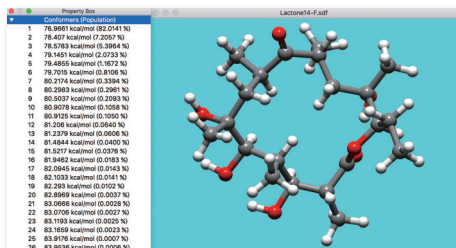


CONFLEX&Interface

- 配座探索
- 構造最適化・基準振動解析
- 分子性結晶構造の最適化
- 結晶構造探索
- 結晶表面解析
- 動的反応座標(DRC)解析
- ホスト-リガンド配位探索
- Gaussian 連携
- 力場パラメーター設定
- GB/SA溶媒効果
- UV/Vis/CDスペクトル



Gaussian&GaussView

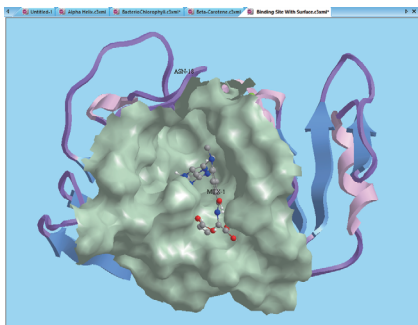
- 分子軌道計算
- 構造最適化
- 遷移状態探索
- 熱化学的諸性質
- 分極率と超分極率
- ONIOM による大規模系の計算
- NMRスペクトル
- 励起状態計算
- 原子電荷・静電ポテンシャル
多極子モーメント
- IR/Raman/VCD/
ROAスペクトル

Amber

- 生体分子動力学計算
- QM/MM計算
- レプリカ交換法
- 自由エネルギー計算
- 一般有機分子力場
- NMRデータ精密化
- 生体膜シミュレーション

ChemDraw

- 化学構造式の描画
- 構造式から化学名の生成、化学名から構造式の生成
- NMR シフト予測、MS フラグメント処理
- 化学反応における量論計算
- 計算インターフェース(CONFLEX、Gaussian等)



配座空間探索
結晶構造探索
分子軌道計算
分子動力学計算

導入相談

- ソフトウェアの選定
- 最適な計算システムの提案
- 計算機の提供
- インストール作業

講習会

- 定期講習会(入門編・応用編)
- 目的に応じてカスタマイズした個別講習会

技術サポート

- 操作方法・計算方法に関するQ&A
- エラー終了した原因の解析と回避方法
- キーワードの使い方

受託計算

- 配座解析・結晶計算
- 生体分子動力学解析
- 分子軌道計算
- 各種スペクトル解析

