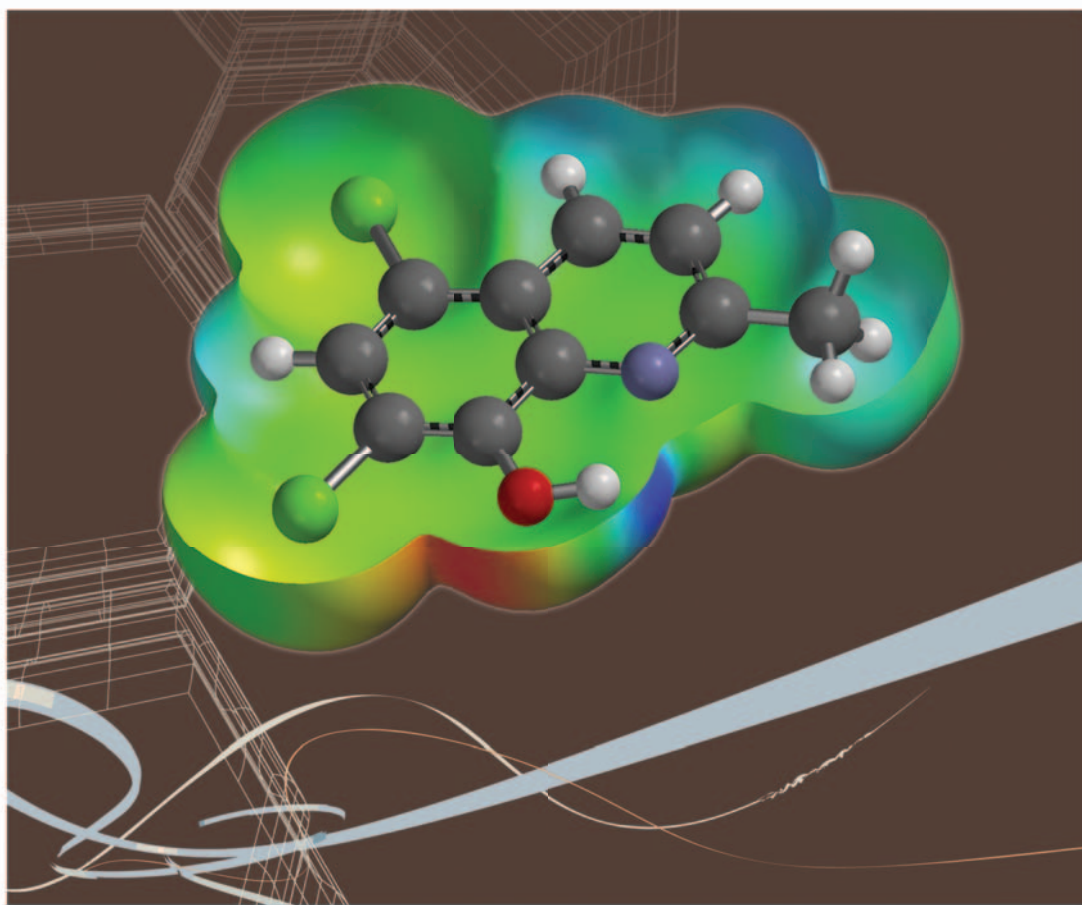


分子モデリングソフトウェア

# Spartan'08

【スパルタン】 For Windows



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'08が新登場です。これまでスパルタン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'08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、データ処理速度が向上しました(Full Editionの場合)。

#### 新しい溶媒モデルを採用

イオンに対する精度が向上しました。

#### NMRの充実

$^{13}\text{C}$ の化学シフトに補正式を導入し、実験値をより正確に再現、また $^1\text{H}$ の化学シフトにはカップリングも導入し、虫眼鏡ツールでピークが分かれているのを確認できるようになりました。

#### データベースを充実

SMD(Spartan Molecular Database)を拡張、低分子15万件の構造を内蔵しました(オプションでフルセットの場合)。既知の構造は計算の必要がなく操作時間を短縮できます。Life Chemicals, Maybridgeのライブラリを追加、配座ライブラリを内包し類似性解析などに使用できます。

#### Spartanファイル形式の拡張

MS Word/PowerPoint/Excelなどの外部ファイルをSpartanファイルに埋め込むことが可能となり、関連ある情報を内包できるようになりました。

## 分子構築ツール(モデルキットパネル)

Spartanには直感的に使用できるさまざまな分子構築ツールを内蔵しています。それぞれのツールを組み合わせることで任意の構造を作れるほか以下の様なファイル互換を持っています。2Dビルダーは起動するとChemDrawで作業したものを自動的に3次元化するもので、別途ChemDrawを必要とします。

### ● 読込可能書式 ●

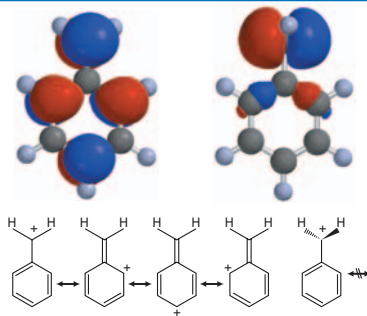
CIF (鏡像無し), CSD  
MacroModel  
Sybyl Mol/Mol2  
Brookhaven  
MDL SD/SKC/TGF  
XYZ, SMILES, ChemDraw

### ● 書出可能書式 ●

MacroModel  
Sybyl Mol/Mol2  
Brookhaven  
MDL SD/SKC/TGF  
XYZ, SMILES  
BMP, JPEG, PNG, AVI

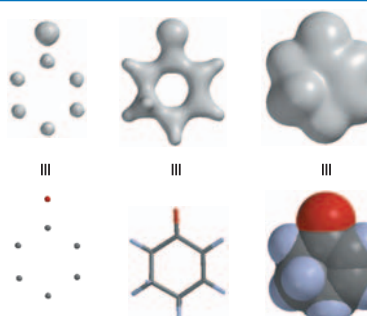
## おもな可視化プロパティとその組合せ

### 分子軌道



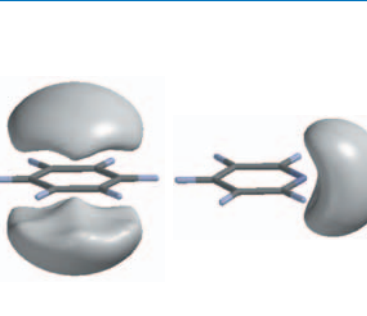
ベンジルカチオンのLUMOを表示。平面構造の場合は、ベンジル位、オルト位、パラ位に非局在化しているのに対して、CH<sub>2</sub>基をねじった構造ではLUMOはベンジル位に局在化していることが分り、更に知見と一致していることが分ります。

### 電子密度



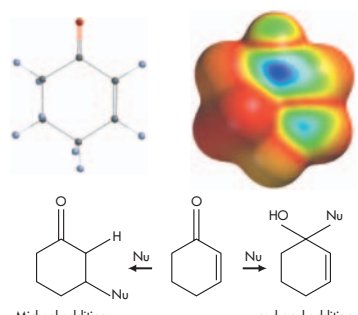
2-シクロヘキサノンの全電子の密度の等値面を表示。その値によって重原子の位置、結合の状態、分子の大きさを表すことができます。

### 静電ポテンシャル



分子と正の点電荷のポテンシャルエネルギーを表示。その分子の静電的な性質について議論できます。ベンゼンとピリジンでは求電子化学的振る舞いが異なることが分ります。

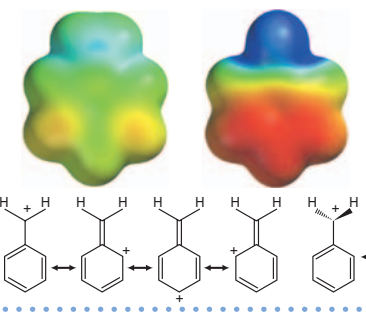
### 分子軌道マップ



2-シクロヘキサノンの電子密度面にLUMOマップを表示。分子表面上での求核攻撃の起こりえる部位について議論できます。

Michael addition      carbonyl addition

### 静電ポテンシャルマップ



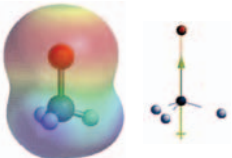
ベンジルカチオンの電子密度面に静電ポテンシャルマップを表示。CH<sub>2</sub>基をベンゼン環に対してねじった場合、分子内に大きな電荷の分極が現れることが分ります。

電子密度面上に分子軌道や静電ポテンシャルをマッピングすることで分子表面上で起こりえる反応を予測すること、反応機構の解釈に役立てられます。

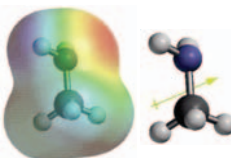
## 静電ポテンシャルマップと双極子モーメント

極性をもつ分子の静電ポテンシャルマップ(分子表面上赤い部位は電子に富み青い部位は電子が乏しい)と双極子モーメントの表示を比較しています。

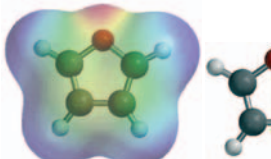
クロロメタン



メチルアミン

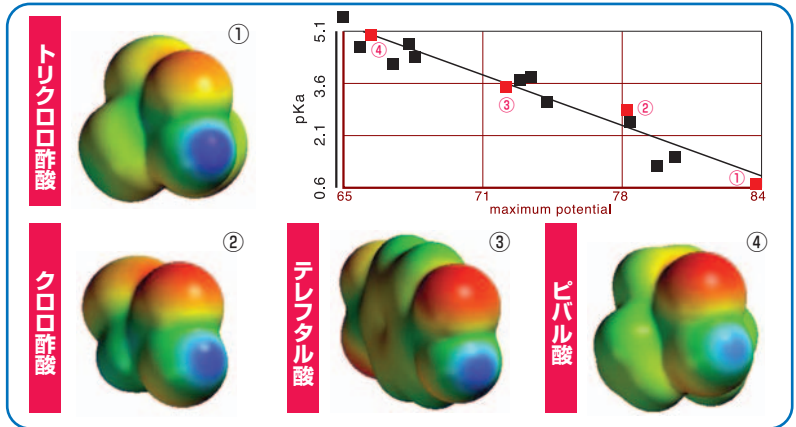


フラン

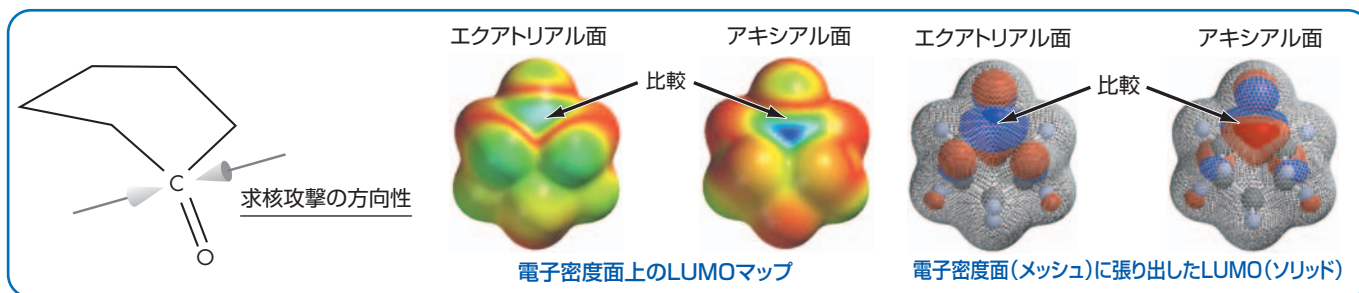


## カルボン酸の酸性度

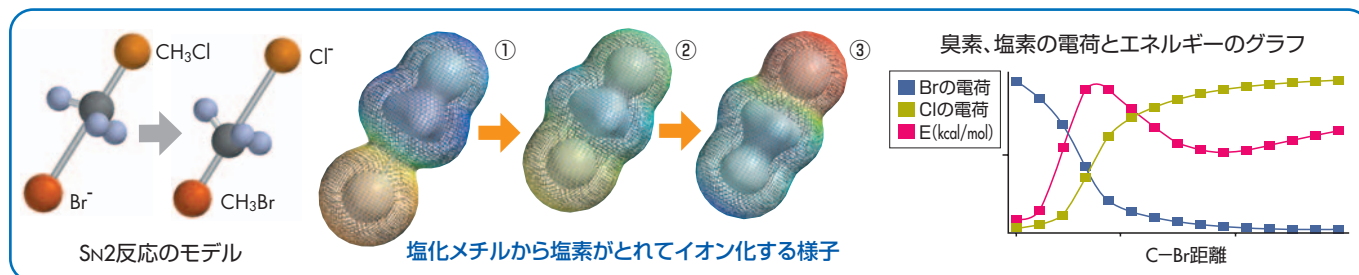
いくつかのカルボン酸分子の静電ポテンシャルマップと実験値(pKa)の相関を調べています。分子表面上(酸性水素)の静電ポテンシャルの最大(正)値とpKaに負の相関が見られます。



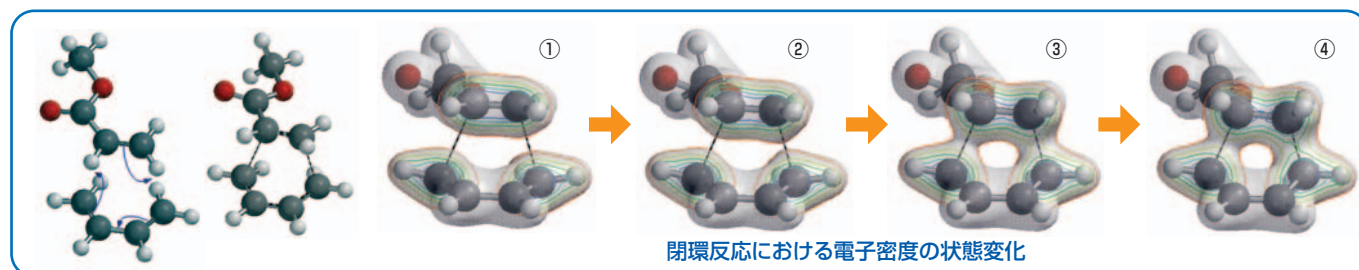
●●シクロヘキサノンの立体選択性●● シクロヘキサノンの求核攻撃を受ける部位として知られているケトン構造において、求核攻撃の方向性をLUMOを表示することで検証できます。



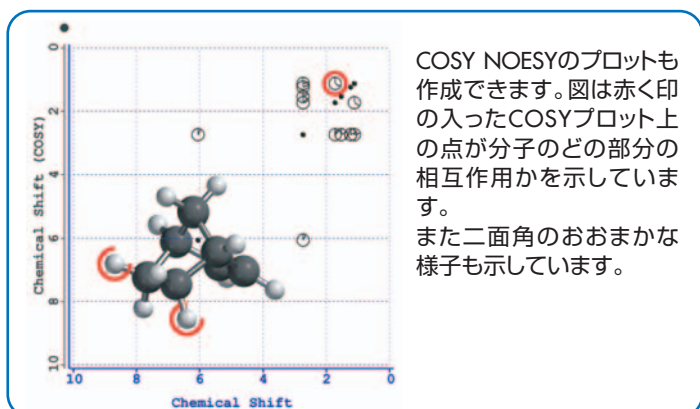
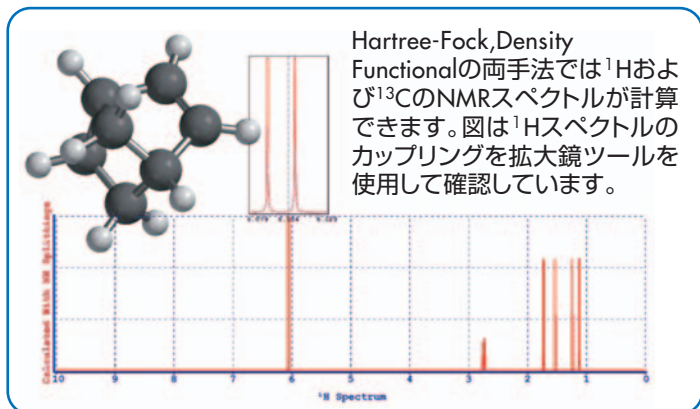
●●塩化メチルと臭化物イオンのSN2反応●● 塩化メチルの炭素原子に臭化物イオンを接近させると、C-Cl結合が切れると同時にC-Br結合が生成され、立体配置の反転する様子がよくわかります。



●●Diels-Alder付加環化反応●● 遷移状態の探索のための反応のデータベースを内蔵しています。電子の移動を検索条件として入力し、ヒットした構造を出発構造として遷移状態の構造最適化を行います。基準振動のうち振動数が虚数のものが一つだけ現れば、遷移状態であるといえます。



●●スペクトルチャートの作成●●



実験で得られたスペクトルチャートをファイルとして取り込み計算値と比較することができます。図で黒いチャートは実験で得られたIRスペクトル、赤いチャートはデータベースで検索の結果ヒットした分子のDFTの結果によるIRチャートです。図のような検索フィルターをかけることもできます。

## 機能比較表

	Full	Essential	Student	Model		Full	Essential	Student	Model
有機ビルダー	○	○	○	○	プロパティ				
無機ビルダー	○	○	○	○	ESP, Mulliken, Natural	○	○	○	○*
ペプチドビルダー	○	○	○	○	双極子モーメント	○	○	○	○*
核酸ビルダー	○	○	○	○	四極子モーメント	○	—	—	—
置換ビルダー	○	○	—	—	多極子モーメント	○	—	—	—
2Dビルダー*	○	○	○	—	溶媒エネルギー	SM5.4	SM5.4	SM5.4	—
MMIによる最適化	○	○	○	○	NMR 化学シフト	○	—	—	—
MO計算					UV/Vis	○	—	—	—
1点エネルギー	○	○	○	—	スペクトル				
構造最適化	○	○	○	—	IR	○	○	○	○*
遷移状態	○	○	○	—	NMR化学シフト	○	—	—	○*
配座解析	○	○	—	—	UV/Vis	○	—	—	○*
プロファイル	○	○	○	—	内蔵データベース				
半経験	300原子	300原子	75原子	—	SMD	○	○	○	○
HF	200原子	200原子	30原子	—	SRD	○	○	○	—
DFT	○	—	30原子	—	SIRD	○	○	—	—
MP2	○	—	20原子	—	外部DBとのインターフェイス				
グラフィックス					CSD	○	○	—	—
電子密度	○	○	○	—	NIST (IR)	○	○	—	—
分子軌道	○	○	○	—	NIST (UV/Vis)	○	—	—	—
静電ポテンシャル	○	○	○	—	Colohne大学 (NMR)	○	—	—	—
MOマップ	○	○	○	—	PDBからの構造の取込	○	○	—	—
ESPマップ	○	○	○	○*					

\* SMDのデータを使用  
注) Spartan Modelは、書籍ヒューリー「Spartan Modelによる有機化学演習」(5,000円)に添付のSpartanシリーズのブラウザソフトです。

## 動作環境システム

- Intel Pentium III以上またはAMD Athlon
- Windows XP, VISTA
- Microsoft Internet Explorer 6以降
- メモリー実装: XPIは1GB、VISTAは2GB以上
- 空きディスク容量: 60GB
- CD/DVD-ROMドライブ
- モニター解像度 1024×768以上

## 価格表

コードNo.	メーカーコード	品名	容量	価格(円)
303-88081	S8F-CW	Spartan'08 Full Edition for Corporate (Windows) スパルタン'08 フル、企業向け(ウィンドウズ版)	1セット	600,000
302-88051	S8E-CW	Spartan'08 Essential Edition for Corporate (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、企業向け(ウィンドウズ版)	1セット	360,000
303-88101	S8F-GW	Spartan'08 Full Edition for Government (Windows) スパルタン'08 フル、政府系機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	444,000
306-88071	S8E-GW	Spartan'08 Essential Edition for Government (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、政府系機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	288,000
300-88091	S8F-EW	Spartan'08 Full Edition for Education (Windows) スパルタン'08 フル、教育機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	240,000
309-88061	S8E-EW	Spartan'08 Essential Edition for Education (Windows) スパルタン'08 エssenシャル、教育機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	138,000
300-88111	S8SA-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
307-88121	S8SU-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
304-88131	S8SU-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	照会
301-88141	S8SU-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
308-88151	S8SU-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
303-88341	SMDO-CW	Spartan Molecular Database Option for Corporate (Windows) スパルタン モレキュラー データベース オプション、企業向け(ウィンドウズ版)	1セット	75,000
307-88361	SMDO-GW	Spartan Molecular Database Option for Government (Windows) スパルタン モレキュラー データベース オプション、政府系機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	56,000
300-88351	SMDO-EW	Spartan Molecular Database Option for Education (Windows) スパルタン モレキュラー データベース オプション、教育機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	28,000

●希望納入価格には消費税等が含まれておりません。

### 販売元: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 TEL 06-6203-1788(学術部)  
支店:〒103-0023 東京都中央区日本橋本町四丁目5番13号 TEL 03-3270-8243(学術部)  
営業所:九州 TEL 092-622-1005 中国 TEL 082-285-6381 東海 TEL 052-772-0788  
横浜 TEL 045-476-2061 筑波 TEL 029-858-2278 東北 TEL 022-222-3072  
北海道 TEL 011-271-0285

URL: <http://www.wako-chem.co.jp> E-mail: [labchem-tec@wako-chem.co.jp](mailto:labchem-tec@wako-chem.co.jp)  
フリーダイヤル: 0120-052-099 フリーファックス: 0120-052-806

### 開発・販売:米国法人 WAVEFUNCTION, INC. 日本支店

〒102-0083 東京都千代田区麹町3-5-2 BUREX麹町  
Tel 03-3239-8339 Fax 03-3239-8340 E-mail [japan@wavefun.com](mailto:japan@wavefun.com)