

PC を用いる化学構造式と分子モデル図の作成

【目標】

炭素数が6以上で、不飽和結合1つ以上とヘテロ原子1つ以上を含む化合物の、構造式と分子モデルの図を、PCで作成できるようになる。

(1) Accelrys Draw for Windows による化学構造式の作成 (概要)

【Accelrys Draw の起動】

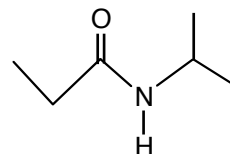
1. Accelrys Draw をインストールしたパソコンを起動する。
2. 「すべてのプログラム」の「工学部」フォルダ内の Accelrys フォルダから Accelrys Draw 4.1 を起動する。
3. メニュー構成

入力 Sheet の左側には、入力および編集用のボタンが並んでいる。

入力 Sheet の上側には、書式設定のツールバーが並んでいる。

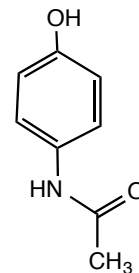
周囲には、各種の構造テンプレートを操作するボタンが並んでいる。

ウインドウの最上部にはいくつかのプルダウンメニューが並んでいる。



【分子骨格の入力】

1. 左側のボタン列の上から8番目の「結合」ボタンをクリックして選択する (初期設定は単結合)。
2. Sheet 内でクリックすると単結合が現れる。両端が (炭素) 原子である。
3. どちらかの原子をクリックすると、そこから次の単結合が伸びる。
4. 任意の原子間を結合で結ぶには、結びたい原子の一方からもう一方へマウスをドラッグしてから離す。2つの原子の間に結合が現れる。
5. 環構造を入力するには、まず上側のテンプレートボタンから希望のものをクリックして選択する。次に、
 - (1) 結合させたい原子をクリックするとその原子に環が結合する。
 - (2) 何もないうところをクリックすると、そこに環が現れる。
 - (3) 結合をクリックすると、その結合の部分で縮環する。
6. 不要な原子または結合を消すには、上から3番目の「消しゴム」ボタンをクリックして選択し、消したい原子または結合をクリックする。



【分子構造の作成】

1. 結合の種類を変える：左側の「結合」ボタンをクリックして選択する。上側の結合のボタンの中から希望の結合をクリックして選択し、変えたい結合をクリックする。構造式の形状が意図した通りでない場合には、意図した形状になるまで繰り返しクリックする。そのたびに形状が変わる。
2. 原子の種類を変える：上から6番目の「原子」ボタンをクリックして選択し、変えたい原子をクリックして選び、キーボードから元素記号で原子または基を入力する。
3. 電荷を入力する：上から7番目の「追加」ボタンをクリックし、原子を指定してクリックすると Property の選択メニューが現れる。Charge をクリックして、現れるボタンから希望の電荷を入力する。
4. 構造の変形：左側の1番上の「投げ縄」ボタンをクリックして選択し、変形したい部分をドラッグする。
5. 構造を整形する：「投げ縄」ボタンをクリックして選び、整形したい部分をドラッグして囲んで選択する。次に最上部のプルダウンメニューの左から5番目にある Chemistry メニューの上から4段目の Clean をクリックすると、長さ、角度、構造が整形される。

【構造の移動】

1. 平行移動：「投げ縄」ボタンをクリックして選び、移動したい部分をドラッグして選択する。選択した分子の上でカーソルを動かし、カーソルが手の形になったときにドラッグして任意の位置へと移動する。
2. 回転：左側の上から2番目の「Chemical Flip/Rotate」ボタン（点線に丸い矢印）の横の▼をクリックし、「Chemical Rotate/Flip tool」（または「3D Rotate tool」）を選んでから、移動したい分子を取り囲んで選択する。選択した分子が青色の枠で取り囲まれているときにドラッグして、任意の角度で回転させる（3D 回転を思い通りに操作するには多少の慣れが必要）。

【画像の保存】

1. Sheet を保存する：File メニューで Save または Save as...を選び、適当なファイル名をつけて保存する。
2. 保存するファイルの主な種類
mol ファイル（デフォルト）：分子（1個または複数個）の構造情報を保存するための標準形式の一つ。分子模型作成・表示ソフトや分子科学計算ソフトと構造情報をやりとりするために用いる。Sheet の内容が複雑な場合にはこの形式では保存できない。
skc ファイル：Sheet の内容を Chem Draw など他の構造式描画ソフトとやりとりするための形式。Accelrys Draw 専用の形式。
3. Sheet を画像ファイルとして保存するには、File メニューから Save as Image...を選び、適当なファイル名をつけて保存する（ファイル形式は bmp, png, gif, tiff, wmf から選べる）。注意：この形式で保存したファイルは Accelrys Draw では開けない。

【画像の利用】

作成した画像を Word 文書などに貼り付けて利用することができる。

1. 「投げ縄」ツールを用いて、貼り付けたい範囲を指定する。
2. Edit メニューから Copy をクリックする。
3. Word などのウインドウで、貼り付けたい位置にカーソルを置き、Paste する。

【Accelrys Draw の終了】

File メニューで Exit を選ぶと Accelrys Draw を終了する。

演習課題（1）

(1) 炭素数が6以上で、不飽和結合1つ以上と、ヘテロ原子を1つ以上含む化合物の構造式を一つ描け（前ページに描かれているものでもよい）。

(2) MS Word を開いて A4 縦長の紙の上部に日付、学籍番号、氏名を書き込み、作成した構造式をその下に貼り付ける。（演習課題（2）へ続く）

【Accelrys Draw の便利な機能】（抜粋）

(1) 水素の表示、非表示の選択

プルダウンメニューの Option (左から3つ目) から、Settings... (下から3つ目) を選んでクリックすると、Settings の表が表示される。表中の Atoms 項目の下から2番目の Show hydrogen labels をクリックすると、右側に選択用キーが表示される。これをクリックすると選択肢が表示される。Hetero または Terminal + Hetero が見やすい。

(2) IUPAC 名を付ける

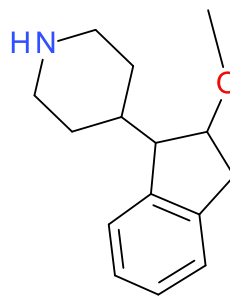
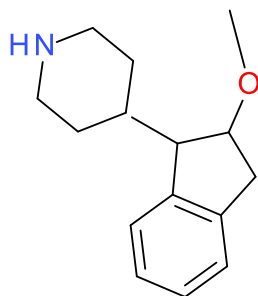
プルダウンメニューの Chemistry (左から 5 つ目) から、Generate Text from Structure (下から 8 つ目) にカーソルを持っていくと、右の選択枝の一番上に IUPAC Name が表示される。これを選ぶと化合物名が表示される。

複数の構造を描いているときは、名前を付けたい構造を予め Select ツールで選んでから上の操作を行う。

次のように、構造が正しく描けているかどうかを確認するためにも使える。

(誤)

(正)



2-methoxy-1-methyl-indane; piperidine 4-(2-methoxyindan-1-yl)piperidine

【Accelrys Draw の入手法】(2017 年現在)

Accelrys Draw は、現在は BIOVIA Draw という名前で Dassault Systems 社が管理しています (2017 年 4 月現在)。自分のパソコンにインストールして、レポートや卒業研究などで活用してください。

(1) BIOVIA/Accelrys の下記ホームページに接続する。*

<http://accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-draw/draw-no-fee.php>

*たとえば、Google で "Accelrys Draw" をキーワードとして検索すると、上位に "No-fee BIOVIA Draw for Academic and Non-commercial Use" が現れる。ここからジャンプできる。

(2) 内容をざっと読んで、"Download No-fee BIOVIA Draw" をクリックする。

(3) 必要事項を (ローマ字で) 記入し (インストールする PC で利用している電子メールアドレスを入力する)、"Submit Form" ボタンを押す。

入力したメールアドレスに、インストール用のファイルをダウンロードするためのサイトの情報などが送られてくる。

(4) 送られてきたメールの指示にしたがってアクセスし、BIOVIA Draw Academic のインストール用ファイルをダウンロードする。

(通常は) 「お気に入り」内の「ダウンロード」フォルダ内に収納される。

(5) ダウンロードしたインストール用ファイルをダブルクリックして起動する。

(2016 年 10 月現在) Accelrys (BIOVIA) Draw 4.1 がインストールされる。

フリーソフトウェアは、ダウンロードするサイトやファイル名が将来変わることがあるので、承知されたい。

(2) Scigress による分子モデリング：Windows 版（概要）

【Scigress の起動】

1. **Scigress** システムをインストールしたパソコンを起動する (Windows)。
2. 「プログラム」の **Scigress** フォルダから **Workspace** を起動する。
「ファイル」から右にいくつかのプルダウンメニューが表示されている。
その下列にいくつかのボタンが表示されている。

【分子骨格の入力】

1. 「ファイル」メニューから「新規 3D モデル」をクリックすると、「**ChemicalSample#**」(#は数字) という **Workspace** ウィンドウが開く。
ウィンドウの上側にはいくつかのボタンが表示されている。
そのすぐ下には元素・混成状態(形)・電荷・結合を指定する選択肢が表示されている。
左側には入力・編集用のボタンが表示されている。
2. 左側のボタンから「描画」(上から 5 番目) を選ぶ。カーソルがエンピツに変わる。
3. 上の選択肢から入力したい原子、混成状態、電荷、結合の種類を選ぶ。
4. ウィンドウ上でマウスをクリックすると選んだ原子が現れる。
5. 原子からマウスをドラッグして、何も無いところで離すと、結合と新しい原子が現れる。別の原子の位置で離すと、2つの原子間に結合が現れる。
6. 原子や結合の種類を変えるには、まず左側の「選択」ボタン(一番上)を押す。カーソルが矢印に変わるので、変えたい原子や結合をクリックし、上の選択肢から選ぶ。

【分子の拡大縮小・移動・回転】

左側のボタンの下 3 つを用いて行う。

1. 拡大・縮小(一番下)：マウスを上か右にドラッグすると拡大、下か左が縮小。
2. 移動(下から 2 つ目)：マウスを上下にドラッグする。
1. 回転(下から 3 つ目)：ウィンドウ上でマウスを回転させたい方向にドラッグする。

【分子構造の作成】

1. 左側のボタンから「選択」を選ぶ。
2. ウィンドウ内でマウスを一回クリックすると、構造全体が鮮明に表示される。
以下は、「構造整形」メニュー(左から 5 番目)から選択する。
3. 「水素補填」を選ぶと、水素が追加表示される。
4. 「軌道混成調整」を選ぶと、構造に対応した混成状態が設定される。
5. 環状構造を持つ場合、「環構造補正」を選ぶと、環構造が最適化される。
6. 「構造補正」を選ぶと、(可能な場合は)混成状態に応じた結合角と結合長になる。
7. 「簡易整形」を選ぶと、上の 3～6 を一度に行うことができる。

【部分構造の改変】

「調整」メニューを用いて、指定した部位で、原子間距離、結合角、二面体角をそれぞれ任意に変えることができる。

1. 左側のボタンから「選択」を選ぶ。
2. 必要な原子を結合順に 2～4 個選ぶ。1 個目はクリック、2 個目からは shift+クリック。
原子間距離：2 個 結合角：3 個 二面体角：4 個
3. 「調整」メニューから必要な項目を選び、数値を数字またはスケールバーで変える。
4. 「適用」で変更、「OK」で変更終了、「キャンセル」で取り消し終了。

【模型の種類を変える】

右上の4つのボタンを切り換えることにより、棒表示、元素記号表示、球と棒表示、空間充填表示を切り換えることができる。

【構造の保存と Scigress の終了】

1. 「ファイル」メニューで「上書き保存」または「名前を付けて保存...」を選び、適当なファイル名をつけて保存する（拡張子は csf）。
2. 「ファイル」メニューで「終了」を選ぶと Scigress を終了する。

【mol ファイルからの入力】

1. 「ファイル」メニューで「開く...」を選び、下方の「ファイルの種類」の選択肢から「MDL 形式 (... mol, ...)」を指定する。
2. mol ファイルのあるフォルダを指定して、ファイルを選択すると、新しい「ChemicalSample」ウィンドウが開き、構造式が分子モデルに変換されて表示される。

練習課題（2）

- (1) 課題（1）で作成した分子の mol ファイルを Scigress で開き、分子モデルを作成する。
- (2) 課題（1）で用意した MS Word ファイルに、(1) で作成した構造を球と棒・空間充填・骨格のうち2通りまたは3通りの表示方法でそれぞれ表示させ、Word のファイルにペーストする。課題（1）の結果と合わせて1ページに納まるように図のサイズを調節する。また、なるべく不必要な空白が生じないように工夫する。
- (3) 日付、学籍番号、氏名を確認して保存し、授業のポータルサイトから提出する。

Scigress には他にもさまざまな便利な機能があります。より進んだ使い方については "user guide" と "getting started with Scigress" をご覧下さい。「ヘルプ」メニューから「オンラインマニュアル」を選ぶと各種文書を参照することができます。

(付録) 分子モデリングができる無償利用ソフトウェア, 化学学習支援サイト

(1) Winmoster (X-Ability Co.,Ltd.)

化学会社に勤務する作者が自分の仕事を支援するために作った分子モデリングソフトウェア。教育機関向けには無償公開。有償版は各種の分子化学計算も可能。

url = <http://winmostar.com/>

(2) Spartan (Wavefunction 社)

ワークステーションを用いる高度な化学計算までをカバーする高機能な分子化学計算システムから出発して、その入出力インターフェースとして開発された分子モデリングシステムまでをカバーしている。機能を限定したお試し版を無償で公開していた（今は見えない）。

url = <http://www.wavefun.com/japan>

(3) 化学の迷路>化学の学習に役立つフリーソフト

学習やレポート作成に役立つ各種のソフトウェアが紹介されている。(1) の Winmoster へのリンクもある。

url = <http://chem.chu.jp/freeware/>

(4) Chem-station 学修者必携の日本最大の化学ポータルサイト

url = <http://www.chem-station.com>