

トラブルシューティング

マシン設定及び HyperChem 設定に関して

当方製品及び HyperChem の動作環境によっては以下の症状が生じる場合があります。

当方製品をインストールした後に HyperChem が起動できなくなる。

[原因]

HyperChem 初回起動時の Windows レジストリへの登録が失敗するために生じます。

[解決策]

HyperChem のインストールと同時に当方製品のインストールを行わないでください。当方製品をインストールする前に必ず HyperChem を一度は利用しておいてください。特に、HyperChem を一度も使用していないアカウントで当方製品を起動する場合は要注意です。本現象が生じた場合には、HyperChem を Windows のコントロールパネルを用いてアンインストールし（リペアでは解決しません）、再度インストールしてから HyperChem を一度起動しておきます。このとき、当方製品をインストール済みでもかまいません。

Amber99や CHARMM27 等の分子力学計算を設定しようとする
とエラーとなる。

[原因]

HyperChem 初回起動時の Windows レジストリへの登録が失敗するために生じます。確認方法としては、HyperChem の「Setup」メニューの「Molecular Mechanics」から「Amber」もしくは「Bio+」を選択して力場をセットします。同メニューの「Select Parameter Set」を選択して力場パラメータの選択ボックスを開きます。ここで、「Amber」の場合は使用の HyperChem がバージョン 7.0 以上の場合に「Amber99」が含まれていないと、レジストリに問題があります。同様に、「Bio+」の場合は使用の HyperChem がバージョン 7.0 以上の場合に「CHARMM27」が含まれていないと、レジストリに問題があります。

[解決策]

HyperChem のインストールと同時に当方製品のインストールを行わないでください。当方製品をインストールする前に必ず HyperChem を一度は利用しておいてください。特に、HyperChem を一度も使用していないアカウントで当方製品を起動する場合は要注意です。本現象が生じた場合には、HyperChem を Windows のコントロールパネルを用いてアンインストールし（リペアでは解決しません）、再度インストールしてから HyperChem を一度起動しておきます。このとき、当方製品をインストール済みでもかまいません。

二次構造の表示を有効にすると HyperChem がハングアップする。

[原因]

一部のグラフィックスボードが HyperChem の OpenGL 機能と相性問題を引き起こすことが知られています。

[解決策]

グラフィックスボードのドライバーを最新に更新してください。最新のドライバーに更新してもなお症状がみられる場合には、本機能を利用しないか、グラフィックスボードを変更されることを推奨します。

HyperChem 上での分子操作（回転など）が極端に遅くなるとともに当方製品のレスポンスが極端に遅い。

[原因]

グラフィックスボードのドライバーがご利用の Windows 用に最適化されていないために生じます。

[解決策]

グラフィックスボードのドライバーを最新に更新してください。

数万原子数の分子を取り扱くと HyperChem 上での分子操作（回

転など) が極端に遅くなる。

[解決策]

コントロールセンターの「Utilities」メニューから「Use OpenGL」オプションを無効にするか、「Default Renderings」から HyperChem のレンダリングオプションを呼び出し、「Rendering Quality」の各項目を適切に設定してください。

当方製品プルダウンメニューのイメージおよびチェックボタン項目が初回プルダウン時にだけ正常に表示されない。

[原因]

Windows の視覚効果と関係があります。

[解決策]

メニューはシステムが管理しているため、メニューに関する Windows の一部処理を無効にする必要があります。具体的には、Windows のコントロールパネルから「パフォーマンスとメンテナンス」を選択し、「システム」を開きます。「詳細選定」タブを選択し、「パフォーマンス」オプションの「設定」を選びます。「視覚効果」タブ中で「カスタム」を選択し、「メニューをフェードまたはスライドして表示する」項目のチェックだけを選択解除します。以上で正常に表示されるようになります。

「Help」メニューの「Index」が利用できない。

[原因]

旧 ChemDraw ファイルとの競合により起こります。

[解決策]

ヘルプはコンパイルされた HTML ヘルプファイル形式 (CHM 形式) を採用していますが、ChemOffice 製品をインストールする場合にファイルの関連付けで旧 ChemDraw ファイル形式 (CHM 形式) の関連付けを行ってしまうと、当方製品に限らず、コンパイルされた HTML ヘルプファイル形式を採用している Windows アプリケーションすべてのヘルプが利用できなくなりますのでご注意ください。関連付けしてしまった場合の解決

策としては Windows レジストリエディタを呼び出し、「HKEY_CLASSES_ROOT」の「.chm」のデータ項目を「chm.file」に変更してください。なお、レジストリでの作業はシステムに致命的なエラーを引き起こす可能性がありますので、自己責任において作業してください。

Windows Vista および Windows 7 での使用に関して

Windows Vista および Windows 7 では以下の問題を生じる場合があります。

ウインドウの配置がずれている。

[原因]

当方製品インストール時にウインドウの配置がずれる場合があります、以後もウインドウがずれたままになることがあります。

[解決策]

リビジョン E1 では Windows Vista まで、リビジョン F1 では Windows 7 まで以下の解決策が参考になれます。コントロールセンターのタイトルバーにある最大化ボタンをクリックして最大表示し、コントロールセンターを終了します。次回から正常に各ウインドウが配置されます。Windows クラシックテーマを利用されている場合には、コントロールセンターの「References」に用意されている「Window Style」を「Classic」に変更後再起動し、最大化ボタンをクリックして最大表示しコントロールセンターを再度終了します。次回から正常に各ウインドウが配置されます。その他、Windows のウインドウデザインにある詳細設定を利用してデフォルトのフレームサイズなどをカスタマイズされている場合には、「MFWindow.ini」ファイルの内容を手動で変更することでウインドウの配置を整えることが可能です。なお、フォントサイズの調整 (Windows Vista) もしくはテキストサイズの設定 (Windows 7) を既定から変更している場合には対応していませんので、解像度を変更するなどして対応してください。

当方製品が応答しなくなる。

[原因]

HyperChem の応答が無くなることにより生じます。HyperChem の応答がなくなる原因の大半はグラフィックスボードのドライバーが HyperChem 用に最適化されていないことによります。

[解決策]

グラフィックスボードのドライバーを最新に更新してください。最新のドライバーに更新してもなお症状がみられる場合には、コントロールセンターの「Utilities」メニューから「Use OpenGL」オプションを無効にするか、グラフィックスボードを変更されることを推奨します。なお、強引にコマンドを使用すると強制終了する場合がありますので、HyperChem の応答が戻るまで作業を一旦中断してください。

Windows Vista および Windows 7 の Aero 機能を利用して
されている場合、以下の問題が生じる場合があります。

アクセスできないはずのウインドウタイトルバーを操作できて
しまうことで、一旦 HyperChem とのコミュニケーションが中断
されてしまう。

[原因]

各モジュールプログラムのメインウインドウやパラメータウインドウは HyperChem コマンド処理中にアクセスできなくなっていますが、Aero 機能有効時ではタイトルバーだけは操作できてしまいます。誤って移動などの操作をした場合、一旦 HyperChem とのコミュニケーションが中断されるとともに、実行中の HyperChem コマンド処理も中断されます。

[解決策]

この場合には、しばらく Windows 上での作業を中断してください。約 1 分ほどで再開できるようになります。根本的な解決策としては、Windows Vista もしくは Windows 7 の Aero 機能を HyperChem 起動時に一時的に外すことです。HyperChem 起動時に一時的に Aero 機能を外すには、スタートメニューから HyperChem のショートカットを右クリックし「プロパティ」を選択します。プロパティダイアログの「互換性」から「デスクトップコンポジションを無効にする」を選択します。

二次構造の表示が有効にもかかわらず、実際には HyperChem 作
業領域に表示されない。

[原因]

Windows Vista および Windows 7 の Aero 機能と OpenGL 機能の競合により生じます。通常、上記現象とともに、分子の回転操作などが極端に遅い、モジュールプログラムの反応が極端に遅い、などの現象も同時に起こります。

[解決策]

このような場合、ご利用の OpenGL 対応グラフィックスボードのドライバーを最新にするとともに、HyperChem 用に調整する必要があります。解決できない場合の解決策としては、Windows Vista もしくは Windows 7 の Aero 機能を HyperChem 起動時に一時的に外すことです。HyperChem 起動時に一時的に Aero 機能を外すには、スタートメニューから HyperChem のショートカットを右クリックし「プロパティ」を選択します。プロパティダイアログの「互換性」から「デスクトップコンポジションを無効にする」を選択します。

HyperChem 作業領域で直接選択作業を行うと画面が消える場合がある。

[原因]

Windows Vista および Windows 7 の Aero 機能と OpenGL 機能の競合により生じます。

なお、本現象は HyperChem8.05 以降で解決されています。

[解決策]

解決策としましては、Windows Vista もしくは Windows 7 の Aero 機能を HyperChem 起動時に一時的に外すことです。HyperChem 起動時に一時的に Aero 機能を外すには、スタートメニューから HyperChem のショートカットを右クリックし「プロパティ」を選択します。プロパティダイアログの「互換性」から「デスクトップコンポジションを無効にする」を選択します。

パーソナルコンピュータでの使用に関して

当方製品はスタンドアロンのPCワークステーションで使用されることを推奨します。

起動時、HyperChem とのコネクションに失敗する場合があります。

[原因]

アンチウイルスやファイヤーウォールソフトがインストールされているデスクトップパソコンあるいはノートパソコンではこれらソフトが定期的にCPUリソースをほぼ使い尽くす状況が一般に続きます。また、PC起動時には、プリインストールされている多くのソフトウェアがネットワークを介して頻繁にハードディスクにアクセスし、キューを発生することでディスクボトルネックの原因となっています。このような状況下に当方製品を起動すると、HyperChem との接続要求がタイムアウトとなる場合があります、この場合に接続エラーとなります。

[解決策]

メッセージで「中止」を選択して再度起動を試みてください。なお、バックエンドで科学計算を多用しているため、マシンリソースを使い尽くすような他のソフトウェアとの共存を避けられることを推奨します。

正常終了しなかった場合、再開時に別プロセスが起動している旨の警告メッセージが現れる場合があります。

[原因]

何らかの理由で当方製品使用時にマシンがダウンした場合、デフォルト設定では、再開時に別プロセスが起動している旨の警告メッセージが現れません。

[解決策]

この場合、メッセージに従ってプロセスマネージャに異常終了したことを認識させる必要があります。なお、Windows の自動アップデート機能が有効な場合、計算途中でもマシンの強制シャットダウンが行われ、長時間実施したシミュレーションが途中で無駄になってしまう場合があります。このため、当方製品を使用するマシンの設定は手動アップデートに変更し

ておくことを推奨します。その他、ハードディスクのデフラグメントなども手動で実施されることを推奨します。

シミュレーション時、マシンが突然ダウンする場合があります。

[原因]

一般のデスクトップパソコンやノートパソコンでは科学計算を多用することを前提に放熱処理設計されていないため、熱暴走によるダウンが原因と考えられます。

[解決策]

室温もしくはマシン温度を十分に低くしてください。なお、当方製品およびHyperChemバックエンド計算エンジンによるシミュレーション時には長時間 CPU 稼働率 100%に達します。また、当方製品パッケージによっては Gaussian の計算エンジンによる高レベルの科学技術計算もバックエンドで同時に使用する場合があります。そのため、当方製品は科学計算を前提に設計されているスタンドアロンの PC ワークステーションで使用されることを推奨します。

使用上に関して

HIN 形式 (HyperChem フォーマット) から ENT 形式に形式変換した場合にコネクションがおかしくなる場合がある。

[原因]

フォーマットのダウングレードにより生じます。

[解決策]

任意のテキストエディタで、形式変換した ENT 形式のファイルを開き、メチオニンとシステイン残基に関するラベルを「HETATM」から「ATOM」(文字数に注意)に置換してください。また、これら残基に関するコネクションテーブルを削除してください。

モジュールプログラムでの PDB ファイル読み込み時もしくは再読み込み時に1分以上の時間がかかる場合にモジュールプログラムが強制終了する。

[原因]

ファイル読み込みに関する HyperChem とのタイムアウト条件が約1分に設定されているために起こります。マシン性能にもよりますが、構成原子数が10万原子に近い分子システムの PDB ファイルを読み込む場合に本タイムアウト条件を満たしてしまう場合があり、この場合にタイムアウトエラーとなってモジュールプログラムが強制終了されます。

[解決策]

構成原子数が数万原子の分子システムの PDB ファイルはコントロールセンターで初回読み込み時にあらかじめ HIN 形式に変換しておいてください。コントロールセンターのオープン機能はタイムアウトとなりません。HIN 形式に変換することで ENT 形式よりも高速に読み込めるようになり、タイムアウト条件を満たさなくなります。なお、ファイル読み込みに関するタイムアウト条件は設定できません。

PDB ファイル (ENT 形式) のオープン時に「Too Many Helix in PDB」のエラーメッセージが現れ、これに対応すると HyperChem が強制終了する。

[原因]

PDB ファイル中にアサインされている二次構造の数が HyperChem で扱える二次構造の数を超えるために起こります。特に、10 万原子に近いあるいはこれを超える構成原子からなるタンパク質分子システムを読み込む場合や、NMR データを読み込む場合に発生することがあります。

[解決策]

PDB ファイルを任意のテキストエディタで開き、「HELIX」および「SHEET」項目を削除してください。

PDB ファイル (ENT 形式) を読み込んだ場合に水素原子が二重に用意される場合がある。

[原因]

PDB フォーマット形式に誤りのある水素原子座標を含んだ PDB ファイルを読み込む場合、あるいは水素原子が重水素化されている場合に生じます。

[解決策]

テキストエディタなどを使用して該当原子名を正しく書き換えるか（重水素化されている場合は水素原子名に変更）、水素原子座標を PDB ファイルから削除しておいてください。重原子に関して PDB フォーマット形式に誤りのある PDB ファイルを読み込む場合にも同様の現象が起こります。なお、コントロールセンターから構造をオープンした後に、「Molecular System Information」オプションを利用して、開いた分子システムの構成に問題がないか確認した後に作業を開始されることを推奨します。

いくつかのモジュールプログラム立ち上げ時に「HyperChem の名前システムと競合があります」というメッセージとともに強制終了する場合がある。

[原因]

多くは配位結合に関するオリジナルの PDB ファイルの記載方法に問題があります。

[解決策]

テキストエディタなどを使用してあらかじめオリジナルの PDB ファイル

の関連個所の残基名や原子名を正しく書き換えてください。また、原子価が考慮されていないコネクションテーブルがある場合にはこれを削除してください。

HyperChem バックエンド力場計算エンジンの応答がなくなる場合がある。

[原因]

分子システムの構成や構成原子数、パラメータの割り当て数とも関係しますが、HyperChem バックエンド力場計算エンジンが許容可能な原子数は HyperChem7.0 以降で 7 万原子弱 (約 50 万 Da) です。これを超える構成原子数からなる分子システムの力場一点計算、構造最適化計算、分子動力学計算を使用する機能は利用できません。

[解決策]

現時点での解決策は、HyperChem バックエンド力場計算エンジンを使用するにあたり、適切に分子システムを分割して実施することです。

HyperChem 半経験分子軌道を利用して分子システム中の低分子に原子電荷を割り当てることができない場合がある。

[原因]

数万原子の構成原子数から成る分子システム中の低分子に HyperChem 半経験分子軌道法を適用する場合に生じます。

[解決策]

本現象が影響するモジュールプログラムは Homology Modeling Professional for HyperChem パッケージの周辺モデリングモジュールプログラムだけですが、本モジュールプログラムに用意されている Gaussian Interface を用いることでこれを回避できます。なお、Gaussian Interface で原子電荷を割り当てるには別途 Gaussian が必要になります。

モジュールプログラムの一部機能を使用した場合、物理メモリ容量以下でメモリーオーバーとなる場合がある。

[原因]

数万原子の構成原子数から成る分子システムを取り扱う場合には、大量の物理メモリを使用する機能が Windows の割り当て可能な約 2 GB 以上の物理メモリを使用できないために生じます。

[解決策]

現時点での解決策は、適切に分子システムを分割して実施することです。なお、本現象が確認されているモジュールプログラムは、現時点で **Homology Modeling Professional for HyperChem** パッケージの水素原子初期座標評価モジュールプログラムだけです。Docking Study with **HyperChem** パッケージでは **PIEFII** モジュールプログラムが本現象を引き起こす可能性があります。

分子動力学計算でスナップショットファイルを設定したデータを利用した場合、読み込み時もしくはマージ時に警告メッセージが現れ、これを放置すると強制終了する場合があります。

[原因]

分子動力学計算後のオリジナルファイルで以後構造改定されてしまうと分子動力学計算時に保存したスナップショットファイルとの構造関係が崩れてしまいます。**HyperChem** はこれを警告するためにメッセージを出し、ユーザーに警告します。モジュールプログラムによっては本警告メッセージに対応していただく必要がありますが、対応がない場合には何らかの理由で **HyperChem** とのコネクションが途切れたと判断し、強制的にモジュールプログラムが終了します。

[解決策]

1 分以内に警告メッセージの「OK」を選択してください。正常に利用できます。

分子動力学計算でスナップショットファイルを設定したデータを利用した場合、読み込み時もしくはマージ時に「**Error opening file ...**」のエラーメッセージが現れ、これを放置すると強制終了する場合があります。

[原因]

分子動力学計算時にスナップショットファイルを設定したオリジナルフ

イルを利用し、スナップショットファイルが見つからない場合、HyperChem は上記のエラーメッセージを出します。特に、関連ファイルを別フォルダに移動した場合など、関連付けが崩れた場合に発生します。本エラーメッセージに対応していただく必要がありますが、対応がない場合には何らかの理由でHyperChem とのコネクションが途切れたと判断し、強制的にモジュールプログラムが終了します。

[解決策]

1 分以内にエラーメッセージの「OK」を選択してください。正常に利用できます。なお、スナップショットファイルを設定する場合にはオリジナルファイルを含め、作業フォルダから移動させないでください。

HyperChem の Orbitals ウィンドウで「Cancel」を選択したのちに、Plot Molecular Properties Options を利用するとHyperChem がハングアップする場合があります。

[原因]

HyperChem に由来する問題です。

[解決策]

必ず、「OK」を選択してください。なお、本現象が影響するモジュールプログラムは、Docking Study with HyperChem パッケージのドックビューアーモジュールプログラムの「Properties」機能だけです。

HyperChem 作業領域から分子構造が消えてしまう、あるいはオープン時に表示されない。

[原因]

HyperChem に由来する問題です。

[解決策]

HyperChem ウィンドウをアクティブにして「Space」キーを押すと回復できます。なお、「Space」キーを使い続けると逆に消えたまま回復できなくなりますので、「Space」キーの乱用は避けてください。回復できなくなった場合は、コントロールセンターで再オープンしてください。また、オ

オープン時に表示されない場合には、一度「Space」キーを押して表示しておき、表示された状態で HIN 形式で保存してください。次回から正常に表示されるようになります。