

WAKO

# Infomatic

# World

実験化学者のための  
IT活用誌

2008

March No. 10

## 目 次

### 計算化学のすすめ

第 8 回 最近の計算化学 ..... 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

(8) 薬化学向け機能について ..... 4

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

ポリオールへのアンチモン吸着機構 ..... 5

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

### “eMD<sup>2</sup>(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

(8) 便利なソフトウェア (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

京都府立大学 人間環境学部 講師 リントウルオト正美

最近ではナノサイエンス、生体反応、重金属を含む有機反応や触媒表面反応、凝縮系のシミュレーションなど巨大で複雑な系に対して、実験と計算を組み合わせられた研究が行われるようになった。さらには実験に先立ち高機能性材料の分子設計を計算によって行う場合もある。今回はこれらの最近の計算化学の動向についてみてみよう。

### 1. 触媒化学、表面化学、ナノサイエンスへの応用

触媒化学、表面化学反応、ナノサイエンスの計算を始めるに当たって第一に必要なこととして系のモデル化がある。ナノサイズとは言っても原子数にすれば数十個以上である場合が多いことから、量子化学計算を行う場合にはモデル化が必要となる。

固体表面のモデルとしてはクラスターモデル、拡張クラスターモデル、周期的境界条件を用いたモデルなどがあげられる。バンド計算を行う場合には周期境界条件および plane wave を用いた計算がよく用いられているが、格子欠陥などの局所的な反応活性点の描写が必要である場合などにはクラスターモデルが使用される。

クラスターモデルとは反応や吸着などに際して、表面に接近してくる原子や分子からは表面の一部分しか見えていないと考え、表面の一部の数個から数十個の原子をバルクから切り出してモデルとして用いるものである(図1)。

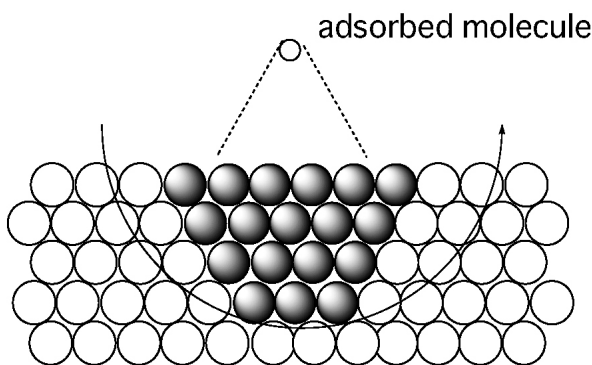


図1. クラスターモデル

クラスターモデルをそのまま用いることもあるが、イオン性固体に対してはクラスターの周りに点電荷を置き、モデルングポテンシャルを再現し、クラスターのまわりのバルクの影響を取り入れるような方法も用いられる。

絶縁体や半導体の場合にはクラスターをバルクから切り

出すことにより、末端の結合が寸断されることになる。この末端は結晶中の状態とは異なった状態であるから、末端を水素でキャップし近似する方法が用いられる。しかし、水素によるキャップのためクラスターモデルの末端付近の結合が実際の系とは異なった特性を持つことも予想されることから、反応活性点などに末端の影響が出ないように十分に大きなクラスターを用いる必要がある。

金属表面における表面反応では電子の移動が大きい場合があるが、クラスターモデルを用いると電子の移動がうまく表現できない場合がある。これに対して、クラスターを「電子の海」に浸されていると考え、クラスターとまわりとの間で電子のやり取りが可能である Dipped Adcluster Model (図2) が考案されている<sup>1)</sup>。

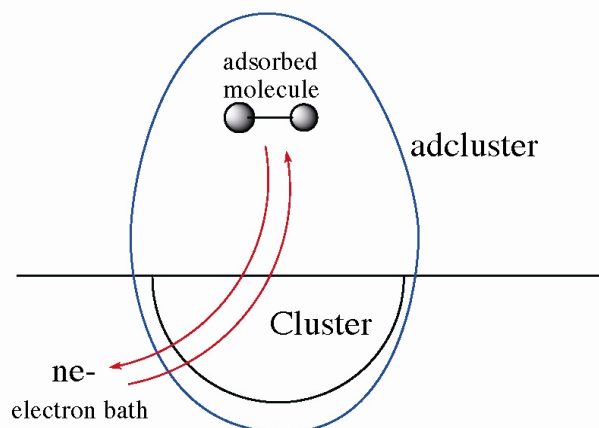


図2. Dipped Adcluster Model

クラスターモデルを拡張して、クラスターと周囲との相互作用を取り込んだ方法として QM/MM 法がある。これらの方法では重要であると考えられる領域を QM 領域とし非経験的 MO 法や経験的 MO 法、DFT などを用い量子化学的に扱い、周りの領域を MM 領域として分子力学法で計算する。QM 領域と MM 領域の境界の影響が小さくて済むように QM 領域を十分に大きく取る必要がある。

クラスターモデルではクラスターサイズによる依存性や固体の周期的特性をうまく表現できない、クラスターのまわりとの相互作用が再現されないなどの欠点があるため、周期的境界条件および plane wave を用いた DFT 計算、第一原理バンド計算もよく用いられている。しかし、先にも記したように周期的境界条件を用いると局所的な反応活性点の取り扱いができないなどの欠点もある。

## 2. 生体系への応用

生体分子の電子状態を非経験的分子軌道法で取り扱うにはその計算コストのために比較的小さい分子に限られてきた。しかし、アルゴリズムの開発や計算機の性能の向上によって、比較的大きな生体系でも非経験的分子軌道法で取り扱われるようになってきた。

生体系のモデル化には先に紹介した QM/MM 法も用いられている。タンパクの分子認識などを扱いたい場合にはタンパクの活性部位を QM 領域として扱い、骨格として重要であると思われる広い領域を MM 領域として扱えばよい。

大きなたんぱく質などの巨大な生体分子に対しては古典的分子動力学法やモンテカルロ法などで取り扱われることが多く、生体分子をまるごと非経験的計算法で取り扱うことはまれであった。しかし、最近ではフラグメント MO 法<sup>2)</sup>が開発され、PC クラスタと組み合わせて使用することにより、タンパク丸ごとの電子状態の計算まで行われている。

フラグメント MO 法とは分子をフラグメントに分割して電子状態の計算を行う近似法である。その結果は非経験的計算法とほぼ同等であることが示されており、計算時間を短縮、効果的な並列化が可能である。現在ではさらに開発が進み、励起状態の計算も可能である。また、MD 法と組み合わせた QMMD 法なども開発され、たんぱく質とリガンドのドッキングなどの現象を対象とした研究も進んでいる。

## 3. 分子デバイスへの応用

大きさ  $1\mu\text{m}$  の素子を組み合わせた現在のデバイスに対し、ナノサイズの分子素子を用いたデバイスが開発されている。例えば、 $\pi$  電子系の小さい分子をスイッチとして用いれば、 $\pi$  電子の重なり方によって電子を通したり、通さなかったりということを制御できる (図 3)。

このデバイスの開発において、量子化学計算を用いることによって、分子の性質、特性を調べた上でデバイスをデザイン、設計できる。非経験的計算法はより小さい分子に対して巨大な生体分子や結晶系に比べると高精度でよりよい結果を与える。分子デバイスでは重要な部分が小さい分子であるから、非経験的計算法に適している。

## 参考文献

1. H. Nakatsuji, J. Chem. Phys., 1987, 87, 4995.
2. (a) K. Kitaura, T. Sawai, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 1999, 312, 319. (b) K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 1999, 313, 701. (c) T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 2000, 318, 614. (d) K. Kitaura, S. Sugiki, T. Nakano, Y. Komeiji, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 2001, 336, 163. (e) T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 2002, 351, 475.

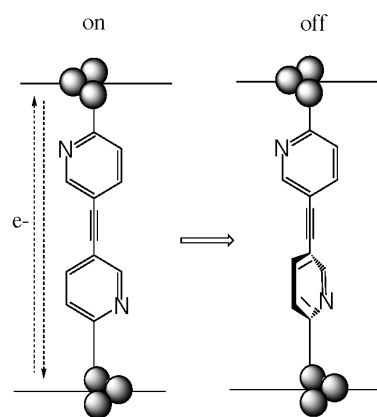


図 3.  $\pi$  電子系を用いた分子スイッチング

分子素子は金属微粒子上に結合され、自己組織化されて使われることが多い。金属微粒子をクラスターモデルで表し、分子素子と結合させたモデルを考えれば、金属の影響も考慮に入れることができる。孤立系のモデルで計算をおこない、よい結果が得られたら、次に周期的境界条件を用いたモデルで自己組織化した状態についても計算を行い、その特性について評価をすればよい。

計算化学的手法と bottom-up-approach との融合により、より効果的な分子デバイスの分子設計、デザインが可能になると考えられる。

## 4. まとめ

計算アルゴリズムの開発、計算機性能の向上、計算方法の開発によって、より大きくより複雑な系に対する計算が可能になってきている。分子デバイスや創薬の現場でそうであるように計算と実験との融合が進んでいる。

計算に先立ち、理論の理解も重要であるが、実在の系のモデル化や基底関数、計算方法の選択など経験的な要素もあるから、計算に慣れるということも重要である。

最近では手持ちの PC で簡単に計算が始められることから、もう少し気軽に研究対象の計算を試みて見られてはいいかであろうか。

## 分子モデリングソフトウェア “Spartan”

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)	1セット	600,000
302-32021	S6E-CW	Spartan '06 Essential Edition for Corporate (Windows)	1セット	350,000
309-32031	S6F-GW	Spartan '06 Full Edition for Government (Windows)	1セット	440,000
306-32041	S6E-GW	Spartan '06 Essential Edition for Government (Windows)	1セット	280,000
303-32051	S6F-EW	Spartan '06 Full Edition for Education (Windows)	1セット	228,000
300-32061	S6F-FW	Spartan '06 Essential Edition for Education (Windows)	1セット	138,000

# 分子モデリングソフトウェア “Spartan” (スパルタン) のご紹介

## (8) 薬化学向け機能について

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝

Spartanには分子軌道計算を使用して静電的なプロパティと分子の活性値との相関をとるなど、薬化学的な使用方法も導入されています。今回は化学特性ディスクリプター (Chemical Function Descriptor : 以下 CFD とします) と PDB ファイルからのリガンドの切り出し機能についてご紹介します。

### ■ CFD とは

薬の分子が、「効く」か「効かない」かはひとえにその分子が、対象とする生体高分子にドッキングするか、しないかにかかっています。では生体高分子はどのように薬の分子を認識しているのでしょうか。化学者が記すような分子式ではなく、水素結合性や疎水性、もしくは静電的な相互作用で引き合っ、または立体障害ではじき出されたりしていると考えられます。このような化学的な特徴を分子構造に付加したものを Spartan では CFD と呼称しています。たとえば図 1 のような分子を Spartan で構築した上で CFD の表示スイッチを入れると図 2 のようになります。

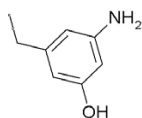


図 1. サンプルの分子

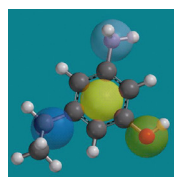


図 2. CFD 表示

ベンゼン環  
黄色 : Aromatic  
炭素原子近傍  
青色 : Hydrophobe  
NH<sub>2</sub>基近傍  
水色 : HBA,  
HBD, +Ionizable  
OH基近傍  
赤色 : HBA, HBD

分子の各部に色分けされた球が表示されています。

ベンゼン環の黄色い球のプロパティを確認すると図 3 のような表示になります。

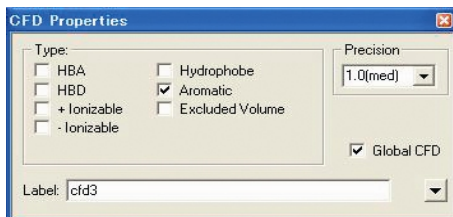


図 3. ベンゼン環の CFD Properties ダイアログ

ベンゼン環が Aromatic 属性の CFD で表示しています。他の属性を付加したり半径を変更したりできます。

### ■ PDB からのリガンドの切り出し機能

Protein Databank で提供されるもののなかにはリガンドを内包しているものがあります。Spartan では直接インターネット上に公開されている PDB ファイルを ID で検索でき、取り込むことができます。

図 4 は PDB から取り込まれた ID : 1opj の構造でタンパクをリボンで、内包する複数のリガンドを半透明表示しています。

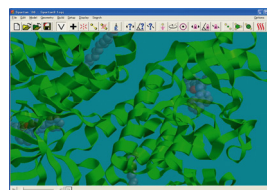


図 4. PDB ID 「1opj」の構造

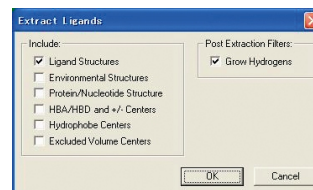


図 5. Extract Ligand ダイアログ

この中にリガンドは 4 つありますがそのうちひとつを切り出してみます。

切り出しのオプション画面は図 5 のようになります。

図 5 ではリガンド分子そのものを水素原子の付加を行って切り出すようになっていますが同時に HBA, HBD, 正負電荷中心、疎水性、排除体積などを特性球として切り出すことができます。こうして切り出された特性球の組み合わせを仮説として、分子の CFD の位置とを重ね合わせることでドッキングの可能性を検査します。

### ■ 仮説と配座ライブラリの重ね合わせ

図 6 はカリウムチャンネル阻害剤の仮説を Spartan で表示したものです。この仮説に分子の配座ライブラリを重ね合わせてみます。

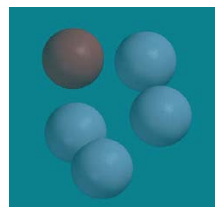


図 6. カリウム阻害剤の仮説

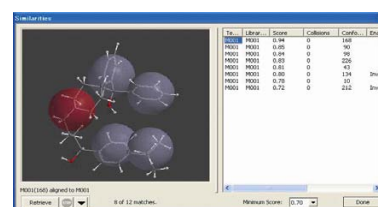


図 7. 仮説と配座ライブラリのスコアリスト

図の水色の球は疎水性または芳香属性、赤い球は正のイオン化中心を示しています。これに Terfenadine 分子の配座ライブラリを重ね合わせます。重ね合わせる分子側の CFD と仮説を構成する特性球を可能な限り重ね合わせてスコア化してリストを作成します。その結果が図 7 です。

仮説の特性球と分子を重ねたグラフィックスがレビュー画面で確認できます。

以上のような機能を使用して、仮説の自動生成こそできませんが、文献やドッキング状態のリガンド情報から仮説を手動でつくりこれに類似分子の配座ライブラリを重ね合わせることで、リード探索を支援することを期待しています。

次回からは Spartan の出力を使ったアプリケーションを紹介いたします。

### 参考文献

S. Ekins et. al., J. Pharmacology and Experimental Therapeutics, 301, 427 (2002)

# ポリオールへのアンチモン吸着機構

北九州市立大学 国際環境工学部 教授 上江洲 一也

アンチモン (Sb) は、アンチモン合金として蓄電池、減磨合金、特殊鋼、硬鉛鋳物、および電線などに使用されている。三酸化アンチモンとしては難燃助剤、塗料、顔料、触媒、およびガラスの清澄剤などに用いられている。純度の高いアンチモンの場合、半導体電子材料として使用されている。アンチモンの急性毒性は、同族元素のヒ素と比較すると 1/10 程度であるが、慢性毒性ではヒ素以上であると言われている。したがって、環境規制対象物質として各種製造工程から排出される廃水からアンチモンを分離する材料が求められている<sup>1), 2)</sup>。

アンチモン分離材料として、われわれは放射線グラフト重合法を用いて高分子基材の孔表面にポリマーブラシ (表面から垂直方向に延伸された配向構造をもつグラフト鎖) を付与し、そのポリマーブラシにアンチモンを捕集するための官能基を導入した機能性膜を開発した<sup>3) - 5)</sup>。機能性膜の調製経路を Fig. 1 に示した。基材としてポリエチレン製多孔性中

空系膜、3 個もつ APD 膜、同じく 3 個もつ IDE 膜、そしてさらに多くの水酸基をもつ Tannin 膜である。これらのポリオールブラシを付与した多孔性中空系膜に Sb (III) 溶液を透過してみたところ、NMG 膜が他の三種類の膜と比較して圧倒的に高い吸着容量を示した。また、これら四種の膜中の官能基密度およびアンチモン結合モル比 (=アンチモン吸着量/官能基密度) を Table 1 にまとめた。Tannin 膜は、アンチ

Table 1. A functional group density of polyol-brush-containing membrane and binding molar ratio of each fiber.

	functional group density [mmol-functional group/g-fiber]	binding molar ratio [-]
NMG membrane	1.7	0.50
APD membrane	2.0	0.045
IDE membrane	1.6	0.07
Tannin membrane	0.1	0.15

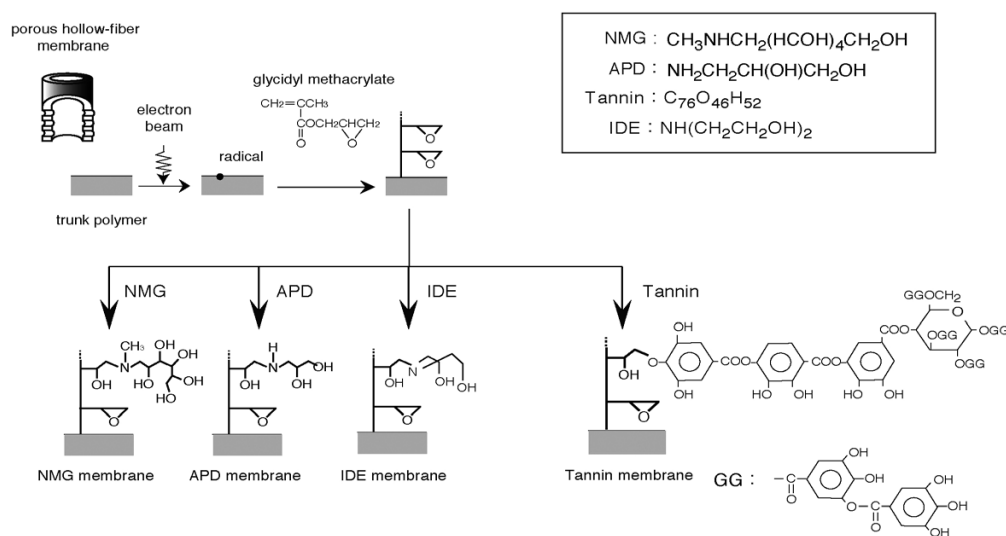


Fig. 1 Preparation of polyol brush onto the porous hollow-fiber membrane.

空系膜 (孔径 500 nm 程度) を用いた。その多孔性中空系膜に電子線を照射してラジカルを発生させ、さらにエポキシ基とビニル基をもつモノマーであるグリシジルメタクリレート (GMA) をグラフト重合させた。エポキシ基という反応性に富んだ官能基が並んだポリマーブラシを高分子の基材表面に付与することができ、さらにそのエポキシ基には様々な官能基を導入することができる。アンチモンと高い錯形成能を有する官能基をポリマーブラシのエポキシ基に導入できれば、アンチモンを高選択的にかつ高容量で吸着することができる。アンチモンを高選択的に吸着する官能基として、水酸基を多くもつものが有望であるということで、Fig. 1 に示すような 4 種類の官能基を導入した。いずれのポリマーブラシにも複数の水酸基が導入されているので、このポリマーブラシをポリオールブラシと呼ぶ。水酸基を合計 6 個もつ

モンの結合モル比が NMG に次いで高いものの、官能基密度を高くできないため、高容量化は難しい。APD 膜と IDE 膜は、官能基密度は NMG 膜と同程度以上であるが、アンチモン結合モル比が非常に低い。

実験的に NMG 膜のアンチモン吸着能が非常に高いということが明らかとなったので、その吸着形態を明らかにすることを試みた。まずは、すでに同定されているアンチモンと水酸基との組み合わせの錯体構造を検索した。見つかった

錯体構造を Fig. 2 に示した。Fig. 2 (a) は三価のアンチモン、Fig. 2 (b) は五価のアンチモンの錯体構造である。いずれの錯体構造も、2 つの分子の隣り合う 2 つの水酸基によってアンチモンと錯形成していた。この構造から推測すると、NMG - Sb (III) および APD - Sb (III) の組み合わせでは同様な錯体構造を取りうる。われわれが推測した NMG - Sb (III) 錯体構造および APD - Sb (III) 錯体構造をそれぞれ Fig. 3 (a), (b) に示した。NMG 膜におけるアンチモン結合モル比が 0.5 であったことから、NMG 膜ではまさに Fig. 3 (a) の構造のアンチモン錯体がポリマーブラシ中に形成されたと推察される。一方、APD においては Fig. 3 (b) のような構造が予測されるにもかかわらず、APD 膜ではアンチモンの結合モル比は 0.045 であり、NMG 膜の結合モル比 0.5 には遠く

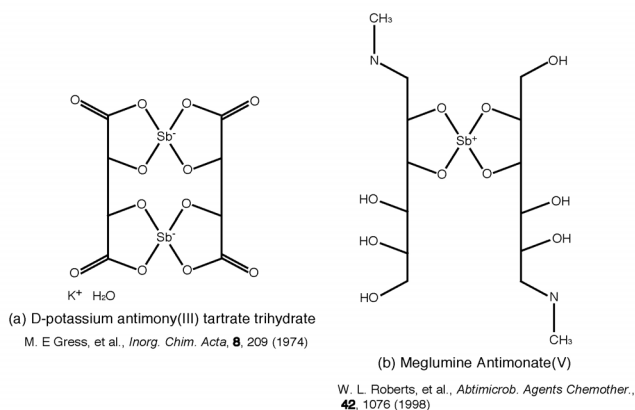


Fig. 2 Complex of antimony with (a) tartaric acid and (b) *N*-methylglucamine.

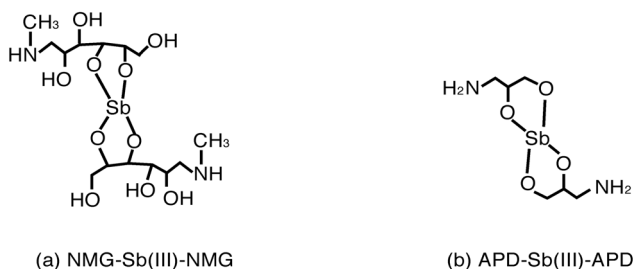


Fig. 3 NMG-Sb(III) (a) and APD-Sb(III) (b) complexes in aqueous solution.

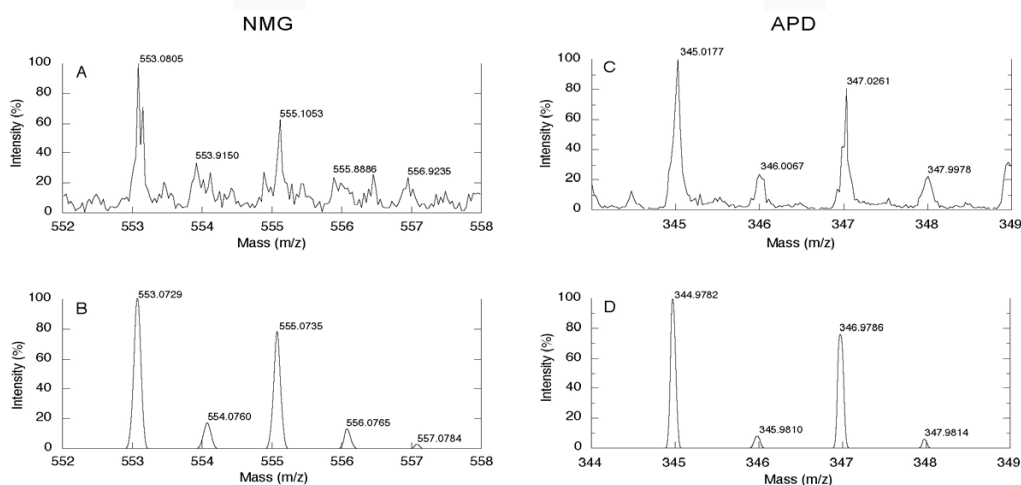


Fig. 4 Positive-ion ESI-TOF mass spectra of NMG-Sb(III) and APD-Sb(III) complex in aqueous solution. Spectra of NMG-Sb(III) (A), NMG-Sb(III)-NMG  $2\text{Na}^+ \text{C}_{14}\text{N}_2\text{Na}_2\text{H}_{30}\text{O}_{10}\text{Sb}$  (B), APD-Sb(III) (C) and APD-Sb(III)-APD  $2\text{Na}^+ \text{C}_6\text{N}_2\text{Na}_2\text{H}_{14}\text{O}_4\text{Sb}$  (D).

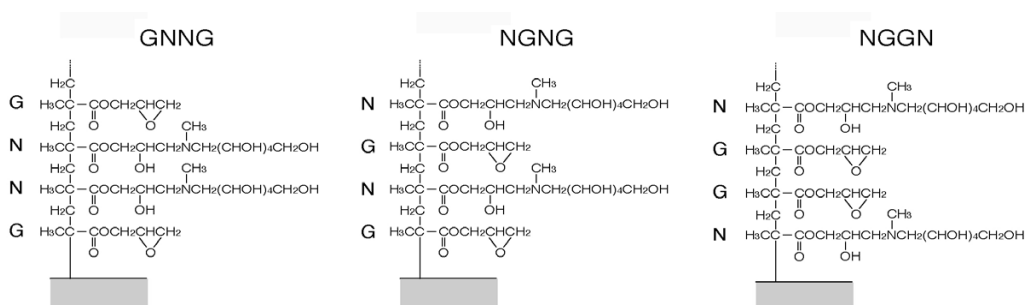


Fig. 5 Sequentially introduced NMG groups to polymer brushes.  
N : *N*-methylglucamine, G: Glycidyl methacrylate.

及ばない。

われわれは、これらの情報から次の仮説をたてた。

「NMGとAPDはポリマーブラシに固定されていない遊離の状態では両方ともアンチモンと錯形成する。しかし、ポリマーブラシに固定された場合、NMGはアンチモンと錯形成できるが、APDはアンチモン捕捉に最適な距離に接近することができないためにアンチモンと錯形成できなくなる。」

この仮説を計算化学的手法を用いて検証するために、まず半経験的分子軌道法であるMOPAC PM3法を用いて、Fig. 3 (a), (b)に示したNMG-Sb(III)錯構造およびAPD-Sb(III)錯構造の構造最適化を行った。これらの最適化構造が、酒石酸-Sb(III)(Fig. 2(a))の結晶構造(ケンブリッジ結晶構造データベースDSKBTR01)と比較して、4つの酸素原子がアンチモンに配位した構造がほぼ同じであることを確認した。半経験的分子軌道法を用いる際には、使用したパラメータの精度が問題になる。そこで、酒石酸-Sb(III)錯体を構造最適化し、その構造と結晶構造とを重ね合わせて、二つの構造間の平均二乗距離の平方根(Root Mean Square Distance, RMSD)を算出した。RMSDの値は0.50Åであり、パラメータの精度は許容範囲内であることを確認した。一方、NMGとAPDが遊離の状態ではアンチモンと錯体を形成するかどうかを実験的にも検証するために、エレクトロスプレーイオン化飛行時間質量分析計(ESI-TOF/MS)によってNMG-Sb(III)およびAPD-Sb(III)の錯体を検出することを試みた(Fig. 4)。

その結果、それぞれFig. 3に示した構造に対応するNMG-Sb(III)-NMGおよびAPD-Sb(III)-APDの錯体が存在することが明らかとなった。したがって、実験的手法と計算化学的手法から、NMGとAPDはポリマーブラシに固定されていない遊離の状態では両方ともアンチモンと錯形成することが示唆された。

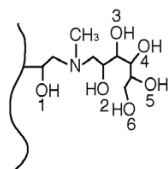
次に、ポリオールブラシにNMGとAPDが固定された場合のアンチモン錯形成状態を計算化学的に考察するために、アンチモン錯体は1本のポリマーブラシ内で形成されるとして、Fig. 5に示す三種類のモデル構造を作成した。いずれもGMAの4量体にNMGが2つ導入されており、GNNGは隣り合ったGMAにNMGが導入された場合、NGNGは1つおきのGMAにNMGが導入された場合、およびNGGNはNMG

の間に2つのGMAが入っている場合である。それぞれ、ポリマーブラシに導入されたNMGの距離が異なるモデル構造である。これらのモデルを半経験的分子軌道法であるMOPAC PM3法を用いて構造最適化した後、混成ハートリー・フォック/密度汎関数法であるB3LYP法(基底系6-31G\*)を用いてエネルギー計算を行った。構造最適化計算もB3LYP法で行う方が望ましいが、今回の計算対象分子では計算時間が非常に長くなると予測されたことと、半経験的分子軌道法は構造最適化の信頼性は比較的高いと考えられるので、構造最適化計算にMOPAC、エネルギー計算にB3LYPという組み合わせを

Table 2. Heat of formation of NMG-Sb(III) structures at each order of NMG group.

	GNNG	NGNG	NGGN
2,3-2,3	0.0	21.3	53.0
3,4-3,4	0.1	-6.0	11.0
4,5-4,5	28.7	-12.4	9.5
5,6-5,6	23.7	9.4	25.2
2,3-3,4	-5.3	-1.0	7.9
3,4-4,5	11.4	22.1	22.0
4,5-5,6	-10.9	13.1	21.2
2,3-4,5	-6.0	4.1	1.1
3,4-5,6	4.8	25.8	24.9
2,3-5,6	3.8	-4.6	0.5
2,3,4,5	12.4	12.2	40.0
3,4,5,6	15.0	57.2	22.4
2,3,5,6	4.3	13.8	36.0

The reference of heat of formation is 2213269.5 kcal/mol. The numbers of OH group of NMG are shown below:



採用した。その計算で得られた生成熱の差をTable 2に示す。最初のカラムの数字は、Table 2の下図に示してあるNMGの水酸基に割り振った番号である。2, 3-2, 3とは、NMGの2番目と3番目の水酸基をそれぞれ2つずつ使ってアンチモンと錯形成をしていることを表す。NMG-アンチモン錯体とAPD-アンチモン錯体は、錯体分子内の原子の種類と総原子数が同一ではない、すなわち構造異性体ではないので、両錯体の安定性を生成熱により直接評価することはできない。そこで、2, 3-2, 3はAPDがアンチモンと錯形成する水酸基の位置と同一であるので、この錯体の生成熱の値を基準値として、生成熱がこの基準値よりも低ければAPDの構造よりも安定であると判断した。NMGの間にGMAが2つ存在しているNGGNでは、全て正の値であるためアンチモンとは錯形成をとりにくい。NMGが隣り合っているGNNGとNMGの間にGMAが1つ存在しているNGNGには、アンチモンと錯形成しやすい組み合わせがいくつか存在する。NGNGでは4, 5-4, 5という2つのNMG中の水酸基の位置が同じ組み合わせが最も安定であるが、GNNGでは4, 5-5, 6という2つのNMG中の水酸基の位置が1つずれた方がより安定であることがわかった。遊離したNMGとアンチモンとの錯体構造では、4, 5-4, 5の場合と4, 5-5, 6の場合には生成熱の差がほとんど見られなかった。したがって、GNNGの場合は2つのNMGが接近しすぎているために、2つのNMG中の水酸基をずらして錯形成する方が安定化すると考えられる。これらの結果より、NMGもAPDもポリマーブラシに固定されることでアンチモンと錯形成するための構造的自由度を失っているため、アンチモンに配位可能な水酸基の位置が制限されることが明らかとなった。したがって、APDはポリオールブラシに固定されることによってアンチモンと錯形成できなくなった可能性が高いと考えている。

## 参考文献

- 齋藤智宣, 常田聡, 齋藤恭一, 平田彰, 水処理技術, **42**(3), 103-111(2001).
- 川喜田英孝, 上江洲一也, 貴金属・レアメタルのリサイクル技術集成, エヌ・ティ・エス, 373-387 (2007).
- S. Nishiyama, Kaori Saito, K. Saito, K. Sugita, K. Sato, M. Akiba, T. Saito, S. Tsuneda, A. Hirata, M. Tamada and T. Sugo, *J. Membr. Sci.*, **214**, 275 (2003).
- T. Saito, S. Tsuneda, A. Hirata, S. Nishiyama, Kaori Saito, K. Saito, K. Sugita, K. Uezu, M. Tamada and T. Sugo, *Sep. Sci. Technol.*, **39**, 3011-3022 (2004).
- T. Saito, H. Kawakita, K. Uezu, S. Tsuneda, A. Hirata, K. Saito, M. Tamada, and T. Sugo, *J. Membr. Sci.*, **236** (1-2), 65-71 (2004).

## eMD<sup>2</sup> -Empowered Molecular Design/Dynamics-

「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 <sup>2</sup> 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 <sup>2</sup> 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

# “eMD<sup>2</sup> (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

## (8) 便利なソフトウェア (その2)

株式会社インフォグラム システム開発部 田上 享

連載最後となる今回は、分子構造データの取り扱いや管理などに便利なツールをご紹介します。

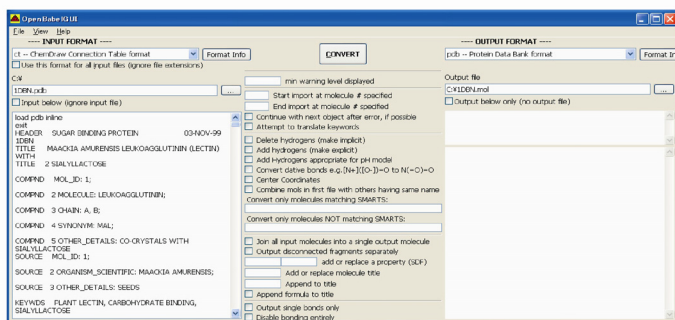
### 1. ファイル変換

現在、数多くの分子構造データのファイルフォーマットが存在しています。

また、分子データを取り扱うソフトウェアも多く、用途に合わせて使い分けるケースも少なくありませんが、ソフトウェアがすべてのファイルフォーマットに対応していることは稀で、それにより、複数のソフトウェアの連携が難しくなる場合があります。

そのような場合、フリーソフトウェアである OpenBabel を用いてファイルフォーマットの変換を行ってみてください。

OpenBabel は非常に多くのフォーマットの入出力に対応しており、主要なフォーマットはほぼ網羅していると思います。



現在、バージョン 2.1.1 が以下のサイトよりダウンロード可能です。

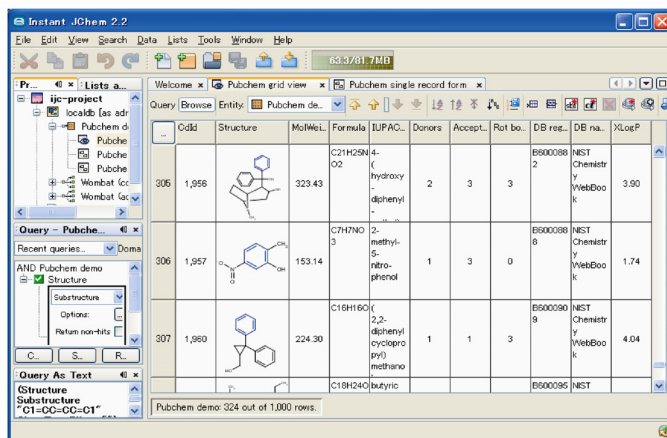
<http://openbabel.org/>

### 2. データ管理

通常のファイルと同様に、分子構造データも数が増えると管理が大変になります。

Office のファイルやテキストファイルであれば、文字で検索して目的にファイルを探すことが出来ますが、分子データの場合は分子構造で検索をしたいというケースも多いのではないのでしょうか。

そのような場合、ChemAxon 社の Instant JChem が非常に便利です。



高機能かつ高速な検索エンジンで、導入も非常に簡単です。取り込んだデータはいつでも手軽に検索でき、ヒットしたデータを Mol ファイルなどに出力可能です。

スタンドアロンで付属のデータベースを使用する場合は無料で使用できます。

詳細な説明や日本語マニュアルは、以下のパトコア株式会社のサイトより入手可能です。

<http://www.patcore.com/chemaxon/instantjchem.html>

また、プログラム本体は以下の ChemAxon 社のサイトよりダウンロードできますので、お試しください。

<http://www.chemaxon.com/product/ijc.html>

### 最後に

8ヶ月間、最後までお付き合いいただきありがとうございました。これまでの内容が、皆様のお役に立てば幸いです。

eMD<sup>2</sup> 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](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>