

WAKO

実験生物学者・  
実験化学者のための  
IT活用誌

# Infomatic

# World

March 2011

No. 23

## Contents

システム生物学の勧め  
第8回遺伝子ネットワーク推定から遺伝子ネットワークを比較へ…… 2

東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター  
教授 宮野 悟、准教授 長崎 正朗、技術職員 斉藤 あゆむ

システム生物学ソフトウェア  
"Cell Illustrator Online【セルイラストレータオンライン】" 5.0 新発売 … 4

リアルタイム化学構造式検索システム…………… 5

分子モデリングソフトウェア  
Spartan'10 新発売…………… 6

MacroModel製品紹介 …………… 7

"実験科学者"のための計算化学入門セミナー 開催案内  
「物質・分子・反応を計算化学で知り尽くそう！」…………… 8

# 第8回遺伝子ネットワーク推定から遺伝子ネットワークを比較へ

東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター

教授 宮野 悟

准教授 長崎 正朗

技術職員 斉藤あゆむ

## 1 比較ネットワークバイオロジーのはじめ

前回、薬を投与したがん細胞株の遺伝子ネットワークが時間とともに変化する様子をあぶり出すことを述べた。そこでは、メラノーマ細胞に抗がん剤を投与して、24時間にわたり14時点の遺伝子発現をDNAチップで解析したデータを用いた。今回は、薬の濃度や刺激の種類・強さ（濃度）によって遺伝子ネットワークの構造がどのように異なっているかを複数の時系列遺伝子発現データから「まとめて推定し」比較する。複数ある時系列遺伝子発現データのそれぞれからひとつずつ遺伝子ネットワークを推定し、それらを比較すればよいのではないかと普通は考える。メラノーマ細胞では14時点のデータを24時間かけて計測したが、よくある実験ではせいぜい10時点以下、そのようなデータからいくら頑張っても精度のよい遺伝子ネットワークを推定することには限界がある。一方、普通の分子生物学をやっている研究者は、刺激の種類を変えたり、刺激の濃度を变化させたデータをよくとる。そしてエクセルでデータをいじってみて、あーだ、こーだと議論をして結論を出す。しかし、システム生物学の観点からデータを出している研究者は少し違っている。文献[1]では、乳がん細胞株MCF-7を使い、これを2種類のErbBリガンドepidermal growth factor (EGF) と heregulin (HRG) で、それぞれ濃度を0.1, 0.5, 1.0, 10.0nMの4段階に変化させ、それぞれの組み合わせに対して、0, 5, 10, 15, 30, 45, 60, 90 (分) の8時点の遺伝子発現データをとっている。データはGene Expression Omnibus (GEO) (Accession Number GSE6462) から得られる。この論文では、EGFとHRG刺激によって動く遺伝子群を発見し、濃度依存的に転写が制御されているだろうという仮説を出している。今回はこのデータを遺伝子ネットワーク比較という観点から解析した結果について、文献[2]に基づいて述べる。

## 2 RW-RENETの威力

我々は文献[2]において、Relevance-Weighted Recursive Elastic Net (RW-RENET) という方法を開発し、このMCF-7の8条件×8時点=64の遺伝子発現プロファイルデータから8つの遺伝子ネットワークを同時に「まとめて推定」した。この方法の詳細は文献[2]を参照していただきたいが、この方法は8つの遺伝子ネットワークを同時に推定することで、ネットワークのどの部分が条件特異的であるか、またどの部分が条件共通になっているかを精度よく焙り出すことができる。これは8時点程度のデータに対して、一つずつ遺伝子ネットワークを計算するだけでは見出すことが難しい。その方法の概略図を図1につけている。こうしたネットワーク比較を目的とした遺伝子ネットワーク推

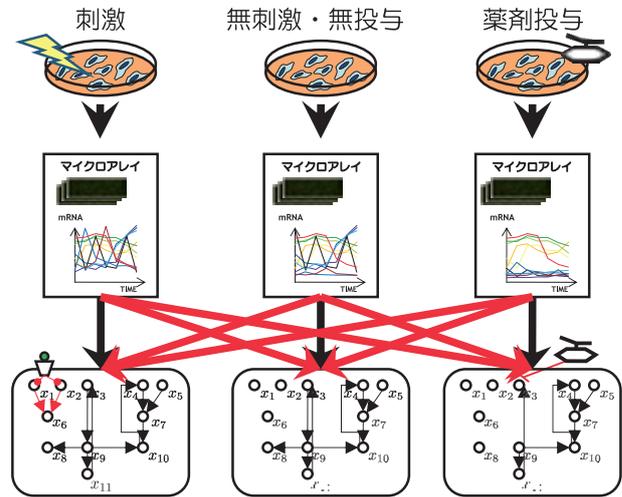


図1 3つの異なる条件下でのデータに対してRW-RENETで遺伝子ネットワークを「まとめて推定」する概念図。システム(ネットワーク)の大部分は実験条件によって変わらないことを仮定し、他の実験条件からの標本を統合することで、ネットワークの推定精度を改善している。

定法は文献[2]の方法が世界で初めてのものである。

この方法の優位性を検証するために、他の方法との比較も行った。相互情報量を用いてネットワーク推定をするARACNE (Basso et al., 2005)、CLR (Faith et al., 2007)、MRNET (Meyer et al., 2007a)、グラフィカルガウシアンモデル (GGM) に基づく方法 (Schafer and Strimmer, 2006)、VARモデルに基づく方法 (Opgerheide and Strimmer, 2007)、ダイナミックベイジアンネットワークに基づく方法 (Lebre, 2009) など、様々な方法を検討した(詳細な情報は文献[2]を参照)。推定した遺伝子ネットワークの精度の評価は、文献情報から人手によって抽出した情報を集めたBIOBASE社のパスイデータベースTRANSPATHの情報をCell Illustratorで読めるようにして用いた。

先ほどの240の遺伝子の内、120の遺伝子は、TRANSPATHデータベースでは、そのどれもがそれ以外の239の遺伝子と長さ2以下のパスではつながっていないことが判明した。そのため、この120の遺伝子を除いた残りの120の遺伝子で遺伝子ネットワークを推定し評価することにした。その評価結果はRW-RENETが他を圧倒した(図2)。

## 3 遺伝子ネットワークの類似性と特異性

文献[1]で提案された仮説が本当だとすると、EGF及びHRGの各濃度レベルに対応する遺伝子ネットワークには濃度変化に応じて共通するエッジがあると考えられる。図2

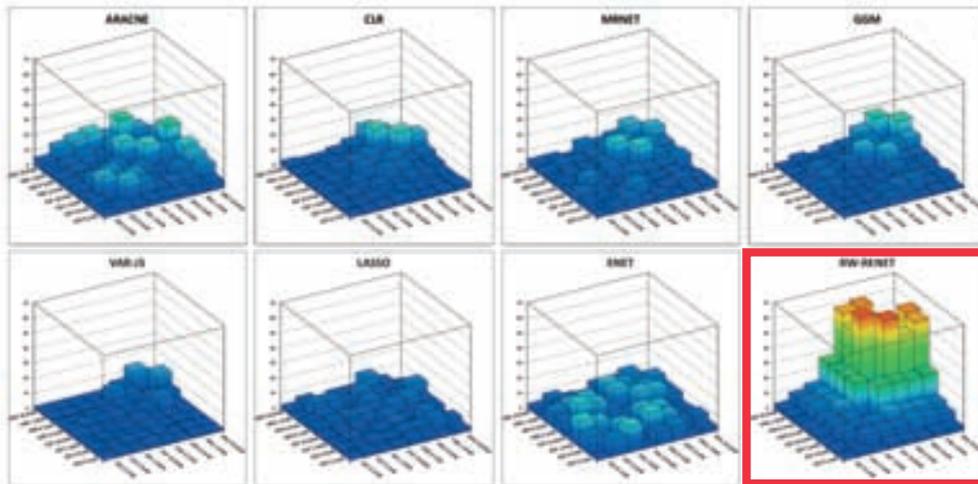


図2 120の遺伝子間のすべての組み合わせに対して推定したネットワークにおける最短パスを計算し、自己ループと1遺伝子を介したインタラクション（パスの長さが2以上）を除いた62の直接的なインタラクションを評価の基準モデルとした。8つの実験条件（EGF刺激：0.1, 0.5, 1.0, 10.0 nM；HRG刺激：0.1, 0.5, 1.0 and 10.0nM）の8時点データから、12種類のネットワーク推定法（ARACNE, CLR, MRNET, ARACNE-D, CLR-D, MRNET-D, GGM, VAR with the James-Stein Shrinkage (VAR-JS), G1DBN, lasso, elastic net, RW-RENET）で推定したネットワーク間で保存されている基準モデルに入っているエッジ数（縦軸）を2Dヒストグラムで表示したもの。

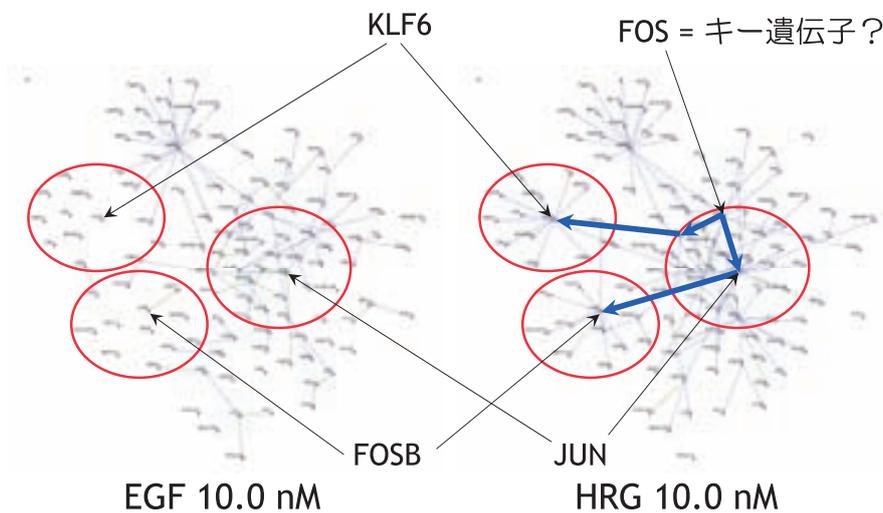


図3 EGF刺激とHRG刺激によって誘導されるネットワークの違いを比較。

の解析結果を見ると、例えば、HRG 0.5nMとHRG 1.0nMの刺激の比較では、ARACNE, CLR, MRNET, ARACNE-D, CLR-D, MRNET-D, GGM, VAR-JS, G1DBN, LASSO、及びENETは、それぞれ8, 19, 7, 10, 5, 5, 11, 5, 7, 7, 7個のエッジを共通のものとして同定し、そのうち文献情報に基づいた基準モデルに入っているものは、それぞれ1, 3, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0個のエッジにとどまっている。これらの方法では遺伝子ネットワーク間の共通部分がほとんど見えていない。一方、図2右下のRW-RENETは50個のエッジを同定しており、そのうち10個が基準モデルに入っており、RW-RENETの解析はこの仮説をよくサポートしている。おそらく、RW-RENET以外の11の方法で推定したネットワークは刺激に応じて動くシステムをうまく捉えることができていないだろう。時点数が少ない場合の限界が露呈している。

次にEGF刺激遺伝子ネットワークとHRG刺激遺伝子ネットワークの違いを見てみよう。EGFによる刺激はMCF-7の増殖を誘導し、HRGによる刺激は分化を誘導する。この背後にあるシステムの違いが見えるだろうか。図3は、RW-

RENETで推定したEGF 10.0nMの遺伝子ネットワークとHRG 10.0nMの遺伝子ネットワークである。このネットワーク比較解析の結果から、どうもFOSがリガンド特異的な細胞運命決定に強く関わっていることが示唆された。その後、文献 [3] でこのことが確認されている。

#### 参考文献

- [1] Nagashima, T., Shimodaira, H., Ide, K., Nakakuki, T., Tani, Y., Takahashi, K., Yumoto, N., Hatakeyama, M.: Quantitative transcriptional control of ErbB receptor signaling undergoes graded to biphasic response for cell differentiation. *J Biol. Chem.* 282(6): 4045-56, 2007.
- [2] Shimamura, T., Imoto, S., Yamaguchi, R., Nagasaki, M., Miyano, S.: Inferring dynamic gene networks under varying conditions for transcriptomic network comparison. *Bioinformatics.* 26(8): 1064-1072, 2010.
- [3] Nakakuki, T., Birtwistle, M.R., Saeki, Y., Yumoto, N., Ide, K., Nagashima, T., Brusch, L., Ogunnaike, B.A., Okada-Hatakeyama, M., Kholodenko, B.N.: Ligand-specific c-Fos expression emerges from the spatiotemporal control of ErbB network dynamics. *Cell.* 141(5): 884-896, 2010.

# “Cell Illustrator Online[セルイラストレータオンライン]”5.0 ～パスウェイ作成からシミュレーション解析まで～



生命システムを構成する複雑なパスウェイ（代謝経路、遺伝子制御ネットワーク、シグナル伝達経路、細胞間の制御反応など）をPC上でまるで絵を描くように作成できるシステム生物学のためのソフトウェアです。

作成したパスウェイはPC上でそのまま簡単にシミュレーションすることができ、生体内の動的な振る舞いを観察・検証できます。

ドイツのC. A. Petri(ペトリ博士) が考案した情報・制御システムの記述・設計・解析・検証に有用なモデル化手法「ペトリネット」をベースに、東京大学が独自に開発した高機能ビジュアル・モデリング・アーキテクチャを使用しています。

セルイラストレータオンライン5.0は、大学や研究所、製薬会社などで活躍するライフサイエンス研究者のために開発されたものですが、豪州クイーンズランド大学の分子生物科学研究所 (IMB) とARCバイオインフォマティクスセンターで行われているVisible Cell™プロジェクトでも既に使用されるなど、専門家がその有用性を実証しています。

※本製品は東京大学医科学研究所で開発されたものです。

## 機能がさらに充実

- 洗練されたGUIインターフェース
- カスタムCSMLDB作成機能
- CSML 3.0フォーマットのフルサポート
- サブグラフのサポート
- パスウェイモードと遺伝子ネットワークモードの統合

- 複数のスクリプト言語のサポート
- より高度なパスウェイレイアウト機能の追加

## 製品ラインアップ

セルイラストレータオンライン5.0は、バイオ関連企業に従事するプロフェッショナル・ユーザー、大学・専門学校などの教育機関、一般向けと3つの異なる製品を用意しています。

### ●セルイラストレータオンライン5.0 プロフェッショナル (プロフェッショナル・ユーザー向け)

あらゆる規模のパスウェイモデルの構築に必要な機能と共に、最新の高度な機能も搭載、導入当初から生産的で効率的な作業を実現します。

### ●セルイラストレータオンライン5.0 スタンダード (一般ユーザー向け)

必要な機能に絞り、コンパクトにまとめました。

### ●セルイラストレータオンライン5.0 クラスルーム (教育機関向け)

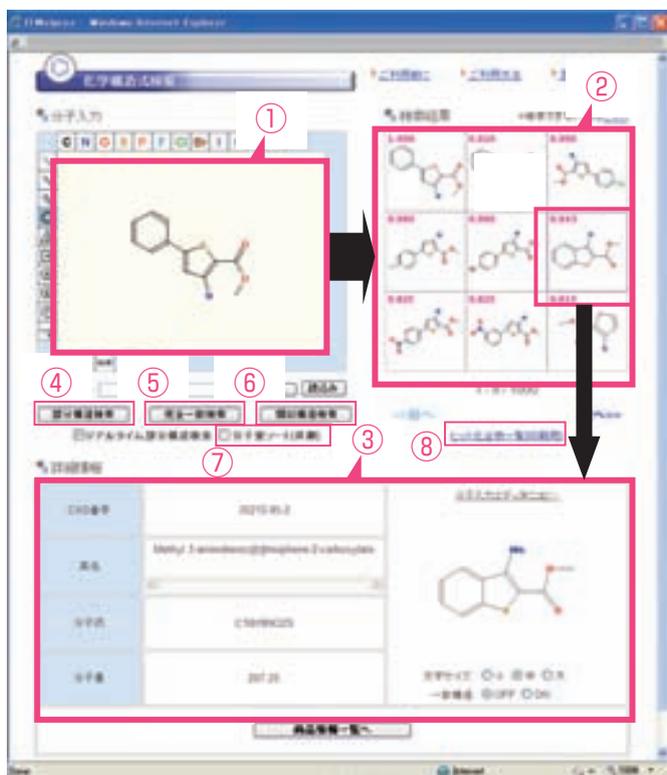
大学・専門学校などで、小規模なパスウェイを対象とした実習でのご利用を想定し、必要十分な機能を持たせながら、リーズナブルな価格でご提供いたします。

※その他、パスウェイの閲覧・シミュレーション結果の再生専用の無償ダウンロードソフトウェア“セルイラストレータ・プレイヤー”があります。

コード No	メーカーコード	品名	容量	希望納入価格(円)*	備考
—	CI050-PC01	Cell Illustrator Online 5.0 Professional Corporate Edition セルイラストレータオンライン 5.0 プロフェッショナル コーポレート版	1セット	1,600,000	プロフェッショナル・ユーザー向け
—	CI050-SC01	Cell Illustrator Online 5.0 Standard Corporate Edition セルイラストレータオンライン 5.0 スタンダード コーポレート版	1セット	550,000	一般ユーザー向け
—	CI050-PAC1	Cell Illustrator Online 5.0 Professional Academic Edition セルイラストレータオンライン 5.0 プロフェッショナル アカデミック版	1セット	160,000	教育機関のプロフェッショナル・ユーザー向け
—	CI050-SAC1	Cell Illustrator Online 5.0 Standard Academic Edition セルイラストレータオンライン 5.0 スタンダード アカデミック版	1セット	55,000	教育機関の一般ユーザー向け
—	CI050-SS01	Cell Illustrator Online 5.0 Standard Student Edition セルイラストレータオンライン 5.0 スタンダード 学生版	1セット	12,000	学生向け (ご注文時学生証の提示が必要)
—	CI050-CA01	Cell Illustrator Online 5.0 Classroom Single Pack セルイラストレータ オンライン 5.0 クラスルーム 1ライセンス	1セット	21,000	教育機関向けバック製品へのライセンス追加価格
—	CI050-CA10	Cell Illustrator Online 5.0 Classroom 10 License Pack セルイラストレータ オンライン 5.0 クラスルーム 10ライセンス	1セット	105,000	教育機関向けバック製品
—	CI050-CA50	Cell Illustrator Online 5.0 Classroom 50 License Pack セルイラストレータ オンライン 5.0 クラスルーム 50ライセンス	1セット	490,000	教育機関向けバック製品

\*年間のライセンス料となります。

“リアルタイム”に検索結果を表示！  
「類似構造検索」で探索範囲を効率的に拡張！



## ●業界初の“リアルタイム”構造検索

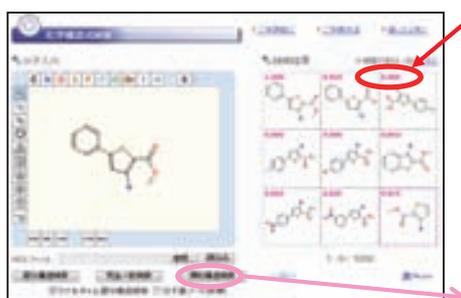
- ①構造を入力すると…
- ②瞬時に「ヒット化合物」を一覧表示
- ③さらに、選択した化合物の詳細情報を表示

## ●多彩な抽出手法

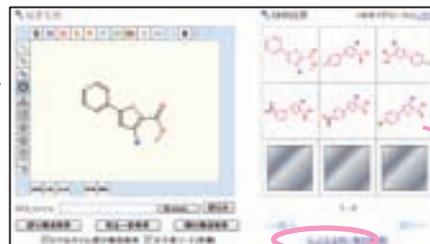
- ④部分構造検索  
クエリ構造を部分構造に含む化合物を抽出
- ⑤完全一致検索  
クエリ構造と完全に一致する化合物を抽出
- New!** ⑥類似構造検索  
独自の類似性基準に基づき探索範囲を効率的に拡張し、化合物を抽出

## ●更なる便利機能

- ⑦分子量(昇順)による並べ替え  
ボックスにチェックを入れることで、ヒット化合物を分子量順(昇順)に並べ替え表示
- New!** ⑧ヒット化合物一覧の印刷  
“ヒット化合物一覧(印刷用)”をクリックすることにより“ヒット化合物一覧ページ”が開き、表示されている9件までの化合物情報を印刷可能



類似度スコアを表示



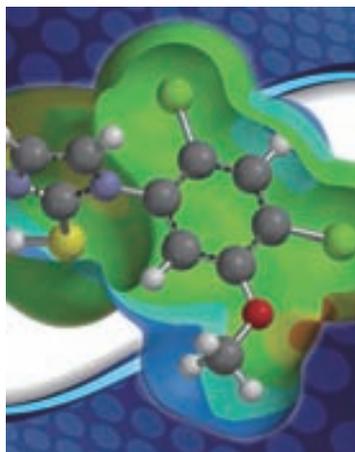
<http://www.siyaku.com/> で **構造式検索** のボタンをクリック！！

思考を途切れさせることなく“Chemical Surfing”するために…  
“CSO”(Chemical Search Online)は進化し続けます…

**Spartan'10**  
For Windows, Macintosh and Linux



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'10が新登場です。これまで Spartan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'10をお試し下さい。



### ●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、ハートリーフォック (HF) や、密度汎関数モデル、RI-MP2法においてデータ処理速度が向上しました (Parallel版)。

### ●NMRの充実

NMRスペクトルとして従来の<sup>1</sup>H、<sup>13</sup>C、COSY、NOESYに加え、オプションとして DEPT、HMBC、HSQCを表示できます。また<sup>13</sup>Cのケミカルシフトの精度が向上しました。

### ●IRスペクトル検索能力の向上

IRスペクトルデータベースを充実、構造が未知の化合物のIRスペクトルから官能基を推定する能力が向上しました。

### ●描画モデルの内側を可視化

表面を切り取る機能により、計算された描画モデルの内側を現すことが可能です。

### ●データベースの充実

SMD (Spartan Molecular Database)、SRD (Spartan Reaction Database) を拡張、検索機能が強化されました。

### ●データマイニング機能の追加

分子の構造、性質、スペクトルから、統計的な分析及びプロットが可能です。

### ■読み可能書式

SMILES, CDX, CIF, SKC, SDF, TGF, XYZ, MacroModel, PDB, SYBYL, MOL, MOL2

### ■書き可能書式

SMILES, MacroModel, XYZ, PDB, MOL, MOL2, SDF

### ■システム動作環境

#### WINDOWS

- ・ Pentium 4 for or higher;AMD Athlon
- ・ Windows XP, Vista, or Windows 7
- ・ 2GB RAM
- ・ 60GB disk space

#### MACINTOSH

- ・ Intel-based Macintosh only
- ・ OS X 10.5 or 10.6
- ・ 2GB RAM
- ・ 60GB disk space

コードNo	メーカーコード	品名(英名)	容量	希望納入価格(円)
005-00550	SXWS-PAC1-C	Spartan'10 Serial Edition 1 Year Maintenance for Corporate (Windows) スパルタン'10 シリアル、1年メンテナンス付き 企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	558,000
005-00550	SXWP-PAC1-C	Spartan'10 Parallel Edition 1 Year Maintenance for Corporate (Windows) スパルタン'10 パラレル、1年メンテナンス付き 企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	666,000
005-00550	SXWS-PAC3-C	Spartan'10 Serial Edition 3 Years Maintenance for Corporate (Windows) スパルタン'10 シリアル、3年メンテナンス付き 企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	684,000
005-00550	SXWP-PAC3-C	Spartan'10 Parallel Edition 3 Years Maintenance for Corporate (Windows) スパルタン'10 パラレル、3年メンテナンス付き 企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	792,000
005-00550	SXWS-PAC1-G	Spartan'10 Serial Edition 1 Year Maintenance for Government (Windows) スパルタン'10 シリアル、1年メンテナンス付き 政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	372,000
005-00550	SXWP-PAC1-G	Spartan'10 Parallel Edition 1 Year Maintenance for Government (Windows) スパルタン'10 パラレル、1年メンテナンス付き 政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	444,000
005-00550	SXWS-PAC3-G	Spartan'10 Serial Edition 3 Years Maintenance for Government (Windows) スパルタン'10 シリアル、3年メンテナンス付き 政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	456,000
005-00550	SXWP-PAC3-G	Spartan'10 Parallel Edition 3 Years Maintenance for Government (Windows) スパルタン'10 パラレル、3年メンテナンス付き 政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	528,000
005-00550	SXWS-PAC1-E	Spartan'10 Serial Edition 1 Year Maintenance for Education (Windows) スパルタン'10 シリアル、1年メンテナンス付き 教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	174,000
005-00550	SXWP-PAC1-E	Spartan'10 Parallel Edition 1 Year Maintenance for Education (Windows) スパルタン'10 パラレル、1年メンテナンス付き 教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	210,000
005-00550	SXWS-PAC3-E	Spartan'10 Serial Edition 3 Years Maintenance for Education (Windows) スパルタン'10 シリアル、3年メンテナンス付き 教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	216,000
005-00550	SXWP-PAC3-E	Spartan'10 Parallel Edition 3 Years Maintenance for Education (Windows) スパルタン'10 パラレル、3年メンテナンス付き 教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	252,000
005-00550	SXSA-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
005-00550	SXSU-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
005-00550	SXSU-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	720,000
005-00550	SXSU-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
005-00550	SXSU-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

Macintosh版はWindows版と同価格です。Linuxをお使いの方はお問い合わせ下さい。

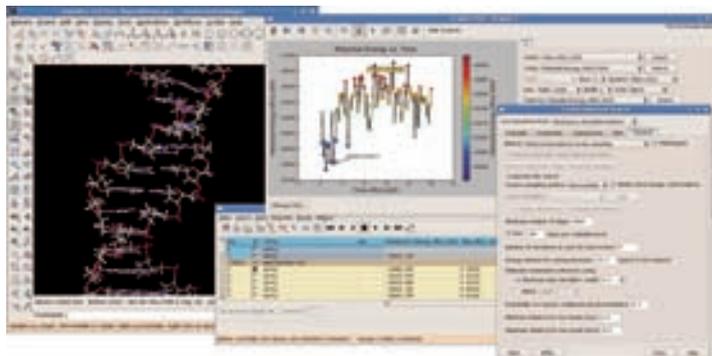
## MacroModel

SCHRODINGER

販売元  
infocom  
インフォコム株式会社

The most trusted name in molecular modeling software

MacroModelは米国コロンビア大学のProf. W.Clark Stillらによって開発された分子力学系の分子設計支援システムです。有機低分子から生体高分子まで、幅広く最適化された力場パラメータと他の追従を許さぬ強力な各種配座探索機能をはじめとする多彩な計算手法、そして操作性に優れたMaestroユーザーインターフェース(GUI)により計算化学を初めて行う人から上級者の方まで幅広いニーズをサポートする計算プログラムです。



## Powerful molecular mechanics software package

## ●有機低分子から生体高分子まで幅広く対応する MacroModel の力場パラメータ

- MM2\*, MM3\*, AMBER\*, OPLS, AMBER94, MMFF, MMFFs, OPLS2001, OPLS2005
- Lewis構造による構造チェック機能と構造修復  
MMFF, MMFFs, OPLS2001, OPLS2005対応

## ●1点エネルギー計算：Force Field Viewerによるパラメータ表示

## ●構造最適化計算

- 6種類のエネルギー最適化アルゴリズムを搭載
- 最適な non-bonded エネルギー項の評価：Bond Dipole Cutoffs (BDCO) を搭載
- Premin コマンド：コマンドラインから大量のリガンド構造をバッチ処理にて構造最適化

## ●複数化合物および収集した配座に対する連続した構造最適化計算 (Multiple Minimization)

- 各溶媒間 (H<sub>2</sub>O, CHCl<sub>3</sub>, Octanol) の分配係数 (LogP) の算出

## ●強力な配座探索機能：単分子の内部座標探索、受容体活性サイト内でのリガンド分子の移動と内部座標探索、全構造および部分構造での配座探索等、幅広いシミュレーションが可能

## ●分子動力学計算：Stochastic Dynamics, Molecular Dynamics

- 複合モードシミュレーション：Monte Carlo/Stochastic Dynamics
- Simulated Annealing

## ●リガンド - レセプター間相互作用エネルギー評価機能 (eMBrAcE)

結合状態を評価する2つのモードを搭載

- Interaction Mode：受容体 - リガンド間を構成するエネルギー成分を評価
- Energy Difference Mode：eMBrAcE\_Energy  $\Delta E = E_{\text{Complex}} - (E_{\text{Receptor}} + E_{\text{Ligand}})$ により結合時のエネルギー変化を評価。配座探索でも利用可能

## ●振動モードの選択・計算・視覚化 (VIBR, VBR2)

## ●Automatic Position of Molecule (COPY/ALGN)

- 蛋白質複合体モデルのリガンド部位をリファレンスとし、新規計算対象のリガンド群を自動的に活性サイトに配置。各配座探索機能や eMBrAcE と組み合わせることで、精度の高いドッキングシミュレーションを実現

## ●発生配座に対する対称性を考慮した重ね合わせ機能 (MMSYM)

## ●リガンド - レセプター間のドッキングスタディ (リガンド分子の移動と回転)

## ●MINTA(オプション)：真空中あるいは溶液中での複合体の自由エネルギーを算出

etc...

■記載の商品名等は各社の登録商標、または商品場合があります。

■仕様は予告なく変更する場合があります。

■価格についてはお問い合わせ下さい。

# “実験科学者”のための計算化学入門セミナー 「物質・分子・反応を 計算化学で知り尽くそう！」



**infocom**  
インフォコム株式会社

CambridgeSoft



近年、PCの飛躍的な高性能化により、以前はワークステーションで行っていた計算がPCでも可能となりました。そして、計算化学ソフトウェアの開発・普及により、有機化合物などの低分子のみならず、タンパク質などの生体高分子の分子モデリングやシミュレーションを、PCで行うことが普通に行われるようになってきています。

この度、研究に計算化学ソフトウェアを取り入れておられる先生方に、その活用のコツなどを具体的かつわかりやすく解説していただきます。計算化学を“身近”に感じ、理論的に理解し、実験を効率化するために、当セミナーで計算化学をご体感下さい。

**開催日時** 2011年6月14日(火) 10時30分～17時00分

**開催場所** 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)]

**参加費** 無 料

**定 員** 40名

- 内 容**
- ・「Chemdrawステップアップ講座」 ケンブリッジソフト社 久枝 秀次 様
  - (講演順) ・「分子モデリングソフトって何だろう」 Wavefunction, Inc. 内田 典孝 様
  - ・「ソフトウェアによる分子力場計算」 インフォコム株式会社 吉留 大輔 様
  - ・「分子現像の密度汎関数法による解析と応用」 大阪大学 柳田 祥三 名誉教授
  - ・「分子構造の予測とその応用」 国立医薬品食品衛生研究所 栗原 正明 室長

※詳細・お申し込み方法は4月に当社ホームページにてご案内致します。

[http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/index\\_software.htm](http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/index_software.htm)

- 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。
- 希望納入価格には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)  
東京支店 ☎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) ●中国営業所 ☎(082)285-6381(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)

フリーダイヤル：0120-052-099 フリーファックス：0120-052-806

● 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: +1-617-354-6772

● Wako Chemicals GmbH (Neuss)  
<http://www.wako-chemicals.de>  
Tel: +49-2131-311-0

■ご意見・お問合せ、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

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