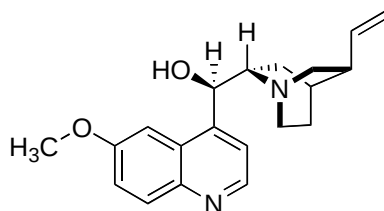


本日の演習内容

Accelrys Draw による分子構造式の描き方

フリーソフトである BIOVIA Draw を利用して構造式や化学式を描画します。下記の分子 (Quinine) の構造を描画する。



Quinine

1. BIOVIA Draw を起動する。
2. 結合長やラベルのサイズの設定を確認する。
(Options のメニューの中の settings を選択すると、これらを含めて描画の基本設定がどうなっているかを確認、変更ができる.)
3. 基本骨格から描画する。ヘテロ元素の元素記号はとりあえず無視して、ベンゼン環のテンプレートを使って骨格を作成する。
4. 基本骨格ができたなら、「Bond Tool」で置換基の骨格を付け加える。
5. 全体の骨格ができたなら、「Atom Toolbar」を使って必要な箇所に元素記号を入れる。元素記号の色は、既定の色のみで良い (黒にするには、その元素記号を選択して「Foreground Color」で黒を選ぶ)。
6. 「Up Wedge Bond」を使って立体構造を表現する。
7. 完成した分子構造を「Lasso Tool (投げ縄ツール)」を使って選択してコピーする。
8. Ms-Word を起動してコピーした構造式を張り付ける。
9. Quinine がどういう分子なのか、ネットで検索し、Quinine に関する説明文を書き加える。

課題 1

1. 以下の 5 つの分子の中から 1 つを選びネットで検索し、その構造式を Accelrys Draw で描く。
 - a. クリスタルバイオレット
 - b. グルコース
 - c. ナノプシヤン
 - d. オセルタミビル
 - e. インジゴカルミン
 - f. その他、自分の描きたい分子
2. Accelrys Draw で描いた分子構造を Ms-Word にコピーし、それぞれをネット検索し、その分子について 2, 3 行の簡単な説明を加えよ。
3. ファイルの右上に自分の学籍番号と名前を書く。
4. ファイル名は“氏名+171004.docx” (例: 立命太郎 171004.docx) とする。

Excel によるグラフの描き方

例: $y = (x-2)^2 - 1$ のグラフを作成する。

x の値を $-5 < x < 5$ の範囲で 0.1 ずつ変化させて表とグラフを作成する。

1. Excel を起動する。
2. ワークシート上のセル A1 に x と入力（見出し）し、セル A2 以降に -5 から 5 まで 0.1 刻みで数値を入力する（オートフィルを用いる）。
3. セル B1 に $y = (x-1)^2 + 2$ と入力（見出し）し、セル B2 には演算式 **`= (A2 - 1)^2 + 2`** を入力、セル B3 以降にオートフィルで演算式を入力する。
4. A 列と B 列の数値を用いてグラフを作成する。その際、グラフの種類は「散布図（平滑線）」とする。

課題 2

以下の課題をエクセル上でを行い、エクセルファイルを提出せよ。

なお、ファイル名は“氏名+171007.xlsx”とする。

- a. $y = \sin x$ のグラフを作成する（ x は $0^\circ < x < 360^\circ$ の範囲で 1° ずつ変化）。
Excel では、角度をラジアンに変換する必要がある。A 列は「角度（°）」、B 列は「ラジアン」（演算式は「=RADIANS(A2)」）、C 列は「 $\sin x$ 」（演算式は「=SIN(B2)」）を入力する。
- b. 一番最初の右上に自分の学籍番号と名前を書く。
- c. ファイル名は“氏名+171007. xlsx”（例：立命太郎 171004.xlsx）とする。

- 完成したら、ファイルをメールに添付して提出すること。

送り先：[ynagasa あつと fc.ritsumei.ac.jp](mailto:ynagasa@fc.ritsumei.ac.jp)

- メールタイトルは”基礎演習 2 レポート：氏名と学生証番号”とすること。
- 提出ファイルの最初のページの右上には必ず氏名と学生証番号を記入すること。
- ファイル名は、それぞれ“氏名+171004.docx”と“氏名+171004.xlsx”とする。
（例：立命太郎 171004.docx と立命太郎 171004.xlsx）
- ファイル名の「氏名」以外は必ず半角。
- 最終締め切り：2017 年 10 月 10 日（火曜）。
- 日常点評価の提出課題は定期試験と同等の意味があるので真剣に取り組むこと。