

CONFLEX version 6

配座探索システム

CONFLEXは、フレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけ出します。今までの構造最適化プログラムでは、ユーザーが入力した初期構造に依存した局所的な最適化構造しか求めることができませんでした。

CONFLEXはその問題を解決し、フレキシブルな多配座分子の解析を可能にしました。

コンフレックス株式会社
〒160-0004
東京都新宿区四谷4-30
第2テイケイビル2F
TEL: 03-5360-6202
FAX: 03-5360-6203
Email: info@conflex.co.jp
http://www.conflex.co.jp

Conflex USA
12526 High Bluff Drive, Suite 300
San Diego, CA 92130 USA
TEL: +1-760-930-9277
USA: 1-800-298-0054
FAX: +1-509-692-4541
Email: info@conflex.us
http://www.conflex.us

Version 6 新機能

■結晶構造最適化

• CONFLEX独自のアルゴリズムに基づき、結晶構造計算を行うことが出来るようになりました。X線結晶構造が既知である有機化合物に対して、配座異性体や分子配向の違いに由来する様々な結晶構造を最適化することが可能です。それにより、結晶多形のエネルギー評価を容易に検討することが出来ます。

■溶媒効果を取り入れた構造最適化・振動解析計算 (MMFF94s)

• GB/SAモデルを用いた計算が、構造最適化・振動解析および配座解析まで適用範囲が広がりました。利用できる分子力場はMMFF94sです。

■アミノ酸残基置換機能の追加：PDBファイルオプション

• CONFLEXの入力ファイルとしてタンパク質構造データベース (PDB) のファイル形式 (.pdbファイル) を用いた場合に限り、ユーザーが指定したアミノ酸残基を任意の必須アミノ酸残基に置換できるようになりました。この「アミノ酸残基置換機能」によって、構造既知のタンパク質の一次配列を変更することが可能になり、ホモロジーモデリングと同様な操作が可能になりました。

■配座探索オプションの追加

• 回転異性体が予想される結合のStepwise Rotationのステップ数を指定できるようになりました。これにより、高分子材料や生体高分子の、限定的な配座探索も可能になりました。

■MMFF94s用力場パラメータの追加

• 弊社で開発したMMFF94s用の力場パラメータを追加しました。これによって、MMFF94s力場で計算できる分子種が増えました。

■遷移状態探索法の導入

• 配座変換の遷移状態を探索するため、独自に開発したフロンティア振動モード追跡法を導入しました。

CONFLEXの機能

- 構造最適化
- 配座探索
- 振動動力学解析
- GB/SA溶媒効果
- 結晶構造計算
- 遷移状態探索

ファイルフォーマット

- mol - MDL-Molファイル
- sdf - MDL SDファイル
- pdb - Protein data bankファイル
- cmf - 結晶構造ファイル

CONFLEX 分子力場

- MM2
- EMM2
- MM3
- MMFF94s

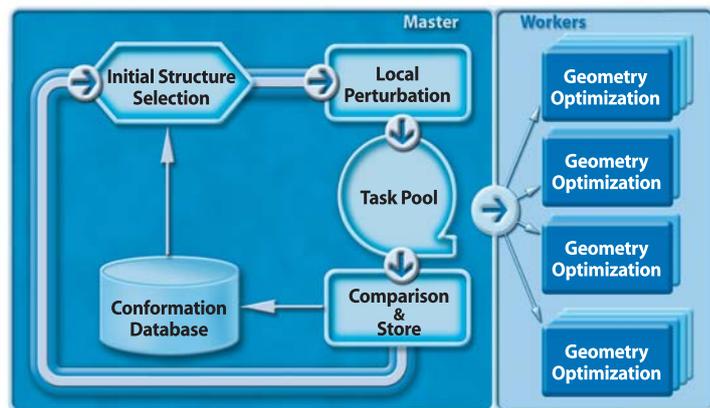
動作環境

CONFLEX

OS: Redhat Linux 8 以上
Windows XP
Mac OS X 10.4 以上
プロセッサ: 1.0GHz 以上
ディスク: 40GB
メモリー: 256MB 以上

PARALLEL CONFLEX

OS: Redhat Linux 8 以上
プロセッサ: 1.0GHz 以上
ディスク: 40GB
メモリー: 256MB 以上



並列版CONFLEXのアルゴリズム