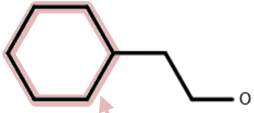
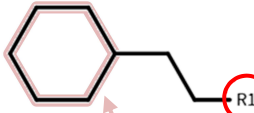
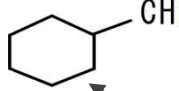
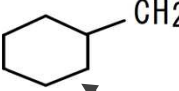
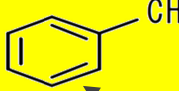


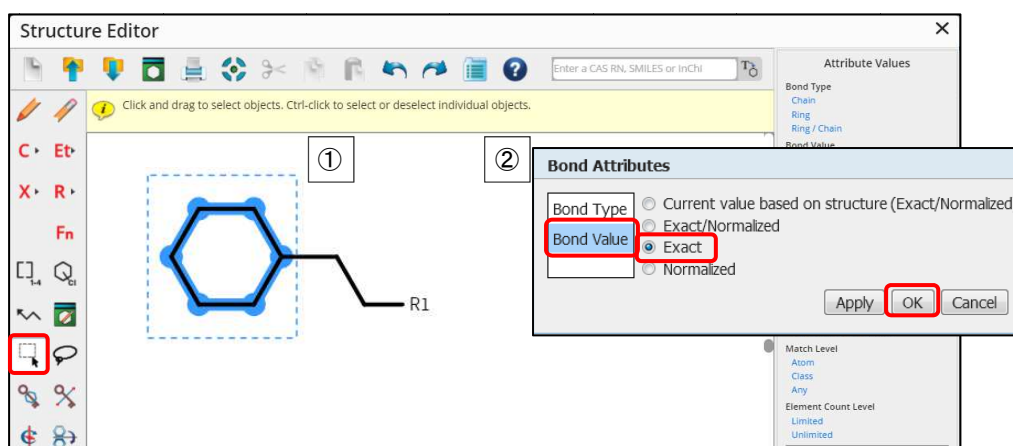
「化学物質検索 - 構造」テキスト (18074 版) 追加資料

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.

構造質問式と Bond Value	 <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>
ヒットする構造	 <p>CH₂-CH₂-OH</p> <p>Exact</p>	 <p>CH₂-CH₂-OH</p> <p>Exact</p>  <p>CH₂-CH₂-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.