

CONFLEXの主な機能

- 配座空間探索
- 基準振動解析
- 結晶構造探索
- 結晶表面解析
- 溶媒効果
- Gaussian連携機能
- Dynamic Reaction Coordinate (DRC)
- ホストリガンド配位探索
- CD/UV/Visスペクトル解析
- NMR結合定数解析
- パラメーター設定
- アミノ酸残基置換機能

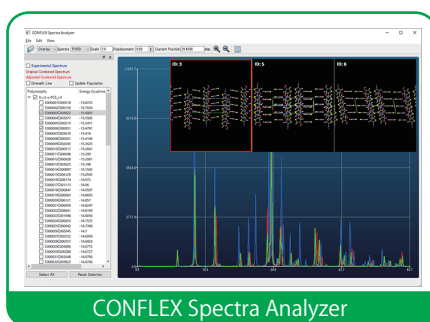
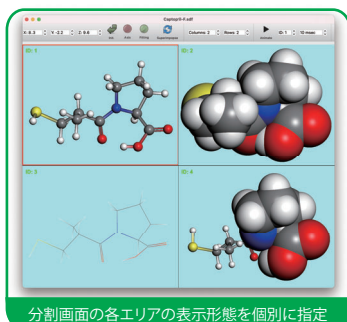
CONFLEX9 & Interface (Rev. B)

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、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。

CONFLEX9 新機能

- ◆ 結晶構造最適化に完全対角Newton-Raphson法が利用できるようになりました。結晶構造探索にかかる時間を大幅に削減できます。
- ◆ 静電相互作用計算にEwald法が利用できるようになりました。遠距離まで働く静電相互作用を高速かつ高精度に計算することができます。
- ◆ AMBER用の入力ファイルを用いて、AMBER力場による構造最適化と配座探索を行えるようになりました。
- ◆ Interfaceにおいて、分子の一部の表示形態を変更できるようになりました。
- ◆ Interfaceにおいて、分割画面の各エリアの表示形態を個別に指定できるようになりました。
- ◆ Interfaceにおいて、表計算機能が追加されました。



Conf. No.	Boltzmann Pop.	Relative Energy (kcal/mol)	Boltzmann Pop. (%)	Total Gibbs Free Energy (kcal/mol)
1	0.000000	-13.72641	16.36581	116.9710
2	0.000000	-13.70666	16.83560	116.9316
3	0.000000	-13.66263	14.29782	116.7824
4	0.000000	-13.61824	8.673425	116.5412
5	0.000000	-13.69979	6.23290	116.5205
6	0.000000	-13.76219	6.367607	116.5160
7	0.000000	-13.68161	4.922227	116.4675
8	0.000000	-13.67473	4.541929	116.5035
9	0.000000	-13.62855	4.161631	116.7669
10	0.000000	-13.71091	2.89754	116.9723
11	0.000000	-13.64404	2.87723	116.8379
12	0.000000	-13.52752	2.104450	116.8607
13	0.000000	-13.43244	1.806422	116.8343
14	0.000000	-13.216782	1.105083	116.4868
15	0.000000	-14.24597E-02	0.892109	119.7109

Gaussian16 (Rev.C.02) & GaussView6 (6.1.1)

Gaussian16 新機能

- ◆ 励起状態の振動数/IRおよびラマンスペクトルの予測、および遷移状態構造の最適化とIRC計算を実行するための、TD-DFT解析的二次微分計算が導入されました。
- ◆ 励起状態構造最適化のためのEOMCC解析的勾配計算が導入されました。
- ◆ VCDおよびROAスペクトルへの非調和振動解析が追加されました。
- ◆ 振電スペクトルとその強度の計算機能が導入されました。
- ◆ 共鳴ラマンスペクトル計算が導入されました。
- ◆ 新規DFT汎関数が追加されました：M08, MN15
- ◆ 新規double-hybrid法が導入されました：DSDPBEP86, PBE0DH, PBEQIDH
- ◆ Linux環境下で、GPUのNVIDIA K40, K80, P100, V100, A100を使ってHartree-Fock及びDFT計算の実行が可能です。

GaussView6 新機能

- ◆ IR, Raman, VCDおよびROAスペクトルの調和、非調和振動解析の結果を表示することが可能です。
- ◆ SCRF計算に用いる溶媒和キャビティーを表示することが可能です。
- ◆ 振電スペクトルとDuschinsky行列を含む、振電相互作用解析結果の表示を新たに可能にしました。
- ◆ 複数のデータを元にそれらを統合したプロットを表示することができます。
- ◆ グループ内の複数の分子に対するGaussianジョブを、いくつかの操作でまとめて設定可能です。
- ◆ ローカルコンピューターのキューイングシステム：SCジョブマネージャーが、組み込まれました。

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 Global

Email : cust-info@conflex.net

<http://www.conflex.net/>

