

## Smart Lab

# 化学者の研究活動を支援する ChemDrawシリーズ

化学構造作画機能を中心とした  
化学・生物研究業務の支援を実現



以下のような特徴・製品ラインナップがあります。

- 化学構造式の描画をはじめ、分子モデリング、化学情報データベースの構築などを可能にする、様々なアプリケーションを包含した高機能なパッケージソフトウェア。化学研究者の研究業務を幅広く支援。
- パソコン上であらゆる化学情報を統合管理でき、化学・バイオなどに関する様々な研究開発を効率化。
- 拡張性に優れた製品構成により、デスクトップからネットワークを利用した全社的な活用まで対応。



### Signals ChemDraw V25

化学文書作成、分子モデリング、データベース構築を行うクラウド対応の最上級デスクトップ化学ソフトパッケージ製品です。ChemDraw V25は、ChemDraw Desktop、Chem3D、ChemFinder、ChemBioViz、PubChem GHS、ChemACX Explorerを搭載したパッケージです。製品の日本語マニュアルはPDFで提供します。お客様毎に提供されるインターネット上のSignals (SaaS) 環境によるライセンス管理と認証を提供します。SaaS環境で利用するChemDraw+を含み、SaaS環境は自動的にバージョンアップされます。

	構成プログラム	内容
	ChemDraw Desktop	化学量論計算、バイオツール、化学命名機能、NMRシフト予測、ClogP予測機能を持つ二次元化学構造作画ソフトウェア。
	ChemACX Explorer	ChemDrawのメニューから構造またはCAS RNを指定することによって1000万件以上の市販化合物を検索可能。
	Chem3D Ultra	OpenGLによる美しいグラフィック表示、分子表面のスライス表示。MM2、MM3などの分子力学計算、GAMESS2020 (Chem3Dは、64-bit GAMESSだけをサポート) をサポート。インターフェイスとしてMOPAC2016、Gaussian16W、Autodock、Conflexをサポート (各プログラムは、別途購入が必要)。
	ChemFinder Ultra	簡単な操作で化学構造式を含めた本格的な化学情報データベースを構築可能。
	ChemBioViz	ChemFinderデータベースの検索結果をグラフ化する便利なツール。統計解析機能やヒストグラム、一次直線、二次曲線、三次曲線などの作成が可能。
	ChemDraw/Excel CombiChem/Excel	Excel上で化学構造式を検索、表示が可能。Excel上でコンビナトリアルライブラリを作成可能。
	ChemFinder for Office	WordやPowerPointに含まれる化学構造式を一括して検索することが可能。

## 化学者の研究活動を支援する ChemDrawシリーズ



### ChemDraw Professional V25

化学構造描画、検索クエリー作成を行う最新のスタンダードなデスクトップ化学ソフトパッケージ製品です。ChemDraw Professionalは、高度な物性予測ツールを含んだ化学の専門家を対象とした構造描画パッケージです。分子モデリングソフト (Chem3D Pro) , 化学情報管理ソフト (ChemFinder Std) を含みます。また、Microsoft Officeとの連携を可能とするChemDraw for Excelも含みます。SciFinder連携、環の彩色、TLCプレート、電気泳動作画ツールを備えています。バイオ関係の描画に便利なフルカラーBioDrawツール、アノテーション、パスウェイ、プラスミドマップ作画機能も備えています。

機能	内容
物性予測	化学構造式から生成された化学物質名、化学式、分子量、化学物性をリアルタイムに更新。構造式に変更を加えるとそれを即座に反映。
化学名称命名機能	電荷を含む化合物、塩基性化合物、対称性の高い構造、無機物質、有機金属系化合物などにも対応。
NMRシフト予測	プロトンNMRの化 学シフトと分割パターンがより正確になり、炭素13NMRシフト予測では、予測精度が向上。
化学量論計算	作画した反応式に基づく、理論収量などの計算を簡単に行う事が可能。
ホットキーの拡張	結合の変更に便利なショートカットなど、さらに多くのホットキーを追加。
MS Officeとの連携	ChemDraw for Excel (Excelアドイン) により、Excelで構造式を表示し、簡単に構造式を検索可能。
SciFinder、SciFinder -n、Reaxys連携	ChemDrawからSciFinderやReaxystとの連携が可能
その他	化学データベース、各種ActiveX/Plug-inも付属。



### ChemDraw Prime V25

二次元化学構造作画機能を中心としたベーシックなデスクトップ化学ソフトパッケージ製品です。薄層クロマト、電気泳動、Draw Curve (ペンツール) 、Mass Fragmentationツール、反応作画ツール、物性計算 (Molecular Networksの機能によりPka, LogP, LogS, tPSAを予測) 、化学構造の整形、ニックネームの定義、注釈の入力、ポリマー表現、独自のTemplateやStyle Sheet作成、反応の原子対応指定、マーカシユ構造の展開、代替基、可変代替基、構造Query指定、三次元検索設定、置換基の結合位置指定、Link Node指定、Paste SMILES,SLNの作成、立体異性の表示  
開くことができるファイル形式 : JCAMP (JDX, DX)、Galactic Industries (SPC)  
ファイル形式を指定して保存 : Connection Table、Chemical Markup Language、ISIS (SKC, TGF, RXN), MDL MolFile (MOL)、MDL RGFile (RGF)、Structure-Data file (SD)  
ChemDraw ProfessionalはChemDraw Primeの全ての機能を含み、Signals ChemDrawはChemDraw Professionalの全ての機能を含みます。

### 研究開発支援ソリューション(Digital Laboratory Platform) に関するお問い合わせフォーム

<https://contactline.jp.fujitsu.com/customform/csque01715/1101636/>

# オプション機能／製品



## ChemDraw+ (Signals ChemDrawで無償提供)

ChemDrawのクラウドバージョンでSignalsプラットフォーム内で化学構造式・反応式を保管および整理できるため、どこからでも情報にアクセス出来るようになります。Signals ChemDrawに含まれます。 Signals ChemDrawは10ライセンス以上で年間ライセンスのみの製品です。



## Signals Notebook (別売り)



## Signals Research Suite (別売り)

Signals Notebookはクラウド環境上の電子実験ノートで、Signals ChemDrawと親和性のよいSignalsプラットフォーム製品です。

10ライセンス以上で年間ライセンスのみの製品です。

Signals Research SuiteはSignalsプラットフォーム上のデータ収集・統合、データ処理・登録を行うSpotfireベースのクラウドアプリケーション製品です。



## ChemACX データベース (別売り) (ChemACX ExplorerはSignals ChemDrawで無償提供)

試薬情報と製品安全データシートの統合パッケージ(1年間ごとの契約製品)

ChemACXは、日本国内の試薬会社の情報を含む世界中の試薬会社790社のカタログデータベースです。

構造式、試薬名、別名など文字情報、数値情報などを1回の検索で取得できます。

48,622,370件の製品、26,736,823件の化合物、26,654,034件の化学構造を収録(ChemACX 24.24.3)。

社内で利用可能なChemACX Oracle版、SD File版があります。

Signals ChemDrawおよびSignals NotebookではChemACX ExplorerとしてACXデータベースをインストールせずにインターネット上で提供されるACXデータを利用できます

# 新機能

## ChemDraw V22.0の新機能

- Dotted/Dashed Bondsツールによる水素結合の記述をサポート
- Crystallographic InformationFile (CIF)をサポート
- 新しいショートカットキーとホットキーの動作を拡張
- FASTA 形式によるシーケンス表示が可能
- ペプチドおよびDNA/RNA配列の新しいグラフィック表示をサポート
- 3D Manufacturing Format (3MF) に出力時のハイライト表示と環の彩色が反映可能

## ChemDraw V22.2の改善項目

- ChemDrawにおける水素結合の改良 (環での認識,3MF形式での書き出し,3D整形)
- RNAモノマーでの色付け
- Chem 3 Dの 64ビット化、CONFLEX 9 Rev Bのサポート

## ChemDraw V23.0の新機能

- Signalsプラットフォームと統合したSignals ChemDrawの新規提供
- ChemDrawのクラウドベース製品であるChemDraw+の新規提供 (Signals ChemDrawのみ)
- MSOffice上の化学構造式を再利用可能とするツールChemOffice+のChemDraw Collectionsへの変更
- molファイル内のトップレベルのキラルフラグを無視する機能 (全製品利用可)
- 構造式がオーバラップしないようにペーストする機能 (全製品利用可)
- アトロブ異性体 (単結合周りの回転が妨げられることで生じる立体異性体) の認識 (全製品利用可)

## ChemDraw V25.0の新機能

- ChemDrawインストーラーを2つに分割しました。 (ChemDraw本体、ChemDrawアプリケーション)
- ChemDrawをARM MacとIntel Macで利用出来るようになりました。アーキテクチャに応じて選択。
- バイオポリマーのクリーンアップ機能を更新。アライメントの理解を容易にするため、可能な限りモノマーを規則的なグリッド上に配置し、シーケンス間のルーティングを改善し、モノマー接続を明確にするため接続の角は丸みを帯びさせています。
- 行の折り返しを削除し、配列を常に同じ行に配置することが可能になりました。ただし、一定数のモノマーを超えると行が折り返されるという従来の動作は維持されます。
- 「ブロックあたりの残基数」設定は「ドキュメント設定」→「バイオポリマー表示」セクションから削除されました。
- 水素結合では点線/破線結合ツールで、相補的なDNA/RNAモノマー間の水素結合を直接描画出来るようにし、水素結合がドナー原子から始まり、かつドナー原子に明示的に水素が存在する場合、水素結合が正しく水素から始まるようになりました。
- アレンとアトロブ異性体の立体中心は、以前のRとSから、MとPでラベル付けされるようになりました。
- 配列のオンラインアノテーションが、SGROUPS内のMOLファイルに保持されるようになりました。
- インラインモノマーのHELM文字列から原子マップSMILESを解析出来て、原子マップSMILES表記に従つてR基を定義出来るようになりました。
- ChemFinderにおける拡張立体化学に関する検索動作を更新し、拡張立体ラベルを持たない完全構造検索と部分構造検索で、ラベルの有無にかかわらずターゲットがヒットするようになりました。

2023年7月 PerkinElmer Informatics は Revvity Signals Software になりました。

Revvity Japan Co., Ltd. (former PerkinElmer Japan Co., Ltd.)

Revvity Signals Software, Inc. (former PerkinElmer Informatics, Inc.)

2025年10月 ChemDraw V20,V21,V22のサポートが2026年9月末までと発表されました。

ChemOffice (全バージョン) については2025年3月1日にサポートが終了しております。

# エンタープライズ 運用支援 動作環境

## ＜エンタープライズ連携＞

研究基幹システムとしての電子ノート（E-Notebook Enterprise, Signals Notebook）環境や試薬在庫管理システムを多数のお客様に提供しております。

## ＜導入時の操作説明会、トレーニング、運用支援＞

富士通では、デスクトップ製品、Enterprise製品などについて、お客様先での説明会、教育サービスをご提供可能です。

サービス名： ChemDraw WebServer スタートアップサービス 型名： SV1A363G01  
サービス名： ChemDraw WebServer 設計/適用 型名： SV1A363J02

- ChemDrawはユーザライセンス（Named License）です。Professional/Primeは1ライセンスで2台までインストールできます。Signalsは何台でもインストール可能で実際に利用するPCで、ログインによるユーザー認証で利用できます。（ただし、Signalsは管理者によるユーザーへのライセンス割り当てが必要となります）
- 製品のインストールは、インターネット経由とメディアパックDVDの両方で可能です。

メディアパックDVD媒体（別売り製品）の内容

- 製品インストール手引書、ChemDraw,ChemFinder,Chem3Dなどの利用マニュアル
- ダウンロード操作説明書（Download Center,Signals使用説明書等）（富士通作成・検証済の日本語版）
- 製品説明資料、ChemDrawV25リリースガイド、HW/SWガイド（日本語版）

上記の製品構成は富士通の提供する商品であり、他の販売会社の構成情報とは異なることがあります。

## 動作環境

	Windows	Macintosh(ChemDrawのみ)
オペレーティングシステム (OS)	Windows 10 (64bit) Windows 11 (64bit)	macOS Sonoma (14.7) macOS Sequoia (15.5)
Microsoft Office (Standard, Professional, Enterprise)	Office 365 (32bit, 64bit) Microsoft Office 2021 (32bit, 64bit) Microsoft Office 2024 (64bit)	Office 365 Microsoft Office 2021 Microsoft Office 2024
.Net Framework	Net Framework 4.8	

# 主な機能比較表

含まれる製品（太字）と機能	Platform	ChemDraw Prime	ChemDraw Professional	Signals ChemDraw
<b>ChemDraw+</b>	web			●
Draw biopolymer sequences using ChemDraw+ HELM editor	web			●
<b>ChemDraw for Excel</b>	Win	●	●	●
<b>Chem3D Professional</b>	Win	●	●	●
<b>Chem3D Ultra</b>	Win		●	●
<b>ChemFinder Standard</b>	Win	●	●	●
<b>ChemFinder Ultra</b>	Win		●	●
Read and Save as ChemDraw .cdx / .cdxml Files	Win/Mac	●	●	●
Read and Save as ISIS Reaction .rxn Files (v2000, v3000)	Win/Mac	●	●	●
Read and Save as ISIS Sketch .skc Files	Win/Mac	●	●	●
Read and Save as MDL .mol Files (v2000, v3000)	Win/Mac	●	●	●
Read and Save as MDL .sdf Files (v2000, v3000)	Win/Mac	●	●	●
Read and Save as MDL .rdf Files (v2000, v3000)	Win/Mac	●	●	●
Read Crystallographic Information Files (CIF)	Win/Mac	●	●	●
Copy/Paste as SMILES	Win/Mac	●	●	●
Copy/Paste as SYBYL (SLN)	Win/Mac	●	●	●
Copy/Paste as InChI	Win/Mac	●	●	●
Copy ChemDraw Structures as OLE Object	Win	●	●	●
Copy/Paste as HELM	Win/Mac		●	●
Copy/Paste as FASTA Peptide	Win/Mac		●	●
Copy/Paste as FASTA DNA/RNA	Win/Mac		●	●
View .sdf Files properties	Win/Mac			●
Copy as 3D-printable Object (.3MF)	Win/Mac			●
Insertion of Chemical Symbols	Win/Mac/web	●	●	●
Aromatic Cycle Display Toggle and Preferences	Win/Mac	●	●	●
Orbitals Tool	Win/Mac	●	●	●
Ignore Top Level Chiral flag	Win/Mac	●	●	●
Enhanced Stereochemistry Support	Win/Mac/web		●	●
Enhanced Stereochemical annotation tool	web			●
Chemical Bonds Tools	Win/Mac/web	●	●	●
Chemical Rings Tools	Win/Mac/web	●	●	●
Text Tool	Win/Mac/web	●	●	●
Join and merge chemical structures	Win/Mac/web	●	●	●
Smart Copy/Paste (SMILES, InChI, HELM)	Win/Mac/web	●	●	●
Expand/Contract Labels	Win/Mac/web	●	●	●
Chemical Structures Templates	Win/Mac/web	●	●	●
3D Perspective Tool	Win/Mac/web	●	●	●
BioDraw Toolbar	Win/Mac		●	●
Atom/Bond Color Highlight & Ring Fill transfer to 3MF	Win/Mac			●
Hydrogen Bonding support in 3MF	Win/Mac			●