

CONFLEX 7

配座解析プログラム

コンフレックス株式会社
〒108-0074
東京都港区高輪3-23-17
品川センタービルディング6F
TEL : 03-6380-8290
FAX : 03-6380-8299
Email : info@conflex.co.jp
http://www.conflex.co.jp/

CONFLEX USA
Email: cust-info@conflex.net
http://www.conflex.net/

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。実践的に意味のある安定な配座異性体を優先的に創出することにより、効率的な配座空間探索を実現します。

また、配座分布を考慮した基準振動解析、熱力学的諸量、円二色性スペクトル、紫外・可視光吸収スペクトル、およびNMRカップリング定数を計算により予測します。

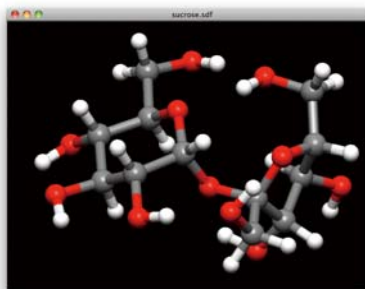
CONFLEXの主な機能

● 配座探索

分子内の環状部分と直鎖状部分を自動的に判別し、環状部分にはCorner FlapおよびEdge Flip、直鎖状部分にはStepwise Rotationを行うことで初期構造を創出して、それら全てに対して構造最適化を行い得られた配座異性体を保存します。

配座探索の目的の1つとして、対象とする分子の最安定構造の算出が挙げられますが、分子構造が柔軟である場合、探索により得られる配座の数が非常に大きくなる場合があります。そこでCONFLEXでは、常にエネルギー的に安定な配座から初期構造を創出する貯水池注水アルゴリズムと、最安定構造から見てどのくらいのエネルギー差の範囲内にある配座まで試行構造として探索に用いるかを指定できるようにしています。

この2つにより、最安定構造探索の効率化と探索配座数の爆発的な増加を防ぐことができます。

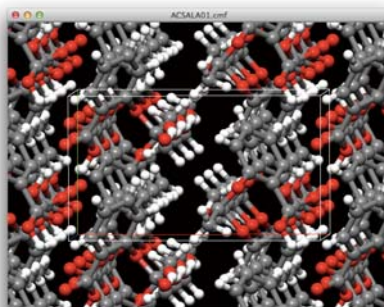


Conformers (Population)		
1	190.981 kcal/mol	(24.6601 %)
2	191.306 kcal/mol	(24.6439 %)
3	192.072 kcal/mol	(6.7679 %)
4	192.127 kcal/mol	(6.1693 %)
5	192.564 kcal/mol	(2.9473 %)
6	192.618 kcal/mol	(2.6924 %)
7	192.676 kcal/mol	(2.4425 %)
8	192.96 kcal/mol	(1.5104 %)
9	193.452 kcal/mol	(0.6588 %)
10	193.557 kcal/mol	(0.5516 %)
11	193.579 kcal/mol	(0.5321 %)
12	193.608 kcal/mol	(0.5066 %)
13	193.634 kcal/mol	(0.4849 %)
14	193.724 kcal/mol	(0.4162 %)
15	193.878 kcal/mol	(0.3209 %)
16	193.923 kcal/mol	(0.2976 %)
17	193.954 kcal/mol	(0.2822 %)
18	194.032 kcal/mol	(0.2475 %)
19	194.045 kcal/mol	(0.2421 %)
20	194.086 kcal/mol	(0.2259 %)
21	194.096 kcal/mol	(0.2223 %)
22	194.171 kcal/mol	(0.1958 %)
23	194.175 kcal/mol	(0.1944 %)
24	194.206 kcal/mol	(0.1844 %)
25	194.265 kcal/mol	(0.1669 %)
26	194.327 kcal/mol	(0.1506 %)
27	194.397 kcal/mol	(0.1338 %)
28	194.407 kcal/mol	(0.1315 %)

● 結晶構造最適化/結晶構造探索

分子構造データと空間群の対称性を入力することで、自動的に結晶構造を作成して構造最適化を行ない、エネルギー極小に位置する結晶構造を網羅的に算出します。

最適化した一連の結晶構造に対して、エネルギーの低い順に並べるだけでなく、あらかじめ用意した粉末回折データに近い順に並べることもできます。



● 粉末X線回折データの出力

結晶構造の粉末回折データを算出し出力します。X線源の元素や波長を変えることも可能です。

CONFLEX 7 新機能

- 結晶構造探索
- 粉末回折データの出力
- ChemOffice対応
- ユーザー定義/パラメーターの追加機能
- ホストリガンド配位探索機能
- 圧力を考慮した結晶構造最適化機能
- 新型CONFLEX Interface
 - ・ ネットワーク経由の計算実行
 - ・ 各種スペクトル表示

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
- cif — 結晶構造ファイル

CONFLEX 分子力場

- MM2
- EMM2
- MM3
- MMFF94s

動作環境

OS: RedHat 6.1 - 6.6, 7.0
Ubuntu 12.04.3, 14.04
Windows 7, 8.1 (32bit&64bit)
Mac OS X 10.8, 10.9, 10.10

CPU: 1.0GHz以上
ディスク: 40GB
メモリー: 256MB以上

CONFLEX 7

配座解析プログラム

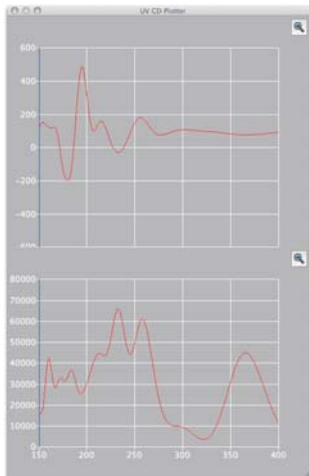
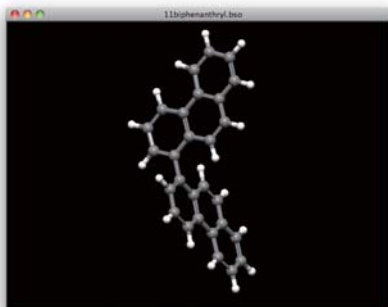
● 溶媒効果

GB/SAモデルを用いた計算が、構造最適化、振動解析及び配座解析まで可能です。

また、LogP値を自動的に算出することが出来ます。

● CD/UV/Visスペクトル解析

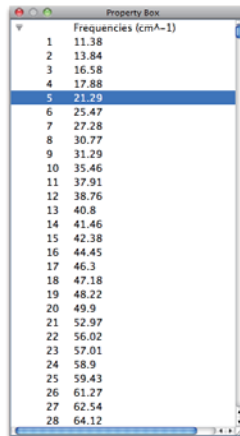
CONFLEXで得られた配座異性体についてCD/UV/Visスペクトル計算を行うことが可能です。



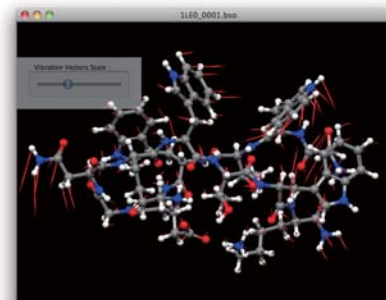
● 構造最適化と基準振動解析

構造最適化で得られた極小構造に対して、自動的に基準振動解析を行います。

基準振動解析により得られた振動モードの表示、およびGibbsの自由エネルギーなどの熱力学的諸量を算出します。構造を部分的に固定して最適化することも可能です。



Frequency (cm⁻¹)
1 11.38
2 13.84
3 16.58
4 17.88
5 21.29
6 25.47
7 27.28
8 30.77
9 31.29
10 35.46
11 37.91
12 38.76
13 40.8
14 41.46
15 42.38
16 44.45
17 46.3
18 47.18
19 48.22
20 49.9
21 52.97
22 56.02
23 57.01
24 58.9
25 59.43
26 61.27
27 62.54
28 64.12



● 遷移状態探索

配座変換の遷移状態の探索をするため、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ています。

● 分子オブジェクト分類法

複数分子で構成された複合体の計算において、分子単位(分子オブジェクト)で構造最適化や基準振動解析を行うことができます。また、指定した分子オブジェクトの配座空間探索を行うことができます。

CONFLEX Interface

● 読み込み可能なファイル

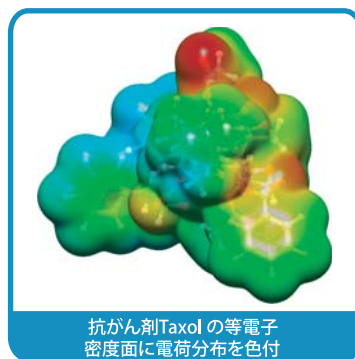
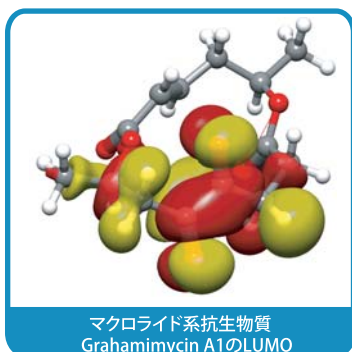
- MDLファイル: .mol, .sdf
- Gaussianチェックポイントファイル .fchk
- CONFLEX出力: .bso, .nmr
- GAMESSログファイル
- 多構造ファイル: .sdf
- Fireflyログファイル
- PDBファイル
- Sybyl mol2ファイル
- 結晶構造データ: .cif, .cmf
- ChemDrawからのカット&ペースト

● 分子の操作

- 結合多重度の修正
- 原子間距離に基づく、自動結合生成
- 原子の形式電荷の設定

● 分子の表示

- 表示形式: ball & stick, CPK
- 3Dでの分子の回転、ズーム表示
- 結合距離、結合角、ねじれ角の表示



● 計算の設定と実行

- 入力ファイルの作成
- ネットワーク経由でのジョブの実行
- 溶媒効果の指定と溶媒計算のパラメーターの指定
- 設定テンプレートの保存機能
- 頻繁に使用するキーワードの簡易設定

● 外部プログラムとの連携

- Gaussian, GAMESS, Fireflyなどの計算実行

● 計算結果の表示

- 結合長、結合角、ねじれ角の観察
- 探索後の各配座の表示
- 基準振動解析結果のベクトル表示
- スペクトルグラフの表示: IR, NMR, CD, UV-Visible, など
- 分子軌道および電子密度の表面表示
- 面の大きさのリアルタイム変更