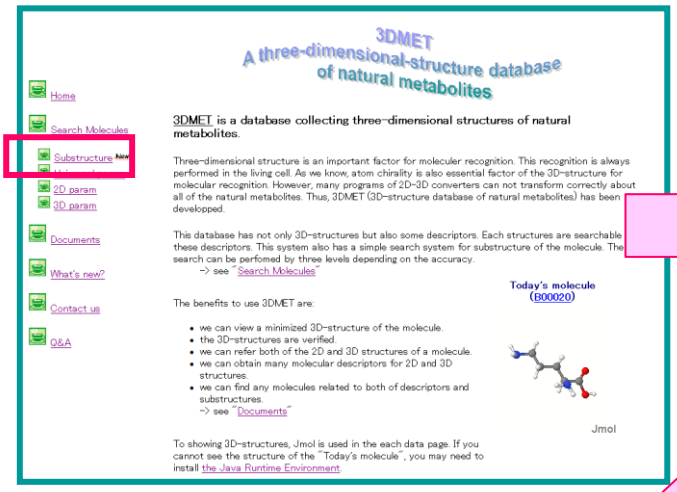
インターネットを利用した

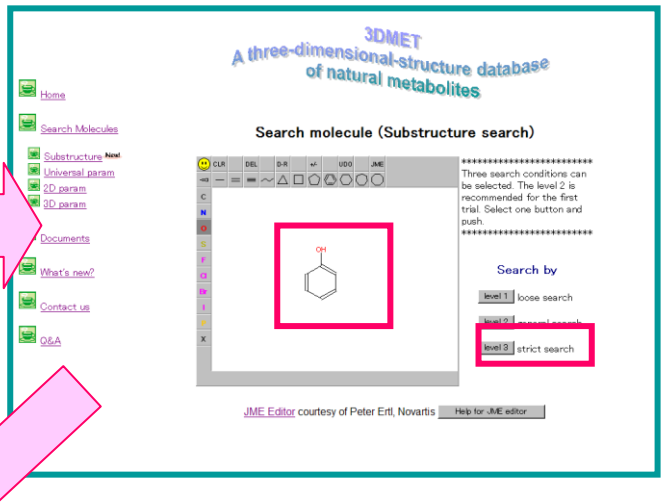
3DMET：生体内分子の三次元構造データベース

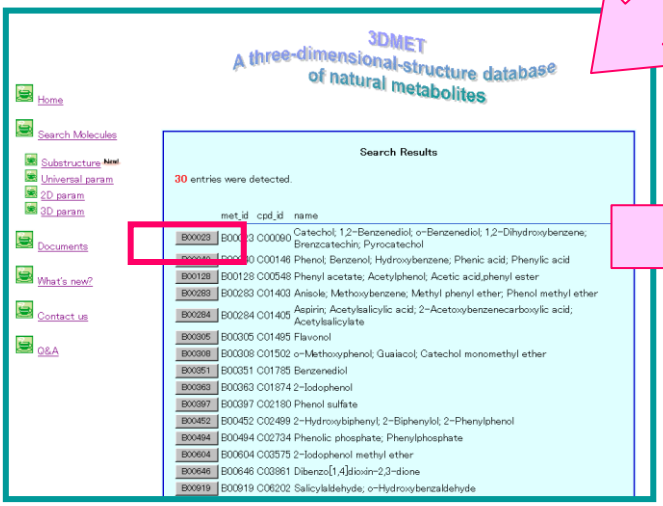
農業生物資源研究所

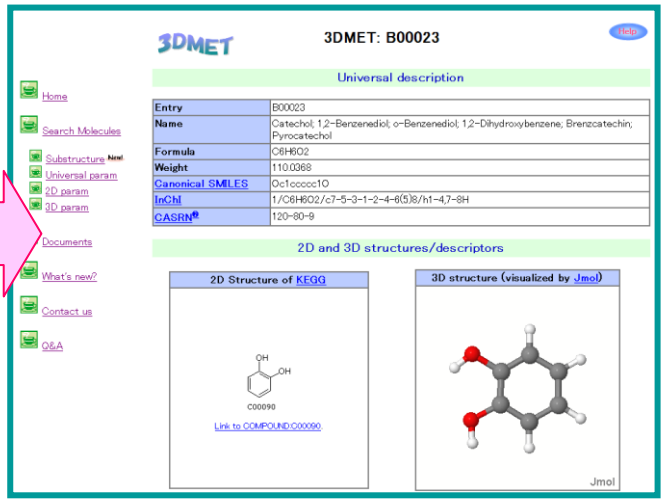
インターネットで簡単な操作により、部分構造と物性値から類似分子を検索し、分子の立体構造と物性値を閲覧することができる。

- ホームページ上で天然分子の三次元構造、物性値を閲覧することができる「3DMET（生体内分子の三次元構造データベース）」を開発しました。
- 細胞内での分子認識においては三次元構造が重要であり、特に農業分野で利用できる（農薬の設計、食品の成分分析等）天然物を中心に構成されています。
- 簡易な入力操作で、構造や物性が類似している化合物を検索し、その構造と種々の物性値を表示します。2008 年 8 月 1 日にリリース 2 を公開、現在 5676 件の立体構造を収録し、30 件の物性値から検索が可能です。
- システムを一般に公開（利用無料）しており、毎月約 50 ヶ国からアクセスがあります。









計算資源：
大規模アプリケーションサーバ
MOE（分子モデリングアプリケーション）

分子の構造入力でわかりやすい部分構造検索ができる。ゲノムネットの COMPOUND と連携しており、二次元構造と三次元構造を対照して検討できる。