

CONFLEX&Interface 7.C (New version!)

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

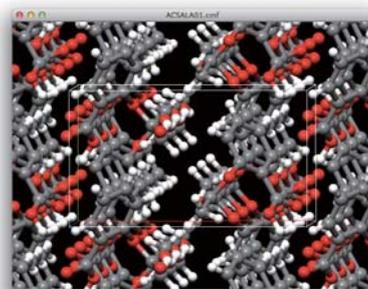
http://www.conflex.us/

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

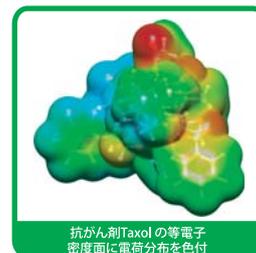
結晶構造の粉末回折データを算出し出力します。X線源の元素や波長を変えることも可能です。

新型Interface

- Interfaceが一押し、Windows、Mac、Linuxに対応しました。
- 外部プログラムとの連携が可能。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

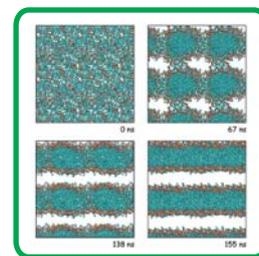
- 配座探索
- 溶媒効果
- 配座間遷移状態探索
- 構造最適化と基準振動解析
- CD/UV/Vis, NMRスペクトル解析
- 分子オブジェクト分類法



Gaussian09 (D.01) & GaussView5 (5.0.9)

D.01 新機能

- 非調和項を取り入れたIR強度等の算出機能の強化
- 新しいDFT汎関数の追加：APFD、HISSbPBE、Truhlarグループにより開発されたM11などの汎関数
- RamanおよびROAの2段階計算
- aug-cc-pV*Z基底関数のバリエーション追加
- 計算性能の向上



Amber14 & AmberTools14

v14 新機能

- 新しい力場の追加：ff14SB, ff14ipq, Lipid14
- 仮想溶媒および実溶媒中での定pH計算
- 自由エネルギー計算
 - EMIL法の導入
 - 自由エネルギー・ワークフローツール (FEW) による自由エネルギー計算の自動化
- 計算手法の拡張
 - ハミルトニアン・モデルの変更
 - レプリカ交換シミュレーションとの統合の強化



ChemBioOfficeシリーズ V14

v14 新機能

- SciFinder®がChemBioDraw®から直接検索可能に
- クリップボードへコピーする新しいオプションが追加
- V3000書式のMOLファイルの作成が可能

CONFLEXインターフェイス搭載

- ChemBio3D(v13以降)にCONFLEXのインターフェイスがついていしますので、CONFLEX(7以降)と同じPCにインストールするとChemDrawで描いた構造から直接CONFLEXの実行が可能です。

