

デスクトップ化学情報管理ツール

■ Instant JChem とは

Instant JChem は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です。サーバーに対するフロントエンドの機能も提供します。

- 化学構造式を含む様々な付随情報をデータベース化し、簡単な操作で検索・登録・分析が行えます。
- ユーザは簡単に化学データベースを新規で構築しインポート、エクスポート、ブラウジング、構造/反応検索、編集が容易にできます。
- Calculator Plugins を使用し、物性値などを計算後新規のデータ項目として追加することができます。

-フォーム形式表示-

Structure	Cdid	Mol weight	Formula	IUPAC name	Donors
	1.001	203.24	C9H17NO4	(2-acetoxy-3-carboxylato-propyl)-trimethyl-ammonium	0
	1.002	196.14	C9H8O4	2,4-dihydroxycyclohexane-1,3-diene-1-carboxylic acid	2
	1.003	75.11	C3H9NO	3-aminopropan-2-ol	2
	1.004	169.07	C8H9NO5	(3-amino-2-oxo-propoxy)acetic acid	2
	1.005	202.55	C9H9NO4	1-chloro-2,4-dinitrobenzene	0
	1.006	163.18	C8H9NO	ethyl 3-oxo-4-oxo-4-amine	1
	1.007	146.16	C8H12O4	2,3-dihydroxy-2-methylsuccinic acid	2
	1.008	260.13	C14H13NO6	(2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanoic acid)	7
	1.009	473.45	C20H27NO7	(2-(4-(2-amino-4-hydroxy-5,6,7,8-tetrahydro-2H-pyridin-2-yl)-2-oxoethyl)acetic acid)	2
	1.010	99.95	C2H6O2	1,2-dichloroethane	0
	1.011	181.44	C9H9ClO	1,2,4-trichlorobenzene	0

-スプレッドシート形式表示-

■ 特長

- 個人向けデータベースと共有データベースをサポート
- 化学構造・反応を含むデータを検索・登録・編集・削除
- 多様な入出力フォーマットをサポート
- 目的に合わせてフォームを自由にデザイン可能
- グラフィックオブジェクトによるデータの可視化

■ オプション

- 化合物データと紐づく、豊富な物性値項目の追加
- ヒストグラムや散布図等でデータの分析・可視化
- Spotfire とのインテグレーション機能

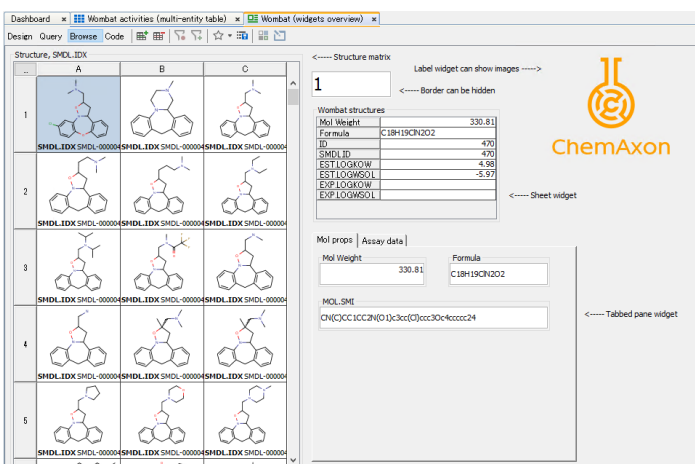
-Vis Add-on(オプション)- 散布図、ヒストグラム等の結果処理が可能

-Spotfire 連携- Instant JChem から直接 Spotfire へインポートが可能

-グラフィックオブジェクトの追加- スペクトル・用量反応曲線等データの可視化が可能

Cdid	Structure	Mol weight	Formula	Spectrum	Timestamp	Real	Range
1		203.24	C9H17NO4			✓	
2		196.14	C9H8O4			✓	
3		75.11	C3H9NO			✗	
4		169.07	C8H9NO5			✓	
5		202.55	C9H9NO4			✗	
6		163.18	C8H9NO			✗	

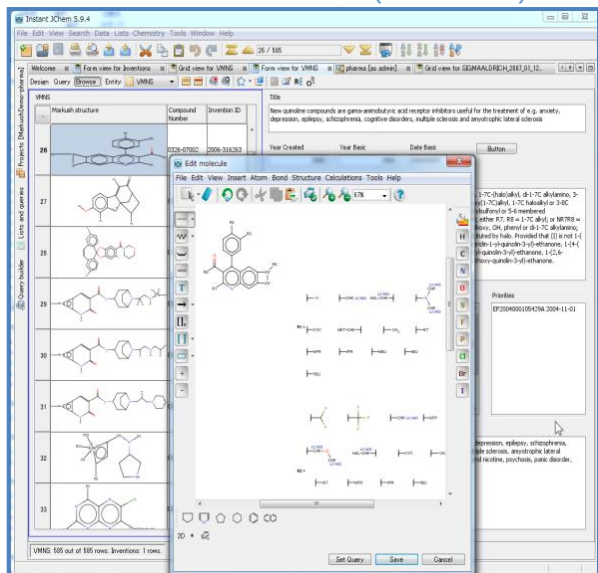
-目的に合わせてフォームを自由にデザイン可能-



-特定の条件による色付けフィルター設定-

...	CatId	Structure	Mol Weight	EST.LOGKOW	EXP.LOGKOW
1	1		330.81	330.81	4.98
2	2		264.37	264.37	3.35
3	3		294.40	294.40	4.30
4	4		308.43	308.43	4.79
5	5		322.45	322.45	5.28
6	6		322.45	322.45	5.28
7	7		350.51	350.51	6.12
8	8		376.38	376.38	4.83
9	9		280.37	280.37	4.09

-マーカッシュ DB の管理(オプション)-



■ 動作環境

➢ ハードウェア要件

項目	内容
CPU	1.2 GHz デュアルコア以上
メモリ	2 GB 以上
ハードディスク	1 GB 以上

➢ ソフトウェア要件

項目	内容
OS	Windows 8 (64-bit) Windows 10 (64-bit) Windows Server 2012/R2 Windows Server 2016 GNU/Linux(32-bit, 64-bit) Mac OS X (64-bit)
データベース	Derby MySQL 5.5 以上 Oracle 10g 以上 Microsoft SQL Server 2005 以上 PostgreSQL9.6 以上
JAVA	Java 8 and Java11 AdoptOpenJDK 8

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。