

＜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、2009年12月現在)

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
＜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	〃	〃	構造モデルの作成とシミュレーションへの入力、計算結果、グラフ、表等の表示・作成	Windows, Linux	お問い合わせ下さい	—	—
Materials Studio Discover	〃	〃	分子力場シミュレーションエンジン。分子、材料系の構造最適化、分子動力学など	〃	〃	—	—
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	〃	〃	凝縮系の再現にも優れた高精度力場。有機物、無機、無機酸化物、金属などへの適用可	〃	〃	—	—
Materials Studio Forcite	〃	〃	分子力学ソフト。分子系、周期系の構造最適化が可能。COMPASS、Universal、Dreiding力場	〃	〃	—	—
Materials Studio Forcite Plus	〃	〃	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 Blends	〃	〃	ポリマー、溶媒、添加剤混合系の混合エネルギー、相図、相互作用パラメーターなどを算出	〃	〃	—	—
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 Conformers	〃	〃	分子のコンフォメーションと柔軟性を明確化するコンフォメーション探索アルゴリズムと分析ツール	〃	〃	—	—
Materials Studio MesoDyn	〃	〃	ポリマー流体、ブレンドなどの複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション	〃	〃	—	—
Materials Studio DPD	〃	〃	散逸粒子ダイナミクス法による複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション	〃	〃	—	—
Materials Studio 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 DMol ³	〃	〃	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 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化学シフトとその関連物性を計算するモジュール	〃	〃	—	—

Materials Studio VAMP	"	"	MNDO近似による半経験的分子軌道法。MNDO(/C、d)、AM1、PM3、ZINDOハミルトニアンなど。溶媒効果、励起状態計算などが可能	"	"	-	-
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	"	"	DMol ³ /GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的計算が可能	"	"	-	-
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 Reflex Plus	"	"	粉末X線結晶回折データから結晶構造を精度良く計算予測するツール	"	"	-	-
Materials Studio ReflexQPA	"	"	有機、無機結晶の粉末回折データから結晶相組成を決定	"	"	-	-
X-Cell	"	"	新規なアルゴリズムによりパラメータ空間を網羅的に探索し指数付ける	"	"	-	-
Materials Studio Polymorph	"	"	分子構造から有力な結晶多形を予測	"	"	-	-
Materials Studio Morphology	"	"	結晶の形態を結晶の原子構造から予測。BFDH、付着エネルギー法、平衡形態法を実装	"	"	-	-
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 QSAR Plus	"	"	反応性指数や高精度エネルギー値を計算するDMol ³ Descriptorsと相関モデル構築ツールであるNeural NetworksをQSARに追加したモジュール	"	"	-	-
Materials Studio Synthia	"	"	グラフ理論に基づく構造物性相関手法によりポリマーの種々の物性値を推算	"	"	-	-
Materials Studio Motif	"	"	分子結晶における水素結合トポロジの情報を分析するツール。CSD(Cambridge Structural Database)を検索することにより注目する水素結合トポロジが既知の結晶構造の中にどのくらいの頻度で現れるかを調査	"	"	-	-
Materials Studio Mesocite	"	"	原子スケールモデルを粗視化し、各ビーズについて力場パラメータを割り当てて古典力学を用いることによって、原子スケールよりも大きなメソスケールの計算を行う	"	"	-	-
Materials Studio Adsorption Locator	"	"	力場を用いたエネルギー評価によりゼオライトやカーボンナノチューブ、シリカゲル、活性炭素など広範囲の材料に対して分子の安定な吸着サイトを探索	"	"	-	-
Materials Studio User Interface to Gaussian®	"	"	Gaussianの広範囲なab initioモデリング法に、使い易いMaterials StudioからのアクセスをするためのGUI	"	"	-	-
<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, Linux	無料	-	-

Discovery Studio STANDALONE	"	"	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、解析プロトコルにアクセスすることも可能	"	お問い合わせ下さい	-	-
Discovery Studio Visualizer Client	"	"	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	"	"	-	-
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	"	"	-	-
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 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 Protein Health	"	"	Profiles-3Dのアルゴリズムを用いて、タンパク質構造の評価を行い、構造が適正かどうかを評価する指標を与える	"	"	-	-
Discovery Studio Protein Docking	"	"	タンパク質-タンパク質相互作用を立体構造をもとに迅速に予測	"	"	-	-
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	"	"	-	-
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 MMFF	"	"	Merck Molecular力場を使用して、高分子とリガンド間のエネルギー特性と相互作用について研究できます	"	"	-	-

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も可能	"	"	-	-
Discovery Studio Flexible Docking	"	"	正確な受容体サンプリング能力と、相互作用フィーチャーベースのドッキングを組み合わせ、合理的な蛋白質フレキシブルなドッキングを行うことが可能	"	"	-	-
Discovery Studio LigandFit	"	"	標的タンパク質の活性部位にリガンドをドッキングさせる	"	"	-	-
Discovery Studio LibDock	"	"	受容体の結合サイトの極性/無極性(ホットスポット)を使用した効率のよいドッキングを行うことが可能	"	"	-	-
Discovery Studio LigandScore	"	"	検証済みのデータセットを用いて構築されたスコアリングファンクションにより、リガンド-タンパク質の相互作用を評価	"	"	-	-
Discovery Studio 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 De Novo Evolution	"	"	scaffold上のフラグメントを連結させたり構築したりすることで、新薬になりうる分子を作成	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst DB Build & Discovery Studio Catalyst DB Search	"	"	化合物の構造データベースを独自に構築し、多種多様なオプションを用いて検索可能	"	"	-	-
Discovery Studio 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 Shape	"	"	分子を3次元構造で表現し、生理活性のある無しにかかわらず、類似の3次元構造を示す分子を識別	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Structure Based Pharmacophore	"	"	既知の、あるいは予測されたターゲット分子の活性部位構造から、Ludi(de novoドラッグデザインツール)の技術を用いてファーマコフォアモデルを自動的に作成	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst Score	"	"	それぞれの化合物に対し、適合性、活性のスコアを計算	"	"	-	-
Discovery Studio Catalyst 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 De Novo Ligand Builder	"	"	独自のフラグメントベースのデザインツール。ファーマコフォアを使ってフラグメントの配置を導き出します。特定の創薬ターゲットへの結合に不可欠と考えられる特性を持つ、新化合物のリストを迅速に作成可能	"	"	-	-
Discovery Studio QSAR and Discovery Studio QSAR+	"	"	活性と相関関係にある分子記述子に簡単にアクセス可能。ページアンモデル、重回帰、PLS、GFAなどの統計モデリング技術を適用可能	"	"	-	-

Discovery Studio Library Design	"	"	ケミカルライブラリ設計に特化した、クラスティング手法を備えたツール。パレート最適化手法により、ライブラリ内の複数の特性を最適化	"	"	-	-
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	"	"	-	-
<データ解析とレポートングプラットフォーム>							
Pipeline Pilot Enterprise Server	"	"	パイオインフォマティクス、ケムインフォマティクス、モデリングシミュレーションをカバーする、大量のデータとその解析手順を視覚的なプロセスフローとして構築するプラットフォームを提供。機能単位であるコンポーネントを組合わせて、効率的にデータを統合。解析手順の構築は、データの収集、統計的解析、レポートング、ダッシュボードまで、コンポーネントの組合わせで視覚的に行なえる	Windows, Linux	"	-	-
Generic	"	"	用途に依存しない一般的なデータ処理機能を提供	"	"	-	-
Integration	"	"	データベースや外部アプリケーションと連携	"	"	-	-
Reorting	"	"	グラフや帳票などのレポート、GUIの作成	"	"	-	-
Sequence Analysis	"	"	配列解析をするためのツールの提供	"	"	-	-
Gene Expression	"	"	BioConductorを基礎とした発現解析とレポートング	"	"	-	-
Chemistry	"	"	化学構造式に付随するデータの取り扱い	"	"	-	-
ADMET/Tox	"	"	ADAMモデルを含む吸収や代謝、毒性の予測	"	"	-	-
Data Modeling	"	"	クラスティングや学習モデルの構築	"	"	-	-
Advanced Data Modeling	"	"	Pareto Optimization等新たなデータモデルの構築	"	"	-	-
R Statistics	"	"	グラフィカルに統計ソフトRを利用する環境を提供	"	"	-	-
Plate Data Analytics	"	"	HTS等のプレートデータの解析・視覚化	"	"	-	-
Imaging	"	"	画像解析と画像データの数値化	"	"	-	-
Advanced Imaging	"	"	画像解析のための拡張機能の提供	"	"	-	-
Text Analytics	"	"	特許・文献検索やテキストマイニング	"	"	-	-
ChemMining	"	"	特許・文献から化合物名をもとに化学構造を抽出	"	"	-	-
<ケムインフォマティクス製品>							
Accord	"	"	クライアント/サーバープラットフォーム上での化学薬品データ管理ツール	Windows	"	-	-

Accord for Excel	"	"	化学計算、完全一致や部分構造一致によるフィルタリング、構造の類似度によるソートなど、化学者が日常的に用いているMicrosoft Excel上で自在に化学を取り扱うことのできる化学スプレッドシート。立体化学も認識する化学者必携のツール。コンビナトリアルケミストリー・ADMET解析にも対応	"	"	—	—
Accord Draw	"	"	化学構造式を描画するツール	"	"	—	—
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 V3.2	アドバンスソフト	アドバンスソフト	大規模分子の高精度計算を効率よく実行するための2つのソルバーを統合。・ABINIT-MP: 非経験的フラグメント分子軌道計算(FMO)法と・ProteinDF: 密度汎関数法による全電子計算。これらにより、生体高分子(タンパク質、DNA、糖)のフラグメント間相互作用、および、タンパク質の全電子計算が可能	お問い合わせください	100万円/年間より	2009年9月	—
Advance/PHASE V2.6	"	"	ナノデバイス開発を支援するナノシミュレーション。電子論に基づいた固体の材料設計・解析ツールとして利用できる。誘電率計算機能により、次世代半導体素子の開発に必要な高誘電率材料や太陽電池材料の光学特性の解析に有効。走査トンネル顕微鏡などの表面分析、触媒などの表面反応の理論的解析に有効	"	100万円/年間より	2009年12月	—
Advance/Flecs V1.1	"	"	Advance/PHASEと親和性の高い古典分子動力学計算ソフトウェア。アモルファス構造の初期原子配置作成に最適	"	50万円/年間より	2009年1月	—
Advance/CIAO V1.0	"	"	擬ポテンシャル作成ソフトウェア。密度汎関数理論のもとで原子の全電子状態を第一原理計算し、その結果得られた全電子ポテンシャルから擬ポテンシャルを計算する	"	50万円/年間より	2009年9月予定	—
Advance/DayStar	"	"	色素増感型太陽電池における荷電体の生成、再結合、輸送などを考慮した電子移動素過程を定式化した微分方程式系を適切な物質パラメータを入力して解くことで、電池の電気化学性能を評価するソフトウェア	"	100万円/年間より	2006年3月	—
Advance/OCTA	"	"	ソフトマテリアル統合シミュレーターで、マイクロからマクロ領域向けに4つのエンジンで構成される。・Muffin: マクロ問題専門プログラム群(相分離流動やマイクロリアクタ、他シミュレータ)、・SUSHI: 高分子材料のメソコピック構造予測シミュレータ、・PASTA: 高分子溶融体レオロジー特性予測シミュレータ、・COGNAC: 租視化分子動力学シミュレーションプログラム	"	お問い合わせ下さい	2006年10月	—

Advance/DESSERT V1.0.1	"	"	3次元デバイス解析ソフトウェアで、3次元高速解析(電流連続、エネルギー輸送、ポアソン等)、物理モデルの充実(トラップ、衝突電離、量子効果補正等)、マスク利用による立体構造を容易に作成、フレキシブルな3次元最適メッシュ生成機能、形状・不純物のバラツキや変形の信頼性解析一などの特徴がある	"	250万円/年間より	2009年6月	—
Advance/FrontFlow/red V2.70RC	"	"	複合連成やマイクロスケール問題を解析する次世代流体解析。新幹線、空調機器、自動車体周りなどの流体音の解析に有効で騒音の低減化が図れる。ガスタービン燃焼器、自動車エンジン内の燃焼反応の解析に有効。台風など強風のビルなど構造物への影響を解析、ゆれ具合の評価、強度設計などに有効	"	100万円/年間より	2008年4月	—
Advance/FrontFlow/MP V1.0	"	"	非構造格子系三次元気液二相流解析ソフト。気相と液相が共存する状態の流動特性や伝熱特性を解析することが可能	"	200万円/年間より	2007年2月	—
Advance/PSE Workbench	"	"	複雑・大規模な解析シミュレーションを効率化する統合プラットフォーム。複雑で大規模なソフトウェア開発のワークベンチ。流体、構造、熱などの総合解析システムの構築に有効。タスクフローという新しい概念に基づくソフトウェア	"	100万円/年間より	2007年2月	—
Advance/FrontSTR V2.0	"	"	大規模・複雑な系に適する構造解析ソフトウェア。静解析、幾何学非線形、固有値解析など。独自入力フォーマットのほか、NASTRAN形式の入出力にも対応。使用できる要素は平面、4面体、6面体要素の他にシェル	"	100万円/年間より	2007年2月	—
ADAP V2.0	"	"	構造・流体・電磁場解析に対応した汎用プリポスト。直感的な操作でモデリング・メッシュ作成・境界条件の設定。結果の可視化といった解析の一連の流れを簡単な操作にて行なうことが可能	"	100万円より	2009年7月	—
Advance/FrontNet/Ω	"	"	配管内の液体の流量と圧力を計算する「管路系液体解析ソフトウェア」。例えば、弁が急に閉じると急激な圧力上昇が起こる水撃現象や、減圧により気化したガスがつぶれて急激な圧力上昇が起こるキャビテーション現象が解析できる。弁の制御は時間遅れやPID要素を考慮し、圧力や流量制御弁の開度変化も解析可能	"	180万円/年間より	2009年5月	—
Advance/FrontNet/Γ	"	"	配管内のガスの圧力・温度・流量・密度を計算する「管路系ガス解析ソフトウェア」。例えば、都市ガス、空調設備、自動車吸排気系の解析やブロワ、弁などの流体機器誤作動時や配管システムの起動・停止時の安全解析、配管太さの変更や流体機器の条件変更の設計解析、流体機器の性能評価解析、等々が可能	"	180万円/年間より	2009年5月	—

Advance/FrontNet/TP	"	"	1次元気液二相流解析ソフトウェアであり、二相流の状態を持つ流体の管路ネットワーク内での時系列の解析が可能。管路ネットワークは、圧縮器、膨張弁、配管等の流体機器から構成される。ソフトウェア内では、質量保存、運動量保存、エネルギー保存を解き、状態方程式はp-h線図で与える。GUIでは、計算するネットワーク網の作成、計算の実行、および、ポスト処理が可能	"	180万円/年間より	2009年5月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
LigandScout	アフィニティサイエンス	オーストリア インテ・リガンド (Inte:Ligand)	構造ベースの3Dファーマコフォアを作成可能なツール。優れたGUIを備え、簡単なマウス操作でモデルの作成、重ね合わせが可能	Windows, Mac OS X, Linux	お問合せください	-	-
PharmacophoreDB	"	"	化学的な特徴に基づいた高品位の3Dファーマコフォアを2,000超収録。各エントリのメタデータは、医学的適応、薬効分類、標的タンパク質、相互作用部位、生物活性リガンド、文献情報をカバーし、効果的なりガンドプロファイルが可能	Linux	"	-	-
ilib diverse	"	"	フラグメント構造からdrug-likeなバーチャル化合物ライブラリを生成可能なツール。Oral bio-availabilityやBBB permeability等のフィルタリング機能を搭載。Molecular Networks社製CORINAと併用することで、3D構造を発生させることも可能	Windows, Linux, Unix	"	-	-
DRAGON	"	伊タレッタ (Talete)	最大3千種超の分子記述子を計算可能なプログラム。求めた分子記述子は、構造活性相関、構造物性相関、類似性解析、スクリーニング等に利用可能	Windows, Linux	"	-	-
MobyDigs	"	"	変数選択に遺伝アルゴリズム (VSS-GA法) を採用した回帰モデル計算・解析プログラム。求めたモデルの追加検証・解析ツールが搭載されており、信頼性の高い回帰モデルを構築可能	Windows	"	-	-
Molecular Conceptor	"	イスラエル シナジックス (Synergix)	医薬品化学、薬物設計、分子モデリングおよびケムインフォマティクスをコンピュータを用いて学習・指導するための革新的なマルチメディア教材。2800ページ、1500以上の3Dイラストからなるコンテンツは、70時間超の講義に相当	Windows	"	-	-
WIEN2k	"	ウイーン工科大学 (Vienna University of Technology)	密度汎関数法による固体の電子構造計算プログラム。(L)APW+lo法を採用しており、高精度なバンド構造計算が可能	Unix, Linux	"	-	-
SIESTA	"	西ナノテック (Nanotec)	数千原子の電子構造計算を目的に開発されたDFTプログラム。リニアスケールリング法により、大規模なAb initio MD計算が可能	Unix, Linux	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

GENIE	アドバンスドテクノロジーインスティテュート	アドバンスドテクノロジーインスティテュート	DNA・たん白質情報の統合解析システム。とりわけ、独自開発によるホモロジーモデリングに基いたたん白質の立体構造予測システムは、予測した構造の局所的な予測精度を推定することができるという独特の機能を備えている	Linux	要問い合わせ	—	—
BioInfo Bank	—	アドバンスドテクノロジーインスティテュート、九州工業大学	我が国独自の蛋白質・リガンド相互作用や蛋白質・核酸複合体に関するバイオ情報データベース群。国際的な利用に応えるように全文英文で開発	インターネット利用	—	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
OmicBrowse (オミックブラウザ)	アクシオヘリックス	アクシオヘリックス	全てFlashベースで表示される、超高性能ゲノムブラウザ。大学や製薬企業などの内部で所有する膨大な研究データを複数のデータサーバに分散配置させることができ、その情報を公開ゲノム情報と統合化して組織内のみで活用する事が可能	Web環境があれば利用可	98万円～	2008年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MolWorks Ver2.0	ビヨンド・コンピュータティング	ビヨンド・コンピュータティング	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開発支援システム	Windows、Web	—	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
KnowItAll (ノウ・イットオール) インフォマティクスシステム	バイオ・ラッドラボラトリーズ	米バイオ・ラッドラボラトリーズ	IR, Raman, NMR, MSスペクトルを1つのアプリケーションで扱うことのできる画期的なソフト。ユーザーが必要なツールを組み合わせる購入することができる。混合物スペクトルの検索機能も新たに追加された	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UV/Visデータベースが追加された。	—	IR 99.5万円、Raman 36万円、NMR 98万円、MS56万円/1年間	2003年4月	—
IRパッケージデータベース ver.5	—	—	世界最大規模のIRスペクトルデータベースを用途、分野に分けて収録。ユーザーの利用形態に合わせて選択可能。2008年新たに7分野のデータベースが追加された	—	詳細問い合わせ	2000年4月	—

KnowItAll インフォマティクスシステムADME/Toxファミリー	"	"	KnowItAllの持つ広範な機能にin silico ADME/Toxで 사용되는プロパティ推定モデルと各種ユーティリティを組合せたアプリケーションソフト。利用するプロパティモデルを任意で選択でき、複数のモデルからコンセンサスモデルも作成できる	Windows2000以上	"	2006年4月	—
KnowItAll インフォマティクスシステムMetabolomicsエディション	"	"	NMRスペクトルの処理からバイオマーカーの同定までのNMRデータによるメタボロミクスリサーチをカバー。主成分解析によるデータ分類、ローディングプロットとメタボライトデータベースの比較、推定バイオマーカーの表示、KEGGへのリンク	"	"	2006年10月	—
KnowItAll U	"	"	大学を対象としたライセンス形態。総数130万件におよぶIR、Raman、NMR、MSスペクトルをユーザー数の制限無く利用できるプログラム	"	"	2007年8月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ChemInTool - Chemish Pro	ケムインフォナビ	東京大学・船津研究室	モデリング(MLR,PLS,BP,CP)、クラスタリング(階層型,Kohonen)、変数選択(GA-PLS)機能を有する統合的ケモメトリックスソフトウェア。モデル式を用いた予測、逆解析および原子団寄与法機能がある。さらに要求特性を満たす化学構造式を自動的に生成する機能もある。 ライセンス種類: ノードロックまたはコンカレント	WindowsXP/Vista /7	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ックスソフトウェア。ライセンス種類: ノードロックおよびコンカレント	"	年間ライセンス5万2500円(税込)~、アカデミック価格あり	2007年	—
ChemInTool - Chemish Free	"	"	Chemish Proの機能限定無償版。PCA、MLR機能が使用可能。HP(http://www.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。ライセンス種類: ノードロックおよびコンカレント	WindowsXP/Vista /7	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: WindowsXP/Vista /7	年間ライセンス84万円(税込)~、アカデミック価格あり	2004年	—

ChemInTool - AIPHOS/KOSP	"	"	有機合成経路設計支援システムAIPHOSのサブセット版。知識ベースから合成ルートを提案する	"	年間ライセンス 31万5000円(税込) ～、アカデ ミック価格あり	2006年	—
ChemInTool - AIPHOS/TOSP	"	"	有機合成経路設計支援システムAIPHOSのサブセット版。Transformと呼ばれるデータベースから合成ルートを提案する	"	年間ライセンス 25万2000円(税込) ～、アカデ ミック価格あり	2006年	—
ChemInTool - SEoN	"	"	NMRスペクトルから、その化学構造を自動推定する構造解析システム。分子式から構造を自動的に生成する機能を用いて、可能性が高い構造を推定できる。また、候補構造に対する予測NMRスペクトルを実測値と比較することでランク付けを行える	WindowsXP	年間ライセンス 63万円(税込) ～、アカデ ミック 価格あり	2004年	—
TS Search	—	山口大学・堀研究室	化学反応の遷移状態探索に特化した、MOPAC, Gaussian, GAMESS用の計算インターフェイス。Minimum energy path法、Saddle法、等高線図法、置換基法等による遷移状態探索が可能	WindowsXP/Vista, UNIX(Linux, Solaris), J2SDK5.0 以上必要	無償	—	—
TS Search Professional	ケムインフォナビ	"	TS Searchの高機能版。複数の反応を同時に解析することが可能。遠隔の計算機を透過的に使用できる機能あり	"	お問い合わせ 下さい	—	—
Gauss Telecom	—	"	遠隔の計算機上でGaussianジョブを実行する	"	無償	—	—
Gauss Grid	ケムインフォナビ	"	MOPAC, Gaussian, GAMESS用のGrid計算エンジン。多数の並列計算機が混在する環境で、ジョブのスケジュール管理、並列計算機の管理、計算結果の自動バックアップなどを行なう	クライアント: WindowsXP/Vista, UNIX(Linux, Solaris), J2SDK5.3 以上必要 サーバ: Linux(J2SDK5.3以 上必要)	お問い合わせ 下さい	—	—
CORINA	"	独モレキュラー ネットワークス	3D分子構造生成ソフトウェア	UNIX(x86 Linux, Sun Solaris, SGI IRIX)、MS Windows	"	—	—
ADRIANA.Code	"	"	分子構造記述子計算ソフトウェア	Windows2000/XP 、x86 Linux	"	—	—
SONIA	"	"	自己組織化ニューラルネットワークソフトウェア(Kohonen, Counter-propagation neural network)	UNIX(Linux, Sun Solaris, SGI IRIX)、MS Windows	"	—	—

ROTATE	''	''	利用者指定によるコンフォメーション・セット発生ソフトウェア	UNIX (x86 Linux, Sun Solaris, SGI IRIX, DEC AlphaStation)	''	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CONFLEX ver.6.7	コンプレックス	コンプレックス	フレキシブルな分子の配座空間を、側鎖の回転・環のFlap・Flipにより探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけだす。それにより、最安定構造も特定することが可能になる。溶媒効果も配座探索に適用可能であり、それを応用してLogP値の予測も可能となっている。結晶構造の最適化も可能である。最新版では、NMRの3JHH値の予測も可能	Windows、Linux、Mac	企業価格：200万円、大学価格：20万円	2009年7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。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	2009年7月	-
Parallel CONFLEX ver.6.7	''	''	CONFLEXのアルゴリズムにより発生する複数の出発構造の最適化を、複数のコンピューターに分散させ並列で配座探索を行う。扱う系のサイズが非常に大きい場合はPC1台で配座探索計算を行うことはできないため、多配座分子の立体構造を素早く解析するために有効	Linux	サイトライセンスのみ、問い合わせ	2009年7月	-
AMBER 10	''	米カリフォルニア大学	カリフォルニア大学のKollman教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよび分子力学と分子動力学計算のパッケージ。様々な溶媒モデルやQM/MM機能も持つ。基準振動解析、トラジェクトリー解析、エネルギー解析などを行うモジュールも含まれる	UNIX、Linux、Mac	問い合わせ	2008年4月	-
Gaussian09 Rev.A02、GaussView5.0、TCP Linda 8	''	米ガウシアン	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法がより強化され、巨大分子の計算がより効率化した。また、遷移状態計算やIRCにも対応した。その他、振動解析・IRC・旋光度の計算が並列環境下で、より高速化された	UNIX、Windows、Mac	問い合わせ	2009年6月	-
受託計算サービス	''	コンプレックス	高効率配座創出アルゴリズムと並列計算システムを応用したCONFLEX法を使用して配座探索を行う。取り得る可能な配座異性体を徹底的に調べて、最安定配座を特定。さらにab initio計算等の精度の高い計算により、探索した各配座異性体について物性値の予測を実施する。また、AMBERによる分子動力学計算も行う	-	5万円～	2009年4月	-

各種サポートサービス、インストール、トレーニング (CONFLEX, Gaussian, AMBER, GAMESS, 他)	〃	〃	計算化学用ハードウェアから各種ソフトウェアのインストール・トレーニング・サポートまで、トータルでソリューションを提供する。技術サポートは、初心者から使い慣れた方まで幅広く対応。トレーニングは、実習形式で顧客のニーズに合わせて行う	—	問い合わせ	2009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・受付センター)	米ケンブリッジソフト	化学および生物学分野における事実上の標準描画ソフトウェアパッケージ。陽子NMRのピーク分割と強調表示、アミノ酸およびDNA配列ツール、TLCプレート描画ツール、Name=Struct機能など、化学・生物学関連研究者必携の機能を満載	Windows/Mac	要問合せ	2009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	〃	〃	2009年9月	—
BioDraw Ultra	〃	〃	生物学用描画ソフト。膜、DNA、酵素、tRNA、リボゾーム、らせん状蛋白質など、出版品質のグラフィックを作成できます。Ver.10からChemDrawと統合され、さらにパワフルに	〃	〃	2009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	〃	2009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	〃	〃	2009年9月	—
ChemBioViz Ultra	〃	〃	ChemBioDraw, ChemBio3D, ChemBioFinder/ChemBioViznoアプリケーションを統合した、化学・生物学へのデスクトップソリューションパッケージ	〃	〃	2009年9月	—
ChemBioOffice Ultra	〃	〃	ChemBioDraw, ChemBio3D, ChemBioFinder/ChemBioVizに加えてBioAssay, 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	〃	〃	2009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	〃	〃	2009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。化学研究機関に最適	〃	〃	2009年9月	—
BioOffice Ultra	〃	〃	分子生物学と化学の両方を扱う研究者に最適な統合製品。BioDraw, BioAssay, BioViz, Inventory, E-Notebookを同梱	〃	〃	2009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	"	"	2009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	"	"	2009年9月	—
ChemACX Ultra Subscription	"	"	約500社の大手試薬販売会社、150万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	"	"	2009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	"	"	2009年9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	英バイオウィズダム	生物データベースマネジメントシステム	サーバー：SUN、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	SUN、Linux	"	—	—
SRS Oracle gateway	"	"	Oracleを介してSRSのデータを取得するモジュール	"	"	—	—
SRS Prisma	"	"	SRSで管理されているデータベースをアップデートするモジュール	"	"	—	—
Genomatix Suite	"	独ジェノマティクス	EIDorado、Gene2Promoter、GEMS Launcher、BiblioSphereを含む制御領域解析トータルパッケージ	Internet経由またはLinux Server	"	—	—
EIDorado	"	"	ヒト、マウス、ラット、イヌ、チンパンジー等複数の生物種の転写制御領域アノテーションデータベース	"	"	—	—
Gene2Promoter	"	"	EIDoradoに対して複数のプロモータ領域を検索するEIDoradoのオプションモジュール	"	"	—	—
GEMS Launcher	"	"	制御領域の解析ツールパッケージ	"	"	—	—
BiblioSphere	"	"	文献から遺伝子-遺伝子、遺伝子-転写因子間の相関関係情報をマイニングしたデータベース	"	"	—	—
RegionMiner	"	"	ゲノムワイドな制御領域解析や、比較ゲノム解析などを行うためのツール	"	"	—	—
MatBase	"	"	転写因子情報のデータベース	"	"	—	—
ChipInspector	"	"	マイクロアレイデータの統計解析ソフトウェア	"	"	—	—
Genomatix Pathway System	"	"	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	"	"	—	—
Genomatix Mining Station	"	"	高速シーケンサーから出てくる膨大な塩基配列を独自の手法をもとにリファレンスゲノムにマッピングする装置	1U 19" server 2×DualCore Opteron 2000 64GB ECC RAM 4×1TB HD	"	—	—

Genomatix Genome Analyzer	"	"	高速シーケンサーから出てくるデータを解析するためのシステム装置 Genomatix社のEIDorado, GEMS Lancherが組み込まれている	Processing Unit and RAID storage system 1 × DualCore AMD Athlon 64-X2 5600 Processor 8GC ECC RAM 4X1 TB HD	"	-	-
BIOBASE Knowledge Library	"	独バイオベース	タンパク質のマニュアルキュレーションデータベース	"	"	-	-
TRANSFAC	"	"	転写因子情報のマニュアルキュレーションデータベース	"	"	-	-
TRANSPATH	"	"	シグナル伝達パスウェイのマニュアルキュレーションデータベース	"	"	-	-
FGENEシリーズ	"	米ソフトベリ	遺伝子領域予測ツール	UNIX	"	-	-
BioExpress, Custom DB	"	米ジーンロジック	ヒト疾患サンプルからの遺伝子発現データベース	SUN	"	-	-
ASCENTA	"	"	BioExpressを統計解析した、遺伝子発現データベース。Bioinformaticianでなくとも簡単に利用可能	Internet経由	"	-	-
ToxExpress	"	"	Toxicogenomicsデータベース	SUN	"	-	-
InforSense KDE	"	英インフォセンス	ダイナミックでビジュアルなデータの統合と分析のプラットフォーム	Windows、Linux	"	-	-
InforSense BioSense/ InforSense BioSense Grid	"	"	遺伝子配列解析、遺伝子発現解析およびテキストマイニング等、Bioinformatics分野にフォーカスしたソフトウェアパッケージ	"	"	-	-
InforSense ChemSense	"	"	各種の構造式データベースへの問い合わせと、化学式の処理、SAR・ADME-Toxなど生物学的なデータと化合物データソースの統合にフォーカスしたパッケージ	"	"	-	-
InforSense TextSense	"	"	非構造化データの代表であるテキストデータを、InforSenseの優れたAnalyticsにより解析するためのテキストマイニングモジュール	"	"	-	-
BioBook	"	英アイディービジネスソリューションズ	生物評価試験用電子実験ノートシステム	Server : Windows XP, 2003, Sun Solaris / Client : Windows XP Vista, Citrix	"	-	-
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, Vista + Office XP, 2003, 2007	"	-	-

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 XP, Vista + Office XP, 2003, 2007	"	-	-
SARView	"	"	構造式とアッセイデータをリンクして表示するレポートツール	Windows XP, Vista, Citrix + Office 2003, 2007	"	-	-
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	Server : WindowsXP, 2003, Solaris Client : WindowsXP + Office XP, 2003	"	-	-
RAKTIS	"	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	試薬在庫管理システム	Symyx社 SymyxDirectの動作する環境にて対応	"	-	-
RegSys	"	"	化学構造式をベースに法令に抵触する構造かどうかチェックするシステム	IE6.0(クライアント)、Symyx社 SymyxDirect、Oracle	"	-	-
Medchem Database/Target Inhibitor Databases (GPCR、Kinase、Protease、NHR、Ion-Channel、Phosphatase、Transporter)	"	印ジーブイケー・バイオサイエンス	各種ターゲットやバクテリアなどに対する阻害化合物情報、バイオアッセイ・生物活性情報を中心にキュレーションしたデータベース	Windows、Linux、SUN	"	-	-
Drug Database	"	"	FDA承認既存薬について、代謝物を含むChemicalな情報、Clinical情報、副作用情報およびPK/ADMET情報を中心にキュレーションしたデータベース	"	"	-	-
Clinical Candidate Database	"	"	IND申請された治験薬及び承認された医薬品(治験薬のうちで開発中止となったもの、及び上市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	"	"	-	-
Mechanism Based Toxicity Database	"	"	化合物の毒性発現について、その化合物情報、毒性メカニズム情報ならびに未変化体・代謝物における毒性試験情報を中心にキュレーションしたデータベース	"	"	-	-
Clinical Biomarker Database	"	"	Clinical Trialで評価されたBiomarkerに関して、治験情報、薬物情報、疾患情報等を網羅的にキュレーションしたデータベース	Internet経由	"	-	-

Leadscope Enterprise / Personal	"	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 Personal版は10万化合物の制限あり。	サーバー: Red Hat Linux Enterprise、Solaris 8 or 9、Windows 2000 SP1、XP Professional /クライアント: Windows	"	-	-
Leadscope Toxicity Database	"	"	詳細な毒性情報が付随した160,000以上の化合物を収録したデータベース	"	"	-	-
Marketed Drugs Database	"	"	FDAおよび他の政府系研究機関が収集した約6000もの薬剤化合物とそれに付随する適応症に関する情報を収録したデータベース	Windows 2000 SP1, XP Professional	"	-	-
Leadscope FDA CDER/CFSAN databases	"	"	FDA CDER/CFSANがCRADA契約を通じて製薬・食品会社から収集した毒性情報を収録したデータベース	Windows 2000 SP1, XP Professional	"	-	-
Leadscope Predictive Data Miner	"	"	フラグメントキーおよびプロパティを用いたQSARモデルの構築とQSARモデルによる新規化合物の活性・毒性予測を行なうLeadscopeのオプションモジュール	"	"	-	-
FDA SAR Genetox / Carcinogenicity Database	"	"	QSARモデル構築ためのリソースとしてLeadscopeで利用できる高品質なGenotoxicity / Carcinogenicityデータベース(それぞれ8400個、1600個以上の化合物)	"	"	-	-
ToxWiz	"	英ケンブリッジセルネットワークス	毒性エンドポイントやメカニズムの予測を行うためのソフトウェア。様々な分子間相互作用を考慮した予測をする。独自のデータベースを保有し関連するパスウェイ、クラスターや18種類の生物種のオーソログ遺伝子のデータが参照可能	サーバー: Linux/SUN /クライアント: Windows 2000/XP	"	-	-
Derek for Windows	"	英ラーサ	構造活性相関に基づく、化合物の定性的毒性予測ソフトウェア	Windows XP, Vista, 2000	"	-	-
Meteor	"	"	構造活性相関に基づく、化合物の定性的代謝産物・代謝経路予測ソフトウェア	Windows XP, Vista, 2000	"	-	-
PK-Sim	"	独バイエルテクノロジーサービス	生理学モデルを用いた薬物動態/薬物動力学シミュレーションソフトウェア	"	"	-	-
MoBi	"	"	生理学モデル構築ツール	"	"	-	-
CORINA	"	独モレキュラーネットワークス	大規模3D-Chemical-Database構築を目的としたAutomatic 3D-Structure Generatorプログラム	Windows、Linux、SUN	"	-	-
CONVERT	"	"	入力した複数の異なるファイルフォーマットを自動認識し、ユーザー指定のファイルフォーマットに自動変換するソフトウェア	"	"	-	-

CHECK	"	"	化学構造式を標準化するソフトウェア	"	"	-	-
STERGEN	"	"	化学構造式から自動的に立体中心を識別し、立体異性体を自動生成するソフトウェア	"	"	-	-
TAUTOMER	"	"	数十万の化学構造データセットをもとに、化学構造式から予測できる互変異性体を自動生成するソフトウェア	"	"	-	-
2DCOOR	"	"	数十万の化学構造データセットをもとに2次元の化学構造式を整形し、それぞれの構造式を方向を一致させるソフトウェア	"	"	-	-
ADRIANA.Code	"	"	2次元の自己相関やRadial distribution functionなど分子に対して様々な記述子を計算するソフトウェア	"	"	-	-
ADRIANA	"	"	ADRIANA.CodeとSONNIAの両機能を持ち合わせたソフトウェア	"	"	-	-
SONNIA	"	"	ADRIANAによって計算された記述子データやモデリングを行うケモメトリクスソフトウェア	"	"	-	-
IMAGE	"	"	mol、SDファイルからイメージファイルを生成するソフトウェア	"	"	-	-
ChemCart	"	米デルタソフト	Webブラウザをインターフェイスとした化学構造式を含む研究データ参照登録システム。フォームが自由に作成・編集できるタブ形式のフォームが利用可能	サーバ: SUN、Windows、Oracle、Tomcat、Java/クライアント: Windows、Java 構造sketcher	"	-	-
Definiens XD	"	独ディフィニエンス	人間による認知・判断の仕組みをモデル化した特許技術により、解析対象を柔軟かつ正確に分類し、定量化するソフトウェア	Windows	"	-	-
TissueStudio	"	"	人間の認知・判断を学習する機能を備えた、バーチャルスライド等の組織画像を高精度高スループットに解析するソフトウェア	"	"	-	-
SureChem	"	米リールツウ	テキストマイニングを利用して、パテントからChemical情報を抽出するエンジン及びポータルサービス	Internet経由、Windows、Linux	"	-	-
Provantis	"	英インシステム	GLP対応、安全性試験支援システム。一般毒性試験から生殖試験、病理試験などを支援。国内GLP対応に加え、国内で販売される同種のシステムとしては唯一FDAの査察実績があり「21CFRパート11」に完全対応	Windows 2003 Server	"	-	-
PKS(Pharsight Knowledgebase Server)	"	米ファーサイト	PK/PDデータ管理システム。各種データ解析の履歴と合わせて、関連するデータやファイルを統合的に管理することが可能	Windows 2003 Server	"	-	-
WinNonlin AutoPilot	"	"	PK解析レポートに必要となる解析結果の図表、テキストデータを自動的に生成するアプリケーション。PKS(Reporter)と連携することでWORDレポートの自動作成までが可能	"	"	-	-

ARISg/j	"	米アリスグローバル	治験・市販後の安全性情報をトータル管理を支援する。標準機能で国内要件に対応しているのに加え、同一システムで国内、欧米当局の3極対応での運用実績がある唯一のシステム	Windows 2003 Server	"	-	-
agSignals	"	"	安全性情報のデータマイニングツール。自社のDBやFDA、WHOのDBをデータマート化し、BIツールで表・グラフなど分析可能。複数の解析アルゴリズムが実装されており、複数の当局でも利用実績あり	"	"	-	-
Register	"	"	薬事申請情報管理DB。各薬剤に関する申請情報や変更情報を全体または各国単位で管理可能。複数国向けにプロダクト管理が必要となる欧州では特に有効。PIM,SPL作成ツールとも統合可能	"	"	-	-
STARLIMS V10	"	米スターリムス	品質管理業務や研究・分析業務において、お客様の業務フローや利用規模に合わせて柔軟に対応できる完全WebベースのLIMS(Laboratory Information Management System)パッケージシステム。ISOやGMPなどの法・規制に準拠し業界標準を遵守する為の基本機能を装備している	サーバー: Windows Server 2003、クライアント:Windows XP/Vista	要問合せ	-	-
STARLIMS SDMS	"	"	クロマトチャートや研究報告書といった非定型データの取込みを容易にするSTARLIMS V10に完全統合されたオプションモジュール。SDMS(Scientific Data Management System)	"	"	-	-
Symyx Isentris	"	米シミックステクノロジーズ	化学構造式を含む化合物情報の登録、検索が可能。実験計画の立案やデータの解析、情報共有などが可能で創薬プロセスにおける統合型の意思決定支援システム	サーバ: WindowsServer2003、SUN、RedHatLinux、Oracle /クライアント:WindowsXP、Vista	"	-	-
Symyx Notebook	"	"	化合物の探索研究から分析、アッセイ、プロセスR&D、製剤までをサポートする電子実験ノートシステム。コンプライアンスにも準拠しており、社内資産の知的財産としての活用を支援	"	"	-	-
Symyx Direct	"	"	化学データカートリッジで構造式および反応式の検索および保存が可能で、独自開発ツールとの連携が容易に可能	"	"	-	-
Symyx Draw	"	"	化学構造式描画ツール	Windows XP、Vista	"	-	-
Symyx Registration	"	"	化学構造式を含む情報の登録ツール	サーバ: WindowsServer2003、SUN、RedHatLinux、Oracle /クライアント:WindowsXP	"	-	-

Symyx Cheshire	"	"	化学構造式の標準化ツール	SUN、ReddHatLinux、WindowsServer2003、XP、Vista	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<ライフサイエンス製品>	サイバネットシステム						
eHiTS	"	加シムバイオシス	タンパク質側とリガンドの自動プロトネーションやタンパク質ファミリーに最適化したスコア関数利用などの機能を持ったドッキングアプリケーション	Linux	詳細問い合わせ	2008年10月	-
eHiTS lightning	"	"	eHiTSのCELL B.E.チップ対応版	Fedore Core 7、Yellow Dog Linux 6.	"	"	-
eHiTS Tune	"	"	eHiTSのスコア関数をユーザー独自にチューニング	Linux	"	"	-
eHiTS Score	"	"	eHiTSのスコア関数機能を独立させたアプリケーション	"	"	"	-
eHiTS LASSO	"	"	活性分子表面の化学的特性を学習させるLBDD高速フィルタアプリケーション	"	"	"	-
CheVi	"	"	eHiTSのインターフェースとしても利用可能な3Dビジュアライザー	"	無償	"	-
SPROUT	"	"	歴史と実績のあるde novoアプリケーション	"	詳細問い合わせ	"	-
SPROUT LeadOpt	"	"	合成性を考慮したリード最適化アプリケーション	"	"	"	-
CAESA	"	"	反応ルールベースの合成難易度評価アプリケーション	サーバ: Linux、クライアント: Webブラウザ	"	"	-
ARChem Route Designer	"	"	反応データベースを利用した合成経路設計支援アプリケーション	"	"	"	-
CLiDE	"	"	画像データ中から構造式を認識し抽出する構造式・反応式OCR	Windows/Linux	"	"	-
ClogP	"	米バイオバイト	Hansch・Leo によるLogP/CMR 推算ソフトのLinux版	Linux	"	1997年1月	-
Bio-Loom	"	"	Hansch・Leo によるLogP/CMR 推算ソフトの最新Windows版	Windows	"	2004年4月	-
BL QSAR	"	"	QSAR式/活性の種類などのデータベースへのアクセス	"	"	"	-
BL Master	"	"	logP/pKa実測値データベースへのアクセス	"	"	"	-
Clustering	"	英デジタルケミストリ	化合物クラスタリング。オプションで最適クラスタ数の算出、マルチCPU対応。ツールキット版も有り	"	"	2004年9月	-
Fingerprinting	"	"	Fingerprint作成/類似度算出。オプションでユーザ定義辞書作成。ツールキット版も有り	"	"	"	-
Diversity	"	"	データセット内の分子構造のDiversity計算。ツールキット版も有り	"	"	"	-

MolSmart	"	"	MDL形式のクエリーからDaylightのSmartsを生成。ツールキット版もあり	"	"	"	-
Markush Toolkit	"	"	Markush(マーカッシュ)構造取扱いを可能にするツールキット	"	"	"	-
Torus: Server	"	"	OracleDBでMarkush(マーカッシュ)構造を取り扱うためのカートリッジ	"	"	2007年11月	-
WOMBAT	"	米サンセットモレキュラー	生物活性データベース(薬学系の論文からデータを収集した実測値データ)	詳細問い合わせ	詳細問い合わせ	2008年10月	-
WOMBAT-PK	"	"	薬物動態データベース(臨床データの実測値データ)	"	"	"	-
<ナノテク製品>							
Atomistix ToolKit DFT edition	"	デンマーク・クオントムワイズ	密度汎関数理論(DFT)と非平衡グリーン関数(NEGF)の手法に基づき、バイアス電圧が印加された2プローブ系の非平衡電子状態を第一原理的に計算。孤立系・バルク系の計算も可能	Windows/Linux、PCクラスター対応	詳細問い合わせ	2004年2月	-
Atomistix ToolKit ATK Semi-Empirical edition	"	"	半経験的手法により電流電圧特性を算出するデバイスシミュレーター。ATK-DFTより大規模な系を高速に計算可能	Linux	詳細問い合わせ	2009年7月	-
Virtual NanoLab	"	"	AtomistixToolKitによる計算を効率的に行うためのGUI。モデルのセットアップから計算の実行、結果の表示を簡単に操作可能	Windows/Linux	詳細問い合わせ	2004年2月	-
Nt_STM	"	仏ナノタイムズ	STMのシミュレーションツール。チップ-試料間の電流を計算し、STM像を描画	Windows/Linux	"	2007年7月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
DiscoveryStudio DS Standalone	ダイキン工業	米アクセルリス	DiscoveryStudioのモジュール群の統合環境として、生体高分子、化合物のデータを可視化、解析を行い、その結果を他の研究者と共有することができる	GUI: Windows、Linux 計算: Windows、Linux	要問合せ	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Sequence Analysis	"	"	BLASTあるいはPSIBLASTを用い、興味のあるアミノ酸配列についてローカルのデータベースあるいはNCBIのWEBサーバに検索を行い、相同性のある配列を探す	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Protein Families	"	"	配列と構造情報を用いて、複数のアミノ酸配列からマルチプルアラインメントを行う。またアラインメント結果から進化系統解析を行う	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS MODELER	"	"	自動ホモロジーモデリング、ループのモデリング、アミノ酸配列の構造に対するアラインメント、タンパク質のミュータントの構築を行う	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Protein Refine	"	"	CHARMmのテクノロジーを用いて、タンパク質の側鎖、ループ領域の最適構造を発生させる	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Protein Health	"	"	Profiles-3Dのアルゴリズムを用いて、タンパク質構造の評価を行い、構造が適正かどうかを評価する指標を与える	"	"	2002年11月	-

DiscoveryStudio DS Biopolymer	"	"	タンパク質、ペプチド、DNA、RNA等の生体高分子のモデルを簡単に構築する。また、静電ポテンシャルおよび溶媒和エネルギーを計算することも可能	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS CHARMM	"	"	タンパク質および複合体の分子動力学シミュレーションエンジン。機能に含まれるCDOCKERを用いて、リガンド分子を高精度にドッキングする。すでにあるドッキング結果に対してCHARMMのリガンド構造最適化をレセプター側の原子も含めて実施	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio CFF	"	"	非常に広範囲(タンパク質、核酸、脂質、炭水化物、低分子化合物)の分子に対応可能な、非常に精度の高い力場(force field)である。CHARMMで利用することが可能	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS CHARMM Lite	"	"	CHARMMの幅広い機能のうち、ドッキング効果の最適化(リガンド構造をレセプターの一部の原子を含めて最適化)のみの機能に限定したバージョン	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Analysis	"	"	タンパク質およびタンパク質/リガンド複合体のシミュレーション結果であるトラジェクトリーファイルの情報を解析、可視化する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS LigandFit	"	"	標的タンパク質の活性部位にリガンドをドッキングさせる	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS LigandScore	"	"	検証済みのデータセットを用いて構築されたスコアリングファンクションにより、リガンド-タンパク質の相互作用を評価する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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 Availables 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である	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Ludi	"	"	タンパク質の活性部位の構造的、化学的特徴を元にして、リード化合物をde novoデザインするためのツール	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio 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	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Analysis	"	"	ドッキングシミュレーションの結果から、RMSDを可視化したり、close contact、水素結合数の解析を高速に実施する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Catalyst Hypothesis	"	"	低分子化合物の、ターゲット生体高分子に対する結合親和性に関する一般化された特性について、詳細な根拠に基づく包括的なファーマコフォア仮説を作成する	"	"	2002年11月	—
DiscoveryStudio DS Catalyst Conformation	"	"	潜在的な薬物活性に基づいて分子のフレキシビリティを考慮しつつ、取りうる3Dコンフォメーションを広範囲に構築するモジュール	"	"	2002年11月	—

DiscoveryStudio DS Catalyst Shape	"	"	分子を3次元構造で表現し、生理活性のある無しにかかわらず、類似の3次元構造を示す分子を識別できる	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Catalyst Structure BasedPhamacophore	"	"	既知の、あるいは予測されたターゲット分子の活性部位構造から、Ludi(de novoドラッグデザインツール)の技術を用いてファーマコフォアモデルを自動的に作成する	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Catalyst Score	"	"	それぞれの化合物に対し、適合性、活性のスコアを計算	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS Catalyst Build&DS Catalyst Search	"	"	化合物の構造データベースを独自に構築し、多種多様なオプションを用いて検索することが可能	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS 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吸収、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	"	"	2002年11月	-
DiscoveryStudio DS TOPKAT	"	"	化合物の構造情報のみから、毒性および環境への影響を予測することが可能	"	"	2002年11月	-
MaterialsStudio MS Visualizer	"	"	マテリアルサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。MaterialsStudioの各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	GUI: Windows、計算: Windows、Linux	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Discover	"	"	分子力場シミュレーション。分子、材料系の構造最適化、分子動力学など	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS AmorphousCell	"	"	ポリマー、低分子化合物の非晶構造セルを作成。分子動力学シミュレーションにより物性を推算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS COMPASS	"	"	凝縮系の再現にも優れた高精度力場。有機物、無機、無機酸化物、金属などへの適用	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Forcite	"	"	分子力学ソフト。分子系、周期系の構造最適化が可能	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS ForcitePlus	"	"	Forciteに分子動力学の機能を付加。分子、材料系の動力学解析ツール	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Blends	"	"	ポリマー、溶媒、添加剤混合系の混合エネルギー、相図、相互作用のパラメータなどを算出	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Equilibria	"	"	モンテカルロ-ギブスアンサンブルに基づき1~3成分分子系の相図を決定	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS GULP	"	"	無機、有機格子シミュレーションソフト。30種近いポテンシャルを内蔵	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Sorption	"	"	モンテカルロ法吸着シミュレーションソフト。吸着等温などを計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS MesoDyn	"	"	ポリマー流体、ブレンドなどの複雑流体の粗視化メソスケール動的シミュレーション	"	"	2000年9月	-

MaterialsStudio MS DPD	"	"	散逸粒子ダイナミクス法による複雑流体の粗視化メソ ケールシミュレーション	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS DMol3 Molecular	"	"	数値基底関数を使い、高速、高精度を実現した密度汎関数 法(DFT) ab initio量子化学計算ソフト	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS DMol3 Solidstate	"	"	3D周期境界条件への拡張版。固体、表面などの反応性、バ ンド構造、状態密度計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS CASTEP	"	"	平面波基底密度汎関数法による分子、固体、表面等の第一 原理計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS NMR CASTEP	"	"	固体のNMR、電磁勾配テンソルを計算	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS VAMP	"	"	MNDO近似による半経験的分子軌道法。MNDO(/C,d)、 AM1、PM3、ZINDOハミルトニアンなど	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS ONETEP	"	"	数千原子レベルのO(N)-DFT計算を高効率パラレル計算で 実行。触媒、生体分子の計算などに有効	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS QMERA	"	"	DMol3/GULPをベースにしたQM/MM法。大きな系の効率的 計算が可能	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Reflex	"	"	結晶の粉末回折像を高速にシミュレート。実験データとのリ アルタイム比較が可能	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS ReflexPlus	"	"	Reflexに粉末図形解析機能の付加	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Reflex QPA	"	"	有機、無機結晶の粉末回折データから結晶相組成を決定	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS X-Cell	"	"	新規なアルゴリズムよりパラメータ空間を網羅的に探索し指 数を付ける	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Polymorph	"	"	分子構造から有力な結晶多形を予測	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Morphology	"	"	結晶の形態を結晶の原子構造より予測。BFDH、付着エネル ギー法、平衡形態法を実装	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS QSAR	"	"	化学品、材料の構造活性(物性)相関モデルの作成、解析。 多数の記述子を完備	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS FastDescriptor	"	"	QSARにおける種々の2D分子記述子を計算。トポロジカル記 述子、熱力学的記述子、構造記述子など	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS GeneticAlgorithm	"	"	遺伝子アルゴリズムに基づくQSARモデル構築時の関数近 似手法	"	"	2000年9月	-
MaterialsStudio MS Synthia	"	"	グラフ理論に基づく構造物性相関手法によりポリマーの種々 の物性値を推算	"	"	2000年9月	-
QUANTA	"	"	蛋白質X線構造解析、フィッティングソフトウェア	"	"	-	-
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 9.0	デジタルデータマネジメント	米ケムイノベーションソフトウェア	構造式の作図機能のほか、構造式からIUPAC名を作成、IUPAC名から構造式を作成、構造式と文書や物性のテーブルを作成して部分構造式などから検索	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2千本
Molecular Modeling Pro	''	米ノルギンモンゴメリーソフトウェア	3Dの化学構造を描図、3-D構造の最適化、半経験的量子化学計算、物性値の推算他	''	9万9千円(一般)、6万3千円(アカデミック)	2005年3月	国内数十本
Sequence-4D	''	米ケムイノベーションソフトウェア	公開されたソースのシーケンスからラベル付けされた線形/環形マップ作成、タンパク質コードとマップを視覚化、制限解析、読み取り枠検索実行	''	8万8千円(一般)、5万2千円(アカデミック)	2003年10月	国内20本
Tencube/WM, Winmoster	''	テンキューブ研究所	最適化構造、原子電荷、双極子モーメント、エネルギー順位、構造最適化などの計算や分子軌道、紫外・可視吸収スペクトル、赤外吸収スペクトルのシミュレーション	Windows NT4.0/2000/XP	9万9千円(一般)	2008年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Patent Chemistry Database	エルゼビア・ジャパン	独エルゼビアインフォメーションシステムズ	研究者のための特許(1976年以降のWO, US, EPの3特許庁)をソースとする有機化合物(540万化合物以上)、有機合成反応(520万反応以上)並びに薬理活性と物性のデータベース。ペーパー実施例とも言われるProphetic化合物も収録。2009年よりReaxysに統合(2010年末をもって提供終了)	オンライン版	—	—	—
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、1100万以上の化合物に対する精選された2200万以上の反応、物性、薬理活性と環境毒性データを収録。2009年よりReaxysに統合(2010年末をもって提供終了)	オンライン版	—	—	—
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。260万以上の化合物、200万以上の反応。2009年よりReaxysに統合(2010年末をもって提供終了)	オンライン版	—	—	—

PharmaPendium	//	独エルゼビアインフォメーションシステムズ	米国FDAおよび欧州EMEAの新薬承認文書を全文検索可能な形で収録。マニュアルインデキシングにより、毒性・副作用の事例がまとめられているため、特定の毒性・副作用の先例を薬剤横断的に閲覧可能。FDA文書は最初の承認薬まで遡ってClassic Collectionとして、オプション提供開始	Windows: Windows 2000 SP3以上、Windows XP SP2、IE 6.0SP1以上、Adobe Reader 7.0以上 Macintosh: MacOS 10.4、Safari 2.0、Adobe Reader 7.0以上、JRE 1.5.0以上	—	—	—
Reaxys	//	//	Beilstein CrossFire、Beilstein Gmelin、Patent Chemistry Databaseの3つのデータベースを統合した化合物・反応データベース。従来の検索機能に加え、合成計画などの機能を追加した化学者のためのベンチサイドツール	Windows: Windows 2000、Windows XP、Windows Vista、IE6/7、Firefox 2/3、JRE1.5.0以上 Macintosh: MacOS X 10.4以上、safari 3.0以上、FireFox 2/3、JRE 5.0以上	—	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ADMEWORKS/Predictor	富士通九州システムズ	富士通九州システムズ	膨大な化合物の薬効、薬物動態、毒性、物性の高速同時予測を行い、容易に新薬候補化合物の絞り込みや優先順位を決めるための統合的な高速インシリコスクリーニングシステム。ADMEWORKS/ModelBuilderで作成した予測モデルをADMEWORKSにインポートする事で、ユーザー独自の予測モデルと標準提供予測モデルを連携し利用できる。また、ネットワークでつながる他の研究者と最新の予測モデルを用いた予測の共有が可能。V5.0ではLook-and-Feelを改良し、操作性を向上、計算エンジンの大幅な改良により、計算速度(従来比:2倍以上)を改善。新たに、染色体異常モデルを提供し毒性モデルのラインナップを充実させた	サーバー: WindowsXP/Vista 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トランスポータ、BBB、HIA、皮膚感作性、hERG阻害、染色体異常予測モデルを提供	-	"	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。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。また、作成したモデルをADMEWORKSへインポート可能。また、モデル式の受託サービスも請負可能。構造以外の外部パラメータ(温度、暴露量など)を取り入れた予測モデルの構築が可能	WindowsXP/Vista (スタンドアロン)	"	2004年3月	-
薬物動態・毒性「ADME/Tox」のIn Silico予測受託サービス、ADMEWORKS/ModelBuilderモデル式受託サービス	"	"	ADMEWORKS/Predictorを利用したモデル予測受託サービスを提供 ADMEWORKS/ModelBuilderを利用したカスタムモデル式の構築受託サービスを提供	-	"	2006年12月	-
ADME Database	"	"	薬物の吸収、分布、代謝、排泄情報のデータベース。クロアチアのProf.Slobodan Rendicにより収集されたヒトP450、ヒトトランスポータ、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。年4回リリースアップ。最新のV16では、CYP3A4、トランスポータを中心にデータを追加、1万1千件以上の論文を収載	インターネットによるオンラインサービス (Internet Explorer 6.X以降)	100万円～(企業)、50万円～(教育機関)	2005年8月	-
SPRESI	"	独インフォケム	旧ソビエト連邦VINIT研究所、ドイツZIC研究所の共同プロジェクトの成果をベースに作成された化学情報データベース。700万件の化合物データ、390万件の反応情報を含み、汎用Webブラウザで検索が可能	JavaAppletが動作可能なブラウザ (Internet Explorer、Netscapeなど)	37万5千円～(企業)、18万7千円～(教育機関): マルチユーザライセンス、コピーレイトライセンスあり	2000年7月	-
LiqCryst 4.8	"	独LCIパブリッシャー	現在知られている全種類のサーモトロピック液晶化合物を網羅。約9.7万件の文献から得られた約96,216の液晶化合物に関する情報を収集。単なる情報検索のみならず検索結果の統計分析や一部物理特性値の予測や、検索された化合物の同族列についてその相転移温度をグラフィック表示可能	Windows2000/XP/Vista	詳細はお問合せ下さい	1995年6月	-

SKIN-CAD	''	バイオコム・システムズ	経皮吸収モデル(皮膚透過・体内動態モデル)に基づいて開発した薬物の皮内・体内動態解析ソフトウェア。薬物の皮膚透過性や体内動態に関するパラメータをもとに、皮膚透過量や血中濃度を予測可能。また、皮膚代謝・結合の影響、血流への吸収、イオントフォレシスの効果、PK-PD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	Windows2000/XP/Vista	150万円～(企業)、50万円～(教育機関)	2005年5月	—
ADMEWORKS/DDI Simulator	''	富士通九州システムズ	薬物併用時における副作用の原因となる薬物相互作用の程度を、実際の薬物体内動態のシミュレーションを行うことで定量的にシミュレーションするシステム。本システムは、特定非営利活動法人 HAB研究機構の薬物相互作用データベースプロジェクトの成果をもとに開発され、Mechanism-Based Inhibitionの機能を新たに追加して製品化。東京大学の杉山教授による監修	WindowsXP/Vista(スタンドアロン)	詳細はお問合せ下さい	2010年2月予定	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SCIGRESS Basic	富士通	富士通	計算化学統合プラットフォームSCIGRESSの基本パッケージ。SCIGRESS共通のGUI環境と基本的な計算エンジン(Mechanics, Dynamics, Extended Huckel, ZINDO)が組み込まれている	Windows XP/Vista	お問合せ下さい	2009年9月	—
SCIGRESS Spreadsheet	''	''	複数計算の一括実行と結果整理がスプレッドシート上で容易に行える。Basicに追加できるオプション製品	''	''	''	—
SCIGRESS MO I/F SCIGRESS MOエンジン	''	''	半経験的分子軌道法プログラム「MO-G」「MO-S」とそれらの計算設定・結果解析を行うGUI。分子構造最適化、反応経路探索、各種物性予測など、電子状態に関連した物性に関心のある研究者の方に最適。Basicに追加できるオプション製品	Windows XP/Vista Linux	''	''	—
SCIGRESS MD I/F SCIGRESS MDエンジン	''	''	分子動力学法プログラム「MD-ME」とその計算設定・結果解析を行うGUI。金属結晶、半導体など周期的な構造の動的挙動に関心のある研究者に最適。Basicに追加できるオプション製品	''	''	''	—
SCIGRESS CONFLEX I/F	''	''	安定配座探索プログラム「CONFLEX3」が内蔵されており、CONFLEX社提供の最新バージョン「CONFLEX6」とのインターフェイスも同梱。Basicに追加できるオプション製品 ※「CONFLEX6」は、別途購入が必要	''	''	''	—
SCIGRESS ADF I/F	''	''	SCM社製の密度汎関数法ソフトウェア「ADF」をSCIGRESS上から計算・解析するためのインターフェースオプション ※「ADF」計算エンジン本体は、別途購入が必要	''	''	''	—
SCIGRESS PHASE I/F	''	''	文科省RSS21プロジェクトで開発された密度汎関数法ソフトウェア「PHASE」をSCIGRESS上から計算・解析するためのインターフェースオプション ※「PHASE」計算エンジン本体は公開サイトからのダウンロードが必要	''	''	''	—

SCIGRESS MO Compact Std/Pro	"	"	分子軌道法ソフトWinMOPACの後継製品。半経験的分子軌道計算プログラム「MO-G」と紫外・可視吸収スペクトルなどの励起状態の計算に適した「MO-S」を搭載。分子構築から計算の実行、結果の可視化までをシームレスに実現する。Std版は、原子数が200まで計算可能。Proは原子数に制限はない	Windows XP/Vista	"	-	-
Materials Explorer	"	"	幅広い材料に適用可能な分子動力学ソフトウェアで、WinMASPHYCの後継製品。有機物だけでなく金属、無機物の計算が可能で、二次解析機能も充実。クライアント・サーバー連携でLinux並列計算エンジン(ノード内2CPUまで)とも連携が可能	"	"	-	-
Materials Explorer /MD	"	"	Linuxサーバ上で動作する並列化専用エンジン。Windows版Materials Explorerと連携することで、より大きな系での計算や高速計算が可能。計算実行・結果のダウンロード等はすべてWindows版Materials Explorerから行えるため、Linux環境を意識することなく使用できる。 ※Windows版Materials Explorerが必要	Red Hat Linux 9.0 Red Hat Enterprise Linux 3 ES, AS SUSE Linux Professional 9.2	"	-	-
ACD/Spectroscopy	"	加アドバンスドケミストリーデベロップメント	分析機器(NMR, MS, UV-IRなど)からのデータを加工し、化学構造式と関連させてデータベース化を行います。また、構造式からNMRシフトを予測することもできる。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意	Windows2000/XP/Vista	"	-	-
ACD/Physchem	"	"	化学構造式から物性値(LogD, LogP, Pka, Solubility, Boiling Point)を予測する。ChemDrawやISISとの連携モジュールや一括計算用バッチプログラムも用意	"	"	-	-
ACD/Chromatography	"	"	HPLC, GCの測定条件をシミュレート、HPLC, GCのデータを加工、データベース化する	"	"	-	-
ACD/Name	"	"	化学構造式から化学名を生成する。ChemDrawやISISとの連携モジュールも用意	"	"	-	-
ACD/Structure Elucidator	"	"	様々なスペクトルから情報を集約し、構造同定作業を支援する	"	"	-	-
ACD/AutoChrom	"	"	装置と連動して、LC/MS, LC/DADのデータ収集と解析を自動で行い、最適な分離メソッドを提案する	"	"	-	-
ACD/Professional Service	"	"	様々なスペクトルの情報管理、処理作業を完全自動化、デスクトップ製品から拡張するイメージでエンタープライズ向けシステムが構築可能	"	"	-	-

ChemBioDraw Ultra/Pro/Std	"	米ケンブリッジソフト	世界標準の化学構造式／反応式作画ソフトウェアで、構造式・反応式等を簡単に作画可能	Windows2000/XP/Vista/7 MacOS 10.3/10.4/10.5/Snow Leopard	"	-	-
ChemBio3D Ultra	"	"	操作性の優れた分子モデリングシステムで、3次元立体構造への容易なアクセスを実現。CS MOPAC Proをバンドルしている	Windows2000/XP/Vista/7	"	-	-
E-Notebook Ultra	"	"	合成実験ノートの記録をパソコンで簡単に管理できるソフト。部分構造、反応、プロジェクト名などによるデータ検索が可能	"	"	-	-
The Merck Index	"	"	化学の百科事典「The Merck Index」の電子データ版。10,000件を超える化合物から、名称・CAS番号・構造式などをキーに素早い検索が可能	Windows2000/XP	"	-	-
ChemACX Ultra	"	"	海外大手試薬販売会社約540社以上の50万件を超える化合物のカタログ情報データベース	Windows2000/XP/Vista/7	"	-	-
ChemBioViz Ultra	"	"	化学情報データベース (ChemFinder) に含まれるデータを簡単に統計解析、グラフ化するためのソフトウェア	"	"	-	-
ChemBioOffice Ultra/Pro	"	"	ChemBioDraw Ultra/Pro、ChemBio3D Ultra/Pro、ChemBioFinder Ultra/Pro、化学データベースのバンドル製品	"	"	-	-
ChemOffice Enterprise	"	"	電子ノートシステムを中心とした化学情報管理システム。化合物登録システム、アッセイ管理、在庫管理など各種業務アプリのオプションがある	Windows2000Server/2003Server	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Screener Assay Analyzer	ジーンデータ	ジーンデータ (スイス)	HTs/uHTS/HCS用 High ThroughPut HitList作成ツール。各種Assayデータの補正をHigh ThroughPutで行い、データのコレクション、Hit List作成を行う	Linux/Solaris Server with Windows PC	要 お問い合わせ	2001年	国内外 30社強 (Screener)
Screener Kinetics Analyzer	"	"	Kinetics Assay向け High ThroughPut Solution。FLIPR, EPIC等のデータ解析及び、Visualizationを行う	"	"	2009年1月	国内外 30社強 (Screener)
Screener High Content Analyzer	"	"	High Content Assay向け High ThroughPut Solution。Thermo他、High Contents Assayデータの解析及び、画像データマネージメントを行う	"	"	2009年5月	国内外 30社強 (Screener)
Screener Condoseo	"	"	High ThroughPut Dose計算ツール	"	"	2002年	国内外 30社強 (Screener)
Screener Hit Profiler	"	"	Excel Likeで、簡単、高速にHit Selectionを行い、Hit Report作成を行う	"	"	2008年3月	国内外 30社強 (Screener)

Expressionist Refiner-Array	"	"	Affymetrix社 Arrayデータ等の Micro Array データ コンデニングをHigh ThroughPut S/Wで行い、データ管理を行う	"	"	2000年	国内外 50社強 (Expressionist)
Expressionist Refiner-MS	"	"	High ThroughPut MSデータアライメント~Peak抽出ソリューション。 3rd PartyのPeptide同定ツールや、Metabolomics用データベース機能を持ち、MSベースのProteomics及びMetabolomics研究をサポートし、任意でデータベース化を行える	"	"	2000年	国内外 50社強 (Expressionist)
Expressionist Refiner-Genome	"	"	次世代シーケンスデータ対応のHigh ThroughPut解析ツール	"	"	2010年	製薬数社と共同開発中
Expressionist Analyst	"	"	High Throughput 対応した統計解析、Biomarker探索、High Content Screening用 S/W	"	"	2000年	国内外 50社強 (Expressionist)
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.10	ゼネティックス	ゼネティックス	Windows版遺伝子解析ソフトウェア。核酸・アミノ酸配列解析、配列データベース、シーケンスアセンブラーなど	Windows 7/Vista/XP	お問い合わせ下さい	1996年4月	—
GENETYX-MAC(Ver.15)	"	"	Windows版遺伝子解析ソフトウェア。核酸・アミノ酸配列解析、配列データベース、シーケンスアセンブラーなど	Macintosh (OS 10.4.11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 7/Vista/XP	"	2004年4月	—
ATGC (Ver.6)(Ver.4.2)	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェア。大量のフラグメント配列の結合処理。波形の信頼度を考慮したコンセンサス配列の決定	Windows 7/Vista/XP Macintosh (OS 10.4.8以上)	"	1998年10月	—
GENETYXネットワーク版	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのネットワーク版、1, 3, 5, 10ライセンスセット	WINのみ、MACのみ、WIN、MAC混在	"	2003年4月	—
ATGCネットワーク版	"	"	シーケンスアセンブリソフトウェアのネットワーク版、1, 3, 5, 10ライセンスセット	"	"	2003年4月	—
G-MAPネットワーク版	"	"	ゲノムマップビューワーソフトウェアのネットワーク版、1, 3, 5, 10ライセンスセット	WINのみ	"	2003年4月	—
GENETYX-SV/R	"	"	遺伝子解析ソフトウェアのクライアント/サーバー版	サーバー: UNIX/Linux、クライアント: Macintosh/Windows	"	1994年3月	—

GENETYX-SV/DB	''	''	核酸配列／蛋白質データベース検索ソフトウェアのクライアント／サーバー版	''	''	1994年2月	—
ATGC-SV	''	''	シーケンスアセンブリソフトウェアのクライアント／サーバー版	''	''	1999年3月	—
GENETYX-SQ/EX	''	''	ゲノム核酸配列自動結合ソフトウェア。大量のフラグメント配列の結合処理。波形の信頼度を考慮したコンセンサス配列の決定	UNIX	''	1991年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
生物種同定シリーズ・DNASIS Taxon V2.0・DNASIS 微生物同定 V2.0	池田理化、タカラバイオ	日立ソフトウェアエンジニアリング	微生物、魚、肉、穀類などの品種判別や、ウイルスをはじめとする多様な生物種において、検体の遺伝子情報（波形ファイルまたは配列ファイル）を用いた相同性検索により生物種の推定・判定を行うソフトウェア。生物種、遺伝子保存領域の違いに関わらず、お客様が独自にデータベースを構築することも可能。微生物を対象とした研究または業務を行われている方は「DNASIS微生物同定」を、そのほかの生物種を対象とされている方は「DNASIS Taxon」を利用していただける	WindowsXP/Vista	175万円～	2009年2月	—
生物種同定シリーズ DNASIS Taxon インフルエンザ判定支援システム	''	''	ノート型パソコンにDNASIS Taxonと最新のインフルエンザウイルス遺伝子データベースがプリインストールされたシステム。購入後すぐに判定にお使いいただける	WindowsXP/Vista	210万円～	2009年6月	—
DNASIS Pro V2.10	タカラバイオ、池田理化、日立ハイテクフィールドディング、和研薬、理科研、DNAチップ研究所	''	直感的かつ洗練された操作性を持つ配列編集機能に、ホモロジー検索、マルチプルアライメント、配列連結（Phred/Phrap）機能など、必要なオプションを追加していくことができる拡張性の高いバイオインフォマティクスソフトウェア	Windows2000/XP/Vista	45万円～	2008年7月	—
DNASIS ReportPad V1.5	''	''	研究情報の管理、日々進化する多様な情報解析手法の追加機能、解析結果を保存するためのノートブック機能、最先端の情報解析を支援するガイダンス機能等を搭載し、研究に最適なバイオインフォマティクスの統合環境を創ることができる	WindowsXP	45万円	2007年3月	—
Luminex200システム	池田理化、日立ハイテクフィールドディング、日立ハイテクノロジーズ、和研薬、理科研	米ルミネックス	蛍光マイクロビーズアレイシステム。それぞれ異なる色に着色された100種類のポリスチレン製微粒子を使用し、1本のマイクロチューブ内で最大100件の解析を同時に行うシステム。Luminex 100,Luminex XYP,Luminex SDのセット	—	980万円	2001年3月	—
Multiplex Antibody Kits	''	米インビトロジェン バイオソース	Luminexシステム用試薬キット。サイトカイン・ケモカイン・グロースファクター定量試薬キット、シグナル伝達タンパク質測定キットなどがある	—	—	—	—

DNASIS Plex	"	日立ソフトウェアエンジニアリング	Luminexシステムのマルチプレックスデータを短時間で解析することを目的に開発されたソフトウェア。定量解析や発現解析に対応している	WindowsXP/Vista	30万円	2006年10月	—
DNASIS Plex Lite	"	"	ELISA等の定量解析及び遺伝子発現解析を強力にサポートするプレートリーダー用解析ソフトウェア。多彩なスタンダードカーブに対応したグラフ機能を搭載。未知サンプルの濃度をスタンダードカーブから自動計算。任意のコントロールサンプルに対するFold Changeを自動計算。プレートリーダーの出力データや計算結果をグラフィカルに表示	WindowsXP/Vista	15万円	2008年8月	—
DNASIS Call	"	"	Luminexシステムから得られたマルチプレックスデータから、遺伝子型の同定やグラフ解析等、大量データ解析を強力にサポートするソフトウェア	Windows98/2000/XP/Vista	30万円	2006年5月	—
Masterplex PT	"	"	ELISA等の定量解析を強力にサポートするプレートリーダー用解析ソフトウェア。Luminexシステムでご好評の定量解析ソフトDNASIS Plexの基本機能をそのままに、プレートリーダーの出力ファイルに対応している	Windows98/2000/XP	お問い合わせください	2008年1月	—
SEQUENCHER V4.9	タカラバイオ、池田理化、日立ハイテクフィールドイニング、和研薬、理科研、DNAチップ研究所	米ジーンコード	簡単で使いやすいDNAシーケンスアセンブルツール。シーケンストリミング・塩基読み上げ・Phredなどのシーケンススコア値のサポート・SNP領域探索支援などの機能も充実している	Macintosh OS X 10.3.9以上。SEQUENCHER V4.8はMac OS X 10.5 (Leopard)に対応します。Windows2000/XP/Vista	68万円(Mac版)、88万円(Win版)	2009年5月	—
BioPackage	"	米モルソフト	タンパク質立体構造シミュレーションソフトウェア。(米国内商品名 ICM: Internal Coordinate Mechanics)	WindowsNT/2000/XP/Vista、MacOS10.2以降、RedHat9.0、IRIX6.5.x	お問い合わせください	2007年4月	—
受託解析サービス	日立ソフトウェアエンジニアリング	日立ソフトウェアエンジニアリング	送付いただいたサンプルの受託解析サービス。・ドライ解析:次世代シーケンサデータ解析メニュー(リシーケンシング-SNP解析サービス、16S rRNA細菌同定サービス)を行う。・ウェット解析:DNA解析メニュー(塩基配列解析、プレミックス塩基配列解析、微生物16SrDNA全長塩基配列解析、微生物迅速同定、食肉種判別)、遺伝子タイピング解析メニュー(SNPタイピング系構築、SNPタイピング分析)、マルチプレックスサスペンションアレイ(Luminex受託解析サービス)、そのほかに各種実験系構築などを用意している	—	お問い合わせください	2006年9月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

AssayZap	ヒューリンクス	英バイオソフト	RIA、ELISA、IRMA、比色分析やその他の評価分析に利用できる汎用分析ツール	Windows	要問合せ	—	—
ATOMS	〃	米シェイプソフトウェア	結晶、高分子、分子等さまざまなタイプの原子構造を3Dで描画	Windows、Macintosh、Linux	〃	—	—
CalcuSyn	〃	英バイオソフト	投薬効果解析のためのソフト。薬の組み合わせによる効果を定量化し、解析の自動化が可能	Windows	〃	—	—
CrystalMaker	〃	英クリスタルメーカーソフトウェア	写真並みのカラー画像で結晶構造を生成、表示、操作可能な結晶構造解析ソフト。マルチウインドウ・マルチアンドウ対応。オプションにより粉末回折、電子線回折パターンシミュレーションが可能	Windows、Macintosh	〃	—	—
Crystal KitX	〃	米トータルレゾリューション	粒子間の結合関係や接触面、軸等を設定することで、非常に短時間であらゆる結晶体の構造を作成できるソフト	Macintosh	〃	—	—
Crystal Studio	〃	豪・中クリスタルソフト	強力なデータベース機能を搭載した高性能、多機能な結晶構造解析ソフト。最新版では、第一原理シミュレーションの機能を持つQuantum版が追加された。Professional版は3500種、Enterprise版・Quantum版は6000種の結晶構造データを持つ	Windows	〃	—	—
CS ChemBio3D Ultra	〃	米ケンブリッジソフト	分子表面、軌道、静電位、電荷密度、スピン密度を視覚化して表示。分子特性を計算するため、MOPAC、Gaussian、GAMESS、Jaguarの各インターフェイス（別売）及び拡張ヒュッケルが使用できる。ChemPropはコノリー表面積、分子体積、またClogP、モル屈折度、臨界温度、圧力などを含めた特性を計算可能	〃	〃	—	—
CS ChemBioDraw Ultra, ChemDraw Ultra/Pro/Std	〃	〃	Struct<=>Name、ChemDrawExcel、ChemNMRなどの機能が含まれている。化学名に基づいて立体化学を含めた正しい構造式を描き出し、構造式の正確なIUPAC名を取得可能。原子とスペクトルの直接的相関によって、ChemDraw構造式をもとにNMRスペクトルを予測。ChemDraw ActiveX/Pluginは、化学インテリジェンスをブラウザに追加して、データベースクエリと情報表示を可能にする	Windows、Macintosh	〃	—	—
CS E-Notebook Ultra	〃	〃	電子実験ノート。画像データやMS Excel、MS Word等のファイルをまとめて管理でき、化学構造式による過去のノートへの検索が可能	Windows	〃	—	—
CS ChemBioOffice Ultra, ChemOffice Ultra/Pro	〃	〃	化学構造式描画ツール（ChemBioDraw Ultra）、立体構造の描画と各種計算プログラムのクライアントツール（ChemBio3D Ultra）、電子ノートブック（E-Notebook）、化学構造式を含むデータベース構築ツール（ChemBioFinder）で構成されたパワフルなソフトウェアパッケージ	〃	〃	—	—
EnzFitter	〃	英バイオソフト	酵素反応動力学的実験解析のために開発された回帰分析ソフト	〃	〃	—	—

Gaussian	"	米ガウシアン	汎用量子化学計算プログラム。量子力学の基本法則から、エネルギー、分子構造、分子系の振動数を予測可能。また、これらの基本的な計算の種類から導かれる様々な分子特性も予測可能	Windows、UNIX、Linux、Macintosh	"	—	—
GaussView	"	"	Gaussian用グラフィカルユーザーインターフェイス	"	"	—	—
Gene Construction Kit	"	米テキストコパイオソフトウェア	グラフィカルな操作体系と高度なドロー機能でDNA配列の取り扱いを飛躍的に容易にしたデスクトップ・クローニング・ツールの代表的ソフトウェア	Windows、Macintosh	"	—	—
Gene Inspector	"	"	研究用電子ノートブックに、DNA配列の総合的解析機能と、パワフルなイラストレーション機能を組み合わせたユニークなツール	"	"	—	—
HyperChem	"	米ハイパーキューブ	機能性、カスタマイズ性、操作性の高さで定評のある分子モデリングソフトウェア。分子力学・動力学法、モンテカルロ法、半/非経験的分子軌道法などをサポート	"	"	—	—
HyperProtein	"	"	分子モデリングとバイオインフォマティクスの2つの機能を組み合わせたタンパク質解析ツール。タンパク質モデリング機能に加え、配列アライメントやタンパク質ファミリーの系統樹作成機能を装備	Windows	"	—	—
IGOR Pro 日本語版	"	米ウエーブメトリックス	グラフ作成、データ解析、プログラミングツールを統合した科学者・技術者向けのパワフルなツール。表現力に富む高品質な2D・3Dグラフ機能に加え、カーブフィッティング、ピークフィッティング、画像解析をはじめ豊富な解析機能を搭載。プレゼン&解析を強力にサポート	Windows、Macintosh	"	—	—
KaleidaGraph 日本語版	"	米シナジーソフトウェア	シンプルなグラフの作成から回帰曲線やエラーバーを適用するような複雑なグラフの作成まで、非常に簡単な操作で実現可能なグラフ作成ソフト	"	"	—	—
KELL	"	英バイオソフト	加重非直線回帰・反復回帰技術を用い、飽和・拮抗の平衡を解析。結合や非結合の定数率を決定することが可能	Windows	"	—	—
Mac TempasX	"	米トータルレゾリューション	マルチスライスシミュレーションと動的な電子線回折パターン、ユニットセルの自動計算等の機能を搭載したTEMイメージシミュレーションソフト	Macintosh	"	—	—
Mathematica 日本語版	"	米ウルフラムリサーチ	広範にわたる分野において世界で数百万ものユーザーの厚い信頼に支えられている、パワフルな数式処理ソフト。開発元のデータベースにアクセスすることで、化学データ表示、構造式表記の取り扱い可能	Windows、Macintosh、UNIX、Linux	"	—	—
Neurone Simulator	"	英バイオソフト	神経生理学の分野の研究に非常に有益な洞察を提供することのできるシミュレーションソフト	Windows	"	—	—

Q-Chem	"	米キューケム	最新の非経験的電子構造計算プログラム。分子の基底状態や励起状態の第一原理計算を可能にし、1つの統合された ab initio ソフトウェアパッケージとして、数多くの計算手法とツールを提供	UNIX、Linux、Macintosh、Windows	"	—	—
QuantiScan	"	英バイオソフト	ポリアクリルアミドゲルやアガロースゲル電気泳動のゲル等をスキャナ(TWAIN 対応)で読み込み、バンドの濃さをグラフ化、数値化するソフト	Windows	"	—	—
SHAPE	"	米シェイブソフトウェア	単結晶、双晶およびエビタキシャルやその他の連晶の形態と対称性を計算し表示するプログラム	Windows、Macintosh、Linux	"	—	—
SigmaPlot	"	米シスタット	生化学者向け機能が豊富なカーブフィッティング & グラフ作成ソフト。最新版では、大幅に統計解析機能を拡充	Windows	"	—	—
SigmaPlot Enzyme Kinetics Module	"	"	酵素反応の阻害形式を素早く決定、詳しくレポートする回帰分析、グラフ作成用の SigmaPlot 専用マクロパッケージ	"	"	—	—
SigmaScan Pro	"	"	特殊な認識機能を用いて、デジタル画像を高速かつ正確に測定、解析することが可能	"	"	—	—
UnGraph	"	英バイオソフト	紙に描かれたグラフをスキャナーで読み込み、X、Y 座標データを任意の精度で認識し、数値化を行うソフト	"	"	—	—
VIBRATZ	"	米シェイブソフトウェア	原子価力定数や Urey-Bradley 力場定数を利用して、分子や結晶の基準座標計算をするプログラム	Windows、Macintosh、Linux	"	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
KeyMolnet	医薬分子設計研究所	医薬分子設計研究所	生体分子・遺伝子・疾患・医薬に関する情報を分子ネットワークを軸に統合した生命情報プラットフォーム。文献調査に基づく高信頼のコンテンツを搭載し、任意の項目間の関係を示すネットワーク検索が可能。DNA chip、プロテオーム、メタボローム等のデータ解析や、ユーザー独自データを統合・利用した検索も可能	Linux(サーバ)、Windows(クライアント)	詳細問い合わせ	2003年4月	—
KeyMolnet Lite	"	"	ノードロック版(アカデミアのみ)	Windows	"	2007年2月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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、Windows XP、Vista	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	"	"	2005年	—
Prime	"	"	蛋白質立体構造予測プログラム。強力なりファイメント機能によりループ構造や側鎖の配座を高精度予測。Glideとの利用でInducedFit解析が可能	"	"	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	"	"	1999年	-
JAGUAR	"	"	Pseudospectralアルゴリズムによる高精度かつ高速な計算を実現した新世代ab-initio量子化学計算プログラム	"	"	1996年	-
JAGUAR pKa Predictor	"	"	JAGUARモジュール(オプション): Ab-initio法によるpKa予測プログラム	"	"	1999年	-
MINTA	"	"	MacroModelモジュール(オプション)。高速かつ高精度に自由エネルギーを算出	"	"	1999年	-
LigPrep	"	"	2次元分子構造からの3次元構造自動発生プログラム。構造最適化計算の他、イオン化モデル、鏡像、トートマー自動発生機能も搭載	"	"	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	"	"	2001年	-
Liaison	"	"	Linear Response法によるBinding自由エネルギー計算プログラム	PC-Linux	"	2001年	-
Qsite	"	"	JAGUARとOPLS-AA力場によるQM/MMプログラム	"	"	2001年	-
Phase	"	"	Pharmacophre/3D-QSAR解析プログラム	PC-Linux, Windows XP, Vista	"	2005年	-
Canvas	"	"	統合型計インフォマティクスプラットフォーム	"	"	2008年	-
Strike	"	"	統計解析/化合物類似性評価プログラム	"	"	2005年	-
QikProp	"	"	3次元構造を利用したの薬物物性予測ソフトウェア。LogPo/w, Caco-2 Cell permeability, Blood-Brain barrier permeability, 溶解度などを予測	"	"	2000年	-
SiteMap	"	"	蛋白質活性部位予測プログラム	"	"	2006年	-
PrimeX	"	"	蛋白質X線結晶構造精密化プログラム	PC-Linux	"	2007年	-
MCPRO+	"	"	生体分子向けモンテカルロシミュレーションプログラム	"	"	2007年	-
Desmond	"	"	生体高分子向け分子動力学プログラム	"	"	2008年	-
WaterMap	"	"	自由エネルギー算出モジュール	"	"	2008年	-
Schrodinger Knime Extensions	"	"	ワークフロー構築プログラムKnime上で利用できるSchrodinger製品との連携拡張ノード群	PC-Linux, Windows XP, Vista	"	2008年	-
J-STRIKE	"	インフォコム	Webベース化合物データ管理システム	お問い合わせください	"	2007年	-
Jchem Extensions	"	"	ワークフロー構築プログラムKnime上で利用できるChemAxon社Jchemノード群	PC-Linux, Windows XP, Vista	"	2008年	-

ADME Suite	"	加アドバンスケ ミストリーディベ ロップメント	入力した2次元化合物構造の情報を元に、Human oral bioavailability, PGP, Absorption, Distribution, P450 Inhibitors/Substrates など 各種の薬物動態特性を予測します。また、予測結果 と共に 入力構造と類似する化合物の文献データとリファレンス値も 合わせて表示	WindowsNT/2000 、XP、Vista	"	2003年5月	—
ADME Suite WEB	"	"	ADME SuiteのWEBブラウザ版	お問合せください	"	2005年	—
Tox Suite	"	"	2次元構造からの毒性予測 (AMES、AcuteTox、Health Effect、hERG、CYP等) およびデータベース機能を持つパッケージプログラム	WindowsNT/2000 、XP、Vista	"	2005年	—
Tox Suite WEB	"	"	Tox SuiteのWEBブラウザ版	お問合せください	"	2005年	—
DMSO Solubility	"	"	DMSO溶解度予測プログラム	WindowsNT/2000 、XP、Vista	"	2003年5月	—
Structure Design Suite	"	"	基本物性を用いたリード最適化ツール	"	"	2009年11	—
QSAR Builder	"	"	物性や活性の解析に化合物の構成を説明する各種フラグメンテーションを利用することが可能。統計モデルには、定量的及び定性的手法を組み合わせるにより予測精度を高めることが可能	"	"	2003年5月	—
Algorithm Builder	"	"	定量的構造活性相関(QSAR)、定量的構造物性相関(QSPR)及び構造活性相関(SAR)のモデルを構築し、これら手法をユーザ独自の予測アルゴリズムに変換させるソフトウェアシステム	"	"	2003年5月	—
Algorithm Launching Pack	"	"	AlgorithmBuilderで作成した予測モデル式をWEBブラウザから利用することが可能	Windows2000他	"	2003年	—
SKIN-CAD	"	バイオコム・システムズ	経皮治療システム開発用薬物動態ソフトウェア	Windows2000、 XP、Vista	"	2000年	—
Debra 5	"	英ラポロジック	FDA 21 CFR Part 11に準拠したADME試験情報管理システム	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	Windows2000、 XP、Vista	"	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ツール	"	"	2000年	-
Metabolism & Transport Drug Interaction Database	"	米ワシントン大学	ヒトでの薬物相互作用に関する論文情報(1966年以降)をFDAガイダンスに添って精査されたデータベース	Webブラウザ利用	"	2004年	-
AntiBase	"	米ワイリー	微生物・酵母・かび等から抽出された天然化合物データベース	Windows2000、XP、Vista	"	-	-
MODDE	"	スウェーデン・ユーメトリックス	実験のデザインと最適化を行う実験科学者向けのソフト。多変量解析手法のMLRおよびPLS法を用いて実験条件と結果の最適化を行う。混合物の配合条件とプロセスの条件を同時に最適化	"	"	1998年	-
SIMCA-P+	"	"	科学者・技術者のためのデータマイニングツール。多変量解析手法は主成分分析およびPLS法が利用可能。多変量解析を利用したプロセス診断も可能	"	"	1998年	-
Chenomx NMR Suite	"	カナダ・ケノミックス	¹ H-NMRスペクトルから、代謝化合物を同定、定量解析を行うソフトウェア	"	"	2006年	-
PEAKS	"	カナダ・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 Q	"	"	PEAKSのオプションツール。各種ラベルに対する定量解析ツール	"	"	2009年4月	-
PEAKS Online	"	"	PEAKSをWebサーバー&クライアントで利用が可能	お問い合わせください	"	2006年	-
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・アブライドマス	系統分類・解析・データベース化ソフト:電気泳動、RFLP画像、ガスクロ、HPLC、分光光度計曲線等の波形データ、塩基/アミノ酸配列データ、マトリックスデータ、酵素/代謝反応実験のプロファイリングなど、各種実験データ入力。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの各種統計手法。RDB対応	Windows2000以降	"	2000年	-
GeneMathsXT	"	"	遺伝子発現データ(DNAチップ・マイクロアレイ)解析システム。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの豊富な各種統計手法。RDB対応	"	"	"	-
MetaCore	"	米ジーンゴー	マニュアルキュレートで文献から得られた分子間相互作用情報を収録したパスウェイ解析ツール	Webブラウザ利用もしくは、サーバー利用(Linux)	"	2005年	-
MetaDrug	"	"	薬物候補化合物から代謝構造予測を経てパスウェイ解析を行う統合型トキシコゲノミクスプラットフォーム	"	"	2005年	-

EUREKA	"	"	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データベース	"	"	2009年	-
Auto Net Finder	"	インフォコム	多変量解析手法Graphical Gaussian Modelingと階層的クラスター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	-
browser	"	英ドットマティクス	各種ケミカルカートリッジが使用可能な完全Web対応型生物・化合物情報管理統合プラットフォーム	Webブラウザ利用	お問い合わせ下さい	2009年10月	-
Vortex	"	"	化学、生物及び一般数値データ視覚化ツール。Browserとの連携により、データベースから情報検索、データ解析をシームレスに実施。	Webブラウザ又はWindows、Linux、Mac	"	2009年10月	-
Pinpoint	"	"	ドットマティクス社製Oracleケミカルカートリッジ	"	"	2009年10月	-
Nucleus	"	"	ETLツール。生物試験、化合物情報とデータベースのマッピング及びデータベースへの自動登録が可能。	Webブラウザ利用	"	2009年10月	-
Gateway	"	"	創薬プロジェクト情報共有ツール。Browser等他のツールとの連携が可能。	"	"	2009年10月	-
Register	"	"	化合物データ登録ツール。登録画面のカスタマイズ及びビジネスルールや塩の取り扱いなど細かい設定が可能。	"	"	2009年10月	-
studies	"	"	生物試験データ管理ツール	"	"	2009年10月	-
APEX	"	米シエラ	MSデータを元にした代謝物同定及び比較定量ソフトウェア	Windows XP、Vista	"	2009年12月	-
AnalyzerPro	"	英スペクトラルワークス	MSスペクトルから混合物解析やデコンボリューションを行なうソフトウェア	"	"	2009年12月	-
RemoteAnalyzer	"	"	複数種類のMS機器にアクセスし、サンプル取扱が可能なツール	Webブラウザ利用	"	2009年12月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CSD	化学情報協会	英Cambridge Crystallographic Data Centre(CCDC)	ケンブリッジ結晶構造データベース：X線・中性子線で解析した有機化合物・有機金属化合物の結晶構造データベース(490,000件以上)。分子間相互作用のデータベースも充実	Windows PC、Linux、Mac	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	Windows PC、Linux	"	-	-

DASH	"	英CCDC、英CCLRC、Prof.B.David	粉末回折パターンからの結晶構造解析ソフト。初期構造決定から構造精密化までの一連の機能を持つ未知構造解析用の統合パッケージ	Windows PC	"	-	-
Relibase+	"	英CCDC、Prof.G.Klebe	Protein Data Bank(PDB)の結晶構造を検索できるWebベースのRelibaseの改良版。蛋白質-リガンド間、及び蛋白質-蛋白質相互作用の検索可能。さらに類似リガンドの検索も可能	サーバ(Linux)、クライアント(Windows PC、Linux)	"	-	-
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(120,000件以上)。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	"	-	-
CRYSTMET	"	加Toth Information Systems	金属(合金、金属間化合物など)の結晶構造データベース(130,000件以上)。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(14,000件以上)。超伝導に関するデータも収録	"	"	-	-
NIST08	"	米NIST、米EPA、米NIH	イオン化質量スペクトルデータベース(192,000化合物、220,000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	"	"	-	-
C&H Dictionaries	"	米Taylor&Francis Group、米Chapman&Hall/CRC	5種類の化合物辞典がある。論文に報告された化合物の名称や分子式、2D構造式、各種物性、CAS登録番号、安全性情報などを収録	Windows PC	"	-	-
SoS	"	独Thieme Chemistry	合成法を記したHouben-Wyleの叢書及びScience of Synthesisのweb版。反応や化合物で検索可能(合成方法3.8万件以上、化学反応25万件以上、化合物102万件以上)	Web	"	-	-
USGENE	"	米SequenceBase Corporation	米国の公開特許・登録特許のタンパク質・核酸の配列情報を収録したデータベース。データのみで構成	-	"	-	-
BEILSTEIN	"	STN	有機化合物、有機金属化合物の物性と合成・反応情報、および参考文献情報	Windows PC、Mac	原則として従量制	-	-
DETERM	"	"	純物質および組成既知の混合物に関する化学プラント設計用の熱物性データと文献情報	"	"	-	-
GENBANK	"	"	米国立衛生研究所作成の核酸配列を収録。核酸配列に関する説明、起源生物、文献等	"	"	-	-

GMELIN97	''	''	無機化合物と有機金属化合物の物性と合成・反応情報、および参考文献情報	''	''	-	-
ICSD	''	''	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(120,000件以上)。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	''	''	-	-
MDF	''	''	鉄鋼、および非鉄金属の機械的性質、物理的性質の数値情報および書誌情報	''	''	-	-
MRCK (MERCK)	''	''	化学物質、医薬品、生体物質、農薬、天然物の化学的・物理的性質と毒性。冊子体 Merck Index 13 版に対応	''	''	-	-
REGISTRY	''	''	Caplus、CA ファイル収録の雑誌論文および特許に索引された化学物質と米国、EC、カナダの既存化学物質台帳収録化学物質、タンパク質、核酸の配列データ、実測および予想物性値、各種スペクトルデータ。特許中の Prophetic 物質も収録	''	''	-	-
SpecInfo	''	''	有機金属化合物を含む有機化合物のスペクトルデータ(NMR、IR、MS)	''	''	-	-
SciFinder	''	米CAS	化学を中心とする医薬、生化学、物理、工学等の科学情報を包括的に掲載。現在、世界中の企業・教育機関・研究機関の研究者により研究・開発の最前線で活用されているスタンダードツール	''	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
日化辞Web	科学技術振興機	科学技術振興機	インターネット上でJSTが作成し提供している日本化学物質辞書を無料で公開するもの。約277万の有機低分子化合物及びその混合物を収録。化学物質名称や分子式などからの文字列検索、及び化学構造検索が無料で可能。化審法の既存化学物質の番号や安衛法の番号も収録 (http://nikkajwebjst.go.jp/)	推奨=Windows 2000,XP :Internet Explorer 6.x及び Netscape 7.x / MacOS 10.x : Safari 1.x, Netscape 7.x / MacOS 9.x : Internet Explorer 5.x及びNetscape 7.x 化学構造検索を行うには ChemDrawPlugin (無料ダウンロード可)をあらかじめインストールしておく必要あり	-	-	-

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
COMSOL Multiphysics	計測エンジニアリングシステム	瑞COMSOL	FEMベースの一般偏微分方程式(PDE)ソルバをコアとしたシミュレーションソフトウェア。化学反応・流体・伝熱・電磁場・構造などPDEで記述できる工学現象に分野を問わず対応可能。またマルチフィジックス機能は物理(フィジックス)の組み合わせの数やパターンには制限がなく、複雑な化学工学プロセスも実現に即した高精度のモデリング/シミュレーションがシームレスに実行可能。物理モデルはソフトウェア搭載既定モデルのほかユーザ定義モデルがGUIで構築できる。既定物理モデルのカスタマイズも可能。CAPE-OPENインタフェース対応。Ver.4.0を2010年3月リリース。さらにCFD・プラズマ・電気化学モジュールを2010年6月リリース予定	Windows, Linux, Solaris, Mac	お問い合わせ下さい(アカデミック価格あり)	2001年8月	—
COMSOL Reaction Engineering Lab	〃	〃	素反応ベースでCVDや燃焼・触媒反応などの本格的な化学反応系モデリング/シミュレーションのためのソフトウェア。反応系の物質・エネルギー・運動量収支を定義するほか空間非依存(0次元)系の化学組成・温度変化を求める(非定常)。形状に依存する、たとえばリアクタ内部における流れ/伝熱/反応が強く相関する反応系に対してはCOMSOL Multiphysicsとの密接な連携により対応。また実験値を元にパラメータ推定で反応速度定数を決定することができる。CAPE-OPENインタフェース対応	〃	お問い合わせ下さい(アカデミック価格あり)	2006年2月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NMRPipe	エルエイシステムズ	米NIH	高速多次元NMRデータ処理および解析プログラム。代表的なNMR装置のFIDファイルに対応	LINUX (UNIX)、MacOSX、Windows (Windows Server for Linux経由)	300万円	—	—
PCA/HSQC	〃	〃	NMRPipeシリーズのモジュールの一つで、滴定実験などの2D-NMRスペクトルによる評価をサポートし、ドラックデザインなどで効力を発揮するツール	〃	100万円	—	—
DYNAMO	〃	〃	NMRPipeシリーズ。シミュレーテ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	〃	240万円	—	—
1D STD SYSTEM	〃	〃	NMRPipeシリーズ。自動 1D バッチプロセスおよびSTD(飽和移動差スペクトル)分析用のツール	〃	210万円	—	—
CYANA	〃	Peter Guntert 他(スイス)	NOE帰属を考慮した、タンパク質構造解析・計算ソフトウェア	Linux	200万円	—	—
KUJIRA	〃	理化学研究所	タンパク質のNMR構造解析でピークピッキングから構造決定までの処理を自動または手動でGUIからおこなう。NMRViewを利用。NMRPipe、CYANAとの連携が可能	〃	300万円	—	—

Mnova NMR	"	スペイン Mestrelab Research	NMRの1D,2Dプロセッシング、解析などを行うソフト。印刷イメージのままNMRプロセスができ、PowerPoint的なレポート作成機能を持ち、自動プロセス機能が優れているので、初心者にも使いやすい。5ライセンス以上の割り引き。サイトライセンスもあり。	Windows、 Mac OSX、 Linux	35万円	—	—
NMRPredict Desktop	"	"	Mnovaのプラグイン 化学構造式から1D 1H、13CNMRスペクトルを予測	"	30万円	—	—
Mnova Lite	"	"	Mnovaの1D専用版	"	20万円	—	—
Mnova MS	"	"	MnovaのMSプラグイン	"	55万円	—	—
PERCH	"	フィンランド PERCH Solutions Ltd.	測定1D NMRのデータ処理、解析とともに立体化学構造の分子モデリング計算とスピン系計算により1D NMRスペクトル予測を行うソフトウェア	Windows	140万円	—	—
Nuts	"	米AcornNMR	NMRデータ処理。1Dおよび2Dのデータ処理が可能。2D データ処理を高速に行えるアレイドモード・モジュール付属。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	Windows、 Macintosh	20万円	—	—
CH-NMR-NP	"	NMRDBTech・ エルエイシステムズ	Web経由で利用可能な有機天然物NMRデータベース 部分化学構造式、NMRピーク値等から検索が可能 2005年8月現在 7,426件の天然物の1H、13Cスペクトルデータを収録	Windows、UNIX、 LINUX、Mac OSX (ブラウザ経由)	90万円	—	—
ChemSketch	"	加ACD	化学構造式、図形を描写するドローソフトウェアの単体製品。化合物の名称から構造を検索できる Dictionary 機能付属。ほとんどのデータ処理製品に付属	Windows	8万円	—	—
ChemFolder	"	"	化学構造式、反応経路、物性値、実験データ等、様々な化合物データを管理できるデータベースソフトウェア	"	36万3,000円	—	—
Name	"	"	構造式からIUPAC/CAS Index ルールに基づき化合物名を命名、化合物名から構造式を検索・出力	"	56万6,000円	—	—
Name Chemists' Version	"	"	IUPAC 命名と主要機能に限定したNameの廉価バージョン	"	御問合わせ下さい	—	—
NMR Processor	"	"	1D、2D NMR測定データを読み込み、FT、フェーズ合わせ、ピークピック、積分、アサインメントなどのプロセス、解析処理をおこない、レイアウトに合わせたレポートを作成	"	御問合わせ下さい	—	—
1D NMR Manager	"	"	1D NMRデータプロセス及びNMRスペクトルと構造式、化学情報を組み合わせた1D、2D NMRデータベースの構築ソフトウェア。化学情報、NMRスペクトルパターン、部分構造式から検索可能。UV、IR、MASSなどのManagerと連携可能	"	78万3,000円	—	—
NMR Workbook	"	"	1D/2D NMRデータプロセス及びNMRスペクトルと構造式、化学情報を組み合わせた1D、2D NMRデータベースの構築ソフトウェア。化学情報、NMRスペクトルパターン、部分構造式から検索可能。UV,IR,MASSなどのManagerと連携可能。V12より複数のスペクトルを1回の操作でプロセスできるNMRsync機能を追加	"	118万9,000円	—	—

Aldrich NMR Library	"	"	NMR Manager プラグイン。約35,000件のAldrich試薬の 1D C/H NMR スペクトルデータを収録	"	御問い合わせ下さい	-	-
Polymer Database	"	"	NMR Manager プラグイン。約430件の高分子化合物の 1D C/H NMR スペクトルデータを収録	"	御問い合わせ下さい	-	-
Chenomx Metabolite Library	"	"	NMR Manager プラグイン。Chenomx社製、約300件の代表的な生体代謝物の 1D HNMR スペクトルデータを収録	"	御問い合わせ下さい	-	-
HNMR Predictor	"	"	構造式から1H NMRスペクトルを予測。内部DBにある約21万件の化合物から部分構造を検索し、170万件の化学シフト値からスペクトルを予測。1D NMR process機能付属	"	98万6,000円	-	-
CNMR Predictor	"	"	構造式から13C NMRスペクトルを予測。内部DBにある約20万件の化合物から部分構造を検索し、250万件の化学シフト値からスペクトルを予測。1D NMR process機能付属	"	98万6,000円	-	-
HNMR DB add-on	"	"	HNMR Predictor の内部DB参照用 Add-on データベース。約21万件のアサインされた化合物の構造、1H 化学シフト、カップリング定数情報を参照可能	"	御問い合わせ下さい	-	-
CNMR DB add-on	"	"	CNMR Predictor の内部DB参照用 Add-on データベース。約0万件のアサインされた化合物の構造、13C 化学シフト、カップリング定数情報を参照可能	"	御問い合わせ下さい	-	-
CNMR Predictor & DB	"	"	CNMR Predictor と Add-on DB のパッケージ製品	"	御問い合わせ下さい	-	-
HNMR Predictor & DB	"	"	HNMR Predictor と Add-on DB のパッケージ製品	"	御問い合わせ下さい	-	-
FNMR Predictor	"	"	入力された化合物の構造式から、化学シフトと結合定数を予測。内部DBにある16,780件の化合物から部分構造を検索し、35,014件の化学シフト値情報を組み合わせて、19F NMR スペクトル(化学シフト、カップリング定数)を予測。(FNMR DB add-on、パッケージ製品も有)。1D NMR process機能付属	"	60万9,000円	-	-
PNMR Predictor	"	"	入力された化合物の構造式から、内部DBにある27,000件の化合物から部分構造を検索し、34,000件の化学シフト値情報を組み合わせて、31P NMR スペクトル(化学シフト、カップリング定数)を予測。(PNMR DB add-on、パッケージ製品も有)。1D NMR process機能付属	"	60万9,000円	-	-
NNMR Predictor	"	"	入力された化合物の構造式から、内部DBにある21,700件の化合物から部分構造を検索し、9,200件の化学シフト値情報を組み合わせて、15N NMR スペクトル(化学シフト、カップリング定数)を予測。(NNMR DB add-on、パッケージ製品も有)。1D NMR process機能付属	"	60万9,000円	-	-

NMR Predictor Suite	"	"	入力された化合物の構造式から、H、C、F、P、Nの1D NMRスペクトル、1H、13CのCOSY、TOCSY、HSQC、HMBCなどの同種核、異種核2D NMRスペクトルを予測。1D、2D NMR Processor機能付属	"	198万7,000円	—	—
NMR Workbook Suite	"	"	1D/2D NMR プロセス、DB構築、C/H/F/N/P/2D NMR 予測機能をパックにし、価格を抑えたセット製品	"	288万6,000円	—	—
1D NMR Expert	"	"	1D NMR Manager、H/C Predictorの連携で、自動でNMRデータセットの評価がおこなえる、NMRハイスルーブットプロセス用ソフトウェア。プレート(ラック)を使用した自動測定NMRデータセットをプレート番号と対応して管理し、バッチ処理で定形プロセス、反応評価(予測スペクトルとの一致度、アサインメントRMS(二乗平均)、純度など)、データベース登録をおこなう。反応進行度の比較評価、品質評価レポート作成などもおこなえる。384 ウェルプレートまで対応	"	御問合わせ下さい	—	—
2D NMR Expert	"	"	1D/2D NMR Manager、H/C Predictorの連携で、自動でNMRデータセットの評価がおこなえる、NMRハイスルーブットプロセス用ソフトウェア。プレート(ラック)を使用した自動測定NMRデータセットをプレート番号と対応して管理し、バッチ処理で定形プロセス、反応評価(予測スペクトルとの一致度、アサインメントRMS(二乗平均)、純度など)、データベース登録をおこなう。反応進行度の比較評価、品質評価レポート作成などもおこなえる。384 ウェルプレートまで対応	"	御問合わせ下さい	—	—
SpecManager Enterprise	"	"	スペクトルデータベース(NMR/ MS/ UVIR/ Curve/ Chrom Manager)のデータベースエンジンとして、サーバー内のOracle 9iまたはOracle 10gを使用してデータ共有、同時作業が可能な企業向けDB連携製品	"	御問合わせ下さい	—	—
ChemFolder Enterprise	"	"	化合物データベース(ChemFolder)のデータベースエンジンとして、サーバー内のOracle 9iまたは PostgreSQL 8.1.4を使用してデータ共有、同時作業が可能な企業向けDB連携製品	"	御問合わせ下さい	—	—
Automation Server	"	"	ACDソフトウェアでの測定後のデータ解析、データベース登録、レポート作成、ファイル操作を自動化するためのサーバソフトウェア。スクリプト作成やAPIを使用したアプリ作成でカスタマイズが可能	"	御問合わせ下さい	—	—
Workflow Manager	"	"	スペクトルデータベースと連携し、化合物単位での分析進捗状況(ワークフロー)を管理するマネージメントソフトウェア。実験フロー、クライアント入力フォーム等をカスタマイズ可能	"	御問合わせ下さい	—	—

Web Librarian	"	"	LAN内のWebサーバーにスペクトルデータベース、化合物データベースなどを構築して、クライアントPCのWebブラウザをユーザ・インターフェースとして用い、DB選択、検索、閲覧、レポート作成などを可能にするWebツール製品。各データベース製品毎に対応した製品有り	"	御問合わせ下さい	-	-
MS Processor	"	"	Massスペクトルデータ処理	"	62万4,000円	-	-
UV-IR Processor	"	"	UV/IR/Vis/Raman などのスペクトルデータ処理	"	16万円	-	-
Chrom Processor	"	"	HPLC、LC/UV (DAD または PDA)、GC、CE(キャピラリー電気泳動)などのクロマトグラムデータ処理	"	16万円	-	-
Curve Processor	"	"	DSC、DTA、TGAなどの熱分析、X線、ESRなどのスペクトル、カーブデータ処理	"	16万円	-	-
IntelliXtract	"	"	LC/MSのデータからコンポーネントを抽出し、各コンポーネント中のフラグメントの[M+H] ⁺ または[M-H] ⁻ アサインを自動またはマニュアルで行える	"	78万3,000円	-	-
MS Manager	"	"	Massスペクトルデータ処理・データベース構築	"	78万3,000円	-	-
UV-IR Manager	"	"	UV/IR/Vis/Raman スペクトルデータ処理・データベース構築	"	78万3,000円	-	-
Chrom Manager	"	"	HPLC、LC/UV (DAD または PDA)、GC、CE(キャピラリー電気泳動)などのクロマトグラムデータ処理・データベース構築	"	78万3,000円	-	-
Curve Manager	"	"	DSC、DTA、TGAなどの熱分析、X線、ESRなどのスペクトル、カーブデータ処理・データベース構築	"	78万4,000円	-	-
MS Manager Suite	"	"	クロマトピークとMS、IR-UVなどの連携解析が可能な、MS Manager、ChromManager、UV-IR Manager のセット製品	"	158万4,000円	-	-
FDM FT-IR Databases	"	"	UV-IR Manager への Add-on DB。Fiveash Data Management Inc.製 FT-IR スペクトルデータ	"	御問合わせ下さい	-	-
NIST IR Database	"	"	UV-IR Manager への Add-on DB。FT-IR スペクトルデータを約 6,000 件収録	"	御問合わせ下さい	-	-
LC Simulator	"	"	液体クロマトグラフィーの保持時間の予測およびグラディエント、溶媒濃度、温度、pH、カラムなど実験条件の最適化。データ処理用のChromProcessorとガスクロマトグラフィー用のGC Simulatorが付属	"	78万3,000円	-	-
MS Fragmenter	"	"	化合物の構造から任意のイオン化法における MSフラグメントを予測	"	39万2,000円	-	-
Chromatography Applications Database	"	"	HPLC、GC、CE(キャピラリー電気泳動)での化合物分離における約8,100件のクロマトグラムと溶媒、グラディエント、pH、カラムなどの実験適用例データベース	"	御問合わせ下さい	-	-
ChirBase	"	"	HPLCでのキラル分離における30,000件の化合物の100,000件の実験適用例データベース。化合物の構造から最適な分離条件を予測	"	御問合わせ下さい	-	-

ChirBase/GC	"	"	GCでのキラル分離における8,000件の化合物の24,000件の実験適用例データベース。化合物の構造から最適な分離条件を予測	"	御問合わせ下さい	-	-
ChirBase/CE	"	"	キャピラリー電気泳動(CE)でのキラル分離における2,000件の化合物の8,000件の実験適用例データベース。化合物の構造から最適な分離条件を予測	"	御問合わせ下さい	-	-
ChromGenius	"	"	LC/MSでの選択スクリーニングにおいて、構造式から内部DBを参照して分解能、保持時間を予測し、最適な分離条件を予測	"	御問合わせ下さい	-	-
Method Development Suite for LC/UV	"	"	LC/UVを中心に、HPLC,GC,CEなどのプロセス、データベース、シミュレーションからの分離条件最適化などをおこなうツールと、化合物構造と蓄積情報から合理的な分離方法を探索するツールの統合製品。ChromManager (Chrom Processor; Chromatography Applications Database) 、LC Simulator 、GC Simulatorが ^g 付属	"	158万1,000円	-	-
AutoChrom for LC/UV	"	"	Method Development Suite for LC/UVにLC/UV装置との連携機能付属	"	317万6,000円	-	-
Method Development Suite for LC/MS	"	"	Method Development Suite for LC/UV製品にMSでの分析機能を追加した統合製品。LC/UVのセット製品に加えて、MS Processor、IntelliXtractが ^g 付属	"	235万7,000円	-	-
AutoChrom for LC/MS	"	"	Method Development Suite for LC/MSにLC/UV/MS装置との連携機能付属	"	477万1,000円	-	-
LogD	"	"	イオン性官能基をもつ有機化合物の構造から、各pHでのオクタノール/水系への分配係数(LogD値)を予測	"	御問合わせ下さい	-	-
LogP DB	"	"	中性有機化合物の構造から、オクタノール/水系への分配係数(LogP値)を予測。約18,400件の化合物の構造と実験LogP値を登録した内部データベース付属	"	御問合わせ下さい	-	-
pKa DB	"	"	酸・塩基有機化合物の構造から、酸解離定数(pKa)を予測。16,000件の構造と31,000件に及ぶ実験値の内部データベース付属	"	御問合わせ下さい	-	-
Solubility DB	"	"	化合物の構造から各pHでの水系への溶解度を予測	"	94万3,000円	-	-
Boiling Point	"	"	化合物の構造から沸点を予測	"	23万2,000円	-	-
Sigma Predictor	"	"	芳香族反応におけるHammett則の置換基定数(σ 値)を、置換基の構造式から予測	"	御問合わせ下さい	-	-
LogD Suite	"	"	化合物の構造から LogP/pKa/LogD値を予測。生物濃縮係数(BCF)、土壌吸着係数(Koc)、Rule of 5などの薬物動態の予測、評価も可能。pKa DB、LogP DB、Sigma Predictorが ^g 付属	"	御問合わせ下さい	-	-
LogD Sol Suite	"	"	LogD SuiteにSolubility DB が ^g 付属したセット	"	御問合わせ下さい	-	-

Name Batch	"	"	構造式からIUPAC/CAS Index ルールに基づき化合物名を命名。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
PhysChem Suite	"	"	logD、pKa、溶解度、沸点などの物性予測のセット製品	"	188万5,000円	—	—
Structure Designer	"	"	ドラッグデザインにおけるバーチャルADME(薬物体内動態)用に、リード化合物へ官能基を導入した誘導体を自動生成し、logP、pKa、logD、溶解度などの物性値を予測	"	御問合わせ下さい	—	—
Structure Design Suite	"	"	Structure Designerに外部アプリケーション連携、実験データベース、ユーザプロトコルなどを追加した類似化合物生成と物性値予測によるバーチャルスクリーニングが可能なセット製品	"	217万5,000円	—	—
Structure Elucidator	"	"	1D、2D NMR、MS、UV-IR、GCなどのデータベース機能と1H、13C、2D NMR Predictor機能を組み合わせて、化学構造解析をおこなう統合ツール。1D/2D NMR スペクトル(HM/SQC、HMBC、13C必須)、分子量、分子組成(元素分析)等の情報から構造式を推定	"	717万円8,000円	—	—
Name-to-Structure Batch	"	"	IUPAC/CAS Index ルールの化合物名からChemFolder DB、sdfファイル形式などで構造式を出力。最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
LogD Batch	"	"	イオン化官能基をもつ有機化合物の構造から、各pHでのオクタノール/水系への分配係数(LogD値)を予測。生物濃縮係数(BCF)、土壌吸着係数(Koc)の薬物動態の評価も可能。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
LogP Batch	"	"	中性有機化合物の構造から、オクタノール/水系への分配係数(LogP値)を予測。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
Solubility Batch	"	"	化合物の構造から各pHでの水系への溶解度を予測。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
LogD Sol Batch	"	"	LogD BatchとSolubility Batchのセット製品	"	御問合わせ下さい	—	—
pKa Batch	"	"	酸・塩基有機化合物の構造から、酸解離定数(pKa)を予測。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
Boiling Point Batch	"	"	化合物の構造から沸点を予測。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—

Sigma Batch	"	"	芳香族反応におけるHammett則の置換基定数(σ 値)を、置換基の構造式から予測。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
PhysChem Batch	"	"	バッチ物性値予測の統合製品。化合物の構造からLogP/pKa/LogD/各pHでの水系への溶解度/沸点/ σ /土壌吸着係数(Koc)/生物濃縮係数(BCF)/極性表面積(PSA)/自由回転結合(FRB)/蒸気圧/蒸発エンタルピー/引火点などの物性値を予測。ChemFolder DB、sdfファイル形式などの連続した構造式データから最大10万件のバッチ処理が可能	"	御問合わせ下さい	—	—
LCModel	"	加 Stephen Provencher	MRIの1H MRスペクトルからカーブフィットにより生体内の代謝産物(クレアチン、コリン、Nアセチルアスパラギンなど)の定量解析を行うソフトウェア	UNIX(SUN、SGI)、Linux (RedHat)	御問合わせ下さい	—	—
nordicICE	"	ノルウェー NordiCImagingLab社	汎用MRI画像解析ソフトウェア。汎用のMRIイメージ処理(画像変換、閲覧、ROI解析、DICOMクライアント)をおこなうBasis Moduleと、臨床的な用途を重視した各脳機能画像法(Diffusion、Perfusion、fMRI、Penguin Stroke Perfusion)用の解析ツールが追加Moduleとしてある	Windows	御問合わせ下さい	—	—
Analyze	"	米 Mayo Clinic	バイオメディカルイメージングソフトウェア。MRI、CTなどのさまざまな医療画像の読み込みに対応しており、ボリュームレンダリング、サーフェスレンダリング、セグメンテーション、ムービー作成など3D画像の高速表示、加工、データ作成に優れている	Windows、Linux	御問合わせ下さい	—	—
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
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 V2.3	"	"	質量分析装置のRAWデータより、独自アルゴリズムで、モノアイソトピックピークを生成。DeNovo解析、定量解析も可能	Windows	"	2005年	—
Mascot Integra	"	"	プロテオミクス解析で発生する各種データマネジメントソフトウェア。小規模版LIMS。拡張可能	Windows、Linux	"	2005年	—
Mascot Wizard	"	"	ペプチドマスフィンガープリント法検索を簡便に行うMascot用インターフェースソフトウェア	Windows	無償	2003年	—
Mascot Daemon	"	"	検索作業のデータハンドリングを自動化するためのソフトウェア	"	"	1999年	—
Scaffold	"	米プロテオームソフトウェア	蛋白同定検索エンジンの結果を取込、各検索結果の比較表示、データマイニングを行うソフトウェア	"	お問合せ下さい	2007年	—
商品名	販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

Xome	三井情報	三井情報	質量分析データを用いたタンパク質の同定・定量・アノテーションを自動で行うことを目的としたプロテオミクス・プラットフォーム。エーザイおよびシーズ研究所との共同開発により、ユーザーの立場に立ったインターフェースや、機器に依存しない統一された操作など、経験豊富な研究者のノウハウで、MS測定後のデータ解析をサポート。高速同定エンジンの採用や、スピードを重視したピーク検出、および定量アルゴリズム、それらの実行状態を管理する負荷分散機能により、ハイスループットなデータ処理を実現する	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18サイト
Mass Navigator	〃	〃	主要な質量分析器のデータフォーマットに対応した、ユニバーサルMSスペクトル解析ソフトウェア。LC-MSの3DViewやMALDI用のGel Viewなどの種々のViewer、スペクトルやクロマトグラムのオーバーラップ機能などユーザフレンドリーなインターフェースを用いて効果的なスペクトルの解析が可能。また、機器の特性に応じたピーク検出、同位体クラスタの検出、スムージングやキャリブレーションなどの補正、目的MSピークの定量等、様々な解析を行うためのアルゴリズムを実装している。さらに、プロテオーム用機能としてXomeと連携しており、タンパク質同定、定量結果を生データレベルで検証することも可能	WindowsXP/2003	200万円(税抜き)、2本目以降値引きあり	2005年下半期	国内21サイト
VoyaGene	〃	〃	DNAマイクロアレイ等で得られた遺伝子発現プロファイルデータから遺伝子間の相互作用(遺伝子ネットワーク)を推定するシステム。性質の異なる4つの遺伝子ネットワーク推定モデルを搭載しており、実験データに応じたモデルの選定や組み合わせが可能。また、ネットワーク表示機能や推定結果検証機能も充実しており、煩雑かつ難易度の高いネットワーク推定を効率よく行うことができる	サーバ: Solaris8、Redhat Linux、クライアント: Redhat Linux、Windows2000/XP	永久ライセンス580万円(税抜き)～、年間ライセンス250万円(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	2003年上半期	国内3サイト
2DICAL	〃	〃	超低流速の液体クロマトグラフィーと質量分析計から経時的に得られるスペクトラムをデジタル処理し、質量電荷比(M/Z)、保持時間(R.T)の2軸で特定されるペプチド等の生体分子を多数検体間で定量比較するシステム。ダイナミックプログラミングによる保持時間の自動補正や価数判定、分子量推定機能により正確なピーク対応を実現。少数検体間での比較実験から100データ以上の大規模解析まで幅広く対応可能	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	2010年1月～3月(予定)	—

SOSui	"	名古屋大学美宅研究室	膜タンパク質判別および膜貫通ヘリックス予測システム。Kyte-Doolittleの疎水性指標と、新規に定義した両親媒性および非電荷指標などを用いて、従来の手法と比べて高速かつ高精度な予測を実現している。他にシグナルペプチドやダンベル型タンパク質の判別プログラムもある	Sun Solaris、RedHat Linux、AIX	V1.5 50万円(税抜き)、V2.0 80万円(税抜き)、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	1999年11月	国内46サイト
GeneFIS	"	名古屋大学本多研究室	ファジィニューラルネットワークを用いて、検体のマイクロアレイ解析結果や病態に関するデータ(疾患の有無、予後のよし悪しなど)から疾患や治療法に関連する原因遺伝子を自動的に絞り込み、高精度の病態推定モデルを構築するソフトウェア。さらに、ファジィ推論を使って、疾患や治療法に関連する因子がどのように組み合わせられると疾患がある、もしくは予後が悪いなどと推定されるかについてのルールを、構築した推定モデルから抽出し、わかりやすく表示することが可能	WindowsNT/2000/XP	80万円(税抜き)～、教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	—	国内5サイト
TRANSFAC	"	独バイオベース	真核生物の転写因子およびその結合部位に関するデータベース。分子生物学者のグループにより校閲されているため高い信頼性を持つ。データベースに含まれる位置特異的重み行列を用いた転写因子結合部位予測ツールMATCHなどが含まれる。目的別にオプションデータベースが用意されている	Compaq Tru64 UNIX、SGI IRIX、Sun Solaris、HP-UX	企業規模により年間使用料が変化します。詳細並びに教育機関向け価格は別途お問い合わせ下さい	1999年7月	—
TRANSCOMPEL	"	"	Composite element(複合シスエレメント)に関するデータベース	"	"	"	—
TRANSPATH	"	"	転写因子のトランス活性化制御機構に関するデータベース。手書きのグラフィカルマップや、検索条件によって動的に生成されるネットワーク表示などにより、複雑な制御機構をわかりやすく表示できる。分子生物学者のグループにより校閲されているため高い信頼性を持つ	"	"	2001年上半期	—

LipidSearch	''	''	東京大学田口研究室と共同開発された生体内脂質の自動同定システム。生体試料を測定した大量の質量分析データを直接読み込み、試料中に含まれる脂質を一括して同定、解析する。同定に用いる脂質データデータベースはカスタマイズ可能な独自のXMLフォーマットにより定義されており、既知の脂質のみでなく未知脂質まで同定が可能。さらに独自に開発した同定アルゴリズムにより高精度な同定を実現している	WindowsXP/2003	1.基本ライセンス 民間:300万円、アカデミック:180万円 2.保守 民間:初年度80万円(/年) 次年度以降60万円(/年) アカデミック:初年度60万円(/年) 次年度以降40万円(/年) ※税込、予定価格	2009年下半期(予定)	-
糖鎖微量迅速解析システム用検索ソフト	''	''	産業技術総合研究所と共同開発された糖鎖同定システム。糖鎖質量分析スペクトルと測定者のスペクトルとの照合により糖鎖構造を推定する。測定者はソフトウェアから提示されたピークを順次測定することで簡単に糖鎖構造解析を行うことができる。従来の解析法では難しかった異性体の区別を含む糖鎖構造解析が可能	Windows XP/Vista (株)島津製作所製 糖鎖微量迅速解析システム用クライアント	400万円(税抜き)	2010年1月	-
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	最強の論理的分子設計ツールHyperChemとGaussianで生体高分子モデリング、解析、シミュレーション。様々な状態の生体高分子システム(タンパクおよび核酸分子システム)に対応。HyperChem、Gaussian計算エンジンによるエネルギーベースの最先端手法。ホモロジーモデリング過程での、挿入配列モデリング、主鎖モデリング、側鎖モデリング、共有結合低分子モデリング、ヘテロ分子・金属原子影響下モデリング、ホモ・ヘテロ会合状態モデリング、溶媒和条件下モデリングなど従来製品では利用できない最先端手法がエネルギーベースで実施できる	HyperChem5.x/6.x/7.x/8.x (必須): Gaussian98 RevA9以上あるいは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	-

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)	〃	〃	統合分子設計支援システムHyperChemで全自動生体高分子-リガンドフレキシブルドッキングシミュレーション、パーティクルスクリーニング。様々な状態の生体高分子システム(タンパクおよび核酸分子システム)に対応。従来製品にはない非グリッドアルゴリズムを採用し、HyperChem高信頼性高速計算エンジンによる全系を対象とした高精度手法。構造ベース予測ファーマコフォア点情報を利用する独自のドッキングアルゴリズムPIEFIIIによる高信頼性を誇る安定複合体構造探索手法。ドッキング・スクリーニングに要求される各種従来機能に加え、生体高分子システムの誘導適合効果を考慮したフレキシブルドッキング機能、アポ体へのドッキングなど誘導適合効果を越えた大きな構造変化にも対応したフレキシブルドッキング機能、標的分子以外の高分子、低分子、水分子、金属原子、共有結合置換基などからの立体電子影響下でのフレキシブルドッキング機能、試行化合物のコンフォメーション毎に任意半経験分子軌道法による電荷アサイン機能、United AtomおよびAll Atom条件の様々な組み合わせ機能、リスタート機能、溶媒和条件下ドッキング機能、分散処理機能など従来製品では未踏の最先端手法を駆使でき、精密なドッキングシミュレーションからin silicoスクリーニングをサポートする。さらに、プロフェッショナルユーザーは分子力学計算・量子力学計算パラメータからドッキング・スクリーニングパラメータに至る全パラメータをGUIベースで詳細に自由に調整できる	HyperChem6.x/7.x/8.x (必須): Windows98/NT/2000/XP/Vista	お問い合わせください	2006年6月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NanoBox(ナノボックス)	ナノシミュレーション	ナノシミュレーション	液晶、合成高分子、低分子混合系のシミュレーションで実績のある分子材料設計用分子動力学ソフトウェア。多成分系の化学ポテンシャルが計算可能。液晶では世界最高峰のソフト	Xeon、Core2、Opteron等 Intel CPU および互換機。OSはLinuxおよびUnix	標準機能版300万円(基本機能のみ120万円)。力場、オプション機能別売	1998年4月	20サイト
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
BIOPRISM LIMS(バイオプリズム リムス)	NECソフト	NEC、NECソフト	ライフサイエンス研究向けLIMSとして、MSデータやDNAチップ等の実験データを確実に管理。サンプルから実験結果までを紐付けて管理し、研究の効率化を支援。工程管理、作業進捗管理も可能	サーバ: LINUX、Windows クライアント: WindowsXP	300万円~(詳細はお問い合わせください)	2005年	非公開

BIOPRISM サンプル管理(バイ オブリズム サンプルカンリ)	"	"	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)を確実に管理。二次元バーコードラベルを活用し、取り違え防止を支援。提供元、管理者等の属性情報の他、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。RF-IDにも対応可能	サーバ: LINUX、 Windows クライアント: WindowsXP	135万円～(詳細はお問い合わせください)	2006年	"
BIOPRISM 臨床情報管理(バイ オブリズム)	"	"	Translational Research Informatics (TRI)向けのシステム基盤として臨床情報を管理。管理対象項目と項目セットはユーザが定義可能。定評ある統計パッケージ(R bioconductor、SAS等)との連携による統計解析管理も可能。患者情報の匿名化、実験データ連携等のオプションも提供	サーバ: LINUX、 Windows クライアント: WindowsXP	150万円～(詳細はお問い合わせください)	2005年	"
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Molegro Vertual Docker	ノーザンサイエ ンスコンサル ティング	デンマーク・モレ グロ	蛋白質-リガンド相互作用を予測するための統合プラットフォーム。分子のプレパレーションからターゲット蛋白質のポテンシャルバインディングサイトの決定、そして、リガンドのバインディングモードの予測まで、ドッキングプロセスの全てを現在トップレベルの精度で行うことができる	Windows、Mac、 Linux	お問合せ下さい	2006年9月	—
Molegro Data Mining	"	"	データモデリング、データマイニングのためのソフトウェア。スプレッドシートにまとめられたデータをインポートし、クラスターリング、回帰モデリングなどの統計解析の結果を得るまで、マニュアル不要で操作できる大変使いやすいGUIが特徴。最先端の解析アルゴリズムを随時、追加搭載予定	"	"	2007年12 月	—
GastroPlus	"	米シミュレーショ ンズプラス	ミシガン大学Amidon教授らのグループが開発したCATモデルを発展させたACATモデルをベースとしたソフトウェア。経口投与製剤の消化管内の挙動、薬物の血中移行を解析・予測。製剤設計支援、Virtual Trialにも有効	Windows	"	1998年8月	—
GastroPlus-Optimization	"	"	吸収率、BA、Cp-time、PK Parameterなどの実測値とシミュレーション値が一致するようパラメータを最適化する GastroPlusのオプションモジュール	"	"	1999年5月	—
GastroPlus-Metabolism & Transporter	"	"	トランスポーターや代謝を考慮して動態解析を行う GastroPlusのオプションモジュール	"	"	2001年7月	—
GastroPlus-PDPlus	"	"	薬効と血中濃度の関係を解析し、最適な投与量や投与間隔を予測するGastroPlusのPharmacodynamics解析オプションモジュール	"	"	2002年8月	—
GastroPlus-PKPlus	"	"	静注によるCp-timeデータから1-, 2-, 3-コンパートメントモデルでのPKパラメータを求めるGastroPlusのオプションモジュール	"	"	2000年8月	—

GastroPlus-PBPK	"	"	体内に入った薬物が、どのように吸収され、各部分に分布、蓄積あるいは排泄されていくのを時間的に予測する生理学的薬物動態モデル(Physiologically-based Pharmacokinetic Model)のGastroPlusオプションモジュール	"	"	2005年12月	—
GastroPlus-IV/IV Correlation	"	"	in vitroでの溶出実験データとGastroPlusで解析したin vivoでの溶出を比較し相関を確認するGastroPlusオプションモジュール	"	"	2000年8月	—
GastroPlus-DDI	"	"	薬物相互作用オプションモジュール	"	"	2010年4月	—
GastroPlus-ADR	"	"	眼、肺、経皮吸収Simulationsモジュール	"	"	2010年4月	—
ADMET Predictor-Physicochemical & Biopharmaceutics Module	"	"	化合物構造からADMET物性値を予測するソフトウェア。物理化学性状:pKa、LogP、LogD、溶解度、拡散係数、生物学的性状:ヒト膜透過性、MDCK膜透過性、BBB透過性、動態的性状:分布容積、血漿タンパク結合率、吸収率、MRTD、活性:HIV。	"	"	2005年5月	—
ADMET Predictor-Toxicity Module	"	"	化合物構造から毒性にかかわる物性値を予測するソフトウェア。AMES、発がん性(Rat/Mouse)、変異原性、魚毒性、急性毒性、hERG Affinity。Ver4.0より肝毒性・腎毒性予測も可能。	"	"	2005年5月	—
ADMET Predictor-Descriptor & Modeler Module	"	"	化合物構造からDescriptorを発生。自社のデータセットからニューラルネットワークやサポートベクターマシンで新しいモデル式を構築し、ADMET PredictorをカスタマイズするModeler機能。予測値がどのDescriptorに影響を受けているか評価できるDescriptor Sensitivity Analysis機能も搭載。	"	"	2005年5月	—
ADMET Predictor-Metabolism Module	"	"	CYP 1A2, 2C9, 2D6, 2D19, 3A4でのKm値、Vmax値を予測するADMET PredictorのOption Module	"	"	2008年1月	—
ADMET Predictor-Simulation Module	"	"	GastroPlusのACATモデルをベースに吸収率および最適薬物投与量を予測。	"	"	2009年8月	—
DDDPlus	"	"	米国薬局方(USP)のパドル法、バスケット法、フロースルー法での試験によるin vitroでの製剤の崩壊および溶出をシミュレーションする世界唯一のソフトウェア。新規有効成分であれば1回の検量試験を行えば、剤形の変更や実験条件の変更による溶出への影響を予測	"	"	2005年5月	—
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。Ver4.6よりPair SAR機能、SAR Network機能搭載	"	"	2006年1月	—

Modern Biopharmaceutics_J	"	米TSRL	製剤学、薬物動態学の解説と簡易計算ツールが含まれている、生物薬剤学教育用ソフトウェア。ユーザ待望の日本語版リリース	"	"	2004年12月	—
HTPro for ADMET Predictor	"	ノーザンサイエンスコンサルティング	ADMET Predictorのインプット・アウトプットを簡易にできるツール。ADMET Predictorで計算可能な物性値の中から必要な物性を定義し、構造を選択するだけでADMET Predictorが計算を開始、Microsoft Excelで読み込み可能なファイルに物性値が出力	"	"	2005年9月	—
ChartSpect	"	"	実験データハンドリングシステム。各種の分析装置から得られるデータを装置の種類やメーカーを問わず相互に関連付けて一元管理	Windows、Linux	"	2007年5月	—
Orange-Reader	"	"	FDAのOrange Bookの情報を効率よく効果的に利用するためのインターフェース。	Windows	"	2009年11月	—
HPLCluster	"	"	医薬品などの保存安定性試験において得られる各条件下でのHPLCのピーク面積比をグリッド上に表示して比較解析を行うツール。	"	"	2008年10月	—
Drug Delivery Information Services (DDIS)	"	米テクノロジーキャタリスツインターナショナル	ドラッグデリバリーに関する技術情報提供サービス。ドラッグデリバリーに関するDB検索、質問数無制限のHot-Lineサービス個別のカスタムスタディー作成などからなる総合情報サービス	—	"	2008年2月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<アプリケーション>	米オープンアイ(窓口:オープンアイジャパン)	米オープンアイ					
AFITT	"	"	リガンドを電子密度に対して完全自動フィッティングするソフトウェア。作業手順を組み込んだGUI付属	Linux、Windows、MacOS X	ホームページ(www.eyesopen.com)をご参照下さい	2006年6月	—
AFITT-CL(前FLYNN)	"	"	上記AFITTのコマンドライン版	"	"	2007年11月	—
BROOD	"	"	ベンチケミスト、モデラー用、バイオアイソスター検索ソフト。フラグメントの比較のために、形状、化学特性、静電ポテンシャル、結合点の幾何学的類似を利用する。柔軟なクエリーの作成が可能なGUIへの更新版(近日公開)	"	"	2010年上旬GUI公開予定	—
EON	"	"	静電ポテンシャル比較のためのソフトウェア。リードホッピングとライブラリーのデザインに有効	"	"	2004年9月	—
FILTER	"	"	化合物の特性計算を行い、適切な化合物を選抜するソフトウェア。物理的特性と官能基によりスクリーニングに先立って化合物の絞り込みに利用される	"	"	"	—

FRED	"	"	蛋白活性部位内でのすべての可能なポーズを評価するドッキングソフトウェア。形状相補性、ファーマコフォア特性に基づき絞り込みを行い、コンセンサススコアリングにより最適のポーズを選択する	"	"	"	—
OMEGA	"	"	化合物のコンフォメーション群を迅速に作成するソフトウェア。活性構造の再現に有効で、信頼性の高いマルチコンフォマーデータベースを作成し、ドッキングプログラム(FRED)、形状比較ソフト(ROCS)などのアプリケーションに利用される	"	"	"	—
QUACPAC	"	"	互変異生体の作成と電荷の設定を行うソフトウェア。分子の相互作用の最大要因は分子形状と静電ポテンシャルであり、分子設計においてチャージ設定の正確さが重要。Quacpacはそのために必要な情報を提供できる	"	"	"	—
ROCS	"	"	分子形状を比較することによるバーチャルスクリーニング、リードホッピングのためのソフトウェア。分子の体積関数をGaussian関数で現し、グローバルな高速最適重ね合わせを可能にした。多彩なクエリー作成及びクエリー評価用GUI付属	"	"	2009年12月-付属クエリーGUI公開予定	—
SZYBKI	"	"	分子構造最適化ソフトウェア。MMFFにより溶媒効果の有/無の両方の場合で分子構造最適化を行い、高精度の3D分子構造を生成する	"	"	"	—
VIDA・VIVANT	"	"	モデリングの結果を可視化し、解析するソフトウェア。VIDAはコンテンツを可視化・解析し、VIVANTは可視化されたコンテンツをPowerPointやWord、インターネット等の様々な媒体で公開する	"	"	2007年12月	—
<ツールキット>			アプリケーションをカスタマイズするためのオブジェクト指向のプログラミングライブラリー	—	—	—	—
GraphSim Toolkit	"	"	化合物類似性の算出するためのプログラミングライブラリー: 3種のフィンガープリント機能と多種の類似度算出アルゴリズムが提供されている	"	"	2009年11月公開	—
Lexichem Toolkit	"	"	化学構造から化合物名、また化合物名から化学構造に変換するためのツールキット。コネクションテーブル(SMILESなど)と化合物名の相互変換を行う	"	"	2009年11月更新	—
MolProp Toolkit	"	"	化合物の1次及び2次元の特性にもとづいた分別を可能にするプログラミングライブラリー、既成のフィルターとしてリード化合物類似、薬物類似フィルターが提供されている	"	"	2009年11月公開	—
OEChem Toolkit	"	"	化学および化学情報のための基礎プログラミングライブラリー。OEChemはオープンアイのコアとなるツールキットで、すべてのツールキットを使用するにはOEChemへのアクセスが必要になる	"	"	2009年11月更新	—

Ogham Toolkit	"	"	化学構造の2D描画を行うツールキット。コネクションテーブル(SMILESなど)や3D構造から描画に適した構造式(2D座標)を作成する	"	"	2009年11月更新	-
Omega Toolkit	"	"	コンフォーマー作成アプリケーションOMEGAと同様の機能を含むプログラミングライブラリー	"	"	2009年11月更新	-
Quacpac Toolkit			Quacpacアプリケーションと同様に、互変異生体の作成、電荷の設定を行うツールキット。			2009年11月更新	
Shape Toolkit	"	"	分子形状を比較するアプリケーションROCSの基本となるツールキット。最適化の方法、分子の取扱、クエリーのタイプなどの微調整が可能	"	"	2009年11月更新	-
Zap Toolkit	"	"	Poisson-Boltzmann静電ポテンシャル計算ツールキット。これにより溶媒移動エネルギー、結合エネルギー、pKaシフト、溶媒力、静電ポテンシャル記述子、表面ポテンシャル、有効な比誘電率などの生物学的に有益な特性を計算する	"	"	2009年11月更新	-
Szybki Toolkit	"	"	MMFF94による構造最適化ツールキット。アプリケーションSZYBKIを参照のこと	"	"	2009年11月更新	-
Spicoli Toolkit	"	"	分子表面、及びこれら表面で囲まれた体積を計算するツールキット。Spicoli TKは表面の性質(水素結合、極性/疎水性、電荷など)を付加し、これによって分子とその表面を同時に可視化することが可能となる	"	"	2009年11月更新	-
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
CRAI創薬基幹システムパッケージ	パトコア	パトコア	創薬研究所の基幹業務をサポートするトータルシステム。登録システム、アッセイデータ管理システム、化学生物情報統合検索参照システム、法規制物質チェックシステム、電子実験ノートの各アプリケーションを互いに連携。完成度の高いパッケージにより低コスト、短期間で最新の創薬情報基盤を構築	Windows	お問合せ下さい	-	-
CRAIS Registration	"	"	化合物登録システム	"	"	-	-
CRAIS Assay	"	"	アッセイ情報登録システム	"	"	-	-
CRAIS Browser	"	"	化学情報統合ブラウジングシステム。アッセイデータと構造などの化学情報との統合検索を行うWebアプリケーション	"	"	-	-
CRAIS Chceker	"	"	法規制物質判定システム。麻薬、向精神薬、指定薬物、毒劇法等に定められた物質を構造式から迅速に判定	"	"	-	-
CRAIS ELN	"	アジレントテクノロジー	Webベースの電子ノートシステム	"	"	-	-
CRAIS Reagent	"	インフォグラム	試薬管理システム	"	"	-	-
Marvin Sketch	"	ハンガリー・ケムアクソン	Javaベースの構造描画ツール。直感的な操作で、構造・反応・クエリーの描画が可能。スタンドアロンの描画ツールとしての利用はもちろん、Webアプリケーションからも利用できる	Windows/Linux/Sun/Mac	条件により無償。詳細はお問合せください	-	-

Marvin View	"	"	SDファイルやSmiles、InChiなど様々な構造フォーマットのファイルを読み込み、テーブル形式やグリッド形式で表示が行える	"	"	-	-
Marvin Space	"	"	Javaベースの高品位分子グラフィックス表示ツール。低分子からタンパク質などの巨大分子までスムーズな三次元グラフィックスの表示を行う。また、Calculator Pluginsの計算結果に基づき分子モデル上に着色することができる	"	"	-	-
Instant JChem	"	"	化学情報をローカルデータベースで管理する為のデスクトップアプリケーション。フォームの作成なども容易に可能で、サーバーのJChem Baseに対するユーザーインターフェースとしての役割も担う	"	"	-	-
JChemBase	"	"	高速な検索アルゴリズムを搭載した構造検索エンジン。完全一致検索、部分構造検索、類似構造検索、スーパーストラクチャー検索、Rグループ検索、反応検索、さらに業界初のマーカッシュ検索をサポートしている	"	お問合せ下さい	-	-
JChemCartridge	"	"	OracleネイティブのSQL環境で、構造および反応の検索ができる。SQLのSELECT文において構造条件に加えCalculator Pluginsを組み合わせて予測物性値を検索条件に指定することも可能。(本製品はJChem Baseの機能を包含する)	"	"	-	-
Screen	"	"	ファーマコフォア解析とバーチャルスクリーニングのためのツール群。ファーマコフォア認識、ケミカルフィンガープリントおよびファーマコフォアフィンガープリントの生成、化合物ライブラリに対するバーチャルスクリーニングが可能	"	"	-	-
Jklustor	"	"	クラスタリング、ダイバシティ計算、分子フィンガープリント、MCS解析、ディスクリプター等に基づくライブラリの評価を行うことができる。コンビケム、ドラッグデザイン、その他化合物ライブラリの解析が必要な場面で活用可能	"	"	-	-
Reactor	"	"	ジェネリックな反応を用いてバーチャルライブラリーを作成するためのソフトウェア。単にバーチャルな分子を作るのではなく、化学的に意味があり、合成できる可能性の高い化合物を生成するユニークなアプローチを採用している	"	"	-	-
Fragmenter	"	"	ドラッグデザインに用いるビルディングブロックを作成するためのソフトウェア。フラグメントに分解する際、切断に関する情報を保持するので、これらのフラグメント情報を用いてバーチャルライブラリーを作成することができる	"	"	-	-
Standardizer	"	"	構造標準化のモジュールで、様々な表記の構造式を設定されたルールに基づいて正規化する。データベースに登録する構造式を予め標準化することなどに利用でき、確実に効率的な検索を可能にする	"	"	-	-
Charge Plugin	"	"	Charge Distribution、Polarizabilityの計算	"	"	-	-

Protonation Plugin	"	"	pKa、Major Microspecies、Isoelectric Pointの計算	"	"	-	-
Partitioning Plugin	"	"	logP、logDの計算	"	"	-	-
Geometry Plugin	"	"	Topological Polar Surface Area (TPSA)、Refractivityの計算	"	"	-	-
HBDA Plugin	"	"	Hydrogen Bond Donor/Acceptor数の計算	"	"	-	-
Isomers Plugin	"	"	Tautomer、Resonance、Stereoisomersの列挙	"	"	-	-
Name to Structure	"	"	IUPAC名 → 構造式変換	"	"	-	-
Structure to Name Plugin	"	"	構造式 → IUPAC名変換	"	"	-	-
Confirmation Plugin	"	"	コンフォメーション生成、分子動力学計算	"	"	-	-
Chemistry Framework Plugin	"	"	MCS、Bermis-Murco Framewok 等のクラスタリング	"	"	-	-
SAR>vision+PLUS	"	"	大容量のデータに対応した骨格抽出・分類に基づくSAR解析ツール	"	"	-	-
ChemASP	"	"	サーバーベースの大規模な骨格抽出(MCS)・分類ツール	"	"	-	-
ChemSABRE	"	"	詳細な置換基の解析ツール。R×Rテーブルの作成が行える	"	"	-	-
MassWorks	"	米Cernoバイオサイエンス	質量分析計の精度を100倍迄改善、革新的な組成式決定支援ツールを提供。四重極質量分析装置で容易に組成式の決定ができる	"	"	-	-
DDIPredict	"	仏AureusPharma	薬物相互作用予測システム	"	"	-	-
AurSCOPE GPCR	"	"	GPCRリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Kinase	"	"	Kinaseリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Ion Channel	"	"	Ion Channelリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Nuclear Receptor	"	"	Nuclear Receptorリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Protease	"	"	Proteaseリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Transporter	"	"	Transporterリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Phosphatase	"	"	Phosphataseリガンドの包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE Global Pharmacology Space	"	"	AurSCOPEシリーズ全体を包含した包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE ADME/DDI	"	"	薬物相互作用の包括的ナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE hERG	"	"	低分子リガンドの心毒性に関するナレッジベース	"	"	-	-
AurSCOPE HepatoTox	"	"	低分子リガンドの肝毒性に関するナレッジベース	"	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	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タリンググループ	ソフトウェアの開発環境と実行環境を一体化させた統合計算化学システム。分子シミュレーション、ドラッグデザイン、コンビケム、蛋白質モデリングの機能を搭載	Windows、MacOS X、Linux、SGI IRIX、Sun Solaris	-	1997年9月	-
PSILO	"	"	タンパク質立体構造情報データベースシステム。WEBインターフェースによるタンパク質-リガンドの相互作用解析とアノテーション	Linux	-	2008年4月	-

FlexSIS	"	独バイオソルヴ アイティ	ドッキングスタディツール。Single Interaction Scanアルゴリズムを使用し、結合部位中でリガンド結合構造を構築	Windows、Linux x86 32bit、Linux x86 64bit	—	2007年11 月	—
FlexSIS-Ensemble	"	"	リガンドと受容体の誘導適合を行うモジュール	"	—	2007年11 月	—
FlexSIS-Pharm	"	"	ファーマコフォアを使ってFlexSISの結果を絞り込むためのモジュール	"	—	2007年11 月	—
FlexSIS-C	"	"	リガンド結合部位中で、リガンド候補構造をコンビケム合成	"	—	2007年11 月	—
FlexSIS-Screen	"	"	FlexSISの精度を保持しつつスクリーニングを数倍から10倍高速化させるモジュール	Linux x86 32bit、 Linux x86 64bit	—	2007年11 月	—
FlexSISnovo	"	"	リガンド結合部位中で、フラグメントを組み合わせてリガンド候補構造をデノボ設計	Windows、Linux x86 32bit、Linux x86 64bit	—	2008年12 月	—
FlexSISnovo-Pharm	"	"	ファーマコフォアを使ってFlexSISnovoの結果を絞り込むためのモジュール	Windows、Linux x86 32bit、Linux x86 64bit	—	2008年12 月	—
Recore	"	"	リガンド構造の母核やリンカーを置き換えるモジュール	Windows、Linux x86 32bit	—	2007年11 月	—
FTrees	"	"	官能基の物理化学的特性と結合情報から成るトポロジカルな分子記述子による類似構造検索	"	—	2007年6月	—
FTrees-FS	"	"	化合物フラグメントデータベースに対して FTrees で デノボ検索	"	—	2007年6月	—
FTrees - Added Value Package (FTreesXL, HTSview, MTrees)	"	"	FTreesのGUIや、FTreesを使ってHTSデータの解析を行うための追加モジュール	Linux x86 32bit	—	2007年11 月	—
CoLibri	"	"	FTrees-FSやFlexSISnovo、コンビケムで使用するためのフラグメントライブラリを作成するモジュール	Linux x86 32bit、 Linux x86 64bit、 SGI IRIX	—	2007年11 月	—
FlexS	"	"	リガンドの重ね合わせ とバーチャルスクリーニングを行う創薬支援ツール	Windows、Linux x86 32bit、Linux x86 64bit	—	2007年6月	—
FlexS-C	"	"	FlexS にコンビケムのルールを加えてテンプレートに整列する仮想化合物ライブラリを構築するモジュール	"	—	2007年7月	—
2Ddraw	"	"	化合物を2次元表示したり FTrees のフィーチャで整列するモジュール	Windows、Linux x86 32bit	—	2007年6月	—
CORINA_F	"	"	環構造の配座解析を行うツール	Windows、Linux x86、SGI IRIX	—	2008年12 月	—
MED-SuMo	"	仏メディット	タンパク質のリガンド結合部位表面の官能基の配置を2次元のグラフに抽象化し、タンパク質構造データベースから高速に類似表面特性を持つ標的タンパク質を探索する	Linux (Server)、 Windows (Client)	—	2008年4月	—

MED-Hybridise	"	仏メディット	タンパク質構造データベースからクエリータンパク質のリガンド結合部位表面に類似した表面に結合するフラグメントを検索し、分子表面上でハイブリッド合成を行うことによりフラグメントベースドラッグデザインを行う	Linux (Server)、Windows (Client)	—	2009年7月	—
Molcode Toolbox	"	エストニア・モルコード	構造活性相関(QSAR)モデルに基づき物理化学的/生物学的特性、ADME/Tox特性、環境毒性、薬物副作用などの化合物特性を予測	Windows	—	2009年6月	—
NetPro	"	印モлекуラーコネクションズ	タンパク質-タンパク質間およびタンパク質-低分子間相互作用の総合的なマニュアルキュレーションデータベース	—	—	2006年4月	—
XTractor Premium	"	"	論文から抽出した知識の検索・解析サービス	—	—	2009年2月	—
BioEpisteme	"	西ブロウスインスティテュート	10万件以上の学習データを利用して構築した独自の予測モデルにより予測を行う薬理機序予測システム	Windows, Linux	—	2006年4月	—
SciMAPS Platform	"	仏サイエノミクス	量子化学からメソスケールシミュレーションにまで対応する材料設計支援統合計算化学システム。低分子から複雑な高分子のバルクモデルまで簡単に構築でき、ABINIT, LAMMPSなど、著名なシミュレーションプログラムを各インターフェースを利用して統合利用可能	"	—	2008年7月	—
Amorphous Builder Plug-in	"	"	CBMC (Configurational Bias Monte Carlo) 法を採用したアモルファス構造構築Plug-in。複雑な系でも現実に近い密度で自然なモデルを構築可能	"	—	2008年7月	—
LAMMPS Plug-in	"	"	分子動力学計算プログラムLAMMPSを利用するPlug-in。LAMMPSの計算実行から結果の解析まで行うことが可能	"	—	2008年7月	—
ABINIT Plug-in	"	"	第一原理バンド計算プログラムABINITを利用するPlug-in。ABINITの計算実行からバンド構造の表示等の解析まで行うことが可能	"	—	2008年7月	—
NAMD Plug-in	"	"	分子動力学計算プログラムNAMDを利用するPlug-in。NAMDの計算実行から結果の解析まで行うことが可能	"	—	2008年7月	—
Towhee Plug-in	"	"	汎用モンテカルロ計算プログラムTowheeを利用するPlugin。分子動力学計算では取り扱うことの難しい液液、気液平衡などの相平衡状態の研究やゼオライトへの吸着現象の研究に利用	"	—	2008年7月	—
QmPot Plug-in	"	"	QM/MM計算の計算プログラムを利用するPlug-in。LAMMPS、ABINIT、TURBOMOLE、MNDOを連携させることが可能	"	—	2008年7月	—
TURBOMOLE IF	"	"	TURBOMOLEの計算の実行から計算結果の解析を行うインターフェース。(TURBOMOLEの計算プログラムは含まれない)	"	—	2006年6月	—
TURBOMOLE Plug-in	"	"	TURBOMOLEの計算の実行から計算結果の解析を行うPlug-in。分子軌道や基準振動解析の結果を表示可能	"	—	2008年7月	—

SciDPD Plug-in	"	"	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	"	—	2008年7月	—
FHMixing Plug-in	"	"	Molecular Silverware法による二元混合物のためのモンテカルロシミュレーションソフトウェア。高分子や液体の熱力学物性やSciDPDの相互作用パラメータの推算に利用	"	—	2008年7月	—
MNDO Plug-in	"	"	半経験的分子軌道法プログラムMNDOを利用するPlugin。分子軌道や基準振動解析の結果を表示可能	"	—	2008年7月	—
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	分子系を対象とした密度汎関数法ソフトウェア。Slater型軌道を採用することで効率的かつ精度の高い計算を実現。各種スペクトルをはじめ様々なプロパティの計算が可能	Windows、Linux、Unix、Mac	—	1998年11月	—
BAND	"	"	周期系を対象とした密度汎関数法ソフトウェア。基底関数として原子軌道(Slater型+数値型)を使用。周期系におけるESR計算など、原子軌道の特徴を活かしたプロパティの計算が可能	"	—	1998年11月	—
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ソフトウェア	Linux、Windows、Mac	—	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	—
COSMObase	"	"	4000化合物以上に対応した分子表面電荷情報データベース	Linux、Windows、Mac	—	2001年9月	—
COSMOfrag	"	"	フラグメントベースの分子表面電荷情報作成ソフトウェア	"	—	2002年9月	—
COSMOmeso	"	"	Flory-Hugginsパラメータ推算ソフトウェア	Linux	—	2009年8月	—
COSMOmic	"	"	分子膜・ミセル内分子分布シミュレータ	Linux、Windows	—	2007年7月	—
COSMOconf	"	"	配座発生ソフトウェア	"	—	2009年1月	—
TURBOMOLE	"	独コスモロジック	Ab initio法分子軌道計算プログラム 高速な密度汎関数法およびCOSMO法計算機能 励起状態の構造最適化や振動計算が可能	HP、IBM、Linux、Sun、Windows、Mac	—	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	—
MedeA-GIBBS	"	"	モンテカルロ法計算プログラム	Windows、Linux	—	2006年8月	—
Transition State Search	"	"	遷移状態探索ツール	Windows	—	#####	—
InfoMaticA	"	"	結晶構造データベース管理ツール	Windows	—	1999年1月	—
Gaussian 09	"	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 5	"	"	Gaussian 09のグラフィカルユーザインターフェース	"	—	1998年10月	—
AMPAC	"	米セミケム	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、Intel-Linux、Windows	—	2005年11月	—
Molpro	"	英University College Cardiff Consultants Limited	CI法などの配置間相互作用の取り扱いを得意とした量子化学計算ソフトウェア	SGI、HP、SUN、IBM、Intel-Linux	—	2004年11月	—
QuantumCube	"	米パラレルクアントムソリューションズ	並列化効率がよく構造最適化に長けた独自量子化学ソフトウェアを搭載した高速計算サーバ	Intel-Linux	—	2004年9月	—
PQS ab initio program	"	"	並列化効率と構造最適化に長けた量子化学計算ソフトウェア	Windows, Intel-Linux, Intel Mac	—	2004年9月	—
Direct Force Field	"	米イーオンテクノロジー	高精度分子シミュレーション支援ソフトウェア。さまざまな分子シミュレーションソフトに高精度の力場パラメータを提供。力場データベースや力場パラメータ開発機能を搭載。テンプレートを利用したユーザ独自の力場関数系の作成も可能	Windows, Linux	—	2001年12月	—
CULGI	"	蘭シュルギ	マルチスケールシミュレーションのための計算科学統合ライブラリ	Windows, Linux	—	2009年4月	—
CBIS	"	米ケムイノベーションソフトウェア	化合物・細胞株・プラスミド・プレートなどの研究材料、プレートアッセイ結果や機器分析結果などの実験データ、報告書や参考文献などの関連文書といった創薬研究に関わるあらゆるデータを統合的に管理するための創薬研究情報共有システム	Windows	—	2002年8月	—
LabCollector	"	仏アジャイルバイオ	生物学系実験研究におけるさまざまな情報を一元管理する簡易なシステム	Windows、MacOS X	—	2006年11月	—
InforSense platform	"	英インフォーセンス	多様なデータやツールを活用した解析ワークフローを、迅速に作成・実行できるインフォマティクス統合プラットフォーム	Windows、MacOS X、Linux	—	2002年8月	—
InforSense IOE	"	"	ORACLE内でのデータ処理をSQLプログラミングの必要なく、ワークフローによって容易に定義し、実行できるモジュール	"	—	"	—
InforSense BioSense	"	"	BLAST、EMBOSSなどのバイオインフォマティクスツールをワークフローで活用できるモジュール	"	—	"	—
InforSense ChemSense	"	"	各主要ベンダーのケムインフォマティクスツールをワークフローで活用できるモジュール	"	—	"	—
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-PRO	"	"	機能強化版製品。高速化・堅牢化されたソルバと独自の先進的な機能が搭載されたパワーユーザ向けのCHEMKINソフトウェア	"	—	2008年7月	—
CHEMKIN-CFD	"	"	CHEMKINの入力形式で作成された化学反応式を数値流体力学計算ソフトウェア(CFD)上に組み込むためのプラグインモジュール	"	—	2005年4月	—
DAYLIGHT Thor/Merlin	"	米デイライト	SMILES言語をベースとする効率的な化合物データ管理システム	"	—	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	—
Partek Discovery Suite	"	米パーテック	高度なデータ可視化機能を搭載し、大規模なデータの取り扱いが可能な統計解析ソフトウェア	Windows、Intel-Linux、Mac	—	2005年8月	—
Partek Genomic Suite	"	"	マイクロアレイと次世代DNAシーケンサーのデータ解析機能を搭載した遺伝子データ解析用パッケージ	"	—	2005年8月	—
Partek QSAR Soluion	"	"	ISISとの連携機能などを搭載したQSAR解析用パッケージ	"	—	2005年8月	—
Partek Screener's Solution	"	"	HTSプレートデータの読み込み機能などを搭載したHTSデータ解析用パッケージ	"	—	2005年8月	—
KoriBlast	"	仏コリログ	配列データバンクに対する配列探索を効率化するグラフィカルなソフトウェア	Windows, Mac OS X, Linux	—	2009年7月	—
Colors	"	東北大学宮本研究室	高速化量子分子動力学計算プログラム	Intel-Linux	—	2002年1月	—
MOPAC2009	"	米スチュワートコンピューショナルケミストリ	高精度のハミルトニアンPM6を搭載したMOPAC最新版	Windows、Linux	—	2007年10月	—
Carbon Analyzer	"	藤本宏之	人造黒鉛の結晶子サイズ、網面サイズ、積層サイズの測定プログラム	Windows	—	2002年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MS Adsorption Locator	サイエンス・テクノロジー・システムズ	米アクセルリス	広範な材料において最安定吸着サイトを見つけるのに役立つ。堆積プロセス、情報記録装置、腐食問題、および微細孔材料における触媒反応などを扱うことができる	Windows、Linux	要問合せ	2008年12月	—
MS Amorphous Cell	"	"	低分子やポリマーの非晶構造を作成。周期境界条件による分子動力学計算から各種物性を計算予測	"	"	"	—

MS Blends	"	"	高分子、溶媒系の相互作用エネルギーの計算から相図、相互作用パラメーターなどを計算	"	"	"	—
MS CASTEP	"	"	密度汎関数法 (Density Functional Theory) に基づいた第一原理平面波・擬ポテンシャルコードで、金属・半導体・絶縁体の結晶、界面、ならびに表面に対する計算を行うツール	"	"	"	—
MS COMPASS	"	"	COMPASSはバルク状態の高精度な分子計算を目的として最適化された第3世代力場。正確な構造、配座、振動と熱物性の予測が可能	"	"	"	—
MS Conformers	"	"	コンフォメーション空間の網羅的な探索データを集め、分析する手法を提供する。単純なものから複雑な系まで、種々の系のコンフォメーション解析へ応用できる	"	"	"	—
MS Discover	"	"	分子動力学計算エンジン。COMPASS力場との組み合わせで高精度のシミュレーションが可能	"	"	"	—
MS DFTB	"	"	密度汎関数タイトバインディング法(DFTB) によって、より長いシミュレーション時間やより大きなサイズの系に対する量子計算が可能	"	"	"	—
MS DMol3	"	"	密度汎関数法に基づいた第一原理計算プログラムで数値局在基底関数を使用。分子系と周期系双方の電子状態計算が可能	"	"	"	—
MS DPD	"	"	一定の原子群をひとつのビーズと設定し、高分子を調和バネで繋がれた鎖と捉えることで、複雑な流体の構造と動的特性を予測する。原子レベルのシミュレーションでは不可能であった大きさ、時間スケールでの予測が可能	"	"	"	—
MS Equilibria	"	"	鎖状炭化水素分子の相平衡状態を計算	"	"	"	—
MS Forcite	"	"	分子力学計算エンジン。COMPASS力場との組み合わせで高精度のシミュレーションが可能	"	"	"	—
MS Gaussian Interface	"	"	Gaussian 03の多様なab initioプログラムとMaterials Studioのモデリング シミュレーション環境内のプログラムとの間で、分子構造およびプロパティデータに関してに互換性を持たせることができる。Windowsのダイアログで、直感的に数回クリックをするだけで理論レベル、基底関数、収束オプションの設定が可能	"	"	"	—
MS GULP	"	"	結晶構造のフォノン計算が可能	"	"	"	—
MS Mesodyn	"	"	混合ポリマーや融解ポリマーなどの複雑な流体の密度とポテンシャルをメソスケールで動力学シミュレーションする。メソスケールに特化したアルゴリズムは、世界的に広く文献や企業レベルで認められている	"	"	"	—
MS MesoProp	"	"	マルチコンポーネントで形成されているナノ構造のバルクの性質を予測する	"	"	"	—

MS Mesotek	"	"	自己無撞着場ベースのメソスケールモデリングツール。ブロックコポリマー、分枝ポリマー、溶液、分散系のナノスケールモデリングや次世代型擬スペクトル法を利用したメソスケール自己無撞着場法による、ポリマー相図と応力分布の計算が可能	"	"	"	—
MS Mesocite	"	"	粗視化分子動力学法 (CGMD) と散逸粒子動力学法(DPD) を搭載した新しいモジュール。ポリマーのメソ相や脂質二重層など構造化した液体のビーズモデリングが可能。CGMDでは立体障害、環状構造、電荷が入ったメソスケールモデルの計算をすることが可能。生体分子系に使用できる粗視化MARTINI 力場を搭載	"	"	"	—
MS Morphology	"	"	分子構造から結晶の形態を計算予測	"	"	"	—
MS NMR CASTEP	"	"	NMRのケミカルシフトを予測する	"	"	"	—
MS Onetep	"	"	DFT計算をDMOL3より高速に行う	"	"	"	—
MS Polymorph Predictor	"	"	ゼロから結晶の多形を計算予測	"	"	"	—
MS QMERA	"	"	QMおよびMM法を統合したハイブリッドQM/MM計算により、純DFT計算に比べて、精度低下なく、10倍におよぶ計算速度での構造計算と遷移状態予測が可能	"	"	"	—
MS QSAR	"	"	定量的構造活性相関を計算	"	"	"	—
MS Reflex	"	"	粉末X線解析データから結晶構造を計算予測する	"	"	"	—
MS Sorption	"	"	吸着等温線やヘンリー定数などの基本的特性を予測する手段を提供。工業用ガスの生産など、吸着に左右されるプロセスを最適化する	"	"	"	—
MS Synthia	"	"	グラフ理論に基づき、ポリマー構造から各種物性を一瞬で予測。ポリマーハンドブックに代わる座右のツール	"	"	"	—
MS VAMP	"	"	半経験的分子軌道法プログラム。MINDO、MNDO、AM1、PM3法を含む。溶媒効果、励起状態計算などが可能	"	"	"	—
MS Visualizer	"	"	MS Modeling各モジュールの入出力プラットフォーム。化学構造モデリングに必要な高度な機能を完備	"	"	"	—
MS X-Cell	"	"	X線データの指数付けを行う	"	"	"	—
DS CFF	"	"	タンパク質から核酸・脂質・糖質・低分子まで幅広くカバーし、極めて最適化およびパラメータ化されたDS CHARMM計算用の力場	"	"	2008年5月	—
DS ADMET Descriptors	"	"	腸内吸収・水溶解度・血液-脳関門透過性・血漿タンパク結合性・チトクロームP450 2D6酵素阻害・肝毒性に関するモデルが予め用意されており、これらを用いることで新薬開発を効率よく行うことができる	"	"	"	—

DS Analysis	"	"	タンパク質およびタンパク質-リガンド複合体の分子動力学結果のトラジェクトリーを解析および視覚化する。RMSD・原子近接・ドッキングした結合様式での水素結合数を計算し、DelPhiを用いて分子系の静電的な性質を調べる	"	"	"	-
DS Biopolymer	"	"	ペプチド・タンパク質・核酸 (DNAおよびRNA) の構造の迅速な構築および修飾が可能	"	"	"	-
DS Catalyst	"	"	ファーマコフォアベースの分子アラインメント、形状ベースの三次元サーチ、SAR データに基づくファーマコフォア仮説の自動作成、コンフォメーション空間を幅広くカバーした複数コンフォメーションの発生といった相補的機能を提供するツール	"	"	"	-
DS CHARMM	"	"	巨大分子や複合体のエネルギー論の検討を行う妥当性が確立されているアプリケーション。分子力学・分子動力学計算が可能	"	"	"	-
DS CHARMM Lite	"	"	リガンド構造の最適化計算 (in situ Ligand Minimization) を CHARMM を用いて行うことにより、ドッキング実験の結果を精密化する	"	"	"	-
DS LibDock	"	"	ホットスポットに高速にドッキングさせるプログラム	"	"	"	-
DS Library Design	"	"	化合物ライブラリによるデザインに特化した類似性と多様性のあるクラスタリング手法を提供する	"	"	"	-
DS LigandFit	"	"	巨大分子の標的受容体の活性部位にリガンドをドッキングする、有効性が認められているプログラム	"	"	"	-
DS LigandScore	"	"	十分に評価・検証されたスコアリング関数とその個々の記述子を用いて、リガンド-タンパク質相互作用を評価する	"	"	"	-
DS Ludi	"	"	受容体の構造特性や化学特性を利用して、リード化合物の de novo 設計のためのテンプレートを作成する	"	"	"	-
DS MODELER	"	"	タンパク質ホモロジーモデリング・ループモデリング・配列および構造に基づくアラインメント・配列プロファイルスキャン・タンパク質変異の構築・タンパク質の検証を自動的に行う	"	"	"	-
DS Protein Docking	"	"	タンパク質同士の相互作用を高速かつ正確に予測するツール	"	"	"	-
DS Protein Families	"	"	配列および構造情報を用いてマルチプルシーケンスアラインメントを実行し、複数のタンパク質をアラインする。さらに機能的に重要な残基の判別のために、系統学的解析および Evolutionary Trace 解析を実行	"	"	"	-
DS Protein Health	"	"	Profiles-3D verification 法を使ってタンパク質構造の質を評価し、タンパク質の構造妥当性のチェックおよび解析を行う	"	"	"	-
DS Protein Refine	"	"	CHARMM 法に基づき、タンパク質の側鎖およびループ部分のエネルギー精密化を行う	"	"	"	-
DS QSAR	"	"	定量的構造活性相関を計算する	"	"	"	-

DS Sequence Analysis	"	"	ウェブ上(NCBI)およびローカルコンピュータ上にインストールされたデータベースをBLASTおよびPSI-BLAST法を用いて検索することにより、ユーザーが検討中のタンパク質配列のホモログを判別する。機能的に重要な残基の判別のために、系統学的解析およびEvolutionary Trace解析を実行	"	"	"	-
DS TOPKAT	"	"	QSARIに基づくシステムで、試薬の分子構造から迅速かつ正確に化学毒性を算出する	"	"	"	-
DS Visualizer	"	"	分子の視覚化を行うことができるGUIの基本ツール	"	"	"	-
DS De Novo Evolution	"	"	一元的、進化的、またはそれらを組み合わせた手法で、scaffold上のフラグメントを連結させたり構築したりすることにより、完全な新規分子を作成。これにより、リード化合物の発見にかかる時間を短縮可能	"	"	"	-
Pipeline Pilot Client	"	"	Pipeline Pilot のコンポーネントを組み合わせてプロトコールを作成可能なGUI	Windows (サーバー部分のみ Linux可)	"	2008年4月	-
Pipeline Pilot Collection ADMET	"	"	合成候補物、ベンダーライブラリ、スクリーニング化合物のような分子コレクションに対して吸収・分布・代謝・排泄の特性予測するコンポーネントを提供。これら薬物動態の特性を創薬過程において最適化することは後段の臨床開発における問題を低減するために非常に重要。ADMET collectionにはヒト腸管吸収、水溶性、脳関門透過性、血漿タンパク結合、チトクロームP450 2D6阻害性、肝毒性の6つの予測モデルコンポーネントが含まれている	"	"	"	-
Pipeline Pilot Collection Chemistry	"	"	125を超える機能が80もの部品にモジュール化されており、分子的な物性計算・フィルタリング・分子構造の自動操作、など様々なケムインフォマティクス特有のジョブが可能	"	"	"	-
Pipeline Pilot Advanced Modeling Component Collection	"	"	recursive Partitioning (PR法)とMulti-objectivePareto Optimization法を提供。PR法ではsingle treeとforest of treeの学習モデルのコレクションが利用でき、Random Forestメソッドを含む。Pareto Optimization componentは、多目的最適化問題に対する手法を含んでおり、部分的に矛盾する目標間で、トレードオフする基準を解決する方法を提供	"	"	"	-
Pipeline Pilot Plate Data Analytics Component Collection	"	"	Pipeline Pilot内でマイクロプレートデータのデータ解析を可能にし、プレートデータの読み書き、レポート作成、表示、編集、計算が可能。またプレートやウェルの情報をデータパイプライン上で扱うことができ、様々な操作が可能。さらにSciTegic Pipeline PilotのGUIを使うことで、プログラムを書くことなく、スクリーニング結果の分析に必要な複雑なデータ解析手法が使えます。Integration Collectionを使うことで、プレートデータをデータベースに登録したり、呼び出しが可能	"	"	"	-

Pipeline Pilot Modeling Collection	"	"	インナープリントを利用したベジアン、PLSモデリングによる構造活性相関モデルの構築、化合物のクラスタリング、Maximal Common Substructureの抽出といった、実在する大規模なデータを効果的に取り扱う手法を提供するコンポーネントコレクション	"	"	"	—
Pipeline Pilot Gene Expression Collection	"	"	個別の標的遺伝子も含めた遺伝子発現解析実験において、解析から可視化、アノテーション、レポートまでのプロセス。コアとなる機能はオープンソースのR言語で実装された、ゲノム解析向けのBioConductorに基づく	"	"	"	—
Pipeline Pilot Catalyst Collection	"	"	ファーマコフォアおよび三次元データベース管理に対する総合的なソリューション。Catalystのテクノロジーは知名度が高く、同種のツールの中では専門家による学術論文などでもっとも頻りに引用されており、Scitegicのプラットフォーム上に構築されていることにより、自動化された使いやすいワークフローの作成が可能になり、ファーマコフォアの作成や解析を合理化することが可能。Catalystの洗練されたアルゴリズムを使用した、コンフォメーションの概算、3Dデータベースの作成、ファーマコフォア仮説の作成、仮想スクリーニングなどを実行することが可能	"	"	"	—
Pipeline Pilot CHARMM Collection	"	"	信頼性の高いCHARMMエンジンを使用した生体分子シミュレーションのための強力なコンポーネントを提供。このコンポーネントコレクションによって、Pipeline Pilot™の標準機能を拡張し、タンパク質、核酸、低分子、タンパク質-リガンド複合体に対する、安定した正確な分子力学計算および分子動力学シミュレーションを行うことが可能	"	"	"	—
Pipeline Pilot Webport	"	"	Pipeline Pilotプロトコルを外部のアプリケーションから呼び出すための開発ツール。 .Net SDK、Java SDK、Java Script SDKの3種類があり、独自に開発したアプリケーションからPipeline Pilotのプロトコルを利用できる仕組みを提供。クライアントSDKにより自社で開発したアプリケーションにPipeline Pilotを組み込むことが可能	"	"	"	—
Pipeline Pilot クライアント SDKs	"	"	Pipeline Pilotのプロトコルは、ウェブサービスとして公開し、共有することが可能。WebPortは公開されたプロトコルをウェブブラウザから利用するためのインターフェースを提供。ブラウザからインタラクティブにプロトコルのパラメータを変更したり、実行結果をPDFなどのレポートとして参照したりすることが可能	"	"	"	—
Pipeline Pilot Collection Decision Trees	"	"	再起的分割モデル (Recursive Partitioning) の構築や検証に特化したコンポーネントコレクション	"	"	"	—

Pipeline Pilot Collection Integration	"	"	外部アプリケーションやデータベースとシームレスにリンクして、どのPipeline Pilotのプロトコルにもつながることができる	"	"	"	-
Pipeline Pilot Collection Reporting	"	"	カスタムレポートを作成する一連のコンポーネント集。複数のテーブル、チャート、イメージを適切に一枚のレポートに表示することにより、様々な視点からデータを見ることができ、例えば別の手法によって得られたデータとの比較をside-by-sideで見ることにより、一段と深い考察が容易となる。多くの標準的なレポートがサンプルとして含まれており、そのまま使用することも可能だが、これらをテンプレートとして独自のカスタムレポートを作成することもできる	"	"	"	-
Pipeline Pilot Collection R-Statistics	"	"	知見に富んだ解析、情報に富むグラフ表示、そしてデータ裏づけされた意思決定が行える。データ操作・クラスタリング・モデル学習・データ解析といった様々な統計手法を実行するコンポーネントを持っている。統計解析エンジンとしては、パブリックドメインとして広く使用されているRパッケージを選択。これによりR統計解析およびデータ操作の手法を、Pipeline Pilotのデータフローに対して適用することが可能となり、またRからの出力をPipeline Pilotを使用した更なる解析へと直接投入することも可能	"	"	"	-
Pipeline Pilot Collection Sequence Analysis	"	"	基本的なバイオインフォマティクスのツールおよびアルゴリズムをもち、研究業務を補完する実践的配列解析ワークフローを作ることができる。50以上もの異なるコンポーネントを用い、DNA・タンパクの配列を、広く受け入れられているバイオインフォマティクス手法を使用して、解析ならびにアノテーションの付与が可能	"	"	"	-
Pipeline Pilot Collection Text Analytics	"	"	文献検索とテキストマイニングの機能をPipelinePilotに加えるもの。デフォルトで様々な文献データベースや検索エンジンのコンポーネントを実装しており、単独で使用しても非常に強力なテキストマイニングのツールだが、ChemistryあるいはBioinformaticsの解析フローと統合するときに、最も大きな効果を発揮する。インタラクティブなキーワード検索、大量の文献情報に対するテキストマイニングなど、どちらにも対応可能	"	"	"	-
Pipeline Pilot Collection Imaging	"	"	実験機器や顕微鏡などから出力される画像データと研究データをシームレスに結びつけ、画像データを有効に活用する環境を提供する。画像データに含まれるあいまいな情報や、解析者による結果のばらつきを均一化、明確化して画像データから効率的に情報を抽出する作業を支援する	"	"	"	-
Pipeline Pilot Polymer Properties (Synthia) Collection	"	"	ポリマー研究のためのプロパティ探索コレクション。柔軟にカスタム化できる新しいSynthiaという位置づけ	"	"	2009年5月	-

Pipeline Pilot Cheminformatics Collection (including a beta version of the LMQS web client)	"	"	ケミスト向け高機能探索コレクション。List Management and Query Services機能, web I/F, SOA対応	"	"	"	-
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	Windows、Linux	"	2008年2月	-
LSKB Chemical Extension	"	"	PubChemを含め多くの化合物データベースの重複をなくし、ひとつのシステムに集約することで、目的に合わせた構造検索ができるデータベースを構築。搭載データは、既存薬、PDBに登録されているリガンド、購入可能な化合物、PubChemと、論文上に登録されている化合物といった5つの化合物サブセットを構築し、目的に合わせて検索対象を選択可能	"	"	"	-
記きroku録	"	"	プライベートデータ管理ソフト。デスクトップ上で70000件までの配列データを管理できる。アノテーション編集、検索機能を利用したグループ分け、プライベートデータベース作成、PC上でのBlast検索可能。PC版、サーバー版と用途に合わせて選択可能	Windows(プラストサーバー部分のみLinux可)	"	"	-
菌KIN	"	"	独自に検証した18S、ITS、156Sデータに対し配列をBLASTし、その結果からFAMILYやGENUSを判別する菌種推定システム。配列間のアライメントおよび系統樹作成まで行うことが可能	Windows	"	"	-
PathwayExpert	"	"	パスウェイ解析統合環境。PathwayExpertはパスウェイ解析ツールで定評のあるAriadneGenomics社の文献情報と、発現実験データからネットワークおよび分子相互作用を推定するシステム。MedScanの自然言語解釈アルゴリズムに基づき、文献中の様々な生物学的情報を自動的に抽出しDB化した後、パスウェイを描画。Medlineの全アブストラクトに対して遺伝子名等でのキーワード検索を実行し、関連する文献から生物医学情報を抽出することが可能	Windows、Linux	"	"	-
GenomeViewer	"	"	UCSCのゲノムデータベースおよびNCBIのRefSeqのヒト、マウス、およびラットゲノムデータを取り込み可能なゲノムビューワ。各染色体ごとに指定した部位の配列およびアノテーション情報を参照できる	"	"	"	-

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

BLAST Servers	"	"	バッチでのBLASTサーチ実行が可能な汎用BLASTサーバーで、クエリーや結果をリレーショナル・データベース(Oracle)で完全管理していることが特徴。BLAST結果から高スコアのデータを抽出するだけでなく、低スコアでもしっかりとエレメントがマッチしているようなデータをマイニングするような、高度なデータマイニングをリレーショナル・データベースに保存された検索結果を利用して容易に行えるようになっている。また、BLAST結果から遺伝子を分類するといった高度なデータマイニングに対応することもできる	Windows、Linux	"	"	—
LaboServer	"	"	大量のデータおよび様々な分析機器からのデータ、さらには実験結果ファイルやプロトコルなどのドキュメント管理までトータル的に行える本格的なデータ管理システム。すでに多くの実績をもっている。文書往来は特に医薬品生産技術開発時に発生する文書およびデータ類のデータベース管理に特化して開発された	Windows	"	"	—
BioElephant	"	"	三菱スペース・ソフトウェア、ワールドフュージョン、ARIADNE GENOMICSのバイオインフォマティクステクノロジーを結集した創薬研究のプラットフォーム	Windows、Linux	"	"	—
Tibco Spotfire DecisionSite	"	米ティブソフトウェア(スポットファイアー)	データウェアハウスなどの整備により、データは日々増大している。重大な意思決定を行う際には、以前とは比較にならない程、膨大なデータをふるいにかけて分析しなければならない。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。スポットファイアーのDecisionSiteは、研究開発、製品開発、生産および経営戦略において、一連のビジネス・プロセスをより速くより正確な意志決定を支援するシステムを提供する	Windows	"	2008年9月	—
Tibco Spotfire DecisionSite for Lead Discovery	"	"	IDBS社ActivityBaseを利用したデータ・スクリーニング、MDL社ISIS利用によるリードの選定および化合物のスクリーニング、Current Drugs社Iddb3をに対するキーワードの及び構造式検索、また企業独自のISISデータベースの構造式に関するSAR解析等、創薬研究に関する様々なデータに対応する	"	"	"	—
Tibco Spotfire DecisionSite for Functional Genomics	"	"	膨大なデータからの重要な遺伝子の探索、カテゴリズを迅速に行う。遺伝子発現解析において、統合されたデータを取得することはとても重要。DS for FG はデータの場所を意識せずに研究者の方は統合されたデータを取得することが可能。またデータのマージやリンクも簡単に行うことができる	"	"	"	—

Tibco Spotfire DecisionSite Statistics	"	"	DecisionSiteの強力なVisualization環境に統計解析機能を提供する。大量かつ多次元のデータからより迅速な意思決定を可能とする。主な機能は、基本統計の計算(mean、median、normality testing、etc)、基本統計のBox Plot表示、Anova(analysis of variance)、PCA(principal component analysis)、K-means cluster、Hierarchical cluster (UPGMA、WPGMA、Word's method etc)、Decision Tree	"	"	"	—
Tibco Spotfire DecisionSite Posters	"	"	膨大なデータからの重要な遺伝子の探索、カテゴライズを迅速に行う。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	"	"	"	—
Tibco Spotfire DecisionSite Analytics Server	"	"	Insightful のS-PLUS、R Project、および SAS から統計エンジンが生成した分析結果を、Spotfire のわかりやすく、使いやすいビジュアル環境に直接投入する。また、DecisionSite が個別のデータベースから素早くデータをソーシングできるようにする情報サービスも提供	"	"	"	—
TIBCO Spotfire Professional	"	"	ビジネスアナリストや専門家は、説得力のある特殊な分析を実行できるだけでなく、分析のワークフローと優良事例が詰め込まれた Guided Analytic アプリケーションを迅速に取得、作成、および共有できます。これらのデータを Spotfire Analytics Library に保存するだけで、TIBCO Spotfire Enterprise Player または TIBCO Spotfire Web Player を使用する他の TIBCO Spotfire Professional ユーザーや「情報の消費者」が、全社的にこれらのデータを瞬時に利用可能	"	"	2009年4月	—
TIBCO Spotfire Enterprise Player	"	"	ユーザーが洞察力や発見のヒントとなる既知の場所へアクセスすると同時に、同じユーザーが自由にデータを検索して、オンデマンドで質問事項を探ることが可能。オフラインでも作業できるため、出先でも簡単に分析を行うことが可能	"	"	"	—
TIBCO Spotfire Web Player	"	"	組織は簡単に対話型の分析アプリケーションおよびワークフローを展開できます。これにより、全社的にビジネスの専門家や意思決定者が洞察力を得ることが可能	"	"	"	—
TIBCO Spotfire Lead Discovery	"	"	Tibco Spotfire版Lead Discovery、Accerlys社、Chembridge社、Symix社のケミカルカートリッジに対応	"	"	"	—

Integromics Biomarker Discovery for TIBCO Spotfire	"	"	発現解析に必要なすべての作業をマウス一つで実行可能な解析モジュール。AffymetrixおよびAgilentを含むマイクロアレイ、Comparative Genomics Hybridization法のマルチプラットフォームからのデータ読み込み、Bioconductor Rのアルゴリズムを利用した統計解析、様々なアノテーションデータとの統合、ArrayUnlockとのインテグレーションによる生物学的解釈の利用が可能	"	"	"	—
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
<プラットフォーム製品>	シミックス・テクノロジーズ、その他代理店2社	米シミックス・テクノロジーズ					
Symyx Isentris	"	"	多様な研究データ・システムを統合する事を可能とする、新世代の3層構造アーキテクチャに基づく創薬研究IT基盤の総称	サーバー： Windows 2003/SUN Solaris、Oracle クライアント： Windows XP/Vista 詳細はお問い合わせください	—	—	—
Symyx Isentris Client	"	"	一つのインターフェイスで簡単に化学構造式・化学反応式の検索・参照を多様な形で行うことが出来るSymyx Isentrisの一コンポーネント。社内・社外両方のデータの統合も可能	クライアント： WindowsXP/Vista、Office 2003/2007	—	—	—
Symyx Isentris Control	"	"	Isentrisの各機能(ログイン・セッション管理、データ表示、クエリ作成、検索履歴、フォーム作成等)をMicrosoft .NETコントロール化したSymyx Isentrisの一コンポーネント。これらを使用して独自クライアントを作成可能	"	—	—	—
Symyx Isentris Personal Edition	"	"	Isentri Client、Symyx Dras、Isentris for Excelのコンポーネントで構成されるIsentrisのスタンドアロン版。研究者個人での研究情報管理を強力に支援	WindowsXP/Vista、Office 2003/2007、SQL Server Express 2005 SP2(製品に同梱)	—	—	—
Symyx Draw	"	"	新世代のより高度な構造式描画に対応した化学構造式描画ツール。Java/VB/Webのアプリケーションへの組み込みや、XMLによる機能の拡張・制御が容易	"	—	—	—
Symyx Core Interface	"	"	ユーザ・セッション管理、多様なデータ操作を行うことを目的とした、Symyx Isentrisの一コンポーネント(中間層)。J2EEを利用して、独自機能の追加が可能	Windows 2003、SUN Solaris & Oracle	—	—	—

Symyx Cheshire	"	"	化学構造式データを操作するソフトウェア開発ツール。構造式や反応式の表記を修正したり、Enumerationや特性値計算を行う	サーバー: Windows 2003/SUN Solaris クライアント: Windows XP/Vista	-	-	-
Symyx Direct	"	"	Oracle Data Cartridgeテクノロジーを用いた、SQL文による化合物構造式や反応式の登録および検索可能なオープンアーキテクチャ対応製品	Windows 2003 server, SUN Solaris, Linux(Red Hat) & Oracle	-	-	-
Symyx ISIS/Host	"	"	ISIS/Baseをフロントエンドとして、サーバー上のさまざまなデータベース(2D/3D化学構造式、反応式、生物活性データなど)にアクセスする	Windows 2003 server, SUN Solaris & Oracle	-	-	-
Symyx ISIS/Base	"	"	小グループでの化合物、反応式ならびに関連データ管理を目的としたデスクトップソフト。ISIS/Hostのクライアントソフトの機能も併せ持つ	Windows XP/Vista	-	-	-
Symyx ISIS/Draw	"	"	化合物構造式描画ソフト。化合物、反応式の登録ならびにプレゼンテーション資料の作成に使用	"	-	-	-
Chime/ChimePro	"	"	Internet Explorerに構造式を表示するためのプラグイン。Chime Proは更にISIS/Hostの構造式検索、スペクトル表示などの機能を持つ	Windows XP/Vista	-	-	-
<アプリケーション製品>							
Symyx Notebook 6	"	"	研究開発全般をカバーできる電子実験ノート。テンプレートを利用して、実験を記録。柔軟なフォーム設計が可能。強力な文書管理機能により21CFR Part11に対応。今後、様々な研究分野の実験に特化したコンポーネントを順次提供していく予定	サーバー: Windows 2003 server, Oracle10g,11g / クライアント: Windows XP/Vista	-	-	-
Symyx Process Notebook 5.5	"	"	プロセス合成向けの電子実験ノート。マルチステップ合成のシナリオ・コスト検討、製造指示書・製造記録書などの機能を持つ	詳細はお問い合わせ下さい	-	-	-
Symyx Logistics	"	"	Isentris環境上に構築された試薬管理システム。Symyx ACD、社内在庫試薬、独自の試薬データソースに対して高度な検索、注文ができる。化合物法規制、他の研究システム・購買システムとのインテグレーションにも対応可能	サーバー: Windows 2003 Server, Sun Solaris / Oracle: Symyx Directと同環境 / クライアント: Windows XP/Vista	-	-	-

Symyx Registration	"	"	Isentris環境上に構築された化合物データ登録システム。化学物質、バッチデータの登録の際に必要な処理(塩・混合物の認識、化合物表記規格化、化合物データ一括登録、化合物重複チェック、ID発行)を自動化。他の研究システムインテグレーションにも対応可能	"	-	-	-
Symyx PlateManager	"	"	サンプル管理・プレート管理システム。96、384および1536穴プレートのすべてのプレートフォーマットやミックスプレートにも対応、Assay Explorerとのリンクにより、アッセイ結果からチェリーピックプレートの作成が可能。HTSロボット対応	サーバー: Windows 2003 Server, Sun Solaris/Oracle: ISIS/Hostと同環 境/クライアント: Windows XP	-	-	-
Symyx Assay Explorer	"	"	アッセイのプロトコル作成、データ入力・管理、結果解析を行いOracle上にDB化する統合ソフト。自由度が高く、HTSからマニュアルアッセイ、探索薬物動態までサポート	サーバー: Windows 2003 Server, Windows XP/Oracle9i,10g /クライアント: Windows XP/Vista	-	-	-
Symyx Report Manager	"	"	Assay ExplorerのアッセイデータやISISの化合物データ及び遺伝子発現データ等のオラクルDBにまたがる検索ができ、構造活性相関(SAR)レポートが作成可能。Excel,Word, HTML及びPDFフォーマットをサポート	Windows XP/Vista, Office 2003/2007	-	-	-
Symyx ISIS for Excel	"	"	MS ExcelからISISリモートデータベースを参照可能にするアドイン。SDFFileをExcelに表示し、加工することも可能	Windows XP/Vista, MS Office 2003/2007	-	-	-
Symyx Isentris for Excel	"	"	MS ExcelからIsentrisリモートデータベースを参照可能にするアドイン。高度なIsentrisの検索・参照機能を使用してデータを加工した後に、Excelにデータを読み込むことが可能	Windows XP/Vista, MS Office 2003/2007	-	-	-
Lab Execution & Analysis	"	"	実験機器と連動して、実験手順の設定・実行、データ収集・解析を行うためのソフトウェア製品群。 Libraly Studio, Automation Studio, Plyview, LEA Data loader, LEA SDK等。詳細はお問い合わせ下さい	詳細はお問い合わせ下さい			
<データベースコンテンツ製品>							

DiscoveryGate	"	"	化合物や反応ファクトデータベース、電子雑誌、電子参考図書など、化合物に関する総合的な情報をシームレスに得るためのインターネット上コンテンツサービス。下記すべてのデータベースが利用可能	Windows 2000 SP4以上/XP SP1以上/Vista、Java Runtime Environment 1.5.0_12、Internet Explorer 6.1 SP1以上 ;MacOS X 10.4以上、Safari 2.0以上	-	-	-
Cheminform Reaction Library	"	"	FIZ Chemie社(独)の反応情報誌ChemInformの電子版で新規合成法を中心に収録。Symyx Reference Library of Synthetic Methodologyの内容を加え、1946年以降の文献から約120万反応を収録	ISIS/Host, Isentris 又は DiscoveryGateと同環境	-	-	-
Symyx Reference Library of Synthetic Methodology	"	"	TheilheimerやCOREなど1991年以前に個々に収録された5つのデータベースを一つに統合した反応データベース。21万反応	"	-	-	-
Symyx Solid-Phase Organic Reactions	"	"	コンビナトリアルケミストリーで注目の低分子固相合成反応データベース。反応に加えてポリマーやリンカーなど最適反応条件情報が得られる。約40,000反応	"	-	-	-
Derwent Journal of Synthetic Methods	"	"	Derwent社のJournal of Synthetic Methods(1980年～)を収録。約99,000反応	"	-	-	-
ORGSYN	"	"	Wiley&SonsのOrganic Synthesesの電子版(1921年～)。確立された反応(6,314)を収録	"	-	-	-
Symyx Metabolite Database	"	"	代謝物構造式や代謝経路、スキームなどの薬物代謝情報データベース。約95,000の代謝反応、約57,000化合物の情報を網羅。Toxicityとの相互参照が可能	ISIS/Host, Isentris 又は DiscoveryGateと同環境	-	-	-
Symyx Toxicity Database	"	"	医薬、農薬など化学物質の毒性データベース。データソースは、RTECSIにNLMのGENETOXやCCRISが加わり、約17万化合物。創薬初期での毒性、代謝研究を支援。Metaboliteとの相互参照が可能	ISIS/Host, Isentris 又は DiscoveryGateと同環境	-	-	-
Symyx Comprehensive Medicinal Chemistry	"	"	Pergamon Press社のComprehensive Medicinal Chemistryを元に収録した医薬治験薬化合物データベース、約9,000化合物	"	-	-	-
Symyx Drug Data Report	"	"	Prous社の医薬開発情報誌 Drug Data Reportを元に、約19万の開発医薬品情報を収録。2D/3D構造式検索可	"	-	-	-
Symyx Available Chemicals Directory	"	"	600社(国内約30社)を超える試薬化合物カタログから収録される約518,000試薬に関する2D/3D構造式、サプライヤー並びに価格などの情報を持つ。202万化合物	"	-	-	-

Symyx Screening Compounds Directory	"	"	スクリーニング用化合物サプライヤーのカタログ情報を集録。723万化合物	"	-	-	-
SPRESI	"	"	旧ソビエト連邦VINITI研究所とドイツZIC社の共同プロジェクトCHIMINFORMをベースにInfoChem社で商品化された反応データベース。物質データには沸点、分解温度、乖離定数、融点、相点移点、屈折率、旋光度、昇華点など、約367万反応を収録	Isentrisと同環境	-	-	-
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
Tencube/WM	テンキューブ研究所	テンキューブ研究所	分子のモデリングから分子軌道計算、計算結果の表示までをWindows上で実現する。GAUSSIAN、MOPAC、GAMESS、Q-Chemへの入出力インタフェース。MOPAC6とCNDO/Sを内蔵。構造最適化、原子電荷、双極子モーメント、エネルギー順位、分子軌道、分子体積・表面積などの計算や紫外・可視吸収、赤外吸収、NMRなどのスペクトルシミュレーション	Windows2000/XP/Vista	9万9千円、年間サイトライセンス42万円(一般)4万9千円、年間サイトライセンス21万円(アカデミック)	2008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
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	Internet Explorer 5.0以上 または Netscape 6.0以上	個別見積	2003年6月	-
Web of Science	"	"	高品質な約11,000(2009年3月現在)の学術雑誌からの書誌情報を提供する学術文献引用データベース。文献の被引用回数・引用文献をたどり、研究の発展や経過の調査が可能。検索結果のメールによるアラート機能、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンク機能もある。◆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1,000,000以上の化学反応が収録され、毎月3,000件の反応が新たに収録。◆2008年には、地域ジャーナル1,200誌を追加し、地域の需要に即したよりきめ細かい検索が可能に。120,000余の会議情報・論文情報もWeb of Science上に統合された ◆EndNote Web(文献管理ツール)、ResearcherID(研究者のセルフプロモーションサイト)を無料提供	WEB環境があれば利用可。検索ソフトは無償提供(インターネット)	"	1997年	-

Thomson Pharma	"	"	製薬・バイオ業界のための統合情報サービス。医薬品・特許・学術文献&ニュース・企業・ドラッグターゲット・化学・核酸&アミノ酸配列などのコンテンツを統合し、業界のあらゆる職種の方が必要とする情報をWeb上でアクセス可能に	WEB環境があれば利用可	"	2005年1月	-
IDdb/Thomson Pharma Partnering	"	"	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で必要な情報を収録している。データは、毎日アップデートされており、医薬品情報のモニタリングが可能	"	"	2004年	-
IDRAC	"	"	世界各国の薬事規制情報データベース。めまぐるしく変わる薬事法に特化した情報を配信することで、顧客企業の世界市場参入のスピードアップを助ける。世界55の国と地域の薬事法や規制上の問題に対応するあらゆる情報をひとまとめにしてお届け、また薬事規制情報の収集、編集、索引付け、相互参照、更新、分析など手間のかかる作業を代わりに行う	"	"	2005年	-
Thomson Message Mapping System SM	"	"	The Thomson Message Mapping System SM (TMMS) 製薬企業向けの戦略分析ツール。TMMSは、学術文献に発表された対象医薬品に関する記述と競合製品の記述を、処方する医師の観点から評価する。そして、治療・処方に関する記述に的を絞ることにより、エビデンスに基づく信頼性評価を行い、薬剤に関する主要記述を集計してSWOT分析をはじめとした60以上の図表・統計データを提供	"	"	2005年	-
Newport Horizon Premium	"	"	ジェネリック医薬品ビジネスを考える開発医薬品メーカー、ジェネリック医薬品メーカー、戦略的なAPIメーカー向けに特別に開発された、医薬品にターゲットしたグローバル・ビジネス・デベロップメント・システム。ジェネリック品開発の可能性をすばやく見出し、新たなビジネス・パートナーやマーケット、独占的なAPI供給元を探し出すことが可能。また、競合に先立ち、グローバルな製品ライセンス、買収の可能性などの情報も提供。新機能として、現行年度と前年度のAPI消費データが、地域別、剤型別にキログラムおよび国際単位もあわせて提供	"	"	2005年	-

Newport Vision Premiun	"	"	新薬・専門領域メーカー、ニッチブランド製薬メーカー向けに特別に開発された、競合戦略、ライフサイクル管理に有効なグローバル・ビジネス・デベロップメント・システム。ジェネリック競合他社の開発状況を早期に見極め、企業の戦略的事業計画に反映されるとともに、ライセンスングや倍主の可能性をすばやく見出し、世界中から新たなビジネス・パートナーを探し出すことが可能。また新機能として、現行年度と前年度のAPI消費データが、地域別、剤型別にキログラムおよび国際単位で提供	"	"	2005年	-
Liquent Insight Manager	"	"	新薬申請に関わる情報、文書を管理する統合ソリューションです。申請情報、製品情報、申請文書情報を全社で一元管理化し、これまで困難であった社内情報にセキュアに容易にアクセスできる環境を提供します。これにより、迅速な経営判断、意思決定が可能	Windows2000Server、2003Server	"	2004年	-
Liquent Insight Publisher	"	"	Insight Managerと統合した新薬申請のためのパブリッシングソリューション。eCDTはもちろんペーパーCTD、レポートパブリッシングもサポート	"	"	2004年	-
Liquent RenderPerfect	"	"	各種レポートのPDF化をサポートするレンディションサーバです。Microsoft Officeはもちろん、多くのソフトウェアフォーマットに対応しており、MS Wordでのレンディションではしおりの自動作成が可能。また、Windowsファイル環境だけでなく、ドキュメントに格納されている文書を直接PDF化することができます。文書間リンクのPDF化もおこなえるため、eCTD申請文書の作成に効果を発揮	"	"	2004年	-
Thomson Innovation	"	"	知的財産の研究と分析のための新しいスタンダード。特許情報、学術文献はもちろんのこと、ビジネス、ニュース情報、分析ツールを単一のプラットフォームに統合した新しい総合ソリューションを提供することにより、知的財産活動を各段階でサポートする	Microsoft Internet Explorer 6.0 および 7.0 Mozilla Firefox 1.5 以降	"	2008年	-
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	"	"	-	-

BIOMARKERcenter	"	"	主要な治療分野で活発に研究され、使用されているバイオマーカーを収載したバイオマーカーに特化したデータベースです。	"	"	2008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 DVD-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 DVD-ROM	"	"	Dictionary of Organic Compounds、Dictionary of Inorganic and Organometallic Compounds、Dictionary of Natural Products、Dictionary of Drugs、Dictionary of Carbohydrates の 5 辞書中の全エントリー、50万件以上の化合物を収録。テキスト・構造の両方から検索可能。6ヵ月毎に更新	"	"	—	—
CHEMnetBASE (Web Version)	"	"	The Combined Chemical Dictionary, The Handbook of Chemistry & Physics, Polymers-A Property Database をインターネット経由で提供する Web 版の新製品。テキスト・構造検索機能あり。検索結果のテーブル表示、化学構造式へのリンク機能等あり	Windows, Mac	"	—	—
Dictionary of Commonly Cited Compounds on CD-ROM	"	"	化学文献に頻出する約2.5万件の化学物質に関するデータベース	"	"	—	—
Index Chemicus Database for ISIS	"	米トムソンサイエンティフィック	新規化合物の速報／索引誌で世界の主要な約110誌の有機化学専門雑誌をカバー。1993年より収録され、部分構造検索ができる	Open VMS or UNIX	"	—	—
Current Chemical Reactions (CCR)	"	"	世界の有機化学専門誌に発表される新規合成反応の抄録誌で、約350誌の有機化学および製薬学の学術誌より採録	"	"	—	—
ChemPrep on CD	"	"	Current Chemical Reaction の Subset 版であり、1985 年以降の反応情報を収録しており、更新データ数は年間35,000件	Windows	"	—	—
Current Contents on Diskette / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	重要学術雑誌の目次速報誌。著者抄録が付加されているので、いち早く学術誌に掲載される論文の内容を正確に把握可。著者へ直接reprint請求(著社側の好意で送付される)可。毎週発行	Windows、Mac	抄録付:58万円～、抄録なし:35万円～	—	—
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ため、文献の引用回数を調べたり、引用文献をたどって研究の発展や経過を調べたりすることができます。検索結果のメールによるアラート、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンクの機能もあります。最新版のWeb of Science v6で、Current Chemical Reactions(反応データベース)とIndex Chemicus(化合物データベース)が含まれ、構造式の検索と表示が可能になりました(要契約)	''	''	-	-
DailyDrugNews .com	''	''	医薬品開発のニュース速報サービス、企業発表、特許情報、学会発表など幅広い情報源からニュースを採択。Internet版にてリリース	Windows、Mac	''	-	-
Integrity	''	''	医薬品開発についてのポータルサイト、過去から最新まで16万以上の化合物を収録。化合物を中心に、特許、文献、関連データなどの関連情報を簡単に利用可能。データは毎日更新	''	''	-	-
Pharmaceutical Substances	''	独Thieme Chemistry	1957年以降から現在までに市場に出た医薬品の有効薬成分(API: Active Pharmaceutical Ingredients)のみを網羅した化学物質データベース。年2回更新	Windows NT 4.0/95/98/2000/XP	''	-	-
Science of Synthesis	''	''	650名以上の化学合成方研究者が最適な合成方法を精査し、それらを収録した合成反応データベース。化学構造式からの検索も可能。叢書”Science of Synthesis”、”Houben-Weyl”も初版から収録。化学構造式からも検索可能	''	''	-	-
EndNote X3	''	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	-	-
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'08 for Windows/Macintosh 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	Spartan'08からマルチコアに対応。MM/Hartree-Fock/Semi-Empirical/DFT/MPなどの計算エンジンによる平衡/遷移構造最適化、配座解析、エネルギープロファイル計算が可能。溶媒中における構造最適化(HF/DFT)、励起状態計算(RI-CIS/TDDFT)、類似性解析なども可能。IR、NMR、UV/Visスペクトル計算、ならびに外部実験データベースとの自動フィッティングによるスケールリング。COSY/NOESYスペクトルのグラフ化。事前に構造最適化された(一部スペクトル情報も持つ)低分子データベース(SMD)の簡易版を装備。SMD/PDB/CSDなどのデータベース検索機能。Smiles/ChemDraw/PDBなどのファイル形式に対応	Windows版: Windows XP/Vista、32bit/64bit対応 Macintosh版: MacOSX 10.4.6以上、IntelMac限定	定価: 60万円、大学: 24万円。詳細お問い合わせ	Windows/Macintosh版: 2009年1月	-

Spartan'08 for Windows/Macintosh Essential Edition	"	"	Spartan'08 Full Edition からDFT/MP/RI-CIS/TDDFTなど高次計算エンジンやNMR、UV/Visスペクトル計算を省略した機能限定廉価版。取り扱える分子サイズはFull Editionと同じ	"	定価：36万円、大学：13万8千円。詳細要お問い合わせ	Windows/Macintosh版：2009年初夏予定	—
Spartan'08 for Linux	"	"	Spartan'08 for Windows/Macintosh Full Edition と同じ	32bit Intel/AMD、64bit Intel EM-645/AMD64、Red Hat Enterprise 4以上、SUSE Linux Enterprise 9以上、Linux Kernel 2.6以上	定価：84万円から、大学：30万円から。詳細要お問い合わせ	2009年1月	—
Spartan Molecular Database (SMD) オプション	"	"	15万分子種について、7~10種類の計算手法で予め構造最適化された低分子データベースを入手できるオプション。内、4万分子についてIR、1万5千分子についてNMR、2千分子についてUV/Vis情報(計算値)を持つ	—	定価：7万5千円、大学：2万8千円	2009年1月	—
Spartan'08 バージョンアップ権 (1年間/3年間)	"	"	有効期間内の全ての更新版を入手できる権利。また、SMD完全版の入手、ライセンスキー破損時の無料交換、有償ワークショップへの優待などの特典あり	—	1年間) 定価：10万8000円、大学：3万円。3年間) 定価：27万円、大学：8万4千円	2009年1月	—
Spartan Student Edition	"	"	学生実習向け分子モデリングソフトウェア。取り扱える分子サイズは制限されるが、MM、PM3、HF/3-21G、6-31G*B3LYP 6-31G*によって平衡/遷移構造最適化、反応座標解析、振動解析が可能。電子密度/分子軌道/IR振動などを可視化して、基本的な分子モデリング環境を提供。有機化学をより直感的に学習できる	Windows版：Windows XP/Vista Macintosh版：MacOSX 10.4.6以上	大学/短大：7万2千円、高専/高校：3万円、学生個人：1万2千円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスクカウントあり	2003年10月、2009年7月V4リリース	—
Spartan Student Edition 1年ライセンス (分子モデリング教育キット「学生用」)	"	"	Spartan Student Edition を1年間使用できるライセンス。マニュアルの他に「分子モデリング演習 初歩の初歩(挿絵を多用した操作説明書)」が付いている	"	1回インストール権(アクセスコード)。教育機関にのみ販売。定価：6千円	2006年10月	—

SpartanModel による有機化学演習	"	"	分子模型ソフトウェアが付いた有機化学演習問題集。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(簡易SMD)から、エネルギー/電荷/双極子モーメント/IRチャートの参照、または電子密度/分子軌道/IR振動などのグラフィックスやアニメーションを参照しながら学習できる。分子の画像は印刷できるが、ファイルの書き出し(保存)はできない。問題集には約200問の例題が用意されている	"	1回インストール権(アクセスコード)。定価: 5千円	2005年6月	—
Odyssey Instructor's Edition	"	"	MDシミュレーションによる一般化学の発見型学習システム。作業画面と問題文(テキスト)が一体化しているGUIは、インタラクティブに学習を進めることができる。作業/テキスト画面上には各種プロパティの値を入力したり、ヒストグラムなどの作成も可能。また、オリジナルケース(分子)の構築も可能。トピックス毎に設問が用意されていて(印刷可)、授業をトータルサポートする。日本語と英語の両コンテンツをボタンで切り替えられ、化学英語や留学生にも有用。講師用であるInstructor's Edition には設問の解答や解説などが付いている	"	大学/短大: 4万8千円、高専/高校: 3万6千円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスクカウントあり	2004年7月	—
Odyssey Instructor's Edition 1年ライセンス	"	"	Odyssey Instructor's Edition を1年間使用できるライセンス	"	1回インストール権(アクセスコード)。教育機関にのみ販売。定価: 7千円	2007年11月	—
Odyssey Student Edition	"	"	Odyssey Instructor's Edition から、設問の解答や解説を省略した学生バージョン	"	大学/短大: 4万円、高専/高校: 2万円、学生個人: 1万2千円。教育機関にのみ販売。ボリュームディスクカウントあり	2004年7月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
<統合型分子設計モデリングシステム【SYBYL】>	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	Linux(RHEL4.0: 32Bit版)、Windows(XPのみ)、Mac(OSX10.5以降)	お問い合わせください	—	—

QSAR/CoMFA	"	"	構造活性相関、3次元構造活性相関CoMFA、クラスター解析	"	"	-	-
Advanced CoMFA	"	"	CoMFAのパワーアップモジュール	"	"	-	-
DISCOtech	"	"	ファーマコフォア探索プログラム	"	"	-	-
Advanced Computation	"	"	立体配座解析、ディスタンスマッピング、レセプターマッピング	"	"	-	-
Biopolymer	"	"	タンパク質・DNAなどの分子構築やアミノ酸辞書を搭載した生体高分子用モジュール。また、Genetic Algorithmを用いて、リガンド及びタンパク質の側鎖を動的に考慮したFlexible Ligand Dockingも実施可能	"	"	-	-
CONCORD	"	"	低分子化合物の2次元構造を高速に3次元構造に変換するモジュール	"	"	-	-
MOLCAD	"	"	3次元分子表面特性可視化プログラム	"	"	-	-
Legion/CombiLibMaker	"	"	ヴァーチャルなコンビナトリアルライブラリー作成プログラム	"	"	-	-
Selector	"	"	ダイバーシティ評価・フィルタリング用プログラム(記述子の相対距離評価法)	"	"	-	-
Diverse Solutions	"	"	BCUT記述子によるダイバーシティ評価、フォーカスト・ライブラリーデザインモジュール	"	"	-	-
UNITY	"	"	分子データベース検索システム。2次元、3次元での検索以外に、分子の柔軟性を考慮した3次元フレキシブルサーチが実施可能	"	"	-	-
ClogP/CMR	"	"	ClogP計算モジュール	"	"	-	-
CScore	"	"	たんぱく質/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	"	"	-	-
RACHEL	"	"	Structure-based Lead Optimization Toolで、タンパク質の活性サイトの情報から、SBDDでコンビナトリアル構造を自動で最適化させるモジュール	"	"	-	-
Tuplets	"	"	活性化合物における複数のファーマコフォア間の距離をFingerprint化し、活性のHypothesisを作成します。このHypothesisを基に、データベース検索から活性候補構造を選択し、コンビナトリアルライブラリーの適否を判断するモジュール	"	"	-	-
StereoPlex	"	"	分子データベース構築において、各分子の立体異性体 (Stereoisomer)を自動生成するモジュール	"	"	-	-
EA-Inventor	"	"	任意の評価関数・評価ソフトウェアを組み合わせ、任意の基準で生成した分子の良否判定を行うことが可能なリガンドの候補構造自動発生 (de novo design) モジュール	"	"	-	-

GALAHAD	"	"	Tupletsの技術とパレット・フィットネス関数を組み合わせた遺伝的アルゴリズムを用いて、分子の重ね合わせとPharmacophoreモデルを構築するモジュール	"	"	-	-
Surflex-Dock	"	"	3種類のプローブ原子で構成される"Protomol"を活性部位と見立てて、低分子の重ね合わせを行うユニークな手法を採用したドッキングモジュール	"	"	-	-
Surflex-Sim	"	"	分子表面形状の類似性と分子形状から考えられる受容体の「サイトポイント」を考慮して重ね合わせパターンを探索するモジュール	"	"	-	-
Advanced Protein Modeling	"	"	予めファミリー・プロファイル化したHOMSTRADデータベースを使用して、Query配列と相同性の高い構造の抽出・アライメントを行う相同性検索ツール(FUGUE)とその結果を利用して、SCR・ギャップ・ループ構造を構築するホモロジーモデリングツール(ORCHESTRAR)を組み合わせたパッケージ製品。精度の良いモデル構造の構築が可能	"	"	-	-
Topomer Search	"	"	TRIPOS社独自のテクノロジーであるChemSpaceのエンジンを用いて、形状とファーマコフォアの類似性から、Lead Hoppingを実現。高速な検索エンジンを搭載	"	"	-	-
Topomer CoMFA	"	"	TRIPOS社独自のテクノロジーを用いて、CoMFA解析を利用した高速なLead Optimizationが実現。Topomerのアライメントルールにより、CoMFAに必要であったアライメントを自動化。更に、得られた活性予測式から、高活性化化合物を検索・予測が可能	"	"	-	-
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	Linux/Winsows	"	-	-
VolSurf	"	"	ADME関連予測QSARモジュール	"	"	-	-
VolSurf Plus	"	"	Vorsurfの機能拡張版。より精度の高いモデル構築をサポートするための様々な機能が追加。構造解析用、スクリーニング用、モデル作成用と機能毎に適したGUIを用意	"	"	2009年12月	-
hint!	"	米eduSoft	各種パラメータ(Hint Score)や分子間相互作用フィールドの計算と表示を行うモジュール。3D-QSARの記述子としても利用可能	"	"	2008年4月	-
Molconn-Z	"	"	各種分子パラメータ計算モジュール。数百種の記述子の計算、各原子の電子的な状態を反映するE-State値の計算を実施。また、計算される記述子を用いてOptiSimTM法による『Diversityを考慮した分子選択』にも利用可能	"	"	"	-
<デスクトップ製品>							

Benchware 3D Explorer	"	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。また、PowerPoint上で立体構造の操作が可能なので、研究者間で構造情報を共有する事が更に簡潔に！	Windows	"	—	—
Benchware DataMiner: Base/HTS/HQSAR	"	"	HTSデータ解析用ツール。クラスタリングやPCA/NLMによる化合物mapの作成・視覚的解析、化合物セットにおける部分構造のルール提示などのSAR解析をサポート	"	"	—	—
Benchware Pantheon	"	"	ケミカルスプレッドシートによる2次元構造の表示・分子記述子の算出や3次元構造の表示・分子表面描画などの多数の機能を持つ情報共有ツール。MUSE、ThemisやKNIMEなどと連結させて、計算条件・結果などを保存、共有する基本プラットフォームとしても利用可能。	"	"	2009年10月	
Benchware Muse	"	"	既存化合物を基に新規化合物/Scaffoldを設計支援するためのde novoデザインツール。搭載された形状・Pharmacophoreに基づくスコア関数だけでなく、外部スコア関数と連携した解析も可能	Windows / Linux	"	2009年8月	—
Benchware D360	"	"	合成・生物・薬理・薬物動態などの各研究者が分散して持っている多種多様のデータファイルやデータベースを一元管理し、高性能且つ使いやすいクライアント画面からの検索機能による各データへの円滑・迅速なアクセスにより、ほしい情報をすぐに入手し、包括的なデータ解析を可能にする”研究支援システム”	Windows (お問い合わせください)	"	2009年10月	
Benchware Themis	"	"	登録した反応とビルディングブロックにより作成するSynthonを利用した仮想化合物データベースシステム。形状類似性などによる検索が可能。100個の反応式を収載。ユーザにより反応データの追加可能	Windows	"	来年リリース予定	—
<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					
LSKB Bio-Knowledge (LSKB : Life Science Knowledge Bank)	"	"	【ナレッジデータベース】遺伝子名やシンボル、キーワードなど、遺伝子に関する情報をデータベース化、関連するタンパク質、疾患、化合物、組織との関連性をまとめたデータベース。化合物は約120万のシノニム用語搭載	Linux or WindowsXPPro. / Oracle または、Webアクセスによる利用	お問い合わせください	—	—
LSKB Chem-Knowledge	"	"	【化合物検索】化合物構造から文献情報・類似市販化合物などを取得するためのLSKB用アドオンモジュール。PubChem, Drugbankなどを収録。化合物の類似性評価にFingerprintによるTanimoto IndexとSYBYLモジュールであるTopomerSearchが利用可能	Linux / Oracleベースのサーバ : クライアント側はBenchware 3D Explorerを採用	"	—	—

LaboServer: Genotypeing 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	"	-	-
BioElephant	"	ワールドフュージョン、三菱スペースソフトウェア共同開発	【総合解析ポータルシステム】社内データと公共データの連携をスムーズに行うと同時に、社内実験データ、配列データと公共データとの連携も行います。柔軟性の高いソフトウェアモジュールで構成変更、お客様の要望に応じてフレキシビリティにシステムの構成や、モジュールの追加可能	Linux	"	-	-
Pathway Studio (Desktop版 / Enterprise版)	"	米アリアドネジェノミクス社	【パスウェイ解析】文献情報を基に、発現実験データなどからネットワークや制御関係、分子間相互作用を解析するシステム。ユーザが自由にデータベースを拡張できることが特長。【テキストマイニングツール】PubMedアブストラクトやドキュメントから、文章中に存在するタンパク質、代謝産物、疾患などの関連情報を抽出するソフトウェア。抽出スピードの速さと高い精度が特長	Desktop版: WindowsXP, Vista, 7 :Enterprise版: Linux / WindowsServer, XP	73万円～	-	-
Pathway Studio ChemEffect (Desktop版 / Enterprise版)	"	"	【パスウェイ解析】主にテキストマイニングで集められた情報を基に、毒性や副作用、バイオマーカー探索を行うためのソフトウェア。【テキストマイニングツール】PubMedアブストラクトやドキュメントから、毒性、代謝、副作用関連のネットワーク情報を抽出する	Desktop版: WindowsXP, Vista, 7 :Enterprise版: Linux / WindowsServer, XP	お問い合わせください	-	-
NEXUS copy number	"	米バイオディスカバリー社	【CNV解析】CGHおよびSNPアレイのデータから染色体上のコピー数異常領域を独自のアルゴリズムに基づき迅速に検出するソフトウェア。アレイデータのゲノム上へのマッピングと可視化、統計処理によるコピー数変化領域の検出と領域に存在する遺伝子の機能解析までを1つのソフトで実行できる。発現マイクロアレイの結果を取り込むことで遺伝子の発現変動情報とコピー数変化領域を統合した解析が可能	WindowsXP / Mac	"	-	-