

WAKO

Infomatic

World

実験化学者のための
IT活用誌

2007

October No.5

目 次

計算化学のすすめ

第3回 構造最適化と振動解析 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

(3) 計算設定 (ジョブのタスク) と IR スペクトル 4

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

カリックスアレーン誘導体によるアルカリ金属イオンの抽出挙動 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

(3) MD 計算前の準備 その2 8

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

計算方法が決まり、化学物質の初期構造の入力、系の電荷、スピン多重度、基底関数を入力すれば、量子化学計算の準備は整った。それでは今回は対象とする分子や系のエネルギー的に最安定な構造を求めてみよう。エネルギー的に安定な構造を求めることを構造最適化といい、構造最適化の後には振動解析が必要である。詳しくみてみよう。

1. ポテンシャルカーブと構造最適化

いま、2原子分子を例に取り、2原子間の結合距離に対するエネルギーをプロットした場合、図1のようになったとする（この曲線をポテンシャルカーブという）。

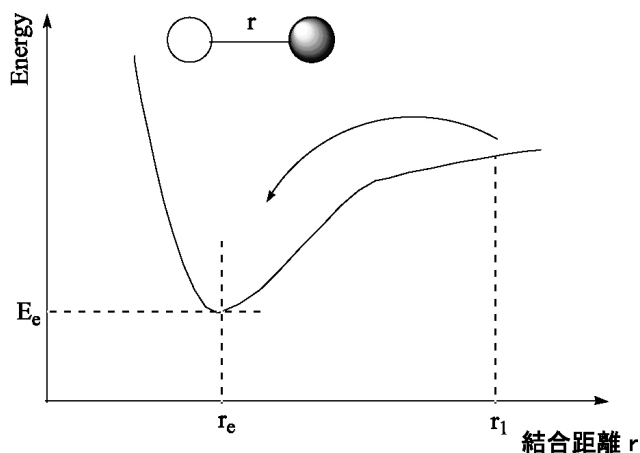


図1、2原子分子のポテンシャルカーブ

r_1 を計算開始点とする。まずこの核間距離における系の全エネルギーが求められる。次に力のベクトル方向が定められ、よりエネルギーが低くなる方向が定められる。これによって次の r_i が計算される。これをくり返していくことにより、系はポテンシャルカーブ上を矢印の方向に進んでいき、最終的にはエネルギーが最も低い点、すなわち、最も安定である点に行き着く。この操作が構造最適化である。 r_e は平衡核間距離（最安定構造、平衡状態構造）、 E_e は平衡エネルギー、最安定エネルギーである。

複雑な分子や系になると自由度が増えることから多次元ポテンシャルカーブが複雑になり、図2に示すように極小点を多く与えるようになる。図2において極小値bがエネルギー最小値を与え global minimum と呼ばれる。他の a、c、d は global minimum よりも高いエネルギーを与え、local minimum と呼ばれる。これらのエネルギー極小点、最小点ではポテンシャルカーブを表す関数のすべての自由度に対して一次微分がゼロとなり、2次微分 = 極率は正となる。

ここで気をつけなくてはならない点は構造最適化を行うプロセスは構造を開始した点、初期構造のごく近傍の極小点

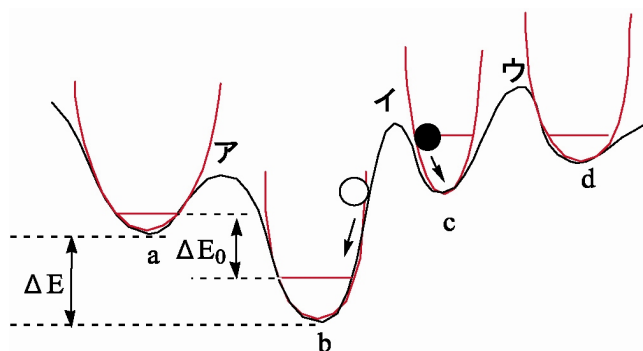


図2、複雑な系のポテンシャルカーブの様式図。調和振動子近似による最低振動状態を赤線で示す。

に向かってエネルギーが小さくなる方向に計算を進め、ポテンシャルカーブを表す関数の一次微分がゼロになれば、計算を終了してしまう点である。例えば、図2において黒丸で表される構造を初期構造として入力すれば、おそらく local minimum である c の構造で計算は終了してしまう。白丸で表される構造を初期構造として入力すれば、最安定構造である b の構造にたどりつくことができる。

たくさんの極小値、構造異性体が予想される場合には MM 計算を半経験的計算の前に、また、半経験的計算を非経験的計算の前に行い、あらかじめポテンシャルカーブ上を探索しておく方法もある。探索によって見つけた比較的安定な配座数種についてより高次の計算を行い、最安定構造を決定するなどの工夫が必要である。

2. 最安定構造の基底関数依存性

最安定構造の基底関数依存性について見てみよう。比較的小さい分子の平衡結合長、結合角の計算結果を表1に示す。計算には B3LYP/STO-3G、6-31G、6-31G(d, p) を用い構造最適化を行っている。(B3LYP とは DFT 計算の交換相関ポテンシャルである。)

すべての分子の結合長、結合角において、STO-3G、6-31G、6-31G(d, p) と基底関数の質が高まるにつれ実験値に近づいていくのがわかる。また、結合距離、結合角ともに定量的

表1、 H_2 、CO、 H_2O の DFT 計算 (B3LYP) による平衡結合長 (Å) および結合角

	H_2	CO	H_2O	
	結合長	結合長	結合長	結合角
STO-3G	0.729	1.188	1.027	97.2
6-31G	0.743	1.156	0.976	108.3
6-31G(d, p)	0.743	1.138	0.965	103.7
実験値	0.741	1.128	0.957	104.5

に記述するためには分極関数が大切であることがわかる。このように正しい安定構造を得るためには質の高い基底関数および分極関数が大切なことがわかるだろう。

3. 力の定数 k と振動解析

図3に示すように極小値付近のポテンシャルカーブ U は2次曲線で近似できる。

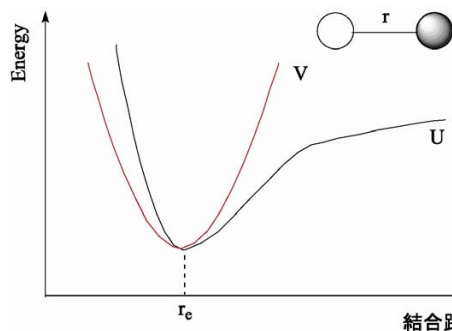


図3、2原子分子のポテンシャルカーブ U と2次曲線 V

この2次曲線は

$$V(x) = \frac{1}{2} k(r - r_e)^2 \quad (1)$$

で表され、調和振動子のポテンシャルカーブに相当する。許される振動エネルギー準位は

$$E = \left(\frac{1}{2} + n \right) h\nu \quad (n=0, 1, 2, \dots) \quad (2)$$

で表される。 k は調和振動子の力の定数でポテンシャルカーブ U を表す関数の2次微分で近似できる。調和振動子の振動数は

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (\mu \text{は換算質量}) \quad (3)$$

で表されることから、極小点でポテンシャルカーブ U を表す関数の2次微分を計算することでIRやラマンスペクトルに必要な情報を得ることができる。

また、この振動解析は遷移状態の探索で重要になる。図2においてそれぞれの極小点の間には極大点(ア~ウ)が存在しており、これらは鞍点(saddle point)と呼ばれる。これらの鞍点ではポテンシャルカーブを表す関数の一次微分がゼロとなり、いくつかの自由度に対して2次微分がマイナスとなる。鞍点のうち、マイナスの2次微分が一つだけあるものが遷移状態となる。振動数は(3)式で表されることから、力の定数 k が負になるということは遷移状態では虚数の振

動数をもつことになる。遷移状態では虚数の振動数を示す自由度が一つだけある。遷移状態の探索をおこなって、振動解析を行った結果、虚数の振動数を複数持っている場合はその構造は高次の鞍点(虚数の振動数が2つであれば2次、3つであれば3次)で遷移状態ではないので探索をやり直す必要がある。一般に遷移状態の探索は安定構造の探索よりも難しく、たくさんの鞍点を与えてしまうことが多いことから、振動解析により確かめる必要がある。

4. ゼロ点振動エネルギー

極小値付近のポテンシャルカーブ U を2次曲線で近似し、その曲線上に調和振動子のエネルギー準位を重ねると図4のようになる。図に示すように調和振動子の各エネルギー準位間のエネルギー差は $h\nu$ である。また、最低エネルギー準位 $n=0$ のエネルギーはゼロではなく、(2)式より $E_0 = (1/2)h\nu$ である。最も低いエネルギーレベルにおいてもエネルギーを有する。これをゼロ点振動エネルギーという。量子論では最低状態でも常にいくらかのエネルギーを有することが要求される。図4の $n=0$ の波動関数の変位は極小点で最大となり、この点を中心に揺らんでいる様子を示している。すなわち $n=0$ でも中心付近で揺らぎ、運動をしていると見ら

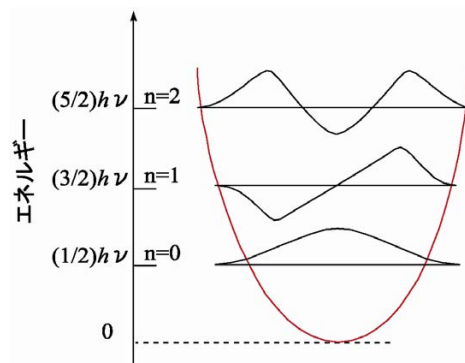


図4、調和振動子のエネルギー準位と波動関数の模式図

れる。これがゼロ点振動エネルギーである。

量子化学計算で得られるのはポテンシャルカーブであって、このゼロ点振動エネルギーは含まれていない。振動解析を行えば、力の定数 k が得られ、ゼロ点振動エネルギーを見積もることができる。ゼロ点振動エネルギーによる補正を行うとより正確に化学反応における生成熱などの評価を行うことができる。例えば、図2において構造異性体 a と b の安定性について比較したいとき、量子化学計算で得られるのは ΔE である。ゼロ点振動エネルギーによる補正を加えてやると ΔE_0 となり、より正確な比較が可能となる。

参考文献

1. 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
2. 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
3. 村橋俊一、戸嶋直樹、安保重一 編集、「分子の物理化学」、朝倉書店、2006年
4. 櫻井実、猪飼篤 編、「計算機化学入門」、丸善株式会社、1999年
5. 廣田実、「分子軌道法」、裳華房、1999年

分子モデリングソフトウェア “Spartan” (スパルタン) のご紹介

(3) 計算設定 (ジョブのタスク) と IR スペクトル

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

計算の設定方法

Spartan では Setup メニューの Calculations で以下のような、計算の設定のダイアログが表示されます。これは、作成した初期構造を計算開始点として、どのような計算を実行するかを指定するものです。

図 1

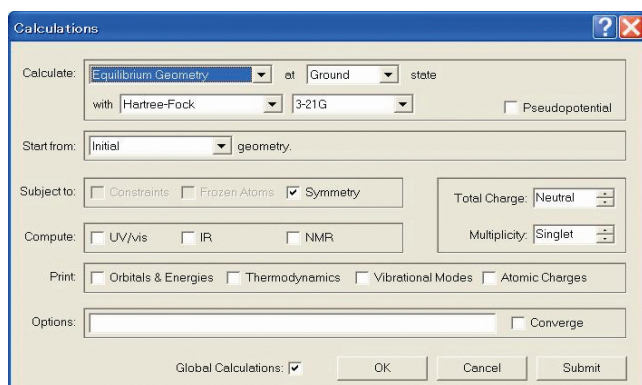
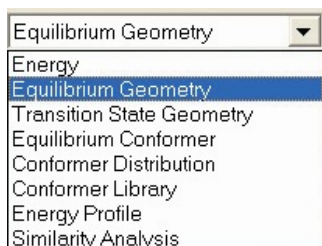


図 2



このうち Calculate のメニューを展開した図を左に示します。

このメニューのデフォルトは “Equilibrium Geometry” となっています。

平衡状態構造を求める構造最適化計算の時に使用します。メニュー先頭の “Energy” では、初期構造を変更せず、その構造におけるエネルギーの計算のみを実行します。すでに信頼できると思われる構造を用いて高精度のエネルギー計算をする際に使用します。

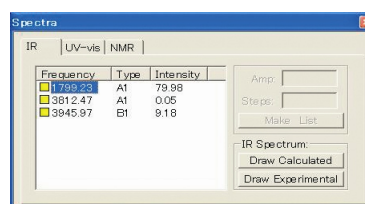
このメニューの中に Conformer とつく選択肢が 3 つありますが、配座解析を行うのは “Equilibrium Conformer” と “Conformer Distribution” の 2 つです。この 2 つの設定で実施される計算は同一のもですが、結果の処理が異なります。“Equilibrium Conformer” では最安定構造のみを分子ファイルに返し残りはすべて消去してしまうのに対し、“Conformer Distribution” では複数の安定配座を別ファイルに出力します。出力された複数の配座に対して個々検証できるようになっています。“Conformer Library” とは分子の配座ライブラリ作成のタスクです。出力されたライブラリを使用して分子の重ねあわせ、類似性解析に使用します。

IR スペクトル

図 1 で Compute ブロックの IR の欄にチェックをして計算を投入すると基準振動計算をし、IR スペクトルを作成できます。

基準振動モードは Display メニューから Spectra ダイアログ (図 3) を開くことでアニメーション表示されます。

図 3



このダイアログには “Draw Experiment” ボタンを装備しており、クリックすることでインターネットを介して外部の公開データベースを検索し、計算による IR スペクトルと重ねて表示することができます。

図 4

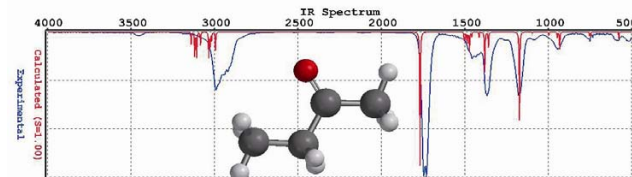


図 5

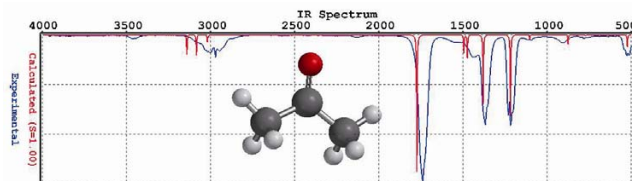
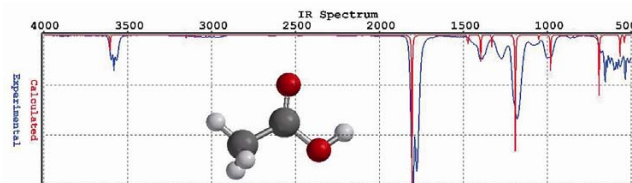


図 6



上図は 2-ブタンオン (図 4)、アセトン (図 5)、酢酸 (図 6) の DFT_EDF1/6-31G* による振動計算による IR スペクトル (赤線) と NIST による公開データ (青線) の比較したものです。

次回は、分子モデルの表示や計算結果の可視化についてご紹介いたします。

カリックスアレーン誘導体によるアルカリ金属イオンの抽出挙動

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

今回は、包接化合物であるカリックス [4] アレーンによるアルカリ金属イオン認識の発現機構を解明するために行った計算¹⁾について紹介したい。実験研究の部分は、九州大学の後藤雅宏先生のグループが、高い分子認識能を発揮することを期待できる包接化合物・カリックスアレーンの様々な誘導体を合成して、高性能抽出剤を開発していった研究の一つである。

カリックスアレーンは、複数個のフェノールをホルムアルデヒドとの縮合反応により連結した環状オリゴマーである。環径を制御して、置換活性なフェノール性水酸基やそのパラ位に官能基を導入することにより、ターゲットとする金属イオンを選択的に認識する優れた抽出剤を設計可能である。本研究では、カリックスアレーンの構造的特徴を生かした金属イオン識別材料としてナトリウムイオンに高い選択性を有するカリックス [4] アレーンカルボン酸誘導体を合成し、液液抽出実験によりアルカリ金属イオン (Li, Na, K) に対する抽出分離特性を検討した。さらに、その抽出挙動を支配する要因を明らかにするために、非経験的 (*ab initio*) 分子軌道法の一つであるハートリー・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 法を用いて、カリックス [4] アレーンカルボン酸誘導体-アルカリ金属錯体の最安定構造を求め、実験で得られた抽出平衡定数と計算で得られた抽出前後の生成熱との定量的構造物性相関 (QSPR, Quantitative Structure-Property Relationship)²⁾ を行った。

抽出剤として、25, 26, 27, 28-tetrakis (carboxymethoxy) -5, 11, 17, 23-tetrakis (1, 1, 3, 3-tetramethylbutyl) calix [4] arene (*p*-^tOct [4] CH₂COOH) を合成した (Fig. 1)。

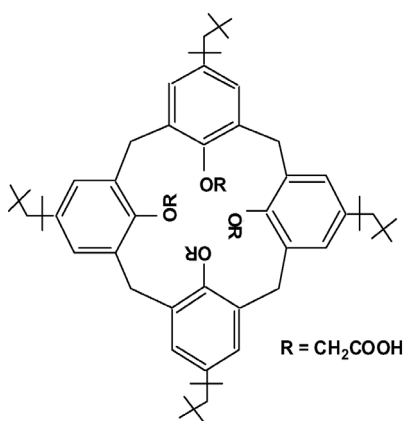


Fig.1 Structure of *p*-^tOct [4] CH₂COOH

環状化合物である *p*-^tOct [4] CH₂COOH には、環の反転により 4 種類のコンホメーション異性体があるが、本実験で用いた化合物は、4 つのカルボキシル基がすべてカリックス骨格の下方を向いたいわゆる “cone 体” であることを ¹H-NMR により確かめている。液液抽出実験は、溶媒

をトルエンとして、金属イオン初期濃度 0.05mM、抽出剤濃度 5.0 mM として行った。*p*-^tOct [4] CH₂COOH による Li, Na, K イオン抽出の pH 依存性を Fig. 2 に示した。*p*-^tOct [4]

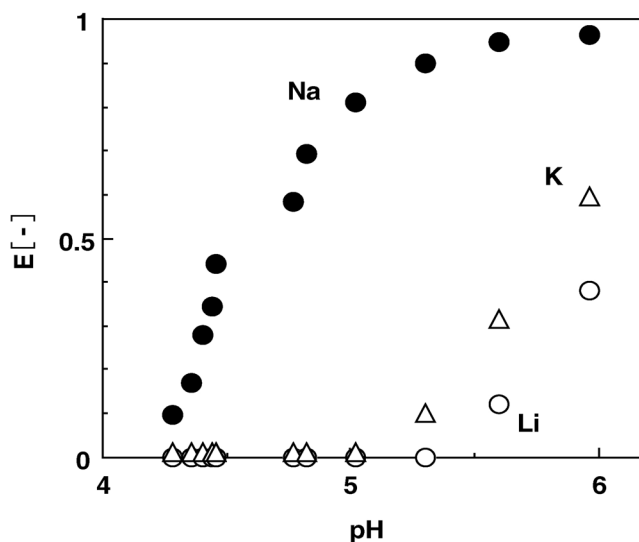


Fig.2 Extraction behavior of alkali metal ions with ^tOct [4]CH₂COOH : alkali metal ion concentration 0.05mM ; extractant concentration 5mM.

CH₂COOH は、Li と K イオンに比べて、Na イオンに対する抽出能が非常に高い。1 価の金属イオンが、1 個のプロトン交換により *p*-^tOct [4] CH₂COOH と 1 : 1 の錯体を形成して抽出される場合 (水中のアルカリ金属イオン (M⁺_{aq}) + 溶媒中の *p*-^tOct [4] CH₂COOH (H₄R_{org}) ⇌ 溶媒中の金属錯体 (M (H₃R)_{org}) + 水中のプロトン (H⁺_{aq})), 抽出平衡定数 K_{ex} ($= G_{M(H3R)org} G_{H+aq} / G_{M+aq} G_{H4Rorg}$) と有機相-水相間の金属の分配比 D ($= G_{M(H3R)org} / G_{M+aq}$) との関係は次式で表され、この式に基づいて抽出平衡定数を求めた。

$$\log D = \text{pH} + \log G_{H4R} + \log K_{ex} \quad (1)$$

半経験的分子軌道法 (MOPAC PM3 法) に Li のパラメータは組み込まれていたが、Na と K のパラメータが存在しなかったため、構造最適化計算を B3LYP 法により行うことにした。B3LYP 法による構造最適化計算では、巨大分子の場合、気の遠くなるほど長い計算時間がかかるので、MOPAC AM1 法や MOPAC PM3 法などの半経験的分子軌道法で構造最適化計算を行い、より精度の高い B3LYP 法などでエネルギー計算を行うことが多い。この組み合わせは、計算コストが低い割に計算精度が高いことが知られている³⁾。今回の計算では、計算時間を短縮するために、抽出剤モデルを *p*-^tOct [4] CH₂COOH の *p*-^tOct 基を水素と置換した構造 (Calix [4] CH₂COOH) と

した。Calix [4] CH₂COOH と Calix [4] CH₂COOH-Li 錯体の初期構造は、MOPAC PM3 法で構造最適化したモデルを用いた。Calix [4] CH₂COOH-Na 錯体と Calix [4] CH₂COOH-K 錯体の初期構造は、Calix [4] CH₂COOH-Li 錯体モデル中の Li イオンを Na と K イオンで置き換えることで作成した。これら 4 種の初期構造を B3LYP/6-31G*により構造最適化し、生成熱を求めた。また、それぞれの金属イオン抽出前後の生成熱変化を比較するために、Li, Na, K イオンの周りに水分子を 13 個配置した構造を B3LYP/6-31G*により構造最適化し、生成熱を求めた。

最終的に B3LYP/6-31G*により構造最適化した Calix [4] CH₂COOH-Li, -Na, -K 錯体構造をそれぞれ Fig. 3a, 3b, 3c に示した。すべての錯体において、アルカリ金属イオン

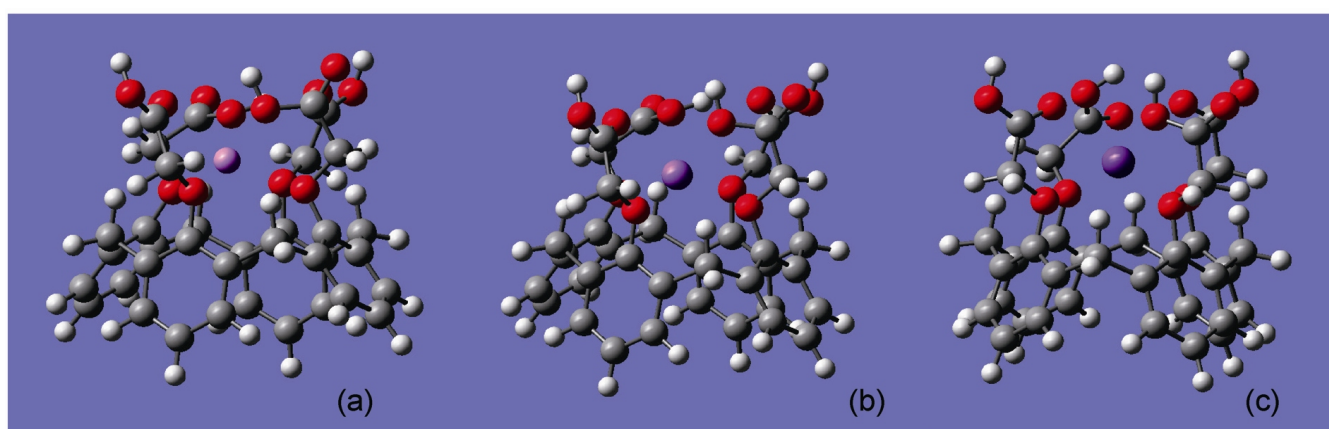


Fig. 3 Geometry-optimized structure of Calix[4]CH₂COOH-Li (a), -Na (b), -K (c) complex

は Calix [4] CH₂COOH の 4 つの OCH₂COOH で囲まれた空孔部に位置している。これらの錯体構造は、Arduini らが NMR 解析で予測した構造と類似していた⁴⁾。OCH₂COOH 中の酸素原子のうち、アルカリ金属イオンと酸素原子との原子間距離が、最近接酸素原子との原子間距離+0.1 Å 内にあるものを配位酸素原子と規定すると、酸素配位数は Li イオンで 2, Na イオンで 5, K イオンで 7 となる。また、Calix [4] CH₂COOH-Li, -Na, -K 錯体における最近接原子間距離は、ケンブリッジ結晶構造データベース (Cambridge Structural Database, CSD) から得られた各アルカリ金属イオンと配位水の酸素原子との最近接原子間距離とほぼ同じであった (Li : 1.90 Å (CSD code NOXB1L) ; Na : 2.43 Å (QUQKES01) ; K : 2.71 Å (QEZXU0))。この酸素原子配位数の差は、Calix [4] CH₂COOH の空孔部の大きさに対する、各アルカリ金属イオンのイオン半径との比で決まっているものである。酸素配位だけを見ると、配位数が最も大きい Calix [4] CH₂COOH-K 錯体が最も安定性が高く抽出されやすいと考えられるが、抽出実験では Na イオンに対する抽出能力が最も高い。

そこで、これらの抽出挙動を支配する要因を明らかにするために QSPR を行った。本抽出系では、抽出前後の生成熱差 ΔH_M は (2) 式のように表される。本計算では、Li, Na, K イオンに配位した水分子の離脱も考慮した。

$$\Delta H_M = (H_{\text{comp}} + H_{\text{H}_2\text{O}}) - (H_M + H_{\text{calix}}) \quad (2)$$

H_{comp} : Calix [4] CH₂COOH-Li, -Na, -K 錯体の生成熱

$H_{\text{H}_2\text{O}}$: H₂O の生成熱

H_M : Li, Na, K アコ錯体の生成熱

H_{calix} : Calix [4] CH₂COOH の生成熱

ここで、 H_{comp} , $H_{\text{H}_2\text{O}}$, H_M , H_{calix} はすべて B3LYP/6-31G* によって求めた生成熱である。抽出平衡定数 K_{ex} と抽出前後の生成熱差 ΔH_M との関係を図 4 に示した。抽出平衡定数と抽出前後の生成熱差とは非常に良好な相関が見られる。 $p^{-1}\text{Oct}$ [4] CH₂COOH によるアルカリ金属抽出挙動は、抽出前後の系の生成熱差で説明することができるので、一見極めて安定な

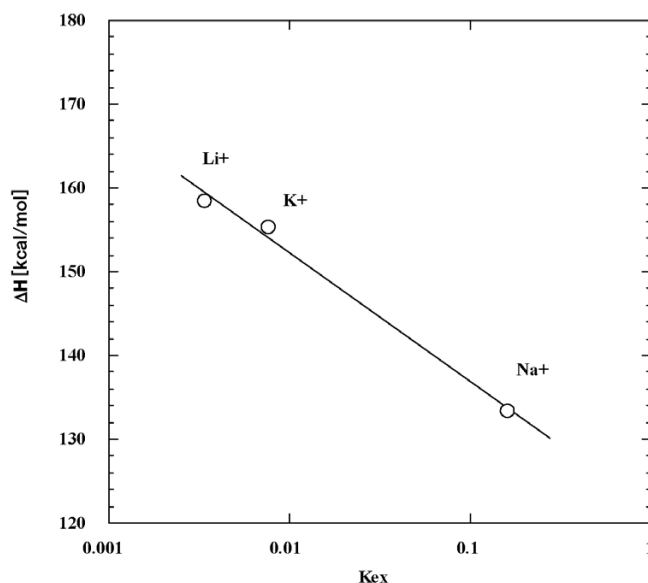


Fig. 4 QSPR of alkaline metal extraction behavior with $p^{-1}\text{Oct}$ [4]CH₂COOH

錯体と推測される $p^{-1}Oct$ [4] $CH_2COOH-K$ イオン錯体には構造的不安定要素があると推察される。そこで、Calix [4] $CH_2COOH-Li$, $-Na$, $-K$ 錯体の各最安定構造からアルカリ金属イオンを取り除き、Calix [4] CH_2COOH の構造を固定したまま生成熱を求めた。Calix [4] CH_2COOH の空孔部に対してイオンサイズが小さい Li と Na イオンでは生成熱がほぼ同じであるのに対し、 K イオンでは Calix [4] CH_2COOH に歪みが生じて 34 kJ/mol ほど不安定になっていた。したがって、 K イオンは $p^{-1}Oct$ [4] CH_2COOH の空孔部に対して若干イオンサイズが大きいため、 $p^{-1}Oct$ [4] $CH_2COOH-K$ 錯体の安定性が低下していると考えられる。

溶媒和に関する考え方

ほとんどの化学的過程は溶媒中で起こるので、系の挙動に及ぼす溶媒の影響を考慮したい場合は多い。溶媒の影響を計算にどのように組み込むかという考え方としては、大きく次の3つに分けられる⁵⁾。

- 1) 溶媒分子が溶質に強く結合して、溶質の一部をなすような場合は、溶媒分子を明示的に考慮する必要がある。溶媒が水であれば、計算対象に必要な数の水分子を加えて

おく。

- 2) 溶質と直接相互作用しているわけではないが、溶質の挙動に溶媒が強く影響を及ぼしている場合は、明示的に溶媒を加える必要はないが、平均場理論などを用いた特別な扱いが要求される。
- 3) 溶媒はバルクな媒質として振る舞うにすぎないが、特にその誘電的性質により溶質が影響を受ける場合は、溶媒分子を明示的に加えず、連続体溶媒モデルで扱う方が溶質の挙動を適切に把握できる。連続体溶媒モデルはいろいろと提案されており、Gaussian03 には Onsager モデルや PCM (Polarizable Continuum Method) モデル、COSMO (Conductor-like Screening Model) モデルなどが組み込まれている³⁾。

カリックス [4] アレーン誘導体によるアルカリ金属イオンの抽出に関する計算において、アルカリ金属イオン特に Li イオンとそれに配位する水分子は一体化した溶質として振る舞うので、上記 1) に該当すると考えた。したがって、アルカリ金属イオンの周りに水分子を配置した系全体を構造最適化して、生成熱を計算している。

参考文献

1. 上江洲一也, 久保田富生子, 後藤雅宏, 海水学会誌, 59, 338-342 (2005).
2. 吉塚和治, 日本イオン交換学会誌, 14, 30-36(2003).
3. J. B. Foresman and A. Frisch, 電子構造論による化学の探究第二版, ガウシアン社(1998).
4. A. Arduini, A. Pochini, S. Reverberi, R. Ungaro, G. D. Andreetti and F. Uguzzoli, Tetrahedron, 42, 2089-2100 (1986).
5. A. R. Leach, 分子モデリング概説, 地人書館(2004).



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。

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

eMD²で始める分子動力学シミュレーション

(3) MD 計算前の準備 その2

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

前回はアトムタイプのアサインと電荷の計算までを行いましたので、今回は eMD² で計算を行う際に最低限必要な初期設定について解説いたします。

① 計算系の決定

eMD² は粒子数・体積・温度が一定の NVT アンサンブルで計算が可能です。

従って、まず体積・粒子数(原子数)・温度を決定します。

1. セルのサイズ(系の体積)の設定

形状は直方形・球形・円柱形の3種類から選択できます。オンラインマニュアルで指定します。

2. 粒子数の決定

粒子数は、挿入した分子と溶媒(水など)の分子数の合計となります。

今回の例である酢酸分子1つ加え、セルを縦・横・高さそれぞれ 50 Å の立方体に設定してセル内を水分子で満たした場合、粒子数は 13,508 個になります。

3. 温度の設定

eMD² では、初期値は 298K (25°C) に設定されています。

系の温度を設定値に維持するための方法として、『速度スケリング法』と

『Nose-Hoover 法』が選択できます。

② 時間刻み幅

MD 計算は、非常に短い時間刻みで分子の動きを計算しますので、まず時間の刻み幅を決定します。通常 0.5fs~1fs (f は 10⁻¹⁵) で計算を行うことが多いようです。

eMD² では、初期値は 1fs に設定されています。

本来、最も軽い水素原子の運動性を考慮すると 0.2~0.5fs 程度の細かい刻み幅に設定する必要がありますが、一般的な MD シミュレーションソフトウェアでは精度を維持したまま刻み幅を大きく出来るよう工夫されており、eMD² では水素原子と結合している原子の距離を固定し水素原子の動きの一部を拘束する『SHAKE』という手法が使われています。

③ シミュレーションステップ数

トータルのシミュレーションステップ数を決定します。

仮に時間刻み幅を 1fs に設定し 1ns 分のシミュレーションを行う場合、ステップ数は 100 万となります。

eMD² では、ステップ数を 0 に設定した場合、ユーザーが停止操作を行うまで計算し続けます。

④ 計算ログの保存

計算後に解析を行う場合は、計算ログを保存するフォルダを指定します。

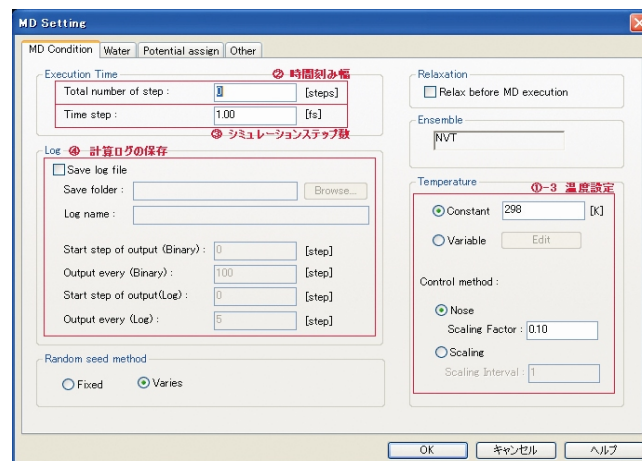


Fig.1 Structure of ρ -Oct[4]CH₂COOH

これら以外にも多くの設定項目がありますが、まずは動かしてみたいという場合、以上の設定で MD を開始することが出来ます。

MD を開始するには、[MD] メニューの [実行] をクリックします。

無事に計算が始まると、シミュレーションによる分子の動きをリアルタイムに観察することが出来ます。

今回までの 3 回で計算を実行するまでのプロセスをご説明しました。

次回は、計算結果の解析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。

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

Wako Chemicals GmbH

European Office

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

Tel: 49-2131-311-0

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