INSTITUTE OF MOLECULAR FUNCTION

Homology Modeling Professional for HyperChem

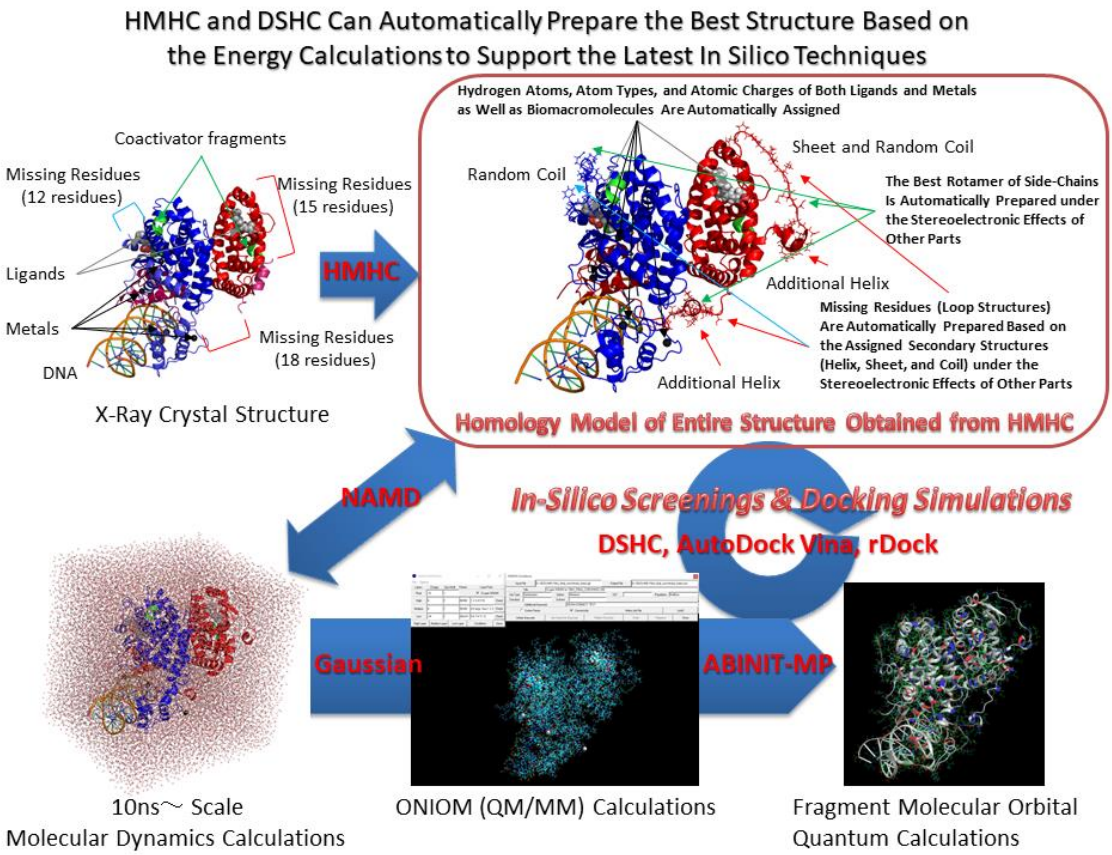
with Gaussian Interface for HyperChem & ONIOM Interface for Receptor

Compatible to NAMD Molecular Dynamics and ABINIT-MP / GAMESS Fragment Molecular Orbital Quantum Mechanics Calculations for Entire Molecular System

統合分子設計支援システム *HyperChem* と最強の計算化学プログラム *Gaussian* で生体高分子モデリング、解析、シミュレーション[1]
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

Homology Modeling Professional for HyperChem（HMHC）では、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[2]で実施できます。
精密化した生体高分子システム立体構造はナノ秒スケールの分子動力学計算プログラムやフラグメント分子軌道法による全系量子力学計算プログラムとシームレスに連携して解析、結果をフィードバックできます。
Docking Study with HyperChem（DSHC）と連携し、最先端のインシリコ創薬をサポートします。

Revision H1



- 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）
- 抜群の費用対効果

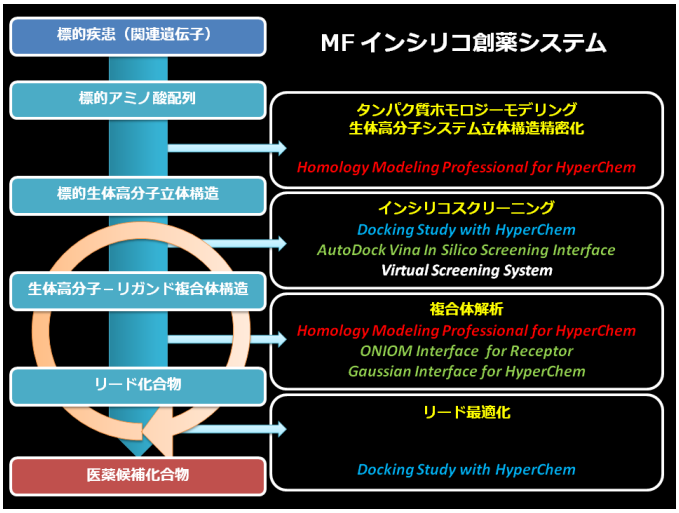
[1] 詳細は旧パンフレットまたは Web にてご確認ください。
[2] 条件にもよりますが、*HyperChem* バックエンド力場計算エンジンを使用する機能は七万（70,000）原子弱（約 50 万 Da）までしか利用できません。

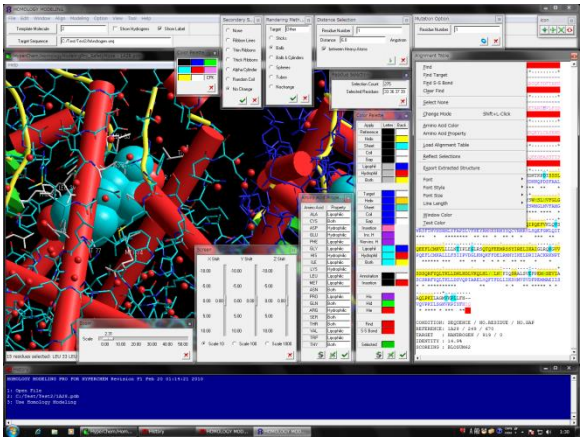
Copyright 2023, Institute of Molecular Function. All Rights Reserved.

INSTITUTE OF MOLECULAR FUNCTION

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や生体高分子システム立体構造精密化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 アニーリング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ンプロットモジュール、結晶水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、生体高分子システムに含まれる低分子・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シミュレーション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や振動解析による結合自由エネルギー計算予測に利用するための Gaussian Interface、ONIOM Interface などが利用できます。





推奨システム構成

OS：Windows 10 及び 11（64 ビットまたは 32 ビット版）
CPU：マルチコア Intel Core または Xeon（2 GHz 以上）
メモリ：8 GB 以上
グラフィックスカード：OpenGL 対応ボード
ハードディスク：512 GB 以上

必要なソフトウエア*

HyperChem（Windows 版プロフェッショナルエディション）：7.5.2 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 または Unix 版）：必須ではありませんが、*Gaussian* の計算結果を利用するには *Gaussian03*、*Gaussian09* または *Gaussian16*（シングルまたはマルチプロセッサ版）が必要です。
OpenBabel（Windows 版）：必須ではありませんが、HIN または PDB 形式から SDF、MOL2、AutoDock PDBQT 形式で出力する場合に必要です。
ClustalW、*Blast*、*Fasta*（Windows 版）：必須ではありませんが、ホモロジー検索機能を利用する場合に必要です。
NAMD および *VMD*（Windows または Unix 版）：必須ではありませんが、ナノ秒スケールの分子動力学計算と連携する場合に必要です。
ABINIT-MP（Unix 版）および *BioStationViewer*（Windows 版）または *GAMESS* および *Fu* あるいは *Facio*（Windows 版または Unix 版）：必須ではありませんが、全系量子力学計算と連携する場合に必要です。

* 本パッケージは、これらのソフトウエアを含みません。

参考文献

Motonori Tsuji, Int. J. Mol. Sci. 23, 11009, 2022.
Motonori Tsuji, FEBS Open Bio. 10, 995–1004, 2020.
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: https://www.molfunction.com/jp
電子メール: 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。

2023/9

Copyright 2023, Institute of Molecular Function. All Rights Reserved.