



インターネットセミナー

# SciFinder 糖の検索

**JAICI**  
化学情報協会

2014 年 12 月



# 糖に関する情報はどのように得ていますか？

SciFinder で得られる糖に関する情報

- ✓ 文献情報
- ✓ 物質情報
  - 物性値
  - 試薬情報
  - 規制情報
- ✓ 反応情報
  - 合成方法
  - 誘導体の合成



---

# 本日の内容

✓糖の種類

✓糖の登録方法

✓検索例

検索の流れとデータ例

---

# 本日の内容

✓糖の種類

✓糖の登録方法

✓検索例

検索の流れとデータ例

# 糖の種類

分類	名称	分子式
単糖	エリトロース	$C_4H_8O_4$
	アラビノース	$C_5H_{10}O_5$
	フルクトース	$C_6H_{12}O_6$
二糖	スクロース	$C_{12}H_{22}O_{11}$
	トレハロース	$C_{12}H_{22}O_{11}$ (無水物)
三糖	ラフィノース	$C_{18}H_{32}O_{16}$
	マルトトリオース	$C_{18}H_{32}O_{16}$
多糖	デンプン	$(C_6H_{10}O_5)_n$
	セルロース	
	グリコーゲン	
	ヒアルロン酸	$(C_{14}H_{21}O_{11})_n$

※ 一部を抜粋

---

# 本日の内容

✓ 糖の種類

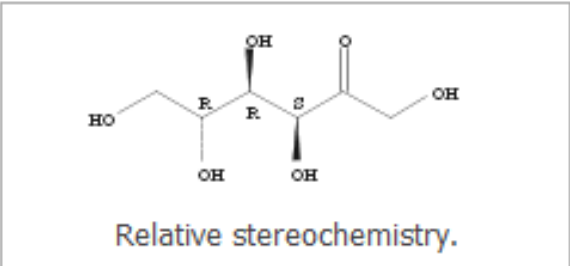
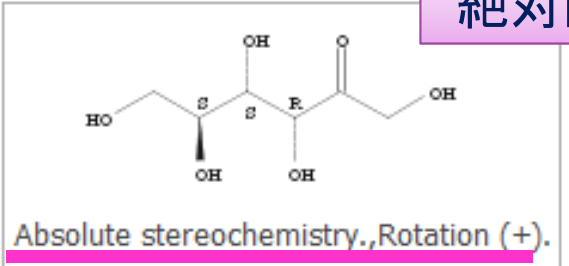
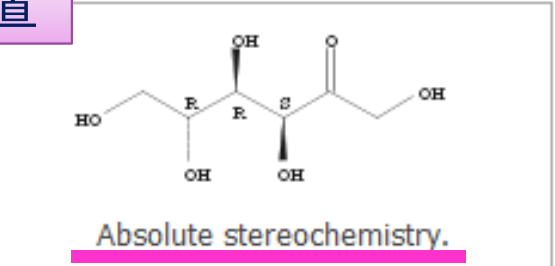
✓ 糖の登録方法

✓ 検索例

検索の流れとデータ例

# データ例

## ・フルクトース(鎖状)

<p>1. 30237-26-4</p> <p>~124</p>  <p>Relative stereochemistry.</p> <p><b>C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub></b> <b>Fructose</b></p> <p>Regulatory Information Experimental Properties</p>	<p>2. 7776-48-9</p> <p>~253</p>  <p>Absolute stereochemistry., Rotation (+).</p> <p><b>C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub></b> <b>L-Fructose</b></p> <p>Experimental Properties</p>	<p>3. 57-48-7</p> <p>~151</p>  <p>Absolute stereochemistry.</p> <p><b>C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub></b> <b>D-Fructose</b></p> <p>Regulatory Information Spectra Experimental Properties</p>
--	--	---

絶対配置




D, L 異性体

これらの光学異性体は個別の CAS 登録番号を持っている

# データ例

## ・フルクトース

CAS Registry Number 30237-26-4

~124   ~1 

**C<sub>6</sub> H<sub>12</sub> O<sub>6</sub>**  
**Fructose**

**Molecular Weight**  
180.16

**pKa (Predicted)**  
Value: 11.86±0.20 | Condition: Most Acidic Temp: 25 °C

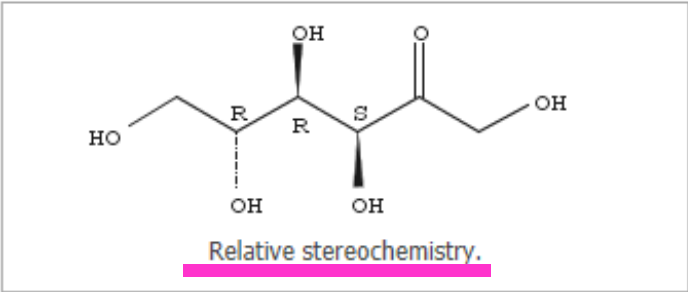
**Melting Point (Experimental)**  
Value: 129-130 °C

**Boiling Point (Predicted)**  
Value: 551.7±50.0 °C | Condition: Press: 760 Torr

**Density (Experimental)**  
Value: 1.665 g/cm<sup>3</sup> | Condition: Temp: 16 °C

**Other Names**  
DL-Fructose  
(±)-Fructose  
Methose  
*arabino*-2-Hexulose  
*d*-Fructose

**相対配置**



Relative stereochemistry.

文献・特許において著者が  
立体情報について明記していない場合  
この物質を索引する



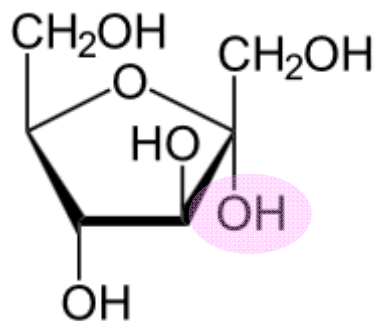
# データ例

## ・フルクトース(環状)

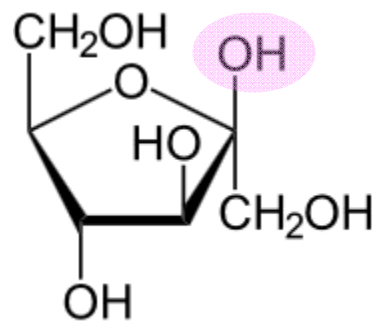
D-フルクトースは分子内  
ヘミアセタールを形成し  
環状構造に変化する



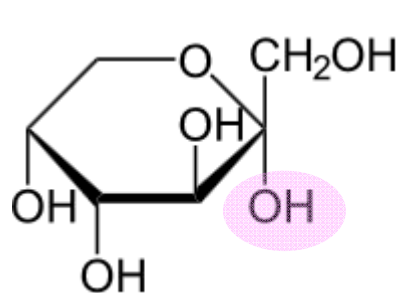
$\alpha$ ,  $\beta$  異性体



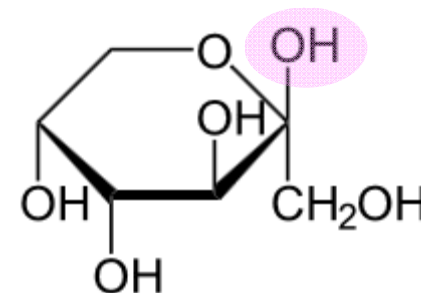
$\alpha$ -D-フルクトフラノース



$\beta$ -D-フルクトフラノース



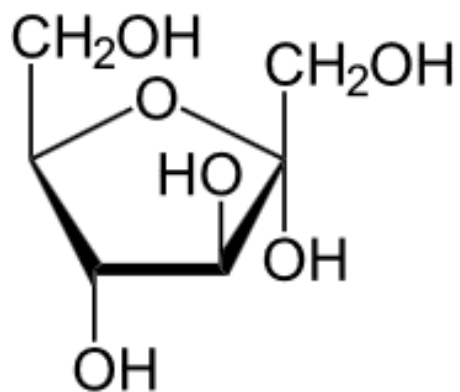
$\alpha$ -D-フルクトピラノース



$\beta$ -D-フルクトピラノース

# データ例

## ・フルクトース(環状)



$\alpha$ -D-フルクトフラノース

1. 10489-79-9

~147

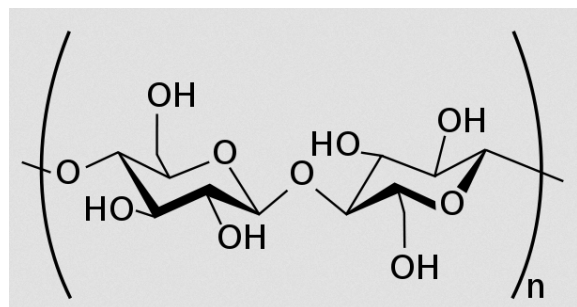
**R, S で表記**

**C<sub>6</sub> H<sub>12</sub> O<sub>6</sub>**  
 **$\alpha$ -D-Fructofuranose**

[Spectra](#)  
[Experimental Properties](#)

# データ例

- 多糖:セルロース



1. 9004-34-6

~164775 ~126

Structure is not confirmed

Substance  
Image  
Cannot Be  
Displayed  
9004-34-6

**Unspecified**  
**Cellulose**

Regulatory Information  
Spectra  
Experimental Properties

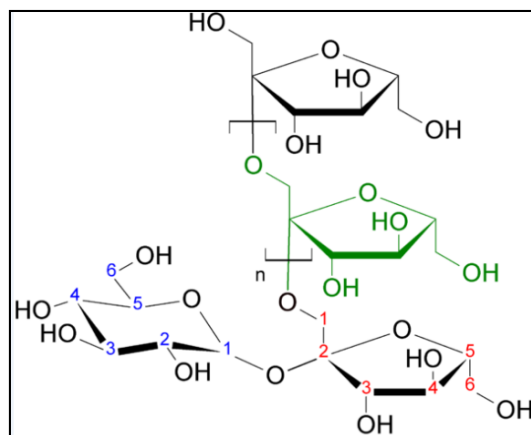
構造は確定できない

名称から検索

慣用名, 商品名からの  
検索も可能

# データ例

- 多糖: イヌリン(フルクトース分子の重合体)



1. 9005-80-5

~8841 ~79

構造は確定できない

Substance  
Image  
Cannot Be  
Displayed  
9005-80-5

**Unspecified**  
Inulin

Regulatory Information  
Spectra  
Experimental Properties

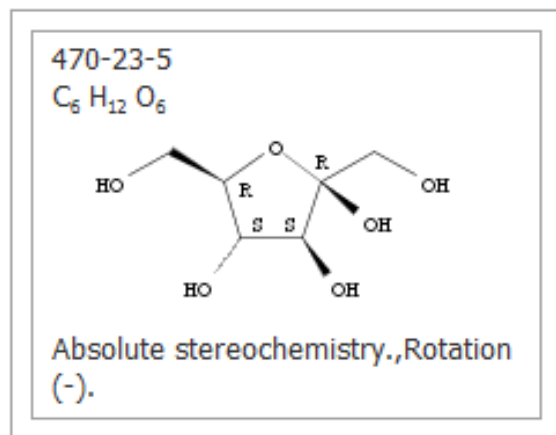
# データ例

## 多糖:フルクトース分子の重合体

合成により生成する物質の場合

1. 158570-94-6

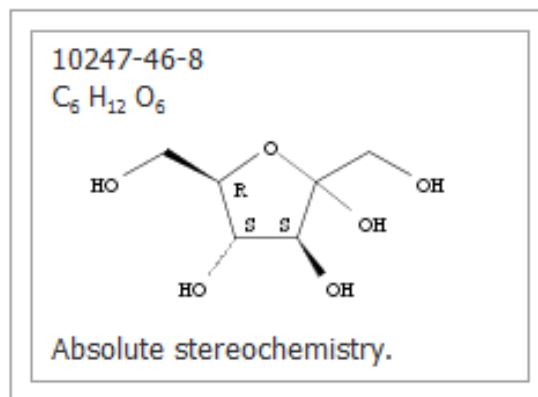
~3



$(C_6H_{12}O_6)_x$   
β-D-Fructofuranose, homopolymer

2. 28551-20-4

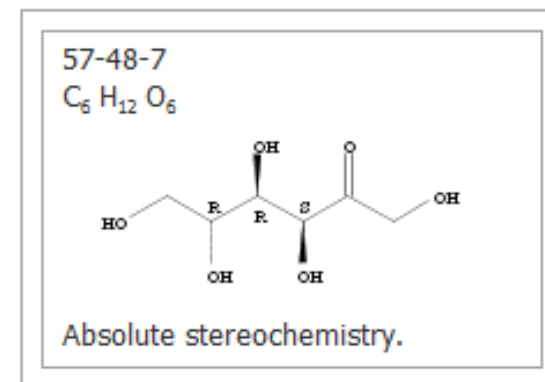
~3



$(C_6H_{12}O_6)_x$   
D-Fructofuranose, homopolymer (9CI)

3. 25702-76-5

~99



$(C_6H_{12}O_6)_x$   
D-Fructose, homopolymer

ポリマーの登録と同様  
構成モノマー単位で収録

---

# 本日の内容

✓ 糖の種類

✓ 糖の登録方法

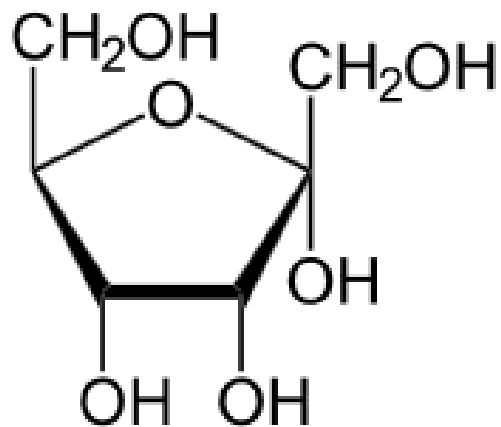
✓ 検索例

検索の流れとデータ例

# 検索例 -検索の流れとデータ例-

## プシコース (Psicose) の検索

### ✓ 構造からの検索

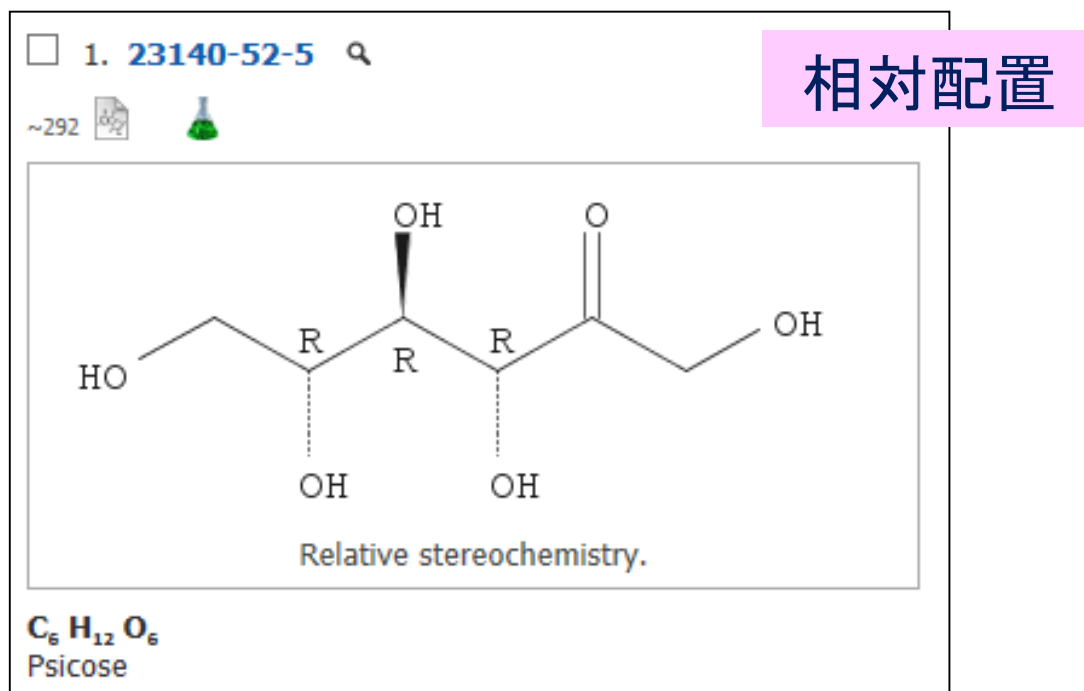


$\alpha$ -D-Psicofuranose



# 検索例 -検索の流れとデータ例-

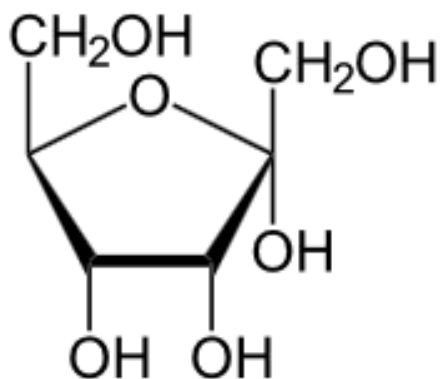
Psicose の名称から検索すると...





# 検索例 -検索の流れとデータ例-

作図:



$\alpha$ -D-Psicofuranose

# 検索例 -検索の流れとデータ例-

立体情報を指定した構造を用いた場合

0 of 5 Stereo Candidates Selected		Substances
<input type="checkbox"/>	Absolute stereo match	10
<input type="checkbox"/>	Absolute stereo mirror image	5
<input type="checkbox"/>	Relative stereo match	3
<input type="checkbox"/>	Stereo that doesn't match query	724
<input type="checkbox"/>	No stereo in answer structure	10

Get Substances

指定した立体配置と絶対構造が一致

鏡像異性体

相対的に立体構造が一致

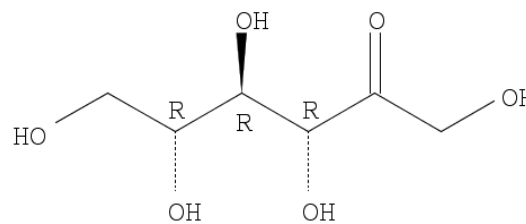
立体配置が一致しない

目的に応じて情報を選択できる

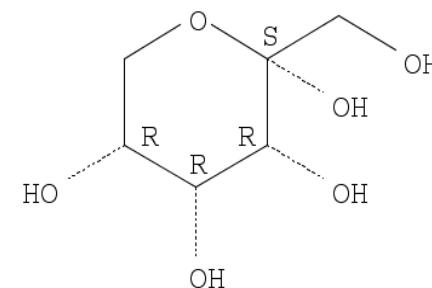
# 検索例 -検索の流れとデータ例-

$\alpha$ -D-Psicofuranose で検索した場合:

- Absolute stereo match

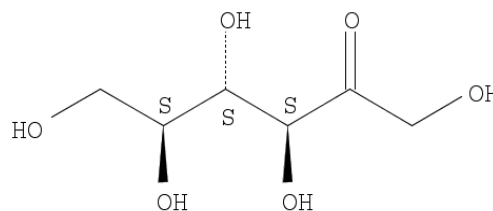


D-Psicose

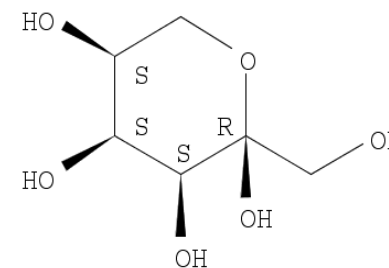


$\alpha$ -D-Psicopyranose

- Absolute stereo mirror image



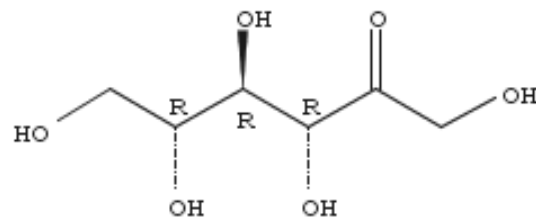
L-Psicose



$\alpha$ -L-Psicopyranose

# 検索例 -検索の流れとデータ例-

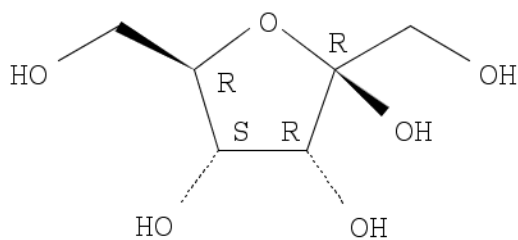
- Relative stereo match



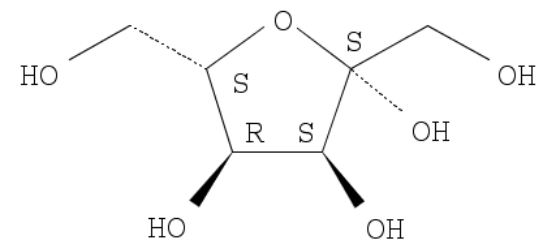
Relative stereochemistry.

Psicose

- Stereo that doesn't match query



$\beta$ -D-Psicofuranose



$\beta$ -L-Psicofuranose

# 本日のまとめ



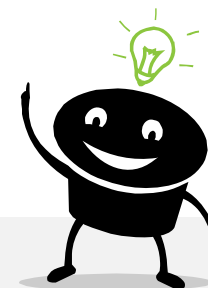
糖は

- ✓ 鎖状と環状, 立体情報の違いにより個別の物質として登録

構造検索において

- ✓ 鎖状, 環状のどちらを描いても自動的に両方の構造が検索される
- ✓ 立体を含む構造検索時には立体情報の違いにより回答が分類される

# 本日のまとめ



## 参考) 名称検索

- ✓ 必要な糖の名称が分かっているならば検索可能
- ✓ “ $\alpha$ ” は alpha として検索