

BARISTA

多配座解析システム(GUI)

コンフレックス株式会社

〒141-0021

東京都品川区上大崎2-15-19

アイオス目黒駅前ビル6F

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

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

BARISTAは、独自の多配座解析機能に加えて、分子構造解析・分子軌道解析・基準振動解析・動力学的解析機能を有する解析支援のためのプラットフォームです。BARISTAは、分子計算プログラムにより計算された結果をもとに分子構造のコンピューターグラフィックスを作成・表示することができ、その結果を容易に解析できます。

BARISTA version 1.2 新機能のご紹介

■Gaussianインターフェイス

Gaussianプログラムをお持ちのお客様は、BARISTAに備えられた簡易インターフェイスを用いてBARISTA上からGaussian計算プログラムを実行できるようになりました。



■描画モデル変更

指定した原子ごと、分子ごとで描画モデルの変更ができるようになりました。たとえばアミノ酸の炭素原子1つを選択し、Space Fillをクリックすると、その原子の表示がSpace Fillに固定されます。

■ステレオビュー

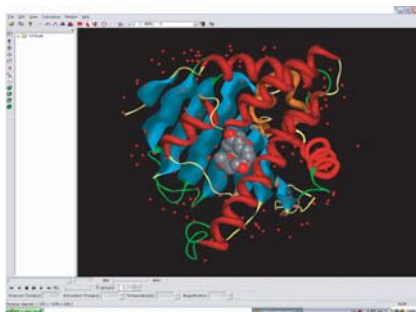
交差法(寄り目で重ねる方法)によりモデルをステレオ表示できます。

■モデル選択操作

選択されている原子またはアトムタイプと同じ原子モデルがすべて選択できます。さらに、タンパク質またはDNA/RNAの主鎖部分を選択できるようになりました。

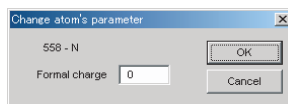
■タンパク質ヘテロ原子表示

タンパク質ファイルを読み込んだ際に、データと一緒に含まれるリガンドや水を発見した場合、リボン表示の際にはそれらは各々の原子モデル(Draw Type)で表示することができます。



■原子形式電荷変更

Formal Charge のボックス内の値を変更して、原子の形式電荷を変更することが出来るようになりました。



■新表示モード追加

モデルの描画の精度(ポリゴンの細かさ)、平面クリッピング、新遠近法(Aerial perspective)が追加されました。

BARISTA version 1.2 新機能

- Gaussianインターフェイス
- 描画モデル変更
- ステレオビュー
- モデル選択操作
- タンパク質ヘテロ原子表示
- 原子の形式電荷表示
- 新表示モード追加

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
- dat - MOPAC座標ファイル
- out - MOPAC出力ファイル

動作環境

BARISTA

OS: Windows XP
プロセッサ: 1.0GHz 以上
ディスク: 40GB
メモリー: 256MB 以上

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

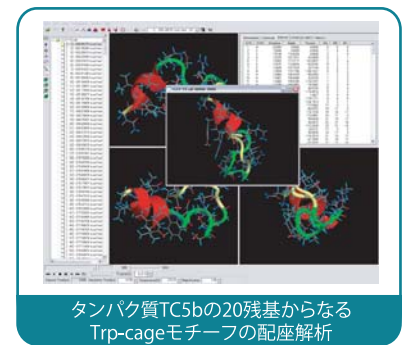
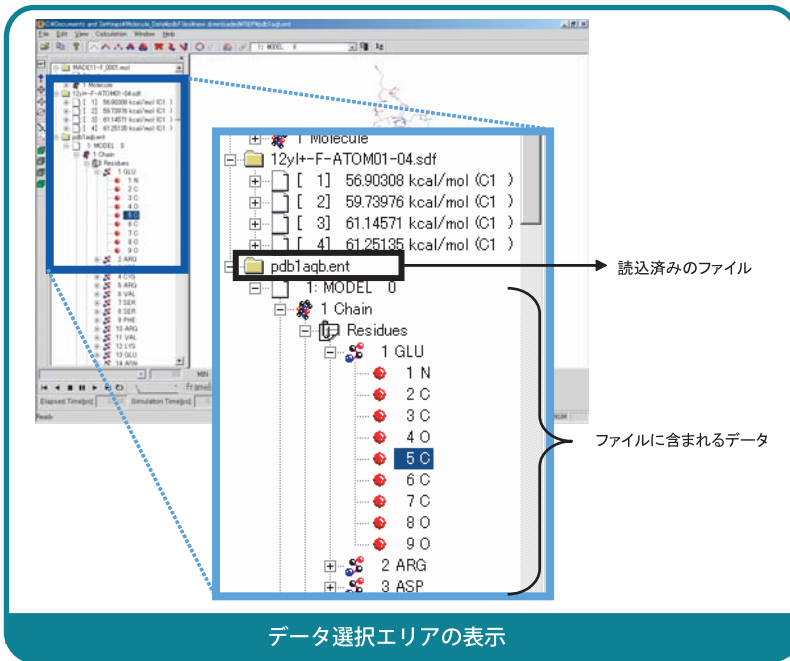


入力ファイルにおける表示方法

BARISTA 機能

| 入力ファイル (計算種類) | | 分子構造 | ベクトル表示 | 付加情報 | アニメーション |
|------------------|-----------------|---------------|----------|-----------------|------------------|
| CONFLEX | 構造最適化 | 分子構造 | — | — | — |
| | 構造最適化 詳細結果 | 初期構造 最適化構造 | 基準振動ベクトル | 電荷分布 | 分子振動の様子 |
| | 配座リスト | 各配座 | — | — | 各配座の スライドショー |
| MOPAC | 構造最適化 | 初期構造 最適化構造 | — | 電荷分布 分子軌道 | — |
| | FORCE THERMO | 分子構造 | 基準振動ベクトル | 振動数スペクトル | 分子振動の様子 |
| | IRC DRC | 分子構造 | 速度ベクトル | エネルギー変遷 電荷分布 | 反応における 分子構造変化 |

- 分子構造解析機能
 - 三方向三次元表示
 - マルチウィンドウ表示
 - Minimal Mouse Operation に
もとづく操作
- 分子軌道解析
 - 等電子密度面の近似表示による
分子軌道の三次元表示
- 基準振動解析
 - 各モードにおける基準振動の様子を
アニメーション化
 - 振動数のスペクトル表示
- 動力学的解析
 - 基準振動解析にもとづく配座の動力学
解析
 - タンパク質及びペプチドのリボン、
チューブ、シリンダー表示
 - エネルギー変化のグラフ化
- 多配座解析
 - 配座のクラスタリング機能
 - 多配座間構造変化経路予測
 - スーパーインポーズ



| ファイルの種類 | 拡張子 | 詳細 |
|----------------|---------|---|
| 座標ファイル | dat | 直交座標表現ファイル 内部座標表現ファイル |
| | mol | MDL-Molfile 形式 |
| | pdb | Protein Data Bank ファイル |
| CONFLEX 出力ファイル | mol.bso | 構造最適化ファイル |
| | sdf | MDL SD ファイル |
| MOPAC 出力ファイル | out | 構造最適化計算ファイル 基準振動計算ファイル (FORCE 計算ファイル) 熱力学的諸量計算ファイル (THERMO 計算ファイル) 反応座標計算ファイル (DRC 計算ファイル) |

