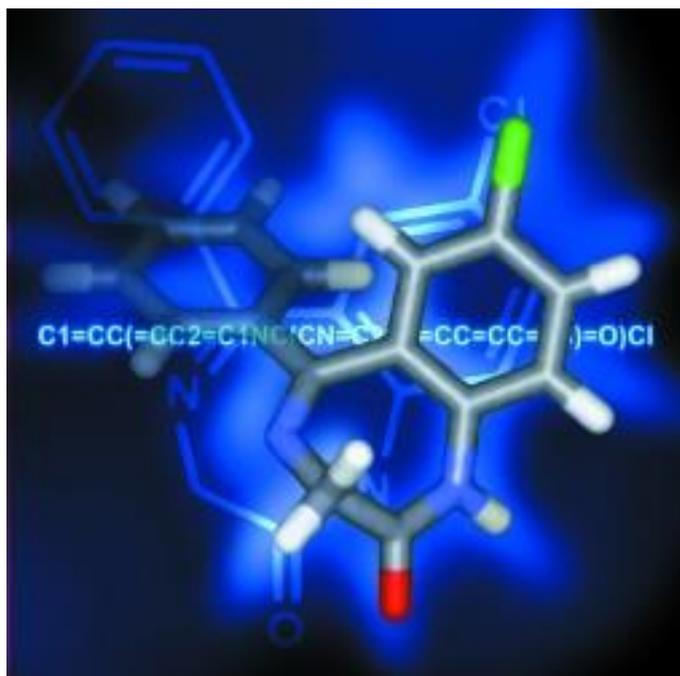


# CORINA Classic

高品質な三次元分子構造を高速かつ高効率的に生成

CORINA Classicは、強力かつ高速に低分子量から中分子量までの有機分子の三次元分子構造を生成するソフトウェアです。CORINA Classicは過去数十年の間に何度もバージョンアップを行い、洗練された機能を有し、高品質な三次元分子構造を生成する標準のソフトウェアとして世界的に認められています。



CORINA Classic は、大量の構造を効率的かつ確実に処理できるように設計されており、大規模な化学データセットやデータベースを変換するのに最適なアプリケーションです。

CORINA Classic は高品質な構造を提供します。公表された X 線構造と CORINA Classic 構築モデルとの RMSD は、市販されている全ての分子構造変換プログラムの中でも最も優れています。

CORINA Classic は非常に高速で、低、中分子量の有機分子で 99.5%以上の優れた変換率で動作します。

## 主な機能

- 広範囲の有機化合物および多くの有機金属化合物に適用可能
- 分子の大きさやリングシステムの大きさに上限はありません
- 低エネルギー配座の生成
- 立体化学情報を考慮
- 立体異性体（四面体キラル中心および E/Z 二重結合）の生成
- 複数の環構造配座の生成
- 三次元構造生成プロセスを制御するさまざまなオプション

## 適用領域

- 三次元分子データベース生成
- ファーマコフォア検索、リガンドドッキングスタディおよび類似性検索などのリード化合物発見および最適化
- 定量的構造活性(物性)相関解析(QSAR/QSPR)
- スペクトル予測と構造解析
- 化学反応予測
- 量子化学計算および力場計算への入力

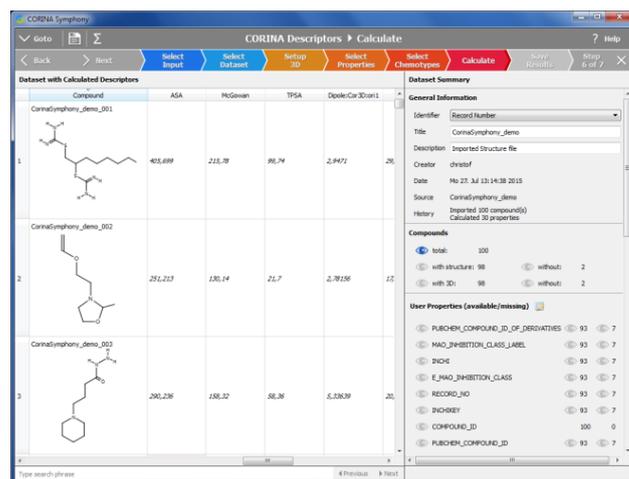
# CORINA Classic

高品質な三次元分子構造を高速かつ高効率的に生成

CORINA Classic の標準バージョンは、バッチモード実行のためのコマンドラインプログラムです。さらに、CORINA Classic は、GUI アプリケーション CORINA Symphony の CORINA Clean/3D ワークフローで利用できます。この対話的なワークフローは、化学構造のクリーンアップと標準化、および三次元構造生成のための CORINA Classic の主要な機能が利用できます。

CORINA Clean/3D は、三次元分子構造の生成や、モデリングのためのデータセットの準備のために、ワークフローを用いて日常的に計算できます。

CORINA Classic の主要な機能が利用できるこのワークフローは、対イオンやフラグメントの除去、中性化、水素原子付加、安定配座への変更、重複の検出/除去に利用できます。計算の入力には、構造ファイル、SMILES、またはデータベースレコードが使用できます。



RHEL7 (64bit)

## 技術的特長

- バッチモード実行
- 直感的で対話的なワークフローベースのユーザーインターフェース
- 内部 IT 環境とワークフローへの統合のためのインターフェース
- リガンドドッキングプログラム FlexX へのインターフェース
- KNIME あるいは BIOVIA PipelinePilot のコンポーネントとして利用可能

## 動作環境

- Microsoft Windows 7/8/10
- x86 Linux RHEL6 (32 and 64bit) 及び x86 Linux

## 参考文献

- J. Sadowski, J. Gasteiger, G. Klebe. Comparison of Automatic Three-Dimensional Model Builders Using 639 X-Ray Structures. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 1000-1008.
- C.H. Schwab. Conformations and 3D pharmacophore searching. *Drug Discovery Today: Technologies*, Volume 7, Issue 4, Winter **2010**, e245-e253.

● 詳細につきましては、お問い合わせください。● 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。● 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。



MN-AM 社 (Molecular Networks GmbH, Germany and Altamira, LLC, USA) 日本代理店  
株式会社モルシス  
〒104-0032 東京都中央区八丁堀三丁目 19 番 9 号 ジオ八丁堀  
Phone: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031  
URL: <https://www.molsis.co.jp/> E-mail: [sales@molsis.co.jp](mailto:sales@molsis.co.jp)