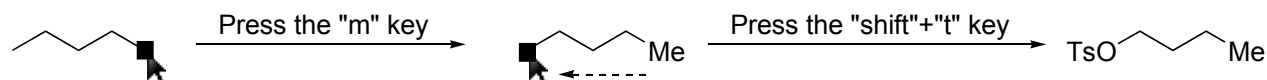


英文マニュアルを読まない貴方へ: ChemDrawテクニック集・日本語Windows版。

原子を簡単に書く



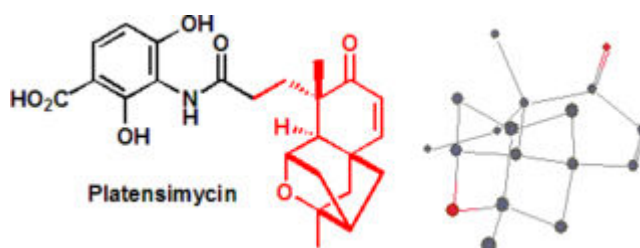
| Label | Key | Label | Key | Label | Key |
|-------|----------|-------|-----|--------------------|--------|
| A | a | F | f | Ph | P or 4 |
| Ac | A or 5 | H | h | Q ** | q |
| Br | b | I | i | R | r |
| n-Bu | 1 | K | k | S | s |
| s-Bu | 2 | Me | m | Si | S |
| t-Bu | 3 | N | n | TMS | t |
| C | c | Na | N | X | x |
| Cl | C or l * | O | o | COOCH ₃ | E |
| D | d | OTs | T | CH ₂ OH | 6 |
| Et | e | P | p | | |

* lower case letter L

** non-hydrogen heteroatom

ref: <http://www.artgang.jp/R/diary/diary.cgi?no=1722>

3Dモデルを書く



Windows, ChemDraw 7.0での方法を書いておりますが、多分他の環境でも大差ないと思います。

- 1) 構造式をChemDrawで描く
- 2) 選択して[Edit]→[Get 3D Model]で3Dモデル図を表示
- 3) 3Dモデル図をダブルクリックしてChem3Dで表示
- 4) [MM2]→[Minimize Energy]→[Run]で構造最適化
[View]→[Setting]で外観を好みに変更
[Tools]→[Show H's and LP's]で水素・lone pairの表示/非表示
- 5) [File]→[(ファイル名)を更新]でChemDraw上に反映

これで3D図が描けます。

ただし

- ・立体(太線/破線)が3D図にたびたび反映されないで、自分でチェック・修正が必要
- ・MM2レベルの計算なので最適化は正確ではない。縮環配座は比較的正確だが鎖状配座はほとんど当てにならない
- ・ちょっと変わった元素が含まれると最適化ができなくなるなどに留意する必要があると思います。

あくまでおおよその立体をつかむ目的で使用するのが良いでしょう。

ChemDrawの図を綺麗にPowerPointに貼り付ける (Windows)

WindowsでChemDrawからPowerPointに図を貼り付けると線がギザギザになりあまり美しくありません。

この対処法としていつも使う手段はChemDrawファイルを一度TIFFファイルへと置き換えた後、PowerPointに貼り付けるというものです。

これで綺麗な図になりますが、これを行うとせっかくのPowerPointの機能が使いにくくなります。

例えば、ある官能基の部分だけに黄色い丸を付けて強調する、といった操作はPowerPoint上では出来ません。こういうことをしたい場合はChemDraw上であらかじめ黄色い丸をつけた図を作って、PowerPointに貼り付ける必要があります。これはこれでよいのですが、影付きとかちょっと変わった図形を導入したいときには不便です。

これらを解決できる方法を以下に書きます。(PowerPoint2003で確認済み)

- 1) 貼り付けたい図をChemDraw上で選びコピー(Ctrl+C)
- 2) 「編集」→「形式を選んで貼り付け」→「Windowsメタファイルとして貼り付け」を選んでPowerpoint上に貼り付け (この段階ではいつもと変わらずギザギザです)
- 3) 図を選んで右クリックし、「図の編集」をクリック
- 4) 「Windowsオブジェクトに変換しますか?」と聞かれるので「はい」を選ぶ

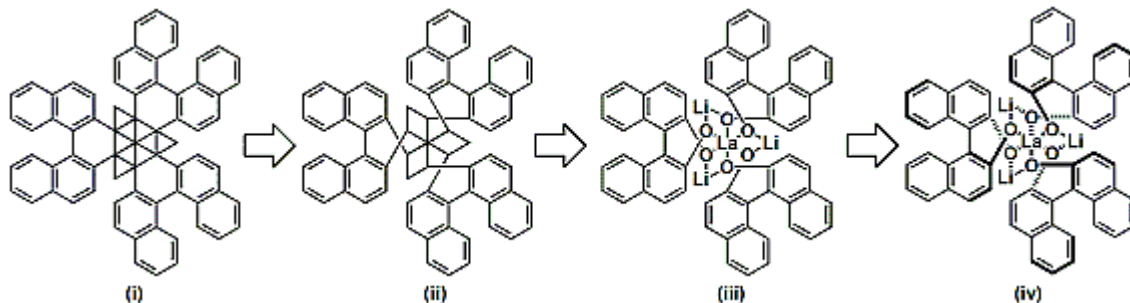
これであら不思議、綺麗な図になります。

しかもこの図、PowerPointでの図ファイルとして認識されているので、その上から色付きの四角とか影付きの丸とかも入れられます。「順序」もいろいろいじれます。試してみてください。

拡大／縮小は「Windowsメタファイルとして貼り付け」た段階で行ってください。

そのあと「図の編集」を選ぶとゆがみなく拡大／縮小された綺麗な図が得られます。

LLB平面構造式の綺麗な描き方



皆さんLLB構造を書くときどうやって書いてますか？

BINOLを先に書いてそれを「コピー→120度回転」を繰り返す方法でも書けますが、もっとキレイにできる方法があります(山際さん直伝です)。

- 1) まずシクロプロパン環を中央に9個、図のように並べて書きます。
次にシクロヘキサン環およびベンゼン環ツールでBINOL骨格の基を書きます。
- 2) 不要な単結合を消しゴムツールで消します。ホモΔ or Λ 錯体にするためにBINOLのC-O結合をクロスに書き直します。
前後関係およびキラリティに適宜注意。
- 3) 必要元素を書き込みます。
- 4) 適宜太線/破線に変えて完成！！

PDF関連フリーウェア (Windows)

ChemDrawやWordファイルをWin/Mac間でやりとりすると、文字化けしたりファイルそのものが開けなかったりと何かと不便で面倒です。

その点PDF文書はフォント・スタイル情報がファイルそのものに埋め込まれるので、どんなPC環境でもおおむね期待通りのレイアウトで見ることができる、という利点があります。編集/加工の要らない文書はPDF形式でやりとりする習慣をつけましょう。ファイルトラブルでの二度手間が減ります。ひとつのITマナーとして覚えておくの良いでしょう。

PDF文書を読むだけならAdobe Readerという(激重)無料ソフトを使えば良いのですが、他のファイルをPDF文書へと変換するには、通常Adobe Acrobatという有料ソフトが必要です。お手軽なはずのPDF文書でも、作るのに出費が必要ではややイマイチです。

現在では素晴らしいことに、PDFを扱える便利なフリーウェアが公開されています。これは使える、と思ったソフトを独断と偏見でいくつか紹介しておきます。

PrimoPDF (<http://www.forest.impress.co.jp/article/2004/03/26/primopdf.html>)

ファイルをPDF文書へと変換できるフリーソフトです。海外ソフトですが、日本語の文書でも変換OKです。かなり重宝します。

Adobe Reader Speed-Up (<http://www.forest.impress.co.jp/lib/offc/document/pdf/adbrdrspdup.html>)

激重なAdobe Readerの起動を速くしてくれるプラグインです。

Foxit Reader (<http://www.forest.impress.co.jp/lib/offc/document/pdf/adbrdrspdup.html>)

PDF-Xchange Viewer (<http://www.forest.impress.co.jp/lib/offc/document/pdf/pdfxchange.html>)

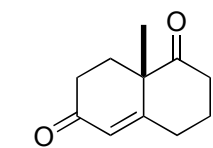
Adobe Readerに比べても高速なPDF閲覧ソフトです。

ただし印刷時、プリンタによってはレイアウトが崩れることがあるので注意。

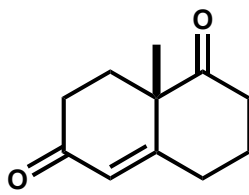
詳しい使い方はリンク先(窓の杜)を参照して下さい。

これらのソフトはWindows限定です。

Coreyのスタイルシート



ACS Documentスタイル



Coreyスタイル

Coreyの論文で用いられている化学構造式は、遠目からでも見栄えのする綺麗なものです。このスタイルシートは、以下のような設定・手順で作成可能です。(ChemDraw7.0の場合)

1) 新規ファイルを作成し、[File]→[Document Settings]を選択

2) 以下のように各タブ毎に設定する

[Drawing]タブ

- Bond Spacing → **15% of Length**
- Fixed Length → **0.708 cm**
- Bold Width → **0.106 cm**
- Line Width → **0.053 cm**
- Margin Width → **0.071 cm**
- Hash Spacing → **0.106 cm**

[Captions]および[Atom Labels]タブ

- Font → **Arial**
- Size → **12**
- Style → **Bold**
- Baseline Style → **Formula**

3) [File]→[Save As]でファイルの種類を[CD Stylesheet(*.cds)]としてスタイルシート用フォルダに保存。

(WindowsならばChemOfficeがインストールされているフォルダ下層のChemDraw Itemsフォルダ内に保存すればOK)

4) 次回からは[File]→[Open Specials]で保存されたスタイルを選択できます。

Windowsで・とか温度の単位とかを出す方法

MacでChemDrawに・(中点)とか温度の°Cを書くのってキーボードから簡単に打ち込むことが出来るんですけどWindowsだとうまくいかないですね。

無理やり0とかoとかを上付きにしたり、・の場合はMSゴシックで代用したりしますが、論文を投稿するときとかMSゴシックでは文字化けしてしまって困ることがあると思います。対応策をここに載せておきます。

1) °Cの出し方

Number LockにしてからAltを押しつつ**0176**と押してAltを離す。

これで上付きOが出ます。Cは普通にCを打ってください。ChemDrawおよびWordに対応しています。

2) ・の出し方

同様にNumber LockにしてからAltを押しつつ**0149**もしくは**0183**を押してAltを離す。

これで・が出てくるはず、0149はWordのみ、0183はWordでもChemDrawでも使えます。

ちなみに両方で・の大きさが違います、お好みに合わせてお使いください。