

## 分子構造ファイルフォーマット

Materials Explorer で用いられている分子構造ファイル（拡張子：.mol）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。分子構造ファイルとは、単一分子の分子構造が定義されるファイルのことです。（複数分子種・複数分子を含む格子構造はユニットセルファイルで定義します。）

### 分子構造ファイルの例

行	カラム
1	MASPHYCVO2L01 Molecular Database File
2	FUJITSU
3	n-pentane molecular structure
4	0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
5	1
6	n-pentane 17 16 2 1 200
7	1 C 1 12.0110 0.0439 -0.0417 -0.4832 0.0000
8	1 C 1 12.0110 1.4415 -0.4549 -0.9489 0.0000
9	1 C 1 12.0110 2.4493 -0.1995 0.1735 0.0000
:	1 C 1 12.0110 3.8469 -0.6126 -0.2923 0.0000
:	1 C 1 12.0110 4.8548 -0.3573 0.8302 0.0000
:	2 H 1.0080 5.8541 -0.6527 0.4972 0.0000
:	2 H 1.0080 4.8551 0.7067 1.0850 0.0000
:	2 H 1.0080 4.5759 -0.9431 1.7110 0.0000
:	2 H 1.0080 3.8467 -1.6766 -0.5470 0.0000
:	2 H 1.0080 4.1258 -0.0268 -1.1730 0.0000
:	2 H 1.0080 2.4496 0.8644 0.4283 0.0000
:	2 H 1.0080 2.1705 -0.7854 1.0543 0.0000
:	2 H 1.0080 1.4413 -1.5188 -1.2037 0.0000
:	2 H 1.0080 1.7204 0.1310 -1.8298 0.0000
:	2 H 1.0080 0.0441 1.0222 -0.2284 0.0000
:	2 H 1.0080 -0.2350 -0.6275 0.3976 0.0000
:	2 H 1.0080 -0.6768 -0.2243 -1.2858 0.0000
n	1 15 1
:	1 16 1
:	1 17 1
:	1 2 1
:	2 13 1
:	2 14 1
:	2 3 1
:	3 4 1
:	3 11 1
:	3 12 1
:	4 5 1
:	4 9 1
:	4 10 1
:	5 6 1
:	5 7 1
:	5 8 1

分子内  
原子数だけ  
繰り返し

分子内  
結合数だけ  
繰り返し

m	C 1	0.0000	0	0.0000	0	0.0000	0	} 分子内 原子数だけ 繰り返し
:	C 1	1.5300	1	0.0000	0	0.0000	0	
:	C 1	1.5299	2	109.4714	1	0.0000	0	
:	C 1	1.5300	3	109.4691	2	-179.9949	1	
:	C 1	1.5300	4	109.4710	3	-179.9956	2	
:	H	1.0940	5	109.4730	4	179.9975	3	
:	H	1.0941	5	109.4658	6	-119.9957	4	
:	H	1.0940	5	109.4704	7	119.9992	6	
:	H	1.0941	4	109.4623	5	-59.9999	8	
:	H	1.0939	4	109.4767	9	144.5171	8	
:	H	1.0940	3	109.4650	4	-59.9995	10	
:	H	1.0940	3	109.4741	11	144.5127	10	
:	H	1.0940	2	109.4713	3	-59.9961	12	
:	H	1.0941	2	109.4695	13	144.5199	12	
:	H	1.0940	1	109.4731	2	-60.0023	14	
:	H	1.0940	1	109.4678	15	144.5224	14	
:	H	1.0940	1	109.4719	16	-119.9959	15	

各項目の説明

行	カラム	説明
1	1 - 80	ファイルを識別するための記号
2	1 - 30	ファイルの作成者
3	1 - 80	任意のコメント
4	1 - 10 12 - 21 23 - 32 34 - 43 45 - 54 56 - 65	常に 0.0000 常に 0.0000 常に 0.0000 常に 0.0000 常に 0.0000 常に 0.0000
5	1 - 4	常に 1
6	1 - 15 17 - 20 24 - 27 31 - 34 38 - 41 45 - 48	分子名 (注 1) 一分子内原子数 一分子内結合数 (注 2) 一分子内原子種数 (注 3) 常に 1 EWS 版 MASPBYC/WB の Molecular Database で使用される原子数以上の整数値 (Materials Explorer では未使用のため任意の整数値でよい)
7 ~	1 - 4 8 - 11 13 - 22 24 - 33 35 - 44 46 - 55 57 - 66	原子種識別番号 (1 ~ 分子内原子種数) (注 3) 原子種名 (= 元素記号 + 原子タイプ) (注 3) 原子量 座標の X 成分 (単位: Å) 座標の Y 成分 (単位: Å) 座標の Z 成分 (単位: Å) 原子の持つ電荷量 (単位: 素電荷 $e = 1.60217733e-19[C]$ )
n ~	1 - 4 8 - 11 15 - 16	結合原子ペアの第一原子の原子識別番号 (注 4) 結合原子ペアの第二原子の原子識別番号 (注 4) 原子ペアの結合タイプ (注 5)
m ~	1 - 4 6 - 15 17 - 20 22 - 31 33 - 36 38 - 47 49 - 52	原子種名 (注 3) 結合長 (単位: Å) 第一原子の原子識別番号 (注 4) 結合角 (単位: deg) 第二原子の原子識別番号 (注 4) 二面角 (単位: deg) 第三原子の原子識別番号 (注 4)

- (注1) 分子名に空白を入れてはならない。  
EWS版MASPHYC/WBのMolecular Databaseで分子構造ファイルを作成した場合、分子名は分子構造ファイル名と同一となる。
- (注2) 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3) 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4) 原子識別番号とは、7行目以降に座標が定義されている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~分子内原子数)  
(上の例では、原子識別番号1~5は炭素、6~17は水素になっている)

(注5) 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
A R	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
P L	ニトロ基を構成する窒素-窒素結合	Ph-NO <sub>2</sub> の窒素-酸素結合