

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環構築

マーカー原子を中心とした部分構造の回転 編集 | 部分編集 | 部分自由回転

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 編集 | 部分編集 | 部分コピー

部分構造のペースト 編集 | 部分編集 | 部分ペースト

部分構造を等間隔に複製 編集 | 部分編集 | 部分複製


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 編集 | 部分編集 | 部分移動

部分構造を数値入力して移動 編集 | 部分編集 | 部分移動 (スライダー)

部分構造の重心にダミー原子を配置 編集 | 部分編集 | 部分重心





結合を軸とした部分構造の回転 編集 | 部分編集 | 部分回転

簡易構造最適化 

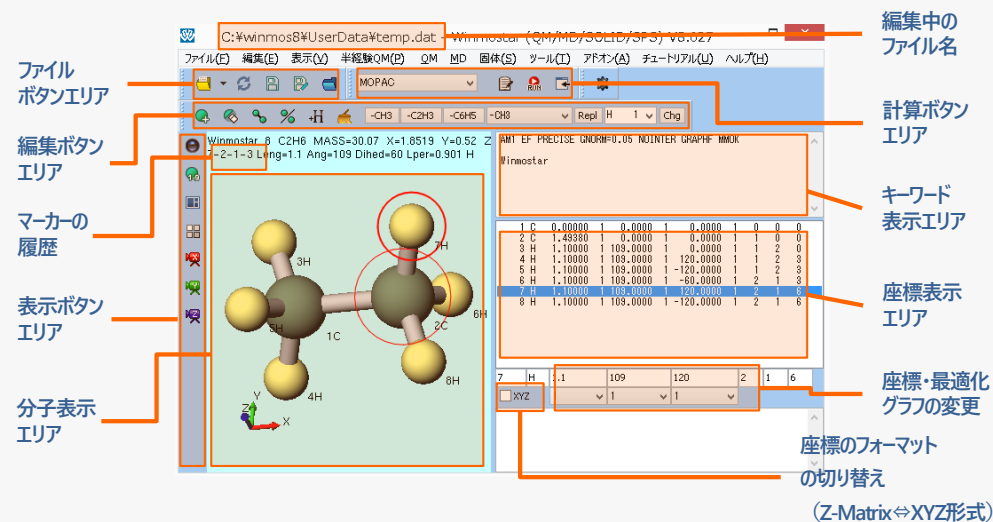
選択原子間の距離・角度の変更 編集 | 変更 | 距離または角度

2原子間の番号の交換 2原子をマーカーで選択し
編集 | 変更 | 番号交換

計算の実行と結果のインポート

1.  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 Set または OK ボタンを押す。
3.  を押し入力ファイルを保存すると計算が始まる。
4. 計算終了後、 から表示したい項目を選択し、計算結果を読み込む。

メインウィンドウの構成



編集中のファイル名

計算ボタンエリア

キーワード表示エリア

座標表示エリア

座標・最適化グラフの変更

座標のフォーマットの切り替え (Z-Matrix ↔ XYZ形式)

ファイルボタンエリア

編集ボタンエリア

マーカーの履歴

表示ボタンエリア

分子表示エリア


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 

ズームの自動調整 表示 | 拡大・縮小 | ウィンドウサイズに合わせる

カメラのリセット 

各原子の番号、電荷の表示切替 

操作を元に戻す、やり直し

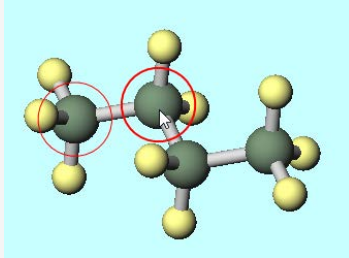
元に戻す 編集 | 元に戻す

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

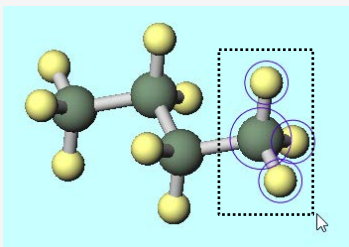
複数原子に対する操作には**青丸**のグループ選択を使う。
グループ選択されていない状態で**部分編集**を実行した場合は、
2つのマーカーで分断される部分構造が操作対象となる。

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 編集 | 分子種単位で選択



分子のモデリング

各種形式のファイルから読み込み

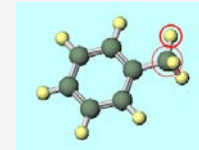
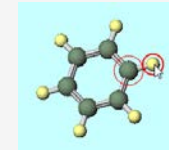
メインウィンドウにドラッグアンドドロップ

SMILESの読み込み

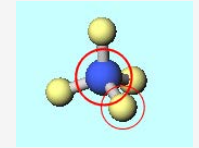
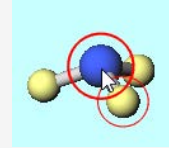
ファイル | インポート | SMILES

部分構造の置換

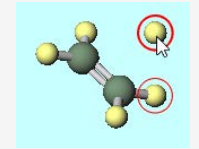
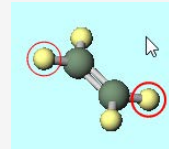
で置換基を選択し
置換したい原子を右クリック



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 | 原子移動

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

編集 | 部分編集 | 部分削除