

분자모델링용 Alchemy 2000

분자를 여러가지 형태로 회전가능

일반적으로 DNA나 또는 특정한 단백질과 같은 거대분자의 3차원 구조의 재생은 X선결정이나 핵자기공명(NMR) 스펙트럼에서 얻은 데이터로부터 경험적으로 나온 것이다.

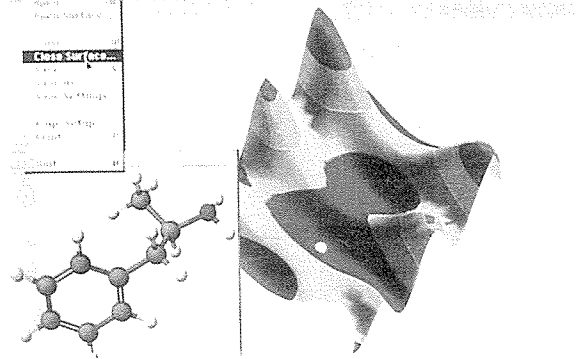
예컨대 X선을 결정화된 단백질에 쬐면 전자는 2차적인 X선을 발산하여 모든 방향으로 분산된다.

이것은 선필름에 독특한 패턴을 만들어 낸다. 컴퓨터 그래픽을 이용하여 오래 전에 화학자들은 X선 결정데이터를 공, 막대기, 와이어, 판 금속으로 구성된 분자모

델로 전환했다. 그래서 1960년대 이전에는 단백질의 모델은 방 하나를 가득 채울 수도 있었다.

마침내 1960년대에 MIT의 사이러스 레빈탈과 하버드대학의 로버트 랭그라이드(현 샌프란시스코 소재 캘리포니아대학 컴퓨터그래픽연구소 근무)가 이룩한 선구적인 연구로 마침내 독일 막스플랑크화학연구소의 알빈 존스의 상호작용분자그래픽 프로그램인 FRODO가 등장하게 된 것이다.

존스는 FRODO를 사용하여 전자의 자료로부터 그래픽으로 분자를



▲ Alchemy 2000을 이용하면 단백질과 생물분자구조를 눈에 보이게 만들 수 있다.

구성할 수 있게 되었다.

강력한 분자그래픽과 계산능력은 또 마이크로 컴퓨터용 소프트웨어시스템으로 달성할 수 있게 되었다.

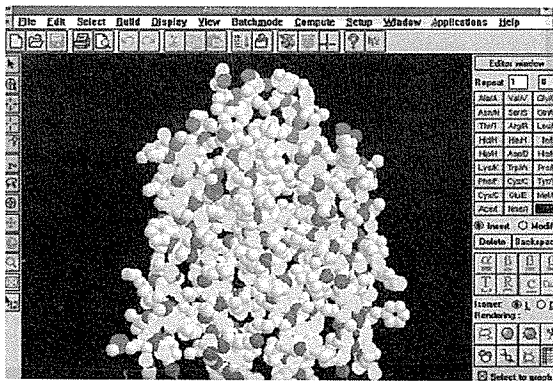
예컨대 트리포스사의 분자모델링용의 윈도 소프트웨어인 'Alchemy 2000'은 첨단 분자그래픽 디스플레이, 에너지계산 그리고 맞춤형 기구용으로 사용된다.

케임브리지 소프트웨어

사의 Chem3D Pro는 매킨토시와 윈도용 분자모델링 및 분석 패키지다.

이 소프트웨어는 매킨토시에만 사용할 수 있는 화학정보관리 소프트웨어인 ChemDraw Pro와 ChemFinder Pro와 통합할 수 있다.

이 패키지를 사용하여 여러가지 형태로 분자를 회전시키고 동화를 만들고 디스플레이할 수 있다.



다양한 분자모델링시스템

Molecule-3D는 3차원 분자구조 작성

단백질과 핵산과 같은 유생분자(바이러스처럼

생명이 있는 분자)를 다루는 연구자들은 이따금

'눈에 보이지 않는 물질'에 대한 실험을 설계하고 수행한다. 현미경으로 건본을 관찰할 수 있는 세포생물학자와는 달리 고분자의 특성을 조사하는 과학자들은 연구하는 재료를 볼 수 없다.

그렇다면 예컨대 DNA를 조사하는 분자생물학자들은 실제로 볼 수 없는 3차원 구조에 바탕을 두는 추론은 어떻게 할까? 과학자들은 보이지 않는 분자를 볼 수 있게 만들기 위해 3차원으로 구조를 재구성하는데 컴퓨터에 의존한다.

사용하기 쉬운 분자모델링시스템을 사용하면 화학구조에 관심이 있는 사람은 누구나 분자의 가상현실을 만들 수 있다.

그래서 화학과 생명과학연구실에서는 컴퓨터 스크린의 그래픽이 어린이의 집짓기 장난감처럼 '작대기'로 연결된 '공'의 원자모델과 자리바꿈을 하고 있다.

분자모델링프로그램은 정보관리와 컴퓨터지원분자설계(CAMD)를 전문으로 하는 6~7개 기업들이 제공하고 있다.

이런 패키지는 윈도우나 매킨토시 운영체제로 가동한다. 예컨대 가장 단순한 수준에서는 미국 캘리포니아주 아나하임 소재의 모레쿨러 아츠사제의 'Molecule-3D'와 같은 소프트웨어 패키지를 이용하면 윈도우 매킨토시 이용자들은 3차원 분자구조를 작성할 수 있다.

같은 메이커에서 나온 'Molecule-3D Pro'는 이보다 한층 높은 수준의 지식을 갖고 분자역학과 에너지계산을 포함하여 'Molecule-3D'에서 얻을 수 없는 계산능력을 제공한다.

매서추세츠주 케임브리지 소재의 케임브리지소프트사가 제공하는 분자그리기패키지인 'ChemDraw'도 윈도우 매킨토시로 가동되는데 그림그리는 능력 외에도 분자식, 분자량 그리고 루이스구조의 계산을 할 수 있다. 캐나다 온타리오주 워터루 소재의 하이퍼큐브사는 어설픈 모델작성자, 교육자 그리고 학생들에게 연구수준의 분자모델을 만드는 능력을 부

여하게 설계된 윈도우 분자모델링 시스템인 'HyperChem Lite'를 내놓았다.

분자그리기와 모델만들기 패키지를 사용하면 이용자들은 2~3차원의 가상분자를 만들 수 있고 더욱 중요한 것은 연구자들에게 출판물에서 복잡

한 화학적인 개념을 설명하는 방법을 제공한다.

케임브리지소프트웨어사의 'ChemDraw'나 또는 'ChemPrint'와 같은 소프트웨어로 만든 화학구조는 워드 프로세싱 프로그램에 도입하여 저널의 기사나 연구비신청서를 빛나게 만들 수 있다.

플라로이드 마이크로 캡 SLR

깊이 험한 현미경용 인스턴트 카메라

깊이 험한 현미경용 완전자동식 인스턴트 카메라인 '플라로이드 마이크로 캡 SLR'을 염가의 '플라로이드 포토팩드' 디지털 스캐너와 조합하면 현미경용의 높은 해상도의 디지털영상포착시스템을 만들 수 있다.

이 시스템을 이용하면 현미경전문가, 연구자 그리고 품질관리 담당자들이 높은 해상도의 현미경 시료의 디지털영상을 만들 수 있다.

이 일안(一眼)레플렉스 카메라는 현미경을 통해 어떤 종류의 시료라도 촬

영할 수 있다. 정교한 노출과 여과제어시스템을 이용하여 단추누르듯이 쉽게 높은 질의 인스턴트 사진을 만들 수 있다.

영상주사(스캐닝)작업은 완성된 사진을 '포토팩드' 위에 놓은 뒤 한단계밖에 필요하지 않다.

디지털화된 영상은 처리, 분석, 전송된 뒤 전자 데이터베이스 속에 기록·보관한다. ㉮