

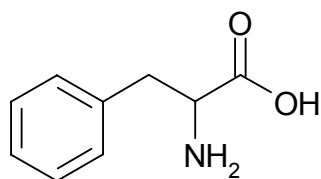
化学系ソフト ISIS/DRAW と WinMOPAC の使い方

理工学部 機能物質化学科
鯉川 雅之
koikawa@cc.saga-u.ac.jp

I . ISIS/DRAW について

化学系のレポートや論文は、文書中に化学構造式が必要な場合があります。昔、まだワープロが普及していなかったころは、ロットリングペンとテンプレート定規を駆使して構造式を書いていました。これがなかなか傍で見るとたいへんな作業で、卒研発表前や学会前には徹夜で何枚もの書き直しをしたことを思い出します。その後、コンピューターが普及し始め、論文もワープロが使われるようになり、他にも便利なアプリケーションが登場してきました。その中のひとつ化学構造式描画ソフト(商品名は申しませんが...)を始めて見たときの感激は今でも忘れられません。当時このアプリは Mac 版のみであったため、化学系の研究室はたちまち高価な Mac に占有されてしまいました。しかしながら Mac もソフトも高価であったため、研究室でもそうそう何台も購入するわけにはいかず、今度は順番争いが絶えなかったことも今となっては懐かしい思い出です。さて、時は流れて時代の主流は Windows となり、化学式描画ソフトの種類も少しずつ増えユーザに選択の幅がでてきました。そんな中、なんと大学や個人使用の範囲なら無償で使用できるものまでが現れました。それがここで紹介する ISIS Draw です。

ISIS/Draw は、MDL Information Systems 社(USA)が配付している「化学構造式用描画アプリケーション」です。これを使うと図のような構造式がいつも簡単に描けてしまいます。



L-Phenylalanyne

これを手描きできれいに描こうとすると、六角形のテンプレートやインレタなんかを引っ張り出してくるだけで10分くらい経ってしまいますから、いかにこの手のソフトウェアが効果的であるかということがお分かりいただけると思います。またこの ISIS Draw は、描いた構造式の式量計算や、構造チェック(結合の本数など)などの評価も下してくれます。それでは入手・インストール方法から説明しましょう。

I -2. ISIS/DRAW のインストール

もちろん、センターのパソコンを使えば、このアプリはすでにインストールしてあるわけですから、そちらをご使用予定の方は次の章まで読み飛ばしていただいて結構です。

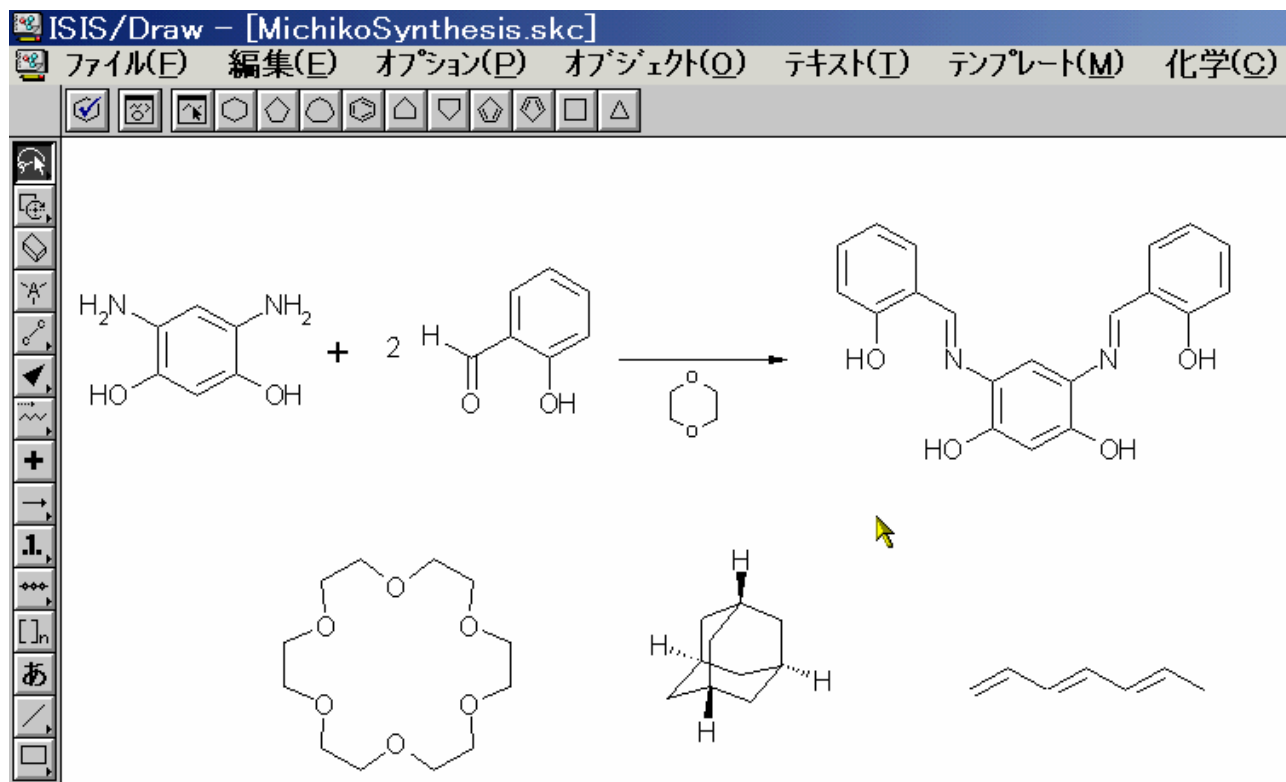
ではまず MDL Information Systems 社のサイトに行ってみましょう。ページの下方に、“Free Download”という画像をクリックして、ダウンロードページに行きましょう。ユーザー情報を登録するとダウンロードのページに移動します。ここで、License Agreement(使用許諾契約書)をクリックしてご一読ください。契約書には「アカデミック・ホームユーザーにのみ使用許可を与える」と書かれていますので、そのような条件に合っている方のみソフトウェアをダウンロードしてください。現在のバージョンは次のようになっています。

Windows95/98/2000/NT 4 ISIS/Draw 2.4 English 版および Kanji 版

Macintosh

ISIS/Draw 2.3 English 版および Kanji 版

インストール方法は、各 OS によりますので、それぞれご自分の環境に合わせてインストールしてください。では、実際の操作を見ていきましょう。



ISIS/Draw 動作イメージ

I-3. ISIS/DRAW の基本操作

上の図は、稼働中の ISIS/Draw の様子を表したものです。基本的にツールバーのボタンで操作を選び、作業ウインドウ上で作業することになります。上部のボタンは、特に「テンプレートボタン」と呼ばれるもので、あらかじめ用意されている最も基本的な構造式を簡単に描くためのものです。



左側に並んでいるボタンは編集関連のボタンが中心です。特に重要なものをあげておきましょう。




選択ツール: ロープで取り囲むようなイメージで選択します。[Ctrl]キーと組み合わせて使うと、ワンクリックで分子全体を選択することができます。



回転ツール: 描画した分子を回転させます。




消しゴムツール: クリックすることで構造式の一部・または全部を消去する。

では、テンプレートボタンの中から、最もポピュラーなベンゼンを選んでその構造式を描いてみましょう。ベンゼンのボタンをクリックしてください。マウスのポインタがに変わったことに気がつきましたか？このように ISIS/Draw では、現在の選択ツールに応じてマウスポインタが変化して選択状態が簡単にわかるようになっています。では、ウインドウの白い余白に好きなところに一回だけクリックしてみましょう。ベンゼンが描けましたね

もし、変なところに作ってしまった場合には、メニューから[編集]—[元に戻す]を選べば、直前に作ったベンゼンは消去されます。また、「消しゴムツール」を使って消去することもできます。左側パレットの「消しゴムツール」ボタンを押すと、マウスポインタが変わります。ここで、マウスのボタンをドラッグすると、消去される領域が、点線の四角形で表示されます。ボタンを離すとその領域の中が全部消去されます。

構造式全体を回転させる場合には「回転ツール」を使います。これをクリックしますと、十字のアイコンが出て、マウスポインタも変化します。十字のアイコンは回転の中心を示しますので、回転させたい部分に十字を動かしてください。中心が決まったらマウスボタンをクリックしたままマウスを動かすと、構造式全体が回転します。

さてここからは、構造を組み合わせる分子を作成する方法を説明しましょう。まずは上図のベンゼンからナフタレンを作ってみます。ツールはテンプレートの中からベンゼンを選択しておきます。既に描いてあるベンゼンの一辺の上にマウスポインタを移動すると、上図のように結合や原子の部分が灰色のボックスで囲まれます。この状態でクリックすると、自動的に現在選択中のものが連結されていきます。ではやってみましょう。一辺を共有する2つのベンゼン環からなる化合物ナフタレンができましたね。このように、基本的には『つなぎたい部位につなぎたい構造をくっつける』という感覚で作業を進めていくことになります。

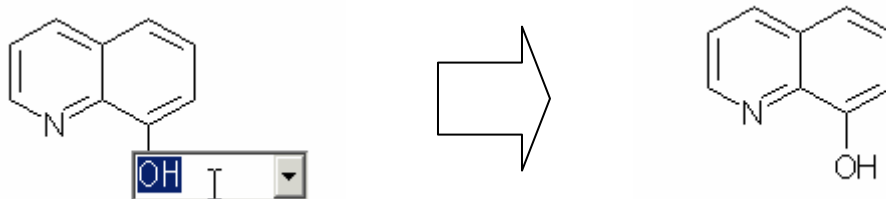
次に構造式中に原子名を加えて、置換基や複素環を表現してみましょう。左側ツールバーからを選択してください。この状態で原子をクリックするとテキスト入力ボックスが現れます。また、原子上からドラッグすると、結合が伸びて置換基の状態でのテキスト入力ができます。このツールによってどのような原子を含む構造式でも描画が可能になります。



ツールバーからベンゼンを選んで描画した状態。マウスカーソルを結合や原子上に動かすと、その部分がグレー表示されて選択状態となる。



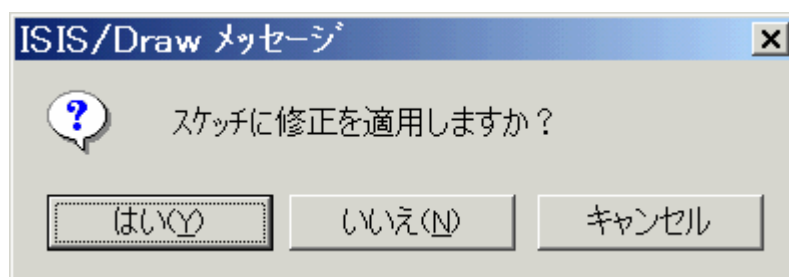
ベンゼンの一辺をクリックするだけで、もうひとつのベンゼン環が描画される。このとき、原子価の状態も自動的に調節される。



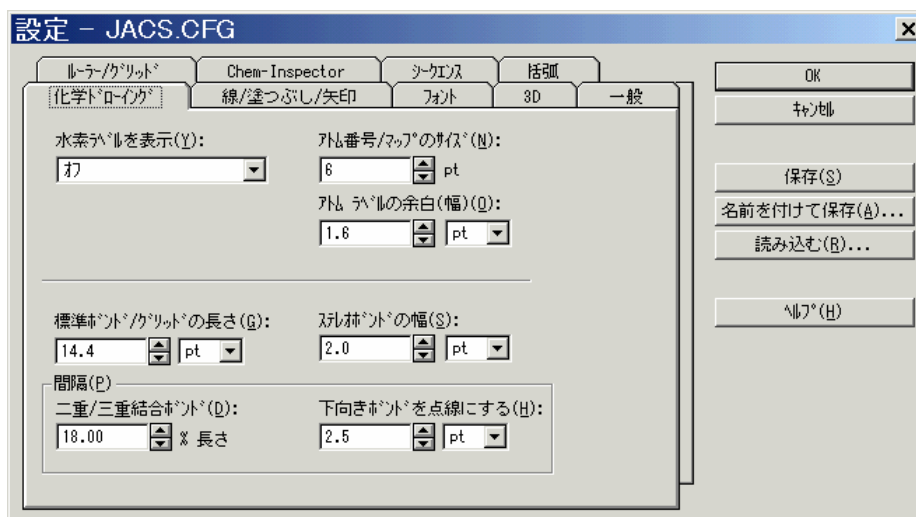
テキスト入力ボックスに、NやOH等の文字を入力するだけで、右図のように自動的にバランス調整された分子構造が描画される。

I-4. 構造式の書式設定

論文投稿時には、投稿先によって線の太さだのフォントの大きさだの細かく規程されているものがあります。このような時はメニューから[オプション]—[ジャーナル/カスタム設定の読み込み]を選択してください。JACS などの代表的な化学系のジャーナルの書式が登録されていますので、その中から適当なものを選択して書式を読み込みます。既に画面上に分子構造が描画されている場合は下記のようなダイアログボックスが現れます。



スケッチとは、描画データのことを指しています。描画済みの分子構造に書式を適用したい場合は「はい」、是以後の作業に対して適応したい場合は「いいえ」を押してください。希望のジャーナルの書式がない場合や、プレゼンテーション用にオリジナルな書式を設定したい場合は、[オプション]—[設定]を選ぶと下図のダイアログボックスが現れますので、これを使って太さやフォントなどをお好みに合わせて設定してください。



実は ISIS/DRAW には、ツールバーのボタン以外にもメニュー[テンプレート]の中に、アミノ酸、糖、マクロ環、等等、たくさんの種類のテンプレートを持っています。複雑な分子構造を描くときは、このテンプレートの中から基本構造の似ているものを使って編集すれば、労力はかなり減ると思います。何が登録されているかは、ご自分で見て確かめてくださいね。

基本的にはこれだけ知っていれば、かなり複雑な構造式でも作成することが可能です。印刷やファイルの保存は他の Windows アプリケーションと同等ですので初心者でも戸惑うことはないでしょう。操作に慣れてきたら、ツールバーのボタンを他にもいろいろ試してみてください。ここで紹介したもの以外に、楔形の結合や長鎖アルカンの入力など、マスターすると便利なツールが山ほど隠されています。少しずつステップアップして、より美しい構造式をスピーディーに描けるようになってください。

II. WinMOPAC について

ISIS/Draw は2次元のドローイングアプリでしたが、こちらの WinMOPAC 3.0 は、3次元的な分子モデリング・分子軌道計算・計算結果のグラフィカルな可視化までを可能としたソフトウェア製品です。分子軌道計算の計算エンジンは次の2種類の半経験分子起動計算プログラムが搭載されています。

MOPAC 2000: MOZYME 法による高速 SCF 計算ルーチン, アミノ酸配列自動認識機能などを導入し、
蛋白質・核酸・高分子材料・分子集合体などの巨大分子系の計算に対応。

MOS-F V4.2: 富士通研究所開発。有機分子の紫外・可視光吸収スペクトル計算や分極率を計算するのに最適化されている。

これらを駆使して、分子の物性・反応性予測、構造解析を手軽に高速に行うことができ、分子軌道計算の入門用から最先端の新材料や薬剤の研究・開発まで幅広い用途で対応できます。また、Windows アプリケーションですので、他のアプリとの連携により、化学論文、レポート、教育資料、プレゼンテーションなどの作成にも有用なツールです。富士通の Web ページから90日間限定の体験版がダウンロードできますので、興味のある方はダウンロードしてみるとよいでしょう。では、実際に分子モデルを作って分子軌道計算の実演をやってみます。

II-1. 分子の構築

初期状態では真っ黒なウインドウが開きます。始めに新規のファイルを作成します。メニューから[File]—[New]を選択して新規ファイルを作成します。ウインドウ上部に並んでいるボタンから、分子構築に関するほとんどの操作を行うことができます。



左側のボタンが描画ボタン、右が消去ボタンです。



これらのボタンで分子フラグメント(sp³, sp² 混成軌道など)を選びます。





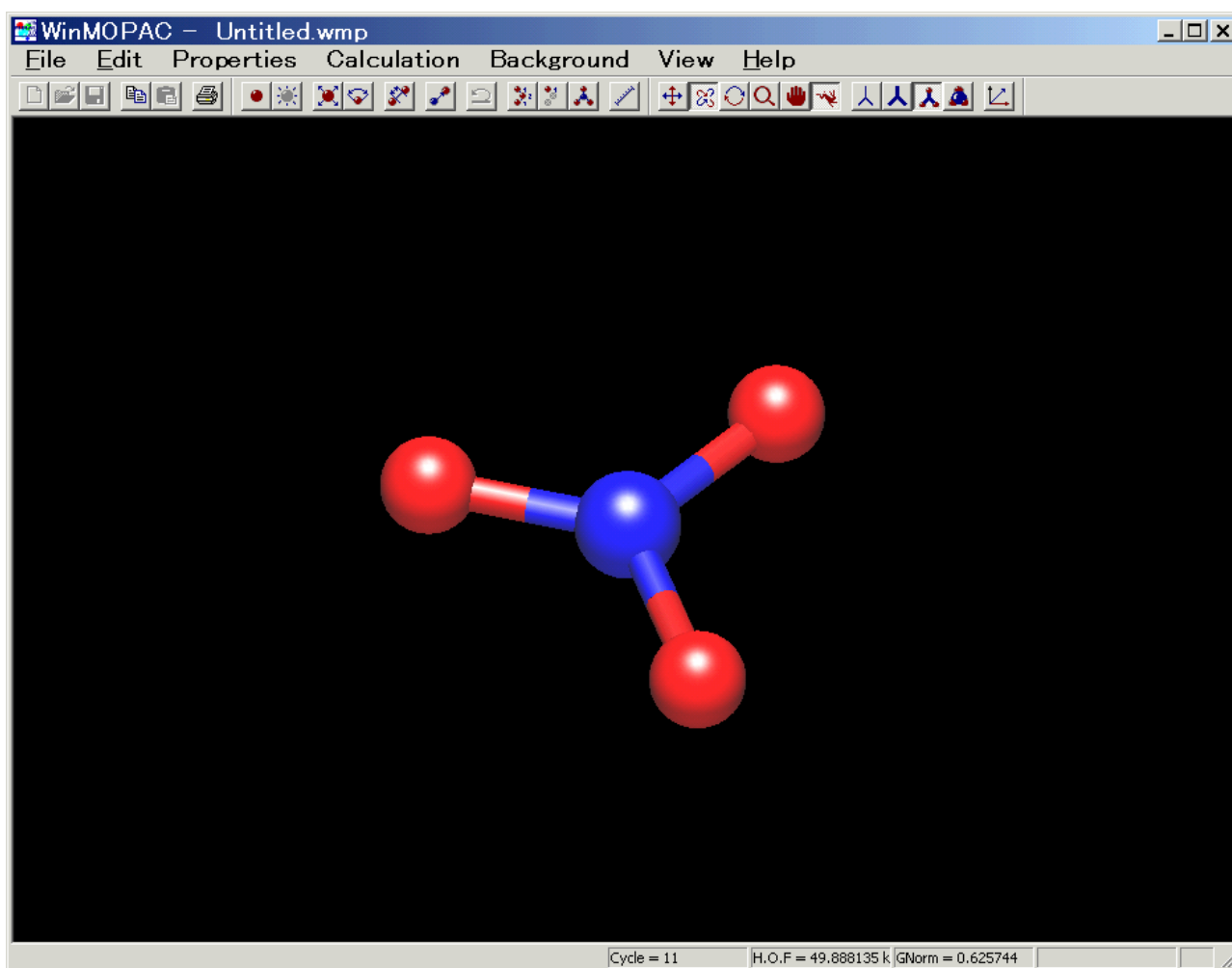
結合距離や角度を変更したり、原子を他の原子に変更したりするツール群です。測定も行えます。



これらのボタンを用いて、分子を回転・移動させたり、表示方法(棒・球モデル, 空間充填モデル等)を切り替えます。

それでは簡単な分子を構築して、エネルギー計算をしてみましょう。sp² 混成軌道を使って硝酸イオンを作ってみます。先ほどの描画ボタンを押した状態で、sp² 混成軌道を選択します。この状態でウインドウの黒い部分をクリックするとパーツをそこに置くことができます。ISIS/Draw でやったのと同じ感覚で、つなげたい位置をクリックするとパーツがつながっていきます。

構築は、始めに sp² 炭素骨格を作った後、炭素→窒素そして水素→酸素に置換するという順序で行います。ではを選択し、画面上でクリックしてください。緑色の分子構造が表示されたはずですが、次に炭素原子を窒素原子に置換してみます。を選択すると、周期表のウインドウが現れます。このウインドウから置換後の原子を選択します(ここでは窒素を選択)。選択後(ウインドウを閉じないように注意してください)、置換したい原子をクリックすると原子の置換が行われます。同様に末端の水素原子も酸素原子に置き換えてください。これで硝酸イオンの形が出来上がりました。



II-2. 分子軌道計算

それでは、エネルギー計算をやってみましょう。メニューから[Edit]-[Z-Matrix]を選択すると、計算オプションを指定するウインドウが出てきます。ここでオプションについての説明はここでは省略しますが、富士通の MOPAC のページで説明されているのでそちらを参照してください。ここではとりあえず、計算方法として MOPAC2000 を選択しておきましょう。

[OK]ボタンを押して確認ダイアログにも[OK]したら、メニューから[Calculation]-[Start]を選んで計算を始めます。計算が始まると、ウインドウの下部に図のように計算中の数値が表示されます。

Cycle = 9 H.O.F = 25.790650 k GNorm = 0.471259

計算終了後(計算が終了するとそれを知らせるメッセージがウインドウ下部に表示されます)、メニューの [Properties] から情報の種類を選択することで、双極子モーメントなどの各種の情報を表示させることが出来ます。

次に分子軌道をグラフィック表示させましょう。メニューの [Properties]-[Molecular orbital] を選択します。開いたウインドウで、可視化したい分子軌道を選択すると、画面にその軌道が表示されます。表示選択ボタン

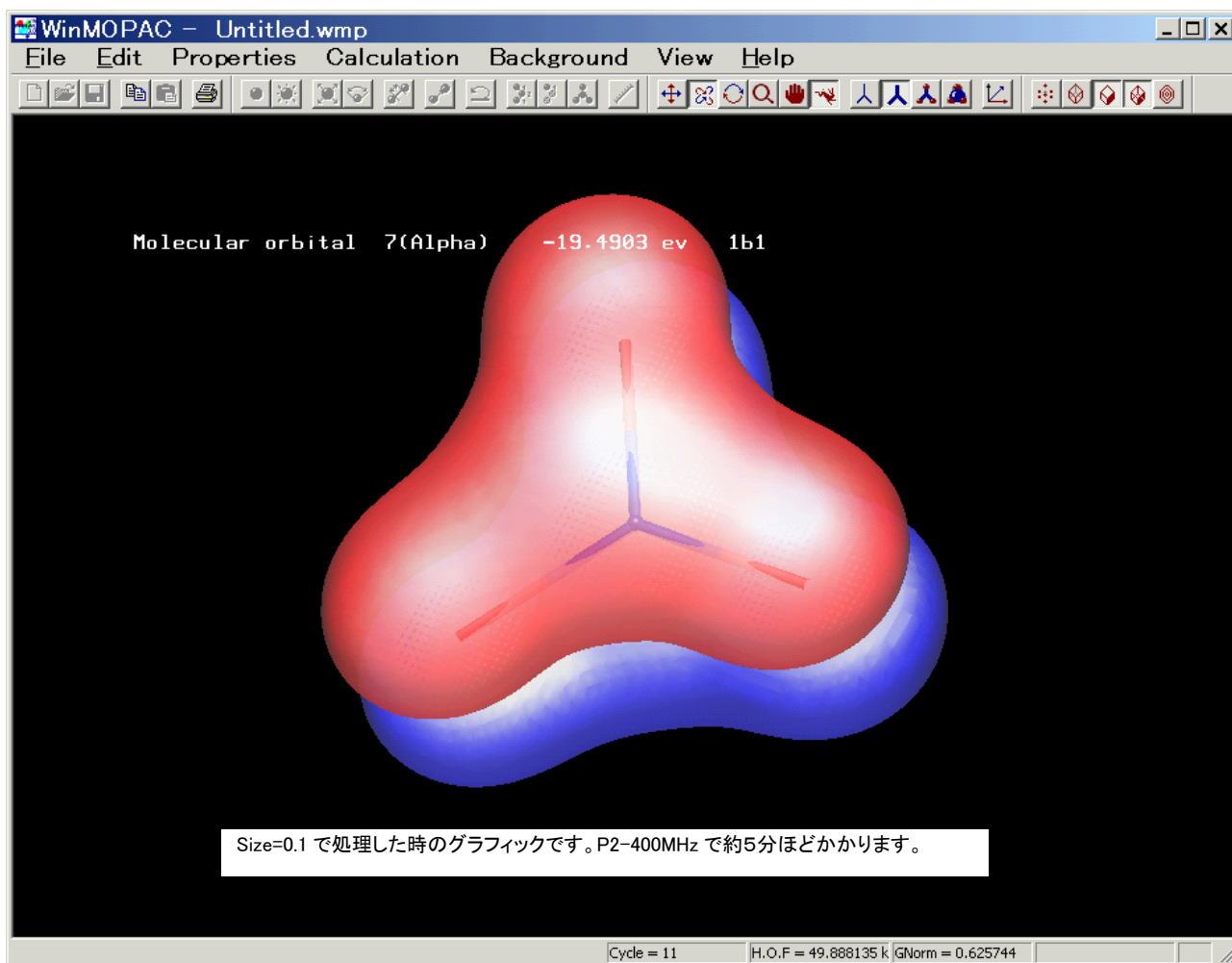
 で軌道表示の種類を変えることが出来ます。

グラフィックスの初期設定では、軌道面の表示がやや荒すぎますので、分子軌道表示設定のダイアログボックス

ス中の[Set grid information]部を調節されることをお勧めします。Size 0.6 という数値を 0.1~0.2 に変更してみてください。計算処理に時間がかかりますが、下図のような美しい分子軌道の描画が可能です。



Size の値と計算時間は反比例する。グラフィック処理中は、止まっているような状態になるのでハン
グアップと勘違いしないように気をつけてください。



Ⅲ. おわりに

以上、簡単に解説を進めてきました。基本的には両アプリとも Windows の作法に従っていますので、初心者の方でもヘルプやツールチップスを活用しながら十分にご利用いただけると思います。特にグラフィック系のアプリの使用経験のある方ならば、きっと問題なく使いこなしていただけるでしょう。両アプリとも教育効果には計り知れないものがありますので、個人的なレポート・論文作成にとどまらず、学生の理解を深めるため、あるいは化学系の情報処理教育を高度化するために講義や演習でもぜひ取り入れてみてください。