

WAKO

Infomatic

World

実験化学者のための
IT活用誌

2008

February No.9

目 次

計算化学のすすめ

第7回 スペクトルの計算 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

(7) グラフィックス(その2)およびスペクトルチャート 4

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

水中における β - (1 \rightarrow 3) - グルカン/核酸複合体の構造解析 6

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

“eMD²” (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

(7) 便利なソフトウェア (その1) 8

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

計算化学のすすめ

第7回 スペクトルの計算

京都府立大学 人間環境学部 講師 リントウルオト正美

実験で得られた NMR、IR、UV、CD などのスペクトル解析に対して、計算化学がよく用いられるようになった。NMR や IR の計算については前回までに説明してきた基底状態についての知識で理解することができるが、UV や CD の計算については励起状態が関係してくる。今回はこれらのスペクトル解析について述べてみよう。

1. イオン化ポテンシャルと電子親和力

最高被占有軌道 HOMO から電子を取り去ることによって正のイオンが生成し、最低空軌道 LUMO に電子を加えることによって負イオンが生成する。電子を取り去るのに必要なエネルギーをイオン化ポテンシャル、電子を加えることによって放出するエネルギーを電子親和力という。Hartree-Fock レベルでイオン化ポテンシャル、電子親和力について考えてみよう。

N 電子の系から一つの電子がとりさられて N-1 電子になったとしよう。N および N-1 電子状態の波動関数を次式で表す。

$$|\Psi_0^N\rangle = |\chi_1\chi_2\chi_3 \cdots \chi_c \cdots \chi_N\rangle \quad (1)$$

$$|\Psi_0^{N-1}\rangle = |\chi_1\chi_2\chi_3 \cdots \chi_{c-1}\chi_{c+1} \cdots \chi_N\rangle \quad (2)$$

χ_i は 1 電子軌道で $|\Psi_0^N\rangle$ では電子軌道 $\chi_1\chi_2\chi_3 \cdots \chi_N$ にそれぞれ電子が入っていることを示している。 $|\Psi_0^{N-1}\rangle$ は $|\Psi_0^N\rangle$ の電子軌道 χ_c から電子を取り除いた場合をあらわしている。また、電子を取り除いた前後でそれぞれの電子軌道は変化しないものとしている。

イオン化ポテンシャルはこの 2 つの状態のエネルギー差で表される。Hartree-Fock レベルではイオン化ポテンシャルは次式で表される。

$$IP = E^{N-1} - E^N = -\epsilon_c \quad (3)$$

ここで ϵ_c は χ_c の軌道エネルギーである。ある軌道から電子を取り去るのにその軌道の軌道エネルギー（反対符号）だけエネルギーが必要であることがわかる。

同様に N 電子状態に電子を一つ加えて N+1 電子状態になったとしよう。N+1 電子状態の波動関数を次式で表す。

$$|\Psi_0^{N+1}\rangle = |\chi_1\chi_2\chi_3 \cdots \chi_N\chi_r\rangle \quad (4)$$

$|\Psi_0^{N+1}\rangle$ は新たに空である電子軌道 χ_r に電子を加えたことをあらわしている。また、電子を加えた前後でそれぞれの電子軌道は変化しないものとしている。

電子親和力は電子を加えた前後の状態のエネルギーで表される。

$$EA = E^N - E^{N+1} = -\epsilon_r \quad (5)$$

ここで ϵ_r は χ_r の軌道エネルギーである。ある軌道に電子を加えることによって放出されるエネルギーはその軌道の軌道エネルギー（反対符号）に等しいことがわかる。

(3)、(5) 式の関係式は Koopmans の定理と呼ばれている。Koopmans の定理は電子を取り去ったり、加えたりしても電子軌道は変化せず、波動関数 $|\Psi_0^{N-1}\rangle$ 、 $|\Psi_0^{N+1}\rangle$ の電子軌道が $|\Psi_0^N\rangle$ と同じであるとする Frozen orbital 近似のもとで考えている。しかし、実際には電子を取り去ったり、加えたりすることによる電子数の変化によって 1 電子軌道は変化（緩和）する。

Koopmans の定理のもとでは N 電子系に対する一点計算から得られる電子軌道エネルギーから、イオン化ポテンシャル、電子親和力を得る。これに対して、電子数の変化に伴う緩和を考慮に入れるには N-1 電子状態、N+1 電子状態についてもそれぞれ計算を行い、それぞれの全エネルギーの差からイオン化ポテンシャル、電子親和力を考える。この方法によって得られた結果を Δ SCF という。表 1 に Koopmans の定理、 Δ SCF によるイオン化エネルギーの計算結果を示す。

表 1. Koopmans 定理と Δ SCF によるイオン化エネルギー (a. u.) の比較。基底関数は 6-31G(d) を用いた。

	CH ₄	H ₂ O	NH ₃
Koopmans 定理	0.546	0.498	0.419
Δ SCF	0.501	0.400	0.340
実験値	0.529	0.463	0.400

ここで意外に Koopmans 定理の結果が優れていることがわかるだろう。軌道の緩和効果を考慮した Δ SCF よりも実験値に近いことがわかる。

図 1 に示すように電子数の変化による軌道の緩和を考慮に入れると電子状態 $|\Psi_0^{N-1}\rangle$ 、 $|\Psi_0^{N+1}\rangle$ のエネルギーは低くなる。従って、イオン化ポテンシャルは緩和の効果により小さくなり、電子親和力は大きくなる。一方、Hartree-Fock

レベルの計算ではさらに高次の計算で得られる電子相関の効果が入っていないが、電子相関エネルギーは電子の数が増えるほど大きくなるので $|\Psi_0^N\rangle$ の電子相関の効果は $|\Psi_0^{N+1}\rangle$ よりも大きい (図 1 参照)。すなわち、イオン化ポテンシャルの軌道の緩和効果を電子相関の効果が打ち消すことになる。これによって、Koopmans 定理の結果が Δ SCF よりも実験値に近くなる。しかし、電子親和力では $|\Psi_0^{N+1}\rangle$ の方が $|\Psi_0^N\rangle$ より電子相関の効果が大きいので軌道の緩和効果と電子相関の効果が同じ方向に働き、誤差が大きくなる。従って、電子親和力の議論に Koopmans の定理を用いることはほとんどない。

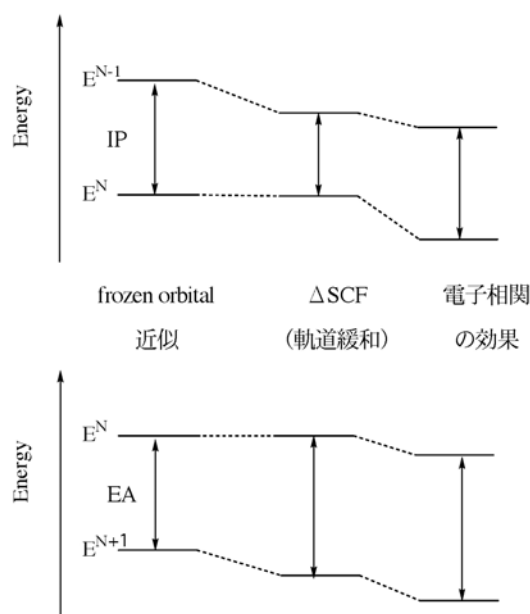


図 1. イオン化エネルギー、電子親和力に対する軌道緩和、電子相関の効果。上はイオン化ポテンシャル、下は電子親和力を示す。

2. 電子スペクトル

分子に光を当て、その波長を変えていくと、ある特定の波長の光を吸収し、励起状態に遷移する。紫外光・可視光域の吸収スペクトルはこのような電子遷移に起因するために電子スペクトルと呼ばれる。

この電子スペクトルを計算によって解析するには基底状態および励起状態のエネルギー差、遷移確率を計算すればよい。これまでは基底状態だけを取り扱ってきたが、ここでは励起状態についても計算する必要がある。励起状態の理論としてはたくさんあるが、ここではごく簡単な理論にとどめておく。

まず、配置換相互作用法 CI 法 (configuration interaction

法) についてみてみよう。Hartree-Fock 近似では電子をエネルギーの低い軌道から入れていくと一つの電子配置が得られ、この一つの電子配置で電子状態を表している。一方で CI 法では他の電子配置、Hartree-Fock 法の占有軌道から空軌道へと励起した状態も含めて考える方法で波動関数を基底状態 $|\Psi_0\rangle$ および一電子励起状態 (一電子が励起した状態)、2 電子励起状態、といろいろな励起状態 $|\Psi_i\rangle$ を記述する電子配置の和で表す。

$$|\Phi(\text{CI})\rangle = C_0|\Psi_0\rangle + \sum_i C_i|\Psi_i\rangle \quad (6)$$

CI 法にもいろいろな方法があるが、ここでは一電子励起だけを考慮した SECI (single excitation) 法についてみてみよう。基底状態の電子配置は一電子励起配置とは直接的には相互作用しないため (Brillouin 定理)、Hartree-Fock で得られた基底状態は電子相関による改善は得られないし、励起状態の電子相関を記述することもないが、簡単に励起エネルギーを知ることができる。

さらに高次の電子相関を取り込む方法としてクラスター展開法という理論にもとづいた方法がある。この方法の一つで、高精度の計算を行うことのできる SAC-CI 法^{1,2)}がある。最近では大きな生体系のスペクトル計算などにも応用され、成果を挙げている。

最近、頻繁に使われる方法として TDDFT 法がある。DFT 法では励起状態は記述できないが、電子励起エネルギーを線形応答理論によって計算することは可能である。TDDFT 法は大きな系についても比較的少ない計算労力で計算が可能であるため最近よく使われるようになってきた。TDDFT の精度は交換相関ポテンシャルに大きく依存することがわかっており、これを補正するポテンシャルについての研究も盛んに行われている。

表 2 にホルムアルデヒドの $n \rightarrow \pi^*$ 、 $\pi \rightarrow \pi^*$ の励起エネルギーの計算 (SECI、SAC-CI、TDDFT) および実験結果を示す。

表 2. ホルムアルデヒドの $n \rightarrow \pi^*$ 、 $\pi \rightarrow \pi^*$ の励起エネルギー (eV) の計算 (SECI、SAC-CI、TDDFT) および実験結果

励起	状態	SECI ¹⁾	SAC-CI ²⁾	TDDFT ¹⁾	実験値 ²⁾
$n \rightarrow \pi^*$	3A_2	3.95	3.70	3.43	3.5, 3.3-3.6
	1A_2	4.72	4.16	4.12	4.1, 4.2
$\pi \rightarrow \pi^*$	3A_1	5.29	6.10	5.85	6.0, 5.6-6.2
	1A_1	10.25	10.83	9.86	10.7

¹⁾ 基底関数として 6-31+G(d) を使用。

²⁾ H. Nakatsuji, K. Ohta, K. Hirao, J. Chem. Phys., 1981, 75, 2952

参考文献

- H. Nakatsuji, Chem. Phys. Letters, 1978, 59, 362; 1979 67, 329
- H. Nakatsuji, K. Hirao, J. Chem. Phys., 1978, 68, 2053
- ザボ, N. S. オストランド「新しい量子化学(上)(下)」, 東京化学出版, 1990 年
- 米澤貞次郎, 永田親義, 加藤博史, 今村桂, 諸熊奎治「量子化学入門(下)」, 化学同人, 1983 年。

分子モデリングソフトウェア “Spartan” (スパルタン) のご紹介

(7) グラフィックス(その2)およびスペクトルチャート

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

今回は本誌 No. 6 でご紹介した (4) グラフィックス (その1) の続きと、スペクトルチャートについてご紹介します。

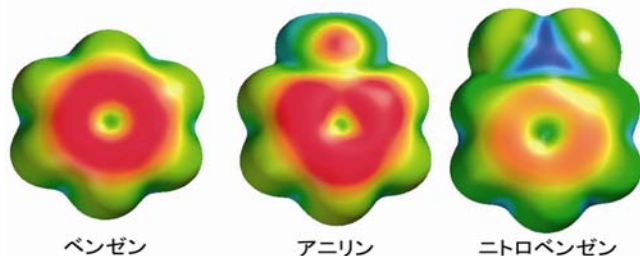
■ 局所イオン化ポテンシャル

(4) グラフィックス (その1) では、全電子密度面、静電ポテンシャル面、そして静電ポテンシャルマップをご紹介しました。

同様に、局所イオン化ポテンシャルのマップ表示を考えます。

まず、局所イオン化ポテンシャルですが、分子近傍の任意の場所から電子を引き抜く際に必要になるポテンシャルエネルギーのことです。このプロパティを、全電子密度面上に色分けして作られたものが局所イオン化ポテンシャルマップです。

下の図は左から、ベンゼン、アニリン、ニトロベンゼンの局所イオン化ポテンシャルマップを示しています。



ここで、Spartan では常に最小値側を赤く、最大値側を青で表示していますので、赤い側がその分子の中で電子が引き抜くエネルギーが小さい場所と考えられます。

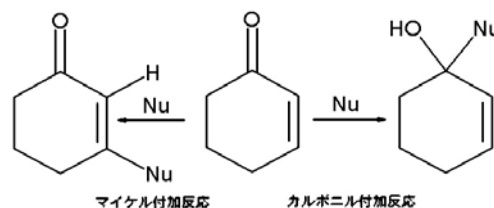
ベンゼンでは、6 箇所の炭素のいずれも同じように赤く塗られましたが、アニリンではオルトおよびパラの位置が支配的であることが予測できます。

一方ニトロベンゼンですが、よく見ると比較的メタの位置で赤い場所が広く塗られているように見え、この位置が支配的であることを示しています。

また、分子全体の色の強さはどうでしょうか？ベンゼンに対してアニリンは全体的に赤く、またニトロベンゼンは赤さが薄く表示されています。このように、求電子反応性を説明するのに局所イオン化ポテンシャルを使用することができます。

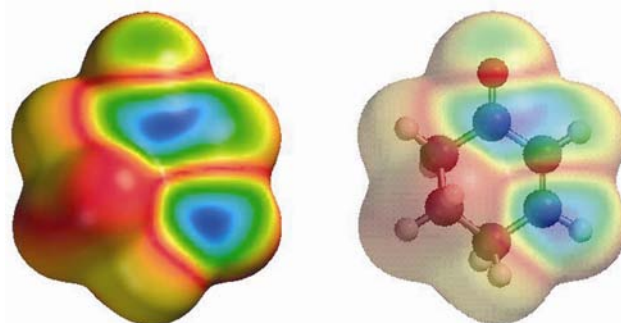
■ LUMO マップ

次は LUMO マップについて見てみましょう、



シクロヘキサノンの求核反応には次のようなマイケル付加反応、カルボニル付加反応が知られていますがこれを、LUMO マップで説明したいと思います。

以下に Spartan でシクロヘキサノンの LUMO マップを作成しました。



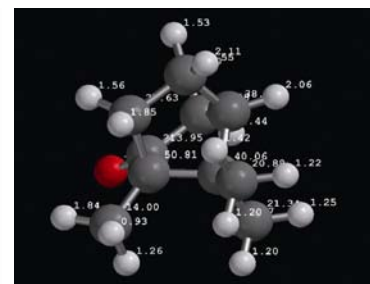
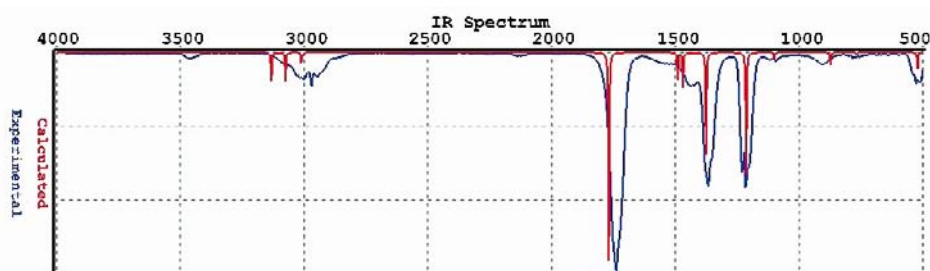
左のソリッド表示を参照してください。

分子の二箇所に青い色で塗られた領域があることがわかります。分子軌道の場合は、数字そのものの大小ではなく、絶対値を使って色分けします。そのため最小値は 0 ですが、0 に近い場所は赤く塗られ、値が大きい場所は青く塗られます。シクロヘキサノンの 2 箇所の青いスポットがそれぞれ、分子表面により強く LUMO が局在化している場所、つまり求核反応の起きやすい場所であることを示すこととなります。これを半透明で表示したものが右の図です。カルボニルの炭素とベータ炭素の 2 つを示しています。ベータ炭素は、マイケル付加反応をカルボニル炭素はカルボニル付加反応をそれぞれ示唆し、この LUMO マップ 1 つで 2 つの反応の予測を説明できます。

■ スペクトルチャート

Setup メニューの Calculations ダイアログには IR, NMR, UV/Vis の 3 つのチェックボックスがありそれぞれのスペクトルチャートを作成できます。

NMR の結果 (シフト値) は、チャートとして出力する場合は実験値としてはケルン大学の公開データベース (15,000 件) を引用します。また、結果の数値を以下のように、原子にラベルとして表示することもできます。

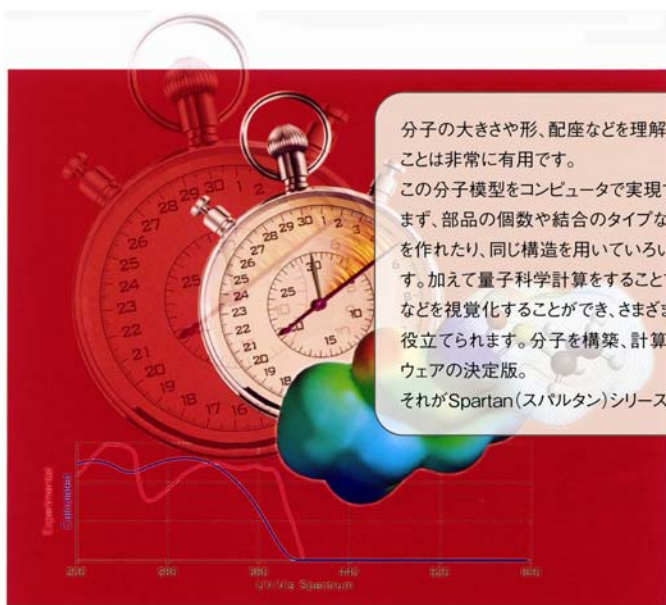


上図は、アセトン分子の IR スペクトルを表示したもので、赤い線が、EDF1/6-31G*による計算値青い線はインターネットを介して NIST の公開データベース (約 12,000 件) から引用した実験値に基づくデータです。

UV/Vis は、いくつかの励起状態の計算も行っており、そのエネルギー差からスペクトルチャートを作成します。IR と同じ NIST の公開データベース (約 1,500 件) を重ねて表示できます。

このほか IR はそれぞれのピークにおける振動のアニメーションを表示することができます。

次回は、分子の類似性の計算機能、および CFD (Chemical Function Descriptor) について紹介します。



分子の大きさや形、配座などを理解するのにプラスチック製の分子模型を使うことは非常に有用です。
この分子模型をコンピュータで実現するとどんなメリットが考えられるでしょうか？
まず、部品の個数や結合のタイプなど汎用性が高く、いくらでも大きな構造を作れたり、同じ構造を用いていろいろなタイプで表示することが可能になります。加えて量子科学計算をすることで、電荷分布やフロンティア軌道の局在化などを視覚化することができ、さまざまな分子の振る舞いや反応機構の理解に役立てられます。分子を構築、計算し結果を表示を行う分子モデリングソフトウェアの決定版。
それが Spartan (スパルタン) シリーズの製品群です。

コードNo.	メーカーコード	品名	容量	希望納入価格(円)
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
302-32021	S6E-CW	Spartan '06 Essential Edition for Corporate (Windows) スパルタン '06 エッセンシャル、企業向け (ウィンドウズ版)	1 セット	350,000
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
306-32041	S6E-GW	Spartan '06 Essential Edition for Government (Windows) スパルタン '06 エッセンシャル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	280,000
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
300-32061	S6F-FW	Spartan '06 Essential Edition for Education (Windows) スパルタン '06 エッセンシャル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	138,000
307-32071	SSA-PW01	Spartan Student Edition, Single Pack Access Code (Windows) スパルタン、学生向け、1 ライセンス (ウィンドウズ版)	1 セット	12,000
304-32081	SSU-DW01	Spartan Student Edition, Single Pack USB Dongle Set (Windows) スパルタン、学生向け、1 ライセンス (ウィンドウズ版)	1 セット	40,000
301-32091	SSU-DW10	Spartan Student Edition, 10 License Pack (Windows) スパルタン、学生向け、10 ライセンスパック (ウィンドウズ版)	1 セット	320,000
304-32101	SSU-DW30	Spartan Student Edition, 30 License Pack (Windows) スパルタン、学生向け、30 ライセンスパック (ウィンドウズ版)	1 セット	756,000
301-32111	SSU-DW50	Spartan Student Edition, 50 License Pack (Windows) スパルタン、学生向け、50 ライセンスパック (ウィンドウズ版)	1 セット	1,100,000

水中における β -(1 \rightarrow 3)-グルカン/核酸複合体の構造解析

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンと核酸とが形成する 3 重螺旋複合体が水溶液中でどのような構造変化をするのかについて、分子動力学 (MD) シミュレーションにより検討した。今回の MD シミュレーションでは、原子数約 3 万の系で 1500 万ステップの計算を行った。通常のパソコンでこのような計算を行うおうとすると、半年程度かかる作業である。PC クラスタを構築して計算時間を短縮するという方法もあるが、われわれは、近年 MD 計算用に理化学研究所が開発した超高速演算拡張ボード「MDGRAPE-3」を利用した。MDGRAPE-3 は、MD 計算プロセスの中で最も計算負荷が高い原子間非結合力の計算を非常に高速に計算することができる。MDGRAPE-3 を装着することで非装着時と比較して計算速度は数十倍向上し、シミュレーション時間を大幅に短縮することが可能となる。また、MDGRAPE-3 と連携して動作する MD 計算用の市販プログラムの中で、株式会社インフォグラムによって開発された「eMD²(エムディースクエア)」を使用した。eMD²は MDGRAPE-3 による計算速度の劇的な高速化を最大限に活かせるリアルタイム MD 機能が搭載されている。そのため MD 計算中に、任意の分子に対して応力を加えて操作することも可能となっている。この機能は、今回の MD 計算の遂行に大きく貢献した。詳細は eMD² のホームページ (<http://www.emd2.jp/>)、もしくは株式会社インフォグラム・田上氏執筆の本誌 2008 年 1 月号を参照していただきたい。

β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカン/核酸複合体の初期構造として、半経験的分子軌道法 (MOPAC AM1 COSMO 法) によって構造最適化したカードラン/Poly(C) (CUR/Poly(C), Fig. 1(a)) モデルとシゾフィラン/Poly(C) (SPG/Poly(C)) モデルを用いた。今回の MD 計算には、糖鎖部には炭化水素の計算によく用いられている GLYCAM93 パラメータ¹⁾を、核酸部にはタンパク質や核酸の計算によく使用される parm94 パラメータ²⁾を採用した。各モデルを直径 50 Å、高さ 100 Å の円筒状セル

の中心に配置し、周りに約 6000 個の水分子をランダムに配置した。水分子のパラメータには SPC/E 力場を採用し^{3, 4)}、能勢法により温度を 298K に制御しつつ^{5, 6)}、NVT アンサンブル (粒子数 (N)、体積 (V)、温度 (T) が一定の条件) で MD 計算を行った。MD 計算開始時に各分子に一斉に運動エネルギーが発生するので、「分子群の初期配置」と「運動エネルギーの発生仕方」に十分留意する必要がある。今回の計算でも、水分子の配置、時間刻み幅、温度上昇の条件などに配慮して、MD 計算自体は問題なく進行したが、Fig. 2 (a) に示したように複合体の螺旋内部に位置していた核酸塩基の一部 (Fig. 2 (a) で空間充填モデルで示した部分) が螺旋外部にせり出した構造となった。実験では、 β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカン/核酸複合体中の核酸塩基はすべて螺旋内側に向いていることが確認されているので、この現象は MD 計算上の問題だと考えられた。本誌 2007 年 12 月号で明らかにしたように、 β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカン特に側鎖を持たない CUR は、MD 計算初期に急激にピッチ (pitch, 螺旋 1 巻分の長さパラメータ) が伸長する。ひょっとしたらそれが CUR/Poly(C) 構造を崩す要因になっているのではないかと推測し、CUR と Poly(C) のピッチの経時変化を別々に計測してみた (Fig. 2 (b))。その結果より、MD 計算開始時に多糖のピッチの急速な伸びに Poly(C) 鎖が追従できず、Poly(C) の塩基部分が螺旋外部へせり出してしまふことが明らかとなった。そこで、Poly(C) 塩基が螺旋外部へせり出さないような複合体モデルを得るために、時間刻み幅と温度上昇条件のさらなる検討や、複合体モデルの原子座標を一部固定するなど、一般の MD 計算で行われている方法を試してみたが、同様の現象が起きてしまった。この問題を解決するのに半年以上もの歳月を費やしてしまつたが、最終的には、eMD²のリアルタイム MD 機能により「任意の分子に対して応力を加え、操作する」ことで解決することができた。螺旋外部へせり出した Poly(C) 塩基に応力を加え、MD 計算を行いながら螺旋内部へ強制的に再配置するという操作を CUR ピッチの伸びが安定するまで行ったところ、Poly(C) 塩基が螺旋内部に位置した CUR/Poly(C) モデルを得た。CUR ピッチの伸長が安定化した後は、応力を加えなくても Poly(C) 塩基が螺旋外部にせり出すことはなかった。

このような手順で MD 計算を 1.5 ns まで行った後の CUR/Poly(C) と SPG/Poly(C) の構造をそれぞれ Fig. 1 (b), (c) に示した。CUR/Poly(C) の末端は多少崩れていたものの、両複合体ともに 3 重螺旋構造を維持していた。また、CUR/Poly(C) のピッチは、最終的に約 19 Å あたりに収束しているのに対

を加え、MD 計算を行いながら螺旋内部へ強制的に再配置するという操作を CUR ピッチの伸びが安定するまで行ったところ、Poly(C) 塩基が螺旋内部に位置した CUR/Poly(C) モデルを得た。CUR ピッチの伸長が安定化した後は、応力を加えなくても Poly(C) 塩基が螺旋外部にせり出すことはなかった。

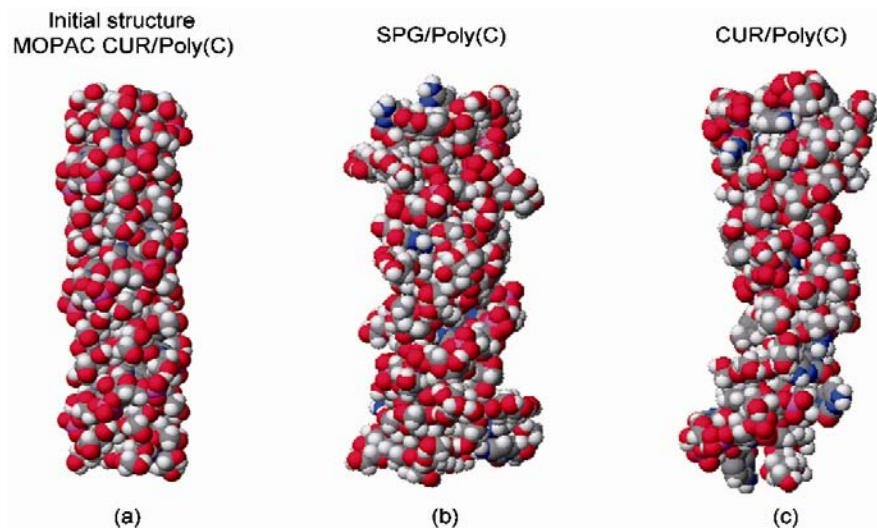
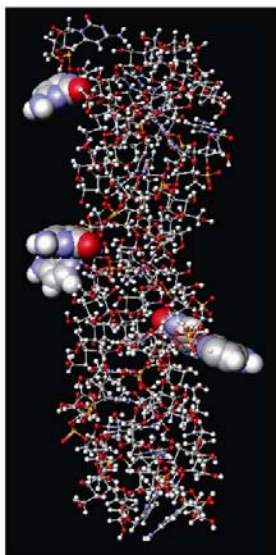
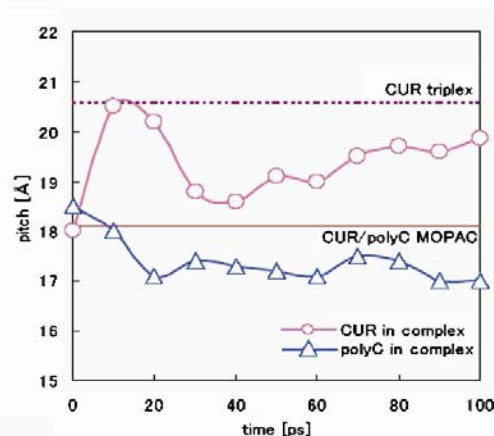


Fig. 1 The geometry-optimized structure of the CUR/Poly(C) by MOPAC calculation (a) and the final structures of SPG/Poly(C) (b) and CUR/Poly(C) (c).



(a)



(b)

Fig. 2 The structure (a) and helix pitch (b) of the CUR/poly(C) at the first stage of MD simulation.

し、SPG/Poly(C)のピッチは約18 Åに収束していた (Fig. 3)。Table 1にSPG/Poly(C)とCUR/Poly(C)の1.2 ns以降の平均

ピッチと標準偏差を示した。2つの複合体を比較すると、SPG/Poly(C)の平均ピッチはCUR/Poly(C)のピッチより約1 Å短い。さらに、標準偏差の値より、SPG/Poly(C)のピッチの熱振動がCUR/Poly(C)よりも抑制されていることが分かる。外観に関しても、CUR/Poly(C)は複合体中心で若干屈曲しているのに対し、SPG/Poly(C)は屈曲していない。これは水中の β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンのMD計算の際に得られた「SPGは水分子を介した“主鎖-側鎖”および“側鎖-側鎖”水素結合によって安定化している」という結果と合致しており^{7, 8)} (本誌2007年12月号参照)、 β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカン/核酸複合体においても β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンの側鎖はその構造の安定化に深く関与していることを示唆している。また、興味深いことに、SPG/Poly(C)のピッチは、MOPAC AM1 COSMO法によって構造最適化したCUR/Poly(C)モデルのピッチに非常に近い値であった。つまり、SPG/Poly(C)は水中においても熱運動を考慮しない静的安定構造とほとんど変わらないということである。

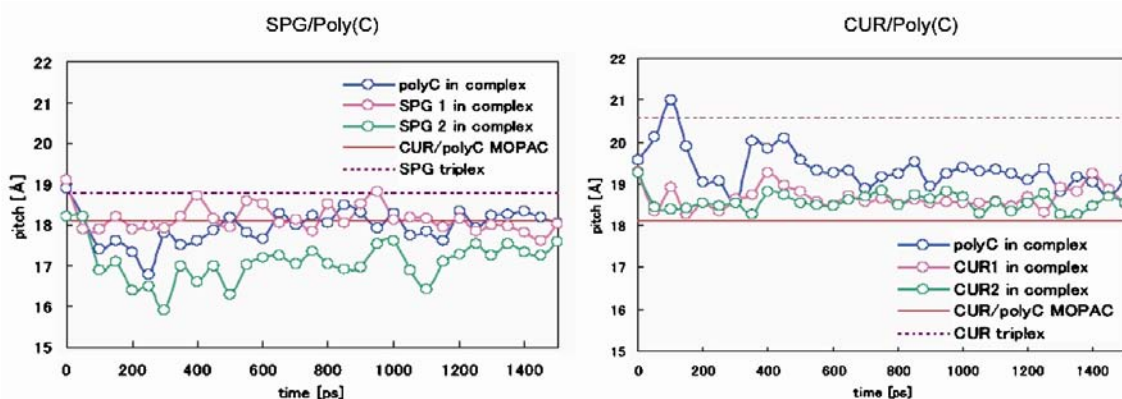


Fig. 3 Fluctuation of the helix pitches for SPG/poly(C) and CUR/poly(C).

Table 1. Average pitch of each strand in the complex between 1200 to 1500 ps

SPG/Poly(C)		CUR/Poly(C)	
Poly(C)	18.2 Å (0.155) ^a	Poly(C)	19.1 Å (0.221) ^a
SPG 2	17.4 Å (0.152)	CUR 1	18.8 Å (0.299)
SPG 1	17.9 Å (0.178)	CUR 2	18.5 Å (0.188)

^a Standard deviation of each strand in the complex between 1200 to 1500 ps.

参考文献

- Woods, R.J., R.A. Dwek, and C.J. Edge, *J. Phys. Chem.* 99, 3832-3846. (1995)
- Cornell, W.D. et al., *J. Am. Chem. Soc.* 117, 5179-5197. (1995)
- Kusalik, P. G. Svishech, I. M. *Science*. 265, 1219-1221. (1994)
- Berendsen, J. C. Grigera, J. R. Straatsma, T. P. *J. Phys. Chem.* 91, 6269-6271. (1987)
- Nose, S. *J. Chem. Phys.* 81, 511. (1984)
- Martyna, G. J.; Klein, M. L.; Tuckerman, M. E. *J. Chem. Phys.* 97, 2635. (1992)
- Miyoshi, K. Uezu, K.; Sakurai, K.; Shinkai, S. *Sen'i gakkaiishi*. 62, 251-257. (2006)
- Okobira, T. Miyoshi, K.; Uezu, K.; Sakurai, K.; Shinkai, S. *Biomacromolecules*. in press (2008)

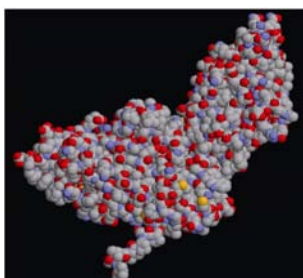
“eMD² (エムディースクエア)” で始める分子動力学シミュレーション

(7) 便利なソフトウェア (その1)

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

MD を行うにあたり、分子構造を表示するためのビューアは欠かせないツールの1つです。

描画の美しいもの、動作の軽快なもの、多機能なものなど様々なビューアがありますが、今回は、無償で利用できる分子ビューアをいくつかご紹介します。



RasMol

非常に動作の軽快な分子ビューアです。

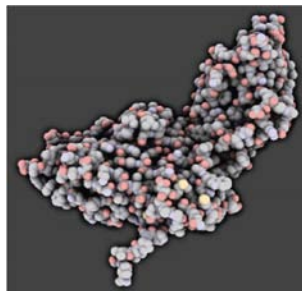
描画の種類は「Wireframe」、「Ball&Stick」、「Spacefill」、「Ribbon」、「Cartoon」などがあり、大きなファイルでもストレス無く描画することが出来ます。

描画の美しさよりも手軽に見

たい場合に有用なソフトウェアです。

ただし、開こうとするファイルのパスに日本語が含まれている場合は開けませんので注意が必要です。

URL : <http://www.openrasmol.org/>



QuteMol

影の付いたリアルな描画が可能な分子ビューアです。

動作も軽快で大きな分子でもスムーズに描画でき、回転などの操作中でも描画の品質は落ちません。

描画の種類は少なく、対応しているファイルも PDB のみですが、

とても立体感のある描画で分子の形状の把握も容易です。

こちらは、ファイルのパスに日本語が含まれている場合も問題なく開くことが出来ます。

URL : <http://qutemol.sourceforge.net/>



PyMOL

描画の綺麗な分子ビューアです。

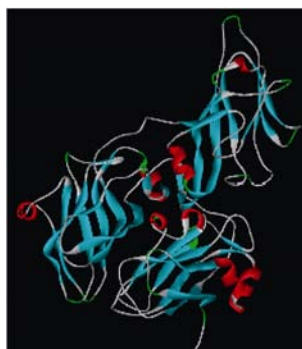
描画の種類や色分けの方法も多彩で、機能も充実しています。

レイトレーシングも実装しており、手軽に綺麗な画像を作成することも出来ます。

また、動作も比較的軽快で、大きな分子でも問題なく描画可能です。

こちらも、RasMol と同様にファイルのパスに日本語が含まれている場合は開けません。

URL : <http://pymol.sourceforge.net/>



DS Visualizer

Accelrys が提供している無償版の分子ビューアです。

多機能で描画も美しく、操作性も優れています。

また、対応しているファイルフォーマットも数多く、インターネット上のファイルを直接開いたりすることも出来ます。

URL :

<http://www.accelrys.com/products/dstudio/index.html>

次回は、ファイル変換のツールなどをご紹介します。

コード No.	品 名	容 量	希望納入価格 (円)
303-17151	(株) インフォグラム (MD-AC1Std) eMD ² スタンダード アカデミック版	1セット	500,000
300-17161	(株) インフォグラム (MD-AC1Std) eMD ² スタンダード コーポレート版	1セット	1,500,000

eMD² 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 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

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

Wako Chemicals GmbH

European Office

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

Tel: 49-2131-311-0