

WAKO

Infomatic

World

実験化学者のための
IT活用誌

2007

August No.3

見本誌

本誌は、電子出版物(PDF)です。継続購読をご希望の皆様は、下記 URL よりお申込みください。発行ごとに、メールでお知らせいたします。

⇒<http://wako-chem.co.jp/siyaku/journal/index.htm>

目次

計算化学のすすめ

第1回 計算化学とは? 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

(1) はじめに 4

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

新しい β -(1 \rightarrow 3)-グルカン内水素結合の発見 5

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

(1) はじめに 7

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

ダイナミック分子モデリングシステム

eMD² -Empowered Molecular Design/Dynamics- 8

計算化学のすすめ

第1回 計算化学とは？

京都府立大学 人間環境学部 講師 リントウルオト正美

最近、実験化学者と計算化学者が共同で研究をすすめたり、実験化学者自らが計算を行いながら研究を進めていることを多く目にするようになった。また、実験化学者から計算ソフトを買ったのだけど、どうやったら計算を始められるかな、というような質問もたびたび受け、計算化学がいかに浸透してきているのかがわかり感慨深い。

私は固体表面における吸着現象、表面化学反応などを主に対象として量子化学計算を用いた研究を続けてきた。最近では巨大な分子系のスペクトル計算や生体分子内における分子認識に関する研究なども行っている。これらの巨大分子系や固体を扱う場合、系のモデル化が不可欠である。また、スペクトル計算に際しては溶媒効果などにも気を配る必要がある。これらのモデル化や計算方法の詳細、基底関数の選択など、計算の専門家にとっては当たり前であり、計算のキモとも言える部分が実験化学者にとっては計算を自分から始めるに際しての高い敷居となっているかも知れない。

大学の講義や実習でも計算化学が取り入れられており、卒論生や大学院生も自分のパソコンを使って、分子モデリングなどをコンピューター上で行うことが可能になってきている。しかし、せっかく計算を行ってもその結果を解析出来ない、理解できない、妥当な結果であるのかを自分で判断できない、では困ってしまう。理論を理解しないことには話は進まないのだろうか？

しかし、習うより慣れろともいう。ここではまず、使ってみようではないか。計算をしながら、理論書を片手に勉強をすすめていくことも可能であるかと思う。それでは量子化学計算を自分で始めるための準備を行っていこう。

1. 計算で何がわかるのか？

では計算で何がわかるのだろうか。何に対して有用なのだろうか。下にざっとあげてみよう。

- ・分子の安定構造と生成熱
- ・遷移状態の構造、活性化エネルギー
- ・分子軌道とそのエネルギー準位
- ・イオン化ポテンシャル、電子親和力
- ・電子密度、静電ポテンシャル、双極子モーメント
- ・スピン分布
- ・様々なスペクトル（紫外可視吸収、発光、赤外、ラマン、NMR、CD など）

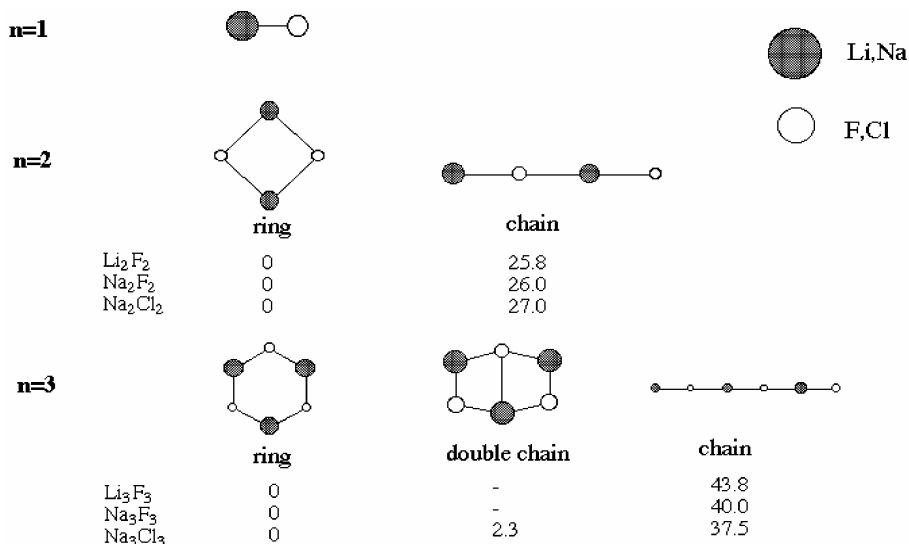


図1、アルカリハライドクラスターの構造と安定性。図中の数字は相対的な安定化エネルギー (kcal/mol)。

例えば、さまざまなコンフォメーションが予想される分子に対して、種々のコンフォメーションを仮定し計算を行い比較することによって、最も安定なコンフォメーションを知ることができる。図1にアルカリハライドクラスターLi_nF_n、Na_nF_n、Na_nCl_nクラスターの構造と安定性について示した。それぞれ予想される構造を仮定し、構造最適化を行い全エネルギーの比較を行ったものである。

さらに分子軌道とそのエネルギー準位から反応活性や選択性などの物性についても予想が可能となる。図2にエチレン、アクロレイン、無水マレイン酸のHOMO、LUMOを示す。HOMO、LUMOのエネルギーレベルがエチレンへのカルボニル基の置換に伴い、変化していることがわかる。

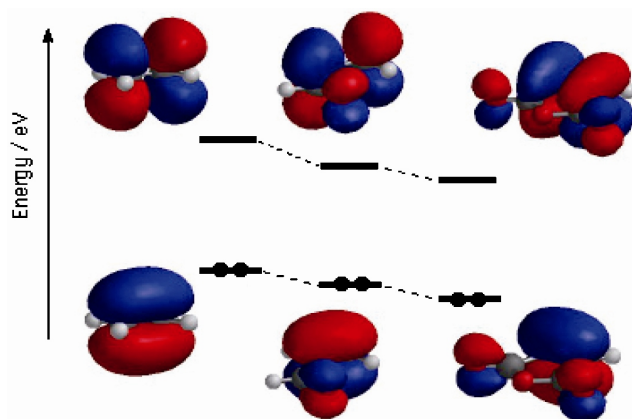


図2、エチレン、アクロレイン、無水マレイン酸のHOMO、LUMO (HF/6-31G(d))

電子密度のある一定の値を選択して、その一定の値をとる点の集合した表面を電子密度表面と言う。この表面は電子の空間的なひろがりを表す。この情報から CPK モデルと同様に分子内の原子間や置換基間の相互作用や立体障害について知ることができるし、分子間の相互作用についての情報もえることができる。

また、図3に示す分子上の電荷分布を示す静電ポテンシャルマップを図示することによって分子のどの部分がどのような反応性をもつのか、分子間相互作用にどの部分がどのように作用するのか一目でわかる。静電ポテンシャルとは単位電気量を持つ正の点電荷がある位置において分子と及ぼしあう相互作用エネルギーで定義される。引き合う相互作用である場合、静電ポテンシャルは負に、反発する場合は正になる。ここでは静電ポテンシャルが正の場合、青、負の場合、赤で表されており、エチレンへのカルボニル基の置換に伴い、電荷の分布が変化していることがわかる。エチレン上の π 電子はカルボニル基によって引っ張られていることがわかる。

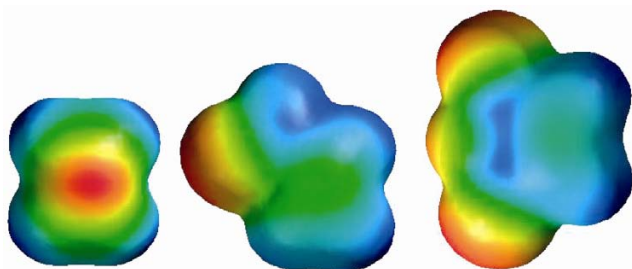


図3、エチレン、アクロレイン、無水マレイン酸の静電ポテンシャルマップ

また、計算労力は格段にあがってしまうが、実験的に掌握の難しい遷移状態の構造や電子的特性について情報を得ることができる。また、活性化エネルギーを知ることができ、反応メカニズムの解明には非常に有用である。

さらに計算労力が増すが、励起状態の計算を行うことにより、様々なスペクトルの予測を可能にし、光化学反応の反応メカニズムの解明にも非常に有用である。

2. いろいろな計算方法

大きく分けて、分子動力学法、分子力学法、分子軌道法、密度汎関数法 (DFT 法) などの計算方法が化学系の研究に頻繁に使われる。ここでは分子動力学法については取り扱わず、後の3つに絞りたい。

分子力学法は分子中の原子の相互作用について実験や観測から得られた経験的なパラメータを用いて、古典力学的に分子の幾何構造を求める。計算のコストが小さく、巨大な分子などの計算も短時間で行うことができるが、電子構造がわからないことから電子的特性は得られないし、励起状態や遷

移状態の計算はできない。

分子軌道法、DFT 法はシュレディンガー方程式を解くことによって電子の構造を求める方法で分子軌道法は Hartree-Fock 方程式を DFT 法は Kohn-Sham 方程式を解いていく方法である。分子軌道法は Hartree-Fock 方程式をとく際に必要な積分を実験で得られた経験的な値であるパラメータを用いたり省略してしまう場合は半経験的方法、積分の省略やパラメータによる置換を全くせず解く場合、非経験的方法 (*ab initio* 法) に分かれる。

半経験的分子軌道法は用いる近似法やパラメータの違いによって、AM1、PM3、MINDO、INDO など多くの計算方法が存在する。*ab initio* 法に比べ、計算コストが小さくてすみ、比較的大きな系、例えば、蛋白や固体表面反応などに適用することができ、また、遷移状態や励起状態の計算も可能である。しかし、*ab initio* 法に比べるとその精度が低く、経験的パラメータのない原子に対しては計算できないなど対象とする系も制限される。

非経験的分子軌道法は膨大な計算量が必要となる結果、半経験的分子軌道法にくらべると対象とする系の大きさが制限されるが、最近では計算機の性能の向上により比較的大きな系、例えば重金属を含むポルフィリンさらに数分子のポルフィリンを含む系、遷移金属固体表面反応にも用いられている。また、電子的特性や各種スペクトルの計算など精密さが要求される計算に対して、高精度の結果を与える。しかし、用いる基底関数によって結果の精度と計算コストが異なってくることから、基底関数の選択には一定の知識が必要となってくる。

それぞれの計算方法には一長一短があり、対象とする系、どの程度の結果を期待するのか、といったことによって、適宜選択する必要があるだろう。そのためにはためらわずに計算を行い、経験をつむことも必要である。

非経験的分子軌道法を用いると特に大きな分子の構造最適化や多くのコンフォメーションが予想される場合などに膨大な時間がかかってしまう。その場合には予備計算として半経験的分子軌道法を用いて、最適構造やコンフォメーションの絞り込みを行い、得られた構造を初期構造として非経験的分子軌道法の計算に用いれば、時間は短縮される。こういった組み合わせの使い方も効果的である。

次回以降、非経験的分子軌道法を中心にして、量子化学計算を自分でやってみたいけれど今までの機会に恵まれなかった方々に対する「計算のすすめ」をしていきたい。基底関数とは何か？に始まって、安定構造の比較、電子的物性、分子軌道と反応予測、反応メカニズム、スペクトル計算について述べ、後半には最近の計算化学の動向についても紹介していきたい。

参考文献

☆「分子軌道法」については、

1. 廣田穰：「分子軌道法」裳華房 (1999)
2. 米澤貞次郎、永田親義、加藤博史、今村詮、諸熊奎治：「量子化学入門(上・下)」化学同人 (1963)
3. A. サボ、N.S. オストランド：「新しい量子化学(上・下)」大野公男他訳 東京大学出版会 (1987)

☆「密度汎関数法」については、

4. 里子允敏、大西権平：「密度汎関数法とその応用」講談社サイエンティフィック (1994)
5. R.G. パール、W. ヤング：「原子・分子の密度汎関数法」狩野覚他訳 シュプリンガーフェアラーク (1996)

分子モデリングソフトウェア“Spartan”（スパルタン）のご紹介

(1) はじめに

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

“Spartan”はWindows、Macintosh デスクトップ環境で利用できる使いやすいユーザインターフェイスを装備した分子モデリングソフトウェアです。

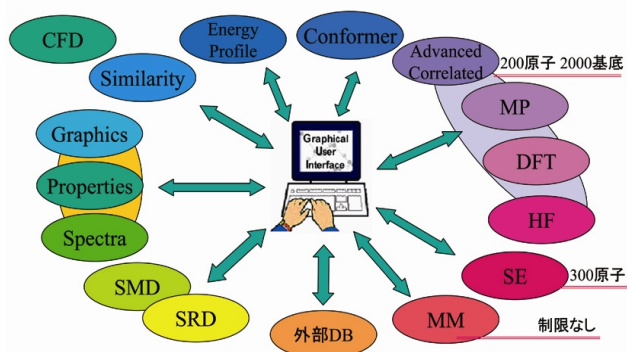
分子モデリングでは分子を作成したり、結果の可視化を行うユーザインターフェイスはもちろん重要ですが、理論的な計算を行う手法をいろいろと使い分ける必要があります。

分子力学法、分子軌道法、密度汎関数法といった計算手法、それに配座解析、エネルギープロファイルの作成、分子の各種プロパティの計算や、複数の分子の重ね合わせなど、さまざまな機能を搭載したソフトウェア、それが“Spartan”です。

分子を作成途中では、暫定的にいびつな構造になることがあります。そんなときは画面上部に常に表示されている“Minimize”というボタンを押せば、構造をリファインできます。ここでは分子力学法を使って瞬時に構造最適化をやっています。その他、分子力学法は、フレキシブルな分子の配座解析に特に有効です。

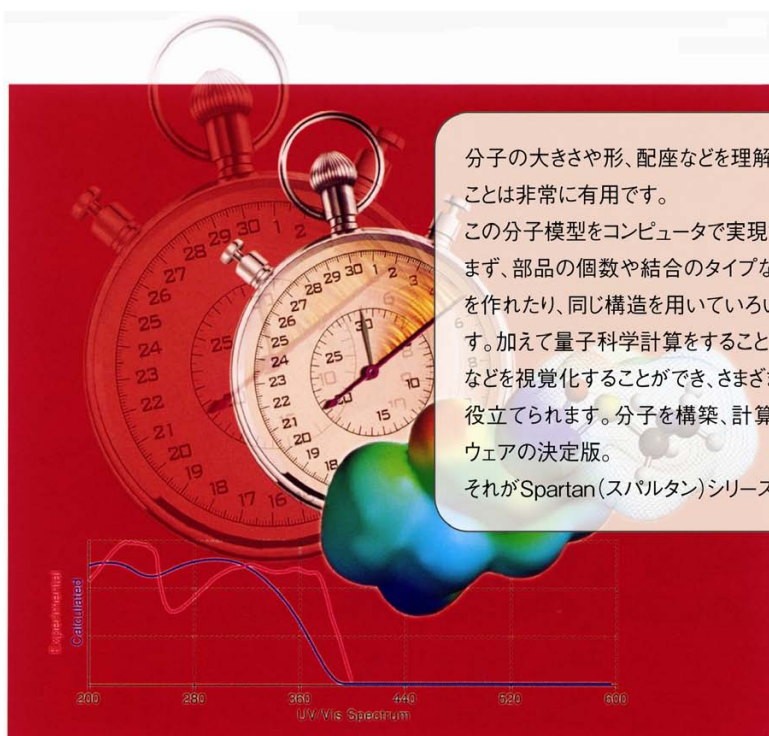
分子軌道法にはいくつものレベルの手法があります。特に非経験的分子軌道法のうち、厳密に波動方程式を解こうとするアプローチをするものでは計算時間やメモリ、ディスク容量など、計算機資源を大量に使用します。そこで、例えば、配座解析は分子力学法で行い、候補配座を絞った上で、それぞれの配座について Hartree-Fock で構造最適化を行い、得られた構造において、エネルギー計算を MP2（二次摂動論）法を使用するなど手法の組合せと使い分けをすれば、効率よく求めたいプロパティを得られます。

Spartan'06 Full Edition



複数の計算手法の組合せ

	MM	SE	HF	DFT	MP2
平衡構造	○	○	◎	◎	◎
遷移構造	NA	○	◎	◎	◎
反応のエネルギー	NA	△	○	◎	◎
活性化エネルギー	NA	△	△	○	◎
配座解析	◎	△	○	◎	◎



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なり、いくらでも大きな構造を作れたり、同じ構造を用いている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、計算し結果の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。

新しい β -(1 \rightarrow 3)-グルカン内水素結合の発見

北九州市立大学国際環境工学部 教授 上江洲 一也

この研究は、科学技術振興機構（JST）基礎的研究発展推進事業（SORST）「1次元分子認識システムを応用した多糖系遺伝子マニピュレーターの創製」（2002～2006年，研究代表者：九州大学・新海征治教授）へ参画し，計算化学的手法により多糖／核酸複合体の構造を探っていく過程で行ったものである。

β -グルカンは，広く植物細胞，藻類，酵母，細菌，カビ，キノコの細胞壁に多く含まれているグルコース環を基本単位とした構造多糖である¹⁾。グルコース同士の結合様式の違いによって β -(1 \rightarrow 3)，(1 \rightarrow 4)，(1 \rightarrow 6)グルカンなどが存在する。中でも β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンには，抗癌，抗エイズウイルス等の有用な効果を有するものがあることから注目を集めている²⁾。 β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンの中でも最も単純な構造をもつカードランは，X線構造解析等により β -1,3結合した主鎖グルコース6つで螺旋が1巻きする6/1の右巻き3重螺旋を形成することがわかっている(Fig.1)³⁾。このカードラン3重螺旋構造は，3つの鎖の同一平面上にある2位の水酸基同士の水素結合により，安定化していると考えられていた。Fig. 2aに示すように，この水素結合の連結は螺旋軸方向に垂直な平面に三角形（正確には不等辺六角形）を形成している。この水素結合様式をタイプAと呼ぶことにする。このタイプAの水素結合様式が実際に存在しうるのか，また他の水素結合様式の可能性が考えられないのかを確認するため，X線解析データ³⁾により決定された原子座標を元にカードラン3重螺旋構造を再現し，半経験的分子軌道法（MOPAC AM1法）を用いて調査を行った。その結果，タイプAが存在しうることが確認されたが，それだけではなく他に2つの水素結合様式の可能性が示唆された。その内の1つはこれまで誰も提案したことのない水素結合様式であった。

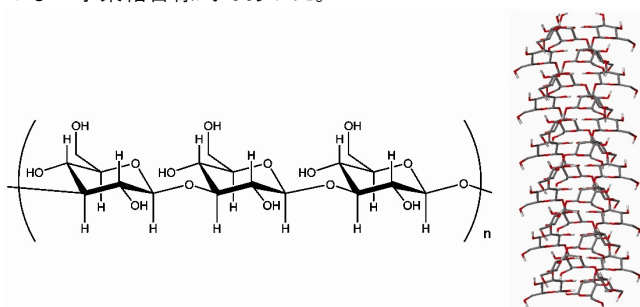


Fig. 1 The repeating units of Curdlan has been identified with X-ray crystallographic data indicating that all three glucans form a right-handed triple helical complex under aqueous conditions.

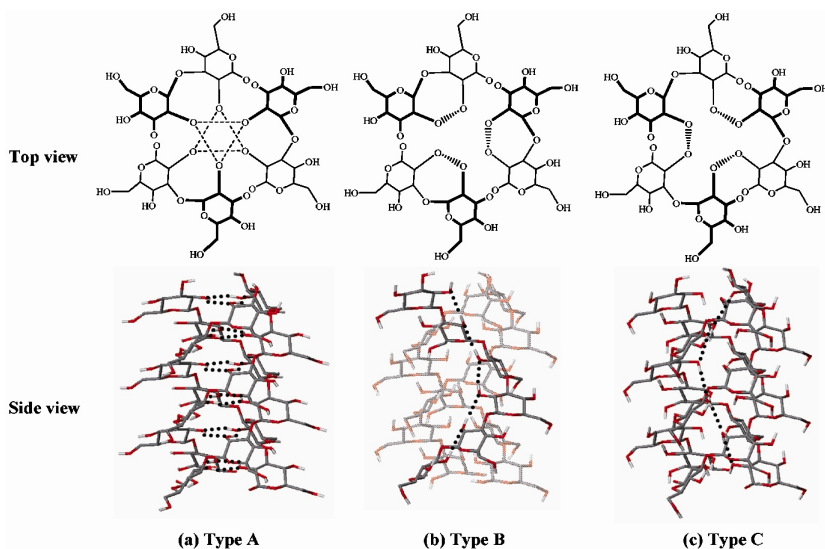


Fig. 2 The top and side view of hydrogen bonding forms in curdlan. The dot-lines indicate the hydrogen bonds. (a) The hexagonal intermolecular hydrogen bonds of type A. (b) The right-handed helical hydrogen bonds of type B. (c) The left-handed helical hydrogen bonds of type C.

新たな可能性が示唆された1つ目の水素結合様式は，同一グルコース鎖内において螺旋の向きと同方向，縦に2位の水酸基同士が水素結合しているもので，これは β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンがとりうる分子内水素結合として既に提案されているものであった⁴⁾。この水素結合の連結はFig. 2bに示すように，分子主鎖と同じく右巻き螺旋を形成しており，これをタイプBと呼ぶことにする。2つ目の水素結合様式は，タイプBと同じく縦方向の水素結合であるが，3本の鎖にまたがって分子間水素結合が連結しており，Fig. 2cに示すように，主鎖とは逆の左巻き螺旋を形成しているものであった。このタイプは，我々のグループが始めて提案した β -(1 \rightarrow 3)-D-グルカンの水素結合モデルであり^{5), 6)}，タイプCと呼ぶことにする。これら3つのタイプの水素結合を形成しているカードラン3重螺旋の生成熱（heat of formation：HOF）をMOPAC AM1法により計算したところ，最も安定な水素結合様式はタイプCであることが判明した。

それではなぜタイプCがタイプAやBよりも安定なのだろうか。我々は，各タイプについてさらに計算精度の高いB3LYP法を用いたエネルギー計算を行うことにした。このB3LYP法は高精度ではあるが計算に膨大な時間がかかるため，まずグルコース4ユニットで1本鎖の3重螺旋モデルを用いて計算を行った。結果は，タイプAが最もエネルギーが低く安定であるというものであった。予想したものと全く逆の結果が出てしまい，これまでに提案されていた水素結合様式が最も安定だったのかと意気消沈してしまった。しかし，すぐには納得できなかったことと，カードラン分子が3重螺旋

旋構造を形成するにはある程度の長さが必要であることが実験的に明らかになっていることもあり、分子長が長くなることによる高分子効果の影響が大きいのではないかと考えた。どうにかして長い分子による計算を B3LYP 法で行う必要があった。

苦肉の策として、タイプ A, B, C の水素結合に関与している 2 位の水酸基の部分の水分子に置き換えて単純化したモデル (Fig. 3 :右図 H₂O-array model) を使って B3LYP 計算を行うことにした。

水分子に置き換えることで、水素結合部分のみではあるが長い鎖長を考慮した計算を行うことが可能となった。それぞれの分子モデルの長さを変化させ (同一平面上の水 3 分子を 1 ユニットとし、そのユニット数を増加させた)、分子の長さとお水素結合による安定化度の関係を検討した結果を Fig. 3 (左図) に示す。タイプ A においては分子鎖が長くなっても水素結合による安定化に大きな変化は見られなかったが、タイプ C においては分子が長くなるにつれて、

12 ユニット (螺旋 2 巻き、すなわち 2 ピッチ) で頭打ちになるまで、エネルギーが下降し続けた。したがって、分子が短い場合はタイプ A が安定であるが、長くなることでタイプ C が安定になることが明らかとなった。タイプ A のように同一

平面上の O2 原子間に水素結合が形成した場合、水素結合の連結はそれぞれの平面において 3 つ連なるのみであるのに対し、タイプ C の場合、分子が長ければ長いほど水素結合の連結も伸びていく (Fig.4)。そのため、水素結合の協同効果⁷⁾によって水素原子中の電子の非局在化が進むことにより、タイプ A よりも安定になっていたのである。

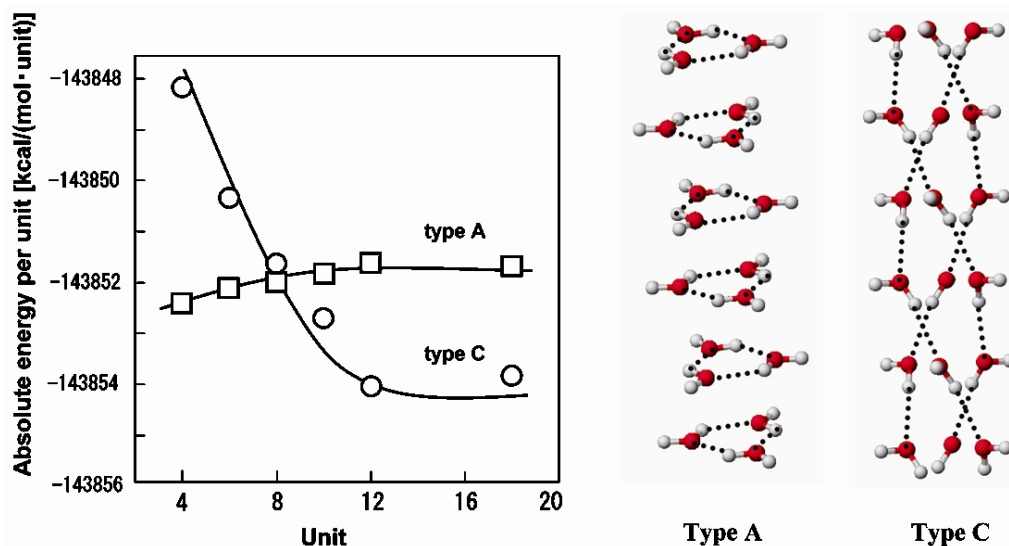


Fig. 3 Chain length dependence of the absolute energy per three H₂O units. The absolute energies were calculated by B3LYP method. The energy per unit of types A and C are represented by squares and circles, respectively.

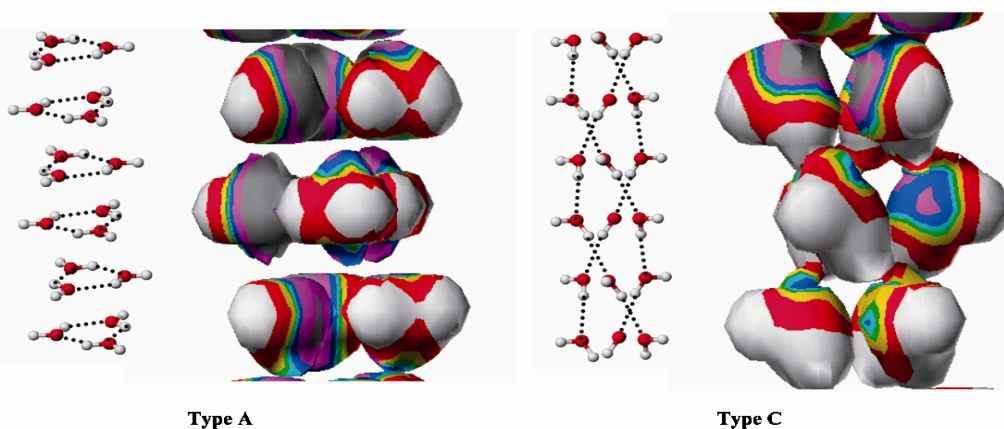


Fig. 4 The graphic of electron density distribution of Type A and Type C. The hydrogen bonds were connected in Type C.

参考文献

1. T. Harada, A. Misaki and H. Saito, *Arch. Biochem. Biophys.* **124**(1), 292-298 (1968).
2. N. R. Di Luzio, D. L. Williams, R. B. McNamee, B. F. Edwards and A. Kitahara, *Int. J. Cancer*, **24**, 773-779 (1979).
3. Y. Deslandes, R. H. Marchessault and A. Sarko, *Macromolecules*, **13**, 1466-1471 (1980).
4. B. K. Sathyanarayana and V. S. R. Rao, *Biopolymers*, **11**, 1379-1394 (1972).
5. K. Miyoshi, K. Uezu, K. Sakurai, and S. Shinkai, *Chem. & Biodivers.*, **1**, 916-924 (2004).
6. K. Miyoshi, K. Uezu, K. Sakurai and S. Shinkai, *Carbohydrate Polymers*, **66**, 352-356 (2006).
7. G. A. Jeffrey and W. Saenger, *Hydrogen Bonding in Biological Structures*. Springer-Verlag : Berlin New York Heidelberg, 1991.

“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

(1) はじめに

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

分子動力学シミュレーション (以下 MD シミュレーション) と聞いて、Linux でコマンドを使わなければならないため難しい、シミュレーションを始めるまでに非常に時間が掛かるといったイメージをお持ちの方も少なくないのではないでしょうか。

実際、MD シミュレーションは手間と時間を必要としますが、厳密な精度でなくてもよいのでとりあえず動かしてみたいとお考えの方も多いのではないでしょうか。

そのようなニーズにお答えするために、シミュレーションを開始するまでの手間を極力簡単にし、更にシミュレーション中に分子に力を加えることによってリアルタイムに分子操作を行うことをコンセプトに eMD²(エムディースクエア)の開発を行いました。

この eMD² を使って、これから MD シミュレーションを始めたい方を対象に、事前に準備が必要なものや実際の操作などについて連載していきます。

MD シミュレーションでは、まず、計算を行う前の準備が非常に大切なものとなります。

計算を行うためには、最低限以下のものがようになります。

①初期構造ファイル

分子構造が記述されたファイルで、MDL Mol・PDB などの形式があります。

```
8 8 0 0 0 0 0 0 0999 V2000↓
① 0.5130 -0.5170 -0.0980 C ② 0 0
-0.7050 0.3730 -0.1490 C 0 0
0.7750 -0.7520 1.1930 O 0 0
1.3870 -0.4690 -0.9300 O 0 0
-0.4910 1.3250 0.3880 H 0 0
-1.5590 -0.1390 0.3470 H 0 0
1.5590 -1.3250 1.2090 H 0 0
-0.9520 0.6030 -1.2090 H 0 0
1 2 1 ③ 0 0 0 0↓
1 3 1 0 0 0 0↓
1 4 2 0 0 0 0↓
2 5 1 0 0 0 0↓
```

① 座標値(X, Y, Z)
② 原子種
③ 結合情報

図1. MDL MOL ファイルの例

②各原子の電荷

強い分子間相互作用でかつ遠距離力なので、MD シミュレーションの成否を決めるほど重要なデータです。

```
ATOM 1 ①N ②LYS 1 ③41.863 28.070 11.605
ATOM 2 H1 LYS 1 41.406 28.282 12.480
ATOM 3 H2 LYS 1 42.854 28.243 11.702
ATOM 4 H3 LYS 1 41.708 27.076 11.510
ATOM 5 CA LYS 1 41.314 28.960 10.570
ATOM 6 HA LYS 1 40.242 28.776 10.629
ATOM 7 CB LYS 1 41.562 30.453 10.774
ATOM 8 HB2 LYS 1 42.494 30.795 10.323
ATOM 9 HB3 LYS 1 41.685 30.584 11.849
ATOM 10 CG LYS 1 40.319 31.253 10.398
ATOM 11 HG2 LYS 1 39.445 30.752 10.815
ATOM 12 HG3 LYS 1 40.215 31.348 9.317
ATOM 13 CD LYS 1 40.290 32.661 10.985
ATOM 14 UNO LYS 1 41.040 29.907 10.517
```

① 原子名
② 残基名
③ 残基インデックス
④ 座標値(X, Y, Z)

図2. PDB ファイルの例

通常は ESP 電荷を用います。ESP 電荷は Spartan、CACHe、Gaussian などのソフトウェアで計算できます。

eMD² では電荷平衡法による自動電荷計算スキームを実装していますので、事前に準備していなくても計算を行うことができます。

ただし、計算できる原子種に制限があり、H、Li、C、N、O、F、Na、Si、P、S、Cl、K、Br、Rb、I、Cs 以外は計算を行えません。

③ポテンシャルパラメータ

原子間の結合、角度やレナード-ジョーンズポテンシャルに関する数値が格納されたパラメータセットです。

eMD² では Amber のパラメータをあらかじめインストールしてありますが、必要に応じてカスタマイズすることもできるようにしています。

	Atom 1	Type 1	Atom 2	Type 2	Kb	req
1	O	W	H	W	553.0000	0.9570
2	H	W	H	W	553.0000	1.5130
3	C		C	A	469.0000	1.4090
4	C		C	B	447.0000	1.4190
5	C		C	M	410.0000	1.4440

① 結合に関するパラメータ
② 結合角に関するパラメータ
③-④ 捻れ角に関するパラメータ
⑤ Lennard-Jonesポテンシャルに関するパラメータ

図3. ポテンシャルパラメータ

今回は、実際に分子構造ファイルを読み込んで MD シミュレーションを開始するまでのプロセスについてご説明します。

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。

ダイナミック分子モデリングシステム

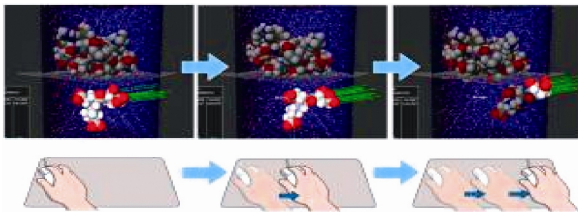
eMD² -Empowered Molecular Design/Dynamics-

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。

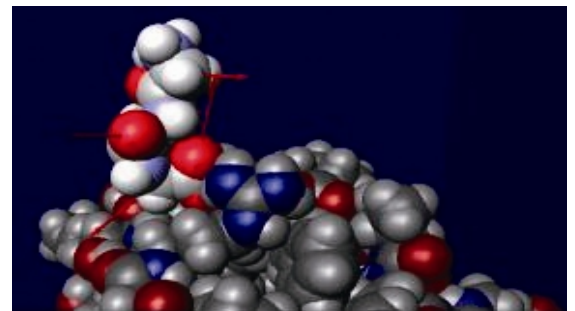
動く分子をマニピュレーション



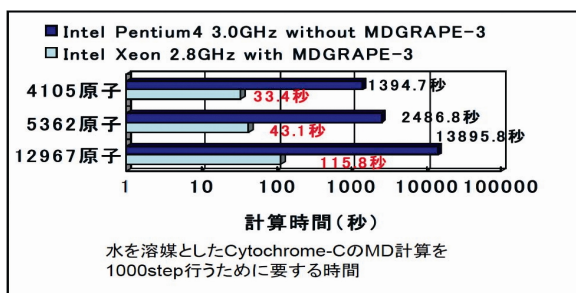
創薬研究において、薬剤分子とターゲットたんぱく質のドッキング (分子フィッティング) シミュレーションは、最適な薬剤分子構造を決めるための重要な研究プロセスです。通常は、結晶構造解析から得られた「静止した」たんぱく質構造を使い、それに対する薬剤分子ドッキングシミュレーションを行います。しかし実際は、たんぱく質も薬剤分子も「動いている分子」です。動く分子を使うことで、コンフォメーション変化などの、よりリアルな「分子の動き」を直感的に把握できます。強力な MD 計算ボードとの組み合わせで、数千以上の原子を含む MD 計算中でも、動いている分子の操作が可能となります。これらの分子操作はすべてリアルタ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

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
634-08061	(有) 高速計算機研究所 MDGRAPE-3 PCI-X アカデミック版	1 枚	1,200,000
-	(有) 高速計算機研究所 MDGRAPE-3 PCI-X コーポレート版	1 枚	照会

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 (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

Wako Chemicals GmbH
European Office

http://www.wako-chemicals.de
Tel: 49-2131-311-0

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