

<最新 CCS 一覧表>

(2003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	アクセルリス	米アクセルリス					
Materials Studio Discover	"	"	高分子材料に最適な分子動力学計算エンジン	Windows	お問い合わせ下さい	—	—
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 DMol3	"	"	密度汎関数法に基づいた第一原理計算プログラムで数値局在基底関数を使用。分子系と周期系双方の電子状態計算が可能	"	"	—	—
Materials Studio ReflexPlus	"	"	粉末 X 線結晶回折データから結晶構造を精度よく計算予測するツール	"	"	—	—
Materials Studio CombiMAT	"	"	材料開発むけハイスループット実験データ管理システム	"	"	—	—
Materials Studio FAST	"	"	「フォーミュレーション」最適化設計データベースシステム	"	"	—	—
ライフサイエンス							
Discovery Studio ViewerPro	"	"	分子の3Dモデル表示と簡単なモデル解析のデスクトップ	"	"	—	—
Discovery Studio Modeling	"	"	デスクトップ上での計算プロテオミクス & シミュレーションツール	"	"	—	—
Discovery Studio MedChem Explorer	"	"	医薬合成化学者むけファーマコファー解析 / DB 検索のための Windows Client-Server ソフトウェア	SGI	"	—	—
Catalyst	"	"	ファーマコフォアベースの分子アラインメント、形状ベースの三次元サーチ、SAR データに基づくファーマコフォア仮説の自動作成、コンフォメーション空間を幅広くカバーした複数コンフォメーションの発生といった相補的機能を提供するツール	"	"	—	—
Cerius2/ADME	"	"	社内保有化合物ライブラリーやコンビナトリアルライブラリーなど、非常に多くの化合物を取り扱う場合に適した ADME 特性の解析及び予測のための高速計算ツール	"	"	—	—
Cerius2/LigandFit	"	"	ハイスループットドッキング & スコアリングモジュール	"	"	—	—
Cerius2/SBF	"	"	タンパク3D構造に基づく3Dファーマコフォアクエリーの構築と3D検索	"	"	—	—
Cerius2/CombiChem	"	"	コンビナトリアルケミストリーにおけるライブラリーデザインツール	"	"	—	—
Cerius2/AutoLudi	"	"	自動 De novo デザイン & スコアリング	"	"	—	—
Insight II	"	"	生体高分子系分子モデリング、シミュレーション	"	"	—	—

QUANTA x-ray	"	"	生体高分子 X 線構造解析モデリング	"	"	-	-
CNX	"	"	X 線および NMR 構造精密化ソルバー	SGI, Linux, AIX	"	-	-
Felix	"	"	NMR 構造解析、スペクトル・ビジュアライゼーション	Windows, SGI	"	-	-
ケムインフォマテイクス							
RS3	"	"	Oracle で構築された総合的ディスカバリー情報管理ソリューション	SUN, Windows	"	-	-
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	"	"	-	-
Accord for Excel Combi Chem	"	"	化学スプレッドシートの Accord for Excel にコンピケムのエニミュレーションツールを統合し、一般反応式の入力、SD ファイルなどから試薬リストを読み込んでボタンを押すだけで化合物ライブラリーを作成するツール	"	"	-	-
Failed Reaction	"	"	Accelrys 監修、30 余りの化学学会誌から、不良反応実例集を集めたユニークなデータベース	"	"	-	-
Method in Organic Synthesis	"	"	英国 RSC 刊の学会誌 "Method of Organic Synthesis" より、重要な有機化学合成反応を収録したデータベース	"	"	-	-
TOPKAT	"	"	化学物質の毒性や環境的影響を分子構造のみから計算し、自動的に評価を確認するソフトウェアシステム	"	"	-	-
TSAR	"	"	統計的およびビジュアル分析ツールを使用してデータの傾向を調べる、完全統合された 2D QSAR パッケージ	"	"	-	-
DIVA	"	"	化学および生物学データを処理するデスクトップ・アプリケーション	"	"	-	-
バイオインフォマテイクス							
Wisconsin Package	"	"	多様な研究ニーズに対応する配列解析ツール	SGI, Alpha	"	-	-
SeqWeb	"	"	Wisconsin Package に対応する web インターフェース	Windows	"	-	-
SeqStore	"	"	Oracle ベースの配列情報管理 DBMS	SUN ,AIX	"	-	-
MacVector	"	"	Macintosh における配列解析ツールのデファクトスタンダード	Mac	"	-	-
Discovery Studio Gene	"	"	極めて優れた操作性を実現した配列解析デスクトップ	Windows	"	-	-
Discovery Studio GeneAtlas	"	"	HTM (High Throughput Modeling) を活用した高品質アノテーションサーバ	SUN, Linux	"	-	-
Discovery Studio AtlasStore	"	"	リレーショナルデータベースによるプロテオミクスデータ管理システム	SUN., Windows	"	-	-

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
DayCart	アダムネット	米デイライト	新製品、オラクル+ Daylight 化学情報管理システム	SGI、SUN、Linux	詳細問い合わせ	2000年9月	—
Daylight DBMS	〃	〃	複雑なクエリーによる高速検索可能な化合物、反応のデータベース管理システム	〃	〃	92年1月	—
Clustering Package	〃	〃	Daylight Fingerprint 使用のクラスタリングソフト	〃	〃	〃	—
Rubicon	〃	〃	Smiles から3D 構造、コンホメーション発生ソフト	〃	〃	〃	—
PCModels	〃	〃	2D 構造から ClogP、CMR を推算するソフト	〃	〃	〃	—
Smiles Toolkit	〃	〃	SD、RD、Mol、Mol2 各ファイルと Smiles ファイルとの相互変換ツール。TPSA の計算可能	〃	〃	〃	—
Smarts Toolkit	〃	〃	複雑な検索クエリーの作成ツール、パーチャルスクリーニングのプログラムに最適	〃	〃	〃	—
Reaction Toolkit	〃	〃	反応ルールに基づいてパーチャルライブラリーを構築するツール	〃	〃	〃	—
Fingerprint Toolkit	〃	〃	独自の Fingerprint 作成ツール、Fingerprint により類似度計算	〃	〃	〃	—
Daylight Java Tools	〃	〃	Jaba による Daylight プログラムへの GUI	〃	〃	98年10月	—
DayCGI Tool	〃	〃	Web による Daylight データベースへのアクセス	〃	〃	〃	—
TCM	〃	〃	新製品、中国3000年の歴史を誇る漢方薬の化学構造データベース	〃	〃	2002年1月	—
Medchem データベース	〃	米バイオバイト	LogP 実測値データベース(約 34,000 件)	〃	〃	92年1月	—
WDI データベース	〃	英ダウエント	ダウエント World Drug Index データベース	〃	〃	〃	—
Spresi React データベース	〃	独インフォケム	化学反応データベース(250万反応)	〃	〃	〃	—
CCR データベース	〃	米 ISI	化学反応データベース(25万反応)。年々3万件追加	〃	〃	〃	—
Index Chemicus データベース	〃	〃	有機化学のジャーナルから抽出された最新化合物データベース(60万構造)	〃	〃	〃	—
Maybridge データベース	〃	英メイブリッジ	試薬カタログ。5万件全て Maybridge 社から供給可能	〃	〃	〃	—
ACD データベース	〃	米 MDL	Available Chemical Directory 約25万試薬	〃	〃	〃	—
NCI データベース	〃	米 NCI 研究所	国立癌研究所データベース約12万化合物	〃	〃	92年1月	—
CQSAR	〃	米バイオバイト	Hansch による過去20年にわたる QSAR 関連データベースを含む構造活性相関モジュール	Alpha/OpenV MS	〃	97年1月	—
CLogP	〃	〃	Hansch・Leo による LogP/CMR 推算ソフト(Mac 版、Win 版) No Missing Fragment	Mac、Windows、SGI	〃	95年4月	—

DockIt	"	米メタフォリックス	ターゲット蛋白とデータセットのドッキングで、コンホメーションを考慮する。コンビケムでバーチャルライブラリのスクリーニングに最適	SGI、SUN	"	2000年1月	-
LUNA	"	"	蛋白質ーリガンド データベース	"	"	2002年1月	-
Fingerprint Generation Package	"	英 BCI	Dictionary をもとに Fingerprint を作成	UNIX, PC	"	97年1月	-
Clustering Package	"	"	Ward 法、K-Means 法、J-P 法など各種クラスタリングパッケージ	"	"	97年1月	-
Diversity Analysis Package	"	"	構造の Diversity を計算しデータセットを評価し、また特異構造を選抜する	"	"	97年1月	-
Molsmart	"	"	二次元描画のクエリーから Daylight クエリーの Smarts を生成する	"	"	2003年4月	-
INForm	"	英 I.L.	ニューラルネットによる配合設計	Wnows	"	2003年4月	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Advance / ProteinDF	アドバンスソフト	アドバンスソフト	大規模タンパク質を解明する次世代量子化学計算。新薬の開発における精密なタンパク質の機能・反応解析に有効。電子素子、光学素子の新素材開発における機能性タンパク質の解析に有効。タンパク質物性研究における精密な全電子計算が可能(バイオサイエンス学術研究)	計算部: Linux (メモリ512MB以上推奨)、GUI部: Windows, Linux (メモリ512MB以上推奨) Java2, Java3D, Jpeg 対応の gnuplot が必要	-	-	-
Advance / ABINIT-MP BioStation	"	"	バイオ創薬を支える タンパク質と化学物質相互作用解。タンパク質と化学物質との相互作用を高精度に予測でき、医薬品等の分子設計の効率化に有効。環境ホルモン等の低分子化合物の人体への影響の予測に役立つ。1000残基規模のタンパク質の電子密度の量子計算が可能で、タンパク質の機能解析に有効	Windows 2000 / XP, Linux PC, Linux PC クラスタ、Hitachi SR 8000、SGI Altix 3700 可視化には Java2, Java3D が必要	-	-	-
Advance / CHASE-3PT	"	"	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や光電子分光などの表面分析、触媒などの表面反応の理論的解析に有効	Linux, Unix LAPACK、MPI ライブラリが必要	-	-	-
Advance / FrontFlow	"	"	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	燃焼、混相流解析: IRX (Ver6.4, Ver6.5), ターボ機械、流体音解析: 加えて OSF1 (Ver5.1), HI-UX / MPP (Ver03.07), SunOS (Ver5.9), UnixSystemV, Linux (Ver2.4.19)	-	-	-

Advance / RINDOW	"	"	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	Windows 2000 / XP、Linux、Unix Java2 が必要	-	-	-
Advance / HPC-MW	"	"	HPCミドルウェア。PCで開発されたソースプログラムをネットワーク上の各ハイエンド計算機のHPC-MWにプラグインすることにより、PCクラスからベクトル並列計算機までのハードウェアに対して最適化されたコードが自動的に生成される。コンパイラ型アプローチを一部採用し、新しいアーキテクチャへの柔軟な対応が可能	-	-	-	-
Advance / TFLAGS	"	"	薄膜成長プロセスシミュレーション。MBE、CVD、スパッタ法などによる薄膜成長プロセスを原子レベルでシミュレート可能。結晶粒サイズ分布や表面の凹凸が堆積速度や基盤温度などの成長条件によってどのように変化するか解析可能。エピタキシャル成長、ガラス基板上の多結晶膜の成長など様々な薄膜成長様式に対応。PCで動作	OS: Windows, Linux, Mac OS X, UNIX CPU: Pentium4 1GHz 以上推奨 メモリ: DDR-SDRAM 512MB 以上推奨	-	-	-
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	サンSPARC (インターネットによる利用が可能)	150万円	94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
MolWorks Ver1.7	ベストシステムズ	ベストシステムズ	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 への入出カ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、WindowsNT/2000、MacOS、Linux	無償	2000年9月	-
Q-Chem	"	米キューケム	オーダーNアルゴリズムを適用した大規模分子系 ab initio 分子軌道計算プログラム	Linux、IBM、SGI、Compaq Alpha、SUN	別途問い合わせ	1993年3月	-
HyperChem	"	米ハイパーキューブ	低分子の有機化合物からたん白質や核酸まで幅広い系に対応したウィンドウズ版分子設計支援ツール。MM、MD、MO、MCなどの計算機能を備えている	Windows95/98、2000/NT/XP	別途問い合わせ	1994年	-
CHEMKIN	リアクションデザイン・ジャパン	米リアクションデザイン	化学反応(気相反応、表面反応)を伴う流れ場のモデリングツール。CVD 薄膜成長、燃焼、化学プロセス、環境の分野で幅広く応用	Windows 98/2000/NT、Linux、SUN、SGI、HP、Compaq Alpha、IBM AIX	別途問い合わせ	1997年6月	-
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	日本バイオ・ラッド ラボラトリーズ	米バイオ・ラッド ラボラトリーズ	IR、Raman、NMR、MS スペクトルを1つのアプリケーションで扱うことのできる画期的なソフト。ユーザーが必要なツールを組み合わせて購入することができる	Windows2000以上	96万円から、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できるプライスシステム	"	IR 98万円、NMR 80万円、MS55万円/1年間	2003年4月	-

IRパッケージデータベース ver.5	//	//		—	詳細問い合わせ	2000年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Computational Chemistry Total Solutions	分子	分子	Gaussian 03 などの量子化学計算を中心とした総合的コンサルティングを展開中。Linux、Unix の分子計算システム構築を受注している。Chemi-, BioInformatics などのソフトウェアの技術情報が充実している	SUN、RS/6000、HP、IRIS、Windows	10万～300万円(アカデミック価格あり)	1987年7月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CONFLEX2000	コンプレックス	コンプレックス	CONFLEX2000は、フレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造を洩れなく見つけだす。今までの構造最適化プログラムでは、ユーザが入力した初期構造に依存した、局所的な最適化構造しか求めることができなかつた。最安定構造でさえも、特定することが困難だつた。これでは、フレキシブルな分子の性質や挙動に関して、限られた情報しか得ることができない。これらの問題を解決するための配座探索プログラムが、バージョンアップされた CONFLEX2000である	Mac、Linux、Windows、SGI	お問い合わせ	2001年4月	—
Parallel CONFLEX	//	//	並列化された CONFLEX2000は、鎖状部分の結合の回転・環を構成する原子の Flap・Flipにより、初期構造を変形させる微小変形により発生する複数の出発構造を複数のコンピュータに分散させて構造最適化を行う。ポストゲノム研究、新機能材料開発などで扱う系は非常にサイズが大きい場合が多くPC1台で手軽に配座探索計算を行うことはできない。特に最近のポストゲノム研究で注目されるタンパク質やDNA、RNAなどの生体高分子はさまざまな三次元構造を有する多配座分子であり、これらの立体構造を分子計算で解析する皆様のためにも Parallel CONFLEXは有効	Mac、Linux、Windows、SGI、MDエンジンII	//	2001年4月	—
AMBER 7	//	米カリフォルニア大学	AMBERは、カリフォルニア大学の故コールマン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、モデリングおよびモレキュラーメカニクスとダイナミクス計算シミュレーションのパッケージ。モデリングでは parm96 や OPLS などの構造データベースをもち、溶媒水分子の配置やチャージのフィッティングを行なうなどのビルダーモジュールが多数用意されている	UNIX、Linux、MDエンジンII、Windows	//	2000年4月	—
MD エンジン II	//	富士ゼロックス	分子動力学を用いたシミュレーションを高速化するアクセラレータボード。パソコンの PCI スロットに装着して使用することも可能で、高速かつ高精度な計算を実現	Linux、Windows	//	2000年4月	—
Gaussian03	//	米ガウシアン	Gaussian 03 は、1999 年に実験データから導き出される経験的パラメータを一切用いない非経験的分子軌道法の普及の功績によりノーベル賞を受賞した J.A.Pople らによって開発された。新たに追加された ONIOM 法により、電子構造理論を巨大分子についても現実的なものとし、分子特性の予測範囲を拡張した	UNIX、Linux、Windows、Mac	//	2003年4月	—

BioBookG4	"	コンプレックス	BioBookG4 は、バイオ研究者向けのポピュラーなツールを Apple PowerBookG4 にセットアップ済みでお届けする、研究者個人向けバイオインフォマティクス支援システム。バイオインフォマティクスと計算生物学は急速に発展する科学分野で、今日ではコンピュータベースのツール無しに、研究開発分野の情報で優位に立つことは不可能。一年間のサポート付きなので、初心者の方も安心して研究開発のツールとして研究時間短縮にご利用いただける	Mac、Windows	"	2003年4月	—
配座創出コンサルティング	"	"	DNAや蛋白質などに代表される生体高分子の三次元立体構造は、それらの活性や物性を研究する上で欠くことのできない情報である。配座創出コンサルティングは新たに開発された、シーケンス型配座創出アルゴリズムと並列計算システムを応用することによって、数千原子分子程度の有機化合物(数百塩基対相当)の立体配座を短時間で創出するサービス	—	"	2003年4月	—
BARISTA	"	"	BARISTA は、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。BARISTA は、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のコンピュータグラフィックスを作成・表示することができ、その結果を容易に解析することができるように支援することを目的としている	Linux, Windows	"	2002年4月	—
MDGRAPE-2	"	"	MDGRAPE-2 は、分子シミュレーションや天体シミュレーションに代表される多粒子系での2粒子間力を高速に求めるためのアクセラレータボード。例えば、分子動力学シミュレーションにおいてその計算時間を劇的に短縮します。MDGRAPE-2 は1枚あたり理論値で64GFlops、実効値で50GFlopsの計算能力を有する	Linux AIX Solaris	"	2003年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MAAT	ACRONET	ACRONET	マイクロアレイ発現解析ソフト、発現率をガンマー分布と仮定した手法と複数実験データにより解析精度を向上させる調整P値法をモデル化	Windows98/Me、2000/NT	要問い合わせ	—	—
MUGEN Extractor	"	"	バイオ文献テキストマイニングツール。PubMed 検索結果の抽象からキーワードに関連する遺伝子名や化合物名を抽出しキーワードとの関連性の強さ、シグナルパスウェイなどを調査することができる。その他、研究を効率化・高速化するための機能を備える	Windows2000/XP	要問い合わせ	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ChemReact	CTC ラボラトリーシステムズ	独インフォケム	VINITI(旧ソ連)とZIC(独)から収集された330万件の化合物データから同一反応タイプを排除したデータベース	"	要問合せ	—	—
ChemSynth	"	"	ChemReact 中から著名なジャーナルに発表されており、収率が50%以上の反応のみを抜粋したデータベース	"	"	—	—
CoRM	"	CTC ラボラトリーシステムズ	試薬管理、発注システム	SGI、Sun、NT	"	—	—

Activity Base	"	英 ID ビジネスソリューション	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	IBM RS/6000、SGI IRIS、DECAlphaVAX、WindowsNT、Sun	"	-	-
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	WindowsNT、Windows95、2000	10万5,000円	-	-
SARGen	"	"	ISIS 上の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	WindowsNT、Windows2000	要問合せ	-	-
DEREK for Windows	"	英ラーサ	ルールベースに基づく化合物毒性予測プログラム	"	"	-	-
METEOR	"	"	ルールベースに基づく代謝予測システム	"	"	-	-
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	SGI、IBM、Sun	"	-	-
TOX staff 21	"	CTC ラボラトリーシステムズ	安全性試験の統合的な支援システム。一般毒性、病理、臨床病理、生殖毒性、統計解析	サーバー: WindowsNT、SUN、クライアント: Windows	"	-	-
ADME staff	"	"	薬物動態試験の総合的な支援システム。臨床、非臨床 PK,TK 試験、濃度計算、LA	"	"	-	-
SQL*Stability	"	米アプライドバイオシステム	製剤、安定性試験支援システム。プロトコル作成、スケジュール管理、LA	サーバー: WindowsNT/2000、SUN、クライアント: Windows	"	-	-
SQL*QA	"	"	治験薬 GMP、GMP 向け品質保証システム。ロット QA、QC、ロットアナロジー管理、LA	"	"	-	-
SQL*LIMS	"	"	ラボラトリー情報管理システム。QC、分析、LA のコアシステム	"	"	-	-
Documentum	"	米ドキュメントム	エンタープライズコンテンツマネジメントシステム +Web ブラウザー	サーバー: SUN、HP、NT、クライアント: Windows、Web ブラウザー	"	-	-
ARISg/j	"	米 Clinarium	国内外対応副作用症例データ管理システム	サーバー: SUN、NT、クライアント: Windows	"	-	-
Oracle Clinical	"	米オラクル	マルチ言語対応臨床データ管理システム。海外治験への対応が可能	サーバー: SUN、HP、NT、クライアント: Windows	"	-	-
Oracle TMS	"	"	MedDRA、自社辞書など GCP・GPMSP における辞書の統合管理を可能にします	"	"	-	-
PH.DataWare	"	米 SAS	臨床データウェアハウジングツール。CDMS ~ 解析環境のデータの流れ、データ抽出・変換・加工のプロセス管理と文書化	要問合せ	"	-	-
PH-Clinical	"	"	臨床試験データの解析環境。バリデートと監査証跡を考慮した解析、レポート作成、解析プログラムの標準化を支援	"	"	-	-

bioSCOUT	"	独ライオン	統合化配列解析システム	サーバー: SGI、 Compaq、クラ イアント: Web ブラウザ	"	-	-
Lion Discovery Center	"	"	Bio、Cheminformatics エリアにおけるデ ータ統合化ソリューション	サーバー: SGI、 LINUX、 Compaq、 SUN、クラ イアント: NT、 Linux	"	-	-
Lion Target Engine	"	"	Bioinformatics 用、遺伝子解析、テキスト マイニング、パスウェイ解析等の研究支 援ツール	サーバー: SGI、 LINUX、 Compaq、 SUN、クラ イアント: NT、 Linux	"	-	-
Lion Lead Engine	"	"	Cheminformatics 用研究支援、解析ツ ール	サーバー: SGI、 LINUX、 Compaq、 SUN、クラ イアント: NT、 Linux	"	-	-
SRS	"	"	生物データベースマネジメントシステム	サーバー: SUN、SGI、 Compaq、 Linux、クラ イアント: Web ブラウザ	"	-	-
GlycoSuite DB	"	豪プロテオ ームシステ ムズ	糖鎖文献データベース	サーバー: Linux、SGI、 SUN、 Compaq、クラ イアント: Web ブラウザ	"	-	-
Genomatix Suite	"	独 Genomatix	Genomatix 社トータルソリューションパツ ケージ	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
PromoterInspect or	"	CTC ラボラ トリーシステ ムズ	哺乳類のプロモータ予測ソフト	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
MatInspector	"	"	転写因子サイト予測ソフト	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
GEMSLauncher	"	"	プロモータ領域解析パッケージ	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
EIDorado	"	"	プロモータ領域アノテーション付、遺伝子 データベース (ヒト、マウス、ラット、アラ ビド)	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
Chip2Promoter	"	"	発現解析時のプロモータ解析ツール	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
BiblioSphere	"	"	遺伝子-遺伝子間、遺伝子-転写因子 間の文献マイニングデータベース	Internet 経由 or Linux Server	"	-	-
SIMS	"	米 Scimagix	イメージデータ管理システム	サーバー: Sun、Win、 Oracle クラ イアント: web	"	-	-

ProteinMine	"	"	2次元電気泳動装置用、イメージ解析ソフト	Sun、Win	"	-	-
arrayTAG	"	独ライオン	高品質な Microarray 作成用 cDNA クローン	-	"	-	-
arrayBASE	"	"	arrayTAG の情報	Web ブラウザー	"	-	-
ProteinAtlas	"	英 Confirmant	ヒト疾患タンパクの機能同定データベース+遺伝子情報データベース	サーバー: Linux、SGI、SUN、Compaq、クライアント: Web ブラウザー	"	-	-
SRS Objects	"	"	SRS と様々なツールを統合するインターフェース	SGI、Compaq、SUN、Linux	"	-	-
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	"	"	-	-
ProteomIQ、BioinformatIQ	"	豪プロテオームシステムズ	プロテオーム研究時の LIMS ソリューション	AIX	"	-	-
DIP	"	米プロテインパスウェイ	タンパク-タンパク相互作用データベース	"	"	-	-
FGENE シリーズ	"	米ソフトベリ-	遺伝子領域予測ツール	UNIX	"	-	-
Renaissance Software	"	米シミックステクノロジーズ	コンビケムの技術を用いて材料開発を支援するソフトウェア	WindowsNT、Oracle	"	2001年1月	-
Discovery Tools™ Polyolefins Systems	"	"	ハイスループットでポリマー重合用触媒の開発を行う装置	WindowsNT、Oracle (ソフトに関して)	"	-	-
Discovery Tools Heterogeneous Catalysis Systems	"	"	ハイスループットで固体触媒の開発を行う装置。1次及び2次スクリーニング装置が含まれている	"	"	-	-
Discovery Tools Polymer Properties Systems	"	"	ポリマー自体の特性評価を微量サンプルからハイスループットで行うことが可能	"	"	-	-
Discovery Tools Pre-Formulations Systems	"	"	医薬品候補化合物の物性評価時における塩及び結晶多形のスクリーニングを行うシステム	"	"	-	-
コラボレーション (マテリアルサイエンス)	"	"	合成用触媒、重合用触媒、化粧品原料、顔料などの受託研究や共同開発を行う	-	"	-	-
コラボレーション (ファーマシューティカル)	"	"	塩、結晶多形のスクリーニングやプロセス研究などの分野において、受託研究や共同開発を行う	-	"	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Space Finder	ダイキン工業	ダイキン工業	Web ブラウザーから分子モデリング、及び Gaussian、MOPAC への計算起動と計算結果の可視化	Windows、LinuxPC、SGI、Compaq、SUN、HP、IBM	別途問い合わせ	2001年3月	-

ComputerChemistryFarm	"	"	Gaussian,Amber,Accelrysソフト等の計算最適化、付加分散、計算スケジューリングシステム	Windows、LinuxPC、SGI、Compaq、SUN、HP、IBM	"	2002年12月	—
DiscoveryStudio	"	米アクセルリス	ライフサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。DiscoveryStudioの各種モジュールを組み合わせることで目的にあわせた高度なシミュレーションが可能	GUI: Windows、計算: Windows、IBM、Linux	"	2002年11月	—
MaterialsStudio	"	"	マテリアルサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。MaterialsStudioの各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	GUI: Windows、計算: WindowsHP、Linux	"	2000年9月	—
Insight II	"	"	ライフサイエンス向け統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。Insight II 配下の各種モジュールを組み合わせることで目的にあわせた高度なシミュレーションが可能	SGI	"	—	—
Cerius2	"	"	統合分子モデリング、シミュレーションパッケージ。Cerius2の各種モジュールを組み合わせることで、有機、無機に関わらず、様々なシミュレーションが可能	"	"	—	—
QUANTA	"	"	蛋白質 X 線構造解析、フィッティングソフトウェア	"	"	—	—
MOPAC2002、WinMOPAC	"	富士通	高分子向けに DistanceCutoff 法を用いた局在化分子軌道計算プログラム、Windows 版 MOPAC	Windows 他	"	1999年4月	—
PDFAMS	"	インシリコサイエンス	タンパク質ホモロジーモデリングソフトウェア	RedHatLinux IRIX	"	2003年6月	—
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 7.0	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、Macintosh (Classic)	2万3千円～8万4千円、1万5千円～4万8千円(アカデミック)	2002年7月	国内1,900本
Merck Index, 13th CD-ROM	"	米ケンブリッジソフト	10300 j 化合物の識別情報、商標名、CAS 番号、物性、毒性、構造式、薬学的作用、処方、特許情報などを集めた化学者必携の書籍の CD-ROM データベース	Windows3.1、95、98、Me、NT4.0、2000、Xp	8万7千円(一般)、3万8千円(アカデミック)	2001年9月	弊社扱い50本
Visual Cloning 3	"	加レダソフト	Web 環境から取り込んだシーケンスからラベル付けされたマップを作成。制限解析および読み取り枠検索も実行。	Windows 98、Me、2000、XP	19万2千円(一般)、9万6千円(アカデミック)	2003年7月	世界290本(国内3本)
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CrossFire BEILSTEIN	富士通九州システムエンジニアリング	独 MDL インフォメーションシステムズ	1771 年からの 850 万件の化合物情報およびその物性、1000 万件の反応情報を統合した有機化学データベースシステム。1980 年以降の論文タイトルと要旨を追加収録。さらに Pharmacological、Ecological データとして薬理、生物、活性、毒性等のデータを収録	サーバー: IBM RS/6000、WindowsNT、クライアント: WindowsNT、95、98、Me、2000、PowerMac	別途問い合わせ	1999年11月	—
CrossFire GMELIN	"	"	GMELIN ハンドブックを電子化した無機、有機、金属化学分野のデータベースシステム	"	"	1996年7月	—

CrossFire Direct	"	"	MDL GmbH 社の CrossFire サーバーにインターネット経由でアクセスできるサービス	"	"	1996年10月	—
SPRESI	"	独インフォケム	ロシア 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。400万件の有機化合物・有機金属化合物情報、300万件の反応情報を含み、汎用 Web ブラウザで検索が可能	Windows95/98、Mac	民間13万円、教育機関6万5千円：マルチユーザーライセンス(10パスワード)、プレミアムユーザーライセンス(25")あり	2000年7月	—
LiqCryst 4.1	"	独 LCI パブリッシャー	液晶化合物の8.2万件、文献3.8万件以上を収録した液晶データベースとその検索ソフトウェア	Windows95、98、ME、NT4.0、2000	民間160万円、教育55万円(年間サポート含む)	1995年6月	—
WinMASPHYC コンサルティングパック	"	富士通九州システムエンジニアリング	分子動力学教育ソフト。富士通製分子動力学ソフト WinMASPHYC Pro を題材に、分子動力学を使って研究を行なう際に必要となる、種々のノウハウやテクニックを、Web ベースの GUI で体験的に学習する製品。学生実験・教育設備として教育機関用にパック商品あり	Windows95/98/Me、NT/2000	民間10万円、教育機関5万円(教育用パック商品10パック:35万円、20パック:60万円、50パック:137万5千円)	2001年4月	—
GeneDiscovery 1.1	"	"	遺伝子/タンパク質データベースに対してホモロジー検索、モチーフ検索を行い、新規遺伝子等にアノテーションを行うためのシステム。アミノ酸シーケンスよりそのタンパク質の機能予測を行う機能も新規に搭載	サーバー: Linux、クライアント: Web ブラウザー	パッケージ価格450万円、システム運用費50万円	2001年11月	—
ChemNavi	"	"	Web ブラウザー上で、薬品の購入から廃棄までを管理するシステム。天秤による液量の管理が可能。スタンドアロン、クライアント-サーバーでの運用が可能	サーバー: WindowsNT、クライアント: Windows95以降	基本システム:100万円)、追加クライアントライセンス:20万~(民間)、10万~(教育機関)、その他オプションやカスタマイズは別途問い合わせ	2001年4月	—
LaimNavi	"	"	DNA チップなどの実験データを、大規模データベースを利用して管理するシステム。データベースの操作はすべて Web ブラウザから行うことができる。ユーザーの実験内容に応じてカスタマイズが可能	サーバー: Windows2000、Solaris、クライアント: Web ブラウザー	基本システム:500万円~	2002年1月	—
(仮称) MedScreen	"	"	MedScreen は、従来から行ってきた薬理活性主体の In Silico 解析と同時に、ADME-Tox を同時に評価するための「インテグレートド高速/仮想インシリコスクリーニング」システム。薬理活性とともに、薬物動態や毒性に関する吸収、代謝予測、毒性予測等の問題を同時に評価することで、大量の化合物ライブラリから、ヒット化合物としての確率を上げるための母集団の絞り込み、さらにリード化合物の最適化へのアプローチを強力に支援する	サーバー: Windows2000、クライアント: Internet Explorer5.5以降	1,000万円~	2003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

薬師 - Xsi	富士総合研究所	富士総合研究所	三次元配座生成のXsi-Conf、三次元構造活性相関解析を行うXsi-SDQSAR、たん白質とのドッキングシミュレーションを行うXsi-Dock、ウェブユーザーインターフェースのXsi-Web、JavaベースのユーザーインターフェースであるXsi-WS、XML専用化学データベース管理システムのXsi-DB、ホモロジーモデリングツールのXsi-Homologyから構成される。Xsi-DB用のデータコンテンツとして医薬とペプチド、コンビナトリアルケミストリーのデータが用意されている	Linux	-	2003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
WinMOPAC 3.5	富士通	富士通	パソコン版分子軌道計算ソフト。MOPAC2002とMOS-F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	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	25万円(企業)、15万円(教育機関)	2001年3月	-
WinMOPAC 3.5 Pro	"	"	高分子対応パソコン版分子軌道計算ソフト。MOPAC2002とMOS-F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	"	60万円(企業)、30万円(教育機関)	2001年3月	-
MOPAC2002 ver.1.5	"	"	巨大分子系の分子軌道を高速計算。たん白質、核酸、高分子材料等の電子構造もスピーディに解析。MOS-Fも添付	VPP、SGI、COMPAQ、HP、IBM等	80万円～(企業)、40万円～(教育機関)	2003年8月	-
ChemFrontier V1.0	"	"	化学構造式/反応式作画ソフト。フリーハンド作画、自動整形機能、3D変換機能など多彩な機能装備。WinMOPACの入力データ作成支援	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	5万円(企業)、2万5千円(教育機関)、1万3,800円(学生)	99年3月	-
ChemLib	"	"	分子情報を取り扱う(座標整形、3D化など)Fortranで開発されたライブラリ群。C++やFortranからライブラリを利用し、独自のモデリングプログラムを開発する事が可能	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP、Sファミリ(Sun)、SGI	600万円	2000年1月	-
BioFrontier/P450	"	"	P450の代謝反応(構造)を収めたDBと代謝物予測機能を持ち合わせた薬物代謝研究支援システム。データは年3回更新	Windows2000/NT/XP	システム300万円、データ200万円(年間)	2002年12月	-
AIPHOS/KOSP	"	"	事実反応データの構造特徴を収めた知識ベースを用いて前駆体を推定する合成経路設計支援システム	Windows2000/XP	200万円～	2004年1月(予定)	-
ChemDraw Ultra/Pro/Std	"	米ケンブリッジソフト	世界標準の化学構造式/反応式作画ソフトウェアで、構造式・反応式・反応機構等を簡単に作画可能	Windows98/NT4.0/2000/Me/XP、MacOS	12万円～(企業)、5万1千円～(教育機関)	95年1月	-
Chem3D 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	"	24万1千円～(企業)、10万1千円～(教育機関)	95年1月	-
E-Notebook Ultra	"	"	合成実験ノートの記録をパソコンで簡単に管理できるソフト。部分構造、反応変換、プロジェクト名などによるデータ検索が可能	Windows98/NT4.0/2000/Me/XP	24万1千円～(企業)、10万1千円～(教育機関)	2002年3月	-
The Merck Index	"	"	化学の百科事典「The Merck Index 13th Edition」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	Windows98/NT4.0/2000/Me/XP	12万円～(企業)、5万1千円～(教育機関)	2002年3月	-

ChemACX Ultra	"	"	海外大手試薬販売会社約 330 社の 50 万件を超える化合物のカタログ情報データベース	Windows98/NT4.0/2000/Me/XP	24 万 1 千円～(企業)、10 万 1 千円～(教育機関)	2003 年 8 月	—
ChemINDEX Ultra	"	"	一般的な化合物について、構造式、名称、分子量、CAS 番号、別名、および物性データ(融点、沸点、蒸気圧など)に関する一般情報を調べるための化学参考文献データベース	Windows98/NT4.0/2000/Me/XP	6 万 7 千円～(企業)、4 万 4 千円～(教育機関)	2003 年 8 月	—
ChemOffice Ultra/Pro	"	"	ChemDraw Ultra、Chem3D Pro、ChemFinder Pro、化学データベースのバンドル製品	Windows98/NT4.0/2000/Me/XP	41 万 5 千円～(企業)、25 万 8 千円～(教育機関)	95 年 1 月	—
ChemOffice WebServer	"	"	Web 対応の化学情報管理システム。化学構造情報や反応情報を容易に DB 構築でき、ブラウザから簡単に検索することが可能。各種業務アプリのオプションあり	WindowsNTサーバー 4.0、Windows2000サーバー	300 万円～(企業)、200 万円～(教育機関)	99 年 1 月	—
Materials Explorer (WinMASPHYC シリーズ)	"	富士通	Materials Explorer は、パソコンで世界初の本格的分子動力学システム WinMASPHYC の後継アプリ。有機物だけでなく金属、無機物の計算も行うことが可能。二次解析機能も充実。C/S 連携で Linux を含む UNIX-OS 並列ソルバとも連携可	Windows2000, XP	Ultra : 240 万円(教育機関 90 万円)、Master : 120 万円(教育機関 60 万円)、Pro : 60 万円(同 30 万円)、Std : 10 万円(同 5 万円)	03 年 12 月(予定)	—
CAChe ワークシステム	"	"	三次元(立体)分子計算モデリングシステム。三次元分子モデルの入力/編集およびMOPAC、ZINDO、拡張MM2およびMM3等の計算ができ、反応性の予測、遷移状態探索、QSARへの応用等幅広く使用できる	PowerMac シリーズ、Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	60 万円～	91 年 4 月	—
パーソナル CAChe	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、拡張MM2 および MM3 / 拡張ヒュッケル計算、計算結果の視覚化(立体視)ができる。計算化学の入門編	"	20 万円～	"	—
CAChe サテライト	"	"	三次元分子モデルの入力/編集、計算結果の視覚化ができる。計算はネットワーク上の CAChe グループサーバー上で実行できる。CAChe ProjectLeader を装備	"	25 万円～	"	—
Quantum CAChe	"	"	CAChe ワークシステムの ProjectLeader 以外のすべてのソフトウェアが使用可能。MOPAC、ZINDO、拡張 MM2/MM3 等の計算ができる	"	40 万円～	97 年 4 月	—
配座探索 CAChe	"	"	安定な分子の配座構造を自動探索するための様々な機能を装備。精度の高い計算手法(DFT、ab initio)の初期配座の発生に使用できる	"	35 万円～	2000 年 11 月	—
Ab initio CAChe	"	"	分子力場法、分子動力学法、半経験的分子軌道法さらに密度汎関数法までをパッケージした精度の高い計算ができる	WindowsNT4.0/2000、XP	60 万円～	2000 年 11 月	—
CAChe Worksystem Pro	"	"	分子力場法、分子動力学法、半経験的分子軌道法および密度汎関数法までをパッケージし、さらに QSAR、QSPR の解析に応用できる	"	80 万円～	2000 年 11 月	—
CONFLEX	"	"	配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の澤先生、後藤先生により開発)、拡張 MM と組み合わせて使用(オプション)	PowerMac シリーズ、Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	15 万円～	99 年 9 月	—

CAChe グループサーバー	"	"	各 CAChe システムの計算サーバーとして、UNIX ワークステーション上で拡張 MM2 および MM3、MD、MOPAC、ZINDO、Dgauss 等が実行できる	IBM RS/6000、SGI ワークステーション	100 万円～	92 年 4 月	—
DGauss サーバー	"	"	各 CAChe システムの計算サーバーとして、UNIX ワークステーション上で DFT 密度汎関数法が実行できる	"	40 万円～	98 年 4 月	—
CONFLEX サーバー	"	"	各 CAChe システムの計算サーバーとして、UNIX ワークステーション上で配座空間探索プログラム(豊橋技術科学大学の 大澤先生、後藤先生により開発)が実行できる	"	25 万円～	"	—
CAChe Project Leader	"	"	計算値と実験値等とのキャリブレーションを CAChe システム上で自動化できる。QSAR、QSPR の解析に最適。スプレッドシート形式で入力操作も簡単に行える。複数分子の自動連続計算の可能	PowerMac シリーズ、Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	—	94 年 1 月	—
Bio CAChe	"	"	たんぱく質構造を簡易的に解析する為の計算化学ツール。分子力学計算による構造最適化や配座構造の自動探索が行える	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	30 万円～	2003 年 5 月	—
BioMed CAChe	"	"	医薬分野に役立つ計算手法をそろえた計算化学ソリューション。安定な分子の配座構造を自動探索するための様々な機能を装備し、さらに QSAR、QSPR の解析に応用できる	"	70 万円～	2003 年 5 月	—
BioMed CAChe ActiveSite	"	"	医薬分野に役立つ計算手法をそろえた計算化学ソリューション。たんぱく質分子に対して分子軌道法計算が実行できるだけでなく、活性部位とリガンドの親和性のスコアリングやドッキングスタディが可能	"	100 万円～	2003 年 9 月	—
CAChe LocalSCF	"	"	たんぱく質向け超高速半経験的な分子軌道計算プログラム。新アルゴリズムにて、少ないメモリでかつ超高速な計算を可能にした	"	250 万円～	2003 年 11 月	—
CAChe MASPHYC	"	"	BioMedCAChe シリーズのオプション機能。BioMedCAChe GUI から分子力学計算が実行可能となる。AMBER パラメタ使用	"	45 万円～	2003 年 7 月 予定	—
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う。また、構造式から NMR シフトを予測することもできる。ChemDraw や ISIS との連携モジュールも用意されている	Windows98/NT/2000/XP	78 万 4,000 円～	2002 年 3 月	—
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されている	Windows98/NT/2000/XP	30 万 4,000 円～	2002 年 3 月	—
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	Windows98/NT/2000/XP	78 万 4,000 円～	2002 年 3 月	—
ACD / Name	"	"	化学構造式から化学名を生成する。ChemDraw や ISIS との連携モジュールも用意されている	Windows98/NT/2000/XP	78 万 4,000 円～	2002 年 3 月	—

Xminer	"	富士通	遺伝子・たん白質関連性探索支援システム。LocusLink、UniGeneをベースに独自に作製した遺伝子辞書から遺伝子間の関連性をマイニングするソフト。パスウェイ解析は2004年春サポート予定	Windows2000/XP	45万円～	2003年8月	—
ADMEWORKS	"	富士通九州システムエンジニアリング	予測モデル式を用いて薬物動態/毒性/物性の良好な化合物を絞り込むWebシステム	サーバー: Windows2000/XP、クライアント: Windows2000/XP、Internet Explorer5.5以降	1,000万円～	2003年9月	—
ADMEWORKS/ModelBuilder	"	富士通九州システムエンジニアリング	多変量解析及びパターン認識による化学データ解析支援システム。ADMEWORKSで使用するモデル式を利用者の化合物データを使って作成	Windows2000/XP	500万円～	2004年3月	—
Tsar	"	米アクセルリス	データ処理(表作成)、統計処理、表示機能がすべて一つのシステムでできる構造活性相関プログラム。HanschとLeoの置換基データベース内蔵。ニューラルネットワーク分析や毒性予測も可能	SGIワークステーション、WindowsNT/2000、XP	—	92年7月	—
Tsar3D	"	"	TSARに以下のプログラムを追加、VAMP(半経験的分子軌道計算)、ASP(静電性、疎水性、立体性について、分子の類似性を定量化する)、Corina(二次元構造のファイルから三次元構造の座標を発生させる)	"	"	92年7月	—
TOPKAT	"	"	化合物毒性予測プログラム。分子構造式からデータベースをもとにQSTR手法により毒性値を予測する。発がん性、催奇形性、Ames、RatOralLD50等14種類の毒性予測モジュールで構成	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	"	"	—
DIVA	"	"	大量データのトレンド解析プログラム。15万件以上の数のライブラリーを入力して、データのトレンドを見つけることを容易にする。トレンド解析、リード探索に様々な表示および解析ツールが用意されている	Windows98、NT4.0/2000、Me、XP	62万円	98年10月	—
RS3 Discovery	"	"	Oracleに高性能の化学構造式検索ルーチンを組み込んだOracleベースのクライアント/サーバ型化学情報管理システム	WindowsNT4.0、Sファミリ(Sun)	800万円より	96年1月	—
RS3 HTS	"	"	RS3 Discoveryをベースに開発されたHTS(HighThroughput Screening)データ管理システム。HTS業務を効果的に支援	"	1,000万円より	96年10月	—
RS3 IAB	"	"	RS3をベースに構築されたDBをブラウザからアクセス可能にする開発支援ツール	"	450万円	2001年4月	—
KDE(Kensington Discovery Edition)	"	英インフォセンス	遺伝子発現解析・疾患関連遺伝子探索・創薬マーカ遺伝子探索研向けデータ統計・マイニングツール。2次元/3次元グラフ表示。Oracleなど標準RDBをサポート	Windows2000/XP	30万円(月額)～	2003年7月	—
LISH mouse2000	"	セレスター・レキシコ・サイエンシズ社	正常マウスRNA in situ hybridization 遺伝子発現データベース。8臓器(肺、精巣、小腸、大腸、膵臓、腎臓(皮質)、腎臓(髄質)、肝臓)×2000遺伝子の発現画像+アノテーション	Mac OSX、Windows2000/XP、Linux2.4、Solaris8	60万円(月額)～	2003年10月	—
Hi-perBLASTシステム構築サービス	"	富士通	NCBI-BLASTをPCクラスタ上で高速処理を実現する機能の構築サービス。NCBIのオリジナルの検索結果と互換があると同時に、使用するCPU数相当もしくはそれを超える性能向上が期待出来る(32CPU Pcクラスタで、1CPU時の約60倍の高速処理の実績)	RedHatLinux	10万円/CPU～(8CPU以上)	2003年6月	—

相同性解析装置	''	''	高性能 PC クラスタ PRIMERGY に高速並列相同性検索ソフト「Hi-per BLAST」をシステムとして一体化したパッケージ製品。相同性検索機能の他、装置用に加工した DB データを自動ダウンロードする機能や検索結果のフィルタリング機能、ビューア向けデータへの変換機能を提供	RedHatLinux	390 万円 (8CPU モデル)~	2003 年 11 月	-
公共バイオデータベース自動更新システム構築サービス	''	''	世界中の Web サイトから公開されている公共バイオデータベースの Release/New データのダウンロード及び更新を実現。利用者は Web から更新状況が確認出来ると共に、管理者による諸設定も Web を介して簡単に実施可能	RedHatLinux Solaris8	100 万円~ (個別見積り)	2003 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
GENETYX-MAC (Ver.12)	ゼネティックス	ゼネティックス	Macintosh 版遺伝子解析ソフトウェア。マルチアライメント、分子進化系統樹作成、機能モチーフ検索、核酸配列自動結合など	Macintosh (OS X 対応)	お問い合わせ下さい	91 年 12 月	-
バイオインターネット拡張キット	''	''	電子メールホモロジー検索支援/プライベートデータベース構築	MAC OS7.5.1 以上	''	96 年 8 月	-
GENETYX-PDB (Ver.5)	''	''	プライベートデータベースソフトウェア構築した DB に対して BLAST、FAST ホモロジーサーチや高速キーワードサーチ、NCBI BLAST、Entrez サーチも可	Windows/Mac OS X + JAVA2	''	2000 年 5 月	-
GENETYX Ver. 7	''	''	Windows 版遺伝子解析ソフトウェア。マルチアライメント、分子進化系統樹作成、機能モチーフ検索核酸配列自動結合など	WindowsXP/Me/98、2000/NT4.0	''	96 年 4 月	-
ATGC (Ver.4)	''	''	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	''	''	98 年 10 月	-
G-PROF (Ver.2)	''	''	大量の DNA 断片のクラスター解析ソフトウェア	WindowsXP/Me/98、2000/NT4.0、Macintosh	''	2001 年 12 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	WIN のみ	''	2003 年 4 月	-
GENETYX-PDB ネットワーク版	''	''	プライベートデータベースソフトウェアのネットワーク版、1、3、5、10ライセンスセット	WIN のみ、MAC のみ、WIN、MAC 混在	''	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: SUN/Linux、クライアント: Macintosh/Windows	''	94 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	''	''	94 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	''	''	99 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	SUN	''	91 年 5 月	-

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
DNASIS Pro	宝酒造、エヌピーキャノン、DNAチップ研究所	日立ソフトウェアエンジニアリング	パソコンの初心者でもすぐに使える分かり易いインターフェイスと、データベース検索機能や制限酵素サイト探索機能などの豊富な機能を兼ね備え、15年間多くのユーザに親しまれ、世界中で1万本以上の販売実績を持つ。SNP解析支援機能等の新たな解析機能を追加。以下、各種オプション有。(1)ホモロジー検索(2)マルチプルアラインメント(3)DNASpace(4)Phred/Phrap(5)DBexpressII(6)GeneBrightIII	Windows98/Me、NT/2000/XP	30万円～	2001年11月	—
SPBIO	DNAチップ研究所	〃	バイオチップ作成装置	WindowsNT	1200万円	99年8月	—
CRBIO II e	〃	〃	バイオチップ読取装置	Windows2000	800万円	2002年4月	—
CHBIO +	〃	〃	バイオチップハイブリダイゼーション反応用恒温槽	Windows98	70万円	2000年1月	—
HyperGeneシリーズ	〃	〃	汎用DNAチップ。Human,Human HouseKeeping Gene,Rat -Liver-,Yeast chip有	—	—	2002年3月	—
DNASIS Array Database	〃	〃	バイオチップ情報処理ソフトウェア	WindowsNT	500万円	99年12月	—
FMBIO III	日立ソフトウェアエンジニアリング	〃	蛍光パイオイメージアナライザー。蛍光物質で標識されたDNAやたん白質を直接読み取り、解析を行うシステム	Windows2000	—	2002年3月	—
DNASIS GeneSolution	〃	〃	バイオラボラトリーソリューションサービス。研究機関ネットワーク構築、カスタマーサポートなど、遺伝子実験施設向けシステムのサポート	—	—	2002年6月	—
Luminex システム	〃	ルミネックス	蛍光マイクロビーズアレイシステム。それぞれ異なる色に着色された100種類のポリスチレン製微粒子を使用し、1本のマイクロチューブ内で最大100件の解析を同時に行うシステム。Luminex 100,Luminex XYP,Luminex SDのセット	Windows98	980万円	2000年10月	—
Multiplex Antibody Kits	〃	パイオソース	Luminex 用サイトカインアッセイキット。ヒト、マウス各種有	—	—	2001年9月	—
MasterPlex QT	〃	ミライバイオ	Luminex 専用定量解析ソフトウェア	Windows98/Me、NT/2000/XP	—	2002年3月	—
Human GENOMESpace	〃	日立ソフトウェアエンジニアリング	ヒトゲノム情報閲覧・検索ソフトウェア。膨大なヒトゲノム情報を、ユーザの下で容易に閲覧・検索可能	Windows98以降	30万円、15万円(アカデミック)	2000年4月	—
SEQUENCHER	〃	米ジーンコード	DNAシーケンスアセンブルソフトウェア。各社のDNAオートシーケンサに対応	Macintosh、Windows98等	57万円(Mac版)、75万円(Win版)	95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
BioSearcher	日本ヒューレット・パッカー	日本ヒューレット・パッカー	独自に開発した MitakeSearch を全文検索エンジンとして用い、大量のゲノムDBの高速な検索を可能にした完全 64bit 対応ソフトウェア	サーバー: Alpha、Tru64UNIX V5.1以上	480万円から(アカデミック向け価格設定あり)	2001年1月	—
BioFinder	〃	〃	ブラウザからBLASTのパラメータを簡単に設定・起動し、その結果を配列毎のアラインメントとして見られるだけでなく、直感的な画像として見る事が可能なビューアー	サーバー: Alpha、Tru64UNIX V5.0a以上	無償	2000年12月	—

BioCollector	''	''	インターネット上のバイオデータを自動的にローカルサイトに取得、更新するソフトウェア	AlphaServer/Tru64UNIX5.1a以上、またはProliant/Redhat7.2以上(マルチCPUを推奨)	98万円から(アカデミック向け価格設定あり)	2002年6月	長浜バイオ大学、独立行政法人製品評価技術基盤機構他
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ATOMS	ヒューリンクス	米シェイブ	分子、高分子、結晶を含むあらゆるタイプの原子構造を3Dで描画する。日本語マニュアル付	Windows、Macintosh	75,000円	-	-
AssayZap	''	米バイオソフト	Assazyから生成されたデータの分析および蓄積を自動化するソフトウェア	''	86,000円	-	-
Atlantis 2000	''	米シングマソフト	グラフ機能と計算機能を兼ね備えたプレゼンテーションツール。2D/3Dのグラフ作成など	Windows	35,500円	-	-
CalculationCenter2 日本語版	''	米ウルフラムリサーチ	強力な演算機能と簡単で直感的なユーザインターフェースを結び付けた演算ソフトウェアで、技術的な問題に素早い回答を求めるプロフェッショナルに最適のツール	Windows、Macintosh	49,000円	-	-
CalcuSyn	''	米バイオソフト	治療薬の組み合わせや投薬量など投薬治療にとって非常に重要な解析を行う	Windows	86,000円	-	-
CART	''	米サルフォードシステム	この2進木解析ソフトを使用すれば、経験的な分類と予測を統計モデルにした分類や予測が簡単にできる	Windows、UNIX、Linux	要問合せ	-	-
Crystal Kit	''	米トータルレゾリューション	粒子間の結合関係や接触面、軸等を設定すれば、非常に短時間であらゆる結晶体の構造を作成できるソフト	Macintosh	396,000円	-	-
CS Chem3D Ultra	''	米ケンブリッジソフト	高品質な分子表面グラフィックや高度な計算を行うパッケージ。Gaussianとの統合により、半経験的な特性のモデリングも可能	Windows、Macintosh	要問合せ	-	-
CS ChemDraw Ultra/Pro/Std	''	''	化学構造式描画ソフト。構造式の描画以外にも研究者が必要とする、NMRスペクトルの予測、複数のドキュメントの作成、立体化学式表示、Name=Struct機能、ポリマー描画などの機能が搭載されている	''	''	-	-
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 ChemOffice Ultra/Pro	''	''	化学者のニーズを満たす ChemDraw、Chem3D、E-Notebookを統合した製品。描画した構造式の3D変換やDBの作成、Webへの発行を行える	Windows、Macintosh	''	-	-
CS ChemOffice WebServer	''	''	化学構造式を含むデータベースを構築するためのアプリケーション。クライアントは、webブラウザから、ChemDrawのプラグインにより、部分構造検索等の検索が行える他、Additional Serverにより、webブラウザからデータベースの管理も可能に	Windows	''	-	-
The Merck Index	''	''	電子版メルクインデックス	-	''	-	-
EnzPack	''	米バイオソフト	Wilkinsonの非直線回帰によってデータを解析し、酵素の計算と解析を行うソフト	Windows	45,000円	-	-

FlexPro6.0 日本語版	"	独ヴァイサン アンドカンパ ニー	大規模データ解析・ビジュアルソフト 。計測機器で測定した大規模データを解 析し、データ収集からプレゼンまでを一 連の流れとしてこなす	"	9万円から		
Gaussian 03 & 03W & 03M	"	米ガウシアン	広範囲にわたるモデリングおよび半経験 的モデルをサポートした汎用量子化学計 算プログラム。CS Chem3Dが描画クラ イアントになる	Windows、 UNIX、 Linux、 MacOSX	要問合せ	—	—
GaussView 3.0	"	"	Gaussian 計算結果の視覚化ツール	Windows、 UNIX、 Linux、 MacOSX	"	—	—
Gene Construction Kit 2.5	"	米テキストコ	複雑なクローニング プロジェクトを立案し 、遂行するソフトウェア	Windows、 Macintosh	385,000 円	—	—
Gene Inspector	"	"	研究者用電子ノートブック、配列解析パ ッケージおよびイラストレーション ツール を兼ね備えるソフトウェア	Macintosh	480,000 円	—	—
IGOR Pro 4.0 日 本語版	"	米ウエーブメ トリックス	高速にインタラクティブに大量データを解 析し、視覚化する究極の解析ツール	Windows、 Macintosh	16 万円	—	—
KaleidaGraph 日 本語版	"	米シナジー	シンプルなグラフの作成から回帰曲線や エラーバーを適用するような複雑なグラ フの作成まで、非常に簡単な操作で実行 できるグラフ作成ソフト	"	46,000 円	—	—
KELL	"	米バイオソフ ト	加重非直線回帰、反復回帰を用い飽和 、拮抗の平衡を解析あるいは、結合や非 結合の定数率を決定する放射線配位子 の結合解析パッケージ	Windows	11 万円	—	—
Linda	"	米サイエンテ ィフィックコン ピューティン グアソシエイ ツ	パラレル計算プログラミングツール	UNIX、 Linux、 MacOSX	要問合せ		
Mac Tempas	"	米トータルレ ゾリューション	マルチスライス計算、回折パターン、任 意の方向に対するセルユニットの自動計 算他の機能を搭載する TEM イメージシ ミュレーションソフト	Macintosh	88 万円	—	—
Mathematica 5.0 日本語版	"	米ウルフラム リサーチ	あらゆる分野で使用できる汎用の数学 処理ソフトウェア。電気、機械、化学、金 融・証券等のパッケージあり	Windows、 Macintosh、 UNIX、Linux	Windows / Macintosh : 45 万円、 UNIX / Linux- 英語 版: 要問い 合わせ	—	—
webMathematica	"	"	web サイト上で科学技術計算ができるソ フト※1年間のサイトライセンス契約の価 格	"	要問合せ		
gridMathematica	"	"	複数の CPU を使用した並列処理計算が できるソフト	"	"		
NameIt	"	米トリニティ ソフトウェア	IUPAC 命名法に基づいて体系的に構築 される学名のネーミングを行うソフト	Windows	36,000 円	—	—
NeuroSim	"	米バイオソフ ト	神経生理学の分野の研究に非常に有益 な洞察を提供できるシミュレーションソフ ト	"	78,000 円	—	—
Paradise		米サイエンテ ィフィックコン ピューティン グアソシエイ ツ	パラレル計算プログラミングツール	UNIX、 Linux、 MacOSX	要問合せ		
PeakAlyze	"	米バイオソフ ト	スペクトログラフ、クロマトグラフのデー タ、ピークデータをパワフルに解析	Windows	86,000 円	—	—
Peak Fit	"	米シスタット	分光器やクロマトグラフィーのデータを解 析するために使用するソフト	"	13 万円	—	—

QuantiScan	"	米バイオソフト	スキャナーで読み込んだ画像を元に、ゲル解析、TCLプレート解析、オートラジオグラム解析	"	11万円	—	—
SHAPE	"	米シェイプソフト	結晶の表面組織や結晶断面を描画する。多くの単結晶、双晶を描画できる。日本語マニュアル付	Windows、Macintosh	35,000円	—	—
SigmaPlot 8	"	米エスピーエスエス	科学者、エンジニア必携の技術データ解析&グラフ作成ソフト。日本語PDFマニュアル付	Windows	128,000円	—	—
SigmaPlot Enzyme Kinetics Module	"	"	酵素及び蛋白質に関するデータを素早く分析し、詳しくレポートする回帰分析、グラフ作成用のマクロパッケージ	"	88,000円	—	—
SigmaScan Pro	"	"	特殊な認識機能を用いて、デジタルのイメージ画像を高速かつ正確に測定、解析する	"	246,000円	—	—
SigmaStat 3	"	"	データの取扱いから実行すべきテストの推奨、仮説検証、適切なテストの実行と結果の解釈まで	"	11万円	—	—
Stat-100	"	米バイオソフト	記述統計、パラメトリック&ノンパラメトリック検定、グラフ作成、画像およびデータ変換を行う総合統計解析パッケージ	"	45,000円	—	—
Stat-200	"	"	記述統計、パラメトリック&ノンパラメトリック検定、グラフ作成、画像およびデータ変換を行う総合統計解析パッケージ	"	86,000円	—	—
SynTree	"	米トリニティソフトウェア	複雑な合成を探求する独自のツール。データベースから可能性のある全ての先駆物質を表示	Windows、Macintosh	44,000円	—	—
SYSTAT10.2	"	米 SYSTAT	探索的なデータ解析が行える科学者、研究者、エンジニア必携の統計解析ソフト	Windows	28万円	—	—
TableCurve 2D	"	"	1つの製品でパワフルな計算機能と回帰分析機能を合せ持つソフト	"	11万円	—	—
TableCurve 3D	"	"	パワフルな計算機能と回帰分析機能を合せ持つソフト。3Dのグラフィカルなプロットの作成が可能	"	11万円	—	—
TurboWorx システム	"	米ターボワークス	複数のコンピューターリソースを活用した並列処理を実現するための、ワークフロー制御を行う開発・実行環境	Windows、UNIX、Linux、MacOSX	要問合せ	—	—
TurboBLAST	"	米ターボワークス	異機種混在環境でBLASTを並列実行する	Windows、UNIX、Linux、MacOSX	要問合せ	—	—
UnGraph	"	米バイオソフト	スキャナーで読み込んだグラフを解析し、XY座標のデータを任意の精度で認識する	"	86,000円	—	—
UNISTAT	"	米ユニスタット	ノンパラ検定、回帰、分散、クラスタ、判別、因子分析、時系列、QC、生存分析、フーリエ解析など様々な解析を備えた統計解析ソフト	"	195,000円	—	—
VIBRATZ	"	米シェイプソフト	原子価力定数や Urey-Bradley 力場定数を利用して、分子や結晶の基準座標計算をする	Windows、Macintosh	75,000円	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績

GREEN	医薬分子設計研究所	医薬分子設計研究所	対話的ドッキングシステム。結合部位環境の表示、リアルタイムの相互作用エネルギー計算、リガンド構造モデリングなどの機能を搭載	SGI	500万円	1995年4月	約20本
LEGEND	"	"	de novo リガンド設計プログラム。蛋白質結合部位に適合するリガンド分子を、乱数と力場に基づき自動生成	SGI、Linux	700万円	1995年4月	約10本
MOLEDIT	"	"	分子モデリングプログラム	SGI	200万円	1995年4月	約10本
Key3D	"	"	化学構造式からの三次元構造生成プログラム。MMFF力場に基づく高精度な構造生成と高い変換率が特徴。ライブラリデータの連続処理も可能	SGI、Linux	600万円	1999年12月	約5本
KeyMolnet	"	"	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)	3,500万円(同時利用5ユーザーの年間利用料、更新・保守含む)	2003年4月	約5本
KeyRecep	"	"	分子重ね合わせ法に基づくHTSヒット化合物の解析システム。分子形状・水素結合性・疎水性等に基づく高精度な分子重ね合わせが可能。化合物分類・構造活性相関解析・データベース検索などの機能も搭載	SGI、Linux	1,500万円から(予定価格)	2003年後半を予定	—
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
JAGUAR	インフォコム(旧: 帝人システムテクノロジー)	米シミュレーティング	Pseudospectral アルゴリズムにより高い精度と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	SGI、IBM、HP、Compaq Digital UNIX、PC-Linux、SUN	お問い合わせ下さい	96年	—
pKa Predictor	"	"	JAGUAR 拡張モジュール。Ab-initio 法により非経験的に pKa を算出	"	"	99年	—
MacroModel	"	"	Prof. Stillらにより開発された分子設計支援システム。有機・生体分子に最適化された力場パラメータと強力な計算・解析機能	"	"	99年	—
MINTA	"	"	MacroModel 拡張モジュール。高速かつ高精度に自由エネルギーを算出	"	"	99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、イオン化モデル自動発生機能も搭載。	"	"	2003年	—
FirstDiscovery: Impact	"	"	FirstDiscovery モジュール: 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	SGI、PC-Linux	"	2001年	—
FirstDiscovery: Glide	"	"	FirstDiscovery モジュール: リガンド-レセプターサイトドッキング計算モジュール	"	"	2001年	—
FirstDiscovery: Liaison	"	"	FirstDiscovery モジュール: リガンド-レセプターサイトドッキング計算モジュール	"	"	2001年	—
FirstDiscovery: Qsite	"	"	FirstDiscovery モジュール: JAGUAR と OPLS-AA 力場による QM/MM プログラム	"	"	2001年	—
Prime	"	"	蛋白質立体構造予プログラム。強力なリファインメント機能によりループ構造や側鎖の配座を高精度予測	"	"	2003年	—

QikProp	"	"	薬物物性予測ソフトウェア。3次元構造式から Caco-2 Cell permeability, Blood-Brain barrier permeability, 溶解度、LogPなどを予測する	Windows95/98/NT/2000、SGI、IBM、HP、Compaq Digital UNIX、PC-Linux、SUN	"	2000年	—
ADME Boxes	"	カナダ・ファルマアルゴリズム	ADME Boxes は、手間の掛かるデータ分析と入念に作り上げたエキスパートモデルに基づいて“生体に関わる物性”を評価するソフトウェア。入力した2次元構造から各モジュールの評価結果表示のほか、文献データとリファレンスを伴ったトレーニングセットから最も類似した構造を5つまで即座に表示する。評価物性種は Physico-chemical properties、Aqueous Solubility、Human Intestinal Permeation、Acute Toxicity、Ionization、P-gp substrate specificity	WindowsNT/2000、XP	"	2003年5月	—
DMSO Solubility	"	"	DMSO 溶解度予測プログラム	WindowsNT/2000	"	2003年5月	—
QSAR Builder	"	"	QSAR Builder は、明白に定義されたルール(規則)に基づく決まりごととユーザが開発したフラグメンテーション・シーケンス(Fragmentation sequences)を利用して、物性や活性の解析にフラグメンタル手法(Fragmetal methods)を適用させることができる。フラグメンタル手法は、特定のリガンド/ファーマコフォー相互作用、あるいは生物活性と関係する同属シリーズを研究する場合の、より小さなデータセットに対しても有効に利用することができる	WindowsNT/2000	"	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)及び構造物性相関(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	—
GastroPlus	"	米シミュレーションプラス	薬物経口投与時の各消化管部位での吸収や挙動を予測。pHによる吸収の変化や投与薬物製剤の物性も考慮でき、コントロールリリースを含む製剤研究にも応用可能	Windows95/98、NT/2000、XP	"	98年	—
GastroPlus:Optimization Module	"	"	GastroPlus のシミュレーション結果を実験値に最適化します。コントロールリリースプロファイルや製剤パラメータを調整することで目標とする血中濃度変化データを得るための製剤情報を求めることが可能	"	"	2000年	—
GastroPlus:Metabolism and Transporter Module	"	"	薬物代謝やトランスポータを加味した吸収や挙動を予測する	"	"	2001年	—
GastroPlus:PKPlus Module	"	"	静脈注射血中濃度変化データから、3-コンパートメントモデルまでの薬物動態パラメータを求めることができる	"	"	2001年	—
GastroPlus:IV-IV Correlation Module	"	"	in vitro の溶解実験データと、GastroPlus で解析した in vivo のリリースや溶解を比較する	"	"	2001年	—
GastroPlus:PDPlus module	"	"	Pharmacodynamics 用解析モジュール	"	"	2002年	—
QMPRPlus	"	"	化学構造(2D/3D)から膜透過係数(ヒトとラット)、LogP、溶解度、拡散係数、BBB 透過係数、タンパク結合、Volume Distributionを予測	"	"	98年	—

QMPRPlus:MDC K Module	"	"	QMPRPlus オプション: MDCK 膜透過率を予測	"	"	2001 年	—
QMPRPlus: 4D Data Mining	"	"	QMPRPlus オプション: 3 次元プロットにてデータ解析します。	"	"	2003 年	—
QMPRchitect	"	"	実測データに基づくニューラルネットワーク予測モデルの自動構築	"	"	2003 年	—
SKIN-CAD	"	イーハイブ・コミュニケーション	経皮吸収予測ソフトウェア	"	"	2000 年	—
Debra 5	"	英ラボロジック	FDA 21 CFR Part 11 に準拠した ADME 試験用情報管理システム	Windows95、98、Me、NT4.0、2000、XP		2003 年	
Pallas pKalc	"	ハンガリー・コンピュータラッグ	分子構造から Hammett と Taft の計算式により pKa 値を予測	Windows95/98、NT/2000	"	99 年	—
Pallas PrologP	"	"	分子構造から Rekker フラグメント法、Broto 原子アプローチ法、Ghose 法の 3 つの方法を組み合わせるにより LogP 値を予測	"	"	"	—
Pallas Combi	"	"	Pallas Combi は pKalc、PrologP、PrologD の 3 つの構成。ProLogD は PKalc、ProLogP により計算された pKa と LogP から LogD を予測	"	"	"	—
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	"	"	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	—
AntiBase	"	"	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	Windows95/98、NT	"	—	—
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	"	"	—	—
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	"	"	—	—
PEAKS	"	カナダ・バイオインフォマティックスソリューションズ	Mass スペクトルデータから未知のタンパク質配列を決定する de-Novo シーケンス解析ソフトウェア	Windows2000、XP	"	2003 年 5 月	—

Pattern Hunter	"	"	高速・高感度の相同性検索ソフトウェア	Windows2000、XP、UNIX 全機種(詳細はお問合せ下さい。)	"	2003年5月	—
GeneData	"	スイス・ジーンデータ	ゲノムからプロテオームまでトータルにサポートする、大量/ハイスループット処理対応のシステム。RDB 環境をもち、トータルでのゲノム/プロテオーム データの管理が可能	サーバー: Unix-OS、クライアント: 全機種 (Java サポート)	"	2000年	—
GeneData : Phylosopher	"	"	比較ゲノム解析システム: 完全長ゲノム情報をもとに、ターゲットタンパク質の絞り込み、未知領域の機能予測が可能。パスウェイ解析、発現データとの連携など、各種の解析機能をもつ	"	"	2000年	—
GeneData : Expressionist	"	"	遺伝子発現データ解析システム: マイクロアレイ、DNA チップ、フィルターなどの各種発現データを規格化した上で、各種統計手法による統一的な解析が可能	"	"	2000年	—
GeneData : Impressionist	"	"	タンパク質発現データ解析システム: 2次元電気泳動のデータの解析。各種統計手法をもつ	"	"	2000年	—
GeneData : Screener	"	"	化合物スクリーニングデータ解析システム	"	"	2003年	—
BioNumerics	"	ベルギー・アプライドマス	バイオインフォマティクス統合システム: 電気泳動、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、マトリクスデータ、酵素/代謝反応実験のプロファイリングなど、各種実験データ入力。階層的/非階層的クラスタリング、多変量解析などの各種統計手法。RDB 対応	Windows NT 以降	"	2000年	—
2D Expert	"	"	2次元電気泳動解析プログラム(近日リリース予定)	"	"	2003年	—
GelComparII	"	"	一次元電気泳動データ解析システム:	"	"	2000年	—
GeneMaths	"	"	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	"	"	"	—
KODON	"	"	核酸配列解析システム:	"	"	2002年	—
Geneseq	"	英ダウエント	全世界の公開特許、登録特許中の核酸、たん白質の配列を独自にコレクションしたDB	PC: 全シリーズ、サーバー: 全シリーズ	"	1995年	—
Geneseq FASTAlert	"	"	全世界の公開特許、登録特許中の核酸、たん白質の配列を独自にコレクションしたDBの速報版	"	"	2000年	—
Lasergene	"	米 DNA スタ—	多機能遺伝子配列解析ソフトウェア	Windows95/98/NT、Macintosh	"	97年2月	—
SWISS-PROT	"	スイス・ジーンバイオ	アミノ酸配列データベース	—	"	—	—
OmniViz	"	米オムニビズ	可視化によるデータマイニング、テキストマイニング、統合型意思決定支援システム	WindowsNT/2000、SUN、PC-Linux	"	2003年5月	—
PathwayAssist	"	米アリアドネジェノミクス	パスウェイ情報可視化・描画ツール	Windows2000、XP	"	2003年2月	—
MedScan	"	"	MEDLINE からタンパク質機能・パスウェイ情報など抽出する自然言語処理プログラム	"	"	"	—

GIBOX	''	国立遺伝学研究所、インフォコム株式会社による共同研究開発	微生物比較ゲノム解析システム:国立遺伝学研究所との共同研究開発システム GIB (Genome Information Broker) のインハウス版。自分のデータも簡単に取り込み、公開ゲノムデータとともに比較ゲノム解析が可能	PC-Linux	''	37926	—
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
NM-SPEC2 (SpecMan, NMR-SAMS)	日本電子	米スペクトラムリサーチ	NMR のスペクトルから平面構造を解析する作業を補助するソフトウェア。1D、2D のスペクトルを読み込みピーク検出を行う SpecMan と、ピークテーブルから部分構造を作り、この組み合わせで全体構造を提起する NMR-SAMS との組み合わせで使う	Windows98/NT4 / 2000/XP	300万円	2000年6月	—
ALICE2 for Windows	''	日本電子データム	NMR データ処理 (1,2 次元対応) プログラム。自動処理機能が充実し、簡単に NMR チャートを得ることができる。処理結果を他のアプリケーションの引渡し、レポート作成や統計解析が容易。新たに J couple、2D correlation 等の解析機能が追加された	Windows98/Me / NT4.0/2000/XP	詳細はお問い合わせ下さい	94年	—
KnowItAll NMR (ノウ・イット・オールエヌエムアール) アナリティカルシステム	日本電子データム	米バイオ・ラッドラボラトリーズ	サドラーの保有する NMR スペクトルデータ 13C を 350,000 件、1H を 18,000 件を検索することができるデータベースは年間契約。ユーザーデータベース構築機能もオプションでつけられる	Windows98/Me / NT4/2000/XP	初期価格 176 万円 (1 年ライセンス付 次年度 DB80 万円)	2001年	—
CAChe ワークシステム	''	富士通	三次元 (立体) 分子計算モデリングシステム。三次元分子モデルの入力 / 編集 および MOPAC、ZINDO、拡張 MM2 および MM3 等の計算ができ、反応性の予測、遷移状態探索、QSAR への応用等幅広く使用できる	PowerMac シリーズ、Windows98/NT / 2000/XP	210 万円	93年4月	—
パーソナル CAChe	''	''	三次元分子モデルの入力 / 編集、拡張 MM2 および MM3 / 拡張ヒュッケル計算、計算結果の視覚化 (立体視) ができる。計算化学の入門編	''	70 万円	93年4月	—
Quantum CAChe	''	''	CAChe ワークシステムの ProjectLeader 以外のすべてのソフトウェアが使用可能。MOPAC、ZINDO、拡張 MM2/MM3 等の計算ができる	''	140 万円	93年4月	—
CONFLEX	''	''	配座空間探索プログラム (豊橋技術科学大学の 大澤先生、後藤先生により開発)、拡張 MM と組み合わせて使用 (オプション)	''	50 万円	99年	—
CAChe Project Leader	''	''	計算値と実験値等とのキャリブレーションを CAChe システム上で自動化できる。QSAR、QSPR の解析に最適。スプレッドシート形式で入力操作も簡単に行える。複数分子の自動連続計算の可能	''	CAChe ワークシステムに含む	94年	—
ACD/1D-NMR	''	加アドバンスドケミストリデベロップメント	1D-NMR のデータを加工し、ケミカルシフトの予測をする。化学構造式と関連させてデータベース化を行い、構造式から NMR シフトを予測できるプログラム。ChemDraw や ISIS との連携モジュールも用意されている。Aldrich NMR スペクトルデータ付き、13C、1H 各々 15,000 件	Windows98/NT/2000/XP	340 万円 ~	2003年	
ACD/2D-NMR	''	加アドバンスドケミストリデベロップメント	2D-NMR スペクトルの処理、2D スペクトルの予測。ACD/NMR-1D に追加のオプション	Windows98/NT/2000/XP	170 万円 ~	2003年	

GRAMS32/V6	"	米ギヤラクテ ィック	主に、IR、UV、RAMANなどのスペクトルデータを対象とし、豊富なパラメータを持って、波形分離を特長とする各種スペクトル処理が出来ます。主要メーカーのスペクトルおよびテキスト形式のものデータ変換が可能	Windows98/N T4 /2000/XP	25 万円～	95 年	—
MS-DXNQNT (DioK)	日本電子	日本電子	高分解能 SIM 法で測定されたダイオキシンなどの異性体を含むクロマトグラムデータから定量演算を行なう	Windows98/N T4 /2000/XP	お問い合わせ ください	1998 年 6 月	—
MS-MSEQ	"	CIGB (キュー ーバ)	アミノ酸一次構造解析支援プログラム	Windows98/N T4 /2000/XP	お問い合わせ せ下さい	1997 年 9 月	—
MS-MSEQ/PSD	"	"	蛋白質同定支援プログラム	Windows98/N T4 /2000/XP	お問い合わせ せ下さい	2000 年 3 月	—
MS-DECONV	"	日本電子	ESI モードで測定された多価イオンマススペクトルに対してデコンボリューション演算を行ない、親イオンのプロファイルを求め、その質量を推定する	Windows98/N T4 /2000/XP	お問い合わせ せ下さい	2001 年 3 月	—
MS-46030W7	"	Palisade	第7版 マススペクトルライブラリーデータベース (Wiley's Registry of Mass Spectral Database) と検索ソフト	Windows98/N T4 /2000/XP	お問い合わせ せ下さい	2002 年 3 月	—
MS-46030W7N	"	"	第7版 NIST 付きマススペクトルライブラリーデータベース (Wiley's Registry of Mass Spectral Database with NIST) と検索ソフト	Windows98/N T4 /2000/XP	お問い合わせ せ下さい	2002 年 3 月	—
商品名	国内販売会 社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
J-OCTA	日本総合研 究所	日本総合研 究所	マイクロ～メソ～マクロ領域での高分子材料設計、マイクロプロセス設計に関わる統合シミュレーション環境で、ナノ複合材料設計、燃料電池設計、コーティング解析、バイオMEMS設計などに応用可	Windows2000 / XP、 Pentium3- 700MHz 以上 、メモリ 256MB 以上、 HD1.5GB 以上、 OpenGL に対応したド ライバソフト、 グラフィックカ ードが必要	800 万円 (標 準構成)	2003 年 4 月	15 システ ム
商品名	国内販売会 社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
CNMR Predictor	エルエイシ テムズ	加 ACD	¹³ CNMR スペクトルの予測。170 万件の化学シフト値を基にスペクトルを予測。MDL 社 ISIS/Base、ISIS/Draw と連携可能	Windows	104 万円	—	—
HNMR Predictor	"	"	¹ HNMR スペクトルの予測。120 万件の化学シフトと 32 万件の結合定数からスペクトルを予測。ISIS から利用可能	"	104 万円	—	—
LogP DB	"	"	中性分子のオクタノール / 水の分配係数 (LogP 値) 予測。約 14,800 件の化合物の構造と実験 LogP 値を登録した内部データベース付属。ISIS から利用可能	"	46 万 4 千円	—	—
p Ka DB	"	"	弱酸の解離定数の予測。15,900 件の構造と 31,000 件に及ぶ実験値の内部データベースを付属。ISIS から利用可能	"	110 万 4 千 円	—	—
Solubility DB	"	"	溶解度の予測。約 4,400 件の実験値データベース付属	"	126 万 4 千 円	—	—
LogD Suite	"	"	部分解離状態の分子の分配係数値 (LogD) 予測。他に LogP DB、pKa DB が付属。ISIS から利用可能	"	158 万 4 千 円	—	—

LogD Sol Suite	"	"	LogD Suite に溶解度計算機能が付属。他に LogP DB、pKa DB、Solubility DB が付属。ISIS から利用可能	"	238 万 4 千円	-	-
Name	"	"	IUPAC ルール・CAS Index ルールに基づく分子の命名。また化合物名から構造式を表示する Name to Structure 機能を付属。ISIS から利用可能	"	78 万 4 千円	-	-
NMR Manager	"	"	NMR 実験データ処理、処理データと構造とを組み合わせたデータベースの構築機能。ほとんどの NMR データ読み込み可能	"	78 万 4 千円	-	-
MS Manager	"	"	MS 実験データ処理、処理データと構造とを組み合わせたデータベースの構築機能。LC/MS データも読み込み可能	"	120 万円	-	-
Aldrich DB for NMR Manager	"	"	NMRManager Add-on モジュール。Aldrich の FT-NMR スペクトルの電子版。構造、スペクトル、沸点など様々な条件で検索	"	42 万円	-	-
Structure Elucidator	"	"	¹³ C スペクトルから構造式の推測。CNMR Predictor、NMR Manager 等の製品が付属。 ¹³ CNMR に加え、 ¹ HNMR、IR、分子量などの情報を入れると推測精度向上	"	792 万円	-	-
Combi NMR	"	"	コンビナトリアル NMR の結果の自動判定。HNMR、NMRManager が付属。実測 NMR データ/バッチ処理結果と予測スペクトルの比較など	"	398 万 4 千円	-	-
Nuts Pro	"	米 AcornNMR	NMR データ処理。1D および 2D のデータ処理が可能。2D データ処理を高速に行えるアレイドモード・モジュール付属。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	Windows、Macintosh	19 万円	-	-
NMRPCPS	"	米 NIH	高速多次元 NMR データ処理および解析プログラム。ほぼ全てのスペクトロメータに対応	UNIX、(UNIX)、MacOSX	300 万円	-	-
PCA/HSQC	"	"	NMRPie シリーズのモジュールの一つで、滴定実験などの 2D-NMR スペクトルによる評価をサポートし、ドラッグデザインなどで効力を発揮するツール	"	100 万円	-	-
DYNAMO	"	"	シミュレーティッドアニーリング法を使い NMR データからマクロ分子や複合体の立体構造の計算が可能	"	400 万円	-	-
TURBO-FRODO	"	仏 AFMB-CNRS	分子設計支援・分子表示プログラム。多様な分子、X 線回折の電子密度マップの読み込み・表示が可能	SGI、LINUX	300 万円	-	-
MRVision	"	米エム・アール・ビジョン	MRI、CT などの医療画像解析。DICOM3 フォーマットにも対応。Diffusion、Perfusion、Functional MRI、緩和時間の解析等	SUN、LINUX (RedHat)	150 万円	-	-
MEDx	"	米センサーシステムズ	医療画像解析。ユーザーフレンドリーな SPM 解析環境を提供。3 次元化も容易に行え、多様な画像モダリティで得られる多次元データ画像処理ルーチンにより解析に最適な可視化をもたらす医療用画像処理・解析プログラム	SUN、LINUX (RedHat)、(SGI、IBM)	150 万円	-	-
Analyze	"	米 MAYO ファウンデーション	3D バイオメディカル画像表示/解析。多様な画像モダリティに対応した、多次元のバイオメディカル画像のインタラクティブな表示・マニピュレーション・測定のための総合プログラム	Windows、UNIX、LINUX	150 万円	-	-

EMSE	"	米ソースシグナルイメージング	研究者向けに開発した EEG/MEG Source Estimation、Multimodal Functional Imaging の為のソフトウェアツール	Windows	お問合せ下さい	-	-
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MDL ISIS Host	日本 MDL インフォメーションシステムズ	日本 MDL インフォメーションシステムズ	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	Windows 2000、SUN Solaris & Oracle	-	-	-
MDL Direct	"	"	Oracle Data Cartridge テクノロジーを用いた、SQL 文による化合物構造式や反応式の登録および検索可能なオープンアーキテクチャ対応製品	"	-	-	-
MDL ISIS/Base	"	"	小グループでの化合物、反応式ならびに関連データ管理を目的としたデスクトップソフト。ISIS/Host のクライアントソフトの機能も併せ持つ	"	-	-	-
MDL ISIS/Draw			化合物構造式描画ソフト。化合物、反応式の登録ならびにプレゼンテーション資料の作成に使用				
MDL Draw			新世代の化学構造式描画ツール。Java や VB のアプリケーションへの組み込みや、XML による機能のコントロールが容易				
MDL 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	"	-	-	-
MDL Cheshire	"	"	構造式からディスクリプターを得たり、構造式や反応式をビジネス・ルールに基づき修正するプログラムツール	Windows 2000/XP、SUN Solaris	-	-	-
Chemscape	"	"	Web ブラウザーから ISIS/Host を利用するための製品群。Chime、ChimePro、Chemscape Server から構成される	Windows 2000 & SUN Solaris & Oracle	-	-	-
Chime/ChimePro	"	"	Netscape Navigator、Internet Explorer などブラウザーに構造式を表示するためのプラグイン。Chime Pro は ISIS/Host の構造式検索、スペクトル表示などの機能を持つ	Windows 2000/XP、Macintosh	-	-	-
MDL Central Library	"	"	化合物ライブラリー情報を管理するためのクライアント/サーバー型システム	ISIS/Host と同環境	-	-	-
MDL Afferent	"	"	コンビナトリアルライブラリー合成の計画、プロトコル、解析など一連の作業を支援する。自動合成機器、分析機器と連動するモジュールもある。スタンドアロン版とネットワーク版がある	クライアント: Windows 2000、サーバー: Windows 2000 & Oracle	-	-	-
MDL Reagent Selector	"	"	コンビナトリアルケミストリーにおける試薬を、官能基や種々の物性値、価格などさまざまな基準を基に選択する	クライアント: Windows 2000、サーバー: ISIS/Host と同環境	-	-	-
MDL Elan	"	"	化学者のための電子ノート	クライアント: Windows NT/2000/XP、サーバー: Windows NT/2000/XP & Oracle など	-	-	-

MDL Lit Link	"	"	ファクトデータベースから電子雑誌などの全文検索 DB にアクセスする仕組みを提供する	クライアント: Windows2000/XP、サーバー: SUN Solaris、Windows2000 & Oracle など	-	-	-
MDL Assay Explorer	"	"	アッセイのプロトコル作成、データ入力・管理、結果解析を行いオラクル DB 化する統合ソフト。自由度が高く、HTS からマニュアルアッセイ、探索薬物動態までサポート	クライアント: Windows 2000/XP、サーバー: Window 2000 & Oracle	-	-	-
MDL Apex	"	"	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	クライアント: Windows 2000、サーバー: Window 2000 & Oracle	-	-	-
MDL Report Manager	"	"	Assay Explorer のアッセイデータや ISIS の化合物データ及び遺伝子発現データ等のオラクル DB にまたがる検索ができ、構造活性相関 (SAR) レポートが作成可能。Excel, Word、HTML 及び PDF フォーマットをサポート	クライアント: Windows 2000/XP	-	-	-
MDL QSAR			構造活性相関解析ソフト。PCA、クラスターリング、回帰分析、判別分析等の解析機能を持つ。遺伝的アルゴリズムなどによるモデル自動作成機能を持ち初心者が簡単に使用できる。約 400 種以上の分子記述子を持つ	Windows NT/2000/XP			
MDL Cacinogenicity module			FDA と MDL との共同開発プロジェクトにより開発された発ガン性予測モデル。このモデルは FDA 所有のげっ歯類発ガン性データを元に作成され、そのデータに加えて FDA の判別ロジックも合わせて提供される	Windows NT/2000/XP			
Pipeline Pilot	"	米 SciTegic	多機能のコンポーネントをビジュアルに組み合わせることにより、様々な化合物ファイルやデータベースの加工、選択、結合、解析等を行う	クライアント: Windows 2000/XP、サーバー: Windows 2000	-	-	-
Partek	"	米パーテック	QSAR、遺伝子など多方面の科学データについて、可視化機能を併せ持つ統計解析ソフト	クライアント: Windows 2000/XP、サーバー: SUN	-	-	-
MDL Sculpt	"	米 MDL インフォメーションシステムズ	3次元構造作成ならびにその可視化ソフト。ISIS あるいは Chemscape とリンクするほか、発表資料やレポートに最適	Windows NT/2000	-	-	-
DiscoveryGate	"	"	ファクトデータベース、電子雑誌、電子叢書まで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サービス	Windows NT/2000/XP	-	-	-
Integrated Major Reference Works	"	"	EROS、COFGGT、SOS、CAC など有機化学の電子化された概説書と MDL 反応データベースとのリンクにより有機化学の包括的な知識を DiscoveryGate 上で提供。InfoChem と Elsevier、Wiley、Springer、Thieme など 4 出版社ならびに MDL との協力	Windows NT/2000/XP	-	-	-
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、938 万化合物に対する精選された 929 万反応、および物性データを収録した信頼高いデータベース	クライアント: Windows 2000/XP、Mac (PowerPC)、サーバー: AIX4 以上、Windows2000	-	-	-

CrossFire Gmelin	"	"	無機化合物(合金、セラミックス、酸化物等)・有機金属化合物の特性・構造・合成法を収録したファクトデータベース(199万化合物、153万反応)	"	-	-	-
Cheminform RXL	"	"	FIZ Chemie 社(独)の反応情報誌 ChemInform から採録される総合的反応データベース。1946年以降の文献から105万反応以上を収録	ISIS/Hostと同環境	-	-	-
MDL Reference Library	"	"	Theilheimer や CORE など 1991 年以前に個々に収録された5つのデータベースを一つに統合した反応データベース。21万反応	"	-	-	-
MDL SPORE	"	"	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。20,000反応	"	-	-	-
DerwentJSM	"	"	Derwent の Journal of Synthetic Methods (1980年~)の電子版。79,000反応	"	-	-	-
ORGSYN	"	"	Wiley&Sons の Organic Syntheses の電子版(1921年~)。汎用的な反応(5,700)を中心に収録	"	-	-	-
MDL Metabolite	"	"	代謝物構造式や代謝経路、スキームなどの薬物代謝情報データベース。65,000の代謝反応情報を網羅。Toxicityとリンク	"	-	-	-
MDL Toxicity	"	"	医薬、農薬など化学物質の毒性データベース。RTECSをもとに構造式を加え、160,000件。創薬初期での毒性、代謝研究を支援。Metaboliteとリンク	"	-	-	-
MDL CMC	"	"	Pergamon Press 社の Comprehensive Medicinal Chemistry を元に収録した医薬治験薬化合物データベース、8500化合物	"	-	-	-
MDL MDDR	"	"	医薬開発情報誌 Prous 社 Drug Data Report を元に、約143,000以上の開発医薬品情報を収録。2D/3D構造式検索可	"	-	-	-
MDL ACD	"	"	600社(国内31社)を超える試薬化合物カタログから収録される約239,000化合物に関する2D/3D構造式、サプライヤー並びに価格などの情報を持つ	"	-	-	-
MDL SCD	"	"	スクリーニング用化合物サプライヤーのカタログ情報を集録。241万化合物	"	-	-	-
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
BLABS	三井情報開発	三井情報開発	バイオサイエンスにおける研究、解析は以前に比べ様々な分野で大規模に行われており、そのようなプロジェクトでは効率的に試料を管理し、情報を共有するシステムが必要になる。BLABSはバーコードを用いた検体の管理から、情報の管理まで行うシステム(LIMS)である	Windows2000、Redhat Linux Advanced Server、Solaris8	400万円	2000年下半期	国内10サイト
SCTS21	"	"	匿名化システム SCTS21は、平成13年に施行された三省合同の倫理指針である「ヒトゲノム・遺伝子解析研究に関する倫理指針」に準拠しており、個人情報の登録、検体の匿名化から研究側への匿名化された個人情報の受渡しまでといった、匿名化業務をサポートするパッケージソフトである	Windows2000	200万円	2001年上半期	国内20サイト

GenomicProfiler Enterprise	"	"	大量に得られる遺伝子発現プロファイルデータをデータベースで管理するパッケージ。Web インターフェースにより PCA、クラスタリング等による各種解析手法、公共データベースからの自動アノテーション収集機能を搭載した。DNA マイクロアレイ・GeneChip の両方に対応している	Windows2000、Redhat Linux Advanced Server、Solaris8	550 万円～、教育機関価格別途お問合せ	2002 年上半期	国内 5 サイト
GenomicProfiler	"	"	大量に得られる遺伝子発現プロファイルデータをデスクトップ上で解析するパッケージ。JAVA アプリケーションにより PCA、クラスタリング等による各種解析手法を搭載した。DNA マイクロアレイ・GeneChip の両方に対応している	Windows2000	100 万円～、教育機関価格別途お問合せ	2002 年上半期	国内 5 サイト
RoboSNP	"	"	主要遺伝子及び SNP データベースから関連情報を収集、管理し、着目遺伝子に関する情報を効率よく調べる事が可能なシステム。ゲノム、遺伝子、SNP のマップをグラフィカルに参照したり、PCR 増幅用のプライマーを作成することが可能である	Solaris8	500 万円～、データ更新サービス 150 万円～、教育機関価格別途お問合せ	2002 年上半期	—
VoyaGene	"	"	遺伝子発現プロファイルデータをデータベースで管理し、データ解析をするとともに遺伝子間の相互作用をシステム同定手法により明らかにするシステム。更に、結果を実験にフィードバックし、システム同定と実験とをインタラクティブに進める研究支援ツール	サーバ: Solaris8、Redhat Linux、クライアント: Redhat Linux、Windows2000/XP	550 万円～、共同研究向け特別価格別途お問合せ	2003 年上半期	—
GenomeGambler	"	"	GenomeGambler は微生物ゲノム配列解析に必要な各種解析プログラム、PhredPhrap、GeneHacker、CRITICA、Glimmer、BLAST 等を自動実行し、WEB インターフェースから結果を参照、編集でき、シーケンスデータの取り込みから配列決定、アノテーションまでをカバーする	Redhat Linux、Tru64 Unix、Solaris8	150 万円～、非営利機関価格別途お問合せ	2001 年上半期	国内 20 サイト
波平	"	"	シーケンサから出力された波形データから高精度に SNP 候補領域を同定する解析ツール。SNP の検出には独自手法を用いている。一般的によく使用されている PolyPhred の問題(擬陽性が多い、塩基の挿入と欠失にうまく対応できていない)を改良している	Solaris8、Windows2000/XP、Linux	150 万円～、教育機関価格別途お問合せ	2003 年下半期	—
XanaGenome	"	ザナジェン	最新の微生物ゲノム情報を網羅(2003 年初頭で 100 以上)し、ゲノム、遺伝子情報の閲覧と検索、比較ゲノム解析を容易に行う事ができるデータベース。ユーザー独自の配列を解析して組み込むサービスも別途提供	—	—	—	—
GCG Wisconsin Package	"	米アクセルリス	約 140 のコマンド群から成る配列解析パッケージソフトウェアである。約 20 年の歴史を持ち、世界中の研究者に愛用され続け、高い信頼性を誇っている。ウェブインターフェース SeqWeb を使用することで、UNIX ユーザでなくても簡単に解析を行ったり、プロジェクト単位でのデータ管理も可能である。オプションの SeqWeb を購入することで、Web ブラウザからの利用が可能になる	Compaq Tru64 UNIX、SGI IRIX、Sun Solaris、Red Hat Linux	300 万円(初年度使用料)、99 万円(次年度以降)、SeqWeb オプション 100 万円～、アカデミックプライス別途問い合わせ	2001 年 3 月	国内 50 サイト
SeqMerge	"	"	高速かつ強力なアセンブル機能と GUI を備えた DNA フラグメントアセンブルツール	"	176 万 4 千円～、アカデミックプライス別途問い合わせ	2000 年 6 月	—
GRAIL Pro	"	"	GCG Wisconsin Package で使用可能なゲノム配列のコード領域予測ツール	"	176 万 4 千円～、アカデミックプライス別途問い合わせ	2000 年 3 月	—

DS SeqStore	"	"	DBMSとしてOracleを使用し、膨大に増加を続ける配列及びその解析データを公共データ、プライベートデータ共に管理するデータマイニングのためのパッケージツールである	"Compaq Tru64 UNIX、SGI IRIX、Sun Solaris" "Netscape4.0以上、Internet Explorer4.0以上" "Oracle8.0x"	別途問い合わせ	2001年1月	—
DS Gene	"	"	アクセルリス社が提案する創薬プラットフォーム Discovery Studio シリーズで核酸及びアミノ酸配列解析を担うWindows用デスクトップ配列解析ソフトウェアである。その使いやすさ、表示の美しさには定評がある	Windows2000/XP	80万円～非営利機関価格別途お問い合わせ	2002年上半期	—
MacVector	"	"	Macintosh用配列解析ソフトウェアとして、今なお世界中の研究者に愛用されつづけている。十分な機能と誰にでもわかりやすい操作性に定評があり、Discovery Studio Geneの元になった	MacOS	80万円～非営利機関価格別途お問い合わせ	—	—
DS GeneAtlas	"	"	DS GeneAtlasは従来法(PSI-BLAST,HMMs等)に加えて、二次構造評価(SeqFold)および三次立体構造自動構築(HTM:High Throughput Modeling)による生化学機能予測を行なうことにより、機能予測の難しい遺伝子に対しても独自の高信頼性アノテーションを付加する解析システムである	Solaris8、Linux、IRIX	別途お問い合わせ	2003年上半期	—
DS AtlasStore	"	"	DS AtlasStoreは33生物種の公知ゲノムに対して70%～99%の遺伝子について、配列/構造/機能などの高品質アノテーション(370万アラインメント,170万3D構造)を提供し、機能の情報、3D構造情報、活性部位情報及びSCOPファミリー情報等により検索可能なプロテオミクスデータ管理システムである	サーバ: Solaris8、Redhat Linux、WindowsNT/2000、IRIXクライアント: Windows98/NT/2000/XP	別途お問い合わせ	2003年上半期	—
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	50万円、アカデミックブライズ別途問い合わせ	99年11月	国内13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	年間使用料416万7千円～、アカデミックブライズ別途問い合わせ	99年7月	国内30サイト
TRANSCOMPEL	"	"	Composite element(複合シスエレメント)に関するデータベース	"	年間使用料104万2千円～	"	国内1サイト
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	"	年間使用料666万7千円～	2001年上半期	国内5サイト

TRANSPLOERER	"	"	遺伝子制御領域の解析を行うためのデスクトップツール。脊椎動物の遺伝子に関する転写開始部位や哺乳類の遺伝子の最初のエクソンの予測、ならびに転写因子結合部位の同定のためのツールを備える。簡単に使える操作性とわかりやすい画像表示により、PC上で手軽に利用できる	WindowsNT/2000/XP、Linux	30万円～非営利機関価格別途お問い合わせ	2003年上半期	—
Phred/Phrap	"	米コドンコード	最も標準的に使用されているゲノム配列アセンブルソフトウェアのパッケージ。Phredは精度の高いベースコール結果を配列の品質情報と共に出力する。PhrapはPhredのクオリティ情報を加味し、精度の高いアセンブルを実現する	WindowsMe/2000/XP、Linux、MacOS、Tru64 UNIX、Solaris8		—	—
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、予後の良し悪しなど)から疾患や治療法に関連する原因遺伝子を自動的に絞り込み、高精度の病態推定モデルを構築する。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	WindowsNT/2000/XP	80万円～教育機関価格別途お問い合わせ	—	—
PDFAMS	"	インシリコサイエンス、SGI	既知の立体構造情報を用いてアミノ酸配列からタンパク質の立体構造を自由に予測するソフトウェア	SGI IRIX、RedHat Linux	100万円～教育機関価格別途お問い合わせ	2003年下半期	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
NanoBox (ナノボックス)	ナノシミュレーション	ナノシミュレーション	液晶、合成高分子のシミュレーションで実績のある分子材料設計用分子動力学ソフトウェア。使用メモリ少なく、大規模計算が容易。液晶では世界最高峰のソフト	Pentium4 & Alpha Linux 他 Unix 機	120万円(大学60万円)。カ場、オプション機能別売	98年4月	19本
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MolStudio	NEC	NEC	分子軌道計算プログラム Gaussianの入力データの作成(分子座標、キーワード)や計算結果の3次元的可視化が簡単に行える。また、Windows版 Gaussianおよびネットワーク接続されたUNIXサーバ上の Gaussianの実行を、マウス操作により手軽に行うことが可能。レポート掲載用の画像データの作成にも便利。Gaussian03 キーワードにも対応し、ONIOMのキーワードやレイヤ設定機能も提供している	Windows98/98SE/Me/XP、2000 Pro/NT4.0WS	9万8千円、8万円(アカデミック)	2002年7月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SemanticObjects	NECソフト	NECソフト	新製品のバイオ情報統合プラットフォーム。複数のデータベースを統合的に扱えるだけでなく、その中からルールを抽出して知識を取り出し、その知識を統合していくこともできる。また、BLASTなどの解析ツールを組み込むためのインターフェース機能も備えている	Windows、Linux	詳細問合せ	2003年4月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Finch-Suite	理経	米ジオスピザ	ゲノム情報管理のためのLIMS。生物学的情報を専門的に徹底的に管理できる。Phrap/Phred,Consed,Cross_Match,Swatなどのアルゴリズムも提供	Linux、Solaris	—	2000年	—
PatternHunter	"	加バイオインフォマティクスソリューションズ	PC上で動作する高速な相同性検索ソフトウェア。100サイト以上の導入実績有り。Smith-Watermanの感度をもちながら、3000倍の速度で計算結果を得ることが可能	Windows、Linux	—	—	—

PEAKS	"	"	ペプチドのMS/MS 実験データからデータベース検索ではなく計算でアミノ酸シーケンスを同定する先進的なソフトウェアシステム	"	-	-	-
PROSPECT	"	"	スレッド手法に基づくタンパク質の構造予測用ソフトウェア	"	-	-	-
Sentient Platform	"	米 IO インフォマティクス	IMO データストラクチャをサポートするインテリジェントなアプリケーションのためのフレーム、IOHにより統一されたビュー、分析、レポートおよび検索の GUI、1つの統合された、仮想データベースである、IOP を提供する	Windows95、98、2000、NT、XP	-	-	-
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インテグレーショングループ	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。ドラッグデザイン、コンピケム、蛋白質モデリングの機能を搭載	SGI、SUN、HP、IBN、Windows、Intel-Linux	-	1997年9月	-
Kinase ChemBioBase	"	米 Julilant Biosys	20万化合物が登録されたキナーゼ阻害剤データベースの MOE 版	SGI、SUN、HP、IBN、Windows、Intel-Linux	-	2004年1月	-
ADF	"	蘭サイエンティフィックコンピュータインテグレーションモデリング	密度汎関数法分子軌道計算プログラム	SGI、IBM、SUN、HP、COMPAQ、Intel-Linux	-	1998年11月	-
COSMOtherm	"	独コスモロジック	第一原理計算による熱力学物性推算プログラム	SGI、Intel-Linux、Windows	-	2001年9月	-
COSMO UI	"	菱化システム	COSMOtherm ユーザーインターフェース	Windows	-	2003年6月	-
Turbomole	"	"	Ab initio 法分子軌道計算プログラム 高速な密度汎関数法および COSMO 法計算機能	SGI、COMPAQ、HP、IBM、Intel-Linux	-	2001年9月	-
MedeA	"	米マテリアルズデザイン	Material Informatics/Quantum 統合型材料設計支援システム	Windows	-	1999年1月	-
Gaussian 03	"	米ガウシアン	Ab initio 法分子軌道計算プログラム	SGI、COMPAQ、HP、SUN、IBM、Intel-Linux、Windows、Mac	-	1998年10月	-
GaussView	"	"	Gaussian98 のグラフィカルユーザーインターフェース	"	-	1998年10月	-
Direct Force Field	"	米イーオンテクノロジー	力場パラメータ開発プログラム	Windows	-	2001年12月	-
CBIS	"	米ケムイノベーション	化合物情報、アッセイ情報、レポート等、化学・薬学・生物学研究におけるデータや情報を一括管理する統合情報管理システム	"	-	2002年8月	-
KDE	"	英インフォセンシス	ワークフロー管理とリソースの統合を特徴とするデータマイニングシステム	"	-	2002年8月	-
ARTHUR	"	米シンセマティクス	化学合成ルート探索システム	"	-	2003年11月	-
Colors	"	東北大学宮本研究室	高速化量子分子動力学計算プログラム	SGI、Intel-Linux	-	2002年1月	-

MOPAC2002、WinMOPAC	"	富士通	高分子向けにDistanceCutoff法を用いた局在化分子軌道計算プログラム、Windows版MOPAC	Unix、Linux、Windows	—	1999年4月	—
Carbon Analyzer	"	藤本宏之&恵子	人造黒鉛の格子定数および結晶子の大きさ測定プログラム	Windows	—	2002年5月	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特長	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
SYBYL/Base	住商エレクトロニクス	米トライボス	SYBYL基本モジュールでグラフィックス、分子動力学、エネルギー計算、QCPEとのインターフェース、モレキュラスプレッドシートが含まれる	IRIX、HP-UX、Linux	お問い合わせください	1988年5月	—
QSAR	"	"	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	"	"	"	—
HQSAR	"	"	ホログラムフィンガープリントを用いて、大量の化合物に対して構造活性相関を行う	"	"	1997年8月	—
Leapfrog	"	"	de novo design リガンドの候補構造自動発生	"	"	"	—
DISCO tech	"	"	ファーマコフォア探索プログラム	"	"	2001年12月	—
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	"	"	1988年5月	—
Recepter	"	"	高速アクティブアナログアプローチ	"	"	"	—
Biopolymer	"	"	生体高分子構築、アミノ酸辞書。ループサーチ Genetic Algorithm を用いてリガンド及び相手のたん白質の側鎖をすべてまたは部分的に動かして Flexible Ligand Docking を高速に行う	"	"	"	—
Composer	"	"	ホモロジーモデリング	"	"	"	—
MatchMaker	"	"	InverseFolding の手法によりたん白質の構造を構築する	"	"	"	—
Protoble	"	"	各残基毎に蛋白質の立体構造の妥当性を評価	"	"	"	—
CONCORD	"	"	2次元構造を高速に3次元化する	"	"	"	—
MM2 / MM3	"	"	アリンジャー教授の分子力場計算プログラム	"	"	"	—
MOLCAD	"	"	3次元分子表面特性可視化プログラム	"	"	"	—
Legion/CombiLib Maker	"	"	ヴァーチャルなコンビナトリアルライブラリー作成プログラム	"	"	"	—
Selector	"	"	ダイバーシティー評価・フィルタリング用プログラム（記述子の相対距離評価法）	"	"	"	—
Diverse Solutions	"	"	ダイバーシティー評価・フィルタリング用プログラム（記述子の絶対配置評価法）	"	"	"	—
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行える	"	"	"	—
FlexX	"	"	リガンド分子/レセプターのドッキング。リガンド分子とたん白質との相対配置を高速計算	"	"	1998年12月	—

GeneFold	"	"	立体構造未知のたん白質の FoldingPattern を高速計算。 HomologyModeling の手法と組み合わせ て 3 次元構造を決定	"	"	2001 年 12 月	—
GASP	"	"	GA を用いた自動重ね合わせツール	"	"		
ClogP/CMR	"	"	ClogP 計算プログラム	"	"		
C Score	"	"	たん白質/リガンド複合体の結合エネルギーを 4 つのスコアで計算 (G-Score 、 D-Score 、 PMF-Score 、 Chem_Score)	"	"	1999 年 12 月	—
Site ID	"	"	たん白質構造の活性ポケットを探索	"	"	"	—
Distill	"	"	分子の共通骨格を基にクラスター化、構造上の特徴を可視化しながら解析を進めることが可能	"	"	"	—
FlexS	"	"	分子重ね合わせプログラム。対象分子を一度フラグメントに分解して結合情報を元に再構築。多量の分子を高速に重ねあわせが可能	"	"	"	—
Confort	"	"	ダイバーシティの高い安定コンフォメーションを高速に発生	"	"	2000 年 12 月	—
VolSurf	"	"	ADME 関連予測 QSAR ツール	"	"	2001 年 12 月	—
CombiFlexX	"	"	コンビナトリアルライブラリー専用ドッキングツール FlexX の拡張プログラム	"	"	2001 年 12 月	—
OptDesign	"	"	Dissimilarity による試薬選択、Product、Reagent の MW、ClogP、etc による Filtering、価格などルーレット法による Biased Selection、各種機能により最適な反応 Matrix の提案を行う	"	"	2002 年 12 月	—
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	"	"	2003 年 4 月	—
hint!	"	"	logP や各種パラメータ (Hint Score) 計算や分子間相互作用フィールドの計算と表示を行います。3D-QSAR の記述子としてもお使いいただける	"	"	"	—
Molconn-Z	"	"	各種分子パラメータ計算モジュールです。数百種の記述子を計算可能各原子の電子的な状態を反映する E-State 値の計算が可能です。また、計算される記述子を用いて OptiSim TM 法による『Diversity を考慮した分子選択』にも利用することができる	"	"	"	—
ZAP	"	"	分子の electrostatic potential を計算するソフトウェアパッケージです。ZAP では electrostatic potential を用いた各種パラメータや、3D QSAR fields を計算することが可能	"	"	"	—
FUGUE	"	"	HOMSTRAD データベースを使用したタンパク質の構築のための新しいホモログ認識・アラインメント tool	"	"	2003 年 7 月	—
FlexX-Pharm	"	"	Post Process を不要にするフレキシブルドッキング FlexX の機能拡張プログラム	"	"	2003 年 7 月	—
FlexE	"	"	タンパク質の Rotamer を使い Flexibility を考慮した Docking program FlexX の拡張プログラム	"	"	2003 年 12 月	—
Desk Top プロダクト							

SARNavigator/B ase	"	米トライボス	HTS データ解析のためのケミカルスプレッドシート	PC	お問い合わせ ください	2003年7 月	-
SARNavigator/H TS	"	"	HTS データ解析のためのケミカルスプレッドシート、クラスタリング用モジュール	"	"	"	-
SARNavigator/H QSAR	"	"	HTS データ解析のためのケミカルスプレッドシート、HQSAR 解析モジュール	"	"	"	-
LeadScope	"	米リードスコ ープ	化合物ライブラリ解析・視覚化・マイニングツール	"	170万円～	2000年 10月	-
Nugensis SDMS	"	米ヌージェネ シス	実験データ、研究レポート総合管理システム。FDA 21CFR Part11に準拠	"	お問い合わせ ください	-	-
Innaphase WatsonLIMS	"	米インナフェ ーズ	ADMEに特化したLIMS	"	"	-	-
Gaussian 03/W/M	"	米ガウシアン	Ab initioの構造最適化ソルバ Gaussianの最新バージョン、蛋白質等にも適用可能に(WはWindows版MはMac版)	UNIX, Linux,Win,Mac	要問合せ +F22	-	-
Gauss View/W/M	"	"	Gaussian プリ・ポストシステム(WSデスクトップ) Gaussian 計算の入力データ作成、出力可視化、解析を行う	"	"	-	-
MolStudio	"	NEC	Gaussian プリ・ポストシステム(PCデスクトップ)リモート計算サーバーに接続してデスクトップクライアントから Gaussian 計算の入力データ作成、出力可視化、解析を行う	PC	"	-	-
CrystalMaker 簡 易日本語マニ ュアル付き	"	英クリスタル メーカー	写真並みのカラー画像で結晶構造を生成、表示、操作するプログラム。マルチウィンドウ・マルチビュー・マルチアンドウといった使いやすさに加え、高速な描画性能、かつ20,000原子に対応。結晶サイト毎に3要素までの断片的占有情報を持たせ、同梱の無償モジュール CrystalDiffract での回折パターン計算に使用可。様々な原子、結合および多面体のスタイルをカラー、グレースケール、白黒で、写真級にリアルにあるいは素朴なタッチでプロット可能	Mac、 PowerMac	11万9千円 /アカデミッ ク8万6千 円	-	-
CrystalMaker 簡 易日本語マニ ュアル付き + CrystalDiffract Pro	"	"	写真並みのカラー画像で結晶構造を生成、表示、操作するプログラム。CrystalDiffractProを使えば、制作したファイルから、エックス線および中性子粉末回折パターンを直接生成できる。格子欠陥もモデル化し、複雑な空間配置の分子さえ容易に理解できる環境を提供する	"	15万9千円 /アカデミッ ク11万4千 円	-	-
CrystalDesigner	"	諸クリスタル ・ストラクチャ ー・デザイン	Macintosh 上であらゆる結晶構造を構築、検討、視覚化するための統合型ツール。結晶構造データを CIF ファイルからインポートすることができる。データ入力も容易。230の空間群のすべてと、700を超える多様な原子、共有原子価、およびイオンの半径がプログラムに組み入れられている	"	8万4千円 /アカデミッ ク5万7千 円	-	-
Crystal Kit	"	米トータルレ ゾリューション	CrystalKit は MacTempas を補助するプログラムで、特に、欠損のある結晶構造を作成するとき有効。最終的な構造体は1つの単位セルとして定義し、ストラクチャーファイルとして書き出しその画像構成を MacTempas で解析する。PICT、PAINT、EPSの形式で保存できる。MacTempas で作成した結晶構造のデータを読み込んでモデル作成を行うことも可能	"	39万6千円	-	-

DIAMOND	''	独クリスタルインパクト	可視的な結晶構造情報システムとして機能し、結晶構造データに関する日常的な作業、主に結晶構造データの可視化を可能にする多数の機能を統合する。大量のデータ処理、分子の生成から複雑な無機構造フレームワークの構築にわたる幅広い機能を備えるDIAMONDは、界面および材料科学者だけでなく、分子および固体化学者のための唯一のツール	Win95/98/Me、WinNT/2000	19万円/アカデミック10万5千円	-	-
WAFERMAP Professional Version	''	独ボーイン	クリーン・ルーム外での計測データの分析・編集作業がパソコンベースで可能。半導体ウエハ上の正確な物理パラメータを収集・編集し、分析して可視化するためのパッケージ・ソフト。エリプソメータ、膜厚計および4点プローブのような様々な計測ツールからデータ・ファイルを読み込可。読み込後、ラインスキャン、等高線図、2D、3Dプロット、又はヒストグラム等の可視化・印刷、またデータの複雑な演算操作も可能。基本仕様として、手動計測機器でのマップ生成や、異なる自動計測機器間(同fab内で別機種種の4点プローブ等)の統合的な可視化が可能	Win95/98、WinNT/2000	31万9千円	-	-
HPLC Column Manager	''	英リマソン	LCカラムインベントリー作成、カラム予約、カラムの利用状況を表示、過去の移動相を把握・損傷、誤用防止の警告リストを作成、カラムテスト方法とパフォーマンス・リミットを保存、パフォーマンスのグラフ化、カラムとともに使用される溶出液と分析物の量を記録、カラム履歴の監査証跡を作成	Win95、WinNT	32万2千円	-	-
CLIP - Computed Lipophilicity Properties/Full Package	''	瑞ローザンヌ大	ローザンヌ大学医化学研究所で作成、開発され、以下が可能。・"親油性ポテンシャル"(MLP)の計算と提示・MLPからのn-オクタノール/水分配係数(log Poct)の計算・個々の配座に対する仮想log P値の計算と、化合物に接近可能な親油域の探索・分子と高分子周囲の所定域におけるMLPの計算と提示・MLPの計算と比較分子フィールド分析(CoMFA)への組入れが可能	UNIX	52万6千円/field only31万9千円/アカデミックは要問合せ	-	-
HYDROGEOCHEM	''	米エスエスジ	飽和-不飽和媒体における、水文学的移送と地球化学的反応の結合モデル。一過性または定常状態のNa、水成分の移送、一過性または定常状態のNs吸着性成分およびイオン交換サイトの物質収支をシミュレートするように設計されている。HYDROGEOCHEMは、移送経路に沿ってN成分種、Mx複合種、My吸着種の種分配を計算する。Mzイオン交換種、そしてMp潜在的沈殿種	DOS、UNIX	28万2千円	-	-
MOVER	''	''	地面の三相(水、油、およびガス)の有限要素モデル。現在のこの種の最も高度なモデル、MOVERを使用して水、油、およびガスのフローのモデルを作成し、飽和/不飽和層準のNAPLエンタラップメントを最小限にしてLNAPLと水の回収を最適化する	Win95/98、WinNT/2000	33万3千円	-	-
MSDS Digital Filing Cabinet Pro	''	米ケムエスダブル	MSDSのドキュメントの記憶および検索用に特に設計されたドキュメント・イメージング・アプリケーション。イメージとしてページを格納する	Win95、WinNT	24万円/アカデミック16万5千円	-	-
DESIGN-EXPERT for Windows	''	米スタット	Windows対応の実験計画(DOE)用ソフトウェアは、プロセスに影響を及ぼす致命的要因をスクリーニング・応答曲面法(RSM)のスクリーニング・応答曲面をビジュアル化。12の応答までの最大妥当性を同時に見いだす計算能力最適化機能がすばらしい	Win95/98、WinNT/2000/XP	18万2千円	-	-

GRG2	''	米ダブルティ ーアイ	制約付非線形最適化プログラム。15年 以上にわたり石油、化学、防衛、財政、 農業、プロセス制御などの分野でj豊富 な実績。LS(Large Sparse)GRG2、ソー スコード等はお問い合わせください	Windows、 UNIX	要問合せ	-	-
PrecisionTree	''	米パリセード	既存のスプレッドシートで判断ツリーと影 響図の作成を初めて実現。実績ある意 思決定解析技術を用いて最良の進路を 確認。また、スプレッドシートを意思決定 モデルに直接統合。影響図は不確実性 を含めた問題の構成要素間の関係の検 討に使用。Proは意思決定アナリストに 必要とされる最もクリティカルな機能を組 み込んで拡張されている	Win95/98、 WinNT/2000	9万5千円 ／Pro 14万 7千円	-	-
CrystalMaker 簡 易日本語マン ュアル付き	''	英クリスタル メーカー	写真並みのカラー画像で結晶構造を生 成、表示、操作するマルチウインドウ・マ ルチアンドウの結晶構造解析ソフト。高 速な描画かつ20,000原子に対応。結晶 サイト毎に3要素までの断片的占有情報 を持たせ、同梱の無償モジュール CrystalDiffract(Proは有償)での回折パ ターン計算に使用可	Mac、 PowerMac	近日価格改 訂要問合せ	-	-
CrystalMaker 簡 易日本語マン ュアル付き + CrystalDiffract Pro	''	''	CrystalMakerで制作したファイルから、 CrystalDiffract Proでエックス線および 中性子粉末回折パターンを直接生成で きる。格子欠陥もモデル化し、複雑な空 間配置の分子でも容易に理解できる環 境を提供する	''	近日価格改 訂要問合せ	-	-
CrystalDesigner	''	諾クリスタル ・ストラクチャ ーデザイン	Macintosh上であらゆる結晶構造を構築 、検討、視覚化するための統合型ツール 。結晶構造データをCIFファイルからイン ポートすることができる。データ入力も容 易。230の空間群のすべてと、700を超 える多様な原子、共有原子価、およびイ オンの半径がプログラムに組み入れられ ている	''	8万4千円 ／アカデミッ ク5万7千 円	-	-
Crystal Kit	''	米トータルレ ゾリューション	CrystalKitはMacTempasを補助するプ ログラムで、特に、欠損のある結晶構造 を作成するときに有効。最終的な構造体 は1つの単位セルとして定義し、ストラク チャーファイルとして書き出しその画像 構成をMacTempasで解析する。PICT、 PAINT、EPSの形式で保存できる。 MacTempasで作成した結晶構造のデー タを読み込んでモデル作成を行うことも可 能	''	39万6千円	-	-
DIAMOND	''	独クリスタル インパクト	可視的な結晶構造情報システムとして機 能し、結晶構造データに関する日常的な 作業、主に結晶構造データの可視化を 可能にする多数の機能を統合する。大 量のデータ処理、分子の生成から複雑 な無機構造フレームワークの構築にわ たる幅広い機能を備えるDIAMONDは、 界面および材料科学者だけでなく、分子 および固体化学者のための唯一のツ ール	Win98/Me、 WinNT/2000/ Xp	19万円／ア カデミック10 万5千円	-	-
ENDEAVOUR	''	独クリスタル インパクト	結晶構造を粉末回折データから解析す るソリューション。回折パターンの計算値 と実測値の差と系の位置エネルギーの、 統合された大域的最適化を実現。上記 DIAMONDの可視化技術に基づいており 、解析過程において完全乱配置の原子 から最終モデルへと結晶構造が発展し ていく様子を確認可能	Win98/Me、 WinNT/2000/ Xp	36万3千円 ／アカデミッ ク19万円	-	-

WAFERMAP Professional Version	〃	独ボーイン	クリーン・ルーム外での計測データ分析・編集をパソコンベースで実現。半導体ウエハ上の正確な物理パラメータを分析して可視化。データ読み込後、ラインスキャン、等高線図、2D、3Dプロット、又はヒストグラム等の可視化・印刷、またデータの複雑な演算操作も可能。基本仕様として、手動計測機器でのマップ生成や、異なる自動計測機器間(同fab内で別機種)の4点プローブ等の統合的な可視化が可能	Win98/Me、WinNT/2000/XP	31万9千円	—	—
Miner 3 D	〃	米ディメンションファイブ	Oracle,Access,Excel,ISIS等と連携し、2D & 3Dデータの可視化とデータマイニングを行うアドイン。立体空間上にさまざまな形状や豊富な表現でデータを描写しWeb上の直感的な検索アプリやリアルタイムモニタリングシステム等を3D表示で美しく再構築する	Win98/Me、WinNT/2000/XP	13万円から	—	—
HYDROGEOCHEM	〃	米エスエスジ	飽和-不飽和媒体における、水文学的移送と地球化学的反応の結合モデル。一過性または定常状態のNa、水成成分の移送、一過性または定常状態のNs吸着性成分およびイオン交換サイトの物質収支をシミュレートするように設計されている。HYDROGEOCHEMは、移送経路に沿ってN成分種、Mx複合種、My吸着種の種分配を計算する。Mzイオン交換種、そしてMp潜在的沈殿種	DOS、UNIX	28万2千円	—	—
MOVER	〃	〃	地面の三相(水、油、およびガス)の有限要素モデル。現在のこの種の最も高度なモデル、MOVERを使用して水、油、およびガスのフローのモデルを作成し、飽和/不飽和層準のNAPLエンタラップメントを最小限にしてLNAPLと水の回収を最適化する	Win98/Me、WinNT/2000/XP	33万3千円	—	—
DESIGN-EXPERT for Windows	〃	米スタット	Windows対応の実験計画(DOE)用ソフトウェアは、プロセスに影響を及ぼす致命的要因をスクリーニング・応答曲面法(RSM)のスクリーニング・応答曲面をビジュアル化。12の応答までの最大妥当性を同時に見いだす計算能力最適化機能が特長	Win98/Me、WinNT/2000/XP	18万2千円	—	—
PaulingFileBinaries	〃	独クリスタルインパクト	二元系無機物質の様々な性質を総合的に取扱うデータベースで、1900年以降に発行された550誌、21,000冊以上の文献から集めたデータを収録	UNIX/Linux Win98/Me、WinNT/2001/XP	要問合せ	—	—
MolecularConceptor	〃	以シナジクス	ゲノム創薬を含む現代創薬の理論・実践的概念、サクセスストーリー、具体的な手法等についてのべられた世界標準のコースウェア	Win98/Me、WinNT/2002/XP	要問合せ	—	—
PrecisionTree	〃	米パリセード	既存のスプレッドシートで判断ツリーと影響図の作成を初めて実現。実績ある意思決定解析技術を用いて最良の進路を確認。また、スプレッドシートを意思決定モデルに直接統合。影響図は不確実性を含めた問題の構成要素間の関係の検討に使用。Proは意思決定アナリストに必要なとされる最もクリティカルな機能を組み込んで拡張されている	Win98/Me、WinNT/2000/XP	9万5千円 / Pro 14万7千円	—	—
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
EsTerra Bio Informatics Ware	サイエンス・テクノロジー・システムズ	メディアフュージョン	テラバイト級のネイティブXMLストレージを核に、膨大なBioDataに対応する柔軟で拡張性の高いXMLインターネットシステムを構築するための、サーバ及びクライアントアプリケーション基盤ソフトウェア	Linux/Solaris	別途お問い合わせください	2003年12月予定	—

Reatop (リートツプ)	"	サイエンス・テクノロジー・システムズ	「研究・試験業務において使用する試薬の統合的な管理を実施したい」という声から生まれた試薬管理システムです。試薬受入・貸出・返却・廃棄・管理履歴・帳票出力の機能をもち、バーコード入力による業務の簡略化、電子天秤からの秤量値自動取り込み、既存 H/W 利用により低コスト導入を実現。21 CFR Part 11 にも対応可能	Windows2000 /XP	別途お問い合わせください	2003年8月	-
検体管理システム(仮)	"	サイエンス・テクノロジー・システムズ	「研究・試験業務において使用する検体(サンプル)の統合管理をしたい」という声から生まれた検体管理システムです。バーコード入力(1次元・2次元)による業務の簡略化を行い、プロジェクト管理、保管情報の管理機能付き	Windows2000 /XP	別途お問い合わせください	2004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
明日の新薬構造式データ	テクノミック	テクノミック	化学構造式可読フォーマットによる治験薬データベース	ISIS/Base など	年間38万円から	93年4月	-
明日の新薬 CD-ROM	"	"	国内外の医薬品開発情報を提供する「明日の新薬」CD-ROM 版	Windows95/NT	年間70.5万円から	99年1月	-
SCREENING ALERT DATABASE	"	田辺 R&D サービス	医薬特許から生物活性試験法を中心に新規化合物情報を提供	ACCESS、PDF ファイル	年間75万円から	98年	-
Patent fast-alert	"	カレント・ドラッグス	化学構造式可読フォーマットによる医薬品特許速報データベース	ISIS/Base など	年間120万円から	-	-
Adis R&D Insight	"	エイディス・インターナショナル	世界治験薬データベース。詳細な薬剤情報と引用文献の評価も収録	Windows95	年間120万円から	95年1月	-
IDdb	"	カレント・ドラッグス	Internet/Intranet 対応の医薬品研究開発データベース(薬剤、特許、学会、文献、ニュースを包括的に提供)	Intranet : Oracle 8、RS3、Internet	年間500万円から	93年5月	-
ACTFUND	"	武田敬一	天然物由来活性物質データベース。UV 値による検索、化学構造の表示	Windows95/NT	60万円(最終版)	92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
GENESEQ	トムソンサイエンティフィック	トムソンサイエンティフィック	世界中から集めた包括的な核酸・アミノ酸に関する特許・配列情報データベース製品	Internet Explorer 5.0 以上 または Netscape 6.0 以上 または インハウス検索システム	詳細をお問い合わせください	2002年6月	-
GENESEQ FASTAlert	"	"	毎週、遺伝子配列・特許に関するカレントアウェアネスなサービスを提供	"	"	2002年6月	-
Derwent Discovery	"	"	Derwent Drug File と Derwent World Drug Alerts Plus の二つのデータベースからなる、ウェブで検索可能な製薬および薬剤関連特許・文献情報データベース製品	Internet Explorer 5.0 以上 または Netscape 6.0 以上	"	2003年3月	-
Derwent Biotechnology Resource	"	"	特許、文献ジャーナル、学術会議レポートからまとめたバイオテクノロジー関連情報を収録	"	"	2002年6月	-
Derwent Innovations Index	"	"	特許情報データベースの Derwent World Patents Index と引用特許情報データベースの Derwent Patents Citation Index を、ISI 社の引用間リンクの技術で統合した Web ベースの特許情報データベース製品	"	"	2003年6月	-
Derwent Analytics powered by VantagePoint	"	"	特許情報データベース Derwent World Patents Index の分析・解析ツール	Windows95、98、2000、ME、WindowsNT4.0 (128MB RAM 以上)	"	2003年6月	-

Web of Nanotechnology	"	"	1963年からの35,000件の特許情報: Derwent World Patents Index (年間10,000件追加更新)や、トムソンISI社が提供する185,000件の雑誌・専門誌などの文献情報: ISI Web of Science (年間25,000件追加更新)の情報、さらに専門家が厳選したウェブサイト情報を基に構成されており、さまざまな産業にわたるナノテクノロジー先行技術情報の広範囲な検索が可能	Internet Explorer 5.0以上 または Netscape 6.0以上	"	2003年2月	-
Derwent WPI Global Intranet Solution	"	"	独立したコンサルティングにより、業界をリードするカスタマイズされたソリューションを提供するためのさまざまなTSのコンテンツ、ツールおよびサービスを統合する	Lotus Notes、Internet Explorer 5.0以上	"	2002年2月	-
Web of Science	"	"	高品質な約8,700の学術雑誌からの書誌情報を提供する。新たにIndex ChemicusとCurrent Chemical Reactionsを収録。これにより、化学構造式を利用した引用ナビゲーション検索(文献の被引用回数、引用文献をたどり研究の発展や経過を調査)が可能。検索結果のメールによるアラート、雑誌のフルテキストや外部のデータベースへのリンクの機能もある。◆Index Chemicus(新規化合物検索)-化学構造式、立体化学、生物活性情報の検索。1993年から現在までの約210万件の新規有機化合物へのアクセスを提供。◆Current Chemical Reactions(新規反応検索)-反応構造および条件の検索。1986年以降に発見された800,000以上の新規反応の検索と、さらにINPI(Institut National de la Propriete Industrielle)のアーカイブ(1840-1985年)へのアクセスを提供	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	-
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
CrossFire Beistein	ユサコ	米MDLインフォメーションシステムズ	1700年代からの有機化合物を約800万件と900万件の反応情報を収録。クライアント/サーバー方式のネットワークで稼働し、独自のインターフェースで構造検索を可能とし、物性データ、固定データ等、全650以上の検索項目を提供。更	サーバー: RS6000/WindowsNT、クライアント: Windows/Mac	詳細問い合わせ	-	-
CrossFire Gmelin	"	"	1700年代からの無機化合物、有機金属化合物を約160万件と130万件の反応情報を収録。クライアント/サーバー方式のネットワークで稼働し、独自のインターフェースで構造検索を可能とし、物性データ、固定データ等、全800以上の検索項目を提供。更新頻度は、年4回	"	詳細問い合わせ	-	-
AutoNom 2000	"	"	化学構造を入力することにより、IUPAC名を導き出すソフト。立体構造の命名も可能	Windows、Mac	詳細問い合わせ	-	-
Dictionary of Organic Compounds on CD-ROM	"	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	72万円~(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-
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	"	58万円~(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-
Dictionary of Natural Products on CD-ROM	"	"	天然物質約15万件を収録する天然物辞典。テキスト検索・化学構造検索および相互のリンク検索が可能	"	95万円~(企業向け)、他アカデミック価格あり	-	-
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	"	23万円~	-	-

The Combined Chemical Dictionary on CD-ROM	"	"	Dictionary of Organic Compounds、Dictionary of Inorganic and Organometallic Compounds、Dictionary of Natural Products、Dictionary of Drugs、Dictionary of Carbohydrates の 5 辞書中の全エンタリー、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 カ月毎に更新	"	115 万円～(企業向け)、他アカデミック価格あり	—	—
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	詳細問い合わせ	—	—
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	"	23 万円～	—	—
Index Chemicus Database for ISIS	"	米トムソン ISI	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	詳細問い合わせ	—	—
Index Chemicus on CD	"	"	上記製品の CD-ROM 版。抄録を含み、また部分構造検索が可能	Windows	詳細問い合わせ	—	—
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	Open VMS or UNIX	詳細問い合わせ	—	—
ISI Chemistry	"	"	上記製品の Web 版。反応情報のデータ件数 66 万件以上、化合物情報 98 万件以上	Windows、Mac	詳細問い合わせ	—	—
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	52 万円～	—	—
Chemistry Citation Index	"	"	科学全般の引用文献索引である SCI の化学編	Windows、Mac	詳細問い合わせ	—	—
Reaction Citation Index	"	"	CCR と SCI を結合し、化学反応の引用文献に導くもの。350 誌以上の有機化学、農芸化学、製薬学等の雑誌から重要な化学反応を厳選し、書誌情報および反応条件、立体化学、生物活性等とともに収録	Open VMS or UNIX	詳細問い合わせ	—	—
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: 20 万円～、抄録なし: 12 万円～	—	—
Current Contents on CD-ROM / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	上記製品の CD-ROM 版。毎週発行。常時 1 年間分検索	Windows	42 万円～	—	—
Current Contents Connect / Physical, Chemical & Earth Sciences	"	"	上記製品の Web 版。毎日更新	Windows、Mac	58 万円～	—	—

Synthline	"	スペイン・ブラウザサイエンス	臨床段階中の反応合成経路データベース。約 9,700 件以上の合成経路情報とこれらの約 49,000 件以上の合成中間体データ及び 6,000 件以上の医薬品データを提供 (Jun.2003)。隔月更新。CD-ROM 版及び Web 版あり	Windows98/2000/XP	52 万円～	—	—
Ensemble	"	"	前臨床段階から上市後までの過去の医薬品開発に関わった化合物に付いての開発段階情報、特許、関連文献を収録。毎月更新。DVD-ROM 版及び Web 版あり	"	117 万円～	—	—
MFLine	"	"	実験薬理の情報を文献としてではなく、発表されたデータを収録しているデータベース。隔月更新。CD-ROM 版のみ	"	66 万円～	—	—
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	38 万円～	—	—
R&D Backgrounders	"	"	病気から、関連医薬品、学会情報、関連文献などをレポート。同じ作用機序を持つ医薬品についての開発状況などをレポート。Internet 版にてリリース。各レポート毎に契約可能	"	詳細問い合わせ	—	—
Integrity	"	"	医薬品開発についてのポータルサイト、過去から最新まで 16 万以上の化合物を収録。化合物を中心に、特許、文献、関連データなどの関連情報を簡単に利用可能。データは毎日更新	"	詳細問い合わせ	—	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
Spartan '04 for Windows (Full Edition)	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	シンプルな操作画面が特長の分子モデリングパッケージソフトウェア。MM、Ab Initio、Semi-Empirical、DFT などの各種エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。事前に構造最適化された低分子データベース (SMD) を標準装備	Windows 2000/XP を推奨	大学 19.8 万円、定価 55 万円。詳細要問い合わせ (授業用価格は応相談)	2003 年 10 月	—
Spartan '04 for Windows (Essential 版)	"	"	"Spartan'04 Full Edition" から DFT や励起状態の計算ソルバーを省略した機能限定版。教育システムに最適。事前に構造最適化された低分子データベース (SMD) を標準装備	Windows 2000/XP を推奨	大学 13 万 5000 円、定価 32 万円。詳細要問い合わせ (授業用価格は応相談)	2003 年 10 月	—
Spartan Student Edition for Windows	"	"	Spartan'04 の機能を省略した学生バージョン	Windows 2000/XP を推奨	大学 10 本パッケージ 32 万円: 学生個人用 12,000 円: 共同購入価格あり	2003 年 10 月サンプル販売開始	—
SpartanView for Windows	"	"	Spartan のデータブラウザ。教科書やデータ集とのバンドルが可能	Windows 98/NT/Me/2000/XP	応相談 (単品販売は不可)	1998 年	—
Spartan '02 for Macintosh (Full Edition)	"	"	シンプルな操作画面が特長の分子モデリングパッケージソフトウェア。MM、Ab Initio、Semi-Empirical、DFT などの各種エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。B3LYP、LMP2、MP3、MP4 や G2、G3、CIS、CIS(D) など導入	MacOS X 10.2 以上	大学 19.8 万円、定価 50 万円。詳細要問い合わせ (授業用価格は応相談)	2003 年 11 月	—
Spartan '02 for Windows (Essential 版)	"	"	"Spartan'02 Full Edition" から DFT や励起状態の計算ソルバーを省略した機能限定版。教育システムに最適	MacOS X 10.2 以上	大学 12 万 8000 円、定価 25 万円。詳細要問い合わせ (授業用価格は応相談)	2003 年 11 月	—

Spartan '02 for Unix/Linux	"	"	シンプルな操作画面が特長の分子モデリングパッケージソフトウェア。MM、Ab Initio、Semi-Empirical、DFTなどの各種エンジンによって、構造最適化、配座解析、反応座標解析が可能。B3LYP、LMP2、MP3、MP4 や G2、G3、CIS、CIS(D) など導入	SGI IRIX 6.5、Compaq Tru64 Unix V.5、Red Hat 6.2 以上	Unix 大学向け40万円、Linux 大学向け28万円。詳細要お問い合わせ	2002年1月 (Unix)、2001年8月 (Linux)	—
ODYSSEY Student Edition for Windows	"	"	分子動力学法を使用した教育用パッケージソフト。インターフェイスを Internet Explorer に表示する	Windows 2000/XP を推奨	価格未定	2004年	—
商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	動作環境	ソフト価格	出荷年月	販売実績
XanaGenome	ザナジェン	ザナジェン	微生物ゲノムの統合データベース。公的なデータベースではアノテーションの基準がそれぞれ異なるが、XanaGenome では統一した基準で再アノテーションを実施。使いやすいインタフェースに加え、ゲノム比較、遺伝子翻訳効率予測、自己組織化地図による分類などの独自の機能を備えている。また、プライベートなゲノムデータを追加して閲覧・比較解析を行うことも可能	インターネット経由でのアクセス、あるいは専用サーバ機との組み合わせ	年間100万円～(アカデミックディスカウントあり)	2002年2月	国内外の約20の機関で使用
XanaMine	"	"	非常に強力なデータマイニングアルゴリズムである SOM(自己組織化地図法)を改良し、ゲノム解析に応用したシステム。ザナジェンで独自に作成した、あるいは解析を受託して作成したデータ(マップ)とそのビューフを合わせて販売。更に解析プログラム自身も単体で販売	データのビューフは JDK1.1 以上のバージョンの JAVA 実行環境で動作	解析プログラム 30万円、ビューフ 20万円、マップ 30万円～	2002年1月	国内数箇所の研究機関にて評価利用中
GenomeGambler	"	海洋科学技術センター、三井情報開発、ザナジェン	微生物の全ゲノム配列決定プロジェクトを支援するシステム。ベースコール、アセンブル、ORF抽出、ホモロジーサーチ、アノテーション、DDBJ登録といった一連のデータ処理を自動化	SUN Solaris2.6 (UltraSPARCII CPU) 以上、あるいは Tru64-UNIX 4.0G(Alpha 21264 CPU) 以上のワークステーション。PC クラスタによる高速化にも対応	150万円	1999年12月	国内外の約20の機関で使用
Phred/Phrap/Consed	"	米コドンコード	米国 University of Washington で開発された、ショットガンシーケンシングに必要なベースコール、アセンブラ、コンティグエディタのソフトウェア。世界中の数多くの研究機関で利用されており、非常に高い精度で配列決定を行うことができる	SUN、Compaq、Linux ワークステーション、Windows-PC、Macintosh(詳細はお問合せください)	112万円 (Phred、Cross_match、RepeatMasker、Phrap のサイトライセンスの場合)	—	全世界で1000サイト以上

