

ChemDraw Professional V20.0 操作練習資料

1. ChemDraw の起動

スタートメニューから、プログラム > ChemOffice2020> ChemDraw Professional 20.0 を選択します。

2. 画面の構成

まず、ChemDraw ツールバーをご覧ください。これは ChemOffice 製品で共通のものです。

また、メニューにドラッグして、ツールバーをメニューに統合することができます。

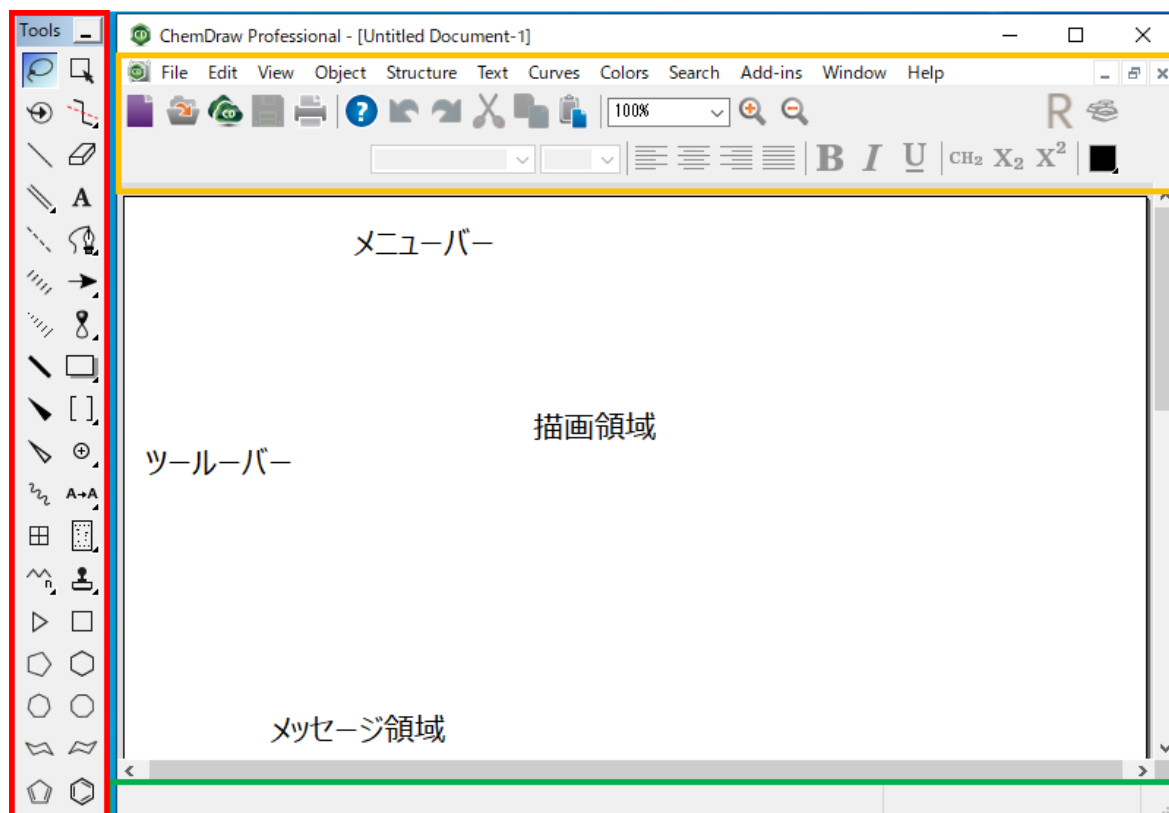
独立したツールバーとウィンドウすべてを結合することも、切り離すこともできます。

更に、すべてのツールバーを消すこともできます。

画面の中央には描画領域があります。化学構造などはここに書き込みます。

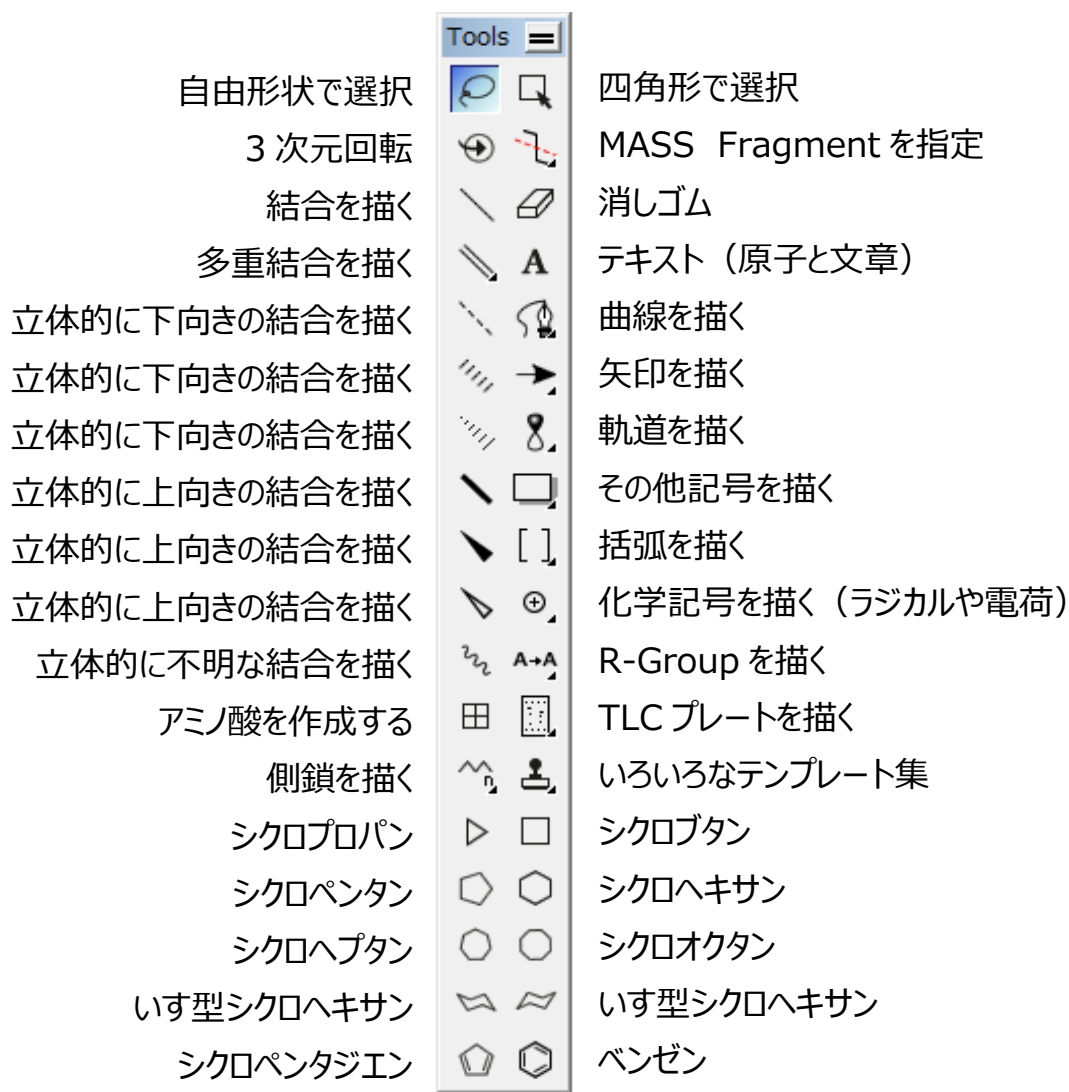
画面の下にはメッセージ領域があり、ヘルプメッセージなどが表示されます。

ツールバーが表示されていない場合には、View > Show Main toolbar にチェックを入れてください。



2.1. ツールバーの構成

ChemDraw では、いろいろな作画ツールが下のようなツールバーに集められています。

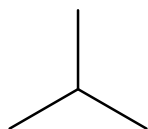


3. 化学構造の作画

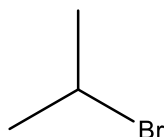
3.1. 基本的な化学構造式作画

基本的には、ツールバーにある単結合ツール やテキストツール **A** を使用して化学構造式を描きます。

単結合ツールを選択し、作画画面上でポイントしドラッグして結合を描きます。



テキストツールを選択し、マウスイカーソルが **A** に変わっていることを確認し、原子を配置したい場所をポイントします。
テキスト入力画面に変わりますので Br と入力します。



間違った場合には、消しゴムツール で削除できます。

3.2. 原子の作画

3.2.1. テキストツール

原子の作画ですが、その前に初心者の方が混乱してしまうテキスト原子ラベルについて解説します。

ChemDraw では、普通の文も原子ラベル (COOH, Br など) も同じ Main Toolbar の A と表示されているテキストツールで書きます。

このひとつのテキストツールに対して 2 つの独立した設定メニュー (Caption text と Atom Labels Text) があります。これが初めての方には意味不明で混乱してしまうようです。

簡単に図示すると以下のような関係になります。

ツールバーの中の A : テキストツール

└ 普通のテキスト (Caption Text)

└ 原子ラベル (Atom Label Text)

では、ひとつしかないテキストツールでこの二つの設定がどうすれば切り替わるのでしょうか。

どちらの設定で書かれるかは、マウスのカーソルの形で表示されています。

つまり、I が表示されていれば、普通のテキストモードであり、A が表示されていれば、原子ラベルモードです。

次にこの二つのモードでどのように書き方が変わってくるかという点ですが、通常は、普通のテキストモードでは、下付き文字になりません。しかし、原子ラベルモードでは、下付き文字になります。

<入力例>

普通のテキストモード : CH₂OH

原子ラベルモード : CH₂OH (つまり分子式形式 : Formula)

上記で「通常は、」との前提をつけたのは、設定で変更ができるからです。

File メニュー > Document Settings にある Text Captions と Atom Labels を見比べれば簡単に気がつくと思いますが、この二つの設定の違いは、実質的に英語ならば、Baseline Style の内容の内、Normal と Formula の違いしかないのです。

従ってこの設定を変えれば、まったく反対の動作をさせることも可能です。(実用上、意味がありません。)

3.2.2. 原子の書き方

3.2.2.1 テキストツールを選択します。



3.2.2.2 原子を書きたい位置にマウスポインタを合わせます。

3.2.2.3 マウスポインタの形状が A に変わりますので、その位置でクリックします。

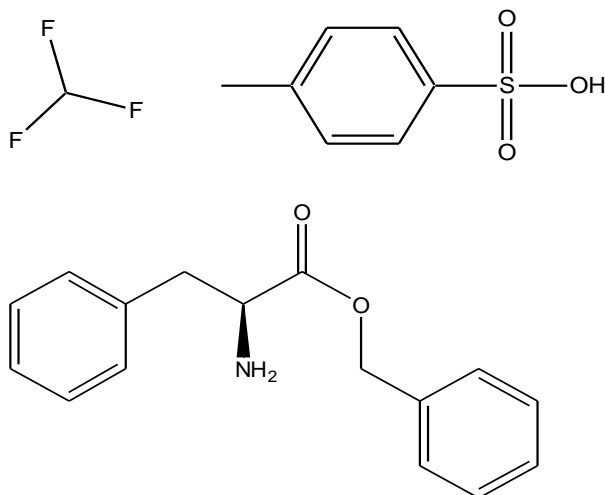
3.2.2.4 表示されるテキストボックスに原子ラベルを入力します。

3.2.2.5 テキストボックスを閉じるには、以下の二つの方法があります。

作画領域の空白部分をクリックします。

他のツールをクリックします。

<原子の作画例>












3.3. 結合の書き方

ChemDraw には、さまざまな結合を描くためのツールが揃っています。

結合の種類には、以下のものがあり、すべて単結合です。

普通の単結合、Up,Down 表示用の単結合、配位結合などが用意されています。

Solid Bond			
Dashed Bond		Bold Bond	
Hashed Bond		Bold Wedged Bond	
Hashed Wedged Bond		Hollow Wedged Bond	
Dative Bond			
Wavy Bond			

3.3.1. 結合の作画方法

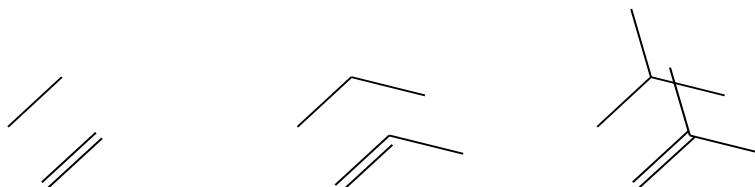
3.3.1.1 Main Toolbar の左列 3 番目の Solid Bond を選択します。

(Main Toolbar が表示されていない場合には、View メニューで Show Main Toolbar にチェックが入っているかどうか確かめてください。)

3.3.1.2 結合を書きたい位置にマウスポインタを合わせます。

3.3.1.3 ドラッグ (マウスボタンを押したまま動かす。) し、マウスボタンを離します。

<結合の作画例>



二重結合を描く場合は、単結合を 2 回描きます。

(単結合を 2 回書く感じです。単結合の横に結合を並べてはいけません。)

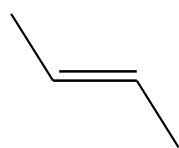
三重結合も同様に 3 回描きます。

Main Toolbar の左列 4 番目の Multiple Bonds を使用しても同様に作画できます。

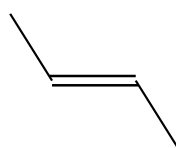


3.3.1.3.1 二重結合の配置調整

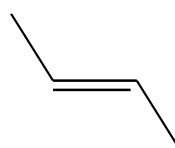
二重結合の場合は、以下のような配置の微調整が可能です。



上に配置



中央に配置



下に配置

<操作方法>

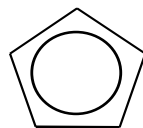
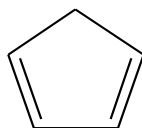
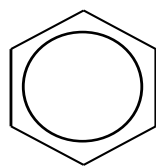
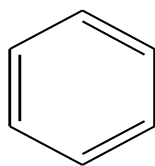
- 二重結合の描画に使用した結合ツール（Solid Bond など）を選択します。
- 二重結合の中央部をクリックします。

3.3.1.3.2 非局在化環の作画

二重結合と単結合が交互に並ぶ結合と非局在化した結合を選択することができます。

環ツールを選択し、環構造を作画する時に Ctrl キーを押した状態で環構造を描きます。

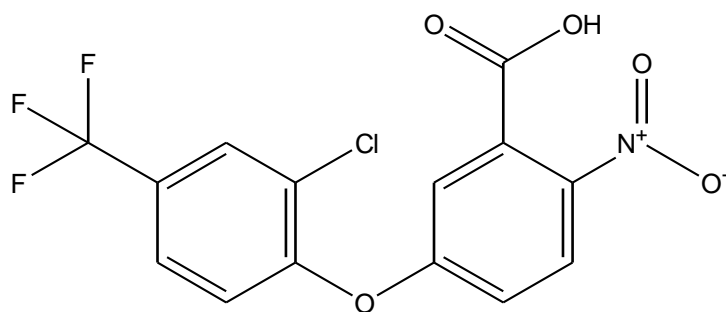
Alt キーを押した状態で環構造を描くと結合長の設定が一時的に解除されるので、任意の大きさの環を描くことができます。



3.4. 分子の作画

これまで述べてきた基本的な作画方法を基に具体的な化学構造式を実際に描いていきます。

以下の分子を描いてみます。



3.4.1. 作画手順

3.4.1.1 File メニューから New A4 Document を選択します。

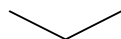
(New A4 Document になっていない場合は、File > Open Style Sheets > New A4 Document を選択します。以降、New A4 Document になります。)

3.4.1.2 Object メニューで Fixed Lengths、Fixed Angles が選択されている (左端にチェックマークがついている状態) ことを確認してください。

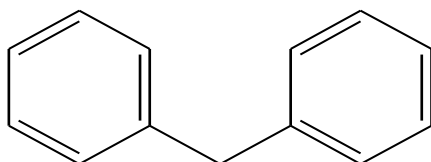
3.4.1.3 Main Toolbar の左列 3 番目の Solid Bond を選択し、作画領域上をドラッグします。



3.4.1.4 作画した結合の端をクリックします。



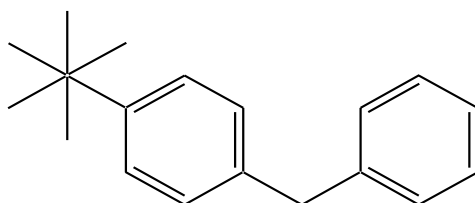
3.4.1.5 Main Toolbar から右列一番下にあるベンゼン環を選択し、付加したい場所でそれぞれクリックします。



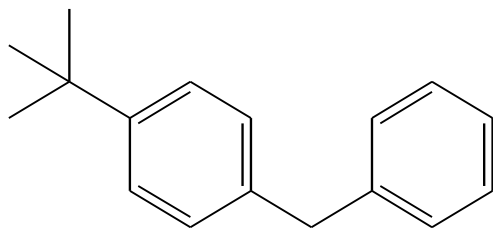
3.4.1.6 Solid Bond を選択し、左のベンゼン環上の付加位置をクリックします。

自動的に適切な角度で単結合が付加されます。

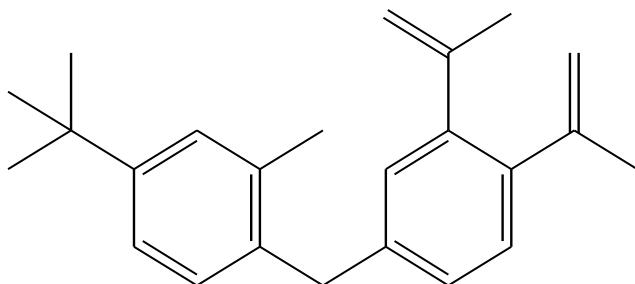
伸ばした単結合の先の同じ位置をさらにクリックすると等間隔に結合が付加されます。



- 3.4.1.7 不要な結合を削除するために右列 3 つ目にある消しゴム (Eraser) を選択し、削除したい単結合上をクリックします。



- 3.4.1.8 二重結合を描くためには、Solid Bond で単結合を 2 回描きます。
(Solid Bond の下にある Multiple Bonds を使用することもできます。)

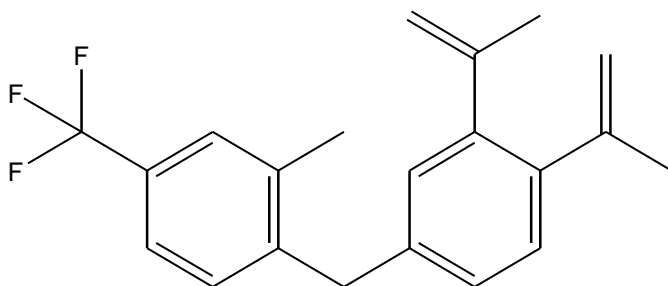


- 3.4.1.9 原子ラベルとして F に置換 (省略値は、C) するために Main Toolbar から右列 4 つ目の Text を選択し、置換したい位置にマウスカーソルを合わせます。

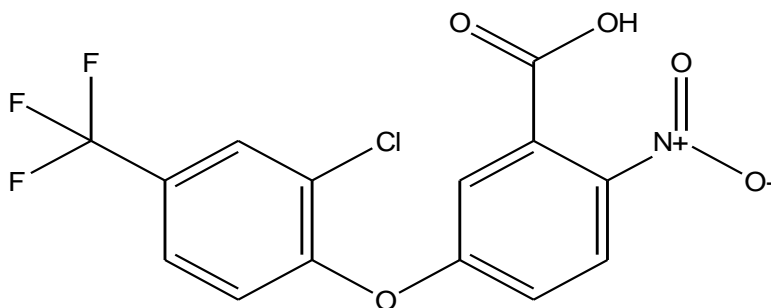
マウスカーソルの形状が A になっているのを確認してクリックするとテキストボックスが開きます。

テキストボックスに F を入力します。

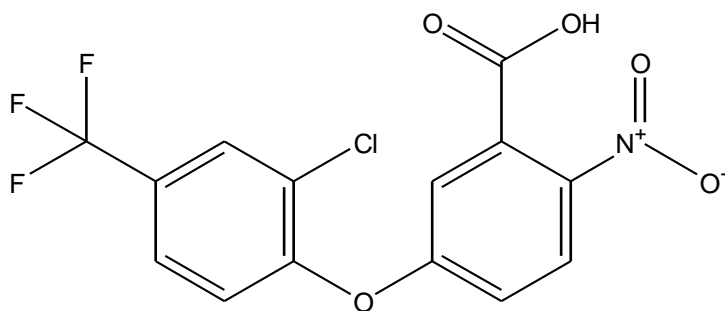
同じ原子ラベルを次々と設定するには、順次、置換したい位置上でダブルクリックしていきます。



- 3.4.1.10 順次、原子ラベルを入力していきます。N⁺は、N+と入力します。O⁻は、O-と入力します。



3.4.1.11 N⁺の+とO-の-の微調整するためには、+の場合、Text ツールを選択した後、+の部分をドラッグして選択し、Text メニューStyle, Superscript を選択すると上付き文字になります。
同様に-も上付き文字に変更します。これで完成です。



3.5. 反応の作画

3.5.1. 反応の作画方法

基本的な反応の作画方法は、各化学構造に反応の矢印を加えること程度であり、化学構造式を描くことと同様です。ただし、化学的に意味のある反応を描くためには、矢印の位置を調整し、分子間のマッピングに注意しなければなりません。化学反応を美しく書くコツは、以下の通りです。

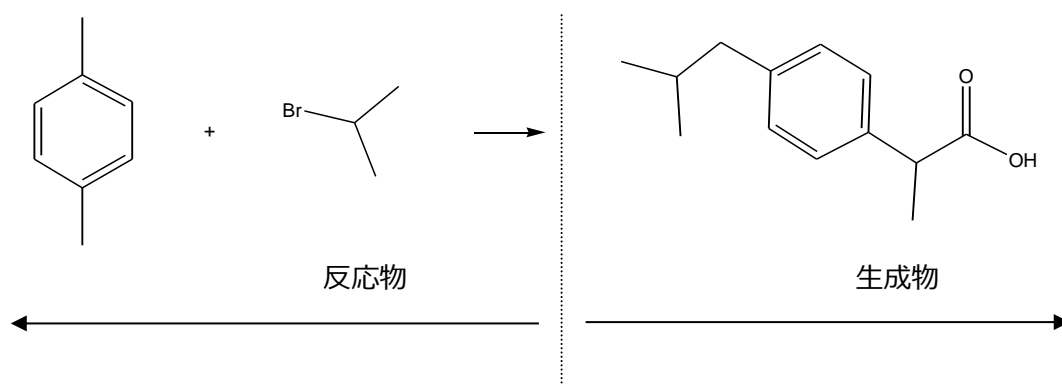
- ・反応物と生成物の構造が似ていることを利用する。
- ・オブジェクトの整列、配置機能を活用する。

また、化学的に意味のある反応を描くために注意すべき項目は、以下の通りです。（単に図形として反応を描くだけならば、これらのことを考慮する必要はありません。）

- ・反応物と生成物の区切りは、矢印の先で分かります。

単純に矢印の先を境界にして、左側が反応物（Reactant）であり、右側が生成物（Product）です。

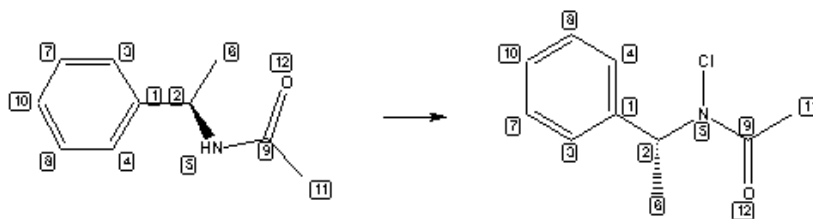
ChemDraw では、化合物を分けている“+”は、意味を持ちません。あってもなくても化学的な意味は、同じです。



・分子間のマッピング

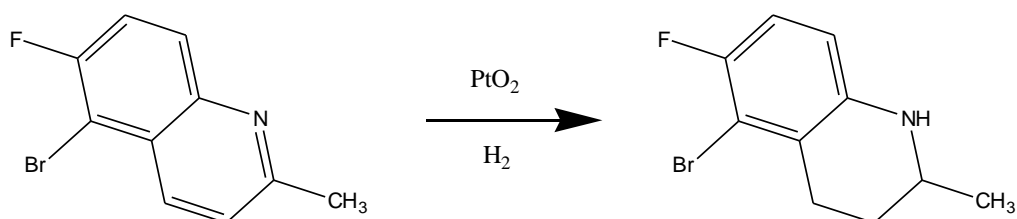
反応の前後で変化する部位を明確に指定する機能が反応のマッピングです。

反応マッピングを自動的に行うには、反応における反応物と生成物を選択し、A→A ツールを選択します。

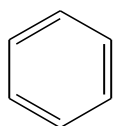


3.5.2. 反応の作画例

以下の反応を描いてみます。



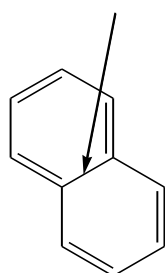
3.5.2.1 反応物としてベンゼン環を描きます。



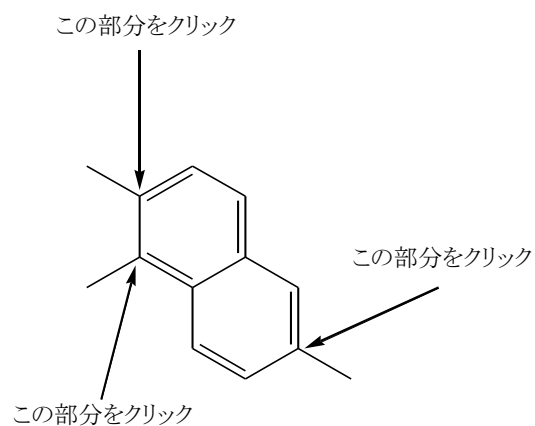
3.5.2.2 ベンゼン環ツールを使って環を縮合させます。

自動的に二重結合が調整されます。

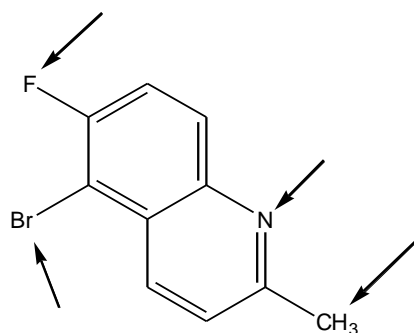
この結合をクリックして縮合させます。



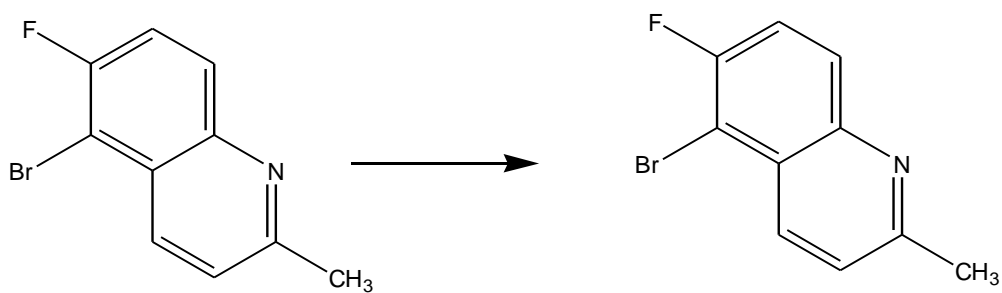
3.5.2.3 単結合ツールを選択して他の結合を追加します。



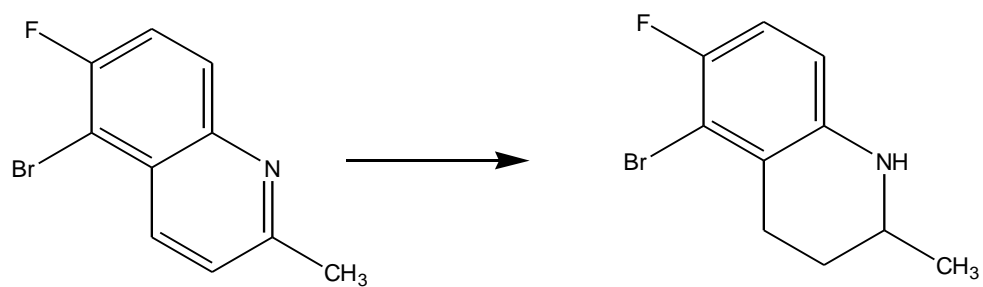
3.5.2.4 テキストツールを選択し、原子を置換していきます。



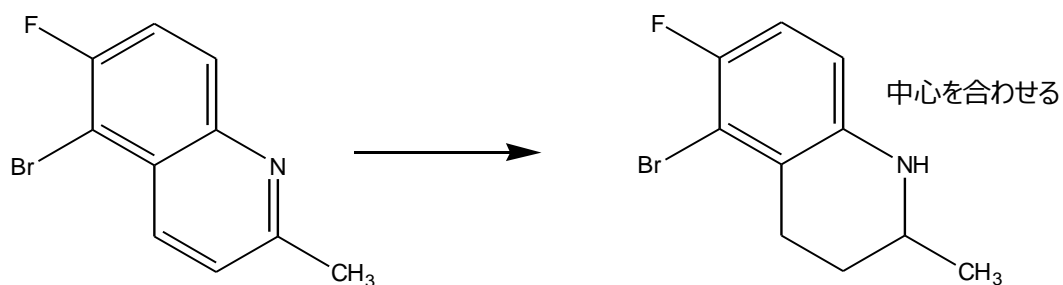
3.5.2.5 反応物を Copy & Paste して生成物とします。また、矢印ツールを使用して矢印を付加します。



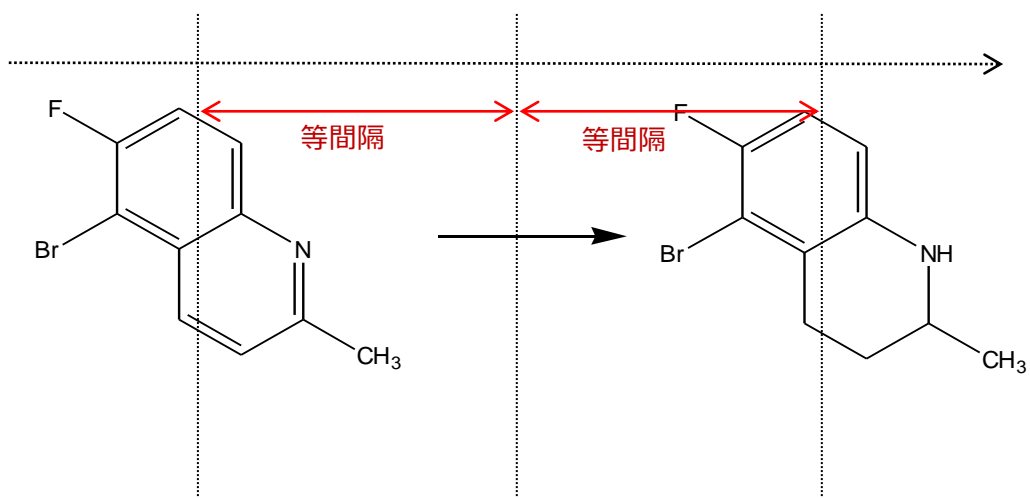
3.5.2.6 N の近くの二重結合ともう一つの二重結合を消しゴムツールで削除します。自動的に N が NH に変更されます。



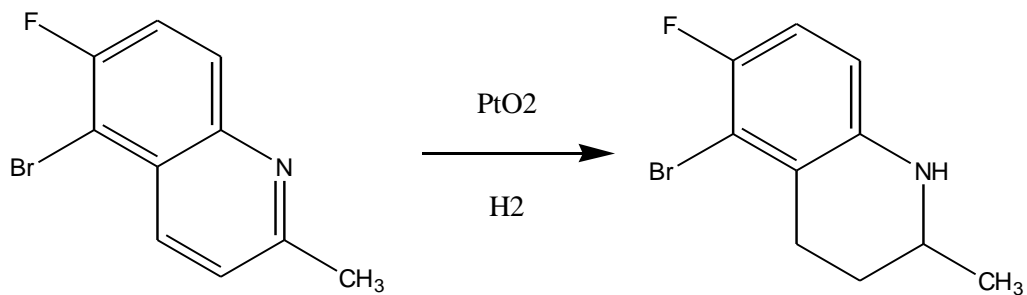
3.5.2.7 構造を整列するために選択ツールで全体を選択した後、Object メニュー、Align、T/B center を指定します。



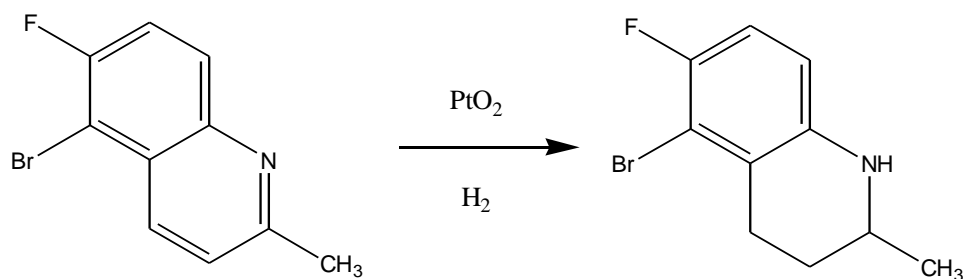
3.5.2.8 配置を調整するために、Object, Distribute, Horizontally を指定します。



3.5.2.9 テキストツールで触媒分子を矢印の上下に追加します。



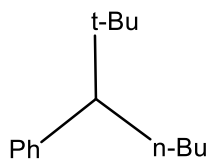
3.5.2.10 選択ツールを選択し、SHIFT キーを押しながら PtO₂ と H₂ を指定して、Text、Style、Formula を指定します。これで完成です。



3.6. ワンタッチで置換基を描く方法

ラベルを追加したい位置にマウスカースルを置いて特定のキーを押すとワンタッチでラベルを描くことができます。

<例>



設定されている主なホットキー

"a" のキーを押すと" benzene" が描かれます。

"A" のキーを押すと"Ac" がラベルとして描かれます。

"e" のキーを押すと"Et" がラベルとして描かれます。

"E" のキーを押すと" CO₂Me " がラベルとして描かれます。

"2" のキーを押すと"carbonyl" が描かれます。

"3" のキーを押すと"benzene" が描かれます。

"6" のキーを押すと"cyclohexane" が描かれます。

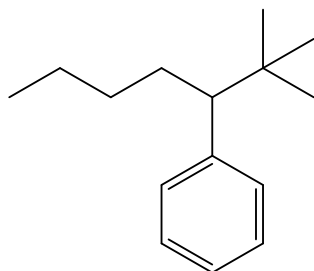
"7" のキーを押すと"cyclopentane" が描かれます。

※この設定は、以下の場所にあります。


<C:¥ProgramData¥PerkinElmerInformatcs

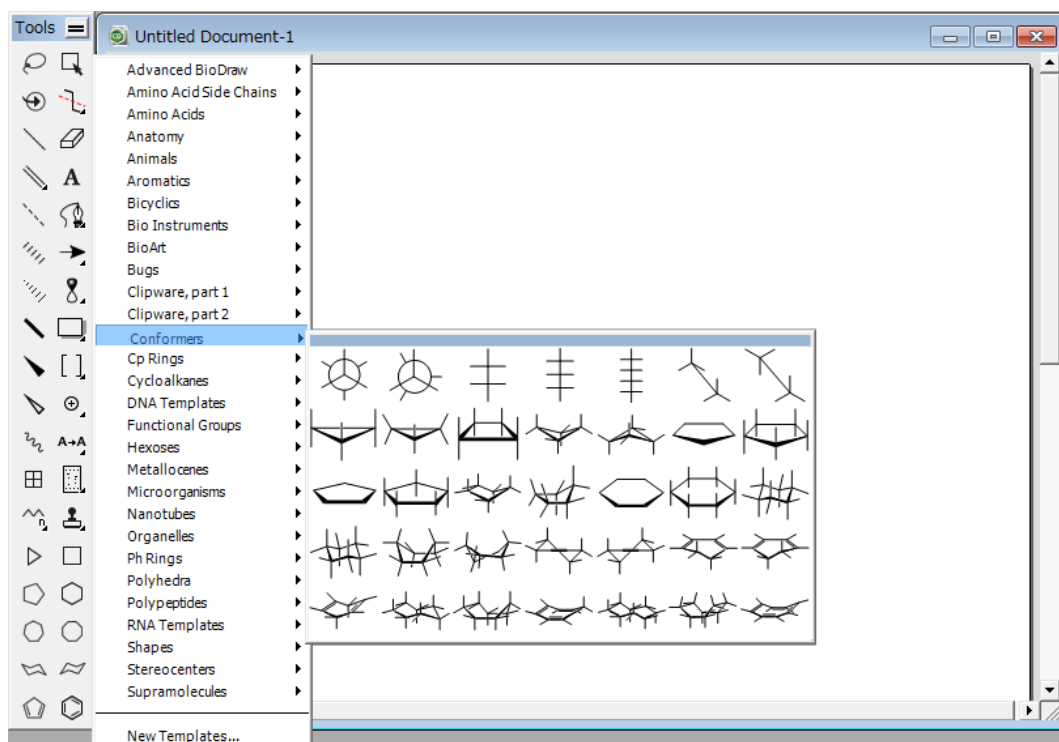
¥ChemOffice2020¥ChemDraw¥ChemDraw Items¥hotkeys.xml>

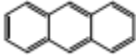
ラベルを追加した後で、Strucure>Expand Label を実行すると、以下のようになります。

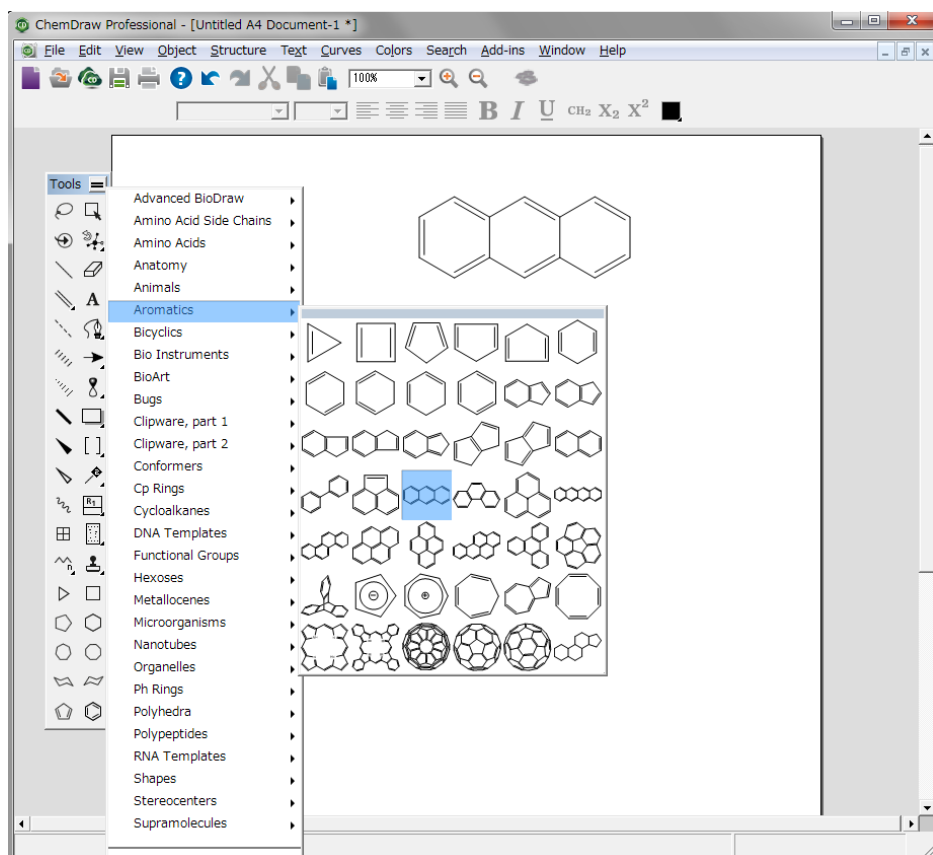


3.7. テンプレートを用いた化学構造作画

Main Toolbar にいろいろなテンプレートがあります。



たとえば、anthracene を作画するには、Templates から Aromatics を選択し、 を選択します。
選択した後、構造作画画面上をクリックすると、テンプレートで選択した化学構造が作画されます。



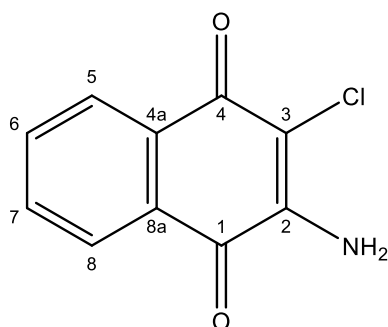
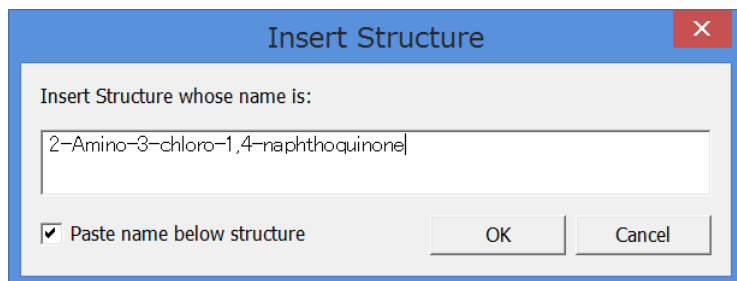
3.8. 化学名から構造式を生成する。

ChemDraw を使用して構造を生成させることができます。

Structure > Convert Name to Structure を選択します。

ポップアップダイアログボックスの中に名前「2-Amino-3-chloro-1,4-naphthoquinone」をタイプして、OK を選択します。

IUPAC 原子番号が構造式に表示され、名前が構造式の下に表示されます。



2-amino-3-chloronaphthalene-1,4-dione

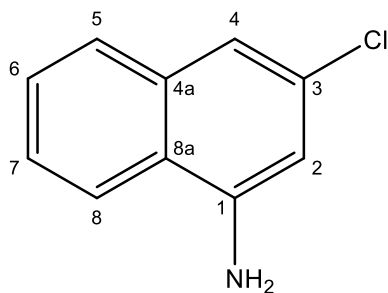
3.9. 構造式から化学名を生成する。

ChemDraw を使用して化学名を生成させることができます。構造式を選択してから、

Structure > Convert Structure to Name を選択します。

IUPAC 原子番号が構造式に表示され、名前が構造式の下に表示されます。

構造式を変化させると命名結果も連動します。



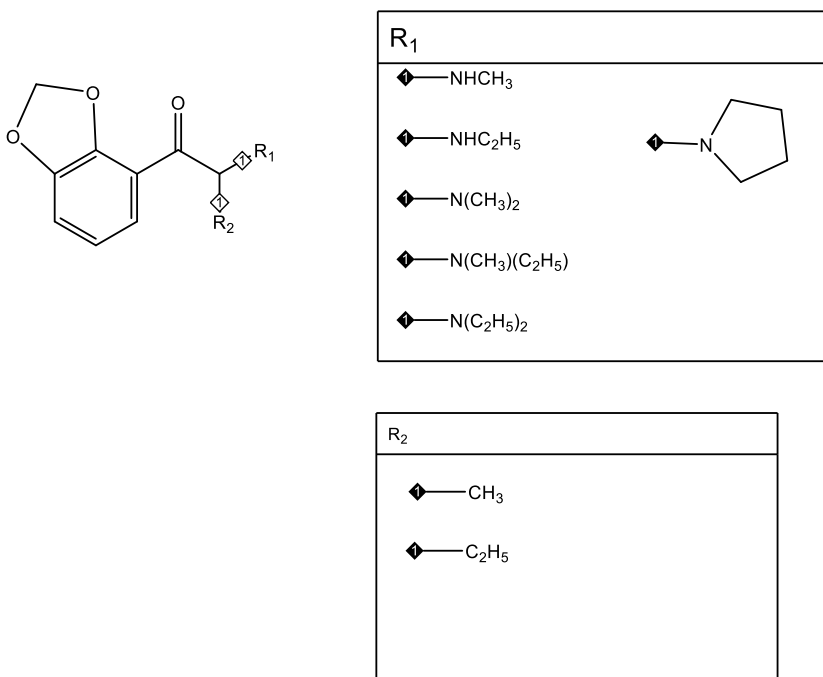
3-chloronaphthalen-1-amine

3.10. 基本骨格を利用した置換構造の一括作成

構造式の基本骨格を基に置換基を変化させた構造を一括して生成できます。

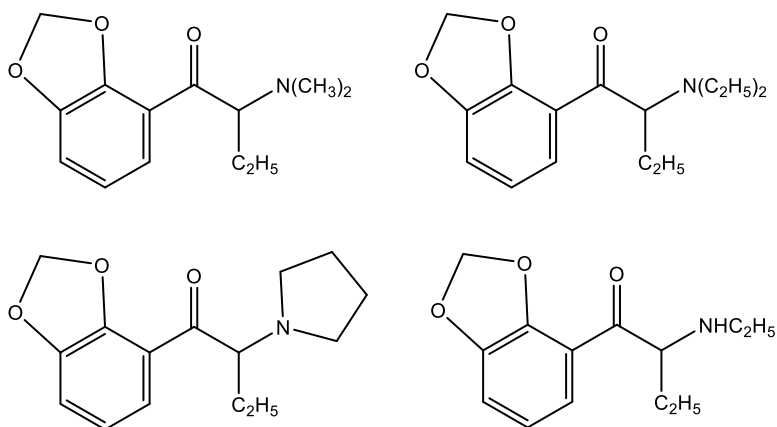
3.10.1. 基本骨格とルール(Main Toolbar の Query Tools の を利用)を指定します。

Query Tools は使用したツールによって表示が変わります。



3.10.2. 範囲（基本骨格と R1, R2 の枠など）を選択して Structure > Expand Generic Structure を実行すると多数の置換構造が生成されます。

<生成された構造式の例>



4. 化学計算と物性予測機能

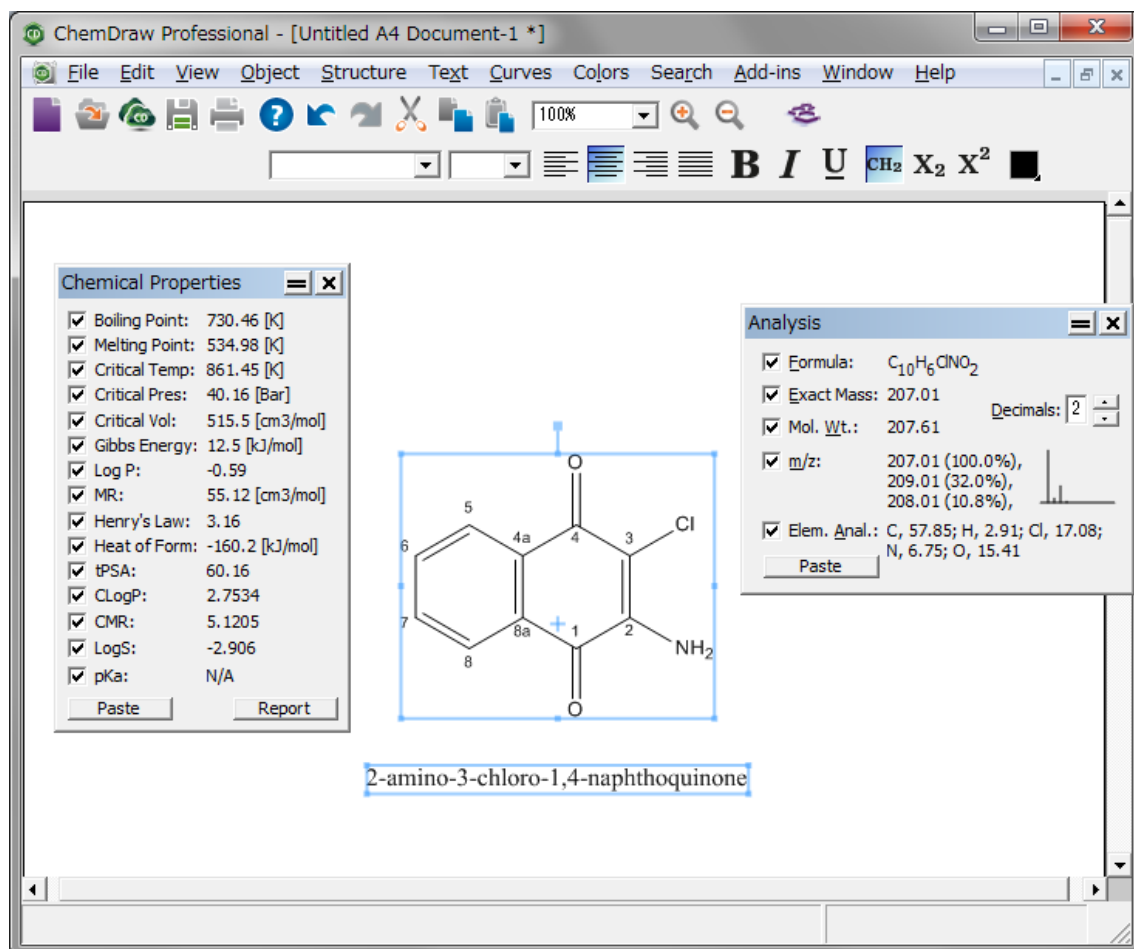
構造が描かれている状態で、View > Show Analysis Window 及び Show Chemical Properties Window を選択します。

すると、新しいパネルが表示され、分析あるいは、予測された化学情報が表示されます。

もし、複数の構造がある場合には、希望する構造を選択してから実行してください。

化学情報を見た時に興味がある項目は、そのまま、チェックをつけて Paste を選択すれば、画面に貼り付けられます。

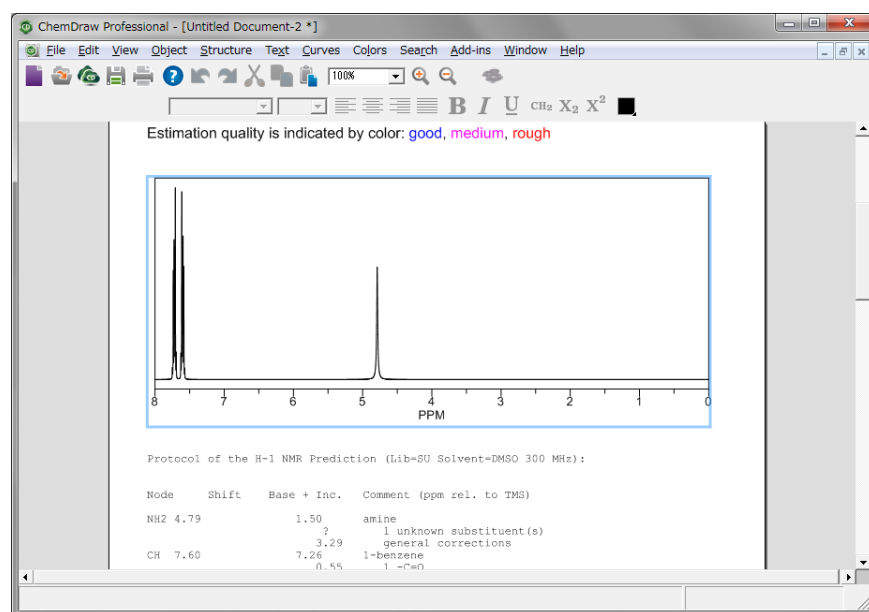
また、Report を選択すれば、詳しい情報を見ることができます。



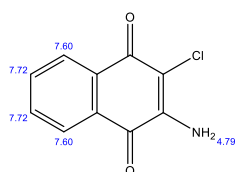
5. NMRシフト予測機能

ChemDraw Professional では、NMR スペクトルの予測ができます。

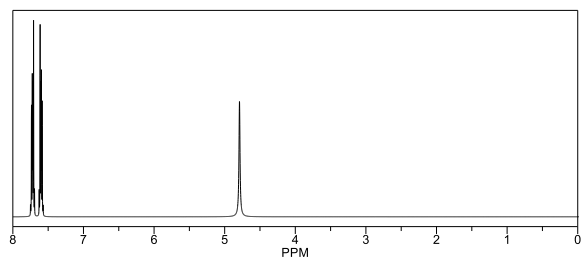
Structure > Predict 1H-NMR Shifts 又は Predict 13C-NMR Shifts で実行できます。



ChemNMR ¹H Estimation



Estimation quality is indicated by color: good, medium, rough



Protocol of the H-1 NMR Prediction (Lib=SU Solvent=DMSO 300 MHz):

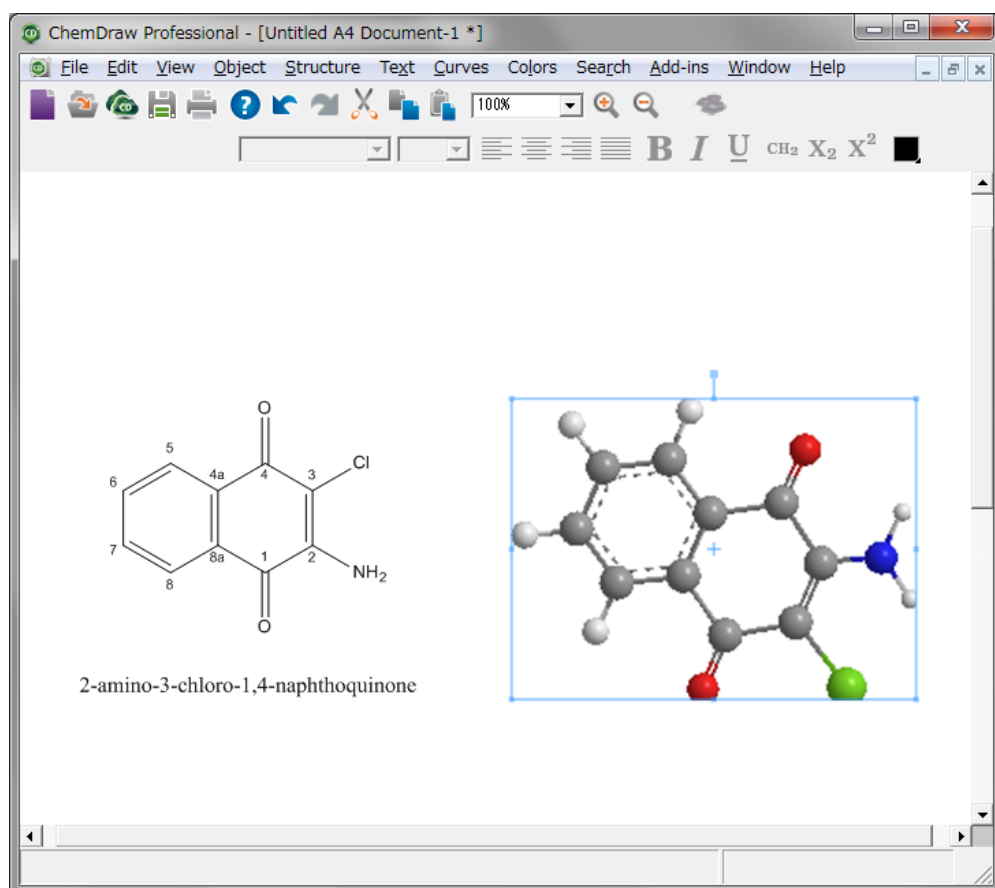
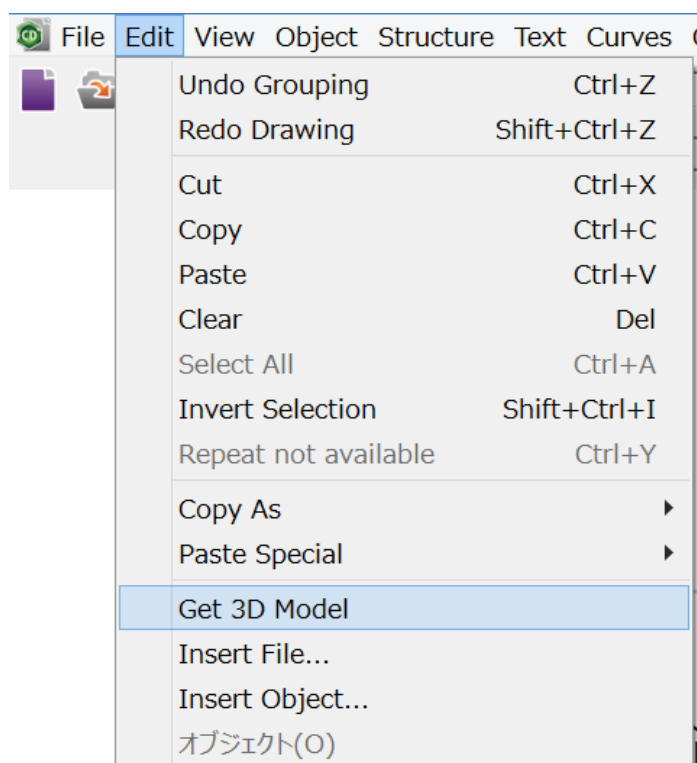
Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
NH2	4.79	1.50	amine
		?	1 unknown substituent(s)
		3.29	general corrections
CH	7.60	7.26	1-benzene
		0.55	1 -C=O
		0.19	1 -C=O
		-0.40	general corrections
CH	7.60	7.26	1-benzene
		0.19	1 -C=O
		0.55	1 -C=O
		-0.40	general corrections
CH	7.72	7.26	1-benzene
		0.19	1 -C=O
		0.28	1 -C=O
		-0.01	general corrections
CH	7.72	7.26	1-benzene
		0.28	1 -C=O
		0.19	1 -C=O
		-0.01	general corrections

1H NMR Coupling Constant Prediction

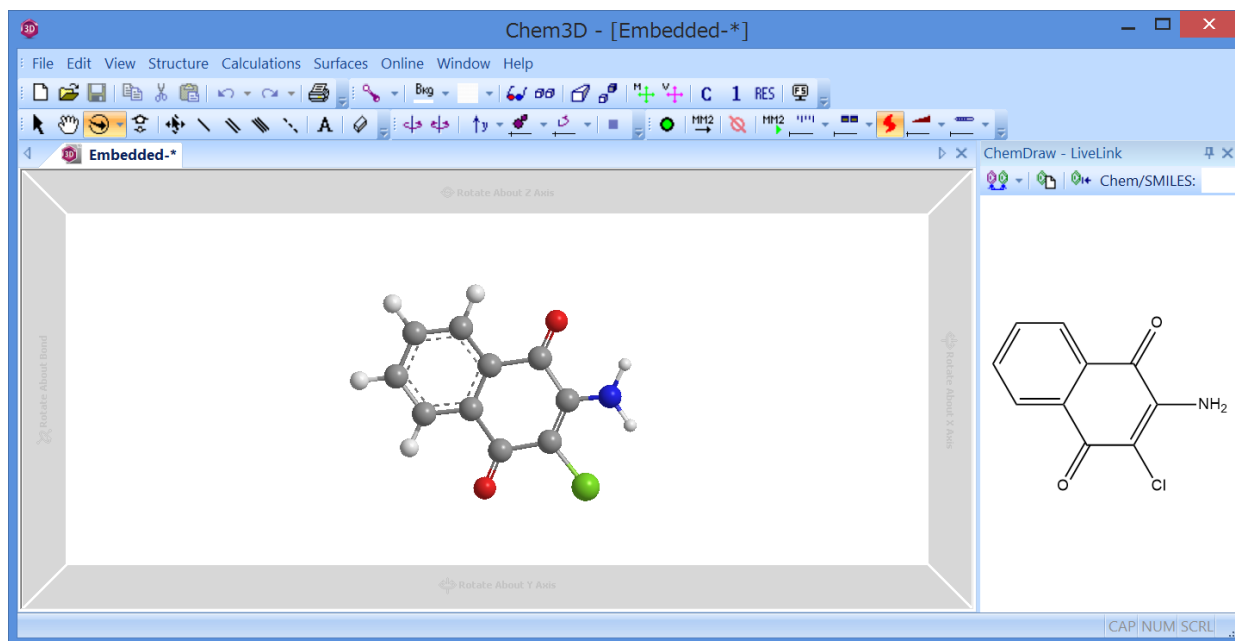
shift	atom index	coupling partner, constant and vector
4.79	14	
7.60	6	
		7 7.5 H-C-C-H
		8 1.5 H-C-CH-C-H
7.60	9	
		8 7.5 H-C-C-H
		7 1.5 H-C-CH-C-H
7.72	7	
		6 7.5 H-C-C-H
		8 7.5 H-C-C-H
		9 1.5 H-C-CH-C-H
7.72	8	
		9 7.5 H-C-C-H
		7 7.5 H-C-C-H
		6 1.5 H-C-CH-C-H

6. 三次元モデルの表示

ChemDraw Professional では、興味を持った構造を簡単に3次元化して観察することができます。構造式を選んで、Edit > Get 3D Modelを実行します。



6.1. 3次元化した構造をダブルクリックすると、Chem3D が起動されます。



7. MS Word との連携

ChemDraw は MicroSoft Word と連携できます。

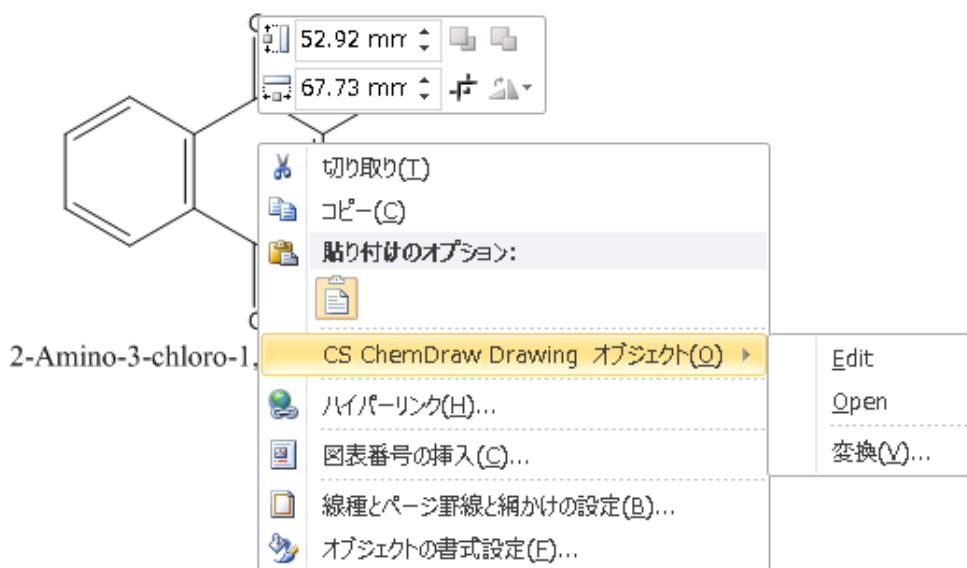
Word に埋め込まれた ChemDraw Structures を編集するには、構造をダブルクリックします。

Word の構造の上をダブルクリックすると ChemDraw ツールバーが表示されます。

また、MS Word に埋め込まれた構造をポイントし、右クリックすると、CS ChemDraw Drawing オブジェクトの選択メニューが表示されます。

Edit を選択するとダブルクリックと同じ動作になります。

Open を選択すると、ChemDraw が起動されて大きな編集画面となります。



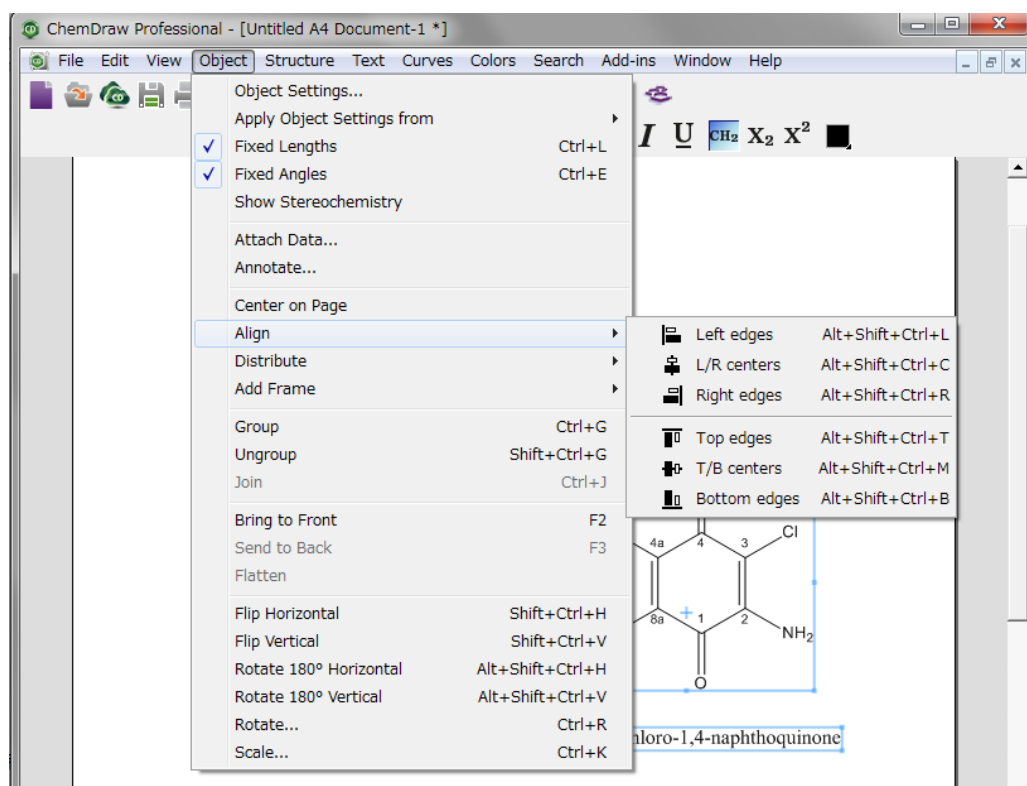
8. テーブル作成ツール

ChemDraw Professional では、テーブル作成ツールがサポートされています。

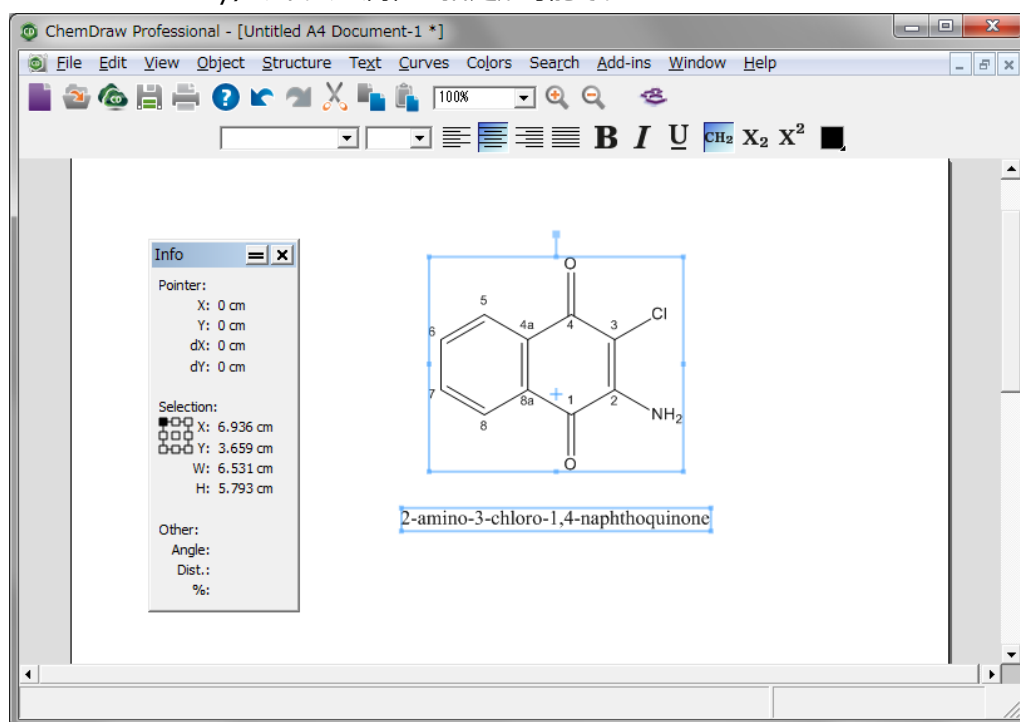
ChemDraw toolbar のテーブルツールを使うと一つの枠ごとに操作できます。

列や行のサイズを揃えたり、削除できたりします。

また、枠の中の構造を右クリックして揃えることもできます。テーブルの外見も変えることができます。



その他、ChemDraw には、細かい設定が可能になるように位置情報表示 (View > Show Info Window)、原子番号の表示 (右クリック > Atom > Show Atom Numbers)、立体属性表示 (右クリック > Atom > Show Stereochemistry)、ポリマー属性の指定が可能です。

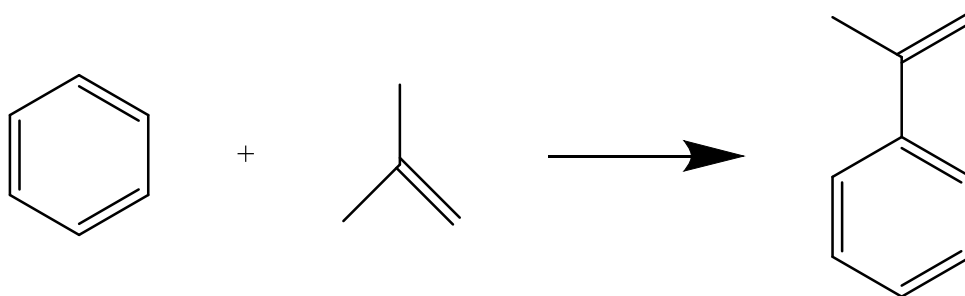


9. 化学量論ツール

ChemDraw Professional では、化学量論ツールがあります。

反応を描いて、Structre > Analyze Stoichiometry を選択します。

自動的に分子量などが計算され、計算に便利な表が作成されます。



<i>Reactants</i>			<i>Products</i>	
Formula	C₆H₆	C₄H₈	Formula	C₉H₁₀
MW	78.11	56.11	MW	118.18
Limiting?	Yes	No	Equivalents	
Equivalents			%Completion	
Sample Mass			Expected Mass	
%Weight			Expected Moles	
Molarity			Measured Mass	
Density			Purity	
Volume			Product Mass	
Reactant Moles			Product Moles	
Reactant Mass			%Yield	

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

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

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