

## CONFLEXとGaussianの連携活用

### ～配座探索の重要性～

コンフレックス株式会社

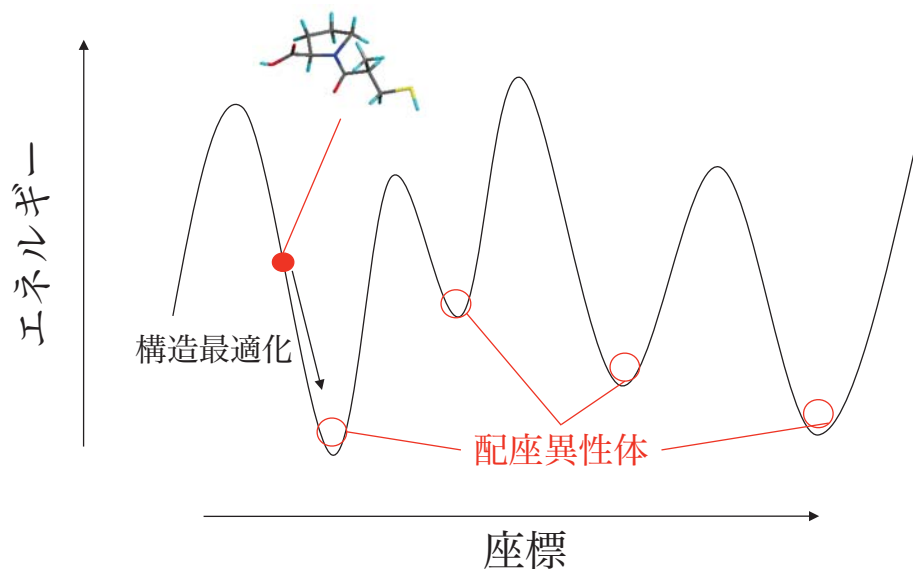
Email: [info@conflex.co.jp](mailto:info@conflex.co.jp) <http://www.conflex.co.jp/>  
TEL: 03-6380-8290 FAX: 03-6380-8299

## CONFLEXとは？

- フレキシブルな有機化合物の配座異性体を、熱振動による配座変換を模倣した独自のアルゴリズムを用いることで網羅的かつ効率的に創出することを実現したコンピュータ・システム
- 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、研究開発に必要な分子構造を確実に網羅
- 並列版による高効率な探索、結晶構造、各種スペクトル計算機能も備えた統合システム

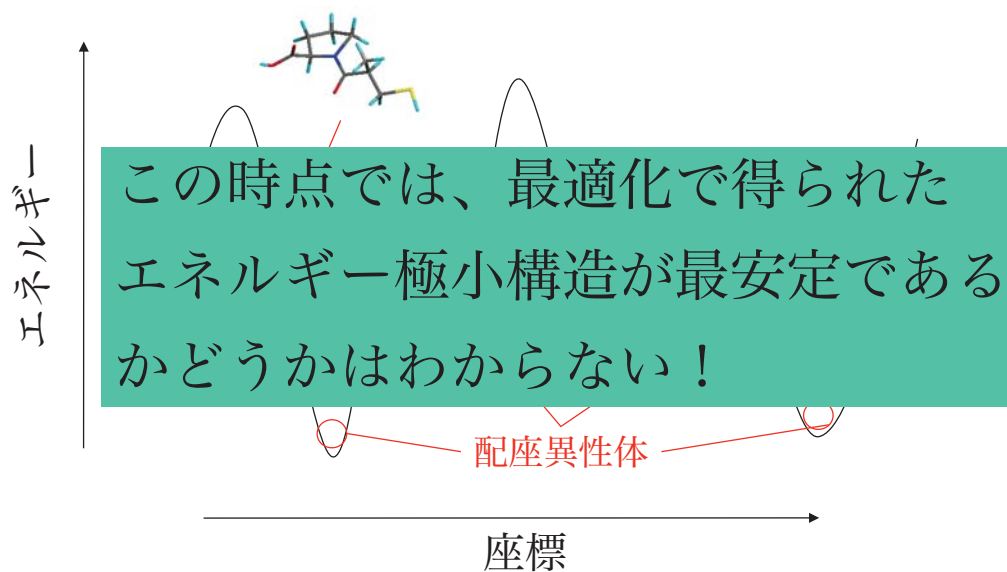
# 配座異性体と

## ポテンシャルエネルギー面



# 配座異性体と

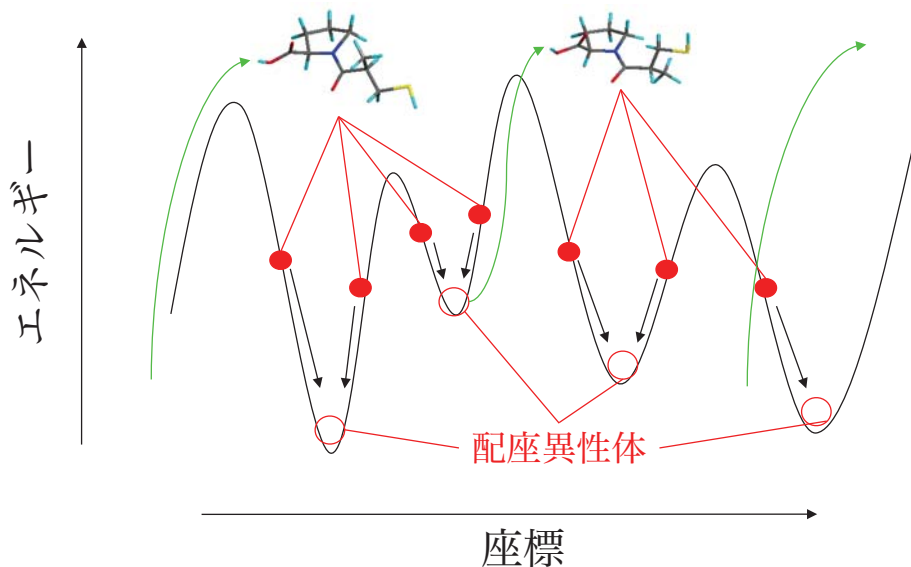
## ポテンシャルエネルギー面



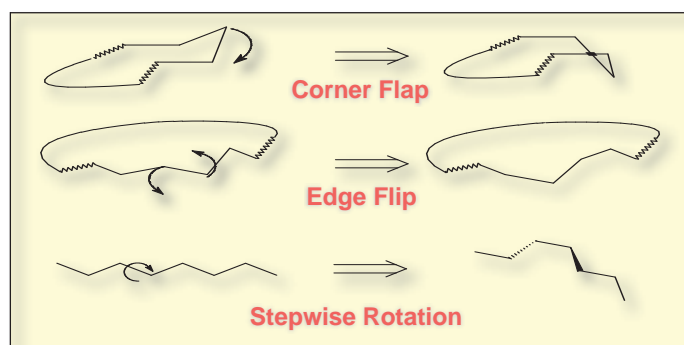
# 配座異性体と



## ポテンシャルエネルギー面



## CONFLEXによる配座空間探索



これら3つの局所変形操作は、熱振動によって配座異性体間で起こる相互変換運動を模倣している。

## CONFLEXによる配座空間探索 (2)



貯水池に水を注ぐときに、水面が徐々に上昇しながら地形の凹凸を埋めていくように、探索する配座空間を低エネルギー領域から徐々に高エネルギー領域に広げていく

## CONFLEXの主な機能

- 構造最適化
  - 経験的な分子力場を使用：MM2、EMM2、MM3、MMFF94、MMFF94s
  - 溶媒効果：GB/SAモデル (MMFF94s のみ)
- 配座探索、配座解析
  - CONFLEXアルゴリズム (Flip、Flap、Stepwise Rotation)
  - クラスタリング
- 分子性結晶計算
  - CONFLEX/KESSHOU



## 配座探索でわかること

---

- 最安定構造
- 配座異性体の存在比率（配座エネルギー）
  - 実験で得られる物性値は、配座異性体それぞれの物性値に分布比を重み付けした値の総和である
- 類似構造の分布（クラスタリング）
  - 既知の構造に類似した配座異性体の分布



## CONFLEXから Gaussianへ

---

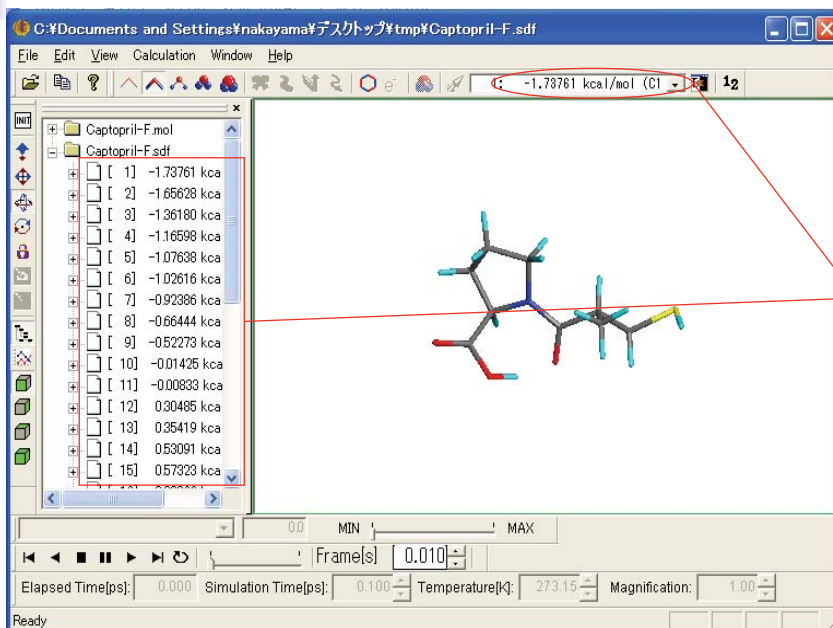
- 配座異性体は一通り求めたけれど・・・
- 配座エネルギーを、高精度の電子状態計算で求めたい
  - 電子状態に由来する物性値を求めたい
    - 双極子、多極子モーメント
    - NMR化学シフト、結合定数
    - 励起エネルギー、etc

# CONFLEXからGaussianへ

配座異性体は一通り求めたけれど・・・  
CONFLEXで得られた配座を  
Gaussianの入力として利用  
→ GaussViewで読み込みあるいは  
BARISTAからGaussianを直接実行

- NMR化学シフト、結合定数
- 励起エネルギー、etc

## BARISTAによる 配座探索計算結果の表示



配座異性体の  
相対エネルギー

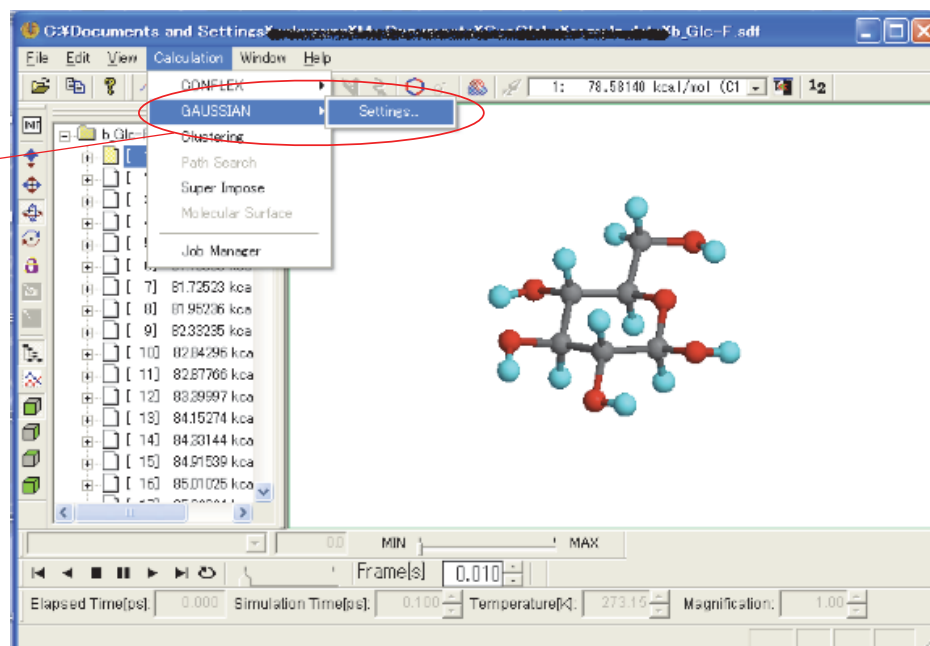
# CONFLEXから Gaussianへ :

## (1) BARISTAの利用

Calculation

-> GAUSSIAN

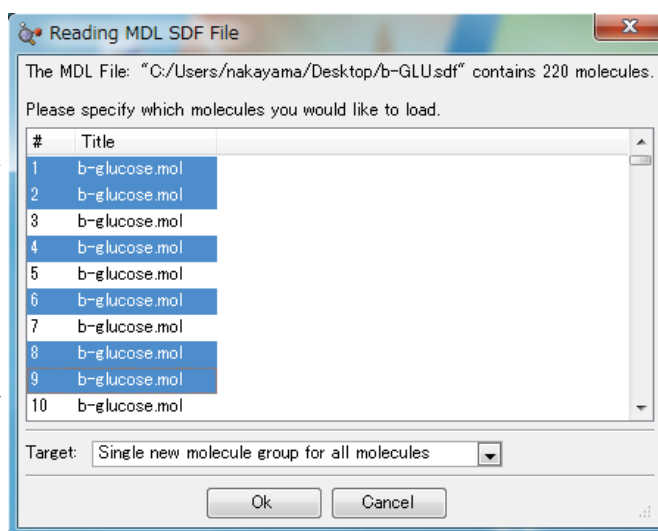
-> Settings...



# CONFLEXから Gaussianへ :

## (2) GaussViewの利用

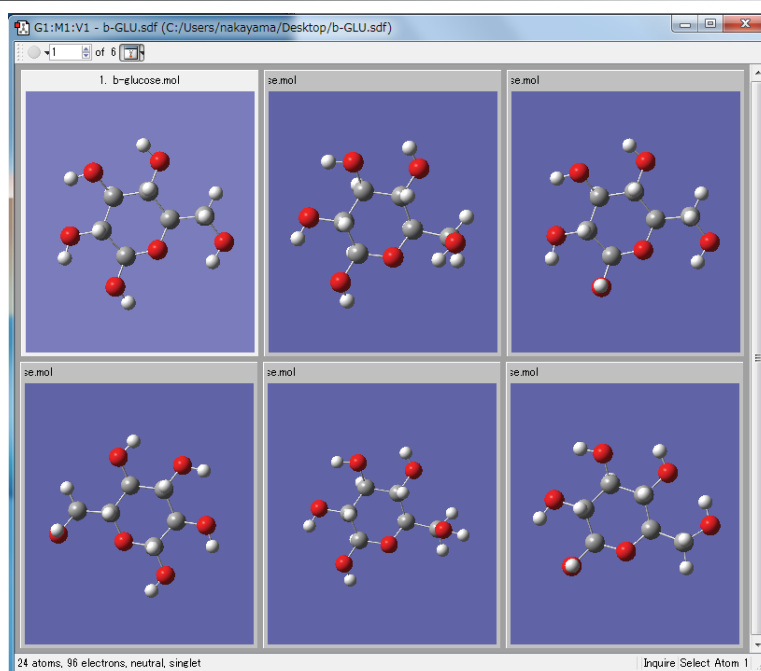
Ctrlキーを押しながら  
左クリックで選択



MDL-SDファイルを読み込み、計算する配座異性体を選択

# CONFLEXからGaussianへ：

## (2) GaussViewの利用



## CONFLEX6.8リリース！

- CONFLEX/BARISTA (Windows)の64bit対応
- OpenMPによるマルチスレッド化（改良）
- 水素原子位置のみの最適化
- 結晶計算アルゴリズムの変更
- 複合体中の特定の分子のみの構造最適化・振動計算、および配座探索





## CONFLEXの今後の開発予定

---

- 分子性結晶構造の予測
- 新規GUIの導入
- 新規分子力場「CMFF (CONFLEX Molecular Force Field)」の導入
- Frontier Mode法による配座探索機能の導入



## 弊社のサポート体制

---

### < 計算化学に特化した会社 >

各ソフトウェア、それぞれ専門のスタッフを中心としたチーム体制で、あらゆる質問に迅速かつ正確に対応

### < サポート内容 >

- － **CONFLEX、Gaussian、GAMESS、AMBER**に関する技術的なQ&A（計算方法、入力ファイルの作成方法、エラーの対処方法、etc...）
- － 必要に応じて開発元へ問い合わせ、日本語で報告



## その他サービス

### <受託計算>

入力データの作成を含む各アプリケーションによる  
計算の代行、計算手順書の作成

### <受託プログラミング>

お客様ご希望のプログラムを独自に作成

### <計算化学コンサルティング>

適用する計算手法やモデリングに関する相談

### <ハードウェアを含むシステム提案>

クラスター構築、インストール&トレーニング



本資料に関してご質問等ございましたら、

Email: [info@conflex.co.jp](mailto:info@conflex.co.jp)

<http://www.conflex.co.jp/contact.html>

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

までお問い合わせください。