

アナリティカル サークル Analytical Circle

2006.7
No.41

分析・クロマト

| | |
|--------------------------------|---|
| (株)ニッピ製 生体試料破碎用器具 バイオマッシャー | 7 |
| HPLC によるトルエンと陰イオン界面活性剤の分析 | 8 |
| コーニングインターナショナル(株)製 パッケージストリペット | 9 |

環境

| | |
|---|---|
| ポジティブリスト制度対応 農薬混合液 | 2 |
| 水質試験用 24 種揮発性有機化合物混合標準液 | 3 |
| Cambridge Isotope Laboratories, Inc.製 環境関連標準品 | 4 |

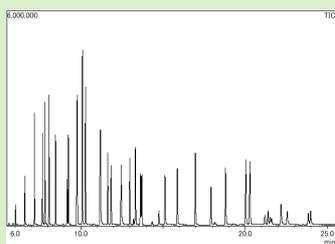
その他

| | |
|--|----|
| 試薬管理はなぜ必要か(1) | 6 |
| 動く分子を操作する ～次世代型分子モデリング時代の到来～ | 12 |
| “和光&富士通”計算化学セミナー開催記 | 14 |
| (株)インフォグラム製 ダイナミック分子モデリングシステム eMD ² | 16 |

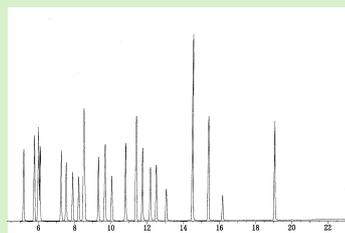
お知らせ

| | |
|-----------------|----|
| HPLC 用試薬カタログ発行! | 9 |
| お客様相談室だより(29) | 10 |
| クロスワードパズル | 11 |

ポジティブリスト制度対応
農薬混合液 (P.2)



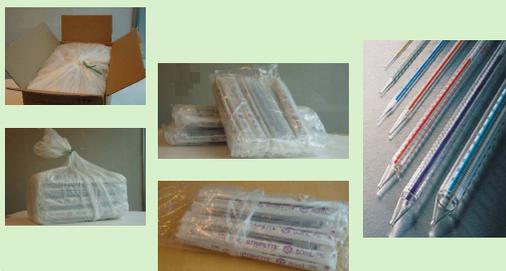
水質試験用試薬
24 種揮発性有機化合物
混合標準液 (P.3)



生体試料破碎用器具
バイオマッシャー® (P.7)



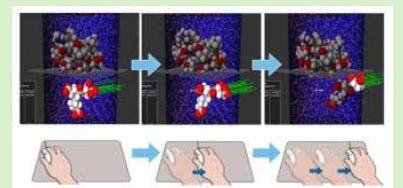
クリーンルーム用
パッケージストリペット (P.9)



HPLC 用試薬カタログ
(P.9)



ダイナミック分子モデリングシステム
eMD² (P.16)

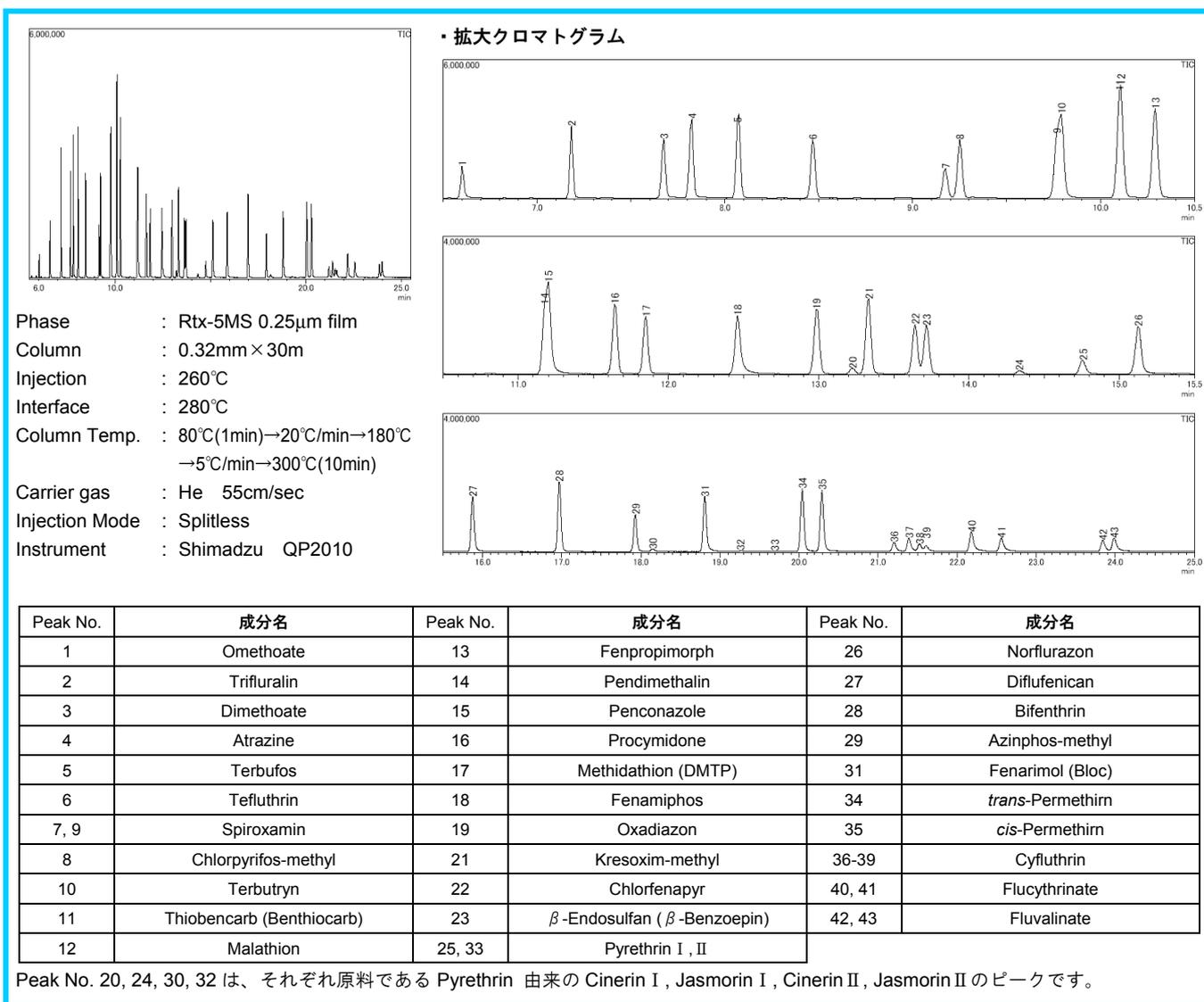


平成 18 年 5 月ポジティブリスト制度が施行されました。それにさきがけ平成 17 年 11 月に厚生労働省より一斉試験法が通知されました。(食安発第 1129002 号)

弊社では、この一斉試験法に対応した農薬混合液を販売しています。

本製品の組合せにより、「GC/MS による農薬等の一斉試験法(農産物)」および「GC/MS による農薬等の一斉試験法(畜水産物)」に記載されているほとんどの成分を揃えることができます。成分詳細については、Siyaku.Com (URL : <http://www.siyaku.com/>) をご参照ください。その他、農薬混合液のパフレットをご用意しております。

分析例 農薬混合液 PL-1-1 (169-22261) の GC/MS (TIC)



各試験法の組み合わせ

| 一斉試験法 (食安発第 1129002 号による) | 対応商品 (略号) |
|---|---|
| GC/MS による農薬等の一斉試験法 (農産物) | 農・PL-1、農・PL-2、農・PL-3、農・PL-4、農・PL-5、農・PL-6、農・PL-11 |
| GC/MS による農薬等の一斉試験法 (畜水産物) 「筋肉、脂肪、肝臓、腎臓及び魚介類」 | 農・PL-1、農・PL-2、農・PL-3、農・PL-9、農・PL-11 |
| GC/MS による農薬等の一斉試験法 (畜水産物) 「乳、卵及びはちみつ」 | 農・PL-1、農・PL-2、農・PL-3、農・PL-9、農・PL-10、農・PL-11 |

一部、一斉試験法記載の成分で、混合液に含まれていない成分があります。

| コード No. | 品名 | 容量 | 希望納入価格(円) | 成分数 | 略号 |
|-----------|---|-----------------|-----------|-----|---------|
| 169-22261 | 農業混合液 PL-1-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) | 1ml \times 5A | 40,000 | 32 | 農・PL-1 |
| 166-22271 | 農業混合液 PL-2-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) | 1ml \times 5A | 40,000 | 31 | 農・PL-2 |
| 163-22281 | 農業混合液 PL-3-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) ※1 | 1ml \times 5A | 40,000 | 29 | 農・PL-3 |
| 160-22291 | 農業混合液 PL-4-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) ※1 | 1ml \times 5A | 45,000 | 37 | 農・PL-4 |
| 163-22301 | 農業混合液 PL-5-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) | 1ml \times 5A | 45,000 | 37 | 農・PL-5 |
| 160-22311 | 農業混合液 PL-6-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) | 1ml \times 5A | 45,000 | 37 | 農・PL-6 |
| 161-22341 | 農業混合液 PL-9-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) | 1ml \times 5A | 30,000 | 18 | 農・PL-9 |
| 168-22351 | 農業混合液 PL-10-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) | 1ml \times 5A | 20,000 | 9 | 農・PL-10 |
| 558-90541 | 農業混合液 PL-11-1 (各 20 μ g/ml アセトン溶液) ※2 | 1ml \times 5A | 50,000 | 15 | 農・PL-11 |

※1 農業混合液 PL-3-1 および農業混合液 PL-4-1 は特定毒物のためご購入の際は、「特定毒物研究者許可証」が必要となります。

※2 農業混合液 PL-11-1 は第1種特定化学物質のため、ご購入の際は、「確約書」が必要となります。

(K.I.)

水質試験用試薬

24 種揮発性有機化合物混合標準液



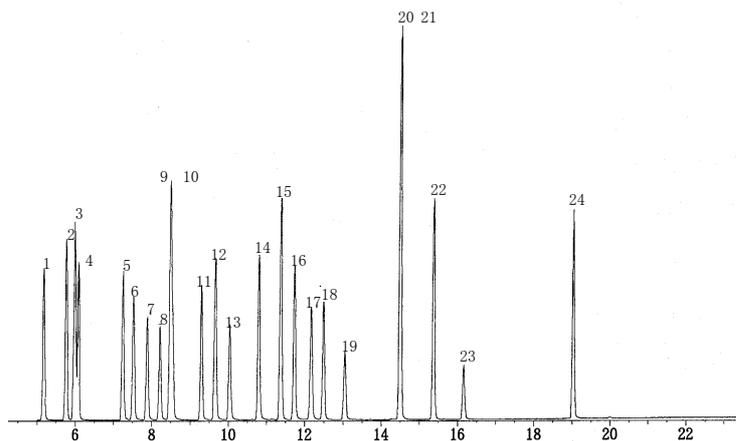
厚生労働省より、平成 15 年度 5 月に新たな水質基準に関する省令が公布され、平成 16 年 4 月より施行されています。

本改正で水質管理目標設定項目に追加された *t*-ブチルメチルエーテルを、従来の 23 種揮発性有機化合物混合標準液に加えた、24 種揮発性有機化合物混合標準液を発売しました。

内 容

- | | | |
|-------------------------------|--------------------------------|------------------------|
| 1. 1,1-ジクロロエチレン | 9. 1,2-ジクロロエタン | 17. 1,1,2-トリクロロエタン |
| 2. ジクロロメタン | 10. ベンゼン | 18. テトラクロロエチレン |
| 3. <i>t</i> -ブチルメチルエーテル | 11. トリクロロエチレン | 19. ジプロモクロロメタン |
| 4. <i>trans</i> -1,2-ジクロロエチレン | 12. 1,2-ジクロロプロパン | 20. <i>m</i> -キシレン |
| 5. <i>cis</i> -1,2-ジクロロエチレン | 13. プロモジクロロメタン | 21. <i>p</i> -キシレン |
| 6. クロロホルム | 14. <i>cis</i> -1,3-ジクロロプロペン | 22. <i>o</i> -キシレン |
| 7. 1,1,1-トリクロロエタン | 15. トルエン | 23. プロモホルム |
| 8. 四塩化炭素 | 16. <i>trans</i> -1,3-ジクロロプロペン | 24. <i>p</i> -ジクロロベンゼン |
- (各 1mg/mlメタノール溶液)

分析例



Column : BP-624 1.8 μ m 0.32mm \times 60m

Injection : 250 $^{\circ}$ C

Interface : 220 $^{\circ}$ C

Column Temp : 50 $^{\circ}$ C(2min) \rightarrow 10 $^{\circ}$ C/min \rightarrow 100 $^{\circ}$ C \rightarrow

5 $^{\circ}$ C/min \rightarrow 130 $^{\circ}$ C \rightarrow 10 $^{\circ}$ C/min \rightarrow 190 $^{\circ}$ C(5min)

Carrier gas : He 1.7ml/min

Split ratio : 1/100

| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|-------------------|-------|------------------|-----------|
| 227-01571 | 24 種揮発性有機化合物混合標準液 | 水質試験用 | 2ml \times 10A | 17,000 |

【関連商品】

| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|---------------------------------|-------------------------------------|------------------|-----------|
| 229-01271 | 23 種揮発性有機化合物混合標準液 | 水質試験用 | 2ml \times 10A | 16,800 |
| 228-01241 | 16 種揮発性有機化合物混合標準液 | 水質試験用 | 2ml \times 10A | 15,700 |
| 551-94551 | (SGE 社 054841) BP-624 キャピラリーカラム | 1.8 μ m, 0.32mm \times 60m | 1 本 | 120,900 |

(K.S.)

■医薬品標準品

今般、医薬品による環境汚染が注目されておりますが、その汚染レベルを調査する場合の内部標準品等にご使用ください。

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格 (円) |
|---------|---------------|---|-------|------------|
| | CLM-7407-1.2 | AMOXICILLIN: 3H ₂ O (PHENYL-13C ₆ , 99%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 照会 |
| | CNLM-3726-1.2 | ACETAMINOPHEN (ACETYL-13C ₂ , 99%; 15N, 98%+) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 123,800 |
| | ULM-7629-1.2 | ACETAMINOPHEN (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 31,300 |
| | FSC-077-100 | CAFFEINE (TRIMETHYL-13C ₃ , 99%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 18,800 |
| | DLM-2806-1.2 | CARBAZEPINE (D10, 98%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE-D ₃ | 1.2ml | 123,800 |
| | ULM-6581-1.2 | CARBAZEPINE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 23,800 |
| | CNLM-7539-1.2 | CIPROFLOXACIN:HCL (2,3-CARBOXYL-13C ₃ , 99%; 15N, 98%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 123,800 |
| | ULM-7710-1.2 | CIPROFLOXACIN (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 31,300 |
| | FSD-127-1000 | CODEINE (UNLEBELED) 1.0 MG/ML IN METHANOL | 1.2ml | 26,000 |
| | FSU-018-1000 | CODEINE (D ₆ , 98%) 1.0 MG/ML IN METHANOL | 1.2ml | 4,500 |
| | FSD-128-1000 | (±)-COTININE (D ₃ , 98%) 1.0 MG/ML IN METHANOL | 1.2ml | 26,000 |
| | FSD-129-1000 | (-)-COTININE (UNLABELED) 1.0 MG/ML IN METHANOL | 1.2ml | 4,500 |
| | CLM-3672-1.2 | ERYTHROMYCIN (N,N-DIMETHYL-13C ₂ , ~90%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 123,800 |
| | FSD-343-100 | FLUOXETINE-D ₆ OXALATE (D ₆ , 98%) 1.0 MG/ML IN METHANOL | 1.2ml | 27,000 |
| | CLM-6943-1.2 | IBUPROFEN (PROPIONIC-13C ₃ , 99%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 123,800 |
| | ULM-7275-1.2 | IBUPROFEN (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 23,800 |
| | CDLM-7665-1.2 | NAPROXEN (METHYL-13C, 99%; METHYL-D ₃ , 98%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 173,800 |
| | ULM-7709-1.2 | NAPROXEN (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 31,300 |
| | CLM-3045-1.2 | SULFAMETHAZINE (PHENYL-13C ₆ , 99%), 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 112,500 |
| | ULM-7220-1.2 | SULFAMETHAZINE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 31,300 |
| | CLM-6944-1.2 | SULFAMETHOXAZOLE (RING-13C ₆ , 99%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 148,800 |
| | ULM-7527-1.2 | SULFAMETHOXAZOLE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 31,300 |
| | DLM-6861-1.2 | WARFARIN (PHENYL-D ₅ , 98%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE-D ₃ | 1.2ml | 93,800 |
| | ULM-7242-1.2 | WARFARIN (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 23,800 |

■PAH 代謝物標準品

多環芳香族炭化水素の代謝産物の標準品です。代謝分解過程で水酸化体となり、その水酸化 PAH が新たな毒性化合物として注目されております。

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格 (円) |
|---------|--------------|---|-------|------------|
| | CLM-7299-1.2 | 3-HYDROXYBENZO[A]PYRENE (13C ₃ , 99%) 50 UG/ML IN TOLUENE | 1.2ml | 173,800 |
| | ULM-7581-1.2 | 3-HYDROXYBENZO[A]PYRENE (UNLABELED) 50 UG/ML IN TOLUENE | 1.2ml | 48,800 |
| | CLM-6890-1.2 | 3-HYDROXY-DIBENZ[A,H]ANTHRACENE (13C ₆ , 99%) 50 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2ml | 173,800 |

■難燃剤標準品

難燃剤化合物の新規標準品です。プラスチック中や環境中の難燃剤分析の標準品としてご使用ください。

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格 (円) |
|---------|--------------|---|-------|------------|
| | ULM-7375-1.2 | 1,2-(BISPENTABROMOPHENYL) ETHANE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2ml | 31,300 |
| | ULM-7595-1.2 | 1,2-BIS (2,4,6-TRIBROMOPHENOXY) ETHANE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2ml | 31,300 |
| | ULM-7607-1.2 | HEXABROMOBENZENE (UNLABELED) 100 UG/ML IN TOLUENE | 1.2ml | 18,800 |
| | ULM-7606-1.2 | TETRACHLOROBISPHENOL A (UNLABELED) 50 UG/ML IN METHANOL | 1.2ml | 23,800 |

■臭素化ジフェニルエーテル（BDE）代謝物標準品

ポリ臭素化ジフェニルエーテル（PBDE）の代謝物及びサロゲートの標準品です。PBDE の代謝物は、甲状腺ホルモン様作用などの危険性について、最近、注目されております。分析又は毒性試験などの標準品としてご使用ください。

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格（円） |
|-----------|-----------------|---|---------|-----------|
| | OHBDE-5206-1.2 | 6-HYDROXY-2,2',4,4'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 148,800 |
| 550-67271 | OHBDE-5206-1.2 | 6-HYDROXY-2,2',4,4'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 4×1.2mℓ | 395,000 |
| | OHBDE-5212-1.2 | 4'-HYDROXY-2,2',4,5'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 118,800 |
| 557-67281 | OHBDE-5212-1.2 | 4'-HYDROXY-2,2',4,5'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 4×1.2mℓ | 521,900 |
| | OHBDE-5214-1.2 | 6'-HYDROXY-2,2',4,5'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 148,800 |
| 552-67471 | OHBDE-5214-1.2 | 6'-HYDROXY-2,2',4,5'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 4×1.2mℓ | 652,000 |
| | OHBDE-5228-1.2 | 6-HYDROXY-2,2',4,4',5-PENTABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 148,800 |
| 554-67291 | OHBDE-5228-1.2 | 6-HYDROXY-2,2',4,4',5-PENTABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 4×1.2mℓ | 521,900 |
| 551-82581 | OHBDE-5190-1,2 | 6-HYDROXY-2,2',4,4'-TETRABDE (13C12, 99%), 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 261,000 |
| 558-82591 | OHBDE-5191-1,2 | 2-HYDROXY-2,4,4',5,6-PENTABDE (13C12, 99%) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 261,000 |
| | MEOBDE-5153-1.2 | 2'-METHOXY-2,3',4,5'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 112,500 |
| | MEOBDE-5205-1.2 | 6-METHOXY-2,2',4,4'-TETRABDE (UNLABELED) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 112,500 |

■水酸化 PCB 標準品

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格（円） |
|---------|---------------|---|-------|-----------|
| | OHCb-5114-1.2 | 4'-OH-3,3',4,5'-TETRACB (13C12, 99%) 50 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 243,800 |

■フタル酸エステル代謝物標準品

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格（円） |
|---------|----------|--|-------|-----------|
| | ULM-7393 | MONO-N-PENTYL PHTHALATE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2mℓ | 56,300 |
| | ULM-7394 | MONOCYCLOHEXYL PHTHALATE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2mℓ | 56,300 |
| | ULM-7395 | MONOISOPROPYL PHTHALATE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2mℓ | 56,300 |

■農薬及び農薬代謝物標準品

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格（円） |
|---------|--------------|--|-------|-----------|
| | CLM-4544-1.2 | PHORATE (DIETHOXY-13C4, 99%) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2mℓ | 87,500 |
| | ULM-7567-1.2 | PHORATE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ACETONITRILE | 1.2mℓ | 23,800 |

■ハロゲン化ベンゼン、フェノール、アニソール標準品

| コード No. | メーカーコード | 品 名 | 容 量 | 希望納入価格（円） |
|---------|--------------|--|-------|-----------|
| | CLM-7488 | 2,3,4-TRIBROMOPHENOL (13C6, 99%) | — | 照会 |
| | DLM-7506 | 2,4,6-TRIBROMOPHENOL (3,5-D2, 98%) | — | 照会 |
| | ULM-7597-1.2 | PENTACHLORONITROBENZENE (UNLABELED) 100 UG/ML IN NONANE | 1.2mℓ | 23,800 |
| | ULM-7598-1.2 | 1,2,4,5-TETRACHLOROBENZENE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ISOCTANE | 1.2mℓ | 18,800 |
| | ULM-7599-1.2 | 1,2,3,5-TETRACHLOROBENZENE (UNLABELED) 100 UG/ML IN ISOCTANE | 1.2mℓ | 18,800 |
| | ULM-7600-1.2 | 2,4,6-TRICHLOROPHENOL (UNLABELED) 100 UG/ML IN METHANOL | 1.2mℓ | 18,800 |
| | ULM-7605-1.2 | PENTACHLOROANISOLE (UNLABELED) 100 UG/ML IN TOLUENE | 1.2mℓ | 18,800 |
| | ULM-7603-1.2 | 2,6-DIBROMOPHENOL (UNLABELED) 100 UG/ML IN TOLUENE | 1.2mℓ | 18,800 |
| | ULM-4210-1.2 | 2,4,6-TRIBROMOPHENOL (UNLABELED) 100 UG/ML IN TOLUENE | 1.2mℓ | 18,800 |

(G.BN)

はじめに

21世紀に入ってはや6年が経過しました。化学薬品も時代と共に危険性有害性の情報がしだいに豊富になり、いままで普通物のように取り扱っていた薬品が突然危険なもの、有害なものとして認識され、取扱い量に制限が加えられたり、取扱い方法が厳しく管理されるようになったり、排出量が規制されるようになってきました。また20世紀末において起こった様々な化学薬品における事件や事故をきっかけとして薬品管理における取り組みが国際的な広がりを見せ、化学兵器禁止法やオゾン対策法、RoHS 規制、PRTR 法、GHS など数え上げれば枚挙に暇がないほど、化学薬品に関する規制が実施され、また今後も新たな規制が追加されていくと思われれます。規制緩和は他の話で、こと化学薬品に関しては規制強化が行われているわけです。

このような状況の中、化学薬品である試薬はどのような対応をせまられているのでしょうか。試薬は産業の種であり、教育から品質管理、試験研究、環境管理、最先端技術など広範囲な分野で使用され、重要な役割を担っております。試薬は少量多品種が特徴であり、化学工業分野から比較すると取り扱い数量が少ない分だけ危険性については低いと思われれますが、有害性については少量でも有害なものがあります。また多品種なためその危険有害性の情報が十分でなく、普通物として認識したために思わぬ事故に遭うことがあります。

また、各法規制も量による適用除外はほとんど無く、試薬はそのまま化学薬品としての規制を受けます。（一部化審法など適用除外はありますが）

また、許可や届け出が不要な規制もありますので、知らないうちに法律違反を犯していたり、危険有害性の規制対策をないがしろにしていたために事故や事件が起こったりすることがあります。そういうことを起こさないためには試薬に対する適正な取り扱いに関する管理と適正な法規制管理が必要と成ってきます。

試薬の購入から廃棄まで

1. 試薬の購入

必要量だけ購入する。：大量に買い込むと単位あたりの金額は少なくなるが、未使用分在庫しなければならなくなるのでかえって危険性が増す。またコンタミによる試薬の汚染が起こる確率が高くなり、廃棄すれば廃棄費用がかさむことになる。そのため必要最小限の量を購入することがベストである。

薬品管理⇒現在の在庫量および在庫日数などを管理しておけば必要最小限の量を割り出すことができる。また各研究室でばらばらに保管している場合もトータル数量がわかるので融通しあうことも可能である。

物質の特定をラベル表示で確認する。：自分が依頼した品目と同じかどうかをラベルで確認する。一字違えば全

く別物であるのでコード No.や英名と共に二重チェックで確認したい。

薬品管理⇒試薬管理システムではバーコード管理されているので更に確実にチェックできる。

購入年月日がわかるようにしておく。：時間が経つにつれて酸化、潮解、風解、着色分解など品質劣化がおこることがある。そのため古い試薬は使わないほうが良いし、使用期限付きの品目は期限切れになったら廃棄する必要がある。

薬品管理⇒薬品管理システムで在庫期間管理をすることにより、常に新鮮な試薬を在庫しておくことができる。また古い試薬は定期的に廃棄するようにする。

容器の破損、漏れ、異物混入などがなければ外観を観察する：入荷時にチェックし良品のみを受け入れること。

2. 保管時の注意点

保管場所の換気および適度な照明：安全点検できるように整理整頓。

鍵のかかる場所で保管する薬品：毒劇物、医薬品、麻薬向精神薬、覚せい剤および覚せい剤原料、毒物相当品、悪用防止品目など鍵のかかる場所で保管し盗難紛失を防ぐ。

在庫量の把握：盗難、紛失が無いかどうかを確認する。盗難、紛失があった場合は直ちに警察、保健所、消防署へ通報する。またその体制を作っておく。

危険物は指定数量以上の保管は届け出が必要であるためTOTAL 保管数量の把握をしていなければならない。

薬品管理⇒在庫量の把握は薬品管理の眼目である。盗難紛失の有無を常時チェックするツールとして利用したい。また注文数量の割り出し等にも利用でき適正発注、適正在庫が可能になる。また各種届け出（PRTR、化審法、急な行政からの取扱量調査など）には電子化対応により、スピーディーに集計が可能となる。

保管条件：品質を劣化させないためにラベルやカタログ、取扱説明書等に記載されている保管条件を必ず守る。

薬品管理⇒薬品管理システムで保管条件が入力されているので適正な場所に保管されているか確認できる。また入荷時に適正な保管場所が決定できる。

その他：地震などで薬品棚から落下破損した場合に異種薬品の混合による発火発熱を防止するため、混触危険物同士を近くの棚に置かない。

混触危険物：強酸化剤＋有機物、強酸化剤＋強還元剤、強酸＋強アルカリ、シアン化合物＋酸、次亜塩素酸塩＋酸類等

3. 取り扱い上の注意点

有害性の把握、危険性の予知：MSDS や商品カタログが

らの情報や事故例、ヒヤリハットなどを利用して KYT 運動により予知訓練を行う。

構造式から危険性の予知。ニトロ基やニトロソ基、ヒドラジン類、過酸化物、ジアゾニウム塩、金属アセチリドなどの官能基が多ければ危険性は高い。

薬品管理⇒薬品管理システムからその化学薬品に対応した MSDS が表示できるので安全な取扱の予知、教育などに有効活用ができる。

次回へつづく
(EG.Y.)

生体試料破碎用器具 バイオマッシャー[®]



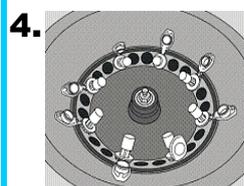
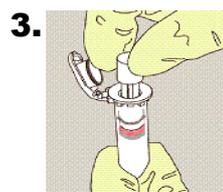
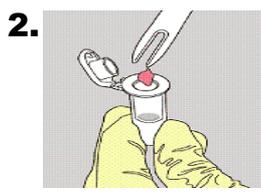
バイオマッシャーは、使い捨てタイプのホモジナイザーです。フィルターチューブと破碎棒から構成されています。検体をフィルターチューブに入れ、破碎棒を挿入し、遠心分離により検体を破碎します。使い捨てのためコンタミが防げ、短時間で大量に検体を処理できます。DNA、RNA、タンパク質抽出時の動物組織や植物の破碎、アクリルアミドゲルからのタンパク質の抽出等に御利用下さい。

【製品内容】

1. フィルターチューブ
2. 回収用チューブ (1.5ml、2.0ml用)
3. 破碎棒 (Oリング付き、Oリング無し)

*Oリングはゴム製で、フィルターチューブと密接しており、破碎時の試料の逆流を防ぐ構造になっています。

【操作方法】



1. 回収用チューブにフィルターチューブをセットします。
 2. フィルターチューブに試料を挿入します。
 3. 破碎棒を上から挿入します。
 4. 遠心分離機にセットし 15,000×g*、10~30 秒間遠心分離します。
 5. 破碎された試料が回収チューブに回収されます。
- *15,000g を越えると破損する場合があります。

【バイオマッシャーQ&A】

- Q** チューブは滅菌済ですか？
A 滅菌されていません。必要に応じてオートクレーブをしてご使用ください。
- Q** 微生物は破碎されますか？
A メンブレンのポアサイズは 100μm で、微生物は素通りします。
- Q** どれ位の量の試料が処理できますか？
A 各種臓器では約 300mg です。一度遠心操作を行った後に臓器を追加して破碎量を増やす事は可能です。

| コード No. | メーカーコード | 品名 | 容量 | 価格(円) |
|-----------|---------------|---------------------------------|---------------|--------|
| 307-30751 | NIP-50-1.5 | バイオマッシャー 1.5ml マイクロチューブ | 50 セット | 7,000 |
| 304-30761 | NIP-50-1.5-O | バイオマッシャー 1.5ml マイクロチューブ (Oリング付) | 50 セット | 8,000 |
| 303-30753 | NIP-200-1.5 | バイオマッシャー 1.5ml マイクロチューブ | 200 セット(50*4) | 24,000 |
| 300-30763 | NIP-200-1.5-O | バイオマッシャー 1.5ml マイクロチューブ (Oリング付) | 200 セット(50*4) | 26,000 |
| 301-30771 | NIP-50-2.0 | バイオマッシャー 2.0ml マイクロチューブ | 50 セット | 7,000 |
| 308-30781 | NIP-50-2.0-O | バイオマッシャー 2.0ml マイクロチューブ (Oリング付) | 50 セット | 8,000 |
| 307-30773 | NIP-200-2.0 | バイオマッシャー 2.0ml マイクロチューブ | 200 セット(50*4) | 24,000 |
| 304-30783 | NIP-200-2.0-O | バイオマッシャー 2.0ml マイクロチューブ (Oリング付) | 200 セット(50*4) | 26,000 |

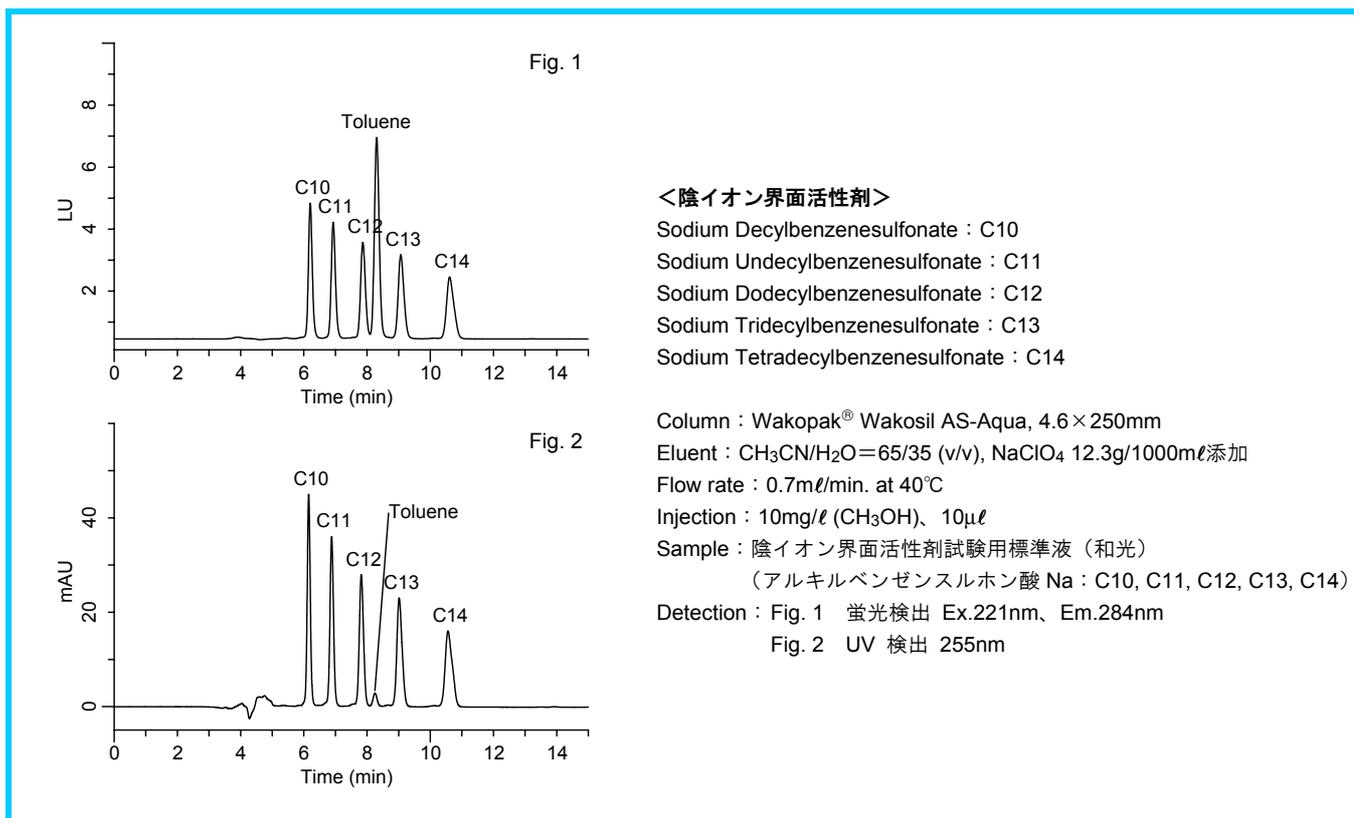
(G.T.)

陰イオン界面活性剤分析用 HPLC カラム「Wakopak® Wakosil AS-Aqua」について、既にアナリティカルサークル No.36(2005年3月発行)でカラムと共に基本データをご紹介しており、また、前処理方法についても、弊社の固相抽出カラム「Presep®-C C18 (ODS)」と「Presep®-Agri」による比較データを提示しておりますが、今回は、抽出にトルエンを使用した前処理方法において「Wakopak® Wakosil AS-Aqua」によるトルエンと陰イオン界面活性剤との分離データをご紹介いたします。

「Wakopak® Wakosil AS-Aqua」は、前処理抽出方法にトルエンを用いた場合でも、陰イオン界面活性剤がトルエンピークに妨害を受けることなく高感度に分析することが可能です。

陰イオン界面活性剤試験用標準液とトルエンの分析

試料：10 μ g/ml (CH₃OH) の混合標準液 1ml にトルエン 1 μ l を添加し、10 μ l 注入



| コード No. | 品名 | カラムサイズ | 希望納入価格 (円) |
|-----------|---------------------------|---------------------------|------------|
| 001-00030 | Wakopak® Wakosil AS- Aqua | 4.6 ϕ \times 250mm | 60,000 |

【関連商品】

| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格 (円) |
|-----------|--|--------------|-----------------|------------|
| 013-20131 | Anionic Surfactants Mixture Standard Solution (each 1mg/ml Methanol Solution) | 水質試験用 | 1ml \times 5A | 25,000 |
| 195-13111 | Sodium Decylbenzenesulfonate Standard Solution (1mg/ml Methanol Solution) | 水質試験用 | 1ml \times 5A | 7,500 |
| 192-13121 | Sodium Undecylbenzenesulfonate Standard Solution (1mg/ml Methanol Solution) | 水質試験用 | 1ml \times 5A | 7,500 |
| 199-13131 | Sodium Dodecylbenzenesulfonate Standard Solution (1mg/ml Methanol Solution) | 水質試験用 | 1ml \times 5A | 7,500 |
| 196-13141 | Sodium Tridecylbenzenesulfonate Standard Solution (1mg/ml Methanol Solution) | 水質試験用 | 1ml \times 5A | 7,500 |
| 193-13151 | Sodium Tetradecylbenzenesulfonate Standard Solution (1mg/ml Methanol Solution) | 水質試験用 | 1ml \times 5A | 7,500 |
| 238-02261 | Wakosil® AS-Aqua Eluent | 高速液体クロマトグラフ用 | 1 ℓ | 6,500 |
| 292-32251 | Presep®-C C18 (ODS) | 試料前処理用 | 10 個 \times 5 | 25,000 |
| 291-26851 | Presep®-Agri | 残留農薬試験用 | 50 本 | 39,000 |

(G.TK.)

医薬関連品製造施設などのコンタミネーションのリスク管理に敏感な、管理施設での使用に最適なパッケージングです。GMP、FDA、USDAなどの規格に準拠した施設でのニーズに応じてコーニングが開発し、業界に先駆けてカタログ掲載品として販売を開始いたしました。通常のストリペット包装に2つの包装を追加したものです。現在1ml、2ml、5ml、10ml、25ml、50ml、100mlのペーパープラスチック包装のストリペットがトリプルパックで入手可能です。最低発注量（ミニマムオーダー）の制約がございませんので、1ケースから購入可能です。このほかの製品につきましても製造施設用特別パッケージのご相談をお受けしております。

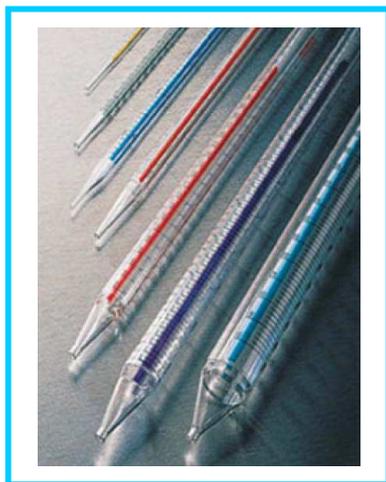


ダンボール箱の持ち込みを規制されている施設などへピペットを持ち込むのに最適な包装です。



ヒートシールをしたエアタイトなプラスチックパック

ひと皮剥くと“滅菌済み”の状態なので、クリーンベンチに持ち込む際に、アルコールスプレーで滅菌する必要がありません。



| コード No. | メーカーコード | 品名 | 容量 | 希望納入価格 (円) |
|-----------|---------|---------------------|---------|------------|
| 643-09311 | 7041 | ストリペット 1mlトリプルパック | 1,000 本 | 55,000 |
| 640-09321 | 7042 | ストリペット 2mlトリプルパック | 1,000 本 | 60,000 |
| 647-09331 | 7045 | ストリペット 5mlトリプルパック | 200 本 | 18,200 |
| 646-09281 | 7015 | ストリペット 10mlトリプルパック | 200 本 | 19,200 |
| 643-09291 | 7016 | ストリペット 25mlトリプルパック | 200 本 | 25,400 |
| 646-09301 | 7017 | ストリペット 50mlトリプルパック | 100 本 | 33,300 |
| 649-09271 | 7000 | ストリペット 100mlトリプルパック | 100 本 | 115,200 |

(G.K.)

HPLC 用試薬カタログ発行！



本カタログは、(1) 専用分析システム、(2) 製品紹介 (前処理用製品、HPLC 用製品)、(3) 技術情報 (Appendix) の3部構成になっており、大変見やすくなっております。分析対象物ごとの最適な専用分析システムの紹介や HPLC 分析に有用な技術情報を満載しており、皆様のお役に立つものと存じます。本カタログのご請求をお待ちしております。

カタログ構成

- | | |
|--------------------|-------------------------------|
| 1. 専用分析システム | 環境、生体試料、食品など |
| 2. 前処理用製品 | 固相抽出カラム、前処理フィルター |
| 3. HPLC 用製品 カラム・試薬 | ワコーパック、溶媒、イオンペア試薬 |
| 4. HPLC 用製品 他社カラム | GraceVydac、ダイセル化学、昭和電工、日立化成工業 |
| 5. Appendix | クロマトに関する技術情報 |
| 6. Index | |

カタログ請求先

Analytical Circle 係
 FAX : 06-6201-5964 E-mail : analyti@wako-chem.co.jp



(G.TK.)

ミネラルオイル

「ミネラルオイル」とは何でしょうか？Siyaku.Com で検索すれば出てくるのですが、弊社カタログには記載がありません。そこで、今回は「ミネラルオイル」についてご紹介いたします。

ミネラル [mineral] の意味は？!

辞書で調べると二つの意味があります。(1) 鉱物。無機物。(2) 栄養素の一つ。

ミネラルオイル（鉱物油）[mineral oil] は、(1) の鉱物に該当します。要するに石油系のオイルのことです。ミネラルウォーター [mineral water] は、いまさら言う必要も無いかとは思いますが、無機塩類を比較的多量に含む清浄な天然湧水、又は浄化した水に無機塩類を微量加えたもので、(1) の無機物、(2) の栄養素の一に該当します。

ミネラルオイル（別名：流動パラフィン）の原料は？!

ミネラルオイルは当社のカタログには記載されていません。理由は、米国薬局法（USP）では「ミネラルオイル」とありますが、JIS、試薬 JIS、日本薬局方、食品添加物公定書等では「流動パラフィン」と定義されているためです。

ということで「流動パラフィン」の製造方法について、図1に概要を示します。原料は石油です。原油を常圧蒸留してガソリン、灯油、軽油、重油などに分留した後、残留分（重油）を更に減圧蒸留してパラフィン油分（潤滑油原料）を取り、各種の精製法により精製が行われます。精製法には、(1) 溶剤精製法、(2) 水素精製法、(3) 硫酸処理法、(4) 白土精製法がありますが、これらを組み合わせて精製されます。

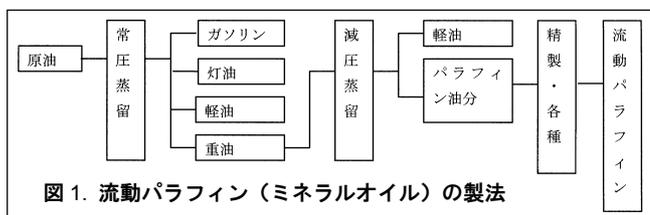


図1. 流動パラフィン（ミネラルオイル）の製法

主成分と不純物は？!

原油から得た液状の炭素数 15~35 程度の広い範囲を持つ炭化水素の混合物です。パラフィン系、ナフテン系及び芳香族炭化水素が存在します。高度に精製されますので原油からの不純物は少なく、JIS・薬局方・食品添加物公定書等不

純物の試験項目が定められています。例えば JIS K9003 では、酸、塩基、塩化物、硫酸塩、固形パラフィン、硫酸着色物質、過マンガン酸還元物質の試験項目があります。また、Nujol 法による赤外吸収スペクトル（IR）分析の際使用する流動パラフィンには、多核芳香族炭化水素、硫酸着色物質の試験をしています。



IR 用流動パラフィン

ミネラルオイルとミネラルオイルホワイトは何が違うのか？!

米国における FDA 規格は、食品に直接添加することができる white mineral oil、食品に添加はできないが接触を許される technical white mineral oil、mineral oil があります。

ミネラルオイルの LIGHT と HEAVY の違いは？!

密度（Density: ρ 、ローと読みます）の差によって規定されます。LIGHT は 0.84g/ml、HEAVY は 0.88g/ml です。

流動パラフィンの用途は？!

医薬品や医薬部外品の製剤原料（軟膏や貼付剤の基材）。化粧品・食品・繊維・化学品・合成樹脂等、各種産業に幅広く使用されています。

弊社では研究用試薬として試薬特級、IR 用、和光特級（CAS No. 8042-47-5）のほかにも、輸入品になりますが分子生物学用の試薬を用意しています。PCR・少量培養（受精卵の培養など）では、重層して水分の蒸発を最小限に抑え、浸透圧・pH の変化を防ぐ目的で使用されます。

【製品リスト・価格表】

| 規格（メーカー名） （メーカーコード No.、用途） | 流動パラフィン | | | | | MINERAL OIL LIGHT WHITE | | MINERAL OIL (Heavy white) |
|----------------------------------|-------------------|-----------------|-------------|-------------|-------------|--------------------------|---------------------------|------------------------------|
| | 試薬特級 JIS K9003 | IR 用 (赤外分析用) | 和光特級 Ⓢ | 和光特級 Ⓢ | 和光特級 Ⓢ | MPBio 151694 赤外分析用 | MPBio 194836 分子生物学用 | MPBio 150138 |
| CAS No. | 8012-95-1 | 8012-95-1 | 8042-47-5 | 8042-47-5 | 8042-47-5 | 8042-47-5 | 8042-47-5 | 8042-47-5 |
| 密度 (20°C) g/ml | 0.86~0.89 | 0.825~0.850 | 0.795~0.830 | 0.815~0.840 | 0.825~0.850 | 0.84 | 0.84 | 0.88 |
| 容量 | 500ml | 10ml×10 | 500ml | 500ml | 500ml | 1ℓ | 5ml×5 | 100ml |
| コード No. | 128-04375 | 129-04741 | 129-04785 | 122-04775 | 125-04765 | 590-07531 | 597-07541 | 593-07521 |
| 希望納入価格 (円) | 1,260 | 5,000 | 3,000 | 1,500 | 1,500 | 5,100 | 4,700 | 4,400 |

(G.N.)



下のヒントにもとづいて、マス目をカタカナでうめて下さい。A~Fをつなぐと一つの言葉になります。

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ① | | ② | ③ | | ④ | | ⑤ |
| | | | A | | | | |
| | | ⑥ | | | ⑦ | ⑧ | |
| ⑨ | ⑩ | | | | | ⑪ | |
| ⑫ | | | F | | | | |
| | ⑭ | | | | ⑬ | | |
| ⑮ | | | | | ⑯ | | E |
| | | | | | ⑰ | | |
| | | ⑱ | | ⑲ | | | ⑳ |
| ㉑ | | | | | ㉒ | | |
| | | | C | | | B | |

【応募方法】

FAX または E-mail に次の事項を明記してご応募下さい。

①問題の答え

②本誌についてのご意見、ご要望

③氏名・年齢・勤務先

[所属、役職、郵便番号、住所、電話番号、FAX 番号]

④ご専門分野

正解者の中から抽選で 10 名様に 3,000 円相当の図書券をさしあげます。

【締め切り】 平成 18 年 8 月 31 日

【送り先】 〒540-8605 大阪市中央区道修町 3-1-2
和光純薬工業(株) 学術部 クロスワードパズル係

FAX : 06-6203-1999

E-mail : analyti@wako-chem.co.jp

タテのヒント

- ①塩酸と硝酸の混合溶液の通称。その強力な酸化作用により、金や白金までも溶かしてしまします。
- ②無色で刺激臭のある猛毒の気体。水やエタノールに可溶。化学式は、 C_2N_2 。
- ③7%以上のニトログリセリンを含有する爆破薬。1866年に、スウェーデンで発明されました。えっ、誰がって？ そりゃ～あなたあ～っ!! べ(^o^;))
- ④話し相手となり、その人の機嫌をとったり退屈を慰めたりすること。「必ず弟儲け給へ、〇〇にせさせん/ 盛衰記四三]
- ⑤筆記・印刷用の液体。筆記用の青黒色のものは、没食子酸、硫化鉄、タンニン酸などの混合物です。
- ⑧甲状腺から分泌されるホルモン。よう素を含む一種のアミノ酸で、精神や身体の成長促進作用があります。
- ⑩原子番号 81 番の元素。元素記号は Tl。発見時の原子スペクトルの緑色輝線にちなみ、ギリシャ語で“緑の小枝”を意味する語にちなんで命名されました。
- ⑬ *Croton tiglium L.* の種子から得られる黄褐色、透明の油。粘性が高く、軟膏として神経痛や凍傷などに外用されています。
- ⑰〇〇度は、溶液 1ℓ中に含まれる当量数で表示されます。
- ⑱枝葉を取り去った竹の長い棒。「〇〇竹屋」は決してツブレないとか…。なんでえ～っ?。
- ⑳動物の頭部に突き出ている角質または骨質の突起。鹿の若い“モノ”は、漢方薬としても珍重されています。

ヨコのヒント

- ①太陽光により、炭化水素や窒素酸化物などから生成する酸化性物質の総称。光化学スモッグの主な原因と考えられています。
- ⑥インドシナ原産の、タデ科の一年草。茎や葉から染料を得るため、古くから全国各地で栽培されていた。主成分は、インジゴ。
- ⑦白色無定形の粉末または繊維状のムコ多糖。甲殻類の主要な構造多糖で、殻を塩酸処理して得られます。“健康食品”としてもおススメ(?)。
- ⑨水素化スズの別称。無色の気体。塩化スズ(II)に水素化リチウムアルミニウムを作用させて得ることができます。熱的に不安定で、室温でも緩やかに分解します。
- ⑪当座の褒美としてあたえられるもの。多くは衣服で、肩に掛けて与えられた。「力を尽くしたること少なからず。しかるに〇〇いまだ給はらず/ 竹取]
- ⑫彼岸や土用などの最初の日。今年の彼岸の〇〇は、3月18日と9月20日ですね～。
- ⑬みつぎ。年貢。「古よい間の現(おつつ)に万(よろず)〇〇奉るつかさと作りたるその生業(なりわい)/ 万四二二]
- ⑭山地帯の低木林に生息するスズメ科の小鳥。鳴く声がキレイで、“春告げ鳥”、“花見鳥”ともいわれています。美声の女性の形容にも用いられます。
- ⑮置換基や廃止の相対的な位置関係を表す接頭語の一つ。“こちら側”を意味するラテン語に由来しています。
- ⑯旧約聖書中の人物。ノアの息子で、セムの兄弟。ミツライム(エジプト)・クシ(エチオピア)・カナンなどの民族の祖先とされています。
- ⑰トリノオリンピックで、フィギュアスケートの荒川選手の獲得したメダルの色。日本選手団が獲得した唯一のメダルでしたね～。
- ⑱人目につくような派手な行動をしたり、外見を飾ること。青葉城主で、独眼竜といえは…?
- ㉑統合、同盟、連合などの意。特に、労働組合を指すことが多いです。
- ㉒“=NH”または“-NH”基の名称。

(G.M.)

動く分子を操作する

～次世代型分子モデリング時代の到来～

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/次世代ナノパターンニング研究チーム 藤川 茂紀

1 はじめに

分子を扱う実験化学者にとって、分子構造は研究の生命線である。このため3次元分子構造を直感的に理解しようとする工夫は古くから行われてきた。10年ほど前からデスクトップコンピューターでも実用的な計算ができ、実験研究者にとっても使い勝手のいい分子モデリングソフトが数多く登場したため、より直感的に理解できるようになった。それとともに、分子の電子密度や振動解析、ダイナミクスなどの分子シミュレーションも実験化学者にとって身近になってきた。その反面、シミュレーション技術の高度専門化も進み、実験化学者が片手間にできないレベルのものも多くなってきている。このような状況で、実験化学者にとって身近な役に立つ分子モデリングとは何か？ 我々のアプローチを紹介したい。

2 “動く”分子模型との出会い

分子化学者の基本は分子構造で考えることである。分子構造をじっと眺め、頭で想像しながら自分の目的にあう分子構造を設計する。大学の先生の中には、今でも机の上にプラスチックの分子模型が置いてあり、それをじっと眺めているいる想像されている方も多いはずである。分子構造を見つめ、そこから何を感じ取れるかが化学者としてのセンスとも言えよう。分子模型がコンピュータースクリーンの中に移っても同じことである。より良いモデリングを行うため、最近では実験化学者でも単純な構造最適化計算や簡単な電子軌道計算くらいは行うようになってきたが、それでも大抵はここで終わる。計算化学ならびにコンピューターパワーの発達した現段階においても、それでよいのであろうか？

筆者は、2000年に理化学研究所の国武豊喜ディレクターが率いるグループに博士研究員として参画した。実験化学者として、である。その当時、実験に行き詰っていたということもあってか、分子シミュレーションに手を出し始めたのもその頃である。そのとき、学生時代からお世話になっていた上江洲一也氏（現 北九州市立大学国際環境工学部助教授）から、いろいろな分子シミュレーション技術を教えていただいた。上江洲氏は、実験化学者でありつつも早くから分子シミュレーションを研究に取り込まれていた。私にとって上江洲氏は、実験化学と計算化学のバランスが取れた格好の相談相手であった。2002年ごろ、上江洲氏が「バーチャルリアリティ技術を使った分子モデリング」について調査研究を開始され、新物好きの私もその話にすぐに飛びついた。そのようなとき、上江洲氏とともに理化学研究所のスーパーコンピュータールームを見学する機会があった。私もスーパーコンピューターの外観と性能に圧倒され、説明者がいるのを忘れて「うおー」と感動したのを覚えている。それを見て気をよくした説明の方が、戎崎俊一主任研究員が主宰する研究室に我々を連れて行き、そこであるデモプログラムを見せていた

だった。それを見たとき、上江洲氏と私はそのコンセプトに驚愕した。それは「分子構造が立体表示され、かつ分子振動している分子を3次元ジョイスティックを使って、自由に近づけたり離したりし、さらに分子にかかる力をそのジョイスティックを通じて感じるができる」プログラムだったのである。あまりにも大きな衝撃を受け、二人で大笑いしながらも、「これは!!!」と思った瞬間であった。そのときに説明してくれた研究員が、現在パートナーとして我々のグループで研究している古石貴裕氏である。早速私は、上司である国武ディレクターにも見せたところ、国武ディレクターも「これは面白い（意味がある）!!」と言われ、忙しいにも関わらず、しばらくそれを楽しまれていたことをよく覚えている。

このとき我々が感じたことは、ただ「おもちゃ的要素として面白い」と思ったのではなく、「動く分子を使ってその力を感じながら動く分子を使ったモデリングできる」と言う点である。分子模型を扱っていたときは、止まった構造をじっと見ながら頭の中で「こことここが相互作用して……」と想像していた部分が、目の前でリアルに起こっている。まさに「新しい分子モデリングの時代が到来した」と、実感した瞬間でもあった。

3 分子動力学シミュレーション

では、どうやってそのようなモデリングを実現していたのだろう。基本は「分子動力学（MD）計算」である。MD計算は、二つ原子の間に働く力を非常に短い時間刻みで計算し、その力に応じて原子位置を少し移動してはまた計算、ということをはたすら繰り返す。これを計算したい系内のすべての原子について行うことで、各原子や分子の動きをシミュレートすることができ、さらにある状態での各分子・原子に作用している力を知ることができる。このためMD計算は、たんぱく質などのフォールディング、液体・固体・気体状態の分子原子の振る舞い、分子集合体のシミュレーション、非共有分子間相互作用のシミュレーション（分子認識など）などの系に適用される。先のデモプログラムは、このMD計算実行中に、ある特定の分子に任意の力を加えて振動を与えつつMD計算を実行していたのである。これによって、「動いている分子」を使って、「あーでもない、こーでもない」とこれまでどおりの分子モデリングができるわけである。

ちなみに、分子動力学シミュレーションは分子力学（Molecular Mechanics）法などのように分子構造の最安定構造を求めるものではない。強いて言えば系の熱力学的平衡状態をシミュレートしようとするものである。従ってMD計算中は絶対温度0度にしない限り、設定温度に従って分子振動し、分子自身も動きまわる。分子モデリングにおいては、確かに分子の最安定構造も必要だが、現実の系では、極低温や固体結晶中でもない限り、分子は動き回っているため、最安定構造だけを考えても仕方の無い場合のほうがむしろ多

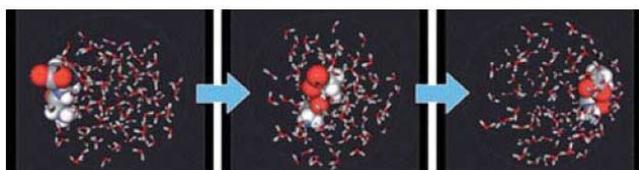
い。従来の静的な構造から、動的な構造変化を考える。つまり分子のダイナミクスを考慮しながら分子設計することも、実験化学者には必要になってくるのではなかろうか？

4 eMD² (Empowered Molecular Design/Dynamics)

このような背景のもと、2003 年から理化学研究所の産業界連携制度助成金を得て、eMD² (エムディスクウェア) の開発がスタートした。正式名称からも推察できるとおり、Molecular Design を MD で empower するというものであり、根本のコンセプトは「リアルに動く分子模型」である。実験化学者がツールとして使いやすいよう、機能もできるだけシンプルで、直感的に操作できるように工夫している。以下に機能を紹介したい。

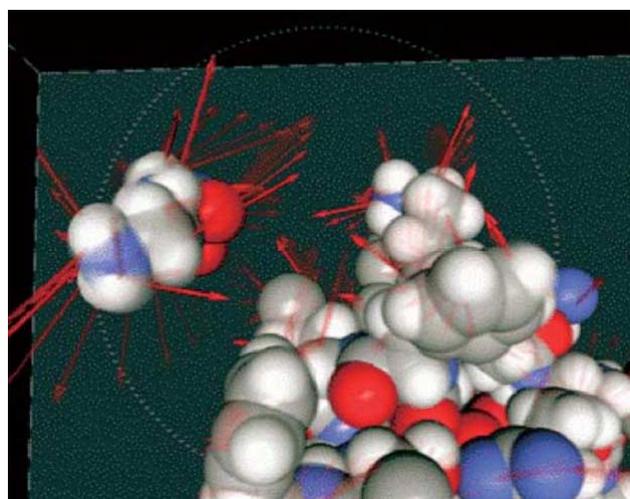
4-1) リアルに動く分子模型

まずは動かしたい分子構造ファイルを読み込む。対応している分子構造ファイル形式は、MDL mol ファイルと PDB ファイルである。これをメニューから読み込み画面に表示する。アミノ酸だけからなるたんぱく質（あるいはオリゴペプチド）は、そのまま実行ボタンを押せば MD シミュレーションが開始される。操作したい分子あるいはその一部の原子を選択し、マウス操作によって分子を動かす。正確に言えば、「選択されている分子あるいは原子に対し、マウス操作量に対応した力を加える」ことになる。原子や分子から見れば、マウスを動かした方向に押されることとなる。これによって注目する分子を好きな方向に動かし、その後の振る舞いが一目瞭然に把握できる。分子のダイナミクスをシミュレートしているため、当初予想しなかった挙動も起こりえる。我々が学会等でデモを行っているときも、たんぱく質にある有機低分子を“ぶつける”と、衝突場所によって、いわゆる“Induced fit”のような動きや、たんぱく質表面を低分子がごろごろと転がる場合も見られた。このような動きは、止まっている分子構造をじっと眺めているだけでは、想像することは難しい。



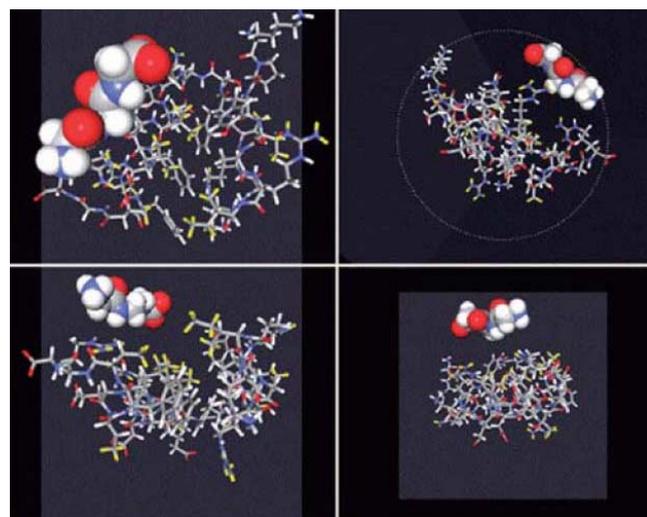
4-2) 分子間相互作用を実感する

先ほども述べたとおり、MD シミュレーションでは分子(原子)間の相互作用を計算している。我々のモデリングソフトでは各原子に働く力が視覚的に表示されるため、相互作用の程度を「実感」しやすくなっている。当然それらの力は刻々と変化するが、これが可視化されることで、これまでと違ったインスピレーションが触発され、分子デザインの新しい視点が得られることが期待される。ある分子を他の分子に近づけたときに働く引力・斥力、そしてそれらの大きさを直感的に把握できる機能によって、ただ動く分子を操作するというだけでなく、分子操作に伴う分子挙動を体感しながら定性的に解釈できる。



4-3) ユーザー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 次元構造であり、それらが 3 次元空間の中に配置されている。一般的な分子ソフトでは、ある一方向から見た状態が表示されるが、空間把握に長けた人で無い限り、分子位置や分子操作に伴う空間的な動きの度合いを直感的に把握することは難しい。これに対しこのソフトでは、4 面ビュー（上面・正面・側面・指定面）機能を実装し、空間的な配置状況が正確かつ容易に把握できるようになっている。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る。



4-4) 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

昨今の PC 性能の劇的な向上によって、数百から千原子程度までは、通常のデスクトップでもシミュレーションが可能となってきた。しかしながら、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、すぐに数万原子のシミュレーションとなり、強力な計算能力が必要になる。eMD² 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-3 と連携できるように設計されている。MDGRAPE-3 をデスクトップ PC に搭載することで、計算スピードが数 10 倍から 100 倍程度向上する。これによって、より現実に近いサイズ・状態での MD シミュレーションが可能となり、リアルな分子モデリングとなる。これと同等の性能を有する PC クラスタを構築した場合と比較すると、コストとスペース、そしてメンテナンス性のどれをとっても、eMD² と MDGRAPE-3 を組み合わせ

せた本分子モデリングシステムが圧倒的に優位である。eMD²に高い計算スケーラビリティを持たせることで、単なる分子モデリングツールというだけでなく、圧倒的なパワーも利用可能な、強力な分子動力学計算システムにもなるのである。

5 終わりに

実験化学者が行う実験条件下では、分子は動いているほうが圧倒的に多い。このため、動的な挙動を取扱う分子動力学シミュレーションは格好の計算技法である。この方法に「リアルタイム分子操作」という機能を加えることで、「動く分子を使った新しい分子モデリング」が可能となった。今までプラスチックの分子模型などで行ってきた「静止した」分子ではなく、「動く分子」を使い、「力を感じながら」試行錯誤という次世代の分子モデリングというフェーズになってきたと考えられる。このリアルな分子模型が研究者のよきツールとしてインスピレーションを触発し、新たな分子化学の視点が開けることを期待したい。

なおこの分子モデリングソフトは、インフォグラムの田上

氏・吉仲氏・麻生氏、そして理化学研究所の古石氏、戎崎氏、北九州市立大学の上江洲氏、そして私の上司である国武ディレクターの協力によって昨年4月にバージョン1がリリースされた。私はこの開発のプロジェクトリーダーとして参画させていただいた。

ソフトのデモ版は、以下の URL から入手可能である。チュートリアルを参考にさせていただき、一度ご体感いただければと願う。

<http://www.emd2.jp>

今後更なる機能アップを目指してソフトウェアのバージョンアップをし続ける予定である。皆様からの忌憚りの無いご意見をいただければ幸いである。

最後に、上江洲氏の興味をかきたてる大胆なアイデア、そのプロトタイプを具現化していた古石氏の高いプログラミング能力と計算科学者としての実力、奥歯をかみ締め、じっと怒りをこらえながら我々の開発要望に忍耐強く応えてくれた、田上氏、吉仲氏、そしてこれらの開発プロジェクト推進を強力にサポートしてくれた麻生氏、戎崎氏、国武氏にこの場をお借りして深く感謝いたします。

“和光 & 富士通” 計算化学セミナー開催記

分子モデリングシステムのご紹介

FUJITSU  Wako

～計算化学の応用事例について～

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となっています。

当社では、本研究のためのツールとして、ダイナミック分子モデリングシステム「eMD²-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8日（水）、富士通様のご協力を得まして、同社汐留シティセンターにて、分子モデリングソフト2製品のご紹介セミナーを開催いたしました。

1. 「eMD² (エムディースクウェア)」 [(株)インフォグラム]
2. 「BioMedCACHe ActiveSite」 [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～」
北九州市立大学 国際環境工学部 上江洲 一也 氏
- ・ 質疑応答
- ・ 体験コーナー「eMD²」をさわってみよう!!
(コーヒーブレイク)
- ・ 「BioMedCACHe ActiveSite によるドッキングシミュレーションのご紹介」
富士通株 バイオ IT 事業開発本部 高巢 康秀 氏



- ・ 質疑応答
- ・ お楽しみ抽選会「ウワサの“iPOD shuffle”」など豪華グッズをゲットしよう!!
- ・ 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

ー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ー

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す。

- 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 eMD2（エムディスクウェア）のご紹介とデモスライド集は、

こちら  http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/info/syn/article/eMD2_kaisai.htm

【講師紹介】

北九州市立大学 国際環境工学部 環境化学プロセス工学科 助教授 上江洲 一也 氏

平成 4 年 東京大学大学院 工学系研究科 博士課程単位取得満期退学。同年 7 月 工学博士号（東京大学）を取得。
東燃化学㈱、九州大学工学部助手、Heidelberg 大学留学などを経て、平成 13 年 4 月より現職。

■ BioMedCACHe ActiveSite によるドッキングシミュレーション

ドッキングシミュレーションは、新薬の候補を発見するために創薬研究分野で行われるコンピュータを使った解析手法であり殆どの製薬企業において活用されています。

病気は、ヒトの生理機能異常や病原菌の介在が原因とされています。これには、何らかのタンパク質が関係しており、機能異常を正常に戻すタンパク質とピッタリはまる化合物を探す手段として、ドッキングシミュレーションが一般的におこなわれています。そのためには、原子レベルで見たタンパク質の 3 次元構造を表示し、薬が入る可能性のある隙間を探し、その結合状態を評価するシステムが必要です。

このようなシステムは、数年前まで高価で使いにくい Unix システムが一般的でした。しかしながら、近年のパソコンの性能向上とソフトウェア開発技術の進歩により Windows ベースの使い易いツールが実用的になってきました。そこで、富士通は、巨大分子（タンパク質など）の計算が Windows パソコン上で可能な BioMedCACHe シリーズを開発しました。

実際のドッキングシミュレーションにおいては、以下のような前処理が簡単にできる機能や手順が必要です。



- ・不完全な蛋白質情報の補正や結合情報の追加
- ・バインディング領域の設定とグリッド間隔の指定
- ・ドッキング評価関数の設定

今回は、BioMedCACHe ActiveSite が持つタンパク質を扱う為の 3 つのウィンドウを利用しながら、実際のドッキングシミュレーション手順をご紹介します。

スライド集は、

こちら  http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/info/syn/article/eMD2_kaisai.htm

【講師紹介】

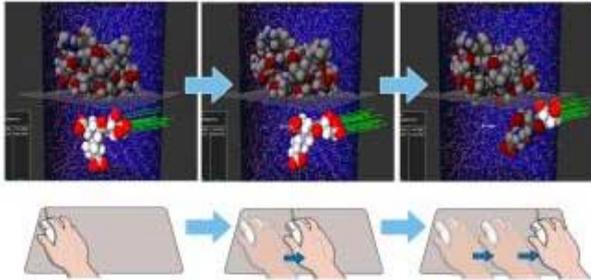
富士通㈱ バイオ IT 事業開発本部 バイオソフトウェアプロジェクト 高巢 康秀 氏

eMD² (エムディースクエア) は、分子動力学シミュレーション (MD) 計算と分子操作をリアルタイムに連携させた新しいタイプの分子モデリングソフトです。ユーザーフレンドリーなインターフェイスを通じ、通常のデスクトップコンピュータ上で「分子間相互作用を実感しながら、“動く分子を使った分子モデリング”」が可能となりました。

「よりリアルに、よりパワフルに、そして直感的に。」

これが我々の目指す、分子モデリングソフトの新しいカタチです。

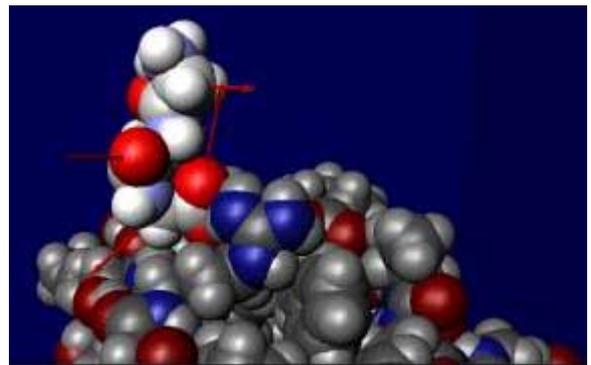
動く分子をマニピュレーション



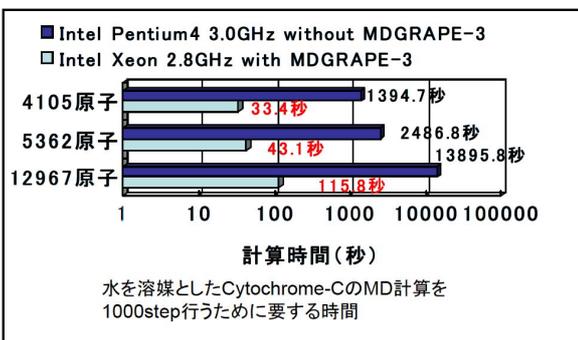
創薬研究において、薬剤分子とターゲットたんぱく質のドッキング (分子フィッティング) シミュレーションは、最適な薬剤分子構造を決めるための重要な研究プロセスです。通常は、結晶構造解析から得られた「静止した」たんぱく質構造を使い、それに対する薬剤分子ドッキングシミュレーションを行います。しかし実際は、たんぱく質も薬剤分子も「動いている分子」です。動く分子を使うことで、コンフォメーション変化などの、よりリアルな「分子の動き」を直感的に把握できます。強力な MD 計算ボードとの組み合わせで、数千以上の原子を含む MD 計算中でも、動いている分子の操作が可能となります。これらの分子操作はすべてリアルタイムに MD 計算に反映されており、ダイナミックな分子マニピュレーションが可能です。

分子間相互作用を実感する

MD シミュレーションでは分子 (原子) 間の相互作用が計算されます。動いている分子を操作するだけでなく、その分子間に働く相互作用を「実感」することで、分子モデリングに新しい視点をもたらされます。分子を別の分子に近づけたときに働く引力・斥力、そしてそれらの大きさを直感的に認識することは、これまでの分子モデリングシステムに無い新しい機能です。これにより、単純に動く分子を操作するというだけでなく、分子操作に伴う分子挙動を体感しながら定性的に解釈できます。



超高速 MD 計算



独立行政法人理化学研究所で開発された MDGRAPE-3 は、2 原子間のクーロン相互作用やレナードジョーンズポテンシャルなどを高速に計算する PC 拡張ボードです。これを PC に搭載することで、通常の PC でも強力な分子動力学計算パワーが得られます。

eMD² はこのボードとも連携可能であり、大規模な MD 計算も高速に実行できます。eMD² と MDGRAPE-3 を連携させた場合、MDGRAPE-3 を使用しなかった場合と比べて、原子数 12,967 個の場合で 154 倍にもなります。

これは 5 ヶ月かかった計算が 1 日で終わることを意味します。

(G.M.)

本文に収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、「医療品」、「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。

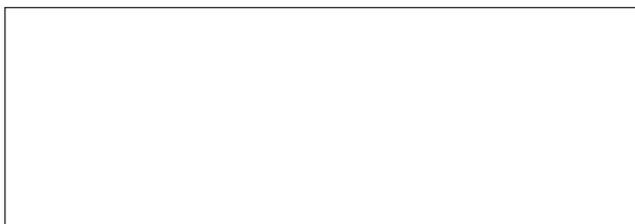
和光純薬工業株式会社

本社 ☎540-8605 大阪市中央区道修町三丁目1番2号 ☎(06) 6203-1788 (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 : analyti@wako-chem.co.jp まで



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

06.713 学 01H