

Chrowler™

網羅的化学構造統合検索ソリューション

ありとあらゆる化学構造に関する統合的な検索を可能とする画期的なケムインフォマティクスツールです。ネットワーク上の様々なデータソース中に含まれる PDF や MS Office ファイル、画像ファイル、各種化学構造描画ツールのファイルなどあらゆるファイルの化学構造情報を収集してデータベース化、インデックスを生成して、高速な検索を可能とします。

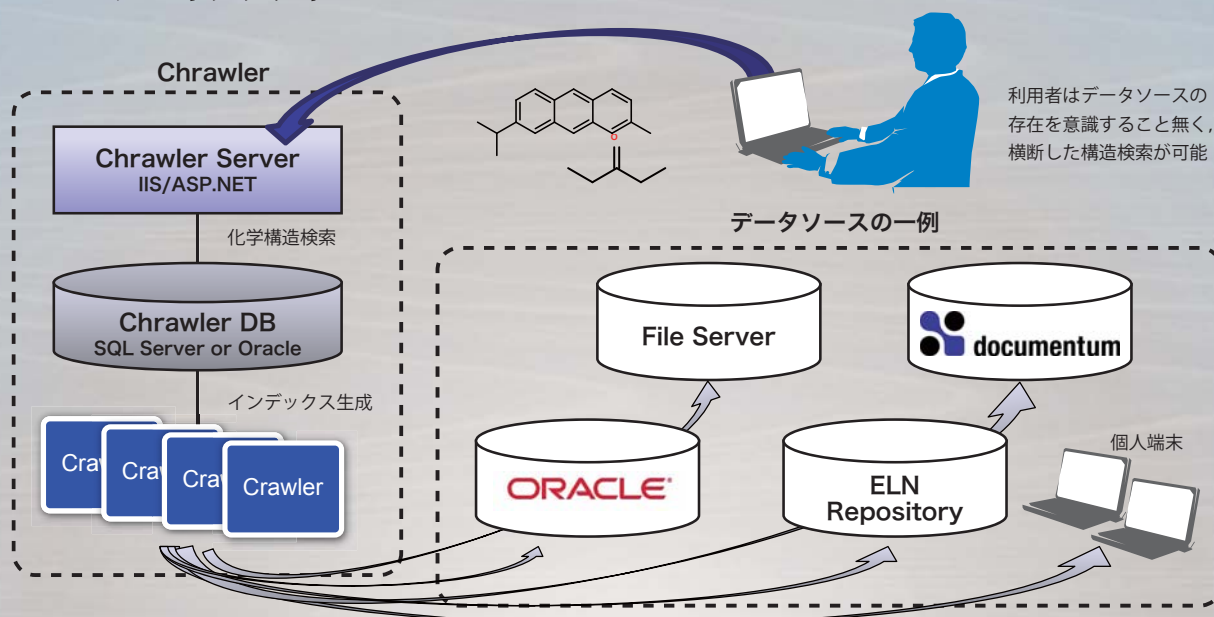
検索画面

Web による検索インターフェースを持ち、接続された様々なデータソース（ローカルドライブ、ネットワークドライブ、ELN レポジトリ、Documentum, Oracle 等）に対し、構造検索が可能です。構造検索は完全一致検索、部分構造検索、構造類似検索が可能で、テキスト全文検索と組み合わせた検索も可能です。

検索結果

検索結果プレビュー

Chrawler アーキテクチャ



主な機能

- ・名前 - 構造変換機能
 - データソース中に含まれる化合物に関連したテキストから構造を抽出しインデックス生成
 - OPSIN, OPENEYE, ChemDraw から選択可能
- ・OSR (Optical Structure Recognition) 機能
 - OSRA を利用した PDF や画像ファイルからの化学構造抽出とインデックス生成
- ・US Patent No., 国際特許番号を指定した構造抽出機能
 - USPTO, google patent から指定した特許番号のテキストを DL し, テキスト内の構造をインデックス化
- ・構造検索機能
 - 完全一致検索, 完全一致検索 (立体化学を考慮), 部分構造検索, 類似度検索 (60%, 80%, 90%), 配列検索 (protein, DNA)
- ・全文検索機能
 - 日本語の全文検索には現在未対応
- ・構造プレビュー機能
 - ヒットした検索結果に対し, 元ファイルのプレビューが可能
- ・Chrawler Web 検索インターフェース
- ・Chrawler SOAP インターフェース

対応データソース

- Network drives
- Documentum
- Electronic Lab Notebook
- Compound databases (Oracle/SQL Server/MySQL)
- Outlook email servers
- Microsoft SharePoint

インデックス対象データ

- | | | |
|-------------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| Word DOC and DOCX | Accelrys Draw SKC | ELN Repositories |
| Excel XLS and XLSX | Marvin MRV | Corporation Compound IDs |
| PowerPoint PPT and PPTX | JChem for Excel | IUPAC Names, |
| Outlook Emails | JSDraw JSDRAW and JSSDF | Trade Names and other Synonyms |
| SDF, MOL, RXN, MOL2, | TouchMol | SMILES Strings |
| CML | TouchMol for Office | InChI Strings |
| SMILES, InChI | ZIP, GZ, TAR compressed files | CAS |
| ChemDraw CDX and CDXML | Oracle, SQL Server, MySQL | PDF |
| ChemDraw for Excel | databases | Image |
| ChemFinder CFX | EMC Documentum Repositories | |

問合せ先

Scilligence

Scilligence Corporation
15 New England Executive Park
Burlington, MA 01803 USA
Japan Contact: Masahiro Hayashi
URL: <http://www.scilligence.com/>
Mail: mhayashi@scilligence.com

サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社

サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社

日本販売代理店
サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社
〒113-0033
東京都文京区本郷 5-1-16 NP-II ビル 2 階
URL: <http://www.st-systems.co.jp/>
Mail: info@st-systems.co.jp