

BIOVIA DRAW

データシート

BIOVIA Draw は、複雑な分子や化学反応を極めて容易に描画、編集でき、科学情報を共同で検索、表示、伝達、アーカイブすることを促進します。

よりすばやく、より効率的に

BIOVIA Draw のルック&フィールは ISIS/Draw と同じですが、化学構造描画の速度と効率性がさらに向上しています。

- 多目的描画ツールを用いて、結合の描写、環の削除、原子の追加などを途切れなく実施
- よく使用する構造や化学略語を簡単に再使用できるようツールバーにドラッグ&ドロップ
- 右クリックで、原子、結合、断片の特性、ならびにクエリーオプションを表示
- 「元に戻す」、「やり直す」の操作を複数回実行して手順を容易にたどることが可能
- クエリーおよびエニユメレーション用に R グループを持つ構造を簡単に作成
- 反応式に対して、文字、色、さまざまなスタイルの矢印で注釈をつけられます。
- 出版品質の構造を作成し、Microsoft Office のレポートおよびプレゼンテーションに統合

連携・設定が簡単

企業用ソフトウェアである BIOVIA Draw をご利用になれば、Java® および .NET のカスタムアプリケーションとの柔軟な連携、さらには Symyx Isentris® および ISIS アプリケーションとの連携も可能です。また、それぞれの組織のニーズに合うよう、XML を用いて化学描画のルック&フィールを調整できます。

- カスタムアドインを作成して描画作業を向上
- 既存のデスクトップアプリケーションと連携
- ウェブアプリケーション上で検索および閲覧

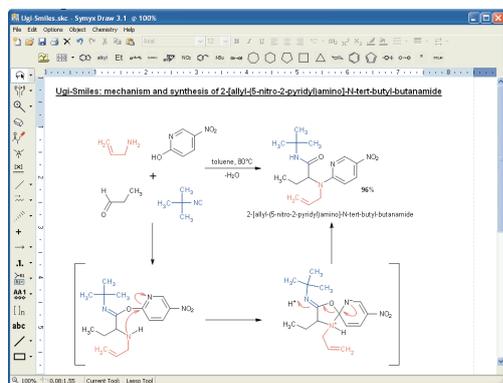


図1: BIOVIA Draw では、高品質印刷に適した合成を容易に描画できます。構造の下に表示される製品名は、付属の「構造→名前」への変換機能を用いて自動的に生成されます。

研究者向け： すばやく、効率的に構造およびクエリーを描画

- 構造・名称変換機能は以下に対応：「構造→ IUPAC 名」「IUPAC 名→構造」、「構造→標準 SMILES 名」「SMILES →構造」、「構造→InChI 名」「InChI →構造」「構造→InChI キー」
- ISIS と互換性のあるスケッチを作成・編集、あるいは強化されたスケッチクリーニング機能でレガシースケッチを編集
- ISIS/Draw の化学描画ツールや操作を踏襲しているため容易に移行が可能
- ポリマー、組成、混合物 (S グループ) を作成、編集
- 内臓 R グループクエリーロジックを含む、R グループ (Markush) クエリーを作成、編集
- 3D クエリーを作成、編集 (3D 回転など、あらゆる 3D クエリー機能に対応)
- シンボルを自由にカスタマイズ (複合シンボルなど)
- 豊富な保護基テンプレートライブラリから選択
- NEMA アルゴリズムにより、四面体および幾何学的立体の中心の化学的認識機能が強化

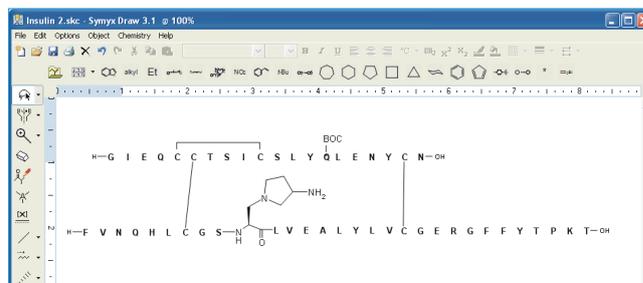


図2: 1文字/3文字表記のペプチド、DNA、RNAを容易に作成、登録検索、表示することができます。また、非天然の残基を付加する為にシーケンスを修正できるほか、テンプレートを使用して保護基を追加することも可能です。

生化学者向け： 化学修飾したペプチドやヌクレオチドのシーケンスを描画、登録、検索、報告

- シーケンスツールを用いて、1文字/3文字表記のペプチド、DNA、RNA シーケンスを作成
- 同じツールで、交差結合、ジスルフィド架橋を描画、あるいは側鎖保護基を追加
- クリップボード、FASTA、Swiss-Prot、PDB、EMBLファイルのテキスト表記による分子を、化学的に意味を持つシーケンスに変換
- シーケンスの残基を完全構造にまで拡張して、化学修飾を描画

開発者向け： 構造式描画/表示機能をアプリケーションに追加し 組織のワークフローに合うようにカスタマイズ

- BIOVIA Drawを Microsoft Internet Explorer® ブラウザで使用
- BIOVIA Draw は Microsoft XP、Vista、Office 2003/2007ソフトウェアに対応
- 以下のカスタムアドインなどを用いて、BIOVIA Draw の
 リック&フィールドを用意に拡張することが可能:
 - 2D-to-3D Structure Converter*
 - ACD/Labs calculators*
 - ACD/Name*
 - Enumerator
 - Bio-availability (Rule of 5)
 - Calculate-As-You-Draw
 - Isotopomer Distribution

*別途ライセンス要

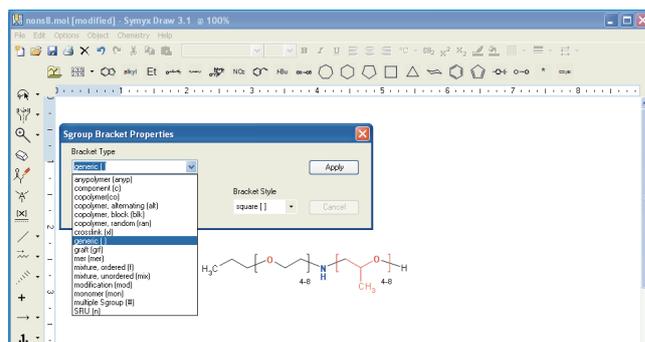


図 3: ポリマー、混合物、組成 (Sグループ) などの構造にすべて対応しています。この例では、汎用データと S グループの組み合わせを使用して、Markush 構造を表示しています。

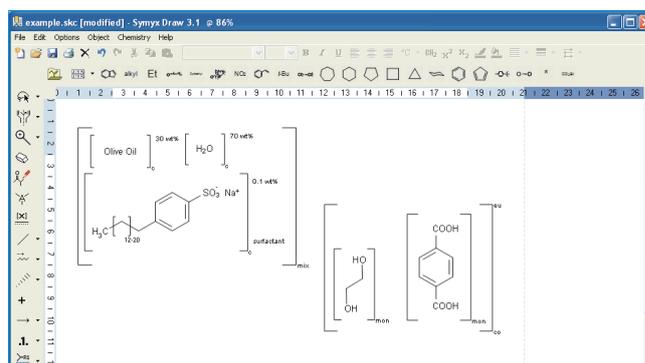


図 4: ポリマー、混合物、組成、Markush 構造を含む混合化合物、およびポリエチレンテレフタレート (PET) の複雑な混合物の例が示されています。

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語) をご参照ください。



©2014 Dassault Systemes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOWIA, EXPLERD, 3D VIA, 3BIOVIA, Discovery, StudioVDM, BIOVIA, および NETVIBES はアメリカ合衆国、BIOVIA、および NETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国におけるダッソー・システムズまたはその子会社の登録商標または商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、書面による事前の承認が必要です。