

## 高速かつ高度な構造/反応検索をサポート

### ■JChem Base とは

JChem Base は高速な検索アルゴリズムを搭載し、完全一致検索、部分構造検索、類似構造検索、スーパーストラクチャー検索、反応検索、マーカッシュ(Markush)構造のハンドリングをサポートしています。

- また、これらの検索時には次のような複雑なクエリーを用いることができます。
- SMARTS のサポート
- アトムリスト、ノットリスト、スーパーアトム
- チャージ、アイソトープ、ラジカル
- 水素数、芳香族/脂肪族原子
- リングサイズ、コネクティビティー ボンドタイプ、リング/チェーン
- R グループ
- ステレオケミストリー

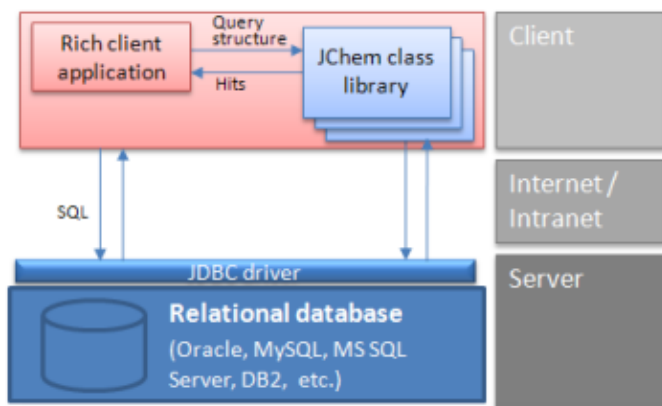
Structure	CID	MOLFORMULA	MOLWEIGHT	IDNumber	UPDATE_DATE	SUPPLIER	AVAILABILITY	BUILDINGBLOCK	COMMENT	CANC
	1	C10H10FN	211.203	AKS-88/0001	12/7/2006 12:00:00 AM	AKS		2 "Yes"	Building Block is on stock. Available in gram quantities.	OCI-N2CC
	2	C10H10FN	219.2367	AKS-88/0002	12/7/2006 12:00:00 AM	AKS		2 "Yes"	Building Block is on stock. Available in gram quantities.	OCI-N2CC
	3	C10H10FN	219.8855	AKS-88/0003	12/7/2006 12:00:00 AM	AKS		2 "Yes"	Building Block is on stock. Available in gram quantities.	OCI-N2CC
	4	C12H18N	209.2871	AKS-88/0005	12/7/2006 12:00:00 AM	AKS		2 "Yes"	Building Block is on stock. Available in gram quantities.	CCI-N

-ライブ構造が使えるカスタムリスト-

### ■様々なリレーショナルデータベースをサポート

JChem Base は Oracleをはじめ、SQL Server、MySQL、DB2、PostgreSQLなどをサポートしており、使用目的に合わせて最適なリレーショナルデータベース管理システムを選択できます。

Jchem Base は GUI 管理ツールを提供しており、データベース管理者は容易にテーブルの作成、構造データのインポート/エクスポートができます。



### ■開発効率の高い API を提供

JChem Base は Java および .NET (JNBridge 経由、オプション) 対応の使い易い API を提供しております。構造検索や表示、化学的なデータのハンドリングをスムーズに行うことができます。特に Web アプリケーションの開発のし易さで定評があります。

### ■様々なクライアントからアクセスが可能

デスクトップ製品の InstantJChem をはじめ Web アプリケーションや EXCEL, Spotfire, SciTegic PipelinePilot などのサードパーティーアプリケーションからアクセスが可能です。

### ■化学的パラメータの組み合わせ (ケミカルターム) による検索

ケミカルタームとは ChemAxon が考案した化学的ルールを記述するための言語で、化合物の物理化学的パラメータなどを複数組み合わせ、検索や条件設定に用いる事ができます。JChem Base では、例えば、「任意の部分構造をもつリードライクな化合物」あるいは、「ある構造に類似したバイオアピラビリティーの優れた化合物」といった条件で検索が行えるようになります。ケミカルタームで用いるパラメータは、検索実行時にオンザフライで計算されます。予め計算したプロパティをデータベースに格納する必要はありません。(本機能のご利用には Calculator Plugin が必要です。)

### ■動作環境

#### ➢ ソフトウェア要件

項目	内容
OS	Windows Server 2012 R2 (32bit/64bit) Windows Server 2016 (32bit/64bit) Windows 8.1 (32bit/64bit) Windows 10 (32bit/64bit)
Java	Java 8 AdopOpenJDK 8 ※Libfontconfig パッケージを含める必要あり。

※ご検討時にお問い合わせください。

### 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. (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。