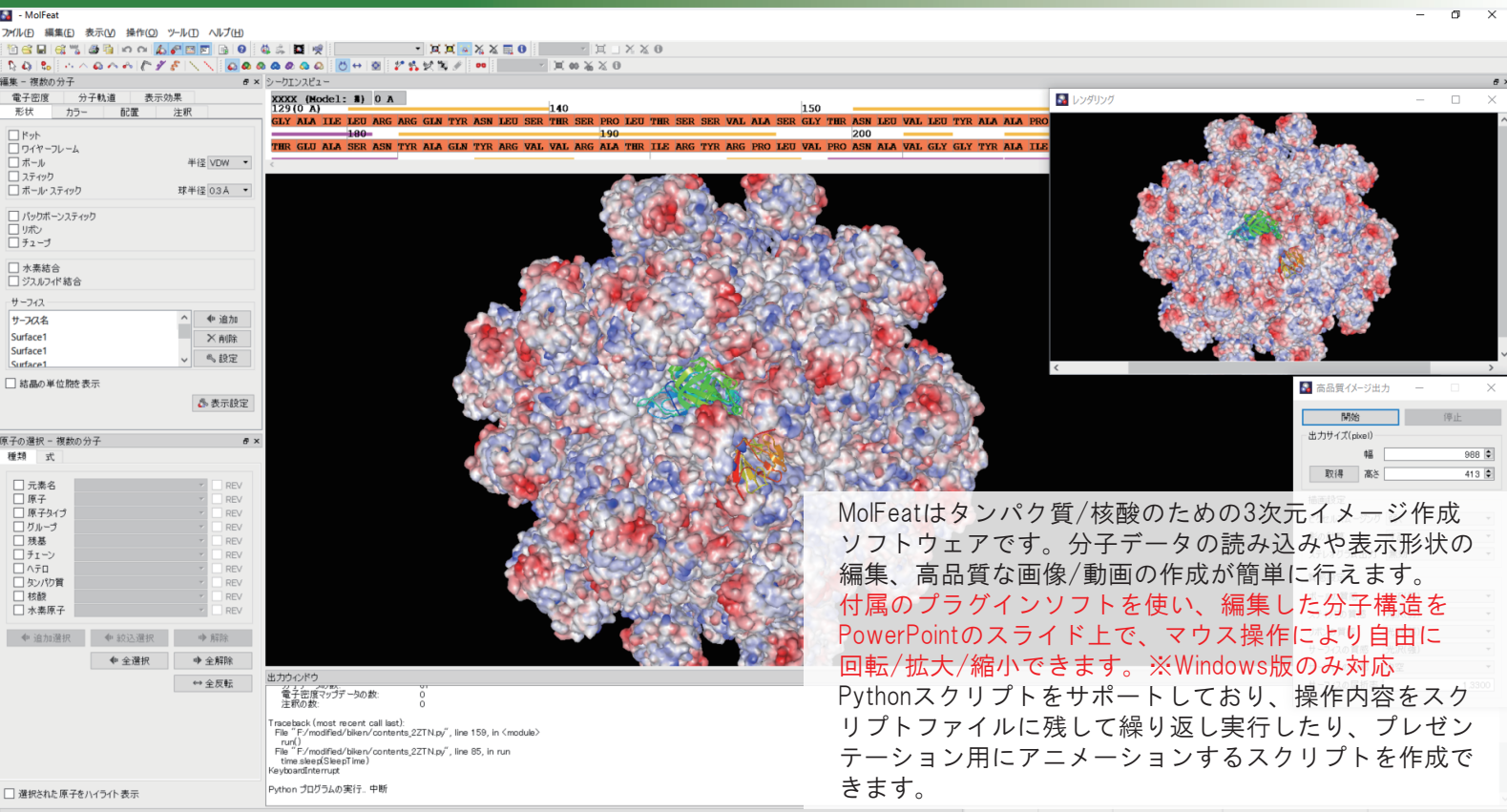


MolFeat v5.4



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), mmCIF

■ 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
BRX形式, CNS形式
SITUS形式

■ シーケンスの書き出し
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

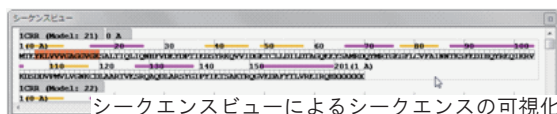
ポイントミュートーション
2次構造情報の編集
分子の重ね合わせ
マウス/座標値による座標の移動
結晶学的対称分子の計算
分子データのマージと分離
水素原子の付加と削除

■ 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

シーケ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

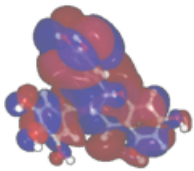
アニメーション機能

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。

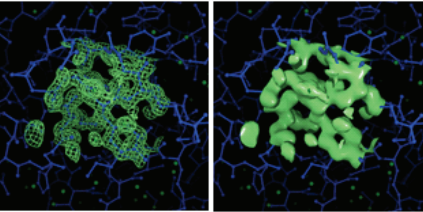
分子軌道の表示

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
コンター/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。



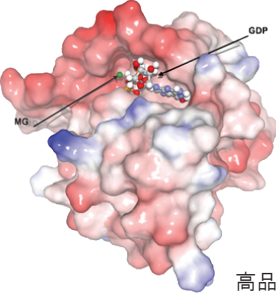
プレゼンテーション機能

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

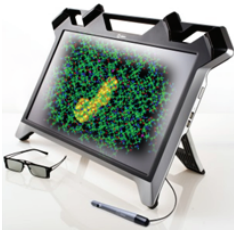
Windows版 推奨動作環境

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
■ 水平インターリーブ
■ zSpace (オプション)



価格

定価 ￥98,000 (税別)

ライセンス形態はUSBライセンスキーです。
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さいます。価格はお問い合わせください。

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	・国立循環病センター研究所	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	MacOSX 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