

# ChemOffice V22 シリーズ

ChemOfficeシリーズは、化学構造作画機能を中心とした化学研究のための製品です。

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。



## ChemOffice V22



化学文書作成、分子モデリング、データベース構築を行うデスクトップ化学ソフトパッケージ

ChemOffice V22は、ChemDraw Professional、Chem3D、ChemFinder、ChemBioViz、PubChem GHS、Google Patents、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。無償ソフトウェアとして、GAMESSを提供。ただし、無償提供ソフトウェアのためサポートはありません。

構成プログラム	内容
ChemDraw Professional	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、GAMESS2018 (Chem3Dは、64-bit GAMESSだけをサポート) を搭載。インタフェースとしてMOPAC2016、Jaguar、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。



## ChemDraw Professional V22



化学構造描画、検索クエリー作成を行う最新の化学ソフトウェアパッケージ  
分子モデリングソフト (Chem3D Pro), 化学情報管理ソフト (ChemFinder Std) を含んでいます。  
ChemDraw Professional 22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。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/CombiChem for Excel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Reaxys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 V22

二次元化学構造作画機能だけの製品です。  
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、マーカシュ構造の展開、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)



## ChemOffice+ Cloud Standard/Signals Notebook

ChemOfficeとクラウド環境を統合した小規模向けお買い得パッケージ

ChemOffice+ Cloud Standard/Signals Notebook Bundleは、ChemOffice, ChemOffice+ と Signals Notebook Standard（クラウド版電子ノート）を含みます。最大20名までの小規模のお客様のための製品です。

5ライセンス以上で年間ライセンスのみの製品です。



## ChemOffice+ Cloud Standard V22

クラウド環境と化学文書作成、分子モデリング、データベース構築を行う最上位化学ソフトパッケージ ChemOfficeとChemOffice+, ChemDraw JSを含みます。

5ライセンス以上で年間ライセンスのみの製品です。



## ChemACX データベース

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785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回の検索で指定できます。

43,076,024 件の製品、23,658,939 件の化合物、23,575,300 件の化学構造を収録（ChemACX 22.22.3）。

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

ChemACX Explorer としてChemOffice およびSignals Notebook でも利用できます

データベース	内容
ChemACX	富士フイルム和光純薬、Sigma-Aldrich、Fisher、Acros、Alfa Aesar、TCI Americaなど大手試薬会社のカタログを収録。試薬の購入に必要な情報を迅速に入手可能。
ChemSCX	大手スクリーニング化合物販売会社のカタログを収録。検索も可能。
ChemMSDX	研究で使用される化学物質に対し、20,000以上の化学物質安全データシート（米国版）を提供。

# 新機能

## ChemDraw V19.0の新機能

- 化学構造式に含まれる原子、結合、環状構造への色付け
- Scifinder® およびReaxys® 検索ボタンをAdd-ins ツールバーに統合
- ChemDrawのPubChem GHS LCSS アドインを使って構造、安全性データをPubChem から検索可能
- 高分子化合物などの表記で使用する括弧にラベル、繰り返し回数、分子量を指定可能

## ChemDraw V20.0の新機能

- ChemDraw 新しいEnterホットキーを提供
- ChemDraw ChemDrawで描いた構造を3次元構造として整形
- ChemDraw Google Patents Add-inで特許情報を検索
- ChemOffice+ 新しいクラウドツールの提供により、クラウドアクセス環境が充実

## ChemDraw V21.0の新機能

- ChemOffice+の改良
- HELMモノマー管理の改良
- ChemDrawで3D構造を3MFファイルにエクスポート可能
- 形式を選択してPNG形式にコピー可能
- 3Dクリーンが強化され、フェロセン類似構造をサポート
- ホットキーの動作を拡張
- 最新（2019年12月11日）の分子量を採用 (<https://iupac.qmul.ac.uk/AtWt>)
- Chem3DでGAMESS 2020R2をサポート

## 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 Information File (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

# エンタープライズ 運用支援 動作環境

## <エンタープライズ製品>

研究基幹システムとしての電子ノート（E-Notebook Enterprise）環境や富士通独自開発の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。（使用データベース：Oracle）

## <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、教育サービスを提供できます。

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

古いChemBioOfficeシリーズの製品をお持ちの場合は、割安な移行価格でご希望の製品の最新版をお求めいただけます。同時起動ライセンス（コンカレントライセンス、ネットワークライセンス）は、廃止になりました。

- 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からの両方で可能

メディアパックDVD媒体（別途ご購入）の内容（日本語版）

- 製品インストール手引書、ChemDraw,ChemFinder,Chem3Dなどの操作手引書、機能個別解説書
  - サイトライセンス操作説明書（Download Center使用説明書等）
  - 富士通監修による日本語ユーザーガイド（PDF形式）
1. ChemDraw 22.0 ユーザーズガイド, 英語版22.0  
Windows/Macintosh版 日本語版444<sup>^</sup> -ジ` (9.17MB) 英語版436<sup>^</sup> -ジ` (8.15MB)
  2. Chem3D 20.0 ユーザーズガイド, 英語版21.0（内容は20.0）  
Windows版 日本語版329<sup>^</sup> -ジ` (6,514kB) 英語版329<sup>^</sup> -ジ` (5,64MB)
  3. ChemFinder 15.0 ユーザーズガイド, 英語版21.0（内容は15.0）  
Windows版 日本語版328<sup>^</sup> -ジ` (6,009kB) 英語版313<sup>^</sup> -ジ` (5,17MB)
  4. ChemFinder for Office 15.0 ユーザーズガイド, 英語版21.0（内容は15.0）  
Windows版 日本語版19<sup>^</sup> -ジ` (961kB) 英語版18<sup>^</sup> -ジ` (417kB)
  5. Signals Notebook日本語マニュアル（富士通翻訳品：85ページ（707kB）

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 Monterey (12.6) macOS Ventura (13.2)
Microsoft Office (Standard, Professional, Enterprise)	Microsoft Office 2019 (32bit, 64bit) Office 365 (32bit, 64bit) Microsoft Office 2021 (32bit, 64bit)	Microsoft Office 2019 Office 365 Microsoft Office 2021
.Net Framework	Net Framework 4.8	
Browser ActiveX controls	Microsoft Internet Edges (IE Mode)	

# 主な機能比較表

含まれる機能	製品名	ChemDraw Professional	ChemOffice	ChemOffice + Cloud
ChemDrawでの三次元構造の整形	Win/Mac	○	○	○
原子、結合の色付け	Win/Mac	○	○	○
環状構造への色付け	Win/Mac	○	○	○
HELMツールバー	Win/Mac	○	○	○
HELM, FASTA Peptide DNA/RNA形式として複写、貼付	Win/Mac	○	○	○
Monomer管理	Win/Mac	○	○	○
Reaxys検索	Win/Mac	○	○	○
SciFinder,SciFinder-n検索	Win/Mac	○	○	○
CAS RN to Structure from ChemACX	Win/Mac	○	○	○
Query構造検索	Win/Mac	○	○	○
化合物命名	Win/Mac	○	○	○
ClogP予測	Win/Mac	○	○	○
Biopolymer Tool	Win/Mac	○	○	○
化学量論計算ツール	Win/Mac	○	○	○
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C NMRスペクトル予測	Win/Mac	○	○	○
ChemDraw JS	Win/Mac			○
ChemFinder	Win	Std	Ultra	Ultra
ChemDraw Excel, Combichem Excel	Win	○	○	○
ChemScript+Python	Win	○	○	○
三次元印刷可能な形式をサポート(.3MF)	Win/Mac		○	○
Chem3D	Win	Pro	Ultra	Ultra
特許、論文検索連携アドイン (Google Scholar / Patents)	Win/Mac		○	○
PubChem GHS Safety Add-in	Win/Mac		○	○
試薬データベース検索 (ChemACX Explorer)	Win/Mac		○	○
HELMライブラリの共有	Win/Mac		○	○
Interface GAMESS2020R2,Gaussian16W,MOPAC2016	Win		○	○
Interface Conflex,Autodock	Win		○	○
ChemDraw JS(Java Script) サイト契約のみ提供	Win/Mac			○
ChemOffice+	Win/Mac			○
クラウド環境へのインターフェース	Win/Mac			○

## 富士通株式会社

Digital Solution事業本部 ラボラトリーイノベーション事業部  
HP <https://www.fujitsu.com/jp/chemoffice/>

インフラ&ソリューションセールス本部  
プリセールス統括部 DLPプリセールス部

### お問い合わせ先

富士通コンタクトライン (総合窓口) 0120-933-200

受付時間 9時~12時および13時~17時30分 (土曜・日曜・祝日・当社指定の休業日を除く)

© 2023 Fujitsu Limited

20230301