

#### 例題 4.2

抗インフルエンザ薬 oseltamivir (商品名：タミフル) の立体構造を、化合物データベース PubChem からダウンロードし、エネルギー最小化せよ。

## 解答例

PubChem を「oseltamivir」で検索すると、この化合物の Compound CID が 65028 であることがわかる。UCSF Chimera を開き、メニューから「File」→「Fetch by ID」を開く。Database に「PubChem」を選び、ID に「65028」と入力し、「Fetch」する。立体構造がダウンロードされメインウインドウに表示される。続いて、「Tools」→「Structure Editing」→「AddH」を選び、デフォルトの設定のまま「OK」をクリックして、アミノ基に水素原子を付加する。さらに、「Tools」→「Structure Editing」→「Add Charge」を選び、デフォルトの設定のまま「OK」をクリックして、各原子に電荷を割り当てる。このとき全電荷 (net charge) が +1 となっていることを確認する。「Tools」→「Structure Editing」→「Minimize Structure」を選び、デフォルトの設定のまま「Minimize」をクリックしてエネルギー最小化を実行する。これにより、ポテンシャルエネルギーの値は  $163.6 \text{ kJ mol}^{-1}$  から  $-7.93 \text{ kJ mol}^{-1}$  に低下した。下図にエネルギー最小化前と最小化後の構造の重ね合わせを示す。

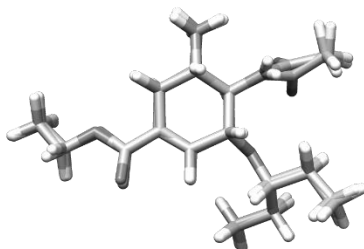


図 エネルギー最小化前とエネルギー最小化後の構造の重ね合わせ。