

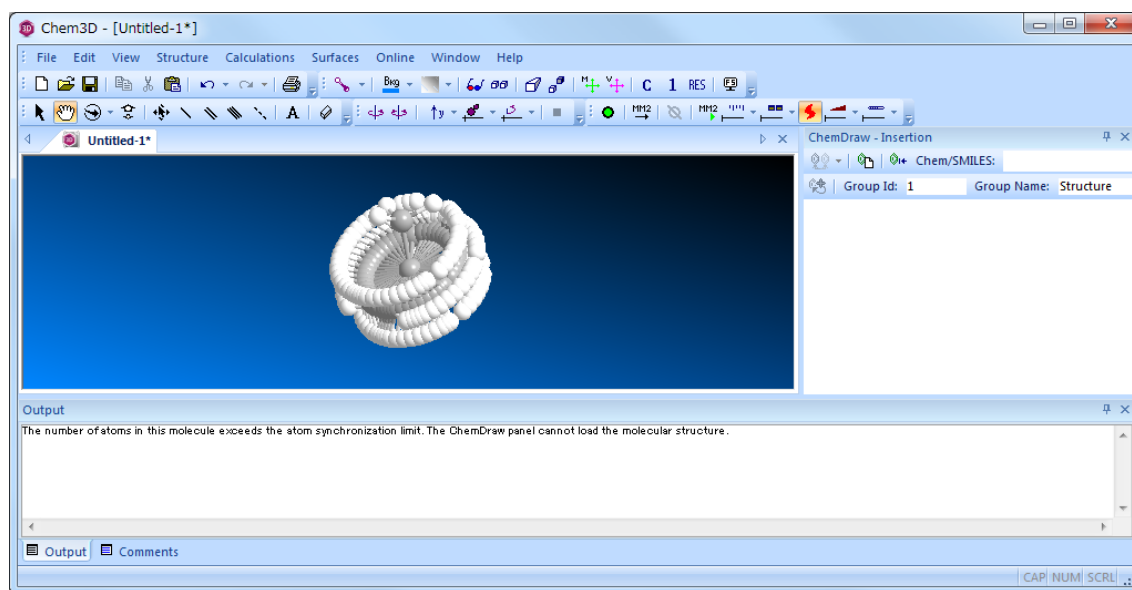
## Chem3D Professional V20.0 操作練習資料

## 1. Chem3D の機能

### 1.1. Chem3D のメニューについて

Chem3D Ver20.0 の画面は、以下のようになっています。画面は、Model Explorer（分子などの構成表）、Model Window(作画領域)、ChemDraw Panel(ChemDraw 作画領域)、Output and Comments Windows（メッセージや結果通知領域）などから構成されています。

- モデルウィンドウ：3次元モデルを表示
- メインメニュー：File,Edit など
- ChemDraw パネル：2次元構造を表示
- Model Explorer タブ：分子を構成する要素の情報を表示



### 1.1.1. ツールバー一覧

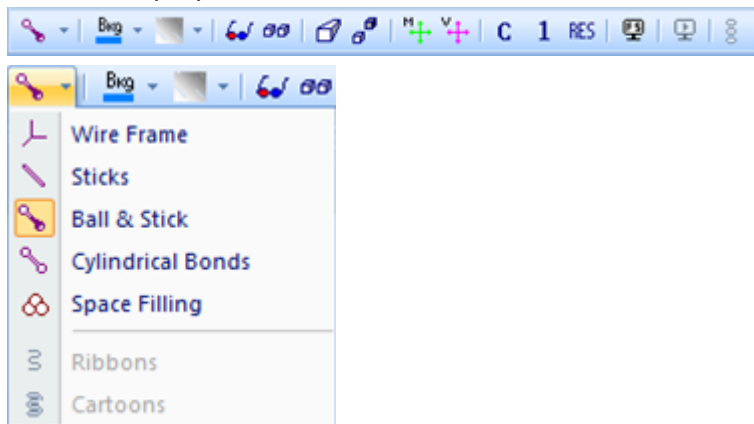
- Standard



- Building



- Model Display



- Demo




- Calculation

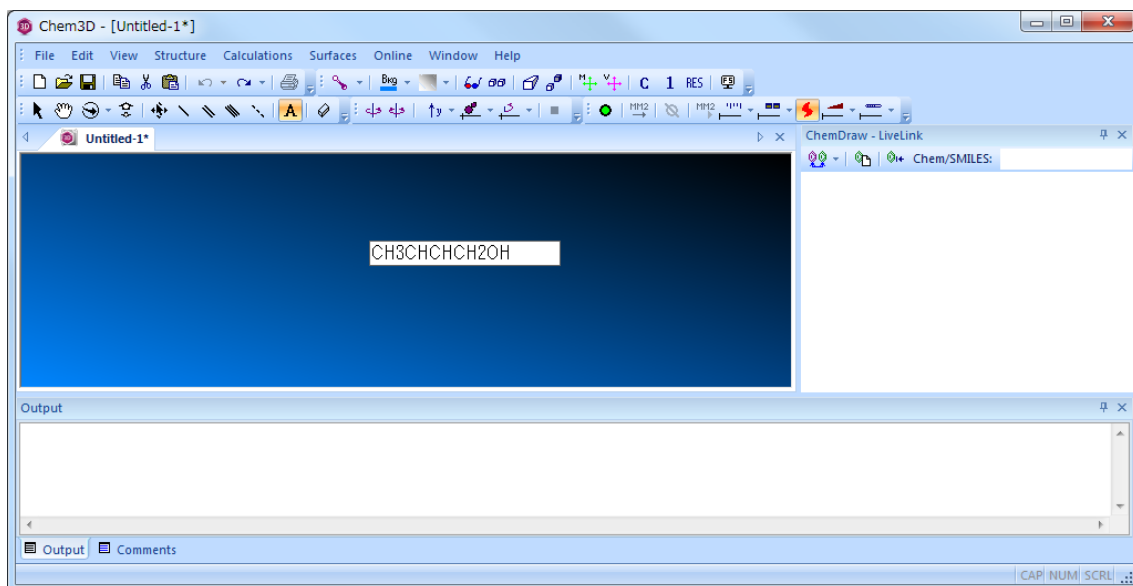


## 1.2. 分子式入力による分子モデルの作成

何か表示されている場合は、Model Window の×をクリックし、File > New で新しい作画領域を表示させます。

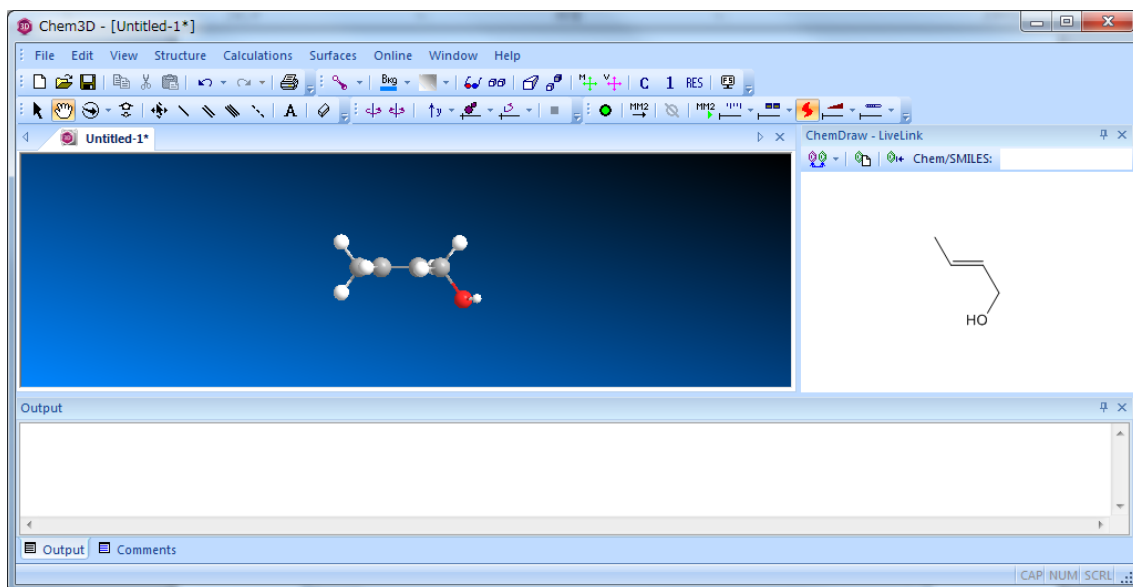
Building ツールバーの Build from Text  を選択し、作画画面をクリックすると、テキスト入力画面になります。そこに分子式や示性式を入力すると、入力に応じた鎖式炭化水素を分子モデルとして自動的に表示します。

- 1.2.1. Text Tool を選択し、作画画面をクリックし表示されたテキスト入力画面に、CH<sub>3</sub>CHCHCH<sub>2</sub>OH と入力して Enter を押下してください。



- 1.2.2. 分子モデルが表示されます。

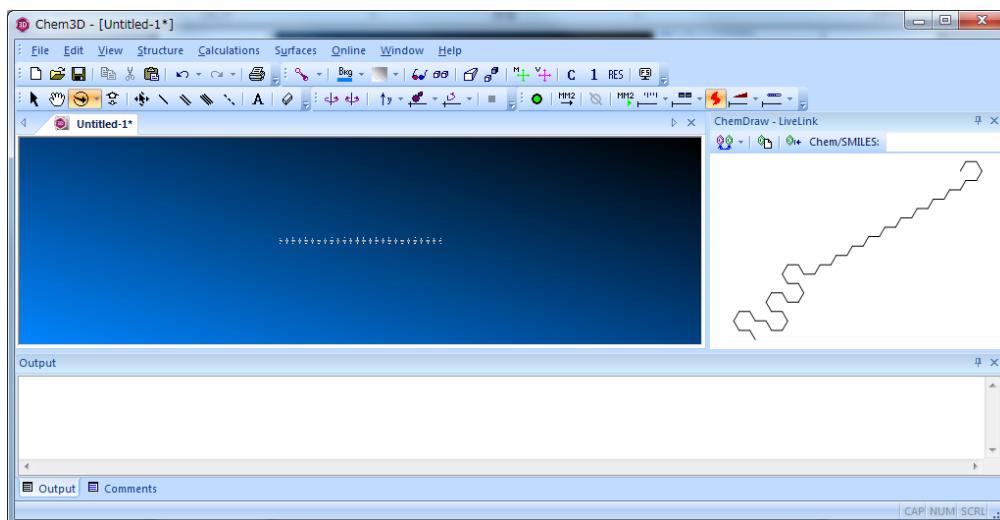
分子名 : (E)-but-2-en-1-ol



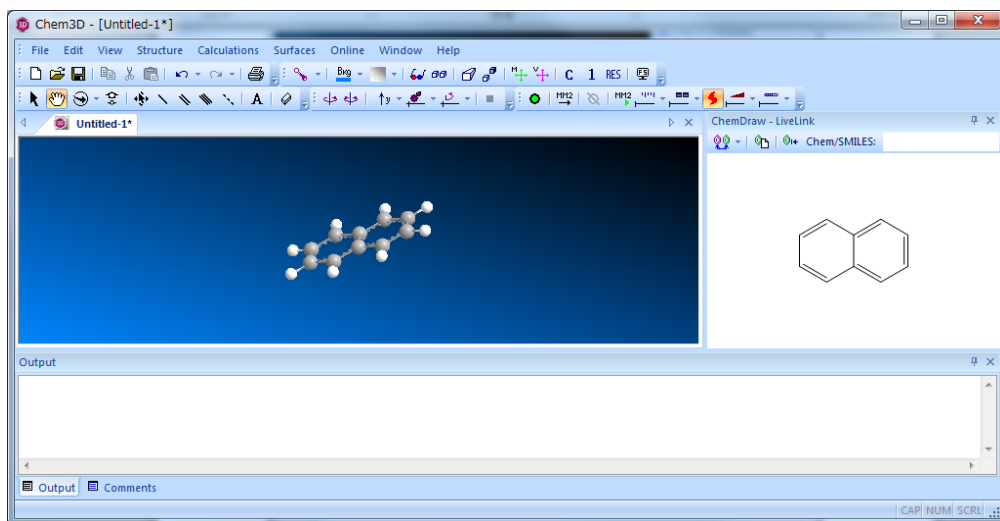
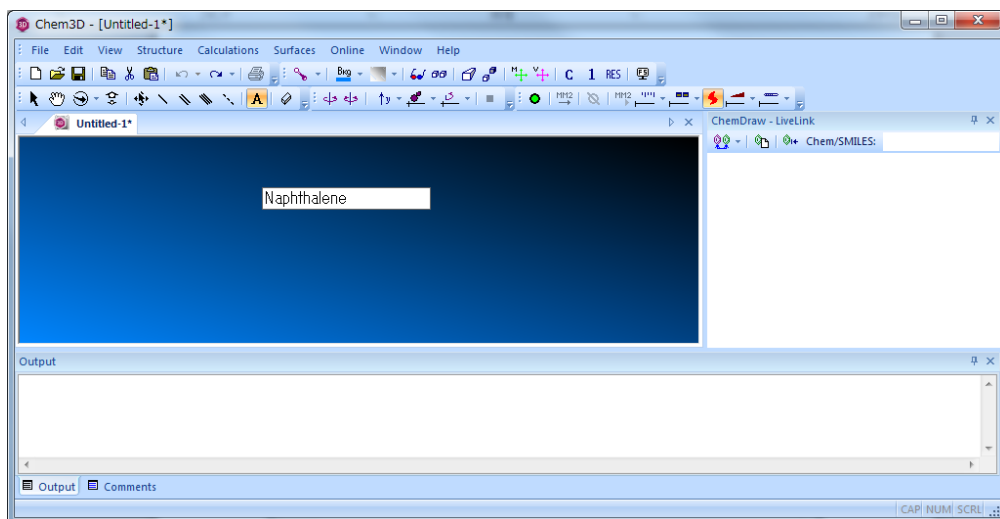
### 1.2.3. 長鎖の飽和炭化水素のモデルを表示します。

新しい作画画面を開き、Text Tool を使用しテキスト入力画面に C50H102 と入力して Enter を押下してください。

分子モデルが表示されます。分子名 : pentacontane



### 1.2.4. ナフタレン(C10H8)などは Naphthalene と入力しても分子モデルが表示されます。

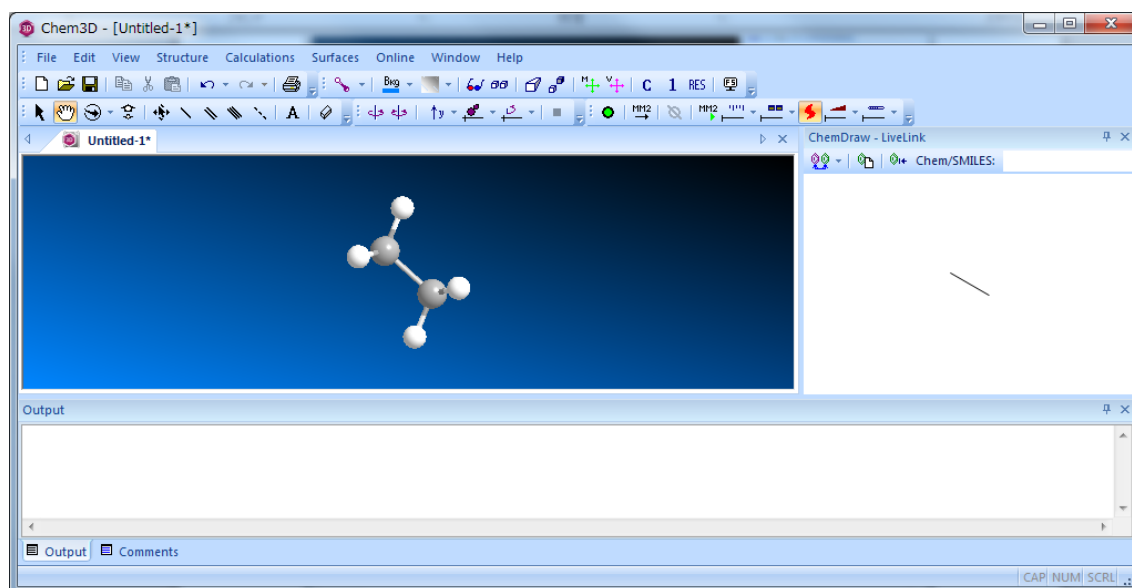
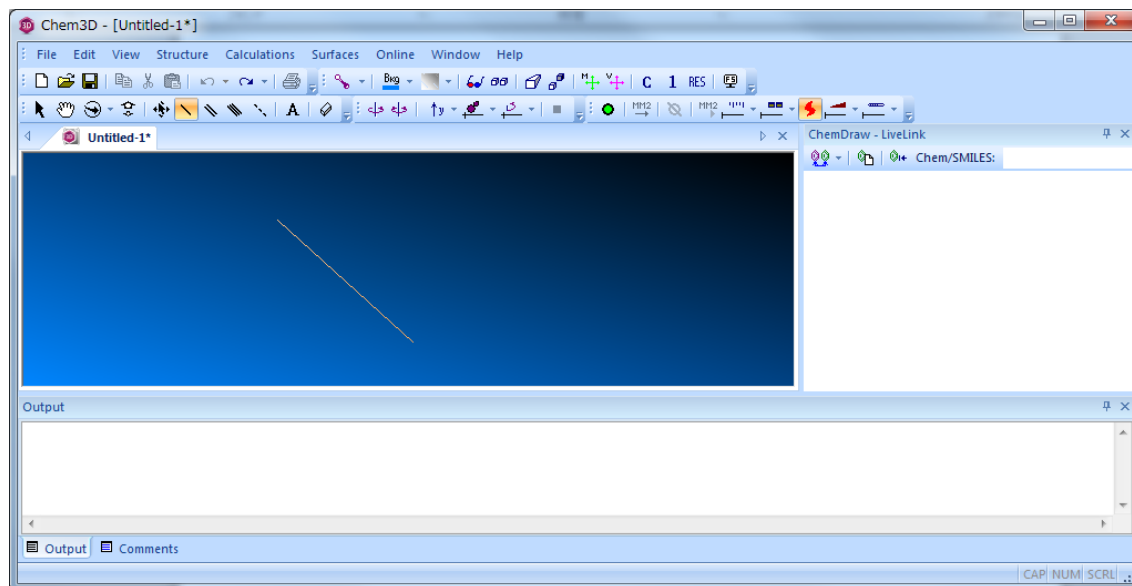



### 1.3. ツールボックスによる分子モデルの作成

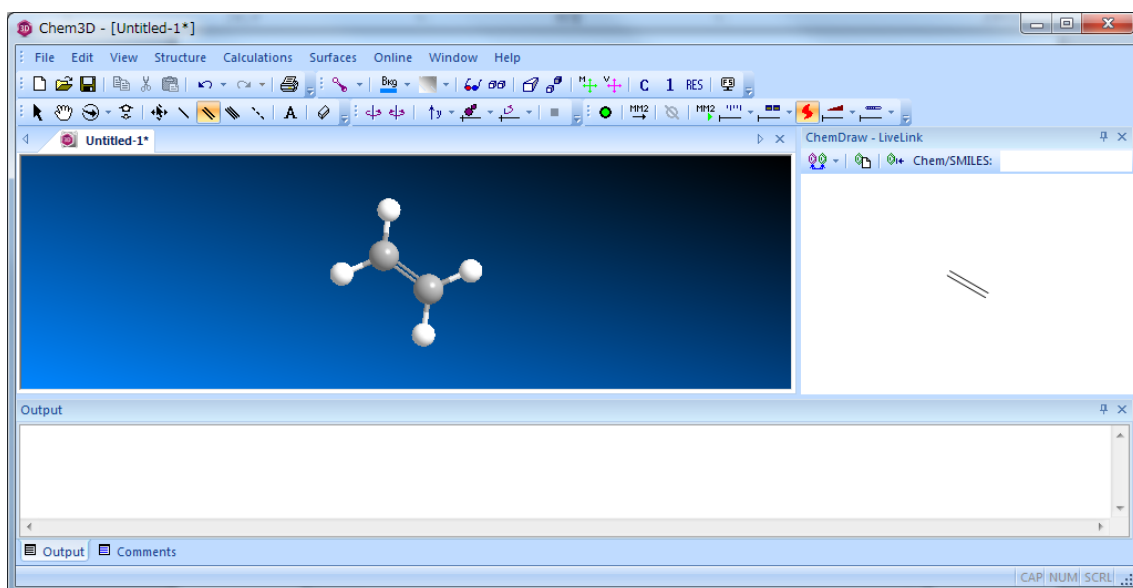
分子式を入力しなくても Building ツールバーの Bond ツールを利用すれば、簡単な鎖式炭化水素であれば、Build from Text<sup>A</sup>よりも簡単に分子モデルを描くことができます。

Single Bond(単結合)<sup>B</sup>、Double Bond(二重結合)<sup>C</sup>、(Triple Bond)三重結合<sup>D</sup>のうち描きたい結合を選択し、ウィンドウの中でドラッグすると、原子と結合から構成される分子モデルが表示されます。

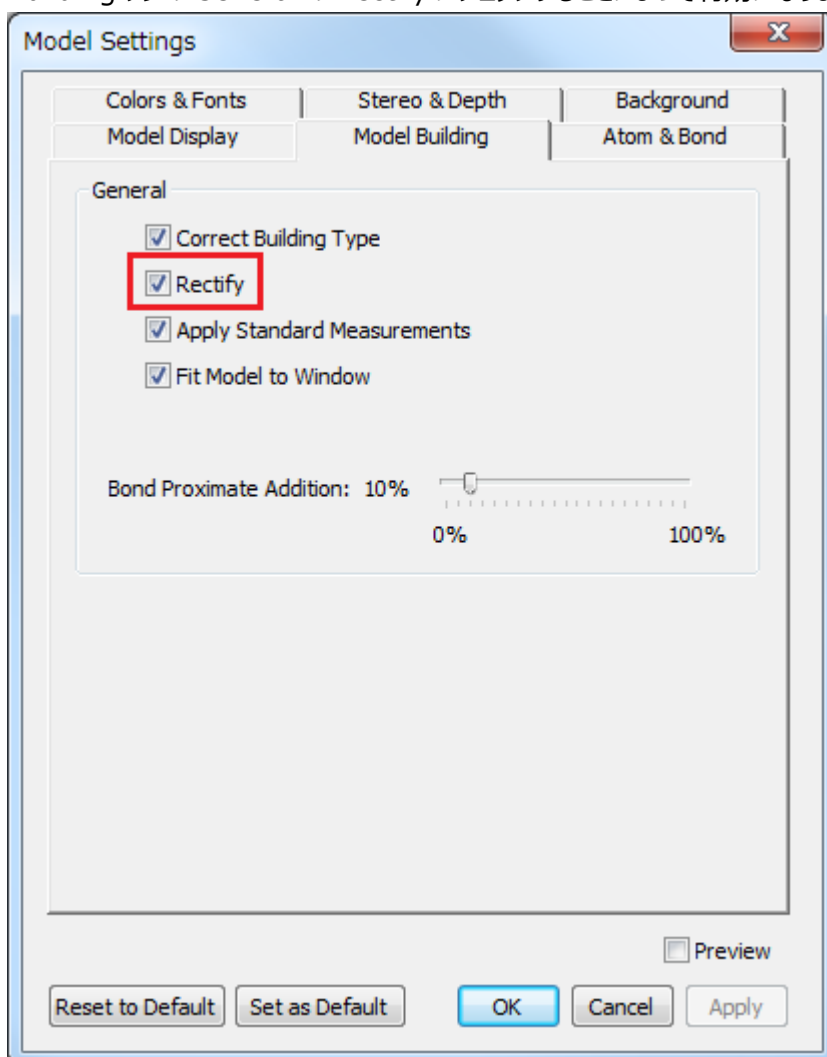
Single Bond(単結合)<sup>B</sup>ツールでポイントしドラッグすると ethane が作画できます。





- 1.3.1. 作成した分子モデルの結合の種類を、ツールボックスを用いて自由に変更することができます。たとえば、単結合を二重結合に変える場合は、二重結合を選択して、炭素原子間をドラッグすると、単結合 (C-C) が (C=C) に変化します。

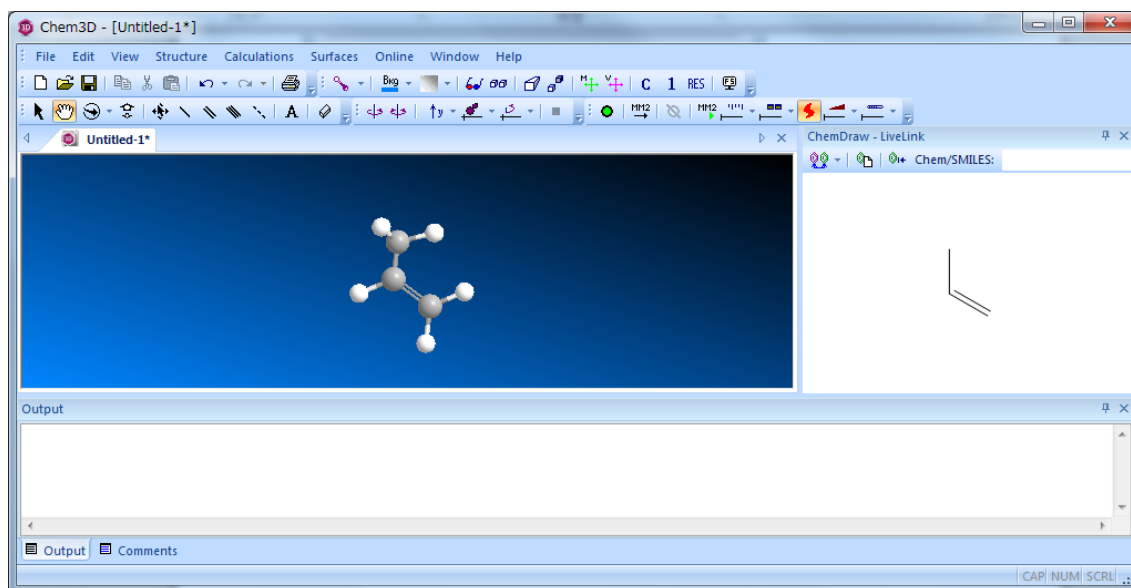
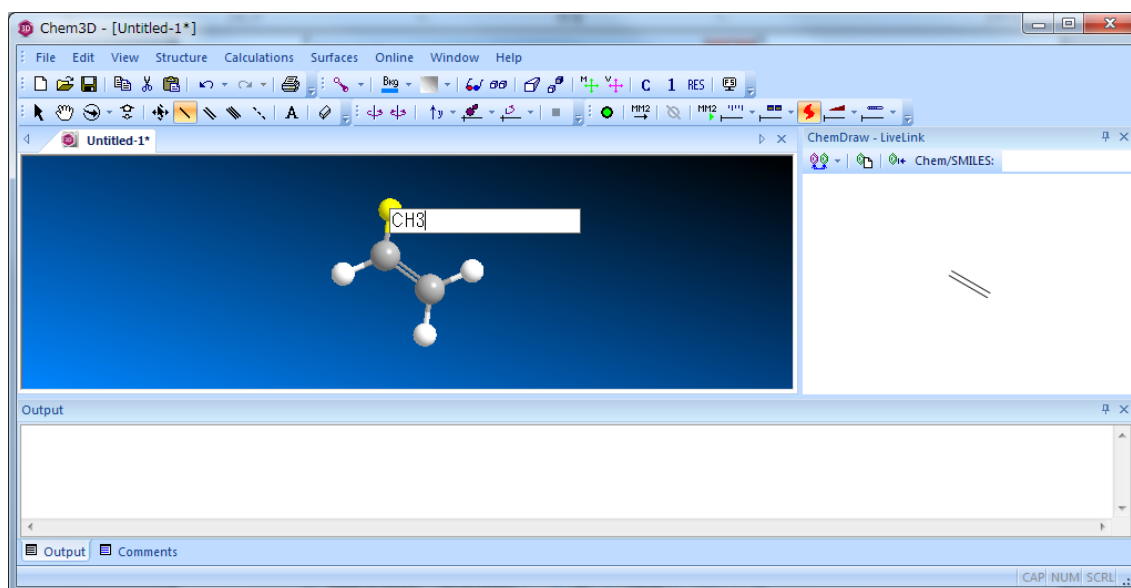


- 1.3.2. 水素の数も自動的に変更されます。この値数による自動最適化は、File > Model Settings > Model Building タブの General の Rectify にチェックすることによって有効になります。



#### 1.4. 原子や原子団の置換

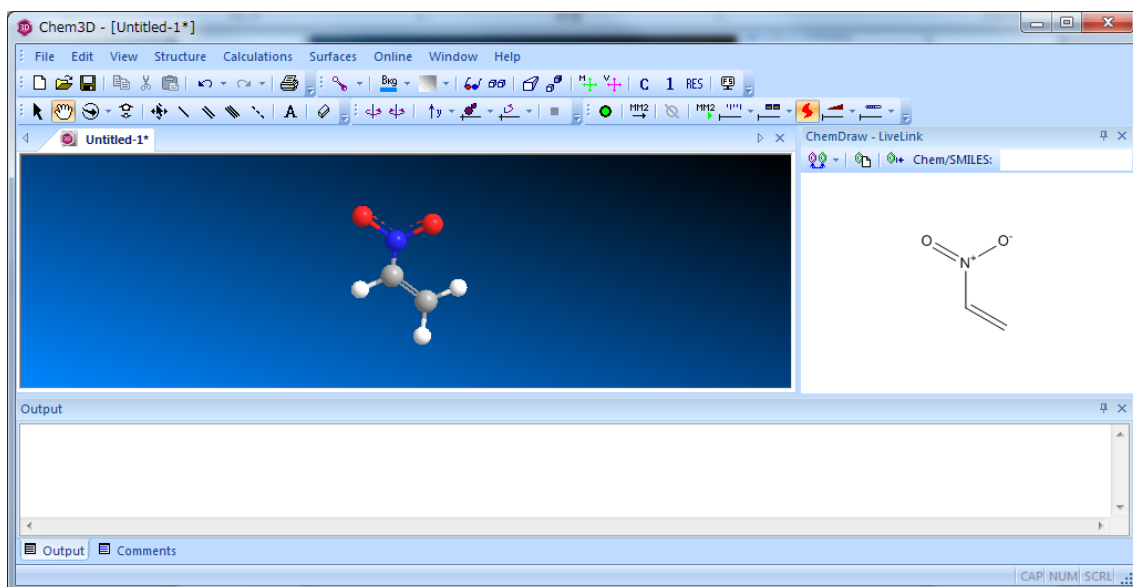
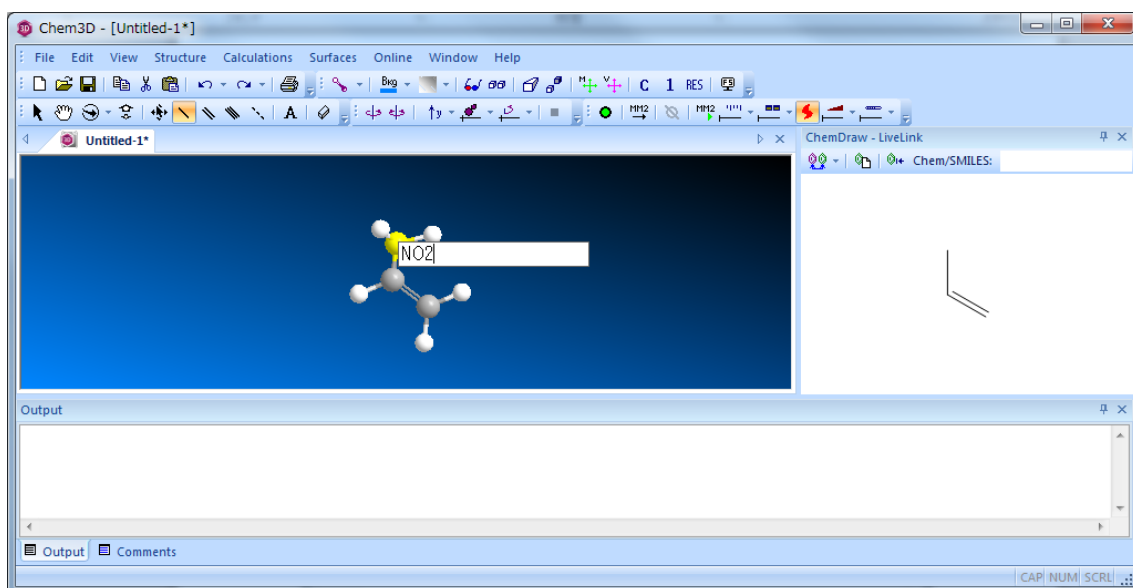
あらかじめ描いておいた炭化水素の水素原子を Select ツール によって選択します。Build from Text  でテキストボックスを開き、別の原子や原子団を入力することにより、原子を置き換えることが可能です。また、この原子や原子団の置換はある程度の制限はあるものの繰り返し行うことができます。水素原子をメチル基に置き換える例を次に示します。






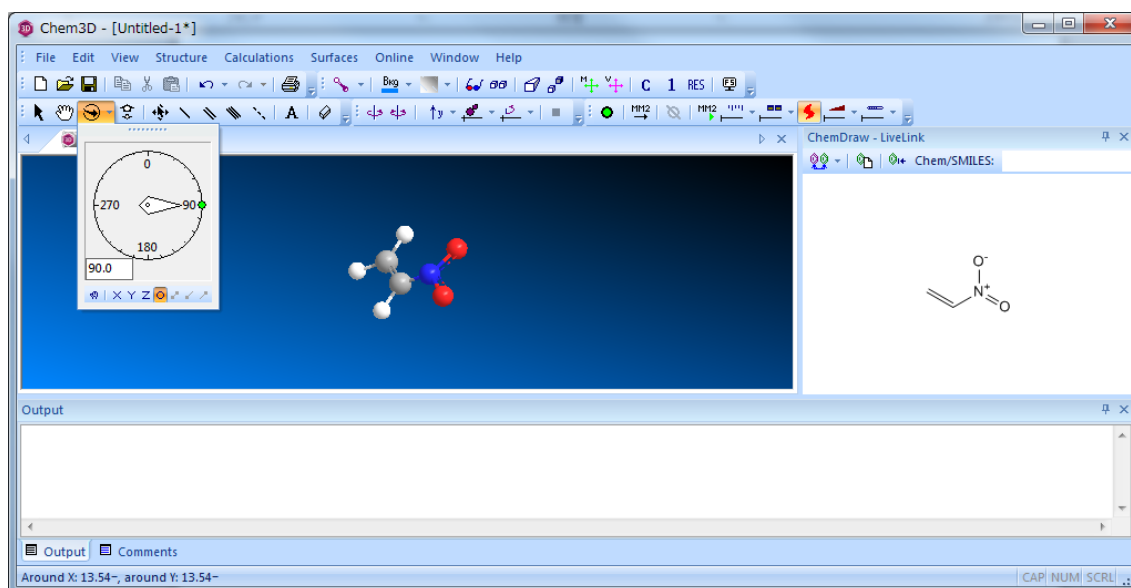
#### 1.4.1. メチル基をニトロ基に置き換える例

この機能は、炭化水素の異性体からアルコールの異性体を考えたり、芳香族炭化水素の誘導体の異性体(o-、m-、p-の異性体)を考えたりする際に有効な手段です。



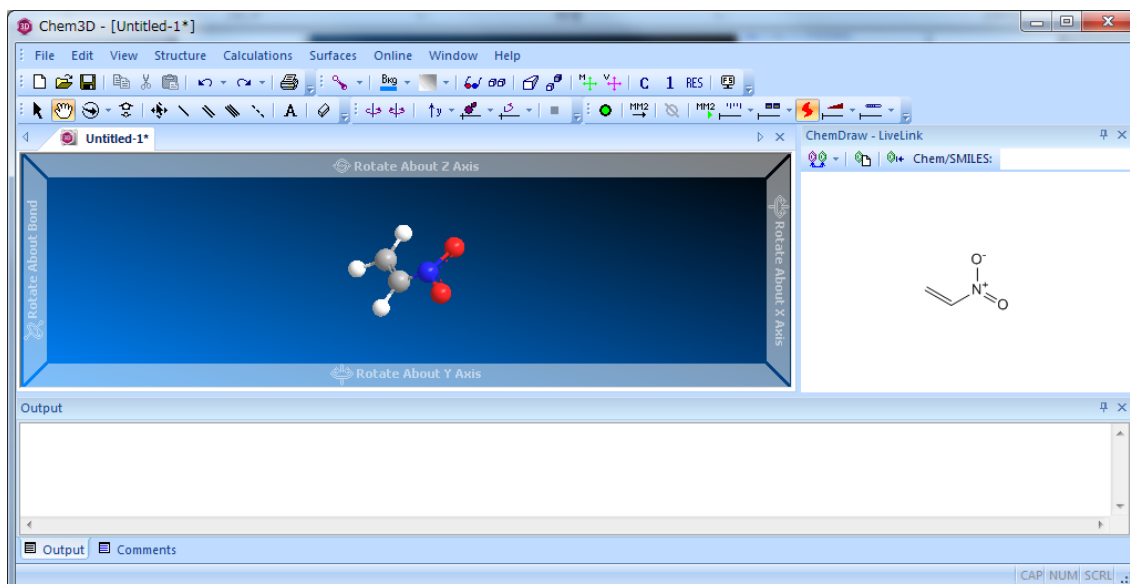
## 1.5. 分子モデルの回転

作成した原子モデルについて Rotate ツールを用い、様々な方向から観察できるように画面上で回転させることができます。Rotate ツールの▼をクリックすると、角度を指定するための時計のようなツールが表示されます。省略値は、マウスでの回転ですが、細かい角度の指定（X、Y、Z 軸中心、2つの原子軸中心、2面角）も可能になっています。




### 1.5.1. Rotate ツールを用いて回転させた例

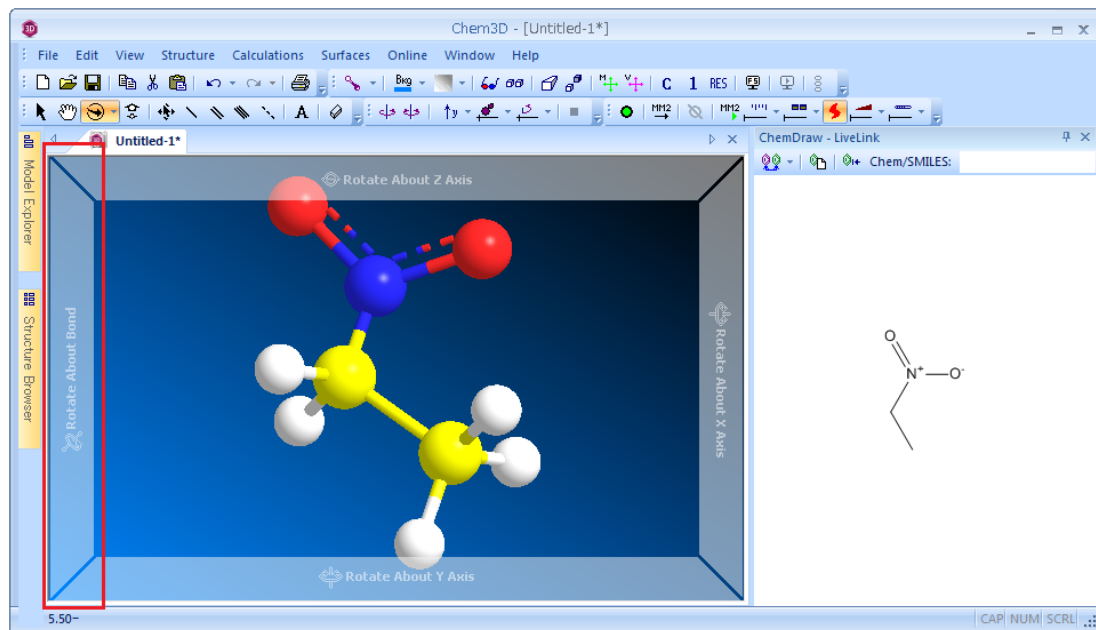
表示画面の周囲にマウスをポイントすると、上下左右に Rotate About Axis が表示されます。この部分をポイントしてドラッグした場合と、画面の中心部をポイントしてドラッグした場合とで動作が異なることに注意してください。



#### 1.5.1.1 CとCを指定して、C-C結合を中心として回転させた例

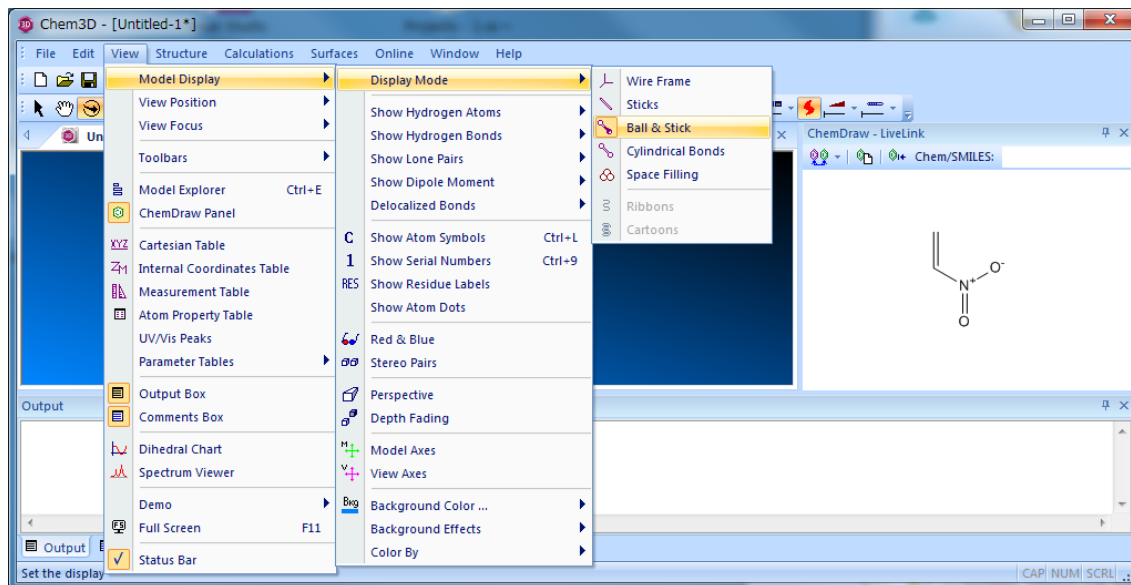
選択ツールで C-C 結合をクリックして、指定した結合が黄色く表示されているのを確認します。

回転ツールをクリックし、分子モデル表示画面の周囲にマウスをポイントすると、左側に Rotate About Bond が表示されますので、その上で上下にドラッグすると選択した軸を中心にして回転できます。



## 1.6. 分子モデルの表示タイプ変更

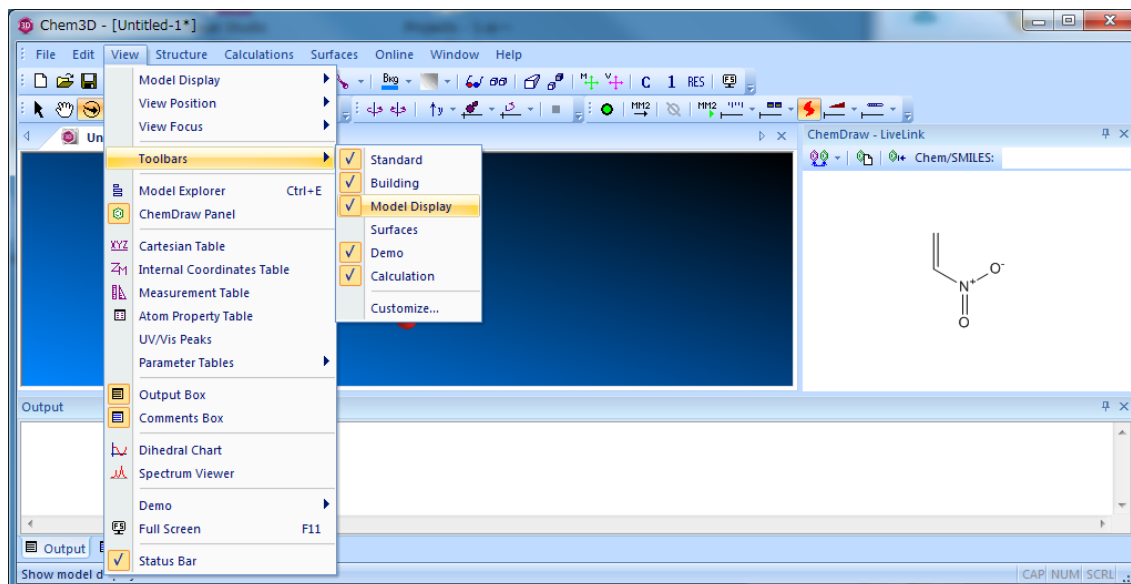
作成した分子モデルを様々なタイプの表示形式に変更することができます。また、Chem3D で表示可能なモデルのタイプは、View > Model Display > Display Mode で確認できます。なお、このメニューにある Ribbons と Cartoons は、蛋白質表示用です。



表示形式の変更は、Model Display ツール

の  をクリックすることによって簡単に変更できます。

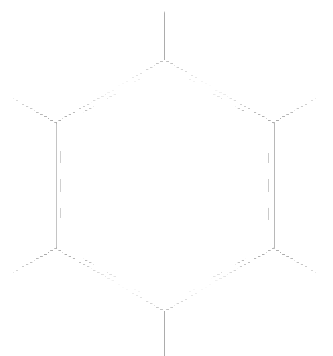
Model Display ツールの表示は、View > Toolbars > Model Display を選択します。



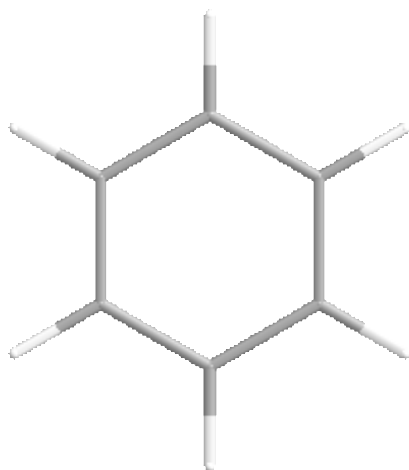
### 1.6.1. 様々な表示形式の例

Wordとの連携では、Word上の分子モデルをダブルクリックすると、Chem3Dが自動的に起動します。

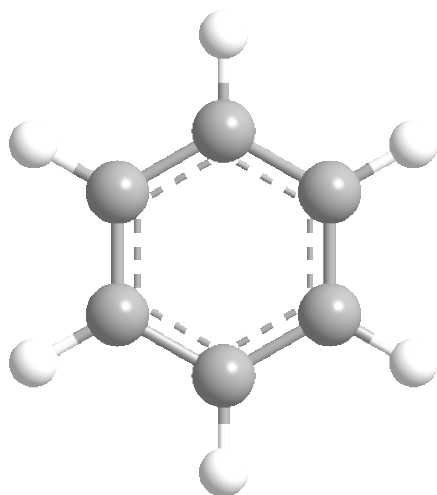
#### 1.6.1.1 Wire Frame



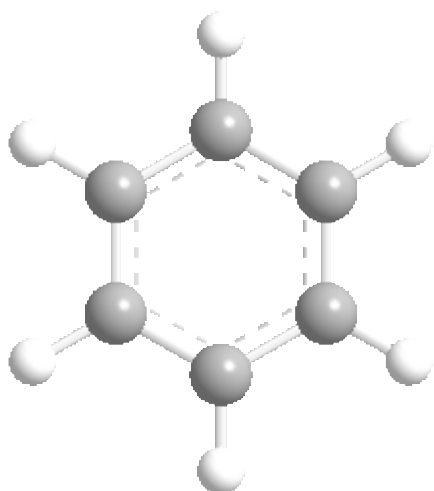
#### 1.6.1.2 Stick



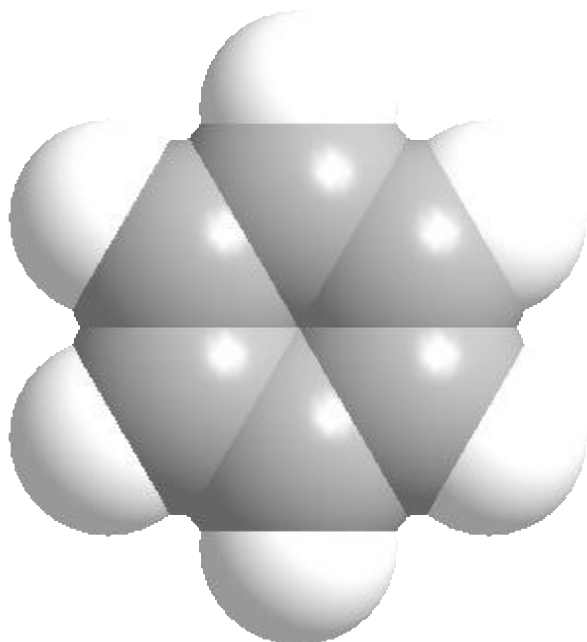
#### 1.6.1.3 Ball & Stick



#### 1.6.1.4 Cylindrical Bonds



#### 1.6.1.5 Space Filling (分子表面は、van der Waals 半径で描かれています。)



## 2. Chem3D を用いた応用事例

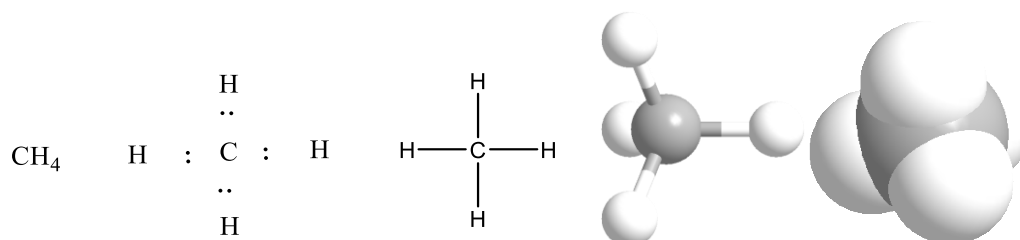
### 2.1. 電子配置と化学結合について

共有結合の原子価の理解と分子の形の理解を深めるために、Chem3D を用いて分子を作成し、構造式と電子式の関係や原子同士の結合と分子の形状との関係を見てみます。教科書には、下記のような分子の構造と電子式、構造式の記述がありますが Chem3D では、前述の Ball and Stick と Space Filling 2 タイプの分子モデルの表現が容易であるため、簡単な分子の実際の形の理解と構造式との関係の理解に大変有効です。

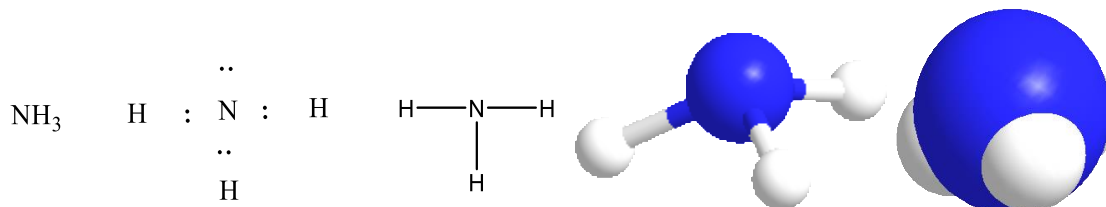
#### 2.1.1. メタン、アンモニア、水、フッ化水素を描画したもので確認します。

分子式、電子式、構造式、Ball and Stick、Space Filling の順に描いています。

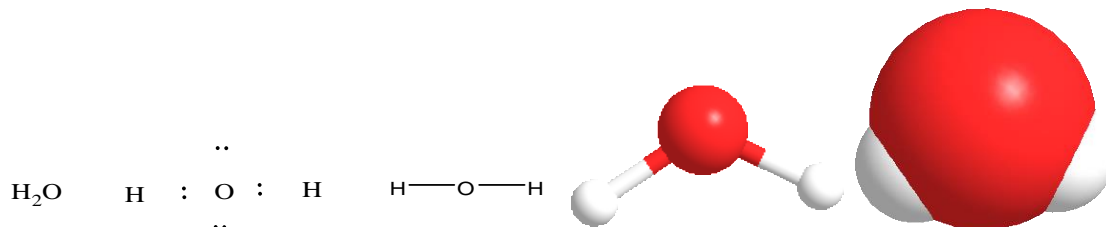
##### 2.1.1.1 メタン



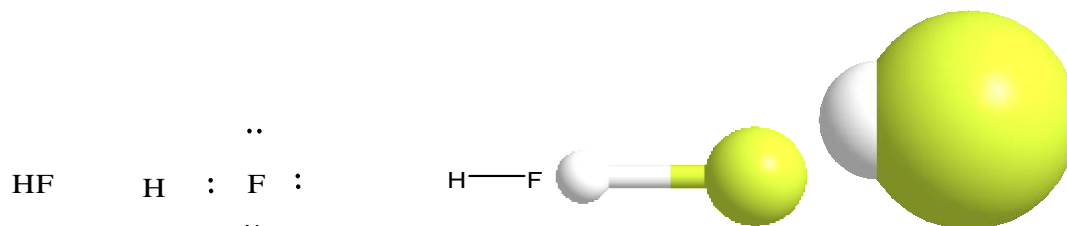
##### 2.1.1.2 アンモニア



##### 2.1.1.3 水



##### 2.1.1.4 フッ化水素



2.1.2. 以上の作画で必要なテクニックは、以下の通りです。

#### 2.1.2.1 ChemDraw

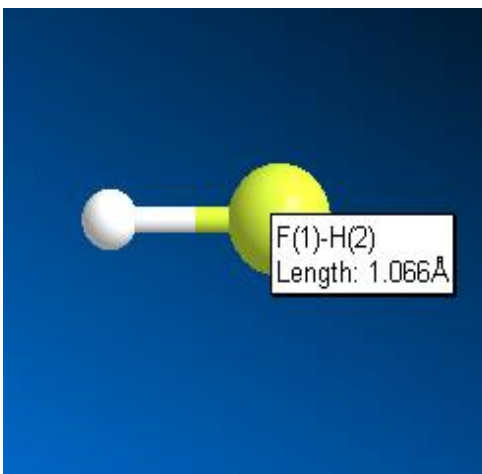
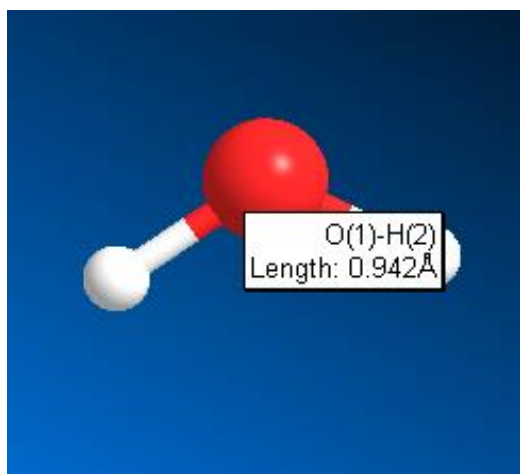
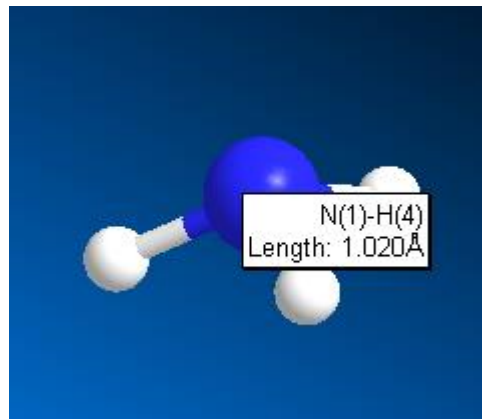
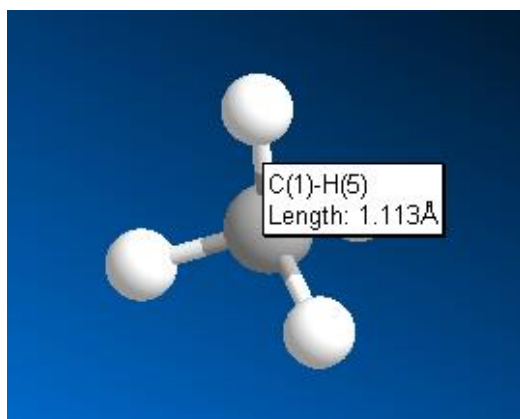
Text メニュー > Style > Formula で下付き文字の作成できます。

Object > Align、Distribute を用いてオブジェクトの整列ができます。

File > Preferences > Building/Display > Automatically Rectify Hydrogen in Atom Labels のチェックをはずすことによるラベル自動修正の抑止できます。

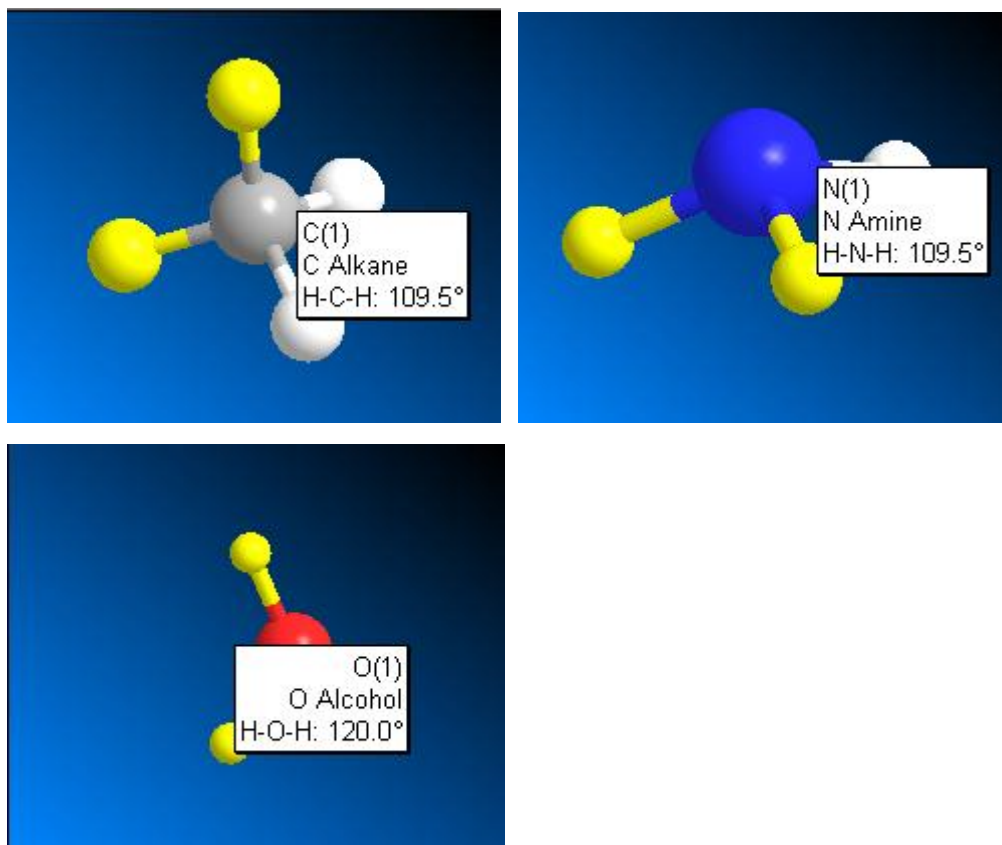
#### 2.1.2.2 分子の結合角や原子間距離を表示する方法

原子間の結合距離を見るには、結合部分にマウスカーソルをポイントします。また、ひとつの原子を選択した後でもうひとつの原子をマウスカーソルでポイントしてもその原子間距離が表示されます。





2.1.2.3 原子間の角度を表示するには、Shift キーを押しながら、3つの原子をクリックして選択し、マウスカースールでポイントすると原子間の角度が表示されます。



## 2.2. 極性分子と無極性分子について

Chem3D では、Space Filling 表示で分子の形状と原子の分布を容易に表現できます。従って、完成した分子モデルと電気陰性度の表をもとにしてその分子が極性分子なのか無極性分子であるかを考えることができます。

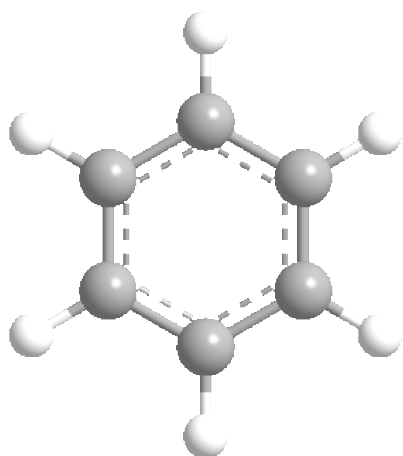
## 2.3. 固体や液体の溶解

固体や液体の溶解を考えるとときも溶媒分子と溶質分子の極性の有無や強弱を考察する必要があります。[3.1.]や[3.2.]で述べたような分子モデルの作成と分子の極性を考察することを通して、溶解についての考察へも応用できると思います。

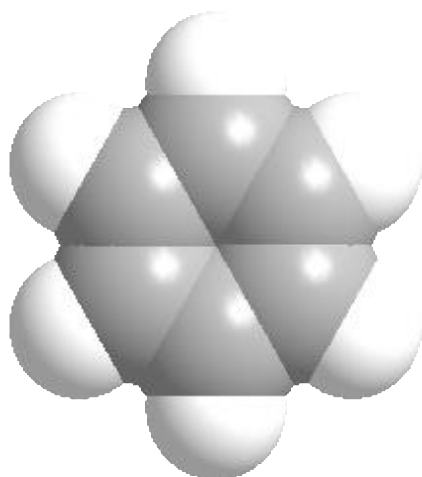
## 2.4. 芳香族化合物について

ベンゼン環にさまざまな官能基を置換する方法により、各種芳香族化合物の分子の形を知ることができます。ベンゼン環の構造は、下記にあげるような紹介をされることが多く、ベンゼン環には空洞があるものと誤解する場合も少なくありません。Space Filling 表示での分子の形状を観察することで、このような誤解を防ぐことができます。

### 2.4.1. ベンゼン環の構造



### 2.4.2. ベンゼン環の構造(Space Filling)

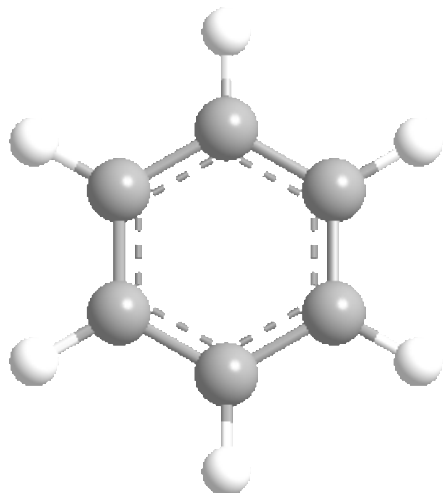


2.4.3. いろいろな表示を実現するための方法は、以下の通りです。

#### 2.4.3.1 角度、距離の表示

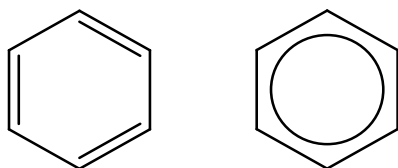
角度（原子 3 個を選択）、距離（結合を選択）し、Chem3D の Structure メニュー > Measurements で表示する項目を選択

- Display Distance Measurement : 距離
- Display Bond Angle Measurement : 角度



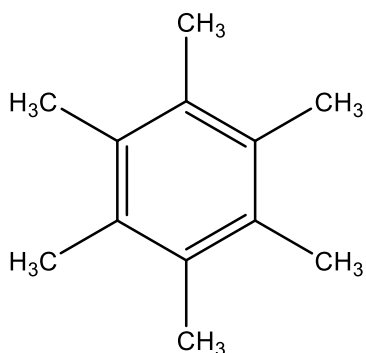
#### 2.4.4. 共鳴構造の表示

##### 2.4.4.1 Ctrl キーを押しながらベンゼン環を描きます。



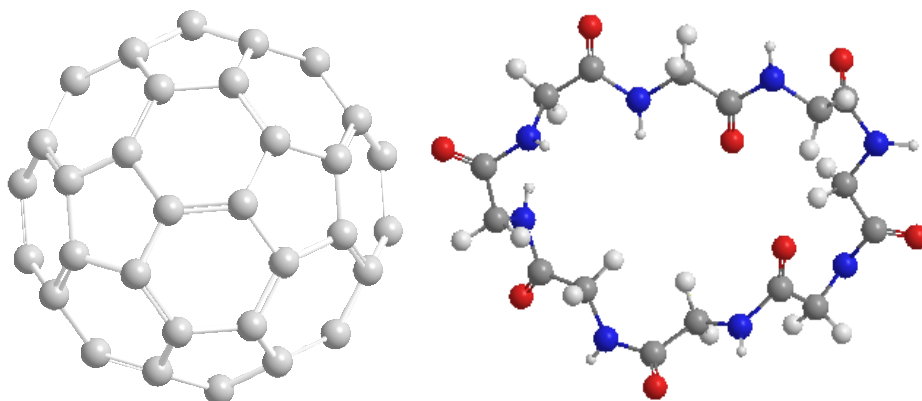
##### 2.4.4.2 末端の表示（ChemDraw での操作）

末端の CH<sub>3</sub> などの表示設定については、File > Document Settings > Atom Labels タブの Show labels on terminal carbons や Hide Implicit Hydrogen もあります。



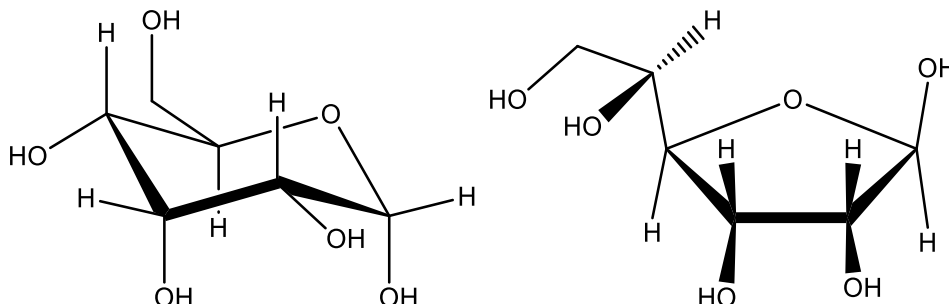
#### 2.4.5. 合成高分子化合物について

直鎖状の高分子化合物も作成することが可能です。従来の分子模型では、構成する“たま”の数量に限界があるために高分子のイメージを模型で作成できないという面がありました。しかし、Chem3D では高分子ポリマーを画面上に作成できるので、高分子のイメージがより具体的に分かりやすく理解できます。



#### 2.4.6. 糖類の分子構造

教科書では単糖類の構造を下記のように紹介している例が少なくありませんが、この表し方では単糖類の実際の分子構造のイメージが理解できにくだけでなく、ベンゼン環同様に糖類の環状構造には空洞があるという誤解を招きやすいものです。事前に作成した糖類のひな形ファイルを開いて、各自がモデルを回転させて観察し、Ball and Stick 表示と Space Filling 表示の 2 タイプの分子モデルの比較をすることによって、糖類の分子構造を正しく理解することが容易になるだけでなく、前に述べた分子構造の誤解も解消できます。



### 3. コンピュータを用いた分子モデル作成の利点

#### 3.1. 実際に触ることができない分子を画面上で触れることができます。

作成した分子を回転させたり、原子団を置換させたりすることによって、実際に触ることができない分子を画面上では触れる経験を得ることができます。コンピュータを使って行う分子モデルの作成は、単に実験シミュレーションやデータ処理の自動化とは異なり、実際に体験できないことをイメージさせる作業として、意義は大きいと考えます。

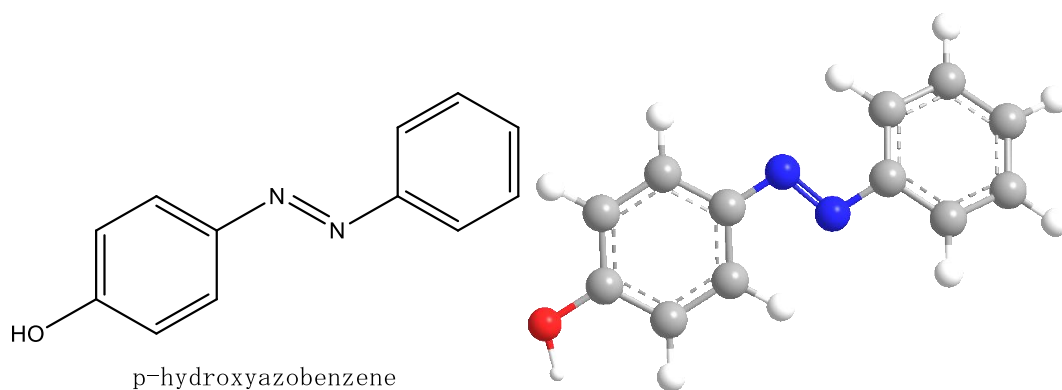
#### 4. 分子の形状に対する誤解を解消可能

従来の分子模型は分子を“たま”と“結合手”で表現することで、原子核の位置関係と共有結合半径を表現してきました。これはこれで意義がありますが、幾つかの誤解を与えてきたことも事実です。これまでも「ベンゼン環や糖類に空洞構造がある」という誤解を挙げましたが、その他にも次のような点が挙げられます。

##### 4.1. ジアゾ化合物におけるベンゼン環と窒素原子との位置関係

p-という意味から一直線上に並んでいるという誤解

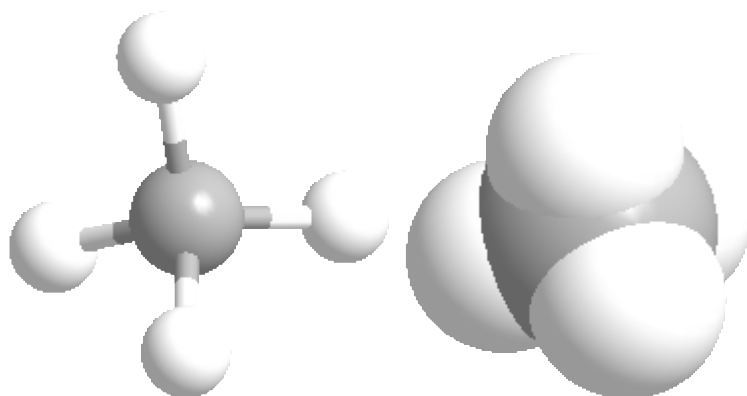
##### 4.1.1. p-ヒドロシアゾベンゼン, または p-フェニルアゾフェノール



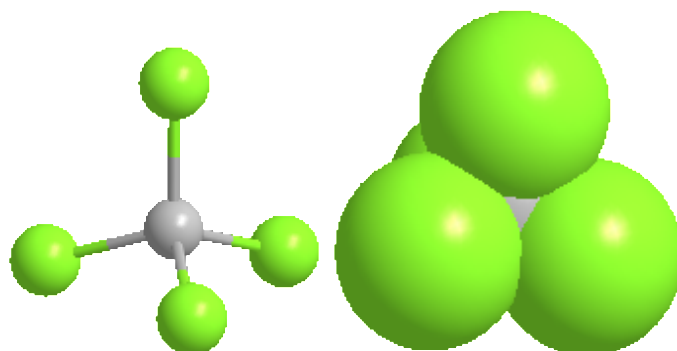
##### 4.2. メタンと四塩化炭素の形状

sp<sup>3</sup> 混成軌道の共通点で単に「正四面体構造」で全く同じ形状であるという誤解

##### 4.2.1. メタン



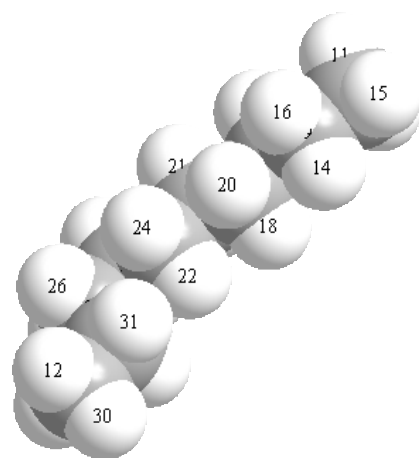
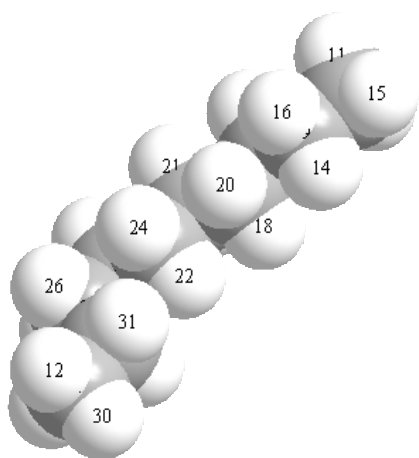
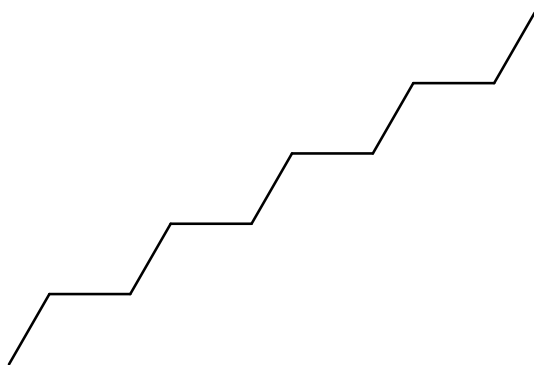
##### 4.2.2. 四塩化炭素



### 4.3. 炭化水素(基)の形状

想像以上に細長い棒状の構造であり、水素が近接しているという誤解

#### 4.3.1. デカン (C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>)

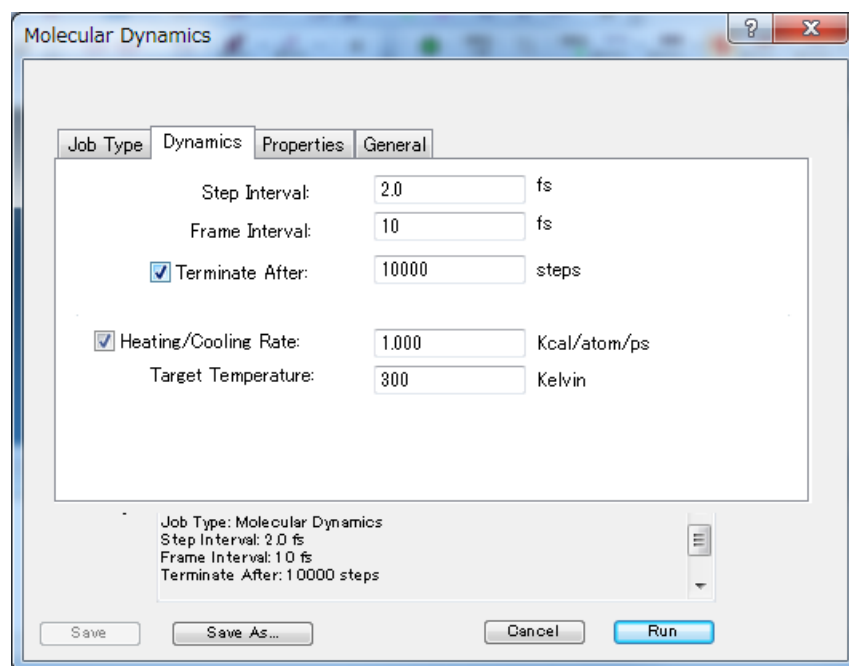
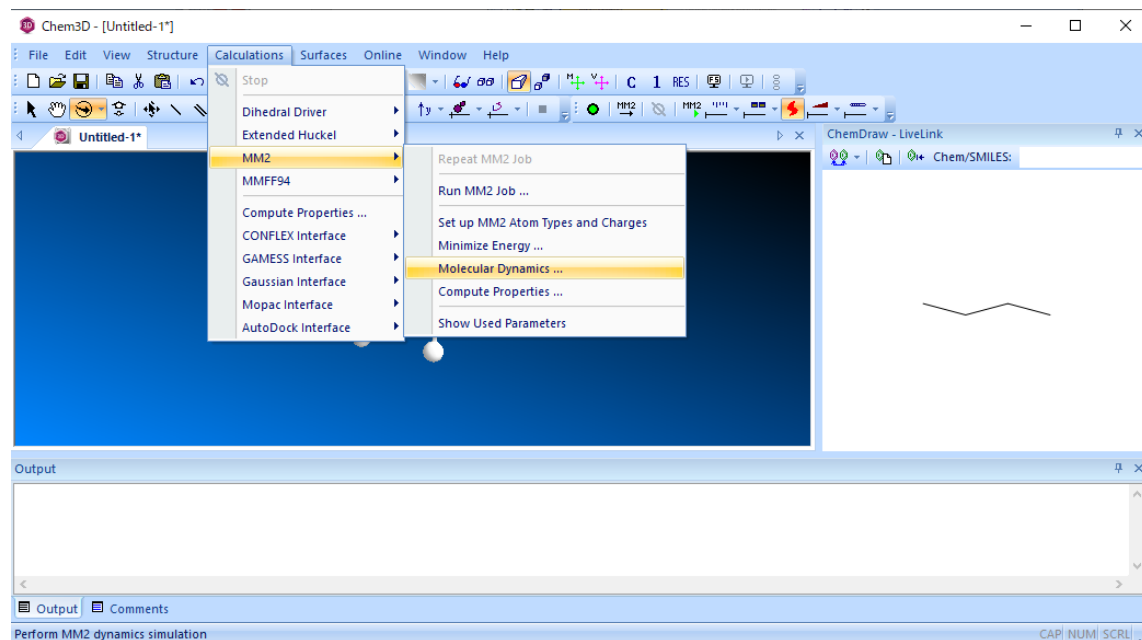


## 5. その他の機能

### 5.1. 分子の様々な運動

作成した分子にあるエネルギーを与えたとき(ある温度を設定したとき)の分子の運動をシミュレーションし、アニメーションの形で連続的に観察できます。分子の振動運動や回転運動などを容易に理解することが可能です。これは、化学的な視点だけでなく物理的な視点から分子を理解する際に有効です。

Calculations > MM2 > Molecular Dynamics

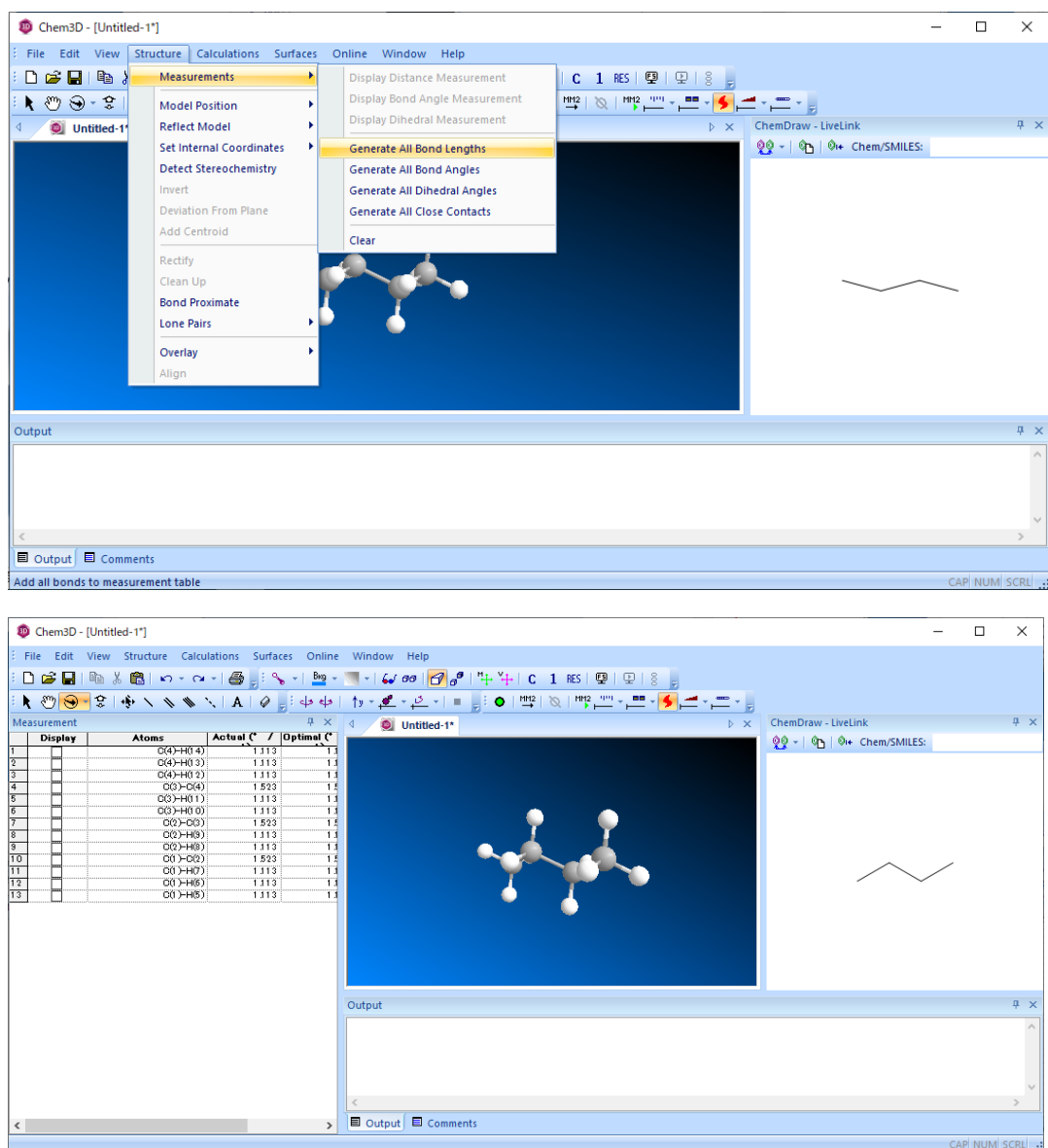


## 5.2. 分子を構成している原子、結合データの表示

作成した分子の共有結合半径をデータとして表示させることができます。単結合、二重結合、三重結合などの違いによる結合距離の違いを視覚的にだけでなく、数量的にも捉えることが可能です。

### 5.2.1. すべての結合距離を表示する場合

Structure > Measurements > Generate All Bond Lengths



The screenshot shows the Chem3D software interface. The 'Measurements' menu is open, and 'Generate All Bond Lengths' is selected. The output window displays a table of bond lengths for a molecule.

Display	Atoms	Actual Å	Optimal Å
1	O(4)-H(4)	1.113	1.1
2	O(4)-H(2)	1.113	1.1
3	O(4)-H(2)	1.113	1.1
4	O(2)-O(4)	1.523	1.5
5	O(2)-H(1)	1.113	1.1
6	O(2)-H(1)	1.113	1.1
7	O(2)-O(2)	1.523	1.5
8	O(2)-H(3)	1.113	1.1
9	O(2)-H(3)	1.113	1.1
10	O(2)-O(2)	1.523	1.5
11	O(2)-H(7)	1.113	1.1
12	O(2)-H(7)	1.113	1.1
13	O(2)-H(5)	1.113	1.1

### 5.2.2. 結合角を表示する場合

Structure > Measurements > Generate All Bond Angles

### 5.2.3. 二面角を表示する場合

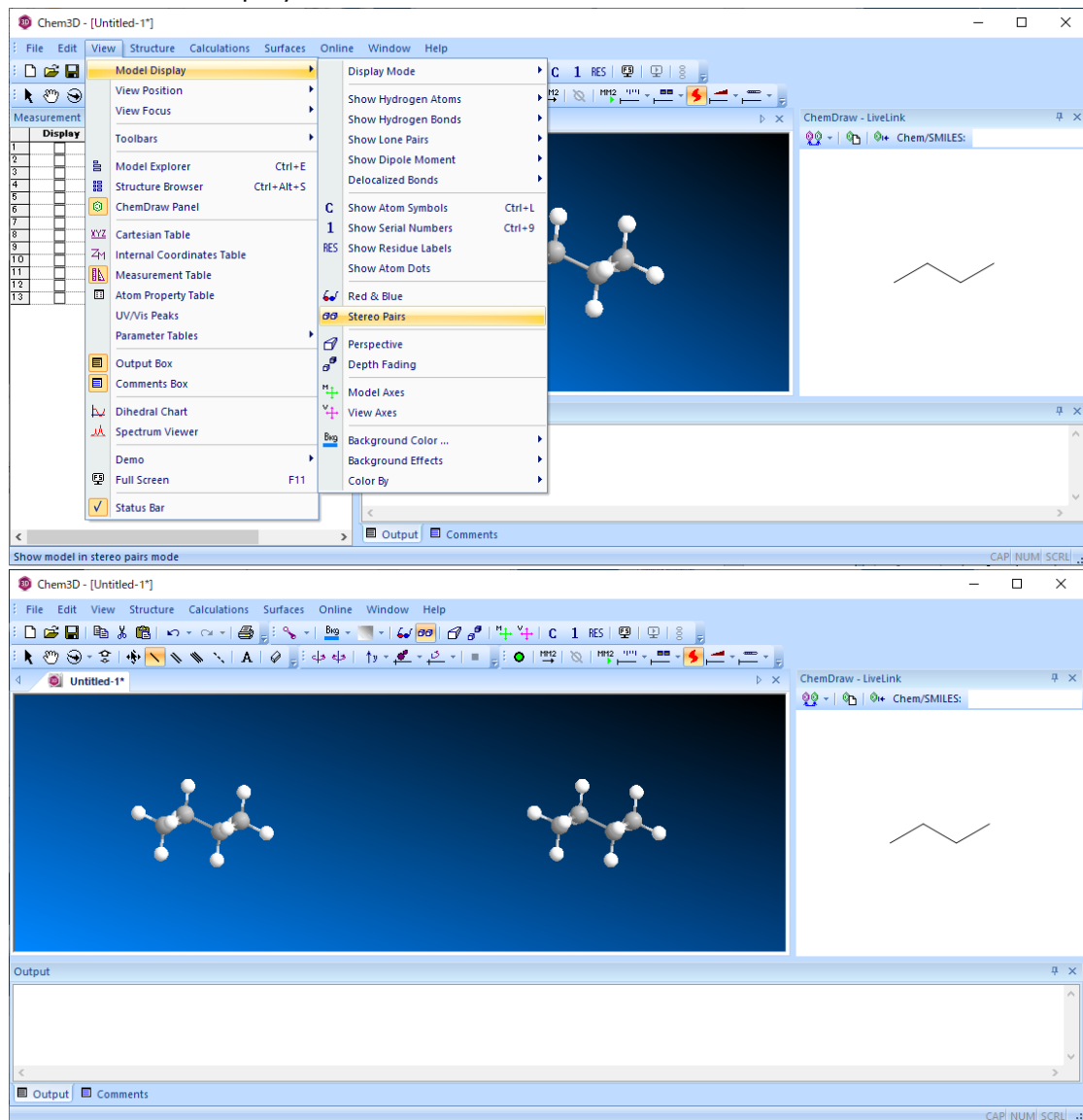
Structure > Measurements > Generate All Dihedral Angles



### 5.3. ステレオ図の作成

作成した分子モデルのステレオ図を簡単に作成し、印刷することができます。平面に作成した分子構造の立体感の限界を補い、より正確な分子の形状を理解する助けになります。

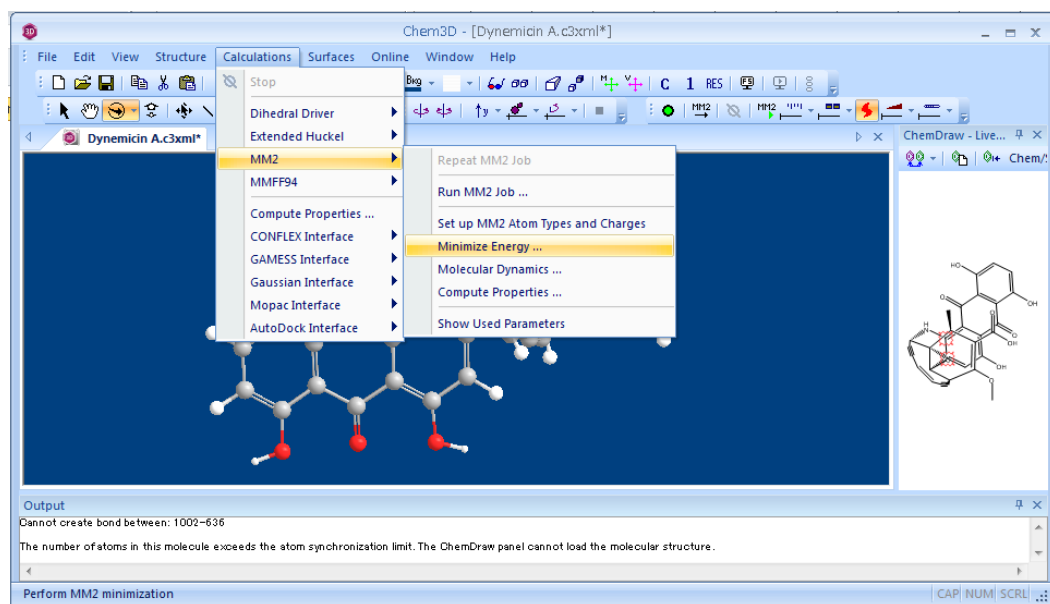
View > Model Display > Stereo Pairs



#### 5.4. 分子構造の緩和（安定状態の探索）

MM2 で初期構造に対する緩和（エネルギー最小化）を行います。

Calculations > MM2 > Minimize Energy



Minimize Energy

Job Type Dynamics Properties General

Job Type: Minimize Energy

☒ Setup new Atom Types before Calculation

☒ Setup new Atom Charges before Calculation

☒ Display Every nth Iteration 1

☐ Copy Measurements to Output Box

☐ Move Only Selected Atoms

Minimum RMS Gradient: 0.0100

Summary: Parameter Quality: All parameters used are finalized.  
Job Type: Minimize Energy to Minimum RMS Gradient of 0.010  
Display Every Iteration

Save Save As... Cancel Run

## 5.5. タンパク質（PDB ファイル形式）データの読み込みと表示例

### 5.5.1. まず、構造データを <https://pd bj.org/> から入手します。



### 5.5.2. 入手する構造データを検索します。

「149: Leptin」を入手する手順を記載します。



### 5.5.3. レプチン (Leptin)の PDB ファイル形式をダウンロードします。

#### 5.5.3.1 説明文中「ここに示す構造は PDB エントリー 1ax8」の 1ax8 上のリンクをクリックします。



### 5.5.3.2 ダウンロード画面にアクセスします。

レプチン(ここに示す構造は PDB エントリー 1ax8 )

157712  
件公開中 (2019-11-13 00:00 UTC / 09:00 JST)

PDBj  
Protein Data Bank Japan

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdj.org 全体を検索 (日本語or)

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

**1AX8**

**Human obesity protein, leptin**

1AX8 の概要

分子名称 OBESITY PROTEIN (2 entities in total)

機能のキーワード helical cytokine, hematopoietic factor, diabetes, obesity, cytokine

由来する生物種 Homo sapiens (human)

細胞内の位置 Secreted P41159

ダウンロード

Sequence (fasta)  
PDBx/mmCIF  
PDBML (ヘッダのみ (no-atom))  
PDB形式 (全ての情報)  
検証レポート (PDF)

構造

非対称単位を表示

ダウンロードタブをクリック

157712  
件公開中 (2019-11-13 00:00 UTC / 09:00 JST)

PDBj  
Protein Data Bank Japan

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdj.org 全体を検索 (日本語or)

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

**1AX8**

**Human obesity protein, leptin**

リソース

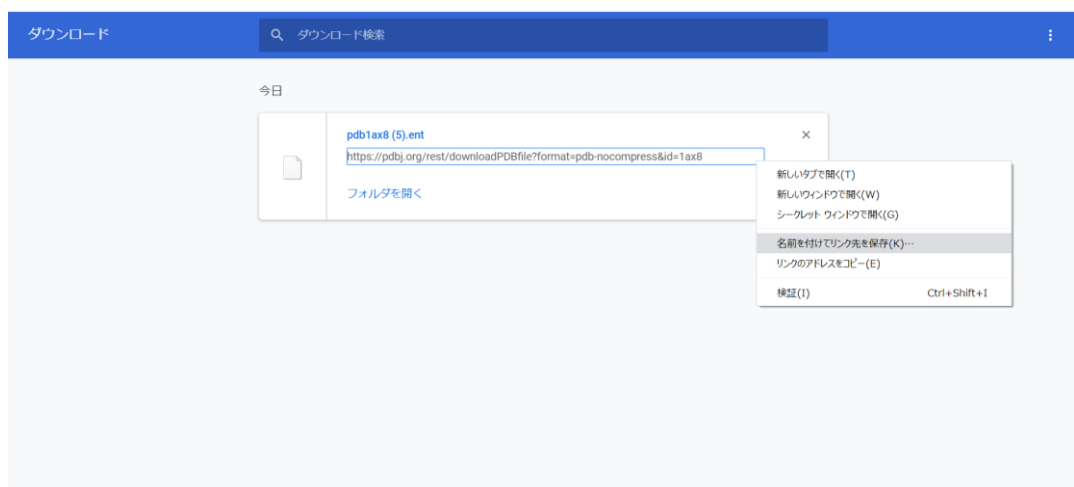
ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)	
PDB	全ての情報	pd1ax8.ent.gz (27.45 KB) 画面表示
	全ての情報 (非圧縮)	pd1ax8.ent (118.65 KB)
	ヘッダのみ	pd1ax8.ent.gz (5.65 KB) 画面表示
PDBx/mmCIF	1ax8.cif.gz (35.23 KB)	画面表示
PDBML	全ての情報	1ax8.xml.gz (45.7 KB) 画面表示
	ヘッダのみ	1ax8-noatom.xml.gz (12.29 KB) 画面表示
	座標情報のみ	1ax8-extatom.xml.gz (24.84 KB) 画面表示

### 5.5.3.3 PDB すべての情報 (非圧縮) pd1ax8.ent をクリックします。

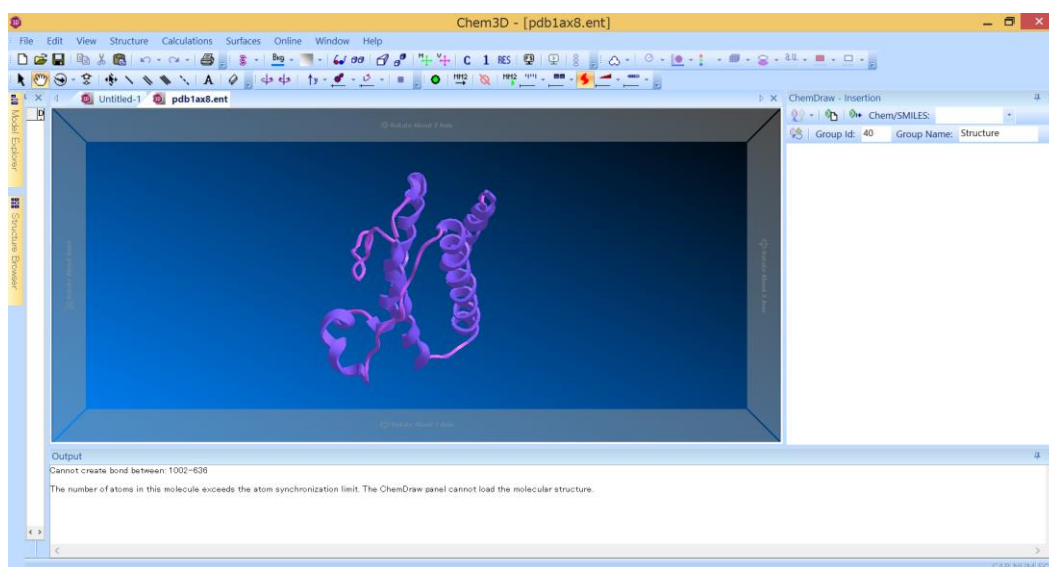
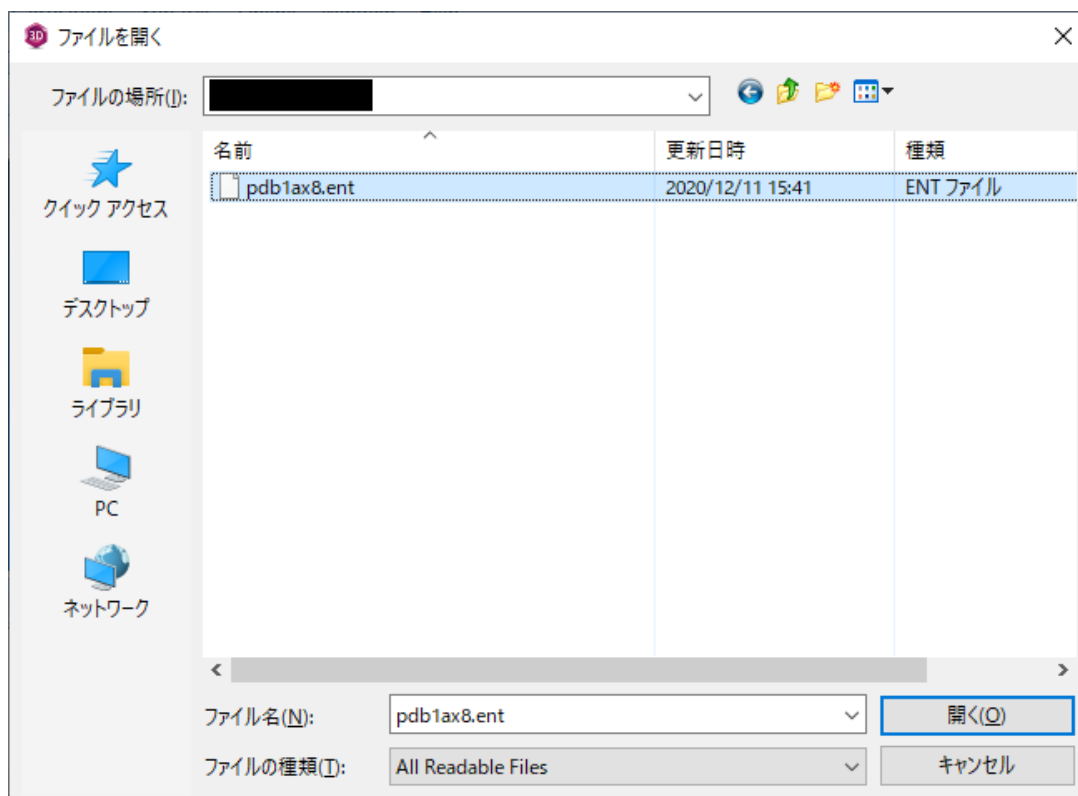
▼ リソース

ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)	
PDB	全ての情報	pd1ax8.ent.gz (27.45 KB) 画面表示
	全ての情報 (非圧縮)	pd1ax8.ent (118.65 KB)
	ヘッダのみ	pd1ax8.ent.gz (5.65 KB) 画面表示
PDBx/mmCIF	1ax8.cif.gz (35.23 KB)	画面表示
PDBML	全ての情報	1ax8.xml.gz (45.7 KB) 画面表示
	ヘッダのみ	1ax8-noatom.xml.gz (12.29 KB) 画面表示
	座標情報のみ	1ax8-extatom.xml.gz (24.84 KB) 画面表示

#### 5.5.3.4 ポップアップが表示されるため、すべて表示から名前を付けてリンク先を保存をクリックし、任意の場所に保存を行います



5.5.4. Chem3D を起動し,File > Open で pdb1ax8.ent を指定します。



## 6. この資料作成に利用した参考文献

東京学芸大学附属高等学校研究紀要 37、東京学芸大学附属高等学校、2000 年

富士通及び本資料に関する問い合わせ先：

富士通株式会社

ソーシャルデザイン事業本部

デジタルラボ事業部

ChemOffice シリーズ製品担当

郵便番号 144-0052

東京都大田区蒲田 5 丁目 37 番 1 号

ニッセイアロマスクエア 4 階

電話 03-6424-9659

E-mail [contact-pki@cs.jp.fujitsu.com](mailto:contact-pki@cs.jp.fujitsu.com)

デスクトップ製品の技術的な問い合わせ先：

PerkinElmer 社

[informatics.support@perkinelmer.com](mailto:informatics.support@perkinelmer.com)

ソフトウェアのインストールと設定に関するご質問および製品に関するご質問については、

<http://www.perkinelmer.com/informatics/support/contact>

のサポートフォームに記入をしてください。

（サポートフォームは日本語で記入いただけます。）

以上