SciFinder®

インターネットセミナー

# 2014年5月の新機能

JAICI
化学情報協会

2014 年 5 月



## 本日ご紹介する内容


- ChemBioDraw Ultra Version 14との連携
- Non-Java 作図ツールの強化

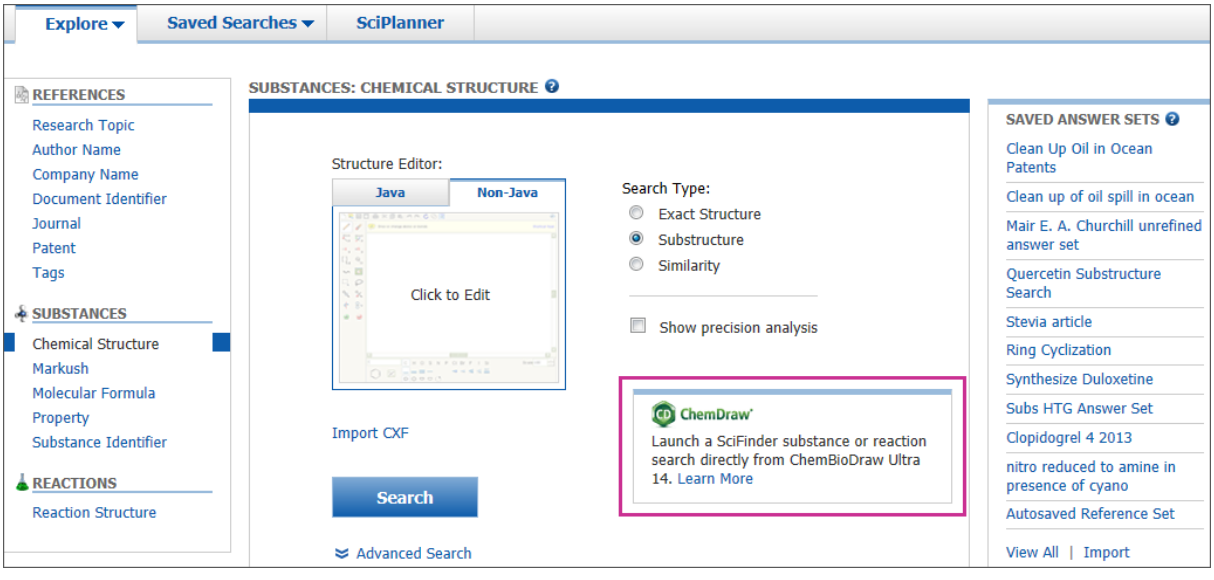
# ChemBioDraw Ultra Version 14 との連携機能

最も利用されている化学構造作図ツールから
SciFinder での検索がシームレスに行えます！

JAICI 化学情報協会

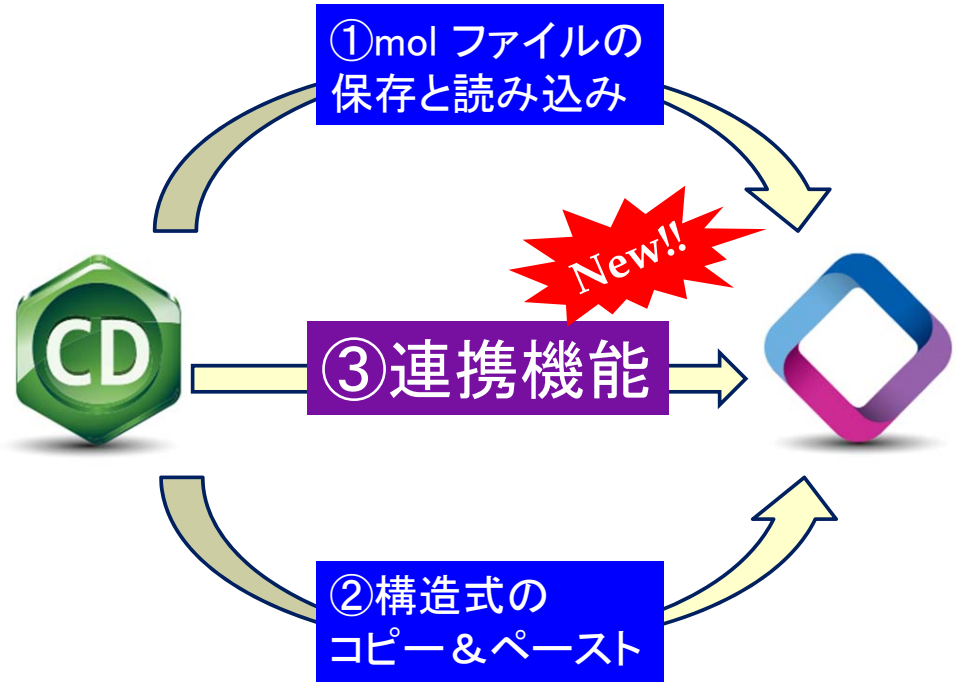


# 本日より有効です！



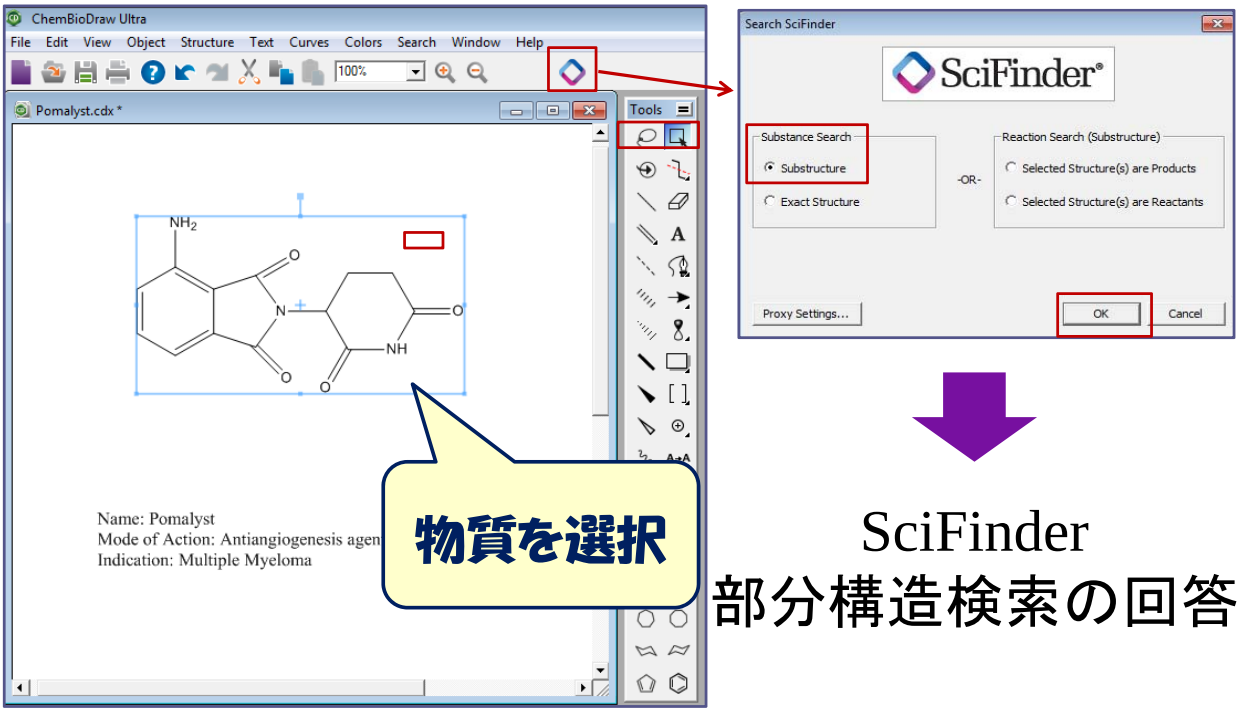

※ChemBioDraw Ultra Version 14 が必要です

# ChemBioDraw から構造式を移す方法



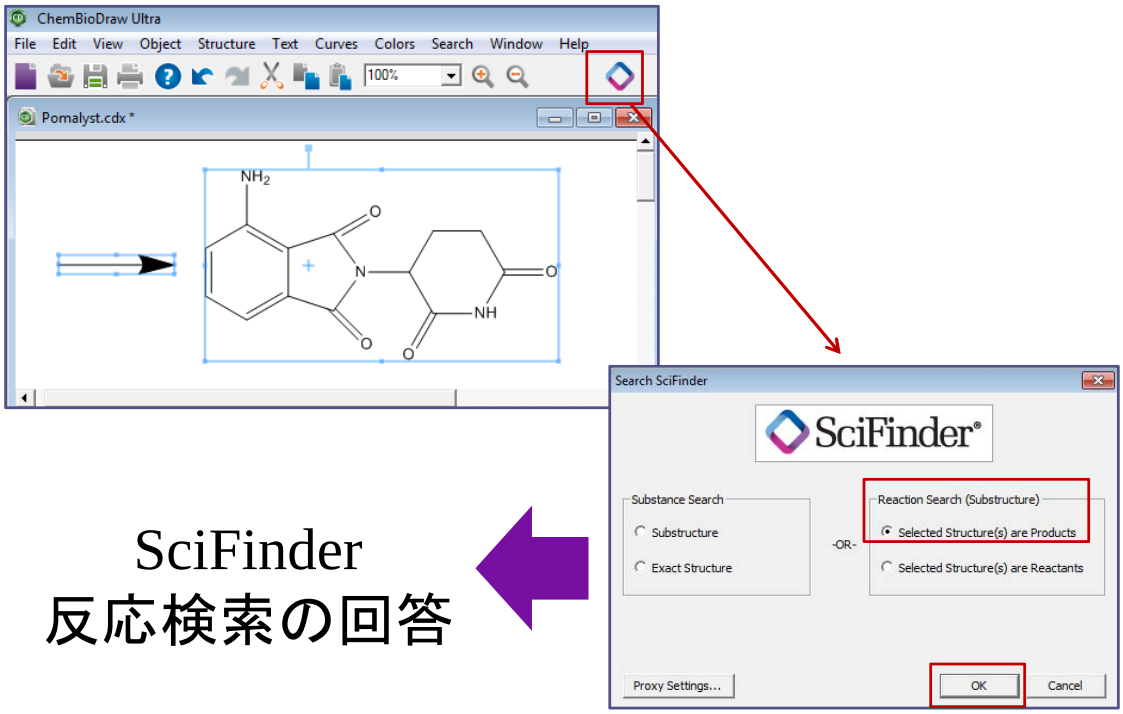



# ついに実現！ChemBioDraw との連携機能




SciFinder
部分構造検索の回答

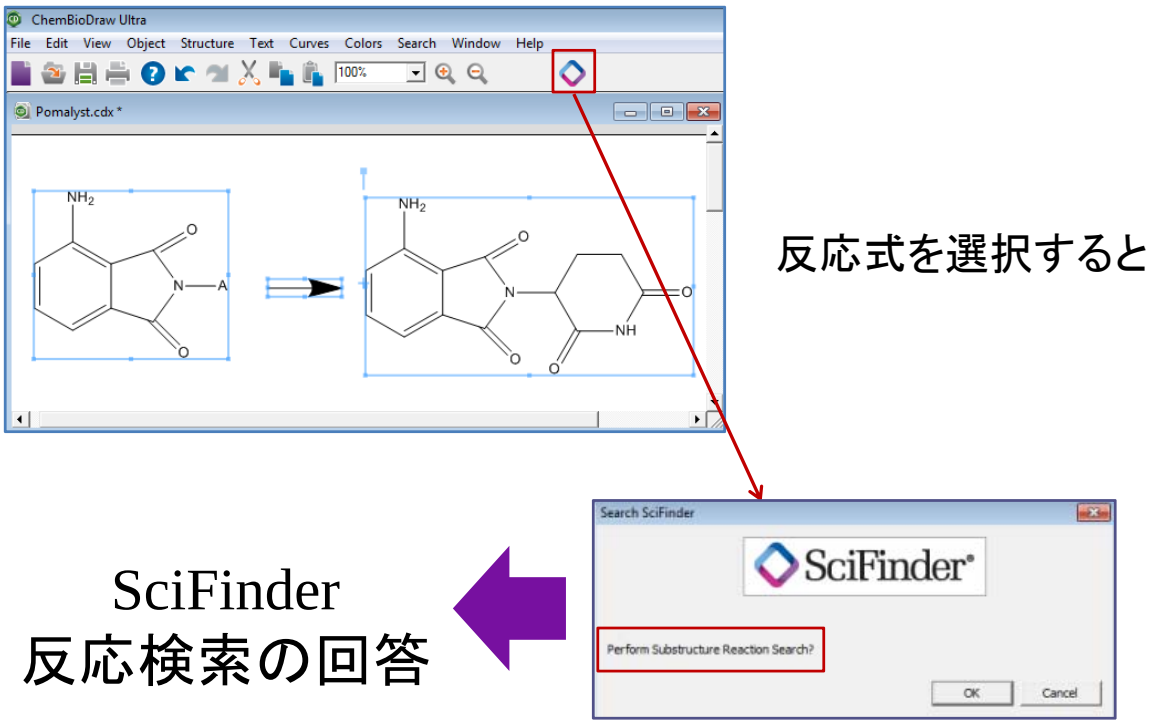
# ついに実現！ChemBioDraw との連携機能




SciFinder
反応検索の回答



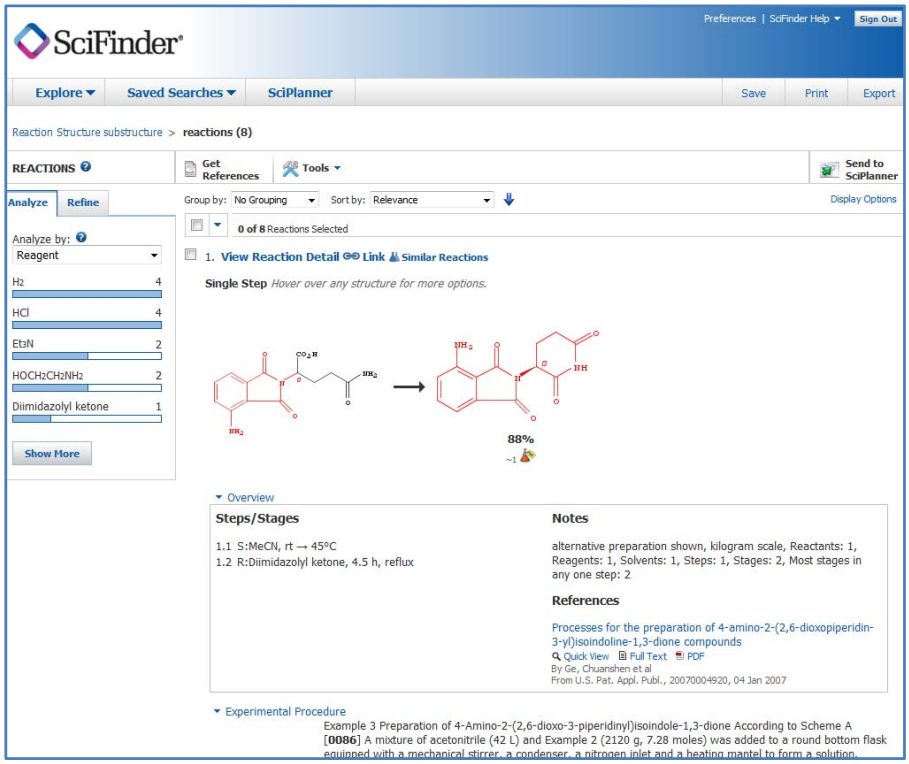
# ついに実現！ChemBioDraw との連携機能




反応式を選択すると

SciFinder
反応検索の回答

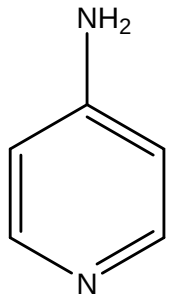
# ついに実現！ChemBioDraw との連携機能






# 検索例1

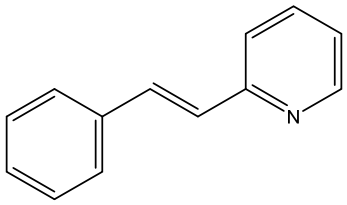
- CBD 上で以下の物質を作図し，そのまま SciFinder で部分構造検索を実行




- 得られた回答で以下の絞込みを行う
  - 縮合環禁止（Lock Rings）
  - R グループを使って限定

# 検索例2

- CBD 上で以下の構造を作図し，そのまま反応検索を実行




- 以下の絞込みを行う
  - 縮合環禁止（Lock Rings）
  - Experimental Procedure が存在する反応
  - Heck 反応に限定



## Non-Java 作図ツールの強化

# Java 構造作図ツール

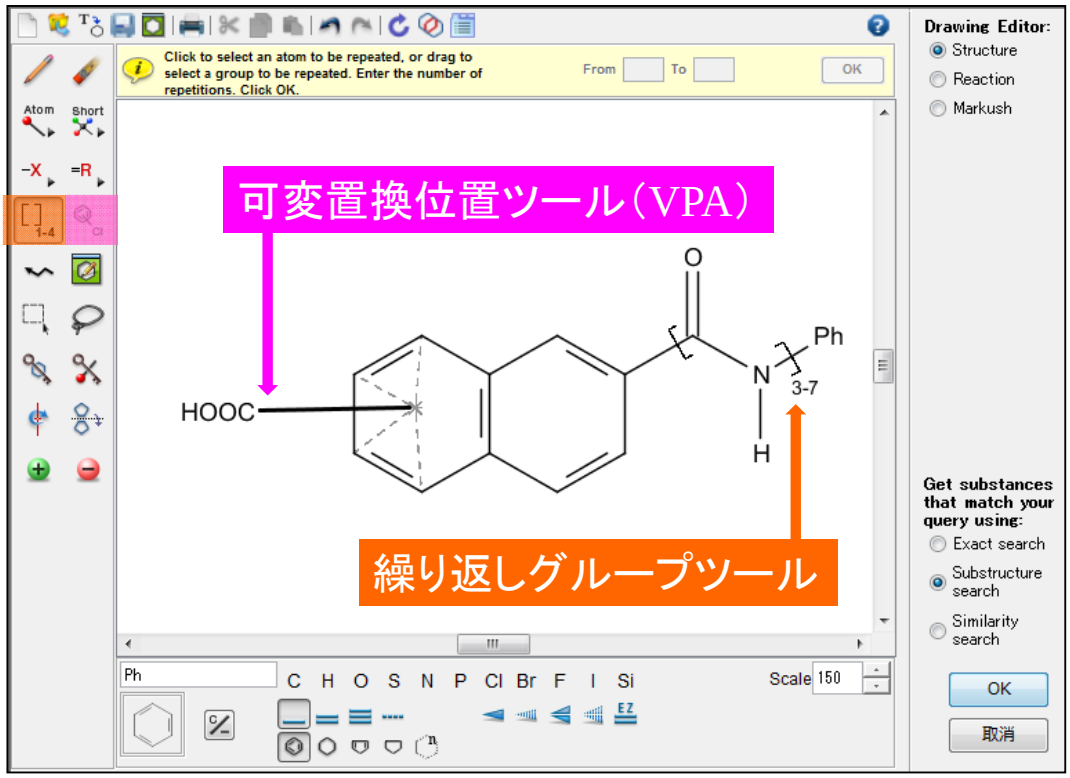

- Java作図ツールは，Java およびブラウザのセキュリティ方針変更が動作に影響
- セキュリティ警告が毎回表示される




# Non-Java構造作図ツールがますます便利に

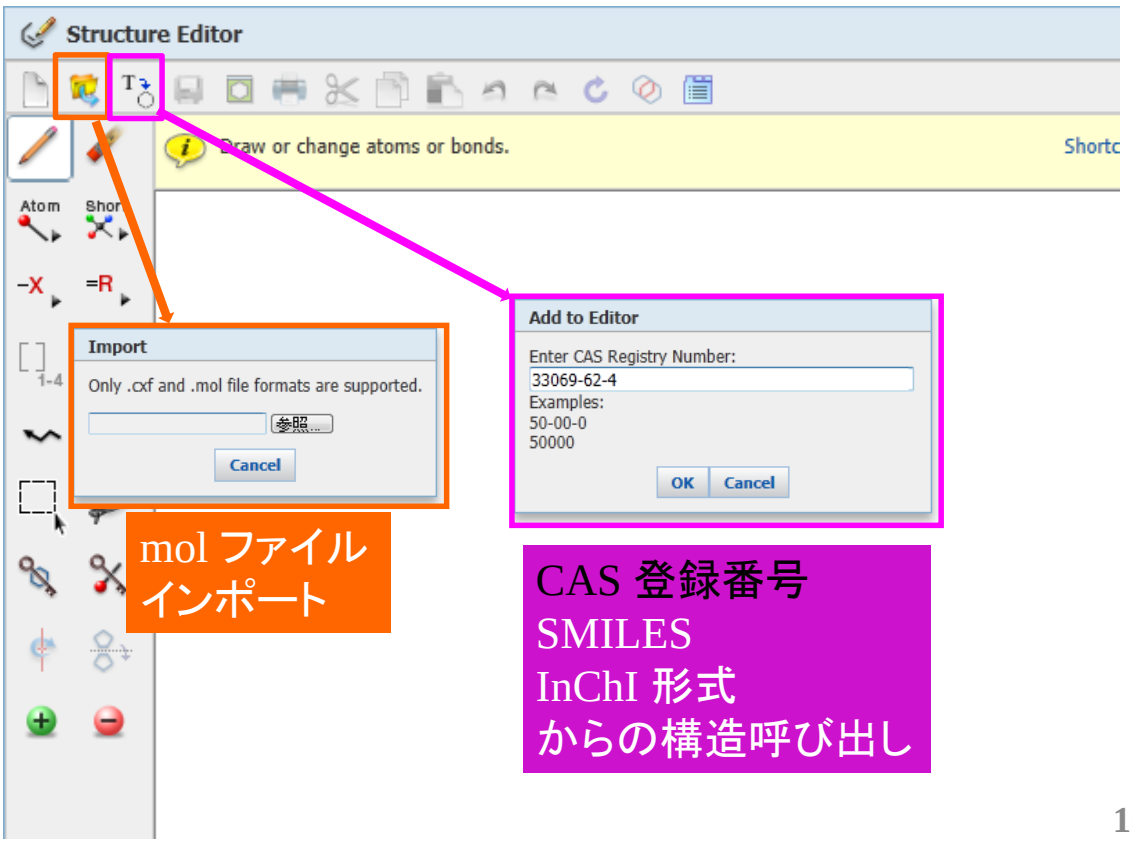

- 2013/10　リリース
- 2013/12　Lock Atoms，鎖ツールの
- 2014/1　R グループツール．デフォルト化．
- 2014/3　mol ファイルインポート，ショートカットキー
- 2014/4　可変置換位置ツール(VPA)，官能基ツール
- 2014/5　繰り返しグループツール，SMILES, InChI 形式から構造呼び出し

# Non-Java構造作図ツールがますます便利に

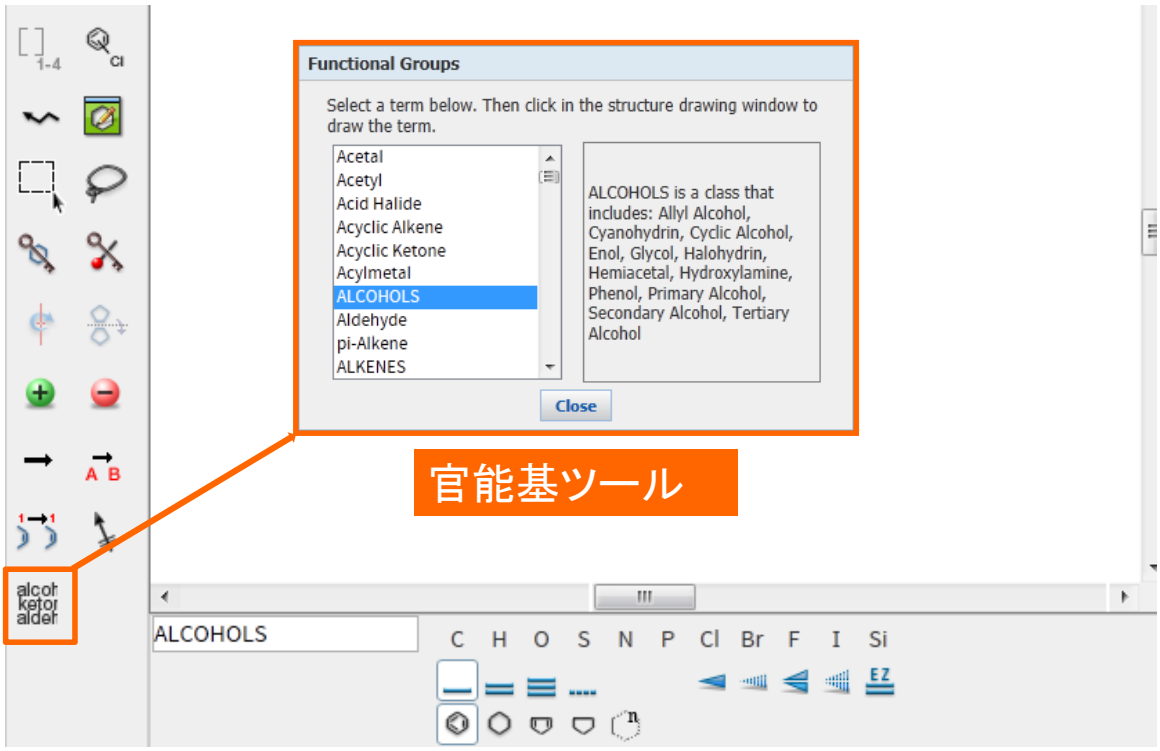





# Non-Java構造作図ツールがますます便利に



# Non-Java構造作図ツールがますます便利に






# 検索例

- 以下の官能基変換反応を実行

  Carboxylate Ester → Aldehyde

- 以下の絞込みを行う
  - 構造式
  - VPA
  - 繰り返し構造