

2015年10月1日

プレスリリース

化学研究の全分野で利用価値のあるデータベースの利用範囲が拡大  
—CSD・GOLDのアカデミックライセンス保持者は  
ケンブリッジ結晶学データセンターの全ソフトウェアへ無料アクセス可能に—

化学情報協会ならびに大阪大学蛋白質研究所は、化学分野における国際的なデータベース活用において連携を行っているケンブリッジ結晶学データセンター(Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC)が発表したプレスリリースを受けて、国内向けに次のとおり、お知らせいたします。

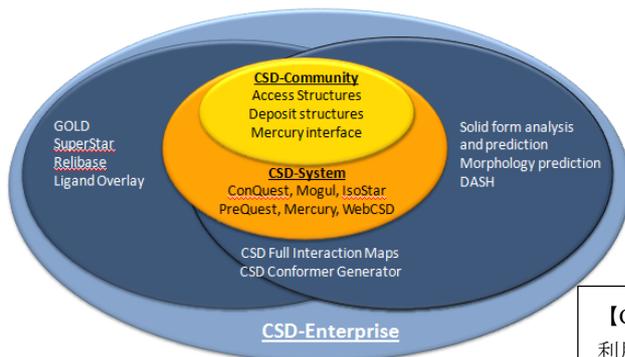
化学情報協会は、1981年以来、CCDCの国内代理店として、会社等営利機関向けにCCDCのサービスを提供しています。また、大阪大学蛋白質研究所は、国際蛋白質立体構造データバンク (wwPDB)の4拠点の一つとして日本蛋白質構造データバンク (PDBj)を運営し、アジア・オセアニア地区のデータ登録・配信と各種サービスを行っており、CCDCサービスの国内の大学・教育機関向けの窓口ともなっております。

【発表内容】 (英国ケンブリッジおよび米国ニュージャージー州ピスカタウェイ発、2015年9月1日)  
<http://www.ccdc.cam.ac.uk/NewsandEvents/News/Pages/NewsItem.aspx?newsid=41>

ケンブリッジ結晶学データセンター(Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC)は、世界のアカデミック向けに提供しているソフトの重要なアップグレードを発表しました。2016年以降、ケンブリッジ結晶構造データベース(Cambridge Structural Database, CSD)、またはドッキングソフトGOLDを年間ライセンスで利用しているすべてのアカデミックユーザは、下記に紹介するCSD-Enterpriseの全機能を追加費用なしで受けることができます。これにより研究分野に合わせ、CSDの他、CCDCが公開しているすべてのソフトへのアクセスが可能になります。

CSD-Enterpriseには、CSD Systemの新バージョン、GOLD、粉末結晶構造解析ソフトDASHの他、構造化学、分子モデリング、生命科学、材料科学の研究向けソフトが含まれます。GOLDの年間ライセンスまたはCSD Systemのライセンスを持つアカデミックユーザは、Researcher、Group、Campusのどのレベルであるかを問わず、CSD-Enterpriseのコンポーネントの全部または一部を必要に応じてダウンロードして使用することができます。

CCDCのコリン・グルーム所長は「CSDの豊富な構造化学データは科学研究の全分野で利用価値があります。アカデミックユーザにCSD-Enterprise全体を提供することで、網羅的なソフトのコレクションから研究に必要な特定のものを任意に入手できることとなります」と述べています。



【CSD-Enterpriseの概要】

利用範囲が、従来のCSD-System・GOLDから大幅に拡大。

### 【ケンブリッジ結晶学データセンターについて】

ケンブリッジ結晶学データセンター(CCDC)は、公益のために化学および結晶学の進歩を図ることを使命とし、共同研究およびCSDの開発を通じて全世界的に向けて構造化学研究を支援しています。CSDは分子性結晶構造に関する完全に管理された最新データを網羅的に提供する世界唯一の知識ベースです。



THE CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC  
DATA CENTRE

CSDは50年前に世界最初の数値データベースの一つとして発足し、現在では785,000件以上のレコードを収録しています。最新の構造解析用ソフトの提供、受容体モデリング、リガンドデザイン、ドッキング、リード最適化、材料研究などの専門家による研究サービスがCCDCの価値を一層高めています。CSDのレコードはすべてオンラインでアクセスでき、データベースおよび関連ソフトは世界1400ヶ所の研究機関に利用されています。その中には80ヶ国の大学研究機関および世界最上位の製薬・化学企業すべてが含まれています。

CCDCの起源はケンブリッジ大学の化学科にあります。現在では英国リサーチ・カウンシルに属する独立研究機関かつケンブリッジ大学の協力研究所であり、法的には登録チャリティとなっています。50年の歴史を持つ科学研究機関としてのCCDCの顕著な実績は、750本以上の査読付き雑誌論文に示されています。

▽詳しくは <http://www.ccdc.cam.ac.uk> をご覧ください。

### 【大阪大学蛋白質研究所について】

大阪大学蛋白質研究所は、多様な機能・構造・物性・生理機能をもつ蛋白質の基礎的、応用的研究を実施する全国共同利用研究所として1958年に創設され、現在では共同利用・共同研究拠点として特殊機器や大型機器を共同利用に供するとともに、多くの分野から共同研究員を受け入れて蛋白質に関する研究を推進しています。国際蛋白質立体構造データバンク (wwPDB) の4拠点の一つとして日本蛋白質構造データバンク (PDBj) を運営し、アジア・オセアニア地区のデータ登録・配信と各種サービスを行っております。また、CCDCサービスの国内の大学・教育機関向けの窓口ともなっております。



▽詳しくは <http://www.protein.osaka-u.ac.jp> をご覧ください。

### 【化学情報協会 (略称: JAICI) について】

化学情報協会は、化学技術情報の流通を図るため1971年に設立されました。米国をはじめ世界各国の情報機関などと協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして、大学・企業などの情報取得・分析から研究・開発までを支援しています。また、1981年以来、CCDCの国内代理店として、会社等営利機関向けにCCDCのサービスを提供しています。



▽詳しくは <http://www.jaici.or.jp> をご覧ください。

### 本件に関するお問い合わせ先

大阪大学蛋白質研究所 情報科学研究室 行俊 奈津子  
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2  
TEL: 06-6879-4311 FAX: 06-6879-8636  
e-mail: ynatsuko@protein.osaka-u.ac.jp

化学情報協会 広報グループ  
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル  
Tel: 03-5978-3608 Fax: 03-5978-3600  
<http://www.jaici.or.jp>