

Schrödinger MolecularSimulation Products

人気製品の新価格・新パッケージをご用意しました！！

PRICE DOWN
**50%
OFF!**

MacroModel

MacroModelは配座探索を中心とした基本的な分子力学系のシミュレーションソフトウェアです。分子が取り得る様々な形状を網羅的に発生させるための配座生成手法を豊富に取り揃えており、他のプログラムでは取り扱うことが困難である複雑な骨格を有する天然物化合物や複数の分子から形成される系等に対しても安定配座を探索するのに適した計算プログラムとなっております。

MacroModelに組み込まれているGB/SAの溶媒効果では水/クロロホルム/オクタノールが選択可能で、独自に開発を継続しているOPLS系の力場パラメータと水溶媒の組み合わせは長い年月での研究と検証が重ねられた結果、蛋白質のみならず核酸やペプチド・糖鎖といった生体分子向けのシミュレーションを強力にサポートするものとなっております。

**特別
価格**

Desmond

Desmondは周期境界モデルを対象としたGPU 演算による分子動力学計算ソフトウェアです。モデル構造の構築から計算オプションの変更と実行、結果の観察や解析までの一連の作業をGUI パネルから実施することが可能であり、シミュレーションのご経験をお持ちでない研究者の方々が分子動力学計算に取り組み出される上でも障壁が小さい構成となっております。

計算対象とするモデル構造の平衡化プロセスについても十分に検証されたプロトコルが準備されており、またMetadynamicsやReplica Exchange MDといった高度な計算手法にも対応しております。

Academic MD Suite for Biologics

蛋白質構造を対象とした分子動力学計算について、入力構造の準備・調製や演算後の解析を含めて最適に実施できるよう構成したパッケージです。

ホモロジーモデリングや実験データにおける欠損部位の修復に利用できるPrimeや、蛋白質の活性部位や表面特性の解析のためのSiteMapといったプログラムが含まれます。

- Desmond
- Prime 蛋白質構造モデリング
- Epik イオン化状態/互変異性体生成
- SiteMap 活性部位探索、作用領域解析
- Canvas クラスタリング解析 等
- Maestro 統合インターフェース

Academic MD Suite for Small Molecule

低分子だけでなく核酸やペプチド・糖鎖といった生体分子から材料系の高分子まで幅広い分子系をカバーする分子動力学計算用のパッケージです。

多彩な配座探索機能を持つMacroModelと高い演算パフォーマンスを誇るDesmondの組み合わせは、様々な研究対象について多くの立体構造的知見を見出すための最適な計算環境を与えます。

- Desmond
- MacroModel
- LigPrep 低分子3次元立体構造の構築
- Epik イオン化状態/互変異性体生成
- SiteMap 活性部位探索、作用領域解析
- Canvas クラスタリング解析 等
- Maestro 統合インターフェース



Schrödinger
シュレーディンガー株式会社

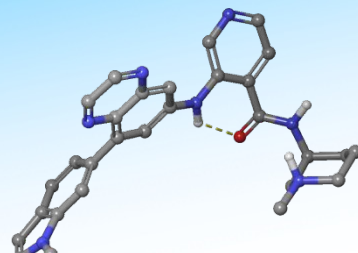
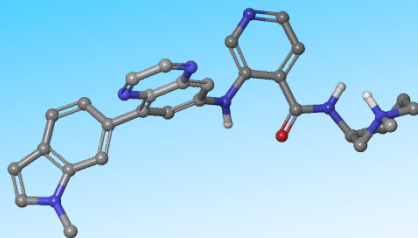
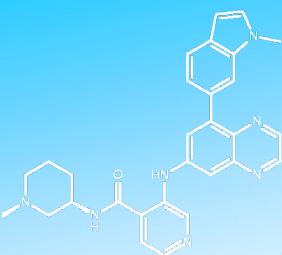
〒100-0005 東京都千代田区丸の内1-8-1 丸の内トラストタワーN館 13階
TEL:03-4520-7090 E-mail:info-japan@schrodinger.com

分子力場計算プログラム

MacroModel

分子のエネルギー計算を行い構造最適化や配座探索、および関連する様々な解析を可能にするプログラムです。有機合成化学をはじめとする低分子を対象とした研究や生体高分子を対象とした研究を支援します。ノートパソコン（Windows, Mac）でも利用可能です。

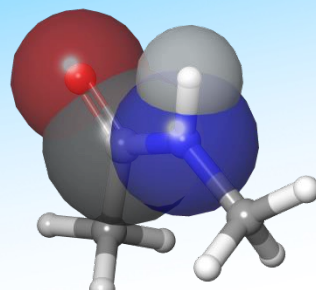
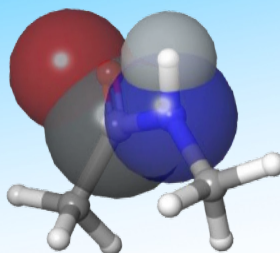
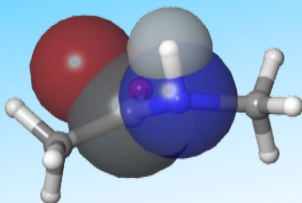
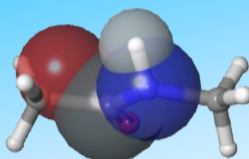
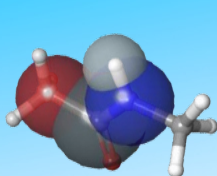
Minimization for Small Molecule



構造最適化

構造最適化計算では、入力構造の中で経験的な情報と比較してずれがある結合長や結合角を適正な値に整えたり、van der Waals 半径を考慮した際の立体障害や各原子間の静電的な反発を小さくするため、各原子の座標を少しずつ変化させて安定な形へ落ち着かせる処理が可能です。

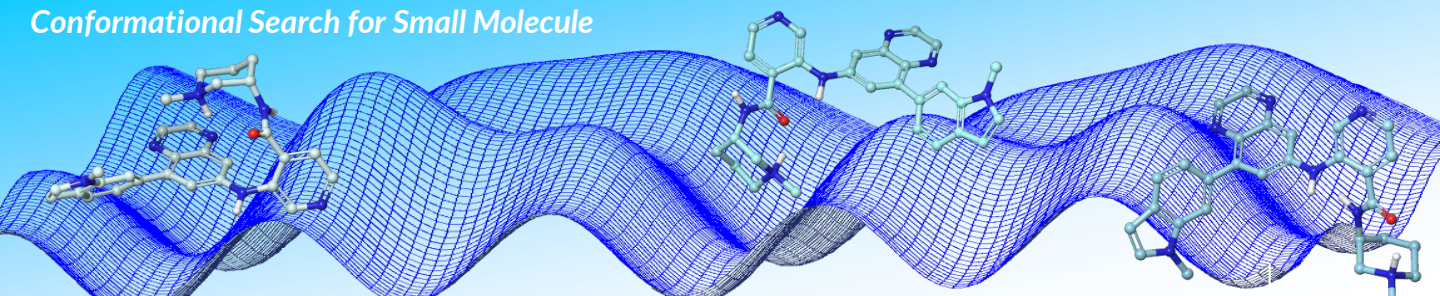
Minimization with Applying Constraints



拘束条件を付加した構造最適化

計算対象とするモデル構造において、原子間距離や二面角等の部分構造要素に制限をかけ、その条件（拘束条件）に合うような構造変化を起こすことができます。入力構造の一部の原子座標や3つの原子がなす角度も指定でき、拘束する強さや特定の値からの許容範囲を変更した上での計算が実行可能です。

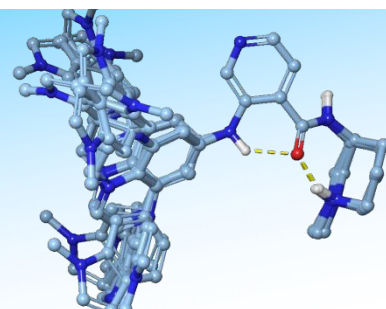
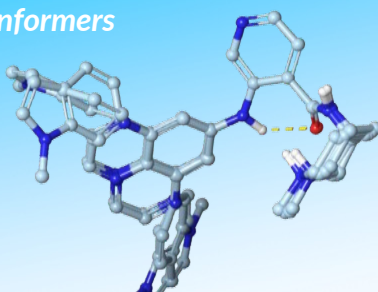
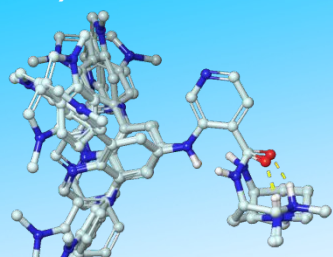
Conformational Search for Small Molecule



配座探索

回転可能な結合（Rotatable Bond）について、その二面角をランダムに変化させる、もしくは環状部分を一時的に開裂することで新規配座を発生させるTorsional Samplingが可能です。

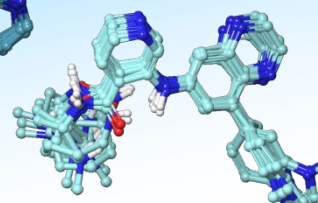
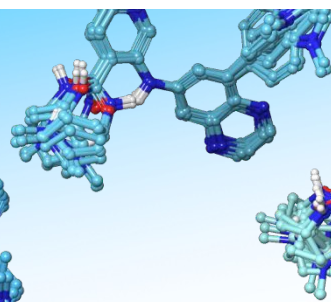
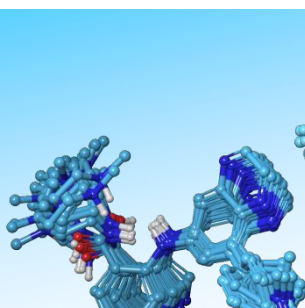
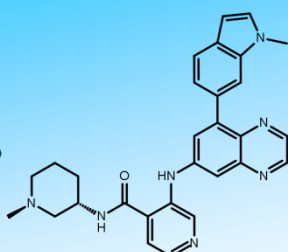
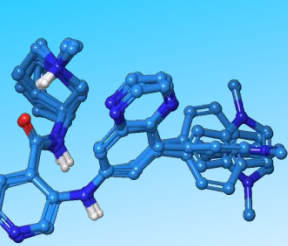
Analysis for Generated Multiple Conformers



発生配座の解析

各手法で発生させた複数の配座群に対して、いくつかの方法で解析可能です。原子間距離や二面角等、分子を構成する部分構造を一括で測定することができる Measurements の機能と指定した部分構造で各配座を重ね合わせる機能を有します。

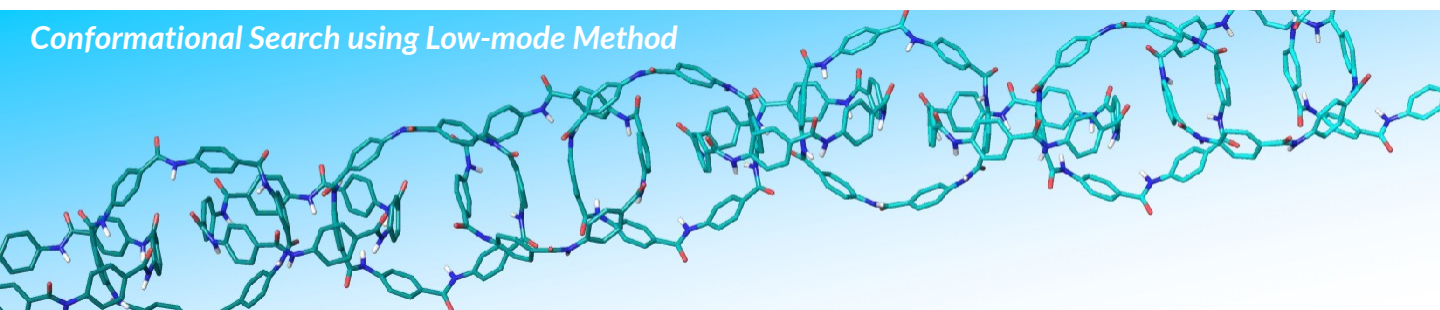
Clustering of Conformers



発生配座のクラスタリング

各手法で発生させた複数の配座群をそれぞれの類似性からクラスタリングするための機能が利用可能です。階層的なクラスタリングが実行されることになり、入力条件として指定した数のグループに分類する処理までが自動的に実行されますので、分類状況の妥当性を測るための指標を得ることが可能です。

Conformational Search using Low-mode Method



Low-mode法による配座探索

Torsional Samplingでは環状部分を一時的に開裂させるプロセスが含まれ、カテナン分子のように複数の環構造が貫通し合った系に対しては環構造の絡み合いが崩れてしまう可能性があります。一方、Low-mode Samplingでは環状部分の開裂は行われず、環構造の絡み合いが保持される点で、このような系に適した手法と言えます。

【対応環境】

Linux Red Hat Enterprise Linux, CentOS, Rocky Linux, Ubuntu
(各OSごとの対応バージョンはWEBサイトでご確認いただけます)

Windows Windows 10, 11

MacOS Ventura, Monterey, Big Sur

【お問い合わせ】

シュレーディンガー株式会社

東京都千代田区丸の内1-8-1 丸の内トラストタワーN館13階

03-4520-7090

info-japan@schrodinger.com