

Schrödinger Molecular Simulation Products

MacroModel

MacroModelは配座探索を中心とした基本的な分子力学系のシミュレーションソフトウェアです。分子が取り得る様々な形状を網羅的に発生させるための配座生成手法を豊富に取り揃えており、他のプログラムでは取り扱うことが困難である複雑な骨格を有する天然物化合物や複数の分子から形成される系等に対しても安定配座を探索するのに適した計算プログラムとなっております。

MacroModelに組み込まれているGB/SAの溶媒効果では水/クロロホルム/オクタノールが選択可能で、独自に開発を継続しているOPLS系の力場パラメータと水溶媒の組み合わせは長い年月での研究と検証が重ねられた結果、蛋白質のみならず核酸やペプチド・糖鎖といった生体分子向けのシミュレーションを強力にサポートするものとなっております。

Desmond

Desmondは周期境界モデルを対象としたGPU演算による分子動力学計算ソフトウェアです。モデル構造の構築から計算オプションの変更と実行、結果の観察や解析までの一連の作業をGUIパネルから実施することが可能であり、シミュレーションのご経験をお持ちでない研究者の方々が分子動力学計算に取り組み出される上でも障壁が小さい構成となっております。

計算対象とするモデル構造の平衡化プロセスについても十分に検証されたプロトコルが準備されており、またMetadynamicsやReplica Exchange MDといった高度な計算手法にも対応しております。

Academic MD Suite for Biologics

蛋白質構造を対象とした分子動力学計算について、入力構造の準備・調製や演算後の解析を含めて最適に実施できるよう構成したパッケージです。

ホモロジーモデリングや実験データにおける欠損部位の修復に利用できるPrimeや、蛋白質の活性部位や表面特性の解析のためのSiteMapといったプログラムが含まれます。

- Desmond
- Prime 蛋白質構造モデリング
- Epik イオン化状態/互変異性体生成
- SiteMap 活性部位探索、作用領域解析
- Canvas クラスタリング解析 等
- Maestro 統合インターフェース

Academic MD Suite for Small Molecule

低分子だけでなく核酸やペプチド・糖鎖といった生体分子から材料系の高分子まで幅広い分子系をカバーする分子動力学計算用のパッケージです。

多彩な配座探索機能を持つMacroModelと高い演算パフォーマンスを誇るDesmondの組み合わせは、様々な研究対象について多くの立体構造的知見を見出すための最適な計算環境を与えます。

- Desmond
- MacroModel
- LigPrep 低分子3次元立体構造の構築
- Epik イオン化状態/互変異性体生成
- SiteMap 活性部位探索、作用領域解析
- Canvas クラスタリング解析 等
- Maestro 統合インターフェース



Schrödinger

シュレーディンガー株式会社

〒100-0005 東京都千代田区丸の内1-8-1 丸の内トラストタワーN館 13階
TEL: 03-4520-7090 E-mail: info-japan@schrodinger.com