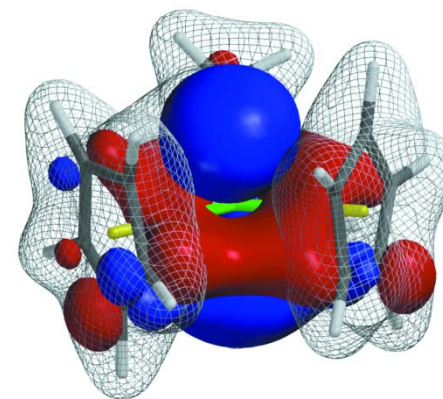


# *Spartan Workshop*

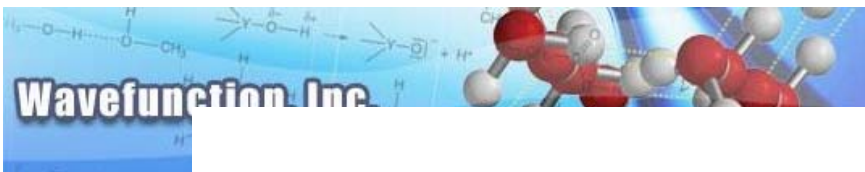
Wavefunction, Inc. Japan Branch Office

内田典孝 / 高橋美弥子



Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved





# 1998年度 ノーベル化学賞

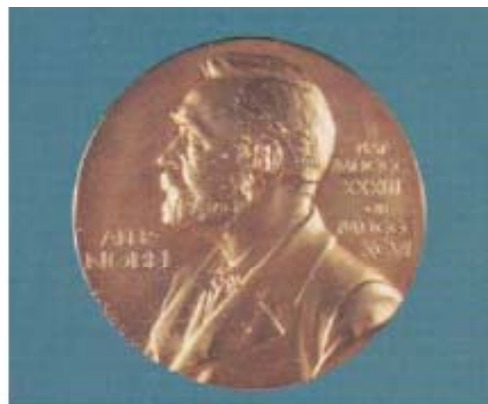


photo: Mary Hamilton

**ジョン A. ポープル**  
John A. Pople  
ノースウェスタン大学 (イリノイ州、エヴァンストン)、米国

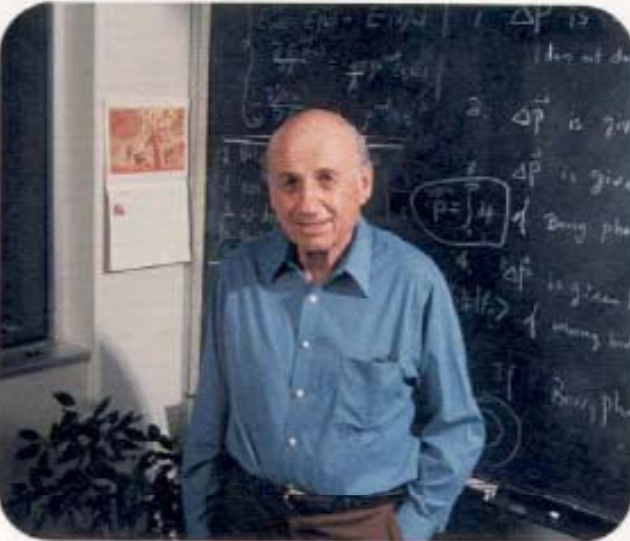
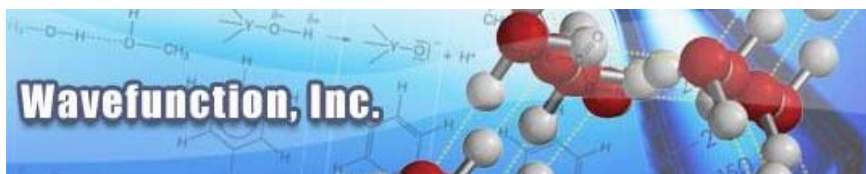


photo: Dave Folks

**ウォルター・コーン**  
Walter Kohn  
カリフォルニア大学 (サンタ・バーバラ)、米国

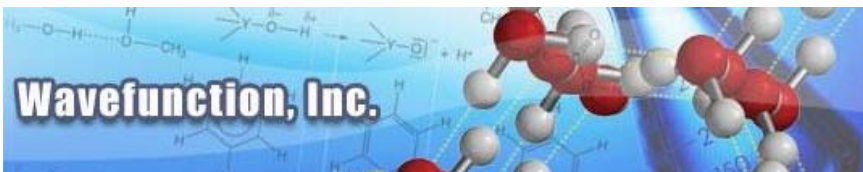




## The “Pople” Software Packages

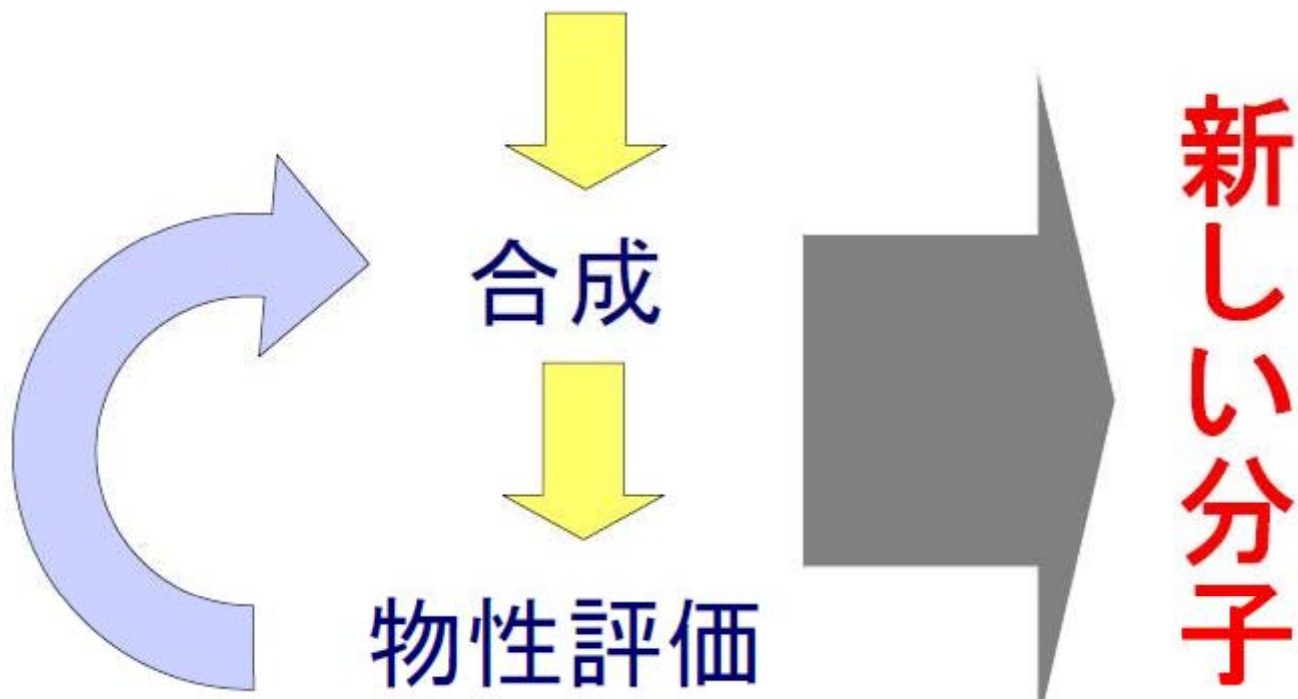
- “GAUSSIAN” – Mike Frisch
- “GAMESS” – Mark Gordon
- “Hyperchem” – Neil Ostlund
- “Spartan” – Warren Hehre
- “Q-Chem” – Peter Gill





# 新しい分子の創生

## 経験によって分子を設計



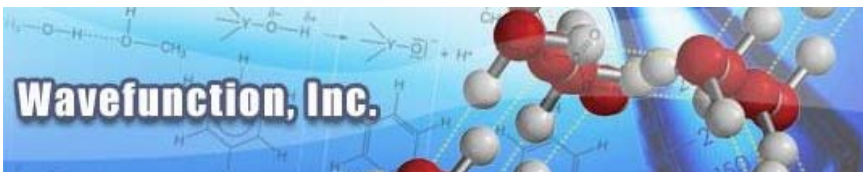
幅田揚一: 研究で“分子モデリングを”初めて導入するコツ 2008年3月6日



Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved







# 新しい分子の創生

経験によって分子を設計



幅田揚一: 研究で“分子モデリングを”初めて導入するコツ 2008年3月6日



Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved





# 実験化学 vs. 計算化学 (分子モデリング)

計算の利点

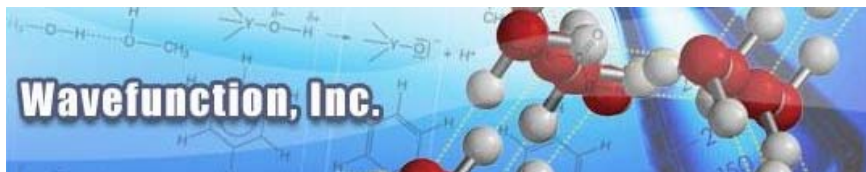
- 容易で手軽
- 時間短縮
- コストダウン
- 未知化合物への適用  
(安全性、情報の可視化)

化合物を  
得られる  
訳ではない

“決して実験化学の代替ではなく、  
むしろ補完するものです”

“計算化学で得た情報を  
いかに実験に活用するかが大切です”

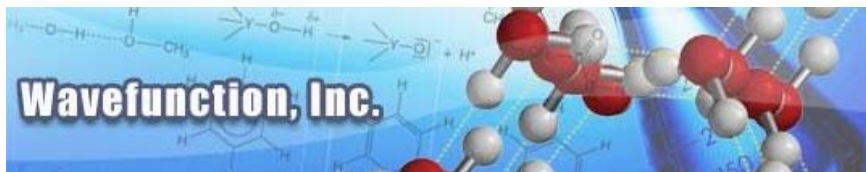




# 計算化学

- **分子力学法 (Molecular Mechanics):**  
原子の位置に基づく静的な解析 → 構造  
 $\propto N$  (原子数)
- **分子動力学法 (Molecular Dynamics):**  
粒子の運動を追う動的な解析 → 物質の諸性質 (密度・硬さなど)  
 $\propto n * N * T$  (時間ステップ数)
- **分子軌道法 (Molecular Orbital):**  
量子力学に基づく電子分布解析 → 構造・エネルギー  
半経験的  $\propto N^3$  (原子数) (実験データによるパラメータを使用)  
非経験的  $\propto N^4$



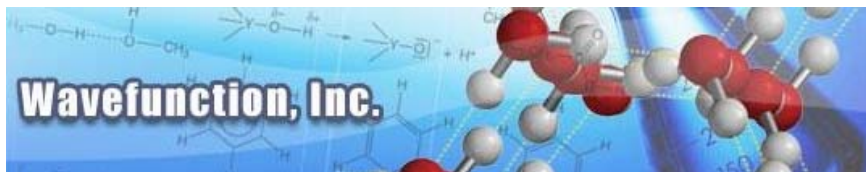


# 計算化学 (Spartan)

- **分子力学法 (MM):**
  - モデル構築時のリファイン
  - 配座解析
- **分子動力学法 (MD):**
  - Spartanには導入なし
  - Odysseyで教材として使用
- **分子軌道法 (MO):**
  - 半経験的分子軌道計算
  - Hartree-Fock (非経験的) 分子軌道計算
  - 密度汎関数法 (Density Functional Theory)





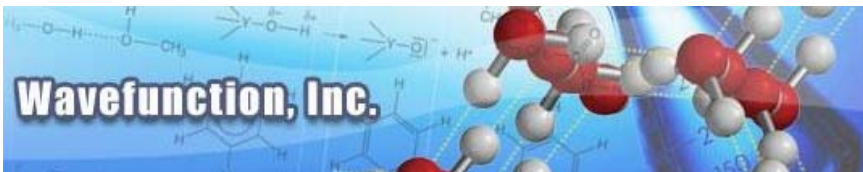


# 製品ラインナップ

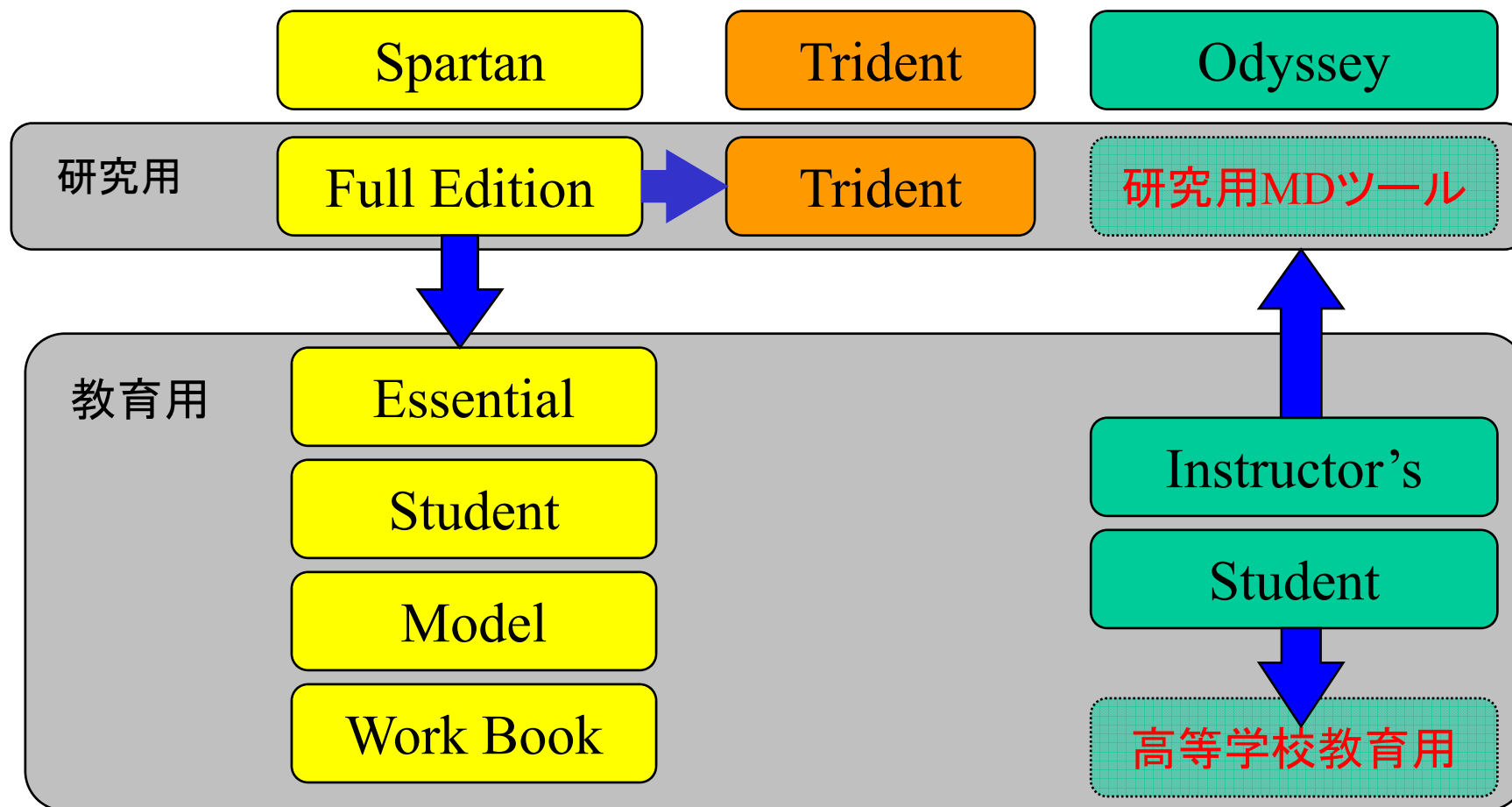


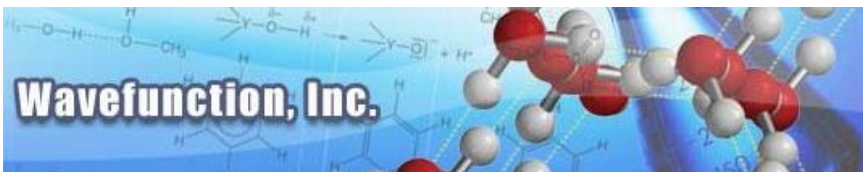
Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved



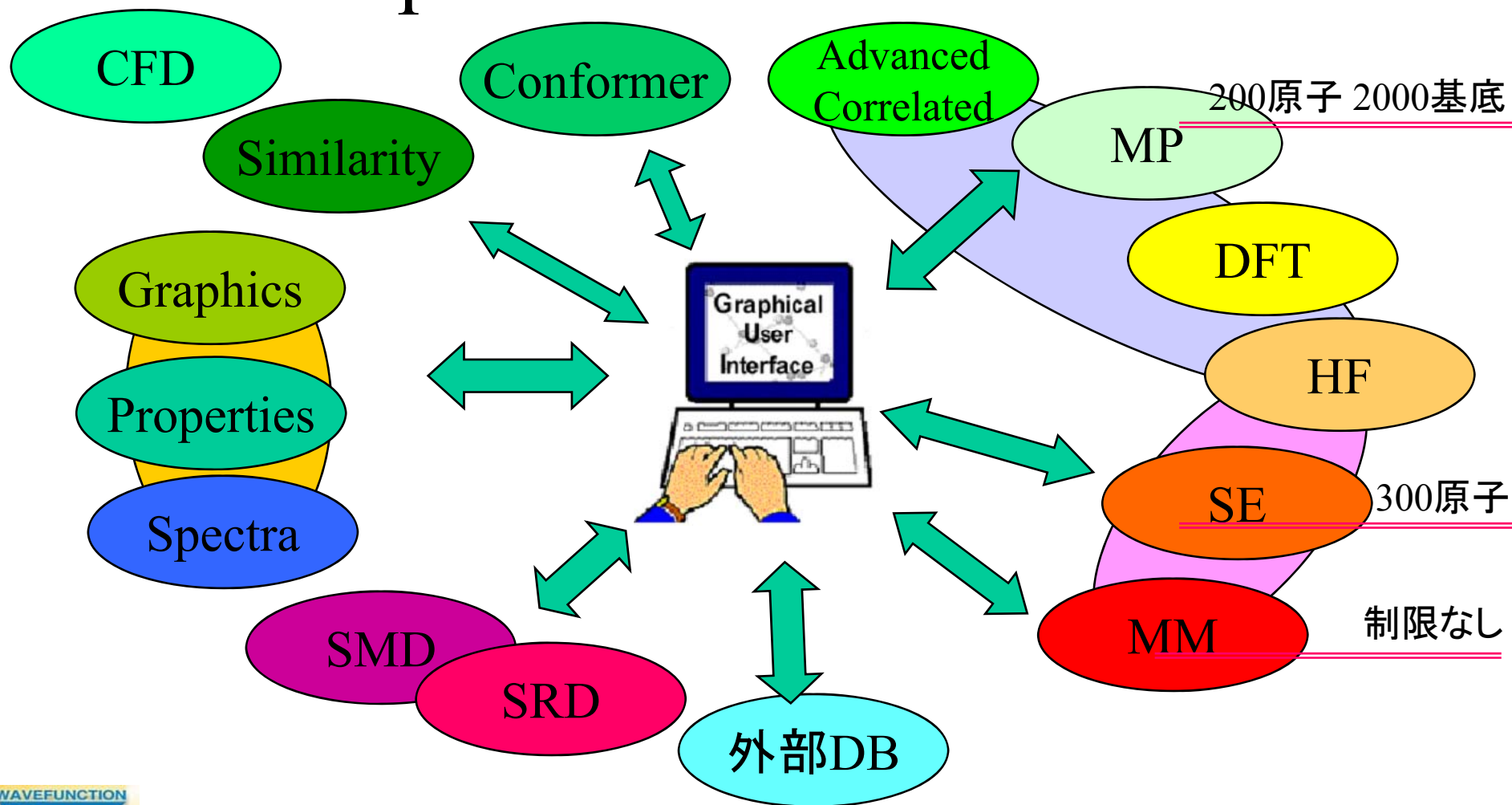


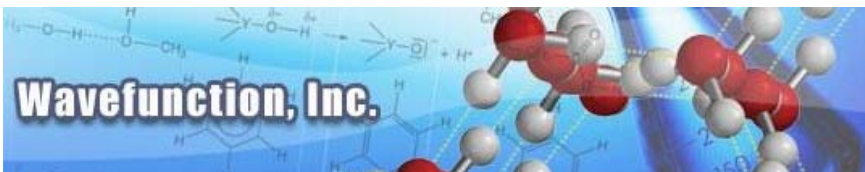
# 製品ラインナップ



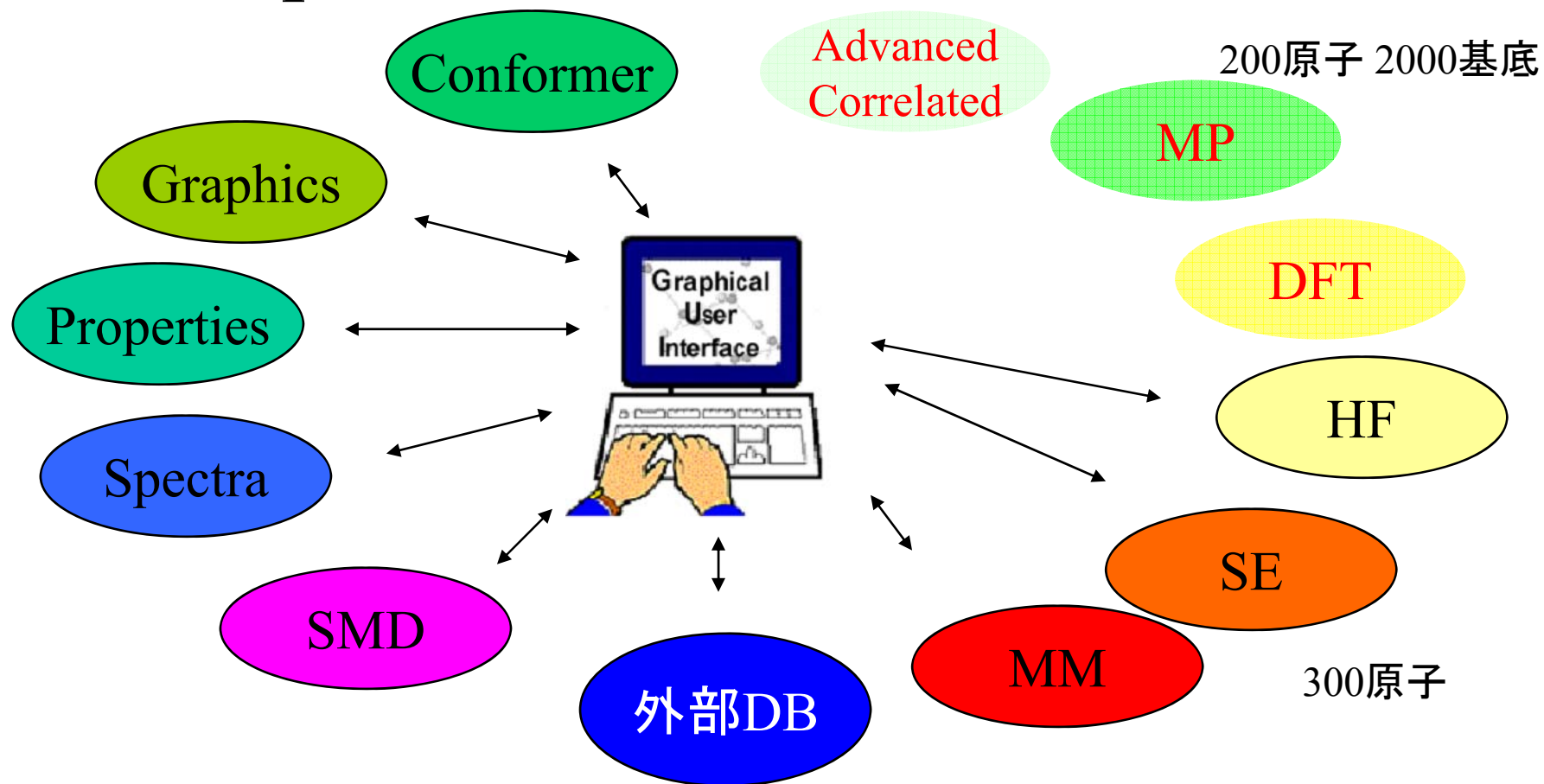


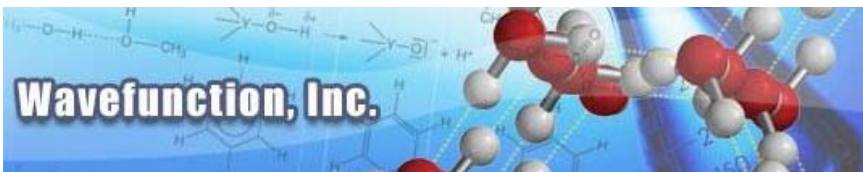
# Spartan'06 Full Edition



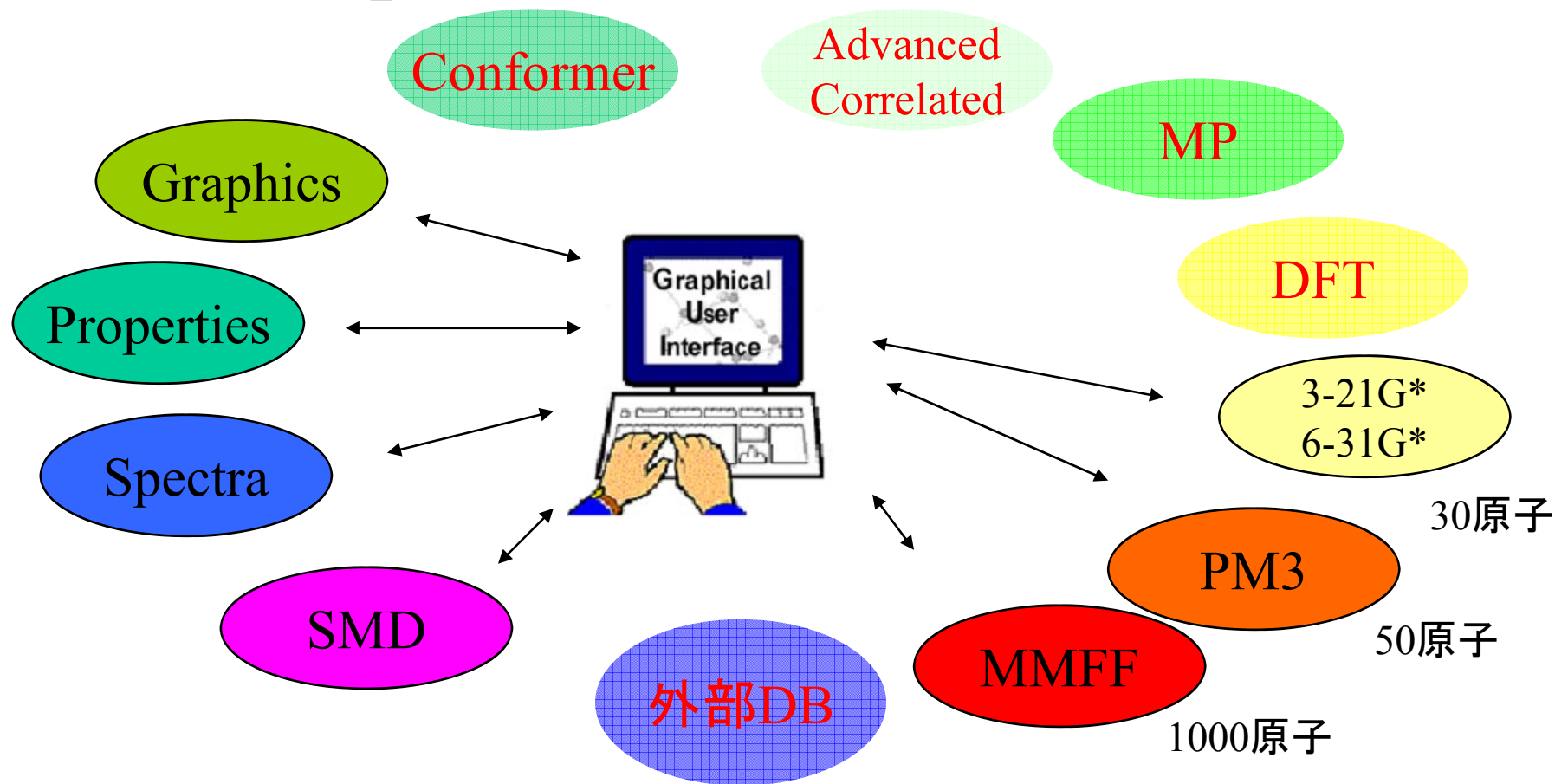


# Spartan'06 Essential Edition

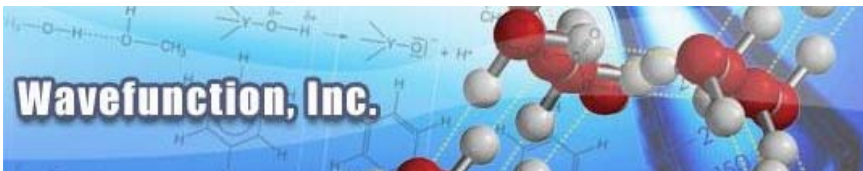




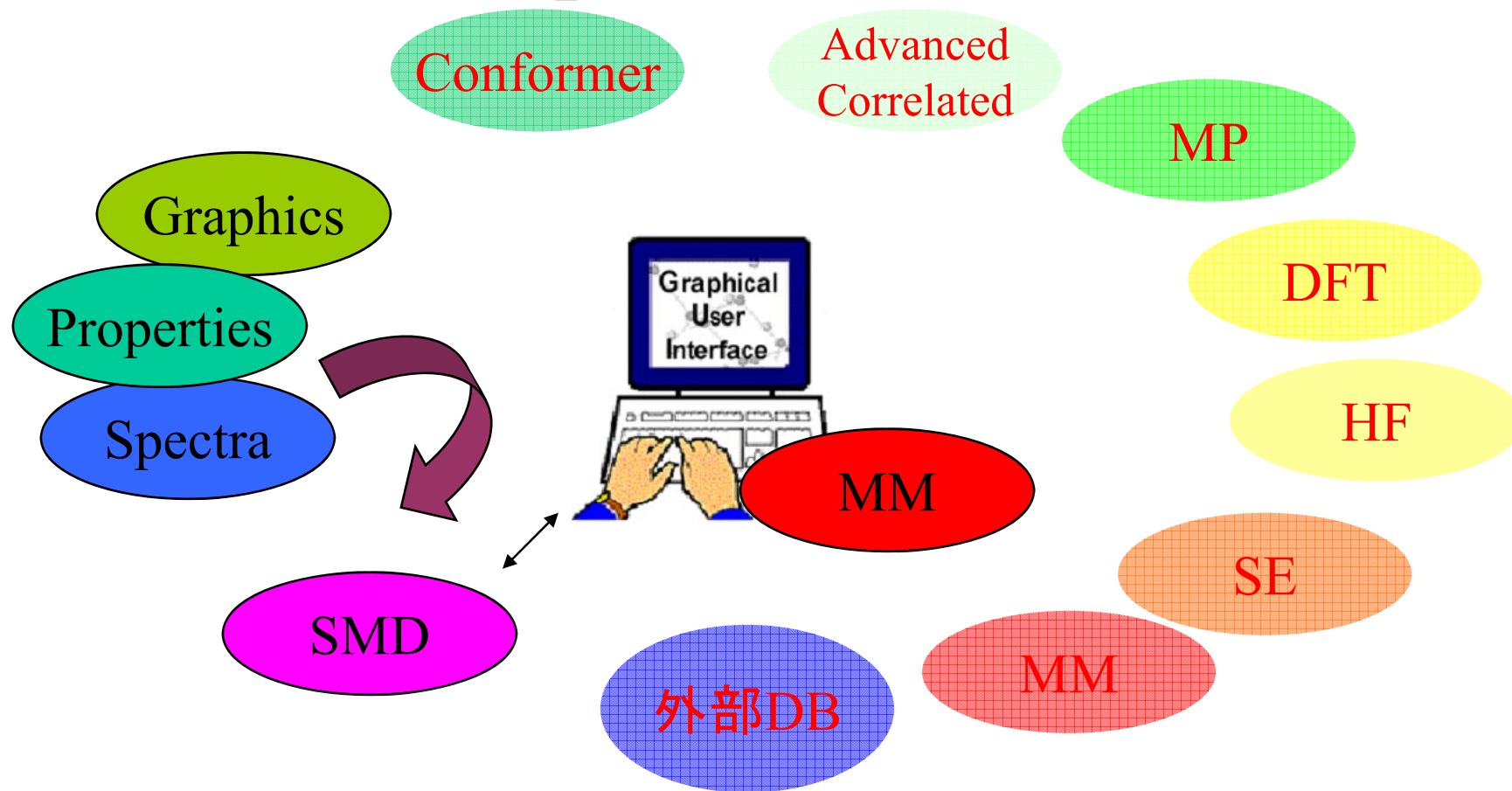
# Spartan Student Edition

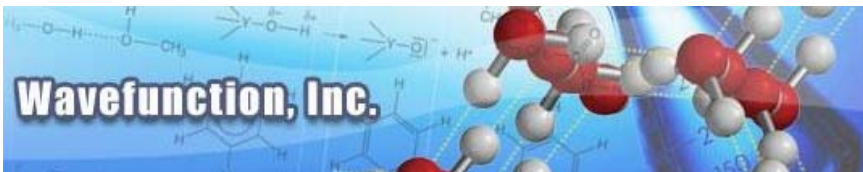




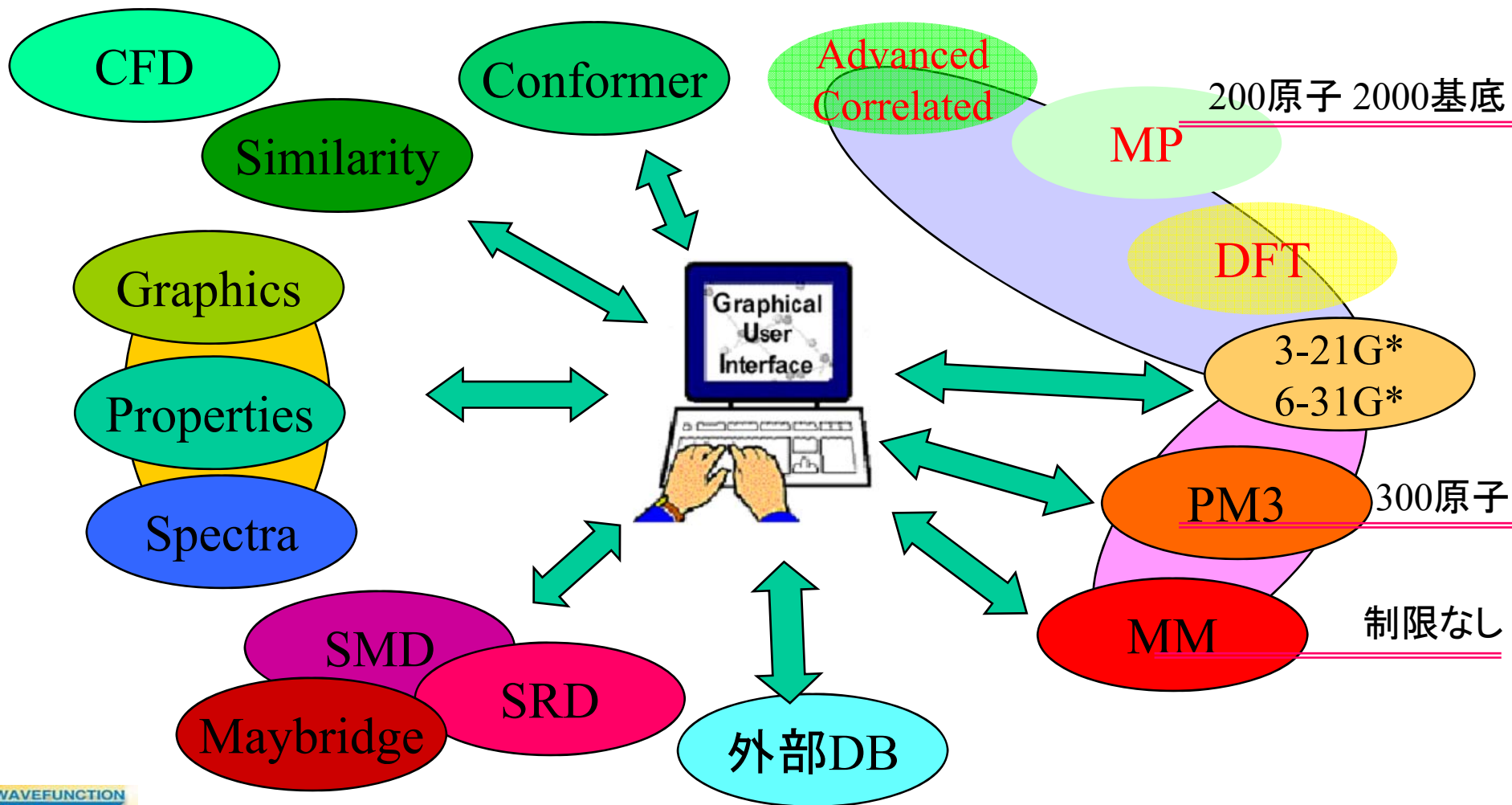


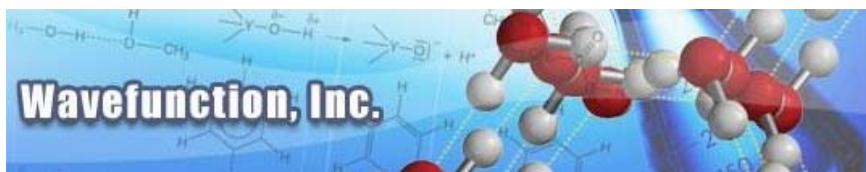
# SpartanModel





# Trident

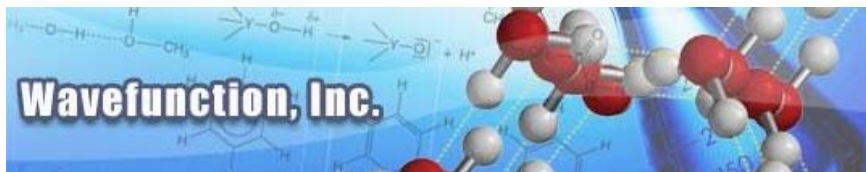




## 内蔵データベース

- SMD(Spartan Molecular Database)
  - Spartanの最適化計算結果(~150,000)
  - 数種類の手法(平均7件:Fullの場合)
  - 名前、3D構造、電荷、エネルギー
  - Spectra(IR:~40,000、NMR:~15,000、UV/Vis:~1,500)
- SRD(Spartan Reaction Database)
  - 計算された遷移構造(~1500)
  - IR
  - 構造による検索

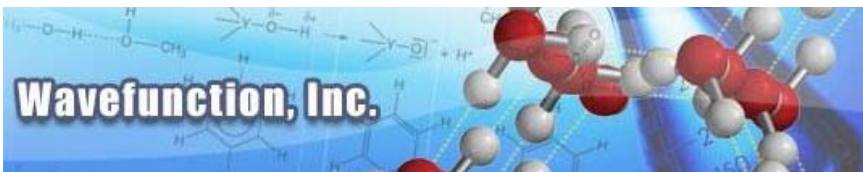




## 外部データベース

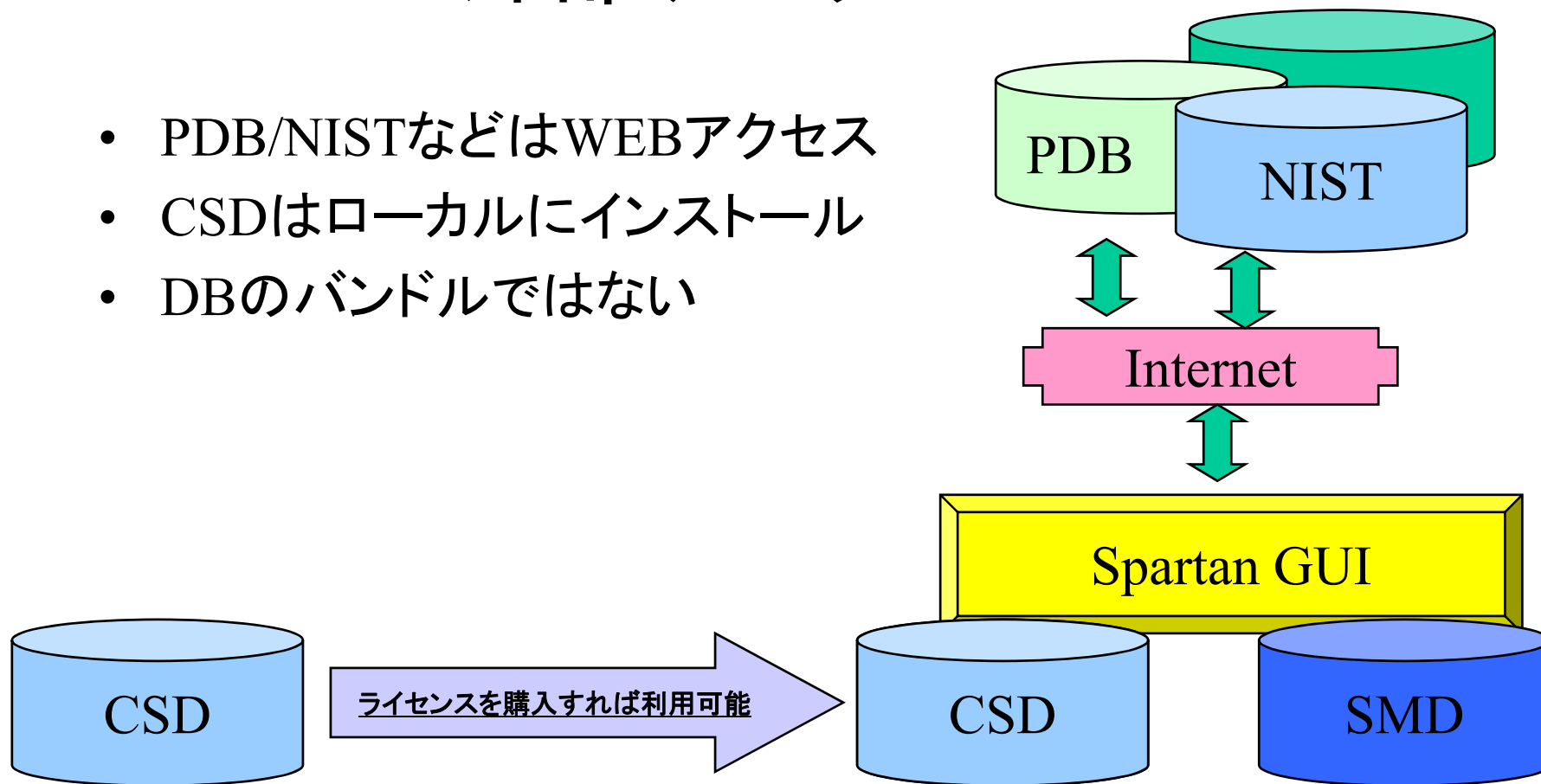
- CCDC/CSD
  - トポロジー検索をSMD同様に可能
  - 3D構造、文献情報
- NIST (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>)
  - IR ~12,000
  - UV/Vis ~ 1,500)
- Protein Databank
- Cologne大学
  - NMR ~15,000



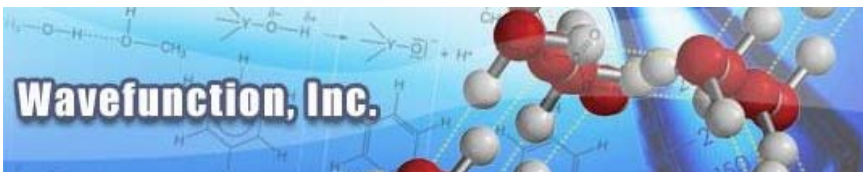


# 外部データベース

- PDB/NISTなどはWEBアクセス
- CSDはローカルにインストール
- DBのバンドルではない

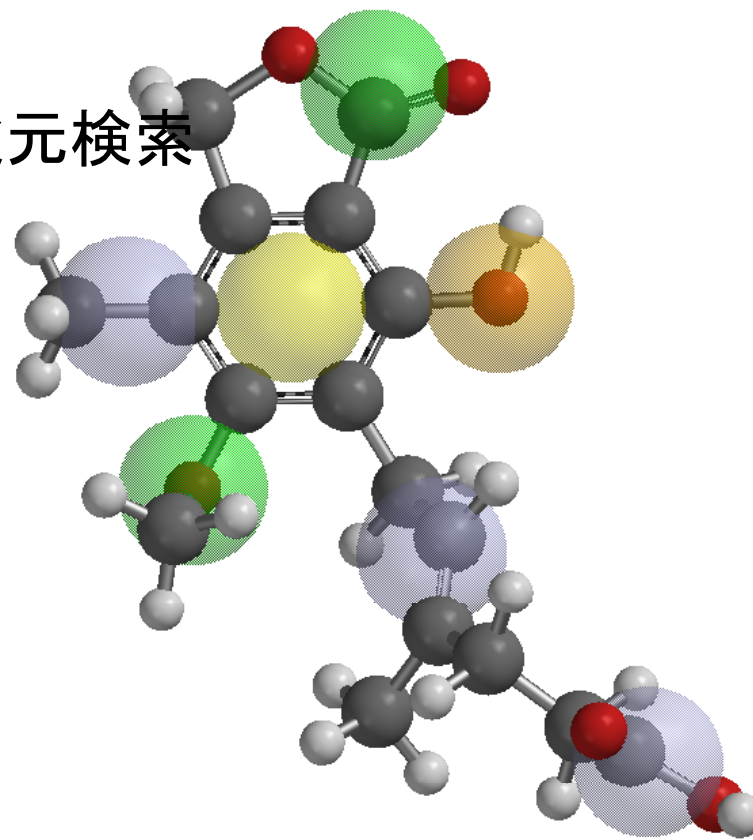






# CFD(化学特性ディスクリプター)

- ファーマコファアの考慮
  - ライブラリの自動生成機能
  - 球形のフィーチャの導入と3次元検索
  - 重ね合わせとスコアリング
- フィーチャ
  - 疎水性、水素結合性、電荷

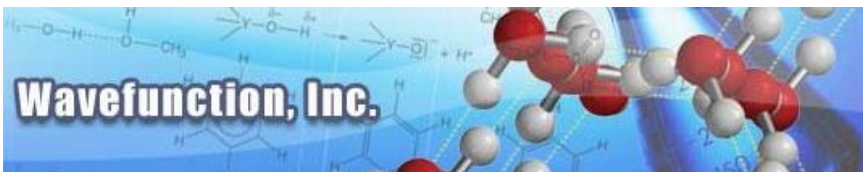




# 日本語教材

- Spartan Student Edition マニュアル
  - ヒーリー「計算有機化学入門」
- Spartan ワークショップノート
  - 挿絵を多用したマニュアル
  - 「分子モデリング演習 初歩の初歩」
- 操作説明ストリーミング
  - WEBにて配信
  - マニュアルに添付
- SpartanModelによる有機化学演習
- ヒーリー「有機化学のための分子モデリングワークブック」
- オンラインマニュアル
  - WEBに公開



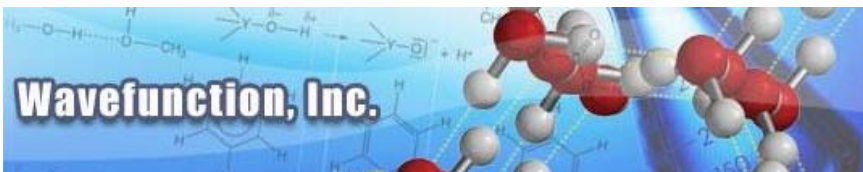


# 手法とその特徴



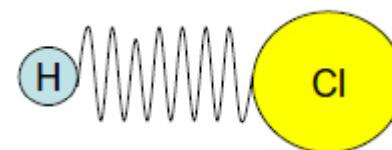
## 分子力学法 (MM) と分子軌道法 (MO)



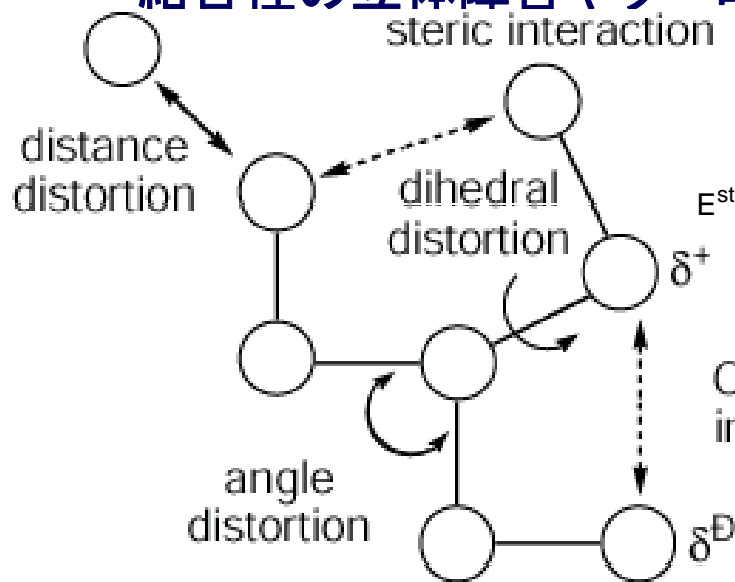


# 分子力学法

- 分子のエネルギーを構造, 位置関係および結合の種類などによって算定。
- 標準的な構造からの歪みを非結合性の立体障害やクーロン

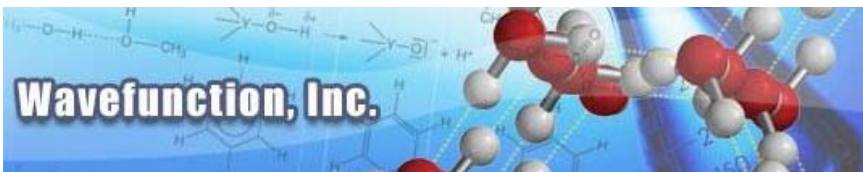


“ばね”でモデル化



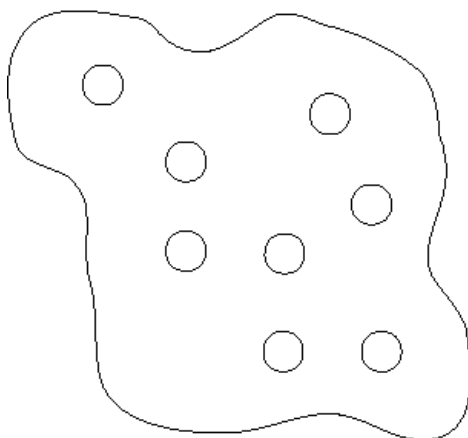
$$E_{\text{strain}} = \sum_A^{\text{bonds}} E_A^{\text{stretch}} + \sum_A^{\text{bond angles}} E_A^{\text{bend}} + \sum_A^{\text{torsion angles}} E_A^{\text{torsion}} + \sum_A \sum_B^{\text{non-bonded atoms}} E_{AB}^{\text{non-bonded}}$$





# 分子軌道法

- 分子軌道法とは分子に含まれている原子核と電子の相互作用によって、構成する分子のエネルギーを求める
- 前提条件: 原子種(原子番号)と原子核の位置、扱う全ての電子の数と不対電子の数
- 原子間結合の情報は不要 > 計算結果から判断

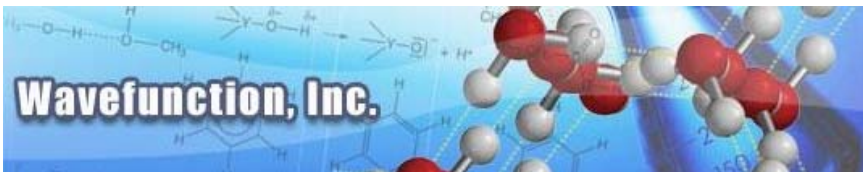


$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

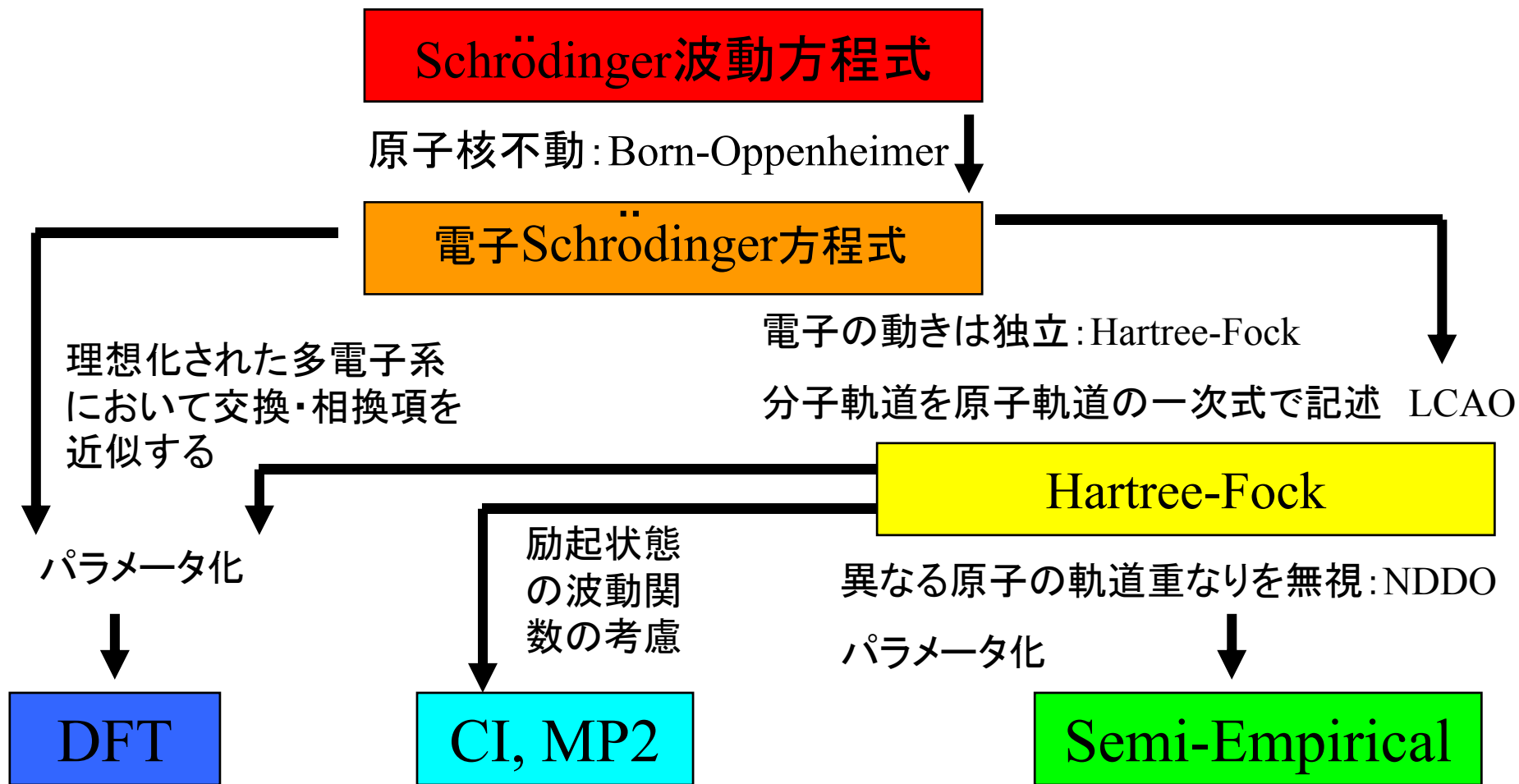
波動方程式を解く

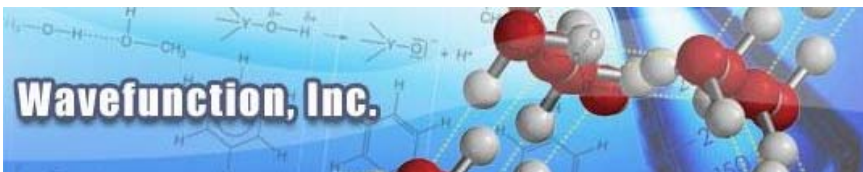






# 分子軌道法



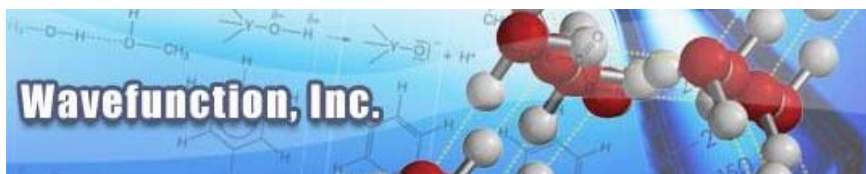


# 計算のコストと範囲

	Formal	Large Molecule	Range (Heavy atoms)
MM	$N^2$	N	>1000
Semi-Empirical	$N^3$	$N^3$	< 200
Hartree-Fock	$N^4$	$\sim N^3$	< 100
Density Functional	$N^4$	$\sim N^3$	< 100
MP2	$N^5$	$N^5$	< 20

Spartanの制限: MM(無制限)、SE(300原子)  
Ab Initio(200原子、2000基底)



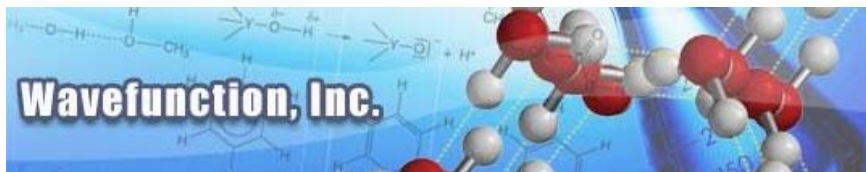


# モデリングの評価

	organics	inorganics/ organometallics
Molecular Mechanics	0.01	--
Semi-Empirical	0.02	0.05
Hartree-Fock	0.01	poor
Density Functional	0.01	0.02
MP2	0.01	0.05

- ・ 実験による誤差はおよそ0.02 Å 程度



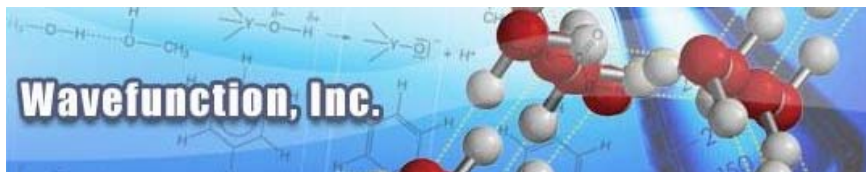


# モデリングの評価

	bonding not conserved	bonding partially conserved	bonding fully conserved
Molecular Mechanics	--	--	--
Semi-Empirical	> 10	> 5	> 5
Hartree-Fock	> 5	2-3	1-2
Density Functional	4-5	2-3	1-2
MP2	2-3	1-2	1-2

- ・ 実験による誤差はおよそ1-3kcal/mol程度



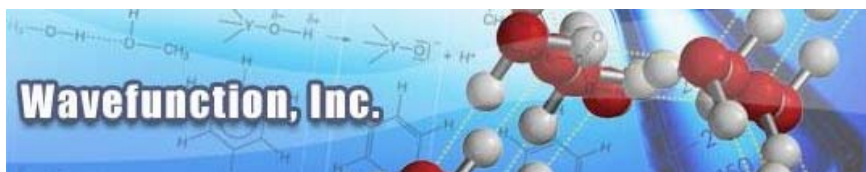


## 理論モデルのパフォーマンスとコスト

	MM	SE	HF	DFT	LMP2	MP2
構造(有機)	C	G	G	G	NA	G
構造(金属)	NA	G	P	G	NA	P
遷移状態	NA	C	G	G	NA	G
配座	G	P	C	G	NA	G
熱化学	NA	P	C	G	G	G
熱化学 isodesmic	NA	P	C	C	G	G
計算コスト	極めて低	低	中程度	中程度	高	高

G: Good    C: Good with Care    P: Poor    NA: Not Applicable





# 計算時間

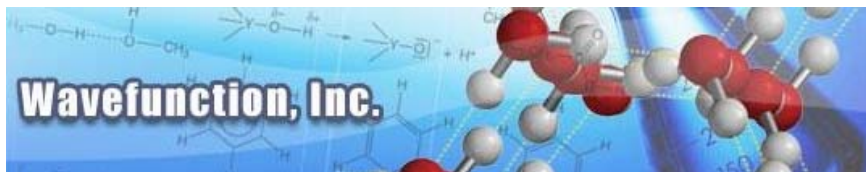
	camphor C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O			morphine C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>6</sub>			triacetyldynemicin A C <sub>36</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>12</sub>	
	3-21G	6-31G*	6-311+G*	3-21G	6-31G*	6-311+G*	3-21G	6-31G*
	131基底	197基底	338基底	227基底	353基底	576基底	491基底	785基底
	Energy	Geometry	Frequency	Energy	Geometry	Frequency	Energy	Geometry
		4step			12step			36step
<b>MMFF</b>	Too Small to measure							
<b>AM1</b>								
<b>HF/3-21G</b>	1	5	27	1a	12	38	1b	60
<b>HF/6-31G*</b>	7	30	150	8	110	—	7	540
<b>HF/6-311+G*</b>	42	180	—	40	—	—	—	—
<b>EDF/6-31G*</b>	12	57	710	10	140	—	5	240
<b>EDF/6-311+G*</b>	60	290	—	50	—	—	—	—
<b>B3LYP/6-31G*</b>	13	65	720	12	160	—	10	610
<b>B3LYP/6-311+G*</b>	85	370	—	76	—	—	—	—
<b>MP2/6-31G*</b>	27	270	—	80	2000	—	320	—
<b>MP2/6-311+G*</b>	260	—	—	650	—	—	—	—
<b>LMP2/6-31G*</b>	25	—	—	50	—	—	90	—
<b>LMP2/6-311+G*</b>	140	—	—	270	—	—	—	—

- a) camphorの3-21Gエネルギー計算に対しておよそ4倍程度  
 b) camphorの3-21Gエネルギー計算に対しておよそ27倍程度

A guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations W.J. Hehre  
 2003 Wavefunction, Inc.







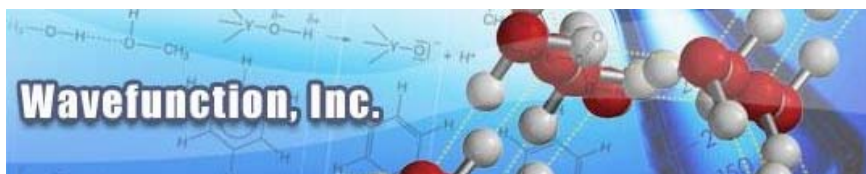
# 計算時間: 実測

	3-21G 6-31G* 6-311+G* Energy	camphor C10H16O 131基底 197基底 338基底 Geometry 4step	Frequency
<b>AMI</b>	-	-	-
		00:00.5 00	00:10.6 08
<b>HF/3-21G</b>	1 00:12.7	5 02:07.8	27 03:05.0
	1	10(12step)	15
<b>HF/6-31G*</b>	7 00:58.0	30 10:11.0	150 18:01.0
	5	48(11step)	85
<b>HF/6-311+G*</b>	42 08:44.2	190 1:29:18	- -
	41	422(11step)	-
<b>B3LYP/6-31G*</b>	13 01:53.6	65 20:22.2	720 -
	9	96(12step)	-
<b>MP2/6-31G*</b>	27 02:11.9	270 46:37.5	- -
	10	220(11step)	-


Intel Xeon 3GHz  
2GB RAM

SCF回数は初期構造に依存する

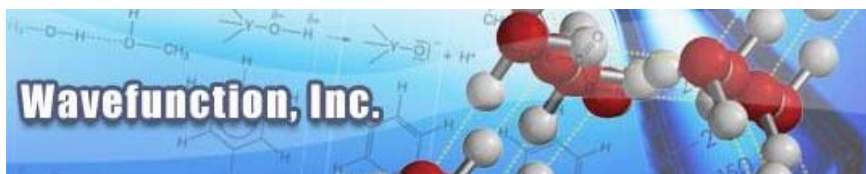




## 演習 (いろいろなタスク)

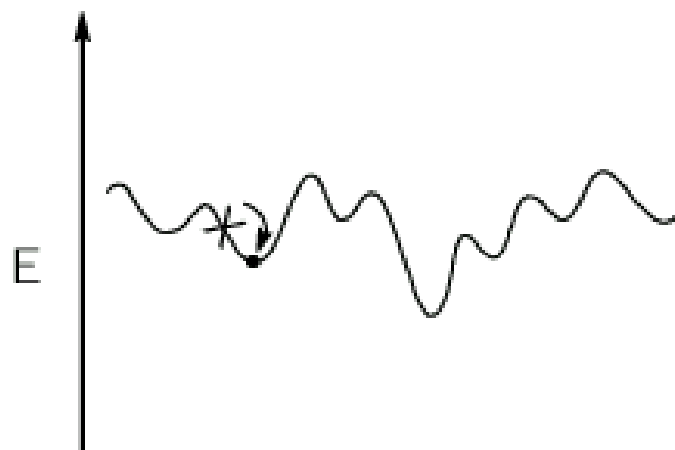
- 
- 平衡構造
  - 遷移構造
  - 配座解析
  - 反応のエネルギー
  - 相対活性化エネルギー
  - スペクトル (IR, NMR, UV/Vis)

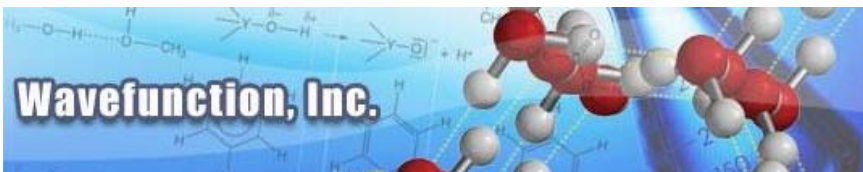




# 平衡構造

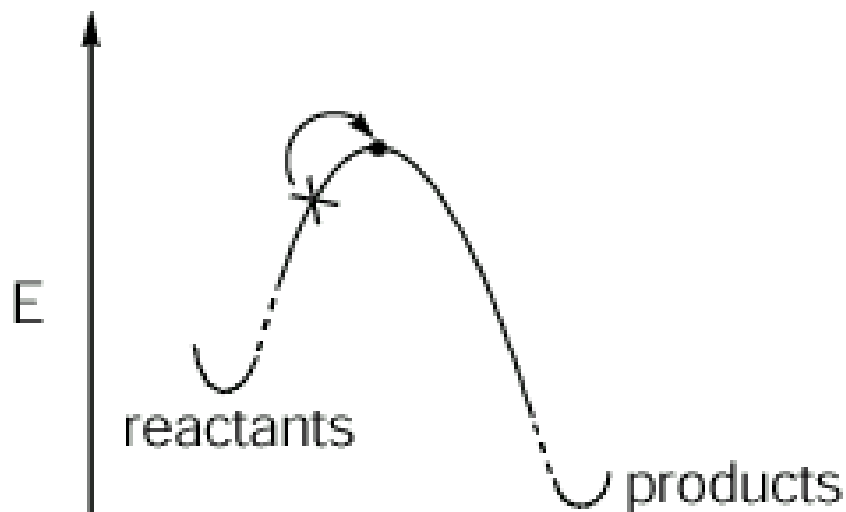
- 多次元のエネルギー面上の局所的な最小値(極小値)を探すことです。
- 平衡構造は実験で入手可能. 計算によって得られた構造の“質”を判定することができます。

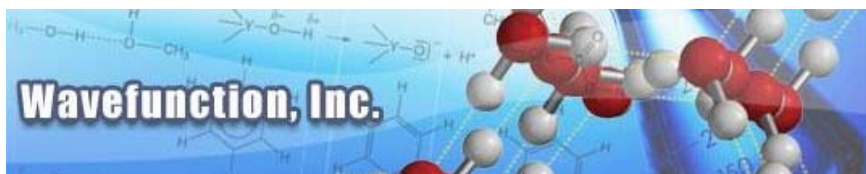




## 遷移状態の構造

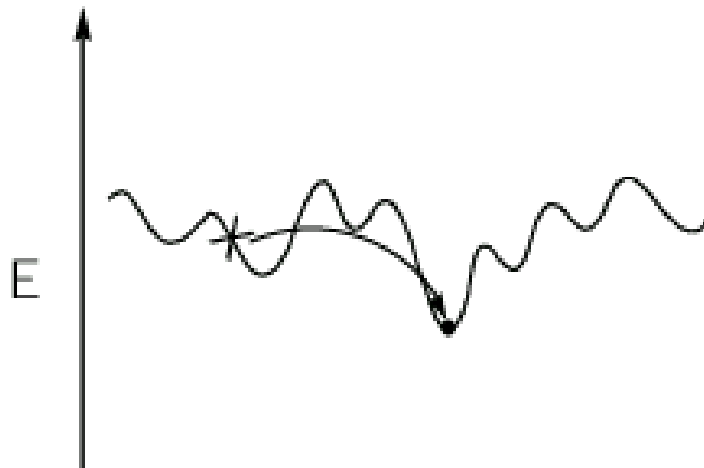
- 反応経路上のエネルギー最大値の場所とその構造を探索することです。
- 遷移状態の構造は、計算でのみ得ることができます。

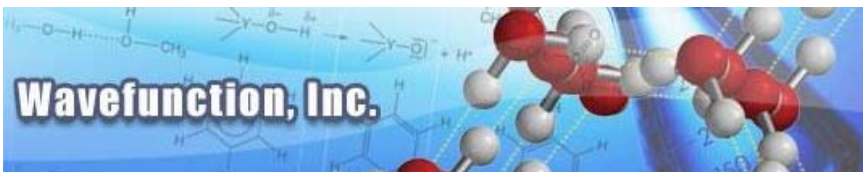




## 配座解析

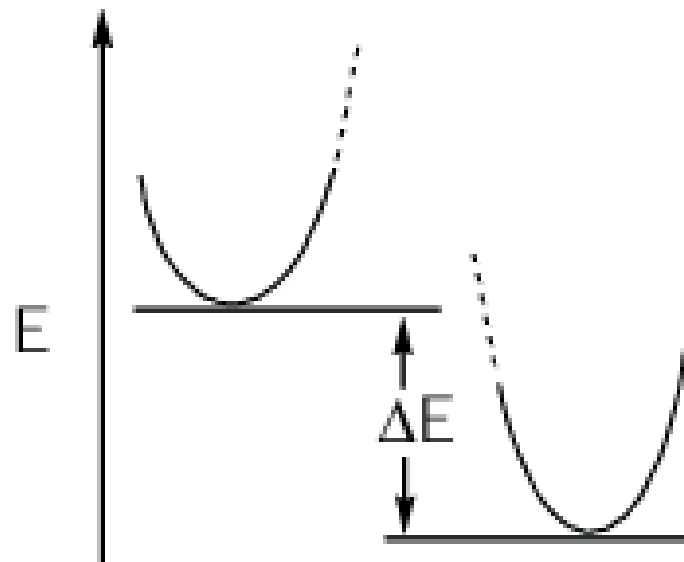
- エネルギー最小値(最安定構造)/一連の安定構造を求めること
- 原理的には, 各々の配座における平衡構造は実験での探索が可能
- 実際には最安定構造以外の検出は困難



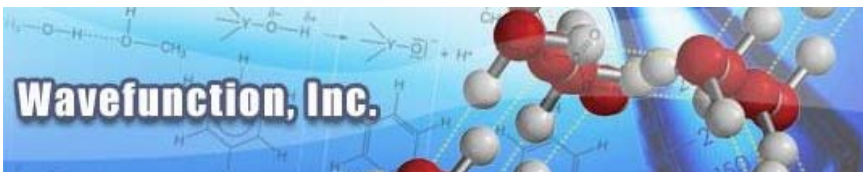


# 反応のエネルギー

- 二つのエネルギーの最小値の差を求めること
- 反応前後のエネルギーの差

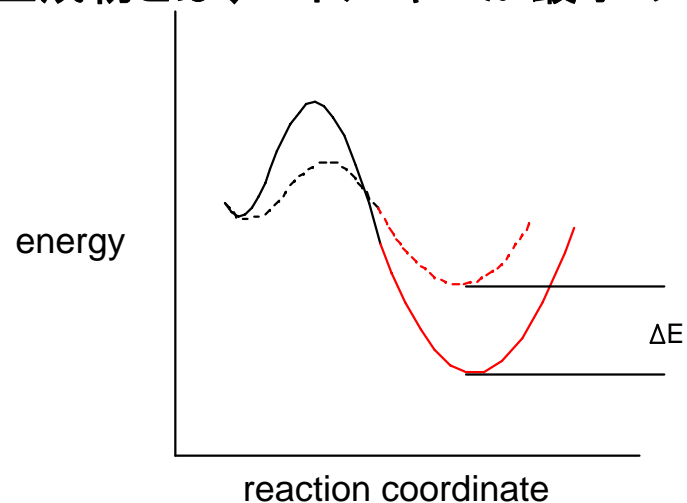






# 熱力学的生成物

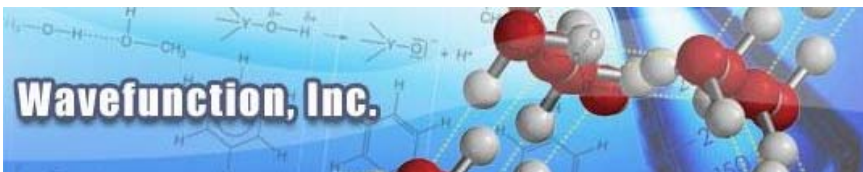
熱力学的生成物とは、エネルギーが最小のものです



エネルギーの差分から ( $\Delta E$ ) 生成比 (主生成物:副生成物)が、計算できます。

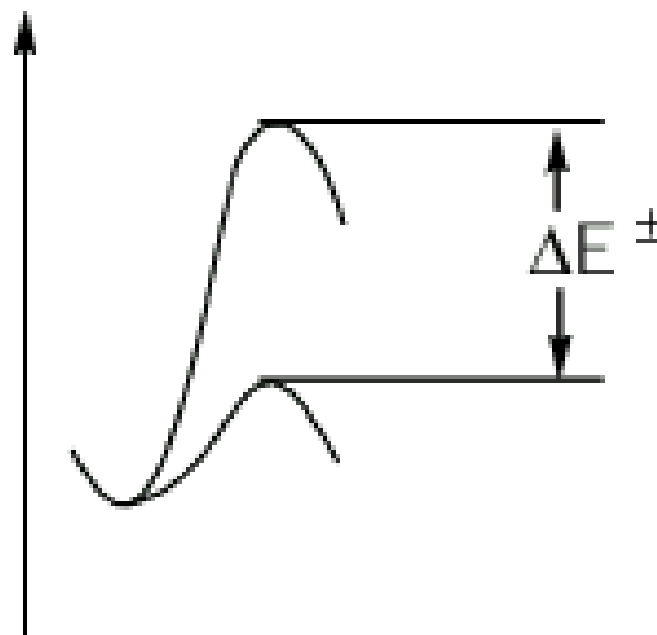
$\Delta E$ (kJ/mol)	主:副
4	90:10
8	95:5
12	99:1

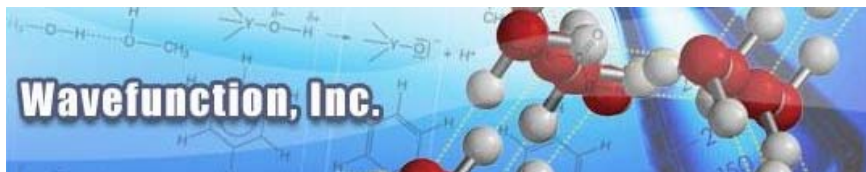




# 相対活性化エネルギー

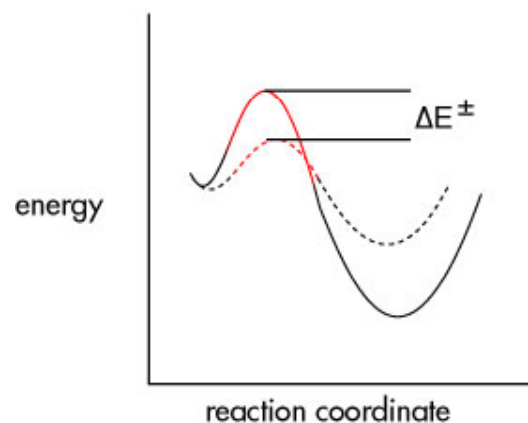
- 二つ以上の経路における最大値の差を求めることです。
- 生成した化合物の割合は相対的な活性化エネルギーに従います。
- 計算の検証が可能です。





# 速度論的生成物

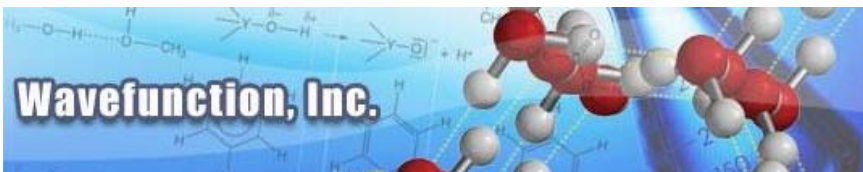
速度論的生成物は活性化エネルギーが最小のものです



エネルギーの差分 ( $\Delta E^\ddagger$ )から生成比(主生成物:副生成物)が計算できます

$\Delta E^\ddagger$ (kJ/mol)	主:副
4	90:10
8	95:5
12	99:1

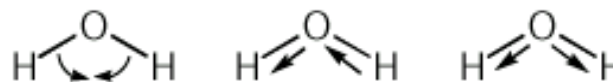


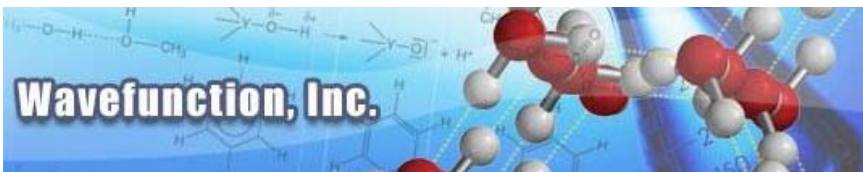


# 振動計算 (IR)

- ・ 平衡構造におけるエネルギーの二次微分(力の定数)はIRの振動を導きます。
- ・ この振動の動きは鉛筆でも表現できます、が、、
- ・ 複雑な分子の場合、コンピュータ分子モデリングを使わないで振動の動きを正確に表現することは困難。

振動数  $\propto \sqrt{\frac{\text{力の定数}}{\text{換算質量}}}$

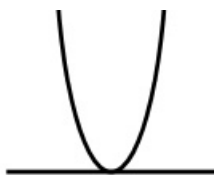




# 振動計算 (IR)

$$\text{振動数} \propto \sqrt{\frac{\text{力の定数}}{\text{換算質量}}}$$

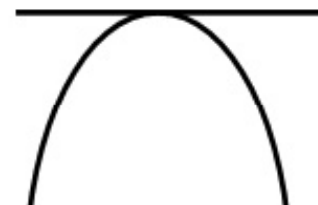
- 力の定数
  - ポテンシャル面の二次微分
  - 面の湾曲大 → 力の定数大 → 振動数大 → 伸縮方向
  - 面の湾曲小 → 力の定数小 → 振動数小 → 回転方向
- 換算質量 > 0



面の湾曲: 大

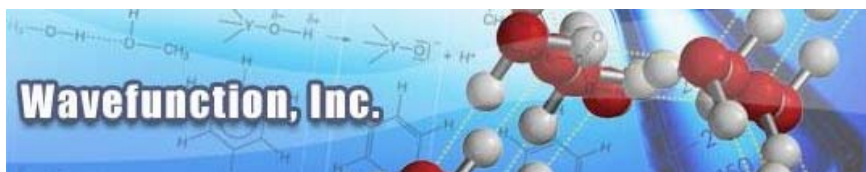


面の湾曲: 小



面の湾曲: 負





# ポテンシャルエネルギー

- 反応物、遷移構造、生成物

$$\frac{dE}{dR_i} = 0 \quad (\text{全ての} i \text{ において})$$

- 反応物、生成物

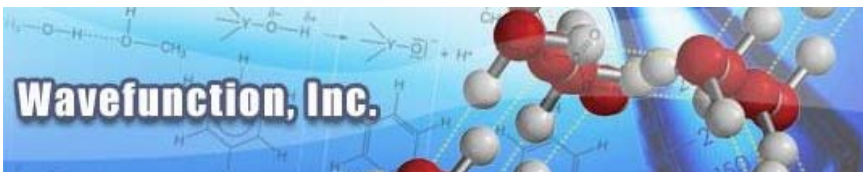
$$\frac{d^2E}{dR_i^2} > 0 \quad (\text{全ての} i \text{ において})$$

- 遷移構造

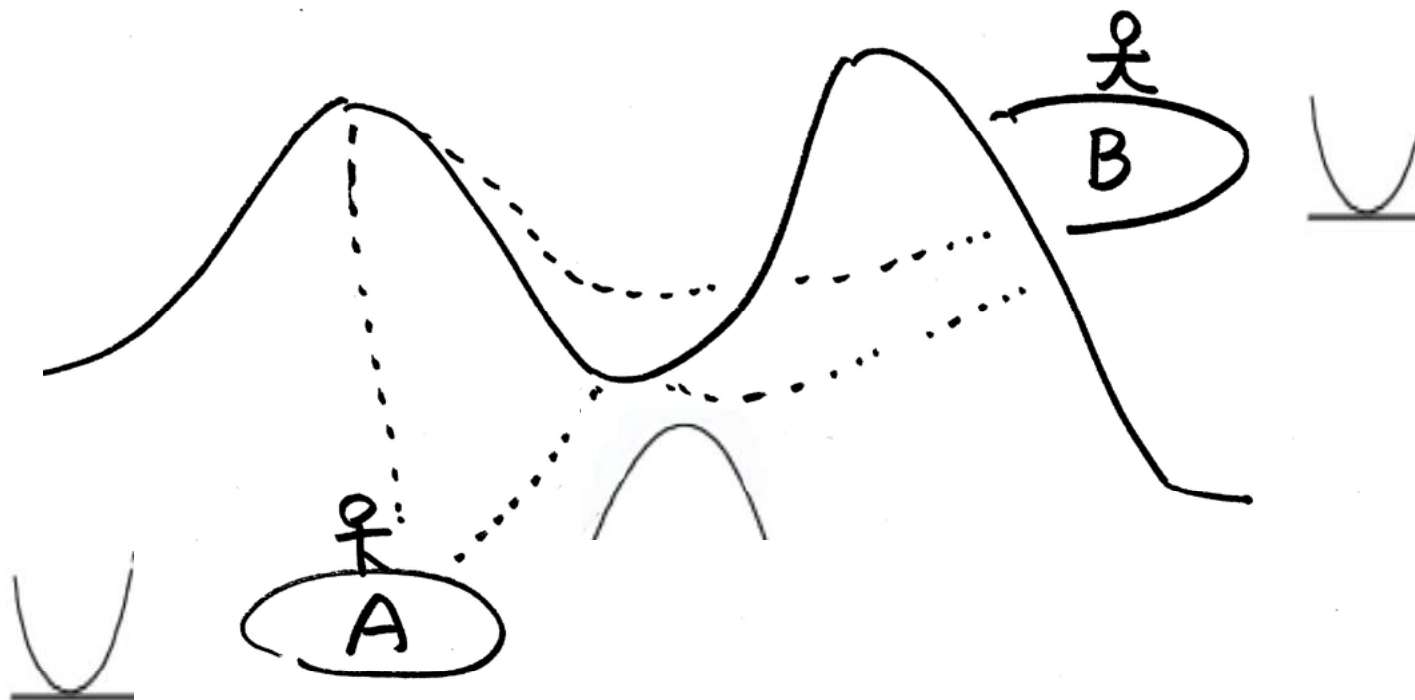
$$\frac{d^2E}{dR_i^2} < 0 \quad (i \text{ が唯一存在する})$$

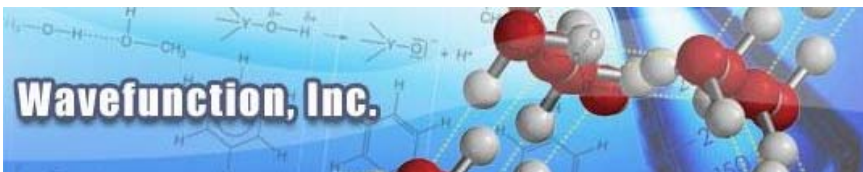






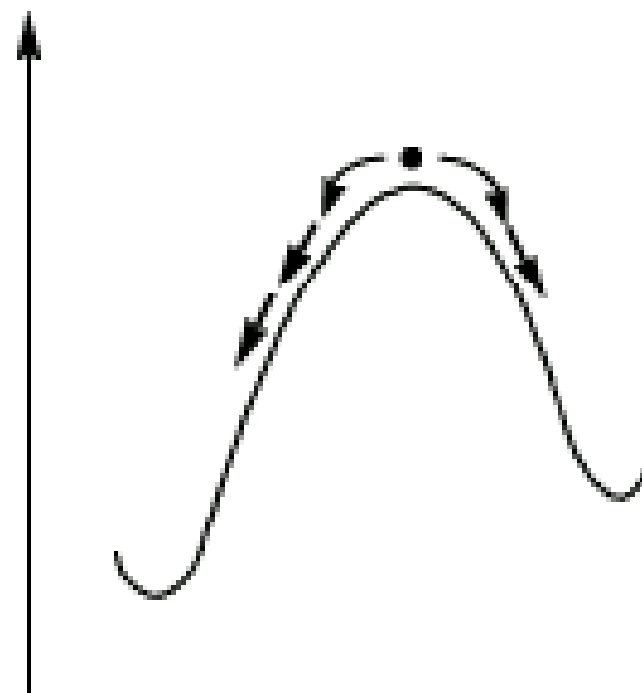
# 遷移状態のモデル

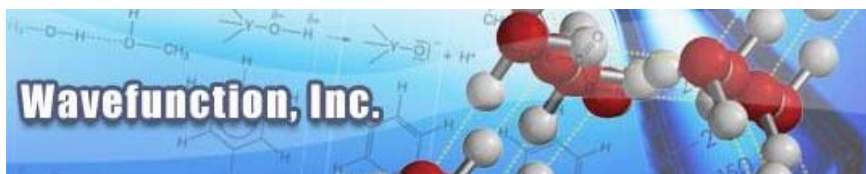




# 反応経路

- 遷移状態を探し、そのエネルギーの二次微分から振動を得る。
- 振動の動きは、遷移構造を中心とした反応座標系。
- 反応物と生成物をなめらかに結ぶ反応座標上に存在する事以外にはこの振動の動きを実験的に再現することは不可能。



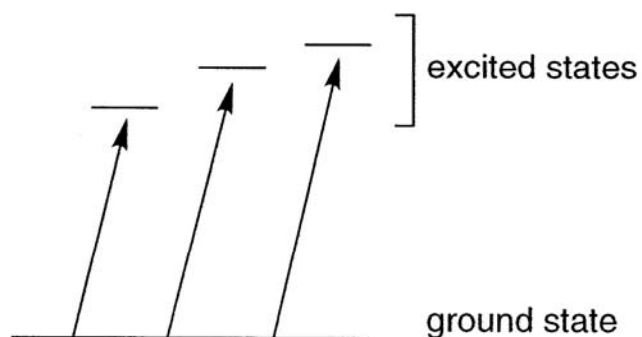


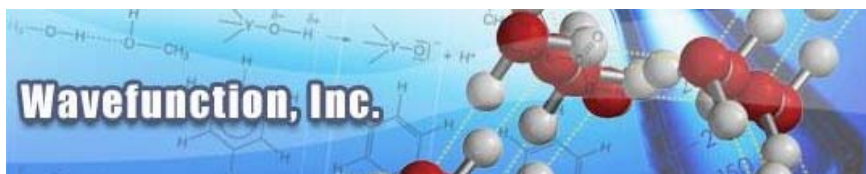
# NMR

- Hartree-FockとDFT
- 化学シフト ( $^1H$   $^{13}C$ )
- カップリング定数は未導入

# UV/Vis

- CI, TDDFT



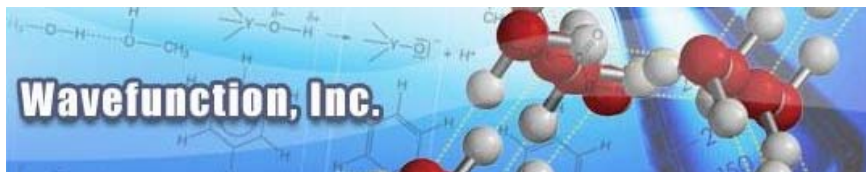


## 演習 (グラフィックス)



いろいろなグラフィックスの作成

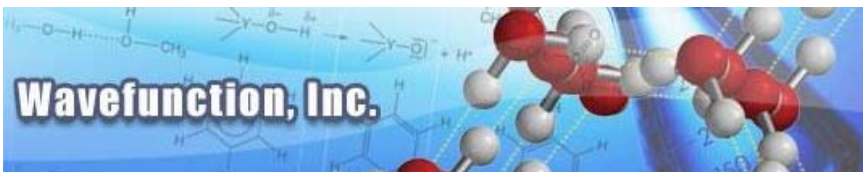




# グラフィックス

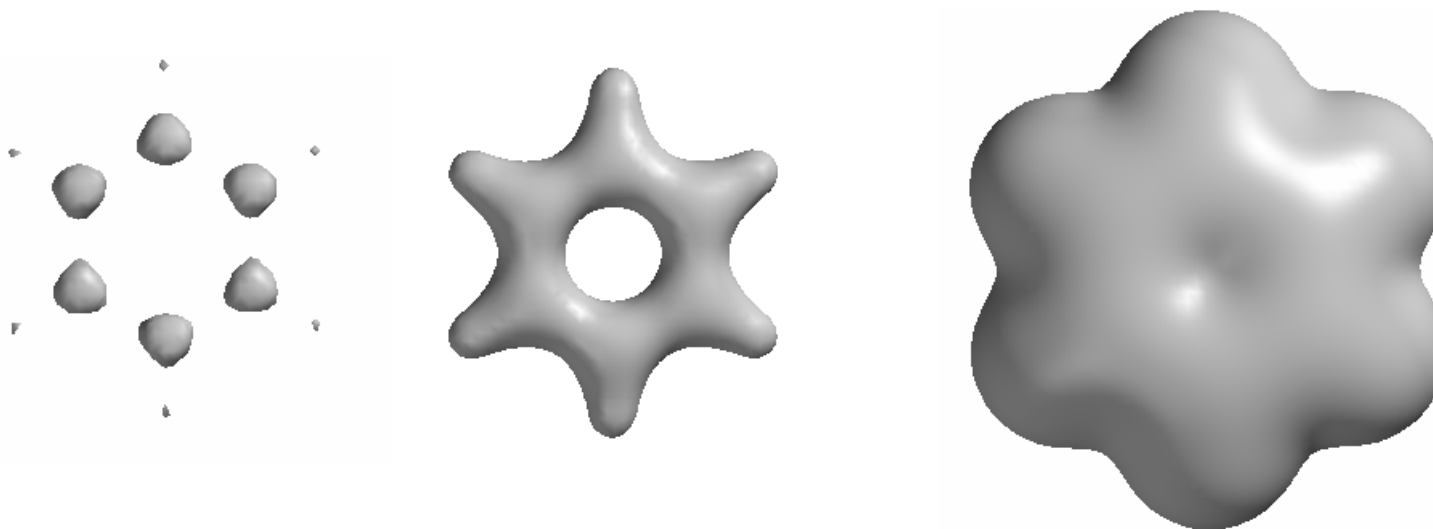
- サーフェス
  - 全電子密度 (Electron Density)
  - 静電ポテンシャル (Electrostatic Potential)
  - 局所イオン化ポテンシャル (Local Ionization Potential)
  - 分子軌道 (Molecular Orbital Surface)
- マップ
  - 静電ポテンシャルマップ
  - 局所イオン化ポテンシャルマップ
  - 分子軌道マップ
- スライス
  - 各プロパティの断面



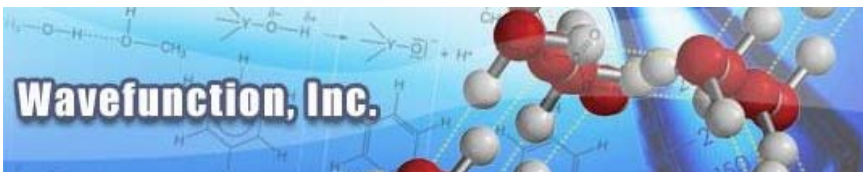


## 全電子密度

- 電子の存在確率の分布＝電子密度
- 電子密度の等値面：値によって、原子の位置、結合、分子の大きさなどさまざまな情報を提供します

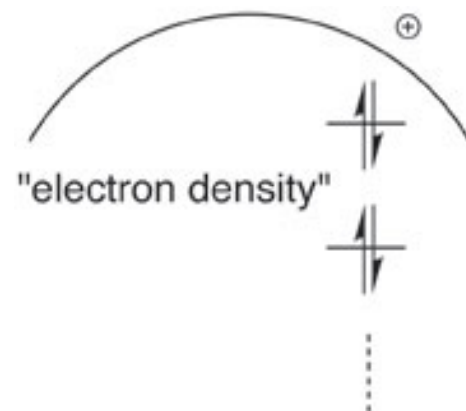


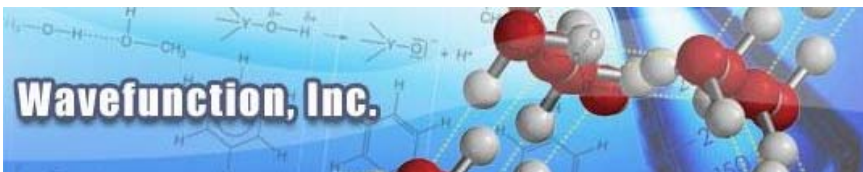




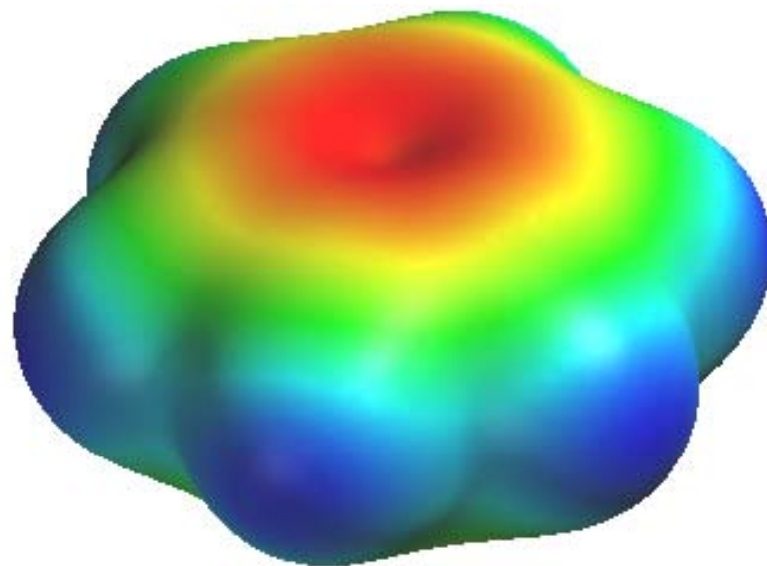
## 静電ポテンシャルマップ

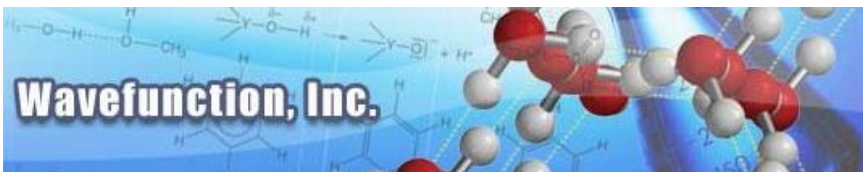
- 分子近傍での正の点電荷に対するポテンシャルエネルギー
- 電子密度面上に静電ポテンシャルの色分け=マップ
- 分子表面上の電荷分布の理解
- 赤(負値) ← → 青(正值)





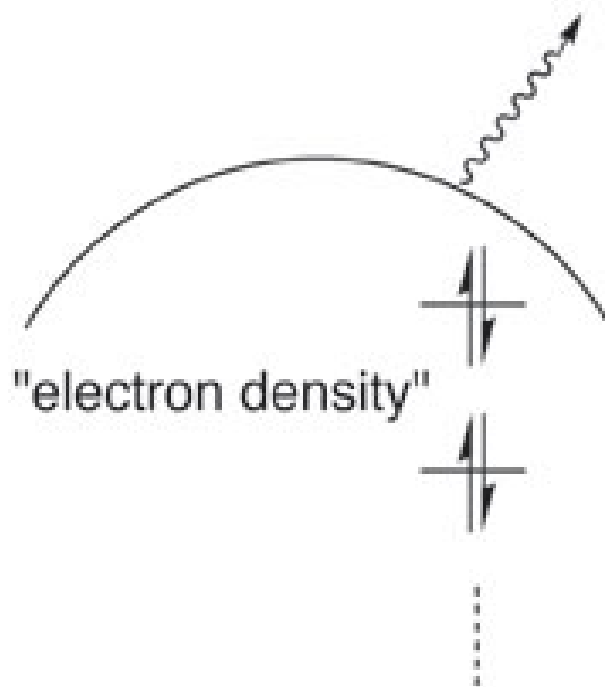
## 静電ポテンシャルマップ:ベンゼンの場合

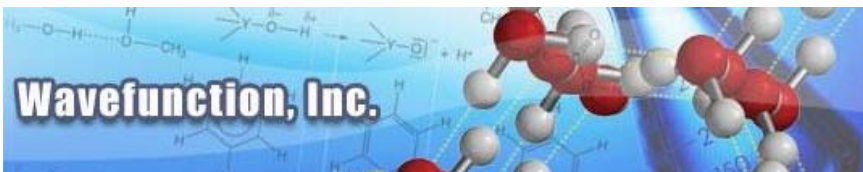




## 局所イオン化ポテンシャルマップ

- 分子近傍から電子を引き抜く際のポテンシャルエネルギー
- 電子密度面上に色分け=マップ
- 分子表面上の求電子反応性の理解
- 赤(最小値): 反応性大 ← → 青(最大値) 反応性小

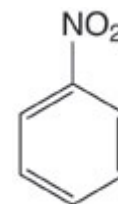
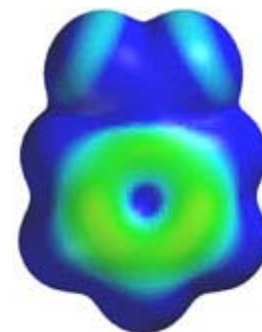
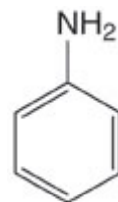
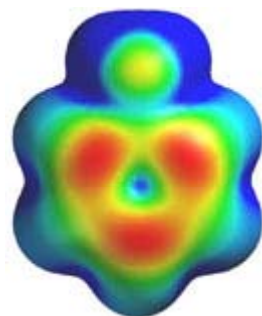
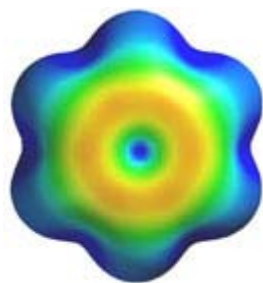


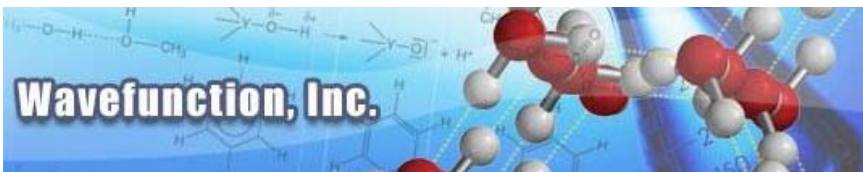


## 局所イオン化ポテンシャルマップ

求電子置換反応の反応性・位置選択性(配向性)

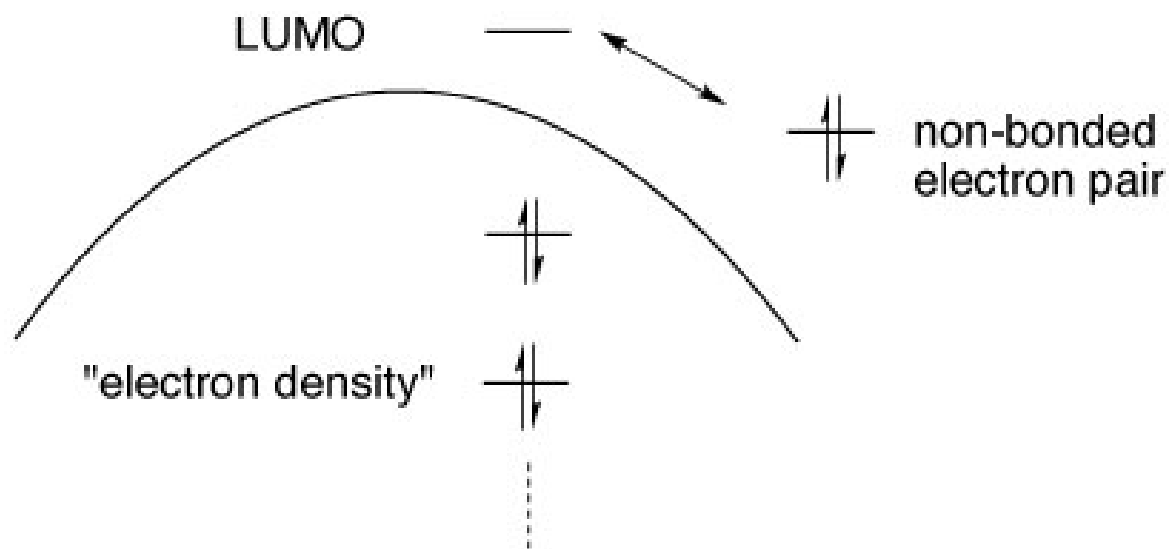
- $\text{NH}_2$  オルト/パラ  $\text{NO}_2$  メタ
- $\text{NH}_2$  電子供与基、活性化基  $\text{NO}_2$  電子受容基、不活性化基

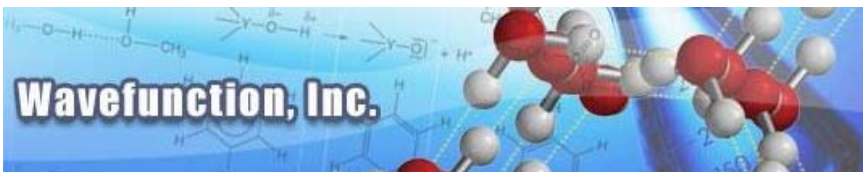




## LUMO マップ

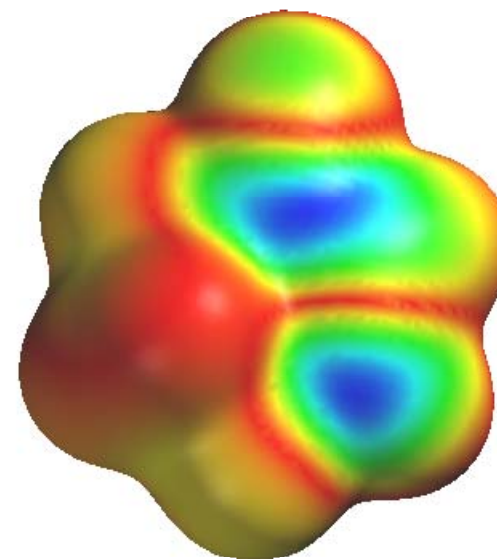
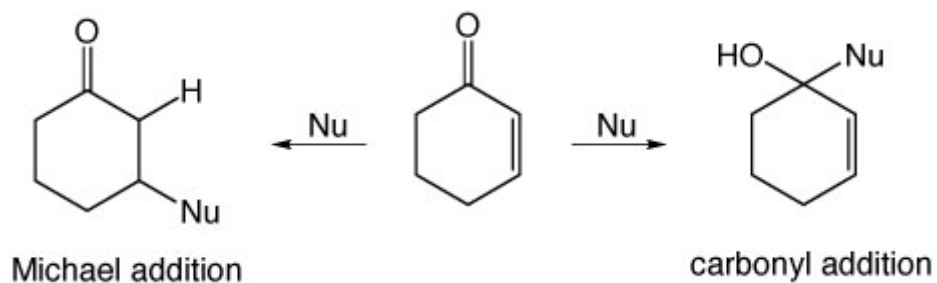
- 電子密度面に最低空軌道 (LUMO) を色分け = マップ
- 分子表面上の求核反応性の理解
- 赤 (最小値) 反応性小  $\longleftrightarrow$  青 (最大値) 大



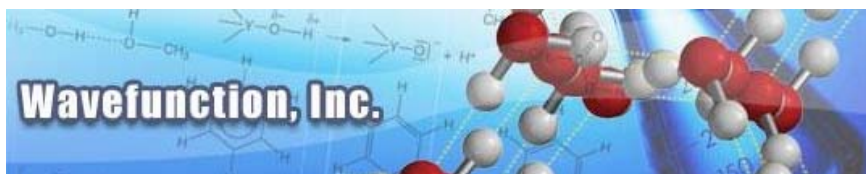


## LUMOマップの使い方: エノンの求核反応の可能性

- シクロヘキセノンにおける求核付加反応のしくみ
- カルボニル付加とマイケル付加



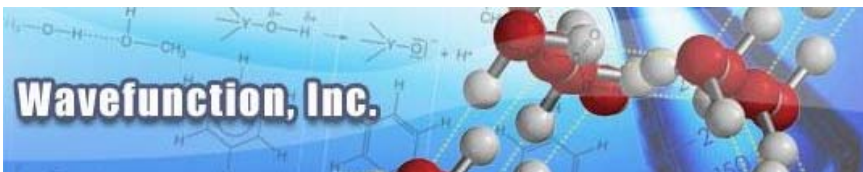




# 薬化学向け新機能と新製品Trident

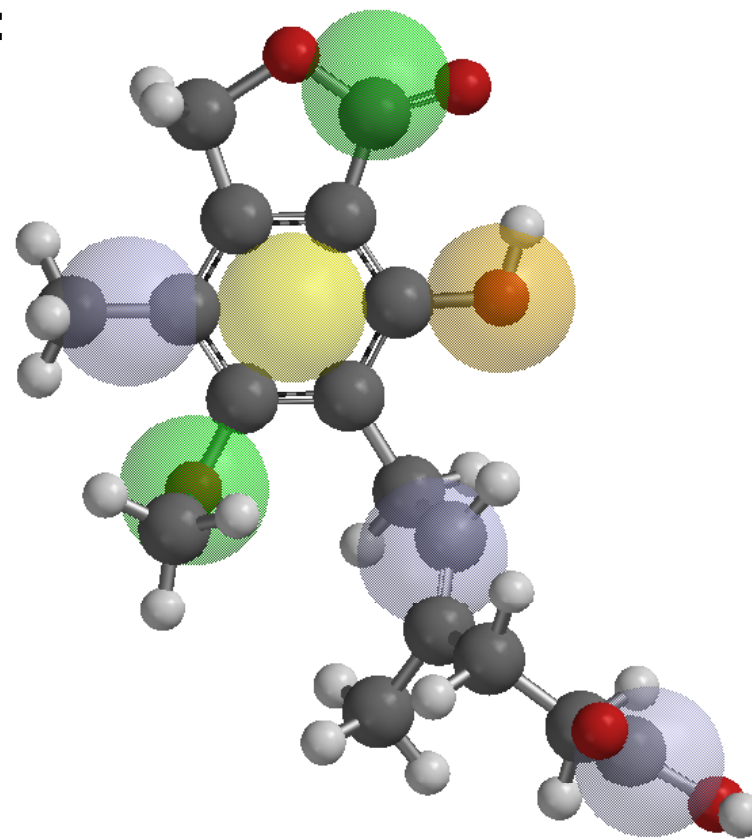
- 類似性解析
- 配座ライブラリの生成
- 新規データベース
- 追加演習

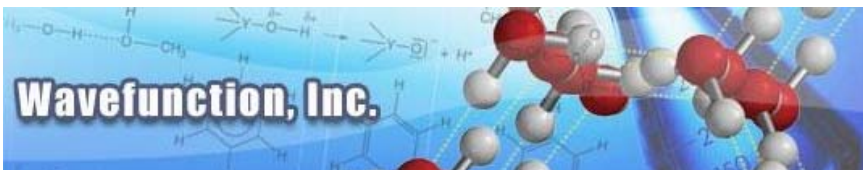




## 類似性解析

- 構造を基準とした分子同士の類似性解析
- CFDを基準とする分子同士の類似性解析:
  - 水素結合性
  - 正負イオン化中心
  - 疎水性、芳香属性
- 分子とファーマコフォアの類似性解析
- プロテイン、核酸のデータから切り出し
  - リガンド、
  - リガンド周りの環境
  - CFDの切出（排除体積）





## Spartan(Trident)からアクセス可能なデータベース

### Small Molecules

~120K Organic Molecules with Structures, Energies and Properties Pre-calculated with Hartree-Fock 6-31G\* Molecular Orbital Theory



### Maybridge

~70K Sets of Diverse Conformers for the Maybridge Compendium “Compounds for Drug Discovery Chemistry”

### Pharmaceuticals

~5K sets of Diverse Conformers for Pharmaceuticals and Pharmaceutical Candidates

### Ligands



### CSD

Collection of ~1250 Small Molecules Bound to Proteins and Nucleotides in the PDB

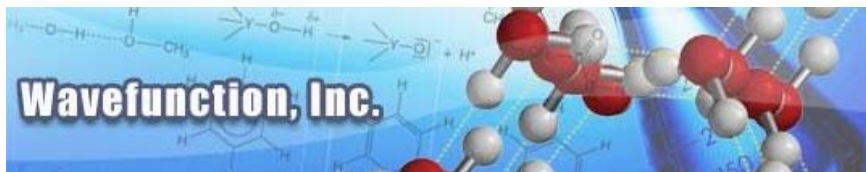
Cambridge Structural Database (license required) 大阪大学/情報化学協会へ

*Trident* . . . Databases



Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved





## Problem 1: 血液脳関門の透過と分子のプロパティとの相関\*

A. Polar Surface Area (古典的) と実験値との相関

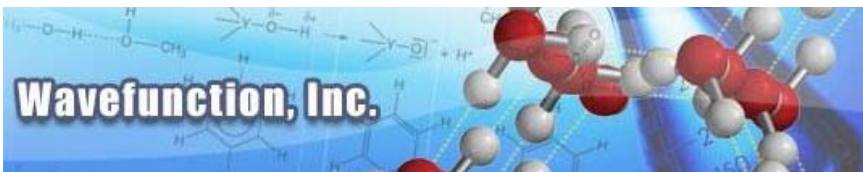
B. 静電ポテンシャルマップから算出した Polar Area と実験値との相関

\* J. Kelder, et. al., *Pharmaceutical Res.*, **16**, 1514 (1999)



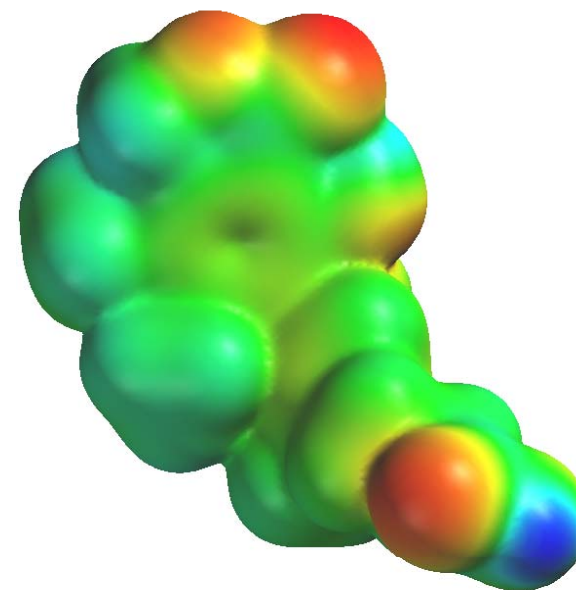
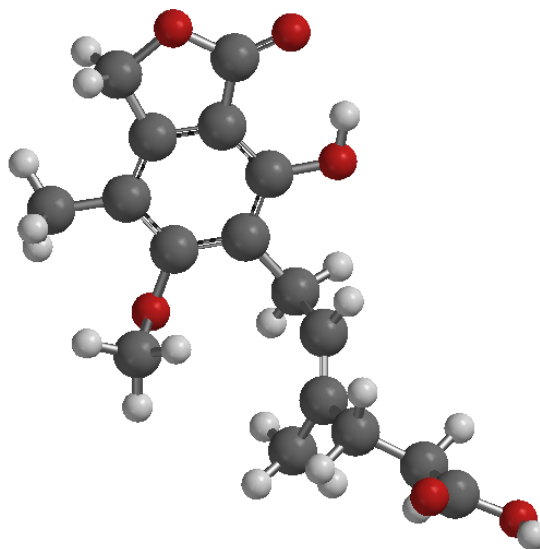
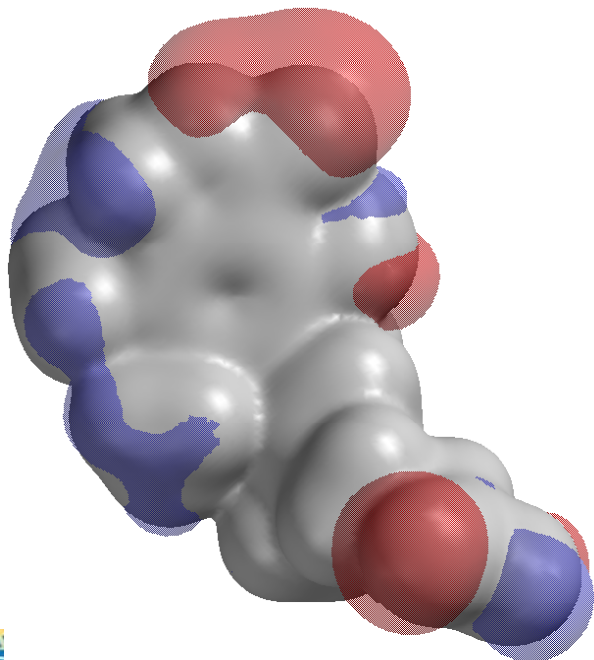
Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved



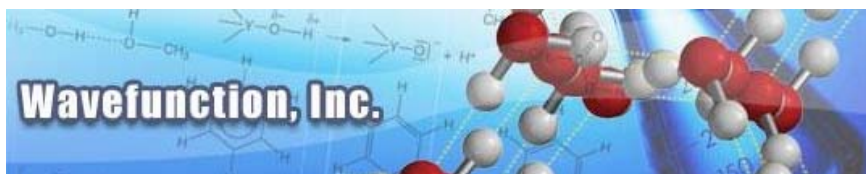


## Polar Areaの算出に使用する3つの面

1. 全電子密度面(大きさ、形の再現).
2. 負の静電ポテンシャル面 (赤表示)  
>全電子密度面への突き出し> 電子がリッチな部位 (塩基性).
3. 正の静電ポテンシャル面 (赤表示)  
>全電子密度面への突き出し> 電子がプアーな部位 (酸性).





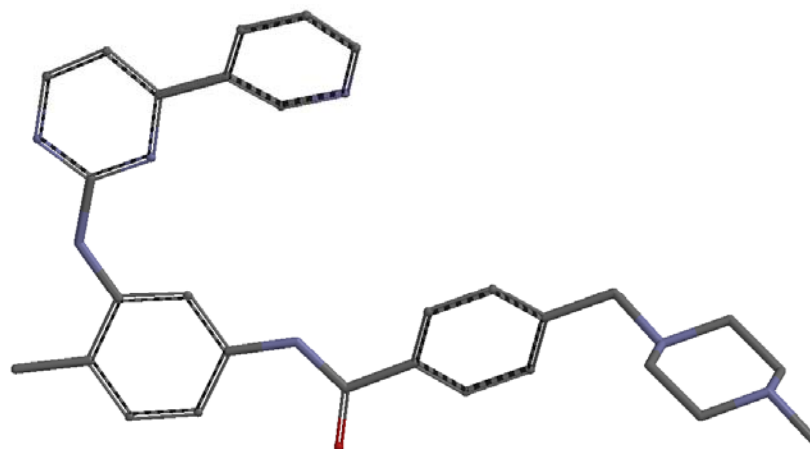


**Problem 2: タンパクにリガンド分子がドッキングする“コスト”の見積もり  
グリーベック vs プロテインチロシンキナーゼ**

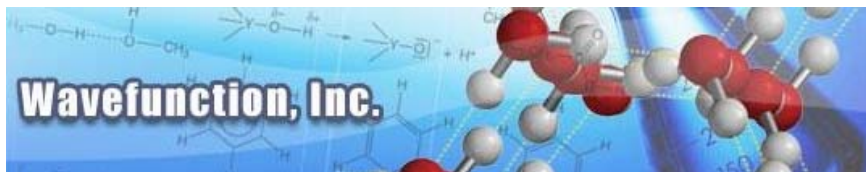
**A. PDB file からの切り出し “1opj”**

**B. 配座解析とドッキングの配座の比較**

**C. エネルギーの計算**







## リガンドを内包させたプロテインから切り出せるもの

リガンドの構造

リガンドの環境-非ファンデルワールスのコンタクトサイト

タンパク/核酸側の構造

リガンドのCFD

HBA, HBD

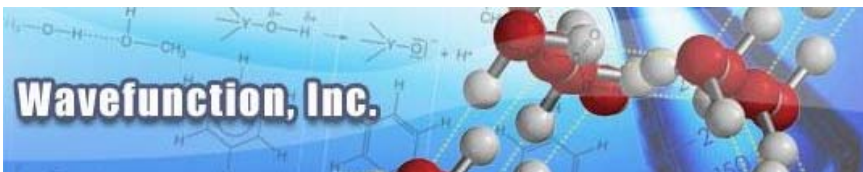
正負のイオン化中心

疎水性

排除体積

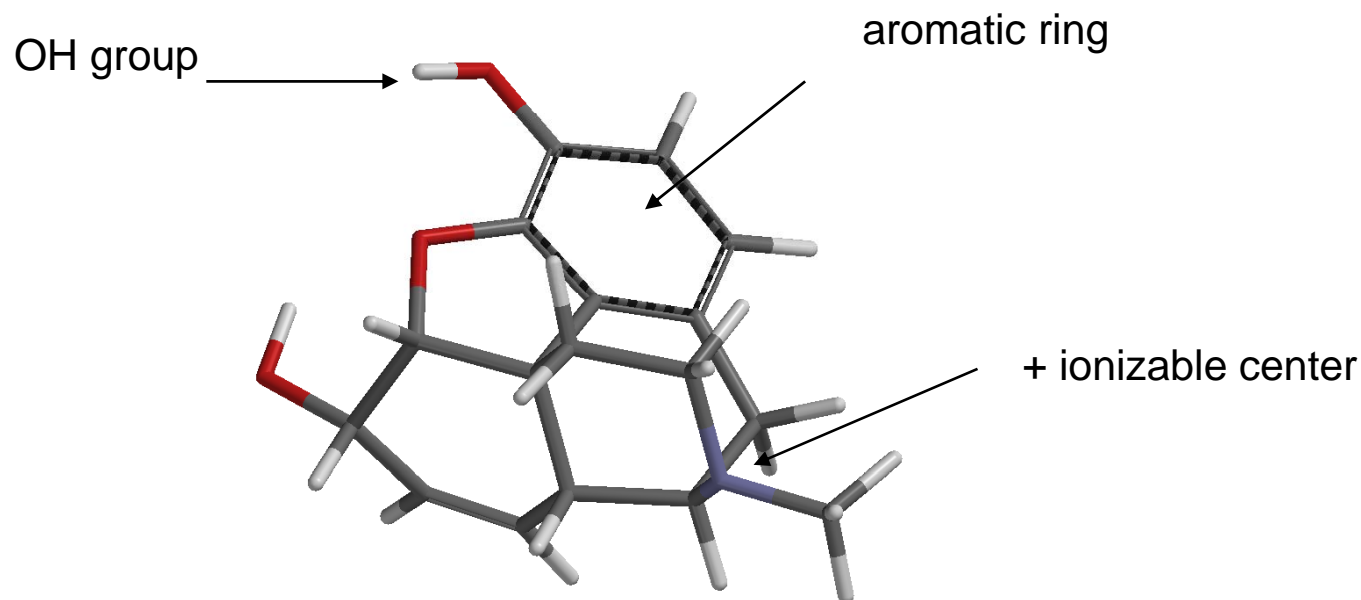
*Trident* . . . Ligand Extraction from PDB files

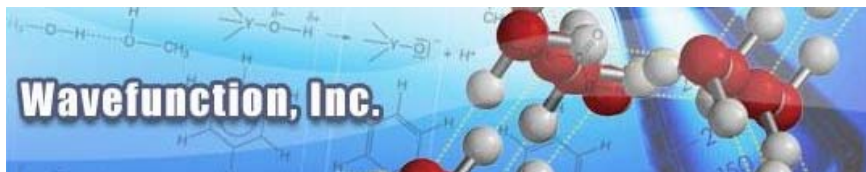




## Problem3 : モルヒネの類似分子...Structure vs. Function

- A. DBからフェノール、トリメチルアミンを使って化合物を検索
- B. HITリストとモルヒネを分子構造を比較
- C. HITリストとモルヒネをCFDで比較





分子同士の構造を基準とした類似性解析

分子同士のCFD(化学特性ディスクリプター)を基準とした類似性解析

HBA, HBD  
正負イオン化中心  
疎水性、芳香属性  
排除体積

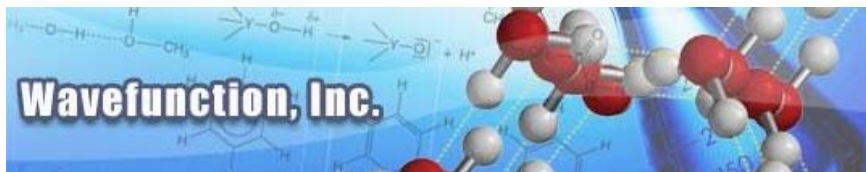
分子とファーマコフォアの類似性解析

*Trident* . . . Similarity Analysis



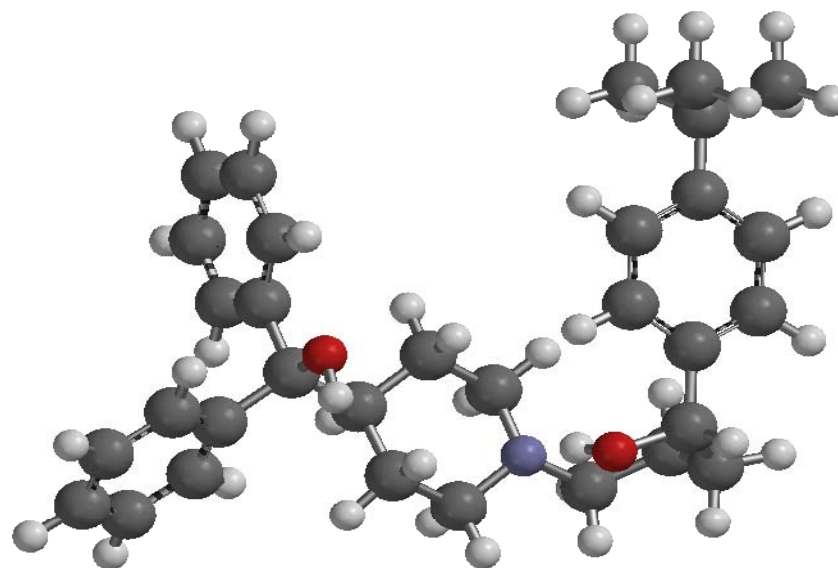
Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved





## Problem4 : ターフェナدين:カリウムチャンネル阻害剤になりえるか?

文献に報告されたファーマコファー\*を使用して 抗ヒスタミン剤ターフェナدينがカリウムチャンネル阻害になりえるか観察する

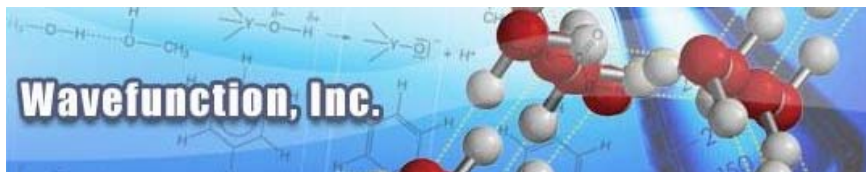


\*S. Ekins et. al., J. Pharmacology and Experimental Therapeutics, 301, 427 (2002)



Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved





## 考えられる使い方

リードと類似性の高い分子の探索

リード群のCFDから**手動**で共通のフィーチャを決める>仮説

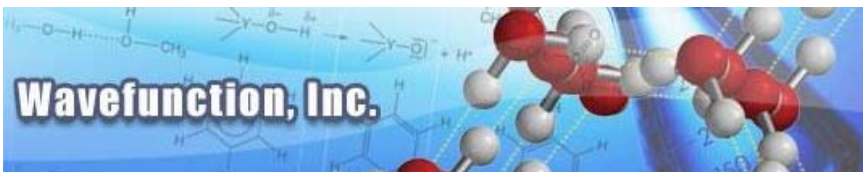
タンパクなどとのバインド構造からリガンド特性を切出>仮説

既知の仮説の利用>他社ソフト、論文など

仮説とリード群の重ね合わせ>スコア化

仮説と配座ライブラリの重ね合わせ>スコア化





# Odyssey

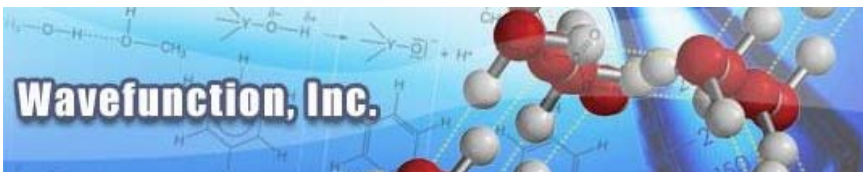


## MDをつかった教材ソフト

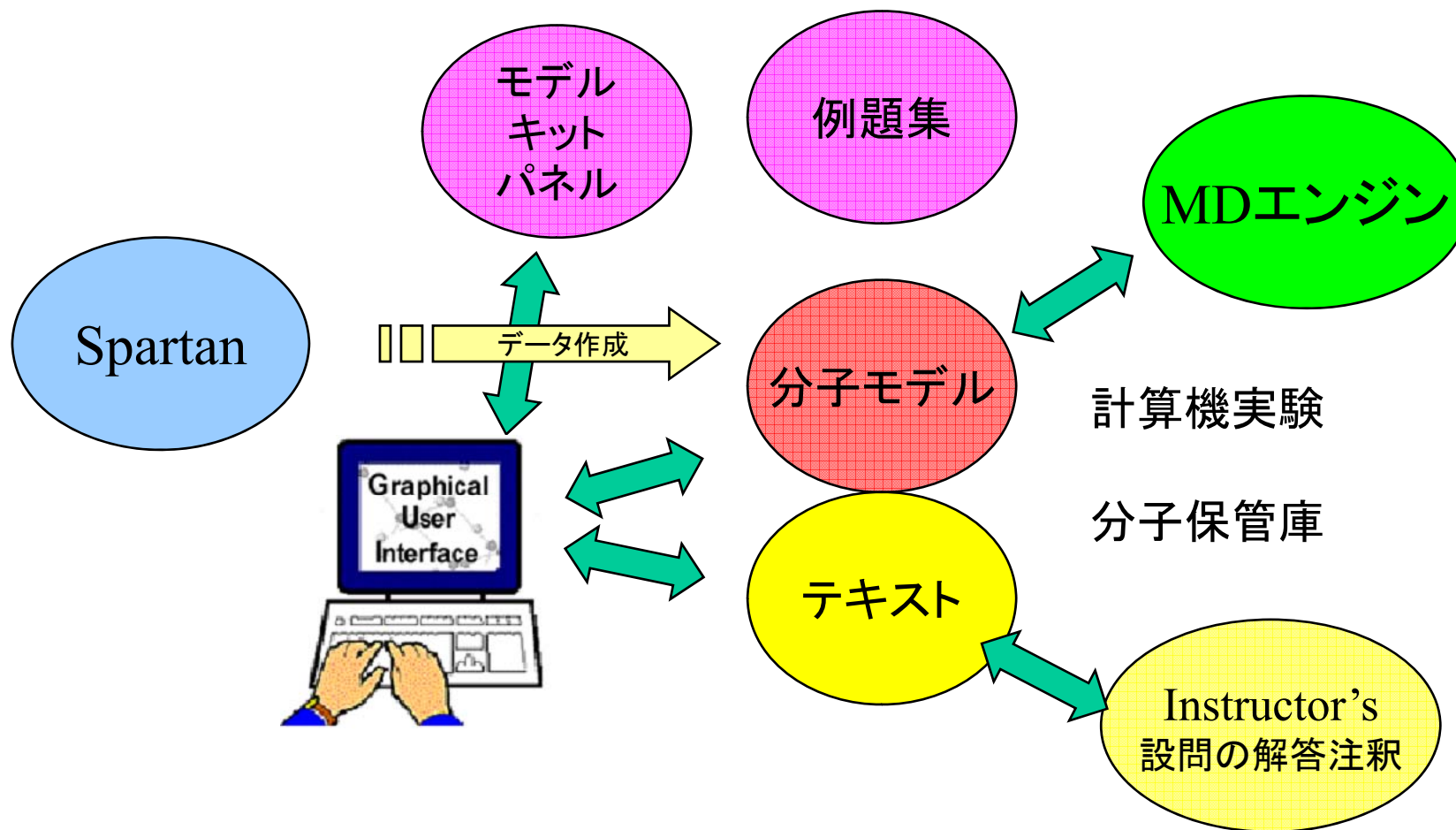
1. 計算機実験
2. 分子保管庫
3. モデルキットの使い方
4. モデルキット







# Odyssey





# Odyssey (計算機実験)

## 物質の状態 (3)

元素、化合物、混合物  
気相、液相、固相

## 熱力学 (5)

化学エネルギー  
回転と振動

## 原子と分子 (14)

原子の電子分布  
原子軌道、孤立電子対  
ベンゼンの安定性

## 気体 (22)

密度、温度、体積、圧力  
原子の動き  
分子間力  
ボイルの法則  
シャルルの法則

## アボガドロの法則

速度分布、温度  
混合気体、噴流、拡散  
高圧気体

## 液体と固体 (14)

液体、固体の分子特性  
分子間力  
水素結合  
アルコール  
融解転移  
立体結晶格子  
金属における最密充填

## 溶液 (6)

モル濃度 重量モル濃度  
混和性、非混和性  
溶液の構造、エネルギー  
水和エネルギー

## 酸と塩基 (3)

分子構造と酸の強度  
オキソ酸  
有機酸

## 化学熱力学 (3)

自発的な過程  
エントロピーと相変化

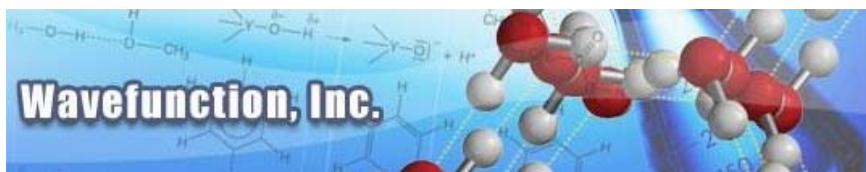
## 遷移金属錯体 (3)

キレート化合物  
構造異性体  
立体異性体

## 生化学 (6)

アミノ酸、ペプチド  
タンパク質、糖  
ヌクレオチド、DNA





# Odyssey (分子保管庫)

## 元素 (45)

亜鉛、アルゴン  
炭素、ヨウソ  
ナトリウム  
タリウム  
タングステン  
鉄、金、銀、白金

## 無機化学 (64)

$\alpha$ -石英  
塩化鉛  
塩化水素  
強酸  
銀塩  
酸化ナトリウム

## • 混合物 (21)

- 惑星、衛星の大気
- 空気
- 合成ガス
- 四塩化炭素との混合物

## • 界面 (6)

- 塩化ナトリウムと水
- 二硫化炭素と水

## • 有機化学 (58)

- アミド、アミン
- アルケン、アルキン
- アルコール
- アルデヒド
- カルボン酸
- フェノール

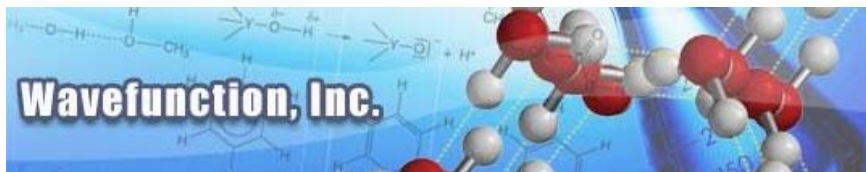
## ポリマー (13)

強力接着剤  
ケブラー  
テフロン  
ナイロン  
発砲スチロール

## 生化学 (19)

アミロース  
インシュリン  
エンドセリン  
コラーゲン  
セルロース





# Odyssey (初級例題集)

エタノール

硫酸

塩化アンモニウム分子

硫黄

塩化ナトリウム(固体)

固体のヨウ素

二酸化炭素

空気

爆発物

グルコース

液体の水

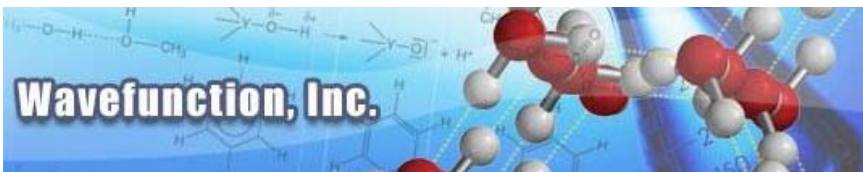
塩の水溶液

高分子

ペプチド

DNA





# More..

Japan Branch

[www.wavefun.com/japan](http://www.wavefun.com/japan)

US HQ

[www.wavefun.com](http://www.wavefun.com)



Copyright 2002-2007 Wavefunction, Inc. All right reserved

