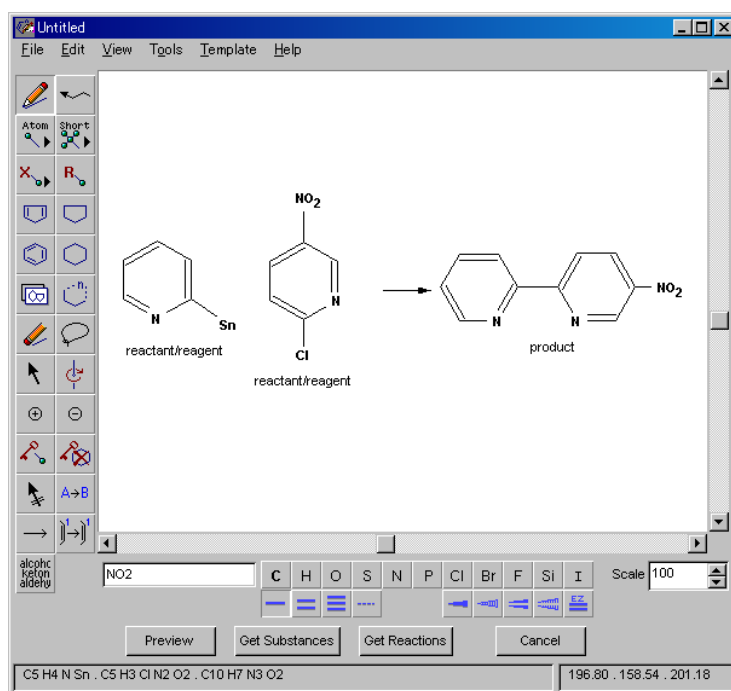




SciFinder®

# 構造検索・部分構造検索 & 反応検索

2004 年 1 月



STN/CAS

<http://www.jaici.or.jp/>

社団法人 化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル  
ヘルプデスク TEL: 03-5978-3601 E-mail: helpdesk@jaici.or.jp  
その他 TEL: 03-5978-3621 E-mail: cas-stn@jaici.or.jp  
FAX: 03-5978-3600

## 目次

<b>第 I 章 SciFinder の構造作図</b>	<b>1</b>
構造作図ウインドウ	2
構造作図メニュー	3
垂直ツールパレット	8
水平ツールパレット	20
構造を描く	22
<b>第 II 章 SciFinder の完全一致構造検索</b>	<b>27</b>
構造の完全一致検索	28
物質の詳細情報を見る	31
物質に関する文献を見る	33
物質の三次元構造モデルを見る	35
物質のカatalog情報を見る	36
物質の規制情報を見る	37
物質の反応情報を見る	38
完全一致構造検索の終了	39
<b>第 III 章 SciFinder の部分構造検索</b>	<b>41</b>
部分構造検索	42
構造作図ウインドウ	43
構造式の作図	44
部分構造の Preview	46
部分構造検索の実行	51
回答の Analyze	54
原子上の置換基の Analyze	55
可変グループの Analyze	56
R グループの構成原子の Analyze	57
検索精度による Analyze	58
環構造による Analyze	59
立体構造による Analyze	64
回答の絞り込み (Refine)	68
Spotfire DecisionSite による Analyze	71
部分構造検索の終了	71
<b>第 IV 章 SciFinder の反応検索</b>	<b>73</b>
反応検索	74
反応の片側からの検索	75
反応の Keep	81
回答の Analyze	81
回答の Refine	82
反応物／試薬と生成物の両方を指定した検索	86
官能基を使った検索	88
官能基と構造の組み合わせによる検索	94
反応検索の終了	96
<b>Appendix A Smartsearch : 構造検索のしくみ</b>	<b>97</b>
Smartsearch とは？	97
Smartsearch は具体的に何をする？	97
完全一致構造検索と部分構造検索	100

# 第 I 章 SciFinder の構造作図

SciFinder では構造作図した化学物質、化学反応を検索し、それらに関する論文・特許の書誌情報、抄録、索引などを得ることができます。SciFinder の検索には以下の種類があります。

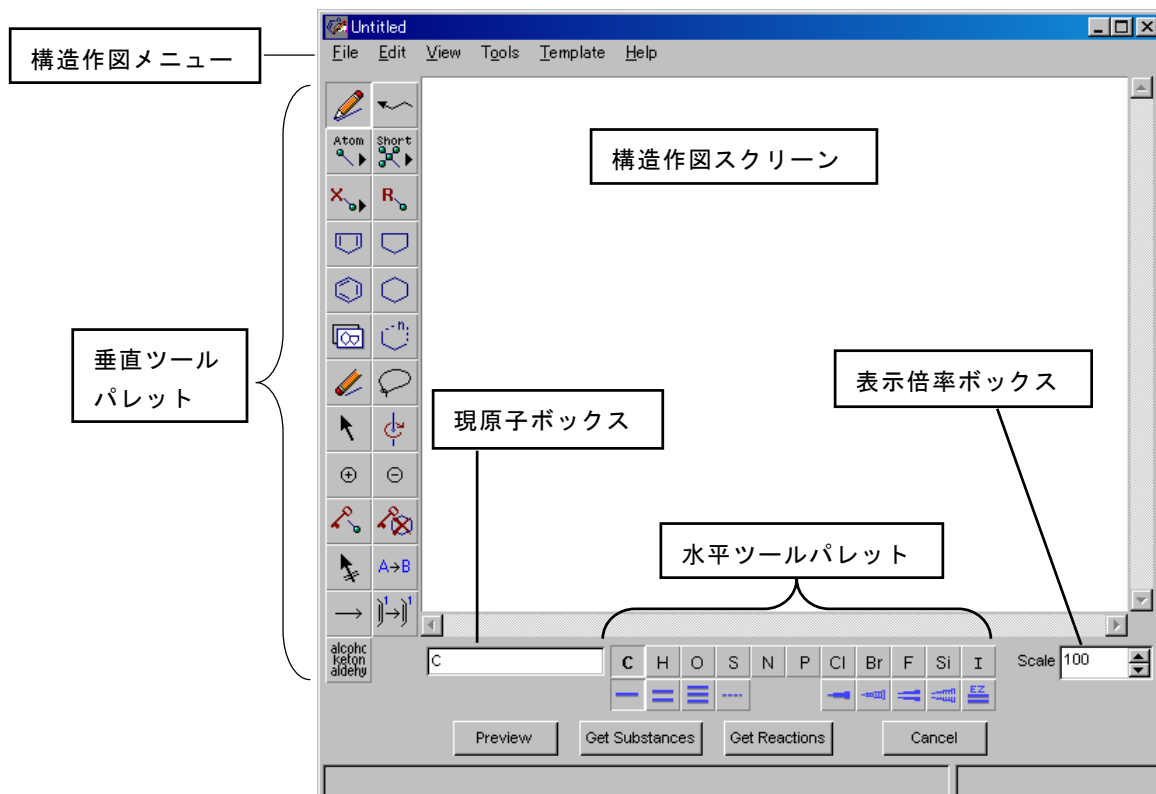
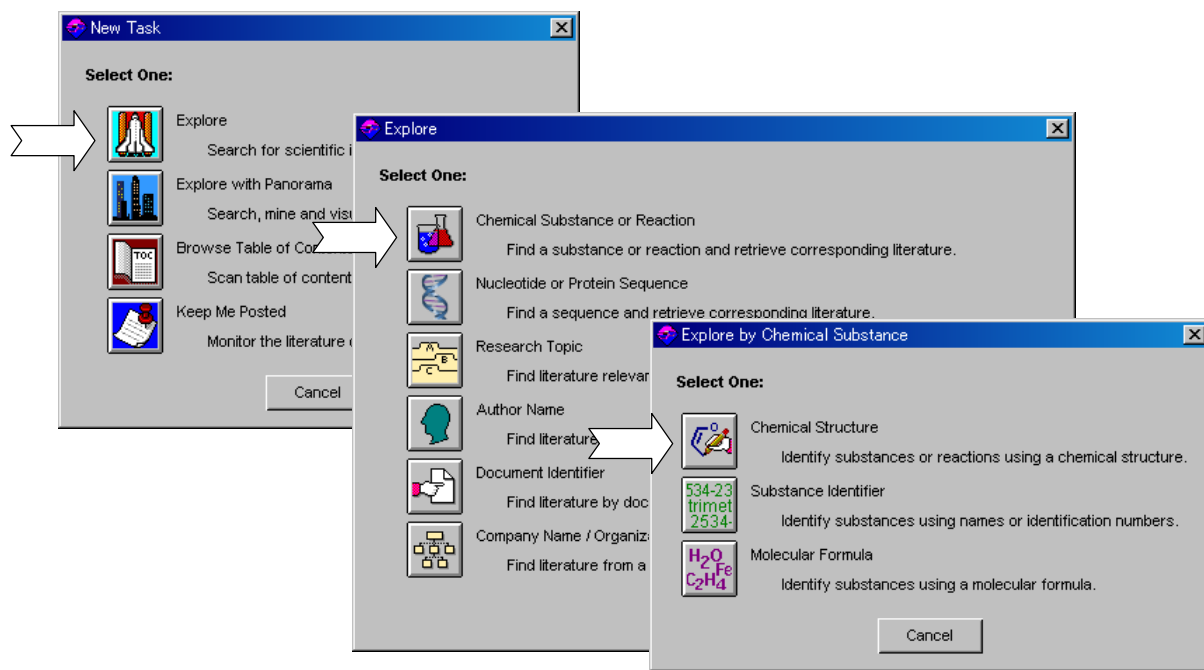
- 完全一致構造検索 (第 II 章)
- 部分構造検索 (第 III 章)
- 反応検索 (第 IV 章)

この章ではまず、SciFinder の構造作図の方法を説明します。

- 構造作図ウインドウ
- 構造作図メニュー
- 構造作図ツール

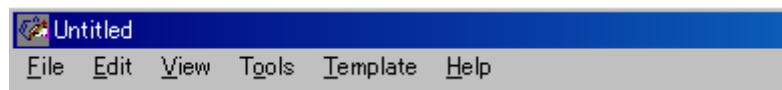
## 構造作図ウィンドウ

構造作図をするには、New Task ウィンドウの *Explore* アイコンをクリックし、*Chemical Substance or Reaction* を選択します。さらに *Chemical Structure* をクリックすると、構造作図ウィンドウ "Untitled" が開きます。





## 構造作図メニュー

構造作図メニューには、化学構造を作成に必要なツールがあります。



### File メニュー

File メニューには基本的な構造作図とウインドウ管理コマンドがあります。

メニュー項目	定 義
New	新しい構造作図ウインドウを開く
Open	保存してある構造を開く
Close	構造作図ウインドウを閉じ、New Task ウインドウを表示する
Save	現在開いている構造作図ウインドウの構造を保存する (ダイアログボックスは表示されない)
Save As	異なるフォーマット (例: MDL molfile) やファイル名で保存する
Revert	これまでに行った構造の変更操作を破棄し、最後に保存した段階に戻す
Get Substances	作図した化学構造に一致する物質を検索する 互変異性体、イオンなども含めて検索する
Get Reactions 	作図した反応質問式を含む化学反応を検索する
Preview 	部分構造検索の回答の予測件数とサンプルを表示する
Print Setup (Windows) Page Setup (Macintosh)	印刷の設定をする
Print	表示されている構造を印刷する
Exit SciFinder (Windows) Quit (Macintosh)	SciFinder を終了する



反応検索で使います。構造検索で使おうとすると利用できない旨の警告メッセージが表示されます。



部分構造検索で使います。契約上、ご利用になれない場合があります。

## Edit メニュー

Edit メニューには標準的な編集機能のほかに SciFinder に特有な編集機能もあります。

メニュー項目	定 義
Undo	最後に行った編集作業を取り消し、その前の状態に戻す。複数回使用可能
Redo	Undo コマンド実行前の状態に回復する
Cut	選択したテキストあるいは構造を削除し、クリップボードに保存する
Copy	選択したテキストあるいは構造をクリップボードにコピーする
Paste	カーソル位置にクリップボードの内容を貼り付ける
Clear	選択したテキストあるいは図形を削除する
Select All	構造作図ウインドウのすべてを選択する
Unselect All	構造作図ウインドウのすべての選択をはずす
Clear All	構造作図ウインドウをクリアする
Repaint	構造作図スクリーンを強制的に再描画する
Delete All Mappings 	原子マッピングツールで指定したマッピングすべてを削除する

## View メニュー

View メニューは作図した構造図の原子や結合の表示方法を変更するためのオプションです。それぞれのオプションをクリックするとチェックマークがつき、もう一度クリックするとオプション選択が解除されます。

メニュー項目	定 義	デフォルト
Dot Atoms	炭素原子を点で表示する（しない）	表示しない
Position Number	原子位置の番号を表示する（しない）	表示しない
Status Bar	現在の構造の分子式や分子量を示すステータスバーを表示する（しない）	表示する

Dot Atoms と Position Numbers は同時には有効にできません。一方を選択するともう一方は無効になります。

Preference Editor の Drawing タブでデフォルトを変更可能です。

## Tool メニュー

Tool メニューには構造作図のためのオプションや SciFinder の初期設定を変更するツールがあります。最初の三つのオプション、*Valency Checking*, *Fix Drawing Angles*, *Fix Drawing length* はクリックするとチェックマークがつき、もう一度クリックすると選択が解除されます。これらのデフォルトは Preference Editor の Drawing タブで変更することができます。

メニュー項目	定 義
Valency Checking	構造を書くたびに原子価をチェックし、問題がある時は警告を表示する
Fix Drawing Angles	結合角を固定、あるいは可変にする。デフォルトは可変。固定の結合角は結合を単独で作図した時のみに適用され、ツールやテンプレートを使って鎖や環を作図した場合には適用されない
Fix Drawing Length	結合長を固定、あるいは可変にする。デフォルトは可変。固定の結合長は鎖や環、単結合を作図する場合に適用される
Check Overlaps	ノードや結合の重なりがないかチェックし、あれば警告を表示する
Unlock All Positions	<i>Lock Out Substitution</i> ツールや <i>Lock All Positions</i> オプションによって置換基の追加が禁止されたすべてのノードを解除する
Lock All Positions	構造作図ウインドウにある全ノードへの置換基の追加を禁止する
Reverse Shortcut	選択されたショートカットの表示方向を逆にする (例 : COOH → HOO C)
Flip Horizontal	選択された構造図やフラグメントを垂直軸に対して反転させる
Flip Vertical	選択された構造図やフラグメントを水平軸の周りに反転させる
Fuse Fragments	二つのフラグメントの選択されたノードや結合同士を接合させる
Edit Preferences...	Preference Editor を開く
Database Settings...	Preference Editor の Database タブを開く

## Template メニュー

Template メニューには多くの構造のテンプレートがあります。メニューからテンプレートを選択すると、そのまま構造作図ウインドウに作図できます。

メニュー項目	定 義
Monocarbocyclic...	炭素原子のみから構成される単環系
Bicarbocyclic...	炭素原子のみから構成されるビシクロ環系
Polycarbocyclic...	炭素原子のみから構成される縮合環系
N-containing...	窒素原子を含む環状化合物
O-containing...	酸素原子を含む環状化合物
S-containing...	硫黄原子を含む環状化合物
NOS-containing...	窒素, 酸素, 硫黄原子を含む環状化合物
Alkaloid...	アルカロイド類
Amino Acid...	アミノ酸構造
Carbohydrate...	炭水化物構造
Nucleic Acid...	核酸構造
Steroid...	ステロイド構造
Coordination...	特定の金属の多様な配位形態
Misc...	その他の様々な構造
User Defined...	ユーザーが定義した構造テンプレート

ユーザー定義のテンプレートを作成するには、作図した構造を User\_Def フォルダに保存します（保存するフォルダは Preference Editor の Drawing タブで指定できます）。

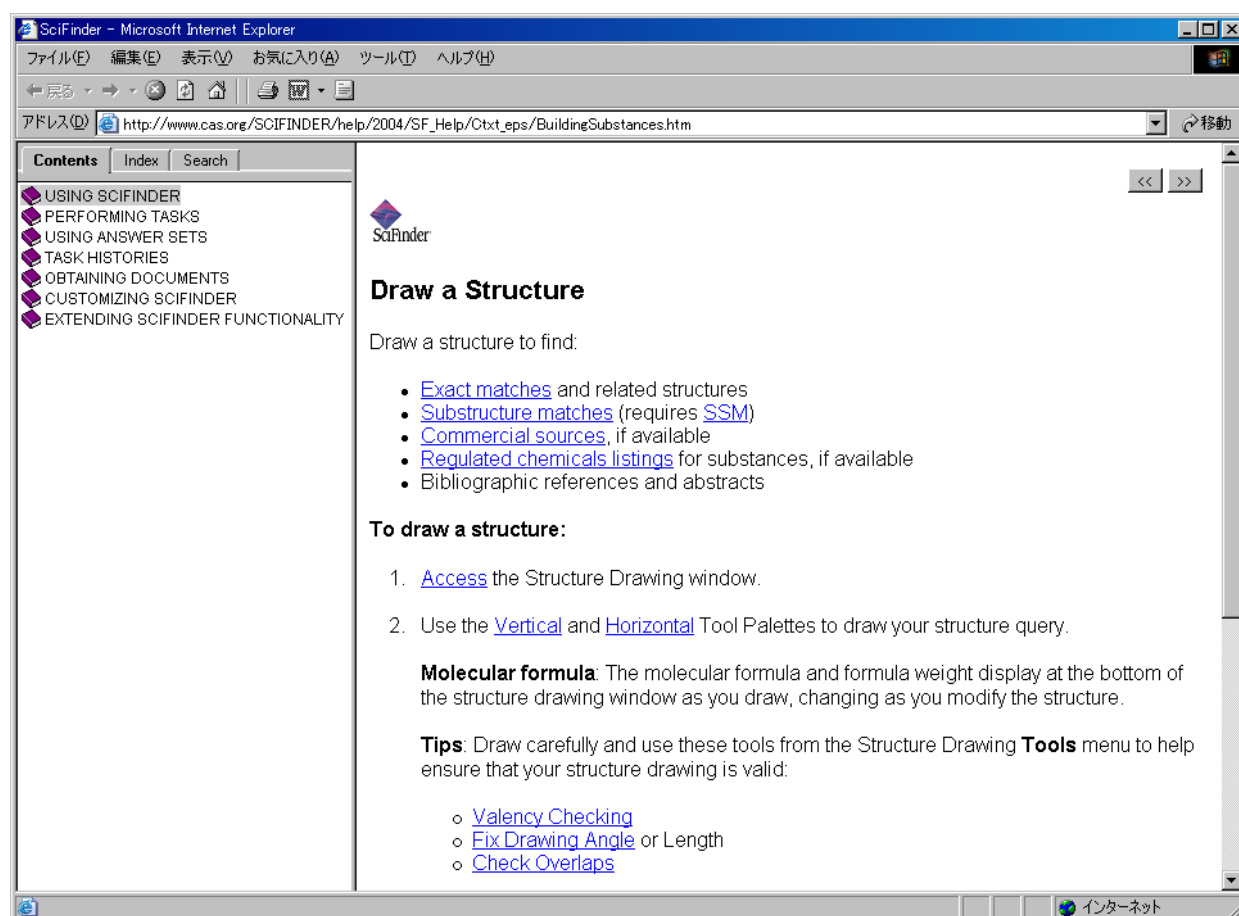
ユーザー定義のテンプレートの使用法は他のテンプレートと同様です。Template メニューから **User Defined** を選び、描画したいテンプレートを選択して、構造作図ウインドウ上でクリックします。



## Help (Windows)あるいはSciFinder Help (Macintosh)メニュー

Help (Windows)あるいはSciFinder Help (Macintosh)メニューはSciFinder のヘルプを表示します。

メニュー項目	定 義
SciFinder Help	SciFinder のオンラインヘルプファイルを開く
Contents and Index	SciFinder のオンラインヘルプファイルを開く
Message of the Day	CAS からの「今日のメッセージ」を表示する
About SciFinder	SciFinder の著作権とバージョンを表示する



Macintoshではもう一つHelpメニューがありますが、これはMacOSに関するヘルプでSciFinderとは関係ありません。

## 垂直ツールパレット

垂直ツールパレットには化学構造を作図，変更するためのツール類が備えられています．ツールを使うにはアイコンをクリックします．そのまま構造作図ウインドウの中に移動すると，カーソルが現在選択しているツールのアイコンの形に変わります．

ペンシルツール

原子メニューツール

X メニューツール ◎

シクロペンタジエン環ツール

ベンゼン環ツール

テンプレートツール

消しゴムツール

選択ツール

正電荷ツール

Lock Out

Substitution ツール ◎

反応サイトツール ▲

矢印ツール ▲

官能基ツール ▲



鎖ツール

ショートカットメニューツール

R グループツール ◎

シクロペンタン環ツール

シクロヘキサン環ツール

n 員環ツール

投げ縄ツール

回転ツール

負電荷ツール

Lock Out Rings ツール ◎

反応ロールツール ▲

原子マッピングツール ▲

◎：部分構造検索あるいは反応検索でのみ有効

▲：反応検索でのみ有効

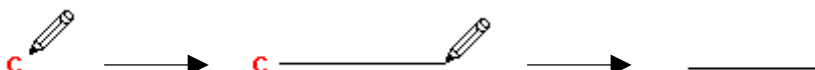
## ペンシルツール



ペンシルツールはノードや結合を描くために使います。ノードには原子やショートカットを指定します。ペンシルツールアイコンをクリックするとカーソルが鉛筆の形に変わり、現在選択している原子や結合を描くことができます。

結合で結ばれたノードを描くには：

1. ノードを描きたい位置にカーソルを合わせます。
2. マウスボタンを押したまま適当な位置までドラッグしてからマウスボタンを離します。



ノードや結合は水平ツールパレットや原子メニュー、ショートカットメニュー、およびXメニューツールで選ぶことができます。また現原子ボックスも利用できます(利用法は後述します)。

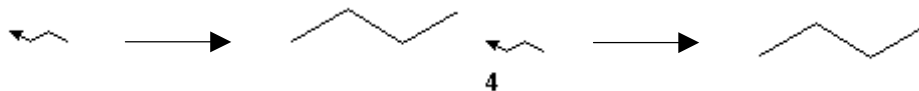
既にウインドウ上にあるノードや結合の種類を変更することもできます。まずノードや結合を選び、次に変更したいノードや結合の上にカーソルを移動します。ハイライトされたことを確認し、クリックするとノードや結合の種類が変更されます。

## 鎖ツール




鎖ツールは結合鎖を描くときに使用します。鎖ツールアイコンをクリックするとカーソルは鎖の形に変わります。

結合鎖を描くには結合鎖を始めたい位置に鎖の矢印の先端を移動させ、マウスボタンを押して必要な長さまでドラッグします。ドラッグしている間は鎖の長さがカーソルの近くに表示されるので、鎖に含まれる原子数が一目でわかります。結合鎖が描きたい長さになったらマウスボタンを放します。このとき結合鎖に含まれる原子数は表示されなくなります。



結合鎖の出る向きを変えたい時は〈Shift〉キーを押しながら結合鎖を描いてください。

## 原子メニューツール



Atom	Short																
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	


原子メニューツールは原子の種類を選ぶときに使用します。選択した原子は現在の SciFinder セッションのデフォルトになり、異なる原子、ショートカット、R グループあるいは官能基のいずれかが選択されるまで変わりません。このツールを選択するとカーソルは自動的にペンシルツールに変わります。

原子メニューアイコンの上でマウスボタンを押しつづけると**原子メニューツール**から周期律表が表示されます。この周期律表にある原子はすべて SciFinder で検索可能です。

原子を選択するには周期律表の上をドラッグしてカーソルを移動し、選択したい原子がハイライトされたらマウスボタンを放します。選択した原子は水平ツールパレット上の現原子ボックスに表示されます。

構造作図画面あるいは既にあるノードをペンシルツールでクリックすると、新しい原子が導入されます。

## ショートカットメニューツール



Short				
CH	Bu-n	o-C6H4	Cl3	NH2
CH2	Bu-i	m-C6H4	CHO	NH3
Me	Bu-s	p-C6H4	CN	NO2
OMe	Bu-t	CF2	C(O)CH3	OH
Et	OBu-n	CF3	CO2H	OPO3H2
OEt	OBu-i	CCl2	COOH	OSO3H
Pr-n	OBu-s	CCl3	COSH	PO3H2
Pr-i	OBu-t	CBr2	CS2H	SH
OPr-n	Ph	CBr3	CSSH	SO2
OPr-i	OPh	Cl2	NH	SO3H

ショートカットメニューツールは構造の中にショートカットを導入するために使用します。選択したショートカットは現在の SciFinder セッションのデフォルトになり、異なる原子、ショートカット、R グループあるいは官能基を選択するまで変わりません。このツールを選択すると、カーソルはペンシルツールに変わります。

ショートカットメニューアイコンの上でマウスボタンを押しつづけるとショートカットメニューが表示されます。

ショートカットを選択するにはショートカットメニューの上をドラッグしてカーソルを移動し、選択したいショートカットがハイライトされたらマウスボタンを放します。選択したショートカットは水平ツールパレット上の現原子ボックスに表示されます。

構造作図画面あるいは既にあるノードをペンシルツールでクリックすると、新しいショートカットが表示されます。

ショートカットの作図後、表示の方向を逆にできます（例：MeO → OMe）。選択ツールで画面上のショートカットを選択し（後述）、Tools メニューから *Reverse Shortcut* を選択すると表示が逆になります。

末端基のショートカットは置換が禁止されており、いかなる置換基も含まない設定になっています。Lock Out Substitution ツール（後述）でも置換を許容にすることはできません。

## X メニューツール



X	R
X	Any halogen
M	Any metal
A	Any atom except H
Q	Any atom except C or H
Ak	Any alkyl chain
Cy	Any cycle
Cb	Any carbocycle
Hy	Any heterocycle

X メニューツールは部分構造検索用、あるいは反応検索用の質問式に対して、可変原子を導入するために使います。選択した可変原子は現在の SciFinder セッションの新たなデフォルトになります。異なる原子、ショートカット、R グループあるいは官能基を選択するまで変わりません。このツールが選択されると、カーソルはペンシルツールに変わります。

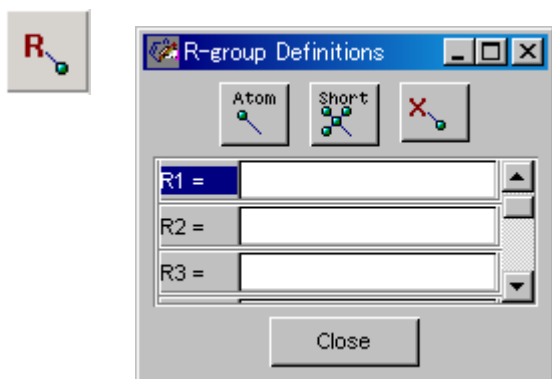
X メニューアイコンの上でマウスボタンを押しつづけると可変原子メニューが表示されます。

可変原子を選択するには可変原子メニューの上をドラッグしてカーソルを移動し、選択したい可変原子がハイライトされたらマウスボタンを放します。選択した可変原子は水平ツールパレット上の現原子ボックスに表示されます。

構造作図ウインドウ上あるいは既にあるノードの上にペンシルツールを移動させてクリックすると、新しい可変原子が導入されます。

Ak（アルキル基）はデフォルトでは四角で囲まれており、これは置換が禁止されていることを意味しています。この場合 Ak に置換基が付くことはなく、検索は直鎖、枝分かれ、あるいは不飽和の炭素鎖に限定されます。Ak の置換を許容するには、Lock Out Substitution ツールをクリックし、Ak の上にカーソルを移動します。ハイライトされたらクリックすると四角い囲みは消えます。置換が許容された Ak はどのように置換された炭素鎖でも検索対象となります。置換の禁止と許容に関する詳細は、Lock Out Substitution ツールの項を参照してください。

## R グループツール



R グループツールは部分構造検索用あるいは反応検索用の質問式に R グループを導入するために使用します。一つの R グループには二つ以上の置換基を定義します（最大 20）。

R グループツールアイコンをクリックすると R-group Definitions ダイアログボックスが R1 をハイライトした状態で表示されます。R1 は現在の SciFinder セッションの新たなデフォルトになります。異なる原子、ショートカット、R グループあるいは官能基を選択するまで変わりません。

R1 を定義するには、R-group Definitions ダイアログボックス上で *Atom*, *Short*, *X menu* ボタンをクリックし、それぞれ原子、ショートカット、可変原子を選択します。複数のアイテムを選択すると、それぞれカンマで区切られて R1 に格納されます。

別の R グループが必要なときは、カーソルを R2, R3... に移してください。最大 10 個の R グループを定義できます。

構造中に R グループを導入したいときは、R-group Definition ダイアログボックスで R グループを指定し、ペンシルツールで構造に加えます。

## シクロペンタジェン環ツール



シクロペンタジェン環ツールはシクロペンタジェン環を描くために使います。

シクロペンタジェン環ツールを使うにはアイコンをクリックします。次にカーソルを構造作図ウインドウ上に移動し、クリックします。

既に存在するノードや結合にシクロペンタジェン環を縮合させるには、ノードや結合がハイライトされるまでカーソルを近づけてからクリックします。

シクロペンタジェン環はマウスボタンを押し続けながらドラッグすると回転します。マウスボタンを放すと環はその方向に固定されます。

## シクロペンタン環ツール



シクロペンタン環ツールはシクロペンタン環を作成するために使用します。作図方法はシクロペンタジェン環ツールと同様です。

## ベンゼン環ツール



ベンゼン環ツールはベンゼン環を描くために使います。  
作図方法はシクロペンタジエン環ツールと同様です。

## シクロヘキサン環ツール



シクロヘキサン環ツールはシクロヘキサン環を描くために使います。  
作図方法はシクロペンタジエン環ツールと同様です。

## テンプレートツール



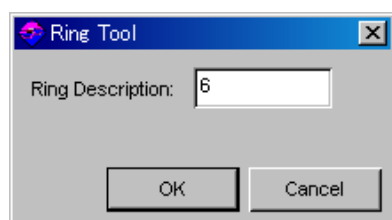
テンプレートツールは Template メニューから選択したテンプレートを描くために使います。Template メニューからテンプレートを選択した直後のみ有効です。

まず構造作図メニューの Template メニューからいずれかの構造テンプレートを選びます。すると構造の候補が表示されるので、必要な構造をクリックすると、候補画面は消えます。

構造作図ウインドウ上にカーソルを移動しクリックすると、選択した構造テンプレートが導入されます。

テンプレート構造を既にあるノードや結合につなげることはできません。

## n 員環ツール



n 員環ツールは 3~15 の炭素原子からなる単環を描くために使います。アイコンをクリックすると Ring Tool ダイアログボックスが表示されます。

デフォルトの環のサイズは 6 になっています。設定可能な 3~15 の間の数字を入れて OK をクリックします。カーソルの形は n 員環ツールアイコンに変わります。

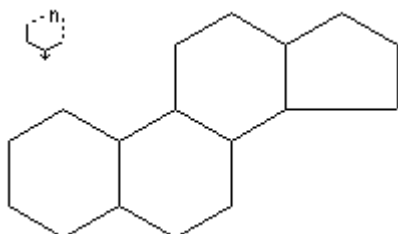
環を描くには構造作図ウインドウにカーソルを移動し、クリックします。

既に存在するノードや結合に環を縮合させるには、ノードや結合がハイライトされるまでカーソルを近づけてからクリックします。

環はマウスボタンを押し続けながら動かすと回転します。マウスボタンを放すと環はその方向で固定されます。

4-, 5-, 6-員環から構成される縮合環も ***n* 員環ツール**アイコンをクリックし Ring Tool ダイアログボックスで環系をキーボード入力すればすぐに作図できます。縮合の方向は U(Up)あるいは D(Down)で指定します。最初のデフォルト方向は左から右です。方向を変えると、再びそれを変更するまで縮合の方向は継続します。

例えば、ステロイド環系を描くには "66U6D5" とキー入力します。構造作図ウインドウ上にカーソルを移動してクリックすると、以下のような構造が描かれます。



## 消しゴムツール



消しゴムツールは構造からノードや結合を消去するために使用します。**消しゴムツール**アイコンをクリックすると、カーソルは消しゴムの形に変わります。

ノードを消すには、カーソルをノードに近づけ、ノードがハイライトされたらクリックします。すると、ノードとノードに接続していた結合が消去されます。

結合を消去するには、カーソルを結合の中心に移動します。結合がハイライトされたらクリックすると結合が消去されます。結合の両端のノードは結合を二つ以上持つならば消去されることはありません。しかし末端のノードは結合が一つしかないのので消去されます。

## 投げ縄ツール



構造や構造フラグメントを選択するには**投げ縄ツール**を使います。選択すると、移動、カット、コピーあるいは削除ができます。ショートカットを選択し、表示の方向を逆にすることもできます。

選択を行うためには**投げ縄ツール**アイコンをクリックします。するとカーソルは投げ縄の形に変わります。選択したい構造の近くでマウスボタンを押し、その構造を取り囲むようにマウスをドラッグします。ドラッグの軌跡には線が引かれるので、構造を囲んだらマウスボタンを放します。

選択されたフラグメントを動かすには、選択された範囲内にカーソルを移動します。するとカーソルが手の形に変化するので、マウスボタンを押し、移動したい位置までドラッグします。

選択されたフラグメントを削除するには Edit メニューから **Cut** あるいは **Clear** を選ぶか <Delete> キーを押します。Cut を選んだ場合は、構造フラグメントはクリップボードにコピーされた後で削除されます。



選択された構造をクリップボードにコピーするには、Edit メニューから *Copy* を選びます。

ノードを選択するには、投げ縄の結び目部分をノードの上に動かし、クリックします。ノードは選択されて四角くハイライトされます。

## 選択ツール



選択ツールはノード、結合、構造フラグメント、構造全体を選択するために使います。選択すると、移動、カット、コピーあるいは削除ができます。ショートカットを選択し、表示の方向を逆にもできます。

使用するには**選択ツール**アイコンをクリックします。カーソルが矢印になるので、矢印の先端をノードや結合の上に動かしてクリックします。選択されたアイテムがハイライトされます。

複数のノードや結合を選択するには、〈Shift〉キーを押しながらクリックを繰り返します。クリックされたすべてのアイテムがハイライトされます。

複数のノードや結合をすばやく選択するには、マウスボタンを押し、ドラッグしてできる四角い枠の中に選択したいノードや結合をすべて入れます。マウスボタンを放すと枠の中にあったすべてのアイテムが選択されます。

構造全体を選択するには、構造の任意の部分をダブルクリックします。

ハイライトした構造フラグメントを動かすには、矢印カーソルの先端をハイライト部分まで動かします。マウスボタンを押し、ドラッグしてから移動させたい位置でマウスボタンを放すと、ハイライトされた部分は構造を保ったまま移動します。

構造全体を動かすのも同様です。構造全体をハイライトし、構造の任意の部分でマウスボタンを押します。構造を動かしたい位置までドラッグし、マウスボタンを放します。

選択されたアイテムをカットするには、Edit メニューから *Cut* を選びます。アイテムは構造作図スクリーンから削除され、クリップボードに移動します。

選択されたアイテムをコピーするには、Edit メニューから *Copy* を選びます。選択されたアイテムはクリップボードへコピーされ、スクリーン上からは削除されません。

選択されたアイテムを削除するには、〈Delete〉キーを押します。

ショートカットの表示の方向を逆にする（例：MeO→OMe）には、ショートカットをハイライトさせ、Tools メニューから、*Reverse Shortcut* を選択します。

ハイライトを解除するには、構造作図ウインドウ上の選択部分以外の場所をクリックします。

## 回転ツール



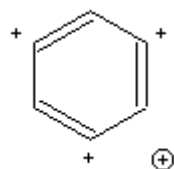
回転ツールは選択したノードを中心に時計まわりあるいは半時計まわりに構造フラグメントを回転させるために使います。

構造を回転させるには、**回転ツール**アイコンをクリックします。カーソルはこのアイコンの形になります。回転の中心となるノードでマウスボタンを押し、ドラッグします。フラグメントはドラッグと同時に回転するので、任意の角度でマウスボタンを放します。

## 正電荷ツール



正電荷ツールはノード上に正電荷 (1+) を置くために使われます。このツールを選択すると、カーソルはこのアイコンの形になります。



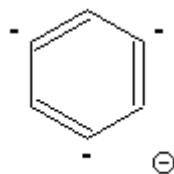
ノードに正電荷を割り当てるには、**正電荷ツール**アイコンをクリックし、カーソルの先端をノードの上に動かします。ノードがハイライトされるのでクリックすると、正電荷がノードに割り当てられます。正電荷の数を増やすには続けてクリックします。

正電荷の数を減らすには、**負電荷ツール**を使用します。

## 負電荷ツール



負電荷ツールはノード上に負電荷 (1-) を置くために使われます。このツールを選択すると、カーソルはこのアイコンの形になります。



ノードに負電荷を割り当てるには、**負電荷ツール**アイコンをクリックし、カーソルの先端をノードの上に動かします。ノードがハイライトされるのでクリックすると、負電荷がノードに割り当てられます。負電荷の数を増やすには続けてクリックします。

負電荷の数を減らすには、**正電荷ツール**を使用します。

## Lock Out Substitution ツール



SSM

RXN

Lock Out Substitution ツールは、部分構造検索または反応検索用の質問式で、特定のノードへの置換基の追加を禁止するために使います。

ノードへの置換基の追加を禁止するには、*Lock Out Substitution ツール*アイコンをクリックします。カーソルはこのアイコンの形に変わります。

カーソルの鍵の先端をノードがハイライトされるまで近づけ、クリックします。置換基の追加禁止を示すため、ノードの周りが四角く囲まれます。この操作は画面上の複数のノードに対して行うことができます。

Me 基などの末端のショートカットは Ak を除き定義上置換基の追加が禁止されています。上記の操作で末端のショートカットを四角く囲むことはできません。

## Lock Out Rings ツール



SSM

RXN

Lock Out Rings ツールは部分構造検索または反応検索用の質問式で環の縮合を禁止し、孤立させるために使用します。また鎖が環の一部になることを禁止するためにも使用します。

環と鎖を孤立させるには、*Lock Out Rings ツール*アイコンをクリックします。カーソルはこのアイコンの形に変わります。

カーソルの鍵の先端を環や鎖のセグメントがハイライトされるまで近づけ、クリックします。環の縮合の禁止を示すため線が太くなります。この操作は画面上の複数の環や鎖に対して行うことができます。

## 反応サイトツール



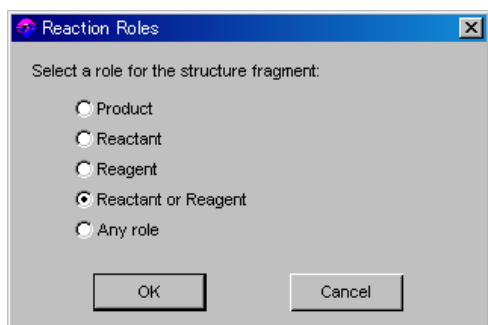
RXN

反応サイトツールは反応検索用の質問式で、反応に伴って状態が変化する結合をマークするために使います。このアイコンをクリックすると、カーソルはこのアイコンの形に変わります。

結合をマークするには、*反応サイトツール*アイコンをクリックします。カーソルの先端をマークしたい結合に近づけ、ハイライトされたらクリックします。マークされたことを示すため、結合には垂直の二重線が引かれます。

反応式はいくつでもマークできますが、結合をマークすると検索の回答件数は減少します。

## 反応ロールツール



反応ロールツールは反応検索用の質問式中の化学構造に, Reactant/Reagent, Product, あるいは Any Role などのロール (役割) を指定するために使います。

ロールを指定するには, まず **反応ロールツール**アイコンをクリックし, 構造にカーソルを合わせクリックします。Reaction Roles ダイアログボックスが表示されるので, 割り当てたいロールを指定して **OK** をクリックします。すると指定した構造の下にロールを示すラベルが表示されます。

一度指定したロールを置換するには, **反応ロールツール**アイコンを再びクリックし, カーソルをその構造またはラベルに合わせます。クリックすると Reaction Roles ダイアログボックスが現れるので, 異なるロールを選択して **OK** をクリックします。それまでのロールは上書きされ, 新しいラベルが構造の下に表示されます。

ロールを自動的に割り当てるには, 次に説明する**矢印ツール**を使います。ロールが割り当てられていない構造を含む反応を検索しようとするすると, Unspecified Roles ダイアログボックスが表示されます。もしロールを割り当てたくない場合は “Any Role” を選ぶか **Cancel** をクリックして構造作図ウインドウに戻り, あらためてロールを割り当てます。

## 矢印ツール



**矢印ツール**は反応検索用の質問式で使用され, 構造作図ウインドウにある構造に自動的に化学反応上のロール (役割) を割り当てます。

反応の矢印を描くためには**矢印ツール**アイコンをクリックします。カーソルは水平矢印に変わります。適切な位置でマウスをクリックしカーソルを反応の方向にドラッグします。

構造作図ウインドウに既に構造があれば, 矢印との位置関係を考慮してロールが自動的に割り当てられ, それまであったロールは上書きされます。自動的に割り当てられたロールを変更したいときは, 先に説明した**反応ロールツール**を使用します。

## 原子マッピングツール



原子マッピングツールは反応検索用質問式で反応物・生成物間の原子の対応関係を指定するために使用します。反応物・生成物の原子は1から始まる同一番号のラベルで対応関係が示されます。

原子のペアを指定するにはまず反応物と生成物を作図し、次に**原子マッピングツール**アイコンをクリックします。**原子マッピングツール**アイコンをクリックするとカーソルがこのアイコンの形になります。カーソルの先頭を反応物の指定したいノードに合わせ、ハイライトされたらクリックします。反応物のノードに数字のラベルが付けられます。次に生成物の対応するノードをクリックすると、生成物のノードに同じ数字のラベルが付けられます。

ラベルを変更あるいは削除するには、**消しゴム**ツールを選んでラベルをクリックします。反応物、生成物両方のラベルが削除され、消去された数字より大きな数値のラベルはすべて数値が1下がります。

必要ならいくつでも原子のペアを作ることができます。しかし原子のペアを増やすにつれて検索の回答件数は減少します。

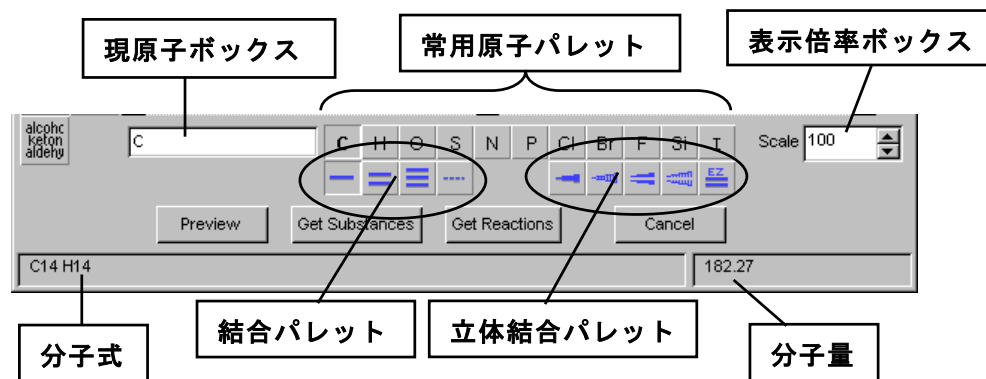
## 官能基ツール



**官能基**ツールを使うと官能基名を含む反応を作図できます。官能基名には**反応ロール**ツールや**矢印**ツールによりロール（役割）を割り当てることができます。官能基検索語の使用法についての詳細は、第IV章を参照してください。

## 水平ツールパレット

水平ツールパレットには構造作図で使用する一般的な原子と結合を収めるパレット、現在作図している構造の分子式、分子量表示ボックスなどがあります。



### 現原子ボックス

現原子ボックスは現在選択されている原子、ショートカット、可変原子、R グループあるいは官能基を表示します。現原子ボックスに表示されている記号はペンシルツールで構造作図画面に描くと表示されます。デフォルトはC（炭素）です。

表示されている記号はハイライトするか消去してから他の元素記号、ショートカット、可変原子の記号をキーボードから入力して変更できます。大文字・小文字の区別はありません。



無効な記号を入力した状態で、構造作図画面をクリックするか、〈Enter〉キーを押すとダイアログボックス（左図）が表示されますので、**OK**をクリックします。すると、構造作図画面に戻るので、正しい原子、ショートカット、可変原子を入力してください。もちろん **Atom**, **Short**, **X menu** ツールから選択してもかまいません。

構造作図スクリーン上の原子を変更するには：

1. 常用原子パレットや、**原子メニュー**、**ショートカットメニュー**、**X メニュー**ツールあるいはキーボード入力により必要な記号を現原子ボックスに入れる。
2. 変更したいノードに**ペンシルツール**の先端を移動する。ノードがハイライトされるのでクリックすると、現原子ボックスにある原子に変更される。

### 常用原子パレット

原子パレットには構造作図でよく使用する原子が収められています。

パレット上の原子アイコンをクリックすると、この原子がデフォルトになり、現原子ボックスに表示されます。

## 結合パレット

結合パレットには構造作図で使用する結合が収められています。結合の種類には左から、「単結合」、「二重結合」、「三重結合」および「不定」があります。デフォルトは単結合です。

パレット上の結合アイコンをクリックすると、その結合がデフォルトになり、ハイライトされます。単結合、二重結合、三重結合のすべてを検索対象にしたい場合は「不定」を選択します。

構造作図スクリーン上にある結合の種類を変えたい時は：

1. 結合パレットから指定したい結合を選択する。
2. ペンシルツールの先端を変化させたい結合上に移動する。結合がハイライトされるのでクリックすると、現在選択されている結合に変化する。

## 立体結合パレット

二重結合の幾何異性、不斉炭素の立体配座などを指定するために使います。結合の種類には左から、「画面より手前に向く単結合」、「画面より背後に向く単結合」、「画面より手前に向く二重結合」、「画面より背後に向く二重結合」および「E,Z 二重結合」があります。

パレット上のアイコンをクリックすると、その結合がデフォルトになり、ハイライトされます。立体結合がある構造を *Get Substances* で検索すると、まず立体構造の種類と数を示すウィンドウが表示されます。詳しくは第Ⅲ章をご覧ください。

構造作図スクリーン上にある結合を変えたいときは、結合パレットと同様に操作します。

## 表示倍率ボックス

表示倍率ボックスには構造作図画面の表示倍率が示されています。デフォルトは 100% です。

表示倍率を変えるには、表示倍率ボックスの数字をハイライトさせ、新しい倍率を入力し、〈ENTER〉を押します。上下の矢印を使うこともできます。入力した表示倍率はただちに構造作図画面に反映されます。

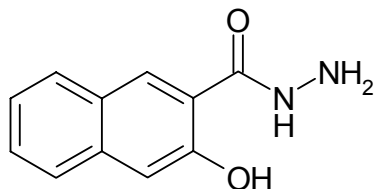
表示倍率は 25% から 400% の範囲で変えることができます。

## 分子式/分子量

水平ツールパレットの下部に現在作図中の構造の分子式、分子量が表示されます。

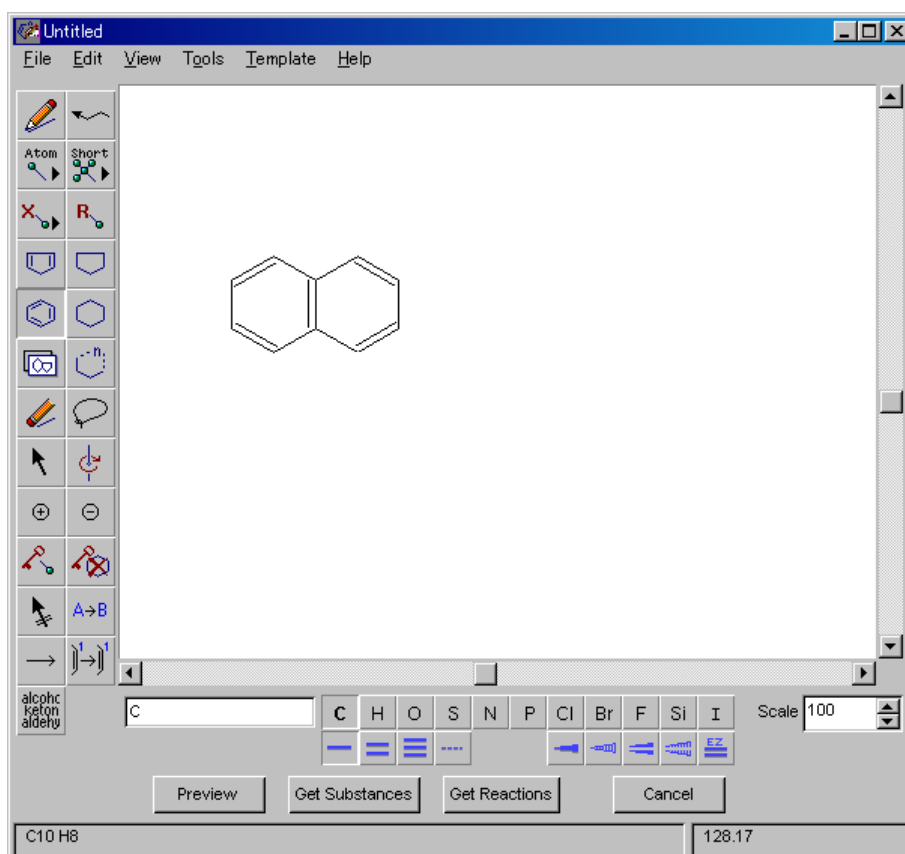
## 構造を描く

例として以下のような化学構造を作図する手順について説明します。



- ① 構造作図ウインドウの垂直ツールパレットから **ベンゼン環ツール**アイコンを選びます。

環になったカーソルを構造作図ウインドウ上でクリックしてベンゼンを作図します。次にカーソルを先に作図したベンゼン環の右側，縦の二重結合の真中に移動します。結合がハイライトされたらクリックし，ベンゼン環を縮合させます。この時点では二つのベンゼンが縮合し，どちらの環も炭素のみで構成されているはずです。



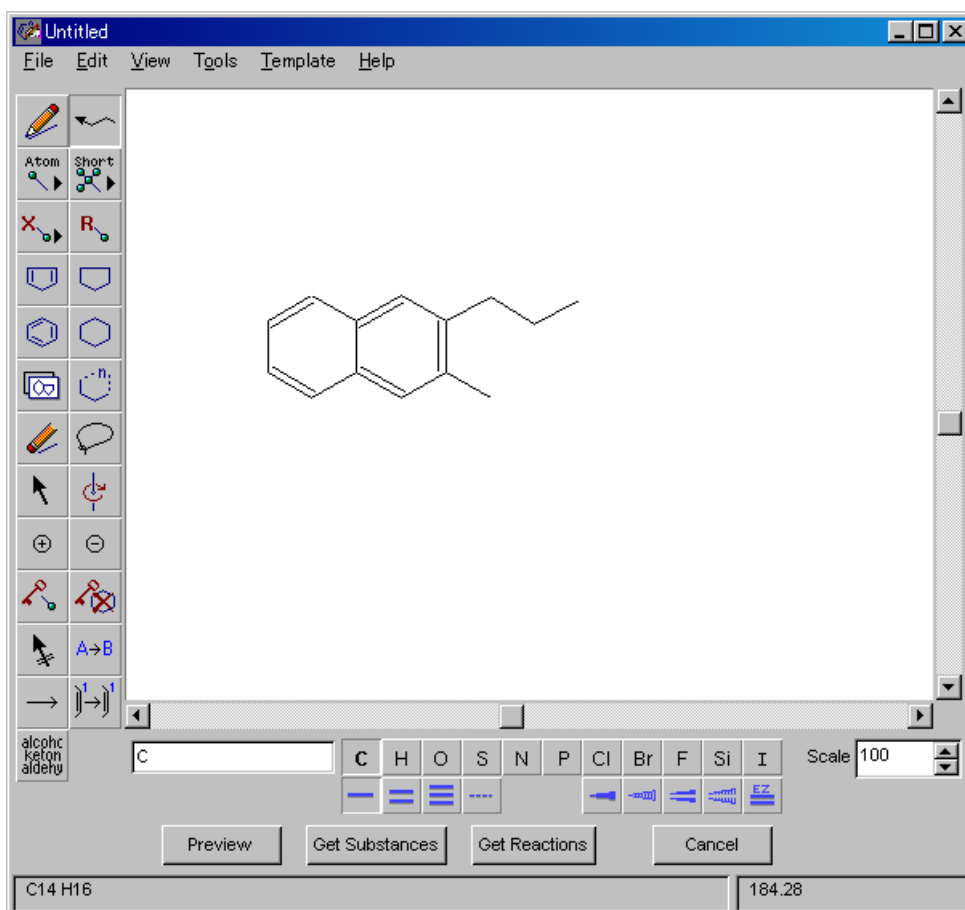
二つめのベンゼン環を縮合させるには，別の方法も使えます。カーソルの矢印先端を画面上のベンゼンの右側，上下いずれかのノードに合わせます。クリックしてドラッグするとマウスを動かすにつれて新しく描かれたベンゼン環は回転するので，二つのベンゼン環が縮合した時にマウスボタンを放します。



② **鎖ツール**アイコンをクリックします。

鎖カーソルを右側の環の右上のノードに合わせて、ノードがハイライトされるのでクリックします。鎖の長さが3になるまで右方向へドラッグしてマウスボタンを放すと、炭素原子が単結合で結ばれます。

次に鎖カーソルを今度は右下のノードに合わせて、鎖の長さが1つになるまで右方向へドラッグしてマウスボタンを放します。



③ 水平ツールパレットの**二重結合**アイコンをクリックします。カーソルは自動的にペンシルツールに変わります。

ペンシルカーソルの先端をプロピル基の酸素と二重結合するノードに合わせて、マウスボタンを押して鎖の長さが1になるまで真っ直ぐ上にドラッグします。二重結合がプロピル基のノードに加わりました。

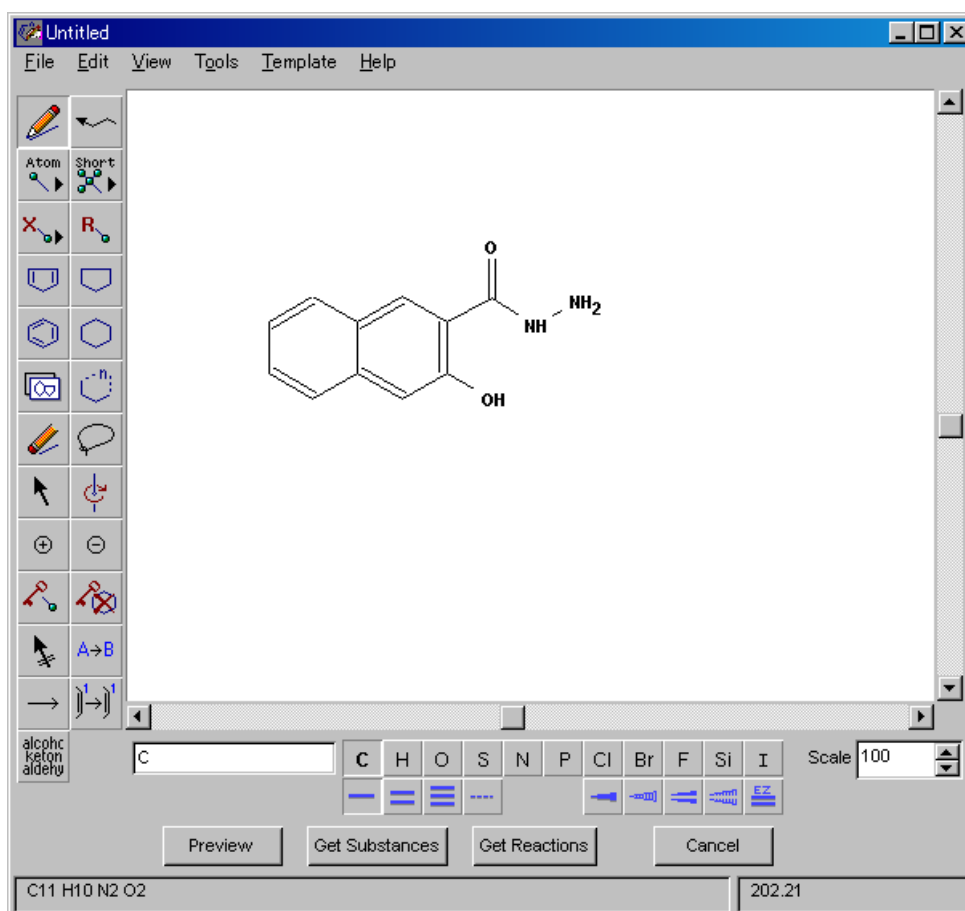
二重結合は別の方法でも描けます。まず、②で述べた方法でプロピル基の酸素と二重結合するノードに単結合を描きます。次に、**二重結合**アイコンをクリックし、ペンシルカーソルの先頭を単結合の上に合わせ、クリックします。すると、単結合は二重結合に変わります。

三つ目の方法は、単結合を描いた後、同じように単結合を上書きします。結合は二重結合に変わります。

- ④ 現原子ボックスをクリックし、現在表示されている原子（たぶん O 原子）をハイライトさせるか消去します。アミノ基を示す記号，“NH2”を入力します。するとアミノ基が新しいデフォルトになります。ペンシルカーソルの先端をプロピル基の末端に合わせてクリックすると、炭素原子は“NH<sub>2</sub>”に置換されます。

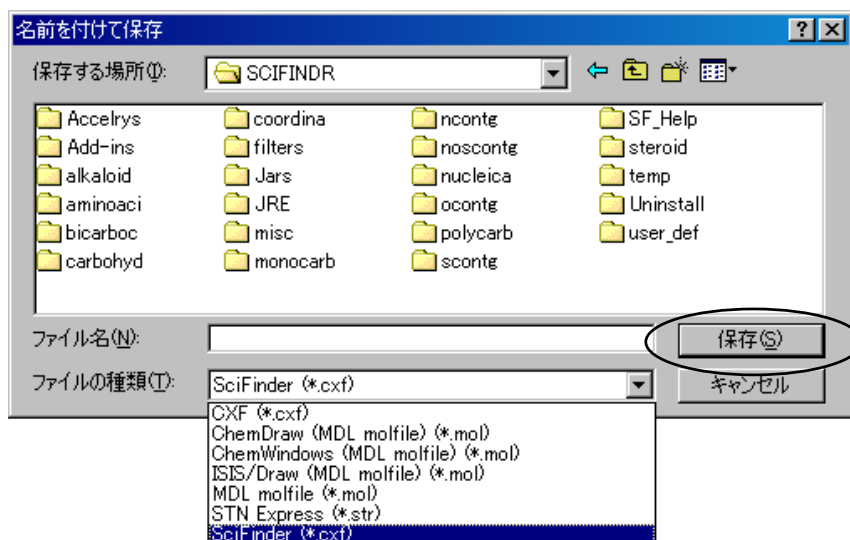
垂直ツールパレットのショートカットメニューツールをクリックして **NH2** を選択することもできます。詳細はショートカットメニューツールの項を参照してください。

同様の方法で、プロピル基の該当するノードを NH，メチル基の末端を OH にそれぞれ変換します。



## 構造の保存と構造の再利用

SciFinder で作図した構造を保存し SciFinder や他のアプリケーションで再利用することができます。構造作図ウインドウの File メニューから **Save** あるいは **Save As...** を選ぶと、ダイアログボックスが表示されます。画面下の「ファイルの種類」プルダウンメニューから、保存したいファイル形式を選び、ファイル名を指定して保存をクリックします。



適切なファイル形式で保存されていれば、SciFinder あるいは再利用したいアプリケーションからファイルを開くことができます。

## 複数のフラグメント・成分の検索

特殊な構造フラグメントや複数の成分を含む検索を行う場合、独立した複数の構造を一つの画面上に描きます。 **Get Substances** (詳細は次のセクションを参照) をクリックすると、構造作図画面に複数のフラグメントがある旨の警告メッセージが表示されますので、そのまま検索を続けるなら **OK** をクリックします。



## 第Ⅱ章 SciFinder の完全一致構造検索 (Exact Chemical Structure)

SciFinder の完全一致構造検索機能は作図した化学構造をもつ物質の検索や関連構造を調査するために使います。この機能を利用すれば次のような物質を検索できます。

- 作図した構造に完全に一致する化学物質
- 構造異性体
- 互変異性体（ケト-エノール異性を含む）
- 配位化合物
- 電荷をもつ化合物
- ラジカルおよびラジカルイオン
- 同位体元素を含む物質
- ポリマーの構成モノマー

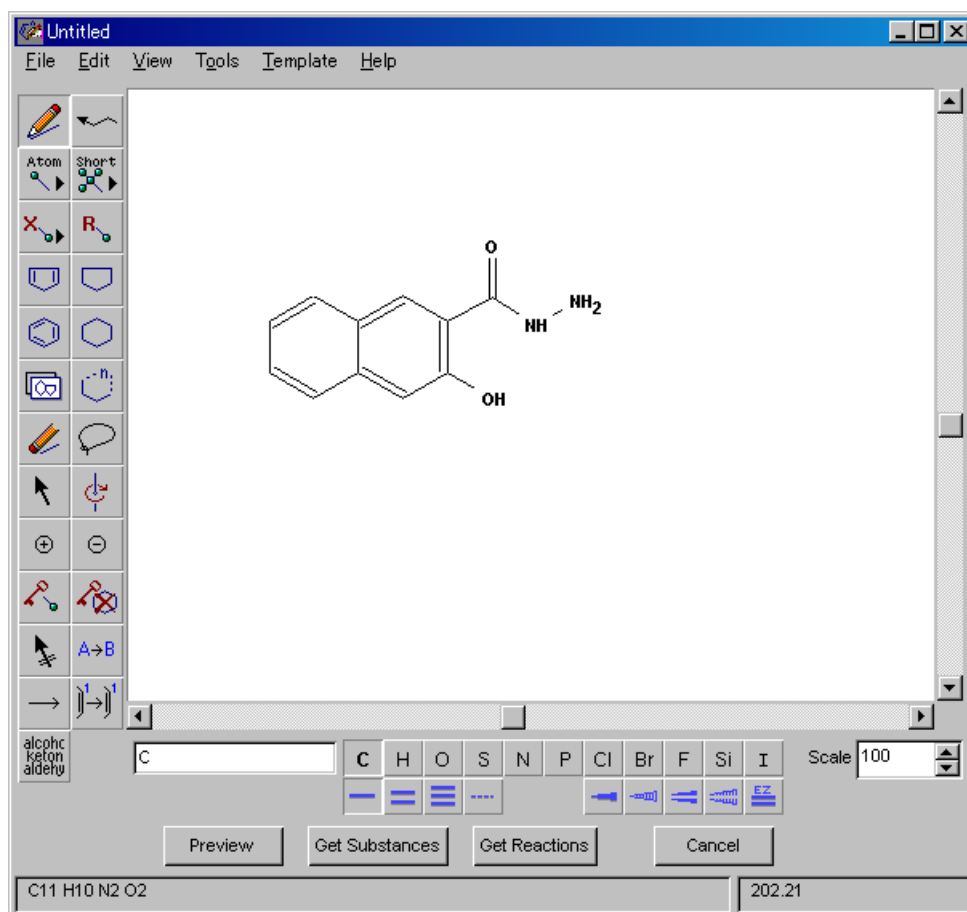
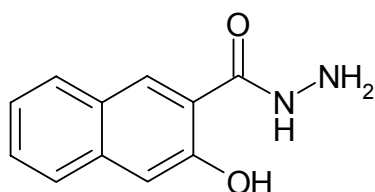
回答として得られた物質レコードには次のような情報が含まれます。

- 物質同定情報
- 計算及び実測物性値
- 文献や特許の書誌情報と抄録
- カタログ情報
- 既存化学物質台帳情報や規制情報
- その物質に関する反応情報（定額契約の方のみ利用可能）

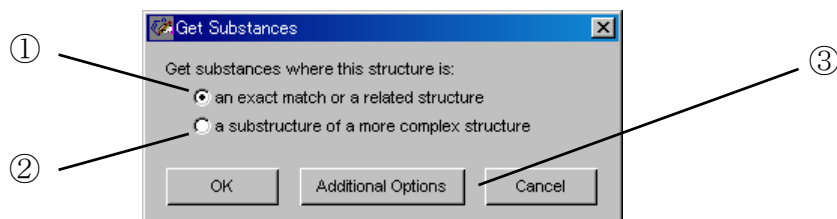
## 構造の完全一致検索

化学構造の作図が完成したら、構造検索の準備が整ったことになります。SciFinder では作図した構造をそのまま構造検索でき、他のアプリケーションで作成した構造ファイルをインポートして利用することもできます。

構造の完全一致検索の例として、第 I 章 SciFinder の構造作図で描いた化合物を用います。



検索を始めるには *Get Substances* ボタンをクリックします。部分構造検索 (SciFinder Substructure Module:SSM) オプションをご契約頂いている場合には以下の *Get Substances* ダイアログボックスが表示されます。



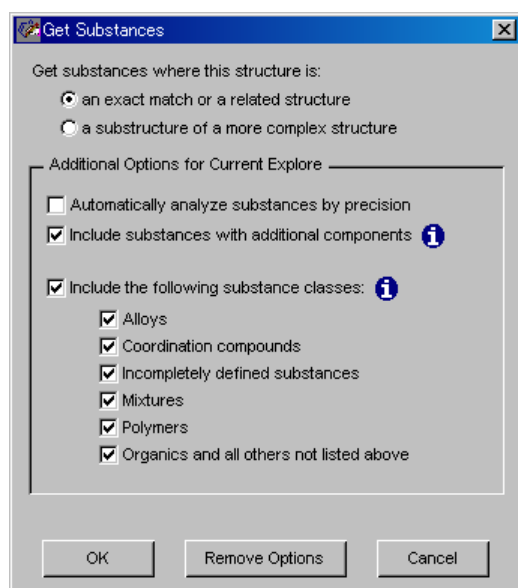
次のどちらかを選択します。

- ① 完全一致検索あるいは関連構造検索
- ② より複雑な構造の部分構造検索 (第Ⅲ章を参照)

ここでは① *an exact match or a related structure* を選択します。

①では構造質問式に一致する物質を検索します。回答には以下のようなタイプの化合物が含まれます：

- ・ 作図した構造に完全に一致する物質
- ・ 多成分物質 (Substances with additional components)
- ・ 合金 (Alloy)
- ・ 配位化合物 (Coordination compound)
- ・ 不定化合物 (Incompletely defined substance) 例え ば Trichlorobenzene
- ・ 混合物 (Mixture)
- ・ 作図した物質をモノマーとするポリマー (Polymer)
- ・ 電荷を持つ化合物
- ・ ラジカル, ラジカルイオン
- ・ 立体異性体
- ・ 互変異性体 (ケト-エノールを含む)

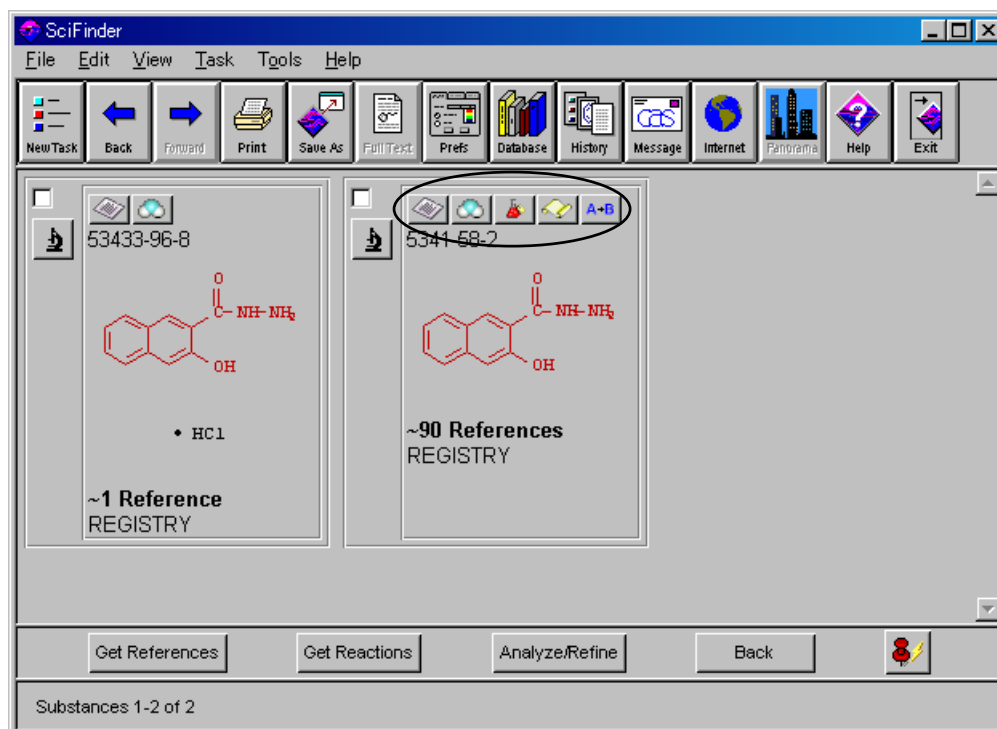


検索結果を特定のタイプに限定するには、③ *Additional Options* をクリックし、*Additional Options for Current Explore* の設定を変更します (左図)。Preference Editor の Explore タブにある設定を変更しても同様です。また、*Additional Options* の設定を解除するには、*Remove Options* をクリックしてください。


検索を継続するには *OK* をクリックしてください。

SciFinder の検索は Smartsearch という、CAS が開発した検索プロセスに基づいて行われ、完全一致検索に対して回答件数を常に最大化しようとします。例えばケト-エノール互変異性や同位体、ポリマーを構成しているモノマーなども検索対象に含まれるので、*Additional Options* で設定を変更して必要なものだけ含まれるようにしてください。Smartsearch に関する詳細は Appendix A. Smartsearch をご覧ください。






検索を始めると、検索を中止する **Stop** ボタンがウインドウの右下に現れますので、検索をキャンセルしたい場合はこれをクリックします。検索が終了して該当する構造が見つかった場合、結果は SciFinder ウインドウに表示されます。



すべての回答で構造質問式に一致する部分構造は赤くハイライトされます。回答結果は Preferences で設定してある書式・順序で表示されます。表示の書式を変更するには View メニューの *Option (Compact, Standard, Summary, Full)* を選択するか、Preference Editor の Display タブにあるデフォルトを変更します。


物質レコード左上にある顕微鏡ボタン  をクリックすると、物質の詳細な情報を見ることができます。→31 ページ

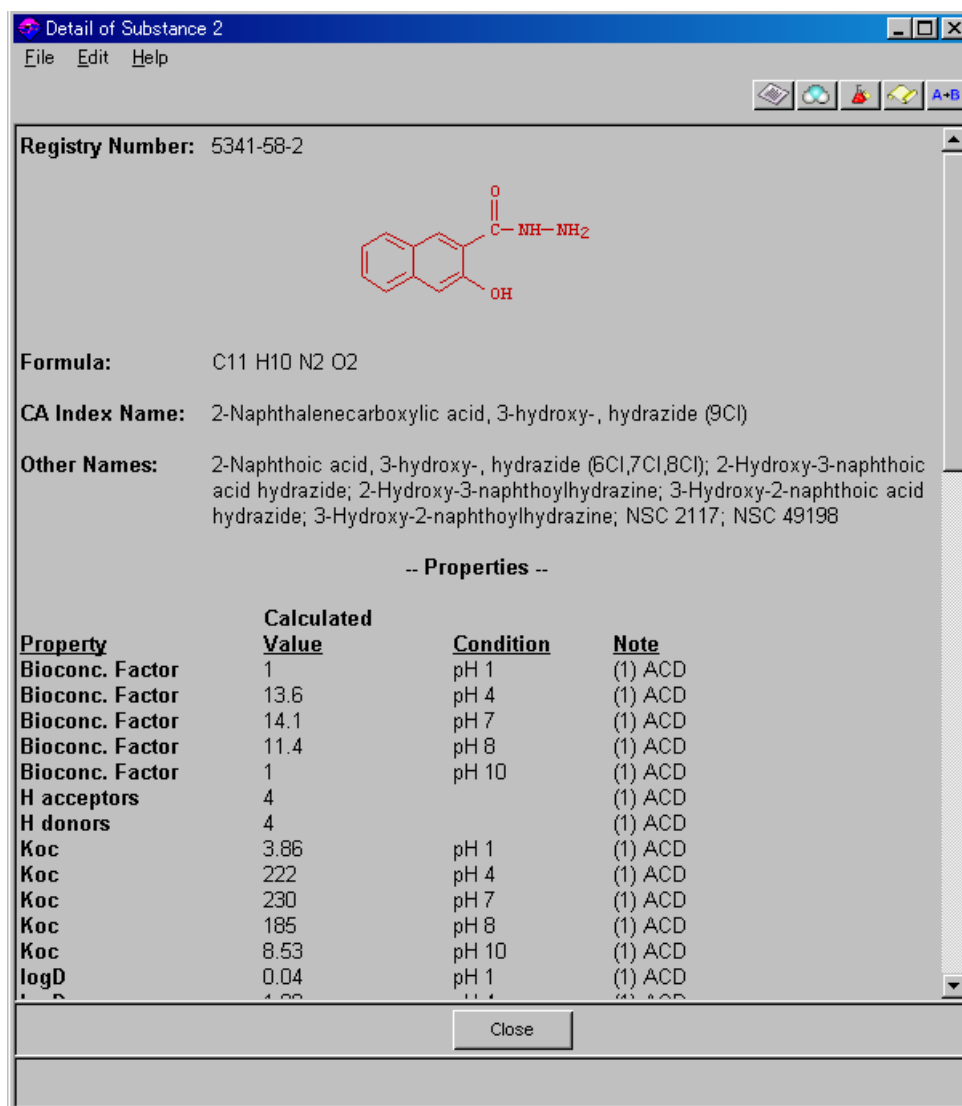
また、それぞれの物質レコードの上部にあるボタンをクリックすると、以下の機能が実行されます。

-  物質に関する文献を表示します (*Get References* ボタンでも可能) →33 ページ
-  物質の三次元構造モデルを表示します →35 ページ
-  物質のカタログ情報を表示します →36 ページ
-  物質の規制情報を表示します →37 ページ
-  物質の反応情報を表示します (*Get Reactions* ボタンでも可能)  
[定額契約の方のみ利用可能] →38 ページ

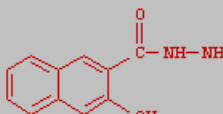


## 物質の詳細情報を見る

物質の詳細を見たいときは、各レコードの左横にある顕微鏡アイコンをクリックします。すると Detail of Substance # ダイアログボックス（#は回答番号）が表示されます。物質レコードは通常 CAS 登録番号、化学構造、分子式、名称、物性値及び関連情報を含んでいます。



**Registry Number:** 5341-58-2

**Chemical Structure:** 

**Formula:** C11 H10 N2 O2

**CA Index Name:** 2-Naphthalenecarboxylic acid, 3-hydroxy-, hydrazide (9CI)

**Other Names:** 2-Naphthoic acid, 3-hydroxy-, hydrazide (6CI,7CI,8CI); 2-Hydroxy-3-naphthoic acid hydrazide; 2-Hydroxy-3-naphthoylhydrazine; 3-Hydroxy-2-naphthoic acid hydrazide; 3-Hydroxy-2-naphthoylhydrazine; NSC 2117; NSC 49198

**-- Properties --**

Property	Calculated Value	Condition	Note
Bioconc. Factor	1	pH 1	(1) ACD
Bioconc. Factor	13.6	pH 4	(1) ACD
Bioconc. Factor	14.1	pH 7	(1) ACD
Bioconc. Factor	11.4	pH 8	(1) ACD
Bioconc. Factor	1	pH 10	(1) ACD
H acceptors	4		(1) ACD
H donors	4		(1) ACD
Koc	3.86	pH 1	(1) ACD
Koc	222	pH 4	(1) ACD
Koc	230	pH 7	(1) ACD
Koc	185	pH 8	(1) ACD
Koc	8.53	pH 10	(1) ACD
logD	0.04	pH 1	(1) ACD

Close

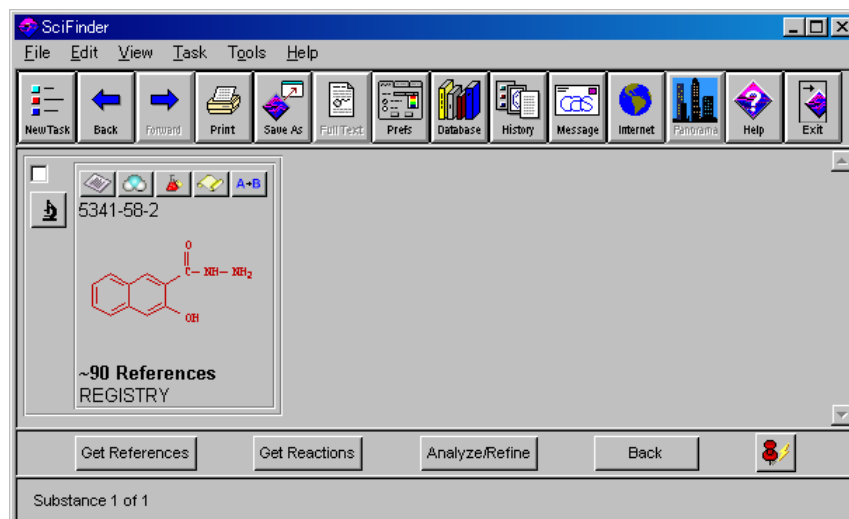
物質の詳細情報はデフォルト表示形式で表示されます。この設定は Preference Editor の Display タブで変更できます。

表示したレコードは File メニューの *Print...* で印刷できます。また *Save As...* で保存も可能です。

SciFinder ウィンドウに戻るには、*Close* をクリックします。

## 興味ある物質のみに絞る


興味ある物質のみに絞るためには *Keep Substances* オプションを利用します。まず残したい化合物構造の左上にあるチェックボックスをクリックしていきます。次に Tools メニューから *Keep Substances* を選ぶと、チェックした化合物に絞られて表示されます。

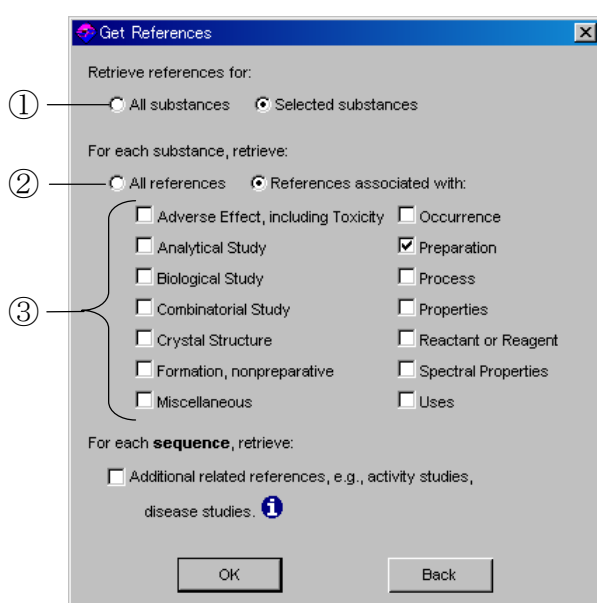


## 回答セットの限定と分析 (Analyze/Refine)

物質の回答セットは、構造、物性または市販しているかどうかで限定できます。また検索精度や環の骨格、原子、結合で分析することも可能です。物質の限定と解析に関する詳細は第Ⅲ章をご覧ください。

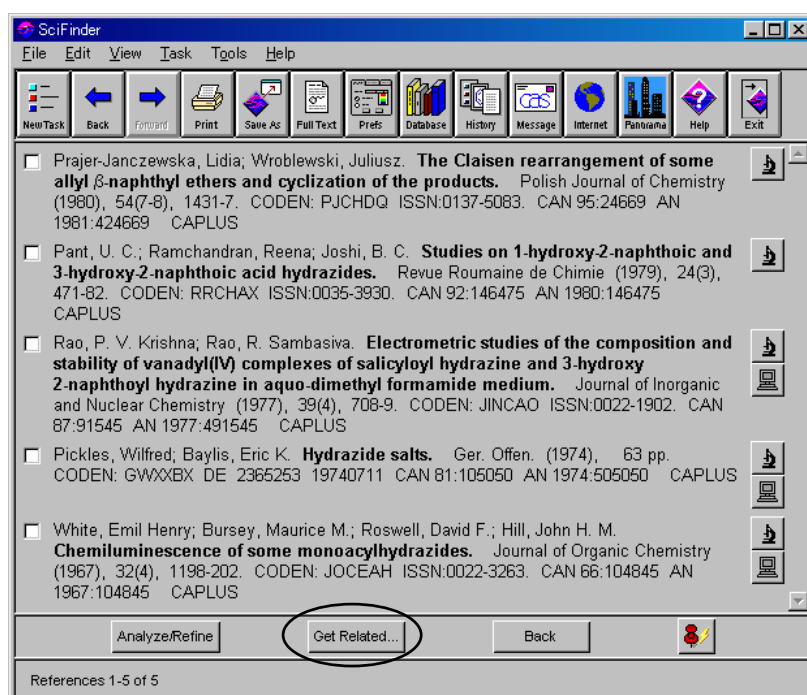
## 物質に関する文献を見る

一つまたは複数の物質に関する文献情報を得るためには、ウインドウ下部にある **Get References** ボタンをクリックします。各物質レコードの上部にある  をクリックしても、その物質に関する同様の情報が得られます（下のウインドウ画面は **Get References** ボタンをクリックした場合です）。Get References ダイアログボックスが表示されるのでオプションを設定することができます。



Adverse Effect, including Toxicity	副作用 (毒性を含む)
Analytical Study	分析に関する研究
Biological Study	生物学的研究
Combinatorial Study	コンビナトリアル・ケミストリーに関する研究
Crystal Structure	結晶構造
Formation, nonpreparative	生成 (意図的合成ではない)
Miscellaneous	その他
Occurrence	起源・分布
Preparation	製造
Process	プロセス
Properties	物性
Reactant or Reagent	反応物または試薬
Spectral Properties	スペクトル物性
Uses	用途

まず①ですべての物質の文献を得るのか、選択した物質のみに限定して文献を得るのかを選びます。次に②で文献の範囲を指定します。**References associated with:** ラジオボタンをクリックした場合は、③で分野を選択できます（例: Preparation）。最後に **OK** をクリックします。



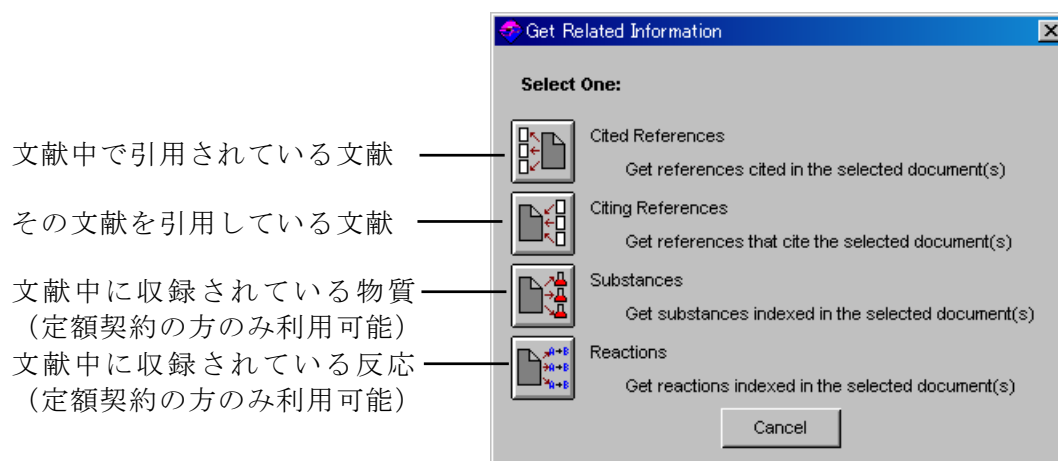
選択した物質に関する文献が SciFinder ウインドウに表示されます。

文献の書式や順序は Preference Editor の Display タブで変更できます。

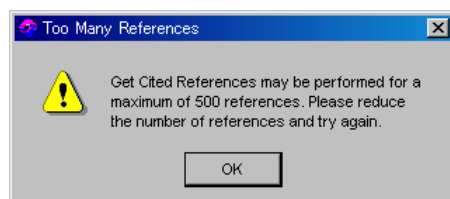
File メニューから **Save As...** や **Save Answer Set...** を選び、回答を保存することが可能です。また、**Print...** を選び、様々な形式で印刷することもできます。

## 文献集合から関連情報を検索する (Get Related...)

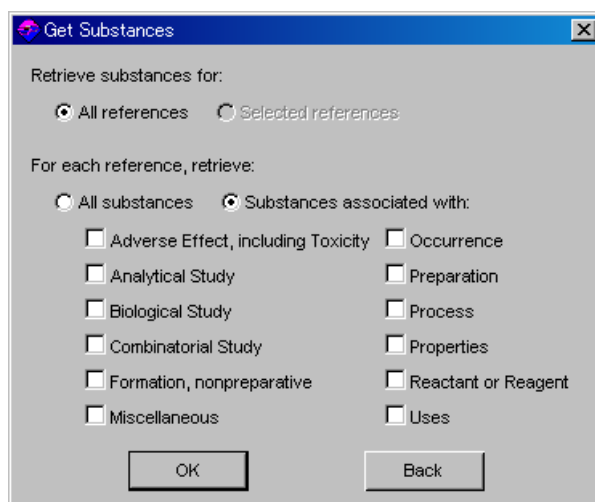
文献の集合から、その文献に含まれている情報をさらに検索することができます。文献の集合から *Get Related...* をクリックします。すると、Get Related Information ダイアログボックスが表示されます。Select One: のそれぞれのボタンをクリックすると、次の情報を検索します。



Cited References, Citing References は 500 件以下、Substances, Reactions は 1000 件以下に文献集合の数を絞り込んでから検索してください。文献集合数が多いと以下のようなウィンドウメッセージが表示されます。




文献中に収録されている物質の種類を限定するには、Get Substances ダイアログボックスで、*Substances associated with:* ラジオボタンをクリックして、分野を選択することができます。最後に *OK* をクリックします。

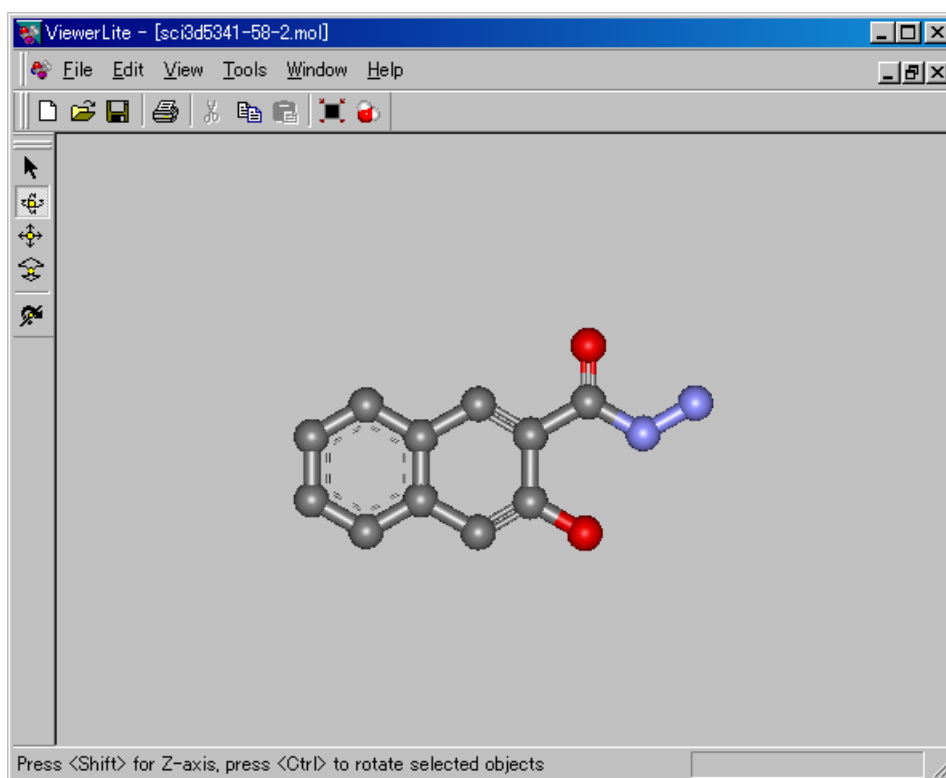


## 物質の三次元構造モデルを見る


三次元構造の表示には、Accelrys Viewer Pro もしくは ViewerLite のインストールが必要です。（Windows 版のみ）

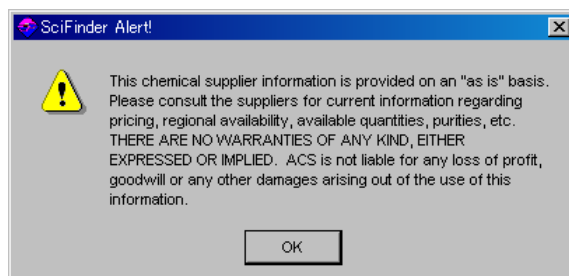
インストールすると、物質レコードに三次元構造へのリンク  が表示されます。


物質の三次元構造を見るには、各レコードの上部にある  をクリックします。

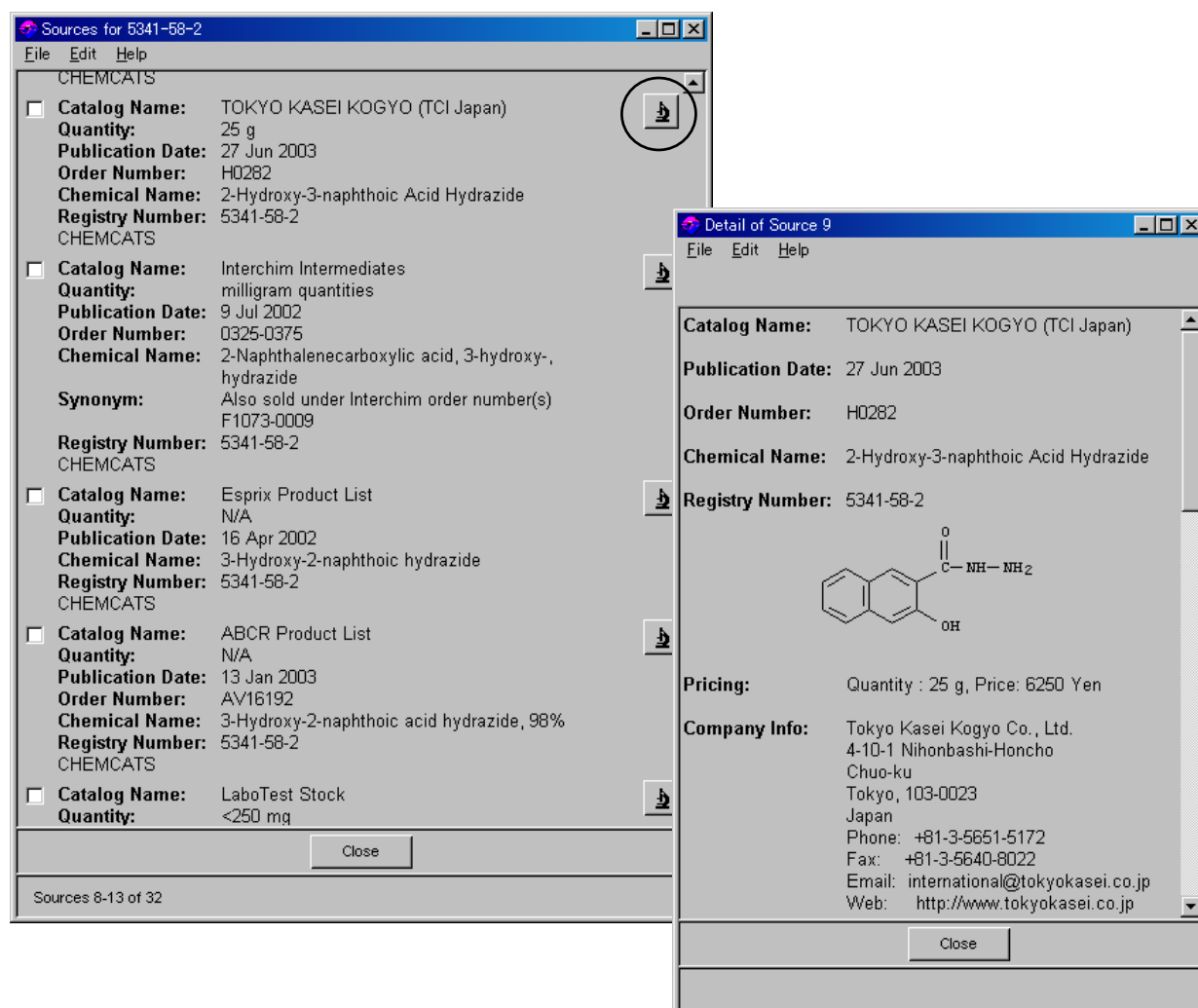


## 物質のカタログ情報を見る

物質を販売している業者や販売価格などの情報を表示するときは、各レコードの上部にある  をクリックします。以下のアラートウインドウが表示されますが、そのまま OK をクリックします。するとカタログのリストが表示されます。



レコード中には、世界中の供給業者が提供している化学薬品に関する各種の情報、例えば、カタログ名、等級、カタログ発行日、化学物質名、商品名、CAS登録番号などが表示されます。さらに、レコードの横にある顕微鏡アイコン  をクリックすると、値段、構造図、供給業者の名称、所在地、連絡先、ウェブサイトも表示されます。各種情報を収録する状況は、供給業者によって異なります。



**Sources for 5341-58-2**

<input type="checkbox"/>	Catalog Name:	Quantity:	Publication Date:	Order Number:	Chemical Name:	Registry Number:
<input type="checkbox"/>	CHEMCATS	25 g	27 Jun 2003	H0282	2-Hydroxy-3-naphthoic Acid Hydrazide	5341-58-2
<input type="checkbox"/>	Interchim Intermediates	milligram quantities	9 Jul 2002	0325-0375	2-Naphthalenecarboxylic acid, 3-hydroxy-, hydrazide	5341-58-2
<input type="checkbox"/>	Esprit Product List	N/A	16 Apr 2002	AV16192	3-Hydroxy-2-naphthoic hydrazide	5341-58-2
<input type="checkbox"/>	ABCR Product List	N/A	13 Jan 2003	AV16192	3-Hydroxy-2-naphthoic acid hydrazide, 98%	5341-58-2
<input type="checkbox"/>	LaboTest Stock	<250 mg				

Close

Sources 8-13 of 32

**Detail of Source 9**

File Edit Help

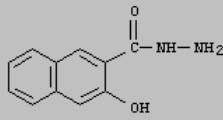
**Catalog Name:** TOKYO KASEI KOGYO (TCI Japan)

**Publication Date:** 27 Jun 2003

**Order Number:** H0282

**Chemical Name:** 2-Hydroxy-3-naphthoic Acid Hydrazide

**Registry Number:** 5341-58-2




**Pricing:** Quantity : 25 g, Price: 6250 Yen

**Company Info:** Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd.  
4-10-1 Nihonbashi-Honcho  
Chuo-ku  
Tokyo, 103-0023  
Japan  
Phone: +81-3-5651-5172  
Fax: +81-3-5640-8022  
Email: international@tokyokasei.co.jp  
Web: http://www.tokyokasei.co.jp

Close

## 物質の規制情報を見る

物質の規制情報を表示するときは、各レコードの上部にある  をクリックします。すると、日本、米国、EU、カナダ、韓国、オーストラリア、スイス、フィリピン、イスラエル、台湾の化学物質台帳情報や各国・地域での規制情報を見ることができます。ただし台帳情報は、CAS登録番号の付与された化学物質に限定されるので、総称名物質の多い日本や韓国の台帳上の収載の有無をこれのみで判断することはできません。

Regulated Chemicals Listing for 5341-58-2

File Edit Help

Accession Number: 12376 CHEMLIST

CAS Registry Number: 5341-58-2

Chemical Name

2-Naphthalenecarboxylic acid, 3-hydroxy-, hydrazide (TSCA, NDSL, ASIA-PAC)  
3-Hydroxy-2-naphthohydrazide (French) (NDSL, EINECS)  
3-hydroxy-2-naphthohydrazide (EINECS, ENCS)  
3-Hydroxy-2-naphthohydrazid (German) (EINECS)  
3-hidroxi-2-naftohidrazida (Spanish) (EINECS)  
2-Hydroxy-3-naphthoic acid hydrazide  
2-Hydroxy-3-naphthoylhydrazine  
2-Naphthoic acid, 3-hydroxy-, hydrazide  
3-Hydroxy-2-naphthoic acid hydrazide  
3-Hydroxy-2-naphthoylhydrazine  
NSC 2117  
NSC 49198

File Segment

ASIA-PACIFIC: ASIA-PAC; CANADA: NDSL; EEC: EINECS; JAPAN: ENCS; USA: TSCA

Confidentiality Status

Public

Regulatory List Number

EINECS No.: 226-282-7  
ENCS No.: 4-1814

Inventory Status

On TSCA Inventory  
July 2003 Inventory Tape  
On NDSL  
Canada Gazette, Part I, January 31, 1998  
On EINECS  
Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990  
On ENCS  
Japanese Gazette, February 14, 2002  
ENCS Designation: It is required to report the amount after the manufacture of the substance.  
Contained within class: Low Molecular Carbo-polycyclic Organic Compounds.  
On ASIA-PAC

==== U. S. EPA Regulations - TSCA ====

Interagency Testing Committee

Interagency Testing Committee  
Fed. Regist. 56 #160:41212 (19 Aug 1991).  
The Interagency Testing Committee, in its 28th Report, defers further consideration of this substance at the present time because it was not reported to EPA or the U.S. International Trade Commission as being recently produced. [Also reported in Pesticide Toxic Chem. News 19 #32:4 (12 Jun 1991), in Chem. Regul. Rep. 15 #10:307 (07 Jun 1991) and 15 #21:651 (23 Aug 1991), and in Chem. in Prog. Bull. 12 #3:10 (Aug. 1991). The full text also appears in Chem. Regul. Rep. 15 #21:659 (23 Aug 1991).]

Database: CHEMLIST

Close

Regulated Chemicals Listing 1 of 1

## 物質の反応情報を見る [定額契約の方のみ利用可能]

1 つまたは複数の物質に関する反応情報を見たいときは、ウインドウ下部にある *Get Reactions* ボタンをクリックします。各物質レコードの上部にある **A+B** をクリックしても、その物質に関する同様の情報が得られます。（下のウインドウ画面は *Get Reactions* ボタンをクリックした場合です）。

Reaction Roles ダイアログボックスが表示されるので、*Retrieve reaction for:*からは全ての物質の反応情報を得るのか、選択した物質のみに限定して反応情報を得るのかを選びます。次に *Select a reaction role:*から反応ロール（役割）を選択します。

ここでは Reactant（反応物）を選択し、OK をクリックします。

The image shows a screenshot of the SciFinder software interface. On the left, a 'Reaction Roles' dialog box is open. It has two sections: 'Retrieve reactions for:' with radio buttons for 'All substances' and 'Selected substances' (the latter is selected), and 'Select a reaction role:' with radio buttons for 'Product', 'Reactant' (selected), 'Reagent', 'Reactant or Reagent', 'Catalyst', 'Solvent', and 'Any role'. 'OK' and 'Cancel' buttons are at the bottom.

The main SciFinder window displays two reaction results. Each result shows a chemical reaction scheme with reactants, reagents, and products. The first reaction involves a naphthalene derivative and a diazo compound, with reagents 1.1 S:EtOH, 1.2 R:H2SO4, and 2 Ac2O, S:Ac2O. The second reaction is similar but with a different substituent. Below each reaction scheme, there is a 'NOTE' section and a reference link: 'Bioorganic & Medicinal Chemistry, 10(9), 2893-2898; 2002 CASREACT'. At the bottom of the SciFinder window, there are buttons for 'Get References', 'Analyze/Refine', and 'Back', and a status bar indicating 'Reactions 1-3 of 65'.

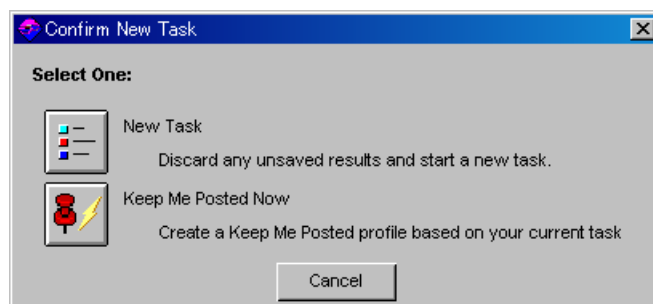
Get References をクリックすると、選択した反応の文献が表示されます。

反応検索の詳細につきましては、第IV章 SciFinder の反応検索 をご覧ください。

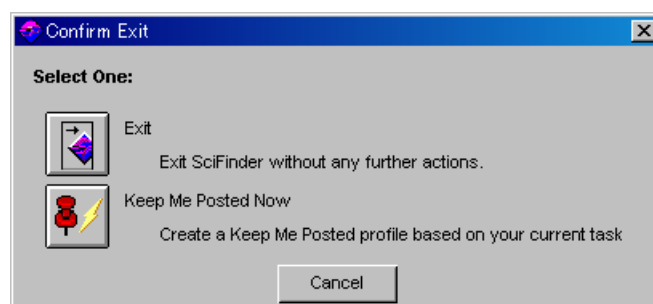


## 完全一致構造検索の終了

新しい検索を始めるには、メインメニューのツールバー *New Task* をクリックするか、File メニューから *New Task* を選びます。Confirm New Task ダイアログボックスで *New Task* をクリックして下さい。その際、保存されていない回答結果は破棄されますのでご注意ください。



SciFinder を終了するには、メインメニューツールバーから *Exit* をクリックするか、File メニューから *Exit SciFinder* を選びます。Confirm Exit ダイアログボックスで *Exit* をクリックして下さい。





## 第Ⅲ章 SciFinder の部分構造検索 (Substructure)

SciFinder Substructure Module (SSM) は SciFinder のオプション機能です。この機能を利用すれば、作図した構造から次のような物質を検索することができます。

- 作図した構造と完全に一致する物質（完全一致構造検索と同じ）
- 上記物質が成分の一つであるような多成分物質，たとえばポリマー，混合物，塩
- 作図した構造を部分構造として含み，指定した位置に置換基を持つ物質
- 作図した環骨格がさらに他の環と縮合している物質

回答として得られた物質レコードには次のような情報が含まれます。

- 物質同定情報
- 計算及び実測物性値
- 文献や特許の書誌情報と抄録
- カタログ情報
- 既存化学物質台帳情報や規制情報
- その物質に関する反応情報（定額契約の方のみ利用可能）

SciFinder の部分構造検索では，以下の機能が利用できます。

- 作図した構造による部分構造検索
- 環の孤立（縮合の禁止）の指定（一般式ノード Hy（ヘテロ環），Cy（環式化合物），Cb（炭素環）を有する構造を含む）
- 作図した鎖が ring 中に含まれること，または chain 中に含まれることの指定
- 鎖全体に対しては「chain のみ」の指定
- 環および鎖に対する置換の有無の指定
- 原子，ショートカット，可変原子を含む R グループ（一つの位置に複数個の原子を許容）の利用。ただし，一つの構造について 10 個まで。
- 可変原子（一般ノード）の指定
- 立体構造の指定
- 質問式の部分構造の属性を含めたインポートまたはエクスポート

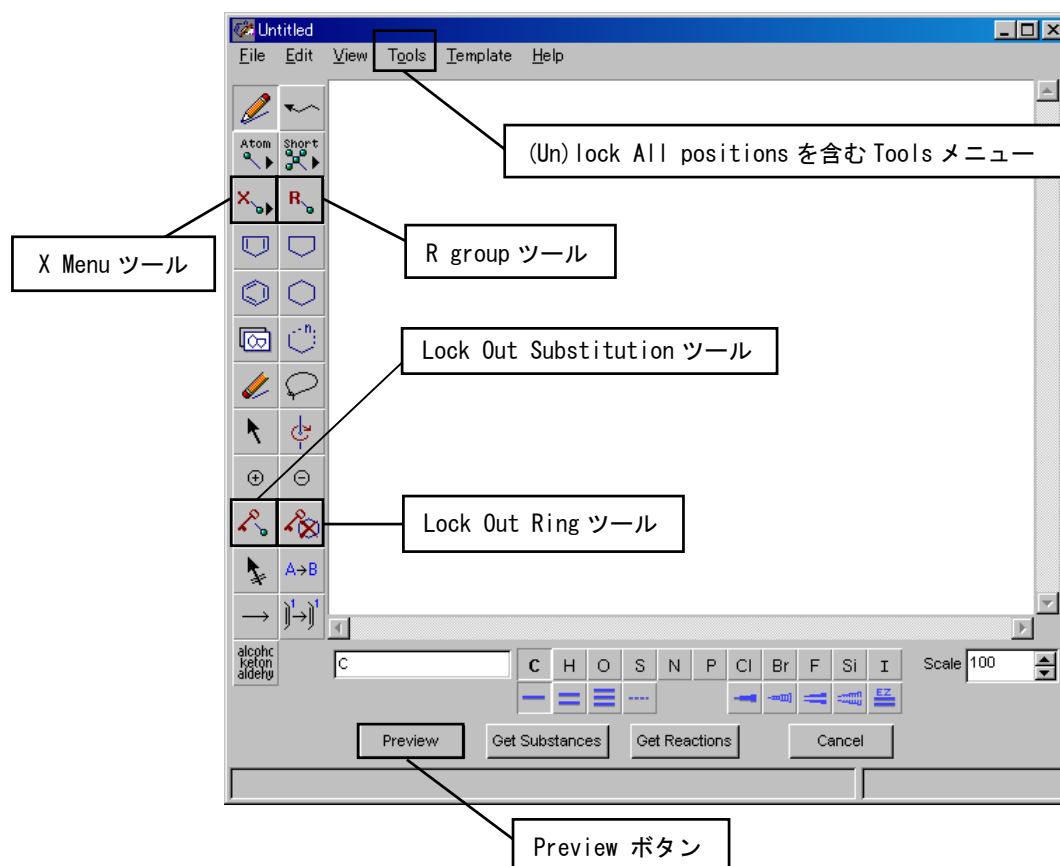
また Preview 機能が用意されており，実際に検索を行う前に，得られる回答のサンプルを検討することができます。この機能によって，回答数を参照しながら適切な質問式を作成することが容易になり，またどのような回答が得られる可能性があるかを事前に知ることができます。

回答集合は，Refine/Analyze 機能を利用してさらに分類，限定できます。

## 部分構造検索

部分構造検索を開始するには、Task メニューの *Explore* から *Chemical Substance or Reaction* サブメニュー を選択し、更に *Chemical Structure* を選択します。あるいは New Task ダイアログボックスから *Explore* を選択し、続くダイアログボックスで *Chemical Substances or Reaction* と *Chemical Structure* をそれぞれ選びます。

構造作図ウインドウ ”Untitled” が開きます。



## 構造作図ウィンドウ

構造作図ウィンドウには部分構造検索に利用するツール、メニュー項目、ボタンがあります。その機能は次のとおりです。

- Lock Out Substitution ツール： 指定したノードへの現状以上の置換を禁止します。
- Lock Out Ring ツール： 環の縮合を禁止します。鎖全体に対し、鎖のみの指定をします。
- Tools メニューの *Unlock All Positions* コマンド： 選択するとすべてのノードへの置換が許容されます。
- Tools メニューの *Lock All Positions* コマンド： 選択するとすべてのノードへの置換が禁止されます。
- X Menu ツール： 可変原子を指定するときに使用します。
- R-group ツール： R-Group Definition ダイアログボックスが開き、R グループ（一つのノードに対して定義できる部分構造）を 10 個まで作成できます。
- File メニューの *Preview* コマンドおよび原子・結合パレットの下の *Preview* ボタン： 質問式を検討し、サンプル回答を得るのに使用します。

## 構造作図のデフォルト

作図した部分構造に適合する回答を探す際に SciFinder が用いるデフォルトは次のとおりです。

質 問 式	回 答
環	作図された骨格に置換基がついたもの 作図された構造に完全一致するもの 作図された骨格がさらに他の環と縮合しているもの
鎖	作図した鎖中の原子に置換基がついたもの 作図した鎖中の原子が鎖または <b>環の一部</b> であるもの 作図した鎖中の結合が、より長い鎖または <b>環の一部</b> であるもの
末端ショートカット	Ak（アルキル鎖）を除き、末端ショートカットは置換禁止

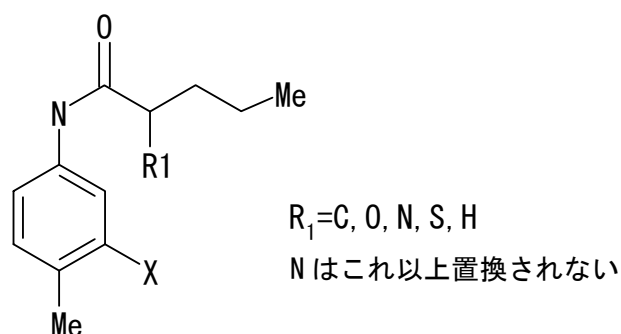
## 構造作図のデフォルトの変更

作図ツールを用いて、構造作図のデフォルトを変更することができます。

構造	デフォルト	変更方法
環系	孤立または他の環と縮合	Lock Out Rings ツールで環の孤立を指定 縮合およびスピロ結合が禁止される
鎖	原子，結合とも環または鎖の一部	Lock Out Rings ツールで結合を鎖のみに限定 原子のデフォルトは変更不可
原子	無置換でも置換基が付いてもよい	Lock Out Substitution ツールまたは Lock All Positions ツールで，置換を禁止

## 構造式の作図

部分構造検索を実行するには，まず構造を作図します．構造作図画面で，以下の構造を作図してみます．



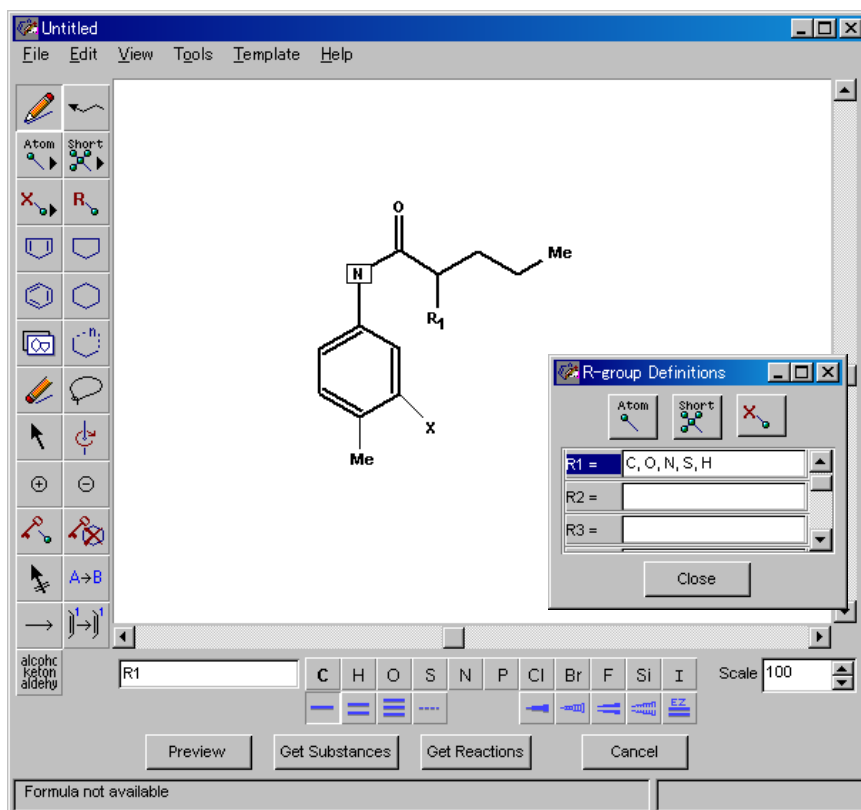
構造作図の詳細については，第 I 章 「構造を描く」をご覧ください．作図ツールの詳細については第 I 章で説明されています．

File メニューから *Open* を選択し，以前に作成した構造ファイルを呼び出して利用することもできます．または，他のソフトウェアで作成した構造図をコピー&ペーストで貼り込むこともできます．

## 作図方法

1. ベンゼン環ツールで、ベンゼン環を作図します。
2. ショートカットメニューツールから、*Me* を選択します。カーソルがペンシルツールに変わりますので、ベンゼン環の一つの炭素にカーソルを合わせ、鎖の長さ 1 だけドラッグします。
3. *X* メニューツールから *X* (ハロゲン) を選択し、同様にベンゼン環からドラッグします。
4. 原子パレットの *N* (窒素) アイコンをクリックし、同様にベンゼン環からドラッグします。
5. 鎖ツールを使って、*N* から炭素を五つ伸ばします。
6. ショートカットメニューツールから、*Me* を選択し、炭素鎖の末端を *Me* に変えます。
7. *R* グループアイコンをクリックし、*R1* の定義に ***C, O, N, S, H*** と入力したのち、炭素鎖に *R1* を付けます。
8. 続いて原子パレットの *O* (酸素) アイコン、および結合パレットの**二重結合**アイコンをクリックします。ペンシルツールを炭素鎖のノードに合わせ、上へ鎖の長さ 1 だけドラッグします。鎖中の原子が酸素、酸素への結合が二重結合となります。
9. **Lock Out Substitution** ツールを選択したのち *N* をクリックします。*N* は、置換が禁止されます。
10. **Lock Out Ring** ツールを選択したのちベンゼン環をクリックします。環の縮合が禁止されます。
11. 炭素鎖の上で、再度クリックします。結合は鎖に限定されました。

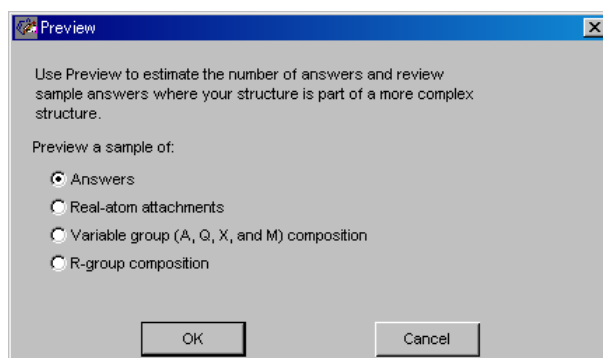
作図が終了すると、下記ようになります。



## 部分構造の Preview

Preview 機能により、作図した構造式に該当する回答に関する様々な情報を得ることができます。

構造作図が終了したら **Preview** ボタンをクリックします。Preview ダイアログボックスが開きます。

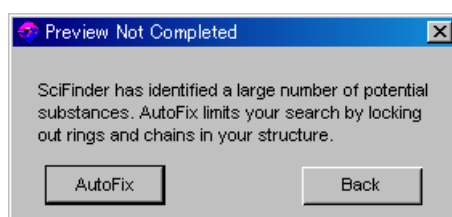


Preview のオプションとその結果は次のとおりです。

オプション	結 果
Answers	<ul style="list-style-type: none"><li>代表的な回答</li><li><i>Get Substances</i> での回答数予想</li></ul>
Real-atom attachments	<ul style="list-style-type: none"><li>原子上の置換基</li><li><i>Get Substances</i> での回答数予想</li></ul>
Variable group (A, Q, X, and M) composition	<ul style="list-style-type: none"><li>可変グループの構成原子</li><li><i>Get Substances</i> での回答数予想</li></ul>
R-group composition	<ul style="list-style-type: none"><li>R グループに含まれる原子</li><li><i>Get Substances</i> での回答数予想</li></ul>

## Preview が実行できない場合

作図した構造が一般的すぎる場合、Preview を実行すると Preview Not Completed ダイアログボックスが表示されます。 **Autofix** ボタンをクリックすれば、質問式を限定することができます。

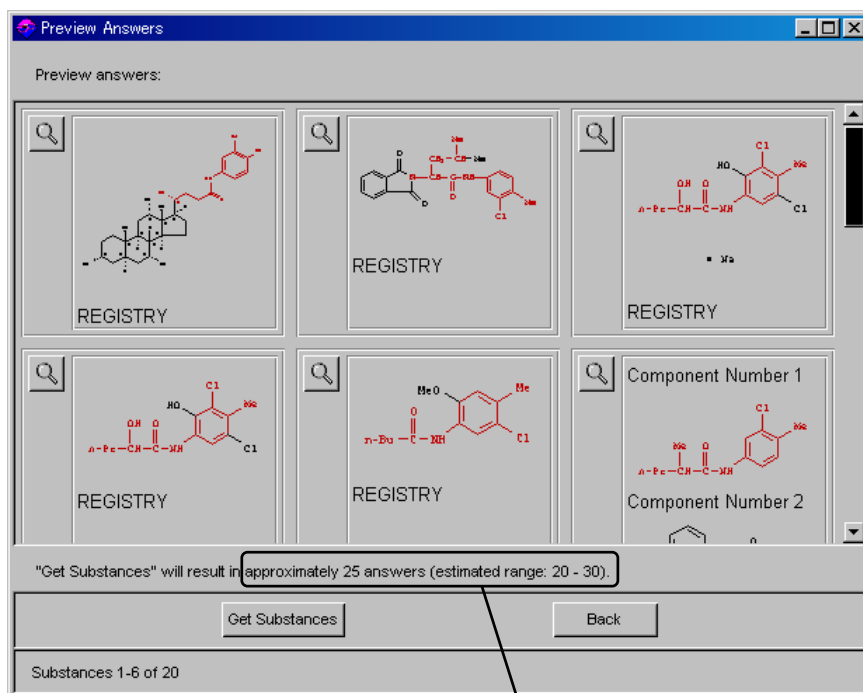


**Autofix** ボタンをクリックすることにより、すべての環の縮合が禁止され、またすべての鎖は、鎖のみの結合に限定されます。これは、**Lock Out Rings** ツールを利用したのと同様の結果になります。これらの指定を行ったあとに、再度 **Preview** を実行します。




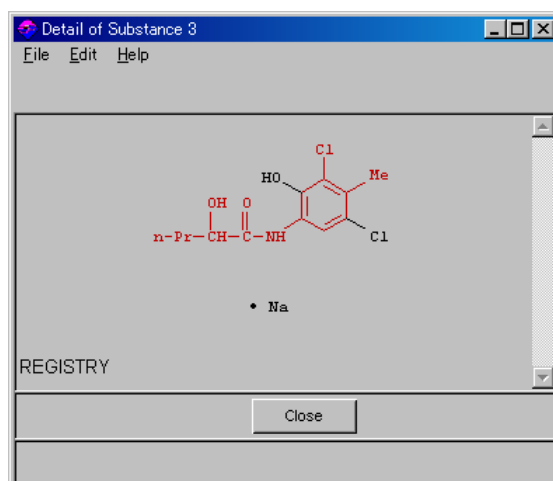
## 回答例の Preview

構造質問式に対する回答のサンプルを見るには、**Answers** オプションを選択し、ついで **OK** をクリックします。Preview Answers ダイアログボックスが開き、回答のサンプル、その数、**Get Substances** を実行した時の予想回答数が表示されます。



予想される回答数（予想範囲）

**拡大鏡** アイコン  をクリックすると、Detail of Substance ダイアログボックスが表示され、回答の構造を拡大して見ることができます。

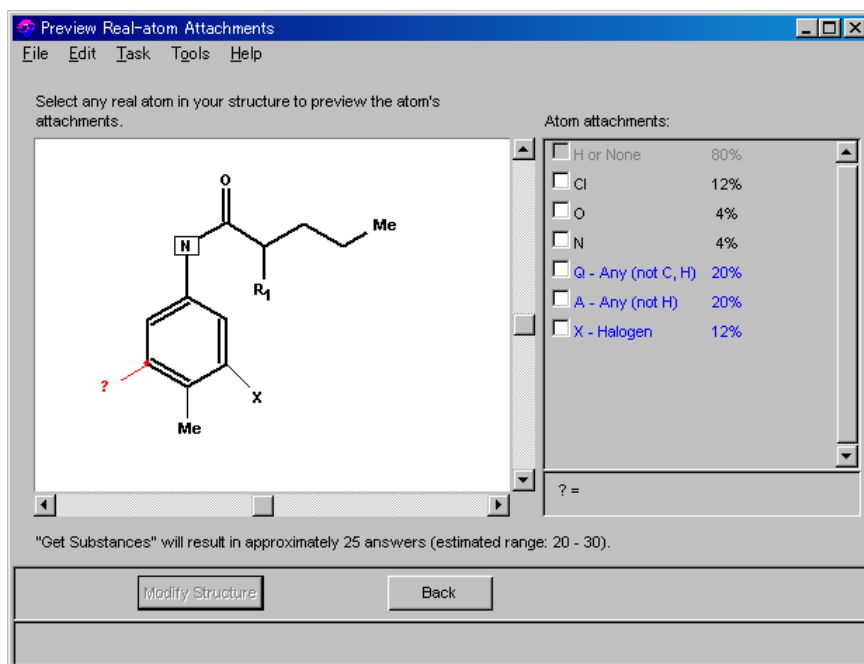


**Close** をクリックすると Preview Answers ダイアログボックスに戻ります。更に **Back** をクリックすると Preview ダイアログボックスにもどり、他の Preview のオプションを選択することができます。

## 原子上の置換基の Preview

作図した原子に置換する可能性のある原子を Preview するには、*Real-atom attachments* オプションを選択し、ついで **OK** をクリックします。Preview Real-atom Attachments ダイアログボックスが開き、入力した構造が表示されます。

置換基を確認したい原子ノードにカーソルを合わせてクリックすると、原子がハイライトされ、傍らに ? マークが現れます。ダイアログボックスの Atom Attachments のセクションには、サンプル回答物質の指定部位における原子の一覧が、原子は黒、可変原子は青で表示されます。



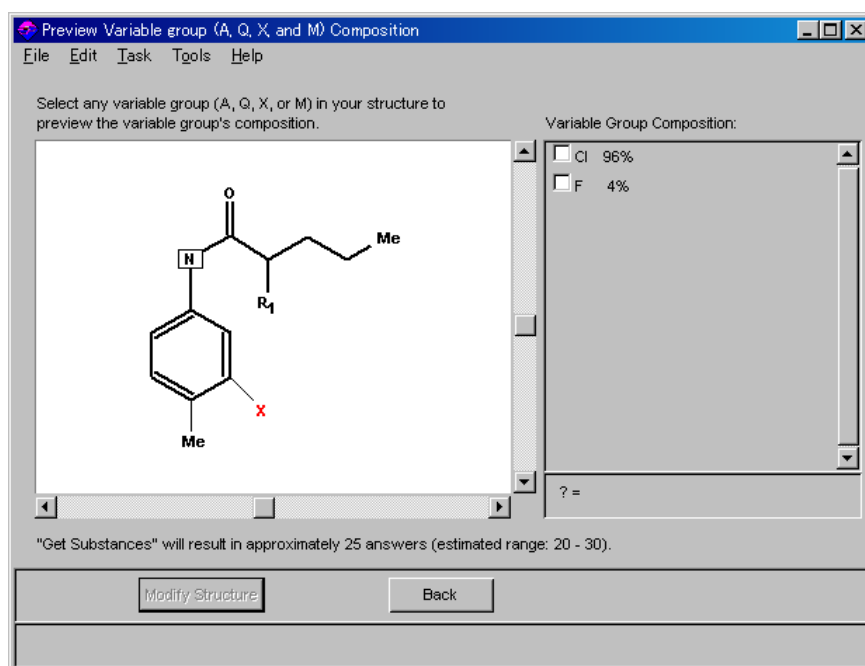
質問式の制限を強めて回答数を減らすには、必要とするすべての原子の隣のボックスをクリックし、ついで **Modify Structure** をクリックします。作図した構造式が修正され、指定されたノードの置換基を含む構造となります。

または、**Back** をクリックして Preview ダイアログボックスにもどり、他の Preview のオプションを選択することができます。

## 可変グループ (A, Q, X, M) の Preview

可変ノードの原子を Preview するには *Variable group (A, Q, X, and M) composition* オプションを選択します。Preview Variable Group (A, Q, X, and M) Composition ダイアログボックスが開き、Preview の対象となる構造が表示されます。

Preview したい可変原子にカーソルを合わせてクリックすると、選択した可変原子がハイライトされ、それを構成する原子の一覧が Variable Group Composition セクションに表示されます。



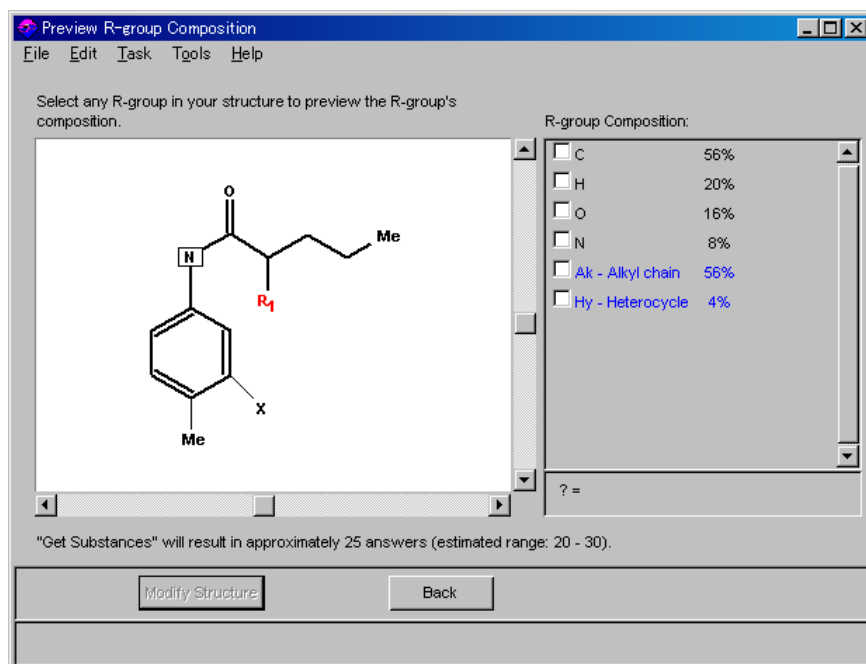
質問式の制限を強めて回答数を減らすには、必要とする原子の隣のボックスをクリックし、ついで *Modify Structure* をクリックします。作図した構造式が修正され、指定されたノードの置換基を含む構造となります。

または、*Back* をクリックして Preview ダイアログボックスにもどり、他の Preview のオプションを選択することができます。

## R グループの構成原子の Preview

サンプル回答に含まれる R グループの構成原子を Preview するには、*R-group composition* オプションを選択します。Preview R-group Composition ダイアログボックスが開き、Preview の対象となる構造が表示されます。

Preview したい R グループにカーソルを合わせてクリックすると、選択した R グループがハイライトされ、サンプル回答中でそれを構成している原子、可変原子などの一覧が R-Group Composition セクションに表示されます。



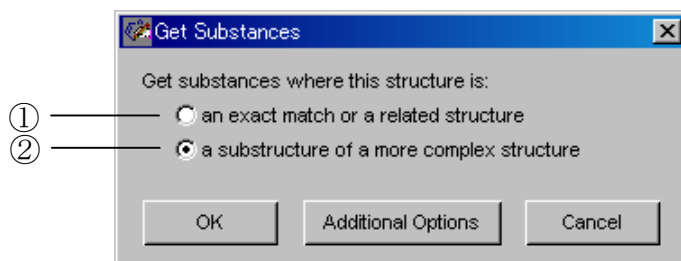
質問式の制限を強めて回答数を減らすには、必要とする原子の隣のボックスをクリックし、ついで *Modify Structure* をクリックします。作図した構造式が修正され、指定されたノードの置換基を含む構造となります。

または、*Back* をクリックして Preview ダイアログボックスにもどります。

作図が終了したら、Preview ダイアログボックスで *Cancel* をクリックし、構造作図画面に戻ります。

## 部分構造検索の実行

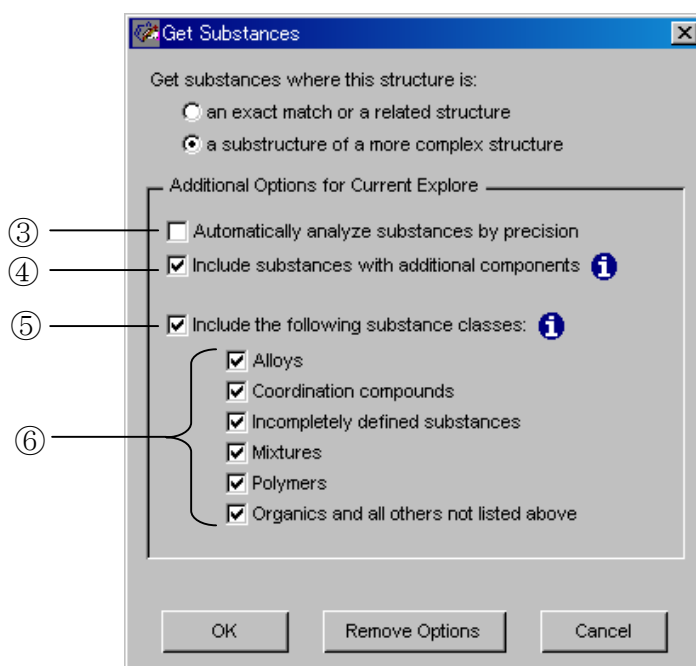
構造の作図が終了したら、*Get Substances* をクリックします。Get Substances ダイアログボックスが表示されます。



部分構造検索では②がデフォルトになります。作図した構造に R グループや可変原子 (X, Ak など) を含む場合、①を選択して実行すると Structure Drawing Error が表示されます。

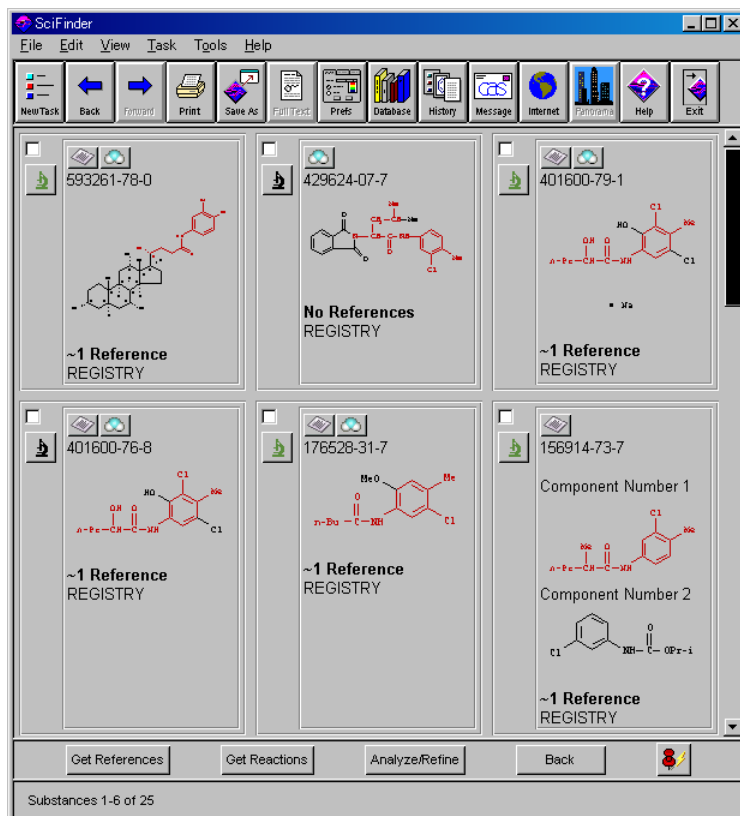
さらに詳細な条件を設定したい場合は、*Additional Options* ボタンをクリックします。

以下のオプションは、Preference Editor の Explore タブで表示されるものと同じです。



- ・ 検索結果に対して自動的に立体結合による Analyze を実行したい場合は③をチェックします。  
(Analyze については後述します)
- ・ 多成分物質を検索対象に含める場合には④をチェックします。
- ・ 合金や配位化合物など、⑥に分類されているような物質を回答中に含める場合には⑤をチェックします。
- ・ 回答中に含める物質を選択するには、⑥のそれぞれの分類にチェックします。
- ・ Additional Options の設定を全て解除する場合には *Remove Options* をクリックします。

*OK* をクリックすると、SciFinder ウィンドウに部分構造検索による回答物質と、それぞれの文献の概数が表示されます。

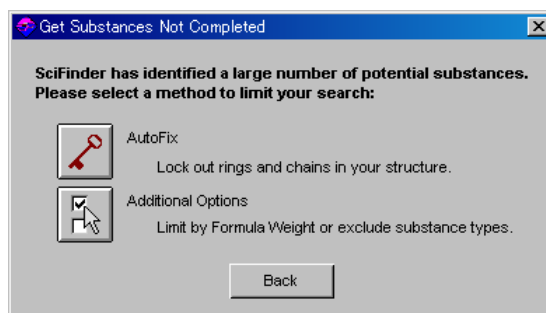


回答中の構造図では、ヒットした部分構造が赤くハイライトされます。回答は、デフォルトの形式および順序で表示されます。表示形式を変更するには、View メニューから選択するか、Preferences Editor の Display タブでデフォルトを変更します。

物質の詳細情報を見るには、**顕微鏡**アイコンをクリックします。また、**Get References** で関連する文献の検索を行うことと、上部にあるボタンで関連情報を表示することができます。詳細については、第 II 章をご覧ください。

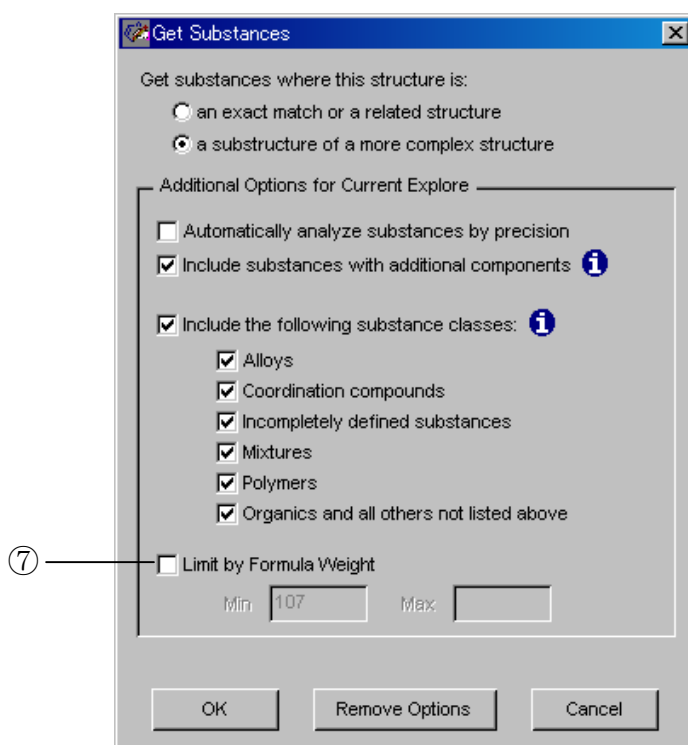
## 検索が実行できない場合

作図した構造が一般的すぎる場合、**Get Substances** を実行すると Get Substances Not Completed ダイアログボックスが表示されます。



**Autofix** ボタンをクリックすれば、質問式を限定することができます。 **Autofix** ボタンをクリックすることにより、すべての環の縮合が禁止され、またすべての鎖は、鎖のみの結合に限定されます。これは、Lock Out Rings ツールを利用したのと同様の結果になります。これらの指定を行ったあとに、再度 **Get Substances** を実行します。

もしくは、 **Additional Options** をクリックします。以下のオプションが表示されます。



ここで表示されるオプションは、最初に **Get Substances** ボタンをクリックした時とほとんど同じですが、⑦が追加されています。

⑦の **Limit by Formula Weight** オプションにより、指定した分子量の範囲の物質に回答を限定することができます。 **Min** のボックスには構造式から計算された数字が自動的に入力されています。 **Min** および **Max** を希望の数字に変えてください。ただし多成分物質の一つの成分が指定した分子量の範囲にある物質も回答として含まれます。

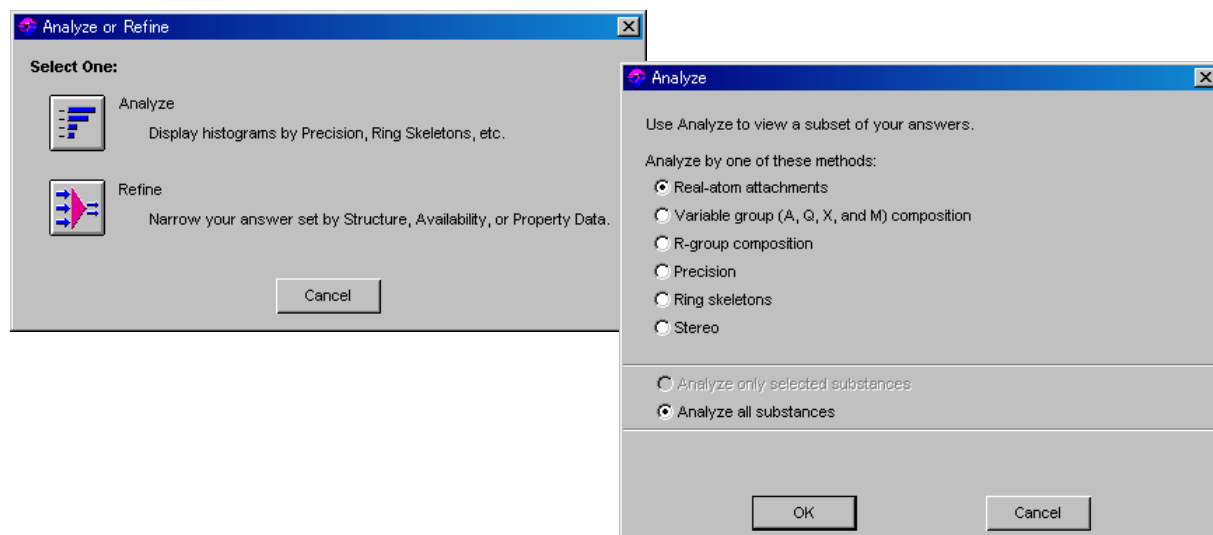
**Additional Options** の設定を全て解除する場合には **Remove Options** をクリックします。

指定した条件の下で検索を実行するには、 **OK** をクリックします。

## 回答の Analyze

部分構造検索の結果に限り、得られた回答を Preview と類似の機能により、解析・限定することができます。

回答を解析・限定するには、**Analyze/Refine** ボタンをクリックし、続く Analyze or Refine ダイアログボックスで、**Analyze** をクリックします。Analyze ダイアログボックスが表示されます。



各オプションの定義は、以下のとおりです。

オプション	結果
Real-atom attachments	原子上の置換基による解析・限定
Variable group (A, Q, X, and M) composition	可変グループの構成原子による解析・限定
R-group composition	R グループ構成原子による解析・限定
Precision	検索精度による解析・限定
Ring skeletons	環の骨格, 原子, 結合による解析・限定
Stereo	立体構造による解析・限定

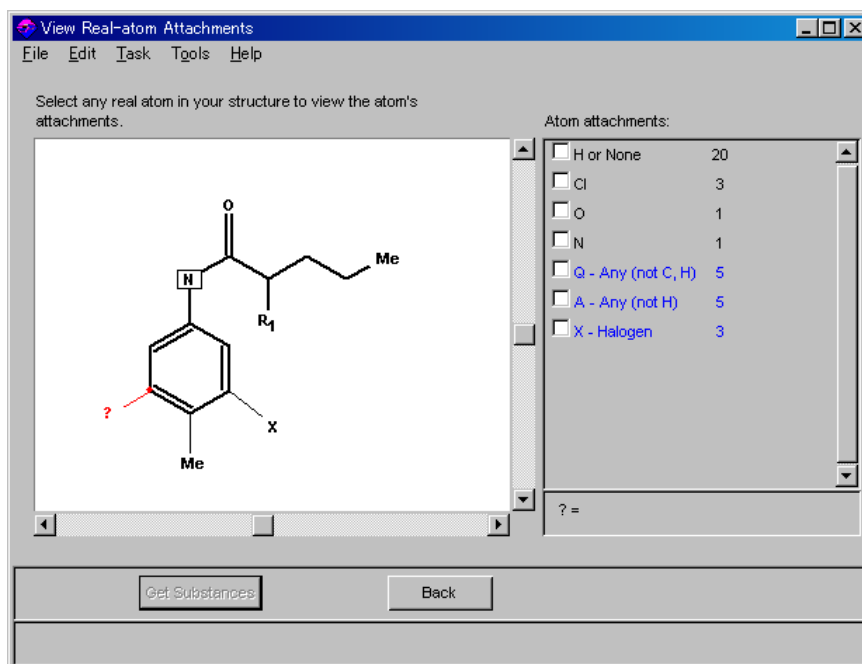
すべての回答物質を Analyze することも、回答の一部を Analyze することもできます。一部のみを Analyze する場合は、検索結果画面にもどり、Analyze したい物質の左のチェックボックスをクリックします。再度 **Analyze/Refine** をクリックし、Analyze ダイアログボックスを表示させます。**Analyze only selected substances** が選択されていることを確認し、**OK** をクリックします。



## 原子上の置換基の Analyze

回答中の特定原子の置換基で Analyze するには、Analyze ダイアログボックスの *Real-atom attachments* オプションを選択し、ついで *OK* をクリックします。View Real-atom Attachments ダイアログボックスが開き、入力した構造が表示されます。

置換基を確認したい原子ノードにカーソルを合わせてクリックすると、原子がハイライトされ、傍らに ? マークが現れます。ダイアログボックスの Atom attachments セクションには、回答中における指定部位の置換原子の一覧が表示されます。原子は黒、可変原子は青で示されます。



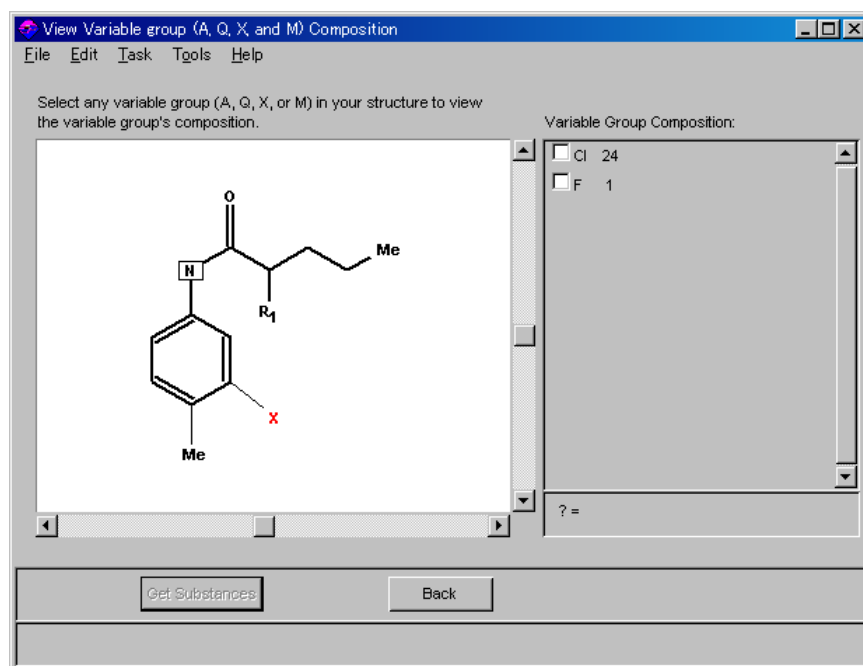
特定の置換基を有する物質に限定したい場合は、Atom attachments から原子を選択し、*Get Substances* をクリックします。

*Back* をクリックすると、Analyze ダイアログボックスに戻り、他の Analyze オプションが利用できます。

## 可変グループ (A, Q, X, M) の Analyze

回答中の可変ノードの原子で Analyze するには, Analyze ダイアログボックスの *Variable group (A, Q, X, and M) composition* オプションを選択します. View Variable Group (A, Q, X, and M) Composition ダイアログボックスが開きます.

Analyze したい可変原子にカーソルを合わせてクリックすると, 選択した可変原子がハイライトされ, それを構成する原子の一覧が Variable Group Composition セクションに表示されます.



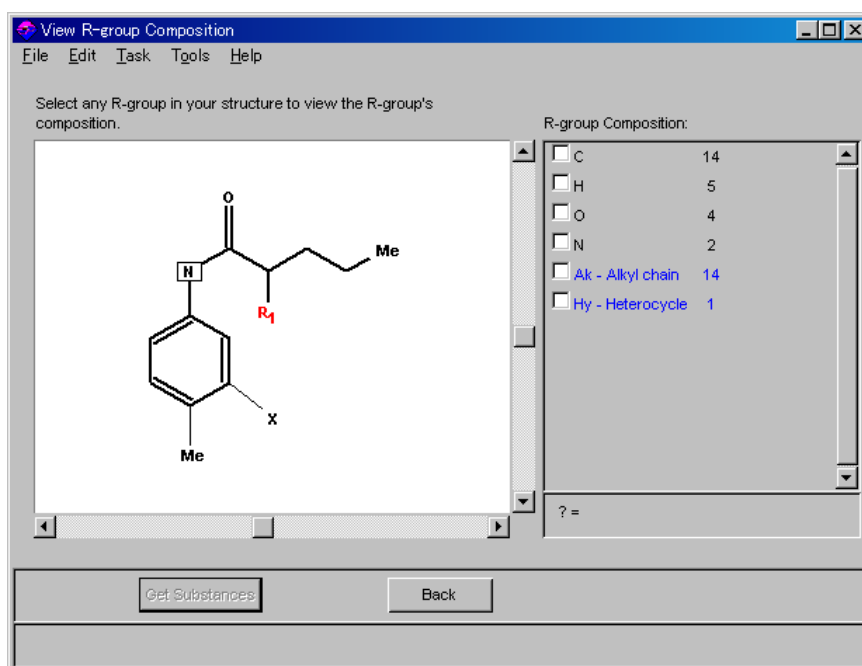
特定の原子を有する物質に限定したい場合は, Variable Group Composition から原子を選択し, *Get Substances* をクリックします.

*Back* をクリックすると, Analyze ダイアログボックスに戻り, 他の Analyze オプションが利用できます.

## R グループの構成原子の Analyze

回答中の R グループの構成原子で Analyze するには、Analyze ダイアログボックスの *R-group composition* オプションを選択します。View R-group Composition ダイアログボックスが開きます。

Analyze したい R グループにカーソルを合わせてクリックすると、選択した R グループがハイライトされ、それを構成する原子の一覧が R-Group Composition セクションに表示されます。



特定の原子を有する物質に限定したい場合は、R-Group Composition から原子を選択し、*Get Substances* をクリックします。

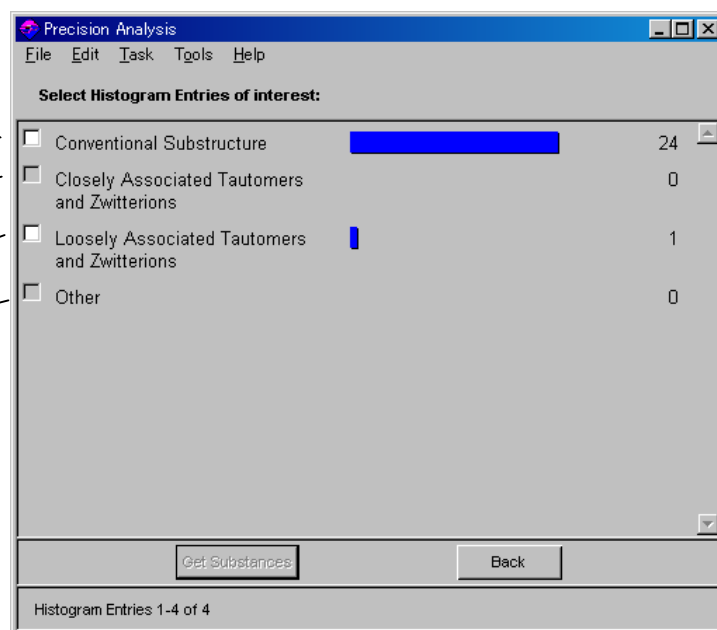
*Back* をクリックすると、Analyze ダイアログボックスに戻り、他の Analyze オプションが利用できます。

## 検索精度による Analyze

検索結果は、部分構造検索の解釈の広さにより解析・限定することができます。

検索の精度で Analyze するには, Analyze ダイアログボックスの *Precision* オプションを選択します. Precision Analysis ダイアログボックスが開きます.

- ・従来の構造検索で得られていた回答
- ・互変異性体や双性イオンを狭義に含めた回答
- ・互変異性体や双性イオンを広義に含めた回答
- ・その他の回答



特定のカテゴリに属する物質に限定したい場合は、カテゴリチェックを入れ、*Get Substances* をクリックします。

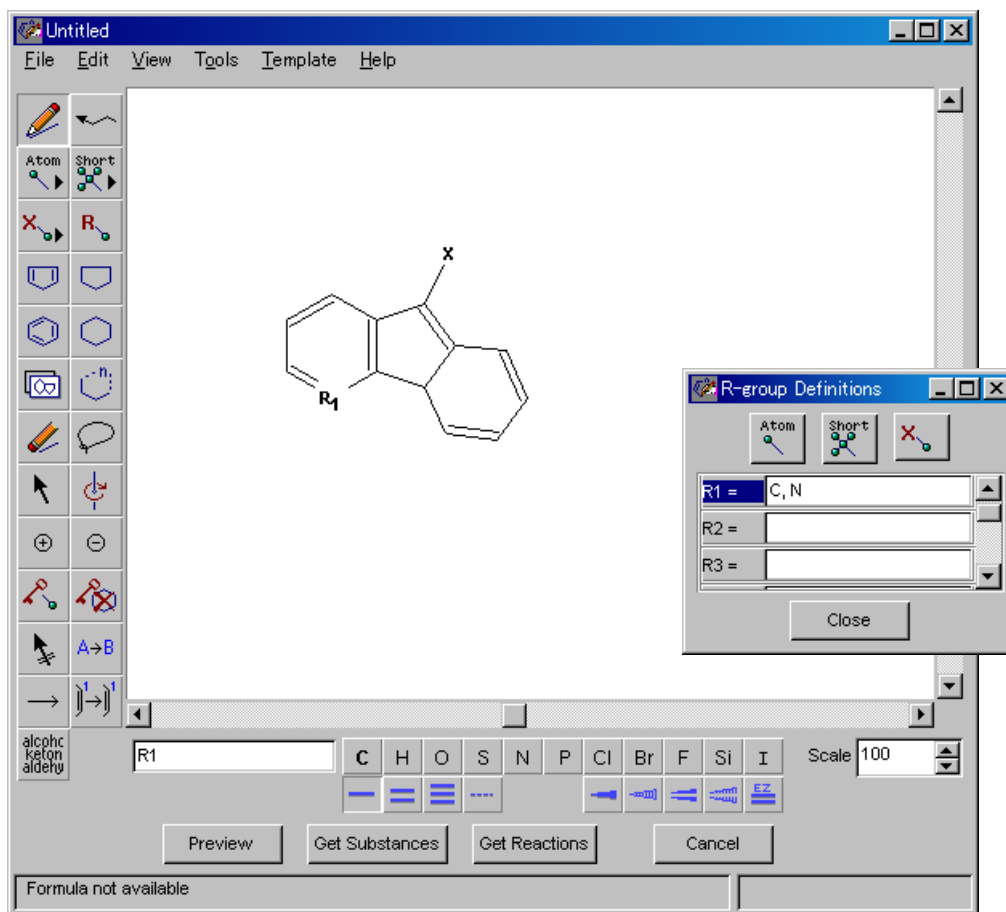
*Back* をクリックすると、Analyze ダイアログボックスに戻り、他の Analyze オプションが利用できます。

## 環構造による Analyze

検索結果は、以下のような環の構造により解析・限定することができます。

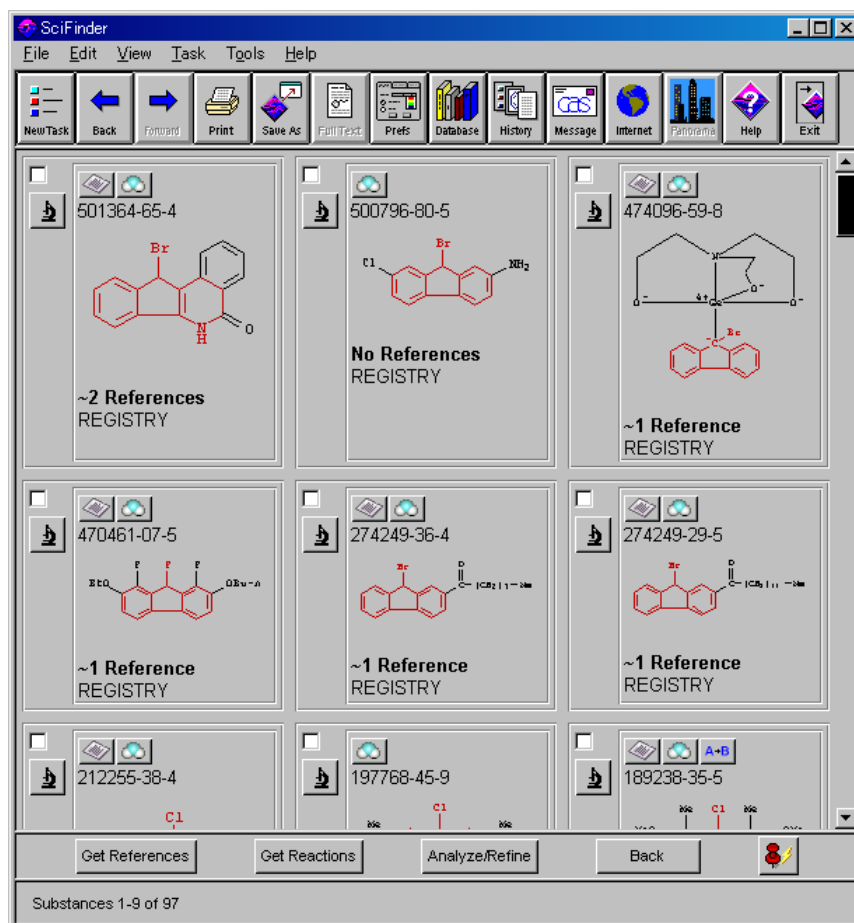
- 骨格のみ
- 骨格と構成元素
- 骨格と構成元素と結合

この例では、以下の構造を使います。



この部分構造で検索をすると、他の置換基がついた物質や他の環が縮合した物質が得られます。置換や縮合を制限したい場合は、*Lock Out Rings* ツールや *Lock Out Substitution* ツールを使います。

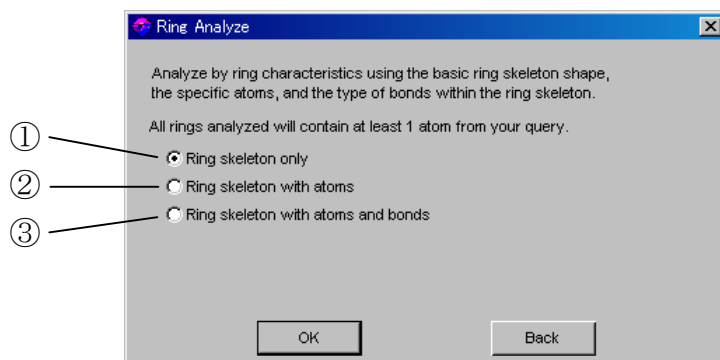
部分構造検索を実行するには、*Get Substances* をクリックした後、*a substructure of a more complex structure* を選択し、続いて *OK* をクリックします。



回答中では、質問式にマッチする部分は赤くハイライトされています。環構造による Analyze では、回答を特定の環骨格ごとに分類します。

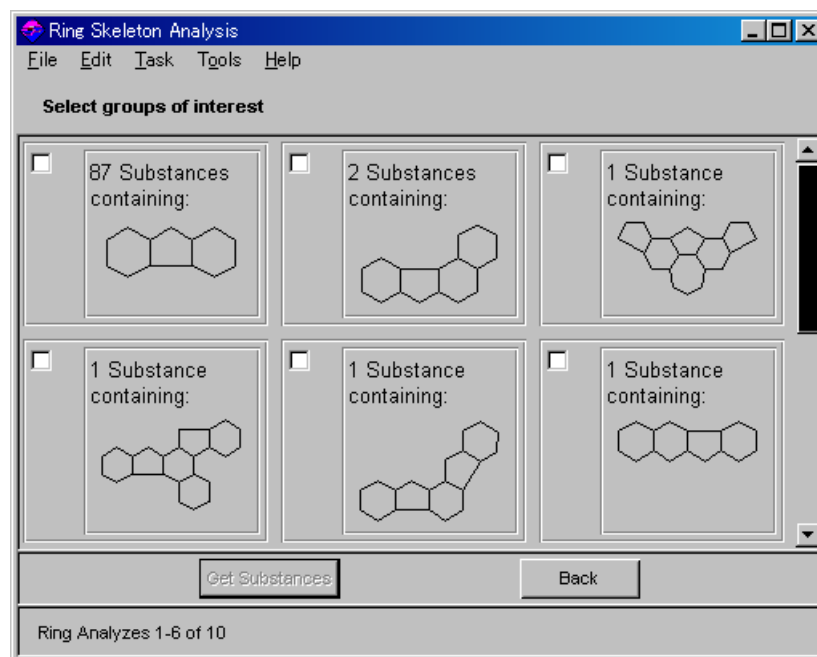
**Analyze/Refine** ボタンをクリックし、続く画面で **Analyze** をクリックします。回答の一部のみを Analyze する場合は、Analyze したい物質の左のチェックボックスをクリックしたのちに、**Analyze Substances** をクリックします。Analyze ダイアログボックスが表示されますので、**Ring skeletons** オプションを選択し、すべての回答を Analyze するか、一部のみかを選び、続いて **OK** をクリックします。

Ring Analyze ダイアログボックスが開きますので、オプション①～③を選択し、**OK** をクリックします。

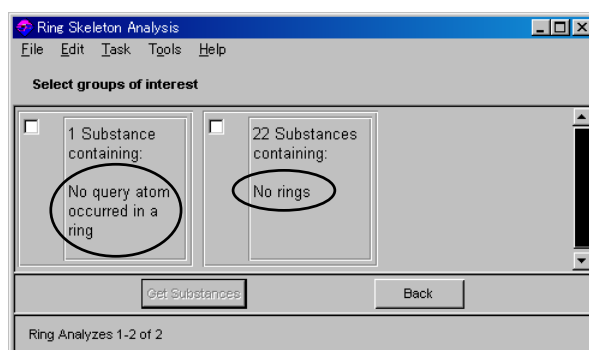


## ① 環骨格のみによる分類

環骨格のみの分類では、構成元素や結合を考慮することなく、骨格のみで環进行分类します。Ring Analyze ダイアログボックスで *Ring skeleton only* を選択し、OK をクリックします。Ring Skeleton Analysis ダイアログボックスが開き、作図した構造と少なくとも一つの元素を共有する骨格が頻度の多い順に表示されます。



まれにですが、骨格の構造が表示できない場合があります、その場合は “no ring image available” と表示されます。その他、以下のように表示される場合があります。



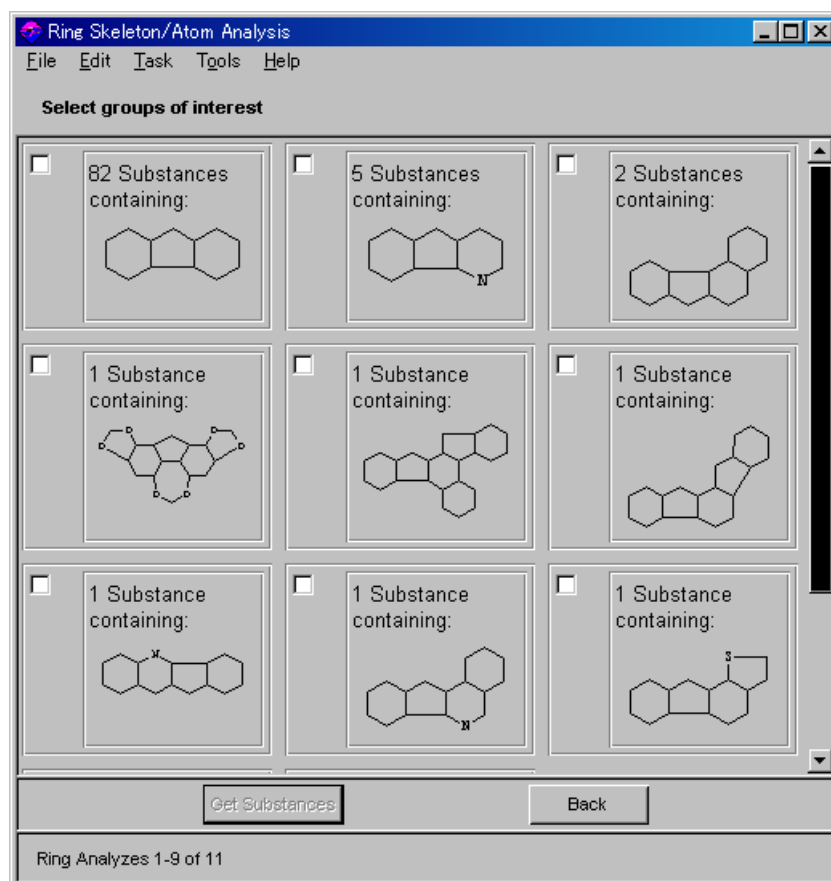
- No query atom occurred in a ring : 回答中に環構造は存在するが、作図した構造と共通の元素を持つ環はない
- No Rings : 環を持たない物質
- Other : 環骨格の解析が終了しなかった物質

特定の骨格を有する物質のみに限定したい場合は、チェックボックスをクリックしたのち、*Get Substances* をクリックします。

*Back* をクリックすると、Ring Analyze ダイアログボックスに戻り、他のオプションが利用できます。

## ② 環骨格と構成元素による分類

環骨格と構成元素による分類では、結合を考慮することなく、骨格とその構成元素で環を分類します。Ring Analyze ダイアログボックスで *Ring skeleton with atoms* を選択し、OK をクリックします。Ring Skeleton/Atom Analysis ダイアログボックスが開き、作図した構造と少なくとも一つの元素を共有する環骨格が構成元素とともに表示されます。



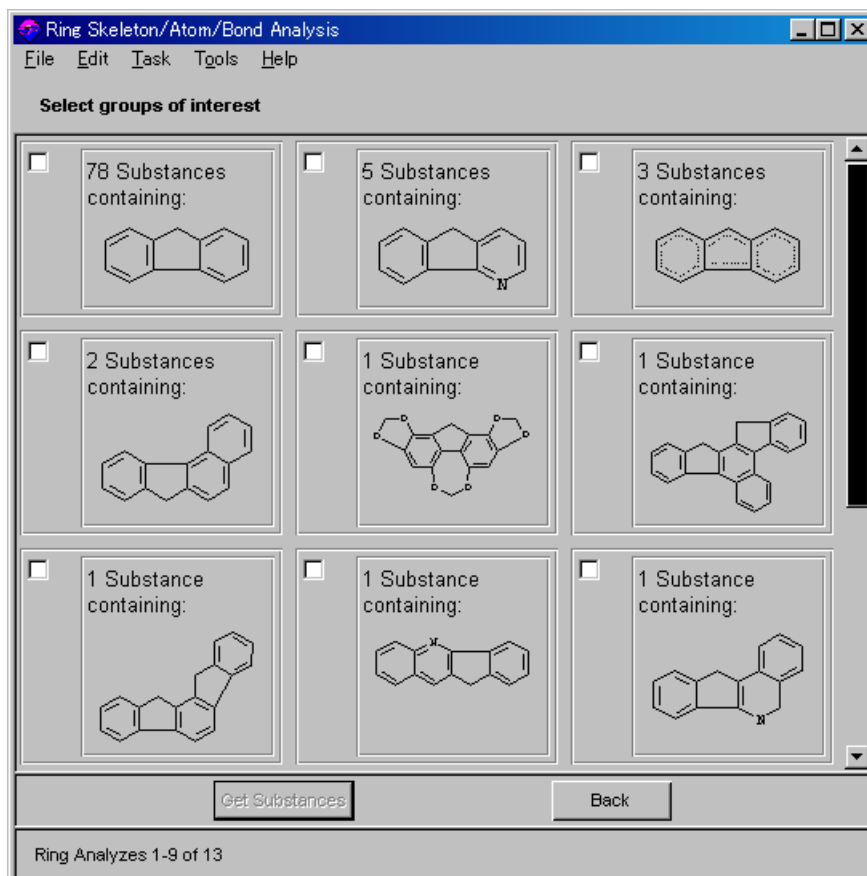
特定の構成元素からなる骨格を有する物質のみに限定したい場合は、チェックボックスをクリックしたのち、*Get Substances* をクリックします。

*Back* をクリックすると、Ring Analyze ダイアログボックスに戻り、他のオプションが利用できます。



### ③ 環骨格と構成元素と結合による分類

環骨格と構成元素と結合による分類では、回答を特定の骨格/構成元素/結合からなる環に分類します。Ring Analyze ダイアログボックスで *Ring skeleton with atoms and bonds* を選択し、*OK* をクリックします。Ring Skeleton/Atom/Bond Analysis ダイアログボックスが開き、作図した構造と少なくとも一つの元素を共有する環骨格が構成元素/結合とともに表示されます。



特定の構成元素および結合からなる骨格を有する物質のみに限定したい場合は、チェックボックスをクリックしたのち、*Get Substances* をクリックします。

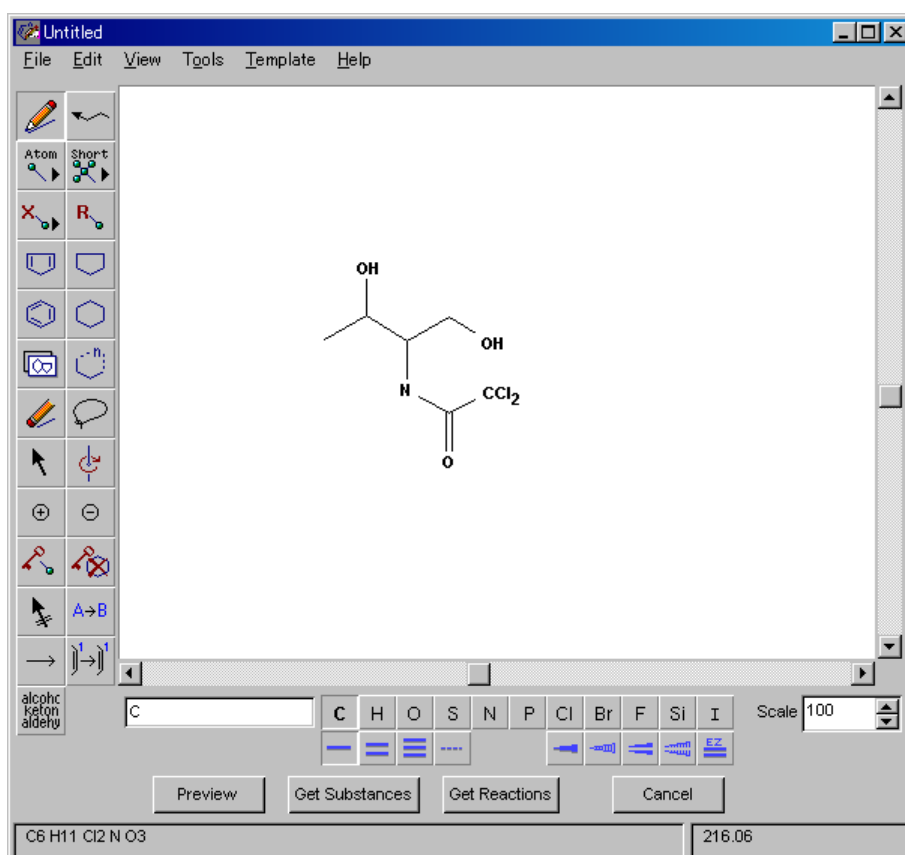
*Back* をクリックすると、Ring Analyze ダイアログボックスに戻り、他のオプションが利用できます。

## 立体構造による Analyze

検索結果は、次の立体構造に基づき解析・限定することができます。

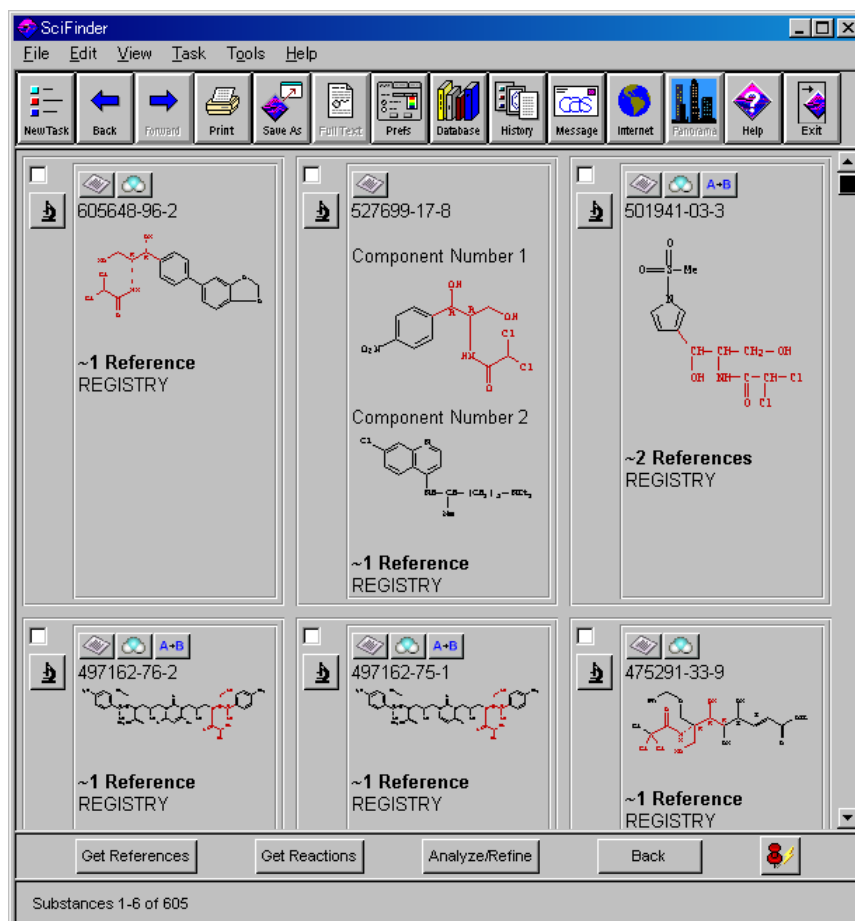
- 立体情報をもつ
  - 絶対配置が完全に一致
  - 鏡像異性体
  - 相対配置が一致
  - 二重結合回りの配座が一致
  - 絶対配置は一致しないが立体情報を持つ
- 立体情報をもたない

この例ではまず、以下の構造を使います。



この部分構造で検索をすると、他の置換基がついた物質や他の環が縮合した物質も回答に含まれます。置換や縮合を制限したい場合は、*Lock Out Rings* ツールや *Lock Out Substitution* ツールを使います。

部分構造検索を実行するには、*Get Substances* をクリックした後、*a substructure of a more complex structure* を選択し、続いて *OK* をクリックします。

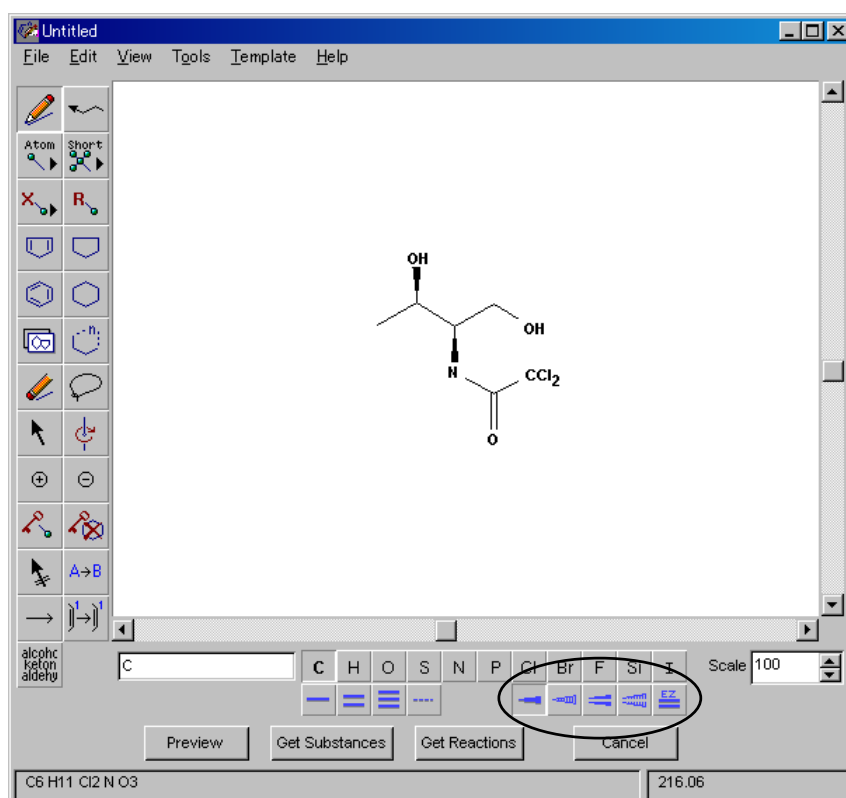


回答中では、質問式にマッチする部分は赤くハイライトされています。この状態から立体構造による Analyze を実行すると、回答が立体情報をもつかどうかのみで分類されます。

**Analyze/Refine** ボタンをクリックし、続く画面で **Analyze** をクリックします。回答の一部のみを Analyze する場合は、Analyze したい物質の左のチェックボックスをクリックしたのちに、**Analyze Substances** をクリックします。Analyze ダイアログボックスが表示されますので、**Stereo** オプションを選択し、すべての回答を Analyze するか、一部のみかを選び、続いて **OK** をクリックします。Stereo Analysis ダイアログボックスが表示されます。

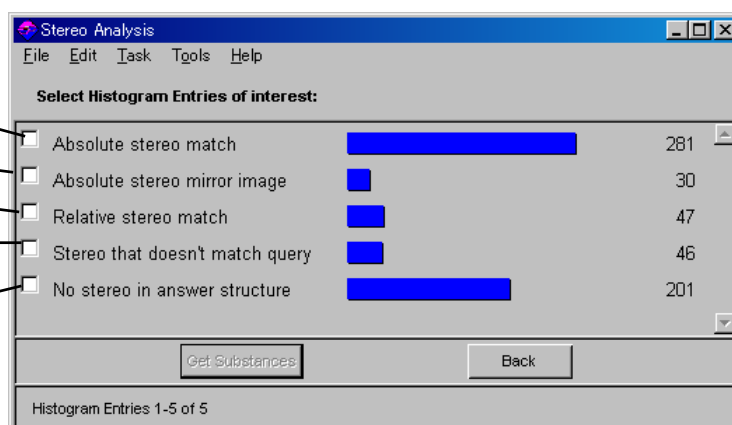
立体構造を持つ物質と持たない物質とに分類されるので、いずれかのチェックボックスをクリックし、**Get Substance** をクリックします。選択した物質のみが選択的に表示されます。

一方，結合パレットを使って構造を作図したのち検索を実行すると，より詳しい立体情報に基づいて分類されます．例えば以下のように構造作図した場合

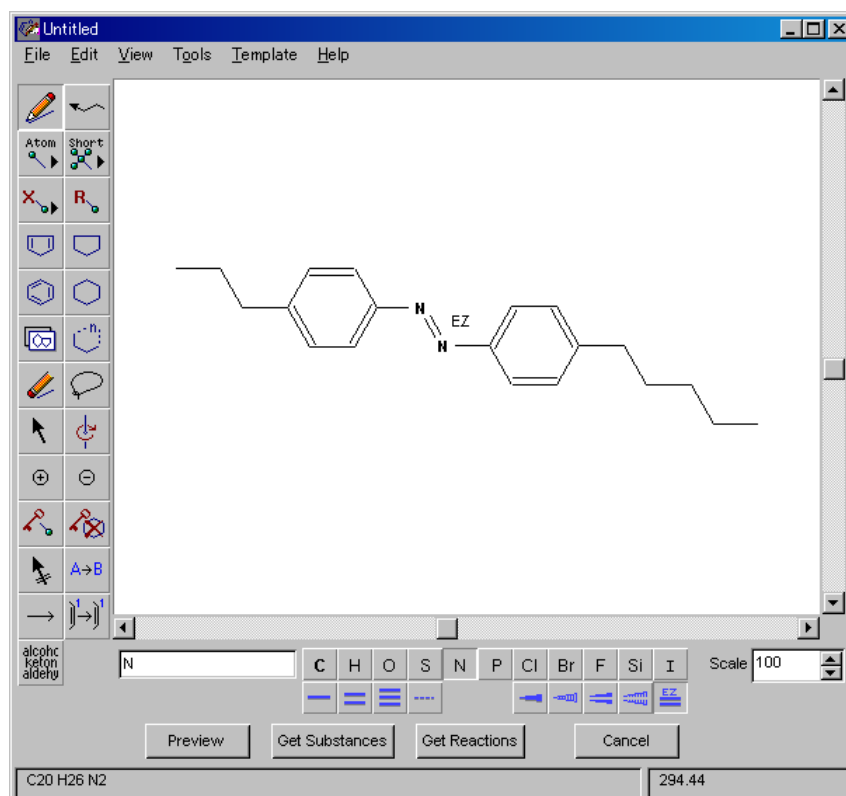


*Get Substances* をクリックして部分構造検索を実行すると，最初から Stereo Analysis ダイアログボックスが表示されます．このとき，以下のように分類されます．

- ① 絶対配置が完全に一致
- ② 鏡像異性体
- ③ 相対配置が一致
- ④ 絶対配置は一致しないが  
立体情報を持つ
- ⑤ 立体情報を持たない

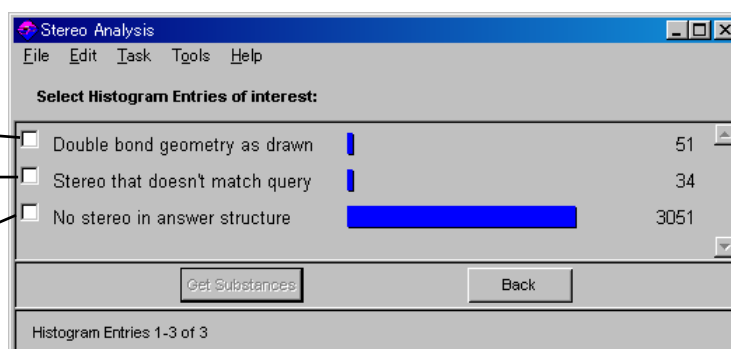


幾何異性体の場合は立体結合パレットを使って二重結合を作図します。二重結合の横に “EZ” という文字が付与されます。



*Get Substances* をクリックすると、最初から Stereo Analysis ダイアログボックスが表示されます。このとき、以下のように分類されます。

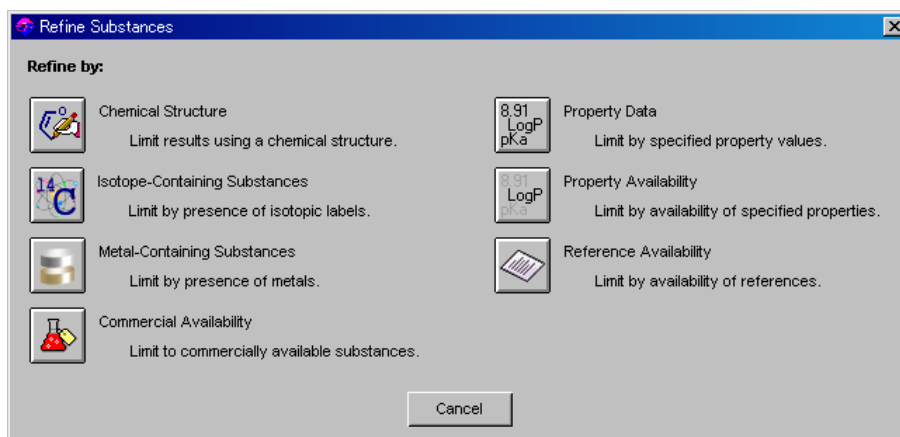
- ① 二重結合の幾何異性が一致
- ② 二重結合の幾何異性が一致  
していない
- ③ 立体情報を持たない



## 回答の絞り込み (Refine)

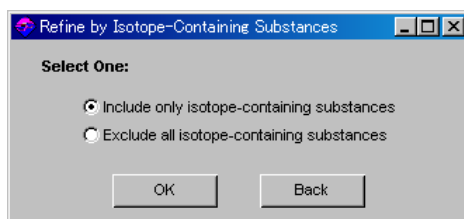
回答件数が多い場合は、Refine 機能により回答を限定することができます。

回答を限定するには、*Analyze/Refine* ボタンをクリックし、続く画面で *Refine* をクリックします。Refine Substances ダイアログボックスが表示されます

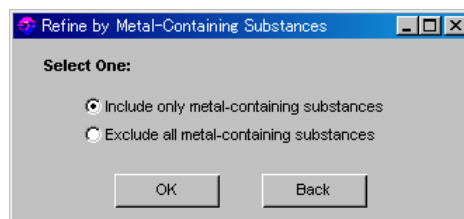


① *Chemical Structure* を選択すると、作図画面が開きますので、置換基を付けたり、別のフラグメントを追加したりした後に、*Get Substances* をクリックします。すると、加えた条件に一致した物質だけに絞り込まれます。「特定の構造を含むがどこに置換していてもよい」といった条件で回答を絞り込む場合は、前の作図画面をクリアした上で、その構造だけを作図し、*Get Substances* をクリックします。

② *Isotope-Containing Substances* を選択すると、同位体の有無による限定ができます。



③ *Metal-Containing Substances* を選択すると、金属原子の有無による限定ができます。



④ *Commercial Availability* を選択すると、市販カタログ収載物質だけに限定できます。

- ⑤ **Property Data**を選択すると、Refine by Property ダイアログボックスが表示されます。  
(部分構造検索ご契約の方のみ)

Hydrogen Acceptors	構造中の水素結合受容基の数
Hydrogen Donors	構造中の水素結合供与基の数
Molecular Weight	分子量
LogP	オクタノール/水分配係数の対数値
Freely Rotatable Bonds	回転可能な結合数
Bioconcentration Factor	生物濃縮係数
Boiling Point	沸点 (°C)
Enthalpy of Vaporization (*1)	蒸発エンタルピー (kJ/mol)
Flash Point	引火点 (°C)
Koc (Organic Carbon Adsorption Coefficient)	有機炭素の吸着係数
LogD	pH を考慮したオクタノール/水分配係数の対数値
Molar Solubility (*2)	水へのモル溶解度 (mol/L)
pKa (=−LogKa) (*2)	Ka：酸塩基解離定数
Vapor Pressure (*2)	蒸気圧 (Torr)
Melting Point	融点 (°C)

\*1 760 Torr で計算

\*2 25°Cで計算

限定項目を選び、数値を入力または選択します。複数の物性を選択した場合は、すべてを満足する物質のみが回答として得られます。

*Include substances with no value for the specified properties* にチェックをつけると、指定した物性データを含まない物質も回答として残ります。物性値を持つ物質のみに限定したい場合は、このチェックをはずします。

Refine by Property ダイアログボックスでは、最初から4種の物性（構造中の水素結合受容体及び水素結合供与体、分子量、LogP 値）が選択されています。これらの物性値は Pfizer 社の Christopher A. Lipinski 博士らによって提唱されたパラメータです(\*)。これらの条件で限定された物質は、経口医薬品の候補化合物として医薬品業界で広く認められています。これらの数値は、Preference Editor の Analyze タブに入力されている値がデフォルトになっています。

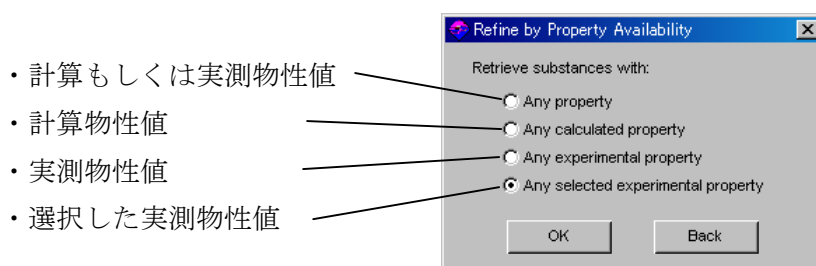
\* C. A. Lipinski; F. Lombardo; B. W. Dominy; P. J. Feeney, *Adv. Drug Delivery Rev.*, **23**, 3–25 (1997).

デフォルトを変更するには、**Change Preferences** ボタンをクリックします。クリックしなければ、入力した物性はこのときだけ有効になります。

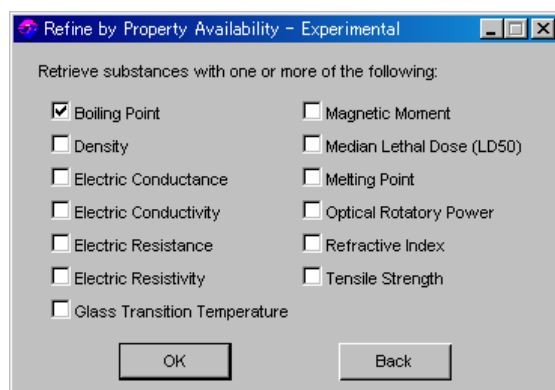
Preference Editor の Analyze タブが開き、Refine by Property の部分に入力した物性値が自動的に入ります。さらに他の条件を指定することもできます。この条件を新しいデフォルトに設定するには、**OK**をクリックします。

すべての条件を入力後、**OK**をクリックして、物性による絞り込み検索を実行します。

⑥ **Property Availability**を選択すると、物性値の存在の有無による限定ができます。

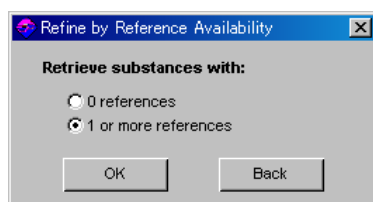


Any selected experimental property で限定すると、更に、沸点・融点などの実測物性値の有無による絞り込み検索ができます。



Boiling Point	沸点 (°C)
Density	密度 (g/cm <sup>3</sup> )
Electric Conductance	コンダクタンス (S)
Electric Conductivity	電気伝導率 (S/cm)
Electric Resistance	電気抵抗 (Ω)
Electric Resistivity	電気抵抗率 (Ω/cm)
Glass Transition Temperature	ガラス転移温度 (°C)
Magnetic Moment	磁気モーメント (μ <sub>B</sub> )
Median Lethal Dose (LD50)	50%致死量 (mg/kg)
Melting Point	融点 (°C)
Optical Rotatory Power	旋光度
Refractive Index	屈折率
Tensile Strength	引張強度 (MPa)

⑦ **Reference Availability**を選択すると、文献情報の有無による限定ができます。





## Spotfire DecisionSite による Analyze

SciFinder と同じパソコンに Spotfire DecisionSite for Lead Discovery がインストールされている場合、得られた回答は Spotfire DecisionSite で解析することができます。

### 部分構造検索の終了

部分構造検索を終了するには、File メニューから *New Task* を選択するか、メインメニューバーの *New Task* アイコンをクリックします。

SciFinder を終了するには、File メニューから *Exit SciFinder* を選択するか、メインメニューバーの *Exit* アイコンをクリックします。



## 第IV章 SciFinder の反応検索 (Reaction)

SciFinder の反応検索では、反応物/試薬および生成物の構造や含まれる官能基から反応を見つけることができます。反応物のみ、生成物のみの指定をすることも、双方を指定して反応を検索することもできます。反応ツールにより、反応サイトや原子同士のマッピングを指定することもできます。

この章では、SciFinder における反応検索について以下の例を用いて説明します。

- 化学構造
  - ー反応物/試薬または生成物のみの指定
  - ー反応物/試薬および生成物の指定
- 官能基グループ
  - ー官能基のみの検索
  - ー官能基と構造を組み合わせた検索

回答としては以下のような情報が含まれている場合があります。

- 作図した構造や官能基を含む反応
- 特定物質の合成方法
- 反応関与物質の販売元
- 反応関与物質の既存化学物質台帳情報や規制情報
- その反応を収録している文献や特許の書誌情報と抄録

反応検索では、Appendix A で説明されている構造検索における Smartsearch 機能は働きません。また、立体結合パレットを使って構造を作図しても構造異性体を区別して検索しません。

## 反応検索

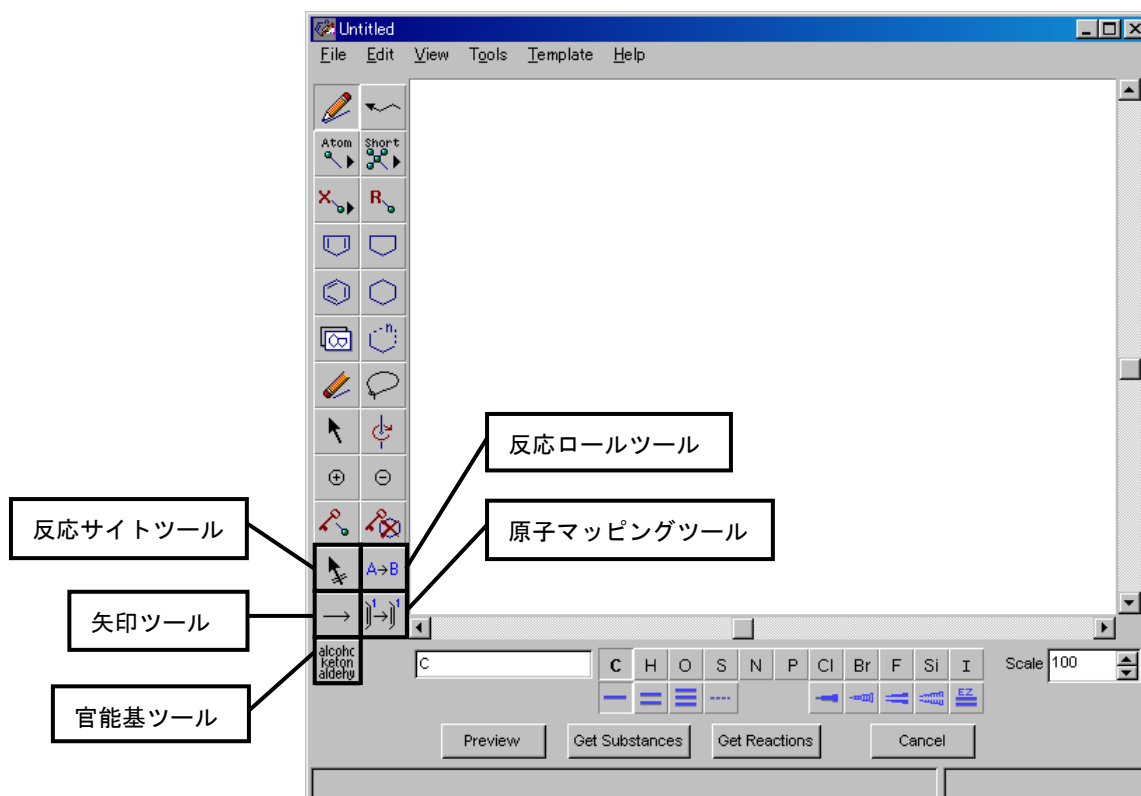
反応検索を開始するには、Task メニューの Explore から *Chemical Structure* を選択します。あるいは New Task ダイアログボックスから *Explore* を選択し、続くダイアログボックスで *Chemical Substances or Reaction* と *Chemical Structure* をそれぞれ選びます。

構造作図ウインドウ “Untitled” が開きます。

ラベルがついているのは、反応質問式作図用のツールです。作図用のツールの詳細な説明については、第 I 章をご覧ください。

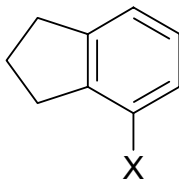
File メニューから *Open* を選択し、以前に作成した反応式ファイルを呼び出して利用することもできます。

反応検索で作図できる最大のノード数は 253 個、結合数は 1500 本です。

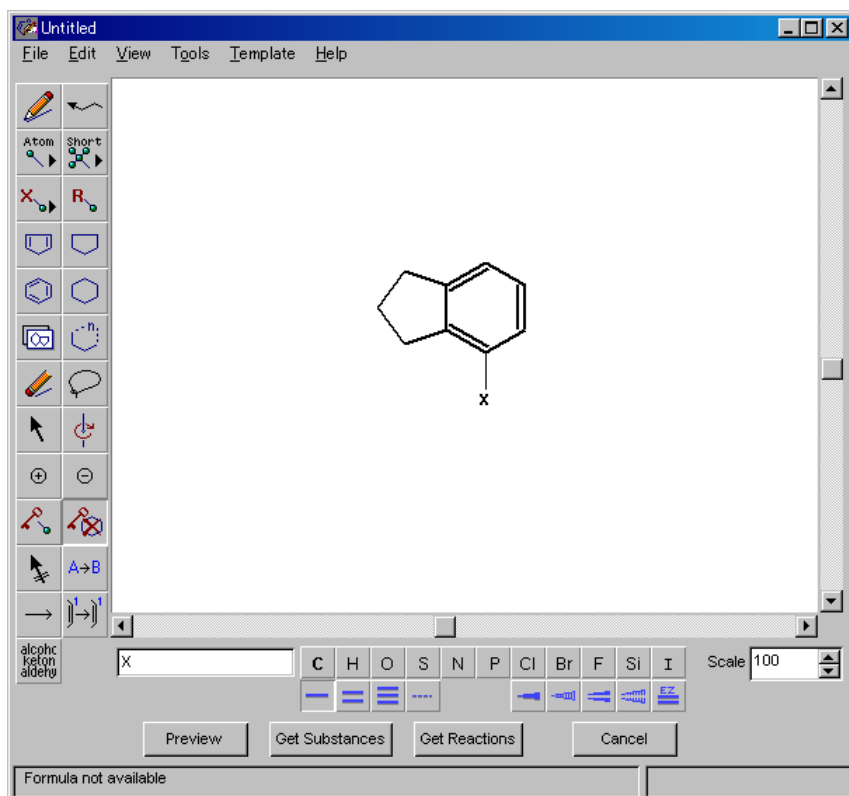


## 反応の片側からの検索

反応検索を実行するには、まず構造を作図します。この例では以下の構造から検索をします。

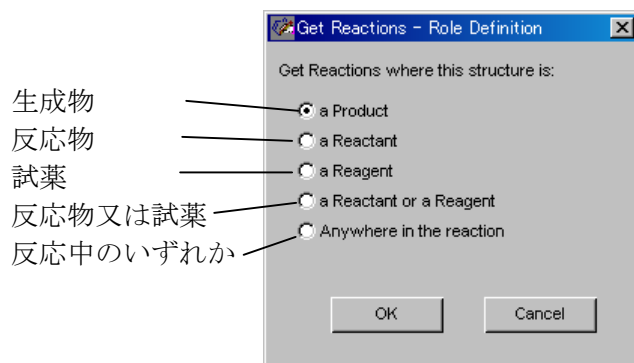


1. ベンゼン環ツールで、ベンゼン環を作図します。
2. シクロペンタン環ツールを選んだ後、ベンゼン環の左の結合でカーソルをクリックし、縮合環を作図します。
3. Xメニューツールから X (ハロゲン) を選択し、ベンゼン環の一つの炭素にカーソルを合わせ、鎖の長さ 1 だけドラッグします。
4. Lock Out Rings ツールを選択した後、環の結合の一カ所でクリックをします。環の縮合が禁止されます。

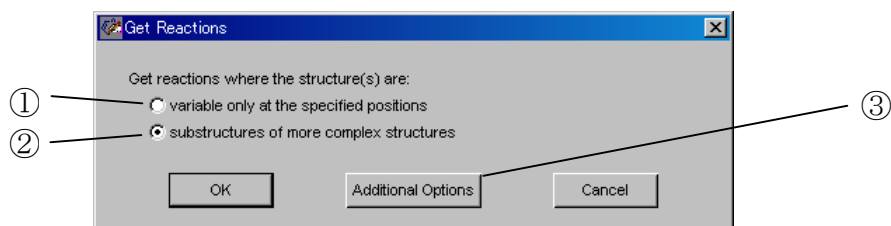


## 反応検索の実行

構造の作図が終了したら、**Get Reactions** をクリックします。Get Reactions - Role Definition ダイアログボックスが表示されます。作図した構造の反応ロール（役割）を選択します。



例として、ここでは **a Product**（生成物）を選択し、**OK** をクリックします。今度は Get Reactions ダイアログボックスが表示されます。



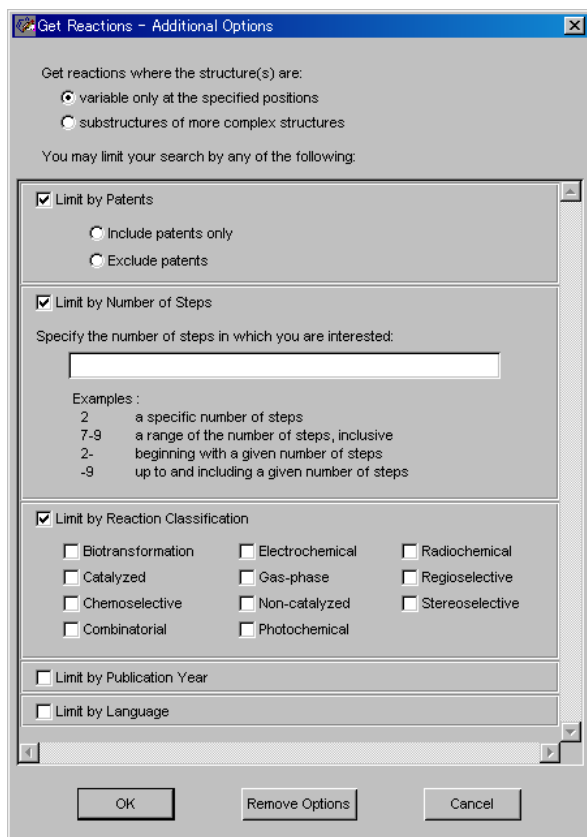
次のどちらかを選択します。

- ① 空いている置換位置は全て水素として検索
- ② あらゆる置換を許容して検索

ここでは② **substructures of more complex structures** を選び、**OK** をクリックします。

検索結果を特定のタイプに限定するには、③ **Additional Options** をクリックし、**You may limit your search by any of the following:** の設定を変更します（次頁）。限定には出展文献の種類、反応ステップ数、反応の種類、出展文献の発行年、出展文献の言語があります。**Additional Options** の設定を解除するには、**Remove Options** をクリックしてください。

検索を継続するには **OK** をクリックしてください。



## Reaction Classification (反応の種類)

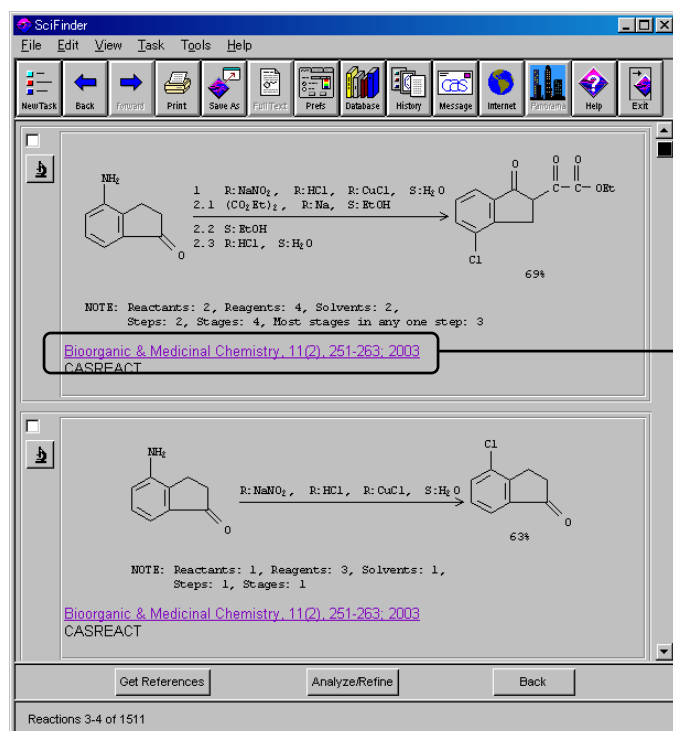
Biotransformation	生物学的
Catalyzed	触媒
Chemoselective	化学選択的
Combinatorial	コンビナトリアル
Electrochemical	電気化学
Gas-phase	気相
Non-catalyzed	無触媒
Photochemical	光化学
Radiochemical	放射化学
Regioselective	位置選択的
Stereoselective	立体選択的

SciFinder ウィンドウに、反応検索による回答が表示されます。回答は反応単位または文献単位で表示できます。回答表示の形式は **View** メニューの *All reactions* (反応単位での表示) または *One Reaction per Reference* (文献単位での表示) で選択してください。

反応単位での表示

文献単位での表示

## 反応単位での表示



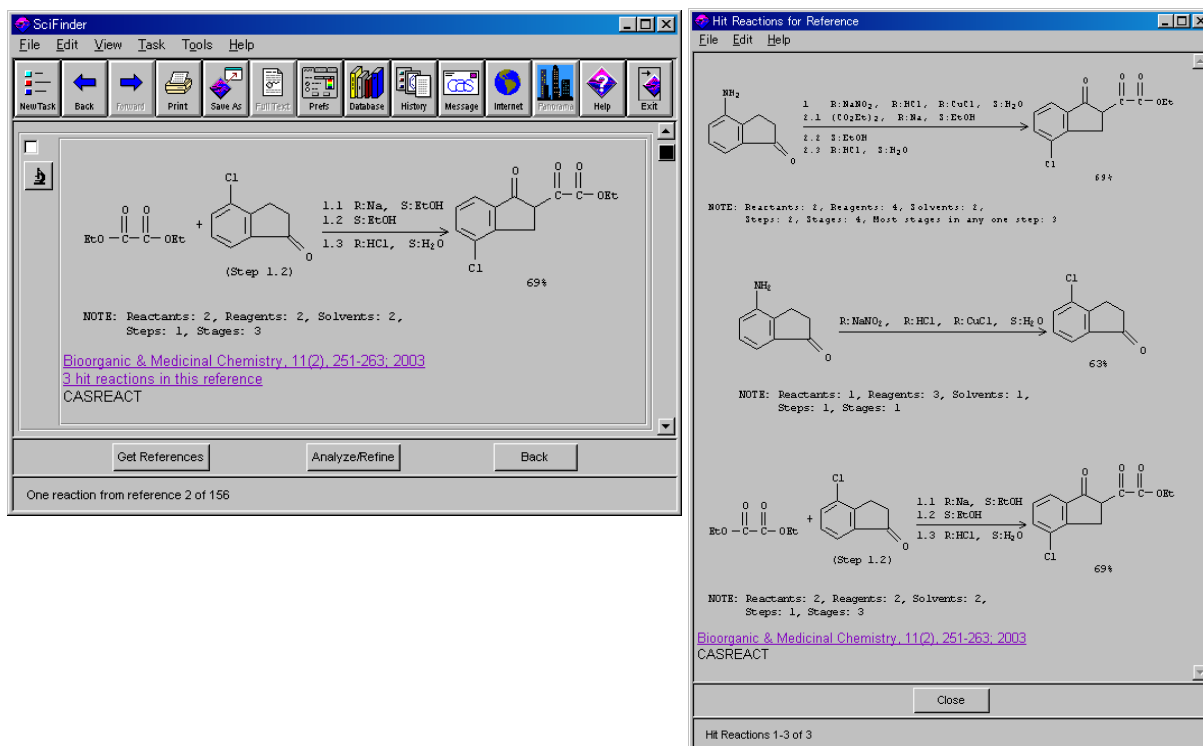
同一文献由来の反応は個別に表示されます。また、多段階反応のケースも含まれます。

反応の下にある出典をクリックすると、その文献の詳細が表示されます。

## 文献単位での表示

各文献でヒットした最初の反応が表示されます。

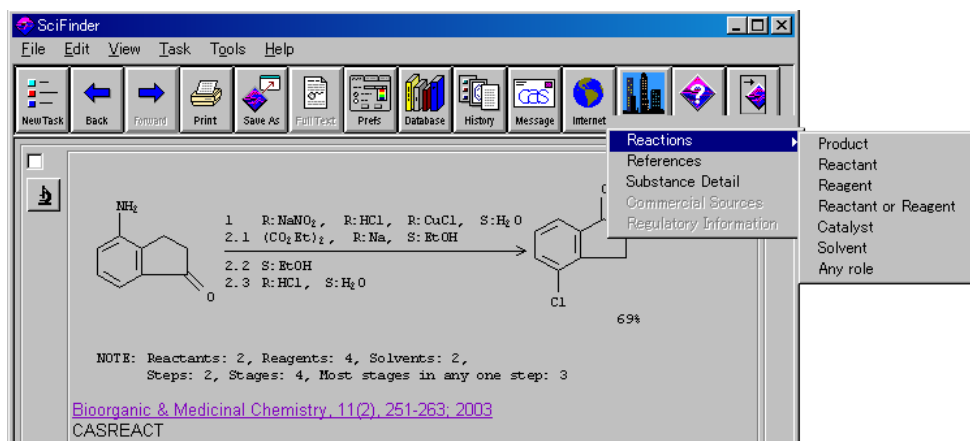
出展の下にある *#hit reactions in this reference* をクリックすると、Hit Reactions for Reference ウィンドウが開き、その文献に含まれるヒットしたすべての反応が表示されます。



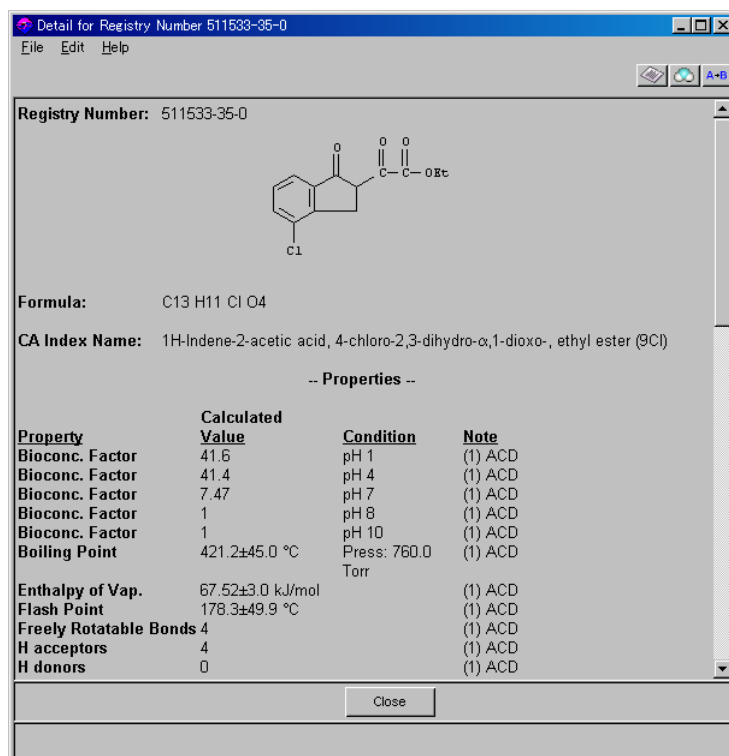


## 反応関与物質の情報

化学反応式中の物質の上にカーソルを置いてクリックすると、その物質に関するメニューが現れます（定額契約以外の方は次の Substance Detail が表示されます）。Reaction サブメニューからは、さらに直接ロールを指定した検索が可能です。



Substance Detail を選ぶと次のような化学物質の詳細が表示されます。



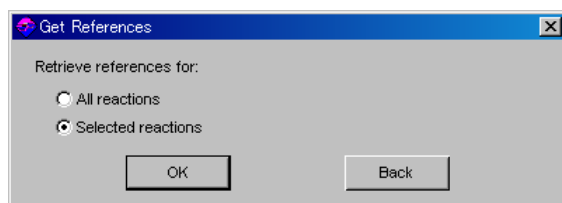
化学物質の情報はデフォルトの表示形式で表示されます。デフォルト表示形式は、Preference Editor の Display タブで変更できます。

File メニューから *Print...* または *Save As...* を選択すると、回答を印刷、保存することができます。

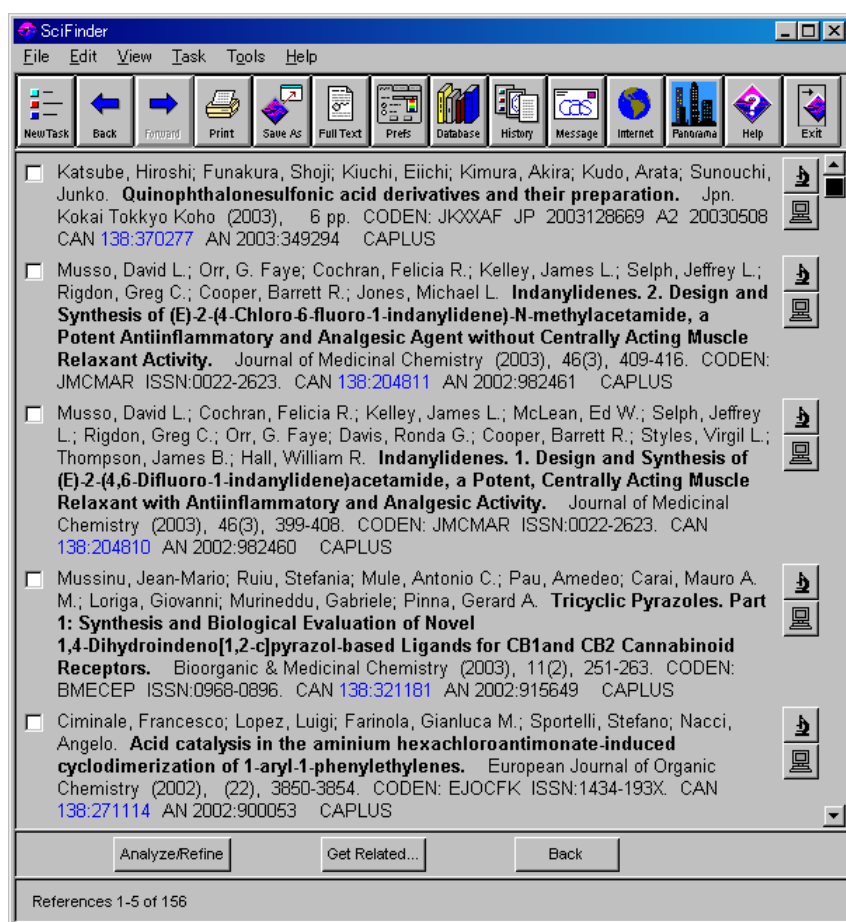
SciFinder に戻るには、*Close* をクリックします。

## 反応検索結果から文献へ

ヒットした反応が収録されている文献を表示するには、興味のある反応の左にあるチェックボックスをクリックしたのち、**Get References** をクリックします。Get References ダイアログボックスが表示されます。全ての反応に関する文献か選択した反応に関する文献かを選び、**OK** をクリックします。



SciFinder ウィンドウに文献リストが表示されます。



文献はデフォルトの形式と順序で表示されます。文献は、順序の並び替え (View メニューの **Reverse Order** コマンド)、詳細の表示 (顕微鏡アイコン)、フルテキストの表示 (**e-document** アイコン)、解析と限定 (**Analyze/Refine** ボタン)、関連情報の表示 (**Get Related...** ボタン) ができます。また回答の印刷、保存も可能です。

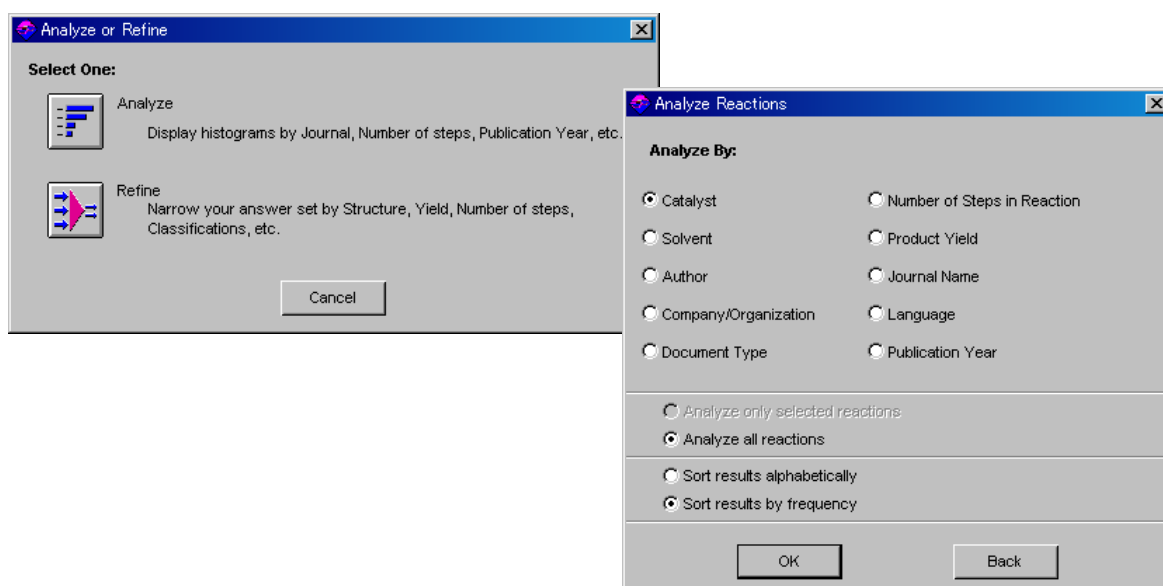
反応検索結果に戻るには、**Back** をクリックします。

## 反応の Keep

反応検索結果の回答が多数の場合、その一部だけの集合を作り直すことができます。残しておきたい反応にチェックを付け、Tools メニューから *Keep Reactions* を選択します。選んだ反応のみが表示されます。

## 回答の Analyze

回答を解析・限定するには、*Analyze/Refine* ボタンをクリックし、続く Analyze or Refine ダイアログボックスで、*Analyze* をクリックします。Analyze ダイアログボックスが表示されます。



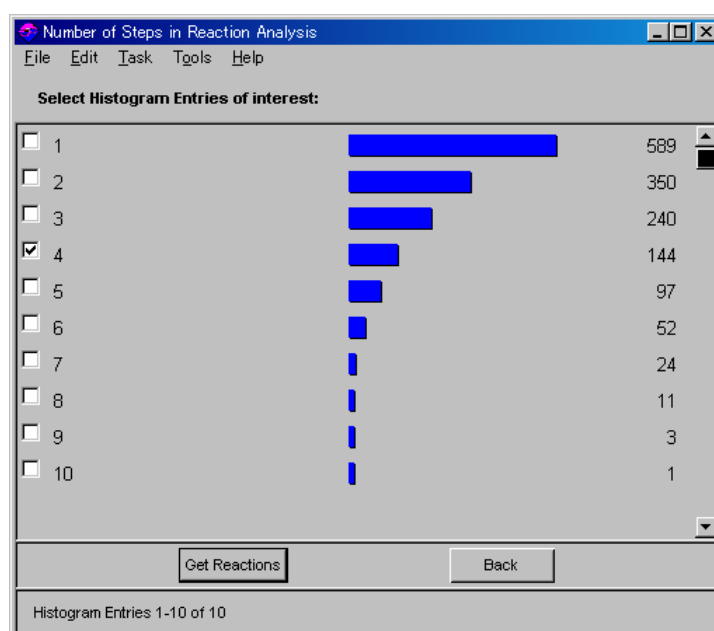
各オプションの定義は以下のとおりです。

オプション	結果
Catalyst	反応触媒による解析
Solvent	反応溶媒による解析
Number of Steps in Reaction	反応ステップ数による解析
Product Yield	反応の収率による解析
Author	出展文献の著者による解析
Company/Organization	出展文献の著者の所属による解析
Document Type	出展文献の種類による解析
Journal Name	出展文献の雑誌名による解析
Language	出展文献の言語による解析
Publication Year	出展文献の発行年による解析

また、解析結果の表示のオプションの定義は以下のとおりです。

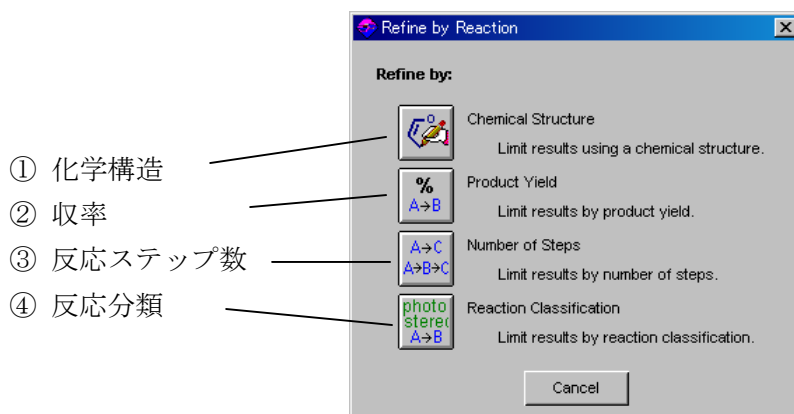
Analyze only selected reactions	選択した反応のみ解析
Analyze all reactions	すべての反応の解析
Sort results alphabetically	アルファベット順に解析結果を表示
Sort results frequency	回答頻度順に解析結果を表示

例えば Number of Steps in Reaction を選択すると以下のようなヒストグラムが表示されます。興味ある検索結果をチェックし *Get Reactions* アイコンをクリックすると、回答が更に限定できます。



## 回答の Refine

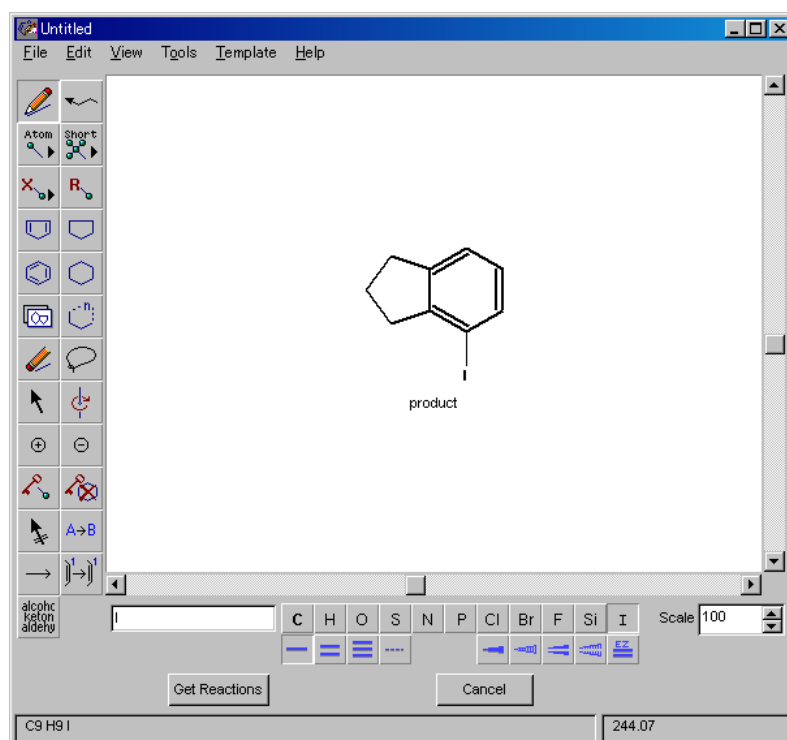
Refine 機能により、反応検索結果を限定することができます。 *Analyze/Refine* ボタンをクリックし、続く Analyze or Refine ダイアログボックスで、 *Refine* ボタンをクリックすると Refine by Reaction ダイアログボックスが表示されます。



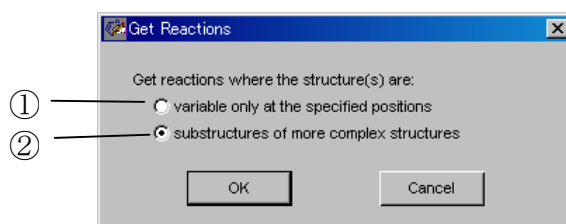
## ① 化学構造による Refine

化学構造による Refine により、元の反応質問式を構造で限定することができます。① *Chemical Structure* を選択します。構造作図画面が開き、元の反応質問式が表示されます。

たとえば、ハロゲンをヨウ素 (I) に限定するには、元素パレットから I を選択し、画面上の X にカーソルを置きクリックします。X が I に変わります。



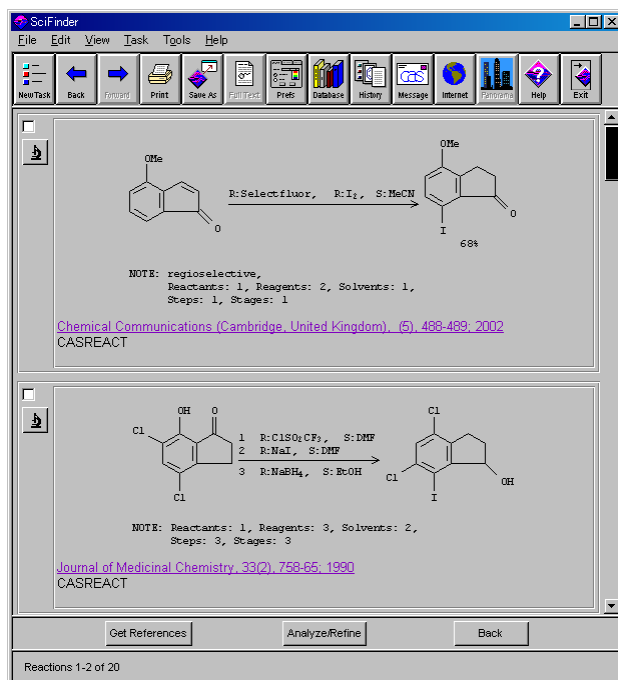
*Get Reactions* ボタンをクリックすると、Get Reactions ダイアログボックスが表示されます。



次のどちらかを選択します。

- ① 空いている置換位置は全て水素として検索
- ② あらゆる置換を許容して検索

ここでは② *substructures of more complex structures* を選び、*OK* をクリックします。



結果を確認した後に、**Back** をクリックし、さらに構造作図画面で **Cancel** をクリックすると、最初の反応検索結果に戻ります。そこで **Analyze/Refine** をクリックすると、別の限定オプションが利用できます。

## ② 反応収率による Refine

反応収率による Refine により、回答を特定収率または収率の範囲に限定することができます。

② **Product Yield** を選択します。Refine by Product Yield ダイアログボックスが表示されます。

Refine by Product Yield

Please enter the minimum and maximum product yield values.

0 Minimum product yield.

100 Maximum product yield.

☐ Include reactions that do not have yield data.

OK Back

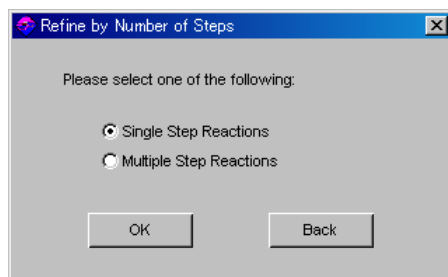
最低収率および最高収率を指定します。収率情報がない反応もありますので、それらも回答に含めたい場合は、**Include reactions that do not have yield data** にチェックを付け、**OK** をクリックします。収率で限定された回答が SciFinder ウィンドウに表示されます。

結果を確認した後に、**Back** をクリックし、さらにもう一度 **Back** をクリックすると、最初の反応検索結果に戻ります。そこで **Analyze/Refine** をクリックすると、別の限定オプションが利用できます。

### ③ 反応ステップ数による Refine

反応ステップ数による Refine により、一段階反応と多段階反応を区別することができます。

③ *Number of Steps* を選択すると Refine by Number of Steps ダイアログボックスが表示されます。



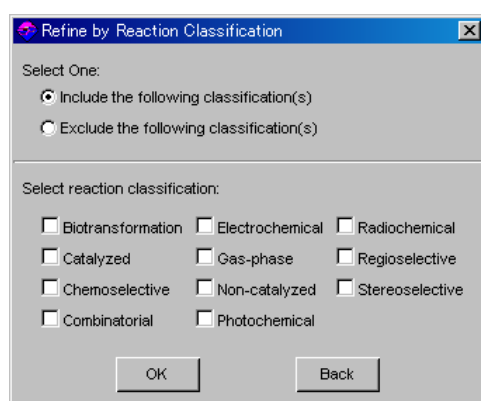
*Single Step Reactions* または *Multiple Step Reactions* を選択し、*OK* をクリックします。目的の回答が SciFinder ウィンドウに表示されます。

絞られた反応からは、*Get References* で文献を表示することも、また回答をさらに限定することもできます。*Back* をクリックし、さらにもう一度 *Back* をクリックすると、最初の反応検索結果に戻ります。そこで *Analyze/Refine* をクリックすると、別の限定オプションが利用できます。

### ④ 反応分類による Refine

反応分類による Refine により、特定のタイプの反応に限定することができます。SciFinder では反応をいくつかの分類（たとえば立体選択的の反応、気相反応、電気化学的の反応など）にわけており、その内の一つまたは複数を選択して、目的の反応に絞り込むことができます。

④ *Reaction Classification* を選択します。Refine by Reaction Classification ダイアログボックスが表示されます。

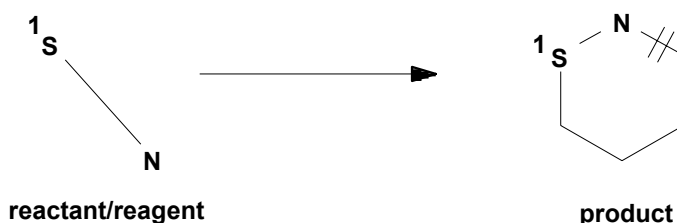


除きたい、または含めたい反応分類を選択し、*OK* をクリックします。目的の回答が SciFinder ウィンドウに表示されます。

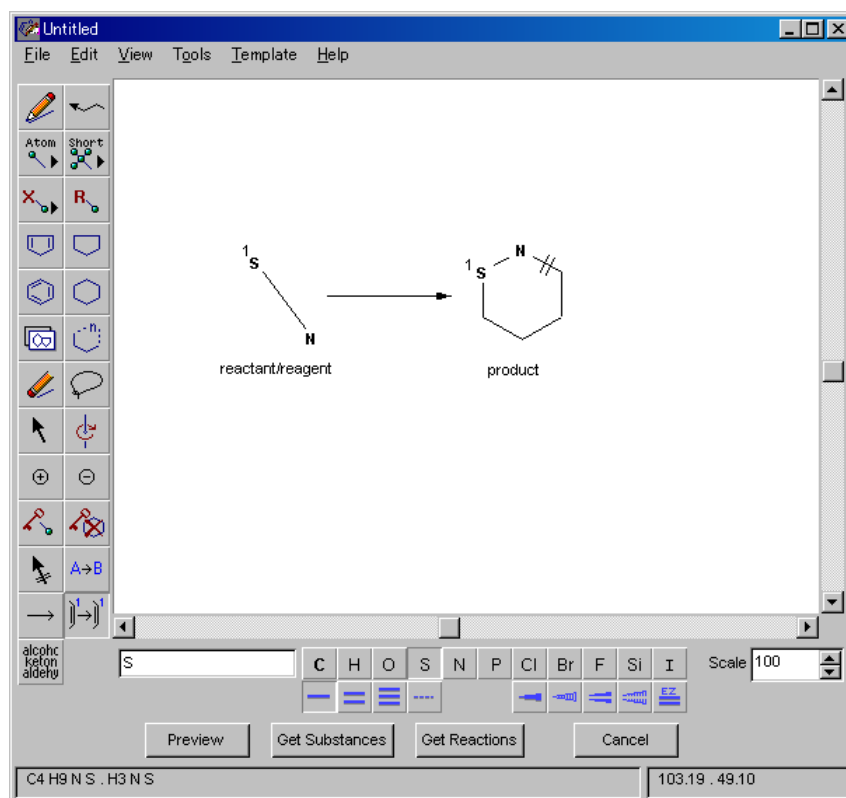
結果を確認した後に、*Back* をクリックし、さらにもう一度 *Back* をクリックすると、最初の反応検索結果に戻ります。そこで *Analyze/Refine* ボタンをクリックすると、別の限定オプションが利用できます。

## 反応物／試薬と生成物の両方を指定した検索

反応検索を実行するには、まず構造を作図します。構造作図画面で以下の構造を作図してみます。  
(二重線は反応部位を意味します)



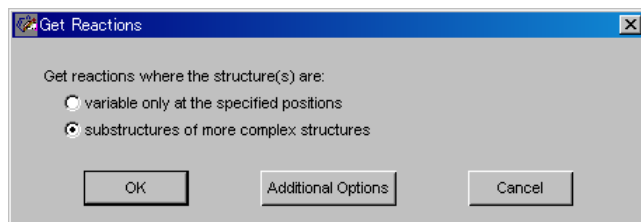
1. 反応物として、ペンシルツールで長さ 2 の鎖を作図画面の左に描きます。
2. シクロヘキサン環ツールで、作図画面の右にシクロヘキサン環を描きます。
3. 常用原子パレットから **S** (硫黄) を選び、鎖の左の炭素および環の一つの炭素を S に変えます。  
次に **N** (窒素) を選び、鎖のもう一方の炭素と環にある S の隣の炭素を N に変えます。
4. 矢印ツールを選択し、反応物から生成物に向けて、カーソルをドラッグします。すると、reactant/reagent と product のラベルが自動的に付与されます。
5. 原子マッピングツールを選択し、反応物の S をクリックすると、1 が付与されます。続いて、生成物の S を同様にクリックすると同じく 1 が付与されます。
6. 反応サイトツールを選択し、環の N と C の間の結合をクリックします。反応サイトが指定されます。





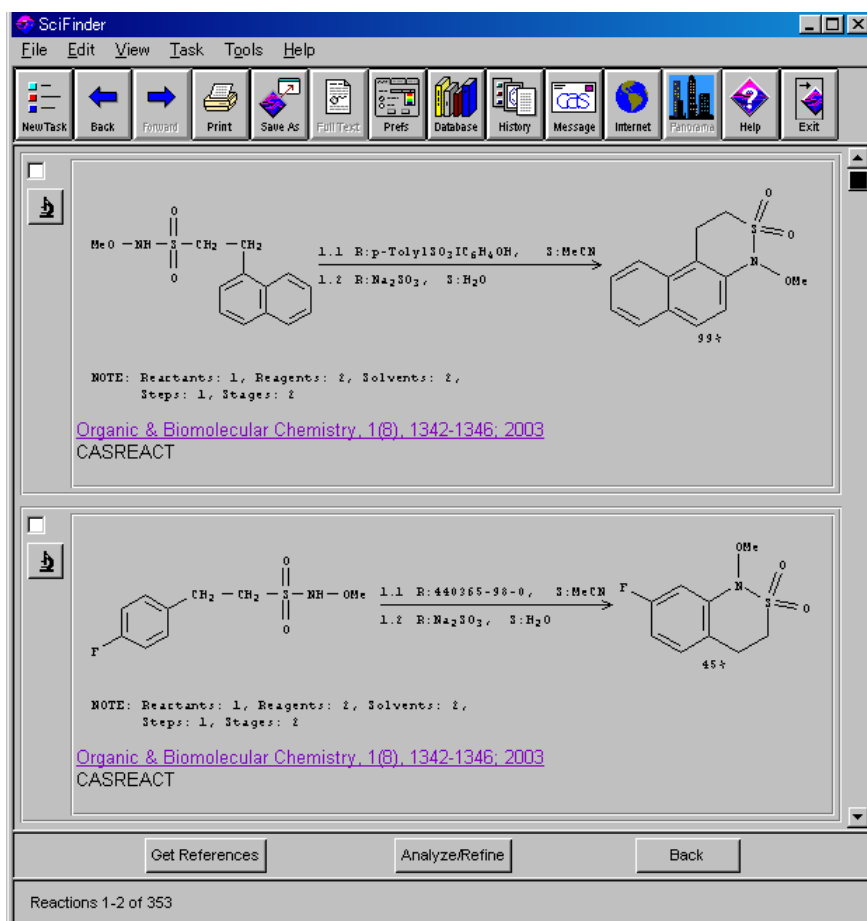
## 反応検索の実行

構造の作図が終了したら、*Get Reactions* をクリックします。Get Reactions ダイアログボックスが現れますので、ここでは *substructures of more complex structures* を選択して *OK* をクリックします。



検索結果を特定のタイプに限定するには、*Additional Options* をクリックし、*You may limit your search by any of the following:* の設定を変更します (76 ページ参照)。

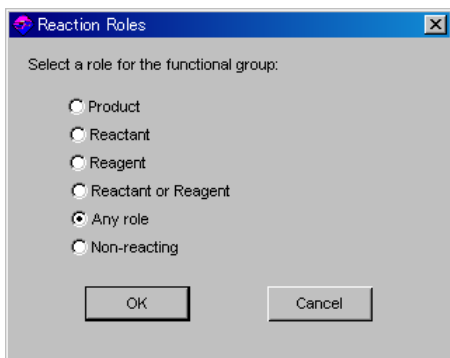
SciFinder ウィンドウに、反応検索による回答が表示されます。



反応式の表示、反応の Keep と Analyze/Refine、そして文献情報の表示については前述の通りです。回答の保存と印刷についても、これまでと同様に行えます。

## 官能基を使った検索

SciFinder では、官能基による反応検索ができます。官能基には以下の反応ロールが指定できます。



Product	反応で生成
Reactant	反応物
Reagent	試薬
Reactant or Reagent	反応物 / 試薬
Any role	指定なし
Non-reacting	反応に関与しない

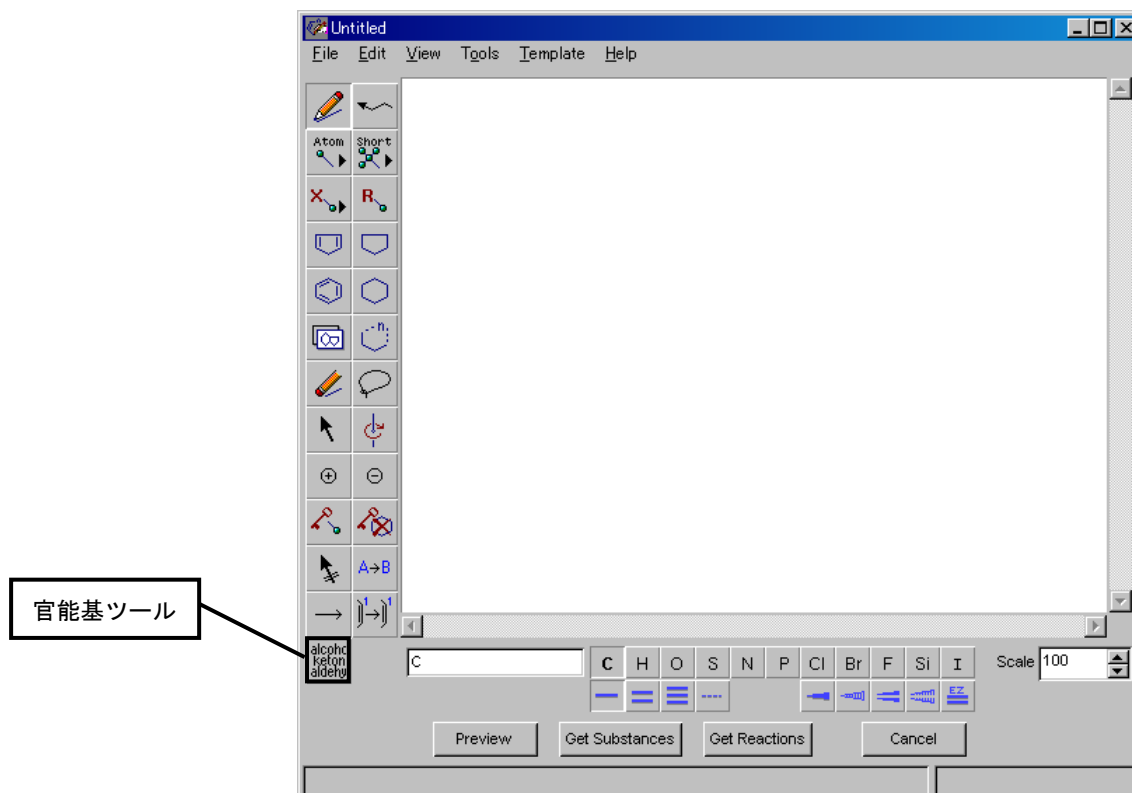
\* Non-reacting は官能基を使った検索のみ使用可能

官能基検索を利用すれば、非常に一般的な構造を持つ物質の反応の集合が容易に得られます。その結果をさらに別の条件で限定すれば、目的の反応を得ることができます。限定方法の詳細については、反応の Analyze/Refine のセクションをご覧ください。

## 官能基検索

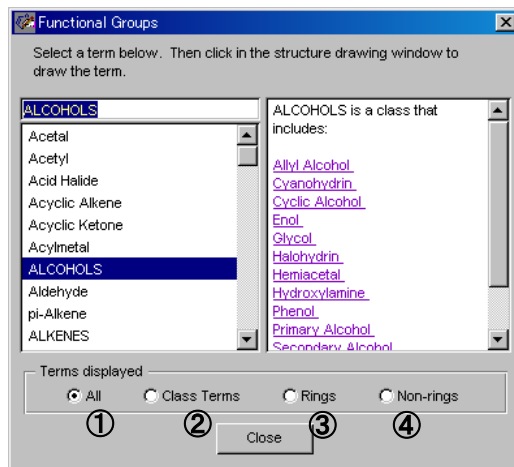
官能基検索を開始するには、Task メニューの Explore から *Chemical Structure* を選択します。あるいは New Task ダイアログボックスから *Explore* を選択し、続くダイアログボックスで *Chemical Substances or Reaction* と *Chemical Structure* をそれぞれ選びます。

官能基ツールを使って検索式を作図します。



## 官能基の選択

官能基を作図するには、**官能基ツール**アイコンをクリックします。Functional Groups ダイアログボックスが表示されます。



官能基は左のスクロール画面に表示されますが、4通りの表示オプションがあります。

- ① すべての官能基
- ② 官能基クラス
- ③ 環の官能基
- ④ 環以外の官能基

デフォルトでは、①すべての官能基が表示されます。官能基クラスと特定官能基がアルファベット順に表示され、その後に環タームが続きます。

- ② **官能基クラス**を選択すると官能基クラス用語だけが表示されます。これらは、特定の官能基の上位概念になります。それぞれの官能基クラス（たとえば **ALCOHOLS**）をクリックするとその下位に含まれる特定官能基が右のボックスに表示されます。**ALCOHOLS**を検索に利用すれば、これらの下位の官能基がすべて検索されることになります。（次頁の表参照）
- ③ **環の官能基**を選択すると、環を表す官能基だけが表示されます。官能基名をクリックするとその構造が右の画面に表示されます。たとえば、**1,2-C4NS**をクリックすると、この官能基を使って反応検索を実行した際に利用される構造が画面に表示されます。
- ④ **環以外の官能基**を選択すると、環を含まない官能基だけが表示されます。官能基名（たとえば、**Aldehyde**）をクリックするとその構造が右の画面に表示されます。

選択された官能基は、Functional Groups ダイアログボックスの左上に表示されます。さらに、構造作図画面の現原子ボックスにも表示されます。官能基のリストから選択する代わりに、直接現原子ボックスに官能基名を入力して、〈Return〉キーを押して官能基を指定することもできます。入力した官能基名がリスト中の官能基と完全に一致しない場合は、最も近い官能基が選ばれます。

使用する官能基を選択したら、カーソルを作図画面上におき、クリックします。官能基名が画面に現れます。カーソルを官能基名に近づけると、その官能基の構造や下位の官能基のリストが表示されます。

官能基クラス (Class Term)	官能基クラスに含まれる特定官能基 (Functional Groups Included)
ALCOHOLS	Allyl Alcohol, Cyanohydrin, Cyclic Alcohol, Enol, Glycol, Halohydrin, Hemiacetal, Hydroxylamine, Phenol, Primary Alcohol, Secondary Alcohol, Tertiary Alcohol
ALKENES	Acyclic Alkene, Allene, Allyl Alcohol, Allyl Halide, Cyclic Alkene, Diene, Enamine, Ketene, Ketenimine, Vinyl Halide
ALKYNES	pi-Alkyne, Alkyne, Enyne
AMINES	Amine Oxide, Aziridine, Chloramine, Cyanamide, Enamine, Hydroxylamine, Imine, Primary Amine, Secondary Amine, Tertiary Amine
CARBONATE DERIVATIVES	Carbamate, Carbonate, Guanidine, Haloformate, Thiourea, Urea
CARBOXY DERIVATIVES	Acid Halide, Amide, Amidine, Anhydride, Carboxylate Ester, Carboxylic Acid, Haloformate, Imide, Lactam, Lactone, Peroxy Acid, Peroxy Ester, Thioamide, Thiocarboxy, Unsaturated Acid, Unsaturated Ester
HALIDES	Acid Halide, Alkyl Halide, Allyl Halide, Aryl Halide, Chloramine, gem-Dihalide, vic-Dihalide, Haloformate, Halohydrin, Metal Halide, Sulfenyl Halide, Sufinyl Halide, Sulfonyl Halide, Trihalide, Vinyl Halide
HETEROCYCLES	Aziridine, Cephem, Episulfide, Epoxide, Penam, Purine, 1,2-C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> , 1,2-C <sub>3</sub> NO, 1,2-C <sub>3</sub> NS, 1,2-C <sub>3</sub> O <sub>2</sub> , 1,2-C <sub>3</sub> OS, 1,2-C <sub>3</sub> S <sub>2</sub> , 1,2-C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> , 1,2-C <sub>4</sub> NO, 1,2-C <sub>4</sub> NS, 1,2-C <sub>4</sub> O <sub>2</sub> , 1,2-C <sub>4</sub> OS, 1,2-C <sub>4</sub> S <sub>2</sub> , 1,3-C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> , 1,3-C <sub>3</sub> NO, 1,3-C <sub>3</sub> NS, 1,3-C <sub>3</sub> O <sub>2</sub> , 1,3-C <sub>3</sub> OS, 1,3-C <sub>3</sub> S <sub>2</sub> , 1,3-C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> , 1,3-C <sub>4</sub> NO, 1,3-C <sub>4</sub> NS, 1,3-C <sub>4</sub> O <sub>2</sub> , 1,3-C <sub>4</sub> OS, 1,3-C <sub>4</sub> S <sub>2</sub> , 1,4-C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> , 1,4-C <sub>4</sub> NO, 1,4-C <sub>4</sub> NS, 1,4-C <sub>4</sub> O <sub>2</sub> , 1,4-C <sub>4</sub> OS, 1,4-C <sub>4</sub> S <sub>2</sub> , 1,4-C <sub>5</sub> N <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> S, C <sub>3</sub> N, C <sub>3</sub> O, C <sub>3</sub> S, C <sub>4</sub> N, C <sub>4</sub> O, C <sub>4</sub> S, C <sub>5</sub> N, C <sub>5</sub> O, C <sub>5</sub> S, C <sub>6</sub> N, C <sub>6</sub> O, C <sub>6</sub> S
KETONES	Acyclic Ketone, Cyclic Ketone, o-Quinone, p-Quinone, Unsaturated Ketone
ORGANOMETALLICS	Acylmetal, pi-Alkene, pi-Alkyne, pi-Allyl, mu-Carbonyl, Metal Arene, Metal Carbene, Metal Carbonyl, Metal Cyclopentadienyl, Metal Halide, Metal Hydride, Metal-metal Bond, Metal Nitrogen, Metal Nitrosyl, Metal Phosphine, Metal Sulfur, Metallocarbocycle, Organometal

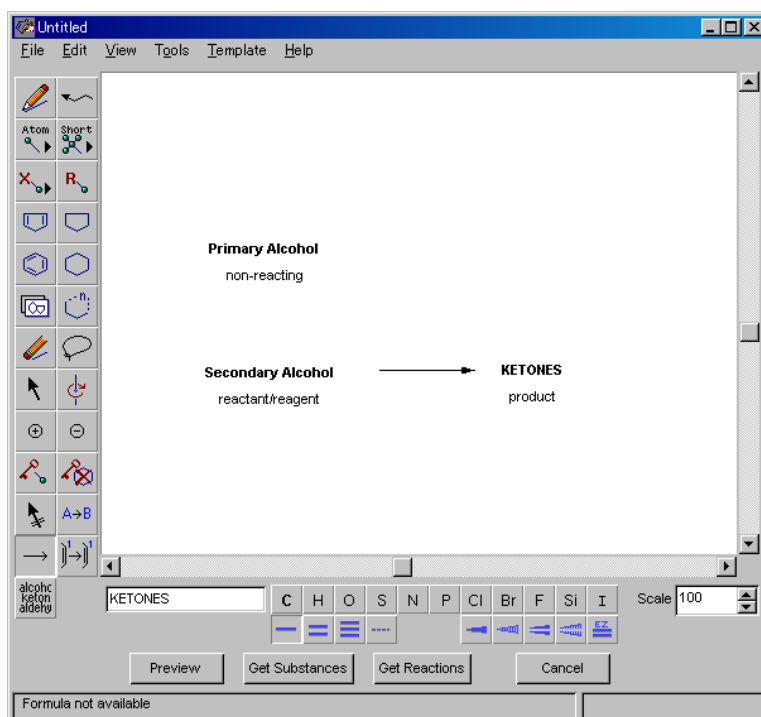
## 官能基質問式の作図

官能基質問式は構造作図画面で作成します。一つの質問式に一つの官能基を使うことも、複数の官能基を使うこともできます。各官能基には反応ロールを指定する必要があります。反応ロールを指定するには、**反応ロールツール**か**矢印ツール**を使います。

官能基は構造と組み合わせて一つの反応質問式にすることができます（詳細は後述）。

ここでは、二級アルコールをケトンに変換し、しかも反応物中の一級アルコールは変化しないという反応を検索します。

1. **官能基**ツールを選択します。Functional Group ダイアログボックスが表示されます。
2. リストをスクロールして、**Secondary Alcohol** を選択し、次にカーソルを作図画面の左側でクリックします。Secondary Alcohol が作図されます。
3. 同様に **KETONES**を選択し、作図画面の右側に作図します。さらに、**Primary Alcohol** を選択し、Secondary Alcohol の上部に作図します。
4. **Close** をクリックして Functional Group ダイアログを閉じます。
5. **矢印**ツールをクリックし、カーソルを Secondary Alcohol の右から KETONES に向かってドラッグします。反応ロールが付与されます。
6. **反応矢印**ツールにより、Primary Alcohol には Reactant/Reagent のロールが付与されます。これを変更するために**反応ロール**ツールを選択した後に、Primary Alcohol をクリックします。Reaction Roles ダイアログボックスが表示されますので、**non-reacting**を選択し、**OK**をクリックします。反応ロールが変更されます。



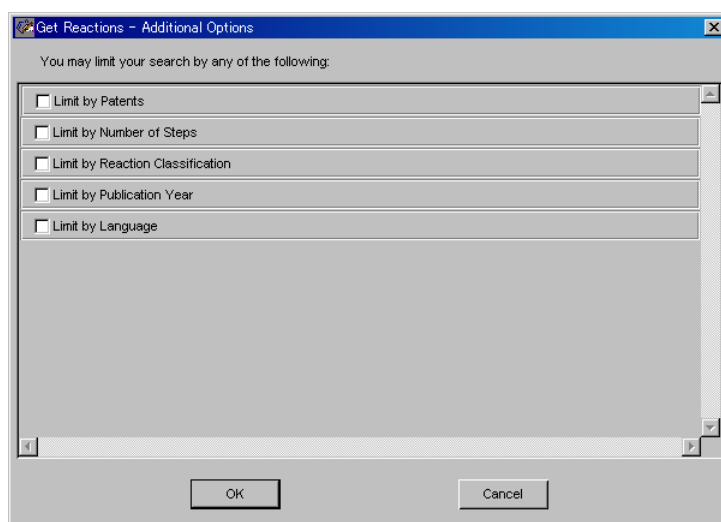
官能基質問式の作図には、以下の制約があります。

- 官能基に構造を結合させることはできません。
- 官能基に電荷を指定することはできません。
- 原子マッピングや反応サイトの指定はできません。
- 官能基は回転させることはできません。
- 作図できるノードの数は最大 **253** 個です。

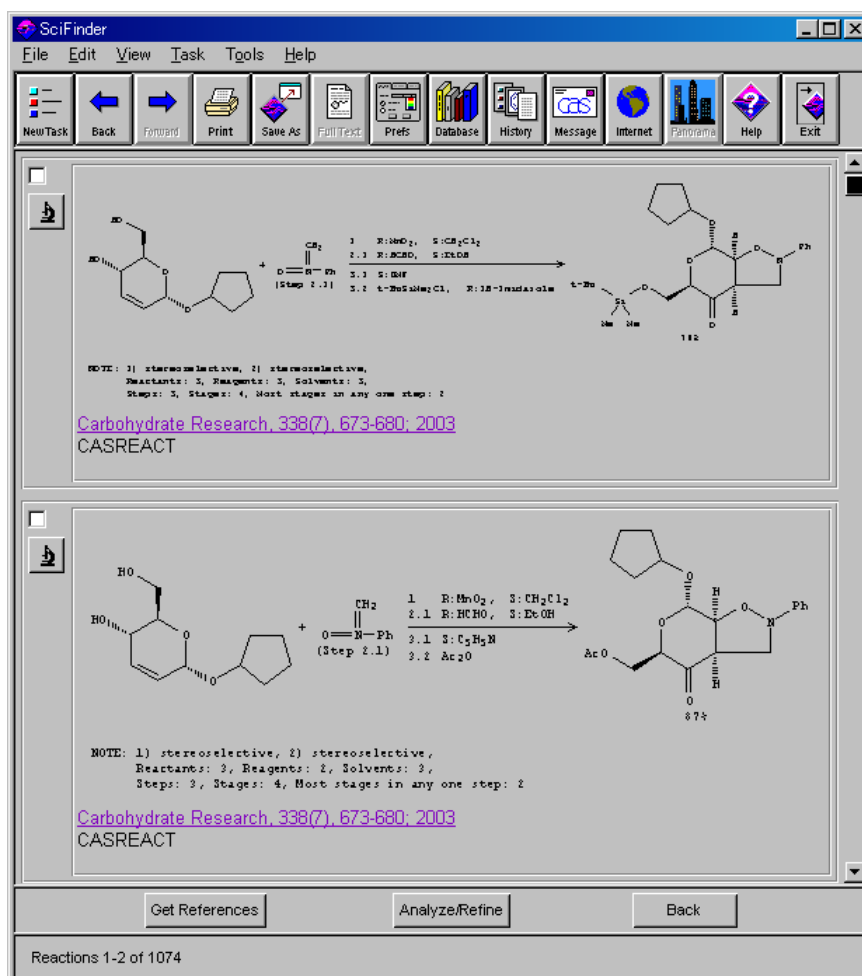
## 官能基検索の実行

反応質問式の作図が終了したら、*Get Reactions* をクリックします。Get Reactions - Additional Options ダイアログボックスが現れますので、*OK* をクリックします。

検索結果を特定のタイプに限定するには、*You may limit your search by any of the following:* の設定を変更します (76 ページ参照)。



SciFinder ウィンドウに、反応検索による回答が表示されます。



官能基検索は非常に広い検索になりますので、場合によっては多数の回答が得られます。検索結果は、構造などを使って限定することができます。限定をする場合は、**Analyze/Refine**をクリックしてください（限定方法の詳細は前述）。

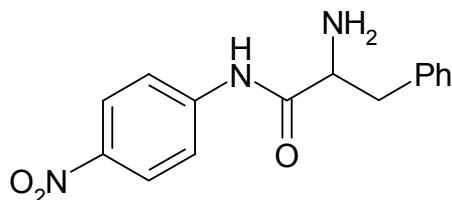
ヒットした反応が収録されている文献を表示するには、興味のある反応の左にあるチェックボックスをクリックしたのち、**Get References**をクリックします。Get References ダイアログボックスが表示されます。全ての反応に関する文献か、選択した反応に関する文献かを選び、**OK**をクリックします。

文献はデフォルトの形式と順序で表示されます。文献は、順序の並び替え（View メニューの **Reverse Order** コマンド）、詳細の表示（顕微鏡アイコン）、フルテキストの表示（**e-document** アイコン）、解析と限定（**Analyze/Refine** ボタン）、関連情報の表示（**Get Related...** ボタン）ができます。また回答の印刷、保存も可能です。

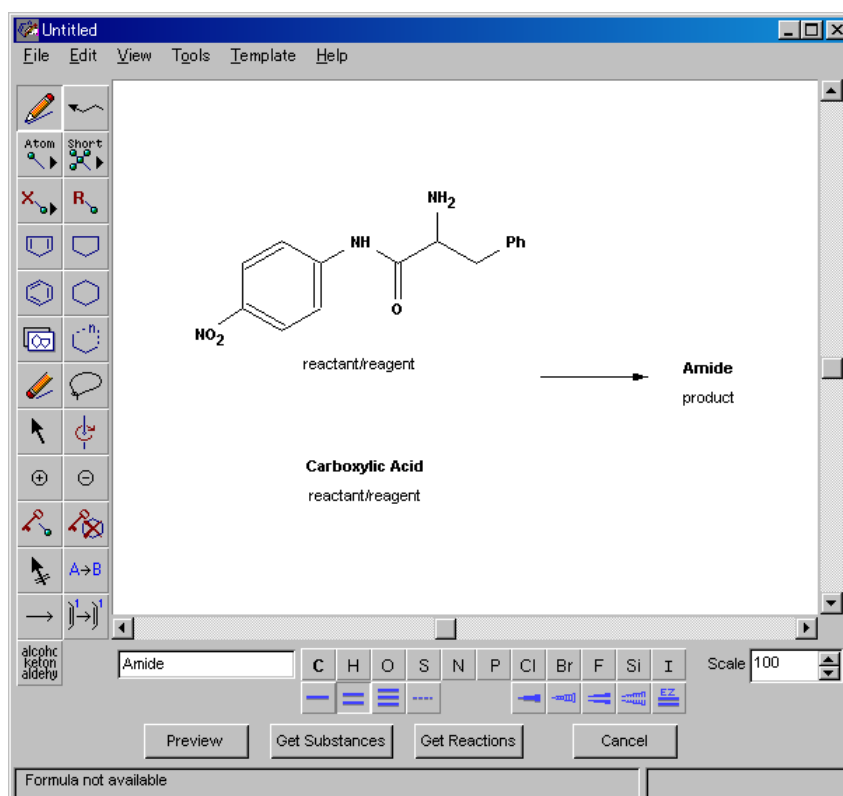
## 官能基と構造の組み合わせによる検索

一つの反応質問式で官能基と構造を組み合わせることができます。官能基、構造をそれぞれ作図して、反応ロールを指定します。

次の例では、以下の物質とカルボン酸との反応によりアミドを生成する反応を検索します。



1. 上記の構造を作図画面に作図します。
2. **官能基**ツールをクリックし、Functional Group ダイアログボックスから *Carboxylic Acid* を選択したのち、カーソルを作図画面の左下でクリックします。Carboxylic Acid が作図されます。同様に Functional Group ダイアログボックスから *Amide* を選択して Amide を画面右に作図します。
3. 反応矢印ツールをクリックし、カーソルを Carboxylic Acid から Amide にむけてドラッグします。反応ロールが付与されます。
4. *Close* をクリックして Functional Group ダイアログを閉じます。

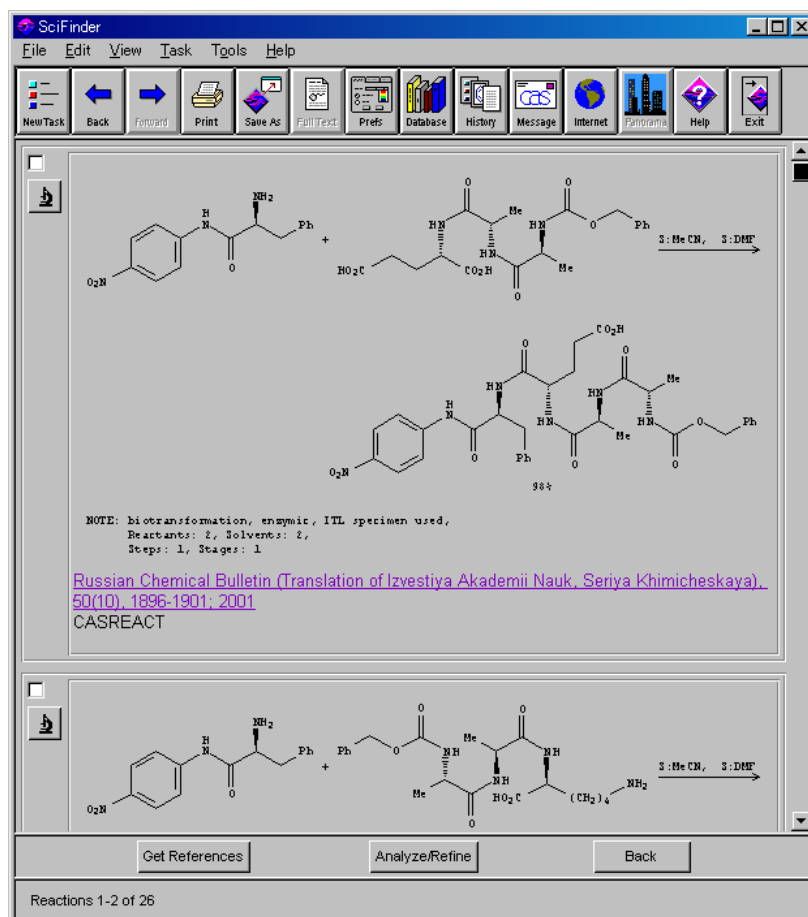




## 反応検索の実行

構造の作図が終了したら、**Get Reactions**をクリックします。Get Reactions ダイアログボックスが現れますので、ここでは *variable only at the specified positions* を選択して **OK** をクリックします。

SciFinder ウィンドウに、反応検索による回答が表示されます。



多数の回答が得られた場合は、構造などを使って限定することができます。限定をする場合は、**Analyze/Refine** をクリックしてください（限定方法の詳細は前述）。

ヒットした反応が収録されている文献を表示するには、**Get References** をクリックします。文献はデフォルトの形式と順序で表示されます。文献は、順序の並び替え（View メニューの **Reverse Order** コマンド）、詳細の表示（顕微鏡アイコン）、フルテキストの表示（*e-document* アイコン）、解析と限定（**Analyze/Refine** ボタン）、関連情報の表示（**Get Related...** ボタン）ができます。また回答の印刷、保存も可能です。

## 反応検索の終了

反応検索を終了するには、File メニューから *New Task* を選択するか、メインメニューバーの *New Task* アイコンをクリックします。

SciFinder を終了するには、File メニューから *Exit SciFinder* を選択するか、メインメニューバーの *Exit* アイコンをクリックします。

## Appendix A. Smartsearch : 構造検索のしくみ

化学構造を作図し *Get Substance* ボタンをクリックして構造検索を実行すると物質の集合が表示されます。この回答結果が表示されるまでの過程では Smartsearch という検索機能が SciFinder 内部で働き、構造質問式に対する回答数を最大にしようとします。

ここではこの検索プロセスが実際にどのように進行していくのかを説明します。

注意：この機能は完全一致構造検索および部分構造検索で実行されます。

### Smartsearch とは？

物質を探すとき最も便利なのは化学構造からの検索です。Smartsearch では構造作図画面に描かれた化学構造を読み込み、作図上の様々な前提を考慮します。Smartsearch は作成された構造質問式を様々な側面から解釈し、構造質問式に関連するあらゆる物質を回答に含めようとします。

### Smartsearch は具体的に何をする？

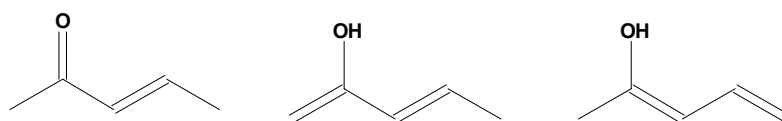
Smartsearch は構造質問式と同じ原子配置と結合を含む全ての物質を自動的に探します。回答には以下の物質が含まれます：

- ・ 構造質問式と完全に一致する物質
- ・ 構造異性体
- ・ 互変異性体（ケト-エノール異性を含む）
- ・ 配位化合物
- ・ 電荷をもつ化合物
- ・ ラジカル，ラジカルイオン
- ・ 同位体元素を含む物質
- ・ ポリマーの構成モノマー

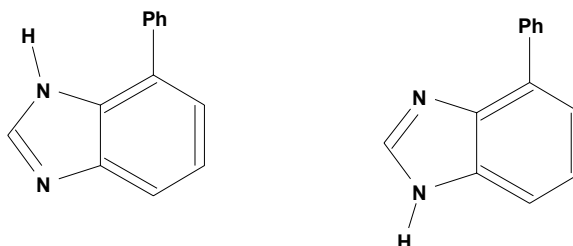
具体的な例：

- ・ ケト-エノールなどの互変異性体や共役系の結合は、たとえ単結合や二重結合の位置が異なったとしても自動的に考慮して回答に含めます。

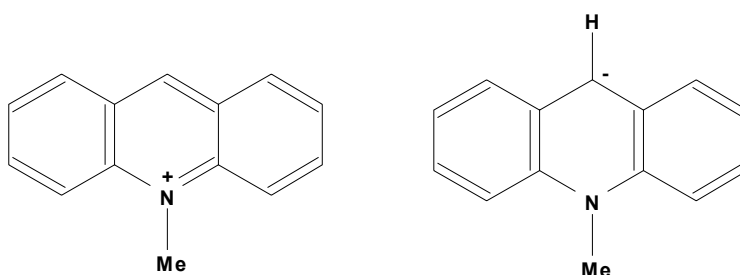
例えば、以下のいずれかの構造で検索すれば、全ての構造が検索されます。



- 分子内での水素の結合位置が異なることによる互変異性も自動的に考慮されます。例えば以下のいずれかの構造で検索すれば、両方の構造が検索されます。



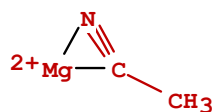
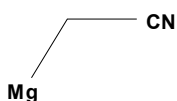
- 分子が電荷をもつ場合、分子内で電荷が移動した物質も自動的に考慮されます。例えば以下のいずれかの構造で検索すれば、両方の構造が検索されます。



- 金属原子を含む構造質問式では、金属原子が分子内の他の位置に移動した物質も検索されます。たとえ質問式で明示的に金属との結合が描いてあったとしても関係ありません。

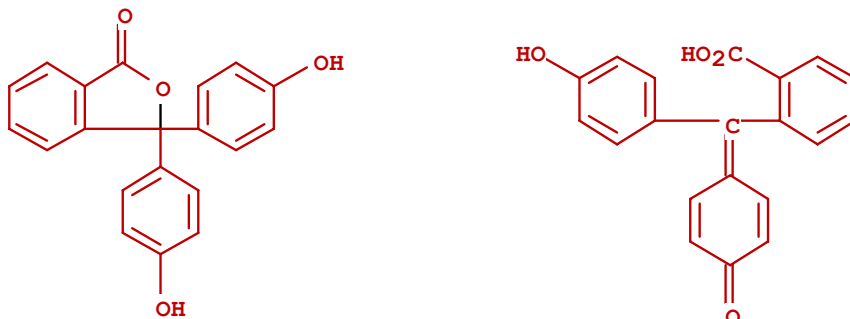
金属原子とは**次の元素以外の元素**と定義されています: H, B, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, As, Se, Br, Te, I, At, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn. また金属原子を含む質問式に対しては水和物も自動的に検索対象となります。

例えば、左の構造 ( $\text{HMg}-\text{CH}_2-\text{CN}$ ) から検索すると、残り 6 つの構造も検索されます。



- フルオレセインおよびフタレイン系化合物などでは開環型，閉環型のどちらを描いたとしても自動的に両方の構造が検索されます．糖とヘミアセタールについても同様です．

例えば左の構造で検索した場合，右の構造も回答集合に含まれます．



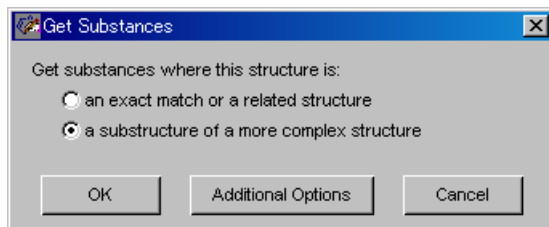
- ハロゲン化砒素やハロゲン化リン構造では，ハロゲン原子がイオンである場合，砒素又はリン原子に結合している場合，他のハロゲン原子に結合している場合が考慮されます．
- 構造異性体は，質問式中に立体結合が含まれていれば構造異性体の種類を自動的に Analyze した結果を表示します．立体結合が含まれていなければ，全ての物質を回答に含めて表示します．
- 例外として，ポリマー，複雑な炭水化物，配列，合金，表形式無機物質，ラジカルイオンに関しては特別な回答結果は含まれません．しかし質問式の構造がこれらと一致しさえすれば回答に含まれます．

構造検索では SciFinder は回答の正確さよりも，包括的で検索もれが生じないことを優先します．そのため回答の中には，意図しない物質が含まれることがあります．しかし，**Keep Substances** や **Refine Substances**，**Analyze Substances** などのツールを使えば回答を絞り込むことができます．特に **Analyze** の **Precision** 機能を使えば関連性の薄い回答をうまく除くことができますでしょう．

最終的には見た目がほとんど同じような物質にまで絞られていきます．もちろん完全に同じということはありません．立体化学など何らかの要素が異なるはずです．**顕微鏡**アイコンをクリックして物質の名称から違いを確認してください．

## 完全一致構造検索と部分構造検索

部分構造検索オプション（SSM）をご契約いただいている場合、*Get Substances* ボタンを押すと次のウィンドウが表示され、完全一致検索か部分構造検索かを選べるようになっています。



SSM をご契約いただいていない場合はこのウィンドウは表示されず、そのまま完全一致検索が実行されます。以下では完全一致および部分構造検索それぞれで Smartsearch がどのように働くかを説明します。

### 完全一致検索

完全一致検索を実行すると Smartsearch 機能が働き、最初に説明したような物質が回答に含まれます。ポリマーや混合物、塩なども自動的に対象となります。特定の物質に回答を限定したいときは Preference Editor の Explore タブでオプションを変更するか、Get Substance ウィンドウで *Additional Options* をクリックして必要なものだけにします。

完全一致検索では質問式に明示的に描かれている置換基のほかには、置換基の勝手な追加は許されません。つまり完全一致検索では、置換が自由な原子は存在せず、何も描いてない結合は基本的に H（水素）で埋められます。従って完全一致検索をする場合の質問式では H は描いても描かなくても回答は同じになります。

### 部分構造検索

部分構造検索を実行すると Smartsearch 機能が働き、最初に説明したような物質が回答に含まれます。特定の物質に回答を限定したいときは Preference Editor の Explore タブでオプションを変更するか、Get Substance ウィンドウで *Additional Options* をクリックして必要なものだけにします。

部分構造検索では追加の置換基がついた物質も回答に含めます。結合をもたない全ての原子は置換が自由と解釈され、デフォルトでは環の縮合も許容されています。環の縮合を禁止するには第Ⅲ章をご覧ください。

結合をもたない原子にはいかなる置換も許容されてしまいますが、*X* メニューツールや *R* グループツールを使えば、置換基の種類を限定することができます。詳しくは第Ⅲ章をご覧ください。