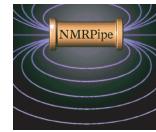
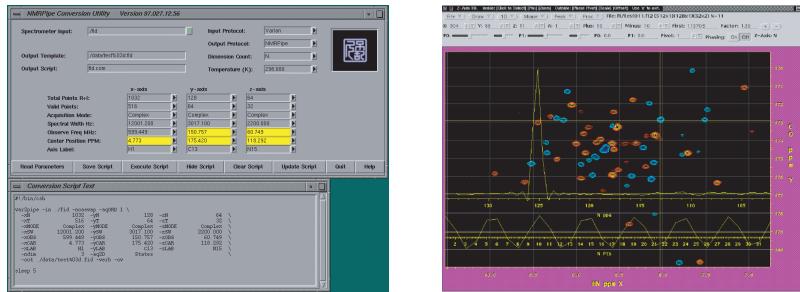




NMRタンパク質解析ソフトウェア NMRPipeシリーズ

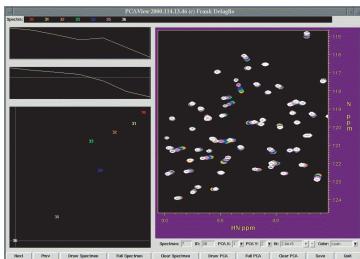


NMRPipe



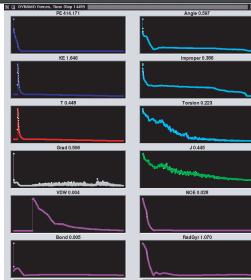
NMR Pipeは、高速な多次元NMRデータプロセッシングプログラムです。Bruker、Varian、JEOLのスペクトロメータをはじめとして、現在利用されているほぼ全てのスペクトロメータのRawデータファイルからNMR測定パラメータ、FIDデータを読み込むことができます。1次元から4次元までの多次元NMRデータに対応しており、データ処理はマクロ(シェルスクリプト)を使って高速に実行できます。付属のNMRDrawは、データ処理用のGUIプログラムで、NMRPipeでプロセスしたデータに対してフェーズ合わせ、ピークピックなどを画面上からの操作でおこなえます。

PCA/HSQC



PCA/HSQC(以下PCA)は滴定実験などにおけるHSQC 2D-NMRスペクトルの化学シフト変化の主成分分析(PCA:Principal Component Analysis)統計処理をサポートする、ドラッグデザインなどの現場で効力を発揮するツールです。通常、HSQCのスペクトルによる新規物質のNMRによる評価では、種々の添加物の滴定によりスクリーニングを行い、スペクトル処理には、数十スライスの2Dスペクトルの処理が伴いますが、PCA/HSQCでは統合的にデータを取り扱うことができます。

Dynamo



DYNAMOは、NMRデータ(NOE距離制限、二面角制限など)からシミュレートィッドアニーリングによりタンパク質の構造計算をおこなうプログラムです。

- NOEから算出される水素間の距離制限
- NMRから算出される二面角制限
- 3Jカップリング定数
- 相対または絶対配位制限
- 回転半径
- 双極子カップリング
- 擬接触化学シフト

【お問合せ先】 株式会社エルエイシステムズ

〒110-0005 東京都台東区上野1-11-5時計会館ビル1F

TEL:03-5812-5311 FAX:03-5807-4050

e-mail:support@las.jp URL:<http://www.las.jp>