

HUMAN HEALTH

ENVIRONMENTAL HEALTH

ChemDraw 16.0 ユーザーズガイド

目次

最新の追加事項	vii
第 1 章: はじめに	1
このマニュアルについて	1
第 2 章: 操作の開始	5
ChemDraw チュートリアルについて	5
ChemDraw ユーザー インターフェイス	5
ツールバー	6
ドキュメント	7
第 3 章: ページ レイアウト	13
描画領域	13
ドキュメント タイプ	13
印刷	15
ページ設定の保存	16
35mm スライドの境界ガイド	16
描画の確認	17
表	19
第 4 章: オプションと設定	23
プリファレンスの設定	23
ツールバーのカスタマイズ	27
ドキュメント設定およびオブジェクト設定	27
ホットキーのカスタマイズ	39
色の使用	42
ドキュメント設定	45
第 5 章: ショートカットとホットキー	51
原子キー	51
結合ホットキー	52
ホットキー機能	53

ショートカット	54
ニックネーム	58
第 6 章: 基本的な描画テクニック	60
結合	60
原子	65
タイトル	67
環の描画	76
鎖	79
オブジェクト	80
構造式の整形	99
構造式の検査	100
化学的な警告	100
第 7 章: BioDraw (Professional レベルのみ)	103
BioDraw テンプレート	103
カスタマイズ可能なオブジェクト	106
第 8 章: 生体高分子の描画	113
生体高分子エディタ	114
保護基	115
シーケンスの貼り付け	116
シーケンスの展開	118
ラベルの簡略化	118
シーケンスの残基の変更	119
残基と側鎖の統合	120
ハイブリッド生体高分子	123
IUPAC コード	124
ジスルフィド架橋	128
ラクタム架橋	129
第 9 章: 高度な描画テクニック	130

オブジェクトの色付け	130
ラベル	131
結合点	134
原子の番号付け	136
構造式の三次元表示	138
マス フラグメント	138
反応の描画	141
化学量グリッド	147
テンプレート	150
ニックネームの定義	152
ChemScript	155
第 10 章: Struct=Name (Professional レベル)	157
Struct>Name	157
Name>Struct	161
ディクショナリへの構造式の追加	163
FDA 承認薬ディクショナリ	163
第 11 章: 化学的機能	164
構造式解析	164
ChemFinder ホットリンク	165
立体化学構造	165
化学的物性	170
化学的注釈	178
三次元表示	182
TLC	184
ChemNMR (Professional レベル)	189
第 12 章: ChemDraw/Excel と CombiChem	197
ChemDraw/Excel のセットアップ	197
表のインポート	198

ヒット リストのインポート	198
Excel 表のエクスポート	198
テーブルの同期	199
構造式の追加	200
検索	202
R-基分析	203
構造式	204
ChemDraw/Excel の関数	205
化学的物性	219
一般オプション	227
CombiChem	229
第 13 章:	238
ChemScript の利点	238
ChemScript のしくみ	238
操作の開始	239
スクリプトの編集	240
ChemScript API の紹介	241
チュートリアル	242
参考資料	245
第 14 章: 検索構造式	247
検索における制限	247
総称ラベル	247
原子属性	250
結合属性	258
元素リスト	261
ポリマー	263
代替基	268
無指定代替基	273

汎用構造式の展開	274
原子対原子のマッピング	277
立体化学記号	279
3D 属性	280
エクスポート時の互換性	281
第 15 章: 情報の共有	286
クリップボード	286
オブジェクトの転送	289
オブジェクトの埋め込み	291
エクスポート	291
インポート	292
異なるプラットフォームへの転送	297
ChemDraw Cloud について	297
第 16 章: 化学的解釈	310
データベースの表記法	310
第 17 章: 特性計算	324
第 18 章: ChemDraw の Web 情報	327
オンライン登録	327
ユーザズ ガイド	327
テクニカル サポート	327
ChemDraw を使用した SciFinder® の検索 (Professional レベル)	329
第 19 章: チュートリアル	332
チュートリアル 1: 構造式の描画	332
チュートリアル 2: 環の描画	333
チュートリアル 3: フィッシャー投影図	335
チュートリアル 4: 遠近感のある描画	339
チュートリアル 5: ニューマン投影図	343
チュートリアル 6: 立体化学構造	345

チュートリアル 7: テンプレート	348
-------------------------	-----

監修：富士通株式会社テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部
科学システムソリューション統括部有田・正博、久保木俊彦、原田明彦、石田伸子、
鶴岡麻美子、丸山絵里、間杉奈々子
本マニュアルの査読に関しては、富士通株式会社テクニカルコンピューティング・
ソリューション事業本部の協力を得ております。
富士通は、日本においてパーキンエルマーインフォマティクス社の製品の販売、
サポートを行っております。



FUJITSU

最新の追加事項

Windows 10 (32 ビットと 64 ビット)、Microsoft Office 365 (32 ビット)、および Mac OS X 10.10.x と 10.11.x (32 ビットと 64 ビット)。

ChemDraw は、化学的概念および生物学的概念を対象とする優れた描画作成ツールとして、長年、好評を得てきました。最新のオペレーティング システムやツールと互換性があることは、その重要な要素の 1 つです。Windows および Mac プラットフォーム上の最新のブラウザで ChemDraw Active-X コントロール機能を使用できることも、このプロセスの一部です。

拡張逆合成ツール.

拡張逆合成ツールを使用して、分子がどのように合成することが可能かを分析できるようになりました。詳細については「[140 ページの “拡張された逆合成ツール”](#)」を参照してください。

ChemDraw Cloud.

ChemDraw をインストールせずに Web ブラウザ上でさまざまな端末から ChemDraw Cloud として利用できるようになりました。ChemDraw Desktop と ChemDraw Cloud では、アップロードとダウンロードによってファイルを共有できます。詳細については、「[297 ページの “ChemDraw Cloud について”](#)」を参照してください。

データ添付機能の強化.

データをオブジェクトに添付する際に、1 文字のタグを指定できるようになりました。これらのタグはオブジェクトと一緒に表示されます。詳細については、「[293 ページの “添付データ”](#)」を参照してください。


立体フラグ構成オプション.

MDL 形式ファイルを開くときに、個々の分子の立体中心に立体フラグ ラベルを表示するのではなく、1 つの汎用立体フラグ ラベルを表示するように選択できます。詳細については、「[24 ページの “立体フラグの構成オプション”](#)」を参照してください。。

SKC 形式で保存するときに Enhanced Stereochemistry の設定を保存できるようになりました。詳細については、「[24 ページの “立体フラグの構成オプション”](#)」を参照してください。

ChemDraw E-Notebook.

ChemDraw E-Notebook は、科学実験のデザインと記録をサポートするクラウドベースのツールです。ChemDraw E-Notebook およびデスクトップの ChemDraw では、ChemDraw ドキュメントを共有できます。

 **注:** ChemDraw E-Notebook は ChemOffice 16.0 リリース時点ではまだ利用できませんが、間もなく利用できるようになります。

詳細については、「[308 ページの “ChemDraw E-Notebook とは”](#)」を参照してください。

はじめに

ChemDraw は、科学者や科学を学ぶ学生、さらに科学関連の著作活動を行う方を対象として設計された、強力でありながら使いやすいツールであり、化学および生物学の描画に利用できます。ChemDraw では、独自の描画を自由に作成できるだけでなく、ライブラリとして用意されている描画をテンプレートとして使用することもできます。

テクニカル サポート

Online メニューの **Technical Support** をクリックすると、テクニカル サポート Web ページが開きます。このページでは、PerkinElmer Informatics Knowledge Base、製品ダウンロード、FAQ、マニュアルなどの Desktop Support リソースが提供されています。

PerkinElmer 社のインフォマティクス テクニカル サポート Web ページにアクセスするには、次の操作を行ってください。

1. Online メニューの **Browse PerkinElmer Technical Support** をクリックします。テクニカル サポート Web ページが開きます。
2. **Desktop Support** をクリックします。

このマニュアルについて

このマニュアルでは、ChemDraw の機能について説明します。このマニュアルで説明している操作の中には、他のソフトウェアと組み合わせて実行する必要があるものもあります。たとえば、ChemDraw/Excel に関する説明では、Microsoft Excel を併用した作業が必要になるため、このマニュアルではその操作についても説明しています。Microsoft Excel のオンライン ヘルプやユーザーズ ガイドも併せて参照してください。

このマニュアルの表記規則

このマニュアルでは、ChemDraw の習得を容易にするため、以下の基本表記規則を使用します。

操作手順


操作手順は、メニュー階層や画面を移動する方法の説明を目的とします。メニュー項目は**太字**で示します。たとえば、新しい描画テンプレートを開く操作は、次のように表記されています。

1. **File**、**Open Templates**、**Amino Acids** の順に選択します。

これは、まず **File** メニューを選択し、(**File** メニュー内の) **Open Templates** を選択して、さらに (**Open Templates** サブメニュー内の) **Amino Acids** を選択するという意味です。

注、ヒント、注意

このマニュアルでは、各種の情報を表すために、次の特殊なアイコンを使用します。

 **注:** 重要な情報を強調表示します。

 **ヒント:** 知っておくと役に立つ特定の補足的な情報を提供するために使用します。

 **注意:** 注意を怠るとデータ損失などの重大な問題につながるおそれのある重要な情報を示します。

その他の情報

ChemDraw の操作方法を習得するには、以下の関連資料が役に立ちます。

オンライン ヘルプ

ChemDraw で、F1 キーを押すか、**Help**、**Contents** の順に選択すると、オンライン ヘルプを参照できます。

ツール ヒント

ツール ヒントは、ツールの名前または短い説明です。ツール ヒントを表示するには、マウス ポインタをツールに重ねます。ツール ヒントの長い説明はステータス バーに表示されます。

ステータス バー

ChemDraw ウィンドウの左下隅を見ると、以下のような役に立つ情報が表示されています。

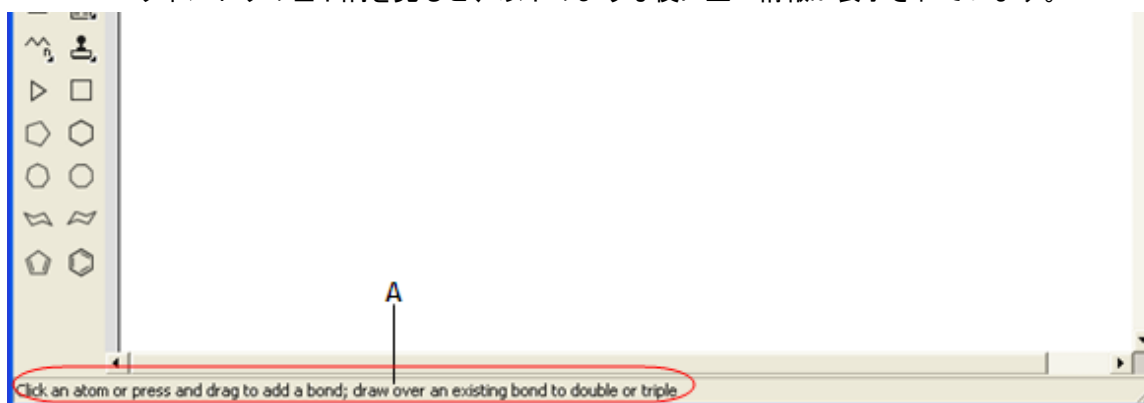


図 1.1: ステータス バーに表示された線結合に関する情報

シリアル番号とテクニカル サポート

シリアル番号および登録コードの入手方法の詳細については、[オンラインのサービス Web サイト](#)を参照してください。

登録ユーザーの方々は、インターネットや弊社テクニカル サポートを通じて技術的なサポートを受けることができます。

テクニカル サポートにご連絡いただく際には、ChemOffice アプリケーションのシリアル番号の提示が必要です。弊社のテクニカル サポート Web ページには、FAQ（よく寄せられる質問）への回答、およびその他の情報が掲載されています。

弊社の ChemDraw のテクニカル サポートにアクセスするには、**Online** メニューの **Browse PerkinElmer Technical Support** をクリックします。

解決方法が Web サイトで得られなかった場合は、テクニカル サポートにご連絡いただく前に、次の手順に従ってください。

1. ソフトウェアのシステム要件を確認してください。
2. [3 ページの“トラブルシューティング”](#)を読み、そこに記載されている解決手段を実行してください。
3. 上記のいずれの方法でも問題が解決できない場合は、[テクニカル サポート](#)にお問い合わせください。

お問い合わせの前に:

- 弊社にご連絡いただく前に、問題が再発するかどうか確認してください。問題が再現できる場合は、手順を正確に記録してください。
- 表示されたエラー メッセージの内容を正確に記録してください。
- 問題の解決を試みた際の手順を記録してください。

さらに、ChemOffice では次の形式で情報を提供しています。

- ChemDraw オンライン ヘルプ
- [PerkinElmer Informatics Web サイト](#)
- [PerkinElmer Informatics Services](#)

トラブルシューティング

ここでは、弊社デスクトップ アプリケーションの総合的なパフォーマンスを改善する手順や、ChemDraw ソフトウェア製品のご使用中にコンピューターがクラッシュした場合に従う手順について説明します。

パフォーマンス

ChemOffice デスクトップ アプリケーションを使用する際は、次のような方法でコンピューターの処理速度を最適化できます。

- システムのコントロール パネルの Performance タブで、より多くのプロセッサ時間をこのアプリケーションに割り当てます。
- 物理 RAM を増設します。物理 RAM の容量が大きいほど、ChemOffice デスクトップ アプリケーションが仮想メモリを使用するためにハード ディスクにアクセスする回数が減ります。
- 仮想メモリ (VM) を増やします。仮想メモリはハード ディスクの空き領域を RAM として割り当てることで、RAM を拡張します。ただし、アプリケーションとハード ディスクの間のスワップは、物理 RAM のスワップと比べると遅くなります。

アプリケーションとドライバ

ほとんどの複雑なソフトウェア アプリケーションで起こりうる事態ですが、ChemDraw からの応答がなくなることがあります。ソフトウェアとドライバの問題を解決するために、以下の手順を試してください。

1. Windows を再起動し、問題が再発するかどうか確認します。問題が再発する場合は、次の手順に進んでください。
 2. ビデオドライバ、プリンタドライバ、スクリーンセーバー、ウイルス保護ソフトウェアの衝突が起きている可能性があります。当社へのご連絡が必要な場合は、ご使用のドライバのタイプやバージョンなどを確認してください。
- **ビデオ ドライバ関連の問題:** ChemOffice デスクトップ アプリケーションの表示に問題がある場合は、まずコントロール パネルのディスプレイまたは System Setup で VGA ビデオ ドライバに切り替えて、問題が再発するかどうかチェックしてください。ドライバを変更して改善が見られる場合は、元のドライバを更新する必要がありますと思われる。ドライバのメーカーに連絡して最新のドライバを入手してください。問題が解決しない場合は、元のドライバに関する詳しい情報と問題の内容を当社までご連絡ください。
 - **プリンタ ドライバ関連の問題:** 別のプリンタ ドライバを使って再テストしてください。ドライバを変更して改善が見られる場合は、元のドライバを更新する必要がありますと思われる。ドライバのメーカーに連絡して最新の

ドライバを入手してください。問題が解決しない場合は、元のドライバに関する詳しい情報と問題の内容を当社までご連絡ください。

3. ソフトウェアを再インストールしてください。ソフトウェアを再インストールする前に、ソフトウェアをアンインストールして、スクリーンセーバーおよびウイルス保護ソフトウェアも含むすべてのバックグラウンドアプリケーションを無効にします。詳細なアンインストール手順については、テクニカルサポート Web ページを参照してください。
4. 上記の処置を行っても問題が解決しない場合は、オンライン [連絡フォーム](#) にトラブルの詳しい内容をご記入のうえ、テクニカルサポート部までご連絡ください。

操作の開始

この章の各トピックでは、ユーザー インターフェイスについて説明します。

ChemDraw チュートリアルについて

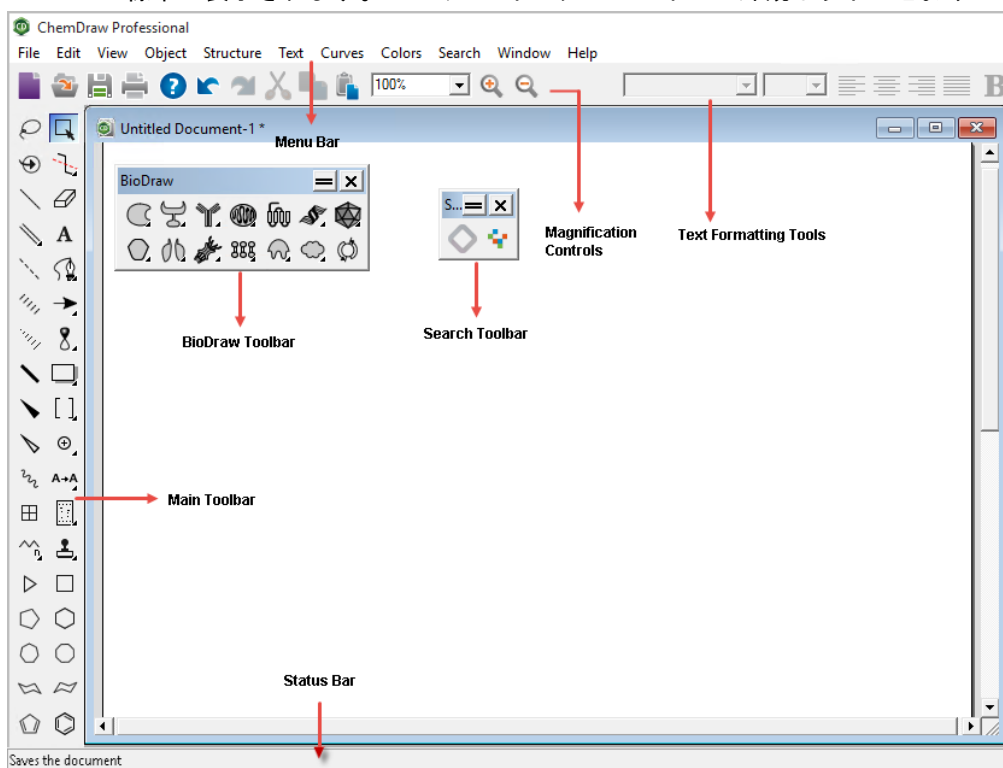
[チュートリアル](#)の章では、次の 7 つのチュートリアルを利用できます。

- チュートリアル 1: 構造式の描画
- チュートリアル 2: 環の使用法
- チュートリアル 3: フィッシャー投影図
- チュートリアル 4: 遠近感のある描画
- チュートリアル 5: ニューマン投影図
- チュートリアル 6: 立体化学構造
- チュートリアル 7: テンプレート

これらのチュートリアルでは、ChemDraw ツールの使用手順を順を追って説明しています。

ChemDraw ユーザー インターフェイス

ユーザー インターフェイスには、使用頻度の高いツールバー、メイン メニュー、およびドキュメント ステータス バーが標準で表示されます。ユーザー インターフェイスの外観は以下のとおりです。



ChemDraw Professional Windows 版ユーザー インターフェイス

ツールバー

ChemDraw には、Search、Structure、Curves、Windows、Biopolymer などの新しいツールバーが導入されました。ツールバーの表示/非表示を切り替えるには、**View** メニューの各ツールバーの名前をクリックします。ツールバーが表示されているときは、そのツールバー名の横にチェック マークが付きます。ツールバーの右上端にある 'X' アイコンをクリックして、ツールバーを非表示にすることもできます。

メイン ツールバー

メイン ツールバーには、構造式を描画するときによく使用されるツールがあります。ここには、選択ツールと結合ツールがあります。メイン ツールバーからは、他のツールバーを開くことができます。**View** メニューの **Show Main Toolbar** をクリックします。

ツールバーの切り離し

メイン ツールバーには、自身に関連付けられた他のツールバーを持つツールがあります。このようなツールは、右下隅の小さな黒い三角形で示されます。次に例を示します。



これらの下位ツールバーは“切り離し”て、画面の任意の位置に置くことができます。ツールバーを切り離すには、次の操作を行ってください。

- メイン ツールバーをダブルクリックして二次ツールを表示させ、これを画面上の適切な場所にドラッグします。

固定表示と浮動表示

標準のツールバーはすべて、固定表示と浮動表示を切り替えられます。ツールバーを固定表示にすると、描画ウィンドウに結合した状態で固定されます。浮動表示ツールバーはドキュメント ウィンドウの前面に表示され、描画ウィンドウ内で移動できます。ツールバーをダブルクリックすると、そのツールバーは直前の位置、標準の位置、または固定の位置に戻ります。

ツールバーを固定表示するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- ツールバーをクリックし、描画ウィンドウの外側のいずれかの縁に向かってドラッグします。
- ツールバーを右クリックして、**Dock Toolbar** をクリックします。

ツールバーを浮動表示するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- 固定表示されているツールバーをダブルクリックします。
- 固定表示されているツールバーをクリックし、描画ウィンドウの内側に向かってドラッグします。
- ツールバーを右クリックして、**Float Toolbar** をクリックします。

BioDraw ツールバー

BioDraw ツールバーには、生物学および生化学の要素を描画に追加できる描画ツールがあります。詳細については、103 ページの “BioDraw (Professional レベルのみ)” を参照してください。

ドキュメント

ドキュメントは、構造式の作成および編集に使用される作業領域です。ドキュメントは複数ページまたは単一ページで構成されます。

ドキュメントの作成

新しいドキュメントは、デフォルト設定を使用するか、または設定をカスタマイズしたスタイル シートを使用して作成できます。ドキュメントを作成するには、File メニューの **New Document** をクリックします。

スタイルの使用

別のスタイル シートまたはステーショナリを使用して新しいドキュメントを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File、**Open Style Sheets** の順にクリックします。
2. スタイルシートを一覧から選択します。

ChemDraw の ChemDraw Items フォルダには、あらかじめ定義されたスタイル シートが格納されています。たとえば、ACS Document 1996 は、米国化学学会誌 (ACS) の 2 段組書式で通常用いられる、結合長、結合幅、文字間隔や行間、フォントなどが設定されたドキュメントが作成できるようにあらかじめ構成されています。このようなドキュメントの設定内容の一覧については、45 ページの “ドキュメント設定” を参照してください。

ドキュメントを開く

ドキュメントを開くには、次のいずれかの操作を行ってください。

- File メニューの **Open** をクリックします。Open ダイアログでファイル名とファイルの場所を選択し、**Open** をクリックします。
- File メニューの、一番下の一覧からドキュメントを選びます。

開いているドキュメントの選択

Window メニューには、現在開いているすべてのドキュメントおよびテンプレートのリストが表示されます。このリストで選択したドキュメントがアクティブ ウィンドウになります。

ドキュメントの注釈付け

注釈を利用してテキスト情報を付記しておく、データベース検索のときドキュメントを識別するのに役立ちます。注釈はキーワードと関連するデータの値で分類されます。標準では、数種類のキーワード (Name、Description、Type、Other Info) が用意されています。ユーザーが独自のキーワードを追加することもできます。

ドキュメントに注釈を付けるには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Annotations** をクリックします。Annotate ダイアログが表示されます。
2. キーワード リストからキーワードを選択するか、独自のキーワードを追加します。
3. キーワードを追加するには、次の操作を行ってください。
 - a. キーワード リストから **Add New Annotation** を選択します。Add New Annotation ダイアログが表示されます。
 - b. **New Keyword** テキスト フィールドにキーワードを入力します。
 - c. **New Content** テキスト フィールドにドキュメントに付記する注釈の内容を入力して、**Add** をクリックします。
4. **OK** をクリックします。

キーワードの削除

キーワードを削除すると、そのキーワードの注釈も削除されます。


1. Annotate ダイアログ ボックスで、キーワード リストからキーワードを選択します。
2. **Delete Keyword** をクリックします。確認を求めるプロンプトが表示されたら **Yes** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

変更の破棄

前回保存したファイルの内容に戻るには、**File** メニューの **Revert** をクリックします。


取り消し、再実行、および繰り返し

ChemDraw は、操作履歴を記録します。前回の操作の取り消し、再実行、または繰り返しを行うには、**Edit** メニューをクリックし、実行する操作に応じて適切なオプションを選択します。記録される操作の数は、利用可能なメモリ (RAM と仮想メモリ) の容量によって制限されます。

 **注:** ChemDraw では、ドキュメントを最後に保存してから行った操作のみが記録されます。

ドキュメントの保存

1. **File** メニューの **Save** をクリックします。
2. ファイルの保存先のフォルダを選択します。
3. **Save As** テキスト フィールドにファイル名を入力します。
4. ファイル形式を選択します。
5. **Save** をクリックします。

 **注:** ChemDraw では、デフォルトで **CDX** ファイル形式が使用されます。他のファイル形式でも描画を保存できますが、構造式に関連する化学データが全体として保存されないことがあります。たとえば、ChemDraw の描画を **.eps** ファイル形式で保存すると、構造式の画像だけが保存され、原子と結合の關係の化学的意味についてのデータは保存されません。

ChemDraw を使用すると、保存するドキュメントにコメントまたは説明を追加できます。

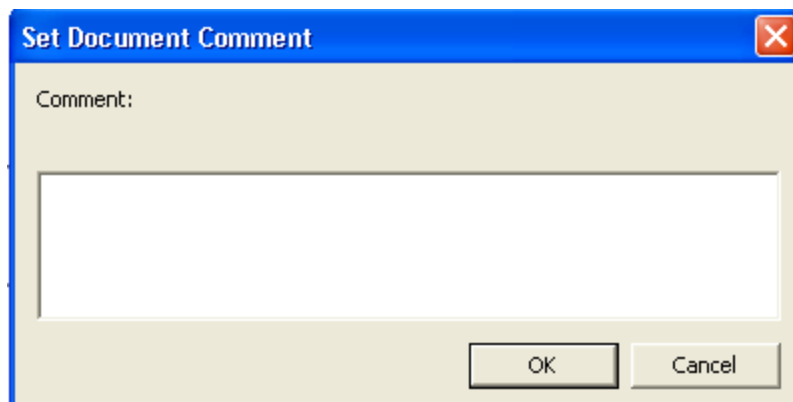
ドキュメントのコメントを有効または無効にするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。

2. **Open/Save** タブをクリックします。
3. **Prompt for Comment** チェック ボックスをオンにします。

ドキュメントのコメントを追加するには、次の操作を行ってください。

1. **Save** をクリックします。Set Document Comment ダイアログが開きます。




2. 説明を入力して **OK** をクリックします。

デフォルトのファイル形式

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Open/Save** タブをクリックします。
3. **Saving Files** セクションの **Use Default File Format** チェック ボックスをオンにして、一覧から形式を選択します。

CDX および CDXML ファイルのプレビュー

CDX ファイルおよび CDXML ファイルは、「簡易表示」サムネイルでプレビューすることができます。


 **注:** Macintosh ユーザーは、ChemDraw 16.0 をインストールする際、必ず *CDQuickLook.qlgenerator* ファイルをクリックして *QuickLook* フォルダにドラッグしてください。

- Windows の場合は、Windows エクスプローラで CDX ファイルまたは CDXML ファイルをクリックすると、サムネイル画像が表示されます。
- Macintosh 環境の場合：
 1. **Finder** をクリックします。
 2. **View** メニューの **Show Preview** を選択します。
 3. CDX ファイルまたは CDXML ファイルを見つけてクリックすると、サムネイル画像が表示されます。

自動保存と自動復元

ChemDraw では、開いているドキュメントを、定期的に保存するように設定できます。また、デフォルトの Enable Autorecovery チェックボックスをオンにしておくと、プログラムがクラッシュした場合に一時ファイルが保存されます。自動保存または自動復元によるコピーの保存場所は、ユーザーが指定できます。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Open/Save** タブをクリックします。

 **注:** Macintosh を使用している場合は、*ChemDrawProfessional/ChemDraw Prime, Preferences...* の順に選択します。

3. **Save Files Every** チェック ボックスをオンにし、時間を分単位で入力します (5 分など)。

時間は、ドキュメントに最初の変更を加えた後から始まります。

名前付き宛先への自動保存または自動復元

ファイルの自動保存または自動復元のパスを選択できます。

Windows の場合 :

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Directories** タブをクリックします。
3. **Use Documents Location** チェックボックスをオンにしてファイルをデフォルトの場所に保存するか、または **Location for AutoSave/Autorecovery Path** フィールドの横にある **Browse** ボタンをクリックして、保存ファイルおよび復元ファイルの場所を指定します。

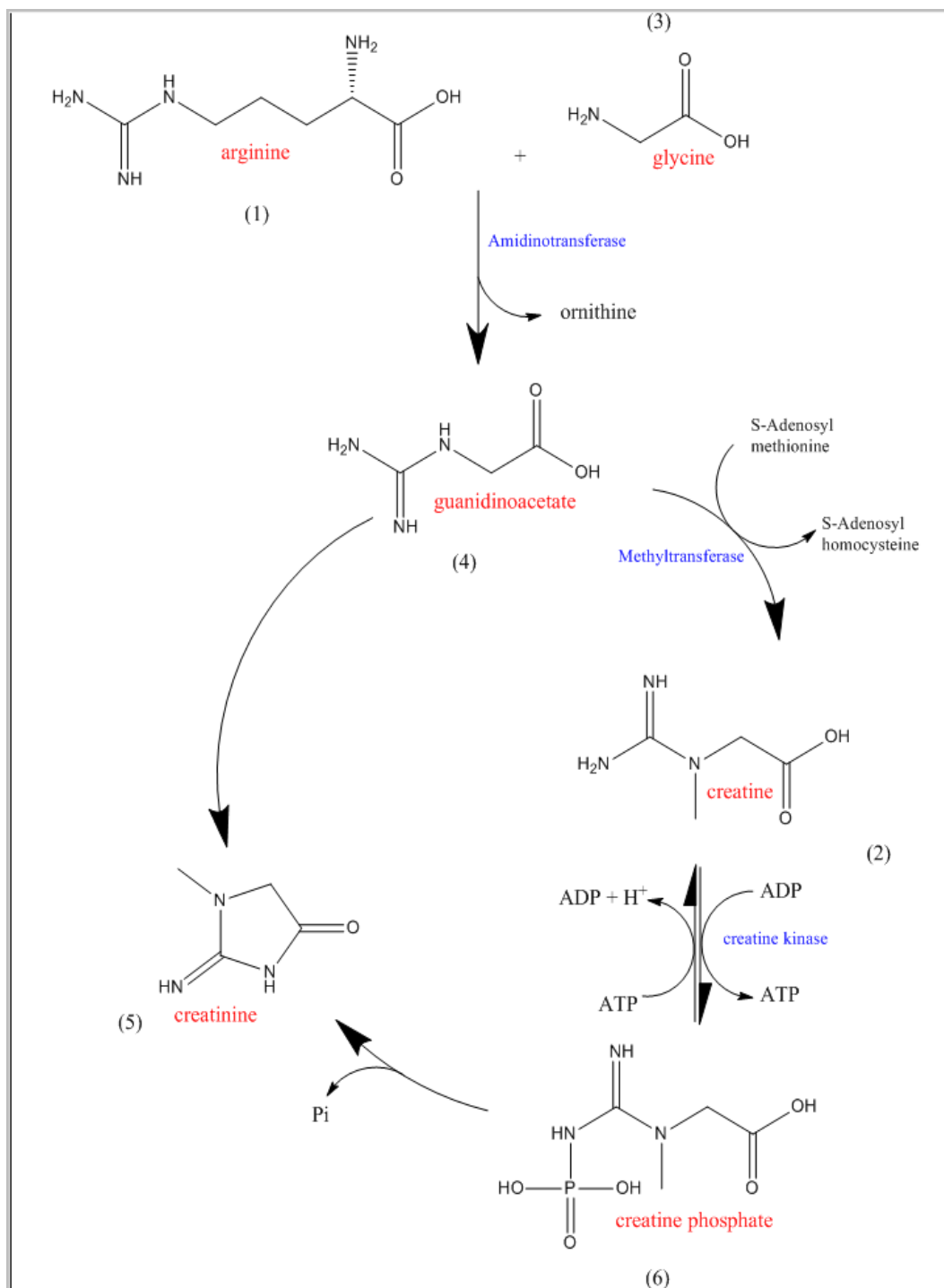
自動番号付け反応スキーム

分子は反応スキームで自動的に順序どおりに番号付けできます。
番号付けスキームを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Settings** を選択し、左側にあるオプションの **Reaction Display** をクリックします。
2. **Numeric Style** ドロップダウン リストから、Roman、Arabic、または Alphanumeric を選択します。また、**Starting From:** フィールドで開始番号も選択できます。
3. **OK** をクリックします。


自動番号付けを使用するには、次の操作を行ってください。

1. 反応スキームを描画します。
2. **Edit** メニューの **Select All** メニュー オプションか、矩形選択ツールまたはなげなわ選択ツールを使用して、反応を選択します。
3. **Structure** メニューの **Autonumber Reaction** を選択します。分子の下にローマ数字またはアラビア数字が表示されます。



自動番号付けを削除するには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Select All** メニュー オプションか、矩形選択ツールまたははげなわ選択ツールを使用して、反応を選択します。
2. **Edit** メニューの **Undo Autonumber Reaction** を選択します。構造式から自動番号付けが削除されます。

 **注:** 自動番号付けを元に戻す場合は、**Edit** メニューの **Redo Autonumber Reaction** を選択します。反応スキームに自動番号付けが再表示されます。

自動番号付けの後に反応番号を消去するには、**Edit** メニューの **Select All** を使用して反応を選択し、**Structure** メニューの **Clear Reaction Numbers** を選択します。

ページ レイアウト

オブジェクトの配置、ページ サイズ、向きなどの要素は、ドキュメントの表示品質に影響を与えます。

描画領域

ドキュメント ウィンドウのサイズが、ページの描画領域と同じでないことがあります。ドキュメント ウィンドウに、描画領域の一部しか表示されないことがあります。

このオプションでは、画面の描画領域を設定することができます。

- Document Settings および Page Setup では、ページ、マージン、ヘッダー、フッター、およびドキュメントのタイプとサイズを変更できます。
- View メニュー オプション: 実寸表示、全体表示、拡大、縮小
- 表示倍率コントロール: 拡大と縮小
- ドラッグして描画領域を拡大します。

ドキュメント タイプ

ドキュメントはページまたはポスターとして設定できます。

ページ. 1 枚以上のシートで構成される単一のドキュメントで、各シートが用紙 1 枚に印刷されます。

ポスター. 1 ページの大きなドキュメントで、必要に合わせて用紙を何枚にも分割して印刷できます。

ページ ドキュメント設定

1 ページ以上のドキュメントを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Document Settings** をクリックします。Document Settings ダイアログが表示されます。
2. Layout タブで **Pages** を選択します。
3. Document Size でページ数を指定します。ページ設定によってページのサイズが決まります。詳細については、[15 ページの "ページ設定"](#)を参照してください。
4. Margin 設定を入力します。マージンの単位は Preferences ダイアログ ボックスで設定します。用紙サイズからマージンを差し引いた寸法が描画領域になります。
5. [14 ページの "ヘッダーとフッター"](#)で説明されている方法でヘッダーとフッターを作成します。
6. OK をクリックします。指定した設定で新しいドキュメントが開きます。

ポスター ドキュメント設定

単一の大きな描画領域を作成すればポスターを作成することができます。この描画は必要に合わせて多くのページに分割して印刷することができます。ドキュメントのサイズと各ページ間の重なり幅を指定すれば、ChemDraw が必要ページ数とマージン幅を算出します。分割印刷したページを貼り合わせてポスターに組むためのガイドとして、各ページの重なり設定を示す位置合わせマークを設定することができます。

ポスターを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Document Settings** をクリックします。
2. Layout タブで、**Poster** をクリックします。

3. Height、Width、およびPage Overlap に値を入力します。
4. 位置合わせマークを印刷 (Print Registration Marks) するかどうかを選択します。
5. ヘッダーとフッターを作成します。
6. OK をクリックします。

ヘッダーとフッター

ポスターでは、ドキュメント全体でヘッダーとフッターは 1 つしか表示されません。ヘッダーとフッターを作成するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの Document Settings をクリックします。
2. Header/Footer カテゴリをクリックします。
3. ヘッダーまたはフッターを表示する位置を、ページ端からの距離で入力します。
4. ヘッダーとフッターに表示するテキストを入力します。
5. その他の情報を表示するには、以下の文字をテキスト ボックスに入力します。
 - ファイル名 &f
 - ページ番号 &p
 - 印刷日 &d
 - 印刷時刻 &t
6. 次に示す適切な文字を入力して、テキストを水平方向に配置します。
 - 中央揃え &c
 - 右揃え &r
 - 左揃え (標準) &l

次に例を示します。

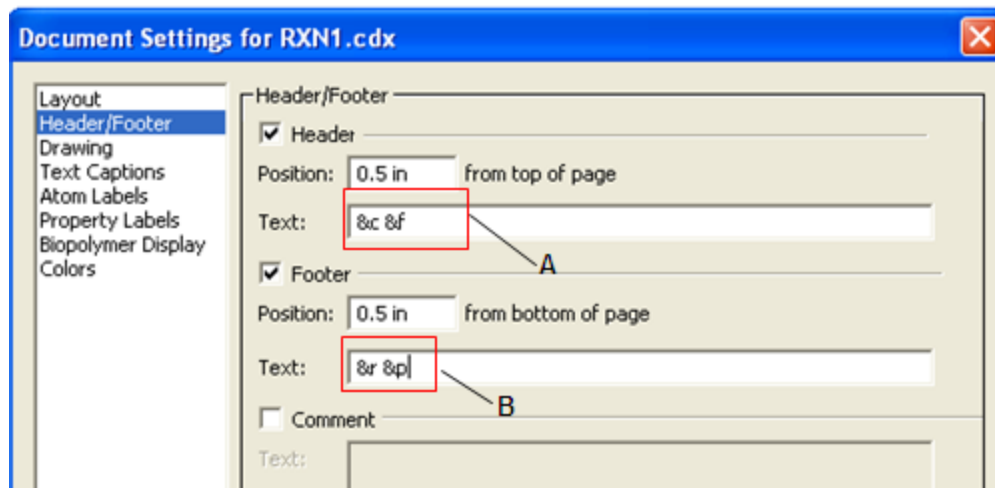


図 3.1: A) ファイル名を中央揃えでヘッダーに表示する変数、B) ページ番号を右揃えでフッターに表示する変数

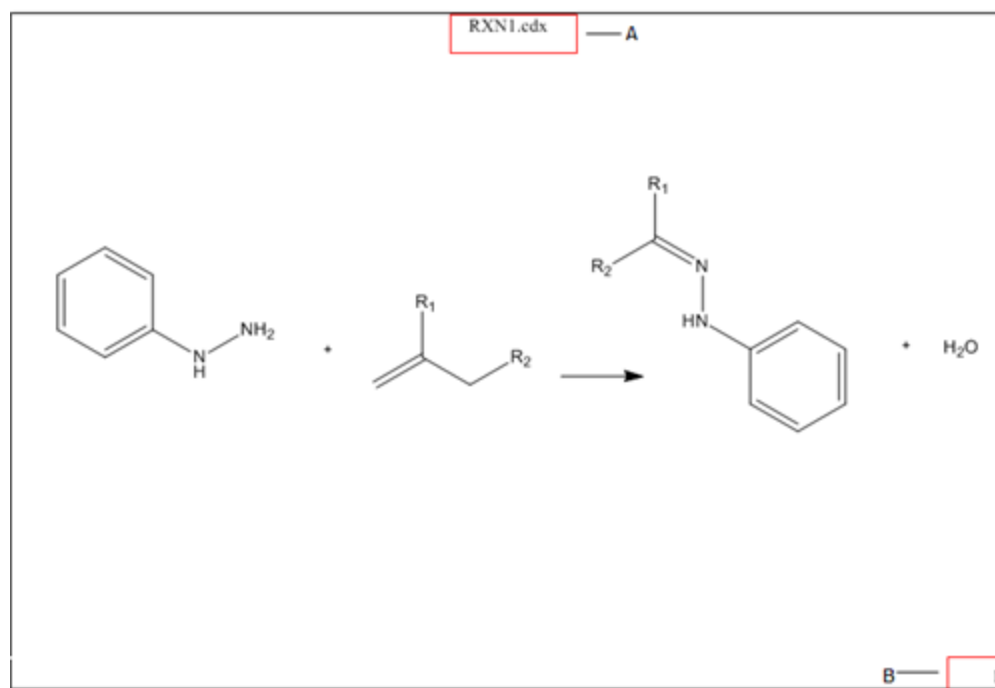


図 3.2: A) ファイル名はヘッダーに中央揃えで表示、B) ページ番号はフッターに右揃えで表示

ページ設定

ページを設定するには、File メニューの **Page Setup** をクリックします。ページ設定のオプションは次のとおりです。

Paper. ドキュメントを印刷する用紙のサイズ、およびプリンタ トレイを選択します。

Orientation. 縦向きまたは横向きを選択します。

Margins. 標準では、マージンは 0.5 インチに設定されます。

Printer. クリックすると、プリンタの選択とオプションの設定を実行できます。Print Options ダイアログ ボックスでプリンタを選択することもできます。

印刷

ChemDraw は、標準的なシステム コマンドを用いてドキュメントを印刷します。選択できるオプションは、ご使用のプリンタによって異なります。詳細は使用するプリンタのマニュアルを参照してください。

一般的に、ドキュメントを印刷するには、次の操作を行います。

1. File メニューの **Page Setup** をクリックします。
2. 使用中のプリンタに合わせて必要な項目を選択し、**OK** をクリックします。
3. File メニューの **Print** をクリックします。

4. Print ダイアログで必要な項目を選択し、OK をクリックします。

エクスペローラからドキュメントを印刷するには、次の操作を行ってください。

1. 印刷するドキュメントを選択します。
2. File メニューの Print をクリックします。ChemDrawが起動し、Print ダイアログが表示されます。
3. Print ダイアログで必要な項目を選択し、OK をクリックします。

印刷オプション

Select Printer. このウィンドウには、コンピュータに接続されている全プリンタの一覧が表示されます。通常使うプリンタを使用することも、他のプリンタを選択することもできます。

Print to File. ドキュメントは、プリンタ設定を含む .prn ファイルとして保存されます。このファイルを使用して、後からドキュメントをプリンタに送信できます。

Find Printer. クリックすると、Select Printer ウィンドウに表示されていないプリンタを関連付けることができます。

Page Range. 印刷するページを選択します。ドキュメントの一部を印刷する場合は、対象の部分を選択し、Print Options ダイアログの **Selection** を選択します。

Number of copies. 標準では、印刷部数は 1 部です。

拡大縮小

プリンタの中には、さまざまな比率（25 ~ 400%）で描画を縮小または拡大できるものがあります。このオプションを設定すると、ドキュメント ウィンドウ内のすべてのオブジェクトとテキストを拡大縮小できます。用紙サイズ、マージン、および印刷の向きに合わせてサイズが変わります。

拡大/縮小のオプションを使用すれば、画像のサイズを保ったまま、描画領域のサイズを変更できます。ドキュメント設定で選択したプリンタと実際に使用するプリンタが異なる場合、実際に使用するプリンタの要求するマージン幅の方が大きいと、描画がドキュメント ウィンドウの縁で欠ける場合があります。その場合には、縮小オプションで、描画のサイズを縮小すれば、ドキュメント ウィンドウに収まるように変更できます。

ページ設定の保存

スタイル シートにページ設定を保存することができます。この設定では、テキスト設定、描画設定、およびカラー パレットも一緒に保存されます。

35mm スライドの境界ガイド

ドキュメントのハードコピーまたはスクリーン キャプチャから 35 mm のスライドを作成する場合、35 mm スライドの形式である 2:3 の比率に合った 7 インチ x 10.5 インチの枠を画面に表示させることができます。これらのガイドは印刷されません。この境界線を表示するには、ページの描画領域は 7 x 10.5 インチ以上必要です。35 mm スライド境界線を表示するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **Building/Display** タブを選択します。

3. **Show 35mm Slide Boundary Guides** チェック ボックスをオンにします。
4. **OK** をクリックします。

Page Setup ダイアログで選択した方向に、2 本の 35 mm スライド境界ガイドが表示されます。このガイドはすべてのドキュメントで表示されるようになります。

描画の確認

拡大率

拡大すると、描画の見た目上の大きさが変更されますが、実際のサイズは変更されません。ドロップダウン リストで値を選択するか、または 1 ~ 999% の範囲の独自の値を入力します。

拡大

1. 描画を拡大するときに表示範囲に残すオブジェクトを選択します。

 **注:** オブジェクトを選択しない場合、最後に描画したオブジェクトが拡大表示の中心になります。

2. 次のオプションを選択します。

- オブジェクトの表示を拡大するには、**View、Magnify** の順に選択します。
- オブジェクトの表示を縮小するには、**View、Reduce** の順に選択します。
- ドキュメントを実寸表示に戻すには、**View、Actual** の順に選択します。
- ドキュメント全体を表示するには、**View、Show Document** の順に選択します。
- 表示倍率を特定の倍率に設定するには、標準ツールバーでパーセント値を選択するか直接入力します (Other は 1 ~ 999 % の範囲で入力します)。

ルーラ

ルーラを使用して、基準点から一定の距離にオブジェクトを配置したり、およそのサイズのオブジェクトを作成できます。ルーラの単位を設定するには、**File** メニューの **Preferences** をクリックし、**General** タブをクリックします。

ルーラの表示

ルーラのオンとオフを切り替えるには、**View** メニューの **Show Rulers** をクリックします。ポインタを移動すると、各ルーラ上にガイドが表示され、ポインタの位置が示されます。

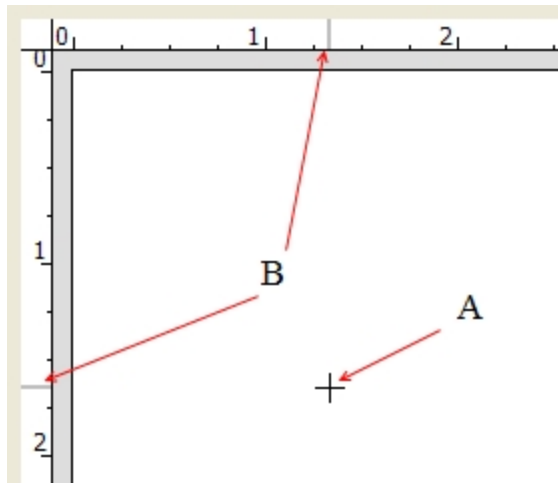


図 3.1: ルーラによる位置表示: A) カーソル、B) カーソルの垂直位置と水平位置を示すルーラ ガイド

オブジェクトを選択すると、各ルーラに 2 つのガイドが表示されます。この 2 組のガイドは、選択されているオブジェクトの高さと幅を示します。

 **注:** ルーラには、ドキュメント設定で選択された単位が使用されます。

クロスヘア

クロスヘアは、オブジェクトの位置を決めるために役立ちます。

クロスヘアのオンとオフを切り替えるには、View メニューの Show Crosshair をクリックします。

クロスヘアでは、オブジェクトを簡単に整列できるように、直交軸上の目盛りを延長したグリッド線が表示されます。

クロスヘアとルーラを同時に表示すると、クロスヘア軸上の目盛りの単位がわかります。

クロスヘアの移動

1. クロスヘアの軸が交差する位置にカーソルを置きます。

カーソルをクロスヘアの中心付近に置くと、カーソルの形状が矢印に変わります。

2. クロスヘアをクリックしてドラッグします。

クロスヘアの移動方向を X 軸方向または Y 軸方向に制限するには、Shift キーを押しながらクロスヘアをドラッグします。

オブジェクトの配置

クロスヘアを使用して 2 つ以上のオブジェクトを整列させるには、次の操作を行ってください。

1. クロスヘアの各軸を移動して、オブジェクトに整列させます。

2. オブジェクトを選択し、クロスヘア軸またはグリッド線に整列する位置までドラッグします。

3. 2 番目のオブジェクトを選択します。

- 2番目のオブジェクトを、クロスヘア軸またはグリッド線までドラッグし、最初のオブジェクトに整列させます。

また、矢印キーを使用できるキーボードでは、選択したオブジェクトを矢印キーで少しずつ移動してクロスヘアと整列させることもできます。1ポイント移動するには、オブジェクトを選択し、矢印キーを押します。10 pt 単位で移動するには、Alt キーを押しながら矢印キーを押します。

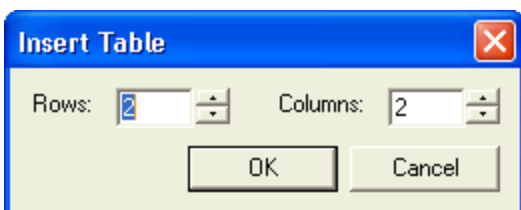
表

表を作成した後、罫線や色を調整することができます。

表の作成

表を作成するには、次の操作を行ってください。


- メイン ツール ツールバーの表ツールを選択します。
- 次のいずれかの操作を行ってください。
 - ドキュメント ウィンドウ内でクリックしてドラッグし、表を作成します。表には、行と列が2つずつ含まれます。
 - ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。Insert Table ダイアログで行数と列数を入力し、OK をクリックします。



ドキュメント ウィンドウに表が表示されます。

表のサイズ変更

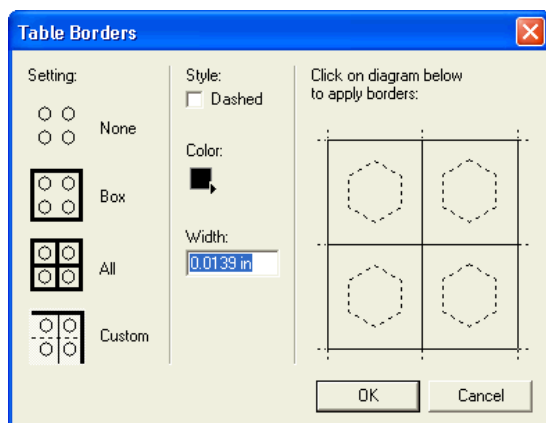
行または列のセルのサイズを変更するには、表ツールで罫線をクリックし、ドラッグします。

-  **注:** 表内のすべての行と列のサイズを均等に変更するには、表の上および左の罫線をクリックし、ドラッグします。

罫線のカスタマイズ

表の罫線を変更するには、次の操作を行ってください。

- 選択した表ツールで、罫線を右クリック します。
- コンテキスト メニューの **Borders** をクリック します。Table Borders ダイアログが表示 されます。



3. Setting で、罫線の設定を選択します。
4. Style で、適用する罫線のスタイル、色、および幅を選択します。
5. カスタム罫線の場合は、表の図で必要な罫線を選択します。
6. **OK** をクリックします。

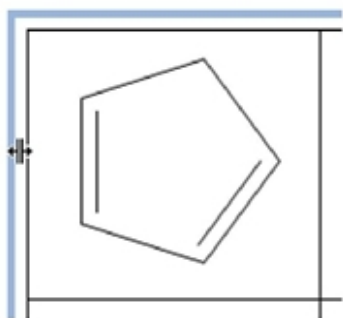
表ツールには、セルの内容を整列するためのコマンドがあります。セルに合わせる、セルの追加、削除、およびクリアなどです。通常、表を変更するには、右または下の罫線进行操作します。行または列を変更するには、右または上の罫線进行操作します。

セルのサイズをその内容に合わせて変更するには、次の操作を行ってください。

1. 罫線上で右クリックします。
2. **Size To Fit Contents** を選択します。セルのサイズが内容に合わせて変更されます。

表の行または列を追加または削除するには、次の操作を行ってください。

1. 行または列を追加または削除する場所の上または左の罫線をポイントします。罫線が次のように表示されます。



2. 罫線を右クリックし、コンテキストメニューから適切なオプションを選択します。

列または行内のすべてのオブジェクトを整列するには、表ツールで上または左の罫線をポイントし、右クリックします。次に、コンテキストメニューの **Align** コマンドをポイントし、目的の整列方法を選択します。セルの中身が移動し、セルに対して固定された位置に整列します。標準では整列設定なしです。

表に含まれるすべてのオブジェクトを整列するには、下または右の罫線をポイントし、右クリックします。次に、Align をポイントし、目的の整列方法を選択します。

テキスト ツールの使用

ChemDraw では、テキスト ツールと Tab キーを使用して、テキストの表を作成できます。

Compound	Formula	Mol. Wt.
Benzene	C ₆ H ₆	78.11
Toluene	C ₇ H ₈	92.14

最初の行を作成し表の列を設定するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを使用して、ドキュメント ウィンドウ内の表を開始する位置をクリックします。
2. 文字列を入力します。
3. Tab キーを押します。2 番目の文字列のテキスト ボックスが表示されます。
4. 2 番目の文字列を入力します。2 番目の列が、20 ポイント右に表示されます。
5. 3 番目の列を作成するには、もう一度 Tab キーを押します。以降、同様にします。

 **注:** 各列に設定するスタイル、フォントおよびサイズは、後に続くすべての行に適用されます。

タイトルの編集時に列間隔を 1 ポイントずつ変更するには、次の操作を行ってください。

1. タイトルを選択します。
2. 矢印キーを使用してタイトルを移動します。

オブジェクトの移動の詳細については、[94 ページの“オブジェクトの移動”](#)を参照してください。

3. 前と同じ間隔でさらにもう 1 列追加するには、テキスト ツールを選択して Tab キーを押します。3 番目のタイトルのテキスト ボックスが表示されます。

新しい行の作成

最初の行と同じに配列された新しい行を始めるには、行の末尾で Tab キーを 2 回押します。

- 1 行目の最初のタイトルの下に、ちょうど 20 ポイントの位置に配置された文字列テキスト ボックスが表示されます。

表を作成する際に行間隔を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 行のすべてのタイトルを選択します。
2. 矢印キーを使用してタイトルを移動します。

オブジェクトの移動の詳細については、[94 ページの“オブジェクトの移動”](#)を参照してください。

行または列の間隔の調整

1. 選択ツールで行または列のすべての文字列を選択します。
2. Shift キーを押しながらタイトルをドラッグします。

移動は X 軸または Y 軸方向に制限されるため、行または列の整列は維持されます。

新しい行の挿入

行を挿入するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを選択し、文字列の行を選択します。
2. 選択した行を Shift キーを押しながらドラッグします。
3. Shift キーにより Y 軸方向の動きが制限され、列の配置が保たれます。
4. すぐ上の行または作成したスペースの下にある最初のタイトルを選択します。
5. Control + Shift + ドラッグで文字列をコピーし、作成した空のスペースに配置します。
6. コピーしたタイトルを配置することで、挿入される行の位置が決まります。

挿入した行に文字列を入力するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールをクリックして、挿入した行の最初のタイトルを選択します。
2. 新しいテキストを入力します。
3. Tab キーを押して、挿入した行の 2 番目の文字列に移動します。以降、同様に行います。

オプションと設定

ChemDraw は、Preferences および Document Settings ダイアログ ボックスの各種オプションの設定により、作業上の必要性や操作方法を好みに合わせてカスタマイズできます。

Preferences では、開いているドキュメントすべてに適用される特定のオプションの標準の動作を変更することができます。ドキュメント設定で指定した変更は、ドキュメント内にも適用可能で、アプリケーション全体には適用できません。オブジェクト設定で指定した変更は、選択したオブジェクトだけに有効です。

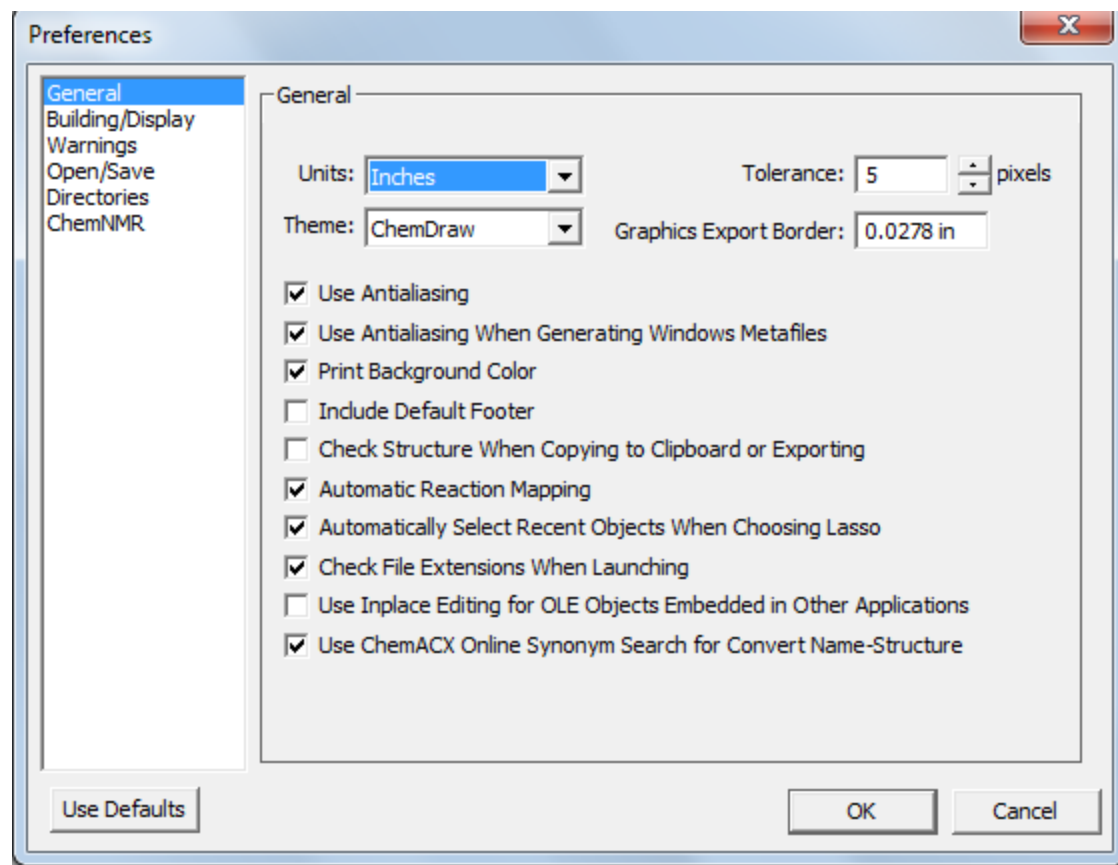
詳細については、この章の次のトピックを参照してください。

- [プリファレンスの設定](#)
- [ツールバーのカスタマイズ](#)
- [ドキュメント設定およびオブジェクト設定](#)
- [ホットキーのカスタマイズ](#)
- [色の使用](#)

プリファレンスの設定

プリファレンスの設定は、作業対象のドキュメントの種類に関係なく、ChemDraw の動作に反映されます。

1. Preferences ダイアログ ボックスを開くには、File メニューの **Preferences** をクリックします。



2. 標準の設定を復元するには、**Use Defaults** をクリックします。

テーマ オプション

テーマは、ChemDraw GUI の外観を定義したものです（機能には影響を与えません）。標準では、ChemDraw は ChemDraw テーマを表示します。ChemDraw Large テーマでは、アイコンが大きく表示されるため読みやすくなりますが、画面上のアイコンの表示スペースが広がることになります。

テーマを変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックし、**General** タブをクリックします。
2. **Theme** ドロップダウン リストから、適用するテーマを選択します。
3. **OK** をクリックします。

ドキュメントの場所の標準ディレクトリ

ファイルを開く操作の実行時に、既定のファイル ディレクトリを設定できます。

標準のファイル ディレクトリを設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Directories** タブをクリックします。
3. **Use Documents Location** チェック ボックスをオンにし、使用する保存場所を入力するか、参照から保存場所を指定します。

標準の保存ファイル形式

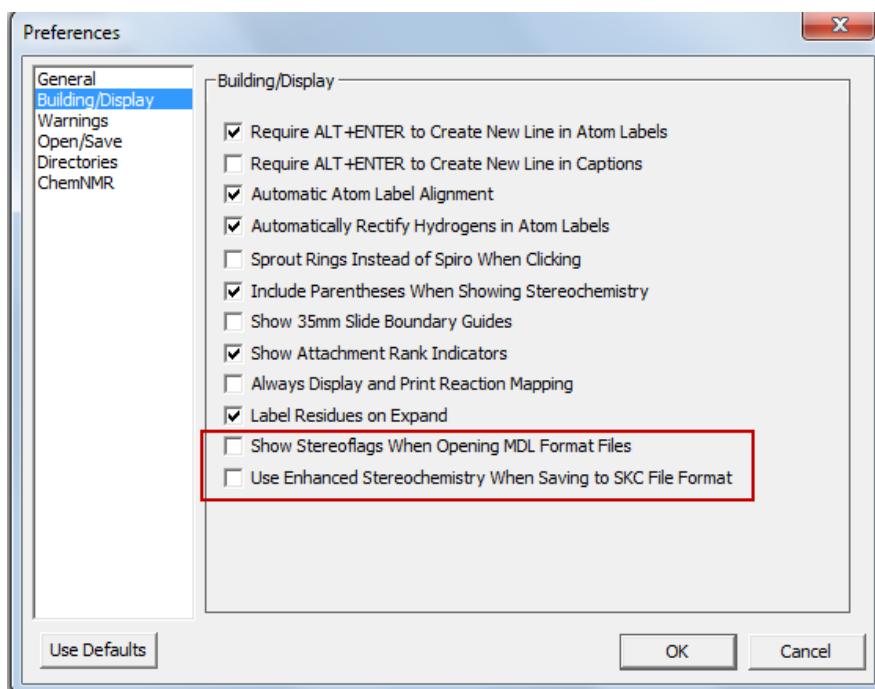
標準のファイル形式を **Open** ダイアログ ボックスで設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Open/Save** タブをクリックします。
3. **Opening Files** セクションの **Use Default File Format** をクリックし、一覧からファイル形式を選択します。

立体フラグの構成オプション

絶対/相対/ラセミの立体化学設定を持つ MDL 形式ファイルを開くときに、個々の分子の立体中心に立体フラグ ラベルを表示するのではなく、1 つの汎用立体フラグ ラベルを表示するには、Preferences ダイアログの **Building/Display** タブにある **Show Stereoflags When Opening MDL Format Files** オプションをオンにします。

SKC 形式で保存するときに Enhanced Stereochemistry の設定を保存するには、Preferences ダイアログの **Building/Display** タブにある **Use Enhanced Stereochemistry When Saving to SKC File Format** オプションをオンにします。



標準のツールの設定

ドキュメントを開いたときに選択されるツールを指定できます。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Open/Save** タブをクリックします。
3. **Opening Files** でツールを選択します。

改行およびテキスト ボックスの閉じ方

タイトルのテキスト ボックスで新しい行を作成するには、Enter キーまたは Return キーを押します。原子ラベルに新しい行を作成するには、Alt + Enter キーを押します。テキストボックスを閉じるには、テキストボックスの外側をクリックするか、または別のツールをクリックします。

標準値を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **Building/Display** タブをクリックし、適切なオプションを選択して次の標準値を変更します。
 - 原子ラベル テキスト - Alt + Enter を使用して原子ラベルに新しい行を作成。
 - タイトル テキスト - Alt + Enter を使用して新しい行を作成。
3. **OK** をクリックします。

強調表示ボックスの影響範囲

影響範囲では、強調表示ボックスのサイズと、強調表示ボックスを表示するために必要なカーソル/オブジェクト間の距離を設定します。影響範囲の標準の設定は 5 ピクセルです。この設定では、ポインタの位置が結合オブ

ジェクトの一番近い点から 5 ピクセル以内の範囲にあれば、結合上に強調表示ボックスが表示されます。影響範囲を設定するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **General** タブで、影響範囲の値を選択または入力します。この変更はすべてのドキュメントに影響します。

ChemDraw Items フォルダ

このフォルダには、詳細設定ファイル、ホットキー ファイル、ニックネーム、同位体ファイル、スクリプト、および総称ニックネーム ファイルが格納されています。また、テンプレート ドキュメントとテンプレート ショナリ パッドも、このフォルダに含まれています。フォルダは複数保存することが可能なため、ニックネームや標準テンプレートなどの個人ファイルを企業内で管理する際に便利です。

ChemDraw Items フォルダの場所は、オペレーティング システムによって異なります。ChemOffice 2016 の使用時は、このフォルダは次の場所にあります。

C:\ProgramData\PerkinElmer\Informatics\ChemOffice2016\ChemDraw\ChemDraw Items

ChemDraw Items フォルダのパスを追加するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **Directories** タブをクリックします。
3. **Add New** をクリックし、場所を選択して、**OK** をクリックします。新しいパスが一覧に追加されます。
4. 検索の順番を並べ替えるには、**Move Up** ボタンおよび **Move Down** ボタンをクリックします。
5. パスを削除するには、**Remove** をクリックします。追加したすべてのパスを削除するには、**Default Paths** をクリックします。

標準のスタイル

ChemDraw では、標準のスタイルはスタイル シートとして保存されます。ChemDraw の起動時には、前回使用したスタイル シートが標準的に開きます。標準とは別のファイルを選択すると、そのファイルが標準設定になります。

別のファイルを選択しても標準のスタイルが変更されないように設定することもできます。それには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **Open/Save** タブをクリックし、**Browse** をクリックして、標準として設定するスタイル シートを指定します。
3. **New from Any Style Sheet Changes Default** をオフにします。
4. **OK** をクリックします。

標準のスタイルを確認するには、**File** メニューをクリックします。**New** メニューの項目にスタイル シートの名前が表示されます。

カスタマイズしたスタイルの保存

作成される新しいドキュメントはどれも、スタイル シート ファイルを使用してドキュメント設定を行います。これらのファイルには、あらかじめ定義されたオブジェクトを含めることも可能です。新しいドキュメントを作成

する際には、実際にはスタイル シートの無題のコピーを作成することになります。このコピーに変更を加えても、その変更の影響が元のファイルに及ぶことはありません。

これらのドキュメントを CDS ファイルとして保存すると、カスタマイズした設定が格納されたスタイル シートを作成することができます。CDS ファイルを ChemDraw Items フォルダに保存すると、そのファイルは (File メニュー下の) Open Templates メニューに表示されます。

ドキュメント設定をスタイル シートとして保存するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Save As** をクリックします。名前を付けて保存ダイアログ ボックスが表示されます。
2. ファイルに名前を付け、タイプ (OS X:形式) を CD Style Sheet (cds) に変更します。
3. **Save** をクリックします。

ツールバーのカスタマイズ

ツールバーの外観と配置は 1 組の XML ファイルで定義されます。XML ファイルの編集に習熟しているユーザーは、実際の作業で使いやすいようにツールバーに変更を加えることができます。ボタンの削除、名前変更、サイズ変更、ボタン アイコンの変更、または別のツールバーへの移動を実現できます。ツールバーを作成または削除することもできます。

ツールバー スキーマ


Toolbars.xsd ファイルには、すべてのツールバーのスキーマ定義が記述されています。このスキーマ定義には、ツールバー、ポップアップ テキスト、およびステータス バー テキストの定義が含まれています (具体的な設定内容は含まれていません)。

ツールバー XML ファイル

C:\Programdata\PerkinElmer\Informatics\ChemOffice2016\ChemDraw\GUI\Common\XML\Toolbars にある Toolbars ディレクトリには、各種ツールバーの xml ファイルが格納されているサブディレクトリが含まれています。実際に格納されている xml ファイルは、それらのファイルが使用されているスキンの種類によって異なります。ツールバーのカスタマイズは、ほとんどの場合、このディレクトリの xml ファイルを編集することによって行います。XML ファイルを起動すると、XML ファイルは自らをオンラインで保存されている Toolbars.xsd ファイルと比較検証します。

XML ファイルの編集

任意の xml またはテキスト エディタを使用してファイルを編集できます。ファイルの保存後には、ChemDraw をいったん終了して再起動する必要があります。再起動によって、設定の変更が有効になります。編集する前に、すべての XML ファイルのバックアップを作成してください。

 **注:** アイコンとして使用できる画像ファイルは、png 形式のファイルのみです。

ドキュメント設定およびオブジェクト設定

ドキュメント設定およびオブジェクト設定を、現在のドキュメントに適用できます。ドキュメント設定で指定した変更は、ドキュメント内のみ適用可能で、アプリケーション全体には適用できません。オブジェクト設定で指定

した変更は、選択したオブジェクトだけに有効です。

設定には、以下のものが含まれます。

描画設定. 結合の描画に使用する固定長などの描画関連オプションを設定します。

タイトルとラベルのテキスト設定. 原子ラベルとタイトルで使用するフォントなどのテキスト関連オプションを設定します。

色設定. オブジェクトやドキュメントの背景で使用できる色を設定します。

印刷/ページ設定. 使用するページ サイズやフッターに表示されるテキストなどのオプションを設定します。

ドキュメントの設定は、次の方法で行います。

- Document Settings ダイアログを用いて、そのドキュメント全体に対する設定をカスタマイズします。
- 既存のドキュメントを利用し、現在編集中のドキュメント全体に対して設定を適用します。
- 現在編集中のドキュメントの中の選択したオブジェクトに対する設定に、既存のドキュメントの設定を適用します。

描画設定

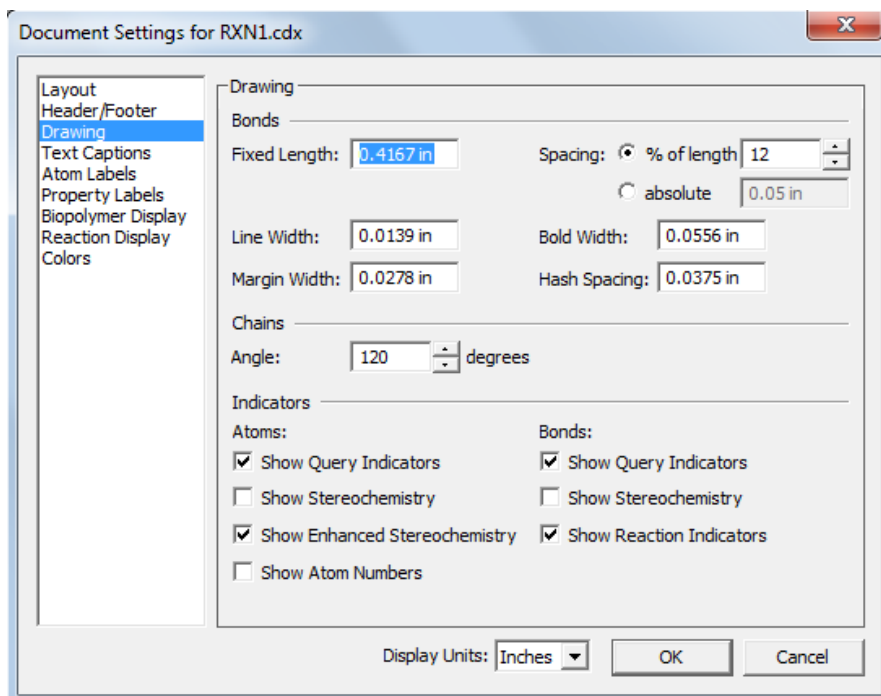
描画設定は、結合やその他のオブジェクトの描画方法に影響を与えます。描画設定は、以下の方法により、ドキュメント全体に対して、あるいは特定のオブジェクトに対して指定することができます。

- ドキュメント全体の設定を行うには、File メニューの **Document Settings** をクリックし、**Drawing** カテゴリを選択します。
- オブジェクトに対する設定には、**Object Settings** ダイアログ ボックスを使用します。

描画設定での変更は、アクティブなドキュメント ウィンドウに対してのみ反映されます。描画設定は、スタイルシートに保存できます。

現在のドキュメントに他のドキュメントの設定を適用するには、File メニューの **Apply Document Settings from** サブメニューを使用します。

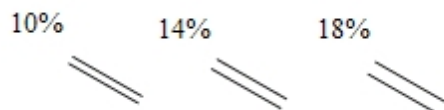
Drawing カテゴリでは、さまざまなオプションを選択できます。



Fixed Length. 結合を指定の長さで常に描画します。Clean Up Structure コマンドを使用するときの望ましい結合長も調整されます。64 ページの“固定長結合の描画”と 134 ページの“結合点”を参照してください。

Spacing. 二重結合または三重結合の線の間隔を設定します。この間隔は次のいずれかに設定します。

- 結合長に対する割合 (1 ~ 100%)。結合が固定長ではない場合にこの設定を使用すると、間隔を長さに比例させることができます。



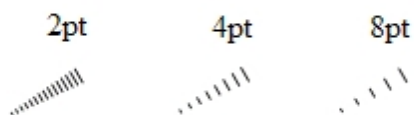
- 使用しているドキュメントで指定した単位での絶対値。

Line Width. 描画中のすべての結合、線、矢先の幅を設定します。

Bold Width. 太線結合とウェッジ結合の描画に使用する線の幅を設定します。太線幅の設定値は線幅の設定値よりも大きくする必要があります。ウェッジの端は太線幅の 1.5 倍になります。

Margin Width. つながっている結合の一部を消去してしまうすべての原子ラベルの周囲の間隔を変更します。結合交差内の手前の結合の周囲の白い空白も、マージン幅で決定されます。63 ページの“結合交差”を参照してください。

Hash Spacing. ハッシュ ウェッジ結合、ハッシュ結合、点線結合、点線矢印や点線曲線の描画に用いるハッシュの間隔を設定します。



Chain Angle. 非環式鎖ツールで作成する結合角や Clean Up Structure コマンドで最適化する結合角 (1° ~ 179°) を設定します。79 ページの “鎖” と 134 ページの “結合点” を参照してください。

単位. Object Settings ダイアログ ボックスで使用する単位を、センチメートル、インチ、ポイント、またはパイカで設定します。

Indicators Atoms Bonds. どの標識を表示するかを設定します。136 ページの “原子の番号付け” を参照してください。

ドキュメントの設定

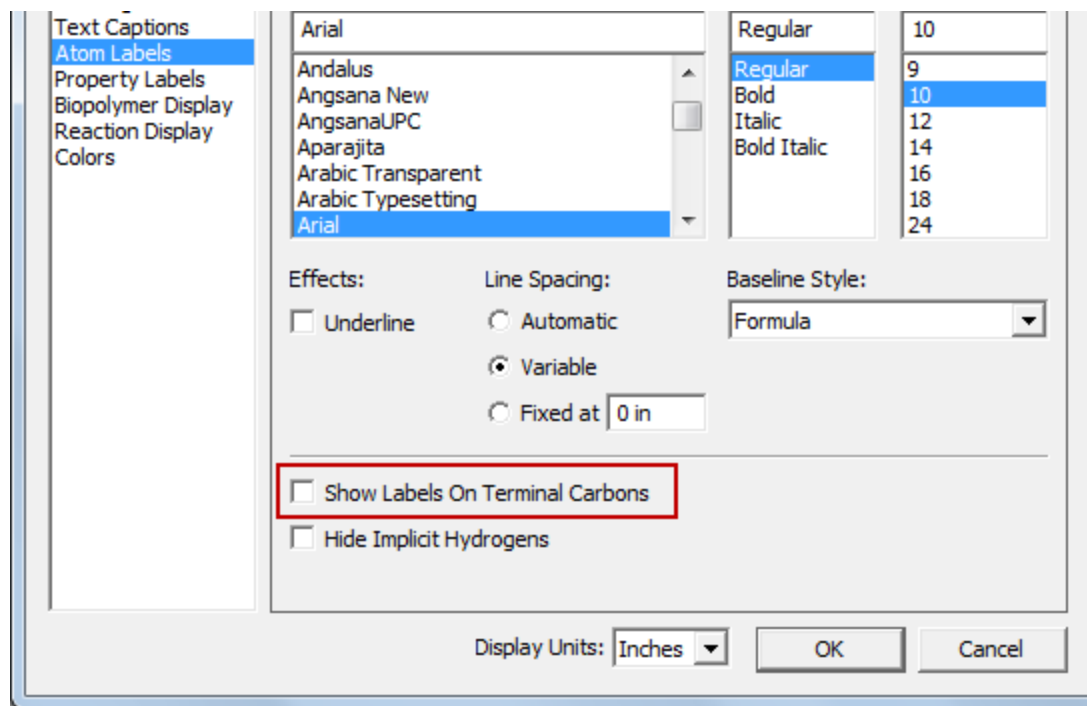
1. File メニューの **Document Settings** をクリックします。
2. **Drawing** カテゴリをクリックし、設定を指定します。
3. **OK** をクリックします。

末端炭素のラベル

標準では、ChemDraw は末端炭素を表示しません。

末端炭素のラベルを表示するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Document Settings** をクリックします。
2. **Atom Labels** カテゴリを選択します。
3. **Show Labels On Terminal Carbons** を選択します。次の図を参照してください。



オブジェクトの設定

選択したオブジェクトに対して描画設定を指定するには、次の操作を行ってください。

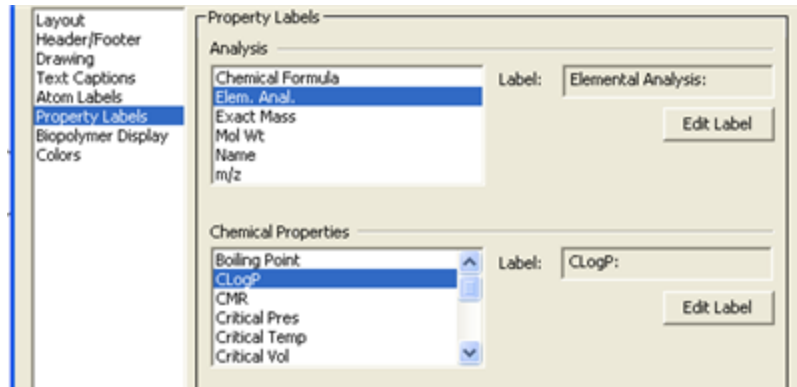
1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Object Settings** をクリックします。
3. 設定を指定した後、**OK** をクリックします。選択した設定は、選択したオブジェクトに対してのみ適用されます。

Analysis および Chemical Properties

これらの基本構造属性データは、描画内に貼り付けることができます。必要に応じて、これらの属性の名前を変更することもできます。たとえば、ページ上の領域を節約する目的で、“Molecular Weight” という名前を “MW” に変更したい場合などです。この設定の変更は、描画内に貼り付けられる属性の名前のみ適用されます。Analysis ダイアログ ボックスおよび Chemical Properties ダイアログ ボックスに表示される名前は、設定変更の影響を受けません。

属性の表示名を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Settings** をクリックします。
2. **Property Labels** カテゴリをクリックします。次の図を参照してください。



3. Analysis ウィンドウで、名前を変更する対象の属性を選択します。
4. **Edit Label** をクリックし、**Edit Label** テキスト ボックスに新しい名前を入力します。OK をクリックします。
5. 新しい名前を入力し、OK をクリックします。
6. 他の属性についても、手順 4 を実行します。
7. OK をクリックします。

タイトルの書式設定

テキスト設定は、現在作成中のドキュメントのタイトルおよび原子ラベルの描画方法および書式設定に影響します。

書式設定オプションには以下が含まれます。

- フォント (フォントタイプ)
- サイズ (フォントサイズ)
- スタイル (フォントとベースラインのスタイル)
- 行間隔
- 配置

フォント パラメータの設定

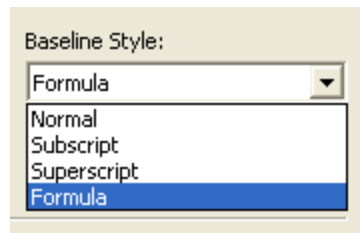
Document Settings ダイアログでテキスト形式を変更すると、現在作成中のドキュメントのみに反映されます。個々のオブジェクトに対する設定の変更は、Object Settings ダイアログ、Text メニュー、またはスタイル ツールバーを使用して行うこともできます。

タイトルおよび原子ラベル用のドキュメントのテキスト設定を編集するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Document Settings** をクリックします。
2. **Document Settings** ダイアログで、**Text Captions** または **Atom Labels** をクリックします。
3. 必要に応じて設定を変更します。オプションについては、次のセクションで説明します。
4. **OK** をクリックします。書式設定は現在作成中のドキュメントに適用されます。

ベースラインのスタイルの設定

ベースラインには次のスタイルを指定できます。



Normal. 通常のテキストに使用します。

Superscript. テキスト サイズが約 25% 縮小され、ベースラインが上がります。

Subscript. テキスト サイズが約 25% 縮小され、ベースラインが下がります。

Formula. 一般的な化学式が正しく表示されるように書式設定します。数字は下付き文字になります。ただし、大文字は手動で指定する必要があります。

また、1 つのタイトルの複数の部分にそれぞれ異なるスタイルを適用することもできます。

スタイル標識

ドキュメント ウィンドウ内の任意のテキストを選択し、**Text** メニューの **Style** をクリックすると、そのテキストに適用されているスタイルを確認することができます。チェック マークは、選択したすべてのテキストにそのスタイルが適用されていることを示します。ハイフンは、選択したテキストの一部にそのスタイルが適用されていることを示します。

行間隔の指定

次の種類の行間隔を指定できます。

Automatic (自動). タイトル中で高さが最大の文字にテキスト全体の行間隔を合わせます。行間隔の標準値です。

Variable (可変). 各行の最も背の高い文字および最も低いデセンダ（ベースラインより下に伸びる部分）に合わせて、行ごとに間隔を設定します。

Fixed. 指定した一定の行間隔をテキスト全体で使用します。

テキストの配置

タイトルや原子ラベルは、必要に応じてテキストを揃えるように配置することができます。利用できるオプションは、配置するのがタイトルか原子ラベルかによって異なります。設定の適用は、Object Settings ダイアログで行います。

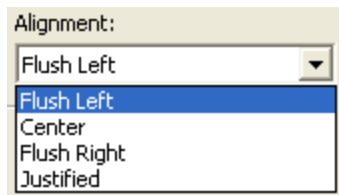
Object Settings ダイアログを開くには、次の操作を行ってください。

1. タイトルまたは原子ラベルを選択します。
2. **Object** メニューの **Object Settings** をクリックします。Object Settings ダイアログが表示されます。

文字列

タイトルの整列および行間隔は Object Settings ダイアログの Text Captions タブで指定します。1 つのタイトル内のテキストは、すべて同じ文字配置と行間隔になります。

文字配置には 4 通りあります。



Flush Left. タイトルのテキストを左に揃えます。


中央揃え. タイトルのテキストを中央に揃えます。


Flush Right. タイトルのテキストを右に揃えます。

Justified. タイトルのテキストの両端を揃えます。

原子ラベル

Centered (中央揃え配置)、**Flush Left** (左揃え配置)、**Flush Right** (右揃え配置)、**Stacked Above** (積み重ね配置)、または **Automatic** (自動配置) の文字配置を適切に使用すると、結合や他の原子ラベルに重なることなく、化学構造式の中の原子と官能基を指定するラベルを作成できます。

 **注:** *Stacked Above* (積み重ね配置) の文字配置を使用する場合、Alt + Enter キーを使用して文字列を上から下に入力し、新しい行に進みます。ラベルを入力した後に文字配置を変更すると、警告が表示されることがあります。

 **注:** IUPAC ガイドラインの通り、結合が左向きの原子ラベルで *Flush Right* (右揃え配置) を使用した場合、その結合はラベルの一番右の原子に付加されます (たとえば、 F_3C- は炭素に、 CF_3- はいずれかのフッ素に付加されます。後者の場合は、フッ素の原子価が矛盾しているため、赤い警告ボックスが表示されることがあります)。例外は、水素が追加的な原子であり、 CH_3- および H_3C- が両方とも炭素に付加される場合です。ChemDraw では、水素は他の元素とは扱いが異なるからです。なるべく自動文字配置 (下記参照) を使用して、ラベルが目的の化学的に正しいラベルを正確に反映するようにしてください。

以下は原子ラベルの文字配置の例です。

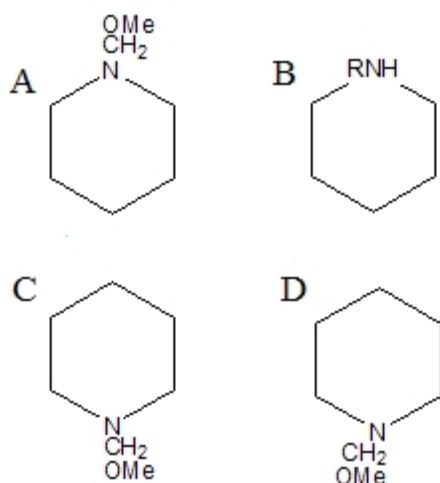


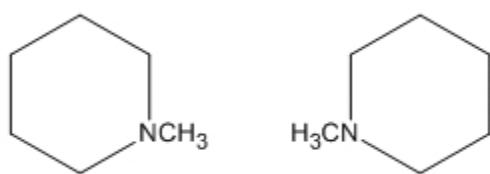
図 4.1: 原子ラベルの文字配置。A) 積み重ね配置、B) 中央揃え配置、C) 左揃え配置、D) 右揃え配置

自動文字配置

原子ラベルの自動文字配置を指定すると、ChemDraw では、ラベルが複数の文字列に分割されます。文字列は、大文字の後ろに数字または小文字が続く形式になっています。最初の文字列が原子に結び付けられ、残りのラベルは、化学構造式のその他の部分に重ならないように配置されます。

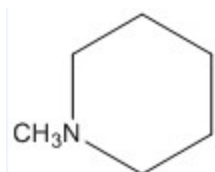
たとえば、Nメチルピペリジンを作成するには、シクロヘキサン内の原子に「NCH₃」のラベルを付けます。このラベルには「N」、「C」および「H₃」という 3 つの文字列があります。C3 にラベルを付けると、文字列は左から右に配置されます。これは原子の左側に結合があるためです。

一方、C5 にラベルを付けると、結合が原子の右側にあるので、文字列は右から左に表示されます。



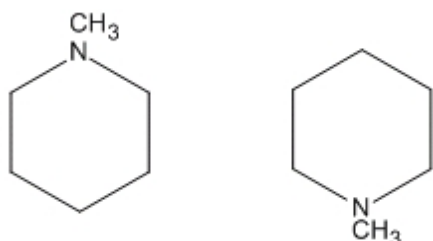
ニックネームを定義することにより、多原子ラベル全体を 1 つの文字列として扱うことが可能です。こうしておけば、構造式の左側にラベルを付けたときに、ラベルが反転することはありません。

たとえば、「CH₃」というニックネームを定義して、C5 にラベルとニックネーム「NCH₃」を組み合わせると、最終的なラベルの配置は、「H₃CN」ではなく「CH₃N」となります。この場合はニックネーム「CH₃」が文字列です。



C1 にラベルを付けると、原子の下に結合があるため、2 番目と 3 番目の文字列は最初の文字列の上に配置されます。

C4 にラベルを付けると、2 番目と 3 番目の文字列は最初の文字列の下に配置されます。



標準の書式の変更

新規のタイトルまたは原子ラベルではすべて、フォント、フォント サイズ、およびスタイルについてタイトルと原子ラベルの標準のドキュメント設定が使用されています。

この書式は以下の操作により変更できます。

- 現在作成中のドキュメントで、以降の描画に対するドキュメント設定を変更します。
- 文字を入力する前に Text メニューまたはツールバーから個々のタイトルやラベルに対して新たな書式を選択します。
- 入力した後、テキスト選択し個別のラベルに対して新規の書式を適用します。

新規テキストのテキスト設定

現在作成中のドキュメントの新規タイトルおよび原子ラベルに対してテキスト設定をするには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Document Settings** をクリックします。
2. Document Settings ダイアログで、**Text Captions** または **Atom Labels** をクリックします。
3. 適切なオプションを選択します。
4. **OK** をクリックします。

これらの設定は、現在作業中のドキュメントで新たに作成するタイトルまたは原子ラベルのすべてに影響します。同じ設定を他の新規ドキュメントでも使用する場合は、スタイル シートに保存します。

. 詳細については、27 ページの “ドキュメント設定およびオブジェクト設定” を参照してください。

タイトルまたはラベルの書式設定

個々のタイトルや原子ラベルに対して、入力する前にテキスト書式を設定することができます。書式の変更は現在作成中のテキストにのみ適用されます。

入力前にテキスト書式を設定するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを選択し、ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
2. テキスト書式を設定するには、次のいずれかの操作を行います。
 - Text、Font、Style または Size の順に選択します。
 - スタイル ツールバーを使用して書式オプションを設定します。
3. テキスト ボックス内に、テキストを入力します。

この書式は入力したテキストに対して適用されます。引き続き入力するテキストでは、標準のドキュメント設定が使用されます。

テキスト設定の変更

選択したタイトルや原子ラベルに対するテキスト設定を変更することができます。実施する設定を、選択したテキストに対して適用するのか、引き続き入力するテキストのすべてに対して適用するのか選択することができます。選択したタイトルや原子ラベルに対するテキスト設定を変更するには、次の操作を行ってください。

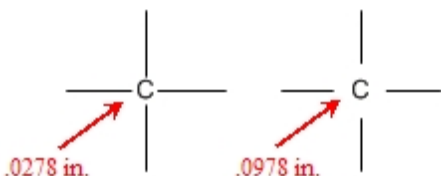
1. 選択ツールを使用して、変更するテキストを選択します。
2. Text メニューの適切なオプションを設定します。

タイトルの一部分を変更するには、変更対象にする部分をテキスト ツールで選択します。選択したテキストのフォントおよびサイズを指定するには、次のいずれかの操作を行います。

- Text メニューからフォントおよびサイズを選択します。
- 右クリックし、コンテキスト メニューからフォントおよびサイズを選びます。
- スタイル ツールバーのドロップダウン リストから、フォントおよびフォント サイズを選択します。

文字列余白の指定

結合点の一部が隠れるように原子ラベルの周りの空白領域を調整できます。



空白領域を調整するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Settings** をクリックします。Document Settings ダイアログ ボックスが表示されます。
2. **Drawing** タブをクリックします。
3. 新しい **Margin Width** の値を入力します。
4. **OK** をクリックします。

この文字列余白は、現在のドキュメントで以降の描画のすべてに適用されます。

他のドキュメントの設定を適用

他のドキュメントに含まれているドキュメント設定をアクティブ ウィンドウに適用するには、**File** メニューの **Apply Document Settings from** をポイントし、設定適用元のドキュメントを選択します。アクティブなドキュメント ウィンドウの設定が、選んだスタイルシートの設定に変更されます。

 **注:** 設定は、現在のドキュメントのみに適用されます。ドキュメントを開いたときに常に適用される標準の設定にするには、**File** メニューの **Open Style Sheets** をクリックします。

メニューの一覧にないドキュメントやスタイルから設定を適用するには、次の操作を行ってください。

1. **File**、**Apply Document Settings from**、**Other** の順にクリックします。Select document ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 適切なフォルダを開いて、ドキュメントまたはスタイル シートを選択します。
3. **Open** をクリックします。

オブジェクト設定の適用

別のドキュメントの設定を、現在編集中のドキュメントの選択したオブジェクトに適用することができます。選択した設定は、選択したオブジェクトに対して、あるいは現在編集中のドキュメントの新規オブジェクトすべてに対しても適用できます。

オブジェクト設定を適用するには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Apply Object Settings from** をポイントし、設定適用元のドキュメントを選択します。ダイアログ ボックスが表示されます。
3. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - 選択したオブジェクトのみに設定を適用する場合は、**No** をクリックします。
 - 選択したオブジェクトだけでなく、これから描画する任意の新規オブジェクトにも設定を適用する場合は、**Yes** をクリックします。

生体高分子の設定

次のように、ドキュメント全体または特定のシーケンスでのシーケンスと残基の表示方法を指定することができます。


- ドキュメント全体の設定を行うには、**File** メニューの **Document Settings** をクリックし、**Biopolymer Display** タブをクリックします。
- オブジェクトに対する設定には、**Object Settings** ダイアログ ボックスを使用します。

Biopolymer Display タブで、次のいずれかのオプションを選択します。

Residues per line. シーケンスの各行に表示される残基の数を指定します。

Residue per block. シーケンスの各ブロックに表示される残基の数を指定します。

Amino-acid Termini. シーケンスの終端として **NH₂/COOH** または **H/OH** を設定します。

 **注:** 終端が **NH₂/COOH** スタイルで表示される場合、本当にある原子は実際には **H** と **OH** です。ラベルは、**N** 末端または **C** 末端が存在するかどうかを示すことを目的としています。混乱を招いたり不明瞭になったりする可能性があるため、この表示の使用はお勧めしません。この表示は、他の製品との互換性を確保するためだけに提供されています。

ホットキーのカスタマイズ

XML の知識があれば、ChemDraw のホットキーを編集したり独自のホットキーを作成できます。


ホットキーをカスタマイズするには、テキスト エディタで **Hotkeys.xml** ファイルを開きます。**デフォルト インストール**か**カスタム インストール**かによって、2 つのパスがあります。推奨される方法は、**カスタム インストール**の場所からこのファイルを編集するという方法です。

- **デフォルト インストール**の場合、パスは次のようになります。

Go > Applications > Right-click on ChemDraw > Choose Show Package Contents > Contents > Resources > SpecialPurpose > ChemDraw Items > Hotkeys.xml

- **カスタム インストール**の場合、パスは次のようになります。

Custom location folder > ChemDraw Items > Hotkeys.xml

 **注:** **デフォルト インストール**の場所からではなく、**カスタム インストール**の場所から **Hotkeys.xml** ファイルを編集するのが最も安全です。**デフォルト インストール**の場所から **Hotkeys.xml** ファイルを編集すると、**ChemDraw** パッケージの内容全体に影響する可能性があるためです。

ファイル内のホットキーは、オブジェクト タイプ別に整理されています。

- “原子”: 原子を変更するホットキー
- “結合”: 結合を変更するホットキー
- “AA1”: アミノ酸 (1 文字ラベル) のラベルを設定するホットキー
- “DNA”: DNA 配列のラベルを設定するホットキー
- “RNA”: RNA 配列のラベルを設定するホットキー
- “一般”: ツールを選択してダイアログ ボックスを開くホットキー


各ホットキーは、次の形式でエンコードされています。

```
<Hotkey key="{key}" command="{command}" value="{value}" description="{description}" />
```

キー

キーは、コマンドを呼び出すキーボードのキーです。その機能が異なるオブジェクト タイプに定義されている限り、異なる機能に同じキーを割り当てることができます。たとえば、“b” は Atom オブジェクト タイプでは原子

をホウ素に変更し、Bond オブジェクト タイプでは結合を太線に変更し、Generic オブジェクト タイプではベンゼン ツールに割り当てることができます。固定化されたホットキー（ファンクション キー、Enter、Space、BackSpace、および矢印キー）以外は、どのようなキーも使用できます。


 **注：**ホットキーでは大文字と小文字が区別されます。たとえば、ホットキー “S” と “s” を 1 つのオブジェクト タイプ内の異なる機能に定義できます。

また、ファイルで同じオブジェクト タイプに同じキーが複数回使用されている場合は、ファイルの末尾に一番近いキーが優先されます。

コマンド

コマンドは、事前に定義されたいずれかのコマンド名です。使用可能なコマンドはすべて、hotkeys.xml ファイルで説明されています。コマンド ID は、次のようにオブジェクト タイプに基づいて定義されます。

オブジェクト タイプ	コマンド ID	説明
原子	LABELTEXT	原子テキストのラベルの設定
	SPROUT	原子への結合の追加
	CHARGE	原子の電荷の変更
	FREE_SITE	原子のフリー サイトの増加/減少
	UPTO_SITE	原子の置換基の最大数の増加/減少
	EXACT_SITE	原子の置換基の数の増加/減少
	ATOMNUMBER	原子番号の表示/非表示
結合	ATTACHMENTPOINT	結合点の値の設定
	BONDORDER	結合次数の設定
	BONDDISPLAY	結合表示の設定
	BONDPOSITION	結合位置の設定
	BONDDOUBLEPOSITION	二重結合の配置の設定
一般	FUSERING	結合に対する環の縮合
	DIALOG	ダイアログの表示
	TOOLMODE	現在のツールの変更
AA1	AA1	1 文字のアミノ酸のラベルの設定
DNA	DNA	DNA 配列のラベルの設定
RNA	RNA	RNA 配列のラベルの設定

 **注：**コマンド リストに追加することはできません。

値

これは、コマンドに関連付けられているパラメータ値です。たとえば、コマンドが LABELTEXT の場合、値は表示されるラベルです。コマンドが BONDDISPLAY の場合、値は結合表示タイプに対応します。

特定のツールに切り替わるホットキーを作成するには、コマンドに TOOLMODE を選択し、値に次のいずれかのコマンド名を使用します。

LASSO	TLCPLATE
MARQUEE	BENZENE
3DTRACKBALL	CYCLOPENTADIENE
MASSFRAG	CYCLOHEXANECHAIR2
ERASER	CYCLOHEXANECHAIR1
TEXT	CYCLOOCTANE
SOLIDBOND	CYCLOHEPTANE
MULTIBOND	CYCLOHEXANE
DASHEDBOND	CYCLOPENTANE
PEN	CYCLOBUTANE
HASHEDBOND	CYCLOPROPANE
ARROW	TEMPLATE
HASHEDWEDGEDBOND	SNAKINGCHAIN
ORBITAL	ACYCLICCHAIN
BOLDBOND	QUERY
DRAWINGELEMENTS	TABLE
WEDGEDBOND	ARC
BRACKET	WAVYBOND
HOLLOWWEDGEDBOND	CHEMICALSYMBOLS

 **注:** 使用できる機能は、お持ちの ChemDraw のレベルによって異なります。

説明


ツール説明では、各ホットキーの機能を説明します。

Hotkeys.xml ファイルの編集

 **注:** ホットキーを編集している間は、“Smart Quotes” を無効にしておいてください。

ChemDraw のホットキーを編集するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト エディタで **hotkeys.xml** ファイルを開きます。
2. hotkeys.xml ファイルで、該当するホットキー リストに移動します。
3. 適切な形式および値を使用して新しいホットキー エントリを追加するか、リスト内の既存のホットキーを編集します。
4. hotkeys.xml ファイルを保存します。
5. ChemDraw を終了して再起動します。

 **注意:** hotkeys.xml ファイルを編集する際には注意が必要です。形式の設定が不適切な場合、ファイルを読み取ることができず、ChemDraw の一部の機能が正しく動作しなくなる可能性があるためです。変更を加える前に、ファイルのオリジナル版をバックアップしてください。

色の使用

ChemDrawは、モニターでの表示、カラープリンタでの印刷、およびフィルムプリンタ用の 35 mm スライドを作り、化学的な描画のフルカラープレゼンテーションを作成することができます。

ほぼすべてのコンピュータは最大 1600 万色を表示できますが、色数はモニタの機種やグラフィックスカードの種類によって制限されることがあります。

色を指定できる描画要素

ChemDraw では、背景色、前景色、および個々のオブジェクトおよび元素の色を変更できます。

背景色. ドキュメント ウィンドウの色。標準では、背景は白です。

前景色. 描画するオブジェクトの色。標準では、前景は黒です。

個々のオブジェクト. オブジェクトに個別に色を割り当てると、他のオブジェクトから目立たせることができます。

個々の元素. 構造式の特定の原子または元素に色を割り当てることができます。

背景色および前景色を変更するには、次の操作を行ってください。

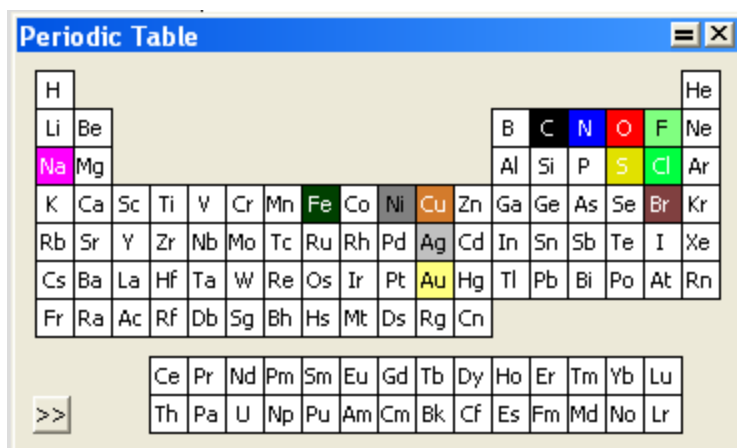
1. **File** メニューの **Document Settings** をクリックし、**Colors** タブを選択します。
2. 背景色と前景色を選択します。
3. **OK** をクリックします。

元素ごとの色分け

原子記号に関連付けられた色を使用して、原子ラベルを色分けできるようになりました。周期表内の元素に色を割り当てできます。描画で特定の元素を使用するときに、その元素は周期表で割り当てたのと常に同じ色で表示されます。

周期表で元素に別の色を割り当てするには、次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **Show Periodic Table Window** をクリックします。周期表が表示されます。

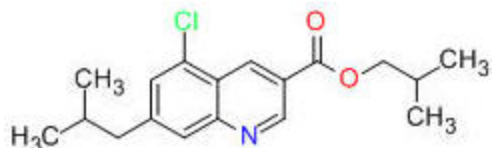



2. 元素をダブルクリックします。カラーパレットが表示されます。
3. 色を選択し、**OK** をクリックします。

 **注:** 変更した色は、ChemDraw を終了するときに保存されます。

構造式に色を適用するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **Color**、**By Element** の順にクリックします。




 **注:** 原子の色は動的に設定されないため、ラベルを変更しても色は再設定されません。

カラー パレット

カラー パレットを使用して、アクティブ ウィンドウ内のドキュメントのオブジェクトやテキストに色を指定できます。パレットは、各ドキュメントとスタイル シートに保存されます。スタイル シートを使用すると、同じ配色を使って複数のドキュメントを作成できます。

色のカスタマイズ

カラー パレットに対して行った変更は、現在作業中のドキュメントにのみ影響を与えます。保存できる色数は、最大 20 色です。詳細については、[27 ページの「ドキュメント設定およびオブジェクト設定」](#)を参照してください。

 **注:** 複数の色がついているオブジェクトまたはグループを選択すると、Color メニューの各色の横にチェックマークが表示されます。このチェック マークは、変更を行うと複数の色に影響が及ぶことを警告するためのものです。

現在のドキュメントのカラー パレットを変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Settings** をクリックします。Document Settings ダイアログが表示されます。
2. **Colors** タブをクリックします。
3. 変更する色（背景または前景）をクリックし、**Other** を選択します。Color ダイアログが表示されます。
4. **Basic Colors** または **Custom Colors** セクションで新しい色をクリックします。
5. **OK** をクリックします。色は新しい色に変更され、Color メニューに追加されます。

独自の色を追加するには、次の操作を行ってください。

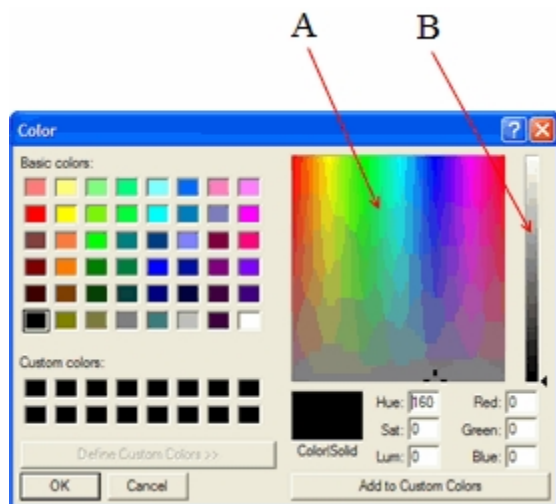


図 4.2: カスタム カラーの設定。A) Color refiner ボックス、B) Luminosity ボックス

6. Color Refiner ボックス内の 1 色をクリックして、色相と彩度を設定します。
クリックすると、ポインタがクロスヘアに変わります。他の場所にドラッグして色相や彩度を変更することができます。
7. Luminosity ボックス内をクリックして、色の明度を設定します。
8. ボックス内の数値を入力変更して、色相、彩度、明度および RGB 成分を変更することもできます。
9. **Add to Custom Colors** をクリックします。
10. **OK** をクリックします。

テンプレートと色

テンプレート ポップアップ パレットのテンプレートで用いられている背景色および前景色は、そのテンプレートをドキュメント ウィンドウ内で描画する際には使用されません。ただし、テンプレートのその他の色は、ドキュメントのカラー パレットに追加されます（まだ追加されていない場合）。詳細については、[289 ページの“自動スケーリング”](#)を参照してください。

カラー パレット設定の保存

カラー パレットは、スタイル シートに保存できます。カラー パレットは、ページ セットアップ設定、テキスト設定、描画設定など、他のドキュメント設定とともに保存されます。


背景色の印刷

背景色の印刷の有無を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **General** タブの **Print Background Color** を選択または選択解除します。
3. **OK** をクリックします。

ドキュメント設定

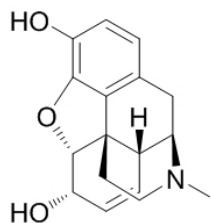
ChemDraw には、科学関係の有力な出版物でよく使われているドキュメント設定に基づいたドキュメント設定ライブラリが含まれています。たとえば、機関誌などの定期刊行物の中には、投稿記事を一定のマージンやフォントやページ サイズに従ってフォーマットしなければならないものがあります。ご自分のドキュメントを特定の定期刊行物に投稿する予定なら、ChemDraw で、その定期刊行物用のスタイル シートを開いてください。独自のスタイルシートを作成することもできます。

 **注:** ドキュメント設定に加えた変更は、現在のドキュメントにのみ反映され、アプリケーション全体では利用できません。

独自のスタイル シートを作成するには、次の操作を行ってください。

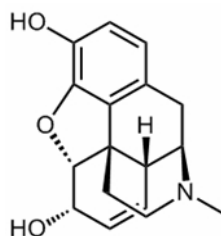
1. 新しいドキュメントを作成するには、次の操作を行ってください。
2. Page Setup、Drawing、Text Settings、Color Palette の各ダイアログ ボックスに設定値を入力します。
3. File メニューの **Save As** をクリックします。
4. Save As ダイアログ ボックスで次の操作を行います。
 - a. ChemDraw のスタイル シート ファイル形式を選択します。
 - b. ドキュメント名を入力します。
 - c. テンプレートを ChemDraw Items フォルダに保存します。
5. **OK** をクリックします。

ACS Document 1996



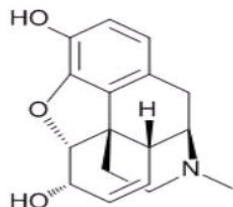
- 固定長: 14.4 pt
- 太線幅: 2 pt
- 線幅: 0.6 pt
- マージン幅: 1.6 pt
- ハッシュ スペーシング: 2.5 pt
- 鎖角 (度): 120
- 結合幅 (長さの %): 18
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ: 10 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ: 10 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ): 540 pt x 720 pt
- ページ サイズ: US Letter
- 縮小率 (%): 100

Adv. Synth Catal.



- 固定長:17 pt
- 太線幅:2 pt
- 線幅:1 pt
- マージン幅:1.6 pt
- ハッシュ スペーシング:2.5 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):18
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:10 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:12 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):540 pt x 720 pt
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):100

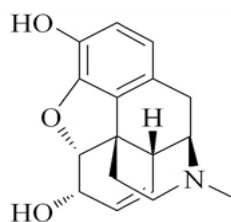
J. Chin. Chem. Soc.



- 固定長:18 pt
- 太線幅:2.5 pt
- 線幅:1 pt
- マージン幅:2 pt
- ハッシュ スペーシング:2.5 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):20
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:12 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:12 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):693 pt x 918 pt
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):80

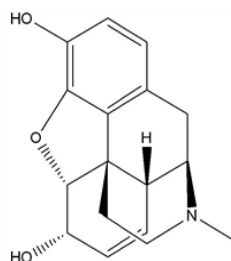
J. Mol. Mod. (1 列)

- 固定長:14.4 pt
- 太線幅:2 pt
- 線幅:0.6 pt
- マージン幅:1.6 pt
- ハッシュ スペーシング:2.5 pt
- 鎖角 (度):120



- 結合幅 (長さの %):18
- 原子ラベル フォント:Times New Roman
- 原子ラベル サイズ:10 pt
- タイトル フォント:Times New Roman
- タイトル サイズ:10 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):8.5 cm x 25.4 cm (1列); 17 cm x 25.4 cm (2列)
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):100

新規ドキュメント



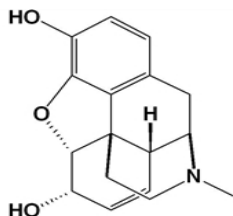
- 固定長:30 pt
- 太線幅:2 pt
- 線幅:1 pt
- マージン幅:2 pt
- ハッシュ スペーシング:2.7 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):12
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:10 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:12 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):7.5 in x 10 in
- ページ サイズ:US Letter または A4 (選択による)
- 縮小率 (%):100

新規スライド



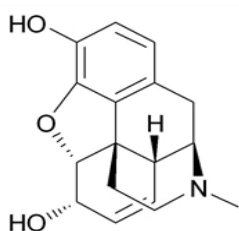
- 固定長:30 pt
- 太線幅:4 pt
- 線幅:1.6 pt
- マージン幅:2 pt
- ハッシュ スペーシング:2.7 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):15
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:12 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:16 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):7.5 in x 10 in

Phytomedicine



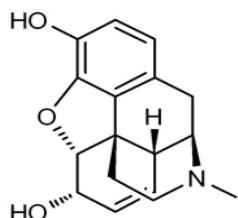
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):100
- 固定長:20 pt
- 太線幅:1.33 pt
- 線幅:1pt
- マージン幅:1.25 pt
- ハッシュ スペーシング:3 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):8
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:12 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:12 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):540 pt x 720 pt
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):100

RSC



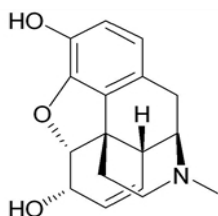
- 固定長:0.43 cm
- 太線幅:0.056 cm
- 線幅:0.016 cm
- マージン幅:0.044 cm
- ハッシュ スペーシング:0.062 cm
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):20
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:9 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:9 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):8.9 cm x 25.4 cm (1列); 19 cm x 27.7 cm
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):100

Science of Synthesis



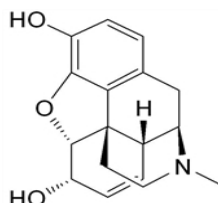
- 固定長:17 pt
- 太線幅:2 pt
- 線幅:0.8 pt
- マージン幅:2.25 pt
- ハッシュ スペーシング:2.5 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):18
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:10 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:10 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):19.79 cm x 27.15 cm
- ページ サイズ:A4
- 縮小率 (%):100

Synthesis, Synlett



- 固定長:17 pt
- 太線幅:2 pt
- 線幅:0.8 pt
- マージン幅:1.3 pt
- ハッシュ スペーシング:2.5 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):18
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:10 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:10 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):12 cm x 26.7 cm
- ページ サイズ:A4
- 縮小率 (%):100

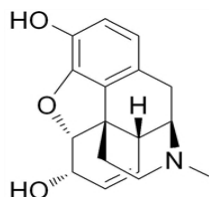
Verlag Helvetica Chimica Acta



- 固定長:17 pt
- 太線幅:2.9 pt
- 線幅:0.54 pt
- マージン幅:2 pt
- ハッシュ スペーシング:2 pt
- 鎖角 (度):120

- 結合幅 (長さの %):14
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:10 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:12 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):368 x 720 pts
- ページ サイズ:US Letter
- 縮小率 (%):100


Wiley Document



- 固定長:17 pt
- 太線幅: 2.6 pt
- 線幅: 0.75 pt
- マージン幅:2 pt
- ハッシュ スペーシング:2.6 pt
- 鎖角 (度):120
- 結合幅 (長さの %):18
- 原子ラベル フォント :
- 原子ラベル サイズ:12 pt
- タイトル フォント :
- タイトル サイズ:12 pt
- 描画エリア (幅 x 高さ):19.79 x 27.15 cm
- ページ サイズ:A4
- 縮小率 (%):100

ショートカットとホットキー

ホットキーは、原子ラベル、結合タイプ、および機能（電荷の追加や結合の表示など）のためのホットキーに分類されています。ショートカットは、コマンドが配置されているメニューごとにまとめて示してあります。

 **注:** ホットキーとニックネームは、ユーザーが変更することができます。このセクションの各表に示したホットキーやニックネームは、標準で設定されているものです。

原子キー

キーボードを使用して描画に原子を挿入するには、原子キーを使用します。たとえば、原子にマウスポインタを合わせてキーボードの 3 キーを押すと、tert-ブチル基が追加されます。

原子ラベル	キー
A	a
F	f
Ph	P または 4
Ac	A または 5
H	h
Q*	q
Br	b
I	i
R	r
n-Bu	1
K	k
S	s
s-Bu	2
Me	m
Si	S
t-Bu	3
N	n

原子ラベル	キー
TMS	t
C	c
Na	N
X	x
Cl	C または l
O	o
COOCH3	E
D	d
OTs	T
CH2OH	6
Et	e
P	p
B	B

結合ホットキー

結合を変更するには、結合にマウス ポインタを合わせて、次のいずれかのキーを押します。

関数	キー
単結合に変更	1
点線結合に変更	d
二重結合に変更	2
波線結合に変更	y
三重結合に変更	3
二重結合を左へ移動	l
四重結合に変更	4
二重結合を中央へ移動	c

関数	キー
太線結合に変更	b
二重結合を右へ移動	r
ウェッジ結合に変更	w
結合を手前に移動	f
ハッシュ結合に変更	H
結合属性テキスト ボックスを表示	/ (スラッシュ) または ?
ハッシュ ウェッジ結合に変更	h
5 員環の縮合	5
6 員環の縮合	6
7 員環の縮合	7
8 員環の縮合	8
いす形シクロヘキサンを 2 つの方向で作成	9 または 0

ホットキー機能

ホットキー機能を使用するには、原子にマウス ポインタを合わせて、該当するキーを押します。

関数	キー
結合点を追加	. (ピリオド)
原子の番号を追加	' (アポストロフィ)
負電荷を追加	-
正電荷を追加	+
1 本の結合を派生	0
2 本の結合を派生	9
3 本の結合を派生	8
Atom Properties ダイアログ ボックス	/ (スラッシュ) または ?

関数	キー
-----------	-----------

クスを表示

Choose Nickname ダイアログ ボックスを開く	= (等記号)
クスを表示	

原子ラベル テキスト ボックスを開く	<Enter>
--------------------	---------

原子ラベルの取り消し	Backspace、Delete または Space
------------	----------------------------

ショートカット

以下に、一般的によく使用される操作のショートカット キーの一覧を示します。

File

コマンド	キーの組み合わせ
-------------	-----------------

新規ドキュメントの作成	Ctrl + N
-------------	----------

ドキュメントを開く	Ctrl + O
-----------	----------

ドキュメントを保存	Ctrl + S
-----------	----------

ドキュメントに名前を付けて保存	Shift + Ctrl + S
-----------------	------------------

ドキュメントの印刷	Ctrl + P
-----------	----------

ページ設定	Shift + Ctrl + P
-------	------------------

ドキュメントを閉じる	Ctrl + W
------------	----------

ChemDraw の終了	Alt + F4
--------------	----------

Edit

コマンド	キーの組み合わせ
-------------	-----------------

切り取り	Ctrl + X
------	----------

複製	Ctrl + C
----	----------

CDXML としてコピー	Ctrl + D
--------------	----------

コマンド	キーの組み合わせ
------	----------

貼り付け	Ctrl + V
------	----------

すべて選択	Ctrl + A
-------	----------

取り消し	Ctrl + Z
------	----------

再実行	Shift + Ctrl + Z
-----	------------------

前のコマンドを繰り返す	Ctrl + Y
-------------	----------

消去	消去
----	----

SMILES としてコピー	Alt + Ctrl + C
---------------	----------------

MOL テキストとしてコピー	Alt + Shift + Ctrl + O
----------------	------------------------

SMILES として貼り付け	Alt + Ctrl + P
----------------	----------------

MOL/GDXML として貼り付け	Alt + Shift + Ctrl + P
-------------------	------------------------

View

コマンド	キーの組み合わせ
------	----------

実寸表示	F5
------	----

縮小	F8
----	----

拡大	F7
----	----

ウィンドウに合わせる	F6
------------	----

ルーラの切り替え	F11
----------	-----

クロスヘアの切り替え	Ctrl
------------	------

Object

コマンド	キーの組み合わせ
------	----------

固定長の切り替え	Ctrl + L
----------	----------

コマンド	キーの組み合わせ
固定角の切り替え	Ctrl + E
複数オブジェクトの選択	Shift + クリック (なげなわ選択、矩形選択、または構造式 3 次元表示ツールを使用)
選択したオブジェクトのグループ化	Ctrl + G
オブジェクトのグループ化の解除	Shift + Ctrl + G
選択したオブジェクトの結合	Ctrl + J
手前に移動	F2
奥に移動	F3
左右反転	Shift + Ctrl + H
上下反転	Shift + Ctrl + V
左右 180° 回転	Alt + Shift + Ctrl + H
上下 180° 回転	Alt + Shift + Ctrl + V
回転(Rotate Objects ダイアログを表示)	Ctrl + R
サイズ変更 (Scale Objects ダイアログを表示)	Ctrl + K
左端揃え	Alt + Shift + Ctrl + L
中央揃え	Alt + Shift + Ctrl + C
右端揃え	Alt + Shift + Ctrl + R
上端揃え	Alt + Shift + Ctrl + T
上下中央揃え	Alt + Shift + Ctrl + M
下端揃え	Alt + Shift + Ctrl + B

Structure

コマンド	キーの組み合わせ
------	----------

構造式の整形	Shift + Ctrl + K
--------	------------------

化学名を構造式に変換	Shift + Ctrl + N
------------	------------------

構造式を化学名に変換	Alt + Ctrl + N
------------	----------------

Text

コマンド	キーの組み合わせ
------	----------

左揃え	Shift + Ctrl + L
-----	------------------

Center	Shift + Ctrl + C
--------	------------------

右揃え	Shift + Ctrl + R
-----	------------------

Justified	Shift + Ctrl + J
-----------	------------------

自動文字配置	Shift + Ctrl + M
--------	------------------

標準	Ctrl + T
----	----------

Bold	Ctrl + B
------	----------

斜体	Ctrl + I
----	----------

下線	Ctrl + U
----	----------

Formula	Ctrl + F
---------	----------

選択した文字または次に入力する文字を下付きにする	F9 (ラベル内)
--------------------------	-----------

選択した文字または次に入力する文字を上付きにする	F10 (ラベル内)
--------------------------	------------

度記号 (°) を追加	Alt + 248 (ラベル内)
-------------	------------------

Drawing

コマンド	キーの組み合わせ
------	----------

選択したオブジェクトの複写	Ctrl + ドラッグ
---------------	-------------

選択したオブジェクトの複写	Shift + Ctrl + ドラッグ
---------------	---------------------

コマンド

キーの組み合わせ

写

(X 軸および Y 軸方向に制限)

変形 (X 軸または Y 軸方向のサイズ変更) Shift + ドラッグ (サイズ変更ハンドルを使用)

なげなわ選択ツールとその前に使用した描画ツールの切り替え Ctrl + Alt + Tab

連鎖方向を変更 Ctrl + ドラッグ (アルカン鎖ツールを使用)

二重結合の方向を変更 Shift + クリック (飽和二重結合環ツールを使用)

共鳴非局在化環を作成 Ctrl + クリック (いす形シクロヘキサン環ツール以外の環ツールを使用)

曲線セグメントを削除 Alt + Shift + クリック (ペン ツールを使用)

ニックネーム

Ac	Bz	c-C7H13	cyclopropyl	DPIPS	i-C4H9
Ad	BOM	c-C8H15	Cys	DPTBS	i-C5H11
Ala	Bs	c-Hx	Dan	DTBMS	i-Pr
Alloc	Bt	C10H20	DEAE	DTBS	Ile
Allyl	Btm	C10H21	DEIPS	Et	Im
Am	Bu	Cbz	DMIPS	Fmoc	Leu
Arg	Bzh	cHx	DMPM	Gln	Lys
Asn	Bzl	CoA	DMPS	Glu	m-C6H4
Asp	BzOM	Cy	DMTr	Gly	m-Phenylene
Benzoyl	c-C3H5	cyclobutyl	DNP	His	m-Tolyl

Benzyl	c-C ₄ H ₇	cycloheptyl	Dnp	i-Am	MDIPS
Bn	c-C ₅ H ₉	cyclooctyl	Dns	i-Bu	MDPS
Boc	c-C ₆ H ₁₁	cyclopentyl	DNS	i-C ₃ H ₇	Me

MEM	n-Pr	Phenyl	s-Butyl	TBDMS	Thr
Mes	N ₃	Pht	s-C ₄ H ₉	TBDPS	TIPDS
Met	neo-Am	Piv	s-C ₅ H ₁₁	TBMPs	TIPS
MMTr	neo-C ₅ H ₁₁	PMB	SEM	TBS	TMS
MOM	Np	PMBM	Ser	TDS	Tos
MPM	o-C ₆ H ₄	PNB	SES	Tf	trans-Cinnamyl
Ms	o-Phenylene	Poc	t-Am	Tfa	Troc
MTM	o-Tolyl	PPi	t-BOC	TFA	Trp
n-Am	p-C ₆ H ₄	Pr	t-Boc	Thexyl	Trt
n-Bu	p-Phenylene	Pro	t-Bu	THF	Ts
n-C ₃ H ₇	p-Tolyl	Pv	t-Butyl	Thf	Tyr
n-C ₄ H ₉	Ph	s-Am	t-C ₄ H ₉	THP	Val
n-C ₅ H ₁₁	Phe	s-Bu	t-C ₅ H ₁₁	Thp	Xyl

基本的な描画テクニック

ChemDraw には、基本的な化学構造から複雑な反応まで、あらゆるものを描画するための多彩なツールが用意されています。この章では、初めて化学構造を作成する人のために基本的なテクニックを紹介します。矢印や図形を付加することで、描画した化学構造や反応の見栄えをよくする方法も説明します。描画機能の詳細については、103 ページの “BioDraw (Professional レベルのみ)” と 130 ページの “高度な描画テクニック” を参照してください。

結合

メイン ツールバーと多重結合ツールバーに、結合を描画するための多数のツールが用意されています。これらのツールの中には、特定のタイプの結合を描画するツールのほかに、データベース クエリ用の構造式を描画するツールもあります。各種結合タイプの詳細については、311 ページの “結合の表記法” を参照してください。

結合の描画

化学構造の最初の結合を描画するには、メイン ツールバーの線結合ツールを選択し、ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。描画ウィンドウに結合が表示されます。最初の結合に追加された別の結合を描画するには、最初の結合のどちらかの端点をクリックします。下図のように、描画ウィンドウに 2 つめの結合が表示されます。

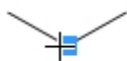


図 6.1: 原子に対する結合の追加

結合は、任意の方向に描画できます。結合ツールを使い、ドキュメント ウィンドウ内の既存の原子または空白領域をクリックし、そこからカーソルをドラッグします。カーソルをドラッグした方向に結合が描画されます。

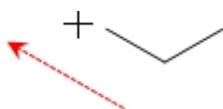


図 6.2: ドラッグによる結合の追加

二重結合


二重結合は、次の 5 通りの方法で描画できます。

- 二重結合ツールで結合を描画する。
- 既存の単結合に重ねて単結合を描画する。
- 任意の結合ツールまたは選択ツールを使い、既存の結合をポイントして「2」と入力する。51 ページの “ショートカットとホットキー” を参照してください。
- 結合を右クリックし、コンテキスト メニューから **Double**、**Plain** の順に選択する。

- 単結合ツールを使用し、いずれかの単結合を1回クリックして二重結合にする。さらにクリックすると、結合を表す2本のラインが移動します。

二重立体不特定結合

二重立体不特定結合または交差二重結合では、未指定の二重結合設定または混合設定を指定します。二重立体不特

定結合を描画するには、多重結合ツールバーの二重立体不特定結合ツール  を使うか、次の操作を行ってください。

1. 波線結合ツールで結合を描画します。
2. 結合の中央部をクリックして二重結合を作成します。
3. もう一度クリックして二重立体不特定結合を作成します。

三重結合

三重結合は、次の3通りの方法で描画できます。

- 三重結合ツールで結合を描画します。
- 実線、点線、または太線結合ツールを使い、既存の二重結合の一方の端点からもう一方の端点へドラッグします。
- 任意の結合ツールまたは選択ツールを使い、既存の結合をポイントしてキーボードから「3」と入力します。

四重結合


四重結合は、次の3通りの方法で描画できます。

- 四重結合ツールで結合を描画する。
- 実線、点線、または太線結合ツールを使い、既存の三重結合の一方の端点からもう一方の端点へドラッグします。
- 任意の結合ツールまたは選択ツールを使い、既存の結合をポイントしてキーボードから「4」と入力します。

四重結合を単結合に変更するには、次の操作を行ってください。

1. 結合ツールを選択します。
2. 既存の四重結合の端から端までドラッグします。

多重結合の描画は、結合を右クリックしてショートカットメニューから結合タイプを選択する方法や、Bond Properties ダイアログボックスで結合タイプを変更する方法、またはホットキーを使用する方法でも実行できます。258 ページの“結合属性”を参照してください。

 **注：** 結合次数を減らすには、消しゴム ツールを選択して結合をクリックします。

配位結合

配位結合は、結合を形成する2つの原子で共有される電子対が原子の1つからのみ供給される、特定タイプの共有結合です。電子対を供与する原子は“供与体”と呼ばれ、供与しないで電子対を共有する原子は“受容体”と呼ばれます。

配位結合を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 配位結合ツールを選択します。

2. 配位結合の正端から負端（矢先）の方向にドラッグします。

配位結合はドキュメント ウィンドウで一定の方向に描画されます。

配位結合の向きを変更するには、次の操作を行ってください。

- 配位結合ツールを使用して、結合をクリックします。

ウェッジ結合


ウェッジ結合を描画するには、次の操作を行ってください。

1. いずれかのウェッジ結合ツールをクリックします。
2. ウェッジ結合の幅の狭い端から幅の広い端の方向にドラッグします。

ウェッジ結合はドキュメント ウィンドウで一定の方向に描画されます。

ウェッジ結合の向きを変更するには、次の操作を行ってください。

- ウェッジ結合ツールを使用して、結合をクリックします。

 **注:** ChemDraw のハッシュ ウェッジ結合は、幅の狭い端が画面平面上に位置し、幅の広い端が表示平面の後方に位置するものとして扱われます。

結合の変更

結合は次の操作により変更できます。

- 結合タイプの変更
- 結合の配置と方向の変更
- 原子の移動
- 交差する結合の前後配置の変更

結合タイプの変更

単結合のタイプを別のタイプに変更するには、次のいずれかの方法を使います。


- 結合ツールを選択し、既存の結合をクリックします。
- 右クリックし、コンテキスト メニューから新しいタイプを選びます。
- ホットキーを使用します。51 ページの “ショートカットとホットキー” を参照してください。

二重結合に変更

二重結合を別のタイプに変更するには、次の操作を行ってください。

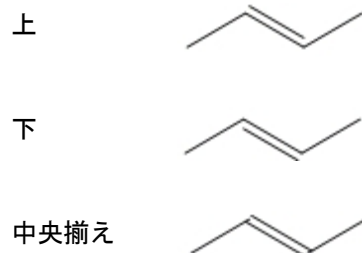
1. 太線結合ツール、点線結合ツール、または線結合ツールを選択します。
2. 二重結合をクリックします。

二重結合が新しいタイプの結合に変わります。二重結合内の結合の 1 つは、常に線または点線の結合になります。

 **注:** 点線結合ツールを使用して、互変異性結合（線/点線）を再びクリックすると、芳香族二重結合（点線/点線）が作成されます。

二重結合の配置

二重結合の配置方法は、他の結合の上側または下側に配置する方法と、他の結合と中央揃えして配置する方法があります。




1. 既存の二重結合の作成に使用した結合ツールを選択します。
2. 配置方法を変更するには、次のいずれかの操作を行ってください。
 - 二重結合の中央部をクリックします。
 - 結合を右クリックし、コンテキストメニューの **Bond Position** をポイントして、配置を選択します。

原子の移動

構造式内の原子を移動するには、選択ツールで原子をクリックしてドラッグします。構造式内の 2 個の結合原子を移動するには、その間にある結合をクリックしてドラッグします。

個々の原子を移動するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールをクリックします。
2. 移動対象の原子をポイントします。その原子の上に強調表示ボックスが表示されます。
3. Shift キーを押しながら原子をドラッグします。

 **注:** 選択ツールを使って原子を移動することもできます。94 ページの “オブジェクトの移動” を参照してください。

環サイズの縮小

環の原子数を減らすことができます。たとえば、シクロヘキサンをシクロペンタンに変換できます。

環のサイズを縮小するには、いずれかの操作を行ってください。

- 選択ツールを使用し、クリックしてドラッグします。
- 結合ツールを使い、原子をポイントし、Shift キーを押しながらドラッグします。原子がもう 1 つの原子の上に重なったら、マウス ボタンを離します。原子間の結合が消えます。

結合交差

結合が別の結合と交差するとき、どちらの結合を上置くか指示できます。下にある結合は、重なる部分が小さく切り取られるため、どの結合が最上面にあるかを明確に識別できます。

オブジェクトを前面に移動するには、次の操作を行ってください。

1. 前面に移動するオブジェクトを選択します。

2. **Object** メニューの **Bring to Front** をクリックします。選択したオブジェクトが他のオブジェクトの一番手前に表示されます。

同じようにして、**Object** メニューの **Send to Back** をクリックすると、結合が他の結合の背面に移動します。



- 注:** 原子の三次元座標を格納するファイル形式もあれば、二次元座標のみを格納する形式もあります。三次元座標を持つ結合の場合、表示される結合の交差は、常にそれらの座標によって決まります。**Bring To Front** と **Send To Back** を行っても効果はありません。結合および構造式を三次元ビューに変換する方法の詳細については、[182 ページの“三次元表示”](#)を参照してください。

結合長と結合角の固定

標準では、ChemDraw は固定された結合長と結合角で構造式を描画します。これらの長さおよび角度の値は、特定タイプのドキュメントの設定で決定されます。詳細については、[45 ページの“ドキュメント設定”](#)を参照してください。ただし、固定長および固定角に制限されないように動作を変更できます。

- 注:** 固定長および固定角の設定を一時的に無効にするには、**Alt** キーを押しながら結合をドラッグします。

固定長結合の描画

固定長に制限された結合を描画するには、次の操作を行ってください。

1. **Object** メニューの **Fixed Lengths** をクリックして、**Fixed Lengths** の横にチェック マークが表示されていることを確認します。
2. 任意の結合ツールを使用して、結合を描画します。

固定角結合の描画

一般に結合角は、標準の連鎖角度の 120 度に設定されるか、15 度単位での設定に制限されています。

固定角結合を描画するには、次の操作を行ってください。

1. **Object** メニューの **Fixed Angles** をクリックして、**Fixed Angles** の横にチェック マークが表示されていることを確認します。
2. 任意の結合ツールを使用して、結合を描画します。

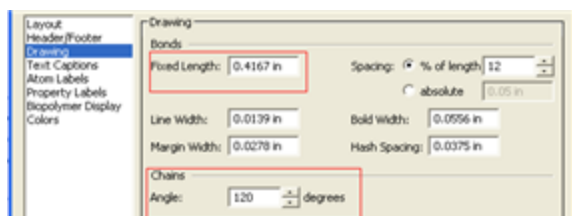
新しく描画した構造式の結合は、標準的な 120 度の角度で表示されます。

固定値の変更

既定値では、結合長は .4167 インチ、鎖状構造における結合角は 120 度になります。

固定値を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Settings** をクリックし、**Drawing** カテゴリをクリックします。

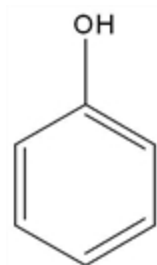


2. **Fixed Length** テキスト フィールドに値を入力します。値は、in、cm、pt、または picas のいずれかの単位で指定できます。
3. **Chains** の **Angle** テキスト フィールドに値を入力します。
4. **OK** をクリックします。

描画設定の詳細については、[28 ページの “描画設定”](#)を参照してください。

原子

標準では、さまざまな結合、環、鎖のツールを使用して構造式を描画すると、単純な炭化水素が作成されます。テキスト ツールを使用して、原子に原子ラベルを追加することができます。また、テキスト ツールを使用してドキュメントにテキストのタイトルを追加することもできます。たとえば、原子ラベル「OH」をトルエンの描画に追加してフェノールを作成するには、次の操作を行います。

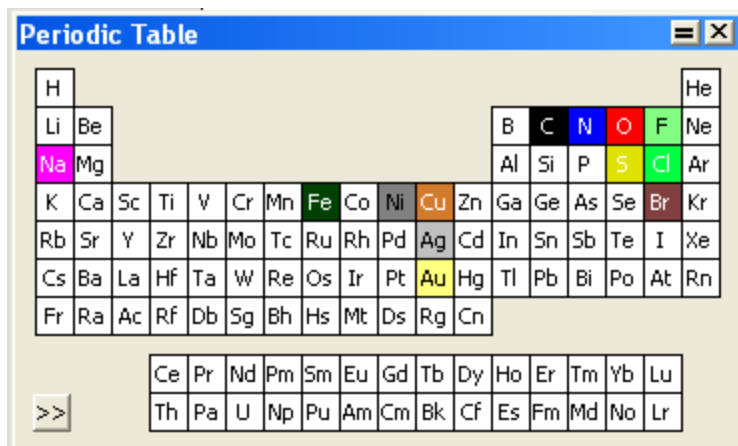


1. トルエンの構造式を描画します。
2. テキスト ツールでメチル炭素をクリックします。テキスト フィールドが表示されます。
3. テキスト フィールドに「OH」と入力します。
4. テキスト フィールドの外側をクリックします。

原子ラベルを編集するには、テキスト ツールでテキスト フィールド内をクリックしてから文字を入力します。テキスト フィールドに原子ラベルを入力するか、原子の上にカーソルを移動してホットキーを押すことができます。ホットキーの詳細については、[70 ページの “ホットキー”](#)および [51 ページの “ショートカットとホットキー”](#)を参照してください。

周期表

周期表を使用して原子を構造式に挿入できます。**View** メニューの **Show Periodic Table Window** をクリックします。



周期表で記号をクリックして原子を強調表示し、テキスト ツールをアクティブにします。表の上にカーソルを移動すると、各原子が強調表示されます。

原子の追加. 周期表で目的の元素を選択し、ドキュメント内の空白部分をクリックします。追加された原子は、化学的に中性の形態で表示されます。たとえば、炭素は CH_4 と表示され、水素は H_2 と表示されます。

原子ラベルの追加. ラベルの付いていない既存の原子をクリックします。

酸化状態の変更. 原子を表す記号を使用して、ドキュメント ウィンドウ内で原子をクリックします。

別の原子への変更. 周期表で別の原子を選択し、描画内で変更する原子をクリックします。

ラベルの編集. テキスト ツールで原子ラベルを編集できます。テキストをハイライトし、周期表で記号をクリックします。強調表示したテキストが置換されます。

原子ラベル追加の繰り返し

テキスト ツール、結合ツール、または環ツールを使用して、同じ原子ラベルを繰り返し追加することができます。

1. テキスト ツールをクリックします。
2. 1 つの原子にラベルを付けます。
3. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - テキスト ツールで別の原子をダブルクリックする。
 - 結合ツール、環ツール、または非環式鎖ツールで別の原子をトリプルクリックする。

ラベルの削除

原子ラベルを削除するには、次のいずれかの操作を行います。

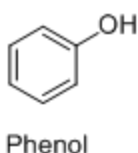
- 消しゴム ツールを使用して原子ラベルをクリックします。
- 選択ツール、結合ツール、または環ツールを選択した状態で、原子ラベルをポイントし、スペースバー、Backspace キー、または Delete キーを押します。原子にラベルが付けられているときに、スペースバー、Backspace キー、または Delete キーを押すとラベルが削除されますが、原子は削除されないので注意してください。原子も削除する場合は、もう一度 Delete キーを押して、ラベルの付いていない原子を削除します。

タイトル

テキスト ツールを使用して、構造式にタイトルを追加して編集することができます。次の例では、フェノールの構造式に“Phenol”というタイトルを追加します。

フェノールの構造式に“Phenol”というタイトルを追加するには、次の操作を行ってください。

1. フェノールの構造式を描画します。
2. テキスト ツールを使い、図の下の方をクリックして、テキスト フィールドに「Phenol」と入力します。
3. テキスト フィールドの外側をクリックします。



タイトルを編集するには、テキスト ツールでテキスト フィールド内をクリックしてから文字を入力します。詳細については、[25 ページの“改行およびテキスト ボックスの閉じ方”](#)を参照してください。

書式設定

新規の文字列または原子ラベルでは、すべて、フォント、サイズ、およびスタイルについてタイトルと原子ラベルの標準のドキュメント設定が使用されています。この書式は以下の操作により変更できます。


- 現在作成中のドキュメントで、以降の描画に対するドキュメント設定を変更します。
- 文字を入力する前に Text メニューまたはツールバーから個々のタイトルやラベルに対して新たな書式を選択します。
- 入力した後、テキスト選択し個別のラベルに対して新規の書式を適用します。

現在作成中のドキュメントの新規タイトルおよび原子ラベルに対してテキスト設定をするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Document Settings** をクリックします。Document Settings ダイアログが表示されます。
2. Text Captions カテゴリまたは Atom Labels カテゴリを選択します。
3. 適切なオプションを選択します。
4. **OK** をクリックします。これらの設定は、現在作業中のドキュメントに対して、以降新たに作成するタイトルまたは原子ラベルのすべてに影響します。

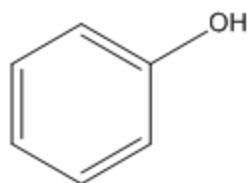
個々のタイトルや原子ラベルに対して、入力する前にテキスト書式を設定することができます。

入力前にテキスト書式を設定するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールをクリックし、ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。テキスト フィールドが表示されます。
 2. 以下のいずれかの方法でテキスト書式を設定します。
 - Text メニューの書式オプションをクリックします。
 - Style ツールバーの Format Options をクリックします。
 3. テキスト ボックス内に、テキストを入力します。
-  **注:** 書式の変更は現在作成中のテキストにのみ適用されます。引き続き入力するテキストはいずれも、現在作成中のドキュメントの標準のドキュメント設定に従った書式設定が適用されます。

選択したテキストのフォント、スタイル、およびサイズを指定するには、次のいずれかの操作を行います。

- Text メニューからフォントおよびサイズを選択します。
- 右クリックし、コンテキスト メニューからフォントおよびサイズを選びます。
- Style ツールバーのドロップダウン メニューから、フォントおよびサイズを選びます。



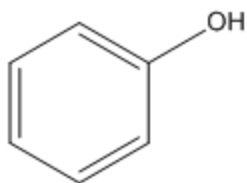
Phenol

テキストの色付け

タイトルや原子ラベルは、そのテキストの入力前または入力後に色を付けることができます。色は全体に対しても、あるいは一部に対しても付けられます。

タイトルや原子ラベルに色を付けるには、次の操作を行ってください。

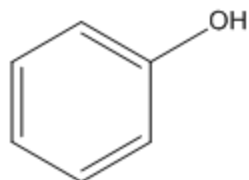
1. テキスト ツールを選択します。
2. テキストを配置したいドキュメント内をクリックします。
3. Color メニューから色を選択します。
4. タイトルまたは原子ラベルを入力します。



Phenol

個々の文字に色を付けるには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを用いて、既存のタイトルまたは原子ラベルの一部を選択します。
2. Color メニューから色を選択します。



Phenol

複数のタイトルまたは原子ラベルに一度に色を付けるには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを用いて、タイトルまたはラベルを選択します。
2. Color メニューから色を選択します。

タイトルの幅

タイトルの幅を変更するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを使用してタイトルをクリックします。タイトルの右側にサイズ変更ハンドルが表示されません。
2. サイズ変更ハンドルをドラッグして、タイトルの幅を変更します。

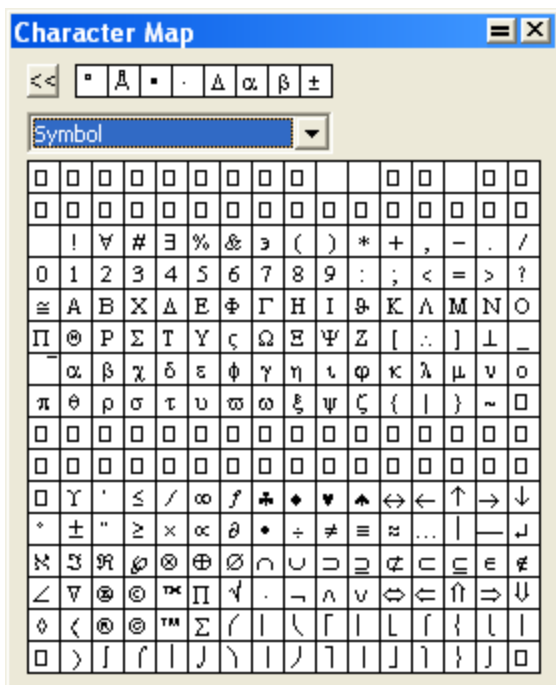
フォントについて

ChemDraw では、コンピュータにインストールされているフォントが使用されます。ChemDraw のドキュメントに特定のコンピュータで使用できないフォントが含まれている場合は、使用できるフォントに置き換えられます。

Character Map

浮動表示される文字フォント表ウィンドウは、あらゆるフォントで 256 文字の ASCII 文字を表示します。標準のフォントは Symbol です。

Character Map を使用して、各種のフォント スタイルで記号をドキュメントに追加できます。この表の表示/非表示を切り替えるには、View メニューの Show Character Map Window をクリックします。下図に文字フォント表を示します。



文字フォント表は、テキスト フィールドが編集のため開かれている場合にのみアクティブです。テキスト ボックスを開いた状態でウィンドウ上にマウスを置き、ウィンドウ右上コーナーの文字を拡大バージョンで表示します。表で文字をクリックすると、その文字がテキスト フィールドに入力されます。選択したフォント（文字フォント表ウィンドウに表示されているフォント）はその文字にのみ適用されます。テキスト フィールド内のアクティブなフォントは変更されません。

ウィンドウの上端には、最近使用した 8 文字が表示されます。1 つの文字を複数の異なるフォントで使用した場合は、その同じ文字がこのセクションに複数回表示されることがあります。Back ボタンをクリックすると、表示されている文字を順番に選択することができます。

ホットキー

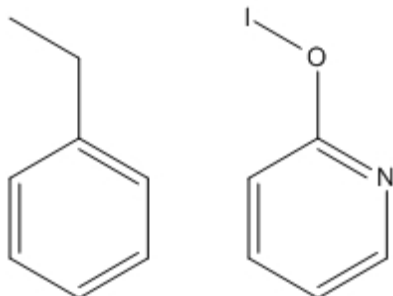
ホットキーとは、キーボード上のキーの中で、特定の原子ラベルにリンクされているキーのことです。ChemDraw のホットキーを使用して、原子のラベル付けや原子属性の適用が迅速にできます。ChemDraw で使用されるホットキーは、ChemDraw Items フォルダの Hotkeys.xml ファイルに含まれています。ホットキーを追加、または変更するには、テキスト エディタでこのファイルを編集します。

ホットキーの使い方

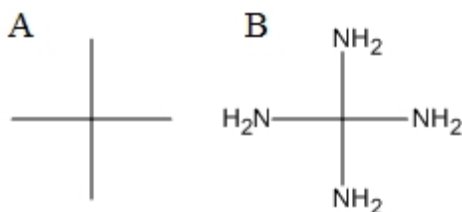
ホットキーを使うと、ワンタッチで官能基を化学構造に追加できます。たとえば、炭化水素鎖の末端に tert-ブチル基を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 炭化水素鎖を描画します。
2. 官能基を追加する場所をポイントします。
3. キーボードの 3 キー（tert-ブチル基のホットキー）を押します。構造式に “t-Bu” が追加されます。
4. 構造式の “t-Bu” を選択し、Structure メニューの Expand Label をクリックします。

n (窒素)、o (酸素)、i (ヨウ素) の各ホットキーを使用すると、エチルベンゼンをピリジン-2-イル次亜ヨウ素酸塩に変換できます。



一度に複数の原子にラベルを付けることもできます。たとえば、ネオペンタン (図 A) をメタンテトラアミン (図 B) に変更できます。



1. ネオペンタンの化学構造を作成します。
2. Shift キーを押しながらクリックして、すべての末端炭素を選択し、キーボードの n キーを押します。

 **注:** ホットキーの一覧については、51 ページの “ショートカットとホットキー” を参照してください。

ニックネーム

構造式に原子記号を追加する最も簡単な方法は、テキスト フィールドに記号を入力することです。しかし、一度に 1 つずつ原子を入力するとは限りません。ニックネームを使用すると、各原子を描画しなくても官能基、鎖などの構造的特徴を追加できます。

ニックネームとは、部分構造式を表す英数字の略称です。ニックネームは、大きな構造式や、同じ機能を繰り返し使用する構造式を描画する場合に便利です。

構造的特徴にニックネームを割り当てることができます。後で描画にニックネームを簡単に追加できるように、ニックネームにホットキーを割り当てることもできます。ニックネームの定義の詳細については、152 ページの “ニックネームの定義” を参照してください。

ニックネームの使用

ニックネームを利用すると、官能基に省略名を付け、それを原子ラベルやラベルの一部として使うことができます。原子にニックネームのラベルを付けても、展開された構造式の化学的意味は変わりません。

よく使われる Me、Et、Ph などのニックネームは、ChemDraw Items フォルダに格納されています。このリストにあるニックネームの編集や削除ができます。

ニックネームにはホットキーを割り当てることができます。たとえば、ホットキー 4 を押すと、フェニル基を示す "Ph" のラベルが原子に付けられます。

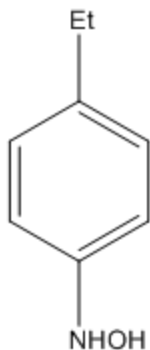
ニックネームの適用

ニックネームは、入力するか、ニックネーム リストから選択します。ニックネームの定義の詳細については、[152 ページの "ニックネームの定義"](#)を参照してください。

ニックネームを利用して原子にラベルを付けるには、次の操作を行ってください。

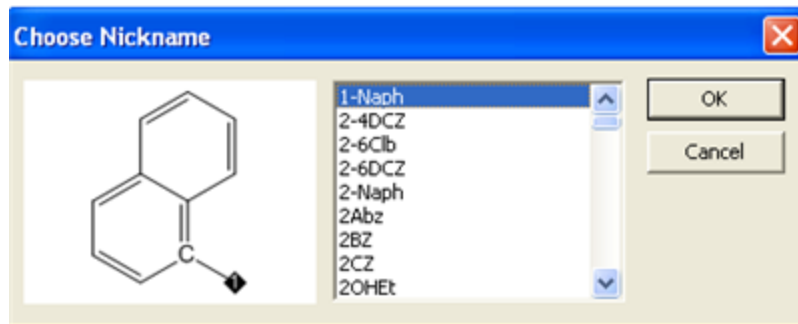
1. 構造式で、原子を結合ツールでダブルクリックするか、テキスト ツールでクリックします。原子ラベル テキスト フィールドが表示されます。次のいずれかの操作を行ってください。
 - 「Et」などのニックネーム ラベルを入力します。
 - **File** メニューの **List nicknames** をクリックします。List Nicknames ダイアログ ボックスが表示されます。
 - 必要なニックネームを選択し、**Paste** をクリックします。
 - **Done** をクリックします。

次に例を示します。




ホットキーを使用して原子に適用するニックネームを選択するには、次の操作を行ってください。


1. 原子をポイントします。
2. ホットキー = (等号) を押します。Choose Nickname ダイアログが表示されます。



3. リストからニックネームを選択します。

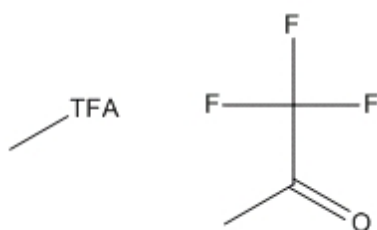
 **ヒント:** ニックネーム リストをスクロールするよりも、ニックネームの先頭の文字のキーを押すことによって、リスト内をすばやく移動できます。

4. **OK** をクリックします。

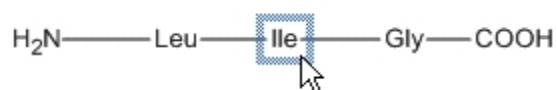
 **注:** ニックネームの文字列自体には化学的意味がないため、自動文字配置の使用時にニックネームを構造式の左側に配置しても、向きが反転することはありません。たとえば、ニックネームが定義されていなければ、ラベル "OTHP" は "PHTO" と表示されます。一方、ニックネーム "THP" は定義されているので、ラベルは "THPO" と表示されます。詳細については、[33 ページの「テキストの配置」](#)を参照してください。

ニックネームの展開

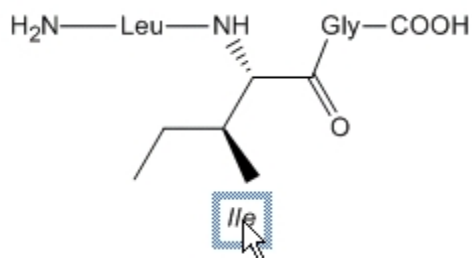
構造式に定義済みのニックネーム、長い原子ラベル、簡略化したラベルがあれば、ChemDraw は構造式を元の展開形式に戻すことができます。定義済みのニックネームを含む構造式を展開している間、ニックネームは展開された構造式によって以下のように置き換えられます。



生体高分子の場合、ニックネームを展開すると、残基ラベルが展開されたアミノ酸の下側に表示されます。例として、グリシン、イソロイシン、ロイシンの 3 つのアミノ酸の鎖を操作する場合を示します。



アミノ酸を選択するには、以下のようにニックネームをダブルクリックします。



原子のニックネームを展開するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを選択します。
2. 展開するラベルを選択するか、構造式をダブルクリックします。構造式をダブルクリックすると、構造式内のラベルがすべて選択されます。
3. **Structure** メニューの **Expand Label** をクリックします。構造式が展開された形式で再描画されます。

展開されたニックネームを簡略化するには、次の操作を行ってください。

1. 生体高分子構造式で、展開した部分を選択します。
2. **Structure** メニューの **Contract Label** をクリックします。構造式が簡略化された形式で再描画されます。

 **注:** この操作は、生体高分子にのみ適用できます。

注釈

注釈は、オブジェクトに関する簡単な説明、またはオブジェクトの属性に関するコメントです。注釈は、検索および閲覧時に、オブジェクトの機能やカテゴリを識別するのに便利です。注釈はキーワードで分類されます。標準では、数種類のキーワード (Name、Description、GUID (Globally Unique Identifier) Type、Other Info) が設定されています。ユーザーが独自のキーワードを追加することもできます。テンプレート ファイル内の多くのオブジェクトには、注釈が関連付けられていて、ファイル内でオブジェクトを識別するのに役立ちます。オブジェクトに注釈を付けるには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Annotate** をクリックします。Annotate ダイアログが表示されます。
3. Keyword リストで、次のいずれかの操作を行います。
 - キーワードを選択する。
 - **Add New Keyword** を選択する。
4. オブジェクトまたは描画に付記するメモ (注釈) の内容を **Content** テキスト フィールドに入力します。
5. **OK** をクリックします。

キーワードの削除

キーワードを削除すると、そのキーワードに対応するメモ (注釈) もすべて削除されます。

1. Annotate ダイアログで、キーワード リストからキーワードを選択します。
2. **Delete Keyword** をクリックします。
3. **OK** をクリックします。

プリファレンスの設定

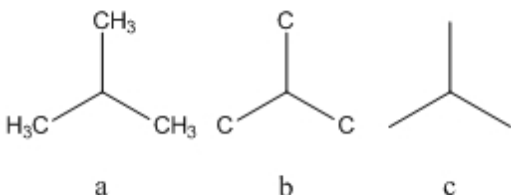
ChemDraw を使用する際に、タイトルやラベルの体裁を毎回指定できます。指定した変更は、アプリケーション全体で使用できます。File メニューの **Preferences** をクリックし、**Building/Display** タブをクリックします。そこで、次のいずれかのオプションを選択します。

Automatic Atom Label Alignment (原子ラベルの自動配置). 原子ラベルの配置は、その原子ラベルに結び付く結合の位置に従って調整されます。たとえば、水平方向の結合の左端に入力した "CH₃" は "H₃C" に変更されます。

Automatically Rectify Hydrogens in Atom Labels (原子ラベルにある水素数の自動修正). 描画内容を変更するときに必要に応じて原子ラベルの水素が自動的に追加または削除され、標準的な原子価が常に保持されます。たとえば、エチレンを作成するためにエタンの結合次数を増やすと、"CH₃" が "CH₂" に変更されます。

標準とする原子ラベル スタイルの設定

原子ラベルの標準の文字スタイルを設定するには、File メニューの **Document Settings** をクリックし、**Atom Labels** をクリックします。このタブでは、フォントのスタイルやベースラインのスタイルを変更したり、末端炭素や暗黙的な水素の表示/非表示を切り替えたりすることができます。



ドキュメントの標準の原子ラベル スタイルを設定するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Documents and Settings** をクリックします。
 2. **Atoms Labels** タブの **Show Labels on Terminal Carbons** チェック ボックスをオンにします。
 3. **OK** をクリックします。
- 1 つ以上の構造式の標準の原子ラベル スタイルを設定するには、次の操作を行ってください。
1. (1 つまたは複数の) 構造式を選択し、選択した構造式を右クリックします。
 2. コンテキスト メニューの **Object Settings** をクリックします。Object Settings ダイアログが表示されます。
 3. **Atoms Labels** タブの **Show Labels on Terminal Carbons** チェック ボックスをオンにします。

末端炭素のラベルを追加または削除するには、その原子を右クリックし、**Show Terminal Carbon Labels** をオン/オフします。

化学的意味

標準では、可能な限りタイトルを化学的意味があるものと見なします。たとえば、分子ではなくラベルとして“CH3OH”などのラベルを作成した場合でも、それに結合を付加することができます（適切に修正されます）。さらに、その値は Analysis ウィンドウに含められます。誤った原子価が含まれるラベルは、赤いボックスでマークされます。

赤いボックスを削除するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールで該当するラベルを選択します。
2. 右クリックし、コンテキストメニューの **Interpret Chemically** をオフにします。
3. 化学的意味を有効にするには、ラベルを右クリックし、**Interpret Chemically** をクリックします。

解析データ

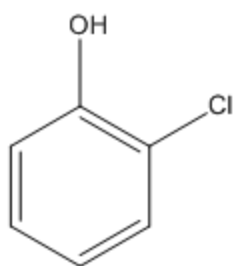
タイトルには、Analysis ウィンドウに表示される属性データを追加できます。自動更新がオンになっている場合は、構造式の変更時に値が更新されます。自動更新の詳細については、[161 ページの“自動更新”](#)を参照してください。

タイトルに解析データを追加するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を右クリックし、コンテキストメニューの **Analysis** をクリックします。
2. 追加する属性を選択します。

Chemical Formula: C₆H₅ClO

Molecular Weight: 128.56



環の描画

メイン ツール パレットには、さまざまなサイズとタイプの環を描画できる以下のツールが含まれています。

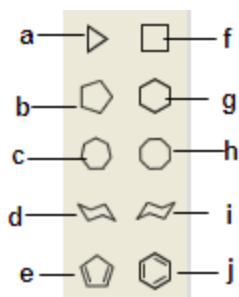


図 6.3: a) シクロプロパン、b) シクロペンタン、c) シクロヘプタン、d) いす形シクロヘキサン (1)、e) シクロペンタジエン、f) シクロブタン、g) シクロヘキサン、h) シクロオクタン、i) いす形シクロヘキサン (2)、j) ベンゼン

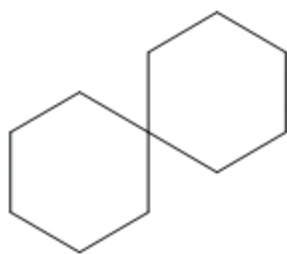
環を描画するには、次の操作を行ってください。

1. メイン ツールバーで環ツールを選択します。
2. ドキュメント内をクリックし、カーソルをドラッグして環の向きを決めます。

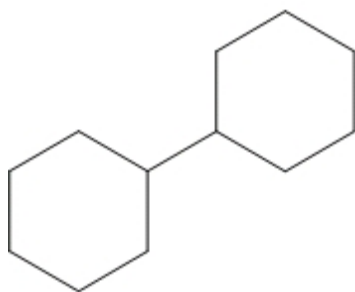
既存の構造式内の原子または結合を環ツールでクリックすると、環とその原子または結合が縮合します。また、ホットキーを使用して環を縮合させることもできます。詳細については、[52 ページの“結合ホットキー”](#)を参照してください。環のサイズを縮小することもできます。詳細については、[63 ページの“環サイズの縮小”](#)を参照してください。

スピロ結合および結合を挟んだ環の追加

標準では、環ツールで環内の原子をクリックすると、スピロ結合が形成されます。ただし、キーボードで Alt キーを押しながら原子をクリックすると、環が追加されます。



この標準動作を変更して、スピロ環ではなく結合を挟んで環を追加するように設定することもできます。



1. File メニューの Preferences をクリックします。
2. Building/Display タブで、Sprout Rings Instead of Spiro When Clicking チェック ボックスをオンにします。

いす形シクロヘキサン環

いす形シクロヘキサン環ツールは、横と縦の 2 つの方向に描画できます。単にクリックすることによって、いす形シクロヘキサン環を描画すると、いす形の環が水平方向に描画されます。

いす形シクロヘキサン環の向きを縦に変更するには、次の操作を行ってください。

1. いす形シクロヘキサン環ツールの 1 つを選択します。
2. 構造式をクリックして描画する方向にドラッグします。

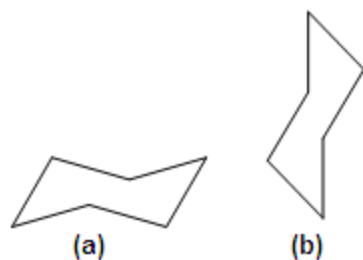


図 6.4: a) 水平方向、b) 垂直方向

芳香族構造式

非局在化環の描画

いす形シクロヘキサン環以外の任意の環ツールを使って、共鳴非局在化環を描画できます。

1. 環ツールを選択します。
2. Ctrl キーを押しながら、ドキュメント ウィンドウ内をドラッグまたはクリックして環を描画します。



共鳴構造

シクロペンタジエンまたはベンゼンは、複数の形式で描画できます。



シクロペンタジエン環ツールまたはベンゼン環ツールの二重結合は、2つの形式のいずれかで描画できます。通常、最初に描画される結合は二重結合です。これが、シクロペンタジエン環とベンゼン環ツールのポインタ上に表示される向きとなります。

描画するには、シクロペンタジエンまたはベンゼン描画ツールでドキュメント ウィンドウ内をクリックします。環の方向を変更し、最初に描画される結合を単結合にするには、次のいずれかの操作を実行します。

- 最初の単結合の始点から終点まで Shift キーを押しながらドラッグします。
- または、ドキュメント ウィンドウ内で Shift キーを押しながらクリックして、固定長の結合を描画します。


鎖

非環式鎖ツールまたは鎖式ツールのいずれかを使用すると、炭化水素鎖状化合物を描画できます。非環式鎖ツールを使用すると、直線状の炭化水素鎖状化合物を描画できます。

1. 非環式鎖ツールを選択します。
2. ドキュメント ウィンドウ内をクリックし、鎖を描画する方向にドラッグします。鎖の終端に表示される数字は、描画した原子の数を示します。

連鎖方向の変更

描画中に向きを変更するには、鎖式ツールを使用するか、選択した非環式ツールで Ctrl キーを押しながら目的の方向に鎖を描画します。

 **注:** 描画を終了するときは、先にマウス ボタンを離してから、**Ctrl** キーを離してください。

固定長の適用

固定長と固定角を適用すると、一定の結合長と結合角で構造式が作成できます。固定長は Drawing Settings ダイアログで設定します。固定角は常に 15 度の倍数になります。

固定長は、Object メニューで **Fixed Length** コマンドを有効 (チェック ボックスをオン) にしているときに、描画する結合の長さを指定した長さに固定するのに使用します。**Clean Up Structure** コマンドで修正された構造式の望ましい結合長も調整されます。

Fixed Lengths が有効になっている場合は、非環式鎖状化合物上のポインタをドラッグすると、X 軸に対して任意の角度で描画できます。鎖状化合物の鎖の長さが一定であれば、最初の結合とそれに続くすべての奇数番号の原子の位置は、ドラッグする方向によって定まります。マウス ボタンを離す前に反対方向にドラッグすると、この位置が変わります。

Fixed Lengths を無効にしている場合は、**Ctrl + Alt** キーを押しながら連鎖の方向を反転します。向きを反転するには、**Fixed Angles** を有効にする必要があります。

固定角

Fixed Angles が有効になっている場合、非環式鎖の X 軸に対する角度は 15 度の倍数に制限されます。

構造式への非環式鎖の追加

非環式鎖を既存の構造式に追加するには、その構造式の原子をクリックします。クリックし、鎖状化合物を描画する方向にドラッグします。

鎖の長さの指定

描画する前に鎖の長さを正確に指定するには、次の操作を行ってください。

1. 非環式鎖ツールを選択します。
2. ドキュメント ウィンドウ内の描画した原子または空白部分をクリックします。Add Chain ダイアログが表示されます。
3. 鎖内の炭素原子の個数を入力します。
4. **Add** をクリックします。

同じ長さの別の鎖をドキュメント ウィンドウ内に追加するには、**Alt** キーを押しながら、鎖の開始位置をクリックします。

オブジェクト

メイン ツールバーにある各種ツールを使用して、図形をドキュメントに追加することができます。ツールパレットは、切り離して描画ウィンドウ内の好きな場所に置くことができます。回転ハンドルを使用してオブジェクトを回転させたり、サイズ変更ハンドルまたは変形ハンドルを使用してオブジェクトのサイズを変更したり、変形させたりできます。

矢印

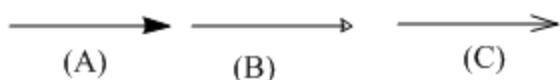
矢印は、反応物から生成物への変換を表したり、電子の流れを示したりするのに使用できます。矢印は、長さや角度のほか、矢先の幅と形状をカスタマイズできます。また、矢印を中央部からドラッグして、任意の長さの円弧を作成することもできます。円弧を作成すると、矢印の角度が変更されます。

なげなわ選択ツール、矩形選択ツール、または矢印ツールを選択した状態で、矢印の上にマウスを移動すると、調整ハンドルが表示されます。以下に例を示します。

調整ハンドルをドラッグすると、矢印の長さ、角度、形状を変更できます。**Fixed Angles** が有効な場合、矢印の角度の変更は、 15° の倍数の角度に制限されます。Alt キーを押しながらドラッグすると、任意の角度に設定できます。ペン ツールを使用して任意のなめらかな曲線を描画することにより、矢印を作成し、矢先を追加することもできます。

矢先

矢印の先端（矢先）の形状は、塗りつぶし、中抜き、線引きの 3 種類です。形状を変更するには、矢印を右クリックし、コンテキストメニューから形状を選択します。



矢印の先端（矢先）の形状は、A) 塗りつぶし、B) 中抜き、C) 線引きです。

矢印の種類

ChemDraw には、×印付きの矢印、長さの異なる平衡矢印、楕円弧など、さまざまな円弧や矢印が用意されています。

円弧矢印

次の 2 通りの方法で円弧矢印を作成できます。

1. 直線矢印の円弧調整ハンドルをクリックしてドラッグします。

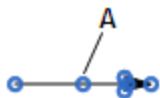
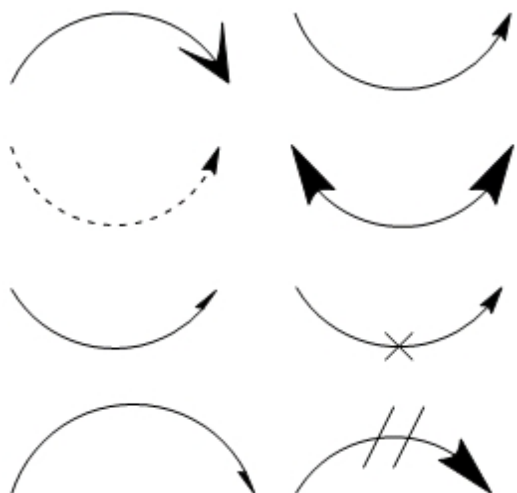


図 6.5: A) 矢印の調整ハンドル

2. 矢印パレットから円弧矢印を選択する。

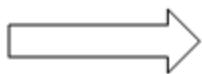
円弧矢印は、直線矢印と同じように簡単にカスタマイズできます。いくつかの例を以下に示します。



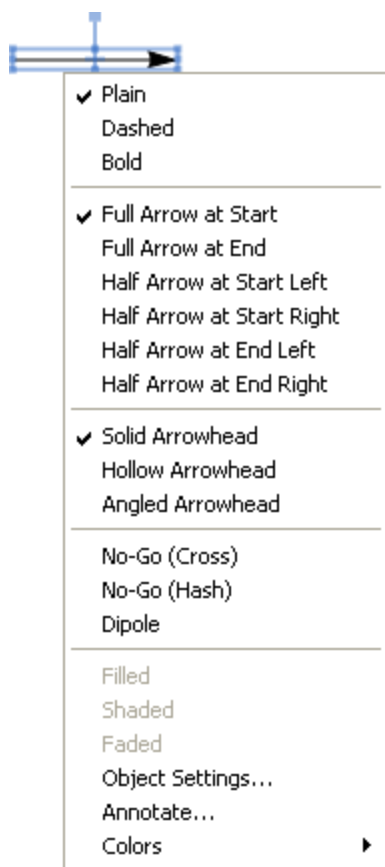
- a. 長さの変更を除き、矢印に加えた変更をすべて取り消す場合は、同じ矢印ツールで矢印をクリックします。
- b. 変更を加えていない矢印や、長さのみを変更した矢印をクリックすると、向きを反転することができます。

中抜き矢印

中抜き矢印は、回転させることや、長さや幅を変更することができます。通常の矢印と同様に、角度を変更したり、円弧矢印を作成したりすることができます。




矢印はコンテキストメニューで変更できます。これらのコンテキストメニューのコマンドの一部は、Curvesメニューにもあります。ツールにない矢印（太い点線や双極子など）を作成するには、コンテキストメニューを使用します。



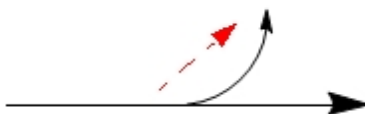
矢印の連結

既存の矢印のいずれかの端または中間点に対し、新しい矢印を連結できます。

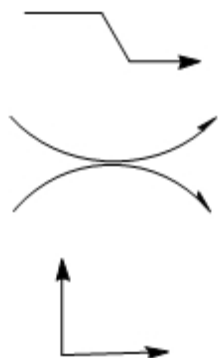
 **注:** コンテキストメニューの “left” (左) および “right” (右) は、矢印の先端の向きに対する相対的な方向を表します。

たとえば、既存の矢印の中間点から伸びる新しい矢印を描画するには、次の操作を行います。

1. 矢印パレットで、新しい矢印の種類を選択します。
2. 既存の矢印の中間点にカーソルを合わせ、Shift キーを押します。調整ハンドルは強調表示された小さな四角形に変わり、カーソルは “+” 記号に変わります。
3. Shift キーを押したままドラッグして、既存の矢印の中間点から新しい矢印を描画します。



また、既存の矢印同士をドラッグして連結することもできます。以下に例を示します。



また、矢印は、なげなわ選択ツールや矩形選択ツールのほか、構造式の 三次元表示ツールでも回転できます。構造式の三次元表示ツールを使用する際の詳細については、138 ページの “構造式の三次元表示” を参照してください。これらの方法を組み合わせると、多種多様な矢印を描画できます。

平衡矢印

平衡矢印の場合は、長さを変更すると、両方の矢印が同じ比率で変更され、矢先の形状を変更すると、両方の矢先が同じように変更されます。



いずれか一方の矢印の長さを変更するには、Alt キーを押したままにします。新しい調整ハンドルが 2 つ表示されます。いずれか一方の平衡矢印を調整する場合、その矢印を元の長さ以上の長さにはできません。



曲線矢印

矢印ツールバーに含まれている矢印の多くは曲線状にすることができます。矢印を描画に貼り付けてから、矢印の中央にある選択点をクリックしてドラッグします。

選択点をドラッグしていくと、円弧の角度が度数で示されます。

色付き矢印

矢印に色を付けるには、次の操作を行ってください。

1. 描画ウィンドウで、色を付ける矢印を選択します。
2. Color メニューから色を選択します。

ブロック矢印の色付け

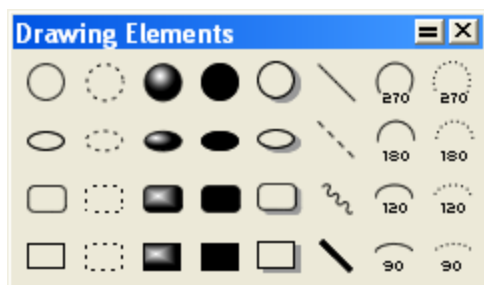
ブロック矢印（単純な線で構成される矢印ではない）の場合、Filled、Faded、Shaded といったオプションを使って、さまざまな色効果を適用することができます。

ブロック矢印に色効果を適用するには、次の操作を行ってください。

1. 矢印パレットからブロック矢印を選択し、ブロック矢印を右クリックします。
2. Color メニューから色を選択します。
3. コンテキストメニューの Filled、Faded、または Shaded を選択します。

描画要素

描画要素とは、円や四角形などの図形のことです。



1. 描画要素を構造式とグループ化するには、Object メニューの Group をクリックします。96 ページの “オブジェクトのグループ化” を参照してください。
2. オブジェクトを移動するには、選択ツールでオブジェクトを選択し、クリックしてドラッグします。94 ページの “オブジェクトの移動” を参照してください。

円と楕円

円または楕円を描画するには、次の操作を行ってください。

1. いずれかの円ツールまたは楕円ツールをクリックします。
2. 円または楕円の中心となる位置をポイントします。
3. 円の中心から外側に向かってドラッグします。

サイズ変更と回転

楕円や四角形については、長さや幅の両方を調整してサイズと形状を変更できます。円について調整できるのは半径のみです。また、四角形は、隅にもハンドルがあり、長さや幅を同じ比率で調整できます。

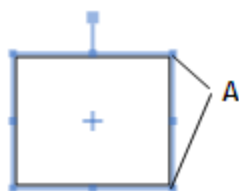


図 6.6: A) 四角形の隅にあるハンドル

1. 図形に対応する描画ツールまたは選択ツールでポイントして調整ハンドルを表示します。
2. クリックし、ドラッグして形状を変更します。

線

線は結合線に似ていますが、扱いが異なります。

- 線は化学的解釈の対象になりません。
- 複数の線が交差する場合にも実線として表示されます。結合線の場合はそうではありません。

線を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 描画要素ツールバーで、線ツールを選択します。
2. 描画ウィンドウ内の、線を開始したい位置をクリックします。

円弧

実線または点線の円弧を描画できます。描画できる円弧の中心角は 90°、120°、180°、270° です。円弧を描画するには、次の操作を行ってください。

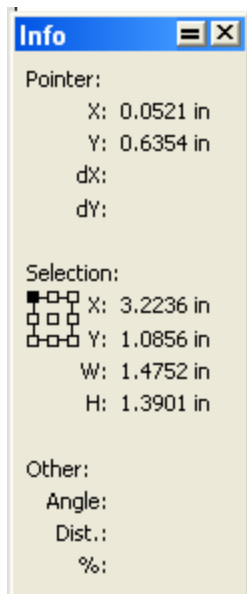
1. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - ChemDraw Standard では、円弧ツールをポイントしてドラッグし、パレットから角度を選択します。
 - その他の ChemDraw アプリケーションでは、描画要素ツールをポイントしてドラッグし、ツールパレットから角度を選択します。
2. 左から右にドラッグすると凸型円弧が作成され、右から左にドラッグすると凹型円弧が作成されます。

円弧の編集

円弧のサイズ変更または回転を行うには、次の操作を行ってください。

1. 円弧ツールで円弧をポイントします。両端と中間点にドラッグポイントが表示されます。
2. 円弧のいずれかの端をドラッグして長さを変更します。
3. 中央点をドラッグして曲がり方を変更します。
4. 選択ツールを使用して、サイズを変更するか、回転させます。

Info ウィンドウを表示するには、View メニューの **Show Info Window** をクリックします。円弧の両端間の距離および右回りの終端の X 軸に対する角度が Info ウィンドウに表示されます。



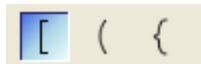
サイズ変更ハンドルをドラッグすると、拡大率または縮小率が Info ウィンドウに表示されます。回転ハンドルをドラッグすると、回転角度が Info ウィンドウに表示されます。Info ウィンドウの詳細については、94 ページの “Info ウィンドウ” を参照してください。

括弧

括弧には中括弧 { }, 大括弧 [], および丸括弧 () があります。一般に、大括弧はポリマーを示すときに使用します。ポリマーの詳細については、263 ページの “ポリマー” を参照してください。

単括弧

単括弧は、任意の向きに描画できます。括弧ツール パレットから単括弧ツールを選択します。



1. 括弧を開始する位置をポイントします。
2. 括弧の一方の端から他方の端までドラッグします。

対括弧

対括弧は縦方向のみに配置できます。ただし、対括弧を描画したら、それを選択して、水平位置または任意の方向に回転させることができます。枠またはボックスで位置を定義します。


対括弧を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 括弧ツール パレットから対括弧ツールを選択します。
2. 括弧の角となる位置をポイントします。
3. ボックスの一方の角から対角に、斜めにドラッグします。

ダガー

ダガーを描画するには、次の操作を行ってください。

1. 括弧ツール パレットからダガー ツールを選択します。
2. 描画ウィンドウ内をクリックします。

 **注:** ダガーのサイズを変更するには、ダガーを選択して、いずれかのサイズ変更ハンドルをクリックしてドラッグします。

オブジェクトを囲む

描画やグループ化した構造式は、矩形、大括弧、中括弧、または丸括弧で囲むことができます。オブジェクトを囲むには、次の操作を行ってください。

1. 取り囲む描画を選択します。
2. **Object** メニューの **Add Frame and select a frame type** をクリックします。

ペン ツール

ペン ツールは、曲線や図形をフリーハンドで描画するときに使います。

曲線を描画するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- メイン ツールバーのペン ツール パレットから曲線描画ツールを選択し、描画ウィンドウでクリックし、カーソルをドラッグします。
- **View、Other Toolbars、Pen Tools** の順に選択します。曲線描画ツールを選択し、描画ウィンドウでクリックしてカーソルをドラッグします。


曲線の編集

曲線編集ツールで選択して操作することにより、曲線を編集できます。

編集する既存の曲線を選択するには、次の操作を行ってください。

1. メイン ツールバーのペン ツール パレットから曲線編集ツールを選択します。
2. 曲線をポイントします。正しい位置をポイントすると、カーソルは “+” から矢印に変わります。
3. クリックして曲線を選択します。下図のように、選択した曲線に沿って調整ハンドルが表示されます。

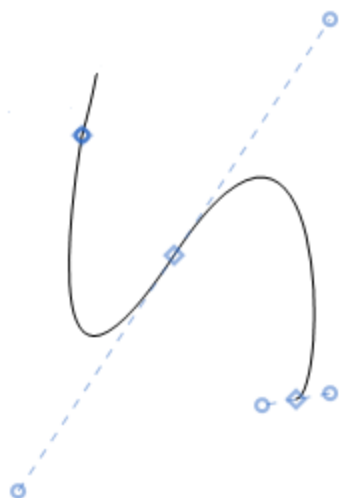


“+” 記号の付いた手のカーソル () が表示されます。ただし、曲線上の点にカーソルを合わせると、“+” 記号が消え、手のカーソルが表示されます。

曲線の形状の変更. 曲線の端にある正方形のハンドルを使用して曲線の長さを調節できます。方向線の終点を使用して曲線の方向を変更できます。

曲線の形状を変更するには、次の操作を行ってください。

- 方向線をドラッグして目的の形状を作成します。



セグメントの追加. 曲線編集ツールで曲線を選択し、曲線編集ツールを選択した状態でドキュメント ウィンドウ内をクリックすると、既存の曲線にセグメントを追加できます。曲線の端にセグメントが追加されます。

フリーハンドの図形

閉じたフリーハンドの図形を作成するには、曲線を描画し、**Curves** メニューの **Closed** をクリックします。曲線の属性を追加するには、**Curve** メニューまたは曲線ツールバーの **Filled**、**Faded**、または **Shaded** を選択します。曲線に矢先を付けて、任意の形状の矢印を作成することもできます。色を追加するには、**Color** メニューで色を選択します。

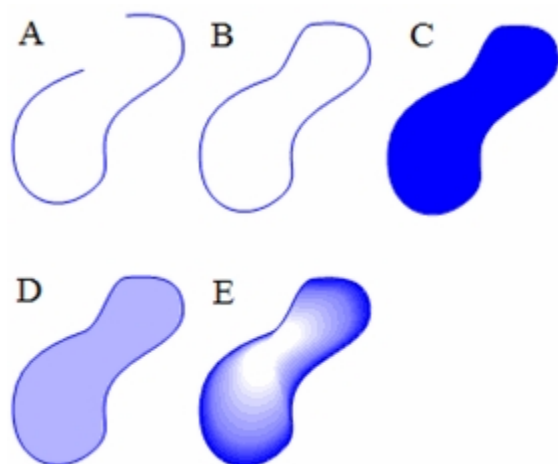


図 6.7: さまざまな属性のフリーハンドの曲線 A) 単純曲線、B) 閉曲線、C) 塗りつぶし、D) 淡色表示、E) 影付き

オブジェクトの選択

なげなわ選択ツールは任意の形の領域をフリーハンドで選択する場合に使用し、矩形選択ツールは長方形の領域を選択する場合に使用します。



構造式またはオブジェクトを選択すると、それを囲むように色付きのフレームが表示されます。フレームには、選択範囲の回転、変形、およびサイズ変更を行うためのハンドルがあります。

なげなわ選択ツール

なげなわ選択ツールを使用すると、不規則な形の領域をフリーハンドで選択できます。

なげなわ選択ツールを使用してオブジェクトを選択するには、次の操作を行ってください。

1. なげなわ選択ツールを選択します。
2. ポインタがどのオブジェクト上にもない状態で、マウス ボタンを押します。
3. 構造式やその他のオブジェクトの一部分を囲むようにドラッグします。

ドラッグ中は、選択領域を示す線が表示されます。この領域内に完全に含まれる結合や構造式などのオブジェクトのみが選択されます。

矩形選択ツール

矩形選択ツールを使用すると、長方形の範囲内にあるオブジェクトおよび構造式を選択できます。

1. 矩形選択ツールを選択します。
2. クリックし、構造式やその他のオブジェクトを囲むように、斜めにドラッグします。

ドラッグ中は、選択領域を示す四角形が表示されます。分子以外のオブジェクトは、その中心または少なくともオブジェクトの大半が、三角形の選択枠の内部にある場合のみ選択されます。

一方の選択ツールが、もう一方の選択ツールと同様に動作するように設定するには、Alt キーを押しながらいずれかのツールをクリックします。

選択ツールとその前に使用した描画ツールを交互に切り替えるには、Control + Alt + Tab キーを押します。

構造式全体の選択

- 1 つの構造式全体を選択するには、選択ツールで構造式内の結合または原子をダブルクリックします。その化学構造式やオブジェクトがグループの一部である場合は、グループ全体が選択されます。

クリックによるオブジェクトの選択

1. なげなわ選択または矩形選択ツールを選択します。
2. ドキュメント ウィンドウ内のオブジェクトをポイントします。
ポイントされたオブジェクトの上に強調表示ボックスが表示されます。
3. オブジェクトをクリックします。

選択したオブジェクトが選択枠内に表示され、カーソルが手の形に変わります。

注: グループ内のオブジェクトを個別に選択することもできます。96 ページの“オブジェクトのグループ化”を参照してください。

複数オブジェクトの選択

複数のオブジェクトを選択すると、各オブジェクトに選択ボックスが表示されます。

他のオブジェクトを選択対象に追加するには、Shift キーを押しながら、追加するオブジェクトを選択します。すべてのオブジェクトを選択するには、Edit メニューの Select All を選択するか、Ctrl + A キーを押します。

すべてのオブジェクトの選択解除

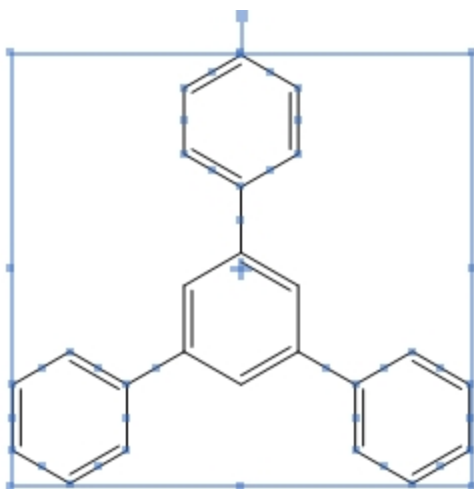
すべてのオブジェクトの選択を解除するには、次のいずれかの操作を行います。

- 選択枠の外側の空白部分をクリックします。
- Esc キーを押します。
- 他のツールを選択します。
- Shift キーを押さずに、別のオブジェクトをクリックします。

特定のオブジェクトの選択解除

選択された複数のオブジェクトのどれか 1 つを選択解除するには、Shift キーを押しながら、選択ツールでそのオブジェクトをクリックします。

注: 次の図に示すように、オブジェクトが選択枠に含まれているように見えても、選択されていないことがあります。下例の中央の環は選択されていません。



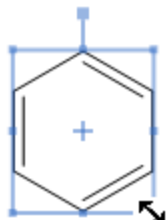
オブジェクトのサイズ変更

選択したオブジェクトのサイズ変更ハンドルをドラッグするか、またはスケール設定で、オブジェクトのサイズを変更することができます。

縦横比を保ったまま選択したオブジェクトのサイズを変更するには、次の操作を行ってください。

1. サイズを変更するオブジェクト（複数）を選択します。サイズ変更ハンドルは、選択枠の各角にあります。

2. サイズ変更ハンドルをポイントします。カーソルが双方向の矢印に変わります。

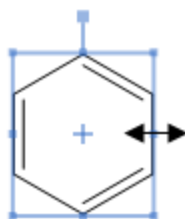


3. オブジェクトが目的のサイズになるまでハンドルをドラッグします。

ほとんどの場合、オブジェクトのサイズを変更してもオブジェクトの縦横比（オブジェクトの幅に対する高さの比率）は変わりません。ただし、化学構造式、円、ボックス、楕円などの特定のオブジェクトを変形することはできません。

水平方向または垂直方向にオブジェクトを変形するには、次の操作を行ってください。

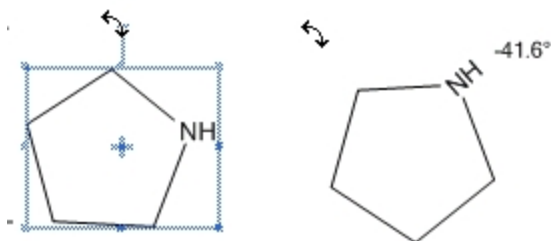
1. オブジェクトを選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - 変形する辺のハンドルをドラッグします。



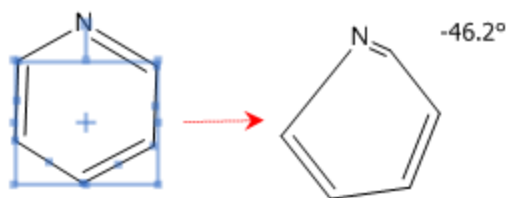
- Shift キーを押しながら、サイズ変更ハンドルを目的の方向にドラッグします。Shift キーを押しながらサイズ変更を実行すると、X 軸または Y 軸に沿ってオブジェクトを変形できます。

オブジェクトの回転

1. 回転させるオブジェクトを選択します。回転可能なオブジェクトの場合は、選択枠の上辺の外側に回転ハンドルが表示されます。
2. 回転ハンドルを右回りまたは左回りにドラッグします。
3. 原子ラベルを構造式と一緒に回転させるには、Ctrl キーを押しながら構造式をドラッグします。



注: 構造式を回転させるときに 1 つの原子を選択解除しておく、下の例のように構造式はその選択解除された原子を中心に回転します。



選択したオブジェクトを指定した角度で回転させるには、次の操作を行ってください。

- 次のいずれかの操作を行ってください。
 - Object メニューの **Rotate** をクリックします。
 - 回転ハンドルをダブルクリックします。Rotate Objects ダイアログが表示されます。
- 回転角の数値を入力し、右回転の場合は **degrees CW** を、左回転の場合は **degrees CCW** をクリックします。
- 原子ラベル テキストを回転させる場合は、**Rotate Atom Labels** を選択します。
- Rotate** をクリックします。オブジェクトは選択枠の中心を軸に回転します。

ドキュメント ウィンドウ内の任意のオブジェクトに対して同じ回転操作を繰り返すには、次の操作を行ってください。

- 回転を実行した直後に、回転させる他のオブジェクトを選択します。
- Edit メニューの **Repeat Rotate** をクリックします。

回転中心の移動

標準で、オブジェクトは中心を軸に回転します。しかし、回転の中心を移動すれば、オブジェクトを特定の原子やページ上のその他の場所を軸に回転させることができます。

回転中心を移動するには、次の操作を行ってください。

- オブジェクトを選択します。図のように、回転中心標識 (“+”) がオブジェクトの中心に表示されます。

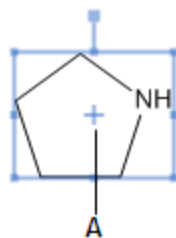


図 6.8: A) 回転中心

- Alt キー を押しながら、標識をクリックして別の場所へドラッグします。次の例を参照してください。



図 6.9: B) 移動した回転中心

- オブジェクトを回転させるには、回転ハンドルをクリックしてドラッグします。回転中心を標準の位置にリセットするには、オブジェクトを選択解除します。

 **注:** 原子付近にドラッグすると、回転中心は原子の位置に合わせて配置されます。

オブジェクトの移動


- 選択ツールで移動するオブジェクトを選択します。
- オブジェクトをクリックし、移動先にドラッグします。

移動の方向を水平方向または垂直方向のみに制限するには、Shift キーを押しながら選択したオブジェクトをドラッグします。

細かい幅での移動は、オブジェクトの位置揃えに役立ちます。

オブジェクトを少しずつ移動するには、次の操作を行ってください。

- オブジェクトを選択します。
- 矢印キーを押します。選択されたオブジェクトが矢印の方向に 1 ポイント移動します。

 **注:** より大きな幅でオブジェクトを移動するには、Alt キーを押しながら矢印キーを押します。選択されたオブジェクトが矢印の方向に 10 ポイント移動します。

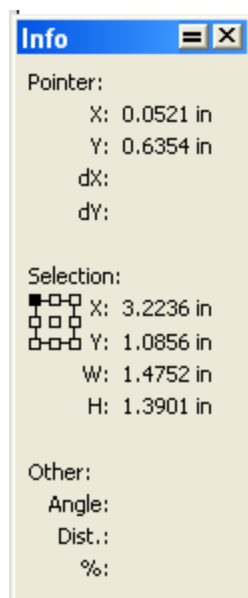
オブジェクトのコピー

- 1 つ以上のオブジェクトを選択します。
- Ctrl キーを押しながらオブジェクトをドラッグすると、オブジェクトのコピーが作成されるので、それを適当な場所に配置します。

コピーを配置するとき移動の方向を垂直方向または水平方向のみに制限するには、Shift + Ctrl キーを押しながら移動します。

Info ウィンドウ

このウィンドウには、ポインタのサイズと位置、または選択されている項目のサイズと位置が表示されます。このウィンドウの表示/非表示を切り替えるには、View メニューの Show Info Window をクリックします。



Pointer

X および Y には、マウス ポインタの現在位置の座標が表示されます。 dX および dY は、移動した選択対象の X 座標と Y 座標の変化量を示します。

Selection

X および Y には、選択対象の位置が表示されます。 W および H は、それぞれ幅と高さを表します。

Other

Angle は、結合角、または選択対象の回転角度を表します。*Dist* は、結合距離、または選択対象が移動した距離を表します。オブジェクトのサイズ変更時には、元のサイズに対する現在のサイズの比率が % に表示されます。

鏡像

X 軸または Y 軸に垂直な平面を軸にして構造式を反転させることができます。構造式をコピーすることで、構造式の鏡像を作成して立体異性体を作成できます。

鏡像を作成するには、次の操作を行ってください。

1. 定義済みの立体化学構造式、たとえばウェッジ結合の構造式を描画します。
2. Ctrl キーを押しながら、コピーする構造式をドラッグします。
3. コピーを選択した状態で、**Object** メニューの **Flip Horizontal** または **Flip Vertical** をクリックします。オブジェクト ツールバーの水平反転ツールまたは垂直反転ツールを使用することもできます。

オブジェクトの削除

選択したオブジェクトを削除するには、次のいずれかの操作を行います。

- Delete キーを押します。

- Edit メニューの **Clear** をクリックします。
- 消しゴム ツールを使用します。


構造式の統合

2 つの構造式を統合してその間で結合が共有されるようにするには、次の操作を行ってください。

1. 最初の構造式内で結合を選択します。
2. Shift キーを押しながら、2 番目の構造式内で目的の結合をクリックして選択します。
3. **Object** メニューの **Join** をクリックします。

2 つの構造式を統合してその間で原子が共有されるようにするには、次の操作を行ってください。

1. 統合する原子同士がほぼ向き合うように 2 つの化学構造式を配置します。
2. 統合する 2 つの原子を選択します。
3. **Object** メニューの **Join** をクリックします。

 **注:** 異なる色の結合や原子を統合すると、一番手前のオブジェクトの色が、統合した新しいオブジェクトの色になります。ラベルが付いている 2 つの原子を統合すると、一番手前の原子ラベルが、作成される新しい原子の原子ラベルになります。オブジェクトの前後の順番についての詳細は、13 ページの “ページ レイアウト” を参照してください。

オブジェクトのグループ化

グループとは、単一のオブジェクトとして振る舞うオブジェクトの集まりです。選択ツールでそのオブジェクトに含まれるオブジェクトをダブルクリックするだけで、グループ化されたオブジェクトをすべて選択することができます。

グループ化されたオブジェクト内部のオブジェクトを個別に選択できないようにするには、*Integral* グループを作成します。Integral グループでは、その中のどのオブジェクトを選択しても、グループ全体が選択されます。Integral 以外のグループ内のオブジェクトは、グループの一部であっても個別に選択し、操作できます。

グループ化されたオブジェクトの位置や方向は変更可能です。グループ内の各オブジェクトでは、グループ化されたオブジェクトを回転、整列、または間隔調整しても、それぞれの相対位置が維持されます。

1 つの化学構造式を構成する原子と結合は常にグループ化されます。構造式の一部と他のオブジェクトとをグループ化すると、構造式全体がグループ化されます。グループ化された構造式に原子や結合を加えると、その新しい原子や結合もグループの一部になります。

オブジェクトをグループ化するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを用いてオブジェクトを選択します。
 2. **Object** メニューの **Group** をクリックします。
- グループ内の個別のオブジェクトを選択するには、オブジェクト上に選択ツールを移動し、オブジェクトが強調表示されたら 1 回クリックします。
 - グループ化されたオブジェクトを選択するには、グループ内のオブジェクト上に選択ツールを移動し、オブジェクトが強調表示されたらダブルクリックします。


個々のオブジェクトを選択できないグループ (Integral グループ) を作成するには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Group** をクリックします。
3. グループを右クリックし、**Group** メニューの **Integral** をクリックします。

Integral グループを通常のグループに戻すには、次の操作を行ってください。

1. Integral グループを選択します。
2. グループを右クリックし、**Group** メニューの **Integral** をクリックしてオフにします。

オブジェクトのグループ化の解除

 **注:** テンプレート ドキュメント内にある多くの図形と描画は *Integral* グループです。ただし、グループ化を解除したり、編集することはできません。

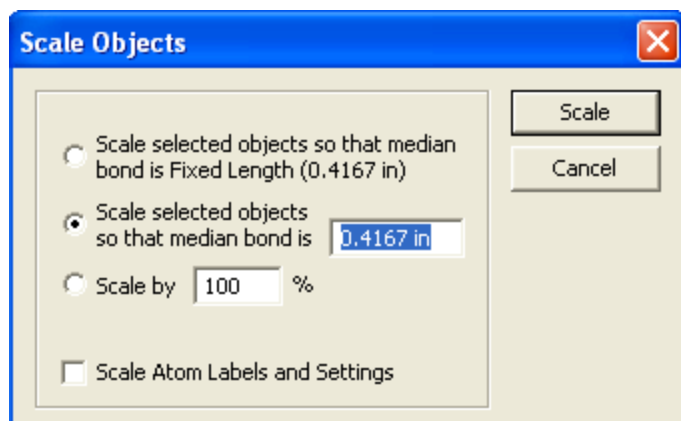
オブジェクトのグループ化を解除するには、次の操作を行ってください。

1. グループを選択します。
2. **Object** メニューの **Ungroup** をクリックするか、グループを右クリックして **Group** メニューの **Ungroup** をクリックします。

オブジェクトの拡大縮小

1 つ以上のオブジェクトを拡大縮小して別のサイズに変更するには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - **Object** メニューの **Scale** をクリックします。
 - サイズ変更ハンドルをダブルクリックします。Scale Objects ダイアログが表示されます。



3. 次のいずれかの操作を行ってください。

- 結合のサイズを変更し、指定の固定長が新しい中間結合長になるためには、**Scale selected objects so that median bond is Fixed Length (0.4167 in)** を選択します。
 - 結合長を新しく指定した固定長に変更するには、**Scale selected objects so that median bond is** を選択して、テキスト フィールドに新しい中間結合長を入力します。
 - オブジェクトのサイズを現在のサイズに対して一定の比率に変更するには、**Scale by** を選択して、テキスト フィールドで比率を指定します。拡大するには 100% より大きな値を指定し、縮小するには 100% より小さな値を指定します。

4. **Scale** をクリックします。

オブジェクトの中央配置


オブジェクト（またはオブジェクトのグループ）をページの中央に配置するには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Center on Page** をクリックします。

選択枠の中心がページの中央になるように、選択したオブジェクトが移動します。


オブジェクトの整列

複数のオブジェクトの中心または端を揃えて、垂直または水平に整列できます。

 **注:** オブジェクトは、ページで一番上に表示されている選択オブジェクトに合わせて整列されます。

2 つ以上のオブジェクトを整列させるには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Align** をクリックします。

 **注:** 選択ツールを使用して構造式や基の一部のみを選択すると、選択した部分のみを使用して整列が実行されますが、構造式または基の全体が移動します。

オブジェクトの間隔調整

間隔調整コマンドを用いて、オブジェクトを水平方向または垂直方向に等間隔に配置します。

3 つ以上のオブジェクトを均等に配置するには、次の操作を行ってください。

1. 均等に配置するオブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Distribute** をクリックし、**Vertically** または **Horizontally** を選択します。

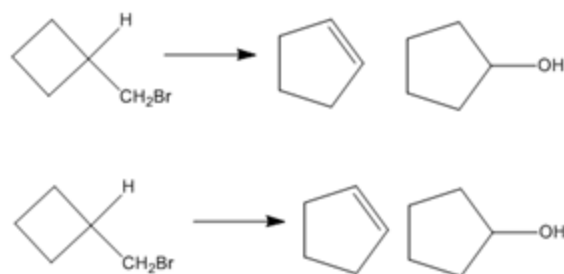


図 6.10: オブジェクトの間隔調整

各オブジェクトは等間隔に配置されます。選択されたオブジェクトの上下左右の位置は変わりません。

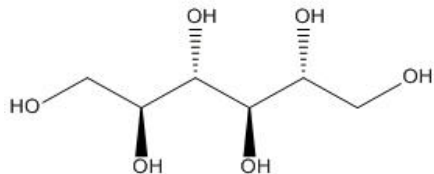
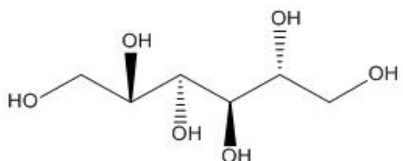
構造式の整形

Clean Up Structure コマンドは、結合長や結合角を標準化し、描画された分子を見やすくします。矢印や芳香族円環などのグラフィック オブジェクトには影響しません。フリーハンドで描いた構造式を再描画したり、他のアプリケーションからインポートした構造式を見やすくするために使用できます。

化合物の中には、**Clean Up Structure** コマンドを選択したときにページ外にはみ出すような構造式が生成される場合があります。構造式全体を表示させるためには、構造式のサイズを変更するか、印刷ページを拡大してください。97 ページの“オブジェクトの拡大縮小”、および 15 ページの“ページ設定”を参照してください。

Clean Up Structure 機能には以下の規則が適用されます。

- 結合は、ドキュメント設定で指定された目標とする固定長に設定されます。詳細については、45 ページの“ドキュメント設定”を参照してください。
- 環が再描画されるのは、環を構成するすべての結合が選択されている場合だけです。
- 多重結合原子ラベル、可変結合点、および多中心結合は、成型できません。
- 可能な限り多くの結合の角度が 15 度の倍数になるように構造式が回転します。
- **Clean Up Structure** は、次のようにウェッジ結合やハッシュ結合を正確に表示するよりも、立体化学的な意味を優先して保持します。



Clean Up Structure を使用するには

1. 整形する構造式または構造式の一部を選択します。
2. **Structure** メニューの **Clean Up Structure** をクリックするか、Shift + Ctrl + K キーを押します。

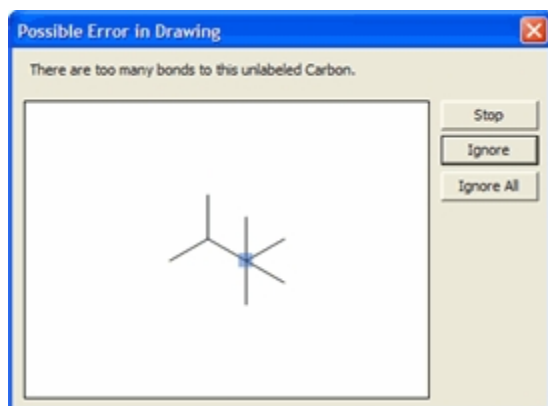
注: *Clean Up Structure* コマンドは構造式を繰り返し処理で再描画します。そのため、このコマンドを何回か選択しなければならないことがあります。

反応または生体高分子も整形できます。詳細は、[144 ページの“反応の整形”](#)、および [119 ページの“生体高分子の整形”](#)を参照してください。

構造式の検査

Check Structure コマンドで、選択した構造式、構造式の一部、タイトル (Formula スタイル) の化学属性をチェックできます。標準原子価、元素、定義済みのニックネームなどを用いて構造式をチェックします。構造式の中の選択したすべての原子価をチェックするには、次の操作を行ってください。

1. 化学構造、化学構造の一部、またはタイトルを選択します。
2. **Structure** メニューの **Check Structure** をクリックします。
化学構造が正しくない場合は、次のようなメッセージ ウィンドウが表示されます。



3. 引き続き構造式をチェックする場合は、**Ignore** をクリックします。
4. 以降のエラーをすべて無視する場合は、**Ignore All** をクリックします。
5. エラーのチェックを停止する場合は、**Stop** をクリックします。

コピーした化学構造の検査

クリップボードから構造式をコピーする度に構造式の検査を自動的に実行するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **General** タブの **Check Structure When Copying to Clipboard or Exporting** をクリックします。

この変更はすべてのドキュメントに影響します。

化学的な警告

ChemDraw では、化学構造の作成中に、その化学的な構文がチェックされます。構造式にエラーが検出されると、オブジェクトの周りに赤い波線のボックスが表示されます。このボックスは画面に表示されるだけで印刷はされません。

化学的な警告の抑止

標準設定では、警告が表示されます。化学的な警告を抑止するには、**View** メニューの **Show Chemical Warnings** をクリックします。

特定のオブジェクトのエラー検査を抑止するには、そのオブジェクトを右クリックし、コンテキストメニューの **Display Warnings** の選択を解除します。

オブジェクトについて **Display Warnings** を無効にすると、

- 赤いボックスはオブジェクトの周囲に表示されなくなります。
- 構造式に問題がないかどうかは **Check Structure** コマンドで確認できます (**Structure** メニューの **Check Structure** をクリックします)。

問題の内容を表示するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- マウスで警告をポイントして、ツール ヒントに表示されるエラーの内容を確認します。
- 警告を右クリックし、**Explain This Warning** を選びます。
- 構造式を選択し、**Structure** メニューの **Check Structure** をクリックします。

警告オプション

化学警告の表示タイプを選択するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. **Warnings** タブをクリックします。
3. 警告のタイプを選択し、**OK** をクリックします。

警告のタイプの一覧を次の表に示します。

警告	説明
Valence and Charge Errors	描画されたオブジェクトに不適切な原子価または電荷が含まれています。たとえば、同一の元素に対して正と負の電荷が割り当てられている場合、複数の方法で電荷が割り当てられている場合、またはニックネーム、総称ニックネームまたは代替基名に電荷が割り当てられている場合に表示されます。
Unbalanced Parentheses	“開”括弧に対する“閉”括弧が存在しません。
Invalid Isotopes	無効な同位体に対して表示されます。たとえば、元素記号の前に上付き文字の数字があるラベルで、その数字が認識されている同位体に対応していない場合に、この警告が表示されます。たとえば、 $^{24}\text{CH}_3$ などです。
Isolated Bonds	ラベルのない単結合が別の結合に結び付いていません。
Atoms Near Other Bonds	原子は結合の近くにありますが、結合されていません。
Unspecified Stereo	不斉中心にウェッジ結合、ハッシュ結合、点線結合、または太線結合がありません。

警告	説明
Chemistry	
Ambiguous Stereochemistry	描画された構造式から絶対立体化学構造を判別できない立体中心です。たとえば、太線結合によって 4 つの異なる配位子に連結されている炭素原子には、この警告が表示されます。
Stereobond between Chiral Atoms	2 個の立体中心を結ぶ立体結合です。
Linear Atom	ラベルが付いていない原子が 180 度の角度を作る 2 つの同一の結合に割り当てられています。

BioDraw (Professional レベルのみ)

ChemDraw には、酵素や受容体などの代謝経路を描画するためのさまざまなツールがあります。BioDraw ツールバーを表示するには、**View** メニューの **Show BioDraw Toolbar** をクリックします。

描画要素ツール パレットまたは矢印ツール パレットを使用して、円、楕円、矢印などの標準的な図形を含めることもできます。また、曲線ツールを使用して自由な図形を作成することもできます。

オブジェクトの色を変更したり、線と塗りつぶしの属性を変更したり、回転したりすることができます。

BioDraw オブジェクトを作成するには、ページ上でオブジェクトを表示する場所をクリックまたはドラッグします。クリックした場合は既定値の大きさと形状で作成され、ドラッグした場合はオブジェクトを拡大/縮小できます。X 軸または Y 軸上をドラッグすることで形を変えることもできます。線形のオブジェクトはドラッグした方向に引き延ばされます。細胞膜およびタンパク質のツール (DNA およびヘリックス) では、ドラッグに応じてサブユニットが追加され、サブユニット数が表示されます。オブジェクトのグループ化を解除して不要な部分を移動または削除し、オブジェクトの必要な部分のみを保持できます。

オブジェクトのグループ化を解除するには、次の操作を行ってください。

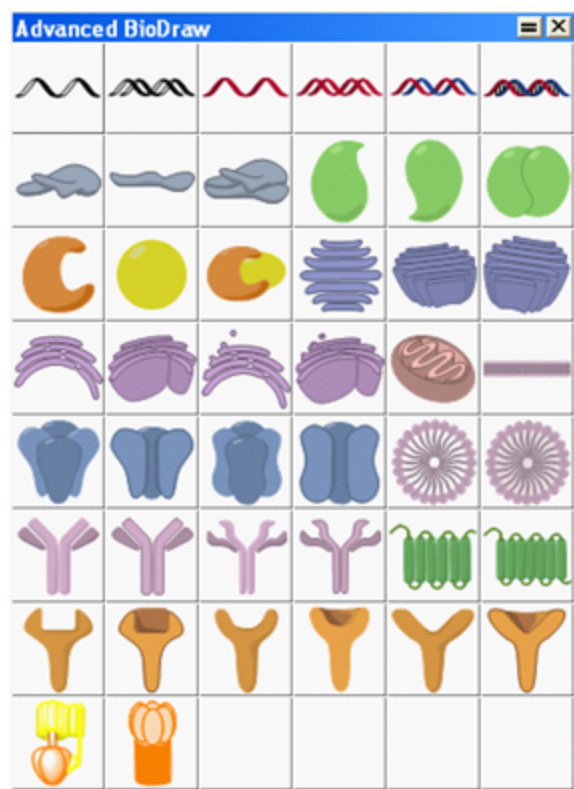
1. コンテキスト メニューから **Group**、**Integral** の順に選択します。
2. **Group** メニューの **Ungroup** を選択します。オブジェクトのグループ化が解除され、各オブジェクトを個別に移動できます。

BioDraw テンプレート

ChemDraw Professional には、出版物用にフルカラーで生体系を描画するための各種テンプレートが用意されています。

1. テンプレートを開くには、次の操作を行ってください。
 2. **View** メニューの **Templates** をクリックします。
- 目的のテンプレート ツールバーを選択します。使用可能な BioDraw のテンプレートの一部を次に示します。

Advanced BioDraw



Anatomy のテンプレート



Animals



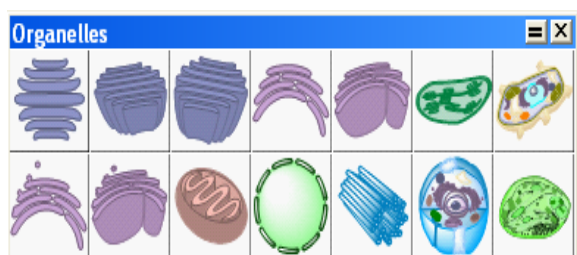
Bio Instruments



Microorganisms



Organelles



詳細は、150 ページの “テンプレート” を参照してください。

カスタマイズ可能なオブジェクト

次の表に、BioDraw ツールバーのカスタマイズ可能な BioDraw オブジェクトを示します。BioDraw オブジェクトをカスタマイズするときには、選択ツールまたは作成時に使用したツールを使用する必要があります。

ツール	カスタマイズ可能なオプション
受容体	幅
G タンパク質、ガンマサブユニット	形状
ヘリックス タンパク質	高さ、ストランドの幅、円柱の幅、間隔
DNA	高さ、ストランドの幅、2 番目のストランドのオフセット、間隔
細胞膜 (線)	サブユニットの大きさ (全体の長さは変わらず、サブユニットの数は大きさに反比例して変わります)
細胞膜 (円弧)	長さ、円弧、サブユニットの大きさ
細胞膜 (楕円)	サブユニットの大きさ
ミセル	サブユニットの大きさ
プラスミド マップ	マーカーと領域の追加/調整
リボソーム	大きさ変更、色
tRNA	大きさ変更、色

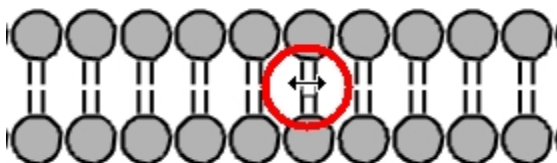
BioDraw ツールバーの次のツールは、カスタマイズできません。


イオンチャネル	G タンパク質 (アルファ サブユニット)
イオンチャネル	G タンパク質 (ベータ サブユニット)
免疫グロブリン	ゴルジ体
小胞体	ミトコンドリア
微細な網状組織	
雲	大きさ変更、色

細胞膜 (線)

1. BioDraw ツールバーから細胞膜 (線) ツールを選択します。
2. 目的とする大きさで細胞膜 (線) を描画するにはクリックしてからドラッグします。標準の大きさで描画する場合はクリックのみです。

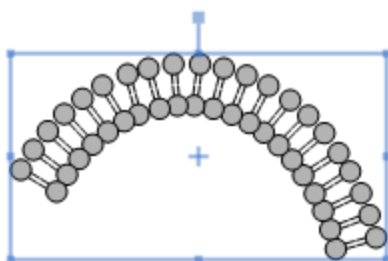
固定角が適用されている場合 (**Object** メニューの **Fixed Angles** をクリック)、細胞膜の向きを変更する場合は 15 度単位での変更となります。この制限を無視して操作を行うには、**Shift** キーを押しながらドラッグします。細胞膜ユニットの大きさを変更するには、細胞膜の中心部にある調節用のハンドルをクリックしてドラッグします。



 **ヒント:** 細胞膜の長さを変更するには、細胞膜を選択して、選択ボックスの左または右のハンドルをドラッグします。選択を解除してサブユニットの大きさを再調整できます。

細胞膜 (円弧)

細胞膜 (円弧) を作成するには、BioDraw ツールバーの細胞膜 (円弧) ツールを使って曲線をクリックしてドラッグします。



ツールには 3 つの調整ハンドルがあります。

- 始点のハンドルでは長さを調整できます。
- 中央のハンドルではサブユニットの大きさを調整できます。
- 先端のハンドルでは円弧を調整できます。

ヘリックス タンパク質

ヘリックス タンパク質を作成するには、次の操作を行ってください。

1. BioDraw ツールバーからヘリックス タンパク質ツールを選択します。
2. ドキュメント ウィンドウ内でドラッグして描画します。クリックすると標準の大きさで描画されます。

固定角が適用されている場合 (Object メニューの **Fixed Angles** をクリック)、タンパク質の向きを変更する場合は 15 度単位での変更となります。この設定を無視して操作を行うには、**Shift** キーを押しながらドラッグします。

ヘリックス タンパク質には 4 つの調整ハンドルがあります。高さ、ストランドの幅、円柱の幅、および間隔です。

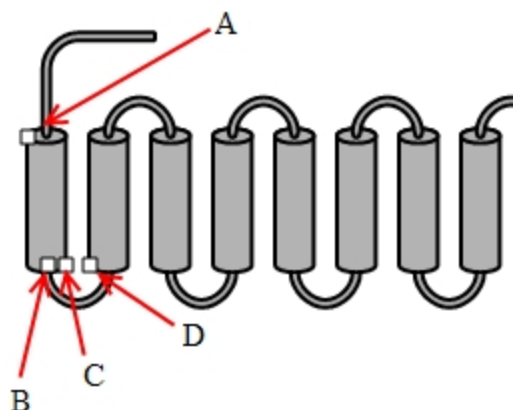


図 7.1: ヘリックス タンパク質の調整ハンドル。A) 高さの調整、B) ストランドの幅、C) 円柱の幅、D) 円柱の間隔

DNA 分子

DNA 分子を作成するには、次の操作を行ってください。

1. BioDraw ツールバーで DNA ツールを選択します。
2. 作業領域でドラッグして描画します。クリックすると標準の大きさと描画されます。

Object メニューの **Fixed Angles** オプションが選択されている場合、DNA の向きを変更するときには、15 度単位での変更となります。標準の動作を無視するには、**Alt** キーを押しながらドラッグします。

DNA には 4 つの調整ハンドルがあります。高さ、ストランドの幅、2 番目のストランドのオフセット、および間隔です。

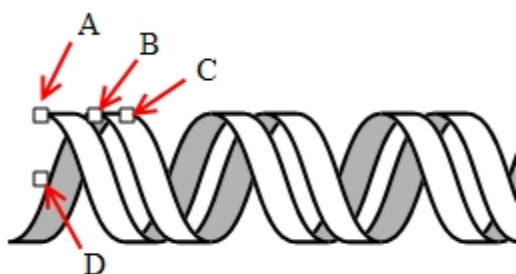


図 7.2: DNA の調整ハンドル: A) 高さの調整、B) 間隔、C) 幅、D) オフセット

残基の色付け

タンパク質または DNA ストランドを描画した後で、色付けツール（濃淡付け、影付け、塗りつぶし）を使用して個々の残基に色を付けることができます。

1. 矩形選択ツールまたはなげなわ選択ツールを使用して、色付けを行う残基を選択します。
2. Color メニューで目的の色を選択します。
3. Curves メニューで、Filled、Shaded、または Faded を選択します。

tRNA

tRNA 分子を作成するには、次の操作を行ってください。

1. BioDraw ツールバーで tRNA ツールを選択します。
2. 作業領域をクリックし、tRNA オブジェクトが目的の大きさになるまでドラッグします。

tRNA 分子を描画した後で、必要に応じて修正できます。

リボソーム

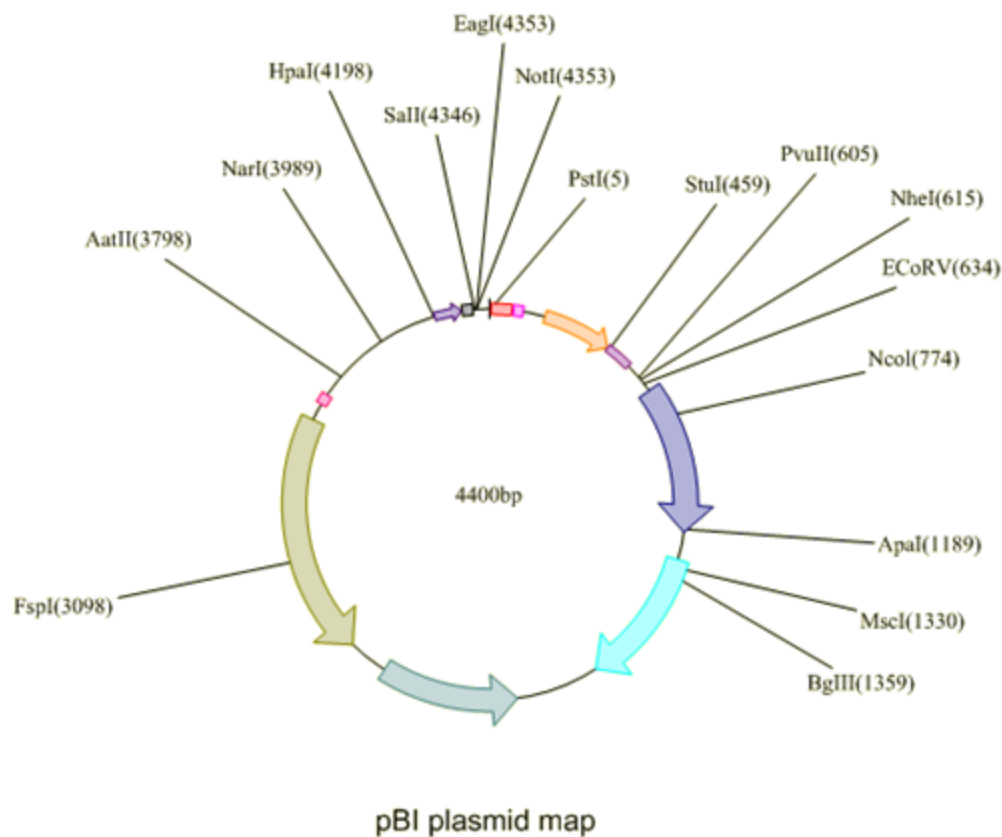
リボソームを描画するには、次の操作を行ってください。

1. リボソームまたは BioDraw ツールバーのリボソーム ツールをクリックします。
2. 作業領域をクリックし、リボソーム オブジェクトが目的の大きさになるまでドラッグします。

オブジェクトを描画した後で、外観を変更できます。

プラスミド マップ

プラスミド マップを描画するには、マップで表す塩基対の数を入力してから、マーカーを追加します。簡易な pBI プラスミド マップの例を次に示します。



プラスミド マップの作成

1. BioDraw ツールバーから、プラスミド マップ ツールを選択します。
2. プラスミド マップを描画する描画ウィンドウをクリックします。Insert Plasmid Map ダイアログが表示されます。
3. Insert Plasmid Map ダイアログで、マップの塩基対の数を入力し、OK をクリックします。プラスミド マップが描画されます。

領域の追加

領域は、プラスミドのフラグメントを表します。マップへは、必要に応じていくつでも領域を追加できます。領域を追加するには、次の操作を行ってください。

1. プラスミド マップを右クリックし、コンテキスト メニューの **Regions** を選択します。
2. **Regions** ダイアログで、フラグメントの始めと終わりの塩基対の数をそれぞれのフィールドに入力します。たとえば、1 ~ 1000 までのすべての塩基対を含むフラグメントの場合、テキスト フィールドに「1」および「1000」と入力します。
3. フラグメントの **Start** と **End** の塩基対の数を描画に表示するには、**Add Markers At Region Ends** を選択します。
4. **Add** をクリックします。
5. 領域をさらに追加するには、手順 2 ~ 4 を繰り返します。
6. **OK** をクリックします。

マーカーの追加

プラスミド マップの塩基対にマーカーで注記を付けることができます。たとえば、塩基対またはフラグメントにラベルを付けるにはマーカーを追加します。

マーカーを追加するには、次の操作を行ってください。

1. プラスミド マップを右クリックし、コンテキスト メニューの **Markers** を選択します。
2. **Markers** ダイアログ ボックスで、マーカーを追加する塩基対の数を **Position** ボックスに入力します。
3. **Label** テキスト ボックスで、マーカーを識別するためのテキストを入力します。
4. **Add** をクリックします。
5. **OK** をクリックします。

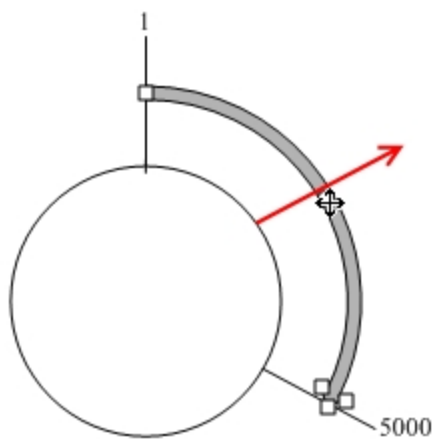
マーカーの移動


マーカー ラベルを移動するには、ラベルをクリックしてドラッグします。ラベルの値を編集することもできます。

領域の大きさ変更

領域の矢印は、大きさを変更して異なる塩基対を示したり、外側へ延長して強調したりすることができます。

1. 選択ツールで領域の矢印の先端にカーソルを移動します。矢印の大きさ変更ハンドルが表示され、カーソルが両方向の矢印 (↔) に変わります。
2. 大きさ変更ハンドルをクリックしてドラッグし、矢印の大きさを調整します。



矢印を延長するには、上の図のカーソル（）が示す中央ハンドルをクリックしてドラッグします。

描画の拡張

プラスミド マップは他の描画と同じように操作できます。色や網かけを追加したり、線の幅を変更したり、テキストを変更することができます。

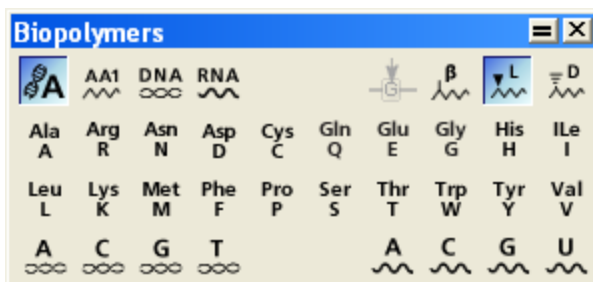
生体高分子の描画

生体高分子は、精密で明確な形状と構造を有する複合的な分子集合体です。生体高分子の明確な形状と構造は、その役割を果たすうえで重要な鍵となります。生体高分子は、化学ブロックの反復で構成される鎖状の分子から成り、長大な構造を持つことがあります。生体高分子は、構成される反復単位によって次の 3 つのグループに分類されます。

- 糖分で構成される多糖類
- アミノ酸タンパク質
- 核酸（ヌクレオチド）

ChemDraw には、生体高分子の描画やシーケンスの作成を容易に行うためのわかりやすいインターフェイスが用意されています。生体高分子エディタを使用することにより、核酸やアミノ酸に割り当てられた定義済みのラベルを使ってポリペプチドやヌクレオチド配列を描画できます。ラベルの展開、簡略化、削除といった操作により、描画を完成させることができます。

Biopolymer ツールバーを表示するには、**View、Show Biopolymer Toolbar** の順に選択します。Biopolymers ツールバーが表示されます。



Biopolymers ツールバーには次のオプションがあります。

- **生体高分子エディタ**:すべての核酸およびアミノ酸を描くことができます。
- **アミノ酸 (1 文字ラベル)**:すべてのアミノ酸を描くことができます。
- **ベータ アミノ酸、L 型アミノ酸、D 型アミノ酸**:ベータ、L 型、および D 型のアミノ酸を追加できます。
- **DNA 配列**:DNA 分子の作成に使用できるデオキシリボヌクレオチドを描けます。
- **RNA 配列**:RNA 分子の作成に使用できるリボヌクレオチドを描けます。

シーケンスを描画するには、次の操作を行ってください。

1. Biopolymer ツールバーから次のいずれかのツールを選択します。

AA1 ツール (アミノ酸 (1 文字ラベル) ツール). 各種アミノ酸を表す 1 文字のラベルを使用してポリペプチド鎖を作成します。

標準アミノ酸の IUPAC コードを入力するか、ツールバーのアイコンを押してシーケンスを作成できます。標準では、L 型アミノ酸が作成されます。1 文字ラベルのシーケンスは、分離が固定されて描画されるため、残基は隣接

する行の残基の位置と合わせられます。D 型アミノ酸の立体化学構造オプションを使用して D 型アミノ酸を作成できます。

D 型アミノ酸 (1 文字ラベル) は、小文字で表示されます。D 型アミノ酸 (3 文字ラベル) には「D-」の接頭辞が付加されます。

注: Shift キーを押すと、切り替えられます。したがって、L モードのときに D 型アミノ酸を入力するには、Shift キーを押しながら 1 文字ラベルのシーケンスを入力します。一方、D モードのときに L 型アミノ酸を入力するには、Shift キーを押しながら 1 文字ラベルのシーケンスを入力します。

注: 114 ページの“生体高分子エディタ”を使用してアミノ酸 (3 文字ラベル) を入力し、キーボードまたはツールバーから残基を入力できます。

DNA ツール. 各種核酸を表すラベルを使用して DNA 鎖を作成します。

RNA ツール. 核酸ラベルを使用して RNA 鎖を作成します。

2. シーケンスの開始位置をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。

3. テキスト ボックスに残基の 1 文字ラベルを入力します。

注: 残基ラベルの一覧については、124 ページの“IUPAC コード”を参照してください。

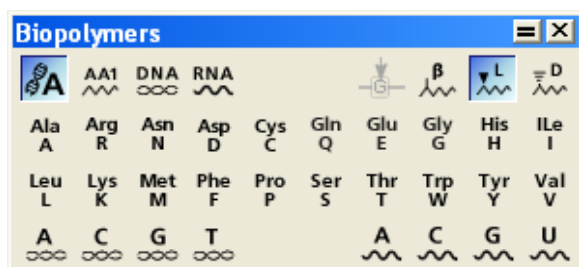
4. 残基ごとに手順 2 を繰り返します。

5. 鎖が完成したら、ENTER キー、または Esc キーを押します。

シーケンスの作成時に、標準では現在アクティブな残基の後に新しい残基が挿入されます。挿入位置は、オレンジ色の山形記号で示されます。Residue replacement ボタンを使用して、シーケンスを上書きしたり、置き換えることができます。また、アクティブな残基がないときに、残基の上にマウスを動かした状態でホットキーを押しても原子配列を置き換えることができます。

生体高分子エディタ


Biopolymers ツールバーには、生体高分子エディタというツールがあります。



生体高分子エディタを使用して、IUPAC コードの代わりに残基名を明示的に指定することにより、シーケンスを作成できます。英字を入力すると、オート コンプリート機能により、ライブラリ中の既知の残基に一致する名前が提示されます。たとえば、「a」と入力すると、「Ala」という残基が提示されます。提案を受け入れる場合は、Space または Enter キーを押します。Tab キーを押すと、入力位置が選択したラベルの終わりに移動します。

β アミノ酸を入力するには、bAla などのニックネームを入力します。「b」は、 β の記号に置き換えられます。生体高分子エディタの β -amino acid ボタンを使用して β アミノ酸を作成することもできます。 β アミノ酸は常に 3 文字略号で表示されます。グリシンにはベータ炭素がないため、ベータバージョンはありません。

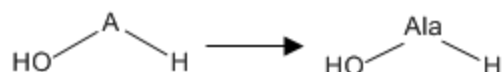
D 型アミノ酸を入力するには、残基名の前に「d-」を指定します。グリシンは非キラルでもあるため、Dバージョンはありません。

 **注:** D-amino acid ボタンと β -amino acid ボタンを同時に使用すると、D- β アミノ酸が生成されます。

生体高分子エディタの Residue replacement ボタンを使用して、原子配列を上書きしたり、置き換えたりすることもできます。詳細については、[121 ページの「残基の置換」](#)を参照してください。

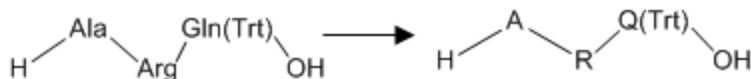
アミノ酸の切り替え

Toggle Amino Acid Style AA1 \leftrightarrow AA3 オプションにより、アミノ酸の表現形式を 1 文字から 3 文字（またはその逆）に切り替えることができます。次に例を示します。



1. シーケンスを選択します。
2. Toggle from Amino Acid Style AA1 \leftrightarrow AA3 を右クリックして選択します。

アミノ酸の表示は展開形式、置換形式、および保護形式に変更することもできます。次に例を示します。



Toggle Amino Acid Stereo L \leftrightarrow D オプションにより、アミノ酸の立体化学構造を L から D（またはその逆）に切り替えることができます。

アミノ酸を切り替えるには、次の操作を行ってください。

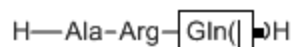
1. シーケンスを選択します。
2. Toggle Amino Acid Stereo L \leftrightarrow D を右クリックして選択します。

保護基

付加的な NH₂ 基または OH 基 (Arg, Aad) を含むアミノ酸に Trt や Fmoc などの保護基を追加することができます。保護基は、括弧 () で囲んで指定します。

保護基を追加するには、次の操作を行ってください。

1. シーケンスで、下記のように完全な残基名の後に「(」を入力します。

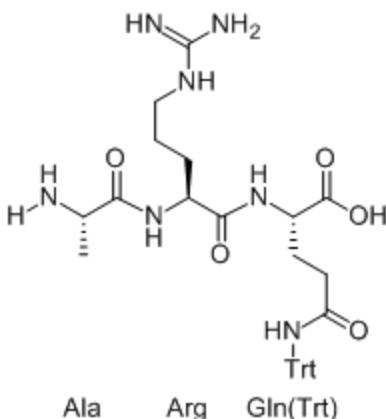


2. 保護基の名前を入力し、名前の終わりに「)」を入力します。

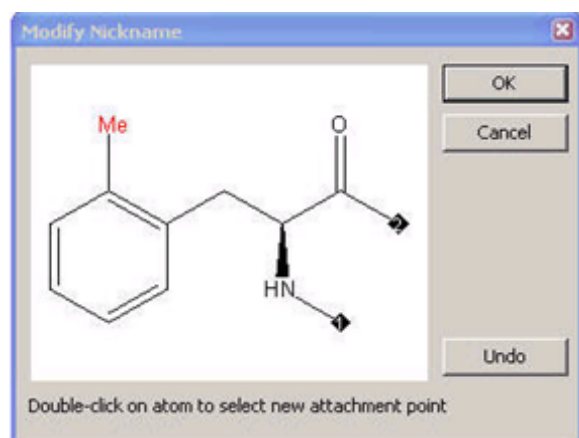


保護基の名前により、NH₂ 基または OH 基を保護するかどうか判断されます。接頭辞に 0 が使用されている場合は、OH 基を保護します。

通常の残基と同じように、保護された残基も展開したり、簡略化したりできます。



脱離基が見つからない場合は、「」を入力した後ダイアログが現れ、結合点を指定するように要求されます。



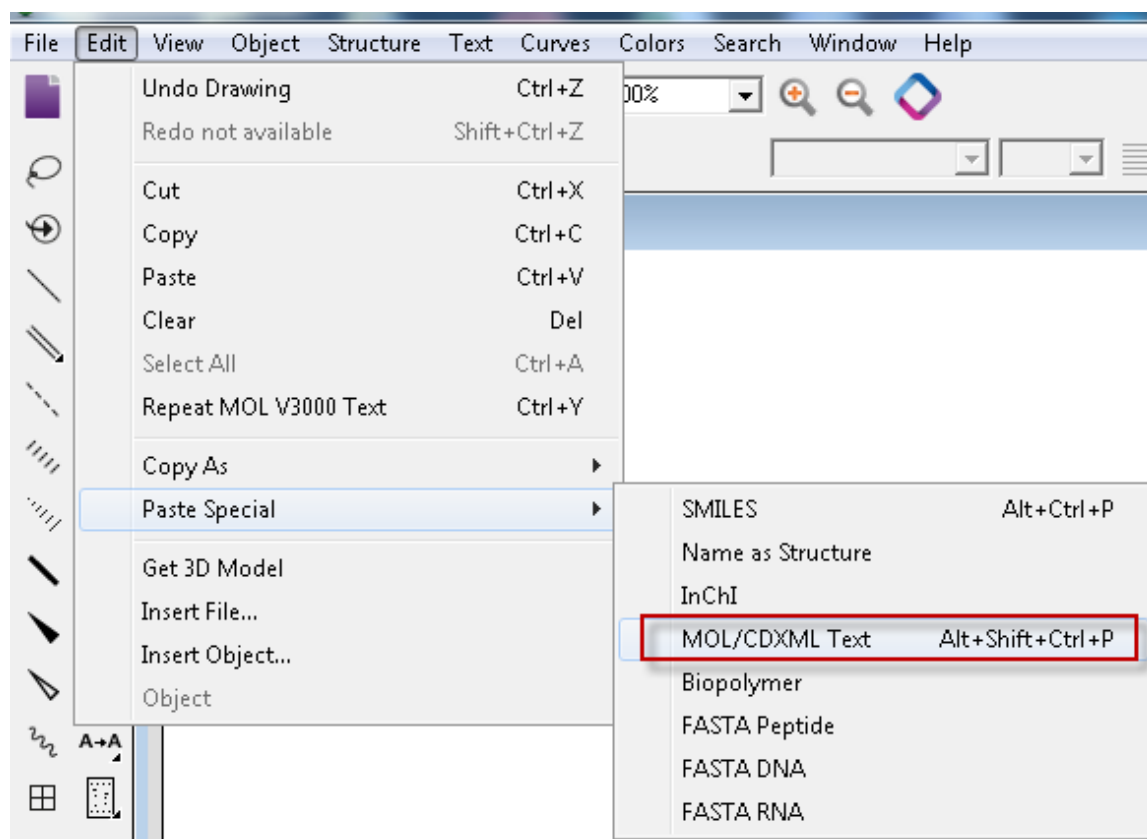
通常の残基と同じように、保護された残基も展開したり、簡略化したりできます。

シーケンスの貼り付け

シーケンスは、FASTA 形式で貼り付けることができます。1 文字ラベルの IUPAC コードは、FASTA 形式で表されるため、これがペプチド、DNA、RNA のいずれの生体高分子配列に対応するのかを指定する必要があります。残基を表す IUPAC 記号は、スペースや省略を表す文字を除き、すべて貼り付けることができます。

シーケンスを貼り付けるには、次の操作を行ってください。

1. 右クリックして、**Paste Special** サブメニューに移動します。

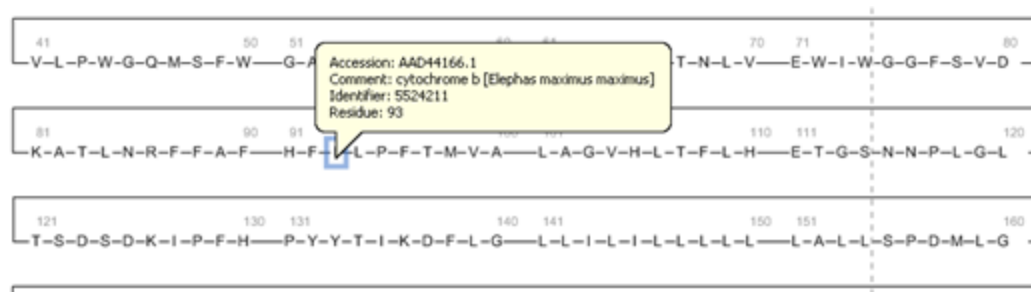


2. 次の 3 つの貼り付けオプションのいずれかを選択します。

- FASTA Peptide
- FASTA RNA
- FASTA DNA

```
>gi|5524211|gb|AAD44166.1| cytochrome b [Elephas maximus maximus]
LCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLLITMATAFMGYVLPWGQMSFWGATVITNLFSAIPYIGTNLV
EWIWGGFSVDKATLNRFFAFHFILPFTMVALAGVHLTFLHETGSNNPLGLTSDSDKIPFHPYYTIKDFLG
LLILLLLLLLLALLSPDMLGDPDNHMPADPLNTPHLIKPEWYFLFAYAILRSVPNKLGGVVALFLSIVIL
GLMPFLHTSKHRSMMRLRPLSQALFWTLTMDLLTLTWIGSQPVEYPYTIHQMASILYFSIILAFPLIAGX
IENY
```

残基の上にマウス ポインタを重ねると、残基とシーケンス データの説明が表示されます。

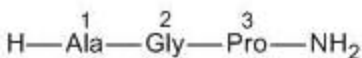



テキスト文字列の貼り付け

テキスト文字列は、有効な区切り文字を使用して貼り付けることができます。スペース、タブ、およびダッシュが有効な区切り文字と見なされます。コピーするテキスト文字列は、ChemDraw 上で、またはそれ以外でも生成できます。テキスト文字列には、有効な残基名またはニックネーム、さらにオプションとして終端が記述されていなければなりません。終端が明示的に定義されていない場合は、標準の終端が割り当てられます。

テキスト文字列を貼り付けるには、次の操作を行ってください。

1. テキスト文字列（たとえば、「H-Ala-Gly-Pro-NH₂」）をコピーし、空白部分で右クリックします。
2. コンテキストメニューから **Paste Special**、**Biopolymer** の順に選択します。テキスト文字列がシーケンスとして貼り付けられます。



 **注：** テキスト文字列のラベルは明示的なニックネームに対応していなければなりません。


シーケンスの展開

シーケンスを作成した後で、シーケンス全体や特定のラベルのみを展開できます。

シーケンスを展開するには、次の操作を行ってください。

1. なげなわ選択ツール、または矩形選択ツールを使用してシーケンス中のラベルを 1 つ以上選択します（複数のラベルを選択するには、Shift キーを押しながら選択操作を行います）。
2. **Structure** メニューの **Expand Label** をクリックします。

残基を構造式に展開すると、ラベルが構造式の下側に表示されます。

 **注：** 生体高分子シーケンス内で括弧を使用できるようになりました。繰り返し単位を含む生体高分子は化学的に解釈されます。生体高分子の展開と簡略化も括弧を考慮します。展開では、括弧（および化学構造）は保持され、構造は明示的に展開されません。

ラベルの簡略化

構造式を簡略表示して（シーケンス内の）ラベルに戻すには、次の操作を行ってください。


1. 操作対象のラベルをダブルクリックして、その構造式を選択します。
2. **Structure** メニューの **Contract Label** をクリックします。

構造式を簡略化する前にラベルを編集すると、簡略化された構造式に新しいラベルのテキストが組み込まれます。たとえば、残基を変更し、名前を Ala から Ala' に変更するとします。簡略化すると、シーケンスには Ala' の文字列が組み込まれます。

生体高分子の整形

ラベルを簡略化した後、**Clean Up Biopolymer** コマンドを使用して、シーケンスを整形することができます。このコマンドにより、残基を整列したり折り返したりして、シーケンスを再配置します。「1 行あたりの残基」の数や生体高分子中にある「ブロックあたりの残基」の数を指定するには、生体高分子を選択して **Object**、**Object Settings**、**Biopolymer Display** タブの順に選択します。

シーケンスの残基の変更

 **注:** 描画中の残基構造式を変更する場合は、簡略化ラベルに変更が反映されるように、新しいニックネームを定義する必要があります。

シーケンスの残基を変更するには、次の操作を行ってください。

1. シーケンス中の残基が簡略化されている場合は、残基を右クリックして **Expand Label** を選択します。
2. 残基を変更します。
3. テキスト ツールを使用して、残基ラベルの名前を新しい構造式に応じて変更します。以下の例では、「Ser」のラベルがホモセリンに合わせて「hSer」に変更されています。

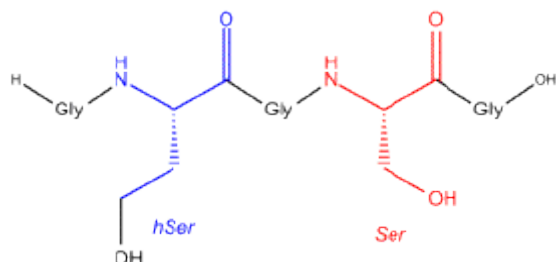


図 8.1: 展開された 2 つのセリン残基左側の残基は、ホモセリンを生成するように変更されています。

レベルを簡略化するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを使用して、残基ラベルを右クリックし **Select Linked Objects** を選択するか、展開した残基のラベルをダブルクリックすると、関連する構造式が選択されます。
2. **Structure** メニューの **Contract Label** をクリックします。

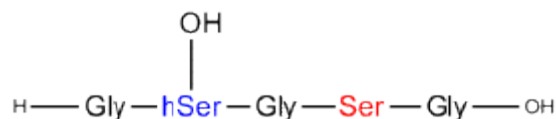


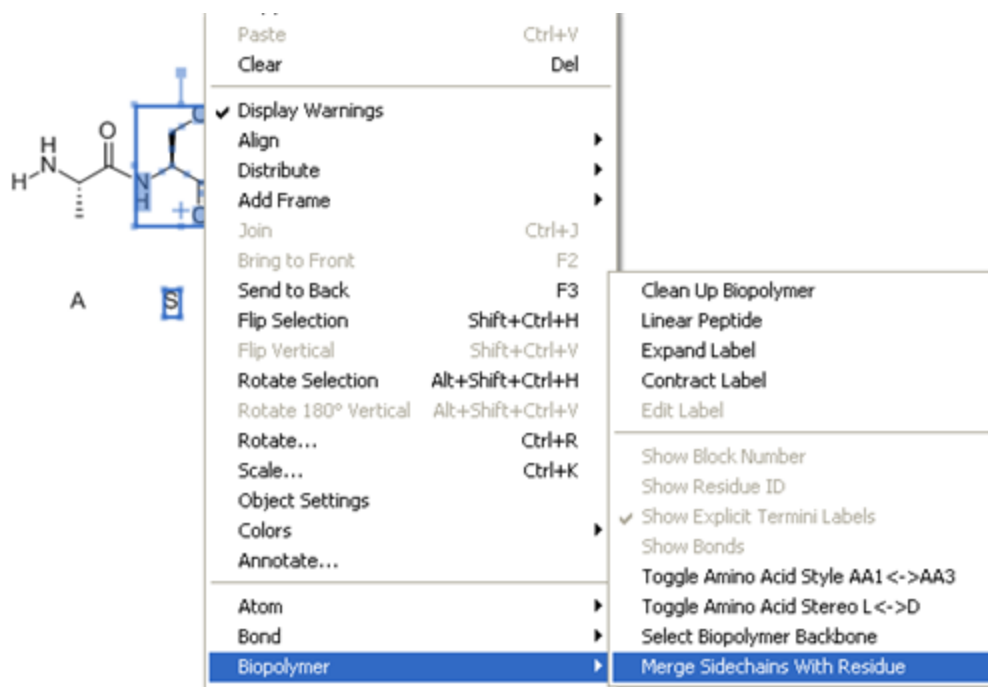
図 8.2: 簡略化したラベル

簡略化ラベルに変更が反映されるように、新しいニックネームを定義する必要があります。たとえば、残基定義自体にヒドロキシル基を含む新しいニックネームとして「hSer」を定義できます。

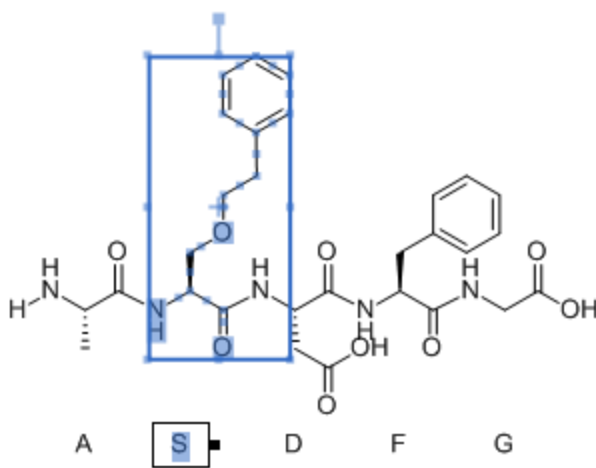
残基と側鎖の統合

残基と側鎖の統合機能を使用して展開した残基を編集し、この変更内容を残基定義に統合することができます。側鎖を統合するには、次の操作を行ってください。

1. 残基ラベルをダブルクリックして、残基を選択します。
2. 右クリックして、コンテキストメニューから **Biopolymer**、**Merge Sidechains With Residue** の順に選択します。側鎖全体が残基と統合されます。



残基が選択されて、残基ラベルを編集できるようになります。



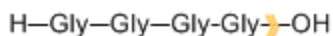
残基の削除

残基を削除すると、隣接するラベルの間で結合が自動的に再作成され、隙間が詰められます。残基を削除するには、次の操作を行ってください。

1. ラベルが展開されている場合は、その構造式を簡略化してラベルに戻します。
2. ラベルを選択するか、その上にマウスを移動させます。
3. Delete キーを押します。

残基の置換

Biopolymer ツールバーには、Insertion モードと Replacement モードという 2 つのデータ入力モードがあります。標準は Insertion モードです。Insertion モードでは、次の残基を挿入する位置にオレンジ色の山形記号が表示されます。たとえば、下図のシーケンスに示すオレンジ色の山形記号は、4 番目の Gly 残基の後に次の残基を挿入することを表します。

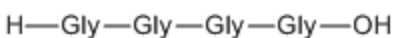


Biopolymer ツールバーにある Replace current residue ボタンを使用して、シーケンス中の残基を置き換えることができます。Replacement モードでは、置き換える残基がオレンジ色の四角形で表示されます。たとえば、下図のシーケンスに示すオレンジ色の四角形は、3 番目の「G」残基が置き換えられることを表します。

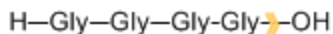


以下に、テトラグリシン シーケンスで残基を置換する方法を示します。

1. テトラグリシン シーケンスを描画します。



2. Biopolymer ツールバーの生体高分子エディタを選択します。
3. テトラグリシン シーケンスで、4 番目の「Gly」残基をクリックします。オレンジ色の山形記号は、次の残基を挿入する位置を示します。



4. Biopolymer ツールバーから Replace current residue モードを選択します。「Gly」テキストが選択されます。
5. 「Ala」と入力するか、または Ala ボタンをクリックすると、「Gly」が置換されます。



残基のフォームを変更するには、次の操作を行ってください。


1. 上のテトラペプチド シーケンスで、2 番目の Gly 残基をクリックします。
2. L-amino acid と Beta-amino acid の両方をクリックし、選択します。
3. Cys ボタンをクリックして、図のように「Gly」をベータ Cys に置き換えます。



残基の追加

1 つ以上の残基を既存のシーケンスに追加できます。
残基を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 適切な生体高分子ツールを選択します。
2. 新しい残基を追加する位置に隣接した残基をクリックします。オレンジ色の山形記号は挿入位置を示します。
3. 追加する新しい残基を入力します。選択した既存の残基の右側に、新しいラベルが追加されます。

 **注:** シーケンスの先頭に追加するには、終端の原子を選択し、アミノ基（タンパク質シーケンスの場合）または 3' 基（DNA/RNA シーケンスの場合）を選択します。

残基の番号付け

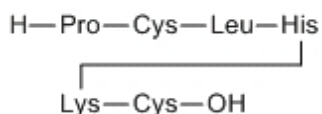
残基の上に残基 ID を表示できます。
残基 ID を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 残基を選択します。
2. 右クリックして、コンテキスト メニューから **Show Residue ID** を選択します。残基の上に残基 ID が表示されます。

非線形シーケンス（複数行シーケンス）

個々のシーケンスで 1 行の長さでブロックのサイズが定義されています。ブロック サイズに達すると、シーケンスにさらにスペースが追加されます。行のサイズに達すると、以降の残基は改行して追加されます。ただし、行を選択してドラッグすれば、不規則な行を含むシーケンスを作成できます。シーケンス ツール モードで残基を選択して Alt + Enter キーを押すと、改行して残基を配置できます。以降の残基は改行して配置されます。

シーケンスを入力しながら改行を追加するには、キーボードで Alt + Enter キーを押します。以降の残基は改行して入力され、この特定のシーケンスに対する行のサイズが設定されます。

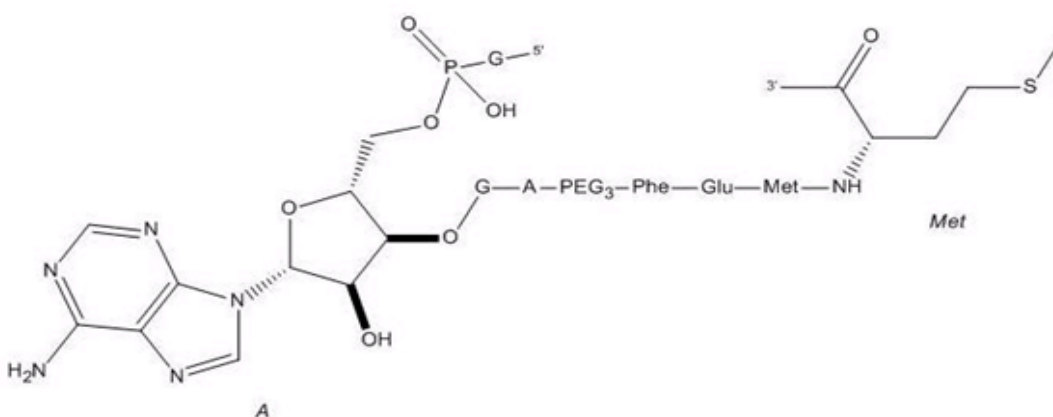


複数行のシーケンスを作成するには、次の操作を行ってください。

1. シーケンスを描画します。
2. シーケンス ツールを使用して、最初の行の末尾に配置する残基（前記の例では「His」）を選択します。
3. キーボードの Alt + Enter キーを押します。

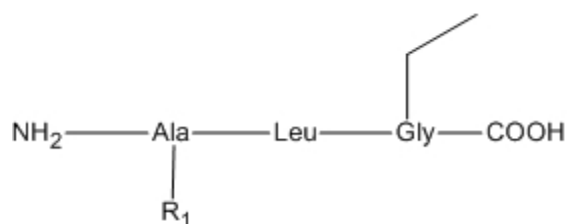
ハイブリッド生体高分子

Biopolymer ツールバーでさまざまな生体高分子ツールを組み合わせることにより、混合生体高分子またはハイブリッド生体高分子を作成できます。したがって、核酸をアミノ酸配列に挿入したり（またはその逆）、RNA と DNA を組み合わせたりできるようになります。



分岐生体高分子

一般に残基ラベルには 2 つの結合点があります。ただし、結合点を追加してシーケンスを分岐させることもできます。次に例を示します。



結合点を追加するときに、展開したラベルに結合先の原子を指定します。

シーケンスからの結合を作成するには、次の操作を行ってください。

1. 分岐を作成する位置のラベルを始点として結合を描画します。Modify Nickname ダイアログが開かれ、選択したシーケンス構造が表示されます。
2. Modify Nickname ダイアログで、結合点を追加する構造内の原子をダブルクリックします。新しい結合点が表示されます。
3. OK をクリックします。

IUPAC コード

シーケンス内のヌクレオチドまたはアミノ酸を指定する際は、以下の表のコードを入力してください。

IUPAC ヌクレオ チド コード	塩基	IUPAC アミノ 酸コード	3 文字略号	アミノ酸
A	アデニン	A	Ala	アラニン
C	シトシン	C	Cys	システイン
G	グアニン	D	Asp	アスパラギン酸
T (または U)	チミン (またはウラ シル)	E	Glu	グルタミン酸
R	A または G [いづれ かのプリン]	F	Phe	フェニルアラニン
Y	C または T [いづれ かのピリミジン]	G	Gly	グリシン
S	G または C [3 つ の強い水素結合]	H	His	ヒスチジン
W	A または T [2 つ の弱い水素結合]	I	Ile	イソロイシン
K	G または T [塩基の ケト基]	K	Lys	リシン
M	A または C [塩基の アミン基]	L	Leu	ロイシン
B	C、G または T [A ではない (B は A の後の英字)]	M	Met	メチオニン
D	A、G または T [C ではない]	N	Asn	アスパラギン
H	A、C または T [G ではない]	P	Pro	プロリン
V	A、C または G	Q	Gln	グルタミン

[RNA コンテキスト での U、または DNA コンテキストでの T ではない]				
N	任意の塩基 [RNA コ ンテキストの A/U/G/C、または DNA コンテキストの A/T/G/C ではない]	R	Arg	アルギニン
		S	Ser	セリン
		T	Thr	スレオニン
		V	Val	バリン
		W	Trp	トリプトファン
		Y	Tyr	チロシン

次の表に、非特異性アミノ酸と非タンパク質性アミノ酸を表す 3 文字略号を記載します。

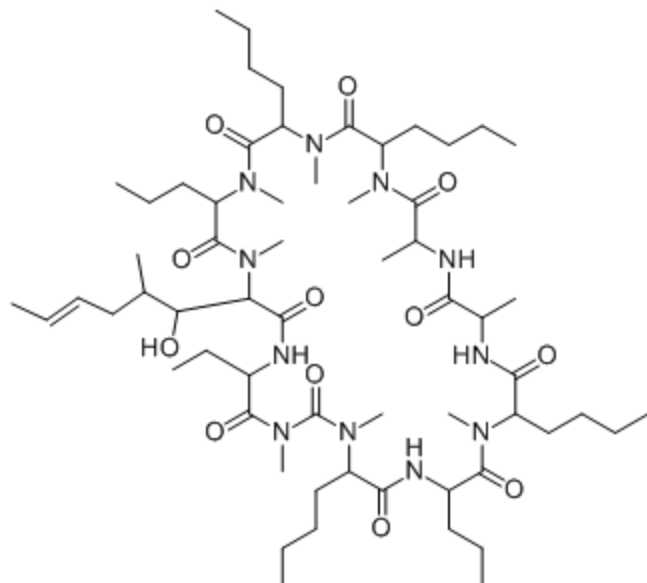
IUPAC アミノ酸 コード	3 文字略 号	非特異性アミノ酸
B	Asx	アスパラギンまたはアスパラギン酸
Z	Glx	グルタミン酸またはグルタミン
J	Xle	ロイシンまたはイソロイシン
X	Xaa	任意のアミノ酸 (ニックネームなし)

IUPAC アミノ酸コー ド	3 文字略号	非タンパク質性アミノ酸
O	Pyl	ピロールリジン
U	Sec	セレノシステイン
	Aib	α アミノイソ酪酸

Abz	2-アミノ安息香酸
Nle	ノルロイシン

環状ペプチド、交差結合ペプチド、分岐ペプチド

環状ペプチドは、ペプチド配列で末端残基を結合することにより作成できます。ループ状の結合は、ペプチドが環状であることを示します。次に環状ペプチドの例を示します。

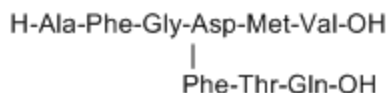


インシュリンなどの交差結合ペプチドは、生体高分子ツールと結合ツールを使用して作成できます。

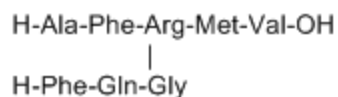
分岐ペプチド

分岐ペプチドは、1 つの残基に複数の脱離基が存在する場合に形成されます。たとえば、Arg にはアミノ基が 2 つ、Asp にはカルボキシル基が 2 つそれぞれ含まれています。これらの基のいずれか、またはその両方で重合反応が生じる可能性があります。このため、重合反応の間には、重合を単一の地点だけに限定して発生させるように、保護基が使用されることがあります。

たとえば、ペプチドが Asp 残基で分岐する例を考えてみます。



次の例では、残基が Arg 残基で分岐しています。



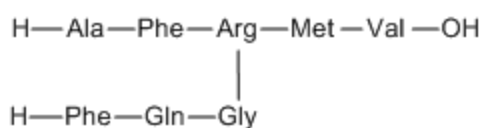
線結合ツールにより分岐ペプチドを作成して、1 つ目の鎖と 2 つ目の鎖にある各分岐残基を結合します。残基に自動検出の可能な脱離基が含まれている場合は、その各地点で分岐します。これ以外の場合は、Modify Nickname

ダイアログが表示されます。ここで 3 つ目の結合点を手動で定義する必要があります。次に、分岐ペプチドを作成する例を考えてみます。

1. 次のような生体高分子鎖を 2 つ描画します。

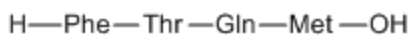
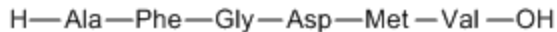


2. 線結合ツールを使用して、下の鎖の Gly-3 と上の鎖の Arg-3 を結合します。下の鎖の末端水素が削除され、分岐ペプチドは次のようになります。

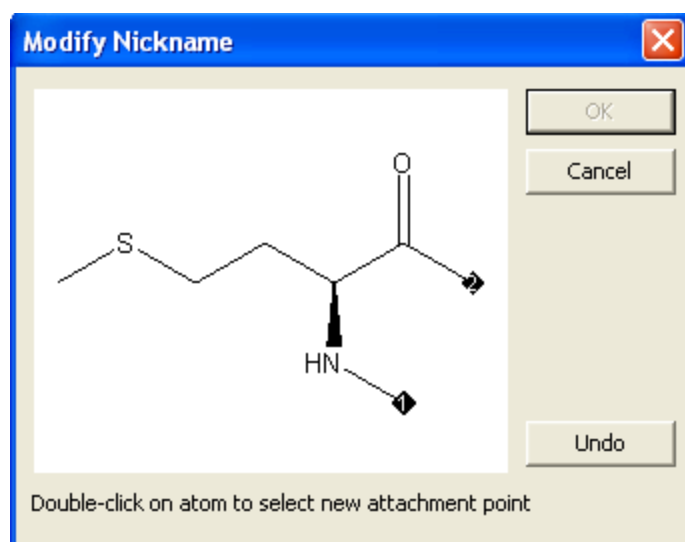


残基に自動検出の可能な脱離基が含まれていない場合は、Modify Nickname ダイアログが表示されます。ここで 3 つ目の結合点を手動で定義する必要があります。次の例を考えてみます。

1. 次のような生体高分子鎖を 2 つ描画します。



2. 線結合ツールを使用して、下の鎖の Met-4 と上の鎖の Met-5 を結合します。これらの残基にはいずれにも定義された脱離基がないため、個々の残基に対して Modify Nickname ダイアログが 2 回表示されます。

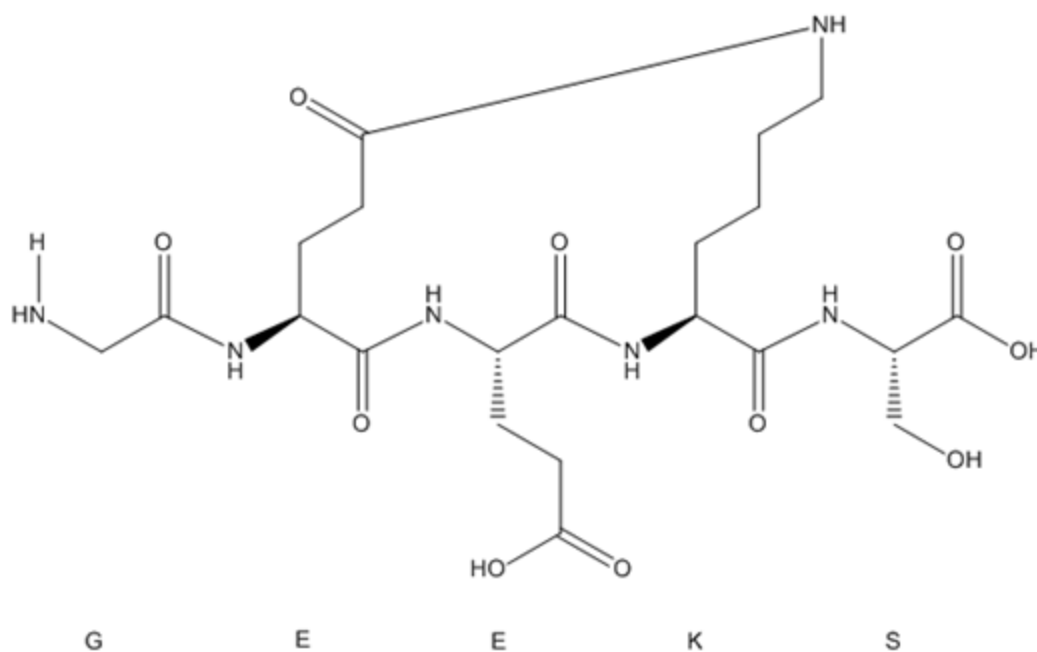
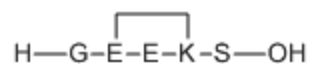


ラクタム架橋

Lys-Asp 残基と Lys-Glu 残基の間にラクタム架橋を描画できます。残基は、側鎖の間のアミド結合により結合されます。ジスルフィド結合およびラクタム架橋を混在させることもできます。

ラクタム架橋を描画するには、次の操作を行ってください。

1. Lys および Asp か Glu のいずれかを含むシーケンスを描画します。
2. 線結合ツールを使用して、Lys ともう 1 つの残基の間で結合を描画します。次に例を示します。



高度な描画テクニック

高度な機能は、ユーザーの時間を節約すること、または基本ツールでは行うことのできない機能を実行することを目的としています。たとえば、マウスをクリックして、二次元の描画を三次元モデルとして表示したり、立体異性体を作成したりできます。その他の機能を使用して、次のことを実行できます。

- [結合を原子ラベルの文字に付加する](#)
- [明確に結合点を定義していない結合を作成する](#)
- [原子番号を追加する](#)
- 構造式の一部を簡略表示または展開する
- [構造式を三次元で表示する](#)
- [マス フラグメント、逆合成、合成の描画を作成する](#)
- [テンプレートを使用して描画する](#)
- テンプレートを作成および編集する
- 官能基にニックネームを使用してラベルを付ける

オブジェクトの色付け

オブジェクトを選択して色付けすることができます。色を付けられるのは、化学構造式の一部または全体、ボックス、曲線、矢印、軌道、反応機構記号などです。

オブジェクトに色を付けるには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - スタイル ツールバーの Color ボタンをクリックし、表示されたメニューから色を選択します。
 - Color メニューから色を選択します。
 - 右クリックしてコンテキスト メニューから色を選びます。
 - Object メニューの Object Settings をクリックして、Drawing タブで色を選択します。設定が完了したら、OK をクリックします。

原子団の色分け

ChemDraw での色付け方法は、原子団と Integral グループとで異なります。Integral グループを色付けする場合、そのグループ内のオブジェクトは新しい色を取得しますが、元の濃淡は保持されます。通常の原子団を色付けする場合は、新しい色が適用され、元の濃淡は無視されます。

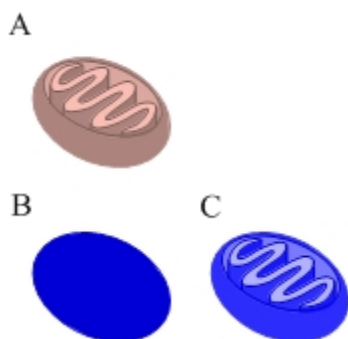


図 9.1: A) 標準の色で表示されたミトコンドリア構造式、B) 原子団として青で色付けされた構造式、C) Integral グループとして青で色付けされた構造式

原子団内のオブジェクトの元の色が揃っていない場合でも、新しい色はその原子団内のすべての構造式に適用されます。次の例を参照してください。

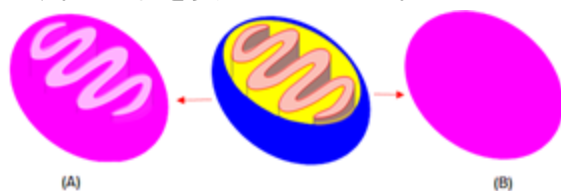


図 9.2: A) Integral グループとしてピンクで色付けされた構造式、B) 原子団としてピンクで色付けされた構造式

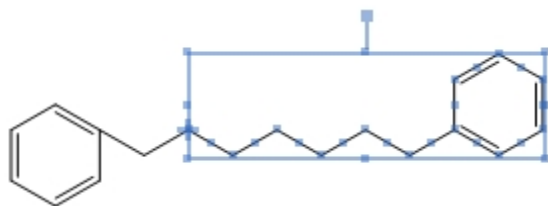
ラベル

ラベルは、原子を表す以外に、ユーザーが定義する構造式の領域を表すこともできます。たとえば、分子の重要な部分にラベルを割り当てて、この部分を簡略化することにより、描画のサイズを縮小することができます。その後、ラベルを展開して分子全体を表示することができます。

ラベルの作成

簡略ラベルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 簡略化する構造式の範囲を選択します。



2. **Structure** メニューの **Contract Label** をクリックします。Contract Label ダイアログが表示されます。

3. 簡略化した構造式に対するラベルを入力します。

4. **OK** をクリックします。

このラベルが、構造式を選択部分に置き換わります。



注: 簡略化する構造式の範囲にエラーがあれば、エラー ダイアログが表示されます。その他のエラーを見るには **Ignore** をクリックします。エラーをすべて無視するには **Ignore All** をクリックし、簡略化処理を終了させるには **Stop** をクリックします。

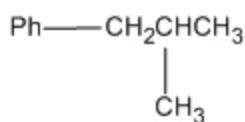
ラベルの展開

構造式に定義済みのニックネーム、長い原子ラベル、簡略化したラベルがあれば、ChemDraw は構造式を元の展開形式に戻すことができます。

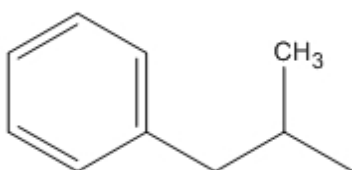
原子ラベルを展開するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールを選択します。
2. 展開するラベルを選択するか、構造式をダブルクリックします。構造式をダブルクリックすると、構造式内のラベルがすべて選択されます。
3. **Structure** メニューの **Expand Label** をクリックします。構造式ツールバーの **Expand Label** ツールを使用することもできます。構造式が展開された形式で再描画されます。ラベルを展開する例を以下に示します。

簡略化:



展開:

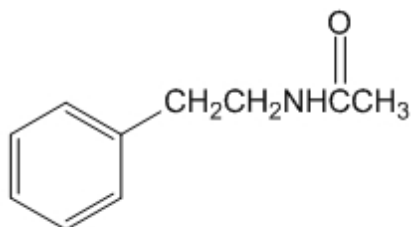


二価のニックネームを含むラベル、たとえば **H-Ala-OH** を展開する場合、結合順序は結合を作成した順序に依存します。

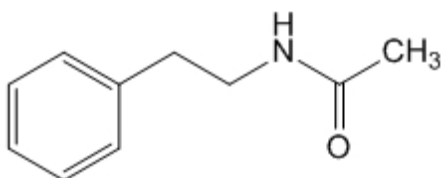
複数の原子

ラベルは原子団で構成することができます。ラベルを展開すると通常の構造式になります。

簡略化:



展開:



複数の原子のラベルの追加

1. テキスト ツールを使用して、ラベルを付けたい構造式の中の原子をクリックします。
2. 分子式 (“CH2NHCH3” など) を入力します。
3. 選択ツールを使用して、式を選択します。
4. 分子式を右クリックして **Expand Label** を選択するか、**Structure** メニューの **Expand Label** をクリックします。構造式ツールバーの **Expand Label** ツールを使用することもできます。

原子ラベルへの結合の追加

原子ラベルに結合を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を描画し、必要な原子ラベルを付加します。
2. 結合ツールを選択します。
3. 追加の結合を付加する場所にカーソルを配置します。原子ラベルの選択した部分が強調表示されます。
4. クリックして原子ラベルからドラッグし、結合を描画します。

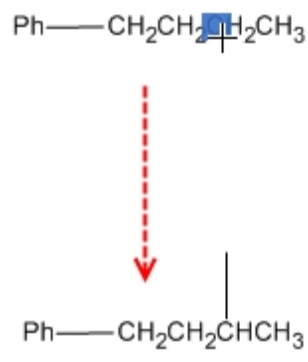


図 9.3: ラベルに結合を追加する

ドラッグする方向により、作成される結合の方向が決まります。クリックして結合を追加する場合、次のように作成される結合が優先する方向はいくつかあります。

- 原子ラベルの終端に結合すると、作成される結合は可能な限り水平方向になります。
- 原子ラベルの中央部に結合すると、作成される結合は可能な限り垂直方向になります。
- 原子ラベルの先頭に結合すると、可能な限り、Drawing Settings ダイアログで設定された連鎖角で結合を描画します。その角度が使用できない場合は、次善の角度が用いられます。

結合点

結合点を使用すると、フェロセン ((Cp)₂Fe) のようなポリハプト構造式や簡略表示による化合物の配置異性体を描画することができます。手順は似ており、どちらのケースでも構造式の化学的意味が保持されます。汎用構造式の展開機能を使って、簡略複合構造式からすべての可能な構造式を生成することができます。詳細については、[274 ページの“汎用構造式の展開”](#)を参照してください。

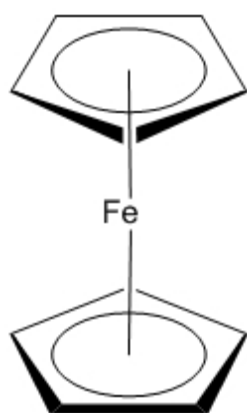


図 9.4: ポリハプト構造式の描画

多中心結合


構造式に多中心結合点を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式全体または構造式の一部を選択します。
2. **Structure** メニューの **Add Multi-Center Attachment** をクリックします。アスタリスクは多中心ノードを示します。

多中心結合点への結合を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 結合ツールをクリックします。
2. アスタリスクをポイントした後、クリックまたはドラッグして結合を作成します。

このアスタリスクは、そのフラグメントに結合を描画すると表示されなくなります。ただし、結合点は結合ツールまたは選択ツールを使って表示できます。

 **ヒント:** 固定長が有効な場合は、**Alt** キーを押しながら結合をドラッグします。

可変結合点

Add Variable Attachment コマンドを使用して、化学的意味を保持したまま簡略表示による化合物の配置異性体を描画することができます。

たとえば、下図のようにジブロモベンゼンの 3 つの異性体を明示的に区別して描画することができます。下図のような可変結合を使用すれば、3 種類の異性体をすべて 1 種類の親構造式として表現することもできます。

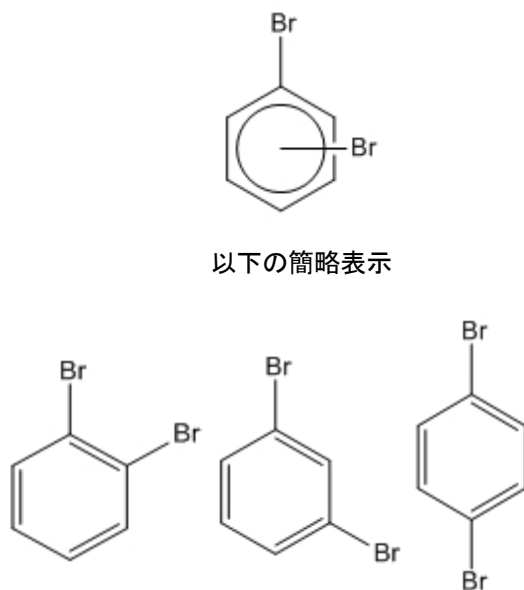





図 9.5: ジブロモベンゼンの異性体

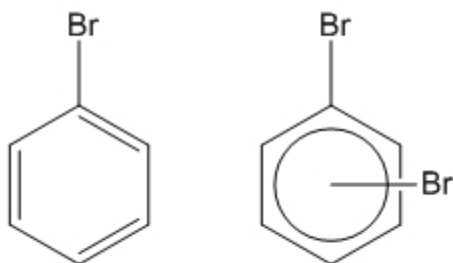
構造式に可変結合点を追加するには、次の操作を行ってください。


1. 構造式全体または構造式の一部を選択します。
2. **Structure** メニューの **Add Variable Attachment** をクリックします。
3. 構造式内のアスタリスクをポイントし、ドラッグして結合を描画します。

 **注:** 固定長を無効にするか切り替えることにより、結合が環から引き離して描画されるようにします。

 **注:** 下図の構造式を描画するには、まだ臭素原子が結合されていない 5 環の原子のみ選択します。分子全体を選択すると、1 番上の炭素で原子価の問題が生じる可能性があります。

 **ヒント:** 固定長が有効な場合は、**Alt** キーを押しながら結合をドラッグします。



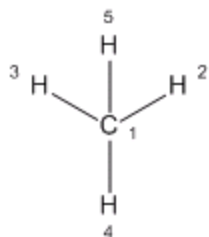
 **注:** 結合点から結合を描画すると、アスタリスクが消えます。結合点を表示するには、結合ツールまたは選択ツールのいずれかでカーソルを結合点の上に置きます。


原子の番号付け

構造式内の原子に連番の番号または文字を追加できます。追加できるデータは以下のとおりです。

- 数字 (1、2、3、...)
- 末尾が数字のテキスト (atom1)
- ギリシャ文字 (アルファ、ベータ、...)
- 文字 (a、b、c、...)

標準の標識は数字です。




-  **ヒント:** 数字ではなくテキストを使用するには、原子に数字を割り当ててからその数字を編集します。以下の「原子番号の書式設定」を参照してください。

原子番号の表示

1. 番号を付ける 1 つまたは複数の原子を選択します。
2. 選択した原子または構造式をポイントして、次のいずれかの操作を行ってください。
 - 右クリックして、コンテキスト メニューで **Atom**、**Show Atom number** の順に選択します。
 - ホットキー「**]**」(アポストロフィ) を押します。

原子番号を非表示にするには、次の操作を行ってください。


1. 目的の原子または構造式を選択します。
2. 右クリックして、**Atom** をポイントし、**Show Atom Number** の選択を解除します。

 **注:** 原子番号標識を削除するには、消しゴム ツールを使用して標識をクリックします。

原子番号の書式設定

原子の番号のテキストとスタイルを編集するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを選択します。
2. 原子番号を選択し、新しいテキストを入力します。

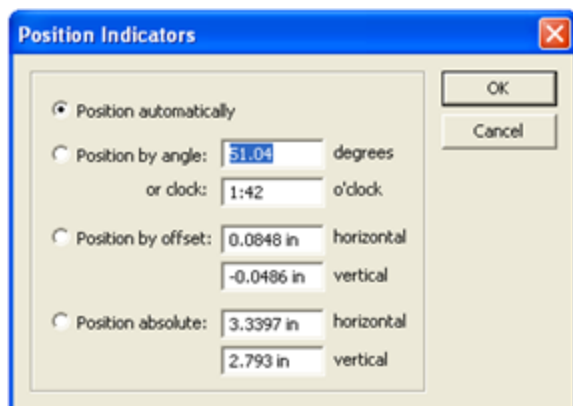
 **注:** 新しいインジケータを入力すると、カウンタが新しいスタイルにリセットされ、標準の方法によってそのスタイルで番号付けを続けることができます。たとえば、テキスト ボックスに「 α 」と入力した後、別の原子をポイントし、コンテキスト メニューまたはホットキーを使用すると、2 番目の原子に「 β 」というラベルが付きます。別の構造式に切り替えると、カウンタがリセットされます。
3. 原子番号スタイルを編集するには、テキスト ツールで原子番号を選択し、Text メニューまたはテキスト書式設定ツールバーを使用してスタイルを変更します。

原子番号の配置

対応する原子の周辺や、その原子から一定の距離を置いた位置に各原子番号を配置できます。

原子番号の位置を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 移動する標識を右クリックし、コンテキスト メニューの **Position** コマンドをクリックします。Position Indicators ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 適切な配置オプションをクリックし、値を入力します。



配置

原子または結合の中心から標識の中心へ

原子または結合の中心から標識の左下へ

指定した座標位置

入力する値

角度または時刻（方向）


縦横の移動距離

水平方向と垂直方向の絶対座標値


構造式の三次元表示

構造式の三次元表示ツールを使用して、分子または分子の一部を三次元で回転させることができます。構造式を回転させるには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールまたは構造式の三次元表示ツール
2. 構造式の三次元表示ツールで、選択した構造式をクリックしてドラッグします。マークの付いた枠の中にカーソルを置き、任意の方向にドラッグします。

 **ヒント:** X 軸または Y 軸のみに回転を限定するには、Shift キーを押しながらドラッグします。

いくつかの部分からなる分子の一部を選択して、特定の結合の周囲を回転させることもできます。

 **注:** 構造式の三次元表示ツールを軌道に適用することはできません。

構造式の三次元表示ツールの効果を取り除くには、次の操作を行ってください。

1. なげなわ選択ツールまたは矩形選択ツールで構造式を選択します。
2. Object メニューの Flatten をクリックします。

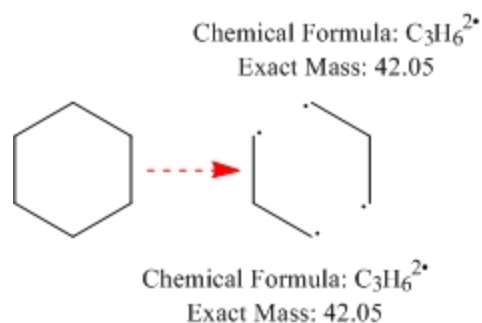
 **注:** 構造式を平面化すると、構造式の Z 座標情報が削除されますが、外観は変化しません。

マス フラグメント


マス フラグメントは質量分析計の分子のフラグメント化を模倣したものです。マス フラグメント ツールを構造式に適用すると、結合を切断して元の構造式からフラグメントを作成するので、構造式が切断されます。これは予

測ツールではありませんので、どの結合を切断するかを指定する必要があります。

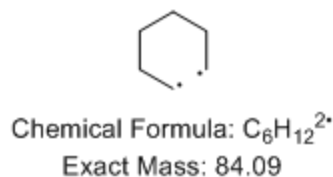
構造式をフラグメント化するには、マス フラグメント ツールを使って 1 つまたは複数の結合上にマウスをドラッグします。マウス ボタンを離すと、結合が切断されます。



標準では、マウス ボタンを離すと描画した線が消えます。

 **注:** 曲線を描画するか、または線を表示したままにするには、Altキーを押しながら、描画します。

線が結合に交差すると、あたかも均一に切断されたかのように、結合のいずれの側にもフラグメントの式と質量が表示されます。単結合は各フラグメントでモノラジカルとなり、二重結合は 1 対のジラジカルとなります。複数の結合に線が交差している場合、線の各側のフラグメントはすべて一緒と見なされます。環結合のみに線が交差している場合、1 対の式/質量が表示されます。

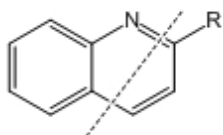


化学式と質量の表示を再配置、または削除することができます。

合成と逆合成

ChemDraw には、合成反応を描画できる 2 つのツールが用意されています。合成ツールは、指定した生成物の構造式に基づいて合成反応を描画します。また、逆合成ツールで反応を描画すると、左側に生成物が表示され、その横には反応物を指す矢印が示されます。これらのツールは、メイン ツール パレットのフラグメンテーション ツール パレット内にあります。

これらの機能を説明するため、以下の構造式から始まるキノリンの Beyer 法を使用します。



適切なツールを使って、点線で示されているように結合の上をドラッグすることで、いずれかのタイプの反応を作成することができます。たとえば、逆合成ツールを使用してこの反応を作成します。

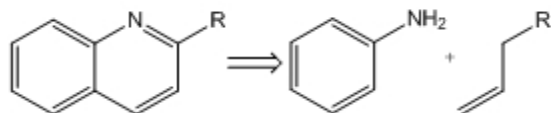
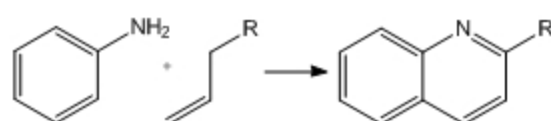


図 9.6: キノリン逆合成

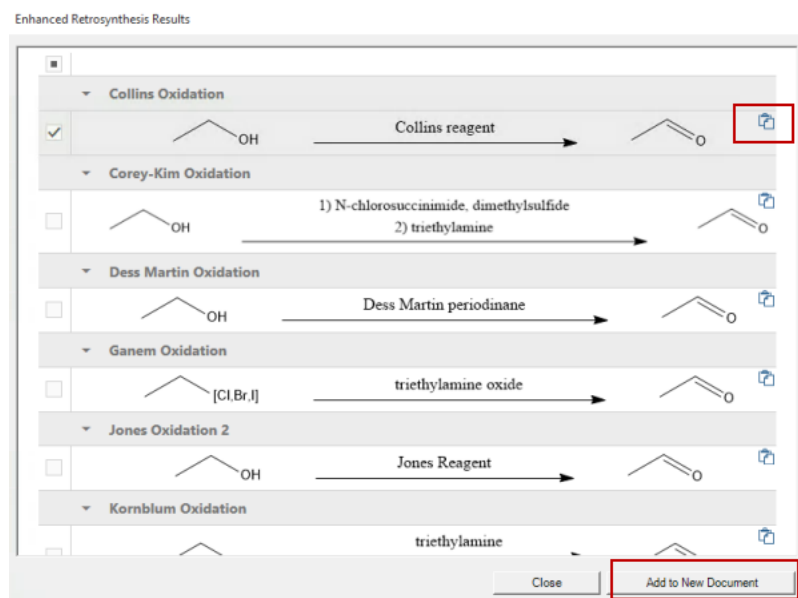


キノリン合成

拡張された逆合成ツール

拡張逆合成ツールは、直感的に使用できる反応予測ツールです。このツールを使用すると、選択した結合を作成する可能性のある反応の一覧が提示されるので、分子の合成反応を分析できます。原子を選択すると、拡張された逆合成ツールでは、その原子が形成することになるすべての結合と、それらを形成する反応式に関する情報を示します。

合成しようとする化合物の構造式の原子または結合をクリックすると、およそ 300 の標準的な有機反応が収められた反応データベースを検索して、Enhanced Retrosynthesis Results ダイアログにヒットが表示されます。次の例を参照してください。



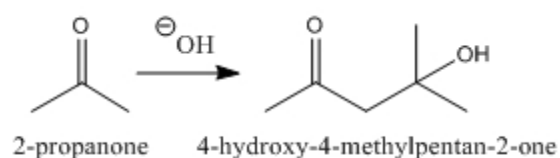
ヒットリストにいずれかの反応をコピーするには、次のいずれかの操作を行います。

- 目的の反応に対応する **Copy to Clipboard** をクリックして、クリップボードにコピーします。
- 1 つまたは複数の反応を選択して **Add to New Document** をクリックし、新しい Chemdraw ドキュメントに反応をコピーします。

 **注:** 拡張された逆合成ツールは *ChemDraw Professional* でのみ使用できます。

反応の描画

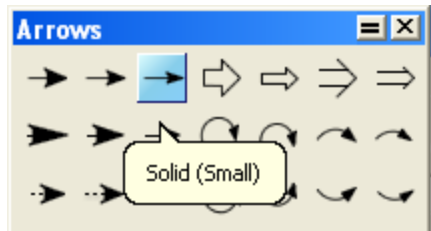
次の例を使用して反応の描画方法を示します。




矢印の描画

2-プロパノンから始めて (332 ページの “チュートリアル 1: 構造式の描画”)、反応矢印を描画します。

1. 矢印ツールバーで、次に示すように最初の行の左から 3 番目の矢印をクリックします。



2. ドキュメント ウィンドウで、マウスをクリックし、2-プロパノン構造式の右に水平にドラッグします。矢印が表示されます。
3. テキスト ツールを選択します。
4. 矢印の上をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
5. 「OH」と入力し、Esc キーを押します。必要に応じて、選択ツールを使ってテキスト ボックスを再配置します。

 **注:** *Show Chemical Warnings* がオン (標準) の場合に、ツールを変更したり別のテキスト ボックスを開いたりすると、OH ラベルの周りに赤いボックスが表示されますが、これはエラーです。これは現時点では無視してください。

Chemical Symbols ツール パレットを使用して、電荷記号を追加します。

1. メイン ツール ツールバーの化学記号ツールをクリックします。
2. マウス ボタンを押しながら、円で囲まれた **Circle Minus** 記号を選択します。
3. 次に、OH ラベルの中央をポイントします。カーソルを右または左に少し移動して、**0** を選択します。
4. 酸素原子を選択した状態で、原子の周りの電荷記号を希望する位置にドラッグします。



化学記号パレットから追加されるオブジェクトは、一番近い構造式に自動的に関連付けられます。なお、負電荷を追加すると、赤い原子価エラー警告が消えます。

生成物の描画

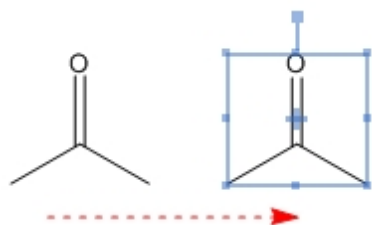
今度は 2-プロパノン構造式のコピーを使って、4-ヒドロキシル-4-メチル-2-ペンタノンを作成することにします。生成物を最初から自分で作成することも、既存の構造式をコピーすることもできます。


構造式をコピーするには、次の操作を行ってください。

1. 2-プロパノン構造式とそのタイトルを選択します。
2. Ctrl キーを押したままにします。

ポインタの形状が中に + 記号のある手のマークに変わり、選択ツールのコピー モードになったことがわかります。


3. 選択枠を右にドラッグし、マウス ボタンを離します。

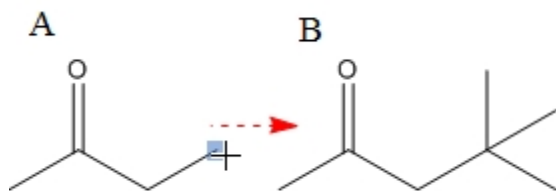


 **注:** コピーの位置を元の構造式の位置と整列させるには、*Shift* キーを押しながらドラッグします。

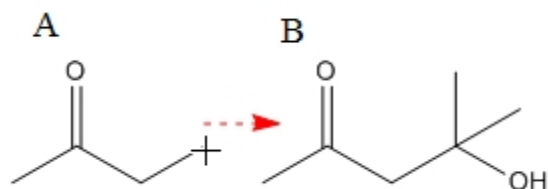
コピーした構造式を修正するには、次の操作を行ってください。

1. 線結合ツールを選択します。
2. コピーした構造式の右端の結合をクリックします (下図)。
3. 終端の炭素原子をポイントします。
4. 3 つの結合が表示されるまで炭素原子を繰り返し (少し間をおきながら) クリックします。

 **注:** クリックの間隔が短すぎると、ダブルクリックと解釈されてテキスト ボックスが開かれるか、またはトリプルクリックと解釈されて最後に作成した原子ラベルがコピーされます。



5. 終端の炭素原子をポイントします。
6. 「OH」と入力します。



生成物のタイトルを置き換えます。

1. テキスト ツールでタイトルを選択し、「4-hydroxy-4-methyl-2-pentanone」と入力し、*Enter* キーを押して「1 mole」と入力します。

2. テキスト ツールを使用して、反応物のタイトルに「2 Mole」を追加します。

反応の整形

反応を描画した後、**Structure** メニューの **Clean Up Reaction** コマンドを使用して反応を整形できます。**Clean Up Reaction** コマンドを適用すると、反応成分間の間隔が変更され、各反応成分は均等に配分され、必要に応じてプラス記号が挿入され、矢印の長さが調整されます。

反応を整形するには、次の操作を行ってください。

1. 反応を選択します。
2. **Structure**、**Clean Up Reaction** の順にクリックします。

ドキュメントに対して反応の幅が広すぎる場合、反応は折り返されて複数の行に表示されます（下例を参照）。

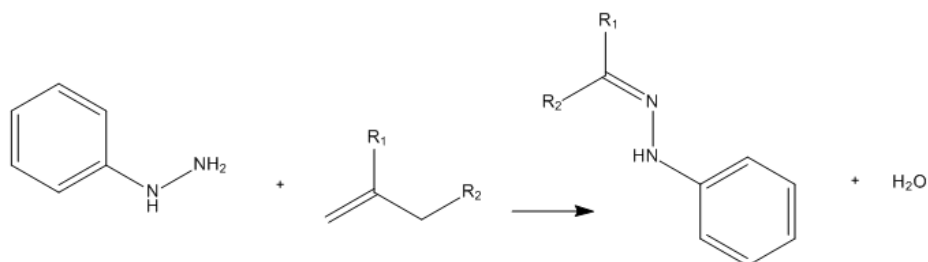


図 9.7: *Clean Up Reaction* コマンドを適用する前の反応

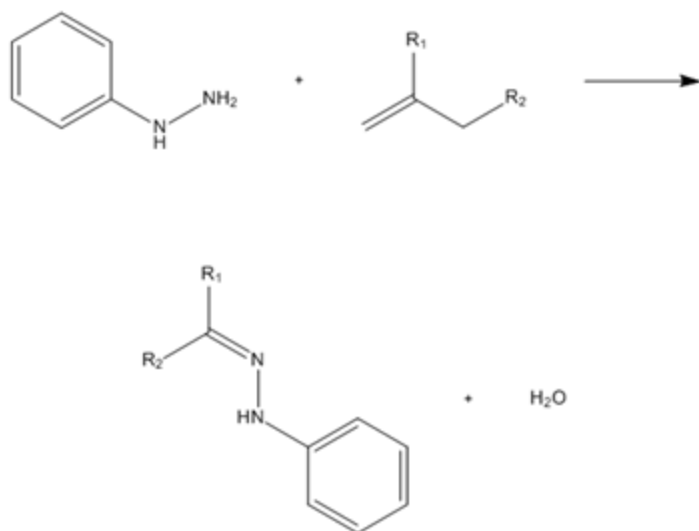



図 9.8: *Clean Up Reaction* コマンドを適用した後の反応

 **注:** *Clean Up Reaction* は、1 ステップの反応でのみ使用できます。

注: *Clean Up Reaction* コマンドは、直線の矢印を持つ反応でのみ使用できます。曲線の矢印の場合、*Clean Up Reaction* コマンドは無効です。

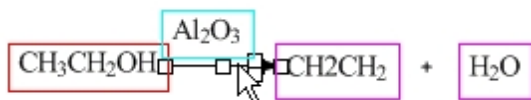
反応インタープリタ

反応インタープリタは、描画された反応を解析して、反応を次の個別の成分に分類します。

- 反応機構
- 反応ステップ
- 反応物
- 生成物
- 条件

ファイルを CDXML として保存して、解釈をディスクに保存できます。反応をデータベースに保存する場合、この保存データは重要になります。

Show Reaction Interpretation を選択した状態で反応物、生成物、触媒、および反応の注釈の上にカーソルを置くと、反応インタープリタによってこれらが色分けされます。これは、反応が正しく認識されているかどうかを判断するのに役立ち、ユーザーは反応を調整して解釈を修正することができます。



反応を解釈するには次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **Show Reaction Interpretation** をクリックします。
2. カーソルを反応矢印の上に移動します。

反応を解釈するには、次のことが必要です。

- それぞれの反応物と生成物に最低 1 つの原子が含まれていること。
- それぞれの反応物と生成物を 1 つのラベルを使って記述すること。
- 複数の反応物や生成物は “+” 記号で連結すること。
- 反応条件は反応矢印の左右の境界内に完全に収まっていること。
- 反応に曲線矢印を含んでいないこと。


反応は次のように色付けされます。

- 反応は赤。
- 生成物はマゼンタ。
- 反応矢印の上にあるものはすべてシアン。
- 反応矢印の下にあるものはすべて青。

電子の押し出しおよびラジカルの押し出し

一般に、有機反応メカニズムを描画する際は、電子の押し出し矢印を使用して電子の移動を表します。ChemDrawには、電子の移動を表すための電子の押し出しツールおよびラジカルの押し出しツールが用意されています。原子間、結合間、軌道間の電子の移動を描画できます。

電子対の移動を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号ツールバーで**電子の押し出しツール**  を選択します。
2. ソース オブジェクトでマウスをクリックし、ターゲット オブジェクトにドラッグしてマウスを放します。電子対の移動を示す両方向矢印が表示されます（下図を参照）。

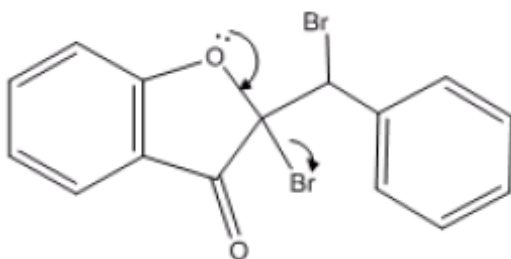


図 9.9: 電子の押し出しの例

1 つの電子の移動を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号ツールバーで**ラジカルの押し出しツール**を選択します。
2. ソース オブジェクトでマウスをクリックし、ターゲット オブジェクトにドラッグしてマウスを放します。1 つの電子のみの移動を示す片方向矢印が表示されます（下図を参照）。

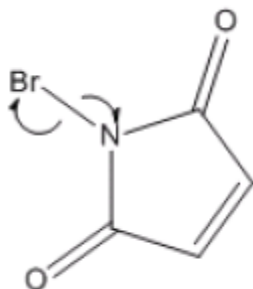


図 9.10: ラジカルの押し出しの例

矢印を選択するか矢印の上にカーソルを置いて、Delete キーを押し、電子移動矢印を削除できます。矢印ツールまたは電子の押し出しツールを使用して、電子移動矢印の形状を変更できます。電子の押し出し矢印またはラジカルの押し出し矢印の上にカーソルを置くと、矢印の他に、関連するオブジェクトが強調表示されます。

化学量グリッド

化学量グリッドは反応の化学量論データの計算に使用します。反応の描画を変更するとこのグリッドが更新され、計算がすべて自動的に行われます。

化学量グリッドを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 反応を描画するか、反応が含まれているファイルを開きます。
2. **View** メニューの **Show Reaction Interpretation** をクリックします。**Show Reaction Interpretation** をオンにすると、ChemDraw によって反応が正しく解釈されるようになります。マウス ポインタを反応の上に移動すると、次のようになります。



- 反応物 - 赤
 - 生成物 - マゼンタ
 - 反応矢印の上下にあるものすべて - シアンおよび青
3. 反応を選択し、**Structure** メニューの **Analyze Stoichiometry** をクリックします。複数のデータ フィールドに標準値が入力されたグリッドが反応の下に表示されます。

Reactants				Products		
Formula	C ₆ H ₆	CH ₃ Cl	AlCl ₃	Formula	C ₇ H ₈ ⁺	ClH
MW	78.11	50.48	133.33	MW	92.14	36.46
Limiting?	Yes	No	No	Equivalents		
Equivalents				%Completion		
Sample Mass				Expected Mass		
%Weight				Expected Moles		
Molarity				Measured Mass		
Density				Purity		
Volume				Product Mass		
Reactant Moles	0.05mol			Product Moles		
Reactant Mass				%Yield		

 **注:** 反応矢印の上側に触媒または条件を示すラベルが表示されている場合は、グリッドを作成する前に、そのラベルを右クリックし、コンテキスト メニューの **Interpret Chemically** を選択解除してください。

グリッドにデータを入力するには、次の操作を行ってください。

1. 等量計算の基準化合物を設定します。標準の設定が妥当でない場合は、Limiting 行に表示されている No を **Control** キーを押したままクリックし、コンテキスト メニューの **Set Limiting** をクリックします。

<i>Reactants</i>				<i>Products</i>		
Formula	C₆H₆	CH₃Cl	AlCl₃	Formula	C₇H₈⁺	ClH
MW	78.11	50.48	133.33	MW	92.14	36.46
Limiting?	Yes	No	No	Equivalents		
Equivalents				%Completion		
Sample Mass				Expected Mass		
%Weight				Expected Moles		
Molarity				Measured Mass		
Density				Purity		
Volume	<input type="text" value="0.05ml"/>			Product Mass		
Reactant Moles				Product Moles		
Reactant Mass				%Yield		

2. テキスト ツールを選択し、データを入力する場所をクリックします。必要に応じて、すべての反応の値を入力します。標準以外の単位を使用する場合は、値とともに単位も入力します。スペースは不要です。

値	コメント
Limiting?	等量計算の基準化合物として設定されている反応物。等量計算の基準化合物として指定できる反応物は 1 つだけです。
Sample Mass	反応物の質量。標準の単位: g
%Weight	反応物の純度。標準値は 100% です。
Volume	標準の単位: ml。モル濃度または密度を入力する必要があります。
Molarity	標準の単位: M
Density	標準の単位: g/ml

最小限の情報を入力すると、その時点で値が計算されます。

新しい値を入力、入力内容を編集、または反応を変更すると、自動的に値が再計算されます。入力内容を編集するには、編集する箇所をクリックして新しい値を入力します。次の表はその例です。

<i>Reactants</i>				<i>Products</i>		
Formula	C₆H₆	CH₃Cl	AlCl₃	Formula	C₇H₈⁺	ClH
MW	78.11	50.48	133.33	MW	92.14	36.46
Limiting?	Yes	No	No	Equivalents		
Equivalents				%Completion		
Sample Mass		2.52g	6.67g	Expected Mass	4.61g	1.82g
%Weight				Expected Moles	50.00mmol	50.00mmol
Molarity				Measured Mass		
Density				Purity		
Volume				Product Mass		
Reactant Moles	50.00mmol	50.00mmol	50.00mmol	Product Moles		
Reactant Mass	3.91g	2.52g	6.67g	%Yield		

表の中の、反応物の Reactant Moles フィールドの値を 30.00 mol に編集すると、表の他の部分が更新されます。

<i>Reactants</i>				<i>Products</i>		
Formula	C₆H₆	CH₃Cl	AlCl₃	Formula	C₇H₈⁺	ClH
MW	78.11	50.48	133.33	MW	92.14	36.46
Limiting?	Yes	No	No	Equivalents		
Equivalents				%Completion		
Sample Mass		1.51kg	4.00kg	Expected Mass	2.76kg	1.09kg
%Weight				Expected Moles	30.00mol	30.00mol
Molarity				Measured Mass		
Density				Purity		
Volume				Product Mass		
Reactant Moles	30.00mol	30.00mol	30.00mol	Product Moles		
Reactant Mass	2.34kg	1.51kg	4.00kg	%Yield		

 **注:** 入力値は太字で表示され、計算値は通常のフォントで表示されます。

グリッドの行または列の表示/非表示を選択できます。行を隠すには、行を右クリックしてコンテキストメニューから **Hide Row** を選択します。

Reactants				Products		
Formula	C ₆ H ₆	CH ₃ Cl	AlCl ₃	Formula	C ₇ H ₈ ⁺	ClH
MW	78.11	50.48	133.33	MW	92.14	36.46
Limiting?			No	Equivalents		
Equivalents				%Completion		
Sample Mass			4.00kg	Expected Mass	2.76kg	1.09kg
%Weight				Expected Moles	30.00mol	30.00mol
Molarity				Measured Mass		
Density				Purity		
Volume				Product Mass		
Reactant Moles	0.000mol	0.000mol	30.00mol	Product Moles		
Reactant Mass	2.34kg	1.51kg	4.00kg	%Yield		

列を隠すには、列を右クリックし、コンテキストメニューから **Hide Column** を選択します。
非表示の行または列を表示するには、コンテキストメニューから **Show All** を選択します。テキストの色を変更するには、コンテキストメニューから **Color** を選択します。

テンプレート

ChemDraw にはテンプレートのライブラリが用意されています。テンプレートは新しい描画の出発点として、また既存の描画に追加するために使用できます。パレットはテンプレートのセットです。

ユーザーが定義できるテンプレートは原子や結合に限りません。テンプレートは、文字列、色、ボックス、円弧、軌道、矢印、反応機構記号、曲線なども含むことができます。他のアプリケーションの画像をテンプレート表示枠に貼り付けることもできます。PerkinElmer Informatics Web サイトからテンプレートをダウンロードして使用できます。使用可能なテンプレートおよびユーザーがダウンロード可能なテンプレートの詳細については、


[ChemDraw テンプレート ファイル](#) および [BioDraw テンプレート](#) を参照してください。

テンプレートを開くには、次のいずれかの操作を行ってください。

- メイン ツールバーのテンプレート ツールを選択します。
- **View** メニューの **Templates** をクリックして、リストからテンプレート ツールバーを選択します。

テンプレートを使用して描画に追加するには、次の操作を行ってください。

1. テンプレート ツールバーから必要なテンプレートを選択します。
2. ドキュメント ウィンドウで、テンプレートが必要な向きになるまでマウスをクリックしてドラッグします。

 **ヒント:** テンプレートのサイズを変更するには、テンプレートを描画しながら **Alt** キーを押します。

テンプレートは、既存の描画に構造上の特徴を追加するときにも使用できます。


既存の描画に構造上の特徴を追加するには、次の操作を行ってください。

1. テンプレート ツールバーから必要なテンプレートを選択します。
2. 既存の描画に含まれている原子または結合をクリックして、テンプレート構造式を追加します。

テンプレートのカスタマイズ

テンプレート パレットを修正して、独自のパレットを作成できます。パレットを作成すると、ドキュメント ウィンドウの上に空のテンプレートのセットの表示枠が表示されます。パレットを保存すると、そのパレットには描画したテンプレートが含まれます。こうして作成したパレットは、テンプレート ツールのパレット一覧から選択できます。削除されるドキュメント内で個別のエンティティとして扱われるように、テンプレートをグループとして保存することも、Integral グループとして保存することもできます。テンプレート パレットを作成するには、次の操作を行ってください。

1. **File**、**Open Templates**、**New Templates** の順に選択します。
2. テンプレート表示枠をクリックします。
3. ドキュメント ウィンドウで新しい構造式を描画します。
4. 別のテンプレート表示枠をクリックし、新しい構造式を描画します。
5. 希望するテンプレートをすべて描画したら、**File** メニューの **Save** をクリックします。

 **注:** 作成したパレットは、*ChemDraw Items* フォルダに保存します。これにより、メイン ツールバーに表示されるようになります。

6. 任意の描画で、メイン ツールバーのテンプレート ツールを選択して、保存したパレットを使用できます。

テンプレートの修正

1. **File** メニューの **Open Templates** をクリックして、パレットを選択します。
2. パレットで、テンプレート表示枠をクリックします。ドキュメント ウィンドウにテンプレートが表示されます。
3. ドキュメント ウィンドウでテンプレートを編集します。
4. テンプレートを保存します。

パレットでパレットの行または列を追加または削除するには、次の操作を行ってください。

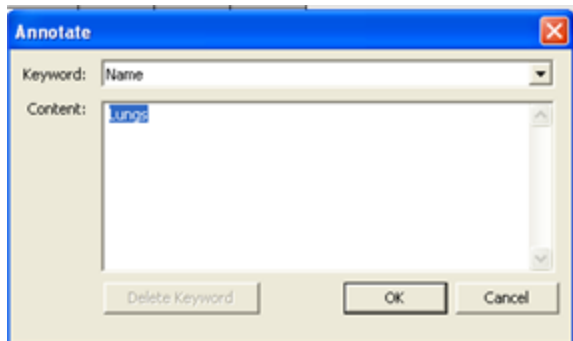
1. パレットで、行または列のセルをクリックします。
2. **Edit** メニューの適切なオプションを選択します。

テンプレートの追加

テンプレートを追加するには、空のテンプレート表示枠をクリックし、ドキュメント ウィンドウでテンプレートを描画します。**File** メニューの **Save** をクリックします。

テンプレートの注釈付け

1. **File** メニューの **Open Templates** をクリックして、パレットを選択します。
2. テンプレート表示枠内の空白部分を右クリックし、**Annotate** を選択します。Annotate ダイアログが表示されます。



3. **Content** テキスト ボックスで、テンプレートの新しい名前を指定します。
4. **OK** をクリックします。
5. **Save** をクリックします。注釈は、注釈付きのテンプレートをポイントしたときに、ツールヒントとして表示されます。

テンプレートの削除

1. 削除するテンプレートのテンプレート表示枠を選択します。
2. ドキュメント ウィンドウで描画全体を選択します。
3. **Edit** メニューの **Clear** をクリックします。
4. **File** メニューの **Save** をクリックします。

テンプレートの向きの変更

作成するテンプレートを使いやすくするには、使用頻度の高い結合を修正できるようにテンプレート構造式の向きを変更します。

テンプレート表示枠のサイズ変更

テンプレート表示枠内のテンプレート表示枠のサイズを変更するには、テンプレート表示枠の右下隅をドラッグします。必要であれば、クリックしてからサイズ変更ハンドルをドラッグします。

ニックネームの定義

ニックネームとは、部分構造式を表す英数字の略称です¹。ニックネームは、大きな構造式や、同じ機能を繰り返し使用する構造式を描画する場合に便利です。簡略ラベルはニックネームに似ていますが、簡略ラベルは使用しているそのドキュメントだけで有効です。

ChemDraw には、一般的な官能基とモノマーのニックネームのライブラリがあります。たとえば、タンパク質の構造式をよく描画するのであれば、描画の中でアミノ酸のニックネームを使用するほうが、いちいちアミノ酸を描画するよりも便利でしょう。

ニックネームが表す部分構造式は、1 つまたは複数の結合点を使用して残りの構造式に結合します。ただし、結合点は単結合でなければなりません。2 つ以上の結合点を持つ部分構造式の場合は、結合点の番号付けによって、構

¹部分構造式は、描画した構造式の任意の部分です。

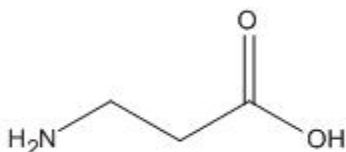
構造の他の部分が結合される順序が決まります。たとえば、H-Leu-OH という構造式を展開すると、水素がロイシンの最初の結合点に結合し、ヒドロキシル基が 2 番目の結合点に結合します。

詳細については、71 ページの “ニックネームの使用” を参照してください。

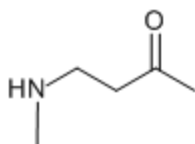
新しいニックネームを定義するには、次の操作を行ってください。

(以下の例では、b-アラニン構造式が使用されています。)

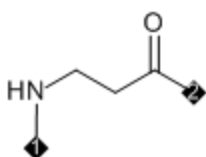
1. b-アラニン構造式を描画します。




2. NH2 基への結合を描画します。
3. OH 基でラベルを削除します。



4. 結合点ツールを使用して、結合を N 末端に追加します。
5. 結合を C 末端に追加します。



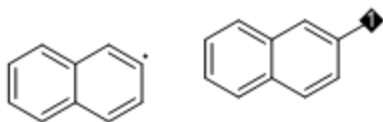
6. 構造式を選択して、**Structure**、**Define Nickname** の順にクリックします。
7. ニックネーム用の短い名前を入力します。

 **ヒント:** 元素名と重複しないように、3 文字以上の名前を指定します。

8. **OK** をクリックします。

 **注:** 結合点の順序は、結合点を構造式に追加した順序によって決まります。

単一ラジカルを含む構造式からニックネームを定義することもできます。結合点は、ラジカル的部位に追加されません。




構造式から部分構造式を取り出してニックネームを定義することもできます。

ニックネームと原子ラベル

元素名と同じニックネームを使うと、その元素がニックネームによって置き換えられるというメッセージが表示されます。たとえば、アセチル基のニックネームとして **Ac** を使用すると、元素であるアクチニウムが置き換えられてしまいます。また、Check Structure コマンドは、ラベルをアクチニウムではなくアセチル基として認識します。

ニックネーム リストには、次のようなニックネームと元素名の重複があります。

記号	ニックネーム	元素
Ac	アセチル	アクチニウム
Am	アミル	アメリシウム
Np	パラ-ニトロフェニル	ネプツニウム
Pr	プロピル	プレセオジミウム

 **注:** *Periodic Table* ダイアログを使用して原子を構造式に挿入する場合、優先的に元素が入れられます。*Periodic Table* から **Ac** を選択して原子をクリックすると、アセチルではなくアクチニウムが配置されます。

ニックネームが元素名を置き換えてしまわないように、ニックネームを削除するには、File メニューの **List Nicknames** をクリックし、そのニックネームの定義を削除します。

ニックネームの削除

ニックネーム ライブラリからニックネームを削除するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **List Nicknames** をクリックします。
2. ニックネームを選択し、**Delete** をクリックします。

ニックネームのトラブルシューティング

Define Nicknames コマンドが無効になっている場合は、次の項目をチェックしてください。

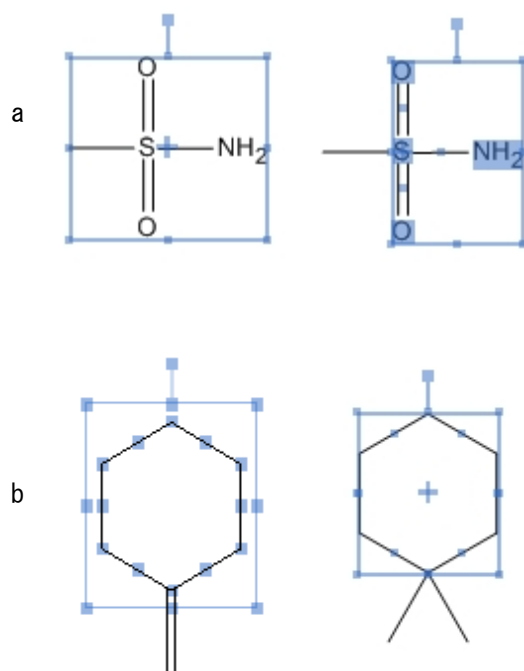
- 結合点がない
- 3 つ以上の結合点が定義されている
- 結合点が単結合ではない

次の図 a では、官能基全体が選択されています。結合点を指示する原子がないため、ニックネームを定義することができません。スルホンアミド基を未選択の結合に付加すると、ニックネームを定義できます。

図 b では、ニックネームの 1 つの原子に複数の結合点があります。

誤り

正しい



ChemScript

ChemScript は、化学情報処理のためのソフトウェア開発キット (SDK) です。PerkinElmer Informatics 製品で広く使用されているプログラミング アルゴリズムが含まれます。ソフトウェア コード作成の十分な知識をお持ちであれば、ChemScript を適用して ChemOffice アプリケーションで使用する独自のスクリプトを作成できます。

ChemDraw Professional には、自由に使用できるサンプル スクリプトのライブラリも用意されています。File メニューの **ChemScripts** をクリックして、オプションを選択します。

現行の描画に対してスクリプトを実行するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Run ChemScript** をクリックします。
2. Open ダイアログでスクリプトを選択し、**Open** をクリックします。
3. (オプション) スクリプトを再度実行するには、File メニューの **Re-run Previously Selected ChemScript** をクリックします。

ChemScript との統合

 **注:** ChemScript は、プログラミングの経験を持つユーザーを対象とした拡張機能です。

ChemScript を使用すると、独自の機能を ChemDraw に追加できます。独自のスクリプトはアプリケーションから起動でき、スクリプトの結果は新しい ChemDraw ドキュメントに返されます。スクリプトは、PYTHON または .NET を使用して作成する必要があります。カスタム スクリプトは次の目的で使用します。

- ChemScript を使用した独自の描画ルールを適用する
- ChemDraw から外部アプリケーションを起動する
- ChemDraw からワークフローを自動化する

スクリプトの入力データは、ChemDraw で現在アクティブなドキュメントからの CDXML データで構成されます。ドキュメントの一部を選択した場合、ドキュメントで選択した部分のみがスクリプトの入力として使用されます。スクリプトは化学構造式や反応に適用できます。

使いやすくするために、スクリプトは Scripts ディレクトリに配置することができます。Scripts ディレクトリは、ChemDraw 項目ディレクトリと同一ディレクトリ内にあります。

スクリプトを起動するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- File メニューの **ChemScripts** をクリックして、Scripts ディレクトリからスクリプトを選択します。
- File メニューの **Run ChemScript** をクリックして、Scripts ディレクトリ以外のディレクトリからスクリプトを選択します。

File メニューの **ChemScripts** から ChemDraw で使用可能なサンプル スクリプトも使用できます。次に例を 1 つ示します。

1. ドキュメント ウィンドウで少なくとも 3 つの構造式を描画します。
2. File、**ChemScripts**、**Layout Molecules in a Circle** の順に選択します。円の中に配置した構造式が新しいドキュメント ウィンドウに表示されます。

Struct=Name (Professional レベル)

ChemDraw には、構造式と化学名を生成するための 2 つの機能 (*Name>Struct* および *Struct>Name*) が含まれています。この 2 つの機能は、まとめて *Struct=Name* と呼ばれます。

Struct>Name では、立体化学構造における Cahn-Ingold-Prelog (CIP) の順位則を使用して、化学構造式の名前を生成することができます。このオプションを使用すると、描画した構造式の名前を生成できます。

Name>Struct により、化学名を対応する化学構造式に変換できます。これは、化学者が使っている化学名を解釈できるように設計されています。つまり、公式な IUPAC (国際純正応用化学連合)、IUBMB (国際生化学分子生物学連合) および CAS などの法則や勧告の他に、略語やスラングも認識します。

Struct>Name

Struct>Name により、多種多様な化学構造式を解釈できます。つまり、構造式を描画し、*Struct>Name* によってその構造式に名前を付けることができます。また、その構造式を修正すると、*Struct=Name* によって名前が更新されます。

Struct>Name の使用

構造式の名前を生成するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **Structure** メニューの **Convert Structure to Name** をクリックします。構造式の下に名前が表示されます。

サポートされる構造式

Struct>Name が解釈するものには以下のものがあります。

■ 立体化学構造

環と鎖の主要な原子団

カルボン酸	S、Se、および、Te 酸
ペルオキシ酸	S、Se、および、Te エステル
酸アミド派生物	S、Se、および、Te 酸ハロゲン
炭酸	S、Se、および、Te アミド
硝酸	硫化物とカルコゲン類似物
酸ハロゲン化物	スルホキシドとカルコゲン類似物
カルボンエステル	ヘテロ原子酸 (P、B、A など)
塩	ヘテロ原子エステル
無水物	酸ハロゲン化ヘテロ原子
ヒドラジド	アルデヒドとカルコゲン類似物
イミド	ケトンとカルコゲン類似物
アミド	アルコールとカルコゲン類似物
ヒドラジン	過酸化水素

ニトリル
アミドとイミド

過酸化物

非環構造式

- 官能基の分離と命名
- 分子の基本鎖の識別
- 部分構造式の識別と作成
- 接頭辞によってのみ引用される原子団の命名法
- ヘテロ非環式化合物
- 置換基の命名
- ロカント
- 名前生成（アルファベット順、句読法など）

環構造式

Struct>Name では、次のタイプの環構造式がサポートされます。

- 炭素単環構造式
- ヘテロ単環構造式
- 縮合多環構造式：
 - 単純命名縮合多環構造式
 - 多環縮合環
 - 二構造複合環の縮合環
 - 三以上構造複合環の縮合環
- 架橋単環構造式
- スピロ環構造

以下に、これらの環構造の一部の定義を示します。

環集合

環集合には、単結合または二重結合で結合されている 2 つ以上の同一の環式系があります。環集合を構成する複数の環式系は、単環、縮合系、脂環式 von Baeyer 系、スピロ系、フェイン系、フラレーンのいずれかです。

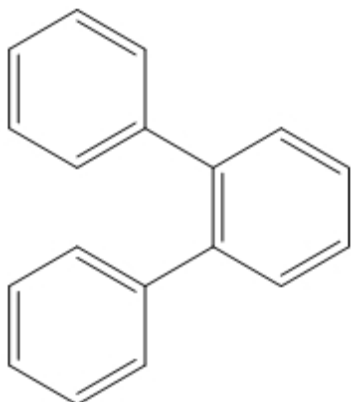


図 10.1: 環集合構造式の例: 1, 1':2', 1''-テルフェニル

縮合環系

Struct>Name では、次のような 2 つ以上の環を持つ縮合環系がサポートされています。

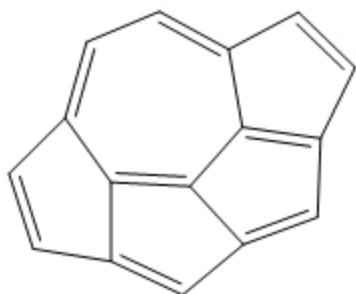


図 10.2: 縮合環系の例: シクロペンタ [ij] ペンタレノ [2, 1, 6-cde] アズレン

架橋縮合環系

ChemDraw では、均一の（同一元素の原子のみから成る）単純非環式（鎖状）独立橋と縮合環系が 2 つの（2 価および多価の）結合点で結合されている架橋縮合環系がサポートされています。次に例を示します。

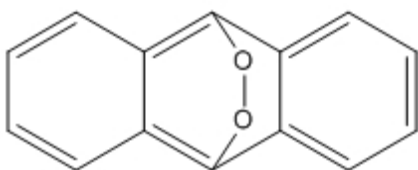


図 10.3: 架橋縮合環系の例: 9, 10-エピジオキシアントラセン

ポリマー

ポリマーの構造式を SMILES で表すことはできません。ただし、Struct>Name は多くのホモポリマー、コポリマー、代替ポリマーをサポートしています。次に例を示します。

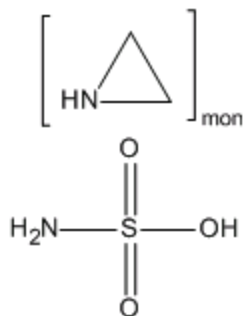


図 10.4: 硫酸 (1:1) を持つポリエチレンイミン化合物

その他の化合物

- リンおよびヒ素化合物
- Si、Ge、Sn、および、Pb 化合物
- ホウ素化合物
- 有機金属化合物

Struct>Name は、正規の CIP 立体化学構造記述子を使用して命名します。

Struct>Name は、分数化学量を含めた括弧属性として指定された化学量を直接サポートします。また、0.5 (“ヘミ”) および 1.5 (“セスキ”) の化学量を処理する方法も改善されています。次に例を示します。

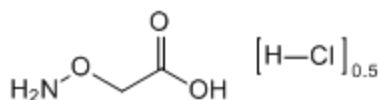


図 10.5: 2-(アミノオキシ) 酢酸ヘミ塩酸塩

Struct>Name は、化学名の生成時には IUPAC ルールに厳密に従います。ただし、指定された水素を処理する際は、CAS の命名規則の推奨事項に準拠します。たとえば、1,3-ジオキソール内の 2 つの酸素原子間の炭素原子は、隣接する 2 つの原子 (酸素原子) に空き原子価がないため、二重結合を形成できません。この構造式に推奨される IUPAC (PIN) 名は 2H-1,3-ジオキソールであり、Struct>Name により 1,3-ジオキソールという名前が生成されます。Struct>Name により生成された名前は、この点で CAS の命名規則の推奨事項に準拠しています。

サポートされない構造式

この機能には、一部の構造式の解釈に若干の制限があります。こうした構造式としては次のものがあります。

- スルホンとカルコゲン類似物

- 同位体修飾された化合物
- ラジカル、イオン、ラジカルイオン


自動更新

ChemDraw で生成された構造式の名前をワークシートに貼り付けた場合、その名前は構造式を変更すると動的に更新されます。名前が描画されたものと一致しなくなることはありませんが、構造式に対する変更により、**Struct>Name** で名前を生成できない化学構造が作成される可能性があります。また、化学名や化学分析などの化学的物性をタイトルで使用することもできます。タイトルの内容は、構造式を変更すると自動的に更新されます。化学的物性をタイトルに追加する方法の詳細については、76 ページの“解析データ”を参照してください。

自動更新機能を切り替えるには、次の操作を行ってください。

1. タイトルをポイントします。
2. 右クリックし、**Auto-update** を選択します。コマンドをオンにすると、コマンドの横にチェック マークが付きます。繰り返しクリックすると、コマンドのオン/オフが切り替わります。


自動更新機能がオン（標準）になっていると、構造式を変更するたびにラベルが更新されます。


 **注：** 大きな構造式の場合、新しいラベルが数秒間表示されないことがあります。その間も、引き続き構造式の変更を行うことができます。

Name>Struct

化学名を入力して、Name>Struct により構造式を描画します。

一部の商品名は使用できませんが、Name>Struct は商品名や一般名称を解釈できるように設計されていません。これらの構造式を知るには、ChemFinder.com などの化学データベースの方が適しています。

 **注：** アミノ酸の形式を入力するときは、“アルファ”や“ベータ”などの語を使用します。たとえば “alpha alanine” や “beta alanine” は、有効な Name>Struct 化学名です。

 **注：** また Name>Struct では多くのドイツ語名も解釈することができます。

名称から構造式への変換

名称を入力して構造式に変換するには、次の操作を行ってください。

1. **Structure** メニューの **Convert Name to Structure** をクリックします。
Insert Structure ダイアログ ボックスが表示されます。
2. 名称（たとえば、2-ブロモ安息香酸）を入力するか、クリップボードからコピーした名前を貼り付けます。

 **ヒント：** 名称は、キーボード コマンド (Ctrl + V) を使用して貼り付けることができます。

3. 名称が構造式の下に表示されるようにしたい場合は、**Paste name below structure** を選択します。
4. **OK** をクリックします。

クリップボードに複写した名前の変換

クリップボードに複写した名前を構造式として貼り付けるには、次の操作を行ってください。

1. ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。
2. **Edit**、**Paste Special**、**Name as Structure** の順に選択します。ドキュメントに構造式が表示されます。

タイトルの変換

タイトルを構造式に変換することができます。

1. タイトルを選択します。
2. **Structure** メニューの **Convert Name to Structure** をクリックします。

サポートされる構造式

Struct>Name では、以下の構造式クラスの化合物を命名することができます。

環と鎖の主要な原子団

- | | |
|---------------------|---------------------|
| ▪ 酸ハロゲン化物 | ▪ 酸アミド派生物 |
| ▪ アルコールとカルコゲン類似物 | ▪ 無水物 |
| ▪ アルデヒドとカルコゲン類似物 | ▪ 炭酸 |
| ▪ アミド | ▪ イミド |
| ▪ アミドとイミド | ▪ 硝酸 |
| ▪ カルボン酸 | ▪ ペルオキシ酸 |
| ▪ カルボンエステル | ▪ 塩 |
| ▪ 酸ハロゲン化ヘテロ原子 | ▪ 硫化物とカルコゲン類似物 |
| ▪ ヘテロ原子酸 (P、B、A など) | ▪ スルホキシドとカルコゲン類似物 |
| ▪ ヘテロ原子エステル | ▪ 過酸化物 |
| ▪ ヒドラジド | ▪ S、Se、および、Te アミド |
| ▪ ヒドラジン | ▪ S、Se、および、Te 酸ハロゲン |
| ▪ 過酸化水素 | ▪ S、Se、および、Te 酸 |
| ▪ ケトンとカルコゲン類似物 | ▪ S、Se、および、Te エステル |
| ▪ ニトリル | |

環構造式

- | | |
|---------------|--------------|
| ▪ 架橋単環構造式 | ▪ ヘテロ単環構造式 |
| ▪ 炭素単環構造式 | ▪ 二環式縮合環 |
| ▪ 単純命名縮合多環構造式 | ▪ 二構造複合環の縮合環 |

その他の化合物

- | | |
|-----------|-----------------------|
| ▪ ホウ素化合物 | ▪ Si、Ge、Sn、および、Pb 化合物 |
| ▪ 有機金属化合物 | ▪ リンおよびヒ素化合物 |

Name>Struct は、ほとんどの有機化学物質および無機化学物質の標準名称を認識します。ただし、タイプによってはサポートされないものもあります。

- 配位化合物
- ポリボラン
- ポリマー
- フラーレンやポルフィリン/ポルフィンなど、一部の高度な架橋環系
- 次のような立体化学構造指定子: +、-、+/-、+-、D、l、dl、endo、exo、syn、anti、r、t、c

ディクショナリへの構造式の追加

頻繁に使用する構造式または化合物の独自のライブラリを作成できます。構造式を表す短い名前または頭字語を入力して、以降の化学的描画の際に構造式を簡単に挿入できるようにします。新しい構造式名を呼び出すと、ChemDraw でその構造式が自動的に描画領域に描画されます。

たとえば、検討中の新しい未承認薬について、ディクショナリに追加する構造式を作成することもできます。構造式を作成すると、その構造式名および SMILES 文字列はディクショナリに保存されます。

ディクショナリに新しい構造式を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 「xyz」構造式を描画します。この「xyz」は、新しい頻繁に使用する構造式になります。
2. 構造式を選択し、**Structure** メニューの **Add Structure to Dictionary** をクリックします。
3. 構造式の短い名前または頭字語を入力して、**Save** をクリックします。

Structure メニューの **Convert Name to Structure** を選択して、新しい構造式の短い名前を入力すると、描画領域にその構造式が表示され、新しい構造式名もタイトルとして表示されます。

FDA 承認薬ディクショナリ

ChemDraw には、2009 ~ 2015 年度における FDA 承認済みの薬物とその構造式のディクショナリが用意されています。このディクショナリは毎年更新されます。**Structure** メニューの **Convert Name to Structure** を使用して構造式を検索すると、ChemDraw ではまずその構造式機能に対する内部名を使用して構造式の作成が試みられます。それが成功しない場合は、FDA ディクショナリが確認され、それも成功しない場合はユーザー定義のディクショナリが確認されます。このプロセスは非常に高速で行われ、ユーザーの目に触れることはありません。それでも検索が成功しない場合は、ユーザーがインターネット接続を確立していれば、オンラインの ChemACX データベースの Synonym テーブルが検索されて、入力された名前との照合が試みられます。それでも成功しない場合や、入力された名前に複数の ChemACX エントリが一致した場合は、検索の結果を示すメッセージが表示されません。

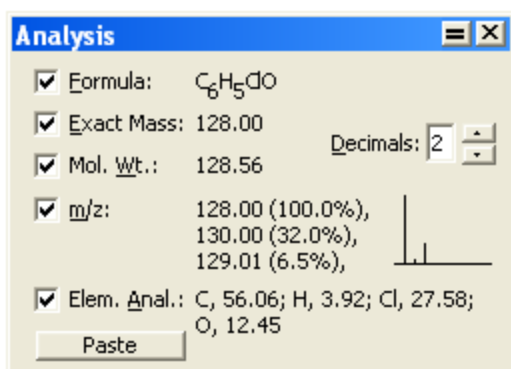
化学的機能

構造式解析

Analysis ウィンドウに、ドキュメント全体、構造式、または構造式の一部の化学式、精密質量、分子量、m/z、および元素解析を表示できます。

ドキュメント ウィンドウで選択したオブジェクトの値が表示されます。ドキュメントで構造式を選択していない場合は、ドキュメント全体の値が表示されます。

このウィンドウは、ドキュメント内で描画している間は表示しておくことが可能です。描画状況に応じて、最新の値が表示されます。次に例を示します。



小数点設定は Exact Mass、Molecular Weight、および m/z に対してのみ適用されます。Analysis ウィンドウに表示される値を次に示します。

Formula. 分子式は、分子の各元素の原子数、電荷、ラジカル、同位体を正確に表示します。

Exact Mass. 構造式の正確な分子量です。各原子の原子量は、その元素が最も一般的に存在する同位体に基づいています。

Mol. Wt. 構造式の平均分子量。原子量は、その元素の全同位体の天然存在量に基づいています。

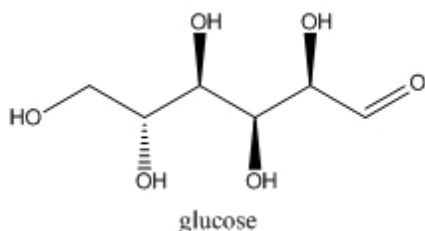
m/z. 質量/電荷。最も一般的な同位体の質量と、同位体の存在量のグラフが表示されます。

分子量には、各元素の同位体とそれらの天然存在量が考慮されます。存在量の多い同位体が複数ある場合は、複数の分子量が計算されます。存在量の低い組み合わせ（同位体の存在量が低いか、中位の存在量の寄与を多く含んでいる）は考慮されません。

Elem. Anal. 構造式に含まれる各元素の重さの割合です。

Analysis ウィンドウを表示するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式全体または構造式の一部を選択します。何も選択しない場合、Analysis ウィンドウには構造式全体の値が表示されます。
2. View、**View**、**Show Analysis Window**. Analysis ウィンドウに、選択した描画部分の値あるいは何も選択しなかった場合は描画全体の値が表示されます。
3. (オプション) **Paste** を選択すると解析情報が描画面面に追加されます。情報が編集可能な文字列として表示されます。



Chemical Formula: C₆H₁₂O₆
 Exact Mass: 180.06
 Molecular Weight: 180.16
 m/z: 180.06 (100.0%), 181.07 (6.9%), 182.07 (1.4%)
 Elemental Analysis: C, 40.00; H, 6.71; O, 53.29

図 11.1: 構造式解析

構造式を編集すると、編集結果に応じて文字列の情報が更新されます。この情報の表示/非表示を切り替えるには、次の操作を行ってください。

1. 任意のツールで文字列を右クリックします。
2. **Analysis** をポイントし、表示/非表示を切り替える項目をクリックして選択または選択解除します。

ChemFinder ホットリンク

PerkinElmer Informatics は化合物とその特性に関する膨大なデータベースを保持しています。ChemDraw には、以下のようなデータベースへのインターネット接続機能があります。


- PerkinElmer Informatics ChemIndex などのデータ リソースへのリンク
- ChemSpider データベースへのリンク
- 名前と別名
- CAS 登録番号や ChemACX ID などの識別名

ホットリンク情報もデータ自体も頻繁に更新されています。

ホットリンクでは、ドキュメント ウィンドウに構造式に関する情報が表示されます。

ChemFinder ホットリンクを開くには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **View** メニューの **Show ChemFinder HotLink Window** をクリックします。

 **注:** ChemSpider データベースにアクセスするには、ChemFinder Hotlink ウィンドウの Properties テーブルで InchiKey または Std InchiKey の値をクリックします。

立体化学構造

ChemDraw では、Cahn-Ingold-Prelog (CIP) の順位則に従って絶対立体化学構造が計算されます。詳細については、318 ページの "Cahn-Ingold-Prelog" を参照してください。

四面体および二重結合の立体化学構造のみサポートしており、また非ラセミ立体化学しか解釈できません。芳香族結合の立体化学標識は表示されません。

ChemDraw では、以下のような表記を使用します。

(R), (S)

標準四面体立体化学構造

(r), (s)

他の立体化学中心が決定する四面体立体化学構造。次に例を示します。*cis*-デカリンおよび *myo*-イノシトール

(E), (Z)

標準二重結合立体化学構造

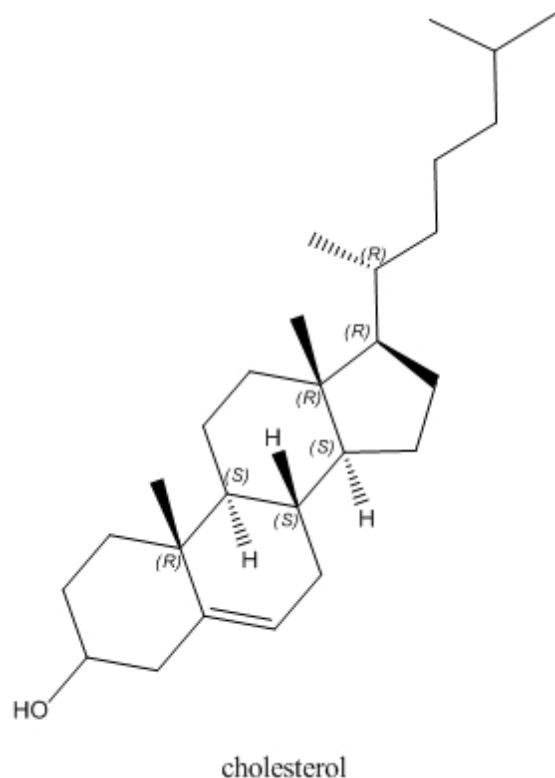
立体化学構造標識

描画を変更すると、立体構造標識が更新されます。

描画に立体化学構造標識に含めるには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. 右クリックして、コンテキストメニューから **Object Settings** を選択します。
3. Drawing タブの Atom Indicators および Bond Indicators の下にある **Show Stereochemistry** を選択します。

この例のように、立体中心にはマークが付けられます。



標識の非表示

1. 非表示にする標識を選択します。
2. 右クリックして、コンテキストメニューから **Hide Indicator** を選択します。

標識の書式設定

フォントの書式を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 操作する標識を選択します。
2. 右クリックして、コンテキストメニューから **Style** を選びます。

括弧の適用

括弧を立体化学構造標識に適用するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。
2. Preferences ダイアログの Building/Display タブで **Include Parentheses When Showing Stereochemistry** を選択します。

標識の削除

標識を削除するには、消しゴム ツールを使用して標識をクリックします。

標識の配置

検索標識を配置するには、ドラッグするか、新しい場所の数値を入力します。

正確な位置を指定するには、次の操作を行ってください。

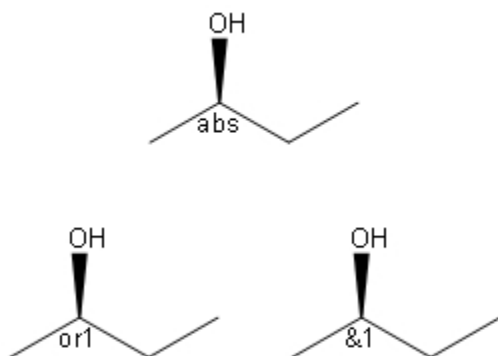
1. 再配置する標識を選択します。
2. 右クリックし、コンテキストメニューから **Position** を選びます。Position Indicator ダイアログが表示されます。
3. 適切なオプションをクリックして、次の表を参考に値を入力します。

配置	指定する値
原子または結合の中心から標識の中心へ	角度 (度数) または 時計 (時間)
原子または結合の中心から標識の左下へ	縦横の移動距離
指定した座標位置	水平方向、垂直方向の絶対座標値

相対立体化学構造

分子内の立体中心の原子団の関係を指定できます。

この表記法では、立体化学構造の特性および個々の立体中心（分子全体ではない）を記述できます。そのため、少数の（あるいは 1 つの）構造式を使って、いくつもの鏡像体の特性を記述できます。この表記法による記述列を以下に示します。



構造式に立体化学表記法を追加するには、**Structure** メニューの **Enhanced Stereochemistry** をクリックします。

この表記法の有効性が顕著に現れるのは、複雑な鏡像体を描画する場合です。たとえば、β-シペルメトリンは 2 つの鏡像体対から成る 4 種類の立体異性体の混合物です。しかし、これを描画するのに必要な構造式は 1 つだけです。

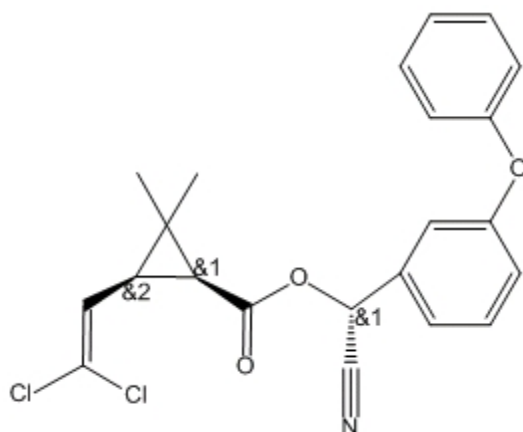


図 11.2: β -シペルメトリン

2 つの立体中心に &1 記号が表示されているのは、これらが固定相対立体配置の関係にあるためです。一方が (R) のとき、他方は (S) でなければなりません。結果として、これらは原子団を形成しているのです。3 番目の立体中心は独立に変化するので、&2 記号が付きます。各原子団には 1 から順に自動的に番号が割り当てられます。 β -シペルメトリンの立体異性体をすべて表示するには、File、Open Samples、b-Cypermethrin の順に選択します。

原子団の立体化学構造を示すには、次の操作を行ってください。

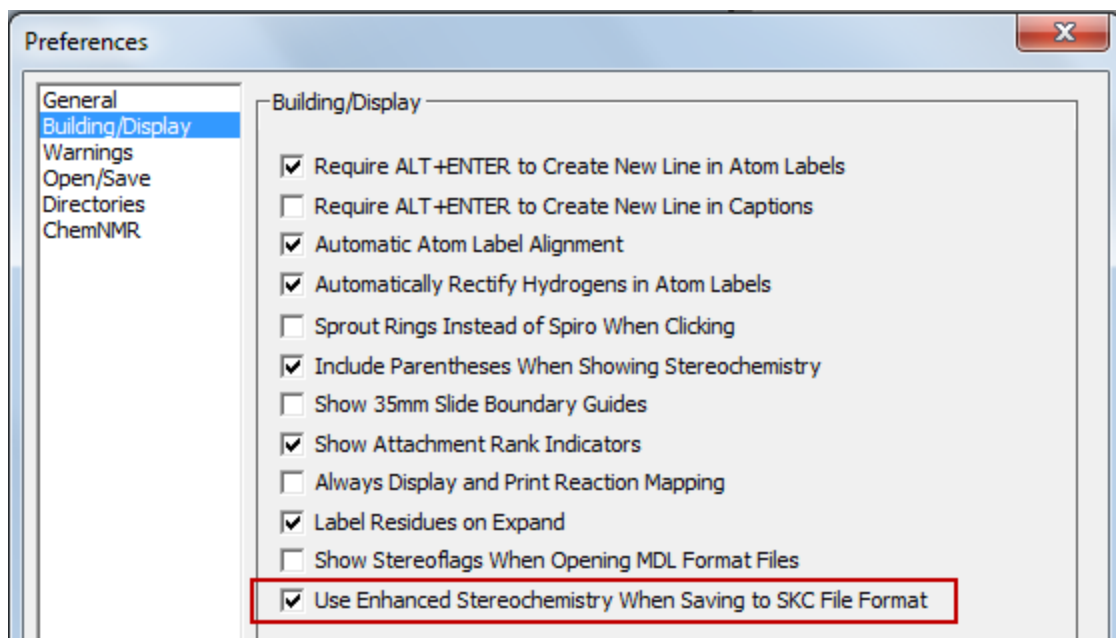
1. Shift キーを押しながらクリックして、原子団のすべての原子を選択します。
2. Structure メニューの Enhanced Stereochemistry をクリックし、立体化学構造マーカーを選択します。

標識の表示と非表示については、168 ページの“相対立体化学構造”を参照してください。

この強化された立体化学構造表記法は、次のいずれの形式でも保存できます。(CDX、CDXML、MOL V3000、RXN V3000、SKC、TGF)

SKC または TGF 形式で保存すると、標識は対応するデータ SGroup に変換されます。そのようなデータ SGroup が含まれている SKC または TGF 形式のファイルを開くと、真の Enhanced Stereochemistry 値に変換されます。

SKC 形式で保存するときに Enhanced Stereochemistry の設定を保存するには、Preferences ダイアログの Building/Display タブにある Use Enhanced Stereochemistry When Saving to SKC File Format オプションをオンにします。



- **注:** 絶対/相対/ラセミの立体化学設定を持つ MDL 形式ファイルを開くときに、個々の分子の立体中心に立体フラグ ラベルを表示するのではなく、1 つの汎用立体フラグ ラベルを表示するには、Preferences ダイアログの *Building/Display* タブにある *Show Stereoflags When Opening MDL Format Files* オプションをオンにします。

化学的物性

化学的物性の予測は ChemOffice がサポートする機能です。さまざまな手法の値を計算できます。たとえば、位相記述子（例：Wiener 指数、Balaban 指数）、熱力学的記述子（例：溶解度、融点、沸点）、分配係数（例：CLogP）、化学物質の 3 次元形状および体積に関する特性（例：コノリー表面積および容積）などがあります。ある構造式に対して総数で 100 を超す化学的物性を計算できます。

特定のアプリケーションで予測可能な特性のリストについては、以下のそれぞれのリンクをクリックするか、[PerkinElmer Informatics Web サイト](#)を参照してください。

- 170 ページの “ChemDraw での特性予測”
- 175 ページの “Chem3D での特性予測”
- 174 ページの “ChemDraw/Excel での特性予測”
- 177 ページの “ChemFinder の特性予測”

ChemDraw での特性予測

最大 100 個までの原子から成る化学構造式の物理的、熱力学的な特性の予測値を入手できます。

特性は、選択した構造式に対して最も信頼できる方法で計算されます。LogPの値は、計算よりも文献に記載されている数値に基づいた LogP 値がレポート ファイルに記載されます。レポートはテキスト ファイルとして作成され、ここに記載される情報は、Word ドキュメントのように、切り取って別のドキュメントに貼り付けることができます。

計算できるすべての特性一覧を以下に示します。

B	H	P
Boiling Point (沸点)	Heat of Formation (生成熱)	pKa
C	Henry' s Law Constant (ヘンリーの法則 の定数)	T
Critical Pressure (臨界圧力)	L	tPSA
Critical Temperature (臨界温度)	LogP	
Critical Volume (臨界容積)	LogS	
CLogP/CMR	M	
G	Melting Point (融点)	
Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	MR	

Molecular Networks について

* 化合物の酸解離定数、水溶解度、およびオクタノール/水の分配係数を予測するための MOSES. pKa、MOSES. logS、および MOSES. logP は、Molecular Networks のケモインフォマティクス プラットフォーム MOSES に基づく計算モジュールです。MOSES は、Molecular Networks GmbH (ドイツ、エルランゲン) が開発、保守、所有しています。詳細については、www.molecular-networks.com/moses を参照してください。All rights reserved. Molecular Networks GmbH, Erlangen, Germany (www.molecular-networks.com)

制限

次の原子タイプおよび混成状態のみがパラメータ化されます。

C_{sp^3}	C_{sp^2}	$C_{aromatic}$	C_{sp}
N_{sp^3}	N_{sp^2}	N_{amide}	$N_{aromatic}$
N_{sp}	O_{sp^3}	O_{sp^2}	P_{sp^3}
S_{sp^3}	S_{sp^2}	$S_{sulfoxide}$	$S_{sulfone}$
F	Cl	Br	I

Boiling Point (沸点)

沸点は絶対温度で表示します。

溶液は、純溶媒よりわずかに高い温度で沸騰します。沸点の変化は次の数式で算出します。

$$\Delta T_b = K_b m$$

K_b はモル沸点定数です。m は、重量モル濃度で表される溶質の濃度です。 ΔT_b は温度変化です。

Critical Pressure (臨界圧力)

バーで表示します。臨界温度で気体を液化するために必要な最小圧力です。

Critical Temperature (臨界温度)

絶対温度で表示します。気体の場合に、どれほど圧力を加えても液化できなくなる最低温度です。


Critical Volume (臨界容積)

cm^3/mol で表示します。臨界温度および臨界圧力において 1 モルの物質によって占有される体積です。

CLogP/CMR

CLogP は *n*オクタノール/水分係数 ($\log P_{ow}$) を計算するために使用します。計算ではなく文献に記載されている数値に基づいた LogP 値がレポート ファイルに記載されます。

CMR はモル屈折率の計算に使用します。計算ではなく文献に記載されている数値に基づいた MR 値がレポート ファイルに記載されます。

 **注:** CLogP と CMR の値が表示されるのは、ChemDraw Professional の場合のみです。

Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)

ギブスの自由エネルギーは次のように定義されます。

$$G(p, T) = U + pV - TS$$


以下と同じです。

$$G(p, T) = H - TS$$

各項の意味は次のとおりです。

- U は内部エネルギーです (SI 単位: ジュール)。
- p は圧力です (SI 単位: パスカル)。
- V は体積です (SI 単位: m^3)。
- T は温度です (SI 単位: ケルビン)。

- S はエントロピーです (SI 単位: ジュール毎ケルビン)。
- H はエンタルピーです (SI 単位: ジュール)。

 **注:** H と S は、標準温度および圧力で見られる熱力学的な値です。

Heat of Formation (生成熱)

KJ/mole で表示します。生成熱は、定圧で構成分子から 1 モルの物質が生成される際のエンタルピーの増加量です。

Henry' s Law Constant (ヘンリーの法則の定数)

単位なしの値です。ヘンリーの法則の定数は次のように表現できます。

$$k_{H,pc} = \frac{p}{c}$$

“p” は、溶液の上にある気体の溶質の分圧です。“c” は、溶質の濃度です。“ $k_{H,pc}$ ” は、濃度で除算した圧力の次元を伴う定数です。ヘンリーの法則の定数と呼ばれる定数は、溶質、溶媒、温度に依存します。

LogP

分配係数は、2 つの溶液間のイオン化していない化合物の濃度の比です。イオン性溶質の分配係数を測定する場合は、化合物の優勢型がイオン化されないように水相の pH が調整されます。溶媒内のイオン化していない溶質の濃度の比の対数は、LogP と呼ばれます。

通常、選択する溶媒の 1 つは水です。もう一方は疎水性のもの（オクタノールなど）です。

LogP の計算式は次のとおりです。

$$\log P_{oct/wat} = \log \left(\frac{[solute]_{octanol}}{[solute]_{un-ionizedwater}} \right)$$

LogS

LogS は、物質の溶解度を決定します。mol/L 単位で測定されます。

化合物の水溶解度は、その化合物の吸収特性と分布特性に大きく影響することで知られています。

 **注:** LogS 計算は、Microsoft Windows 版の ChemDraw でのみ使用できます。

Melting Point (融点)

標準大気圧で固体が液体になる温度です。融点では、固相と液相が平衡状態で存在します。融点の計算式は次のとおりです。

$$T = \frac{\Delta H}{\Delta S}$$

“T” は融点の温度です。“ΔS” は融解エントロピーの変化です。“ΔH” は融解エンタルピーの変化です。

MR

モル屈折率は、Crippen のフラグメント化法、および Viswanadhan のフラグメント化法により推定されます。レポート ファイルでは、選択した物質について追加して実験値の LogP データが表示されます。

pKa

pKa は、酸解離定数 K_a の負の対数です。化合物またはイオンが溶液中で解離する傾向を表します。次の数式で算出します。

$$pK_a = -\log_{10} K_a$$

レポート ファイルでは選択した物質について経験的 pKa データが表示されます。

 **注:** pKa 計算は、Microsoft Windows 版の ChemDraw でのみ使用できます。

tPSA

フラグメントの寄与率に基づいた PSA の計算です。

ChemDraw/Excel での特性予測

ChemDraw/Excel の特性予測機能を使用して、特定の構造式に対するさまざまな特性の値を表示することができます。最適な方法を使用して各特性が計算されます。ChemDraw/Excel で使用できる特性の一覧を以下に示します。各特性の詳細については、ChemDraw/Excel オンライン ヘルプを参照するか、[PerkinElmer Informatics Web サイト](#)をご覧ください。

予測できる特性には次のものがあります。

B	F	Melting Point (融点)	Shape Attribute (形状属性)
Balaban Index (Balaban 指数)	Formal Charge (形式電荷)	Molar Refractivity (モル屈折率)	Shape Coefficient (形状係数)
Boiling Point (沸点)	Freezing Point (凝固点)	Molecular Formula (分子式)	Sum of Degrees (次数合計)
C	G	Molecular Weight (分子量)	Sum of Valence Degrees (原子価合計)
Cluster Count (クラスター数)	Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	N	T

Critical Pressure (臨界圧力)	H	Number of Rotatable Bonds (回転可能結合数)	Total Connectivity (結合合計)
Critical Temperature (臨界温度)		Heat of Formation (生成熱)	O
Critical Volume (臨界容積)		Henry's Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	Ovality (卵形度)
Connolly Accessible Area (コノリー接触面)	I		Topological Diameter (形状径)
Connolly Molecular Surface Area (コノリー分子表面積)		Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	Topological Index (形状指数)
Connolly Solvent Accessible Surface Area (コノリー溶媒接触表面)	L		Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
Connolly Solvent-Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)		LogP	
E	M		Principal Moments of Inertia (X, Y, Z) (主慣性モーメント (X、Y、Z))
Exact Mass (精密質量)	Mass (質量)	S	Vapor Pressure (蒸気圧)
		Radius (半径)	Water Solubility (水溶性)
			Wiener Index (Wiener 指数)

Chem3D での特性予測

Chem3D により、特性の構築、解析、および計算をきわめて簡単に実行することができます。質量や分子式を計算するための構造式の解析、さまざまな物理特性の予測に加え、分子形状の計算を行うこともできます。Chem3D で使用できる特性の一覧を次に示します。各特性の詳細については、Chem3D オンライン ヘルプを参照するか、[PerkinElmer Informatics Web サイト](#)をご覧ください。

B	G	Mol Weight (分子量)	Spin Density (スピン密度)
Balaban Index (Balaban 指数)	Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	Molecular Mass (分子量)	Sum of Degrees (次数合計)
Boiling Point (沸点)	H	Molecular Surfaces (分子表面)	Sum of Valence Degrees (原子価合計)
C	Harmonic Zero Point Energy (調和ゼロポイントエネルギー)	Molecular Topological Index (分子形状指数)	T

C_p	Heat Capacity (熱容量)	Molecular Volume (分子体積)	Thermodynamic Energy (熱力学的エネルギー)
C_v	Heat of Formation (生成熱)	Mulliken Charges (Mulliken 電荷)	Topological Diameter (形状径)
Cluster Count (クラスタ数)	Henry's Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	Mulliken Populations (Mulliken Population)	Total Connectivity (結合合計)
Connolly Accessible Area (コノリー接触面)	Hyper Polarizability (超分極率)	m/z	Total Energy (エネルギー総量)
Connolly Molecular Area (コノリー分子面)	Hyperfine Coupling Constants (超微細結合定数)	N	Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)	I	Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)	V
Critical Pressure (臨界圧力)	Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	O	Vapor Pressure (蒸気圧)
Critical Temperature (臨界温度)	Internal Energy (内部エネルギー)	Ovality (卵形度)	W
Critical Volume (臨界容積)	Ionization Potential (イオン化ポテンシャル)	P	Water Solubility (水溶性)
D	K	Partition Coefficient (分配係数)	Wiener Index (Wiener 指数)
Dipole (双極子)	Kinetic Energy (運動エネルギー)	pKa	Z
E	L	Polar Surface Area (極性表面積)	Zero-Point Energy (ゼロポイントエネルギー)
Electron Density (電子密度)	LogP	Polarizability (分極率)	
Electrostatic Potential (静電的ポテンシャル)	LogS	Potential Energy (ポテンシャルエネルギー)	
Elemental Analysis (元素解析)	Lowdin Charges (Lowdin 電荷)	Principal Moment (主モーメント)	
Enthalpy (エンタルピー)	Lowdin Populations (Lowdin 電子密度)	R	
Entropy (エントロピー)	M	Radius (半径)	

Exact Mass (精密質量)	Mass (質量)	RMS Force (RMS 力)
F	Melting Point (融点)	S
Formal Charge (形式電荷)	Mol Formula (分子式)	SCF Energy (SCF エネルギー)
Frequencies (周波数)	Mol Formula HTML (分子式 HTML)	Shape Attribute (形状属性)
	Mol Refractivity (モル屈折率)	Shape Coefficient (形状係数)

ChemFinder の特性予測

以下に示す特性は、ChemFinder Professional for ChemOffice で計算できます。これらの特性の詳細および計算方法については、ChemFinder オンライン ヘルプを参照してください。

B	H	P
Balaban Index (Balaban 指数)	Heat of Formation (生成熱)	Partition Coefficient (分配係数)
Boiling Point (沸点)	Henry' s Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	pKa
C	I	Polar Surface Area (極性表面積)
Chemical Name (化学名)	Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	Principal Moment (主モーメント)
Cluster Count (クラスタ数)	L	R
Critical Pressure (臨界圧力)	LogP	Radius (半径)
Critical Temperature (臨界温度)	LogS	S
Critical Volume (臨界容積)	M	Shape Attribute (形状属性)
Connolly Accessible Area (コノリー接触面)	Mass (質量)	Shape Coefficient (形状係数)
Connolly Molecular Area (コノリー分子面)	Melting Point (融点)	Sum of Degrees (次数合計)
Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)	Mol Formula (分子式)	Sum of Valence Degrees (原子価合計)
E	Mol Formula HTML (分子式 HTML)	T
Elemental Analysis (元素解析)	Mol Refractivity (モル屈折率)	Topological Diameter (形状径)
Exact Mass (精密質量)	Mol Weight (分子量)	Total Connectivity (結合合計)
F	Molecular Topological Index (分子形状指数)	Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
Formal Charge (形式電荷)	m/z	V
G	N	Vapor Pressure (蒸気圧)
Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)	W
	O	Water Solubility (水溶性)
	Ovality (卵形度)	Wiener Index (Wiener 指数)

化学的物性の表示

化学的物性を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 特性を表示する対象の構造式を選択します。
2. View、**View>Show Chemical Properties Window**. Chemical Properties ウィンドウが表示されます。
3. ドキュメントに基本特性を貼り付けるには、**Paste**.
4. レポートを作成し、他の微細化法の結果を表示するには、**Report**.

化学的注釈

ChemDraw では、以下のツールおよびツール パレットを使用して、ドキュメントに化学的注釈を追加することができます。


Orbital ツール パレット. 軌道を描画します。

Chemical Symbols ツール パレット. 電荷、ラジカル、その他の記号を描画します。

軌道ツール

軌道は、ノードが最初に表示されるように描画します。描画した軌道の背景色、影付け、および純色は、**Color** メニューを使用して変更できます。

描画中に Info ウィンドウを表示させると、軌道の長さ X 軸に対する角度が表示されます。軌道の長さ X 軸に対する角度を制限するには、**Object** メニューの **Fixed Lengths** または **Fixed Angles** をクリックします。

 **注:** 軌道は近接する構造式の一部ではないため、結合、原子または原子ラベルを選択ツールでダブル クリックしても選択されません。軌道を構造式とグループ化するには、**Object** メニューの **Group** をクリックします。
96 ページの “オブジェクトのグループ化” を参照してください。

s-軌道

下図に s-軌道を示します。



s-軌道を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから **s-軌道** ツールを選択します。
2. 描画内で、軌道の中心になる原子をクリックします。

シグマ軌道

下図にシグマ軌道を示します。



σ -軌道を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから **σ -軌道** ツールを選択します。
2. 描画内で、軌道の中心になる原子をクリックします。

シングル ロープ軌道

シングル ロープ軌道を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから**シングル ロープ軌道**ツールを選択します。
2. 軌道の狭い方の端を結合する原子をクリックします。

p-軌道

下図に p-軌道を示します。



p-軌道を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから **p-軌道** ツールを選択します。
2. 軌道の節を結合する原子をポイントします。

混成軌道

下図に混成軌道を示します。



混成軌道 ('sp³') を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから**混成軌道**ツールを選択します。
2. 軌道の節を結合する原子をポイントします。

d-軌道

下図に d-軌道を示します。



d-軌道 ('dxy') を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから **d-軌道** ツールを選択します。
2. 軌道の節を結合する原子をポイントします。

d_{z²} 軌道を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 軌道ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから **d_{z²}-軌道** ツールを選択します。
2. 軌道の節を結合する原子をポイントします。

化学記号

付加されている化学記号 (H-ドットと H-ダッシュ以外) は、関連付けられている原子から任意の距離に移動できます。使用可能な化学記号は次のとおりです。

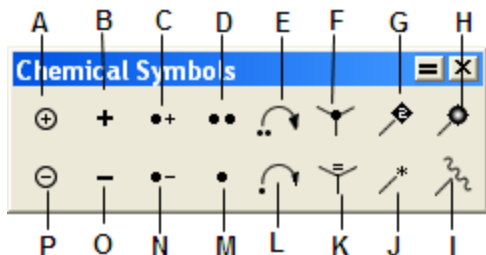


図 11.3: 化学記号: A) 円で囲まれたプラス、B) プラス、C) ラジカル カチオン、D) 孤立電子対、E) 電子の押し出し、F) H-ドット、G) 結合点、H) ポリマー ビーズ結合点、I) 結合点、J) 結合点、K) H-ダッシュ、L) ラジカルの押し出し、M) ラジカル、N) ラジカル アニオン、O) マイナス、P) 円で囲まれたマイナス。

どの原子にも付加されていない記号は、ドキュメント内の任意の位置に配置してサイズを変更することができます。

H-ドットと H-ダッシュ


- Z 軸に沿って描画平面から手前に向かう水素を表すには、H-ドット記号を使用します。
- Z 軸に沿って描画平面から奥に向かう水素を表すには、H-ダッシュ記号を使用します。H-ドットおよび H-ダッシュを挿入するには、原子をクリックします。

孤立電子対/ジラジカル

ルイス構造式を描画する際に多用される孤立電子対を表すには、孤立電子対記号を使用します。

孤立電子対記号を使用するには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから**孤立電子対**を選択します。
2. 孤立電子対を描く原子をクリックし、孤立電子対を配置する場所にドラッグします。孤立電子対は原子から一定の距離を保って配置されます。

 **注:** 孤立電子対を選択して、ALT キーを押しながら原子をクリックすると、孤立電子対の二重ドット記号ではなく、孤立電子対のバー記号が配置されます。

電子の押し出しおよびラジカルの押し出し

ChemDraw には、電子の移動を表すための電子の押し出しツールおよびラジカルの押し出しツールが用意されています。原子間、結合間、軌道間の電子の移動を描画できます。詳細については、146 ページの“電子の押し出しおよびラジカルの押し出し”を参照してください。

ラジカル

単一の非結合電子を表すには、ラジカル記号を使用します。

ラジカル記号を使用するには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから**ラジカル**を選択します。
2. ラジカル記号を描く原子をクリックし、ラジカル記号を配置する場所にドラッグします。

 **注:** 孤立電子対記号は、ラベルなしの炭素原子の横に配置されると、ジラジカルとして解釈されます。

ラジカル カチオンとラジカル アニオン

荷電したラジカルを表すには、荷電ラジカル記号を使用します。

荷電ラジカル記号を使用するには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから記号を選択します。
2. 記号を描く原子をクリックし、記号を配置する場所にドラッグします。
3. ラジカル カチオン記号またはラジカル アニオン記号を水平方向に追加するには、原子をクリックします。

電荷記号

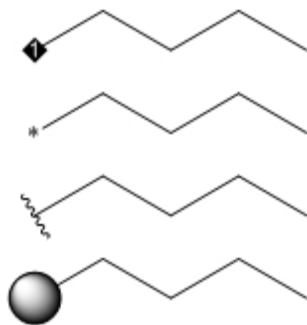
電荷を描画して、それを構造式に関連付けるには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号ツールの上で、マウス ボタンを押したままドラッグして、パレットから**電荷記号**を選択します。
2. 電荷を対応させる原子をクリックしてドラッグします。


電荷記号の追加に合わせて、水素の数が適切に増減されます。

結合点

結合点を表示する機能は、ポリマー結合コンビナトリアル合成、タンパク質化学、およびその他の場合において役立ちます。Chemical Symbols ツールバーには、化学的意味を維持しながら結合点を表示する結合点描画ツールがあります。



ビーズ ツールは、レジンとの結合を示すために用意されているものです。これらのツールは、いずれも検索式で可変結合を示すために使用できますが（134 ページの“結合点”を参照）、順位番号を示すのはダイヤモンド ツールだけです。このツールを使用して構造式にダイヤモンド記号を追加していくと、追加した各点に連番が割り当てられます。

 **注:** また、矩形選択ツールで選択して、サイズ変更ハンドルをドラッグしても、ポリマー ビーズをサイズ変更できます。

記号の回転


ラジカル アニオン記号、ラジカル カチオン記号、および孤立電子対記号は、最初に描画を開始した端点を中心に回転させることができます。たとえば、ラジカル カチオン記号は、電荷を中心として回転し、サイズが変更できます。回転操作中には、記号の一端の X 軸に対する角度が Info ウィンドウに表示されます。

化学記号を回転させるには、次の操作を行ってください。

1. 化学記号を選択します。
2. 化学記号の回転ハンドルをドラッグします。92 ページの [“オブジェクトの回転”](#) を参照してください。

三次元表示

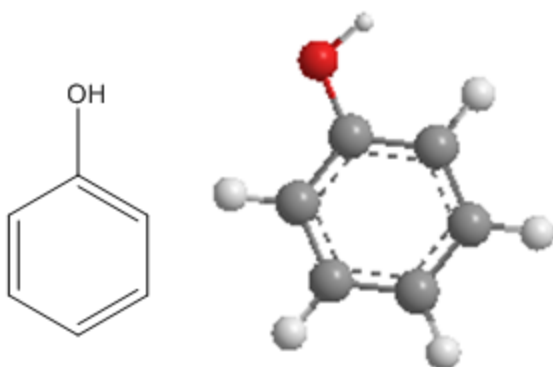
描画の作成時に 3 次元で表示できます。ChemDraw には、構造式を三次元表示できる機能が 2 つあります。

 **注:** 構造式を 3 次元でプレビューするためには、コンピュータに Chem3D をインストールする必要があります。


三次元モデル


三次元モデルを使って、構造式の三次元バージョンを描画に貼り付けます。

1. 構造式を選択します。
2. Edit メニューの **Get 3D Model** をクリックします。三次元構造式がドキュメント ウィンドウに表示されません。




Chem3D でモデルを表示するには、モデルをダブルクリックします。

 **注:** この方法で挿入された 3D オブジェクトは、異なるオペレーティングシステム間で転送することはできません。詳細については、294 ページの [“ファイル形式”](#) を参照してください。

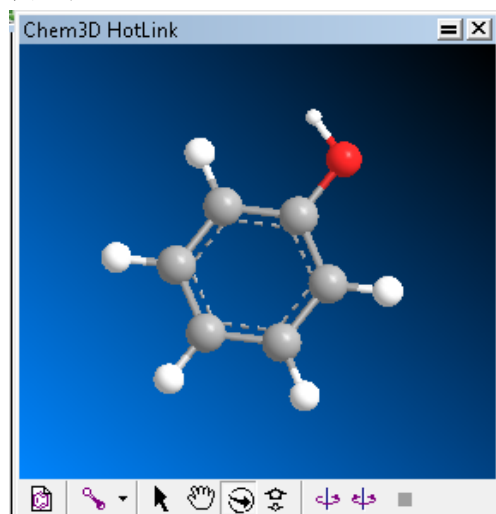
 **注:** また、“Copy as CDX” を使用して Chem3D からモデルをコピーして ChemDraw に貼り付けることができます。三次元座標を持つ ChemDraw 構造式が生成されるので、構造式の三次元表示ツールを使用して、三次元でこの構造式を回転させることができます。

Chem3D のプレビュー オプション

プレビュー ウィンドウには、選択した構造式、何も選択していない場合はすべての構造式が三次元で表示されます。Chem3D のプレビューは、化学構造式に対してのみ機能します。

 **注:** Chem3D Hotlink Window オプションは、ChemOffice Professional でのみ使用できます。

表示するには View メニューの Show Chem3D Hotlink Window をクリックします。次に例を示します。



プレビュー ウィンドウを開いた状態で、ドキュメント ウィンドウまたはプレビュー ウィンドウのいずれかで構造式の表示方法を変更することができます。

ドキュメント ウィンドウの場合

プレビュー ウィンドウを開いた状態でも、ドキュメント ウィンドウで描画の表示方法を変更できます。プレビュー ウィンドウは、変更内容を反映するように更新されます。

Chem3D のプレビューの場合

プレビュー ウィンドウには、構造式の表示オプションが複数用意されています。

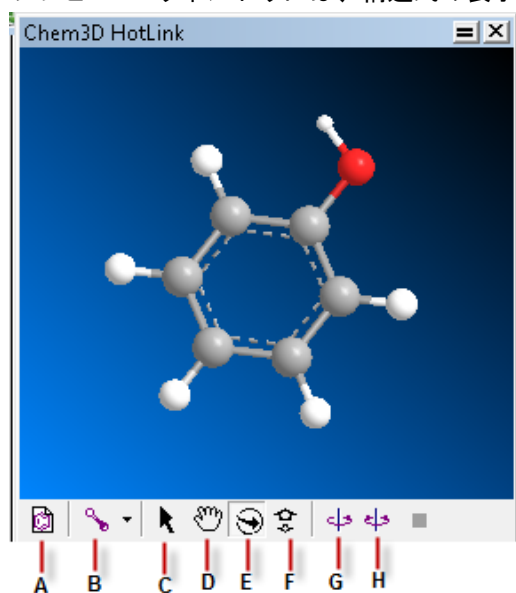


図 11.4: A) Chem3D の起動、B) 表示モード、C) 選択、D) 移動、E) 回転、F) 拡大、G) 反転、H) 固定

Chem 3D の起動. 構造式は、Chem3D で編集可能なモデルとして表示されます。

表示モード. モデルの表示オプションとして、ワイヤ フレーム、スティック、ボール & スティック、シリンダ結合、空間充填のいずれかを選択します。

選択. 構造式または構造式の一部を選択します。

移動. 構造式を移動します。

回転. 構造式を 3 次元で回転させます (画像は Chem3D のプレビューでのみ回転します)。

拡大. 構造式の見かけのサイズを拡大または縮小します。

反転. 構造式を水平に一方向に回転させます。

固定. 構造式を水平に行ったり来たりする形で回転させます。

ドキュメント ウィンドウに戻る

Chem3D のプレビューを終了するには、プレビュー ウィンドウを閉じます。

三次元モデルを編集するには、次の操作を行ってください。

1. 三次元構造式をダブルクリックします。Chem3D が開きます。
2. 構造式を編集して、Chem3D を閉じます。

編集した構造式が ChemDraw のドキュメント ウィンドウに表示されます。

TLC

TLC (薄層クロマトグラフィー) ツールを使用すると、薄層クロマトグラフィー プレートを描くことができます。このツールでは、原点を結ぶ線、溶媒フロント、および単数または複数のレーンを持つ矩形プレートを作成できます。レーンには、異なる R_f 、サイズ、形、または色のスポットを入れることができます。

TLC プレートを作成するには、次の操作を行ってください。

1. クロマトグラフィー ツールバーで TLC ツールを選択します。
2. 元の点から任意の方向にドラッグします。プレートの幅によってレーンの数が決まります。

次の方法で、プレートに変更を加えることができます。

目的	操作
プレートの高さまたは幅を変更する。	縁または角をドラッグします。
原点または溶媒フロントを移動する。	原点または溶媒フロント ラインをクリックおよびドラッグします。
原点、溶媒フロント、枠、またはサイド ティックを表示または非表示にする。	プレートを右クリックし、適切な操作を選択します。 スキャンしたプレート上に TLC プレートを重ねるには、Transparent オプションを使用します。
レーン順を変更する。	原点ティックを新しい位置にドラッグします。
レーンを追加、削除、またはコピーする。	1. カーソルを削除または複製するレーンの上 (また

目的

操作

スポットを移動する。

- は追加するレーンの間) に配置します。
2. プレート内で右クリック*blankします。
 3. 該当する操作を選択します。
 4. (オプション) レーンを削除するには、消しゴムツールでクリックします。

スポットをドラッグします。ドラッグすると、 R_f が表示されます。

スポットを複製する。

スポットを別のレーンに **Ctrl + ドラッグ** します。

スポットを削除する。

消しゴム ツールでスポットをクリックします。レーンのスポットをすべて消すと、レーンが削除されません。

スポットの R_f を表示または設定する。カスタム スポットを追加する。

1. スポットを右クリックします。
2. **TLC スポット** をポイントして、適切な操作を行います。
3. すべてのスポットの R_f を表示するには、プレートで右クリックし、TLC Spots サブメニューから **Show Rf** を選択します。

スポットのスタイルまたは色を変更する。

1. スポットを右クリックします。
 2. スタイルまたは色を選択します。
- 注意:** すべてのスタイルをオフのままにすると、中空のスポットが作成されます。
3. すべてのスポットのスタイルを変更するには、プレートを右クリックし、TLC Spots サブメニューからスタイルを選択します。

スポットを拡大する、または塗る。

スポットを **Shift** キーを押しながらドラッグします。カーソルをスポット上に配置して **Shift** キーを押すと、カーソルを置いた位置に応じて、カーソルが以下の 3 つのいずれかの形になります。

- 十字矢印カーソル (スポットを拡大する)
- 横矢印カーソル (スポットの幅を拡大する)
- 縦矢印カーソル (スポットの長さを拡大するか、三日月を作成する)

Rf 表示

スポットを右クリックして **Show Rf** を選択すると、そのスポットの保持値が表示されます。標準では、値として小数点 2 桁までの R_f が表示されます。

タグの移動

タグを選択ツールでクリックしてドラッグするか、またはタグを右クリックし、**Position** を選択します。次に、**Position Indicators** ボックス内の値を編集します。

Rf 値の編集

テキスト ツールでタグを選択し、その値を編集します。

- R_f を変更すると、スポットは示された新しい位置に移動します。
- R_f を異なる精度に編集すると、その精度が保持されます。

スポットのサイズ変更

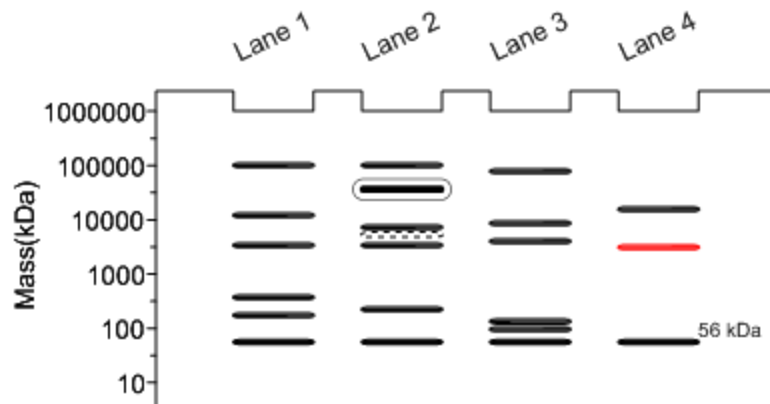
Shift キーを押しながらスポットの縁をポイントすると、スポットのサイズを変更することができます。スポットの左側または右側をドラッグすると、スポットの幅のみが調整されます。上からドラッグすると、スポットの高さが調整されます。下からドラッグすると、スポットの末尾が調整されます。他の 4 つの角のいずれからドラッグしても、3 つの値はすべて拡大または縮小されます。

カスタマイズ スポット

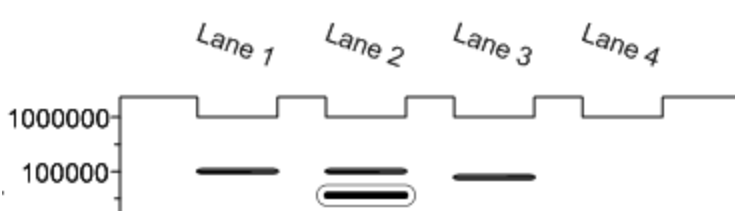
一般的なスポット図形は、TLC ツールを使って作成します。他のタイプ（なすりつけたようにバンドが尾を引く形状など）のスポットは、カスタム スポットとして表現します。**Set Custom Spot** コマンドを使うと、スポット用のグラフィック ファイルを挿入できます。通常、これらのファイルは、TLC プレートをスキャンし、スポットをスポット図形ライブラリに保存することにより作成されます。

ゲル電気泳動ツール

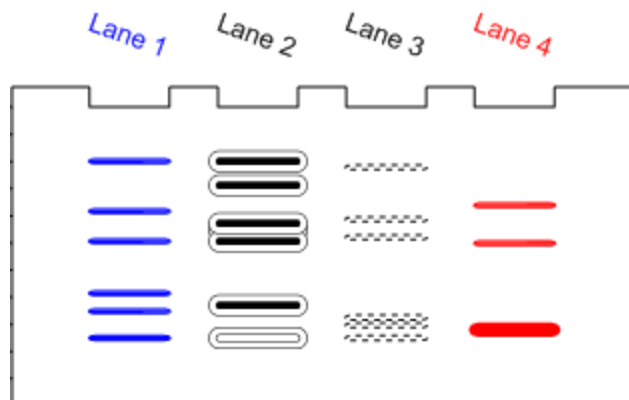
ゲル電気泳動ツールは、クロマトグラフィー ツールバーにあり、TLC ツールとよく似た機能を備えています。このツールは、1 つ以上のバンドが含まれる複数のレーンを持つプレートで構成されています。バンドは、サイズを変更したり、レーンに沿って移動させたりすることができます。たとえば、次の図を見てみましょう。



プレートでは、次の操作を行うことができます。

オプション	動作
Show scale.	プレートの右側にスケールバーが表示されます。標準では、表示単位は kDa です。単位は、Log (質量)、質量、または距離に変更できます (“Units” サブメニューから選択)。Log (質量) と質量では、最上部に最高値が表示されます。距離では、最下部に最高値 “1” が表示されます。
Show Lane Labels.	各レーンにラベルが表示されます。ラベルの名前を変更したり、任意の角度に回転させたりすることができます。いずれかのラベルを回転させると、他のラベルも同じ角度で回転します。
	
Set Range...	ダイアログボックスが表示され、新しい範囲を入力するように求められます。このダイアログボックスに入力する理論値の単位は常に “kDa” です。標準の範囲は 10 ~ 1,000,000 (質量)、1 ~ 6 (Log)、0 ~ 1 (距離) です。範囲を変更すると、範囲外となったバンドは非表示になります。
Add Bands...	ダイアログボックスが表示され、選択したレーンに作成される新しいバンドの質量を入力するように求められます。区切り文字にはスペースを使用します。入力できるのは数字だけです。また、次の方法でバンドを追加することもできます。Alt キーを押しながら、プレートのレーンの上にカーソルを移動します。カーソルが “+” に変わったら、プレートをクリックすると、新しいバンドが配置されます。
Add Lane	新しいレーンが追加されます。
Duplicate Lane	レーンの複製が追加されます。Ctrl キーを押しながら、選択したレーンをドラッグしても、レーンが複製されます。
Delete Lane	レーンが削除されます。

特定レーンのすべての項目を同時に変更することができます。そのためには、レーンの上にカーソルを移動し、必要なコンテキストメニューオプションを選択します。たとえば、レーンのすべての項目を特定の色やスタイルで表示することができます。



バンドに対しては次の操作を行うことができます。

オプション 動作

Show size.

バンドの上に現在の値が表示されます。値はバンドの上部に常に表示され、バンドと結合されています。バンドを別の場所にドラッグすると、バンドとテキストをつなぐ線が表示されます。



マーカー ラベルを移動するには、Alt キーを押します。

Set Size.

ダイアログ ボックスが表示され、バンドの新しい質量 (サイズ) を入力するように求められます。バンドは、この新しい値に従って自動的に移動します。範囲外となり非表示になったバンドを配置することができます。

Style

選択したバンドのスタイルを指定します。指定できるスタイル オプションは、塗りつぶし、塗りつぶしなし、太点線、二重塗りつぶしの 4 つです。スタイルは組み合わせることもできます。

オプション	動作
-------	----




Set Custom Band	ダイアログ ボックスが表示され、選択したバンドに表示するグラフィック ファイルを指定するように求められます。
-----------------	--



Duplicate Band	バンドを複製するには、バンドを選択し、Ctrl キーを押しながらドラッグします。
----------------	--

Remove Custom Band	選択したバンドのカスタム バンド設定が削除され、標準のスタイルでバンドが表示されるようになります。
--------------------	---

Delete Band	レーンからバンドが削除されます。また、バンドの上にカーソルを移動し、Delete キーを押してレーンのバンドを削除することもできます。
-------------	---

 **注:** レーンは空になってもかまいません。

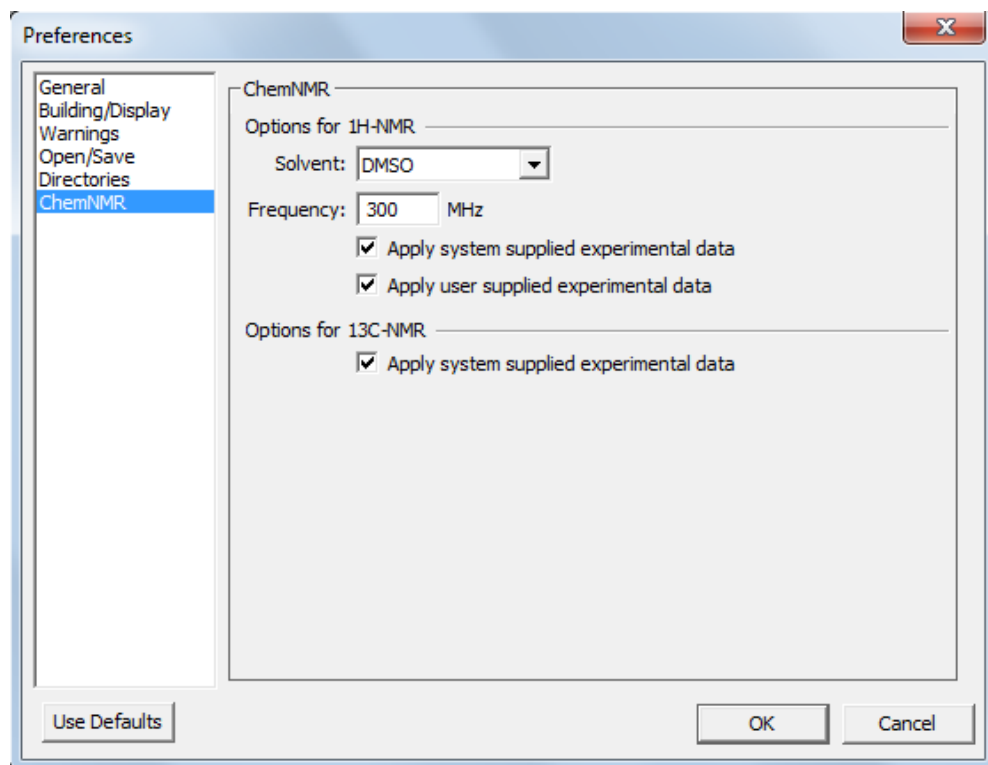
ChemNMR (Professional レベル)

ChemNMR を使用すると、選択した分子の陽子と炭素-13 の化学シフトを推算し、表示できます。

ChemDraw と同様に、Chem3D を使用して NMR を予測することもできます。Chem3D には、NMR を予測する計算化学パッケージ用のインターフェイスがいくつか用意されています。パッケージによっては IR スペクトルやその他のスペクトルを予測するものがあります。NMR 予測に対応した Chem3D パッケージの詳細と使用できるパラメータについては、『Chem3D ユーザーズ ガイド』を参照してください。

ChemNMR のパラメータ値の設定

Preferences ダイアログの ChemNMR オプションを使用して、ChemNMR のパラメータ値を設定します。次の例を参照してください。



溶媒

ChemNMR では、溶媒をユーザーが定義することはできません。ただし、カスタムのシフト補正データを新規に追加する場合を除きます。標準の ChemNMR データベースのスペクトルに対しては、ほとんどの場合重水素化クロロホルムが使用されますが、データベースでは無溶媒を前提としています。ChemDraw では、Preferences ダイアログで、溶媒として重水素化クロロホルムまたは重水素化ジメチルスルホキシドのいずれかを設定できます。溶媒に依存するスペクトル シフトは通常、“rough” の予測値として示されます。

分光器の周波数

水素イオンの NMR を予測するとき、ChemNMR では分光器の標準の周波数として 300 MHz を使用します。標準の周波数を変更するには、Preferences ダイアログで別の周波数を設定するか、Alt キーを押しながら **Predict 1H-NMR Shifts** を選択して、周波数を MHz 単位で入力し、スペクトルを実行します。新しい周波数は、いったん ChemDraw を終了した場合でも、この値をリセットするまで適用されます。分光器の周波数パラメータは、陽子 NMR にのみ適用されます。

詳細については、下記を参照してください。

- [191 ページの “NMR シフト”](#) (ChemDraw での NMR 予測の実行方法)
- [192 ページの “スペクトルへの構造式の割り当て”](#) (ピークへの原子の再リンク)
- [192 ページの “スペクトル割り当ての表示”](#) (原子に関連付けられたピーク)
- [193 ページの “スペクトル割り当ての解除”](#) (原子とピークの関連付け解除)
- [193 ページの “カスタムのシフト補正データ”](#) (新しいスペクトル情報の追加)

- 196 ページの “ChemNMR の制限” (元素と標準偏差)
- 196 ページの “NMR の参考文献” (引用した文献)

NMR シフト

ChemNMR は、加算性の原則が適用可能なすべての水素および炭素原子について化学シフトを推算します。階層式リストに従って、分子の主要な部分構造が最初に判定されます。部分構造から推定されたシフトの基礎となる値を得ることができます。たとえばベンゼンはトリニトロトルエンの主要な部分構造です。

部分構造がデータにない環構造をしていると、ChemNMR は埋め込まれている環を用いて、その基礎シフトを概算し、必要な場合は環構造を非環式部分構造に分解します。

ChemNMR は、分子の残りの部分を部分構造の置換基とみなします。各置換基は、結合している部分構造の基礎シフトに対して加算または差し引きされます。加算性の原則によって各置換基の漸増率が判定されます。置換基の漸増率が判定できない場合、ChemNMR は、同じ近傍の原子を持つより小さな構造単位で埋め込まれている置換基を使用します。あるいは、置換基の影響が同じ程度と仮定して、対応する部分構造と同じ置換基または対応する部分構造に埋め込まれている置換基の漸増率を適用します。

ChemNMR は、適用した推算過程の詳細な手順を表示します。名称、化合物の種類（ほとんどの場合）、リニアコードの形態における置換基などで部分構造を表示します。

また、エチレン（シス/トランス）とシクロヘキサン（エクアトリアル/アキシヤル）のモデルも用意しています。¹H または ¹³C NMR 情報を表示するには、次の操作を行ってください。

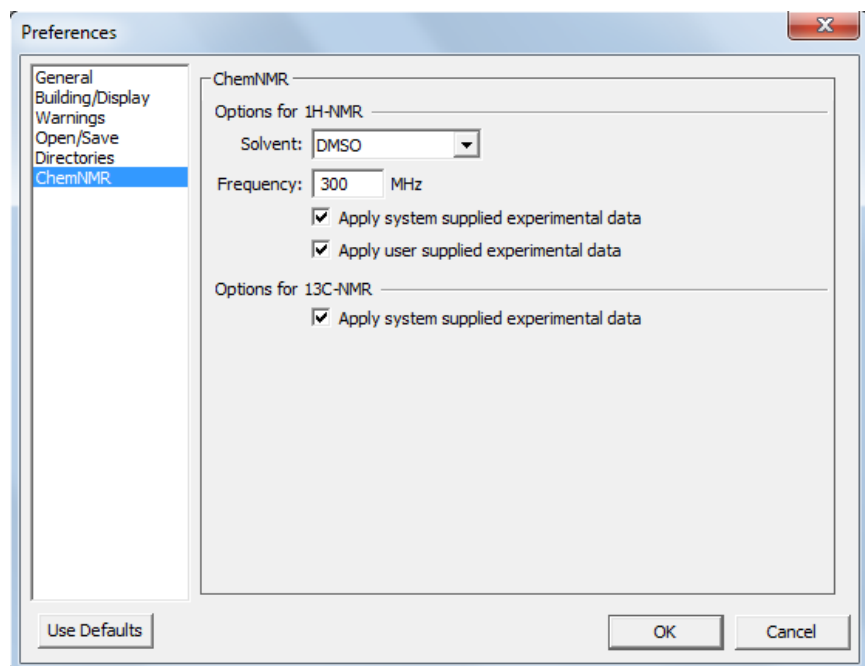
1. 構造式を選択します。
2. **Structure** メニューの **Predict 1H-NMR Shifts** または **Predict 13C-NMR Shifts** をクリックします。

ChemNMR は、推定されたシフトで分子を再描画し、新しいウィンドウに情報と線スペクトルを表示します。

NMR 周波数の変更

ChemDraw で陽子 NMR 予測を行う際の NMR の標準の周波数である 300 Mhz は変更することができます。周波数を変更するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Preferences** をクリックします。Preferences ダイアログが表示されます。
2. **ChemNMR** オプションを選択します。



3. Frequency テキスト ボックスで、新しい周波数を指定します。
4. OK をクリックします。
5. Structure メニューの Predict 1H-NMR Shifts をクリックします。 . 予測された NMR スペクトルが表示されます。

スペクトルへの構造式の割り当て

ChemDraw Professional では、スペクトルに構造式を割り当てることができます。構造式が割り当てられているスペクトルでは、特定のピークにポインタを合わせると、そのピークに関連付けられている構造式が表示されます。

スペクトルに構造式を割り当てするには、次の操作を行ってください。

1. スペクトル ファイルを開きます。
2. スペクトルに割り当てる構造式（複数も可）を描画します。
3. 構造式内の特定の原子および結合を選択します。
4. 構造式を割り当てるピーク（複数も可）を、Shift キーを押しながらクリックします。
選択したオブジェクトを囲む選択枠が表示されます。
5. Structure メニューの Make Spectrum-Structure Assignment をクリックします。
構造式内の選択された原子と結合が選択されたスペクトルのピークに関連付けられます。

スペクトル割り当ての表示

スペクトル割り当てを表示するには、次の操作を行ってください。

1. なげなわ選択ツールまたは矩形選択ツールをクリックします。
2. ピークの上にポインタを置きます。割り当てられた原子または結合が強調表示されます。

スペクトル割り当ての解除

構造式へのスペクトルの割り当てを解除するには、次の操作を行ってください。

1. なげなわ選択ツールまたは矩形選択ツールをクリックします。
2. 割り当てを解除するオブジェクトを選択します。
3. **Structure** メニューの **Clear Spectrum-Structure** をクリックします。

カスタムのシフト補正データ

陽子予測のための独自のシフト補正データを追加して、ChemNMR アルゴリズムで使用される既存のデータを補うことができます。補正データを使用するには、SDfile 形式でデータを作成し、そのファイルを使用して ChemDraw ChemNMR データベースを更新します。

ACD Labs ソフトウェアや Mnova Lite などのサードパーティ製ツールを使用して予測結果を強化することにより、分析プロセスをサポートすることができます。Mnova Lite では、Mnova NMR でスペクトルを割り当て、割り当て内容を SD ファイルに保存することができます。これを ChemNMR データベースに追加します。追加するデータが増えるほど、予測が正確になります(手順については、アプリケーションのユーザーズ ガイドを参照してください)。

NMR データ形式

SDF ファイルに追加する補正データは、次の形式で記述する必要があります。

```
> <SHIFT>  
<atom_id>, <shift_value>, <ignored>
```

次に例を示します。

```
> <SHIFT1>  
2, 9.61, 0.0  
> <SHIFT2>  
3, 8.92, 0.0
```

各分子の補正データは、その分子の構造式データの直後に記述する必要があります。たとえば、SDF ファイルにベンゼンが含まれている場合は、ベンゼンの構造式データの直後にその NMR データを記述する必要があります。

ChemNMR データベースの更新

補足データを含む SDF ファイルの作成が完了したら、次の手順に従って ChemNMR データベースを更新します。

1. ChemDraw を終了します。
2. ChemDraw ChemNMR ディレクトリの場所を確認します。
3. DOS プロンプトを開きます。
 - Windows 8 では、**スタート** メニューの**ファイル名を指定して実行**をクリックし、ファイル名を指定して実行ウィンドウに「cmd」と入力して、**OK** をクリックします。
 - Windows 7 では、**スタート** ボタンをクリックし、検索の開始フィールドに「cmd」と入力して、Enter キーを押します。
4. DOS プロンプトで、手順 2 で確認した ChemNMR ディレクトリに移動します。

5. 次のコマンドを入力します。

MakeChemNMRUserDB.exe <入力ファイル> <リソース ディレクトリ> <出力ディレクトリ>
各項の意味は次のとおりです。

- <入力ファイル> には、補正データが含まれている SDF ファイルのファイル名を完全パスで指定します。
- <リソース ディレクトリ> および <出力ディレクトリ> には、ChemNMR ディレクトリへの完全パスを指定します。

6. ChemDraw を再起動します。

標準の NMR データを復元

独自のデータの使用を中止して、ChemDraw を元の設定に戻すには、次の操作を行ってください。

1. ChemDraw を終了します。
2. ChemNMR ディレクトリの場所を確認します。
3. Ushiftdb5H1.txt と Usimilvecx.h1 の各ファイルを削除します。
4. ChemDraw を再起動します。

補足データ例

次の例では、2 つの構造式の補足 NMR データを含む SDF ファイルを示します。補足データは構造式データの後に記述されています（わかりやすいように補足データの部分は背景をグレーにしてあります）。

```
ACD/Labs07190711112D

14 14 0 0 0 0 0 0 0 0 15 V2000
5.7578 -1.9992 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.7578 -3.3267 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
4.6062 -1.3275 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
4.6062 -3.9825 0.0000 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.4547 -1.9992 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.4547 -3.3267 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6.9094 -1.3275 0.0000 N 0 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
8.0609 -1.9992 0.0000 O 0 5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6.9094 -0.0000 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.3031 -1.3275 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.3031 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.1516 -1.9992 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.1516 -3.3267 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.0000 -1.3275 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0 0
1 3 2 0 0 0 0
```

```

1 7 1 0 0 0 0
2 4 2 0 0 0 0
3 5 1 0 0 0 0
4 6 1 0 0 0 0
5 6 2 0 0 0 0
5 10 1 0 0 0 0
7 8 1 0 0 0 0
7 9 2 0 0 0 0
10 11 1 0 0 0 0
10 12 1 0 0 0 0
12 13 2 0 0 0 0
12 14 1 0 0 0 0
M ZC 1 5
M ZC 2 6
M ZC 3 4
M ZC 4 1
M ZC 5 3
M ZC 6 2
M CHG 2 7 1 8 -1
M ZC 7 9
M ZC 8 13
M ZC 9 10
M ZC 10 7
M ZC 11 8
M ZC 12 11
M ZC 13 12
M END
> <ID>
1
> <solvent>d6-DMSO <SHIFT1>2, 9. 61, 0. 0> <SHIFT2>3, 8. 92, 0. 0> <SHIFT3>6, 9. 01, 0. 0>
<SHIFT4>10, 3. 11, 0. 0> <SHIFT5>11, 1. 16, 0. 0> <SHIFTS>5$$$$ TH <solvent>d6-DMSO
<SHIFT1>2, 9. 6, 0. 0> <SHIFT2>3, 8. 91, 0. 0> <SHIFT3>6, 9. 11, 0. 0> <SHIFT4>10, 2. 75, 0. 0>
<SHIFT5>11, 1. 17, 0. 0> <SHIFT6>12, 2. 41, 0. 0> <SHIFTS>6$$$$
ACD/Labs07190711112D 15 15 0 0 0 0 0 0 0 0 16 V2000 7. 1683 -1. 9521 0. 0000 C 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 7. 1683 -3. 2484 0. 0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 6. 0438 -1. 2962
0. 0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 6. 0438 -3. 8887 0. 0000 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
4. 9194 -1. 9521 0. 0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 4. 9194 -3. 2484 0. 0000 C 0 0 0 0 0

```

```

0 0 0 0 0 0 8.2927 -1.2962 0.0000 N 0 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 9.4171 -1.9521
0.0000 0 0 5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 8.2927 -0.0000 0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.7950 -1.2962 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 3.7950 -0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 2.2489 -2.1708 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1.1401 -1.5149
0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.0000 -2.1552 0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.1401 -0.2186 0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 2 1 0 0 0 0 1 3 2 0 0 0 0 1 7 1
0 0 0 0 2 4 2 0 0 0 0 3 5 1 0 0 0 0 4 6 1 0 0 0 0 5 6 2 0 0 0 0 5 10 1 0 0 0 0 7 8
1 0 0 0 0 7 9 2 0 0 0 0 10 11 1 0 0 0 0 10 12 1 0 0 0 0 12 13 1 0 0 0 0 13 14 2 0
0 0 0 13 15 1 0 0 0 OM ZC 1 5M ZC 2 6M ZC 3 4M ZC 4 1M ZC 5 3M ZC 6 2M CHG 2
7 1 8 -1M ZC 7 9M ZC 8 14M ZC 9 10M ZC 10 7M ZC 11 8M ZC 12 11M ZC 13 12M
ZC 14 13M END> <ID>2
> <solvent>d6-DMSO> <SHIFT1>2, 9.6, 0.0> <SHIFT2>3, 8.91, 0.0> <SHIFT3>6, 9.11, 0.0>
<SHIFT4>10, 2.75, 0.0> <SHIFT5>11, 1.17, 0.0> <SHIFT6>12, 2.41, 0.0> <SHIFTS>6$$$$
  
```

ChemNMR の制限

- このプログラムは次の元素および同位体を扱うことができます。
H、D、He、Li、Be、B、C、N、O、F、Ne、Na、Mg、Al、Si、P、S、Cl、Ar、K、Ca、Sc、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Zn、Ga、Ge、As、Se、Br、Kr、Rb、Sr、Y、Zr、Nb、Mo、Tc、Ru、Rh、Pd、Ag、Cd、In、Sn、Sb、Te、I、Xe、Cs、Ba、La、Ce、Pr、Nd、Pm、Sm、Eu、Gd、Tb、Dy、Ho、Er、Tm、Yb、Lu、Hf、Ta、W、Re、Os、Ir、Pt、Au、Hg、Tl、Pb、Bi、Po、At、Rn、Fr、Ra、Ac、Th、Pa、U、Np、Pu、Am、Cm、Bk、Cf、Es、Fm、Md、No、Lr。
- 官能基は自動的に展開されます。
- ¹H NMR の場合、標準偏差を 0.2 -0.3 ppm として、全 CH_x-基の約 90% のシフトを推定します。極性溶媒を使用すると、この偏差が大幅に増大することがあります。また、複素環の炭素以外の原子に結合している水素原子については、溶媒、濃度、不純物、立体効果などによって大きく影響を受けるため推定を行いません。
- ¹³C NMR の場合は、平均偏差 -0.29 ppm、標準偏差 2.8 ppm で、95% 以上のシフトを推定します。

NMR の参考文献

ChemDraw の NMR データは、以下の文献の情報に基づいています。

- Fürst, A.; Pretsch, E. *Anal. Chim. Acta* 1990, 229, 17.
 Pretsch, E.; Fürst, A.; Badertscher M.; Bürgin, R.; Munk, M. E. *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* 1992, 32, 291-295.
 Bürgin Schaller, R.; Pretsch, E. *Anal. Chim. Acta* 1994, 290, 295.
 Bürgin Schaller, R.; Arnold, C.; Pretsch, E. *Anal. Chim. Acta* 1995, 312, 95-105.
 Bürgin Schaller, R.; Munk, M. E.; Pretsch, E. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1996, 36, 239-243.

ChemDraw/Excel と CombiChem

ChemDraw/Excel は、Microsoft Excel for Windows のアドインです。ChemDraw または ChemFinder データベース内の化学構造式や他のデータを Excel ワークシートに追加できます。その後、数多くの構造特性を計算したり、Sdfile を検索した結果を調べることができます。ChemFinder と同じ検索機能があります。アドインをインストールすると Excel メニューに ChemOffice メニューが追加され、ツールバーが表示されません。

ChemDraw/Excel のセットアップ

ChemDraw をインストールすると、ChemDraw/Excel もインストールされます。ChemDraw/Excel アドインにより、新しいタブが Excel 2016、Excel 2010、Excel 2013 のリボン インターフェイスに追加されます。ChemDraw/Excel アドインが無効な場合、有効にするには次の操作を行ってください。

1. **File、Options、Add-ins** の順に選択します。
2. ChemDraw for Excel を選択し、**Go** をクリックします。
3. Add-Ins ウィンドウで、**ChemDraw for Excel** と **ChemDrawExcel 16** の機能がオンになっていることを確認します。
4. **OK** をクリックします。

サードパーティ製品によってプログラムでレジストリの値が変更され、ChemDraw/Excel アドインが無効になっていることもあります。この場合、HKEY_LOCAL_MACHINE\SOFTWARE\Microsoft\Office\Excel\Addins\ChemDrawExcelAddIn16.ExcelAddIn と HKEY_LOCAL_MACHINE\SOFTWARE\Wow6432Node\Microsoft\Office\Excel\Addins\ChemDrawExcelAddIn16.ExcelAddIn (32ビット Microsoft Office が実行されている 64 ビット システムの場合) で "LoadBehavior" の値をリセットして、アドインを有効にすることができます。"LoadBehavior" の値を 3 から 0 にリセットして、Excel を再起動します。

ChemDraw/Excel を使用するには、ChemOffice ワークシートを開きます。**ChemOffice16** メニューの **New ChemOffice Worksheet** をクリックします。ワークシートがアクティブになると、タイトル バーに ChemDraw/Excel と表示されます。


標準の Excel ワークシートを ChemDraw/Excel ワークシートに変換するには、**ChemOffice16** メニューの **Convert Worksheet** をクリックします。Excel タイトル バーに "ChemDraw for Excel" と表示されます。


古いバージョンの ChemDraw/Excel ワークブックの場合、最新のアドインと互換性がないことがあります。そのため、アップグレードしなければならないことがあります。アップグレードするには、**ChemOffice16** メニューの **Upgrade Workbook** をクリックします。

表のインポート

ChemDraw/Excel では、次のデータをインポートできます。

- MDL SDFiles: ファイル内のすべてのレコードをインポートします。標準では、化学式が構造式の名前になります。ただし、名前は **Name Molecule** コマンドで変更できます。
- ChemFinder データベース (CFW、CFX): メインフォーム内に保存されているすべてのフィールドをインポートします。


 **注:** CFW ファイルを Excel にインポートする場合は、ファイルを保存する際に "allow GAL/OLE Automation access" セキュリティ設定をオンにしてください。詳細については、『ChemFinder ユーザーズガイド』の「セキュリティ オプションの設定」を参照してください。


 **注:** ChemFinder XML ファイルとして保存された構造式は、アドインを使用して Excel にインポートできません。

表をインポートする際、構造式データは構造式の描画に変換されて 1 列目に、その他のフィールドは別の列にインポートされます。

表をインポートするには、次の操作を行ってください。

1. Excel でインポートを開始するセルを選択します。インポートの左上隅がこのセルになります。下方向および右側の列に向かってデータが埋められます。
2. ChemOffice16、Import/Export、Import Table の順に選択します。Import Table ダイアログ ボックスが表示されます。
3. インポートするファイル名を入力または選択して **Open** をクリックします。すべてのレコードがワークシートに追加されます。

 **注:** progress ダイアログ ボックスに、インポート処理の進行状況が表示されます。実行中のインポートは、Cancel をクリックしていつでもキャンセルできます。Cancel をクリックすると、インポートされたレコードを保持するか、インポートをキャンセルするか、あるいはインポートを続行するかを指定するよう求めるプロンプトが表示されます。

 **注:** 新しい ChemOffice ワークシートに対してのみ表をインポートできます。

ヒット リストのインポート

ChemFinder でレコードを検索し、Import ChemFinder List コマンドを使用して、ヒット リストの構造式をデータとともに Excel にインポートできます。

ヒット リストをインポートするには、次の操作を行ってください。


1. ChemOffice16、Import/Export、Import ChemFinder List の順に選択します。
2. ChemFinder を起動するかどうかを確認するプロンプトが表示されたら、**Yes** をクリックします。
3. メッセージ ボックスの **Yes** をクリックしてヒット リストをインポートします。レコードが Excel にインポートされます。

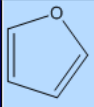
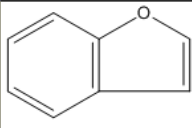
Excel 表のエクスポート


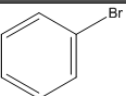
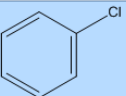
ChemDraw/Excel では MDL SDFFile 形式で Excel 表をエクスポートできます。エクスポートする範囲の 1 列目の一番上のセルには、「Structure」と入力されている必要があります。1 列目以外の列にある構造式は無視されます。

データをエクスポートするには、次の操作を行ってください。

1. 「Structure」セルも含め、エクスポートするセルを選択します。

 **注:** Structure テーブルから選択した行や列をエクスポートできます。セルが連続して選択されていることを確認します。次の例を参照してください。

A1		Structure				
	A	B	C	D	E	F
1	Structure	Formula	MolWeight	Mol_ID	Molname	
2		C ₄ H ₄ O	68.074	3	Furan	
3		C ₉ H ₆ O	118.133	23	Benzofuran	

A3		C6H5Br				
	A	B	C	D	E	F
1	Structure	MOLREGNO	MOLNAME	CORP_ID	DATE	ACTIVITY
2		2	Benzene	MUSE00000002	1/1/91	
3		3	Bromobenzene	MUSE00000003	1/1/91	
4		4	Chlorobenzene	MUSE00000004	1/1/91	

2. ChemOffice16、Import/Export、Export Table の順に選択します。
3. Save Table To ダイアログ ボックスにファイル名を入力し、Save をクリックします。ステータス バーに進捗状況が表示されます。

テーブルの同期

ワークシートのテーブルを ChemFinder データベース (たとえば .CFX ファイル) と同期できます。ChemDraw/テーブルと ChemFinder テーブルを同期させると、MS Excel テーブル内にはない ChemFinder テーブル内のフィールド (およびその中のデータ) が MS Excel テーブルに追加されます。

 **注:** MS Excel で加えた変更は、ChemFinder のテーブルには影響しません。

テーブルを同期させるには、次の操作を行ってください。


1. テーブルを選択します。
2. **ChemOffice16、Sync Table with ChemFinder DB** の順にクリックします。
3. ChemFinder テーブルを選択し、**Open** をクリックします。
4. ワークシートの行とデータベース レコードを一致させるために使用するフィールドを選択し、**OK** をクリックします。
5. 更新するフィールドを選択します。複数のフィールドを選択するには、Ctrl キーを押しながら各フィールドをクリックします。**New** というマークのあるフィールドを選択すると、列がワークシートに追加されます。
6. **OK** をクリックします。

構造式の追加

ChemDraw がサポートしているすべてのファイル形式から、ワークシートに化学構造式を追加することができます。ChemDraw/Excel は、**Name Molecule** コマンドを使用して変更可能な構造式名として、分子式を割り当てます。

新しい構造式をセルに挿入するには、セルをダブルクリックするのが最も簡単です。

1. ChemOffice ワークシートを作成します。
2. セルをダブルクリックします。ChemDraw/Excel に、セルへの構造式の追加を確認するダイアログが表示されます。
3. **Yes** をクリックします。ChemDraw が表示されます。
4. 構造式を描画したら、**File、Close** の順に選択するか Ctrl + W キーを押して、ChemDraw/Excel に戻ります。ワークシートに構造式が表示されます。

 **注:** ワークシート上の構造式（または構造式が含まれるセル）をダブルクリックすると、ChemDraw で構造式を編集できるようになります。

ファイルからの構造式の追加

1. Excel で、構造式の追加先のセルを選択します。
2. **ChemOffice16、Molecule、Load** の順に選択します。**Choose Molecule to Load** ダイアログ ボックスが表示されます。
3. 構造式のファイル名を入力または選択し、**Open** をクリックします。

サポートされている形式は、次のとおりです。

ChemDraw (*.cdx)	MDL Rxn (*.rxn)
ChemDraw XML (*.cdxml)	MDL Graphic (*.tgf)
ChemDraw 3.5 (*.chm)	Connection Table (*.ct)
Chem3D XML (*.c3xml)	MSI Molfile (*.msm)
MDL Molfile (*.mol)	SMD 4.2 (*.smd)
MDL Sketch (*.skc)	

SMILES 文字列

SMILES 文字列をセルに挿入し、構造式に変換することができます。

1. SMILES 文字列をセルに入力または貼り付けます。
2. 変換するセルを選択します。
3. **ChemOffice16、Convert、SMILES to Molecule** の順に選択します。また、コンテキストメニューのコマンドを使用して SMILES を分子に変換することもできます。セルに有効な SMILES 文字列が含まれていない場合は、変換できない SMILES 文字列の数を示す警告が表示されます。

Inchi 文字列


Inchi 文字列をセルに挿入し、構造式に変換することができます。

1. Inchi 文字列をセルに入力または貼り付けます。
2. 変換するセルを選択します。
3. **ChemOffice16、Convert、Inchi to Molecule** の順に選択します。セルに有効な Inchi 文字列が含まれていない場合は、エラーメッセージが表示されます。

名称による構造式の追加

化学名をセルに入力または貼り付けて、構造式に変換できます。

1. 名称をセルに入力します。
2. 変換するセルを選択します。

 **ヒント:** Excel に含まれている分子式から生成された名称も変換できます。

3. **ChemOffice16、Convert、Name To Molecule** の順に選択します。Name=Struct 対応の名称を含むセルには、その名前に対応する構造式が追加され、セルにその構造式の名前が付けられます。

構造式の保存

化学構造式を別のファイルに保存することができます。

1. ワークシートで、構造式を含むセルを選択します。
2. **ChemOffice16、Molecule、Save** の順に選択します。Save To File ダイアログボックスが表示されます。
3. 既存のファイルを選択するか、新しいファイル名を入力して **Save** をクリックします。

サポートされている形式は、次のとおりです。

ChemDraw (*.cdx)	Connection Table (*.ct)
ChemDraw XML (*.cdxml)	MSI Molfile (*.msm)
ChemDraw 3.5 (*.chm)	SMD 4.2 (*.smd)
Chem3D XML (*.c3xml)	Metafile (*.wmf)
MDL Molfile (*.mol)	GIF (*.gif)

MDL Sketch (*.skc)	TIFF (*.tif)
MDL Rxn (*.rxn)	PNG (*.png)
MDL Graphic (*.tgf)	Bitmap (*.bmp)
PostScript (*.eps)	

検索

構造式を検索するには、検索条件と検索機能を指定します。ChemDraw/Excel には、基本的な検索機能が 3 つあります。

- 標準検索
- 類似構造検索
- R-基分析

データベースを開く

検索を開始する前に構造式データベースを開く必要があります。

1. Excel で、**ChemOffice16** メニューの **New ChemOffice Worksheet** をクリックします。
2. **ChemOffice16** メニューから **Import/Export** を選択し、**Import Table** または **Import ChemFinder list** をクリックして、インポートするファイルを選択します。

標準検索

標準検索では、検索ダイアログ ボックスで指定した条件に一致する完全構造式または部分構造式を見つけることができます。

1. **Structure** ラベルを含むセルを選択します。
2. **ChemOffice16**、**Search**、**Normal** の順に選択します。**ChemDraw for Excel** ダイアログ ボックスが表示されます。
3. **Search** タブをクリックします。
4. 空白のウィンドウ内をクリックし、検索したい構造式を描画します。
5. ダイアログ ボックスの最下部にある **Normal** タブをクリックします。
6. Search Type として、**Full Structure** か **Sub Structure** を選択します。
7. Filter Type として、ヒットを含めるか除外するかを選択します。
8. 分子式を用いた検索式を入力します。
9. **Search** をクリックします。このヒット リストは Match という列に表示されます。検索基準に一致する項目には、**TRUE** のラベルが付いています。

類似構造検索

類似構造検索では、選択した構造式に対応する機能を持つ構造式を見つけることができます。類似構造検索の詳細については、『*ChemFinder ユーザーズ ガイド*』を参照してください。

類似による検索をするには、次の操作を行ってください。

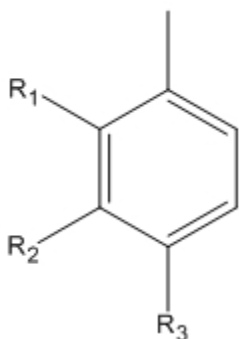
1. **Structure** ラベルを含むセルを選択します。
2. **ChemOffice16**、**Search**、**Similarity** の順に選択します。ChemDraw for Excel ダイアログ ボックスが表示されます。
3. **Search** タブをクリックします。
4. 空白のウィンドウ内をクリックし、検索したい構造式を描画します。
5. **Similarity** タブをクリックします。
6. Search Type として、**Full Structure** か **Sub Structure** を選択します。
7. 反転する **Sort Results** で並べ替え順を選択します。
8. **Similarity Percent** で類似値を選択します。
9. **Search** をクリックします。このヒット リストは **Similarity** という列に表示されます。検索基準に一致する項目には、TRUE のラベルが付いています。

R-基分析

R-基分析では、検索式データベースの中から、指定したテンプレート構造式を含むすべての分子が返ります。たとえば、構造式にトルエンを含むすべての分子を見つけたいとします（データベースに含まれている p-クレゾールや o-キシレンなど）。その場合、トルエンをテンプレートとして描画するだけで、トルエンの構造式を少なくとも 1 つ含む分子がすべて返されます。

例として、o-、m-、p-クレゾール、およびブロモベンゼンという 4 つの分子で構成される小さなデータベースを考えてみましょう。そして、このデータベースに対して R-基分析を実行して、構造式にトルエンを含むすべての分子を検索するとします。この結果には、次の 3 つの主要部分が含まれます。

- トルエンのテンプレートを含む分子のリスト。この例では、結果には o-、m-、および p-クレゾールが含まれます。ブロモベンゼンは、トルエンのテンプレートを含まないため、除外されます。
- データベースで見つかった R-基の結合のすべてのバリエーションを含むトルエンのテンプレート。この例では、結合が官能基で表されます。これらは、解析結果で見つかった R-基の場所です。すなわち、o-、m-、および p-クレゾールのヒドロキシル基です。



- 各検索結果について、それぞれの R_n の位置で見つかった官能基。返された分子について、当該の行を参照して、各 R-基の位置の官能基を参照します。この例では、検索結果が R₁、R₂、および R₃ の水素およびヒドロキシル基で構成されます。

構造式

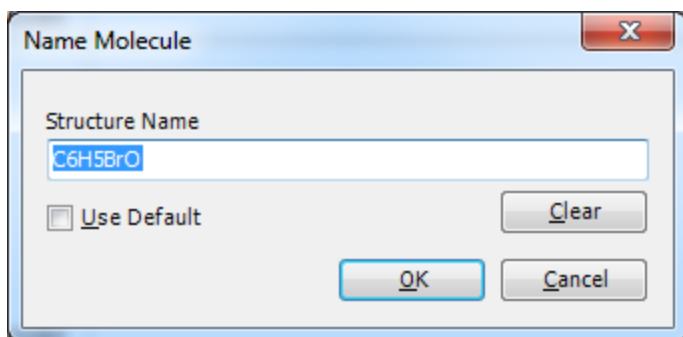
ChemDraw/Excel では、構造式の名前の変更、クリップボード使用での構造式の切り取り、コピー、貼り付けができます。


構造式の名前変更

Excel は、一定の文字を分子式として認識します。システムが化学構造式の名前を Excel の計算式として解釈しないように、構造式名を変更することができます。

構造式の名前を変更するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **ChemOffice16、Molecule、Name** の順にクリックします。複数のセルが選択されている場合は、**ChemOffice16、Molecule、Name All Selected** の順にクリックします。**Name Molecule** ダイアログボックスが表示されます。



 **注:** **Clear** をクリックすると、構造式名が削除されます。**Use Default** をオンにすると、構造式名が標準の名前（分子式など）に置き換えられます。

3. 名前を入力し、**OK** をクリックします。

クリップボードの使用

クリップボードを使用して、構造式の切り取り、複写および貼り付けを行うことができます。ChemDraw/Excel の **Copy As** コマンドを使用すれば、構造式を InChI 文字列、InChIkey 文字列、または SMILES 文字列として複写できます。

構造式をセルから切り取るには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **ChemOffice16、Molecule、Cut** の順にクリックします。構造式がクリップボードに配置されます。**Paste** をクリックすると構造式がセルから移動し、指定されたセルに貼り付けられます。

構造式をセルから複写するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **ChemOffice16、Molecule、Copy** の順にクリックします。

構造式はセルに残り、コピーがクリップボードに配置されます。

構造式を InChI、InChIkey、または SMILES としてコピーするには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **ChemOffice16**、**Molecule**、**Copy As** の順に選択し、次のオプションのいずれかを選択します。
 - InChI
 - InChIkey
 - SMILES

構造式はセルに残り、指定した文字列形式のコピーがクリップボードに配置されます。

構造式をセルに貼り付けるには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を貼り付けるセルを選択します。
2. **ChemOffice16**、**Molecule**、**Paste** の順にクリックします。構造式がクリップボードから貼り付けられます。

構造式の表示

スプレッドシートの構造式の表示/非表示を切り替えることができます。全体の内容が表示されるようにセルのサイズを調整することもできます。

構造式の表示/非表示を切り替えるには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **ChemOffice16** メニューの **Structure** を選択し、**Show** または **Hide** をクリックします。

構造式の整列

構造式がセルに対して大きすぎたり、セルに適切に配置されないことがあります。

構造式を整列させるには、構造式が入っているセルを選択し、**ChemOffice16**、**Structure**、**Align** の順に選択します。セルが調整され、内容が表示されます。

構造式のサイズ変更

1. サイズを変更したい構造式のセルを選択します。
2. **ChemOffice16**、**Structure**、**Resize** の順にクリックします。選択した構造式の上にサイズ変更ハンドルが表示されます。
3. サイズ変更ハンドルをクリックしてドラッグし、構造式のサイズを変更します。構造式に加えた変更は、比例して他の構造式に反映されます。
4. サイズ変更を終了するには、セルをクリックして構造式を選択を解除します。

標準では、構造式が 1 か所に集まらないように、構造式のサイズ変更プロパティが **"Move and Resize with cells"** に設定されています。

ChemDraw/Excel の関数

ChemDraw/Excel には、ChemDraw/Excel ワークシート内の構造式の化学的物性を返す関数ライブラリが用意されています。

ChemDraw/Excel 関数をワークシートに挿入するには、次の操作を行ってください。

1. ターゲット セルを選択します。
2. ChemOffice16 の ChemDraw Functions (Excel 2010 の場合は Options、ChemDraw Functions) をクリックします。ChemDraw for Excel ダイアログ ボックスが表示されます。
3. Functions タブで使用可能なリストから挿入する関数をダブルクリックします。Functions Argument ダイアログ ボックスが表示されます。
4. 構造式を選択します。
5. OK をクリックします。

最適な方法を使用して各特性が計算されます。セルの参照引数が有効な構造式セルを指していない場合、セルに #N/A が表示されます。

以下に ChemDraw/Excel のすべての関数を説明します。

化学名

化学構造式の体系名を表示します。立体化学構造の Cahn-Ingold-Prelog (CIP) 則にも対応しています。


関数

CFW_CHEMICAL_NAME (セル参照)

例

セル内: =CFW_CHEMICAL_NAME (A2)

結果: 1-(2, 3-dihydro-1H-inden-2-yl)propan-2-one

 **注:** PerkinElmer Informatics 製品のパッケージおよびレベルによって、構造式から名前への変換を無制限に行えるものと、一定の制限が設定されているものとがあります。

化学組成

セル参照のみを指定して呼び出すと、構造式のすべての元素の元素量割合を表示します。セル参照と原子記号を指定して呼び出すと、構造式の特定の元素の重量比を表示します。

関数

CHEM_COMPOSITION (セル参照)

CHEM_COMPOSITION (セル参照, 原子記号)

例

セル内: =CHEM_COMPOSITION (A2)

結果: C, 82.72; H, 8.10; O, 9.18

セル内: =CHEM_COMPOSITION (A2, "C")

結果: 0.827188133

分子式

セル内の構造式の分子式を表示します。

関数

CHEM_FORMULA (セル参照)

CHEMPROPSTD_MOL_FORMULA (セル参照)

例

セル内: =CHEM_FORMULA (A2)

結果: C12H14O

セル内: =CHEMPROPSTD_MOL_FORMULA (A2)

結果: C12H14O

分子量

構造式の平均分子量を表示します。原子量は、その元素すべての同位体の加重平均に基づいています。

単位

原子質量単位

関数

CHEM_MOLWEIGHT (セル参照)

CHEMPROPSTD_MOL_WEIGHT (セル参照)

CHEMPROPSTD_MASS (セル参照)

例

セル内: =CHEM_MOLWEIGHT (A2)

結果: 174. 23896

セル内: =CHEMPROPSTD_MOL_WEIGHT (A2)

結果: 174. 238960

セル内: =CHEMPROPSTD_MASS (A2)

結果: 174. 238960

精密質量

分子の正確な分子量を表示します。各原子の原子量は、その元素で最も一般的な同位体に基づいています。

単位

g/mole

関数

CHEMPROPSTD_EXACT_MASS (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPSTD_EXACT_MASS (A2)

結果: 174. 104465

原子数

セル参照のみを指定して呼び出すと、構造式の原子の総数を表示します。セル参照と原子記号を指定して呼び出すと、構造式の特定の元素の原子数を表示します。

関数

CHEM_NUM_ATOMS (セル参照)

CHEM_NUM_ATOMS (セル参照, 原子記号)

例

セル内:=CHEM_NUM_ATOMS (A2)

結果: 27

セル内:=CHEM_NUM_ATOMS (A2, "C")

結果: 12

水素結合受容体の数

トポロジに基づき、水素結合受容体の数を表示します。

関数

CHEM_NUM_HBACCEPTORS (セル参照)

例

セル内:=CHEM_NUM_HBACCEPTORS (A2)

結果: 1

水素結合供与体の数

トポロジに基づき、水素結合供与体の数を表示します。

関数

CHEM_NUM_HBDONORS (セル参照)

例

セル内:=CHEM_NUM_HBDONORS (A2)

結果: 0

SMILES 文字列

構造式の SMILES 文字列を表示します。

関数

CHEM_SMILES (セル参照)

例

セル内:=CHEM_SMILES (A2)

結果: O=C (C) CC (C1) Cc2c1cccc2

形式電荷

分子の正味電荷を表示します。

関数

CHEMPROPSTD_FORMAL_CHARGE (セル参照)

例

セル内:=CHEMPROPSTD_FORMAL_CHARGE (A2)

結果: -1

セルに構造式があるか

セルに ChemOffice/Excel 構造式または反応式がある場合は TRUE、そうでない場合は FALSE を返します。

関数

ISSTRUCTURE (セル参照)

例

セル内: =ISSTRUCTURE (A2)

結果: False

セルに反応式があるか

セルに反応式がある場合は TRUE を返します。

関数

ISREACTION (セル参照)

例

セル内: =ISREACTION (A2)

結果: True

沸点

1 気圧における分子の沸点です。

単位

ケルビン

関数

CHEMPROPPRO_BOILING_POINT (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_BOILING_POINT (A2)

結果: 540.059

融点/凝固点

1 気圧における化学構造の融点/凝固点です。

単位

ケルビン

関数

CHEMPROPPRO_MELTING_POINT (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_MELTING_POINT (A2)

結果: 331.31

蒸気圧

摂氏 25 度における蒸気圧です。

単位

P_a

関数

CHEMPROPPRO_VAPOR_PRESSURE (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_VAPOR_PRESSURE (A2)

結果: 47.57999897

臨界圧力

臨界温度で化学構造を液化するために必要な最小圧力です。

単位

bar

関数

CHEMPROPPRO_CRITICAL_PRESSURE (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_CRITICAL_PRESSURE (A2)

結果: 49.804

臨界温度

化学構造が気体の場合に、どれほど圧力を加えても液化できなくなる最低温度です。

単位

ケルビン

関数

CHEMPROPPRO_CRITICAL_TEMPERATURE (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_CRITICAL_TEMPERATURE (A2)

結果: 615.351

臨界容積

化合物が、その臨界温度および臨界圧力のときに占める容積です。

単位

cm³/mole

関数

CHEMPROPPRO_CRITICAL_VOLUME (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_CRITICAL_VOLUME (A2)

結果: 562.5

ギブスの自由エネルギー

化学構造の 298.15 K および 1 気圧における、ギブスの自由エネルギーです。

単位

kJ/mole

関数

CHEMPROPPRO_GIBBS_FREE_ENERGY (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_GIBBS_FREE_ENERGY (A2)

結果: 84.77

生成熱

298.15 K、1 気圧における化学構造の生成熱です。

単位

kcal/mole

関数

CHEMPROPPRO_HEAT_OF_FORMATION (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_HEAT_OF_FORMATION (A2)

結果: -105.73

理想気体熱容量

理想気体化合物の 298.15 K における定圧 (1 気圧) モル熱容量です。

単位

J/[mole K]

関数

CHEMPROPPRO_IDEAL_GAS_THERMAL_CAPACITY (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_IDEAL_GAS_THERMAL_CAPACITY (A2)

結果: 201.036

LogP

n-オクタノール/水分配係数の対数です。

関数

CHEMPROPPRO_LOGP (セル参照)

CLOGP_DRIVER_PARTITION_COEFFICIENT (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_LOGP (A2)

結果: 2.233

セル内: =CLOGP_DRIVER_PARTITION_COEFFICIENT (A2)

結果: 2.243

モル屈折率

モル屈折率指数です。

単位

cm³/mole

関数

CHEMPROPPRO_MOL_REFRACTIVITY (セル参照)

CLOGP_DRIVER_MOL_REFRACTIVITY (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_MOL_REFRACTIVITY (A2)

結果: 53.305

セル内: =CLOGP_DRIVER_MOL_REFRACTIVITY (A2)

結果: 5.3297

水溶性

化学構造の摂氏 25 度における水溶性の予測です。

単位

mg/L

関数

CHEMPROPPRO_WATER_SOLUBILITY (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPPRO_WATER_SOLUBILITY (A2)

結果: 0

コノリー溶媒接触表面

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際の、球の中心の軌跡です。

単位

Å²


関数

CHEMPROPSTD_CONNOLLY_ACCESSIBLE_AREA (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPSTD_CONNOLLY_ACCESSIBLE_AREA (A2)

結果: 428.557

 **注:** 計算で使われる標準のプローブ半径は 1.4 オングストロームです。

コノリー分子表面積

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際にできる接触面です。

単位

Å²

関数

CHEMPROPSTD_CONNOLLY_MOLECULAR_AREA (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPSTD_CONNOLLY_MOLECULAR_AREA (A2)

結果: 212.294

 **注:** 計算で使われる標準のプローブ半径は 1.4 オングストロームです。

 **注:** 体積は、Michael Connolly の分子表面積および体積計算プログラムを使って計算します
(M. L. Connolly. *The Molecular Surface Package*. *J. Mol. Graphics* **1993**, 11)。

コノリー溶媒排斥容積

接触分子表面の範囲内に含まれる体積です。

単位

Å³

関数

CHEMPROPSTD_CONNOLLY_SOLVENT_EXCLUDED_VOLUME (セル参照)

例

セル内: =CHEMPROPSTD_CONNOLLY_SOLVENT_EXCLUDED_VOLUME (A2)

結果: 170.277

 **注:** 体積は、Michael Connolly の分子表面積および体積計算プログラムを使って計算します
(M. L. Connolly. *The Molecular Surface Package*. *J. Mol. Graphics* **1993**, 11)。

卵形度

分子表面積の最小表面積に対する比率です。最小表面積は、分子の溶媒排斥容積に等しい容積を持つ球の表面積です。Connolly Molecular Surface Area および Solvent-Excluded Volume 特性から計算されます。

関数

CHEMPROPSTD_OVALITY (セル参照)

例

セル内:=CHEMPROPSTD_OVALITY (A2)

結果: 1.428947

主慣性モーメント (X、Y、Z)

直交座標軸を分子の主座標軸としたときの慣性モーメントです。

単位

g/mole Å²

関数

CHEMPROPSTD_PRINCIPAL_MOMENT (セル参照)

例

セル内:=CHEMPROPSTD_PRINCIPAL_MOMENT (A2)

結果: 249.546 1409.279 1658.824

Balaban 指数

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_BALABAN_INDEX (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_TOPOLOGY_BALABAN_INDEX (A2)

結果: 29909

クラスタ数

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_CLUSTER_COUNT (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_TOPOLOGY_CLUSTER_COUNT (A2)

結果: 13

形状指数

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_MOLECULAR_TOPOLOGICAL_INDEX (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_TOPOLOGY_MOLECULAR_TOPOLOGICAL_INDEX (A2)

結果: 1998

回転可能結合数

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_NUM_ROTATABLE_BONDS (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_NUM_ROTATABLE_BONDS (A2)

結果: 2

極性表面積

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_POLAR_SURFACE_AREA (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_POLAR_SURFACE_AREA (A2)

結果: 17.07

半径

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_RADIUS (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_RADIUS (A2)

結果: 4

形状属性

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_SHAPE_ATTRIBUTE (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_SHAPE_ATTRIBUTE (A2)

結果: 11.076923

形状係数

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_SHAPE_COEFFICIENT (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_SHAPE_COEFFICIENT (A2)

結果: 0

次数合計

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_SUM_OF_DEGREES (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_SUM_OF_DEGREES (A2)

結果: 28

原子価合計

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_SUM_OF_VALENCE_DEGREES (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_SUM_OF_VALENCE_DEGREES (A2)

結果: 40

形状径

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_TOPOLOGICAL_DIAMETER (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_TOPOLOGICAL_DIAMETER (A2)

結果: 7

結合合計

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_TOTAL_CONNECTIVITY (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_TOTAL_CONNECTIVITY (A2)

結果: 0.009821

原子価結合合計

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_TOTAL_VALENCE_CONNECTIVITY (セル参照)

例

セル内: =MOLECULAR_TOPOLOGY_TOTAL_VALENCE_CONNECTIVITY (A2)

結果: 0.001157

Wiener 指数

関数

MOLECULAR_TOPOLOGY_WIENER_INDEX (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_TOPOLOGY_WIENER_INDEX (A2)

結果: 249

MOLECULAR_NETWORKS_LOGP

分配係数は、2 つの溶液間のイオン化していない化合物の濃度の比です。溶媒内のイオン化していない溶質の濃度の比の対数は、LogP と呼ばれます。

関数

MOLECULAR_NETWORKS_LOGP (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_NETWORKS_LOGP (A4)

結果: 3.019

MOLECULAR_NETWORKS_LOGS

MOLECULAR_NETWORKS_LogS は、物質の溶解度を決定します。mol/l 単位で測定されます。

関数

MOLECULAR_NETWORKS_LOGS (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_NETWORKS_LOGP (A4)

結果: -2.029

MOLECULAR_NETWORKS_PKa

MOLECULAR_NETWORKS_PKa は、酸解離定数 K_a の負の対数です。化合物またはイオンが溶液中で解離する傾向を表します。

関数

MOLECULAR_NETWORKS_PKa (セル参照)

例

セル内:=MOLECULAR_NETWORKS_PKa (A4)

結果: 14.834000

薬品性の予測

ChemDraw/Excel 関数を使用すると、構造式の薬品性を判断する計算を作成できます。以下の値を計算できます。

1. Lipinski の Rule of Five

2. Ghose Modifications

3. Congreve の Rule-of-Three

Lipinski の Rule of Five

Lipinski の法則は、5 つの条件を使用して物質が薬品性を持つかどうかを判断します。物質には次の条件が必要です。

- 水素結合供与体が 5 以下。
- 水素結合受容体が 10 以下。
- 分子量が 500 ダルトン未満。
- LogP が 5 未満。
- 上記 4 つのルールのうち当てはまらないものが 2 つ未満である。

物質が Lipinski の法則の要件を満たすかどうかを判断するには、次の操作を行ってください。

1. 以下の関数について、それぞれの値を計算します。

- CHEM. NUM. HBDONORS ()
- CHEM. NUM. HBACCEPTORS ()
- CHEM. MOLWEIGHT ()
- CHEMPROPPRO. LOGP ()

2. 関数によって返される値が Lipinski の法則の条件を満たすことを確認します。たとえば、CHEM. MOLWEIGHT () が 500 より小さい値を返す場合、Lipinski の 3 番目の条件を満たします。

3. 満たす条件の数を計算します。違反の数が 2 つ未満の場合、Lipinski の法則を満たしています。

Ghose modifications

Ghose Modifications は、次の条件を使用します。

- 原子数が 20 ~ 70。
- モル屈折率が 40 ~ 130。
- 分子量が 160 ~ 480 ダルトン。
- LogP が -0.4 ~ +5.6。
- 上記 4 つのルールのうち当てはまらないものが 2 つ未満である。

物質が Ghose Modifications の要件を満たすかどうかを判断するには、次の操作を行ってください。

1. 以下の関数について、それぞれの値を計算します。

- CHEM. NUM. ATOMS ()
- CHEMPROPPRO. MOL. REFRACTIVITY ()
- CHEM. MOLWEIGHT ()
- CHEMPROPPRO. LOGP ()

- 関数によって返される値が Ghose Modifications の条件を満たすことを確認します。たとえば、ある構造式に対して関数 CHEMPROPPRO.LOGP() から返される値が $-0.4 \sim +5.6$ の範囲内にある場合、Ghose Modifications の 4 番目の条件を満たします。
- 満たす条件の数を計算します。違反の数が 2 つ未満の場合、Ghose Modifications の要件を満たしていません。

Congreve の Rule-of-Three

Congreve の Rule-of-Three は、次の条件を使用します。

- 水素結合供与体が 3 以下。
- 水素結合受容体が 3 以下。
- 分子量が 300 ダルトン未満。
- LogP が 3 未満。
- 上記 4 つのルールのうち当てはまらないものが 2 つ未満である。

物質が Congreve の Rule-of-Three の要件を満たすかどうかを判断するには、次の操作を行ってください。

- 以下の関数について、それぞれの値を計算します。
 - CHEM.NUM.HBDONORS()
 - CHEM.NUM.HBACCEPTORS()
 - CHEM.MOLWEIGHT()
 - CHEMPROPPRO.LOGP()
- 関数によって返される値が Congreve の Rule-of-Three の条件を満たすことを確認します。たとえば、構造式に対して関数 CHEMPROPPRO.LOGP() から返される値が 3 より小さい場合、Congreve の Rule-of-Three の 4 番目の条件を満たします。
- 満たす条件の数を計算します。違反の数が 2 つ未満の場合、Congreve の Rule-of-Three の要件を満たしています。

化学的物性

化学的物性の予測は、ChemOffice アプリケーションがサポートする重要な機能です。さまざまな手法の値を計算できます。たとえば、位相記述子（例：Wiener 指数、Balaban 指数）、熱力学的記述子（例：溶解度、融点、沸点）、分配係数（例：CLogP）、化学物質の 3 次元形状および体積に関する特性（例：コノリー表面積および容積）などがあります。ある構造式に対して総数で 100 を超す化学的物性を計算できます。

特定のアプリケーションで予測可能な特性のリストについては、次の各リンクをクリックしてください。特定のアプリケーションで予測可能な特性の詳細については、それぞれのオンライン ヘルプまたは [PerkinElmer Informatics Web サイト](#) を参照してください。

- [220 ページの “ChemDraw/Excel での特性予測”](#)
- [170 ページの “ChemDraw での特性予測”](#)
- [175 ページの “Chem3D での特性予測”](#)

ChemDraw/Excel での特性予測

ChemDraw/Excel には、特定の構造式の特性を報告するためのさまざまな関数が用意されています。最適な方法を使用して各特性が計算されます。

特定の構造式の特性を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式のセルを選択します。
2. セルを右クリックし、コンテキストメニューから **Structure、Properties** の順に選択します。さまざまな特性と値を示す Properties ダイアログボックスが表示されます。

特性には次のものがあります。

B	F	M	S
Balaban 指数	Formal Charge (形式電荷)	MOLECULAR_NETWORKS_LOGP	Shape attribute (形状属性)
Boiling point (沸点)	Freezing Point (凝固点)	MOLECULAR_NETWORKS_LOGS	Shape coefficient (形状係数)
C	G	MOLECULAR_NETWORKS_PKa	Sum of degrees (次数合計)
Cluster count (クラスタ数)	Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)	Molecular Formula (分子式)	Sum of valence degrees (原子価合計)
Connolly Accessible Area (コノリー接触面)	H	Molecular Weight (分子量)	T
コノリー分子表面積	Heat of Formation (生成熱)	N	Topological Diameter (形状径)
コノリー溶媒接触表面	Henry' s Law Constant (ヘンリーの法則の定数)	Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)	Total Connectivity (結合合計)
Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)	I	O	Total Valence Connectivity (原子価結合合計)
Critical Pressure (臨界圧力)	Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)	Ovality (卵形度)	V
Critical Temperature (臨界温度)	M	P	Vapor Pressure (蒸気圧)
Critical Volume (臨界容積)	Mass (質量)	Polar Surface Area (極性表面積)	W
E	Melting Point (融点)	Principal Moment Of Inertia (主慣性モーメント)	Water Solubility (水溶性)
Exact Mass (精密質量)	Molar Refractivity (モル屈折率)	R	Wiener Index (Wiener 指数)
		Radius (半径)	

Molecular Networks について

* 化合物の酸解離定数、水溶性、およびオクタノール/水分配係数を予測するための MOSES.pKa、MOSES.logS、および MOSES.logP は、Molecular Networks の ケモインフォマティクス プラットフォーム MOSES に基づく計

算モジュールです。MOSES は、Molecular Networks GmbH（ドイツ、エルランゲン）が開発、保守、所有しています。詳細については、www.molecular-networks.com/moses を参照してください。All rights reserved. Molecular Networks GmbH, Erlangen, Germany (www.molecular-networks.com)

Balaban 指数

$$J = \frac{q}{\mu + 1} \sum_{edges\ ij} (S_i S_j)^{-1/2}$$

各項の意味は次のとおりです。

- q は分子グラフのエッジの数です。
- $\mu = (q - n + 1)$ は分子グラフのサイクロマティック数です。
- n は分子グラフの原子数です。
- S_i は、分子の形状距離マトリックスの i 番目の行（または列）にある全エントリの合計です。距離マトリックスには、すべての原子ペア間の最短パスが格納されます。

Boiling point (沸点)

沸点は絶対温度で表示します。

溶液は、純溶媒よりわずかに高い温度で沸騰します。沸点の変化は次の数式で算出します。

$$\Delta T_b = K_b m$$

K_b はモル沸点定数です。m は、重量モル濃度で表される溶質の濃度です。 ΔT_b は温度変化です。

Cluster count (クラスタ数)

距離マトリックスの特定の長さのパス数です。

Connolly Accessible Area (コノリー接触面)

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際の、球の中心の軌跡です。

コノリー分子表面積

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際にできる接触面です。単位はオングストローム² です。

コノリー溶媒接触表面

(溶媒を表す) プローブ球が分子モデルをなぞる際の、球の中心の軌跡です。単位はオングストローム² です。

Connolly Solvent Excluded Volume (コノリー溶媒排斥容積)

溶媒接触分子表面で囲まれた領域の容積です。

Critical Pressure (臨界圧力)

パールで表示します。臨界温度で気体を液化するために必要な最小圧力です。

Critical Temperature (臨界温度)

絶対温度で表示します。気体の場合に、どれほど圧力を加えても液化できなくなる最低温度です。

Critical Volume (臨界容積)

cm³/mol で表示します。臨界温度および臨界圧力において 1 モルの物質によって占有される体積です。

Exact Mass (精密質量)

分子の個々の同位体の質量の合計です。たとえば、2 個の水素-1 (1H) と 1 個の酸素-16 (16O) が含まれる水の精密質量は 1.0078 + 1.0078 + 15.9994 = 18.0106 です。2 個の水素-2 (重水素つまり 2H) と 1 個の酸素-16 (16O) が含まれる重水の精密質量は 2.014 + 2.014 + 15.9994 = 20.027 です。

Formal Charge (形式電荷)

化学結合の電子が、相対的な陰性に関係なく原子間で等しく共有されるという前提のもとに、分子内の原子に割り当てられる電荷です。

分子内の原子の形式電荷は次の数式で算出できます。

$$FC = V - N - B/2$$

“V” は、分離している原子 (基底状態の原子) の価電子数です。“N” は、分子内のこの原子における非結合電子の数です。“B” は、分子内の他の原子と共有結合で共有される電子の総数です。

Freezing Point (凝固点)

1 気圧における化学構造の凝固点です。単位はケルビンです。

Gibbs Free Energy (ギブスの自由エネルギー)

KJ/mole で表示します。ギブスの自由エネルギーは次のように定義されます。

$$G(p, T) = U + pV - TS$$


以下と同じです。

$$G(p, T) = H - TS$$

各項の意味は次のとおりです。

- U は内部エネルギーです (SI 単位: ジュール)。

- p は圧力です (SI 単位: パスカル)。
- V は体積です (SI 単位: m³)。
- T は温度です (SI 単位: ケルビン)。
- S はエントロピーです (SI 単位: ジュール毎ケルビン)。
- H はエンタルピーです (SI 単位: ジュール)。

 注: H と S は、標準温度および圧力で見られる熱力学的な値です。

Heat of Formation (生成熱)

KJ/mole で表示します。生成熱は、定圧で構成分子から 1 モルの物質が生成される際のエンタルピーの増加量です。

Henry's Law Constant (ヘンリーの法則の定数)

単位なしの値です。ヘンリーの法則の定数は次のように表現できます。

$$k_{H,pc} = \frac{p}{c}$$

“p” は、溶液の上にある気体の溶質の分圧です。“c” は、溶質の濃度です。“k_{H,pc}” は、濃度で除算した圧力の次元を伴う定数です。ヘンリーの法則の定数と呼ばれる定数は、溶質、溶媒、温度に依存します。

Ideal Gas Thermal Capacity (理想気体熱容量)

理想気体の定容での熱容量は次のとおりです。

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \hat{c}_V N k_B = \hat{c}_V n R$$

各項の意味は次のとおりです。

- c_V は温度に依存する定数です。
- U は内部エネルギーです。
- T は絶対温度です。
- V は体積です。
- n は気体の物質質量です。
- R は気体定数です (SI 単位で 8.314 J·K⁻¹mol⁻¹)。
- N は気体粒子の数です。
- k_B はボルツマン定数です (SI 単位で 1.381×10⁻²³J·K⁻¹)。

理想気体の定圧での熱容量は次のとおりです。

$$C_p = \left(\frac{\delta H}{\delta T} \right)_p = (\hat{c}_V + 1)Nk$$

“H” は気体のエンタルピーです。算出方法: $H = U + pV$

MOLECULAR_NETWORKS_LOGP

分配係数は、2 つの溶液間のイオン化していない化合物の濃度の比です。イオン性溶質の分配係数を測定する場合は、化合物の優勢型がイオン化されないように水相の pH が調整されます。溶媒内のイオン化していない溶質の濃度の比の対数は、LogP と呼ばれます。

通常、選択する溶媒の 1 つは水です。もう一方は疎水性のもの（オクタノールなど）です。

MOLECULAR_NETWORKS_LOGS

MOLECULAR_NETWORKS_LogS は、物質の溶解度を決定します。mol/l 単位で測定されます。化合物の水溶解度は、その化合物の吸収特性と分布特性に大きく影響することで知られています。

MOLECULAR_NETWORKS_PKa

MOLECULAR_NETWORKS_PKa は、酸解離定数 K_a の負の対数です。化合物またはイオンが溶液中で解離する傾向を表します。

Mass (質量)

統一原子質量単位 u (12C の原子 1 個の質量の 1/12 に等しい) を基準とした、物質の分子 1 個の質量です。分子量とも呼ばれます。

Melting Point (融点)

標準大気圧で固体が液体になる温度です。融点では、固相と液相が平衡状態で存在します。融点の計算式は次のとおりです。

$$T = \frac{\Delta H}{\Delta S}$$

“T” は融点の温度です。“ ΔS ” は融解エントロピーの変化です。“ ΔH ” は融解エンタルピーの変化です。

Molar Refractivity (モル屈折率)

1 モルの物質の総分極率の測定値です。温度、屈折率指数、圧力に依存します。モル屈折率 “A” は次の式で表されます。

$$A = \frac{4\pi}{3} N_A \alpha$$

“ N_A ” はアボガドロ定数です。α は平均分極率です。

Molecular Formula (分子式)

化合物の分子式です。

Molecular Weight (分子量)

分子内のすべての原子の原子量の合計です。

Num Rotatable Bonds (回転可能結合数)

分子内の回転可能結合の数です。回転可能結合は、単結合として描画される非環式結合として定義され（アミド C-N 結合、O=C--N が回転可能です）、端の原子は、少なくとも 1 つの非水素置換基を持ちます。この形状パラメータは分子柔軟性の測定値です。水素または末端原子、アミドの単結合、スルホンアミドに結び付いている単結合、2 つのヒンダード芳香族環（少なくとも 3 つのオルト置換基を持つ）を結び付ける単結合、および不飽和結合は、回転不能と見なされます。

Ovality (卵形度)

分子の形状が球（一方の究極の形状）または葉巻形（他方の究極の形状）にどの程度近づいているかを表します。卵形度は、面積に対する体積の比で表されます。

$$O = A / (4 \times \pi \times ((3 \times V) / 4 \times \pi)^{2/3})$$

ここで、“A” は面積、“V” は体積、“O” は卵形度です。

ヘリウム原子の卵形度は 1.0 です。HC₂₄H（三重結合 12）は約 1.7 です。

Polar Surface Area (極性表面積)

極性表面積（PSA）は、すべての極性原子における表面積の合計として定義されます。

Principal Moment Of Inertia (主慣性モーメント)

分子の主座標軸に関する主慣性モーメントを表します。次の数式を使用して、質量の中心を通る一連の直線の慣性モーメントが計算されます。

$$I = \sum_i m_i d_i^2$$

- 距離は、質量の中心の両側の I の平方根の逆数に比例する各線に従って確立されます。これらの距離の軌跡によって楕円体表面が形成されます。主モーメントは、楕円体の主座標軸に関連付けられます。
- 3 つのモーメントがすべて等しい場合、分子は対称コマであると見なされます。どのモーメントも等しくない場合、分子は非対称コマであると見なされます。

Radius (半径)

原子の離心率は距離マトリックスの行（または列）内の最大値で、その分子が中心から離れている率を表します。直径 (D) は、全原子の直径の最大値で、最も遠い原子によって計算されます。例: メタンの直径 = 0、エタンの直径 = 1、プロパンの直径 = 2、n-ブタンの直径 = 3
半径 (R) は、半径の最小値で、最も中心にいる原子によって計算されます。例: メタンの半径 = 0、エタンの半径 = 1、プロパンの半径 = 1、n-ブタンの半径 = 2

Shape attribute (形状属性)

形状属性 (kappa) は、分子の分岐を測定し、特定の次数において可能な最小値と最大値の間になるように調節されます。1 次形状属性は 1 結合パスの数をカウントします。2 次属性は、2 結合パスの数をカウントします。次数は 3 つ (1 ~ 3) まで使用可能です。

Shape coefficient (形状係数)

形状係数 I は、次の式によって計算されます。

$$I = (D - R) / R$$

直径 (D) は、全原子の直径の最大値で、最も遠い原子によって計算されます。半径 (R) は、半径の最小値で、最も中心にいる原子によって計算されます。

D の値の例: メタン = 0、エタン = 1、プロパン = 2、n-ブタン = 3

R の値の例: メタン = 0、エタン = 1、プロパン = 1、n-ブタン = 2

Sum of degrees (次数合計)

全原子の次数の合計です。原子の次数とは、結合している非水素原子の数のことです。

Sum of valence degrees (原子価合計)

全原子の次数の合計です。水素を含んだ隣接結合次数の合計が原子価になります。

Topological Diameter (形状径)

分子の最大寸法です。

Total Connectivity (結合合計)

全ヘテロ原子の結合です。

Total Valence Connectivity (原子価結合合計)

全ヘテロ原子の原子価結合です。

Vapor Pressure (蒸気圧)

固相または液相と平衡状態にある蒸気によって加えられる圧力です。蒸気圧により、気相中の溶媒分子の濃度が測定されます。

蒸気圧は、ラウールの法則を使用して計算できます。蒸気圧の計算式は次のとおりです。

$$P_{tot} = \sum_i P_i X_i$$

“p” は蒸気圧です。“i” は構成要素指数です。“χ” はモル分率です。

Water Solubility (水溶性)

特定の温度および圧力下で、平衡状態で水に溶解できる物質の最大量です。水溶性の単位は mg/L です。

Wiener Index (Wiener 指数)

分岐を測定します。次のように定義されています。

$$W = \frac{1}{2} \sum D_{ij}$$

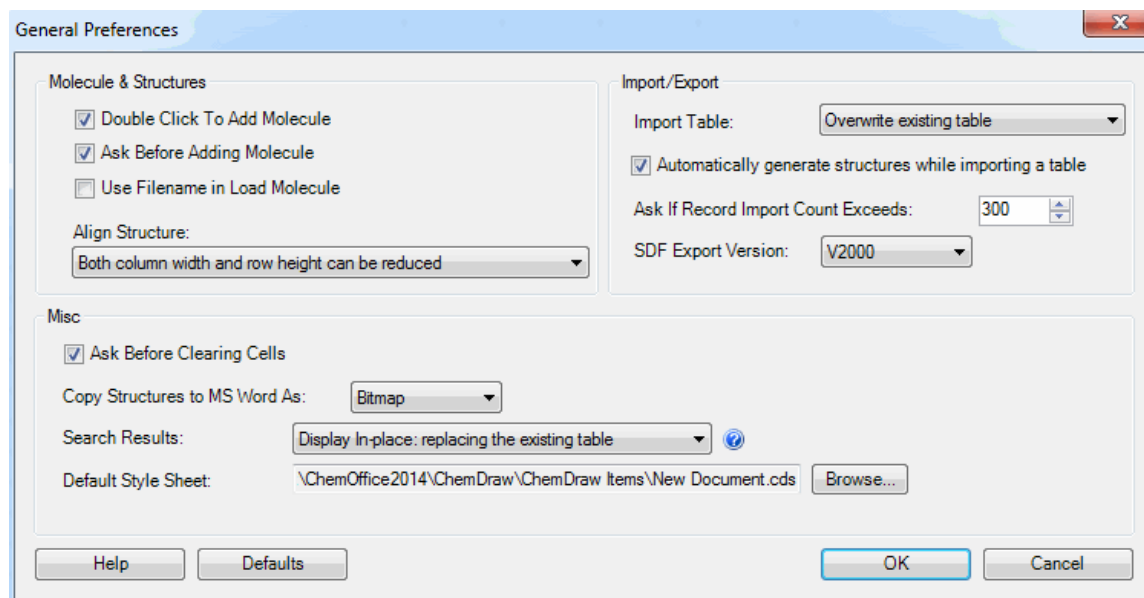
D_{ij} は、距離マトリックスの非対角要素です。

一般オプション

General Preferences ダイアログを利用して、特定の作業ニーズに合わせて ChemDraw for Excel をカスタマイズできます。

ChemDraw for Excel をカスタマイズするには、次の操作を行ってください。

1. **ChemOffice、Options、Preference** の順にクリックします。General Preferences ダイアログが表示されます。



2. 作業ニーズに基づいて、General Preferences ダイアログのオプションをカスタマイズします。オプションは、Molecules & Structures、Import/Export、Misc の3つにカテゴリに分かれて表示されます。

Molecules & Structures:

- **Double Click To Add Molecule:**セルをダブルクリックすると、ChemDraw が起動します。
- **Ask Before Adding Molecule:**分子を追加するセルをダブルクリックすると、確認のメッセージが表示されます。
- **Use Filename in Load Molecule:**分子のロード後、分子の下に組成式ではなくファイル名を表示します。
- **Align Structure:**構造式をどのようにセルに割り当てるかを指定します。列幅、行の高さ、またはその両方を縮小できます。

Import/Export:

- **Import Table:**テーブルを上書きするか、既存のテーブルにレコードを追加するかを指定します。
- **Automatically generate structures while importing a table:**Import Table コマンドを使用してテーブルを読み込んでいる間に、個々のレコードについて構造式画像を生成します。このオプションを無効にすると、読み込み処理を高速化できます。読み込まれるのは構造式とテーブルのデータのみです。画像は生成されません。構造式のセルを選択し、Show Picture を使用すると、画像が表示されます。
- **Ask If Record Import Count Exceeds:**読み込んでいるテーブルが、指定されたカウント数を超えるレコードが含まれていると、メッセージが表示されます。
- **SDF Export Version:**ChemDraw for Excel でエクスポートされる構造式データファイル(SDF)のバージョンを指定します。SDF ファイルは V2000 または V3000 を指定できます。標準は V2000 で、分子内の原子と結合の数が制限されます。V2000 ファイルでは、それぞれ 1000 個まで可能です。V3000 は V2000 の上位仕様で、立体化学構造の仕様が強化されています。V2000 とは異なり、V3000 形式では分子内の原子と結合の数は制限されません。

Misc:

- **Ask Before Clearing Cells:**Delete キーまたは Backspace キーを押して ChemOffice ワークシートのセルの内容を削除しようとする時、メッセージが表示されます。

- **Copy Structure to MS Word As:**Bitmap や OLE オブジェクトなど、構造式を MS Word ドキュメントにコピーする際に使用する形式を選択できます。
- **Search Results:**標準では、検索を実行したのと同じワークシートに検索結果が表示されます。Display in a new worksheet オプションを有効にすると、"SearchResults X" (X は 1、2、3 など) という名前の新しいワークシートが作成され、元のワークシートを変更せずに、この新しいシートに検索結果が表示されます。
- **Default Style Sheet:**Import Table、Load Molecule を使用して、または Add Molecule コマンドによって構造式を追加するときに必ず適用されるスタイルシートを指定します。特定の分子にスタイルを適用するには、**ChemOffice、Molecule、Style** の順に選択します。標準のスタイルシートは、New Document.cds です。

CombiChem

CombiChem を使用すると、構造的に関連性のある分子による仮想コンビナトリアル ライブラリを作成できます。その後、さまざまな特性についてライブラリをスクリーニングして、合成する化合物を決定できます。

CombiChem は Microsoft Excel のプラグインであり、ChemDraw/Excel に含まれています。MS Excel の操作に慣れていれば、CombiChem が使いやすいことがわかるでしょう。ただし不明点がある場合は、MS Excel のヘルプ文書を参照してください。

操作の開始

ChemFinder または ChemOffice をインストールすると、CombiChem アドインもインストールされます。CombiChem を使用するには、Microsoft Excel 2010 以降が必要です。

CombiChem を使用するにあたって

CombiChem では、Excel ワークシート形式のヘルプがあります。ChemOffice16 メニューから **CombiChem、Help** の順に選択します。

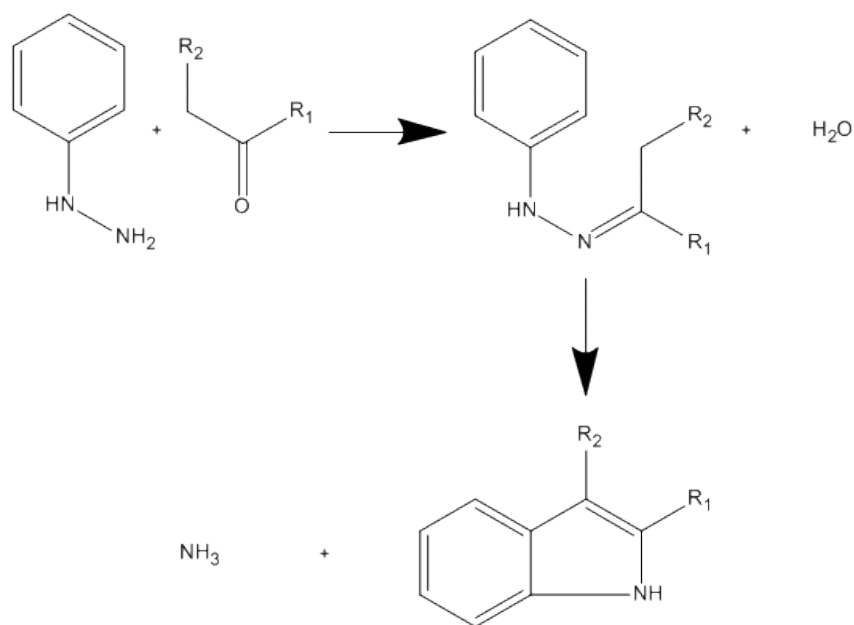
標準で、作成する各ワークシートにも操作方法を示す簡単な指示が記載されます。指示が見つからない場合は、次の操作を行ってください。

1. ChemOffice16 メニューから **CombiChem、Preferences** の順に選択します。
2. **Add Instructions to Every Sheet** を選択します。
3. **OK** をクリックします。

作成した新しいワークシートに指示が表示されます。

コンビナトリアル ライブラリの作成

コンビナトリアル ライブラリを作成するには、最初に一般的な反応が必要です。この反応は、化合物を合成するために研究室で使用する実際の反応に似ています。一般的な反応には、実際の反応における反応物や生成物を表す 1 つ以上の検索構造式が含まれます。一般的な反応の例を次に示します。



反応物の検索構造式と一致する化合物を化学データベースで検索するには、一般的な反応を使用します。一致するすべての化合物が見つかったら、CombiChem は検索式で見つかった化合物から反応のリストを生成します。

作成する一般的な反応は、次の条件を満たす必要があります。

- 反応物のすべての一般的な原子は、R-基で表される必要があります。
- 溶媒、触媒、およびその他実際のエレメントは一般的な反応に含めません。
- 複数ステップの一般的な反応にも対応しています。

一般的な反応の入力

一般的な反応を入力するには、最初に反応ワークシートを作成する必要があります。

- **ChemOffice16** メニューから **CombiChem**、**New Reaction** の順に選択します。「Reactions」という名前の新しいワークシートがワークブックに表示されます。

次に、一般的な反応をインポートするか ChemDraw で描画して、反応ワークシートに追加します。


反応をインポートするには、次の操作を行ってください。


1. 「Reaction - Double-click to edit」というテキストが含まれるセルにカーソルを置きます。
2. ChemOffice ツールバーで **Load Molecule** アイコンをクリックするか、**ChemOffice16** メニューから **Molecule**、**Load** の順に選択します。
3. 一般的な反応が含まれるファイルを参照して **Open** をクリックします。Reactions ワークシートに反応が表示されます。

ChemDraw で反応を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 「Reaction - Double-click to edit」というテキストが含まれるセルをダブルクリックします。
2. 新しい分子を追加するかどうかを求められたら **Yes** をクリックします。ChemDraw が起動します。

- ChemDraw で、一般的な反応を描画します。
- ChemDraw で **File** メニューの **Exit** をクリックします。Excel に戻り、反応がワークシートに表示されません。

 **ヒント:** 反応の表示/非表示を切り替えるには、*Show Picture* または *Hide Picture* アイコンをクリックします。

 **注:** 反応テンプレートに複数の反応を追加しないでください。

反応物ワークシートの作成

一般的な反応には、最低 1 つの一般的な反応物 (1 つ以上の R-基結合を持つ反応物) が含まれます。Excel に一般的な反応を入力したら、一般的な反応物ごとにワークシートを作成します。CombiChem では反応物ワークシートを使用して、合成で使用できる構造式をデータベースで検索します。複数ステップの反応では、CombiChem によって最初のステップで反応物が検索されますが、中間反応物は無視されます。

反応物ワークシートを作成するには、次の操作を行ってください。

- Reactions ワークシート タブを選択します。
- ChemOffice16 メニューで **CombiChem**、**Reactants**、**Make Reactant Worksheets** の順に選択します。一般的な反応物ごとに新しいワークシートが追加されます。


CombiChem は一般的な反応物ごとにワークシートを作成します (通常、入力した反応ごとに 1 つまたは 2 つの反応物ワークシート)。

反応物検索

反応物ワークシートは、作成された時点では空です。各ワークシートにデータベースからの構造式の設定するには、データベースを SD ファイルとしてインポートするか、または ChemFinder を使用してレコードを検索します。

SD ファイル内の反応物を検索するには、次の操作を行ってください。

- Reactant ワークシート タブを選択します。
- ChemOffice16 メニューで **CombiChem**、**Reactants**、**Search for Reactants** の順に選択します。ダイアログボックスが表示されます。
- Search Directly** を選択して、検索する SD ファイルをインポートします。

 **注:** SD ファイルの拡張子は *.sdf* です。

- Database** フィールドにファイルパスを入力するか、**Browse** をクリックしてファイルの場所を指定します。
- OK** をクリックします。一般的な反応と一致するファイル内のレコードが返されます。

ChemFinder を使用して反応物を検索するには、次の操作を行ってください。


- ChemOffice16 メニューで **CombiChem**、**Reactants**、**Search for Reactants** の順に選択します。
- ダイアログボックスで、**Search in ChemFinder** を選択します。

3. **Database** フィールドで、ChemFinder データベースの検索に使用する ChemFinder フォームへのパスを入力します。

 **注:** ChemFinder フォーム ファイルの拡張子は *.cfx* または *.cfw* です。

4. **OK** をクリックします。ChemFinder が起動します。


ChemFinder が起動すると、入力したフォームを使用して対応するデータベースで一般的な反応物と一致するレコードが検索されます。検索結果は ChemFinder で参照してから Excel の反応物ワークシートにインポートすることができます。

-
-  **ヒント:** 検索結果からレコードを除外するには、ChemFinder でそのレコードに移動し、ChemFinder のメニュー、*Record*、*Omit from List* の順に選択します。
-

5. Excel で、**ChemOffice16** メニューから **CombiChem**、**Reactants**、**Import ChemFinder Hitlist** の順に選択します。

また、検索構造式をコピーして ChemFinder に貼り付け、検索を実行することもできます。

1. Excel で、一般的な反応物を含むセルを選択します。
2. ChemOffice ツールバーの Copy Molecule アイコン をクリックします。
3. ChemFinder で、検索するデータベースを開きます。
4. 一般的な反応物構造式を検索フォームに張り付け、検索を実行します。
5. Excel の反応物ワークシートで、**ChemOffice16** メニューから **CombiChem**、**Reactants**、**Import ChemFinder Hitlist** の順に選択して、検索結果をインポートします。検索結果が反応物ワークシートに表示されます。

-
-  **ヒント:** *Show Picture/Hide Picture* コマンドを使って、列を表示したり、非表示にしたりできます。
-

反応物ワークシートの再作成

いつでも一般的な反応を編集できます。ただし、その場合は反応物ワークシートを削除して再作成する必要があります。

反応物ワークシートを再作成するには、次の操作を行ってください。

1. Reactant ワークシート タブを右クリックし、**Delete** を選択します。
2. メッセージが表示されたら、ワークシートを削除することを確認します。
3. **ChemOffice16** メニューで **CombiChem**、**Reactants**、**Make Reactant Worksheets** の順に選択します。
4. **ChemOffice16** メニューで **CombiChem**、**Reactants**、**Search for Reactants** の順に選択します (詳細については、[231 ページ](#)の“**反応物検索**”を参照してください)。

すでに反応物ワークシートが含まれるワークブックに新しい反応物ワークシートを作成するときは、既存のワークシートを削除するかどうかを尋ねられます。メッセージが表示されたら、次のいずれかのオプションを選択します。

- **Yes** をクリックして、既存のワークシートを置換します。既存のワークシートは永久に削除されます。


- **No** をクリックします。新しいワークシートは作成されず、現在のワークシートが保持されます。

既存のワークシートを保持するには、**File** の **Save As** を選択し、ワークブックを保存します。その後、上記の手順に従って反応物ワークシートを再作成します。既存の各ワークシートを削除するメッセージが表示されたら、**Yes** をクリックします。新しい反応物ワークシートが作成され、これまでのワークブックは保存済みファイルとして利用できるようになります。

実験の作成


実験とは、反応物の検索結果が一般的な反応に適用されることによって作成される生成物構造式のライブラリです。ワークブックごとに複数の実験を作成または列挙できます。

たとえば、インポートしたすべての反応物を使って、すべての反応物の可能な組み合わせを含めた実験セットを一覧表にできます。これらの生成物に関する特性を計算した後、これらの生成物の内 10% が研究所で合成してみる価値があると判断したとします。その場合、計算に基づいて期待のできる生成物だけを含む実験を作成できます。反応物リストの「Use (Y/N)」列は、リストの関連反応物が実験で使用されるのか（「Y」）使用されないのか（「N」）を表します。標準では Y が表示されます。


 **注:** *Structure* 列および *Use (Y/N)* 列のみ必要です。その他の列は含めることはできますが、*CombiChem* で無視されます。削除してもかまいません。

新しい実験セットを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 各反応物リストで、使用する反応物の「Use (Y/N)」列に「Y」と入力して選択します。使用しない反応物には、「N」と入力します。


 **注:** セルに「n」または「N」を入力しないと、標準値の「Y」になります。

2. **ChemOffice16** メニューで **CombiChem**、**Experiments**、**New** の順に選択するか、またはフローティング実験フォームを使用します (**Combi Options**、**Experiment**、**New** の順に選択)。選択された反応物の数で実験セットを作成するか尋ねるダイアログ ボックスが表示されます。

 **注:** 生成物ライブラリの一覧表作成には、特に多数の反応物がある場合や遅いプロセッサを使用している場合などには、長時間を要する可能性があります。

CombiChem/Excel によって、一覧表の内容が *ChemFinder* データベース ファイルに保存されます。

3. メッセージが表示されたら、実験ファイルを保存します。

 **注:** 列挙が終了すると、*CombiChem/Excel* がデータをワークシートにインポートします。

実験ワークシート


実験セットが作成されると、いくつかのシートがワークブックに追加されます。

Experiment Reactant シート. 実験セットで使用される反応物のリストを含みます。各反応物に対して 1 つの **Experiment Reactant** シートがあります。シートの名前は **Experiment n -Reactant m** です (n は、特定の実験を指定し (複数作成している場合)、 m は実験の反応物)。

Experiment Product シート. **Experiment Product** シートには、一般的な反応と反応物ワークシートで「Y」とマークした反応物に基づいた実験で一覧表示された生成物を含みます。標準では生成物のみがリストされます。列

挙げられた反応をすべてリストするには、次の操作を行ってください。

1. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Preferences** の順に選択します。
2. Combi Preferences ダイアログ ボックスで、**Show Full Reaction for each product** を選択します。
3. 反応物ワークシートを選択します。
4. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Experiments**、**New** の順に選択します。新しい実験が追加され、反応全体が生成物ワークシートに表示されます。

 **注:** 新しい実験が作成される時は常に、既存の実験ワークシートは保持されます。削除するには、各実験タブを右クリックして **Delete** を選択するか、または実験フローティング フォームを使用します (**Combi Options**、**Experiment**、**Delete** の順に選択)。

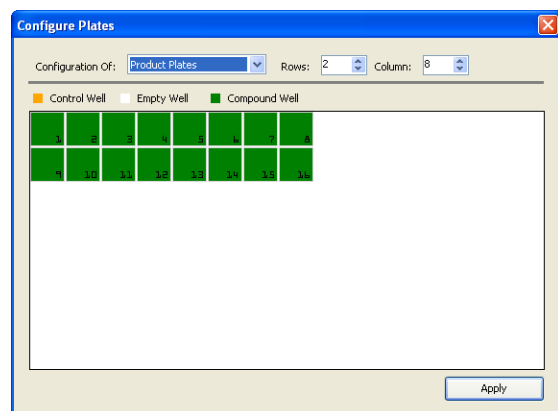
Combi Options、**Experiment**、**Toggle** の順に選択して、ワークブック内のすべての実験ワークシートを非表示/非表示解除することができます。

プレートの設定

実験を作成したら、生成物を生成物ウェルに、実験の反応物を反応物ブロック プレートにそれぞれ割り当てることができます。これは合成ロボットを使用して実験を行う場合に便利です。50 行と 50 列までのプレートを設定できます。

割り当てを設定するには、次の操作を行ってください。

1. Experiment Reactant または Experiment Product ワークシートを開きます。
2. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Plates**、**Configure Plates** の順に選択します。
Configure Plates ダイアログ ボックスが表示されます。
3. **Configuration of:** ドロップダウン リストで、**Product Plates** または **Reactant Block Plates** を選択します。
4. プレートに割り当てる行数および列数を入力します。
番号が付いているボタンは選択したプレートのウェルを表しています。



5. コントロールとして使用するウェル、合成された化合物として使用するウェル、または空のままにするウェルを指定します。ウェルをクリックして、その指定を変更します。

6. 終了後は **Apply** をクリックします。

プレートの割り当て

次の手順は、プレートをそれぞれの反応物および生成物に割り当てることです。
反応物または生成物をプレートに割り当てるには、次の操作を行ってください。

1. Experiment-Reactant ワークシートを選択します。
2. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Plates**、**Assign to Wells** の順に選択します。
3. 生成物ワークシートを選択します。
4. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Plates**、**Assign to Wells** の順に選択します。

反応物または生成物のワークシートには、Well Plate、Well Row、Well Column の 3 つの列が追加されています。

Well Plate	Well Row	Well Column
1	1	1
1	1	2
1	1	3
1	1	4

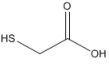
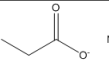
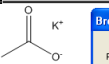
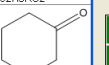
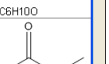
特定のプレートの割り当てを変更するには、ワークシートで値を編集します。
すべてのプレート ウェルの割り当てを削除するには、次の操作を行ってください。

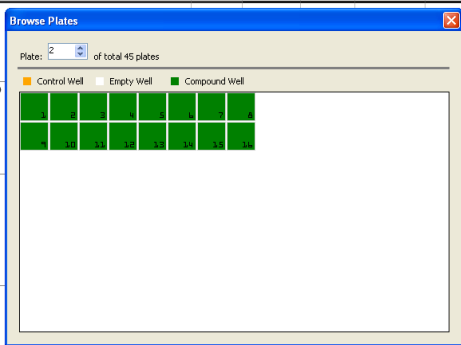
1. 割り当てを削除するワークシートを選択します。
2. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Plates**、**Remove well assignments** の順に選択します。

プレートの閲覧

ウェルに反応物または生成物を割り当てると、各ウェルに割り当てた内容を閲覧できます。

1. 反応物または生成物のワークシートを選択します。
2. ChemOffice16 メニューから **CombiChem**、**Plates**、**Browse Plates** の順に選択します。Plate Browser ダイアログ ボックスが表示されます。
3. **Plate** スクロール リストで表示するプレート番号を選択、または入力します。
4. ダイアログ ボックスで表示するウェルを選択します。選択したウェルに割り当てられている反応物または生成物までワークシートをスクロールします。

Structure	Reactant	Well Plate	Well Row	Well Column
 30 C ₂ H ₄ O ₂ S		24	2	1 7
 31 C ₃ H ₅ NaO ₂		25	2	1 8
 32 C ₂ H ₃ KO ₂				
 33 C ₆ H ₁₀ O				
 34 C ₄ H ₈ O ₂				



関連構造式の表示

実験を閲覧すると、どの反応物が生成物になったか、または一定の反応物からどの生成物が生じたかを参照できます。

関連構造式を表示するには、次の操作を行ってください。

1. Experiment Reactant または Experiment Product シートの行を 1 つ選択します。
2. **ChemOffice16** メニューから **CombiChem**、**Highlight Related Records** の順に選択します。
Experiment Reactant および Experiment Product シート上の関連レコードの色が強調して表示されます。
3. (オプション) すべての行から強調表示を取り除くには、**ChemOffice16**、**CombiChem**、**Highlight**、**Unhighlight All** の順に選択します。

標準値の設定

CombiChem では、特定の情報を各ワークシートで表示する方法や可否を選択できる複数のオプションを用意しています。**ChemOffice16** メニューから **CombiChem**、**Preferences** の順に選択し、これらのオプションから選択します。

Add Instructions to Every Sheet. 標準で、各 CombiChem ワークシートの行 1 には指示が含まれます。このオプションの選択/選択解除を切り替えると、作成する新しいシートごとに表示/削除を切り替えることができます。

Show Full Reaction for each product. 標準では、反応矢印および生成物が各実験ワークシートに表示されます。このオプションを選択すると、新しい各実験ワークシートに反応全体を表示します。

Discard duplicate reactions in experiment. このオプションを選択すると、実験の重複した反応がすべて破棄され、固有の反応のみが保存されます。

Assign Compounds From. プレーートの行と列を割り当てます。**Left to Right** を選択すると、ウェル番号を行ごとに割り当てます (1-1、1-2、1-3 など)。**Top to Bottom** を選択すると、ウェル番号を列ごとに割り当てます (1-1、2-1、3-1 など)。

Plate Column Label. 数字またはアルファベットによるラベルをプレートの列に割り当てます。

Plate Row Label. 数字またはアルファベットによるラベルをプレートの行に割り当てます。

ChemScript は、化学情報処理のためのソフトウェア開発キット (SDK) です。PerkinElmer 製品で広く使用されているプログラミング アルゴリズムが含まれます。ソフトウェア開発者であれば、ChemScript を適用して ChemOffice アプリケーションで使用する独自のスクリプトを作成できます。

ChemScript ライブラリ内のすべてのサンプル スクリプトは、Python および C#/.NET で利用できます。これらの言語のどちらかを習得していれば、サンプル スクリプトを容易に理解できるでしょう。Python にも C#/.NET にもなじみがなければ、章末に記載の Web サイトや書籍を参照することをお勧めします。

ChemScript は Python と C#/.NET に対応していますが、ここでは Python を使って ChemScript の説明を行います。Python は広く利用されているフリーのプログラミング言語です。

ChemScript の利点

ChemScript によって、化学データの扱いの柔軟性が大きく高まります。ChemScript を使うことで、自身で作成した規則を用いたデータの変更、表示、移動が可能になります。¹

以下に一般的な使い方をいくつか示します。

塩の分離と除去

描画した構造式から塩フラグメントを識別して除去し、純粋化合物を登録できます。

標準コード

一連の構造式を表す標準コードを生成し、そのコードを使ってデータの重複を検出します。

ファイル形式の変換

構造式または反応データ ファイルの形式を変換します。

特性の生成

ChemDraw の Struct=Name または物理的特性の生成機能を実行します。

共通骨格の配向

確立された共通の部分構造式の配向規則に基づいて、構造の標準配向を適用します。

二次元構造式の生成 (2D SDG) および整形

ChemDraw のアルゴリズムを使って、座標情報を用いないで結合テーブルから新たな二次元構造を生成し、既存の二次元構造を整形します。

ChemScript のしくみ

ChemScript の最も根本的な使用法は、あるソースからデータを読み込み、スクリプトを使ってそのデータを変更し、変更したデータを別の場所へ書き込むことです。データの取得や書き込みは、ほぼどのようなデータベース、

¹ChemScript は、1 日に最大 10,000 件のデータレコードを変換できます。処理能力をさらに高めるには、ChemScript Ultra が必要になります。詳細については、PerkinElmer 社にお問い合わせください。

ファイル、アプリケーションとの間でも可能です。

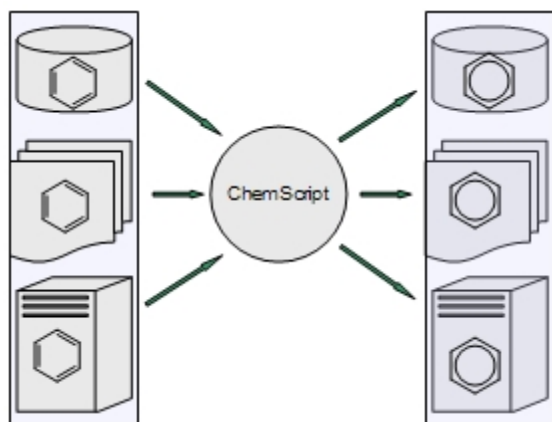


図 13.1: ChemScript によるスクリプトは、あるソースからデータを取得し、変更して、その結果を別の場所に出力することができます。

データがどのように変更されるかは、完全にそのスクリプト次第です。スクリプトでは、データの削除、新しいデータの計算や追加、既存データの編集が可能です。データとしては、テキストか構造型、またはその両方が使えます。

ChemScript のスクリプトは、他のあらゆる Python スクリプトや .NET プログラムと同じように、Windows のコマンド ラインまたは任意の開発環境を使って実行できます。

操作の開始

標準設定では、ChemOffice のインストール時に、ChemScript と Python 3.2 がローカル コンピュータにインストールされます。インストール終了後、ChemScript の操作に慣れるために、以降で述べる簡単な動作確認を行うことをお勧めします。

ChemScript ファイルの編集には、利用可能な多くのプログラミング ツールの 1 つを使うことをお勧めします。Python インストールには、こうしたツールの 1 つである IDLE が含まれています。IDLE の詳細については、IDLE のメインメニューにあるオンライン ヘルプを参照してください。


IDLE の起動

Windows のスタート メニューから**すべてのプログラム、Python 3.2、IDLE (Python GUI)**の順にクリックします。Python の起動後、Python のシェルが IDLE で開き、先頭行に Python のバージョン (例:3.2) と IDLE のバージョン (例:1.2) が示されます。プロンプトも「>>>」のように表示されます。

ChemScript ライブラリのロード

コマンド プロンプトに次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
import ChemScript16
```

 **注:** このコマンドでは、大文字と小文字が区別されます。

“Welcome to CS ChemScript” というメッセージの後にコマンド プロンプトが表示されます。

ChemScript のヘルプ

IDLE 内では、任意の ChemScript クラスの説明を参照できます。たとえば、次の行を入力すると、ChemScript の Atom クラスに関するヘルプが表示されます。

```
help(Atom)
```

ヘルプ情報は、次のようなメッセージで始まります。

```
“Help on class Atom in module ChemScript16:”
```

SMILES データの入力

ChemScript をテストして、正しく動作していることを確認することもできます。ChemScript の一般的な使用法の 1 つは、関数を SMILES 文字列に適用することです。たとえば、変数に SMILES 文字列を割り当てることができます。次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
myMol = Mol.LoadData('C1CCCC1C')
```

次のメッセージが表示されます。

```
Open molecule successfully: chemical/x-smiles (分子のオープンに成功: chemical/x-smiles)
```

化学名の表示

変数を使用して、化学名を表示できるようになりました。たとえば、コマンド プロンプトに次の行を入力して、Enter キーを押します。

```
myMol.chemicalName()
```

methylcyclohexane という行が表示されます。

原子数のカウント

文字列内の原子数をカウントするには、次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
myMol.CountAtoms()
```

chemical/x-smiles 形式で明示された構造式 'C1CCCC1C' における原子の個数、7 が返されます。

IDLE の終了

終了するには、次の行を入力し、Enter キーを押します。

```
exit()
```

exit コマンドの実行に関するメッセージが出たら確認を行います。Python の IDLE が終了します。

基本操作ガイド

ChemScript には、自作スクリプトの開発と使用に役立つ基本操作ガイドが含まれています。このガイドを開くには、**スタート**、**すべてのプログラム**、**ChemOffice2016**、**ChemScript 16.0**、**Getting Started** の順にクリックします。

このドキュメントには、ChemScript のオブジェクトと機能、それに Python についての簡単な説明と、インストールされたサンプルの概要が記されています。

スクリプトの編集

IDLE またはその他の開発環境を使えば、ChemOffice に付属するスクリプトの編集や、独自のスクリプトの作成ができます。スクリプトには、その開発形態に関係なく、次のコマンドを含める必要があります。

```
from sys import *
from os import *
from os.path import *
from ChemScript16 import *
```

最初のコマンドは Python システムをインポートします。2 番目と 3 番目のコマンドは、オペレーティング システムのモジュールをインポートします。最後のコマンドは、すべての ChemScript 関数をインポートします。これらのコマンド行さえ記述すれば、スクリプトの残り部分はすべて開発者に委ねられます。

ChemScript API の紹介

ChemScript には、ChemScript API リファレンス ガイドが付属します。このガイドを表示するには、**スタート、すべてのプログラム、ChemOffice 2016、ChemScript 16.0、API Reference** の順にクリックします。そこには、ChemScript クラスに関するリンクと情報が記されています。

ChemScript のオブジェクト モデルは、次に示す 2 つの基本的なレベルの機能で構成されています。

ChemScript クラス

最上位レベルにあるこの API は、次の 4 つのクラスで構成されます。

原子

元素、電荷、隣接原子との結合、3D 座標（使用できる場合）、立体化学など。

結合

結合された原子、結合次数など。

分子 (Mol)

1 個以上の分子フラグメントを表すことができる化学結合テーブル。このクラスには、ファイル I/O 機能とその他の高度な化学機能（立体化学など）も含まれます。

反応 (Rxn)

1 つ以上のステップからなる化学反応。

関数とアルゴリズム

2 番目のレベルは、特定のビジネス ニーズに合わせて変更可能な、コアとなる一連の高水準機能群で構成されます。いくつかの例を次に示します。

テンプレートに基づく正規化

化学データに含まれる官能基を標準的な形式で表します。

テンプレートに基づく生成物の生成

反応物のセットと一般的に定義された反応から生成物を自動生成します。たとえば、アミンとカルボン酸塩の反応がこれに該当します。

部分構造の識別とマッピング

部分構造を持つ分子を原子ごとに比較一致した場合は、部分構造内の原子と分子内の原子の原子ごとの対応を示すマップが得られます。

塩の除去

塩フラグメントの定義済みリストに基づいて、反応から塩を除去します。

構造の方向

確立された一般的な骨格の方向に基づいて、構造の標準的な方向を適用します。

二次元構造式の生成と整形

ChemDraw ベースのアルゴリズムを使って、新規の構造式の生成を行ったり、プログラムによる化学データの変更後に利用します。

標準コード

固有の識別コードを化学構造式から生成します。

ファイル形式の変換

PerkinElmer の製品でサポートされているすべてのファイル形式 (CDX、CDXML、MOL、CHM、SKG、SMILES など) でファイル データの読み取りまたは書き込みを行います。

化学名と構造式の変換¹

ChemStruct=Name 機能を使って、化学名から構造式を生成したり構造式から化学名を生成したりします。

分子力学

MM2 力場を使って分子構造式を最適化します。

ChemScript API オンライン

PerkinElmer では API オンラインのドキュメントも提供しています。API の情報は sdk.cambridgesoft.com で参照できます。

チュートリアル

ここでは、いくつかのサンプル スクリプトを使って、ビジネス ニーズを満たすカスタム コードの開発方法を説明します。ここで取り上げるスクリプトの多くは、ChemScript のサンプル ディレクトリに入っています。デフォルトでは、ChemOffice 2016 補助ファイルがインストールされている次の場所がこのディレクトリにあたりません。

Windows 7 および 8 の場合:

C:\ProgramData\PerkinElmer\Informatics\ChemOffice2016\ChemScript\Examples\

紙面の都合上、このマニュアルではスクリプトの掲載や Python の説明は行いません。ただし、使い方に応じて変更や拡張ができるように、サンプル コードの利用法には簡単に触れています。このチュートリアルを読む際に

¹PerkinElmer 社とのライセンス契約によって利用できる高度な機能です。

は、該当するコードを IDLE で表示し、必要であれば編集を加えて各サンプルの動作を確認することをお勧めします。IDLE の詳細については、239 ページの“操作の開始”を参照してください。

例 1: 構造式の自動整形

このサンプル スクリプトは、複数の ChemDraw ファイル内の構造式をまとめて整形します。ChemDraw のものと同じ整形機能が使われています。該当するスクリプトは、Example.001/script.py ディレクトリにあります。このスクリプトは、ソース ディレクトリから CDX 構造式ファイルを読み取り、それぞれの構造式に整形機能を適用して、変更後のファイルを出力ディレクトリに書き出します。元のファイルは変更されずに残ります。

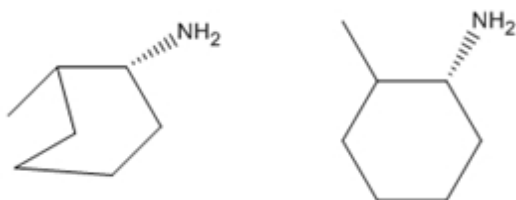


図 13.1: この構造式整形スクリプトは、構造式ファイルの内容（左）を読み取り、整形された構造式ファイル（右）を新たに作成します。

この例では、CDXML 形式を使用します。MDL MOL などの形式も適用できます。また、ChemScript には、特定のファイル形式を使ったデータの読み取りと書き込みを行わせることも可能です。

例 2: SD ファイルの作成

この例では、既存の CDXML ファイルから SD ファイルを作成する方法を示します。該当するスクリプトは、Example.002/script.py にあります。最初に、それぞれに化学構造式を持つ CDXML ファイルのリストがあります。ファイルのリストは、この ChemScript スクリプト内にハードコーディングされています。このスクリプトを実行すると、SDFFileWriter メソッドによって、それらの構造式すべてを含む SD ファイルが作成されます。

例 3: CDXML ファイルのリスト作成

この例は、SD ファイルの読み取りと CDXML ファイルのリストの書き込みを行う方法を示しています。ソース ファイルは、Example.003/script.py にあります。

例 4: SD ファイルのフィルタ処理

このサンプルは、atomByAtomSearch メソッドを使用して、“原子単位”で部分構造を検索する簡単な ChemScript アプリケーションの作成例です。このプログラムは、SD ファイルを 1 つ読み込み、構造式にフィルタを適用して、フェニル基の有無によって 2 つの SD ファイルのどちらかに出力します。また、SMILES 文字列形式の化学データを読み取る方法もわかります。詳細については、Example.004/script.py を参照してください。

例 5: 標準コードの計算

このサンプル スクリプトは、2 つの SD ファイルの両方に含まれる構造の有無を構造式の標準コードに基づいて検査します。出力は、重複する構造式を除いた新たな SD ファイルです。詳細については、Example.005/script.py を参照してください。

このサンプルはまず、構造ごとに標準コードを求めます。同じ化学構造が異なる形態で表現されていても標準コードは変わらないため、このコードを使って 2 つの構造が化学的に同等かどうかを確認できます。

この例では、Python のディクショナリも使用します。これは連想配列です。ディクショナリによって、キーが値に関連付けられます。このディクショナリは、ある標準コードが既出であるかどうかの判断に使用されます。

このスクリプトでは、SD ファイルを読み取るために代替のループ構造を用いています。

標準コードは永続的に残しておくものではありません。その表記は、ChemScript のバージョンごとに変更される可能性があるためです。

例 6: 構造式オーバーレイ

このスクリプトでは、ChemScript の構造式オーバーレイ機能を取り上げています。化学的に類似した 2 つの構造を重ね合わせるために、骨格構造ファイルを使用します。このスクリプトはまず、共通の骨格部分構造を含む SD ファイル内にある構造を調査します。続いて、それらの構造の向きが骨格に対して同じになるように整列します。詳細については、Example.006/script.py を参照してください。

 **注:** オーバーレイの機能は、三次元の構造式の整列にも使えます。

例 7: 反応変換

これは、反応変換のわかりやすい例です。具体的には、分子の変換を規定する反応を描画し、その変換を一連の構造式ファイルに適用することができます。

このチュートリアルに必要な全ファイルは、Example.007 ディレクトリにあります。transform1.cdxml ファイルには、変換を規定する反応が用意されています。input.sdf ファイルには、変換の対象となるすべての構造式が含まれています。



図 13.2: 変換ファイルは、どのような変換がソース構造に適用されるかを定義している

このスクリプトは、変換ファイル内に反応物として記されたニトロ基を持つ構造式を入力ファイルから探し出します。構造式が見つかった場合、そのニトロ基が生成物に示された形に変換され、構造式全体が新しいファイルにコピーされます。次の図は、その一例を示しています。

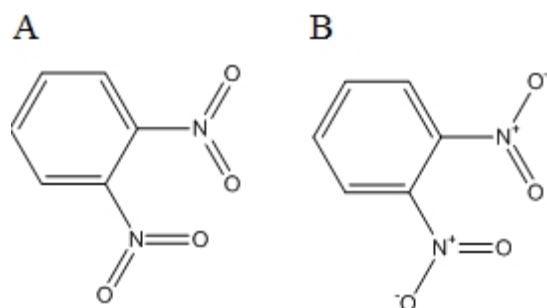



図 13.3: A) 変換の適用前、B) 変換後

検索の基準に一致しない構造式は無視されます。

例 8: 簡単な塩の除去

このプログラムでは、SD ファイルを読み取り、塩の構成要素を識別し、存在する場合にそれらを除去し、2 つの SD ファイルを出力します。構造式の出力ファイルには、塩の構成要素を除いた元の構造式が格納され、塩の出力ファイルには、除去された塩の構成要素が元の構造式への参照情報と共に格納されます。詳細については、Example.008/script.py を参照してください。

 **注:** この例では、PerkinElmer 社によるデフォルトの塩セットを使用しています。ただし、独自の塩テーブルを定義して、どの化学物質を塩と見なすかを指定することも可能です。

参考資料

Python や C#/.NET の習得に使える資料は、数多くあります。そうした多数の書籍および Web サイトのほんのいくつかを次に示します。

書籍

Python

- 『Beginning Python: From Novice to Professional』 Magnus Lie Hetland 著
- 『Dive into Python』 Mark Pilgrim 著
- 『Learning Python』 Mark Lutz、David Ascher 共著。これは、入門/中級者レベルの学習に適した手引き書兼参考書です。
- 『Python in a Nutshell』 Alex Martelli 著。この書籍は、Python の手短な入門書であり、とても参考になります。

C#/.NET

- 『C# in a Nutshell』 Peter Drayton、Ben Albahari、Ted Neward 共著
- 『Pro C# with .NET 3.0』 Andrew Troelsen 著
- 『C# Essentials』 Ben Albahari、Peter Drayton、Brad Merrill 共著
- 『C# 3.0 Cookbook』 Jay Hilyard、Stephen Teilhet 共著

Web サイト

Python

Python の詳細については、Web サイト <http://www.python.org> を参照してください。これは、プログラミング言語 Python の公式サイトです。

.NET

.NET の詳細については、<http://msdn.microsoft.com> を参照してください。

検索構造式

検索とは、データベースに格納されている情報を検索することです。Web ブラウザを使ってインターネットを検索したことがある場合は、簡単な検索を実行していたこととなります。

検索構造式は、化学データベースの検索に使うパラメータです（検索式が有効になるようにデータベースに構造式が含まれていることが必要です）。検索構造式に結合属性と原子属性を含めて、検索結果のリストを絞ったり広げたりすることもできます。次に、2 つの検索構造式の例を示します。

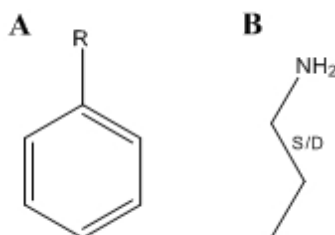


図 14.1: 2 つの構造式検索の例。A) 結果には、“R” によって指定された位置に結合した任意の原子が含まれる、B) 結果には、“S/D” で指定された位置にある単結合または二重結合のいずれかが含まれる

検索式を実行するには、まず ChemDraw で検索構造式を描画します。次に、ChemFinder などのデータベース アプリケーションにその構造式を入力します。アプリケーションにより、指定した 1 つまたは複数のデータベースが検索され、検索式の結果が返されます。

検索における制限

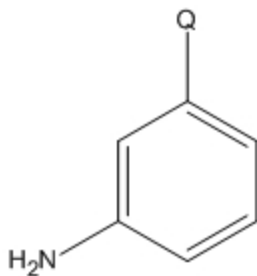
返される検索結果は、複数の要因によって決まります。希望どおりの結果を取得するには、まず、描画する構造式で実行する検索式を正確に表現することが必要です。たとえば、検索構造式が、芳香族構造式のどの炭素原子も環の一部にならないことを要求した場合は、使用した検索システムに応じて、結果が返されないか、エラーが返される可能性があります。

使用する検索アプリケーションが検索式に影響することもあります。アプリケーションが検索構造式またはデータベース内の構造式を正確に解釈しない場合は、不正確な結果を受け取る可能性があります。

総称ラベル

総称ラベルは、不特定の結合を表します。任意の原子、官能基、構造的特徴のいずれにもなることができます。検索を実行すると、使用した総称ラベルのタイプと検索構造式でのその位置に基づいて、構造式の検索式が行われます。検索結果には、検索構造式と一致するレコードが返されます。

たとえば、次の検索構造式では、文字 “Q” を使って、指定した位置に水素原子でも炭素原子でもない原子が存在しなければならないことを示しています。



他の総称ラベルを使用して、その他の検索条件タイプを示すことができます。ChemOffice がサポートする総称ラベルは次のとおりです（すべて、化学的に意味のあるものとして認識されます）。

- **A**: 水素以外を表します。
- **M**: 金属を表します。
- **Q**: 水素でも炭素でもない原子を表します。
- **X**: 任意のハロゲン化合物を表します。
- **R**: 制限なし、つまり任意の種類の 1 個以上の結合された原子を表します。

構造式に総称ラベルを追加するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- 原子をダブルクリックしてテキスト ボックスを開き、ニックネームを入力します。
- 原子を右クリックして、コンテキスト メニューの **Insert Generic Label** をポイントし、サブメニューで挿入するラベルをクリックします。


総称ニックネームのホットキー

他のニックネームと同じように、総称ニックネームにもホットキーを割り当てることができます。ニックネームにホットキーを割り当て方法の詳細については、[39 ページの“ホットキーのカスタマイズ”](#)を参照してください。

総称ニックネームの定義


化学的に意味を持つものとして認識される総称ニックネームは、ChemDraw Items フォルダ内の Generic Nicknames ファイルに一覧表示されています。

総称ニックネーム ファイルを編集するには、Generic Nicknames ファイルをテキスト エディタで開き、必要な変更を加えます。ファイル内の例を参考にして、正しい形式になるようにしてください。

 **注**: 総称ニックネームが付けられた構造式を検査すると、構造式に可変の置換基が含まれているためメッセージが表示されます。このメッセージを無視すると総称ニックネームは無視され、総称ニックネームを含んでいる原子ラベルが選択されなかったものとして、化学式や質量などが報告されます。

Reaxys

Reaxys は、合成化学者と医化学者向けに設計された化学分野の Web ベース検索エンジンです。Reaxys データベースには、化学的物性、構造式、反応、および実験データが収録されています。ChemDraw と ChemDraw for Reaxys® を併用すれば、検索構造式を描画して Reaxys データベースで検索することができます。

 **注:** Windows 版の場合は、お使いのシステムに Reaxys Structure Editor プラグインと ChemDraw アプリケーションまたはプラグインをインストールする必要があります。

Reaxys は、A、M、Q、X、R だけでなく、これら以外の一般的な原子もいくつか認識します。

構造式に Reaxys 総称ラベルを追加するには、次の操作を行ってください。

- 原子を右クリックし、コンテキストメニューを **Insert Generic Label**、Reaxys の順にポイントして、挿入するサブメニューのラベルをクリックします。

次の表にラベルとその意味を示します。

ラベル	意味
AH	任意または H
MH	金属または H
QH	任意、炭素または H 以外
XH	ハロゲンまたは H
G	Unspecified
GH	未指定または H
G*	未指定、閉環を許可
GH*	未指定、閉環を許可または H
ACY	非環式
ACH	非環式または H
ABC	カルバ環式
ABH	カルバ環式または H
AYL	アルキニル
AYH	アルキニルまたは H
ALK	アルキル
ALH	アルキルまたは H
AEL	アルケニル
AEH	アルケニルまたは H
AHC	ヘテロ非環式
AHH	ヘテロ非環式または H
AOX	アルコキシ
AOH	アルコキシまたは H

ラベル	意味
CYC	環式
CYH	環式または H
CBC	炭素環式
CBH	炭素環式または H
ARY	アリル
ARH	アリルまたは H
CAL	シクロアルキル
CAH	シクロアルキルまたは H
GEL	シクロアルケニル
GEH	シクロアルケニルまたは H
CHC	複素環式
CHH	複素環式または H
HAR	ヘテロアリール
HAH	ヘテロアリールまたは H
CXX	炭素なし
CXH	炭素なしまたは H

原子属性

原子属性によって、原子の部分で許される構造的特徴を決めることができます。たとえば、炭素原子が環の一部であること、少なくとも 2 つの結合を持つこと、結合を持たないこと、特定の同位体であることなどを指定できます。

原子属性の割り当て

構造式内の選択された原子に属性を割り当てるには、次の操作を行ってください。

1. 1 個以上の原子を選択します。
2. Atom Properties ダイアログを開くには、次のいずれかの操作を行ってください。
 - 右クリックして、Atom Properties をクリックします。
 - Structure メニューの Atom Properties をクリックします。
 - ホットキー「/」を押します。
3. Atom Properties ダイアログで、選択した原子と関連付ける属性を選びます。
4. OK をクリックします。

検索式標識

以下のように、検索標識に、構造式に割り当てた原子属性が表示されます。複数の属性が割り当てられている場合、それぞれの原子の横に属性の標識が表示されます。

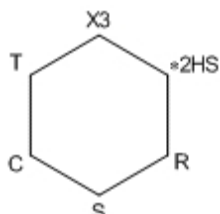


図 14.2: この構造式は、割り当てることのできる有効な原子属性を複数示している

各標識は以下のとおりです。

- * - 置換基:Free Sites (フリー サイトの数が続きます)
- U - 置換基:Up to (置換基の最大数が続きます)
- X - 置換基:Exactly (置換基の数が続きます)
- H - 暗黙的な水素。254 ページの “暗黙的な水素” を参照してください。
- R - 環結合の数
- S - 不飽和結合
- C - 反応で変化する
- T - 反応立体
- L - 変換
- (なし) - 異常原子価

原子または結合の標識の表示

置換基検索属性を除いて、文字は対応する属性が適用されていることを示しますが、属性の値は示しません。検索属性の設定値を確認するには、次の操作を行ってください。

1. 原子を選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - 右クリックし、原子をポイントして、適切な属性をポイントします。
 - **Structure** メニューの **Properties** をクリックし、**Atom Properties** タブで設定を確認します。

原子または結合に検索標識を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 原子または結合を右クリックします。
2. コンテキスト メニューの **Show Query Indicator** をクリックします。

構造式の標識の表示

構造式の検索標識を表示するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. 右クリックして、コンテキスト メニューの **Atom** または **Bond** の **Show Query Indicator** をクリックします。

検索標識の配置

検索標識を配置するには、ドラッグするか、新しい場所の数値を入力します。

1. 標識を右クリックして、**Position** をクリックします。Position Indicator ダイアログが表示されます。
2. 適切な Position オプションをクリックして、値を入力します。

配置

入力する値

原子または結合の中心から標識の中心へ 角度（度数）または時計（時間）

原子または結合の中心から標識の左下へ 縦横の移動距離

指定した座標位置 水平方向、垂直方向の絶対座標値

検索標識の非表示

標識を非表示にするには、次の操作を行ってください。

1. 標識を右クリックします。
2. コンテキスト メニューの **Hide Indicator** をクリックします。

原子属性の削除

1 つの原子からすべての属性を削除するには、次の操作を行ってください。

1. 原子を選択します。
2. **Structure** メニューの **Atom Properties** をクリックします。
3. **Use Defaults** をクリックします。

1 つの原子から特定の属性を削除するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- 原子を右クリックします。コンテキスト メニューの **Atom Properties** をクリックし、削除する属性を選択します。
- **Structure** メニューの **Atom Properties** をクリックします。削除する原子属性をクリックします。
- 検索標識を表示した状態で、消しゴム ツールを使用して検索標識をクリックします。

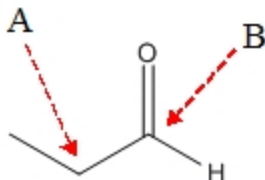
原子属性のオプション

次に、原子に割り当てることができる属性について説明します。

置換基

置換基は、任意の結合次数の結合によって接続された水素原子以外の原子として定義されます。Substituents 属性で、選択した原子に結合できる置換基の数が指定されます。

たとえば、下図のカルボニル炭素 (B) は置換基数が 2 となり、アルファ炭素 (A) およびアルデヒド酸素と結び付いています (水素原子はカウントされません)。アルデヒド酸素には置換基が 1 つしかありません。



置換基数に関わる原子属性を使用して、対象となる構造式内の原子の結合数を指定できます。これには検索構造式内に既に描画されている結合も含まれます。


置換基のオプションは以下のとおりです。

Unspecified. 標準値です。ターゲット データベースによって検索内容が決まります。データベースの中には、選択した原子について、すべての置換基と結び付く化合物を検索するものや、描画した置換基と結び付く化合物のみを検索するもの (DARC など) があります。

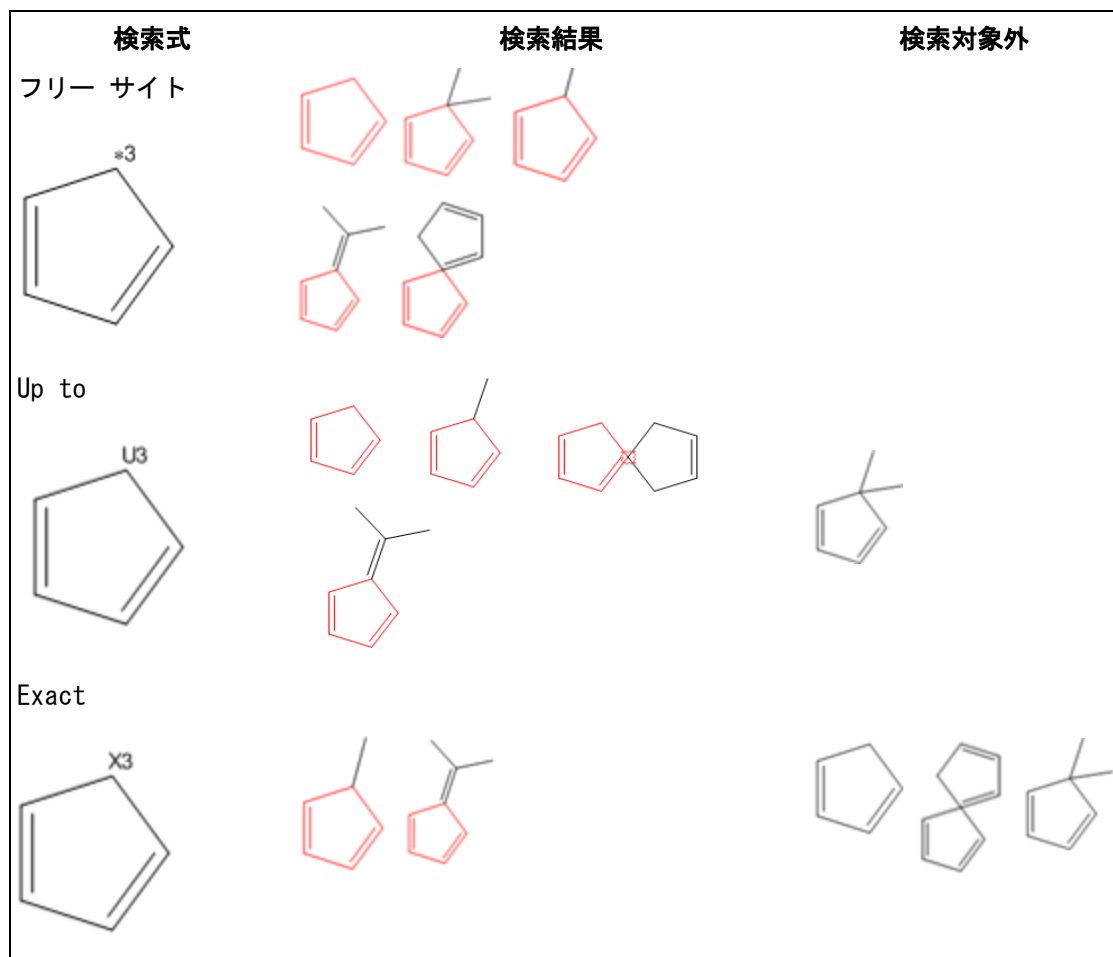
フリー サイト. 指定された置換基数に描画した結合の数を加えた数までの範囲の置換基が選択中の原子に含まれる化合物を検索します。この値が 0 の時は、描画通りの置換基数を検索します。また、検索ツールバーの Free Sites 記号を使ってフリー サイトを適用することもできます。フリー サイトや不完全な置換では、原子に含めることができる置換基の最大数を定義します。不完全なカウントで使用する数字には、検索構造式で表す置換基を含める必要がありますが、フリー サイトのカウントではその必要はありません。

Up to. 選択した原子が、指定された数までの数の置換基を持っているような化合物を検索します。

Exactly. 選択した原子が、最大 15 個までの範囲で、指定されたのと同じ数の置換基を持っているような化合物を検索します。

 **注:** コンテキスト メニューの **Substituents** オプションを使用して、最大「4」までの置換基数を指定できます。最大「15」までの置換基数を指定するには、コンテキスト メニューから **Atom Properties** オプションをクリックします。フリー サイト ツールを選択した状態でクリックすると置換基数が最大「9」まで増え、Alt キーを押しながらクリックすると置換基数が減ります。

次に例を示します。



暗黙的な水素

暗黙的な水素とは、水素原子またはその結合が含まれているが表示されない水素原子のことです。明示的な水素およびその結合は表示されます。

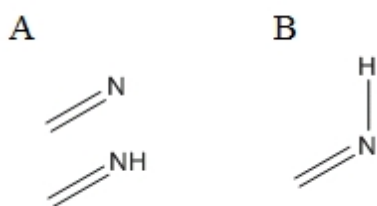


図 14.3: A) 暗黙的な水素の例、B) 明示的な水素の例

Implicit Hydrogens 属性は、選択した原子に暗黙的な水素原子が付加できるかどうかを指定します。暗黙的な水素原子が禁止されている場合、その原子の全原子価は非水素原子との結合で満たされていなければなりません。

Allowed. 標準値です。選択中の原子に水素が結びついているかどうかを考慮せずに化合物を検索します。

Not allowed. 選択中の原子に追加の水素が結びついていない化合物を検索します。

環結合の数

Ring Bond Count は、どんなサイズの環でも、その一部になっている原子に付加されている結合の数を指定します。単純な場合、この数は原子が存在できる環の最大数になります。

Any. 標準値です。選択した原子が、どのようなタイプの環にでも属することができる化合物およびどのような環にも属さない化合物を検索します。

No ring bonds. 選択中の原子が非環式になっている化合物を検索します。

As drawn. 選択した原子が、描画されたのと同じタイプと数の環に存在する化合物を検索します。

Simple ring. 選択した原子が、1つの環のみに属する化合物を検索します（原子には2つの環結合があります）。

Fusion. 選択した原子が、環の縮合部分に存在する化合物を検索します（原子には3つの環結合があります）。

Spiro or higher. 選択中の原子がスピロ結合以上の結合に属する化合物を検索します（原子には4つ以上の環結合があります）。

不飽和結合

Unsaturation 属性は、選択した原子に多重結合が結び付いているかどうかを指定します。

Unspecified. 標準値です。原子に多重結合が結び付いているかどうかを考慮せずに化合物を検索します。

Must be absent. 選択中の原子に多重結合が結び付いていない化合物を検索します。

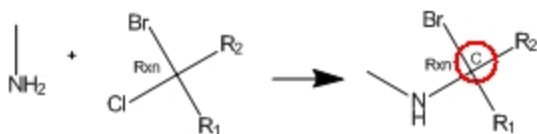
Must be present. 選択した原子に少なくとも1つの多重結合（二重結合、三重結合または芳香族結合）が結び付いている化合物を検索します。

反応による変化

Reaction Change 属性は、選択した原子に、反応後において変化が起きるかどうかを指定します。この属性は、化学反応を含むデータベースを検索する場合にのみ意味を持ちます。ChemFinder では、生成物の原子のみが検査されます。反応物に関して立体指定は無視されます。

May be anything. 標準値です。選択した原子に反応後に何らかの変化が起きるかどうかに関わりなくすべての化合物を検索します。

Must be as specified. Atom Properties ダイアログの反応中心属性で指定されたとおり正確に、選択した原子において変化する反応すべてを検索します。



反応立体

Reaction Stereo 属性は、選択した原子が反応の立体中心かどうかを指定します。この属性は、化学反応を含むデータベースを検索する場合にのみ意味を持ちます。

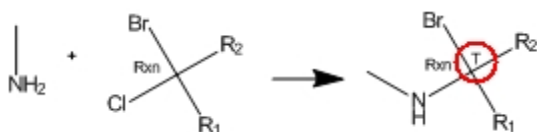


図 14.4: 反応立体標識 (円で囲まれている部分)

Any. 標準値です。選択した原子の立体化学構造に関わらず、すべての化合物を検索します。

Inversion. 反応後、選択中の原子が反転した立体構造を持つ化合物を検索します。

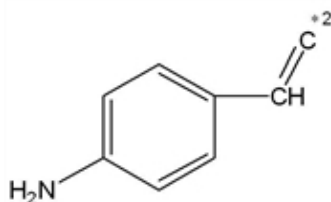
Retention. 反応後、選択中の原子の立体構造が変化しない化合物を検索します。

フリー サイト

フリー サイトを使用すると、結果に含めることができる置換基の最大数を指定できます。ただし、結果内の結合は、表示方法も検索構造式とまったく同じである必要があります。ChemDraw では、フリー サイトに以下のような表記法を使用します。

- *0 (0 フリー サイト)
- *1 (1 フリー サイト)
- *2 (2 フリー サイト)
- *3-*15 (3 ~ 15 フリー サイト)

たとえば、以下のような検索構造式を使用して、結合パターンを維持したままビニル炭素原子で 2 つの置換基を検索するとします。この場合、検索構造式は次のようになります。



結果には以下のようなものがあります。

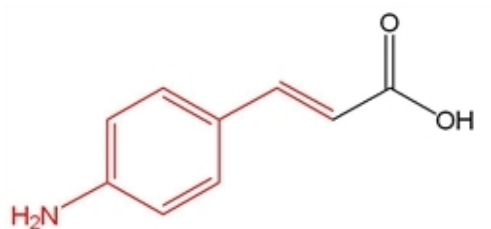


図 14.1: (E)-3-(4-アミノフェニル)アクリル酸

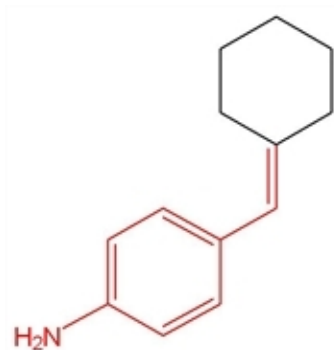


図 14.2: 4-(シクロヘキシリデンメチル)アニリン

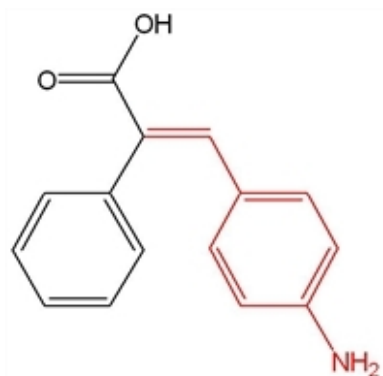


図 14.3: (E)-3-(4-アミノフェニル)-2-フェニルアクリル酸

フリー サイト数を増やすには、次の操作を行ってください。

1. 検索式ツールを表示するには、**View**、**Other Toolbars**、**Query Tools** の順に選択するか、メイン ツール パレットの検索式ツール アイコンをクリックします。
2. クエリ ツール パレットでフリー サイト ツールをクリックします。
3. フリー サイトを適用する原子をクリックします。
4. フリー サイトの数を増やすには、原子をクリックし続けます。

フリー サイトの数を減らすには、Alt キーを押しながら原子をクリックします。

フリー サイトの数は、Atom Properties ダイアログやショートカット メニューを使用して変更することもできます。250 ページの“原子属性”を参照してください。

変換

Translation 属性は、構造式検索と一致するため、また Markush DARC 検索式でデータベースにヒットするために何が必要であるかを指定します。

Equal. 標準値です。特定の条件同士または一般的な条件同士を一致させます。

Broad. 特定の検索原子をデータベース内の対応するスーパー原子に変換します。

Narrow. 検索式のスーパー原子を、データベース内の対応する特定の原子または基に変換します。

Any. 一般条件または特定条件をどのような条件にでも変換します。

詳細については、『Markush DARC ユーザーズ マニュアル』を参照してください。

同位体の存在量

Isotopic Abundance 属性は、任意の場所で核種を指定すると、モノ重ベンゼンとヘキサ重ベンゼンなど異なる同位体化合物の違いを区別することができます。

Unspecified. 標準値です。

Any. ChemFinder では標準値と同じになります。標準値が異なる他のシステムとの互換性を実現するために用意されています。

Natural. 同位体で置き換わっていない核種を示します。

Enriched. 同位体で置換された核種と同位体で置き換わっていない核種の混合を示します。

Deficient. 核種存在量が自然比以下であることを意味する減損ラベルを示します。

Nonnatural. 同位体置換された核種を示します。基本的に化合物の分子はいずれも、表示された核種しか持っていません。


異常原子価

Abnormal Valence 属性は、選択した原子が正常数以外の原子価を持てるかどうかを指定します。各元素の“正常な”原子価は、ChemDraw Items フォルダの Isotopes Table ファイルに定義されています。

 **注:** Abnormal Valence 原子属性に標識は表示されません。

Not allowed. 標準値です。選択した原子が正常な原子価のみを持つ化合物を検索します。Check Structure When Copying to Clipboard or Exporting がオンになっている場合は、原子価の異常を警告するエラー メッセージが表示されます。

Allowed. 特定の原子価が描画されている化合物を検索します。

 **注:** Abnormal Valence が許可されている場合は、Check Structure コマンドを実行しても、選択した原子の原子価が無効であることを知らせる Invalid Valence メッセージは表示されません。

結合属性

割り当てる各属性の結合の横に標識が表示されます。

結合属性の割り当て

結合属性を定義するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式内の 1 つまたは複数の結合を選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - 右クリックしてコンテキストメニューを開き、**Bond** をポイントし、目的の属性をポイントして、必要なオプションを選択します。
 - **Structure** メニューの **Bond Properties** をクリックします。**Bond Properties** タブで、ドロップダウンリストから属性を選択し、**OK** をクリックします。
 - 結合をポイントしてホットキー “/” を押します。Bond Properties ダイアログが表示されます。
3. Bond Properties ダイアログで、選択した原子に関連付ける属性を選択します。**OK** をクリックします。

詳細については、[251 ページの “検索式標識”](#) を参照してください。

次の標識が用意されています。

標識	結合検索式属性
Any	260 ページの “結合タイプ” : Any
S/D	260 ページの “結合タイプ” : 単結合または二重結合
D/A	260 ページの “結合タイプ” : 二重結合または芳香族結合
S/A	260 ページの “結合タイプ” : 単結合または芳香族結合
Rng	260 ページの “形状” : 結合は環の一部である。
Chn	260 ページの “形状” : 結合は鎖の一部であり、環の一部ではない。
R/C	260 ページの “形状” : 結合は環または鎖の一部である可能性あり。
Rxn	261 ページの “反応の中心” : 結合は反応中心の一部である。

結合属性の表示

Reaction Center 検索属性の記述子は、属性が適用されていることを示しますが、属性の値は示しません。検索結合属性の設定値を確認するには、次の操作を行ってください。

1. 結合を選択します。

2. 次のいずれかの操作を行ってください。

- 右クリックしてコンテキストメニューを開いて **Bond Properties** をポイントし、属性を選択します。
- **Structure** メニューの **Bond Properties** をクリックします。

結合属性の削除

1 つ以上の結合から検索属性をすべて削除するには、次の操作を行ってください。

1. 結合を選択します。
2. **Structure** メニューの **Bond Properties** をクリックします。
3. **Use Defaults** をクリックします。

特定の結合の属性を削除するには、次の操作を行ってください。

1. 結合を選択します。
2. 次のいずれかの操作を行ってください。
 - 右クリックしてコンテキストメニューを開いて該当する属性をポイントし、削除する属性をクリックします。
 - **Structure** メニューの **Bond Properties** をクリックし、削除する結合属性をクリックします。

結合属性のオプション

次に、結合に割り当てることができる属性について説明します。

結合タイプ

この属性は、選択した結合の結合タイプを指定します。

標準の結合タイプは、描画した現在の結合タイプ（単結合、二重結合など）になります。

Single (all) および **Dative**. 選択中の結合に対して選択した結合タイプを持つ化合物を検索します。

Double または **Double Bold**. 選択した結合が二重結合になっている化合物を検索します。

Double Either. 選択した結合が二重結合で、シスまたはトランスの立体化学構造を持つ化合物を検索します。

Aromatic. 選択した結合が芳香族結合になっている化合物を検索します。

Tautomeric. 選択した結合が互変異性を持つ化合物を検索します。

Triple. 選択した結合が三重結合になっている化合物を検索します。


Quadruple. 選択した結合が四重結合になっている化合物を検索します。

Any. 選択した結合のタイプに関わらず、任意の化合物を検索します。

S/D. 選択した結合が単結合または二重結合になっている化合物を検索します。

D/A. 選択した結合が二重結合か芳香族結合になっている化合物を検索します。

S/A. 選択した結合が単結合か芳香族結合になっている化合物を検索します。

 **注:** ファイル形式によっては保存できない結合タイプもあります。保存できない結合タイプの場合は、最も近い結合タイプに変換されて保存されます。

形状

Topology 属性は、選択した結合の環の形状を指定します。

Unspecified. 標準値です。形状を考慮せずに化合物を検索します。

Ring. 選択した結合が環の一部になっている化合物を検索します。

Chain. 選択した結合が鎖状化合物の一部になっている（しかし、環の一部ではない）化合物を検索します。

Ring or Chain. 選択した結合が環または鎖の一部になっている化合物を検索します。

反応の中心

Reaction Center 属性は、選択した結合がどのように反応の影響を受けるかを指定します。この属性は、化学反応を含むデータベースを検索する場合にのみ意味を持ちます。

Unspecified. 標準値です。選択した結合が反応に影響されるかどうかに関わらず、化合物を検索します。

Center. 選択した結合が反応に影響されても変化のタイプが指定されていない化合物を検索します。

Make/Break. 選択した結合が反応過程で破壊または形成される化合物を検索します。

Change. 選択した結合の次数が、反応過程で変化する化合物を検索します。

Make & Change. 選択した結合が、反応過程で形成、破壊、または結合次数が変化する化合物を検索します。

Not Center. 選択した結合が反応中心に属さない化合物を検索します。

Not Modified. 選択した結合が反応中心に属するか属さないかに関わらず、その結合次数が変化しない化合物を検索します。

Unmapped. すべての化合物を検索します。

元素リスト

元素リストは、指定された場所で許可される原子のリストです。たとえば、次の検索構造式では、ブromoベンゼン、ヨードベンゼン、クロロベンゼンを結果として返すことができます。次は元素リストの例です。

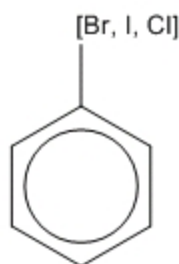


図 14.4: 原子ラベルとして使用する元素リスト

リストに指定する元素は、カンマで区切る必要があります。各カンマと括弧の後のスペースは省略できます。

注: 元素リストには元素記号のみに加え、*D*（重水素）および *T*（三重水素）が含まれる場合があります。

元素リストを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 原子ラベル テキスト ボックスを開きます。

- 「[」を入力した後、元素リストをカンマで区切って入力し（「Cl, Br, I」など）、「]」を入力します。たとえば、[Cl, Br, I] のようになります。
- テキスト ボックスを閉じます。

次の条件に一致する化合物を検索する検索構造式の例を以下の図に示します。



- (A) は、原子が水素以外の任意の原子と一致する必要があることを示します。
- 結合の近くに表示される標識 (B) は、その結合が単結合または二重結合 (S/D) である必要があることを示します。
- 元素リスト (C) は、これらの元素の 1 つが対象となる構造式と一致している必要があることを指定しています。

否定元素リスト


否定元素リストは、リストに含まれている元素が、検索結果では許可されないことを指定します。否定元素リストでは、必ずカンマで元素を区切る必要があります。各カンマと括弧の後のスペースは省略できます。

NOT という語は、すべて大文字で表記し、その後ろに必ずスペースを入れます。NOT の代わりに、マイナス符号を使用することもできます。

次に例を示します。

— NOT[F, Br] — [NOT F, Br] — [-F, Br]

図 14.5: 否定元素リスト

 **注:** 否定元素リストには元素記号のみに加え、D (重水素) および T (三重水素) が含まれる場合があります。

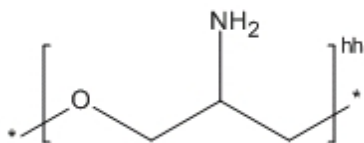
否定元素リストを作成するには、次の操作を行ってください。

- 原子ラベル テキスト ボックスを開きます。
- 「[」を入力した後、「NOT」とスペースを入力します。(例: 「[NOT)。続けて元素リストをカンマで区切って入力し（「Cl, Br, I」など）、その後に「]」を入力します。たとえば、[NOT Cl, Br, I] のようになります。

ポリマー

ポリマーを指定するには、大括弧、中括弧、および丸括弧で、繰り返される構造式または構造式の一部分を囲みます。大括弧属性で、繰り返し単位の意味と向きを指定できます。

次に例を示します。



構造式を括弧で囲むには、次の操作を行ってください。

1. 括弧ツールバーを表示するには、**View**、**Other Toolbars**、**Bracket** の順に選択します。
2. 括弧ツールバーで、対括弧ツールの 1 つを選択します。
3. 括弧を描画するには、括弧で囲む構造式の周囲をクリックしてドラッグします。

これにより、成分の順番、複数グループの反復数、単一繰り返し単位ラベルに標準値が与えられます。

括弧属性の設定

括弧属性を設定するには、次の操作を行ってください。

1. 括弧を選択します。
2. **Structure** メニューの **Bracket Properties** をクリックします。Bracket Properties ダイアログが表示されます。

Flip Type オプションは、はしご状のポリマーの場合のみ表示されます。[267 ページの "Flip Type"](#) を参照してください。

次に挙げる括弧タイプに対しては、括弧の右下に表示されるテキストをカスタマイズできます。

- Component (c#) — Component Order には負でない整数を指定します。指定した整数は "c" の後に（またはゼロを指定した場合には "c" のみが）表示されます。
- Multiple Group (#) — Repeat Count には正の整数を指定します。
- SRU (n) — SRU ラベルには任意のテキストを指定できます。

上記の Bracket Usage タイプでは、テキスト ツールを使用してドキュメント内でテキストを編集することもできます。その他の Bracket Usage タイプで表示されるテキストは編集できません。

括弧の使用法

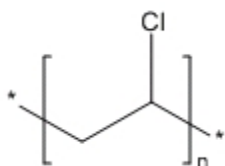
ポリマーは、構造式ベースまたはソースベースのどちらかで表現します。使用する括弧のタイプは、表現方法によって決まります。

構造式ベースのポリマー

構造式ベースの表現では、構造式の一部のみが括弧で囲まれます。また、1 つ以上の結合がそれぞれの括弧と交差します。交差する結合同士は一致し、ポリマーの構造式がより明確になります。

構造式ベースのポリマーは、構造式の一部を SRU (n) タイプの括弧で囲って表します。IUPAC (国際純正および応用化学連合) では、未知のサイズの構造式ベースの表現を示す記号として下付きの “n” を推奨していますが、これはテキスト ツールを用いて編集できます。

ポリマー (塩化ビニル) の構造式ベースの表現を次に示します。



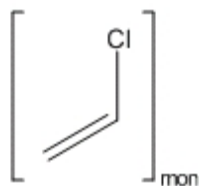
Bracket Usage タイプの “Crosslink(xl)”、“Graft (grf)”、および “Modification (mod)” を使用して、構造式ベースの表現で繰り返し単位のタイプを表すこともできます。

ソースベースのポリマー

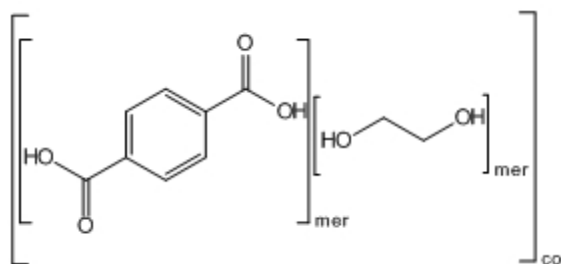
ソースベースのポリマー表現では、個別の化学物質を括弧で囲みます。重合形式はその内容から明らかであるか、または未知です。ソースベースの表現は、出発物質はわかっているが反応生成物の正確な構造式はわかっていない処理を表す際に便利です。

ソースベースの表現は、“Monomer (mon)” 括弧で構造式を囲んで作成します。

ポリマー (塩化ビニル) のソースベースの表現を次に示します。



個々の構成成分が繰り返さない、または他の構成と交互になっていることがわかっている、コポリマーの成分には “Mer (mer)” 括弧を使用できます。次に例を示します。



コポリマーは、繰り返し単位が複数ある物質を表します。一般的には、“Component (co)” の括弧タイプを使用できます。また、“Copolymer, alternating (alt)”、“Copolymer, random (ran)”、および “Copolymer, block (blk)” を使用して、異なる種類のコポリマーをソースベースで表現できます。

括弧タイプ “Mixture, unordered (mix)” は、存在する可能性があるが、必ずしもその存在量が判明していない物質の集合体を表すのに使用できます。括弧タイプ “Component (c)” は、次のように個々の混合要素を示します。

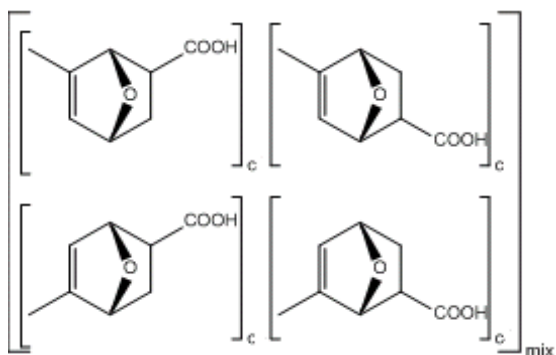


図 14.6: 混合物を示すために使われる括弧

括弧タイプ “Mixture, ordered (f)” は主に製造プロセスを表すために使用され、成分の順番が重要となります。Unordered Mixtures 同様、順番付けられた混合物の個々の元素は “Component (c)” タイプの括弧で囲みます。ただし、Ordered Mixtures の成分にはその順番を表す番号を付ける必要があります。番号は、ラベルの “c” をテキスト ツールで編集して追加します (“c1”、“c2” など)。

複数のモデル

括弧タイプ “Multiple Group (#)” は、括弧で囲まれた項目が判明している回数繰り返すことを表します。Multiple Group タイプの括弧では、構造式全体、または構造式の一部を囲むことができます。いくつかの例を以下に示します。

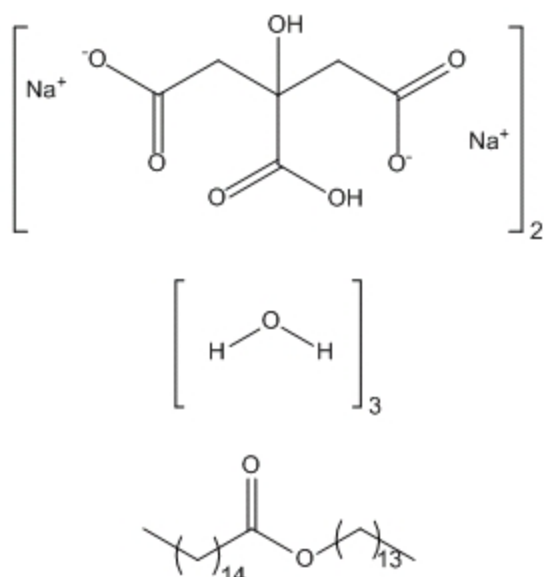


図 14.7: 複数のグループを示す括弧

Multiple Group タイプの括弧は、特定の繰り返し回数を表すため、括弧で囲んだ構造式に対する分子量（および関連データ）を Analysis ウィンドウに表示することができます。

繰り返しパターン

単純な線状のポリマーでは、繰り返し単位はその先端と末尾または先端同士で結合します（またはそれらを組み合わせた繰り返しパターンか未知の繰り返しパターン）。この繰り返し方法も属性として括弧に割り当てることができます。

次に示すように、Head-to-Tail タイプは標準の繰り返しパターンです。

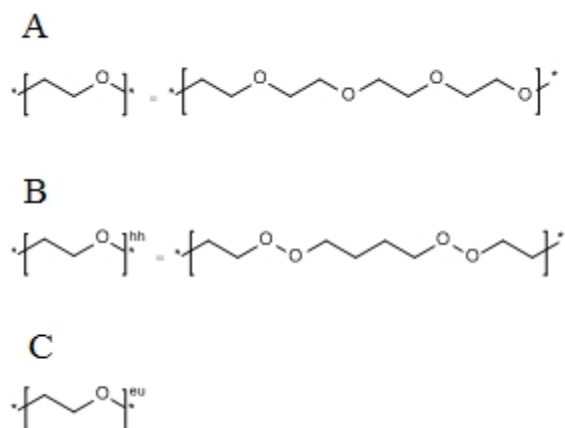



図 14.8: 先端と末尾が結合された繰り返しパターン。A と B は、表示されているポリマーを表します。C は A と B の混合物です。

Bracket Usage ラベルの削除

Bracket Usage ラベルを削除するには、次のいずれかの操作を行ってください。

- ラベルの上にマウス ポインタを重ねて **Delete** キーを押します。
- 消しゴム ツールを使用してラベルを削除します。

 **注:** Bracket Usage タイプを "Unspecified" に設定すると、現在の Bracket Usage の割り当てがすべて削除されます。


リンク ノード

リンク ノードを使用している原子が何度か繰り返し可能であることを示すことにより、可変長の環または鎖状化合物を指定できます。

リンク ノードには、接続している結合が 2 つ必要です。

原子ラベルは次の規則に従って作成します。

- 総称名または 1 つの元素記号から成ってなければなりません。
- ラベルの最後の部分は、「数字-数字」の書式とし、下付きの文字で記載します。
- 大括弧 [] の代わりに丸括弧 () または中括弧 { } を使用できます。

 **注:** ChemFinder でリンク ノードについてサポートされる括弧は大括弧 [] だけです。ChemFinder ではリンク ノードについて丸括弧 () や中括弧 { } を使用することはできません。

- 使用しなくても内容が明確な場合 (例: O_{1-3})、括弧は省略できます。

リンク ノードを作成するには、次の操作を行ってください。

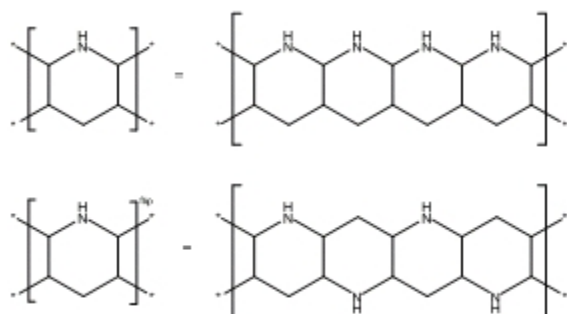
1. 原子ラベル テキスト ボックスを開きます。
2. リンク ノードを次の書式で入力します。

[CH2]3-7

Flip Type

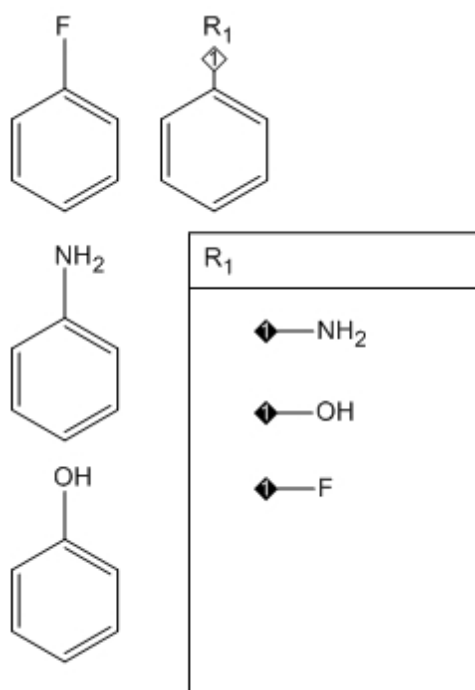
はしご状のポリマー (両側に接続する結合が 2 つずつあるポリマー) では、結合の順番が定義されていないことがあります。これを定義するには Flip Type 属性を割り当てます。この属性は、2 つの交差結合を含む括弧にのみ適用されます。

No Flip は最も一般的なため、特別な注記は表示されません。次の例は、はしご状のポリマーの Flip Type を示しています。



代替基

可変の官能基または部分構造式を含む検索式を作成できます。共通の部分構造式を持つ構造式に対しては、親構造式を利用して単一の検索式を出すことで複数の検索式に代えることができます。親構造式には、定義する代替基リストへの結合点を持たせることができます。



代替基の定義

各置換基が検索式で使用されている、置換基のセットを表す代替基の定義（R、G など）を作成できます。代替基を定義するには、次の操作を行ってください。

1. **View、Other Toolbars、Query Tools** の順に選択し、検索式ツールバーを開きます。
2. 代替基検索式ツールをクリックし、ドラッグしながら、代替基を描画できる大きさの領域を作成します。

3. Alternative Group Title ボックスにタイトル (R_1 など) を入力し、Alternative Group ボックスに部分構造式フラグメントを描画します。

✔ ヒント: 代替基リストを囲むボックスは、後から描画することができます。

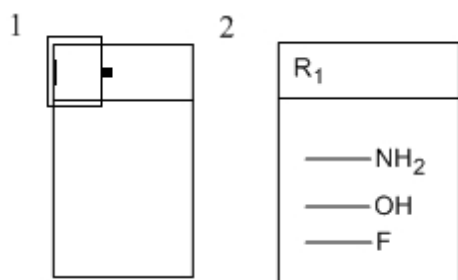


図 14.9: 代替基を定義する

結合点を定義して、代替基ラベルでフラグメントが親構造式に結合する位置を指定します。

1. 次のいずれかの操作を行ってください。

- 化学記号パレットのダイヤモンド形の結合点ツールを選択し (View、Other Toolbars、Chemical Symbols の順に選択し)、結合点を配置する部分構造式フラグメントをクリックします。
- 結合点を配置する部分構造式フラグメントをポイントし、ホットキー . (ピリオド) を押します。

結合点記号が表示されます。

2. すべてのフラグメントに対して繰り返します。

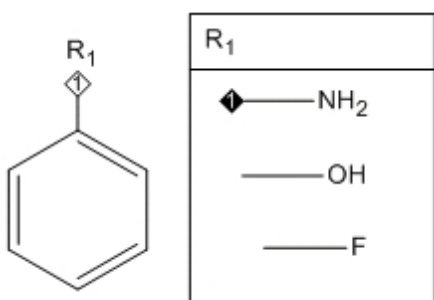


図 14.10: 結合点を追加する。結合点記号は窒素原子に付加されている。

代替基を含む構造式を作成すると、ラベルの横に結合点記号が表示されます。結合点番号は定義済みの代替基の番号と一致しています。

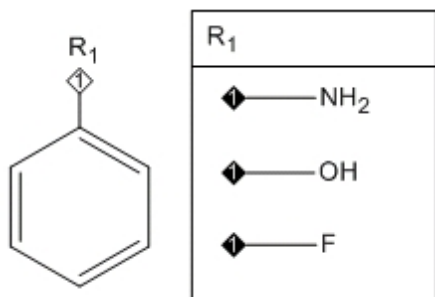
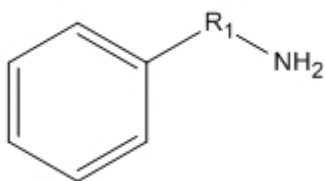


図 14.11: R-基テーブルを持つ構造式

結合点記号に表示される番号は結合点順位です。270 ページの“複数の結合点”の例を参照してください。

複数の結合点

次のように、複数の結合点を含む R-基を使用することができます。



このタイプの R-基では、テーブルで結合点の順序を示すことが必要です。構造式フラグメント上に明確に定義した複数の結合点を指定すると、特定の物質を検索できます。配座が似ている構造式を検索する場合に便利です。たとえば、次の図 A の化合物の検索は必要ですが、図 B の化合物の検索は不要とします。

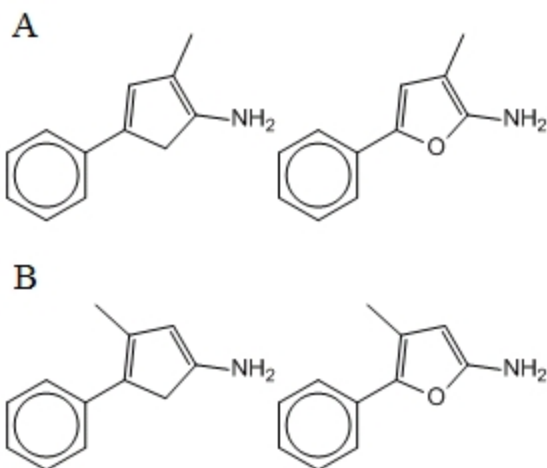
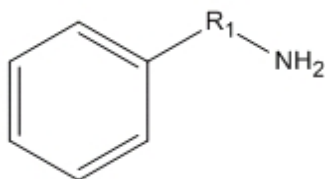


図 14.12: 複数の結合点

この場合、結合点の順序を指定することにより、不要な化合物を検索対象から除外できます。結合点の順序を指定するには、次の操作を行ってください。

1. 下図の構造式を描画します。



2. 「R1」というラベルを付けて代替基ボックスを作成します。

3. 構造式フラグメントを描画して、結合点にラベルを付けます。

代替基の定義が完了すると、親化合物に結合点記号が表示されます。

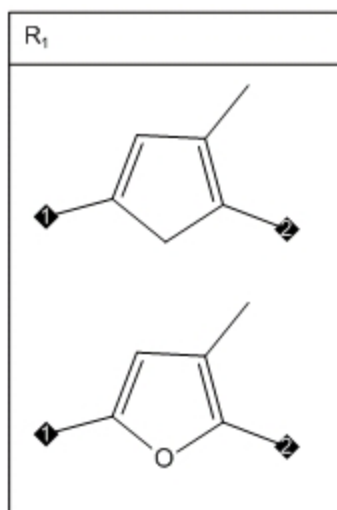


図 14.13: 複数の結合点を持つ R-基

結合点に番号を付けることで、メチル基とアミン基が隣接しなければならないことを指定します。これで検索対象外の配座体は除外されます。

結合点の番号付け

結合点に番号を付けることで、構造式フラグメントをどのように親構造式に結合するかを指定することができます。

結合点の順序を設定するには、結合点ツールを使って、番号付けをしたい順序で結合の端をクリックします。結合点の順序を変更するには、次の操作を行ってください。

- 結合点ツールで結合点をクリックします。

結合順位標識の非表示

必要であれば、結合順位標識を非表示にすることもできます。たとえば、出版物に使用される描画では、結合順位が自明で、結合順位標識が必要ないことがあります。

結合順位標識を非表示にし、結合点から番号を削除するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの Preferences をクリックします。
2. Preferences ダイアログで、Building/Display をクリックします。
3. Show Attachment Rank Indicators をオフにします。

この変更はすべてのドキュメントに影響します。

次の図に、結合順位標識を非表示にした代替基の定義と親構造式を示します。

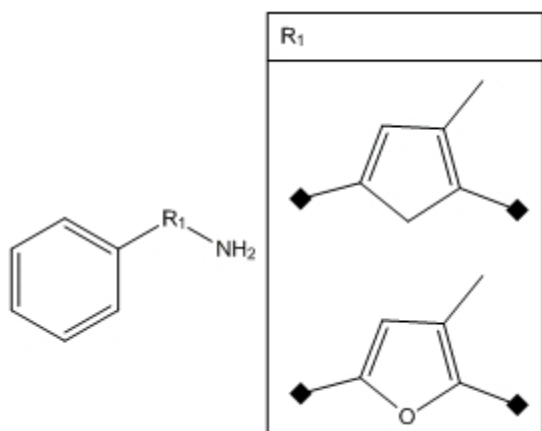
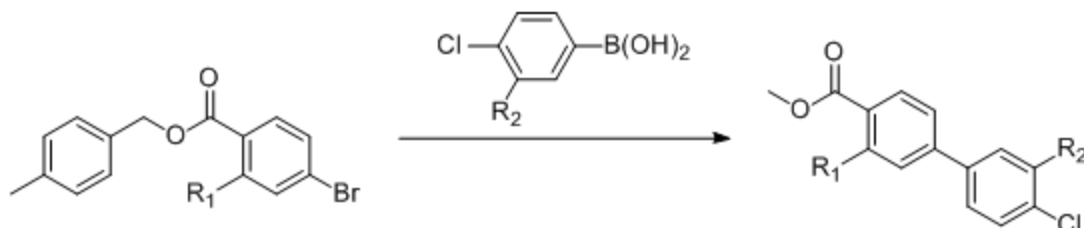


図 14.14: 非表示の結合標識

R-基反応の検索式

反応を検索および保存することができます。反応では、単一または複数の化合物（反応物）が他の化合物（生成物）に変換されます。個々の反応物（または生成物）の間はプラス記号 (+) で区切ります。反応物と生成物の間は矢印 (→) で区切ります。

R-基を含む化学反応を検索することもできます。R-基を含む化学反応の例を次に示します。



反応物検索

反応物検索は、ある出発原料から生成可能な物質を調べたいときに便利です。反応物のクエリは、通常のリアクション検索とよく似ています。ただし、矢印の右側を空白にしておく点が異なります。たとえば、次のような反応物のクエリを例にとります。

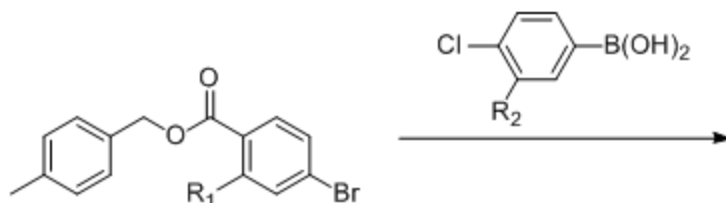
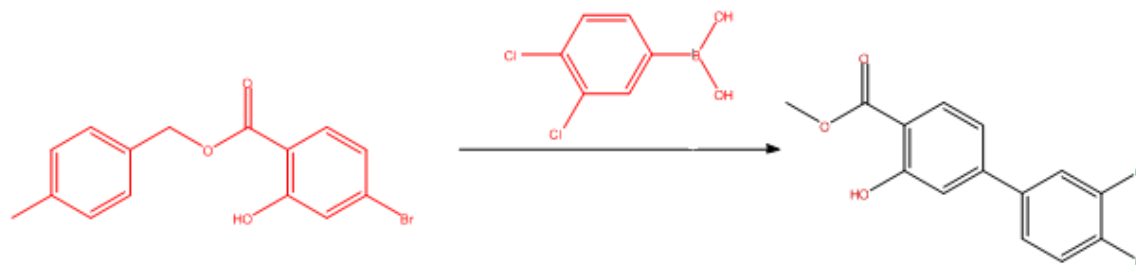


図 14.15: R-基反応物のクエリの例

上のクエリで見つかる可能性のある結果を次に示します。



生成物検索

生成物検索は、特定の生成物に注目し、その生成物を得るための方法を調べたいときに便利です。生成物のクエリは、通常のリアクション検索とよく似ています。ただし、矢印の左側を空白にしておく点が異なります。たとえば、次のような反応物のクエリを例にとります。

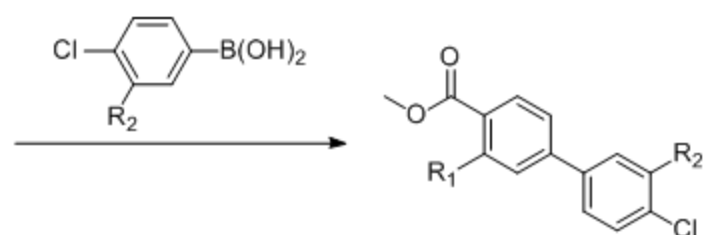


図 14.16: R-基生成物のクエリの例

無指定代替基

無指定代替基は、元素リストと代替基を組み合わせたものです。元素リストが単体元素で構成されるのに対し、無指定代替基には、ニックネームや総称ニックネームなどの文字形式で表現可能なあらゆる構造式を含むことができます。無指定代替基は、通常のリアクション検索のショートカット表記であるため、“R1”などの名前を指定する必要がありません。

無指定代替基を使用すると、検索式を簡潔に定義できます。原子位置に部分構造式リストのラベルを付けることにより、検索対象の構造式からリストに指定した部分構造式の 1 つと一致する部分構造式を検索できます。無指定代替基の表記も名称ごとにカンマで区切らなければなりません。カンマの後のスペースや括弧は省略できます。無指定代替基の例を次に示します。

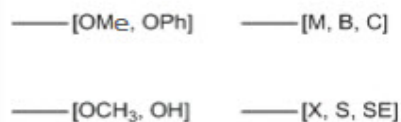


図 14.17: 無指定代替基

無指定代替基を作成するには、次の操作を行ってください。

1. 原子ラベル テキスト ボックスを開きます。
2. 「[」を入力した後、元素、フラグメント、ニックネームまたは総称ニックネームのリストをカンマで区切って入力し、「]」を入力します。

汎用構造式の展開

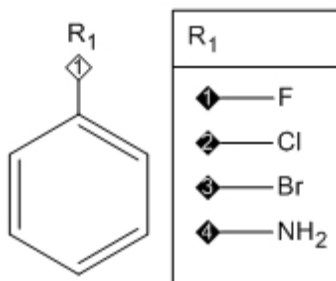
Expand Generic Structure ツールを使って、簡略複合構造式から複数の構造式を生成することができます。このツールでは、生成できる構造式は 500 個に制限されています。組み合わせ構造式の大規模な展開については、CombiChem for Excel を使用してください。

使用できる簡略化組み合わせ定義は次の 4 つです。

定義

例

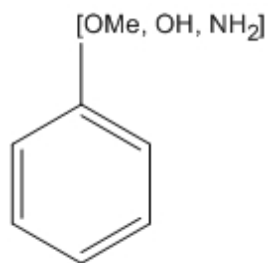
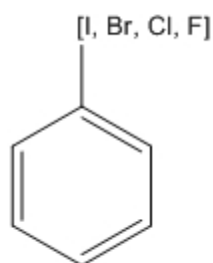
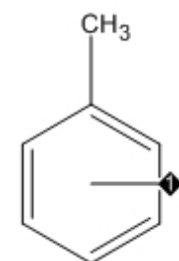
代替基と
R-表



無指定代替基


定義

例

元素
リストVariable (可変)
結合点

これらの定義は複数の完全分子に展開することができます。選択した定義の中に複数の座位が存在する場合は、展開構造式にすべての置換基の並びが含まれます。展開した構造式は新規ドキュメント内に生成されます。汎用構造式を展開するには、次の操作を行ってください。

1. 展開する 1 つまたは複数の汎用構造式を選択します。

 **注:** 代替基/R-表については、代替基ラベルと表が選択されている必要があります。ラベルが選択されていて、テーブルが選択されていない場合、そのラベルは展開で修正されず、生成されたすべての構造式にラベルとして表示されます。

2. **Structure** メニューの **Expand Generic Structure** をクリックします。

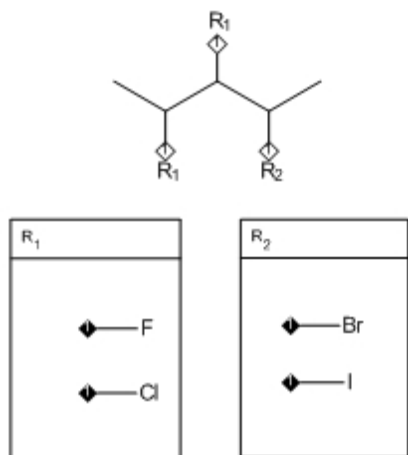
構造式は新規ドキュメント内に作成されます。

R-ロジック検索式

汎用構造式と一群の R-基ができれば、それらを使用して構造式データベースに対して検索式を実行することができます。これを R-ロジック検索式と呼びます。

R-ロジック検索式を実行すると、R-基の組み合わせと汎用構造式を持つ構造式が検索されます。これらの組み合わせは、定義したブール式に基づきます。R-ロジック検索を準備するには、**Structure** メニューの **R-Logic Query** をクリックして、R-Logic Query ダイアログを開きます。

検索式を定義するには、構造式の R-基を 1 つまたは複数選択し、その出現回数も選択します。最初の R-基条件が満たされた場合に（すぐに結果を返さずに）次の R-基も検索するかどうかを指定できます。たとえば、次の検索構造式を考えてください。



この構造式は、どちらの R_1 部位もフッ素原子または塩素原子で構成されていなければならないこと、および R_2 部位は臭素原子またはヨウ素原子のいずれかでなければならないことを示します。

両方の R_1 位置に F 原子または Cl 原子があつて、 R_2 位置に Br 原子または I 原子があるすべての構造式をデータベースで検索する場合、次の操作を行ってください。

1. **Structure** メニューの **R-Logic Query** をクリックします。
2. R-Group ドロップダウン リストから R_1 を選択します。
3. 発生回数の制限としては 2 を選択します。これは R_1 基のインスタンスが 2 つ出現してから結果を返すように指定するものです。
4. If R(i) としては R_2 を選択します。これは R_2 位置が Br または I から成っていないなければならないことを指定するものです。
5. **Add** をクリックします。
6. **OK** をクリックします。

Rest H

可能な R-基位置が 2 つあって、1 つしか満たされていない場合に、もう 1 つが水素でない限り肯定的な結果が返されないように指定するには、R-Logic Query ダイアログで **Rest H** を選択します。

原子対原子のマッピング

反応データベースを検索するため、異なる構造式の原子間に対応関係を作成できます。マッピングされる反応としては、1 ステップの反応と複数ステップの反応があります。原子対原子のマッピングを含む描画は、データベースに追加したり検索で使用したりすることができます。

原子マッピングの割り当て方には、次の 2 つの方法があります。

- 自動マッピング (Structure メニューの **Map Reaction Atoms** をクリックします)。
- 手動マッピング。メイン ツール パレットの原子対原子反応マッピング ツールを使用します。

いずれの方法を使用しても、ChemDraw によって反応物と生成物の反応中心が割り当てられます。

反応マッピングを作成した後、原子対原子反応マッピング ツールを使用して 1 つの構造式の原子をポイントすると、他の構造式中のマッピング済みの原子を強調表示することができます。

表示と印刷

反応マッピング記号を画面や印刷物に表示するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの **Preferences** をクリックします。
2. Preferences ダイアログの **Building/Display** タブをクリックします。
3. **Always Display and Print Reaction Mapping** をクリックします。
4. **OK** をクリックします。

Always Display and Print Atom Mapping の選択を解除すると、原子対原子反応マッピング ツールを選択したときだけ記号が表示されるようになります。記号は印刷されません。

自動マッピング

反応マップを作成するには、次の操作を行ってください。

1. 反応を選択します。

 **ヒント:** 選択ツールで矢印をダブルクリックして、反応を選択します。

2. Structure メニューの **Map Reaction Atoms** をクリックします。

反応物と生成物中の結合で、反応によって変化したものの横には、「Rxn」という記号が表示されます。Reaction Center 結合属性の詳細については、[258 ページの“結合属性”](#)を参照してください。

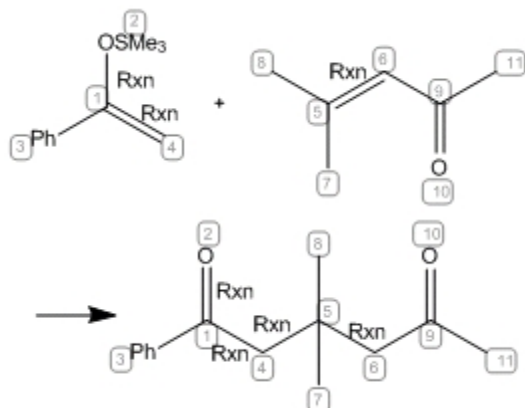


図 14.18: 自動反応マッピング

手動マッピング

原子対原子マッピングを手動で行う必要がある場合は、原子対原子反応マッピング ツールを使用します。手動マッピングが必要になるのは、複雑な反応で自動マッピングを実行した結果、誤りがあった場合です。そのような場合には、反応マッピングを手動で調整することができます。

次の図は、原子対原子反応マッピング ツールで初期マッピングを修正する様子を示しています。

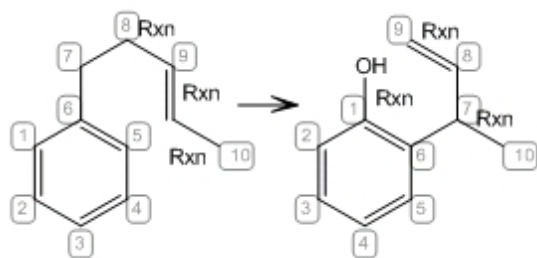


図 14.19: 自動マッピングの修正

原子対原子反応マッピング ツールを使用して反応の手動マッピングを実行する場合は、対象となる原子以外の原子の自動再マッピングを抑制することができます。

自動再マッピングを抑制するには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの Preferences をクリックします。
2. General タブで、Automatic Reaction Mapping の選択を解除します。
3. OK をクリックします。

自動マッピングの結果を調整するために原子対原子反応マッピング ツールを使用するには、次の操作を行ってください。

1. 検索式ツールバーの原子対原子反応マッピング ツールをクリックします。

- マップを作成する反応物中の原子をポイントします。たとえば、次の描画では、エーテルの酸素の隣りにある非環式炭素をポイントします。
- 反応物の原子を、対応する生成物の原子までドラッグします。

残りの原子のマッピングは、手動マッピングに基づいてマッピングされます。

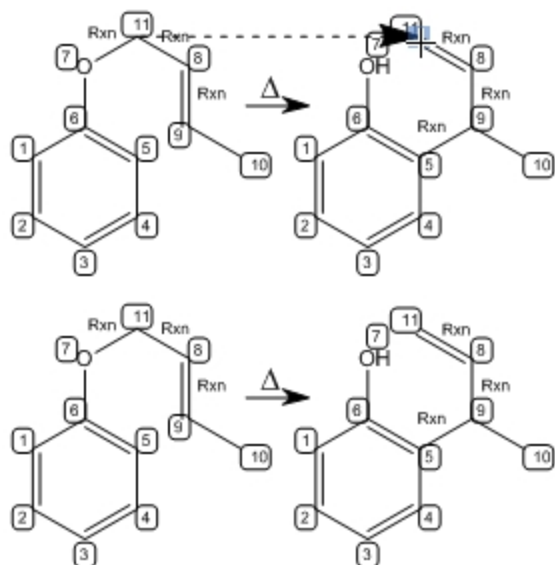


図 14.20: 最終的なマッピング

反応内の別の原子のマッピングを設定したり変更したりすることができます。

反応マッピングの取り消し

反応マッピングを取り消すには、次の操作を行ってください。

- マッピングを取り消す構造式を選択します。
- Structure** メニューの **Clear Reaction Map** をクリックします。

原子対原子反応マッピング ツールを使用して、任意の原子をクリックし ChemDraw ウィンドウの空白部分にドラッグすると、その原子のマッピングが取り消されます。

反応マッピング情報のエクスポート

反応マッピングと反応中心に関する情報は、*.cdx ファイル形式で保存されます。ChemDraw でファイルを開き、ChemFinder などの原子マッピングを読み取る他のアプリケーションにそのファイルを転送することができます。クリップボードを利用して、マップ済みの反応を上記のアプリケーションにコピーすることもできます。

立体化学記号

立体化学を示すフラグは 3 種類あります。

ラセミ. ラセミ混合物

絶対. 立体配置が既知の純粋鏡像体

相対的. 立体配置が不明な純粋鏡像体

立体化学フラグのフォントとサイズは、ドキュメントの標準の原子ラベル サイズによって決まります。

立体化学フラグを描画するには、次の操作を行ってください。


1. 検索式ツールを表示するには、**View**、**Other Toolbars**、**Query Tools** の順に選択するか、メイン ツール パレットの検索式ツール アイコンをクリックします。
2. 検索式ツール パレットで、使用するフラグのツールをクリックします。
3. フラグを割り当てる構造式の横をクリックします。

3D 属性


三次元検索式は、たとえば、可能性のあるレセプタ配位子における、原子と結合間の三次元関係を探す場合の薬理的検索で便利です。三次元検索式を作成するには、幾何学的構造（ラインや面など）と制限（範囲として指定）を検索構造式に追加します。たとえば、2 つの原子が 4 ~ 5 Å 離れている必要があること、または 2 つの平面が 80 ~ 100 度離れている必要があることを指定できます。

構造式に三次元属性を割り当てるには、次の操作を行ってください。

1. 構造式または部分構造式を選択します。

 **注:** 三次元属性によっては順序を指定する必要があるため、Shift キーを押しながらクリックして、必要な順序で選択します。

2. **Structure** メニューの **Add 3D Property** をクリックし、下記の表からオプションを選択します。

 **注:** 下記の表で、ポイントは、原子、質量中心、結合点のいずれかを指します。ラインはラインまたは法線を指します。

Angle. 3 つの結合点間の角度制限を定義します（順序）。範囲として示されます。

Dihedral. 4 つのポイント（順序）、2 本のライン、または 2 面間の 2 面（ねじれ）角制限を定義します。範囲として示されます。

Distance. 2 つのポイント、1 つのポイントと 1 本のライン、または 1 つのポイントと 1 面の間の距離制限を定義します。オングストローム単位で範囲として示されます。

Line. 選択した結合点に最適なラインを定義します。

Plane. 選択したポイント、またはポイントとラインについて、最適な面を定義します。

Exclusion Sphere. 結合点周囲の排他球を定義します。複数の結合点を選択した場合、排他球は最初に選択した結合点の周囲に定義され、後続の結合点は検索式が評価されるとその排他球内に位置します。0 から始まるオングストローム単位の範囲として示されます。

Normal. 結合点の方向に定義された面から標準を定義します。

Point. 最初の結合点から 2 番目の結合点の方向（順序）に、または正常の方向に、指定された距離で配置された結合点を定義します。

Centroid. 選択したすべての他の結合点の平均位置に配置された結合点を定義します。

注意:

- 制限値はいずれもテキスト ツールで編集することができます。排他球のみが変更を表示します。
- 結合点を作成すると、ダイアログが表示されます。このダイアログで、最初に選択された結合点から計算された結合点までの距離を指定します。距離はオングストロームの絶対値として、または選択された結合点間の距離のパーセントとして指定できます。
- 負の値は、最初の結合点と 2 番目の結合点の間に計算された結合点があるのではなく、計算された結合点は 2 番目の結合点からの距離が最初の結合点より長いことを示します。
- 幾何学的構造と制限オブジェクトは、構造式を変更すると更新されます。独立して移動させることはできません。
 - CDX、MOL、SKG、および TGF ファイルと併用することができます（リードライト完全互換性）。他の形式とは互換性がありません。
 - ただし、TIFF などの印刷だけが可能な形式で保存することができます。

エクスポート時の互換性

検索属性は化学データベースでのみ使用できるため、使用する対象の検索システムに、ChemDraw から構造式を転送しなければなりません。残念ながら、ファイル形式によっては使用できない検索属性や、化学データベースによっては使用できないファイル形式もあります。サポートされるファイル形式については、ご使用のデータベースのマニュアルを参照してください。

次の表は、ChemDraw が、SKG、TGF、クリップボードのファイル形式に書き出す検索式属性の一覧です。CDX 形式では、すべての検索式属性が保持されます。

エクスポートする検索式属性

ISIS™	Mol	Rxn
Atom Properties		
置換基		
Unspecified	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
■ Free Sites	b	b
■ Up to	a	a
■ Exactly	<input type="radio"/> ^c	<input type="radio"/> ^c
Implicit Hydrogens		
■ Not allowed	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
■ Allowed	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Ring Bond Count		

エクスポートする検索式属性	ISIS™	Mol	Rxn
▪ Any	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ No ring bonds	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ As drawn	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ Simple ring	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ Fusion	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ Spiro or higher	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Unsaturation			
▪ Unspecified	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ Must be absent			
▪ Must be present	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
反応による変化			
▪ May be anything	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
▪ Must be as specified	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
Reaction Stereo			
▪ Any	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
▪ Inversion	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
▪ Retention	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
Translation			
▪ Equal			
▪ Broad			
▪ Any			
▪ Narrow			
Abnormal Valence			
▪ Not Allowed	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
▪ Allowed	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

エクスポートする検索式属性

ISIS™	Mol	Rxn
-------	-----	-----

Bond Properties

Bond Type

▪ Single	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
----------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Dashed	<input type="radio"/>	d	<input type="radio"/>
----------	-----------------------	---	-----------------------

▪ Hashed	d	d	d
----------	---	---	---

▪ Wedged Hashed	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
-----------------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Bold	<input type="radio"/>	e	e
--------	-----------------------	---	---

▪ Wedged	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
----------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Wavy	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
--------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Hollow Wedged	e	e	e
-----------------	---	---	---

▪ Dative	f	f	f
----------	---	---	---

▪ Double	<input type="radio"/> ^g	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
----------	------------------------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Double Either	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
-----------------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Double Bold	h	h	h
---------------	---	---	---

▪ Aromatic	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
------------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Tautomeric	i	i	i
--------------	---	---	---

▪ Triple	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
----------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Quadruple	l	l	l
-------------	---	---	---

▪ Any	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
-------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ S/D	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
-------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ D/A	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
-------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ S/A	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
-------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

Topology

▪ Unspecified	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
---------------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

▪ Ring	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
--------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

エクスポートする検索式属性 ISIS™ Mol Rxn

属性	ISIS™	Mol	Rxn
Chain	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

Reaction Center

Unspecified	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
-------------	-----------------------	--	-----------------------

Center	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
--------	-----------------------	--	-----------------------

Make/Break	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
------------	-----------------------	--	-----------------------

Change	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
--------	-----------------------	--	-----------------------

Make&Change	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
-------------	-----------------------	--	-----------------------

Not Center	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
------------	-----------------------	--	-----------------------

その他の検索式属性

総称ニックネーム	<input type="radio"/> j	<input type="radio"/> j	<input type="radio"/> j
----------	-------------------------	-------------------------	-------------------------

元素リスト	<input type="radio"/> ko	<input type="radio"/> ko	<input type="radio"/> ko
-------	--------------------------	--------------------------	--------------------------

否定元素リスト	<input type="radio"/> k	<input type="radio"/> k	<input type="radio"/> k
---------	-------------------------	-------------------------	-------------------------

代替基	<input type="radio"/>	<input type="radio"/> m	
-----	-----------------------	-------------------------	--

無指定代替基	n	n	
--------	---	---	--

リンク ノード	p	p	p
---------	---	---	---

括弧属性	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

原子対原子マッピング	<input type="radio"/>		<input type="radio"/>
------------	-----------------------	--	-----------------------

可変結合位置			
--------	--	--	--

3D 検索式属性

- a - 適正な代替基数に変換されます。
- b - フリー サイト数がゼロのときは「描画されたままの置換基」と解釈され、その他すべてのフリー サイト値は、現在の総原子価とフリー サイト値に等しい置換基として記述されます。
- c - 5 よりも多い置換基数は“6 以上”と解釈されます。
- d - ハッシュ ウェッジ結合に変換されます。
- e - ウェッジ結合に変換されます。
- f - 単結合に変換され、配位結合の基底原子には正電荷、配位結合の先端の原子には負電荷が適用されます。
- g - ISIS™ は、無指定のシス/トランス立体化学構造と解釈されます。
- h - 二重結合に変換されます。

- i - 芳香族に変換されます。
- j - M、X、Q、A のみ。その他は別名として解釈されます。
- k - 最初の 5 つの元素以外は削除されます。
- l - 単結合に変換されます。
- m - RG ファイルが自動的に作成されます。
- n - 無指定でない代替基に変換されます。
- o - 5 より多い元素のリストは、代替基に変換されます。
- p - 繰り返し範囲の最低数は常に 1 として処理されます。

情報の共有

コンテンツを転送するのに一般的に使用されるシステム コマンドの多くは、ChemDraw でも使用できます。

- コピーと貼り付け
- コンテンツ ファイルのインポートとエクスポート

クリップボードを使用すると、コピーしたオブジェクトを編集することができます。

クリップボード

クリップボードを使用すると、同一のコンピュータ上またはネットワーク上で動作しているアプリケーション間で、アクティブ ドキュメント ウィンドウ内の一部またはすべての情報を転送できます。標準のコピー アンド ペースト機能またはカット アンド ペースト機能を使用して、これらの機能をサポートするアプリケーションに情報を転送します。情報は描画オブジェクトとして転送されます。ChemDraw で編集するには、オブジェクトをダブルクリックします。

また、Copy As 機能を使用して、選択した構造式を SMILES 文字列、SLN 文字列、InChI™ 文字列に変換できます。

クリップボードにコピーした構造式を別の ChemDraw ドキュメントに貼り付ける場合、貼り付けられる情報は新しいドキュメントの設定に基づいて拡大または縮小されます。詳細については、[289 ページの“自動スケーリング”](#)を参照してください。

テキスト表記法

テキスト表記法¹を使用すると、1 行の文字列を、その文字列が表す構造式に展開することができます。多くのソフトウェアで、化学構造式データの入力と保存に SMILES 文字列が使われています。

ある反応を選択し、Copy As SMILES コマンドを実行すると、SMIRKS 文字列がクリップボードにコピーされます。SMIRKS 文字列がクリップボードにある時に Paste Special SMILES コマンドを使うと、ドキュメントに反応が貼り付けられます。

SMILES 文字列の作成

構造式の SMILES 文字列を作成するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. Edit、Copy As、SMILES の順に選択します。

SMILES 文字列がクリップボードに転送されます。

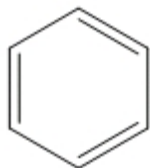
SMILES 文字列を表示するには、ドキュメント ウィンドウに文字列を貼り付けます。

SMILES 文字列をクリップボードにコピーすると、SMILES 文字列を解釈できる別のアプリケーションに SMILES 文字列を転送することができます。

¹SMILES 文字列は、分子の構造式を表す 1 行の文字列です。SMIRKS 文字列は、化学反応をテキストで記述したものです。

ChemDraw からクリップボードに複数の構造式をコピーすると、SMILES 文字列はピリオドで区切られてコピーされます。

SMILES 表記では、小文字による芳香族構造式を表すための代替表記が使用できます。ChemDraw では、明示的な芳香族結合を持つすべての構造式に対して、このタイプの SMILES 文字列が作成されます。



C1=CC=CC=C1



c1ccccc1

SMILES 文字列の貼り付け

SMILES 文字列を構造式として貼り付けるには、次の操作を行ってください。

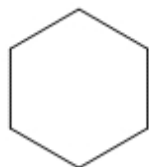
1. ソース ファイルの SMILES 文字列を選択し、Ctrl + C キーを押します。
2. ChemDraw で、Edit、Paste Special、SMILES の順に選択します。

SLN 文字列の作成

構造式を SLN 文字列の形式でクリップボードにコピーすると他のアプリケーションにエクスポートできます。構造式を SLN 文字列としてコピーするには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. Edit、Copy As、SLN の順に選択します。

構造式が SLN 文字列としてクリップボードにコピーされます。



C[1]CCCC@1

InChI™ 文字列の作成

ChemDraw は IUPAC International Chemical Identifier (InChI™) をサポートしています。構造式を InChI™ 文字列として他のドキュメントにコピーするには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. Edit、Copy As、InChI の順に選択します。

コピーできるのは正規の InChI™ 構造式のみです。InChI プロトコルでサポートされていない構造式をコピーしようとすると、サポート外の構造式であることを示す警告が表示されます。

InChIKey 文字列の作成

ChemDraw は InChI 1.02 で利用可能な Standard InChIKey をサポートしています。InChIKey 文字列は、InChI 文字列の簡約デジタル表現です。InChIKey 文字列はすべて同じ長さですが、InChI 文字列は同じ長さではありません。この標準により、Web 検索やデータベースのインデックス化で InChIKey 文字列を活用することができます。

構造式を InChIKey 文字列として他のドキュメントにコピーするには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **Edit**、**Copy As**、**InChIKey** の順に選択します。

InChI™ と InChIKey の詳細については、www.iupac.org/inchi/ を参照してください。

CDXML テキスト、MOL テキスト、または MOL V3000 テキストの作成

構造式の CDXML テキスト、MOL テキスト、または MOL V3000 テキストを作成するには、次の操作を行ってください。

1. CDXML テキスト、MOL テキスト、または MOL V3000 テキストを作成する構造式を選択します。
2. **Edit** メニューの **Copy As** を選択し、**CDXML Text** または **MOL Text** または **MOL V3000 Text** を選択します。

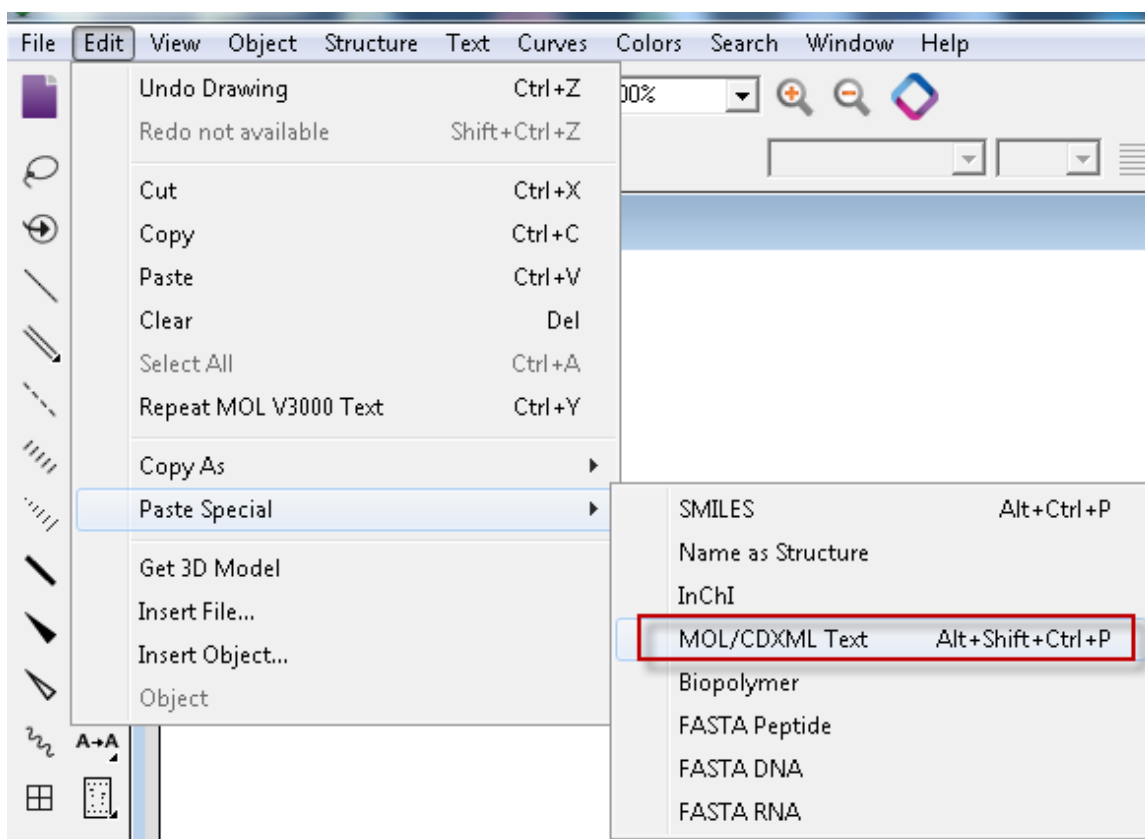
CDXML テキスト、MOL テキスト、または MOL V3000 テキストがクリップボードに転送されます。

CDXML テキスト、MOL テキスト、または MOL V3000 テキストの貼り付け

Paste Special>**MOL/CDXML** コマンドはクリップボードのテキストを解析し、見つかったすべての MOL または CDXML 形式の結果の構造式をドキュメントに貼り付けます。

CDXML テキスト、MOL テキスト、または MOL V3000 テキストをクリップボードからドキュメント ウィンドウに貼り付けて表示するには、次の操作を行ってください。

3. **Edit**、**Paste Special**、**MOL/CDXML Text** の順に選択します。



スクラップ ファイルとクリッピング ファイル

スクラップ ファイルを使用すると、ChemDraw でファイルを保存した後で、描画の一部を他のアプリケーションにコピーすることができます。

スクラップ ファイルやクリッピング ファイルを作成するには、次の操作を行ってください。

1. ドキュメント内のオブジェクトを選択します。
2. 選択した内容をドキュメント ウィンドウからデスクトップまでドラッグします。ファイルがデスクトップに表示されます。

ファイルの内容を表示するには、そのアイコンをダブルクリックします。ファイルの内容をドキュメントで使用するには、そのファイルをドラッグし、ドラッグ アンド ドロップ対応アプリケーションの開いているウィンドウにドロップします。

オブジェクトの転送

このセクションでは、クリップボードまたはドラッグ アンド ドロップを使用してオブジェクトを 1 つのドキュメントから別のドキュメントに転送する際の、ChemDraw の特定の機能の動作について説明します。

自動スケーリング. 転送するオブジェクトは、転送先ドキュメントの設定に合わせて拡大または縮小されます。

結合. 構造式を別のドキュメントにコピーまたは移動すると、新しいドキュメントの固定長の値が構造式に適用されますが、縮尺率は維持されます。

たとえば、元のドキュメントで固定長が 1.0 cm に設定されているとします。ベンゼン環のサイズを 200% に変更すると、結合長は 2.0 cm になります。転送先ドキュメントで固定長が 1.7 cm に設定してある場合、このベンゼン環を転送先ドキュメントに貼り付けると結合は 200 % に拡大され、最終的な結合長は 3.4 cm になります。

原子ラベル. 原子ラベルも、前項で説明した結合と同様に拡大または縮小されます。たとえば、元のドキュメントで原子ラベルのフォント サイズが 16 ポイントに設定されているとします。元のドキュメント内の 1 つまたは 2 つの原子ラベルのサイズを 8 ポイントに変更すると、その倍率は 8:16、すなわち 0.5 になります。転送先ドキュメントの原子ラベルのフォント サイズは 14 ポイントに設定されているとします。転送先ドキュメントに原子ラベルを貼り付けると、フォント サイズは倍率 0.5 で縮小され、原子ラベルの最終的なフォント サイズは 7 ポイントになります。

タイトル. ChemDraw ではタイトルにも自動スケーリングが利用できます。ソース ドキュメント中の固定長に対する転送先ドキュメントの固定長の比率にタイトルのフォント サイズを乗じたサイズになるように常に自動調節されます。文字列のフォント サイズは任意で、Settings ダイアログの設定とは無関係です。このため、貼り付けられる結合に対する文字列の比率は必ず一定に保たれます。

たとえば、ソース ドキュメントの固定長が 1.0 cm、転送先ドキュメントの固定長が 2.0 cm、貼り付けるタイトルが 12 ポイントの場合、自動スケーリングが行われた後のタイトルのサイズは $(2.0 \text{ cm}/1.0 \text{ cm}) \times 12 \text{ ポイント} = 24 \text{ ポイント}$ になります。

非結合オブジェクトと色. ドキュメント設定はすべてのオブジェクトに影響するわけではありません。矢印やボックスのようなオブジェクトは、元のドキュメントでの結合に対する比率が維持されるように拡大または縮小されます。

前景色と背景色の場合を除き、選択対象に使用されている色が転送先ドキュメントのカラー パレットにない場合、貼り付け後、その色が転送先のカラー パレットに追加されず (20 色まで)。転送先ドキュメントでは、背景色は変化せず、前景色で色が付けられたすべてのオブジェクトの色は転送先ドキュメントの前景色に変更されず。


空のドキュメントへの貼り付け. ChemDraw の描画を異なる設定の空のドキュメントに貼り付ける場合には、Change Settings ダイアログが表示されます。

元のドキュメントの設定に合わせて転送先ドキュメントの設定を変更するには、**Change Settings** をクリックします。

転送先のさまざまなドキュメントの設定が、すべて元のドキュメントの設定に合わせて変更されます。また、転送先ドキュメントのカラー パレットのすべての色が、ソース ドキュメントの設定に合わせて変更されます。

元のドキュメントのオブジェクトを転送先ドキュメントの設定値に合わせて拡大または縮小するには、**Don't Change Settings** をクリックします。

前述した比率で、オブジェクトのサイズが、元のドキュメントの設定から転送先ドキュメントの設定に合わせて変更されます。

 **注:** 元のドキュメントが ChemDraw バージョン 3.0 より前のもので作成されている場合は、ダイアログ ボックスには "Unknown" というドキュメント名が表示されます。

オブジェクトの埋め込み

ChemDraw は Windows で Object Linking and Embedding (OLE) プロトコルをサポートします。これにより、他のタイプのドキュメントに貼り付けられた構造式を編集することができます。ChemDraw は OLE サーバーとして機能します。OLE サーバーで作成したオブジェクトは、コピーして他の OLE クライアント アプリケーションに貼り付けることができます。

ChemDraw から、OLE をサポートする別のタイプのドキュメントに描画を転送した場合は、新しいアプリケーション内でその描画を開いて編集できます。

たとえば、バージョン 2003 以上の Microsoft Word ドキュメントに挿入された描画を編集するには、次のいずれかの操作を実行します。

- Microsoft Word で描画を選択し、**Edit** メニューの **CS ChemDraw Drawing Object** をクリックします。
- 描画をダブルクリックします。

Word のツールとメニューの代わりに ChemDraw のツールとメニューが表示されます。ツールを使用して描画を編集します。

変更が完了したら、Word ドキュメント内の別の部分をクリックします。Word のツールとメニューが元通りに表示されます。

エクスポート

ChemDraw の描画は、さまざまなファイル形式にエクスポートして、他のアプリケーションで開くことができます。逆も同様で、ChemDraw はさまざまなファイル形式を認識し、他のアプリケーションからのドキュメントを開くことができます。


ファイルにエクスポートするには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **Save As** をクリックします。
2. **Save As** ダイアログで、次の操作を実行します。
 - a. ファイルの名前と保存場所を入力します。**Go To ChemDraw Items** をクリックして、ChemDraw Items フォルダを検索します。
 - b. ファイル形式を選択します。
 - c. **OK** をクリックします。

ファイル形式によっては、ニックネームまたは構造式フラグメントを含む原子ラベルが使用できない場合があります。このような形式でファイルを保存すると、ChemDraw はすべての原子ラベルを展開し、展開した形式でファイルを保存します。

次の形式はニックネームや構造式フラグメントをサポートしていません。

- Connection Table
- MSI MolFile
- SMD

 **注:** ChemDraw の製品の種類により、一覧に示した形式の一部がサポートされていない場合があります。

形式により異なるオプションで保存することができます。保存オプションがない形式の場合は **Options** がグレー表示になります。次のテキストベース形式は **Text Options** を使用することができます。

- ChemDraw XML
- CML
- Connection Table
- ISIS/TGF
- ISIS/Reactions
- MDL MolFile
- Accelrys MolFile
- SMD

他の形式のオプションは形式の説明に記載されています。

インポート

グラフィックまたはドキュメントを他のアプリケーションから ChemDraw にインポートすることができます。

オブジェクト

挿入されるオブジェクトは OLE ファイルであり、オブジェクトのサイズ変更および回転を実行できますが、反転させることはできません。オブジェクトは、描画ウィンドウ内からネイティブ アプリケーションで編集することもできます。


ファイル

挿入したファイルは描画の一部となります。編集できるのは ChemDraw 形式の場合に限られます。ファイルを挿入するには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Insert File** をクリックします。
2. **Open** ダイアログのドロップダウン リストからファイル形式を選択します。
3. ファイルを選んで **Open** をクリックします。選択したファイルが描画に埋め込まれます。

オブジェクトを挿入するには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Insert Object** をクリックします。
2. **Insert Object** ダイアログで、**Create from File** をクリックします。
3. オブジェクト ファイルを参照し、**OK** をクリックします。

 **注:** ChemDraw がサポートしていないファイル形式 (TXT など) を選択すると、エラー メッセージが表示されます。

オブジェクトを作成するには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Insert Object** をクリックします。
2. **Create New** をクリックします。

3. **Object Type** を選択します。
4. **OK** をクリックします。

ISIS™ 互換性

ChemDraw Professional と ChemDraw Prime では、R-ロジックおよび脱離基を含む ISIS/Sketch がサポートされています。

添付データ

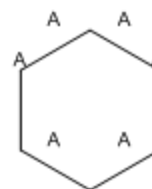
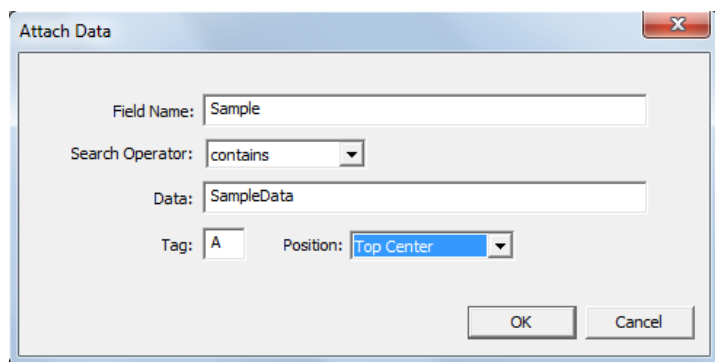
フィールド名を使用することで、原子や結合などのオブジェクトにテキストを添付することができます。この機能は、MDL 形式の “データ SGroup” と互換性があります。フィールド名が指定され、かつ原子と結合の集合または 1 対の括弧に添付されている場合、MDL 形式で保存するときには、データ SGroup に変換されます。

フィールド名が原子と結合の集合と、1 対の括弧の両方に添付されている場合には、2 つの異なるデータ SGroup に変換されます。

データをオブジェクトに添付する際に、1 文字のタグを指定できるようになりました。これらのタグはオブジェクトと一緒に表示されます。複数のタグを 1 つのオブジェクトに追加できます。

オブジェクトにデータを添付するには、次の操作を行ってください。

1. オブジェクトを選択します。
2. **Object** メニューの **Attach Data** をクリックします。Attach Data ダイアログ ボックスが表示されます。
3. フィールド名を入力します。
4. 提供されている事前に定義された演算子のセットから **Search Operator** を選択します。
5. **Data** テキストボックスにデータを入力します。
6. 1 文字のタグを **Tag** テキストボックスに指定します。
7. リンク付けたオブジェクトに関連するタグの位置を **Position** リストボックスから選択します。
8. **OK** をクリックします。




A = contains SampleData

添付データの変更

添付したデータを編集するには、添付したデータを右クリックし、コンテキスト メニューの **Edit Attached Data** をクリックします。Attach Data ダイアログが表示され、必要な変更を行うことができます。

添付データを選択しているときに表示されるコンテキスト メニューには、2 つのコマンドが追加されています。

- **Select Linked Objects:** そのデータに対応するすべてのオブジェクトが含まれるように選択が変更されます。
- **Position:** 対応する構造式との相対位置でデータを配置できます。

 **注:** MDL 形式で保存すると位置情報は失われます。

グラフィック エクスポート ボーダーの詳細設定

描画のエクスポート時にボーダーのサイズを指定することができます。この詳細設定は、すべてのグラフィックス形式の出力に影響を与えます。WMF、PICT、EPS、TIFF、GIF、BMP、および PNG などの形式を含みます。クリップボードにコピーした場合とファイルに保存した場合のどちらにも、この設定が適用されます。標準値は 2 ポイント (0.278 インチ、0.071 センチ) です。

ファイル形式

ChemDraw で使用できるファイル形式は次のとおりです。

形式	Windows
ChemDraw (CDX)	<input type="radio"/>
ChemDraw XML (CDXML)	<input type="radio"/>
ChemDraw (CHM)	<input type="radio"/>
ChemDraw Style Sheets (CDS)	<input type="radio"/>
Connection Table (CT)	<input type="radio"/>
Chemical Markup Language (CML)	<input type="radio"/>
Bitmap (BMP)	<input type="radio"/>
TIFF file (TIF)	<input type="radio"/>
Graphic Image Format (GIF)	<input type="radio"/>
ISIS (SKC、TGF、RXN)	<input type="radio"/>
JCAMP (JDX、DX)	<input type="radio"/>
JPEG (JPG、JPEG)	<input type="radio"/>
MDL SDfile (SDF)	<input type="radio"/>
MDL MolFile (MOL)	<input type="radio"/>
MSI ChemNote (MSM)	<input type="radio"/>
PNG Image (PNG)	<input type="radio"/>

形式	Windows
Standard Molecular Data 4.2 (SMD)	○
Galactic Spectra (SPC)	○
Windows Metafile (WMF)	○
Enhanced Metafile (EMF)	○
ChemDraw Templates (CTP)	○
ChemDraw Templates Style sheets (CTS)	○
PDF	×
MDL Molfile V3000 (MOL)	○
MDL SDFfileV3000 (SDF)	○
Reaction Molfile V3000 (RXN)	○
PICT	
PICT Scaled 4x	×
Encapsulated PostScript	○
Scalable Vector Graphics	○

ChemDraw では、次に示すファイル形式のインポートとエクスポートがサポートされています。これらのファイル形式でエクスポートするには、**Save As...** オプションを使用します。

ChemDraw 製品によっては、一部の形式がサポートされていません。[292 ページの “インポート”](#)を参照してください。

形式	インポート	エクスポート
ChemDraw (CDX)	○	○
ChemDraw XML (GDXML)	○	○
ChemDraw3.5 (CHM)	○	○
ChemDraw 2.0 and ChemDraw 2.1 (CHM)	○	×
ChemDraw Template (CTP)	○	○

形式	インポート	エクスポート
ChemDraw Template Style Sheet (CTS)	○	○
ChemDraw Style Sheets (CDS)	○	○
Connection Table (CT)	○	○
Chemical Markup Language (CML)	○	○
Bitmap (BMP)	○	○
PostScript (EPS)	×	○
Graphic Image Format (GIF)	○	○
ISIS (SKC、TGF、RXN)	○	○
JCAMP (JDX、DX)	○	×
JPEG (JPG、JPEG)	○	○
MDL MolFile (MOL)	○	○
MDL RGFile (MOL)	○	○
MDL V3000 MolFile (MOL)	○	○
MDL SDfileV3000	○	○
MSI ChemNote (MSM)	○	○
Portable Network Graphics (PNG)	○	○
Standard Molecular Data (SMD)	○	○
Structure Data file (SDF)	○	○
Galactic Spectra (SPC)	○	×
Windows Metafile (EMF、WMF)	○	○
Scalable Vector Graphics (SVG)	×	○
Portable Document Format (PDF)	○	○
Tagged Image File (TIF、TIFF)	○	○

異なるプラットフォームへの転送

cdx ファイルは Macintosh 版と Windows 版の両方の ChemDraw で開くことができます。プラットフォーム間でファイルを転送する場合、フォントは転送されません。転送されたドキュメントで用いているフォントが転送先のプラットフォームにない場合には、ChemDraw では転送先のプラットフォームにあるフォントに置き換えられます。

ChemDraw Cloud について

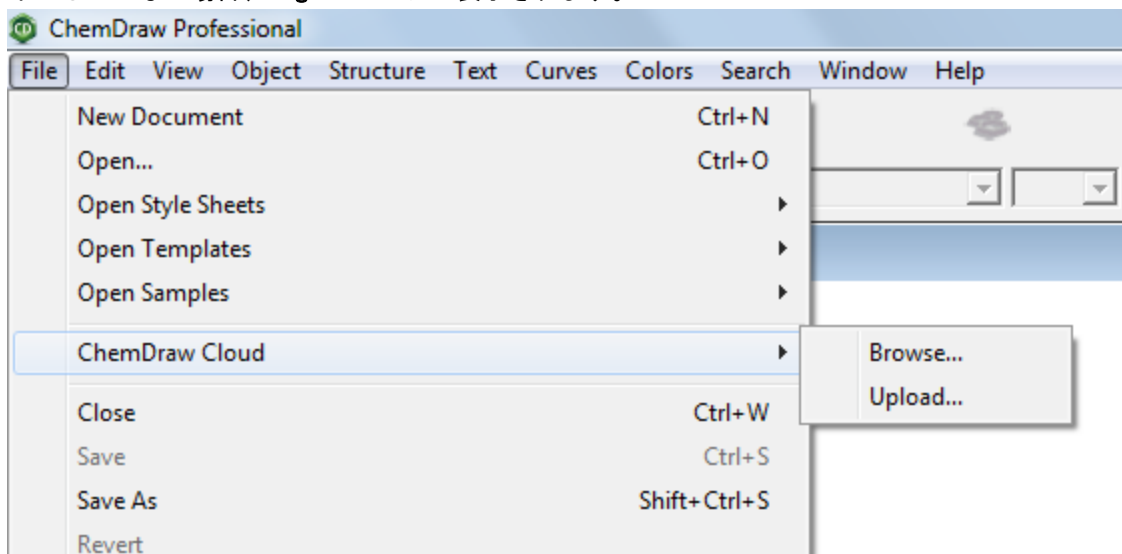
ChemDraw をインストールせずに Web ブラウザ上でさまざまな端末から ChemDraw Cloud として利用できるようになりました。ChemDraw Cloud は、描画ツールバーとドキュメント ウィンドウで構成されています。ドキュメント ウィンドウでは、ChemDraw Cloud ツールバーで利用できるさまざまな描画ツールを使用して、化学構造式を描画・編集できます。ChemDraw Desktop と ChemDraw Cloud では、アップロードとダウンロードによってファイルを共有できます。

 **注:** ChemDraw Cloud 機能は ChemDraw Professional でのみ利用できます。

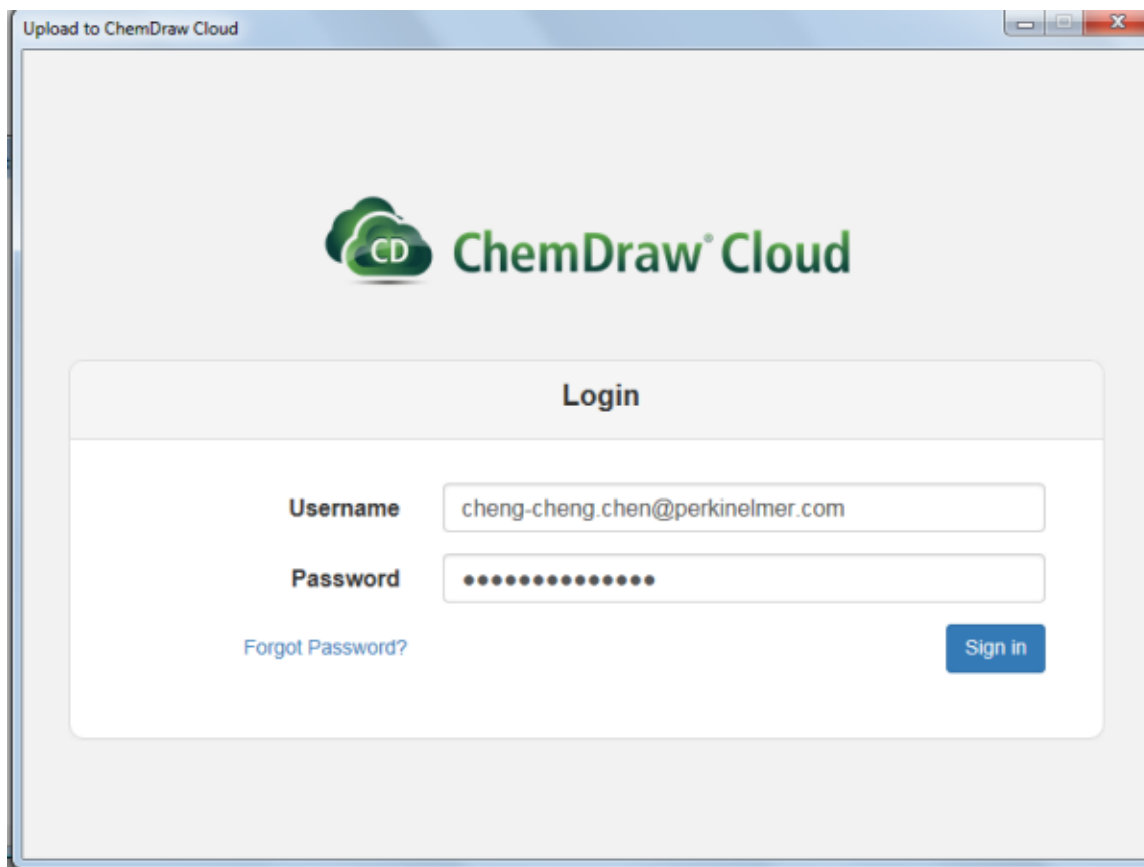
ChemDraw Cloud へのログイン

ChemDraw Cloud にログインするには、次の操作を行ってください。

1. File メニューの ChemDraw Cloud をクリックして **Browse...** または **Upload...** を選択します。まだログインしていない場合、Login ページが表示されます。



2. Username と Password を入力して Sign In をクリックします。




ChemDraw Cloud ログイン認証情報の管理

ChemDraw Cloud アカウントにログインしたら、ChemDraw Cloud ウィンドウの右上に表示される「Would you like to remember the password for the user」ポップアップ メッセージを使用して、必要に応じてログイン認証情報を ChemDraw Cloud に記憶させることができます。



次のいずれかの操作を行ってください。

- **Yes** をクリックして、ログイン認証情報を保存します。**Yes** をクリックすると、ログイン認証情報が保存され、次回 ChemDraw Cloud にログインしたときに、ログイン認証情報が Login ウィンドウに自動的に表示されます。認証情報を保存したら、いつでも Key アイコン  をクリックして、ポップアップ メッセージ ボックスを表示または非表示にすることができます。
- 保存した認証情報を消去するには、**Forget It** をクリックします。
- 保存した認証情報を保持したままにするには、**Keep it Remembered** をクリックします。

- ログイン認証情報を今は保存しないものの、後で保存する場合は、**Not Now** をクリックします。
 - ☑ **注:** **Not Now** をクリックした場合、ログイン認証情報は保存されず、次回 ChemDraw Cloud にログインしたときに、このポップアップ メッセージが表示されます。
- ChemDraw Cloud ログイン認証情報を保存しない場合は、**Never** をクリックします。
 - ☑ **注:** **Never** をクリックした場合、ログイン認証情報は保存されず、次回 ChemDraw Cloud にログインしたときにも、このポップアップ メッセージは表示されません。

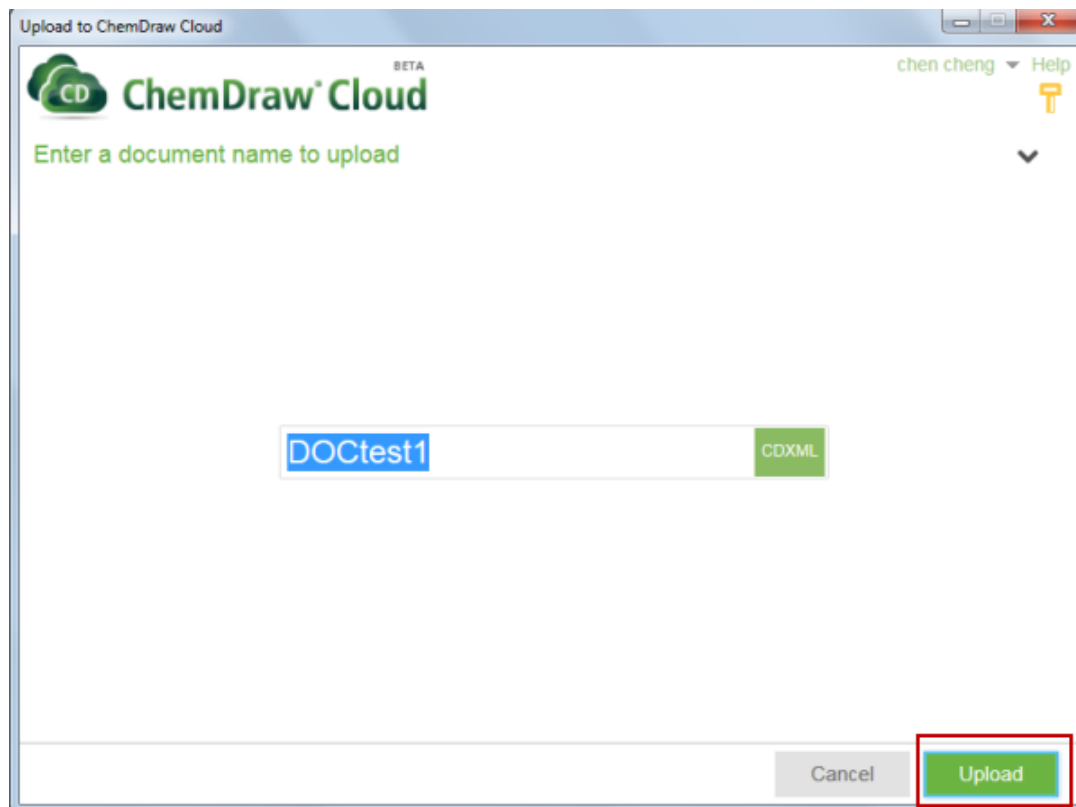
ChemDraw Cloud へのドキュメントのアップロード

ChemDraw から ChemDraw Cloud にドキュメントをアップロードするには、次の操作を行ってください。

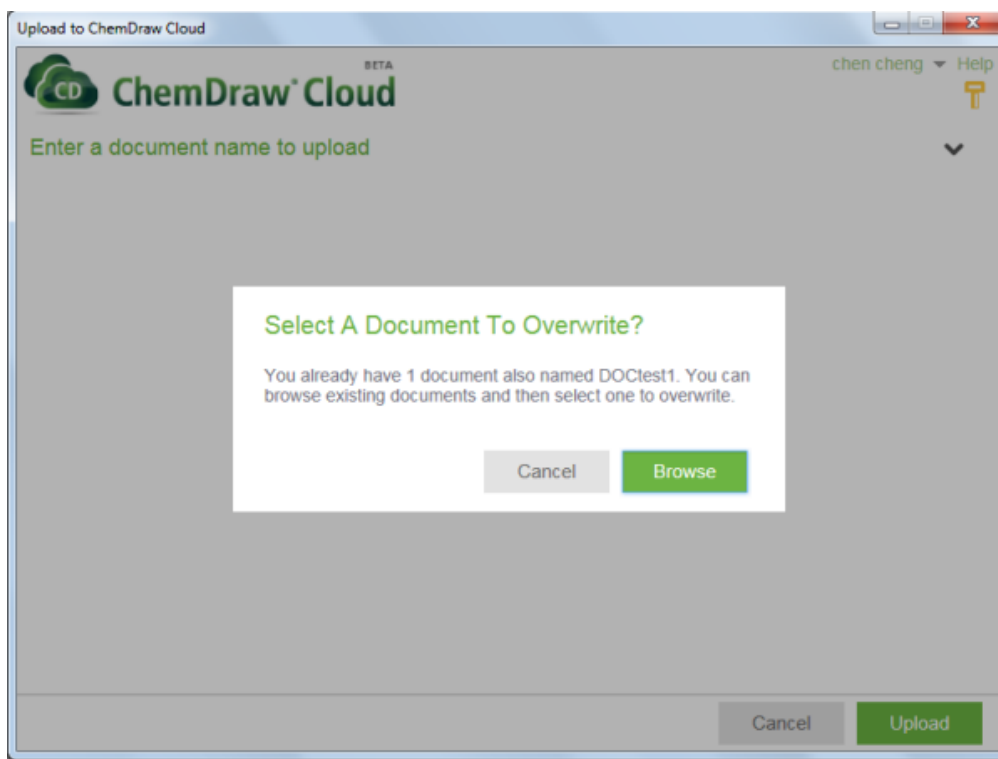
1. File メニューの **ChemDraw Cloud** をクリックして **Upload...** を選択します。
2. 有効なアカウントでログインします。

☑ **注:** 既にログインしている場合、*Login* ページは表示されません。

3. ドキュメント名を入力して **Upload** をクリックし、ChemDraw Cloud にドキュメントを保存します。



指定したドキュメント名が既に存在する場合、次のダイアログが表示されます。



以下のいずれかを選択して実行できます。

- **Cancel** をクリックしてアップロードをキャンセルする。
- **Browse** をクリックして既存のドキュメントを参照し、上書きするドキュメントを選択する。

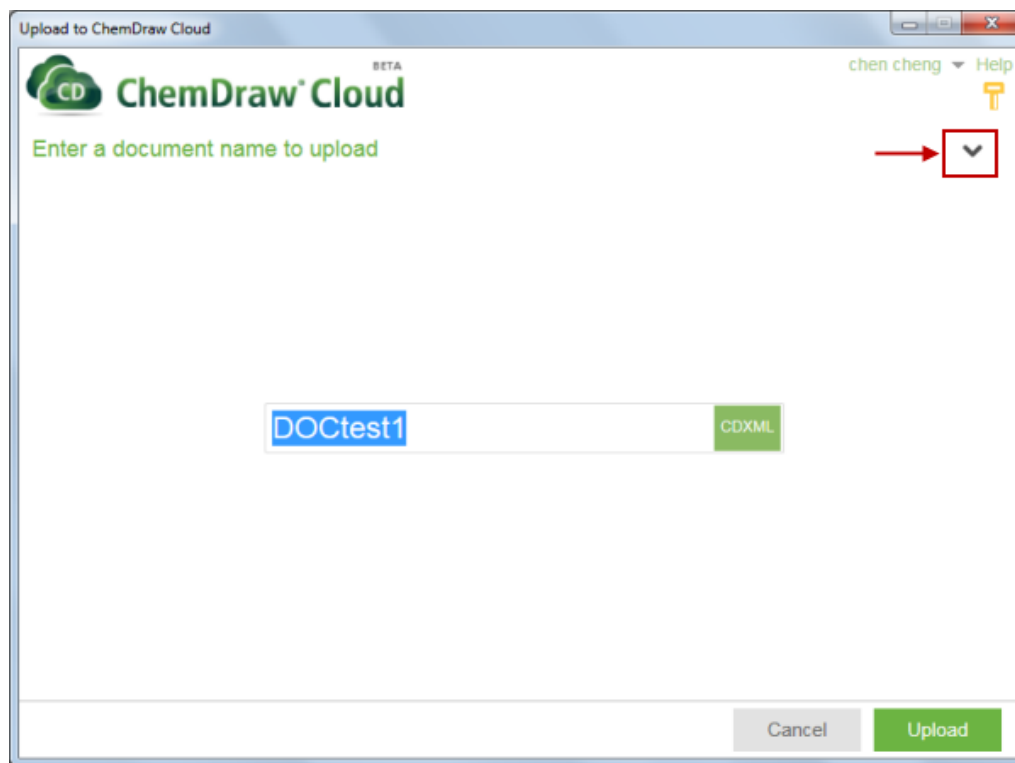
ドキュメントの上書き

ドキュメントは以下の 2 つの方法で上書きできます。


- ドキュメントのリスト表示からドキュメントを選択する。
- 検索ボックスにキーワードを入力して、推奨リストを表示させる。

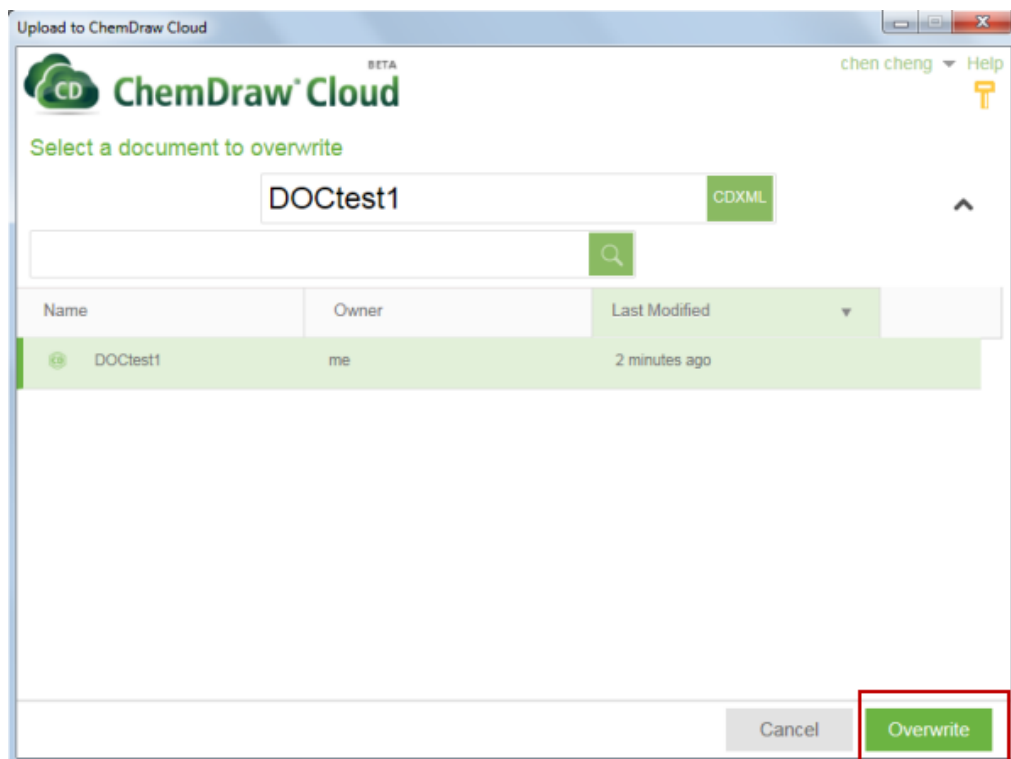
ドキュメント リスト表示のドキュメントを上書きするには、次の操作を行ってください。

1. ページの右上にある下向き矢印のリンクを選択して、ドキュメント リストを表示させます。

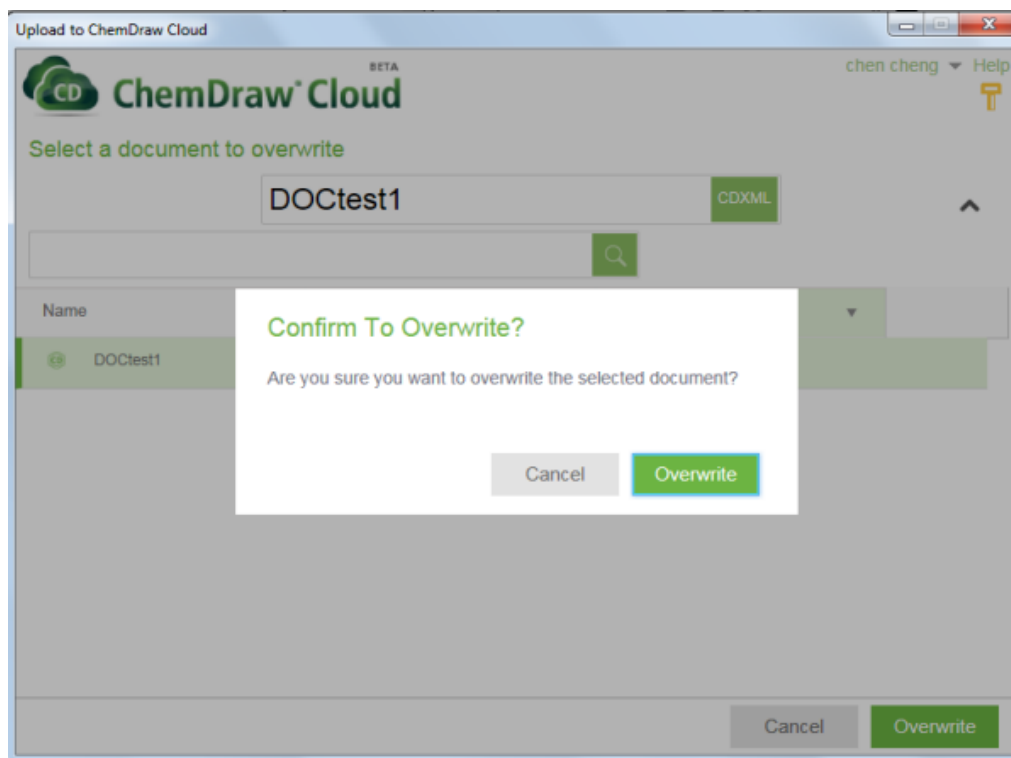


2. 上書きするドキュメントをリストから選択します。

 **注:** *Upload* ボタンが *Overwrite* に変わります。

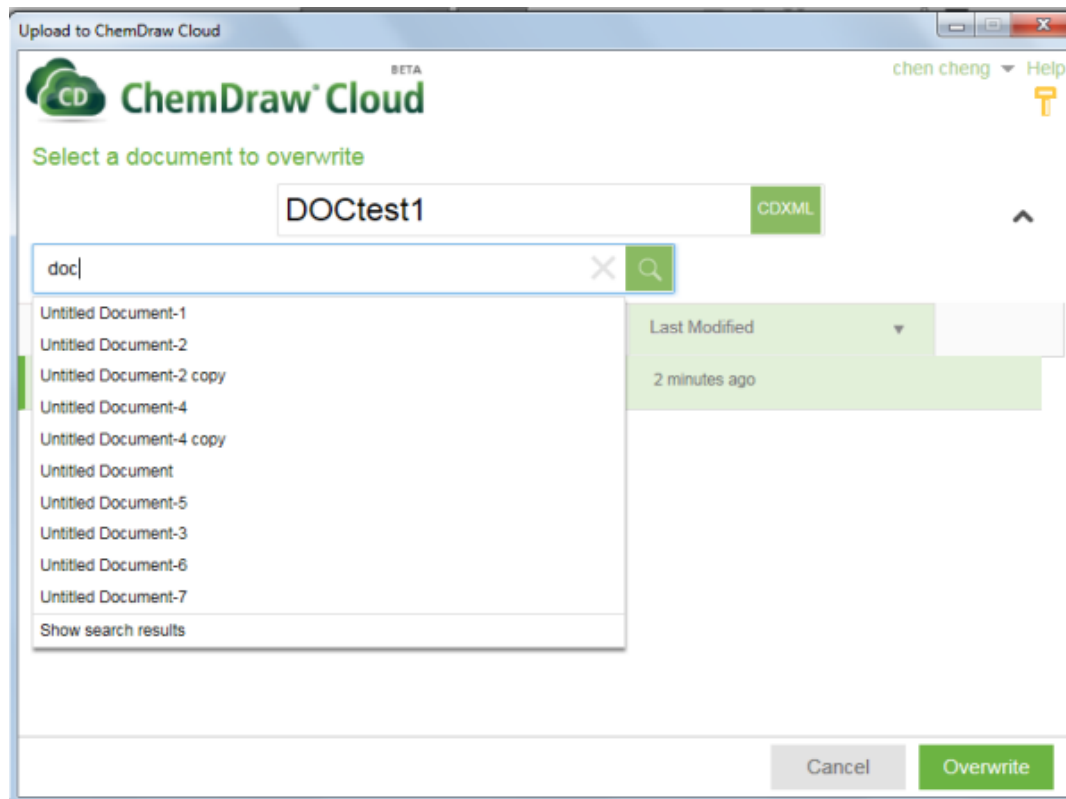


3. **Overwrite** をクリックします。もう一度 **Overwrite** をクリックして、確定します。



キーワードを入力してドキュメントを上書きするには、次の操作を行ってください。

1. 検索ボックスに適切なキーワードを入力して、推奨リストを表示させます。

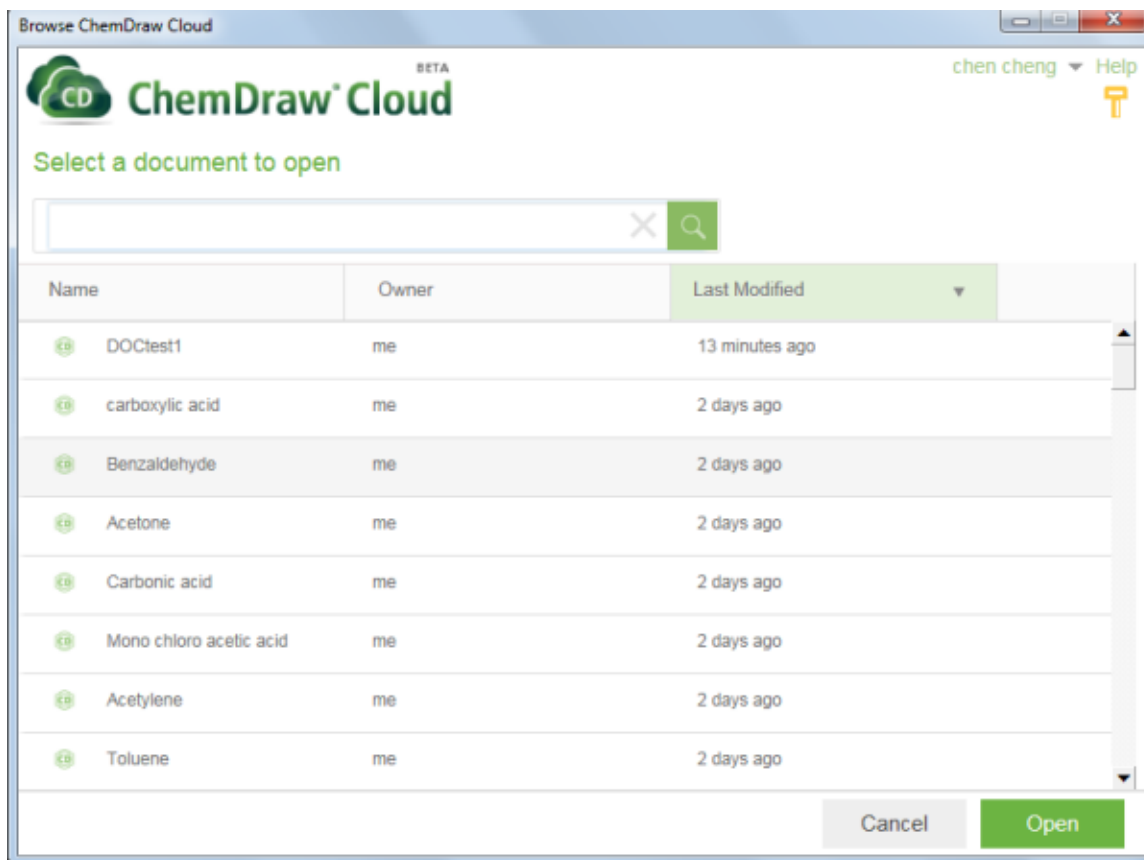


2. 推奨リストのいずれかの項目をクリックし、**Overwrite** をクリックします。上記の **手順 3** と同様の確認メッセージが表示されます。
3. **Overwrite** をクリックします。

ChemDraw Cloud でのドキュメントの参照

ChemDraw Cloud でドキュメントを参照するには、次の操作を行ってください。

1. **File** メニューの **ChemDraw Cloud** をクリックして **Browse...** を選択し、有効なアカウントでログインします。Browse ChemDraw Cloud ページが表示されます。



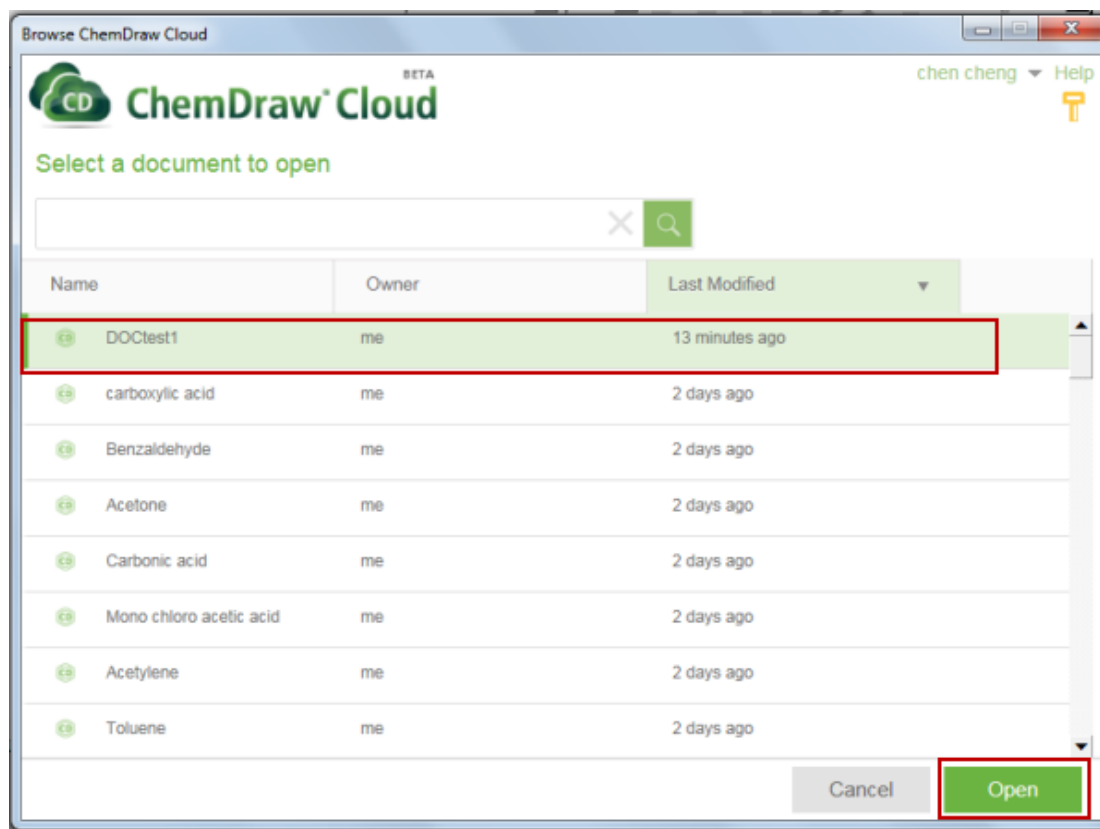
このページから、次のことを行えます。

- ドキュメントを開く
- ドキュメントを並び替える
- ドキュメントのページをめくる
- ドキュメントを検索する

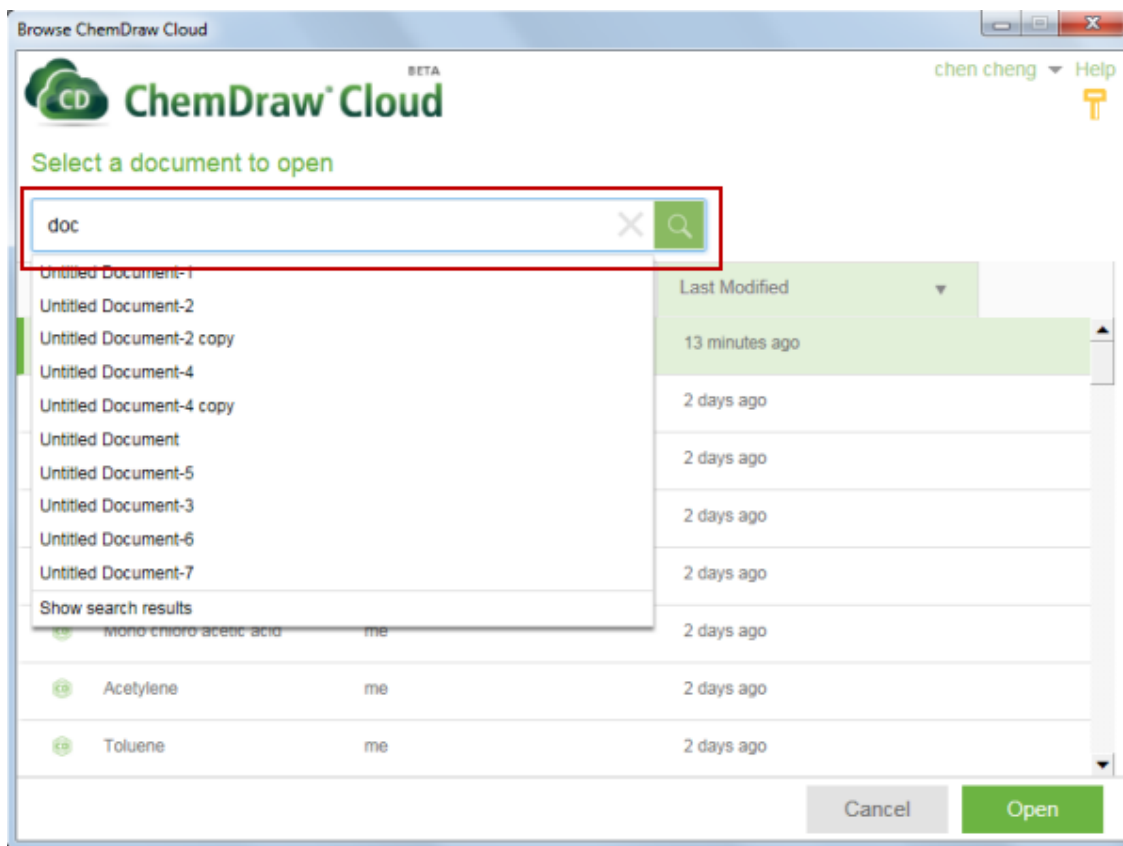
ドキュメントを開く

ドキュメントは以下の 3 つの方法のいずれかで開くことができます。

- リストの 1 つの行をクリックして、**Open** ボタンを押す。

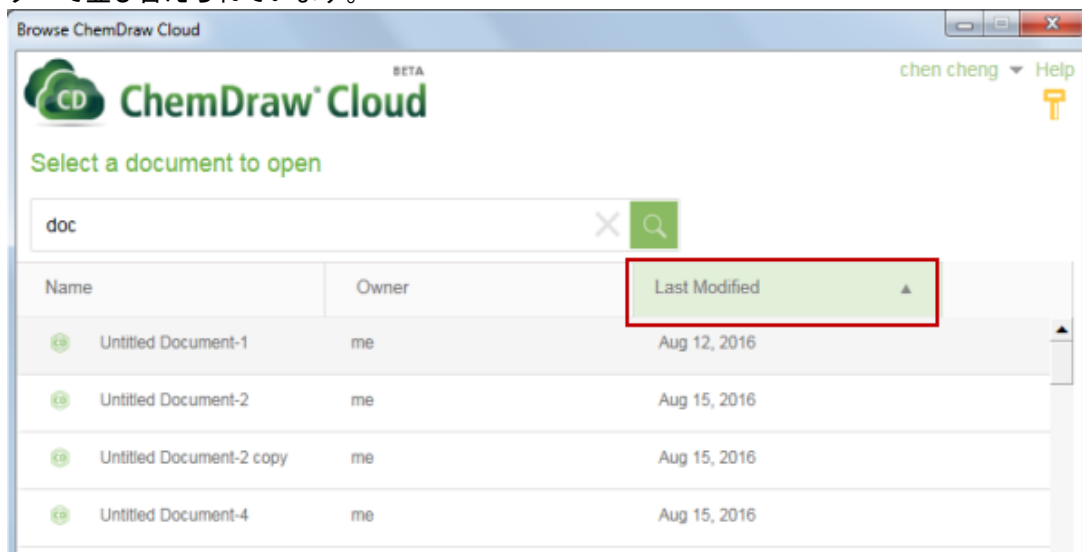


- リストの 1 つの行をダブルクリックする。
- 検索ボックスに文字を入力して、ドロップダウン リストを開く。リストのいずれかの項目をクリックする。



ドキュメントの並び替え

ドキュメントを並び替えるには、目的のヘッダーをクリックします。デフォルトでは、「Last Modified」ヘッダーで並び替えられています。

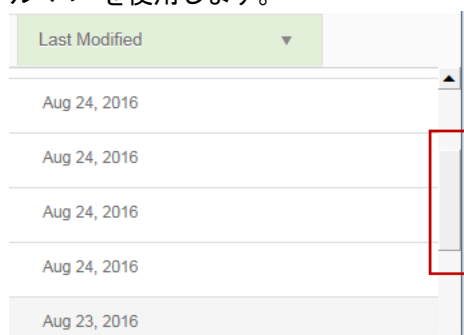


- 「Name」および「Owner」カラムは最初のクリックで昇順で並び替えられます。

- 「Last Modified」カラムは最初のクリックで降順で並び替えられます。

追加のレコードの参照

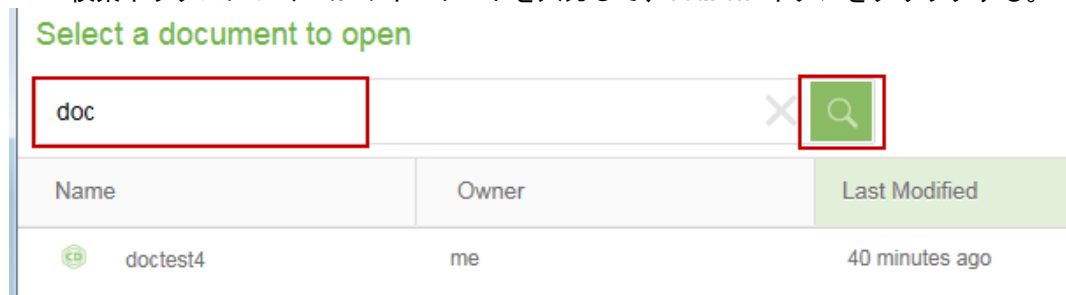
デフォルトでは、最新のレコードがロードされます。それ以上のレコードを参照する場合は、右側にあるスクロールバーを使用します。



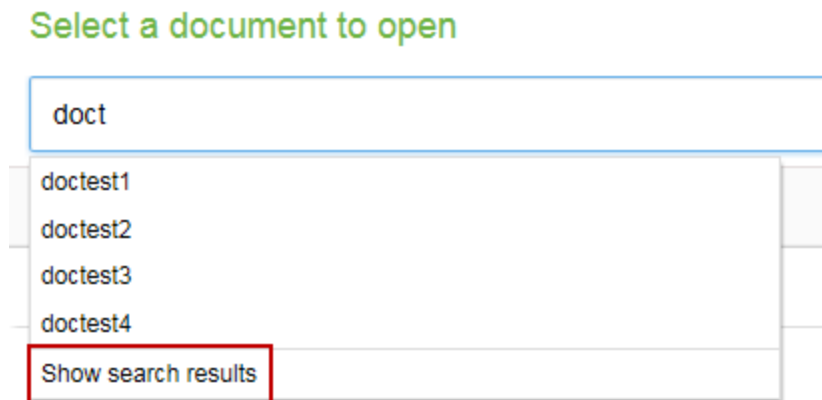
ドキュメントの検索

検索ボックスにいくつかのキーワードを入力すると、ドキュメントを検索できます。検索用語を入力しないと、すべてのレコードが表示されます。検索は以下の 3 つの方法で実行できます。

- 検索ボックスにいくつかのキーワードを入力して、**Search** ボタンをクリックする。



- 検索ボックスにいくつかのキーワードを入力して、ドロップダウン リストの **Show search results** をクリックする。

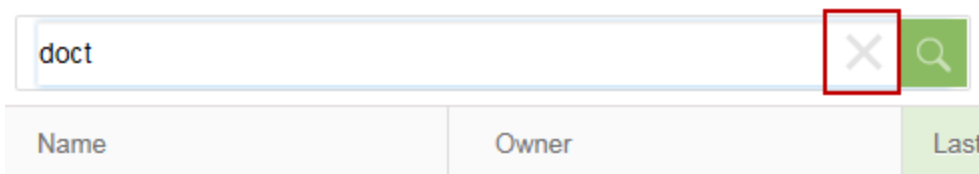


注: 推奨検索リストを表示するには、検索ボックスに 3 文字以上入力する必要があります。

- 検索ボックスにキーワードを入力して、**Enter** キーを押す。

注: 検索ボックスに文字を入力すると、右側に「X」マークが表示されます。「X」をクリックすると、フィルタがクリアされます。

Select a document to open



Name	Owner	Last
------	-------	------

ChemDraw E-Notebook とは

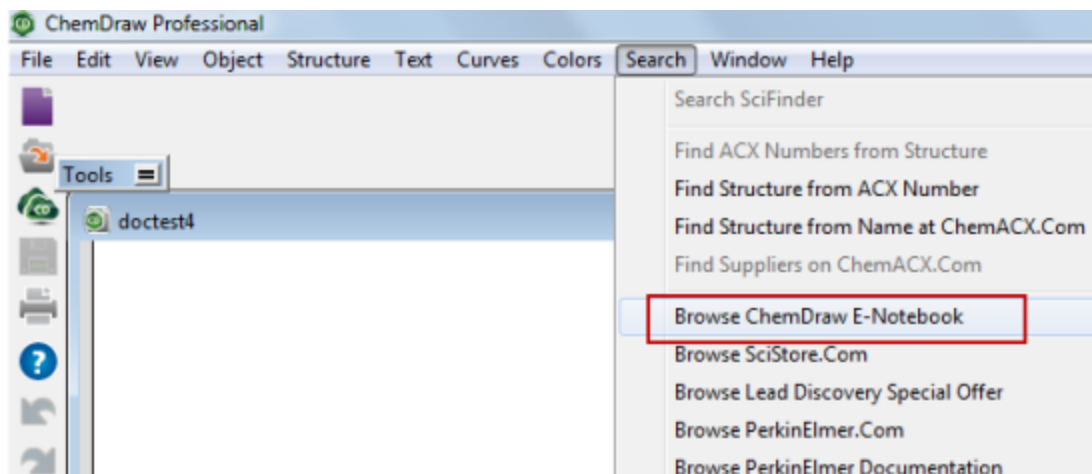
ChemDraw E-Notebook は、科学実験のデザインと記録をサポートするクラウドベースのツールです。間もなく ChemOffice Professional ユーザが利用できるようになります。ChemDraw E-Notebook およびデスクトップの ChemDraw アプリケーションでは、ChemDraw ドキュメントを共有できます。ChemDraw E-Notebook では HTML5 構造式エディタ機能を使用します。このエディタの外観と操作手順は、ChemDraw のデスクトップバージョンと一致しています。

注: ChemDraw E-Notebook アプリケーションは、間もなく ChemOffice Professional ユーザーが利用できるようになります。

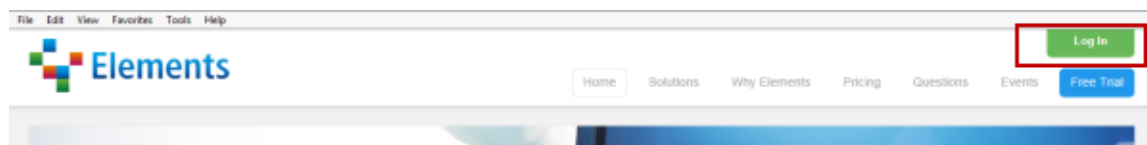
ChemDraw E-Notebook へのアクセス

ChemDraw E-Notebook にアクセスするには、次の操作を行ってください。

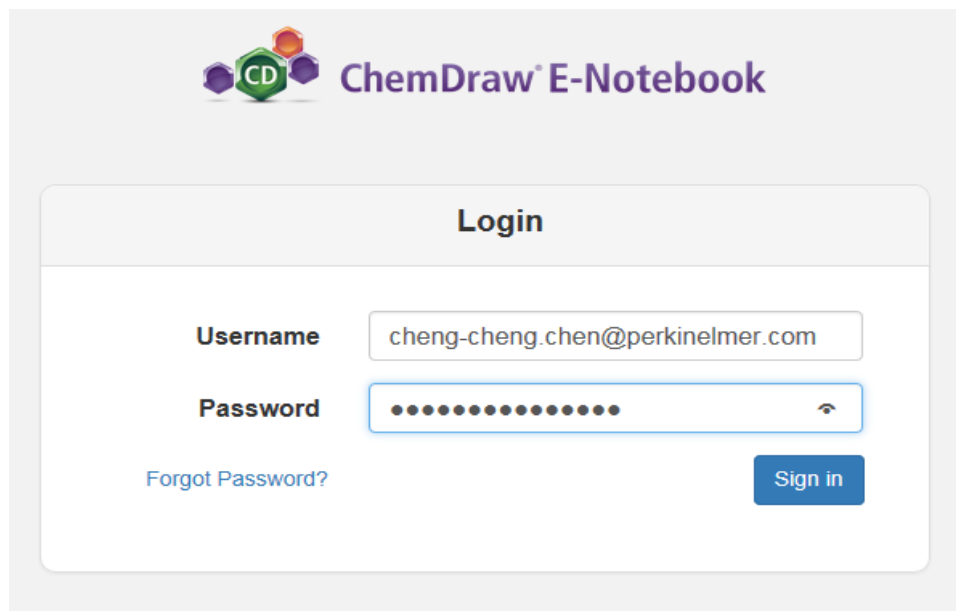
1. Search メニューの **Browse ChemDraw E-Notebook** をクリックします。



2. ChemDraw E-Notebook のホームページが表示されます。**Login** をクリックします。



3. Login ページに Username と Password を入力して、Sign in をクリックします。



The screenshot shows the ChemDraw E-Notebook login page. The page title is 'ChemDraw E-Notebook'. The login form is titled 'Login' and contains the following fields and buttons:

- Username:** cheng-cheng.chen@perkinelmer.com
- Password:** Masked with 12 dots and a visibility toggle icon.
- [Forgot Password?](#)
- Sign in** button

化学的解釈

ChemDraw は、描画作業中に、線、文字、その他の記号を化学的に意味のあるオブジェクトに変換します。これはバックグラウンドで行われますが、この化学情報を表示させることも可能です。また、ChemDraw で使用できる表記法の一部のみをサポートするファイル形式にエクスポートする際には、この化学情報が使用されます。このセクションでは、描画が ChemDraw でどのように解釈されるかについて説明します。

データベースの表記法

ほとんどのデータベースでは、化学的に正しい構造式を描画するだけでなく、データベースが理解できるように描画する必要があります。たとえば、フェロセンについて考えてみましょう。主要なデータベースでは、この物質は少なくとも 4 種類の方法で表現されます。

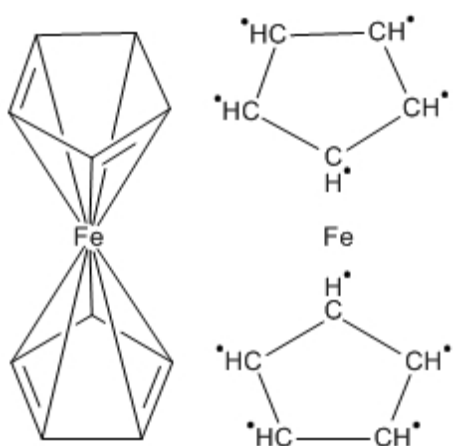
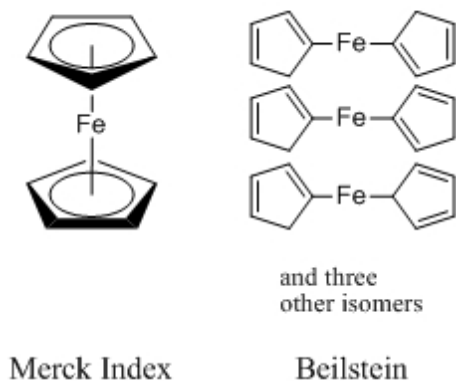


図 16.1: フェロセンの表現

あるデータベースの検索で見つけることができても、他のデータベースの検索では見つけられないこともあります。疑問がある場合は、データベースで使用される表記法をマニュアルで確認してください。

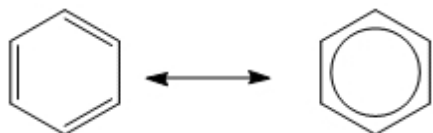
結合の表記法

次の表は、ChemDraw が認識できる化学表記です。

結合	説明
	任意の立体化学構造の単結合。
	最初に描画した原子から 2 番目に描画した原子への向きが、印刷物であれば、紙の下に入り込んでいく方向の下方立体化学構造の単結合。
	最初に描画した原子から 2 番目に描画した原子への向きが、印刷物であれば、紙の上に浮き上がってくる方向の上方立体化学構造の単結合。
	“上向き”と“下向き”の立体化学構造が未知の割合で混ざっている単結合。
	配位結合。ピリジン窒素酸化物における N-O 結合などの極性結合を表すために多く使用される。
	描画通りのシスとトランス立体化学構造を持つ二重結合。
	どんなシスまたはトランス立体化学構造を持つかわからない二重結合。
	互変異性の規則に基づき、単結合または二重結合になった互変異性結合。
	非局在化共鳴系の一部になった芳香族結合。
	三重結合。
	四重結合。



閉じた円環の近くにある単結合は芳香族結合として認識されます。



原子ラベル

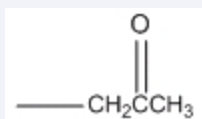
単純な原子ラベルの場合は、次のいずれかを含むことがあります。

	単一の元素
	1 個の元素といくつかの水素原子
	ニックネーム
	括弧内で繰り返す単位
	上記の任意の組み合わせ

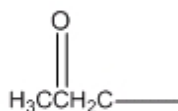
ChemDraw は原子ラベルを左から右に向かって順に解析し、原子価の標準的な規則を適用して原子間の結合を決定します。ただし、化合物の左側にある自動配置が設定された原子ラベルは例外です。このタイプの原子ラベルは逆

方向に (OCH₃ ではなく H₃CO のように) 表示され、解析も右から左に向かって行われます。各原子の標準的な原子価は、Isotopes Table の中で定義されています。

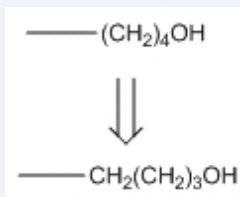
定義上、“単純な”原子ラベルでは、結合はすべて最初または最後の文字に付けられます。多重結合原子ラベルでは、複数の文字に結合が付けられるか、または原子ラベルの中央の 1 文字にすべての結合が付けられます。多重結合原子ラベルは、常に最初から最後まで解釈されますが、原子ラベルに自動配置スタイルを設定し、それを元の構造式の左側に配置した場合、右から解釈が始まります。



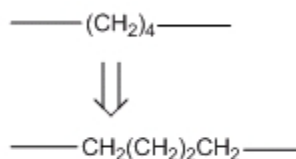
左から右に解釈される多重結合ラベル



右から左に解釈される多重結合ラベル



反復基の「開」括弧に結び付いている結合は、基の先頭に結び付いているかのように処理されます。



「閉」括弧または反復基の反復数に結び付いている結合は、基の末尾に結び付いているかのように処理されます。

単一ラベル内の複数のフラグメントは、次の方法で指定することができます。



暗黙的に原子価の標準的な規則を用います。

スペース、ピリオド（上付きでも下付きでもない）、ブレット（黒点）、またはそれらの組み合わせを用いて明示的に指定します。

— COO⁻Na⁺
 — COO⁻.Na⁺
 — COO⁻·Na⁺
 — COO⁻.Na⁺

— (CHOO⁻)₃Na⁺
 — (CHOO⁻)₃Na+Na+Na+

フラグメントの先頭にある上付きでも下付きでもない整数は、化学量論乗数と認識され、該当する数のフラグメントが明示的に描画されたかのように処理されます。

化学的に意味のあるテキスト

MeOH や H₂O などの化学式は、原子と結合で構成される構造式を描画するよりも多くの場合簡単です。ChemDraw は明確な構造式であれば解釈します。たとえば、CH₃COCH₂CH₃ はメチル エチル ケトンと解釈し、MeOH はメタノールと解釈します。C₆H₆ と表記されている場合はベンゼンかもしれませんが、他の異性体かもしれません。一般的に実験式 (C₂H₆ や H₂SO₄) は認識されませんが、構造式 (CH₃CH₃ や HOSO₂OH) は認識されます。実験構造の質量や元素解析はできますが、それには Expand Label コマンドを使用できません。実験構造は明確な構造式を必要とする別のアプリケーションに変換されると破棄されてしまいます。化学的に意味のあるテキストは、完全な化学式スタイル、または同位体や電荷を示す上付き文字スタイルである必要があります。また、テキスト ブロックが大きすぎる場合、ChemDraw はテキスト ブロックに埋め込まれている化学式を認識できません。

NH₄⁺

結合を描画し、原子ラベルを追加した後で、その結合を削除すると、フォント、サイズおよびスタイルが他の原子ラベルに一致する、化学的に意味のあるテキスト ブロックになります。

H₂O

テキスト ツールで文字列を作成した後で、そのタイトルを化学式スタイルに設定すると、フォント、サイズおよびスタイルが他のタイトルに一致する、化学的に意味のあるテキスト ブロックになります。

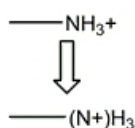
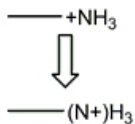
電荷

電荷は、原子ラベルの一部として、または化学記号ツールバーから選択された適切な記号を用いて作成できます。電荷は常に原子ラベル内の特定の元素に割り当てられ、その元素の受け入れ可能原子価は、同数の電子を持つ類似中性元素の受け入れ可能原子価になります。

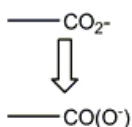
元素の後に続く電荷が、その元素に割り当てられます。



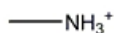
元素の後に続いていない電荷は、次の元素に割り当てられます。



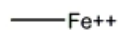
一価元素の後に続く、反復数が示された電荷は、その元素の前の元素に割り当てられます。



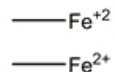
他の反復単位の後続く電荷は、その単位間で分配されます。



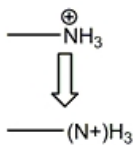
電荷は上付き文字で記述することもできます。



複数の電荷も適切に認識されます。



電荷に反復数を付けるには、電荷と反復数の両方を上付き文字で記述します。



化学記号ツールを使用して配置した“浮遊”電荷は、一番近くにある原子に割り当てられます。固定長として設定された距離内に原子が存在しない場合、その電荷は無視され、どの原子にも割り当てられません。



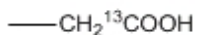
非局在化系内に配置した“浮遊”電荷は、Analyze Structure 機能により認識されますが、すべての電荷が特定の原子に関連づけられている必要がある形式で保存されると破棄されてしまいます。

同位体と元素

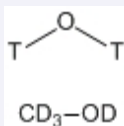
標準では、完全な元素表に記載されている同位体はすべて認識されます。このデータは CRC Press, Inc. が作成したもので、同位体は Isotopes Table ファイルに定義されています。テキスト エディタを使用してこのファイルを編集し、新しい同位体を追加することもできます。



元素記号の前の上付き数字は同位体原子量を示します。



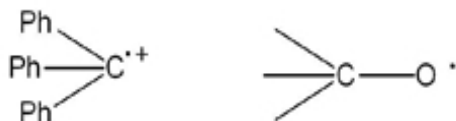
通常のエレメントを配置できるいずれの場所にも同位体を配置できます。



重水素と三重水素は 1 文字の記号で表すことができます。

ラジカル

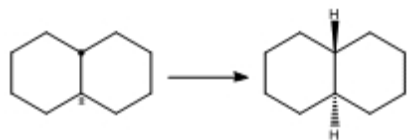
ラジカルは化学記号パレットの該当する記号で表示されます。ラジカルも電荷と同様に最も近い原子に割り当てられます。ラジカルは電荷と同じ効果を持ち、常に 1 個の自由な原子価を占有します。実際の表示は次の 2 つの例のようになります。



 **注:** 孤立電子対記号は、ラベルなしの炭素原子の横に配置されると、ジラジカルとして解釈されます。

H-ドットと H-ダッシュ

化学記号パレットにある H-ドットと H-ダッシュ記号は、水素原子の立体化学構造を表示します。これらの記号は次のような縮合系で最もよく見られます。



錯体

電子対を持つ化合物は、電子が不足したルイス酸と結合するルイス塩基として作用します。同様の作用は、非共有電子対と金属との間にも見られます。

このような相互作用を最適な方法で表現するには、電子対の電子供与体から電子受容体に伸びる配位結合を使用します。配位結合の代わりに単純な結合を使用すると、原子価エラーが発生します。配位結合を使用すれば、より正確に電子供給を表現できます。

錯体は、結合を用いずに明示的な非共有電子対でも表現できます。

単純な結合で錯体を表現するには、Atom Properties ダイアログ ボックスで、Abnormal Valence を **Allowed** に設定します。

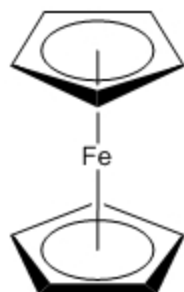
多中心結合

多中心結合が意味を持つのは、Structure メニューの **Add Multi-Center Attachment** コマンドを使用して作成したときのみです。多中心結合で、化学計算中に無視されるダミー原子が作成されますが、熟練した化学者にとっては意味のある図を作成できます。次に、いくつかの例を示します。

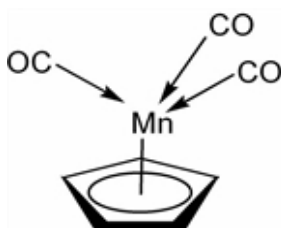
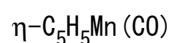
η^3 または π -アリル錯体



フェロセン、 π -アリル錯体



Cp_2TiCl_2 、もう 1 つの π -アリル錯体



Cahn-Ingold-Prelog

Cahn-Ingold-Prelog (CIP) の順位則に従って、四面体原子構造と二重結合について絶対立体化学構造を計算します。

CIP の順位則は、複数の配位子をそれぞれの優先順に並び、空間中に並べられた配位子の方向に基づいて記述子を決定するというものです。

配位子は、立体中心に追記されているエンティティです。たとえば、四面体炭素は 4 つの置換基のそれぞれに対応する配位子を持っています。四面体炭素が環に中にある場合でも 4 つの配位子を持ちます。2 つは環の外側、3 つ目は環に沿って右回り、4 つ目は環に沿って左回りになります。

配位子の優先順位を決定するために用いる 5 つの規則を以下に簡単に述べます。詳細については参考文献を参照してください。

- 規則 1. 原子の番号の高い原子が低い原子に優先
- 規則 2. 質量数の大きい原子が小さい原子に優先
- 規則 3. シスがトランスに優先
- 規則 4. 可能性の高い記述子が可能性の低い記述子に優先
- 規則 5. R が S に優先

ChemDraw は、立体中心から離れている原子 15 個まで違いを検査します。

立体化学構造標識

配位子の順位が決定すると、次の表に示した規則に従って標識が割り当てられます。

立体中心	標識
二重結合	各対の最高位の配位子が結合と同じ側にあれば Z、そうでなければ E を用います。
四面体原子	最下位の配位子が中心原子の背後に配座されている場合で、

立体中心

標識

- 他の 3 つの配位子が降順に右回りに配座されていれば R を用います。
- 他の 3 つの配位子が降順に左回りに配座されていれば S を用います。
- 擬似不斉原子については、r または s を用います。

立体化学フラグ

特定の立体中心のキラリティは、該当するウェッジ結合、ハッシュ結合、または単純な結合で表現できますが、すべての立体中心間の関係を考えると、分子全体の相対的な立体化学構造を表記する方が便利な場合があります。立体化学フラグは、一番近くにある構造式に適用されます。固定長の値によって指定された距離内に構造式が存在しない場合は、どの構造式にも立体化学フラグは割り当てられません。

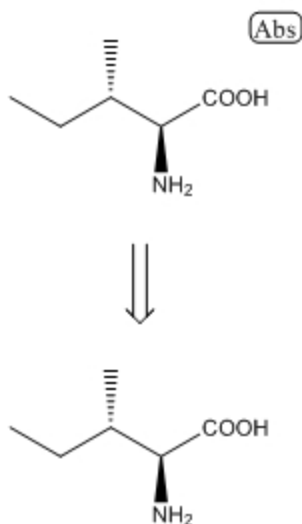


図 16.2: Absolute フラグは、描画したままの正確な立体異性体を表します。

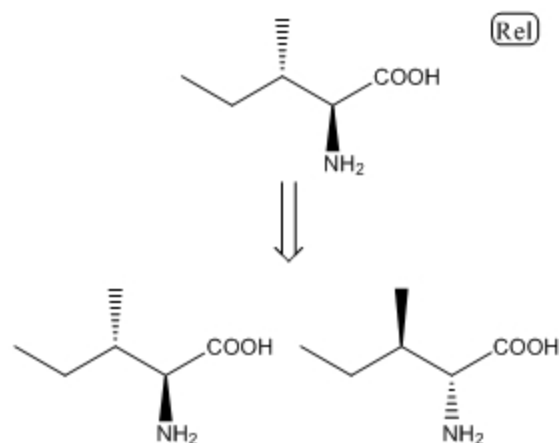


図 16.3: *Relative* フラグは、描画したままの正確な立体異性体またはその鏡像体を表します。

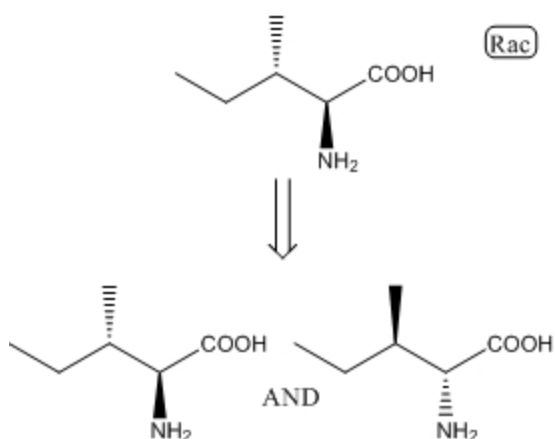


図 16.4: *Racemic* フラグは、描画したままの正確な立体異性体とその鏡像体と混在していることを表します。

ポリマー表現

ポリマーは、繰り返し出現する構造や構造フラグメントを括弧で囲むことによって表されます。括弧属性で、繰り返し単位の意味と向きを指定できます。括弧属性の詳細については、263 ページの“括弧属性の設定”を参照してください。

参考資料

『Graphic Representations (Chemical Formulae) of Macromolecules (Recommendations 1994)』 *Pure Appl. Chem.*、66、2469–2482 (1994)。

『Source-Based Nomenclature for Copolymers (Recommendations 1985)』 *Pure Appl. Chem.*、57、1427–1440 (1985)。次のサイトからも入手可能。<http://www.iupac.org/publications/books/pbook/PurpleBook-C7.pdf>

『Basic Definitions of Terms Relating to Polymers (1974)』 *Pure Appl. Chem.*、40、479–491 (1974)。次のサイトからも入手可能。<http://www.iupac.org/reports/1996/6812jenkins/index.html>

IUPAC 発行の、ポリマー科学および技術分野における文献および報告書の著者ガイドも参照してください。

解析メッセージ

構造式を完全に解析できない場合には、次の 2 種類の一般的なメッセージが表示されます。

- 最終的な解析には影響しないような問題を報告するステータス メッセージ
- 最終的な解析に影響するような致命的なメッセージ

メッセージ	説明
<i>There are too many bonds to this unlabeled Carbon.</i>	4 つ以上の満たされた原子価を持つ、ラベルの付いていない原子に対して表示されます。満たされた原子価は、結合次数、電荷、ラジカルおよびフリー サイトの合計などです。各芳香族結合は 1.5 として計算されますが、その原子への唯一の結合でない場合は小数点以下が切り捨てられます。電荷には正または負の符号が付けられ、配位結合による暗示的な電荷も含まれます。Substituents 検索式属性では、Free Sites、Up to、Exactly が同様に扱われます。したがって、2 つの明示的な結合と「Substituents:Up To 3」または「Substituents:Exactly 3」または「Substituents:Free Sites 1」の属性値を持つ原子は、3 つの原子価が満たされていることになります。
<i>An atom in this label has an invalid valence.</i>	結合を付加する場所が見つからないか、または原子に付加する結合が見つからない場合に表示されます。各元素の有効原子価は Isotopes Table ファイルに一覧表示されています。
<i>ChemDraw can't interpret this label.</i>	元素、ニックネーム、総称ニックネームまたは代替基名として識別できないテキストが見つかった場合に表示されます。
<i>Parentheses don't match.</i>	「開」括弧に対する「閉」括弧が存在しない場合に表示されます。
<i>This label has conflicting or unassignable charges.</i>	同一の元素に対して正と負の電荷が割り当てられている場合、複数の方法で電荷が割り当てられている場合、またはニックネーム、総称ニックネームまたは代替基名に電荷が割り当てられている場合に表示されます。
<i>Formula cannot be computed for queries.</i>	総称ニックネーム、元素リストまたは代替基を含むすべてのラベルに対して表示されます。これは単なるステータス メッセージで、問題のあるラベルが選択されなかったものとして解析が続行します。

メッセージ

説明

Text not in Formula style won't be interpreted.

原子ラベルまたは代替基名ではなく、化学式、下付き文字または上付き文字スタイル以外のテキストが含まれている最初の文字列に対して表示されます。これは単なるステータス メッセージで、選択対象になっているタイトルの数に関係なく、一度だけ表示されます。

This named alternative group contains no attachment point.

代替基ボックス内にあり、結合点が欠けているすべての構造式に表示されます。これは単なるステータス メッセージです。

This named alternative group contains fragments with inconsistent valences.

代替基内ボックス内の構造式の結合点の数が異なる場合、その代替基ボックスに対して表示されます。代替基ボックス内のすべての構造式は互換的に使用されるので、これらの構造式には同数の結合点が含まれている必要があります。これは単なるステータス メッセージです。

This named alternative group contains no fragment.

空の代替基ボックスに表示されます。これは単なるステータス メッセージです。

Part of a molecule is outside of the alternative group definition.

代替基ボックスの枠が構造式の一部と交差する場合に表示されます。これは単なるステータス メッセージです。

This isolated bond is probably not intended to have chemical significance.

ラベルのない単結合が別の結合に結び付いていない場合に表示されるステータス メッセージです。すべての結合は通常、 C_2H_6 として化学的に解釈されるため、描画の線としてのみ使用している場合、予期せぬ結果を産み出す可能性があります。これは単なるステータス メッセージです。

The atom is very close to another atom or bond.

原子が別の原子や結合にほとんど接しているにも関わらず、結合していない場合に表示されます。実際には結合を意図したものである場合、構造式の解析結果は間違っただけとなります。これは単なるステータス メッセージです。

The stereocenter has no stereobonds specified.

ウェッジ結合、ハッシュ結合、点線結合、または太線結合のない不斉中心に対して表示されます。これは単なるステータス メッセージで、Show Stereochemistry がオンになっていて、構造式内に他に少なくとも 1 つはウェッジ結合、ハッシュ結合、点線結合、または太線結合がある場合にのみ表示されます。

There is a valence and charge error somewhere in this aromatic system.

(中間に円のある) 非局在化系として描画された奇数員の環で、対応する電荷が付随していない場合に表示されます。たとえば、シクロペンタジエンを非局在化して表した場合には、負の電荷または多中心の結合のどちらかが含まれていなければなりません。

メッセージ

The stereocenter has conflicting or ambiguous stereobonds specified.

説明

描画された構造式から絶対立体化学構造が判別できない立体中心（四面体原子、非対称二重結合など）に対して表示されます。たとえば、太線結合によって 4 つの異なる配位子に連結されている炭素原子には、このメッセージが表示されます。このメッセージが表示されるのは、Show Stereochemistry がオンになっている場合のみです。

This label has an unrecognized isotopic mass.

元素記号の前に上付き文字の数字があるラベルで、その数字が認識されている同位体に対応していない場合に表示されます。たとえば、 $^{24}\text{CH}_3$ などです。

特性計算

最大 200 個までの重原子で構成されている構造式について、選択した物理的、熱力学的特性の予測値を算出することができます。このセクションでは、これらの値の算出方法を説明します。

LogP

LogP 値の予測には次の 3 つの微細化法が使用されます。

- **方法 1:** 最小二乗分析法で 830 の分子について、94 の原子寄与率を評価した結果に基づきます。この方法は、標準偏差 0.47 LogP 単位の精度があり、水素、酸素、窒素、硫黄、ハロゲンを含んだ分子を扱うことができます。
- **方法 2:** 1 つ目の方法の延長ですが、最小二乗分析法で 893 の分子について、120 の原子寄与率を評価した結果に基づきます。1 つ目の方法で可能な原子に加え、燐およびセレン原子を持つ分子も扱えるようになりました。この方法は、標準偏差 0.50 LogP 単位の精度で動作します。
- **方法 3:** 最小二乗分析法で 1868 の分子について、222 の原子寄与率を評価した結果に基づきます。この方法では、標準偏差 0.43 LogP 単位で LogP を計算し、水素、酸素、窒素、硫黄、ハロゲン、燐原子を持った分子を扱うことができます。この方法は標準偏差 0.83 LogP 単位で、内部に水素結合のある分子に適用されます。

ヘンリーの法則

ヘンリーの法則の定数を予測するためには、次の 2 つの方法を使用します。

- **方法 1:** この方法は、結合寄与率法に基づいた方法であり、59 の結合寄与率値と 15 の補正ファクターを使います。寄与率は、345 の化学薬品のデータ グループを用い、最小二乗法で算出してあります。この方法は平均誤差 0.30 単位、標準偏差 0.45 単位で推定し、炭素、水素、酸素、窒素、硫黄、燐、ハロゲンを含んだ分子を扱うことができます。
- **方法 2:** 直線回帰法で得た方程式を用いて、ヘンリーの法則の定数を推定します。多官能基化合物はこの研究の対象から外されました。離れた極性基間の相互作用がある化合物に、この方法を使うことはできません。

モル屈折率

モル屈折値を推定するためには、次の 2 つの微細化法を用います。

- **方法 1:** 拘束付き最小二乗法を用いて、504 種類の分子から算出評価した 93 の原子寄与率があります。この方法は、標準偏差 1.27 cm³/mol で行い、水素、酸素、窒素、硫黄、ハロゲンを持つ分子を扱うことができます。
- **方法 2:** 1 つ目の方法の延長であり、拘束付き最小二乗解析法を使って 538 種類の分子から算出評価した 120 種類の原子寄与率があります。1 つ目の方法で可能な原子に加え、燐およびセレン原子を持つ分子も扱えるようになりました。この方法は、0.77 cm³/mol の標準偏差でも使えます。

pKa、CLogP、CMR

- Medicinal Chemistry Project と BioByte 社が開発したフラグメントベースの方法で、LogP およびモル屈折率を計算するための特定のアルゴリズムです。詳細については、<http://www.biobyte.com/blqsar/index.html> を参照してください。
- LogP と CLogP はオクタノール/水分配係数を推定しますが、異なる方法を使用します。

- CLogP と CMR は、Chemical Properties ウィンドウの一部として計算されます。ただし、LogP データには、次のように他にもいくつかのソースが存在します。
- **LogP 予測に対する ChemDraw Report ウィンドウ:** Chemical Properties ウィンドウには、LogP の平均値と MR の平均値が表示されます。“Report” ボタンをクリックすると、適用可能な各推定方法の元の値を確認できます。推定方法は Crippen の微細化法、Viswanadhan の微細化法、および Broto の微細化法です。
- **LogP 実験的データに対する ChemDraw Report ウィンドウ:** 選択した物質の Chemical Properties ウィンドウの Report ボタンには、“Data from Database” セクションが含まれています。このセクションには、指定した pH レベルでの分配係数の測定値と pKa 値、および引用している原典が含まれます。
- **ChemDraw ChemFinder Hotlink ウィンドウ:** 使用可能ないくつかのデータベースには、次のような LogP および pKa 情報が含まれています。
 - ChemSpider (InChI リンクからアクセス) は、LogP と LogD のいくつかのバリエーションを予測します。
 - ChemINDEX (Physical Properties セクション、Environment Science Center データベース) には、pKa と LogP の実験的データが含まれています。

ChemDraw/Excel

Microsoft Excel の ChemDraw アドイン モジュールは次のものを予測します。

- LogP (関数 CHEMPROPPRO_LOGP)
- CLogP (関数 CLOGP_DRIVER_PARTITION_COEFFICIENT)
- MR (関数 CHEMPROPPRO_MOL_REFRACTIVITY)
- CMR (関数 CLOGP_DRIVER_MOL_REFRACTIVITY)

ChemFinder/BioViz

Property Populator は次のものを予測します。

- LogP (サーバー ChemPropPro、特性 LogP)
- CLogP (サーバー CLogP ドライバ、特性 Partition_Coefficient)
- MR (サーバー ChemPropPro、特性モル屈折率)
- CMR (サーバー CLogP ドライバ、特性モル屈折率)

Chem3D

Property Picker は次のものを予測します。

- LogP (ChemPropPro LogP)
- CLogP (CLogP ドライバ分配係数)
- MR (ChemPropPro モル屈折率)
- CMR (CLogP ドライバ モル屈折率)

Chem3D MOPAC インターフェイス

酸素に結合される最も酸性度の高い水素原子の pKa を計算します。詳細については、

http://www.openmopac.net/pKa_table.html を参照してください。

詳細については、205 ページの “ChemDraw/Excel の関数”、324 ページの “LogP”、324 ページの “特性計算”、324 ページの “pKa、CLogP、CMR” を参照してください。

TPSA (トポロジカル極性表面積)

分子の PSA (測定単位は平方オングストローム) は、体内の薬学的移動特性を予測するために利用できます。ChemDraw では、そのような革新的なアルゴリズムの 1 つが実装されています。従来、この特性は時間のかかる 3D 技術を使用して計算されていました。しかし最近の論文で、この特性を正確かつ迅速に予測する方法が発表されました。

その他の特性

標準沸点と標準融点

次の 2 つの方法を使用して、絶対温度で推定されます。

- **方法 1:** Joback の微細化法。
- **方法 2:** Stein 修正の Joback の微細化法。すべての沸点は 1 atm の圧力下で推定されます。

さまざまな特性

生成熱、ギブスの自由エネルギー、理想気体熱容量、凝固点、臨界温度、臨界圧力、臨界容積は、Joback の微細化法を用いて推定されます。

ChemDraw の Web 情報

PerkinElmer Informatics Web サイトは有益な情報を得られる貴重な情報源です。このサイトを追加するには次の方法があります。

- ソフトウェアの登録
- 名前または ACX 番号による化学情報の検索や、ワークシートへの構造式の挿入
- テクニカル サポートの利用と、マニュアルやソフトウェアなどのダウンロード

ChemDraw では **Search** メニューの適切なオプションを選択することにより、このサイトに直接アクセスすることができます。

オンライン登録

ChemOffice アプリケーションをアクティブにするには、PerkinElmer Informatics Web サイトでアプリケーションを登録し、登録コードを入手します。必要な情報を登録フォームに入力して送信すると、登録コードが電子メールで通知されます（この登録方法はサイト ライセンスには適用されません）。

シリアル番号が無効な場合やインターネットに接続できない場合は、PerkinElmer Informatics のサポート窓口を通じて登録コードを取得する必要があります。


ChemOffice アプリケーションは、登録作業が完了するまでの間も使用できます（ただし回数に制限があります）。使用回数が制限に達した場合は、ソフトウェアの登録が完了するまで使用できなくなります。

このサイトでは、ソフトウェアの登録だけでなく、参考資料の請求や、ChemFinder.com、ChemACX.com の制限付き無償アクセス登録および電子メール版 ChemNews の購読登録を行うこともできます。これらのオンライン登録を行うには、**Search** メニューの **Register Online** をクリックします。ユーザー登録の Web ページがブラウザに表示されます。

ユーザーズ ガイド

Search メニューを使用すると、現在および過去のマニュアルを見つけることもできます。マニュアルのページにアクセスするには、**Search** メニューの **Browse PerkinElmer Documentation** をクリックします。

デスクトップ >> サポート ドキュメント Web ページが表示されます。Manuals を選択します。

 **注:** PerkinElmer Informatics のユーザー アカウントをお持ちでない場合は、ユーザー アカウントの登録ページに進みます。

テクニカル サポート

Search メニューの **Browse PerkinElmer Technical Support** をクリックすると、テクニカル サポート Web ページが開きます。このページでは、PerkinElmer Informatics Knowledge Base、製品ダウンロード、FAQ、マニュアルなどの Desktop Support リソースが提供されています。

1. **Search** メニューの **Browse PerkinElmer Technical Support** をクリックします。テクニカル サポート Web ページが開きます。
2. **Desktop Support** をクリックします。

ChemACX.com の登録サプライヤー

ChemACX (Available Chemicals Exchange) は市販されている化学製品のデータベースを提供します。データベースには、研究および工業化学薬品販売業者のカタログが格納されています。

ChemACX.com に接続して描画した化合物を実際に扱っている販売業者のレコードを検索するには、次の操作を行ってください。

1. ChemDraw 内で、描画した構造式を選択します。
2. **Search** メニューの **Find Suppliers on ChemACX.com** をクリックします。ChemACX.com のページが開き、選択した構造式の情報が表示されます。

ChemACX Web サイトの使用の詳細については、『*ChemOffice Enterprise Workgroup & Databases Guide*』を参照してください。

ACX 構造式と ACX 番号

ChemDraw は ACX を検索して関連する構造式および番号に関する情報を表示します。これらの情報をドキュメントに保存することもできます。

ACX 構造式

ACX 構造式を検索するには ACX 番号または名前のいずれかを使用します。

ACX 番号を指定して構造式を検索するには、次の操作を行ってください。

1. **Search** メニューの **Find Structure from ACX Number** をクリックします。Find Structure from ACX Number ダイアログ ボックスが表示されます。
2. ダイアログ ボックスに ACX 登録番号を入力します。
3. **OK** をクリックします。ドキュメントに構造式が表示されます。

名前を指定して構造式を検索するには、次の操作を行ってください。

1. **Search** メニューの **Find Structure from Name at ChemACX.com** をクリックします。Find Structure from Name ダイアログ ボックスが表示されます。
2. ダイアログ ボックスに化学名または商品名を入力します。
3. **OK** をクリックします。ドキュメントに構造式が表示されます。

ACX 番号

ある構造式の ACX 番号を検索するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式を選択します。
2. **Search** メニューの **Find ACX Numbers from Structure** をクリックします。Find ACX Numbers from Structure ダイアログ ボックスに ACX 番号が表示されます。

Chem3D ActiveX コントロール

[Chem3D ActiveX コントロール](#) ページでは、Web ページへのコントロールの組み込みを検討している管理者 (Web 開発者)、およびエンド ユーザー向けに Chem3D プラグインと ActiveX のドキュメントを提供しています。

す。

SciStore.com

SciStore では、生命科学用デスクトップ ソフトウェア、エンタープライズ ソリューション、化学データベース、およびバイオテクノロジー業界、製薬業界、化学業界向けのコンサルティング サービスが提供されています。SciStore にアクセスするには、**Search** メニューの **Browse SciStore.com** をクリックするか、SciStore (www.scistore.com) にアクセスします。

PerkinElmer Informatics

PerkinElmer Informatics のホーム ページを開くには、**Search** メニューの **Browse PerkinElmer.com** をクリックします。PerkinElmer Informatics の Web サイトで、新製品情報をチェックしてください。PerkinElmer Informatics のホーム ページから ChemNews.Com や他のページにもアクセスできます。



ChemOffice SDK の使用

ChemOffice Software Developer's Kit (SDK) を使用すると、アプリケーションをカスタマイズできます。ChemOffice SDK ページを表示するには、**Search** メニューの **Browse ChemOffice SDK** をクリックします。ChemOffice SDK ページでは、Application Programming Interfaces (API) のマニュアル、サンプル コード、およびその他のリソースが提供されています。

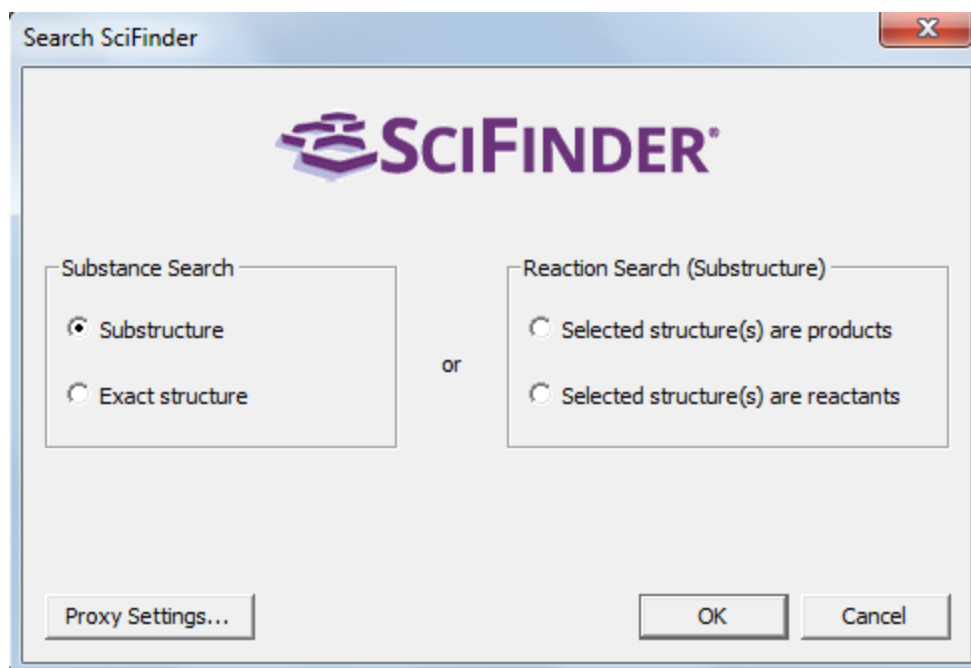
ChemDraw を使用した SciFinder® の検索 (Professional レベル)

SciFinder® は CAS (Chemical Abstract Services) によって開発された研究検索アプリケーションです。化学および関連科学分野における世界最大の信頼できる文献、物質、反応ソースに一元的にアクセスすることができます。

ChemDraw には、デスクトップで作成した検索式を使用して SciFinder® を検索するためのインターフェイスが用意されています。次のいずれかの方法で、ChemDraw 構造式または反応の検索式を SciFinder® に送信します。

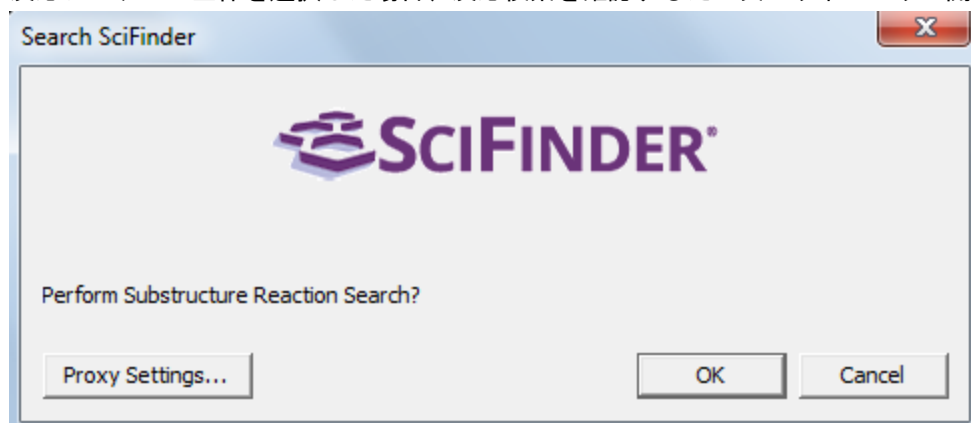
- メニュー バーの下にある水平なメイン ツールバー上の SciFinder® アイコンをクリックします。 
 - **Search** メニューの **Search SciFinder** をクリックします。
-  **注:** 検索対象の構造式が選択されている場合を除き、SciFinder® アイコンと Search メニュー項目はグレー表示になっています。

Search SciFinder ダイアログ ウィンドウが開きます。1 つの構造式または複数の構造式を選択した場合、次のウィンドウが表示されます。




これで、部分構造式検索を実行するかまたは物質データベースの完全一致検索を実行するか、あるいは反応データベースを検索するか、選択した構造式が反応物か生成物かを選択できます。反応検索はすべて部分構造式検索です。


反応シーケンス全体を選択した場合、反応検索を確認するため次のウィンドウが開かれます。



OK を押すと、SciFinder® が起動し、検索結果が取得されてブラウザ ウィンドウに表示されます。

2 番目またはその後の検索を SciFinder® に送信すると、SciFinder® の回答セットを既に受け取ったことを警告する中間画面が表示されます。最新の検索を続行するには、OK をクリックします。

 **注：** 検索を続行するには、次の条件が必要です。

- インターネットに接続されていること
 - データベースにアクセスするための有効な SciFinder® 個人購読があること
-  **注:** 大学経由で購読していて、プロキシ サーバーを利用して SciFinder® に接続している場合は、*Proxy Settings* ボタン (Windows) またはプロキシ サーバー 標識行 (Mac) の隣の矢印をクリックして、使用しているアカウントのプロキシ サーバー URL を入力する必要があります。この操作は、初回検索実行時にのみ必要です。
- ログインしていない場合、または有効な SciFinder® 購読がない場合は、SciFinder® のメイン ページにリダイレクトされます。そこで、ログインするか、購読方法に関する情報を見ることができます。ChemDraw の高度な検索構造式作成機能の中には、SciFinder® が完全に解釈できないものもあります。検索式に SciFinder® で処理できない仕様が含まれる場合、簡素化の試行により可能な限り解釈され、警告メッセージが表示されます。解釈された検索構造式は SciFinder® スケッチャーに表示され、検索を開始する前に必要に応じて更なる処理が行われます。得られた結果が適切でない場合は、CAS または PerkinElmer のカスタマ サポートにご連絡ください。問題の対処に努め、お客様のご要望に応じる代わりとなる検索式をご提案いたします。

検索に関する追加情報:

- 反応内の分子を選択した場合、反応データベースの検索ではなく物質データベースの検索を指定できます。
- 分子の一部を検索エンティティとして選択できます。完全一致検索または部分構造式検索用の分子全体と同じように処理されます。選択内容が複数のフラグメントで構成される場合、それらは独立した一部分として処理されます。検索結果がヒットとして登録されるには、そのすべてが CAS record 内に含まれている必要があります。
- 単一検索では、複数ステップの反応または複数の反応はサポートされていません。反応シーケンスの各ステップを個別に検索する必要があります。

チュートリアル

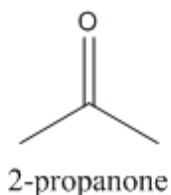
このチュートリアルでは描画の基本テクニックを学びます。各チュートリアルでは、新しい描画方法を紹介するか、またはそれ以前のチュートリアルとは異なった別の手順を示します。そのため、最初のチュートリアルから順序どおりに 1 つずつチュートリアルを進めていくことをお勧めします。

チュートリアルで使われている用語に慣れるために、作業を開始する前にもう一度 [1 ページの “このマニュアルの表記規則”](#) をご確認ください。


ChemDraw では化学構造の作成中に、その構造が化学的に正しいかが検査されます。エラーが検出されると、問題があるオブジェクトの周りに赤いボックスが表示されます（赤いボックスは印刷されません）。特定のオブジェクトの赤いボックスを無効にするには、そのオブジェクトを右クリックし、コンテキストメニューの **Display Warnings** の選択を解除します。

チュートリアル 1: 構造式の描画

このチュートリアルでは、構造式を描画する方法について説明します。




結合角と長さを固定するには、**Object** メニューの **Fixed Lengths** と **Fixed Angles** をクリックします。これにより、結合長と結合角が構造式で一定になります。

 **注:** 固定長の長さは *Document Settings* ダイアログの *Drawing* タブで設定します。固定角は常に 15 度の倍数になります。

結合を作成するには、次の操作を行ってください。

1. **View** メニューの **Show Main Toolbar** をクリックします。
 2. メイン ツールバーの線結合ツールを選択します。
 3. ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。結合が表示されます。
 4. 2 番目の結合を追加するには、前の手順で作成した結合の右端をクリックします。
- 2 つの結合が作る角度は 120 度になります。

 **注:** 連鎖角の設定により、2 つの結合間の角度が決定されます。連鎖角を変更するには、[28 ページの “描画設定”](#) を参照してください。

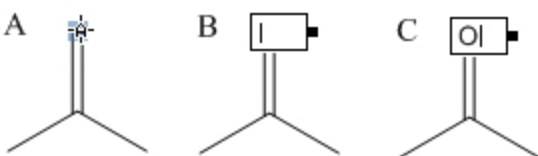
5. 第三級炭素を作成するには、上記の手順 4 でクリックした結合の端点をもう一度クリックします。

結合次数の変更

二重結合を作成するには、目的の結合の中央にマウス ポインタを重ねて「2」と入力するか、その結合をクリックします。

原子ラベルの追加

1. テキスト ツールを使用して、以下のように二重結合の端点をクリックします。結合の端の位置にテキストボックスが表示されます。



2. テキスト ボックスに大文字で「O」と入力します。
3. キーボードの Esc キーを押してテキスト ボックスを閉じるか、別のツールを選択します。
4. 別の方法として、二重結合の端点の原子にマウス ポインタを重ねて O キーを押すことでも入力できます。この方法では ChemDraw のホットキー機能を使用します ([第 5 章の「ショートカットとホットキー」](#)を参照してください)。

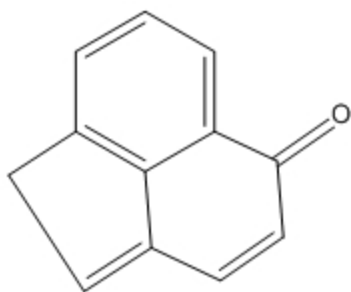
タイトルの追加

分子名を指定するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを使用して、構造式の左下の領域をクリックします。テキスト ボックスが表示されます。
2. テキスト ボックスに「2-propanone」と入力します。
3. キーボードの Esc キーを押してテキスト ボックスを閉じるか、別のツールを選択します。


チュートリアル 2: 環の描画

このチュートリアルでは、環を使用して構造式を作成します。



環を作成するには、次の操作を行ってください。

1. ベンゼン ツールを使用して、Shift キーを押しながらドキュメントの空白領域をクリックします。

 **注:** シクロペンタジエン環ツールまたはベンゼン ツールの使用時は、Shift キーを押しながら共鳴構造を変更しません。

2. ベンゼン環の右下にある結合の中央部をポイントします。
3. クリックして、もう 1 つの環を縮合させます。
4. 最終的な構造式では 2 番目の環に二重結合が 1 つだけあります。この構造式を修正するには、2 番目の環の二重結合の 1 つにマウス ポインタを重ねて「1」と入力します。もう一方の二重結合についても同じ操作を繰り返します。

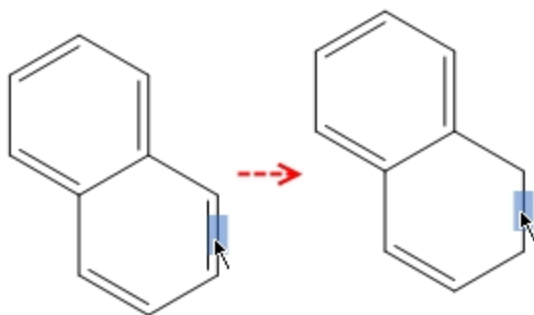
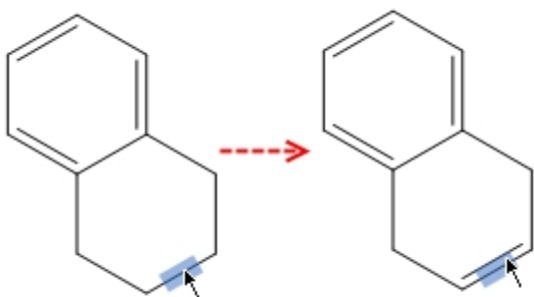
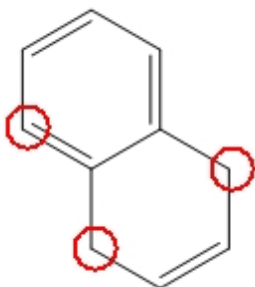


図 19.1: 結合次数を変更するには、「1」と入力します。

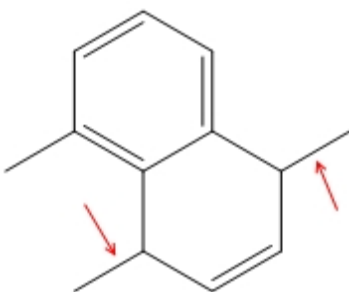
5. 二重結合を 2 番目の環に作成するには、目的の結合にマウス ポインタを重ねて「2」と入力するか、その結合をクリックします。



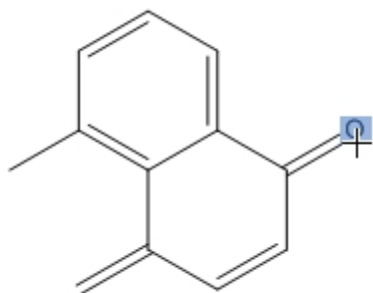
6. 結合ツールを使用して、下図の円で囲んだ炭素原子をクリックします。3 つの結合が表示されます。



7. 下図に示すように結合の 1 つにマウス ポインタを重ねて「2」と入力します。もう一方の結合についても同じ操作を繰り返します。



8. 右端の炭素原子にマウス ポインタを重ねて文字「0」を入力し、ケトン官能基を作成します。

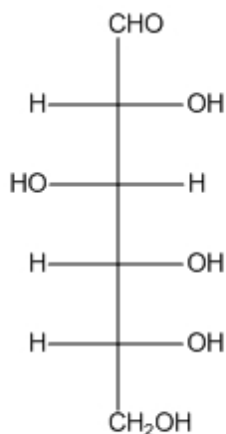


9. 左端の炭素同士を結合するには、線結合ツールを選択し、一方の炭素をクリックしてもう一方の炭素までドラッグして結合を作成します。

これで構造式は完成です。

チュートリアル 3: フィッシャー投影図

このチュートリアルでは、グルコースのフィッシャー投影図の作成方法を学習します。



Chemical Formula: C₆H₁₂O₆

Exact Mass: 180.06

Molecular Weight: 180.16

m/z: 180.06 (100.0%), 181.07 (6.9%), 182.07 (1.4%)

Elemental Analysis: C, 40.00; H, 6.71; O, 53.29

図 19.2: フィッシャー投影図

最初の結合を描画するには、次の操作を行ってください。

1. 線結合ツールをクリックします。
2. ドキュメント ウィンドウ内をポイントします。下へドラッグして 1 番目の結合を描画します。
3. 下側の原子をポイントし、再度下向きにドラッグして、2 番目の結合を描画します。

Show Chemical Warnings が選択されているため、赤い波線のボックスが表示されます。現時点では、このオプションを選択したままにしておきます。

4. 5 つの結合ができるまで手順 3 を繰り返します。

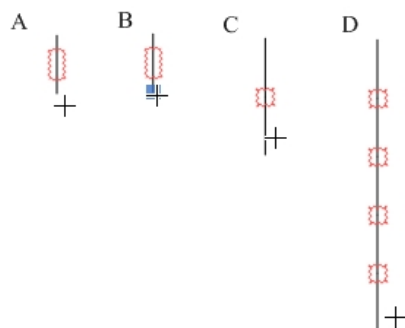


図 19.3: 骨格構造の描画

注: 描画した結合の長さに添ってポイントをドラッグすると、ポイントとして矢印と + が交互に表示されます。矢印は結合の中央部をポイントしていることを示し、+ は原子をポイントしていることを示します。

作成した結合列の 2 番目の原子に水平結合を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 水平結合を追加するために、1 番上の化学警告ボックスをポイントしてクリックします。結合を追加すると、赤い波線のボックスの表示が消えます。
2. もう一度クリックして、反対側にも水平結合を追加します。
3. 化学警告ボックスごとに上記の手順 1 と 2 を繰り返して、すべての水平結合を追加します。

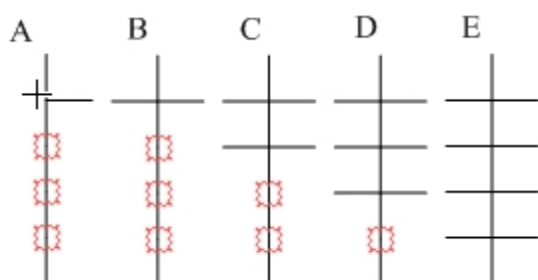


図 19.4: 骨格構造に対する水平な結合の追加

最初と最後の炭素原子にラベルを追加するには、次の操作を行ってください。

1. テキスト ツールを選択します。
2. 1 番上の炭素原子をクリックしてテキスト ボックスを開き、「CHO」と入力します。
3. 1 番下の炭素原子をクリックし、「CH₂OH」と入力します。

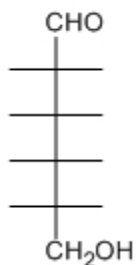


図 19.5: 原子ラベルの追加

繰り返し出現する水素およびヒドロキシル基のラベルを追加するには、次の操作を行ってください。

1. 次の図に A で示した原子をクリックし、「H」と入力します。

2. B で水素の原子ラベルが付いている位置の各原子（直前の手順でラベルを付けた原子を除く）を順にダブルクリックします。

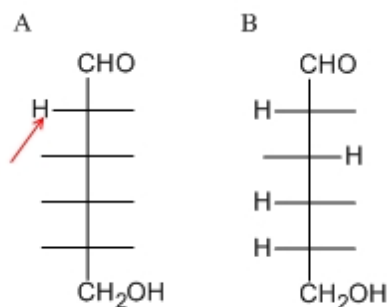


図 19.6: 繰り返し出現する原子ラベルの追加

✔ ヒント: テキスト ツールで原子をダブルクリックすると、前回追加したラベルと同じラベルを追加できます。

- まだラベルが付いていない位置のいずれかの原子をクリックし、「0」と入力します。
- 残りの原子を順にダブルクリックして、同じラベルの追加を繰り返します。

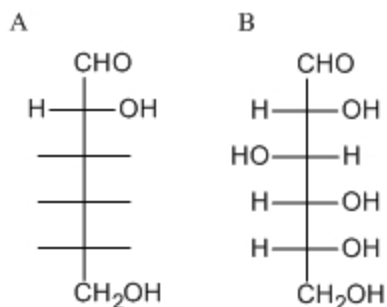


図 19.7: 描画の完成

描画した構造式の基本特性を表示し、情報をドキュメントに貼り付けるには、次の操作を行ってください。


- 選択ツールをクリックすると、最後に描画した構造式が選択されます。構造式が選択されない場合は、構造式をダブルクリックします。
- View メニューの Show Analysis Window をクリックします。
- Analysis ウィンドウで Paste をクリックします。構造式の下に、タイトルとして解析情報が表示されます。

チュートリアル 4: 遠近感のある描画

このチュートリアルでは、次の α -D-グルコースのモデルをハワース投影図として作成し、遠近感のある描画を作成する方法を学習します。

標準のスタイルを使用して新しいドキュメントを作成するには、次の操作を行ってください。

- **File**、**Open Style Sheets**、**New Document** の順に選択します。

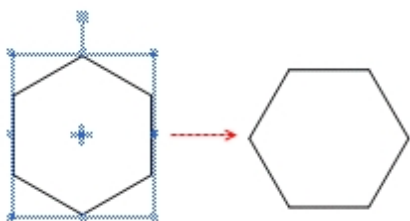
 **注:** ChemDraw では前回の描画で使ったスタイル シートの情報が保持されているため、チュートリアルを順序どおりに進めている場合は、ドキュメントを開く際に、前のチュートリアルで使った ACS スタイル シートが標準として選択されているはずですが、この手順によってこの設定はリセットされ、New Document が標準になります。

環を描画するには、次の操作を行ってください。

1. シクロヘキサン環ツールをクリックします。
2. ドキュメント ウィンドウの空白領域をクリックします。シクロヘキサン環が表示されます。

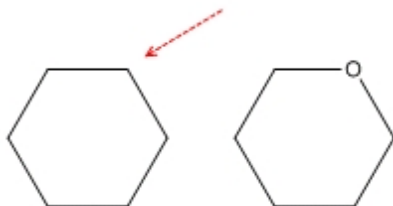
環を回転させるには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Select All** をクリックします (または Ctrl + A キーを押します)。
2. **Object** メニューの **Rotate** をクリックします (または Ctrl + R キーを押します)。
3. Rotate Objects ダイアログ ボックスで角度として 30 度を入力し、**Rotate** をクリックします。シクロヘキサン環が回転します。



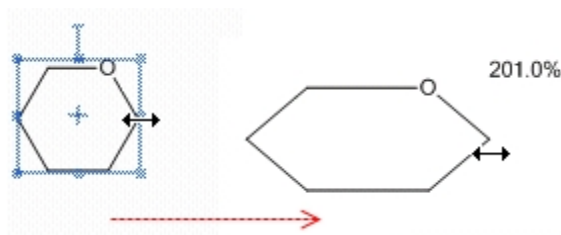
シクロヘキサンをテトラヒドロピランに変更するには、次の操作を行ってください。

1. 構造式の外側をクリックして選択を解除します。
2. 次の図に示した原子をポイントし、文字の **o** キーを押します。



水平方向へサイズを変更するには、次の操作を行ってください。

1. **Edit** メニューの **Select All** をクリックします (または Ctrl + A キーを押します)。
2. 選択ツールを使用して右側のハンドルをクリックし、環を水平方向へドラッグしてサイズを変更します。環のサイズがおよそ 200% になったら、マウス ボタンを離します。



環を拡大するには、次の操作を行ってください。

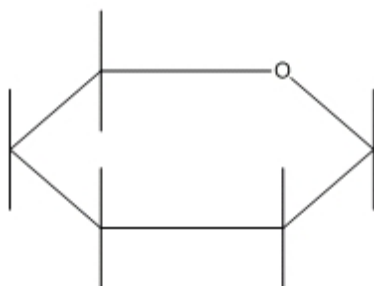
1. **Edit** メニューの **Select All** をクリックします (または Ctrl + A キーを押します)。
2. 環の頂点にある調整ハンドルをクリックし、輪のサイズが 150% になるまでドラッグします。描画とテキストの設定値を増やすかどうかを問合わせるダイアログ ボックスが表示されます。
3. **No** をクリックします。

垂直方向の結合を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 線結合ツールをクリックします。
2. 下図に示した原子をポイントし、上にドラッグして結合を作成します。



3. 同じ原子をポイントし、下にドラッグしてもう 1 つの結合を作成します。
4. この手順をさらに 4 回繰り返して、下図のとおり垂直方向の結合の対を追加します。



OH ラベルを追加するには、次の操作を行ってください。

チュートリアル 4 で示した方法を使用して同じ結合ラベルを繰り返し追加するか、またはホットキーを使用します。ホットキーを使用する場合は、ラベルを追加する位置をポイントして文字の **o** キーを押します。少し変えて、ここではテキスト ツールを用いる方法を再度使用します。

1. 線結合ツールを選択し、下図に示された原子をポイントした後ダブルクリックしてテキスト ボックスを開きます。
2. 「OH」と入力します。

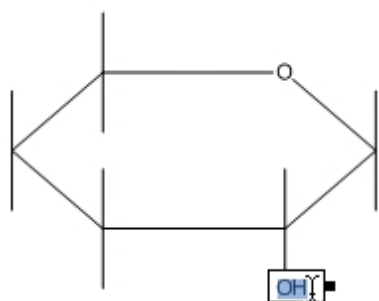
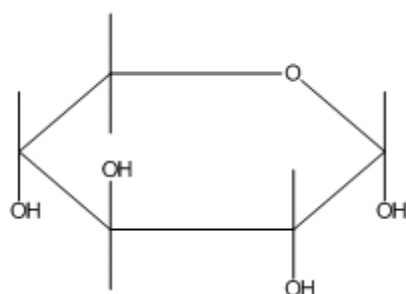



図 19.8: OH ラベルの追加

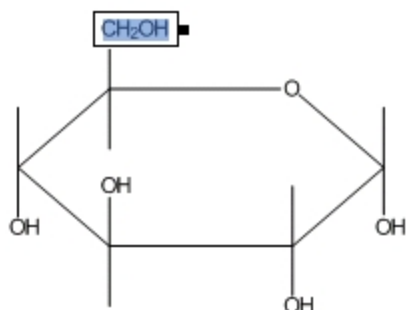
3. 下図に示したように次の原子にポインタを移動させ、トリプルクリックして原子ラベルを繰り返します。



 **ヒント:** 描画が小さすぎてラベルを配置できない場合は、**View** メニューの **Magnify** をクリックして拡大します。

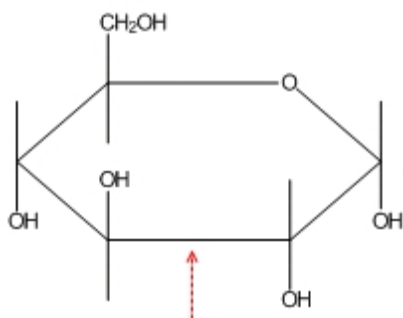
CH₂OH ラベルを追加するには、次の操作を行ってください。

1. **C5** の上側の原子をトリプルクリックします。
2. Enter キーを押して原子ラベルのテキスト ボックスを開きます。OH の前に「CH₂」と入力します。




一番手前の結合のタイプを変更するには、次の操作を行ってください。

1. 太線結合ツールをクリックします。
2. 図に示された結合をクリックします。



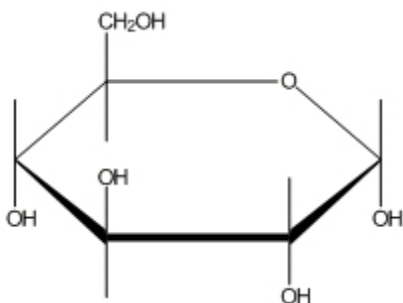
3. 結合をポイントすると、カーソルの形状が太線矢印に変わります。
4. ウェッジ結合ツールをクリックします。
5. 太線結合に隣接する 2 つの環結合を順にクリックします。

個々の結合の中央付近を、ウェッジの幅の広い端を向ける方向にやらずらしてクリックします。

 **ヒント:** ポインタが中央部から離れすぎていると、強調表示ボックスが消えます。ポインタを配置しにくい場合は、**View** メニューの **Magnify** をクリックします。

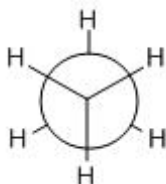
 **注:** ウェッジが間違った方向を向いている場合は、結合を再度クリックして向きを変更します。

最終的な構造式は次のようになります。



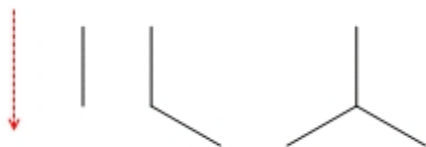
チュートリアル 5: ニューマン投影図

このチュートリアルでは、エタンの場合を例に、ニューマン投影図の描画方法を学習します。

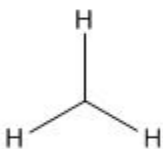


エタンを描画するには、次の操作を行ってください。

1. 線結合ツールをクリックします。
2. ドキュメント ウィンドウ内をクリックし、下にドラッグして最初の結合を作成します。
3. 結合の下側の原子をクリックし、2 番目の結合を追加します。
4. 下側の原子をもう一度クリックし、3 番目の結合を追加します。



5. 各結合の末端にマウスを移動し（クリックはしません）、「H」と入力して水素原子を追加します。



構造式を複製するには、次の操作を行ってください。

1. 選択ツールをクリックします。最後に描画した構造式が選択されます。
2. 複製を作成するには、Ctrl キーを押しながら、構造式を選択枠を右上方向にドラッグします。

ドラッグ中は選択枠が表示されません。

コピーした構造式の間結合を追加するには、次の操作を行ってください。

1. 線結合ツールをクリックします。
2. 下側のフラグメントの第三級炭素原子をクリックし、他方の第三級炭素までドラッグします。

 **注:** 既存の原子を結合する場合、固定長や固定角のコマンドは無視されます。


マウス ボタンを離すと、エタンの構造式が完成します。次に、この構造式のニューマン投影図を作成します。

ニューマン投影図の描画

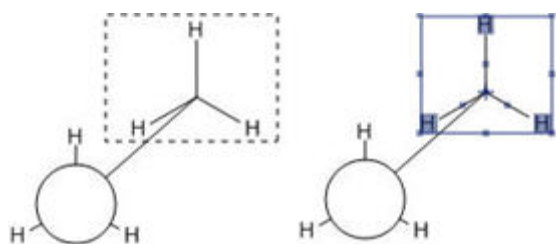
このステップでは、ニューマン投影図特有の中空円を描画します。

1. 軌道ツールをクリックし、開いた s 軌道を選択します。
2. 左側の中央の炭素をポイントしてクリックし、外側へ向けてドラッグします。

軌道のサイズは、結合の場合と同様に制限されます。この制限は、Document Settings ダイアログ ボックスの Drawing タブで、固定長に対する割合として設定されています。

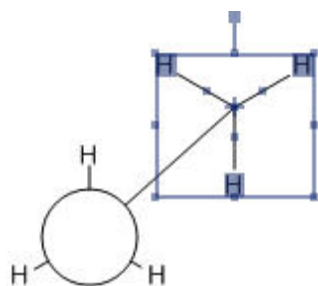
 **注:** 軌道と構造式との自動的なグループ化は行われません。軌道を、描画した構造式とグループ化していっしょに移動できるようにするには、Object メニューの Group をクリックします。

1. 矩形選択ツールをクリックします。軌道が選択されます。空白部分をクリックして、選択を解除します。
2. 構造式の上方から、上側のフラグメントを矩形で囲むようにドラッグして、3 本の結合を選択します。構造式の 2 つのフラグメントを結んでいる結合は選択しないでください。



選択範囲を回転させるには、次の操作を行ってください。

1. 回転ハンドルをダブルクリックして、Rotate Objects ダイアログ ボックスを開きます。
2. Angle テキスト ボックスに「180」と入力し、Rotate をクリックします。

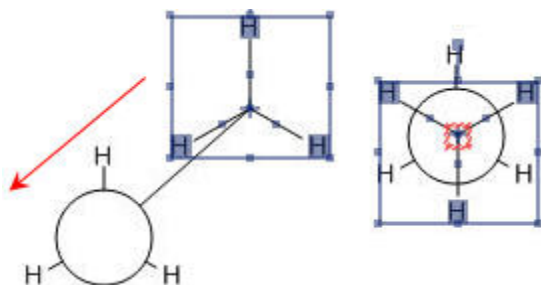


回転した結合が選択されている状態のまま、構造式の層の前後配置を変更して、選択部分を前面に移動します。

3. **Object** メニューの **Bring to Front** をクリックします（この操作を行っても、表示上の変化は現れません）。

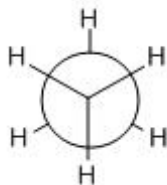
構造式の手前側の部分を移動して、ニューマン投影図を作成します。

1. 選択枠の内部をポイントします。選択枠内ではポインタが手の形に変わります。
2. 選択領域をドラッグして、選択枠内の第三級炭素を軌道の中心に移動します。



注： 化学警告が有効になっている場合は、構造式を重ねた時点で赤い警告ボックスが表示されます。これは炭素原子が C-C 結合に重なっているためです。化学警告をオフにするには、**View** メニューの *Chemical Warnings* の選択を解除します。この種類の警告を無効にするには、**Preferences** をクリックし、*Warnings* タブで *Atoms Near Other Bonds* を選択解除します。

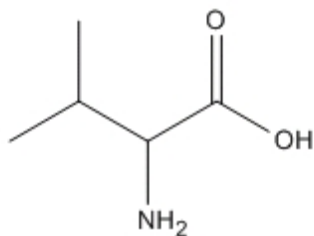
3. マウス ボタンを離して選択枠の外側をクリックし、構造式を選択を解除します。



チュートリアル 6: 立体化学構造

このチュートリアルでは、立体化学マーカーおよび Flip コマンドについて学習します。

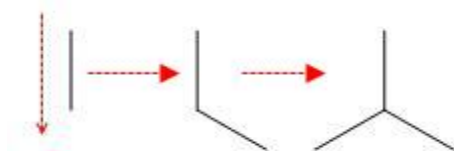
最初に、この構造式を描画します。



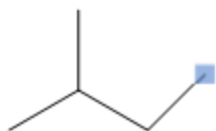
2-amino-3-methylbutanoic acid

この構造式を描画するには、次の操作を行ってください。

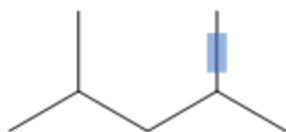
1. 線結合ツールをクリックします。
2. ドキュメント ウィンドウ内をクリックし、下にドラッグして最初の結合を作成します。
3. 下側の原子をポイントしてクリックし、2 番目の結合を追加します。
4. 同じ原子をポイントしたまま、もう一度クリックして、3 番目の結合を追加します。



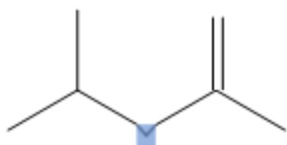
5. 下図に示す原子をポイントし、2 度クリックして結合を 2 つ作成します。



6. 下図に示す結合をポイントして右クリックし、コンテキスト メニューから **Double**、**Plain** の順に選択します。

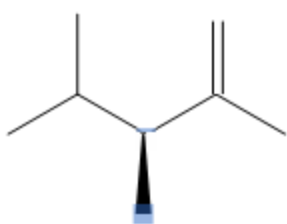


7. ウェッジ結合ツールをクリックし、下の原子をポイントしてクリックします。

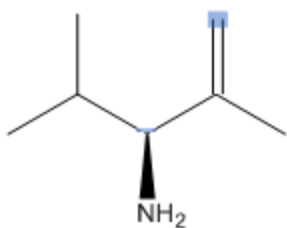


原子ラベルの追加

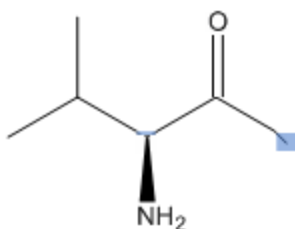
1. テキスト ツールを選択した状態で下図に示す原子をクリックし、表示されるテキスト ボックス内に「NH₂」と入力します。



2. テキスト ツールを選択した状態で下図に示す原子をクリックし、表示されるテキスト ボックス内に「O」を入力します。



3. テキスト ツールを選択した状態で下図に示す原子をクリックし、表示されるテキスト ボックス内に「OH」を入力します。

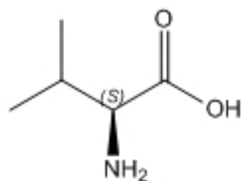


立体化学マーカの表示

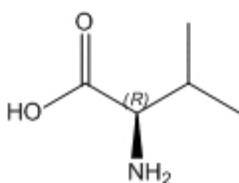
ここまでで、2 種類の異性体を区別するための立体化学マーカ (R) および (S) を表示できるようになりました。

マーカーを追加するには、次の操作を行ってください。

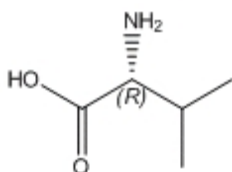
1. なげなわ選択ツールまたは矩形選択ツールを使用して構造式の全体を選択します。
2. **Object** メニューの **Show Stereochemistry** をクリックします。S マーカーが表示されます。



3. 構造式を選択し、**Object** メニューの **Flip Horizontal** をクリックします。R マーカーが表示されます。



4. 構造式が選択されている状態で、**Object** メニューの **Rotate 180° Vertical** をクリックします。オブジェクト ツールバーを使用して構造式を回転することもできます。

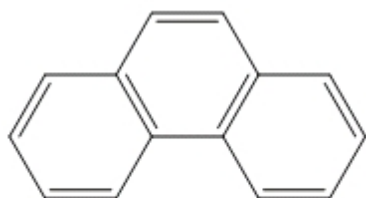


ウェッジ結合がハッシュ表示になり、(R) 立体化学構造は保存されます。

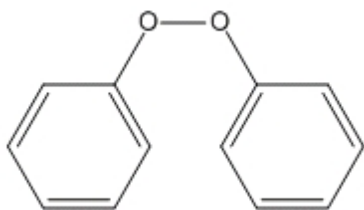
チュートリアル 7: テンプレート

ChemDraw には、あらかじめ描画された構造式や画像のテンプレート ライブラリが豊富に用意されています。テンプレートは、新たに描画を開始する場合と、既存の描画に変更を加える場合のどちらにも使用できます。

このチュートリアルでは、フェナントレンのテンプレートを使用してペルオキシジベンゼンを作成します。テンプレートと最終的な描画を次に示します。



phenanthrene



peroxydibenzene

フェナントレンのテンプレートを追加するには、次の操作を行ってください。

1. **File**、**Open Style Sheets**、**New Document** の順に選択します。
2. メイン ツールバーのテンプレート ツールを選択します。テンプレート パレットの一覧が表示されます。
3. **Aromatics** パレットで、フェナントレン テンプレートを選択します。
4. ドキュメント ウィンドウ内をクリックします。フェナントレンが表示されます。

ここで、構造式の中央環から 2 本の結合を削除して 2 つの酸素原子を追加する必要があります。フェナントレンを修正するには、次の操作を行ってください。

1. メイン ツールバーの消しゴム ツールを選択します。
2. 中央環の下側の結合をクリックします。
3. 中央環の上側の二重結合をクリックします。これにより、二重結合が単結合に変化します。
4. メイン ツールバーのテキスト ツールを選択します。
5. 炭化水素鎖（変更前は中央環であった部分）のどちらかの炭素原子を選択します。
6. **O** キーを押して、その炭素原子を酸素原子に変更します。
7. もう 1 つの炭素原子を選択して、同様に酸素に変更します。以上で、ペルオキシジベンゼンの描画が完了しました。