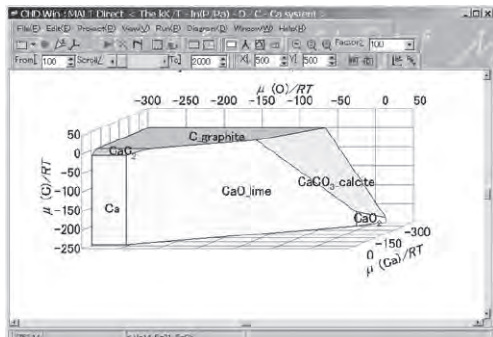


2026 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

WindowsPC用熱力学データベース MALT Omega/Basic

Omega (7890種) 価格 (税込) 935,000円 1種の化合物が複数相データを含みます。
Basic (4930種) 価格 (税込) 一般308,000円 アカデミック132,000円
永くライセンス価格です。



■化学熱力学データの収録

反応における整合性が重視されている高品質データベース。

もともと高温化学者のために開発されているため高温データが充実しています。

■計算機能 (デュアルソルバー)

反応の平衡定数を求める機能以外に、一般化された化学ポテンシャル図の作成 (Omega ではプルベ線図の作成も) / 多元系平衡計算 (気相、凝縮相、混合相) 分圧などの指定等各種条件下での計算が可能です。

著作: MALTグループ

株式会社科学技術社

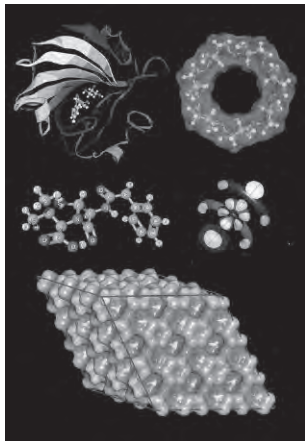
〒111-0052 東京都台東区柳橋2-10-8 武田ビル

TEL.03-5809-1132 FAX.03-5809-1138

URL: <https://www.kagaku.com/malt/> E-mail: malt@kagaku.com

ChemDoodle 2D/3D, version 12 (描図/変換/スペクトル/3Dレンダリング)

価格 (税込) : 170,500円



■化学構造式の作図 ■反応式の描図 ■構造式からIUPAC PINと Traditional名の作成とその逆 ■ルイス構造の自動作成 ■ニューマン投影式の作成 ■カーボンナノチューブの作成ツール ■MOL、スペクトルの作成 (Mass, H1-NMR, C13-NMR) ■Inchi KeyやMOLファイルなどのインポート / エクスポート ■ACS他の主要雑誌のスタイルシートでのドキュメントの作成 ■クリップアートのテンプレート ■2D構造式から3Dを作成と最適化 ■リボン、チューブ、シリンダー等でのマクロ分子表示 ■PDB (Protein Data Bank) からのインポート

プラットフォーム: Windows 10/11 (64 bits)、macOS、Linux

製作: iChemLabs, LLC.

株式会社デジタルデータマネジメント

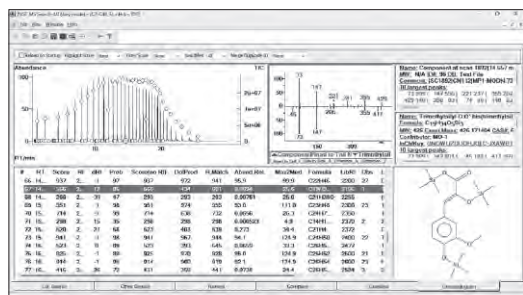
〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル

TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772

URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library (NIST2026)

価格 (税込) : EI Massのみ/新規893,200円
EI+MS/MS/新規948,200円



■The NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library (EI-MS)

431,000 EIスペクトル (347,000化合物)

■NIST Tandem Mass Spectral Library (MS/MS and MS/MS/MS)

3,200,000 MS/MSスペクトル (51,501化合物の400,000プリカーサイオン)

■NIST Retention Index Database

492,000 RI

■データステーション用フォーマット (EI-MSのみ) *追加料金が必要

(★Agilent MassHunter / ChemStation ★Shimadzu GCMSolution)

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

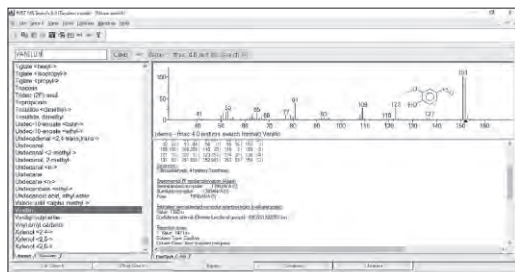
URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

2026 コンピュータ・ケミストリー

～ 最新優秀ソフト製品 ～

Mass Spectra of Flavor and Fragrance of Natural and Synthetic Compounds, 4th edition (香料のマスペクトル)

価格(税込) : 825,000円



Chromaleont (イタリア) のDr.Mondelloによる4,030件のマスペクトルにリニアリテンションインデックス、CAS番号、化学構造型、一般名、CAS名、シノニウム、分子量、分子式、InChIKeyなども含まれています。

3種類の固定相 (半極性、無極性、極性) のホモログ系列 (Alkanes C7-C40, FAMES C4-C24, FAEEs C4-C24) を使って計算されたりニアリテンションインデックスがあります :

1. poly (5% diphenyl/95% dimethyl) siloxane phase (4030 LRIs)
2. poly (dimethyl) siloxane phase (2573 LRIs)
3. poly (ethylene) glycol phase (2780 LRIs)

(NISTフォーマットとAgilentフォーマット有り)

株式会社デジタルデータマネジメント

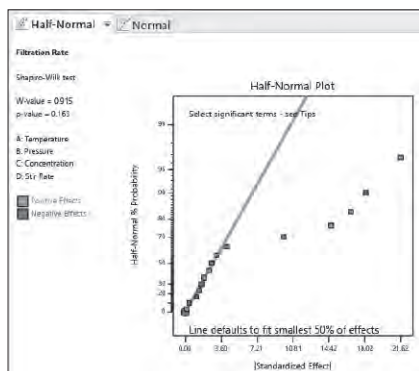
〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル

TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772

URL: <http://www.ddmcorp.com> E-mail: tech@ddmcorp.com

Design-Expert (実験計画法)

価格(税込) : 198,000円(年間ライセンス) / 594,000円(永久ライセンス)



計画を作成する計画ビルダー、実験試行を追加するフォルドオーバー機能、因子の効果と相互作用を診断する強力なツールを備え、プロセスまたは製品を最適に改善するために重要な因子を識別できます。

- 32個までの因子の2水準因子の計画 : プロセスまたは製品を最適化するために重要な因子を識別できるスクリーニングに適しています。
- 全般的な因子研究 : 任意の因子数と水準数で原材料供給のソース対形式のようなカテゴリ因子の最善の組み合わせを見つけることができます。
- 応答曲面法 (RSM) : 最高の実行性を得るために最適なプロセス設定を見つけます。
- 使用できる計画法 : ・Full Factorial Design ・Fractional Factorial Design ・Plackett Barman Design ・Central Composite Design ・Box Bennis Design, ・D-Optima Design ・Mixing Design ・Taguchi OA Design

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

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

価格(税込) : 572,000円 / 82,500円 / 年間(一般/教育)



2,332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型の立体表示
- ユーザーデータベースの作成

プラットフォーム : Windows 10/11 (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

2026 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)
Match!	粉末回折データベース (ICDD PDF-2/4/5/Axio) 検索、回折波形のデータ処理、リートベルト解析 (FullProf)。	385,000円 (一般) 253,000円 (教育)
Wiley Registry of Mass Spectral Database 2023	コーネル大学 (米) 収集されたデータにChemical Concept (独) で、収集されたデータが追加された873,000スペクトル (741,000化合物) の最も大きなEIマスマスペクトルライブラリー。	1,971,200円
Mass Spectra of Designer Drugs 2026	合成薬物 (麻薬)、毒薬化学に使用される物質のEIマスマスペクトル、化学構造式、Kovatsリテンションインデックス他。スペクトル数: 32,855件 (約25,343件の化合物)。	1,540,000円
Mass Spectra of Flavors and Fragrances of Natural and Synthetic Compounds 4 th Edition (FFNSC4)	香りと香料の分野で著名なDr. Mondelloによって収集されたモノテルペン、セスキテルペン、酸化誘導体などを含む精油のマスマスペクトル (4,030件) とリテンションインデックス (3種類) のデータベース (NISTフォーマット)。	825,000円
Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography/Mass Spectrometry, 4 th Edition	Dr. Adamsの約2,200件のEIテルペンライブラリー。	198,000円
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。	132,000円 (一般) 99,000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。	363,000円 (一般) 198,000円 (教育)
ChemDoodle 2D/3D, version 12	化学構造式の作図と3D構造への変換、反応式の描図、構造式からIUPAC名の作成とその逆、ルイス構造の自動作成、ニューマン投影式の作成、カーボンナノチューブの作成ツール、主要雑誌のスタイルシートでのドキュメントの作成、クリップアートのテンプレート。	170,500円
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。	92,400円 (一般) から 16,500円 (教育) まで
CRANIUM	化学構造式の描図またはMOLファイルのインポートによる構造式を基に物性値を推算。混合物もサポート。推算値を物性データベースとして保存。ヘンリー定数、オクタノール/水の分配係数、熱容量、活量係数他の30種類以上。	440,000円 (一般) 165,000円 (教育) (買切り)
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。	253,000円 (一般) 224,400円 (教育) まで
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別でき、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。(買取り/年間ライセンス有)	198,000円 (年間ライセンス) 594,000円 (永久ライセンス)
DIAMOND	結晶構造の可視化、CIF、Shelx、PDB他のデータをインポート。空間群と原子パラメータから作成。	275,000円 (一般) 143,000円 (教育)
DIPPR with DIADEM Elite	2,332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572,000円 (一般) 年間82,500円 (教育)
Peak Spectroscopy	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。	308,000円 (一般) 209,000円 (教育)
GRAMS/AI	IR、UV、GC、LC、MS、NMRなど機器分析データの処理。	495,000円 (一般) 198,000円 (教育)
GRAMS IQ	PLS-1、PLS-2、PCR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。	220,000円 (要GRAMS/AI)
HSC Chemistry Version 10	28,000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。	年間528,000円 (一般) 年間176,000円 (教育)
Mass Mountaineer	NISTフォーマットのデータベース検索、同位体、フラグメント、精密質量の計算など。	209,000円 (Fullバージョン)
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クラスターリング、PLSまたはPCRの回帰分析ができます。	286,000円 (一般) 121,000円 (教育)
Molecular Modeling Pro Flavor Plus	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。	198,000円
Molecular Modeling Pro Flavor Plus	Molecular Modeling ProにFlavor Simulator機能を追加。	198,000円
NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library (NIST2026)	431,000件のEIスペクトル、3,200,000件のMS/MSスペクトル	EI Massのみ/新規893,200円 EI+MS/MS/新規948,200円
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。	550,000円 (一般) 253,000円 (教育)
Polymerix	マスマスペクトルからリピートユニット、アルファ/オメガ末端基、付加物を見つけて順次アサイン。分子量分布の計算。	2,420,000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。	275,000円

2026 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)
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。	220,000円
The Static SIMS Library	約800物資のポジティブ/ネガティブスペクトルデータベース。	792,000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。	66,000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。	71,500円

■次回予定

2027 コンピュータ・ケミストリー ～ 最新優秀ソフト製品 ～

2027年1月号に掲載を予定しております。

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