

技術サポート、講習会

High Performance Conformation Analysis

技術サポート

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/

弊社専門の技術スタッフによるサポートサービスを提供しています。計算化学ソフトウェアを効率よく活用するためには、専門的な知識や経験が不可欠です。弊社では、長年に渡る豊富なサポート実績により、多種多様な分野のご質問に対応可能です。

また、Windows、Mac、Linux全ての計算環境が整っており、様々なエラーの再現も可能で、初心者向けから応用編まで迅速に対応しております。ご導入いただいたソフトウェアを効率よく最大限にご活用いただくために、是非弊社サポートサービスをご利用下さい。

<ご質問例>

- 作成した入力データで計算が実行できない。どこを修正すればいいのか?
- ジョブが途中で停止してしまっただが、何が原因かわからない。
- 計算が収束していないようだが、どうすれば収束するのか?
- このキーワードはどのような時に使うのか?
- こういう計算をしたいのだが、こういった設定が適切か?

※ご導入時には、機密保持に関する条項を含んだ契約書も締結しておりますので、お客様には安心してご利用いただけます。

※価格はライセンス、ユーザー数により変わります。

講習会

初心者向けの内容から、応用編、ご研究のテーマに合わせてカスタマイズした講習会も承っております。1人1台のPCを使いながら実習形式で行ったり講義形式でも対応しております。

<Gaussian講習会例>

Gaussian概要

- 開発の系譜、Gaussianで出来ること
- 使用可能な計算手法と基底関数

GaussViewの操作

- 分子構造の構築
- 構造パラメーターの操作

ファイルの構成と計算実行

- 入出力ファイルと中間ファイル
- 実行コマンド

量子化学計算の概要

- Hartree-Fock法、SCF計算
- 基底関数の数と計算量
- エネルギー計算と分子軌道・電荷分布

構造最適化

- 構造最適化
- 遷移状態構造の探索

振動数計算

- IR・ラマンスペクトル
- 振動数と極小・遷移構造の判定

<Gaussian講習会応用編例>

化学反応の解析
励起状態計算
ONIOM法

<CONFLEX講習会例>

配座探索とスペクトル計算

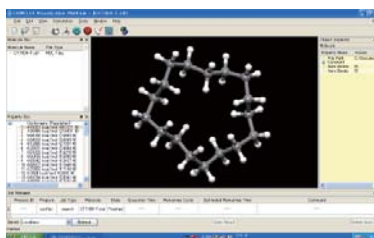
- CONFLEX配座探索アルゴリズム
- UV/CDスペクトル
- NMR結合定数
- ファイルの説明

CONFLEX Interfaceの基本操作

- 計算の実行
- 結果の解析

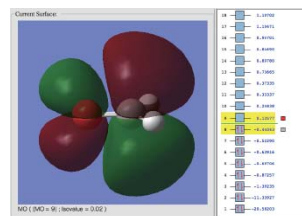
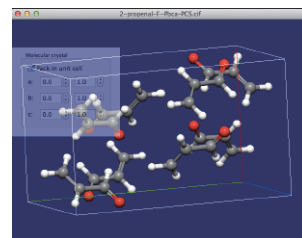
分子性結晶構造計算

- 超微小球状結晶の構築とエネルギー
- 結晶構造探索の手順
- ファイルの説明



対応ソフトウェア

- CONFLEX & Interface
- Gaussian & GaussView
- Amber & AmberTools



<AMBER講習会例>

トポロジーおよび座標ファイルの作成

- タンパク質と核酸の力場の読み込み
- アラニン・ジペプチドの構築
- アラニン・ジペプチドの溶媒和
- Amberのprmtopとinpcrd入力ファイルの保存

PMEMDの入力ファイルの作成

- 構造最適化の設定入力
- 昇温の設定入力
- プロダクション行程の入力

PMEMDの実行

- 構造最適化の実行
- 昇温・動力学計算の実行
- プロダクション動力学計算の実行

動力学計算の結果の解析

- プロダクション動力学系の性質
- Cpptrajを利用したRMSDの解析