

WAKO

# Infomatic

# World

実験化学者のための  
IT活用誌

2007

September No.4

## 目 次

### 計算化学のすすめ

第2回 基底関数系とは? ..... 2

京都府立大学 人間環境学部 講師 リントウルオト正美

### 分子モデリングソフトウェア “Spartan” (スパルタン) のご紹介

(2) モデルキットパネル ..... 4

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

### 分子モデリングソフトウェア “Spartan” (スパルタン)

ITスキルアップ応援キャンペーン ..... 5

平成19年10月末まで

AI(Ⅲ)とIn(Ⅲ)の分離のための $\beta$ -ジケトン誘導体の分子設計 ..... 6

北九州市立大学国際環境工学部 教授 上江洲 一也

### “eMD<sup>2</sup>” (エムディースクエア) で始める分子動力学シミュレーション

(2) MD 開始までのプロセス ..... 8

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

量子化学計算を始めるにあたって、まずは対象とする化学物質の構造の入力、基底関数の選択をする必要がある。今回は構造の入力、基底関数の選択についてみて見よう。

### 1. 構造の入力

量子化学計算を始めるには対象とする分子や系のモデルの構造を入力する必要がある。初期構造を入力しないことには計算は始まらない。

構造の入力座標としては Cartesian coordinate、Z-matrix (分子内座標) などがある。Cartesian coordinate による方法では分子を構成する原子の (x, y, z) 座標の入力を順次行っていく。Z-matrix とは分子内の原子の相対的位置関係 (結合距離、結合角、2 面角) を入力していく方法である。また、Cartesian coordinate と Z-matrix を組み合わせて用いる場合がある。自由度の大きい系を扱う場合などには両方の方法について精通している必要がある。

しかし、最近では量子化学計算ソフトに対するフロントエンドが多数市販され、フリーソフトでも手に入る。フロントエンドとは分子の構造を 3 次元で入力することを助け、また、計算結果の視覚化を行うプログラムをさす。これらのフロントエンドの利用によりマウスを動かすだけで複雑な分子の組み立ても可能になる。

量子化学計算ソフトウェアとして有名な Gaussian には Gaussview というフロントエンドがある。また、フリーのソフトウェアとしては Facio<sup>1)</sup> などがある。これらのフロントエンドの使用により分子構造を視覚で確かめながら、インプットが可能であることから、入力間違いなどもなく確かである。まずはこれらのフロントエンドの利用がお勧めである。

### 2. 基底関数とは何か？

量子化学計算をする場合、基底関数の選択が必要で必ず研究者本人が選択する必要がある。選択をする以上は基底関数の種類やその意味についてある程度知っておく必要があるだろう。

量子化学計算では一電子軌道  $\phi_i$  を構成原子の原子軌道関数の重ね合わせ (線形一次結合) で近似する方法をとっている。この原子軌道関数を基底関数 (basis set) という。

$$\phi_i = \sum_r C_r \chi_r \quad (1)$$

基底関数  $\chi_r$  の係数  $C_r$  は変分法で求められる。基底関数の代表的なものとしてはスレーター型軌道 (STO) とガウス型軌道 (GTO) がある。STO および GTO の  $s$  関数を示す。

$$\chi_s (\text{STO}) \sim \exp(-\eta r) \quad (2)$$

$$\chi_s (\text{GTO}) \sim \exp(-\alpha r^2) \quad (3)$$

$\eta$  や  $\alpha$  は軌道指数と呼ばれ、基底関数の広がり (大きさ) を決める指数である。

2 つの関数の違いは  $r=0$  と  $r$  の大きなところで現れる。 $r=0$  では STO は有限の傾きを持つのにに対し、GTO ではゼロとなる。GTO は  $r=0$  付近で平たく、STO はとんがっているのである。また、 $r$  が大きいところでは GTO は STO よりも早く減衰してしまう。

STO は GTO よりもより原子の波動関数に近い形をしているので基底関数として適当である。しかし、STO では GTO よりも分子積分の数値計算に多大な時間を要してしまう。GTO を使うほうが計算は容易になる。しかし、GTO はよい関数ではないので計算の精度はさがってしまう。この問題は多数の GTO の線形結合で表す縮約 GTO (CGTO) を用い STO の形状を近似することで解決する。

$$\chi_r (\text{STO}) = \sum_m d_{m,r} g_{m,r} \quad (4)$$

ここで  $g_{m,r}$  は GTO をあらわしている。(4) を (1) に代入すると、

$$\phi_i = \sum_r C_r \chi_r = \sum_r C_r \sum_m d_{m,r} g_{m,r} \quad (5)$$

結局、分子軌道を多数の GTO で表すこととなる。(4) (5) 式の係数  $d_{m,r}$  は短縮係数といい、短縮される前の GTO を原始 (primitive) GTO をいう。原始 GTO の数が増えるほど STO へのフィッティングはよくなり計算の精度がよくなると予想され、またそうなることがわかっている。

各原子の各電子殻に対し、STO 1 個を用いる基底関数系を最小 (minimal) STO 基底系といい、各原子上に  $\eta$  の異なる STO を 2 個置くものを DZ (double zeta) STO 基底系という。DZ 基底系にすると分子内における原子軌道の柔軟性が高められ、計算の精度はあがる。結合には直接関与しない内殻軌道である  $1s$  には一つの STO、それ以外の外殻軌道には 2 つの STO を用いることにより基底関数の数を減らし計算の労力を減らしつつも計算の精度は十分に得られるように工夫したものを split valence 基底系という。以下に種々の基底系についてみてみよう。

#### ・ 2-1. STO-NG 基底系

STO-NG は minimal STO 基底系で各原子の各電子殻に対し、STO 1 個を用い、さらに各々の STO を CGTO であらわす。N は 1 つの STO を N 個の GTO であらわすことを示す。

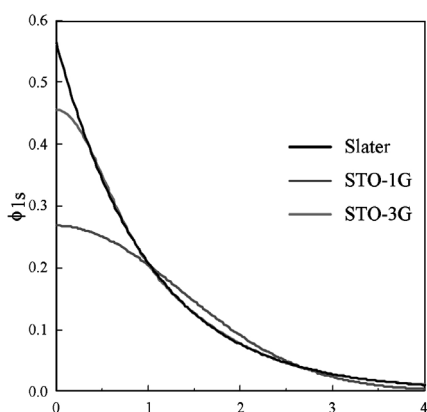


図 1、1s 軌道に対する STO 軌道および STO-NG 軌道入手可能

水素原子について STO-3G を例に考えて見よう。STO は 1s 1 個であり、原始 GTO は 3 個となる。酸素原子はどうか。STO は 1s および 2s、 $2p_x$ 、 $2p_y$ 、 $2p_z$  で 5 つとなる。原始 GTO はそれぞれ STO に対し 3 つずつであるので  $3+3+3 \times 3 =$

15 個となる。

$H_2O$  の計算を行うときには原始 GTO は一体いくつ必要であろうか。2 つの H に計 6 個、O には 15 個であるから、総計 21 個である。

この基底関数、原始関数の総数によって CPU への負担、メモリーの必要量や計算時間を見積もることができる。基底関数を増やせば、計算の精度はあがるが、計算の労力は増えるばかりであるので計算を実際に始める前に原始 GTO を勘定し、計画をよく練ることが必要である。

## ・ 2-2. split valence 基底系 (6-31G、4-31G、3-21G など)

STO-NG では軌道の柔軟性が脆弱なため、定量性が低かった。これを改善したものとして split valence 基底系がある。最もよく使われる基底系として 6-31G や 4-31G、3-21G 基底系がある。

内殻は 1 つの STO、外殻軌道には 2 つの STO を用いる。内殻の STO はそれぞれ 6、4、3 個の原始 GTO を用い、外殻電子殻の 2 つの STO 軌道はそれぞれ  $3+1$  個、 $2+1$  個の原始 GTO を用い近似している。

水素原子について 6-31G 基底系を用いた場合の基底関数の数をみてみよう。STO は 2 つである (内殻は存在しない)。ひとつの STO に対し 3 個ともう一つの STO には 1 個、計 4 個の原始 GTO を用いる。酸素原子に対してはどうか。STO は 1s に対して 1 個の STO、2s 軌道に対しては 2 個の STO、 $2p_x$ 、 $2p_y$ 、 $2p_z$  に対しそれぞれ 2 つずつの 6 個。STO は全部で 9 個となる。原始 GTO は 1s に対して 6 個、2s に対しては 1 つの STO に対して 3 個ともう一つの STO に対して 1 個の計 4 個、 $2p$  にたいしては x、y、z おおののに 1 つの STO に 3 個ともう 1 つの STO に 1 個であるので計 12 個で原始 GTO の総数は 22 個となる。

$H_2O$  の計算を行うときには原始 GTO は  $4 \times 2 + 22 = 30$  個必要となる。

## ・ 2-3. 分極関数

基底系をより改善するには一つの電子殻に対して用いる STO の数を 3、4、…と増やしていけばよいように思える。しかし、単調に同じ方位量子数をもった基底関数を足しこんでいっても基底関数のバランスが崩れてしまう。たとえば、s 関数、p 関数だけを増やしていくとアンモニアの構造は平面に近い構造になってしまう。基底関数の更なる改良としては分極関数を加えるのが普通である。

分子中の水素原子は一樣な電場を感じており、電子雲は電場によって分極し、電子分布は核のまわりに球対称ではなくなってしまう。この分極の効果、実際の分子中の原子軌道の異方性の効果を取り入れるため、分極関数を加える。例えば水素原子の場合、s 関数にたいして p 関数を加えてやることによって、軌道に異方性を持たせることができる。普通、Li から F までの第一周期の原子には d 型、H には p 軌道を加える。

6-31G\* や 6-31G(d) という場合は 3d 型の原始 GTO で、6-31G\*\* や 6-31G(d, p) は 6-31G(d) にさらに水素原子に対して p 型の GTO を加えることを表している。

## ・ 2-4. 有効内殻ポテンシャル (ECP) 近似

原子の内殻の電子は結合や反応には直接関与せず、価電子のみが直接関与する。特に電子数の多い遷移金属においてはその傾向は顕著になる。また、電子の数が増えると、すべての電子を考慮に入れ計算すると大変な労力を必要としてしまう。これに対し、内殻の電子の効果はポテンシャルの形でとりいれ、原子価電子のみを計算にいれる近似法として ECP 近似がある。

この方法の利点は計算の労力を減らすこと、また、重原子では重要な相対論的效果をポテンシャルをうまく選択すれば、取り込める点にある。

## ・ 2-5. 基底関数系の選択

基底関数系の選択にあたっては用いるコンピュータの性能も考慮に入れつつ、できるだけ大きな基底系を用いるのがもちろんよい。しかし、たった一つの基底関数系を使った結果に安心するのではなく、いろいろな基底系を試してみよう傾向を自ら確かめるのがもっとも正しい方法である。また、同じような計算の報告などから使用されている基底系の傾向を調べてみることも非常に大切である。

よく使われている基底系としては 6-31G(d, p) などがあげられ、最初の一步として使用してみるとよいだろう。

## 参考文献

1. Facio とは九州大学理学研究院化学部門 末永正彦先生が開発されたフロントエンド。http://www1.bbq.jp/zzzfelis にて入手可能
2. 基底関数についての参考書 米澤貞次郎、永田親義、加藤博史、

- 今村栓、諸熊奎治「量子化学入門 (下)」、化学同人、1983 年  
A. ザボ、N. S. オストランド「新しい量子化学 (上)」、東京化学出版、1990 年

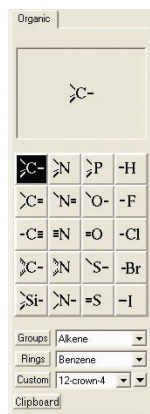


# 分子モデリングソフトウェア “Spartan” (スパルタン) のご紹介

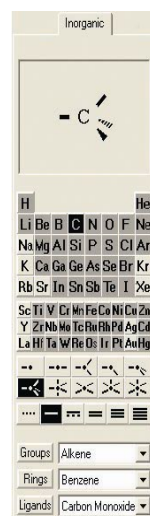
## (2) モデルキットパネル

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

今回は、Spartanによるモデル構築について、モデルキットパネル（または、ビルダー）とよばれる、部品を取り出す画面の紹介をします。



Organic



Inorganic



Peptide

Spartan を起動して分子を作成する手順に入ると画面右側にモデルキットパネルが表示されます。モデルキットパネルは以下に説明する 6 枚がありますが、最初に表示されるのは「Organic」パネルです。

炭素、窒素、酸素などの有機化学で頻繁に使用する原子レベルのフラグメント単位でモデルを作成することができます。例えば図のように  $sp^3$  の炭素が選ばれている状態で作業画面をクリックすると、メタン分子を入力したことになります。

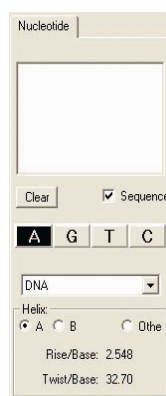
炭素原子の周り 4 箇所の水素原子であるべきところは黄色い棒状のオブジェクトで表示されています。

これは空の結合を意味しており、ここに新たにフラグメントを付加することができることを意味しています。

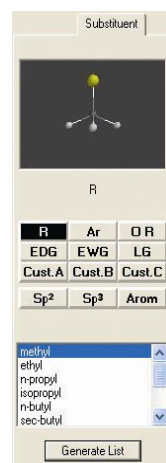
空の結合は、元の View モードに戻るとすべて水素原子に置き換えられます。

このパネルの下には、そのほか良く使用される官能基や環構造を「Groups」メニューや「Rings」メニューからアクセスして入力も可能で、Spartan に付属の構造ライブラリにアクセスできる「Custom」メニューもあります。ここからは、自分で一度作成したモデルを呼び出すこともでき、用意されたライブラリを拡張、変更することも可能です。画面内に表示された構造は、領域選択すると、構造をクリップボードへコピーすることができます。「Clipboard」ボタンを押すと、プレビュー画面にフラグメントが表示されます。

「Inorganic」パネルは無機、有機金属分子を作成する際に使用します。ここでは原子種と、構造、結合のタイプをそれぞれ選択して作成、編集し、任意の構



Nucleotide



Substituent



2D

造を作成します。

生体分子の作成には「Peptide」パネル「Nucleotide」パネルを使用します。それぞれアミノ酸、核酸のシーケンスを入力して作業画面に一気に分子を構築できます。

「Substituent」パネルは母核構造をもつ類似した分子群を発生させるツールです。修飾する官能基群を編集、追加することも可能です。

「2D」パネルの使用には ChemDraw を必要とします。「New」, 「Edit」のボタンを押すことで ChemDraw のファイルを新規作成または呼び出して編集し、自動的に 3 次元化した部品として作業画面に追加することができます。

フラグメントの結合の後、そのほかの結合を作成、もしくは結合の切断などの機能もボタンからアクセスでき、分子力場による構造最適化もボタンをクリックすることで可能です。

このように、Spartan は、多彩で、かつ拡張可能なモデルキット群を装備しており、プラスチック製の分子模型を構築するのと同じような手順で、途中の構造を目で確認しながら、分子の作成ができます。

次回は、構造最適化および配座解析についてご紹介いたします。

## 分子モデリングソフトウェア “Spartan 【スパルタン】” IT スキルアップ応援キャンペーン

平成 19 年 10 月末まで

- コンピュータを利用して、業務を効率化したい...
- コンピュータをもっと活用して、ワンランク上の研究成果につなげたい...



「計算化学」は、「実験化学」を“相補的”に  
サポートできるレベルに達してきています!!

### その1 もれなく……

“Spartan Full Ed., Essential Ed., Student Ed.” をご購入いただいた皆様に、もれなく、販売書籍 1~3 冊をプレゼント!!

- ① ヒーリー「有機化学のための分子モデリングワークブック」(フルカラー)  
W.J. Hehre, A.J. Shusterman, J.E. Nelson 著 幅田 揚一訳 4,750 円(税込)
- ② 「計算有機化学入門」  
W.J. Hehre 著 幅田 揚一訳 2,650 円(税込)
- ③ 「分子モデリング演習 初歩の初歩」  
米国法人 WAVEFUNCTION, INC 日本法人編 2,100 円(税込)



### その2 抽選で……

実験化学者向け IT 活用誌 “Infomatic World” の購読をお申しいただいた皆様の中から、  
抽選で 10 名様に、ご希望の販売書籍 1 冊をプレゼント!!

購読のお申込みは、こちらから⇒<http://wako-chem.co.jp/siyaku/journal/index.htm>

#### ★ キャンペーン対象商品

コード No.	メーカーコード	品 名	容量	希望納入価格(円)	プレゼント書籍
305-32011	S6F-CW	Spartan'06 Full Edition for Corporate (Windows) スパルタン'06 フル、企業向け (ウィンドウズ版)	1 セット	600,000	①②③
302-32021	S6E-CW	Spartan'06 Essential Edition for Corporate (Windows) スパルタン'06 エssenシャル、企業向け (ウィンドウズ版)	1 セット	350,000	①②
309-32031	S6F-GW	Spartan'06 Full Edition for Government (Windows) スパルタン'06 フル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	440,000	①②③
306-32041	S6E-GW	Spartan'06 Essential Edition for Government (Windows) スパルタン'06 エssenシャル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	280,000	①②
303-32051	S6F-EW	Spartan'06 Full Edition for Education (Windows) スパルタン'06 フル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	228,000	①②③
300-32061	S6E-EW	Spartan'06 Essential Edition for Education (Windows) スパルタン'06 エssenシャル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	138,000	①②
304-32081	SSU-DW01	Spartan Student Edition, Single Pack USB Dongle Set (Windows) スパルタン、大学向け、1 ライセンス (ウィンドウズ版)	1 セット	40,000	③

●希望納入価格には消費税等が含まれておりません。

# Al(III)とIn(III)の分離のためのβ-ジケトン誘導体の分子設計

北九州市立大学国際環境工学部 教授 上江洲 一也

今回は、私が計算化学的手法を用いた初めての研究例（分子力学法による計算）を紹介したい。この研究は、1999年にドイツ・ハイデルベルク大学のPeter Comba先生が来日した際に、京都大学・梅谷重夫先生と共同研究を決め、ドイツ帰国後に私に計算するよう指示して、私が留学中に行ったものである<sup>1)</sup>。

13族元素に属するAl(III)とIn(III)のイオン半径の差が非常に大きく（Al(III) :  $r=0.53\text{\AA}$  ; In(III) :  $r=0.80\text{\AA}$ ），この2つのイオンを分離するためには、イオンサイズを認識できるような抽出剤を分子設計すればいい。β-ジケトン誘導体（Fig. 1）は、さまざまな金属イオンと安定な錯体を形成するので抽出試薬やキレート滴定のマスク剤として広く利用されており、13族元素とも安定な錯体を形成する。

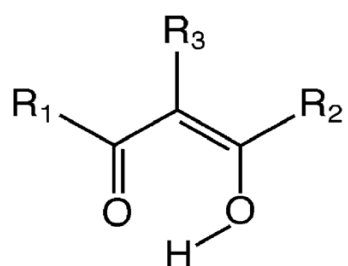


Fig. 1 The structures and abbreviations of the ligands

Ligand	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>
HL1	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	H
HL2	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Ph
HL3	CH <sub>3</sub>	Ph	H
HL4	CH <sub>3</sub>	Ph	Ph
HL7	CH <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	H
HL8	Ph	CF <sub>3</sub>	H
HL9	Ph	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>

Al(III)もIn(III)もβ-ジケトン誘導体との錯体は、1:3の6配位錯体となる（Fig. 2）。β-ジケトン誘導体の13族元素

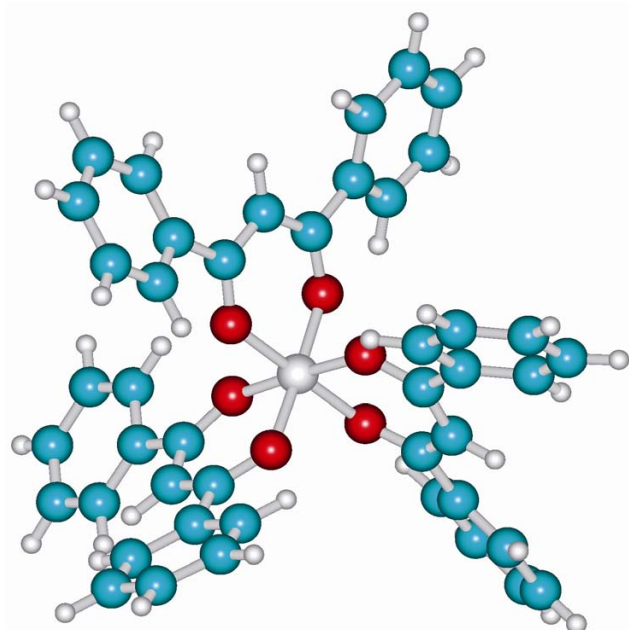


Fig. 2 Al(III)-β-diketone derivative complex (CSD code : DUBMU102).

選択性を決定する重要な因子は、「金属に配位する酸素原子間の距離」と「錯体内での配位子間相互作用」であることを示した研究がすでに行われていた<sup>2)</sup>。たとえば、R1とR3あるいはR2とR3との間に斥力を生じるような嵩高い置換基（フェニル基など）を導入して、酸素原子間距離を短くすることで、イオン半径が大きいIn(III)との錯形成を阻害することができる。また、錯体形成に関与する3つのβ-ジケトン誘導体間で斥力を生じるような嵩高い置換基をR1やR2の位置に導入すれば、イオン半径の小さいAl(III)の場合にβ-ジケトン誘導体同士の反発により、錯形成が阻害されるようになる。より高性能な金属イオン認識材料の高精度分子設計を行うために、これら2つの因子を分子力学法によって得られる金属錯体のひずみエネルギーと抽出実験データとの相関をとることにより定量的に評価しようと試みた。

Fig. 1に示した7種類のβ-ジケトン誘導体を用いて、Al(III)とIn(III)の抽出平衡実験を有機相としてベンゼンを用いて、通常の液-液分配法に基づいて行った結果をTable 1に示した。ケンブリッジ結晶構造データベース（Cambridge Structural Database, 1 <http://www.protein.osaka-u.ac.jp/csd/csd.html>）から得られたβ-ジケ

Table 1. Extraction data for Al(III) and In(III) (Extraction conditions : ligand in benzene 1.0 mM, metal 0.1 mM).

Ligand	pH <sub>1/2</sub>		logK <sub>ex</sub>	
	Al(III)	In(III)	Al(III)	In(III)
HL1	3.30	3.95	-6.90	-8.85
HL2	4.01	-	-9.03	-
HL3	3.20	3.39	-6.60	-7.17
HL4	4.24	-	-9.72	-
HL7	2.12	2.63	-3.36	-4.89
HL8	3.00	2.51	-6.00	-4.53
HL9	3.47	4.98	-7.41	-11.97

トン誘導体およびそのAl(III)とIn(III)との錯体構造を再現するように、今回の分子モデリングに必要なパラメータを決定した。次に、それぞれのβ-ジケトン誘導体のAl(III)とIn(III)との錯体の最安定構造を求め、その錯体のひずみエネルギーを算出した。

分子モデリングで計算される抽出前後の錯体内部エネルギー差Δ*U*と抽出平衡定数*K*<sub>ex</sub>との関係は次式で表される。aおよびbは金属イオンの種類を表している。

$$\Delta U_a - \Delta U_b = \alpha \log \left( \frac{K_{ex,a}}{K_{ex,b}} \right) \quad (1)$$

ここで $\alpha$ は、抽出平衡と内部エネルギー差との直線関係式における見かけの定数であり、このような解析手法は、定量的構造物性相関法 (QSPR, Quantitative Structure-Property Relationship) と呼ばれる<sup>3)</sup>。5種類の $\beta$ -ジケトン誘導体において、Al(III)錯体とIn(III)錯体のひずみエネルギー差と抽出平衡定数の比との相関をとったQSPRの結果をFig. 3に示した。(HL2とHL4ではIn(III)が全く抽出されないため

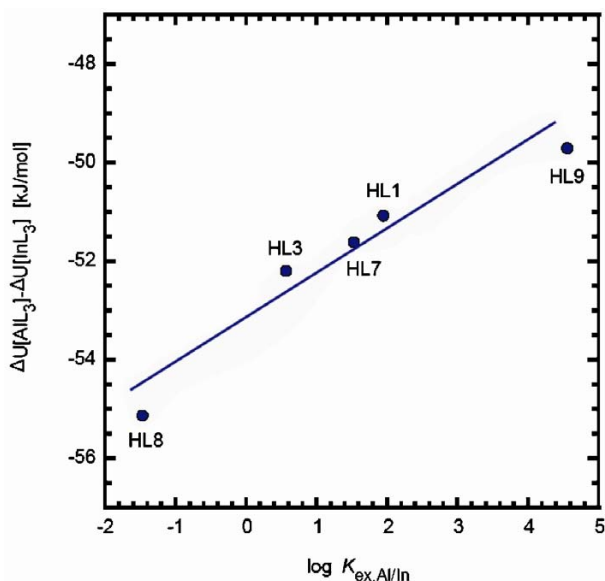


Fig. 3 QSPR for the selectivity of  $\beta$ -diketones for Al(III) and In(III).

ロットできなかつた。)これは、Al(III)-In(III)選択性とひずみエネルギー差との相関を示している。錯形成に伴うひずみエネルギー変化量と抽出平衡定数の常用対数とは傾き 0.88 の良好な直線関係となった。HL8 では、他の $\beta$ -ジケトン誘導体とAl(III)-In(III)選択性が逆転しているが( $\log K_{ex, Al/In} < 0$ )、その傾向も表現できている。また、Al(III)錯体とIn(III)錯体のひずみエネルギーと抽出平衡定数との相関をとったQSPRの結果をFig. 4に示した。これは、Al(III)あるいはIn(III)に対する抽出能とひずみエネルギーとの相関を示しており、良好な直線関係となった。さらに、In(III)を全く抽出しないHL2とHL4では、ひずみエネルギーがFig. 3のIn(III)に関する相関線から大きく外れるほど高くなっていることから(HL2: 88kJ/mol; HL4: 78kJ/mol)、この相関線から大きく外れるような錯体は形成不能であると考えられる。これらの結果より、「金属に配位する酸素原子間の距

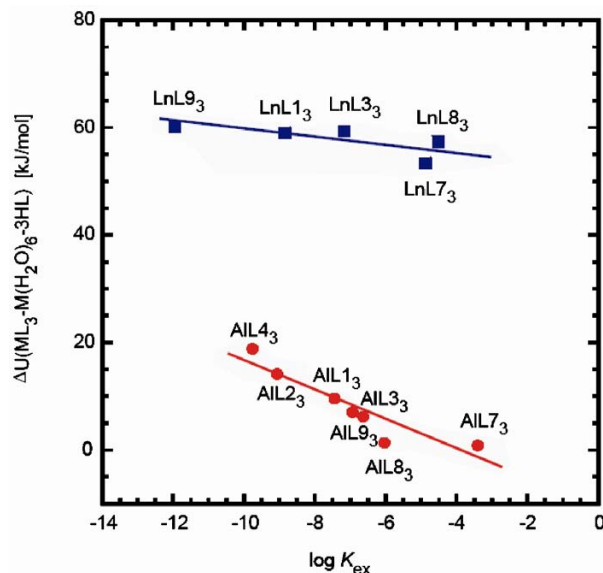


Fig. 4 QSPR for the extractivity of  $\beta$ -diketones for Al(III) and In(III).

離」と「錯体内での配位子間相互作用」という2つの構造的要因だけを考慮した分子モデリングにより、 $\beta$ -ジケトン誘導体によるAl(III)あるいはIn(III)の抽出分離特性を説明できたことになる。

#### 分子力学法の力場パラメータの作成について

分子力学法の計算には適切な経験的力場パラメータが必要であり、パラメータ作成をする際にはどのような物性にフィッティングするかが重要である。極論すると、フィッティングした物性に関してはそのパラメータの有用性が保証されるが、他の物性では有用であるとは限らない。本研究では、 $\beta$ -ジケトン誘導体とそのAl(III)錯体あるいはIn(III)錯体の結晶構造がひずみエネルギーが最低となる構造すなわち最安定構造となるようにパラメータを作成した。作成したパラメータは、結合伸縮エネルギー、変角エネルギー、ねじれエネルギーに関するものである。そのうち、エネルギー障壁が最も低いねじれエネルギーに関するパラメータの決定が最も困難であったが、10種類以上の $\beta$ -ジケトン誘導体の結晶構造を精度よく再現できるように根気よく調整していったので、「 $\beta$ -ジケトン誘導体」に対しては非常に精度の高いパラメータを作成することができたと自負している。この例のように、特性発現が主に構造的因子で決定されている場合は、類似構造をサンプルとして決定されたパラメータを独自で作成して構造物性相関をとることが、分子認識材料設計に非常に有用な方法であると考えている。

#### 参考文献

1. K. Uezu, Q. T.H. Le, S. Umetani and P. Comba, *Solvent Extraction Research and Development, Japan*, **13**, 161-173(2006).
2. Q. T.H. Le, S. Umetani and M. Matsui, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 3835-3840(1997).
3. 吉塚和治, 日本イオン交換学会誌, **14**, 30-36 (2003).



# “eMD<sup>2</sup>” (エムディースクエア)で始める分子動力学シミュレーション

## (2) MD 開始までのプロセス

株式会社インフォグラムシステム開発部 田上 享

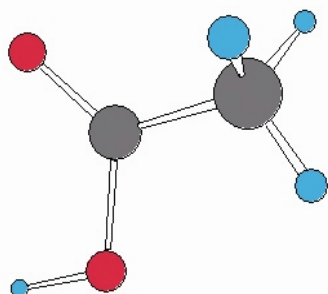
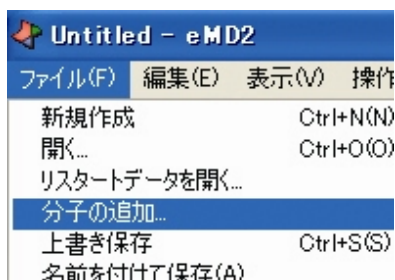
今回は、分子構造ファイルを読み込んで MD を開始するまでのプロセスについて説明していきたいと思えます。

MD の準備段階に必要なものとして、前回、初期構造ファイル・各原子の電荷・ポテンシャルパラメータの3つを挙げましたが、最初に必要となるのが初期構造ファイルです。

今回は、例として Chem3D で描画し MDL Mol 形式 (ファイル拡張子は .mol) で保存した酢酸分子を使用します。

まずは、この酢酸分子ファイルを eMD<sup>2</sup> に読み込んでみましょう。

図のように、ファイルメニューの分子の追加をクリックして作成した Mol ファイルを選択すると、簡単に読み込むことが出来ます。



画面に酢酸分子が表示されたら、続いてアトムタイプの割り当て及び電荷の計算を行います。アトムタイプとは各原子の別名のようなもので、同一原子種でも他原子との結合などによって特性が異なるため、特性ごとに細かく分類してポテンシャルパラメータ内に定義されています。例えば、eMD<sup>2</sup> で使用している Amber のポテンシャルパラメータ

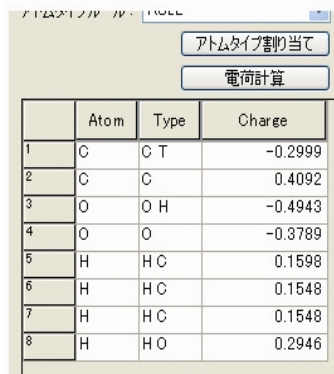
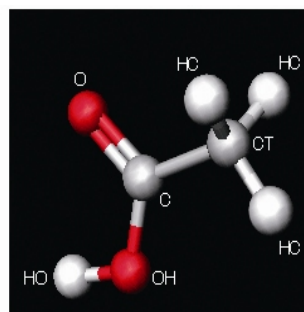
では、カルボキシル基の炭素は C、メチル基の炭素は CT というアトムタイプが割り当てられています。

MD を行うには、全ての原子に対して適切にアトムタイプを割り当てる必要がありますが、この各原子の特性を考慮しながら割り当てる作業が大変なことや、割り当てた結果、他の原子との結合の組み合わせによってはポテンシャルパラメータ内に定義がなく MD が実行できないといった状況が発

生することがあり、これらのことが MD の大きなハードルの1つとなっていますが、eMD<sup>2</sup> ではこのような負担を軽減するために、有機分子に関しては自動的に割り当てを行う機能を実装しています。

eMD<sup>2</sup> でアトムタイプの割り当てと電荷の計算を行うには、分子のプロパティ画面を開き下図の「アトムタイプ割り当て」ボタン及び「電荷計算」ボタンを押すだけです。

分子の種類によっては自動的に割り当たらないものもありますので、その場合は手動での割り当てを行う必要があります。



	Atom	Type	Charge
1	C	C T	-0.2999
2	C	C	0.4092
3	O	O H	-0.4943
4	O	O	-0.3789
5	H	H C	0.1598
6	H	H C	0.1548
7	H	H C	0.1548
8	H	H O	0.2946

次回は、MD の初期設定、実際にシミュレーションを実行するプロセスについてご説明します。

eMD<sup>2</sup> の体験版及び今回の連載記事の Web 版を以下の URL よりご覧いただけます。  
<http://www.emd2.jp/> こちらも、是非ご覧下さい。

本文に記載しております試薬は試験・研究の目的にのみ使用されるもので、「医薬品」、「食品」、「家庭用品」などとして使用できません。価格はすべて希望納入価格であり、消費税等が含まれておりません。

## 和光純薬工業株式会社

本社 ☎540-8605 大阪市中央区道修町三丁目1番2号 ☎(06) 6203-1788 (試薬学術部)  
支店 ☎103-0023 東京都中央区日本橋本町四丁目5番13号 ☎(03) 3270-8243 (試薬学術部)

●九州営業所 ☎(092) 622-1005 (代) ●横浜営業所 ☎(045) 476-2061 (代)  
●東海営業所 ☎(052) 772-0788 (代) ●筑波営業所 ☎(029) 858-2278 (代)  
●東北営業所 ☎(022) 222-3072 (代) ●北海道営業所 ☎(011) 271-0285 (代)  
●中国営業所 ☎(082) 285-6381 (代)

フリーダイヤル 0120-052-099 フリーファックス 0120-052-806

☐ご意見・お問い合わせ、本誌のDM新規登録・変更等については、

E-mail : [org@wako-chem.co.jp](mailto:org@wako-chem.co.jp) まで

Wako Chemicals USA, Inc.

<http://www.wakousa.com>

●Head Office (Richmond, VA)

Tel: 1-804-714-1920

●Los Angeles Sales Office

Tel: 1-949-679-1700

●Boston Sales Office

Tel: 1-617-354-6773

Wako Chemicals GmbH

European Office

<http://www.wako-chemicals.de>

Tel: 49-2131-311-0

URL : <http://www.wako-chem.co.jp>