

＜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、2007年6月現在)

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
＜マテリアルサイエンス製品＞	アクセルリス	米アクセルリス					
Materials Studio Visualizer	"	"	MS Modeling各モジュールの入出力プラットフォーム。化学構造モデリングに必要な高度な機能を完備	Windows	お問い合わせ下さい	—	—
Materials Studio Discover/Forcite	"	"	分子力学・分子動力学計算エンジン。COMPASS力場との組み合わせで高精度のシミュレーションが可能	"	"	—	—
Materials Studio ForcitePlus	"	"	Forciteに分子動力学の機能を追加。分子、材料系の動力学解析ツールを備える	"	"	—	—
Materials Studio Amorphous Cell	"	"	低分子やポリマーの非晶構造を作成。周期境界条件による分子動力学計算から各種物性を計算予測	"	"	—	—
Materials Studio COMPASS	"	"	擬縮系の再現にも優れた高精度力場。無機、無機酸化物、金属などへの適用可	"	"	—	—
Materials Studio Equilibria	"	"	鎖状炭化水素分子の相平衡状態を計算	"	"	—	—
Materials Studio GULP	"	"	無機、有機格子シミュレーションソフト。30種近いポテンシャルを内蔵				
Materials Studio Sorption	"	"	モンテカルロ法吸着シミュレーションソフト。吸着等温線などを計算	"	"	—	—
Materials Studio Blends	"	"	高分子、溶媒系の相互作用エネルギーの計算から相図、相互作用パラメーターなどを計算	"	"	—	—
Materials Studio DPD & MesoDyn	"	"	メソスケールシミュレーションソフト。ポリマーブレンドやブロックポリマーのメソ構造を予測	"	"	—	—
Mesoprop	"	"	メソシミュレーションの結果を使用し機械物性などのマクロ物性を有限要素法で計算	"	"	—	—
Materials Studio Synthia	"	"	グラフ理論に基づき、ポリマー構造から各種物性を一瞬で予測。ポリマーハンドブックに代わる座右のツール	"	"	—	—
Materials Studio CASTEP	"	"	密度汎関数法 (Density Functional Theory) に基づいた第一原理平面波・擬ポテンシャルコードで、金属・半導体・絶縁体の結晶、界面、ならびに表面に対する計算を行うツール	"	"	—	—
Materials Studio NMR CASTEP	"	"	CASTEPによる分子、結晶などのNMRケミカルシフトなどの計算モジュール	"	"	—	—
Materials Studio DMol3	"	"	密度汎関数法に基づいた第一原理計算プログラムで数値局在基底関数を使用。分子系と周期系双方の電子状態計算が可能	"	"	—	—
Materials Studio VAMP	"	"	半経験的分子軌道法プログラム。MINDO,MNDO,AM1,PM3法を含む。溶媒効果、励起状態計算が可能	"	"	—	—
Materials Studio ONETEP	"	"	数千原子レベルのO(N)-DFT計算を高効率パラレル計算で実行。触媒、生体分子の計算などに有効	"	"	—	—
Materials Studio QMERA	"	"	DMol3/GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的計算が可能	"	"	—	—
Materials Studio Reflex	"	"	結晶の粉末回折像を高速にシミュレート。実験データとのリアルタイム比較が可能	"	"	—	—
Materials Studio ReflexPlus	"	"	粉末X線結晶回折データから結晶構造を精度よく計算予測するツール	"	"	—	—

Materials Studio ReflexQPA	"	"	結晶混合相の定量的な相分析ソフト。最も総合的な最新アルゴリズムを採用しており、有機、無機系に適用	"	"	—	—
X-Cell	"	"	特許保有の、強力で使い易い、中～高品質粉末回折パターンの指数付けソフト。電子線、中性子線回折にも	"	"	—	—
Materials Studio Morphology	"	"	分子構造から結晶の形態を計算予測	"	"	—	—
Materials Studio Polymorph	"	"	結晶の多形を計算予測	"	"	—	—
Materials Studio QSAR	"	"	化学品、材料の構造活性(物性)相関モデルの作成、解析。多数の記述子を完備	"	"	—	—
Materials Studio FastDescriptor	"	"	QSARにおける種々の2D分子記述子を計算。トポロジカル記述子、熱力学的記述子、構造記述子など	"	"	—	—
Materials Studio GeneticAlgorithm	"	"	遺伝子アルゴリズムに基づくQSARモデル構築時の関数近似手法	"	"	—	—
<ライフサイエンス製品>							
Discovery Studio Visualizer	"	"	分子の3Dモデル表示と簡単なモデル解析のデスクトップツール	Windows	無料	—	—
Discovery Studio Sequence Analysis	"	"	BLASTあるいはPSIBLASTを用い、興味あるアミノ酸配列についてローカルデータベース又はNCBIのWEBサーバにアクセスし、相同性のある配列を検索。また系統樹の描画、Evolutionary Trace解析を行い、タンパク質の機能に対して重要な残基を推定	Windows, Linux	お問い合わせ下さい	—	—
Discovery Studio Protein Families	"	"	配列と構造情報を用い、複数のアミノ酸配列からマルチプルアラインメントを行う。またアラインメント結果から進化系統解析を行う	"	"	—	—
Discovery Studio MODELER	"	"	自動ホモロジーモデリング、ループのモデリング、アミノ酸配列の構造に対するアラインメント、タンパク質のミュータントの構築	"	"	—	—
Discovery Studio Protein Refine	"	"	CHARMmのテクノロジーを用い、タンパク質の側鎖、ループ領域の最適構造を発生させる	"	"	—	—
Discovery Studio Protein Health	"	"	Profiles-3Dのアルゴリズムを用て、タンパク質構造の評価を行い、構造が適正かどうかを評価する指標を与	"	"	—	—
Discovery Studio Biopolymer	"	"	タンパク質、ペプチド、DNA、RNA等の生体高分子のモデルを簡単に構築し、コンピュータ上で取扱うことができるようにする。また、静電ポテンシャルおよび溶媒和エネルギーを計算することも可能	"	"	—	—
Discovery Studio CHARMm	"	"	非常によく検証された、タンパク質および複合体のシミュレーションエンジン	"	"	—	—
CFF			非常に広範囲(タンパク質、核酸、脂質、炭水化物、低分子化合物)の分子に対応可能な、非常に精度の高い力場(force field)。CHARMmで利用可能	"	"	—	—
Discovery Studio CHARMm Lite	"	"	CHARMmの幅広い機能のうち、ドッキング結果の最適化(リガンド構造をレセプターの一部の原子を含めて最適化)のみの機能に限定したバージョン	"	"	—	—
Discovery Studio Analysis	"	"	タンパク質およびタンパク質/リガンド複合体のシミュレーション結果であるトラジェクトリーファイルの情報を解析、可視化。RMSD計算、close contact、水素結合数の解析をドッキング結果に対して実行することも可能。また、Delphiによって、分子の静電場計算を行うこと	"	"	—	—
Discovery Studio LigandFit	"	"	標的タンパク質の活性部位にリガンドをドッキングさせ	"	"	—	—

Discovery Studio LigandScore	"	"	検証済みのデータセットを用いて構築されたスコアリングファンクションにより、リガンド-タンパク質の相互作用	"	"	-	-
Discovery Studio LigandFit/CAP	"	"	DS LigandFitでのドッキングシミュレーションを行うように用意されたCAP(Chemicals Available for Purchase)データベース。CAPは市販試薬、スクリーニング化合物のデータベース	"	"	-	-
Discovery Studio Ludi	"	"	タンパク質の活性部位の構造的、化学的特徴を元にして、リード化合物をde novoデザインするためのツール	"	"	-	-
Discovery Studio AutoLudi	"	"	DS Ludiにおけるde novoドラッグデザインの過程を自動化するツール。Evolutionary, Quick, Combiの3つのモードを備え、より確からしい構造、より合成しやすい構造といった視点から解析を行うことが可能	"	"	-	-
Ludi/CAP	"	"	CAPのデータから厳密な規則に基づいて生成された、DS Ludi、DS AutoLudiのためのフラグメントライブラリ	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Hypothesis	"	"	低分子化合物の、ターゲット生体高分子に対する結合親和性に関する一般化された特性について、詳細な根拠に基づく包括的なファーマコフォア仮説を作成	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Conformation	"	"	潜在的な薬物活性に基づいて分子のフレキシビリティを考慮しつつ、取りうる3Dコンフォメーションを広範囲に構築するモジュール	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Shape	"	"	分子を3次元構造で表現し、生理活性のある無しにかかわらず、類似の3次元構造を示す分子を識別	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Structure Based Pharmacophore	"	"	既知の、あるいは予測されたターゲット分子の活性部位構造から、Ludi(de novoドラッグデザインツール)の技術を用いてファーマコフォアモデルを自動的に作成	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Score	"	"	それぞれの化合物に対し、適合性、活性のスコアを計	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Build & Discovery Studio Catalyst	"	"	化合物の構造データベースを独自に構築し、多種多様なオプションを用いて検索可能	"	"	-	-
Discovery Studio ADMET Descriptors	"	"	研究対象の化合物に対して、解析の初期の段階からあらかじめ体内における呼吸、分布、代謝、排出、および毒性といった、薬物体内動態(ADMET)を予測することにより、合成化合物の検討、市販ライブラリの導入、スクリーニングにおいて有用な情報を得ることができる	"	"	-	-
Discovery Studio TOPKAT	"	"	化合物の構造情報のみから、毒性および環境への影響を予測することが可能	"	"	-	-
Discovery Studio Visualizer Pro Enterprise Version	"	"	Discovery Studioのモジュール群の統合環境として、生体高分子、化合物データを可視化、解析を行い、その結果を他の研究者と共有することができる使いやすいユーザーインターフェース。ネットワーク上の解析サーバにアクセスし、それぞれの研究領域における解析プロトコールを実行可能。さらに、Pipeline Pilotを用いて作成された独自の解析プログラム、解析プロトコールに	"	"	-	-
Discovery Studio Visualizer Pro	"	"	タンパク質および低分子化合物のデータについて、非常に高精度なグラフィックスで可視化、解析、結果の共有を行うことが可能	"	"	-	-

Pipeline Pilot	"	"	バイオインフォマティクス、ケムインフォマティクス、モデリングシミュレーションをカバーする、ライフサイエンスのための解析プロトコール構築ツール。Discovery Studioから利用する解析プロトコールを構築するほか、大規模なインフォマティクスシステム、WEBインターフェースのシステム構築も容易。また、ユーザー独自のツールを組み込んで利用することも可能	"	"	—	—
<ケムインフォマティクス製品>							
Accord	"	"	クライアント/サーバープラットフォーム上での化学薬品データ管理ツール	Windows	"	—	—
Accord for Excel	"	"	化学計算、完全一致や部分構造一致によるフィルタリング、構造の類似度によるソートなど、化学者が日常的に用いているMicrosoft Excel上で自在に化学を取り扱うことのできる化学スプレッドシート。立体化学も認識する化学者必携のツール。コンビナトリアルケミスト	"	"	—	—
TSAR	"	"	統計的およびビジュアル分析ツールを使用してデータの傾向を調べる、完全統合された2D QSAR/パッケージ	"	"	—	—
DIVA	"	"	化学および生物学データを処理するデスクトップ・アプリケーション	"	"	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Advance /BioStation V3.0	アドバンスソフト	アドバンスソフト	大規模分子の高精度計算を効率よく実行するための2つのソルバーを統合。・ABINIT-MP: 非経験的フラグメント分子軌道計算(FMO)法と・ProteinDF: 密度汎関数法による全電子計算。これらにより、生体高分子(タンパク質、DNA、糖)のフラグメント間相互作用、および、タンパク質の全電子計算が可能	Linux PCクラスタ(Pentium4,Xeon-IA32対応) (これら以外の環境についてはお問い合わせください)	100万円/年間より	2007年7月	—
Advance /PHASE V2.0	"	"	ナノデバイス開発を支援するナノシミュレーション。電子論に基づいた固体の材料設計・解析ツールとして利用できる。誘電率計算機能により、次世代半導体素子の開発に必要な高誘電率材料や太陽電池 材料の光学特性の解析に有効。走査トンネル顕微鏡などの表面分析、触媒などの表面反応の理論的解析に有効	Red Hat Enterprise Linux 3以上(IA32, AMD64, EM64T)、Windows 2000 Professional, Windows XP Professional/Home Edition	100万円/年間より	2007年2月	—
Advance /DayStar	"	"	Advance/DayStarは、色素増感型太陽電池における荷電体の生成、再結合、輸送などを考慮した電子移動素過程を定式化した微分方程式系を適切な物質パラメータを入力して解くことで、電池の電気化学性能を評価す	OS:Windows XP /RedHat Linux	100万円/年間より	2006年3月	—
Advance /OCTA	"	"	ソフトマテリアル統合シミュレータのAdvance/OCTAは、ミクロからマクロ領域向けに4つのエンジンで構成される。・Muffin: マクロ問題専門プログラム群(相分離流動やマイクロリアクタ、他シミュレータ)、・SUSHI: 高分子材料のメソスコピック構造予測シミュレータ、・PASTA: 高分子溶融体レオロジー特性予測シミュレータ、・COGNAC: 租視化分子動力学シミュレーションプロ	OS:Windows XP /RedHat Linux	お問い合わせ下さい。	2006年10月	—

Advance /FrontFlow/red V2.0	"	"	複合連成やマイクロスケール問題を解析する次世代流体解析。新幹線、空調機器、自動車体周りなどの流体音の解析に有効で騒音の低減化が図れる。ガスタービン燃焼器、自動車エンジン内の燃焼反応の解析に有効。台風など強風のビルなど構造物への影響を解析、ゆれ具合の評価、強度設計などに有効	OS:IRIX64(V6.5) /Linux(Ver.2.4) /Windows XP Pro /Windows2000 /SUPER-UX(地球シミュレータ) /AIX-5L(SR11000)等	100万円/年間より	2007年2月	-
Advance /FrontFlow/blue V2.0	"	"	Advance/ FrontFlowは、複合連成やマルチスケール問題を解析する次世代流体解析ソフトウェア。/blueはラージ・エディ・シミュレーション(LES)を用いた大規模渦の高精度な乱流シミュレーションを実現。乱流音、キャビテーション解析が可能であり、水力機械の性能評価、空力騒音予測等になどに有効	OS: AIX、HP-UX、HI-UX/MPP、IRIX、SUPER-UX(地球シミュレータ)、Linux	100万円/年間より	2007年2月	-
Advance /FrontFlow/MP V1.0	"	"	非構造格子系三次元気液二相流解析ソフトであるAdvance/FrontFlow/MPIは、気相と液相が共存する状態の流動特性や伝熱特性を解析することが可能	OS:IRIX64(V6.5) /RedHat Linux9 /SGI Advanced Linux /SUSE Linux /Windows XP Pro	200万円/年間より	2007年2月	-
Advance /PSE Workbench	"	"	複雑・大規模な解析シミュレーションを効率化する統合プラットフォーム。複雑で大規模なソフトウェア開発のワークベンチ。流体、構造、熱などの総合解析システムの構築に有効。タスクフローという新しい概念に基づく	Linux、Windows 2000、Windows XP、Unix (Java2 が必要)	100万円/年間より	2007年2月	-
Advance /FrontSTR V2.0	"	"	大規模・複雑な系に適する構造解析ソフトウェア。静解析、幾何学非線形、固有値解析など。独自入力フォーマットのほか、NASTRAN形式の入出力にも対応。使用できる要素は平面、4面体、6面体要素の他にシェル	Linux、Windows 2000、Windows XP	100万円/年間より	2007年2月	-
Advance /TFLAGS	"	"	薄膜成長プロセスシミュレーション。MBEやCVDによる薄膜成長プロセスを原子レベルでシミュレート可能。結晶粒サイズ分布や表面の凹凸が堆積速度や基盤温度などの成長条件によってどのように変化するか解析可能。エピタキシャル成長、ガラス基板上の多結晶膜の成長など様々な薄膜成長様式に対応。PCで動作	OS: Windows、Linux、Mac OS X、UNIX、CPU: Pentium4 1GHz以上推奨、メモリ: DDR-SDRAM 512MB以上	19万6000円	2004年12月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GENIE	アドバンスドテクノロジーインスティテュート	アドバンスドテクノロジーインスティテュート	DNA・たん白質情報の統合解析システム。とりわけ、独自開発によるホモロジーモデリングに基いたたん白質の立体構造予測システムは、予測した構造の局所的な予測精度を推定することができるという独特の機能	Linux	要問い合わせ	-	-
BioInfo Bank	"	アドバンスドテクノロジーインスティテュート、九州工業大学	我が国独自の蛋白質・核酸に関するバイオ情報データベース群。国際的な利用に応えるように全文英文で開発	インターネット利用	要問い合わせ	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MolWorks Ver2.0	ビヨンド・コンピューティング	ビヨンド・コンピューティング	分子設計のためのビルダーを備え、物性値の推算およびGAUSSIAN、MOPAC、GAMESS、Q-Chemへの入出力インタフェースを備えている。ダウンロード先: http://www.molworks.com/	Windows98/Me/NT/2000/XP、Linux、MacOS、MacOS X	無償	2000年9月	-

Pallas	"	ハンガリー・コンピュータドラッグ	化合物の構造情報を元に、物性(pKa, logP, logD)、薬物代謝、毒性、rule of 5 (医薬品候補の指標)、TPSA (Topological Polar Surface Area)、HPLCの各種設定条件を予測	Windows、UNIX、Web、SDK版	別途問い合わせ	2005年	-
EMIL	"	"	京都大学の藤田稔夫名誉教授らが開発した、リード化合物の構造進化データベース及びデータ処理エンジンを持つ医薬品開発支援システム	Windows、Web	"	"	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
KnowItAll (ノウ・イットオール) インフォマティクスシステム	バイオ・ラッド ラボラトリーズ	米バイオ・ラッド ラボラトリーズ	IR、Raman、NMR、MSスペクトルを1つのアプリケーションで扱うことのできる画期的なソフト。ユーザーが必要なツールを組み合わせて購入することができる	Windows2000以上	19.8万円から、詳細問い合わせ	2001年10月	-
ハブ・イットオール ライセンスキー	"	"	サドラーのスペクトルデータベースすべてを1年間制限なく検索利用することのきるプライスシステム。あらたにSDBS NMRデータベースが加わった	"	IR 98万円、NMR 97万円、MS56万円/1年間	2003年4月	-
IRパッケージデータベース ver.5	"	"	世界最大規模のIRスペクトルデータベースを用途、分野に分けて収録。ユーザーの利用形態に合わせて選択可能。2006年新たに19分野のデータベースが追加	-	詳細問い合わせ	2000年4月	-
KnowItAll インフォマティクスシステムADME/Toxファミリー	"	"	KnowItAllの持つ広範な機能にin silico ADME/Toxで使用されるプロパティ推定モデルと各種ユーティリティを組合せたアプリケーションソフト。利用するプロパティモデルを任意で選択でき、複数のモデルからコンセンサスモデルも作成できる	Windows2000以上	詳細問い合わせ	2006年4月	-
KnowItAll インフォマティクスシステムMetabolomicsエディション	"	"	NMRスペクトルの処理からバイオマーカーの同定までのNMRデータによるメタボロミクスリサーチをカバー。主成分解析によるデータ分類、ローディングプロットとメタボライトデータベースの比較、推定バイオマーカーの表示、KEGGへのリンク	"	詳細問い合わせ	2006年10月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ChemInTool - Chemish Pro	ケムインフォナビ	東京大学・船津研究室	モデリング(MLR,PLS,BP,CP)、クラスタリング(階層型,Kohonen)、変数選択(GA-PLS)機能を有する統合的ケモメトリクスソフトウェア。モデル式を用いた予測、逆解析および原子団寄与法機能がある。さらに要求特性を満たす化学構造式を自動的に生成する機能もある	Windows2000/XP/Vista	年間ライセンス 8万4000円(税込)、アカデミック価格あり	2004年	-
ChemInTool - Chemish Standard	"	"	Chemish Proの機能限定版。モデリング(MLR,PLS,BP)、クラスタリング(階層型,Kohonen)、変数選択(GA-PLS)機能を有する統合的ケモメトリクスソフトウェア	"	年間ライセンス 5万2500円(税込)、アカデミック価格あり	2007年	-
ChemInTool - Chemish Free	"	"	Chemish Proの機能限定無償版。PCA、MLR機能が使用可能。HP(http://www.cheminonavi.co.jp)よりダウンロードできる	"	無償	2005年	-
ChemInTool - ToMoCo	"	"	分子設計、構造活性相関解析を行うためのトータルシステム。Hopfieldニューラルネットワークによる分子構造重ね合わせ手法により、基本骨格が異なる分子でも重ね合わせが可能。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	Windows2000/XP	年間ライセンス 210万円(税込)~、アカデミック価格あり	2004年	-

ChemInTool - AIPHOS	"	"	反応知識ベースを用いて有機合成経路設計を支援するシステム。合成したい目的化合物を入力することにより、合成ルートを提案する	サーバー: Linux、クライアント: Windows2000/XP	年間ライセンス 84万円(税込)～、アカデミック価格あり	2004年	—
ChemInTool - AIPHOS/KOSP	"	"	有機合成経路設計支援システムAIPHOSのサブセット版。知識ベースから合成ルートを提案する	サーバー: Linux、クライアント: Windows2000/XP	年間ライセンス 31万5000円(税込)～、アカデミック価格あり	2006年	—
ChemInTool - AIPHOS/TOSP	"	"	有機合成経路設計支援システムAIPHOSのサブセット版。Transformと呼ばれるデータベースから合成ルートを提案する	サーバー: Linux、クライアント: Windows2000/XP	年間ライセンス 25万2000円(税込)～、アカデミック価格あり	2006年	—
ChemInTool - SEoN	"	"	NMRスペクトルから、その化学構造を自動推定する構造解析システム。分子式から構造を自動的に生成する機能を用いて、可能性が高い構造を推定できる。また、候補構造に対する予測NMRスペクトルを実測値と比較することでランク付けを行える	Windows2000/XP	年間ライセンス 63万円(税込)～、アカデミック価格あり	2004年	—
FIND-TSINFO	"	山口大学・堀研究室	構造検索や反応検索を行うことが可能な遷移状態データベースシステム	"	お問い合わせ下さい	—	—
TSLB	"	"	遷移状態データベース	"	お問い合わせ下さい	—	—
TS_Search	"	"	遷移状態データベースと連携して遷移状態探索をアシストするシステム	"	無償	—	—
hag98	"	"	多数のコンピュータが存在する環境でGaussian03のジョブのスケジュール管理を行うシステム	"	お問い合わせ下さい	2006年	—
CORINA	"	独モレキュラーネットワークス	3D分子構造生成ソフトウェア	UNIX(x86 Linux, Sun Solaris, SGI IRIX)、MS Windows	お問い合わせ下さい	—	—
ADRIANA.Code	"	"	分子構造記述子計算ソフトウェア	Windows2000/XP、x86 Linux	お問い合わせ下さい	—	—
SONIA	"	"	自己組織化ニューラルネットワークソフトウェア (Kohonen, Counter-propagation neural network)	UNIX(Linux, Sun Solaris, SGI IRIX)、MS Windows	お問い合わせ下さい	—	—
ROTATE	"	"	利用者指定によるコンフォメーション・セット発生ソフトウェア	UNIX(x86 Linux, Sun Solaris, SGI IRIX, DEC AlphaStation)	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

CONFLEX ver.6.1	コンプレックス	コンプレックス	フレキシブルな分子の配座空間を、側鎖の結合回転・環のFlap・Flipにより探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけた。それにより、最安定構造も特定することが可能になる。単純な構造最適化プログラムでは、初期構造に依存した局所構造しか求めることができない。これでは、フレキシブルな分子の性質や挙動に関して、限られた情報しか得ることができない。CONFLEXはこれらの問題を解決するための配座探索プログラム。最新版では、溶媒効果も配座探索に適用可能になり、結晶構造の最適化も可能に	Windows、Linux、Mac	企業価格：200万円、大学価格：20万円	2007年3月	—
BARISTA	''	''	独自の多配座解析機能に加えて、分子構造解析・分子軌道解析・基準振動解析・動力学的解析機能を有する解析支援のためのプラットフォーム。これまでジョブを1つずつ投入する必要があったが、バッチ処理機能により複数のジョブを投入する事が可能になった。分子計算プログラムにより計算された結果をもとに分子構造をコンピューターグラフィックスで表示することができ、計算結果を容易に解析することが可能になる	Windows	企業価格：50万円、大学価格：5万円	2007年3月	—
Parallel CONFLEX ver.6	''	''	CONFLEXのアルゴリズムにより発生する複数の出発構造の最適化を、複数のコンピューターに分散させ並列で配座探索を行う。扱う系のサイズが非常に大きい場合はPC1台で配座探索計算を行うことはできないため、多配座分子の立体構造を素早く解析するために有	Linux	サイトライセンスのみ、問い合わせ	2007年3月	—
CONFLEX.NET	''	''	イントラネット環境下におけるCONFLEXの共有利用が可能。また、CONFLEXの計算結果はネットワーク上のデータベースサーバーに蓄積されるため、配座データベースの再利用が容易にできる	Linux	問い合わせ	2007年3月	—
AMBER9	''	米カリフォルニア大学	カリフォルニア大学のKollman教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよび分子力学と分子動力学計算のパッケージ。様々な溶媒モデルやQM/MM機能も持つ。基準振動解析、トラジェクトリー解析、エネルギー解析などを行うモジュールも含まれる	UNIX、Linux、Mac、Windows	ソースのみ 企業価格：300万円（日本語チュートリアル付） 大学価格：20万円（1ヶ月間サポート、日本語チュートリアル	2006年4月	—
Gaussian03/GaussView4.0	''	米ガウシアン	J.A.Popleらによって開発された、実験データから導き出される経験的パラメーターを一切用いない非経験的分子軌道法プログラム。ONIOM法により、巨大分子についても適用可能にした。励起状態を扱う手法に、新しくSAC-CI法が追加された。GaussView4により、2変数以上のScan結果を3次元表示できるようになった。UV/Vis.スペクトルの表示が可能に。面のスライス表示	UNIX、Windows、Mac	問い合わせ	2003年4月 (GaussView4.0:2007年7月)	—

受託計算サービス	"	コンフレックス	弊社独自に開発したシーケンス型配座創出アルゴリズムと並列計算システム(グリッド環境を含む)を応用したCONFLEX法を使用して配座探索を行う。取り得る可能な配座異性体を徹底的に調べて、最安定配座を特定。さらにab initio計算等の精度の高い計算により、探索した各配座異性体について物性値の予測を実施する。また、AMBERによる分子動力学計算も行う	-	5万円~	2000年4月	-
各種サポートサービス、インストラクション、トレーニング (CONFLEX, AMBER, Gaussian, 他)	"	"	計算化学のプログラムを使いこなすには、高度な専門的知識が必要とされ、限られた研究時間で多くの結果を出すことは難しいのが現状。このような、計算化学を利用したいものの計算できる環境や人員が不足している企業や大学の研究者のために、各種サポートサービスを提供し、研究開発の時間短縮や経費節減に協力	-	問い合わせ	2000年4月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ChemBioDraw Ultra	大学生協、ヒューリンクス、富士通、ケンブリッジソフトジャパン(ご注文・受付セン)	米ケンブリッジソフト	化学および生物学分野における事実上の標準描画ソフトウェアパッケージ。陽子NMRのピーク分割と強調表示、アミノ酸およびDNA配列ツール、TLCプレート描画ツール、Name=Struct機能など、化学・生物学関連研究者必携の機能を満載	Windows/Mac	要問合せ	2008年9月	-
ChemDraw Ultra/Pro/Std	"	"	化学構造式・反応式描画の定番ソフトウェアパッケージ。化学量論的組成の表示、NMRスペクトル予測、立体化学式表記、Name=Struct機能など、化学関連研究者必携の機能を満載	"	"	2008年9月	-
BioDraw Ultra	"	"	生物学用描画ソフト。膜、DNA、酵素、tRNA、リボソーム、らせん状蛋白質など、出版品質のグラフィックを作成抱きます。Ver.10からChemDrawと統合され、さらに	"	"	2008年9月	-
ChemBio3D Ultra	"	"	3D分子モデル描画ソフト。分子の豊かで高品質の3次元的表现が直感的に得られ、生成エネルギー、遷移状態最適化などの計算機能・インタフェースを備えた包括的なソフト。タンパク質など表面表示にも優れる	Windows	"	2008年9月	-
BioAssay Ultra	"	"	プレートを使用して行うIC50実験分析ツール。大量のアクセス データを処理・分析・視覚化・保存できるスマートなソリューションを提供	"	"	2008年9月	-
ChemBioOffice Ultra	"	"	ChemBioDraw, ChemBio3D, ChemFinderに加えてBioAssay, BioViz, Inventory, E-Notebookを統合した、化学・生物学へのトータルソリューションパッケージ	"	"	2008年9月	-
ChemOffice Ultra/Pro	"	"	ChemDraw, Chem3D, ChemFinderに加えてE-Notebookを統合した、化学関連研究者へのトータルソリューションパッケージ	"	"	2008年9月	-
ChemOffice Enterprise	"	"	Web上で化学構造・反応情報をDB構築・検索を可能にする、化学情報管理システムを提供。化学研究機関に	"	"	2006年4月	-
BioOffice Ultra	"	"	分子生物学と化学の両方を扱う研究者に最適な統合製品。BioDraw,BioAssay,BioViz,Inventory,E-Notebook	"	"	2008年9月	-
E-Notebook Ultra	"	"	実験・反応記録などが容易に管理・共有できる、研究機関必携のソフト。強力な検索機能で研究をパワフルにサポート	"	"	2008年9月	-

Inventory Ultra	"	"	研究機関で使用する化学薬品・試薬を調達から使用・廃棄段階まで追跡・管理が可能なソフト。監査記録やEH&Sデータ管理も可能	"	"	2008年9月	—
ChemACX Ultra	"	"	約500社の大手試薬販売会社、100万件を超えるケンブリッジソフト独自のカタログ情報データベース	"	"	2008年9月	—
The Merck Index	"	"	国際的に名声を得ている化学物質・医薬・生体物質の辞典The Merck Indexのオンライン版。物質名、CAS番号などから検索可能	"	"	2007年10月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SRS	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	米バイオウイスタム	生物データベースマネジメントシステム	サーバー: SUN、SGI、Compaq、Linux、クライアント: Webブラウザ	要問合せ	—	—
SRS WS Objects	"	"	SRSと様々なツールを統合するAPI	SGI、Compaq、SUN、Linux	要問合せ	—	—
SRS Prisma	"	"	SRSで管理されているデータベースをアップデートするモジュール	"	要問合せ	—	—
Genomatix Suite	"	独ジェノマティクス	EIDorado、Gene2Promoter、GEMS Launcher、BiblioSphereを含む制御領域解析トータルパッケージ	Internet経由またはLinux Server	要問合せ	—	—
EIDorado	"	"	ヒト、マウス、ラット、イヌ、チンパンジー等複数の生物種の転写制御領域アノテーションデータベース	"	要問合せ	—	—
Gene2Promoter	"	"	EIDoradoに対して複数のプロモータ領域を検索するEIDoradoのオプションモジュール	"	要問合せ	—	—
GEMS Launcher	"	"	制御領域の解析ツールパッケージ	"	要問合せ	—	—
BiblioSphere	"	"	文献から遺伝子-遺伝子、遺伝子-転写因子間の相関関係情報をマイニングしたデータベース	"	要問合せ	—	—
BioKnowledge Library	"	独バイオベース	タンパク質のマニュアルキュレーションデータベース	"	要問合せ	—	—
TRANSFAC	"	"	転写因子情報のマニュアルキュレーションデータベース	"	要問合せ	—	—
TRANSPATH	"	"	シグナル伝達パスウェイのマニュアルキュレーションデータベース	"	要問合せ	—	—
FGENEシリーズ	"	米ソフトベリ	遺伝子領域予測ツール	UNIX	要問合せ	—	—
BioExpress, Custom DB	"	米ジーンロジック	ヒト疾患サンプルからの遺伝子発現データベース	SUN	要問合せ	—	—
ASCENTA	"	"	BioExpressを統計解析した、遺伝子発現データベース。Bioinformaticianでなくとも簡単に利用可能	Internet経由	要問合せ	—	—
ToxExpress	"	"	Toxicogenomicsデータベース	SUN	要問合せ	—	—
InforSense KDE	"	英インフォセンス	ダイナミックでビジュアルなデータの統合と分析のプラットフォーム	Windows、Linux	要問合せ	—	—
InforSense BioSense/ InforSense BioSense Grid	"	"	遺伝子配列解析、遺伝子発現解析およびテキストマイニング等、Bioinformatics分野にフォーカスしたソフトウェアパッケージ	"	要問合せ	—	—
InforSense ChemSense	"	"	各種の構造式データベースへの問い合わせと、化学式の処理、SAR・ADME-Toxなど生物学的なデータと化合物データソースの統合にフォーカスしたパッケージ	"	要問合せ	—	—
InforSense Spotfire Connector 1.0	"	"	InforSenseのWorkflowに基づく強力なデータ統合・分析機能と、SpotfireのVisualizationを結合するためのモ	"	要問合せ	—	—
InforSense TextSense	"	"	非構造化データの代表であるテキストデータを、InforSenseの優れたAnalyticsにより解析するためのテキストマイニングモジュール	"	要問合せ	—	—

BioBook	"	英アイディービ ジネスソリュー ションズ	実験ノートスタイルの生物評価試験データ管理システム	Server : Windows XP, 2003, Sun Solaris / Client :	要問合せ	—	—
ActivityBase	"	"	HTS、マニュアルアッセイの双方に対応したクライアント サーバー型のアッセイ情報管理システム	Server : Windows, UNIX, Linux / Client : Windows XP + Office XP, 2003	要問合せ	—	—
XLfit	"	"	アッセイデータの解析を支援するMS-Excelのアドオン ソフト	Windows 2000, XP + Office 2000, XP,	要問合せ	—	—
SARView	"	"	構造式とアッセイデータをリンクして表示するレポート ツール	Windows XP + Office XP, 2003	要問合せ	—	—
AIM (Activity Base Inventory Manager)	"	"	Activity Baseとリンクするサンプル/プレート管理シ ステム	Server : Windows, UNIX, Linux / Client : Windows XP + Office XP, 2003	要問合せ	—	—
ChemXtra	"	"	化学構造式をOracleデータベースとして取り扱い、一般 的な技術でデータベース構築メンテナンスを行うことを 可能にするOracleデータカートリッジ	Windows, Sun Solaris, Red Hat Linux	要問合せ	—	—
ChemIQ	"	"	化学構造式を用いたシステムを構築する際に、 Chemical Intelligenceを提供する開発Toolkit	Windows XP	要問合せ	—	—
PredictionBase	"	"	様々な生物活性データ、物性データから薬効・薬理/ 代謝/毒性などの予測ルールを構築する予測支援シ ステム	サーバー: WindowsXP、2003/ クライアント:	要問合せ	—	—
CoRM、SIMS	"	シーティーシー・ ラボラトリーシ ステムズ	試薬管理、発注システム	エルゼビアMDL社 ISISの動作する環境 に対応	要問合せ	—	—
Target Informatics Platform (TIP)	"	米アイドジェン サータンティ	Structure-based Drug Discoveryを支援するソリュー ション	Internet経由	要問合せ	—	—
Eidogen Visualization Environment (EVE)	"	"	配列、構造、サイトおよびサイト-リガンド相互作用の類 似性の表示、比較解析システム	"	要問合せ	—	—
ARK Kinase Knowledgebase	"	"	Kinase gene familyにフォーカスした化合物データを キュレーションしたデータベース	"	要問合せ	—	—
ChIP	"	"	遺伝的アルゴリズムに基づいた新規化合物の探索シ ステム	"	要問合せ	—	—
Medchem Database/Target Inhibitor Databases	"	印ジーブイ ケー・バイオサ イエン	各種ターゲットやバクテリアなどに対する阻害化合物 情報、バイオアッセイ・生物活性情報を中心にキュレ ーションしたデータベース	Windows、Linux、 SUN	要問合せ	—	—
Drug Database	"	"	FDA承認既存薬について、代謝物を含むChemicalな情 報、Clinical情報、副作用情報およびPK/ADMET情報を 中心にキュレーションしたデータベース	"	要問合せ	—	—
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	"	要問合せ	—	—
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	"	要問合せ	—	—

Leadscope Enterprise	"	米リードスコープ	構造的特徴と読込んだ活性値や自動計算される物性・プロパティ値に対する相関をグラフィカル表示するデータマイニング・意思決定支援プログラム	サーバー: Linux/クライアント: Windows	要問合せ	—	—
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	"	要問合せ	—	—
Leadscope Known Drugs Database	"	"	詳細な薬効分類情報が付随した13,000以上の医薬品化合物を収録したデータベース	"	要問合せ	—	—
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	"	要問合せ	—	—
FDA SAR Genetox Database	"	"	QSARモデル構築ためのリソースとしてLeadscopeで利用できる高品質なGenetic Toxicityデータベース(2400以上の化合物)	"	要問合せ	—	—
Leadscope Personal	"	"	Leadscopeのパーソナル版(10万化合物の制限あり)	Windows	要問合せ	—	—
Derek for Windows	"	英ラーサ	ルールベースに基づく化合物毒性予測プログラム	"	要問合せ	—	—
Meteor	"	"	ルールベースに基づく代謝予測システム	"	要問合せ	—	—
PK-sim	"	独バイエルテクノロジーサービス	生理学モデルを用いた薬物動態/薬物動力学シミュレーション・ソフトウェア	"	要問合せ	—	—
MoBi	"	"	生理学モデル構築ツール	"	要問合せ	—	—
CORINA	"	独モレキュラーネットワークス	大規模3D-Chemical-Database構築を目的としたAutomatic 3D-Structure Generatorプログラム	Windows、Linux、SUN	要問合せ	—	—
CONVERT	"	"	入力した複数の異なるファイルフォーマットを自動認識し、ユーザー指定のファイルフォーマットに自動変換するソフトウェア	"	要問合せ	—	—
CHECK	"	"	化学構造式を標準化するソフトウェア	"	要問合せ	—	—
STERGEN	"	"	化学構造式から自動的に立体中心を識別し、立体異性体を自動生成するソフトウェア	"	要問合せ	—	—
TAUTOMER	"	"	数十万の化学構造データセットをもとに、化学構造式から予測できる互変異性体を自動生成するソフトウェア	"	要問合せ	—	—
2DCOOR	"	"	数十万の化学構造データセットをもとに2次元の化学構造式を整形し、それぞれの構造式を方向を一致させるソフトウェア	"	要問合せ	—	—
ADRIANA.Code	"	"	2次元の自己相関やRadial distribution functionなど分子に対して様々な記述子を計算するソフトウェア	"	要問合せ	—	—
ADRIANA	"	"	ADRIANA.CodeとSONNIAの両機能を持ち合わせたソフトウェア	"	要問合せ	—	—
SONNIA	"	"	ADRIANAによって計算された記述子データやモデリングを行うケモメトリックスソフトウェア	"	要問合せ	—	—
IMAGE	"	"	mol,SDファイルからイメージファイルを生成するソフト	"	要問合せ	—	—
ChemCart	"	米デルタソフト	Webブラウザをインターフェイスとした化学構造式を含む研究データ参照登録システム。フォームが自由に作成・編集できるタブ形式のフォームが利用可能	サーバ: SUN、Windows、Oracle、Tomcat、Java/クライアント: Windows、Java 構造sketcher	要問合せ	—	—

e-cognition	"	独ディフィニエンス	画像から解析対象となる目的物(イメージオブジェクト)を極めて正確に分類し、イメージオブジェクトから得られる様々な情報を数値結果としてアウトプットする、新しいイメージ解析ツール	Windows	要問合せ	—	—
SIMS	"	米バイオイメージ	イメージデータ管理システム	サーバー: SUN、Windows、Oracle / クライアント: Webブラウザ	要問合せ	—	—
Classification System	"	米ルールツウ	Semi-automaticにテキストを関連のあるカテゴリーに分類するclassificationエンジン	Windows、Linux、SUN	要問合せ	—	—
Document Router	"	"	指定したカテゴリーに新しい情報が追加された場合にお知らせするアラート機能モジュール	"	要問合せ	—	—
Entity Extractor	"	"	テキスト内の目的とするエンティティを抽出するソフト	"	要問合せ	—	—
SureGene	"	"	Classification Systemを使用し、文献を関連する遺伝子別にカテゴリー化したデータベース	Internet経由、Windows、Linux	要問合せ	—	—
SureChem	"	"	Entity extractorを使用したシステムで、テキストからChemical情報を効率的に検索するソフトウェア	"	要問合せ	—	—
SQL*Stability	"	米アブライドバイオシステム	製剤、安定性試験支援システム。プロトコル作成、スケジュール管理、LA	サーバー: WindowsNT/2000、SUN / クライアント: Windows	要問合せ	—	—
SQL*QA	"	"	治験薬GMP、GMP向け品質保証システム。ロットQA、QC、ロットアナロジー管理、LA	"	要問合せ	—	—
SQL*LIMS	"	"	ラボラトリー情報管理システム。QC、分析、LAのコアシステム	"	要問合せ	—	—
PROVANTIS	"	米インシステム	GLP対応データ管理・進捗管理ツール	Windows	要問合せ	—	—
TOX staff 21	"	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	安全性試験の統合的な支援システム。一般毒性、病理、臨床病理、生殖毒性、統計解析	サーバー: WindowsNT、SUN / クライアント:	要問合せ	—	—
ADME staff	"	"	薬物動態試験の総合的な支援システム。臨床、非臨床PK、TK試験、濃度計算、LA	"	要問合せ	—	—
PKS(Pharsight Knowledgebase Server)	"	米ファーサイト	セキュア型PK/PDデータ管理システム。データだけでなく、モデル解析結果も紐付けて管理	Windows	要問合せ	—	—
PKS Reporter	"	"	標準化もしくはカスタマイズされたレポートと文書の作成ツールで、更新、チェック/承認機能も提供。PKSにリンクし、各種データやモデル解析結果をPKSに保存	"	要問合せ	—	—
PKS Validation Suite	"	"	PKS製品の効率的なバリデーションツール	"	要問合せ	—	—
Pharsight Trial Simulator	"	"	臨床試験デザインの為のシミュレーターソフトウェア	"	要問合せ	—	—
Oracle Clinical	"	米オラクル	グローバル治験へ対応可能な臨床データ管理システム。各種データのライブラリ化により、業務の効率化やStudy SetUpの期間を大幅に短縮する	サーバー: SUN、HP、NT / クライアント: Windows	要問合せ	—	—
Remote Data Capture	"	"	Oracle ClinicalとリンクしたEDCシステム。実際のCRFと同等の画面イメージ(PDF形式)でのデータエントリーが	"	要問合せ	—	—
Oracle TMS	"	"	MedDRA、自社辞書などGCP・GPMSPにおける辞書の統合管理を可能にする	"	要問合せ	—	—
ARISg/j	"	米アリスグローバル	グローバル安全性情報管理システム。安全性情報のグローバル管理を実現、Pharmacovigilance対応のファンクションが充実	サーバー: SUN、NT/2000 / クライアント: Windows	要問合せ	—	—

SafetyMart	"	"	安全性情報のデータマイニングツール。BusinessObjectsの機能を利用して、安全性情報管理DBのデータを様々な角度から分析し、表・グラフ化が	"	要問合せ	—	—
Register	"	"	プロダクト情報管理DB。各プロダクトに関する申請時期や用法用量、添付文書情報等を各国単位で管理可能で、複数国向けにプロダクト管理が必要となる欧州では特に有効。EVMPD対応	"	要問合せ	—	—
Documentum	"	米ドキュメンタム(イーエムシー)	エンタープライズ・コンテンツ管理用プラットフォーム。申請文書管理の他、多様な業務コンテンツの共有やプロセス管理、コラボレーション環境を実現する	サーバー: SUN、HP、NT/クライアント: Windows	要問合せ	—	—
STARLIMS	"	米スターリムス	日々創出される素材や製品の多岐にわたる分析・評価技術に柔軟に対応することで、研究情報を蓄積し有効活用するための研究情報システムソリューション	Windows Xp, Oracle	要問合せ	—	—
Symyx Software【Lab Notebook】	"	米シミックステクノロジーズ	化合物の探索からプロセス、製剤・調合、分析までをサポートする電子実験ノートシステムで電子署名やGMPなどの各種規制に対応し知的財産の活用を支援	サーバ: WindowsServer2003、Oracle/クライアント: Windows2000、XP	要問合せ	—	—
Symyx Software Lab Notebook【Discovery Notebook】	"	"	データベースと過去の実験ノートを活用し新規化合物の合成実験のプランニングおよび実験記録を作成する電子実験ノート	"	要問合せ	—	—
Symyx Software Lab Notebook【Process Notebook】	"	"	プロセス検討の実験ノート作成、マルチステップ合成のシナリオ・コスト検討、製造指示書・製造記録書を作成する電子実験ノート	"	要問合せ	—	—
Symyx Software Lab Notebook【Formulation Notebook】	"	"	製剤検討の実験ノート作成、コスト検討、製造指示書・製造記録書を作成する電子実験ノート	"	要問合せ	—	—
Symyx Software【Lab Execution】	"	"	自動/半自動/手動装置の制御/モニタ/管理を行うソフトウェアでSymyxの装置だけでなく他社製の装置の制御も対応する。Library Studio, Automation Studioの2	"	要問合せ	—	—
Symyx Software【Experiment Analysis】	"	"	リアルタイムでのデータ保存と化学式や文書で検索・閲覧しレポートを作成する機能を提供。PolyView, Spectra Studio, Data Browserの3製品を展開	"	要問合せ	—	—
Symyx Software【Vault Platform】	"	"	Lab NotebookをはじめとしたSymyx Softwareの基礎となる文書管理システムで、情報の保管、検査、閲覧、アクセス管理、履歴管理機能を提供	"	要問合せ	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<ライフサイエンス製品>							
Bio-Loom	サイバネットシステム	米バイオバイト	Hansch・LeoによるLogP/CMR 推算ソフト No Missing Fragment	Windows	"	2004年4月	—
BL QSAR	"	"	QSAR式へのアクセス	Windows	"	2004年4月	—
BL Master	"	"	Hansch・Leo Biobyteデータベースへのアクセス	Windows	"	2004年4月	—
CQSAR	"	"	Hanschによる過去20年にわたるQSAR関連データベースを含む構造活性相関モジュール	Alpha/OpenVMS	"	1997年1月	—
Clustering Mainprog	"	英デジタルケミストリ	Ward法、K-Means法、J-P法など各種クラスタリングパッケージ	UNIX, PC	"	1997年1月	—
Diversity Mainprog	"	"	構造のDiversityを計算しデータセットを評価し、また特異構造を選抜する	"	"	1997年1月	—

Fingerprinting Mainprog	"	"	Dictionary をもとにFingerprintを作成	"	"	1997年1月	-
MolSmart Mainprog	"	"	二次元描画のクエリーからDaylight クエリーのSmartsを生成する	"	"	2003年4月	-
AFITT	"	米オープンアイ	電子密度マップへの構造のフィッティングとリファインメント	Unix、Linux、Windows、MacOS X	"	2006年6月	-
BROOD	"	"	バイオアイスターフラグメント探索	"	"	"	-
EON	"	"	静電ポテンシャル類似度の検証	"	"	2004年9月	-
Filter	"	"	物性、官能基による化合物のスクリーニングツール	"	"	"	-
Fred	"	"	高速ドッキングツール	"	"	"	-
Omega	"	"	システマティックな3Dコンホマー生成ツール	"	"	"	-
Quacpac	"	"	低分子、たんぱく質のpKa計算	"	"	"	-
Rocs	"	"	3D分子形状(Shape)の類似度検証ツール	"	"	"	-
Smack	"	"	DBクエリーの最適化、MDLクエリーのSmartsへの変換	"	"	"	-
SZYBKI	"	"	リガンドの気相、溶液中、たんぱく質活性部位における構造最適化	"	"	"	-
WABE	"	"	リードエボリューション及び静電ポテンシャル検証	"	"	"	-
Lexichem Toolkit	"	"	化合物名-構造式相互変換	"	"	"	-
OEChem Toolkit	"	"	ケムインフォマティクス及び3D化合物DB管理	"	"	"	-
Ogham Toolkit	"	"	構造のレンダリングツール	"	"	"	-
Omega Toolkit	"	"	コンホマー発生ツール	"	"	"	-
Shape Toolkit	"	"	3D重ね合わせによる分子形状比較	"	"	"	-
Zap Toolkit	"	"	ポアソン-ボルツマン静電ポテンシャル計算	"	"	"	-
VIDA	"	"	化合物のGUI.及び計算結果の解析	"	"	"	-
<ナノテク製品>							
Virtual NanoLab	"	デンマーク・Atomistix	ナノ電極間の電子輸送と電子状態計算により電流電圧特性を算出。孤立系・バルク系の計算も可	Windows/Linux、P Cクラスター対応	詳細問い合わせ	2004年2月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Space Finder	ダイキン工業	ダイキン工業	Webブラウザから分子モデリング、及びGaussian、MOPACへの計算起動と計算結果の可視化	Windows、LinuxPC、SGI、Compaq、SUN、HP、IBM	別途問い合わせ	2001年3月	-
ComputerChemistryFarm	"	"	Gaussian,Amber,Accelrysソフト等の計算最適化、付加分散、計算スケジューリングシステム	Windows、LinuxPC、SGI、Compaq、SUN、HP、IBM	"	2002年12月	-
DiscoveryStudio	"	米アクセルリス	ライフサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。DiscoveryStudioの各種モジュールを組み合わせることで目的にあわせた高度なシミュレーションが可能	GUI:Windows、Linux 計算:Windows、Linux	"	2002年11月	-
MaterialsStudio	"	"	マテリアルサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。MaterialsStudioの各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	GUI:Windows、計算:Windows、Linux	"	2000年9月	-
Insight II	"	"	ライフサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。Insight II 配下の各種モジュールを組み合わせることで目的にあわせた高度なシミュレーションが可能	SGI、Linux	"	-	-
Cerius2	"	"	統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。Cerius2の各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	"	"	-	-

QUANTA	"	"	蛋白質X線構造解析、フィッティングソフトウェア	"	"	—	—
Accelrys Gene	"	"	配列解析用パッケージソフトウェア。Windows上で、配列の編集、PCRプライマー解析、データベース検索、配列の確認、タンパク解析が可能	Windows	"	—	—
PDFAMS	"	インシリコサイエンス	タンパク質ホモロジーモデリングソフトウェア	RedHatLinux、IRIX	"	2003年6月	—
KeyMolnet	"	医薬分子設計研究所	生体分子・遺伝子・疾患・医薬の情報戦略プラットフォーム。文献調査に基づく信頼度の高いコンテンツを搭載し、任意の項目間の関係をネットワーク検索可能。DNA chip、プロテオーム等のデータ解析にも対応	Linuxサーバー & Windowsクライアント	"	2004年6月	—
KeyMolnet Lite	"	"	生体分子・遺伝子・疾患・医薬の情報戦略プラットフォーム。文献調査に基づく信頼度の高いコンテンツを搭載し、任意の項目間の関係をネットワーク検索可能。DNA chip、プロテオーム等のデータ解析にも対応	Windows	"	2004年6月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Chemistry 4-D Draw 8.0	デジタルデータマネジメント	米ケムインペーションソフトウェア	構造式の作図機能のほか、構造式からIUPAC名を作成、IUPAC名から構造式を作成、構造式と文書や物性のテーブルを作成して部分構造式などから検索	Windows3.1、95、98、Me、NT4.0、2000、XP、Vista、Macintosh(Classic)	2万4千円～8万8千円(一般)、1万5千円～5万2千円(アカデミック)	2002年7月	国内1,950本
Molecular Modeling Pro	"	米ノルギンモンゴメリーソフトウェア	3Dの化学構造を描図、3-D構造の最適化、半経験的量子化学計算、物性値の推算他	"	9万9千円(一般)、6万3千円(アカデミック)	2005年3月	国内数本
Sequence-4D	"	米ケムインペーションソフトウェア	公開されたソースのシーケンスからラベル付けされた線形/環形マップ作成、タンパク質コードとマップを視覚化、制限解析、読み取り枠検索実行	"	8万8千円(一般)、5万2千円(アカデミック)	2003年10月	国内10本
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Patent Chemistry Database	エルゼビア・ジャパン	米Elsevier MDL	研究者のための特許(1976年以降のWO、US、EPの3特許庁)をソースとする有機化合物(440万化合物)、有機合成反応(430万反応)並びに薬理活性と物性のデータベース。ペーパー実施例とも言われるProphetic化合物も収録。CrossFire Commanderあるいは有機化合物の最も大きなファクトデータベースの一つで、999万化合物に対する精選された1000万反応、物性、薬理活性と環境毒性データを収録	サーバー: AIX 4.3、5.1、5.2、solaris 8、9 Windows 2000、2003 Server、Windows NT4 SP6a	—	—	—
CrossFire Beilstein	"	"	有機化合物の最も大きなファクトデータベースの一つで、999万化合物に対する精選された1000万反応、物性、薬理活性と環境毒性データを収録	サーバー: AIX 4.3、5.1、5.2、solaris 8、9 Windows 2000、2003 Server、Windows NT4 SP6a	—	—	—
CrossFire Gmelin	"	"	無機化合物(合金、セラミックス、酸化物等)・有機金属化合物の物性・構造・合成法を収録。240万化合物、	"	—	—	—
MDL CrossFire Commander	"	"	上記CrossFire Beilstein、Gmelin並びにPatent Chemistry Databaseの検索用クライアントソフトウェア	クライアント: Windows 2000 Professional SP4/Windows XP	—	—	—

DiscoveryGate	"	"	化合物や反応ファクトデータベース、電子雑誌、電子参考図書など、化合物に関する総合的な情報をシームレスに得るためのインターネット上コンテンツサービス。下記すべてのデータベースが利用可能	Windows 2000/XP、MacOS X 10.4	-	-	-
Integrated Major Reference Works	"	"	COFGT(官能基変換)とCAC(不斉合成)という有機化学における参考図書を電子化し、さらにBeilsteinやMDL 反応データベースとのリンクにより有機化学の包括的な知識をDiscoveryGate上で提供	DiscoveryGateと同環境	-	-	-
xPharm	"	"	創薬に必要な不可欠な最新のライフサイエンスを、薬剤、標的因子、疾病、作用機序に分類し、第一線の研究者が概説する電子参考書。DiscoveryGate上で利	DiscoveryGateと同じ環境	-	-	-
PharmaPendium	"	"	FDAに提出された新薬承認申請(NDA)文書の全文検索を可能にするなど、薬剤の安全性情報を効率的に取得することができる。NDA文書はFDA公開分よりも古い1992年から収録	DiscoveryGateと同じ環境 Adobe Reader 7.0以上	-	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<プラットフォーム製品>	Elsevier MDL	米Elsevier MDL					
MDL Isentris	"	"	多様な研究データ・システムを統合する事を可能とする、新世代の3層構造アーキテクチャに基づく創薬研究IT基盤の総称	Windows 2003/XP, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL Isentris Client	"	"	一つのインターフェイスで簡単に化学構造式・化学反応式の検索・参照を多様な形で行うことができるMDL Isentrisの一コンポーネント。社内・社外両方のデータ	クライアント: Windows XP	-	-	-
MDL Isentris Control	"	"	Isentrisの各機能(ログイン・セッション管理、データ表示、クエリ作成、検索履歴、フォーム作成等)をMicrosoft .NETコントロール化したMDL Isentrisの一コンポーネント。これらを使用して独自クライアントを作成	"	-	-	-
MDL Draw	"	"	新世代のより高度な構造式描画に対応した化学構造式描画ツール。JavaやVBのアプリケーションへの組み込みや、XMLによる機能のコントロールが容易	"	-	-	-
MDL Core Interface	"	"	ユーザ・セッション管理、多様なデータ操作を行うことを目的とした、MDL Isentrisの一コンポーネント(中間層)。J2EEを利用して、独自機能の追加が可能。	Windows 2003, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL Cheshire	"	"	化学構造式データを操作するソフトウェア開発ツール。構造式や反応式の表記を修正したり、Enumerationや特性値計算を行う	サーバー: Windows 2003/SUN Solaris クライアント: Windows XP	-	-	-
MDL Direct	"	"	Oracle Data Cartridgeテクノロジーを用いた、SQL文による化合物構造式や反応式の登録および検索可能なオープンアーキテクチャ対応製品	Windows 2000/2003 server, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL ISIS/Host	"	"	ISIS/Baseをフロントエンドとして、サーバー上のさまざまなデータベース(2D/3D化学構造式、反応式、生物活性データなど)にアクセスする	Windows 2000 server/2003 server, SUN Solaris &	-	-	-
MDL ISIS/Base	"	"	小グループでの化合物、反応式ならびに関連データ管理を目的としたデスクトップソフト。ISIS/Hostのクライアントソフトの機能も併せ持つ	Windows 2000/XP	-	-	-
MDL ISIS/Draw	"	"	化合物構造式描画ソフト。化合物、反応式の登録ならびにプレゼンテーション資料の作成に使用	"	-	-	-

Chime/ChimePro	"	"	Netscape Navigator、Internet Explorerなどブラウザに構造式を表示するためのプラグイン。Chime Proは更にISIS/Hostの構造式検索、スペクトル表示などの機能	Windows 2000/XP、Macintosh	-	-	-
<アプリケーション製品>							
MDL Logistics	"	"	Isentris環境上に構築された試薬管理システム。MDL ACD、社内在庫試薬、独自の試薬データソースに対して高度な検索、注文ができる。化合物法規制、他の研究システム・購買システムとのインテグレーションにも対応可能	サーバー: Windows 2003 Server, Sun Solaris / Oracle: MDL Directと同環境 / クライアント:	-	-	-
MDL Notebook	"	"	Isentris環境上に構築された電子実験ノート。化学反応式を含む合成化学情報のデータベース保存・検索・管理、実験プロトコル作成・パラレル合成対応機能等がある。化合物・化学反応・文献DBコンテンツへのリンク、試薬管理・登録システムとのインテグレーションも可	"	-	-	-
MDL Registration	"	"	Isentris環境上に構築された化合物データ登録システム。化学物質、バッチデータの登録の際に必要な処理(塩・混合物の認識、化合物表記規格化、化合物データ一括登録、化合物重複チェック、ID発行)を自動化。他の研究システムインテグレーションにも対応可能	"	-	-	-
MDL PlateManager	"	"	サンプル管理・プレート管理システム。96、384および1536穴プレートのすべてのプレートフォーマットやミックスペレートにも対応、Assay Explorerとのリンクにより、アッセイ結果からチェリーピックプレートの作成が可能。HTSロボット対応	サーバー: Windows 2003 Server, Sun Solaris / Oracle: ISIS/Hostと同環境 / クライアント: Windows XP	-	-	-
MDL Assay Explorer	"	"	アッセイのプロトコル作成、データ入力・管理、結果解析を行いオラクルDB化する統合ソフト。自由度が高く、HTSからマニュアルアッセイ、探索薬物動態までサポート	サーバー: Windows 2003 Server、Windows XP Pro / Oracle: 8.1.7.4、9.2.0.1 / クライアント	-	-	-
MDL Report Manager	"	"	Assay ExplorerのアッセイデータやISISの化合物データ及び遺伝子発現データ等のオラクルDBにまたがる検索ができ、構造活性相関(SAR)レポートが作成可能。Excel、Word、HTML、及びPDFフォーマットをサポート	Windows 2000/XP	-	-	-
MDL ISIS for Excel	"	"	MS ExcelからISISリモートデータベースを参照可能にするアドイン。SDFFileをExcelに表示し、加工することも可能	Windows 2000/XP、MS Office 2000/Office XP/Office 2003	-	-	-
MDL Isentris for Excel	"	"	MS ExcelからIsentrisリモートデータベースを参照可能にするアドイン。高度なIsentrisの検索・参照機能を使用してデータを加工した後に、Excelにデータを読み込	Windows 2003/XP、MS Office 2003	-	-	-
MDL Elan	"	"	化学反応式を含む合成化学情報をデータベースで保存管理する電子ノートアプリケーション	サーバ: ISIS/Hostと同環境 / クライアント: Windows	-	-	-
MDL QSAR	"	"	構造活性相関解析ソフト。PCA、クラスターリング、回帰分析、判別分析等の解析機能を持つ。遺伝的アルゴリズムなどによるモデル自動作成機能を持ち初心者が簡単に使用できる。約400種以上の分子記述子を持つ	Windows 2000/XP	-	-	-

MDL Gacinogeticity module	"	"	FDAとMDLとの共同開発プロジェクトにより開発された発ガン性予測モデル。このモデルはFDA所有のげっ歯類発ガン性データを元に作成され、そのデータに加えてFDAの判別ロジックも合わせて提供される	"	-	-	-
<データベースコンテンツ製品>							
DiscoveryGate	"	"	化合物や反応ファクトデータベース、電子雑誌、電子参考図書など、化合物に関する総合的な情報をシームレスに得るためのインターネット上コンテンツサービス。下記すべてのデータベースが利用可能	Windows 2000/XP、MacOS X 10.4	-	-	-
Cheminform Reaction Library	"	"	FIZ Chemie社(独)の反応情報誌ChemInformの電子版で新規合成法を中心に収録。MDL Reference Library of Synthetic Methodologyの内容を加え、1946年以降の文献から140万反応以上を収録	ISIS/Host又はDiscoveryGateと同環境	-	-	-
MDL Reference Library of Synthetic Methodology	"	"	TheilheimerやCOREなど1991年以前に個々に収録された5つのデータベースを一つに統合した反応データベース。21万反応	"	-	-	-
MDL Solid-Phase Organic Reactions	"	"	コンビナトリアルケミストリーで注目の低分子固相合成反応データベース。反応に加えてポリマーやリンカーなど最適反応条件情報が得られる。31,000反応	"	-	-	-
Derwent Journal of Synthetic Methods	"	"	Derwent社のJournal of Synthetic Methods(1980年～)を収録。89,000反応	"	-	-	-
ORGSYN	"	"	Wiley&SonsのOrganic Synthesesの電子版(1921年～)。確立された反応(5,900)を収録	"	-	-	-
MDL Metabolite Database	"	"	代謝物構造式や代謝経路、スキームなどの薬物代謝情報データベース。780,000の代謝反応、48,000化合物の情報を網羅。Toxicityとリンク	"	-	-	-
MDL Toxicity Database	"	"	医薬、農薬など化学物質の毒性データベース。データソースは、RTECSIにNLMのGENETOXやCCRISが加わり、約16万化合物。創薬初期での毒性、代謝研究を支援。Metaboliteとリンク	"	-	-	-
MDL Comprehensive Medicinal Chemistry	"	"	Pergamon Press社のComprehensive Medicinal Chemistryを元に収録した医薬治験薬化合物データベース、8,800化合物	"	-	-	-
MDL Drug Data Report	"	"	Prous社の医薬開発情報誌 Drug Data Reportを元に、約173,000以上の開発医薬品情報を収録。2D/3D構造式検索可	"	-	-	-
MDL Available Chemicals Directory	"	"	600社(国内約30社)を超える試薬化合物カタログから収録される約518,000試薬に関する2D/3D構造式、サプライヤー並びに価格などの情報を持つ	"	-	-	-
MDL Screening Compounds Directory	"	"	スクリーニング用化合物サプライヤーのカタログ情報を集録。468万化合物	"	-	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

ADMEWORKS/Predictor	富士通九州システムエンジニアリング	富士通九州システムエンジニアリング	膨大な化合物の薬効、薬物動態、毒性、物性の高速予測を行い、容易に候補新薬を特定する「インテグレートド高速／仮想インシリコスクリーニング」システム。多量の化合物に対し、統合的な同時高速スクリーニングをサポートする。解析結果（予測モデル）をADMEWORKSにインポートする事で、ユーザー独自の予測モデルと標準提供予測モデルを連携し利用できる。また、ネットワークでつながる他の研究者と最新の	サーバー： Windows2000/XP/2003、クライアント： InternetExplorer6.0以降	詳細はお問合せ下さい	2003年10月	—
ADMEWORKS/Predictor用予測モデル式	〃	〃	ADMEWORKS用の標準提供モデル式。溶解性、Ames変異原性、CYP3A4阻害、発癌性、生分解性、蓄積性、PGPTランスポータ、BBB、HIA皮膚感受性モデル式を	—	詳細はお問合せ下さい	2004年4月	—
ADMEWORKS/ModelBuilder	〃	〃	化学性に基づいた化合物群の解析と予測モデルを構築するための「化学データ解析支援/予測モデル作成」システム。科学性を失わずに高度な予測性をもつ予測モデルを構築できる。500を超える化学パラメータと高度なQSAR解析機能を利用可能。ユーザーの化合物データを分類・解析し独自のADME-T予測モデル式を作成できる。また、作成したモデルをADMEWORKSへインポート可能。また、モデル式の受託サービスも請負	Windows2000/XP (スタンドアロン)	詳細はお問合せ下さい	2004年3月	—
薬物動態・毒性「ADME/Tox」のIn Silico予測受託サービス、ADMEWORKS/ModelBuilderモデル式受託サービス	〃	〃	ADMEWORKS/Predictorを利用したモデル予測受託をサービスする ADMEWORKS/ModelBuilderを利用したカスタムモデル式の構築受託をサービスする	—	詳細はお問合せ下さい	2006年12月	—
ADME Database	〃	〃	薬物の吸収、分布、代謝、排泄情報のデータベース。クロアチア・ザグレブ大学のProf.Slobodan Rendicにより収集されたヒトP450、ヒトランスポータ、薬物代謝酵素を収録。薬物の開発研究などへの有用な情報をデータベースとして、柔軟性の高い検索ツールとともに提供。今回新たに構造検索機能を追加	インターネットによるオンラインサービス (InternetExplorer5.X以降)	100万円～(企業)、50万円～(教育機関)	2005年8月	—
Protein Adviser/Crystal T.B.	〃	丸和栄養食品、富士通九州システムエンジニアリング	タンパク質の結晶作成にとって重要なタンパク質の結晶化に関する情報を、専門家の手により網羅的かつ体系的に収集したデータベース。本データベースを用いることで、過去のタンパク質結晶化条件を基に、現在ターゲットとしているタンパク質の結晶化条件の検討に大きく役立てることができ、タンパク質立体構造解析をさらにスピードアップすることができる	〃	詳細はお問合せ下さい	2003年11月	—
SPRESI	〃	独インフォケム	旧VITEC連邦VINIT研究所、ドイツZIC研究所の共同プロジェクトの成果をベースに作成された化学情報データベース。600万件の化合物データ、380万件の反応情報を含み、汎用Webブラウザで検索が可能	JavaAppletが動作可能なブラウザ (InternetExplorer、Netscapeなど)	37万5千円～(企業)、18万7千円～(教育機関)： マルチユーザライセンス、コーポレートライセ	2000年7月	—

LiqCryst 4.6	"	独LCIパブリッ シヤー	LiqCrystは現在知られている全種類のサーモトロピック液晶化合物を網羅。約8万件の文献から得られた約92,600の液晶化合物に関する情報を収集。単なる情報検索のみならず検索結果の統計分析や一部物理特性値の予測や、検索された化合物の同族列についてその相転移温度をグラフィック表示可能	Windows98/2000/X P	詳細はお問 合せ下さい	1995年6月	—
SKIN-CAD	"	バイオコム・シス テムズ	SKIN-CADは、経皮吸収モデル(皮膚透過・体内動態モデル)に基づいて開発した薬物の皮内・体内動態解析ソフトウェア。薬物の皮膚透過性や体内動態に関するパラメータをもとに、皮膚透過量や血中濃度を予測可能。また、皮膚代謝・結合の影響、血流への吸収、イオントフォレシスの効果、PK-PD相関など経皮治療システムに関わる種々の問題の解析も可能	Windows98/Me/200 0/XP	150万円～ (企業)、50 万円～(教 育機関)	2005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
Materials Explorer	富士通	富士通	Materials Explorerは、パソコンで世界初の本格的分子動力学システムWinMASPHYCの後継アプリ。有機物だけでなく金属、無機物の計算も行うことが可能。二次解析機能も充実。C/S連携でLinux並列ソルバー(ノード内2CPUまで)とも連携可	Windows2000/XP	お問合せ下 さい	—	—
SynthPath Explorer V1.0	"	"	事実反応データの構造特徴を収めた知識ベースを用いて前駆体を推定する合成経路設計支援システム	"	お問合せ下 さい	—	—
Scigress Explorer Ultra	"	"	分子力場法、分子動力学法、半経験的分子軌道法および密度汎関数法(DFT)の各種計算エンジンがパッケージされたScigress Explorerシリーズの最上位製品。QSAR/QSPR解析への応用も可能。Gaussianイン	Windows XP	お問合せ下 さい	—	—
Scigress Explorer Professional	"	"	三次元(立体)分子計算モデリングシステム。三次元分子モデルの入力/編集およびMOPAC、ZINDO、拡張MM2/MM3等の計算、反応性の予測、遷移状態探索、QSARへの応用等、幅広く使用可能	"	お問合せ下 さい	—	—
Scigress Explorer Standard	"	"	Scigress Explorer ProfessionalのProjectLeader以外のすべての機能が使用可能。MOPAC、ZINDO、拡張MM2/MM3等の計算が可能	"	お問合せ下 さい	—	—
Scigress Explorer DFT	"	"	Scigress Explorer Standardの機能に密度汎関数法(DFT)の計算エンジンがパッケージされ、高精度な計算が可能。NMRや振動スペクトルを算出可能	"	お問合せ下 さい	—	—
Scigress Explorer 配座探索	"	"	安定な分子の配座構造を自動探索するための様々な機能を装備。配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の太澤先生、後藤先生により開発)による配座異性体の最適化構造の計算が可能	"	お問合せ下 さい	—	—
Scigress Explorer Entry	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、拡張MM2およびMM3/拡張ヒュッケル計算、計算結果の視覚化(立体視)が可能。計算化学の入門ツールとして最適	"	お問合せ下 さい	—	—
Dgauss(オプション)	"	"	Scigress Explorerシリーズのオプション機能。密度汎関数法(DFT)計算による高精度な計算が可能。NMRや振動スペクトルを算出可能	"	お問合せ下 さい	—	—
CONFLEX(オプション)	"	"	Scigress Explorerシリーズのオプション機能。配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の太澤先生、後藤先生により開発)による配座異性体の最適化構造の計算が可能。拡張MMと組み合わせて使用	"	お問合せ下 さい	—	—

MOPAC 原子数拡張(オプション)	"	"	Scigress Explorerシリーズのオプション機能。半経験的分子軌道法プログラムMOPAC計算の原子数制限を1000原子に拡張	"	お問い合わせ下さい	—	—
Scigress Explorer GroupServer	"	"	各Scigress Explorerシステムの計算サーバとして、UNIXワークステーション上で拡張MM2およびMM3、MD、MOPAC、ZINDO、Dgauss等が実行可能	"	お問い合わせ下さい	—	—
DGauss Server(オプション)	"	"	Scigress Explorer GroupServerのオプション機能。計算サーバとして、UNIXワークステーション上で密度汎関数法(DFT)計算が可能	"	お問い合わせ下さい	—	—
CONFLEX Server(オプション)	"	"	Scigress Explorer GroupServerのオプション機能。計算サーバとして、UNIXワークステーション上で配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の澤先生、後藤先生により開発)計算が可能	"	お問い合わせ下さい	—	—
MOPAC 原子数拡張Server(オプション)	"	"	Scigress Explorer GroupServerのオプション機能。計算サーバとして、UNIXワークステーション上で半経験的分子軌道法プログラムMOPACによる原子数拡張計算が可能	"	お問い合わせ下さい	—	—
WinMOPAC 3.9	"	"	パソコン版分子軌道計算ソフト。MOPAC2002 V1.5とMOS-F V6を搭載。分子構築から計算の実行、結果の可視化までをシームレスに実現	Windows2000/XP	お問い合わせ下さい	—	—
WinMOPAC 3.9 Pro	"	"	高分子対応パソコン版分子軌道計算ソフト。MOPAC2002 V1.5とMOS-F V6を搭載。分子構築から計算の実行、結果の可視化までをシームレスに実現	"	お問い合わせ下さい	—	—
MOPAC2006 V1.0	"	"	巨大分子系の分子軌道を高速計算。タンパク質、核酸、高分子材料等の電子構造もスピーディに解析。同梱のMOS-F V7により、QM/MM法に基づいたタンパク質の電子スペクトル計算を実現	Fujitsu/PrimePower、SGI、HP、IBM、Linux等	お問い合わせ下さい	—	—
ACD/Spectroscopy	"	加アドバンストケミストリーデータベース	分析機器(NMR,MS,UV-IRなど)からのデータを加工し、化学構造式と関連させてデータベース化を行う。また、構造式からNMRシフトを予測することもできる。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意されている	"	お問い合わせ下さい	—	—
ACD/Physchem	"	"	化学構造式から物性値(LogD,LogP,Pka,Solubility,Boiling Point)を予測する。ChemDrawやISISとの連携モジュールや一括計算用	"	お問い合わせ下さい	—	—
ACD/Cromatography	"	"	HPLC、GCの測定条件をシミュレート、HPLC,GCのデータを加工、データベース化する	"	お問い合わせ下さい	—	—
ACD/Name	"	"	化学構造式から化学名を生成する。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意されている	"	お問い合わせ下さい	—	—
ChemDraw Ultra/Pro/Std	"	米ケンブリッジソフト	世界標準の化学構造式/反応式作画ソフトウェアで、構造式・反応式・反応機構等を簡単に作画可能。	Windows2000/XP、MacOS	お問い合わせ下さい	—	—
Chem3D Ultra	"	"	操作性に優れた分子モデリングシステムで、3次元立体構造への容易なアクセスを実現。CS MOPAC Proを	Windows2000/XP	お問い合わせ下さい	—	—
E-Notebook Ultra	"	"	合成実験ノートの記録をパソコンで簡単に管理できるソフト。部分構造、反応変換、プロジェクト名などによるデータ検索が可能	"	お問い合わせ下さい	—	—
The Merck Index	"	"	化学の百科事典「The Merck Index」の電子データ版。10,000件を超える化合物から、名称・CAS番号・構造式などをキーに素早い検索が可能	"	お問い合わせ下さい	—	—
ChemACX Ultra	"	"	海外大手試薬販売会社約330社の50万件を超える化合物のカタログ情報データベース	"	お問い合わせ下さい	—	—

ChemINDEX Ultra	"	"	一般的な化合物について、構造式、名称、分子量、CAS番号、別名、および物性データ(融点、沸点、蒸気圧など)に関する一般情報を調べるための化学参考文献データベース	"	お問合せ下さい	—	—
ChemOffice Ultra/Pro	"	"	ChemDraw Ultra、Chem3D Pro、ChemFinder Pro、化学データベースのバンドル製品	"	お問合せ下さい	—	—
ChemOffice Enterprise	"	"	Web対応の化学情報管理システム。化学構造情報や反応情報を容易にDB構築でき、ブラウザから簡単に検索することが可能。各種業務アプリのオプション	Windows2000 Server、Windows2003 Server	お問合せ下さい	—	—
ADMEWORKS/Predictor	"	富士通九州システムエンジニアリング	予測モデル式を用いて薬物動態/毒性/物性の良好な化合物を絞り込むWebシステム	サーバー: Windows2000/XP、 クライアント: Windows2000/XP InternetExplorer6.0以降	お問合せ下さい	—	—
ADMEWORKS/ModelBuilder	"	"	多変量解析及びパターン認識による化学データ解析支援システム。ADMEWORKSで使用するモデル式を利用者の化合物データを使って作成	Windows2000/XP	お問合せ下さい	—	—
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
GENETYX Ver.8	ゼネティックス	ゼネティックス	Windows版遺伝子解析ソフトウェア。マルチアライメント、分子進化系統樹作成、機能モチーフ検索核酸配列自動結合など	WindowsVista/XP/Server2003/Me/98/2000/NT4.0	お問い合わせ下さい	1996年4月	—
GENETYX-MAC(Ver.14)	"	"	Macintosh版遺伝子解析ソフトウェア。マルチアライメント、分子進化系統樹作成、機能モチーフ検索、核酸配列自動結合など	Macintosh(OS 10.4.8以上)	"	1991年12月	—
G-MAP(Ver.2)	"	"	ゲノムマップビューワーソフトウェア	Windows XP/2000	"	2004年4月	—
GENETYX-PDB(Ver.6)	"	"	プライベートデータベースソフトウェア 構築したDBに対してBLAST、FASTホモロジーサーチや高速キーワードサーチ、NCBI BLAST、Entrezサーチも可	Windows/MacOSX + JAVA2	"	2000年5月	—
ATGC(Ver.5)	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェア。大量のフラグメント配列の結合処理。波形の信頼度を考慮したコンセンサス配列の決定	WindowsVista/XP/Server2003/Me/98/2000/NT4.0 Macintosh(OS	"	1998年10月	—
G-Probe1(Ver.1)	"	"	cRNAプローブ検索ソフトウェア。遺伝子発現解析用cRNA プローブを検索	WindowsXP/Server2003/Me/98/2000/NT4.0	"	2005年9月	—
GENETYXネットワーク版	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ、MACのみ、WIN、MAC混在	"	2003年4月	—
ATGCネットワーク版	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	"	"	2003年4月	—
GENETYX-PDBネットワーク版	"	"	プライベートデータベースソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	"	"	2003年4月	—
G-MAPネットワーク版	"	"	ゲノムマップビューワーソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WINのみ	"	2003年4月	—
GENETYX-SV/R	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのクライアント/サーバー版	サーバー: UNIX/Linux、クライアント: Macintosh/Windows	"	1994年3月	—

GENETYX-SV/DB	"	"	核酸配列／蛋白質データベース検索ソフトウェアのクライアント／サーバー版	"	"	1994年2月	—
ATGC-SV	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェアのクライアント／サーバー版	"	"	1999年3月	—
GENETYX-SQ/EX	"	"	ゲノム核酸配列自動結合ソフトウェア。大量のフラグメント配列の結合処理。波形の信頼度を考慮したコンセンサス配列の決定	UNIX	"	1991年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
DNASIS Pro	宝酒造、日立計測器サービス、DNAチップ研究所、ステラ	日立ソフトウェアエンジニアリング	パソコンの初心者でもすぐに使える分かり易いインターフェイスと、データベース検索機能や制限酵素サイト探索機能などの豊富な機能を兼ね備え、20年間多くのユーザーに親しまれ、世界中で1万本以上の販売実績を持つ。SNP解析支援機能等の新たな解析機能を追加。以下、各種オプション有。(1)ホモロジー検索(2)マルチプルアラインメント(3)DNASpace(4)Phred/Phrap	Windows	30万円～	2001年11月	—
DNASIS ReportPad	"	"	研究者が日常的に扱う情報の整理・管理・解析をサポートするツール。研究目的に合わせてさまざまな解析機能を手軽に利用できる。ウェブ上で提供されている解析サービスやフリーソフトなどの解析機能を取り込んで、自分用の解析シナリオを作成することが可能。目的に合わせた解析手順をワークフロー化し、研究者	"	45万円	2006年12月	—
SPBIO	DNAチップ研究所	"	バイオチップ作成装置	WindowsNT	1200万円	1999年8月	—
CRBIO II e	"	"	バイオチップ読取装置	Windows2000	800万円	2002年4月	—
CHBIO+	"	"	バイオチップハイブリダイゼーション反応用恒温槽	Windows98	70万円	2000年1月	—
HyperGeneシリーズ	"	"	汎用DNAチップ。Human, Human HouseKeeping Gene, Rat -Liver-, Yeast chip有	—	—	2002年3月	—
AceGeneシリーズ	"	"	汎用オリゴDNAチップ。Human, Mouseの全遺伝子それぞれ約30,000個を1枚のスライドガラスのスポット	—	62,790円/1枚(税込標準価格)	2002年12月	—
DNASIS Array	"	"	DNAチップ画像解析ソフトウェア	Windows	80万円	2001年12月	—
FMBIO III	日立ソフトウェアエンジニアリング	"	蛍光バイオイメージアナライザー。蛍光物質で標識されたDNAやたん白質を直接読み取り、解析を行うシステム	Windows2000/XP	—	2002年3月	—
Luminexシステム	"	ルミネックス	蛍光マイクロビーズアレイシステム。それぞれ異なる色に着色された100種類のポリスチレン製微粒子を使用し、1本のマイクロチューブ内で最大100件の解析を同時に行うシステム。Luminex 100, Luminex XYP, Luminex	Windows98/2000/XP	980万円	2000年10月	—
Multiplex Antibody Kits	"	バイオソース	Luminex用サイトカインアッセイキット。ヒト、マウス各種	—	—	2001年9月	—
MasterPlex QT	"	ミライバイオ	Luminex専用定量解析ソフトウェア	Windows98/Me、NT/2000/XP	—	2002年3月	—
SEQUENCHER	"	米ジーンコード	DNAシーケンスアセンブルソフトウェアでデファクトスタンダードとなっている。各社のDNAオートシーケンスに対応	Macintosh、Windows	68万円(Mac版)、88万円(Win版)	1995年9月	—
BioPackage	"	米モルソフト	たん白質立体構造シミュレーションソフト。高精度なドッキングシミュレーション、たん白質立体構造予測機能を搭載している	WindowsNT/2000/XP、MacOS10.2以降、RedHat9.0、IRIX6.5.x	お問い合わせください	2007年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

ATOMS	ヒューリンクス	米シェイプソフト	分子、高分子、結晶を含むあらゆるタイプの原子構造を3Dで描画する	Windows、Macintosh、Linux	要問合せ	—	—
AssayZap	''	英バイオソフト	AssayZap は、RIA、ELISA、IRMA、比色分析やその他の評価分析に利用できる汎用分析アナライザです	Windows	''	—	—
CalcuSyn	''	米バイオソフト	治療薬の組み合わせや投薬量など投薬治療にとって非常に重要な解析を行う	Windows	''	—	—
Canoco	''	米マイクロコンピュータパワー	生態学の分野でもっともポピュラーな多変量解析ツール CANOCO (Software for Canonical Community Ordination: 正規群集序列化ソフト)	Windows	''	—	—
ChemBrain	''	瑞エキスパートソフト	三次元分子構造を扱うことが可能な化学データベース	Windows	''	—	—
Chemical WorkBench	''	露キンテック	GUIベースの化学プロセスシミュレータ。燃焼波および爆発波、安全解析、CVD (化学気相成長法) や不均一系 (heterogeneous) 又は触媒による反応やプロセスに適用可能	Windows	''	—	—
CrystalMaker	''	英クリスタルメーカー	写真並みのカラー画像で結晶構造を生成、表示、操作可能な結晶構造解析ソフト。マルチウィンドウ・マルチアンドゥ対応。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。Intel/MacOS、Vista	Windows、MacOSX	''	—	—
Crystal KitX	''	米トータルレゾリューション	粒子間の結合関係や接触面、軸等を設定すれば、非常に短時間であらゆる結晶体の構造を作成できるソフト	MacOSX	''	—	—
Crystal Studio	''	米クリスタルソフト	高機能、多機能な結晶構造解析ソフト。強力なデータベース機能を搭載し、Professional版は3500種、Enterprise版は6000種の結晶構造データを持つ。	Windows	''	—	—
Chem3D Ultra	''	米ケンブリッジソフト	ChemDrawとの連携に優れた3D分子モデリングソフト。GAMESS、Gaussian、CS Mopac、Jaguar用インターフェイス搭載	Windows	''	—	—
ChemDraw Ultra/Pro/Std	''	''	化学構造式描画ソフト。構造式の描画以外にも研究者が必要とする、NMR スペクトルの予測、複数のドキュメントの作成、立体化学式表示、Name=Struct機能、ポリマー描画などの機能が搭載されている	Windows、MacOSX	''	—	—
E-Notebook Ultra	''	''	電子実験ノート。画像データやMS Excel、MS Word等のファイルをまとめて管理でき、化学構造式による過去のノートへの検索が可能	Windows	''	—	—
ChemOffice Ultra/Pro	''	''	化学者のニーズを満たすChemDraw、Chem3D、E-Notebookを統合した製品。描画した構造式の3D変換やDBの作成、Webへの発行を行える	Windows	''	—	—
ChemOffice Enterprise	''	''	化学構造式を含むデータベースを構築するためのアプリケーション。クライアントは、webブラウザから、ChemDrawのプラグインにより、部分構造検索等の検索が行える他、Additional Serverにより、webブラウザからデータベースの管理も可能に	Windows	''	—	—
Cumulus	''	独カント	豊富な機能を備えたマルチメディアデータベースソリューション。画像データ、レイアウトデータ、ビデオ、音声データ、テキスト文書、CAD 図面といった様々な「デジタルアセット(デジタル資産)」をアーカイブ、検索、共有することが可能	Windows、MacOSX、Linux、Unix	''	—	—

DESIGN-EXPERT for Windows	"	米スタットイーズ	Windows対応のパワフルで使いやすい実験計画法(DOE)プログラム。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	"	-	-
DIAMOND	"	独クリスタルインパクト	結晶構造データに関する日常的な作業、主に結晶構造データの可視化機能を多数搭載。大量のデータ処理、分子の生成から複雑な無機構造フレームワーク構築にわたる幅広い機能を備えるDIAMONDは、界面および材料科学者だけでなく、分子・固体科学者にも最適	Windows	"	-	-
ENDEAVOUR	"	"	結晶構造を粉末回折データから解析するプログラム。DIAMONDの可視化技術をベースとしており、解析過程において完全乱配置の原子から最終モデルへと結晶構造が発展していく様子を確認可	Windows	"	-	-
FlexPro7 日本語版	"	独ヴァイサン	大規模データ解析・ビジュアライズソフト。計測機器で測定した大規模データを解析し、データ収集からプレゼンまでを一連の流れとしてこなす	Windows	"	-	-
Gaussian 03 & 03W & 03M	"	米ガウシアン	汎用量子化学計算プログラムGaussianの最新バージョン	Windows、UNIX、Linux、MacOSX	"	-	-
GaussView	"	"	Gaussian 用グラフィカルユーザーインターフェイス	Windows、UNIX、Linux、MacOSX	"	-	-
Gene Construction Kit 2.5	"	米テキストコ	複雑なクローニング プロジェクトを立案し、遂行するソフトウェア	Windows、Macintosh	"	-	-
Gene Inspector	"	"	研究者用電子ノートブック、配列解析パッケージおよびイラストレーション ツールを兼ね備えるソフトウェア	Windows、MacOSX	"	-	-
HyperChem	"	加ハイパーキューブ	多くの計算手法をサポートする統合型分子設計支援システム	Windows、MacOSX	"	-	-
Homology Modeling Professional for HyperChem	"	分子機能研究所	HyperChemをコアとしたホモロジーモデリングパッケージ	Windows	"	-	-
Docking Study with HyperChem	"	"	HyperChemをコアとしたドッキングシミュレーションパッケージ	Windows	"	-	-
IGOR Pro 日本語版	"	米ウエーブメトリックス	高速にインタラクティブに大量データを解析し、視覚化、ドキュメント化する究極の解析ツール。分光機器や電子顕微鏡などとの連携も可能	Windows、MacOSX	"	-	-
KaleidaGraph 日本語版	"	米シナジー	シンプルなグラフの作成から回帰曲線やエラーバーを適用するような複雑なグラフの作成まで、非常に簡単な操作で実行できるグラフ作成ソフト	Windows、Macintosh	"	-	-
KELL	"	英バイオソフト	加重非直線回帰、反復回帰を用い飽和、拮抗の平衡を解析あるいは、結合や非結合の定数率を決定する放射線配位子の結合解析パッケージ	Windows	"	-	-
Khimera	"	露キンテック	Gaussian、ADF、Jaguar、GAMESSなどの量子化学計算プログラムの計算結果から反応速度を予測	HP-Unix、Linux	"	-	-
Mac TempasX	"	米トータルレゾリューション	マルチスライス計算、回折パターン、任意の方向に対するセルユニットの自動計算他の機能を搭載するTEMイメージシミュレーションソフト	MacOSX	"	-	-
MolFeat	"	フィアラックス	分子構造3次元イメージ編集ソフト。蛋白質などの高分子の立体構造をMS PowerPointのスライドショー上で操作可能。電子密度データの読み込み、原子間距離、二面角の計測等、豊富な機能を搭載	Windows、MacOSX	"	-	-

Mathematica 日本語版	"	米ウルフラムリサーチ	あらゆる分野で使用できる汎用の数学処理ソフトウェア。電気、機械、化学、金融・証券等のパッケージあり	Windows、MacOSX、UNIX、Linux	"	—	—
webMathematica	"	"	webサイト上で科学技術計算ができるソフト。1年間のサイトライセンス契約型製品	"	"	—	—
gridMathematica	"	"	マルチCPUやクラスター環境でMathematicaの並列処理を実現	"	"	—	—
Molpro	"	英カーディフ大学	電子構造計算のための完成された ab initio プログラム。multiconfiguration-reference CI や、結合クラスター法をサポート	Unix、Linux	"	—	—
NeuroSim	"	英パイオソフト	神経生理学の分野の研究に非常に有益な洞察を提供できるシミュレーションソフト	Windows	"	—	—
Peak Fit	"	米シスタット	分光器やクロマトグラフィーの重なったピークを簡単なクリック操作で複数のガウス関数に分離するソフト	Windows	"	—	—
PiSystems	"	瑞エキスパートソフト	有機分子の色や電子スペクトルの計算に特化したユーザフレンドリーな量子化学計算プログラム	Windows	"	—	—
Q-Chem	"	米キューケム	低分子から大規模分子系まで適用可能な非経験的電子構造計算プログラム。先進的なアルゴリズムを採用し、高精度、高速な演算が可能	UNIX、Linux、MacOSX、Windows	"	—	—
QuantiScan	"	英パイオソフト	電気泳動ゲルをスキャナーで読み込み、解析。その他、TCLプレート解析、オートラジオグラム解析も可	Windows	"	—	—
SHAPE	"	米シェイプソフト	結晶の表面組織や結晶断面を描画する。多くの単結晶、双晶を描画できる	Windows、Macintosh、Linux	"	—	—
SigmaPlot	"	米シスタット	生化学者向け機能が豊富なカーブフィッティング&グラフ作成ソフト	Windows	"	—	—
SigmaPlot Enzyme Kinetics Module	"	"	酵素反応の阻害形式を素早く決定、詳しくレポートする回帰分析、グラフ作成用の SigmaPlot 専用マクロパック	"	"	—	—
SigmaScan Pro	"	"	特殊な認識機能を用いて、デジタル画像を高速かつ正確に測定、解析する	"	"	—	—
SigmaStat	"	"	データの取扱いから実行すべきテストの推奨、仮説検証、適切なテストの実行と結果の解釈まで	"	"	—	—
Spartan	"	米ウェイブファンクション	シンプルな操作画面から分子を構築し、MM、Ab Initio、Semi-Empirical、DFT などの各種ソルバーによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能な分子モデリングパッケージソフトウェア	Windows、Mac OSX	"	—	—
TableCurve 2D	"	米シスタット	1つの製品でパワフルな計算機能と回帰分析機能を合せ持つソフト	Windows	"	—	—
TableCurve 3D	"	"	パワフルな計算機能と回帰分析機能を合せ持つソフト。3Dのグラフィカルなプロットの作成が可能	"	"	—	—
UnGraph	"	英パイオソフト	スキャナーで読み込んだグラフを解析し、XY座標のデータを任意の精度で認識する	"	"	—	—
UNISTAT	"	米ユニスタット	ノンパラ検定、回帰、分散、クラスター判別、因子分析、時系列、QC、生存分析、フーリエ解析など様々な解析を備えた統計解析ソフト	"	"	—	—
VIBRATZ	"	米シェイプソフト	原子価力定数や Urey-Bradley 力場定数を利用して、分子や結晶の基準座標計算をする	Windows、Macintosh、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

GREEN	医薬分子設計 研究所	医薬分子設計 研究所	対話的ドッキングシステム。結合部位環境のグラフィックス表示、リアルタイムの相互作用エネルギー計算、リガンド構造モデリングなどの機能を搭載。ADAM、LEGEND等の作業プラットフォームとしても有用	SGI	お問い合わせください	1995年4月	非公開
LEGEND	"	"	de novoリガンド設計プログラム。蛋白質結合部位に適合するドラッグライクナリガンド分子を自動生成。構造展開のヒントを得る目的にも最適	SGI、Linux	"	1995年4月	"
MOLEDIT	"	"	分子モデリングプログラム	SGI	"	1995年4月	"
Key3D	"	"	化学構造式からの三次元構造生成プログラム。MMFF力場に基づく高精度な構造生成と高い変換率が特徴。MO計算へのインターフェース機能も搭載。ライブラリデータの連続処理も可能	SGI、Linux Windows	"	1999年12月	"
KeyMolnet	"	"	生体分子・遺伝子・疾患・医薬に関する情報を分子ネットワークを軸に統合した生物情報プラットフォーム。文献調査に基づく高信頼のコンテンツを搭載し、任意の項目間の関係をネットワーク検索可能。DNA chip、プロテオーム等のデータ解析や、ユーザー独自データを利用	Linux(サーバー)、 Windows(クライアント)	"	2003年4月	"
KeyRecep	"	"	分子重ね合わせ法に基づくHTSヒット化合物の解析システム。分子形状・水素結合性・疎水性等に基づく高精度な分子重ね合わせが可能。化合物分類・構造活性相関解析・データベース検索などの機能も搭載	SGI、Linux	"	2005年4月	"
Bluto	"	"	蛋白質-リガンド複合体の連続最適化とエネルギー解析。ドッキングスタディ、バーチャルスクリーニング等での結合性スコア解析に最適	"	"	2005年4月	"
ADAM	"	"	高精度な自動フレキシブルドッキング法。ローカルなinduced-fitのある系にも適用可能。正解を逃しにくいアルゴリズムと、バーチャルスクリーニングへの応用における豊富な成功実績が特長	"	"	2005年4月	"
EUREKA	"	"	データベースに対する類似構造検索と自動ドッキングを同時に実施できるソフトウェア。戦略に応じて多様な利用法が可能	"	"	2005年4月	"
KeyProx	"	"	蛋白ホモロジーモデリングプログラム。側鎖構造探索、主鎖ループ構造探索も可能	"	"	2005年4月	"
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Glide	インフォコム	米シュレーディンガー	レセプターに対するリガンドのフレキシブルサイトドッキング計算プログラム	PC-Linux、SGI、 IBM、WindowsXP	お問い合わせ下さい	2001年	—
XP Visualizer	"	"	Glideモジュール(オプション):XP Glide Scoreを構成する各項に強く関与するリガンド/レセプター間相互作用をハイライトして表示	"	"	2007年	—
CombiGlide	"	"	コンビナトリアルライブラリ自動ドッキングプログラム	PC-Linux	"	2005年	—
Prime	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム。強力なリファインメント機能によりループ構造や側鎖の配座を高精度予測。Glideとの利用でInducedFit解析が可能	PC-Linux、SGI	"	2003年	—
MacroModel	"	"	Prof. Stillらにより開発された分子力学系分子設計支援システム。低分子から生体高分子までの対応が可能な各種力場パラメータ、配座解析アルゴリズムを搭載	PC-Linux、SGI、 IBM、WindowsXP	"	1999年	—
JAGUAR	"	"	Pseudospectralアルゴリズムによる高精度かつ高速な計算を実現した新世代ab-initio量子化学計算プログラ	"	"	1996年	—

JAGUAR pKa Predictor	"	"	JAGUARモジュール(オプション): Ab-initio法によるpKa予測プログラム	"	"	1999年	—
MINTA	"	"	MacroModelモジュール(オプション)。高速かつ高精度に自由エネルギーを算出	"	"	1999年	—
LigPrep	"	"	2次元分子構造からの3次元構造自動発生プログラム。構造最適化計算の他、イオン化モデル、鏡像、トートマー自動発生機能も搭載	PC-Linux、SGI、IBM、WindowsXP	"	2003年	—
Epik	"	"	pKa予測/イオン化モデル・互変異性体自動発生プログラム	"	"	2005年	—
Impact	"	"	生体高分子(タンパク、核酸等)向け分子力学、動力学プログラム	PC-Linux、SGI、IBM	"	2001年	—
Liaison	"	"	Linear Response法によるBinding自由エネルギー計算プログラム	"	"	2001年	—
Qsite	"	"	JAGUARとOPLS-AA力場によるQM/MMプログラム	"	"	2001年	—
Phase	"	"	Pharmacophore/3D-QSAR解析プログラム	PC-Linux、SGI	"	2005年	—
Strike	"	"	統計解析/化合物類似性評価プログラム	PC-Linux、SGI、WindowsXP	"	2005年	—
QikProp	"	"	3次元構造を利用した薬物物性予測ソフトウェア。LogP o/w, Caco-2 Cell permeability, Blood-Brain barrier permeability, 溶解度などを予測	PC-Linux、SGI、IBM、WindowsXP	"	2000年	—
SiteMap	"	"	蛋白質活性部位予測プログラム	PC-Linux、SGI	"	2006年	—
PrimeX	"	"	蛋白質X線結晶構造精密化プログラム	PC-Linux	"	2007年	—
MCPRO+	"	"	生体分子向けモンテカルロシミュレーションプログラム	PC-Linux	"	2007年	—
J-STRIKE	"	インフォコム	Webベース化合物データ管理システム	お問い合わせください	"	2007年	—
ADME Boxes	"	カナダ・ファーマアルゴリズム	2次元構造を利用した薬物物性予測 (Solubility, Ionization, Stability, Passive absorption, First-pass metabolism, P-gp efflux) から Human Bioavailability を予測。各物性データベース機能も装備。予測結果の他、入力構造に類似した化合物のリファレンスも併せて	WindowsNT/2000、XP	"	2003年5月	—
ADME Boxes WEB	"	"	ADME BoxesのWEBブラウザ版	お問い合わせください	"	2005年	—
Tox Boxes	"	"	2次元構造からの毒性予測 (AMES, AcuteTox, Health Effect) および AMES データベース機能を持つパッケージプログラム	WindowsNT/2000、XP	"	2005年	—
Tox Boxes WEB	"	"	Tox BoxesのWEBブラウザ版	お問い合わせください	"	2005年	—
DMSO Solubility	"	"	DMSO溶解度予測プログラム	WindowsNT/2000	"	2003年5月	—
QSAR Builder	"	"	物性や活性の解析に化合物の構成を説明する各種フラグメンテーションを利用することが可能。統計モデルには、定量的及び定性的手法を組み合わせることにより予測精度を高めることが可能	"	"	2003年5月	—
Algorithm Builder	"	"	定量的構造活性相関(QSAR)、定量的構造物性相関(QSPR)及び構造活性相関(SAR)のモデルを構築し、これら手法をユーザ独自の予測アルゴリズムに変換させるソフトウェアシステム	"	"	2003年5月	—
Algorithm Launching Pack	"	"	AlgorithmBuilderで作成した予測モデル式をWEBブラウザから利用することが可能	Windows2000他	"	2003年	—
SKIN-CAD	"	バイオコム・システムズ	経皮治療システム開発用薬物動態ソフトウェア	Windows98、Me、NT、2000、XP	"	2000年	—

Debra 5	"	英ラボロジック	FDA 21 CFR Part 11に準拠したADME試験用情報管理システム	お問合せください	"	2003年	—
Pallas Combi	"	ハンガリー・コンピュータドラッグ	2次元構造から pKalc、PrologP、PrologDを予測するプログラム	Windows98、NT、2000	"	1999年	—
Pallas EluEx	"	"	C18逆相カラムを使用する研究者に最適な測定条件を予測。2回の測定結果の入力により、溶媒混合比に対するRs値の変化プロットを表示	"	"	"	—
Pallas Hazard Expert	"	"	発癌性、変異原性、催奇形成、膜刺激性、神経毒性といった化合物の異なる毒性の影響予測を行う	"	"	"	—
Pallas Metabol Expert	"	"	哺乳類および植物内での反応ルールに基づくDB搭載。哺乳類や植物の代謝物の構造を予測	"	"	"	—
Pallas plug-in for ISIS	"	"	ISIS/BaseからPallas Combi(pKa/logP/logD)の計算を行う、ISIS/BaseへのAdd-Inソフトウェア	"	"	2000年	—
EMIL for Windows	"	"	医・農薬品の膨大な構造を元にリード化合物から効果的にアナログ構造を発生させるライブラリーデザイン	"	"	2000年	—
Metabolism & Transport Drug Interaction Database	"	米ワシントン大学	ヒトでの薬物相互作用に関する論文情報(1966年以降)をFDAガイダンスに添って精査されたデータベース	Webブラウザ利用	"	2004年	—
AntiBase	"	米ワイリー	微生物・酵母・かび等から抽出された天然化合物データベース	Windows2000、XP	"	—	—
MODDE	"	スウェーデン・ユーメトリックス	実験のデザインと最適化を行う実験科学者向けのソフト。多変量解析手法のMLRおよびPLS法を用いて実験条件と結果の最適化を行う。混合物の配合条件とプロセスの条件を同時に最適化	"	"	1998年	—
SIMCA-P	"	"	科学者・技術者のためのデータマイニングツール。多変量解析手法は主成分分析およびPLS法が利用可能。多変量解析を利用したプロセス診断も可能	"	"	1998年	—
Chenomx NMR Suite	"	カナダ・ケノミックス	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	"	"	2006年	—
PEAKS	"	カナダ・バイオインフォマティクスソリューションズ	Massスペクトルデータからタンパク質、アミノ酸配列、翻訳後修飾を予測する、de novoシーケンシング/データベースサーチソフトウェア	"	"	2003年5月	—
PEAKS Online	"	"	PEAKSをWebサーバー&クライアントで利用が可能	お問合せください	"	2006年	—
PatternHunter	"	"	高速・高感度のホモロジーサーチソフトウェア。独自のアルゴリズムを使用し、高速・高感度な相同姓領域検索を実現	Windows2000、XP、UNIX全機種(詳細はお問合せ下さい。)	"	2003年5月	—
BioNumerics	"	ベルギー・アブライダマス	系統分類・解析・データベース化ソフト:電気泳動、RFLP画像、ガスクロ、HPLC、分光光度計曲線等の波形データ、塩基/アミノ酸配列データ、マトリックスデータ、酵素/代謝反応実験のプロファイリングなど、各種実験データ入力。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの各種統計手法。RDB対応	Windows2000以降	"	2000年	—
GeneMathsXT	"	"	遺伝子発現データ(DNAチップ・マイクロアレイ)解析システム。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの豊富な各種統計手法。RDB対応	"	"	"	—
OmniViz	"	米オムニピズ(バイオウエイズダム)	可視化によるデータマイニング、テキストマイニング、統合型意思決定支援システム	Windows 2000、XP、PC-Linux	"	2003年5月	—

PathwayStudio (旧PathwayAssist)	"	米アリアドネジェ ノミックス	PubMed等科学文献情報から相互作用情報を自然言語処理にて抽出したデータベースを搭載したパスウェイ解析ツール。クライアント-サーバー型もあり	Windows2000、XP、 Vista	"	2003年2月	—
MetaCore	"	米ジーンゴー	マニュアルキュレートで文献から得られた分子間相互作用情報を収録したパスウェイ解析ツール	Webブラウザ利用も しくは、サーバー利 用(Linux)	"	2005年	—
MetaDrug	"	"	薬物候補化合物から代謝構造予測を経てパスウェイ解析を行う統合型トキシコゲノミクスプラットフォーム	Webブラウザ利用も しくは、サーバー利 用(Linux)	"	2005年	—
MetaCore/MetaDrug Discovery Platform	"	"	MetaCoreとMetaDrugを統合したパスウェイ/薬剤代謝予測ツール	Webブラウザ利用も しくは、サーバー利 用(Linux)	"	2007年	—
CLC DNA workbench	"	デンマーク・シー エルシーバイオ	DNA配列解析ソフト。プライマーデザイン、配列データのコンティング、アセンブルも可能	Windows2000、XP、 Vista、MacOS X、 Linux	"	39083	—
CLC RNA workbench	"	"	RNA配列解析ソフト。2次構造予測、および自由エネルギーの計算も可能	Windows2000、XP、 Vista、MacOS X、 Linux	"	39083	—
CLC Protein workbench	"	"	タンパク質配列解析ソフト。2次構造/膜貫通領域/シグナル配列の予測、PDBファイルの読み込みも可能	Windows2000、XP、 Vista、MacOS X、 Linux	"	39083	—
CLC Combined workbench	"	"	全workbenchの機能を搭載したソフトウェア	Windows2000、XP、 Vista、MacOS X、 Linux	"	39083	—
CLCbio Bioinformatics Cell & Cube	"	"	高速配列解析用システム。BLAST、Smith Watermanに対応。PCにUSB接続することで利用可能	Windows2000、XP、 Vista、MacOS X、 Linux	"	39083	—
CLC Free workbench	"	"	無償配列解析ソフト。系統樹解析、制限酵素部位部位検索など基本的な配列解析が可能	Windows2000、XP、 Vista、MacOS X、 Linux	フリーウェア	39083	—
Auto Net Finder	"	インフォコム	多変量解析手法Graphical Gaussian Modelingと階層的クラスタリングとを組み合わせた新しい関連ネットワーク推定システム。PCアルゴリズムによる遺伝子間のネットワーク推定も可能	Windows 2000、XP、 Linux	お問い合わせ 下さい	2005年	—
MicrobiotaProfiler	"	"	T-RFLPデータ編集・解析ソフト。細菌叢に含まれる候補微生物を同定	Windows2000、XP	"	2006年	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CSD	化学情報協会	英Cambridge Crystallographic Data Centre(CCDC)	ケンブリッジ結晶構造データベース:X線・中性子線で解析した有機化合物・有機金属化合物の結晶構造データベース(400,000件)。分子間相互作用のデータベースも充実	Windows PC, Linux, UNIX	お問い合わせ 下さい	—	—
GOLD	"	英CCDC, Sheffield大学, GlaxoSmithKline 社	遺伝的アルゴリズムに基づいたタンパク質とリガンドとのドッキングプログラム。コンフォメーションの情報はCSDのデータを活用	"	"	—	—
DASH	"	英CCDC, 英 CCLRC, Prof.B.David	粉末回折パターンからの結晶構造解析ソフト。初期構造決定から構造精密化までの一連の機能を持つ、未知構造解析用の統合パッケージ	Windows PC	"	—	—

Relibase+	"	英CCDC, Prof.G.Klebe	Protein Data Bank(PDB)の結晶構造を検索できるWebベースのRelibaseの改良版。蛋白質-リガンド間、及び蛋白質-蛋白質相互作用の検索可能。さらに類似リガンドの検索も可能	サーバ(Linux, UNIX), クライアント(Windows PC, Linux, UNIX)	"	—	—
ICSD	"	独FIZ Karlsruhe, 米 NIST	無機化合物(セラミックス, 金属間化合物など)の結晶構造データベース(97,000件)。検索した結晶構造から粉末パターンの計算可能。リートベルト解析の初期構造としての利用に有効	Windows PC, Linux, UNIX	"	—	—
CRYSTMET	"	加Toth Information Systems, Inc.	金属(合金, 金属間化合物など)結晶構造データベース(109,000件)。含有元素, 組成式, 粉末パターンより検索が可能	Windows PC	"	—	—
NQRS	"	核四極共鳴スペクトル委員会, 化学情報協会	固体の核四極共鳴スペクトル周波数のデータベース(13,000件)。超伝導に関するデータも収録	"	"	—	—
NIST05	"	米NIST, 米EPA, 米NIH	イオン化質量スペクトルデータベース(163,000化合物, 190,000スペクトル)。化合物名, 分子式のほかスペクトルデータからも検索が可能	"	"	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ALICE2 for Windows	日本電子、日本電子データム	日本電子データム	NMRデータ処理(1,2次元対応)プログラム。自動処理機能が充実し、簡単にNMRチャートを得ることができる。処理結果を他のアプリケーションの引渡し、レポート作成や統計解析が容易。新たにJ couple、2D correlation等の解析機能が追加された	"	詳細はお問い合わせ下さい	1994年	—
ALICE2 for Metabolome	"	"	ALICE2 for Windowsを基礎としてこれに全自動メタボローム解析機能を特化し新規開発した。多検体FIDをバッチで読み込み、スペクトル処理、バケット積分を行い、多変量解析(PCA, SIMCA)を1つのインターフェイスで行う。混合物サンプルのグループ分けや経時変化な	"	"	2005年10月	—
KnowItAll NMR(ノウ・イット・オールエヌエムアール)アナリティカルシステム	日本電子データム	米パイオ・ラッド ラボラトリーズ	サドラーの保有するNMRスペクトルデータ13Cを394,000件, 1Hを31,000件を検索することができるデータベースは年間契約。ユーザーデータベース構築機能もオプションでつけられる	"	初期価格 176万円(1年ライセンス付 次年度DB88万円)	2001年	—
CACheワークシステム	"	富士通	三次元(立体)分子計算モデリングシステム。三次元分子モデルの入力/編集およびMOPAC、ZINDO、拡張MM2およびMM3等の計算ができ、反応性の予測、遷移状態探索、QSARへの応用等幅広く使用できる	PowerMacシリーズ、 Windows2000/XP	210万円	1993年4月	—
パーソナルCAChe	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、拡張MM2およびMM3/拡張ヒュッケル計算、計算結果の視覚化(立体視)ができる。計算化学の入門編	"	70万円	1993年4月	—
Quantum CAChe	"	"	CACheワークシステムのProjectLeader以外のすべてのソフトウェアが使用可能。MOPAC、ZINDO、拡張MM2/MM3等の計算ができる	"	140万円	1993年4月	—
CAChe CONFLEX	"	"	配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の太澤先生、後藤先生により開発)、拡張MMと組み合わせて使用(オプション)	"	50万円	1999年	—

CAChe Project Leader	"	"	計算値と実験値等とのキャリブレーションをCACheシステム上で自動化できる。QSAR、QSPRの解析に最適。スプレッドシート形式で入力操作も簡単に行える。複数分子の自動連続計算の可能	"	CACheワークシステムを含む	1994年	—
ACD 1D/2D-NMR	"	加アドバンスドケミストリデベロップメント	NMRのデータを加工し、ケミカルシフトの予測をする。化学構造式と関連させてデータベース化を行い、構造式からNMRシフトを予測できるプログラム。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意されている。Aldrich NMR スペクトルデータ13C、1H各々15,000件(年間ライセンス)。2D-NMRスペクトルの処理、スペクトルの	Windows2000/XP	80万円～	2003年	—
ACD MASS	"	"	MASSスペクトルの読み込み、構造フラグメントに対するピーク分析等の解析	"	80万円～	2003年	—
GRAMS32/V6	"	米ギャラクティック	主に、IR、UV、RAMANなどのスペクトルデータを対象とし、豊富なパラメータを持って、波形分離を特長とする各種スペクトル処理が出来ます。主要メーカーのスペクトルおよびテキスト形式のものデータ変換が可能	"	25万円～	1995年	—
MS-DXNQNT(DioK)	日本電子	日本電子	高分解能SIM法で測定されたダイオキシンなどの異性体を含むクロマトグラムデータから定量演算を行なう	"	お問い合わせください	1998年6月	—
MS-MSEQ	"	CIGB(キュー)	アミノ酸一次構造解析支援プログラム	"	"	1997年9月	—
MS-MSEQ/PSD	"	"	蛋白質同定支援プログラム	"	"	2000年3月	—
MS-DECONV	"	日本電子	ESIモードで測定された多価イオンマススペクトルに対してデコンボリューション演算を行ない、親イオンのプロファイルを求め、その質量を推定する	"	"	2001年3月	—
MS-46030W7	"	Palisade	第7版マススペクトルライブラリーデータベース(Wiley's Registry of Mass Spectral Database)と検索ソフト	"	"	2002年3月	—
MS-46030W7N	"	"	第7版NIST付きマススペクトルライブラリーデータベース(Wiley's Registry of Mass Spectral Database with NIST)と検索ソフト	"	"	2002年3月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
J-OCTAプラットフォーム	日本総研ソリューションズ(旧社名:日本総合研究所)	日本総研ソリューションズ	樹脂やゴム等、高分子材料(ソフトマテリアル)の物性予測を行う、シミュレーションシステムのプラットフォーム。素材・材料開発をする上で、これまで「経験と勘」によるノウハウを技術者間で共有し、研究開発を支援するツールである。分子動力学法など、高分子材料開発に重要な4つのエンジン(シミュレータ)を連携する機能を有し、さまざまな物性予測を行うことができる	Windows2000/XP、Pentium3-700MHz以上、メモリ256MB以上、HD1.5GB以上、OpenGLに対応したドライバソフト、グラフィックカードが	お問い合わせ	2005年4月(V1.0)/2005年11月(V1.1)2006年12月(V1.2)	—
COGNACモデラー(DPDモデラー内蔵)	"	"	(粗視化)分子動力学法に対応するモデラー。化学構造式をGUI操作により作成し、分子動力学計算を行う作業を強力にサポートする。散逸粒子動力学法(DPD)にも対応する。高(粗視化)分子動力学法に対応するモデラー。化学構造式をGUI操作により作成し、分子動力学計算を行う作業を強力にサポートする。散逸粒子動力学法(DPD)にも対応する。高分子材料の力学特性、熱特性、ガス透過性など、幅広い物性を予測できる	"	"	"	—
PASTAモデラー	"	"	高分子材料のレオロジー特性(粘性、粘弾性)を予測するための、レプテーションダイナミクス法に対応するモデラー。分子量分布を有する高分子の粘性、粘弾性について予測できる	"	"	"	—

NAPLESモデラー	"	"	高分子材料のレオロジー特性(粘性、粘弾性)を予測するための、プリミティブチェーンネットワークモデルに対応するモデラー。高分子鎖の複雑な形状(直鎖状、分岐、楕形など)に対応するほか、ゴム・エラストマーなど、架橋構造をもつ高分子材料も扱える				
SUSHIモデラー	"	"	動的・静的平均場法に対応するモデラー。高分子材料を混合する場合の相分離の予測、ミセルの形態など、高分子の相互作用による相構造などを予測できる。また、化学構造式をもとに、相互作用パラメータ(χ パラメータ)を推算する機能もある	"	"	"	—
MUFFINモデラー	"	"	多相構造法に対応するモデラー。海一島構造など、相分離構造を有する高分子材料の弾性挙動および流動場を予測できる	"	"	"	—
VSOP(高速分子動力学エンジン)	"	"	(粗視化)分子動力学エンジンであるCOGNACエンジンに対応した、並列計算が可能な分子動力学エンジン。マルチCPUで並列計算を行うことで、高速に分子動力学計算を行うことができる	Linux MPI版	"	"	—
解析事例データベースコンテンツ(オプション)	"	"	解析作業を行う上で、解析プロセス、繰り返し作業、およびモデル作成など、解析作業に必要なツールを雛形として集めたもの。ユーザの作業負担を大幅に軽減し、業務のスムーズな立ち上げに大変便利な構成となっている。そのまま解析業務に用いることも、カスタマイズして独自の解析手法として利用することもできる。V.1.2現在、以下のコンテンツをすべて含む。(1.高分子材料の弾性挙動予測、2.低分子の拡散性予測、3.配向複屈折性の予測、4.ガラス転移温度の予測、5.ナノコンポジット材料の物性予測、6.架橋ポリマーのモデル作成機能、	"	"	"	—
Gaussian&MOPACインターフェイス(オプション)	"	"	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機能。J-OCTAプラットフォームからGaussianおよびMOPACの入力ファイルを作成、分子軌道計算を実行できる。GUIにより、初心者でも簡単に分子軌道計算が実行できる	"	"	"	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
日化辞Web	科学技術振興機構	科学技術振興機構	インターネット上でJSTが作成し提供している日本化学物質辞書を公開するもの。約245万の有機低分子化合物及びその混合物を収録。化学物質や分子式などからの文字列検索、及び化学構造検索が無料で可能。化審法の既存化学物質の番号や労安法の番号も収録(http://nikkajweb.jst.go.jp/)	推奨=Windows 2000,XP :Internet Explorer 6.x及び Netscape 7.x / MacOS 10.x : Safari 1.x, Netscape 7.x / MacOS 9.x : Internet Explorer 5.x 及び Netscape 7.x 化学構造検索を行うには ChemDrawPlugin(無料ダウンロード可)をあらかじめインストール	—	—	—
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

Nuts Pro	エルエイシステムズ	米AcornNMR	NMRデータ処理。1Dおよび2Dのデータ処理が可能。2D データ処理を高速に行えるアレイドモード・モジュール付属。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	Windows、Macintosh	19万円	—	—
NMRPIPE	''	米NIH	高速多次元NMRデータ処理および解析プログラム。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	UNIX、(UNIX)、MacOSX	300万円	—	—
PCA/HSQC	''	''	NMRPieシリーズのモジュールの一つで、滴定実験などの2D-NMRスペクトルによる評価をサポートし、ドラックデザインなどで効力を発揮するツール	''	100万円	—	—
DYNAMO	''	''	シミュレーティッドアニーリング法を使いNMRデータからマクロ分子や複合体の立体構造の計算が可能	''	400万円	—	—
CYANA	''	Peter Guntert 他(スイス)	NOE帰属を考慮した、タンパク質構造解析・計算ソフトウェア	Windows	200万円	—	—
PERCH	''	Oy PERCH Solutions Ltd. フィンランド	1D NMRのデータ処理、解析、分子モデリング計算及びスピン系計算による1D NMRスペクトル処理を行うソフトウェア	''	お問合せ下さい	—	—
Mnova	''	スペイン Mestrelab Research	NMRの1D,2Dプロセッシング、予測等を行うソフトウェア。レポート作成機能が優れているので、初心者にも使いやすい	''	お問合せ下さい	—	—
CH-NMR-NP	''	エルエイシステムズ	Web経由で利用可能な有機天然物NMRデータベース。部分化学構造式、NMRピーク値等から検索が可能。2005年8月現在 7,426件の天然物の1H、13Cスペクトルデータを収録	Windows、UNIX、LINUX、Mac OSX	年間ライセンス30万円	—	—
LCModel	''	加 Stephen Provencher	MRI用の1H MRスペクトルから代謝産物の解析を行うソフトウェア	UNIX(SUN、SGI)、LINUX (RedHat)	お問合せ下さい	—	—
MRVision	''	米エム・アール・ビジョン	MRI、CTなどの医療画像解析。DICOM3フォーマットにも対応。Diffusion、Perfusion、Functional MRI、緩和時間の解析等	SUN、LINUX (RedHat)	150万円	—	—
MEDx	''	米センサーシステムズ	医療画像解析。ユーザーフレンドリーなSPM解析環境を提供。3次元化も容易に行え、多様な画像モダリティで得られる多次元データ画像処理ルーチンにより解析に最適な可視化をもたらす医療用画像処理・解析	''	150万円	—	—
Analyze	''	米MAYOファウンデーション	3Dバイオメディカル画像表示/解析。多様な画像モダリティに対応した、多次元のバイオメディカル画像のインタラクティブな表示・マニピュレーション・測定のための総合プログラム	Windows、UNIX、LINUX	175万円	—	—
Ostergaard	''	デンマーク・オーフス大学・Leif Ostergaard	Perfusion解析のためのソフトウェア	''	120万円	—	—
CNMR Predictor	''	加ACD	13CNMRスペクトルの予測。216万件の化学シフト値を基にスペクトルを予測。MDL社ISIS/Base、ISIS/Drawと連携可能 (ISIS Integration が必要)	Windows	104万円	—	—
HNMR Predictor	''	''	1HNMRスペクトルの予測。144万件の化学シフト値を基にスペクトルを予測。ISISと連携可能	''	104万円	—	—
LogP DB	''	''	中性分子のオクタノール/水の分配係数(LogP値) 予測。約18,400件の化合物の構造と実験LogP値を登録した内部データベース付属。ISISと連携可能	''	40万円	—	—
pKa DB	''	''	弱酸の解離定数の予測。16,000件の構造と 31,000件に及ぶ実験値の内部データベースを付属。ISISと連携	''	104万円	—	—
Solubility DB	''	''	溶解度の予測。約 5,000件の実験値データベース付属	''	104円	—	—

LogD Suite	"	"	部分解離状態の分子の分配係数値 (LogD) 予測。他に LogP DB、pKa DBが付属。ISISと連携可能	"	158万4000円	—	—
LogD Sol Suite	"	"	LogD Suiteに溶解度計算機能 (Solubility DB) が付属。ISISと連携可能	"	238万4000円	—	—
Name	"	"	IUPACルール・CAS Index ルールに基づく分子の命名。また化合物名から構造式を表示する Name to Structure 機能を付属。ISISと連携可能	"	62万4000円	—	—
NMR Manager	"	"	NMR実験データ処理、処理データと構造とを組み合わせたデータベースの構築機能。ほとんどのNMRデータ読み込み可能	"	78万4000円	—	—
MS Manager	"	"	MS 実験データ処理、処理データと構造とを組み合わせたデータベースの構築機能。LC/MS データも読み込	"	120万円	—	—
Structure Elucidator	"	"	13Cスペクトルから構造式の推測。CNMR Predictor、NMR Manager等の製品が付属。13CNMRに加え、1HNMR、IR、分子量などの情報を入れると推測精度向	"	792万円	—	—
TURBO-FRODO	"	仏AFMB-CNRS	分子設計支援・分子表示プログラム。多様な分子、X線回折の電子密度マップの読み込み・表示が可能	SGI、LINUX	300万円	—	—
EMSE	"	米ソースシングナルイメージング	研究者向けに開発したEEG/MEG Source Estimation、Multimodel Functional Imagingの為のソフトウェアツ	Windows	お問合せ下さい	—	—
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
Mascot Server	マトリックスサイエンス	英マトリックスサイエンス	質量分析データによる蛋白質同定を行う代表的ソフトウェア。各種検索機能を装備したWebサーバー、蛋白質定量解析機能装備	Windows、Linux	お問合せ下さい	1999年	—
Mascot Cluster	"	"	Mascot Server のクラスターバージョン 高速、大量データ処理が可能	"	"	1999年	—
Mascot Distiller V2.1	"	"	質量分析装置のRAWデータより、独自アルゴリズムで、モノアイソトピックピークを生成。DeNovo解析、定量	Windows	"	2005年	—
Mascot Integra	"	"	プロテオミクス解析で発生する各種データマネジメントソフトウェア。小規模版LIMS。拡張可能	Windows、Linux	"	2005年	—
Mascot Wizard	"	"	ペプチドマスフィンガープリント法検索を簡便に行う Mascot用インターフェースソフトウェア	Windows	無償	2003年	—
Mascot Daemon	"	"	検索作業のデータハンドリングを自動化するためのソフトウェア	"	"	1999年	—
商品名	販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Xome	三井情報	三井情報	質量分析データを用いたタンパク質の同定・定量・アノテーションを自動で行うことを目的としたプロテオミクス・プラットフォームです。エーザイ(株)シーズ研究所との共同開発により、ユーザーの立場に立ったインターフェースや、機器に依存しない統一された操作など、経験豊富な研究者のノウハウで、MS測定後のデータ解析をサポート。高速同定エンジンの採用や、スピードを重視したピーク検出、および定量アルゴリズム、それらの実行状態を管理する負荷分散機能により、ハイス	WindowsXP/2003	300万円(税抜き)、別途有償にてカスタマイズに応じます	2005年下半期	国内10サイト

Mass Navigator	"	"	<p>主要な質量分析器のデータフォーマットに対応した、ユニバーサルMSスペクトル解析ソフトウェアです。LC-MSの3DViewやMALDI用のGel Viewなどの種々のViewer、スペクトルやクロマトグラムのオーバーラップ機能などユーザフレンドリーなインターフェースを用いて効果的なスペクトルの解析が可能。また、機器の特性に応じたピーク検出、同位体クラスターの検出、スムージングやキャリブレーションなどの補正、目的MSピークの定量等、様々な解析を行うためのアルゴリズムを実装している。さらに、プロテオーム用機能としてXomeと連携しており、タンパク質同定、定量結果を生データレベ</p>	WindowsXP/2003	200万円(税抜き)、2本目以降値引きあり	2005年下半期	国内10サイト
VoyaGene	"	"	<p>DNAマイクロアレイ等で得られた遺伝子発現プロファイルデータから遺伝子間の相互作用(遺伝子ネットワーク)を推定するシステム。性質の異なる4つの遺伝子ネットワーク推定モデルを搭載しており、実験データに応じたモデルの選定や組み合わせが可能。また、ネットワーク表示機能や推定結果検証機能も充実しており、煩雑かつ難易度の高いネットワーク推定を効率よく行うことができる</p>	サーバ: Solaris8、Redhat Linux、クライアント: Redhat Linux、Windows2000/XP	永久ライセンス580万円(税抜き)～、年間ライセンス250万円(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	2003年上半期	国内3サイト
波平	"	"	<p>シーケンサから出力された波形データから高精度にSNP候補領域を同定する解析ツール。SNPの検出には独自手法を用いている。一般的によく使用されているPolyPhredの問題(擬陽性が多い、塩基の挿入と欠失にうまく対応できていない)を改良している</p>	Solaris、RedHatLinux	150万円(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	2003年下半期	—
SOSui	"	名古屋大学美宅研究室	<p>膜タンパク質判別および膜貫通ヘリックス予測システム。Kyte-Doolittleの疎水性指標と、新規に定義した両親媒性および非電荷指標などを用いて、従来の手法と比べて高速かつ高精度な予測を実現している。他にシグナルペプチドやダンベル型タンパク質の判別プログラムもある</p>	Sun Solaris、RedHat Linux	V1.5 50万円(税抜き)、V2.0 80万円(税抜き)、教育機関向け価格は別途お問い合わせ	1999年11月	国内46サイト
GeneFIS	"	名古屋大学本多研究室	<p>ファジィニューラルネットワークを用いて、検体のマイクロアレイ解析結果や病態に関するデータ(疾患の有無、予後の良し悪しなど)から疾患や治療法に関連する原因遺伝子を自動的に絞り込み、高精度の病態推定モデルを構築するソフトウェア。さらに、ファジィ推論を使って、疾患や治療法に関連する因子がどのように組み合わせられると疾患がある、もしくは予後が悪いなどと推定されるかについてのルールを、構築した推定モデルから抽出し、わかりやすく表示することが可能</p>	WindowsNT/2000/XP	80万円(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	—	国内5サイト

TRANSFAC	"	独バイオベース	真核生物の転写因子およびその結合部位に関するデータベース。分子生物学者のグループにより校閲されているため高い信頼性を持つ。データベースに含まれる位置特異的重み行列を用いた転写因子結合部位予測ツールMATCHなどが含まれる。目的別にオプションデータベースが用意されている	Compaq Tru64 UNIX, SGI IRIX, Sun Solaris, HP-UX	企業規模により年間使用料が変化します。詳細並びに教育機関向け価格は別途お問い合わせ	1999年7月	—
TRANSCOMPEL	"	"	Composite element(複合シスエレメント)に関するデータベース	"	"	"	—
TRANSPATH	"	"	転写因子のトランス活性化制御機構に関するデータベース。手書きのグラフィカルマップや、検索条件によって動的に生成されるネットワーク表示などにより、複雑な制御機構をわかりやすく表示できる。分子生物学者のグループにより校閲されているため高い信頼性	"	"	2001年上半期	—
TRANSPLOERER	"	"	遺伝子制御領域の解析を行うためのデスクトップツール。脊椎動物の遺伝子に関する転写開始部位や哺乳類の遺伝子の最初のエクソンの予測、ならびに転写因子結合部位の同定のためのツールを備える。簡単に使える操作性とわかりやすい画像表示により、PC上で	WindowsNT/2000/XP、Linux	"	2003年上半期	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Homology Modeling Professional for HyperChem	分子機能研究所	分子機能研究所	分子力学計算はもとよりab initio量子化学計算、分子動力学シミュレーションを網羅的に実施して、巨大分子モデリング、機能解析、シミュレーションできる、HyperChemをコアとする最先端分子モデリングプログラムパッケージ。HyperChemとGaussian03をシームレスに制御、計算結果をリアルタイムにフィードバックでき、巨大分子システム全体を量子化学的に処理して、更なるモデリング、機能解析、およびシミュレーションに利用できる。すべての操作が完全自動化・GUI化され、構造ベース創薬からライフサイエンス研究におけるあらゆる論理的分子設計、未踏研究をロジカルに支援できる。	HyperChem5.x/6.x/7.x/8.03 (必須): Gaussian98 RevA9以上あるいはGaussian03: Windows95/98/NT/2000/XP/Vista	アカデミック: 24万円、一般: 48万円	2005年12月	有り
Homology Modeling for HyperChem	"	"	HyperChem上でホモロジーモデリング、タンパクモデリング、機能解析、シミュレーションを一貫して実施するために必要な全機能を提供するプログラムパッケージ。Gaussian Interface for HyperChemの全機能が利	"	学生: 9万5千円、アカデミック: 19万円、一般: 38	2005年8月	有り
ONIOM Interface for Receptor	"	"	タンパク質分子と低分子からなる分子システムに特化したONIOMインターフェイス。Gaussian Interface for HyperChemの全機能に加え、HyperChem上に表示した分子システムに対するGaussian03の2-layerおよび3-layer ONIOM計算用入力ファイルを自動生成して起動し、その計算結果をフィードバックすることで巨大タンパク分子システム全体を量子化学的に処理して、更なるモデリング、機能解析、シミュレーションに利用できる	"	アカデミック: 5万5千円、一般: 11万円	2005年12月	有り
Gaussian Interface for HyperChem	"	"	HyperChem上に表示した複雑な分子システムにおける個々の分子の分子モデリング、分子エディタ用プログラム。生体高分子以外のあらゆる分子種に関してGaussian入力ファイルを自動生成して起動し、計算結果をリアルタイムにフィードバックして、更なる分子モデリ	"	アカデミック: 3万5千円、一般: 7万円	2005年12月	有り

Docking Study with HyperChem Essential(単一化合物)、Premium Essential(10化合物)、Professional(100化合物)、Advanced(1,000化合物)、Ultimate(10,000化合物)	"	"	HyperChemの優れた計算化学環境上でタンパク・リガンドフレキシブルドッキングシミュレーションを可能にするプログラム/パッケージ。HyperChemに搭載されるすべての力場、あらゆる原子条件の組み合わせをサポート。タンパクに対しては主鎖や側鎖のインデュードフィット効果が明示的に取り扱え、化合物に対しては網羅的なコンフォメーションサーチが可能。完全自動化、GUI化され、パラメータファイル等の編集作業やコマンドライン作業が一切不要。1タスクあたり最大1万化合物までのin silicoスクリーニングに必要な全機能を搭載したマルチ化合物対応版も利用可能。二次元化合物データベースから三次元化する全自動化化合物2D-3D構造変換プログラムMol Dimensionおよびデモンストレーションレベルの全自動レンダリング機能を搭載した洗練されたヒット化合物閲覧、解析準備用多機能ビューア Dock Viewerも搭載。さらに、タンパク・リガンド複合体形成部位、リガンドのファーマコフォア、およびスキヤット	HyperChem6.x/7.x/8.03(必須): Windows98/NT/2000/XP/Vista	お問い合わせください	2006年6月(マルチ化合物対応版は2006年11月中旬)	有り
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NanoBox(ナノボックス)	ナノシミュレーション	ナノシミュレーション	液晶、合成高分子のシミュレーションで実績のある分子材料設計用分子動力学ソフトウェア。溶解度、蒸気圧等、自由エネルギー計算が可能。液晶では世界最高峰のソフト	Pentium4、Xeon、Alpha等 Linux機、SGI 等 Unix機	120万円(大学75万円)。力場、オプション機能別売	1998年4月	20サイト
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NEC Homology Searcher	NEC	NEC	BLAST/PSI-BLASTの配列検索を並列化することで高速処理を実現。小規模から大規模までの柔軟なシステム構築に対応。また、BLAST結果の解析・可視化機能、ClustalWへの展開等、画面インターフェース、DB自動更新機能等も標準装備。導入後のサポートも充実	サーバ: LINUX、クライアント: Windows2000、WindowsXP	30万円～(詳細はお問い合わせください)	2001年	非公開
BioCompass(バイオコンパス)	"	"	DNAマイクロアレイの結果等、大量遺伝子・タンパク質への一括アノテーション付けソフトウェア。関連情報(生理現象、遺伝子機能、疾患、化合物など)をグラフィカルに表示。クラスタ内、クラスタ間での比較が容易。バイオ文献・バイオ情報のマイニング機能と、同義語・多義語処理にて実現	ASP形式でのご提供 クライアント: Windows2000、WindowsXP、ブラウザ: Internet Explorer6.2以上	30万円～(詳細はお問い合わせください)	2004年	"
BioPrism(バイオプリズム)	"	"	プロテオミクス研究向けLIMSとして、MSデータ等あらゆる実験データを確実に管理。さらにヒトサンプル等の倫理規定を遵守すると同時に、取り違いを予防するためにバーコードを活用したサンプル管理機能も提供。ICカードによるログイン・ログアウト、タッチパネルインターフェース等、実験中の操作を簡易化するオプションも各	サーバ: LINUX、クライアント: WindowsXP	300万円～(詳細はお問い合わせください)	2005年	"
BioPrism Sample Assistance(バイオプリズム サンプルアシスタンス)	"	"	各生体組織や植物組織などの試料サンプルについて、保管場所への登録(受け入れ処置)や出庫(取り出し)に、二次元バーコードシールの活用による取り違えない確実な管理が可能。受け入れ元、管理者等の由来情報の他、画像ファイル、文書ファイル等の関連情報をサンプルに対応付けて保存することができる	サーバ: LINUX、クライアント: WindowsXP	150万円～(詳細はお問い合わせください)	2006年	"

MD Server	"	"	研究者を強力に支援する分子動力学計算サーバー。Express5800のラックマウント型またはタワー型モデルと一体化されている。専用のMDエンジンを搭載しており、カットオフなしの高精度計算が可能	専用ハードウェアと一体化。OSはLinux	340万円～ (詳細はお問い合わせください)	2005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
Molegro Virtual Docker	ノーザンサイエンスコンサルティング	デンマーク・モレグロ	蛋白質-リガンド相互作用を予測するための統合プラットフォーム。分子のプレパレーションからターゲット蛋白質のポテンシャルバインディングサイトの決定、そして、リガンドのバインディングモードの予測まで、ドッキングプロセスの全てを現在トップレベルの精度で行うこ	Windows, Mac, Linux	お問合せ下さい	38961	—
GastroPlus	"	米シミュレーションズプラス	ミシガン大学Amidon教授らのグループが開発したCATモデルを発展させたACATモデルをベースとしたソフトウェア。経口投与製剤の消化管内の挙動、薬物の血中移行を解析・予測。製剤設計支援、Virtual Trialにも	Windows	"	1998年8月	—
GastroPlus-Optimization	"	"	吸収率、BA、Cp-time、PK Parameterなどの実測値とシミュレーション値が一致するようパラメータを最適化するGastroPlusのオプションモジュール	"	"	1999年5月	—
GastroPlus-Metabolism & Transporter	"	"	トランスポーターや代謝を考慮して動態解析を行うGastroPlusのオプションモジュール	"	"	2001年7月	—
GastroPlus-PDPlus	"	"	薬効と血中濃度の関係を解析し、最適な投与量や投与間隔を予測するGastroPlusのPharmacodynamics解析オプションモジュール	"	"	2002年8月	—
GastroPlus-PKPlus	"	"	静注によるCp-timeデータから1-, 2-, 3-コンパートメントモデルでのPKパラメータを求めるGastroPlusのオプションモジュール	"	"	2000年8月	—
GastroPlus-PBPK	"	"	体内に入った薬物が、どのように吸収され、各部分に分布、蓄積あるいは排泄されていくのを時間的に予測する生理学的薬物動態モデル(Physiologically-based Pharmacokinetic Model)のGastroPlusオプションモ	"	"	2005年12月	—
GastroPlus-IV/IV Correlation	"	"	in vitroでの溶出実験データとGastroPlusで解析したin vivoでの溶出を比較し相関を確認するGastroPlusオプションモジュール	"	"	2000年8月	—
ADMET Predictor	"	"	化合物構造からADMET物性値を予測するソフトウェア。物理化学性状:pKa、LogP、LogD、溶解度、拡散係数、生物学的性状:ヒト膜透過性、MDCK膜透過性、BBB透過性、動態的性状:分布容積、血漿タンパク結合率、吸収率、MRTD、毒性:AMES、発がん性、変異原性、魚毒性、hERG Affinity、ver2.0よりADMET Modeler	"	"	2005年5月	—
ADMET Modeler	"	"	自社のデータセットからニューラルネットワークやサポートベクターマシンで新しいモデル式を構築し、ADMET Predictorをカスタマイズするプロフェッショナル用ソフトウェア。ADMET Predictor ver2.0に統合	"	"	2005年5月	—
DDDPlus	"	"	米国薬局方(USP)のパダル法、バスケット法、フロースルー法での試験によるin vitroでの製剤の崩壊および溶出をシミュレーションする世界唯一のソフトウェア。新規有効成分であれば1回の検量試験を行えば、剤形の変更や実験条件の変更による溶出への影響を予測	"	"	2005年5月	—
MembranePlus	"	"	化合物の膜透過試験をシミュレーションするソフトウェア。Caco2、MDCKのみならず人工膜にも対応	"	"	2007年12月 予定	—

ClassPharmer	"	"	研究者の視点でケミカルスクリーニングデータの可視化、体系化、検索、解析をシンプルにかつ高機能に行うソフトウェア。SDおよびSMILESファイルを出発とした内容の可視化や閲覧、クラスタリング、クエリー検索、ディスクリプター生成、QSARモデル作成、構造類似性解析が可能。Virtual Libraryを発生させる機能も追加	"	"	2006年1月	—
AMES Database	"	"	化合物のAMES試験でのDatabase	"	"	2007年12月 予定	—
Modern Biopharmaceutics	"	米TSRL	製剤学、薬物動態学の解説と簡易計算ツールが含まれている、生物薬剤学教育用ソフトウェア	Windows, Mac	"	2004年12月	—
Modern Biopharmaceutics Professional	"	"	生物学的同等性、BCSクラス分けをシミュレーションするソフトウェア	Windows	"	2007年12月 予定	—
HTPro for ADMET Predictor	"	ノーザンサイエンスコンサルティング	ADMET Predictorのインプット・アウトプットを簡易にできるツール。ADMET Predictorで計算可能な物性値の中から必要な物性を定義し、構造を選択するだけでADMET Predictorが計算を開始、Microsoft Excelで読み込み可能なファイルに物性値が出力	"	"	2005年9月	—
ChartSpect	"	"	プレフォーマミュレーション実験データハンドリングシステム。各種の分析装置から得られるデータを装置の種類やメーカーを問わず相互に関連付けて一元管理	Windows, Linux	"	2007年5月	—
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
SDChecker	パトコア	Patcore&Phastec	法規制物質判定システム	Windows	お問合せ下さい	—	—
SDCheckerEnterprise	"	"	全社規模の法規制物質判定システム・SOA採用	Windows/Linux	お問合せ下さい	—	—
SDClean	"	"	構造式標準化ソリューション	"	お問合せ下さい	—	—
SDFilter	"	"	物性計算および物性等に基づく化合物フィルタリングツール	"	お問合せ下さい	—	—
SDSearch	"	"	類似度等に基づくライブラリ比較・構造絞込みツール	"	お問合せ下さい	—	—
SDStation	"	"	SDファイルの表示、マージ、分割ツール	"	お問合せ下さい	—	—
SDCounter	"	"	任意のフラグメント数カウントツール	"	お問合せ下さい	—	—
SD3D	"	"	高精度3D構造の生成ツール	"	お問合せ下さい	—	—
SMILESviwer for EXCEL	"	"	EXCEL上のSMILES文字列の構造式表示・埋め込み	Windows	お問合せ下さい	—	—
SMILESviwer for Spotfire	"	"	Spotfire上のSMILES文字列の構造表示	"	お問合せ下さい	—	—
J-S Connectorer	"	"	JChemBaseとSpotfireの統合化ソリューション	"	お問合せ下さい	—	—
J-E Connectorer	"	"	JChemBaseとEXCELの統合化ソリューション	"	お問合せ下さい	—	—
Marvin Sketch	"	"	構造式描画ツール	"	条件により無償。詳細はお問合せください	—	—

Marvin View	"	Chemaxon	構造ファイルブラウジングツール	"	条件により無償。詳細はお問合せください	-	-
Marvin Space	"	"	高品質3D構造表示ツール	"	条件により無償。詳細はお問合せください	-	-
Instant JChem	"	"	リレーショナル型デスクトップ化合物データベース管理システム	"	条件により無償。詳細はお問合せください	-	-
JChemBase	"	"	ハイパフォーマンス反応・構造検索エンジン	Windows/Linux/Sun	お問合せ下さい	-	-
JChemCartridge	"	"	Oracleデータカートリッジ(反応・構造検索)	"	お問合せ下さい	-	-
Screen	"	"	高速バーチャルスクリーニングシステム	"	お問合せ下さい	-	-
Jkluster	"	"	高速MCS生成、クラスタリング、ダイバシティ解析	"	お問合せ下さい	-	-
Reactor	"	"	仮想反応エンジン	"	お問合せ下さい	-	-
Fragmenter	"	"	フラグメント生成、Rグループへの分解	"	お問合せ下さい	-	-
Standardizer	"	"	構造式標準化エンジン	"	お問合せ下さい	-	-
Charge Plugin	"	"	Charge Distribution, Polarizabilityの計算	"	お問合せ下さい	-	-
Protonation Plugin	"	"	pKa, Major Microspecies, Isoelectric Pointの計算	"	お問合せ下さい	-	-
Partitioning Plugin	"	"	logP, logDの計算	"	お問合せ下さい	-	-
Geometry Plugin	"	"	Topological Polar Surface Area (TPSA), Refractivityの計算	"	お問合せ下さい	-	-
HBDA Plugin	"	"	Hydrogen Bond Donor/Acceptor数の計算	"	お問合せ下さい	-	-
Isomers Plugin	"	"	Tautomer, Resonance, Stereoisomersの列挙	"	お問合せ下さい	-	-
Confirmation Plugin	"	"	コンフォメーション生成、分子動力学計算	Windows	お問合せ下さい	-	-
MolSign	"	Jubilant Biosys	バイオマーカーデータベース	"	お問合せ下さい	-	-
eMolSign	"	"	バイオマーカーデータベース(ASPサービス)	"	お問合せ下さい	-	-
PathArt	"	"	マニュアルキュレーションパスウェイデータベース	"	お問合せ下さい	-	-
ePathArt	"	"	マニュアルキュレーションパスウェイデータベース(ASPサービス)	"	お問合せ下さい	-	-

Kinase ChemBiobase	"	"	キナーゼに活性を持つ構造関連情報・アッセイ情報を集録	SDF/RDF/RCG3	お問い合わせ下さい	—	—
GPCR ChemBiobase	"	"	GPCRに活性を持つ構造関連情報・アッセイ情報を集録	"	お問い合わせ下さい	—	—
PDE ChemBiobase	"	"	PDE(Phosphodiesterase) に活性を持つ構造関連情報・アッセイ情報を集録	"	お問い合わせ下さい	—	—
NR ChemBiobase	"	"	核内リセプターに活性を持つ構造関連情報・アッセイ情報を集録	"	お問い合わせ下さい	—	—
Protease ChemBiobase	"	"	プロテアーゼに活性を持つ構造関連情報・アッセイ情報を集録	"	お問い合わせ下さい	—	—
Ion Channel ChemBiobase	"	"	イオンチャンネルに活性を持つ構造関連情報・アッセイ情報を集録	"	お問い合わせ下さい	—	—
Drug Database	"	"	FDA承認医薬品の構造式、代謝物、PK/PDパラメータ、相互作用を収録	"	お問い合わせ下さい	—	—
SAR>vision	"	Altoris	骨格抽出(MCS)・分類に基づくSAR解析ツール	Windows	19万9500円	—	—
SAR>vision+PLUS	"	"	大容量のデータに対応した骨格抽出・分類に基づくSAR解析ツール	"	お問い合わせ下さい	—	—
DMax Chemistry Assistant	"	Pharma DM	仮説創生ツール	"	お問い合わせ下さい	—	—
MassWorks	"	Cerno Bioscience	質量分析計の精度を100倍迄改善、革新的な組成式決定支援ツールを提供	"	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
RIAS(Remixpoint Interactive Archive Service)	リミックスポイント	リミックスポイント	画像変換エンジンとデータベース機能を直感的なインターフェースでまとめあげ、画像データやアノテーション情報の管理をより簡単にする実験コンテンツ管理システム。遺伝子機能解析のためのプロテオーム実験データやパスウェイデータからPDF形式での学術論文データの管理まで、研究機関におけるさまざまなコンテンツの管理機能を提供	【OS】Solaris 8 以降、RedHat Linux 7.2 以降、【RDB】PostgreSQL 7.2 以降、Oracle 10g 以降、【その他環境】Apache 1.3.x or 2.0.x、Tomcat4.x、	300万円～ (CPUライセンス)	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MOE	菱化システム	加ケミカルコンピューティンググループ	ソフトウェアの開発環境と実行環境を一体化させた統合計算化学システム。分子シミュレーション、ドラッグデザイン、コンビケム、蛋白質モデリングの機能を搭載	SGI、SUN、HP、IBN、Windows、Intel-Linux、Mac	—	1997年9月	—
FlexS	"	独バイオソルヴアイティー	リガンドの重ね合わせ とバーチャルスクリーニングを行う創薬支援ツール	Linux x86、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX Itanium2	—	2007年6月	—
FlexS-C	"	"	FlexS にコンビケムのルールを加えて整理する仮想化合物ライブラリを構築するモジュール	"	—	2007年7月	—
Ftrees	"	"	官能基の物理化学的特性と結合情報から成るトポロジカルな分子記述子による類似構造検索	Windows、Linux x86、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX Itanium2	—	2007年6月	—
Ftrees-FS	"	"	化合物フラグメントデータベースに対して Ftrees でデノボ検索	Windows、Linux x86、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX Itanium3	—	2007年6月	—
2Ddraw	"	"	化合物を2次元表示したり FTrees のフィーチャで整理するツール	Windows、Linux x86	—	2007年6月	—

GVK Database	"	印GVKバイオサイエンス	下記のようなさまざまな化合物データベースを MOE/Daylight/CBISの各フォーマットで提供 Kinase Inhibitor, GPCR Inhibitor, Protease Inhibitor, Ion Channels Inhibitor, Transporters, NHR,, Phosphatase Inhibitor, Pre-Clinical Candidate, Pre-Clinical Candidate, Drug, MedChem, Mechanism Based	"	—	2006年7月	—
NetPro	"	印モレキュラーコネクション	タンパク質-タンパク質間およびタンパク質-低分子間相互作用の総合的なデータベース	Windows	—	2006年4月	—
Plasma Protein knowledgebase	"	"	疾患時における血清/血漿中のタンパク質濃度変化など、血漿タンパク質に関する知見をまとめたデータベース	"	—	2006年4月	—
BioEpisteme	"	西プロウスインスティテュート	薬理機序予測システム	Windows, Linux	—	2006年4月	—
SciMAPS	"	仏サイエノミクス	量子化学からメソスケールシミュレーションにまで対応する材料設計支援統合計算化学システム。低分子から複雑な高分子のバルクモデルまで簡単に構築でき、ABINIT, LAMMPSなど、著名なシミュレーションプログラムを各インターフェースを利用して統合利用可能	"	—	2006年6月	—
LAMMPS IF	"	"	分子動力学計算ソフトウェアLAMMPSを利用するインターフェース。LAMMPSの計算実行から結果の解析まで行うことが可能	"	—	2006年6月	
ABINIT IF	"	"	第一原理バンド計算ソフトウェアABINITを利用するインターフェース。ABINITの計算実行からバンド構造の表示等の解析まで行うことが可能	"	—	2006年6月	
NAMD IF	"	"	分子動力学計算ソフトウェアNAMDを利用するインターフェース。NAMDの計算実行から結果の解析まで行うことが可能	"	—	2006年6月	
TURBOMOLE	"	"	独カールスルーエ大学の量子化学グループのAhlrachs教授により開発された量子化学計算のソフトウェアで、HF、MP2、DFT、時間依存DFT、CC法等、さまざまな手法を搭載したソフトウェアです	"	—	2006年6月	
TURBOMOLE IF	"	"	TURBOMOLEの計算の実行から計算結果の解析を行うインターフェース。分子軌道や基準振動解析の結果	"	—	2006年6月	
SciDPD	"	"	散逸粒子動力学ソフトウェア。液体や高分子の相変化など、分子動力学計算では対応の難しいメソスケールのシミュレーションが可能	"	—	2006年10月	
SciDPD IF	"	"	SciDPDを実行、解析するためのインターフェース。メソスケール用ビルダーによる構造構築や等値面表示などさまざまな機能有	"	—	2006年10月	
FHMixing	"	"	Molecular Silverware法による二元混合物のためのモンテカルロシミュレーションソフトウェア。高分子や液体の熱力学物性やSciDPDの相互作用パラメータの推算	"	—	2006年10月	
MNDO	"	"	独Max-Planck-Institut für KohlenforschungのWalter Thiel教授のグループで開発された半経験的分子軌道法のソフトウェア	"	—	2006年6月	
MNDO IF	"	"	MNDOの計算の実行から計算結果の解析を行うインターフェース。分子軌道や基準振動解析の結果を表示	"	—	2006年6月	

ADF	"	蘭サイエンティフィックコンピュティング&モデリング	密度汎関数法分子軌道計算プログラム	SGI, IBM, SUN, HP, Intel-Linux, Windows, Mac	-	1998年11月	-
COSMOtherm	"	独コスモロジック	第一原理計算による熱力学物性推算プログラム	SGI, Intel-Linux, Windows	-	2001年9月	-
COSMOthermCO	"	"	プロセスシミュレータ用COSMOthermインターフェース	Windows	-	2007年4月	-
COSMO UI	"	菱化システム	COSMOthermユーザーインターフェース	"	-	2003年6月	-
Turbomole	"	独コスモロジック	Ab initio法分子軌道計算プログラム 高速な密度汎関数法およびCOSMO法計算機能	SGI, HP, IBM, Intel-Linux	-	2001年9月	-
MedeA	"	米マテリアルズデザイン	Material Informatics/Quantum統合型材料設計支援システム	Windows	-	1999年1月	-
MedeA VASP	"	"	第一原理/バンド計算プログラム	Windows, Linux	-	2001年5月	-
MedeA MT	"	"	弾性率・熱力学物性評価ソフトウェア	Windows	-	2003年4月	-
MedeA Phonon	"	"	格子振動・熱力学物性評価ソフトウェア	"	-	2003年4月	-
Gaussian 03	"	米ガウシアン	Ab initio法分子軌道計算プログラム	SGI, HP, SUN, IBM, Intel-Linux, Windows, Mac	-	1998年10月	-
GaussView	"	"	Gaussian98のグラフィカルユーザーインターフェース	"	-	1998年10月	-
AMPAC	"	米セメケム	構造最適化や遷移状態探索を高速で実行することのできる半経験的分子軌道法プログラム。付属のGUIは、GaussViewの全機能も包含	"	-	2005年11月	-
CODESSA	"	"	豊富な分子記述子計算機能をもつ構造物性関連ソフトウェア	SGI, HP, SUN, IBM, Intel-Linux,	-	2005年11月	-
Molpro	"	英University College Cardiff Consultants Limited	CI法などの配置間相互作用の取り扱いを得意とした量子化学計算ソフトウェア	SGI, HP, SUN, IBM, Intel-Linux	-	2004年11月	-
QuantumStation	"	米パラレルクアントムソリューションズ	並列化効率がよく構造最適化に長けた独自量子化学ソフトウェアを搭載した高速計算サーバ	Intel-Linux	-	2004年9月	-
PQS ab initio program	"	"	並列化効率と構造最適化に長けた量子化学計算ソフトウェア	Windows, Intel-Linux	-	2004年9月	-
Direct Force Field	"	米イーオンテクノロジー	高精度分子シミュレーション支援ソフトウェア。さまざまな分子シミュレーションソフトに高精度の力場パラメータを提供。力場データベースや力場パラメータ開発機能を搭載。テンプレートを利用したユーザ独自の力場関	Windows, Linux	-	2001年12月	-
CBIS	"	米ケムイノベーション	化合物情報、アッセイ情報、レポート等、化学・薬学・生物学研究におけるデータや情報を一括管理する統合情報管理システム	"	-	2002年8月	-
LabCollector	"	仏アジャイルバイオ	生物学系実験研究におけるさまざまな情報を一元管理する簡易なシステム	"	-	2006年11月	-
KDE	"	英インフォーゼンス	ワークフロー管理とリソースの統合を特徴とするデータマイニングシステム	"	-	2002年8月	-
CHEMKIN	"	米リアクションデザイン	燃焼や触媒反応、CVDなどの複雑な化学反応プロセスにおけるキネティクスを詳細に解析するソフトウェア	Unix, Linux, Windows	-	2005年4月	-

CHEMKIN Particle Tracking	"	"	CHEMKIN GUI上で、すずやカーボンブラックなどの核生成反応や粒子サイズ分布などを解析するためのプラグインモジュール	"	-	2006年7月	-
KINetics	"	"	CHEMKINの入力形式で作成された化学反応式を数値流体力学計算ソフトウェア(CFD)上に組み込むためのプラグインモジュール	"	-	2005年4月	-
DAYLIGHT Thor/Merlin	"	米デイト	SMILES言語をベースとする効率的な化合物データ管理システム	Unix、Linux、Windows	-	2005年4月	-
DAYLIGHT DayCart	"	"	Oracleデータベースに化合物情報を取り扱う機能を追加するためのデータカートリッジ	"	-	2005年4月	-
DAYLIGHT Database	"	"	Daylight社のデータベースシステムで使用するのことができる化合物データベースコンテンツ	"	-	2005年4月	-
DAYLIGHT Applications	"	"	clogpなどの記述子やフィンガープリントを算出するプログラム群	"	-	2005年4月	-
DAYLIGHT Toolkit	"	"	SMILES,SMARTSなどの機能をユーザ独自のプログラムに組み込むためのライブラリ	"	-	2005年4月	-
Sentient Desktop	"	米IO-Informatics	分散する各種研究データの統合、比較、解析を行うことのできる統合型電子ノートブック	Windows	-	2005年4月	-
Partek Discovery Suite	"	米パーテック	高度なデータ可視化機能を搭載し、大規模なデータの取り扱いが可能な統計解析ソフトウェア	SGI、SUN、Intel-Linux、Windows、	-	2005年8月	-
Partek Genomic Solution	"	"	Discovery Suiteに、Affymetrixデータの読み込み、Nucleotide、GenBankなどの外部データベースへのリンク、アノテーション機能を搭載した遺伝子発現解析用パッケージ	"	-	2005年8月	-
Partek QSAR Soluion	"	"	Discovery Suiteに、ISISとの連携機能などを搭載したQSAR解析用パッケージ	"	-	2005年8月	-
Partek Screener's Solution	"	"	QSAR Solutionに、HTSプレートデータの読み込み機能などを搭載したHTSデータ解析用パッケージ	"	-	2005年8月	-
Colors	"	東北大学宮本研究室	高速化量子分子動力学計算プログラム	SGI、Intel-Linux	-	2002年1月	-
MOPAC2006、WinMOPAC	"	富士通	高分子向けにDistanceCutoff法を用いた局在化分子軌道計算プログラム、Windows版MOPAC	Unix、Linux、Windows	-	1999年4月	-
Carbon Analyzer	"	藤本宏之&恵	人造黒鉛の格子定数および結晶子の大きさ測定プロ	Windows	-	2002年5月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Reatop(リートップ)V2	サイエンス・テクノロジー・システムズ	サイエンス・テクノロジー・システムズ	研究開発領域における試薬の統合的な管理を実施したいというユーザー要望に答えて開発した試薬管理システム。受入・貸出・返却・廃棄という運用フローに合わせて履歴管理機能を持ち、バーコード操作による業務の簡略化を実現している。また、電子天秤からの秤量値自動取り込み、既存機器の利用により低コスト導入を実現。カスタマイズも可能。バージョンアップにより更	Windows2000/XP	別途お問い合わせください	2004年8月	あり
TDAMS(ティーダムス)	"	"	検体試験の工程を簡単な操作で設定し、進捗を管理することができるシステム。検体管理にはバーコードを使用し、試験工程をグラフィカルにデザインすることができる。また、試験別・試験内検体別・工程別検体毎の管理を可能にするとともに、一括表示・個別表示が可能。アドオン開発により解析データとの連携を実現し、インフォメーション・マネージメント・システムとしての運用も	Windows2000/XP	"	2004年4月	あり

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

Insight II	"	"	生体高分子系分子モデリング、シミュレーション	"	"	—	—
QUANTA	"	"	高分子X線結晶学者向けの高度なツール	"	"	—	—
ZDOCKpro	"	"	タンパク-タンパクのドッキングシミュレーション	"	"	—	—
CNX	"	"	X線およびNMR構造解析用の構造精密化エンジン	SGI, Linux, AIX	"	—	—
Felix	"	"	全タイプのNMRデータに対応する業界標準のオフラインのデータ処理、スペクトル・ヴィジュアルイゼーションおよび解析を行なうソフトウェア	Windows, SGI	"	—	—
PathArt	"	ジュビラントパイオシス	疾患や生理現象に対する、シグナル伝達および代謝パスウェイのデータベース。100%マニュアルキュレーションで作成。ソースは文献および公的データベースで、重要度の高い31種類以上の疾患パスウェイを収録。また関連する低分子化合物の情報を統合化。変異、ノックアウト、SNPs情報を提供。約12万の蛋白-蛋白および蛋白-低分子相互作用情報を集録。生物種、臓器、セルラインなどの属性情報も収録。SBML対応。マイクロアレイデータ(テキスト、Spotfire、enespring)の	WindowsNT/2000/2003, Linux, Solaris Oracle9.2以降、Oracle10g	"	—	—
MolSign	"	"	1998年以降のジャーナルからマニュアルキュレーションにより抽出した疾患バイオマーカー情報のデータベース。合計6万レコード(例:癌について約5,400件)。3ヶ月毎にデータ更新。Expression data, Inhibitor data, Mutation data, Splice variants, Post-translational modification, LOH, Epigenetic events, Protein-protein Interaction等の収録データ項目有り。様々な観点から	Windows, Linux (RedHat), Oracle9.2以降、Oracle10g	"	—	—
LSKB (LifeScienceKnowledgeBank)	"	ワールドフュージョン	遺伝子名やシンボル、キーワードなど、遺伝子に関する情報をデータベース化したシノニム辞書と、相同性検索により同定された遺伝子、関連するタンパク質の機能辞書を搭載。シノニム辞書を利用して行った文献マイニングのデータを保持。遺伝子と疾患、化合物との関連性を検索表示することが可能。登録されている遺伝子数はヒトで約33,000、ヒト遺伝子シノニム数は約228,000、化合物数はFDA承認化合物が入り約210,000件、疾患数約5,000件、遺伝子-疾患-化合物のマイニング情報は約100,000,000。他、遺伝子数:マウス約63,000件(シノニム 約217,000)、ラット約28,000件(シノニム 約85,500)(2006年5月現在)。2006/6月後半より	RedHatEnterpriseLinuxES3.0 or higher/Oracle10g	"	2006年6月	—
記kiroku録	"	"	プライベートデータ管理ソフト。デスクトップ上で70000件までの配列データを管理できる。アノテーション編集、検索機能を利用したグループ分け、プライベートデータベース作成、PC上でのBlast検索可能。PC版、サーバー版と用途に合わせて選択可能	Windows98/NT4.0/2000	"	—	—
菌KIN	"	"	独自に検証した18S, ITS, 156Sデータに対し配列をBLASTし、その結果からFAMILYやGENUSを判別する菌種推定システム。配列間のアライメントおよび系統樹作成まで行うことが可能	Windows2000/XP	"	—	—

PathwayExpert & MedScan	"	"	パスウェイ解析統合環境。PathwayExpertはパスウェイ解析ツールで定評のあるAriadneGenomics社の文献情報と、発現実験データからネットワークおよび分子相互作用を推定するシステム。MedScanの自然言語解釈アルゴリズムに基づき、文献中の様々な生物学的情報を自動的に抽出しDB化した後、パスウェイを描画。Medline の全アブストラクトに対して遺伝子名等でのキーワード検索を実行し、関連する文献から生物医学	RedHatEnterpriseLinux4.0 or higher/PostgreSQL8.1.0以上TSearch2 module	"	—	—
GenomeViewer	"	"	UCSCのゲノムデータベースおよびNCBIのRefSeqのヒト、マウス、およびラットゲノムデータを取り込み可能なゲノムビューワ。各染色体ごとに指定した部位の配列およびアノテーション情報を参照できる	RedHatLinux9.0or higher/MySQL4.x	"	—	—
Genowiz	"	"	マイクロアレイ結果の解析、表示に優れたデスクトップ型発現解析ソフト。多様なデータフォーマットに対応。フィルタリング機能で、データをより解析しやすい形にまとめ、ノーマライズや、ソートさらには様々な階層、非階層のクラスタリングアルゴリズムによる解析が可能 Ocimum Biosolutions 社製品	Windows2000/XP, Macintosh OSX 10.3 以上	"	—	—
Spotfire DecisionSite	"	米国spotfire社	データウェアハウスなどの整備により、データは日々増大している。重大な意思決定を行う際には、以前とは比較にならない程、膨大なデータをふるいにかけて分析しなければならない。今後もITの技術革新は益々加速して、意思決定プロセスはより一層、重要かつ複雑になっていくことが予想される。Spotfire社のDecisionSiteは、研究開発、製品開発、生産および経営戦略において、一連のビジネス・プロセスをより速くより正確な意志決定を支援するシステムを提供する	Microsoft Windows 2000, XP	"	—	—
Spotfire DecisionSite for Lead Discovery	"	米国spotfire社	IDBS社ActivityBaseを利用したデータ・スクリーニング、MDL社ISIS利用によるリードの選定および化合物のスクリーニング、Current Drugs社Iddb3をに対するキーワードの及び構造式検索、また企業独自のISISデータベースの構造式に関するSAR解析等、創薬研究に関する様々なデータに対応する	Microsoft Windows 2000, XP	"	—	—
Spotfire DecisionSite for Functional Genomics	"	米国spotfire社	膨大なデータからの重要な遺伝子の探索、カテゴリズを迅速に行う。遺伝子発現解析において、統合されたデータを取得することはとても重要。DS for FG はデータの場所を意識せずに研究者の方は統合されたデータを取得することが可能。またデータのマージやリンクも簡単に行うことができる	Microsoft Windows 2000, XP	"	—	—
Spotfire DecisionSite Statistics	"	米国spotfire社	DecisionSiteの強力なVisualization環境に統計解析機能を提供する。大量かつ多次元のデータからより迅速な意思決定を可能とする。主な機能は、基本統計の計算(mean、median、normality testing、etc)、基本統計のBox Plot表示、Anova (analysis of variance)、PCA(principal component analysis)、K-means cluster、Hierarchical cluster (UPGMA、WPGMA、Word's method etc)、Decision Tree	Microsoft Windows 2000, XP	"	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

Derwent Discovery	トムソンサイエ ンティフィック	米トムソンサイ エンティフィック	Derwent Drug File とDerwent World Drug Alerts Plus の二つのデータベースからなる、ウェブで検索可能な 製薬および薬剤関連特許・文献情報データベース製品	Internet Explorer 5.0 以上 または Netscape 6.0以上	個別見積	2003年3月	-
Derwent Innovations Index	"	"	特許情報データベースのDerwent World Patents Index と引用特許情報データベースのDerwent Patents Citation Indexを、引用間リンクの技術で統合したWeb ベースの特許情報データベース製品	"	"	2003年6月	-
Thomson Data Analyzer	"	"	特許情報データベース Derwent World Patents Index、 Delphion、Derwent Innovations Index、学術文献情報 データベース Web of Science や他の社内・外のデー タを取り込み、特許マップなどを作成したり、グラフや表を 作成したりすることが可能なツール	Windows 2000、XP (128MB RAM以上)	"	2006年4月	-
Web of Science	"	"	高品質な約9,200の学術雑誌からの書誌情報を提供す る。2005年にCentury of Science が完成し、1900年～ 1944年 の厳選された85万件の論文情報が追加収録。 さらに、Index ChemicusとCurrent Chemical Reactions を収録し、化学構造式を利用した引用ナビゲーション検 索(文献の被引用回数、引用文献をたどり研究の発展 や経過を調査)が可能。検索結果のメールによるア ラート、雑誌のフルテキストや外部のデータベー スへのリンクの機能もある。◆Index Chemicus (新規 化合物検索)-化学構造式、立体化学、生物活性情報 の検索。1993年から現在までの約230万件の新規有機 化合物へのアクセスを提供。◆Current Chemical Reactions(新規反応検索)-反応構造および条件の検 索。1986年以降に発見された800,000以上の化学反応 が収録され、毎月3,000件の反応が新たに収録される。 さらに、39特許発行機関からも最新化学反応を収録し ている。オプションでINPI(Institut National de la	WEB環境があれば 利用可。検索ソフト は無償提供(インター ネット)	"	1997年	-
Thomson Pharma	"	"	製薬・バイオ業界のための統合情報サービス。医薬 品・特許・学術文献&ニュース・企業・ドラッグターゲ ット・化学・核酸&アミノ酸配列などのコンテンツを統合 し、業界のあらゆる職種の方が必要とする情報をWeb	WEB環境があれば 利用可	"	2005年1月	-
Delphion	"	"	データベース検索機能と全文特許明細書取り寄せ機 能、さらには特許情報解析ツールを併せもったウェブ サービス。さらにオプションとして、世界41特許発行機 関からの特許を英語で収録した Derwent World	"	"	1977年	-
IDdb	"	"	医薬品開発のあらゆるステージをサポートするデー タベース。研究ターゲットの決定から申請および上市ま で、医薬品開発におけるあらゆるステージに必要な情 報を収録している。データは、毎日アップデードされて おり、医薬品情報のモニタリングが可能	"	"	2004年	-
SDdb	"	"	The Strategic Drug database。SDdbのソリューションは 製薬企業の戦略的計画、販売、市場調査、事業開発、 競合情報におけるエグゼクティブの意志決定をサポート する。SDdbは現在の市場をリードする主要薬剤と将 来マーケットに登場する新規医薬品のインパクトをタイ ムリーに分析。このデータベースは医薬品の成功・不 成功を根底から分析、統合して評価する専門家の知識	"	"	2004年	-

IDRC	"	"	世界各国の薬事規制情報データベース。めまぐるしく変わる薬事法に特化した情報を配信することで、顧客企業の世界市場参入のスピードアップを助ける。世界41の国と地域の薬事法や規制上の問題に対応するあらゆる情報をひとまとめにしてお届け、また薬事規制情報の収集、編集、索引付け、相互参照、更新、分析など手間のかかる作業を代わりに行う	"	"	2005年	-
Thomson Message Mapping SystemSM	"	"	The Thomson Message Mapping SystemSM(TMMS) 製薬企業向けの戦略分析ツール。TMMSは、学術文献に発表された対象医薬品に関する記述と競合製品の記述を、処方する医師の観点から評価する。そして、治療・処方に関する記述に的を絞ることにより、エビデンスに基づく信頼性評価を行い、薬剤に関する主要記述を集計してSWOT分析をはじめとした60以上の図表・統	"	"	2005年	-
Horizon Global	"	"	ジェネリック医薬品ビジネスを考える開発医薬品メーカー、ジェネリック医薬品メーカー、戦略的なAPIメーカー向けに特別に開発された、医薬品にターゲットしたグローバル・ビジネス・デベロップメント・システム。ジェネリック品開発の可能性をすばやく見出し、新たなビジネス・パートナーやマーケット、独占的なAPI供給元を探し出すことが可能。また、競合に先立ち、グローバルな製品ライセンス、買収の可能性などの情報も提	"	"	2005年	-
Vision CI	"	"	新薬・専門領域メーカー、ニッチブランド製薬メーカー向けに特別に開発された、競合戦略、ライフサイクル管理に有効なグローバル・ビジネス・デベロップメント・システム。ジェネリック競合他社の開発状況を早期に見極め、企業の戦略的事業計画に反映されるとともに、ライセンスや倍主の可能性をすばやく見出し、世界中から新たなビジネス・パートナーを探し出すことが可能	"	"	2005年	-
Liquent Insight Manager	"	"	新薬申請に関わる情報、文書を管理する統合ソリューションです。申請情報、製品情報、申請文書情報を全社で一元管理化し、これまで困難であった社内情報にセキュアに容易にアクセスできる環境を提供します。これにより、迅速な経営判断、意思決定が可能	Windows2000Servr、2003Server	"	2004年	-
Liquent Insight Publisher	"	"	Insight Managerと統合した新薬申請のためのパブリッシングソリューション。eCDTはもちろんペーパーCTD、レポートパブリッシングもサポート	"	"	2004年	-
Liquent RenderPerfect	"	"	各種レポートのPDF化をサポートするレンディションサーバです。Microsoft Officeはもちろん、多くのソフトウェアフォーマットに対応しており、MS Wordでのレンディションではしおりの自動作成が可能。また、Windowsファイル環境だけでなく、ドキュメントに格納されている文書を直接PDF化することができます。文書間リンクのPDF化もおこなえるため、eCTD申請文書の作成に効果を発揮	"	"	2004年	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

Dictionary of Organic Compounds on CD-ROM	ユサコ	米CRCプレス	有機化合物約26万件を収録する辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	Windows	詳細問い合わせ	-	-
Dictionary of Inorganic and Organometallic Compounds on CD-ROM	"	"	無機、有機金属化合物を合わせて10万1千件を収録する辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	"	-	-
Dictionary of Natural Products on CD-ROM	"	"	天然物質約15万件を収録する天然物辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	"	-	-
Dictionary of Drugs on CD-ROM	"	"	薬物約4万件を収録する辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	"	-	-
The Combined Chemical Dictionary on CD-ROM	"	"	Dictionary of Organic Compounds, Dictionary of Inorganic and Organometallic Compounds, Dictionary of Natural Products, Dictionary of Drugs, Dictionary of Carbohydrates の5辞書中の全エントリー、50万件以上の化合物を収録。テキスト・構造の両方から検索可能。6か月毎に更新	"	"	-	-
CHEMnetBASE (Web Version)	"	"	The Combined Chemical Dictionary, The Handbook of Chemistry & Physics, Polymers-A Property Database をインターネット経由で提供する Web 版の新製品。テキスト・構造検索機能あり。検索結果のテーブル表示、化学構造式へのリンク機能等あり	"	"	-	-
Dictionary of Commonly Cited Compounds on CD-ROM	"	"	化学文献に頻出する約2.5万件の化学物質に関するデータベース	"	"	-	-
Index Chemicus Database for ISIS	"	米トムソンサイエンティフィック	新規化合物の速報／索引誌で世界の主要な約110誌の有機化学専門雑誌をカバー。1993年より収録され、部分構造検索ができる	Open VMS or UNIX	"	-	-
Current Chemical Reactions (CCR)	"	"	世界の有機化学専門誌に発表される新規合成反応の抄録誌で、約350誌の有機化学および製薬学の学術誌	"	"	-	-
ChemPrep on CD	"	"	Current Chemical Reaction の Subset 版であり、1985年以降の反応情報を収録しており、更新データ数は年間35,000件	Windows	"	-	-
Current Contents on Diskette / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	重要学術雑誌の目次速報誌。著者抄録が付加されているので、いち早く学術誌に掲載される論文の内容を正確に把握可。著者へ直接reprint請求(著社側の好意で送付される)可。毎週発行	Windows, Mac	抄録付:45万円～、抄録なし:24万円～	-	-
Current Contents Connect / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	上記製品の Web 版。毎日更新	"	詳細問い合わせ	-	-
Web of Science	"	"	1945年からの8,500以上の重要学術雑誌から書誌情報を収録している文献のデータベースです。引用文献情報も搭載しているので、文献の引用回数を調べたり、引用文献をたどって研究の発展や経過を調べたりすることができます。検索結果のメールによるアラート、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンクの機能もあります。最新版のWeb of Science v6で、Current Chemical Reactions(反応データベース)とIndex Chemicus(化合物データベース)が含まれ、構造式の検索と表示が可能になりました(要契約)	"	"	-	-

Synthline on the Web	"	スペイン・ブロウ スサイエンス	臨床段階中の反応合成経路データベース。約9,700件以上の合成経路情報とこれらの約49,000件以上の合成中間体データ及び6,000件以上の医薬品データを提供 (Jun.2003)。隔月更新。CD-ROM版及び Web 版あり	Windows98/2000/X P	"	—	—
DailyDrugNews .com	"	"	医薬品開発のニュース速報サービス、企業発表、特許情報、学会発表など幅広い情報源からニュースを採択。Internet版にてリリース	Windows、Mac	"	—	—
R&D Backgrounders	"	"	病気から、関連医薬品、学会情報、関連文献などをレポート。同じ作用機序を持つ医薬品についての開発状況などをレポート。Internet版にてリリース。各レポート	"	詳細問い合わせ	—	—
Integrity	"	"	医薬品開発についてのポータルサイト、過去から最新まで16万以上の化合物を収録。化合物を中心に、特許、文献、関連データなどの関連情報を簡単に利用可能。データは毎日更新	"	"	—	—
Pharmaceutical Substances	"	独Thieme Chemistry	1957年以降から現在までに市場に出た医薬品の有効薬剤成分 (API: Active Pharmaceutical Ingredients) のみを網羅した化学物質データベース。年2回更新	Windows NT 4.0/95/98/2000/XP	"	—	—
Science of Synthesis	"	"	650名以上の化学合成方研究者が最適合成方法を精査し、それらを収録した合成反応データベース。化学構造式からの検索も可能。叢書"Science of Synthesis", "Houben-Weyl"も初版から収録。化学構造	"	"	—	—
EndNote XI	"	米トムソンISIリ サーチソフト	インターネット上での文献検索によって得られたデータを取り込んでデータベースを作成し、さらに論文原稿の文中引用文献と参考文献リストを自動的に作成することが可能	Windows 2000/XP、 Mac OS X	5万2,290円 (新規)、2万 790円 (アッ プグレード)、 複数購入割 引あり	—	—
RefViz	"	"	電子的な文献情報を分析し、文献中の語句の出現傾向や相関関係を視覚的に解析するためのソフトウェアです。大量の文献情報から文献の検索と参照を効率よく行い、重要な文献の見落としを防ぎ、さらには新たな知識の獲得を支援	Windows NT/2000/ME/XP、 Mac OS X	4万9,800円、 複数購入割 引あり	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Spartan'06 Full Edition	米ウェイブファン クション 日本支 店	米ウェイブファン クション	MM、Hartree-Fock、Semi-Empirical、DFT、MPなどの各種計算エンジンによって、構造最適化、配座解析などが可能。NMR、IR、UV/Visスペクトルを計算。事前に構造最適化された低分子データベース (SMD) を標準装備。ChemDrawからの直接のビルディング機能などさらに使いやすく、またNISTなど外部データベースへのWEBアクセス機能やTridentで導入された分子の類似性解析機能などを搭載	Windows版: Windows XP, VISTA Macintosh版: MacOS 10.4.6以上 G4,G5 Pentium	大学: 22万 8000円、定 価: 60万円。 詳細要問 い合わせ	2006年11月	—
Spartan'06 Essential Edition	"	"	"Spartan'06 Full Edition" からDFT、MP、CI などの高次計算エンジン、NMR、UV/visなどを省略した機能限定廉価版。取り扱い可能分子サイズは"Full Edition" と全く同じ。学生実習の講師用にお勧め	"	大学: 13万 8000円、定 価: 35万 円。詳細要 問い合わせ	2006年12月	—

Spartan Student Physical Chemistry Edition	"	"	基本機能は"Spartan Student Edition"と同じ。分子ビルダーパネルは有機と無機に限定。計算エンジンにDFT、Moller-Plessetが追加され、精度の高い計算が可能。エネルギー評価にフォーカスしたバージョン	Windows版: Windows2000以上 P3以上 Macintosh版: MacOSX v.10.3.5以上 G4以上	大学、短大: 8万円。ボリュームディスカウント、共同購入価格あり。詳細要問い合わせ	2005年12月	—
Spartan Student Edition	"	"	学生実習向け分子モデリングソフトウェア。取り扱える分子サイズは制限されるが、MM、PM3、HF/3-21G、6-31G* によって構造最適化、反応座標解析、振動解析など、基本的な分子モデリング環境を提供。有機化学をより直感的に学習できる	"	大学、短大: 4万円、高専、高校: 2万円、学生個人: 1万2000円ポ、ボリュームディスカウント、共同購入価	2003年10月	—
Spartan Student Edition 1年ライセンス 分子モデリング教育キット「学生用」	"	"	Spartan Student Editionを1年間使用できるライセンスマニュアルと分子モデリング演習初歩の初歩のセット	"	教育機関のみ購入可1回インストール権ライセンス 1本	2006年10月	—
SpartanModel 書籍「ヒーリーSpartanModelによる有機化学演習」	"	"	分子模型ソフトウェア。従来のプラスチック製の分子模型の代わりに、デスクトップ上で分子模型を構築し、バンドルされているデータベース(SMD)から、エネルギーや電荷、双極子モーメント、IRチャートなどを参照できる。電子雲や分子軌道などのグラフィクスも表示可能、ファイルの書き出しはできない。マニュアルを日	"	1回インストール権(アクセスコード): 5千円	2005年6月	—
Spartan'04 for Linux	"	"	シンプルな操作画面が特長の分子モデリングパッケージソフトウェア。MM、Hartree-Fock、Semi-Empirical、DFT、MPなどの各種計算エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。'04では、TDDFT、NMR、UV/visなどが追加	Linux Kernel 2.6以上、Redhat Enterprise 4以上、SUSE 9.1、SLSE 9以上	大学: 28万円。詳細要お問い合わせ	2006年5月	—
Odyssey Student Edition	"	"	MDシミュレーションによる一般化学の学習システム。作業画面とテキストが一体化しているGUIはインタラクティブに学習を進めることができる。作業並びにテキスト画面上には各種プロパティの値を入力したり、ヒストグラムなどの作成も可能。トピックス毎に設問が用意されていて(印刷可)、授業をトータルサポート、V2.3から日本語、英語両コンテンツをボタンでの切り替機能が導入	Windows 2000 XP Vista Macintosh 10.4.6以降	大学: 4万円、学生個人: 1万2000円。ボリュームディスカウント、共同購入価格あり。詳細要問い合わせ	2004年7月	—
Odyssey Instructor's Edition	"	"	講師用バージョン。設問の解答や解説などの情報が追加	"	大学: 4万8000円、ボリュームディスカウントあり。詳細要問い合わせ	2004年7月	—

Trident	"	"	メディシナルケミスト向けモデリングツール新登場！ Spartanライクのシンプルな操作画面から、3つの機能を使って効率よく新薬探索: 1) PM3、Hartree-Fock などによる構造最適化やプロパティ計算、2) MMIによる配座解析、3) 構造、化学特性ディスクリプター(水素結合性や排除体積他)、ファーマコフォアとの類似性解析。 SMD、Maybridgeを含む4種のデータベースをバンドル。 PDBやCSDとのインターフェースもあり	"	大学: 12万8000円、定価: 32万円。 詳細要問い合わせ	2006年6月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<統合型分子設計モデリングシステム【SYBYL】>	ワールドフュージョン	米トライボス					
SYBYL/Base	"	"	グラフィックス、分子動力学、エネルギー計算、QCPEとのインターフェース、モレキュラースプレッドシートが含まれるSYBYLの基本モジュール	IRIX(6.5.26以上)、Linux(RHEL3.0以上: 32Bit版)	お問い合わせください	2007年4月	—
QSAR/CoMFA	"	"	構造活性相関、3次元構造活性相関CoMFA、クラスター解析	"	"	"	—
Advanced CoMFA	"	"	CoMFAのパワーアップモジュール	"	"	"	—
DISCOtech	"	"	ファーマコフォア探索プログラム	"	"	"	—
Advanced Computation	"	"	立体配座解析、ディスタンスマッピング、レセプターマッピング	"	"	"	—
Biopolymer	"	"	タンパク質・DNAなどの分子構築やアミノ酸辞書を搭載した生体高分子用モジュール。また、Genetic Algorithmを用いて、リガンド及びタンパク質の側鎖を動的に考慮したFlexible Ligand Dockingも実施可能	"	"	"	—
CONCORD	"	"	低分子化合物の2次元構造を高速に3次元構造に変換するモジュール	"	"	"	—
MOLCAD	"	"	3次元分子表面特性可視化プログラム	"	"	"	—
Legion/CombiLibMaker	"	"	ヴァーチャルなコンビナトリアルライブラリー作成プログ	"	"	"	—
Selector	"	"	ダイバーシティー評価・フィルタリング用プログラム(記述子の相対距離評価法)	"	"	"	—
Diverse Solutions	"	"	BCUT記述子によるダイバーシティー評価、フォーカスト・ライブラリーデザインモジュール	"	"	"	—
UNITY	"	"	分子データベース検索システム。2次元、3次元での検索以外に、分子の柔軟性を考慮した3次元フレキシブルサーチが実施可能	"	"	"	—
ClogP/CMR	"	"	ClogP計算モジュール	"	"	"	—
CScore	"	"	たん白質/リガンド複合体の結合エネルギーを4つのスコアで計算(G-Score、D-Score、PMF-Score、Chem_Score)し、コンセンサスコアで評価	"	"	"	—
Distill	"	"	分子の最大共通部分構造を用いたクラスター化、構造上の特徴を可視化しながら解析するモジュール	"	"	"	—
VolSurf	"	"	ADME関連予測QSARモジュール	"	"	"	—
RACHEL	"	"	structure-based lead optimization Toolで、タンパク質の活性サイトの情報から、SBDDでコンビナトリアル構造を自動で最適化させるモジュール	"	"	"	—
hint!	"	"	各種パラメータ(Hint Score)や分子間相互作用フィールドの計算と表示を行うモジュール。3D-QSARの記述子としても利用可能	"	"	"	—

Molconn-Z	"	"	各種分子パラメータ計算モジュール。数百種の記述子の計算、各原子の電子的な状態を反映するE-State値の計算を実施。また、計算される記述子を用いてOptiSimTM法による『Diversityを考慮した分子選択』に	"	"	"	—
ZAP	"	"	分子の electrostatic potential を計算するソフトウェアパッケージです。ZAPではelectrostatic potentialを用いた各種パラメータや、3D QSAR fieldsを計算することが	"	"	"	—
Tuplets	"	"	活性化化合物における複数のファーマコフォア間の距離をFingerprint化し、活性のHypothesisを作成します。このHypothesisを基に、データベース検索から活性候補構造を選択し、コンビナトリアルライブラリーの適否を判断するモジュール	"	"	"	—
Almond	"	"	GRINDと呼ばれる記述子を用いた新しいQSARツール。MIFと呼ばれるリガンド周囲の距離・相互作用情報と活性の相関をPLS,PCA等で解析・検討するモジュール	"	"	"	—
Protoplex	"	"	Protonation状態の異なる構造、あるいはTautomerを自動生成する。Dockingの前処理に必須のモジュール	"	"	"	—
StereoPlex	"	"	分子データベース構築において、各分子の立体異性体(Stereoisomer)を自動生成するモジュール	"	"	"	—
EAIInventor	"	"	任意の評価関数・評価ソフトウェアを組み合わせ、任意の基準で生成した分子の良否判定を行うことが可能なリガンドの候補構造自動発生(de nove design)モ	"	"	"	—
Savol	"	"	分子表面積や体積に基づいたQSAR/QSPR計算のためのソフトウェア。原子の属性(Polar/Non-polar)を認識し、分子表面の様子を解析	"	"	"	—
GALAHAD	"	"	Tupletsの技術とパレット・フィットネス関数を組み合わせた遺伝的アルゴリズムを用いて、分子の重ね合わせとPharmacophoreモデルを構築するモジュール	"	"	"	—
Surflex-Dock	"	"	3種類のプローブ原子で構成される"Protomol"を活性部位と見立てて、低分子の重ね合わせを行うユニークな手法を採用したドッキングモジュール	"	"	"	—
Surflex-Sim	"	"	分子表面形状の類似性と分子形状から考えられる受容体の「サイトポイント」を考慮して重ね合わせパターンを探索するモジュール	"	"	"	—
Advanced Protein Modeling	"	"	予めファミリー・プロファイル化したHOMSTRADデータベースを使用して、Query配列と相同性の高い構造の抽出・アライメントを行う相同性検索ツール(FUGUE)とその結果を利用して、SCR・ギャップ・ループ構造を構築するホモロジーモデリングツール(ORCHESTRAR)を組み合わせたパッケージ製品。精度の良いモデル構造	"	"	"	—
<デスクトップ製品>							
Benchware 3D Exproler	"	米トライボス	分子設計研究者とメディシナルケミスト間の情報共有ツール。従来の分子Viewer機能に加え、分子エディターやVBAを利用したアプリケーションの実行が可能。新Ver.では、PowerPoint上で立体構造の操作が容易となったため、研究者間で構造情報を共有する事が更に	WindowsPC	"	"	—
Benchware DataMiner: Base/HTS/HQSAR	"	"	HTSデータ解析用ツール。クラスタリングやPCA/NLMによる化合物mapの作成・視覚的解析、化合物セットにおける部分構造のルール提示などのSAR解析をサ	"	"	"	—

Benchmark LibraryMaker	"	"	バーチャル・コンビナトリアルライブラリー作成ツール。試薬および生成物のフィルタリング機能を装備したデスクトップツール	"	"	"	—
Benchmark LibraryDesigner	"	"	コンビナトリアルライブラリーを作成する際の試薬選択、活性化化合物からフォーカスト・ライブラリーを作成するデスクトップツール	"	"	"	—
Benchmark NoteBook	"	"	TRIPOS社がScheringAG社との共同開発を基に製品化した「電子実験ノート」。進捗管理、プロジェクト管理、化合物ID管理、各種分析機器の結果データの蓄積/管理が可能。ユーザの要求に合わせたカスタマイズも可能	"	"	"	—
<システムバイオロジー・ゲノミクス製品>	"	ワールドフュージョン					
Life Science Knowledge Bank (LSKB)	"	"	【ナレッジデータベース】遺伝子名やシンボル、キーワードなど、遺伝子に関する情報をデータベース化、関連するタンパク質、疾患、化合物、組織との関連性をまとめたデータベース。化合物は約120万のシノニム用	Linux / Oracle または、Webアクセスによる利用	お問い合わせください	—	—
LaboServer: Genotyping System	"	"	【ジェノタイピングシステム】PGx向けシステム。大量のデータ管理とさまざまな統計的アルゴリズム搭載	Linux / Windows 2003 Server	"	—	—
GenomeViewer	"	"	【ゲノム解析】ヒト、マウス、ラット、微生物などのゲノム情報を登録。独自のアノテーション情報追加機能、配列解析(BAST)機能付属	Linux	"	—	—
BioElephant	"	ワールドフュージョン・三菱スペースソフトウェア共同開発	【総合解析ポータルシステム】社内データと公共データの連携をスムーズに行うと同時に、社内実験データ、配列データと公共データとの連携も行います。柔軟性の高いソフトウェアモジュールで構成変更、お客様の要望に応じてフレキシビリティにシステムの構成や、モ	Linux	"	—	—
Pathway Studio Enterprise / PathwayExpert	"	米アリアドネジェノミクス社	【パスウェイ解析】文献情報から、または発現実験データからネットワークおよび分子相互作用を推定するシステム。ユーザーフレンドリーなインターフェースとビューワーには定評あり	Linux版/ Windows版 または Webアクセスによる利用	"	—	—
MedScan Reader	"	"	【論文文脈解釈ソフトウェア】PubMedアブストラクトやドキュメントなどから文章中に存在する因子(タンパク質、化合物、疾患など)とその関連情報を抽出することで、すばやく文献の内容を理解するためのソフトウェア	WindowsPC	18万円～	—	—