

分子のまわりの静電ポテンシャル、電気力線の可視化

西本匡伸、秦野やす世

中京大学情報科学部

分子の周りの静電的な状況を把握することは、起こりうる化学反応のメカニズムを理解する上で極めて重要である。ここでは、分子軌道計算で得られる静電ポテンシャルおよび電気力線をコンピュータグラフィックスによって可視化することを試みる。可視化のためのツールとして、AVS(Application Visualization System)を使用する。ここで適用する分子は、化学式で $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOMgNH}_2\text{CH}_2\text{COOCH}_3$ と表されるグリシンとグリシンエステルの金属錯体におけるグリシンエステルの加水分解反応のメカニズムの解明を試みた。そして、数値計算から得られた多量のデータをコンピュータグラフィックスを用いて可視化することにより、どの原子がどのように攻撃されやすいかを直観的に理解することが可能となることを示す。可視化技術がより複雑な系の化学反応の理解の手段となりうることが示された。

Visualization of the Electrostatic Potential and Lines of Electric Force around a Molecule

Masanobu Nishimoto, Yasuyo Hatano

School of Computer and Cognitive Sciences, Chukyo University

In the present work, we have developed a software on the basis of the graphic tool AVS(Application Visualization System). By using it, three-dimensional quantities such as electrostatic potential and lines of electric force are visualized with a molecular skeleton. A picture of lines of electric force around a molecule is useful for understanding of mechanism of chemical reaction. In hydrolysis, for example, the picture leads us to predict which atom would be attacked by a nucleophilic reagent. We applied this software to interpret the hydrolysis reaction on a metal complex, $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOMgNH}_2\text{CH}_2\text{COOCH}_3$. For this molecular system, we will show several pictures including isosurfaces of electrostatic potential and lines of electric force. They are calculated from effective net charges placed on nuclei which are obtained by the ab initio molecular orbital method.

はじめに

コンピュータの性能向上とソフトウェアの普及により、分子の電子構造に関する理論計算が高精度で行われるようになったのと同時に扱う数値データは膨大になっている。この高精度かつ膨大なデータは、人間が直観的に理解する情報量を超えるほどのものになりつつある。ここでは、分子のまわりの静電的な状況を把握するために、コンピュータによる可視化技術を用いて、そこに起こりうる化学反応を人間が直観的に理解できる映像にし、そのメカニズムの解明の手がかりをつかむことの可能性を示す。ここで適用した分子は、グリシンとグリシンエステルの金属錯体である $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOMgNH}_2\text{CH}_2\text{COOCH}_3$ である。そして、この分子のまわりの静電ポテンシャル、電気力線を描くことにより、グリシンエステルの加水分解反応のメカニズムの解明を試みる。

計算方法とコンピュータシステム

分子の静電ポテンシャルは通常その系の波動関数から計算される。しかし、この方法は、多くの分子積分を含む多大な計算量を必要とするため、このままでは分子間の静電相互作用の解析などに適用することは困難である。このために、ここでは分子を構成する原子核の上に点電荷を配置することによって電荷分布を表現する近似方法を採用する。近似的静電ポテンシャル $f(r)$ は、原子核 A の上の点電荷 q_A を用いて次のように表される。

$$f(r) = \sum_A \frac{q_A}{r - R_A}$$

ここで、 R_A は原子核 A の位置ベクトルである。また、 r における電場ベクトル E は、

$$E = - \sum_A \frac{q_A \{ (x - X_A)i + (y - Y_A)j + (z - Z_A)k \}}{|r - R_A|^3}$$

で表される。ある原子核のまわりの点から出る電気力線は、その点における電場ベクトルの方向に延びる微小線分をつなぐことによって得られる。

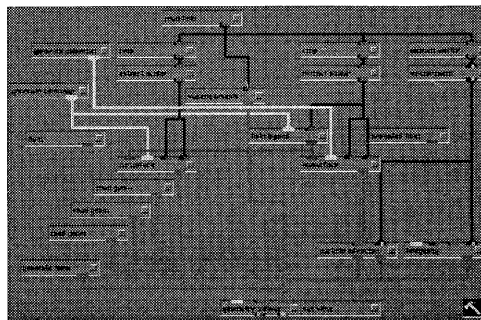
$$r_{i+1} - r_i = -\eta_i E$$

ここで η_i は力線が滑らかに描かれるように調整するためのファクターである。

分子軌道法計算は、プログラムシステム JAMOL4 を使用し、名古屋大学大型計算機センタのシステム M1800 (Fujitsu) で実行し、静電ポテンシャルの計算は、グラフィックスワークステーション Titan 750 V (Kubota) を使用する。

映像化の手法

映像化するシステムは、グラフィックスワークステーションTitanとサイエンティフィック・ビジュアルライゼーション・システムAVS(Advanced Visual Systems Inc.)を使用する。AVSは、汎用データ可視化システムの一つで、科学技術計算結果の可視化向けに開発されており、データフローアーキテクチャやビジュアルプログラミングといった特徴を持っている。この特徴を活かしたネットワークエディタを使うことで、ユーザーは容易にデータを加工することができる。ネットワークエディタ上<図1>で、isosurfaceやhedghogなどのモジュールと呼ばれる部品をリンクし、ジオメトリビューワで最終的な形状を出力する。ジオメトリビューワでは、それを自由に回転および拡大縮小ができ、注目点をよりわかりやすく見せることができる。

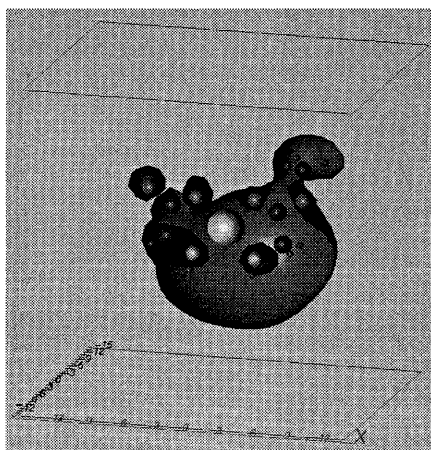


<図1：ネットワーク>

この分子のまわりの静電ポテンシャルは、次の三次元空間座標上の関数として表される。

$$f(x,y,z)=\sum_{A=1}^n \frac{q_A}{\sqrt{(x-X_A)^2+(y-Y_A)^2+(z-Z_A)^2}}$$

この関数の計算によってそれぞれの数値データを得る。得られたデータをフィールドデータ(AVSで扱うことのできるデータ。格子点上にデータを配置していくデータ型)に変換し、AVSでネットワークエディタを使ってモジュールを組み、ポテンシャルの等値面を表示する。等値面表示における表現方法として、ポテンシャルの値によって色を変化させたり、アニメーション機能を利用してポテンシャルの値を変化させながら等値面の連続表示したり、等値面内部の状況を把握するために任意の面で一部を切り取り表示する。図2に示すような表示を得るために、isosurface,animation floatやcropなどのAVSモジュールをリンクした。



<図2：静電ポテンシャルの等値面>

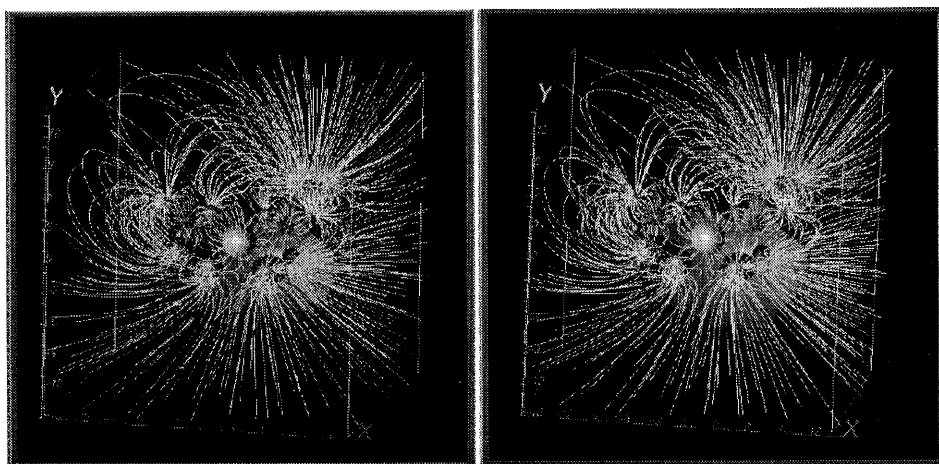
分子のまわりの電気力線は、先ず静電場について計算する。点 (x,y,z) における電場を $E(E_x, E_y, E_z)$ 、

$$E_x = \sum_A \left\{ -\frac{q_A}{r_A^3} (x - X_A) \right\}$$

$$E_y = \sum_A \left\{ -\frac{q_A}{r_A^3} (y - Y_A) \right\}$$

$$E_z = \sum_A \left\{ -\frac{q_A}{r_A^3} (z - Z_A) \right\}$$

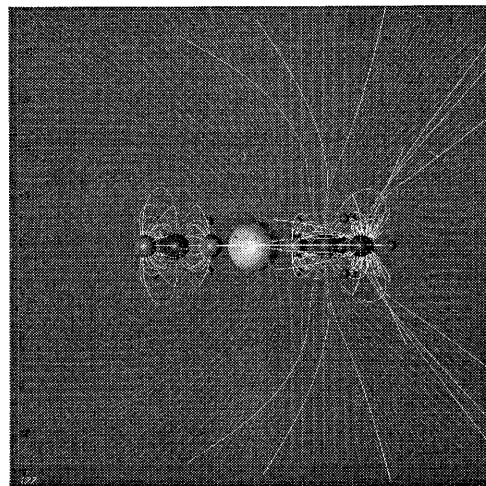
として、この電場の計算によって得られたベクトル量をもとに、繋ぎあわせて電気力線を表現する。つまり、ベクトルの終点にあたる点 $(x+E_x, y+E_y, z+E_z)$ を次の始点として電場の計算を行い、これを繰り返すことで電気力線を描く。図3では、特定の原子に対して、原子の表面を始点とする勾配ベクトルをつなげていき、流線として表現している。AVSでは、ジオメトリデータとしてファイルシステムに出力した後、ジオメトリビューワを用いて表示する。



<図3：電気力線の表示（ステレオ表示）>

結果

このグリシンメチルエステルの加水分解反応におけるメカニズムを解明するために分子軌道計算を行ってきたが、その可視化結果の一つを図4に示す。この図より、分子面より遠方にある、OHイオンは右側の垂直に延びたベクトルの延長線方向から分子に接近しメチルエステル側（図4右側）の炭素原子を攻撃して、加水分解反応を起こして、メチルアルコールを生成するというイメージを示している。このことを一点の数値データから両炭素の違い（それぞれの有効電荷は、1.01と1.06の近い値を取る）を知ろうとするのは難しい。しかし、このように三次元（あるいは二次元）のオブジェクトとして表示することで、両者のまわりの電気的な状況の違いがはっきりと表示される。すなわち、与えられる数値及び数式からは反応しやすい部分を見つけることは難しいが、可視化をすることによって直観的にその形状や反応部分を理解することができる。



＜図4：炭素原子からの電気力線と分子面に直交する面上の電場ベクトル＞

おわりに

分子軌道法による数値計算から得られた多量のデータをコンピュータグラフィックスを用いて可視化することにより、分子の形状や電気的性質を直観的に理解することが可能となることを示した。このとき、最適な形状や反応部分を得るためには、各種のパラメータを連続的に変化させて映像化するアニメーションの技術が有効である。そして、より複雑な系の化学反応の理解の手段となりうることを示された。また、このためのツールとしてAVSが有効であることが認められた。

参考文献

- [1]萩野博,萩野和子(1974),「金属酵素の錯体化学」 p.43,169, 南江堂.
- [2]Kashiwagi et.al(1987), JAMOL4: A program package for ab initio SCF MO calculations, a library program of the computer center of institute for molecular science. This program distributed through JCPE, Japan Chemical Program Exchange.
- [3]AVS(1993). "AVS User's Guide. Release4.", Advanced Visual Systems Inc.
- [4]Yasuyo Hatano and Masanobu Nishimoto(1995), "Graphical Representation of the Electric Field around a Biomolecule", Bioimages 3, pp.19-24, Bioimaging Society