

事業者ガイダンス

－BIOVIA Drawの簡単な使い方－

※BIOVIA Drawは化審法の少量新規・低生産量新規申出
手続きの範囲での使用が認められています。

商業目的での利用にあたっては、BIOVIA Drawのライセン
ス条項をご確認ください。

はじめに —BIOVIA Draw の入手方法—

- BIOVIA Draw の入手手順を説明します。



◆ ダウンロードの大まかな流れ

1. 下記ホームページに接続。

<https://discover.3ds.com/biovia-draw-academic>

2. 申込フォームに必要事項を(英数字で)記入し、“Submit”ボタンを押す。
3. ダウンロードページになるので、インストール用ファイルをダウンロード(300MB弱)。(詳細は次ページ)

Register now

Professional E-mail*

Next

Register now

STEP 2 OF 2

First Name*

Last Name*

Company*

Japan

State / Province*

Which of these best describes your level of interest?*

Please contact me immediately

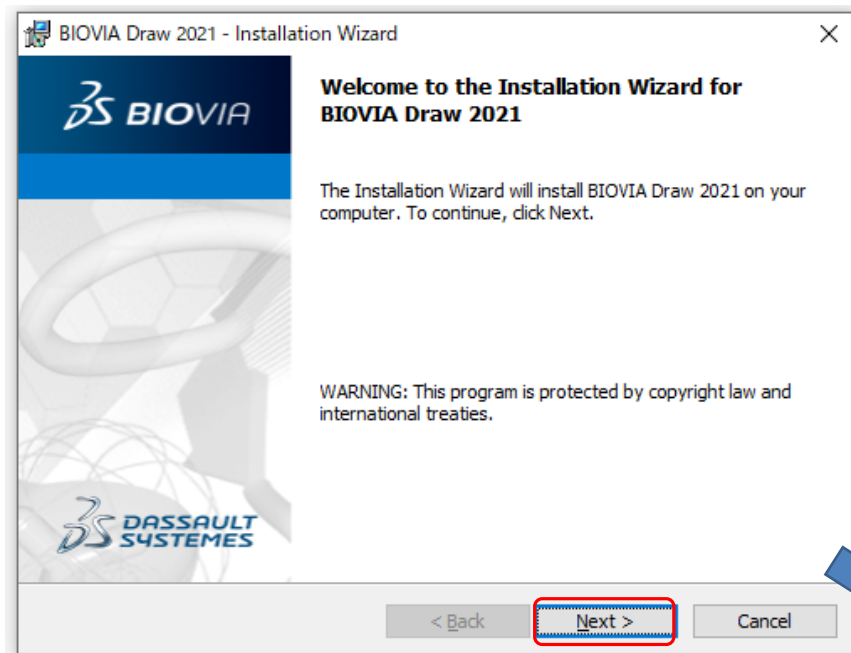
I acknowledge I have read and I hereby accept the [privacy policy](#) under which my Personal Data will be used by Dassault Systèmes*

I agree to receive marketing communications from Dassault Systèmes and its business partners

Submit

はじめに –インストール方法(その1)–

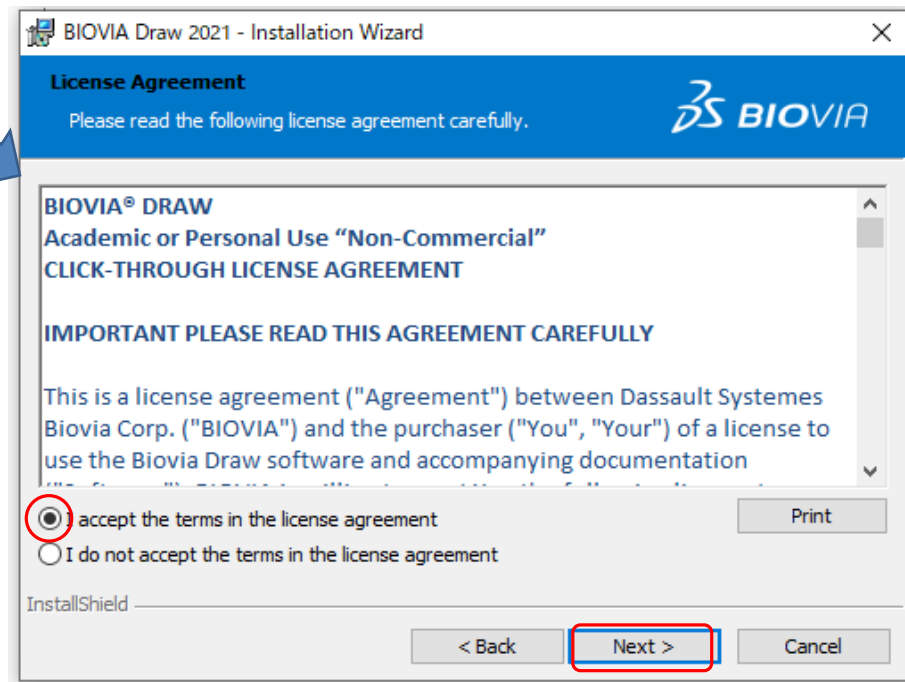
図1



◆ インストール手順 (32-bit 版の例)

1. 「Installation Wizard」で「Next」をクリック(図1)。
2. 「I accept the terms in the license agreement」をチェックして「Next」をクリック(図2)。

図2



はじめに –インストール方法(その2)–

図3



◆ インストール手順 (続き)

3. インストール先フォルダを選択し「Next」をクリック(図3)。
4. 「MS Officeと関連付けを行うか」どうかは各自の好みで選択し、「Next」をクリック(図4)。
5. 「Install」ボタンのクリックでインストールが開始(図5、図6)。

図4

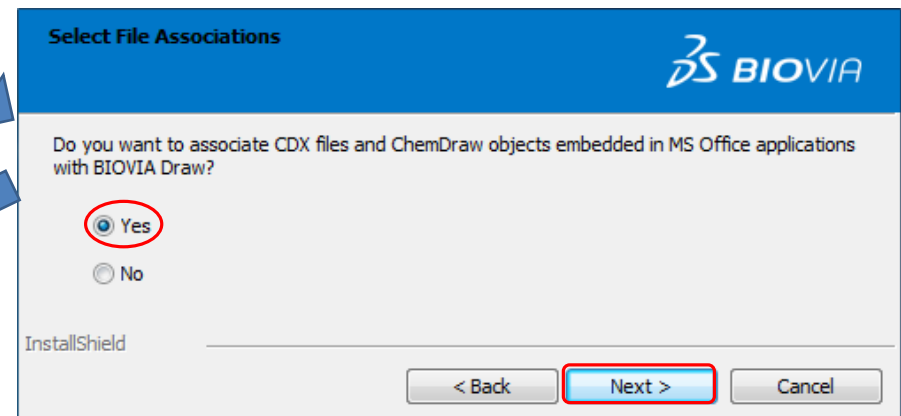
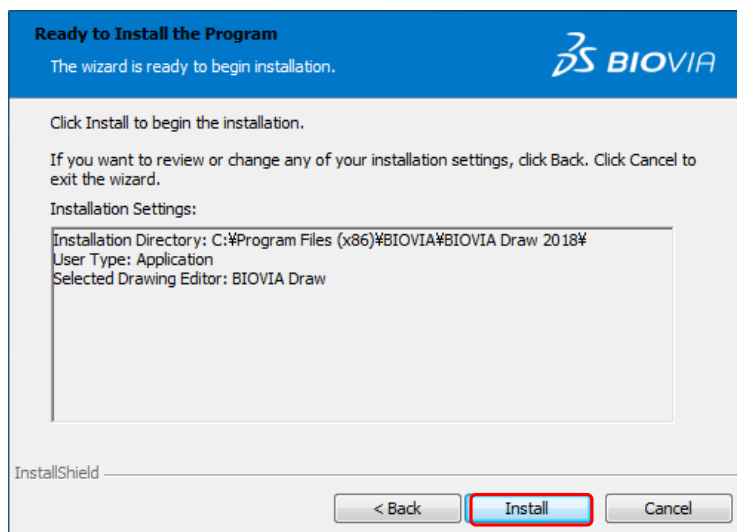
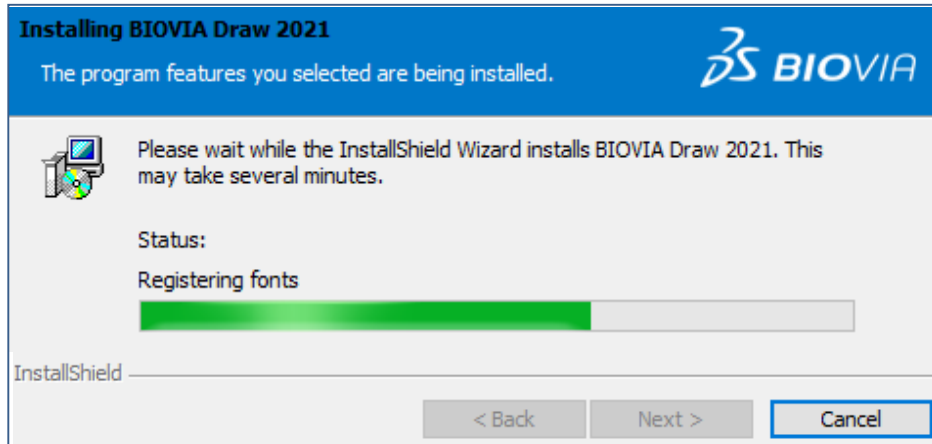


図5



はじめに –インストール方法(その3)–

図6



6. 「Next」をクリック(図7)。

7. 「Finish」をクリックするとインストール完了(図8)。

図7

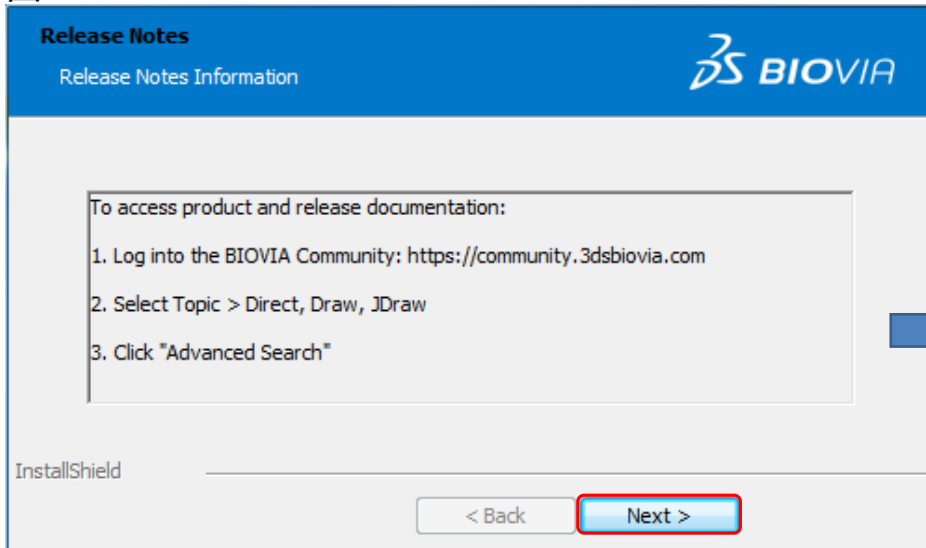
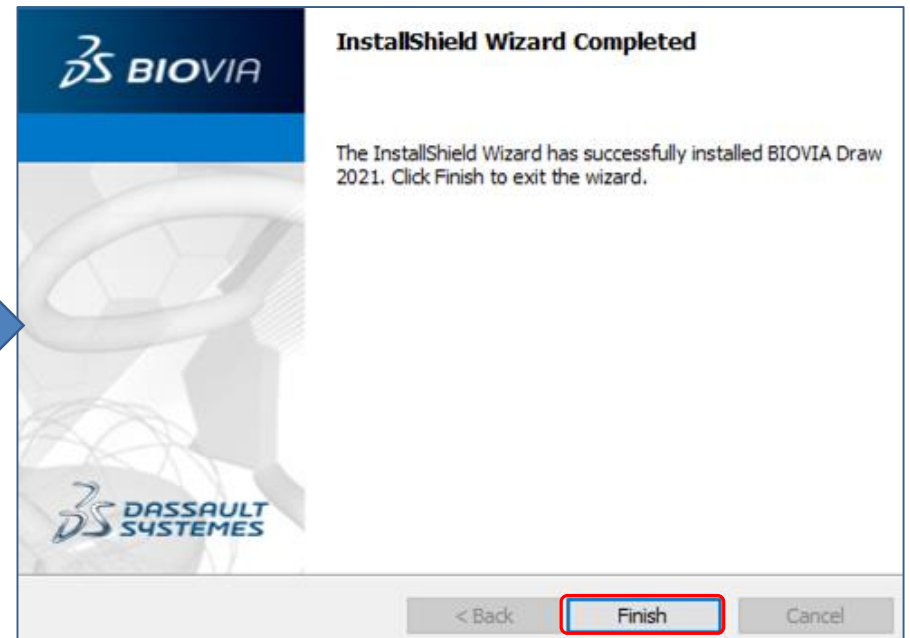


図8



はじめに — BIOVIA Drawの外観と主な機能(概要; その1) —

- BIOVIA Drawは、構造式描画を容易にする様々なパレット(ツールバー)が用意されている。

Before デフォルトの状態

After テンプレートを表示させた状態

ウインドウ

Before デフォルトの状態

After テンプレートを表示させた状態

Windowより各種のParetteを選択すると、テンプレートを表示できる。

テンプレートツール

Window

- Previous Tab Ctrl+Shift+F6
- Next Tab Ctrl+F6
- Reset Palettes to Classic Mode
- Formatting Toolbar
- Atoms Palette
- Bonds Palette
- Arrows Palette
- Unnamed1

Default

- Carbonyls
- Nitrogen
- Protecting Groups
- Bio Objects
- Rings
- Functional Groups
- Create Blank Toolbar
- Import Toolbar
- Remove Toolbar
- Rename Toolbar
- Export Toolbar


リング(環)パレット

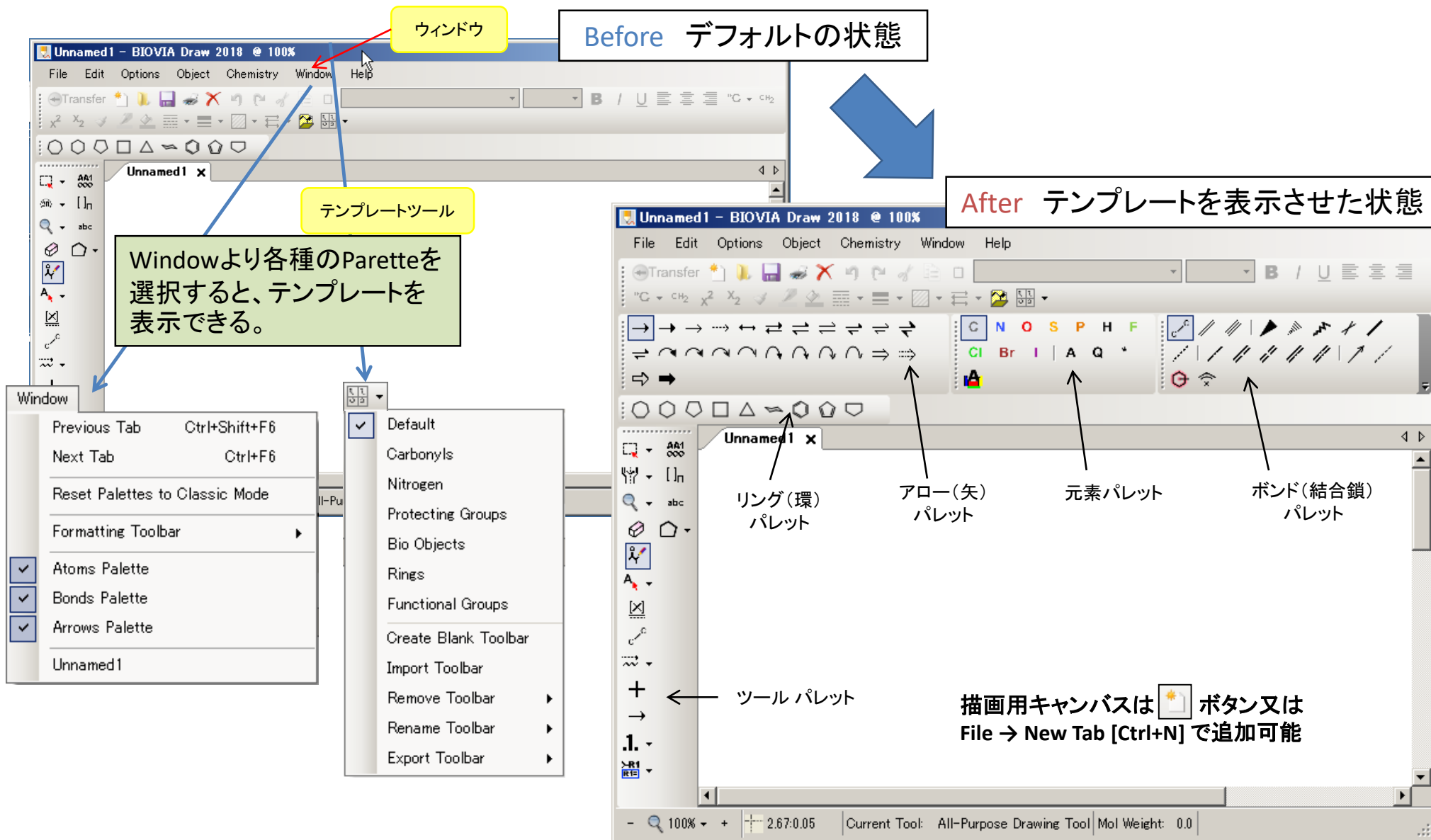
アロー(矢)パレット

元素パレット

ボンド(結合鎖)パレット

ツールパレット

描画用キャンバスは  ボタン又は File → New Tab [Ctrl+N] で追加可能



はじめに — BIOVIA Drawの外観と主な機能(概要; その2) —

- 典型的な構造はテンプレートが用意されている。また、自作した構造式テンプレート(MOLファイル)の取込も可能。

BIOVIA Draw のウィンドウ

テンプレートディレクトリの呼出

テンプレートディレクトリ

テンプレートの追加

テンプレートフォルダのインポート

インポートされたフォルダ

Right click on a folder or template to add or rename it. Select template and then click on canvas to place template.

Find: Next

- Personal Templates
 - Alpha-D-Sugars
 - Amino Acids
 - Aromatics
 - Bases
 - Beta-D-Sugars
 - Bicyclic Hydrocarbons**
 - Carbonyls
 - D-Amino Acids
 - D-Sugars
 - Functional Groups
 - Gmelin Inorganics
 - Gmelin Polyhedra
 - Heterocyclic Rings
 - L-Amino Acids
 - Nitrogen
 - Orbitals
 - Phosphorus
 - Pi Ligands
 - Protecting Groups
 - Rings
 - Sugars
- Imported Templates
 - TEMP

110 111

221 222

311 321

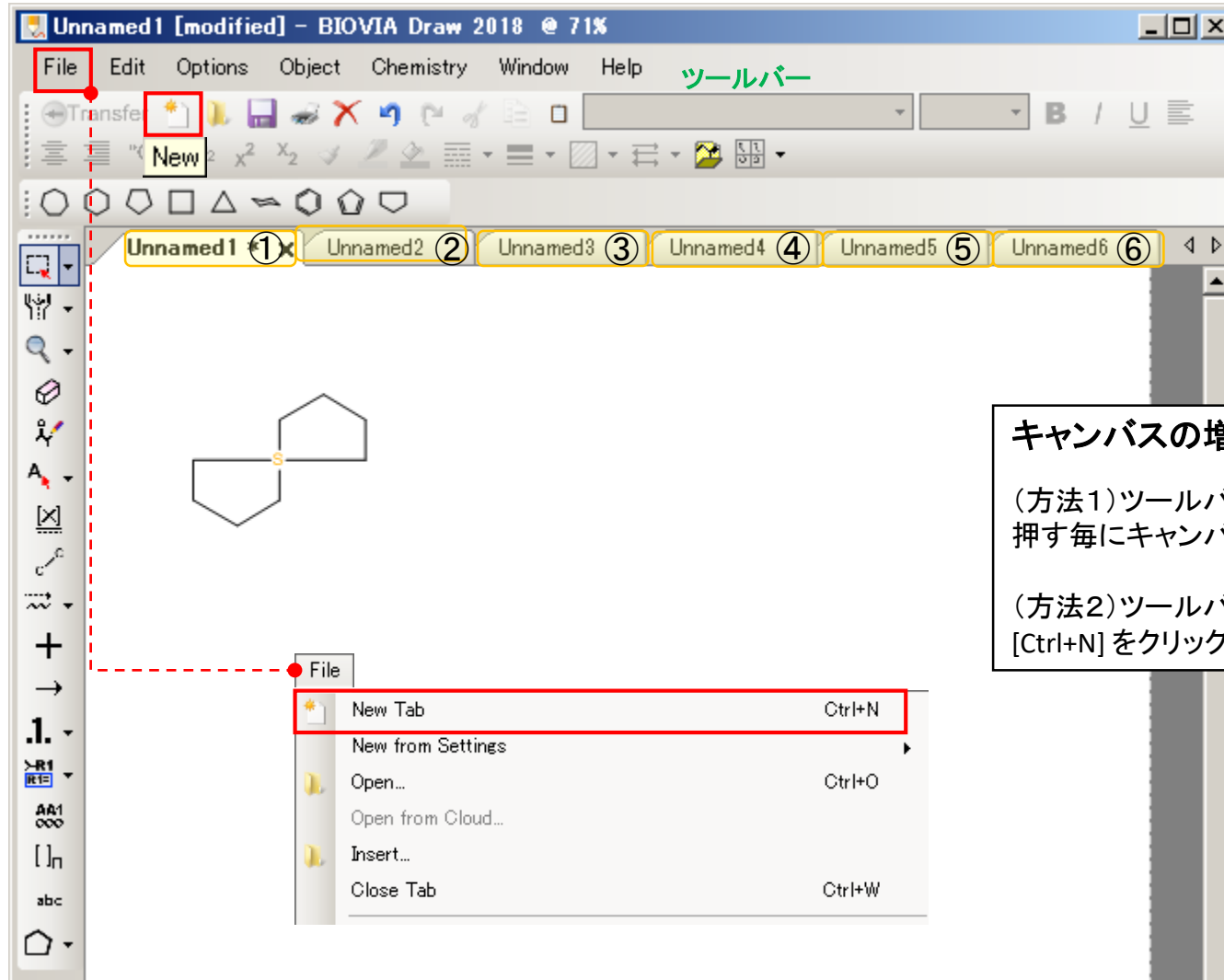
331 332

Close


テンプレートディレクトリ画面から目的の物質(例えば221)を選択(左クリック)し、BIOVIA Draw のキャンパス上でもう一度左クリックすると、目的の物質が出現。

はじめに —BIOVIA Drawの外観と主な機能(概要;その3)—

- 描画作業は複数キャンバス(タブ)で実施可能。
- 別キャンバスへの移動はキャンバス上部の「タブ」をクリック。複数の物質描画を並行して行ったり、別物質を参照しながら作業できるため、おすすめの機能。



キャンバスの増やし方

(方法1) ツールバーの New ボタン  を押す毎にキャンバスが1シートずつ追加。

(方法2) ツールバーの File → New Tab [Ctrl+N] をクリック。

ステップ1 初期設定の確認・変更



ステップ2 元素



(ア) 元素の入力

(イ) 元素のプロパティの入力

ステップ3 骨格



(ア) 鎖状構造の入力

(イ) 環状構造の入力

ステップ4 元素の変更



ステップ5 結合鎖の変更



ステップ6 画像処理(整列／拡大・縮小／コピー／移動・回転等)



ステップ7 保存と確認(ファイルを開く)

ステップ1 初期設定の確認・変更

- 基本的な初期設定は Options → Settings ... で確認・変更が可能。

① オプション

The screenshot shows the software's main window with the 'Options' menu open. A yellow box highlights the 'Options' menu item in the top bar. A blue arrow points from this box to the 'Options' menu. In the 'Options' menu, the 'Settings...' item is highlighted with a red box and a yellow box labeled '② セッティング'. To the right, the 'Settings - default.xml' dialog box is open, titled 'セッティング(設定)画面'. It contains a tree view on the left with categories like 'Arrows', 'Atoms', 'Attached Data', 'Bonds', 'Colors', 'Fonts', 'General', 'Haptic/Markush structure', 'InChI', 'Reactions', 'Rgroups', 'Sequences - All', 'Sequences - Centralized Library', 'Sequences - Sequence view', 'Sequences - Structure view', 'Sgroups', 'Stereochemistry', 'Templates', 'Three Dimensional (3D)', and 'Zero Order Bonds'. The 'Fonts' category is expanded, and the 'Text default font' item is selected. A red box highlights the details for 'Text default font', which includes a table with the following data:

Chemistry label font	Arial, 10pt
Stereo configuration label font	Arial, 8pt
Text default font	Arial, 12pt
Name	abc Arial
Size	12
Unit	Point
Bold	False
Italic	False
Strikeout	False
Underline	False

A yellow box labeled '設定詳細項目・内容' points to this table. Below the table, there is a section titled 'Text default font' with the description 'Specifies the default font for Text. Default: Arial, 12pt.' and a yellow box labeled '設定内容の説明'. At the bottom of the dialog are buttons for 'Load...', 'Save As...', 'Reset', 'Apply and Save', 'Apply', and 'Cancel'.

ステップ2 元素 ー元素の入カー

- 元素の表示は Atom Toolbar で行う。

②

④ 周期律表 表示ボタン

Atom Toolbar

周期律表

Atom type

⑤

①

③

ズーム →

Atom Toolbar

Atom Tool

← ツールパレット

① ツールパレットで Atom Toolbar を選択するとツールバーが表示。


② Atom Toolbar で目的の元素を選択。

③ キャンバス上の任意の点でクリック→目的の元素を表示。

④ ツールバーにない元素を入力したい場合は、「周期律表表示ボタン」を選択。

⑤ 現れた周期律表から目的の元素を選択。

元素の色表示のオン・オフは Options→ settings... → Atoms項目の、Color Atoms by Type 詳細設定を Off にします(又は、Atom Property (次節)→ Color...)

操作を取り消すには
・ Undo  ボタンを押すか
・ Edit → Undo [Ctrl + Z]
のクリックで実現します。

ステップ2 元素 – 元素のプロパティの入力

- 電荷等の元素情報を変更したい際には、Atom Property画面で変更が可能。具体的には、同位体、電荷、ラジカル等を変更可能。

右クリック

Atom Property

- Atom Symbol... 元素の変更
- Charge... 電荷
- Isotope 同位体
- Valence... 原子荷
- Radical ラジカル
- Hydrogen Display 水素表示位置
- Color... 色表示
- Stereoconfiguration 立体異性体設定
- Remove Properties 設定したプロパティの削除

① Atom Symbol... 元素の変更

② 電荷の設定

+6	+7			
+1	+2	+3	+4	+5
Off				
-1	-2	-3	-4	-5
-6	-7	-8	-9	-10
-11	-12	-13	-14	-15

③ 同位体の設定

20	21	22	23	24
15	16	17	18	19
14	Off			
13	12	11	10	

④ 原子価* の設定

(0)	(I)	(II)	(III)	(IV)
(V)	(VI)	(VII)	(VIII)	(IX)
(X)	(XI)	(XII)	(XIII)	(XIV)
Off				

* (明示されていない水素を含む) 結合の数

⑦ 色の設定

ステップ3 骨格 —鎖状構造の入力—

- 鎖状構造の描画には、① All-Purpose Drawing Tool 又は ② Chain Tool を使用。

① All-Purpose Drawing Tool

② Chain Tool

↓ a - b 間でドラッグ

①による鎖状構造の描画結果 (C13)

- ・ a - b' のドラッグで1本の単結合を描画(炭素数が1増える)

c - d 間でドラッグ

②による鎖状構造の描画結果 (C11)

- ・ c - d' のドラッグで1本の単結合を描画(炭素数が1増える)

※参考
「常に末端の元素を表示したい」等の細かな設定は「Options→ settings... → Atoms」の、「Show hydrogen labels」で設定可能。(例: ①' 及び ②' は、「Terminal + Hetero」を選択した例)。

← ツールパレット

90% 5.36:0.03 Current Tool: Select Tool Mol Weight: 340.67

ステップ3 骨格 —環状構造の入力—

- 代表的な構造のパレットは既に用意されており、下記の通りユーザーによって追加が可能。
- 縮合環は、要素となる環の辺又は点を重ねて作成(右下図)。

デフォルトの環構造パレット

Change to different templates

① クリック

③ 選択

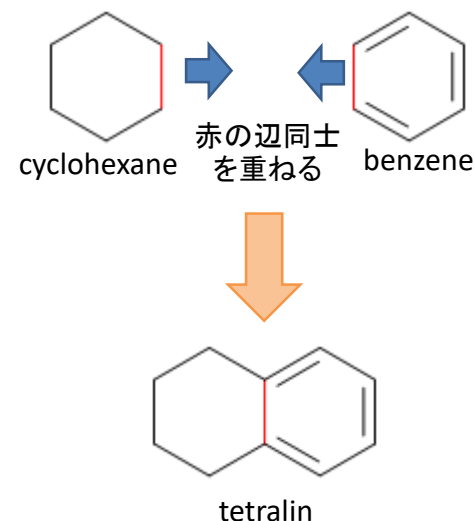
④ 貼付

オプションの環構造パレット

② クリック

縮合環 ※

※ 縮合環の描き方



※図形の選択・移動・回転の詳細はステップ6へ。

ステップ4 元素の変更

- 結合鎖上の任意の元素の種類を変更する方法は、以下の3つ。

方法Ⅰ. 「Atoms palette」で変更したい元素種を選択・変更(黒①～黒③)

方法Ⅱ. キーボードで直接元素記号を入力・変更(青①～青④)

方法Ⅲ. 「Atom property」→「Atom Symbol...」で変更(→ステップ2参照)

※慣れないうちは方法Ⅰをオススメします。

【方法Ⅰ】

① 選択 ※

② 変更したい元素をクリック

③ 変更完了

【方法Ⅱ】

① Select Tool 又は All-Purpose Drawing Tool を選択した状態で...

② 変更したい元素をクリック

③ キーボード入力 (例: "O" を入力)

④ 変更完了

※ Atoms palette が非表示の場合は、メニューバーの「Windows」→「Atoms Palette」を選択。

注) キーボード入力(方法Ⅱ)は、存在しない元素まで入力でき、そのままMOLファイルとして出力されてしまう可能性があるため注意!

(参考) 環状物質(縮合環)も同様の操作で対応可能。

ステップ5 結合鎖の変更

● 結合鎖の種類を変更する方法は、以下の2種類；

方法Ⅰ．ツールパレットの「Bond Tool」を選択 → 「Bonds Palette」を表示

方法Ⅱ．結合鎖の上で右クリック → 「Bond Property」で指定

Unnamed1 [modified] - BIOVIA Draw 2018 @ 82%

File Edit Options Object Chemistry Window Help

Transfer C CH_2 X^2 X_2

C N O S P H F Cl Br I A Q

Unnamed1 * x

① クリック

② クリック

③ クリック

方法Ⅰ ※1

Bond Tool

Bonds Palette

Bonds

Double Bond

① ② ③

Double Bond を選択すると、クリック毎に二重結合の“外觀”を①→②→③の順で変更可能。

クリック毎に「二重結合」→「三重結合」→「単結合」の順で変更可能。

これらのボタンは使用不可！※2。

※1 「Bonds palette」は、メニューバーの「Windows」→「Bonds Palette」でも表示可能。

※2 (注意) 使用可能な結合鎖は下記のみ！

- ◎ 単結合 Single Bond
- ◎ 二重結合 Double Bond
- ◎ 三重結合 Triple Bond
- ◎ アップ Up Wedge Bond
- ◎ ダウン Down Wedge Bond

方法Ⅱ 結合鎖の上で右クリック→ウィンドウ(下図)の「Bond Order」で上記と同様に設定可能。

Bond Property

Bond Order

Zero-Order Bond

Stereobond

Bond Thickness

Bond Length...

Bond Crossed

Color...

Query bond type

Chain or Ring Bond

E/Z-Geometric Double Bond

Attach Data...

Show Stereoconfiguration

Create Template/Abbreviation...

Remove Properties

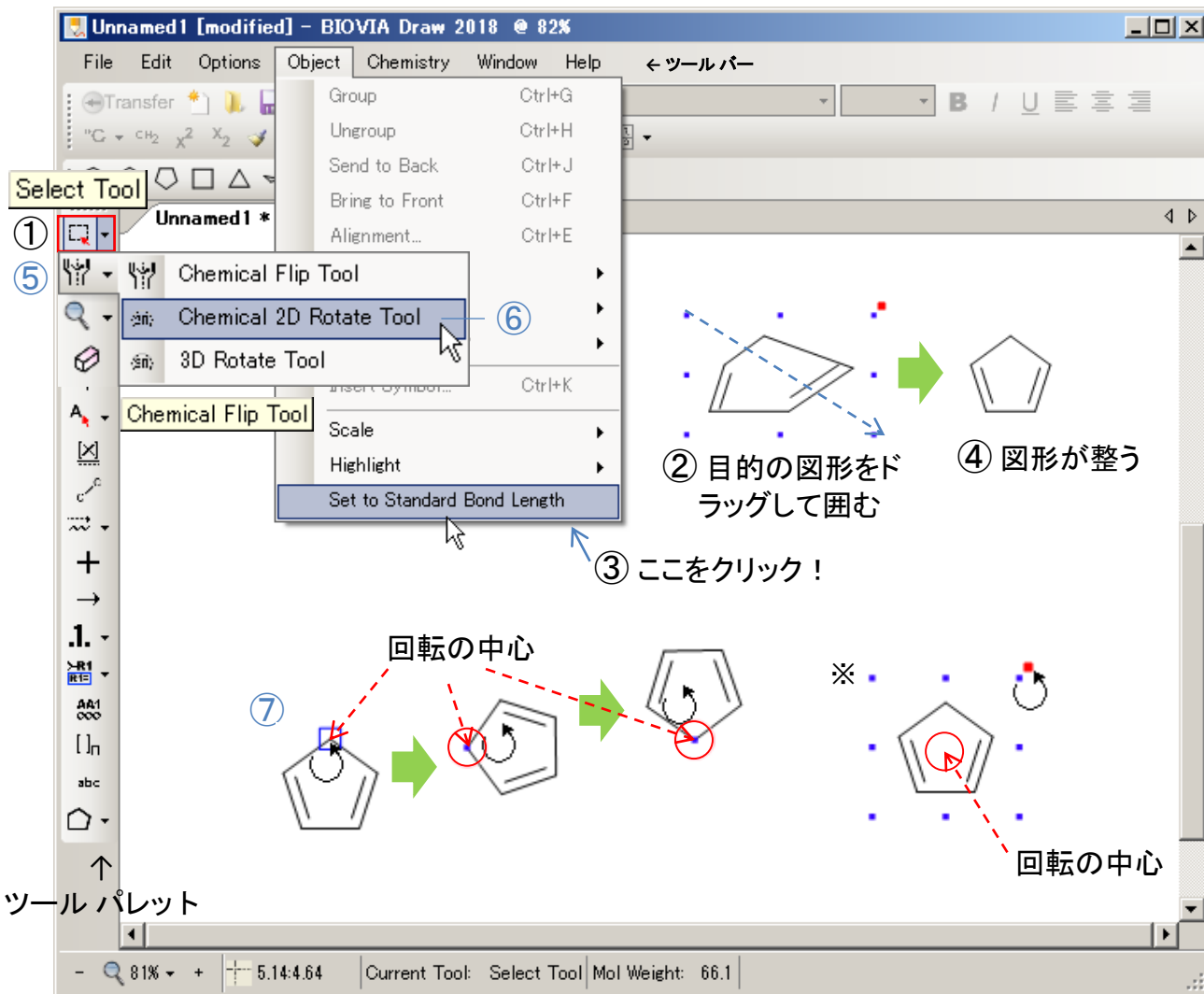
Single

Double

Triple

ステップ6 画像処理(整形;その1)

- 図形(構造式)を整形する機能はツールバーの「Objects」→「Set to Standard Bond Length」。
- 図形(構造式)の回転(反転)はツールパレットの「Chemical Flip Tool」を使用。



図形(構造式)を整形

- ① 「Select Tool」ボタンを選択。
- ② 目的図形を囲むようドラッグ※。
- ③ 「Object」→「Set to Standard Length」をクリック。
- ④ 整形完了。

図形(構造式)を回転(反転)

- ⑤ 「Chemical Flip Tool (▼)」をクリック。
- ⑥ オプションを選択。
(Flip(反転)、2D(3D) Rotate (平面(立体)の回転))
- ⑦ 任意の元素の上でクリック→ドラッグで回転(反転)。

※「②」の動作において表示される『赤いドット』をクリック→ドラッグでも回転が可能。

(参考)その他、「Object」→「Rotate」→「Bond to vertical (Bond to horizontal)」で、選択した結合(辺)が垂直/水平になるまで図形全体を回転する機能もある。



ステップ6 画像処理(整形;その2)

- 複数の図形(構造式等)を整列する機能はツールバーの「Objects」→「Alignment ...」。

① 「Select Tool」ボタンを選択。

② 目的図形を囲むようドラッグ。

③ 「Object」→「Alignment ...」をクリック。

④ 下図のようなウィンドウが開くので、揃えたい基準(左図では縦・左端、右図では横上端)をチェック後OKボタンをクリック。

⑤ 整列完了。

横揃え

縦揃え

Alignment

Horizontal: None, Top, Center, Bottom

Vertical: None, Left, Middle, Right

Preview: 縦・左揃えのイメージ

Alignment

Horizontal: None, Top, Center, Bottom

Vertical: None, Left, Middle, Right

Preview: 横・上揃えのイメージ

ステップ6 画像処理(拡大・縮小、コピー)

- 図形(構造式)の拡大・縮小はツールパレットの「Zoom Tool(虫眼鏡マーク)」又は「Options Zoom In [F6] / Zoom Out [F7]」で可能。
- コピーは図形(構造式)を選択→「Edit」→「Copy [Ctrl+C]」→「Edit」→「Paste [Ctrl+V]」で可能。

The screenshot illustrates the workflow for zooming and copying a chemical structure in BIOVIA Draw 2018. The main window shows a benzene ring structure being zoomed in and out. A red dashed arrow points from the 'Zoom In' option in the 'Options' menu to the larger structure, labeled '[F6]で拡大'. Another red dashed arrow points from the 'Zoom Out' option to the smaller structure, labeled '[F7]で縮小'. A blue double-headed arrow connects the two structures. A green dashed arrow points from the 'Copy' option in the 'Edit' menu to the larger structure, labeled '[Ctrl+C]でコピー'. Another green dashed arrow points from the 'Paste' option to the smaller structure, labeled '[Ctrl+V]で貼付'. A green double-headed arrow connects the two structures. The 'Options' menu is open, showing 'Zoom In' (拡大) and 'Zoom Out' (縮小) options. The 'Edit' menu is also open, showing 'Copy' and 'Paste' options. The 'Zoom Tool' is highlighted in the 'Tools' palette. The status bar at the bottom shows 'Current Tool: Zoom Tool' and 'Mol Weight: 78.11'. The text 'ツールパレット' (Tools Palette) is written at the bottom left.

①

② 右クリック→ Zoom In
で拡大

← ツールパレット

Options		
Page Width		
Whole Page		
Actual Size	Ctrl+Shift+A	
Zoom In	拡大	F6
Zoom Out	縮小	F7
Zoom Default		
Outline for Complex Selection		
Size		
Show Ruler		
Show Grid		
Grid Settings...		
Custom Modifications Browser...		
Document Border		
Autoconvert Reaction Arrow		
Settings...		
Apply Settings		
Load Settings...		

Edit		
Undo		Ctrl+Z
Redo		Ctrl+Y
Cut		Ctrl+X
Copy		Ctrl+C
Paste		Ctrl+V
Copy As		
Paste As		
Duplicate		Ctrl+D
Delete		Del
Italic		Ctrl+I
Bold		Ctrl+B
Underline		Ctrl+U
Select All		Ctrl+A
Insert Object		

ステップ6 画像処理(移動・回転)

- 図形(構造式)の移動、回転方法は以下の通り(例:縮合環の場合)。

① Select Tool

② 角(又は辺)を掴んで移動(ドラッグ)

③ 結合

④ 角(又は辺)を掴んで移動(ドラッグ)

※赤い点に近づけるとカーソルの形が変化

回転の中心

図形(構造式)の移動と結合

- ① 「Select Tool」ボタンを選択。
- ② 対象の図形(構造式)を囲むようにドラッグ。
→図形(構造式)周囲が青ドット(8個)で囲まれ、右上隅に赤ドットが出現
- ③ 目的物質の結合鎖(辺)又は元素(角)をクリック。
→図形(構造式)周辺が青四角で囲まれる
- ④ そのままドラッグ→結合相手先の結合鎖(辺)又は元素(角)まで移動。

※ 移動したい図形(構造式)の向きを回転したい場合は、赤ドット上にカーソル(マウス)を移動→ドラッグ→ドロップで回転が可能。なお、回転の中心は、青ドットで囲まれた四角形の中心。

ステップ6 画像処理(異性体の描画;その1)

- 図形のコピー、移動、回転等の機能を使った異性体の描画の例を示す。

①

[1] オルト体 → メタ体

② 選択部分を切り離す → カット (Ctrl+X) & ペースト (Ctrl+V)

③ 切り離した部分の一方の末端を環のメタ位につける

④ Object → Set to standard Bond Length で整形

[2] シス (Z-) → トランス (E-)

② 選択部分を切り離す → カット (Ctrl+X) & ペースト (Ctrl+V)

③ 切り離した部分を回転

④ 回転させた部分を移動してC末端をもう一方のC末端につける

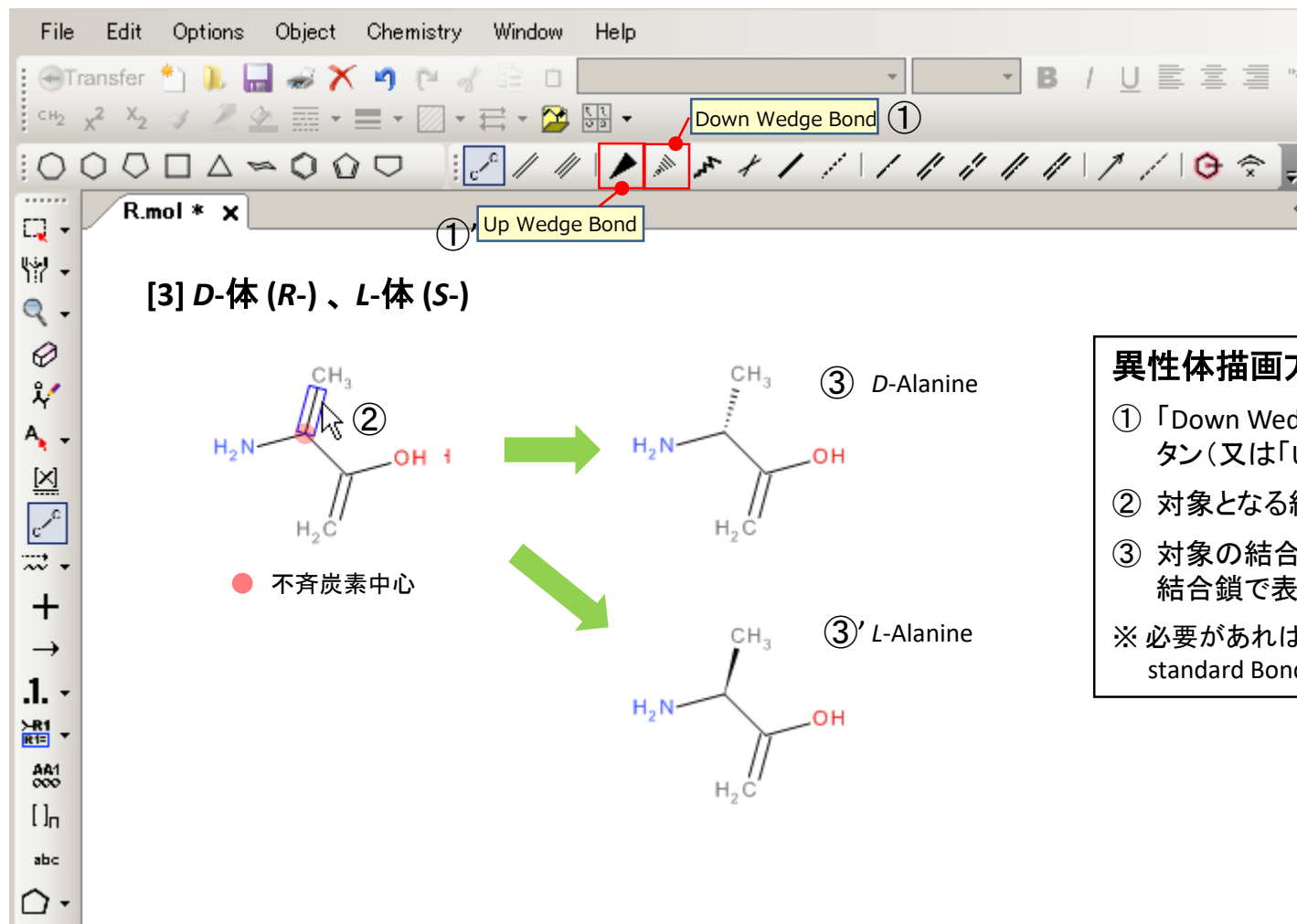
完成

異性体描画方法の例

- ① 「Select Tool」 ボタンを選択。
 - ② 対象になる結合と元素を Shift キーを押しながらクリック。
→ 対象の図形が青ドットで表示される
 - ③ Ctrl + X で対象図形を切り取り、Ctrl + V で元の位置から離れた位置に貼付。
 - ④ 切り取った図形を選択し(必要に応じ回転した後)結合すべき末端を目的の位置([1]ではメタ位、[2]では二重結合)に接続。
- ※ 必要であればツールバーの Object → Set to standard Bond Length で整形。

ステップ6 画像処理(異性体の描画;その2)

- 結合鎖の変更による立体化学的異性体の描画の例を示す。



異性体描画方法の例

- ① 「Down Wedge Bond (下向き楔結合)」ボタン(又は「Up Wedge Bond」①')を選択。
- ② 対象となる結合をクリック。
- ③ 対象の結合が下向き(又は上向き③')の結合鎖で表現される。

※ 必要があればツールバーのObject → Set to standard Bond Length で整形。

ステップ7 保存(その1)

- 図形(構造式)の保存は「ファイルメニュー」→「Save As ... (名前を付けて保存)」で実施。

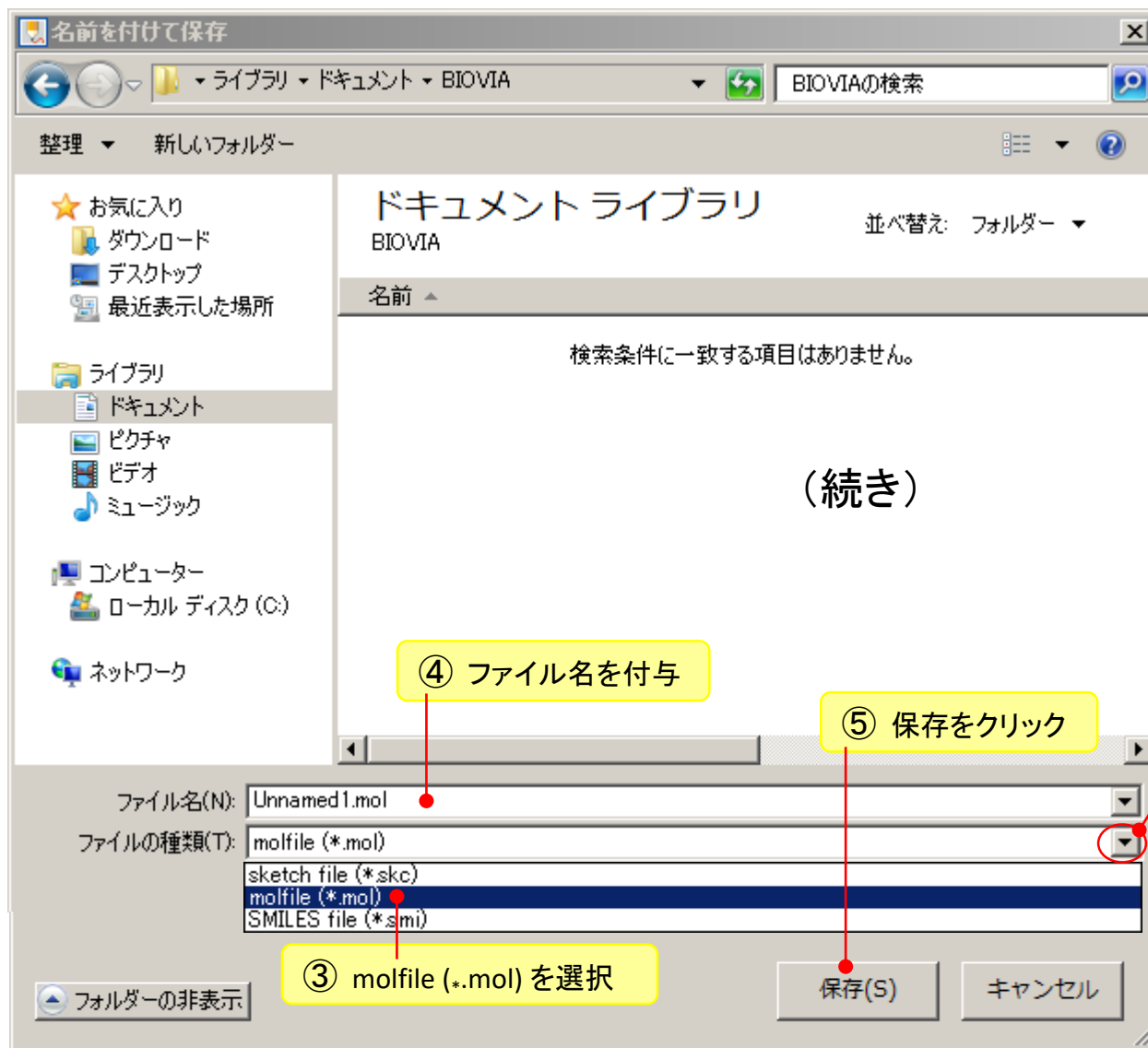
The screenshot shows the BIOVIA Draw 2018 interface. The 'File' menu is open, and the 'Save As...' option is highlighted with a red box and a red circle containing the number 1. A red arrow points from this circle to a yellow callout box containing the text '① Save As ... をクリック'. The main workspace displays a chemical structure of a bicyclic compound with a sulfur atom (S) at the bridgehead. The title bar indicates the file is 'Unnamed1 [modified]'.

図形(構造式)の保存方法

- ① 「File」→「Save As ... [Ctrl+Shift+S)」を選択。

(次頁へ)

ステップ7 保存(その2)



図形(構造式)の保存方法

- ② 「ファイルの種類 (T) [▼]」をクリック。
- ③ molfile (*.mol) を選択。
- ④ ファイル名を付与。
- ⑤ 保存をクリック。

② クリック

※ BIOVIA Drawのデフォルトのmolfile保存形式は「v2000」。分子数の大きい場合は自動的に「v3000」が選択・保存される。
(参照: Settings)

ステップ7 確認(ファイルを開く;その1)

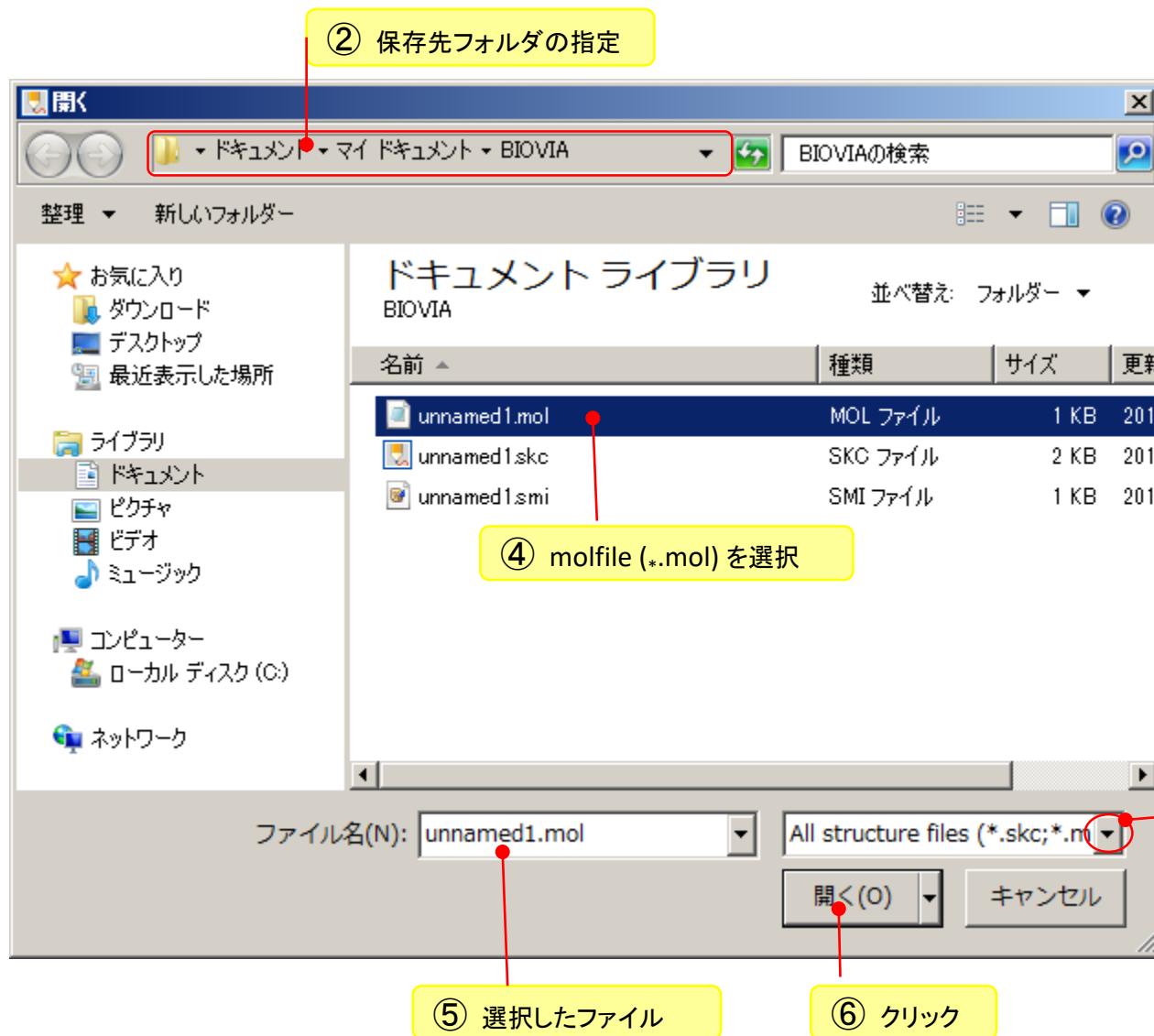
- 作成した図形(構造式)の確認は「ファイルメニュー」→「Open...(開く)」で可能。

The screenshot shows the BIOVIA Draw 2018 software interface. The 'File' menu is open, and the 'Open...' option is highlighted with a red box and a red circle containing the number 1. A red arrow points from this circle to a yellow callout box at the bottom left that says '① Open... をクリック'. The main workspace shows a chemical structure of a bicyclic sulfide. The 'File' menu items are: New Tab (Ctrl+N), New from Settings, Open... (Ctrl+O), Open from Cloud..., Insert..., Close Tab (Ctrl+W), Save (Ctrl+S), Save As... (Ctrl+Shift+S), Save to Cloud..., Save Selection As... (Ctrl+L), Save As Image..., and Save As SCSR Template...

図形(構造式)の確認方法

- ① 「File」→「Open... [Ctrl+O)」を選択。
(次頁へ)

ステップ7 確認(ファイルを開く;その2)



図形(構造式)の確認方法

- ② 保存したMOLファイルのあるフォルダを指定。
- ③ ファイルの種類を All structure files (...) (デフォルトのまま)、又は [▼] をクリックして mol files (*.mol) を選択。
- ④ 確認したいMOLファイルを指定。
- ⑤ ファイル名(N)欄に指定のファイル名が表示されたことを確認。
- ⑥ 開く(O)をクリック。

ステップ7 確認(ファイルを開く;その3)

unnamed1.mol - BIOVIA Draw 2018 @ 100%

File Edit Options Object Chemistry Window Help

Transfer

CH₂ X₂ X₂

5lambda4-t... unnamed1.mol x

新しいキャンバス(ファイル名)

図形(構造式)の確認方法

⑦ 新しいキャンバス(ファイル名)上に指定(保存)したファイルの図形(構造式)が表示される。

(終了)

C1CCSC12CCCC2