

分子設計 演習課題 1 文献検索

文献検索の課題を決めて、利用可能なデータベースのうち適切と思われるものをJDream IIIの他に1つまたは2つ用いて学术论文を検索し、双方でヒットする文献の数・種類などを比較検討する。

注意：JDream IIIでは、国内外の学术论文だけを検索対象とする（学会要旨集などは含めない）。

利用できる他のデータベースの例：GeNii, First Search, PubMed, Web of Science, SciFinder Scholar, Google Scholar, その他の学術文献検索サイトなど（JStage などの論文全文公開サイトは除く）。

第一段階（検索課題の決定）：検索課題は、自分の研究テーマに関連するもの、研究室（ゼミ）の研究テーマに関連するもの、自分の興味あるもの（自然科学・科学技術の範囲で）などから一つを選び、ポータルアンケートに回答する形で書き込む。他人のまねをしないこと（すぐわかる）。担当教員の承認（コメント）を得て第二段階に進む。

第一段階締切：10月31日（金）担当教員の承認。

検索テーマがうまくまとまらない場合は早めに相談してください。

第二段階（検索および結果の比較）検索に取りかかり、いくつかのキーワード（英語が望ましい）を必要に応じて組み合わせて用い、件数の実態を把握する。ある程度（多い方でヒット数が20件程度だと比較しやすい）の絞り込みが可能なところまで、検索方法・検索範囲を工夫する。この段階で検索課題を軌道修正してよい。ヒットした文献の書誌事項をデータベース間で比較し、各データベースの守備範囲・掲載範囲について検討する。以上の経過・結果をレポートにまとめる。

レポート項目：検索課題、検索方法の概要（キーワード、コマンドなど）、検索経過（絞り込みと文献数など）、検索結果（件数、文献リストなど。抄録は載せない）、考察（共通にヒットした文献の特徴、各データベースの守備範囲の特徴）など。

最終締切：11月10日（月）レポートの提出。

提出先：Word ファイルとして学習支援ポータルから提出。

演習：Scigress システムを用いた計算

各自が選んだ化合物に関する課題（予めポータルサイトのフォーラムに提案する）について、Scigressシステムの分子軌道法MOPACを用いて計算を行い、結果をレポートにまとめて提出する。ただし、下の例（3）にあてはまる課題の場合には分子力学法を用いてもよい。

課題の例（選んだ分子によって適切な課題は異なる）

- （1）異性体（互変異性体を含む）または配座異性体の安定性の比較：生成熱に基づいて考察する。
- （2）構造異性体、幾何異性体の極性の比較：双極子モーメントに基づいて考察する。
- （3）その他、興味深い構造・性質が予想される分子に関する検討：適切な計算結果に基づいて考察する。
- （4）化学反応の起こりやすさの比較。位置選択性、配向性など：反応性指数に基づいて考察する。

課題の提案方法

上記の演習課題2のテーマ案を考える。すなわち

- (1) 何という化合物について（化合物名）
- (2) 何を（課題例（1）～（4）を参考にして課題の概要を記す）
- (3) どの計算方法を使って（MMかMOか、Property、Usingの項目名など）調べたいかを提案する。

提出方法：ポータルサイトの「フォーラム」に提出する

期限：12月4日（木）

レポート執筆の指針（MOPACを用いた場合を想定）

- ・テーマ概要：課題の概要、対象分子の構造式（簡略化されたものでよい。Symyx Drawなどで描画しても、画像を貼り付けてもよい）と名前を含むこと。
 - ・計算方法（「プロシージャ」で用いた計算方法（PM3など）、設定したProperty、Usingの項目名など）
 - ・結果：計算した安定構造の図と生成熱、考察に必要な計算結果の抜粋（図を含めてもよい）
 - ・考察と結論
- などを含めて、レポートにまとめる（学籍番号と氏名を忘れずに記す）。

注意：

- ・ 課題例（3）などで分子軌道法ではなく分子力学法を用いるテーマを希望する場合には、予めそのテーマが分子力学法を用いて検討するのに適していることをポータルサイトの「フォーラム」で主張して教員の了解を得ること。
- ・ MS Wordを用いて作成する場合はWord 1999-2004互換形式で保存すること。

提出方法：ポータルサイトの「レポート」からアップロード。

締切：12月22日（月）

（23日以後は停電その他のため年明けまでWS室が使えなくなります。）

（資料）Scigress Workspace procedure の指針

(1) Category: の選択

- Chemical sample
- Atom
- Bond
- Conformations of*
- Chemical sample conformation*
- Reaction and transition states*

(2) Property の選択

- Chemical sample properties
 - Optimized geometry
 - Heat of formation
 - UV-visible transitions*
 - IR transitions*
 - Current energy
 - Electron density
 - HOMO and LUMO
 - HOMO-5 to LUMO+4*
 - All molecular orbitals*
 - Electrostatic isopotential*
 - (electrophilic, nucleophilic, or radical) Susceptibility
 - (electrophilic, nucleophilic, or radical) Superdelocalizability

Atom properties

- Atomic partial charge

Bond properties

- Calculated bond order
- Calculated bond strain

上記以外の項目は、「3. その他」で特別のテーマを選ばなければ使われない。

各 Property の求め方の詳細を知るには、Scigress フォルダ内の Online Books フォルダまたは Scigress の実行画面の help メニューから、UserGuide (pdf ファイル) を参照されたい。