

# 受託計算サービス

## High Performance Conformation Analysis

受託計算サービスでは、コンフレックス株式会社が独自に開発したシーケンス型配座創出アルゴリズムと並列計算システムを応用したCONFLEX法を使用して配座探索を行います。取り得る可能な配座異性体を徹底的に調べ、最も安定な配座を特定します。

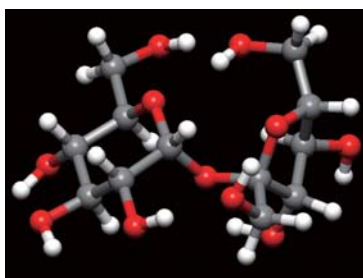
さらに、ab initio計算等の精度の高い手法により、探索した各配座異性体に対して、エネルギーや各種スペクトルなどお客様の要求される物性値等の予測計算を実施する事も可能です。

また、AMBERプログラムを用いてタンパク質やDNAなど生体分子の分子動力学計算を行うサービスもあります。溶媒和シミュレーション、QM/MMシミュレーションなどにより、生体分子の挙動に関してさまざまな知見を得る事が可能になります。

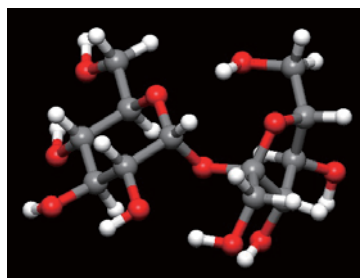
計算化学のプログラムを使いこなすには、高度な専門的知識が必要とされ、限られた研究時間で多くの結果を出すことは難しいのが現状です。このような、計算化学を利用したいものの計算できる環境や人員が不足している企業や大学の研究者の皆様のために、受託計算サービスを提供し、研究開発の時間短縮や経費節減に協力いたします。

また、弊社専門の技術スタッフによるサポートサービスも提供しております。ご購入いただいたソフトウェアを最大限にご活用いただくためにも、サポートサービスをお勧めしております。

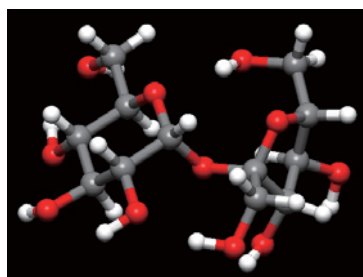
### スクロースの配座異性体：MMFF94s力場を使用



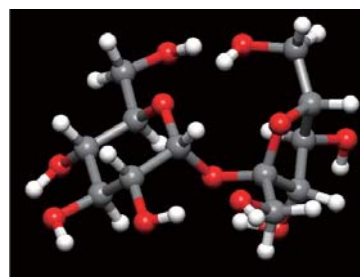
最安定構造



2番目



3番目



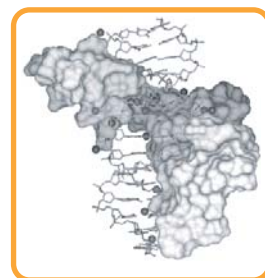
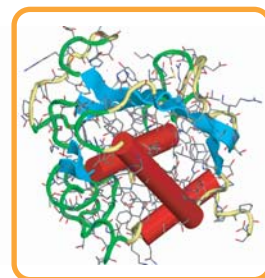
4番目

### 計算内容

1. 配座発生
2. ab initio計算
3. MD計算 (AMBER)
4. 各種振動計算(熱力学諸量)
5. NMR化学シフト(ab initio)
6. 溶媒効果計算

### 主な受託計算実績

- 配座解析
- 反応解析
- 量子化学計算
- タンパク質構造解析
- IR/UV/Vis/CD/NMRスペクトル解析
- 遷移状態探索



ご依頼の際は、機密保持契約書を締結させていただいております。