

CONFLEX 9

配座探索・結晶構造探索プログラム

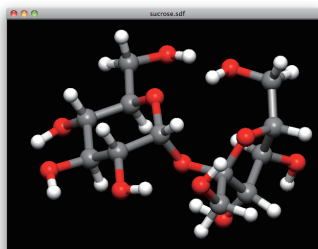
CONFLEXは、フレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけ出します。実践的に意味のある安定な配座異性体を優先的に創出することにより、効率的な配座空間探索を実現します。

CONFLEXの主な機能

● 配座探索

CONFLEXでは、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。

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ことにより、効率的な最安定構造探索を実現しています。



Property Box		
Conformers (Population)		
1	190.981 kcal/mol	(42.6601 %)
2	191.306 kcal/mol	(24.6439 %)
3	192.072 kcal/mol	(6.7679 %)
4	192.127 kcal/mol	(6.1693 %)
5	192.364 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	(0.4848 %)
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。

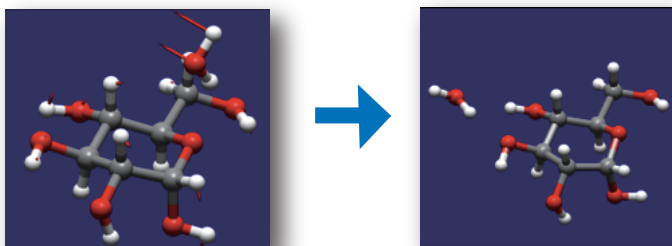
最適化した一連の結晶構造に対して、エネルギーの低い順に並べるだけでなく、あらかじめ用意した粉末回折データに近い順に並べることもできます。

● 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。

● Dynamic Reaction Coordinate (DRC)

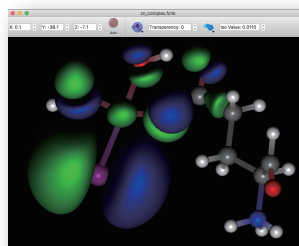
基準振動モードを使用して初期速度ベクトルを算出し、動力学計算を行う計算方法です。複数分子の配置変換や、大きな分子の配座変換に適用できます。



● Gaussian呼び出し機能

同じマシンにGaussianがインストールされている場合、CONFLEXからGaussianを呼び出して、構造最適化および配座探索計算を直接行うことができます。

分子力場パラメーターの無い分子や、古典力場では扱えない電子状態での構造最適化・配座探索が可能です。



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/

ファイルフォーマット

- mol — MDL Molファイル
- mol2 — Sybyl mol2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

分子力場

- MM2
- EMM2
- MM3
- MMFF94s
- Amber

動作環境

OS: Windows

macOS

Linux

(OSのバージョンは弊社ホームページで公開)

OpenGL: Version 3.3 以上

CPU: 1.0GHz以上

ディスク: 40GB

メモリー: 256MB以上

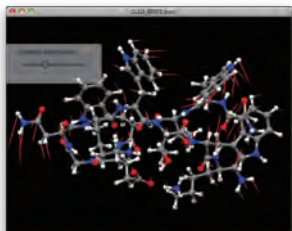
CONFLEX
HIGH PERFORMANCE
Conformation Analysis

CONFLEX 9

配座探索・結晶構造探索プログラム

● 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。



Frequencies (cm ⁻¹)	
1	11.96
2	13.84
3	16.58
4	17.82
5	21.23
6	23.47
7	27.28
8	30.77
9	31.29
10	35.46
11	37.91
12	39.76
13	40.8
14	41.46
15	42.38
16	44.45
17	46.3
18	47.58
19	48.22
20	49.9
21	52.97
22	56.02
23	57.51
24	58.9
25	59.43
26	61.27
27	62.54
28	64.12

● 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。

● パラメーター設定

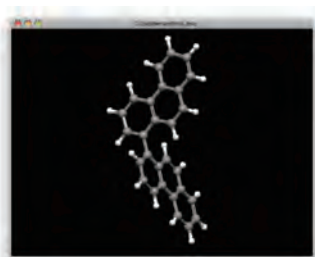
CONFLEXに含まれている力場パラメーターに対応していない原子タイプを含む分子について、パラメーターを追加して計算することができます。既存のパラメーターを修正して計算することも可能です。MMFF94s力場のみの対応です。

● ホストリガンド配位探索

複数の分子を含む系について、ある一つの分子が他の分子(群)に対してどの位置にどのような向きで配位するのが安定かを探索します。二量体や錯体の安定構造の探索に利用出来ます。

● 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。



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

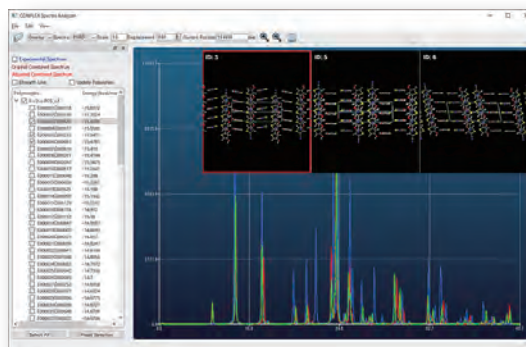
- 結合多重度の修正
- 原子間距離に基づく、自動結合生成
- 原子の形式電荷の設定

● 分子・結晶構造の表示

- 表示形式: line, 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
- 結晶面の表示
- 基準振動、DRCのアニメーション表示



Molecule Name	HOMO	LUMO	LUMO + HOMO	E
Act. ALA_NME_0001.fch	-6.6332138E	1.80935413E-01	0.844258561	
Act. ALA_NME_0002.fch	-3.7133227E	1.91947125E-01	0.563279452	
Act. ALA_NME_0003.fch	-3.7133291E	1.91941998E-01	0.563279249	
Act. ALA_NME_0004.fch	-3.8996491E	1.76807797E-01	0.536712285	
Act. ALA_NME_0005.fch	-3.6749071E	1.90436482E-01	0.57926615	
Act. ALA_NME_0006.fch	-3.8506695E	1.8532407E-01	0.8743936E	



● 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

● 計算結果の表示

- 結合長、結合角、ねじれ角の表示
- 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
- Gaussianによるスペクトル計算結果の存在確率に沿った重ね合わせ
- 表計算機能

● 外部プログラムとの連携

- Gaussianなどの計算実行
- ChemOfficeからの計算実行