分散した流れ場の計算が可能。MPS/DEMの機能を導入している。VSOPと同様にマルチCPUで並列計算が可能	OS: Red Hat Linux 7/8 (64bit) MPI: OpenMPI/IntelMPI/MPICH3	"	初版:2021年10月(V7.1)	-
VSOP-PS(粒子法シミュレーションエンジン) Windows版	"	"	"	OS: Windows10/11(64bit) MPI: MPICH2	"	初版:2021年10月(V7.1)	-
MD-GAN	"	"	短時間のMD計算結果から、機械学習を用いて長時間の分子の運動を予測することが可能	OS: Windows10/11 (64bit)、Red Hat Linux 7/8 (64bit)	"	初版:2022年04月(V1.0)	-
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)	科学技術振興機構	科学技術振興機構	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380万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://jglobal.jst.go.jp/#%7B%22category%22%3A%22%7D)	●Windowsをお使いの場合 <推奨ブラウザ> ・Microsoft Edge 最新版 ・Mozilla Firefox 最新版 ・Google Chrome 最新版 ●Macをお使いの場合 <推奨ブラウザ> ・Safari 最新版	-	2016年3月	-
NBDC Nikkaj RDF	科学技術振興機構 NBDC事業推進部	科学技術振興機構 NBDC事業推進部	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/Isdba.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
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
Mascot Server	マトリクスサイエンス	英マトリクスサイエンス	質量分析データによる蛋白質同定を行う代表的ソフトウェア。各種検索機能を装備したWebサーバー、蛋白質定量解析機能装備	Windows、Linux	お問合せ下さい	1999年	-
Mascot Cluster	"	"	Mascot Server のクラスターバージョン 高速、大量データ処理が可能	"	"	1999年	-
Mascot Distiller	"	"	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、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	お問い合わせ下さい	2010年	-
Scaffold Q+S	"	"	蛋白同定検索エンジンの結果を取り込み、SILACやラベルフリー定量解析を行うソフトウェア	"	"	2012年	-
Scaffold PTM	"	"	蛋白同定検索エンジンの結果を取り込み、翻訳後修飾解析を行うソフトウェア	"	"	2011年	-
Scaffold DDA	"	"	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	"	"	2023年	-
Scaffold Elements	"	"	アンターゲッテッド・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	"	"	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データ読み込みから、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
GraphPad Prism	エムデーエフ	米GraphPad Software	GraphPad Prism は、医学・薬学・生物学分野に特化した統計解析とグラフ作成機能を備えたソフトウェアです。データに直結したグラフを美しく出力します。日本語化アドオンの利用で、日本語表示が可能(Winのみ)。製品詳細: https://www.mdf-soft.com/prism	対応OS: Win, Mac システム条件は製品ページをご参照ください: https://www.mdf-soft.com/products/prism10.html#system	価格表ページをご参照ください: https://mdf-soft.com/order/price.html	-	-
nQuery	"	米Statsols	nQuery は、臨床試験デザインで使用する統計にフォーカスした臨床統計ソフトウェアです。バイス流アプローチによるアダプティブ・デザイン、サンプルサイズの算出、検定力分析などの機能を備えています。製品詳細: https://www.mdf-soft.com/nquery	対応OS: Win システム条件は製品ページをご参照ください: https://www.mdf-soft.com/nquery/index.html#system	価格表ページをご参照ください: https://mdf-soft.com/nquery/nquery_price.html	-	-
SnapGene	"	米GSL Biotech	SnapGene は、分子生物学・遺伝子工学実験支援ソフトウェアです。遺伝子クローニング作業に必要な手順のシミュレーション、制限酵素認識配列の確認やプライマー設計、アノテーション付きプラスミドマップの作成、遺伝子の向きやフレームチェック機能など、分子生物学、遺伝子工学、構造生物学分野に携わるリサーチヤーの研究をサポートします。日本語対応。製品詳細: https://www.mdf-soft.com/snapgene	対応OS: Win, Mac, Linux システム条件は製品ページをご参照ください: https://www.mdf-soft.com/products/prism10.html#system	価格表ページをご参照ください: https://mdf-soft.com/snapgene/snapgene_price.html	-	-
Geneious Prime	"	米Biomatters	Geneious Prime は、DNA配列解析のための強力なハイオインフォマティクスソフトウェアです。NGSデータの前処理(リミシング、アセンブルなど)、アライメント、マッピングなどの配列解析機能、系統樹作成機能に加え、分子生物学実験シミュレーション、プライマー設計機能を備えています。製品詳細: https://www.mdf-soft.com/geneious	対応OS: Win, Mac, Linux システム条件は製品ページをご参照ください: https://www.mdf-soft.com/geneious/index.html#system	価格表ページをご参照ください: https://mdf-soft.com/geneious/geneious_price.html	-	-
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
miHub(エムアイハブ)	MI-6	MI-6	ベース最適化を含むMI技術による高度なデータ解析と研究ナレッジの蓄積を実現するSaaS型実験計画プラットフォーム。試行錯誤マネジメント&コラボレーションとノーコードMIの2つの主要機能が構成されており、これらの機能が融合することで、データとナレッジを最大限活用した材料開発を実現する	Google Chromeが動作する環境(OS非依存)	お問い合わせください	-	未公開
商品名	販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
LipidSearch	三井情報	三井情報	大量の高分解能質量分析データから脂質分子を網羅的に同定・定量解析する世界初の脂質同定プラットフォーム。東京大学田口研究室と共同開発し、2010年商品化、2013年からグローバル販売を開始している。質量分析計で測定した生データを読み込み、クロマトグラムのピーク抽出から脂質の同定、定量比較のアライメントまでの一連の解析を全自動で実行。また、150万種以上の脂質構造を搭載した独自の仮想構造データベースにより、既知脂質だけでなく未知脂質も含めた脂質の網羅的解析が実現可能	Microsoft Windows 10 (x64), Microsoft Windows 11	お問い合わせください	2010年4月	世界30か国以上、国内外600以上の研究機関へ導入
AQXeNA	"	"	大量の高分解能質量分析データから核酸関連物質の一括同定・定量を実現した高精度・高ハイスループット・ベンダーフリーな核酸解析プラットフォーム。理化学研究所の中山洋先生、東京都立大学の田岡万悟先生らが開発した世界初の核酸同定アルゴリズム「Ariadne※」と、核酸医薬に頻用される人工核酸・mRNAキャップ構造とキャップ構造に由来するフラグメントイオンを搭載した柔軟かつ簡便な核酸構造データベースが核酸関連物質の正確かつ効率的な同定・解析を実現。くわえてヌクレアーゼ処理した数千塩基の長鎖配列の解析にも対応しており、核酸医薬・mRNA医薬品の開発を支援 ※ H.Nakayama et al. <i>Nucleic Acids Res.</i> 2009 Apr;37(6)	Microsoft Windows 10 (x64), Microsoft Windows 11	"	2020年6月	非公開
MetaboAlign	"	"	100検体以上のメタボロームデータを高速かつ正確に一斉定量、様々な測定データを統合し解析する環境を実現したメタボローム解析統合プラットフォーム。マルチベンダー対応のため、高分解能質量分析計で測定した質量精度の高いデータをSRMライクに定量分析を実現。また、予め測定対象分子を決めるターゲット解析に加え、ターゲットを定めずに多検体から特異的な変動がある分子の探索も支援。さらにLC-MS、GC-MSIに対応しており、幅広い化合物を同一ソフトウェア上で解析・管理が可能	Microsoft Windows 10 (x64), Microsoft Windows 11	"	2022年10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
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(タンパク質および核酸分子システム)に対応。HyperChem、Gaussian計算エンジンによるエネルギーベースの最先端手法。ホモロジーモデリング過程での、挿入配列モデリング、主鎖モデリング、側鎖モデリング、共有結合低分子モデリング、ヘテロ分子・金属原子影響下モデリング、ホモ・ヘテロ会合状態モデリング、溶媒和条件下モデリングなど従来製品では利用できない最先端手法がエネルギーベースで実施できる。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 及び11 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)	詳細はお問い合わせください	2005年12月 最新版H1 (Revision 8.1.5) は 2023年2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

<p>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)</p>	"	"	<p>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、標的タンパク以外の高分子、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、リストアップ機能、溶解度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</p>	OS: Windows(Windows10及び11 最新バージョンで正常動作を確認済み)、HyperChem for Windows (必須)	詳細はお問い合わせください	2006年6月最新版H11 (Revision 8.1.5)は2023年2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	<p>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、様々な極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</p>	OS: Windows(Windows10 及び11 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	<p>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、パ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、講義などにも対応</p>	成果データ一式と報告書はOSに依存しない形式に変換して提出	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 2019年11月からMFDDインシリコ創薬受託研究サービスと名称変更して提供	Science, 319, 624, 2008を筆頭に、査読論文公開、特許取得事例多数あり
受託計算サービス	"	"	<p>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業者、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。主に協力会社の米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</p>	成果データ一式と報告書はOSに依存しない形式に変換して提出	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)	<p>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</p>	Windows、Mac、Linux	-	1997年9月	-
PSILO	"	"	<p>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</p>	Linux (Server) / Windows、Mac、Linux (Client)	-	2008年4月	-
ClaritySuite	"	西ケモターゲッツ	<p>医薬品の安全性薬理研究から市販後調査までのすべての毒性・安全性データを統合した、トランスレーショナル・セーフティとファーマコビジランスのための新しいプラットフォーム。全ての医薬品の開発フェーズにおけるトレーサビリティと安全性シグナルをそれぞれシームレスに解析</p>	Webサービス	-	2021年7月	-
FlexX	"	独バイオソルブアイティー	<p>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提案</p>	Windows、Linux、Mac	-	2018年3月	-
FTrees	"	"	<p>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</p>	"	-	2007年6月	-
SpaceLight	"	"	<p>フィンガープリントを用いて巨大なケミカルスペースの中から類似構造を高速に検索</p>	"	-	2023年4月	-
SpaceMACS	"	"	<p>巨大なケミカルスペースの中から部分構造検索や最大共通部分構造検索を実行</p>	"	-	2024年4月	-
CoLibri	"	"	<p>infiniSee、FTrees、SpaceLight、SpaceMACSで使用するためのケミカルスペースを作成するソフトウェア</p>	Windows、Linux	-	2007年11月	-
FlexS	"	"	<p>リガンドの重ね合わせとパーチャルスクリーニングを行う分子アラインメントソフトウェア</p>	Windows、Linux、Mac	-	2007年6月	-
Hyde	"	"	<p>リガンド-受容体間の結合自由エネルギー寄与を高速に計算</p>	"	-	2023年4月	-
FastGrow	"	"	<p>高速な分子フラグメント付加によるリガンド分子のFBDDを実施</p>	"	-	2023年4月	-
PoseView	"	"	<p>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</p>	Windows、Linux	-	2012年2月	-

SeeSAR	"	"	メタシ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寄与や物性値の推算、二面角の妥当性をモニタリングしながら、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、重ね合わせなどの分子設計手法を統合	Windows、Linux、Mac	-	2014年10月	-
ModelRunner	"	"	化合物に対してOptibrium/StarDropのADMEプロパティを計算。SeeSARとinfiniSee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巨大なケミカルスペースからクエリ分子との類似構造や部分構造を検索。合成可能かつ購入可能な構造を高速に提案する。ケミカルスペースとしてEnamine REAL Space、eMolecules eXplore等の他に自社のケミカルスペースからの検索に対応	"	-	2019年7月	-
SciMAPS Classical	"	仏サイエノミクス	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Soft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Soft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	"	蘭ソフトウェアフォーケミストリー&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化合物を取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	-
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	IBM、Fujitsu、Intel-Linux、Windows、Mac	-	1998年10月	-
GaussView 6	"	"	Gaussian 16のグラフィカルユーザーインターフェース	Intel-Linux、Windows、Mac	-	1998年10月	-
Molpro	"	独ディーティアイ	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	—
CDD VAULT	"	米コロバレーティブドラッグディスカバリー	化合物、ペプチド、オリゴヌクレオチド、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	—
Daylight Developer ToolBox	"	米デライト	in-silico 創薬および化学情報管理システムを構築するための開発用ツール群	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	—
GENEVESTIGATOR	"	瑞ネビオン	GEO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イ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	"	"	実験資材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、実験資材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(GoA)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	—
CORINA Classic	"	独モレキュラーネットワークス	有機化合物の三次元分子構造を、バッチ計算により、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	—
ChemTunes.ToxGPS	"	"	化合物の安全性評価とリスク評価のためのプラットフォーム	Webブラウザ(Windows、Linux、Mac)	—	2017年7月	—
DISGENET	"	西 MedBioinformatics Solutions	ヒトの疾患に関わる遺伝子や変異データベース	Webブラウザ(Windows、Linux、Mac)	—	2023年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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。近年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。中でも最新のSS解析は、非晶高分子のガラス/ゴム/メルト三態への転移を明確に再現し、ポリマーシミュレーションの基盤を提供する。応用面では、誘電緩和解析がGHz域低誘電正接材料の分子設計に貢献し、SS解析は高靱性/高耐衝撃性材料の分子設計で大きな成果を挙げつつある	Xeon、Core i 等 Intel CPU および交換機。OSはLinuxおよびUnix	標準機能版300万円(基本機能版120万円)。力場、オプション機能別売	1998年4月	20サイト
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴(2022年度)	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GastroPlus	ノーザンサイエンスコンサルティング	米シミュレーションズプラス (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 モデルを搭載。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、バ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	"	"	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させ、新たなモデルを構築	"	"	1999年5月	—
GastroPlus-Metabolism & Transporter Module	"	"	小腸、肝臓、その他各組織に 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 Module	"	"	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、投与スケジュールの変化によるPD 効果の変化を予測	"	"	2002年8月	-	
GastroPlus-PKPlus Module	"	"	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算出。また、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 Module	"	"	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シミュレートし、各組織中の薬物濃度を予測。各種動物モデルに対応。ヒトの場合、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)、妊婦モデルの設定可能	"	"	2005年12月	-	
GastroPlus-IVIVCPlus Module	"	"	in vitro の溶出と in vivo の PK プロファイルから相関式を構築。当該相関式を用い、溶出が異なる類似剤の血中濃度プロファイルを予測可能。従来手法の Wagner-Nelson, Loo-Riegelman, Numerical Deconvolution に加え、最新手法である Mechanistic Absorption (吸収過程を考慮) 等の計算モデルを搭載。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	"	"	Steady-State または Dynamic な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を利用し、候補化合物とのDDIを予測。2つの薬物のみならず、3つ以上の薬物間相互作用もシミュレーション可能。	"	"	2010年9月	-	
GastroPlus-ADR Module	"	"	基本モジュールに搭載されている経口、静脈投与以外の投与経路での薬物吸収を予測可能。皮膚 (局所、皮下)、口腔内、肺 (鼻腔内、呼吸器)、眼、筋肉、関節内投与での薬物吸収モデルを搭載。	"	"	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。トランスポーター阻害/基質 分類、BBB 透過性や ECCS 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) について、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) での薬物動態シミュレーション	"	"	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) や生物薬学的プロパティ (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。ADMET Predictor に搭載されているグローバルモデルにユーザーのデータを組込んだ新たなモデル (DELTA) を構築することもでき、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	"	"	コンビナトリアル変換、コンビナトリアル反応、R-Table Explorer による新規構造発生。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す、多目的最適化された候補化合物を提示	"	"	2020年10月	-	
ADMET Predictor-HTPK Simulation Module	"	"	GastroPlus の ACAT モデルと ADMET プロパティ予測を組合せ、マウス、ラット、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	-	
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、などを行うインシリコ創薬プラットフォーム。ADMET Predictorユーザーに無償提供	"	"	2016年9月	-	
ADMET Predictor-REST API	"	"	ADMET Predictorの主要な機能にアクセスするための Web API。他の計算が実行中でもリクエストを受け付け、順次実行されるキューイングシステムを搭載。サードパーティ製インフラマティクスプラットフォームからADMET Predictorを利用することも可能	"	"	2021年10月	-	
DDDPPlus	"	"	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でシミュレーション。各種剤型 (散剤、錠剤、カプセル剤、コーティング剤、コートビーズ剤、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) 及び各種試験法 (バドゥル法、バスケット法、フロースルー法、回転ディスク法、 μ Diss Profiler) に対応。剤形変更や溶出試験条件変更による溶出への影響を予測。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 膜透過試験を様々な実験条件や試験法でシミュレーション。タンパク結合、リソソームトラッピング、pHの違い、振とう速度、パラセラー透過性、担体輸送や代謝等の影響も考慮。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)、経皮モデルにも対応	"	"	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関連する画像データや化学構造、物性値などの数値データ、テキストデータと一元管理するプラットフォーム。データの管理、共有のみならず、比較解析に役立つ機能が豊富に搭載。定型レポートを簡便な操作により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一元管理するプラットフォーム。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毒性肝障害 (DILI) の危険性を示し、DILI の原因メカニズムの解明をサポートする。定量的毒性 (QST) ソフトウェア。DILI をマイクロからマクロまで幅広いスケールで表現、個体間のバラつきも考慮	"	"	2019年1月	-
RENAsym	"	"	新薬候補が薬剤性腎障害 (DKI) を引き起こす危険性を予測する QST ソフトウェア。腎臓の薬物濃度は GastroPlus® で予測後、その値をインポート可能	"	"	2022年5月	-
NAFLDsym	"	"	非アルコール性脂肪性肝疾患 (NAFLD) および非アルコール性脂肪性肝炎 (NASH) 治療候補の有効性を予測する定量的システム薬理学 (QSP) ソフトウェア	"	"	2019年1月	-
IPFsym	"	"	特発性肺線維症 (IPF) 治療候補の有効性を予測する QSP ソフトウェア	"	"	2022年1月	-
ILDsym	"	"	全身性硬化症 (SSC) に伴う間質性肺炎 (ILD) の治療候補の有効性を予測する QSP ソフトウェア	"	"	2022年1月	-
OBESITYsym	"	"	肥満患者に使用可能な GLP-1 治療薬について、これまでに報告されている臨床反応をシミュレートする QSP ソフトウェア。単剤および併用療法の治療成績を予測可能。新規治療薬の作用機序や作用機序の検討、既に市販されている薬剤との比較が可能	"	"	2024年4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。分子のプレハ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	-
PKAnalix	"	フランス Lixoft	シンプルなワークフローを備えたグラフィカルインターフェイスを使用して、臨床・非臨床における NOA、コンパートメントモデル解析、複数製剤の生物学的同等性 (BE) 評価を実現。Sparse データ (疎らなデータ) での NOA 解析にも対応	Windows、Linux、MacOS	"	2022年1月	-
Monolix	"	"	Stochastic Approximation Expectation-Maximization (SAEM) アルゴリズムを利用して非線形混合効果モデルのパラメータ推定、モデル評価を実現。一般的な段階的共変量モデリングアルゴリズム "SGM" に加えて、同社が開発した、段階的アプローチの条件付きサンプリングを利用した "Cossac" や共変量効果に適用された "SAMBAs" を用いた自動モデリングも可能	"	"	"	-
Simulx	"	"	臨床試験を計画する前段階でさまざまな治療法、被験者数、母集団を設定してシミュレーションを行うことで、臨床試験に掛かるコストの削減、開発サイクルの短縮を実現。グラフィカルインターフェイスを使用して、様々なシミュレーションシナリオを容易に生成。Monolix で生成したモデルを使用する事で効率的な母集団シミュレーションが可能	"	"	"	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
PatReg SM	パトコア	パトコア	化合物登録システム。「クリーン」な自社化合物データベースの構築のために様々なエラーチェックメカニズム、構造正規化機構を有している。電子実験ノートからの登録を可能にする Web サービスを実装	Windows	お問い合わせください	-	-
PatReg 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	"	-	-
CRAIS Chceker	"	"	法規制物質判定システム。輸出貿易管理令、麻薬、向精神薬、指定薬物、毒劇法、薬事法、消防法、労安法等に定められた物質を構造式から迅速に判定	"	"	-	-
Transformer2	"	"	構造変換アイディア提示ツール。変換ルールに基づき入力構造の構造改変案を提示。自社データの MMP 解析で得られた知見をルールとして取り込み、構造最適化に活用できる	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15社のカタログデータベース、約3,200万件の商品と1,100万件の構造式を収録。構造式、国内法規制情報、SDSリンク等、化学物質管理に必須のデータを収録。年4回のアップデート	Windows/Linux	"	-	-
GRAIS 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、GRAIS 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	Windows/Linux/Mac	"	-	-
Marvin JS	"	"	Webアプリケーション向けの化学構造式・反応式及びクエリー描画・表示ツール。Javascriptで開発された構造描画モジュールで、プラグインが不要で軽快に動作	HTML5対応ブラウザ	"	-	-
Marvin PRO	"	"	化学構造式・反応式を素早く描くことができ、出版物クオリティの高精細な化学表現ができる次世代の構造描画ツール。レポートやプレゼンテーションに使える絵の描画も充実	"	"	-	-
Design Hub	"	"	化合物デザインプラットフォーム。デザイン中の分子に関する各種計算結果、DBの検索結果などをリアルタイムで表示し、データ駆動型創薬をサポート。合成の優先順位をカンバンボードで整理し、CROとの連携も可能	"	"	-	-
Trainer Engine	"	"	学習～モデルの共有のライフサイクルをシンプル化することで、生物活性や物理化学的特性の予測を、組織規模で効率的に機械学習の取り組みのルーチン化を可能にする	"	"	-	-
Compliance Chcker	"	"	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	"	"	-	-
cChemTS	"	"	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、日本、英国、スイス、中国、インドに対応	"	"	-	-
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 (MS Office2013,2016,2019、Office365デスクトップ版)	"	-	-
JChem for Office Light	"	"	MSOfficeに再編集可能な形式で、化学構造式を美しくペーストすることに特化した軽快な化学アドイン	Windows (MS Office2013,2016,2019、Office366デスクトップ版)	"	-	-
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 Standard edition	"	"	化学情報をローカルデータベースで管理する為のデスクトップアプリケーション。フォームの作成なども容易に可能。ローカルデータベースでありながら、大容量の構造・反応データの処理が可能	"	"	-	-
Instant JChem 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	"	"	-	-
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	"	"	超高速の第2世代JChem化学エンジンを用いたOracleカートリッジ。Amazon RDSにも対応	"	"	-	-
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)	"	"	-	-
Bio Registration	"	"	バイオマテリアルの登録管理を行うSaaSベースのソリューション。天然および化学修飾された生体分子の標準化機能を含み、あいまいさを残さず、誰もが正確にエンティティを理解できるようになります。抗体、核酸、ADC、ワクチン、細胞等あらゆるモダリティの管理に対応している	HTML5対応ブラウザ	"	-	-
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HELM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	Windows/Linux	"	-	-
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記列と化学構造式の橋渡しをする	HTML5対応ブラウザ	"	-	-
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	Windows/Linux/Mac	"	-	-
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、トランジショナルネーム変換	"	"	-	-
Name to Structure	"	"	IUPAC名、体系名(含む日本語)、一般名から化学構造式を生成するプログラム	"	"	-	-
Document to Structure	"	"	あらゆる文書から構造情報を自動抽出。画像化された文書(未OCR)にも対応。強力なOCRエラー補正機構を搭載し、高精度な構造抽出が可能。構造抽出の対象となる情報は、CAS番号、一般名、体系名、自社附番コード、SMILES、InChI、及びOLE埋め込み構造式、画像の構造式(OSRA、KLIDE、Imagoと連携)抽出箇所の前後の文字列なども抽出可能で、テキストマイニングに利用可能。特許の迅速な分析が可能に	"	"	-	-
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	"	"	-	-
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、実施例構造式群からマーカッシュ構造を自動生成可能。任意の構造がマーカッシュ構造の範囲に入るかどうか瞬時に判定	"	"	-	-
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	"	"	-	-
SAR>vision 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ーラクティブに解析が可能	Windows	"	-	-
SAR>vision PROTAC解析モジュール	"	"	分子をリンカーと2つのリガンドに分解し、SARvision SMのSAR Tableで簡単に解析できるようにする	"	"	-	-
SAR>vision 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	"	"	-	-
CLIMSON	"	パトコア	構造検索に対応したクラウドベースの試薬管理アプリです。カタログ検索から発注・納品、在庫管理、廃棄までを一括管理可能。数千万件の試薬マスターを搭載し、契約後短時間で本稼働が可能。国内主要試薬ベンダーのカタログを搭載し、製品情報や法規制情報も自動的に更新	SaaSサービス	"	-	-
Smart Purchase	"	"	研究所向けに特化したクラウドベースの間接購買システム。試薬、PI、実験動物、消耗品に対応し、研究所固有の法規制や承認フローにも対応。また、外部商用サイトとのバンチャアウト連携にも対応	"	"	-	-
CRAIS Chcker 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	"	"	-	-
D360*	"	米サタラ (Certara)	あらゆるデータソースから、セルフサービスで必要なデータを簡単に検索・取得し、最適な視覚化を行うアプリ。データに基づく意思決定を支援	お問い合わせください	お問い合わせください	-	-
D360*Express	"	"	小規模な創薬研究組織向けに最適化した創薬情報プラットフォーム。複数のデータソースの検索と視覚化環境を即実現	"	"	-	-
D360*Partner	"	"	CROなどの社外の共同研究パートナーにセキュアかつ廉価にデータの共有・参照環境を提供	"	"	-	-
GOSTAR ONLINE	"	印エクセルラ (Excelra)	世界最大のマニュアルキュレーションされたSARデータベースの検索サービス(SaaSベース)	SaaSサービス	"	-	-
GOSTAR FLAT FILE	"	"	世界最大の手動キュレーションされたSARデータベースであるGOSTARのデータコンテンツを、様々なファイル形式で提供	データファイルの提供	"	-	-
GOSTAR FLAT FILE FOR AI/ML Company	"	"	創薬AIのベンダーが、GOSTARの標準化された高品質のSARデータを用いてAI学習し、そのモデルを商用化する為のライセンス	"	"	-	-
Target Protein Degradator (TPD) Database (標的タンパク分解誘導薬データベース)	"	"	標的タンパク質分解薬に関する公開データを構造化・標準化し、統一フォーマットで提供します。PROTACの設計・最適化に必要な情報や戦略立案に役立つ競合情報を提供し、効率的な情報収集や競合分析を可能にして開発期間の短縮に寄与	お問い合わせください	"	-	-
RNA binding small molecules database (RNA標的の低分子データベース)	"	"	RNA標的の低分子薬に関する公開データを構造化・標準化し、統一フォーマットで提供します。RNA標的の低分子薬の設計・最適化、ライブラリーデザインに有用な情報を効率的に提供	"	"	-	-

Bio Visualizer	"	"	直感的なインターフェースでプログラミング不要のデータ解析ツールです。リアルタイムでの操作と視覚化が可能で、迅速な意思決定を支援します。多様なプロットや統計的検定を簡単に生成し、ライフサイエンスや生物学的データの解析に対応。ハルクRNAシーケンスやバスウェイ解析もサポートし、柔軟なデータ管理とカスタマイズが可能	"	"	-	-
ImmunoRaptor	"	"	免疫レパートリーのシーケンスデータを容易に管理・解析	"	"	-	-
OP2	"	"	オンラインバイプラインプラットフォームを提供し、データ解析バイプラインのアクセスと実行を実現	"	"	-	-
Single Cell Browser	"	"	シングルセルトランスクリプトミクスデータセットへの容易なアクセスと可視化	"	"	-	-
Data transformation Service	"	"	公的及び自社データベース出版物特許規制文書会議録健康記録などさまざまなソースからのデータを構造的に整理し社内リポジトリへの取り込みを簡素化するために複数のフォーマット(.tsvやAPIなど)でデータを共有・配信し業界標準に準拠した構造化データに標準オントロジーを実装	"	"	-	-
Data analysis and biological interpretation Service	"	"	マルチオミクスデータ解析と解釈臨床患者データの解析による実際のエビデンスデータ解析のためのカスタマイズされたバイプラインシステム生物学インフォマティクス予測機械学習モデリングシミュレーション	"	"	-	-
Research Informatics	"	"	クラウドベースのカスタムアプリケーションおよびプラットフォーム開発を行います。R shiny HTML JS NextFlowなどで行い可視化はSpotfire Tableau R shinyなどで行いクラウドおよびオンプレミスデプロイメントに対応	"	"	-	-
Synapsys	"	シンガポールパトスナップ (Patsnap)	医薬R&Dインテリジェンス調査ツールで、医薬品、臨床試験、ニュース、文献、特許を一度に検索できます。医薬品の研究開発、導入出・M&A・共同研究先の検討、マーケティングの意思決定を支援します。特許や競合リスクの特定、疾患領域や承認情報の把握にも利用でき、R&Dの効率化とコスト削減を促進	SaaSサービス	"	-	-
Eureka	"	"	専門性と安全性を兼ね備え、特許と文献のみで学習したEurekaのGPTが、情報漏洩の心配なく、迅速で高精度な特許調査を実現。企業の技術探索、技術ロードマップの理解、競合の監視、情報共有を効率化し、研究開発の効率を向上させます。速さと深さを兼ね備えた、研究のための知的検索ツール	SaaSサービス	"	-	-
Bio	"	"	大規模な配列データベースと高度な検索技術により、網羅性の高い配列検索を行い特許調査を革新します。DNA、RNA、タンパク質配列の検索により、特許情報や豊富な非特許文献リソースを特定します。特許検索・分析ツールAnalyticsと連携し、より詳細な特許の解析が可能です。高度なデータ処理技術と独自の検索 AI アルゴリズムで生物配列のFTOを飛躍的に改善し検索漏れリスクを低減	SaaSサービス	"	-	-
Chemical	"	"	化学構造検索又はCAS登録や名称、各種プロパティなどによる検索により化学物質を特定し、それらに関連する特許、文献、リストを整理して表示します。さらに特許解析アプリのAnalyticsとシームレスに連動し、化学構造と特許の検索・解析をワンストップで実現	SaaSサービス	"	-	-
Discovery	"	"	技術スカウティングと競争分析で新しいアイデアを生む強力なツール。AIを活用した技術トレンドの把握、企業戦略の深い洞察、技術パートナーや競合の動向把握、企業ランキングによる市場プレーヤーの評価、新市場の発見とトレンド予測、技術力の強弱分析が可能。市場リーダーやスタートアップの関係図も一目で分かる全方位的な技術情報提供が特長	SaaS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
汎用原子レベルシミュレータ MATLANTIS	Preferred Computational Chemistry (PFCC)	株式会社 Preferred Networksと株式会社 ENEOSとの共同開発	従来の原子シミュレータに深層学習モデルを組み込んだNeural Network Potential (NNP)に基づいて、原子スケールで材料の挙動を再現して広範な材料探索を実行できる汎用原子レベルシミュレータ。結晶・分子等の構造から第一原理計算レベル相当の精度でエネルギー・力を高速に算出でき、各種物性算出機能も配備。また、従来のNNPとは異なり、ユーザーによるデータ収集や事前学習は不要	クラウド:学習済み深層学習モデル、物性計算ライブラリ、高性能な計算環境をクラウド上に実装しているため、ハードウェアの準備や環境構築が不要	Webサイトからお問い合わせください。https://matlantis.com/ja/	2021年7月	Webサイトに掲載許可を得た一部クライアントのロゴのみ掲載
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
Polymerize Labs	Polymerize 合同会社	シンガポール Polymerize Pte. Ltd.	マテリアルズ・インフォマティクス (MI) のクラウドプラットフォーム。「実験データの一元管理(記録・分析)」、「独自の機械学習AIによる処方・特性の予測」等が可能となっており、MIのワークフローを包括的にサポートしながら、情報の資産化、日常業務の効率化、新製品開発期間の短縮を実現する	クラウド型プラットフォーム。推奨ブラウザ: Google Chrome, Microsoft Edge	お問い合わせ下さい	-	お問い合わせ下さい
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Byos	プロテインメトリックス	米プロテインメトリックス	バイオ医薬品の有効成分であるタンパク質やオリゴヌクレオチドの質量分析機器による重要特性解析を、機器ベンダーフリーで簡潔な操作でデータ処理・レポート作成。包括的なワークフローを標準実装しており、MS/MS検索には定評のあるByonicを内蔵しており、柔軟性の高いレポート機能の活用により容易な社内標準化、業務効率化に貢献する	Windows	お問合せ下さい	-	国内外主要バイオ医薬企業 (>200)、大学研究機関 (>300)
Byosphere	"	"	Byosのエンタープライズ製品。Byos機能に加え、機器データの収集からレポート作成までの自動化機能、ユーザー定義によるメタデータによる検索機能、解析データを跨る検索機能を実装。規制領域での運用支援機能を実装	"	"	-	-
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
Signals ChemDraw	大学生協、ヒューリンクス、富士通、コンフレックス、レビティージャパン シグナルズソフトウェア事業部 (旧株式会社ハーケンエルマー ジャパン インフォマティクス事業部)	Revvity Signals Software Inc. (旧PerkinElmer Informatics Inc)	旧ChemOfficeのデスクトップ製品、ChemDraw、Chem3D、ChemFinder/BioViz、およびChemDraw+(ブラウザ版 ChemDraw)、ChemDraw Collection (旧ChemOffice+)を統合し Signals Platform上でユーザー管理を可能にした化学・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。3MFファイル (3D Manufacturing Format)の出力サポート、ChemDraw Professionalの全ての機能が含まれる。大学向け University Editionにはライセンスの規模に合わせた Signals Notebook Standardのライセンスが含まれる	Windows/Mac	要問合せ	2024年6月	-

ChemDraw JS	"	"	ChemDraw JS は HTML5/JavaScript で実装されたChemDrawです。ChemDrawの構造式・反応式作図機能とChemicalインテリジェンス機能をウェブベースのアプリケーションに組み込むことが可能	"	"	2024年6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。構造式からNMRスペクトラの予測、アミノ酸およびDNA配列ツール、化合物名から構造式を生成するName=Struct機能、2D構造式を3D構造式に変換、環の彩色、構造式のハイライトなどの化学・生物学関連研究者必携の機能を装備。ChemDrawにはSciFinder-n、Reaxsysとの連携機能が含まれる。ChemDraw Primeの全ての機能が含む	"	"	2024年6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。構造式から分子量、分子式などの計算が可能。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	"	"	2024年6月	-
ChemACX	"	"	789社の試薬販売会社、およそ2,600万件の化合物と3,700万件の試薬を網羅し、四半期毎にアップデートするレビティ シグナルズソフトウェア Inc.独自の試薬カタログ情報データベース	Windows	"	2024年6月	-
E-Notebook	富士通、ヒューリックス、レビティ ジャパン シグナルズソフトウェア事業部(旧株式会社パーキンエルマー ジャパン インフォマティクス事業部)	"	業界第一位の実績を持つサーバー・クライアント型の電子実験ノート。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いての必須ツール	"	"	2024年6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	"	"	2024年6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	"	"	2024年6月	-
Signals Notebook Standard/Enhanced Enterprise Edition/Private Cloud	"	"	誰でも簡単に始めることができるクラウド電子実験ノート。記入したい項目欄を自由に追加・レイアウトができるので生物、化学研究者だけでなく、様々な研究分野の記述が可能。化学者向けにはChemDrawJSIによる量論計算だけでなく、パラレル合成にも対応。生物向けにはプレート情報、配列ファイルを視覚的に表示でき、そのほか実験で生成したサンプルの管理、分析ワークフローをサポートするタスクとリクエスト、ラボの様々な物品を在庫管理できる機能も含まれる	Windows/Mac、スマホ、タブレットに対応	要問合せ	2024年6月	-
Spotfire Analyst	富士通、EPKロア、レビティ ジャパン シグナルズソフトウェア事業部(旧株式会社パーキンエルマー ジャパン インフォマティクス事業部)	Cloud Software Group, 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	"	2024年6月	-
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-エクセル、パワーポイントへの書き出しもサポート	"	"	2024年6月	-
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-エクセル、パワーポイントへの書き出しもサポート	"	"	2024年6月	-
Lead Discovery Premium	"	Revvity Signals Software Inc. (旧PerkinElmer Informatics Inc.)	Spotfireにて化学構造式と評価データを組み合わせた評価・解析を実現。化学構造式の表示、R Group解析、部分構造検索、類似構造検索、物性計算、構造クラスター、骨格抽出、QSAR(Free Wilson Analysis)、フォームビュー、SAR専用ビューアー、3D構造ビューアー、配列の表記、レーダーチャート、ベン図チャート、HELM配列ビューアー及び解析機能 などをサポート	"	"	2024年6月	-
Lead Discovery Premium Personal Subscription	"	"	Spotfire AnalystとLead Discovery Premiumをパッケージにしたパーソナル利用を目的とした1年間使用ライセンス	"	"	2024年6月	-
Signals VitroVivo Personal Subscription	"	"	Spotfire AnalystとSciStreamをパッケージにしたパーソナル利用を目的とした1年間使用ライセンス。様々な実験機器(プレートリーダー、フローサイトメーター)からの出力されるデータをSpotfireへインポートするSciStreamにより、カラム型のデータだけでなく、ウェルプレート型、時系列型などの形式で出力されるデータをSpotfireで扱いやすいデータフォーマットに変換するだけでなく、ヘッダーやフッターなどの実験情報もインポートすることが可能	"	"	2024年6月	-
Signals Inventa	富士通、レビティ ジャパン シグナルズソフトウェア事業部(旧株式会社パーキンエルマー ジャパン インフォマティクス事業部)	"	Spotfire AnalystとLead Discovery PremiumにIndex化されたデータレイク機能を搭載。データレイクへのフレキシブルで高速な検索とSpotfireのビジュアライゼーション機能を組み合わせた次世代の意思決定統合プラットフォーム	"	"	2024年6月	-
Signals VitroVivo	"	"	日々の実験で得られる様々な実験データを解析するワークフローの構築・定型化・管理・実行を実現する仕組みを搭載したSpotfire上で使用するクラウド/オンプレミス型プラットフォーム。実験に対応した解析ワークフローを使用し、実験データのインポートから正規化・データ除外・各種計算によるエンドポイントテーブルを作成・Signals DataFactoryへの登録までの手順を簡単に実行することができ、登録したデータはSignals Inventaにより様々な実験データに対して横断的に評価解析を行うことができる。Spotfireのパワフルな機能を使用することで、HTS/HCS/SPRなどのin vitroの解析ワークフローだけでなく、in vivoの薬物動態試験など、様々な解析ワークフローを作成することができる。HSCデータを解析するHigh Content Profilerのワークフローも含まれており、Signals ImageArtistを併用することで、HCSデータの管理だけでなく、Spotfireのビジュアライゼーションに顕微鏡画像を表示し数値データと細胞画像を比較することができる	"	"	2024年6月	-

Signals Line Listing Review	レピティジャパン シグナルズソフトウェア事業部 (旧株式会社 パーキンエルマー ジャパン インフォマティクス事業部)	"	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。Line Listing Reviewはデータレビュー結果の記録、ステークホルダー間の対話、及びステータス管理が可能。	"	"	2024年6月	-
Signals Clinical	"	"	臨床試験におけるデータプラットフォーム。EDCをはじめ臨床試験で発生するあらゆるデータの統合が可能でデータの標準化を行い、臨床データレビューのワークフローを実現。データレイク機能を保持し、試験横断的な分析も実施可能。	"	"		
Signals ImageArtist	"	"	画像データベースとしての機能と、その画像を解析する機能を持つクラウド/オンプレミス型プラットフォーム。各社のHigh Content Screening (HCS)装置から得られた画像データを管理し、画像解析を行うことで多変量パラメータを出力することができる。出力した多変量パラメータをSignals VitroVivoのHigh Content Profilerで解析を行う	"	"	2024年6月	-
Signals Research Suite	"	"	Signals Notebook、Signals VitroVivo、Signals Inventaを含むクラウド型プラットフォーム。研究開発活動のすべてのプロセスをサポートする包括的な科学データ管理および分析機能環境を提供	"	"	2024年6月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<Small-Molecule Drug Discovery Products> 低分子創薬分子設計支援ソフトウェア				-	-		-
AutoQSAR	米Schrodinger LLC(窓口: シュレーディンガー株式会社)	米Schrodinger LLC	自動QSAR解析支援プログラム	Linux, Windows, macOS((詳細はお問い合わせ下さい。プログラムによりLinuxのみの提供となるものもございます))	お問い合わせ下さい	2016年	-
ConfGen	"	"	高速活性配座探索プログラム	"	"	-	-
Core Hopping	"	"	SBDDおよびLBDDによる母骨格の置換が可能	"	"	2010年	-
Desmond	"	"	生体高分子向け分子動力学プログラム	"	"	2008年	-
Epik	"	"	pKa予測/イオン化モデル・互変異性体自動発生プログラム	"	"	2005年	-
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	-
Filed-Based QSAR	"	"	3次元QSAR解析プログラム	"	"	2011年	-
Glide	"	"	高速高精度ドッキング計算プログラム	"	"	2001年	-
Jaguar	"	"	Pseudospectralアルゴリズムによる高精度かつ高速な計算を実現した新世代ab-initio量子化学計算プログラム	"	"	1996年	-
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	"	"	-	-
OPLS4	"	"	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	-
PIPER	"	"	蛋白質-蛋白質ドッキング計算プログラム	"	"	2012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	-
PyMOL	"	"	分子描画ソフトウェア	"	"	2010年	-
QikProp	"	"	3次元構造を利用した薬物物性予測ソフトウェア	"	"	2000年	-
QSite	"	"	Jaguarを用いたQM/MM計算プログラム	"	"	2001年	-
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	-
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	"	"	2008年	-
<Biologics Suite> バイオロジクスソフトウェア				-	-		-
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, macOS((詳細はお問い合わせ下さい。プログラムによりLinuxのみの提供となるものもございます))	お問い合わせ下さい	2012年	-
Desmond	"	"	生体高分子向け分子動力学プログラム	"	"	2008年	-
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	-
PIPER	"	"	蛋白質-蛋白質ドッキング計算プログラム	"	"	2012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	-
<Materials Science Products> マテリアルサイエンスソフトウェア				-	-		-
AutoQSAR	"	"	自動QSAR解析支援プログラム	Linux, Windows, macOS((詳細はお問い合わせ下さい。プログラムによりLinuxのみの提供となるものもございます))	お問い合わせ下さい	2016年	-
Desmond	"	"	分子動力学プログラム	"	"	2008年	-

GA Optoelectronics	"	"	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	"	"	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	"	"	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	"	"	-	-	
Quantum Espresso GUI	"	"	Quantum Espressoインターフェース(固体結晶・表面・界面のDFT計算)	"	"	2017年	-	
<Enterprise Informatics Solution>エンタープライズ・インフォマティクス						-	2013年	-
LiveDesign	"	"	化合物を対象としたコミュニケーションツール。機械学習との連携可	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	-	
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	
BIOVIA Materials Studio Base	サイエンス・テクノロジー・システムズ	仏ダッソー・システムズ	化学構造モデリングに必要な高度な機能を備えた入出力プラットフォームであり可視化ツールであるVisualizer、Gaussianプログラムと連携しVisualizer上で操作可能なインターフェイスを提供するGaussian 1F、半経験的分子軌道法プログラムであるVAMPが含まれる基本パッケージ	Windows (サーバー部分のみLinux可)	お問い合わせください	2020年9月	-	
BIOVIA Materials Studio Classical Simulation Solver Pack	"	"	非晶質構造のモデリングや周期境界条件による分子動力学計算及び各種物性を計算予測するAmorphous Cell、分子力学計算エンジンのForciteを分子動力学に機能拡張した古典力学計算ツールForcite Plus、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力場であり正確な構造、配座、振動と熱物性の予測が可能なCOMPASS、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Conformersが含まれるパッケージ	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio CASTEP Solver Pack	"	"	密度汎関数理論(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あり金属・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であるCASTEP、及びNMRのケミカルシフトを予測するNMR CASTEPが含まれるパッケージ	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio DMOL3 Solver Pack	"	"	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	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio DFTB+	"	"	密度汎関数法タイバインディング法(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	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio Adsorption Solver Pack	"	"	分子の吸着シミュレーションに必要な機能を備えたパッケージ。堆積プロセス、情報記録装置、腐食問題、および微細孔材における触媒反応などの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Adsorption Locator、工業用ガスの生産など、吸着に左右されるプロセスにおいて、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Sorptionが含まれる	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio 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	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio Crystal Morphology Solver Pack	"	"	分子構造から結晶の形態を計算予測するMorphology、ゼロから結晶の多形を計算予測するPolymorph Predictor、分子結晶内の水素結合情報を分析するMotifが含まれるパッケージ	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio FlexTS	"	"	強力な手法でエネルギー曲面計算や遷移状態探索を行うことが可能な、化学反応経路を予測するためのプログラム	"	"	2021年3月	-	
BIOVIA Materials Studio GULP Solver Pack	"	"	結晶構造のフォノン計算が可能	"	"	2020年9月	-	
BIOVIA Materials Studio Kinetix	"	"	反応表面を模した二次元格子の単位格子内に定義した吸着サイトの占有状態を、動的モンテカルロ法(KMC)による多数の確率的な遷移(吸着質の拡散、吸着および脱離)により変化させることにより、反応機構を予測する	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio MESODYN Solver Pack	"	"	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	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio ONETEP Solver Pack	"	"	DFT計算をDMOL3より高速に行う	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio PhaseField	"	"	メソスケールで微細構造の状態変化を予測する	"	"	2021年3月	-	
BIOVIA Materials Studio Powder Diffraction Solver Pack	"	"	粉末X線解析データから結晶構造を計算予測するReflex、Reflex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したReflex Plus、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Reflex QPA、X線データの指数付けを行うX-cellが含まれるパッケージ	"	"	2020年9月	-	
BIOVIA Materials Studio QMERA Solver Pack	"	"	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	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio Soft Matter Solver Pack	"	"	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するBlends、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Mesocite、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するSynthiaが含まれるパッケージ	"	"	"	-	
BIOVIA Materials Studio Statistical Models Solver Pack	"	"	定量的構造活性相関の計算が可能なQSAR+を含むパッケージ	"	"	"	-	

BIOVIA Discovery Studio Base	"	"	分子の視覚化を行うことができるGUIであるDS Visualizerが含まれる基本パッケージ	"	"	"	—
BIOVIA Discovery Studio Protein Modeling	"	"	生体高分子の配列アラインメント、タンパク質のホモロジーモデリング、X線結晶解析を行うためのパッケージ	"	"	"	—
BIOVIA Discovery Studio Protein Engineering	"	"	抗体モデリング及びシミュレーションが可能な生物学的製剤開発向けパッケージ	"	"	"	—
BIOVIA Discovery Studio Toxicity	"	"	毒性予測ツール。QSARIに基づくシステムで、試薬の分子構造から迅速かつ正確に化学毒性を算出するTOPKATや、構築済みのADMETモデルが含まれる。	"	"	"	—
BIOVIA Discovery Studio Simulation	"	"	生体高分子のモデリング、分子力学・分子動力学 (CHARMm) や密度半関数理論 (DMol3) に基づくシミュレーション、及び解析ツールを含むパッケージ	"	"	"	—
BIOVIA Discovery Studio Small Molecule Engineering	"	"	低分子医薬品開発向けのパッケージ。ファーマコフォア解析やドッキングシミュレーションが可能	"	"	"	—
BIOVIA 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、脳関門透過性、血漿タンパク結合、チトクロームP450 2D6阻害性、肝毒性の6つの予測モデルコンポーネントが含まれている	"	"	"	—
BIOVIA 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	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Analytics and Machine Learning Collection	"	"	機械学習に必要なコンポーネントを提供。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ことができる。また、Recursive Partitioning (RP法) とMulti-objective Pareto 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	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Documents and Text Collection	"	"	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と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	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Gene Expression and Mass Spec 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	"	"	"	—
BIOVIA 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	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Lab Analytics 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	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Server	"	"	プロトコル開発及び実行の基盤となるデータサイエンスプラットフォーム	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Professional User	"	"	GUI上での視覚的な操作によりコード不要でプロトコルを開発することができる	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Polymer Properties User Collection	"	"	ポリマー研究のためのプロパティ探索コレクション。柔軟にカスタム化できる新しいSynthiaという位置づけ	"	"	"	—
BIOVIA 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が可能	"	"	"	—
BIOVIA Pipeline Pilot Next Gen Sequencing Collection	"	"	次世代シーケンサーから出力される膨大なデータを解析するためのコンポーネントを提供	"	"	"	—
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	"	"	2009年4月	—
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	"	"	"	—
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	日本シンプシス	Synopsys Inc.	密度汎関数理論 (DFT) 理論に基づいた計算エンジン。高次元原子数値基底と、精度の高い平面波基底の両方を利用可能。400種類以上の相関交換汎関数を利用可能。半導体バンドギャップをよく再現するMetaGGA、Scan、HSE06も使用できる。HSE06汎関数と原子数値基底のコンビネーションによる高精度で高速なDFT計算を実現。さらにDFTB、拡張Hückel、Slater-Koster、およびその他のtight-bindingモデルを使用した半経験的計算エンジンも利用可能	Windows/Linux	詳細問い合わせ	—	—

QuantumATK NEGF	"	"	非平衡グリーン関数(NEGF)の手法に基づき、バイアス電圧が印加された2プローブ系の非平衡電子状態を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。計算手法として、DFT,半経験的手法が利用可能	"	"	-	-
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 NEGF、QuantumATK ForceFieldと共に使用する。256並列から	"	"	-	-
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、結果の表示を簡単に操作可能	"	"	-	-
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GUI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。半導体メーカ向け	"	"	-	-
ML fitting of MTP potentials	"	"	機械学習力場(Moment Tensor Potentia(MTP)のフィッティング機能。第一原理計算に基づき機械学習実行の自動フレームワークを完備。新規の系に対して、MTPを開発、体系改善、使用が可能。生成したポテンシャルは第一原理計算とほぼ同精度の原子間相互作用(エネルギー、フォース、およびストレス)を遥かに高効率に計算可能	"	"	-	-
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
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中で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(2022年6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 2007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	販売休止中
スマートジョブスケジューラ Orche[m]istra: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]istra Solo	"	"	遠隔の計算機上でGaussianジョブを実行する簡単ソフトウェア	"	無償	2009年	-
PowerMC 3.0	"	"	量子化学計算を用いたモンテカルロシミュレーションソフト。QM/MC法、QM/MC/FEP法を実装。化学反応の溶媒中における自由エネルギー挙動が計算できる	Linux	サイトライセンスのみ。コーポレート: 790万円(税込)、290万円(税込)	2011年	"
理論物性計算クイックオーダーサービス	"	TSテクノロジー	化学物質の物性や反応性などの様々な理論値を、物質1個単位から素早く分析委託できるサービス。機器分析などのデータと組み合わせ、ハイスルーput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/	-	19,000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。270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	270以上、化学・製薬・国内研究機関等(2024年3月)
Log2Crd	"	"	Gaussianの出力アーカイブ(log)を、入力ファイル形式に変換するソフトウェア。Webから簡単操作。インストール不要	ブラウザ上で実行可能。WindowsXP/Vista、UNIX(Linux、Solaris)、J2SDK5.0以上必要	無償	2010年	-
TS Search	"	山口大学・堀研究室	化学反応の遷移状態探索に特化した、MOPAC、Gaussian、GAMESS用の計算インターフェイス。Minimum energy path法、Saddle法、等高線図法、置換基法等による遷移状態探索が可能	WindowsXP/Vista、UNIX(Linux、Solaris)、J2SDK5.0以上必要	無償	-	-
TS Search Professional	"	"	TS Searchの高機能版。複数の反応を同時に解析することが可能。遠隔の計算機を透過的に使用できる機能あり	"	お問い合わせ下さい	-	-
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180,000~、教育機関60,000~)、年間サイトライセンス(民間企業・官公庁1,440,000~、教育機関1,240,000~)	2012年	化学・製薬・国内研究機関等(2023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
Spartan'20 for Windows Parallel Suite Gt16	米ウェイブファンクシオン 日本支店	米ウェイブファンクシオン	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: 7/8.1/10/11(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: MacOS10.10以降/11.x /12.x /13x M1M2チップにも対応	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。詳細要お問い合わせ	2021年5月	-	
Spartan'20 for Linux	"	"	Spartan'20 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以降順次	要お問い合わせ	2021年10月	-	
Spartan Spectra and Properties Database (SSPD)	"	"	分子量500までの低分子約280,000件について、IR、NMRスペクトルデータ(計算)を有し、QSARで使用する各種プロパティを内包。Spartanにはサンプルセット(約5,000件)が収められていて、完全版は別にライセンスが必要 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/7/8/10/11 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。ボリュームディスクカウントあり	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。ボリュームディスクカウントあり	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。ボリュームディスクカウントあり	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の内蔵、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 Multipul 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 Polarity	"	"	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	-	
		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。9万万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	"	"	次世代シーケンズデータを利用した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)	"	-	-	
OLC 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	"	-	-	
OLC 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	"	"	-	-	
NEXUS copy number	"	米バイオディスクカバリー	[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	"	-	-	

Clarity Suite	"	西 ChemoTargets	薬剤のトランスレシーショナルセーフティ解析を行うファーマコビジランス向けWebアクセスの製品、薬剤、有害事象、ターゲット、疾患から関連情報の検索と有害事象の時系列、各ステージでのトランスレシーショナル解析を可能にした製品とデータ提供サービス	Windows/Mac/Linux (64 bit)	"	-	-
Exemplar LIMS	"	米 SAPIO SCIENCE S	電子実験ノート(ELN)とラボトリ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)	"	-	-
COMA (Clinical Oral Metagenome Analysis Software)	"	ワールドフュージョン	COMAは、メタゲノム解析ソフトMetagenome@Kinを歯科専用に変更したソフトウェアで、口腔内細菌をNGSでシーケンズした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ズデータから、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行い、B型インフルエンザの場合はB型インフルエンザ検出を報告する。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、異なる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)	"	-	-
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、またスキンケア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	-	-	-	-
PubMedify	"	"	興味のある文献を解析しキーワードの入力なしに、PubMedの更新時に類似論文を提示するサービス。テーマ毎に作成したフォルダで文献を管理するサブスクリプションのサービス	Windows/Mac/Linux (64 bit)	-	-	-
CompStor	"	米OmniTier	遺伝子疾患に対応する自動3次解析パイプライン搭載の高速解析プラットフォームで希少疾患にも応用可能。自社オリジナルのより正確なバリエーションコール機能を持ち、WES/WGS/アンプリコン解析を高速度で実現。ショートリードおよびロングリードに対応。プログラムの知識がなくても利用可能な初見でもわかりやすいGUIで、疾患予測レポートまで自動で排出可能となっている	-	-	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Winmostar V11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ーに対応。40種以上の豊富なチュート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/	Windows7/8/10/11	・特定ユーザライセンス レギュラーサポート付き エリート 民間企業・官公庁 年間使用権+年間保守:36万円、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+年間保守:18万円、教育機関 エリート 永久使用権+年間保守:24万円、教育機関 プレミアム 永久使用権+年間保守:12万円、教育機関 エコノミー 永久使用権+年間保守:6万円 ・サイトライセンス レギュラーサポート付き エリート 民間企業・官公庁 年間使用権:288万円、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	特定ユーザライセンス(旧シングルライセンス)の累計販売数は2012、サイトライセンスの累計導入先は88(2023年9月26日現在)
Winmostar V11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	2023年9月26日現在、毎日平均30のダウンロード
Winmostar V11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	2023年9月26日現在、毎日平均20のダウンロード
Winmostar V11 DCDFTBMDアドオン	"	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と、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/	"	・特定ユーザライセンス 民間企業・官公庁 年間使用権:60万円、教育機関 永久使用権:6万円	2017年4月	-
Winmostar V11 Fragment ERアドオン	"	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/	"	・特定ユーザライセンス 民間企業・官公庁 年間使用権:40万円	2017年4月	-