

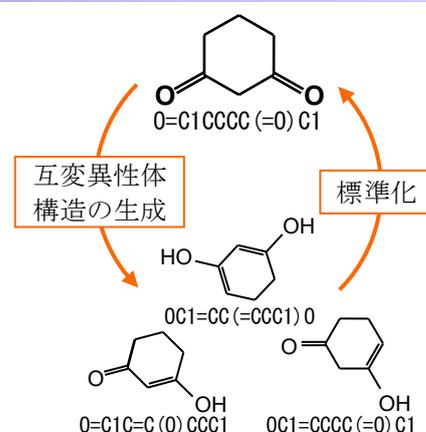
情報化学システム構築ツール

Daylight

Toolkits / Database Server Systems

Daylight ソフトウェアの特長

- 分子構造をコンパクトに表現して処理する SMILES 機能
- Daylight フィンガープリントにより、類似構造をすばやく効果的に絞り込み
- 化学情報を効率的に扱えるように設計された THOR データベース
- Merlin システムによる極めて高速なデータベース検索
- 互変異性体構造の網羅的生成と標準化に対応する高度な化学構造認識
- ツールキットやパッケージの組み合わせによる柔軟なカスタマイズ



概要

Daylight 社のソフトウェア群は、*in-silico* 創薬および化学情報管理システムを構築するための開発ツールです。化合物・化学反応情報のデータベース登録・検索や、化合物に対する様々な操作を効率よく行えるよう設計されています。システムの規模に係わらず、プロジェクトや創薬戦略に応じた理想的な化学情報管理システムが構築できます。

ソフトウェア群は大きく分けると、プログラミング環境を提供する“ツールキット”、独自のデータ形式で化学情報を高速に処理する“データベースパッケージ”、各種の“コマンドラインツール”、化学情報を処理する Oracle カートリッジ“DayCart”、および“データコンテンツ”があります。

ツールキット

- **SMILES Toolkit**
分子オブジェクトと SMILES 言語
- **SMARTS Toolkit**
部分構造認識と SMARTS パターン言語
- **Fingerprint Toolkit**
フィンガープリントの作成とカスタマイズ
- **Reaction Toolkit**
化学反応情報の処理
- **Depict Toolkit**
2D と 3D の描画情報
- **THOR Toolkit**
THOR system の利用
- **Merlin Toolkit**
Merlin system の利用

データベースパッケージ

- **THOR system**
化学情報データベースの登録と参照
- **Merlin system**
高速検索と探索的データ解析
- **Merlin Control Language**
Merlin 検索自動化用のスクリプト言語 (オプション)
- **Reaction Package**
反応データベース機能 (オプション)

コマンドラインツール

- **Clustering Package**
大規模セットのクラスター解析
- **PC Model, DayProp**
分子物性 (ClogP, CMR 等) の計算と互変異性体発生

Daylight ツールキット / THOR & Merlin Systems

Daylight ツールキット

Daylight ツールキットを利用すると、すでにお使いのサードパーティーソフトウェアに Daylight ソフトウェアの機能を組み込んで、一連の解析の中でシームレスに利用できるようになります。また、Daylight システムへのインターフェースとして使用することもできます。

使い慣れたソフトウェアと Daylight ソフトウェアの連携で、研究の幅も広がります。

THOR & Merlin Systems

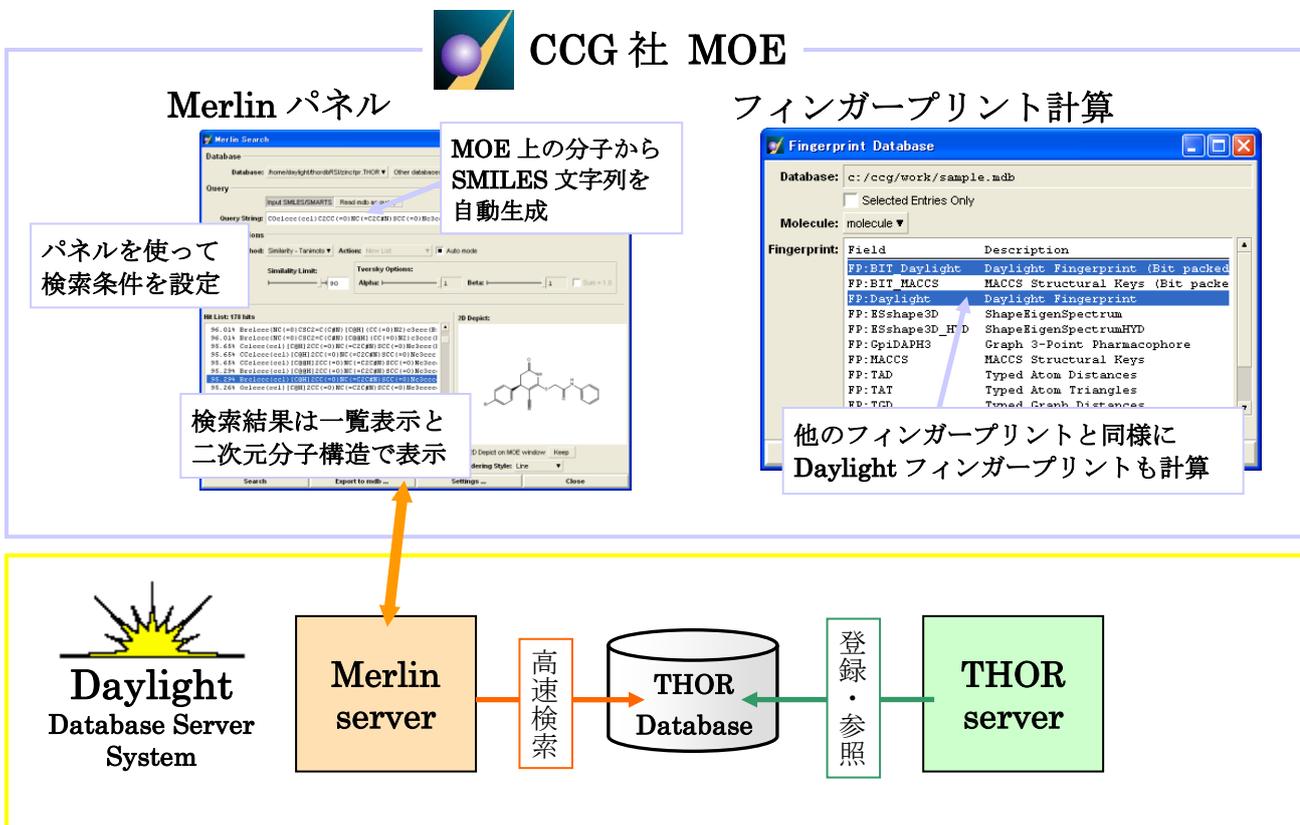
Daylight ソフトウェアでは、分子構造とそれに関する各種データを THOR Database という形で管理します。

THOR System は、THOR Database に対する登録や、分子構造をキーとした参照を行います。

Merlin System は、THOR Database をメモリ上に展開することで、高速で多様な種類の検索機能を提供します。

Daylight ソフトウェアによるシステム構築例

例えば、THOR & Merlin によるデータベースと、Daylight ツールキットを組み込んだ CCG 社製 MOE と組み合わせると、下記のような使い方が可能になります。

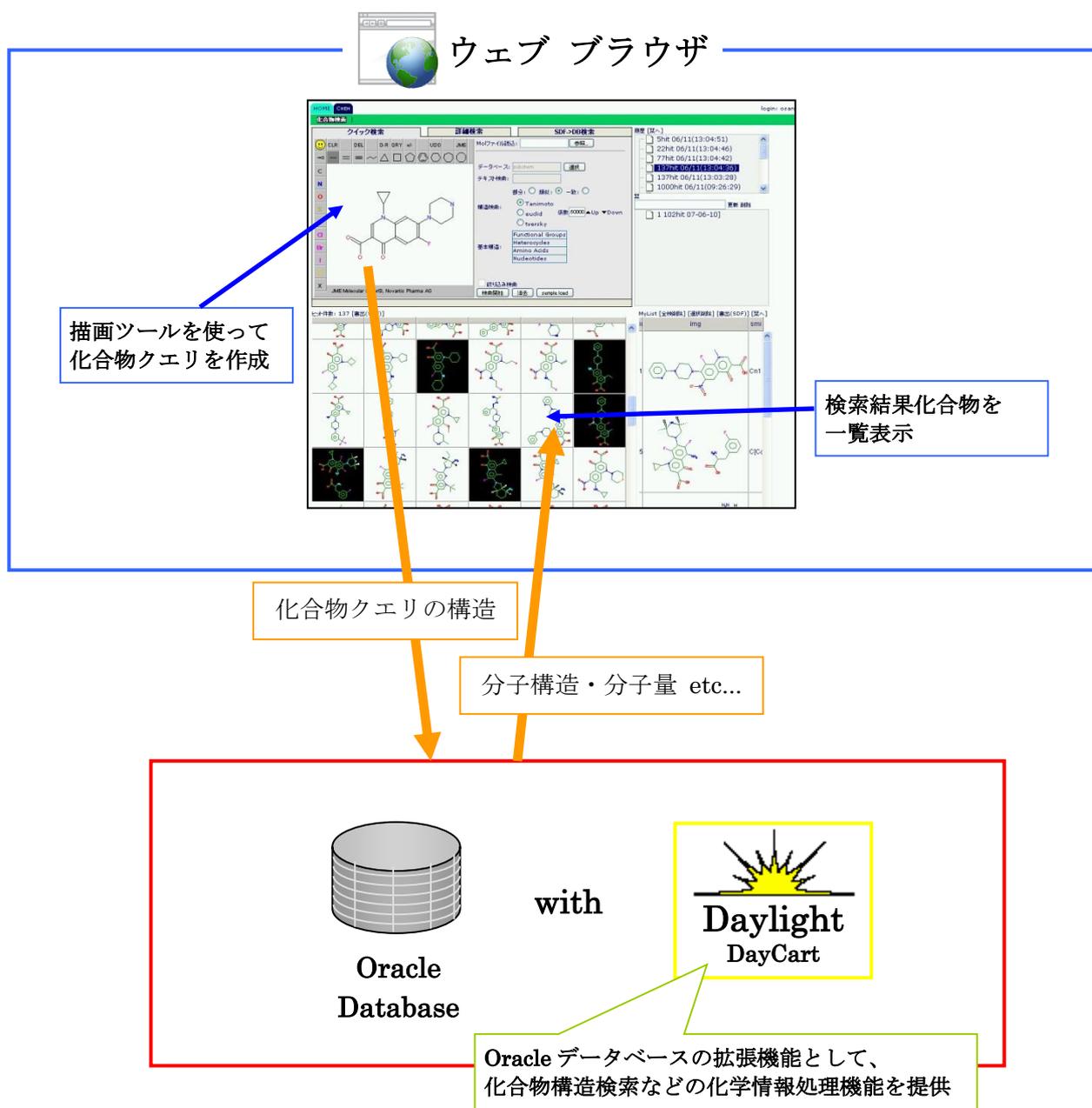


DayCart — Oracle / PostgreSQL データベース用拡張機能

DayCart は、Daylight の化合物処理機能を Oracle データベースや PostgreSQL データベースに拡張機能として組み込むための統合ツールです。堅牢な Oracle データベース、あるいは無償の PostgreSQL データベースを利用して、高速な化合物登録・検索システムを構築することができます。

DayCart を利用したシステム構築例

例えば、Oracle データベース、Web サーバ、描画ツールを組み合わせることで、下記のような化合物登録・検索システムが構築できます。表示項目などの画面構成は、柔軟にカスタマイズすることができます。



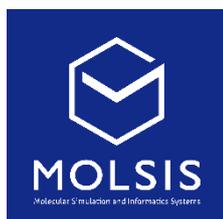
データコンテンツ

THOR/Merlin 形式、DayCart 形式にて以下のコンテンツが提供されています。

データベース	概要	提供元
ACD (Available Chemicals Directory™)	48 万件以上の重複のない、商業的に入手可能な化合物のデータベース	MDL
MedChem	LogP や pKa が測定されたものも含め、総数 5 万 5000 件以上の化合物のデータベース	BioByte Corp.
SPRESI	56 万件以上の文献データから抽出された約 380 万件の化合物のデータベース	InforChem GmbH
WDI (World Drug Index™)	約 8 万件の医薬品・薬理活性化合物データベース	Derwent Publications

- 詳細はお問い合わせください。
- 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。
- 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。

(2018/06)



Daylight Chemical Information Systems 社代理店

株式会社 モルシス ライフサイエンス部

〒104-0032 東京都中央区八丁堀 3-19-9
ジオ八丁堀 7 階

TEL: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

E-mail: sales@molsis.co.jp