

演 題	中低分子のための分子体積・表面積計算プログラムについて	
発 表 者 ( 所 属 )	長尾輝夫 ( 函館高専 )	
連 絡 先	〒042-8501 函館市戸倉町 14-1 函館工業高等専門学校 物質工学科 TEL & FAX 0138-59-6466 E-mail: nagao@hakodate-ct.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	分子表面、分子体積、分子表面積	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	分子の体積。表面積を計算するソフトは数多く発表されているが、その多くは蛋白質のような高分子を対象にし、特化してきているものが多く、QSPR や QSAR など、中低分子を扱う場合、対応できないものも多い。そこで、広く用いられている MOL 形式のデータに対応し、また、2種類の分子表面に対応した比較的簡単な積算式のアルゴリズムを用いた分子体積・表面積計算プログラムを作成した。	
環 境	適 応 機 種 名	D O S / V
	OS 名	Windows95、98、Me、Windows NT4.0、2000、XP
	ソース言語	Fortran
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 未定	具 体 的 方 法

## 1. はじめに

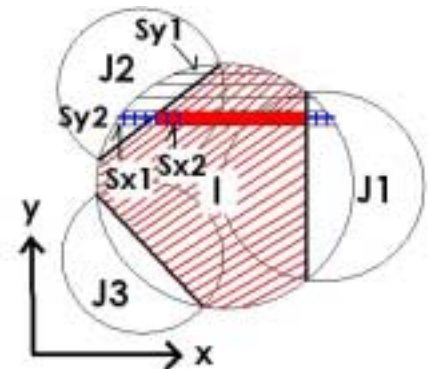
分子の体積や表面積を計算するソフトは、既に数多く発表されているが、その多くは蛋白質のような高分子を対象として、特化したものが多く、計算は高速ではあるが、QSPR ( 定量的構造物性相関 : Quantitative Structure Property Relationship ) や QSAR ( 定量的構造活性相関 : Quantitative Structure Activity Relationship ) など扱う中低分子を対象とする場合、PDB 形式のデータに変換しても、蛋白質構成成分以外の個々の原子に対する van der Waals (vdW) 半径の割り当てがされていないものなどがあり、ソフト変更の必要を生じ、取り扱いが難しい。その点、自作ソフトでは対応が容易である。今回、既報<sub>1)</sub>と類似しているが、分子中の個々の原子の体積・表面積を計算でき、また、汎用データ形式の MOL 形式のデータに対応し、分子表面として vdW 表面と Solvent accessible (SA) 表面が計算できるプログラムを作成した。計算アルゴリズムは、球 ( 原子 ) のスライス面の積算方式である。他の幾つかの計算プログラム<sub>2)</sub>を同一 vdW 半径に変更し、その計算結果について比較検討する。

## 2. システム構成

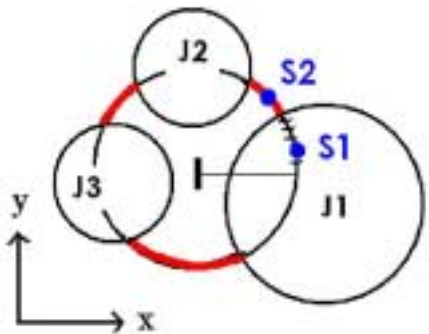
ハード構成は DOS/V マシン、OS は MS Windows 95/98、Me、NT4.0、2000、XP で、富士通 (株) Fortran & C Package V2.1L10 を用いて、Fortran で作成した。

## 3. 分子体積・表面積計算の概要

分子体積：各原子に vdW 半径を割り当て、分子を球の集合とし、SA 表面は 1.40 の半径 (水分子) を加えた表面として計算する。対象原子 I を z 軸方向でスライスし、x-y 平面で、右図のように、他原子 J1 ~ J3 との交わりを考慮し、I 原子の面積を求め、z 軸方向に積算して、個々の原子の体積を求め、全体積を計算する。個々の原子体積が計算できるのが特徴である。

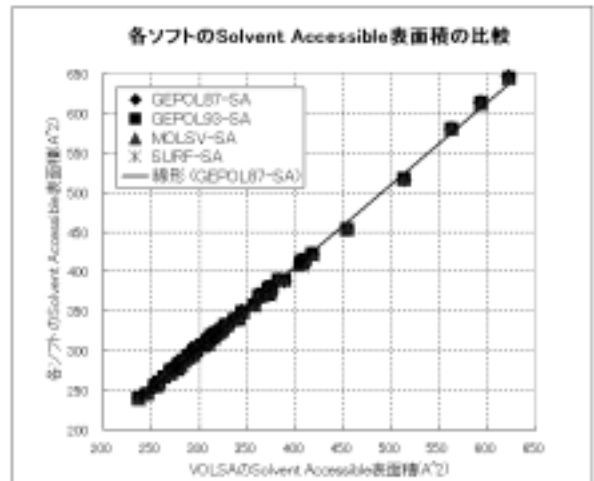
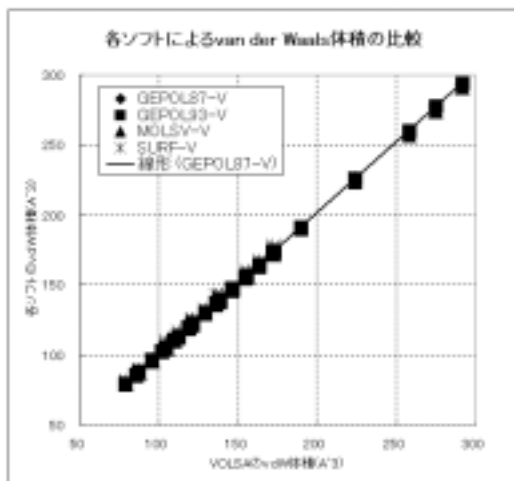


分子表面積：既報 1) と同様に、“球の表面積 = 円柱の側面積” の関係を用い、対象原子 I を z 軸でスライスし、x-y 平面で円周を分割し、右図のように、他原子 J1 ~ J3 との交わりを考慮して、I 原子の円周を求め、円柱上の帯状の分割面を積算して、個々の原子の表面積を求めていく、全表面積はその合算である。



## 4. 結果と考察

本ソフト “VOLSA” と他のソフト (GEPOL87、GEPOL93、MOLSV、SURF) <sub>2)</sub> との比較結果を vdW 体積と SA 表面積について下図に示す。各ソフトの計算結果の一致はよかった。MOL 形式のデータは、汎用性の長所はあるが、芳香族やアルカンの炭素など原子の個性に対応した vdW 半径の割り当てができない欠点もあった。



参考文献：

- 1) 長尾輝夫、函館工業高等専門学校紀要、第 27 号 pp.111 ~ 120
- 2) MOLSV: Quantum Chemistry Program Exchange, University of Indiana, No.509 by G.M.Smith,  
SURF: [http://server.ccl.net/cca/software/SOURCES/FORTRAN/molecular\\_surface/surf/index.shtml](http://server.ccl.net/cca/software/SOURCES/FORTRAN/molecular_surface/surf/index.shtml)  
GEPOL87: Quantum Chemistry Program Exchange, University of Indiana, No.554 by J.L.Pascual-Ahuir  
GEPOL93: [http://server.ccl.net/cca/software/SOURCES/FORTRAN/molecular\\_surface/gepol93/index.shtml](http://server.ccl.net/cca/software/SOURCES/FORTRAN/molecular_surface/gepol93/index.shtml)