

SciFinder® インターネットセミナー

物質回答の絞り込みや解析(1)

2014年10月

JAICI
化学情報協会

1

SciFinder®で構造検索した際、 ヒット数が多くて困ったことはありませんか？

SciFinder®

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner

Chemical Structure substructure > substances (273925)

SUBSTANCES

Analyze Refine

Sort by: Relevance

0 of 273925 Substances Selected

9926. 1300723-95-8

CC(=O)c1ccc2c(c1)ccc3c2ccc(=O)c4ccccc34

$C_{18}H_{14}O_2$
Ethanone, 1,1'-(1,6-anthracenediyl)bis-

欲しい物質は
どこだろう??

探すのが大変だから
あきらめよう...



JAICI
化学情報協会

2

**本セッションでは、構造情報での
絞り込みに関するテクニックを
紹介します**



本セッションの流れ

- 1. 絞り込みの項目について**
2. 検索例
3. まとめ

画面上の位置

絞り込み

解析

絞り込みは、画面左にある“Refine”から行う

絞り込みの項目

Chemical Structure	化学構造
Isotope-Containing	同位体元素の有無
Metal-Containing	金属元素の有無
Commercial Availability	市販カタログ情報の有無
Property Availability	物性情報の有無
Property Value	物性値
Reference Availability	文献の有無
Atom Attachment	原子上の置換基

本セッションでは、“Chemical Structure”
“Atom Attachment”での絞り込みを
紹介します

化学構造 (Chemical Structure) での絞り込み

Refine by:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Structure Editor:

Java Non-Java

Click image to change structure or view detail.
Search type: **Substructure**

Only retrieve substances that:

- Have references
- Are commercially available
- Are a single component
- Are in specific substance classes
- Are in specific types of studies

Refine

置換基を加えるなど。再作図

Structure Editor

Me

C

Get substances that match your query using:

- Exact search
- Substructure search

Refine

化学構造 (Chemical Structure) での絞り込み

・絞り込みによく使う作図ツール

Lock Atoms ツール
(置換禁止部分の指定)

Lock Rings ツール
(縮合禁止の指定)

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds.

Me

C

Get substances that match your query using:

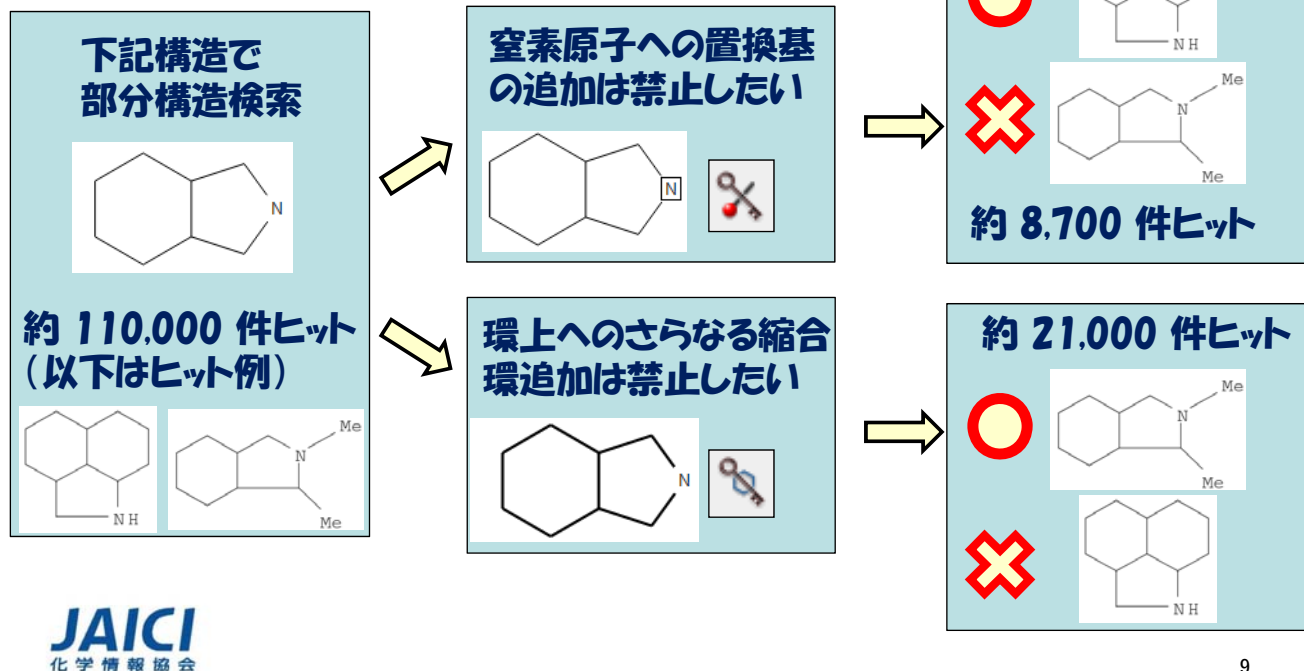
- Exact search
- Substructure search

OK

Cancel

化学構造 (Chemical Structure) での絞り込み

Lock Atoms (Rings) ツールの使用例



9

化学構造 (Chemical Structure) での絞り込み

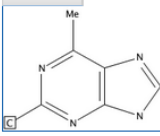
Analyze Refine

Refine by:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Structure Editor:

Java Non-Java



Click image to change structure or view detail.

Search type: Substructure

Only retrieve substances that:

- Have references
- Are commercially available
- Are a single component
- Are in specific substance classes
- Are in specific types of studies

Refine

Have references	文献情報あり
Are commercially available	カタログ情報あり
Are a single component	追加成分を除く
Are in specific substance classes	物質の分類
Are in specific types of studies	物質の役割

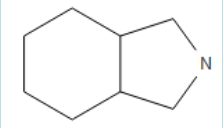
“Chemical Structure” での絞り込みでは、
構造 + 物質の特徴で限定も可能

10

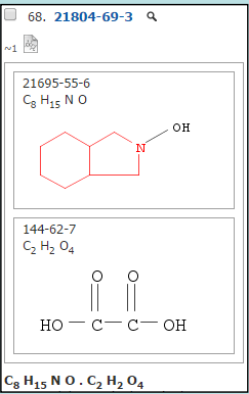
化学構造 (Chemical Structure) での絞り込み

“Are a single component” の使用例

下記構造で
部分構造検索



下記のような多成分
の物質もヒット



68. 21804-69-3

21695-55-6
C₈H₁₅N O

144-62-7
C₂H₂O₄

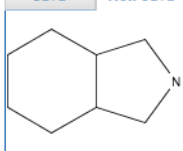
C₈H₁₅N O · C₂H₂O₄



多成分の物質を
除きたい

Structure Editor:

Java Non-Java


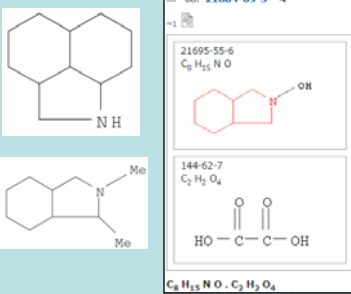


Click image to change structure or view detail.
Search type: Substructure

Only retrieve substances that:

- Have references
- Are commercially available
- Are a single component
- Are in specific substance classes
- Are in specific types of studies

Refine

作図した成分数を超える物質は除かれる。ここでは単成分物質のみに絞り込まれる。

※水和物、水素化物は例外的に除くことができない

11

原子上の置換基 (Atom Attachment) での絞り込み

Analyze Refine

Refine by:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

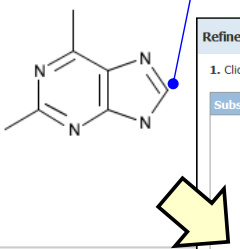
Select Attachments



Refine by Atom Attachment

1. Click on an atom to display the attachments present at that site.

Substructure

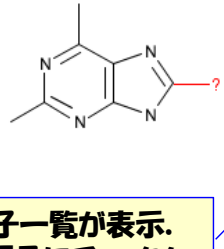


置換原子を確認したい部分を選択

Select All Deselect All

2. Select attachment(s) of interest.

Substructure



置換原子一覧が表示。必要な原子にチェックを入れると、絞り込まれる

Atom Attachments

Select All Deselect All

<input type="checkbox"/> H or None	627
<input checked="" type="checkbox"/> O	1998
<input type="checkbox"/> C	453
<input checked="" type="checkbox"/> N	7
<input type="checkbox"/> S	3
<input type="checkbox"/> Sn	2
<input type="checkbox"/> A - Any (not H)	2463
<input type="checkbox"/> Q - Any (not C,H)	2010
<input type="checkbox"/> Alk - Alkyl chain	269
<input type="checkbox"/> Cb - Carbocycle	161
<input type="checkbox"/> Hy - Heterocycle	16
<input type="checkbox"/> M - Metal	2

? = O,N,S

Refine Cancel

本セッションの流れ

1. 絞り込みの項目について

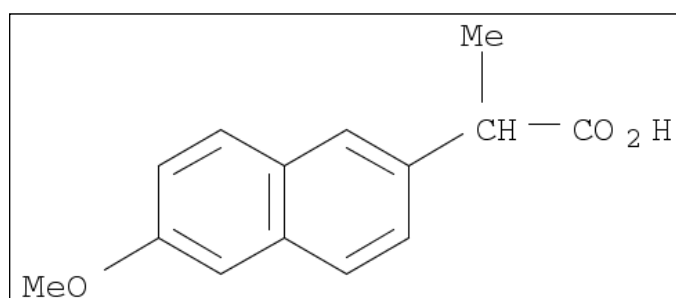
2. 検索例

3. まとめ

検索例①

(±)-ナフロキセン骨格をもつ物質(CAS RN:23981-80-8)について検索. 得られた結果が多い場合は, 下記条件で絞り込む.

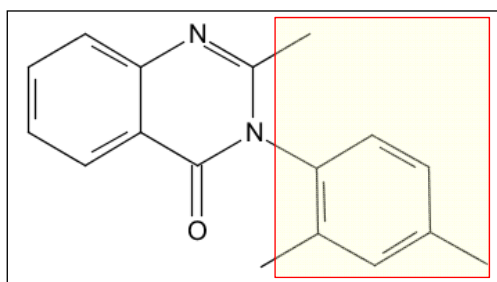
- ・カルボン酸部分への置換基の追加は禁止
- ・ナフロキセン骨格にこれ以上の縮合環の追加は禁止
- ・ハロゲンを含む物質
- ・単成分の物質



検索例②

下記骨格をもつ物質(CAS RN: 1915-80-6)について検索.

- ・四角で囲まれた部分にはどのような原子が置換する物質が多いのか傾向を把握し、その後絞り込む.



本セッションの流れ

1. 絞り込みの項目について
2. 検索例
3. まとめ

まとめ

★構造情報を用いて物質回答を絞り込む方法



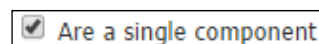
・作図した構造式に条件を付けるには…

⇒ **Chemical Structure** で再作図



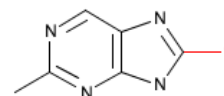
・追加成分を含む物質を除くためには…

⇒ **Single component** にチェック



・特定部分の置換元素を確認したい場合は…

⇒ **Atom Attachment** の活用



参考

～物質詳細情報画面・レイアウト変更～

Substance Detail page for Butanoic acid, 4-amino- (CAS 56-12-2). The page shows various properties and a sidebar with expandable sections. Callouts point to:

- 代表的な物性値 (Representative physical properties)
- 物質名称 (慣用名や商品名も含む) (Substance name, including common names and trade names)
- 物性値, スペクトルや規制情報など (Physical properties, spectra, and regulatory information, etc.)

コンパクトな表示に変更。
各項目をクリックすると、
詳細情報が展開表示。

EXPERIMENTAL PROPERTIES						
Biological	Chemical	Lipinski	Structure Related	Thermal		
Thermal Properties				Value	Condition	Note
Enthalpy				See full text		(9) CAS
Fusion Enthalpy				See full text	1 of 2	(10) CAS
Heat Capacity				See full text		(9) CAS
Melting Point				203 °C		(17) CAS
Melting Point				203 °C		(18) CAS
Melting Point				203 °C		(19) CAS
Melting Point				203 °C (decomp)		(20) CAS
Melting Point				203 °C (decomp)		(21) SRC
Melting Point				202 °C		(22) CAS
Melting Point				202 °C (decomp)		(23) APC
Melting Point				200 °C (decomp)		(24) CAS
Melting Point				200 °C	Solv: ethanol (64-17-5); water (7732-18-5)	(25) CAS

参考 ～物質詳細情報画面・レイアウト変更～

規制情報も“REGULATORY INFORMATION”の項目に表示に変更

▼ REGULATORY INFORMATION

- ▶ Regulatory Synonyms
- ▼ Regulatory Overview by Country
 - Confidentiality Status
Public
 - ▶ Australia
 - ▶ Canada
 - ▶ China
 - ▶ European Union
 - ▼ Japan
 - Inventory Status
On ENCS Japanese Gazette. Contained within class: Low Molecular Chain-like Organic Compounds.
 - Regulatory List Number
ENCS No.: 9-114
 - ▶ New Zealand
 - ▶ Philippines
 - ▶ United States
 - ▶ International and other lists
- ▶ U.S. Environmental Protection Agency (EPA) Regulations - Toxic Substances Control Act (TSCA)
- ▶ Canadian Regulations
- ▶ European Community Regulations
- ▶ File Segment

国別に表示