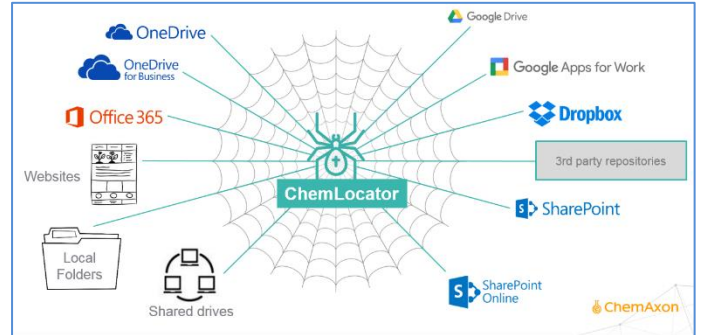


社内化学情報検索システム

■化合物に関する資料探索のコストを大幅に削減

研究の現場では、膨大な時間が文献や報告書、Office ファイルなどを探す為に費やされています。全文検索システムを導入しても、特に化学物質は多くの名前や識別番号を持つ為、キーワードでの検索では、必要なドキュメントを探し出せないことが多くあります。

ChemLocator は社内のファイルサーバーや SharePoint、クラウド上のドライブに置かれたファイルに対し、構造式などの化学的情報とフリーテキスト検索を合わせた検索を可能にしたエンタープライズサーチエンジンです。



■特徴

- Office、PDF、テキストドキュメント(化合物名、CAS、Inchi、Chemical Data:SMILES等)、各種構造ファイル(SDF,RDF,MOL,CDX,MRV等)に対する構造検索が可能
- 構造検索と、Free Text(作者,作成日,変更日,Ontology等)を合わせた検索が可能
- 構造プロパティ(原子数、分子量、Lipinski rule、Chemical Term等)での検索フィルタリング機能
- ヒットした構造データをドキュメント中でハイライトやアノテーション、また構造データの出力が可能
- Compliance Checker との連携 (法令情報)

■検索実行から結果表示 (利用イメージ)

- 構造エディタで検索クエリ構造を作画、構造検索の種類を選択後、検索を実行
- 検索条件として、テキスト情報を指定する事も可能
- 検索実行後、検索対象フォルダ内ファイル中の該当構造情報が画面上に表示され、表示構造がどのファイルに含まれているかを確認することもできる

Any file format

<input type="checkbox"/> Chemical (cdx)	<input type="checkbox"/> Chemical (cdxml)
<input type="checkbox"/> Chemical (cml)	<input type="checkbox"/> Chemical (mol)
<input type="checkbox"/> Chemical (mrv)	<input type="checkbox"/> Chemical (rdf)
<input type="checkbox"/> Chemical (sdf)	<input type="checkbox"/> Chemical (skc)
<input type="checkbox"/> Office (doc)	<input type="checkbox"/> Office (docx)
<input type="checkbox"/> Office (ppt)	<input type="checkbox"/> Office (pptx)
<input type="checkbox"/> Office (xls)	<input type="checkbox"/> Office (xlsx)
<input type="checkbox"/> Plain text (txt)	<input type="checkbox"/> Portable document (pdf)
<input type="checkbox"/> Web (html)	

Molecule format

Any molecule format

<input type="checkbox"/> ChemDraw OLE	<input type="checkbox"/> Chemical file
<input type="checkbox"/> Common text	<input type="checkbox"/> Corporate Identifier
<input type="checkbox"/> Generic text	<input type="checkbox"/> Isis OLE
<input type="checkbox"/> Marvin OLE	<input type="checkbox"/> Smiles
<input type="checkbox"/> Systematic text	

Molecule properties

Any molecule property

Atom count: -1 to 495

Bond count: 0 to 499

LogP: -22.0220737 to 10.5077171

Molecule weight: 15.035 to 3465.03

■動作環境

➤ ハードウェア要件

項目	内容
Memory	ChemLocator サーバ：16GB 以上 ElasticSearch サーバ：16GB 以上 MSSQL サーバ：4GB 以上 All-in-one サーバ：64GB 以上
Disk	SSD,RAID 推奨
Network	1Gbps 以上
Cloud	AWS 等のクラウド環境に設定可能

➤ ソフトウェア要件

項目	内容
OS	WindowsServer2012 R2 WindowsServer2016
Java	1.8
Web Browser	Edge,Chrome,Firefox
.NET	4.5 以上
SQL Server	2012 以上

Patcore, Inc.

〒100-0005 東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー26F

富士通株式会社

ソーシャルデザイン事業本部 デジタルラボ事業部
〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町 1 番地 5 JR 川崎タワー24 階

URL: <https://www.fujitsu.com/jp/patcore/>

Copyright © Patcore, Inc., All rights reserved. は Patcore, Inc. の登録商標です。
その他の会社名、商品名、製品名は、一般に各社の登録商標または商標です。
本ドキュメントの記載内容、製品およびサービスの仕様は予告なく変更されることがあります。

