

# 化学・理系の便利な情報満載！

「研究には、素直さと明るさと情熱を。」

—向山光昭—

2014年6月18日

理系（特に化学・生命系）で、何かと役に立つ情報を載せておこうと思います。

といっても、主な内容は、レポート作成に役立つようなツール、便利なウェブサイトなどで、直接何かの試験や実験に役立つわけではありません。（つまり、シケプリとして公開するには多少不適切かもしれません。）

しかし、頭の片隅にでも何かしらの情報があれば、いざというときに役に立つはずなので、そんなときに引っ張ってくるシケプリだと思ってください。

作者は「東京大学工学部 化学・生命系三学科」のどこかにいる学生です。（そちらで過去のバージョンを公開してきた経緯があるので、今回の UTaisaku-Web 版は ver.17 から始まります。）よって、情報が化学系に（極端に）偏っています。しかし、UTaisaku-Web に公開することで、**化学系以外の分野の方（もしくはこれから進学する予定の方）のご意見も反映できるのではないかと**考えています。

そこで、ご意見やここに掲載されていないウェブサイト・フリーソフトウェアのレビュー・その他の小技等を 以下へお知らせください；

benritaro@gmail.com

どの分野でも構いません（数学、物理でも、もちろん理系のみにとどまらず役に立つかもしれないと思うものなら何でも）。もちろん、ただの感想などでも結構です。何らかの形で反映させていただきます。できれば、所属（例：「理科一類」）も添えてください。匿名で OK です（そもそも作者も匿名ですね）。お待ちしております！

（お知らせ） UTaisaku-Web に同時公開の

「うなるプリント」（振動・波動論）

も合わせてよろしく申し上げます。

さて、とりわけ化学系の人間としては、最近、以下のフリーウェアも化学系や関連分野で重宝されているという情報を入手しました。

- **Gwyddion** : SPM, AFM, STM などの解析ソフトウェア？
- **ImageJ** : 画像解析ソフトウェア？
- **WinGX** : X 線結晶構造解析システム？
- **Discovery Studio Visualizer, Chimera** : 分子可視化システム、モデリングシステム？

これらに関する情報・ソフトウェアレビューなどがあれば、お知らせください。次回更新時に参考にさせていただきます。

—更新情報—

2014 年 6 月 18 日 (New!) 新規作成 (ver. 17)

# 目次

<b>1 便利な PC 用ツール・小技 (2014.6.16)</b>	<b>1</b>
1.1 Microsoft Word でのグラフ作成 (2012.11.11) . . . . .	1
1.2 Microsoft Office や OpenOffice.org 用 化学辞書ツール (2013.3.2) . . . . .	1
1.3 Firefox での検索を便利にするアドオン (2013.2.5) . . . . .	1
1.4 Web アプリをデスクトップアプリケーション化して使う方法 (2014.6.16) . . . . .	2
1.5 TeX をインストールせずに美しい数式を出力する方法 (2014.6.16) . . . . .	3
<b>2 化学系の有用なウェブサイトのリンク (2014.4.19)</b>	<b>4</b>
2.1 化学一般 (2014.2.12) . . . . .	4
2.2 化学全般のデータベース (2014.2.12) . . . . .	5
2.3 有機化学・生化学関連データベースなど (2014.2.12) . . . . .	5
2.4 無機化学・結晶化学関連データベースなど (2013.1.7) . . . . .	6
2.5 有機化合物命名法 (2012.12.16) . . . . .	6
2.6 化学系英語学習 (2013.2.5) . . . . .	6
2.7 化学関連の最新情報やおもしろいウェブサイト (2014.2.17) . . . . .	7
2.8 化学系検索エンジン (2013.3.15) . . . . .	8
<b>3 化学系フリーウェア (2014.6.16)</b>	<b>9</b>
3.1 構造式描画ソフトウェア (2014.6.16) . . . . .	9
3.2 分子軌道計算 (主として半経験的分子軌道法) ソフトウェア (2013.3.15) . . . . .	10
3.3 分子モデル表示ソフトウェア (2012.12.23) . . . . .	10
3.4 結晶モデル表示ソフトウェア (2013.1.7) . . . . .	11
3.5 その他: 文献管理ツール、スマホ向けアプリなど (2013.5.19) . . . . .	13
<b>4 理系フリーウェア (2014.6.16)</b>	<b>14</b>
4.1 TeX(2014.6.16) . . . . .	14
4.2 Emacs(2013.3.15) . . . . .	14
4.3 グラフ作成ソフトウェア (2013.3.15) . . . . .	15
4.4 数式処理ソフトウェア (2013.3.15) . . . . .	15
4.5 統計解析ソフトウェア (2014.4.26) . . . . .	15
<b>A 管理者の試行錯誤メモ</b>	<b>16</b>
<b>B 過去に掲載した化学者の名言</b>	<b>16</b>

## 1 便利な PC 用ツール・小技 (2014.6.16)

### 1.1 Microsoft Word でのグラフ作成 (2012.11.11)

電気工学大要第一の講義で、杉山先生が少し触れていた Word でのグラフ作成アドインについて、ダウンロードサイトを見つけたのでリンクをつけておきます。

「Word および OneNote の Microsoft Mathematics Add-in」

<http://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=17786>

「Word 文書や OneNote ノートブックで、2次元グラフおよび3次元グラフの作成、数値計算、等式または不等式の計算、代数式の簡約を簡単に行うことができます」とあり、確かに便利そうです。

### 1.2 Microsoft Office や OpenOffice.org 用 化学辞書ツール (2013.3.2)

Microsoft Office や OpenOffice.org で化合物名（英語）を入力すると、スペルチェック機能のためにほとんど全てが赤の波線だらけ…ということになってしまいがちです。これでは本当にスペルミスをしているかどうか区別が付きません。そこで、下の辞書ツールを紹介します。

“Chemistry Dictionary for Word Processors V3.0”

<http://www.chemistry-blog.com/2008/12/17/>

「化学者のつぶやき」の記事 <http://www.chem-station.com/blog/2011/01/post-240.html> を読めば、辞書の威力がよくわかると思います。実に 10 万語を超える化合物名、置換基名を網羅しています。これを使えば、本当のタイプミスを見逃す恐れもぐんと減ることでしょう。

さらに、別の方が生物学・医学系の Word 用辞書ツールを公開しています。必要に応じて使ってみてください。

“Free Medical Spell Checker For Microsoft Word, Custom Dictionary”

<http://mtherald.com/free-medical-spell-checker-for-microsoft-word-custom-dictionary/>

### 1.3 Firefox での検索を便利にするアドオン (2013.2.5)

Web ブラウザ Mozilla Firefox に様々な検索エンジン（こちらも参照）を追加しておく、いちいちサイトへ移動して検索する手間が省けます。Add to Search Bar というアドオンを利用し、Web サイト上の追加したい検索バーの中で右クリック→「サーチバーに追加」をクリックするだけです。



図 1.1: Firefox で検索エンジン（後で紹介）を追加した。まあこんなに要らないのですが…

さらに、各検索エンジンにキーワードを設定しておけば、アドレスバーから“キーワード + 半角スペース + 検索ワード”という書式で直接検索が可能になります<sup>1</sup>。

また、**Context Search** というアドオンを利用すると、Firefox にデフォルトで実装されている「キーワードを選択・反転→右クリックメニュー」での検索機能を拡張でき、登録されている検索エンジン全てが選択可能になります。

Firefox の場合は、(1) 標準機能の「キーワード設定」(2) アドオン「Add to Search Bar」(3) アドオン「Context Search」が連動し、(2) で追加した検索エンジンは(1) や(3) に自動で反映されるという点も手軽だと思います(別の Web ブラウザ Google Chrome の拡張機能にも同様の機能を持つものがあるようですが、設定方法が上記に比べて煩雑だったので紹介は見送りました)。

※この項目では、以下の「化学者のつぶやき」の記事を参考にしました。

- <http://www.chem-station.com/blog/2011/02/post-243.html>
- <http://www.chem-station.com/blog/2011/02/-firefox.html>

## 1.4 Web アプリをデスクトップアプリケーション化して使う方法 (2014.6.16)

普段 Web ブラウザ上で使用している Web アプリを、デスクトップアプリケーションと同じように独立したウィンドウで動かす方法の紹介です。こうすることで、いちいち「ブラウザを立ち上げる」→「ブックマーク等から Web ページに移動」といった手間が省け、仕事を効率化できます。

### < Mac の場合 >

Mac では **Fluid** という便利なアプリケーションが存在するので、これを利用します。

1. Fluid を起動
2. アプリケーション化したい Web アプリの URL を入力し、アプリ名をつける  
アイコンは任意の画像ファイルを指定 (Web ページの Favicon を使用する場合はそのまま「Use Website Favicon」を選択すれば OK)
3. 保存先を指定して完了

完了すると、アプリケーションが生成しています。

### < Windows の場合 >

残念ながら上の方法は Windows には対応していないので、**Windows 標準の「ショートカットの作成」と高速 Web ブラウザ「Google Chrome」** を組み合わせて利用します。

1. デスクトップを右クリックして、「新規作成」>「ショートカット」を選択
2. 「項目の場所を入力してください」には以下の文字列を入力：  
"`chrome.exe` の場所 >" `--app=< Web アプリの URL >`
3. ショートカットの名前を入力

完了するとデスクトップにアイコンが出現します。アイコンは標準で Google Chrome と同じものになっていますが、後から自由に変更可能です。項目の場所については、Windows 7 の場合、例えば

`"C:\Program Files (x86)\Google\Chrome\Application\chrome.exe" --app=http://pdf.cuspy.org/`  
などとなります (この方法は Windows + Chrome 環境限定です)。

<sup>1</sup>これはアドオンの機能ではなく、Firefox にデフォルトで実装されている機能です。また、アドレスバーには「Ctrl + L」だけで飛べるので、キーボードから手を離さずに検索できます。

いずれの方法でも、ブラウザから Web ページを開いた時よりもウインドウが非常にすっきりしています。もちろん元は Web アプリなので、ネットワークに接続していないと使用できません。

※この項目では、以下の URL を参考にしました。

- <http://ozpa-h4.com/2012/07/23/fluid-mac-app/>
- <http://tieki83.blog106.fc2.com/blog-entry-148.html>

## 1.5 TeX をインストールせずに美しい数式を出力する方法 (2014.6.16)

世界標準の組版ソフトウェア「TeX」ですが、インストールが面倒（もしくは管理者権限がないために不可能）な場合の代替策として、Web アプリを利用する簡単な方法です（正規のインストールについては第 4.1 章を参照してください）。

TeX のコマンドを入力することで Web 上で数式を出力し、画像形式（PNG または EPS）でダウンロードできるサイトとして **TeXclip**（日本語非対応）や **TeXCrop**（日本語対応）があります。多様なフォントで出力でき、色も変更できるので便利です（TeX の数式コマンドは覚える必要があります）。

注：ブラウザによっては利用できない場合もあるようです。既に TeX をコンピュータにインストールした場合には、Mac ユーザーの方は MacTeX 標準の「**LaTeXiT**」で同様の処理が可能です。また、Windows と Mac に対応したフリーウェアとして「**TeX2img**」があり、Windows の W32TeX や Mac の TeX Live を通して画像を出力することができます<sup>2</sup>。

---

<sup>2</sup>Windows で TeX 関連の一連のプログラム（W32TeX, dviout for Windows, Ghostscript など）をあまり深く考えずに（とりわけ「TeX インストーラ」を利用して）インストールした場合（第 4.1 章を参照）、これらのパスが空白を含む（例えば C:\Program Files や C:\Program Files (x86) の下にある）ときに TeX2img のデフォルトでは正常に動作しないことがあります。プログラムの場所を指定するときにそれぞれ C:\PROGRA~1 や C:\PROGRA~2 などの MS-DOS8.3 形式という短縮形式にすることで回避できるかもしれません。ちなみに Windows 7 (64 bit) に W32TeX 等を「TeX インストーラ」でインストールしている管理者は「gswin32c」の場所を C:\PROGRA~2\gs\gs9.06\bin\gswin32c.exe と指定しました。

## 2 化学系の有用なウェブサイトのリンク (2014.4.19)

学内の端末からは、多くの主要なジャーナルの論文について全文アクセスが可能で、ほぼ自由に（ただし常識の範囲内で）ダウンロードできることはよく知られていると思います（大量ダウンロードは契約違反となり大学全体でサービス停止となりかねないのでやめましょう）。また、それらに個人のPCからアクセスするには、「SSL-VPN Gateway サービス」を利用すればよいことを知っている人も少なからずいると思います。大学に所属している間は、大学側が契約している多くのジャーナルやデータベースを無料で利用できるのもので、大いに活用したいものです。

以下、一般に自由にアクセスできるサイトのみならず、大学が契約していて学生が恩恵を受けられるサイトについてもいくつか挙げておきます。「学内のみ」「利用登録が必要」などと明記するので、参考にして下さい。

※利用に際しては、コンピュータのウイルス・スパイウェア対策やセキュリティ管理は自己責任でお願いします。

### 2.1 化学一般 (2014.2.12)

化学の最新情報がいろいろ得られそうな有名な学会や組織などのウェブサイトの紹介。

- **IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry)** - もはやお馴染み。

<http://www.iupac.org/>

このサイトの The IUPAC Network の中で、特にすぐ使いそうなものとしては

- **IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry** (有機化合物命名法)

<http://acdlabs.com/iupac/nomenclature/>

- **IUPAC Compendium of Chemical Terminology** (化学用語辞典みたいなもの)

<http://goldbook.iupac.org/>

- **ACS (American Chemical Society)** - アメリカ化学会。

<http://portal.acs.org/portal/acs/corg/content>

- **RSC (Royal Society of Chemistry)** - 英国王立化学会。

<http://www.rsc.org/>

このサイトの中で特に「Education」などが興味深いと思います。

- **日本化学会** - 国内ならこれ。

<http://www.chemistry.or.jp/>

- **独立行政法人 科学技術振興機構 (JST)** - 国内のサイトでは特に有用だと思います。

<http://www.jst.go.jp/>

さまざまな電子ジャーナル・データベース・ソフトウェアライブラリ・学習用コンテンツへのリンクがありますが、特に個人的なお気に入りか

「Web ラーニングプラザ」 <http://weblearningplaza.jst.go.jp/>

です。技術者向けで、様々な分野の基礎的技術や知識をナレーション付アニメーションや映像で学習することができます。実験レポートの参考になるかも？

## 2.2 化学全般のデータベース (2014.2.12)

- SciFinder

<https://scifinder.cas.org/>

ACSによる化学情報データベースサービス CAS (Chemical Abstracts Service) のオンライン版。化学物質情報・科学技術文献情報・有機化学反応情報・試薬のカタログ情報などを検索できます。

<注意>学内のみ・利用登録が必要；一度学内からアクセスし、ECCSのメールアドレスで登録します。また、学外からはSSL-VPN Gateway サービスで利用できます。

- ChemSpider

<http://www.chemspider.com/>

RSCによるオンラインデータベース。自由にアクセスできます。

- Springer Materials (The Landolt-Börnstein Database)

<http://www.springermaterials.com/docs/index.html>

Springer社による物理・化学・技術工学分野のデータ集である Landolt-Börnstein が全巻オンライン化されたものです。

<注意>学内のみ；学外からはSSL-VPN Gateway サービスで利用できます。

- NIST Chemistry WebBook

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

米NIST (National Institute of Standards and Technology : 国立標準技術研究所) によるデータベースの一つです。ほかにもNISTのウェブサイトに行けば、Standard Reference Dataに含まれる多くのデータベースを探せます。

- 理科年表プレミアム

<http://www.rikanenpyo.jp/member/>

1925年以降最新版までの理科年表の内容を収録したデータベースです。表データはCSV形式でダウンロード可能です。

<注意>学内のみ；「ログイン」をクリックすると入れます。学外からは利用できません。

- 化学書資料館 (丸善)

<https://www.chem-reference.com/>

丸善の『化学便覧：基礎編/応用化学編』『実験化学講座』『標準化学用語辞典』の一括検索・本文閲覧ができます。

<注意>学内のみ；学外からは利用できません。

## 2.3 有機化学・生化学関連データベースなど (2014.2.12)

- Protein Data Bank (PDB) - タンパク質構造データベース。

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

- Nucleic Acid Database (NDB) - 核酸構造データベース。

<http://ndbserver.rutgers.edu/>

- Bordwell pKa Table - 有機化合物のpK<sub>a</sub>一覧。

<http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/pkatable/index.htm>

- Phil Baran lab's HP - "Patrick Lam's Electrostatic Potential Maps" - 芳香族化合物などの電子分布 (静電ポテンシャル) 図。

<http://www.scripps.edu/baran/heterocycles/>

- **有機化合物のスペクトルデータベース SDBS** - 独立行政法人産業技術総合研究所が無償で提供しているスペクトルデータベース。  
[http://sdb.sriodb.aist.go.jp/sdb/s/cgi-bin/cre\\_index.cgi?lang=jp](http://sdb.sriodb.aist.go.jp/sdb/s/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=jp)
- **WebSpectra** - スペクトルによる有機化合物同定の演習。UCLA (カリフォルニア大学ロサンゼルス校) のサイトですが、英語ができなくても大丈夫です。  
<http://www.chem.ucla.edu/~webspectra/>

## 2.4 無機化学・結晶化学関連データベースなど (2013.1.7)

- **IMA Database of Mineral Properties** - 全ての鉱物を網羅した、IMA (International Mineralogical Association) による公式の鉱物データベース。  
<http://rruff.info/ima/>  
ここで検索すれば以下のデータベースの情報などを得ることができます。
  - **American Mineralogist Crystal Structure Database (AMCSD)** - 結晶構造に特化したデータベース。  
<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>
  - **Mindat.org – the mineral and locality database** - 鉱物の原産地・主要産地、名称の由来なども詳しく、鉱物写真も掲載。  
<http://www.mindat.org/>
  - **Mineralogy Database** - 鉱物の物理的性質のほか、X線粉末回折データも掲載。  
<http://www.webmineral.com/>
- **結晶構造ギャラリー** - 固体酸化物型燃料電池やリチウムイオン電池、超伝導材料に用いられる結晶の構造を見ることができます。誕生石も紹介。  
<http://staff.aist.go.jp/nomura-k/japanese/itscgallery.htm>

## 2.5 有機化合物命名法 (2012.12.16)

なるべく簡潔にまとまっているもの。原文 (英語) は上の IUPAC の項目参照。

- **有機化学 plus on web** (PDF, 33 pages)  
[http://pub.maruzen.co.jp/book\\_magazine/yuki/web/](http://pub.maruzen.co.jp/book_magazine/yuki/web/)  
命名法のほかにもさまざまなコンテンツがあるので一見の価値あり。
- **Wikipedia IUPAC 命名法** (日本語より English が better)

## 2.6 化学系英語学習 (2013.2.5)

- **Nobel Prize** (とりわけ化学賞)  
[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/)  
過去のノーベル賞受賞者へのインタビューの音声や動画を視聴できます。しかも、受賞者発表当日の電話インタビューについては全文スクリプト付で、英語の学習にも使えるかもしれません。
- **Eminent Organic Chemists: The Human Side**  
<http://www.layingthegroundwork.com/chemists/>  
アメリカ化学会の有機化学部会 (The Division of Organic Chemistry ; ORGN) の 100 周年を記念した、著名な有機化学者へのインタビュー動画などを見ることができます。

- **Springer Exemplar – words in context**

<http://www.springerexemplar.com/index.aspx>

Springer 社が公開している、論文用例データベース。登録不要で、無料。学術論文で使われている用例や言い回しに特化しているため、自分が論文を書く場合により適した表現を調べることができます。論文時系列・著者の属する地域・ジャーナル別の統計も表示されます。

- **Dictionary.com**

<http://dictionary.reference.com/>

科学系の専門用語も多く収録している、オンライン英英辞典。ネイティブの発音も聞ける。

- **Online Life Science Dictionary - ライフサイエンス辞書オンラインサービス**

<http://lsd.pharm.kyoto-u.ac.jp/ja/service/weblsd/index.html>

辞典を紹介したのでこちらも紹介。ライフサイエンス系の専門用語を含む 10 万語を収録したオンライン英和・和英辞典。ここで検索した単語についてさらに詳しく調べたい場合、Google Scholar, Entrez, Google, Wikipedia へのリンクをクリックすれば飛びます。

- **日本化学物質辞書（日化辞）**

[http://nikkajiweb.jst.go.jp/nikkaji\\_web/pages/top.jsp](http://nikkajiweb.jst.go.jp/nikkaji_web/pages/top.jsp)

科学技術振興機構 (JST) による有機化合物辞書データベース。英語の有機化合物名に対応する日本語名・慣用名を知りたい場合に使えますが、その他の使い道はあまりないかもしれません。

- **インタラクティブ有機化学英語**

<http://ndk.dip.jp/~shashin/IELSFOC/>

有機化学英語の正しい発音を学んだり、リスニング能力を高めたりできるように、英単語や文章を音声付きで収録したものです。かつては有機合成化学協会から 1000 円で販売されていたものですが、公開され、無償でダウンロード可能です。約 170MB で少々重いです。「サーバーの負荷軽減のため研究室や会社など複数人で利用される場合は、代表者がダウンロードしてそれをコピーして使うようにしてください」とのこと。

- **Virtual Textbook of Organic Chemistry**

<http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/intro1.htm>

インタラクティブ有機化学英語で一部引用されている、Web 上に公開されている有機化学教科書。基礎的概念が平易な英語の文章で綴られています。

## 2.7 化学関連の最新情報やおもしろいウェブサイト (2014.2.17)

国内で特に有名なものからいくつか紹介します。

- **Chem-Station 日本最大の化学ポータルサイト**

<http://www.chem-station.com/>

通称ケムステ。化学系サイト・ブログ・データベース・ジャーナル等のリンクが豊富です。最新記事を知らせてくれる twitter アカウントも持っています。

追記： 2014.2.17 ついにケムステ国際版・中国語版が始動しました。

国際版:<http://www.chem-station.com/en/>、中国語版:<http://www.chem-station.com/cn/>

- **ChemPort 有機化学者のためのポータルサイト**

<http://chemport.seesaa.net/>

有機化学サイト・ブログ・データベース・ジャーナルへのリンクが豊富です。有機化学ブログの最新記事を知らせてくれる twitter アカウントも持っています。

- **Bio Impact** バイオテクノロジー・ライフサイエンスの情報サイト  
<http://bioimpact.jp/>  
 バイオテクノロジー・ライフサイエンス系のポータルサイト。
- **Jabion** 日本語バイオポータルサイト  
<http://www.bioportal.jp/ja/>  
 ライフサイエンスの情報提供を行う研究プロジェクトのポータルサイト。バイオ系の研究も紹介されています。
- **化学者のつぶやき**  
<http://www.chem-station.com/blog/>  
 上で紹介した Chem-Station スタッフによるブログです。
- **有機化学美術館**  
<http://www.org-chem.org/yuuki/yuuki.html>  
 個人運営サイトです。「分子の知恵の輪」というタイトルの記事で応化の藤田教授の研究成果が登場しています。
- **気ままに有機化学**  
<http://chemistry4410.seesaa.net/>  
 個人運営ブログです。上で紹介した ChemPort の管理者のようです。
- **化学の迷路**  
<http://chem.chu.jp/>  
 管理者は大学院生だそうです。
- **おもしろ有機化学ワールド**  
<http://www.geocities.jp/junk2515/>  
 個人運営サイトです。「おもしろ化合物 第 16 話：かご型立体からまり分子」というタイトルの記事でこちらも応化の藤田教授の論文が引用されています。
- **ChemASAP**  
<http://blog.livedoor.jp/chemasap/>  
 上で紹介した有機化学美術館の管理人による、新着論文の情報提供ブログ。まだ日は浅いですが、気軽に論文に触れられるという点でよいと思います。
- **生活環境化学の部屋**  
<http://www.ecosci.jp/>  
 環境問題や身近な現象を化学の視点から考えていくウェブサイト。膨大なリンクがあります。

## 2.8 化学系検索エンジン (2013.3.15)

化学情報検索に有用な検索エンジンの紹介。

- **Google Scholar** <http://scholar.google.co.jp/> - 言わずもがな。
- **Chemistry Reference Resolver**  
<http://chemsearch.kovsky.net/>  
 論文検索に役立つような検索エンジンです。例えば、論文の Reference 欄にある「*J. Am. Chem. Soc.*, 1997, 119, 840」などをそのままコピーして検索してもちゃんと目的のジャーナルを探し当ててくれます (少し検索に時間がかかる気もするのですが)。詳細は化学者のつぶやきの記事へ。

### 3 化学系フリーウェア (2014.6.16)

こちら、利用に際しては自己責任でお願いします。

<参考>大学に所属し ECCS アカウントを持っていないければ無償では入手不能なソフトウェアも含まれます。

<注意>後で紹介する理系フリーウェアとは異なり、化学系専門のソフトウェアは研究室が独自に開発・公開している場合が多く、解説書も少ないです。しかし、ネットで検索すると、開発元がマニュアルを用意している場合や、講義でソフトウェアを使用している場合の講義資料など、参考になるサイトが複数存在するので、詳しい使い方は載せません (第一、管理者自身使いこなせないで説明できません)。

#### 3.1 構造式描画ソフトウェア (2014.6.16)

- **ChemSketch** <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>

Windows 上で、化学構造式 (主に有機化学) を簡単に、そしてきれいに描けます。テンプレートに含まれている Lewis 構造式や Newman 投影式、Haworth 構造式なども併用すれば、複雑な構造式も手軽に描けます。また、Structure (構造式) モードの他に Draw (描画) モードがあり、テンプレートを併用しながら実験装置を組み立てることもできます。

他にも 3 次元構造最適化や化合物命名などが可能ですが、無償版 (アカデミックフリー) は有償版より機能が制限されています。

入出力できるファイル形式が多く、ChemDraw をはじめとする多くの類似ソフトウェアに対応しています。

1. 構造式を Word や Power Point などに貼り付ける場合 :

- 画像として一旦 PNG や WMF 形式で保存する
- (1) ChemSketch のウィンドウで「Edit → Copy」
- (2) Word 等の貼り付けたい場所で「形式を選択して貼り付け」→「ACD/ChemSketch オブジェクト」を選択

後者の方法では、図をダブルクリックすると ChemSketch で再編集できます。

2. 構造式を T<sub>E</sub>X に取り込む場合 : 画像として一旦 PNG や PDF 形式で保存する

<注意>無償版は、簡単な構造 (具体的には原子数 50 個まで・環の数 3 つまで) に IUPAC 命名法に従った命名を行ってくれるのですが、どういうわけか、例えば 2-ethylbut-1-ene が 3-methylenepentane となるなど、最長炭素鎖を基準にした命名が行われてしまいます。命名はあくまで参考程度です。

<注意>利用登録が必要 ; 氏名・メールアドレスなどの基本情報でアカウント登録すればフリーウェア版が入手可能になります。高価な ChemDraw の無料試用版は 2 週間しか使えないのに対し、こちらは教育目的に限り (おそらく) 永久に使えます。

- **Marvin Sketch** <http://www.chemaxon.com/download/marvin-suite/>

こちらはマルチプラットフォームの化学構造式描画ソフトウェアです。上で挙げた ChemSketch と同様に、テンプレートを併用して化学構造式を手軽に描くことができ、構造最適化や化合物命名も可能です。

1. 構造式を Word や Power Point などに貼り付ける場合 :

- 画像として一旦 PNG や EMF 形式で保存する
- (1) Marvin Sketch のウィンドウで「Edit → Copy」
- (2) Word 等の貼り付けたい場所で「形式を選択して貼り付け」→「MarvinOLE オブジェクト」を選択

後者の方法では、図をダブルクリックすると Marvin Sketch で再編集できます。

2. 構造式を  $\text{T}_\text{E}\text{X}$  に取り込む場合：画像として一旦 PNG や EPS 形式で保存する

<注意> **利用登録が必要**；基本情報でアカウント登録すれば入手可能です。

< ChemSketch と Marvin Sketch の比較 >

以上 2 つのフリーウェアで異なる点として、現在確認しているものは；

- ChemSketch は（主に）Windows 向け、Marvin Sketch はマルチプラットフォーム
- ChemSketch は無償版の機能制限が少々煩わしいが、Marvin Beans というパッケージの主要な機能のほとんどは特別なライセンスを必要としない（例えば化合物命名が原子数無制限）
- ChemSketch は多くの類似ファイル形式に対応しているが、Marvin Sketch は未対応
- Marvin Sketch には Draw モードがない（すなわち実験装置の描画などは困難）
- ChemSketch は PDF 形式や WMF 形式で出力できるが、Marvin Sketch は EPS 形式や EMF 形式で出力できる
- テンプレートの種類が異なる（ChemSketch には Draw モード用の二重らせんやミセル、実験装置などが含まれるが、Marvin Sketch には有機金属化合物のテンプレートが含まれる etc.）

### 3.2 分子軌道計算（主として半経験的分子軌道法）ソフトウェア（2013.3.15）

- **Winmostar** <http://winmostar.com/>

MOPAC, GAMESS, Gaussian といった計算プログラムに対応した計算化学支援ソフトウェア。Windows で分子軌道計算を行う際、入力作成や出力可視化にかかる手間を大幅に削減できます。標準で「MOPAC6」「CNDO/S（紫外・可視吸収スペクトル計算用）」を内蔵しています。

<注意> **利用登録が必要**；教育用（2013年4月からは学生用に名称変更）に限り無償です。ECCS のメールアドレスで教育用ライセンス（13ヶ月有効）を取得でき、有効期間中は何度でも最新版を無償で入手可能です。

<参考> 標準で内蔵の **MOPAC** は少し古いバージョンです（この後プログラムが有償化されたため）。教育目的に限り、ECCS メールアドレスを用いて MOPAC 公式サイトから登録すれば、MOPAC の最新版<sup>3</sup>を入手できます。また、**GAMESS** は GAMESS 公式サイトから無償でライセンス取得可能です。

- **Avogadro** [http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main\\_Page](http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page)

マルチプラットフォーム（Windows, Linux, Mac）の分子モデル構築ソフトウェア。オープンソースで、自由にダウンロード可能です。公式 Wiki にはスクリーンショットも多数載っています。

### 3.3 分子モデル表示ソフトウェア（2012.12.23）

- **RasMol** <http://www.bernstein-plus-sons.com/software/rasmol/>

分子の 3 次元構造を可視化するマルチプラットフォームのソフトウェア。他のソフトウェアで作成した 3D 分子構造や、PDB、NDB などのデータベースからダウンロードした分子構造を表示できます（もちろん ChemSketch で描画した分子も、「.mol」ファイルに保存すれば OK!）。コマンド入力操作も覚えれば表示を詳細に調整できます。

<sup>3</sup>2013年3月22日現在、MOPAC2012 ver.13.071 です。

### 3.4 結晶モデル表示ソフトウェア (2013.1.7)

- VESTA <http://jp-minerals.org/vesta/jp/>

結晶構造の3次元データの可視化ソフトウェア（電子・核密度の解析・可視化のためのソフトウェアパッケージである VENUS の一部）。マルチプラットフォーム（Windows, Linux, Mac OS X）です。IMA 等のデータベースからダウンロードした数値データを図示することができます。

以下、参考までに以上のフリーウェアで出力した図の例を挙げてみます。

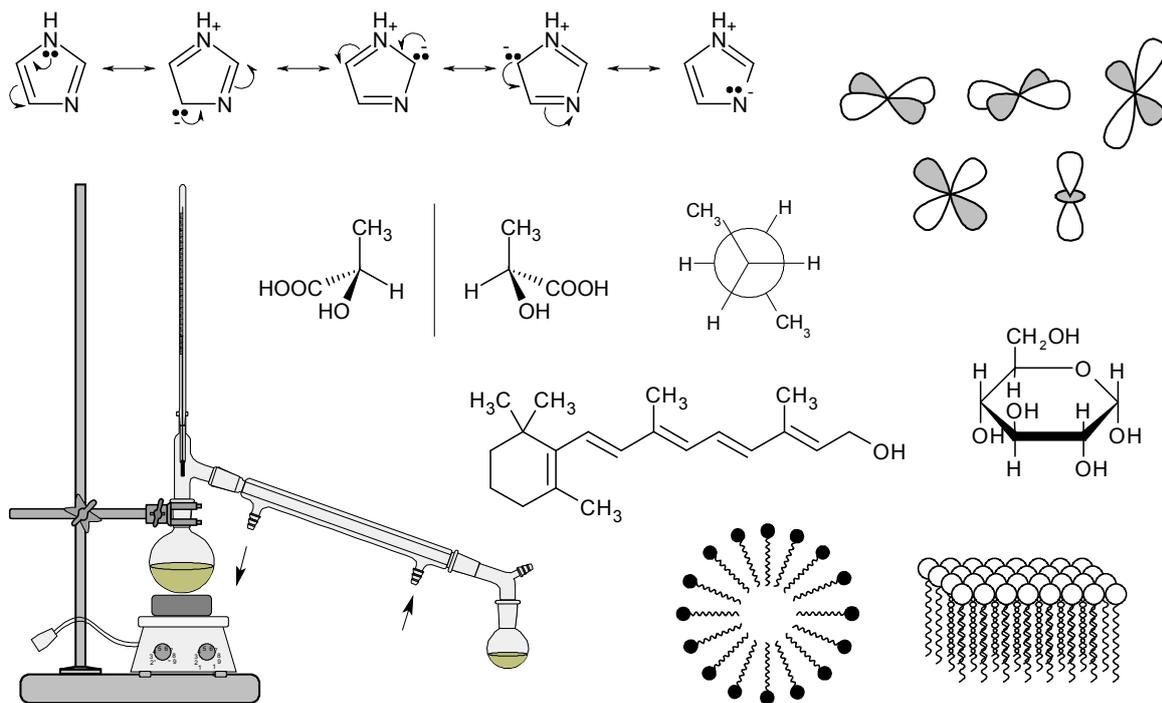


図 3.1: ChemSketch でランダムにさまざまな図を描いてみた。TEX で取り込むため PDF で保存した。

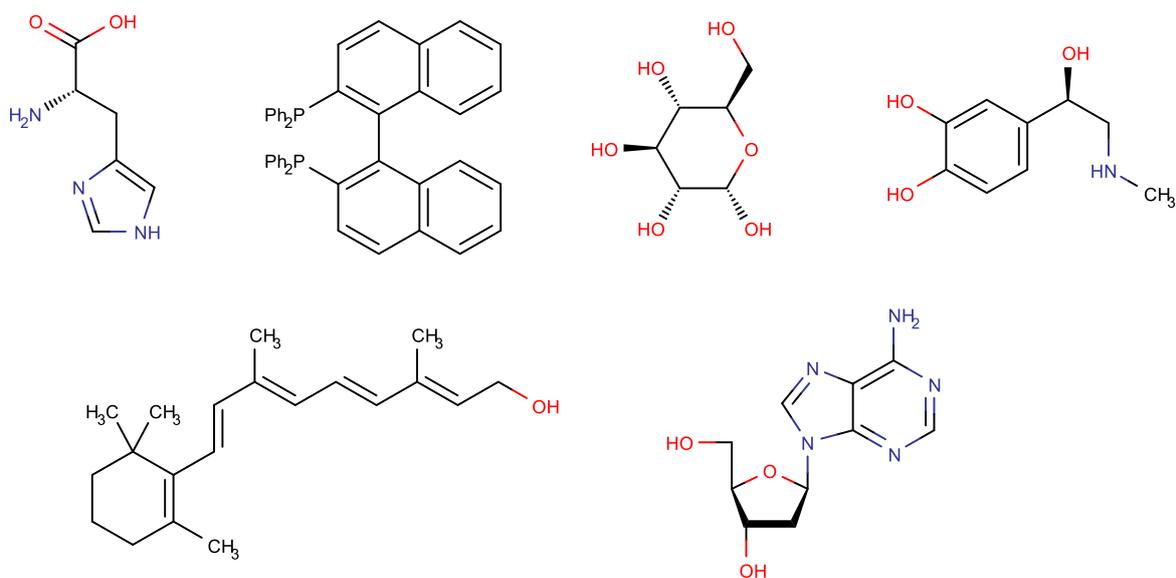


図 3.2: Marvin Sketch で構造式を描いてみた。TEX で取り込むため EPS で保存した。

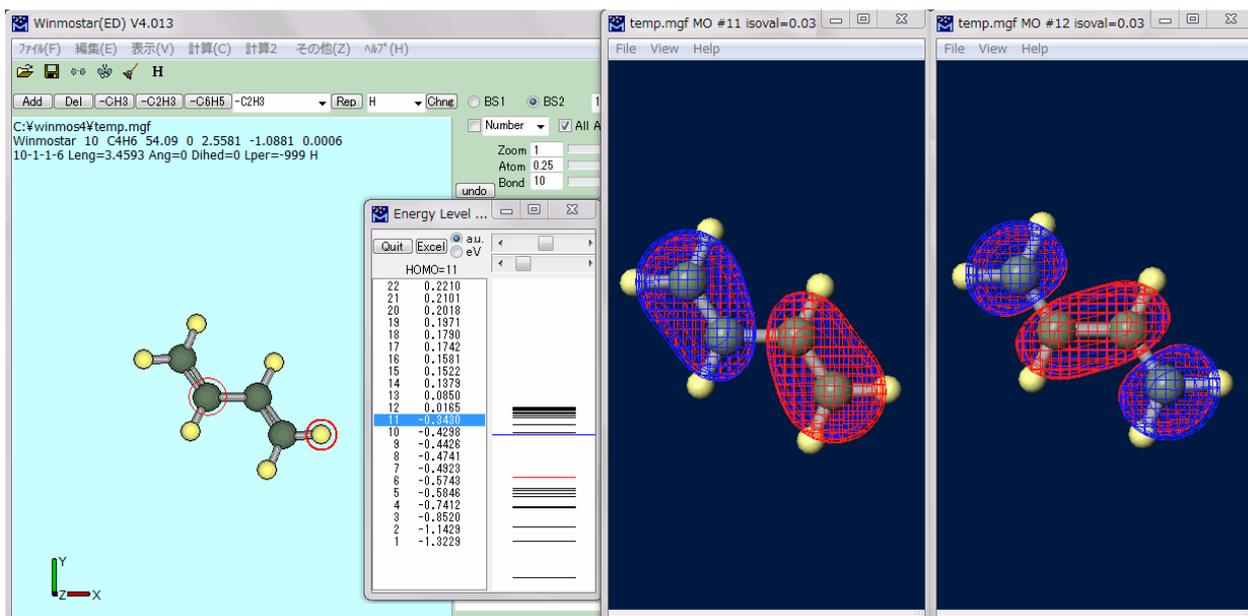


図 3.3: Winmostar で buta-1,3-diene を描き、HOMO と LUMO を表示した。

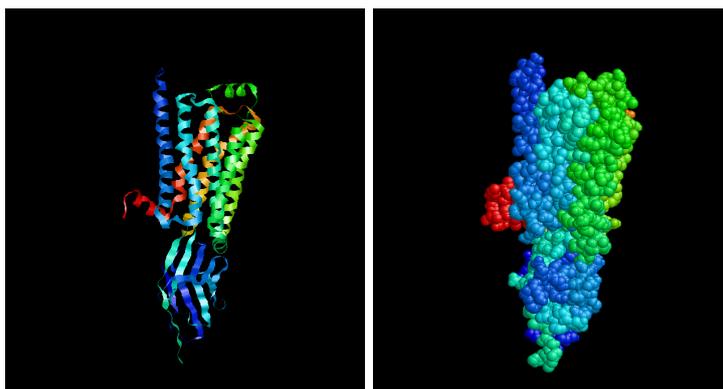


図 3.4: RasMol で表示した  $\beta_2$ -アドレナリン受容体 3P0G (G タンパク質共役受容体 ; 2012 年ノーベル化学賞)。左が「Ribbons」表示、右が「Spacefill」表示。

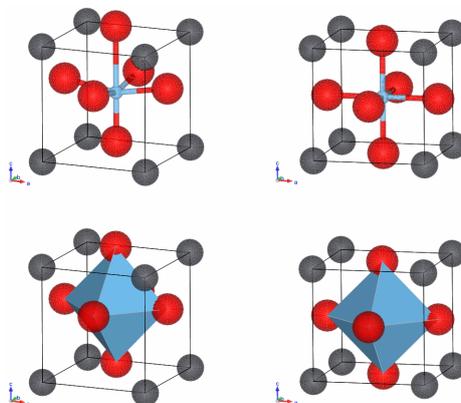


図 3.5: VESTA で表示した  $\text{PbTiO}_3$  (Macedonite) の単位格子。上段が「Ball & Stick」表示、下段が「Polyhedral」表示。各段左が 25 °C (室温 : 正方晶)、右が 550 °C (高温 : 立方晶)。

### 3.5 その他：文献管理ツール、スマホ向けアプリなど (2013.5.19)

Chem-Station 代表の山口潤一郎氏が中心となり、化学研究に有効な Web 情報やソフトウェアの利用法に特化した“化学研究ライフハック”を紹介したサイト <http://www.chem-station.com/chemlifecycle/chemlifecycle/Home.html> を参照してください。なお、化学同人発行の月刊「化学」に同氏が寄稿した記事のサポートページとしての役割も果たしています。

## 4 理系フリーウェア (2014.6.16)

やはり利用に際しては自己責任でお願いします。

<注意>以下で紹介するソフトウェアは、(いくつかの例外を除いて) 世界中で利用されている有名なフリーウェアです。多くの人が開発に携わり、日々新しい機能が付加されています。近年では日本国内でも利用者が増え、解説書も多数出版されているので、基本的な使い方はこれらを読めば分かるはず(ネット上にも多数存在します)。

### 4.1 T<sub>E</sub>X(2014.6.16)

言わずと知れたマルチプラットフォームの組版ソフトウェア<sup>4</sup>。数式を綺麗に表示できることで有名です。数学・物理系ならレポートや論文で使うことも多いですが、化学系ではあまり使われず、一流の化学雑誌も T<sub>E</sub>X の原稿を受け付けていないそうです。ただ、使えるツールの選択肢を増やしておくのはいいと思います。覚えるコマンドが多く、一つ一つのコマンドが少し長すぎる気もしますが、

- 大規模な文書を作った時でも書式を全体で統一しやすく、変更も容易
- 目次の作成が手軽
- とにかく軽い

ことなどもメリットだと思います(そもそもこの PDF ファイル作成に使っているのだから分かりますね)。T<sub>E</sub>X を使ううちに、数式中で記号の正しい使い方を意識するきっかけも得られるはず<sup>5</sup>。

インストールや使い方は、何はともあれ、まずは **TeX Wiki** へどうぞ。Windows で一番簡単にインストールできるのはあべのりページの「TeX インストーラ」でしょう(ここでインストールされる W32TeX には TeXworks というエディタが付属しています)。Mac の場合は 2014 年 5 月現在最新の「MacTeX-2013」というパッケージがおそらく簡単です(ここでインストールされる TeX Live には TeXShop というエディタが付属しています)。

注:「まずは少しだけ試しに T<sub>E</sub>X を使ってみよう」という場合は、学内の ECCS 端末にインストールされている T<sub>E</sub>X システムを使ってみるといいと思います。これに関しては「はいばーワークブック」で解説されているので、ぜひ使ってみてください。

注:「いちいち T<sub>E</sub>X をインストールしたくないが、数式だけは T<sub>E</sub>X のように美しく出力したい」という場合は、第 1.5 章を参照してください。

### 4.2 Emacs(2013.3.15)

マルチプラットフォームの超高機能テキストエディタです。Windows 用 Emacs は、gnupack Project から「emacs-24.2-20121208.exe」(新版が公開されるとバージョン番号は変わりますが)をダウンロードするのがよい(個人的には)と思います。これを解凍して、bin フォルダ内「runemacs.exe」を使えば OK です。ちなみに T<sub>E</sub>X の編集の際は「AUCT<sub>E</sub>X」や「YaTeX」を使うとよいそうです(が、管理者自身は使ったことがありません)。

<sup>4</sup>T<sub>E</sub>X の開発者である Donald E. Knuth 氏は T<sub>E</sub>X の語源について、「technology という英単語は、 $\tau\epsilon\chi\nu\eta$  というギリシャ語を語源としており、このギリシャ語は技術と同時に芸術をも意味する言葉である。T<sub>E</sub>X という名称はここからきていて、ギリシャ語の  $\tau\epsilon\chi$  の大文字で綴る。」と述べています。すなわち T<sub>E</sub>X は「ティー・イー・エックス」ではなく、「タウ・イプシロン・カイ」です。

<sup>5</sup>関係ないですが、Wikipedia の T<sub>E</sub>X 関連の入力支援テンプレートがすごいですね。T<sub>E</sub>X, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>, pT<sub>E</sub>X, jBibT<sub>E</sub>X, X<sub>Y</sub>T<sub>E</sub>X, X<sub>Y</sub>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> など、複雑なロゴを HTML で見事に再現しています。ここまで凝っているのは日本語版くらいですよね。さすがに  $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}$ -L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X は無理だったようですが。

### 4.3 グラフ作成ソフトウェア (2013.3.15)

- **gnuplot** <http://gnuplot.info/>

マルチプラットフォームで、コマンドで操作するグラフ作成ソフトウェアです。Windows 版インストールについては米澤先生のページが参考になります。2次元・3次元のプロットができ、アニメーション GIF も出力できます。

注：gnuplot も学内の ECCS 端末にインストールされており、使用法は「はいばーワークブック」で解説されています。

- **GRAPES** <http://www.osaka-kyoiku.ac.jp/~tomodak/grapes/>

Windows 上で直感的に操作できるグラフ作成ソフトウェアです。高校数学の教材用として開発されたものですが、実際ははるかに高機能です。サンプルとして配布されている「うなり」や「マイクロイド」などで音やアニメーションを楽しめるのも特長です。

### 4.4 数式処理ソフトウェア (2013.3.15)

学内の ECCS 端末には Mathematica がインストールされており、使用法は「はいばーワークブック」で解説されているので事足りませんが、個人の PC で必要となった場合は参考にして下さい。

- **Maxima** <http://maxima.sourceforge.net/>

タダで使える Mathematica だと思えば OK です。マルチプラットフォームで、Mathematica や Maple のような高価な数式処理ソフトウェアとほぼ同等の機能を無料で使える、数少ないソフトウェアの 1 つです。連立方程式を解いたり、微分方程式を解いたり、方程式の近似解を求めたり、グラフを描いたり（これは gnuplot に命令を送って描かせます）することができます。

### 4.5 統計解析ソフトウェア (2014.4.26)

- **R** <http://www.r-project.org/index.html>

統計解析とグラフィックスのための、マルチプラットフォームのプログラミング言語＋統合環境です。統計処理言語として有名な S 言語を基に構築されているため環境が似ており、同等の機能を持っています。また、多様で美しいグラフを出力することができます。

注：R は学内の ECCS 端末で利用できます。

## A 管理者の試行錯誤メモ

以下、個人的な感想をいくつか。

- 「SSL-VPN Gateway サービス」を利用すれば、自分の PC から学内限定のサイトにアクセスできたり、論文を閲覧できたりと、なかなか便利です。ただ、少々面倒で、大学のサーバを経由するため SciFinder などを利用すると遅いという印象を受けました。(2012.12.16)
- $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  で構造式を描くには  $\text{X}_{\text{f}}\text{M}_{\text{T}}\text{E}_{\text{X}}$  や  $\text{chemT}_{\text{E}}\text{X}$  などを使う手もあるようですが、いちいちコマンドを覚えるのが面倒で、どう考えても ChemSketch のように GUI で操作する方が簡単だと思います。しかも、一流の化学雑誌では  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  での原稿を受け付けていないそうなので、やはり ChemDraw や ChemSketch といったソフトウェアを使う方が実用的だと思います。(2012.12.16)
- 化学系の Microsoft Word 用アドインとして様々なものが各所で紹介されているのですが、
  - － 「Chemistry Formatter Add-in」: 化学式の上付き・下付き文字、ラジカルを表す点などを表現できるそうですが、必須ではない
  - － 「Chemistry Add-in for Word」: 化学構造式を描けるのですが、ChemSketch には及ばない  
と思い、紹介を見送りました。(2012.12.23)
- 「化学系検索エンジン」で紹介していた「**Scirus Elsevier**」<http://www.scirus.com/srsapp/> は 2014 年 1 月末でサービスが終了していたことが判明しました。Elsevier 社が提供していた科学技術専用の Web 検索エンジンで、一般的な検索エンジンでは見つけることができない科学情報を探ることが可能であるとして各所で紹介されていました。(2014.4.19)
- ver. 17 から、この PDF ファイルに日本語フォントを埋め込むように変更しました。ファイルサイズは大きくなりますが、閲覧環境に依らず同じフォントで表示されることを優先しました。(2014.6.16)

## B 過去に掲載した化学者の名言

- 「化学は予期しないことが起きる。そこで独創性が問われると思います。」—白川英樹—
- 「メモしないでも覚えているような思いつきは大したものではない。メモしないと忘れてしまうような着想こそが貴重なのです。」—福井謙一—
- 「科学的研究は、最も単純には『問題+解答』とモデル化することができ、私たちは課題に対してよい解答を得るべく努力する。しかし、より重要でより困難なことは『如何にしてよい問題をつくるか』である。」—野依良治—
- 「われわれは単なる事実（それは見かけ上だけの真実なのかもしれないし、単なる間違いかもしれない）を追い求めているのではなく、あれこれと真実を追い求めているのである。ただし一つの問題は、ほとんどすべてのことに関して、何が真実か誰も知らないことだ。  
真実に非常に近い可能性があるものを見出す唯一の実際的な方法は、手に入れた事実と数字を正確に吟味することである。しかし、覚えておいてほしいのは、繰り返したからといって、それが保証にはならないことである。というのは、人は何度でも間違った実験を繰り返す可能性があるからである。」—根岸英一—
- 「『常識』の反対は、『独創的』である。」—田中耕一—
- 「重要なことは、たえず『転んだ方がベスト』と思えること。この信条さえあれば、自分がどの道に転ぼうと、最後は『自分の選んだ道は正しかった』と思えるようになります。」—藤田誠一—

- 「仕事を成功させるため、真剣に研究に対処し、結果を把握し、一生懸命続ける。そうしないと、幸運に恵まれない。」—鈴木章—
- 「有機合成にはまだまだ達成されていない多くの課題がある。大事なことは、一つでも多くの課題を見つけ、抱き続けることであろう。すぐに解決することは困難でも、経験を経るうちに答えが見えてくるときがある。思い描いていた可能性の一つが自身の手で解決できたとき、幸せと自信を得ることができる。」—宮浦憲夫—