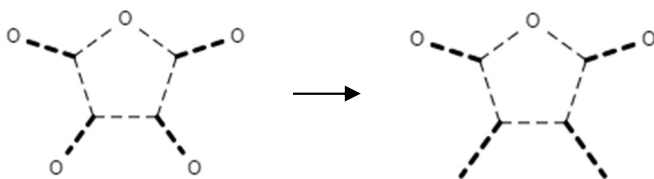


## 「化学物質検索 - 構造」テキスト (18074 版) 追加資料

## ■ 修正点

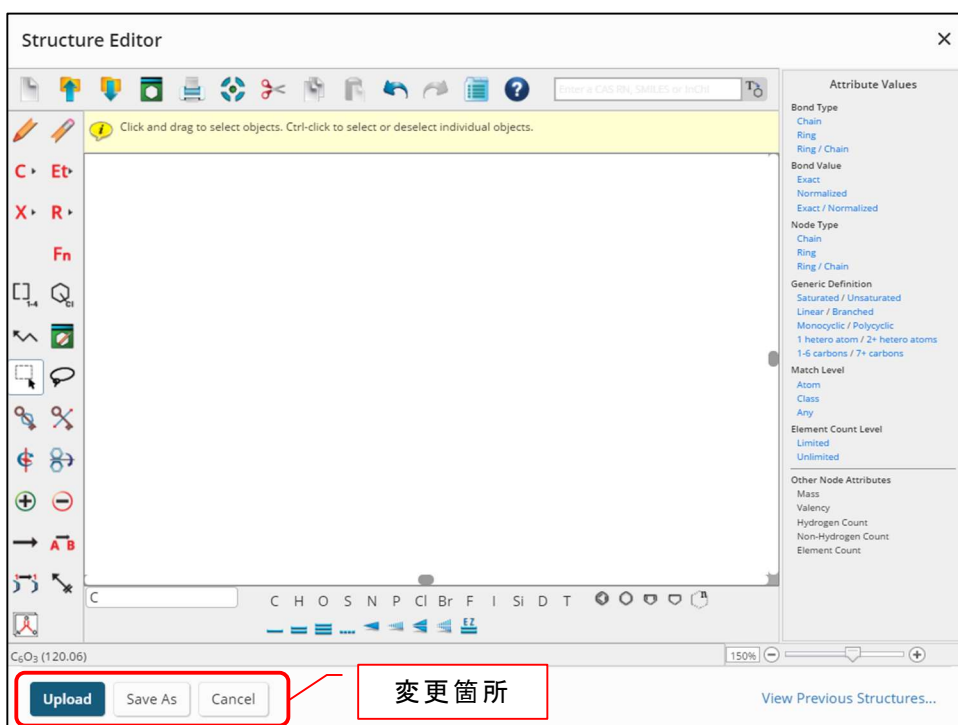
P. 4-7 構造質問式の 3,4 位の酸素 (O) を炭素 (C) に修正.



## ■ 強化に伴う変更点

P. 6-7 作図画面の変更

- ・ P. 6 の作図画面が下図のように変更された.



- ・ 構造作図画面左下の **Upload** をクリックし、構造質問式をアップロードする (P.7).  
構造は自動で STNext 上に保存されます.

P. 7 参考を削除

- ・ 構造質問式をアップロードすると、参考に記載の属性（一般式属性、元素数、結合非水素数）も、自動的に表示されるようになった.

P.15 に追加

- STNext の構造検索のシステム制限値が緩和され、イタレーション数・回答数の制限値が 1 億件になった。STN Express, STN on the Web はテキスト通り。
- REGISTRY ファイルの構造検索におけるシステム制限値 (STNext)

	オンライン検索		BATCH 検索 *
	サンプル検索	フルファイル検索	フルファイル検索
イタレーション数	1,000,000 件	1 億件	1 億件
回答数	50 件	1 億件	1 億件

P.40 参考を削除

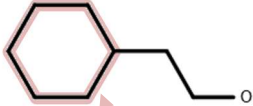
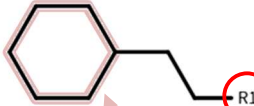
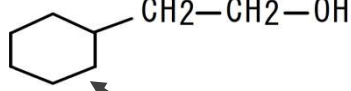
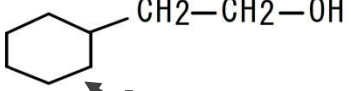
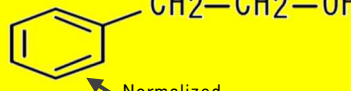
- STNext で -SH (チオール) のショートカットを利用しても、デフォルトで Lock Atoms が適用になり、4 価や 6 価の硫黄化物が回答に含まれなくなった。

P.50 補足

- STNext では、構造検索のシステム制限値が緩和されたため INCOMPLETE の回避方法を利用しなくても、構造検索を実行できるようになった。

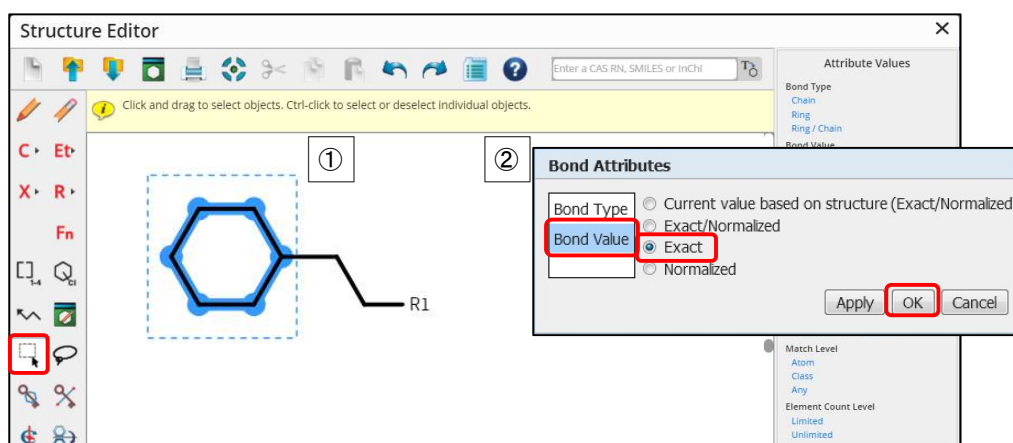
P.26 に追加 (R グループを指定する場合の注意点)

- Current value based on structure (Exact) の結合を含む構造に R グループを付与すると、Bond Value は自動的に Current value based on structure (Exact/Normalized) に変更される。

<p>構造質問式と Bond Value</p>	<p>Lock Ring あり</p>  <p>Bond Attributes</p> <p>Bond Type <input checked="" type="radio"/> Current value based on structure (Exact)</p> <p>Bond Value <input type="radio"/> Exact/Normalized <input type="radio"/> Exact <input type="radio"/> Normalized</p>	<p>Lock Ring あり R1 = N, O</p>  <p>Bond Attributes</p> <p>Bond Type <input checked="" type="radio"/> Current value based on structure (Exact/Normalized)</p> <p>Bond Value <input type="radio"/> Exact/Normalized <input type="radio"/> Exact <input type="radio"/> Normalized</p> <p>R グループを作図すると Bond Value が自動的に変わる</p>
<p>ヒットする構造</p>	 <p>CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-OH</p> <p>Exact</p>	 <p>CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-OH</p> <p>Exact</p>
	 <p>CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-OH</p> <p>Normalized</p>	

- ・ 上記のベンゼン環の構造 (Normalized) の回答が不要の場合には、Bond Value を指定する。

- ① 選択ツールで環を囲み、ハイライトされた結合にカーソルを合わせて右クリックする。
- ② 「Bond Value」を選択し、属性を「Exact」に指定する。



※ ノーマライズド結合の詳細は Appendix 参照。