INSTITUTE OF
MOLECULAR
FUNCTION

Homology Modeling Professional for HyperChem

with Gaussian Interface for HyperChem & ONIOM Interface for Receptor

The New, High-Performance Software for Protein Modeling, Functional Analysis and Simulations

Institute of Molecular Function

Copyright(c) 2005-2007 Institute of Molecular Function. All rights reserved.

HyperChem - 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

平面分子作画システム,自動三次元化,水素原子
自動付加機能,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

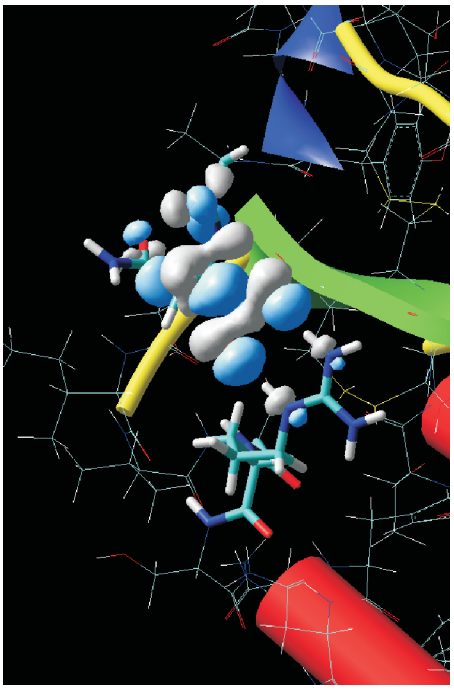
網羅的計算化学環境

分子力学計算

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

Extended Huckel,CNDO,INDO,MINDO3,MNDO,MNDO/d,AM1,PM3,ZINDO/1,ZINDO/s,
TNDO



Ab Initio分子軌道法

Hartree-Fock,MP2,CI

密度汎関数法

一点計算,構造最適化

分子動力学計算

Molecular Dynamics,Langevin Dynamics,Monte Carlo

極小化アルゴリズム

Steepest Descent,Flecher-Reeves,Polak-Ribiere,
Eigenvector Following,Newton-Raphson,
Conjugate Directions

振動解析,遷移状態解析,NMR解析,QSAR

豊富なレンダリング機能

選択的表示機能,Customカラー表示

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

スティック,ボール,ボール＆スティック,CPK,チューブ,ドット表示

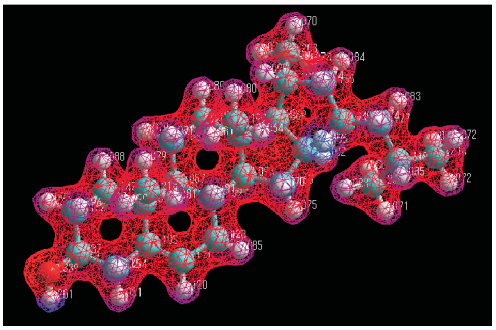
2D-3D分子軌道,静電ポテンシャル,電荷密度,スピン密度表示

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

C,C++,Fortran,Tcl/Tk,DDEスクリプタブル

互換性

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

Homology Modeling Professional for HyperChem

分子力学計算はもとよりab initio量子化学計算、分子動力学シミュレーションを網羅的に実施して、巨大分子モデリング、機能解析、シミュレーションできる、HyperChemをコアとする最先端分子モデリングパッケージ。HyperChemとGaussian03をシームレスに制御、計算結果をリアルタイムにフィードバック。巨大分子システム全体を量子化学的に処理。すべての操作が完全自動化・GUI化され、構造ベース創薬からライフサイエンス研究におけるあらゆる論理的分子設計、未踏研究をロジカルに支援。

■ 最新、高性能･高機能タンパクモデリング、機能解析、シミュレーションパッケージ

Homology Modeling Professional for HyperChemは、分子モデリングで世界的に最も定評のあるHyperChemをフロントエンドとし、タンパクモデリング、機能解析およびシミュレーションに必要な多くのモジュールプログラムから構成されています。これらモジュールプログラムの多くが既知モデリングシステムにはない最先端独自技術を搭載しており、HyperChemの機能と融合することで、かつてない画期的な分子モデリング、機能解析、シミュレーション支援システムおよび新薬開発研究における創薬支援システムとなります。

■ 研究者による研究者のためのソフトウエア設計

Homology Modeling Professional for HyperChemでは直感的操作性に強く配慮されており、HyperChemオプションでは複雑なステップを必要とする操作がワンクリックで達成されます。ほとんどの場合、ボタンを選択するだけで自動的に目的が達成されるように設計されています。また、Homology Modeling Professional for HyperChemで用意されるツールにより、モデリング中のHyperChem自体の操作は分子の回転操作以外を必要としません。完全自動レンダリング機能および自動ラベルリング機能を全モジュールプログラムに搭載しており、文献のフィギュアやデモンストレーションレベルの美しさでモデリング、機能解析、シミュレーションできます。その他、分子番号参照時におけるタンパクと他の分子との区別、目的部位へのセンタリング機能、モデリングに伴う構造修正時の取り消し機能などの細かなサポートがなされています。このため、HyperChemのコマンドおよびオプションに関する予備知識なしでもタンパクモデリングが可能であるとともに､パワーユーザーはHyperChemの機能もあわせて駆使できるよう設計されています。

■ 複雑な分子システムに対応

Homology Modeling Professional for HyperChemでは、扱える原子数が約10万（HyperChem7.5）と、現在PDBに登録されている構造データをほぼ網羅的に扱えます（PDBフォーマットバージョン2.3、3.0および3.1を取り扱えます）。さらに、タンパク分子以外の高分子、低分子あるいは金属原子等を含む混在環境のまま、タンパクモデリング、機能解析、シミュレーションできます。また、これらがタンパクと共有あるいは配位結合している場合にも対応しています。必要なパラメータは自動的に割り振られるか、後述する各種計算化学により生成できます。このため、本システムで作成した高精度タンパクモデルまたは精密化した結晶構造とシードやリード化合物との詳細な相互作用解析により、化合物最適化など高度なin silico創薬研究が可能となります。

■ 世界最強計算化学環境：分子力学計算から量子化学計算まで

HyperChemでサーポートされる計算化学がすべて利用できることから、極めて強力なタンパク機能解析環境を提供します。Mopac2000とMopac Interface for HyperChemおよびQ-

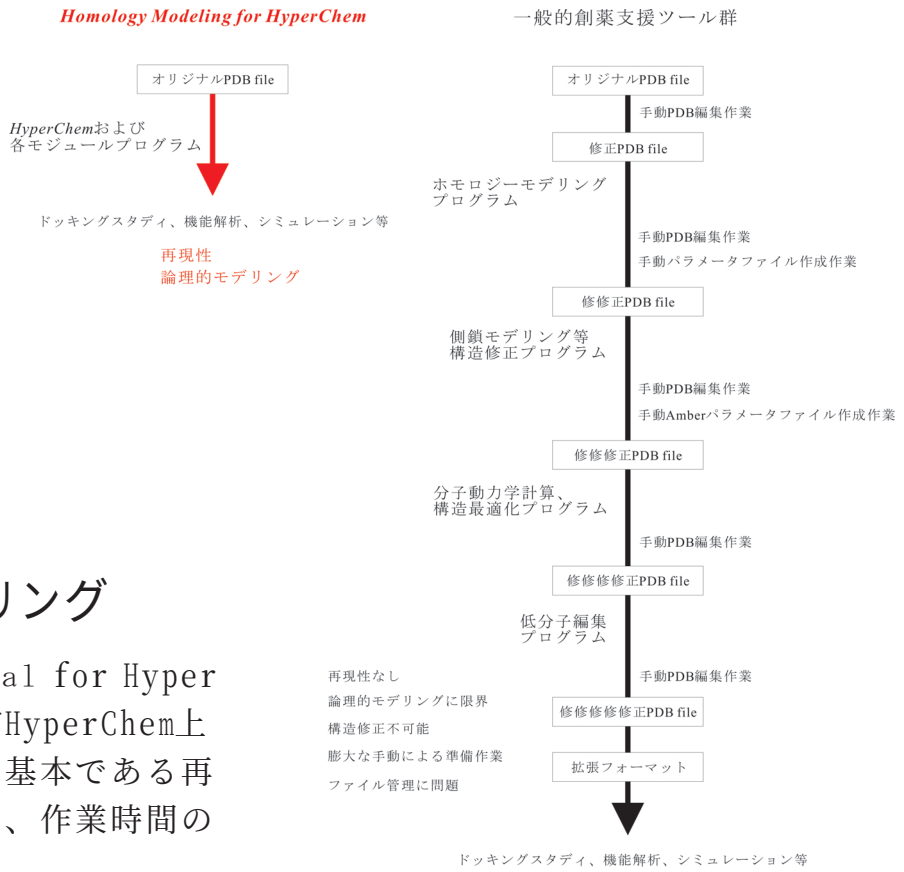
Chem1.2 for Windowsが利用可能な環境ではこれらがサポートする計算化学がすべて利用できます。さらに、Homology Modeling Professional for HyperChemに搭載されるGaussian Interface for HyperChemおよびGaussianが搭載するONIOM計算のための完全自動インターフェイスであるONIOM Interface for Receptorを介してGaussianジョブを実行し、タンパク結晶構造中に含まれるすべての分子種の電子状態を自動的、リアルタイムにHyperChem上の分子システムに反映させることができ、これにより分子システム全体を量子化学的に処理して、究極のモデリング、機能・相互作用解析、シミュレーションさらには未踏研究をもロジカルに支援します。

導入後、即研究可能

その他、各モジュールプログラムは互いに独立して個別に使用でき、併用およびマルチタスクも可能です。PDBファイル、パラメータファイル等を一切編集、準備する必要がないため、研究者は本来の研究に即打ち込めます。プログラムが使用したパラメータおよび結果を含む詳細なログが自動的に生成されます。モデリングおよび機能解析に使用したファイルの管理をプログラム側が行います。HyperChemバージョン5.x/6.x/7.x/8.03をサポートしていることから、初期バージョンのHyperChemが最新のタンパクモデリング機能解析環境として利用できるようになります。

画期的パフォーマンス

Homology Modeling Professional for HyperChemは単なる創薬支援ツールとしてのみならず、既存システムでは不可能な、レセプタータンパクによるリガンド認識メカニズムなどの未踏の研究をもサポートできる優れた潜在的パフォーマンスを有しており、かつ論理的な研究の場を提供します。一方、同種既存システムが本システムの一部のモジュールプログラムの年間使用料だけで数百万から数千万と一般の企業や大学では到底使用できない環境にある中で、Homology Modeling Professional for HyperChemは既存システムの数十分の一あるいは数百分の一という画期的なコストパフォーマンスを達成しています。
IntelベースWindowsプラットフォームで動作するため、計算速度、ユーザーインターフェイスの両面でもUnixをプラットフォームとするシステムとは圧倒的性能差が期待できます。



再現性と論理的モデリング

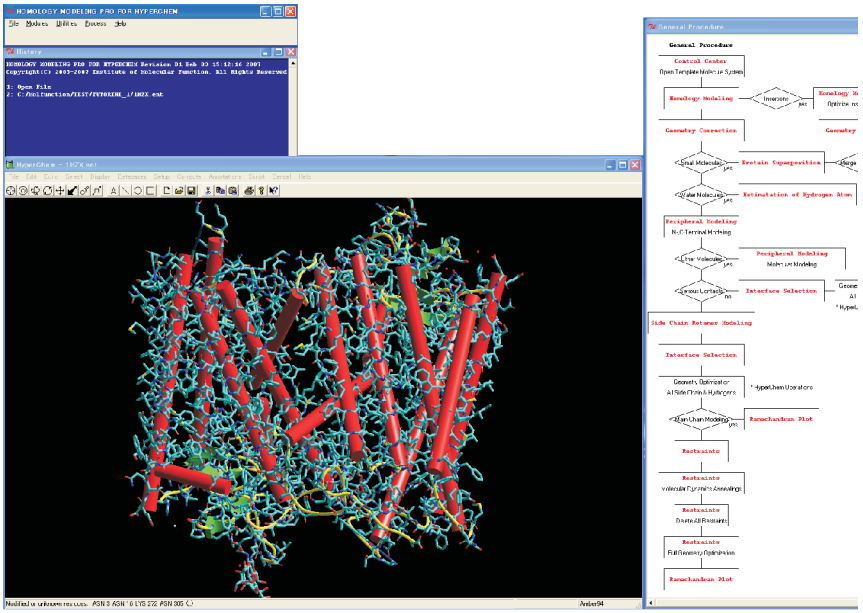
Homology Modeling Professional for HyperChemは分子モデリングを一貫してHyperChem上で行うことにより、サイエンスの基本である再現性と論理性を確保するとともに、作業時間の大幅な短縮を可能にしています。

Homology Modeling Professional for HyperChem

－論理的タンパク研究、論理的構造ベース創薬研究支援システム－

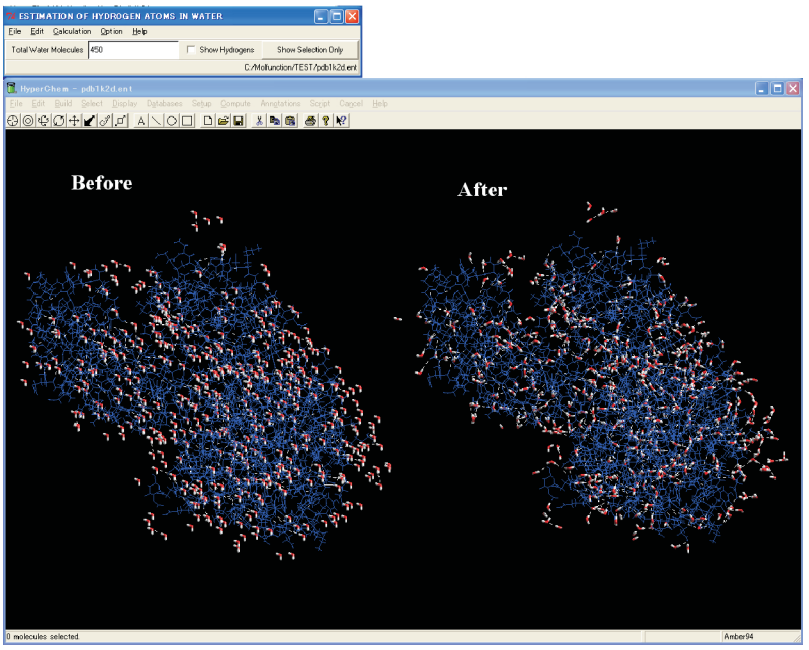
Module Programs

■ コントロールセンター



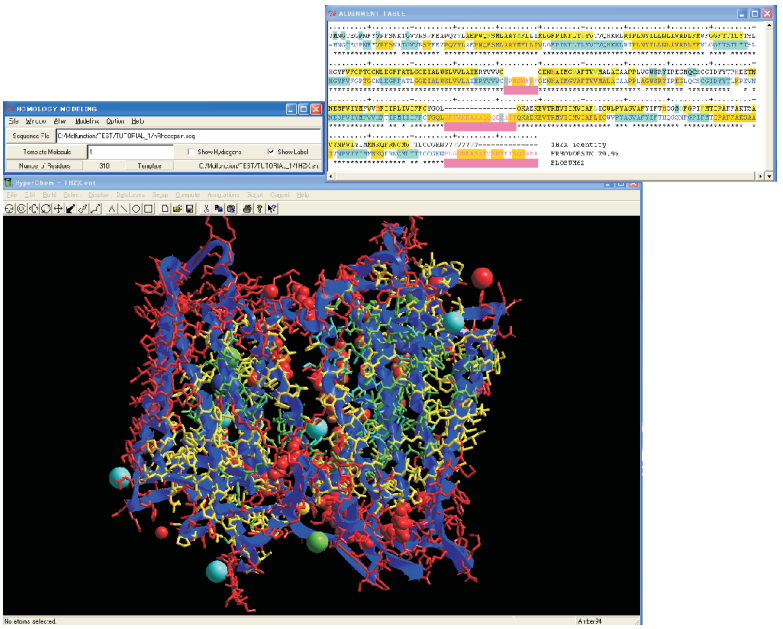
コントロールセンターはHyperChemおよびHomology Modeling Professional for HyperChemのすべてのモジュールプログラムを集中管理して、タンパクモデリングと機能解析をより効率的に行うための統合インターフェイスです。
また、コントロールセンターでは、タンパクホモロジーモデリングをHyperChem上で一貫して実施するための一般的な手順が使用するモジュールプログラム名とともに示されており、使用あるいは変更ファイル名と使用モジュール名の履歴が残されることから、ナビゲータとしての機能も果たします。

■ 水素原子初期座標評価

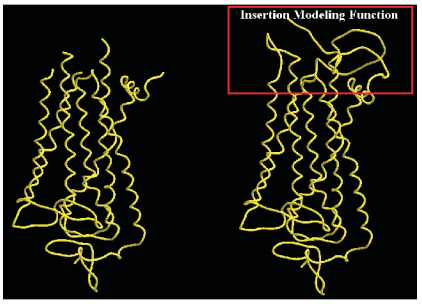


タンパク結晶構造において、水素原子は、後から任意の方向に配置されます。一部の極性残基を除く、アミノ酸残基あるいはリガンドなどのヘテロ分子における水素原子では、その位置が比較的限定されるため、あまり問題になりません。しかしながら、最も大量に含まれている水分子では、その水素原子位置が単純に限定できないばかりでなく、リガンド結合部位などにある場合には水素結合ネットワークを形成して重要な因子となっていることがあります。また、タンパク表面では静電ポテンシャルや誘電率に大きく寄与しています。
水素原子初期座標評価プログラムは、このタンパク結晶中に含まれる水の水素原子初期座標を独自アルゴリズムを基に自動的にそして論理的に準備します。

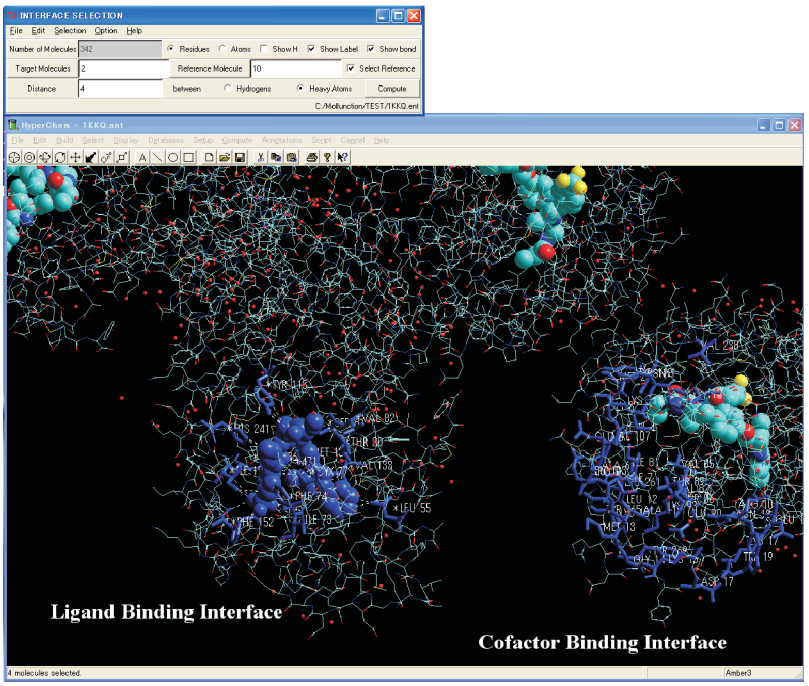
ホモロジーモデリング



ホモロジーモデリングプログラムはHyperChem作業領域に表示した鋳型三次元（3D）構造を利用して標的アミノ酸配列の3D構造を自動的に構築します。最も不確定性が高く、論理性が要求されるアライン精密化には標的配列に対して実施した二次構造予測結果を利用できる独自の技術を搭載しています。また、アラインのためのスコアマトリクスはほぼ網羅的に搭載しています。さらに、プロフェッショナルバージョンでは無制限長の挿入配列でも容易にモデリングできる独自の挿入配列モデリング機能を搭載しています。この機能は単なるループ生成機能とは異なり、途中に二次構造を配置したり、既知構造部分と連続した二次構造も作成でき、先の二次構造予測結果に基づいてモデリングすることもできます。生成された挿入配列の構造は自動的に複数回の構造最適化を経て最適化されます。構造最適化にはHyperChemに搭載される全ての分子力学計算、Ambers、Amber2、Amber3、Amber94、Ambre96、Amber99、MM+、OPLS、Bio+83、Bio+85、CHARMM19、CHARMM22、CHARMM27、が利用できます。その他にも、アサインしたヒスチジン残基のプロトン化状態をモデルに反映させるなど、様々な機能が搭載されています。なお、鋳型と異なるアミノ酸側鎖のコンフォメーション（ロータマー）は本パッケージに含まれる側鎖ロータマーモデリングプログラムの究極の側鎖モデリング機能を利用して極めて論理的に、そして完全自動で決定できます。



インターフェイス選択

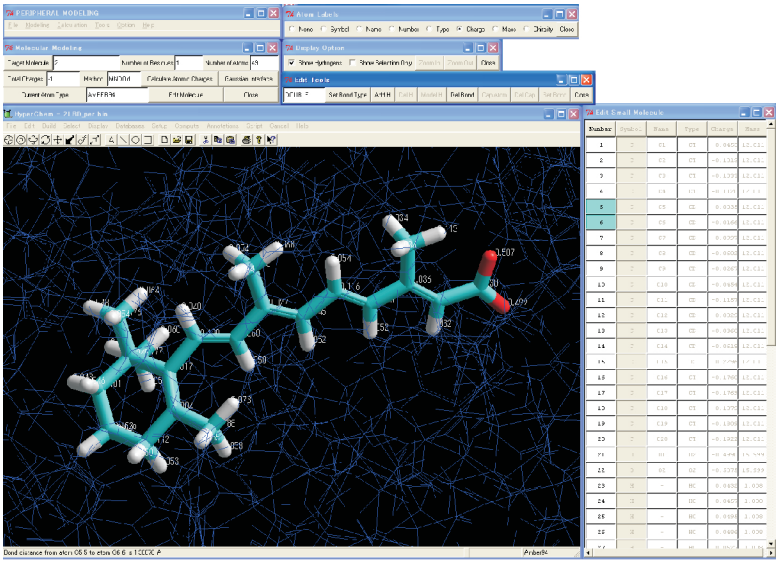


HyperChemは選択された分子、原子あるいは残基などのフラグメントに対して部分的にさまざまなオプション機能を適用できます。インターフェイス選択プログラムは、これらHyperChem機能をタンパクモデリングおよび機能解析で利用するための選択ツールです。タンパク-タンパクおよびタンパク－リガンド相互作用に関与する原子や残基の探索のみならず、非常に多くの選択パターンを作成することができます。その他にも繊細なレンダリングを施したり、選択部分を安全に削除したりするのに非常に便利です。

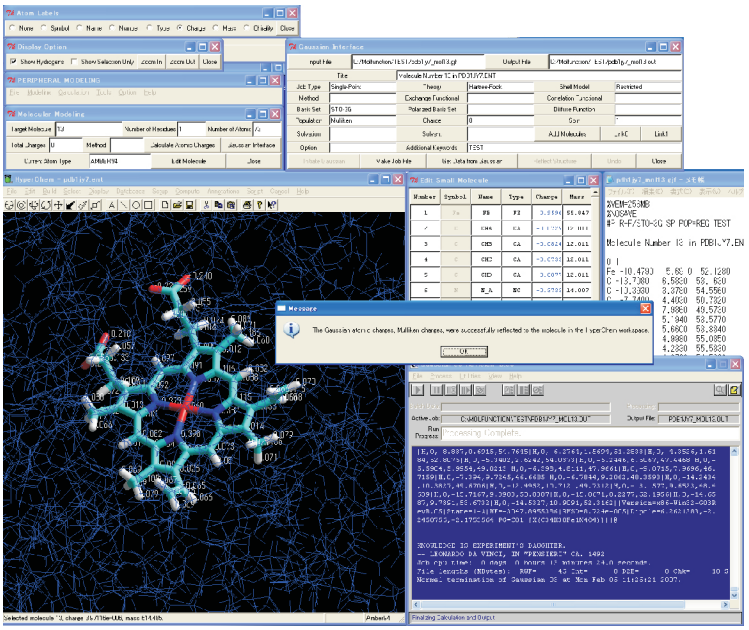
周辺モデリング

タンパク結晶構造データであるPDBはタンパク分子と水分子以外にも、基質、リガンド、金属、その他の低分子データも同時に含んでいます。しかしながら、これら分子に関しては、水素原子座標情報がなく、また結合タイプ、電荷、原子タイプ情報等の多くの情報が不足しています。そのため、特に、これら分子からの立体、電子効果を無視することのできないドッキングスタディや機能解析に要求されるタンパクモデルあるいは精密化の必要な結晶構造では、相互作用する分子をあとから編集する必要があります。

周辺モデリングプログラムは大きく5つの分子モデリング、編集機能を有しています。



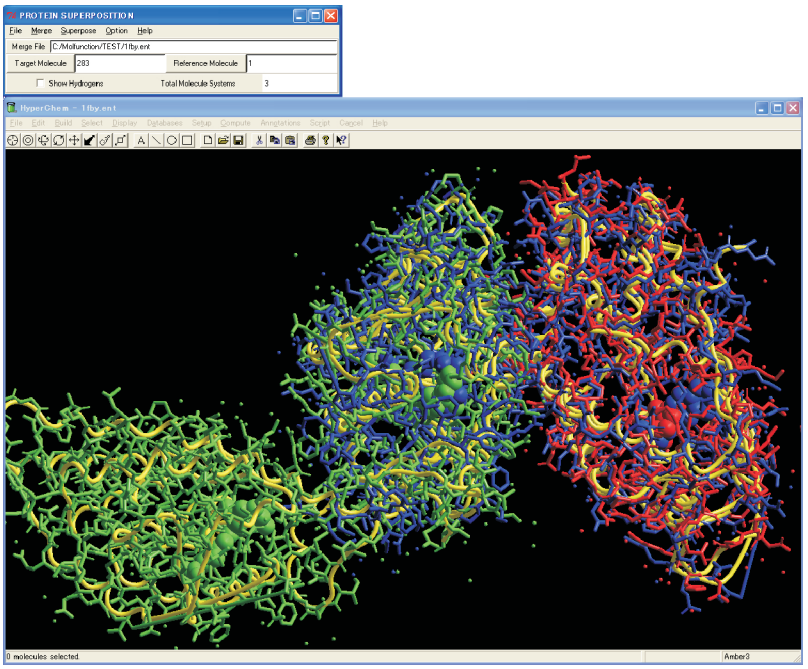
一つ目は、このプログラムを使用することで、HyperChemの洗練された低分子モデリング機能を、タンパク分子との混在環境にある低分子、金属、ポリマーあるいは金属錯体の編集作業で有効に使えるようになり、対話的、ほぼ自動的な編集作業が可能となります。また、複雑な分子システム中の個々の着目分子を単分子モデリングのように取り扱うことができます。二つ目は、通常、タンパクモデリングでは、タンパクと共有結合している低分子を取り扱うことができませんが、本プログラムは独自開発したQM/MM手法を用いてこの問題を解決しており、こうしたタンパクをも非常に単純な作業で論理的、高精度にモデリングできます。三つ目は、一般にPDBではタンパク分子のN末端とC末端の情報が不足していますが、このモジュールプログラムはほぼ自動的に必要な両端情報を付加できます。四つ目は、タンパク分子との混在環境にある低分子、金属、ポリマーあるいは金属錯体の電子状態をGaussian Interface for HyperChemを利用してGaussianで計算し、リアルタイムにHyperChem上のこれら分子に計算結果を反映させることができます。また、タンパク結晶構造中に含まれるすべてのヘテロ分子を同時にGaussianで計算することも可能です。このため、特に酵素基質反応系に対しては遷移状態計算を用いた電子状態を反映させることも極簡単にできます。



その他の手法として、各種反応場モデルを用いて溶媒和効果を加味した電荷の利用や、Gaussianでの計算に構造最適化を用いてその電子状態のみをHyperChem上の分子に反映させるなど、あらゆる手法で論理的モデリング、機能解析あるいは論理的構造ベース創薬研究を支援することが可能です。五つ目は、プロフェッショナルバージョンではGaussianが搭載するONIOM計算のための完全自動インターフェイスであるONIOM Interface for Receptorを搭載しており、レセプターとリガンドなどのタンパク分子と低分子からなる分子システムの2-レイヤ（QM:QMおよびQM:MM）あるいは3-レイヤONIOM（QM:QM:QMおよびQM:QM:MM）計算用入力ファイルが自動生成できます。これにより、インターフェイス起動後、わずか数秒で巨大分子システムの高精度な量子化学計算がGaussianでシームレスに実行き、リアルタイムにHyperChem上の分子システムにその計算結果（電荷と構造）をフィードバックさせることができます。本機能により、HyperChemとGaussianにおける分子モデリングがシームレスとなり、既存システムでは不可能なあらゆる形態の分子システムについての高度な論理的分子設計がGUIベースで完全自動化されて、可能となります。
こうした、作業は非常に高度に思えますが、本プログラムを利用すれば、全ての高度な作業がほぼワンクリックで達成できます。

タンパク重ね合わせ

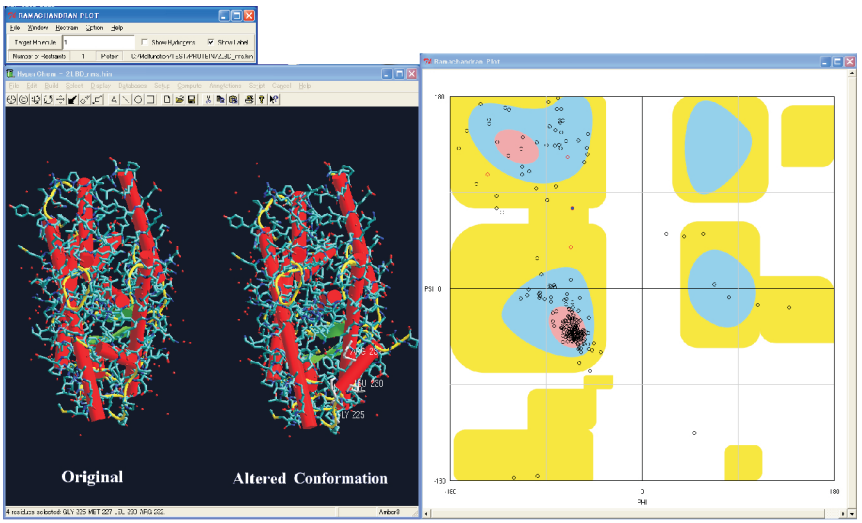
タンパク重ね合わせ（RMSフィット）プログラムはHyperChem作業領域にロードされている参照分子（システムA）上にマージした標的分子（システムB）を自動的に重ね合わせます。マージするシステムB（別の分子システムC,D,...）はほぼ無制限に追加、重ね合わせしていくことができ、また、アンマージしていくこともできます。
このモジュールプログラムは構造インフォマティクスで幅広く利用できるとともに、モデル作成時には鋳型システムからの重要成分の抽出やキメラモデル作成に利用します。



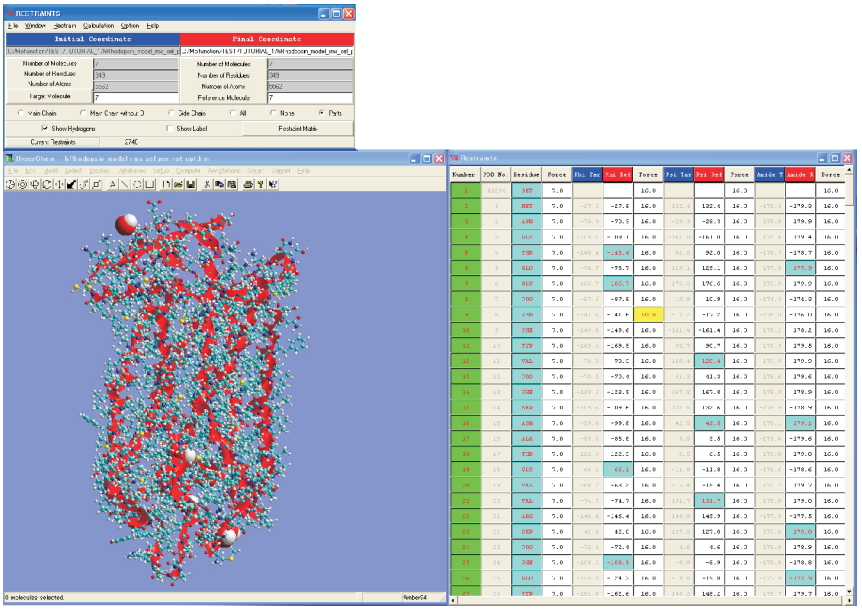
ラマチャンドランプロット[1]

ラマチャンドランプロットプログラムはHyperChem作業領域にロードされたモデルの最終的な精度を評価する目的に利用するとともに、タンパク分子の主鎖コンフォメーションを、対応するラマチャンドランプロット上のポイント（φ,ψ空間）をマウスで移動させ、直接自由にモデリングすることができます。変更した構造をオリジナルに戻すこともできます。また、変更したφ,ψ空間値に向けて束縛を設定して、引き続き構造最適化または分子動力学計算を実施して安定主鎖コンフォメーションをモデリングすることができます。この機能を利用するとアゴニストフォームからアンタゴニストフォームのモデルを作成するといった作業が、単純でありながらも論理的に実施できます。

[1] ラマチャンドランプロット中の有色領域は主鎖コンフォメーション採用可能領域を示します。この領域は約25,000のPDBデータ中、分解能4Å以内のX線結晶構造でかつ同一タンパクを含まない約4,000のタンパクデータをもとに統計解析された最新結果から得たものです。



束縛

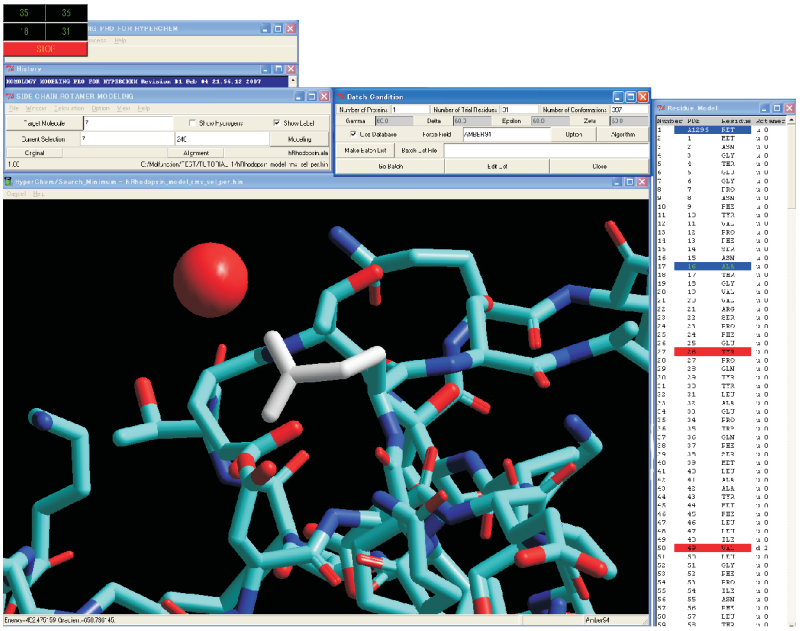


低分子に対しては、分子動力学計算は安定コンフォメーションの探索あるいは複数の初期構造の生成を目的として使用し、ほとんどの場合に束縛条件の必要性はありません。しかしながら、生体高分子などの巨大分子に対する分子動力学シミュレーションあるいはアニーリングには束縛条件設定が大前提の必須となります。そこで問題となるのは、その束縛条件の膨大な数と正確な設定です。通常はこれを手動で膨大な時間をかけて入力ファイルとして作成しますが、本プログラムを利用するとこの問題をいっきに解決できます。

束縛プログラムはタンパクにおける二面角（φ、ψおよびアミド）とタンパク、水および、その他のヘテロ分子の全原子座標（主鎖原子や側鎖原子などのグループも可能）に構造最適化あるいは分子動力学計算のための束縛条件をいっきに、そして個別の設定で準備できるこれまでにない画期的なユーザーインターフェイスです。通常は、モデル作成最終段階での分子動力学アニーリングに必要な束縛条件設定のために使用しますが、その有用性は既存の使用法に限定されず、例えば、アポタンパクからホロタンパクへの反応座標を追跡するなど、タンパクの動力学的挙動を完全にGUIベースで制御できます。

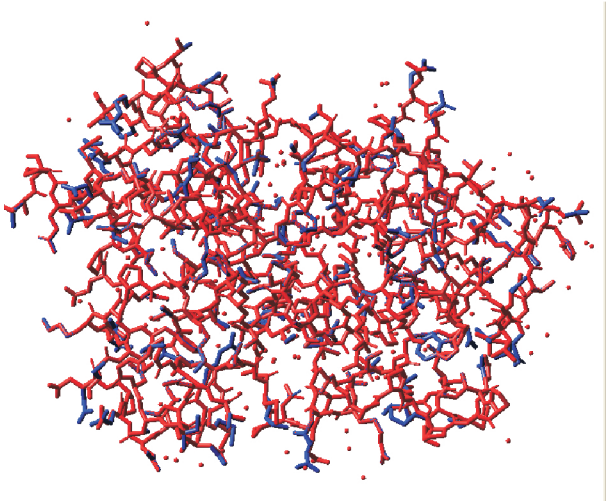
HyperChemに搭載される全ての分子動力学計算、Molecular Dynamics、Langevin Dynamics、Monte Carloとともに、構造最適化もサポートされています。また、HyperChemに搭載される全ての力場、Ambers、Amber2、Amber3、Amber94、Ambre96、Amber99、MM+、OPLS、Bio+83、Bio+85、CHARMM19、CHARMM22、CHARMM27、をサポートしています。

側鎖ロータマーモデリング



側鎖ロータマーモデリングプログラムは、マニュアル、データベース、自動ab initioエネルギー評価およびこれらの組み合わせによるすべての側鎖モデリング機能を備えています。
自動エネルギー評価機能（部分構造最適化および一点計算）を用いた自動側鎖ロータマー探索機能は、HyperChemに搭載される全ての分子力学計算、Ambers、Amber2、Amber3、Amber94、Ambre96、Amber99、MM+、OPLS、Bio+83、Bio+85、CHARMM19、CHARMM22、CHARMM27、をサポートしています。
一点計算では高速法と高精度法が、部分構造最適化では高速法が探索に利用できます。また、側鎖ロータマーデータベース探索機能に対応した最新のデータベースが付属します。[2] さらに、ロータマーデータベースを使用した側鎖モデリングでも自動エネルギー評価機能が使用できることから、ロータマーデータベースと自動エネルギー評価機能を組み合わせた手法は巨大分子（数万原子）の側鎖モデリングの高速化に威力を発揮します。[3] さらに、プロフェッショナルバージョンでは自動ロータマー探索機能（ノーマルモードおよびデータベースモード）にバッチ計算がサポートされており、完全自動化された側鎖ロータマーモデリングが可能です。デフォルトではN-末端からC-末端に向けて順番に鋳型と異なるすべてのアミノ酸側鎖の最安定ロータマーが決定されますが、鋳型とアミノ酸一致度が極端に低く、周囲に未決定の側鎖ロータマーが多くあるようなケースにも対応できるように、バッチ計算の順番は自由に変更できます。また、全てのアミノ酸や特定のアミノ酸だけをバッチ計算することもできます。

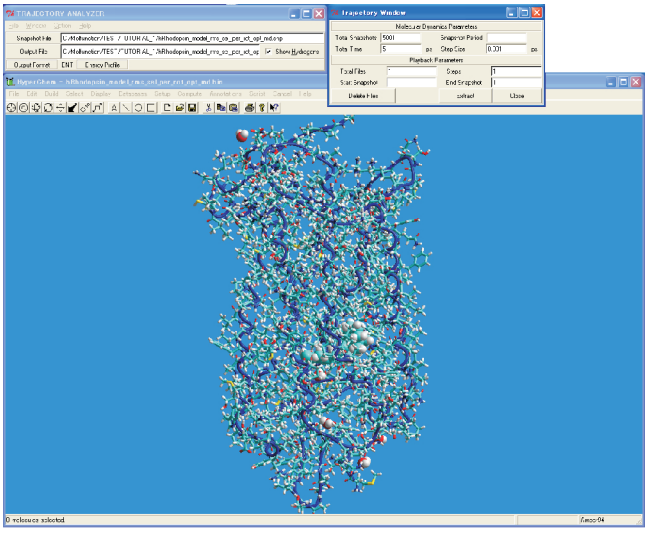
右図は立体構造既知タンパクの全ての側鎖ロータマーについて、ロータマーデータベースを利用してAmber94力場下に一点計算の自動側鎖ロータマー探索を実施した結果です。赤のチューブは予測ロータマーであり、青のチューブが実験結果です。当然の結果ですが表面の荷電アミノ酸のロータマーはエネルギー的に予測した結果と若干異なっているものの、その他のロータマーは非常に良好に実験結果を再現しています。



[2] 最新ロータマーデータベースは約25,000のPDBデータ中、分解能4Å以内のX線結晶構造でかつ同一タンパクを含まない約4,000のタンパクデータをもとに統計解析されたものです。
[3] デフォルトの60°刻みの回転角で、最大約95%計算時間（処理時間）の短縮につながります。具体的にはLysおよびArgではこのデフォルト条件下に1296+1通りのロータマーを探索しますが、ロータマーデータベース（バージョン1.0）を使用した場合には81+1通りの探索で済みます。

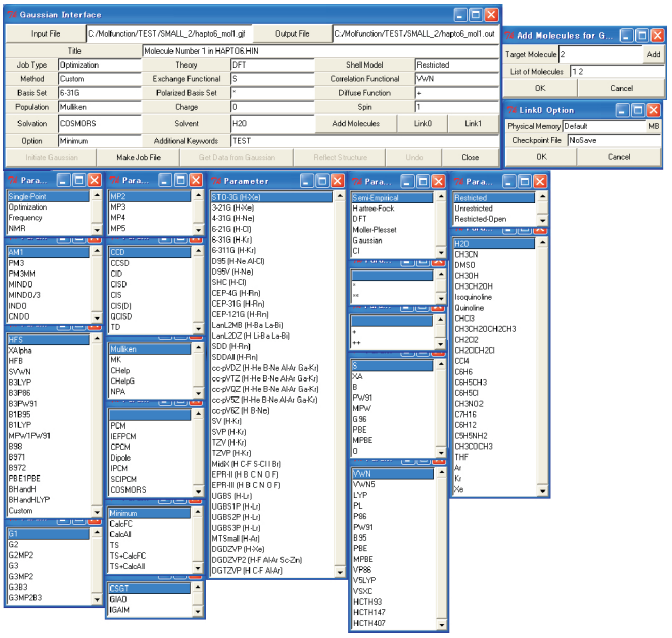
トラジェクトリー解析

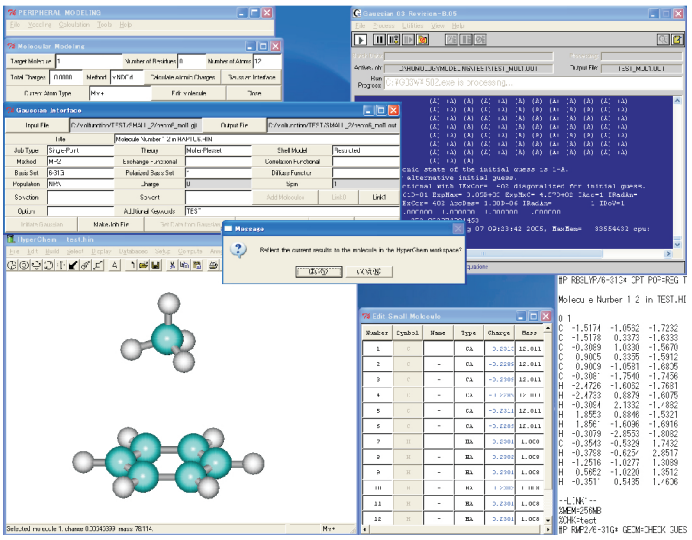
トラジェクトリー解析プログラムはHyperChem分子動力学計算から得られるスナップショットファイルからエネルギープロファイルをテキスト形式で抽出するとともに、任意の時間あるいは時間範囲における分子座標をHIN（HyperChemフォーマット）、ENT、あるいはPDB形式にいっきに変換できます。
これにより、ステップ時間毎での個々の構造を詳細に解析できるようになります。また、HyperChem以外の分子ビューワーソフトでのトラジェクトリーのアニメーション化が可能となります。



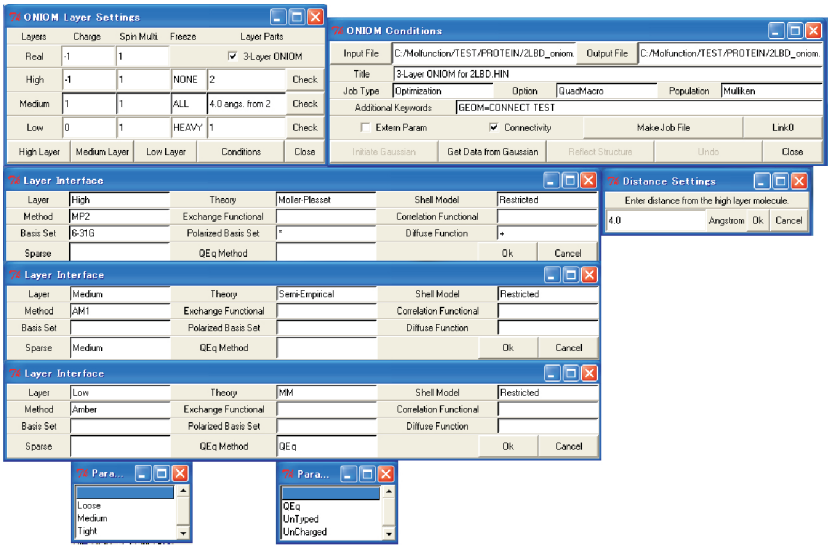
Gaussian Interface for HyperChem

Gaussian Interface for HyperChemはHyperChemの分子モデリング機能で用意した分子の初期構造あるいは最適化構造に対してGaussianの入力ファイルを自動的に生成して起動し、その計算結果を再びHyperChemに取り込むためのインターフェイスです。ONIOM法を除く、主なメソッドおよびオプションがほぼすべて準備できます。また、リンク1計算にも対応しています。
HyperChemに取り込める情報としては、各種電荷および計算構造です。さらに、構造最適化中の途中構造をリアルタイムで更新でき、別ジョブがある場合には区別して情報を取り込むことができます。HyperChem作業領域に複数の分子がある場合、これらを同時および個別に取り扱うことができます。Gaussian Interface for HyperChemは周辺モデリングプログラムと一体となっており、低分子のGaussianインターフェイスとしてのみならず、タンパク構造中に含まれる基質、リガンド、金属、ポリマー（核酸等）あるいは金属錯体等のモデリングツールとして威力を発揮します。具体的には、周辺モデリングプログラムにおいて、ONIOM法等のQM/MMに代わる簡便、高速、高精度な手法（ONIOM法でのハイレイヤとローレイヤから成る方法に相当）を提供します。





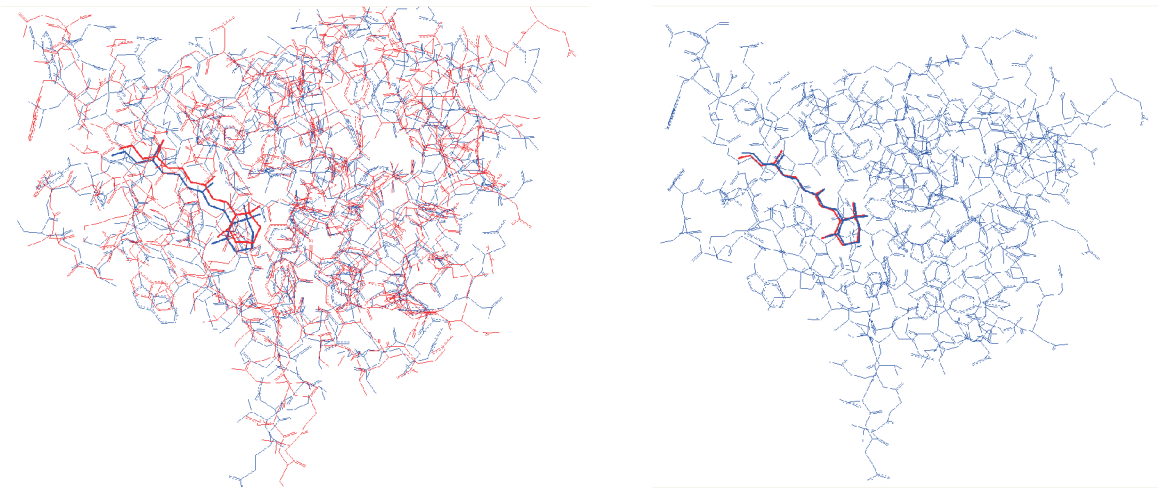
ONIOM Interface for Receptor



タンパク分子システムなどの巨大分子システムに対する代表的な量子化学計算手法として、現在、Gaussianが搭載するONIOM法、MOPAC200Xが搭載する半経験分子軌道法によるMOZYME法およびAb-InitioフラグメントMO法が挙げられます。本プログラムはHyperChemユーザーインターフェイスを利用してGaussianに搭載されるONIOM計算を極めて容易に実行可能にします。また、HyperChemユーザーインターフェイスを利用してMOPAC2000に搭載されるMOZYME計算を実行できるMopac Interface for HyperChemがすでにあることから、本プログラムの登場により、巨大分子システムに対する代表的量子化学計算手法のうちの2手法がHyperChemユーザーインターフェイス上で極めて容易に実行可能となります。

ONIOM Interface for ReceptorはHyperChemの分子モデリング機能で用意した分子システムの2-レイヤ（QM:QMおよびQM:MM）および3-レイヤONIOM（QM:QM:QMおよびQM:QM:MM）計算のためのGaussianの入力ファイルを自動的に生成して起動し、その計算結果を再びHyperChemに取り込むことができます。[4] HyperChemに取り込める情報としては、各種電荷および計算構造です。さらに、構造最適化中の途中構造をリアルタイムで更新できます。ONIOM Interface for Receptorはレセプターとリガンドなどのタンパクと低分子からなる分子システムに特化したインターラクティブなONIOMインターフェイスです。このため、Gaussianにおける不足力場パラメータ、リンク原子情報および電荷情報を自動的に生成できます。また、HyperChemに計算結果をその場でフィードバックさせる必要がない場合には、UNIX版Gaussian用ONIOMインターフェイスとしても極めて有用です。

以下は周辺モデリングプロフェッショナルプログラムで調整した初期構造（赤色）をもとにGaussianの2-レイヤONIOM（HF/6-31G*:Amber）で構造最適化（青色）し、その構造をHyperChemにフィードバックしてタンパク重ね合わせプログラムでRMSフィットした結果です（右図はLowレイヤの重原子座標を固定した部分構造最適化の結果です）。



[4] （QM:MM）および（QM:QM:MM）の場合、Lowレイヤで設定できる分子力場計算（MM）はAmberのみです。

INSTITUTE OF MOLECULAR FUNCTION

Homology Modeling Professional for HyperChem

ライセンス形態

Homology Modeling Professional for HyperChemは、1CPUにつき1ライセンスの形態を採ります。

シングルライセンス

推奨最小システム構成

OS:　マイクロソフトWindows95/98/NT4/2000/XP/Vista*
CPU:　インテルPentiumIII/Pentium4/Celeron/Core2Duo/Xeon (1 GHz以上)
RAM:　256MB
グラフィックス: OpenGL対応ボード
その他: HD (30 MB);CD-ROMドライブ;マウス

* Windows Aero機能を使ってアクティブウインドウ以外のウインドウを操作しようとした場合にHyperChemとのプログラム間通信が一旦中断する場合があります。

必要なソフトウエア*

HyperChem: 5.x/6.x/7.x/8.03 (Windows版;但し学生版はサポート対象外)**

TclPro1.2: Windows版 (下記のURLより無料で入手できます)

http://www.tcl.tk/software/tclpro//eval/1.2.html

Gaussian: Gaussian Interface for HyperChemおよびONIOM Interface for Receptorを使用するにはGaussian98W (Rev. A.9以上) あるいはGaussian03Wが必要です。***

* 本パッケージは、これらのソフトウエアを含みません。
** ONIOM Interface for Receptorの使用にはHyperChem 6.x以上が必要です。側鎖ロータマーモデリングプロフェッショナルの自動ロータマー探索機能を使用する場合、HyperChem 5.xでは力場パラメータを追加する必要のある場合があります。
*** ONIOM Interface for Receptorを使用する場合、Gaussian98では生成されたGaussian入力ファイルを編集する必要があります。

本パッケージの具体的な使用方法、ログの解説または検証結果等に関しては下記のホームページをご参照ください。

http://www.molfunction.com/jp/

HyperChemはHypercube, Inc.の登録商標です。
GaussianはGaussian, Inc.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。
本カタログの仕様は予告なく変更する場合があります。

Copyright(c) 2005-2007 Institute of Molecular Function. All rights reserved.

Institute of Molecular Function

住所:　〒341-0037
埼玉県三郷市高州2-105-14

電話:　048-956-6985
FAX:　048-956-6985
URL:　http://www.molfunction.com
E-mail:　support@molfunction.com

Ver. 2007.9.04