



化学構造作画ソフト

ChemDraw[®]

初心者向け 講習会

【主催】九州大学化学系研究室連合 【共催】九州大学附属図書館

【講師】

有田 正博 氏

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
TCフロンティアセンター

【概要】

九州大学では、化学系各研究室の協力により、PerkinElmer 社の「ChemDraw Professional」のサイトライセンスを契約しています。本学在籍者は誰でもこのソフトウェアを利用できます。この講習会では、サイトライセンスでの利用方法や、基本的な描画ツールの説明、汎用的に利用される分子モデリング機能を中心に実演を交えながら解説を行います。

【講演内容】

1) 化学構造作画ソフトChemDraw Professional の機能紹介、操作説明

- ChemDraw Professional の作画機能
- 化学構造式から各種物性を予測する
- 化学構造式からNMRスペクトルを予測する
- 化学構造式からIUPAC名に基づいた命名をする
- 化学構造式やバイオ関係まで対応する豊富な描画ツールとテンプレート
- 基本骨格を基に置換基をさまざまに置き換えた構造の一括作成
- 反応設計に伴う自動化学量論計算機能

2) 分子モデリング、シミュレーションソフトChem3D Pro の機能紹介、操作説明

- Chem3D Pro の作画機能
- 2次元描画から3次元描画への変換
 - 3次元構造の修正、原子追加、原子置換
- 3次元化した化学構造式の構造緩和機能（MM計算）
 - 3次元化した化学構造式の操作方法（回転、拡大、縮小）
- 3次元化した化学構造式の観察方法（座標、結合角、距離、分子表面）
 - タンパク質のPDBデータの読み込みのコツと3次元表示

参加無料

実習希望の方はPC持参

※事前にChemDrawをインストールしてください

日時	場所
5月16日（木） 14:50～16:20	【伊都地区】 理系図書館 3F 大会議室
5月17日（金） 10:30～12:00	【筑紫地区】 総合研究棟（C-cube） 3F 303号室

【お申込み・ChemDrawインストール方法】

図書館ウェブサイト > イベント > ChemDraw 講習会

【問い合わせ】九州大学理系図書館理系参考調査係

TEL: 092-802-2454 E-mail: titosanko@jimu.kyushu-u.ac.jp

