

2013 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

■本ガイドに掲載の製品に関するカタログ・資料請求は…

直接広告掲載会社へご連絡いただくか、下の資料請求用紙にご記入の上、広告取扱会社(株)明報社までFAXにてお送りください。

(株)明報社『化学と工業』係行 化学と工業 2013年2月号

FAX.03-3546-6306

資料請求用紙

平成 年 月 日

| | |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ご請求者 | 住 所 <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> - <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> |
| | 会社名 |
| | 所属 |
| | フリガナ |
| | 氏 名 |
| | TEL () - FAX () - |
| | E-mail: |

ご希望製品の会社名・ソフトウェア名をご記入ください。

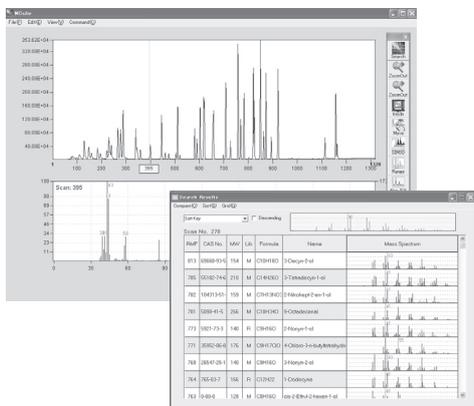
| 会 社 名 | ソフトウェア名 |
|-------|---------|
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |

2013 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

NIST/EPA/NH Mass Spectral Library (NIST11)

価格(税込) : 357,000円(約24万スペクトル(212,961化合物)と構造式)
価格(税込) : 231,000円(NIST08/05/02...からのアップグレード)



MS³を使ったNIST11

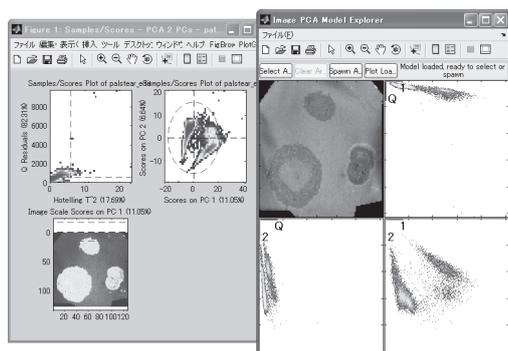
- NIST MS Search, Ver.2 (検索ソフトウェア) + NIST11 (NIST Format) Library
- MS³ (MS Searchとのインターフェイスソフトウェア=オプション) (+5万円)
 - ・ 生データの読み込み
 - ・ TICおよびSIMの表示(ズーム)
 - ・ 構造式の表示およびクリップボードコピー
- ライブラリーデータのみ(ライブラリーフォーマット)
 - ・ Agilent ChemStation : Thermo Fisher (Finnigan-Mat) GCQ, Magnum : Perkin-Elmer Turbo-Mass : Varian Saturn

株式会社デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772
URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

PLS_Toolbox, 7.0 / MIA_Toolbox 2.8 (ケモメトリクスソフトウェア)

MATLAB用アドイン(PLS_Toolbox) 定価(税込) : 199,500円 / 79,800円(一般/教育)
MATLAB用アドイン(MIA_Toolbox) 定価(税込) : 84,000円 / 21,000円(一般/教育)



データの管理と分析、モデルの作成と結果の解釈用のグラフィックインターフェイスを提供します。いろいろなデータソースからデータをインポートし、データセットのオブジェクトを組み立てできます。

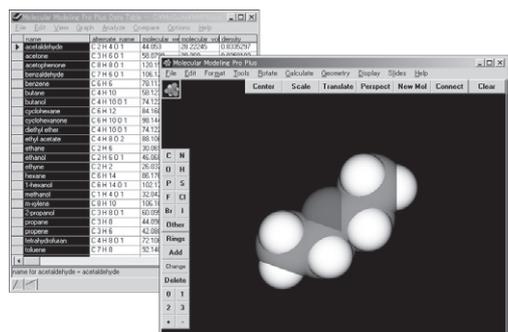
- ★ データの探求とパターン認識 (主成分分析、PARAFAC、MCR、変数選択)
 - ★ 分類 (SIMCA、PLS判別分析、クラスター解析、デンドグラムを持つクラスター解析)
 - ★ 回帰モデリング (PLS、主成分回帰、重回帰)
 - ★ 高度なグラフィックによるデータセットの編集と視覚化ツール
 - ★ 高度な前処理 (中央化、スケーリング、スムージング、微分)
- (製作元 : Eigenvector Research Inc.)

株式会社デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772
URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

Molecular Modeling Pro

価格(税込) : 63,000円 / 31,500円(一般/教育)



- Macromodel, PDB, MOL, MOPAC 他の方ファイルのRead/Write
- 構造式から分子特性、物性値を計算
- MM2最小化
- QSAR/QSPR用に特化した統計とグラフ化ツール
- MLR, PLS回帰, PCAなどの統計解析
- ワイヤフレーム、ボールアンドスティック他の3D構造式のディスプレイ
- 構造式と物性のデータベース作成
- ASCIIまたはMOLとしてデータベースのインポート/エクスポート

プラットフォーム : Windows 95/98/NT 4.0/Me/2000/Xp
製作 : Norgwyn Montgomery Software, Inc.

株式会社デジタルデータマネジメント

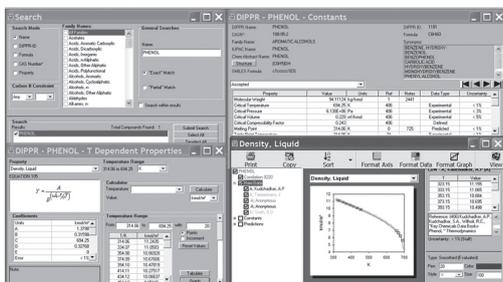
〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772
URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

2013 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

化学プロセス用の物性データベース DIPPR with DIADEM pro (Design Institute for Physical Property Data)

価格(税込) : 367,500円/63,000円/年間(一般/教育)



2,030化合物についての49種類の熱物性値(実測値)、複数の推算式、原文献データと15種類の温度依存物性には推算式の係数などのデータベースです。AIChE推奨のインターフェイスソフトウェア(DIADEM)付きのスタンドアロンシステムです。

おもな機能(DIADEM)

- 検索対象 : Name, Formula, CAS番号、物性データ
- 物性値 : 実測値、推算式による予測値
- データ表示 : テーブルとグラフプロット
- 複数化合物データの重ね合わせプロット
- MDL Chime プラグインによる構造式の立体表示
- ユーザーデータベースの作成

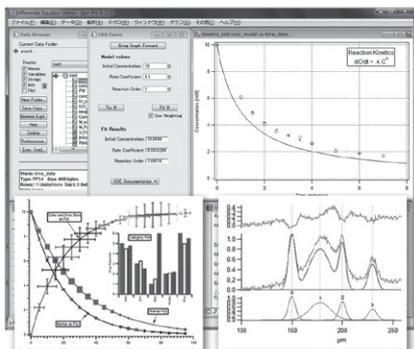
プラットフォーム : Windows Xp/Vista/7 (AIChE DIPPR Project 801)

株式会社デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772
URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

IGOR Pro 6.2 日本語版

価格 : お問い合わせ下さい



IGOR Proは、広範囲にわたる工学的な解析・グラフ作成機能、プログラミングツールを一つに統合したパワフルなソフトウェアです。読み込み可能なファイル形式は様々で、計測機器から直接取り込んだ時系列の大規模データも高速に処理します。

- 自由度が高い2Dグラフ作成機能
- 3Dおよびボリュームビジュアライゼーション
- イメージ描画
- カーブフィッティング/マルチピークフィッティング
- シグナル処理
- 強力な画像処理および画像解析

どなたでも参加可能な初級者向け無料セミナーを定期的開催しています。

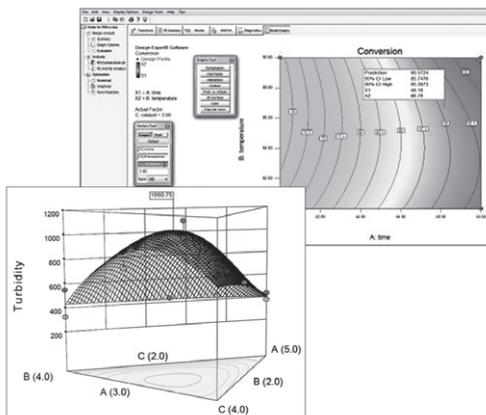
IGOR Pro にご興味がある方は、是非ご参加ください。

【動作環境】Windows 版 : Windows XP/Vista/7/8

Mac 版 : Mac OS X 10.4 以降 (LionおよびMountain Lionに対応)

Design-Expert 8

価格 : お問い合わせ下さい



Design-Expert は、パワフルで使いやすい実験計画法 (DOE) プログラムです。実験のセットアップからデータの解析・結果の2D/3Dグラフ表示まで、直感的な操作で行うことができます。2水準要因配置スクリーニング計画、一般的な要因配置、応答曲面法 (RSM)、混合計画、混合物とプロセスの複合計画など、あらゆる実験ニーズに応える豊富な計画構築ツールを装備。製造プロセスの改善や品質向上に利用できます。

豊富な機能をご活用いただくため、弊社のWebサイトには日本語のチュートリアルを公開しております。

【動作環境】Windows XP/Vista/7

株式会社ヒューリンクス

〒103-0015 東京都中央区日本橋箱崎町 5-14
TEL.03-5642-8380 FAX.03-5642-8381
URL: <http://www.hulinks.co.jp/> E-mail: soft.sales@hulinks.co.jp

2013 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

株式会社デジタルデータマネジメント TEL.03-5641-1771 URL: <http://www.ddmcorp.com>

| ソフトウェア名 | 概要 | 価格(税込) |
|-------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| CaRline Crystallography | 3Dの結晶構造、多面体、逆格子、ステレオ投影図の表示および回転、回折パターンの推測、構造因子の計算 | 165,900円(一般) 121,800円(教育) |
| Casa XPS | VAMASフォーマットのXPSデータ処理およびブラウザー機能：XPS装置メーカーの生データの変換機能 | 346,500円(一般) 189,000円(教育) |
| Chemistry 4-D Draw, Office/Pro/Std/Lite | 構造式作図、構造式とIUPAC名との相互変換機能、構造式のデータベース作成と検索機能 | 88,200円(一般)から 15,750円(教育)まで |
| CLide Standard | 化学構造式用のOCRソフトウェア | 年間279,300円(一般) 141,750円(公立機関) 84,000円(大学) |
| Crystal Studio | 多彩な結晶の3D表現、電子線回折およびX線回折パターンの作成 | 241,500円(一般) 214,200円(教育)まで |
| CRC Handbook of Chemistry & Physics on CD-ROM, Version 2012 | 毎年更新される有機物および無機物の物性データ | 43,050円 |
| Design-Expert | 実験計画法ソフトウェア。プロセスの開発に画期的な因子を識別し、最大の実行性に到達できます。重要な因子とその相互作用を選択でき、数的な最適化も行えます。回転可能な3Dプロットは応答曲面を視覚化します。 | 168,000円(一般) 47,250円(教育) |
| Dictionary of Chemical Names and Synonyms | 25,000化合物の同義語辞書データベース：一般名、CAS番号、SMILE表記など | 31,500円 |
| Diamond | CIFフォーマット他の外部データのインポートからグラフィック表示までを自動作成できるウィザード機能。POV-Rayインターフェイスを使ったグラフィックス。 | 210,000円(一般) 126,000円(教育) |
| DIPPR with DIADEM | 2,030化合物についての49種類の熱物性値(実測値)、複数の推算式、原文献データと15種類の温度依存物性には推算式の係数などのデータベース | 年間367,500円(一般) 年間63,000円(教育) |
| Endeavour | 単位セルパラメータ、組成、回折パターン(2θと強度)の情報からの構造解析ソフトウェア。 | 315,000円(一般) 168,000円(教育) |
| EssentialFTIR | マルチOS環境に対応するPython言語で作成されたIR、Raman、UV領域のスペクトルデータ処理ソフトウェア。FTIR装置に必要な標準的な機能をすべて網羅。 | 240,000円 |
| FDM Comprehensive Organics | 10,500化合物のFT-IRスペクトルライブラリー。FDM Electro Handbookまたは既存のFT-IRデータステーション用のライブラリーとして供給。 | 294,000円 |
| GRAMS/AI | IR、UV、GC、LC、MS、NMRなど機器分析データの処理 | 420,000円(一般) 168,000円(教育) |
| HSC Chemistry for Windows | 20,000種(気相、固相、水溶液相)のエンタルピー、エントロピー、熱容量などの熱化学データベースと、熱力学計算と状態図作成 | 315,000円 |
| Industrial Chemical Thesaurus, 3rd. ed. | CAS番号、物性、用途、規制情報など9,000化学品のデータベース | 52,500円 |
| MassFinder | 精油分析に関連する約2000化合物のスペクトル、構造式、リテンションインデックスを持つTerpenoidライブラリーを含んだデータベース検索ソフトウェア。 | 450,000円 |
| Mass Spec Calculator Pro | 描画した化学構造式またはインポートしたMOLファイルから、マニュアルまたは自動のマススペクトルのフラグメンテーション計算 | 84,000円 |
| MIA_Toolbox | 顕微鏡からの多変量イメージデータを使って、PCA、MCR(ALSとPurity)、SIMCAとPLSDA判別分析、K-Meanクラスタリング、PLSまたはPCRの回帰分析ができます。 | 84,000円(一般) 21,000円(教育) |
| Molecular Modeling Pro | MM2などによる構造式の最適化、100種類以上の化学特性の計算、MOPACまたはCNDOを使った半経験的量子化学、QSARデータベースの作成他 | 63,000円(一般) 31,500円(教育) |
| MS ³ with NIST11 | GCMS生データの読み込み、TICとSIMの表示。NIST08の検索、構造式の表示他 | 409,500円 |
| NIST11 Mass Spectral Library | 243,893件のEIマススペクトルのデータベース、Agilent ChemStation、Finnigan Magnum/GCQ、Perkin Elmer TurboMass用など | 357,000円(新規) 231,000円(更新) |
| Pearson's Crystal Data | 100,000件以上の異なった相、約14,000件の実測の粉末回折パターン、167,000件の計算による回折パターン(面間隔、強度、ミラー指数)などのパターン約180,000構造データセット(原子座標、決定されたときの変位パラメータ)の無機物の結晶データベース。 | 630,000円(一般) 475,000円(教育) |
| GRAMS IQ | PLS、PCR、PCAを備えたスペクトルデータ専用のケモメトリックアプリケーション | 210,000円(要GRAMS/AI) |
| PLS_Toolbox | データの前処理(中央平均化、スケール変更、微分、スムージング)、回帰モデリング(PLS、PCR、MLR)、分類(SIMCA、PLSDA)などをサポートするケモメトリックスソフトウェア | スタンドアロン 336,000円/ 139,600円(一般/教育) MATLABアドイン 199,500円/ 79,800円(一般/教育) |
| Polymer Desigh Tools | 描画されたポリマーのリピート単位の構造式からAskadskii, Bicerano, Krevelen法によるポリマーの物性推算 | 525,000円～1,365,000円 |
| PPP Handbook | ポリマー1362件に関する60種類以上の物性データベース | 210,000円(一般) 178,500円(教育) |
| Quick SP3 | CSV、SPC(等間隔、非等間隔)のスペクトルデータファイル(IR、UV、Raman、GCMS、LCMSなど)からワイヤフレーム、ソリッド、等高線図を簡単に作成。スクリーン上の任意部分をクリップボードにコピー。 | 52,500円 |
| @RISK | Excel上で定義された変動要素をモンテカルロシミュレーション | 189,000円～ |
| RTECS | 文献から抽出された約13万化合物の毒性、刺激性、発ガン性、変異原性データ(WebまたはCD-ROM) | 年間63,000円 |

2013 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

| ソフトウェア名 | 概要 | 価格(税込) |
|------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|
| Scientist | 非線形代数方程式、微分方程式、ラプラス変換、陰方程式、多変量方程式のモデルをサポートするデータ解析、カーブフィッティング、グラフ化ソフトウェア | 150,000円(一般) 80,000円(教育) |
| Statgraphics Centurion XV | データ解析の解釈: 統計的な有意性の決定: スクリーニング実験、応答表面計画、タグチ計画、混成計画の作成 | 88,200円(一般) 63,000円(教育) |
| StatTools | Excelアドインの統計解析パッケージ。 | 131,250円(Professional) 78,750円(Standard) |
| SlicerDicer | HDFフォーマットで作成されたMRIなどの3Dイメージから任意にスライスおよび部分切り出し | 84,000円 |
| Spectral Data Processor | XPS, AES, UPS, PL, LIFの生データ、ASCIIファイル、VAMASフォーマットをインポート。ピークフィッティング他のデータ処理。ビットマップ、テキストファイルへのエクスポート。 | 141,750円 |
| Spectral ID | MS、IR、Raman、UV-Vis、Fluorescence、NIRのプライベートライブラリーを構築および検索。ユークリッド距離、絶対差、最小二乗、相関、一次微分相関、ドット積、複合ドット積、リバース、フォワードなどのアルゴリズムを選択 | 210,000円 |
| The Static SIMS Library | 約800物質のポジティブ/ネガティブスペクトルデータベース | 756,000円 |
| The XPS of Polymers Database | VAMASフォーマットのXPSデータファイル(111種のポリマー)と書籍イメージのPDFファイル | 63,000円 |
| Unscrambler 10.2 | PLS, PCA, PCR, MLAをサポートするケモメトリックスのパッケージ。実験計画法のモジュールも。 | 735,000円 (アカデミック367,500円) |
| UN-SCAN-IT | 機器分析データのチャートからスキャナーで得られたイメージをASC II (X, Y) データに変換 | 68,250円 |
| Viewer+ | JCAMP DXおよびGRAMS SPC形式のFTIRおよびNIR用スペクトルビューワ | 52,500円 |

株式会社ヒューリンクス TEL.03-5642-8380 URL: <http://www.hulinks.co.jp/>

| ソフトウェア名 | 概要 | 価格 |
|----------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|
| AssayZap | RIA、ELISA、IRMA、比色分析やその他の評価分析に利用できる汎用分析ツール | 98,700円 |
| ATOMS | 結晶、高分子、分子等さまざまなタイプの原子構造を3Dで描画 | 67,200円～ |
| CalcuSyn | 投薬効果解析のためのソフト。薬の組み合わせによる効果を定量化し、解析の自動化が可能 | 103,950円 |
| CLiDE Standard/Professional/Batch | 印刷文書や画像から分子を抽出する(化学構造式のOCR)ためのソフトウェアツールです。1つずつ取り出せるStandard、複数を取り出せるProfessional、コマンドラインで大量に取り出せるBatchがある | 198,450円/年～ (アカデミック版 66,150円/年～) |
| CrystalMaker | 写真並みのカラー画像で結晶構造を生成、表示、操作可能な結晶構造解析ソフト。マルチウィンドウ・マルチアンドウ対応。オプションにより粉末回折、電子線回折パターンシミュレーションが可能 | 123,900円～ (アカデミック版 86,100円～) |
| CrystalKitX | 粒子間の結合関係や接触面、軸等を設定することで、非常に短時間であらゆる結晶体の構造を作成できるソフト | 344,400円 |
| Crystal Studio | 強力なデータベース機能を搭載した高機能、多機能な結晶構造解析ソフト。Professional版は3500種、Enterprise版またはQuantum版は6000種の結晶構造データを持つ | 199,500円～ (アカデミック版 189,000円～) |
| CS ChemBioOffice Ultra, ChemOffice Ultra/Pro | 化学研究者向けのChemDraw、ChemBio3D、ChemFinder、ChemACX、生物学者向けのBioAssay、BioViz、BioDraw、研究用のInventory、E-Notebookで構成されたパワフルなソフトウェアパッケージ | 378,000円～ (アカデミック版 174,300円～) |
| CS ChemBio3D Ultra | 分子表面、軌道、静電位、電荷密度、スピン密度を視覚化して表示。分子特性を計算するため、MOPAC、Gaussian、GAMESS、Jaguarの各インターフェイス(別売)及び拡張ヒューケルが使用できる。ChemPropはコノリー表面積、分子体積、またClogP、モル屈折度、臨界温度、圧力などを含めた特性を計算可能 | 177,450円～ (アカデミック版 53,550円～) |
| CS ChemBioDraw Ultra, ChemDraw Ultra/Pro/Std | Struct<=>Name、ChemDrawExcel、ChemNMRなどの機能が含まれている。化学名に基づいて立体化学を含めた正しい構造式を描き出し、構造式の正確なIUPAC名を取得可能。原子とスペクトルの直接的相関によって、ChemDraw構造式をもとにNMRスペクトルを予測。ChemDraw ActiveX/Pluginは、化学インテリジェンスをブラウザに追加して、データベースクエリと情報表示を可能にする | 105,000円～ (アカデミック版 26,250円～) |
| CS E-Notebook Ultra | 電子実験ノート。画像データやMS Excel、MS Word等のファイルをまとめて管理でき、化学構造式による過去のノートへの検索が可能 | 177,450円～ (アカデミック版 53,550円～) |
| Design-Expert | 実験計画法(DOE)プログラム。実験を素早くセットアップし、データを解析し、結果をグラフィカルに表示することが可能 | 123,900円～ |
| EnzFitter | 酵素反応実験データの解析のために開発されたフィッティングソフト | 98,700円 |
| eHiTS, eHiTS LASSO, eHiTS Score, eHiTS Tune | 高速で高精度な化合物のハイスループット・スクリーニングを可能にするソフト。タンパク質-リガンドドッキングシミュレーション、スコア計算、スコア関数作成、リガンドベーススクリーニングを組み合わせることが可能 | 2,796,150円～ (アカデミック版 210,000円～) |
| Gaussian | 汎用量子化学計算プログラム。量子力学の基本法則から始めて、様々な化学環境下における分子や化学反応のエネルギー、分子構造、振動周波数、および、分子特性を予測。Gaussianの化学モデルは、安定化学種から、例えば、短寿命の中間体や遷移構造など、実験的には観測が難しいか、または、不可能な化合物にまで適用することが可能 | 329,700円～ (アカデミック版 152,250円～) |

2013 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

| ソフトウェア名 | 概要 | 価格 |
|-----------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|
| GaussView | Gaussian用グラフィカルユーザーインターフェイス | 199,500円～ (アカデミック版 103,950円～) |
| Gene Construction Kit | グラフィカルな操作体系と高度なドロー機能で DNA配列の取り扱いを飛躍的に容易にした、代表的なデスクトップ・クローニング・ツール | 378,000円 (アカデミック版 215,250円) |
| Gene Inspector | 研究用電子ノートブックに、DNA配列の総合的解析機能と、パワフルなイラストレーション機能を組み合わせたユニークなツール | 346,500円 (アカデミック版 199,500円) |
| HyperChem | 機能性、カスタマイズ性、操作性の高さで定評のある分子モデリングソフトウェア。マウス操作による分子の構築、GUIから計算手法の選択や入力値の設定が可能で、ユーザーフレンドリーな分子モデリング環境を提供 | 143,850円～ (アカデミック版 98,700円～) |
| HyperProtein | 分子モデリングとバイオインフォマティクスの2つの機能をあわせ持ち、グラフィカルに操作できるタンパク質解析ツール。配列操作機能の大部分がマルチウィンドウ GUI で互いに強固に結びつけられており、配列の一次元情報をタンパク質の三次元構造と関連付けすることが可能 | 283,500円 (アカデミック版 193,200円) |
| IGOR Pro 日本語版 | グラフ作成、データ解析、プログラミングツールを統合した科学者・技術者向けのパワフルなツール。表現力に富む高品質な2D・3Dグラフ機能に加え、カーブフィッティング、ピークフィッティング、画像解析をはじめ豊富な解析機能を搭載しており、プレゼン&解析を強力にサポート | 126,000円～ (アカデミック版 92,400円～) |
| iSolution 日本語版 | 画像の自動解析を行う。全ての標準的な解析ツールに加え、画像の蛍光染色のような画期的な機能や、自動サイズ計測機能などを提供する高性能の画像ソリューション | 338,100円～ (アカデミック版 201,600円～) |
| KaleidaGraph 日本語版 | シンプルなグラフの作成から回帰曲線やエラーバーを適用するような複雑なグラフの作成まで、非常に簡単な操作で実現可能なグラフ作成ソフト | 50,400円 |
| MacTempasX | マルチスライスシミュレーションと動的な電子線回折パターン、ユニットセルの自動計算等の機能を搭載したTEMイメージシミュレーションソフト | 1,365,000円 |
| Mathematica 日本語版 | 世界で広く使われている数式処理システム。統合的なソフトウェア環境として、数値計算、可視化、プログラミング、シミュレーション、開発、文書化、配備などにも利用可能 | 445,200円～ (アカデミック版 201,600円～) |
| Q-Chem | 最新の非経験的電子構造計算プログラム。分子の基底状態や励起状態の第一原理計算を可能にし、1つの統合されたab initioソフトウェアパッケージとして、数多くの計算手法とツールを提供 | 170,100円～ (アカデミック版 91,350円～) |
| QuantiScan | ポリアクリルアミドゲルやアガロースゲル電気泳動のゲル等をスキャナ (TWAIN対応) で読み込み、バンドの濃さをグラフ化、数値化するソフト | 98,700円 |
| SHAPE | 単結晶、双晶およびエビタキシャルやその他の連晶の形態と対称性を計算し表示するプログラム | 49,350円 |
| SigmaPlot | 生化学者向け機能が豊富なカーブフィッティング&グラフ作成ソフト。豊富な統計解析機能も実装されている | 100,800円～ (アカデミック版 70,350円～) |
| SigmaScan Pro | 汎用画像処理パッケージ。デジタル画像を高速かつ正確に測定、解析することが可能 | 220,500円～ (アカデミック版 157,500円～) |
| StarDrop | 創薬の現場において、薬となり得る化合物探索を支援するソフトウェア。各種物性予測、ケミカルスペース解析、スコアリング、構造式-物性値の相関解析機能などを備えている | 799,000円～ |
| UnGraph | 紙に描かれたグラフをスキャナーで読み込み、X、Y座標データを任意の精度で認識し、数値化を行うソフト | 103,950円 |
| VIBRATZ | 原子価力定数やUrey-Bradley力場定数を利用して、分子や結晶の基準座標計算をするプログラム | 67,200円 |

■次回予定 2013年6月号には コンピュータ・ケミストリー ～最新優秀ソフト製品～ を掲載予定にしております。

2013 コンピュータ・ケミストリー ～ 最新優秀ソフト製品 ～

企画・製作

株式会社 明報社

〒104-0061 東京都中央区銀座7丁目12番4号 (友野本社ビル)

TEL 03 (3546) 1337(代) FAX 03 (3546) 6306 goto@meihosha.co.jp 担当/後藤