

RDKitとは？

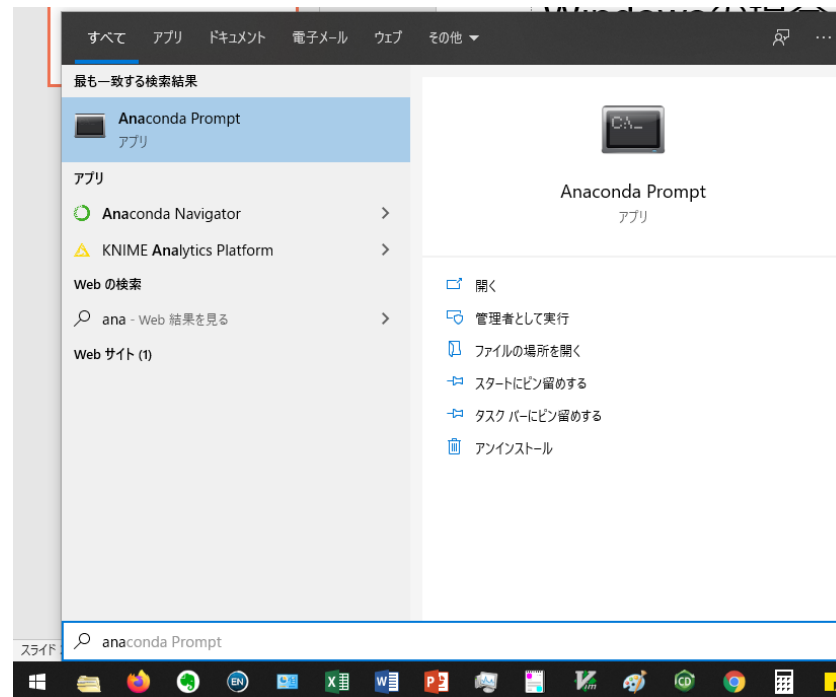
化学構造を使うためのオープンソースのライブラリ

<https://www.rdkit.org/>

- Pythonなどで使える
- Fingerprint、Descriptorの計算
- 分子構造の計算など

RDKitのインストール

- Windowsの場合。 Mac, Linuxでは異なる可能性有り
- Anacondaをインストールしておく
- Anaconda Promptを起動



次のコマンドをコピーして実行

conda install -c conda-forge rdkit

- このコマンドは、RDKitをpythonにインストールします、という意味
- 本当にインストールしますか？と英語で聞かれるので、"y" と入力してエンター
- proxy環境だとhttp errorが出るので注意

ライブラリの使用

実行例はjupyter notebookを参照。

詳しいことよく分からなくても、とりあえず使えればok..?

参考ページ

RDKit全般

https://www.rdkit.org/docs_jp/Getting_Started_with_RDKit_in_Python_jp.html

分子描画

<https://future-chem.com/rdkit-2ddraw-svg/#i-2>

Descriptor

<https://future-chem.com/rdkit-descriptors/>

用語

Fingerprintとは？

→分子の特徴を0と1の羅列で表したもの

Descriptor(記述子)とは？

→分子中に酸素原子が○個、など、特徴を表したもの