

質問事項	回答
<p>大学院生 化合物の合成やデザインに、計算科学を活かしたいと考えております。普段使いのPCレベルで動き、種々溶媒中における化合物の最適化構造や、タンパク質との簡単なドッキングシミュレーションが行えるソフト(フリー、あるいは学生でも手に入るレベルのものであればありがたいです。)というものはあるのでしょうか。無理を申し上げているかもしれませんが、もしご存知であれば教えていただければ幸いです。</p>	<p>1. 私の知る限りでは、残念ながら統合環境ソフトは有料で大変高額です。ご質問の一つ一つの機能を行うフリーソフトは存在するはずですが、また、化合物がQM計算でも、タンパク質とのドッキングシミュレーションがMMならば、今どきのPCで十分動くはずですが、フリーソフトは帯に短したすきに長しですので、あまりお金をかけられない状況でこれらを行っている方々は、様々なソフトを組み合わせる研究を行っているようです。</p> <p>2. 私が実際に経験してのアドバイスではありませんが、ご質問の内容を具体的に言うならば: 種々溶媒中における化合物の最適化構造: Gaussian+GaussView タンパク質との簡単なドッキングシミュレーション: AutoDock が思い浮かびます。ただし、GaussianとGaussViewは有料です。これに代わるフリーソフトはありますが、使い勝手は私はあまり詳しくありません。 # フリーだとGAMESSが良いかもしれません。</p> <p>3. 上記であるからこそ、1研究室でソフトを保持していることは稀です。そこで、よく学科等の単位で共同購入していることがあります。この場合は、共同利用ルールの中で自由に使えます。MOEやChemOffice等の統合環境は専門の学科でないと難しいかもしれませんが、GaussianやGaussViewはそのような契約を行っている可能性が高いです。情報基盤センターで使えるといった場合もあります。貴研究室の先生に伺ってみてはどうでしょうか。</p> <p>4. また、セミナーに参加してみるのも手です。恐らく、あなたの目的にぴったりのセミナーがあるはずですが、無料のものも有料のものもありますが、有料のものの方が標準的な方法を教えてくれるはずですが、無料の場合は何かとタイアップしていることが多く、情報にバイアスがかかる可能性があります。 # 両方参加してみるのが良いです。 このようなセミナーに参加することで、どのような手順でシミュレーションを行うのかだけでなく、どのような環境を構築したらよいか具体的な参考になるはずですが、PCはインターフェースとして使用して計算はクラウドで行うといった、比較的安い有償のサービスも用意されていると思います。</p>