



ChemAxon日本総代理店

Patcore



ChemAxon

CBI学会2017 年大会

ランチョンセミナー 10月3日 12:00~ 4F 401

構造変換アイデア提示システム CRAIS TRANSFORMER Ver.2

MMP解析等の社内ナレッジを簡単に活用し
合成展開における課題を解決

- ・社内知識・過去の経験などを有効活用する仕組が欲しい
- ・若手ケミストの育成、経験不足を補完したい
- ・課題解決の行きづまりを突破したい



驚異的超高速類似構造検索 MadFast Similarity Search

億単位の化合物を瞬時に検索！

- ・インメモリを利用した高速類似検索用エンジン
- ・非類似分布ヒストグラムを生成
- ・CLI, Web UI, REST API, JAVA APIにて提供



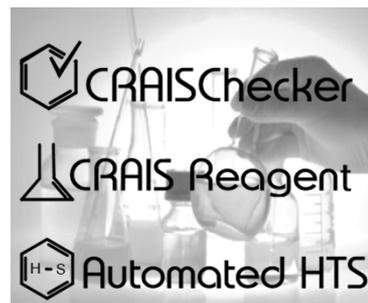
パトコア株式会社 <https://patcore.com>

東京都千代田区丸の内1-7-12サピアタワー26F Tel.03-6256-0331 e-mail. info@patcore.com

注目のソリューション

化学物質コンプライアンス対応ソリューション

- 今日様々な法規制等により、化学物質の適正な取り扱いが求められています。
- CRAIS Checkerが化学物質管理の要である化合物の法規制確認をより高精度且つ効率的に実現します。オプションで海外法令をサポートします。
 - 試薬管理システムCRAIS Checkerは生物系試薬やキット品を含むあらゆる試薬について、購入から廃棄まで、各種規制や社内規則に沿って適正な管理が行えるよう様々な機能を提供します。
 - CROの利用など化合物の輸出入の機会は増大していますが、Automated HTSを用いると厄介な有機化学品のHSコードが瞬時に特定できます。



Post ISISソリューション

最新のICT環境の恩恵を受けながらも、使い慣れたISISの使用感を継承してスムーズに次世代システムに移行出来ます。

- JChem Oracle Cartridgeに共有データを移行
- Instant JChem及びPlexus Connectでデータを検索・参照
- PatRegiにより化合物登録系を再構築。電子実験ノートからの登録や法規制チェックに対応。
- Instant JChemでローカルデータベースの運用が可能
- アッセイデータ登録など、Plexusシリーズの豊富な周辺機能が利用できます



驚異的超高速類似構造検索

MadFastは、メモリ内データストレージと最適化されたマルチスレッド実装により、超高速類似構造検索を実現した最新の検索テクノロジーです。優れた検索性能により、億単位の化合物のリアルタイム検索を実現します。迅速なデータ読込とフィンガープリント生成により、短時間で検索の準備が完了します。これにより、大量の化合物群同士を短時間で比較し、類似性空間の最適化を可能にします。MadFastは、コマンドライン、REST API、Web UIなどの多彩なインターフェースを介して利用可能です。



MadFast Similarity Search

ナレッジに基づく構造転換アイデアの提示

MMP (Matched molecular pair) 解析により活性や物性改善の為の構造転換ナレッジが急速に蓄積されていますが、研究組織内でそれらを活用することは容易ではありません。Transformerは永年蓄積されてきた生物学的等価体の知見やMMP解析によって得られた構造変換のナレッジに基づき、現在取り組んでいるリード構造の活性や物性改善の為の構造変換アイデアを自動的に提示します。



Transformer

システム内製化支援ツール&カスタム開発

“ビジネスのデジタル化”の時代にはソフトウェアが競争力の源泉となります。この為、既成のアプリケーションでは不十分で、システムの内製化やカスタム開発が必須となります。ChemAxonでは化学情報を利用する様々なシステムが効率的に開発できる優れたソフトウェア部品を提供しています。また、パトコアではこれまでに蓄積した豊富な化学系アプリケーション構築の経験とMSCグループの開発力を結集し、お客様の「デジタル化」の推進を全力でサポート致します。

