

4 化学構造式

化学を学習・研究する上で化学構造式を描くことは必要不可欠である。そこで、化学構造式描画の標準的なソフトである ChemDraw について学ぶ。パソコンによる化学構造式の描画は、プレゼンテーションや、通常のレポート作成等にも役立つ。ここでは、いくつかの代表的な例を用いて、ChemDraw の基本的な操作について学習する。さらに高度な使用法については、各自が研究室に配属され、通常版の ChemDraw が利用できる環境になってから学んで欲しい。

4.1 ChemDraw Net の起動

情報教室のパソコンにインストールされている ChemDraw Net は、残念ながら ChemDraw の正規版ではなく、デモンストレーション版なので、機能が制限されていて、印刷、保存はできない。

Windows XP

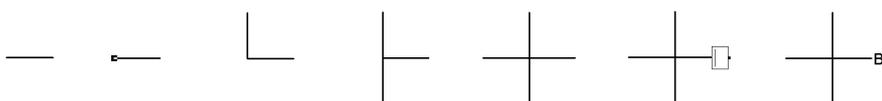
1. [スタート] [プログラム] [CS ChemOffice] [CS ChemDraw Net]
2. ChemDraw のウインドウの中にドキュメント・ウインドウと Tools パレットが現れる。

4.2 骨格のみの描画

臭化 *tert*-ブチル (2-ブロモ-2-メチル-プロパン) を題材にして最も簡単な骨格のみによる構造式の描画について説明する。

有機化合物を骨格のみで表す場合、線は結合を表わし、その両端や交点には炭素原子があるものとみなされる。もしも、他の原子が結合している場合にはその部分に原子記号を描く。炭素原子に直接結合している水素原子はすべて省略される。

ChemDraw Net

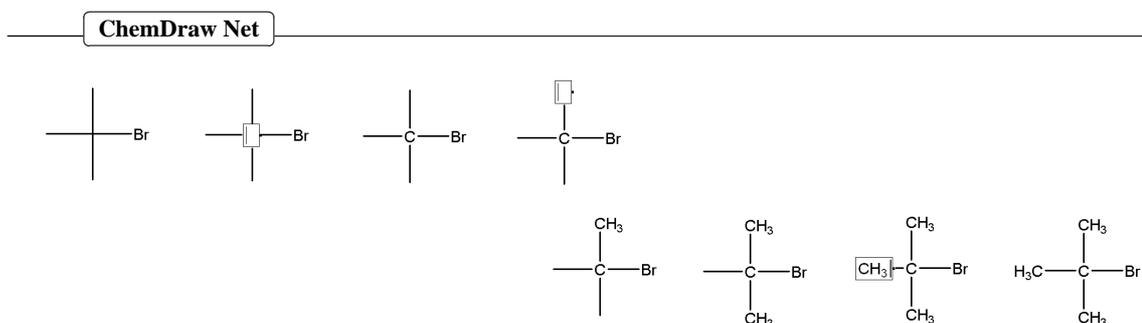


1. Tools パレットの線結合ボタン  をクリックしてからドキュメントウインドウ上で右向きにマウスをドラッグすると、横棒が一本描画される。
2. 横棒の左端にマウスポインタを合わせると  が現れるので、その状態で真上にマウスをドラッグすると、上にも一重結合がのびる。
3. 描画を大きく表示したい場合には **F7** (あるいはメニューバー「Tools」 「Magnify」)、小さく表示したい場合には **F8** (あるいはメニューバー「Tools」 「Reduce」)。
4. 失敗したら、メニューバー「Edit」 「Undo」で元に戻る。
5. 部分的に消去したいときには消しゴムツール  で消すか、大きな範囲を消したいときには、なげなわ選択ツール  か矩形選択ツール  で消したい範囲を選択してから **Delete** (またはメニューバーで [Edit] [clear])。
6. 始めに描いた横棒の一重結合の左端 (先ほどと同じ場所) にポインタを合わせて  にして、今度は真下にドラッグする。
7. 始めに描いた横棒の一重結合の左端 (先ほどと同じ場所) にポインタを合わせて  にして、今度は左

- にドラッグする。これで 2,2-ジメチルプロパン (テトラメチルメタン) の骨格 (十文字) ができた。
- 十字の骨格の一番右端にポインタをあわせてにしてからダブルクリックすると、文字が入力できる状態になる。
 - テキストボックスに「Br」 と入力すると、臭化 *tert*-ブチルの骨格ができあがる。

4.3 炭素と水素を省略しない描画

同じく臭化 *tert*-ブチルを題材にして、炭素や水素を省略しない構造式を描く。



- 先ほどの骨格のみの構造式から出発する。
- 十字の骨格の中心 (交点) にマウスポインタをあわせてダブルクリックし、現れたテキストボックスに「C」 と入力する。
- 十字の骨格の一番上にマウスポインタをあわせてダブルクリックし、現れたテキストボックスに「CH3」 と入力する。「3」は自動的に下付き文字になるはず
- 十字の骨格の一番上に下も同様にして CH₃ を描く。
- 十字の骨格の一番左にマウスポインタをあわせてダブルクリックし、現れたテキストボックスに「CH3」 と入力する。
- を入力する前は CH₃ であったものが、 を入力したら H₃C となる。これで完成。
- 文字を大きくしたり、結合の角度や長さを微調整したりは、イロイロやってみたらわかるはず。

4.4 化学反応式

臭化 *tert*-ブチルと水との反応を題材にして、ごく簡単な化学反応式を、構造式を用いて書く。

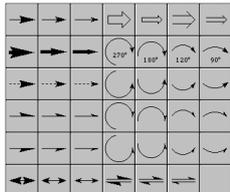


- ChemDraw Net
- Tools パレットのテキストボタン をクリックしてから先ほど描いた臭化 *tert*-ブチルの右横をクリックしてテキストボックスを表示し、そこに「+」(半角文字) を入力。
-
- 「+」の文字の部分を選択して (緑色になる)、メニューバーの下のフォント設定ボックスで「Arial」の 10 pt に設定する。
 - でテキストボックスから出る。(だとテキストボックス内が二行になるので注意。 を押してしまったら で戻ればよい)

4. 不必要なところをクリックしてしまってもテキストボックスが現れても **Esc**。
5. さらに右横に別のテキストボックスを作り、「H2O」と入力し、上と同じ要領でフォントを「Arial」の 10 pt に設定する。

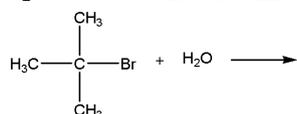


6. さらに、H2O の 2 の部分だけを選択し、メニューバーの下の下付きボタン **X₂** で下付きにして **Esc**。
7. Tools パレットの矢印ボタン  を押し続けると矢印パレットが現れる。

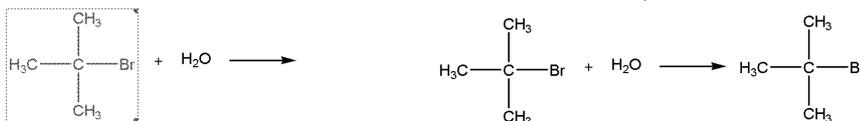


一行目の左から 3 番目を選ぶ。

8. H₂O の右横の適当な位置からマウスを右にドラッグすれば矢印が描画される。

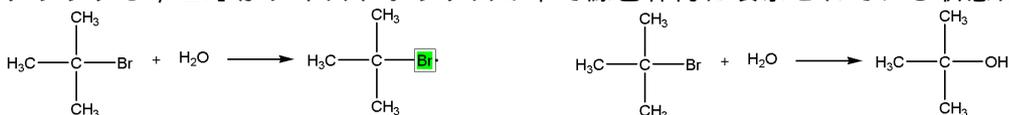


9. Tools パレットの矩形選択ボタン  をクリックしてから、臭化 *tert*-ブチルの構造式を選択する。



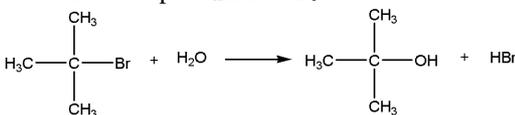
10. **Ctrl** キーを押しながら選択した部分を矢印の右横までドラッグすると、臭化 *tert*-ブチルの構造式がコピー&ペーストされる (**Ctrl** を押さなければ移動のみ)。そして **Esc**。

11. Tools パレットのテキストボタンをクリックしてから、右辺の *tert*-ブチルの「Br」をクリックし、「Br」がテキストボックスの中で緑色枠内に表示されている状態にする。



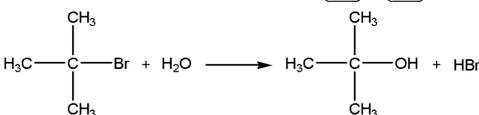
12. 「Br」を「OH」に変更して **Esc**。

13. さきほど「+」と「H2O」を書いたのと同じ要領で一番右に「+」と「HBr」を書いて、フォントを「Arial」の 10 pt に設定する。



14. もしも右側に場所が足りなくなったら、矩形選択ツール等をつかって全体を左に移動させる。

15. メニューバー「Edit」「Select all」。メニューバー「Object」「Align」「T/B center」で、左右に引いた上下の中心線にそって整列される。その後、矩形選択ツール等をつかって個々のオブジェクトを選択し、矢印のキー () で上下左右位置を微調整してできあがり。



4.5 保存・印刷

ChemDraw Net

1. さきに述べたように、情報処理教室の ChemDraw Net は、デモンストレーション用バージョンであるため、作業の結果を保存・印刷できない。描画を他のアプリケーションにコピー&ペーストすることもできない。
2. 通常版の ChemDraw なら、勿論、他の Windows アプリケーションと同様の手順で、保存・印刷できる。

4.6 描画をどうしても他で利用したいとき

多少画質は低くなるが、いま作成した構造式を含む化学反応式を Word 文書に貼り付ける。この方法を知っていれば、現状でもレポート作成に ChemDraw Net が利用できる。

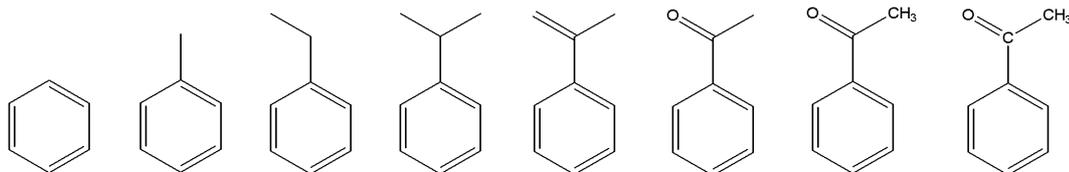
Windows XP

1. Word 2007 を起動しておく。ページ設定等は任意。
2. ペイントを起動しておく。[スタート] [プログラム] [アクセサリ] [ペイント]
3. ChemDraw Net のウインドウが前面にある状態でキーボードの **Print Screen** (プリント・スクリーン) キーを押す。これで、画面全体がメモリに画像として記憶される。(この時、画面表示の大きさで解像度が決まるので、きれいな描画が使いたければ、できるだけ画面いっぱいに描画を拡大しておく必要がある。拡大 **F7**, 縮小 **F8**)
4. ペイントのウインドウをアクティブにして、メニューバーで [編集] [貼り付け]。これで、ペイントのウインドウに先ほど記憶した画面が表示される。
5. ペイントの選択ツールボタン  をクリックしてから、画像のうち必要な部分をマウスのドラッグで選択し、[編集] [コピー]。
6. Word 2007 のウインドウをアクティブにし、カーソルを適当な場所に置いて、「ホーム」タブ 「クリップボード」グループ 「貼り付け」
7. Word 2007 の文書を、適当なファイル名で保存しておくこと。次の章の学習で必要になる。

4.7 ベンゼン環や二重結合のある構造式

アセトフェノンを題材に、ベンゼン環や二重結合のある構造式を描く。

ChemDraw Net



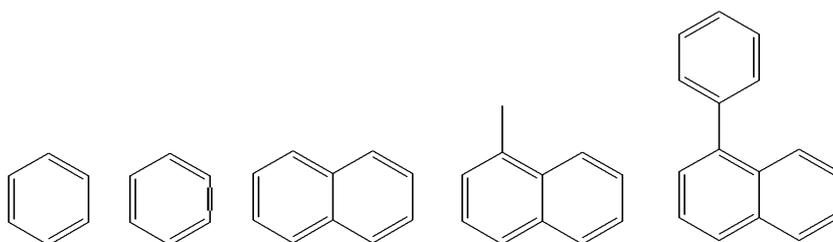
1. メニューバー「File」 「New document」
2. Tools パレットのベンゼン環ボタン  をクリックしてからドキュメントウインドウをクリックすると、ベンゼン環が描画される。

- Tools パレットの線結合ボタン  をクリックしてからベンゼン環の側鎖をのばしたい頂点（いまは一番上）に + 型のポインタをあわせてクリックすると、一重結合の側鎖がのびる。
- のばした側鎖の上端にポインタをあわせクリックすると、左上に結合が伸びる。
- 今と同じ位置でも一度クリックすると、右上にも結合が伸びる。
- 今と同じ位置（Y の中心）から、左上に伸びた結合にそってマウスをドラッグすると、左上に伸びた結合が二重結合になる。
- 二重結合の上端をダブルクリックし、テキストボックスに「O」と入力して Esc。
- 右側の一重結合の上端をダブルクリックし、テキストボックスに「CH3」と入力して Esc。
- 「Y」の中心をダブルクリックし、テキストボックスに「C」と入力して Esc。
- できあがった構造式は、先ほどと同じ手順で、Word 2007 の文書に貼り付けておく。

4.8 アントラセンやピフェニルのような構造式

次に、1-フェニル-ナフタレンを題材に、ベンゼン環が連なった共役系や、C-C 結合を介してベンゼン環が連なった構造を描く。

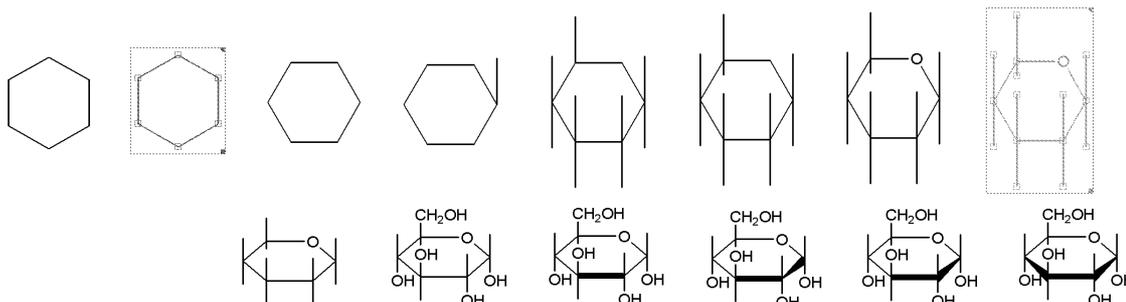
ChemDraw Net



- メニューバー「File」 「New document」
- Tools パレットのベンゼン環ボタン  をクリックしてからドキュメントウィンドウをクリックするし、ベンゼン環を一つ描画する。
- マウスのポインタをベンゼン環の右の縦棒にあわせて縦長の  が現れた状態にして、クリックするとナフタレンになる。
- Tools パレットの線結合ボタンをおしてから、ナフタレンの左上の頂点にポインタをあわせ  が現れた状態にして、クリックして、上に結合をのばす。
- Tools パレットのベンゼン環ボタン  をクリックしてから上で伸ばした結合の上端にポインタをあわせ、Shiftを押しながらクリックすると 1-フェニル-ナフタレンになる。
- できあがった構造式は、先ほどと同じ手順で、Word 2007 の文書に貼り付けておく。

4.9 立体的な構造式

次に、 α -グルコースを例に、立体的な構造式を書く。



1. メニューバー「File」 「New document」
2. Tools パレットのシクロヘキサンボタン  をクリックしてからドキュメントウインドウをクリックするし、シクロヘキサンを一つ描画する。
3. Tools パレットの矩形選択ボタン  等でシクロヘキサンの構造式を選択する。
4. メニューバー [Object] [Rotate] で 30° 回転する。(選択範囲の右上の部分にポインタを合わせて曲線両矢印を表示させた状態でマウスドラッグすることで回転させることもできる。その場合、ウインドウの左下に回転角度が数字で表示される。)
5. Tools パレットの線結合ボタン  をクリックしてからシクロヘキサンの右端の頂点にポインタを合わせ、真上にドラッグして結合をのばす。
6. 同様の方法で、右端、右下、左下、左端の頂点から上下に結合をのばす。
7. 左上の頂点からは、まず、上に結合をのばす。
8. 次に同じ左上の頂点から **[Alt]** を押しながらマウスをドラッグし、通常の半分程度の結合を下向きにのばす(線が重なってしまうのを防ぐため)。
9. 右上の頂点は「O」(酸素)に変える。
10. Tools パレットの矩形選択ボタン  等で今までに描いた部分をすべて選択する。
11. 選択範囲の右下の部分にポインタを合わせて上下両矢印を表示させた状態で **[Alt]** を押しながらマウスを上下にドラッグすることで、縦方向だけ拡大縮小することができる (**[Alt]** を押さなければ縦横比を保って拡大縮小)。このとき、ウインドウの左下に倍率が数字で表示される。この機能を使って、縦方向のみに 50% 縮小する。
12. 必要な部分に「OH」や「CH₂OH」を書く。
13. Tools パレットの太線結合ボタン  をクリックしてから六員環の下の結合をクリックすると、その結合の線が太くなる。
14. Tools パレットの太線ウェッジ結合ボタン  をクリックしてから六員環の右下の結合をクリックすると、その結合の線が三角形になる。もう一度クリックすると三角の方向が逆になる。
15. 六員環の左下の結合を同様の方法で三角形にしてできあがり。
16. できあがった構造式は、先ほどと同じ手順で、Word 2007 の文書に貼り付けておく。

4.10 ChemDraw Net の終了

1. メニューバー「File」 「Exit」