

## ユニットセルファイルフォーマット

Materials Explorer で用いられているユニットセルファイル（拡張子：.bdl）のファイルフォーマットと、その各項目についての説明を以下に示します。ユニットセルファイルとは、複数分子を含む単位格子構造（注1）が定義されるファイルのことです。（格子構造を持たない単一の分子構造は分子構造ファイルで定義します。）

### ユニットセルファイルの例

行	123456789.....	123456789.....	123456789.....	123456789.....	123456789.....	123456789.....	123456789.....	123456789.....	123456789.....
1	000001	30.00000	30.00000	30.00000					
2	000002	90.00000	90.00000	90.00000					
3	000003	2	2						
4	000004	H2O			3	3	2		
5	000005	O 1	-0.828	0.1494	0.7691	0.1633	15.999		
6	000006	H	0.414	0.1771	0.7509	0.1689	1.008		
7	000007	H	0.414	0.1247	0.7573	0.1809	1.008		
:	000008	O 1	-0.828	0.7892	0.2281	0.8376	15.999		
:	000009	H	0.414	0.8047	0.2101	0.8146	1.008		
:	000010	H	0.414	0.7563	0.2265	0.8318	1.008		
:	000011	O 1	-0.828	0.6086	0.0978	0.5623	15.999		
:	000012	H	0.414	0.5837	0.0929	0.5417	1.008		
:	000013	H	0.414	0.6345	0.0806	0.5520	1.008		
n	000014	1	2	1					
:	000015	1	3	1					
:	000016	CH3OH			2	3	2		
:	000017	C 13	0.136	0.4916	0.1304	0.4001	12.011		
:	000018	O 1	-0.344	0.5283	0.1120	0.3772	15.999		
:	000019	H	0.208	0.5228	0.1162	0.3453	1.008		
:	000020	C 13	0.136	0.7007	0.2963	0.8659	12.011		
:	000021	O 1	-0.344	0.6751	0.2833	0.9032	15.999		
:	000022	H	0.208	0.6957	0.2786	0.9275	1.008		
:	000023	1	2	1					
:	000024	2	3	1					

一分子内原子数だけ繰り返す  
 一つ目の分子種  
 二つ目の分子種

一分子内結合数だけ繰り返す

各項目の説明

行	カラム	説明
1	1 - 6	未使用
	10 - 17	格子定数 a (単位: Å)
	20 - 27	格子定数 b (単位: Å)
	30 - 37	格子定数 c (単位: Å)
2	1 - 6	未使用
	10 - 17	格子定数 $\alpha$ (単位: deg)
	20 - 27	格子定数 $\beta$ (単位: deg)
	30 - 37	格子定数 $\gamma$ (単位: deg)
3	1 - 6	未使用
	10 - 11	分子種数
	15	ファイルフォーマット識別番号 2の場合: 5行目以降 72-79 カラムを原子量として読み込む 識別番号が存在しない場合: 72-79 カラムは無視され、原子量は自動設定される。
4	1 - 6	未使用
	10 - 25	分子名 (注2)
	42 - 45	分子数
	48 - 50	一分子内原子数
	53 - 55	一分子内結合数 (注3)
5 ~	1 - 6	未使用
	10 - 13	原子種名 (=元素記号+原子タイプ) (注4)
	15 - 22	原子の持つ電荷量 (単位: 素電荷 $e = 1.60217733e-19[C]$ )
	24 - 38	格子座標の X 成分 (注5)
	40 - 54	格子座標の Y 成分 (注5)
	56 - 70	格子座標の Z 成分 (注5)
72 - 79	原子量 (3行目 15 カラムが 2 以外の場合は無視される)	
n ~	1 - 6	未使用
	10 - 14	結合原子ペアの第一原子の原子識別番号 (注6)
	20 - 24	結合原子ペアの第二原子の原子識別番号 (注6)
	30 - 31	原子ペアの結合タイプ (注7)

- (注1) ここでいう単位格子とは、基本単位格子（最小繰り返し構造）だけに限られるものではない。最小繰り返し構造をいくつか集めた格子構造でも良い。
- (注2) 分子名に空白を入れてはならない。
- (注3) 一分子内結合数は、一つの分子内にある結合の総数を表す。  
United Atom に含まれる結合は数えない。
- (注4) 原子種は、元素記号と原子タイプによって識別される。したがって同じ元素でも、原子タイプが異なる場合は違う原子種として取り扱われる。原子種名は、元素記号（2文字）と原子タイプ（2文字）の合計4文字で定義される。元素記号は左詰めで記述される。（元素記号が1文字ならば第二文字目は空白となる）

原子タイプの第一文字目（原子種名の第三文字目）は次のような意味をもつ。

文字	意味
空白	共有結合を有さない (水素原子は、共有結合を有する場合も空白とする)
1	最大結合次数が単結合
2	最大結合次数が二重結合
3	最大結合次数が三重結合
R	共鳴結合を有する

原子タイプの第二文字目（原子種名の第四文字目）は次のような意味をもつ。

文字	意味
1 ~ 4	United Atom として取り扱うために、取り込んでいる水素原子数 (CH <sub>n</sub> , NH <sub>n</sub> (nは整数) のみ適用される。)
空白	United Atom でない原子

原子種名の例

原子種名	意味
Ar	アルゴン単原子
C 12	sp <sup>3</sup> 炭素に、二つの水素原子を取り込んだ原子団CH <sub>2</sub>
C R1	ベンゼン環に属するsp <sup>2</sup> 炭素原子に、一つの水素原子を取り込んだ原子団CH

- (注5) 格子座標とは、単位格子で規格化された座標系（0 ≤ 座標値 < 1）を意味する。格子座標 (X, Y, Z) と通常の実座標 (x, y, z) との関係は、単位格子の a 軸、b 軸、c 軸の各ベクトルをそれぞれ (a<sub>1</sub>, a<sub>2</sub>, a<sub>3</sub>), (b<sub>1</sub>, b<sub>2</sub>, b<sub>3</sub>), (c<sub>1</sub>, c<sub>2</sub>, c<sub>3</sub>) としたとき次のようになる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$$

(注6) 原子識別番号とは、5行目以降に座標が定義されている一分子内の各原子に対して、1から順に振られる番号を指す。(1～一分子内原子数)

(注7) 原子ペアの結合タイプは2文字(1文字の時は左詰め)から成り、次のような意味をもつ。

文字	意味	例
1	単結合	CH <sub>4</sub> の炭素-水素結合
2	二重結合	CH <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub> の炭素-炭素結合
3	三重結合	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> の炭素-炭素結合
AR	ベンゼン環の炭素-炭素結合	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> の炭素-炭素結合
R	ベンゼン環以外の共鳴構造に関係する結合	Ph-CH=CH <sub>2</sub> の側鎖の炭素-炭素単結合および二重結合
PL	ニトロ基を構成する窒素-酸素結合	Ph-NO <sub>2</sub> の窒素-酸素結合