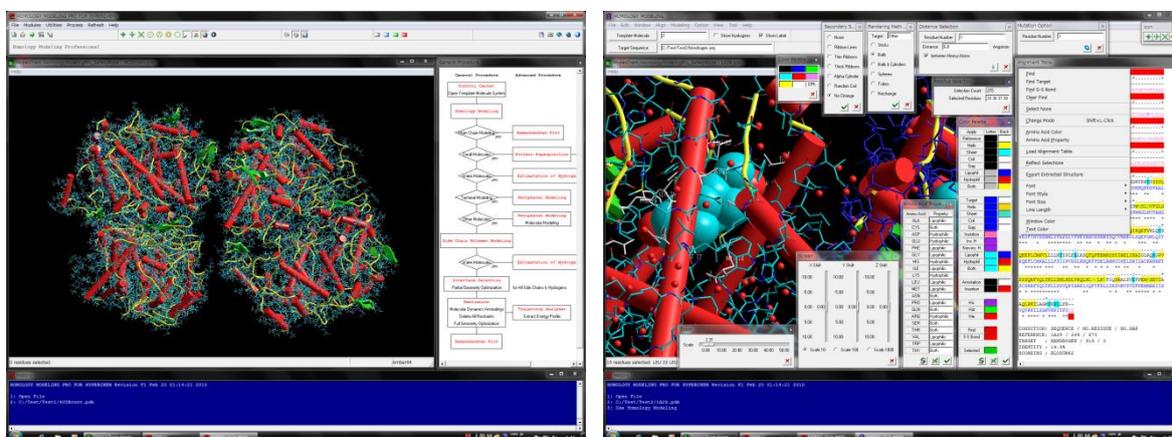


## Homology Modeling Professional for HyperChem

統合分子設計支援システム *HyperChem* と最強の論理的分子設計ツール *Gaussian* で生体高分子モデリング、解析、シミュレーション<sup>1</sup>。様々な状態の生体高分子システム（タンパクおよび核酸）に対応 *HyperChem*、*Gaussian* 計算エンジンによるエネルギーベースの最先端手法

ホモロジーモデリング過程での、挿入配列モデリング、主鎖モデリング、側鎖モデリング、共有結合低分子モデリング、ヘテロ分子・金属原子影響下モデリング、ホモ・ヘテロ会合状態モデリング、溶媒和条件下モデリングなど従来製品では利用できない最先端手法がエネルギーベース<sup>2</sup>で実施できます。

### Revision G1



- 直観的なユーザーインターフェイス（研究者は本質的な思考に集中できます）
- 大幅な作業時間の短縮（特殊な作業知識、テキストベースのパラメータ設定等が不要）
- 分子力学計算（MM+, Ambers, Amber2, Amber3, Amber94, Amber96, Amber99, OPLS, BIO+83, BIO+85, CHARMM19, CHARMM22, CHARMM27）、量子化学計算（半経験法、HF、DFT、MPnなど *HyperChem* と *Gaussian* 搭載計算化学）、分子動力学計算（分子動力学、ランゲビン動力学、モンテカルロ）の各手法を網羅
- 抜群の費用対効果
- 開発元による日本語での技術サポート<sup>3</sup>
- 受託研究、導入時検証事例、ユーザーサポートからのフィードバックなどに対応し、操作性、安定性、信頼性を確保、細部に行渡る多数のユーザー支援機能が利用できます。

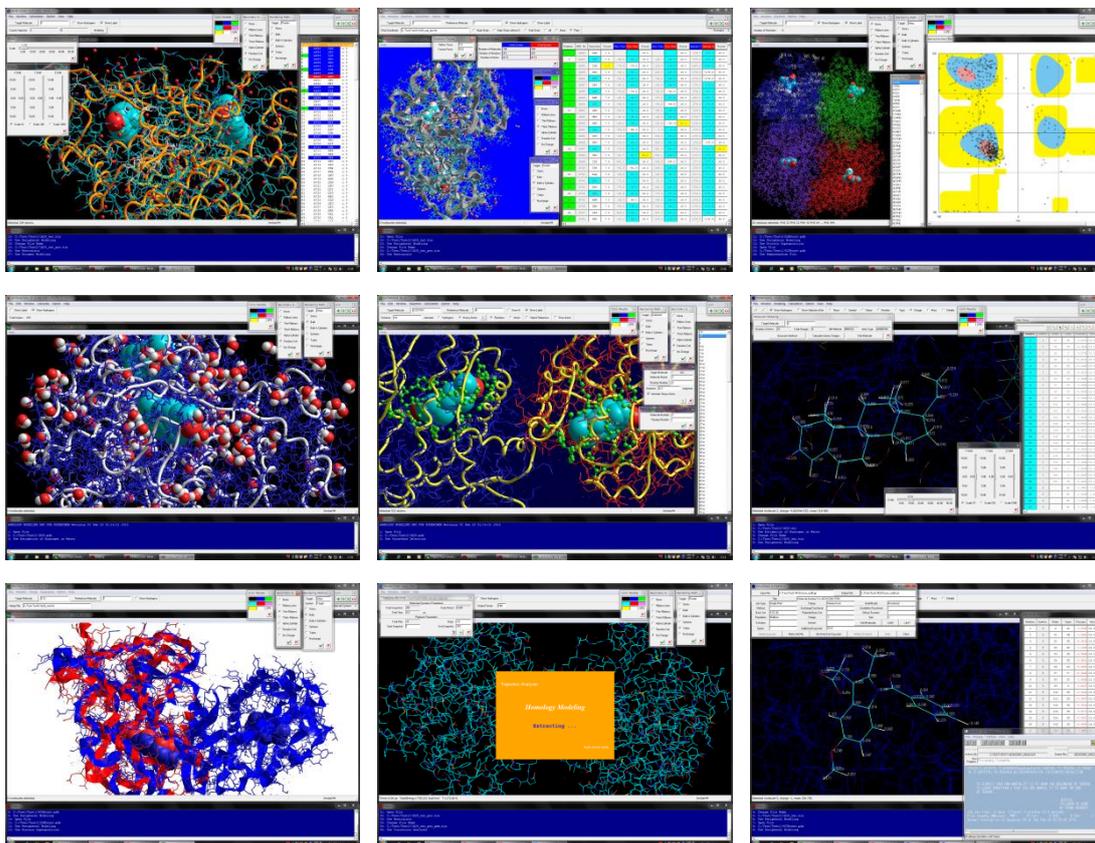
<sup>1</sup> 詳細は旧パンフレットまたは Web にてご確認ください。

<sup>2</sup> 条件にもよりますが、*HyperChem* バックエンド力場計算エンジンを使用する機能は七万（70,000）原子弱（約 50 万 Da）までしか利用できません。

<sup>3</sup> 詳細はお問い合わせください。

## モジュールプログラム

パッケージはタンパクホモロジーモデリングを高精度に実施するための複数のモジュールプログラムで構成されています。ホモロジーモデリング、側鎖ロータマーモデリング、生体高分子 MD シミュレーション用束縛モジュールを始め、主鎖モデリングも実施できるラマチャンドラプロットモジュール、水分子の水素原子座標を予測する水素原子初期座標評価モジュール、複雑な構造選択を簡便に実施でき、選択部分の部分構造最適化も実施できるインターフェイス選択モジュール、生体高分子に含まれる低分子・金属原子モデリングのための周辺モデリングモジュール、会合状態やヘテロ分子影響下モデリングにも利用するタンパク重ね合わせモジュール、MD解析のためのトラジェクトリ解析モジュール、*Gaussian*での計算結果を更なるモデリングに利用するための Gaussian Interface、ONIOM Interface などが利用できます。



## 推奨システム構成

OS: Windows XP、Vista、7、8.x または 10 (32 ビットまたは 64 ビット版)  
CPU: Core2Duo または Dual Core Xeon 以降 (2 GHz 以上)  
メモリ: 1024 MB 以上  
グラフィックスカード: OpenGL 対応ボード

## 必要なソフトウェア\*

*HyperChem* (Windows 版プロフェッショナルエディション) : 7.52 以降  
*TclPro1.2* (Windows 版) : Web (<http://www.tcl.tk/software/tclpro//eval/1.2.html>) より無料で入手できます。  
*Gaussian* (Windows 版) : 必須ではありませんが、*Gaussian* の計算結果を利用するには *Gaussian03W*、*Gaussian09W* または *Gaussian16W* (シングルまたはマルチプロセッサ版) が必要です。

\* 本パッケージは、これらのソフトウェアを含みません。

## 参考文献

Motonori Tsuji, J. Comput. Aided Mol. Des. 31, 577–585, 2017.  
Motonori Tsuji, et.al., FEBS Open Bio. 7, 391–396, 2017.  
Motonori Tsuji, J. Mol. Graph. Model. 62, 262–275, 2015.  
Motonori Tsuji, et.al., J. Comput. Aided Mol. Des. 29, 975–988, 2015.  
Motonori Tsuji, J. Struct. Biol. 185, 355–365, 2014.  
Motonori Tsuji, Mol. Sci. 1, NP004, 2007.

## お問い合わせ

URL: <http://www.molfunction.com/jp>  
電子メール: [sales@molfunction.com](mailto:sales@molfunction.com)

*HyperChem* は Hypercube 社の登録商標、*Gaussian* は Gaussian 社の登録商標です。  
その他の商品名は各社の商標または登録商標です。  
本カタログの内容は予告なく変更する場合があります。