

WAKO

# Infomatic

# World

実験化学者のための  
IT活用誌

2007  
June No. 1

### 創刊にあたり

- ・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!!

近年の飛躍的な“近似手法の進展”や、かつてのワークステーションさえも凌駕する“高性能パソコン”の登場などにより、「量子化学計算」や「分子シミュレーション」は、理論化学の専門家のみならず、実験をメインとする研究者にとっても必須のものとなりました。しかし、「計算化学」の非専門家にとっては、①適切な計算方法を対象化合物に応じて選択し、②インプットデータを正しく作成し、③計算結果を正しく読み解く、…ことは、未だに容易なことではありません。本誌では、実験を主とした研究を行っておられる皆様を想定し、「計算化学」の入門的 & 実用的な方法や事例を、連載形式にてわかりやすく解説していきます。

“実験の飛躍的な効率化”と“理論武装強化”のために、皆様の研究に「計算化学」をお役立ていただくことをご提案いたします。

## 目 次

### 思考のツールとしての計算化学

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

### (株)インフォグラム製 ダイナミック分子モデリングソフト “eMD<sup>2</sup>”

—Empowered Molecular Design/Dynamics—

### 第2回 “和光&富士通” 計算化学セミナー開催記

### 『創薬のための最新技術のご紹介』～創薬研究手法の最前線～

- ・デスクトップ型 PC で分子の相互作用をキャッチ  
～世界最速計算パワーとリアルタイムマニピュレーションを組み合わせた新しい動力学シミュレーションの可能性～  
独立行政法人理化学研究所 トポケミカルデザイン研究チーム/  
次世代ナノパターニング研究チーム 副チームリーダー 藤川 茂紀
- ・SynthPath Explorer Ver. 1.0 のご紹介 富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 新井 一史
- ・Structure Based Drug Design による構造創出 富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 朝永 惇
- ・CS E-Notebook Enterprise のご紹介 富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 萩原 稔

# 思考のツールとしての計算化学

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

計算化学に何を期待するのか。系の状態(対象分子, 温度, 圧力など)を指定して, ボタンをクリックすれば, 翌日にはどんなことがどのような過程を経て起こるかが詳細に提示されることなのか。原子・分子を明示的に取り扱わない流体解析ソフトやプラントシミュレータなどでは, 確かにそのようなことが現実のものとなっている。しかし, 原子・分子を明示的に取り扱う計算化学ソフトでは, 近年のコンピュータの劇的な高性能化と計算化学理論のめざましい発展をもってしても, まだまだそのようなことになるのは近い将来ではない。では, 計算化学は実験研究者にとってまだまだ未成熟なものなのか。対象分子の最安定構造, 分子構造の経時変化, 反応経路の探索, 自由エネルギー計算, 溶媒効果など, 計算目的をはっきり決めれば, 適切な計算方法が見つかり, 必要な情報を得ることが可能なので, 大局的には未成熟な感があるものの, 局所的には成熟していると言える。

したがって, 計算化学をこれまでの実験研究や理論研究に相補的かつ強力な道具として利用していくためには, まず自分が計算化学的手法を用いて何を知りたいのかをはっきりさせることと, 計算化学的手法の特徴とその適用法を知ることが重要である。計算化学に興味を持って, 計算化学という学問を一生懸命理解しようとしているうちに, 今ひとつ理解できずに挫折してしまったり, 一通り計算化学的手法を理解してみたものの自分の研究対象に適用できずに計算化学はまだまだ有用なツールではないと判断している研究者が非常に多いと感じている。これは, 駆使できるようになるとなんとなく格好良さそうなイラスト作成ソフトに興味を持って, その使い方を覚えようとしてみたが操作方法の複雑さに挫折し, しばらくしてまた挑戦してやっと操作方法を覚えることに成功したら, 実は心底書きたいイラストなんてなかったという話に似ている(私もその経験者の一人)。もし実験研究に重心をおいて, 計算化学を現象を理解するツールの一つとして使いたいと思っているならば, できるかできないかは別としてまずは「計算化学で何を知りたいのか」を明確にするべきである。

私が計算化学に取り組み始めるときは, 知りたいことだけは明確であった。九州大学の助手時代(1993~2001年)に, 抽出や吸着操作における分子認識材料開発(文献1,2)を行っていた。1998年頃, 実験データを

基に高性能な材料開発の設計指針を作成することに成功したと感じ, それら分子認識機構に関する分子モデルをコンピュータ上で再現できないかと考えていたときに, 計算化学的手法に興味を持った。私の専攻は化学工学であり, 取り組んだ研究の最後には現象を説明するためのモデル式(ほとんどが偏微分方程式)を立てて, その式を数値計算で解くというのが常道であり, 計算化学もそれぞれの手法が独自のモデル式に相当すると考えれば同じような感覚で利用できるのではないかと考えた。コンピュータの劇的な低価格・高性能化と計算化学ソフトウェアの発展により, 通常のデスクトップコンピュータでも意義のある計算が可能になったと巷で言われおり, Pople博士とKohn博士が1998年度ノーベル化学賞を受賞した年であった。各分野専用の計算化学ソフトウェアというものは存在しないので, 自分自身でそれぞれの計算目的を考慮しながら対象分子の計算を行う必要があるにもかかわらず, 計算化学的手法の特徴とその適用法をほとんど知らないまま無謀にもこの分野に飛び込んでしまった。

最初に取り組もうとした計算は, 「リン酸系抽出剤と亜鉛との錯体がトルエン-水界面でどのような形態をとるのか」であった。分子動力学法でやれば良いと言われたが, いきなり躓いてしまった。この計算を行うための金属周りのパラメータがないことと, 自前のパソコンのパワーにとって系が大きすぎたのである。このまま挫折するのも癪に障るので, 金属錯体の分子モデリングを精力的に行っているドイツ・ハイデルベルク大学のComba教授の下に1999年に留学して, この時期から抽出剤などの機能性分子の分子モデリングを行っている。

私が計算化学に携わってからもう8年以上が経過しており, これまでに自分の実験研究だけでなく, 他の実験研究者との共同研究もいくつか行ってきた。それらの経験の中で, 自分にとって最も有益だったことは, 実験データを解釈するための作業仮説を計算化学的手法により検証していく過程で, 計算化学的考察によって作業仮説の書き換えが行われ, それによってこれまでの実験データで見逃していた特徴を抽出でき, さらに新たな実験計画を立てることができたことである。後で振り返ってみると, 実験データだけで最終の作業仮説を導き得たかもしれないが, 計算化学による迅速な思考実験の有用性を痛感している。そこで, 本連載

では、実験研究者が計算化学を思考のツールとして用いることを想定して、具体的な事例の中で、どの計算手法をどのように適用するに至ったかの舞台裏をお見せしながら、適宜計算手法の概略や計算上の注意点などを解説していきたい。私の主たる研究分野が、イオン交換や溶媒抽出といった分離操作に使用する分離材料の開発であるため、計算対象や知りたいことに相当偏りがあるかもしれないが、計算化学を思考のツールとして使うためのヒントにはなると信じている。

今回は、計算化学的手法の特徴を簡単にまとめたので、今後の連載の理解に役立てて欲しい。

計算化学手法には大別して、以下の4つに分類される。

### (1) 分子軌道 (Molecular Orbital, MO) 法

量子化学理論を基礎とし、分子の性質を表すシュレディンガーの波動方程式を解く手法。できるだけ厳密に解くことを指向した非経験的 (ab initio (from the beginning)) 分子軌道法と、計算コスト (計算機価格×ソフトウェア価格×時間×人件費) を軽減するために経験的パラメータを組み込んだ半経験的 (semi-empirical) 分子軌道法などがある。ab initio 分子軌道法の基本は、多電子原子の全電子波動関数を各原子ごとの波動関数の積で表したハートリーの方法を、フォックが電子スピンの性質を含めたものに改良したハートリー・フォック (Hartree-Fock) 法である。ハートリー・フォック法は、電子間相互作用 (電子相関) が厳密には考慮されていないので、電子相関を正確に見積もるための手法が提案されている。たとえば、摂動法 (Moeller-Plesset, MP 法)、配置間相互作用 (Configuration Interaction, CI 法)、クラスター展開法 (Coupled Cluster, CC 法) などがある。また、半経験的分子軌道法の代表的なプログラムとして、1983年に James J. P. Stewart 博士によってパッケージ化された MOPAC (Molecular Orbital PACKage) がある。保存系の全エネルギーを表す関数であるハミルトニアンとして、経験的パラメータを導入した MNDO, MINDO/3, AM 1 および PM 3 などが備わっている。

#### <適用例>

多糖の構造解析 (文献 3, 4),  $\beta$ -1,3-グルカン/核酸複合体の構造解析 (文献 5, 6), ポリオールのアンチモン吸着機構 (文献 7)

### (2) 密度汎関数 (Density Functional Theory, DFT) 法

シュレディンガーの波動方程式を解くわけではなく、基底状態のエネルギーなど系の性質が電子密度の汎関数で表されることに基づいて、全電子エネルギーと全電子密度分布を計算する方法。電子相関効果は最初から組み込まれている。計算コストがそれほど高くない割に計算精度が高い。ハートリー・フォック法の電子

交換エネルギーを表す式と密度汎関数法の交換 - 相関エネルギーを表す式を組み合わせた B3LYP 法が広く用いられている。ab initio 分子軌道法や B3LYP 法では、分子軌道を数学的に記述した基底系 (Basis Set) が重要である。有機分子では、一般的に 6-31G\* という基底系が用いられている。6-31G は、内殻軌道に 6 個のガウス関数、原子価軌道の短縮部分と拡散部分にそれぞれ 3 個と 1 個のガウス関数が割り当てられていることを意味する。6-31G\* は、重原子 (非水素原子) に対して電荷分布の異方性を表すための分極関数を加えた 6-31G 基底系を意味し、星印 (\*) をつけて区別される。

#### <適用例>

カリックス [6] アレーンカルボン酸誘導体/アミノ酸エステル複合体の NMR 解析 (文献 8), カリックス [4] アレーン/アルカリ金属錯体の構造解析 (文献 9)

### (3) 分子力学 (Molecular Mechanics) 法

古典力学を基礎とし、原子と結合を剛球とバネのように考え、ポテンシャルエネルギー成分 (結合伸縮, 結合角の曲がり, 二面角のねじれ, 非結合性相互作用, 静電的相互作用, 水素結合など) を表す関数とその関数で使用するパラメータとを合わせた“力場 (Force Field)”を仮定して総ひずみエネルギーを計算する方法。力場として、比較的分子量の小さい有機分子によく用いられる Allinger らによる MM2, MM3, MM4 力場, タンパク質と核酸などの生体高分子用に設計された Kollmann らによる AMBER 力場, Karplus らによる CHARMM (Chemistry at HARvard using Molecular mechanics) 力場, MMFF (Merck Molecular Force Field) 力場, 金属錯体用に設計された Comba らの MOMEK 力場, 広範な元素に適用可能な力場として普遍力場 (Universal Force Field, UFF) や SYBYL 力場などがある。対象分子に適切な力場であれば、非常に精度の高い構造最適化計算などが可能である。また、計算コストが非常に低いので、数千原子以上の巨大分子の構造を求めたり、自由度の高い分子の配座解析をする場合には唯一現実的なアプローチである。

#### <適用例>

ランタニド元素分離のための二座配位抽出剤の分子設計 (文献 10, 11),  $\beta$ -ジケトン誘導体の 13 族元素選択性の定量的評価 (文献 12)

### (4) 分子動力学 (Molecular Dynamics) 法

運動する多数の分子に対する運動方程式を同時に数値的に解き、各分子の位置と速度の値から調和のとれた分子配置を求め、これにより系の平衡および動的性質を計算する手法。コンピュータ上で取り扱える原子数は数万程度であるが、3次元周期境界条件により仮想的に無限に広がった系を作り出して、実在の系に近



い条件を設定することが可能となる。また、統計力学の基本公理の一つである“エルゴードの仮定”に基づいて集団平均は時間平均に等しいとして、分子動力学法における物理量の平均値を時系列的な平均値として算出することで、実験で得られる熱力学量と直接比較することが可能となる。

溶媒を含む生体高分子の系のシミュレーションには、AMBER 力場が広く用いられている。AMBER 力場のパラメータセットには、タンパク質や核酸用に parm94, parm96, parm99, 糖鎖等の炭化水素用に GLYCAM00, GLYCAM04 などがある。また、水のポテンシャル関数も 20 種類以上提案されているが、その中で SPC/E, TIP3P, TIP4P がよく用いられている。

#### <適用例>

水溶液中の  $\beta$ -1,3-グルカンの動的挙動 (文献 13)

上記の計算を行うために、われわれが使用している Windows OS で動作する市販計算化学ソフトウェアの一部を Table 1 に示した。また、それぞれのソフトウェアのどの機能を主に使って

いるかも併せて記した。その他の計算化学ソフトウェアについては、コンピュータケミストリーニュースのサイトを参考にさせていただきたい (<http://www.f2.dion.ne.jp/~ccsnews/>)。また、Table 2 に計算化学に関する書籍 (和書のみ) を紹介したので、是非書店などで手にとって確認して欲しい。

Table 1 Commercial Softwares for Computational Chemistry

ソフト名	主な使用法	URL	備考
Spartan	分子ビルダー, 分子力学法, 半経験的分子軌道法, 非経験的分子軌道法, 密度汎関数法.	<a href="http://www.wavefun.com/japan/products/spartan.html">http://www.wavefun.com/japan/products/spartan.html</a>	Macintosh 版もあり.
CAChe	分子力学法, 半経験的分子軌道法.	<a href="http://venus.netlaboratory.com/material/messe/cache/">http://venus.netlaboratory.com/material/messe/cache/</a>	最新の MOPAC2002 を実装し, 遷移金属パラメータが豊富.
Material Explorer	分子動力学法.	<a href="http://venus.netlaboratory.com/me4/index.html">http://venus.netlaboratory.com/me4/index.html</a>	油水界面のモデル作成やパラメータ作成が容易.
eMD <sup>2</sup>	分子動力学法.	<a href="http://www.emd2.jp/">http://www.emd2.jp/</a>	MD 専用 LSI・MDGRAPE3 との連携で大規模シミュレーションと直感的な分子モデリングが可能.
Gaussian03	非経験的分子軌道法, 密度汎関数法.	<a href="http://www.gaussian.com/">http://www.gaussian.com/</a>	定番ソフトウェア.
Direct Force Field	分子動力学法用力場パラメータの作成.	<a href="http://www.aontechnology.com/">http://www.aontechnology.com/</a>	金属イオンのパラメータも作成可能.

Table 2 Recommended Books for Computational Chemistry

書籍名	著者	出版社	ISBN	備考
分子モデリング概説—量子力学からタンパク質構造予測まで	A. R. Leach 著 江崎俊之 訳	(株) 地人書館	4805207523	計算化学的手法全般.
計算機化学入門 生物工学基礎コース	櫻井実・猪飼篤 編	丸善 (株)	4621046357	計算化学的手法全般. 入門書として最適.
計算化学実験	堀憲次・山崎鈴子 著	丸善 (株)	4621044982	分子軌道法計算の演習が豊富.
すぐできる 量子化学計算 ビギナーズマニュアル	平尾 公彦 監修	(株) 講談社	406154330X	量子化学計算を始める研究者に向けた Q&A 形式の実用的な入門書.
電子構造論による化学の探究 第二版	J. B. Foresman・A. Frisch 著 田崎健三 訳		0963676989	分子軌道法. Gaussian03 を購入すると付属するガイドブック.
コンピュータシミュレーションの基礎	岡崎進 著	(株) 化学同人	4805207523	分子動力学法.
新しい量子化学—電子構造の理論入門 (上)	A. Szabo・N. S. Ostlund 著 大野公男・望月祐志・阪井 健男 訳	東大出版会	4130621114	分子軌道法の基礎.
原子・分子の密度汎関数法	R. G. Parr・W. Yang 著 狩野覚・吉田元二・関元 訳	シュプリンガー フェアラーク	4431707220	密度汎関数法.

#### 参考文献

- K. Uezu, M. Goto, S. Irie, K. Ikemizu and F. Nakashio, Extraction of Rare Earth Metals Using Liquid Surfactant Membranes Prepared by a Synthesized Surfactant, Sep. Sci. Technol., 30 (17), 3325-3338 (1995).
- K. Uezu, H. Nakamura, J. Kanno, T. Sugo, M. Goto and F. Nakashio, Metal Ion-Imprinted Polymer Prepared by the Combination of Surface Template Polymerization with Postirradiation by  $\gamma$ -rays, Macromolecules, 30 (13), 3888-3891 (1997).
- K. Miyoshi, K. Uezu, K. Sakurai, and S. Shinkai, Proposal of a new hydrogen-bonding form to maintain curdlan triple helix, Chem. & Biodivers., 1, 916-924 (2004).
- K. Miyoshi, K. Uezu, K. Sakurai and S. Shinkai, Inter-Chain and Arrayed Hydrogen Bonds in  $\beta$ -1, 3-D-Xylan Triple Helix Predicted by Quantum Mechanics Calculation, Carbohydrate Polymers, 66, 352-356 (2006).
- K. Miyoshi, K. Uezu, K. Sakurai, and S. Shinkai, Polysaccharide-Polynucleotide Complexes. Part 32. Structural Analysis of the Curdlan/Poly(cytidylic acid) Complex with Semiempirical Molecular Orbital Calculations, Biomacromolecules, 6, 1540-1546 (2005).
- 三好賢太郎, 上江洲一也, 櫻井和朗, 新海征治, 計算化学を用いた多糖/核酸複合体の構造検討, 高分子論文集, 63 巻 7 号, 451-457 (2006).
- T. Saito, H. Kawakita, K. Uezu, S. Tsuneda, A. Hirata, K. Saito, M. Tamada, and T. Sugo, Structure of polyol-ligand-containing polymer brush on the porous membrane for antimony(III) binding, J. Membr. Sci., 236 (1-2), 65-71 (2004).
- T. Oshima, K. Inoue, K. Uezu, and M. Goto, Dominant factors affecting extraction behavior of amino compounds by a calix[6]arene carboxylic acid derivative, Anal. Chim. Acta, 509 (2) 137-144 (2004).
- 上江洲一也, 久保田富生子, 後藤雅宏, カリックス[4]アレーンによるアルカリ金属イオンの抽出挙動と計算化学, 海水学会誌, 29 巻 4 号, 338-342 (2005).
- M. Goto, S. Matsumoto, K. Uezu, F. Nakashio, K. Yoshizuka, K. Inoue, Development and Computational Modeling of Novel Bi-functional Organophosphorus Extractants for Lanthanoid Separation, Sep. Sci. Technol. 34 (11), 2125-2139 (1999).
- 上江洲一也, 山川潤一郎, 後藤雅宏, 計算化学の援用によるアクチニドおよびランタニド元素分離のための二座配位抽出剤の分子設計, 化学工学論文集, 32 巻 1 号, 1-5 (2006).
- K. Uezu, Q. T. H. Le, S. Umetani and P. Comba, Molecular Modeling of  $\beta$ -Diketones for the Separation of Aluminium(III) and Indium(III), Solvent Extraction Research and Development, Japan, 13, 161-173 (2006).
- K. Miyoshi, K. Uezu, K. Sakurai and S. Shinkai, Molecular Dynamics Simulation for  $\beta$ -1,3-D-Glucan in Aqueous Solutions: Attachment of One Side Chain Induces a Entire Structural Change, 繊維学会誌, 62 巻 11 号, 251-257 (2006).

## ダイナミック分子モデリングシステム “eMD<sup>2</sup>”

### — Empowered Molecular Design/Dynamics —

- ◇ 創薬研究や材料開発において、分子シミュレーションは欠かせない研究プロセスです。
- ◇ 分子特性の予測に加え、分子間相互作用やそれに基づく分子ダイナミクスも機能に直結する必須ファクターです。
- ◇ ダイナミックに動く分子を自由に操作し、その動きを“感じながら”モデリングを行うことによって、よりリアルなシミュレーションと直感的な分子デザインが可能となります。

#### eMD<sup>2</sup> の特徴

##### ◆ 動く分子をマニピュレーション

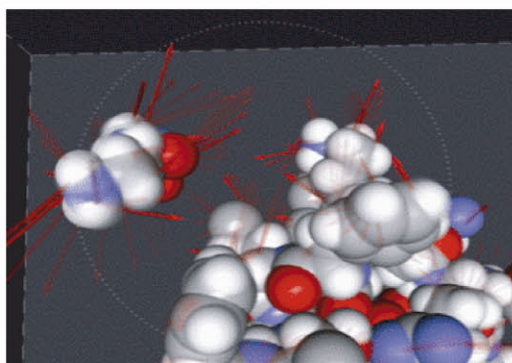
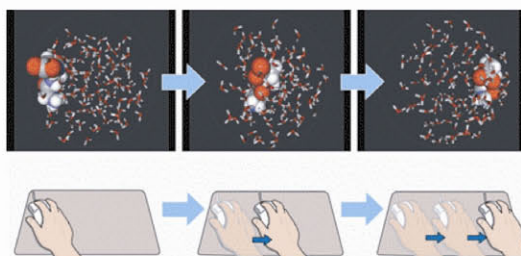
例えば創薬研究において、薬剤分子とターゲットたんぱく質のドッキング(分子フィッティング)シミュレーションは、最適な薬剤分子構造を決めるための重要な研究プロセスです。

通常は、結晶構造解析から得られた「静止した」たんぱく質構造を使い、それに対する薬剤分子ドッキングシミュレーションを行います。

しかし実際は、たんぱく質も薬剤分子も「動いている分子」です。

動く分子を使うことで、たんぱく質のコンフォメーション変化など、フェムト秒スケールの「分子のダイナミクス」を直感的に把握できます。

すべての分子操作はリアルタイムにMD計算され、操作と計算結果が常にリンクしたダイナミック分子マニピュレーションが可能です。



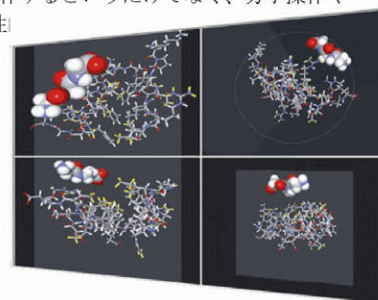
##### ◆ 分子間相互作用の状態を把握する

動く分子を操作するだけでは、相互作用の程度を把握できません。MDシミュレーションでは分子(原子)間力や分子の位置情報、エネルギー情報が算出されます。

より適切な分子デザインのためには、これらの情報を直感的に把握することが重要です。

このソフトでは、個別の原子にかかる力の大きさと向き、あるいは原子間距離や角度、さらには状態の内部エネルギーなどの各種計算情報が、リアルタイムに表示され、より定性的に状態を把握することが可能です。

これにより、ただ動く分子を操作するというだけでなく、分子操作や分子構造変化に伴う状態を定性



##### ◆ フレンドリーなモデリングを可能とする4面ビューイング

分子は3次元空間の中に配置されています。

ある一方向からのビューイングでは、その分子位置や分子操作、そしてそれに伴う動きの度合いを直感的に把握することができません。

4面ビュー(上面・正面・側面・指定面)によって、空間的な配置状況が正確かつ容易に把握できます。

さらにこの4面ビューイング機能はMD計算実行中にも利用でき、多角的な空間解析も可能となります。

##### ◆ 数原子から数万原子まで対応可能な高いスケーラビリティ

数百から千原子程度までは通常のデスクトップPCでシミュレーションが可能です。

さらに多くの原子が存在する場合(例えば、水溶液中のタンパク質シミュレーションなど)は、数万原子でのシミュレーションとなり、強力な計算能力が必要になります。

このモデリングシステムは、理化学研究所で開発された超高速MD計算用のPC拡張ボードMDGRAPEとの連携が可能です。

これをデスクトップPCに搭載することで、計算スピードが数十倍程度向上出来ます。

eMD<sup>2</sup>は、ユーザーが希望する原子数に応じて計算能力を拡張できる高いスケーラビリティを持っています。

※1: 計算能力・スピードは計算を実行するPCの性能に大きく依存し、このような性能が出ない場合もあります。

※2: MDGRAPE-3は理研ベンチャー (有) 高速計算機研究所の製品であり、別売品です。



## その他の機能

### ● ファイル操作

- 読み込み可能分子ファイル
  - ・MDL molファイル、PDBファイル、molxファイル
- 書き出し可能分子ファイル
  - ・molxファイル
- マルチメディアファイルへの書き出し
  - ・jpeg、bitmap、pov-ray
- ワークスペース（分子は位置情報）ファイルの保存

### ● MD計算

- 計算アンサンブル: NVTのみ(今後拡張予定)
- 計算セル形状: 直方体・立方体・球・円柱
- 計算セルサイズ: 指定可能(オングストローム単位)
- 温度制御方法: 能勢法・スケーリング法
- 温度設定: 一定値あるいは可変値
- 計算ステップ数上限: 特になし
- 保存データ: MD計算リスタート用バイナリーデータと分子座標と速度のテキストデータ
- 水の自動発生(対応水分子: SPCE, TIP3P, TIP4P)
- 水素原子の自動補完: PDBファイルから読み込まれたペプチド分子については可能
- 力場: アンバーポテンシャルを初期実装
- ボンド制限: SHAKEに対応
- MD計算実行直前での分子構造緩和機能
- 計算拡張ボードMDGRAPEに対応
- 1ステップごとの計算実行(計算のコマ送り)
- MD計算実行中の位置更新機能のオン・オフ
- MD計算中に位置を固定する原子の設定
- MD計算中に行う分子操作力力の設定

### ● 分子操作

- 分子のコピー・ペースト・グループ化
- 選択分子の平行移動・回転操作
- カメラモードと分子操作モードの切り替え
- 分子プロパティモード実装(アトムタイプや電荷編集機能付)

### ● 表示

- 画面: 1画面モード(任意視点)
- 4画面モード(正面・側面・上面・任意)
- グリッド: XY, YZ, ZXの軸平面をグリッド表示可能
- 分子表示タイプ: Ball&stick, space fil, stick, ribbon, wire frame, tube
- 回転操作作用円の表示・非表示
- 計算セル境界の表示・非表示
- 計算中の力ベクトル表示
- MD計算中のリアルタイム分子描画
- 色設定: 各原子単位から変更可能

### ● 解析

- 二体相関関数機能を実装
- 計算結果のムービー表示

### ● その他

- ポテンシャルエディター実装
- アトムタイプ自動アサイン用ルールエディタ実装

## 必要システム

### ● 必要システム

- ・Intel Pentium 4 2GHz以上 または同等以上のプロセッサ (Pentium4 3GHz以上を推奨)
- ・Microsoft Windows XP 日本語版
- ・256 MB以上の空きメモリ(512MB以上を推奨)
- ・500MB以上のハードディスク空き容量
- ・解像度800 x 600 以上のディスプレイ (1024 X 768以上推奨)
- ・CD-ROM ドライブ
- ・Microsoft DirectX 9.0c ランタイム
- ・Microsoft DirectX 9.0以上に対応のグラフィックボード

### ● ご注意

- ・必要システム、ハードディスク容量は、システム環境によって異なる場合がありますので、ご注意ください。
- ・記載されている機能の中には、お使いのシステムの環境、およびご利用方法によっては、記載以外の制限が発生する場合がございますので、あらかじめご了承ください。
- ・本製品は、CD-ROM 版のみとなります。

### ● 別売品

- ・MDGRAPE-3に対応
- MDGRAPE-3に関するお問い合わせは、(有)高速計算機研究所[ <http://www.peta.co.jp/> ] へお願いします。

最新情報は <http://www.emd2.jp/> をご参照ください。



## 第2回 “和光 & 富士通” 計算化学セミナー開催記

### 『創薬のための最新技術のご紹介』 ～ 創薬研究手法の最前線 ～

創薬研究や材料開発においては、常に新たな研究手法の開発が求められています。

当社では、その分子シミュレーションツールとして、ダイナミック分子モデリングシステム「eMD<sup>2</sup>-Empowered Molecular Design/ Dynamics-」 [開発・製造元：(株)インフォグラム]をご提供しています。(本製品は、独立行政法人理化学研究所と共同開発されたものです)

去る2月20日(火)、富士通(株)様のご協力を得まして、最新の独創的研究手法のご紹介セミナーを開催いたしました。

- |  |              |
|--|--------------|
| 1. eMD <sup>2</sup> (エムディスクウェア)                | [(株)インフォグラム] |
| 2. SynthPath Explorer Ver.1.0 (新規合成経路設計支援システム) | [富士通(株)]     |
| 3. Structure Based Drug Design(候補化合物構造創出サービス)  | [富士通(株)]     |
| 4. CS E-Notebook Enterprise(電子実験ノートシステム)       | [富士通(株)]     |

- ・開会挨拶 和光純薬工業(株) 学術部
- ・「デスクトップ型 PC で分子の相互作用をキャッチ  
～世界最速計算パワーとリアルタイムマニピュレーションを組み合わせた新しい動力学シミュレーションの可能性～  
理化学研究所 フロンティア研究チーム 藤川 茂紀 氏
- ・体験コーナー 「eMD<sup>2</sup>」をさわってみよう!! (コーヒープレイク)
- ・「SynthPath Explorer Ver.1.0 のご紹介」  
富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 新井 一史 氏
- ・「Structure Based Drug Design による構造創出」  
富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 朝永 惇 氏
- ・「CS E-Notebook Enterprise のご紹介」  
富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 萩原 稔 氏
- ・お楽しみ抽選会
- ・閉会挨拶 富士通(株) バイオ IT 事業開発本部



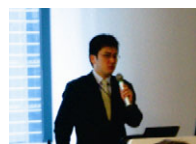
### デスクトップ型 PC で分子の相互作用をキャッチ

世界最速計算パワーとリアルタイムマニピュレーションを組み合わせた新しい分子動力学シミュレーションの可能性  
PCの性能向上と低価格化とともに実験化学者がコンピュータを使って簡単に分子設計できるようになりました。

とりわけ分子間相互作用は、物質の特性を決定する重要なファクターのひとつですが、しかしながら分子間の相互作用を考慮しながらの直感的な分子設計はまだまだ発達段階です。

分子間相互作用は分子動力学計算(MD計算)によりシミュレーション可能です。理研では、通常のデスクトップPCに搭載可能なMD専用高速計算ボードを開発し、通常のPCの数百倍の能力で高速にMD計算するシステムと、それを直感的に操作するWindows版分子モデリングシステムを開発しました。

この組み合わせにより、従来の分子モデリングソフトでは不可能であった新たな分子モデリング法をご紹介しました。



- 1) 分子リアルタイムマニピュレーションの必要性 (開発経緯)
- 2) MDとは?
- 3) MD専用高速計算ボードのご紹介
- 4) 新しい分子モデリングソフト eMD<sup>2</sup>(エムディスクウェア)のご紹介とデモ

#### [講師]

理化学研究所 フロンティア研究システム

トポケミカルデザイン研究チーム 次世代ナノバタニング研究チーム(兼務) 副チームリーダー 藤川 茂紀 氏  
平成11年3月 九州大学大学院 工学研究科 博士課程修了。理学博士。日本学術振興会特別研究員、Yale 大学 博士研究員、理化学研究所 フロンティア研究員、基礎科学特別研究員などを経て、平成16年10月より現職。

## 「SynthPath Explorer Ver.1.0」のご紹介



SynthPath Explorer Ver.1.0 は、知識と論理に基づき、目的とする化合物の2次元構造を入力するだけで、合成物の前駆体を推測することができます。

事実反応データに基づいた知識ベースによる経験（情報）指向経路探索により、構造特徴/脱離基を抽出し、戦略部位の認識や脱離基の付与などを自動的に行い、目的とする合成物の前駆体を推測する手順をご紹介します。

### [講師]

富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 バイオケミカルプロジェクト室 新井 一史 氏

## 「SBDD (Structure Based Drug Design)」による構造創出



OPMF は、de novo 設計とリード化合物の最適化を行い、OPMF で得られた構造と類似の部分構造を有する化合物は、Reverse SSS 検索手法により既存化合物ライブラリから検索することが可能です。

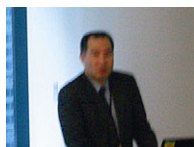
標的蛋白質に対し、手法では、de novo design、otimization、library searching が可能であり、その概要と実例をご紹介します。

### [講師]

富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 バイオケミカルプロジェクト室 部長 朝永 惇 氏

## 「CS E-Notebook Enterprise」のご紹介

E-Notebook Enterprise は、研究者が日々の実験においてこれまで手書きで実験ノートに記入していた様々な実験データを簡単・効率的にブラウザから登録でき、これら実験情報の知識化・共有化・再利用を目的に開発された本格的な電子実験ノートシステムです。



既存の化合物管理システムとの連携による化合物登録業務負荷の軽減、研究報告書作成時間の短縮、既存合成試験情報への容易なアクセスなどが実現でき、今後の研究業務フローを大きく改善します。

今回は、海外の状況も含め、導入に関するポイントなどをご紹介します。

### [講師]

富士通(株) バイオ IT 事業開発本部 バイオケミカルプロジェクト室 課長 萩原 稔 氏

各講演のスライド集はこちら

⇒[http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/info/syn/article/eMD2\\_2.htm](http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/info/syn/article/eMD2_2.htm)

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 大阪府中央区道修町三丁目1番2号 ☎(06) 6203-1788 (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 (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>