

CBI学会2018 年大会

ランチョンセミナー 10月10日 11:30~ 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

- ・Ver.2で生成構造の妥当性や使いやすさを大幅に改善！
- ・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



# 社内化学情報検索システム ChemLocator



社内のあらゆる文書を  
構造式（+キーワード）で検索できる！

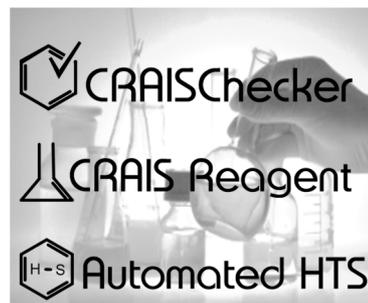
- ・化学的情報検索とフリーテキスト検索の組合せが可能
- ・企業の独自化合物IDにも対応可能
- ・インデックス生成スピードが昨年版の3倍に！
- ・PDFとHTMLはヒット個所をハイライト表示



# 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。



## 化学情報プラットフォーム

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



## 国内法規制対応試薬カタログデータベース

市販の試薬カタログデータは網羅性は高いものの、年間使用料は高額であり、かつ、国内法令やSDS情報の記載が十分ではありませんでした。製薬/化学会社では、危険物管理など国内法令等に準拠した適正な管理を行うために、個々の試薬メーカーよりカタログを取り寄せ、大変な手間をかけて試薬管理および購買システムで必要とされる情報の整備を行って来ました。SMARTSはこれらの問題を一気に解決する、国内法規制に対応した構造式付きの試薬カタログデータベースです。



## 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

## 特許明細書作成支援システム

特許明細書実験項の作成を飛躍的にスピードアップ！  
電子ノートや化合物・活性データベースなどの情報財産を活用し、チーム内のプロジェクトを一括してサーチ、正確で「強い」実験項の作成を迅速に作成できます。

- 容易な操作で迅速に実験項作成
- プロジェクト内のデータを把握
- 強い知財をサポート

