

CONFLEX 7 ChemBioOffice v13

CONFLEX&Interface (New version 7リリース!)

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、配座分布を考慮した基準振動解析、熱力学的諸量、円二色性スペクトル、紫外・可視光吸収スペクトル、およびNMRカップリング定数を計算により予測します。

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

MG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

5631 Palmer Way,

Suite C, Carlsbad, CA

92010 USA

TEL : +1-760-930-9277

USA : 800-298-0054

FAX : +1-509-692-4541

Email : info@conflex.us

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

CONFLEX7 新機能

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

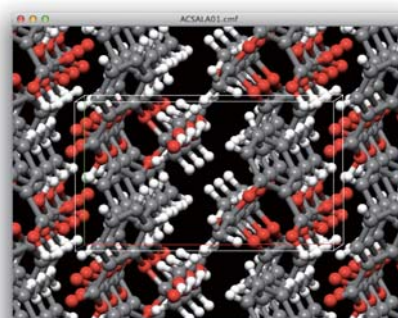
結晶構造の粉末回折データを算出し出力します。X線源の元素や波長を変えることも可能です。

新型Interfaceの登場

- Interfaceが一新し、Windows、Mac、Linuxに対応しました。
- ネットワーク経由でのジョブの実行が可能になりました。例えば、Windows PCからLinuxサーバーへ計算を実行することができます。またLinuxサーバー上で得られた結果をそのままWindows PCで読み込むことができます。
- 外部プログラムとの連携が可能です。例えば、Gaussianのネットワーク経由での計算実行が出来ます。

CONFLEX 基本機能

- 配座探索
- 溶媒効果
- 配座間遷移状態探索
- 構造最適化と基準振動解析
- CD/UV/Vis, NMRスペクトル解析
- 分子オブジェクト分類法



マクロライド系抗生物質
Grahamimycin A1のLUMO



抗がん剤Taxolの等電子
密度面に電荷分布を色付

ChemBioOfficeシリーズ (New version 13リリース!)

v13 製品一覧

- ChemBioOffice Ultra v13 (Windows)
- ChemOffice Pro v13 (Windows)
- ChemBioDraw Ultra v13 (Windows, Mac)
- ChemDraw Pro v13 (Windows, Mac)
- ChemDraw Std v13 (Windows, Mac)
- ChemBio3D Ultra v13 (Windows)

CONFLEXインターフェイス搭載

v13にCONFLEXのインターフェイスが搭載。ChemBioOffice Ultra、ChemOffice Pro、ChemBio3D Ultraのv13から直接CONFLEXの計算実行が可能です。

