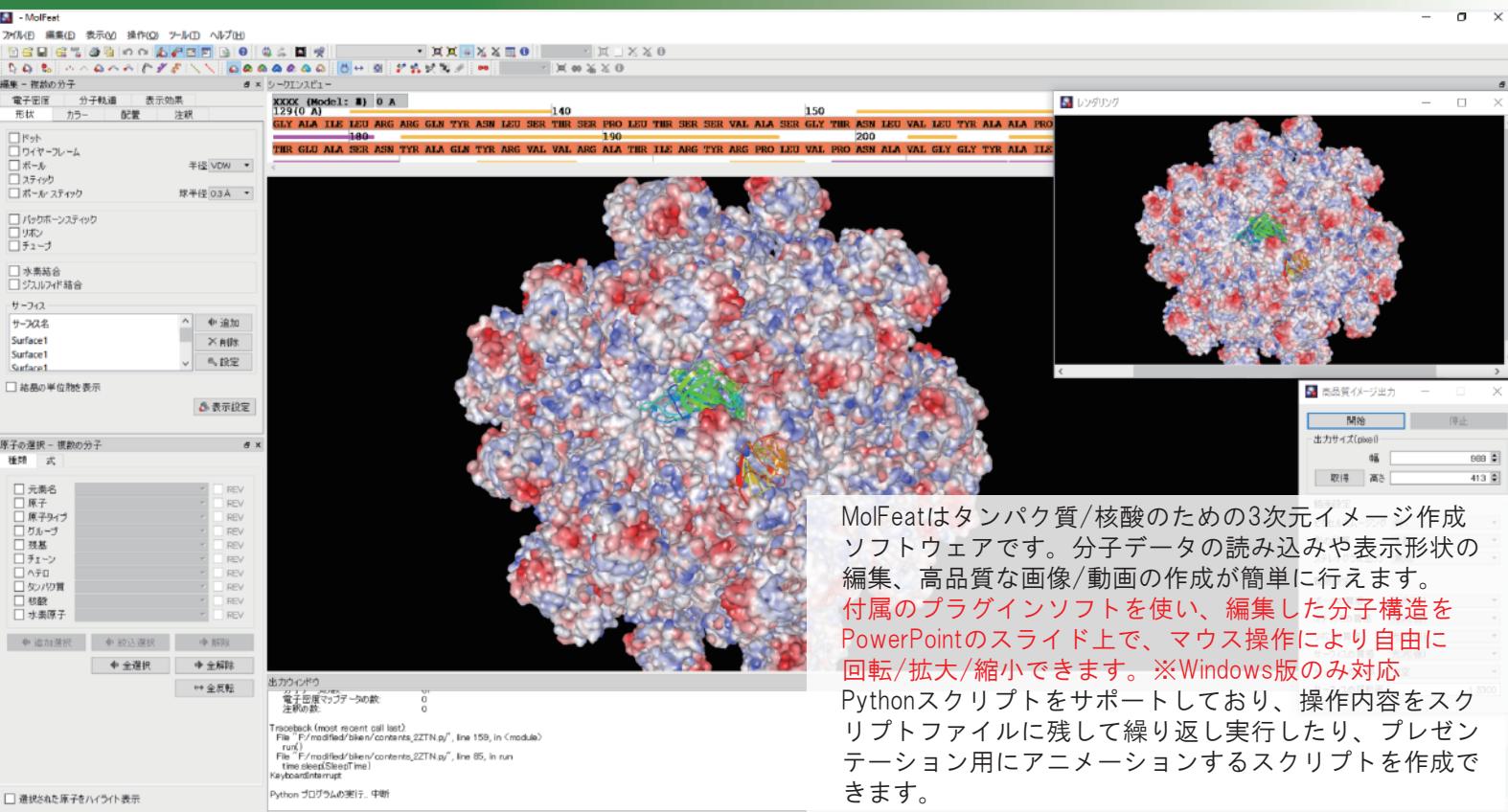


MolFeat v5.4



ファイルのサポート

■分子データの読み込み/書き出し
pdb, mol, mol2, cif(mmCIF形式), mmtf

■トラジェクトリデータの読み込み
AMBER形式(.prmtop, .nc, .mdcrd)
CHARMM, NAMD形式(.dcd)
TINKER形式(.arc)
GROMACS形式(.trr)
Cosgene形式(.cor)

■分子軌道データの読み込み
Gaussian形式(.cube)

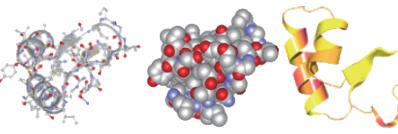
■電子密度データの読み込み
CCP4(Model2)形式
BRIX形式, CNS形式
SITUS形式

■シークエンスの書き出し
FASTA形式, 主鎖2面角 ϕ , ψ のファイルへの書き出し

分子の表示の編集

分子データを読み込み、表示形状や色などを原子単位で自由に編集できます。

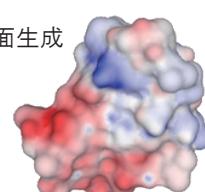
■形状編集
ボール, スティック, リボンなど



■カラー編集
2次構造別、等方性温度因子、疎水性インデックス、半透明表示など

■分子サーフェス表示
VDW半径、溶媒との接触点、溶媒中心での分子表面生成

■静電ポテンシャルの計算と表示
pHを考慮したポテンシャル計算(APBS/PDB2PQR)
サーフェスへの色付け
任意平面のポテンシャル分布の表示



分子データの編集

ポイントミューテーション

2次構造情報の編集

分子の重ね合わせ

マウス/座標値による座標の移動

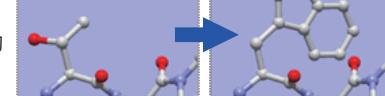
結晶学的対称分子の計算

分子データのマージと分離

水素原子の付加と削除

ポイントミューテーション

分子の重ね合わせ

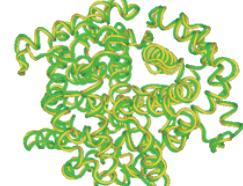


分子の重ね合わせ

■計測

2原子間距離, 3原子間角度

トーション角



■編集対象の原子の選択

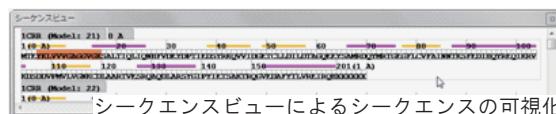
シークエンスビューのマウスによる選択

マウス操作による直接選択

選択原子から指定距離以内にある残基の選択

原子種別、残基種別、2次構造別などのカテゴリ別選択

選択式での選択



Pythonスクリプト

PythonスクリプトでMolFeatを操作できます。

例えば下記のような操作を行えます。

■操作の自動化

PDBのダウンロード→原子選択→形状編集→高品質な画像の作成といった一連の操作を複数の分子に対して自動的に実行

■GUI操作を記録し、その内容をPythonスクリプトとして出力

アニメーション機能

MDのトラジェクトリアアニメーションやスクリプトを使った分子のアニメーションが可能です。

PowerPointのスライド上でもアニメーションできます。

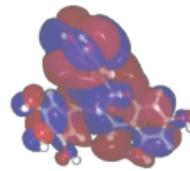
分子軌道の表示

表示された分子構造の上に分子軌道を重ねて表示できます。

表示する分子軌道の選択

センター/サーフェース/ドット/閾値/

色/線幅の表示設定が行えます。



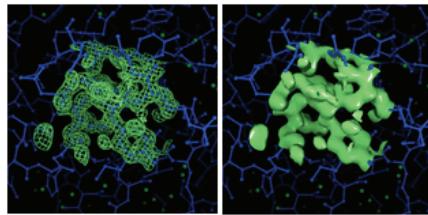
電子密度の表示

読み込んだ電子密度データに対して複数の表示領域を作成できます。

表示領域は選択した複数の原子を中心に作成できます。

サーフェース/ポリゴン/ドット表示/表示領域/色/線幅/単位胞の

表示設定が行えます。



プレゼンテーション機能

編集したデータをPowerPointのスライドショーやWebブラウザ上に、インタラクティブなビューアとして貼り付けることができます。

スライドショー実行中は、マウスを使って自由に分子構造を回転、拡大・縮小できます。

※当機能はWindows版のみ対応しています。

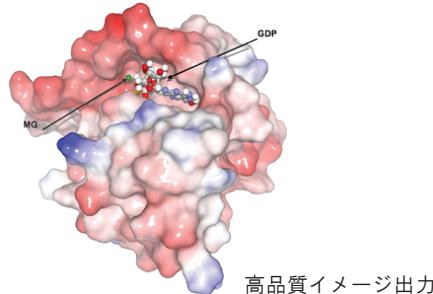


イメージ作成機能

編集した内容を画像や動画に出力できます。

高品質イメージ出力では、ジャギーが少なく高解像度なイメージが得られます。学会誌や論文などの印刷物掲載用に最適です。

対応フォーマット：BMP, JPG, PNG, TIFF, AVI



高品質イメージ出力

Windows版 推奨動作環境

OS Windows 10/11

CPU Intel Core i 以上

メモリ 4GB 以上

ハードディスク 256MB 以上

ビデオカード OpenGL対応ビデオカード
QuadBufferを備えたビデオカード(※1)
ステレオ表示機能を持ったビデオカード(※1)

※1 フレームシーケンシャル方式とzSpaceでの立体視をおこなう場合に必要となります。

※2 記載内容は予告なく変更されることがあります。あらかじめご了承ください。

ステレオ表示機能

各種ステレオ表示に対応しています。

■ フレームシーケンシャル

■ サイドバイサイド

■ 水平インターリープ

■ zSpace (オプション)



価格

定価 ￥98,000 (税別)

ライセンス形態はノードロックです。

教育機関向けは3ライセンス付属します。

サイトライセンスもございます。価格はお問い合わせください。

※諸般の事情により、USBライセンスキーの提供を終了致しました。

導入実績

・ 北海道大学	様	・ 味の素株式会社	様
・ 弘前大学	様	・ アステラス製薬株式会社	様
・ 群馬大学	様	・ 医薬基盤研究所	様
・ 茨城大学	様	・ エーザイ株式会社	様
・ 筑波大学	様	・ 化学及血清療法研究所	様
・ お茶の水女子大学	様	・ 株式会社三和化学研究所	様
・ 日本医科大学	様	・ 株式会社豊田中央研究所	様
・ 帝京大学	様	・ キッセイ薬品工業株式会社	様
・ 東京工業大学	様	・ 協和発酵キリン株式会社	様
・ 東京大学	様	・ 国立遺伝学研究所	様
・ 明治薬科大学	様	・ 国立感染症研究所	様
・ 早稲田大学	様	・ 国立循環器センター研究所	様
・ 千葉大学	様	・ 高輝度光科学研究センター	様
・ 金沢大学	様	・ 産業技術総合研究所	様
・ 岐阜大学	様	・ 塩野義製薬株式会社	様
・ 京都大学	様	・ 自然科学研究機構	様
・ 大阪大学	様	・ セイコーエプソン株式会社	様
・ 大阪医科大学	様	・ 大正製薬株式会社	様
・ 奈良女子大学	様	・ タカラバイオ株式会社	様
・ 関西学院大学	様	・ 武田薬品工業株式会社	様
・ 近畿大学	様	・ 田辺三菱製薬株式会社	様
・ 神戸大学	様	・ 東レ株式会社	様
・ 岡山大学	様	・ トヨタ自動車株式会社	様
・ 徳島大学	様	・ 日本原子力研究開発機構	様
・ 広島大学	様	・ 日本電気株式会社	様
・ 九州大学	様	・ 三菱レイヨン株式会社	様
・ 九州工業大学	様	・ 山之内製薬株式会社	様
・ 熊本大学	様	・ 理化学研究所	様

その他多数納品済

(令和4年8月現在 520サイト以上)

30日間無料評価版

下記でダウンロードできます。

<http://www.fiatlux.co.jp/download/download-index.html>

Mac版 推奨動作環境

OS Mac OSX 10.13 以降

CPU Intel Core i 以上

メモリ 4GB 以上

ハードディスク 200MB 以上

ビデオカード OpenGL対応ビデオカード

【販売代理店】

 ATTRIBUTE

アトリビュート株式会社

〒108-0072 東京都港区白金3丁目17番-10-106号

TEL: 03-4405-8920 HP: <http://www.attribute-jp.com>

E-Mail: support@attribute-jp.com