

標準器群の管理

maintenance of compound standard

標準器の管理として重要なことは、その標準器の維持している測定量の値が適切に維持されていることの確認作業である。通常、標準器は、定められた校正周期で、より上位の標準器により校正され、また、その計量特性が評価されている。校正周期内であっても標準器に異常等が検出された場合は、再校正・再評価が必要となる。標準器群の管理とは、各標準器の個別管理とは異なり、複数の標準器をまとめて群として管理する方法である。通常、1台の標準器で維持できる値の範囲は限られている。したがって、保持すべき測定標準の値の範囲が広い場合、適当な範囲毎に複数の標準器を用い、それら標準器群により標準が維持されている。標準器群の管理においては、定期的に複数の標準器を様々な組み合わせで相互比較し、標準器間の値の整合性を評価する。このことにより、各標準器の値が適切に維持されているかどうかを検証することができる。実際の管理では、原理・校正範囲・校正方法の異なる多くの標準器を管理することもあり、合理的・効率的な管理手法が必要となる。

(産業技術総合研究所 小島 時彦)

相互作用は正確に記述されない。このずれを電子相関といい、これを精度良く見積もることが重要である。電子相関を見積もる方法としては摂動 (MP) 法、配置間相互作用 (CI) 法、クラスター展開法、MCSCF法等がある。MO法はMM法に比べて膨大な計算時間がかかり、タンパク質のような巨大分子を扱うことは不可能と考えられていた。しかしコンピュータの高速化やQM/MM法・FMO法といった方法論の開発により、タンパク質のMO計算も可能になった。

(キッセイ薬品 (株) 小沢 知永)

分子力学法 (MM 法)

molecular mechanics method

分子を古典力学に基づき球 (原子) とバネ (結合) で表現する方法。分子を構成する原子に働く力をポテンシャル関数により表現する。関数は (1) 分子内の結合の伸縮エネルギー、(2) 結合角の変角エネルギー、(3) 振れ角 (二面角) の振れエネルギー、(4) 非結合相互作用エネルギーの各成分の和として表現される。関数形はパラメータによって規定され、関数とパラメータを合わせて分子力場と呼ぶ。主な力場として、低分子用ではMM2/MM3, MMFFタンパク質や核酸のような生体高分子ではAMBER, CHARMMが挙げられる。パラメータを使うことにより比較的簡単な計算で、タンパク質や核酸のような大きな分子でも高速にエネルギーを求めることが出来る。ただし電子を考慮していないため、化学反応を扱うことは出来ない。MM法は分子の動的な挙動を扱う分子動力学法 (MD法) の基礎となる。MD法は水溶液中でのタンパク質挙動のシミュレーション等に使われる。

(キッセイ薬品 (株) 小沢 知永)

分子軌道法 (MO 法)

molecular orbital method

分子系の電子状態に関するSchrödinger方程式を近似的に解く方法である。MO法は電子を扱っているため、化学反応にも適用可能である。実験的パラメータを使わないMO法として*ab initio*法が汎用される。MO法の基本は1電子波動関数近似に基づくHartree-Fock (HF)法である。HF法では電子は平均場の中を運動すると近似されるため電子同士の

株式会社日東分析センター 分析技術者募集

日東分析センターは設立以来、三十数年にわたり日東電工グループの一員として、有機高分子材料・オプティカル材料を中心に分析・解析を行ってきました。このたび、高分子材料の熱分析を主とした各種分析・解析業務を行う分析技術者を募集いたします。

- (1) 募集人員：1名、(2) 資格：35才程度まで、理工系大卒以上、
- (3) 経験：熱分析 (DSC, TG/DTA, TMA, DMA)、(4) 着任時期：決定後できるだけ早い時期、
- (5) 勤務地：愛知県豊橋市、(6) 提出書類：履歴書・職務経歴書
- (7) 書類提出・問合せ先：〒567-8680 大阪府茨木市下穂積1-1-2 (株) 日東分析センター本社管理部

TEL.072-623-3381, 担当：神田