分子モデリング・分子シミュレーション・計算化学ソフト 費用対効果の高いスタンダードの統合分子設計支援システム

HyperChem Release 8

長年、世界中の化学者に愛用されている費用対効果の 高いスタンダードの分子モデリング・分子シミュレー ション・計算化学ソフト。

あらゆる分子種を表現可能な平面分子作画機能、自動 三次元化機能、自動水素付加機能、自動力場設定機能 、アミノ酸・核酸・糖・ポリマーエディタ・クリスタ ルビルディング機能など卓越した分子モデリング機能 。各種の分子力学計算、半経験分子軌道法、量子力学 計算、密度汎関数法、分子動力学計算、極小化アルゴ リズムが利用できる網羅的計算化学環境。豊富なレン ダリング機能、ユーザーによる機能拡張性、各種ファ イルフォーマットに対応した互換性などが特徴。

Molecular Modeling & Simulations Molecular Mechanics Semi-empirical MO ab initio MO Density Functional Molecular Dynamics

What's new

Third-Party Interfaces
 Batch Capabilities

Batch Capabilities
Double Precision
Undo and Redo
Recent Files List
Geometric Measurements
Chemical Substituents
Entropy and Free Energy
Heat Capacities
Zero-point Energies
Rate Constants
Equilibrium Constants
MP2 additions
Configuration Interaction

MP2 additions
 Configuration Interaction
 Temperature
 LineWidths
 MM-QM
 Fixed Atoms

Hixed Atoms
 Electric Fields
 New Visualization
 Vibrational Analysis
 Particle in a Box
 Multiple Unit Systems
 RM1 Semi-empirical Method

New Release of HyperChem

 $\sum_{1} \frac{V_1}{2} (1 + \cos \phi) + \frac{V_2}{2} (1 - \cos 2\phi) + \frac{V_3}{2} (1 + \cos 3\phi)$

高校化学、大学学部や大学院の基礎化学、有機化学、無機化学、物理化学、 理論化学、計算化学、量子化学、生化学、薬化学、農薬化学、機能材料化学 、環境化学、天然物化学、生理活性化合物化学、石油化学、機器分析(振動 解析チャート予測)、構造解析(核磁気共鳴ケミカルシフト予測)などの教 材および学術研究ツールとして世界中で最も広く使われている統合分子モデ リングソフトです。

ハイパーケムは 1980 年代後半から開発されてきた非常に歴史のあるソフト で信頼性も高く、低分子用計算化学プログラムとしての機能を備えつつ、10 万原子を超える複雑系システムの分子モデリングまで実施でき、既存の医薬 分子設計や機能性材料設計のための高価な分子モデリングソフトの大半は八 イパーケムをまねて作られているといっても過言ではありません。無料のモ デリングソフトではまねのできない様々な付加価値のある高度な機能が多数 用意されています。

ハイパーケムは誰でも簡単に操作ができ、分子の仕組みや反応の説明に利用

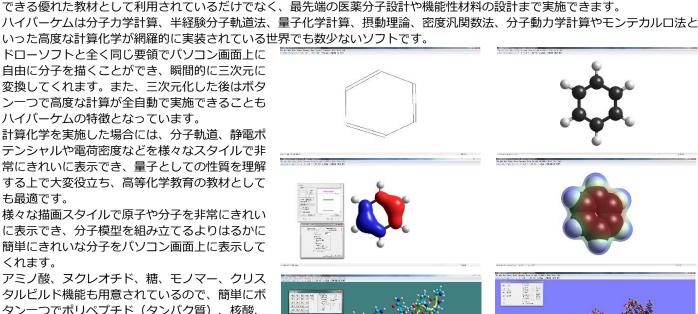
ハイパーケムは分子力学計算、半経験分子軌道法、量子化学計算、摂動理論、密度汎関数法、分子動力学計算やモンテカルロ法と

ドローソフトと全く同じ要領でパソコン画面上に 自由に分子を描くことができ、瞬間的に三次元に 変換してくれます。また、三次元化した後はボタ ン一つで高度な計算が全自動で実施できることも ハイパーケムの特徴となっています。

計算化学を実施した場合には、分子軌道、静電ポ テンシャルや電荷密度などを様々なスタイルで非 常にきれいに表示でき、量子としての性質を理解 する上で大変役立ち、高等化学教育の教材として も最適です。

様々な描画スタイルで原子や分子を非常にきれい に表示でき、分子模型を組み立てるよりはるかに 簡単にきれいな分子をパソコン画面上に表示して くれます。

アミノ酸、ヌクレオチド、糖、モノマー、クリス タルビルド機能も用意されているので、簡単にボ タン一つでポリペプチド(タンパク質)、核酸、 多糖、ポリマーを構築でき、学生さんや研究者の 方が分子の形を理解するのに大変役立ちます(自 動的に原子タイプや電荷も同時に割り振られるた め、構造ビルドと同時に計算を実施できます)。



PC1 台用のスタンドアロンバージョンから学年、学部、全学、所属機関で利用できるサイトライセンスも用意されています。 費用も同種分子モデリングソフトと比較して数十分の1から数百分の1に価格が抑えられており、大変導入しやすくなっていま す。このように費用対効果に大変優れていることも、世界中で広く、そして長年愛用されている理由の一つです。 様々なファイル形式に対応している他、多くの分子モデリングおよび分子ビューアソフトがハイパーケム独自のフォーマットをサ

ハイパーケムは理系の高等学校、高等専門学校、大学、大学院教員および学生の方々の化学教材として必須のソフトウエアです。 アノテーション機能を活用すると、授業中にメモをとりながら教師が板書した内容をそのまま保存できます。内部の電荷や原子タ イプといったパラメータを保持したままコピー&ペーストも簡単にできます。授業を電子化して学生と共有することもごく簡単に できます。

HyperChem機能 分子モデリング・分子シミュレーション・計算化学 - 洗練された分子モデリング環境 -

卓越した分子モデリング機能

あらゆる分子種を表現可能な平面分子作画システム(10万原子以上表示可能) 自動三次元化、自動水素原子付加、自動力場パラメータ設定機能 アミノ酸、核酸、糖、ポリマーエディタ、クリスタルビルダー機能 RMSフィット、オーバーレイ機能

コンフォメーション探索機能

カット&ペースト機能

対称性操作、リストレイン・コンストレイン設定機能

細かな選択機能と選択部分のみでの部分計算機能やレンダリング機能



分子力学計算(MM): MM+、Ambers、Amber2、Amber3、Amber94、 Amber96, Amber99, Bio+83, Bio+85, Charmm-19, Charmm-22, Charmm-27、Opls、Custom

半経験分子軌道法(QM): Extended Huckel、CNDO、INDO、MINDO3、 MNDO、MNDO/d、AM1、PM3、RM1、ZINDO/1、ZINDO/s、TNDO

Ab Initio分子軌道法(QM): Hartree-Fock、MP2、CI

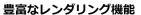
密度汎関数法(QM)

分子動力学計算(QM、MM両方可能): Molecular Dynamics、Langevin

Dynamics, Monte Carlo

極小化アルゴリズム: Steepest Descents、Flecher-Reeves、Polak-Ribiere、Eigenvector Following、Newton-Raphson、 Conjugate Directions

−点計算、構造最適化、振動解析、遷移状態解析、NMR解析、QSAR解析、コンフォメーション探索(QM、MM両方可能)、 QM/MM計算、周期境界条件



選択的表示機能、Customカラー表示

ラベル機能: symbol、name、number、type、charge、spin、mass、 chirality, basis set, RMS gradient, residue, sequence, res+seq, bond length, bond order, custom

分子表示:スティック、ボール、ボール&スティック、CPK、チューブ、ドット 分子軌道、静電ポテンシャル、電荷密度、スピン密度表示: 2D-3D、メッシュ、 Jorgensen-Salem、ライン、フラット、半透明、その他

水素結合、双極子モーメント、OpenGL二次構造表示、リボン表示、反応座標、 NMRチャート、振動チャート



拡張性

HCL (HyperChem Command Language) スクリプタブル C、C++、Fortran、Tcl/Tk、DDEスクリプタブル(Windows版のみ) HyperChemはマルチコア対応ではありませんが、同時に複数スレッドを立ち 上げることが可能なため、コア(スレッド)数分の独立したHyperChemが同 時に実行できます。

互換性

PDB(ENT)、カーテシアン、Z-マトリックス、ISIS、MDL、TRIPOS、ChemDraw

推奨最小システム構成

プロセッサー: インテルCoreまはたXeon以降 (1GHz以上)

オペレーティングシステム: Windows 10及び11 (32ビットおよび64ビット) (Windows 95以降に対応)、Mac OS X, OS X, macOS10.x*、Linux:*

メモリー (RAM): 2GB以上 (最低256 MB以上)

ハードディスク: 128GB以上(本体のみで300MB必要)

その他: CD-ROMドライブ、キーボード、マウス(タッチパネルにも対応) *注意: MacおよびLinux版は使用環境に依存します。必ず、ご使用環境で使用可否を評価版にてご確認ください。

評価版

評価版は期間限定の完全版です。ダウンロード方法、評価用ライセンスについてはお問い合わせください。

お問い合わせ先

分子機能研究所 TEL: 048-956-6985 電子メール: sales@molfunction.com URL: https://www.molfunction.com/jp/

