

最高水準の精度を誇るプロパティ計算ツール

Calculator Plugins とは

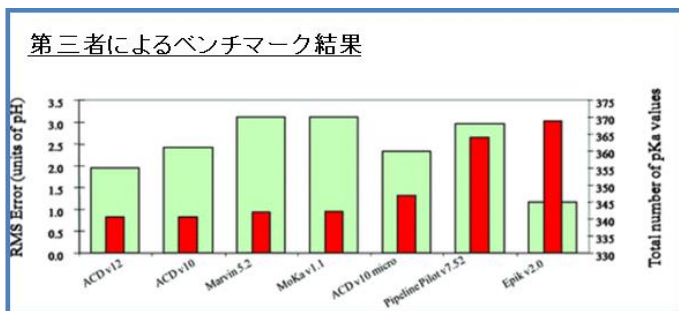
構造から様々なプロパティを計算するためのツール群です。

MarvinSketch および MarvinView の Tools メニューからインタラクティブに利用できます。

バッチ処理はコマンドラインから利用可能 (cxcalcs)。

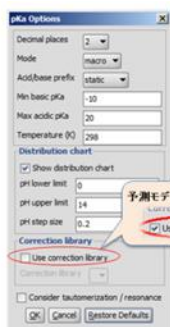
Protonation/人気 No.1 の pKa 予測ツール!

- 他社ソフトに比べ高い精度が期待できます※。
- Partial charge distribution に基づきイオン化され得るグループの pKa を計算
- 分子中のイオン化可能な原子数に上限はなく、タンパク等に対しても利用可能
- 指定した pH における major protonation form を計算
- 電離後の化合物全体の電荷平均が 0 となる pH を計算

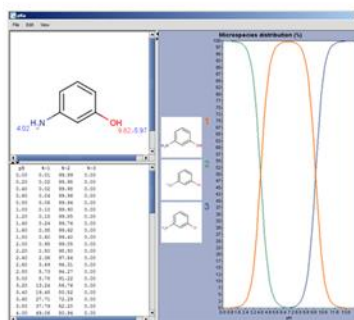


※Evaluation of pKa Estimation Methods on 211 Druglike Compounds

John Manchester*, Grant Walkup, Olga Rivin and Zhiping You
Infection Discovery, AstraZeneca R&D Boston, 35 Gatehouse Drive,
Waltham, Massachusetts 02451
J. Chem. Inf. Model., 2010, 50 (4), pp 565-571



パラメータ設定



MarvinによるGUIの表示

■IUPAC Name

- 構造式から IUPAC 名を生成

■Partitioning

- logP、logD を計算

■Charge

- 各原子の partial charge の値を計算
- partial charge の効果を考慮に入れ分極率を計算
- Partial charge distribution から電気陰性度を計算

■Isomers

- 互変異性体の生成
- 共鳴構造の生成
- 立体異性体の生成

■Conformation

- 3次元構造の Conformer を生成
- 分子力学の力場を用いて原子核の位置を計算

■Geometry

- 分子の位相幾何学的な指標を計算
- 分子の幾何学的な指標を計算
- 極性原子により形成される極性表面積を計算
- Van der Waals と solvent accessible の 2 タイプの分子表面積を計算

■Markush

- 一般化されたマーカッシュ形式で表現される構造ライブラリの全体あるいは部分集合の個別構造を発生します。また、マーカッシュ形式で表現される化合物の総数を計算

■Structural Framework

- 入力構造に対して Bemis and Murcko frameworks を計算

■その他

- drug likeness の評価に有用な水素結合受容体数および水素結合供与体数を計算
- 局在エネルギー等を計算
- モル屈折率を計算

■動作環境

- ソフトウェア要件

項目	内容
OS	Windows8.1 (32bit/64bit) Windows10(32bit/64bit)
Java	Java 11 OpenJDK8 及び 11

※ご検討時にお問い合わせください。

■Calculator Plugins に関する留意事項

1. Calculator Plugin ご発注時には、合わせてバンドルをご指定下さい。

◎バンドルは以下の通りとなります。

(1) Structural Calculations: Charge, Conformer, Geometry, Hückel, Refractivity, Hydrogen Bond Donor/Acceptor (HBDA), Structural Frameworks calculations

(2) Protonation: pKa, Major Microspecies, Isoelectric Point calculations

(3) Partitioning: logP, logD, HLB calculations

(4) Isomers: Tautomerization, Stereoisomers, Resonance calculations

(5) Solubility: Solubility Predictor

(6) NMR: NMR Predictor

※1: Structural Calculations は以前個別のバンドルとして販売していたいくつかの製品が一つに集約されました。

Charge グループ: Charge Distribution, Polarizability, Orbital Electronegativity calculations が含まれます。

Conformer グループ: Conformers, Molecular Dynamics, Flexible 3D Alignment が含まれます。

Geometry グループ:

Topology Analysis, Geometry, 2D Topological Surface Area (FREE), 3D Molecular Surface Area が含まれます。

2. ユーザー数の考え方

計算を行う者、計算結果を参照する者ともにユーザーとしてカウントする必要が有ります。

3. JChem Web Services add on を利用する場合、価格表価格の15%アップの金額となります。

本サービスを用いると REST や SOAP Webservice として Calculator Plugin の機能を利用できます。

詳細:

<https://www.chemaxon.com/products/jchem-web-services/>

4. 参考情報

製品概要:

<https://www.chemaxon.com/products/calculator-plugins/>

ユーザーガイド:

<https://docs.chemaxon.com/display/CALCPLUGS/Calculator+Plugins+User%27s+Guide>

計算手法の詳細など背景情報について:

<https://docs.chemaxon.com/display/CALCPLUGS/Background+materials>

バリデーション結果:

<https://docs.chemaxon.com/display/CALCPLUGS/Validation+results>

FAQ:

<https://docs.chemaxon.com/display/CALCPLUGS/FAQ>

Patcore, Inc.

〒100-0005 東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー26F

富士通株式会社

ソーシャルデザイン事業本部 デジタルラボ事業部
〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町1番地5 JR川崎タワー24階

URL: <https://www.fujitsu.com/jp/patcore/>

Copyright © Patcore, Inc., All rights reserved. は Patcore, Inc. の登録商標です。
その他の会社名、商品名、製品名は、一般に各社の登録商標または商標です。
本ドキュメントの記載内容、製品およびサービスの仕様は予告なく変更されることがあります。

