

Chem3D 19.0 ユーザーズ ガイド

目次

最新の追加事項	viii
章 1: Chem3D について	1
追加できる計算エンジン	1
テクニカル サポート	3
Chem3D チュートリアルについて	3
章 2: Chem3D の基礎	5
画面の構成	5
ユーザー インターフェイスの設定	10
背景の設定	10
サンプル ファイル	10
Dropbox への保存	11
章 3: 基本的なモデル作成	13
標準設定	13
表示モードの選択	13
結合ツールの使用	14
ChemDraw パネルの使用	16
他の 2 次元作画パッケージの使用	17
テキストによる作成	17
フラグメントの追加	19
原子や結合の選択	20
原子の電荷	23
オブジェクトの配置	24
部分構造	26
モデルの最適化	29
コピーと印刷	30
オンラインでの構造式の検索	34
章 4: モデルの表示	36

表示モード	36
原子および結合のサイズ	38
ドット面の表示	39
シリアル番号	39
原子の表示	40
原子記号	41
モデルの回転	42
原子特性と結合特性	45
水素結合の表示	46
水素と孤立電子対	47
モデルの移動	48
モデルの拡大縮小	48
モデルの整列	48
色の適用	50
Model Explorer	53
分子の測定	60
オーバーレイによるモデルの比較	63
分子表面	64
立体視の使用	74
立体効果	74
ビュー フォーカス視点の設定	75
章 5: 高度なモデルの作成	76
ダミー結合とダミー原子	76
部分構造	77
近接結合	80
測定値の設定	80
原子タイプと構築タイプ	83
立体化学構造	87

Cartesian テーブルを使った作成	89
ISIS/Draw を使ったモデル作成	90
孤立電子対	90
章 6: 計算エンジン	91
ab initio 法	91
半経験的方法	91
力場計算法	91
物性特性の計算	91
複数の特性の計算	94
MM2 と MMFF94	94
Gaussian	107
CONFLEX	113
MOPAC	114
GAMESS	138
章 7: パラメータ テーブル	144
元素	145
構築タイプ	146
Substructures 部分構造テーブル	149
References 参照	150
Bond Stretching Parameters 結合伸縮パラメータ	150
Angle Bending Parameters 折り曲げ角パラメータ	151
Conjugated Psystem Bonds 共役パイシステム結合	152
Pi Atoms パイ原子	153
Electronegativity adjustments	154
MM2 Constants	154
MM2 Atom Type Parameters 原子タイプパラメータ	156
Torsional Parameters ねじれパラメータ	157
Out-of-Plane Bending OOP 変角エネルギー	159

ファンデルワールス相互作用	160
章 8: ドッキング	161
AutoDock のインストール	161
AutoDock Tools のインストール	161
AutoDock の設定	162
AutoDock Interface での操作	163
ステップ 1: 受容体の準備	163
ステップ 2: リガンドの準備	164
ステップ 3: (オプション) グループの定義	165
ステップ 4: キャビティの準備 (GPF の準備)	166
ステップ 5: 形状 パラメータの選択 (DPF の準備)	168
ステップ 6: ドッキング	169
ステップ 7: ドッキング結果の表示	169
参考資料	170
章 9: 計算の概念	171
計算化学の概要	171
計算手法の概要	171
計算手法の利用	172
構造最適化	172
最適な計算手法の選択	174
分子力学理論の概要	177
力場	178
分子動力学シミュレーション	186
章 10: ChemScript	188
ChemScript の利点	188
ChemScript のしくみ	189
操作の開始	189
スクリプトの編集	191

ChemScript API の紹介	191
チュートリアル	192
参考資料	195
章 11: 化学的物性予測	198
Chem3D の物性予測特性	198
ChemFinder の物性特性予測	226
ChemDraw で計算できる化学的特性	226
ChemDraw/Excel の物性予測特性	227
章 12: キーによる変更	228
回転	228
選択	229
章 13: 2 次元から 3 次元への変換	231
立体化学関係	231
ラベル	232
章 14: ファイル形式	233
ファイル形式の原子タイプの編集	233
ネイティブ形式	233
ファイル形式の例	233
書き出しファイル形式	265
章 15: 参考資料	275
MEP	275
MM2 の参考文献	275
MOPAC	278
章 16: オンライン情報	292
SciStore	292
PerkinElmer Informatics	292
オンライン ドキュメント	292
オンライン登録	292

ChemOffice SDK	292
トラブルシューティング	292
章 17: チュートリアル	294
モデルの作成	294
モデルの検証	306
計算エンジンの使用	324

監修：富士通株式会社テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部
TC フロンティアセンター
有田正博、久保木俊彦、原田明彦、石田伸子、鶴岡麻美子、丸山絵理、武金萍
本マニュアルの査読に関しては、富士通株式会社テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部の協力を得ております。
富士通は、日本においてパーキンエルマーインフォマティクス社の製品の販売、サポートを行っております。



最新の追加事項

Chem3D では、以前のバージョンになかったさまざまな改良が行われました。ここでは、これらについて簡単に説明します。

GAMESS IR 振動の描画とアニメーション. 赤外線スペクトルを計算した後、適用される IR 振動モードとベクトルの表示やアニメーションを行うことができます。詳細については、“[GAMESS IR 振動の表示とアニメーション](#)” ページ 141 を参照してください。

GAMESS 2018 と MOPAC 2016 による分子軌道の計算. GAMESS 2018 または MOPAC 2016 のいずれかを使用して分子軌道を計算できます。標準では、PM7 が最新バージョンの MOPAC の基底関数の省略値になります。

Gaussian 16W 対応. Chem3D では Gaussian 16W がサポートされます。Gaussian は PerkinElmer から購入できます。

ネイティブ 64 ビット GAMESS 2018 のサポート. GAMESS 2018 のダウンロードは、<http://www.msg.ameslab.gov/gamess/index.html> のリンクから行えます。

V3000 MolFile ファイル形式のサポート. 読み込みと書き出しの両方がサポートされています。

3 次元モデルの 2 次元断面図. ボリューム スライス ツールを使用することにより、ほぼすべての分子表面の 2 次元断面図を表示できます。この機能は、モデル中の任意の位置における電子密度を表示するときに非常に便利です。X、Y、Z のいずれかの平面で軌道モデルまたはモデル全体をスライスし、必要に応じてスライスの位置を調整できます。詳細については、“[ボリューム スライス](#)” ページ 73 を参照してください。

ドッキング. AutoDock によって 1 個以上の低分子を巨大な分子の受容部位に入れるために調整する方法を指定できます。分子、受容部結合部位、および計算パラメータを選択します。AutoDock では、条件に適合する個々の低分子の配座と位置を計算、表示します。

詳細については、“[ドッキング](#)” ページ 161 を参照してください。

CONFLEX. CONFLEX は、CONFLEX Corporation が開発した立体配座解析パッケージです。CONFLEX を使用すると、モデル内で低エネルギー配座異性体を探索して、最適な状態でそれぞれのフラグメントを作成できます。詳細については、“[CONFLEX](#)” ページ 113 を参照してください。

Molecular Networks の統合. Chem3D では、Molecular Networks の新機能を統合して、pKa、LogS、および LogP の溶解度を推定します。“[Chem3D の物性予測特性](#)” ページ 198 を参照してください。“[Molecular Networks について](#)” ページ 2 も参照してください。

Chem3D について

ChemOffice スイートの一部として提供される Chem3D は、化学構造式の 3 次元モデルを作成、可視化、および分析するためのツールです。Chem3D モデルは、デスクトップ パブリッシング編集ツールに読み込んでみたり、Web 上に表示したりできます。

追加できる計算エンジン

Chem3D では、追加のできる計算エンジンを複数サポートします。これらのツールについて、簡単に説明します。詳細な説明は、このガイドの各章を参照してください。入手および購入については、PerkinElmer Informatics にお問い合わせください。

GAMESS について

GAMESS は、*ab initio* 量子化学計算に使用するプログラムです。GAMESS を使用すると、UV/VIS、IR、および NMR の各スペクトルを予測し、エネルギー、その他数多くの分子特性を計算することができます。

Gaussian について

Chem3D では Gaussian 16 がサポートされます。Gaussian は、化学者、化学技術者、生化学者、物理学者その他の科学者によって使用される特性予測プログラムです。Gaussian では *ab initio* および半経験的な量子力学を使用して、分子のエネルギー、分子構造、振動周波数、化学的物性、その他さまざまな化学環境での反応を予測します。Gaussian は安定化合物と実験では困難または観測できない化合物（短期間の中間生成物や遷移構造など）の両方に適用できます。Gaussian では、拘束ありおよび拘束なしの Hartree Fock 法などの *ab initio* 法をサポートします。

電子密度表面や分子構造の最適化の計算では、*ab initio* および半経験的な方法を使用できます。Gaussian では、CNDO/2、INDO、MINDO3、および MDO エネルギーおよび勾配のような基底状態における半経験的な方法手法をサポートします。

 **注意:** 「半経験的」という語は、量子力学で定められている一般的な処理を使用する一方で、処理を簡略化して速度を向上させると共に、実験データを使用して簡略化した結果を補正するという手法を指します。

 **注意:** Gaussian 16 は 32 ビット バージョンまたは 64 ビット バージョンの Windows が必要です。

詳細については、“[Gaussian](#)” ページ 107 を参照してください。

MOPAC について

MOPAC は原子および分子に対して半経験的な計算を実行して、分子の構造や特性の詳細を決定します。たとえば、MOPAC を使用すると、熱力学計算、構造最適化、力定数計算などを実行できます。Chem3D は MOPAC 2016 をサポートします。MOPAC の各機能は、Chem3D インターフェイスを介して提供されます。

MOPAC2016 には MOPAC のすべての機能が含まれ、オプションのプラグインとしてのみご使用いただけます。

MOPAC 2016 は、MOZYME 法や PM5 法などの高度な機能をサポートします。簡単で高度なエネルギー最小化の実

行、遷移状態への最適化、およびさまざまな特性の計算を実行できます。MOPAC2016 は MOPAC スパークルをサポートします。詳細については、「MOPAC」 ページ 114 を参照してください。

注意: 「MOPAC スパークル」とは、MOPAC に追加された特別な 8 つの元素で、純粋なイオン価を表します。

MOPAC は追加オプションとして購入できます。詳細については、PerkinElmer Informatics またはお近くの代理店にお問い合わせください（かなり前のバージョンには一部含まれていましたが、今は別売りです）。

AutoDock について

AutoDock は、自動化された結合ツールで、既知の 3D 構造の受容体に対してどのように低分子が結合するのかを予測できるようにします。Chem3D には、ドッキング計算を実行するための AutoDock へのインターフェイスがあります。AutoDock の計算は、いくつかの手順で実行されます。詳細については、<http://autodock.scripps.edu> を参照してください。

詳細については、「[ドッキング](#)」を参照してください。

CONFLEX について

CONFLEX は、CONFLEX Corporation が開発した立体配座解析パッケージです。CONFLEX を使用すると、柔軟な様々な分子における化学的に重要な配座異性体を探索したり、配座異性体をモデルのフラグメントとして表示したりできます。配座異性体は、定義した検索方法およびエネルギー制限に基づいて報告されます。詳細については、www.conflex.net を参照してください。

詳細については、「[CONFLEX](#)」を参照してください。

Molecular Networks について

化合物の酸解離定数、水溶性、およびオクタノール/水の分配係数を予測するための pKa、LogS、および LogP は、Molecular Networks のケモインフォマティクス プラットフォーム MOSES に基づく計算モジュールです。MOSES は、Molecular Networks GmbH（ドイツ、エルランゲン）が開発、保守、所有しています。詳細については、www.molecular-networks.com/moses を参照してください。All rights reserved. Molecular Networks GmbH, Erlangen, Germany (www.molecular-networks.com)

制限

次の原子タイプおよび混成状態のみがパラメータ化されます。

C _{sp³}	N _{sp²}	O _{sp²}	S _{sulfone}
C _{sp²}	N _{amide}	P _{sp³}	F
C _{aromatic}	N _{aromatic}	S _{sp³}	Cl
C _{sp}	N _{sp}	S _{sp²}	Br
N _{sp³}	O _{sp³}	S _{sulfoxide}	I

テクニカル サポート

登録ユーザーの方々は、インターネットや弊社テクニカル サポート部を通じてテクニカル サポートを受けることができます。テクニカル サポートに問い合わせをするときは常に、ChemOffice アプリケーションのシリアル番号とバージョン番号をお知らせください。弊社のテクニカル サポート Web ページには、FAQ（よく寄せられる質問）への回答、およびその他の情報が掲載されています。

弊社の Chem3D のテクニカル サポートにアクセスするには、**Online** メニューの **Browse PerkinElmer Technical Support** をクリックします。

解決方法が Web サイトで得られなかった場合は、テクニカル サポートにご連絡いただく前に、次の手順に従ってください。

1. ソフトウェアのシステム要件を確認してください。
 2. 「[トラブルシューティング](#)」のセクションを読み、そこに記載されている解決手段を実行してください。
 3. 上記のいずれの方法でも問題が解決できない場合は、[テクニカル サポート](#)にお問い合わせください。
 - 弊社にご連絡いただく前に、問題が再発するかどうか確認してください。問題が再現できる場合は、手順を正確に記録してください。注：日本語での入力可能
 - 表示されたエラー メッセージの内容を正確に記録してください。
 - 最後に、問題の解決を試みた際の手順を記録してください。
-  **注意:** AutoDock と計算エンジンはサードパーティ製品であり、実行した機能のログ ファイルが作成されることがあります。ログ ファイルを参照して、発生した問題がサードパーティ製品によるものか Chem3D によるものかを特定し、その情報をテクニカル サポートへのご連絡時にお伝えください。

Chem3D チュートリアルについて

「[チュートリアル](#)」の章では、12 のチュートリアルを利用できます。チュートリアルは 3 つのカテゴリに分けられており、ガイド全体を通して説明されています。

- **モデルの作成:**
 - チュートリアル 1: 2次元でのモデル作成
 - チュートリアル 2: 結合ツールを使ったモデルの作成
 - チュートリアル 3: テキストを使ったモデルの作成
- **モデルの検証:**
 - チュートリアル 4: 立体配座の検証
 - チュートリアル 5: 二面角ドライバ
 - チュートリアル 6: モデルのオーバーレイ
 - チュートリアル 7: モデルの整列
 - チュートリアル 8: 軌道の表示
 - チュートリアル 9: 表面のマッピング
 - チュートリアル 10: 部分電荷
- **計算エンジンの使用:**
 - チュートリアル 11: 回転異性体の分析
 - チュートリアル 12: 回転する結合の計算

これらのチュートリアルでは、Chem3D ツールの使用手順を順を追って説明しています。「チュートリアル」の章から、他の章にある特定のチュートリアルにすばやくリンクできます。

Chem3D の基礎

Chem3D の機能と使用に関する基本情報については、以下のリンクを使用してください。

[画面の構成](#)。画面レイアウトとその構成要素について説明します。

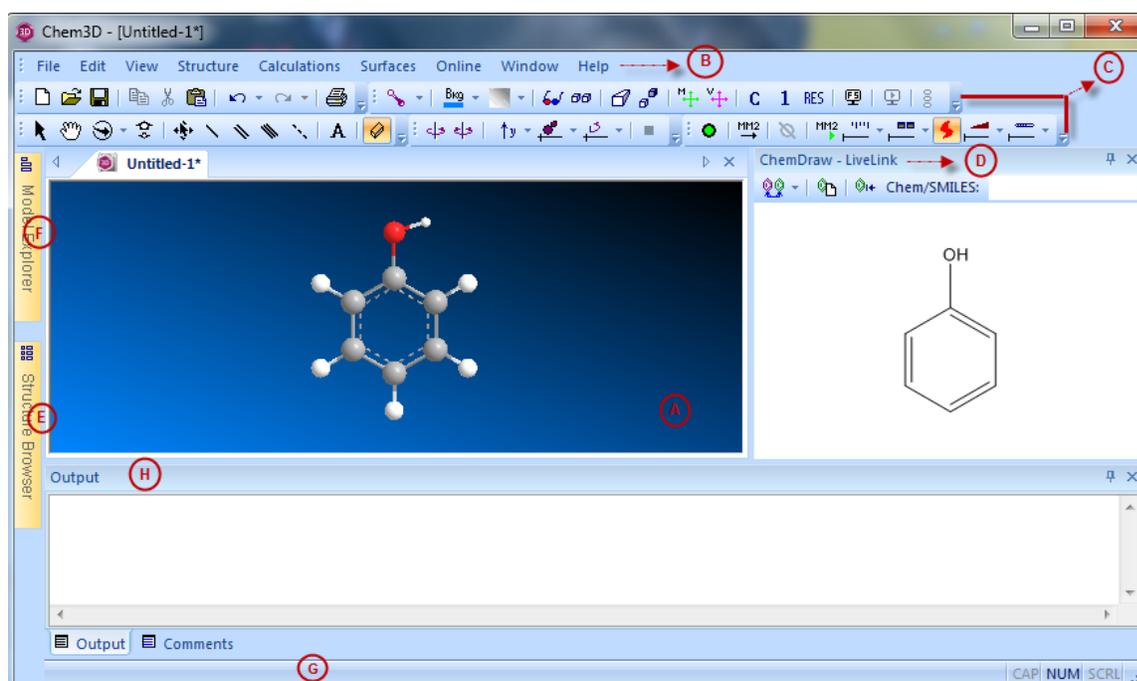
[基本的なモデル作成](#)。最初のモデルを作成する方法について説明します。

[チュートリアル](#)。Chem3D でタスクを用いて作業を行う実行する方法のデモを示します。

[計算エンジン](#)。Chem3D で使用できる計算法について説明します。

画面の構成

ここでは、グラフィカル ユーザー インターフェイス (GUI) とその用途、GUI のさまざまな画面要素について説明します。



メイン画面: A) モデル ウィンドウ、B) メイン メニュー、C) ツールバー、D) ChemDraw パネル タブ、E) Structure Browser タブ、F) Model Explorer タブ、G) ステータス バー、H) Output ウィンドウ

モデル ウィンドウ. モデルを作成、表示する作業領域です。

メイン メニュー. モデルの作成と表示、計算の実行、化学的物性の表示に必要なすべてのツールが含まれます。メニュー オプションの多くはコンテキスト メニューからも使用できます。

ツールバー. 多用する機能へのショートカットのアイコンが表示されます。ツールバーは、画面のどの位置にもドラッグできます。

ChemDraw パネル. モデルの作画を 2 次元で作成したり変更したりできます。

Structure Browser. 構造式のリストを参照し、構造式を個別にモデル ウィンドウに表示できます。

Model Explorer. 階層に分かれたツリー形式でモデルを表示します。Model Explorer は、タンパク質などの複雑な分子で作業を行う場合に便利です。

ステータス バー. モデルのアクティブ フレームについての情報や、非表示になっている原子についての情報が表示されます。

Output ウィンドウ. 計算結果などのテキストの結果が表示されます。

モデル ウィンドウ

モデルはモデル ウィンドウで作成します。開いたり作成したりするモデル ファイルごとに、新しいタブが追加されます。タブを選択して、表示したいモデルをアクティブにするためには、タブを選択します。ファイル名の横のアスタリスクは、最後に変更を加えてからファイルが保存されていないことを示します。



図 2.1: アクティブなタブでのインシュリンのモデル

ChemDraw パネル

ChemDraw パネルを使用すると、2 次元構造式作画を作画し、それを 3 次元モデルに変換できます。別の方法として、3 次元モデルを作成し、それを 2 次元の作画に変換してパネルに表示することもできます。ChemDraw パネルをアクティブにするには、**View** メニューの **ChemDraw Panel** をクリックします。デフォルトでは、パネルは画面の右側に表示されます。画面の任意の場所に浮動表示したり、Chem3D ユーザー インターフェイスに固定することもできます。ChemDraw パネルのタイトル バーを右クリックして、**Docking** または **Floating** を選択します。ChemDraw パネルのタイトル バーをクリックして、標準の固定方向にドラッグすることもできます。

2 次元および 3 次元ビューのリンク

ChemDraw パネルとモデル ウィンドウには、LiveLink と Insertion という 2 つのリンク モードがあります。LiveLink モードでは、モデル ウィンドウで作成したモデルはすべて ChemDraw パネルに表示されます。反対に、ChemDraw パネルで作画した構造式はすべてモデル ウィンドウに表示されます。ChemDraw パネルのタイトル バーに、どちらのモードがアクティブかが表示されます。

リンク オプションは、タイトル バーのすぐ下に表示されます。Insertion モードのオプションは次のとおりです。

Link Mode. LiveLink モードと Insertion モードを切り替えます。

Clear. ChemDraw パネルの構造式をクリアします。

Add or Replace contents in ChemDraw panel. デフォルトの機能は置き換えです。

Chemical names/SMILES. 化合物の名前または SMILES 文字列を Name=Struct ボックスに入力して、モデルを作成します。

Group name. 追加または置き換える化合物のグループ名を指定します。

Group ID. 追加または置き換える化合物のグループ ID を指定します。

Draw->3D (ADD). このオプションは、次の条件が満たされている場合に利用できます。

- 有効な化合物のグループ名とグループ ID が指定されている。
- ChemDraw-Insertion パネルに構造式が表示されている。
- ID が数値で指定されている。

Draw->3D (ADD) を用いて構造式を作画するには、次の操作を行ってください。

1. 化合物のグループ名とグループ ID を指定します。
2. **Draw->3D (ADD)** アイコンをクリックします。

指定したグループ名とグループ ID の組み合わせの構造式が存在する場合、モデル ウィンドウの既存の構造式を新しい構造式に置き換えるよう求めるメッセージが表示されます。既存の構造式を置き換えるには **Yes** をクリックします。モデル ウィンドウおよび構造式ブラウザで、既存の構造式が指定した構造式で置き換えられます。構造式ブラウザがアクティブな場合は、該当する値が構造式ブラウザに追加されます。

指定したグループ名とグループ ID の組み合わせの構造式が存在しない場合、ChemDraw パネルの構造式がモデル ウィンドウと構造式ブラウザに追加されます。

ChemDraw パネルの同期制限

デフォルトでは、LiveLink モードは原子数が 200 未満の分子でのみ使用できます。

デフォルトの設定を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Chem3D Preferences ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **ChemDraw** タブをクリックします。
3. **Atom Synchronization Limit (100-10000)** で原子数を指定します。
4. **Apply** をクリックし、**OK** をクリックします。

 **注意:** *Atom Synchronization Limit (100-10000)* フィールドで大きい値を指定すると、大きな作画領域が生成されるため、作画速度が遅くなります。

Structure Browser

Structure Browser を使うと、ファイルに保存された複数の構造式を参照し、それらの構造式をモデル ウィンドウに表示できます。Structure Browser では、モデルを参照するときにモデル ウィンドウに表示する構造式を選

扱でき、それらの構造式を重ね合わせることもできます。このことは、薬品のような分子や、レセプタ内でのそれらの分子の相互作用を検証するような作業で役立ちます。

Structure Browser は、デフォルトでは折り畳まれており、モデル ウィンドウの左側に縦長のタブとして表示されます。このタブの上にマウス ポインタを合わせると Structure Browser が表示されます。

構造式を Structure Browser に読み込むには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **New** をクリックして新しいドキュメント ウィンドウを開きます。
2. **File** メニューの **Import File** をクリックして、表示する構造式を含むファイルを読み込みます。

 **注意:** 構造式データは、SD ファイル、sybyl mol2 ファイル、sm2 ファイル、または ml2 ファイルからも読み込むことができます。

ファイルを読み込むと、そのファイルの構造式がフラグメントとして Model Explorer にリスト表示されます。構造式を参照するには、はじめに、構造式を Model Explorer から Structure Browser にドラッグする必要があります。

1. Model Explorer と Structure Browser のウィンドウが開いたままになるように、Model Explorer と Structure Browser で自動非表示アイコン  をクリックします。
2. Model Explorer ウィンドウでフラグメントをクリックして、Structure Browser ウィンドウにドラッグします。構造式の化学名が、Structure Browser にコピーされます。
3. 必要な場合は追加のフラグメントを Model Explorer から Structure Browser にドラッグします。

Structure Browser で各構造式を表示または非表示にするには、その構造式に対応するチェック ボックスをオンまたはオフにします。

- チェック ボックスをオンにすると、構造式が表示されます。
- チェック ボックスをオフにすると、構造式が非表示になります。
- チェック ボックスがグレーになっているときは、その構造式が選択されています。選択した構造式は、常に表示されます。

 **ヒント:** すべてのフラグメントをコピーするには、Structure Browser で右クリックして **Auto-populate the Structure Browser** を選択します。

 **注意:** Model Explorer でフラグメントを削除すると、Structure Browser からそのフラグメントが削除されます。

高速オーバーレイ

すべてのオブジェクトをオーバーレイするには、Structure Browser 内で右クリックし、**Fast Overlay** を選択します。Structure Browser 内のフラグメントがオーバーレイされます。

MM2 計算

Structure Browser にリスト表示されているフラグメントで単純な MM2 計算を実行できます。計算は、1 度に 1 つのフラグメントでのみ実行できます。

フラグメントで MM2 最小化を実行するには、フラグメントを右クリックして **MM2 Minimization** を選択します。

任意の温度範囲のフラグメントで回転と移動運動エネルギーをシミュレートできます。フラグメントを右クリックし、**MM2 Dynamics** をクリックします。シミュレーションの結果は、Output ウィンドウに表示されます。

表示オプション

フラグメントの表示モードを変更するには、次の操作を行ってください。

1. Structure Browser 内のフラグメントを右クリックします。
2. コンテキストメニューの Display Mode をクリックして、表示モード オプションを選択します。詳細については、“[表示モード](#)” ページ 36 を参照してください。

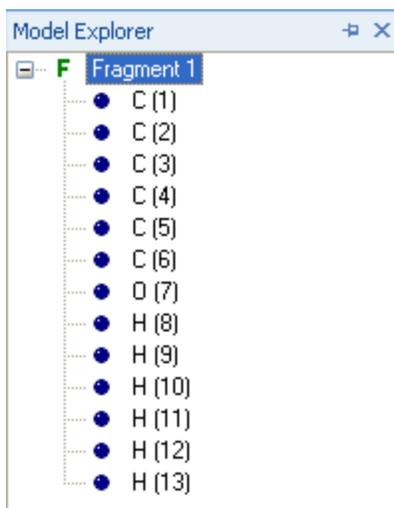
色

フラグメント内のすべての原子に同じ色を適用するには、次の操作を行ってください。

1. Structure Browser でフラグメントを右クリックし、Color の **Select Color** をクリックします。カラーパレットが表示されます。
2. カラーパレットで、好みの色を選択して **OK** をクリックします。

Model Explorer

Model Explorer を使って、モデルの構造的特徴を調べることができます。Model Explorer は、デフォルトでは折り畳まれており、垂直に並んだタブとして表示されます。Model Explorer タブの上にマウスポインタを置くと、Model Explorer ウィンドウが開き、現在表示されているモデルが階層ツリー形式で示されます。



Model Explorer ウィンドウでは、モデルの特性を変更することができます。グループに加えた変更は、グループ内のすべてのメンバーに適用されます。

変更内容を追跡できるように、非表示や変更された特徴は色付きのアイコンで表示されます。詳細については、“[Model Explorer](#)” ページ 53 を参照してください。

ユーザー インターフェイスの設定

作業方法に合わせて、ユーザー インターフェイスのスタイルや動作を変更できます。GUI の配色、タブの動作、およびその他の表示オプションを変更できます。

設定を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。**Preferences** ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **GUI** タブをクリックします。
3. **GUI Style** セクションでスタイルを選択して、Chem3D インターフェイスの全体的な外観と操作性を変更します。

 **注意:** *VS 2005 (Whidbey)* スタイル オプションには、ツールバーのスマート ドッキング機能が含まれています。

4. **Apply** をクリックして、新しい設定を表示します。デフォルトのスタイル設定に戻るには、**Reset to Default** をクリックします。
5. **Window Settings** セクションで、次の機能を有効または無効にします。
 - **Tabbed windows**。開いているファイルを、モデル ウィンドウのタブとして表示できます。
 - **Sliding windows**。Structure Browser や Model Explorer などのウィンドウを、Chem3D にスライド インまたは Chem3D からスライド アウトできます。オフにすると、ウィンドウはスライディングなしで表示または非表示されます。
 - **Sliding window animation**。Sliding ウィンドウのアニメーションを有効にします。
 - **Message in Output box**。Chem3D 下部の Output ボックスにメッセージを表示します。
6. **OK** をクリックします。

 **注意:** これらの機能をアクティブにするために、Chem3D を閉じてから再起動しなければならないことがあります。

背景の設定

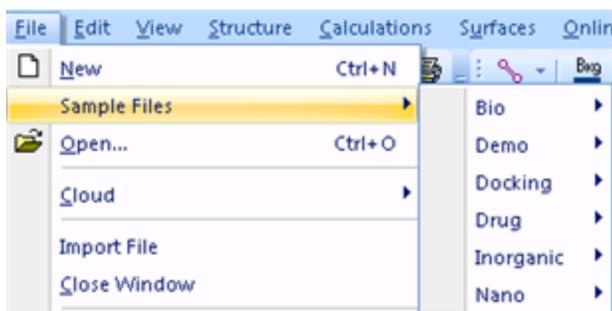
背景の色、効果、画像を設定するには、**File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Background** タブを選択します。**Set as Default** を選択した場合を除き、変更は現在のモデル ウィンドウにのみ適用されます。

サンプル ファイル

Chem3D には、生体構造や無機構造など、分子モデルの作成方法および調査方法を学ぶのに役立つさまざまなサンプル ファイルが用意されています。

サンプル ファイルを開くには、**File** メニューの **Sample Files** をクリックし、次のいずれかのグループからファイルを選択します。

- Bio
- Demo
- Docking
- Drug
- Inorganic
- Nano



Dropbox への保存

他のユーザーまたは Chem3D iPad アプリと共有するファイルのリポジトリとして、Chem3D ファイルを Dropbox に保存できます。Dropbox サービスを使用するために必要なものは次のとおりです。

- 有効な Dropbox アカウントを所有していること、および
- Chem3D がインストールされていること。

作画を現在の Chem3D ドキュメント ウィンドウから自分のリモートの Dropbox フォルダの場所にアップロードできます。これらのファイルは、必要になった時点で後からダウンロードできます。

ファイルのアップロード

Chem3D の現在のドキュメント ウィンドウで作画を自分のリモートの Dropbox フォルダにアップロードできます。

ファイルをアップロードするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Save As** をクリックします。
2. ファイルの名前を指定します。
3. 描画をアップロードするファイル形式を選択します。
4. 現在のフォルダ設定を **Desktop** > [ユーザー名のシステム フォルダ] > **Dropbox** > に変更します。
5. ファイルを保存するフォルダの場所を選択します。
6. (オプション) ファイル名を変更する場合は、ダイアログ ボックスの下部にある **File name** テキスト ボックスに新しいファイル名を入力します。

 **注意:** Chem3D iPad アプリを使用して Dropbox に保存した場合、Chem3D フォルダは既に Dropbox に存在します。アプリを使用して保存していない場合、自分でフォルダを作成する必要があります。

7. **Save** をクリックします。

ファイルのダウンロード

リモートの Dropbox フォルダからローカル マシンへファイルをダウンロードできます。ダウンロードが終了すると、Chem3D ドキュメント ウィンドウに作画モデルが自動的に表示されます。任意の場所にファイルを保存できません。

ファイルをダウンロードするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Open** をクリックします。
 2. 現在のフォルダ設定を **Desktop** > [ユーザー名のシステム フォルダ] > **Dropbox** > に変更します。
 3. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - ダウンロードするファイルをダブルクリックします。
 - ダウンロードするファイルを指定して、**Open** をクリックします。
-  **注意:** ダウンロード処理が完了するまでの時間制限を指定できます。それには、*Time out limit* テキストボックスに秒数で値を指定します。時間制限は、最短 5 秒から最長 120 秒までの任意の値を指定できます。

基本的なモデル作成

モデルは、1 つ以上の分子構造式、溶媒、イオン、または単一の原子により構成されます。モデルの作成には、基本的な方法がいくつかあります。

- モデル作成ツールを使用して、モデルに一度に 1 つの結合を作成します。“[結合ツールの使用](#)” ページ 14 を参照してください。
- ChemDraw パネルで 2D 構造式を作画し、その構造式を 3D モデルに変換します。“[ChemDraw パネル](#)” ページ 6 を参照してください。
- テキスト作成ツールを使用して、モデル ウィンドウに化学構造式の名前を入力します。“[テキストによる作成](#)” ページ 17 を参照してください。
- ChemDraw パネルに化学名または SMILES を入力します。
- テーブルからモデル データを読み込んでモデルを作成することもできます。“[Cartesian テーブルを使った作成](#)” ページ 89 を参照してください。

通常、これらの方法を組み合わせると、よい結果が得られます。たとえば、ChemDraw パネルまたは結合ツールでモデルの炭素骨格を作成してから、テキスト作成ツールで炭素の一部を他の元素に変更します。

基本的なモデルを作成した後で、Chem3D の基本機能を調べることをお勧めします。たとえば、オブジェクトを移動したり、非表示にしたり、サイズ変更したりできます。見やすくなるように、モデルの回転、移動、拡大/縮小を行うこともできます。

標準設定

Chem3D になじみがなければ、標準設定と適切な表示モードを選択してください。タンパク質分子にはリボン形式またはアニメーション形式の表示モードを、大きな分子にはワイヤ フレームまたはボールとスティックの表示モードを選択することをお勧めします。小さな分子はどの表示モードでも問題なく表示されるので、任意の表示モードを選択できます。モデルに表示される内容は、選択した[表示モード](#)によって異なります。

標準設定を適用するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Model Settings** をクリックします。Model Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Reset to Default** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

表示モードの選択

シリンダ結合表示モードを選択すると、自分のモデルをこのガイドに示されているモデルの外観に似せることができます。

表示モードを選択するには、次のいずれかの操作を行います。

- **View、Model Display、Display Mode、Cylindrical Bonds** の順に選択します。
- モデル表示ツールバーの  の隣にあるドロップダウンの矢印をクリックして、ドロップダウン リストから **Cylindrical Bonds** を選択します。

 **注意:** モデル表示ツールバーをアクティブにするには、*View*、*Toolbars*、*Model Display* の順に選択します。

詳細については、[表示モード](#)を参照してください。

結合ツールの使用

結合ツールでモデルの基本構造を作成できます。その後、目的の外観になるように修正できます。たとえば、炭素または水素を別の元素に変更する、水素を非表示にして画面を見やすくする、といったことが可能です。



図 3.1: 単結合、二重結合、三重結合、および**ダミー結合**の各ツールが含まれる作成ツールバー

結合ツールでモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 単結合ツールなどの結合ツールを選択します。
2. モデル ウィンドウ内をクリックし、結合の向きを決めてその方向へドラッグします。
3. マウス ボタンを放すと結合が作画されます。
4. さらに結合を追加するには、作画した原子をクリックしてドラッグします。
5. 原子を変更するには、テキスト作成ツール  を選択してその原子をクリックし、新しい原子記号を入力します。たとえば、水素原子から塩素原子への変更は次のようにします。
 - a. 水素原子をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
 - b. テキスト ボックスに「Cl」と入力します。
 - c. Enter キーを押します。

結合次数の変更

一度に 1 つ以上の結合の結合次数を変更する場合は、結合ツール、コマンド、またはテキスト作成ツールを使うことができます(原子タイプを変更することで、原子に付加されている結合の結合次数を変更することもできます。“[構築タイプ](#)” ページ 146 を参照してください)。

結合ツールを使用した結合次数の変更

結合ツールを使用して結合次数を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 異なる次数の結合ツールを選択します。
2. 一方の原子をクリックして、もう片方へドラッグします。

コマンドを使用した結合次数の変更

コマンドを使用して結合次数を変更するには、次の操作を行ってください。

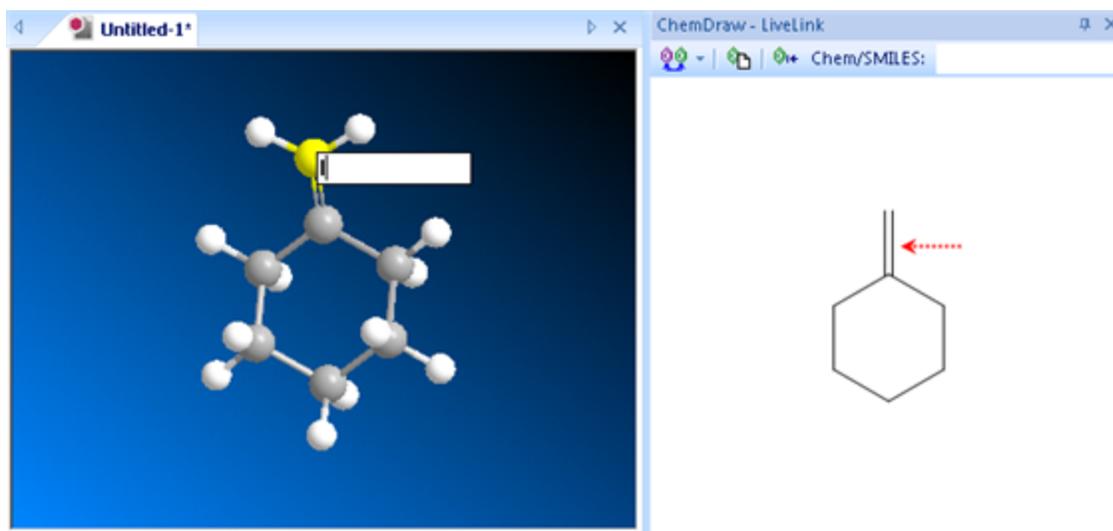
1. 結合を右クリックします。結合が黄色に変わります。
2. **Set Bond Order** をポイントし、結合次数を選択します。

結合の一端での原子タイプの変更による結合次数の変更

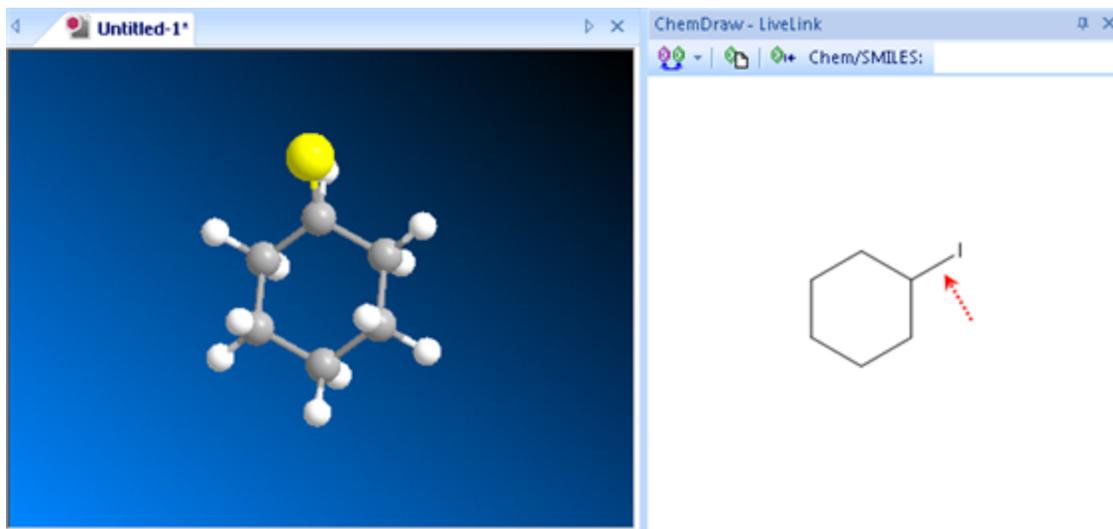
この方法は、結合次数を下げる場合にのみ適用できます。この方法を適用して結合次数を上げると、単結合が生成され、原子価が水素で満たされます。

結合の末端の原子タイプを変更して結合次数を変更するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツール  をクリックします。
2. 次数を変更する結合が付加されている原子をクリックします。
3. 選択した原子と置き換える新しい原子タイプを入力します。次の例では、炭素 (C) をヨウ素 (I) に置き換えています。



4. Enter キーを押します。結合の結合次数は新しい原子タイプを反映して変更されます。



複数の結合の同時変更

一度に複数の結合次数を変更するには、次の操作を行ってください。

1. ChemDraw パネルを開き、パネル内をクリックして ChemDraw コントロールをアクティブにします。
2. なげなわ選択ツールまたは矩形選択ツールを選択します。

3. Shift キーを押しながら、変更する結合をクリックします。
4. 選択範囲内で右クリックし、次のいずれかを実行します。
 - **Single** をクリックし、結合タイプを選択します。
 - **Double** をクリックし、結合タイプを選択します。
 - **Triple** をクリックし、Plain を選択します。
5. Chem3D ウィンドウ内をクリックして操作を完了します。

 **注意:** 結合を切断するには、結合を右クリックし、**Break Bond** を選択します。

環の作成

結合ツールを使用して環を作成するには、次の操作を行ってください。

1. 結合ツールを選択します。
2. 構造式内の一方の原子をクリックし、同じ構造式内の隣接しない原子までドラッグします。

 **注意:** 通常は、結果的に構造式が歪むこととなります。これを修正するには、MM2 または MMFF94 による最小化が必要となります。

ChemDraw パネルの使用

ChemDraw パネルを使用して、2 次元の構造式を ChemDraw の場合と同じように作画することができます。別の方法として、ChemDraw パネルの Chem/SMILES ボックスを使用して、テキストを使ったモデルを作成することもできます。

構造式を作画すると、対応する 3 次元モデルがモデル ウィンドウに表示されます。

ChemDraw パネルを使用してモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **ChemDraw Panel** をクリックします。ChemDraw パネルが表示されます。
2. パネル内をクリックしてアクティブにします。ツール パレットが表示されます。

 **注意:** ツール パレットが表示されない場合は、ChemDraw パネルを右クリックし、**View** メニューの **Show Main Toolbar** をクリックします。

3. ツール パレットのツールを選択し、ChemDraw パネルをクリックして、選択したツールで構造式を作画します。ChemDraw パネルの LiveLink オプションを選択した状態 (ChemDraw パネルの左上) で、構造式を作画すると、対応する 3 次元モデルがモデル ウィンドウに表示されます。

また、次の方法により、ChemDraw を使用して構造式を作画し、ChemDraw パネルに貼り付けることもできます。

1. ChemDraw で構造式を作画します。
2. 構造式をクリップボードにコピーします。
3. Chem3D で **Edit** メニューの **Paste** をクリックするか、ChemDraw パネルで Ctrl + V キーを押します。

詳細については、[ChemDraw パネル](#)を参照してください。

他の 2 次元作画パッケージの使用

Chem3D では、ChemDraw 以外の 2 次元作画パッケージで作画した 2 次元構造式も使用することができます。これらのパッケージを使用してモデルを作画するときは、次の点に注意してください。

- 変換の過程で標準測定値がモデルに適用されません。詳細については、“2 次元から 3 次元への変換” ページ 231 を参照してください。
- Chem3D は、クリップボードにコピーされた矢印、軌道、曲線などのオブジェクトを無視します。
- Chem3D で対応する部分構造が見つかった場合は、ISIS/Draw に含まれるスーパー原子が展開されます。これ以外の場合は、部分構造を定義する必要があります。“部分構造の定義” ページ 26 を参照してください。

テキストによる作成

モデルを作成するには、作成するモデルの構造を表すテキスト文字列を入力する方法が簡単です。テキストは、構造式の化学名、分子式、InChI、または SMILES 文字列として入力できます。

以下に例を示します。

- 名前: Tyrosine, Iron (III) Phosphate
- 分子式: CH₃CH₂COOPH₂、CH₃(CH₂)₂COO-NH₄⁺
- SMILES 文字列: OC[C@@H](O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H](O)1
- InChI 文字列: InChI=1/C8H7ClO/c1-6(10)7-2-4-8(9)5-3-7/h2-5H,1H3

モデルには複数の構造式を含めることができます。それぞれの構造式は、フラグメントとして定義されます¹。

 **注意:** 水は溶媒と見なされます。モデルに追加する個々の水分子が 1 つのフラグメントを構成します。

Name-to-Structure (N2S) ツールの使用

テキストからモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーのテキスト作成ツール  を選択します。
2. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト フィールドが表示されます。
3. テキスト フィールドに構造式の名前を入力するか貼り付けて、Enter キーを押します。

ヒント: テキスト ツールを使用してモデルを作成するときに注意する必要がある点を次に示します。

1. テキストは大文字小文字の区別が必要です。たとえば、酸素原子を指定するには、「O」と入力します。
2. テキストを使用して形式電荷を追加できます。たとえば、「PhO-」と入力すると、フェノールではなくフェノール塩イオンのモデルを作成します。
3.  原子をダブルクリックすると、その前のテキスト ボックスの内容が原子に適用されます。原子をいくつか選択した場合は、テキスト ボックスの内容が各原子に個別に適用されます。
4. すべてのテキスト置換が有効というわけではありません。たとえば、「benzene」というラベルを持つ 1 つの鎖にある 2 つの原子を選択することはできません。

¹イオン化合物は、複数のフラグメント (1 つのイオンにつきフラグメント 1 個) で構成されることがあります

テキスト ボックスのテキストの解釈は、原子の選択状態によって異なります。

- モデル ウィンドウで何も選択されていない場合は、新しい分子が追加されます。
- 原子が 1 個以上選択されていると、テキストが選択対象に追加されます。ただし、選択されている原子の属性と矛盾していない場合に限ります。
- テキスト ボックスが表示された状態で、Shift キーを押しながら原子をクリックするか Shift キーを押しながらドラッグで複数の原子を選択すると、選択範囲を変更できます。

構築タイプを変更したり、結合次数を指定したりすることもできます。

テキスト作成ツールでは、テキストを直接入力することも、Table Editor を使用して入力することもできます。

 **注意:** 以下の説明では、*Model Settings* ダイアログ ボックスの *Model Building* タブのオプションがすべてオンであると仮定します。

記号および分子式の使用

テキスト作成ツールを使用すると、化学記号および分子式を使用してモデルを作成できます。

元素記号を使用するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールを選択します。
2. モデル ウィンドウ内をクリックし、「C」と入力します。
3. Enter キーを押します。メタンのモデルが作成されます。

原子タイプとして C Alkane が割り当てられ、適切な数の水素が追加されます。

同じテキストを使ってメチル基をもう 1 つ追加するには、次の操作を行ってください。

1. 置き換える原子（この例では水素）にマウス ポインタを合わせ、クリックします。テキスト ボックスが開き、前に指定したラベルが表示されます。
2. Enter キーを押します。

別の元素を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 水素原子をクリックします。原子の上にテキスト ボックスが表示されます。
2. 「N」と入力し、Enter キーを押します。窒素が追加されてエチルアミンが形成されます。

上の一連の操作で作成したモデルを 1 回の操作で作成するには、次の操作を行ってください。

1. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
2. 「CH3CH2NH2」または「ethylamine」と入力します。
3. Enter キーを押します。

Table Editor

テキスト作成ツールを使用してモデルを作成する際、テキストを手で入力する代わりに、Table Editor を使用してテキストを入力できます。

Table Editor を使用してテキストを入力するには、次の操作を行ってください。

1. View、Parameter Tables、Chem3D Building Atom Types の順に選択します。

2. テーブル中の元素または構築タイプを選択します。
3. Ctrl + C キーを押します。
4. Chem3D モデル ウィンドウ内をダブルクリックします。
5. Chem3D で、Edit メニューの Paste をクリックします。
6. Enter キーを押します。

SMILES 文字列を使ったモデルの作成

Chem/SMILES ボックスを使用して名前からモデルを作成するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- Chem/SMILES ボックスで、化学名または SMILES 文字列を入力し、Enter キーを押します。
- ドキュメントから名前または SMILES 文字列をコピーし、Chem/SMILES ボックスに貼り付け、Enter キーを押します。

ヒント: 名前または SMILES 文字列をモデル ウィンドウに貼り付けて、3D モデルを作画できます。また、分子式を Chem3D モデル ウィンドウに貼り付けることもできます。ただし、式は異性体を表すこともあるので注意してください。

デフォルトでは、Chem/SMILES ボックスを使用して構造式を作画する場合、ChemDraw パネルに既にある構造式が置き換わります。Chem/SMILES ボックスを使用して構造式を作画するときに既存の構造式が置き換えられないようにするには、Add or Replace contents of ChemDraw panel ツール  をクリックします。

フラグメントの追加

モデルが複数のフラグメントで構成されることがあります。通常、フラグメントは、モデル内の 1 つの構造で構成されます¹。

テキスト作成ツールを使用してフラグメントを追加するには、次の操作を行ってください。

1. ウィンドウの空白部分をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
2. 元素名、原子タイプまたは部分構造（たとえば水の場合は H2O）を入力します。
3. Enter キーを押します。フラグメントが作成されます。
4. (オプション) 別の場所をダブルクリックして、別のフラグメントを追加します。

 **注意:** 水は溶媒と見なされます。モデルに追加する個々の水分子が 1 つのフラグメントを構成します。

¹イオン化合物は、複数のフラグメント (1 つのイオンにつきフラグメント 1 個) で構成されることがあります

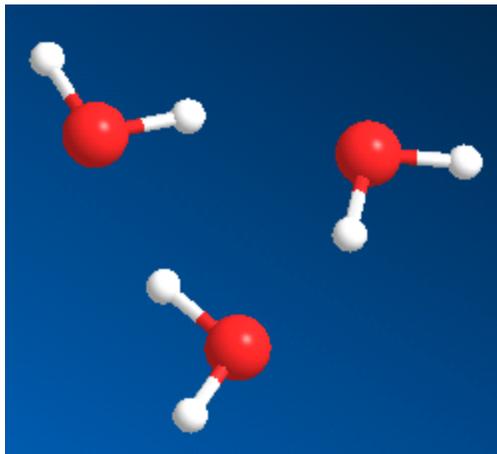


図 3.2: H₂O モデルに含まれる 3 つのフラグメント

原子や結合の選択

通常、原子や結合を変更または移動するには、最初にそれらを選択する必要があります。モデル ウィンドウで原子や結合を選択するには、次の操作を行ってください。

1. **選択** ツールをクリックします。
2. 原子または結合をクリックします。

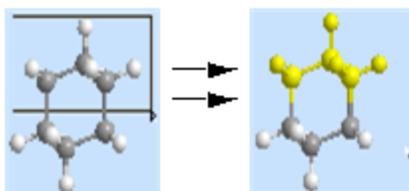
 **注意:** 結合を選択するには、その結合をクリックするか、結合に隣接する 2 つの原子を選択します。

1 つ以上の原子を選択するには、Shift キーまたは Ctrl キーを押しながら原子をクリックします。モデル内のすべての原子と結合を選択するには、Edit メニューの **Select All** をクリックするか、Ctrl + A キーを押します。

Model Explorer では、別の方法で原子や結合を選択できます。“[Model Explorer](#)” ページ 53 を参照してください。

グループ外の原子の選択

複数の原子や結合を選択するには、移動ツール  か選択ツール  のどちらかを使用して、クリック後に斜めにドラッグして枠を描きます。



マウス ボタンを離したときに選択枠に一部でも含まれている原子が選択されます。結合は、隣接する原子が 2 つとも選択された場合にのみ選択されます。

- ✔ **ヒント:** 原子を 1 つずつ選択したり、個々の原子を選択対象に追加していくには、*Shift* キーを押しながら追加する原子それぞれをクリックします。

原子や結合の選択解除

原子の選択を解除すると、隣接する結合もすべて選択解除されます。両端に結合した原子も選択解除されます。ただし、両端の原子が他の選択された結合を形成している場合は選択解除されません。

- *Shift* キーを押しながら選択解除する原子または結合をクリックします。
- モデル ウィンドウ内の空白部分をクリックして、すべての原子と結合の選択を解除します。

元素の変更

原子を他の元素に変更するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールをクリックします。
2. 変更したい原子をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. 元素記号を入力します（大文字小文字が区別されます）。
4. *Enter* キーを押します。
5. (オプション) 記号をもう一度適用するには、別の原子をダブルクリックします。

例

ベンゼンをアニリンに変更するには、次の操作を行ってください。

1. 置換する水素原子をクリックし、「NH₂」と入力します。
2. *Enter* キーを押します。

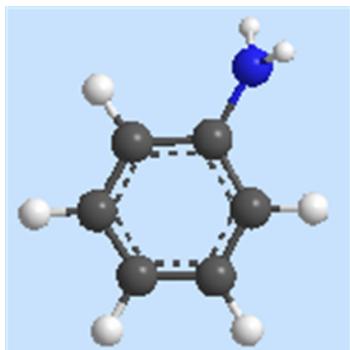


図 3.3: アニリンのモデル

Kekule 結合と非局在化結合

芳香族などの化合物で二重結合と単結合が交互に現れる配置は、Kekule 結合または非局在化結合で表示できます。典型的な 2 つの例として、CO₂²⁻ およびベンゼンを次に示します。



図 3.4: Kekule 結合と非局在化結合

モデル作成後、Kekule 結合と非局在化結合を次のいずれかの方法で切り替えることができます。

- モデル ウィンドウで、Ctrl + K キーを押します。
- View、Model Display、Delocalized Bonds の順に選択し、いずれかのオプションを選択します。
- File から Model Settings を選択して Model Display タブを開き、Show Delocalized Bonds as Dashed Lines チェック ボックスをオンまたはオフにします。

選択色の設定

選択した原子と結合は、デフォルトでは黄色で強調表示されます。Model Settings ダイアログ ボックスでデフォルトの選択色を変更できます。

1. File メニューの Model Settings をクリックします。Model Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. Color & Fonts タブをクリックします。
3. Selection Color ドロップダウン リストから目的の色をクリックします。
4. OK をクリックします。

結合幅の調整

モデル内の一部の結合、またはすべての結合の幅を調整できます。

- 1 つ以上の選択した結合の幅を調整するには、次の操作を行ってください。
 1. 1 個以上の結合を選択します。
 2. 選択した結合を右クリックします。
 3. コンテキスト メニューの Select Object Bond Size をクリックします。結合サイズのスライダが表示されます。
 4. スライダを動かして幅を調整します。
 5. (オプション) 結合を既定の幅にリセットするには、結合を右クリックして、Reset to Default を選択します。

モデル内のすべての結合の幅を調整するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Atom & Bond** タブを選択します。
2. **Bond Size** スライダーで幅を調整します。
3. **OK** をクリックします。
4. (オプション) すべての結合を既定の幅にリセットするには、**File** メニューの **Model Settings** をクリックします。次に、**Atom & Bond** タブを選択し、**Reset to Default** をクリックします。

結合や原子の削除

原子または結合を削除するには、次の操作を行ってください。

1. 原子または結合を削除するには、次のいずれかの操作を行ってください。
 - 消しゴム ツールを選択し、原子または結合をクリックします。
 - 原子または結合を選択して、**Edit** メニューの **Clear** をクリックします。
 - 原子または結合を選択して、Delete キーを押します。

結合を削除する場合は、結合を右クリックして **Break Bond** をクリックするという方法もあります。

 **注意:** 自動修正がオンになっている場合は、水素原子を削除することはできません。モデルを編集するときは自動修正をオフにしてください(**File**、**Model Settings**、**Model Building** タブの順にクリック)。

原子の電荷

原子とその原子に対する結合を基にして、原子には形式電荷が割り当てられています。電荷は、原子をポイントすると表示されます。

電荷の設定

原子の形式電荷を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **テキスト作成** ツールをクリックします。
2. 変更する原子を選択します。
3. 「<+>」または「-」の符号を付けて電荷の値を入力します。
4. Enter キーを押します。

分子フラグメント中の原子の形式電荷を設定するには、フラグメントの元素の後に電荷を書き加えます。

例

フェノール塩フラグメントのモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

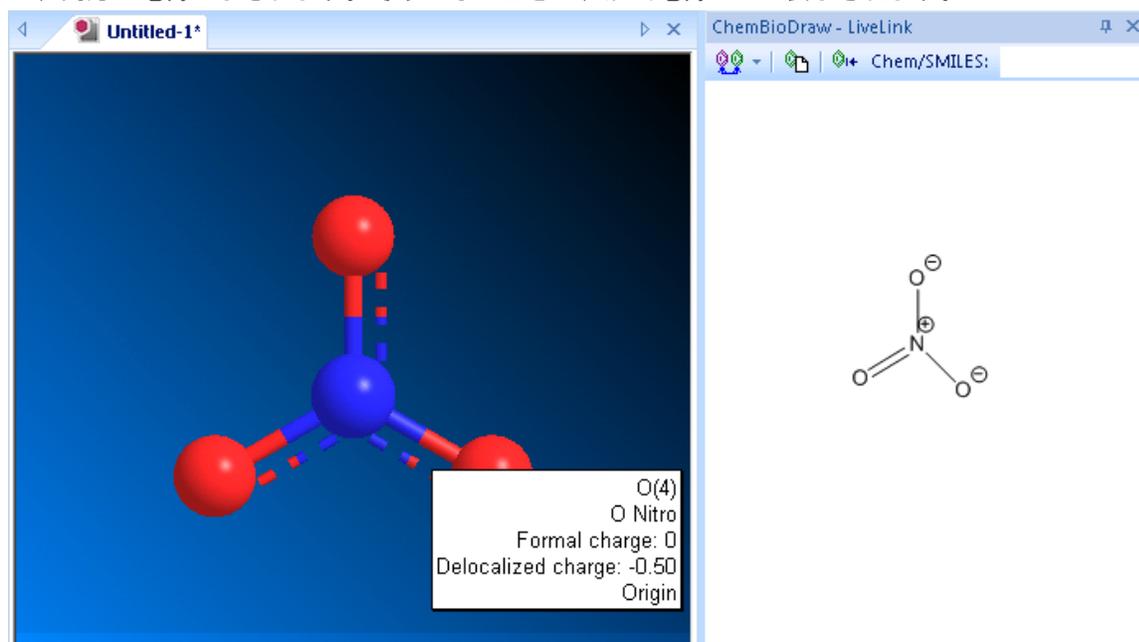
1. 原子を選択しない状態で、テキスト ボックスに「PhO-」と入力します。
2. Enter キーを押します。フェノール塩イオン分子が表示されます。

原子から形式電荷を削除するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールをクリックします。
2. 荷電原子を選択します。
3. 「<+0>」と入力します。
4. Enter キーを押します。

電荷の表示

Chem3D は、原子の形式電荷と非局在化電荷を認識します。ChemDraw の作画にも示されるように、Chem3D は原子に割り当てられた形式電荷を表示し、非局在化電荷を計算します。原子の非局在化電荷が形式電荷と異なる場合は、両方の電荷が表示されます。そうでないときは、形式電荷のみが表示されます。



オブジェクトの配置

モデルの各オブジェクトの位置は、2つの直交座標軸のセット、すなわちモデルの軸と表示の軸によって定義されます。モデルの軸（緑）によって、すべてのオブジェクトの絶対位置が決まります。オブジェクトを移動しない限り、オブジェクトがモデルの軸に合わせて位置を変えることはありません。

表示の軸（紫）により、モデルのすべてのオブジェクトの相対位置が定義されます。表示の軸の原点は、モデルのすべてのオブジェクトの中心です。そのため、モデル ウィンドウでオブジェクトの追加、削除、移動を行うと、モデルのすべてのオブジェクトが表示の軸の原点を基準にして移動します。

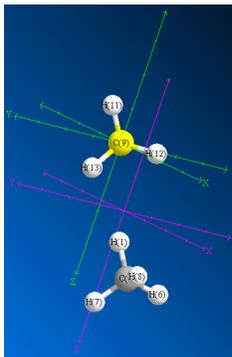


図 3.5: 両方の座標セットが表示されたモデル。C(9) 炭素はモデルの軸の原点に配置。モデルのすべてのオブジェクト (2 個のメタン フラグメント) は表示の軸の原点を中心として配置。

オブジェクトの移動

オブジェクトを移動する場合は、モデルの軸と関連させて位置を変更します。詳細については、“[オブジェクトの配置](#)” ページ 24 を参照してください。

1. 作成ツールバーのオブジェクトの移動ツール  をクリックします。
2. オブジェクトを 1 つ以上選択します (複数のオブジェクトを選択する場合は、Shift キーを押しながらオブジェクトを 1 つずつクリックしていきます)。
3. 選択したオブジェクトのいずれかをドラッグします。

原子を移動すると、結合している修正原子 (通常は水素) も一緒に移動します。結合を移動すると、隣接する原子も移動します。

移行ツール  を使用してオブジェクトを移動することもできます。

1. モデル ウィンドウで 1 つ以上のオブジェクトを選択します。
2. Shift キーを押しながら、移動ツールを使用して、選択したオブジェクトをクリックしてドラッグします。

選択部分を中央に表示

モデルのサイズを変更する場合、または計算を実行する前に、たいいていはモデルを中央に表示すると便利です。Chem3D では、1 個以上の原子を選択してモデルの中心としたり、モデル全体に対して計算を実行したりできます。

選択に基づいてモデルをウィンドウの中央に表示するには、次の操作を行ってください。

1. (オプション) 1 個以上の原子を選択します。
2. **Structure、Model Position、Center Model** (または **Selection) on Origin** の順に選択します。

このコマンドは、選択されている原子の図心を、モデルの軸の原点に表示します。Chem3D では、図心は選択されている原子の X、Y、Z 座標軸の平均として算出されます。原子を選択していない場合、モデル全体が中央に揃います。

部分構造

部分構造とは、構造に含まれる単純な要素（基本的にはビルディング ブロック）のことで、これによりモデルを定義したり、素早く作成したりできます。部分構造には、他の原子や部分構造の接続先となる結合点があります。Substructures 構造テーブル (substructures.xml ファイル) には、あらかじめ定義された部分構造がいくつか記載されています。独自の部分構造を定義してテーブルに追加することができます。詳細については、“[部分構造の定義](#)” ページ 26 を参照してください。

モデルに部分構造を適用するには、フラグメントの原子の 1 つを部分構造に置き換えて既存のフラグメントに追加するか、またはモデル ウィンドウに新規のフラグメントとして部分構造を貼り付けます。

モデルに部分構造を適用するには、次の操作を行ってください。

1. **View、Parameter Tables、Substructures** の順に選択します。
2. Substructures テーブルで、部分構造の **Name** を右クリックし、**Copy** を選択します。
3. モデル内で次のいずれかの操作を行ってください。
 - 既存のフラグメントに部分構造を追加するには、フラグメントにある原子を右クリックして、**Paste** を選択します。
 - 部分構造を新しいフラグメントとして追加するには、モデル ウィンドウの空白部分を右クリックして、**Paste** を選択します。

部分構造の定義

部分構造式を選択するには、次の操作を行ってください。

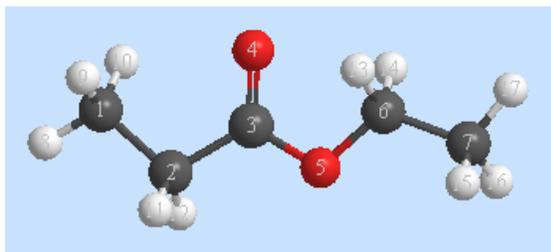
1. モデルを作成します。モデルの一部（または全体）に部分構造として定義する原子が含まれている必要があります。Chem3D のツールを使用するか、または ChemDraw パネルで作成できます。
2. モデルで、部分構造として定義する構造式の一部（または全体）を選択します。
3. **Edit** メニューの **Copy** をクリックします。

部分構造の定義を保存するには、次の操作を行ってください。

1. **View、Parameter Tables、Substructures** の順に選択し、部分構造のウィンドウを開きます。
2. Substructure テーブルを右クリックし、**Append Row** を選択します。新しい行がテーブルに追加されます。
3. **Model** 列で、セルを選択します。
4. セルを右クリックし、コンテキスト メニューから **Paste** を選択します。ただし、内容は、別のセルに移動するまでは表示されません。
5. **Name** 列で、セルをクリックします。
6. 部分構造の名前を入力します。
7. Substructures テーブルを閉じて保存します。

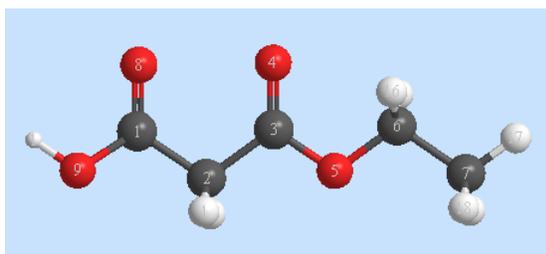
例

エステルの部分構造、 R_1COOR_2 を考えます。この部分構造は次のようなモデルの一部として組み立てることができます。



原子 3 ~ 5 (酸素原子 2 個とその間にある炭素原子 1 個) を選択し、前述と同じ手順で Substructures テーブルに新しい行を作成します。

エステルを鎖の末端にカルボキシル酸として付加するには、水素をダブルクリックして、エステルに置換します (ただし、部分構造の名前がテキスト ボックスに表示されている必要があります)。この方法で元の構造の H(8) を置換すると、次の構造が作成されます。



水素がエステル内の炭素に置換されました。これは、エステルを定義したときに、部分構造内の他の結合位置を形成した酸素のシリアル番号が (5) であり、炭素のシリアル番号 (3) がそれより小さかったためです。

注意: 複数の付加点を持つ部分構造を定義する際は、モデル内に挿入された部分構造が正しい方向に配置されるように、原子のシリアル番号に注意してください。詳細については、“[結合位置の規則](#)” ページ 28 を参照してください。

部分構造を使用する利点

部分構造を使用する利点は次のとおりです。

- 部分構造ではエネルギーを最小に最適化しています。
- 部分構造では複数の結合原子が前もって定義されています。

たとえば、フェニル基の部分構造 Ph には結合点が 1 個あります。カルボキシル基の部分構造 COO には、カルボキシル炭素と陰イオン酸素に結合点があります。アミノ酸やその他の重合単位にも、類似の多重結合点が定義されています。

- アミノ酸の部分構造には、 α 型と β 型があります。アミノ酸の名前の前に記号 “ β ” が付く場合、酸は β 型であることを示します。これ以外の場合、酸は α 型です。二面角は、 α ヘリックス型と β 型を作成できるようにあらかじめ設定されています。
- 部分構造は単独で使用することも、個々の元素や原子タイプを使用することもできます。

- 部分構造を使用すると、Groups テーブルにレコードが作成され、このレコードで原子団単位の選択や色分けが簡単にできます。
- 部分構造は高分子の作成に特に便利です。
- 部分構造を定義して Substructures テーブルに追加したり、独自のテーブルを作成したりすることができます。詳細については、“[部分構造の定義](#)” ページ 26を参照してください。
- この方法を使って意味のある構造を取得するには、各部分構造の結合点がどこにあるかを把握している必要があります。あらかじめ定義されている部分構造には、化学の標準規則によって定義されている結合点があります。詳細については、“[結合位置の規則](#)” ページ 28を参照してください。

部分構造を独立したフラグメントとして追加するには、原子が選択されていないことを確認します。

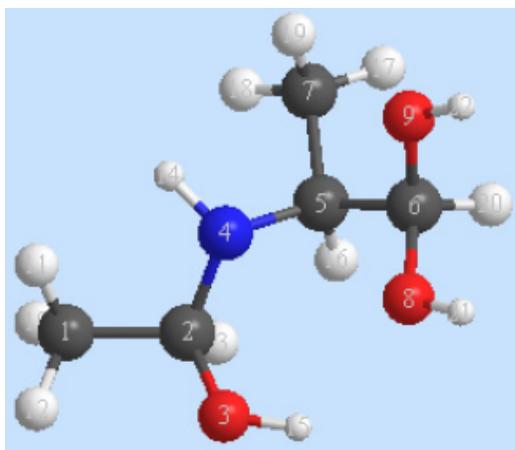
モデルに部分構造を挿入するには、部分構造の結合点に結合される原子を選択します。部分構造を使用してモデルを作成する方法については、“[部分構造](#)” ページ 77を参照してください。

角度と距離

選択された原子と選択されていない近接した原子の間の測定値が部分構造と共に保存されます。これらの測定値は、モデルで使用される際に、他の原子との相対的な部分構造の位置を決めるために使用されます。

たとえば、Chem3D は、部分構造内の 2 つの原子と、選択されていない 2 つの原子が形成する二面角を部分構造と共に保存します。選択原子（部分構造）と非選択原子（非部分構造）の間に複数の二面角ができる場合は、シリアル番号の最も小さい原子が形成する二面角が部分構造に保存されます。

次のモデルを使って、アラニンの部分構造を定義してみましょう。



ポリペプチドは、N 末端基アミノ酸を先頭に指定されるため、N(4) のシリアル番号をカルボキシル C(6) よりも小さくしなければなりません。アラニン部分構造の鎖が正しく形成されるためには、C(1) のシリアル番号を O(3) のシリアル番号より小さくして、C-C-N-C の二面角により隣接する部分構造がラベル内に配置されるようにします。

結合位置の規則

部分構造を保存すると、それと共に結合位置も保存されます。

結合位置の規則は次のとおりです。

- 部分構造に同じ原子が 2 つある場合は、シリアル番号の最も小さい原子が最初の結合位置になります。
- 空き原子価が満たされておらず、選択原子と結合している原子は、非選択原子と結合している原子より後に結合します。
- 自動修正原子にのみ結合している原子は、非自動修正原子に結合している原子より後に結合します。
- 上記の基準において同じ条件の原子が 2 つある場合は、シリアル番号の最も小さい原子と結合している原子の方が先に結合します。

モデルの最適化

3D モデルの作成後、幾何学的かつ構造的に正しくなるように、さらなる最適化が必要になる場合があります。たとえば、モデルの作成中にオブジェクトをあちこち移動させたり削除したりすると、結合角と結合長が化学的に正確でなくなる可能性があります。また、他の原子を削除した場合には、モデルの原子を調整して原子価を調節しなければならないこともあります。

原子の調整

モデルの原子を調整すると、選択した各原子が適切な数の原子に結合されるように、必要に応じて水素原子が追加または削除されます。適切な数は、原子タイプの原子価によって指定されます。Rectify コマンドでは、原子タイプの割り当てを行ってから結合を調整します。

選択されている原子の原子タイプは、隣接する原子の要求する結合次数や結合先の原子タイプに合うように変更されます。

選択されている原子の原子価を満足するように結合を追加および削除するには、次の操作を行ってください。

1. 調整する原子を選択します。
2. **Structure** メニューの **Rectify** をクリックします。

結合調整をデフォルトとして設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Model Building** タブを選択します。
2. **Rectify** を選択します。
3. **OK** をクリックします。

 **注意:** 結合調整設定は、既にモデル ウィンドウに表示されているフラグメントには影響しません。既存の原子を調整するには、原子を選択し、**Structure** メニューの **Rectify** をクリックします。

Model Building タブの **Correct Building Type** と **Rectify** がオンのときは、使用している結合ツールに応じて原子タイプが設定され、適切な数の水素原子が追加されます。

PDB ファイルでの原子の調整

PDB ファイルを開いているときは、PDB ファイルのモデルの水素が調整されるように指定できます。

PDB ファイルに水素を追加するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Open** をクリックします。
2. 開く PDB ファイルを選択します。

3. 次のチェック ボックスをオンにします。
 - Compute Atom Types and Bond Orders
 - Rectify Atoms

4. **Open** をクリックします。

読み込み時に、PDB ファイルから分子に水素が追加されます。

モデルの整形

モデルを作成したときや、モデル ウィンドウでオブジェクトを任意に移動させたとき、モデルが歪んで表示される場合があります。この歪みを修正するには、**Clean Up** コマンドを使用します。モデル中の選択されている原子の位置を修正するには、次の操作を行ってください。

1. 整形するモデルの一部またはすべてを選択します。
2. **Structure** メニューの **Clean Up** をクリックします。

Clean Up コマンドを使用すると、結合長や結合角のエラーをなくすように、選択されている原子の位置が修正されます。平面原子は平面化され、二重結合の周りの二面角は 0 度または 180 度に回転されます。

また、Measurement テーブルに設定した結合長や結合角は無効になります。Chem3D では、その測定値が **Optimal** 列の値と一致するように構造が調整されます。この最適値は、Bond Stretching Parameters テーブルおよび Angle Bending Parameters テーブルの標準測定値です。Clean Up または MM2 計算を実行すると、他のすべての値も変更されます。これらの計算に独自の値を適用するには、拘束を適用する必要があります。詳細については、“[拘束の適用](#)” ページ 82 を参照してください。

コピーと印刷

Chem3D には、モデルのコピー、埋め込み、印刷のためのオプションが複数用意されています。最適なオプションは、ニーズや好みによって異なります。

コピー

Chem3D モデルを、デスクトップ パブリッシング プログラムなどの他のアプリケーションにコピーできます。モデルのコピー方法は、そのモデルを新しいアプリケーションでどう表示するかによって異なります。

モデルを Chem3D から別のアプリケーションにコピーするとき、オリジナル元の特性属性は保持されます。モデルの編集は、Chem3D を使用するのみ有効です。構造式を編集して、保存すると、モデルを貼り付けたアプリケーションに変更が反映されます。

編集可能なモデルとしてのコピー

モデルをコピーするには、次の操作を行ってください。

1. Chem3D 内でモデルを選択します。
2. **Edit** メニューの **Copy** をクリックします。

3. 転送先のソフトウェア アプリケーション内で、開いたファイルにモデルを貼り付けます。たとえば、Microsoft® Word では **Ctrl + V** キーを押します。

アプリケーションにモデルを貼り付けた後で、必要なときにこのモデルを編集できます。

貼り付けたモデルを編集するには、次の操作を行ってください。

1. モデルを貼り付けたアプリケーション内で、モデルの画像をダブルクリックします。モデルが Chem3D で開かれます。
2. Chem3D 内でモデルを編集します。
3. Chem3D で、**File** メニューの **Exit & Return** をクリックします。Chem3D が終了します。

静的な画像としてのコピー

モデルをビットマップか Enhanced Meta ファイル (EMF) のどちらかとしてコピーできます。ビットマップでは Chem3D に表示されている背景が保持されますが、EMF では貼り付け先のアプリケーションで使用されている背景 (通常は白) が採用されます。

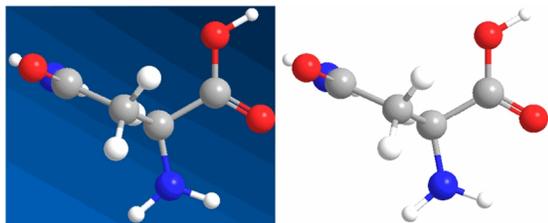


図 3.1: ビットマップ (左) と EMF (右) として読み込んだアスパラギンのモデル

他のアプリケーションに貼り付けると、これらのファイルは静的な画像となり、変更できません。ただし、ビットマップや EMF ファイルは通常、埋め込み形式で貼り付けたモデルよりもファイル サイズが小さくなります。モデルを静的な画像としてコピーし、貼り付けるには、次の操作を行ってください。

1. モデルを選択します。
2. **Edit** メニューの **Copy As** をクリックし、**Bitmap** または **Enhanced Metafile** を選択します。
3. 転送先のソフトウェア アプリケーション内で、開いたファイルにモデルを貼り付けます。たとえば Microsoft® Word では **Ctrl + V** キーを押します。

グラフィック形式でコピーする場合、Chem3D からクリップボードにコピーするファイルのサイズは、モデル ウィンドウのサイズによって決まります。コピーする分子のサイズを調整するには、コピーする前にモデル ウィンドウのサイズを変更してください。

ヒント: すべて同じサイズになるように複数のモデルのコピーを書き出すには、同じサイズになるようにモデル ウィンドウを調整して、**Fit Model to Window** がオンになっていることを確認します。**Fit Model to Window** 機能を有効にするには、**File**、**Model Settings**、**Model Building** タブの順に選択し、**Fit Model to Window** チェック ボックスをオンにします。

ChemDraw へのコピー

ChemDraw にコピーしたモデルは、2 次元作画として表示されます。これは、他のすべての ChemDraw 構造式と同様に作画を編集できることを意味します。

モデルを ChemDraw にコピーするには、次の操作を行ってください。

1. モデルを選択します。
2. **Edit**、**Copy As**、**ChemDraw Structure** の順に選択します。
3. ChemDraw で、**Edit** メニューの **Paste** をクリックします。

単一の文字列表記としてのコピー

モデルを SMILES、InChI、または InChIKey の文字列としてコピーするには、モデルを選択し、**Edit** メニューの **Copy As** をクリックし、**SMILES**、**InChI**、または **InChIKey** を選択します。

オブジェクトの埋め込み

Chem3D ActiveX コントロールを使って、モデルを Microsoft PowerPoint、Word、HTML ベースの文書、または任意の COM 対応アプリケーションに埋め込むことができます。

 **注意:** Microsoft Word に埋め込まれた Chem3D のオブジェクトを表示するには、マクロのセキュリティ設定を調整することが必要な場合があります。マクロのセキュリティ設定は、有効なマクロについて「低」または「中」のどちらかにする必要があります。

モデルがオブジェクトとして埋め込まれている場合、Chem3D にある多くの機能を使用してこのモデルを表示できます。たとえば、モデルの回転、拡大と縮小、モデルの表示モードの変更ができます。

モデルを埋め込むには、次の操作を行ってください。

1. Chem3D 内で **Ctrl + A** キーを押してモデルを選択します。
2. **Edit**、**Copy As**、**Embedded Object** の順に選択します。
3. 他のアプリケーション (PowerPoint など) を起動します。
4. オブジェクトをターゲット ドキュメント対象となる文書に貼り付けるには、**Ctrl + V** キーを押します。

 **注意:** PowerPoint に埋め込んだモデルを表示するには、PowerPoint で **F5** キーを押してスライド ショーを開始します。

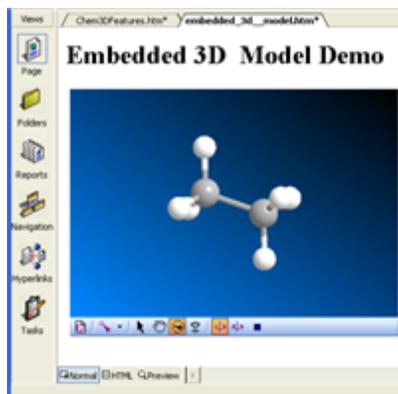


図 3.2: FrontPage にオブジェクトとして埋め込んだ Chem3D モデル

 **注意:** このマニュアルでは、HTML に埋め込まれた画像の修正については説明しません。3次元モデルの HTML ページを作成している場合は、Chem3D アプリケーション フォルダ内の ReadMeG3DP.htm を参照してください。

PowerPoint プレゼンテーションにモデルを埋め込む場合は、表示特性を修正することができます。右クリックで表示されるコンテキスト メニューから **Properties** を選択します。

埋め込みオブジェクトで変更できる特性属性を以下に示します。

AutoRedraw. これは、既定で True に設定されています。

DemoAxis. DemoMode に DemoRock か DemoSpin を選択した場合、回転軸を定義します。

DemoMode. スライドショー内でモデルをロックするか、回転するか、静止したままにするかを決定します。

DemoSpeed. DemoMode に DemoRock か DemoSpin を設定している場合の、相対的な回転速度。

EncodeData. 編集できません。これは、既定で True に設定されています。

Fullscreen. 編集できません。これは、既定で False に設定されています。

Height. オブジェクト ウィンドウの高さを定義します。

Left. オブジェクト ウィンドウの左端の配置を定義します。

Modified. 編集できません。

Rock amplitude. DemoMode を DemoRock に設定している場合に、モデルがロックされる振幅。

ShowContextMenu. オブジェクト ウィンドウを右クリックしたときに表示されるコンテキスト メニューの表示/非表示を切り替えます。

ShowRotationBar. 回転ツールバーの表示/非表示を切り替えます。

ShowToolbar. ツールバーの配置（左、右、上、下）を指定するか、ツールバーを非表示にします。

Top. オブジェクト ウィンドウの上端を、スライドの上端からの測定距離で定義します。

ViewOnly. 既定で False に設定されています。

Visible. オブジェクト ウィンドウの表示/非表示を切り換えます。

Width. オブジェクト ウィンドウの幅を定義します。

印刷

モデルは、Adobe PostScript または非 PostScript プリンタで印刷できます。

モデルを印刷するとき、画像の縮尺や解像度など、いくつかのオプションを指定できます。

印刷オプションを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Print Setup** をクリックします。Print Setup ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Printer** ドロップダウン リストでプリンタを選択します。
3. **Form** ドロップダウン リストで用紙サイズを選択します。
4. 印刷の向きを選択します。
5. 以下のオプションから選択します。

Scale To Full Page. モデル サイズをページ サイズに合わせて調整します。

Scale to ____ mm/Angstrom.

Always print with White Background. 画面の背景色を白に置き換えます。

High resolution Printing. 印刷品質を高めます。印刷時間を短くしたいときは、オフにしてください。

Include a Footer. 用紙にフッターを印刷します。

6. **OK** をクリックします。

印刷するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Print** をクリックします。Print ダイアログ ボックスが表示されます。

2. **OK** をクリックします。

オンラインでの構造式の検索

Chem3D には、構造式をダウンロードできるオンライン リソースが含まれています。ダウンロードした構造式はモデル ウィンドウで表示できます。たとえば、Protein Data Bank (PDB)、Crystallographic Information File (CIF)、または Available Chemicals Exchange (ACX) のデータベースからファイルをダウンロードできます。PDB ファイルまたは CIF ファイルをダウンロードするには、ファイルの PDB 番号または CIF 番号が必要です。ACX ファイルをダウンロードするには、ACX 番号または構造式の化学名が必要です。

! **注意:** 大きな構造式をダウンロード中に ChemDraw パネルを開いた場合、次のようなエラー メッセージが表示されることがあります。「The number of atoms in this molecule exceeds the atom synchronization limit. The ChemDraw panel cannot load the molecular structure. (この分子の原子数は、原子の同期制限数を超過しています。) ChemDraw パネルに分子構造式をロードできません。」エラーメッセージを閉じます。ダウンロードした構造式はモデル ウィンドウには表示されますが、ChemDraw パネルには表示されません。

PDB および CIF ファイル

PDB ファイルまたは CIF ファイルをダウンロードするには、次の操作を行ってください。

1. **Online** メニューの **Find Structure from PDB ID** をクリックします。ダイアログ ボックスが表示されます。

2. 表示されたダイアログ ボックスで、**PDB ID** ドロップダウン リストに構造式の PDB ID を入力するか、リストから選択します。

3. **Format** ドロップダウン リストで、PDB または CIF を選択します。

4. ファイルを保存する場所を入力するには、**Save As** をクリックして保存場所に移動します。

5. **Get File** をクリックします。ファイルがダウンロードされ、新しいモデル ウィンドウに表示されます。

ACX ファイル

その ACX 番号を使用して ACX ファイルをダウンロードするには、次の操作を行ってください。

1. **Online** メニューの **Find Structure from ACX Number** をクリックします。ダイアログ ボックスが表示されます。

2. 表示されたダイアログ ボックスで、**ACX No** ドロップダウン リストに構造式の ACX 番号を入力するか、リストから選択します。

3. ファイルを保存する場所を入力するには、**Save As** をクリックして保存場所に移動します。
4. **Get File** をクリックします。ファイルがダウンロードされ、新しいモデル ウィンドウに表示されます。

構造式の化学名を使用して ACX ファイルをダウンロードするには、次の操作を行ってください。

1. **Online** メニューの **Find Structure from Name at ChemACX.com** をクリックします。ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 表示されたダイアログ ボックスで、**Name** ドロップダウン リストに構造式の化学名を入力するか、リストから選択します。
3. ファイルを保存する場所を入力するには、**Save As** をクリックして保存場所に移動します。
4. **Get File** をクリックします。ファイルがダウンロードされ、新しいモデル ウィンドウに表示されます。

ChemACX からの注文

Chem3D のメイン メニューから ChemACX を通じて化学物質を注文できます。

 **注意:** 化学物質を注文するには、*ChemDraw ActiveX* コントロールをインストールしておく必要があります。

化学物質を注文するには、次の操作を行ってください。

1. モデル ウィンドウのモデルで、**Online** メニューの **Find Suppliers on ChemACX.com** をクリックします。
2. プロンプトが表示されたら、*ChemDraw ActiveX* コントロールをインストールします。
-  **注意:** 次の手順に進む前に、*PerkinElmer Web* サイトに登録してログインする（またはこのサイトにログインする）必要があります。
3. ブラウザに ChemACX Database の Web サイトが開き、構造式が表示されます。
4. **Suppliers list** で、注文する販売会社を選択します。選択した販売会社の製品リストが表示されます。
5. 製品リスト内で注文する製品を 1 つ以上選択し、**Add to Cart** をクリックします。
6. 準備が整ったら、**View Shopping Cart** をクリックして注文を終了します。
-  **注意:** *ChemACX* を使用して化学物質を注文する方法の詳細については、*ChemACX* のメイン メニューの **Help** をクリックしてください。

モデルの表示

Chem3D の表示オプションでは、モデルに視覚的効果を追加できるだけでなく、構造特性を調べるための助けになります。基本ツールを使用して、モデル内のさまざまなオブジェクトを拡大/縮小、回転、移動できます。オブジェクトを識別するために色を追加したり、原子間距離や結合角の測定値を表示できます。

表示モード

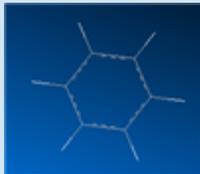
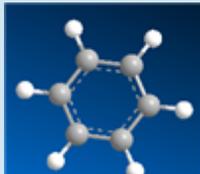
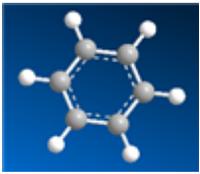
表示モードによって結合や原子の表示方法が決まります。デフォルトでは、モデルはボール & スティック表示モードで表示されます。表示モードを変更するには、**View**、**Model Display**、**Display Mode** の順に選択し、表示モード オプションを選択します。モデルのフラグメントの表示モードも変更できます。“[フラグメントの表示モード](#)” ページ 59を参照してください。表示モードについて、次に説明します。

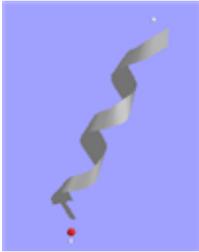
デフォルトの表示モードの設定

Chem3D では、新しいモデル ウィンドウを開くと常にデフォルトの表示モードが適用されます。デフォルトの表示モードを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。**Model Settings** ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Model Display** タブをクリックします。
3. **Model Type** ドロップダウン リストでオプションを選択します。
4. **Set as Default** をクリックします。
5. **OK** をクリックします。

次の表に、表示モードを示します。

表示モード	説明
ワイヤ フレーム 	ワイヤ フレームは、最も単純な表示モードです。結合はピクセル幅の線で表示されます。原子は明示的には表示されず、結合の各半分が原子の元素色を表す色で表示されます。ワイヤ フレーム モデルは、タンパク質など巨大なモデルに最適です。
スティック 	スティック モデルは、ワイヤ フレーム モデルに似ていますが、結合がやや太めです。また、このモデルは、タンパク質などの非常に大きなモデルを視覚化するのに適しています。
ボールとスティック 	これらのモデルでは、結合は太い線で、原子は塗りつぶされた球形で表示されます。原子球は、原子の元素または位置に対応するパターンや色で塗りつぶされています。
シリンダ結合 	これらのモデルは、結合タイプがシリンダで描かれている点を除き、ボールとスティック モデルに似ています。
空間充填 	これらのモデルは、原子の物理的な相対サイズを把握するのに最適です。それぞれの原子のサイズは、原子のファンデルワールス (VDW) 半径によって決まります。作画が複雑なモデルなので、表示に時間がかかる場合があります。原子は、Atom Types テーブルで指定されているファンデルワールス半径の実寸 (100% のスケール) で描かれています。ファンデルワールス半径は、非結合原子間の重なり部分が大きな (約 0.5 kcal/mole) 反発相互作用を表すように設定されます。

表示モード	説明
リボン 	これらのモデルは、二次構造および三次構造を明解に示す形式で、大きなタンパク質分子に使用します。 リボン形式では Colored by Group オプションを使って、アミノ酸の成分を識別できます。リボン形式を表示するには、タンパク質のバックボーンを形成する必要があります。
アニメーション 	アニメーション形式は、リボン モデルのように、二次構造および三次構造を明解に示す形式で、大きなタンパク質分子に使用します。 リボン モデルとアニメーション モデルの表示モードでは、情報をポップアップで表示しません。また、ビットマップとして印刷することを目的としていません。

原子および結合のサイズ

ボールとスティック、シリンダ結合、空間充填の各モデルでは、原子および結合のサイズを調整できます。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。Model Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Atom & Bond** タブを選択します。
3. 適用する前に変更内容を表示するには、**Preview** を選択します。
4. 原子サイズを調整するには、**Atom Size** スライダを動かします。
5. 結合サイズを調整するには、**Bond Size** スライダを動かします。
6. **OK** をクリックします。

原子サイズ の値 0 (小) ~ 100 (大) は、Elements テーブルで各原子に指定された共有結合半径の割合を表します。原子サイズが 100 のとき、原子は最大半径に縮尺変更されます。この設定の値は、ボールとスティック モデルとシリンダ結合モデルに影響します。

 **注意:** Elements テーブルを開くには、**View, Parameter Tables, Elements** の順に選択します。

ドット面の表示

モデルの任意の表示モードにドット面を追加できます。**View**、**Model Display**、**Show Atom Dots** の順に選択します。スティック モデルを使用した例を次に示します。

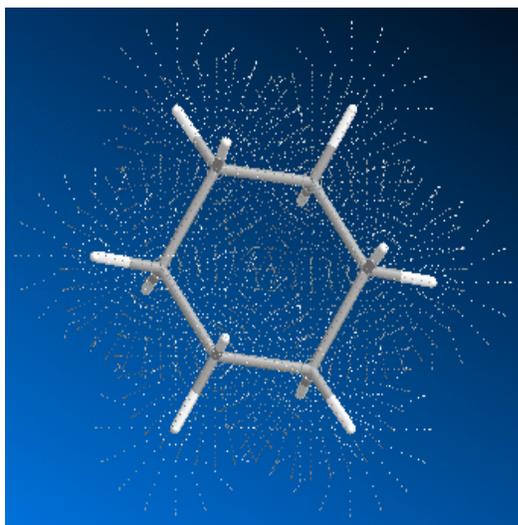


図 4.1: ドット面の表示

選択中の原子の原子ドットだけを表示するには、次の操作を行ってください。

1. モデル ウィンドウで 1 つ以上の原子を選択します。
2. 選択した原子のいずれかを右クリックします。
3. コンテキスト メニューから、**Atom Dots** メニューの **Show Atom Dots** をクリックします。

すべての原子にデフォルトでドット面を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Atom & Bond** タブを選択します。
2. **Atom Dot Surfaces** セクションの **Show by Default** チェック ボックスをオンにします。
3. **Density** スライダーを使ってドット面の密度を調整し、**Apply** をクリックします。
4. **OK** をクリックします。

シリアル番号

モデル内の各原子には、その他すべての原子と区別するために、固有のシリアル番号が割り当てられています。そのため、**Model Explorer** や **Measurement** テーブルを表示したときに、各原子を識別できます。

シリアル番号を表示するには、次のいずれかのオプションを選択します。

- 個々の原子については、**選択** ツールで原子をポイントします。ポップアップ メニューにシリアル番号が表示されます。

- **View**、**Model Display**、**Show Serial Numbers** の順に選択します。すべての原子のシリアル番号が表示されます。
- **File**、**Model Settings**、**Model Display** タブの順に選択し、**Show Serial Numbers** チェック ボックスをオンにします。**Apply** をクリックし、**OK**をクリックします。
- モデル表示ツールバーにあるシリアル番号トグルをクリックします。

シリアル番号の変更

シリアル番号は自動的に作成順に割り当てられますが、後で番号を付け直すこともできます。原子のシリアル番号を付け直すには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer で、番号を変更する原子を選択します。
 2. 選択した原子を右クリックし、**Atom Serial Numbers**、**Hide Atom Serial Numbers** の順に選択します。
-  **注意:** Model Explorer は、シリアル番号が表示された状態でモデルが変更された場合、その変更内容に合わせてシリアル番号を更新することができません。このステップを実行しないと、ツリー コントロールとモデルの番号が一致しなくなります。その場合には、シリアル番号を一時的に非表示にしてから、再び表示してください。
3. **テキスト作成** ツールをクリックします。
 4. シリアル番号を付け直したい原子をクリックします。原子が選択され、テキスト ボックスが表示されます。
 5. テキスト ボックスにシリアル番号を入力します。
 6. Enter キーを押します。
 7. 番号を割り当て直した原子を右クリックし、**Atom Serial Numbers**、**Show Atom Serial Numbers** の順に選択します。原子の新しいシリアル番号が表示されます。
 8. 番号を割り当て直すすべての原子について、手順 4 ~ 7 を繰り返します。
- 他の原子に付いている番号と競合する番号が使用された場合は、競合する番号を持つ原子の番号も変更されます。
 - 別の原子を次の番号に付け直すには、変更したい次の原子をダブルクリックします。

複数の原子のシリアル番号を同時に変更するには、次の操作を行ってください。

1. **テキスト作成** ツールをクリックします。
2. Shift キーを押しながら、複数の原子を選択します。
3. テキスト ボックスに最初のシリアル番号を入力します。
4. Enter キーを押します。

通常、選択されている原子は元の番号の順に従って新しい番号が割り当てられます。ただし、最初に選択した 4 個の原子には、選択した順序で番号が割り当てられます。

原子の表示

Model Explorer を使って、モデル ウィンドウに表示される原子を制御できます。

原子または原子団を非表示にするには、任意のレベルで右クリックし、**Visibility** をポイントして **Hide...** (Atom Group など) をクリックします。非表示になった原子や原子団はツリー コントロールで括弧内に表示されます。

既定ではすべての階層レベルがその上のレベルの設定を継承するように設定されていますが、原子団を非表示にしてその中にある個々の原子は表示するように設定を変更することもできます。

原子の表示

非表示になっている原子団に属する原子を表示するには、原子を Model Explorer で右クリックし、**Visibility** をポイントして **Show** をクリックします。

すべての原子の表示

大きなモデルでは、原子や原子団が非表示になっていると作業がしづらくなります。非表示になっているすべての原子を表示するには、次の操作を行ってください。

1. ツリー コントロールで非表示になっている原子や原子団の上のレベルを選択するか、Shift キーを押しながらモデル全体をクリックします。
2. コンテキスト メニューの **Select** をポイントし、**Select All Children** をクリックします。
3. もう一度右クリックし、**Show** をポイントして **Inherit Setting** をクリックします。

原子記号

モデルの原子に記号を表示して、その原子が表す元素を明示できます。

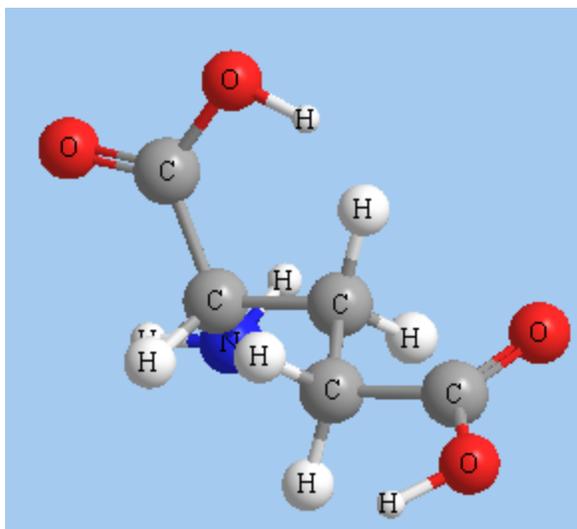


図 4.2: 原子記号が表示されたグルタミン酸

すべての原子に記号を表示するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- **View, Model Display, Show Atom Symbols** の順に選択します。

- モデル表示ツールバーにある原子記号アイコンをクリックします。
 - モデル ウィンドウの空白部分を右クリックし、コンテキスト メニューの **Show Atom Symbols** を選択します。
- 選択中の原子の元素記号を表示するには、次の操作を行ってください。

1. モデル ウィンドウで原子を選択します。

 **ヒント:** *Model Explorer* で原子を選択することもできます。Shift キーまたは Ctrl キーを押しながらリストから原子をクリックします。

2. 選択した原子のいずれかを右クリックします。コンテキスト メニューが表示されます。
3. **Atom Symbols** メニューの **Show Atom Symbols** をクリックします。

原子記号の外観を既定値に設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。
2. **Colors & Fonts** タブで、原子ラベルのフォント、ポイント サイズ、および色を選択します。
3. **Set as Default** をクリックします。現在モデル ウィンドウにあるすべての原子が、選択したオプションで表示されます。
4. **OK** をクリックします。

 **注意:** 既定の外観設定は、シリアル番号にも影響します。

モデルの回転

デフォルトでは、モデルを回転させると、モデル ウィンドウ内のすべてのオブジェクトが一緒に回転します。また、Chem3D にはオブジェクトの回転に関するさまざまなオプションが用意されています。各フラグメント（またはフラグメントの一部）を回転させたり、軸、特定の結合、二面角の結合を中心にオブジェクトを回転させたりできます。

自由回転

モデル全体を、任意の軸を中心に、任意の角度まで自由に回転できます。モデルを自由に回転させるには、次の操作を行ってください。

1. 回転 () ツールを選択します。
2. モデル ウィンドウ内の任意の部分をクリックしてドラッグします。

ステータス バーに X 軸と Y 軸の回転が表示されます。

フラグメントの回転

また、選択した 1 つ以上のフラグメントを回転することもできます。

1 つ以上のフラグメントを回転するには、次の操作を行ってください。

1. 回転したいフラグメントごとに、1 つの原子を選択します。
2. 回転ツールを選択し、Shift キーを押しながらモデル ウィンドウ内をクリックしてドラッグします。

軸回転

X、Y、Z 軸を中心にしてモデルを回転できます。これらの軸はモデル ウィンドウで定義します。ウィンドウの水平軸と垂直軸により、回転の X 軸と Y 軸が定義されます。Z 軸はウィンドウに対して垂直です。これらの軸は、表示の軸とモデルの軸とは無関係です（表示の軸とモデルの軸の詳細については、“オブジェクトの配置” ページ 24を参照してください）。

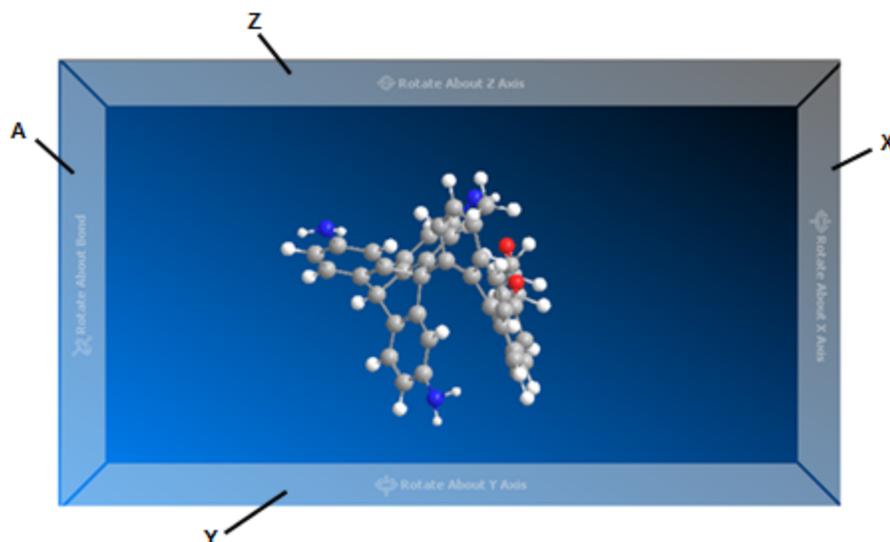


図 4.3: 回転バー。A) 結合回転バー、X) X 軸回転バー、Y) Y 軸回転バー、Z) Z 軸回転バー

X、Y、Z 軸のいずれかに沿ってモデルを回転させるには、次の操作を行ってください。

1. (オプション) **View**、**Model Display**、**Model Axes** の順に選択して、表示の軸を表示します。
2. 回転 (🌀) ツールを選択します。
3. モデル ウィンドウの端をポイントすると、回転バーが表示されます。
4. ポインタをクリックして、モデルを回転させる軸の回転バーに沿ってドラッグします。

ステータス バーに回転の角度が表示されます。

回転バーの非表示

回転バーは、デフォルトでは使用するときだけに画面に表示されます。この回転バーは、使用するときも含めて常に非表示にすることができます。

回転バーの非表示と表示を切り替えるには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックし、**GUI** タブを選択します。
2. 回転バーの表示と非表示を切り替えるには、**Show Mouse Rotation Zones** を選択するか選択解除します。
3. **Apply** をクリックし、**OK**をクリックします。

注意: 回転ツールを選択していれば、回転バーはたとえ非表示でもアクティブになっています。

結合を中心にした回転

結合を中心にしてモデルを回転するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを用いて結合を選択します。
2. 回転ツールを使用して、モデル ウィンドウの左側にある Rotate About Bond 回転バーに沿ってマウス ポインタをドラッグします。

回転ダイヤル

回転ダイヤルを使用すると、結合または二面角を中心とする回転の角度を指定して、モデルの異なる立体配座を作成できます。

回転ダイヤルを開くには、回転ツールの横にある矢印をクリックします。

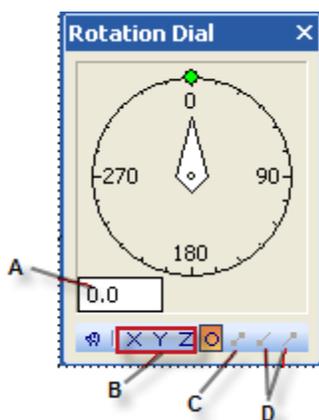


図 4.4: 回転ダイヤル: A) 角度表示ボックス、B) 座標軸を中心とした回転、C) ローカル軸（結合軸）を中心とした回転、D) 二面角の回転

二面角を中心とした回転

二面角を中心として回転するには、次の操作を行ってください。

1. 2 個または 4 個の隣接する原子を選択します。
2. 回転ダイヤルで、どちらかの二面角回転オプションを選択します。
3. 回転ダイヤルの角度表示ボックスに値を入力するか、ダイヤルをクリックして目的の角度までドラッグします。

ヒント: キーボード ショートカットの *Shift + B* キーと *Shift + N* キーを使用して、二面角回転でモデルのどの部分を移動するかを制御します。

モデルの向きを指定した軸に対して変更することができます。ただし、モデルを移動しても、原点 (0, 0, 0) は常にモデル ウィンドウの中央に置かれます。原点の変更については、“[選択部分を中央に表示](#)” ページ 25 を参照してください。

結合を中心にした回転

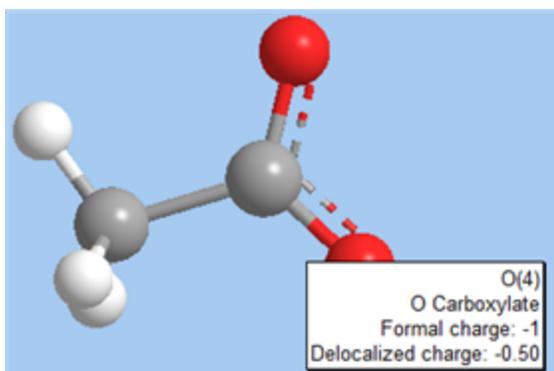
結合を軸にして回転するには、次の操作を行ってください。

1. 2 個の隣接する原子または 1 つの結合を選択します。
2. 回転ダイヤルで、ローカル軸オプションをクリックします。
3. 回転ダイヤルの角度表示ボックスに値を入力するか、ダイヤルをクリックして目的の角度までドラッグします。

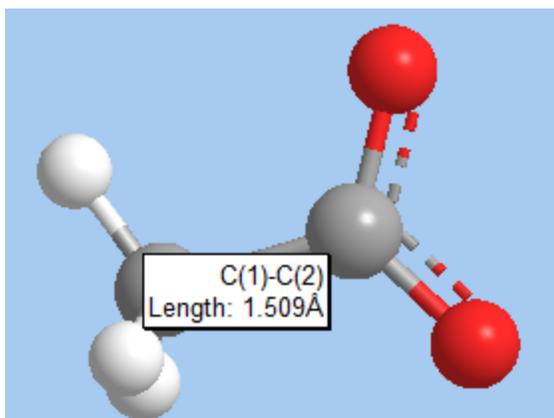
原子特性と結合特性

原子または結合をポイントすると、その特性がポップアップ ウィンドウに表示されます。

原子の例を次に示します。



次の例は、結合の場合です。



特性は原子ラベルで始まり、原子の場合は C(1)、結合の場合は C(1)-C(2) のようになります。表示するその他の情報を選択するには、File メニューの Preferences をクリックし、Popup Info タブを選択します。オプションについて、次に説明します。

Cartesian Coordinates. 原子の位置を、X、Y および Z 軸上の 3 つの数字で表示します。

Atom Type. Atom Types テーブルの最初の列のレコードに対応する原子タイプを表示します。

Internal coordinates. モデル内の原子の位置と角度を原点原子からの相対値として一覧表示します。

Measurements. 選択した 2 個の原子間の距離、選択した 3 個の原子で形成される角度、選択した 4 個の原子によって形成される二面角が表示されます。

Bond Length. 結合によって結ばれた 2 個の原子間の距離をオングストローム単位で表示します。

Bond Order. エネルギーの最小化、立体エネルギー、分子力学で計算される結合次数を表示します。

結合次数は通常、単結合の場合は Single、二重結合は Double、三重結合は Triple と表示されます。計算によって得られる結合次数には、上記以外の端数が出る場合があります。

 **注意:** MM2 カ場が計算されている場合には、必ず非局在化 pi システムの正確な結合次数が表示されます。

Partial Charge. 現在選択されている計算による部分電荷を表示します。

計算の選択方法については、“[表面タイプ](#)” ページ 65 を参照してください。

Group Name. 選択した原子が原子団の一部である場合は、原子団名が表示されます。

Show MM2 Bond Order Instead of Chem3D Bond Order. MM2 計算に基づいて結合次数を表示します。

Show Customized Atom Properties. Atom Property テーブルの列に表示される特性を表示します。Atom

Property テーブルを表示するには、**View, Atom Property Table** の順に選択します。列には、さまざまな方法 (MM2 エネルギー最小化の実行など) でデータが表示されます。

水素結合の表示

Chem3D では、水素結合と極性水素原子を検出して表示できるようになりました。Chem3D では、次の水素結合供与体と水素受容体が識別されます。

水素結合供与体:

- *-N-H
- *-O-H

水素結合受容体:

- 使用可能な孤立原子対を少なくとも 1 つ持つ酸素原子
- 使用可能な孤立原子対を少なくとも 1 つ持つ窒素原子

水素結合を表示するには、次の操作を行ってください。

- **View, Model Display, Show Hydrogen Bonds** の順に選択し、**Show Intermolecular** または **Show All** をクリックします。
- **File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Model Display** タブを選択します。**Hydrogen Bonds** ドロップダウン リストから、**Show intermolecular** または **Show All** を選択します。

水素結合は供与体水素と受容体原子を結ぶ点線で表されます。理想的な幾何学構造になっていない結合は青い色で表示されます。結合が理想的な構造から外れるほど色が濃くなります。

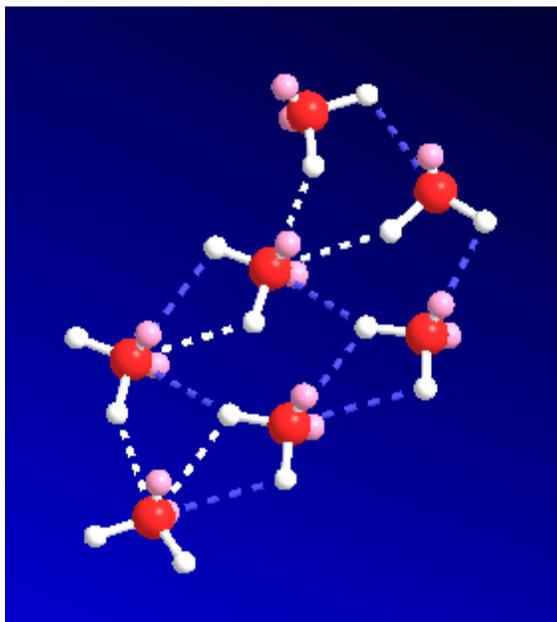


図 4.5: MM2 で最適化された水の水素結合

水素原子と孤立電子対のために独立の操作があり、極性水素（酸素や窒素に結合したもの）だけを表示することもできます。

水素原子と孤立電子対を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。Model Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Model Display** タブをクリックします。
3. **Hydrogen Atoms** ドロップダウン リストから、**Show All** をクリックします。
4. **Lone Pairs** ドロップダウン リストから、**Show** をクリックします。
5. **OK** をクリックします。

既定値では、巨大分子 PDB または mmCIF ファイルがロードされたときには、**Show Polar** が選択されます。

これらの表示モードは全体に有効なオプションですが、Model Explorer で特定の原子や原子団の表示モードを変更すれば、そちらが優先されます。

水素と孤立電子対

モデル内のすべての水素原子または孤立電子対を表示するには、**View** メニューの **Model Display** をクリックし、次のいずれかの操作を行います。

- **Show Hydrogen Atoms**、**Show All** の順にクリックします。
- **Show Lone Pairs**、**Show All** の順にクリックします。

モデルの移動

移動ツールを使用して、モデルのビューを縦向きおよび横向きに移動することができます。ウィンドウ内のオブジェクトは移動せず、モデルを表示する位置を変更するだけです（Web ブラウザでスクロールバーを使用する場合と同じです）。

モデルを移動するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーで移動ツール  を選択します。
2. モデル ウィンドウ内の任意の部分をクリックしてドラッグします。

移動ツールを使用してオブジェクトを移動することもできます。

1. モデル ウィンドウで 1 つ以上のオブジェクトを選択します。
2. Shift キーを押しながら、移動ツールを使用して、選択したオブジェクトをクリックしてドラッグします。

モデルの拡大縮小

拡大縮小ツール  を選択した状態で、モデル ウィンドウ内でクリックして垂直方向にドラッグすると、モデルのサイズが拡大または縮小されます。モデルの座標は変わりません。スクロール機能付きのマウスを使用している場合は、ホイールを使うこともできます。

モデルが表示されるウィンドウに合うように、モデルの縮尺を変更できます。

ウィンドウに合わせてモデルの縮尺を変更するには、**View**、**View Position**、**Fit to Window** の順に選択します。

 **注意:** *Fit* コマンドはモデルの縮尺のみに影響します。原子の半径や原子間距離は修正されません。

モデルをウィンドウに合わせる

変更を加えたときに、モデルのサイズを変更してモデル ウィンドウの中心に表示するかどうかを指定できます。

1. File メニューの **Model Settings** をクリックします。
2. **Model Building** タブで **Fit Model to Window** を選択し、**OK** をクリックします。

モデルの整列

モデルは、座標軸に沿って、または平面上に整列させることができます。

座標軸への整列

1 つのモデルに含まれる任意の原子を 2 つ選択し、X 軸、Y 軸、または Z 軸のいずれかに整列させることができます。原子は、同じ構造になっている必要はありません。

1. 座標軸を表示させるには、モデル表示ツールバーにある**モデルの軸ボタン** 、および**表示の軸ボタン**  を選択します。
2. 任意の原子を 2 つ選択します。
3. **Structure**、**Model Position**、**Align Model with (X、Y、または Z) Axis** の順に選択します。

選択した 2 つの原子が選択された軸に平行になるように向きを決めます。Align View (X、Y、または Z) Axis with Selection により、選択した原子に結合された軸が X 軸、Y 軸、または Z 軸と平行に整列されます (Z 軸は画面と直交、X 軸は左右、Y 軸は画面の上下の方向です)。

選択した原子を画面の向きに合わせるには、次の操作を行ってください。

1. 整列した原子が選択された状態であることを確認します (または再度選択します)。
2. View、View Position、Align View (X、Y、または Z) Axis with Selection の順に選択します。

たとえば、エタノールのモデルを終端が手前になるように表示するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールをクリックします。
2. Shift キーを押しながら C(1) と C(2) をクリックします。

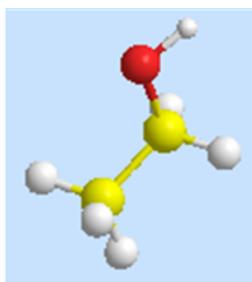
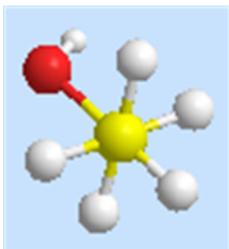


図 4.6: 整列のための原子を選択

3. View、View Position、Align View Z Axis With Selection の順に選択します。



平面への整列

定義する任意の直交座標にモデルを整列させることができます。モデルを平面に整列させるにはまず、最低 3 つの原子を選択して、平面を定義します。3 つ以上の原子を選択すると、選択した原子から平面までの平均距離が最も小さくなるように平面が計算されます (この面のことを通常、最良適合面といいます)。

モデルを平面に整列させるには、次の操作を行ってください。

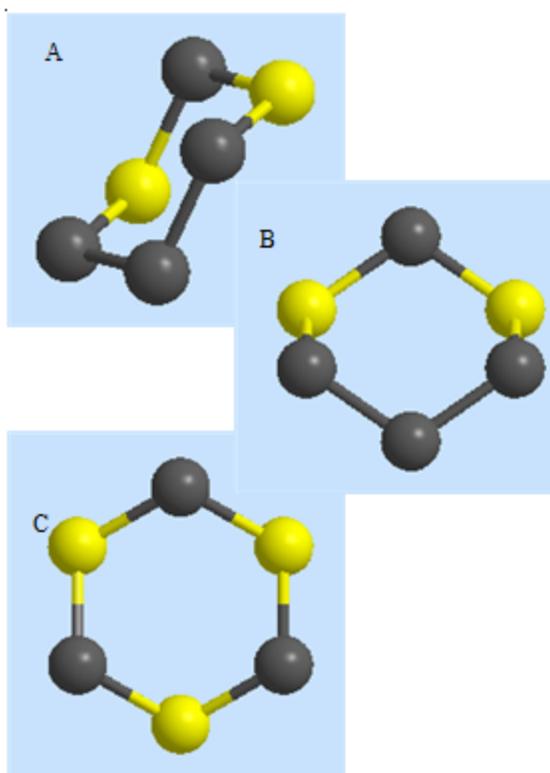
1. 3 個以上の原子を選択します。
2. Structure、Model Position、Align Model (平面を選択) With Selection の順に選択します。

算出された平面が、選択した平面 (X-Y、Y-Z、または X-Z) に平行になるように、モデルが回転します。

- 2 個の原子を座標軸に揃え、第 3 の原子で定義した平面を座標平面に揃えるには、次の操作を行ってください。

1. まず 2 個の原子を選択します。
 2. **View、View Position、Align View (軸を選択) With Selection** の順に選択します。
 3. Shift キーを押しながら、3 つ目の原子をクリックします。
 4. **View、View Position、Align View (平面を選択) With Selection** の順に選択します。
- たとえば、いす形シクロヘキサンを回転して、環の中の 3 個の原子を XY 平面に揃えるには、次の操作を行ってください。

1. 環の中の隣接しない 2 つの炭素原子を選択します。
2. **View、View Position、Align View X Axis With Selection** の順に選択します。
モデルは、図 B に示す位置に移動します。
3. 環の中の隣接していない 3 つ目の炭素原子を選択します。
4. **View、View Position、Align View X-Y Plane With Selection** の順に選択します。
モデルは、図 C に示す位置に移動します。

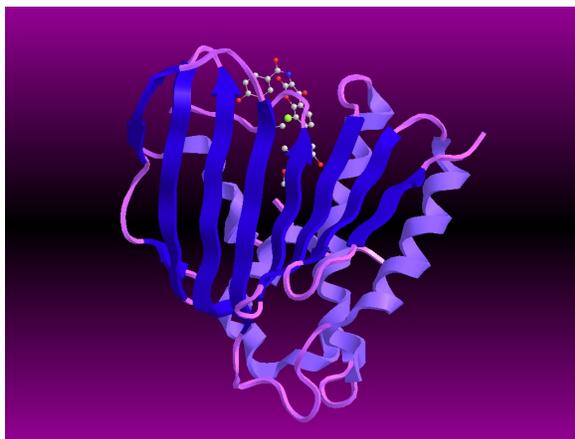


色の適用

色を使用してモデルに視覚的効果を追加することができます。また、色は、モデル フラグメント、官能基、表面、個々の原子を識別するための重要なツールでもあります。

背景のカスタマイズ

背景色を変更したり、背景を画像（会社のロゴなど）に置き換えたりすることができます。リボン形式のフルカラー表示には濃い色の背景が適していることが多いですが、印刷用には淡い色の背景の方が向いています。



背景をカスタマイズするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Background** タブを選択します。
2. 次のいずれかのオプションを選択します。
 - 背景色を変更するには、**Background Color** ドロップダウン リストから選択します。
 - 画像を挿入するには、**Background Picture** を選択してから、画像を変更するために **Transparency** オプションと **Position** オプションを選択します。
 - 既定の背景に戻すには、**Reset to Default** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

 **注意：** リボン表示を使用する場合を除き、背景色を *PostScript* ファイルに保存したり、印刷時に使用することはできません。

選択した原子の色分け

- 1 つ以上の原子の色を変更するには、次の操作を行ってください。
 1. 原子を選択します。
 2. 選択した原子を右クリックし、コンテキストメニューから **Color**、**Select Color** の順にクリックします。**Color** ダイアログボックスが表示されます。
 3. 色を選択し、**OK** をクリックします。原子の色が、新しく選んだ色に変わります。

モデル表示から原子の任意の色を取り消すには、次の操作を行ってください。

1. 表示色を変えたい原子を選択します。
2. 選択した原子を右クリックし、**Color**、**Apply Object Color**、**Inherit Object Color** の順に選択します。

モデルの色の表示

モデル表示に使用する色を設定するには、2 つの方法があります。Model Settings を使用する方法と、Model Display メニューを使用する方法です。

- Model Settings を使用して色を適用するには、File メニューの **Model Settings** をクリックし、**Colors & Fonts** タブを選択します。
- 色を一時的に変更するには、**View**、**Model Display**、**Color By** の順にクリックし、メニュー項目を選択します。

次の項目で色分けできます。

- Monochrome - 原子や結合がグレースケールで表示されます。
 - Chain
 - Element - 原子は、原子が表す元素の既定の色設定を継承します。
 - Group - 原子は、原子団に色が割り当てられている場合に、原子が所属する原子団に割り当てられた色を継承します。
 - Depth - 原子の色は、その Z 軸上の相対位置で決まります。
-  **注意:** *Monochrome* および *Chain* は、リボン形式またはアニメーション形式の表示モードでタンパク質を表示するときだけに使用できます。

元素ごとの色分け

元素ごとの色分けは、小さい分子に対する既定のモードです。既定の色は Elements テーブルに格納されています。

Elements テーブルで指定されている元素の色を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **View**、**Parameter Tables**、**Elements** の順に選択します。Elements テーブルが表示されます。
2. 元素の **Color** フィールドをダブルクリックします。Color ダイアログ ボックスが表示されます。
3. 使用する色を選択し、**OK** をクリックします。
4. テーブルを閉じて、保存します。

 **注意:** 新しい色を有効にするには、変更内容を保存する必要があります。

原子団ごとの色分け

モデル内の原子団（部分構造）ごとに、異なる色を割り当てることができます。

アクティブ モデル内で原子団の色を変えるには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer で原子団の名前を右クリックし、**Color**、**Select Color** の順に選択します。Color ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 使用する色を選択し、**OK** をクリックします。

部分構造ごとの色分け

モデル内の原子団が Substructures テーブル (substructures.xml) で部分構造として定義されている場合、その原子団に標準色を割り当てることができます。

色の割り当てや変更を行うには、次の操作を行ってください。

1. **View**、**Parameter Tables**、**Substructures** の順に選択します。
2. 色の割り当てを変更する部分構造に対応するセルを **Color** 列でダブルクリックします。Color ダイアログボックスが表示されます。
3. 色を選択し、**OK** をクリックします。
4. **Substructures** テーブルを閉じて保存します。

Substructures テーブルで色を割り当てると、原子団ごとに色を適用できるようになります。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。
2. **Colors & Fonts** タブを選択します。
3. **Color by** セクションで **Group** を選択します。モデル内の各原子がそれぞれの原子団の色で色分けされます。

 **注意:** *Color by Group* は、リボン形式とアニメーション形式の表示モードの場合にのみ表示されます。

部分電荷による色分け

部分電荷により色分けをする場合、負の部分電荷が大きい原子は濃い青色になります。正の部分電荷が大きい原子は濃い赤で表示されます。部分電荷が 0 に近づくとつれて色が淡くなります。部分電荷が 0 の原子は白く表示されます。

部分電荷は、Extended Hückel、MOPAC、または Gaussian 計算により求められます。計算を行っていない場合、原子の部分電荷は 0 です。

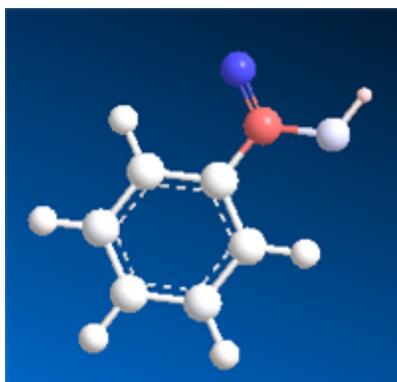


図 4.7: 部分電荷による色分け

Model Explorer

Model Explorer により複雑なマクロ分子も含めてすべてのモデルの構造を簡単に調べることができ、また表示特性も階層レベルごとに変更できます。Model Explorer には、モデル ウィンドウ内のすべての構造式、そこに含まれる原子、定義した構造的特徴（タンパク質活性部位など）が表示されます。

Model Explorer を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **Model Explorer** をクリックします。

表示特性としては次のものを指定できます。

- 表示モード（ボール & スティックやワイヤ フレームなど）
- 各フラグメントの表示設定
- 各フラグメントの原子の色

原子レベルでは、次の要素の表示/非表示を切り替えられます。

- 原子球
- 原子ドット
- 元素記号
- シリアル番号

2. **View** メニューの **Structure Browser** を選択して、フラグメントの追加や削除を行います。

Model Explorer のオブジェクト

Model Explorer には、モデルのすべてのオブジェクトが表示されます。モデルが複数の構造式で構成される場合、各構造式は、子オブジェクトに結合と原子を持つフラグメントとして定義されます。各オブジェクトは一連の特性を持っています。この特性には、親オブジェクトに対する所属関係も含まれます。

Model Explorer を使用してオブジェクトをグループ化し、特性を割り当てることができます。グループ化されたオブジェクトは、モデルで隣接オブジェクトにする必要はありません。また、同じ構造式に含める必要もありません。詳細については、[グループ](#)を参照してください。

 **注意:** Model Explorer を表示するには、**View** メニューの **Model Explorer** をクリックします。

デフォルトの設定では、オブジェクトのすべての特性はその親から継承されます。したがって、特に変更しない限りは、親オブジェクトの特性が子オブジェクトに継承されます。子オブジェクトの特性を変更すると、モデルの調べたい部分を可視化することができます。

Model Explorer は次のような作業に使用します。

- オブジェクトの定義
- グループへのオブジェクトの追加
- オブジェクトの名前変更
- オブジェクトと内容の削除、オブジェクトのみの削除

Model Explorer に表示される各オブジェクト タイプの詳細は次のとおりです。

原子

Model Explorer 内の原子オブジェクトは、モデル内の原子を表します。原子を、その原子を含むフラグメントの外へ移動することはできません。原子または原子団をフラグメントから削除すると、モデル本体が変更されます。

結合

結合オブジェクトは Model Explorer のデフォルト設定では表示されません。結合を表示するには、**File** メニューの **Preferences** をクリックします。GUI タブで、**Show Bonds** を選択します。

フラグメント

モデル ウィンドウに表示される各構造式は、Model Explorer ではフラグメントとして表示されます（イオンは複数のフラグメントとして表示される場合があります）。Model Explorer のフラグメント リストを展開すると、フラグメントに含まれている原子が表示されます。フラグメントは、モデルの最上位レベルの親オブジェクトを表し、通常は構造式全体を表します。モデルが複数の構造式で構成される場合、Model Explorer には各構造式のフラグメントが表示されます。フラグメントはモデルの分かれた各部を表すので、1 つのフラグメントで原子を開始した場合、一連の結合をたどって別のフラグメント内にある原子に接続することはできません。このような 2 原子間に結合を追加すると、Chem3D は階層構造をなくして平らにし、1 つのフラグメントを作成します。フラグメント オブジェクトは通常、鎖と原子団から構成されますが、個別の原子や結合も含まれる場合があります。

PDB ファイルの結合鎖

結合鎖は PDB ファイルに指定されている特殊な原子団です。Chem3D では結合鎖と原子団が同じ機能を果たします。原子団を結合鎖として名前を付け直したり、結合鎖を原子団として名前を付け直すと、それに応じてアイコンが変わります。Group メニューのすべてのコマンドは鎖に適用されます。

溶媒

溶媒オブジェクト グループには、モデル内のすべての溶媒分子が含まれます。個々の原子は、溶媒オブジェクト内にある子原子団として表示されます。溶媒オブジェクトは他のオブジェクトの子となることはできません。

 **注意:** PDB 分子を読み込むと、溶媒が鎖内に表示されることがあります。Chem3D では、PDB ファイルを再び保存するためにこの構造が維持されます。

骨格構造

骨格構造オブジェクトは、タンパク質の炭素と窒素の骨組みを表示するために用意されているオブジェクトです。Model Explorer では、子を持たない個別のオブジェクトとして表示されます。骨格構造を構成する原子と結合は、他の鎖や原子団に所属していると同時に、骨格構造オブジェクトの子でもあります。そのため、骨格構造の表示特性を選択して、階層ツリーでその親にあたる鎖や原子団の表示特性を上書きすることができます。

オブジェクトの非表示

Model Explorer のリストに表示される各オブジェクトの隣には、色分けされたアイコンがあります。色は、オブジェクトの表示状態を表します。

- 緑: 原子は表示されています。
- 赤: フラグメント（または原子）は非表示ですが、存在しています。
- 青: フラグメント（または原子）の表示状態は、親原子団または親フラグメントから継承されています。

フラグメントや原子の非表示または表示を変更するには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer でフラグメントまたは原子を選択します。
2. コンテキスト メニューで **Visibility** をポイントし、適切なオプションを選択します。
 - **Inherit Settings**
 - **Show Fragment**（または **Atom**）
 - **Hide Fragment**（または **Atom**）

オブジェクトの選択

Model Explorer を使って、次のような複数の方法で原子や結合を選択できます。

- 原子または結合を 1 つ選択する。
- 複数の原子を選択する（一度に 1 原子ずつ）。
- 原子団を定義し、その原子団を選択する。
- 距離または半径に基づいて原子や原子団を選択する。

Model Explorer で原子を 1 つ選択するには、その原子をクリックします。複数の原子を選択するには、Shift キーまたは Ctrl キーを押しながらクリックします。

選択していた原子や結合の選択を解除するには、Ctrl キーを押しながら Model Explorer でその原子をクリックします。

距離による選択

選択したオブジェクトの原子や原子団の近くにある原子や原子団を選択することができます。この機能は、タンパク質の結合部位を強調表示するときに特に便利です。

距離によって原子や原子団を選択するには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer を使って原子やフラグメントを選択します。
2. 選択したオブジェクトを右クリックします。コンテキストメニューの **Select** をポイントし、適切なオプションをクリックします。
 - **Select Atoms within Distance of Selection**: 現在選択している部分から指定の距離内にある原子がすべて選択されます。
 - **Select Groups within Distance of Selection**: 現在選択している部分から指定の距離内にある 1 つ以上の原子が含まれている原子団がすべて選択されます。
 - **Select Atoms within Radius of Selection Centroid**: 現在選択している中心から指定の距離内にある原子がすべて選択されます。
 - **Select Groups within Radius of Selection Centroid**: 現在選択している中心から指定の距離内にある 1 つ以上の原子が含まれている原子団がすべて選択されます。

 **注意**: ただし、既に選択された原子や原子団は含まれません。また、複数選択を使用しない限り、現在の選択は選択解除されます。複数選択は Shift キーを押しながら行います。

オブジェクトの色の選択

デフォルトでは、すべての原子に Elements テーブルで定義された色が割り当てられています。Model Explorer では、選択範囲の強調表示色をフラグメントや原子団ごとに指定できます（このとき、Elements テーブルで定義された色は、変更されません）。

Model Explorer で、オブジェクトのデフォルトの色をカスタム色に変更できます。

- カスタム色を選択するには、オブジェクトを右クリックし、Color メニューの **Select Color** をクリックします。

- デフォルトの色に戻すには、Model Explorer でオブジェクトを右クリックして、**Color**、**Apply Atom Color**、**Inherit Atom Color** の順に選択します。
- もう一度カスタム色を選択するには、オブジェクトを右クリックして、**Color**、**Apply Atom Color**、**Apply Atom Color** の順に選択します。

原子団

Model Explorer では、モデル内の複数の原子を選択して、それらを 1 つのリストにグループ化できます。原子団を作成すると、原子を個別に選択しなくても、その原子団のすべての原子に色を付けたり、非表示にしたり、表示モードを変更したりすることができます。原子団を利用して、タンパク質の活性部位のようなモデルの特定部分を視覚効果のために強調表示できます。原子団のオブジェクトはモデルの中で互いに結び付いている必要はなく、これらのオブジェクトは他の原子団、原子、結合で構成されることがあります。

原子団を作成するには、次の操作を行ってください。

1. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - Model Explorer で、Ctrl キーを押しながら、原子団に含める原子を選択します。
 - モデル ウィンドウで、Shift キーを押しながら、原子団に含める原子を選択します。
2. Model Explorer で、選択対象を右クリックし、コンテキスト メニューの **New Group** を選択します。
3. (任意) 新しい名前を入力して原子団の名前を変更します。

原子団の選択

原子団を選択するには、Model Explorer で原子団をクリックします。

原子団の展開

原子団を展開または折り畳むには、原子団の + アイコンまたは - アイコンをクリックします。

原子団へのオブジェクトの追加

下位レベルのオブジェクトを既存の原子団に追加したり、原子団を組み合わせる新しい原子団を形成することができます。

原子団にオブジェクトを追加するには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer で、原子団に追加するオブジェクトを選択します。連続した複数のオブジェクトを選択するには Shift キー、連続していない複数のオブジェクトを選択するには Ctrl キーを押しながらクリックします。
2. 選択対象を右クリックし、コンテキスト メニューから **New Group** を選択します。
3. 必要に応じて原子団の名前を変更します。

 **注意:** このときオブジェクトの選択順序が重要となります。オブジェクトの追加先となる原子団や鎖は最後に選択してください。

原子団の削除

オブジェクトやモデルに影響を与えずに原子団を削除できます。また、原子団とその中のすべてのオブジェクトを削除することもできます。

- **Delete Group to** をオンにすると、原子団を削除した後もその内容は残ります。

- **Delete Group and Contents to** をオンにすると、原子団はモデルから削除されます。

原子団の色分け

原子団ごとに色分けしてモデルをわかりやすく表示することもできます。Model Explorer で変更した原子団の色は、Elements テーブルと Substructures テーブルで指定されている標準の色設定を上書きします。

原子団の色を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 原子団を 1 つ以上選択します。
2. 選択した原子団を右クリックし、コンテキスト メニューから **Color**、**Select Color** の順に選択します。Color ダイアログ ボックスが表示されます。
3. 色を選択し、**OK** をクリックします。

既定の色設定に戻すには、次の操作を行ってください。

1. 原子団を 1 つ以上選択します。
2. 選択範囲を右クリックします。
3. コンテキスト メニューで **Color**、**Apply Group Color** の順にクリックし、**Inherit Group Color** を選択します。

既定値へのリセット

変更内容を元に戻すには、コンテキスト メニューから **Reset Children to Default** コマンドを使用します。

原子団ラベル

原子団を作成するときは、Model Explorer では汎用名を使用して原子団が表示されます。名前は変更してモデルウィンドウに表示することができます。

原子団のラベルを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **Model Explorer** をクリックします (Model Explorer が開かれていない場合)。
2. Model Explorer のリストで、原子団を右クリックします。
3. コンテキスト メニューの **Group Labels** を選択し、目的のオプションを選択します。

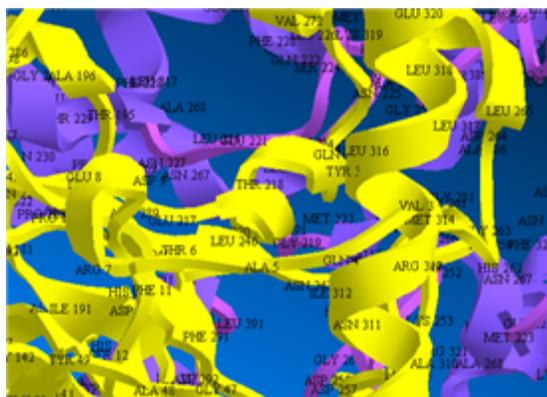


図 4.8: 原子団ラベル

原子団ラベルの表示

モデルに原子団ラベルを表示できます。

1. ラベルを表示するには、Model Explorer で原子団名を右クリックし、コンテキストメニューの **Group Labels** をクリックします。
2. 以下のいずれかのオプションを選択します。
 - **Inherit Settings**: 親の原子団が表示されるとラベルが表示されます。
 - **Show Group Label (this group and children)**: 原子団と子の原子団を表示します。
 - **Show Group Label (this group only)**: この原子団のみを表示します。子の原子団には影響しません。
 - **Hide Group Label (this group and children)**: この原子団と子の原子団を非表示にします。

オブジェクトの移動

オブジェクトを原子団にまとめて、原子団の内外でオブジェクトを移動することができます。この機能が役に立つのは、モデルの複数の部分を強調表示にしたり、属性を割り当てたりするときです。

- オブジェクトを移動するには、オブジェクトをクリックして別の原子団にドラッグします。
- 複数のオブジェクトを移動するには、先に Ctrl キーまたは Shift キーを押しながらオブジェクトをクリックして選択します。

オブジェクトの入れ子

オブジェクトを他のオブジェクト内に収めることもできます。たとえば、DNA フラグメントに 2 つのヘリックス原子団がある場合に、さらにこの原子団に核酸の原子団を収めることもできます。

オブジェクトを移動するときは、以下の点に注意してください。

- フラグメント間でオブジェクトをクリックとドラッグで移動することはできません(たとえば、原子を分子間で移動することはできません)。
- 原子団の中で原子を並べ替えることはできません。

フラグメントの表示モード

Model Explorer を使用して、1 つ以上のフラグメントの表示モードを変更できます。

1. Model Explorer でフラグメントを選択します。
2. Model Explorer ウィンドウを右クリックします。
3. **Display Mode** から表示モード オプションを選択します。

詳細については、“[表示モード](#)” ページ 36を参照してください。

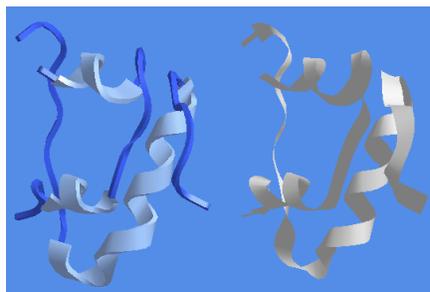


図 4.9: Model Explorer のアニメーション形式 (左) とリボン形式 (右) の表示モード

Structure Browser: フラグメントの追加と削除

Model Explorer から Structure Browser にフラグメントを追加したり、Structure Browser のフラグメントを削除したりすることができます。Structure Browser に追加したフラグメントは、モデル ウィンドウに表示されます。

Structure Browser にフラグメントを追加するには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer をまだ開いていない場合は、**View** メニューの **Model Explorer** をクリックします。
2. Model Explorer で、Structure Browser に追加するフラグメントを右クリックします。
3. コンテキスト メニューの **Add to Structure Browser** をクリックします。

Structure Browser からフラグメントを削除するには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer をまだ開いていない場合は、**View** メニューの **Model Explorer** をクリックします。
2. Model Explorer で、Structure Browser から削除するフラグメントを右クリックします。
3. コンテキスト メニューの **Remove from Structure Browser** をクリックします。

Structure Browser でフラグメントを除外する

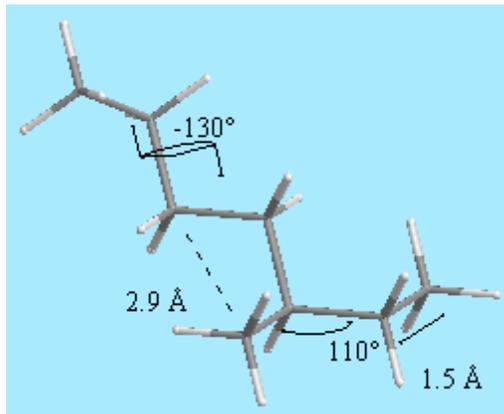
Model Explorer では、Structure Browser でフラグメントを排他的に使用可能にすることができます。Model Explorer で 1 個以上のフラグメントを選択して、そのフラグメントを Structure Browser で排他的にすることができます。Structure Browser でフラグメントを排他的にした場合、Structure Browser ではその項目しか使用できません。

Structure Browser でフラグメントを排他的にするには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer をまだ開いていない場合は、**View** メニューの **Model Explorer** をクリックします。
2. Model Explorer で、Structure Browser で排他的にするフラグメントを右クリックします。
3. コンテキスト メニューの **Make exclusive in Structure Browser** をクリックします。

分子の測定

原子間の距離、結合角、二面角をモデル ウィンドウに表示できます。ここでは、個々の測定を表示する方法について説明します。モデルにすべての測定を表示する方法については「[Measurement テーブル](#)」を参照してください。



原子間の距離を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 原子を選択します。原子は、結合を共有する必要はありません。
2. **Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。

✔ **ヒント:** または、2 つの原子を選択し、選択した原子の 1 つの上にカーソルを移動します。ポップアップウィンドウに距離が表示されます。

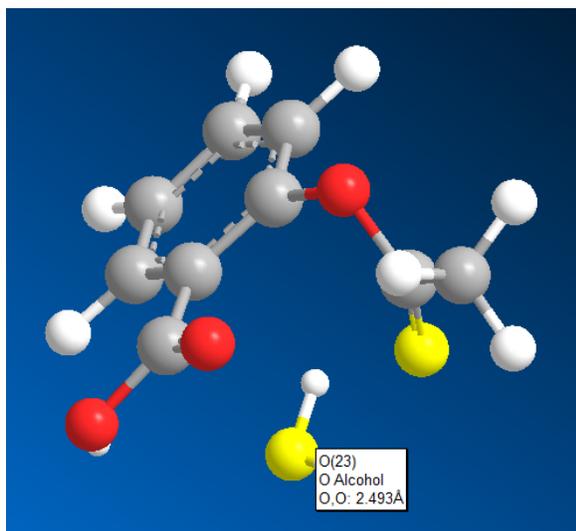


図 4.10: ポップアップ ウィンドウに、別々のフラグメント内にある原子間の距離が表示されます。

2 つの結合の間の角度を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 2 つの隣接する結合または 3 つの隣接する原子を選択します。
2. **Structure、Measurements、Display Bond Angle Measurements** の順に選択します。

二面角を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 二面角を構成する 3 つの連続する結合または 4 つの連続する原子を選択します。
2. **Structure**、**Measurements**、**Display Dihedral Measurement** の順に選択します。

デフォルトで、モデル ウィンドウ内の測定は、小数点以下の桁数が 1 桁で表示されます。測定値を調整するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **Preferences** ダイアログ ボックスで **Measurements** タブを選択します。
3. **Display decimal places** スクロール ボックスで、測定値に表示する小数点以下の桁数を選択します。
4. 設定が完了したら、**OK** をクリックします。

 **注意:** 選択した測定の表示値は、モデル ウィンドウでのみ値に影響します。

Measurement テーブル

Measurement テーブルには、生成したモデルのすべての測定値をまとめたリストが表示されます。必要な測定値を生成したら、モデルに表示されるように測定値をテーブルから選択できます。Measurement テーブルを開くには、**View** メニューの **Measurement Table** をクリックします。

	Display	Atoms	Actual (°/Å)	Optimal (°/Å)
A	<input type="checkbox"/>	C(2)-H(8)	1.1130	1.1130
	<input type="checkbox"/>	C(2)-H(7)	1.1130	1.1130
	<input type="checkbox"/>	C(2)-H(6)	1.1130	1.1130
	<input type="checkbox"/>	C(1)-H(5)	1.1130	1.1130
	<input type="checkbox"/>	C(1)-H(4)	1.1130	1.1130
	<input type="checkbox"/>	C(1)-H(3)	1.1130	1.1130
	<input type="checkbox"/>	C(1)-C(2)	1.5230	1.5230
B	<input type="checkbox"/>	H(8)-C(2)-H(7)	108.8118	109.0000
	<input type="checkbox"/>	H(8)-C(2)-H(6)	109.0000	109.0000
	<input type="checkbox"/>	H(8)-C(2)-C(1)	110.0000	110.0000
	<input type="checkbox"/>	H(7)-C(2)-H(6)	109.0000	109.0000
	<input type="checkbox"/>	H(7)-C(2)-C(1)	110.0000	110.0000
	<input type="checkbox"/>	H(6)-C(2)-C(1)	110.0000	110.0000

図 4.11: Measurement テーブル:A) 結合距離、B) 結合角

1. 測定値を生成するには、**Structure**、**Measurements**、**Generate All** (**Bond Lengths**、**Bond Angles**、**Dihedral Angles**、または **Close Contacts**) の順に選択します。Measurement テーブルが表示されます。
2. モデル ウィンドウに測定値が表示されるようにするには、対応する **Display** チェック ボックスをオンにします。

 **注意:** テーブル内で測定値を変更することもできます。“測定値の設定” ページ 80を参照してください。

最適化されたデータ

最適値は、Clean Up Structure コマンドなどを実行する際、標準のデータの代わりにいつでも使用できます。最適値データは Measurement テーブルが表示されているときのみ使われます。いったん Measurement テーブルを閉じると、標準データがパラメータ テーブルから適用されます。データの最適値を指定するには、Optimal 列の値を編集します。

Chem3D は Align コマンドでも最適値を使用します。Structure メニューの Align を選択すると、一方のフラグメントを他方との関係を正確に保ちながら移動することで、2 つのフラグメントの原子間の実際の距離が最適値に調整されます。

測定値の削除

モデルに影響を与えずに、Measurement テーブルから情報を削除することもできます。Structure、Measurements、Clear の順に選択します。

原子座標の表示

座標テーブルには、モデル内の各原子の位置が表示されます。Internal coordinate (内部座標) テーブルには、原子の位置が別の原子との相対位置で表示されます。Cartesian (直交) テーブルには、原子の X、Y、および Z 座標が空間の固定位置との相対位置で表示されます。

Cartesian テーブルを表示するには、View メニューの Cartesian Table をクリックします。

内部座標 (Z-Matrix 座標)

Internal coordinates テーブルの最初の原子が原点原子になります。テーブル内の他のすべての原子は、原点原子との相対位置で示されます。

Internal coordinates テーブルを表示するには、View メニューの Internal coordinates Table をクリックします。

テーブル内のレコードを選択すると、モデル内の対応する原子が選択されます。逆に、モデル内の原子を選択すると、それに対応するレコードがテーブル内で選択されます。

原点原子にする原子を変更するには、Structure、Set Internal Coordinates、Set Origin Atom の順に選択します。

直交座標

Cartesian Coordinates テーブルの各フィールドには、原子名とその原子の X、Y、Z の各座標が表示されます。原子はシリアル番号順に表示されます。1 つのフラグメントを構成する原子のレコードは、連続して表示されます。水素、孤立電子対、ダミー原子は、最後に表示されます。

他のテーブルと同様に、このテーブルでも値を編集すると、モデルが更新されて変更が反映されます。

Cartesian Coordinates テーブルを表示するには、View メニューの Cartesian Table をクリックします。

オーバーレイによるモデルの比較

オーバーレイ機能を使って分子を重ね合わせて配置できます。この機能が役立つのは、構成要素の異なる 2 つのモデルの構造上の類似性を比較する場合や、同じモデルの立体配座を比較する場合です。

たとえば、メタンフェタミンとエピネフリンの構造的な類似性を比較するとします。

1. File メニューの New をクリックして、新しいモデル ウィンドウを開きます。
2. テキスト作成ツールを選択し、モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. テキスト ボックスに「Epinephrine」と入力し、Enter キーを押します。エピネフリン分子がモデル ウィンドウに表示されます。
4. モデル ウィンドウで、エピネフリン分子の下方をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。

- 「Methamphetamine」と入力し、Enter キーを押します。メタンフェタミンの分子が、エピネフリン分子の下に表示されます。

この 2 つの構造式を作成した後で、オーバーレイを適用するのに使用する原子対を 3 つ以上指定する必要があります。それぞれの対は、各構造式から選択した原子 1 つずつで構成します。

 **注意:** 原子対は、一定の距離を置いて別々のフラグメント内に存在する 2 つの原子で構成されます。

- 1 つ目の原子対には、エピネフリン フラグメントとメタンフェタミン フラグメントのベンゼン環の第三級炭素を選択します（選択ツールを使用して、Shift キーを押しながら両方の原子をクリックします）。
- Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。Measurement テーブルに選択した 2 つの原子間の距離が表示されます。
- 2 つ目の原子対には、それぞれの構造式で、1 つ目の原子対で選択した炭素原子の反対側の炭素を選択します。
- Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。
- 3 つ目の原子対には、各構造式の窒素原子を選択します。
- Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。

原子対を定義した後で、各原子対の Distance Measurement を 0 に設定してからオーバーレイ計算を実行することで、一方の構造式をもう一方の構造式にオーバーレイします。

- Measurement テーブルで各原子対の **Optimal** 列に「0」と入力し、Enter キーを押します。

Measurement				
	Display	Atoms	Actual (°/Å)	Optimal (°/Å)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	C(1)-C(2)	1.5230	0.0000

図 4.12: Measurement テーブルへの最適値の追加

- Structure、Overlay、Minimize** の順に選択します。Overlay ダイアログ ボックスが表示されます。
- Minimum RMS Error** に「0.100」、**Minimum RMS Gradient** に「0.010」と入力します。

RMS Error が Minimum RMS Error の値より小さくなるか、RMS Gradient が Minimum RMS Gradient の値より小さくなると、オーバーレイ計算が終了します。

- Display Every Iteration** をクリックします。
- Start** をクリックします。

オーバーレイ計算が完了するたびに、各フラグメントの動きを表示することができます。

あらかじめ設定されたミニマムに達する前にオーバーレイ計算を停止するには、ツールバーの **Stop Calculation** をクリックします。オーバーレイと記録の処理が停止します。

分子表面

分子表面には、構造の表示により提供される原子と結合の情報ではなく、分子全体に関する情報が表示されます。

表面の表示では分子の物理的特性や化学的物性がわかります。これらの表示は外側の表面インターフェイスや分子

の電子分配を示します。

ほとんどの場合、分子表面を表示する前に、Extended Hückel または Gaussian で使用可能な方法のいずれかを使って表面の記述に必要なデータを計算しなければなりません。

Solvent Accessible Surface については、計算の必要はありません。この表面は、パラメータ テーブルのデータに基づいてレンダリングされます。

表面タイプ

次の表は、表面タイプとその表示に必要な計算を示します。

 **注意:** スピン密度マップでは、開殻系の波動関数を用いて MOPAC または Gaussian 計算を実行する必要があります。

表面タイプ	Extended Hückel	MOPAC	Gaussian
溶媒アクセス可能	該当なし	該当なし	該当なし
コノリー分子	はい	はい	はい
総電荷密度	はい	はい	はい
分子軌道のマップ	はい	はい	はい
スピン密度のマップ	いいえ	はい	はい
部分電荷	はい	はい	はい
分子静電位のマップ	いいえ	いいえ	はい
総スピン密度	いいえ	はい	はい
分子静電位	いいえ	いいえ	はい
分子軌道	はい	はい	はい

分子表面を表示するには、次の操作を行ってください。

1. Extended Hückel または Gaussian のうち、適した方法を使って計算を実行します。
2. **Molecular Surfaces** の特性計算を使用できる場合は、これも必ず含めます。

 **注意:** Gaussian による表面計算は、Chem3D のみで使用できます。

計算タイプ

計算タイプによって異なる結果が得られます。モデル上で複数の計算 (Extended Hückel と AM1 計算の両方など) を実行した場合、表面の生成にどの計算結果を使用するかを選択する必要があります。

計算タイプを選択するには、次の操作を行ってください。

1. **Surfaces** メニューの **Choose Calculation Result** をクリックし、いずれかの計算タイプを選択します。

2. **Surfaces** メニューの **Choose Surface** をクリックし、いずれかの表面タイプを選択します。

 **注意:** *Choose Surface* コマンドは、表示/非表示を切り替えるスイッチです。クリックすると表示され、再度クリックすると非表示になります。一度に複数の表面を表示することができます。表面が表示されると、そのアイコンが強調表示されます。

3. 表面表示ツールを使って表示を調整します。

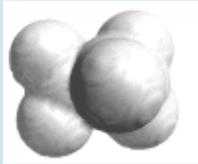
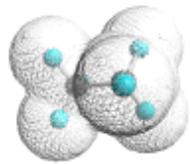
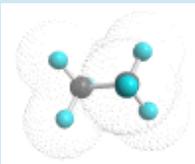
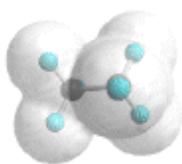
 **ヒント:** 表示に関して多くの調整が必要な場合は、表面ツールバーをアクティブにして、よく使用する特定のツールを切り離してください。

すべての表面をすべての計算で表示できるわけではありません。たとえば、分子静電位のある表面は、Gaussian 計算のみで表示できます。表示できない表面は、サブメニューのコマンドがグレー表示されます。

MOPAC または Gaussian から表面を生成するには、プログラムによって計算される特性の 1 つとして、Molecular Surfaces を選択する必要があります。

表面表示タイプ

Chem3D はそれぞれ異なった特性を持つ 4 つの形式の表面表示を提供します。次の表で、これらの形式について示します。

表面表示タイプ	説明
純色 (Solid) 	表面の表示は不透明です。単色は、表面自体の詳細に関心があり、その下にある原子と結合には特に関心がない場合に適したオプションです。
ワイヤ メッシュ (Wire Mesh) 	表面は線が接続された網目状で表示されます。ワイヤ メッシュは、表面の特徴に注目しながら、原子と結合の構造も表示させたい場合に適したオプションです。
ドット (Dots) 	表面はつながりのない一連のドットとして表示されます。ドットは、主に基本的な構造に関心があり、表面形状は概要だけわかればよいという場合に適したオプションです。
半透明 (Translucent) 	表面は半透明の単色球として表示され、その中にある原子と結合も見ることができます。半透明は、表面表示形式としてはバランスの取れたものといえます。

表面解像度

表面解像度によって、表面がどれくらい滑らかに表示されるかが決まります。解像度が高いほど、より多くのポイントが表面の計算に使われ、表面はより滑らかに見えます。ただし、解像度値を高くすると計算時間も長くなります。既定値 30 は、処理速度と滑らかさの両方を考慮した適切な値です。

解像度を設定するには、次の操作を行ってください。

1. **Surfaces** メニューの **Resolution** をクリックします。**Resolution** スライダが表示されます。
2. スライダを使って解像度を調整します。

指定した解像度は、**Resolution** ツールの下中央に表示されます。

表面の色

表面のタイプに応じて、分子表面の色を設定します。

溶媒接触、コノリー分子、総電荷密度の各表面に色を設定するには、**Surfaces**、**Color Mapping**、**Surface Color** の順に選択して、新しい色を選択します。

総スピン密度、分子静電位、分子軌道の各表面では、2 つの色を指定する必要があります。**Surfaces** メニューの **Color A** または **Color B** を選択します。

表面のマッピング

Mapping property により、原子、原子団、疎水性、部分電荷、静電位を溶媒接触表面上に重ね合わせる形で色分けして表示できます。

Surface Color. 分子表面色に選択した色です。

Atom Color. 表示された原子の色に基づいています。これはデフォルトの元素の色である場合もあります。

Element Color. Elements テーブルで指定されたデフォルトの色に基づいています。

Group Color. Model Explorer で原子団の作成中に指定した色がある場合にはそれに基づいています。

疎水性 (Hydrophobicity). アミノ酸の疎水性に端を発して広く使われている色分けに従って表示されます。この色分けでは、疎水性が最も高い（親油性の）部分が赤で、疎水性が最も低い（疎油性の）部分が青で表示されます。

部分電荷と静電位（部分電荷から）. これらの特性は現在選択している計算から得ることができます。複数の計算をモデルで行った場合、使用する計算を指定できます。**Surfaces** メニューの **Choose Result** をクリックします。

同値

同値は表面の形成に使用される定数です。それぞれの表面の特性により、スペースの中で値を計算することができます。たとえば、静電位は分子の各原子に近い場合は高く、遠くの場合はきわめて低くなります。Chem3D では、スペースの中で同値を持つすべてのポイントを接続することにより表面が生成されます。天気図は 2 次元における同値の良い例で、等しい温度（等温線）か等しい気圧（等圧線）の位置を接続します。同値には 2 つのタイプがあり、どちらを選択するかはどの表面を選択するかで決まります。総電荷密度表面の場合は同電荷値を設定し、分子軌道表面の場合は同輪郭値を設定します。

同値の設定. 同値を設定するには、次の操作を行ってください。

1. **Surfaces** メニューの **Choose Surface** をクリックし、表面タイプを選択します。
2. **Surfaces** メニューの **Iso**、**contour** または **Iso, charge** を選択します。
3. スライダを使って新しい同値を調整します。

指定した同値は、Isocontour ツールの下中央に表示されます。

溶媒半径

スライダを使って溶媒半径を設定することができます。デフォルト溶媒半径は 1.4 Å で、これは水の値です。その他の一般的な溶媒半径を以下の表に示します。

溶媒	半径 (Å)
水	1.4
メタノール	1.9
エタノール	2.2
アセトニトリル	2.3
アセトン	2.4
エーテル	2.4
ピリジン	2.4
DMSO	2.5
ベンゼン	2.6
クロロホルム	2.7

溶媒半径を設定するには、次の操作を行ってください。

1. **Surfaces** メニューの **Solvent Radius** をクリックします。**Radius** スライダが表示されます。
2. スライダを使って解像度を調整します。

指定した半径は、**Radius** ツールの下中央に表示されます。

Extended Huckel

Extended Hückel は基本的な半経験的方法で、ほとんどの分子のモデル表面をすばやく生成するのに使用できます。Extended Hückel 計算を適用することは、より高度な方法を使用して表面を予測するために行われる一般的な準備手順です。

Extended Hückel 法を使って分子表面を計算するには、**Calculations**、**Extended Hückel**、**Calculate Surfaces** の順に選択します。

 **注意:** Chem3D では、Extended Hückel 計算を実行する前に、孤立電子対とダミー原子がすべて削除されます。

この段階では、計算は既に行われていて、計算結果はモデルと共に格納されています。

Extended Hückel 法を使って部分電荷を計算するには、**Calculations**、**Extended Hückel**、**Calculate Charges** の順に選択します。

モデルの各原子に、原子とその電荷を一覧にしたメッセージが作成されます。Model Settings ダイアログボックスの **Pop-up Information** タブで **Partial Charge** を選択した場合、原子にマウスポインタを合わせるとポップアップ情報として部分電荷が表示されます。

溶媒接触表面

その名前が意味するように、溶媒接触表面は、溶媒分子によりアクセスできる分子の一部を意味します。溶媒接触表面を決めるには、溶媒分子をシミュレートしている小さな調査球体が分子の表面（すなわち、ファンデルワールス表面）を転がっているかを確認めます。溶媒接触表面は、次の図のように、調査球体の中心点で示された軌跡として定義されます。

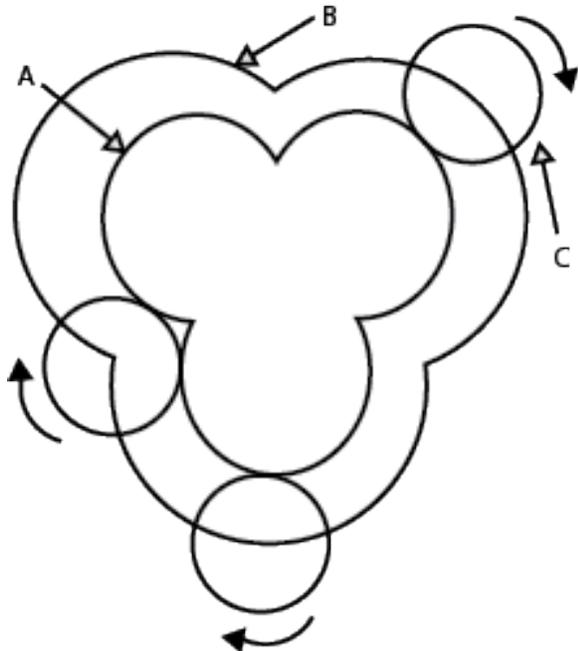


図 4.13: ファンデルワールス表面: A) ファンデルワールス表面、B) 溶媒接触表面、C) 溶媒プローブ

コノリー分子表面

コノリー表面は、分子表面または溶媒排斥表面とも言われます。表面は溶媒球体がファンデルワールス表面に接触して形成される表面として定義されています。コノリー表面に包まれる容積は、溶媒排斥容積と呼ばれます。これらの表面を次の図に示します。

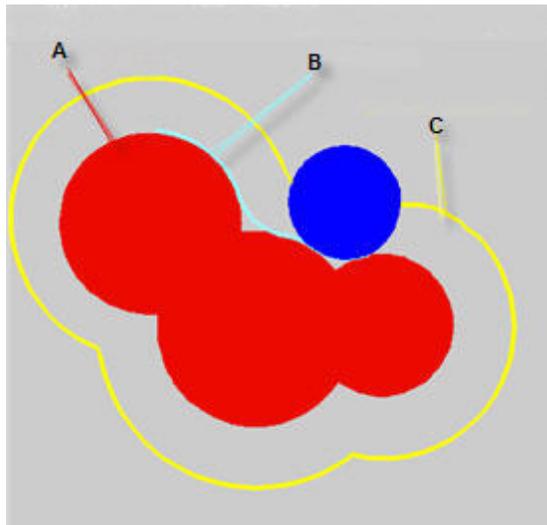


図 4.14: コノリー分子表面: A) ファンデルワールス表面、B) コノリー表面、C) 溶媒接触

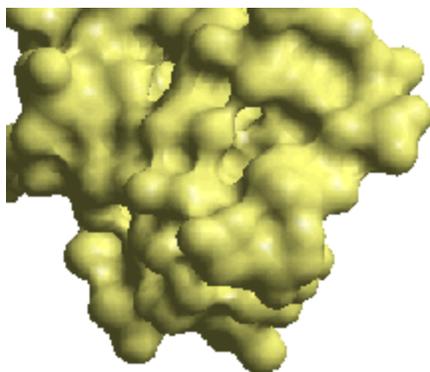


図 4.15: *icrn* のコノリー表面

総電荷密度

総電荷密度 (Total Charge Density) とは、分子の核を囲む空間の電子密度、または分子の周りの空間で電子が見つかる確率関数のことです。デフォルト同電荷値は 0.002 原子ユニット (a. u.) です。この値は分子のファンデルワールス半径に似ていて、分子によって占められる 3 次元空間全体のおよそ 95% をカバーします。

総電荷密度表面は、分子の形を視覚的に表現する最も優れた手段であり、分子の電荷分布によって求められます。

総電荷密度表面は、各分子に対してゼロから計算され、一般に空間充填表示よりも正確です。

総電荷密度表面のマッピングに使用できる特性は、分子軌道、スピン密度、静電位、および部分電荷です。マッピングの色には特性の強度が最も高いものに赤、最も低いものに青を使います。中間は白です。

分子軌道

分子軌道 (MO) の表面は、分子のさまざまな静的電子分布を視覚的に表示します。最先端の軌道理論によると、最高被占分子軌道 (HOMO) と最低空分子軌道 (LUMO) の形状と対称性は、生物の反応や、化学反応の立体化学的、位置化学的結果を予測するうえで極めて重要です。

Surfaces メニューの **Molecular Orbital** コマンドを使って、表面へのマッピングに分子軌道を使うよう指定できます。HOMO/LUMO サブメニューに軌道の番号が表示されます。モデルの HOMO/LUMO 軌道のリストを表示するには、**Surfaces** メニューの **Select Molecular Orbital** をクリックします。表示する軌道を選択します。

Surfaces メニューの **Isocontour** ツールを使って、計算された MO 表面すべての同輪郭値を指定できます。新しく計算した表面の同輪郭値のデフォルトは、その前に計算した表面に指定された値に設定されます。同輪郭値を指定しなかった場合には、デフォルト値が 0.01 になります。

総スピン密度

総スピン密度表面は、分子スペースの任意の領域での、上向きスピンと下向きスピンの電子間の密度差を記述します。任意の領域においてその違いが大きければ大きいほど、その領域は不対電子に近くなります。総スピン密度が他の表面 (たとえば総電荷密度) にマッピングされると、総スピン密度表面領域での電子の相対的な傾向が、上向きスピンか下向きスピンのかで色分けされて見ることができます。完全に上向きスピン (正の値) の電子は赤、完全に下向きスピン (負の値) の電子は青、電子対 (中間) は白で表示されます。

総スピン密度表面は、分子の不対電子を調べるのに使用できます。この表面は、不対電子がある場合のみに形成されます。総スピン密度表面を表示するには、MOPAC または Gaussian で開殻系の波動関数を使ってスピン密度と分子表面の両方を計算する必要があります。

分子静電位

分子静電位 (MEP) は分子と陽子の間の引力や反発力を表します。引力は負の値によって表され、反発力は正の値によって表されます。MEP 実験値は X 線回折か電子回折技法によって得られ、分子のどの領域が求電子性や求核性攻撃により影響されやすいかなどの、役に立つ情報を提供します。MEP 比較値は、MEP が他の表面 (総電荷密度) にマッピングされているときに色分けすることができます。正の方向に最大の MEP 値は赤、負方向の最大値は青、中間値は白で表されます。

MEP の詳細については、“[MEP](#)” ページ 275 を参照してください。

部分表面

多くの場合、タンパク質-配位子相互作用を研究している科学者は、配位子を除いたタンパク質の分子表面を生成することに興味を持っています。Chem3D では、配位子を除外したり、モデルの選択した部分を除外することによって、部分的な溶媒接触表面およびコノリー表面を生成できるようになっています。

部分表面を生成するには、次の操作を行ってください。

1. **Surfaces** メニューの **Advanced Molecular Surfaces** をクリックします。
2. **Advanced Molecular Surfaces** ダイアログ ボックスで、表面タイプおよび含めたり除外したりするものを選択します。

溶媒原子はデフォルトで除外されますが、チェック ボックスを使って含めることもできます。非表示の原子（通常は水素）も含めたり除外したりすることができます。

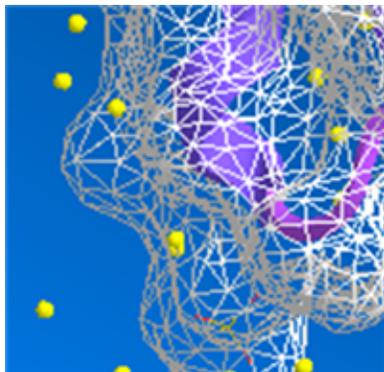


図 4.16: 溶媒原子を除外した部分表面

表面を表示した後で、表面の透明度と反射率を設定できます。表面の色を任意の単色にするほか、原子の色、元素の色、原子団の色、または原子団の疎水性で指定することができます。

選択した原子団からの距離またはフラッキングによって表面を制限することもできます。

ボリューム スライス

ボリューム スライス ツールを使用することにより、ほぼすべての分子表面を 2 次元平面に投影することができます。表面を計算した後、X、Y、Z のいずれかの平面でモデルをスライスし、必要に応じてスライスの位置を調整できます。

1. 必要な面を計算します。詳細については、“分子表面” ページ 64を参照してください。
2. 表面を表示するには、**Surface** メニューの **Choose Surface** をクリックし、表示する面を選択します。

 **注意:** ボリューム スライス ツールは、コノリー表面には適用できません。

3. モデル表示ツールバーで、ボリューム スライス ボタン  をクリックします。volume slicing ダイアログ ボックスが表示されます。
volume slicing ダイアログ ボックスには、モデル ウィンドウの各平面の位置を調整できる 3 つのスライダがあります。
4. ダイアログ ボックスで、表示させる平面のチェック ボックスを 1 つ以上オンにします。
5. スライダを動かして、各平面の位置を調整します。
6. ユーザー自身に正対する（画面と平行方向にする）ように平面の向きを変更するには、**Face User** の下にある該当するボタンをクリックします。+ ボタンをクリックすると選択した平面の 1 つが表示され、- ボタンをクリックすると反対側の平面が表示されます。
7. 面の表示/非表示を切り替えるには、**Show Surface/Orbital** を選択、または選択解除します。
8. 設定が完了したら、**OK** をクリックします。

立体視の使用

Stereo Pairs (立体視) は、ステレオメガネの光学原理に基づく表示技術です。この技術では 2 つのイメージをわずかにずらして表示することにより、立体効果が得られます。

 **注意:** ステレオメガネは、写真を 3 次元で表示するための装置です。

立体表示には、Parallel (平行法) と Reverse (交差法) があります。平行法の方が立体効果を得やすい場合もありますが、人によっては両目を寄せる交差法で 2 つのイメージに焦点を合わせた方が立体効果が高まることもあります。いずれの場合も、立体効果は画面上よりも印刷したモデルの方が簡単に得られます。なるべく小さいイメージを使用し、目との距離を調整してください。

Stereo Pairs パラメータの設定

Stereo Pairs パラメータを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックし、**Stereo & Depth** タブをクリックします。立体表示コントロール パネルが表示されます。
2. **Render Stereo Pairs** を選択して、2 つのモデルを並べて表示します。左側のモデルを Y 軸を中心に回転させたモデルが右側に表示されます。
3. スライダを使って **Eye Separation** (Stereo Offset) を指定します。このスライダは Y 軸を中心とした回転角度を調整します。
4. **Separation** スライダを使って、回転角度を指定します。立体効果を得るには幅の約 5% に設定してください。

交差法か平行法かを選択するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- 右側のフレームを左側のフレームまで回転させるには、**Reversed** を選択します。左目の焦点を右側のモデルに合わせたり、右目の焦点を左側のモデルに合わせると、2 つの立体表示が重なり合います。
- 右側のモデルをさらに右へ回転させるには、**Parallel** を選択します。

立体効果

Chem3D では、ステレオ OpenGL 機能を持つハードウェア用のステレオ グラフィック表示ができます。さまざまなステレオ グラフィック カードや、ステレオ グラス、3D モニタを使用できます。

立体効果をアクティブにするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックし、OpenGL タブを選択します。
2. **Use Hardware Stereo when Available** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

ハードウェアが有効になった後で、立体効果を 3D ウィンドウで使用できます。

 **注意:** ディスプレイ アダプタのプロパティ コントロールおよび Chem3D の Preferences ダイアログ ボックスで "stereo in OpenGL" を有効にし、使用しているグラスやモニタに合ったモードを選択する必要があります。

遠近の影付けやハードウェア機能を利用した遠近法を使用することはできますが、他のステレオモードはアクティブにしないでください。

距離の調整

Eye Separation を調整することで、立体効果を調整できます。

1. File メニューの **Model Explorer** をクリックし、**Stereo & Depth** タブを選択します。
2. **General Stereo Settings** で、Eye Separation スライダーを調整します。
3. **OK** をクリックします。

ビュー フォーカス視点の設定

モデルが大きくなると、どの部分を作業しているか把握するのが困難になります。ビュー フォーカス機能を使用すると、必要に応じてパンできるように、選択した原子にフォーカスを設定できます。

ビュー フォーカスを設定するには、次の操作を行ってください。

1. フラグメント、または原子や結合の集まりを選択します。
2. **View**、**View Focus**、**Set Focus to Selection** の順に選択します。

ビュー フォーカス設定後、結合ツールを使用してモデルの作成を続けると、Chem3D ではビュー フォーカス内の原子が常にすべて表示されるように表示サイズと位置が変更されます。現在のモデルに新しい原子を追加すると、その原子もビュー フォーカスに含まれます。

表示を手動で回転またはサイズ変更するとき、回転、サイズ変更はビュー フォーカスを中心として行われます。

モデル ウィンドウの中心にビュー フォーカスを設定するには、**View**、**View Position**、**Center View on Focus** の順に選択します。

モデル ウィンドウの中心にモデルで選択した原子を配置するには、**View**、**View Position**、**Center View on Selection** の順に選択します。

高度なモデルの作成

Chem3D の高度な作成機能には、基本モデル構造式の拡張、独自の作成パラメータの定義、他のソースのデータと構造式を使ったモデル作成といった、さまざまなオプションが用意されています。

ダミー結合とダミー原子

ダミー結合を使えば、定義済みの結合タイプがなくても 2 つの原子間の結合を指定できます。ダミー結合は、無機化合物の配位複合体で使用されることが多く、後で別の元素に変更されます。

ダミー原子は、別のアプリケーションへ転送して分析する場合などで、原子を Z-Matrix に配置するときにも便利です。これはモデルが大きくなって結合関係の指定が困難なときによく利用されます。

 **注意:** ダミー結合とダミー原子はすべての計算で無視されます。

ダミー結合とダミー原子を追加するには、次の操作を行ってください。

1. ダミー結合ツールを選択します。
2. 原子をポイントし、その原子からドラッグします。ダミー結合とダミー原子がモデルに追加されます。ここで作成された原子には、Chem3D 元素記号でダミー原子を表す Du のラベルが付けられます。

ダミー原子のみを追加するには、次の操作を行ってください。

1. 既存の原子を選択します。
2. テキスト作成ツールを使用して、選択した原子をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. テキスト ボックスに「Du」と入力し、Enter キーを押します。

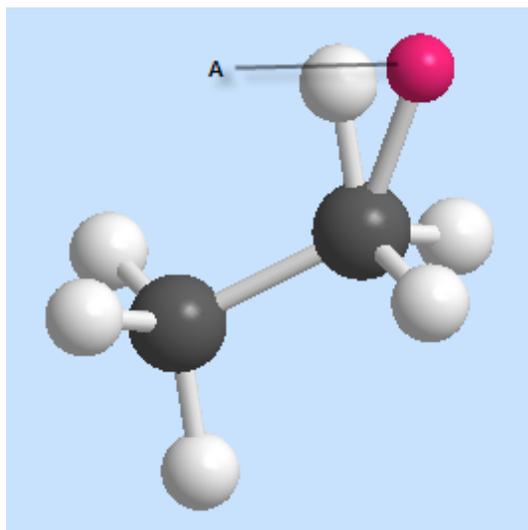


図 5.1: A) ダミー原子

部分構造

大きいモデルの場合は、一度に 1 原子ずつモデルを作成するのではなく、**部分構造**の使用を検討することをお勧めします。部分構造は、環系、その他の構造的特徴など定義済みの原子団です。たとえば、ベンゼンの部分構造を使用してベンゼン環を追加したり、COOH を使用してカルボキシル酸官能基を追加したりできます。部分構造の定義はすべて、Substructure パラメータ テーブルに保存されています。

詳細については、“[Substructures 部分構造テーブル](#)” ページ 149を参照してください。

部分構造を使ったモデルの作成

モデル ウィンドウへの部分構造のコピーと貼り付けを行うには、次の操作を行ってください。

1. Substructures パラメータ テーブルを開くには、**View、Parameter Tables、Substructures** の順に選択します。
2. 部分構造テーブルで、部分構造名が含まれているセルまたは行全体を選択します。
3. 選択したセルまたは行を右クリックし、コンテキスト メニューから **Copy** を選択します。
4. モデル ウィンドウで Ctrl + V キーを押します。または、ウィンドウを右クリックし、コンテキスト メニューから **Paste** を選択します。

テキスト ツールを使用することもできます。

1. テキスト作成ツールでモデル ウィンドウ内をクリックします。
2. テキスト ボックスに部分構造の名前を入力して、Enter キーを押します。部分構造がモデル ウィンドウに追加されます。

 **注意:** テキスト ツールを使用する場合は、Substructure テーブルを開く必要はありません。

部分構造をモデルへ追加

既存のモデルに部分構造を追加するには、次の操作を行ってください。

1. モデル内で、部分構造に結合する原子を選択します。

 **注意:** 選択した原子が部分構造と置き換わります。

2. 選択した原子を右クリックし、**Replace with Text Tool** を選択します。
3. テキスト ボックスに部分構造の名前を入力して、Enter キーを押します。

 **ヒント:** 部分構造名のリストを参照するには、**View、Parameter Tables、Substructures** の順に選択します。

部分構造を使用した例

部分構造を使用した、いくつかの例を次に示します。

例 1: エタンの作成

部分構造を使ってエタンのモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールでモデル ウィンドウ内をクリックします。
2. 原子を選択しないで、テキスト ボックスに、「Et」または「EtH」と入力します。
3. Enter キーを押します。エタンのモデルが表示されます。

 **注意:** 自動結合次数調整機能がオンになっていると、エチルラジカルの原子価を満足する水素原子との結合が作成されます。自動結合次数調整機能がオフになっている場合、同じ結果を得るには、「EtH」と入力する必要があります。原子価の満たされていない原子が複数ある部分構造の場合は、原子価の満たされていない原子ごとに明示的に末端の原子を指定してください。

例 2: 部分構造と他の元素を使用した作成

部分構造と元素を使用してモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールでモデル ウィンドウ内をクリックします。
2. 原子を選択しないで、テキスト ボックスに「PrNH₂」と入力します。
3. Enter キーを押します。プロピルアミンのモデルが作成されます。

例 3: ポリペプチド

部分構造を使用してタンパク質などの生体高分子モデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 原子が選択されていない状態で、テキスト ボックスに「HAlaGlyPheOH」と入力します。追加の H と OH はポリペプチドの両端に付きます。これらが両端に付かず、自動結合調整機能がオンになっていると、Chem3D は原子価に満たない原子を満たそうと試みます。

 **注意:** アミノ酸の繰り返しに何度もアミノ酸を入力する代わりに、繰り返し部分をカッコで囲み、その後に繰り返し数を指定します。たとえば、「HAla(Pro)10GlyOH」と入力します。

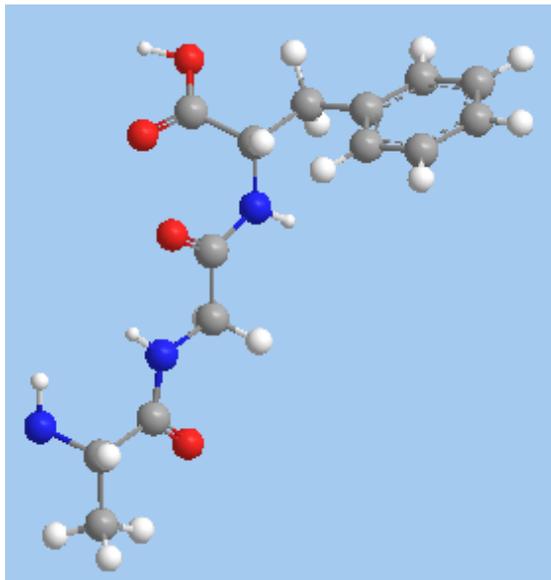
2. Enter キーを押します。

 **注意:** 部分構造に原子価に満たない原子が 2 つ以上含まれている場合、Chem3D は原子価に満たない原子の部位間に結合を作成して、環を作成します。

アラニン、グリシン、フェニルアラニンから成る α 型の中性ポリペプチド鎖が作成されます。

 **注意:** 「H β -Ala β -Gly β -PheOH」のようにアミノ酸の名前の前に「 β -」を付けて、 β 型立体配座を指定することができます。 β という文字を入力するには、Alt キーを押しながら数値パッドで「0223」と入力します。

部分構造では各アミノ酸に適切な結合と二面角があらかじめ定義されています。



HAlaGlyPheOH ポリペプチドのモデル

- ✔ **ヒント:** α ヘリックス生成をよく見るには、回転ツールを使用してモデルの終端が手前にくるように方向を変更します。

ポリペプチドを両性イオンに変更するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールを選択します。
2. 末端の窒素をクリックします。窒素原子の上にテキスト ボックスが表示されます。
3. 「+」と入力し、Enter キーを押します。

窒素原子に電荷が付加されます。その原子タイプが変わり、水素原子が追加されます。

4. 末端の酸素をクリックします。

酸素原子の上にテキスト ボックスが表示されます。

5. テキスト ボックスに「-」と入力し、Enter キーを押します。

酸素原子に負電荷が設定されます。その原子タイプが変わり、水素原子が削除されます。

例 4: その他のポリマー

4 つの構成単位を持つポリエチレン テレフタレート (PET) のモデルを作成するには、原子を選択しない状態でテキスト ボックスに「OH(PET)4H」と入力し、Enter キーを押します。ポリマーの両端に H と OH が付いています。PET モデルを次に示します。

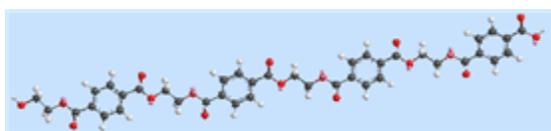


図 5.2: 4 つのユニットを持つ PET ポリマー

近接結合

指定の距離内（結合距離内）にある原子同士が自動的に結合を形成するようにすることができます。

Chem3D は 2 個の原子が結合距離内にあるかどうかを、原子の直交座標値と両原子間に適用される標準結合長に基づいて判断します。

1 対の原子が、標準結合長を一定の割合以上超えない距離にあれば、結合距離にあると判断されます。この割合を小さく設定しておくこと、標準結合長により近い距離にあるもののみが結合されます。標準結合長は Bond Stretching Parameters テーブルに保存されています。

この割合の値を設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。Model Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Model Building** タブを選択します。
3. Bond Proximate Addition% スライダーを使って、標準結合長に加えられる百分率を調整します。Chem3D はこの割合だけ増加した標準結合長の値を、結合距離の最大許容値として使います。

設定できる割合 (%) の値は 0 から 100 までです。この値が 50 の場合には、標準結合長の 1.5 倍の距離までは結合距離内にあると見なされます。0 の場合、2 個の原子間の距離が標準結合長より少しでも離れていると結合距離内にあると見なされません。

近接する原子を結合するには、次の操作を行ってください。

1. 結合を作成する 2 つの原子を選択します。
2. **Structure** メニューの **Bond Proximate** をクリックします。

選択した 2 つの原子が結合距離内にあれば、結合が作成されます。

測定値の設定

モデルを作成するとき、Chem3D は長さや角度の標準測定値のセットを使用して、配置する原子同士の相対的な位置を決定します。必要に応じて、標準測定値を上書きできます。

モデルで使用されている標準測定値を表示するには、**Structure**、**Measurements**、**Generate All (Bond Lengths または Bond Angles)** の順に選択します。Measurement テーブルの Optimal (または Equilibrium) 列に標準測定値が表示されます。モデルの測定値を編集するには、Measurement テーブルの Actual 列の目的の値を置換して、Enter キーを押します。

標準測定値以外の項目も表示できます。二面角や非結合原子間の距離も表示できます。測定値を変更する方法については、“[拘束の適用](#)” ページ 82 を参照してください。

結合長の設定

共有結合、イオン結合、水素結合を共有する 2 個の原子間の長さを設定できます。

2 個の原子の間の結合長を設定するには、次の操作を行ってください。

1. まず 2 個の原子を選択します。
2. **Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。原子間の距離が Measurement テーブルに表示されます。
3. **Actual** 列の値をクリックして編集します。
4. Enter キーを押します。

結合角の設定

結合角を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 角度を定義する 3 個の隣接した原子を選択します。
2. **Structure、Measurements、Display Bond Angle Measurement** の順に選択します。角度の値が Measurement テーブルに表示されます。
3. **Actual** 列の値をクリックして編集します。
4. Enter キーを押します。

二面角の設定

二面角を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 二面角を定義する 4 個の隣接した原子を選択します。
 **注意:** 最初に選択した方の原子が、結合が回転するときに移動します。
2. **Structure、Measurements、Display Dihedral Measurement** の順に選択します。角度の値が Measurement テーブルに表示されます。
3. **Actual** 列の値をクリックして編集します。
4. Enter キーを押します。

近接距離の設定

結合を共有しない原子は、近接状態と見なされます。

近接状態の 2 個の原子間の距離を設定するには、次の操作を行ってください。

1. 結合を共有していない任意の原子を 2 個選択します。
 **注意:** 選択した原子間に距離を設定すると、最後に選択した方の原子が移動します。
2. **Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。2 個の原子間の距離が Measurement テーブルに表示されます。
3. **Actual** 列の値をクリックして編集します。
4. Enter キーを押します。
 **注意:** 移動ツールを使用して原子を移動することもできます。Measurement テーブルは、原子の新しい位置を反映して自動的に更新されます。

原子の移動

値を変更すると、最後に選択された原子が移動します。Chem3D では、移動原子に結合している原子が移動し、選択された他の原子に結合している原子は除外します。

測定値の変更に関係する原子がすべて同じ環に属する場合、移動原子は次の基準で決定されます。

- 測定値の変更に関係する原子 1 個のみを移動する。
- 2 個の原子間の結合長、あるいは距離を変更した場合、選択した原子のうち、移動しない原子に結合している原子は移動しない。移動原子に結合している原子が移動する。
- Model Building タブ (File、Model Settings、Model Building タブの順に選択) の Rectify チェックボックスがオンのときは、移動する原子と相対的な位置関係にある修正原子も移動する。

たとえば、次のような構造式について考えてみます。

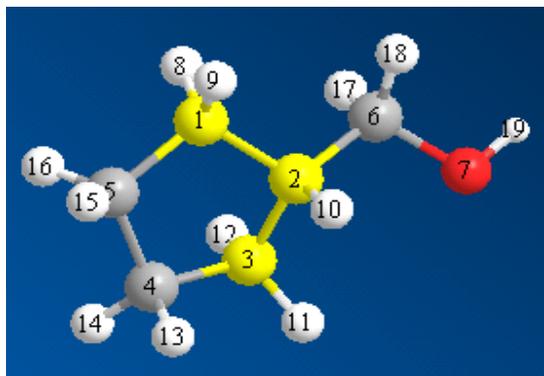


図 5.3: シクロペンチルメタノールのモデル

C(1)-C(2)-C(3) の結合角を 108 度に設定すると、C(3) は移動原子になり、C(1) と C(2) は静止したままです。H(11) と H(12) は、移動原子に結合されるため移動します。Automatically Rectify チェックボックスがオンになっていると、H(10) も移動します。これはこの原子が修正原子であり、C(3) との関係で配置されているからです。

拘束の適用

Chem3D で原子の配置に用いられる標準値を、拘束を適用して変更することができます。特定の結合長、結合角、二面角、または非結合距離に対して拘束を使用でき、Clean Up の使用時や、整列、オーバーレイ、または MM2 計算の実行時に、標準測定ではなくこれらの拘束が適用されます。

拘束を適用するには、Measurement テーブルの Optimal フィールドに、新しい値を入力します。

二面角と非結合距離の場合、拘束によってその値は設定した値 (または近似値) に維持されますが、モデルの残りの部分は計算の影響を受けます。制約によってその原子が計算から削除されることはありません。

原子タイプと構築タイプ

構築タイプとはモデルの構造（結合長、結合角、原子自体の相対サイズ）を決めるものです。Chem3D では、事前に定義された構築タイプを使用してモデルを作成すると、デフォルトで構築タイプが割り当てられますが、独自の構築タイプを作成することもできます。

構築タイプがモデルの構造面を定義するのに対して、原子タイプは結合エネルギー、熱特性、その他の非構造的な特性を表す属性を定義します。力場では、データを使用してモデルの特性を計算し、モデルの動作を予測します。力場計算には、モデル内の各原子のタイプ、原子の位置、原子が属する官能基が考慮されます。たとえば、カルボキシル炭素とアルキル炭素では原子タイプが異なります。Chem3D に原子タイプを追加する方法の詳細については、“[パラメータ テーブルの編集](#)” ページ 145 を参照してください。

Correct Atom Types について、Correct Atom Types は、作成時に各原子に原子タイプを割り当てるかどうかを決定します。C Alkane などの原子タイプによって、原子の原子価、結合長、結合角、および立体構造が指定されます。

構築タイプの特性

原子に構築タイプを割り当てるためには、原子の特性が Chem3D の以下のタイプ特性と一致している必要があります。

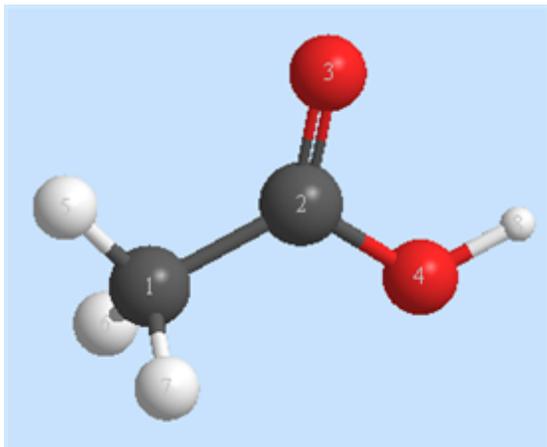
- 原子記号
- 結合先タイプ（このタイプが構築タイプに指定されている場合）
- 結合先次数（結合先タイプが指定されている場合）
- 二重結合、三重結合、非局在化した結合の数

 **注意：** 結合次数を比較する場合は、2 つの非局在化結合を含む原子（ベンゼンなど）に、1 つの二重結合を含む構築タイプが割り当てられます。

構築タイプの Maximum Ring Size フィールドが指定されている場合、対応する構築タイプを割り当てるには、指定のサイズまたはそれ以下のサイズの環内に原子が存在する必要があります。

構築タイプの幾何学的構造により、指定された配位子数より少ない配位子数に原子が結合されている場合、修正タイプが指定されていれば、その構築タイプに原子を割り当てることができます。空き原子価が修正原子で満たされます。

たとえば、エタン酸の構造について構築タイプを考えます。



0(3) は、構築タイプ 0 カルボニルに指定した条件に一致します。特に、“0” ラベルが付いていること、C カルボニルに二重結合で結合していること、1 つの二重結合のみで結合している（三重結合がない）ことが理由に挙げられます。

1 つの原子に複数の構築タイプを割り当てることができる場合、構築タイプは次の順序で割り当てられます。

1. 結合先タイプが指定されており、結合先タイプが修正タイプと異なる構築タイプ
2. 結合先タイプが指定されており、結合先タイプと修正タイプが同じ構築タイプ
3. 結合先タイプが指定されていない構築タイプ

たとえば、上に示すモデルでは、0(4) は複数の構築タイプに当てはまります。まず、結合先タイプが指定されていないという理由で、この原子は 0 エーテルに当てはまります（上の 3 番の場合）。あるいは、結合先タイプが修正タイプの H アルコールと同じとの理由で、この原子は 0 アルコールに当てはまります（上の 2 番の場合）。最後に、結合先タイプが C カルボニルであり、修正タイプが H カルボキシルであるとの理由で、0 カルボキシルに当てはまります（上の 1 番の場合）。指定した結合先タイプが修正タイプと異なる場合（上の 1 番の場合）、その結合先タイプの特性が最優先されるため、酸素原子に 0 カルボキシル構築タイプが割り当てられます。

構築タイプの変更

テキスト ボックスで、構築タイプや結合特性を変更することができます。たとえば、アルカンからアルケンへ変更できます。

原子の構築タイプを変更するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールを使用して、炭素原子をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
2. 隣接する炭素原子を、Shift キーを押しながらクリックします。両方の原子が選択されます。
3. テキスト ボックスの内部をクリックし、「C Alkene」と入力します。
4. Enter キーを押します。

構築タイプと結合次数が変わり、新しいモデルができます。原子や結合にポインタを置くとその情報を表示できます。

構築タイプの割り当て

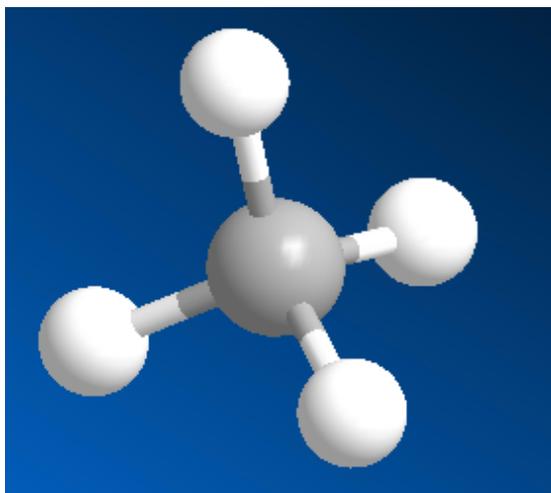
最も簡単なモデル作成方法では、Chem3D 19.0 によって作成過程で原子に構築タイプが割り当てられます。作成するときに構築タイプが割り当てられるようにするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。Model Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Model Settings** ダイアログ ボックスを開き、**Model Building** タブをクリックします。
3. **Correct Building Type** チェック ボックスをオンにします。
4. **OK** をクリックします。

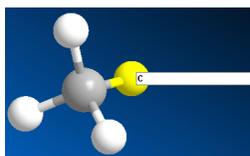
Correct Building Type チェック ボックスがオンのときは、原子や結合を追加、削除、または置換する際に構築タイプが修正されます。

例：

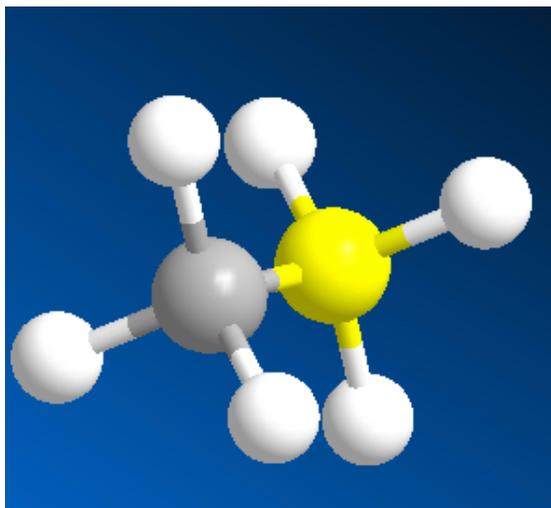
1. 次のようなメタンのモデルを作成します。



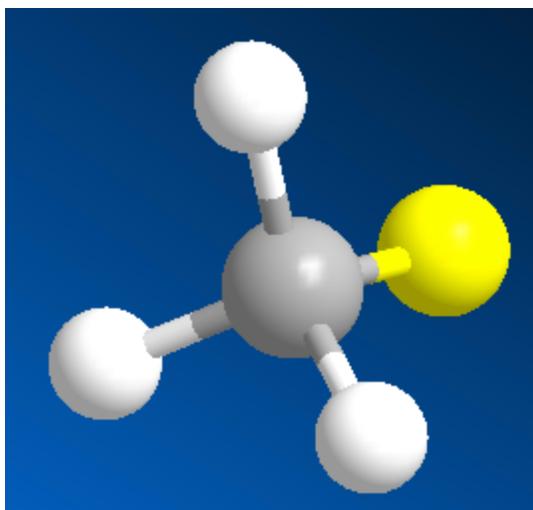
2. **テキスト作成** ツールをクリックします。
3. 水素原子をクリックします。下図のようなテキスト ボックスが表示されます。



4. テキスト ボックスに「C」と入力し、Enter キーを押します。
Correct Building Type チェック ボックスがオンの場合は、次の図が表示されます。



Correct Building Type チェック ボックスがオフの場合は、次の図が表示されます。



上の例に示されているように、構築タイプが割り当てられ、原子を置換すると、Chem3D は各原子の情報（原子の記号や結合数など）と Atom Type テーブルの各レコードを照合し、各原子に最適なタイプを割り当てようとしています。

また、いずれかのタイプの原子をタイプの異なる別の原子に置き換える際に、既存の原子の構築タイプが変更されることもあります。

構築タイプの定義

いくつかのインスタンスでは、モデル作成用の構築タイプ テーブルに追加する場合も、読み込み用のファイル形式インタープリタに追加する場合も、独自の構築タイプを定義できます。

独自の構築タイプを定義するには、次の操作を行ってください。

1. **View、Parameter Tables、Chem3D Building Atom Types** の順に選択します。Chem3D Building Atom Types テーブルのウィンドウが開きます。
2. 構築タイプの編集のみを行う場合は、変更するセルをクリックして、新しい情報を入力します。
3. テーブルの各フィールドに適切なデータを入力します。パラメータ テーブルの中でパラメータ名が重複していないことを確認してください。
4. テーブルを閉じて、保存します。これで、新しく定義した構築タイプが使用可能になりました。

立体化学構造

反転や鏡像によって、モデルの立体化学構造を変更することができます。

反転

反転は、選択したキラル原子に付いている側鎖を配置し直します。

たとえば、C(2) 炭素（下図で強調表示）を軸に N-メチルシクロヘキシルアミンを反転するとします。

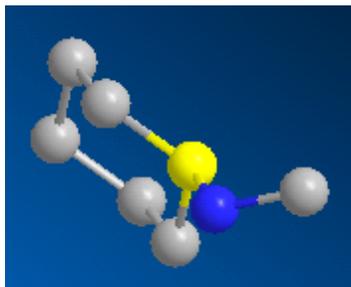


図 5.4: C(2) 原子を選択した N-メチルシクロヘキシルアミン

反転後の構造式は次のようになります。

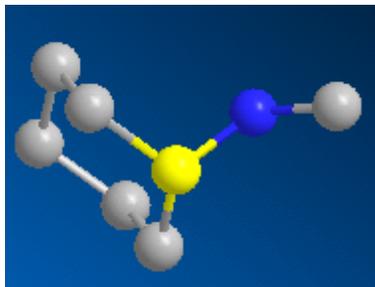


図 5.5: N-メチルシクロヘキシルアミンを反転したモデル

キラル原子を軸に対称に反転するには、次の操作を行ってください。

1. 原子を選択します。
2. **Structure** メニューの **Invert** をクリックします。

複数の二面角（環のすべての二面角など）を一度に反転するには、次の操作を行ってください。

1. 反転する二面角を選択します。
2. **Structure** メニューの **Invert** をクリックします。

環を形成するすべての二面角の符号が変わります。つまり、環に対して平行に配置されていた原子は垂直に配置され、環に対して垂直に配置されていた原子は平行に配置されます。

モデルの鏡像

X-Y、X-Z、Y-Z 平面のいずれかかモデルの原点のどちらか（この平面と原点は、モデルの軸ではなく表示の軸によって定義されます）の鏡像を作成するには、**Reflect** コマンドを使用します。

モデルの鏡像を作成するには、次の操作を行ってください。

Structure メニューの **Reflect Model** をクリックして、以下のいずれかのオプションを選択します。

- Through X-Y Plane
- Through X-Z Plane
- Through Y-Z Plane
- Invert through Origin

平面を軸にしてモデルの鏡像を作成すると、第 3 軸の座標値の符号が変わります。**Invert through Origin** を選択すると、モデルのすべての直交座標値の符号が変わります。

キラル中心が含まれているモデルは、鏡像作成によりその鏡像体に変更されます。さらに、Pro-R 配置の原子すべてが Pro-S になり、Pro-S 配置の原子すべてが Pro-R になります。原子を配置するために使用されたすべての二面角は、符号が変わります。

 **注意:** Chem3D における Pro-R と Pro-S は、化学の標準用語で使用される R や S とは等価ではありません。

たとえば、次の構造でいずれかの原子を選択し、**Structure**、**Reflect Model Through X-Z Plane** の順に選択します。

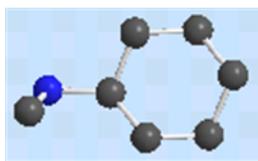


図 5.6: 平面に対する鏡像の作成

Chem3D によって次のような鏡像体が生成されます。

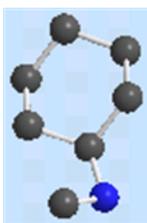


図 5.7: 鏡像作成で生成された鏡像体

Cartesian テーブルを使った作成

Cartesian (直交) テーブルには、モデルの X、Y、および Z 座標がモデルの軸の原点との相対位置で表示されます。新しいモデルを作成する 1 つの方法は、直交座標をスプレッドシート (またはその他のテーブル) から空の Chem3D Cartesian テーブルに貼り付けることです。データを貼り付けた後、Chem3D では最小化パラメータと原子タイプが適用され、モデルの構造式が特定されます。

直交座標や Z-Matrix 座標を Chem3D にコピーするには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ファイルまたはスプレッドシート ファイルでテーブルを選択します。
2. Ctrl + C キーを押して、データをクリップボードにコピーします。
3. **View** メニューの **Cartesian Table** をクリックします。テーブルが表示されます。
4. 空白の Cartesian テーブル内を右クリックし、**Paste** を選択します。

例 1: クロロエタンの Cartesian テーブル

(スペース区切り)

```
C 0 -0.464725 0.336544 0.003670
C 0 0.458798 -0.874491 0.003670
Cl 0 0.504272 1.818951 0.003670
H 0 -1.116930 0.311844 0.927304
H 0 -1.122113 0.311648 -0.927304
H 0 -0.146866 -1.818951 0.003670
H 0 1.116883 -0.859095 0.923326
H 0 1.122113 -0.858973 -0.923295
```

例 2: エタンの Cartesian テーブル (タブ区切り)

```
C -0.4956 0.5782 0.0037
C 0.4956 -0.5782 0.0037
H 0.0552 1.5557 0.0037
H -1.1517 0.5252 0.9233
H -1.1569 0.5248 -0.9233
H -0.0552 -1.5557 0.0037
H 1.1517 -0.5252 0.9233
H 1.1569 -0.5248 -0.9233
```

例 3: エタノールの Z-Matrix テーブル (タブ区切り)

```
C
C 1 1.33
O 2 1.32 1 119.73
H 3 0.978 2 109 1 180
H 2 0.99 1 119 3 180
H 1 0.989 2 119.5 3 180
H 1 0.988 2 119 3 0
```

ISIS/Draw を使ったモデル作成

ISIS/Draw を使用してモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. ISIS/Draw で構造式を作画します。
2. 構造式をクリップボードにコピーします。
3. Chem3D で、Edit メニューの Paste をクリックします。

 **注意:** モデルは ISIS/Draw からモデル ウィンドウに貼り付けることができます。ただし、ChemDraw パネルへの貼り付けはできません。モデルがモデル ウィンドウに表示されたら、ChemDraw パネルに作画が表示されるようにウィンドウを同期させることができます。

孤立電子対

アミンやカルボキシル酸など、孤立電子対のある分子では、モデルを変更するときに孤立電子対の追加や削除を行います。孤立電子対の追加後、モデルの化学構造を変更しないで電子の表示と非表示を切り替えることができます。

孤立電子対の追加

孤立電子対をモデルに追加するには、Structure、Lone Pair、Add の順に選択します。

孤立電子対の削除

電子対を削除するには、Structure、Lone Pair、Remove の順に選択します。

孤立電子対の表示/非表示

電子対を表示するか非表示にするかを指定することができます。

 **注意:** 非表示にした電子対はモデルの一部として残っています。

孤立電子対を表示または非表示にするには、次のいずれかの操作を行ってください。

- Structure の Lone Pair をクリックし、Add、Show または Hide を選択します。
- View、Model Display、Show Lone Pairs の順に選択し、Hide または Show をクリックします。

計算エンジン

計算化学は、化学上の問題を解決するために、化学、数学、およびソフトウェアに適用されます。分子特性やシミュレーション実験結果を計算するための手法などがあります。

計算手法は、次のカテゴリに分類されます。

- [力場計算法](#)
- [ab initio 法](#)
- [半経験的方法](#)

これらの手法を実装するアプリケーションは、計算エンジンと呼ばれます。この項では、MM2、MMFF94、Gaussian、MOPAC、および GAMESS の各計算エンジンについて説明します。

これらの手法は、あらゆる目的に最適であったり、3 つの計算カテゴリすべてを実装していたりするわけではありません。ニーズに合った手法と計算エンジンを選択する必要があります。

計算手法の選択は、下記のようないくつかの要因で決まります。

- 分子の特性とサイズ。
- 情報のタイプ。
- 実験的に決定された適切なパラメータ（計算手法によっては必要）。
- コンピュータ リソース。

特定の特性を計算するために使用するエンジンを判断するには、「[化学的物性予測](#)」を参照してください。

ab initio 法

ab initio 法は、量子化学に基づいた計算手法です。この方法では、シュレディンガーの方程式、基礎定数の値、および存在する原子の原子番号を使用して分子構造が計算されます。

Gaussian および GAMESS の各計算エンジンはいずれも、ab initio 法を採用しています。

半経験的方法

半経験的方法では、実験データの近似値を使用して、数値モデルに対する入力を作成します。

MOPAC および Gaussian の計算エンジンはいずれも半経験的方法を使用しています。

力場計算法

力場とは、分子特性を予測するために使用される計算の形式およびパラメータのことです。たとえば、力場計算によって、結合のねじれ角の制約や分子間の斥力を予測することができます。力場は、さまざまな計算に利用され、多くの場合に実験値によって正確性が確認されています。

物性特性の計算

特定の立体構造の分子エネルギーの計算は、一点エネルギー計算と呼ばれます。物性特性の計算では、一点エネルギー計算により、モデルの現在立体配座の立体エネルギー総量を算出します。

 **注意：** 立体エネルギーは MM2 エネルギー最小化の最後に計算されます。

分子のさまざまな立体配座における立体エネルギーを比較すると、各立配座の相対的な安定度がわかります。

 **注意:** MM2 でサポートされていない原子タイプがモデル内にあるという理由でパラメータが使えない場合、Chem3D は概算そのパラメータを推測します。分析解析の終了後、概算推測したパラメータは、*Show Used Parameters* コマンドを使用して確認できます。

シス型 2-ブテンとトランス型 2-ブテンの立体エネルギーを比較してみます。

トランス型 2-ブテンを作成して物性特性を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツールを選択します。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. テキスト ボックスに「trans-2-butene」と入力し、Enter キーを押します。

トランス型 2-ブテン分子が、モデル ウィンドウに表示されます。

5. **Calculations**、**MM2**、**Compute Properties** の順に選択します。Compute Properties ダイアログ ボックスが表示されます。
6. **Run** をクリックします。

立体エネルギーの計算が終了すると、立体エネルギーの各項と立体エネルギー総量が Output ウィンドウに表示されます。Output ウィンドウのスクロール バーを使用するとすべての出力が見えます。各項に使用される単位は kcal/mol です。計算の開始時に、パラメータが Quality=4、つまり実験的に測定、確認された結果であることが最初のメッセージに示されます。

 **注意:** エネルギーの値は概算であり、計算に使用されるプロセッサの種類によって多少異なる場合があります。

これらの値は次のように表示されます。

- *Stretch* は、最適結合長からのずれに関するエネルギーを示します。
- *Bend* は、最適結合角からのずれに関するエネルギーを示します。
- *Stretch-Bend* 項は結合角を大きく圧縮した場合に、その結合角を形成する 2 つの結合を伸ばすために必要なエネルギーを示します。
- *Torsion* 項は、最適分子ねじれ角からのずれに関するエネルギーを示します。
- *Non-1,4 van der Waals* 項は、3 つ以上の原子に隔てられた原子の非結合相互作用エネルギーを示します。

たとえば、トランス型 2-ブテンの場合、*Non-1,4 van der Waals* エネルギー項には C(1) に結合している水素原子と、C(4) に結合している水素原子との間の相互作用エネルギーが含まれます。

- *1,4 van der Waals* 項は、2 つの原子に隔てられた原子間の非結合相互作用エネルギーを示します。たとえば、トランス型の 2-ブテンの場合、*1,4 van der Waals* エネルギー項には、C(1) に結合している水素原子と、C(2) に結合している水素原子との間の相互作用エネルギーが含まれます。

- Dipole/Dipole 立体エネルギー項は、結合双極子間の相互作用に関するエネルギーを示します。たとえば、トランス型 2-ブテンの場合、Dipole/Dipole には、2 つの C アルカン/C アルケン結合双極子間の相互作用エネルギーが含まれます。

力場計算法を使用して、シス型 2-ブテンとトランス型で立体エネルギー値を比較できます。

シス型 2-ブテンを作成して特性を計算するには、次の操作を行ってください。

1. Edit メニューの Clear をクリックして、モデルを削除します。
2. モデル ウィンドウをダブルクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. テキスト ボックスに「cis-2-butene」と入力し、Enter キーを押します。
シス型 2-ブテン分子がモデル ウィンドウに表示されます。
4. Calculations、MM2、Compute Properties の順に選択します。Output ウィンドウにシス型 2-ブテンの立体エネルギー項が表示されます。
5. Run をクリックします。

下の表は、シス型 2-ブテンとトランス型 2-ブテンの立体エネルギーを比較したものです。

エネルギー項	トランス型 2-ブテン (kcal/mol)	シス型 2-ブテン (kcal/mol)
Stretch	0.0627	0.0839
Bend	0.2638	1.3235
Stretch-Bend	0.0163	0.0435
Torsion	-1.4369	-1.5366
non-1,4 van der Waals	-0.0193	0.3794
1,4 van der Waals	1.1742	1.1621
dipole/dipole	0.0767	0.1032
合計	0.137	1.5512

シス型 2-ブテンとトランス型 2-ブテンでは、Bend 項と Non-1,4 van der Waals 項の値が大きく異なります。シス型 2-ブテンの方で Bend 項が高くなっているのは、C(1) と結合する水素と C(4) と結合する水素間の相互作用による立体混雑を緩和するために、結合角 C(1)-C(2)-C(3) と結合角 C(2)-C(3)-C(4) を最適値の 122.0 度から 127.4 度にずらす必要があるためです。トランス型 2-ブテンでは、C(1) と結合する水素と C(4) と結合する水素間の相互作用がはるかに小さいため、結合角 C(1)-C(2)-C(3) と結合角 C(2)-C(3)-C(4) は最適値

122.0 度にかなり近い 123.9 度になります。トランス型 2-ブテンの Bend 項と Non-1,4 van der Waals 項がより低いため、トランス型 2-ブテンの方がシス型 2-ブテンより立体エネルギーが小さくなります。

複数の特性の計算

Property Picker により、各種の計算エンジンを使用して、複数の化学的物性、位相特性、熱力学特性を計算することができます。計算できる特定の特性の詳細については、“[化学的物性予測](#)” ページ 198 を参照してください。

Property Picker を適用するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。Property Picker ダイアログ ボックスが表示されます。このダイアログ ボックスでは、特性が GAMESS インターフェイスや分子トポロジなどのカテゴリに分類されます。
2. 必要なカテゴリ（複数可）を展開して、計算する特性に対応するチェック ボックスをオンにします。
3. **OK** をクリックします。出力ウィンドウに、選択した特性が表示されます。

MM2 と MMFF94

MM2 と MMFF94 は、力場計算法を適用します。これらのエンジンは、立体エネルギー、熱エネルギーなどの値を計算するために設計されています。計算結果は、原子特性の一部として保存されます。

MM2 と MMFF94 の 2 つがあることから、同じような結果を得るために複数の計算手法が用意されていると思われるかもしれません。どの計算法を使うかは、モデルのタイプと計算する特性によって決まります。

MM2

MM2 は、小さな有機モデルの特性を計算するためによく推奨されます。MM2 手順は、ポテンシャル エネルギー曲面とモデルの立体配座の関係に関する知識を前提としています。これらの概念の詳細については、“[MM2 の参考文献](#)” ページ 275 を参照してください。

MM2 パラメータ

MM2 パラメータは、MM2 Atom Types テーブルにあります。テーブルを表示するには、**View, Parameter Tables, MM2 Atom Types** の順に選択します。元の MM2 パラメータには、有機化合物に通常使用される、炭素、水素、窒素、酸素、硫黄、ハロゲンなどの元素が含まれています。これらの原子タイプの番号は、1 ~ 50 の範囲内です。

その他のパラメータは、オリジナルの MM2 カ場には含まれていない金属などの原子タイプや周期表の元素です。これらの原子タイプの番号は、111 ~ 851 の範囲内です。MM2 Atom Type Parameters テーブル内の各非 MM2 原子タイプの原子タイプ番号は、元素の原子番号と、その原子タイプの幾何学的構造内の配位子数に基づいて決められます。原子タイプ番号を求めるには、原子番号を 10 倍して、これに配位子数を加えます。たとえば、「Co Octahedral」の場合、原子番号は 27、配位子数は 6 です。したがって、原子タイプ番号は 276 ということになります。

同じ元素の複数の原子タイプが同じ配位子数を持つ場合は、2 番目の幾何学的構造に「9」を使用します（例：原子タイプ番号 774 の「Iridium Tetrahedral」と、原子タイプ番号 779 の「Iridium Square Planar」など）。

Chem3D Parameter テーブル内の、すべての非 MM2 原子タイプの結合調整タイプは水素 (H) です。結合調整タイプの詳細は、“構築タイプ” ページ 146を参照してください。

MM2 パラメータの表示

MM2 計算を実行するために Chem3D で使用されるパラメータを表示するには、**View、Parameter Tables、MM2 Atom Type Parameters** の順に選択します。

MM2 パラメータの編集

Chem3D のデフォルトのパラメータは編集が可能です。追加や変更するパラメータは、推定や概算によるものや、文献から得た値に基づいたものでもかまいません。

また、MM2 Constants テーブルには調整可能なパラメータがいくつかあります。

 **注意:** 編集を行う前に、*C3DTable* ディレクトリ内にあるパラメータ ファイルをバックアップしてください。

たとえば、Torsional Parameters テーブルに新しいパラメータを追加するには、次の操作を行ってください。

1. **View、Parameter Tables、Torsional Parameters** の順に選択します。
2. パラメータ テーブルの各フィールドに、適切なデータを入力します。パラメータ テーブルの中でパラメータ名が重複していないことを確認してください。
3. テーブルを閉じて、保存します。

使用されたパラメータの表示

MM2 計算で使用するすべてのパラメータを出力ウィンドウに表示できます。使用されたパラメータを表示するには、**Calculations、MM2、Show Used Parameters** の順に選択します。各パラメータの評価が載っています。経験的に得られた（最も質の高い）パラメータには 4 の評価がついています。「最善の推測」である（最も質の低い）パラメータは 1 と評価されます。

計算の再実行

1. **Calculations、MM2、Repeat MM2 Job** の順に選択します。
2. 必要に応じてパラメータを変更し、**Run** をクリックします。計算が実行されます。

MMFF94

MMFF94 は、タンパク質やその他の生物学的構造のエネルギー最小化計算に使用されます。

複数のプロセッサ

分子モデリングの力場計算は時間がかかるため、巨大分子には不向きです。この問題は、マルチプロセッサの利用によって克服できます。

複数のプロセッサが使われていることを確認するには、次の操作を行ってください。

Calculations、MMFF94、Perform MMFF94 minimization の順に選択します。

Preferences タブで、**Enable Multiprocessor support** を選択します。

MMFF94 原子タイプの表示

モデルの MMFF94 原子タイプを、計算を実行することなく表示できます。Atom Property テーブルには、各原子の名前、原子タイプ、および電荷が表示されます。

モデルの MMFF94 原子タイプのリストを表示するには、次の操作を行ってください。

1. View メニューの Atom Property Table をクリックします。
2. Calculations、MMFF94、Set Up MMFF94 Atom Types and Charges の順に選択します。

ポテンシャル エネルギーの計算

モデルのポテンシャル エネルギーを MMFF94 で計算できます。事前にエネルギー最小化を実行する必要はありません。

1. Calculations、MMFF94、Calculate MMFF94 Energy and Gradient の順に選択します。

1. ダイアログ ボックスで Run をクリックします。
2. 結果を表示するには、View メニューの Atom Property Table をクリックします。

非結合エネルギーは、相互作用を起こしうるすべての非結合原子対のエネルギーの和です。具体的には、それら原子のすべてについてファンデルワールス相互作用と静電相互作用を足し合わせたものになります。

静電計算

静電エネルギーは、分子の非結合原子の電荷、非結合原子間の距離、分子の誘電率の関数で表され、環境による静電相互作用の減衰を説明します。これにより、空間的に近接した粒子や原子間の相互作用と、離れた位置にある原子間の相互作用が考慮されます。厳密な方法、高速多重極展開法 (FMM)、および適応型ツリー法 (ATC) の 3 方式がサポートされています。こうして静電相互作用が近似されるため、カットオフ手法は計算に必要ではありません。

静電エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. Calculations、MMFF94、Perform MMFF94 minimization の順に選択します。Perform MMFF94 Minimization ダイアログ ボックスが表示されます。
2. Electrostatic Calculations タブをクリックします。
3. 計算手法を選択します。
 - 厳密な計算法では、誘電率および誘電指数の値を設定します。誘電指数の値は 1 または 2 となります。
 - 高速多重極展開法では、精度および展開レベルの値を設定します。
 - 適応型ツリー法では、テイラー展開の次数、BMAX MAC 許容パラメータ、ノードあたりの最大粒子数を設定します。
4. Run をクリックします。出力ウィンドウに計算結果が表示されます。

 **注意:** FMM または ATC の使用時には、ファンデルワールスのカットオフ手法の 1 つを使用することを強くお勧めします。そうしないと、原子の数 N に対してファンデルワールス項の数が N の 2 乗の規模になってしまいます。

ファンデルワールス計算

ファンデルワールス計算は、非結合エネルギーに関する計算です。引力は近距離で発生し、作用し合う原子どうしが数オングストローム離れただけで急速に減衰します。相互に作用する原子間の距離が各原子の接触半径の和よりも少しでも小さくなると、斥力が生じます。原子の数が増えるほど、ファンデルワールス計算にかかる時間は延びます。Chem3D には、原子の増加に伴うファンデルワールス計算の所要時間増大を回避するために、次の 3 つのカットオフ手法が導入されています。

- シフト関数
- スイッチング関数
- トランケーション関数

ファンデルワールス計算を実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、MMFF94、Perform MMFF94 minimization** の順に選択します。Perform MMFF94 Minimization ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **van der Waals Calculations** タブをクリックします。
3. カットオフ手法を使って計算を行うには、**Exact calculation** をオフにします。
4. カットオフ手法を選択し、対応するパラメータの値を設定します。
5. **Run** をクリックします。出力ウィンドウに計算結果が表示されます。

エネルギー最小化

モデルを作成したときに、各原子の位置が実際の分子中の原子の位置を正確に表していない場合があります。モデルでは、さまざまな結合に高い歪エネルギーが示されたり、原子間に立体配座の歪みが生じることがあります。その結果、モデルが分子を正確に表していない可能性があります。

モデルを修正するには、MM2 または MMFF94 のエネルギー最小化計算を実行します。計算を実行すると、Chem3D はモデルを検査し、各種の原子タイプを識別します。次に、モデルのポテンシャル エネルギーの累積値が最小になるように各原子の新しい位置が計算されます。新しい位置の計算後、Chem3D は、総エネルギーが最小になるようにモデル内の各原子を移動します。

二重結合を含むリン酸基を作画したモデルではエネルギーを最小化できません。リン酸基を含み、最小化が可能なモデルの作成の詳細については、[Chem3D Drawing FAQ ページ](#)を参照してください。

立体配座サンプリング

確率的立体配座サンプリングは、初期状態における構造や原子の座標、確定済みの結合から、分子の妥当な立体構造を決定します。

原子の X、Y、Z 初期座標のそれぞれは乱数との組み合わせによって変更され、新たなランダム座標位置が生成されます。

こうして歪められた立体配座は、MMFF94 計算を使った最小化の処理を経て保存されます。その後、また別の乱数群が生成され、それらを用いて新たな構造の原子の座標や立体エネルギーが計算されます。

立体配座サンプリングを実行するには、次の操作を行います。

1. **Calculations、MMFF94、MMFF94 Stochastic Conformation Sampling** の順に選択します。ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 最大のランダム オフセット値を nm で指定します。
3. 表示する立体配座の数を指定します。
4. 最小化の最大ステップ数を指定します。
5. **Run** をクリックします。結果が出力ウィンドウに表示されます。

 **注意:** 立体配座サンプリングの確率的方法は、マクロ分子には適用できません。

6. 立体配座を表示するには、**View**、**Model Explorer** の順にクリックし、フラグメント リストから選択します。

MMFF94 を使ったエネルギー最小化

MMFF94 による最小化を実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**MMFF94**、**Perform MMFF94 Minimization** の順に選択します。Perform MMFF94 Minimization ダイアログ ボックスが表示されます。
2. Perform MMFF94 Minimization ダイアログ ボックスの **Preferences** タブで、次のオプションのいずれかを選択します。
 - **Display Every Iteration** - 計算中にモデルを表示します（表示や記録をそれぞれの繰り返しのたびにを行うと計算時間が延びます）。
 - **Copy Measurements to Output Box** - 各測定値を Output ウィンドウに表示します。
 - **Setup new Atom Types before Calculation** - モデルで定義したカスタムの MMFF94 原子タイプが削除されます。これらを残すには、このオプションをオフにします。
 - **Setup new Atom Charges before Calculation** - Atom Property テーブルに入力したカスタムの電荷が置き換えられます。カスタムの電荷を残しておくには、このオプションをオフにします。
3. **Run** をクリックします。結果が出力ウィンドウに表示されます。

MM2 を使ったエネルギー最小化

MM2 に基づいて分子エネルギーを最小化するには、次の操作を行ってください。

1. Measurement テーブルの **Optimal** 列を設定します (**View** メニューの **Measurement table** をクリック)。
2. **Calculations**、**MM2**、**Minimize Energy** の順に選択します。
3. Minimization Energy ダイアログ ボックスで、必要に応じて次のオプションを選択し、**Run** をクリックします。
 - **Minimum RMS Gradient** - ポテンシャル エネルギー面の勾配の収束基準を指定します。大きな値を指定すると、計算時間は短縮されますが計算結果の精度は低くなります。小さな値を指定すると、計算結果は正確になりますが計算時間は長くなります。(既定値の 0.100 は適正な値です)。
 - **Display Every Iteration** - 計算中にモデルを表示します（繰り返しのたびに表示を行うと計算速度が低下します）。
 - **Copy Measurements to Output Box** - 各測定値を Output ウィンドウに表示します。
 - **Select Move Only Selected Atoms** - 最小化の実行中におけるモデルの選択部分の動きを制限します。計算結果への影響はありません。

 **注意:** 最小化を中断するには、**Computing** ダイアログ ボックスで **Stop** をクリックします。

 **注意:** MM2 定数を変更する前に、まずパラメータ テーブルのバックアップ コピーを作成します。

 **注意:** MM2 でサポートされていない原子タイプを含む構造の最小化を試みると、Chem3D によってパラメータが推測されます。

計算が開始されると、計算のたびにデータが出力ウィンドウに表示されます（ただし、**Copy Measurements to Output** オプションを選択していない場合は、前回の計算結果だけが表示されます）。

RMS 勾配が指定した値より小さくなると最小化が終了し、各立体エネルギー コンポーネントと全体のエネルギーの最終的な値が Output ウィンドウに表示されます。

中間の最小化ステータスに関するメッセージが出力ウィンドウに表示されることもあります。また、最小化開始時の立体配座が適切でないため、最小化が正常に終了できなかった場合もメッセージが表示されます。

モデル内での移動、追加、および削除を除く操作を Chem3D で行うことができます。たとえば、最小化の実行中に、ウィンドウの移動、設定の変更、あるいはモデルのサイズ変更ができます。

エネルギー最小化の例

エタン。最小エネルギー（ねじれ型）と最大エネルギー（重なり型）配座がそれぞれ 1 つずつしかないエタンにより、最小化の単純な例を示します。

エタンのエネルギーを最小化するには、次の操作を行ってください。

1. (オプション) **View、Model Display、Display Mode、Ball & Stick** の順に選択します。
2. エタンのモデルを空白のウィンドウに作成します。
3. (オプション) **View、Model Display、Show Serial Numbers** の順に選択します。
4. **Calculations、MM2、Minimize Energy** の順に選択します。
5. **Run** をクリックします。

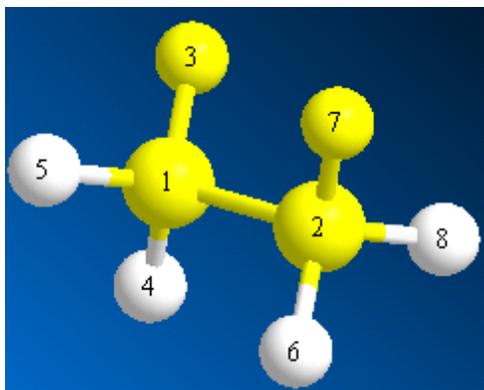
Output ボックスに計算結果が表示されます。

この立体配座の全立体エネルギーは 0.8180 kcal/mol です。この内の大半を占めているのが 1,4 van der Waals 項で、0.6756 になっています。これは H-H の斥力によるものです。

 **注意:** ここに表示される各エネルギー項目の値はおよその値です。計算に使用されているプロセッサの種類によって、多少値が異なる場合があります。

1,4 van der Waals 項に影響する二面角の値を表示するには、次の操作を行ってください。

1. Shift キーを押しながら、**H(7)、C(2)、C(1)、H(4)** の順にクリックして、次の図で二面角を形成する原子を選択します。



2. **Structure、Measurements、Display Dihedral Measurement** の順に選択します。

Measurement				
	Display	Atoms	Actual (° / Å)	Optimal (° / Å)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	H(6)-C(1)-C(2)-H(5)	-60.1551	

図 6.1: エタンの二面角データ

二面角は、エタン モデルの最もエネルギーの小さい立体配座を表します。

Optimal 列に値を入力すると、最小化ルーチンに制約が課されます。

上記の操作では、遷移状態に最適化するために、立体エネルギー計算のねじれ項のエネルギー一定数を大きくしたことになります。

1. 回転ツールを選択します。
2. X および Y 軸回転バーをドラッグして、モデルを配向し、先端を手前に表示します。

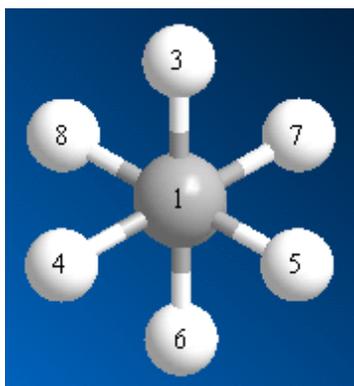


図 6.2: 終端が手前に表示されているエタン モデル

次に、回転障壁を設定するために、遷移状態の立体配座で最小化を収束させます。

1. **Measurement** テーブルで、「0」を選択した二面角の **Optimal** 列に入力し、Enter キーを押します。
2. **Calculations**、**MM2**、**Minimize Energy** の順に選択します。Minimize Energy ダイアログ ボックスが表示されます。
3. **Run** をクリックします。

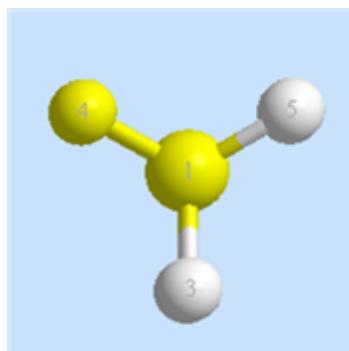


図 6.3: 終端が手前に表示されている最小化されたエタン

最小化が完了すると、モデルは重なり型の構造になり、エネルギー値が Output ウィンドウに表示されます。エネルギーは重なり型立体配座の方が、ねじれ型立体配座よりも大きくなっています。エネルギー値に大きな影響を及ぼすのは、ねじれエネルギーと 1,4 van der Waals 相互作用です。

注意: ここで表示されるエネルギー項の値は近似値であるため、計算に使用されているプロセッサの種類によって多少値が異なる場合があります。

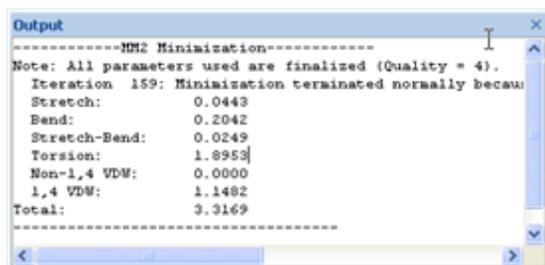


図 6.4: 重なり型エタン モデルの出力

また、制約が課されたため、二面角の Actual 列が 0 になっています。

グローバル ミニマム (前回の計算合計) と遷移状態 (今回の計算合計) のエネルギー差は 2.50 kcal/mole となります。

説明をさらに進めるために、二面角の Optimal 列の値を削除します。次に、計算ツールバーの MM2 アイコンをクリックします。

最小化が終了した時点でも、二面角は 0 度のままです。MM2 最小化を適用する場合には、この点を考慮する必要があります。MM2 最小化はエネルギーの一次導関数を使って、次にエネルギーが低くなる点を決定します。ただし、鞍点 (遷移状態) ではほとんど勾配がないため、MM2 は最小点に達していると判断し、処理を行いません。開始点が最小点でないと思われる場合は、二面角を 2 度ほどずらした後、もう一度最小化を行ってください。シクロヘキサン。この例では、シクロヘキサンのねじれ舟型立体配座と、グローバル ミニマムである椅子型を比較します。

ニトロベンゼンのモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

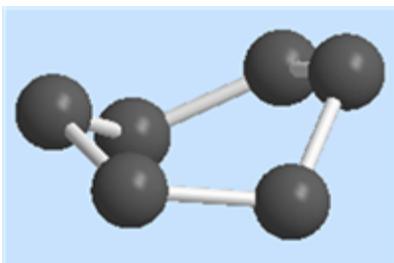
1. File メニューの **New** をクリックします。空のモデル ウィンドウが表示されます。
2. テキスト作成ツールを選択します。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. 「CH2 (CH2) 5」と入力し、Enter キーを押します。

注意: シクロヘキサンのモデルを作成する方法はいくつかありますが、この例では前述の方法を使用してください。

最小化を行う前に、**Clean Up Structure** コマンドを使ってモデルを整えておきます。通常このコマンドを実行すると、Minimize Energy コマンドで最小点に到達する可能性が高くなります。

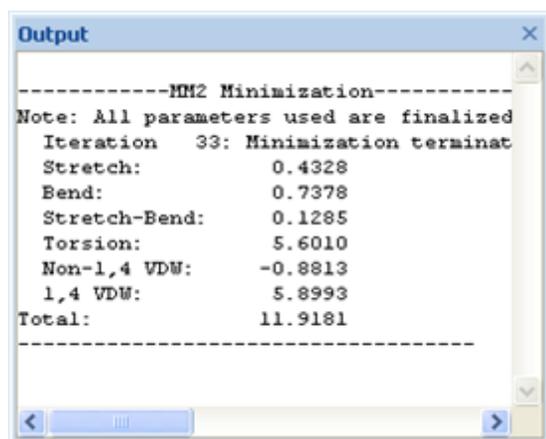
1. Edit メニューの **Select All** を選択します。
2. Structure メニューの **Clean Up** をクリックします。

最小化を実行するには、**Calculations**、**MM2**、**Minimize Energy**、**Run** の順に選択します。
最小化が終了したら、モデルを次の図のように配向します。



収束した立体配座は、グローバル ミニマムを表す見慣れた椅子型立体配座になっていません。モデルが収束したのは、ローカル ミニマムを表すねじれ舟型立体配座です。これは、開始時の立体配座から最も近くにある小エネルギーの立体配座であるということです。

既にエネルギーが最小化されている部分構造を使ってこの構造を作成した場合、つまり ChemDraw パネルの場合は椅子型立体配座に近くなります。MM2 では鞍点を越えてグローバル ミニマムを見つけられないため、最も近くにあるエネルギー最低点が検索されます。



```

-----MM2 Minimization-----
Note: All parameters used are finalized
Iteration   33: Minimization terminat
Stretch:           0.4328
Bend:              0.7378
Stretch-Bend:     0.1285
Torsion:           5.6010
Non-1,4 VDW:     -0.8813
1,4 VDW:          5.8993
Total:            11.9181
  
```

図 6.1: ねじれ舟型立体配座のエネルギー値

モデルの要素のほとんどが 1,4 van der Waals 項とねじれ型の項で占められています。

シクロヘキサンの場合、ローカル ミニマム（ねじれ舟型）が 6 通り、グローバル ミニマム（椅子型）が 2 通り、遷移状態が多数（舟型立体配座 1 つを含む）存在します。

最も単純な分子でない限り、グローバル ミニマムを求めるのはとても困難です。ローカル ミニマムの谷ではなく、グローバル ミニマムの谷にある立体配座から処理を開始する必要があります。シクロヘキサンの場合、グローバル ミニマムは 2 つの椅子型立体配座のどちらかです。したがって、新しい開始時の立体配座を求めるには、ねじれ型配座の二面角を変更して、椅子型配座のポテンシャル エネルギーの谷を表すようにします。二面角を正確に変更するには、二面角を表示しながら、Measurement テーブルの Actual 値を変更します。ただし、特に環の場合には、原子をドラッグして移動し、移動後の立体配座を最小化するほうが簡単です。

二面角を変更するには、次の操作を行ってください。

1. C1 を環の平面より下にドラッグします。手が付いたボックス型のカーソルが表示されます。
2. C4 を環の平面より上にドラッグします。

原子をドラッグすると、結合長と結合角が変更されます。最小化する前に最適値に戻すには、選択ツールでボックスをドラッグしてモデルを選択し、Clean Up を実行します。

それから最小化を実行します。

1. **Calculations**、**MM2**、**Minimize Energy**、**Run** の順に選択します。最小化が終了するまで待ちます。
2. 回転バーを使ってモデルを配向して、最終的な椅子型立体配座を表示します。

 **注意:** ここで表示されるエネルギー項の値は近似値であるため、計算に使用されているプロセッサの種類によって多少値が異なる場合があります。

各エネルギー項と全体のエネルギーを見ると、この立体配座はねじれ舟型に比べ約 5.5 kcal/mole 安定していることがわかります。

分子がシクロヘキサンより複雑で、グローバル ミニマムでの形状が分からない場合は、他の方法でエネルギー最小化のための初期構造を見つける必要があります。大きいエネルギーでの障壁を持つ分子の立体配座空間を探索する方法として、分子力学シミュレーションがあります。つまり、分子を加熱することにより運動エネルギーを増加させ、エネルギー曲面からは好ましくない遷移状態を超えることができます。

分子動力学

分子動力学では、ニュートン力学を使って原子運動のシミュレーションを行います。運動のシミュレーションを行うには、分子の温度を変化させて、運動エネルギーを高めたり低めたりします。

分子動力学では、計算結果を毎回保存して後で各フレームを調べることにより、モデルで利用可能な立体配座空間が得られます。

分子動力学によるシミュレーションは、MM2 と MMFF94 のどちらかを使用して実行します。

MMFF94 を使用した分子動力学シミュレーション

分子動力学でシミュレーションを実行するには、次の操作を行ってください。

1. 計算に使用するモデル（またはフラグメント）を作成します。

 **注意:** 分子動力学の計算速度は、使用するモデル表示タイプによって異なります。計算速度は、ワイヤー フレーム < スティック < ボール & スティック < シリンダ結合 < リボン < 空間充填およびファンデルワールス ドット面 < 分子表面の順に遅くなります。

2. シミュレーション中に測定値を表示するには、次の操作のいずれかを行ってください。

- **Structure**、**Measurements**、**Generate All Bond Angles** の順に選択します。
- **Structure**、**Measurements**、**Generate All Bond Lengths** の順に選択します。

3. Measurement テーブルで、必要な測定値を選択します。

4. **Calculations**、**MMFF94**、**MMFF94 Molecular Dynamics** の順に選択します。Molecular Dynamics ダイアログボックスが表示されます。

5. 適当な値を入力します。

ステップ間隔. シミュレーション ステップの間隔をフェムト秒 (fs) 単位で指定します。ステップの間隔は周波数が最も高い標準モードである振幅周期の 5% 未満に設定する必要があります (たとえば、3336 cm⁻¹ H-X 伸縮振幅の場合は 10 fs)。通常は、ステップ間隔を 1 fs または 2 fs に設定すると、妥当な結果が得られます。ステップ間隔が長くなると、ビーマン アルゴリズムの実行中、位置の高次モーメントが無視されるため、積分法が失敗する恐れがあります。

フレーム間隔. フレームや統計的数値を収集する間隔を指定します。フレーム間隔を 10 fs または 20 fs に設定すると、フレームがかなり滑らかに連続します。長い計算処理の途中で立体配座空間のサンプル データを収集したい場合には、100 fs 以上に設定します。

Terminate After. 指定したステップ数の後、分子力学計算が停止します。起動の合計時間は「ステップ間隔」に「ステップ数」を掛けたものです。

Heating/Cooling Rate. 温度調節を行うかどうかを指定します。Heating/Cooling Rate チェック ボックスがオンになっている場合、Heating/Cooling Rate スライダは、目標の温度からかけ離れている時に、モデルのエネルギーを増減する速度を指定します。

(総エネルギーが一定である) 等エンタルピー軌道を計算するには、Heating/Cooling Rate チェック ボックスをオフにします。

目標温度. 計算を行う最高温度を指定します。計算した温度とこの目標温度の差が 3% を超える場合は、モデルのエネルギーの増減が行われます。

この時に使用される計算温度は、直前約 20 ステップ (記憶可能な容量の半分) の温度指数の荷重平均です。

6. Run をクリックします。

ジョブの保存

計算を実行する前にダイアログ ボックスの **Save As** ボタンをクリックすると、ジョブ タイプと設定が JDF ファイルに保存されます。保存してからこれらの計算を後の作業セッションで実行できます。

計算の開始

計算を開始するには、Run をクリックします。計算が開始されます。出力ウィンドウに、計算ごとのメッセージと監視されているデータが表示されます。終了前に計算を停止するには、Calculations ツールバーの Stop をクリックします。

MM2 を使用した分子動力学シミュレーション

分子動力学でシミュレーションを実行するには、次の操作を行ってください。

1. モデル (またはフラグメント) を作成します。

 **注意:** 分子動力学の計算速度は、使用するモデル表示タイプによって異なります。計算速度は、ワイヤー フレーム < スティック < ボール & スティック < シリンダ結合 < リボン < 空間充填およびファンデルワールス ドット面 < 分子表面の順に遅くなります。

2. シミュレーション中に特定のデータを監視するには、適切な原子を選択し、次の操作のいずれかを行ってください。
 - Structure、Measurements、Set Bond Angle の順に選択します。
 - Structure、Measurements、Set Bond Length の順に選択します。

3. **Calculations**、**MM2**、**Molecular Dynamics** の順に選択します。Molecular Dynamics ダイアログ ボックスが表示されます。

4. 適当な値を入力します。

ステップ間隔. 各ステップ間隔を指定します。ステップの間隔は周波数が最も高い標準モードである振幅周期の 5% 未満に設定する必要があります (たとえば、3336 cm^{-1} H-X 伸縮振幅の場合は 10 fs)。通常は、ステップ間隔を 1 fs または 2 fs に設定すると、妥当な結果が得られます。ステップ間隔が長くなると、ビーマン アルゴリズムの実行中、位置の高次モーメントが無視されるため、積分法が失敗する恐れがあります。

フレーム間隔. フレームや統計的数値を収集する間隔を指定します。フレーム間隔を 10 fs または 20 fs に設定すると、フレームがかなり滑らかに連続します。長い計算処理の途中で立体配座空間のサンプル データを収集したい場合には、100 fs 以上に設定します。

Terminate After. 指定したステップ数の後、分子力学計算が停止します。起動の合計時間は「ステップ間隔」に「ステップ数」を掛けたものです。

Heating/Cooling Rate. 温度調節を行うかどうかを指定します。Heating/Cooling Rate チェック ボックスがオンになっている場合、Heating/Cooling Rate スライダは、目標の温度からかけ離れている時に、モデルのエネルギーを増減する速度を指定します。

Heating/Cooling Rate を約 1.0 kcal/atom/picosecond に設定すると、軌跡の変動が最小限になるように穏やかなエネルギー修正が行われます。この値を大きくすると、モデルは急速に加熱されますが、統計上意味がある結果を得るには、平衡化または安定化のための時間が必要です。

(総エネルギーが一定である) 等エンタルピー軌道を計算するには、Heating/Cooling Rate チェック ボックスをオフにします。

目標温度. 計算を行う最高温度を指定します。計算した温度とこの目標温度の差が 3% を超える場合は、モデルのエネルギーの増減が行われます。

この時に使用される計算温度は、直前約 20 ステップ (記憶可能な容量の半分) の温度指数の荷重平均です。

5. **Run** をクリックします。

6. (オプション) 終了前に計算を停止するには、**Stop** ボタンをクリックします。

ジョブの保存. 計算を実行する前にダイアログ ボックスの **Save As** ボタンをクリックする

と、ジョブ タイプと設定が JDF ファイルに保存されます。保存してからこれらの計算を後の作業セッションで実行できます。

計算の開始. 計算を開始するには、**Run** をクリックします。計算が開始されます。出力ウィンドウに、計算ごとのメッセージと監視されているデータが表示されます。指定した数のステップが実行されるとシミュレーションは終了します。終了前に計算を停止するには、**Calculations** ツールバーの **Stop** をクリックします。

Job Type の設定. Job Type タブで計算のオプションを設定します。

以下のオプションから選択します。

Show Step Information. Output ボックスに毎回の計算結果が表示されます。

Copy Measurements to Output Box. 特定の計算を監視します。

Move Only Selected Atoms. 最小化中、選択した分子の動きを制限します。

Save Step Data In. 各ステップの時間（ピコ秒単位）、エネルギー総量、ポテンシャル エネルギー、温度のデータを保存します。加熱または冷却が行われたステップには、“Heating” または “Cooling” が表示されます。このデータのサマリは、新しいフレームが作成されるたびに、Message ウィンドウに表示されます。

計算が開始されます。出力ウィンドウに、計算ごとのメッセージとデータが表示されます。

指定した数のステップが実行されるか、ユーザーが計算を停止すると、シミュレーションは終了します。

例. ポリテトラフルオロエチレン（PTFE）の短セグメントの分子力学軌跡の計算
モデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツールを選択します。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. テキスト ボックスに「F(C2F4)6F」と入力し、Enter キーを押します。

モデル ウィンドウに、テトラフルオロエチレンの構造が 6 つ繰り返されたポリマー セグメントが表示されま

す。

計算を実行するには、次の操作を行ってください。

1. 左端にある炭素 C(2) を選択し、Shift キーを押しながら右端の炭素 C(33) をクリックします。
2. **Structure、Measurements、Display Distance Measurement** の順に選択します。

分子全体の長さが Measurement テーブルに表示されます。

3. **Calculations、MM2、Molecular Dynamics** の順に選択します。
4. **Run** をクリックします。

計算が開始されると、出力ウィンドウが表示されます。

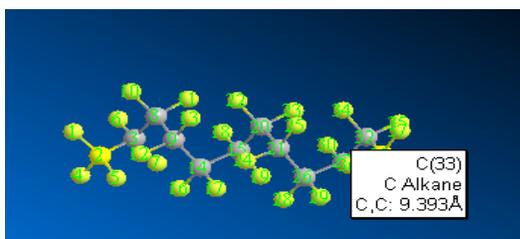


図 6.2: 計算前の C(2) - C(33) の距離

計算前の C(2) - C(33) の距離は約 9.4 Å になっています。

5. 出力ウィンドウの一番下までスクロールし、分子の C(2) - C(33) の距離を調べます。

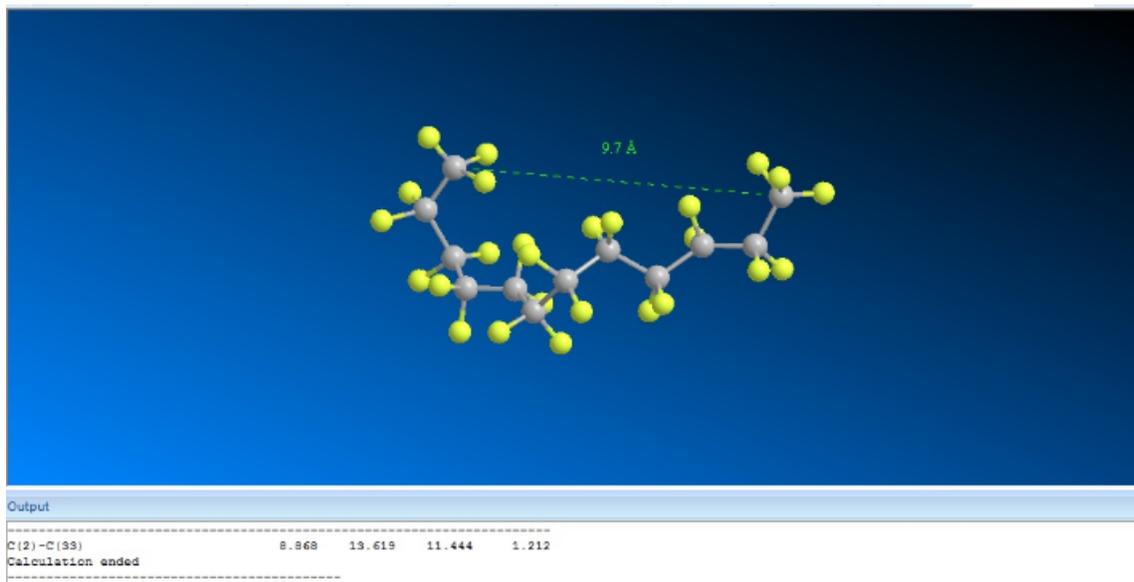


図 6.3: 計算後の C(2) - C(33) の距離

Gaussian

Gaussian は、*ab initio* 法と半経験法の両方を使用する、コマンドライン ベースの計算化学アプリケーションです。

 **注意:** Gaussian は、Chem3D をインストールしているシステムにインストールする必要があります。

Chem3D には、Gaussian 計算用のインターフェイスが用意されています。このバージョンでは以下の機能を含め、すべての Gaussian 計算がサポートされています。

- ^{13}C および ^1H NMR スペクトル予測
- IR および Raman スペクトル予測
- 複数ステップのジョブ
- 部分構造最適化
- DFT 手法のサポート
- 上級モード

Chem3D では、Gaussian を使用して NMR、IR/Raman、および UV/VIS のスペクトルを予測できます。スペクトルを計算するには、**Calculations** メニューの **Gaussian Interface** をクリックし、目的のスペクトルを選択します。

 **注意:** 使用するコンピュータの速度とメモリ容量によっては、大きなモデルの Gaussian 計算に数分間かかる場合があります。

- ヒント:** スペクトルの予測を実行する前にエネルギーの最小化を実行してください。Gaussian によるエネルギー最小化より MM2 の方が高速で、一般には適切でもあります。モデルが最小エネルギー状態にないと、Gaussian でスペクトルを生成できない場合があります。

スペクトルの表示

予測されたスペクトルを表示するには、**View** メニューの **Spectrum Viewer**. 対象の化合物に対して実行する予測ごとに、スペクトル ビューアに新しいタブが表示されます。

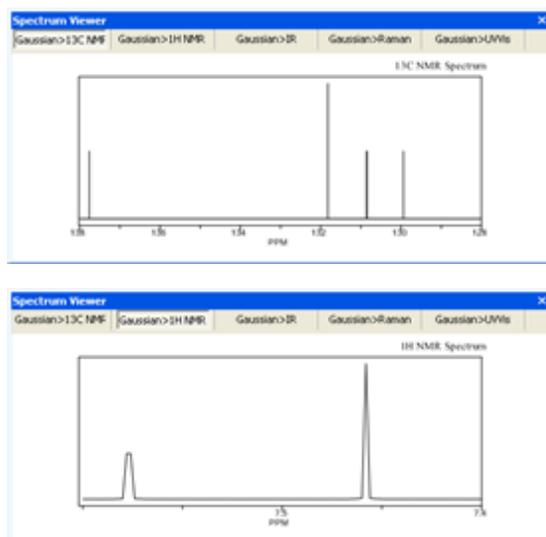


図 6.4: クロロベンゼンの予測スペクトル

- ヒント:** スペクトル ビューアを使用すると、Gaussian 以外の計算エンジンで作成されたスペクトルも表示できます。例については、“GAMESS” ページ 138を参照してください。

複数ステップのジョブ

複数のジョブを連結して 1 つのコマンドで実行することができます。連結できるジョブの数に制限はありません。複数のジョブを実行するには、次の操作を行ってください。

1. 1 番目のジョブ（通常は最小化）を選択するには、**Calculations** メニューの **Gaussian Interface** をクリックして目的のジョブを選択します。
2. キューに新しいジョブを追加するには、+ボタンをクリックし、Job Type ドロップダウン リストを使用します。
3. (オプション) キューからジョブを削除するには、Link タブを選択し、-ボタンをクリックします。
4. ジョブ キューを実行します。途中で実行を終了するには、Calculations ツールバーの停止ボタンをクリックします。

部分構造最適化

部分構造最適化を実行するには、次の操作を行ってください。

1. モデルの一部を選択します。選択部分の最適化と選択外の部分の最適化のどちらを行うこともできます。
2. **Calculations, Gaussian Interface, Optimize to Transition State** の順に選択します。Gaussian Interface ダイアログ ボックスの **Coord. System** テキスト ウィンドウで、**Internal Coordinates** をクリックします。
3. **Move Which** テキスト ウィンドウで、選択した原子と選択していない原子のどちらの最適化を行うのかを指定します。
4. **Run** をクリックします。

 **注意:** Gaussian 16 を使用する場合、計算は Gaussian インターフェイス上で行われるため、結果を Chem3D で表示するには Gaussian 16 インターフェイスを閉じる必要があります。

入力テンプレート

入力テンプレートは、値が最適化された変数で特定のフィールドを置き換えるテンプレート ファイルです。テンプレート ファイルを使用して、エネルギー評価それぞれの現在の変数値を含む実際の Gaussian 入力ファイルを作成します。その後 Gaussian の固定点計算を実行すると、各ステップでこのエネルギーが計算されます。Gaussian Interface ダイアログ ボックスの **General** タブに入力テンプレートがあります。チェック ボックスで出力パラメータを設定でき、実行ファイル内でキーワードを編集できます。

上級モード

専門の方は、入力テンプレートのようなテキスト入力ウィンドウを直接使用することができます。**Calculations, Gaussian Interface, Use Advanced Mode** の順に選択します。**Online Gaussian Keywords** をクリックすると、Gaussian Web サイトのキーワードのページが表示されます。

遷移状態への最適化

モデルを遷移状態に最適化するには、できるだけ遷移状態に近い立体配座から始める必要があります。このアルゴリズムではローカル ミニマムやグローバル ミニマムの位置から構造を変化させることはできませんので、出発点にしないようにしてください。

遷移状態に最適化するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations, Gaussian Interface, Optimize to Transition State** の順に選択します。Gaussian Interface ダイアログ ボックスが表示され、既定の Job Type として **Optimize to Transition State** が表示されます。
2. 標準設定を使用することも、独自のパラメータを設定することもできます。
 **注意:** Gaussian に熟練していない場合は、**Transition State** の標準設定を使用してください。
3. **Properties** タブで、最適化した最終的な立体配座から計算したい特性を選択します。
4. **General** タブで、最適化の変更に使用するキーワードがあれば入力します。
5. **Run** をクリックします。

エネルギーの最小化

エネルギー最小化は一般に、モデルに対して実行する最初の分子計算です。モデルの全体または一部のエネルギーを最小化することができます。モデルの一部についてエネルギーを最小化するには、まず最小化の対象または対象外とする部分を選択します。“[その他のオプション](#)” ページ 111を参照してください。

1. **Calculations, Gaussian Interface, Minimize (Energy/Geometry)** の順に選択します。Gaussian Interface ダイアログ ボックスが表示され、デフォルトの Job Type として Minimize が表示されます。

2. Jobs タブのデフォルト設定を選択するか、独自のパラメータ設定を行います。

Jobs タブで使用できるさまざまなフィールドを次に示します。

Job Type. 各種タイプの計算のデフォルトを設定します。

Method. 手法を選択します。

Basis Set. 基底関数系を指定します。基底関数系はほとんどの方法で指定する必要があります。例外については、Gaussian ヘルプを参照してください。

Wave Function. 閉殻系または開殻系を選択します。詳細については、“[電子構成の指定](#)” ページ 282を参照してください。

Polarization. 重原子 (P、S、またはそれ以上) の分極関数を指定します。

H. 分極関数を選択した場合は、H 関数を選択します。

Diffuse. 基底関数系に拡散関数を追加します。拡散関数を使用する場合は、**Advanced** タブの **Tight Convergence** を指定します。詳細については Gaussian のマニュアルを参照してください。

Advanced タブには、頻繁には調整しないパラメータが表示されます。選択したジョブ タイプに適用されるパラメータのみが有効になっています。

最小化の場合の適用されるパラメータは次のとおりです。

Solvation Model. 溶媒和モデルを選択します。手法の詳細については、Gaussian マニュアルの SCRF キーワードの項を参照してください。

Solvent. 溶媒和モデルを選択すると、溶媒を選択できます。すべてのモデルのデフォルトの溶媒は水です。

Force Constants. 選択できる項目は次のとおりです。

- No calculation
- Initial force constants (CalcFC)
- Calculate at each point (CalcAll)

Population Analysis. 選択できる項目は次のとおりです。

- None — オプションなし
- Full — Regular と同じ。ただし、すべての軌道を対象とします。
- Minimum — 総原子荷電と軌道エネルギーを表示します。
- Regular — 上位 5 つの最高被占軌道と下位 5 つの最低仮想軌道、および密度マトリクスと全 Mulliken Population Analysis を表示します。

その他のオプション

デフォルトでは、Gaussian の計算速度を向上させるため、緩やかな収束基準が使用されます。**Use Tight Convergence Criteria** チェック ボックスをオンにすると、入力テンプレートに「tight」というキーワードが追加され、完全な収束が指定されます。デフォルトの **Use Formal Charge** チェック ボックスをオフにすると電荷を追加できます。または、**Spin Multiplicity** を変更することもできます。スピンには正の整数を指定します。電荷はプラスにもマイナスにもできます。

Internal Coordinate を選択すると、**Selected Atoms** と **Unselected Atoms** のいずれかを選択してモデルの一部のみを最小化できます。

General タブでは、出力を制御するパラメータを設定します。

Display Every Iteration. 計算結果を毎回表示して最小化プロセスをその場で確認します。

 **注意:** *Display Every Iteration* パラメータを使用すると、構造の最小化にかかる時間が伸びます。

Show Output in Notepad. 出力をメモ帳形式のファイルに送信します。

Send Back Output. 各測定値を Output ウィンドウに表示します。

 **注意:** *Send Back Output* パラメータを使用すると、構造の最小化にかかる時間が伸びます。

遷移状態への最適化. モデルを遷移状態に最適化するには、できるだけ遷移状態に近い立体配座から始める必要があります。このアルゴリズムではローカル ミニマムやグローバル ミニマムの位置から構造を変化させることはできませんので、出発点にしないようにしてください。

物性特性の計算

モデルの特性を予測する際、計算のパラメータを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**Gaussian**、**Compute Properties** の順に選択します。Gaussian Interface ダイアログ ボックスが表示され、Properties タブが開きます。
2. 予測する特性を選択します。
3. **Run** をクリックします。

 **注意:** *Gaussian 16* を使用する場合、計算は *Gaussian* インターフェイス上で行われるため、結果を *Chem3D* で表示するには *Gaussian 16* インターフェイスを閉じる必要があります。

ジョブ記述ファイル形式

ジョブ記述ファイルには、Preferences ファイルの場合と同様に、ダイアログ ボックスの設定値が保存されます。以下に説明するように 2 つの種類があります。

JDT 形式. JDT 形式は、ジョブ タイプを指定できるテンプレートです。Minimize Energy ジョブ タイプと Compute Properties ジョブ タイプは、読み取り専用ジョブ タイプの例です。

JDF 形式. JDF 形式は、ジョブ記述を保存するためのものです。ダイアログ ボックス内の **Save** をクリックすると、警告や確認のダイアログ ボックスの表示なしに変更が保存されます。

どちらかのファイル形式でファイルを Gaussian Job フォルダに保存すると、Gaussian サブメニューにそのファイルが追加され、それ以降のアクセスが容易になります。

入力ファイルの作成

Gaussian 入力ファイルを作成して実行することができます。この方法は、同じ計算を何度も実行したり、別のコンピュータで再び実行する場合に便利です。入力ファイルを作成するには Gaussian をインストールする必要があります。

1. モデルを開くか、作成します。
2. **Calculation**、**Gaussian Interface**、**Create Input File** の順に選択します。
3. **Create** をクリックします。

入力ファイルの実行

GJF Gaussian 入力ファイルが既に作成してある場合は、Chem3D 内からそのファイルを実行することができます。

Gaussian 入力ファイルを実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Run Input File** の順に選択します。Run Gaussian Input file ダイアログ ボックスが表示されます。
2. Gaussian ファイルの完全なパスを入力するか、ファイルの場所を閲覧します。
3. 適切なオプションを選択します。
 - a. Show Output in Notepad: 出力をメモ帳形式のファイルに保存します。
 - b. Send Back Output: Output ウィンドウに結果を表示します。
4. **Run** をクリックします。

入力ファイルが実行されます。ある時点になると新しいタブが開き、モデル ウィンドウにモデルが表示されます。

Gaussian ジョブの実行

Chem3D では、以前に作成した Gaussian ジョブ記述ファイル (JDF) を選択することができます。JDF ファイルは、特定のダイアログ ボックスに適用する設定をまとめたものです。

どの Gaussian 計算 (Minimize Energy、Optimize to Transition State) のダイアログ ボックスからでも、計算に必要なオプションを設定してから **Save As** をクリックして、JDF ファイルを作成できます。JDF ファイルの詳細については、“[ジョブ記述ファイル形式](#)” ページ 111を参照してください。

Gaussian ジョブを実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Gaussian** サブメニューの **Run Gaussian Job** を選択します。Open ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 実行するファイルを選択します。ファイル内に保存されたジョブ タイプ (たとえば、Minimize Energy、Compute Properties など) に対応するダイアログ ボックスが表示されます。
3. **Run** をクリックします。

Gaussian ジョブの再実行

Gaussian 計算を実行した後、次の操作を行うとジョブを再実行できます。

1. **Gaussian** サブメニューの **Repeat** [計算の名前] をクリックします。ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 必要に応じてパラメータを変更し、**Run** をクリックします。計算が実行されます。

CONFLEX

CONFLEX は、CONFLEX Corporation が開発した立体配座解析パッケージです。CONFLEX を使用すると、モデル内で低エネルギー配座異性体を検索して、最適な状態でそれぞれのフラグメントを作成できます。Chem3D では現在 Conflex バージョン 7.2B を使用しています。CONFLEX を使用するには、モデルが 1 つのフラグメントのみで構成されるようにしてください。CONFLEX が検出するそれぞれの低エネルギー配座異性体は、Model Explorer で別のフラグメントとして表示されます。

エネルギー最小化

CONFLEX のインターフェイスは、分子のエネルギー最小化を実行する際にも役立ちます。以下の力場がサポートされています。

- MM2
- MM3
- EMM2
- MMFF
- MMFF94S

エネルギー最小化を実行するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式のモデルを作成します。
 2. **Calculations**、**CONFLEX Interface**、**Minimize (Energy/Geometry)** の順に選択します。CONFLEX Interface ダイアログ ボックスが表示されます。
 3. Job & Theory タブの以下のオプションから選択します。
 - a. **Energy Potential** を選択します。
 - b. **Optimization Method** を選択します。
 - c. **Max Computation Time** を選択します。
 4. General タブの以下のオプションから選択します。
 - a. **Results in** フィールドでディレクトリを選択します。このディレクトリは、計算結果ファイルが保存される場所です。
 - b. (オプション) **Backup Calculations Files** でディレクトリを選択します。バックアップ ファイルが、選択した場所に保存されます。
 - c. メモ帳に表示する出力ファイルを選択します。計算が終了した後に、選択したファイルがテキスト ファイル形式で表示されます。
 - INI: このファイルに Job & Theory タブで選択したオプションが収集されます。
 - BS0: このファイルに、モデルの構造特性と熱力学特性が出力されます。
 5. **Run** をクリックします。
 6. 確認ボックスで、最小化した分子を Chem3D に戻すかどうか尋ねられたら **Yes** をクリックします。
-  **注意:** General タブで出力ファイルをメモ帳に表示する場合は、ジョブの終了直後に INI ファイルと BS0 ファイルを表示できます。

立体配座検索

配座異性体を検索するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式のモデルを作成します。
2. **Calculations**、**CONFLEX Interface**、**Conformation Search** の順に選択します。CONFLEX Interface ダイアログ ボックスが表示されます。
3. Job & Theory タブの以下のオプションから選択します。
 - a. **Energy Potential** を選択します。
 - b. **Optimization Method** を選択します。
 - c. **Max Computation Time** を選択します。
 - d. **Conformation Search Limit** を選択します。
4. General タブの以下のオプションから選択します。
 - a. **Results in** フィールドでディレクトリを選択します。このディレクトリは、計算結果ファイルが保存される場所です。
 - b. (オプション) Backup Calculations Files でディレクトリを選択します。バックアップ ファイルが、選択した場所に保存されます。
 - c. メモ帳に表示する出力ファイルを選択します。計算が終了した後に、選択したファイルがテキスト ファイル形式で表示されます。
 - INI: このファイルに Job & Theory タブで選択したオプションが収集されます。
 - BS0: このファイルに、モデルの構造特性と熱力学特性が出力されます。
 - FX0: このファイルに、モデルの構造的特徴と、検索された立体配座に関するデータが収集されます。
5. **Run** をクリックします。

MOPAC

Chem3D では、複数の半経験的方法手法を特徴とする分子計算のアプリケーションである MOPAC 2016 がサポートされます。

 **注意:** インストールを確実に成功させるには、*MOPAC2016.exe* をコマンド プロンプトから実行してください。

MOPAC 2016 では、以下を実行できます。

- エネルギーの最小化
 - “構造の最適化” ページ 116
 - 遷移状態への最適化
- 次のような特性の計算
 - 双極子モーメント (“例 1: 双極子モーメント” ページ 124)
 - カチオン安定性 (“例 2: カチオン安定性” ページ 125)
 - 電荷分布 (“例 3: 電荷分布” ページ 126)
 - m-ニトロトルエンの分極率 (“例 4: m-ニトロトルエンの分極率” ページ 127)
 - 相の安定性 (“例 5: 相の安定性” ページ 129)

- 超微細カップリング定数 (“例 6: Hyperfine Coupling Constants (超微細カップリング定数)” ページ 130)
- UHF スピン密度 (“例 7: UHF Spin Density” ページ 132)
- RHF スピン密度 (“例 8: RHF Spin Density” ページ 133)
- MOPAC の物性特性の使用
- MOPAC ファイルの使用

ここで示す各種手順を行うには、半経験的手法の計算概念や用語の他、構造の最適化（エネルギーの最小化）や固定ポイント エネルギー計算などに関する概念についての基礎知識が必要となります。

エネルギーの最小化

通常、エネルギー最小化はモデルにおける分子計算の第一歩です。Calculations、MOPAC Interface、Minimize Energy の順に選択します。MOPAC Interface ダイアログ ボックスが表示され、デフォルトの Job Type として Minimize が表示されます。

Job Type. 各種タイプの計算のデフォルトを設定します。

Method. 手法を選択します。

Wave Function. 閉殻系か開殻系かを選択します。詳細については、“電子構成の指定” ページ 282を参照してください。

Optimizer. 構造最小化ルーチンを選択します。詳細については、“構造の最適化” ページ 116を参照してください。

Move Which. これを選択することによって、モデルの一部に対して最小化できます。

Minimum RMS. ポテンシャル エネルギー曲面の勾配の収束基準を指定します (“Gradient 標準” ページ 120も参照してください)。

Coord. System. 計算に使用する座標系を指定します。

Use keyword 1SCF. SCF を 1 回行って停止することを指定します。

Use keyword MMOK, GEO-OK. アミド結合の分子力学修正を指定し、いくつかの安全チェックを無効にします。

注釈

RMS. エネルギー最小化ルーチンでは、低いエネルギーの探索を中止して現在の値が最小値を表していることを受け入れるタイミングを決定する条件として、直交座標に関するエネルギーの導関数の RMS（二乗平均）が使用されます。理論上、最小のエネルギーに到達した場合の RMS 勾配は 0 ですが、事実上到達することができません。そのため、構造最適化の設定時は、RMS 勾配の既定値が設定されます。

デフォルト値 0.100 は、精度と処理速度の両方を考慮した適切な値であることがわかっています。値を小さくすると、エネルギー最小点により近づけるために処理が継続され、計算時間が長くなります。逆にこの値を大きくすると計算時間は短縮されますが、エネルギー最小点からは遠くなります。最小値でないことが分かっている配座構造に対してより良い最適化を行うだけでなく、比較データを計算し特定したい時にこの値を増やします。

0.01 より小さな値を使用するには、キーワード セクションで LET を指定します (General タブ)。

Wave Function. 波動関数を選択するときは、RHF と UHF のどちらの計算法を使うかを決めます。

- **RHF** 法は、デフォルトのハートレー - フォック近似手法で、閉殻系に使われます。RHF 法を使用するには、**Close Shell (Restricted)** 波動関数を選択します。
- **UHF** 法は、ハートレー - フォック近似手法の代替手法で、開殻系に使われます。UHF 法を使用するには、**Open Shell (Unrestricted)** 波動関数を選択します。超微細結合定数を計算するときは、UHF 波動関数を選択します。

 **注意:** 一般に UHF 計算は RHF 計算に比べてかなり時間がかかります。

構造の最適化

Chem3D は、Eigenvector Following (EF) ルーチンを最小化計算の既定の構造最適化ルーチンとして使用します。代替方式としては次のものがあります。

TS. TS 最適化ルーチンは、遷移状態への最適化に使用されます。これは、**MOPAC Interface** サブメニューの **Optimize to Transition State** を選択すると自動的に挿入されます。

BFGS. 大きなモデル (500 ~ 1,000 個以上の原子を持つモデル) に使用する最適化ルーチンとしては、Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) が推奨されます。BFGS を指定すると、これが EF の代わりに使用されます。

LBFGS. 非常に大きな系では多くの場合、LBFGS が唯一の使用可能な最適化ルーチンです。これは BFGS 最適化ルーチンに基づいていますが、格納する代わりに必要に応じて逆ヘシアンを計算します。この場合メモリがほとんど使用されないため、非常に大きなシステムに適しています。ただし、他の最適化ルーチンと比べて効率はよくありません。

キーワードの追加

General タブをクリックすると、ここで追加の MOPAC キーワードを指定できます。これにより、より厳密な要件を計算に適用できます。たとえば、キーワードを追加することで、収束基準の変更、基底状態ではなく励起状態での最適化、その他の特性の計算などを指定できます。

 **注意:** このダイアログ ボックスのキーワード セクションで指定する特性によって、計算結果が変わることがあります。詳細については、“[キーワードの使用](#)” ページ 279 を参照してください。

Display Every Iteration	計算結果を毎回表示して最小化を確認します。 構造の最小化にかかる時間が 増加します。
Show Output in Notepad	出力をメモ帳形式のファイル に送信します。
Send Back Output	各測定を Output ウィンドウ に表示します。 構造の最小化にかかる時間が 増加します。

遷移状態への最適化.

モデルを遷移状態に最適化するには、できるだけ遷移状態に近い立体配座から始める必要があります。このアルゴリズムではローカル ミニマムやグローバル ミニマムの位置から構造を変化させることはできませんので、出発点にしないようにしてください。“例” ページ 117も参照してください。

遷移状態に最適化するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Optimize to Transition State** の順に選択します。MOPAC Interface ダイアログ ボックスが表示されます。
 2. **Job & Theory** タブで **Method** および **Wave Function** を選択します。
-  **注意:** MOPAC に熟練していない場合は、*Transition State* のデフォルト設定を使用してください。
3. **Properties** タブで、最適化した最終的な立体配座から計算したい特性を選択します。
 4. **General** タブで使用する追加のキーワードを入力します。
 5. **Run** をクリックします。モデルに関する情報とキーワードが MOPAC プログラムに送られます。**Send Back Output** を選択していた場合は、Output ウィンドウが表示されます。

最小化中は、状況が Output ウィンドウに表示されます。

次の表は、MOPAC に自動的に送られるキーワードと、収束に影響を与えるために使用できるその他のキーワードです。

キーワード	説明
EF	自動的に MOPAC に送信され、Eigenvector Following (EF) 構造最小化ルーチンの使用を指定します。
GEO-OK	自動的に MOPAC に送信され、内部座標のチェックを無効にします。
MMOK	自動的に MOPAC に送信され、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。
RMAX=n. nn	エネルギー計算値/予測値の変化の割合の最大値です。デフォルト値は 4.0です。
RMIN=n. nn	エネルギー計算値/予測値の変化の割合の最小値です。デフォルト値は 0.000です。
PRECISE	計算を実行するたびに値が変動しないように、精度の高い SCF 計算を実行します。
LET	ジョブの時間を短縮するために安全チェックを無効にします。
RECALC=5	最適化計算が遷移状態に収束しにくい場合は、このキーワードを使用します。

MOPAC で表示されるエラー メッセージの説明については、『MOPAC マニュアル』を参照してください。最小化を中断するには、**Stop** をクリックします。

例

この例では、エタンの重なり型遷移状態を確認する方法について示します。

次の操作を行って、エタンのモデルを作成します。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. モデル ウィンドウをダブルクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. 「CH₃CH₃」と入力し、Enter キーを押します。エタンのモデルが表示されます。
4. 回転ツールを選択します。
5. 回転ツールの横にある矢印をクリックし、回転ダイヤルを下にドラッグします。

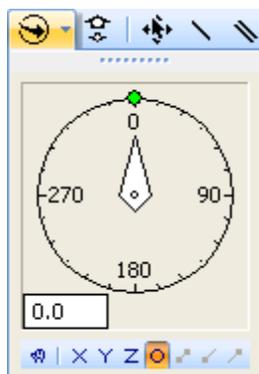


図 6.5: 回転ダイヤル

6. S キーを押したまま、C(1) と C(2) 原子間の結合を選択します。
-  **注意:** S キーを押したままにすると、一時的に選択ツールがアクティブになります。
7. 二面角回転の 1 つを選択し、テキスト ボックスに「57」と入力して、Enter キーを押します。ほぼ完成したエタンの重なり型配座が表示されます。

 **ヒント:** Y 軸上でモデルを回転させて炭素が並ぶようにすると、よりきれいに表示されます。

次の操作を行って、MOPAC を使った正確な重なり型配座の遷移状態を作成します。

1. S キーと Shift キーを押しながら、H(4) と H(7) のようにほぼ重なっている水素原子を 2 つ選択して、確認する二面角を指定します。これで H(4)-C(1)-C(2)-H(7) のような、ほぼ共通平面上にある 4 つの原子鎖が選択されました。
2. **Structure、Measurements、Generate All Dihedral Angles** の順に選択します。Measurement テーブルが現れ、選択した約 3 度の二面角に対する実際の値(実験によって若干異なります)を表示します。
3. **Calculations、MOPAC Interface、Optimize to Transition State** の順に選択します。
4. 内部座標を選択します。
5. **Run** をクリックします。二面角が 0 度になるまで、エタン モデルが最小化されます。これは、エタンの重なり型配座で、ローカル ミニマムとグローバル ミニマムを表す 2 つのねじれ型配座の遷移状態として知られています。

重なり型エタン モデルのニューマン投影図を見るには、次の操作を行ってください。

1. 両方の炭素原子を選択します。
2. **View**、**View Position**、**Align View Z Axis With Selection** の順に選択します。

 **注意:** 同じ二面角からエネルギー最小化を実行すると、エタンのモデルは遷移状態ではなく、二面角が 60 度のねじれ型の立体配座に最適化されます。

物性特性の計算

モデルの現在の立体配座に対して一点エネルギー計算を行うには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。Compute Properties ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Job & Theory** タブで、計算に使用するポテンシャル エネルギー関数を選択します。
3. **Properties** タブで次の操作を行ってください。
 - a. Property 特性を選択します。
 - b. **charges** を選択します。
 - c. 誘電率の値を設定します。
4. 必要に応じて、**General** タブで追加のキーワードを入力します。
5. **Run** をクリックします。

MOPAC の物性特性

ここでは、モデルの立体配座に関して計算可能な物性特性について説明します。物性特性は、Compute Properties コマンドを使用した一点エネルギー計算として、あるいは Minimize Energy コマンドまたは Optimize to Transition State コマンドによるエネルギー最小化の後で計算されます。

生成熱 ΔH_f

これは、モデルの現在における立体配座の生成熱を表します。同じモデルの複数の立体配座の安定度を比較する際に使用されます。

 **注意:** 生成熱にはゼロ ポイント エネルギーも含まれます。立体配座のゼロ ポイント一点 エネルギーを求めるとは、キーワード **FORCE** を使って強制計算を行います。ゼロ ポイント一点 エネルギーは、*.out ファイルの一番下に表示されます。

MOPAC で求められる生成熱は、298K の標準状態で各元素から 1 モルの化合物が生成される際の、気相中の生成熱です。

生成熱は次の各項で構成されます。

$$\Delta H_f = E_{elec} + E_{nucl} + E_{isol} + E_{atom}$$

各項の意味は次のとおりです。

- E_{elec} は SCF 計算の計算値
- E_{nucl} は分子中の原子核に基づく核間斥力
- E_{isol} および E_{atoms} は、分子中の元素のポテンシャル関数で与えられたパラメータ

注意: キーワード *ENPART* を使用し、計算後に *.out ファイルを開くと、生成熱と SCF 計算値を構成する各エネルギー要素を表示できます。詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

Gradient 標準.

これは最適化にフラグされた構造変数に関する導関数のベクトルのスカラ値です。この特性（『MOPAC マニュアル』では GNORM と呼ばれます）

GNORMを計算し、その計算結果と選択した最小の勾配を比較して自動的に最小のものを選択します。選択された最小値に達すると、最小化が終了します。

Compute Properties 操作にこの特性を選択すると（最小化は実行されません）、特定の計算に対するモデルが最適構造にどれくらい近いかが判断できます。

注意: GNORM 特性を、MOPAC のキーワード GNORM と混同しないようにしてください。詳細については、『MOPAC マニュアル』を参照してください。

双極子モーメント.

双極子モーメントは、加適用された電場に関するエネルギーの一次導関数です。分子の電荷分布の非対称性を示す三次元のベクトルとして提示されます。

双極子の値は、Mulliken 電荷、Wang-Ford 電荷、静電ポテンシャルのいずれを選択するかによって変わります。これは、各特性の計算で使用される密度マトリクスが異なるためです。

注意: 詳細については、『MOPAC マニュアル』を参照してください。

電荷.

この特性は、以降の節で説明するテクニックを使って原子の電荷を決定するものです。この例での電荷は、Wang-Ford から導き出した静電荷です。Wang-Ford 電荷は化学的な安定性（つまり反応性）を知るのに役立つため、ここで取り上げました。

Mulliken 電荷.

この特性は、SCF 計算による密度マトリクスを補正して導かれる原子単位の電荷を求めます。前の例で使用した Wang-Ford 電荷とは異なり、Mulliken 電荷では分子内の電荷分布を素早く簡単に調査できます。

注意: 詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

これには、MOPAC に送信される以下のキーワードが含まれます。

キーワード	説明
MULLIK	MOPAC に送信されると、Mulliken Population Analysis を生成します。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	CS MOPAC に送信されると、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。

静電ポテンシャル.

静電ポテンシャル電荷の計算から、化学反応に関する有益な情報が得られます。静電ポテンシャルは、静電ポテンシャル グリッドを作成することで計算されます。Chem3D ではグリッドから導かれる点電荷を報告します。一般に、Coulson 密度マトリクス (電荷) または Mulliken population analysis (Mulliken 電荷) で導かれる原子の電荷と、これらの原子の点電荷を比較して、結合しやすい場所を推測できます。静電ポテンシャルによる電荷の使用法も、原子の電荷とほぼ同じです。他の例についての詳細は、“電荷” ページ 120 を参照してください。原子の点電荷の計算には、Wang-Ford 電荷と静電ポテンシャルの 2 つの特性を使用できます。

Wang-Ford 電荷.

この点電荷計算特性は、ポテンシャル関数が AM1 の場合だけ使用できます。

 **注意:** AM1 ポテンシャル関数で使用できない元素の場合は、静電ポテンシャルの特性を使用します。

MOPAC に送信されるキーワードは以下のとおりです。

キーワード	説明
PMEP	MOPAC に送信されると、PMEP からの点電荷の生成を指定します。
QPMEP	MOPAC に送信されると、Wang/Ford 静電ポテンシャル ルーチンを指定します。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	CS MOPAC に送信されると、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。

静電ポテンシャル.

対象分子内に AM1 ポテンシャル関数で使用できない元素が含まれている場合に、静電ポテンシャルの特性を使用します。詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

次の表は、MOPAC に送信され、この特性に影響を与えるキーワードを示します。

キーワード	説明
ESP	MOPAC に送信されると、静電ポテンシャル ルーチンを指定します。
POTWRT	ESP マップの値を出力する場合は、このキーワードを追加します。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	CS MOPAC に送信されると、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。

分子表面.

分子表面は、総電荷密度、分子静電ポテンシャル、スピン密度、分子軌道表面を実用化するためのデータを計算します。

分極率.

分極率（および超分極率）を使用すると、加電場の存在に基づく電子の分布情報がわかります。一般に、分極率の値は、非局在化した電子が多い分子ほど高くなります。

分極率データは分子の光学的特性の方程式などによく使われます。詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

分極率と超分極率は、1 次 (alpha) テンソル (xx, yy, zz, xz, yz, xy)、2 次 (beta) テンソル、および 3 次 (gamma) テンソルで表示されます。

 **注意:** MINDO/3 ポテンシャル関数を使って分極率を計算することはできません。

水中の COSMO 溶媒和.

COSMO 法は、溶媒中のさまざまな化学種の安定性を定義する上で便利な方法です。既定の溶媒は水です。詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

COSMO 法を実行するには、次の操作を行ってください。

1. Calculations、MOPAC Interface、Compute Properties の順に選択します。
2. Properties タブで、COSMO Area 特性と COSMO Volume 特性、またはそのいずれかをオンにします

 **注意:** 溶媒の処理には誘電定数が使用されます。COSMO での暗黙的な溶媒計算に使用される誘電定数は、既定では EPS=78.4 となります。

Hyperfine Coupling Constants (超微細カップリング定数).

超微細カップリング定数 (Hyperfine Coupling Constants) は ESR (電子スピン共鳴) スペクトルのシミュレーションに使用すると便利です。中央陽子およびその他の同等な陽子を持つ不対電子の超微細相互作用は、ESR スペクトルで複雑なスプリット パターンを引き起こします。強力な磁気フィールド場下で配置されると、ESR 分

光器は不對の陽子電子によるマイクロ波放射線の吸収を検出計測します。超微細カップリング定数 (HFCs) には、ESR スペクトルの超微細なパターン内の線の間隔や、ピーク間の距離が関係します。不對電子を含む化学種は次のとおりです。

- フリー ラジカル
- 奇数個の電子を持つ分子
- 遷移金属錯体
- 希土類イオン
- 三重項状態の分子

詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

次の表は、MOPAC に送信され、この特性に影響を与えるキーワードを示します。

キーワード	説明
UHF	“Open Shell (Unrestricted)” 波動関数を選択した場合に MOPAC に送信され、Unrestricted Hartree-Fock 法の使用を指定します。
Hyperfine	MOPAC に送信されると、超微細計算を指定します。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	CS MOPAC に送信されると、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。

スピン密度

スピン密度は、不對電子が含まれる分子で発生します。スピン密度のデータから、特定の状態における alpha スピン電子の相対的な量がわかります。

スピン密度は、反応場所の特定や ESR スペクトルのシミュレーションを行う上で便利です。不對電子の存在する分子のスピン密度については、RHF スピン密度と UHF スピン密度の 2 種類の方法があります。

UHF スピン密度

UHF スピン密度法では、閉殻系に対する制限がありません。そのため、alpha スピン電子と beta スピン電子の波動関数が別々に計算されます。詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

次の表は、MOPAC に送信され、この特性に影響を与えるキーワードを示します。

キーワード	説明
UHF	“Open Shell (Unrestricted)” 波動関数を選択した場合に MOPAC に送信され、Unrestricted Hartree-Fock 法の使用を指定します。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	CS MOPAC に送信されると、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。
SPIN	スピン密度マトリクスを *.out ファイルに出力する場合は、このキーワードを追加します。

RHF スピン密度

RHF スピン密度法では、1/2 電子による修正とシングル配置間相互作用計算を使って、分子内の alpha スピン密度を分離します。この方法は、大きな分子を評価する場合など、UHF スピン密度法ではリソースの使用量が大きすぎる場合に便利です。詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

次の表は、MOPAC に送信され、この特性に影響を与えるキーワードを示します。

キーワード	説明
ESR	MOPAC に送信されると、RHF スピン密度計算を指定します。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。

例 1: 双極子モーメント

この例は、ホルムアルデヒドの双極子モーメントの計算をする方法を示しています。

1. File メニューの **New Model** をクリックします。
2. テキスト作成ツールをクリックします。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. 「H2CO」と入力し、Enter キーを押します。ホルムアルデヒドのモデルが表示されます。

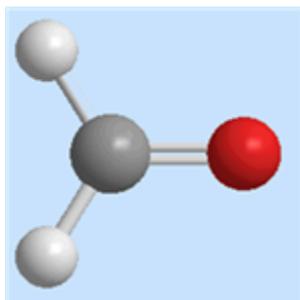


図 6.6: ホルムアルデヒドのモデル

5. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Minimize Energy** の順に選択します。
6. **Theory** タブで **AM1** を選択します。
7. **Properties** タブで **Dipole** を選択します。
8. **Run** をクリックします。

Messages ウィンドウに表示された結果を見ると、酸素原子の方向に電子分布が歪んでいることがわかります。

	X	Y	Z	合計
双極子 (vector Debye)	-2.317	0.004	0.000	2.317

モデルを回転させると、X、Y、Z の各要素は変わりますが、双極子の合計は変わりません。この例では、X 軸沿いの要素が大きくなるようにモデルを配置しています。

例 2: カチオン安定性

この例では、分子の同族列におけるカチオン安定性を比較します。

モデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツールをクリックします。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. トリクロロの場合、「C+Cl3」と入力し、Enter キーを押します。
5. 他のカチオンすべてについて、ステップ1 ~ 4 を繰り返します。ジクロロの場合は「C+Cl2」、モノクロロの場合は「C+Cl」、メチルカチオンの場合は「CH3+」とそれぞれ入力します。

 **注意:** この例のカチオンはすべて偶数個の電子を持つ閉殻系で、一重項の基底状態にあるものとします。追加キーワードで変更する必要はありません。既定の RHF 法で計算されます。

計算を実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Minimize Energy** の順に選択します。
2. **Theory** タブで **AM1** を選択します。
3. **Properties** タブの **Properties** リストで **Charges** を選択します。

- Charges リストで **Wang-Ford** を選択します。
- Run** をクリックします。計算が終了すると、Message ウィンドウに各モデルの結果が表示されます。

分子は平面構造になり、中心の炭素の sp^2 混成軌道を反映しています。

この簡単な計算から、カチオンの電荷は中心炭素に局在化されず MOPAC に送信され、アミド結合の分子力学修正を指定する MMOK によって別の方向に分散されると推論できます。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。

例 3: 電荷分布

この例では、1 原子置換のフェノキシ イオン列の電荷分布を分析しています。

- File メニューの **New Model** をクリックします。
- テキスト作成ツールをクリックします。
- モデル ウィンドウ内をクリックします。
- 「PhO⁻」と入力し、Enter キーを押します。フェノール塩イオンのモデルが表示されます。

 **注意:** 比較対象となる 1 原子置換フェノールはすべて偶数個の電子を持つ閉殻系で、一重項の基底状態にあるものとします。追加キーワードで変更する必要はありません。既定の RHF 法で計算されます。

- Calculations、MOPAC Interface、Minimize Energy の順に選択します。
- Theory タブで **PM3** を選択します。これにより、Charges リストから **Mulliken** が自動的に選択されます。
- Property タブで **Charges** を選択します。
- Run** をクリックします。

パラニトロフェノール塩イオンを作成するには、次の操作を行ってください。

- テキスト作成ツールをクリックします。
- H10 をクリックし、「N02」と入力して、Enter キーを押します。パラニトロフェノール塩イオンが表示されます。

最後に、最小化を実行します。

最後の 2 つの 1 原子置換ニトロフェノールについては、まず、選択ツールを使ってニトロ基を選択し、Delete キーを押します。メタ (H9) またはオルト (H8) にニトロ基を追加して、分析を繰り返します。

一連の分析データを次に表します。パラ、メタ、オルトのニトロ基を置換すると、メタ、パラ、オルトの順に、フェノキシ酸素の負の電荷が減少し、オルト置換で負の電荷が最も減少しています。このデータから、フェノキシイオンはオルトのニトロ置換によって安定化されると推論できます。

フェノール塩	p-ニトロ	m-ニトロ	o-ニトロ
C1 0.39572	C1 0.41546	C1 0.38077	C1 0.45789
C2 -0.46113	C2 -0.44929	C2 -0.36594	C2 -0.75764
C3 -0.09388	C3 -0.00519	C3 -0.33658	C3 0.00316
C4 -0.44560	C4 -0.71261	C4 -0.35950	C4 -0.41505
C5 -0.09385	C5 -0.00521	C5 -0.10939	C5 -0.09544
C6 -0.46109	C6 -0.44926	C6 -0.41451	C6 -0.38967
O7 -0.57746	O7 -0.49291	O7 -0.54186	O7 -0.48265
H8 0.16946	H8 0.18718	H8 0.21051	N8 1.38805
H9 0.12069	H9 0.17553	N9 1.31296	H9 0.16911
H10 0.15700	N10 1.38043	H10 0.19979	H10 0.17281
H11 0.12067	H11 0.17561	H11 0.14096	H11 0.13932
H12 0.16946	H12 0.18715	H12 0.17948	H12 0.18090
	O13 -0.70347	O13 -0.65265	O13 -0.71656
	O14 -0.70345	O14 -0.64406	O14 -0.65424

例 4: m-ニトロトルエンの分極率.

モデルの双極子モーメントを計算する例をもう 1 つ取り上げます。

今回は、m-ニトロトルエンを使用します。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツールをクリックします。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. 「m-nitrotoluene」と入力し、Enter キーを押します。m-ニトロトルエンのモデルが表示されます。回転ツールを使用して、次のようにモデルを配向します。

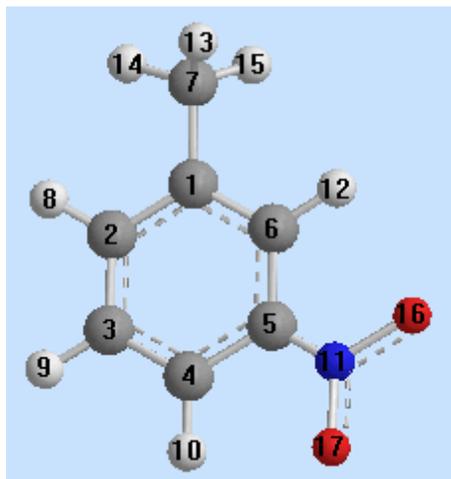


図 6.7: *m*-ニトロトルエンのモデル

5. Edit メニューの **Select All** をクリックします。
 6. View、Model Display、Show Serial Numbers の順に選択します。
- 次の操作を行い、MOPAC を使って双極子モーメントを検出します。
1. Calculations、MOPAC Interface、Minimize Energy の順に選択します。
 2. Theory タブで **AM1** を選択します。
 3. Property タブで **Polarizabilities** を選択します。
 4. Run をクリックします。

次の表は、*m*-ニトロトルエンの一次分極率に対する加電場の影響を示す結果の一部です。

加電場 (eV)	alpha xx	alpha yy	alpha zz
0.000000	108.23400	97.70127	18.82380
0.250000	108.40480	97.82726	18.83561
0.500000	108.91847	98.20891	18.86943

次の表は、MOPAC に送信され、この特性に影響を与えるキーワードを示します。

キーワード	説明
POLAR (E=(n1, n2, n3))	MOPAC に送信されると、分極率ルーチンを指定します。n には開始電圧 (eV 単位) を指定します。既定値は E = 1.0です。 n に別の値を指定してキーワードを再入力すると、開始電圧を変更できます。
GEO-OK	MOPAC に送信されると、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	CS MOPAC に送信されると、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。

例 5: 相の安定性.

この例では、水および気相中におけるグリシン両性イオンの安定性を比較します。安定性を比較するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツールをクリックします。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. 「HGlyOH」と入力し、Enter キーを押します。グリシンのモデルが表示されます。

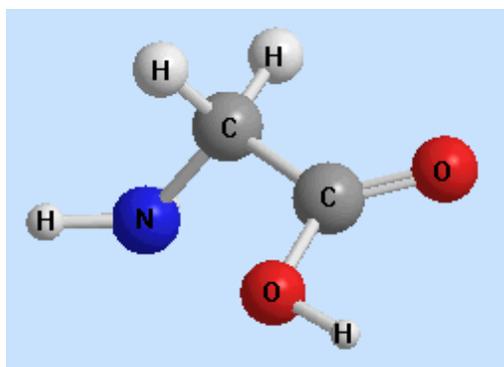


図 6.8: グリシンのモデル

5. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Minimize Energy** の順に選択します。
6. **Job & Theory** タブで **PM3** を選択します。
7. **Properties** タブで、**Heat of Formation**、**COSMO Area** および **COSMO Volume** をクリックします。

8. Run をクリックします。Messages ウィンドウに結果が表示されます。
9. Calculations、MOPAC Interface、Minimize Energy の順に選択します。
10. Run をクリックします。Messages ウィンドウに結果が表示されます。

両性イオン フォームを作成するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールをクリックします。
2. 窒素原子をクリックして「+」を入力し、Enter キーを押します。
3. 酸素原子をクリックして「-」を入力し、Enter キーを押します。グリシン両性イオンが形成されます。

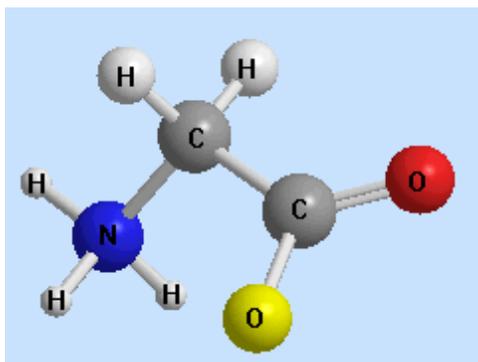


図 6.9: グリシン両性イオン

4. グリシン モデルの場合と同様に、COSMO Area および COSMO Volume 特性を使用した状態と使用しない状態で最小化を行います。

この表は、上記の 4 つの分析結果をまとめたものです。

グリシンの形態	ΔH (kcal/mole)	溶媒接触表面 \AA^2
中性 (H2O)	-93.52810	105.82
両性イオン (H2O)	-62.58924	104.02
中性 (気体)	-93.52810	
両性イオン (気体)	-62.58932	

このデータにより、H2O ではグリシン両性イオンが最も優先的な配座であり、気相では中性が優先的であると推論できます。

例 6: Hyperfine Coupling Constants (超微細カップリング定数)

これは超微細カップリング定数の例であり、エチル基を使用します。

モデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの New Model をクリックします。

2. テキスト作成ツールをクリックします。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. 「EtH」と入力し、Enter キーを押します。
5. 選択ツールをクリックします。
6. H(8) を選択します。
7. Backspace キーを押して、H(8) 水素を削除します。

原子価の自動結合調整がオンになっている場合は、この機能をオフにしてから計算を行うように指示するメッセージが表示されます。

8. **Turn Off Automatic Rectification** をクリックします。エチル基が表示されます。

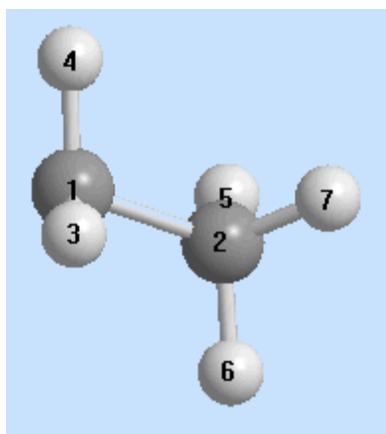


図 6.10: エチル基のモデル

HFC 計算を実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Minimize Energy** の順に選択します。
2. **Job & Theory** タブで、**PM3** ポテンシャル関数および **Open Shell (Unrestricted)** 波動関数を選択します。
3. **Properties** タブで **Hyperfine Coupling Constants** を選択します。
4. **Run** をクリックします。

この表は、超微細カップリング定数を示したものです。

Hyperfine Coupling Constants (超微細カップリング定数)	
C1	0.02376
C2	-0.00503
H3	-0.04719
H4	-0.04714
H5	0.11328
H6	0.11325
H7	0.02325

例 7: UHF Spin Density.

今回もエチル基を使って UHF スピン密度を計算します。

1. File メニューの **New Model** をクリックします。
2. テキスト ツールから **Build** をクリックします。
3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. 「Eth」と入力し、**Enter** キーを押します。
5. **Calculations**、**MOPAC Interface**、**Minimize Energy** の順に選択します。
6. Theory タブで **PM3** を選択します。波動関数として **Open Shell (Unrestricted)** を選択します。
7. Properties タブで **Spin Density** を選択します。
8. **Run** をクリックします。

Messages テーブルに原子軌道スピン密度のリストが表示されます。

各値の原子軌道にはラベルが付いていませんが、一般的なルールは次の表のとおりです (MOPAC では、s 軌道、 p_x 軌道、 p_y 軌道、 p_z 軌道のみを使います)。

Spin Density (スピン密度)	原子軌道
0.071267	C1 s
0.446974	C1 p _x
0.237395	C1 p _y
0.414225	C1 p _z
-0.015082	C2 S
-0.057698	C2 p _x
-0.024727	C2 p _y
-0.033987	C2 p _z
-0.078510	H3 s
-0.078504	H4 s
0.024426	H5 s
0.024455	H6 s
0.069765	H7 s

この結果から、エチル基の不安定電子は C1 の p_z 軌道の方に局在化していると推論できます。これは一般に、反応場所を示します。

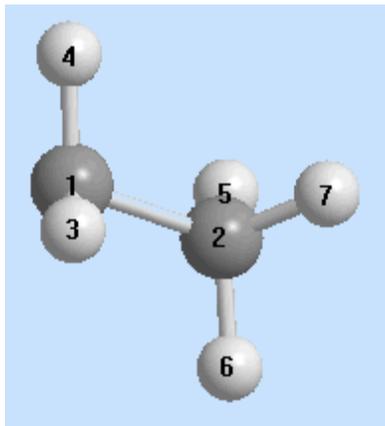
例 8: RHF Spin Density.

この例ではエチル基を使用して RHF スピン密度を計算します。

1. ラジカルを作成するには、モデル ウィンドウ内でクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
2. 「EtH」と入力し、Enter キーを押します。
3. 選択ツールをクリックします。
4. H(8) を選択します。
5. **Backspace** キーを押して、H(8) 水素を削除します。

原子価の自動結合調整がオンになっている場合は、この機能をオフにしてから計算を行うように指示するメッセージが表示されます。

6. **Turn Off Automatic Rectification** をクリックします。エチル基が表示されます。



7. Calculations、MOPAC Interface、Minimize Energy の順に選択します。
8. Theory タブで PM3 および Closed Shell (Restricted) を選択します。
9. Properties タブで Spin Density を選択します。
- 10.Run をクリックします。

Message ウィンドウに、各原子の総スピン密度のリストが表示されます（原子ごとに、すべての軌道のスピン密度が合計されます）。

 **注意:** *.out ファイルを調べると、各原子軌道のスピン密度の内容がわかります。

総スピン密度	原子
1.1699	C1
-0.1315	C2
-0.0785	H3
-0.0785	H4
0.0244	H5
0.0245	H6
0.069766	H7

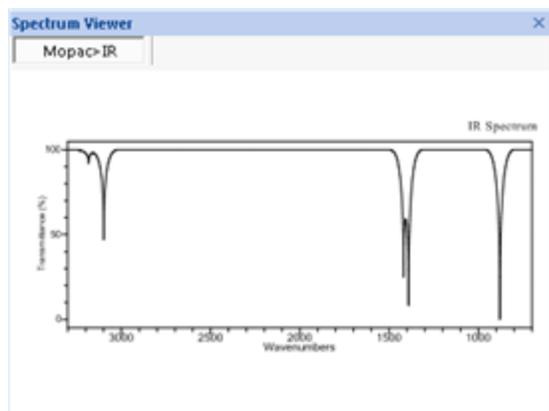
この結果から、エチル基の不安定電子は C1 の方に局在化していると推論できます。これは一般に、反応場所を示します。

IR スペクトルの予測

選択した分子の IR スペクトルを表示するグラフを生成できます。

IR スペクトルを生成するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**Mopac interface**、**Predict IR Spectrum** の順に選択します。MOPAC Interface ダイアログボックスが表示されます。
2. **Properties** タブで、Job type リストから **Predict IR Spectrum** を選択します。
3. **Job & Theory** タブで、方式、波動関数、溶媒、および座標系の値を設定します。
4. **Run** をクリックします。グラフを表示するスペクトル ビューアが表示されます。



MOPAC ファイル

出力ファイルの使用

MOPAC で計算を行うたびに、その計算に関するすべての情報を保存する *.out ファイルが作成されます。*.arax サマリ ファイルも作成されます (x の部分は、計算が完了するたびに a から z まで順に変化します)。*.out ファイルは計算のたびに上書きされますが、*.arax サマリ ファイルは計算のたびに新しいファイル (*.araa、*.arab など) が作成されます。

OUT ファイルと AAX ファイルのデフォルトの保存場所は、**My Documents** フォルダの **¥MOPAC Interface** サブフォルダです。MOPAC Interface ダイアログ ボックスの **General** タブで、これ以外の保存場所を指定することもできます。各計算において、サマリ ファイルに保存される情報は次のとおりです。

- 電子エネルギー (Eelectronic)
- 核間斥力エネルギー (Enuclear)
- 対称性
- イオン化ポテンシャル
- HOMO/LUMO エネルギー

デフォルトでは、次の情報が *.out ファイルに保存されます。

- 開始時の原子の座標
- 開始時の内部座標
- 分子軌道エネルギー (固有値)
- 終了時の原子の座標

多くの計算作業も、計算を実行する前に適切なキーワードを指定することによって *.out ファイルに出力することができます。たとえば、キーワード MECI を指定すると、RHF 1/2 電子近似法で使用される Microstate の方程式を示すことができます。詳細については、“[キーワードの使用](#)” ページ 279 を参照してください。

 **注意:** MOPAC 計算の実行中に *.out ファイルを閉じると、MOPAC アプリケーションの動作が停止します。

入力ファイル

MOPAC 入力ファイル (.MOP) は、モデルとそのダイアログ ボックス設定に関連付けられます。

MOPAC 入力ファイルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、MOPAC Interface、Create Input File** の順に選択します。
2. 適切な設定をすべて選択して、**Create** をクリックします。

入力ファイルを実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、MOPAC Interface、Run Input File** の順に選択します。Run MOPAC Input File ダイアログ ボックスが表示されます。
2. MOPAC ファイルの完全なパス名を入力するか、閲覧してファイルを選択します。
3. 適切なオプションを選択します。このオプションの詳細については、“[電子構成の指定](#)” ページ 282 を参照してください。
4. **Run** をクリックします。

新しいモデル ウィンドウが作成され、初期モデルが表示されます。MOPAC ジョブが実行され、結果が表示されます。

ジョブに要求される特性はすべて *.out ファイルに表示されます。この方法でジョブを実行した場合は、計算回数を示すメッセージのみが表示されます。

 **注意:** 原子価の満たされていないモデルを含む MOPAC ファイルを開く場合は、Building コントロール パネルの *Automatically Rectify* ボックスの選択を解除しておく、Chem3D による座標の再調整を回避できません。

 **注意:** 対象となる Z-Matrix インスタンスを複数含む MOPAC 入力ファイルは、Chem3D では正しく表示されません。たとえば、キーワード SADDLE を使用する計算や、モデル反応座標構造を含む MOPAC 入力ファイルなどは、正しく表示されません。

MOPAC ジョブの実行

Chem3D では、以前に作成した MOPAC ジョブ記述ファイル (JDF) を選択できます。JDF ファイルは、特定のダイアログ ボックスに適用する設定をまとめたものです。

JDF ファイルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、MOPAC Interface、Create Input File** の順に選択し、計算を選択します。
2. 計算に必要な設定を指定し、**Save As** をクリックします。

JDF ファイルから MOPAC ジョブを実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、MOPAC Interface、Run MOPAC Job** の順に選択します。Open ダイアログ ボックスが表示されます。

2. 実行する JDF ファイルを選択します。ファイルに保存されたジョブのタイプに相当するダイアログ ボックスが表示されます。
3. Run をクリックします。

ARC ファイルからの構造式の作成

MOPAC 計算を実行すると、結果が ARC ファイルに保存されます。このファイルは、My Documents フォルダの **¥MOPAC Interface** サブフォルダにあります。

ARC ファイルから構造式を作成するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト エディタで ARC ファイルを開きます。
2. 次のイメージのように、ファイルのキーワード セクションの上部にあるテキストを削除します。

```

SUMMARY OF AM1 CALCULATION
MOPAC2000 Version 1.11
EMPIRICAL FORMULA: C2 H6
2000/ 7/ 5
1SCF NMOK GEO-OK AM1 NULLIK
1SCF WAS SPECIFIED, SO DFOS WAS NOT USED
SCF FIELD WAS ACHIEVED
HEAT OF FORMATION = -17.182949 KCAL = -71.89346 KJ
ELECTRONIC ENERGY = -929.360221 EU
CORE-CORE REPULSION = 590.227818 EU
DIPOLE = 0.00000 DERVE SYMMETRY: 03d
NO. OF FILLED LEVELS = 7
IONIZATION POTENTIAL = 11.047014 EU
HOMO LUMO ENERGIES (EU) = -11.847 4.187
MOLECULAR WEIGHT = 30.069
SCF CALCULATIONS = 1
COMPUTATION TIME = 0.03 SECONDS
FINAL GEOMETRY OBTAINED
1SCF NMOK GEO-OK AM1 NULLIK
C 0.000000 0 0.000000 0 0.000000 0 -0.2137
C 1.523010 1 0.000000 0 0.000000 0 1 -0.2137
H 1.112976 1 109.998169 1 0.000000 0 1 2 0.0714
H 1.112976 1 109.998169 1 -120.076691 1 1 2 3 0.0712
H 1.112976 1 109.998169 1 120.076691 1 1 2 3 0.0712
H 1.112976 1 109.998169 1 179.999634 1 2 1 3 0.0714
H 1.112976 1 109.998169 1 59.923813 1 2 1 3 0.0712
H 1.112976 1 109.998169 1 -59.923813 1 2 1 3 0.0712

```

A points to the line "FINAL GEOMETRY OBTAINED".
B points to the keyword section starting with "1SCF NMOK GEO-OK AM1 NULLIK".

ARC ファイル: A) この行のテキストを削除する、B) キーワード セクション

3. ファイルに MOP 拡張子を付けて保存します。
4. MOP ファイルを開きます。

GAMESS

GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) は、一般的な *ab initio* 量子化学パッケージです。RHF、ROHF、UHF、GVB および MCSCF を使用する波動関数の計算ができます。これらの中には、CI や MP2 エネルギー修正計算で利用できるものもあります。

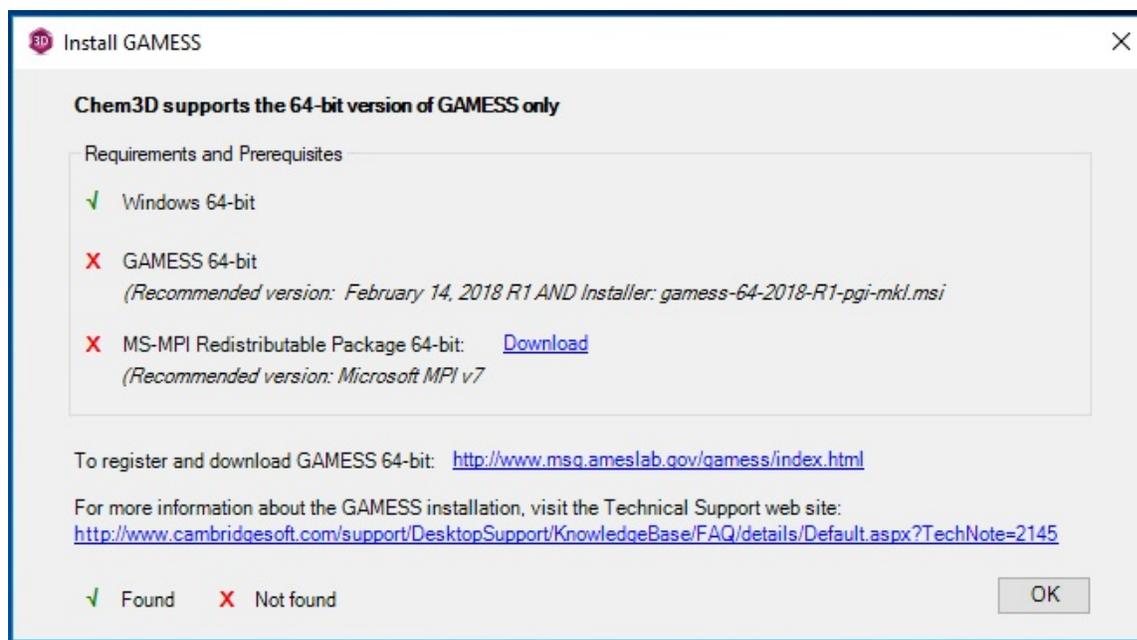
GAMESS は Chem3D に組み込まれています。GAMESS 計算には、次の機能があります。

- エネルギーの最小化
- 遷移状態への最適化
- 特性の計算
- Run Frequency
- IR/Raman スペクトル予測
- NMR スペクトル予測

いずれかの計算オプションを選択すると、GAMESS インターフェイスのダイアログ ボックスが開き、その計算に関して推奨される既定のパラメータが表示されます。計算を実行する前に、このダイアログ ボックスのタブ付き ページでパラメータを変更できます。どのようなパラメータ設定を使用すればよいかわかっている場合は、いずれかのオプションを出発点として計算を実行できます。GAMESS キーワードを熟知している場合は、**Use Advanced Mode** を選択すると、コマンドライン インターフェイスの GUI 版を使用できます。

GAMESS のインストール

 **注意:** GAMESS をダウンロードしてインストールするには、*Calculations*、*GAMESS Interface*、*Install GAMESS* の順に選択します。*Install GAMESS* ダイアログが開き、必要コンポーネントおよび GAMESS 2018 をダウンロードするためのリンクが表示されます。



GAMESS を登録およびダウンロードするには、次の操作を行ってください。

1. <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/download.html> リンクをクリックします。
2. 開かれた Web ページに記載された情報をよく読み、Obtaining GAMESS という赤字のリンクをクリックします。
3. **GAMESS User License Agreement** を読み、合意します。
4. 電子メール アドレスを入力し、**GAMESS version for Microsoft Windows** を選択します。
5. 画面を下方にスクロールし、**Submit Request** をクリックします。2、3 日中に、ダウンロード方法を説明する電子メールが送信されます。
6. 電子メールのリンクをクリックして、**Download (.msi)** の一覧で太字で表示されている実行可能ファイル名をクリックします。

Welcome to GAMESS Microsoft Windows Operating Systems.

64-Bit Windows

Notice: Native binaries for 32-bit Microsoft Windows Operating Systems are no longer supported. It can, however, be compiled from the source.

This version is the complete version of GAMESS is precompiled for use on 64-bit Windows. To download any of these Windows binaries, just click on your choice below, enter the username (which is always **source**), and the current download password, from the e-mail you should have already received. Once downloaded, you just need to double click on the .msi file, and read the instructions.

The files are Microsoft Setup and Installation types (.msi). All post Windows-2000 installations should have an msiexec to run it.

Release	Download (.msi)	Compiler	Flags	Math Library	Comments
2018 R1	games-64-2018-R1-pgi-mkl.msi	PGI v. 17.10	-fastsse	Intel MKL 2018.1	Limit 525 EFP fragments. All exam files pass
2018 R1	games-64-2018-R1-pgi-blas.msi	PGI v. 17.10	-fastsse	PGI Blas	Limit 525 EFP fragments. All exam files pass
2018 R1	games-64-2018-R1-pgi-mkl-noefp.msi	PGI v. 17.10	-fastsse	Intel MKL 2018.1	EFP functionality removed. All exam files pass (exam30 expected to fail)
2018 R1	games-64-2018-R1-pgi-blas-noefp.msi	PGI v. 17.10	-fastsse	PGI Blas	EFP functionality removed. All exam files pass (exam30 expected to fail)

If you are unsure which .msi file to choose then please select the executable name in **BOLD**.

You should also download the directions file, [GAMESS-Windows-64-Bit-README-THEN-README-AGAIN.pdf](#), which contains screen shots of how to install and execute GAMESS.

7. ユーザー名として「**source**」と入力します。電子メールに記載されたパスワードを入力します。
8. **games-64-2018-R1-pgi-mkl.msi** をダブルクリックして、Microsoft Windows 64 ビット版バイナリ対応の GAMESS をインストールします。
9. **Next** をクリックして、インストール手順を進めます。
10. **Finish** をクリックして、インストールを完了します。

スペクトルの表示

予測されたスペクトルを表示するには、**View** メニューの **Spectrum Viewer** をクリックします。対象の化合物に対して実行する予測ごとに、スペクトル ビューアに新しいタブが表示されます。

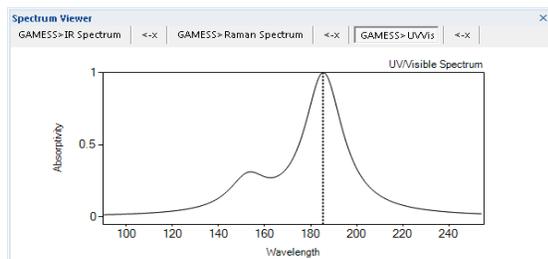


図 6.11: GAMESS を使用したクロロベンゼンの UV-Vis スペクトル予測

UV-Vis のピークの表示

UV-Vis Peaks テーブルを使用して、GAMESS UV-Vis スペクトルにおけるピークの強度と位置を表示します。このテーブルを表示するには、View メニューの **UV-Vis peaks** をクリックします。テーブル内の行をクリックすると、対応するピークがスペクトル内で強調表示になります。

-  **ヒント:** スペクトル ビューアを使用すると、GAMESS の他の計算エンジンで作成されたスペクトルを表示できません。

エネルギーの最小化

モデルで GAMESS エネルギー最小化の計算を実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**GAMESS**、**Minimize Energy** の順に選択します。GAMESS Interface ダイアログ ボックスが開き、**Job & Theory** タブが表示されます。
2. タブで計算をカスタマイズします。詳細については、次の各セクションを参照してください。
3. **Run** をクリックします。

計算の設定の指定

Job & Theory タブで、基底関数系と特定の電子構造論の組み合わせを指定できます。このタブの設定のデフォルトでは、*ab initio* 計算に最適化されています。

基底関数系の詳細については、GAMESS のドキュメントのセクション『\$BASIS』を参照してください。計算の設定を指定するには、次の操作を行ってください。

1. **Method** リストから方式を選択します。
 2. **Wave Function** リストから関数を選択します。
 3. **Basis Set** リストから基底関数系を選択します。
-  **注意:** リストにない方式や基底関数系を使用する場合は、**General** タブの **Additional Keywords** グループ ボックスで入力します。詳細については、“[電子構成の指定](#)” ページ 282 を参照してください。
4. **Diffuse** リストから、基底関数系に追加する拡散関数を選択します。
 5. **Polarization** 関数を設定します。Heavy Atom 関数を選択する場合、H オプションも選択します。
 6. **Spin Multiplicity** の値を選択します。
 7. **Net Charge** の値を選択します。

出力オプションの設定

General タブで、計算結果の表示と記録のオプションを設定します。

ジョブ タイプのオプションを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **Minimize Energy** ダイアログ ボックスで **Job Type** タブをクリックします。
2. 次のオプションから適切なものを選択します。

Display Every Iteration. 計算結果を毎回表示して最小化プロセスを確認します。計算結果を毎回表示または記録すると、構造の最小化に要する時間が長くなります。

Send output to notepad. メモ帳ファイルで出力を指定した場所に保存します。

Kill temporary files. 出力ファイルのみを GAMESS インターフェイス フォルダに生成して入力ファイルを生成しません。

Send Back Output. コメント ボックスに出力を表示します。

Average Equivalent Hydrogens. 同一陽子を統計処理します。

計算する特性の指定

計算する特性を指定できます。デフォルトの Population Analysis タイプは Mulliken です。

特性を指定するには、次の操作を行ってください。

1. Minimize Energy ダイアログ ボックスで **Properties** をクリックします。

2. **Properties** タブで、次のオプションを設定します。

- 計算する特性を選択します。
- Population Analysis タイプを選択します。

一般設定の指定

General タブで、モデルの計算をカスタマイズします。

一般設定を指定するには、次の操作を行ってください。

1. Minimize Energy ダイアログ ボックスで **General** タブをクリックします。

2. **General** タブで、次のオプションを設定します。

- 溶媒とモデルを選択します。
- 溶媒の誘電率を入力します。気体相の計算ではこのボックスは表示されません。
- **Results In** ボックスで、結果を保存するディレクトリへのパスを直接入力するか、閲覧して指定します。
- 必要に応じて、**Additional Keywords** ダイアログ ボックスに GAMESS キーワードを入力します。

GAMESS IR 振動の表示とアニメーション

GAMESS を使用して赤外線スペクトルを作成した後、モデル ウィンドウで IR モードの表示やアニメーションを行うことができます。

IR スペクトルを計算するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を作画します。

2. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Predict IR/Raman Spectrum** の順に選択します。GAMESS Interface ダイアログ ボックスが開きます。

3. ダイアログ ボックスで **Job & Theory** タブをクリックします。

4. **Run** をクリックします。計算が終了すると、スペクトルが表示されます。

 **注意:** モデルが大きい場合、計算に数分間かかる可能性があります。

IR 振動をアニメーションとして再生するには、次の操作を行ってください。

1. モデル表示ツールバーの IR Spectrum ボタン  をクリックします。Animate IR vectors for model ダイアログ ボックスが表示されます。

- 表示されたダイアログ ボックスで、**Frequency** モードか **Intensity** モードをクリックします。ドロップダウン リストは、選択したモードでソートされます。
- ドロップダウン リストで、アニメーションに使用する周波数と強度を選択します。それぞれの数値のペアの最初の数値が、選択したモードのものです。
- 以下のオプションから選択します。
 - **Show Vectors**: 振動の方向を示す矢印を表示します。
 - **Displacement**: 原子が移動する範囲を制御します。
 - **Speed**: アニメーションの速度を制御します。
- play** をクリックします。
- アニメーションを停止するには、**stop** をクリックします。
- モデルを元の開始位置に戻すには、**reset** をクリックします。

NMR スペクトル

GAMESS を使用して、モデルの ^{13}C および ^1H NMR スペクトルを予測することができます。Chem3D によるスペクトルの計算が終わると、スペクトル ビューアにスペクトルが表示されます。スペクトル ビューアでは、スペクトルの表示、印刷、保存を行うことができます。NMR スペクトルは cdx ファイル形式で保存され、ChemDraw で開くことができます。

計算されたスペクトルを表示するには、スペクトル ビューア上部でスペクトルを選択します。

NMR スペクトルを作成するには、次の操作を行ってください。

- Calculations**、**GAMESS Interface**、**Predict NMR Spectrum** の順に選択します。
- GAMESS Interface** ダイアログ ボックスで、必要なオプションを選択し、**Run** をクリックします。

スペクトルを保存または印刷するには、スペクトルを右クリックし、**Save as** または **Print** をクリックします。

カスタマイズしたジョブ記述の保存

ジョブ記述をカスタマイズした後、それを Job Description ファイルとして保存して、後で使用できます。詳細については、“[ジョブ記述ファイル形式](#)” ページ 111を参照してください。

GAMESS ジョブを保存するには、次の操作を行ってください。

- General** タブで、**Menu Item Name** テキスト ボックスにファイル名を入力します。選んだ名前が GAMESS メニューに表示されます。
- Save As** をクリックします。Save ダイアログ ボックスが表示されます。
- ¥Chem3D¥C3D Extensions¥GAMESS Job フォルダを開きます。

 **注意:** ファイルを **GAMESS Job** フォルダに保存しないと、メニューに表示されません。

- .jdf または .jdt ファイル タイプを選択します。
- Save** をクリックします。

GAMESS ジョブの実行

Chem3D で INP GAMESS ジョブ ファイルを実行することができます。

ジョブ ファイルを実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**GAMESS**、**Run a Job** の順に選択します。Open ダイアログ ボックスが表示されます。
2. GAMESS ファイルの完全なパス名を入力するか、そのファイルの場所を閲覧します。
3. **Open** をクリックします。適切なダイアログ ボックスが表示されます。
4. 必要に応じてタブの設定を変更します。
5. **Run** をクリックします。

GAMESS ジョブの再実行

GAMESS ジョブを再実行するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**GAMESS**、**Repeat** [計算の名前] の順に選択します。適切なダイアログ ボックスが表示されます。
2. 必要に応じてパラメータを変更し、**Run** をクリックします。

パラメータ テーブル

Chem3D は、モデルの作成および分析にパラメータ テーブルを使用します。このテーブルには、元素、結合タイプ、原子タイプおよびその他のパラメータに関するエネルギー データおよび形状のデータが含まれています。Chem3D では、これらのテーブルを使用して実際の分子の化学的に正確なモデルを作成するため、通常はユーザーがテーブルを編集する必要はありません。しかし、専門の方が必要に応じて変更することは可能です。テーブルを修正する場合は、テーブルを C3D Items ディレクトリに保存する必要があります。

パラメータ テーブルには次のものがあります。

3-Membered Ring Angles. 3 員環を形成する結合の結合角。力場分析において、3 員環を形成する結合が対象となる力場の、結合屈曲部分。

4-Membered Ring Angles. 4 員環を形成する結合の結合角。力場分析において、4 員環を形成する結合が対象となる力場の、結合屈曲部分。

4-Membered Ring Torsions. 4 員環を形成する原子が対象となる力場の、モデルのねじれ角の部分。

Angle Bending Parameters. 標準結合角。力場分析において、結合が対象となる力場の、結合屈曲部分。

Bond Stretching Parameters. 標準結合長。力場分析において、結合が対象となる力場の、結合伸縮と静電の部分。

Chem3D Building Atom Types. モデルを作成するために使用可能な構築タイプ。

Conjugated Pisystem Atoms. pi 系に含まれる結合の結合長。Pi 原子が対象となる力場の、Pi 系の部分。

Conjugated Pisystem Bonds. Pi 結合が対象となる力場の、Pi 系の部分。

Electronegativity Adjustments. 原子が、陰性原子に結合されている場合、原子間の結合長を最適化します。

Elements. モデルを作成するために使用可能な元素が含まれています。

MM2 Atom Type Parameters. 各原子が対象となる力場を計算するためのファンデルワールス パラメータ。

MM2 Atom Types. モデル内で、MM2 計算に使用できる原子タイプ。

MM2 Constants. MM2 力場の計算に使用する定数。

Out-of-Plane Bending Parameters. 三面平面を形成する原子が平面のままであることを保証するパラメータ。力場分析において、三面平面を形成する原子が平面のままであることを保証するパラメータ。

参考資料. パラメータ情報の原典に関する情報が含まれています。

部分構造. モデルを短時間で作成するためにあらかじめ作画された部分構造が入っています。

Torsional Parameters. 力場の、モデルのねじれ角の部分の計算します。

VDW Interactions. 水素結合などの特定のファンデルワールス相互作用を調整します。

モデル作成時、Chem3D は、モデルの結合長と結合角がパラメータ テーブルで指定した条件を満たすようにします。

モデルへのパラメータの適用

モデルにパラメータ テーブルを適用させるには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Model Settings** をクリックし、**Model Building** タブを選択します。
2. **Apply Standard Measurements** を選択します。

パラメータ テーブルの制約を受けずにモデルを作成する場合は、**Apply Standard Measurements** オプションの選択を解除します。ただし、パラメータが適用されないため、モデルが正確でなくなる可能性があります。

推定されたパラメータ

場合により、Chem3D がパラメータを推定します。たとえば、MM2 分析の実行中、非 MM2 原子がモデル内にあることを発見したとします。原子タイプは Atom Types テーブルで定義されていますが、この原子の場合、必要な MM2 パラメータは定義されていません。たとえば、ねじれ角がありません。通常このような問題は、無機化合物の場合に生じるもので、MM2 ではうまく対応できません。有機化合物には、より多くのパラメータがあります。この場合 Chem3D は可能な限り、経験に基づいた推測を試行します。分析を開始する前にメッセージが表示され、モデルにエラーが含まれているとされる場合もあります。エラーを無視する場合は、分析後に、推測されたパラメータを確定することができます。

MM2 分析で使用されたパラメータを表示するには、**Calculations**、**MM2**、**Show Used Parameters** の順に選択します。推測されたパラメータの Quality 値は 1 です。

パラメータ テーブルの編集

 **注意:** 発表されて間もないパラメータ情報など、追加する情報が確かでない場合、パラメータの追加や変更はお勧めしません。

パラメータ テーブルにパラメータを追加するには、次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **Parameter Tables** をクリックし、パラメータ テーブルを選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - テーブルの列のヘッダーを右クリックし、コンテキスト メニューの **Append Row** を選択します。リストの一番下に空白行が追加されます。
 - 行のヘッダーをクリックして行を選択し、その行を右クリックして、**Insert Row** をクリックします。選択した行の上に空白行が追加されます。
3. 新しいパラメータに関する情報を入力します。
4. 次の操作で、ファイルを閉じて、保存してください。

 **注意:** パラメータ テーブルの行が重複しないように注意してください。重複したパラメータが存在する場合、どのパラメータが計算に使用されるか分かりません。

 **注意:** パラメータ テーブルは、編集できるように設計されています。ただし、専門の方以外はテーブルを編集しないことを強くお勧めします。パラメータを変更する前に、元のパラメータ テーブルのバックアップ コピーを作成して、**C3D Items** ディレクトリから削除してください。

元素

Elements テーブル (Elements.xml) には、モデルを作成するための元素が含まれます。Elements テーブルを構成するフィールドを次に示します。

Symbol. 通常、モデルを作成する場合、Elements テーブルの第 1 列のみを使用します。テキストを編集していない状態で、元素記号の最初の文字を 1 つ以上入力すると、元素から元素に素早く移動できます。

Gov Rad. 共有結合半径は、原子間の結合長を概算するために使用されます。

Pattern. 元素のパターン。

Color. コントロール パネルで Color by Element チェック ボックスがオンになっている場合、元素が色付けされます。元素の色を変更するには、現在の色をダブルクリックします。Color Picker ダイアログ ボックスが表示され、元素の新しい色を指定できます。

モデルに元素を使用するには、その記号を Replacement テキスト ボックスに入力し（または、Symbol フィールドのセルをクリップボードにコピーして、テキスト ボックスに貼り付け）、原子が選択された状態で Enter キーを押すか、原子をダブルクリックします。原子が選択されていないと、フラグメントが追加されます。

Atomic number. 元素の原子番号。原子番号は孤立電子対または一般的な原子には割り当てられません。重水素の原子番号は 1.2 です。

構築タイプ

Building Atom Types テーブル (Chem3D Building Atom Types.xml) には、モデルの作成に使用する原子タイプが含まれています。通常、モデルを作成する場合は、テーブルの第 1 列のみを使用します。モデルに作成タイプを使用するには、その記号を Replacement テキスト ボックスに入力し（または、名前セルをクリップボードにコピーしてテキスト ボックスに貼り付け）、原子が選択された状態で Enter キーを押すか、原子をダブルクリックします。原子が選択されていないと、フラグメントが追加されます。構築タイプのレコードを構成するフィールドは、次のとおりです。

名前

レコードは、原子タイプ名によってアルファベット順に並べられています。構築タイプ名は一意である必要があります。

Symbol

このフィールドには構築タイプに関連する元素記号が表示されます。この記号は、ChemBio3D Building Atom Types テーブルと Elements テーブルにリンクしています。この元素記号は原子ラベルにも使用され、さらに、MDL MolFile のように、構築タイプをサポートしないファイル形式でファイルを保存するときにも使われます。van der Waals Radius (ファンデルワールス半径)。

ファンデルワールス (van der Waals) 半径は、ボール & スティック、シリンダー結合、または空間充填モデルを表示するときの、原子のボールとドット面の表示サイズを指定します。

近接状態を生成する場合 (**Structure, Measurements, Generate All Close Contacts** の順に選択)、Chem3D では 2 つの非結合原子間の距離を、それぞれの原子のファンデルワールス半径の合計と比較して、近接状態を決定します。

 **注意:** MM2 計算の結果には、ChemBio3D Building Atom Types テーブルで指定されたファンデルワールス半径による影響はありません。MM2 計算で使用する半径は、MM2 Atom Types テーブルで指定されたものです。

Text

テキスト番号は、他のパラメータ テーブルで特定の原子群にどの計算を適用するか決定します。

たとえば、C アルカンの構築タイプ番号は 1 で、O アルコールの構築タイプ番号は 6 です。C アルカン原子と O アルコール原子の間にある結合の標準結合長を得るには、Bond Stretching テーブルで、1-6 レコードを参照します。

Charge (電荷)。

構築タイプをモデルの原子に割り当てるときに、構築タイプの電荷が使用されます。

原子に関する情報を表示するとき、電荷は常に原子記号の後に表示されます。電荷が端数の場合もあります。たとえば、シクロペンタジエン環に含まれる炭素原子の電荷は 0.200 です。

Chem3D では、原子に割り当てられた形式電荷を表示し、非局在化電荷を計算します。マウス ポインタを原子上に移動すると、両方の電荷がポップアップ ウィンドウに表示されます（表示されない場合もあります）。

Max Ring Size (最大環サイズ)。

Maximum Ring Size フィールドでは、相当する構築タイプを、一定のサイズの環に含まれる原子に制限するかどうかを指定します。このセルがゼロ、または空白の場合、この構築タイプは制限されていません。たとえば、0シクロプロパンの最大環サイズは 3 です。

Rectification Type (結合調整タイプ)

Rectification Type は原子価に満たない原子を満たす原子タイプを指定します。この原子は、モデルの作成時に追加または削除されます。修正をアクティブ化するには、File メニューの **Model Settings** をクリックします。

Model Building タブで **Rectify** チェック ボックスをオンにします。

使用できる結合調整タイプは次のとおりです。

▪ D	▪ H
▪ H Alcohol	▪ H Amide
▪ H Amine	▪ H Ammonium
▪ H Carboxyl	▪ H Enol
▪ H Guanidine	▪ H Thiol

結合調整タイプを指定する場合、結合調整タイプの結合先タイプと構築タイプの間には矛盾がないように注意してください。原子は、結合調整タイプがない場合、一切調整されません。

たとえば、0 カルボキシルの結合調整タイプが H Carboxyl である場合、H カルボキシルの結合先タイプを 0 Carboxyl または空にします。そうしないと、構築タイプを割り当てる際に、0 カルボキシル原子に結合している水素原子の原子タイプに H Carboxyl が割り当てられません。

Geometry (幾何学的構造)

構築タイプの幾何学的構造は、その原子タイプから拡張する結合数と、その結合が形成する角を記述します。

使用できる幾何学的構造は次のとおりです。

▪ 配位子数 0	▪ 配位子数 1
▪ 配位子数 5	▪ 屈曲
▪ 直線	▪ 八面体
▪ 平面正方形	▪ 四面体
▪ 三方両ピラミッド	▪ 三面平面
▪ 三面ピラミッド	

 **注意:** 結合角の標準パラメータは、中心原子の立体構造が、四面体、三面体、または屈曲構造の場合にのみ使用されます。

Double Bonds、Triple Bonds、Delocalized Bonds（二重結合、三重結合、非局在結合）。

二重結合数、三重結合数、非局在結合数は整数であり、その範囲は、0 から立体構造に指定されている配位子の数までです。Chem3D では、この情報を利用して、結合次数に基づいて構築タイプを割り当てたり、構築タイプに基づいて結合次数を割り当てたりします。

Bound to Order（結合先次数）。

構築タイプと、結合先タイプで指定された原子タイプの間で可能な結合次数です。

たとえば、Cカルボニルの場合、二重結合のみが結合先タイプ O Carboxylate を形成できます。結合先タイプが指定されていない場合は、このフィールドは空になります。結合先次数は、単一、二重、三重、または非局在化のいずれかです。

 **注意:** 結合先次数は、この原子タイプの二重結合数、三重結合数、非局在結合数と整合性があることが必要です。原子タイプの結合先タイプが指定されていない場合、結合先次数は無視されます。

Bound to Type（結合先タイプ）。

原子の結合先となる構築タイプを指定します。制限がない場合、このフィールドは空になります。Bound to Type は、Bound to Order フィールドとともに使用します。

Bound to Type の値が空白でない場合、次のようになります。

▪ C Alkene	▪ C Carbocation
▪ C Carbonyl	▪ C Carboxylate
▪ C Cyclopentadienyl	▪ C Cyclopropene
▪ C Epoxy	▪ C Isonitrile
▪ C Metal CO	▪ C Thiocarbonyl
▪ H Alcohol	▪ H Thiol
▪ N Ammonium	▪ N Azide Center

▪ N Azide End	▪ N Isonitrile
▪ N Nitro	▪ O Carbonyl
▪ O Carboxylate	▪ O Epoxy
▪ O Metal CO	▪ O Nitro
▪ O Oxo	▪ O Phosphate
▪ P Phosphate	▪ S Thiocarbonyl

Substructures 部分構造テーブル

Substructures 部分構造テーブル (Substructures.xml) には、モデルの作成時に使用する部分構造を集めたライブラリが含まれています。部分構造は、新しいフラグメントを作成するときのテンプレートとして使用することも、既存モデルに追加することもできます。

既存のモデルに部分構造を追加するには、次の操作を行ってください。

1. テキストツールの作成を使用して、モデル内の原子をクリックします。
2. 部分構造の名前 (Substructure パラメータ テーブルの 1 列目を参照) を入力して、Enter キーを押します。

部分構造から新しいフラグメントを作成するには、次の操作を行ってください。

1. Substructure パラメータ テーブルで、Model 列にある部分構造の画像を右クリックして、コンテキストメニューから **Copy** を選択します。
2. モデル ウィンドウを右クリックして、コンテキスト ウィンドウから **Paste** を選択します。

Substructure テーブルの編集

テーブルから部分構造を削除するには、次の操作を行ってください。

1. 削除する部分構造の行番号をクリックします。行が強調表示されます。
2. 行で強調表示されたセルを右クリックし、**Delete row** を選択します。行が削除されます。

テーブルに行を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - 既存の行の前に行を追加するには、既存の行を右クリックし、**Insert Row** を選択します。
 - テーブルの一番下に行を追加するには、セルを右クリックして、**Append Row** を選択します。
2. 新しい行の Name 列に、部分構造の名前を追加します。
3. モデル ウィンドウで部分構造モデルを作成します。
4. モデルを選択します。
5. **Edit** メニューの **Copy** をクリックします。
6. Substructure テーブルで新しい行の Model セルを右クリックして、**Paste** を選択します。

7. Color セルをダブルクリックして、部分構造に色を割り当てます。
8. Substructure ウィンドウを閉じて、要求に応じて変更を保存します。

References 参照

References テーブル (References.xml) の中には、他のパラメータの源に関する情報が入っています。

References テーブルを使用しても他のテーブルに影響はありません。

各参照レコードでは、Reference Number と Reference Description のフィールドが使用されます。

Number (数字). Reference Number は参考資料を整理する索引です。各計算法にも、その計算法を示す参照番号が入っている参照フィールドが必要です。

Description (説明). Reference Description の中には、参考資料を説明するために必要な任意のテキストが入っています。Journal references または文献のデータは一般的な例です。

Bond Stretching Parameters 結合伸縮パラメータ

Bond Stretching Parameters テーブル (Bond Stretching Parameters.xml) の中には、さまざまな原子タイプの原子間の標準結合長に関する情報が入っています。標準結合長の他に、Chem3D の MM2 計算で使用する情報も含まれます。

Bond Stretching テーブルには、モデル内の結合が対象となる力場の、結合伸縮と静電の部分の計算に必要な情報が入っています。

Bond Stretching Parameters レコードは、Bond Type、KS、Length、Bond Dpl、Quality、Reference の 6 つのフィールドから成ります。

Bond Type (結合タイプ). Bond Type フィールドには、結合された 2 つの原子の構築タイプ番号が入っています。

たとえば Bond Type 1-2 は、アルカン炭素とアルケン炭素の間にある結合を指定します。

KS. KS (または結合伸縮力定数) フィールドの中には、2 つの原子の間にある結合の強度に直接影響がある比例定数が入っています。KS 値が大きいほど、その結合を圧縮または伸縮することが難しくなります。

Length (結合長). 3 目目のフィールド、Length の中には、特定の結合タイプの結合長が入っています。Length フィールドにある数字が大きいほどそのタイプの結合は長くなります。

Bond Dpl (結合双極子). Bond Dpl フィールドの中には、特定の結合タイプの結合双極子が入っています。このセル内の数字は、結合の極性を示します。値が 0 の場合、特定の結合の原子の間に、陰性の差がないことを示します。結合双極子の値が正の場合、Bond Type フィールド内の第 1 原子タイプ番号で指定する構築タイプの陰性が、第 2 原子タイプ番号で指定する構築タイプの陰性よりも弱いことを示しています。結合双極子の値が負の場合、Bond Type フィールド内の第 1 原子タイプ番号で指定する構築タイプの陰性が、第 2 原子タイプ番号で指定する構築タイプの陰性よりも強いことを示しています。

たとえば、結合を形成する両方のアルカン炭素が同じ陰性を持つため、1-1 の結合タイプの結合双極子は 0 です。エーテルまたはアルコール酸素の陰性はアルカン炭素の陰性よりも強いため、1-6 の結合タイプの結合双極子は 0.440 です。

シラン珪素の陰性はアルカン炭素の陰性よりも弱いため、1-19 の結合タイプの結合双極子は -0.600 です。

注意: 炭素と水素の陰性が異なっていますが、1-5 の結合タイプの結合双極子は 0 です。この概算によって、計算する双極子の数が大幅に減少し、合理的な結果を得ることができます。

Angle Bending Parameters 折り曲げ角パラメータ

これらのパラメータ テーブルは、Chem3D がさまざまなタイプの原子間での結合角を決定するのに使用する標準結合角を提供します。変角パラメータ テーブルには、次の 3 種類があります。

テーブル名	ファイル名	説明
Angle Bending Parameters	Angle Bending Parameters.xml	中心原子の追加物の数が 4 以下で、結合角が 3 員環や 4 員環に含まれていない場合に適用されます。
3-Membered Ring Angles	3-Membered Ring Angles.xml	3 員環に適用されます。
4-Membered Ring Angles	4-Membered Ring Angles.xml	4 員環に適用されます。

Chem3D では、3 員環または 4 員環に含まれるモデルの結合角全体が対象となる MM2 力場の、結合角曲げの部分を実行するときに必要な追加情報を使用します。

これらのテーブルはそれぞれ、以下に説明するフィールドから成ります。

Angle Type. このフィールドには、結合角を形成する 3 つの原子の原子タイプ番号が入っています。

たとえば、1-2-1 の結合角は、アルカン炭素がアルケン炭素と結合し、このアルケン炭素がさらに、別のアルカン炭素に結合して形成される結合角です。ここでは、アルケン炭素が結合角の中心原子であることに注目してください。

KB. KB (または結合角曲がり定数) の中には、3 つの原子によって定義される結合角を曲げるために必要なエネルギーの測定値が入っています。KB 値が大きいほど、その結合角を圧縮または伸縮することが難しくなります。

-XR2- このフィールドの中には、中心原子が水素原子と一切結合していない結合角の最適値が入っています。X が結合角の中心原子を表し、R は X と結合する、水素以外の原子を表します。

たとえば、2,2-ジクロロプロピオン酸の 1-1-3 結合角タイプでは、中心炭素 (C-2) に水素原子が結合されていないので、-XR2- 結合角の 107.8 度が最適値になります。

N,N,N-トリエチルアミンの 1-8-1 結合角タイプでは、中心窒素に水素原子が結合されていないので、-XR2- 結合角の 107.7 度が最適値になります。中心窒素の立体構造が三面ピラミッド型であるため、結合した水素以外の原子の片方が孤立電子対で、もう片方が炭素であることに注目してください。

-XRH-, -XRH- フィールドの中には、中心原子が、水素原子および水素以外の原子と結合している結合角の最適値が入っています。X が結合角の中心原子を表し、R は X と結合する、水素以外の原子を表します。また、H は X と結合する水素原子を表します。

たとえば、2-クロロプロピオン酸の 1-1-3 結合角タイプでは、中心炭素 (C-2) に水素原子が 1 つ結合されているので、-XRH- 結合角の 109.9 度が最適値になります。N,N-ジエチルアミンの 1-8-1 結合角タイプでは、中心窒素に水素原子が結合されているので、-XRH- 結合角の 107.7 度が最適値になります。この場合、1-8-1 結合角の -XR2-値と -XRH-値は同じです。上の N,N,N-トリエチルアミンの例と同様、唯一の水素以外の原子は孤立電子対です。

-XH2-, -XH2- フィールドの中には、中心原子がさらに、2 つの水素原子と結合している結合角の最適値が入っています。

たとえば、プロピオン酸の 1-1-3 結合角タイプでは、中心炭素 (C-2) に水素原子が 2 つ結合されているので、-XH2- 結合角の 110.0 度が最適値になります。

Conjugated Pisystem Bonds 共役パイシステム結合

Chem3D は、Conjugated Pisystems Bonds テーブル (Conjugated PI System Bonds.xml) のパラメータを使用して、pi 系に含まれる結合の長さや角度を修正します。Chem3D では、モデルの pi 結合が対象となる MM2 力場の、pi 系の部分を計算するときに必要な追加情報を使用します。

Pi Bonds テーブルのレコードの中には、次の 5 つのフィールドがあります。Bond Type、dForce、dLength、Quality、Reference です。

Bond Type (結合タイプ). Bond Type は、2 つの結合された原子の原子タイプ番号を表します。

たとえば、2-2 の結合タイプは、2 つのアルケン炭素の間にある結合です。

dForce. dForce は、特定の共役二重結合の結合伸縮力定数を減少するために使用する定数です。計算した pi 結合次数が x である結合のエネルギー定数 K_x は次の方程式で計算します。 $K_x = K_2 - (1 - x) * dForce$
ここで、 K_2 は、Bond Stretching テーブルから得た、非共役二重結合の力定数です。

2 つの pi 原子の間にある結合の K_x の値が高いほど、その結合を圧縮または伸縮することが難しくなります。

dLength. dLength フィールドの中には、任意の共役二重結合の結合長を延長するために使用する定数が入っています。計算した pi 結合次数が x である結合の結合長 l_x は次の方程式で計算します。

$$l_x = l_2 + (1 - x) * dLength$$

ここで、 l_2 は、Bond Stretching テーブルから得た、非共役二重結合の結合長です。2 つの pi 原子の間にある結合の l_x の値が高いほど、その結合は長くなります。

パラメータの Quality は、データの相対的な精度を示します。

Quality	精度のレベル
1	Chem3D によって推定されたパラメータ。“推定されたパラメータ” ページ 145を参照してください。
2	確認されていない、理論上のパラメータ。
3	実験データから導かれたパラメータ。
4	確証が得られたパラメータ。

計測値の参考文献は、References テーブル内の参照番号に相当します。参考文献は、パラメータ データの出典を示します。参考文献のリストについては、References パラメータ テーブルを参照してください。

Pi Atoms パイ原子

Pi Atoms テーブル (Conjugated Psystem Atoms.xml) の中には、pi 系の原子を修正するための電子特性パラメータが入っています。Chem3D では、pi 原子が対象となる MM2 力場の、pi 系の部分を計算するときに必要な追加情報を使用します。

Pi Atoms テーブルのフィールドについて、次に説明します。

Atom Type . Atom type number フィールドの中には、Conjugated Psystem Atoms レコードの残りに適用する原子タイプ番号が入っています。

Electron (電子). Electron フィールドの中には、pi 原子が pi 系に提供する電子の数が入っています。

たとえば、原子タイプ番号が 2 であるアルケン炭素は、pi 系に 1 つの電子を提供し、原子タイプ番号が 40 であるピロール窒素は、pi 系に 2 つの電子を提供します。

Ionization (イオン化). Ionization フィールドの中には、単離した pi 原子から pi 電子を除去するために必要なエネルギー量が入っています (単位: 電子ボルト (eV))。原子の陰性が強くなるほど、イオン化エネルギーが大きくなります。

たとえば、アルケン炭素のイオン化エネルギーは -11.160 eV で、より強い陰性を有すピロール窒素のイオン化エネルギーは -13.145 eV です。

Repulsion (斥力). Repulsion フィールドの中には次のものが入っています。

- それぞれ別の pi 原子に属する 2 つの電子が掛け離れるのを防ぐために必要なエネルギー。
- 同じ pi 原子の同じ起動に含まれる 2 つの電子が掛け離れるのを防ぐために必要なエネルギー (単位: 電子ボルト (eV))。

原子の陰性が強くなるほど、斥力エネルギーが大きくなります。たとえば、アルケン炭素の斥力エネルギーは 11.134 eV で、より強い陰性を有すピロール窒素の斥力エネルギーは 17.210 eV です。

パラメータの Quality は、データの相対的な精度を示します。

Quality	精度のレベル
1	Chem3D によって推定されたパラメータ。“推定されたパラメータ” ページ 145を参照してください。
2	確認されていない、理論上のパラメータ。
3	実験データから導かれたパラメータ。
4	確証が得られたパラメータ。

計測値の参考文献は、References テーブル内の参照番号に相当します。参考文献は、パラメータ データの出典を示します。参考文献のリストについては、References パラメータ テーブルを参照してください。

Electronegativity adjustments

Chem3D では、Electronegativity Adjustments テーブル (Electronegativity Adjustments.xml) に入っているパラメータを使用して、片方の原子が、陰性を有す 3 つ目の原子と結合している場合、2 つの原子の間で最適な結合長を調節します。たとえば、エタンにおける炭素と炭素の単結合の長さは、エタノールにおける炭素と炭素の単結合の長さとは異なります。MM2 パラメータのセットには、炭素と炭素の単結合長に対する 1 つのパラメータがあります (1.523 Å)。陰性の修正パラメータを使用して、エタノールの C-C 結合を修正できます。Electronegativity Corrections テーブルで使用される陰性パラメータは 1-1-6 結合角タイプです。ここで、原子タイプ 1 は C アルカン、原子タイプ 6 は O アルコールです。このパラメータの値は -0.009 Å です。つまり、エタノールの C-C 結合長は、標準の C-C 結合長より 0.009 Å 短くなります。

MM2 Constants

MM2 定数テーブル (MM2 Constants.xml) の中には、Chem3D が MM2 力場を計算するために使用するパラメータが入っています。

三次伸縮定数と四次伸縮定数. フックの法則における方程式を積分することにより、ボール&スプリング モデルの位置エネルギーを現すフック法則のポテンシャル関数が得られます。このポテンシャル関数は、通常のポテンシャル井戸の形をしています。

$$-\frac{dV}{dx} = F = -dx$$

フックの法則のポテンシャル関数は、二次関数であるため、形成されるポテンシャル井戸は対称的な形です。ポテンシャル井戸の実際の形は非対称的であり、モース関数によって定義されますが、フックの法則のポテンシャル関数は、ほとんどの分子に適しています。

$$V(x) = \int_0^x dV = k \int_0^x x dx = \frac{1}{2} kx^2$$

フックの法則では適切に表現できない長い結合を含む分子もあります。そのために、三次伸縮項が MM2 力場に含まれています。三次伸縮項は、非対称的なポテンシャル井戸の形を可能としているため、これらの長い結合に敵対できます。ただし、三次伸縮項では極端に長い結合には対応できません。そこで、四次伸縮項が MM2 力場に含まれており、これらの非常に長い結合から生じる問題を解決します。

C-C-C 結合角のタイプ 2 (-CHR-) 変角力パラメータ.

- 1-1-1 角の -CHR- 変角定数 K
- 4 員環の 1-1-1 角の -CHR- 変角定数 K
- 3 員環の 22-22-22 角の -CHR- 変角定数 K

これらの定数は Angle Bending テーブルで指定された力定数とは異なるものです。MM2 Angle Bending Parameters テーブルにリストされる 1-1-1 角 (1 は、C アルカン原子タイプの原子タイプ番号です) の曲げ力定数 (K) は、水素以外の基が結合されるアルカン炭素に使用されます。1 つまたは 2 つの水素と結合する炭素の角曲げパラメータは、水素と結合していない炭素のものとは異なります。1 つまたは 2 つの水素と結合する炭素は数多くあるので、これらの結合角では別々の力定数を使用します。

1-1-1 角の -CHR- Bending K によって、タイプ 1 (-CH2-) およびタイプ 2 (-CHR-) 相互作用に、より正確な力定数を指定できます。さらに、4 員環の 1-1-1 角の -CHR- Bending K および 3 員環の 22-22-22 角 (22 は、C シクロプロパン原子タイプの原子タイプ番号です) の -CHR- Bending K は、上記 1-1-1 角の -CHR- Bending K とは異なり、個別な定数を正確に指定する必要があります。

伸縮-変角パラメータ.

- X-B、C、N、O-Y 伸縮-曲げ相互作用力定数
- X-B、C、N、O-H 伸縮-曲げ相互作用力定数
- X-Al、S-Y 伸縮-変角力定数
- X-Al、S-H 伸縮-変角力定数
- X-Si、P-Y 伸縮-変角力定数
- X-Si、P-H 伸縮-変角力定数
- X-Ga、Ge、As、Se-Y 伸縮-変角力定数

伸縮-変角パラメータは、上記元素リストでの伸縮-曲げ相互作用項で使用する力定数です。X および Y は水素以外の任意の原子です。

角度が圧縮される場合、MM2 力場は力定数を使ってその角の中心原子から両方の原子までの結合長を大きくします。

たとえば、シクロブタンの正常な C-C-C 結合角は 88.0 度で、比較してシクロヘキサンの C-C-C 結合角は 110.8 度です。伸縮-変角力定数を使用して、シクロヘキサンにおいて 1.536 Å の C-C 結合長から、シクロブタンにおいて 1.550 Å にまで C-C 結合を伸ばします。

六次変角定数. 六次変角定数 (* 10^{**8})

Chem3D は、理論値から大きなひずみを持つ角のエネルギーを増加させるために六次変角定数を使用します。

Dielectric Constants (誘電率).

- 電荷の誘電率
- 双極子の誘電率

誘電率は逆比例定数として静電エネルギー項に使用されます。誘電率は電荷と双極子と分けてあるので、片方を部分的に、または完全に除去できます。

電荷-双極子相互作用は、電荷と双極子の誘電率の幾何平均を使用します。

たとえば、双極子の誘電率を増加した場合、双極子または双極子エネルギーが減少します。結果的に、分子の総合立体エネルギーに対する双極子-双極子相互作用の影響が減少します。

静電およびファンデルワールスのカットオフ パラメータ. これらのパラメータが定義する最短距離を超えると、リストされた相互作用の計算に 5 次の多項スイッチング関数を使用します。

- 電荷または電荷相互作用のカットオフ距離 電荷または双極子相互作用のカットオフ距離
- 双極子または双極子相互作用のカットオフ距離
- ファンデルワールス相互作用のカットオフ距離

MM2 Atom Type Parameters 原子タイプパラメータ

MM2 Atom Types テーブル (MM2 Atom Types.xml) の中には、モデル内の各原子が対象となる力場を計算するときに必要な van der Waals パラメータが入っています。

各 MM2 Atom Type レコードは、次の 8 つのフィールドを含みます。Atom type number、R*、Eps、Reduct、Atomic Weight、Lone Pairs、Quality、Reference です。

Text type number

Text Type number フィールドは、MM2 Atom Type Parameter レコードの残りが適用する原子タイプです。MM2 Atom Type テーブル ウィンドウのレコードは、Atom Type Atom type number の昇順にソートされます。

R. R フィールドは、特定の原子のファンデルワールス半径です。原子のファンデルワールス半径が大きいほど、その原子は大きくなります。

 **注意:** Chem3D では、MM2 Atom Types テーブルのファンデルワールス半径 R を計算に使用します。これは、モデルを表示するときに使用する Atom Types テーブルのファンデルワールス半径とは異なります。

Eps. Eps または Epsilon フィールドは、ポテンシャル井戸の深さと比例する定数です。エプシロンの値が増大するに連れて、ポテンシャル井戸の深さが増大し、原子と他の原子の間にある反発的および引力的な相互作用も増大します。

 **注意:** 特定のファンデルワールス相互作用では、MM2 Atom Types テーブルに含まれた値の代わりに、van der Waals Interactions テーブルの R および Eps 値を使用します。詳細については「ファンデルワールス相互作用」を参照してください。

Reduct. Reduct は、結合した炭素原子の核に向けて、水素の電子雲の中心を、両原子間の距離の約 10% に位置するために使用される定数です。

ファンデルワールス ポテンシャル関数に含まれている原子はすべて、その核を中心とした球形の電子雲を有する必要があります。大きな原子のほとんどの場合この想定は妥当ですが、水素のような小さい原子については妥当ではありません。水素の核を中心とした球形の電子雲に基づいた原子力学計算では正しい結果は得られません。しかし、水素を覆う電子雲が球形であって、その中心が水素の核でないという折中案は妥当です。Reduct 定数を通常の結合長で掛けて、位置を変える電子雲の中心となる新しい結合長を計算します。水素以外の他の原子の場合、Reduct フィールドの値はゼロです。

Atomic weight. 第 5 フィールドの Atomic Weight は、原子タイプ番号で表す原子の原子量です。

 **注意:** 原子量は同位体的に純粋な元素のものです。たとえば、原子番号 1 の原子量は 12.000 で、 ^{12}C の原子量です。

Lone pairs. Lone Pairs フィールドには、特定の原子タイプの付近にある孤立電子対の数が入っています。原子タイプ番号 8 のアミン窒素は孤立電子対を 1 つ、原子タイプ番号 6 のエーテル酸素は孤立電子対を 2 つ有することに注目してください。これらの原子のように電子雲の分配が明らかに非球形である原子の孤立電子対は、明示的に処理されます。電子雲がほぼ球形である 0 カルボニルのような元素には、明示的に孤立電子対を処理する必要はありません。

 **注意:** 孤立電子対は、原子で必要とされる場合でも自動的に表示されません。

Torsional Parameters **ねじれパラメータ**

Torsional Parameters テーブル (Torsional Parameters.xml) には、モデルのねじれ角に対する MM2 カ場の要素を計算するのに使用されるパラメータが含まれています。4-Membered Ring Torsional Parameters テーブル (4-membered Ring Torsionals.xml) には、4 員環内の原子のねじれパラメータが含まれています。Torsional Parameters テーブルおよび 4-Membered Ring Torsional Parameters テーブルの角レコードは、次に示す 6 つのフィールドから成ります。Dihedral Type、V1、V2、V3、Quality、Reference です。

Dihedral Type (二面角のタイプ)

Dihedral Type フィールドの中には、二面角を定義する 4 つの原子タイプの原子タイプ番号が入っています。たとえば、1-2-2-1 の結合角タイプは、アルカン炭素、アルケン炭素、アルケン炭素、アルカン炭素を順番に結合して形成される二面角です。すなわち、1-2-2-1 の結合角タイプは、2-ブテンに含まれる両メチル基の間にある二面角です。

両方のアルケン炭素は、二面角の中心原子です。

V1

V1、または 360 度周期ねじれ定数と呼ばれるフィールドには、原子の総ねじれエネルギーを計算するために必要である、主な 3 つのねじれ定数の第 1 番目が入っています。V1 の名前は、周期が 360 度のねじれ定数では、1 つのねじれエネルギー最小値および 1 つのねじれエネルギー最高値のみが可能であることに由来しています。周期は、-180 度で始まり 180 度で終わります。

陽性の V1 の値は、360 度の周期内で、最大値が 0 度に、最小値が ± 180 度に生じることを意味します。陰性の V1 の値は、360 度の周期で、最小値が 0 度に、最大値が ± 180 度に生じることを意味します。V1 の意味は、次にある V2 の説明の後の例で説明します。

V2

V2、または 180 度周期ねじれ定数と呼ばれるフィールドには、原子の総ねじれエネルギーを計算するために必要である、主な 3 つのねじれ定数の第 2 番目が入っています。V2 という名前は、周期が 180 度のねじれ定数では、2 つのねじれエネルギー最小値および 2 つのねじれエネルギー最高値のみが、360 度の周期内で可能であることに由来しています。

陽性の V2 の値は、360 度の周期内で、最小値が 0 度および +180 度に、最大値が -90 度および +90 度に生じることを意味します。陽性の V2 の値では、最大値と最小値の位置が、上記の V1 の場合のように入れ替わります。

2-ブテンのねじれパラメータ 1-2-2-1 は V1 および V2 ねじれ定数の意味に適する例です。V1 および V2 の Torsional Parameters テーブル内の値はそれぞれ -0.100 および 10.000 です。

最小値が 0 度および +180 度にあることを陽性の V2 の値が示すため、これらの最小値はそれぞれシス-2-ブテンおよびトランス-2-ブテンを意味します。炭素-炭素二重結合を軸とするねじれの V2 ねじれパラメータはすべて、範囲が約 $V2=8.000$ から $V2=16.250$ の値であることに注目してください。なお、炭素-炭素単結合を軸とするねじれの V2 ねじれパラメータはすべて、範囲が約 $V2=-2.000$ から $V2=0.950$ の値です。

炭素-炭素単結合を軸とするねじれよりも炭素-炭素二重結合を軸とするねじれの方が V2 の値が高いです。この V2 の値の差によって、二重結合を軸とする回転のエネルギー障壁が、単結合を軸とする回転の障壁よりもはるかに高くなります。

V1 ねじれ定数によって、V2 定数のねじれエネルギー最小値で表す 2 つの配座の間にねじれエネルギー差が生じます。以上で説明したとおり、陰性の V1 の値は最小値が 0 度に、最大値が 180 に生じることを意味します。

$V1=-0.100$ の値は、シス-2-ブテンが、トランス-2-ブテンで示すねじれエネルギーの最高値より 0.100 kcal/mole 低いねじれエネルギーの最小値であることを意味します。

V1 フィールドが陰性であるという直観に反する事実は、総エネルギーのみが実験データと比較できることを思い出せば理解できます。実際、トランス-2-ブテンの総エネルギーは、シス-2-ブテンの総エネルギーより 1.423 kcal/mole 低いと計算されます。この相関は実験結果に近いものです。二重結合の反対端にあるメチル基や水素の間に生じるエネルギー差は、ファンデルワールス斥力のみに基づくとは過大評価されてしまい、陰性 V1 値を導入することによって補償できます。この例では、次の重要なことが分かります。

MM2 計算に使用される特定のパラメータと分子の特定の物理的特性の間には、必ずしも相関性があるとは限りません。

V3

V3、または 120 度周期ねじれ定数と呼ばれるフィールドには、原子の総ねじれエネルギーを計算するために必要である、主な 3 つのねじれ定数の第 3 番目が入っています。V3 という名前は、周期が 120 度のねじれ定数では、3 つのねじれエネルギー最小値および 3 つのねじれエネルギー最高値が、360 度の周期内で可能であることに由来しています。陽性の V3 の値は、360 度の周期内で、最小値が -60 度、+60 度および +180 度、最大値が -120 度、0 度および +120 度に生じることを意味します。陽性の V3 の値では、最大値と最小値の位置が、以上の V1 および V2 の場合のように逆になります。V3 の意味は、次の例で説明します。

n-ブタン-1-2-3 のねじれパラメータ 1-1-1-1 は V3 ねじれ定数の例です。V1、V2 および V3 の Torsional Parameters テーブル内の値はそれぞれ 0.200、0.270 および 0.093 です。最小値が -60 度、+60 度および

+180 度にあり、最大値が -120 度、0 度および +120 度にあることを陽性の V3 の値が示すため、±60 度にある最小値は、そのメチル基同士が 60 度の二面角にある n-ブタンの両方のゴーシュ配座を意味します。+180 度にある最小値は、そのメチル基同士が反対向きに配向しているアンチ型配座を表します。0 度にある最高値は、そのメチル基同士が重なっているエクリプス型配座を表します。±120 度にある最高値は、そのメチル基と水素が重なっている n-ブタンのエクリプス型配座を表します。

この例では、炭素-炭素二重結合を軸としたねじれの場合使用する V1 ねじれ定数と同様に、V1 および V2 ねじれ定数がねじれエネルギーに影響します（前の例を参照してください）。

注意: V3 ねじれ定数のみを使用した (V1 および V2 をゼロに設定した) 場合、炭化水素を対象とした MM2 計算の結果は、炭化水素を対象とした実験データとの一致が不十分です。しかし、炭化水素を対象とした MM2 計算に、V1 および V2 ねじれ定数に低値を含めると、MM2 の結果と実験データの相関性が大幅に向上します。このような V1 および V2 の使用法では、炭化水素の特定の物理的特性に相当するものは提供しません。

Out-of-Plane Bending OOP 変角エネルギー

Out-of-Plane Bending テーブル (Out-of-Plane Bending Parameters.xml) の中には、MM2 計算で三面平面構造の原子が常に平面内に保持されるために使用するパラメータが入っています。テーブルには次の 4 つのフィールドが含まれます。Bond Type、Force Constant、Quality、Reference です。

Bond Type (結合タイプ)

第 1 フィールドの Bond Type は、結合される 2 つの原子の原子タイプ番号によって定義されます。たとえば、2-3 の Bond Type は、アルケン炭素とカルボニル炭素の間にある結合です。

Force constant

force constant フィールド、または out-of-plane bending constant (平面外への曲げ定数) フィールドは、三面平面原子を非平面にするために必要なエネルギー量を示します。原子の力定数が大きいほど、その原子が非平面になるよう強制するのが難しくなります。

注意: 平面外への変角パラメータは、非対称的なものです。たとえば、2-3 結合の力定数は、タイプが 2 の原子を含む平面を示します。3-2 結合の力定数は、タイプが 3 の原子を含む平面を示します。

Quality

パラメータの Quality は、データの相対的な精度を示します。

Quality	精度のレベル
1	Chem3D によって推定されたパラメータ。“推定されたパラメータ” ページ 145を参照してください。
2	確認されていない、理論上のパラメータ。
3	実験データから導かれたパラメータ。
4	確証が得られたパラメータ。

Reference

計測値の参考文献は、References テーブル内の参照番号に相当します。参考文献は、パラメータ データの出典を示します。参考文献のリストについては、References パラメータ テーブルを参照してください。

ファンデルワールス相互作用

van der Waals パラメータ テーブル (van der Waals Interaction.xml) の中に入っているパラメータは、水素結合等の、分子内の特定のファンデルワールス相互作用を調節し、MM2 カ場の計算と実験データとの改善した一致を提供するためにするために使用されます。

アルカン炭素 (Atom Type 1) および水素 (Atom Type 5) の間にあるファンデルワールス相互作用を例とします。通常では、ファンデルワールス エネルギーは、Atom Types テーブルにある各原子のファンデルワールス半径の合計値 (原子タイプ番号 1 の 1.900 Å + 原子タイプ番号 2 の 1.400 Å = 3.400 Å) に基づきます。しかし、van der Waals Interactions テーブルにあるこの特定の原子対に関する値 (Atom Types 1-5 = 3.340 Å) を、この合計値と置換することにより、計算したファンデルワールス エネルギーと実験データとの改善した一致を得ることが可能です。同様に、特定の原子対の Eps パラメータは、それらの原子タイプが van der Waals Interactions テーブルに含まれている場合、幾何平均によって置換されます。

ドッキング

ドッキングによって、小さな分子（リガンド）を大きな分子（受容体）のキャビティ内にエネルギー曲面から好ましい向きに組み込む方法を決定できます。たとえば、薬品候補の配座異性体を調べて、選択したタンパク質の結合部位に追加できるかどうかを判断できます。

Chem3D には、ドッキング計算を実行するための AutoDock へのインターフェイスがあります。AutoDock では、まずリガンドのランダムに生成された形状の集合が表示されます。形状は、特定の向き、場所、立体配座でのリガンドの実例です。AutoDock は集合から最適な形状を選択して、残りは廃棄します。AutoDock は選択したものから新しい形状を生成し、遺伝的アルゴリズムを使用して集合を再構築します¹。それぞれの選択/再構築サイクルは世代と呼ばれます。AutoDock は、決められた世代の最大数だけこのサイクルを繰り返します。AutoDock は、最終世代から最適な形状を取得し、それらを最終計算結果として報告します。

 **注意:** AutoDock の機能により、ログ ファイルが生成されます。AutoDock でエラーが報告された場合は、ログ ファイルを参照して、エラーが AutoDock の機能によるものか Chem3D の機能によるものかを特定します。1 ページの「[テクニカル サポート](#)」を参照してください。

AutoDock のインストール

AutoDock を使用する前に、AutoDock と AutoDockTools の両方をインストールする必要があります。AutoDock の Web サイトから無料でダウンロードできます。1 回だけインストールすれば済みます。

AutoDock をインストールするには、次の操作を行ってください。

1. Chem3D で、**Calculations**、**AutoDock Interface**、**Install AutoDock/AutoDock Tools** の順に選択します。
2. AutoDock ダイアログ ボックスで **Download AutoDock** をクリックします。Web ブラウザで AutoDock の Web サイトが開き、ダウンロード手順が示されます。
3. AutoDock 4.2.6 をローカル ハード ドライブにダウンロードしてインストールします。

 **注意:** AutoDock Vina ではなく AutoDock 4.2.6 をダウンロードしてください。

4. AutoDock ダイアログ ボックスで **Set AutoDock Path** をクリックして、AutoDock のインストール先へのパスを選択します。

AutoDock Tools のインストール

AutoDock と同様に、AutoDock Tools も無料でダウンロードできます。

AutoDock Tools をインストールするには、次の操作を行ってください。

1. Chem3D で、**Calculations**、**AutoDock Interface**、**Install AutoDock/AutoDock Tools** の順に選択します。
2. AutoDock ダイアログ ボックスで **Download AutoDock Tools** をクリックします。Web ブラウザで AutoDock の Web サイトが開き、ダウンロード手順が示されます。

¹詳細については、『[AutoDock User Guide](#)』を参照してください。

3. AutoDock Tools 1.5.6 をローカル ハード ドライブにダウンロードしてインストールします。

 **注意:** インストールの最後に表示されるパッケージを受け入れたり、インストールしたりする必要はありません。これらは、AutoDock Tools を使用するのに必要ありません。

4. AutoDock ダイアログ ボックスで **Set AutoDockTools Path** をクリックして、AutoDock Tools のインストール先へのパスを選択します。

AutoDock の設定

AutoDock および AutoDock Tools をインストールする際、ファイルを保存する場所をローカル ドライブ内で指定します。必要に応じて、これらのファイルを別のディレクトリに移動したり、再びダウンロードすることができます。AutoDock で生成されたログ ファイルの保存場所を変更することもできます。

AutoDock を設定するには、次の操作を行ってください。

1. AutoDock Interface が開いていない場合は、**Calculations**、**AutoDock Interface**、**Setup AutoDock Calculation** の順に選択します。
2. **General** タブを選択します。
3. AutoDock の作業用フォルダを変更するには、Working Directory の **Change Directory** をクリックします。このフォルダには、AutoDock の実行中に使用されるすべての一時ファイルが含まれます。
 - a. ログ ファイルを保存する新しいフォルダを参照して、**OK** をクリックします。
-  **注意:** 作業用のディレクトリにファイルがある場合、計算を実行することはできません。 **Change Directory** オプションを使用して別のディレクトリを選択するか、作業用のディレクトリに移動してファイルを削除する必要があります。
4. (オプション) AutoDock のファイル用フォルダを変更するには、AutoDock の **Change Directory** をクリックします。このフォルダには、AutoDock の実行可能ファイルが含まれます。この場所は、AutoDock の実行可能ファイルの場所が変更された場合にのみ変更します。
 - a. AutoDock ファイルを保存する新しいフォルダを参照して、**OK**をクリックします。
5. (オプション) AutoDock Tools のファイル用フォルダを変更するには、AutoDock Tools の **Change Directory** をクリックします。このフォルダには、AutoDock Tools の実行可能ファイルが含まれます。この場所は、AutoDock Tools の実行可能ファイルの場所が変更された場合にのみ変更します。
 - a. AutoDock Tools ファイルを保存する新しいフォルダを参照して、**OK**をクリックします。
6. (オプション) AutoDock をインストールするには、次の操作を行ってください。
 - a. AutoDock ダイアログ ボックスで **Download AutoDock** をクリックします。Web ブラウザに AutoDock のダウンロード手順が表示されます。
 - b. 最新バージョンの AutoDock をローカル ハード ドライブにダウンロードしてインストールします。
 - c. AutoDock ダイアログ ボックスで **Set AutoDock Directory** をクリックして、AutoDock のインストール先へのパスを選択します。
7. (オプション) AutoDock Tools をインストールするには、次の操作を行ってください。
 - a. AutoDock ダイアログ ボックスで **Download AutoDock Tools** をクリックします。Web ブラウザに AutoDock Tools のダウンロード手順が表示されます。
 - b. AutoDock をローカル ハード ドライブにダウンロードしてインストールします。

- c. AutoDock ダイアログ ボックスで **Set AutoDockTools Directory** をクリックして、AutoDock Tools のインストール先へのパスを選択します。

AutoDock Interface での操作

Chem3D の AutoDock Interface では、ドッキング計算を実行することができます。AutoDock 計算の準備は複数のステップで構成され、各ステップは AutoDock Interface のタブベース ダイアログにまとめられています。次に、ドッキング計算に含まれるさまざまなステップを示します。

1. **受容体の準備。** このステップでは、受容体を定義します。多くの場合、受容体は Chem3D で既に開かれているファイルまたはモデルにあります。
2. **リガンドの準備。** このステップでは、受容体にドッキングする 1 つ以上のリガンドを定義します。多くの場合、リガンドは Chem3D で開かれているファイルまたはモデルにあります。
3. **グループの定義。** このステップでは、ドッキング後の分析で使用する名前付きグループを定義できます。形状を分析して、名前付きグループと相互作用するかどうかを確認します。これらのグループは、ある形状が受容体と重要な相互作用を持つかどうかを迅速に判断するのに特に便利です。このステップはオプションです。
4. **GPF の準備。** このステップでは、グリッド パラメータ ファイル (GPF) を準備します。GPF を使用して、計算に使用するファイルやパラメータを指定します。特に、このステップでは、ドッキング キャビティの場所とサイズを定義します。
5. **DPF の準備。** このステップでは、ドッキング パラメータ ファイル (DPF) を準備します。DPF を使用して、ドッキング計算に使用するファイルやパラメータを指定します。特に、このステップでは、遺伝的探索アルゴリズムのパラメータを定義します。
6. **ドッキング。** このステップでは、ドッキング計算を実行します。

ドッキング計算の実行後、**Calculations、AutoDock Interface** にある **AutoDock Results** オプションを使用してドッキング結果を確認できます。

ステップ 1: 受容体の準備

まず、受容体をロードします。多くの場合、受容体は Chem3D で既に開かれているファイルまたはモデルにあります。その後、AutoDock を使用して分子全体の電荷と原子タイプを決定します。

-  **注意:** AutoDock はマクロ分子として認識した分子のみを受け入れます。これらは一般に、標準的な残基で構成されるタンパク質配列またはポリペプチド配列です。

受容体を準備するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、AutoDock Interface、Setup AutoDock Calculation** の順に選択します。AutoDock Interface ダイアログ ボックスが開きます。

ヒント: AutoDock の使用中、AutoDock Interface ダイアログ ボックスを常に表示することができます。このダイアログ ボックスを常に表示するには、ダイアログ ボックスのタイトル バーを右クリックして、**Always on Top** を選択します。

2. Prepare Receptor タブを選択します。
3. 受容体をロードするには、次のいずれかの操作を行ってください。

- **Browse** をクリックして、受容体をファイルから AutoDock にロードします。
- **Import** をクリックして、現在 Chem3D でモデルとして開かれている受容体をロードします。

 **注意:** 読み込むには、モデルがアクティブな Chem3D ウィンドウに存在する必要があります。

4. (オプション) AutoDock が受容体に新しい電荷を割り当てないようにするには、**Preserve all input charges** を選択します。
5. 受容体の電荷を計算して原子タイプを特定するには、**Run** をクリックします。

電荷と原子タイプを特定すると、AutoDock により結果が AutoDock 作業フォルダに保存されます。

 **注意:** このファイルは `.pdbqt` というファイル形式で AutoDock 作業フォルダに保存されます。デフォルトのファイル名の形式は、`<InputFileName>.adv.pdbqt` です。たとえば、読み込んだ入力ファイルが `"receptor.pdb"` の場合、出力ファイルのデフォルトのファイル名は `"receptor_adv.pdbqt"` になります。

結果および発生した可能性のあるエラーについてのレポートが、AutoDock Interface ダイアログ ボックスの下部に表示されます。

AutoDock 作業フォルダを設定するには、General タブに移動して **Browse Work Folder** をクリックします。

- ウィンドウをクリアするには、**Clear Log** をクリックします。
- ログをファイルに保存するには、**Save Log** をクリックします。ログ ファイルが作業用ディレクトリに保存されます。
- ファイルが保存されているフォルダを変更する場合、またはログ ファイルを開く場合は、**Browse Work Folder** をクリックします。

 **注意:** 受容体を準備した後に、AutoDock Interface を閉じないでください。ドッキング計算を完了する前にこのダイアログ ボックスを閉じると、始めからやり直す必要があります。

ステップ 2: リガンドの準備

受容体を準備した後、受容体にドッキングする 1 つ以上のリガンドを準備する必要があります。多くの場合、リガンドは Chem3D で開かれているファイルまたはモデルにあります。その後、AutoDock を使用してリガンドの回転可能結合および原子タイプを決定します。AutoDock ではこのデータを使用して、リガンドの立体配座空間および相互作用のタイプを記述します。

リガンドを準備するには、次の操作を行ってください。

1. AutoDock Interface ダイアログ ボックスで Prepare Ligand タブを選択します。
2. リガンドをロードするには、次のいずれかの操作を行ってください。
 - **Browse** をクリックして、リガンドをファイルから AutoDock にロードします。
 - **Import** をクリックして、現在 Chem3D でモデルとして開かれているリガンドをロードします。

 **注意:** モデルを読み込むには、モデルがアクティブな Chem3D ウィンドウに存在する必要があります。

3. (オプション) 必要に応じて、他のリガンドを参照または読み込みます。ロードしたリガンドは、**List Ligands** に表示されます。
4. リガンドの回転可能結合とその原子タイプを特定するには、**Run** をクリックします。

回転可能結合と原子タイプを特定すると、AutoDock により結果が AutoDock 作業フォルダに保存されます。

注意: このファイルは .pdbqt というファイル形式で AutoDock 作業フォルダに保存されます。デフォルトのファイル名の形式は、<InputFileName>.pdbqt です。たとえば、読み込んだ入力ファイルが "ligand.mol2" の場合、出力ファイルのデフォルトのファイル名は "ligand.pdbqt" になります。

結果および発生した可能性のあるエラーについてのレポートが、AutoDock Interface ダイアログ ボックスの下部に表示されます。

- ウィンドウをクリアするには、**Clear Log** をクリックします。
- ログをファイルに保存するには、**Save Log** をクリックします。
- ファイルが保存されているフォルダを変更するには、**Browse Work Folder** をクリックします。

ステップ 3: (オプション) グループの定義

グループは、受容体の受容部位で定義する対象結合部位を表します。グループには、結合部位に選択するすべての原子 (最大 10) および結合部位について定義する半径 (オングストローム単位) が含まれます。

注意: ドッキング計算を実行するためにグループを定義する必要はありません。ただし、定義する場合は、受容体の原子団を定義する前に受容体を準備する必要があります。["ステップ 1: 受容体の準備" ページ 163](#) を参照してください。

ドッキングを実行する際、AutoDock は各配位子の形状をチェックします。その後、Chem3D が、定義した各原子団の半径内に収まる配位子の原子があるかどうかを判断します。原子団を定義したら、**排他領域**または**含有領域**として割り当てます。排他領域は、形状内のすべてのリガンド原子が原子団半径の外部に位置する必要がある結合部位です。含有領域は、形状内の少なくとも 1 つの配位子原子が原子団半径の内部に位置する必要がある結合部位です。

それぞれの名前付きグループは、名前付き原子団の名前を列見出しとして、Chem3D の最終ドッキング テーブルに新しい列を生成します。このテーブルには、形状ごとに 1 つの行があります。形状が名前付きグループに定義されている含有ルールまたは排他ルールに準拠している場合、値 "true" が表示されます。

原子団を定義するには、次の操作を行ってください。

1. 受容体モデルで、最大 10 個の原子を選択し、配位子の名前付き原子団として指定します。
2. AutoDock Interface で Define Groups タブを選択します。
3. **Add New Group From Selected Atoms** をクリックします。作成した新しい原子団が、ダイアログ ボックスのリストに表示されます。
4. ダイアログ ボックスのリストに、原子団の **Group Name** (原子団名) を入力します。
5. 原子団の **Radius** (結合半径) を入力します。デフォルトは 3.5 オングストロームです。名前付き原子団の各原子の周りに、任意の半径の球を配置して実装します。
6. AutoDock が原子団を **Exclusion Zone** (排他領域) と見なすか **Inclusion Zone** (含有領域) と見なすかを選択します。
7. (オプション) 上のステップを繰り返して、さらに原子団を定義します。

原子団を定義したら、これらを使用してドッキングのためのキャビティを準備します。

ステップ 4: キャビティの準備 (GPF の準備)

キャビティは、小さな分子を結合する、受容体の内部にある空洞です。ドッキングする空間を探す場所を AutoDock に指示するには、キャビティを定義する必要があります。キャビティを定義するには、キャビティの境界上の任意の点にある原子または原子団を選択します。Chem3D では、選択した原子または原子団を使用してキャビティの図心を計算し、図心を囲むようにグリッド ボックスを定義します。グリッド ボックスの位置とサイズ (グリッド ポイントの数およびポイントの間隔) を調整し、AutoDock で計算に使用するキャビティの境界上にある、選択した原子または原子団を囲みます。AutoDock の計算対象は、定義されたグリッド ボックス内に制限されます。ステップ 3 で名前付き原子団を定義した場合、グリッド ボックス内でこれらの原子団が除外されていることを確認します。除外されていない場合、配位子が相互作用できません。

ドッキングを計算する前に、AutoDock は配位子原子タイプごとに 1 つ、一連のグリッド マップを作成します。各グリッド マップは、各グリッド ポイントに原子タイプのプローブ原子を配置し、受容体との相互作用エネルギーを計算することで作成されます。ドッキング中、配位子はグリッド ボックス内に表示され、グリッド マップを使用してタンパク質との相互作用エネルギーが計算されます。

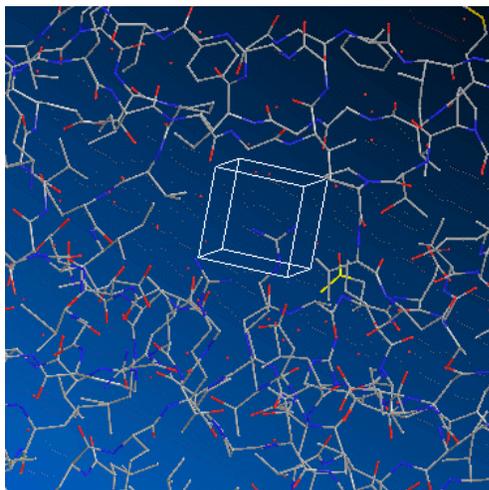


図 8.1: キャビティ内にグリッド ボックスのあるタンパク質 (わかりやすくするために、ここではボックスを白色で表示しています)

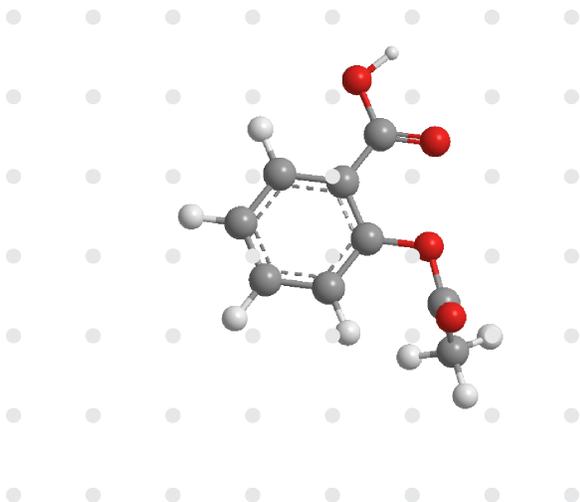


図 8.2: エネルギー グリッド ポイントが計算され、配位子にポーズが付いた 2 次元のグリッド ボックスのイメージ

キャビティを準備するには、次の操作を行ってください。

1. AutoDock Interface で Prepare GPF タブを選択します。
2. モデル ウィンドウで、受容体内にあるキャビティの境界上で少なくとも 1 つの原子またはグループを選択します。

 **ヒント:** キャビティ計算を正確に行うために、境界上の異なる場所で少なくとも 3 つの原子またはグループを選択することを検討してください。

3. **Centroid of the Selection** をクリックします。AutoDock で、選択内容に基づいてキャビティの図心が計算されます。これは、グリッド ボックスの最初の位置を設定するのに便利なツールです。Set GridBox to Receptor Size をクリックして、構造全体を囲むようにボックスを配置することもできます。
4. (オプション) モデル ウィンドウにグリッド ボックスを表示するには、**Display Grid Box** を選択します。グリッド ボックスの中心がキャビティの中心に配置されます。ドロップダウン ボックスからグリッドの色を選択することもできます。
5. Centroid of the Grid Map で X、Y、Z 座標を入力し、必要に応じてグリッド ボックスを動かします。
6. Number of Grid Points で X 軸、Y 軸、Z 軸で使用するグリッド ポイントの数を入力します。値を編集すると、それに応じてグリッド ボックスのサイズが変更されます。

 **注意:** X、Y、Z の値を変更するには、テキスト ボックスに値を入力するか、スクロール矢印を使用します。

7. **Spacing of Grids** をオングストローム単位で選択します。値を入力すると、このグリッド ボックスのサイズが変更されます。
8. (オプション) GPF ファイルを手動で編集するには、Advanced Options で **Edit** をクリックします。GPF ファイルがテキスト エディタで開き、必要な変更を加えることができます。

⚠ 注意: GPF ファイルを手動で編集することはお勧めできません。手動による編集でミスが生じた場合、AutoDock でドッキング ジョブを正しく実行できなくなる可能性があります。

9. **Run** をクリックします。

結果が AutoDock 作業フォルダに保存されます。結果および発生した可能性のあるエラーについてのレポートが、AutoDock Interface ダイアログ ボックスの下部に表示されます。

- ウィンドウをクリアするには、**Clear Log** をクリックします。
- ログをファイルに保存するには、**Save Log** をクリックします。
- ファイルが保存されているフォルダを変更するには、**Browse Work Folder** をクリックします。

ステップ 5: 形状 パラメータの選択 (DPF の準備)

ドッキング計算時、AutoDock は配位子が使用できる各形状を確認して、最適な形状を選択します。

入力する形状 パラメータにより、AutoDock がドッキング計算のために形状を使用する方法が決定されます。

No. of Individuals in Population (集合の個体数). 集合の個体数です。各個体は、遺伝子型およびそれに関連する表現型のカップリングです。値には正の整数を指定します。一般によく使用される値の範囲は、50 ~ 150 です。

Generations (世代). 前の世代から (遺伝的アルゴリズムのルールを使用して) 新しい種類の分子が作成される回数です。大きな分子では、より多くの世代が必要です。値には正の整数を指定します。デフォルト値は 27000 です。一般によく使用される値の範囲は、5000 ~ 30000 です。分子ごとの実行時間は、この数値に応じて直線的に増加します。

Energy Evaluations (エネルギー評価). すべての世代において、1 回の GA の実践で実行されるエネルギー評価の合計数の上限です。計算が永久に実行されるのを防ぐための、一種の“安全値”です。値には正の整数を指定します。デフォルト値は 250000 です。

Docking (ドッキング). 自動的に実行するドッキングの数。一般によく使用される値の範囲は、5 ~ 15 です。

ドッキング計算時間は、この値が増えるにつれて増加します。

形状パラメータを入力するには、次の操作を行ってください。

1. AutoDock Interface で Prepare DPF タブを選択します。
2. **Parameter** フィールドに、形状パラメータを入力します。Advanced Options フィールドに表示される dpf ファイルに、値が保存されます。
3. (オプション) DPF ファイルを手動で編集するには、Advanced Options で **Edit** をクリックします。DPF ファイルがテキスト エディタで開き、必要な変更を加えることができます。

⚠ 注意: DPF ファイルを手動で編集することはお勧めできません。手動による編集でミスが生じた場合、AutoDock でドッキング ジョブを正しく実行できなくなる可能性があります。

4. **Run** をクリックします。

5. これらの値の詳細については、[AutoDock の Web サイト](#)を参照してください。

ステップ 6: ドッキング

ドッキング計算を開始するまでに、AutoDock では配位子、受容体、結合部位に関するすべての必要な情報がログファイル内に用意されます。計算を実行する前に、このログファイルにある情報を編集できます。

AutoDock は、グリッドパラメータファイル (GPF) とドッキングパラメータファイル (DPF) という 2 つのファイルを使用して、配位子、受容体、結合部位に関する情報を記録します。

GPF は、グリッドのサイズおよび場所、使用する原子タイプ、グリッドの計算用のその他のパラメータなど、計算で使用するファイルおよびパラメータを指定します。通常、グリッドパラメータファイルの拡張子は “.gpf” です。

DPF は、ドッキング計算に使用するファイルおよびパラメータを指定します。ドッキングに使用するマップファイル、配位子配位ファイル、および検索用のパラメータも含まれます。通常、ドッキングパラメータファイルの拡張子は “.dpf” です。

注意: AutoDock ログファイルの編集は、専門の方のみ行ってください。AutoDock 計算で不適切な結果が生成されることがあります。

1. AutoDock Interface で Docking タブを選択します。
2. (オプション) Edit GPF をクリックして、キャビティパラメータのログファイルを編集します。
3. (オプション) Edit DPF をクリックして、形状パラメータのログファイルを編集します。
4. Run AutoDock をクリックします。

ドッキングが計算されると、AutoDock ではドッキングジョブが完了したことが報告され、結果を表示するかどうかを確認するメッセージが表示されます。その後、Results ダイアログボックスが表示されます。Chem3D の Structure Browser で結果を確認できます。

注意: 結果は .dlg というファイル形式で AutoDock 作業フォルダに保存されます。デフォルトのファイル名の形式は、<ligand file name>_<receptor file name>_adv.dlg です。たとえば、受容体の名前が “receptor.pdb” で、配位子の名前が ligand.mol2 の場合、出力ファイルのデフォルトのファイル名は “ligand_receptor_adv.dlg” になります。

ステップ 7: ドッキング結果の表示

ドッキング結果を表示するには、次に示すステップに従います。

1. Calculations、AutoDock Interface、AutoDock Resultsの順に選択します。
2. AutoDock Results ダイアログボックスで Prepare Results をクリックします。ドッキングログファイルを開くよう求められます。
3. ドッキングログファイルを開きます。Chem3D でファイルが開きます。

Chem3D モデルウィンドウに結果がモデルとして表示されます。ファイルには、受容体と、ドッキング用に設定したパラメータを満たすすべての形状が含まれます。

前の結果を表示するには、次の操作を行ってください。

1. AutoDock Results ダイアログボックスの Previous Results で Browse Results をクリックします。

2. ドッキング ログ ファイルを保存した場所に移動します。
3. ログ ファイルを開きます。Chem3D でファイルが開きます。

形状をチェックするには、次の操作を行ってください。

ドッキング結果は Structure Browser に表示され、名前付きグループおよびさまざまなドッキング エネルギーレベルは Structure Browser の各列に表示されます。

1. モデル ウィンドウで、ドッキング結果モデルがアクティブなタブであることを確認します。
2. **View** メニューの **Structure browser** をクリックします。ファイル内のすべての形状がリストに表示されます。
3. Structure Browser でチェック ボックスのオンとオフを切り替えて、モデル ウィンドウでの形状の表示/非表示を切り替えます。

参考資料

AutoDock の詳細については、次の参考資料を参照してください。

- [AutoDock User Guide](#)
- [AutoDock の一般的な FAQ](#)
- [AutoDock のパラメータについて](#)
- [ドッキングとエネルギー評価について](#)
- [リガンドの制限事項](#)

計算の概念

計算化学の概要

計算化学を利用すると、実験室での調査が不適當か、非実用的か、または不可能である場合に、コンピュータを使用して分子を調査できます。

計算化学には次の項目が含まれます。

- 分子モデリング
- 計算手法
- コンピュータ支援による分子のデザイン (CAMD)
- 化学データベース
- 有機合成方法の設計

分子モデリングとは、2次元または3次元モデルの分子構造と特性を表すものと考えられます。一方、計算手法は、モデルを描画するのに必要な構造と特性のデータを計算します。Chem3Dなどの分子モデル作成プログラムでは、計算手法が計算エンジンとして扱われ、立体構造エンジンとグラフィックエンジンはモデルの描画を担当します。

Chem3Dはその大規模なビジュアル化オプションに加え、デスクトップにおけるいくつかの強力な計算化学方法をサポートしています。

計算手法の概要

計算化学にはさまざまな数学的方法があり、これらは分子力学と量子力学の2つの分野に大別されます。

- **分子力学**: 古典物理学の法則を、明示的に電子を考慮せずに、分子の中を構成する原子に適用します。
- **量子力学**: シュレディンガー方程式に基づいて、明示的に電子構造を扱い、分子を記述します。

一般に、量子力学的方法は*ab initio*計算と半経験的計算の2つの階層に細分できます。

Chem3Dでは、以下の計算手法が利用可能です。

計算手法		
分子力学	■ MM2	Chem3D 19.0
半経験的	■ Extended Huckel ■ 他の半経験的方法 (AM1、MINDO/3、PM3 など)	Chem3D 19.0、MOPAC、Gaussian
<i>ab initio</i>	■ RHF、UHF、MP2 など	Gaussian、GAMESS

図 9.1: 計算化学

- 分子力学的方法: MM2 (直接)。

- Chem3D および Gaussian による、半経験的 Extended Hückel、MINDO/3、MNDO、MNDO-d、AM1、PM3 の各方法。
- Chem3D の Gaussian または GAMESS インターフェイスによる *ab initio* 法。

計算手法の利用

計算化学の手法では、分子のポテンシャル エネルギー曲面を計算します。ポテンシャル エネルギー曲面 (PES) は、分子の原子間の相互作用力の具体化と考え、PES から、分子の構造と化学的情報を導きます。各計算手法は、表面の計算手法やエネルギー面から導かれる分子特性により異なります。

一般に基本的な計算タイプには、以下があります。

- **一点エネルギー計算 (Single point energy calculation)**: モデルでの原子の立体構造のエネルギーで、その座標における PES の値です。
- **構造最適化 (Geometry optimization)**: 原子座標を系統的に変更した結果、構造の各原子にかかる力が 0 になる幾何学的構造ができたモデル。原子の 3 次元配置は、エネルギーが極小値 (ローカル ミニマム) を取るようになります (立体配座の障壁を超えることのない安定した分子構造になります)。
- **特性計算 (Property calculation)**: 電荷、双極子モーメント、生成熱など、特定の物理的特性や化学的物性を推測します。

この他に、これらの計算手法では、立体配座の検討や分子動力学シミュレーションなど、他の機能も行えます。

構造最適化

モデルで計算を実行する前に、モデルの安定立体配座を計算することで、モデルの構造を最適化できます。

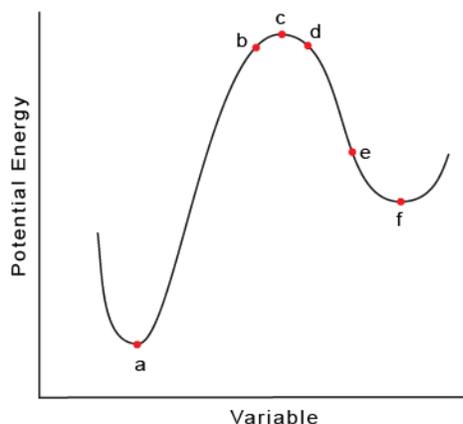
エネルギー最小化の計算を実行すると安定立体配座が得られます。これらの計算で、モデルのエネルギーのグローバル ミニマムやローカル ミニマムが決まります。

構造最適化は、初期立体構造を起点とした反復処理により次のように行われます。

1. 最初に、初期立体構造で一点エネルギー計算を実行します。
2. 原子集団の座標を変更し、一点エネルギー計算を再度実行して、新しく作成された立体配座のエネルギーを決定します。次の構造変更のサイズと方向を決定するエネルギーの一次微分または二次微分 (エネルギー計算法により異なります) が計算されます。
3. 変更が完了します。
4. この情報に基づいて、論理的な移動が行われ、Chem3D でエネルギーおよびエネルギー微分の再計算が行われます。このプロセスは収束するまで繰り返され、最適化が終了します。

エネルギー最小化計算の正確性は、初期立体構造、使用するポテンシャル エネルギー関数、ステップ間の最小許容勾配 (収束基準) によって決まります。

下のイメージは、最小化の概念をより詳しく表しています。単純化するために各独立変数を 2 次元のグラフで表しています。



モデルの初期立体構造によって、どの極値に到達するかが決まります。たとえば、立体構造 (b) を起点とした場合は、グローバル ミニмумである立体構造 (a) に到達します。一方、立体構造 (d) を起点とすると、ローカルミニмумである (f) に到達します。特定の最小点ではなく、いずれかの最小点の近傍を示すには、到達最小勾配を指定します。計算終了点における勾配を小さくすると、立体構造 (e) ではなく、立体構造 (f) に到達できません。

理論上は、収束基準 (エネルギー勾配) があまり緩いと、一次微分最小化により、鞍点に近い立体構造が得られません。これは、鞍点近くのエネルギー勾配値が、最小値付近と同じように非常に小さくなるからです。たとえば、(c) 点では、エネルギーの微分がゼロになるため、エネルギーの最小化という意味で最小点になります。一次微分による最小化では、鞍点を超えて他方の極小点に到達することはできません。

注意: 鞍点について、さらに詳しい評価を行うには、MOPAC の *Optimize To Transition State* コマンドなど、遷移状態を特定できる方法を使用してください。

これらの最小化に関する障害を超え、グローバル ミニмумを見つけるために、Chem3D には、いくつかの方法があります。

- わずかに立体構造を変更した後、再度最小化を行う方法。たとえば、以前の立体構造が (c) であった場合、新しい立体構造では (a) または (f) になります。
- 二面角ドライバを適用して、モデルの立体配座空間も検討できます。[“チュートリアル 5: 二面角ドライバ” ページ 309](#)を参照してください。
- 分子動力学シミュレーションを実行すると、小さなポテンシャル エネルギー障壁を超えることができます。分子動力学シミュレーションを終えた後で、それぞれの立体構造を最小化したり分析したりできます。[“MM2 の参考文献” ページ 275](#)を参照してください。

ポテンシャル エネルギー曲面から多くの特性が計算できます。Chem3D の計算手法を使う特性計算には次のものが含まれます。

- 立体エネルギー
- 生成熱
- 双極子モーメント
- 電荷密度

- 水中の COSMO 溶媒和
- 静電的ポテンシャル
- 電子スピン密度
- 超微細結合定数
- 原子電荷
- 分極率
- その他、IR 振動周波数など

最適な計算手法の選択

どの計算手法でもすべての種類の計算ができるわけではありません。また、どれか 1 つの計算手法がすべての目的に最も適しているというわけでもありません。どのアプリケーションに関しても、方法によって利点と欠点があります。計算手法は、下記のようないくつかの要因に基づいて選択します。

- 分子の特性とサイズ
- 情報のタイプ
- 実験的に決定された適切なパラメータ（計算手法によっては必要）
- コンピュータ リソース

最も重要となるのは、次の 3 つの基準です。

- **モデル サイズ**: 特定の計算手法においては重大な制限要素です。一般に、分子内の原子数の制限は、*ab initio* から分子力学へという順で、ほぼ 1 桁ずつ緩和されます。したがって、*ab initio* では数十個の原子、半経験的計算では数百個の原子、分子力学では数千個の原子となります。
- **使用可能なパラメータ**: 一部の手法では、実験に基づいて決定されたパラメータを使用して計算が実行されま。各計算手法のパラメータとして使用できない原子がモデルに含まれる場合、その計算手法による予測結果が無意味になる可能性があります。たとえば、分子力学はパラメータで力場を設定します。力場は、パラメータ化された限られた種類の原子のみに適用できます。
- **コンピュータ リソース**: 次の各手法とも、モデルのサイズに比例してシステム要件が増大します。

ab initio: モデル内の原子数を N とすると、計算の所要時間は N^4 となります。

半経験的: モデル内の原子数を N とすると、計算の所要時間は N^3 または N^2 となります。

MM2: 原子数を N とすると、計算の所要時間は N^2 となります。

一般的に、分子力学法は量子力学的方法ほどコストはかかりません。一般的な各計算手法について、各アプリケーションごとの適合性を次にまとめます。

分子力学法

Chem3D での分子力学法は、次のものに適用できます。

- 数千個の原子を含む系
- 有機物、オリゴヌクレオチド、ペプチド、糖類
- 気相のみ (MM2 の場合)

MM2 計算では、次の操作が有効です。

- エネルギー最小化による安定した立体配座の配置
- 一点エネルギー計算による同一分子の各立体配座の比較
- 1 つまたは 2 つの二面角変更による立体配座空間の検討
- 分子動力学による分子の動きの研究

量子力学的方法

量子力学により得られる有益な情報には、次のようなものがあります。

- 分子の軌道エネルギーと軌道係数
- 立体配座のエネルギー評価のための生成熱
- 分子軌道係数から求められる原子の部分的電荷
- 静電ポテンシャル
- 双極子モーメント
- 遷移状態の立体構造とエネルギー
- 結合解離エネルギー

Chem3D の Gaussian で利用できる半経験的計算は次のものに適用できます。

- 120 個までの重原子を含む、合計 300 個までの原子を含む系
- 有機物、有機金属、小さな低重合体（ペプチド、ヌクレオチド、糖類）

気相または溶媒中

- 基底状態、遷移状態、励起状態

Chem3D の Gaussian で利用できる *Ab initio* 法は次のものに適用できます。

- 150 個までの原子を含む系
- 有機物、有機金属、分子フラグメント（酵素の触能）
- 気体または溶媒中
- 基底状態、遷移状態、励起状態の研究（特定の計算のみ）

計算手法	利点	欠点	適切な対象
分子力学 (Gaussian) 古典的な物理学を使用 組み込まれた実証的なパラメータをもった力場に依存する	計算量が最も少なく、限られたコンピュータリソースでも有効 酵素と同じくらい大きい分子に使用可能	限られた階層の分子だけに特定の力場を適用 電子特性を計算しない 実験データ (または <i>ab initio</i> からのデータ) がパラメータに必要	大きいシステム (数千個の原子) 結合を壊したり形成したりしない系やプロセス
半経験的計算 (MOPAC、Gaussian) 量子物理学を使用 実験的に導き出される実証的なパラメータを使用 広範囲に近似を使用	<i>ab initio</i> 方法よりも計算量が少ない 遷移状態や励起状態での計算が可能	実験データ (または <i>ab initio</i> からのデータ) がパラメータに必要 <i>Ab initio</i> 法ほど厳密ではない	中間サイズの系 (数百個の原子) 電子遷移にかかわる系
<i>ab initio</i> (Gaussian、GAMESS) 量子物理学を使用 数学的に厳密、実証的なパラメータなし	広範囲な系に有効 実験データに依存しない 遷移状態や励起状態での計算が可能	計算量が多い	小さいシステム (数十個の原子) 電子遷移にかかわる系 実験データがない (「新化学」) 厳密な精度を必要とする系

図 9.2: 方法の比較

ポテンシャル エネルギー曲面

ポテンシャル エネルギー曲面 (PES) は、次のことを説明できます。

- 原子の組成が一定である分子または分子の集合 (エタンなど)、または、化学反応を起こす系
- 立体配座間の相対エネルギー (エタンの重なり型とねじれ型)

ポテンシャル エネルギー曲面は、次によって異なる可能性があります。

- 原子組成が少し異なる分子 (エタンとクロロエタン)
- 原子組成が同じでも結合パターンが異なる分子 (プロピレンとシクロプロパンなど)
- 同じ分子の励起状態と基底状態

モデルの実際のポテンシャル エネルギー曲面は多次元曲面であり、その次元は原子の座標の数に応じて増加します。また、各原子は、X 座標、Y 座標、Z 座標の 3 つの独立変数を持つため、多数の原子を含むモデル表面を表示することはできません。しかし、原子の X 座標と Y 座標など、任意の 2 つの独立変数を調べて全体的な特徴を描くことは可能です。

極値 (Extrema) と呼ばれるポテンシャル エネルギー曲面上で重要な領域が矢印で示されています。

- **グローバル ミニマム**: エネルギーが最小となる極値に最も安定な立体配座が現れます。グローバル ミニマムは 1 つしかありません
 - **ローカル ミニマム**: 最小値以外のエネルギーの停留点。これらの最小点は、立体構造をどの方向に変化させてもエネルギーが大きくなる点として定義されます。
 - **鞍点**: エネルギーが小さくなる 2 つの極値の間にある定常点。鞍点は、ポテンシャル エネルギー曲面上の点で、1 方向を除くすべての方向でエネルギーが増加し、面の傾き (一次微分) が 0 になる点として定義されます。
- ☑ **注意**: エネルギーが最小になる点でも、エネルギーは 0 にはなりません。0 になるのは、立体構造に関するエネルギーの一次微分 (勾配) です。

分子のポテンシャル エネルギー曲面上にある各極小点では、各原子にかかる力の和が 0 になるため、安定した定常点となります。グローバル ミニマムは最も安定した立体配座、ローカル ミニマムはやや安定した立体配座、鞍点はこの 2 つの最小点の間にある遷移状態の立体配座を表します。

一点エネルギー計算

一点エネルギー計算では、モデルの特定の立体構造の特性が計算できます。特性の値は、ポテンシャル曲面上のモデルの位置によって、次のように変わります。

- 一点エネルギー計算をグローバル ミニマムで行うと、最も安定した立体配座に関する情報が得られます。
- 一点エネルギー計算をローカル ミニマムで行うと、比較的安定した立体配座に関する情報が得られます。
- 一点エネルギー計算を鞍点で行うと、遷移状態に関する情報が得られます。
- 一点エネルギー計算をポテンシャル エネルギー曲面上のその他の点で行うと、定常状態、遷移状態以外の立体配座に関する情報が得られます。

一点エネルギー計算は、立体構造の最適化の前または後に実行できます。

- ☑ **注意**: 異なる計算手法によって得た値どうしを比較しないでください。異なる計算手法は、異なる仮定を用いており、任意のオフセットによってエネルギーは異なるためです。

分子力学理論の概要

分子力学では、標準的なポテンシャル エネルギー関数の組を使用して分子のエネルギーを計算します。ポテンシャル エネルギー関数やその評価に使用するデータ (パラメータ) は、一般に「力場」と呼ばれます。分子力学的計算は、次のいくつかの原則に基づいています。

- 核と電子をまとめて 1 つの粒子 (原子) として扱います。
- 原子は通常は球体として扱います。
- 結合は通常はばねとして扱います。

- 原子間の非結合相互作用は、古典力学で導かれているポテンシャル関数を使って表します。
- 結合伸縮、変角、ねじれ（結合の回転）、エネルギー、および空間内（非結合）のそれぞれの相互作用について、別個のポテンシャル関数が使用されます。
- ポテンシャル エネルギー関数は、原子組間の相互作用を説明する経験的に導かれたパラメータ（力の定数、平衡距離）に基づいています。
- 相互作用の和によって、分子の立体配座が決定されます。
- 分子力学エネルギーは、絶対量を示すものではなく、同じ分子の複数の立体配座の相対的な立体エネルギー（歪みエネルギー）を比較するためにのみ使用します。

力場

分子力学では結合をばねとして扱うため、結合の伸縮エネルギー、変角エネルギー、ねじれエネルギーの計算には、ばねの変形計算（フックの法則）を使用します。非結合原子（2 結合以上離れた原子）の相互作用には、ファンデルワールス引力、立体斥力、静電引力/斥力が関係します。これらの特性は、原子をそれぞれ特有の半径を持つ球体と考えると最も簡単に計算できます。分子が持つ総ポテンシャル エネルギー E は、次のように説明できます。

$$E = \text{伸縮エネルギー} + \text{変角エネルギー} + \text{ねじれエネルギー} + \text{非結合相互作用エネルギー}$$

最初の 3 つの項、すなわち結合原子間の相互作用は、ねじれゼロの理想的な立体配座からモデルを変形したときのひずみエネルギーとして表れます。

伸縮エネルギー. 直接結合した原子の結合伸縮エネルギー。

変角エネルギー. 3 番目の原子に隣接する 2 つの原子の間の変角エネルギー。

ねじれエネルギー. 二面角を形成する原子間のねじれ角回転エネルギー。

非結合相互作用エネルギー. 非結合相互作用には、次の 2 つの力場が含まれます。

- 接近しすぎた原子間の斥力および分散力の範囲から遠く離れた位置における引力（ファンデルワールス相互作用）
- 電荷、双極子、四極子に関する相互作用（静電相互作用）

次のイメージは、主な相互作用を示したものです。

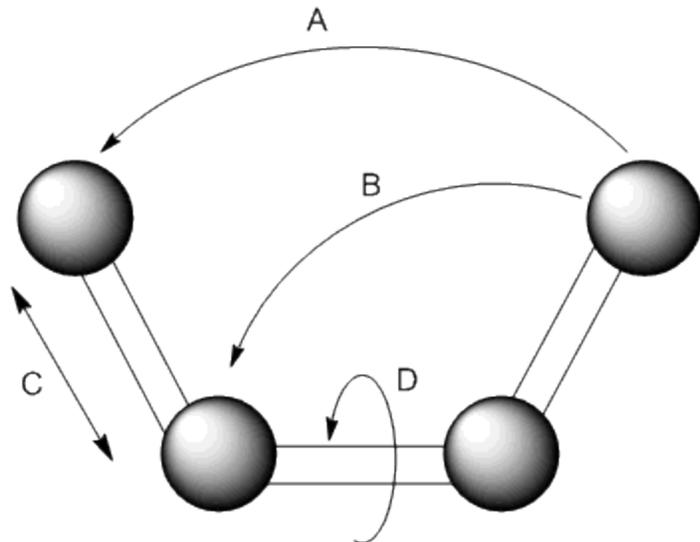


図 9.3: ポテンシャル エネルギー相互作用。A) 非結合相互作用、B) 変角、C) 結合伸縮、D) ねじれ

長年にわたり、さまざまな力場が考案されています。上記とは別の変形を説明するためのエネルギー項を追加したものもあります。また、力学モデルの精度を向上させるために、隣接する結合間の変角エネルギーや伸縮エネルギーの連結を示すものもあります。

MM2

Chem3D で使用される MM2 力場は、Allinger の MM2 力場に修正を加えたものです。MM2 の詳細については、“[MM2 の参考文献](#)” ページ 275 を参照してください。

Allinger の力場への主な追加項目は次のとおりです。

- 電荷-双極子間の相互作用に関する項
- 四次伸縮項
- 5 次多項式スイッチング関数の静電のカットオフとファンデルワールス項
- 必要に応じた自動 pi 系計算
- ねじれ型および非結合に関する制約

Chem3D は、ポテンシャル エネルギー関数のパラメータをパラメータ テーブルに格納します。テーブルを表示するには、View メニューの **Parameter Tables** をクリックし、いずれかの MM2 テーブルを選択します。

各パラメータは、データの相対的な信頼性を示す Quality 番号で分類されています。Quality 番号は 1 ~ 4 まであり、1 は Chem3D が推測したデータであること、4 は完全な実験データ（または *ab initio* データ）から導かれたデータであることを示します。

MM2 Constants というパラメータ テーブルには、さまざまな状況でポテンシャル関数のエラーを修正するための調整可能パラメータが多数保存されています。

注意: Chem3D は MM2 パラメータの編集を許可しますが、これは特に注意して、専門の方のみ行ってください。力場方程式内では、パラメータはパラメータ間で相互作用します。変更を 1 つ行うと、普通、他のものも変更されてしまいます。

結合伸縮エネルギー

結合伸縮エネルギーの方程式は、フックの法則に基づいています。

$$E_{\text{Stretch}} = 71.94 \sum_{\text{Bonds}} K_s (r - r_0)^2$$

これらのパラメータは Bond Stretching Parameters テーブルに保存されています。各結合原子ペアには、原子タイプ (C-C、C-H、O-C など) に基づいて、固有の K_s パラメータと r_0 パラメータが割り当てられます。 K_s パラメータは、結合ばねの硬さ (結合伸縮力定数) を決定し、 r_0 は、ばねの平衡長 (モデル作成時に使用する標準測定値) を表します。定数 71.94 は、結果を kcal/mole 単位で得るための換算係数です。

この方程式は、結果として、平衡状態から結合を變形させるために必要なエネルギーを示します。

この単純な放物線状のモデルでは、解離点の方に結合長を大きくできません。この問題を修正するにはモースの関数を使用するのが最良の方法ですが、モースの関数を使用すると、計算時間が大幅に増えてしまいます。そのため、モースの関数に少しでも近い結果を得るのに三次伸縮定数や四次伸縮定数を追加することで修正する方法もあります。

三次伸縮項は非対称形のポテンシャルの谷を扱えるため、比較的長い結合を使用できます。ただし、三次伸縮項では極端に長い結合には対応できません。そのため、四次伸縮項を使って極端に長い結合長に伴う問題に対処します。三次伸縮項と四次伸縮項を追加すると、結合伸縮エネルギーの式は次のようになります。

$$E_{\text{stretch}} = 71.94 \sum K_s [(r - r_0)^2 + Q_3(r - r_0)^3 + Q_4(r - r_0)^4]$$

三次伸縮定数と四次伸縮定数は MM2 Constants テーブルで定義されています。

Allinger の力場で得られるエネルギーを正確に再現するには、MM2 Constants テーブルの三次伸縮定数と四次伸縮定数を "0" に設定します。

変角エネルギー

$$E_{\text{Bend}} = 0.02191418 \sum_{\text{Angles}} K_b (\theta - \theta_0)^2$$

変角エネルギー方程式も、フックの法則に基づいています。 K_b パラメータは結合ばねの硬さ (変角定数) を決定し、 θ_0 の平衡角を表します。この方程式によって、平衡状態からの結合角の変更に伴うエネルギーが推測できます。定数 0.02191418 は、結果を kcal/mole 単位で得るための換算係数です。

3 つの原子で構成される各原子組には、原子タイプ (C-C-C、C-O-C、C-C-H など) に基づいて固有の変角エネルギー パラメータが割り当てられます。また、各原子組の平衡角は、角の中央にある原子が結合する原子のタイプによって異なります。このため、各結合角は XR2、XRH、XH2 の 3 つから選択できます。たとえば、プロパンの

C-C-C 結合角には、中央の原子と結合する両方の原子が水素であることから、XH2 パラメータが使用され、イソブテンには XRH パラメータが使用されます。また、2,2-ジメチルプロパンには XR2 パラメータが使用されます。

K_b パラメータと θ_0 パラメータによって、放物線の傾斜が変化します。 K_b の値が大きくなるにつれて、平衡状態から角度を変更するために必要なエネルギーが大きくなります。 K_b の値を 1.0 より小さくすると、ポテンシャルの谷が浅くなります。

また、理想的な角度から大きく変形された角度のエネルギーを大きくするには、6 次項を追加します。6 次の変角定数 SF は、MM2 Constants テーブルにおいて定義されます。この 6 次項を追加すると、変角エネルギーの式は次のようになります。

$$E_{\text{Bend}} = 0.02191418 \sum_{\text{Angles}} K_b [(\theta - \theta_0)^2 + \text{SF}(\theta - \theta_0)^6]$$

 **注意:** 6 次の変角定数のデフォルト値は 0.00000007 です。Allinger の力場で得られるエネルギーを正確に再現するには、MM2 Constants テーブルの 6 次変角定数を "0" に設定します。

変角エネルギー パラメータには、3 種類のパラメータ テーブルがあります。

- Angle Bending Parameters
- 3-Membered Ring Angle Bending Parameters
- 4-Membered Ring Angle Bending Parameters

MM2 Constants テーブルでは、さらに 3 つの変角エネルギー定数が使用できます。これらは "-CHR- 変角" 定数で、特に 1 個または 2 個の水素と結合する炭素に対して使用されます。

1-1-1 角¹によって、タイプ (-CHR-) およびタイプ 2 (-CHR-) 相互作用に指定されるエネルギー定数の精度が向上します。

4 員環の 1-1-1 角の -CHR- 変角定数 K_b および 3 員環の 22-22-22 角の -CHR- 変角定数 K_b を正確に指定するには、別の定数が必要になります。

ねじれエネルギー

$$E_{\text{Twist}} = \sum_{\text{Torsions}} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \phi)]$$

この項では、二面角 (ねじれ型) のエネルギーの最小点が $360/n$ という特定の間隔で発生することを説明します。Chem3D では、 n は 1、2、3 のいずれかになります。

$$E_{\text{Twist}} = \sum_{\text{Torsions}} \frac{V_1}{2}(1 + \cos \phi) + \frac{V_2}{2}(1 + \cos 2\phi) + \frac{V_3}{2}(1 + \cos 3\phi)$$

¹の -CHR- 変角定数 K_b

角度定義の数値は、Atom Types テーブルの Text 列を表します。1 は C アルカンを表し、22 は C シクロプロパンを表します。

$V_n/2$ パラメータが、ねじれエネルギー定数です。このパラメータは曲線の振幅を決定しており、 n は、その周期を意味します。 $n\phi$ により、曲線全体が回転軸に沿って移動します。このパラメータは曲線の大きさによって決まります。原子 4 個で構成される各原子組は (C-C-C-C、C-O-C-N、H-C-C-H など) 原子タイプに基づいた固有のねじれ回転パラメータが割り当てられます。

Chem3D には、次に示す 3 種類の Torsional Parameters テーブルがあります。

- Torsional Parameters
- 4-Membered Ring Torsions
- 3-Membered Ring Torsions

非結合エネルギー

非結合エネルギーは、相互作用を起こしうる、一定のカットオフ距離内の非結合原子対のエネルギーの和です。非結合エネルギーは、近距離にある原子間の斥力、遠距離にある原子間の引力を説明します。また、相互に作用する原子が数オングストローム離れたときの急激な引力とその現象についても説明します。

ファンデルワールス エネルギー

相互に作用する原子間の距離が各原子の接触半径の合計よりも少しでも小さくなると、斥力が生じます。Chem3D では、指数斥力と引力分散の相互作用 ($1/R^6$) を含む方程式で斥力を表します。

$$E_{\text{van der Waals}} = \sum_i \sum_j \epsilon (290000e^{-12.5R} - 2.25R^{-6})$$

ここで、

$$R = \frac{r_{ij}}{R_i^* + R_j^*}$$

パラメータには次のものがあります。

- R_i^* および R_j^* : 原子のファンデルワールス半径
- ϵ (イプシロン): 引力ポテンシャル エネルギーの深さと原子を引き付ける難易度を決定
- r_{ij} : 原子間の実際の距離

近距離の場合、上の式では分散力よりも斥力の方が優先されます。これを補うために近距離 ($R=3.311$) では次の式が使用されます。

$$E_{\text{vanderWals}} = 336.176 \sum_i \sum_j \epsilon R^{-2}$$

R^* パラメータとイプシロン パラメータは、MM2 Atom Types テーブルに保存されています。

相互作用によっては、MM2 Atom Types テーブルの値のかわりに VDW Interactions Parameters テーブルの値が使用されます。水分子のように 2 個の原子の陰性度の差が非常に大きい場合などがこれにあたります。

ファンデルワールス相互作用のカットオフ パラメータ

ファンデルワールス項にカットオフ距離を設定すると、比較的重要度の低い遠距離間の作用が計算から除外されるため、大型分子の計算時間を大幅に短縮できます。

Chem3D では、五次のスイッチング多項式を使用しているため二次の連続した力場が得られます。カットオフは、指定されたカットオフ距離の 90% で開始され少しずつ実行されます。この距離は、MM2 Constants テーブルで設定されています。

ファンデルワールス相互作用は $1/r^6$ と小さいため、カットオフを（たとえば、10 Å のような）かなり短い距離に設定できます。このため、比較的小さい分子でも、計算時間が大幅に短縮できます。

注意: Allinger の力場で得られるエネルギーを正確に再現するには、MM2 Constants テーブルで、ファンデルワールス カットオフ定数を大きな値に設定します。

静電エネルギー

静電エネルギーは、非結合原子の電荷 q 、非結合原子間の距離 r_{ij} 、分子の誘電率 D の関数で表され、環境（溶媒または分子自体の環境）による静電相互作用の減衰を説明します。

Chem3D では、電荷を持つ分子の原子の電荷と中性分子の結合双極子を使って静電エネルギーを表します。

Chem3D では次の相互作用が考慮されます。

- 電荷/電荷
- 双極子/双極子
- 双極子/電荷

相互作用が異なる場合には、異なる静電方程式を使用します。

$$E_{\text{Electrostatic}} = \sum_i \sum_j \frac{q_i q_j}{D r_{ij}}$$

電荷/電荷

$$E = 332.05382 \sum_i \sum_j \frac{q_i q_j}{D_q r_{ij}}$$

値 332.05382 は、結果を kcal/mole で得るための換算係数です。

双極子/双極子

$$E = 14.388 \sum_i \sum_j \frac{\mu_i \mu_j}{D_\mu r_{ij}^3} (\cos \chi - 3 \cos \alpha_i \cos \alpha_j)$$

値 14.388 は、結果を ergs/mole から kcal/mole に換算するための換算係数です。 χ は、 μ_i と μ_j の 2 つの双極子間の角、 α_i と α_j は、中央で接触する 2 つのベクトル、 r_{ij} によって双極子が形成する角で、 D_μ は誘電（実効）定数です。

双極子/電荷

$$E = 69.120 \sum_i \sum_j \frac{q_i \mu_j}{r_{ij}^2 \sqrt{D_\mu D_q}} (\cos \alpha_j)$$

値 69.120 は、結果を kcal/mole で得るための換算係数です。

各原子ペアの結合双極子パラメータ μ は、Bond Stretching Parameters テーブルに保存されます。電荷 q は、Atom Types テーブルに保存されます。分子の誘電率は、MM2 Atom Types テーブルで 1.0 ~ 5.0 の定数値に設定します。

 **注意:** Chem3D では、距離に依存する誘電率は使用しません。

カットオフ パラメータ

静電項のカットオフを使用すると、ファンデルワールス項では遠距離間の作用が計算から除外されるため、大型分子の計算時間を大幅に短縮できます。

Chem3D では、ファンデルワールス計算のように、2 次の連続した力場が得られるように、5 次のスイッチング多項式を使用しています。電荷/電荷、電荷/双極子、または、双極子/双極子の相互作用が最小値に達すると、スイッチング関数が表示されます。カットオフ距離は、MM2 Constants パラメータ テーブルで設定します。

距離 r にある 2 点の電荷間の電荷-電荷相互作用エネルギーは、 $1/r$ に比例するため、電荷-電荷のカットオフは、分子のサイズに応じて、かなり大きな値（通常は 30 ~ 40 Å）に設定する必要があります。電荷-双極子、双極子-双極子の場合、 $1/r^2$ 、 $1/r^3$ 、と小さくなるため、カットオフもそれぞれ 25 や 18 Å などの小さな距離に設定できます。Allinger の力場で得られるエネルギーを正確に再現するには、MM2 Constants テーブルで、カットオフ定数を大きな値（99 など）に設定します。

OOP 変角エネルギー

三面平面（sp² 混成）を形成する原子は、OOP 変角エネルギーを計算する他の結合原子とも共通の平面を持つ傾向があります。MM2 は下記の OOP 変角エネルギーで説明された方程式を使用します。

$$E = \sum_{\text{Out of Plane}} K_b [(\theta - \theta_0)^2 + SF(\theta - \theta_0)^6]$$

方程式の形式は変角エネルギー項と同じですが、 θ は 1 対の原子ペアの共通平面からのずれの角度を表し、ゼロに設定されます。

Out of Plane Bending Parameters テーブルには、各原子ペアに特殊なエネルギー定数が定義されています。また、変角エネルギーで説明したように、6 次項が追加されています。6 次の変角定数 SF は、MM2 Constants テーブルにおいて定義されます。

Pi 結合と Pi 結合を持つ原子

Pi 系を含むモデルの場合、MM2 は、Pariser-Parr-Pople Pi 軌道 SCF 計算を実行します。Pi 系は、Conjugate Pi System Atoms テーブルに示された 3 種類以上の連続した原子として定義されます。このため、MM2 計算では 1 次、1.5 次、2 次など以外の結合次数を計算します。

注意: ここでは、D. H. Lo および M. A. Whitehead の方法 (*Can. J. Chem.*, 46, 2027, 1968) と、G. D. Zeiss および M. A. Whitehead の複素環式パラメータ (*J. Chem. Soc. (A)*, 1727, 1971) を採用しています。SCF 計算では、結合伸縮力定数、標準結合長、二重ねじれ障壁の概算に使用する結合次数が得られません。

基本的な処理内容は次のとおりです。

1. Pi 系内の原子ペアの間で電子を共有すべきかどうかを検討され、必要に応じて Fock マトリクスが作成されます。
2. Fock マトリクスから Pi 分子の軌道が計算されます。
3. Pi 分子軌道を使って新しい Fock マトリクスが計算され、この新しい Fock マトリクスを使って、さらに正確な Pi 分子軌道が計算されます。
4. ステップ 2 とステップ 3 では、Fock マトリクスが計算され、新しい Fock マトリクスを使って、さらに正確な Pi 分子軌道が計算されます。この方法は「自己無撞着場法」または「Pi SCF 計算」と呼ばれます。
5. pi 分子軌道から pi 結合次数が計算されます。
6. pi 結合次数を使って、pi 系内の各結合の結合長 (BLres)、エネルギー係数 (Ksres) が修正されます。
7. Ksres と BLres の値を MM2 計算の分子力学要素として、さらに分子が最適化されます。

伸縮エネルギー/変角エネルギーの交差項

伸縮-変角は、結合伸縮と変角の間の交差です。たとえば、角度が小さくなると、MM2 力場は伸縮-変角エネルギー一定数を使ってその角の中心にある原子からその角の両端の原子までの結合長を長くします。

$$E = \sum_{\text{Stretch/Bend } 2} \frac{1}{2} K_{sb} (r - r_0)(\theta - \theta_0)$$

エネルギー一定数 (K_{sb}) は、原子の組み合わせによって変わります。

下のリストは、エネルギー一定数による説明が可能な 7 種類の原子の組み合わせを示したものです。

- X-B, C, N, O-Y
- B-B, C, N, O-H
- X-Al, S-Y
- X-Al, S-H
- X-Si, P-Y
- X-Si, P-H
- X-Ga, Ge, As, Se-Y, P-Y

X および Y は水素以外の任意の原子です。

その他の制約

Measurement テーブルの最適化フィールドによって、ねじれ角および非結合距離に制約が加えられている場合には、力場に項を追加します。この追加項には調和ポテンシャル関数を使用します。この関数を使用する場合、制約を有効にするため、エネルギー一定数を大きい値（ねじれ角では 4、非結合距離では 106）に設定します。ねじれ角の制約による追加項とエネルギー一定数は下の式で表されます。

$$E = \sum_{\text{Torsions}} 4(\theta - \theta_0)^2$$

非結合距離の制約による追加項とエネルギー一定数は下の式で表されます。

$$E = \sum_{\text{Distance}} 10^6 (r - r_0)^2$$

分子動力学シミュレーション

分子動力学では、分子の運動のシミュレーションを行います。運動はすべての化学プロセスに備わっているため、このシミュレーションは有用です。たとえば、結合伸縮や結合角変更などの振動は、IR スペクトルを発生させます。あるいは、化学反応やホルモン受容体結合などの複雑なプロセスは、さまざまな分子内運動や分子間運動に関係しています。

原子の運動のシミュレーションは、時間依存型の方法です。

立体配座の遷移や局部振動は、分子動力学の一般的なテーマとして研究されています。分子動力学では、エネルギー最小化の場合と同様、分子内の自由度を段階的に変更します。エネルギー最小化の各ステップでは、最小点に向かって下降する指示が出されます。

Calculations メニューの Molecular Dynamics コマンドを使用すれば、Chem3D のモデル ウィンドウ内に表示されたフラグメントの分子力学における軌道計算ができます。分子動力学の一般的な利用法は、1 個の分子が利用できる立体配座空間の調査や運動中の分子を表す連続フレームの作成です。分子動力学の詳細については、“[計算エンジン](#)” ページ 91 を参照してください。

分子動力学の公式

分子動力学計算は、通常、連続するステップで成り立ちます。ステップは、一定の間隔、約 2.0 フェムト秒 (fs、 1.0×10^{-15} 秒) ごとに発生します。各ステップにおける原子の新しい位置や速度の計算には、ビーマンの運動方程式統合アルゴリズムと B. R. Brooks の改良係数を採用します。各原子 (i) の移動は、次の公式に従って行います。

$$x_i = x_i + v_i \Delta t + ((5a_i - a_i^{old})(\Delta t)^2) / 8$$

同様に、 x_j 、 y_j と z_j を原子の直交座標、 v_i を速度、 a_i を加速、 a_i^{old} を前ステップの加速、 Δt を現在のステップと前ステップの間の時間として、各原子を Y 軸および Z 軸に沿って移動します。新しい直交座標のポテンシャル エネルギーとその導関数 (g_j) が計算されます。

各ステップにおける新しい加速と速度の計算には、次の公式を使用します (m_i は原子の質量とします)。

ChemScript

ChemScript は、化学情報処理のためのソフトウェア開発キット (SDK) です。PerkinElmer 製品で広く使用されているプログラミング アルゴリズムが含まれます。ソフトウェア開発者であれば、ChemScript を適用して ChemOffice アプリケーションで使用する独自のスクリプトを作成できます。

ChemScript ライブラリ内のすべてのサンプル スクリプトは、Python および C#/.NET で利用できます。これらの言語のどちらかを習得していれば、サンプル スクリプトを容易に理解できるでしょう。Python にも C#/.NET にもなじみがなければ、章末に記載の Web サイトや書籍を参照することをお勧めします。

ChemScript は Python と C#/.NET に対応していますが、ここでは Python を使って ChemScript の説明を行います。Python は、広く利用されているフリーのプログラミング言語です。

ChemScript の利点

ChemScript によって、化学データの扱いの柔軟性が大きく高まります。ChemScript を使うことで、自身で作成した規則を用いたデータの変更、表示、移動が可能になります。¹

以下に一般的な使い方をいくつか示します。

塩の分離と除去

描画した構造式から塩フラグメントを識別して除去し、純粋化合物を登録できます。

正規コード

一連の構造式を表す正規コードを生成し、そのコードを使ってデータの重複を検出します。

ファイル形式の変換

構造式または反応データ ファイルの形式を変換します。

特性の生成

ChemDraw の Struct=Name または物理的特性の生成機能を実行します。

共通骨格の配向

確立された共通の部分構造式の配向に基づいて、構造の標準配向を適用します。

2次元構造式の生成 (SDG) および整形

ChemDraw のアルゴリズムを使って、座標情報を用いないで結合テーブルから新たな 2次元構造を生成し、既存の 2次元構造を整形します。

¹ChemScript は、1日に最大 10,000 件のデータ レコードを変換できます。処理能力をさらに高めるには、ChemScript Ultra が必要になります。詳細については、PerkinElmer 社にお問い合わせください。

ChemScript のしくみ

ChemScript の最も根本的な使用法は、あるソースからデータを読み込み、スクリプトを使ってそのデータを変更し、変更したデータを別の場所へ書き込むことです。データの取得や書き込みは、ほぼどのようなデータベース、ファイル、アプリケーションとの間でも可能です。

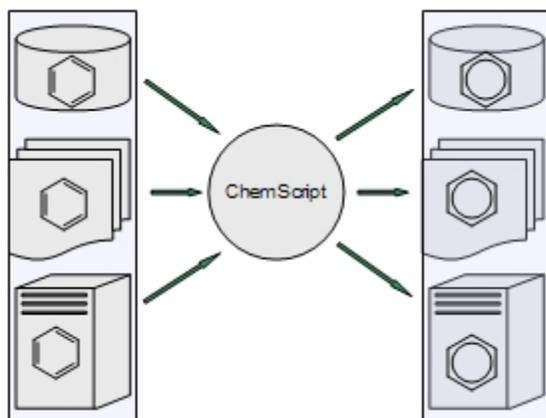


図 10.1: ChemScript によるスクリプトは、あるソースからデータを取得し、変更して、その結果を別の場所へ出力することができます。

データがどのように変更されるかは、完全にそのスクリプト次第です。スクリプトでは、データの削除、新しいデータの計算や追加、既存データの編集が可能です。データとしては、テキストか構造型、またはその両方が使えます。

ChemScript のスクリプトは、他のあらゆる Python スクリプトや .NET プログラムと同じように、Windows のコマンド ラインまたは任意の開発環境を使って実行できます。

操作の開始

標準設定では ChemOffice Professional または ChemDraw Professional のインストール時に ChemScript と Python 3.2 がローカル コンピュータにインストールされます。インストール終了後、ChemScript の操作に慣れるために、以降で述べる簡単な動作確認を行うことをお勧めします。

ChemScript ファイルの編集には、利用可能な多くのプログラミング ツールの 1 つを使うことをお勧めします。Python インストールには、こうしたツールの 1 つである IDLE が含まれています。IDLE の詳細については、IDLE のメインメニューにあるオンライン ヘルプを参照してください。

IDLE の起動

Windows のスタート メニューから**すべてのプログラム**、**Python 3.2**、**IDLE (Python GUI)** の順にクリックします。Python の起動後、Python のシェルが IDLE で開き、先頭行に Python のバージョン (例: 3.2) と IDLE のバージョン (例: 1.2) が示されます。次のようなプロンプトも表示されます。「>>>」

ChemScript ライブラリのロード

コマンド プロンプトに次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
import ChemScript19 *
```

 **注意:** このコマンドでは、大文字と小文字が区別されます。

“Welcome to CS ChemScript” というメッセージの後にコマンド プロンプトが表示されます。

ChemScript のヘルプ

IDLE 内では、任意の ChemScript クラスの説明を参照できます。たとえば、次の行を入力すると、ChemScript の Atom クラスに関するヘルプが表示されます。

```
help(Atom)
```

ヘルプ情報は、次のようなメッセージで始まります。

```
“Help on class Atom in module ChemScript19:”
```

SMILES データの入力

ChemScript をテストして、正しく動作していることを確認することもできます。ChemScript の一般的な使用法の 1 つは、関数を SMILES 文字列に適用することです。たとえば、変数に SMILES 文字列を割り当てることができます。次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
myMol = Mol.LoadData('C1CCCC1C')
```

次のメッセージが表示されます。

```
Open molecule successfully: chemical/x-smiles (分子のオープンに成功: chemical/x-smiles)
```

化学名の表示

変数を使用して、化学名を表示できるようになりました。たとえば、コマンド プロンプトに次の行を入力して、Enter キーを押します。

```
myMol.chemicalName()
```

methylcyclohexane という行が表示されます。

原子数のカウント

文字列内の原子数をカウントするには、次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
myMol.CountAtoms()
```

chemical/x-smiles 形式で明示された構造式 'C1CCCC1C' における原子の個数、7 が返されます。

IDLE の終了

終了するには、次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
exit()
```

exit コマンドの実行に関するメッセージが出たら確認を行います。Python の IDLE が終了します。

基本操作ガイド

ChemScript には、カスタマイズされたスクリプトの作成と使用に役立つ基本操作ガイドが含まれています。このガイドを開くには、**スタート**、**すべてのプログラム**、**ChemOffice 2019**、**ChemScript 19.0**、**Getting Started** の順にクリックします。

このドキュメントには、ChemScript のオブジェクトと機能、および Python についての簡単な説明やインストールされたスクリプト例の概要が記されています。

スクリプトの編集

IDLE またはその他の開発環境を使えば、ChemOffice に付属するスクリプトの編集や、独自のスクリプトの作成ができます。スクリプトには、その開発形態に関係なく、次のコマンドを含める必要があります。

```
from sys import *
from os import *
from os.path import *
from ChemScript19 import *
```

最初のコマンドは Python システムをインポートします。2 番目と 3 番目のコマンドは、オペレーティング システムのモジュールをインポートします。最後のコマンドは、すべての ChemScript 関数をインポートします。これらのコマンド行さえ記述すれば、スクリプトの残り部分はすべて開発者に委ねられます。

ChemScript API の紹介

ChemScript には、ChemScript API リファレンス ガイドが付属します。このガイドを表示するには、**スタート、すべてのプログラム、ChemOffice 2019、ChemScript 19.0、API Reference** の順にクリックします。このガイドには、ChemScript クラスに関するリンクと情報が記されています。

ChemScript のオブジェクト モデルは、次に示す 2 つの基本的なレベルの機能で構成されています。

ChemScript クラス

最上位レベルにあるこの API は、次の 4 つのクラスで構成されます。

原子

元素、電荷、隣接原子との結合、3D 座標（使用できる場合）、立体化学など。

結合

結合された原子、結合次数など。

分子 (Mol)

1 個以上の分子フラグメントを表すことができる化学結合テーブル。このクラスには、ファイル I/O 機能とその他の高度な化学機能（立体化学など）も含まれます。

反応 (Rxn)

1 つ以上のステップからなる化学反応。

関数とアルゴリズム

2 番目のレベルは、特定のビジネス ニーズに合わせて変更可能な、コアとなる一連の高水準機能群で構成されます。いくつかの例を次に示します。

テンプレートに基づく正規化

化学データに含まれる官能基を標準的な形式で表します。

テンプレートに基づく生成物の生成

反応物のセットと一般的に定義された反応から生成物を自動生成します。たとえば、アミンとカルボン酸塩の反応がこれに該当します。

部分構造の識別とマッピング

部分構造を持つ分子を原子ごとに比較一致した場合は、部分構造内の原子と分子内の原子の原子ごとの対応を示すマップが得られます。

塩の除去

塩フラグメントの定義済みリストに基づいて、反応から塩を除去します。

構造の方向

確立された一般的な骨格の方向に基づいて、構造の標準的な方向を適用します。

2D 構造式の生成とクリーンアップ

ChemDraw ベースのアルゴリズムを使って、新規の構造式の生成を行ったり、プログラムによる化学データの変更に利用します。

標準コード

固有の識別コードを化学構造式から生成します。

ファイル形式の変換

PerkinElmer の製品でサポートされているすべてのファイル形式 (CDX、CDXML、MOL、CHM、SKC、SMILES など) でファイル データの読み取りまたは書き込みを行います。

化学名と構造式の変換

ChemDraw の Struct=Name 機能を使って、化学名から構造式を生成したり構造式から化学名を生成したりします。

分子力学

MM2 カ場を使って分子構造式を最適化します。

ChemScript API オンライン

PerkinElmer では API オンラインのドキュメントも提供しています。API の情報は sdk.PerkinElmer.com で参照できます。

チュートリアル

ここでは、いくつかのサンプル スクリプトを使って、ビジネス ニーズを満たすカスタム コードの開発方法を説明します。ここで取り上げるスクリプトの多くは、ChemScript のサンプル ディレクトリに入っています。標準で

は、ChemOffice 2019 補助ファイルがインストールされている次の場所がこのディレクトリにあたります。

Windows の場合:

C:\ProgramData\PerkinElmer\Informatics\ChemOffice2019\ChemScript\Examples\

紙面の都合上、このマニュアルではスクリプトの掲載や Python の説明は行いません。ただし、使い方に応じて変更や拡張ができるように、サンプル コードの利用法には簡単に触れています。このチュートリアルを読む際には、該当するコードを IDLE で表示し、必要であれば編集を加えて各サンプルの動作を確認することをお勧めします。IDLE の詳細については、“[操作の開始](#)” ページ 189 を参照してください。

例 1: 構造式の自動整形

このサンプル スクリプトは、複数の ChemDraw ファイル内の構造式をまとめて整形します。ChemDraw のものと同じ整形機能が使われています。該当するスクリプトは、Example.001/script.py ディレクトリにあります。このスクリプトは、ソース ディレクトリから CDX 構造式ファイルを読み取り、それぞれの構造式に整形機能を適用して、変更後のファイルを出力ディレクトリに書き出します。元のファイルは変更されずに残ります。

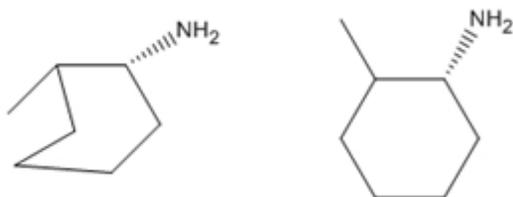


図 10.1: この構造式整形スクリプトは、構造式ファイルの内容（左）を読み取り、整形された構造式ファイル（右）を新たに作成します。

この例では、CDXML 形式を使用します。MDL MOL などの形式も適用できます。また、ChemScript には、特定のファイル形式を使ったデータの読み取りと書き込みを行わせることも可能です。

例 2: SD ファイルの作成

この例では、既存の CDXML ファイルから SD ファイルを作成する方法を示します。該当するスクリプトは、Example.002/script.py にあります。最初に、それぞれに化学構造式を持つ CDXML ファイルのリストがあります。ファイルのリストは、この ChemScript スクリプト内にハードコーディングされています。このスクリプトを実行すると、SDFFileWriter メソッドによって、それらの構造式すべてを含む SD ファイルが作成されます。

例 3: CDXML ファイルのリスト作成

この例は、SD ファイルの読み取りと CDXML ファイルのリストの書き込みを行う方法を示しています。ソースファイルは、Example.003/script.py にあります。

例 4: SD ファイルのフィルタ処理

このサンプルは、atomByAtomSearch メソッドを使用して、“原子単位”で部分構造を検索する簡単な ChemScript アプリケーションの作成例です。このプログラムは、SD ファイルを 1 つ読み込み、構造式にフィルタを適用して、フェニル基の有無によって 2 つの SD ファイルのどちらかに出力します。また、SMILES 文字列形式の化学データを読み取る方法もわかります。詳細については、Example.004/script.py を参照してください。

例 5: 正規コードの計算

このサンプル スクリプトは、2 つの SD ファイルの両方に含まれる構造の有無を構造式の正規コードに基づいて検査します。出力は、重複する構造式を除いた新たな SD ファイルです。詳細については、

Example.005/script.py を参照してください。

このサンプルはまず、構造ごとに正規コードを求めます。同じ化学構造が異なる形態で表現されていても正規コードは変わらないため、このコードを使って 2 つの構造が化学的に同等かどうかを確認できます。

この例では、Python のディクショナリも使用します。これは連想配列です。ディクショナリによって、キーが値に関連付けられます。このディクショナリは、ある正規コードが既出であるかどうかの判断に使用されます。

このスクリプトでは、SD ファイルを読み取るために代替のループ構造を用いています。

正規コードは永続的に残しておくものではありません。その表記は、ChemScript のバージョンごとに変更される可能性があるためです。

例 6: 構造式オーバーレイ

このスクリプトでは、ChemScript の構造式オーバーレイ機能を取り上げています。化学的に類似した 2 つの構造を重ね合わせるために、骨格構造ファイルを使用します。このスクリプトはまず、共通の骨格部分構造を含む SD ファイル内にある構造を調査します。続いて、それらの構造の向きが骨格に対して同じになるように整列します。詳細については、Example.006/script.py を参照してください。

 **注意:** オーバーレイの機能は、三次元の構造式の整列にも使えます。

例 7: 反応変換

これは、反応変換のわかりやすい例です。具体的には、分子の変換を規定する反応を描画し、その変換を一連の構造式ファイルに適用することができます。

このチュートリアルに必要な全ファイルは、Example.007 ディレクトリにあります。transform1.cdxml ファイルには、変換を規定する反応が用意されています。input.sdf ファイルには、変換の対象となるすべての構造式が含まれています。



図 10.2: 変換ファイルは、どのような変換がソース構造に適用されるかを定義します。

このスクリプトは、変換ファイル内に反応物として記されたニトロ基を持つ構造式を入力ファイルから探し出します。構造式が見つかった場合、そのニトロ基が生成物に示された形に変換され、構造式全体が新しいファイルにコピーされます。次の図は、その一例を示しています。

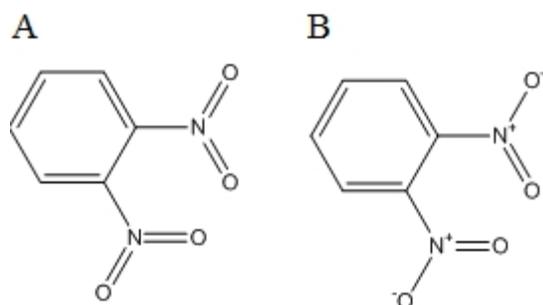


図 10.3: A) 変換の適用前、B) 変換後

検索の基準に一致しない構造式は無視されます。

例 8: 簡単な塩の除去

このプログラムでは、SD ファイルを読み取り、塩の構成要素を識別し、存在する場合にそれらを除去し、2 つの SD ファイルを出力します。構造式の出力ファイルには、塩の構成要素を除いた元の構造式が格納され、塩の出力ファイルには、除去された塩の構成要素が元の構造式への参照情報と共に格納されます。詳細については、Example.008/script.py を参照してください。

 **注意:** この例では、PerkinElmer 社によるデフォルトの塩セットを使用しています。ただし、独自の塩テーブルを定義して、どの化学物質を塩と見なすかを指定することも可能です。

参考資料

Python や C#/.NET の習得に使える資料は、数多くあります。そうした多数の書籍および Web サイトのほんのいくつかを次に示します。

書籍

Python

- 『*Beginning Python: From Novice to Professional*』 Magnus Lie Hetland 著
- 『*Dive into Python*』 Mark Pilgrim 著
- 『*Learning Python*』 Mark Lutz、David Ascher 共著。入門/中級者レベルの学習に適した手引き書兼参考書です。
- 『*Python in a Nutshell*』 Alex Martelli 著。この書籍は、Python の手短な入門書であり、とても参考になります。

C#/.NET

- 『*C# in a Nutshell*』 Peter Drayton、Ben Albahari、Ted Neward 共著
- 『*Pro C# with .NET 3.0*』 Andrew Troelsen 著
- 『*C# Essentials*』 Ben Albahari、Peter Drayton、Brad Merrill 共著
- 『*C# 3.0 Cookbook*』 Jay Hilyard、Stephen Teilhet 共著

Web サイト

Python

Python の詳細については、Web サイト <http://www.python.org> を参照してください。これは、プログラミング言語 Python の公式サイトです。

.NET

.NET の詳細については、以下を参照してください。

<http://msdn.microsoft.com>

化学的物性予測

ChemOffice 2019 スイートでは、100 種類を超えるさまざまな化学的物性、位相特性、物理的特性、熱力学特性を特定できます。このガイドでは、Chem3D で計算できる物性特性について説明し、他の ChemOffice 2019 アプリケーションで使用できる物性特性の関数の一覧を表示します。

Chem3D の物性予測特性

以下に示す特性は、ChemOffice 2019 対応の Chem3D で計算できます。各物性特性の詳細および計算手法については、それぞれのリンクをクリックしてください。

B	H	Molecular Surfaces (分子表面)	S
Balaban Index (Balaban 指数)	Harmonic Zero Point Energy (調和ゼロポイントエネルギー)	Molecular Topological Index (分子形状指数)	SCF Energy (SCF エネルギー)
Boiling Point (沸点)	Heat Capacity (熱容量)	Molecular Volume (分子体積)	Shape Attribute (形状属性)
C	Heat of Formation (生成熱)	Mulliken Charges (Mulliken 電荷)	Shape Coefficient (形状係数)
Cp	Henry's Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	Mulliken Populations (Mulliken 電子密度)	Spin Density (スピン密度)
Cv	Hyper Polarizability (超分極率)	m/z	Sum Of Degrees (次数合計)
Cluster Count (クラスター数)	Hyperfine Coupling Constants (超微細カップリング定数)	N	Sum of Valence Degrees (原子価合計)
Connolly Accessible Area (コノリー接触面)	I	Number of HBond Acceptors (水素結合受容体の数)	T
Connolly Molecular Area (コノリー分子面)	Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	Number of HBond Donors (水素結合供与体の数)	Thermodynamic Energy (熱力学的エネルギー)
Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)	Internal Energy (内部エネルギー)	Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)	Topological Diameter (形状径)
Critical Pressure (臨界圧力)	Ionization Potential (イオン化ポテンシャル)	O	Total Connectivity (結合合計)
Critical Temperature (臨界温度)	K	Ovality (卵形度)	Total Energy (エネルギー総量)
Critical Volume (臨界容積)	Kinetic Energy (運動エネルギー)	P	Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
D	L	LogP/Partition Coefficient (LogP/分配係数)	V
Dipole (双極子)	Lipinski Rule of five (Lipinski の Rule of Five)	pKa	Vapor Pressure (蒸気圧)
E	LogP/Partition Coefficient (LogP/分配係数)	Polar Surface Area (極性表面積)	W
Electron Density (電子密度)	LogS	分極率	Water Solubility (水溶性)

Electrostatic Potential (静電ポテンシャル)	Lowdin Charges (Lowdin 電荷)	Potential Energy (ポテンシャルエネルギー)	Wiener Index (Wiener 指数)
Elemental Analysis (元素解析)	Lowdin Populations (Lowdin 電子密度)	Principal Moment (主モーメント)	Z
Enthalpy (エンタルピー)	M	R	Zero-Point Energy (ゼロポイントエネルギー)
Entropy (エントロピー)	Mass (質量)	Radius (半径)	
Exact Mass (厳密な質量)	Melting Point (融点)	RMS Force (RMS 力)	
F	Mol Formula (分子式)	Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)	
Formal Charge (形式電荷)	Mol Formula HTML (分子式 HTML)		
Run Frequencies (周波数)	Mol Refractivity (モル屈折率)		
G	Mol Weight (分子量)		
Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	Molecular Mass (分子量)		

*Molecular Networks の物性特性の詳細については、“追加できる計算エンジン” ページ 1を参照してください。

Balaban Index (Balaban 指数)

Balaban 指数 (J で表す) は次のように定義されます。

$$J = \frac{q}{\mu + 1} \sum_{edges_{ij}} (S_i S_j)^{-1/2}$$

各項の意味は次のとおりです。

- q は分子グラフのエッジの数です。
- $\mu = (q - n + 1)$ は分子グラフのサイクロマティック数です。
- n は分子グラフの原子数です。
- S_i は、分子の形状距離マトリックスの i 番目の行 (または列) にある全エントリの合計です。距離マトリックスには、すべての原子ペア間の最短パスが格納されます。

Balaban 指数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Balaban Index** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Boiling Point (沸点)

沸点は絶対温度で表示します。

溶液は、純溶媒よりわずかに高い温度で沸騰します。沸点の変化は次の数式で算出します。

$$\Delta T_b = K_b m$$

K_b はモル沸点定数です。m は、重量モル濃度で表される溶質の濃度です。 ΔT_b は温度変化です。沸点を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Boiling Point** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

C_p

C_p は定圧での熱容量です。微分数量として定義されます。物体に加えらるる微量の熱 (δQ) とそれに対応するわずかな温度上昇 (δT) の比率です。数式は次のとおりです。

$$C_p = \left(\frac{\delta Q}{\delta T} \right)_p = \left(\frac{\partial U + p \partial V}{\partial T} \right)_p$$

各項の意味は次のとおりです。

- C_p は定圧での熱容量です。
- δQ は物体に加えらるる微量の熱です。
- δT は温度変化です。
- p は圧力です。
- U は内部エネルギーの部分的変化です。
- V は体積の部分的変化です。
- T は温度の部分的変化です。

C_p を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Cp** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

C_v

C_v は、定容での熱容量として定義されます。

系に熱 (δQ) が導入されたときの内部エネルギーの変化 (δU) は次のようになります。

$$\delta U = \delta Q - p \delta V$$

このプロセスが定容で実行された場合は、次のような関係が成り立ちます。

$$\left(\frac{\delta Q}{dT}\right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = C_V$$

C_V を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Cv** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Cluster Count (クラスタ数)

クラスタ数は、距離マトリックス中で与えられた特定の長さのパス経路の数です。クラスタ数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Cluster Count** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Connolly Accessible Area (コノリー接触面)

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際の、球の中心の軌跡です。コノリー接触面を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Connolly Accessible Area** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

 **注意:** コノリー計算は、原子数が 300 以下の分子に制限されています。

Connolly Molecular Area (コノリー分子面)

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際にできる接触面です。コノリー分子面を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Connolly Molecular Area** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

 **注意:** コノリー計算は、原子数が 300 以下の分子に制限されています。

Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)

溶媒接触分子表面で囲まれた領域の容積です。

コノリー溶媒排斥容積を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Connolly Solvent Excluded Volume** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

 **注意:** コノリー計算は、原子数が 300 以下の分子に制限されています。

Critical Pressure (臨界圧力)

バルで表示します。臨界温度で気体を液化するために必要な最小圧力です。

沸点を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Critical Pressure** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Critical Temperature (臨界温度)

絶対温度で表示します。気体の場合に、どれほど圧力を加えても液化できなくなる最低温度です。

沸点を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Critical Temperature** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Critical Volume (臨界容積)

cm^3/mol で表示します。臨界温度および臨界圧力において 1 モルの物質によって占有される体積です。

沸点を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Critical Volume** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Dipole (双極子)

単位はデバイです。双極子は、共有結合した 2 個の原子間の電荷の分離を表します。双極子は、双極子モーメント（一方の極の電荷または磁荷の大きさと両極間の距離との積に等しい大きさを持つベクトル量）によって特徴付けられます。双極子モーメントは次の数式で算出します。

$$\mu = qr$$

μ は双極子モーメントです。q は分極している電荷の大きさです。r は正電荷から負電荷へのベクトルです。双極子は、GAMESS または Gaussian を使用して計算できます。GAMESS を使用して双極子を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。
2. **Properties** タブで **Dipole**、**Run** の順にクリックします。
3. (オプション) モデルに双極子を表示する場合は、プロンプトが表示された際に **Yes** をクリックします。

Gaussian を使用して双極子を計算するには、次の操作を行ってください。

4. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
5. Gaussian Interface ダイアログ ボックスで、**Jobs** タブをクリックし、**Properties** タブをクリックします。
6. **Properties** タブで、**Dipole** チェック ボックスをオンにします。
7. **Run** をクリックします。
8. (オプション) モデルに双極子を表示する場合は、プロンプトが表示された際に **Yes** をクリックします。

Electron Density (電子密度)

電子が特定の場所に存在する確率です。次の数式で算出します。

$$\rho(r) = \sum \sum P_{\mu\nu} \phi_{\mu}(r) \phi_{\nu}(r)$$

各項の意味は次のとおりです。

- $\rho(r)$ は電子密度で、座標 r の関数です。 $\rho(r)dr$ が少量 (dr) で電子の数になるように定義されます。
- $\phi_{\mu}(r)$ と $\phi_{\nu}(r)$ は基底関数です。
- P は密度マトリクスです。

電子密度は、GAMESS または Gaussian を使用して計算できます。

GAMESS を使用して電子密度を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Electron Density** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Electron Density** をクリックし、**Run** をクリックします。Atom Property ウィンドウに結果が表示されません。

Gaussian を使用して電子密度を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Electron Density** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Gaussian Interface** ダイアログ ボックスで、**Jobs** タブをクリックし、**Properties** タブをクリックします。
3. **Properties** タブで、**Electron Density** チェック ボックスをオンにします。
4. **Run** をクリックします。Atom Property ウィンドウに結果が表示されます。

Electrostatic Potential (静電ポテンシャル)

静電ポテンシャルは次の式で表されます (ある点における V 、電荷の系の F 、複数の点における q_i 、誘電率 ϵ の媒質の r_i)。

$$V = \sum_i \frac{q_i}{\epsilon |r_i - F|}$$

静電ポテンシャルは、GAMESS を使用して計算できます。

静電ポテンシャルを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Electrostatic Potential** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。
2. **Properties** タブで、**Electrostatic Potential** を選択し、**Run** をクリックします。

Elemental Analysis (元素解析)

物質の元素組成と同位体組成が解析されるプロセスです。元素解析は、定性的 (存在する元素を特定) または定量的 (存在する各量を特定) に行うことができます。

元素解析を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Elemental Analysis** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Enthalpy (エンタルピー)

エンタルピーは、化学反応で発生する熱または吸収される熱を計算するのに使用できる物質の特性です。またエンタルピーは状態関数でもあります。生成物と反応物のエンタルピーの差を求めることによって、化学反応のエンタルピー変化を計算できます。エンタルピーは次の数式で算出します。

$$H=U+PV$$

各項の意味は次のとおりです。

- H はエンタルピーです。
- U は内部エネルギーです。
- P は圧力です。
- V は体積です。

エンタルピーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Enthalpy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Entropy (エントロピー)

エントロピーの変化 (dS) は、熱伝達の量 (dQ) および温度 (T) に関係し、次の数式で算出します。

$$dS = \frac{dQ}{T}$$

GAMESS を使用してエントロピーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Entropy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Gaussian を使用してエントロピーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Entropy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Exact Mass (厳密な質量)

分子の同位体の質量の合計です。たとえば、2 個の水素-1 (1H) と 1 個の酸素-16 (16O) が含まれる水の厳密な質量は $1.0078 + 1.0078 + 15.9994 = 18.0106$ です。2 個の水素-2 (重水素つまり 2H) と 1 個の酸素-16

(160) が含まれる重水の厳密な質量は $2.014 + 2.014 + 15.9994 = 20.027$ です。精密質量を割り出すには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Exact Mass** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Formal Charge (形式電荷)

形式電荷は、化学結合の電子が、相対的な陰性に関係なく原子間で等しく共有されるという前提のもとに、分子の原子に割り当てられる電荷です。

分子の原子の形式電荷は次の数式で算出できます。

$$FC = V - N - B/2$$

“V” は、分離している原子（基底状態の原子）の価電子数です。“N” は、分子内のこの原子における非結合電子の数です。“B” は、分子内の他の原子と共有結合で共有される電子の総数です。

形式電荷を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Formal Charge** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Run Frequencies (周波数)

GAMESS を使用して赤外振動周波数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Run Frequencies** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Gaussian を使用して周波数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Run Frequencies** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)

KJ/mole で表示します。ギブスの自由エネルギーは次のように定義されます。

$$G(p, T) = U + pV - TS$$

以下と同じです。

$$G(p, T) = H - TS$$

各項の意味は次のとおりです。

- U は内部エネルギーです (SI 単位: ジュール)。
- p は圧力です (SI 単位: パスカル)。
- V は体積です (SI 単位: m³)。
- T は温度です (SI 単位: ケルビン)。
- S はエントロピーです (SI 単位: ジュール毎ケルビン)。
- H はエンタルピーです (SI 単位: ジュール)。

 **注意:** H と S は、標準温度および圧力で見られる熱力学的な値です。

ChemPropPro または GAMESS を使用してギブスの自由エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** または **ChemPropPro** を開き、**Gibbs Free Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Harmonic Zero Point Energy (調和ゼロ ポイント エネルギー)

通常の量子力学では、ゼロ ポイント エネルギーは系の基底状態に関連付けられたエネルギーです。量子調和振動子の基底状態に関連付けられたエネルギーの一例は、次の式で表します。

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

E はエネルギー、 \hbar は縮小したプランク定数、 ω は角周波数です。
GAMESS を使用して周波数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Harmonic Zero Point Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Heat Capacity (熱容量)

一定量の物質の温度を一定程度変えるのに必要な熱量です。値は Cal/Mol-K 単位で測定されます。
Gaussian を使用して熱容量を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Heat Capacity** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Heat of Formation (生成熱)

KJ/mole で表示します。生成熱は、定圧で構成分子から 1 モルの物質が生成される際のエンタルピーの増加量です。

生成熱を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Heat of Formation** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Henry's Law Constant (ヘンリーの法則の定数)

単位なしの値です。ヘンリーの法則の定数は次のように表現できます。

$$k_{H,pc} = \frac{p}{c}$$

“p” は、溶液の上にある気体の溶質の分圧です。“c” は、溶質の濃度です。“ $k_{H,pc}$ ” は、濃度で除算した圧力の次元を伴う定数です。ヘンリーの法則の定数と呼ばれる定数は、溶質、溶媒、温度に依存します。

生成熱を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Henry's Law Constant** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Hyper Polarizability (超分極率)

GAMESS を使用して超分極率を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Hyper Polarizability** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Hyperfine Coupling Constants (超微細カップリング定数)

GAMESS を使用して超微細カップリング定数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Hyperfine Coupling Constants** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)

理想気体の定容での熱容量は次のとおりです。

$$C_V = \left(\frac{\delta U}{\delta T} \right)_V = \hat{c}_V Nk = \hat{c}_V mR$$

各項の意味は次のとおりです。

- c_V は温度に依存する定数です。
- U は内部エネルギーです。
- T は絶対温度です。
- V は体積です。
- n は気体の物質量です。
- R は気体定数です (SI 単位で $8.314 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$)。
- N は気体粒子の数です。
- k_B はボルツマン定数です (SI 単位で $1.381 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$)。

理想気体の定圧での熱容量は次のとおりです。

$$C_P = \left(\frac{\delta H}{\delta T} \right)_P = (\hat{c}_V + 1)Nk$$

“ H ” は気体のエンタルピーです。算出方法: $H = U + pV$

理想気体熱容量を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Ideal Gas Thermal Capacity** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Internal Energy (内部エネルギー)

内部エネルギーは、分子の運動に分子内の原子の回転と振動を加えた合計エネルギーです。次の数式で算出できます。

$$dU = TdS - PdV + \mu dN$$

各項の意味は次のとおりです。

- dU は内部エネルギーの変化です。
- T は温度です。
- dS はエンタルピーの変化です。
- p は圧力です。

- dV は体積の変化です。
- μ は化学的なポテンシャルです。
- dN は系に追加された粒子数です。

GAMESS を使用して内部エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Internal Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Ionization Potential (イオン化ポテンシャル)

イオン化ポテンシャルは、原子から電子を除去するのに必要なエネルギーです。

Gaussian を使用してイオン化ポテンシャルを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Ionization Potential** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで、**Ionization Potential** を選択し、**Run** をクリックします。結果が **Output** ウィンドウに表示されます。

Kinetic Energy (運動エネルギー)

運動エネルギーの計算式は次のとおりです。

$$K = p^2 / (2m)$$

K は運動エネルギー、 m は質量、 p は運動量 (質量と速度 v の積) です。

GAMESS を使用して運動エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Kinetic Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで **Kinetic Energy**、**Run** の順にクリックします。

Lipinski Rule of five (Lipinski の Rule of Five)

Lipinski の Rule of Five を決定するのに必要な値を表示します。

- 分子量
- 水素結合受容体の数
- 水素結合供与体の数
- 回転可能結合数
- LogP

Lipinski の Rule of Five を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Lipinski Rule** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

 **注意:** レポート値は個別に計算することもできます。

LogP/Partition Coefficient (LogP/分配係数)

分配係数は、2 つの溶液間のイオン化していない化合物の濃度の比です。イオン性溶質の分配係数を測定する場合は、化合物の優勢型がイオン化されないように水相の pH が調整されます。溶媒内のイオン化していない溶質の濃度の比の対数は、LogP と呼ばれます。

通常、選択する溶媒の 1 つは水です。もう一方は疎水性のもの（オクタノールなど）です。

LogP の計算式は次のとおりです。

$$\log P_{oct/wat} = \log \left(\frac{[solute]_{octanol}}{[solute]_{un-ionizedwater}} \right)$$

LogP を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Networks** を開き、**LogP** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

1 つ目の代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**LogP** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

2 つ目の代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。

2. **ClogP Driver** を開き、**Partition Coefficient** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

LogS

物質の溶解度の対数です。mol/L 単位で測定されます。

LogS を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Networks** を開き、**LogS** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Lowdin Charges (Lowdin 電荷)

次の数式で算出します。

$$q_k = Z_k - \sum_{i \in k} (S^{1/2} P S^{1/2})_{ii}$$

各項の意味は次のとおりです。

- Z_k は原子核の電荷です。
- P は電子の密度マトリクスです。
- $S^{1/2}$ はオーバーラップマトリクスの平方根です。
- 合計 i は原子 k を中心とするすべての基底関数を対象とします。

GAMESS を使用して Lowdin 電荷を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Lowdin Charges** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで、**Lowdin Charges** を選択し、**Run** をクリックします。

Lowdin Populations (Lowdin 電子密度)

Lowdin の手法では、非直交原子軌道は直交系に変換されます。変換後の軌道 χ'_b は次の式で求められます。

$$\chi'_b = \sum_a (S^{-1/2})_{ab} \chi_a$$

Lowdin Population Analysis (LPA) では、フラグメント A に関連する α 、 β 、総電子数は次の式で求められます。

$$GP_A^\alpha = \sum_{a \in A} (S^{1/2} P^\alpha S^{1/2})_{aa}$$

$$GP_A^\beta = \sum_{a \in A} (S^{1/2} P^\beta S^{1/2})_{aa}$$

$$GP_A = GP_A^\alpha + GP_A^\beta$$

スピン密度は次の式で求められます。

$$SP_A = GP_A^\alpha - GP_A^\beta$$

GAMESS を使用して Lowdin 電子密度を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Lowdin Populations** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで、**Lowdin Populations** を選択し、**Run** をクリックします。

Mass (質量)

統一原子質量単位 u (12C の原子 1 個の質量の 1/12 に等しい) を基準とした、物質の分子 1 個の質量です。分子量とも呼ばれます。

質量を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Mass** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Melting Point (融点)

標準大気圧で固体が液体になる温度です。融点では、固相と液相が平衡状態で存在します。融点の計算式は次のとおりです。

$$T = \frac{\Delta H}{\Delta S}$$

“T” は融点の温度です。“ΔS” は融解エントロピーの変化です。“ΔH” は融解エンタルピーの変化です。

融点を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Melting Point** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Mol Formula (分子式)

化合物の分子式です。

質量を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Molecular Formula** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Mol Formula HTML (分子式 HTML)

HTML 形式で書かれた分子式です。HTML ファイルに出力をコピーし、貼り付けることができます。

次に、アニリンのモデルの出力例を示します。

C₆H₇N

HTML 形式で分子式を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Mol Formula HTML** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Mol Refractivity (モル屈折率)

1 モルの物質の総分極率の測定値です。温度、屈折率指数、圧力に依存します。

モル屈折率 “A” は次の式で表されます。

$$A = \frac{4\pi}{3} N_A \alpha$$

“N_A” はアボガドロ定数です。α は平均分極率です。

ChemPropPro または ChemPropStd を使用してモル屈折率を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** または **ChemPropStd** を開き、**Mol Refractivity** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Mol Weight (分子量)

分子内のすべての原子の原子量の合計です。
質量を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Mol Weight** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Molecular Mass (分子量)

物質の分子 1 個の質量です。原子ユニット (au) 単位で測定されます。

Gaussian を使用して分子量を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Molecular Mass** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Molecular Surfaces (分子表面)

GAMESS を使用して分子表面を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。
2. **Properties** タブで、**Molecular Surfaces**、**Run** の順にクリックします。

Gaussian を使用して分子表面を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで、**Molecular Surfaces**、**Run** の順にクリックします。

Molecular Topological Index (分子形状指数)

次の数式で定義されるグラフ指数です。

$$MTI = \sum_{i=1}^n E_i$$

E_i はベクトルの構成要素です。

$$E = (A + D)d$$

A は隣接マトリックス、D はグラフ距離マトリックス、d はグラフの頂点次数のベクトルです。

 **注意:** 原子の次数は、隣接する非水素原子の数になります。

分子形状指数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Molecular Topological Index** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Molecular Volume (分子体積)

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Molecular Volume** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで、**Molecular Volume** を選択し、**Run** をクリックします。

Mulliken Charges (Mulliken 電荷)

任意の原子 A のすべての基底関数に対する Gross Orbital Population (GOP) 項の合計は、Gross Atom Population または GAP_A と呼ばれます。原子 A の Mulliken 電荷は次の式で求められます。

$$Q_A = Z_A - GAP_A$$

Z_A は原子 A の原子番号です。

GAMESS を使用して Mulliken 電荷を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Mulliken Charges** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。

2. Properties タブで、**Mulliken Charges** を選択し、**Run** をクリックします。結果が Output ウィンドウと Atom Property テーブルに表示されます。

Gaussian を使用して Mulliken 電荷を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Mulliken Charges** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. Properties タブで、**Mulliken Charges** を選択し、**Run** をクリックします。結果が Output ウィンドウと Atom Property テーブルに表示されます。

Mulliken Populations (Mulliken 電子密度)

Mulliken Population Analysis (MPA) は、密度マトリクスとオーバーラップマトリクスを使用して、さまざまな部分（原子、結合、軌道）に、部分的に分子エンティティの電子を割り当てる分割スキームです。MPA は任意であり、使用する特定の基底関数系に強く依存しています。ただし、一連の分子の電子密度解析を比較することは、分子内の相互作用、化学反応、構造的な規則性を量的に説明するのに役立ちます。MPA によると、Gross Orbital Population (GOP) は次の式で求められます。

$$GOP_{\mu} = \sum_{\nu} P_{\mu\nu}$$

P は電子密度マトリクスであり、閉殻に対して次のように表されます。

$$P_{\mu\nu} = (DS)_{\mu\nu}$$

S はオーバーラップマトリクス、D は密度マトリクスです。分子軌道の基底関数係数が分子軌道 i_{th} の基底関数分子軌道 μ^{th} の $C_{\mu i}$ である場合、密度マトリクスの項は次の式で求められます。

$$D_{\mu\nu} = 2 \sum_i C_{\mu i} C_{\nu i}$$

GAMESS を使用して Mulliken 電子密度を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Mulliken Charges** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。
2. **Properties** タブで、**Mulliken Populations** を選択し、**Run** をクリックします。結果が **Output** ウィンドウと **Atom Property** テーブルに表示されます。

m/z

質量対電荷比は、荷電粒子の電気力学で使用される物理量です。m/z 比が同じ 2 個の粒子は、同じ電場と磁場にある場合、真空中を同じ経路で移動します。

質量対電荷比を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、m/z をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Number of HBond Acceptors (水素結合受容体の数)

モデルの水素結合受容体の数です。

値を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Number of HBond Acceptors** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Number of HBond Donors (水素結合供与体の数)

モデルの水素結合供与体の数です。

値を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Number of HBond Donors** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)

分子の回転可能結合数です。回転可能結合は、単結合として描画される非環式結合として定義され（アミド C-N 結合、O=C--N が回転可能です）、端の原子は、少なくとも 1 つの非水素置換基を持ちます。この形状パラメータは分子柔軟性の測定値です。水素または末端原子、アミドの単結合、スルホンアミドに結び付いている単結合、2 つのヒンダード芳香族環（少なくとも 3 つのオルト置換基を持つ）を結び付ける単結合、および不飽和結合は、回転不能と見なされます。

回転可能結合数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Num Rotatable Bonds** をクリックします。

3. **OK** をクリックします。

Ovality (卵形度)

分子の形状が球（一方の究極の形状）または葉巻形（他方の究極の形状）にどの程度近づいているかを表します。卵形度は、面積に対する体積の比で表されます。

$$O = A / (4 \times \pi \times ((3 \times V) / 4 \times \pi)^{2/3})$$

ここで、“A” は面積、“V” は体積、“O” は卵形度です。ヘリウム原子の卵形度は 1.0 です。HC₂₄H（三重結合 12）は約 1.7 です。卵形度を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Ovality** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

pKa

pKa は、化合物またはイオンが溶液中で解離する傾向を表します。B が酸 HB の共役塩基として定義されるとき、pKa は次のように算出します。

$$pKa = -\text{Log}_{10}(Ka)$$

各項の意味は次のとおりです。

$$Ka = [H^+][B] / [HB]$$

pKa を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Networks** を開き、**pKa** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Polar Surface Area (極性表面積)

極性表面積 (PSA) は、結合している水素を含むすべての極性原子（通常は酸素と窒素）における表面積の合計として定義されます。

PSA を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Polar Surface Area** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

分極率

分極率 α は、原子の誘起双極子モーメントを生成する電場 E と、この双極子モーメントの比として定義されます。分極率の計算式は次のとおりです。

$$\alpha = \frac{p}{E}$$

GAMESS を使用して分極率を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Polarizability** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。
2. **Properties** タブで、**Polarizability** を選択し、**Run** をクリックします。

Gaussian を使用して分極率を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**polarizability** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで、**Polarizability** を選択し、**Run** をクリックします。結果が **Output** ウィンドウに表示されます。

Potential Energy (ポテンシャル エネルギー)

ポテンシャル エネルギーは系内に保存されているエネルギーです。分子系では、ポテンシャル エネルギーは分子内の化学結合、および分子間の力の化学結合として表します。

GAMESS を使用してポテンシャル エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Potential Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。

2. Properties タブで、**Potential Energy** を選択し、**Run** をクリックします。結果が Output ウィンドウに表示されます。
3. **Run** をクリックします。結果が Output ウィンドウに表示されます。

Principal Moment (主モーメント)

分子の主座標軸に関する主慣性モーメントを表します。次の数式を使用して、質量の中心を通る一連の直線の慣性モーメントが計算されます。

$$I = \sum_i m_i d_i^2$$

ここで、“I” は慣性モーメント、“m_i” は質点、“d_i” は回転軸から質点までの距離です。

- 距離は、質量の中心の両側の I の平方根の逆数に比例する各線に従って確立されます。これらの距離の軌跡によって楕円体表面が形成されます。主モーメントは、楕円体の主座標軸に関連付けられます。
- 3 つのモーメントがすべて等しい場合、分子は対称コマであると見なされます。どのモーメントも等しくない場合、分子は非対称コマであると見なされます。

主モーメントを表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropStd** を開き、**Principal Moment** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Radius (半径)

原子の離心率は距離マトリックスの行（または列）内の最大値で、その分子が中心から離れている率を表します。直径 (D) は、全原子の直径の最大値で、最も遠い原子によって計算されます。例：メタンの直径 = 0、エタンの直径 = 1、プロパンの直径 = 2、n-ブタンの直径 = 3

半径 (R) は、半径の最小値で、最も中心にいる原子によって計算されます。例：メタンの半径 = 0、エタンの半径 = 1、プロパンの半径 = 1、n-ブタンの半径 = 2

半径を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Radius** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

RMS Force (RMS 力)

二乗平均の力です。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。

2. **Gaussian Interface** を開き、**RMS Force** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで **RMS Force**、**Run** の順にクリックします。

SCF Energy (SCF エネルギー)

量子多体系の基底状態波動関数を決定する自己無撞着場法です。

SCF エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**SCF Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

1. 代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
2. **Properties** タブで **SCF Energy**、**Run** の順にクリックします。

Shape Attribute (形状属性)

形状属性 (kappa) は、分子の分岐を測定し、特定の次数において可能な最小値と最大値の間になるように調節されます。1 次形状属性は 1 結合パスの数をカウントします。2 次属性は、2 結合パスの数をカウントします。次数は 3 つ (1 ~ 3) まで使用可能です。

形状属性を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Shape Attribute** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Shape Coefficient (形状係数)

形状係数 I は、次の式によって計算されます。

$$I = (D - R) / R$$

直径 (D) は、全原子の直径の最大値で、最も遠い原子によって計算されます。半径 (R) は、半径の最小値で、最も中心にいる原子によって計算されます。

D の値の例: メタン = 0、エタン = 1、プロパン = 2、n-ブタン = 3

R の値の例: メタン = 0、エタン = 1、プロパン = 1、n-ブタン = 2

形状係数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Shape Coefficient** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Spin Density (スピン密度)

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
 2. **Gaussian Interface** を開き、**Spin Density** をクリックします。
 3. **OK** をクリックします。
1. 代替方法は次のとおりです。
 1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Compute Properties** の順に選択します。
 2. **Properties** タブで **Spin Density**、**Run** の順にクリックします。

Sum Of Degrees (次数合計)

全原子の次数の合計です。原子の次数とは、結合している非水素原子の数のことです。次数合計を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Sum of Degrees** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Sum of Valence Degrees (原子価合計)

全原子の次数の合計です。水素を含んだ隣接結合次数の合計が原子価になります。原子価合計を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Sum of Valence Degrees** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Thermodynamic Energy (熱力学的エネルギー)

Gaussian を使用して熱力学的エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Thermodynamic Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Topological Diameter (形状径)

分子の最大寸法です。

形状径を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Topological Diameter** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Total Connectivity (結合合計)

全ヘテロ原子の結合です。

結合合計を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Total Connectivity** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Total Energy (エネルギー総量)

エネルギー総量は、運動エネルギーとポテンシャル エネルギーの合計です。

GAMESS を使用してエネルギー総量を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **GAMESS Interface** を開き、**Total Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

代替方法は次のとおりです。

1. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Compute Properties** の順にクリックします。
2. **Properties** タブで、**Total Energy** を選択し、**Run** をクリックします。結果が **Output** ウィンドウに表示されます。
3. **Run** をクリックします。結果が **Output** ウィンドウに表示されます。

Total Valence Connectivity (原子価結合合計)

全ヘテロ原子の原子価結合です。

原子価結合合計を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Total Valence Connectivity** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Vapor Pressure (蒸気圧)

固相または液相と平衡状態にある蒸気によって加えられる圧力です。蒸気圧により、気相中の溶媒分子の濃度が測定されます。

蒸気圧は、ラウールの法則を使用して計算できます。蒸気圧の計算式は次のとおりです。

$$P_{tot} = \sum_i P_i \chi_i$$

“p” は蒸気圧です。“i” は構成要素指数です。“χ” はモル分率です。

蒸気圧を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Vapor Pressure** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Water Solubility (水溶性)

特定の温度および圧力下で、平衡状態で水に溶解できる物質の最大量です。水溶性の単位は mg/L です。

水溶性を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **ChemPropPro** を開き、**Water Solubility** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Wiener Index (Wiener 指数)

分岐を測定します。次のように定義されています。

$$W = \frac{1}{2} \sum D_{ij}$$

D_{ij} は、距離マトリックスの非対角要素です。

Wiener 指数を計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Molecular Topology** を開き、**Wiener Index** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

Zero-Point Energy (ゼロ ポイント エネルギー)

1. **Calculations** メニューの **Compute Properties** をクリックします。
2. **Gaussian Interface** を開き、**Zero-Point Energy** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

ChemFinder の物性特性予測

下に示す物性は、ChemFinder for ChemOffice 2019 で計算できます。これらの特性の詳細および計算方法については、ChemFinder オンライン ヘルプを参照してください。

B	H	P
Balaban Index (Balaban 指数)	Heat of Formation (生成熱)	Partition Coefficient (分配係数)
	Henry' s Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	pKa
Boiling Point (沸点)		
C	I	Polar Surface Area (極性表面積)
Chemical Name (化学名)	Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	Principal Moment (主モーメント)
Cluster Count (クラスタ数)	L	R
Critical Pressure (臨界圧力)	LogP	Radius (半径)
Critical Temperature (臨界温度)	LogS	S
Critical Volume (臨界容積)	M	Shape Attribute (形状属性)
Connolly Accessible Area (コノリー接触面)	Mass (質量)	Shape Coefficient (形状係数)
Connolly Molecular Area (コノリー分子面)	Melting Point (融点)	Sum of Degrees (次数合計)
Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)	Mol Formula (分子式)	Sum of Valence Degrees (原子価合計)
E	Mol Formula HTML (分子式 HTML)	T
Elemental Analysis (元素解析)	Mol Refractivity (モル屈折率)	Topological Diameter (形状径)
Exact Mass (厳密な質量)	Mol Weight (分子量)	Total Connectivity (結合合計)
F	Molecular Topological Index (分子形状指数)	Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
Formal Charge (形式電荷)	m/z	V
G	N	Vapor Pressure (蒸気圧)
Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)	W
	O	Water Solubility (水溶性)
	Ovality (卵形度)	Wiener Index (Wiener 指数)

ChemDraw で計算できる化学的特性

下に示す物性は、ChemDraw Professional for ChemOffice 2019 で計算できます。これらの特性の詳細および計算方法については、ChemDraw オンライン ヘルプを参照してください。

B	H	P
Boiling Point (沸点)	Heat of Formation (生成熱)	pKa
C	Henry's Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	T
Critical Pressure (臨界圧力)	L	tPSA
Critical Temperature (臨界温度)	LogP	
Critical Volume (臨界容積)	LogS	
CLogP/CMR	M	
G	Melting Point (融点)	
Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	MR	

ChemDraw/Excel の物性予測特性

下に示す物性は、ChemDraw/Excel for ChemOffice 2019 で計算できます。これらの物性の詳細および計算手法については、ChemDraw/Excel オンライン ヘルプを参照してください。

B	I	S
Balaban 指数	Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	Shape attribute (形状属性)
Boiling point (沸点)	L	Shape coefficient (形状係数)
C	LogP	Sum of degrees (次数合計)
Cluster count (クラスタ数)	M	Sum of valence degrees (原子価合計)
Critical Pressure (臨界圧力)	Molar Refractivity (モル屈折率)	T
Critical Temperature (臨界温度)	N	Total Connectivity (結合合計)
Critical Volume (臨界容積)	Number of rotatable bonds (回転可能結合数)	Topological Diameter (位相直径)
Connolly Molecular Surface Area (コノリー分子表面積)	O	Topological Index (位相指数)
Connolly Solvent Accessible Surface Area (コノリー溶媒接触表面)	Ovality (卵形度)	Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
Connolly Solvent-Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)	P	V
G	Principal Moments of Inertia (X, Y, Z) (主慣性モーメント (X、Y、Z))	Vapor Pressure (蒸気圧)
Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	Polar Surface Area (極性表面積)	W
H	R	Water Solubility (水溶性)
Heat of Formation (生成熱)	Radius (半径)	Wiener Index (Wiener 指数)

キーによる変更

以下の表に示すショートカットキーを使うと、変更ツールを使用しなくても、モデルの表示を操作することができます。

回転

キー	ドラッグ	Shift + ドラッグ
Alt	回転ツールを選択し、すべてのオブジェクトを回転させる	回転ツールを選択し、選択したオブジェクトを回転させる。1 つ以上のオブジェクトを選択する必要がある
Shift + B Shift + N		結合を中心にフラグメントの 1/2 を回転させる (どのフラグメントが回転するかは、原子を選択した順序による)
V	すべてのオブジェクトを回転させる (1 つ以上の結合を選択する必要がある)	モデルを軸で回転させる。選択した結合を含むモデルが、その結合を軸にして回転する
X	すべてのオブジェクトを X 軸で回転させる	モデルを X 軸で回転させる
Y	すべてのオブジェクトを Y 軸で回転させる	モデルを Y 軸で回転させる
Z	すべてのオブジェクトを Z 軸で回転させる	モデルを Z 軸で回転させる

ショートカット キーを使用する以外に、マウスをドラッグしてモデルを回転させる方法があります。その場合は、マウスの中央ボタンまたはスクロール ホイールと左ボタンを同時に押しながらドラッグします。

 **ヒント:** マウスのボタンを押す順序は、中央ボタンが先になります。

拡大と移行移動

キー	ドラッグ	Shift + ドラッグ
CTRL	すべてのオブジェクトを移動する	選択したモデルを移動する
A	中心を拡大	
Q	回転の中心を拡大	
W	選択部分の中心を拡大	

ホイール マウスを使用している場合は、スクロール ホイールを使って表示を拡大することもできます。中央ボタンまたはスクロール ホイールを押しながらドラッグすると表示を移動できます。

選択

標準の選択

S キーを押したままにすると、選択ツールが選択されます。S キーを押した状態で、下表に示すアクションを実行できます。

キー	クリック	Shift + クリック	ドラッグ	Shift + ドラッグ
S	原子または結合の選択	クリックして、複数の原子や結合を選択	領域内の複数の原子や結合を選択	複数の原子または結合の囲み選択

 **注意:** 結合をクリックすると、その結合と結合されている 2 つの原子が選択されます。原子または結合をダブルクリックすると、原子または結合が属するフラグメントが選択されます。選択したフラグメントをダブルクリックすると、一階層上のフラグメントが選択されます。つまり、ダブルクリックするごとに選択対象が一階層ずつ上に移動し、最後にモデル全体が選択されます。

放射状選択

放射状選択では、オブジェクトまたはオブジェクトのグループを選択します。この選択方法は、選択されたオブジェクトまたはオブジェクトのグループからの距離または半径に基づいて行われます。この機能は、タンパク質の結合部位を強調表示する場合に便利です。放射状選択を使用するには、Model Explorer または 3D 表示のコンテキストメニューから **Select** サブメニューを選択します。

いずれの場合も、複数選択のときは Shift キーを押しながら選択してください。

サブメニューのオプション	効果
Select Atoms within Distance of Selection	選択部分から指定された距離の範囲内にあるすべての原子（選択済みのもの以外）が選択されます。複数選択をしない場合は、それまでの選択が解除されます。
Select Groups within Distance of Selection	選択部分から指定された距離の範囲内に原子を持つすべての原子団（選択済みのもの以外）が選択されます。複数選択をしない場合は、それまでの選択が解除されます。
Select Atoms within Radius of Selection Centroid	選択部分の中心から指定された距離の範囲内にあるすべての原子（選択済みのものを除く）が選択されます。複数選択をしない場合は、それまでの選択が解除されます。
Select Groups within Radius of Selection Centroid	選択部分の中心から指定された距離の範囲内に原子を持つすべての原子団（選択済みのものを除く）が選択されます。複数選択をしない場合は、それまでの選択が解除されます。

2 次元から 3 次元への変換

ここでは、2 次元から 3 次元への変換を Chem3D がどう実行するか、その方法を説明します。2 次元作画を開くにはいくつかの方法があります。

- ChemDraw または ISIS/Draw ドキュメントを開く。
- クリップボードから ChemDraw または ISIS/Draw 構造式を貼り付ける。
- ChemDraw 結合テーブル ファイルを開く。

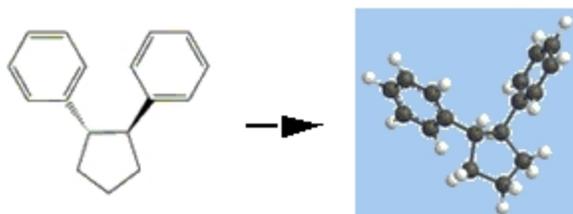
Chem3D は ChemDraw の任意の構造式を取り込むことができます。その際、この章の説明を参考にすることで、Chem3D の 2 次元から 3 次元への変換を円滑に行えます。

Chem3D は ChemDraw で作画された原子ラベルと結合を用いてモデルの構造を形作ります。ChemDraw で作画された結合ごとに、それに対応する結合が Chem3D に作られます。各原子ラベルは、最低 1 つの原子に変換されます。

正の形式電荷が 1 個の原子（配位結合の末端にある原子）に、負の電荷がもう 1 つの原子（配位結合の先頭にある原子）にそれぞれ追加されて、配位結合は単結合に変換されます。

立体化学関係

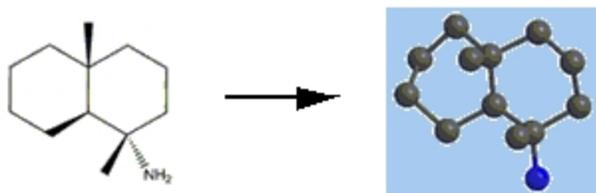
Chem3D は、ChemDraw 構造の立体結合 H-Dot 原子ラベル、H-Dash 原子ラベルを使って、モデルの立体化学関係を定義します。ChemDraw のウェッジ結合は、結合広端の原子が結合狭端の原子の手前にあるような結合を示します。ハッシュ結合はその逆で、ハッシュ結合の広がっている側の原子が、狭くなっている側の原子の後ろにあることを示します。



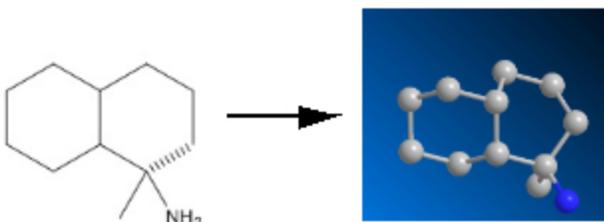
上図では、2 つのフェニル環がシクロペンタン環にトランス結合しています。左側のフェニル環はハッシュ結合、右側のフェニル環はウェッジ結合で結合しています。

結合には、点線結合、ハッシュ結合、太線結合も使用できます。しかし、これら方向性のない結合を使用すると、あいまいになることがあるのでご注意ください。点線結合、ハッシュ結合、太線結合を使う場合は、必ず点線結合、ハッシュ結合、太線結合を含めて最低 3 つの結合位置を持つ 1 つの原子と、2 つ以内の結合位置を持つ 1 つの原子との間で使用する必要があります。

次の図では、窒素原子が環系の後方に配置され、2 つのメチル基が環系の手前に配置されています。これらの 3 つの原子はそれぞれ他の 1 つの原子とのみ結合しており、立体結合の広い方の端にあると推定されます。

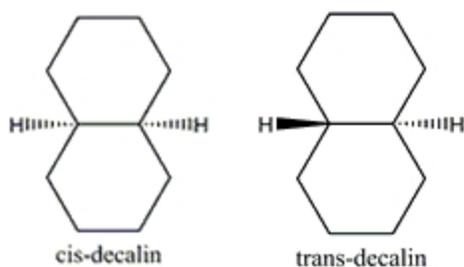


しかし、次の図のハッシュ結合は、結合両端の原子が 2 つ以上の結合を持つので、あいまいです。この場合、ハッシュ結合は線結合とみなされます。また、Wavy 結合は常に線結合として扱われます。



H-Dots および H-Dashes もまた立体化学構造を示すのに使われます。H-Dots は、ウェッジ結合で炭素原子と結合する水素原子になります。H-Dashes は、ハッシュ ウェッジ結合で結合する水素原子になります。

次図の左はシス型デカリン、右はトランス型デカリンです。Chem3D で読み取れるように ChemDraw で作画するとこうなります。もちろん、2 つの H-Dashes を 2 つの H-Dots に変えたシス型縮合を指定することもできます。



一般に、モデルで使用する立体結合の数が多いほど、Chem3D においてキラリティや二面角が正しく選択される確率は高まります。

Chem3D は 2 次元構造を変換する際、標準の結合長と結合角を現在のパラメータ セットに基づいて使います。そのため、Chem3D で張力環系を変換しようとしても閉環結合の長さや角度が正確になりません。

ラベル

Chem3D では、2 次元構造の原子ラベルを使って 各原子の原子タイプを決定します。ラベルのない原子は炭素とみなされます。テキスト ボックスのテキストを原子と結合に変換するのと同じ方法で、ラベルは原子と結合に変換されます。したがって、ラベルには数個の原子や部分構造まで含めることができます。

ファイル形式

ファイル形式の原子タイプの編集

一部のファイル形式には、原子タイプを表す情報が含まれています。通常、これらの原子タイプは、Atom Types テーブルで使用される原子タイプ番号のような数字のセットで表されます。そのファイル形式でサポートされない原子タイプについては、ファイル形式の原子タイプを編集し、必要な原子タイプを追加できます。

Chem3D では、ファイル形式を保存するために XML テーブルが使用されます。これらのテーブルは、任意のテキスト エディタや Chem3D で編集できます。View メニューの **Parameter Tables** をクリックし、編集するテーブルを選択します。

 **ヒント:** この XML ファイルは、...¥Chem3D¥C3D Items¥ のパスにあります。

名前

各原子タイプには、名前が割り当てられます。この名前は、ファイル形式で表される形式のファイル内にある番号です。名前はすべて異なる必要があります。テーブル内のレコードは名前順にソートされています。

 **注意:** 名前は原子タイプ番号と似ており、名前と原子タイプ番号が対応する場合がありますが、対応しなくてもかまいません。

説明

2 番目のフィールドには、C Alkane など、原子タイプ説明が表示されます。この説明は参照用です。残りのフィールドには、Atom Types テーブル内の情報に対応する情報が格納されます。

ネイティブ形式

Chem3D には、3 つのネイティブ ファイル形式があります。別のアプリケーションでモデルを使用する予定がない場合は、いずれかのネイティブ形式でモデルを保存することをお勧めします。

Chem3D XM. Chem3D バージョン 9.0 以降と互換性があります。

Chem3D 8.0. Chem3D バージョン 4.0 ~ 8.0 と互換性があります。

Chem3D 3.2. Chem3D バージョン 3.2 以前と互換性があります。

ファイル形式の例

以下のセクションでは、指定したファイル形式で Chem3D ファイルを保存したときに作成されるファイルの例を示します。

Alchemy ファイル

次に、Chem3D を使って作成したシクロヘキサノール モデルの Alchemy ファイル (Alchemy) の例を示します。

1 列目の数字は、参照用に追加された行番号です。

1 19 ATOMS 19 BONDS				
2	1	C3	-1.1236	-0.177 0.059
3	2	C3	-0.26	-0.856 -1.0224
4	3	C3	1.01	-0.0491 -1.3267
5	4	C3	1.838	0.1626 -0.0526
6	5	C3	0.9934	0.8543 1.0252
7	6	C3	-0.2815	0.0527 1.3275
8	7	O3	-2.1621	-1.0585 0.3907
9	8	H	-1.4448	0.8185 -0.3338
10	9	H	-0.8497	-0.979 -1.9623
11	10	H	0.0275	-1.8784 -0.6806
12	11	H	1.6239	-0.5794 -2.0941
13	12	H	0.729	0.9408 -1.7589
14	13	H	2.197	-0.8229 0.3289
15	14	H	2.7422	0.7763 -0.282
16	15	H	1.5961	0.9769 1.9574
17	16	H	0.7156	1.8784 0.679
18	17	H	-0.8718	0.6068 2.0941
19	18	H	-0.004	-0.9319 1.7721
20	19	H	-2.7422	-0.593 0.9688
21	1	1	2	SINGLE
22	2	1	6	SINGLE
23	3	1	7	SINGLE
24	4	1	8	SINGLE
25	5	2	3	SINGLE
26	6	2	9	SINGLE
27	7	2	10	SINGLE
28	8	3	4	SINGLE
29	9	3	11	SINGLE
30	10	3	12	SINGLE
31	11	4	5	SINGLE
32	12	4	13	SINGLE

33	13	4	14	SINGLE
34	14	5	6	SINGLE
35	15	5	15	SINGLE
36	16	5	16	SINGLE
37	17	6	17	SINGLE
38	18	6	18	SINGLE
40	19	7	19	SINGLE

Alchemy ファイル形式

 **注意:** Alchemy III は Tripos Associates, Inc. の登録商標です。

各行には、分子に関する情報のフィールドを含むデータ レコードが表示されています。Chem3D が使用するフィールドは次のとおりです。

- 行 1 には、2 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは分子内の原子数の合計、2 番目のフィールドは結合数の合計です。
- 行 2 ~ 20 にはそれぞれ 5 個のフィールドがあり、分子内の各原子についての情報を示しています。1 番目のフィールドは原子のシリアル番号、2 番目のフィールドは原子タイプ、残りのフィールドは X、Y、Z の座標です。
-  **注意:** Alchemy ファイル形式では原子タイプの作成および変更が可能です。手順については、“[ファイル形式の原子タイプの編集](#)” ページ 233 を参照してください。
- 行 21 ~ 40 は、分子内の各結合について記述しています。1 番目のフィールドは結合番号 (1 ~ 結合数)、2 番目のフィールドは結合元の原子のシリアル番号、3 番目のフィールドは結合先の原子のシリアル番号、4 番目のフィールドは結合タイプです。結合タイプには、SINGLE (単結合)、DOUBLE (二重結合)、TRIPLE (三重結合)、AMIDE (アミド結合)、AROMATIC (芳香族) があります。結合次数名はすべて、スペースを入れて 8 文字になるように、右に詰めて表示されています。

FORTRAN. Alchemy ファイル形式の各レコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行番号	説明	FORTRAN 書式
1	原子数、結合数	I5, 1X, ATOMS, 1X, I5, 1X, BONDS
2 ~ 20	原子のシリアル番号、 タイプ、および座標	I6, A4, 3 (F9. 4)
21 ~ 40	結合 ID、結合元、結合先、 結合タイプ	I6, I5, I6, 2X, A8

直交座標ファイル

Chem3D を使用すると、Cart Coords 1 または Cart Coords 2 ファイル形式でモデルを保存できます。これらのファイル形式では、モデル内の各原子について原子タイプ、座標、および結合している原子を格納します。これらのファイル形式では、直交または非直交座標内の分数セル座標も解釈します。

これらの 2 つのファイル形式では、ファイル内に含まれる原子タイプ番号を、Chem3D で使用される原子タイプに変換する際に使用されるコードが異なります。Cart Coords 1 では、MM2 における N.L. Allinger による番号の付け方に従って、原子タイプに番号が付けられます。これらの番号は、通常、プログラム PC Model にも従って使用されています。Cart Coords 2 では、すべての原子タイプに対して、原子タイプ番号が計算されます。計算方法は、元素の原子番号に 10 を乗算し、原子タイプの立体構造によって指定された原子価の数を加算します。これらの番号は、通常、プログラム MacroModel にも使用されています。

たとえば、C Alkane（四面体炭素原子）の原子タイプ番号は、Cart Coords 2 を使用した場合に 64 です。

ファイル形式によって定義される原子タイプについては、“[ファイル形式の原子タイプの編集](#)” ページ 233 を参照してください。

直交座標ファイルの形式は、次のとおりです。

19									
C	1	0.7066	1.0661	0.5088	1	2	4	9	10
C	2	-0.8347	1.0755	0.5087	1	1	3	10	11
C	3	-1.4090	0.2755	-0.6689	1	2	6	12	13
C	4	1.2172	-0.3863	0.5088	1	1	5	14	15
C	5	0.6393	-1.1915	-0.6644	1	4	6	16	17
C	6	-0.8944	-1.1698	-0.6466	1	3	5	18	19
O	101	1.1929	1.8096	1.5934	6	1	102		
H	9	1.0525	1.5595	-0.4322	5	1			
H	10	-1.2116	2.1250	0.4570	5	3			
H	11	-1.2089	0.6405	1.4656	5	3			
H	12	-2.5249	0.2816	-0.6258	5	4			
H	13	-1.1155	0.7623	-1.6294	5	4			
H	14	0.9370	-0.8781	1.4700	5	5			
H	15	2.3297	-0.4102	0.4377	5	5			
H	16	1.0034	-2.2463	-0.6182	5	6			
H	17	1.0057	-0.7613	-1.627	5	6			

H	18	-1.2950	-1.7316	-1.5245	5	7
H	19	-1.2651	-1.6852	0.2712	5	7
H	102	2.1275	1.8656	1.4899	21	101

図 14.1: シクロヘキサノールの Cart Coords 1 テーブル

1. 1 行目は、モデル内の原子数です。

オプションで、結晶構造の結晶セル パラメータを持ったファイル内の原子数の後に使用できます。結晶構造の結晶セル パラメータ a 、 b 、 c 、 α 、 β 、 γ を表示できます。また、セルパラメータの後に指数を含めることもできます。その場合、すべての分数セル座標は、10 を指数の次数で累乗した数で除算されます。

2. 直交座標ファイルの 2 行目以降は、各行ごとに、モデル内の各原子のデータを示しています。原子を表す行は、原子記号で始まります。この原子記号は、Elements テーブル内の記号に対応します。原子記号には電荷 (N+ など) が含まれることがあります。原子記号の後にはシリアル番号が示されています。
3. シリアル番号の後には、原子の座標が示されています。ファイルの 1 行目に結晶セル パラメータを指定した場合、これらの値は分数セル座標になります。それ以外の場合は、これらの値は X、Y、および Z 直交座標になります。
4. 座標値の後には、その原子の原子タイプ番号が示されています。原子タイプ番号は、原子タイプ テーブルのファイル形式内に指定された、原子タイプ レコードのコードに対応します。詳細については、“[ファイル形式の原子タイプの編集](#)” ページ 233 を参照してください。
5. 原子タイプ番号の後には、原子の結合テーブルが示されています。ここには、その他の原子を 10 個まで指定できます。直交座標ファイルの結合テーブルは、シリアル番号または位置のいずれかによって並べられます。

シリアル番号によって示された結合テーブルでは、各原子のシリアル番号を使用して、その他の原子の結合テーブルに表示される番号が決定されます。そのため、シリアル番号はすべて一意である必要があります。

位置によって示される結合テーブルでは、ファイル内の原子の相対位置を使用して、その他の原子の結合テーブルに表示される各原子の番号が決まります。つまり、1 番目の原子の番号は 1 となり、2 番目の原子の番号は 2 となり、以下同様に続きます。

6. 同じ原子セットを異なる方法で表示するには、同じ原子を異なる座標系に対応させて、同じ数の行で原子の記述を入れ替えることができます。Chem3D は、追加された座標系のセットを使って、個別のビューを生成します。

Cambridge Crystal Data Bank ファイル

Cambridge Crystal Data Bank (CCDB) ファイルを読み込むことはできますが、ファイルを CCDB 形式で保存することはできません。Chem3D では、FDAT 形式の CCDB を使用しています。このファイル形式の仕様は

Cambridge Crystallographic Data Centre 発行の『Cambridge Structural Database, Version 1 File Specifications』の 26 ~ 42 ページに渡って説明されています。FDAT 形式の詳細については、上記の出版物を参照するか、Cambridge Crystallographic Data Centre に問い合わせてください。

Cambridge Crystal Data Bank 形式の仕様に記述されているように、2 つの原子間の距離がそれらの共有半径の合計より短い場合は、それらの原子間に自動的に結合が形成されます。結合次数は実際の距離と共有半径の合計の比率によって推定されます。モデル内の各原子の原子タイプは、結合次数、結合角、元素記号を元に判断されま

す。結合次数は、実際の距離と共有半径の合計との比率によって予測されます。結合次数、結合角、および原子記号を使用して、モデル内の原子の原子タイプを判断します。

結合タイプ	実際の距離または共有半径の合計
三重	0.81
二重	0.87
非局在化	0.93
単	1.00

内部座標ファイル

内部座標ファイル (INT Coords) は、各原子の配置のために使用する内部座標によって 1 つの分子を記述するテキスト ファイルです。シリアル番号は、ファイル中の原子の順番に対応しています。1 番目の原子はシリアル番号 1、2 番目の原子はシリアル番号 2 のようになります。

内部座標ファイル形式は、次のとおりです。

- 行 1 はコメント行です。Chem3D はこの行を無視します。これより下の行は、構築タイプ番号で始まります。
- 行 2 は、原点原子の構築タイプ番号です。
- 行 3 以降には、構築タイプ番号の後に、新しい原子の結合先の原子のシリアル番号、およびその原子までの距離が示されています。原点原子は、常に、ファイル内で最初の距離を定義する原子です。距離はすべてオングストローム単位で測定されます。
- 行 4 以降には、距離の後に、第 1 度を定義する原子のシリアル番号、新しく定義された原子間との角度、距離を定義する原子、および第 1 角度を定義する原子が示されています。角度はすべて度単位で測定されます。
- 行 5 以降には、第 1 角度の後に、第 2 角度を定義する原子のシリアル番号、第 2 角度の度数、第 2 角度のタイプを表す番号が示されています。第 2 角度のタイプが 0 の場合、第 2 角度は二面角:[新しい原子] - [距離を定義する原子] - [第 1 角度を定義する原子] - [第 2 角度を定義する原子] です。そうでない場合は、第 3 角度は結合角:[新しい原子] - [距離を定義する原子] - [第 2 角度を定義する原子] です。第 2 角度のタイプが 1 の場合、新しい原子は、3 つの定義原子との Pro-R/Pro-S 関係を使って定義されます。第 2 角度のタイプが -1 の場合は、Pro-S 関係を使って定義されます。

 **注意:** 後から配置した原子については、原子を配置できません。

次に、Chem3D で作成したシクロヘキサノールの内部座標出力ファイルの例を示します。

```

1
1 1 1.54146
1 2 1.53525 1 111.7729
1 1 1.53967 2 109.7132 3 -55.6959 0

```

```

1 4 1.53592 1 111.703 2 55.3112 0
1 3 1.53415 2 110.7535 1 57.0318 0
6 1 1.40195 2 107.6989 3 -172.6532 0
5 1 1.11742 2 109.39 4 109.39 -1
5 2 1.11629 1 109.41 3 109.41 1
5 2 1.11568 1 109.41 3 109.41 -1
5 3 1.11664 2 109.41 6 109.41 -1
5 3 1.11606 2 109.41 6 109.41 1
5 4 1.11542 1 109.41 5 109.41 1
5 4 1.11493 1 109.41 5 109.41 -1
5 5 1.11664 4 109.41 6 109.41 1
5 5 1.11617 4 109.41 6 109.41 -1
5 6 1.11664 3 109.41 5 109.41 1
5 6 1.11606 3 109.41 5 109.41 -1
21 7 0.942 1 106.8998 2 59.999 0
5 6

```

結合. 内部座標ファイルでは、結合は 2 つの方法で示されます。

1 番目は、原点原子を除く各原子と、距離を定義する原子間で自動的に作成される結合です。

2 番目は、モデル内に環が含まれる場合、ファイルの最後に閉環結合がリストされます。モデル内に閉環結合がある場合、最後の原子の定義の後に、空の行が追加されます。各閉環に対し、閉環結合を形成する 2 つの原子のシリアル番号が 1 つの行にリストされます。最初の原子のシリアル番号は 1、2 番目の原子のシリアル番号は 2、のようになります。前述のシクロヘキサノールの内部座標出力の例では、シリアル番号 5 および 6 がファイルの最後の行に示されているので、閉環結合は 5 番目と 6 番目の原子間にあります。

内部座標形式のファイルの最後に示されている結合が既に存在する場合（結合内の原子のうちの 1 つが、結合内のその他の原子を配置するのに使用されているため）、その結合はモデルから削除されます。これは、内部座標ファイル内の複数のフラグメントを表したいときに便利です。

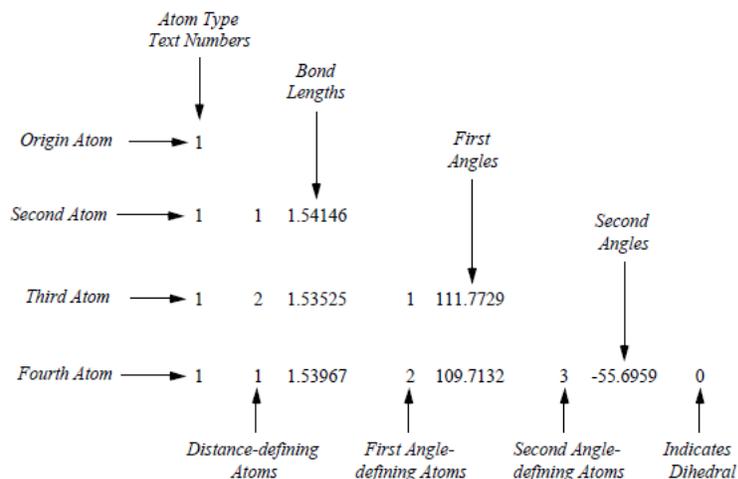


図 14.2: シクロヘキサノールの C(1) から C(4) に対する、内部座標ファイルのコンポーネント

このイメージにおいて、C(1) は原点原子であり、これは距離を定義する原子でもあります。C(2) は C(1) に接続し、その結合長は 1.54146 Å です。C(3) は C(2) に接続し、その結合長は 1.53525 Å、C(3)-C(2)-C(1) で定義された C(1) との結合角は 111.7729 度です。C(4) は C(1) に接続し、その結合長は 1.53967 Å、C(4)-C(1)-C(2) で定義された C(2) との結合角は 109.7132 度です。また、C(4) は C(3) との間に C(4)-C(1)-C(2)-C(3) で定義される二面体角 -55.6959 度を形成します。

内部座標ファイル形式で示されたシクロヘキサノールの C(1) から C(4) の部分を、構造図で表現すると次のようになります。

FORTTRAN 書式. 内部座標ファイル内のレコードを FORTRAN 書式で表すと、次のようになります。

行番号	説明	FORTTRAN 書式
コメント	無視	
原点原子		14
2 番目の原子		14, 1X, 13, 1X, F9.5
3 番目の原子		14, 2(1X, 13, 1X, F9.5)
4 番目から最後まで の原子		14, 3(1X, 13, 1X, F9.5), 14
空の行		
閉環原子		2(1X, 14)

MacroModel

MacroModel は、Columbia University, New York, N. Y. の Department of Chemistry で作成されました。MacroModel ファイル形式は、『MacroModel Structure Files version 2.0 マニュアル』に定義されています。次のファイルは、シクロヘキサノール モデルを表すサンプル ファイルです。

```

19 シクロヘキサノール

3 2 1 6 1 7 1 18 1 0 0 0 0 -1.396 0.3501 1.055 0
3 1 1 3 1 8 1 9 1 0 0 0 0 -0.455 -0.740 1.587 0
3 2 1 4 1 10 1 11 1 0 0 0 0 0.511 -1.222 0.497 0
3 3 1 5 1 12 1 13 1 0 0 0 0 1.302 -0.048 -0.10 0
3 4 1 6 1 14 1 15 1 0 0 0 0 0.372 1.0566 -0.62 0
3 1 1 5 1 16 1 17 1 0 0 0 0 -0.606 1.5251 0.459 0
41 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -2.068 -0.083 0.277 0
41 2 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1.053 -1.603 1.968 0
41 2 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.127 -0.340 2.451 0
41 3 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1.222 -1.972 0.925 0
41 3 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.058 -1.742 -0.30 0
41 4 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1.972 0.3806 0.679 0
41 4 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1.960 -0.413 -0.92 0
41 5 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.981 1.9214 -0.99 0
41 6 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1.309 2.2832 0.037 0
41 6 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.033 2.0317 1.272 0
41 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -2.052 0.7172 1.881 0
42 15 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.275 0.3749 -2.41 0
  
```

各行には、モデルに関する情報のフィールドを含むデータ レコードが表示されています。各フィールドは、スペースまたはタブで区切られています。行 1 には、2 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドはモデル内の原子数、2 番目のフィールドは分子名です。ファイルが Chem3D を使って作成された場合、分子名はファイル名と同じです。

1. 行 2 ~ 19 には、それぞれ 17 個のフィールドが含まれていて、1 つの原子についての情報と、その原子に付いている結合について説明します。

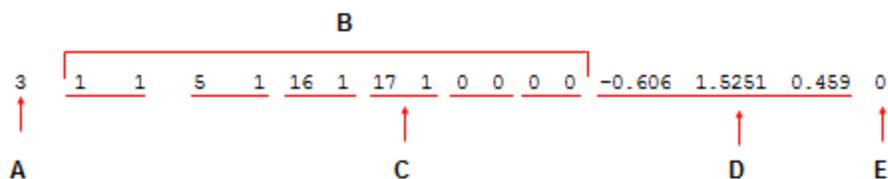


図 14.3: MacroModel ファイル形式では、それぞれの行で 1 つの原子の場所と結合について記述します。A) 原子の原子タイプ、B) 結合された原子の原子対、C) 各原子対の 1 番目の数値は結合された原子のシリアル番号、2 番目の数値は使用された結合タイプ、D) 原子の X、Y、Z 座標、E) 原子の色

 **注意:** Chem3D は原子の色を無視します。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、この色フィールドの値は 0 になります。

 **注意:** 原子タイプは、ユーザーによる定義が可能です。原子タイプの修正および作成方法については、“[ファイル形式の原子タイプの編集](#)” ページ 233 を参照してください。

FORTRAN 書式. MacroModel 形式の各レコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行番号	説明	FORTRAN 書式
1	原子数および分子名 (ファイル名)	1X, 15, 2X, A

MDL MolFile

MDL MolFile ファイル形式の定義は、『Journal of Chemical Information and Computer Science, Volume 32, Number 3』中の論文、「Description of Several Chemical Structure File Formats Used by Computer Programs Developed at Molecular Design Limited」(1992, pages 244–255) に記載されています。

 **注意:** MDL MACCS-II は MDL Information Systems, Inc. (Accelrys, Symyx を経由して現在は Dassault が所有) の製品です。

次に、Chem3D を使って作成した MDL MolFile ファイルの例を示します。このファイルは、シクロヘキサノールのモデルを表しています (参照のために行番号が追加されています)。

1	シクロヘキサノール		
2			
3			
4	19	19	0 0 0
5	-1.3488	0.1946	1.0316 C 0 0 0 0 0

6	-0.4072	-0.8965	1.5632	C	0	0	0	0	0
7	0.5621	-1.3777	0.4733	C	0	0	0	0	0
8	1.3507	-0.2045	-0.1277	C	0	0	0	0	0
9	0.4203	0.9011	-0.6518	C	0	0	0	0	0
10	-0.559	1.3696	0.4359	C	0	0	0	0	0
11	-0.3007	0.4266	-1.7567	O	0	0	0	0	0
12	-2.0207	-0.239	0.253	H	0	0	0	0	0
13	-2.0051	0.5617	1.8571	H	0	0	0	0	0
14	-1.0054	-1.7589	1.9444	H	0	0	0	0	0
15	0.1749	-0.4961	2.4273	H	0	0	0	0	0
16	1.27	-2.1277	0.9014	H	0	0	0	0	0
17	-0.0103	-1.8981	-0.3309	H	0	0	0	0	0
18	2.0207	0.225	0.6551	H	0	0	0	0	0
19	2.0084	-0.5688	-0.9529	H	0	0	0	0	0
20	1.0296	7659	-1.0161	H	0	0	0	0	0
21	-1.2615	2.1277	0.0139	H	0	0	0	0	0
22	0.0143	1.8761	1.2488	H	0	0	0	0	0
23	0.3286	0.2227	-2.4273	H	0	0	0	0	0
24	1	2	1	0	0	0			
25	1	6	1	0	0	0			
26	1	8	1	6	0	0			
27	1	9	1	1	0	0			
28	2	3	1	6	0	0			
29	2	10	1	0	0	0			
30	2	11	1	1	0	0			
31	3	4	1	0	0	0			
32	3	12	1	0	0	0			
33	3	13	1	6	0	0			
34	4	5	1	0	0	0			
35	4	14	1	1	0	0			
36	4	15	1	6	0	0			
37	5	6	1	1	0	0			

38	5	7	1 6 0 0
39	5	16	1 0 0 0
40	6	17	1 0 0 0
41	6	18	1 1 0 0
42	7	19	1 6 0 0

各行は、空白行、または化学構造についての一つまたは複数の情報フィールドを含むデータレコードを表しています。各フィールドは、スペースまたはタブで区切られています。

Chem3D によって使用される MDL MolFile 形式のフィールドについての説明は、次のとおりです。

- 行 1 は、分子名を含むヘッダーブロックです。ファイルが Chem3D を使って作成された場合、分子名はファイル名と同じです。
- 行 2 はヘッダー ブロックの続きで、空白行です。
- 行 3 はヘッダー ブロックの続きで、これも空白行です。
- 行 4 (カウント行) には、分子を説明する 5 個のフィールドが含まれています。1 番目のフィールドは原子数、2 番目のフィールドは結合数、3 番目のフィールドは原子リストの数、4 番目のフィールドは未使用のフィールド、5 番目のフィールドは立体化学構造です。

注意: Chem3D では、原子リストの数、未使用のフィールド、および立体化学構造は無視されます。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、これらのフィールドの値は常に 0 になります。

- 行 5 ~ 23 (原子ブロック) にはそれぞれ、分子内の原子について説明する 9 個のフィールドが含まれています。1 番目のフィールドは X 座標、2 番目のフィールドは Y 座標、3 番目のフィールドは Z 座標、4 番目のフィールドは原子記号、5 番目のフィールドは質量差、6 番目のフィールドは電荷、7 番目のフィールドは立体パリティ指定子、8 番目のフィールドは水素の数、9 番目のフィールドは中心を表します。

注意: Chem3D では、質量差、電荷、立体パリティ指定子、水素の数、および中心は無視されます。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、これらのフィールドの値は 0 になります。

- 行 24 ~ 42 (結合ブロック) にはそれぞれ、分子内の結合について説明する 6 個のフィールドが含まれています。1 番目のフィールドは結合元の原子の ID、2 番目のフィールドは結合先の原子の ID、3 番目のフィールドは結合タイプ、4 番目のフィールドは結合立体指定子、5 番目のフィールドは未使用のフィールド、6 番目のフィールドは位相コードを表します。

注意: Chem3D では、未使用のフィールドおよび位相コードは無視されます。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、これらのフィールドの値は 0 になります。

制限. MDL MolFile 形式で非積分電荷をサポートする方法は、Chem3D とは異なります。

たとえば、典型的な MDL MolFile 形式ファイルでは、ニトロ官能基 (NO₂) 内の 2 つの酸素は異なる電荷 (-1 および 0) を含みます。一方、Chem3D モデルでは、2 つの酸素原子は両方とも -0.500 の電荷を含みます。

FORTTRAN 書式. MDL MolFile 形式の各レコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行番号	説明	FORTRAN 書式
1	分子名 (ファイル名)	A
2	空白行	
3	空白行	
4	原子数、結合数	513
5-23	原子座標、原子記号	3F10. 4, 1X, A2, 513
24-42	結合 ID、結合元、結合先、結合タイプ	6(1X, I2)

MDL V3000 MolFile

拡張された (V3000) MolFile は通常の MolFile と、それに続く結合テーブル (Ctab) の本体を含む 1 つの MolFile 追加情報で構成されます。

 **注意:** ファイルには、以前の “V2000” バージョン表示ではなく “V3000” 表示が付けられます。

バージョンのほかに、ヘッダーには 2 つの変更点があります。

- 実際の行数に関係なく、追加の行数は常に 999 として記述されます。
- “次元コード” がより明示的に保持されます。このため、ゼロ以外の Z 座標が検出された場合、“2 次元” は 3 次元として解釈されますが、“3 次元” は実際には 3 次元を意味します。

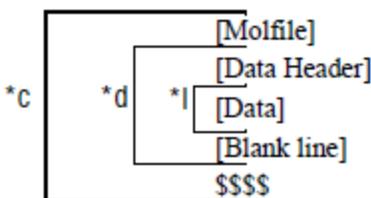
V2000 Molfile とは異なり、V3000 拡張 Rgroup Molfile のヘッダーは Rgroup Molfile 以外のヘッダーと同じです。

次の理由により、V3000 ファイル形式の方が古い V2000 より適しています。

- 新しい化学的物性またはオブジェクトをより適切にサポートし、拡張された立体化学構造をサポートするためです。
- 大きな構造式をサポートするために、固定フィールド幅が除去されています。(V2000 形式の固定制限およびバラバラの特性情報は、拡張された化学的表現にとって理想的ではありませんでした。)
- テンプレート ブロックでテンプレートの使用がサポートされるため、生体分子など大きな構造式を表すのに便利です。30 ページの「テンプレート ブロック」を参照してください。化学オブジェクトの特性情報が整理されています。
- 容易な解析のために、情報は自由形式でタグ付けが使用されています。
- BEGIN/END ブロックの使用により、適切な下位互換性を提供しています。

MDL SDF V3000

MDL SDF 形式は、MDL MOL ファイルをストリームのように拡張したもので、特に構造式の情報を対象としています。「SDF」は構造式データファイル (structure-data file) を表し、SDF ファイルが実際には MolFile (MDL Molfile) 形式を含んでいます。複数の化合物が 4 個のドル記号 (\$\$\$\$) で構成される行で区切られます。形式は次のとおりです。



各項の意味は次のとおりです。

- *| は各データ行を示します
- *d は各データ項目を示します
- *c は各化合物を示します

SDF 形式の機能は、関連するデータを含められることです。関連するデータ項目は次のように示されます。各分子構造の説明の後に、レコードが終了するまで、複数の関連するデータ フィールドが続きます。各レコードが「\$\$\$\$」で終了するまで、ファイルまたはストリームにレコードをいくつでも順に積み重ねることができます。ストリームの読み込み操作が EOF (ファイルの終り) を示した場合、それ以上のレコードはありません。

MSI MolFile

MSI MolFile は第 4 章に定義されています。Chem-Note™ アプリケーションのマニュアルの第 4 章「Chem-Note ファイル形式」(4-1 ~ 4-5 ページ) を参照してください。次に、Chem3D を使って作成したシクロヘキサノールの MSI MolFile ファイルの例を示します (説明をわかりやすくするため、行番号を追加してあります)。

: MSI Molfile 形式

```

1      ! Polygen 133
2
3      Polygen Corporation: ChemNote molecule file (2D)
4
5      * File format version number
6
7      90.0928
8
9      * File update version number
10
11     92.0114
  
```

```

7          * molecule name
8          cyclohexanol-MSI
9          empirical formula
10         Undefined Empirical Formula
11         * need 3D conversion?
12         0
13         * 3D displacement vector
14         0.000 0.000 0.000
15         * 3D rotation matrix
16         1.000 0.000 0.000 0.000 1.000 0.000 0.000 0.000 1.000
17         * 3D scale factor
18         0
19         * 2D scale factor
20         1
21         * 2D attributes
22         1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
23         * 3D attributes
24         0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
25         * Global display attributes
26         1 0 1 12 256
27         * Atom List
28         * Atom# Lbl Type x y z bits chrg ichrg frag istp lp chrl ring frad name seg grp FLAGS
29         1 C 10 0 0 -1 0.46 0.2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 C 1 0 -1 0 0 0 0 0 0
30         2 C 10 0 0 1.2 -1.1 0.2 0 0 0 0 0 0 0 0 C 2 0 -1 0 0 0 0 0 0
30         2 C 10 0 0 1.2 -1.1 0.2 0 0 0 0 0 0 0 0 C 2 0 -1 0 0 0 0 0 0
31         3 C 10 0 0 0.1 -1.6 0.7 0 0 0 0 0 0 0 0 C 3 0 -1 0 0 0 0 0 0

```

32	4	C	10	0	0	1.3	-1.1	0	0	0	0000000C40-1000000[C]
33	5	C	10	0	0	1.2	0.48	0	0	0	0 0 0 0 0 0 0 C 5 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[C]
34	6	C	10	0	0	0	1.01	-1	0	0	0 0 0 0 0 0 0 C 6 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[C]
35	7	O	45	0	0	0	2.42	-1	0	0	0 0 0 0 0 0 0 O 7 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[O]
36	8	H	8	0	0	0.6	2.72	-1	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 7 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
37	9	H	1	0	0	2.1	0.86	-1	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 8 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
38	10	H	1	0	0	1.4	0.86	0.8	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 9 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
39	11	H	1	0	0	1.1	-1.4	-1	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 10 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
40	12	H	1	0	0	2.2	-1.4	0.2	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 11 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
41	13	H	1	0	0	0	0.72	-2	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 12 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
42	14	H	1	0	0	0.1	-2.7	0.7	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 13 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
43	15	H	1	0	0	0.3	-1.3	1.7	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 14 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
44	16	H	1	0	0	-1	-1.5	-1	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 15 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
45	17	H	1	0	0	-2	-1.5	0.9	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 16 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
46	18	H	1	0	0	-1	0.85	1.2	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 17 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
47	19	H	1	0	0	-2	0.83	0	0	0	0 0 0 0 0 0 0 H 18 0 -1 0 0 0 0 0 0
											[H]
48											* Bond List
49											* Bond# bond_type atom1 atom2 cis/trans length locked ring Sh_type Sh_nr Qorder Qtopol Qs
50											1 1 1 2 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
51											2 1 1 6 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
52											3 1 1 18 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
53											4 1 1 19 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
54											5 1 2 3 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
55											6 1 2 16 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
56											7 1 2 17 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
57											8 1 3 4 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
58											9 1 3 14 0 0.000 0 0 0 0 [S] 0 0

```

59          10 1 3 15 0          0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
60          11 1 4 5 0          0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
61          12 1 4 11 0         0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
62          13 1 4 12 0         0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
63          14 1 5 6 0          0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
64          15 1 5 9 0          0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
65          16 1 5 10 0         0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
66          17 1 6 7 0          0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
67          18 1 6 13 0         0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
68          19 1 7 8 0          0.000 0 0 0 0 [S] 0 0
69          * Bond Angles
70          * bond1 bond2 angle locked
71          * Dihedral Angles
72          * at1-cons at1 at2 at2-cons angle locked
73          * Planarity data
74          * User data area
75          * End of File

```

MSI MolFile¹ 形式は、いくつかのセクションに分類できます。各セクションのヘッダーには、アスタリスク (*) が付いています。空白のラインにも、アスタリスク (*) が付いています。各行は、空の行、ヘッダー行、または化学構造についての情報フィールドを含むデータ レコードを表しています。各フィールドは、スペースまたはタブで区切られています。Chem3D によって使用される MSI MolFile 形式ファイルのフィールドについての説明は、次のとおりです。

参照用に、サンプル ファイルからの炭素 6 のフィールド値が括弧内に示されています。

1. 行 1 は、MSI MolFile 形式ファイルの標準のヘッダー行です。
2. 行 2 は、通常、ファイルを作成したアプリケーションを示しています。
3. 行 3 は、ファイル形式バージョン番号セクションのヘッダーです。
4. 行 4 は、ファイル形式バージョン番号を示しています。このフィールドの書式は、YY.MMDD (年月日) です。
5. 行 5 は、ファイル更新バージョン番号セクションのヘッダーです。
6. 行 6 は、ファイル更新バージョン番号を示しています。このフィールドの書式は、YY.MMDD (年月日) です。

¹Molecular Simulations MOLFILE (ChemNote) は、Molecular Simulations, Inc. の製品です。

7. 行 7 は、分子名セクションのヘッダーです。
 8. 行 8 は、フィールドの分子名を示しています。このフィールドは、ファイル名または「Undefined Name (未定義の名前)」を含みます。
 9. 行 9 は、実証的な分子式のヘッダーです。
 10. 行 10 は、実証的な分子式フィールドのヘッダーです。このフィールドは、実証的な分子式または「Undefined Empirical Formula (未定義の実証的な分子式)」を含みます。
 11. 行 11 ~ 24 は、それぞれ 3 次元から 2 次元への変換に関する情報を含みます。
 12. 行 25 は、Global 表示属性セクションのヘッダーです。
 13. 行 26 には、Global 表示属性を説明する 5 個のフィールド、線の太さ (1)、フォント スタイル (0)、書体 (1)、タイプ サイズ (12)、およびフォント (256) が含まれています。これらの値は、ファイルを生成しているプラットフォームによって異なります。
 14. 行 27 は、原子リスト セクションのヘッダーです。
 15. 行 28 は、原子リスト セクションに対して可能なすべてのフィールドを含みます。ChemBio3D Pro を使ってファイルを作成した場合、Atom#、Lbl、Type、および x、y、z フィールドが使用されます。
 16. 行 29 ~ 47 にはそれぞれ 28 個のフィールドがあり、構造式内の各原子についての情報を示しています。1 番目のフィールドは原子番号 (6)、2 番目のフィールドは原子ラベル (C)、3 番目のフィールドは原子タイプ (10)、4 番目と 5 番目のフィールドは 2 次元座標です。Chem3D を使ってファイルを作成した場合は、2 次元座標のフィールドの値は 0 になります。6 番目のフィールドは X 座標 (-0.113)、7 番目のフィールドは Y 座標 (1.005)、8 番目のフィールドには Z 座標 (-0.675) です。Chem3D を使ってファイルを作成した場合は、9 ~ 17 番目のフィールドは無視され、値が 0 になります。18 番目のフィールドには原子ラベル (C)、19 番目のフィールドには原子番号 (6) がもう一度示されます。20 番目のフィールドはセグメント フィールド、21 番目のフィールドは配位数フィールドで、22 番目のフィールドは無視されます。23 番目のフィールドは飽和フィールドです。原子が単結合、二重結合、または非局在結合で接続されている場合、このフィールドの値は 1 (飽和状態でない) で、それ以外の場合は、このフィールドの値は 0 になります。Chem3D を使ってファイルを作成した場合は、24 ~ 27 番目のフィールドは無視され、値が 0 になります。最後のフィールドには、原子ラベル (C) がもう一度示されます。
-  **注意:** *Molecular Simulations MolFile* 形式内の原子タイプは、ユーザーによる定義が可能です。詳細については、“[ファイル形式の原子タイプの編集](#)” ページ 233 を参照してください。
17. 行 48 は、結合リスト セクションのヘッダーです。
 18. 行 49 は、結合リスト セクションに対して可能なすべてのフィールドを含みます。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、Bond#、Bond_type、atom 1、atom 2、および cis/trans and Qorder フィールドが使用されます。
 19. 行 50 ~ 68 にはそれぞれ 4 個のフィールドがあり、構造式内の各結合についての情報を示します。1 番目のフィールドは内部結合数 (6)、2 番目のフィールドは結合タイプ (1)、3 番目と 4 番目のフィールドは結合している原子のシリアル番号 (原子 1 (2)、原子 2 (16))、5 番目のフィールドはシス/トランス指示子 (適用しない場合は 0) です。Chem3D を使ってファイルを作成した場合は、6 ~ 10 番目のフィールドは無視され、値が 0 になります。11 番目のフィールドは結合次数 ([S] は単結合を表します) です。Chem3D を使ってファイルを作成した場合は、12 番目と 13 番目のフィールドは無視され、値が 0 になります。
 20. 行 69 ~ 73 は、3D 変換に使用するセクションのヘッダーです。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、例に示すように、このセクションにはヘッダー名のみが含まれます。

21.行 74 は、User データ領域セクションのヘッダーです。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、例に示すように、このセクションにはヘッダー名のみが含まれます。

22.行 75 は、End of File を示すヘッダーです。

FORTRAN 書式. Molecular Simulations MolFile 形式の各レコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行番号	説明	FORTRAN 書式
29-47	原子リスト、フィールド値	I, 1X, A, 3 (1X, I), 3F9. 3, 1X, I, F4. 1, 7 (1X, I), 1X, A, I, 8(1X, I), "[", A, "] "
50-68	結合リスト、フィールド値	I, 4(1X, I), F9. 3, 4(2X, I), 1X, " [", A1, "]" ", 2(1X, I)

MOPAC

Chem3D では MOPAC Data-File 形式が使用されます。MOPAC Data-File 形式については、MOPAC マニュアル第 5 版の「MOPAC について」セクションの 1-5 ~ 1-7 ページ、および「立体構造の仕様」セクションの 3 ~ 5 ページを参照してください。MOPAC Data-File 形式の詳細については、上記の出版物を参照してください。次に示す表は、Chem3D で作成した シクロヘキサノールの MOPAC 出力ファイルの例です。

```

Line 1:
Line 2:      MyCyclohexanolModel.mop
Line 3:
Line 4a:  C      0      0      0      0      0 0 0 0 0
Line 4b:  C 1.54152      1      0      0      0 0 1 0 0
Line 4c:  C 1.53523      1 111.7747      1      0 0 2 1 0
Line 4d:  C 1.53973      1 109.7114      1 -55.6959 1 1 2 3
Line 4e:  C 1.53597      1 111.7012      1 55.3112 1 4 1 2
Line 4f:  C 1.53424      1 110.7535      1 57.03175 1 3 2 1
Line 4g:  O 1.40196      1 107.6989      1 -172.662 1 1 2 3
Line 4h:  H 1.11739      1 107.8685      1 62.06751 1 1 2 3
Line 4i:  H 1.11633      1 110.0751      1 -177.17 1 2 1 4
Line 4j:  H 1.11566      1 109.4526      1 65.43868 1 2 1 4

```

Line 4k:	H	1.11665	1	109.9597	1	178.6209	1	3	2	1
Line 4l:	H	1.1161	1	109.5453	1	-63.9507	1	3	2	1
Line 4m:	H	1.11542	1	109.4316	1	-66.0209	1	4	1	2
Line 4n:	H	1.11499	1	110.549	1	176.0838	1	4	1	2
Line 4o:	H	1.11671	1	109.93	1	-178.296	1	5	4	1
Line 4p:	H	1.11615	1	109.4596	1	64.43501	1	5	4	1
Line 4q:	H	1.11664	1	110.0104	1	-178.325	1	6	3	2
Line 4r:	H	1.11604	1	109.6082	1	64.09581	1	6	3	2
Line 4s:	H	0.94199	1	106.898	1	-173.033	1	7	1	2

次の図は、シクロヘキサノールの C(1) ~ C(4) に対し、Chem3D を使って作成した MOPAC 出力ファイルのコンポーネントを示しています。

	A	B	C	D	E	F	G	H
C(1)	C	0	0	0	0	0	0	0
C(2)	C	1.54152	1	0	0	0	0	1
C(3)	C	1.53523	1	111.7747	1	0	0	2
C(4)	C	1.53973	1	109.7114	1	-55.6959	1	1

MOPAC Data-File 形式の内部座標セクションには、モデル内の各原子に対して 1 行のテキストが含まれています。各行には、結合長、結合角、二面角、Action 整数、および接続性原子が含まれます。

上のイメージに示すように、C(1) は原点原子です。C(2) は C(1) に接続し、その結合長は 1.54152 Å です。C(3) は、結合長 1.53523 Å で C(2) に接続し、C(1) に対する結合角は 111.7747 度です。C(4) は、結合長 1.539734 Å で C(1) に接続し、C(2) に対する結合角は 109.711411 度です。また、C(4) は C(3) に対して -55.6959 度の二面角を形成しています。

各測定値の横にリストされた Action 整数は、MOPAC に対して次の指示をします。

- 1 この内部座標を最適化する
- 0 この内部座標を最適化しない
- 1 反応座標またはグリッド インデックス

Chem3D を使って MOPAC ファイルを作成するとき、ファイル内に記録された各原子に対し、0 以外の値を持つ結合長、結合角、二面角にそれぞれ Action 整数の 1 が割り当てられます。

FORTAN 書式. MOPAC Data-File 形式ファイルの各行の説明は、次のとおりです。

行番号	説明	Chem3D による 読み取り	Chem3D による 書き込み
1	計算手法のキーワード	いいえ	いいえ
2	分子のタイトル	いいえ	はい
3	コメント	いいえ	いいえ
4a~s	分子の内部座標	はい	はい
5	空の行、立体構造の定義の終結	はい	はい

MOPAC Data-File の内部座標データを含む各行の FORTRAN 書式は、
FORMAT(1X, 2A, 3(F12.6, I3), 1X, 3I4) です。

Protein Data Bank ファイル

Protein Data Bank ファイル形式 (Protein DB) は、『Protein Data Bank Atomic coordinate and Bibliographic Entry Format Description』(1985 年 1 月) の 3、14 ~ 15、および 17 ~ 18 ページから引用されたものです。

Protein Data Bank ファイルには、32 個の異なるレコード タイプを含むことができます。ただし、Chem3D で使用されるのは COMPND、ATOM、HETATM、および CONECT レコードのみで、Protein Data Bank ファイル内のその他のレコードは無視されます。COMPND レコードには、分子名と識別情報が含まれています。

ATOM レコードには、「標準」グループの原子座標レコードが含まれ、HETATM レコードには、「標準以外の」グループの原子座標レコードが含まれています。CONECT レコードには、原子の接続性レコードが含まれています。

 **注意:** COMPND レコードは Chem3D モデルのタイトルを含み、Protein Data Bank ファイル形式を使ってファイルを保存するときのみ、Chem3D によって作成されます。このレコードはファイルを開くときには使用されません。

次の図は、L-Alanine に対し、Chem3D を使って作成した Protein Data Bank 出力ファイルの例を示しています。

COMPND	Alanine.pdb				
HETATM	1	N	0	-0.962	1
HETATM	2	C	0	-0.049	0
HETATM	3	C	0.6	0.834	-1
HETATM	4	C	-2	0.834	1
HETATM	5	O	0.3	1.737	-1

HETATM	6	O	1.8	0.459	0
HETATM	7	H	0.9	-1.398	1
HETATM	13	H	-1	-1.737	1
HETATM	8	H	-1	-0.642	-1
HETATM	9	H	-2	1.564	0
HETATM	10	H	-1	1.41	1
HETATM	11	H	-2	0.211	1
HETATM	12	H	2.4	1.06	-1
CONNECT	1	2	7	13	
CONNECT	2	1	3	4	8
CONNECT	3	2	5	6	
CONNECT	4	2	9	10	11
CONNECT	5	3			
CONNECT	6	3	12		
CONNECT	7	1			
CONNECT	13	1			
CONNECT	8	2			
CONNECT	9	4			
CONNECT	10	4			
CONNECT	11	4			
CONNECT	12	6			
END					

ATOM または HETATM レコードには、レコード名の後に、記述されている原子のシリアル番号、元素記号、X、Y、および Z 直交座標が含まれています。

CONNECT レコードは、原子の接続性を示します。CONNECT レコードには、レコード名の後に、接続性が記述されている原子のシリアル番号、およびその原子に接続している 1 番目、2 番目、3 番目、4 番目の原子のシリアル番号が含まれています。

FORTRAN 書式

Protein Data Bank ファイル内の COMPND レコード形式は、次のとおりです。

列番号	説明	Chem3D で使用
1-6	レコード名 (COMPND)	はい

7-10	未使用	いいえ
11-70	分子名	はい

Protein Data Bank ファイル内の ATOM および HETATM レコード形式は、次のとおりです。

列番号	説明	Chem3D で使用
1-6	レコード名 (HETATM または ATOM)	はい
7-11	原子のシリアル番号	はい
12	未使用	いいえ
13-16	原子名 (元素記号)	はい
17	代替場所のインジケータ	いいえ
18-20	残基名	オプション
21	未使用	いいえ
22	直鎖の識別子	いいえ
23-26	残基のシーケンス番号	いいえ
27	残基挿入のコード	いいえ
28-30	未使用	いいえ
31-38	X 直交 Å 座標	はい
39-46	Y 直交 Å 座標	はい
47-54	Z 直交 Å 座標	はい
55-60	占用度	いいえ
61-66	温度係数	いいえ
67	未使用	いいえ
68-70	注釈番号	いいえ

Protein Data Bank ファイル内の CONECT レコード形式は、次のとおりです。

列番号	説明	Chem3D で使用
1-6	レコード名 (CONNECT)	はい
7-11	原子のシリアル番号	はい
12-16	最初に結合した原子のシリアル番号	はい
17-21	2 番目に結合した原子のシリアル番号	はい
22-26	最初に結合した原子のシリアル番号	はい
27-31	4 番目に結合した原子のシリアル番号	はい
32-36	水素結合、列 7 ~ 11 の原子は供与体です	いいえ
37-41	水素結合	いいえ
42-46	塩橋、列 7 ~ 11 の原子は負の電荷を持ちます	いいえ
47-51	水素結合、列 7 ~ 11 の原子は受容体です	いいえ
52-56	水素結合	いいえ
57-61	塩橋、列 7 ~ 11 の原子は正の電荷を持ちます	いいえ

Protein Data Bank ファイル形式で使用されるレコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行の説明	FORTRAN 書式
COMPND	'COMPND' , 4X, 60A1
ATOM	'ATOM' , 2X, I5, 1X, A4, 1X, A3, 10X, 3F8. 3, 16X
HETATM	'HETATM' , I5, 1X, A4, 14X, 3F8. 3, 16X
CONNECT	'CONNECT' , 5I5, 30X

ROSDAL

ROSDAL (Representation of Organic Structures Description Arranged Linearly) Structure Language¹ ファイル形式は、MOLKICK のマニュアルの付録 C 「Rosdal Syntax」の 91 ~ 108 ページに定義されています。Rosdal 形式は主に、Beilstein Online Database でのクエリ検索に使用されます。Rosdal 形式ファイルは書き出し専用です。次に、Chem3D を使って作成したシクロヘキサノールの Rosdal 形式ファイルの例を示します。

```
1-2-3-4-5-6, 1-6, 2-7H, 3-8H, 4-9H, 5-10H, 6-11H, 1-12O-13H, 1-14H, 2-15H, 3-16H, 4-17H, 5-18H, 6-19H. @
```

SMD

Standard Molecular Data²(SMD) ファイル形式は、『SMD File Format version 4.3 マニュアル』(1987 年 2 月 4 日付)に定義されています。次に、Chem3D を使って作成したシクロヘキサノールの SMD ファイルの例を示します(説明をわかりやすくするため、行番号が追加してあります)。

```
Line 1 >STRT Cyclohexane
Line 2 DTCR ChemBio3D 00000 05-MAY-92 12:32:26
Line 3 >CT Cyclohexan 00039
Line 4 19 19 (A2,5I2) (6I3)
Line 5 C 0 0 0
Line 6 C 0 0 0
Line 7 C 0 0 0
Line 8 C 0 0 0
Line 9 C 0 0 0
Line 10 C 0 0 0
Line 11 H 0 0 0
Line 12 H 0 0 0
Line 13 H 0 0 0
Line 14 H 0 0 0
Line 15 H 0 0 0
Line 16 O 0 0 0
```

¹ROSDAL は Softron 社の製品です。

²SMD 形式 - H. Bebak AV-IM-AM Bayer AG

Line 17	H	0	0	0
Line 18	H	0	0	0
Line 19	H	0	0	0
Line 20	H	0	0	0
Line 21	H	0	0	0
Line 22	H	0	0	0
Line 23	H	0	0	0
Line 24	1	2	1	
Line 25	1	6	1	
Line 26	1	12	1	
Line 27	1	14	1	
Line 28	2	3	1	
Line 29	2	7	1	
Line 30	2	15	1	
Line 31	3	4	1	
Line 32	3	8	1	
Line 33	3	16	1	
Line 34	4	5	1	
Line 35	4	9	1	
Line 36	4	17	1	
Line 37	5	6	1	
Line 38	5	10	1	
Line 39	5	18	1	
Line 40	6	11	1	
Line 41	6	19	1	
Line 42	12	13	1	
Line 43				>CO ANGSTROEM 0020
Line 44	4	(3110)		
Line 45	-6903	13566	-4583	
Line 46	-14061	808	125	
Line 47	-4424	-8880	7132	
Line 48	7577	-12182	-1855	

Line 49	14874	594	-6240
Line 50	5270	10234	-13349
Line 51	-18551	-4300	-8725
Line 52	-9815	-18274	9852
Line 53	4047	-17718	-10879
Line 54	19321	5600	2685
Line 55	10636	19608	-16168
Line 56	-2794	21139	6600
Line 57	2876	15736	11820
Line 58	-14029	20018	-10310
Line 59	-22477	3450	6965
Line 60	-806	-4365	16672
Line 61	14642	-18918	3566
Line 62	23341	-2014	-13035
Line 63	1740	5536	-22837

各行は、空の行、ブロック ヘッダー行、または化学構造についての複数の情報フィールドを含むデータ レコードを表しています。SMD 形式では、情報をいくつかのブロックに分類できます。各ブロックのヘッダーは、> 記号で始まります。各フィールドは、スペースまたはタブで区切られています。

Chem3D によって使用される SMD 形式ファイルのフィールドについての説明は、次のとおりです。

1. 行 1 は、STRT という名前のブロックのヘッダーです。このブロックは分子名を示しています。ファイルが Chem3D を使って作成された場合、分子名はファイル名と同じです。
2. 行 2 は、DTCR という名前のブロックのヘッダーです。この行には、ファイルを作成したアプリケーション名、およびファイルが作成された日時が示されています。
3. 行 3 は、化合物の結合テーブルを含む CT という名前のブロックのヘッダーです。CT の後に表示されている 10 文字のテキストは、結合テーブルを示しています。Chem3D を使ってファイルを生成した場合、結合テーブルを示すテキストはファイル名と同じになります。最後に、CT ブロック内に含まれるレコード数（上の例では、39 個）が示されています。
4. 行 4 は CT ブロックの一部で、4 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは原子数、2 番目のフィールドは結合数を示しています。また、3 番目のフィールドは原子数を FORTRAN 書式で表したもの、4 番目のフィールドは結合数を FORTRAN 書式で表したものです。
5. CT ブロック内の行 5 ~ 23 には、原子を表す 4 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは元素記号（1 文字目は大文字、2 文字目は小文字）です。2 番目のフィールドは、原子に付加している水素の総数、3 番目のフィールドは、原子についての立体構造情報、4 番目のフィールドは、原子の形式電荷を示しています。

 **注意:** Chem3D を使ってファイルが作成された場合、水素の総数、立体構造情報、および形式電荷のフィールドは無視され、値が常に 0 になります。

6. CT ブロック内の行 24 ~ 42 には、2 つの原子間の結合を表す 3 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは、結合が開始される原子のリアル番号、2 番目のフィールドは、結合先の原子のシリアル番号、3 番目のフィールドは、結合次数を示しています。
7. 行 43 は、C0 という名前のブロックのヘッダーです。このブロックには、CT ブロック内のすべての原子の直交座標、および座標タイプ（この例では、Angstroms）が示されています。また、この行の最後に、C0 ブロック内の行数（この例では、20）が示されています。
8. 行 44 には、2 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは、以下の行に含まれる座標を、行 43 に指定された座標タイプに変換する際に使用される指数を示しています。2 番目のフィールドは、原子の座標の FORTRAN 書式を示しています。
9. 行 45 ~ 65 には、それぞれ、CT ブロック内の原子の直交座標を表す 3 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは X 座標、2 番目のフィールドは Y 座標、3 番目のフィールドは Z 座標を表しています。

SYBYL MOL ファイル

SYBYL MOL ファイル形式 (SYBYL) は、『1989 SYBYL Programming Manual』の第 9 章「SYBYL ファイル形式」の 9-1 ~ 9-5 ページに定義されています。

次の表に、Chem3D を使って作成した SYBYL 形式のファイルの例を示します。このファイルは、シクロヘキサノールのモデルを表しています。

```

19 MOL Cyclohexanol0

 1  1  1.068  0.3581 -0.7007C
 2  1 -0.207  1.2238 -0.7007C
 3  1 -1.473  0.3737 -0.5185C
 4  1  1.1286 -0.477  0.5913C
 5  1 -0.139 -1.324  0.7800C
 6  1 -1.396 -0.445  0.7768C
 7  8  2.1708  1.2238 -0.7007O
 8 13  1.0068 -0.343 -1.5689H
 9 13 -0.284  1.7936 -1.6577H
10 13 -0.147  1.9741  0.1228H
11 13 -2.375  1.032 -0.4983H
12 13 -1.589 -0.314 -1.3895H
13 13  1.2546  0.202  1.4669H
14 13  2.0091 -1.161  0.5742H
15 13 -0.077 -1.893  1.7389H
  
```

```

16 13 -0.21 -2.076 -0.0419H
17 13 -2.308 -1.081 0.8816H
18 13 -1.372 0.2442 1.6545H
19 13 2.9386 0.6891 -0.8100H

19 MOL

1 1 2 1
2 1 4 1
3 1 7 1
4 1 8 1
5 2 3 1
6 2 9 1
7 2 10 1
8 3 6 1
9 3 11 1
10 3 12 1
11 4 5 1
12 4 13 1
13 4 14 1
14 5 6 1
15 5 15 1
16 5 16 1
17 6 17 1
18 6 18 1
19 7 19 1

0 MOL

```

次のイメージは、シクロヘキサノールの C(6) および結合 3 に対し、Chem3D を使って作成した SYBYL 出力ファイルのコンポーネントを示しています。

SYBYL MOL ファイル形式は、次のとおりです。

1. SYBYL MOL ファイル内の最初のレコードには、モデル内の原子数、「MOL」というテキスト、分子名、および分子の中心が含まれています。
2. 原子のレコード（シクロヘキサノールの例では、行 2 ~ 20）では、列 1 に原子の ID、列 2 に原子タイプ、列 3 ~ 5 にその原子の X、Y、および Z 直交座標を示しています。
3. 最後の原子レコードの次のラインには、分子内の結合数と「MOL」というテキストが示されています。

4. 結合レコード（シクロヘキサノールの例では、行 22 ~ 40）では、列 1 に結合番号、列 2 に結合が開始する原子（結合元）の ID、列 3 に結合が終結する原子（結合先）の ID を示しています。結合レコードの最後の列は、結合タイプです。ファイルの最後の行は、分子内の機能レコードの数を含む Number of Features レコードです。Chem3Dでは、この情報は使用されません。

FORTRAN 書式. SYBYL MOL ファイル形式の各レコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行の説明	FORTRAN 書式
原子数/ファイル名	I4, 1X, 'MOL', 20A2, 11X, I4
原子レコード	2I4, 3F9.4, 2A2
結合数レコード	I4, 1X, 'MOL'
結合レコード	3I4, 9X, I4
機能数レコード	I4, 1X, 'MOL'

SYBYL MOL2 ファイル

SYBYL MOL2¹ ファイル形式（SYBYL2）では、SYBYL の分子をポータブルに表します。ファイルは ASCII 形式で、分子の構築に必要なすべての情報が含まれます。次に示すシクロヘキサノールのサンプル ファイルは、Chem3D を使って作成されました。

```

          ****
    19    19    1    0    0
SMALL
USER_CHARGES
@<TRIPOS>ATOM
    1    C    00.8340  -0.2126  0.9718    C.3  1  ****  0.0000
    2    C    0.5916  -1.3023  -0.0691    C.3  1  ****  0.0000
    3    C   -0.8165  -1.2202  -0.6525    C.3  1  ****  0.0000
    4    C   -1.1138   0.1685  -1.2118    C.3  1  ****  0.0000
    5    C   -0.8714   1.2582  -0.1708    C.3  1  ****  0.0000
    6    C    0.5366   1.1760   0.4125    C.3  1  ****  0.0000

```

¹SYBYL は TRIPOS の製品です。

7	O	2.1753	-0.2616	1.3768	O.3	1	****	0.0000
8	H	0.1512	-0.3949	1.8316	H	1	****	0.0000
9	H	1.3306	-1.1849	-0.8930	H	1	****	0.0000
10	H	0.7044	-2.2910	0.4295	H	1	****	0.0000
11	H	-0.9114	-1.9670	-1.4722	H	1	****	0.0000
12	H	-1.5439	-1.4296	0.1636	H	1	****	0.0000
13	H	-0.4530	0.3535	-2.0880	H	1	****	0.0000
14	H	-2.1863	0.2022	-1.5074	H	1	****	0.0000
15	H	-1.0049	2.2529	-0.6521	H	1	****	0.0000
16	H	-1.6002	1.1157	0.6583	H	1	****	0.0000
17	H	1.2732	1.4072	-0.3894	H	1	****	0.0000
18	H	0.6114	1.9100	1.2458	H	1	****	0.0000
19	H	2.2933	0.4198	2.0164	H	1	****	0.0000
@<TRIPOS>BOND								
1	1	2	1					
2	1	6	1					
3	1	7	1					
4	1	8	1					
5	2	3	1					
6	2	9	1					
7	2	10	1					
8	3	4	1					
9	3	11	1					
10	3	12	1					
11	4	5	1					
12	4	13	1					
13	4	14	1					
14	5	6	1					
15	5	15	1					
16	5	16	1					
17	6	17	1					
18	6	18	1					
19	7	19	1					

各行は、空の行、セクション ヘッダー、または化合物についての複数の情報フィールドを含むデータ レコードを表しています。SYBYL MOL2 形式では、情報がいくつかのセクションに分類されます。レコード タイプ インジケータ (RTI) によって、分子に関する情報がいくつかのセクションに分割されます。RTI の前には、常に @ 記号が付いています。各フィールドは、スペースまたはタブで区切られています。

Chem3D で使用される SYBYL MOL2 形式ファイル内のフィールドは、次のとおりです。

1. 行 1 はコメント フィールドです。コメント行のテキストの前には、# 記号を付けます。名前: は、分子名を示すフィールドです。ファイルが Chem3D を使って作成された場合、分子名はファイル名と同じです。
2. 行 2 は空の行です。
3. 行 3 「@<TRIPOS>MOLECULE」はレコード タイプ インジケータ (RTI) で、ファイル内の分子に関する情報を含むセクションが始まることを示します。
 - ☑ **注意:** SYBYL MOL2 形式には多数の RTI がありますが、Chem3D では、@<TRIPOS>MOLECULE、@<TRIPOS>ATOM、および @<TRIPOS>BOND のみを使用されます。
4. 行 4 は、分子名です。行 4 の名前と行 1 の名前は同じです。
5. 行 5 には、分子に関する情報を表す 5 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは原子数、2 番目のフィールドは結合数、3 番目のフィールドは部分構造数、4 番目のフィールドは機能数、5 番目のフィールドはセット数です。
 - ☑ **注意:** Chem3D では、部分構造数、機能数、およびセット数は無視されます。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、これらのフィールドの値は 0 になります。
6. 行 6 は分子タイプです。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、このフィールドには「SMALL」と示されます。
7. 行 7 は、分子に関する電荷タイプです。Chem3D を使ってファイルを作成した場合、このフィールドには「NO_CHARGES」と示されます。
8. 行 8 (上の例では、空) には、分子に関連する内部 SYBYL ステータス ビットが含まれることがあります。
9. 行 9 (上の例では、空) には、分子に関連するコメントが含まれることがあります。
 - ☑ **注意:** 分子に関連するステータス ビットはないが、行 9 にコメントがある場合、行 8 に 4 つのアスタリスク (*) が表示されます。
10. 行 10 の「@<TRIPOS>ATOM」は、レコード タイプ インジケータ (RTI) で、分子に関する各原子の情報を含むセクションが始まることを示します。
11. 行 11 ~ 29 には、それぞれ原子についての情報を表す 6 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは原子 ID、2 番目のフィールドは原子名、3 番目のフィールドは X 座標、4 番目のフィールドは Y 座標、5 番目のフィールドは Z 座標、6 番目のフィールドは原子タイプです。
 - ☑ **注意:** 原子タイプは、ユーザーによる定義が可能です。原子タイプの修正および作成方法については、「[ファイル形式の原子タイプの編集](#)」ページ 233 を参照してください。
12. 行 30 の「@<TRIPOS>BOND」は、レコード タイプ インジケータ (RTI) で、分子に関する結合の情報を含むセクションが始まることを示します。

13.行 31 ~ 49 には、それぞれ結合についての情報を表す 4 つのフィールドがあります。1 番目のフィールドは結合 ID、2 番目のフィールドは結合元原子の ID、3 番目のフィールドは結合先原子の ID、4 番目のフィールドは結合タイプです。

FORTRAN 書式. SYBYL MOL2 ファイル形式の各レコードの FORTRAN 書式は、次のとおりです。

行番号	説明	FORTRAN 書式
1	分子名 (ファイル名)	"# ", 5X, "Name:", 1X, A
5	原子数/結合数	4(1X, I2)
11-29	原子タイプ、原子名、座標、ID	14, 6X, A2, 3X, 3F9. 3, 2X, A5
31-49	結合 ID、結合元、結合先、結合タイプ	3I4, 3X, A2

書き出しファイル形式

次の表は、Chem3D がサポートするすべての化学ファイル形式を示しています。

ファイル形式	名前	拡張子
Alchemy	Alchemy	.alc、.mol
Cartesian Coordinate	Cart Coords 1	.cc1
	Cart Coords 2	.cc2
CCDB	Cambridge Crystallographic Database	.ccd
Chem3D		.c3xml、.c3d
Chem3D template		.c3t
ChemDraw	ChemDraw	.cdx、.cdxml
Connection Table	Conn Table	.ct、.con
GAMESS Input	GAMESS Input	.inp
Gaussian Checkpoint		.fchk、.fch
Gaussian Cube		.cub
Gaussian Input	Gaussian Input	.gjc、.gjf

ファイル形式	名前	拡張子
Internal Coordinates	Int Coords	.int
MacroModel	MacroModel	.mcm、.dat、.out
Maestro	Maestro	*.mae
Molecular Design Limited MolFile	MDL MolFile	.mol
MSI ChemNote	MSI ChemNote	.msm
MOPAC input file	MOPAC	.mop、.dat、.mpc、.2mt
MOPAC graph file		.gpt
Protein Data Bank	Protein DB	.pdb、.ent
ROSDAL	Rosdal	.rdl
Standard Molecular Data	SMD File	.smd
SYBYL MOL	SYBYL	.sm1
SYBYL MOL2	SYBYL2	.sm2、.ml2

異なる形式、名前、または保存場所でモデルを保存するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Save As** をクリックします。Save File ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 保存したいファイルの名前、フォルダ、場所などを指定します。
3. モデルを保存するファイル形式を選択します。
4. **Save** をクリックします。

別のファイル形式でファイルを保存すると、その形式で保存可能な情報のみが保存されます。たとえば、MDL MolFile としてファイルを保存すると、ドット面、色、原子ラベルなどの情報は失われます。

印刷形式のファイル形式

ここで説明するファイル形式は、モデルを画像として読み込んだり、書き出すために使用できます。画像は、デスクトップ パブリッシング ソフトウェアやワープロで使用できます。

画像のファイル形式の特徴

- 透明な OLE のコピーと貼り付けができる
- 最大 1,200 DPI までのビットマップ画像を保存できる

- JPEG 品質（圧縮）を 0 ~ 100% まで調整できる
- ムービーを、アニメーションの GIF 形式、マルチページの TIFF 形式、または AVI 形式で保存できる

規定値を設定するは、Preferences ダイアログ ボックスの新しい **Pictures** タブを使用します。

保存するときに Save As ダイアログ ボックスのオプションを使用することで、デフォルトは簡単に上書きできません。

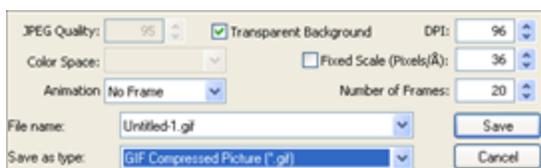


図 14.4: Save as GIF ダイアログ ボックス

グラフィックのファイル形式では、CxImage® (zlib ライセンス下にあるオープン ソースのツールセット) を使用しています。¹

WMF と EMF. Chem3D は Windows の Metafile ファイル形式および Enhanced Metafile ファイル形式をサポートします。(化学分子モデルのファイル形式に対し) グラフィック形式で読み込むことができるのは、この 2 つだけです。また、これらのファイル形式を書き出すこともできます。EMF ファイル形式を書き出すには File メニューの **Save As...** コマンドまたはクリップボードを使用し、WMF ファイル形式を書き出すにはクリップボードを使用します。詳細については、“**静的な画像としてのコピー**” ページ 31 を参照してください。Windows 2000 または Windows XP をご使用の場合には、EMF ファイルとして書き出したモデルでは背景が透明色に設定されません。WMF および EMF ファイル形式は Microsoft Word for Windows などのアプリケーションでサポートされています。

注意: Chem3D で EMF ファイルとして書き出したモデルには、構造に関する情報は埋め込まれません。前のバージョンで作成した EMF ファイルを Chem3D で開いて構造の作業を行うことはできますが、旧バージョンの Chem3D 8.0 で保存した EMF ファイルにはグラフィック情報のみが含まれ、Chem3D で開くことはできません。

BMP. Bitmap ファイル形式は、Chem3D 画像のビットマップ情報を保存します。Bitmap ファイル形式を使用すれば、Chem3D 画像を、Microsoft Word for Windows など、ビットマップをサポートしている他のアプリケーションに移すことができます。

EPS. PostScript ファイル形式は、モデルを Encapsulated Postscript (EPS) ファイルとして保存します。EPS ファイルは、Chem3D 画像を、スケーラブル PostScript ファイルとして取り込んでいる ASCII テキスト ファイルです。EPS ファイルは、PageMaker などのアプリケーションを使って開くことができます。EPS ファイルは、Macintosh、Windows、UNIX など各種の OS の間で移動することができます。

TIF. Tagged Image File Format (TIFF) は、モデルのビットマップ画像をバイナリ データで記述したファイルです。TIFF は、一般にデスクトップ パブリッシング アプリケーションを異なる機器間で読み込む際にグラ

¹[CxImage: Copyright © 2001 - 2004, David Pizzolato](#)

フィックを保存するために使用される高解像度のファイル形式です。TIFF 画像の保存には、解像度、色、圧縮に関してさまざまなオプションが利用できます。TIFF 画像ファイルはサイズが大きくなりがちなので、適切なオプションを選ぶことが大切です。

ファイルを TIFF 形式で保存する場合には、Save As ダイアログ ボックスにオプション ボタンが表示されま

す。

保存オプションを指定するには、次の操作を行ってください。

1. Options をクリックします。

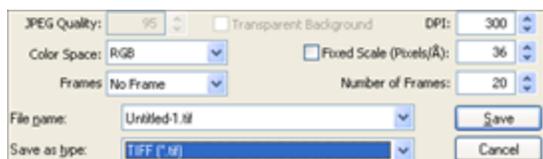


図 14.5: TIFF Options ダイアログ ボックス

2. 解像度を選びます。ファイルは、解像度の 2 乗の割合で大きくなります。

3. 次のうち、適切なカラー オプションを選びます。

目的	選択するオプション
オブジェクトの強制的な白黒画像表示	Monochrome
カラー エンコード方式のコンピュータ モニタ スタイルを使用したカラーの保存	RGB Indexed
印刷タイプのカラー エンコード方式の使用	CMYK Contiguous 色を非連続的に保存します。次に例を示します。CMYKCMYK.PackBits 方式の圧縮はこのタイプに対する圧縮を提供しません。

注意: ドキュメント中のオブジェクトが白黒の場合には、カラー オプションの設定にかかわらず、白黒として保存されます。なお、他のアプリケーションから読み込んだ画像を白黒で印刷する場合は、Color オプションを Monochrome に設定する必要があります。

4. 圧縮オプションを選択します。

PackBits. 情報の中で繰り返しの部分をコード化することでファイルのサイズを圧縮する(たとえば、カラー情報、CCCCMMMMYYYYYKKKKK を、C5M5Y5K5 というように情報を表現する) ことによってこの圧縮方法は、より小さなサイズのファイルを作成します。

CCITT Group 3 または CCITT Group 4. 画像をファックス送信します。

GIF、PNG、および JPG. Chem3D モデルをワールド ワイド ウェブ (WWW) 上で公開する場合は、GIF (Graphics Interchange Format)、PNG (Portable Network Graphics)、または JPEG ファイル形式を使用します。これら

のファイル形式はそれぞれ、圧縮アルゴリズムを使用してファイルのサイズを縮小します。GIF、PNG および JPG ファイルを読み込むことができるアプリケーションには、Netscape Communicator や Microsoft Internet Explorer があります。

GIF 形式のグラフィック ファイルでは、モデルのウィンドウ背景色を透明色として使うことができます。

 **注意:** ファイルを保存するときの Chem3D での画像のサイズが、Web ページに表示される画像のサイズになります。“Fit Model to Window” 作成オプションをオンにすると、Chem3D 内でウィンドウのサイズを変更してモデルのサイズを変更し、保存することができます。

3DM. QuickDraw 3D MetaFile (3DM) ファイル形式は、モデルを 3 次元のオブジェクト データで収めています。3DM ファイルは数多くの 3 次元モデル作成アプリケーションに読み込むことができます。また、3DM ファイルは、Macintosh と Windows の間で転送することもできます。

AVI. アクティブ モデルで作成したムービーを保存するファイル形式です。 作成されたムービー ファイルは、AVI ファイル形式をサポートするアプリケーションに転送できます。

書き出しのファイル形式

下記のファイル形式は、Chem3D 以外の化学分子モデル作成アプリケーションにモデルを書き出す場合に使用されます。読み込みも、大半の形式でサポートされています。

Alchemy

ALC ファイル形式を使用すると、Alchemy® などの TRIPOS® アプリケーションとインターフェイスをとることができます。これは、入力のみをサポートされています。

直交座標

現在のモデルに X、Y、Z 直交座標を読み込むまたは書き出すには、直交座標ファイル形式の 1 (.cc1) または 2 (.cc2) を使います。

ファイルを直交座標ファイルとして保存する場合には、Save As ダイアログ ボックスにオプション ボタンが表示されます。

保存オプションを指定するには、次の操作を行ってください。

1. **Save As** をクリックします。
2. Save As ダイアログ ボックスで直交座標ファイル形式 (.cc1 または .cc2) を選択します。
3. 以下のオプションから選択します。

By Serial Number. シリアル番号付きの各原子の結合テーブルをファイルに含めます。

By Position. 位置によって隣接する原子を記述する、各原子の結合テーブルをファイルに含めます。

Missing. 結合テーブルをファイルに含めません。

Include Serial Numbers. シリアル番号をファイルに含めます。

Include Atom Type Text Numbers. 原子タイプ番号をファイルに含めます。

Save All Frames. モデルの各表示への内部座標をファイルに含めます。

Connection Table

Chem3D は、原子タイプの原子記号と結合次数を割り出すために、結合テーブルの原子記号と結合次数を使用します。結合テーブルのファイル形式には、CT および CON の 2 つがあります。CON ファイル形式は、読み込みのみ

サポートされています。

ファイルを結合テーブルとして保存する場合には、Save As ダイアログ ボックスに、Options ボタンが表示されます。

保存オプションを指定するには、次の操作を行ってください。

1. **Save As** をクリックします。
2. Save As ダイアログ ボックスで、Conn Table ファイル形式を選択します。
3. 以下のオプションから選択します。

- 1 **Blank Line.** ファイル上部に空白行を追加します。
- 2 **Blank Lines.** ファイル上部に 2 行の空白行を追加します。
- 3 **Blank Lines.** ファイル上部に 3 行の空白行を追加します。

Gaussian Input

Gaussian 計算を行うために作成されたモデルとのインターフェイスとして、Gaussian Input (GJC、GJF) ファイル形式を使います。どちらのファイル形式もモデルの読み込みに使用できます。入力ファイルの Molecule Specification のセクションだけが保存されます。Chem3D で特に指定されていない原子の場合、電荷は既定で 0 として書き込まれ、スピンの多重度は 1 として書き込まれます。Gaussian Input ファイルはテキスト エディタを使用して編集でき、キーワードの追加、最適化フラグの変更などを行えます。このファイルを実行するには、Chem3D 内で Run Gaussian Input file コマンドを使用するか、または Gaussian を直接使用します。

Gaussian Checkpoint

Gaussian Checkpoint (FCHK、FCH) ファイルは、Gaussian 計算の結果を保存します。Gaussian Checkpoint には、分子の最終的な立体構造、電子構造（エネルギー レベルを含む）その他の特性が記録されています。

Gaussian Checkpoint ファイルは、読み込みのみサポートされています。

Chem3D は、Checkpoint ファイルに保存されている原子軌道やエネルギー レベルを表示します。Cubegen がインストールされている場合には、分子表面は Checkpoint ファイルから計算されます。

Gaussian Cube

Gaussian Checkpoint ファイルで Cubegen を実行すると Gaussian Cube (CUB) ファイルが得られます。

Gaussian Cube (CUB) ファイルにはグリッド データやモデルの座標に関する情報が保存されています。

Gaussian Cube ファイルは、読み込みのみサポートされています。

Chem3D は、ファイルの記述にある表面を表示します。ファイルに、複数の表面が保存されている場合には、最初の表面だけが表示されます。**Surfaces** メニューを使って、他の表面を表示させることもできます。

内部座標

内部座標 (INT) ファイルは、各原子の配置のために使用する内部座標によって 1 つの分子を記述するテキスト ファイルです。シリアル番号は、ファイル中の原子の順番に対応しています。1 番目の原子はシリアル番号 1、2 番目の原子はシリアル番号 2 です。内部座標 (INT) ファイルは読み込みと書き出しの両方で使用できます。Z-Matrix では、後から配置した原子や、より大きなシリアル番号の原子を配置することはできません。Internal Coordinates Options ダイアログ ボックスで 2 番目または 3 番目のオプションを選択した場合、一貫性のある Z-Matrix が作成されるかどうかはモデルのシリアル番号の付け方によって決まります。作成しようとする Z-

Matrix のシリアル番号が連続した数字でなければメッセージが表示されます。また、一貫性のある Z-matrix を作成するためにモデルの原子のシリアル番号を割り当て直す必要がある場合にも、警告メッセージが表示されません。

Int Coords ファイル形式を選択する場合は、いくつかオプションがあります。保存オプションを指定するには、次の操作を行ってください。

1. **Save As** をクリックします。
2. Save As ダイアログ ボックスで、Int. Coords ファイル形式を選択します。
3. 以下のオプションから選択します。

Use Current Z-matrix. モデルの Internal Coordinates テーブルに記述されている Z-Matrix を使用したモデルを保存します。

Only Serial Numbers; Bond and Dihedral Angles. Z-Matrix を作成し、モデル中の原子の現在のシリアル番号の順序を、その Z-Matrix に保存します。原子の配置に、Pro-R/Pro-S および二面角が使用されます。

Only Serial Numbers; Dihedral Angles Only. Z-Matrix を作成し、モデル中の原子の現在のシリアル番号の順序を、その Z-Matrix に保存します。立体化学で定義される Pro-R および Pro-S は、モデルから Z-Matrix を構築する際には使用されません。原子はすべて二面角だけで配置されます。

MacroModel ファイル

MacroModel¹ (MCM、DAT、OUT) ファイル形式は、『MacroModel Structure Files version 2.0』マニュアルに定義されています。Chem3D では、これら 3 つのファイル形式すべてがサポートされます。MCM は書き出しも可能です。

Maestro ファイル

Chem3D では、分子モデルを読み込んだり書き出すために Schrodinger Maestro ファイル形式 (MAE) をサポートしています。

Molecular Design Limited MolFile

MDL Molfile 形式は、ISIS/Draw、ISIS/Base、MAACS、REACCS などの MDL アプリケーションで作成したファイルの保存形式です。ファイル形式は、『Journal of Chemical Information and Computer Science, Volume 32, Number 3, 1992』244 ~ 255 ページ中の論文、「Description of Several Chemical Structure File Formats Used by Computer Programs Developed at Molecular Design Limited」に記載されています。MDL の ISIS アプリケーションおよびその他の化学関係アプリケーションとのインターフェイスとして使用する場合は、この形式を使用します。読み込みと書き出しの両方がサポートされています。

MSI ChemNote

ChemNote など、Molecular Simulations アプリケーションとのインターフェイスとして使用するには、MSI ChemNote (.MSM) ファイル形式を使用します。ファイル形式は ChemNote マニュアルで定義されています。読み込みと書き出しの両方がサポートされています。

¹MacroModel は、Columbia University, New York, N. Y. の Department of Chemistry で作成されました。

MOPAC ファイル

MOPAC データは、MOP、DAT、MPC、または 2MT のファイル形式で保存できます。Chem3D では、これらのファイル形式のすべてを読み込むことができ、MOP ファイルを書き出すことができます。MOPAC ファイルはテキスト エディタで編集できます。キーワードを追加したり最適化フラグを変更したファイルは、Chem3D 内で **Run MOPAC Input file** コマンドを使って実行できます。

Save All Frames をオンにし、モデルの各表示の内部座標を含む MOPAC Data ファイルを作成します。モデルの最初のフレームには、通常の MOPAC 出力ファイル（下の例を参照）の最初の 3 行の情報が記録されます。その他のフレームには、そのフレーム内の原子の Z-Matrix を示す行のみが保存されます。

 **注意:** データ ファイル仕様については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

ファイルを編集し、Run MOPAC Input File コマンドを使って実行するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト エディタで MOPAC 出力ファイルを開きます。

下の出力ファイルには、最初の 4 行の原子レコードのみが示されています。下のサンプル出力ファイルの 1 行目と 1 列目は説明のために追加されたもので、実際の出力ファイルには含まれません。

	Col. 1	Col. 2 C3	Col. 4 C5	Col. 6	Col. 7	Col. 8
Line 1						
Line 2	Cyclohexanol					
Line 3						
Line 4 C	0	0	0	0	0	0
Line 5 C	1.541521	0	0	0	1	0
Line 6 C	1.535231	111.77	1	0	2	1
L7. Ln C	1.539731	109.7	1	-55.69	1	2
Ln+1						

2. Line 1 に、MOPAC で実行する計算のキーワードを入力します（上の例では空白になっています）。Line 2 には、作成するモデルのウィンドウに割り当てる名前を入力します。ただし、Chem3D はこの行を無視します。
3. Line 3 は空白のままにします。
4. Line 4 から Ln (n は最後の原子のレコード) には、モデルの内部座標、最適化フラグ、結合情報が保存されています。
 - Column 1 は、原子の仕様です。
 - Column 2 は結合長です (Column 8 で結合情報が指定されている場合)。
 - Column 3 は、Column 2 で指定された結合長の最適化フラグです。
 - Column 4 は結合角です (Column 8 で結合情報が指定されている場合)。
 - Column 5 は、Column 4 で指定された結合角の最適化フラグです。
 - Column 6 は二面角です (Column 8 で結合情報が指定されている場合)。
 - Column 7 は、Column 6 で指定された二面角の最適化フラグです。
5. 特定の座標を最適化するように指定するには、各内部座標の Column 3、Column 5、Column 7 の最適化フラグを変更します。MOPAC で使用可能なフラグは次のとおりです。

1	この内部座標を最適化する
0	この内部座標を最適化しない
-1	反応座標またはグリッド インデックス
T	DRC の転換点を監視する

- Ln + 1 行に新たな情報を追加します。たとえば、SADDLE 計算で使用する対称情報などを追加します。
- データ ファイルの最終行は空白のまま残し、ファイルの終わりであることを示します。
- ファイルをテキスト形式で保存します。

MOPAC Graph ファイル

MOPAC Graph (GPT) ファイルは、GRAPH キーワードを含む MOPAC 計算の結果を保存します。このファイルには、最終的な立体構造、電子構造、その他分子の特性が保存されています。Chem3D は、読み込みの場合のみ MOPAC Graph ファイル形式をサポートします。

Protein Data Bank ファイル

Brookhaven Protein Data Bank ファイル (PDB、ENT) は、タンパク質データを保存するために使用され、通常、サイズが大きくなります。PDB 形式は、タンパク質の一次配列を提供します。Chem3D では、PDB および ENT ファイルの種類を読み込み、PDB を書き出すことができます。PDB ファイル形式は、Protein Data Bank Atomic Coordinate and Bibliographic Entry Format Description で指定されています。

ROSDAL ファイル (RDL)

ROSDAL Structure Language¹ (RDL) ファイル形式の定義については、MOLKICK ユーザーズ マニュアルの付録 C 「ROSDAL Syntax」、およびこのマニュアルの「[ファイル形式](#)」ページ 233 を参照してください。ROSDAL 形式は主に、Beilstein Online Database でのクエリ検索に使用されます。Chem3D は、書き出す目的でのみ ROSDAL ファイル形式をサポートしています。

Standard Molecular Data (SMD)

Standard Molecular Data (.SMD) ファイル形式は、オンライン化学分野データベースの検索のために STN Express アプリケーションとのインターフェイスとして使用します。読み込みと書き出しの両方がサポートされています。

SYBYL ファイル

SYBYL[®] (SML、SM2、ML2) ファイル形式は、Tripos の SYBYL アプリケーションとのインターフェイスとして使用します。SML および SM2 ファイル形式は、読み込みと書き出しの両方に使用でき、ML2 は読み込み目的のみのサポートされています。

¹ ROSDAL は Softron 社の製品です。

ジョブ記述ファイル形式

計算用にカスタマイズしたデフォルト設定を保存する場合に、Job Description ファイル形式を使用することができます。カスタマイズ計算を、Job Description ファイル (.JDF) または Job Description Stationery (.JDT) として保存することができます。どちらかの形式で、ファイルを Chem3D ジョブ フォルダに保存することで、そのファイルを該当する Chem3D メニューに追加することができます。

JDF ファイル

JDF ファイル形式は、ジョブ記述を保存するファイル形式です。JDF ファイルを開く際に、設定の編集および保存を行えます。

JDT ファイル

JDT ファイルは、将来の計算に適用する設定を保存するテンプレート形式です。テンプレート ファイルの設定を編集することはできますが、変更内容は保存できません。

参考資料

MEP

分子静電位 (MEP) とは、分子の近くにある陽子のポテンシャル エネルギーのことです。MEP は通常、分子の境界を反映する表面上に MEP 値をマッピングすることによって可視化します。電子密度表面と呼ばれるこの表面は、分子の波動関数の電子密度が一定値となるポイントをグラフ化することによって取得されます。電子密度は、電子が特定の場所に存在する確率の測定値です。次の数式で算出します。

$$\rho(r) = \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\mu\nu} \phi_{\mu}(r) \phi_{\nu}(r)$$

各項の意味は次のとおりです。

- $\rho(r)$ は電子密度で、座標 “r” の関数です。“ $\rho(r) dr$ ” が少量 (“dr”) で電子の数になるように定義されます。
- $\phi_{\mu}(r)$ と $\phi_{\nu}(r)$ は基底関数です。
- P は密度マトリクスです。

密度マトリクスは、量子系の統計的状态を表すトレースの自己共役半正値定符号マトリクスです。密度マトリクスは次の式で求められます。

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$$

各項の意味は次のとおりです。

- ρ は密度演算子です。密度マトリクスでも区別なく使用されます。
- 係数 p_j は正で、合計で 1 になります。
- $|\psi_j\rangle$ は量子系の状態です。

空間内のポイントの標準グリッドの電子密度やスピン密度などの分子特性を計算し、Cube ファイルとして保存することができます。

Cube ファイルは、Chemo3D など、他のグラフィカル視覚化プログラムの入力として使用されるバイナリ ファイルまたは ASCII ファイルです。

MM2 の参考文献

このセクションでは、他の Chem3D のマニュアルで取り上げられていない MM2 パラメータと MM2 カ場について詳しく説明します。

MM2 パラメータ

これらのパラメータの情報源は、次の 3 つです。

- N. L. Allinger 博士 (大部分のパラメータ)
- TINKER プログラムの作者、Jay Ponder 博士 (一部のパラメータ)
- Perkin Elmer (Allinger 博士や Ponder 博士から提供されたもの以外の一般的なパラメータ。ただし、そのほとんどは他のパラメータから推定されたものです)。

MM2 パラメータ セットに関する情報源としては、Ulrich Burkert および Norman L. Allinger 共著の『*Molecular Mechanics*』(ACS Monograph 177, American Chemical Society, Washington, D. C., 1982) が最適です。

非 MM2 原子タイプのパラメータの適切な推定方法については、『*Development of an Internal Searching Algorithm for Parameterization of the MM2/MM3 Force Fields*』(Journal of Computational Chemistry, Vol 12, No. 7, 844-849 (1991)) に説明されています。

MM2 力場

Chem3D は、ワシントン大学の Jay W. Ponder の研究結果に基づく、Norman L. Allinger の MM2 力場の改良版を採用しています。この章では MM2 力場についての詳しい解説はしませんが、Chem3D での MM2 力場の使用方法のほか、Chem3D の MM2 力場、Allinger の MM2 プログラム (QCPE 395)、Ponder の TINKER システム (『*J. Comput. Chem.*』、M. J. Dudek および J. W. Ponder 共著、16、791-816 (1995)) の相違点について説明します。

MM2 の概説と分子力学的手法の一般応用については、U. Burkert および N. L. Allinger 共著の『*Molecular Mechanics*』(ACS, Washington, D. C., USA, 1982) を参照してください。また、T. Clark 著『*Computational Chemistry*』(Wiley, N. Y., USA, 1985) にも分子力学に関する優れた解説があります。

TINKER システムの解説および Ponder の MM2 力場拡張に関する詳細な理論的根拠に関しては、TINKER のホームページをご覧ください。

分子力学の解説と評論は、『*Dynamics of Proteins and Nucleic Acids*』(J. Andrew McCammon, Stephen Harvey 共著、Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1987) を参照してください。この本は生物ポリマーが中心になっていますが、分子力学や関連方法について適切な解説があり、さらに他の分子に応用できる情報も収録されています。

Allinger の力場

Chem3D に導入された Allinger の力場は、次の点で異なります。

- 電荷-双極子間の相互作用に関する項
- 四次伸縮項
- 5 次スイッチング多項式による静電項とファンデルワールス項のカットオフ
- 必要に応じた pi 系の自動計算

電荷-双極子間の相互作用に関する項。 Allinger のポテンシャル関数は、結合双極子に基づく、または原子の部分電荷に基づく、可能な 2 つの静電項のいずれかを含みます。電荷-双極子間の相互作用に関する項を追加したことにより、組み合わせたアプローチが可能になります。このアプローチでは、部分電荷を結合双極子で現し、アンモニウムやりん酸などの電荷群を点電荷として扱います。

四次伸縮項。 四次結合伸縮項を追加したことにより、長い結合が Allinger の力場によって扱われる際に生じる、困難な負結合伸縮エネルギーが除外されます。

四次結合伸縮項は主に分子力学に必要なものであり、低エネルギーの配座に及ぼす影響は、極めて小さいものです。

Allinger の力場で得られるエネルギーを正確に再現するには、MM2 Constants テーブル ウィンドウの四次伸縮定数を 0 に設定します。

静電とファンデルワールスのカットオフ項。 静電項とファンデルワールス項のカットオフは遠距離間の相互作用が計算から除外されるため、大きな分子の計算時間を大幅に短縮できます。

Allinger の力場で得られるエネルギーを正確に再現するには、カットオフ距離を（モデルの直径以上の）大きな値に設定します。

カットオフは、電荷-電荷および電荷-双極子相互作用の場合は指定されたカットオフ距離の 50% から、双極子-双極子の相互作用の場合は 75% から、ファンデルワールス相互作用の場合は 90% から少しずつ実行されます。

Chem3D では、5 次のスイッチング多項式を使用しているため二次の連続した力場が得られます。

距離 r にある 2 点の電荷間の電荷-電荷相互作用エネルギーは、 $1/r$ に比例するため、電荷-電荷のカットオフは、かなり大きな値（通常は 30 ~ 40 Å）に設定する必要があります。電荷-双極子、双極子-双極子およびファンデルワールスのエネルギーはそれぞれ、 $1/r^2$ 、 $1/r^3$ および $1/r^6$ と小さくなるため、カットオフもそれぞれ 25 Å、18 Å および 10 Å などの、より小さな距離に設定できます。幸いなことに、ファンデルワールス相互作用が最も数多い相互作用であるため、相対的に小さな分子の場合でも、このカットオフによって計算速度が有意に向上します。

Pi 軌道 SCF 計算。 Chem3D は、モデルが Pi 系を含むかどうかを判別し、各 Pi 系の Pariser-Parr-Pople Pi 軌道 SCF 計算を実行します。Pi 系は、Pi Atoms テーブル ウィンドウ (PIATOMS.xml) に示された 3 種類以上の連続した原子として定義されます。

D. H. Lo および M. A. Whitehead の方法 (*Can. J. Chem.*, 46, 2027 (1968)) と、G. D. Zeiss および M. A. Whitehead の複素環式パラメータ (*J. Chem. Soc. (A)*, 1727 (1971)) を使用しています。SCF 計算では、結合伸縮力定数、標準結合長、二重ねじれ障壁の概算に使用する結合次数が得られます。

以下に、Pi 系計算実行の概要をプロセス順に説明します。

1. Fock マトリクスと呼ばれる行列が初期化され、Pi 系内の原子ペア間で電子を共有することが有利かどうかを示します。

2. Fock マトリクスから Pi 分子の軌道が計算されます。
3. Pi 分子軌道を使って新しい Fock マトリクスが計算され、この新しい Fock マトリクスを使って、さらに正確な Pi 分子軌道が計算されます。
4. ステップ 2 とステップ 3 では、Fock マトリクスが計算され、新しい Fock マトリクスを使って、さらに正確な Pi 分子軌道が計算されます。この方法は「自己無撞着場法」または「Pi-SCF 計算」と呼ばれます。
5. pi 分子軌道から pi 結合次数が計算されます。
6. pi 結合次数を使って、pi 系内の各結合の結合長 (BL_{res}) および力定数 (KS_{res}) が修正されます。
7. KS_{res} と BL_{res} の値を MM2 計算の分子力学要素として、さらに分子が最適化されます。

MM2 計算後の結合次数を調べるには、次の操作を行ってください。

1. Pop-up Information コントロール パネルで Bond Order を選択します。
2. 結合の上にポインタを置きます。

Pi 系に含まれるすべての結合のために新しく計算された結合次数が、情報ボックスに表示されます。

MOPAC

ここでは、Chem3D のマニュアルの他の部分では取り上げられていない、MOPAC の機能に関する追加情報を提供します。

- ポテンシャル エネルギー関数
- MOPAC へのパラメータの追加
- 電子の配置 (MOPAC スパークルの使用を含む)

 **注意:** Chem3D では MOPAC 2016 がサポートされます。

ポテンシャル エネルギー関数

MOPAC では、MNDO、PM3、PM6、PM7、AM1 および MNDO-d の 6 種類のポテンシャル エネルギー関数が使用できます。これらはすべて SCF (Self Consistent Field、自己無撞着場) 法です。各関数は、分子のシュレディンガー電子方程式に対して数学的な概算を行います。

これらの概算法は、利用可能なコンピュータ技術の範囲内で *ab initio* 計算を可能にするために生まれたという経緯があります。現在、小さな分子については、デスクトップ コンピュータでも *ab initio* 計算を実行できます。大きな分子をデスクトップコンピュータ上でモデリングする場合は、半経験的手法や分子力学手法を使用する方が効率的です。

半経験的手法における MOPAC のポテンシャル エネルギー関数の位置付けについて理解するために、ここで半経験的手法を構成する概算法を年代順に簡単に振り返ってみましょう。最初の概算法は「Complete Neglect of Differential Overlap」の頭文字を取って CNDO と名付けられました。次の概算法は、INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap)、そして MINDO/3 (Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap) が続きました。次に登場したのが、周期表の第 1 行および第 2 行の元素で構成される種々の有機分子について MINDO/3 に修正を加えた MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap)、そして MNDO を大幅に改善した AM1 と続きます。パラメタリゼーション (PM6) では実験データと *ab initio* データを使用しま

す。PM3 および AM1 における誤差は PM6 で補正されています。最新の PM7 では、パラメータ最適化プロセスに使用されなかったシステムの精度が向上しています。

ab initio 計算を使用できない程、大量のリソースを必要とする分子について、二原子軌道を完全に無視しても有益なデータが得られるという初期の仮定を証明するために、ポテンシャル エネルギー関数にこのような一連の改良が加えられてきました。

MOPAC へのパラメータの追加

PM7、PM6、PM3、AM1 ポテンシャル関数で使用可能なパラメータは、常に開発が続けられています。MOPAC に用意されている標準のパラメータ セットで、研究に必要な元素 (Cu など) がサポートされていない場合は、文献の中から必要なパラメータを探し出して、MOPAC ジョブの実行時に追加できます。MOPAC にはこのような柔軟性があるため、実用性に優れています。

MOPAC の実行時にパラメータを追加するには、キーワード EXTERNAL=name を使用します。name には、追加するパラメータが保存されているファイル名 (およびその完全なパス名) を指定します。

キーワードの使用

MOPAC の概算法のパラメータを選択すると、MOPAC インターフェイスの **General** タブのウィンドウにキーワードが自動的に挿入されます。これらのキーワードを編集または追加して別の計算を実行したり、特定の計算の情報を *.out ファイルに保存できます。

 **注意:** MOPAC に精通した上級ユーザー以外は、自動キーワードを使用してください。キーワードを変更すると、結果が信頼できない場合があります。

キーワードの一覧については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

自動キーワード

次の表は、MOPAC に自動的に送られるキーワードと、収束に影響するキーワードを示したものです。

キーワード	説明
EF	自動的に MOPAC に送られ、Eigenvector Following (EF) 構造最小化ルーチンの使用を指定するキーワードです。
BFGS	EF の自動指定挿入を防ぎ、BFGS 最小化に戻します。
GEO-OK	自動的に MOPAC に送信され、Z-Matrix のチェックを無効にします。
MMOK	自動的に MOPAC に送信され、アミド結合の分子力学修正を指定します。このキーワードを無効にするには、追加キーワード「NOMM」を指定します。
RMAX=n. nn	エネルギー計算値/予測値の変化を n. nn 未満に指定します。デフォルト値は 4.0 です。
RMIN=n. nn	エネルギー計算値/予測値の変化を n. n よりも大きく指定します。デフォルト値は 0.000 です。
PRECISE	計算を実行するたびに値が変動しないように、精度の高い SCF 計算を実行します。
LET	ジョブの時間を短くするために安全チェックを無効にします。
RECALC=5	最適化計算が遷移状態に収束しにくい場合は、このキーワードを使用します。

MOPAC で表示されるエラー メッセージの説明については、『MOPAC マニュアル』を参照してください。

追加キーワード

特定の計算の詳細結果を出力させるキーワードを、次の表に示します。アスタリスク（*）の付いた用語が、*.out ファイルに出力されます。

キーワード	データ
ENPART	すべてのエネルギー コンポーネント*
FORCE	ゼロ ポイント エネルギー
FORCE	振動周波数*
MECI	MECI 計算で使用された Microstate*
なし	HOMO/LUMO エネルギー*
なし	イオン化ポテンシャル*
なし	対称性*
LOCALIZE	局在化軌道の出力
VECTORS	最終 Eigenvectors の出力 (分子軌道係数の出力)
BONDS	結合次数マトリクス*

再計算を行うキーワードの一覧を次に示します。アスタリスク (*) の付いた用語が、*.out ファイルに出力されます。

キーワード	説明
CIS	UV absorption energies* (UV 吸収エネルギー) C.I. 計算を行う場合は、必ず一重項の一次励起状態で行ってください。基底状態では行わないでください。 *.out ファイルのエネルギー情報を印刷する場合は、キーワード「MECI」と指定します。
FORCE	基準振動解析 *ゼロ ポイント エネルギーと通常波動モードの計算に便利です。*.out ファイルの波動情報を印刷する場合は、キーワード「DFORCE」と指定します。
NOMM	No MM correction (MM 修正なし) MOPAC はデフォルトで、CONH 結合の分子力学 (MM) 修正を行います。
PI	密度マトリクスを Sigma 結合および pi 結合に解析します。
PRECISE	Increase SCF criteria (SCF 収束判定条件の強化) 収束判定条件を 100 倍強化します。報告するエネルギーの精度を高める場合に便利です。
T = n [M,H,D]	ジョブに割り当てる CPU 処理の合計実行制限時間を増やします。デフォルトは 1h (1 時間) または 3600 秒です。

電子構成の指定

分子が開殻か閉殻かを判断するために、MOPAC 計算では分子の正味電荷が必要です。分子に正味電荷がある場合は、必ず荷電原子タイプを指定するか、電荷を追加してください。

電荷については、テキスト作成ツールによる割り当て、または MOPAC での指定が可能です。

電荷をモデルに追加するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツールをクリックします。
2. モデルの原子をクリックします。
3. 電荷記号を入力します。

たとえば、炭素をクリックし、テキスト ボックスに「+」を入力すると、カルボカチオン化されます。電荷は、計算を実行するときに自動的に MOPAC に送られます。

MOPAC で電荷を指定するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations** メニューの **MOPAC Interface** をクリックし、計算を選択します。MOPAC Interface ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **General** タブで、**Keywords** ボックス内に、キーワード「CHARGE=n」を入力します。n は正または負の整数 (-2、-1、+1、+2) です。

スピニアップ (alpha 電子) とスピンドアウン (beta 電子) の組み合わせが変わると、様々な電子エネルギーも変化します。これらの組み合わせは、分子のスピン多重度と呼ばれます。下の表はスピン総数 S、スピン多重度、不対電子数の関係を簡単に示したものです。

スピン	キーワード	(不対電子数)
0	一重項	0 不対
1/2	二重項	1 不対
1	三重項	2 不対
1 1/2	四重項	3 不対
2	五重項	4 不対
2 1/2	六重項	5 不対

適切なスピンの多重度を決定するには、次を考慮します。

- 計算する分子に含まれる電子数は偶数個か奇数個か。
- 分子が基底状態、励起状態のどちらにあるか。
- RHF 法または UHF 法のどちらを使用するか。

次の表は、この 3 要素の一般的な組み合わせを表したものです。

RHF (閉殻系)

電子状態	使用するキーワード ^a			
	一重項			
基底状態	一重項			
	二重項	1, 2		
	三重項	2, 2		
	四重項	3, 3		
	五重項	4, 4		
	六重項	5, 5		
一次励起状態	一重項		2	
	二重項		2	2
	三重項		2	3
	四重項		2	4
	五重項		2	5
	六重項		2	6
二次励起状態	一重項		3	
	二重項		3	3
	三重項		3	3
	四重項		3	4
	五重項		3	5
	六重項		3	6

^aOPEN(n1, n2) は、基底状態の系に対しては使用しないでください (高度な対称性を持つ開殻系は除く)。

UHF (開殻系)	
電子状態	スピン状態
基底状態	一重項
	二重項
	三重項
	四重項
	五重項
	六重項

偶数個の電子を含む系

分子に含まれる電子数が偶数個の場合、基底状態および励起状態の配置は一重項、三重項、または、ごく稀に五重項になります。通常、基底状態は一重項ですが、対称度を考慮すると三重項が最も安定した基底状態となる分子もあります。

基底状態、RHF 法. 基底状態、RHF 法の設定は次のとおりです。

一重項の基底状態. 偶数個の電子を持つ安定した中性有機化合物では、この配置が最も一般的です。その他のキーワードを指定する必要はありません。

三重項の基底状態. 使用するキーワードの組み合わせは、「TRIPLET OPEN(2,2)」です。

四重項の基底状態. 使用するキーワードの組み合わせは、「QUINTET OPEN(4,4)」です。

注意: OPEN キーワードは、分子酸素のような高度な対称性を持つ分子以外には不要です。キーワード「OPEN」を使用すると、仮想軌道を含むことによってSCF 計算に使用する電子の作用空間が広がられます。このような処理は、電子が偶数個の系の配置の多重度を大きくするために必要となります。また、RHF 法でキーワード「OPEN」を使用すると、1/2 電子近似法と C. I. 計算を呼び出して、最終的な RHF エネルギーを補正します。C. I. 計算で使われた状態を見るには、キーワードに「MECI」と入力します。情報は *.out ファイルの一番下に印刷されます。

基底状態、UHF 法. UHF 法の計算では、すべての不対電子がスピニアップ (alpha) として処理されます。

- 一重項の基底状態 — 偶数個の電子を持つ安定した中性有機化合物では、この配置が最も一般的です。その他のキーワードを指定する必要はありません。
- 一重項の基底状態では、UHF 法を使用しても、RHF 法と同じ結果に収束する可能性が高くなります。
- 三重項または五重項の基底状態 — キーワードは、「TRIPLET」か「QUINTET」を使います。

注意: UHF 法では、各 alpha 電子を個別に扱うため、多重度が大きくなるとエネルギーにばらつきが生じます。

励起状態、RHF 法. 一次励起状態 — 一次励起状態は、実際には各スピン系 (一重項、三重項、五重項) の中で二番目に低い状態 (Root=2) です。

一次励起状態を指定するには、次のキーワードを使用します。

一重項の一次励起状態 —ROOT=2 OPEN(2,2) SINGLET、(または単に「EXCITED」と指定)

三重項の一次励起状態 —ROOT=2 OPEN (2,2)TRIPLET C.I.=n

(n=3 が最も単純なケース)

五重項の一次励起状態 —ROOT=2 OPEN (4,4) QUINTET C.I.=n、(n=5 が最も単純なケース)

二次励起状態 —二次励起状態は、実際は、各スピン系（一重項、三重項、五重項）の中の三番目にエネルギーが低い状態 (Root=3) です。二次励起状態の計算を指定するには、次のキーワードを使います。

一重項の二次励起状態 —OPEN(2,2) ROOT=3 SINGLET

三重項の二次励起状態 —OPEN(2,2) ROOT=3 TRIPLET C.I.=n、(n=3 が最も単純なケース)

二次励起五重項 —OPEN(4,4) ROOT=3 QUINTET C.I.=n、(n=5 が最も単純なケース)

励起状態、UHF 法. UHF 法では一定の多重度の基底状態のみ計算できます。

奇数個の電子を含む系

アニオン、カチオン、ラジカルは通常奇数個の電子を持ちます。一般に、基底状態および励起状態の配置は、二重項、四重項、六重項のいずれかです。

基底状態、RHF 法

二重項の基底状態 —最も一般的な配置です。その他のキーワードを指定する必要はありません。

四重項 —使用するキーワードの組み合わせは、「QUARTET OPEN(3,3)」です。

六重項の基底状態 —使用するキーワードの組み合わせは、「SEXTET OPEN(5,5)」です。

基底状態、UHF 法

UHF 法の計算では、すべての不対電子がスピニアップ (alpha) として処理されます。

二重項の基底状態 —奇数個の電子を持つ分子では、この配置が最も一般的です。その他のキーワードを指定する必要はありません。

UHF 法と RHF 法では、求められるエネルギー値が異なります。

四重項および六重項の基底状態 —キーワードは、「QUARTET」か「SEXTET」を使います。

励起状態、RHF 法. 一次励起状態 —一次励起状態は、実際には、各スピン系（二重項、四重項、六重項）の中で二番目にエネルギーが低い状態 (Root=2) です。一次励起状態を指定するには、次のキーワードを使用します。

二重項の一次励起 —ROOT=2 DOUBLET C.I.=n、(n=2 が最も単純なケース)

四重項の一次励起 —ROOT=2 QUARTET C.I.=n、(n=4 が最も単純なケース)

六重項の一次励起 —ROOT=2 SEXTET C.I.=n、(n=5 が最も単純なケース)

二次励起状態 —二次励起状態は、実際は、各スピン系（一重項、三重項、五重項）の中の三番目にエネルギーが低い状態 (Root=3) です。二次励起状態の計算を指定するには、次のキーワードを使います。

二重項の二次励起 —ROOT=3 DOUBLET C.I.=n、(n=3 が最も単純なケース)

四重項の二次励起 —ROOT=3 QUARTET C.I.=n、(n=4 が最も単純なケース)

六重項の二次励起 —ROOT=3 SEXTET C.I.=n、(n=5 が最も単純なケース)

 **注意:** 作用空間が広がっていないというエラーメッセージが表示される場合は、最も単純なケースでは C. I. > n を使用して作用空間で使用できる仮想軌道の数を増やしてください。C. I. 計算で使われた状態を見るには、キーワードに「MECI」と入力します。情報は *.out ファイルの一番下に印刷されます。

励起状態、UHF 法. UHF 法では一定の多重度の基底状態のみ計算できます。

スパークル

スパークルは、純粋なイオン価を表すために使用します。これらは、次の化学構造とほぼ同等です。

化学記号	同等なもの
+	テトラメチル アンモニウム、 カリウム、またはセシウム カチオン + 電子
++	バリウム ジカチオン + 2 つの 電子
-	ホウ化水素ハロゲン、または 硝酸アニオン - 電子
=	硫酸塩、シュウ酸エステル ジアニオン - 2 つの電子

Chem3D では、スパークルは、荷電ダミー原子をモデルに追加することによって表されます。

 **ヒント:** ダミー原子は未配位結合ツールで作成します。電荷はダミー原子を作成した後で追加する必要があります。

出力ファイルでは化学記号は XX と示されます。

MOPAC におけるハミルトンの近似

MOPAC では、次の 5 種類の近似法を使用できます。

- MNDO
- AM1
- PM3
- PM6
- PM7
- MNDO-d

ポテンシャル エネルギー関数は、Fock マトリクスを近似し、パラメータ化することによって、HF 方程式を修正します。

MOPAC の半経験的近似法は、次の Fock 演算子の領域で機能します。

- 1 電子の原子軌道の構築に使用する基礎は、原子価電子のスレイターの s タイプ軌道と p タイプ軌道 (STO) の最小の基底関数系です。

- 核電子は明示的に扱われません。代わりに、原子核に含めます。このため、原子核の電荷は Neffective と呼ばれます。
たとえば、原子核の電荷が +6、核電子の電荷が -2 の炭素の場合、原子核の実効電荷は +4 になります。
- 2 電子のクーロン積分と交換積分の多くは、元素別にパラメータ化されます。

ハミルトニアンを選択

全体として、これらのポテンシャル関数は、最も古い MINDO/3 法から最新の PM7 法までの年代別発達と見なすことができます。それぞれの方法の発達はグローバルな改善を目指しましたが、状況によっては制約されている場合もありました。

ポテンシャル関数の選択にあたっては、次の 2 点を考慮してください。

- 作成したモデルの全元素が選択する方法のためにパラメータ化されているか。
- 対象となるモデルに悪影響を与える制約事項がないか。

詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

MNDO の適用と制約事項

MNDO は、下の図の網掛け部分の元素に適用されます。

H									He	
Li	Be			B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg			Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca			Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Fb	Sr			Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba			Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

MNDO の制約は次のとおりです。

- ネオペンタンなどの立体的に密集した分子は非常に不安定です。
- クバンなどの 4 員環は非常に安定しています。
- たとえば、水の二量体などの水素結合は事実上存在しません。水素と他の原子との間の非結合の反発相互作用が必要以上に大きくなります。特に MNDO では、単純な水素結合の存在を予測できません。
- 硫酸などの超原子価化合物は非常に不安定になります。
- 一般に、活性化障壁が非常に大きくなります。
- 標準的でない構造は、たとえばエチルラジカルなどの標準的な構造に比べて不安定であると予測されます。
- ニトロベンゼンなどの芳香族環で酸素化された置換基は、平面上に配置されません。
- ・ 過酸化結合が 0.17 Å 少なくなります。
- ・ エーテルの C-O-C 角が大きくなりすぎます。

AM1 の適用と制約事項

AM1 は、下の図の網掛け部分の元素に適用されます。

H									He
Li	Be			B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg			Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca		Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr		Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

AM1 についての大切な事項に、次があげられます。

- AM1 と MNDO はよく似ていますが、核間反発項に違いがあり、パラメータも変更されています。
- 全体的な精度の面では、AM1 は MNDO から大幅に改善されています。具体的な改良点は次のとおりです。
 - 水の二量体の水素結合の強さが、実験値と同じ 5.5 kcal/mol になりました。
 - 反応の活性化障壁が MNDO から大幅に改善されています。
 - MNDO と比べて、超原子価のリン化合物が大幅に改善されています。
 - 一般的に、AM1 による ΔH_f のエラーは、MNDO よりも約 40% 少なくなっています。
 - AM1 のリンは、3.0 Å という非常に急激なポテンシャル障壁を持ちますが、これは正しくありません。この欠陥により、通常は対称な立体構造が歪み、擬似活性化障壁が生じます。そのよい例として、P406 があげられ、AM1 では、平衡であるはずの P-P 結合に 0.4 Å の差が生じます。この点が、AM1 の最も大きな制約事項です。
 - CH₂ フラグメントの生成熱が約 2 kcal/mol 少ないため、アルキル基に系統的誤差が生じます。
 - かなり改善されていますが、依然としてニトロ化合物のエネルギーが大きくなりすぎます。
 - 過酸化結合が依然として 0.17 Å 少なくなります。

PM3 の適用と制約事項

Parameterized Model リビジョン 3 (PM3) は下の図の網掛け部分の元素に適用できます。

H									He
Li	Be			B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg			Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca		Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr		Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

PM3 については次のとおりです。

- PM3 は AM1 のパラメータを変更したものです。
- PM3 は AM1 に比べて大幅に改善されています。
- 超原子価化合物の予測精度がかなり改善されました。
- AM1 に比べると ΔH_f 中の誤差の予測精度は約 40 % 少なくなっています。
- PM3 の制約については、まだそれほど情報がありません。PM3 計算の結果が報告されるにつれて情報量も多くなるでしょう。
- ホルムアミドの回転障壁が事実上存在しません。この問題は、MMOK オプションを使って部分的に修正できます。MMOK の詳細については、『MOPAC オンライン マニュアル』を参照してください。

MNDO-d の適用と制約事項

MNDO-d (Modified Neglect of Differential Overlap with d-Orbitals) は下の図の網掛け部分の元素に適用されます。

H									He
Li	Be			B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg			Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca		Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr		Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

MNDO-d (d 軌道を含む Modified Neglect of Differential Overlap) 法は、d 軌道を含めた拡張された基底関数系を用いて、MNDO 法を再定式化したものです。この方法は下の図の網掛け部分の要素に適用されます。MNDO-d で得られる結果は一般に MNDO より優れており、MNDO は、以前に MNDO を使用して実行されたものを比較したり計算したりする場合に使います。

MOPAC のキーワードとして示された、次の計算手法は MNDO-d との互換性がありません。

- COSMO (Conductor-like Screening Model 法による溶媒和計算)
- POLAR (分極率計算)
- GREENF (グリーン関数)
- TOM (Miertus-Scirocco-Tomasi の自己無撞着反応場モデルによる溶媒和計算)

PM6 の適用と制約事項

Parameterized Model リビジョン 6 (PM6) は、すべての典型元素および遷移金属に適用できます。

PM6 については次のとおりです。

- PM6 は PM5 のパラメータを変更したものです。開発には、9,000 を超える化合物に関する実験データと *ab initio* データが使われています。
- PM6 には、PM3 や AM1 からの著しい進化が見られます。
- AM1 および PM3 における主要な誤差が補正されています。

- 生成熱の予測精度が向上しています。
- 正確な立体構造を生成します。たとえば、アントラキノンでは最適化によって平面縮合環の構造が補正されています。
- 架橋水素結合の位置精度が向上しています。たとえば、ジカルボン酸アニオンでは、架橋水素結合が 2 つの酸素原子間に等間隔となるように配置されます。

PM7 の適用と制約事項

- Parameterized Model リビジョン 7 (PM7) は、すべての典型元素および遷移金属に適用できます。
- PM7 は PM6 を変更した形式です。
- 大きなシステムで誤差が大幅に減少しています。
- 原子および二原子パラメータが再度最適化されています。
- パラメータ最適化プロセスに使用されなかったシステムの精度が向上しています。

オンライン情報

PerkinElmer では、Chem3D を最大限に活用するために役立つ情報をオンラインで提供しています。次に示す情報はすべて、Chem3D のメイン メニューの **Online** からアクセスできます。

SciStore

Online メニューの **Browse SciStore.com** をクリックします。

Scistore.com では、科学コミュニティのためにさまざまな製品、プラグイン、アップグレードを提供しています。分子のモデル化およびその他のソフトウェアについては、[SciStore](#) の Web サイトにアクセスし、SciStore のメイン メニューで **Software**、**Chemistry**、**Molecular Modeling** の順に選択してください。

PerkinElmer Informatics

Online メニューの **Browse PerkinElmer.com** をクリックします。

最新のソフトウェア、データベース、サービス、ビデオ チュートリアルなどについては、PerkinElmer Informatics の Web サイトを参照してください。

オンライン ドキュメント

Online メニューの **Browse PerkinElmer Documentation** をクリックします。

弊社の全ソフトウェア製品のドキュメントをダウンロードおよび表示することができます。

オンライン登録

Online メニューの **Register Online** をクリックします。

ご購入の Chem3D およびその他のソフトウェアを登録できます。

ChemOffice SDK

Online メニューの **Browse ChemOffice SDK** をクリックします。

ChemOffice コンポーネント API のドキュメント、サンプル コード、およびその他のリソースについては、SDK を参照してください。

トラブルシューティング

ここでは、弊社デスクトップ アプリケーションの総合的なパフォーマンスを改善する手順や、OS ソフトウェア製品のご使用中にコンピューターがクラッシュした場合に従う手順について説明します。

パフォーマンス

ChemOffice デスクトップ アプリケーションを使用する際は、次のような方法でコンピューターの処理速度を最適化できます。

- コントロール パネルの [システム] のパフォーマンス設定で、より多くのプロセッサ時間をこのアプリケーションに割り当てます。

- 物理 RAM を増設します。物理 RAM の容量が大きいほど、ChemOffice デスクトップ アプリケーションが仮想メモリを使用するためにハード ディスクにアクセスする回数が減ります。
- 仮想メモリ (VM) を増やします。仮想メモリはハード ディスクの空き領域を RAM として割り当てることで、RAM を拡張します。ただし、アプリケーションとハード ディスクの間のスワップは、物理 RAM のスワップと比べると遅くなります。

アプリケーションとドライバ

ほとんどの複雑なソフトウェア アプリケーションで起こりうる事態ですが、Chem3D からの応答がなくなることがあります。ソフトウェアとドライバの問題を解決するために、以下の手順を試してください。

1. Windows を再起動し、問題が再発するかどうか確認します。問題が再発する場合は、次の手順に進んでください。
2. ビデオ ドライバ、プリンタ ドライバ、スクリーン セーバー、ウィルス保護ソフトウェアの衝突が起きている可能性があります。当社へのご連絡が必要な場合は、ご使用のドライバのタイプやバージョンなどを確認してください。
 - **ビデオ ドライバ関連の問題:** ChemOffice デスクトップ アプリケーションの表示に問題がある場合は、コントロール パネルの [画面] (または [システム]) で VGA ビデオ ドライバに切り替えて、問題が再発するかどうかチェックしてください。ドライバを変更して改善が見られる場合は、元のドライバを更新する必要があると思われる。ドライバのメーカーに連絡して最新のドライバを入手してください。問題が解決しない場合は、元のドライバに関する詳しい情報と問題の内容を当社までご連絡ください。
 - **プリンタ ドライバ関連の問題:** 別のプリンタ ドライバを使って再テストしてください。ドライバを変更して改善が見られる場合は、元のドライバを更新する必要があると思われる。ドライバのメーカーに連絡して最新のドライバを入手してください。問題が解決しない場合は、元のドライバに関する詳しい情報と問題の内容を当社までご連絡ください。
3. ソフトウェアを再インストールしてみてください。ソフトウェアを再インストールする前に、ソフトウェアをアンインストールして、スクリーン セーバーおよびウィルス保護ソフトウェアも含むすべてのバックグラウンド アプリケーションを無効にします。詳細なアンインストール手順については、テクニカル サポートの Web ページを参照してください。
4. 上記の処置を行っても問題が解決しない場合は、オンライン[連絡フォーム](#)にトラブルの詳しい内容をご記入のうえ、テクニカル サポート部までご連絡ください。Problem Description に問題点を日本語で入力して頂けず。

チュートリアル

ここでは、Chem3D で実行できる一部の基本的な作業を具体的な例を交えて紹介します。

モデルの作成

- “チュートリアル 1:2 次元でのモデル作成” ページ 294
- “チュートリアル 2: 結合ツールを使ったモデルの作成” ページ 296
- “チュートリアル 3: テキストを使ったモデルの作成” ページ 302

モデルの検証

- “チュートリアル 4: 立体配座の検証” ページ 306
- “チュートリアル 5: 二面角ドライバ ” ページ 309
- “チュートリアル 6: モデルのオーバーレイ” ページ 312
- “チュートリアル 7: モデルの整列” ページ 314
- “チュートリアル 8: 軌道の表示” ページ 317
- “チュートリアル 9: 表面のマッピング ” ページ 318
- “チュートリアル 10: 部分電荷” ページ 322

計算エンジンの使用

- “チュートリアル 11: 回転異性体の分析” ページ 324
- “チュートリアル 12: 回転する結合の計算” ページ 326

チュートリアルを開始する前に、結果がこのガイドと同じになるように、デフォルトの設定と適切な表示を選択することをお勧めします。

デフォルトの設定を適用するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。
2. **Model Settings** ダイアログ ボックスの **Reset to Default** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

このチュートリアルと同じようにモデルを表示するには、次の操作を行います。

1. **View**、**Toolbars**、**Model Display** の順に選択します。
2. **Model Display** ツールバーの **Display Mode** ドロップダウン メニューから **Cylindrical Bonds** を選択します。

モデルの作成

チュートリアル 1:2 次元でのモデル作成

このチュートリアルでは、ChemDraw パネルを使用してフェノールのモデルを作成します。ChemDraw パネルで作画すると、2 次元の ChemDraw 構造式が Chem3D モデルとして表示されます。

1. **File** メニューの **New** をクリックして、新しいモデル ウィンドウを開きます。

2. **View** メニューの **ChemDraw Panel** をクリックします。ChemDraw パネルが開きます。

 **ヒント:** 標準設定では、ChemDraw パネルは結合され非表示になっています。結合されているパネルを開いたままにするには、右上にあるピンをクリックします。

3. パネルの左上にある LiveLink () を選択します。
4. ChemDraw パネル内をクリックします。ChemDraw ツール パレットが表示されます。
5. ChemDraw ツール パレットのベンゼン ツールを選択します。
6. ChemDraw パネル内をクリックしてベンゼン環を作画します。ChemDraw で描いた構造式が立体表示されます。

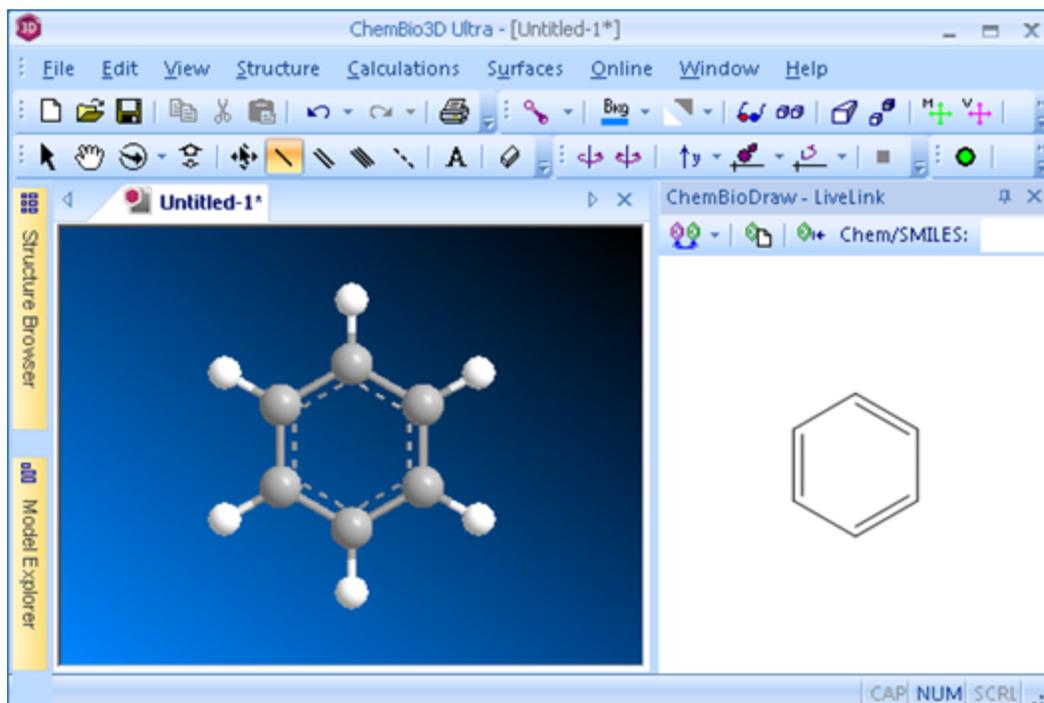


図 17.1: ベンゼンの 3 次元モデル

ベンゼン環をフェノールに変更するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーの結合ツールを選択します。
2. 3 次元モデル内の任意の水素をダブルクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. テキスト ボックスに「OH」（大文字を使用）と入力し、Enter キーを押します。

モデル ウィンドウと ChemDraw パネルにフェノール分子が表示されます。

チュートリアル 2: 結合ツールを使ったモデルの作成

このチュートリアルでは、エタンのモデルを用いて Chem3D の基本機能の一部を具体的に説明します。ここで説明する操作はモデルの回転、結合特性の表示、そして原子シリアル番号の追加です。まず、エタンのモデルを作成します。

1. 作成ツールバーで単結合ツール  をクリックします。
2. モデル ウィンドウ内をクリックしてドラッグし、マウス ボタンを放します。

デフォルトの炭素原子とデフォルトの H 配置で単結合を作画したので、エタンのモデルが表示されます。

モデルの回転

モデルの 3 次元構造を調べるには、回転ツール  を使用してモデルを回転させます。回転操作には、フリーハンドによる回転、X、Y、Z 軸を中心にした回転、特定の結合を軸とする回転の 3 つの方法があります。ステータス バーに回転の角度が表示されます。

フリーハンド回転を実行するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーで回転ツールを選択します。
2. モデル ウィンドウ内の中心の近くをクリックしてドラッグします。

 **注意:** 回転軸はドラッグの向きによって決まります。回転軸は、画面平面上でドラッグ軸と直交します。回転ツールはビューを回転させるだけです。原子の直交座標値は変化しません。

軸を中心にして回転するには、次の操作を行ってください。

1. 選択した回転ツールで、カーソルをモデル ウィンドウの上端に移動します。回転バーが表示されます。
2. モデル ウィンドウの上部で、回転バーをクリックしてドラッグします。モデルが Z 軸を中心にして回転します。
3. (オプション) 右および下の回転バーをクリックしてドラッグし、X 軸と Y 軸を中心にしてモデルを回転させます。

 **注意:** 回転バーは、回転ツールを使用しているときにのみ表示されます。

結合を軸にして回転するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーで選択ツール  をクリックします。
2. モデルで結合を選択します。
3. 回転ツールを選択します。
4. モデル ウィンドウの左側にある Rotate About Bond 回転バー  をクリックしてドラッグします。

結合と原子の特性属性

多くのモデルの特性を一目で確認できます。結合または原子の上にカーソルを置くと、その特性属性が表示されます。

注意: 表示される特性属性を選択するには、**File** メニューの **Preferences** をクリックします。 **Popup Info.** タブで、表示するポップアップ情報を選択します。

エタンの結合と原子の特性属性を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーで選択ツール  をクリックします。
2. カーソルを炭素原子の上に置きます。原子の横に情報ボックスが表示されます。

デフォルトでは、最初の行は原子ラベルです。これは C(1) か C(2) です。2 行目には原子タイプの名前 (C Alkane) が表示されます。その他の情報は、選択した設定に応じて表示されます。

注意: 情報ダイアログ ボックスを表示するには、**File**、**Preferences**、**Popup Info** で次のオプションが選択されている必要があります。

- Atom Type
- Measurement
- Bond Length

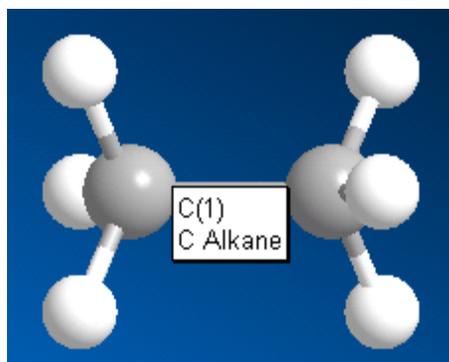


図 17.2: 原子ラベルの表示

3. ポインタを C-C 結合に置くと、その特性属性が表示されます。

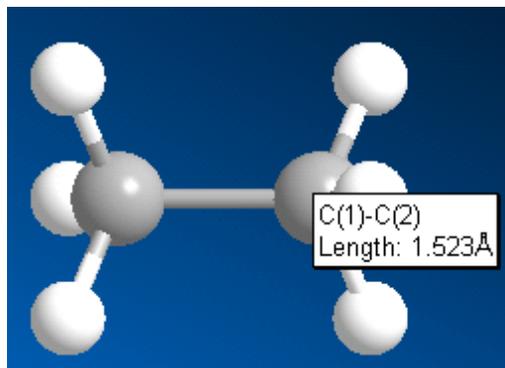


図 17.3: 結合長の表示

結合角を表示するには、互いに隣接する 3 つの原子を選択します。

1. Shift キーを押しながら C(1)、C(2) および H(7) をクリックします。
2. 選択した原子または接続している結合のどれかをポイントします。

該当する角度が表示されます。

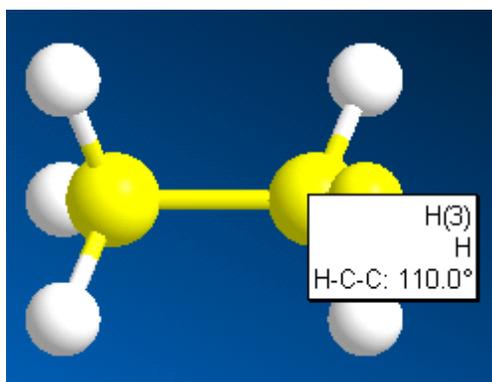


図 17.4: 結合角の表示。

隣接する原子の二面角を表示するには、次の操作を行ってください。

1. Shift キーを押しながら炭素および各炭素の 1 つの水素をクリックします。原子は二面角を形成します。
2. 選択したもののどこかにポインタを置きます。二面角データが表示されます。

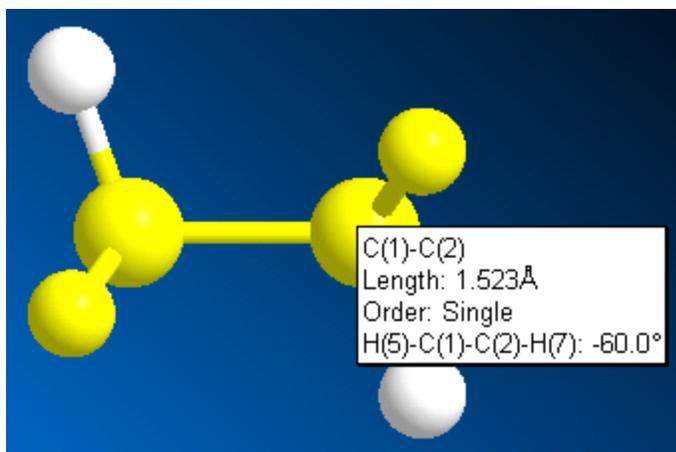


図 17.5: 二面角の表示

結合次数を変更することもできます。この例では、エタン モデルをエチレンに変更します。

1. 作成ツールバーで二重結合ツール  をクリックします。
2. マウス ポインタを C(1) から C(2) にドラッグします。
3. C(1)-C(2) 結合をクリックします。結合長が減少し、結合次数が上がったことに注意してください。

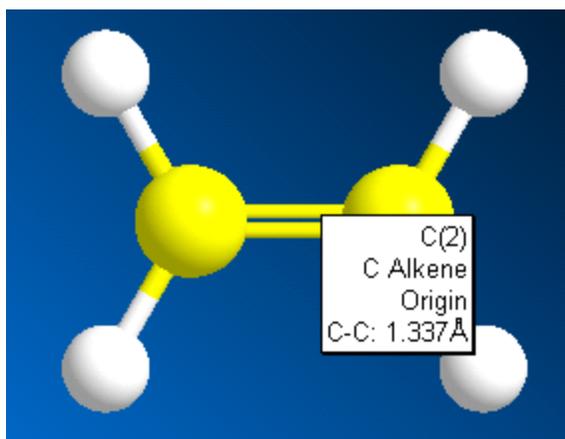


図 17.6: エチレンのモデル

環式化合物の作成

エチレン モデルから続けてさらにシクロヘキサンを作成することができます。最初に、エチレンをエタンに戻します。

1. 作成ツールバーで選択ツールをクリックします。
2. 二重結合を右クリックします。
3. コンテキスト メニューから **Set Bond Order** サブメニューの **Single** を選択します。

水素の非表示

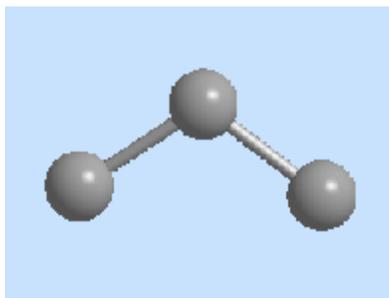
モデルの作成を容易にするためにモデル内の水素原子を非表示にする場合があります。水素は見えなくなるだけで、まだ存在しており、化学的な意味も持っています。

水素を非表示にするには、**View**、**Model Display**、**Show Hydrogen Atoms**、**Hide** の順に選択します。

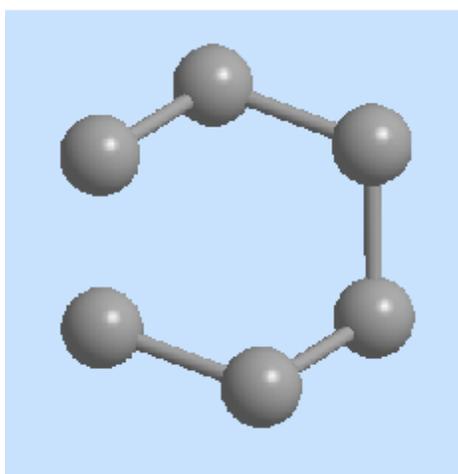
原子の追加

このモデルにさらに原子を追加してシクロヘキサン環を作成します。

1. 作成ツールバーで単結合ツール  をクリックします。
2. 左の炭素を下の方向にドラッグします。別の C-C 結合が表示されます。

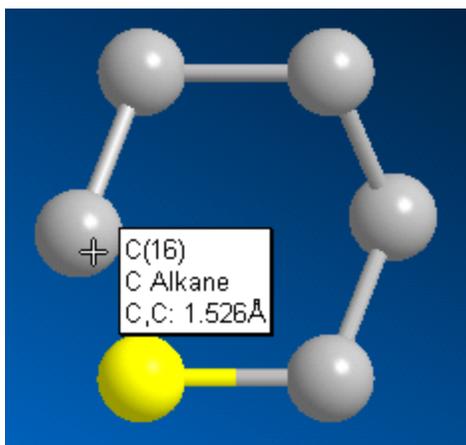


3. 下図のような 6 個の炭素からなるモデルが作成されるまで、結合の追加を続けます。



環の作成

1. 片方の端にある炭素から、もう一方の端にある炭素までドラッグします。



2. マウス ボタンを離すと、環が閉じます。

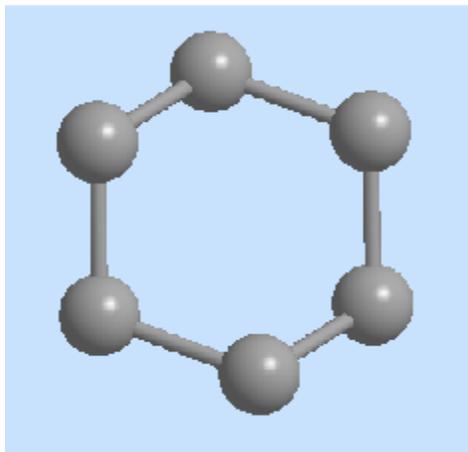


図 17.7: 結合ツールによるシクロヘキサンの作成

シリアル番号とラベル

モデルを作成したり調査したりするとき、当然ながら、同じ種類の原子は見た目がすべて同じになります。しかし、それらを区別できた方が便利なことがあります。原子のシリアル番号とラベルは、このような場合に役に立ちます。

1. **View、Model Display、Show Serial Numbers** の順に選択するか、モデル表示ツールバーの Serial Number アイコンをクリックします。
2. **View、Model Display、Show Atom Symbols** の順にクリックするか、モデル表示ツールバーの Atom Symbol アイコンをクリックします。

 **注意:** 表示されるシリアル番号は正常な通常の順番になっていませんが、これは小さなモデルから始めて原子を追加してきたからです。

どの原子から番号を付けるかを選択して番号付けの順序を変更することもできます。

原子の番号付けを変更するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト作成ツール  **A** を選択します。
2. 番号を付ける最初の原子をクリックします。原子の上にテキスト ボックスが表示されます。

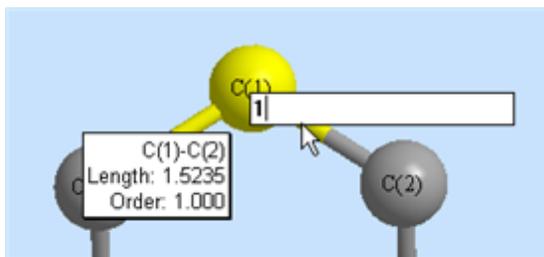


図 17.8: 原子記号と番号の追加

3. この原子に割り当てる番号を入力します（たとえば、1）。
4. Enter キーを押します。最初の原子に（1）が付きます。
5. 番号を付けたい順に原子をそれぞれダブルクリックします。
6. **View**、**Model Display**、**Show Hydrogen atoms**、**Show All** の順に選択し、回転ツールを使用してモデルを調査します。

構造式のクリーンアップ

モデルの作成中、結合角や結合長を誤って変更してしまうことがあります。これを訂正するには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Select All** をクリックします。モデル内の原子がすべて選択されます。
2. **Structure** メニューの **Clean Up** をクリックします。

モデルの保存

次のチュートリアルに進む前に、現在のモデルを保存して閉じます。

1. **File** メニューの **Save** をクリックします。
2. ファイルを保存するディレクトリ（フォルダ）を選択します。
3. ダイアログ ボックスの一番下のテキスト ボックスに「tut2」と入力します。
4. **Save** をクリックします。
5. モデル ウィンドウをクリックしてアクティブにします。
6. **File** メニューの **Close Window** をクリックします。

チュートリアル 3: テキストを使ったモデルの作成

このチュートリアルでは、テキスト作成ツールを使ったモデルの作成について、別の方法を説明します。

名前によるモデルの作成

テキスト作成ツールを使うと、その化合物名を指定してモデルを作成できます。モデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 作成ツールバーでテキスト作成ツールテキストツールから作成  を選択します。
2. モデル領域内の任意の場所をクリックします。
3. 表示されたテキスト ボックスに化合物名（たとえば、cyclohexane）を入力します。
4. Enter キーを押します。モデル ウィンドウにモデルが表示されます。

原子の置換

シクロヘキサン モデルを使用し、水素原子を炭素原子に変更します。

1. テキスト作成ツール  をクリックします。
2. 水素原子をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. 大文字の「C」と入力し、Enter キーを押します。水素原子が炭素に変化します。

注意: 元素記号と部分構造名は、大文字と小文字の区別があります。炭素原子を作成するには大文字の **C** を入力してください。

自動結合調整がオンの場合は、炭素の原子価が水素で満たされます。“[原子の調整](#)” ページ 29 を参照してください。

テキスト ツールは、選択しなくても使えます。移動ツールを使ってダブルクリックすると、テキスト ツールでクリックするのと同じ効果があります。たとえば、この方法でさらに 2 つの水素原子を置き換えます。

1. 回転ツール  を選択します。これはモデルを回転させて、作成中のモデルをよく見るためです。
2. 移動ツール  でさらに 2 つの水素原子をダブルクリックして、メチル基に変換します。

ヒント: 前にテキスト ツールで入力した “C” が、変更を加えるまではデフォルトとして残っています。テキスト作成ツールでダブルクリックするだけで済みます。

ファイルの保存

ファイルを保存するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Save As** をクリックします。
2. 「tut3a」と入力します。
3. ファイルを保存するディレクトリを選び、**Save** ボタンをクリックします。

tut3b という名前でモデルのコピーを保存します。

以上 2 つのモデルは、後のチュートリアルで使います。

ラベルを使ったモデルの作成

テキスト ボックスに原子ラベル（元素記号と番号）を入力する方法でもモデルを作成できます。

たとえば、下図の 4-メチル-2-ペンタノールのモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

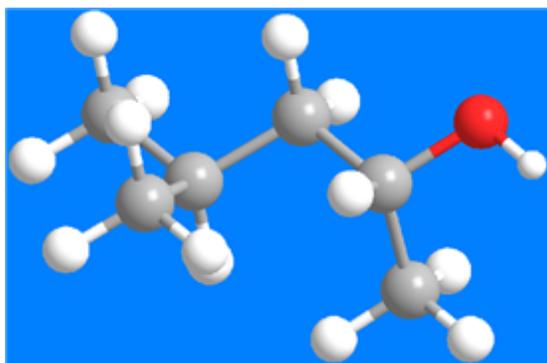


図 17.9: テキスト ボックスによるモデルの作成

1. File メニューの **New** をクリックするか、標準ツールバーの新規作成ツールをクリックします。
2. テキスト作成ツール  をクリックします。

3. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
4. テキスト ボックスに、「CH₃CH(CH₃)CH₂CH(OH)CH₃」または「4-methyl-2-pentanol」と入力します。
ラベルの入力には、構造に名前を付けるのと同じ規則を使用してください。最も長い炭素鎖を中心とし、他の原子団を置換基として指定します。置換基は括弧に入れて、結合相手の原子の後に記入します。
5. Enter キーを押します。

 **ヒント:** テキスト作成ツールでは、SMILES 表記の構造を、キーボードから入力するか他の文書から切り貼りすることもできます。

Name=Struct

このモデルを作成するもう 1 つの方法は、Name=Struct を使用する方法です。

Name=Struct でモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. ChemDraw パネルの空白部分を右クリックし、コンテキスト メニューで **Structure**、**Convert Name to Structure** の順に選択します。
2. Insert Structure ダイアログ ボックスに「4-methyl-2-pentanol」と入力し、OK をクリックします。
ChemDraw パネルに構造式が表示されます。
3. モデルがモデル ウィンドウに表示されるようにするには、ChemDraw パネル上部で LiveLink を選択しておきます。

 **ヒント:** 一時的に選択ツールをアクティブにするには、キーボードの文字 S を押したまま作成ツールのいずれかで操作を行います。

立体化学構造

ラベルによるモデルの作成では、立体化学構造を指定することはできません。たとえば、1,2-ジメチル シクロペンタンはデフォルトでトランス型の配座になります。ただし、デフォルトの構造式を修正してシス型にすることができます。

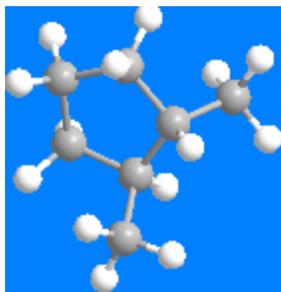


図 17.10: テキスト ボックスによるさらに複雑なモデルの作成

説明のため、最初にデフォルトの構造式を作成します。

1. File メニューの **New** をクリックします。

2. テキスト作成ツール  をクリックします。
3. モデル ウィンドウの空白部分をクリックします。
4. 「1,2-dimethyl cyclopentane」と入力します。
5. Enter キーを押します。トランス型が表示されます。
6. Edit メニューの **Select All** をクリックします。
7. Structure メニューの **Clean Up** をクリックします。

これをシス型に反転します。

1. 選択ツール  をクリックします。
2. C(1) を選択します。
3. Structure メニューの **Invert** をクリックします。

シス型が表示されます。分子の反転後、モデルを回転させると、異性体同士の違いを見ることができます。

部分構造の使用

単純な構造の作成にはラベルが役に立ちます。しかし、より複雑で大きな構造を作成する場合は、ラベルに加えて、あらかじめ定義された部分構造を使うと作成がもっと容易になります。

Chem3D では 200 以上の部分構造があらかじめ定義されています。これらは、一般に用いられる有機化合物をほぼ網羅しています。

 **ヒント:** あらかじめ定義された部分構造は、*substructures.xml* ファイルにリストされています。このリストを表示するには、**View**、**Parameter Tables**、**Substructures** の順に選択します。テキスト ボックスに入力するテキストは大文字と小文字が区別されます (Substructures テーブルに記載されているとおり正確に入力する必要があります)。

部分構造を使ってニトロベンゼンのモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツール  をクリックします。
3. モデル ウィンドウの空白部分をクリックします。
4. テキスト ボックスに「Ph(NO2)」と入力します。
5. Enter キーを押します。ニトロベンゼンのモデルが表示されます。

この例で使用する部分構造はフェニル基です。“Ph” と表記されます。部分構造は他の部分構造との特定の結合点と共に定義されています。フェニル基の結合点は C(1) です。

ペプチドのモデルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツール  をクリックします。
3. モデル ウィンドウ内の空白部分をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。

- 「H(Ala)12OH」と入力し、Enter キーを押します。
- モデルを回転して、 α ヘリックス型が形成されていることを確認します。

モデル表示の変更

モデル表示タイプを変更するには、次の操作を行ってください。

- モデル表示ツールバーのモデル表示モード ツールの右側にある矢印をクリックします。
- モデル タイプとして **Wire Frame** を選択します。

 **ヒント:** *Display Mode* アイコンをクリックする方法もあります。その後でクリック操作を行うと *Display Mode* の各オプションが順次切り替わります。

- 回転ツール  を選択し、ヘリックスの中心を上から見るような向きにモデルを回転させます。
- モデル表示モード ツールを使い、モデル形式として **Ribbons** を選択し、タンパク質によく使われるもう 1 つの表示形式を確認します。

モデルの検証

チュートリアル 4: 立体配座の検証

このチュートリアルでは、立体エネルギー値を用いて重なり型エタンとねじれ型エタンの立体配座を比較します。まず、ねじれ型の立体配座を作成し、立体エネルギーを計算します。次に、重なり型の立体配座について同様に操作します。その後、2 つの立体エネルギー値を比較します。

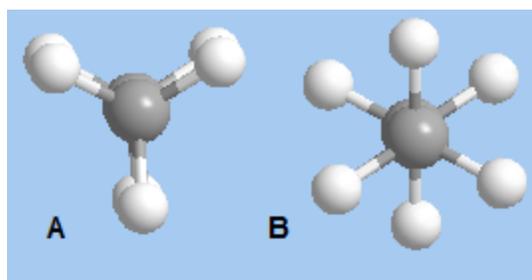
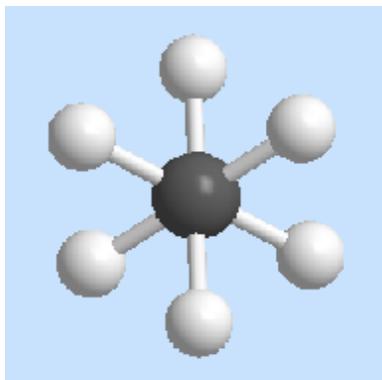


図 17.11: 重なり型エタン (A) とねじれ型エタン (B) の立体エネルギーをこのチュートリアルで計算します。

ねじれ型の立体配座を作成するには、次の操作を行ってください。

- 単結合ツール  を使用して、モデル ウィンドウでエタンのモデルを作画します。
- 作成ツールバーで回転ツール  を選択します。
- クリックしてドラッグすることでモデルを回転させます。
- エタンの末端から見た図が表示されるまで回転します。

このように隣接した炭素に結合している水素原子が互いに最も離れた位置にあるねじれ型の立体配座は、エタンの最も安定した立体配座です。この立体配座では位置エネルギーが最小になります。



この立体配座の立体エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations**、**MM2**、**Compute Properties** の順に選択します。**Compute Properties** ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Properties** タブで、**Pi Bond Orders** および **Steric Energy Summary** を選択します。

✔ **ヒント:** 特性を選択するには、*Shift* キーを押しながらクリックします。

3. **Run** をクリックします。

モデル ウィンドウの下に **Output** ボックスが開き、立体エネルギーの計算結果が表示されます。最後の行にはエネルギーの合計が表示されます。

```

Output
MM2 Calculation completed successfully
-----MM2 Properties-----
Note: All parameters used are finalized (Quality = 4).
  Stretch:          0.0000
  Bend:             0.0005
  Stretch-Bend:     0.0000
  Torsion:          0.0000
  Non-1,4 VDW:     0.0000
  1,4 VDW:          0.9761
Total Energy:      0.9766 kcal/mol

The total energy for this frame:    0.977 kcal/mol
Calculation ended
-----
  
```

✔ **注意:** エネルギー項の値は、計算に使用するプロセッサにより異なります。

エタン モデルを重なり型立体配座にするには、二面角（ねじれ角とも言う）を回転させます。これはモデルの立体配座空間の解析によく用いられる方法です。

二面角を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Structure、Measurements、Generate All Dihedral Angles** の順に選択します。

モデルのすべての二面角の測定値が、Measurement テーブルに追加されます。二面角を変更する際に個々の原子を確認できるようにするには、選択された原子にシリアル番号と元素記号を表示します。

2. Measurement テーブルで、表示されているいずれかの二面角（たとえば H(3)-C(1)-C(2)-H(8)）の **Display** チェック ボックスをオンにします。

 **注意:** Measurements ウィンドウで選択している原子をモデルで表示するには、View メニューの **Model Display** を選択し、次に **Show Serial Numbers** および **Show Atom Symbols** を選択します。

3. 回転ツール  の横にある矢印をクリックし、回転ダイヤルの一番上にある青いバーをドラッグしてダイヤルを切り離します。
4. 回転ダイヤル下部のいずれかの二面角回転ボタンをクリックします。
5. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - a. 角度表示ボックスに値「0.0」と入力します。
 - b. 緑のボタンをクリックしてドラッグし、回転ダイヤルを 0.0 に合わせます。

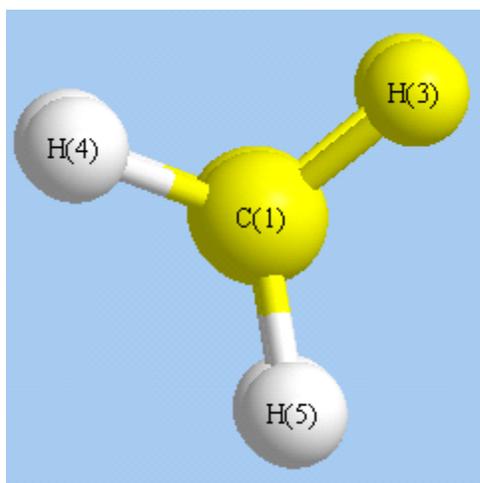


図 17.12: 二面角の回転

立体エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. **Calculations、MM2、Compute Properties** の順に選択します。

 **注意:** Properties タブのデフォルトは、前に計算したときのままになっているはずです。

2. **Run** をクリックします。

Output ボックスの最後の行が表示されます。

```

Output

MM2 Calculation completed successfully
-----MM2 Properties-----
Note: All parameters used are finalized (Quality = 4).
  Stretch:                0.0000
  Bend:                   0.0005
  Stretch-Bend:           0.0000
  Torsion:                 2.1330
  Non-1,4 VDW:            0.0000
  1,4 VDW:                1.7726
Total Energy:             3.9061 kcal/mol

The total energy for this frame:    3.906 kcal/mol
Calculation ended
-----
  
```

図 17.13: Output ボックス

注意: エネルギー項の値は、計算に使用するプロセッサの種類によって、わずかながら変化することがあります。

重なり型配座の立体エネルギー (~3.9 kcal/mole) は、ねじれ型配座の立体エネルギー (~1 kcal/mole) より大きくなっています。これは、ねじれ型配座が実際に存在する構造である可能性が高いことを意味します。

チュートリアル 5: 二面角ドライバ

二面角ドライバは、選択する最大 2 つの二面角の角度を変えることによって、モデルの配座エネルギーをグラフに表示します。各二面角の値で、モデルは MM2 力場に基づきエネルギーが最小化され、モデルの立体エネルギーが計算され、グラフ表示されます。計算終了後、データを調べ、立体エネルギー値が最小の立体配座を特定し、これを開始点としてさらに微調整を行って安定した定常点を見つけることができます。

このチュートリアルでは、エタンに対して二面角ドライバを用いた単一角グラフを示します。

1. エタンのモデルを作成します。
2. 炭素-炭素結合を選択します。
3. Calculations、Dihedral Driver、Single Angle Plot の順に選択します。

二面角ドライバ グラフが開きます。計算が終了すると、エネルギーと選択した結合を軸とする回転角を比較するグラフが表示されます。

立体配座を表示するには、次の操作を行ってください。

1. グラフで、曲線に沿った任意の地点をクリックします。モデル内の二面角の結合が、グラフで選択した角度だけ回転します。
2. 一定の回転角の範囲で立体配座エネルギーを調べるには、モデルの表示中にグラフをクリックしてドラッグします。

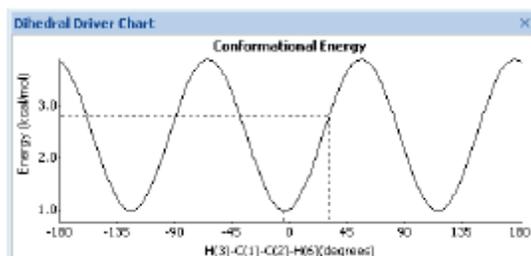


図 17.14: エタンの二面角ドライバのシングルプロット グラフ

注意: 二面角は、5 度単位で 360 度、合計 72 の立体配座を使って回転するので、それを使ってグラフを作ります。Output ウィンドウで、各ポイントの最小化エネルギー値を見ることができます。

もう一方の二面角（結合の他端）を回転させるには、二面角グラフを右クリックし、**Rotate other End** をクリックします。

最小化を実行した再計算

簡易な回転では、二面角回転時に発生する可能性のある他の立体配座の変化は考慮されません（変角エネルギーなど）。このため、モデルでは、さまざまな結合に高い歪みのエネルギーが示されたり、原子間に立体配座の歪みが生じることがあります。この結果、モデルで実際の分子が正確に表示されず、それに対応して **Dihedral Driver Chart** ダイアログ ボックスのグラフも正確でなくなる可能性があります。正確なグラフを得るために、エネルギーを最小化して再計算することを検討してください。

エネルギーを最小化してグラフを作成するには¹**Dihedral Driver Chart** ダイアログ ボックスを右クリックして、**Recompute with Minimization** を選択します。

2 つの二面角の回転

2 つの二面角を回転させるには、次の操作を行ってください。

1. Shift キーを押しながら 2 つの隣接した結合をクリックして選択します。

この場合、中央の原子の位置は変わりません。

2. **Calculations, Dihedral Driver, Double Angle Plot** の順に選択します。

Output ウィンドウが表示されます。計算が終わると、グラフにシート 1 とシート 2 が表示されます。

¹

計算化学では、エネルギー最小化方式を使用して分子および固体の平衡構成を計算します。

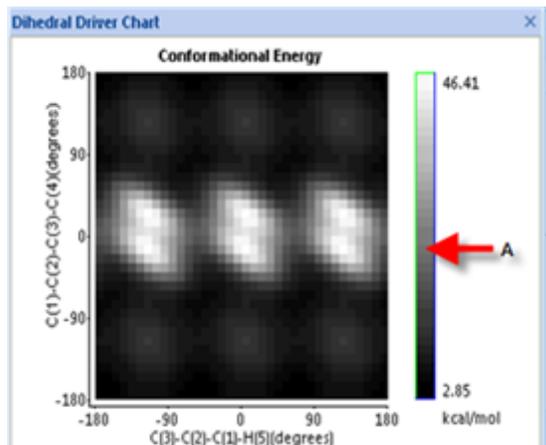


図 17.15: 二面角ドライバ グラフ; A: 凡例バー

注意: この結果は次のようにして得たものです。まず、一方の角を固定して、もう一方の角を 10 度刻みで 360 度回転させます。次に、固定した角を 10 度進め、同じ操作を繰り返します。

任意の点の立体配座/エネルギーを調べるには、グラフ内の任意の点をクリックします。モデル表示が、選択した立体配座/エネルギーの両方の二面角に沿って回転します。

二面角グラフのカスタマイズ

グラフの色やデータの表示方法を変更できます。

凡例グラフ目盛の設定

デフォルトのグラフでは、データは線形目盛で表示されます。線形目盛から対数目盛に変更するには、次の操作を行ってください（二重の二面角グラフのみ該当）。

1. グラフ内の任意の場所を右クリックします。
2. コンテキストメニューから **Set Legend Function** を選択します。
3. 必要なログ オプションを選択します。それに応じてカラー マップも変化します。

軸の差し替え

二重角の二面角グラフでは、軸を差し替えることができます。グラフを右クリックし、**Exchange Axis** を選択します。

最小化を実行した再計算

モデルに歪んだ結合が含まれる場合（通常、原子の移動による）、エネルギーを最小化して二面角グラフを再計算することができます。グラフをクリックして、**Recompute with Minimization** を選択します。

ピークの切り捨て

二重の二面角グラフでは、異常立体配座の高エネルギー値を切り捨てて、より意味のある立体配座に焦点を合わせることができます。凡例の上限と下限の値を変更するには、凡例バーの上部と下部をクリックしてドラッグします。これでカラー マップが変化します。カラー マップの任意のポイントををクリックすると、その位置のエネル

ギー/立体配座が得られます。また、上限をドラッグして、上限値よりも大きいエネルギー値を持つすべての立体配座を無視すれば、ピークを切り捨ててローカル ミニマムに焦点を合わせることもできます。

グラフの色の設定

グラフを右クリックして、計算に使う回転の間隔を設定します。リセットすると、新しい間隔値で二面角計算が繰り返されます。グラフ、背景、座標、ラベルの表示色も選択できます。

グラフの解像度の設定

デフォルトでは、配座エネルギーは 5 度単位で計算されます。解像度を変更するには、グラフを右クリックして **Set Resolution** を選択し、リストから新しい値を選択します。

グラフのコピー、保存および印刷

グラフを右クリックして、次のオプションから選択します。

- **Copy Picture**: グラフをクリップボードにコピーします。
- **Copy Data**: グラフ データをクリップボードにコピーします。
- **Save Picture**: 画像を画像ファイルとして保存します。
- **Print**: グラフを印刷します。

チュートリアル 6: モデルのオーバーレイ

オーバーレイは 2 つのモデル間で構造の類似性を比較したり、同じモデルの配座を比較するために使われます。Chem3D では 2 種類のオーバーレイ手法を使用できます。高速オーバーレイ アルゴリズムまたは最小化計算に基づいた手動方式を使用できます。

このチュートリアルでは高速オーバーレイ手法について説明します。最小化方式については、「[オーバーレイによるモデルの比較](#)」 ページ 63 を参照してください。最小化手法ではより正確な結果が得られますが、高速オーバーレイ アルゴリズムの方が高速です。このチュートリアルで紹介する 2 つの例では、メタンフェタミン分子をエピネフリン (アドレナリン) 分子上に重ねて、構造上の類似点を比較します。

2 つの分子を重ね合わせ、オーバーレイするには、まずそれらを作成する必要があります。

1. **File** メニューの **New** をクリックします。
 2. **View** メニューの **Model Explorer** をクリックします (Model Explorer がまだ開いていない場合)。
 3. 作成ツールバーからテキスト作成ツール  を選択し、モデル ウィンドウ内をクリックします。テキストボックスが表示されます。
 4. 「Epinephrine」 ('E' は大文字) と入力し、Enter キーを押します。エピネフリン分子がモデル ウィンドウに表示されます。
-  **注意**: 分子の名前を大文字で始めると、Chem3D で構造式の生成に *Substructures* テーブルが使用され、構造式の名前が *Model Explorer* に表示されます。それ以外の場合、*Name>Struct* により構造式が生成され、*'fragment1'* が表示されます。
5. モデル ウィンドウでもう一度クリックし、テキスト ボックスをもう 1 つ表示します。
 6. テキスト ボックスで、「Epinephrine」という単語を「Methamphetamine」という単語に置換してから、Enter キーを押します。

Methamphetamine が Model Explorer に表示されます。

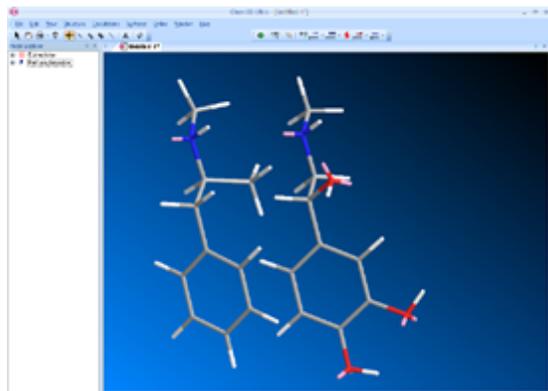


図 17.16: 2 つのフラグメント

2 つのフラグメントが混然としている場合、これらを分離してオーバーレイの実行結果をクリアにすることを検討します。

いずれかのフラグメントを移動するには、次の操作を行ってください。

1. Model Explorer でフラグメント名をクリックします。
2. 移動ツール  を使い、モデル ウィンドウ内のフラグメントをクリックしてドラッグします。

フラグメントをオーバーレイするには、次の操作を行ってください。

1. 移動ツール  を使い、モデル ウィンドウの空白領域をクリックして、すべてのフラグメントを選択解除します。
2. Model Explorer ウィンドウの Epinephrine フラグメントをクリックして選択します。
3. Model Explorer でフラグメントを右クリックし、**Overlay** の **Set Target Fragment** をクリックします。そのフラグメントがターゲットとして選択されます。

 **注意:** ターゲットとしてのフラグメントを選択解除するには、**Overlay** の **Clear Target Fragment** をクリックします。

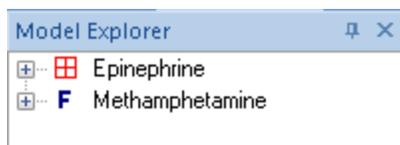


図 17.17: ターゲットが選択された状態の Model Explorer

4. Model Explorer ウィンドウの Methamphetamine フラグメントを右クリックします。
5. コンテキスト メニューで **Overlay** メニューの **fast overlay** をクリックします。2 つのフラグメントが重ね合わされます。

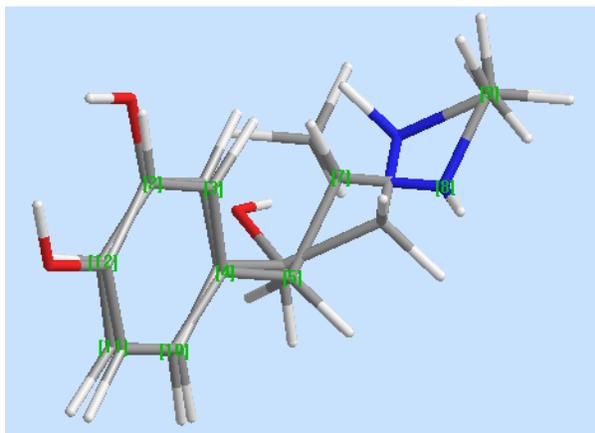


図 17.18: オーバーレイしたフラグメント

チュートリアル 7: モデルの整列

Align コマンドを使用すると、フラグメントを別のフラグメントに対して任意の方向や距離に配置できます。整列計算が完了するまで、各フラグメントの移動はできません。

Align コマンドは、あるフラグメントの原子と別のフラグメントの原子との間の距離が 2 つ以上指定されている場合に使用できます。この距離は Measurement テーブル内の Optimal フィールドのセルに入力されます。整列を使用すれば、2 つの類似したポリマー鎖上にある、類似した脂肪親和性と親水性の領域の、結合のシミュレーションを実行できます。

このチュートリアルでは、Align コマンドを 2 つのポリマー鎖に対して使います。

最初のポリマー鎖の作成

1. 新規のモデル ウィンドウを開き、テキスト作成ツール  を選択します。
2. モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
3. テキスト ボックスに「(AA-mon)3(C2F4)4(AA-mon)3H」と入力します。
4. Enter キーを押します。

ポリアクリル酸/ポリテトラフルオロエチレン ブロック共重合体がモデル ウィンドウに表示されます。(AA-mon)3 というテキストは、3 つのアクリル酸の繰り返しを含むポリマー セグメントに変換されます。(C2F4)4 というテキストは、4 つのテトラフルオロエチレンの繰り返しを含むポリマー セグメントに変換されます。

鎖のコピーの作成

モデル ウィンドウ内の最初のモデルの右上をクリックします。入力済みのテキスト ボックスが表示されるので、Enter キーを押します。第二のポリマー分子が表示されます。

鎖の向き指定

1. モデル ウィンドウの空白部分をクリックして、モデル ウィンドウの原子の選択を解除します。
2. 回転ツール  の下向き矢印をクリックして回転ダイヤル ツールを開きます。

3. Y 軸を選択し、ダイヤルが 55 度になるまでドラッグします。

 **ヒント:** 正確に 55 度にするには、数値ボックスで値を編集してください。編集が済んだら、Enter キーを押します。ダイヤルの右端にある値がボックスの値と同じになります。

結果は次のようになります（お使いになっているコンピュータ上で、第 2 のモデルの表示位置は、この図と同じにならないかもしれません）。

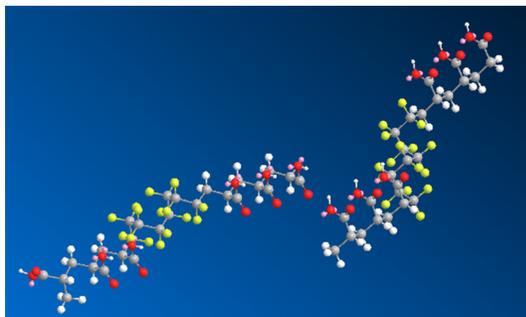


図 17.19: モデルの整列

最適距離の設定

最適距離は、分子が整列する距離を決定します。ここでは、この距離を 5 Å に設定します。

1. Model Explorer で AA-mon 2 原子団の Fragment1 にある C(6) を選択します。
2. Fragment 2 (AA-mon 12 原子団) にある C(98) 原子を見つけ、Ctrl キーを押しながらクリックして選択します。
3. Structure、Measurements、Display Distance Measurement の順に選択します。
C(98)-C(6) 原子対が Measurement テーブルに表示されます。
4. Optimal セルをクリックします。
5. 「5」と入力し、Enter キーを押します。

C(6) と C(98) の間の最適距離として 5.000 Å が指定されました。

正しい整列を得るには、少なくとも 4 組の原子対を指定する必要があります。フラグメントにある該当する原子対についてステップ 1 ~ 5 を繰り返してください。たとえば、各原子団から 1 対ずつ選択した場合、リストは次のようになります。下表の実際の値は、異なることがあります。

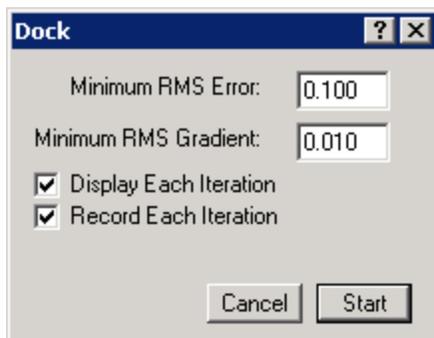
原子	実際	最適
C(1)-C(93)	21.2034	5.0000

原子	実際	最適
C(98)-C(6)	21.1840	5.0000
C(104)-C(12)	21.2863	5.0000
C(108)-C(16)	21.1957	5.0000
C(22)-C(114)	20.6472	5.0000
C(28)-C(120)	20.7001	5.0000
C(34)-C(126)	20.1410	5.0000
C(133)-C(41)	20.3559	5.0000
C(45)-C(137)	20.3218	5.0000
C(50)-C(142)	20.4350	5.0000

第 2 のポリマー分子が作成された際、Actual セルの距離は、最初のポリマー分子に相対的な第 2 のポリマー分子の位置によって変化するため、異なる場合があります。

整列計算を開始するには、次の操作を行ってください。

1. **Structure** メニューの **Align** をクリックします。Align ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Minimum RMS Error** の値として「0.100」、**Minimum RMS Gradient** の値として「0.010」と入力します。



RMS Error か RMS Gradient のどちらかが Minimum RMS Error と Minimum RMS Gradient の数よりも少なくなると、ドッキング計算は終了します。

3. **Display Each Iteration** をクリックします。

これによりドッキング計算の結果が毎回表示され、フラグメントがどれだけ移動したかがわかります。

4. **Start** をクリックします。

整列計算が実行されている間、一方の分子は静止したままで、もう一方の分子が移動することに注意してください。

あらかじめ設定された RMS 値に達する前に整列計算を停止するには、計算ツールバーの **Stop Calculation** をクリックします。整列と記録の両方が停止します。ステータスバーに、計算ごとの値が表示されます。

次のイメージは、整列計算が終了したときの原子対間の距離を示しています。Actual セルの距離は、Optimal セルの距離の値に非常に近くなっています。

Measurement				
	Display	Atoms	Actual (° / Å)	Optimal (° / Å)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	C(6)-C(98)	6.1484	5.0000
2	<input checked="" type="checkbox"/>	C(1)-C(93)	6.0991	5.0000
3	<input checked="" type="checkbox"/>	C(12)-C(104)	5.1307	5.0000
4	<input checked="" type="checkbox"/>	C(16)-C(108)	4.6254	5.0000
5	<input checked="" type="checkbox"/>	C(22)-C(114)	4.3976	5.0000
6	<input checked="" type="checkbox"/>	C(28)-C(120)	4.1512	5.0000
7	<input checked="" type="checkbox"/>	C(34)-C(126)	4.7687	5.0000
8	<input checked="" type="checkbox"/>	C(41)-C(133)	5.1487	5.0000
9	<input checked="" type="checkbox"/>	C(137)-C(45)	5.4206	5.0000
10	<input checked="" type="checkbox"/>	C(50)-C(142)	6.0719	5.0000

図 17.20: ドッキング後のポリマーの測定値

ドッキング後の結果がここで記述されたものと同じでなくても、異常ではありません。ドッキング計算開始時における 2 つのフラグメントまたは 2 つの分子の相対的な位置関係は、結果に影響することがあります。より正確な結果を得るには、Minimum RMS Gradient を小さくします。

チュートリアル 8: 軌道の表示

一般に、最高被占分子軌道 (HOMO) と最低空分子軌道 (LUMO) は、分子の反応性に影響する最も重要な軌道です。ここでは二重結合の反応性を、二重結合を持つ最も単純な分子であるエチレンで調べることにします。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. エチレンのモデルを作成します。
3. **Calculations**、**Extended Hückel**、**Calculate Surfaces** の順に選択します。

最高被占分子軌道 (HOMO) はデフォルトで表示されます。HOMO を表示するには、次の操作を行ってください。

1. **Surfaces**、**Choose Surface**、**Molecular Orbital** の順に選択します。
2. **Surfaces** の **Select Molecular Orbital** をクリックして HOMO/LUMO のオプションを表示します。HOMO (N=6) を選択します。パイ結合軌道表面が表示されます。

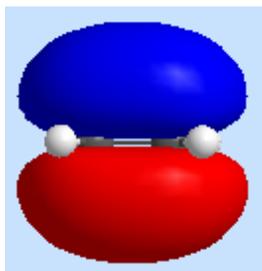


図 17.21: パイ結合軌道表面

☑ **注意:** 軌道が見えるよう、必要に応じて分子を回転させてください。

3. LUMO を表示するには、Surfaces の **Select Molecular Orbital** をクリックし、LUMO (N=7) を選択します。パイ反結合軌道面が表示されます。

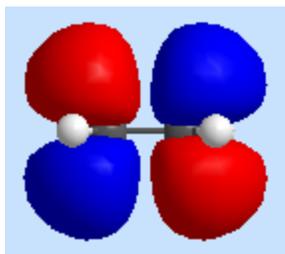


図 17.22: パイ反結合軌道表面

チュートリアル 9: 表面のマッピング

このチュートリアルでは、Gaussian によるエネルギーの最小化と計算値を分子表面にマップして表示する方法を説明します。Extended Hückel の計算でも同じ最小化を実行できます。

アリルラジカルは、共鳴で安定性が高まる簡単な例です。



図 17.23: アリルラジカル

スピン密度面でラジカルを調べるため、最初にアリルラジカルを作成します。

1. **File** メニューの **New** をクリックします。
2. ChemDraw パネルの空白領域を右クリックし (表示されていない場合は、**View** メニューの **ChemDraw Panel** をクリック)、**Structure** メニューの **Convert Name to Structure** をクリックします。
3. Insert Structure テキスト ボックスに「1-propene」と入力し、**OK** をクリックします。1-プロピレンの分子が表示されます。
4. モデル ウィンドウで選択ツール  を使用して H9 水素を選択します。

5. Delete キーを押します。

ダイアログ ボックスが開いて、自動結合調整をオフにするかどうかを尋ねるダイアログ ボックスが表示されます。Chem3D は、この原子価、つまり炭素原子に 4 つの置換基が存在することを認識しています。

6. Turn Off Automatic Rectification をクリックします。プロピレンラジカルが表示されます。

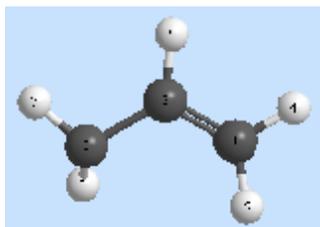


図 17.24: プロピレンラジカル モデル

次に、最小化を実行します。

1. **Calculations**、**Gaussian Interface**、**Minimize (Energy/Geometry)** の順に選択します。
2. **Routine** タブで、方式を **PM3** に設定し、波動関数を **Open Shell (Unrestricted)** に設定します。
3. **Wave Function** を **U-Unrestricted Open-Shell** に設定します。
4. 同じく **Routine** タブで、**Spin Multiplicity** を **2** に設定します。

分子がラジカルなので、Spin Multiplicity を 2 にする必要があります。

スピン密度を表示する一番良い方法は、総電荷密度表面にマッピングすることです。これにより、総電荷量のうちの程度が不対電子（ラジカル）によるものかがわかります。

総電荷密度面にマッピングされたスピン密度を見るには、次の操作を行ってください。

1. **Properties** タブで、**Molecular Surfaces** と **Spin Density** を選択します。
2. **Run** をクリックします。

計算が終了したら、回転ツール  を選択し、モデルをいろいろと回転させて観察してください。完全に平面状になっていることがわかるはずです。

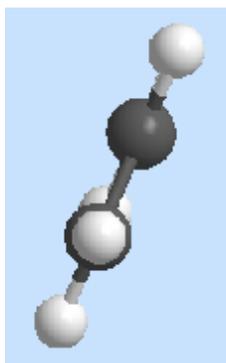


図 17.25: 最小化されたモデルの表示

このチュートリアルを完遂するためには、いくつかの表面設定を調整する必要があります。作業しやすいように、表面ツールバーをアクティブにします。View、Toolbars、Surfaces の順に選択します。

1. 表面ツールバーで Surface  をクリックして、Total Charge Density を選択します。アイコンが、選択された表面を表すものになります。
2. 表面ツールバーで Display Mode  をクリックして、Translucent を選択します。
3. 表面ツールバーで Color Mapping  をクリックして、Spin Density を選択します。
4. 表面ツールバーで Isocharge  を選択します。同値ツールが表示されます。

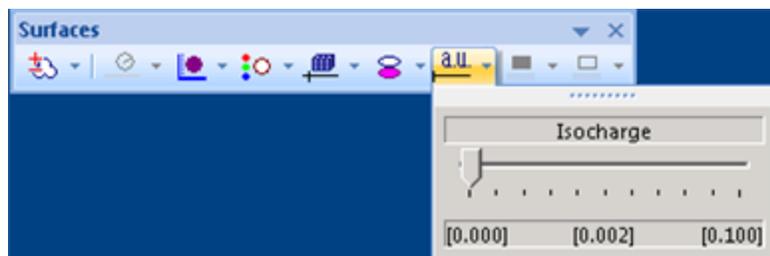


図 17.26: 同値ツールの使用

5. 同値を 0.050 に設定します(中央の数値が現在の設定です)。

 **注意:** 同電荷値は表面の生成に使われます。この値を調整して表示をカスタマイズできます。次のイメージはこの値を 0.0050 に設定した場合の表示です。

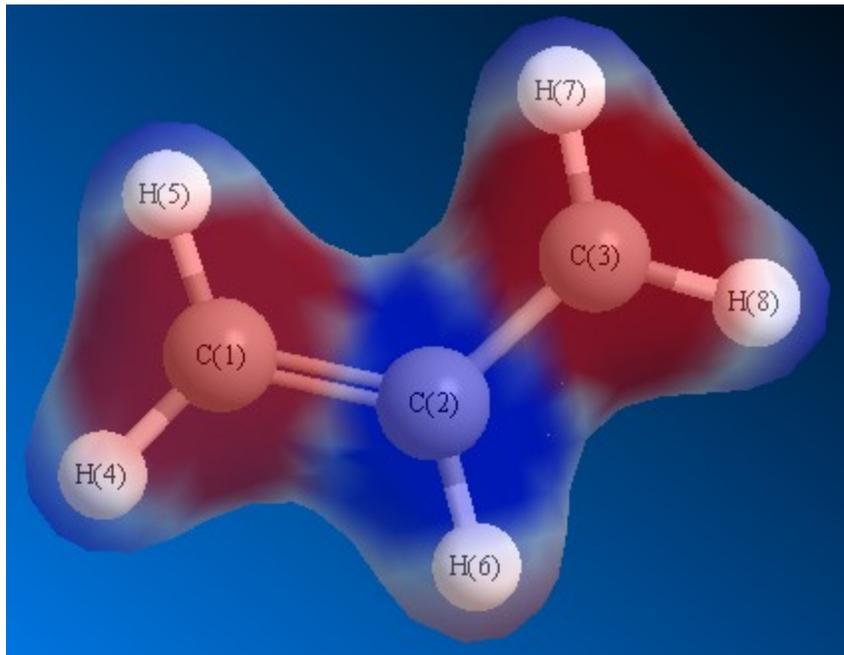


図 17.27: 総電荷密度表面の表示

表面の大部分は灰色です。これは不対電子からの電荷がほとんどないことを示します。両端の各炭素の中心の赤い領域は、予期されるラジカルの非局在化（両端の各炭素の上にラジカルの属性が同時に現れる）を視覚的に表しています。

次に、Surfaces アイコン  をクリックして表面をオフに切り替えます。

スピン密度

ここでは、電荷密度表面にマップしないで、そのままのスピン密度を直接求めます。

1. 表面ツールバーで **Surface**  をポイントし、**Total Spin Density** を選択します。
2. **Surfaces**、**Display Mode**、**Wire Mesh** の順に選択します。
3. **Isospin** を 0.001 に設定します。

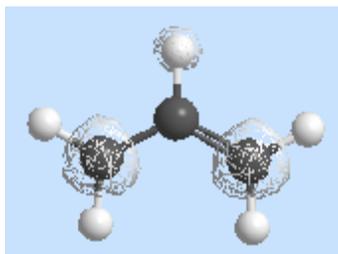


図 17.28: ワイヤ メッシュ表面

予期されるとおり、両端の各炭素に不対電子スピンの大きな集中が見られますが、中央の水素にもわずかながら見られます。このような微量のスピンドensityはあまり意味がありません。上の例でマップ表示したときには表示さえされませんでした。しかし、計算上は存在し、実際にも存在します。

チュートリアル 10:部分電荷

分子の各原子の積分電荷により分子全体に影響を及ぼします。この積分電荷の影響は、原子の形式電荷として知られています。

分子の電荷計算では、各原子の寄与する電子数が各原子核の陽子数から差し引かれます。

Chem3D では、一部の原子が非積分非局在電荷を持ちます。たとえば、ニトロベンゼンの 2 個の酸素原子はそれぞれ -0.5 の電荷を持っています。これは、2 つの N-O 結合に共有される電子が 1 個あるからです。より正確には、量子力学計算によって部分電荷（これも非積分）を求めることができます。

ところが、チュートリアル 9 で示されるように分子の電子は個々の原子に属さない領域を占め、原子間を動き回るので、異なる原子核に引き寄せられます。実際、結合は異なる原子核間での電子の動きの表れです。

電子は分子の 1 つの原子の軌道を占めるわけではないため、各原子の実際の電荷は積分値ではなく、分子内の、ある瞬間に原子の価電子殻を占めている電子の平均数を基にしています。この平均数を分子内の陽子数から差し引くことによって、各原子の部分電荷が決まります。

分子中の原子の部分電荷を視覚化することは、モデルの反応性を理解するもう 1 つの方法です。通常、原子の部分電荷が大きいほど、部分電荷が異符号の原子と結合しやすくなります。

注意: Chem3D は、モデル ウィンドウと ChemDraw パネルで原子に割り当てられた形式電荷を認識します。そして、モデル内の非局在化が生じているすべての原子について、非局在電荷を計算します。形式電荷と非局在電荷を表示するには、マウスを荷電原子の上に置きます。

Extended Hückel、MOPAC、Gaussian などの理論を使い、各電子の部分電荷を計算することができます。次の例では、フェノールの部分電荷を Extended Hückel によって計算しています。

1. File メニューの **New** をクリックします。
2. テキスト作成ツールでモデル ウィンドウ内をクリックします。
3. テキスト ボックスに「PhOH」と入力し、Enter キーを押します。フェノール分子が作成されます。
4. Extended Hückel で電荷を計算するには、**Calculations**、**Extended Hückel**、**Calculate Charges** の順に選択します。

Atom Property テーブルが開き、結果が表示されます。このテーブルを随時表示するには、View メニューの **Atom Property Table** をクリックします。

部分電荷の表示

階調色でモデル内の原子の部分電荷を表すことができます。たとえば、正の強い電荷を明るい赤で表し、負の強い電荷を青で表します。より弱い正または負の電荷は、その値に応じて、色の範囲内のどこかで表します。部分電荷を表示するには、最初に電荷計算を実行する必要があります。

部分電荷を表示するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Model Settings** をクリックし、**Colors & Fonts** タブを選択します。

2. **Color by** の **Atom Properties** を選択します。
3. Atom Properties ドロップダウン リストから **Charge (Hückel)** を選択します。
4. 2 つのカラー バンドの 1 つを選択します。最初のバンドの範囲は青から赤です。2 番目のバンドは、色の範囲がより緻密です。
5. **min/max** テキスト ボックスで、色付けする計算の範囲を選択します。このモデルで計算された値の全範囲を選択するには、**Scan Value Range** をクリックします。
6. 現在のオプション設定でモデルを表示するには、ダイアログ ボックス下部の **Preview** チェック ボックスをオンにし、**Apply** をクリックします。
7. **OK** をクリックします。

選択した色のスケールに基づいて、すべての原子が色付けされます。負の部分電荷が大きい原子は深い青です。正の部分電荷が大きい原子は濃い赤です。電荷が 0 に近づくにつれて、原子の色が薄くなります。

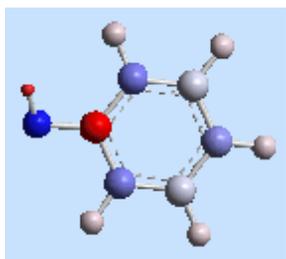


図 17.29: フェノールの部分電荷

フェノールでは一番強い負電荷は酸素原子にかかっています。一番強い正電荷は隣接する炭素原子に、続いて、隣接する水素原子にかかっています。分子の残りの部分は比較的薄い色に表示された原子で、部分電荷はゼロに近いといえます。

チュートリアルを開始する前に、結果がこのガイドと同じになるように、デフォルトの設定と適切な表示を選択することをお勧めします。

デフォルトの設定を使用するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Model Settings** をクリックします。
2. Model Settings ダイアログ ボックスの **Reset to Default** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

このチュートリアルと同じようにモデルを表示するには、次の操作を行います。

1. **View**、**Toolbars**、**Model Display** の順に選択します。
2. **Model Display** ツールバーの **Display Mode** ドロップダウン リストから **Cylindrical Bonds** を選択します。

計算エンジンの使用

チュートリアル 11: 回転異性体の分析

このチュートリアルでは、GAMESS を使用して、単純な分子の特定の結合に関する望ましい（最もエネルギーの小さい）配座異性体を特定します。配座異性体を特定するために、分子で立体配座解析を実行し、エネルギーがローカル ミニマムを超える配座異性体とグローバル ミニマムを超える配座異性体の 2 つの配座異性体でそれぞれ GAMESS 最小化計算を実行します。その後、計算結果を比較します。

分子として 2-フェニルアラニンを使用します。このチュートリアルの目的のために、原子に次のように番号を付けます。

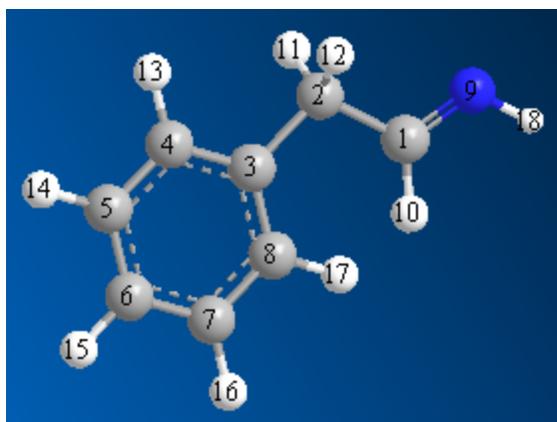


図 17.30: 2-フェニルアラニン

必要な結合を選択して、立体配座解析を実行する必要があります。これは、両方の GAMESS 最小化で使用されます。このチュートリアルでは、下図で赤く示されている結合を選択します。

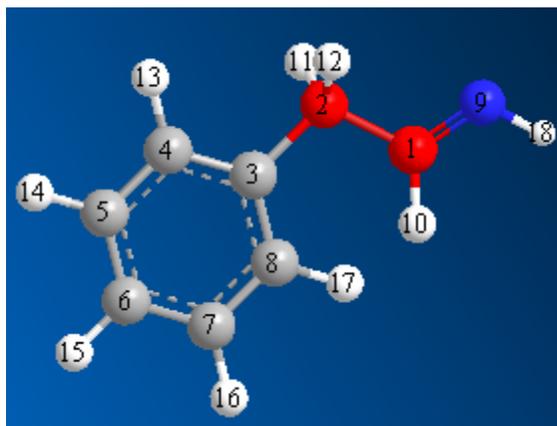


図 17.31: 赤で表示された C(1)-C(2) 結合

結合の配座異性体を分析する際、必要に応じて他の結合の角度を設定できます。このチュートリアルでは、C(1)-C(2)-C(3)-C(4) 二面結合角を次のように 90 度に変更します。

1. ChemDraw パネルに 2-フェニルアラニンを作画します。モデル ウィンドウに分子が表示されます。
2. **Structure**、**Measurements**、**Generate All Dihedral Angles** の順に選択します。Measurement テーブルが表示されます。
3. Measurement テーブルで C(1)-C(2)-C(3)-C(4) 結合を選択します。
4. Actual 列で C(1)-C(2)-C(3)-C(4) 結合の角度を 90 度に変更して、Enter キーを押します。

二面角の結合が設定されたので、C(1)-C(2) 結合について立体配座を実行します。

立体配座分析を実行するには、次の操作を行ってください。

5. モデル ウィンドウでオブジェクトの移動ツールを使用して、C(1)-C(2) 結合を選択します。
6. 立体配座分析を実行するには、**Calculations**、**Dihedral Driver**、**Single Angle Plot** の順に選択します。C(1)-C(2) 結合の配座エネルギーを示す二面角ドライバ グラフが開きます。

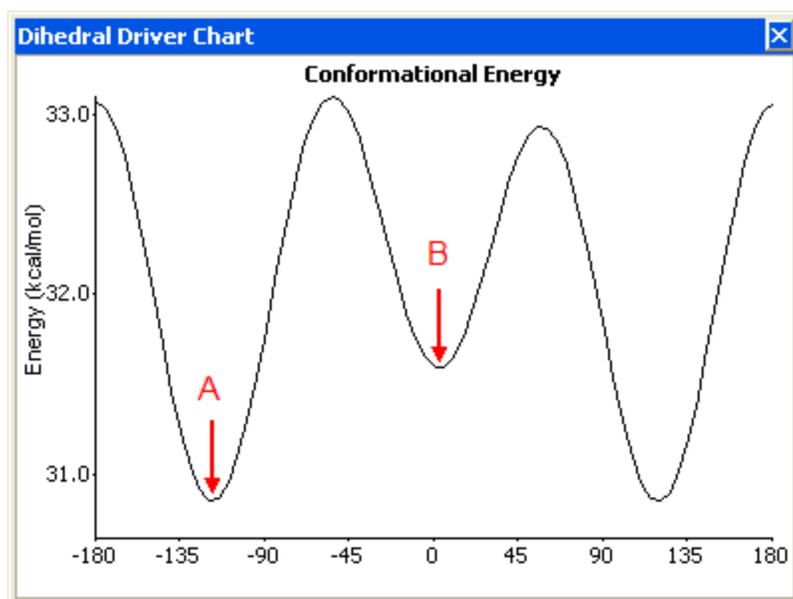


図 17.32: 2-フェニルアラニンの C(1)-C(2) 結合の二面角矢印は、A) 立体配座のグローバル ミニマム、B) 立体配座のローカル ミニマムを示します。

次に、2 つの配座異性体を選択し、それぞれで GAMESS 最小化を実行します。グローバル ミニマムを超える配座異性体を選択して開始します。

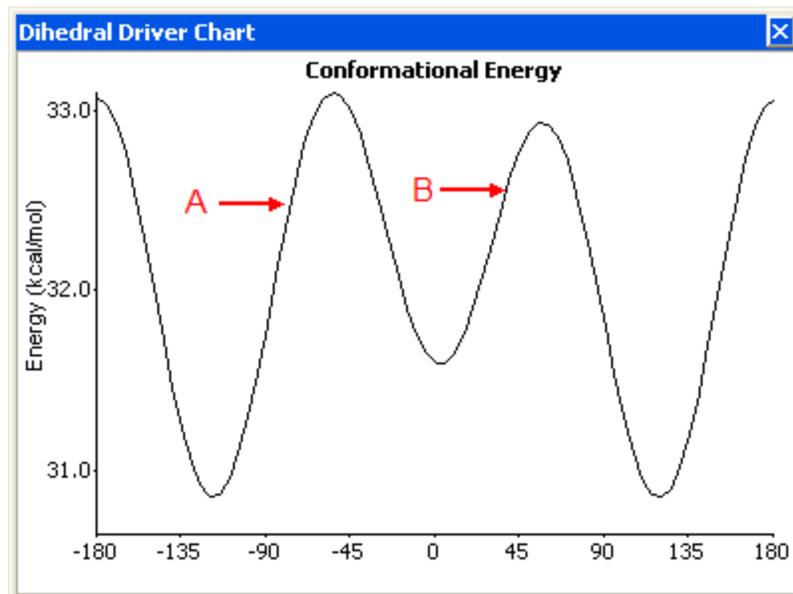


図 17.33: 配座異性体の位置を示す二面角グラフ。ポイント A を選択してグローバル ミニマムを計算し、ポイント B を選択してローカル ミニマムを計算します。

グローバル ミニマムを超える配座異性体で GAMESS 最小化を実行するには、次の操作を行ってください。

1. 二面角グラフで、グローバル ミニマムを超えるポイントをクリックします (たとえば、上図のポイント A)。
2. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Minimize** の順に選択します。GAMESS Interface ダイアログ ボックスが開きます。
3. ダイアログ ボックスで **Run** をクリックします。

出力ウィンドウにグローバル ミニマム エネルギーが表示されます (およそ -226273 Kcal/Mol)。

ローカル ミニマムを超える配座異性体で GAMESS 最小化を実行するには、次の操作を行ってください。

1. 二面角グラフで、ローカル ミニマムを超えるポイントをクリックします (たとえば、上図のポイント B)。
2. **Calculations**、**GAMESS Interface**、**Minimize** の順に選択します。GAMESS Interface ダイアログ ボックスが開きます。
3. ダイアログ ボックスで **Run** をクリックします。

ローカルの最小化の場合、結果はおよそ -226270 Kcal/Mol です。

望ましい配座異性体は、およそ 3 Kcal/Mol 低くなります。

チュートリアル 12: 回転する結合の計算

このチュートリアルでは、二面角ドライバを使用してビフェニルの C-C 結合の回転エネルギーを計算する方法を示します。二面角ドライバを 2 回実行します (最初は Minimization Energy をオンにして、次に Minimization Energy をオフにして)。

ビフェニルの作成

まず、ビフェニルのモデルを作成する必要があります。最も簡単な方法は、Name>Struct を使用する方法です。

1. 選択したテキスト ツールで、モデル ウィンドウ内をクリックします。テキスト フィールドが表示されます。
2. テキスト フィールドに「biphenyl」と入力し、Enter キーを押します。ビフェニルのモデルが表示されます。

二面角ドライバの計算

二面角ドライバを使用すると、1 ヶ所か 2 ヶ所で二面角の角度を変えることによって（このチュートリアルでは 1 ヶ所）、モデルの立体配座空間をマッピングできます。Minimization をオンにすると、各二面角の値でモデルは MM2 カ場に基づきエネルギーが最小化され、モデルの合計エネルギーが計算され、グラフ表示されます。計算終了後、データを調べ、エネルギー値が最小のモデルを特定し、これを開始点としてさらに微調整を行って安定した定常点を見つけることができます。

最小化をオンにするには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの Preferences をクリックします。
2. Preferences ウィンドウで、Dihedral Driver タブを選択します。
3. Enable Minimization チェックボックスをオンにします。
4. OK をクリックします。

二面角ドライバ計算の場合、モデルで結合を選択する必要があります。このチュートリアルでは、ベンゼン環の間の C-C 結合を選択します。

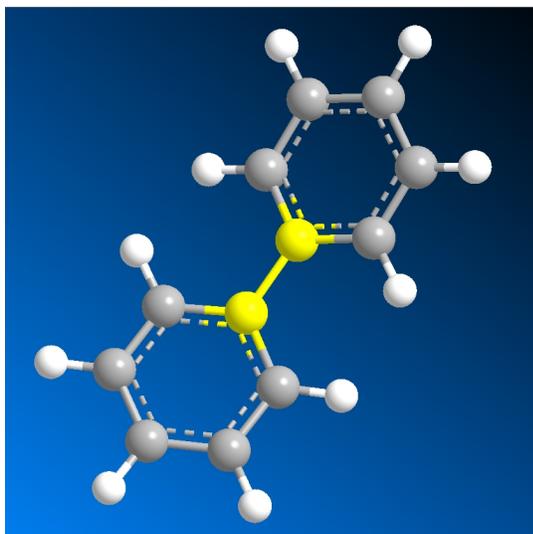


図 17.34: C-C 結合が選択されたビフェニル モデル

回転結合エネルギーを計算するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを使用して、環の間の C-C 結合をクリックします。
2. Calculations、Dihedral Driver、Single Angle Plot の順に選択します。計算が開始されます。

計算中、モデル ウィンドウには選択した結合を軸にして回転するモデルが表示され、Output ウィンドウには各角度のエネルギー値がレポートされます。

最も低い/高いエネルギーの確認

計算が終了すると、二面角ドライバ グラフが開き、エネルギー (kcal) と C-C 結合を軸とする回転角を比較するグラフが表示されます (同じデータが Output ウィンドウにも表示されます)。

立体配座を任意の時点で見するには、次の操作を行ってください。

1. グラフで、曲線に沿った任意の場所をクリックします。モデル表示が、選択した立体配座の二面角に沿って回転します。
2. 一定の回転角の範囲で立体配座エネルギーを調べるには、モデルの表示中にグラフをクリックしてドラッグします。

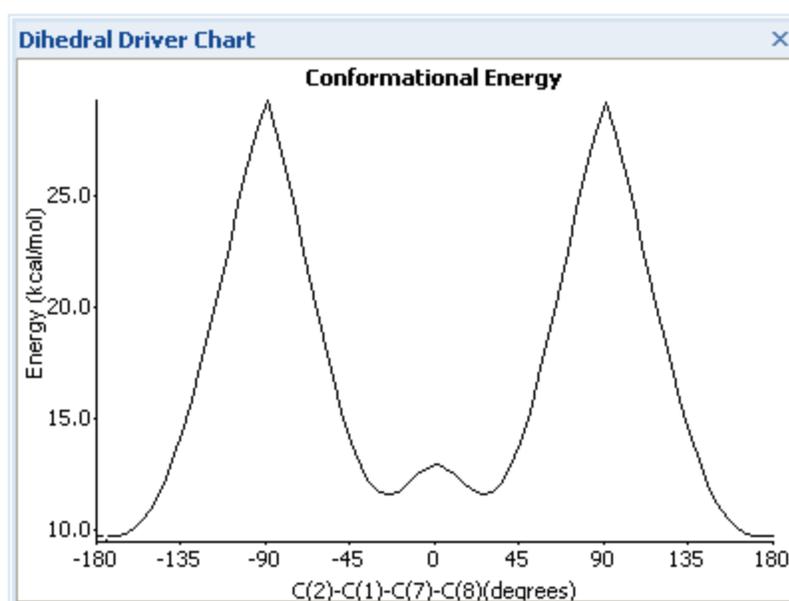


図 17.35: 最小化をオンにした場合のジフェニルの C-C 結合の単一角グラフ

二面角は、5 度単位で 360 度、合計 72 の立体配座を使って回転するので、それを使ってグラフを作ります。Output ウィンドウで、各ポイントの最小化エネルギー値を見ることができます。

 **ヒント:** もう一方の二面角 (結合の他端) を回転させるには、二面角グラフを右クリックし、**Rotate other End** をクリックします。

計算の繰り返し

次に、最小化をオフにして、計算を繰り返します。グラフを右クリックし、**Recompute without Minimization** を選択します。次のグラフが表示されます。

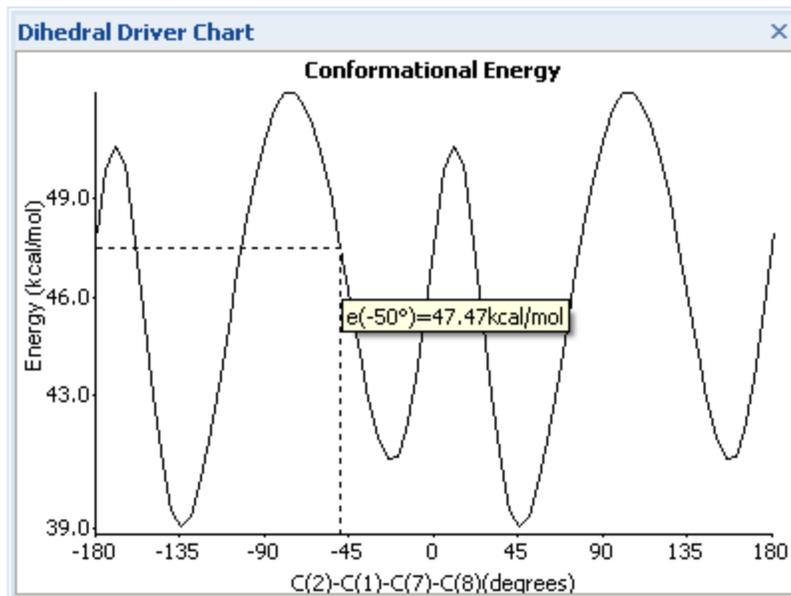


図 17.36: 最小化をオフにした場合のジフェニルの C-C 結合の単一角グラフ

二面角ドライバ グラフのカスタマイズ

デフォルトの二面角グラフでは、データは 5 度単位で表示されます。この単位を変更するには、File メニューの **Preferences** をクリックして、Preferences ダイアログ ボックスで **Dihedral Driver** タブを選択します。グラフで使用する色をカスタマイズするには、Chart colors ドロップダウン リストで color オプションを選択します。