

高精度!

アドバンスソフトの次世代解析ソフト

タンパク質の精密な全電子計算が実行できるソフトウェア

◆タンパク質量子化学計算ソフトウェア◆

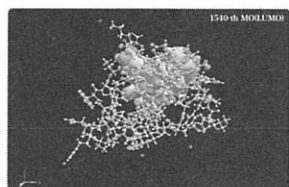
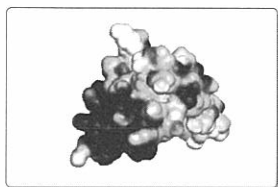
Advance/ProteinDF

定価105万円(年間使用料金)



- タンパク質を細分化せずに量子計算を実行
- 金属タンパク質に対応
- 非常に優れた初期値の自動作成機能
- 高精度計算

タンパク質は生体の中で多様な機能性を発揮します。生体内でのタンパク質は数kcal/molのエネルギーでさまざまな反応を起こします。タンパク質の機能研究を行うためには、精密な精度をもつ計算が必要となります。タンパク質量子化学計算ソフトウェアProteinDFはより精度の高い計算を実行するために、タンパク質を細分化することなく丸ごと取り扱います。



インスリン単量体のHOMO(右)と表面上の静電ポテンシャル(左)

Advance/ProteinDFの機能

◆計算の前処理

- ・水素付加
- ・水素結合の表示
- ・原子衝突の表示
- ・構造妥当性評価
- ・古典分子力場による簡易構造最適化

◆初期値の作成

- ・擬力ノニカル局在化軌道法を採用

◆密度汎関数法プログラム

- ・Gauss型基底関数を用いた純密度汎関数法
- ・100残基規模のタンパク質対応
- ・金属タンパク質対応
- ・RKS、UKS計算対応

◆計算結果解析

- ・HOMO-LUMOギャップの計算
- ・マリケンのポピュレーション解析
- ・分子軌道の等値面表示
- ・静電ポテンシャルの表示

●タンパク質波動関数の計算実績(抜粋)

タンパク質	残基数	原子数	軌道数
インターロイキン4	133	2157	11909
サイトカイン受容体	102	1660	9329
コクリン	100	1475	8196
シトクロムc	104+HEM	1738	9600
インスリン6量体	306	4716	26766

タンパク質と化学物質との相互作用解析のための量子計算ソフトウェア

◆タンパク質-化学物質相互作用解析システム◆

Advance/BioStation

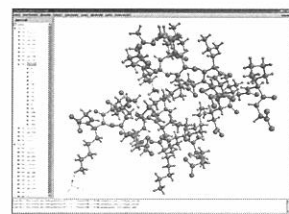
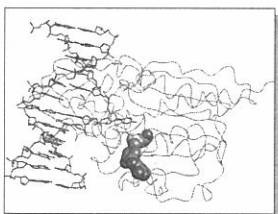
定価105万円(年間使用料金)



- タンパク質、DNA、糖、低分子およびこれらの複合体に対応
- フラグメント間相互作用解析が量子計算で可能
- 並列化による高速・高精度計算

適用テーマ例

- (1) 受容体とそのリガンドとの結合エネルギー評価
- (2) リガンドの設計・探索、受容体の設計・探索
- (3) 特定物質間の詳細な相互作用解析



インタラクティブなGUIによる解析が可能

Advance/BioStationの機能

- ・計算法 制限つき HF法、FMO-HF法、FMO-MP2法
- ・基底関数 STO-3G、6-31G、6-31G*、6-31G** など
- ・計算できる量
フラグメント間相互作用エネルギー、全エネルギー、
フラグメント分子軌道、電子密度、静電ポテンシャル、電場
- ・フラグメント分割
自動分割: タンパク質、DNA、糖鎖 GUIによる分割: 大きな低分子
- ・構造最適化 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 法、共役勾配法
- ・専用の可視化・解析ツール BioStation Viewer が付属
- ・新機能 (V2.0より)
Multi-Layer FMO (以下ML-FMO) 法
VISCANA (Visualized Cluster Analysis of Protein-Ligand Interaction)

アドバンスソフト セミナーのご案内

1. パッケージソフトウェアセミナー Advance/PHASE

多方面のニーズに応える高精度ナノ材料第一原理計算パッケージ紹介

- ・日時: 12月11日(火)
- ・場所: 東京都港区赤坂 三会堂ビル
- ・主催: アドバンスソフト(株)

2. ユーザートレーニングセミナー Advance/PHASE

Advance/PHASEの使用方法 (初級編)

- ・日時: 12月19日(水)
- ・場所: 東京都港区赤坂 アドバンスソフト(株)
- ・主催: アドバンスソフト(株)

アドバンスソフト株式会社はパッケージソフトウェアの販売だけでなく、受託解析、受託開発等ソフトウェアに関する幅広い問題に対してご相談に応じております。詳細は、下記URLをご参照の上、お気軽にお問い合わせ下さい。

アドバンスソフト株式会社

お問い合わせ先 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL: (03)5570-1681 FAX: (03)5570-1683

<http://www.advancesoft.jp/>

・記載されている製品名、会社名は各社の商標または登録商標です。

