







芳香環の作成 作成したい芳香環に含まれる連結した4原子の両端をマーカーで選択し、編集 | 環構築

マーカー原子を中心とした部分構造の回転  | グループを回転 (マウス操作)

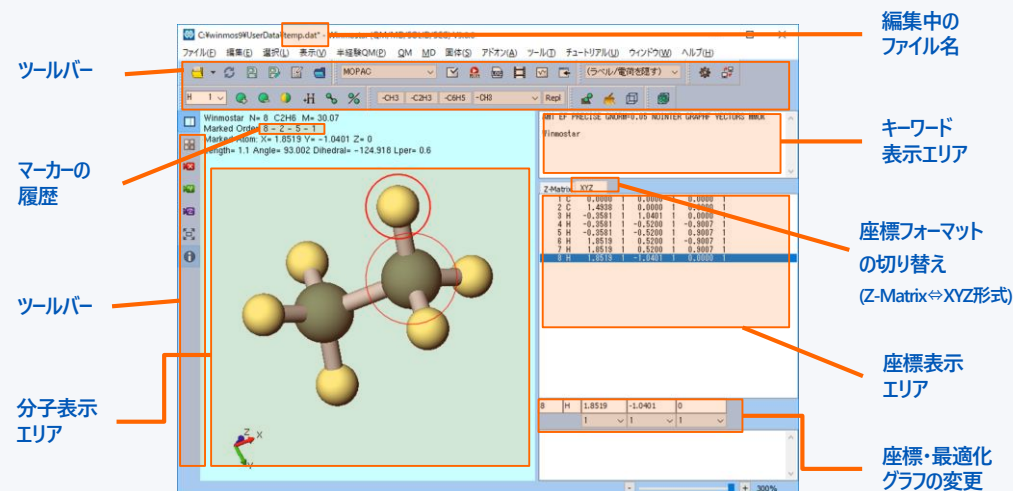
複数分子のモデリング

- | | |
|--------------------|---|
| 分子単位でグループ選択 | 選択したい分子をShift+左クリック |
| 部分構造のコピー |  グループをコピー |
| 部分構造のペースト |  グループを貼り付け |
| 部分構造を等間隔に複製 |  グループを複製 |
| ファイルから構造を読み込んで追加配置 | ファイル 追加読み込み |
| 部分構造をマウス操作で移動 |  グループを並進移動 (マウス操作) |
| 部分構造を数値入力して移動 |  グループを並進移動 (スライダー) |
| 部分構造の重心にダミー原子を配置 | 編集 ダミー原子を追加 グループの重心位置に追加 |
| 結合を軸とした部分構造の回転 |  グループを軸回転 (選択2原子) |
| 簡易構造最適化 |  |
| 選択原子間の距離・角度の変更 | 編集 選択原子間の距離/角度を変更 距離または角度 |
| 2原子間の番号の交換 | 2原子をマーカーで選択し
編集 番号の取り直し/ソート 選択2原子間で交換 |




計算の実行と結果のインポート

1. MOPAC で使用するソルバを選択する。
2.  をクリックし計算条件を設定した後、キーワード設定ウィンドウのRunボタンを押すと計算が始まる。
3. 計算終了後、ログファイルは 、アニメーションは 、エネルギー変化のグラフは 、その他物性は  から、それぞれ確認する。

メインウィンドウの構成



表示の調整

- | | |
|----------------|---|
| カメラの回転 | 左ドラッグ |
| カメラの平行移動 | Shift + 左ドラッグ |
| カメラのズーム | 右ドラッグまたはウィンドウ右下のスライダを調節 |
| ズームの自動調整 |  |
| カメラのリセット |  |
| 各原子の番号、電荷の表示切替 | (ラベル/電荷を隠す)  |

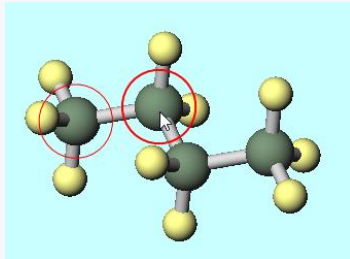
操作を元に戻す、やり直し

- | | |
|------|-----------|
| 元に戻す | 編集 元に戻す |
| やり直し | 編集 やり直し |

原子をマーカーで選択

1原子に対する操作には**赤丸**のマーカーを使う。
分子表示エリアにマーカーの履歴が表示される。

マーカーで選択 原子を左クリック



原子をグループ選択

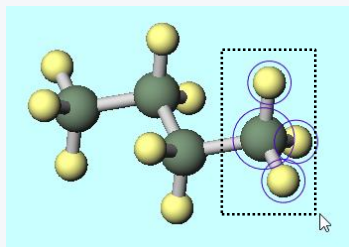
複数原子に対する操作には**青丸**のグループ選択を使う。
グループ選択されていない状態で**グループ編集**を実行した場合は、
2つのマーカーで分断される部分構造が操作対象となる。

原子をグループ選択 原子をCtrl+左クリック

矩形でグループ選択 Ctrl+左ドラッグ

分子単位でグループ選択 分子をShift+左クリック

特定成分をグループ選択 選択 | 分子種によるグループ選択



分子のモデリング

各種形式のファイルから読み込み

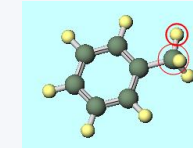
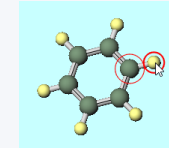
メインウィンドウにドラッグアンドドロップ

SMILESの読み込み

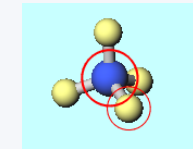
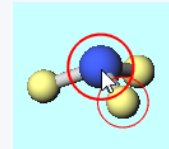
ファイル | インポート | SMILES...

フラグメントで置換

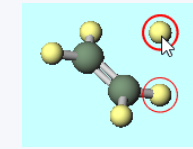
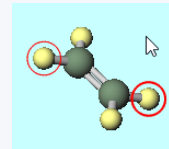
でフラグメントを選択し
置換したい原子を右クリック



原子に水素を付加



任意位置への原子の追加



原子を削除



原子の種類を変更

のプルダウンで元素を選択し 

選択された原子を移動

編集 | 原子を移動 | 並進移動

結合の生成・種類の変更 (一重、二重など)

結合の両側をマーカーで選択し 

結合の切断

結合の両側のマーカーで選択し 

部分構造の削除

 | グループを削除