

WAKO

Infomatic

World

November 2009

No.18

実験生物学者・
実験化学者のための
IT活用誌

Contents

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>

大学初期教育での分子モデリングの利用
～「コンピューターからフラスコまで」を目標とした計算機実験授業～..... 2

明治大学 理工学部 応用化学科
教授 長尾 憲治

Spartan Technical Note
カルボン酸の酸性度の類推..... 8

Spartan体験型ワークショップ 開催のお知らせ.....10

分子モデリングソフトウェア
Spartan '08【スパルタン】For Windows..... 11

“Infomatic World” 創刊三周年記念
分子モデリングソフトウェア “Spartan【スパルタン】”
ITスキルアップ応援キャンペーン.....12

大学初期教育での分子モデリングの利用

～「コンピューターからフラスコまで」を目標とした計算機実験授業～

明治大学 理工学部 応用化学科 教授 長尾 憲治

最近のPCとソフトウェアの目覚ましい進化と高性能化のおかげで、以前はワークステーションで行っていた計算がPCでも可能という認識が常識になりました。現在では、PCを使って分子モデリングやシミュレーションを気軽に行うことが可能になりました。コスト的な面から考えても、分子モデリングは研究室のレベルに留まらず、大学の学部生の学生実験での利用も可能な状況と成りました。本稿では、2000年から明治大学応用化学科（当時は工業化学科でした）で取り組んだ学部2年生と3年生の学生実験に分子モデリングを導入した経緯と結果について紹介したいと思います。

筆者が、分子ソフトウェアと初めて出会ったのは、15年程前のことでした。当時筆者は上智大学で錯体化学の研究室の助手としてルテニウム錯体の研究に携わっていました。お隣の有機化学研究室の先生が三ヶ月無償で借り出してきたUnix版のSpartanを、X線構造解析の計算に使っていたシリコングラフィックスのワークステーションにインストールして使わせてもらいました。当時の私の研究対象であった π 逆供与結合を持つニトロシルルテニウム錯体の最適構造を計算して、その結果を単結晶構造解析のパラメーターと比較してみようと考えました。その計算には非常に時間がかかりましたし、また得られた計算結果も定性的には意味が有りそうでしたが、決して満足のいくものではありませんでした。当時の金属錯体の計算は、計算化学の初心者にはまだ手に余ってしまう様な理論化学の研究課題であると感じました。最近になってやっと、密度汎関数法を使った計算手法による遷移金属錯体のこの種の議論を見かける様になりました。しかし、実際に分子モデリングソフトウェアを使ってみると、別の魅力には気がつきました。自由自在に分子構造が構築でき、その立体的構造を観察し分子の存在感を感じられる。これまで紙の上でしか見ていなかった分子軌道が、画面のモデル上に赤と青に塗り分けられた分子軌道が表示された時にはとてもインパクトがありました。しかし、その時の印象は、分子モデリングソフトウェアは、まだ理論化学や有機化学のごく一部でのみ使用可能なものというものでありました。

そのような印象は、その5年後には大きく変化しました。PCの急激な高速化、グラフィックス性能の向上など、急激な進化により、一般的なPCで分子モデリング（Spartan）が可能となりました。金額や使用法などの面から、以前のUnix版では研究装置といった位置づけであったのが、PC版では高価なツールといった位置まで身近になりました。たった5年で、使ってみたい装置から、研究室で使うべきツールまで進化しました。その時期（1998年）に、筆者は明治大学応用化学科に勤めることになりました。これは丁度、大学

の化学教育にPCの利用が必要とされ始めた頃と一致していました。明治大学に赴任して最初に意見を求められたのが、PCを使った新しい化学教育について夢を語れとういうものでした。そのとき瞬間的に、Spartanの様なグラフィックユーザーインターフェイスを持つ分子モデリングソフトウェアを使った分子構造計算実験を化学の初心者に提供するイメージが浮かびました。この段階では本人はあくまでも気楽に夢を語っただけで、ソフトウェアのコストや教科書¹⁾⁻³⁾のことを考えると学部教育での利用の実現はまだ先のことだろうと、高をくくっていました。しかし、実際には当時の学科のスタッフ達は、2000年度カリキュラムからPCを利用した化学教育を行うための具体案を作成するために筆者に夢を語らせたのでした。こうして本人が希望しないうちにPC化学教育を推進するための首謀者となってしまいました。

全くの計算化学の素人の発想から、新しいPC利用教育を企画することになりました。その素人の思いつきとは次のようなものでした。最近の無機化学の教科書⁴⁾⁻⁶⁾や有機化学の教科書⁷⁾には分子軌道を扱ったコンテンツが多くありますが、実際には、この部分の理解が初心者の学生にはハードルが高く理解するのに難しい内容であります。そこで、これらの講義で扱う分子軌道に関連する内容を学生が学習する際に助けになることを目指した実験科目にしよう、このPC利用教育のコンセプトを定めました。そのためには、量子化学の知識を前提としないで、実験的な手法で分子構造や分子軌道を認識し、分子軌道の役割や性質を理解することに主眼を置いてPC利用化学教育を実施することにしました。実験的な手法で行うという点が重要で、この観点で取り組めば、たとえ量子化学の理解が不十分な学生であっても実験結果の理解と考察が可能であります。したがって、この実験科目を卒業要件に必要な必修科目とすることが出来ます。但し、そのためには卒業生全員に習得可能なレベルに設定することが重要であることは間違いありません。この様な考えに基づいて、我々の学科では、この計算機実験を化学情報実験と呼んで、従来の化学実験と並立する必修の実験授業にする、大胆なカリキュラムを作り上げました。このカリキュラムによって、現在の明治大学応用化学科の教育目標の一つの“コンピューターからフラスコまで”が誕生しました。

2000年カリキュラム以降、化学情報実験（計算機実験の実習）の科目名で学部の2年と3年の2年間（半期×4）に必修科目として実施しています。この実験授業では、毎週2コマ連続の授業時間に（90分×2）、一人一台のPCを使って実験を行います。各半期に、この2コマの実験を12週

実施して2単位の成績評価となります。4つの半期に渡って行いますので、合計で48回の実験で8単位の授業ということになります。この半分の24回は、Spartanを使った分子モデリングの計算実験を行っています。残りの24回の実験は、数値計算、分子動力学、化学工学計算等を実施しています。

24回のSpartanの分子モデリング実験は、各半期に均等に6回の実験を設定しています。その実験コンテンツを表1にまとめました。それらの実験コンテンツは講義科目で学んでいる事柄に関連させて配置しています。2年前期は、無機化学と有機化学の科目の初期に学ぶ内容を対象としています。原子価結合法に基づく分子構造の構築方法とその分子の形についての実験と、2原子分子の分子軌道に関連する実験を行います。2年後期は、有機化学の立体構造の理解を目的にした実験を行います。3年前期は、有機化学反応の反応機

構や選択性に関する計算を行います。3年後期は、金属錯体化合物の構造や電子状態に関する実験を行います。この金属錯体化合物の計算は、研究のレベルでは膨大な時間がかかる高度な計算（密度汎関数法）が必要です。しかし、この実験には、実験結果を精密に再現できる計算が必要なのではなく、性質や構造がある程度説明できる計算で充分であると考えています。そのためには、典型的な遷移金属元素が使用できる ab initio (Hartree-Fock) の計算手法が用意されている Spartan は我々の実験にうってつけでありました。我々がこの実験の為に必要な分子モデリングのソフトウェアには、決して精度の高い計算結果をもたらす性能が必要なのではなく、典型的な遷移金属元素にも対応して計算が可能であるという性能の方が重要でした。その意味において、Spartanには高度な精密な計算が可能な性能とは別の観点（初期導入教育）からのメリットも持ち合わせていました。

表1. Spartan を利用した化学情報実験の実験コンテンツ

2年前期（6週）
1. 分子モデリング（1）-線状分子 2. 分子モデリング（2）-平面状分子 3. 分子モデリング（3）-複雑分子 4. 原子軌道 5. 等核2原子分子の分子軌道（1） 6. 等核2原子分子の分子軌道（2）
2年後期（6週）
1. 鎖状分子の構造と歪エネルギー 2. 環状分子の構造と歪エネルギー（1） 3. 環状分子の構造と歪エネルギー（2） 4. 振動解析と不斉分子 5. 分子軌道 6. 不安定化学種
3年前期（6週）
1. 立体配置の反転：窒素、リン、硫黄の立体化学 2. SN2反応の立体化学と活性化エネルギー 3. 付加反応の遷移状態計算：立体選択性と位置選択性 4. カルボカチオンの安定性とピナコール転位 5. ペリ環状反応1 Diels-Alder反応の位置選択性・endo則 6. ペリ環状反応2 Cope転位・Claisen転位・エン反応
3年後期（6週）
1. コバルト錯体化合物の構造 2. 窒素供与体配位子（N donor ligand） 3. 酸素供与体配位子（O donor ligand） 4. 6配位錯体（コバルト錯体）のd軌道のエネルギー準位 5. 八面体6配位錯体のd軌道（ e_g 軌道）の性質 6. π 逆供与能を有する配位子（一酸化炭素）を持つ6配位錯体（ルテニウム錯体）のd軌道

我々が発想した化学と計算化学の両方に初心者学生に教えるというカリキュラムに適切な教科書が見当たりませんでした。そこで、これらの実験の教科書（実験指針）は、参考文献に挙げたワークブックと教科書を参考にして、化学と計算化学の両方について初歩学生に教えるための教科書を新たに作成しました。初年度の実験授業では、実験を進めながら、教科書を修正し学生の反応を見て実験課題を追加して、2年間に渡って修正と加筆を加えました。この2年間は学科を4グループに分けて実施していましたので、最初のグループの実験で生じた問題点を修正し、次のグループでその修正を試し、また教科書を修正する作業を繰り返しました。これにより最初の1年間で教科書を4回改訂しました。2年目にも、この実験実施—教科書修正のサイクルを繰り返しました。3年目にはほとんど修正の必要はなくなっていましたので、およそ8回の改訂を経て現在の教科書が完成しました。この実験授業では、当初はPC Spartan Proを使っていたのですが、2005年度にPCのリプレースとSpartan 04にバージョンアップしました。この時に、教科書に操作上の小さな改訂を加える必要がありました。

2年前期の実験テーマについて少し具体的に紹介してSpartan 利用実験の紹介をしたいと思います。実験は前半の1～3週と後半の4～6週で課題の色合いを変えて実施しています。この実験を受講する学生の化学知識のレベルは、原子価結合法を使って分子構造を理解することができ、2原子分子の分子軌道を知っているという段階です。しかし、まだその分子軌道の重要性を十分に理解しているわけではなく、ちょっと悪く言えば、講義で説明されて試験の課題として記憶する必要があるという程度です。また、学生は初めて分子モデリングソフトウェアを使うことになりまますから、前半の1～3週ではソフトウェアの使い方の習熟から始めなくてはなりません。したがって、分子モデリングの初歩の初歩といった課題になります。

1週目は、エタノール、エタン、エチレン、アセチレンの構造の構築法（フラグメントの選択やMake bondを使った変形）、構造のスケッチと、距離や角度や二面角などの構造パラメーターの測定を行います。ここでは、操作の習熟と構

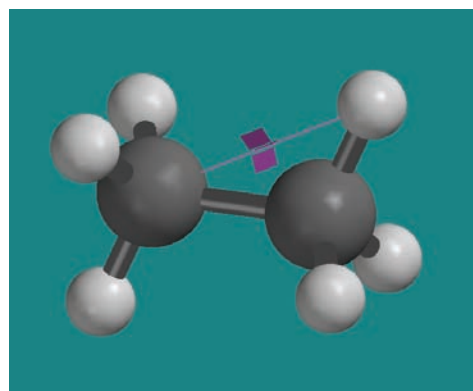


図1. エチレンの力場エネルギー変化曲線作成のために設定する結合していない炭素と水素原子間のコンストレイン。

造の特徴について学びます。実験の最後には、分子構造とエネルギーの関係を理解し、最適構造の意味を理解ねらった実験を行います。この段階では、結合にコンストレインを設定して、その設定条件を変更しながら計算を進めるエネルギープロファイルの機能を使用して結合長を変化させることは、操作上也学生の理解の点でも問題があると考えられます。そこで、図1に示すように、エタン分子の結合が無い部分にコンストレインを設定します。この空間距離にコンストレインを指定してエネルギーミニマイズ（MM法）を使って強制的に変化させると、炭素—炭素結合が変化しその時の力場エネルギーが得られます。感覚的には、分子につっかえ棒（ある時はひっつけ棒）を押し込んで変形させているイメージです。こうすると、力場エネルギーには、炭素—炭素結合変形によるエネルギー変化も含まれます。1.90~2.40 Åまで 0.1 Åの間隔でコンストレイン（つっかえ棒）を変化させ、その時の炭素—炭素結合距離と力場エネルギーを測定します。こうしてマニュアルで得た測定結果を使って、炭素—炭素結合距離に対して力場エネルギーをプロットしてポテンシャル曲線風の力場変化曲線を作成させます。

2週目はベンゼン環を題材にします。オーソドックスなsp²の炭素を繋げて作る方法と、シクロヘキサンを基に2重結合をつくる方法で分子の構築法を練習します。また、図2

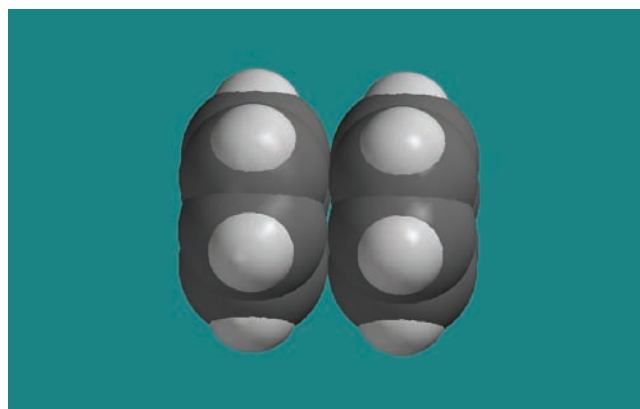
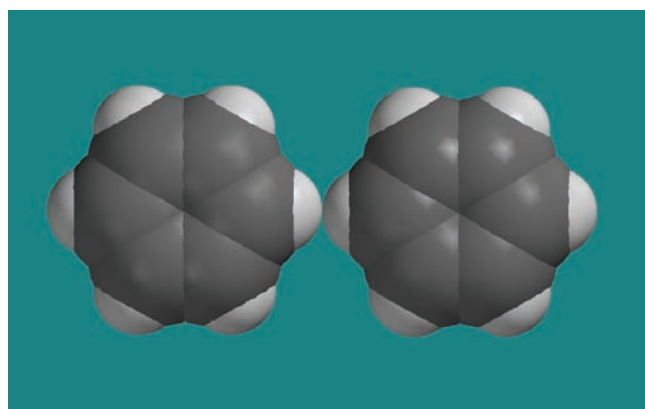


図2. ベンゼンの大きさを認識するための、2種類の接触モデル。

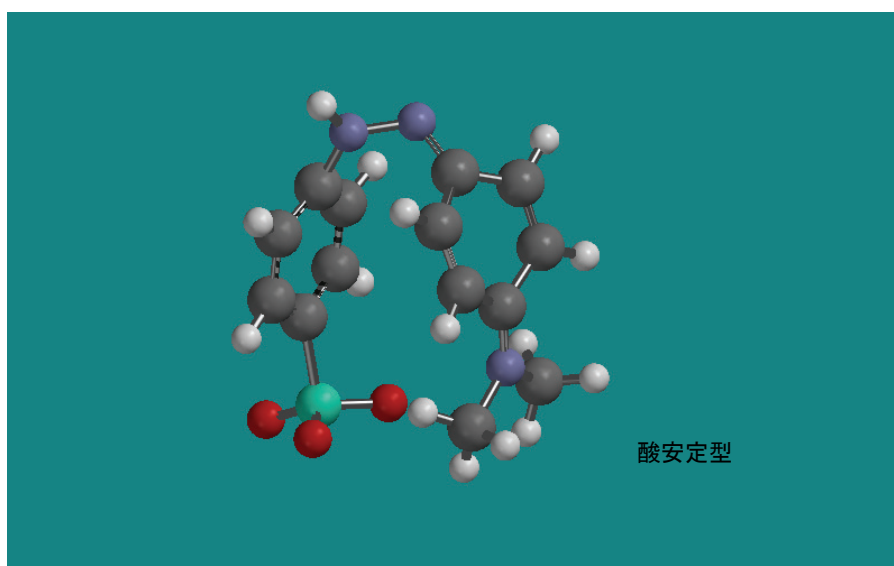
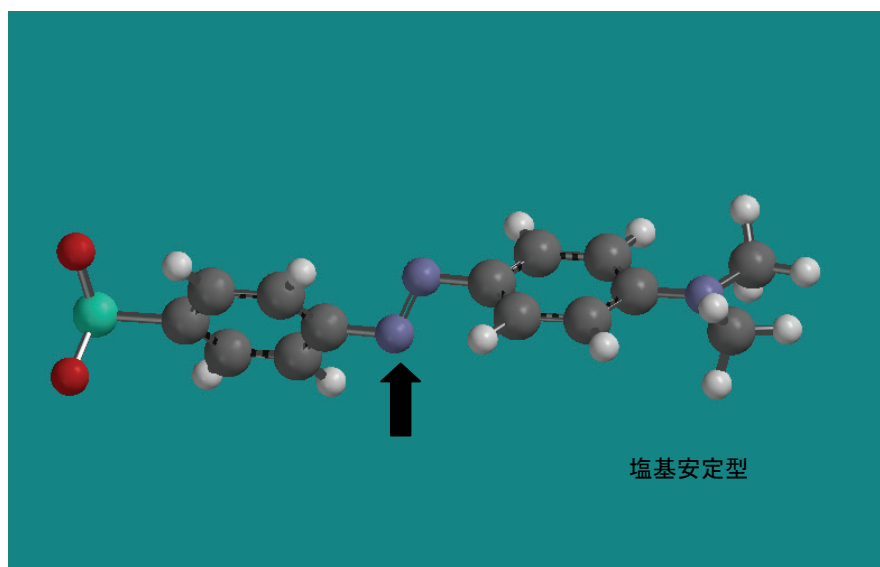
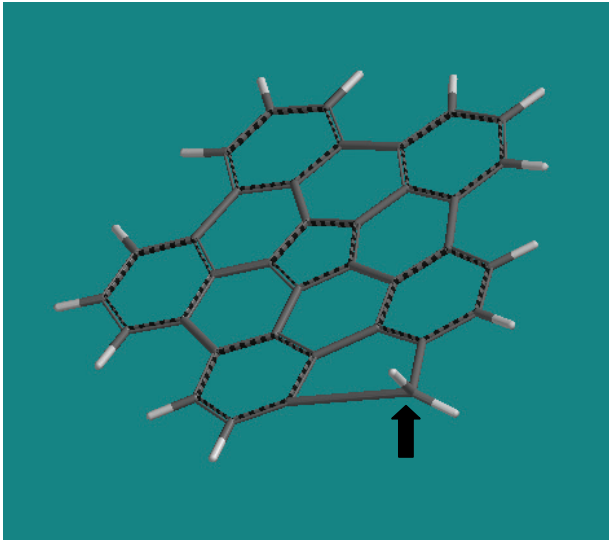


図3. メチルオレンジの塩基安定型と酸安定型の構造

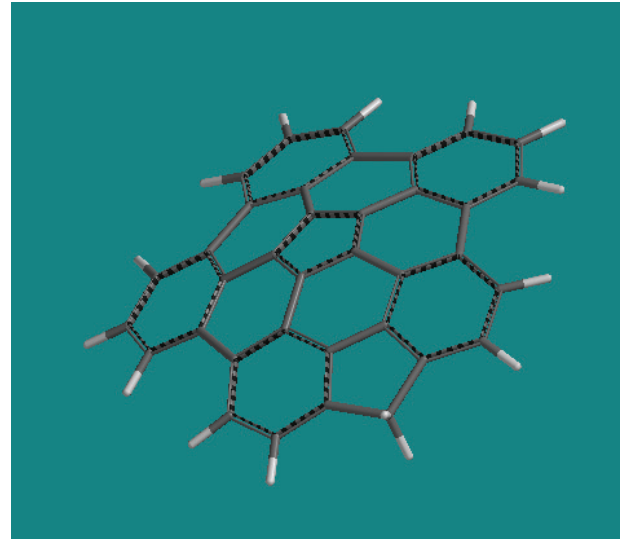
の様に二つのベンゼン環を画面上で2種類の接触モデルを作成し、ベンゼン環の大きさを測定します。これだけでは、多少面白みに欠けるので、最後に複雑な分子の構築をさせています。題材は1年生の基礎化学実験で合成した。メチルオレンジの塩基安定型と酸安定型の構築を行います(図3)、ただしこの段階では、本格的な構造最適化計算は使わずにエネルギーミニマイズを使った計算(構造の歪とり)にとどめています。初心者の段階では、構造変化の様子が目に見えるエネルギーミニマイズ(MM法)を使った計算の方が、構造最適化の過程を感覚的にイメージするのに役に立つと考えてのことです。初めに、二つのフェニル基の間にアゾ基を持つ塩基安定型を構築します(図3上図)。特に意識しなければ、アゾ基の配置がトランス配置の分子が構築できます。このアゾ基の2重結合を回転させてシス配置の分子を作成し、二つの配置の違いについて力場エネルギーを使って考察

させます。この塩基安定型のアゾ基の一つの窒素(図中に矢印で示した)に水素を付加し、一つの環がキノンイミン型になるように結合の次数を調整します。次にエネルギーミニマイズをかけると、分子は2枚貝のように二つの環を合わせる様に動いて安定構造に変化します(図3下図)。この様に分子が変化していく様子が観察できると、学生は興味を示してくれます。ここが、我々の変化の様子を見せるという狙いが学生の興味にぴたりとはまった場面です。

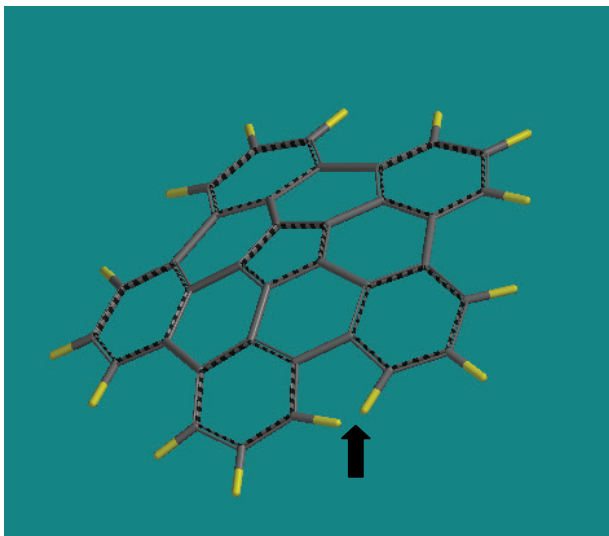
3週目は分子構造構築に関する最後仕上げとして、炭素42個からなるグラファイトを作成し、ここからC₆₀のサッカーボールを作成します。この作成法はSpartanワークショップノート⁸⁾にも紹介されていますが、我々はここに少し違った味付けをしています。その手順の一部を図4に示しました。実験の手順は6員環だけからなるグラファイトのシ



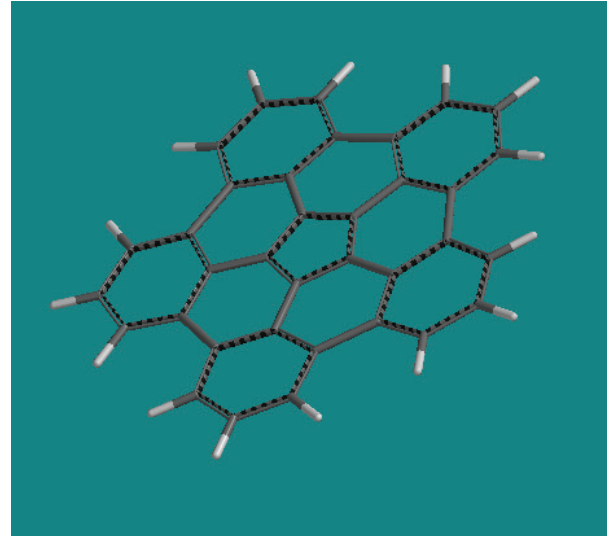
手順 1. 平面構造に sp^3 炭素を導入



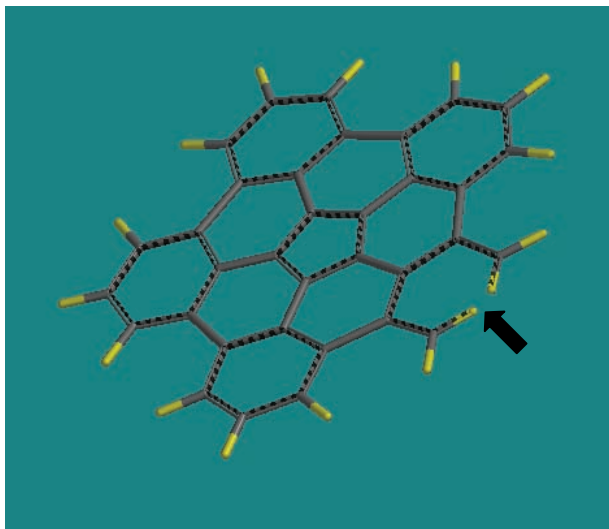
手順 2. エネルギーミニマイズ後の曲面構造



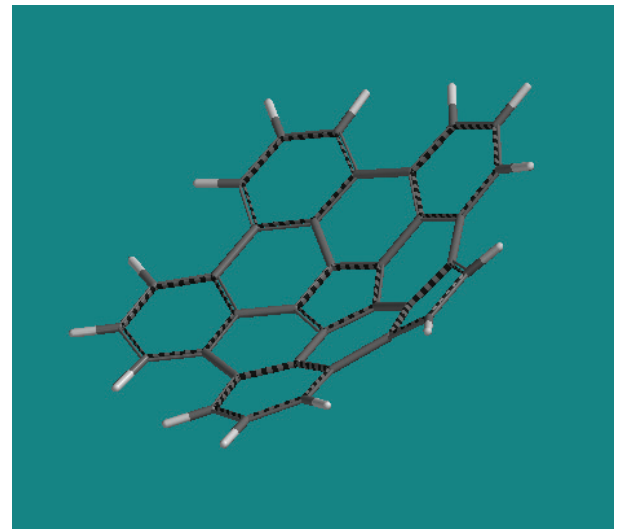
手順 3. sp^3 炭素を削除



手順 4. エネルギーミニマイズ後の平面構造



手順 5. 外周の炭素を削除後、2 個目の 5 員環作成



手順 6. エネルギーミニマイズ後の曲面構造

図 4. 平面グラファイト構造から曲面構造の作製過程

ート (C_{42}) をもとに、中心に5員環を持つシート (C_{35}) を作成します。5員環の周りの6員環の一つを5員環に変えて5員環を二つにしたシート (C_{34}) について、エネルギーミニマイズ (MM 計算) をすれば古いバージョンの PC Spartan Pro ではシートが丸まってボウル状に変形します。この操作で5員環が丸くなる構造には重要であることが分かりますが、Spartan02以降からは、この操作ではシートが丸まってくれません。しかし、裏技がありました。5員環を持つ C_{35} のシート構造の外周の余っている結合の2本を一個の sp^3 炭素で結んでエネルギーミニマイズをすると、この sp^3 炭素によってシートは無理やり丸められます。当然この sp^3 炭素を削除してエネルギーミニマイズをかければ、 C_{35} のシートは元の平面に戻ります。この操作で5員環を一個持つ C_{35} の最適構造は平面であることが分かります。次に一度変形させた C_{35} をもとに5員環を2個に増やした C_{34} を作成し、エネルギーミニマイズをすると、 C_{34} のシートは丸まってボウル状に変形します。ここから C_{30} まで5員環を徐々に増やしていくについて丸みを増していきます。Spartan のエネルギーミニマイズは対称的な構造を重視しているようで、対称的な構造から歪む方向への最適化は障壁が高いようですが、一度折り曲げる変形を経験させると、合理的な最適構造が検索可能になることもあるようです。この後もベンゼン環を加えてこれを5員環にして C_{60} までを作成します。最後に作成した C_{60} の半分の炭素を削除して、スペースフィリングモデルで観察して、内部に空間があることを確認します。この隙間の中心に水素原子、ナトリウム原子、リチウム原子などを置いてその空間のおおよその大きさを測定します。この3週目の実験を学生が一番面白いと感じてくれる実験のようで、非常に一生懸命に取り組んでくれます。このコンテンツは、部分的にオープンキャンパスや体験講義などで高校生向けにも使っています。

2年生前期の残りの後半の4~6週の実験テーマは、化学的知識と分子軌道の基本の習得を目指しています。この実験のねらいは、学生にじっくり考えさせて、分子軌道の意味の深さや面白さなどに魅かれていくようにしむける所がありますが、なかなか簡単にはそのようには行きません。学生はインパクトの感じられる実験には積極的になりますが、じっくり考える段階になると急に消極的になってしまいます。ここでは、学生に実験の理解にモチベーションをもたせるために、この実験の結果を別の無機化学の講義科目の試験の課題と関係づける様にしました。つまり、この実験の理解が無機化学の講義科目の試験対策に結びつくように、実験の課題は無機化学の初歩で扱う重要な2原子分子の分子軌道を扱います。

4週目の課題は水素分子 (H_2) を題材にして、 H_2^+ イオン (1電子)、 H_2 分子 (2電子)、 H_2^- イオン (3電子) の最適構造と分子軌道を計算します。この実験では、電子の個数により結合長とIR伸縮振動が変化しますので、その結果から結合性軌道と反結合性軌道の性質を考察します。5週目は F^- イオンと F_2 分子の分子軌道計算を行い、原子軌道 (s, p)

の形と、分子軌道の形 ($\sigma, \sigma^*, \pi, \pi^*$) の特徴とその区別について考察します。計算結果のアウトプットから各分子軌道のエネルギー (Eigenvalues) を読み取り、分子軌道のエネルギー準位図を作成します。

最後の6週目は酸素分子 (O_2) を題材に、3重項と1重項酸素の構造と分子軌道 (電子配置) についてエネルギー準位図を作成して考察します。この実験の目標とする学習到達レベルは、分子軌道の形 ($\sigma, \sigma^*, \pi, \pi^*$) の特徴が分かり、通常の酸素分子が常磁性の3重項酸素であることが分かるというあたりに置いています。本当ならもっと深いレベルまで到達することを目標としたいところですが、必修の実験科目での目標は履修者全員が確実に到達できる所に設定する必要がありますので、このレベルが丁度良い所だと考えています。

ここまで、筆者が担当し企画した2年前期の化学情報実験1の内容について紹介しました。この実験を導入にして、化学情報実験2、3、4と実験を積み重ねていきますが、この稿ではこれらの実験の詳しい内容については省略させていただきます。この実験授業を通してSpartanを初心者学生に紹介してきた経験から思いついたことが一つあります。私などの世代 (40~50才) は、さんざん紙に書かれた図から分子の立体感をイメージする訓練を積んだ後に、Spartanが作る画面中の分子の表示を見てその立体感に感激しました。しかし、今の20才の学生は、Spartanの画面上に平面的な分子の存在感を感じる様です。私達の様に奥行きを意識した画面の中の立体的な分子としての認識とはならないようです。その分子の立体感を理解するために、従来のプラスチック製のモデルを使ってその感性を養う必要があります。実際に近いプラスチック製モデルが、バーチャルな画像より認識といった点で優れているのは明らかかもしれませんが、この立体感の認識の点で、Spartanなどの分子モデリングソフトウェアの一層の進化に期待したいと思います。おそらく学生がSpartanの画面に立体感を感じないのは、その画面上にあるものすべてが想像上のものであるためではないかと思えます。例えば、その画面の中に分子構造と共に人間の手が表示され、その手を使って分子をつまんだり、折り曲げたり、引き延ばしたり、ねじったり出来たら、手の立体との認識の比較から分子の存在感を実感できるのではと思います。ゲームの世界の立体感にせまるグラフィック表示の実現を熱望しております。

最後に、Spartanを利用した本化学情報実験の実現は、実験コンテンツの提案と実験指針を作成していただいた本学の西浜忠明先生や鹿又宣弘先生 (現在早稲田大学化学・生命化学科) をはじめとする応用化学科の多くの先生方と、実際の実験の指導と実施上の問題点の改善にあたってくれた多くのティーチングアシスタントの大学院生の皆さんの熱意と惜しみない労力の賜物であります。ここに深く感謝いたします。

参考文献

1. W. J. Hehre, L. D. Burke, A. J. Shusterman, and W. J. Pietro, 園田高明, 友田修司, 堀憲次, 平山俊一, 千住孝俊 共訳, 計算有機化学実験, アイネック学術出版, 1996。
2. W. J. Hehre, A.J. Shusterman, and J. E. Nelson, The Molecular Modeling Workbook for Organic Chemistry, Wavefunction Inc., Irvine, CA, 1998. W. J. Hehre, A.J. Shusterman, and J. E. Nelson, 幅田陽一 訳, 有機化学のための分子モデリングワークブック, 株式会社CRC総合研究所, 2000。
3. W. J. Hehre, and A.J. Shusterman, 内田典孝 訳, 化学教育における分子モデリングの導入 第2版, 株式会社CRC総合研究所。
4. F. A. コットン, G.ウィルキンソン, P. L. ガウス 著, 中原勝言 儼 訳, 基礎無機化学[原著第3版], 培風館, 1998。
5. D. F. Shriver, P. W. Atkins, C.H. Langford 著, 玉虫伶太, 佐藤弦, 垣花真人 訳 シュライバー無機化学 (原著第2版), 東京化学同人, 1996。
6. J. E. Huheey 著, 小玉剛二, 中沢浩 訳, 東京化学同人, 1984。
7. J. McMurry 著, 伊東椒, 児玉三明, 荻野敏夫, 深澤義正, 通元夫 訳 マクマリー有機化学 (第4版), 東京化学同人, 1998。
8. 内田典孝 Spartan ワークショップノート 分子モデリング演習 初歩の初歩, 米国法人 Wavefunction 日本支店, 2006。

Spartan Technical Note

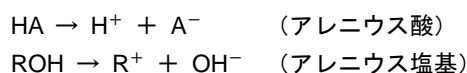
カルボン酸の酸性度の類推

“酸”と“塩基”は、化学における最も基本的な物質の分類のひとつで、その定義は時代とともに拡張されてきました。現在では下記の3つがよく知られています。

1. アレニウスの定義 (1884年)
2. ブレンステッド・ローリーの定義 (1923年)
3. ルイスの定義 (1923年)

最も基本的な「アレニウスの定義」によれば、“酸”とは水 H₂O に溶けて水素イオン (プロトン) H⁺を生じる物質、“塩基”とは水酸化物イオン OH⁻を生じる物質のことです。

すなわち、“酸”を HA、“塩基”を ROH とすると、下記のように表現できます。



本ノートでは、“Spartan”で作成できるグラフィックスの1つである「静電ポテンシャルマップ」を利用して、カルボン酸の酸性度を説明できることを紹介します。

「静電ポテンシャルマップ」とは、正の点電荷を分子近傍に置いたときに受けるポテンシャルエネルギーを全電子密度面の上に色分けしたものです。[言い換えれば、分子表面の電荷分布 (電子が豊富にある場所や欠乏している部位) を色分けしたものです]

表1. 各種カルボン酸と酸解離定数 pKa

ID	カルボン酸 (R-COOH)	示性式 (R-)	pKa ¹⁾
a)	Trichloroacetic Acid	Cl ₃ C-	0.7
b)	Oxalic Acid	HOOC-	1.23
c)	Dichloroacetic Acid	Cl ₂ CH-	1.48
d)	Cyanoacetic Acid	NCCH ₂ -	2.45
e)	Chloroacetic Acid	ClCH ₂ -	2.85
f)	Fumaric Acid (trans)	HOOCCH=CH-	3.10
g)	Terephthalic Acid	p-HOOC ₆ H ₄ -	3.51
h)	Formic Acid	H-	3.75
i)	(E)-3-Chloroacrylic Acid (trans)	ClCH=CH-	3.79
j)	Benzoic Acid	C ₆ H ₅ -	4.19
k)	p-Chlorocinnamic Acid	p-ClC ₆ H ₄ CH=CH-	4.41
l)	Crotonic Acid (trans)	CH ₃ CH=CH-	4.70
m)	Acetic Acid	CH ₃ -	4.75
n)	Pivalic Acid	(CH ₃) ₃ C-	5.03

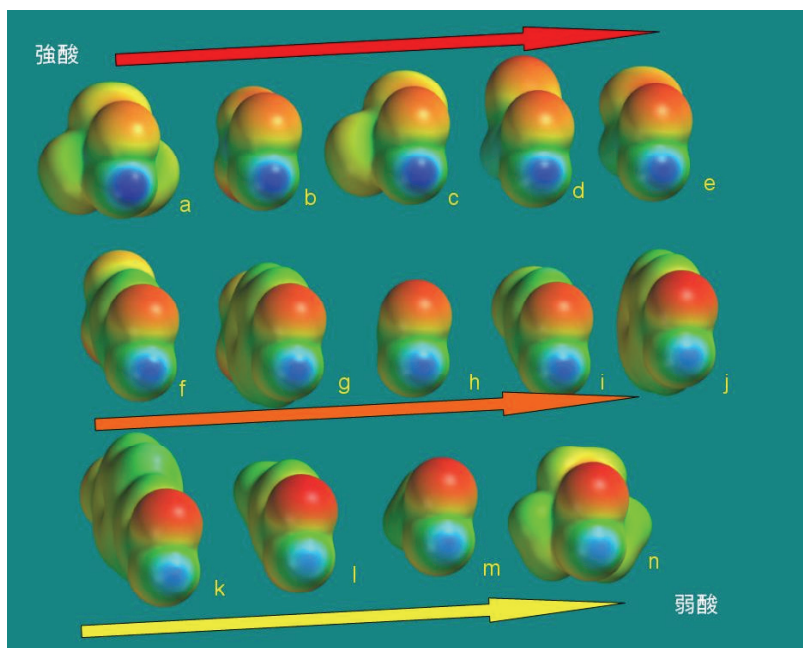


図2. カルボン酸の静電

図2に表1のカルボン酸の静電ポテンシャルマップを順番に並べて表示します。

pKaの値の「小さなものから大きなものへ」の順、言い換えれば「強酸から弱酸」に順番に並んでいます。水素イオンの解離すべき部位が青く塗られており、電子の欠乏により水素イオンとして解離する可能性を示唆しています。また強酸ほど青色の領域が広く、かつ濃いことがわかります。

この部位における静電ポテンシャルの値(領域の最大値)と表1のpKaの相関図を作成します。

酸性に寄与する水素における静電ポテンシャルとその物質の酸性度には、下の式で表される合理的な相関が認められることがわかります。

$$\text{pKa} = -0.23 \times \text{静電ポテンシャル} + 20$$

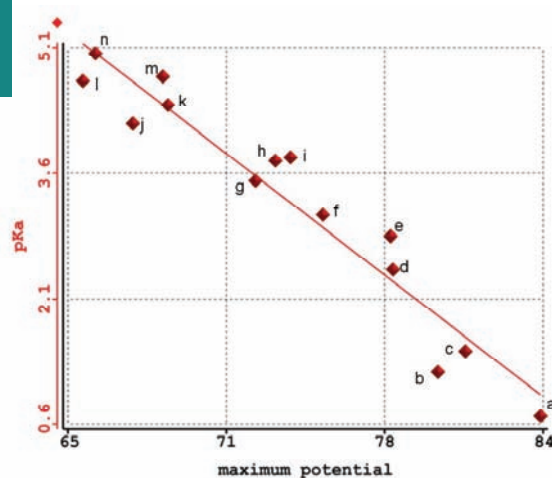


図3. 酸解離定数と静電ポテンシャルの相関図

(関連商品)

ID	コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
a	200-02402	Trichloroacetic Acid	試薬特級	25g	1,300
b	156-00452	Oxalic Acid	和光特級	25g	1,400
c	040-16653	Dichloroacetic Acid	和光一級	25ml	1,500
d	039-19162	Cyanoacetic Acid	和光特級	25g	1,400
e	033-02232	Chloroacetic Acid	試薬特級	25g	1,550
f	069-00652	Fumaric Acid	和光特級	25g	1,200
g	208-08162	Terephthalic Acid	和光一級	25g	1,300
h	068-02241	Formic Acid (abt. 98%)	和光一級	100ml	1,130
i	500-56921	trans-3-Chloroacrylic Acid (ALF A15527)	—	1g	19,200
j	020-00982	Benzoic Acid	試薬特級	25g	1,100
k	322-35982	p-Chlorocinnamic Acid	—	25g	7,300
l	037-04832	Crotonic Acid	和光特級	25g	1,250
m	017-00256	Acetic Acid	試薬特級	500ml	840
n	163-02803	Pivalic Acid	和光特級	25ml	2,400

参考文献

1. E.P.Sargeant and B. Dempsey: Ionization Constants of Organic Acids in Aqueous Solution, IUPAC no. 23 (Permagon Press 1979).

分子モデリングソフト「Spartan」 体験型ワークショップ 開催のお知らせ

Spartan の操作の基礎を体験、演習いただける午後半日のコースです。少人数制ですので、個別のご質問にも可能な限り対応させていただきます。

- コース名: ワークショップ「Spartan を用いた計算化学実験」ショートコース [定員 20 名]
- 使用ソフトウェア: Spartan'08 for Windows 最先端の分子モデリングパッケージ
- 日時: 2009 年 12 月 10 日 (木) 13:00~16:30 於: 和光純薬工業(株) 東京支店 6F セミナー室
[〒103-0023 東京都中央区日本橋本町 4-5-13; TEL: 03-3270-8243(学術部)]
- 内容: ・13:00~14:30 インTRODクシヨン
[分子力学と量子力学]
どんな計算ができますか
[①平衡構造、遷移構造 ②配座解析 ③反応/活性化エネルギー
④スペクトル ⑤エネルギープロファイル]
- ・14:40~16:00 グラフィックスをつくってみましょう
[①電子密度面 ②静電ポテンシャルマップ ③分子軌道マップ]
- ・16:00~ Q & A、自由演習
- 費用: 無料
- お申し込み方法: 下記 URL より、必要事項をご入力の上お申し込み下さい。

> <http://www.wavefun.com/japan/events/short.html>

「Spartan を用いた計算化学実験 : アドバンスコース」開催のご案内

Wavefunction, Inc. 社長 Dr. Warren J. Hehre の来日に伴い、Spartan 各シリーズのユーザー、もしくは上記ショートコースを受講して Spartan の基本操作を習得されている皆様を対象とした、上記コースを開催予定です。

本コースでは、分子モデリングによってどのようなアプローチ及び考察をするのかを、具体的かつ実際的な例題を用いて解説いたします。(レクチャーは英語ですが、テキストは日本語です)

日時: 2010 年 1 月 19 日 (火) 10:00~16:00
場所: 京華スクエア内ハイラクセンター (東京都中央区)
定員: 16 名

お申し込みはこちら

> <http://www.wavefun.com/japan/events/advance.html>

■Dr. Warren J. Hehre 略歴

Wavefunction, Inc. President & CEO。1945 年アメリカ NewYork 生まれ。Cornell 大学卒、Carnegie-Melon 大学にて学位取得 (Dr.Pople)。

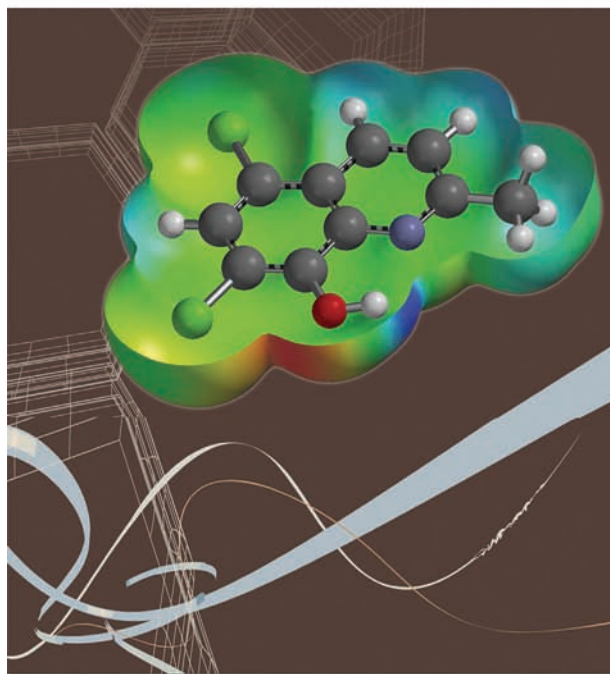
1972 年から California 大学 Irvine 校所属、1977 年同校教授、1995 年 同校名誉教授。コンピュータケミストリーの方法論の確立と開発及び有機化学、有機金属への適用についての研究、著作多数。

1991 年分子モデリングの実用的アルゴリズム及び方法論を実現するソフトウェア開発会社、Wavefunction, Inc. 設立。

分子モデリングソフトウェア

Spartan'08

[スパルタン] For Windows



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 Spartan(スパルタン)シリーズ。さらに進化した Spartan'08 が新登場です。これまでスパルタンシリーズをお使いの方、他の分子モデリングソフトウェアをお使いの方、またこれからご検討になる方もぜひ一度 Spartan'08 をお試しください。

マルチコア環境に対応

Quad-Core までのプロセッサ環境に対応した並列化処理を導入、データ処理速度が向上しました (Full Edition の場合)。

新しい溶媒モデルを採用

イオンに対する精度が向上しました。

NMR の充実

^{13}C の化学シフトに補正式を導入し、実験値をより正確に再現、また ^1H の化学シフトにはカップリングも導入し、虫眼鏡ツールでピークが分かれているのを確認できるようになりました。

データベースを充実

SMD (Spartan Molecular Database) を拡張、低分子 15 万件の構造を内蔵しました (オプションでフルセットの場合)。既知の構造は計算の必要がなく操作時間を短縮できます。Life Chemicals、Maybridge のライブラリを追加、配座ライブラリを内包し類似性解析などに使用できます。

Spartan ファイル形式の拡張

MS Word/PowerPoint/Excel などの外部ファイルを Spartan ファイルに埋め込むことが可能となり、関連ある情報を内包できるようになりました。

動作環境システム

- Intel Pentium III 以上または AMD Athlon
- Windows XP、VISTA
- Microsoft Internet Explorer 6 以降
- メモリー実装 : XP は 1GB、VISTA は 2GB 以上
- 空きディスク容量 : 60GB
- CD/DVD-ROM ドライブ
- モニター解像度 1024×768 以上

価格表

コード No.	メーカーコード	品 名	容 量	希望納入価格(円)
303-88081	S8F-CW	Spartan'08 Full Edition for Corporate (Windows) スパルタン'08 フル、企業向け (ウィンドウズ版)	1 セット	600,000
302-88051	S8E-CW	Spartan'08 Essential Edition for Corporate (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、企業向け (ウィンドウズ版)	1 セット	360,000
303-88101	S8F-GW	Spartan'08 Full Edition for Government (Windows) スパルタン'08 フル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	444,000
306-88071	S8E-GW	Spartan'08 Essential Edition for Government (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	288,000
300-88091	S8F-EW	Spartan'08 Full Edition for Education (Windows) スパルタン'08 フル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	240,000
309-88061	S8E-EW	Spartan'08 Essential Edition for Education (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	138,000
300-88111	S8SA-PW01	Spartan Student Edition, Single Pack Access Code (Windows) スパルタン、学生向け、1ライセンス (ウィンドウズ版)	1 セット	12,000
307-88121	S8SU-DW01	Spartan Student Edition, Single Pack USB Dongle Set (Windows) スパルタン、大学向け、1ライセンス (ウィンドウズ版)	1 セット	72,000
304-88131	S8SU-DW10	Spartan Student Edition, 10 License Pack (Windows) スパルタン、大学向け、10ライセンスパック (ウィンドウズ版)	1 セット	照会
301-88141	S8SU-DW30	Spartan Student Edition, 30 License Pack (Windows) スパルタン、大学向け、30ライセンスパック (ウィンドウズ版)	1 セット	照会
308-88151	S8SU-DW50	Spartan Student Edition, 50 License Pack (Windows) スパルタン、大学向け、50ライセンスパック (ウィンドウズ版)	1 セット	照会
303-88341	SMDO-CW	Spartan Molecular Database Option for Corporate (Windows) スパルタン モレキュラー データベース オプション、企業向け (ウィンドウズ版)	1 セット	75,000
307-88361	SMDO-GW	Spartan Molecular Database Option for Government (Windows) スパルタン モレキュラー データベース オプション、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	56,000
300-88351	SMDO-EW	Spartan Molecular Database Option for Education (Windows) スパルタン モレキュラー データベース オプション、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1 セット	28,000

●希望納入価格には消費税等が含まれておりません。

分子モデリングソフトウェア “Spartan 【スパルタン】”
IT スキルアップ応援キャンペーン

2010年3月末まで

- 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!!

“Spartan Full Ed., Essential Ed., Student Ed.” をご購入いただいた皆様に、もれなく、販売書籍 1~3 冊をプレゼント!!

☆ キャンペーン対象商品

コード No.	メーカーコード	品 名	容 量	希望納入価格(円)
303-88081	S8F-CW	Spartan'08 Full Edition for Corporate (Windows) スパルタン'08 フル、企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	600,000
302-88051	S8E-CW	Spartan'08 Essential Edition for Corporate (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	360,000
303-88101	S8F-GW	Spartan'08 Full Edition for Government (Windows) スパルタン'08 フル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	444,000
306-88071	S8E-GW	Spartan'08 Essential Edition for Government (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	288,000
300-88091	S8F-EW	Spartan'08 Full Edition for Education (Windows) スパルタン'08 フル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	240,000
309-88061	S8E-EW	Spartan'08 Essential Edition for Education (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	138,000
307-88121	S8SU-DW01	Spartan Student Edition, Single Pack USB Dongle Set (Windows) スパルタン、大学向け、1ライセンス (ウィンドウズ版)	1セット	72,000

● 希望納入価格には消費税等が含まれておりません。

☆ プレゼント対象販売書籍

① ヒーラー「有機化学のための分子モデリングワークブック」(フルカラー)

W.J. Hehre, A.J. Shusterman, J.E. Nelson 著 幅田揚一訳 4,725 円 (税込)



有機化学の授業を分子モデリング主導で実施するのに必要なすべてを網羅している。副読本として使用できるように、21 章 200 以上の問題から構成され、それぞれの問題は 1 つ以上の分子モデルを使用している。

- エネルギーの熱力学的および速度論的なデータへの換算方法
- 分子軌道：絵で見る量子力学
- 電子密度と分子の大きさと形
- 静電ポテンシャルマップと分子の電荷分布

② 「計算有機化学入門」

W.J. Hehre 著 幅田揚一訳 2,625 円(税込)



Spartan Student Edition の日本語マニュアル。
Student Ed. 以外の Spartan シリーズを使用した演習書としても利用可能。

③ 「分子モデリング演習 初歩の初歩」

米国法人 WAVEFUNCTION, INC

日本法人編 2,100 円(税込)



Spartan ワークショップの内容を画面イメージを多用して説明。
演習内容の画面動画を Flash 化した CD-ROM 添付。
ビギナー向け。

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 ☎540-8805 大阪市中央区道徳町三丁目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
http://www.wako-chemicals.de
European Office
Tel: +49-2131-311-0

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