

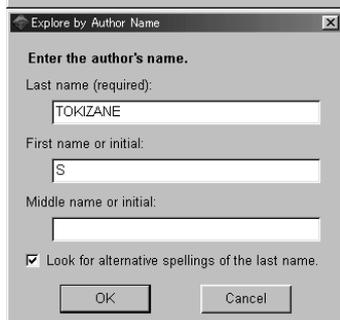
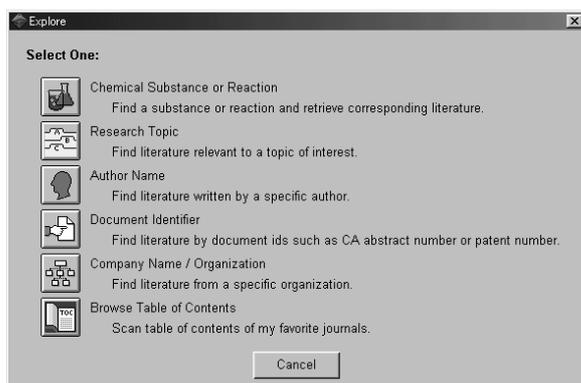
「第 10 章 SciFinder Scholar」練習問題

問題 A (Author Name)

問題 A-1

自分の師事した先生または先輩の論文を一件調べなさい。

解答例

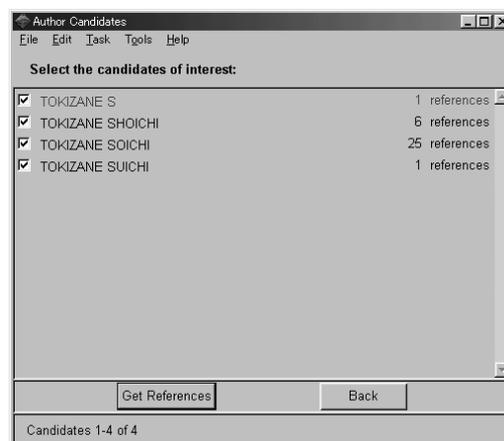


1. SciFinder Scholar のトップメニューで

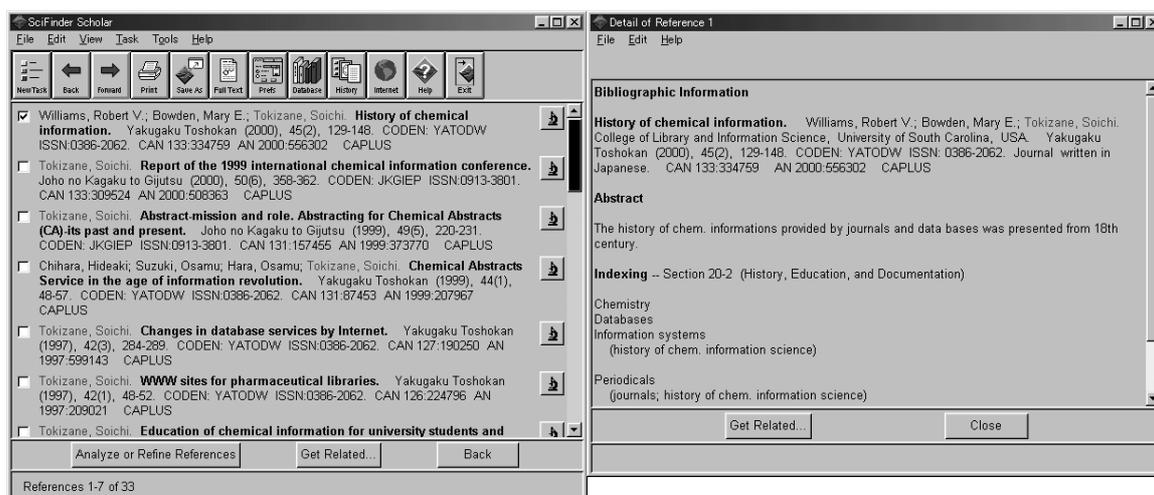


をクリック。

2. 著者名の姓と名, 必要ならミドル・イニシャルを入力。



3. 名をイニシャルで入力しておく, このようにそのイニシャルで始まる名前も候補として挙げられて来る. 適当なものを選択して「Get References」をクリック。

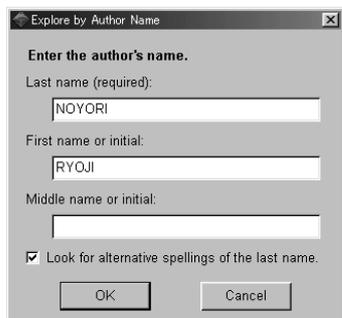


4. 回答リストが表示されるので,  をクリックすると詳細が表示される。

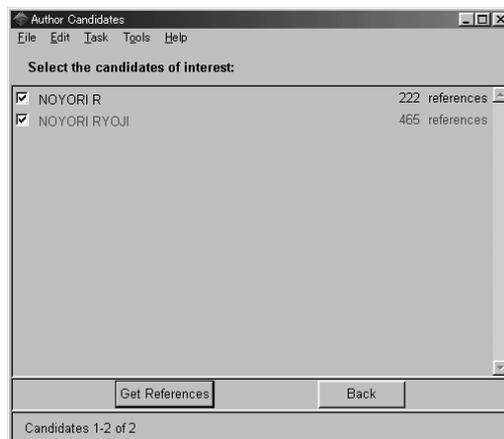
問題 A-2

野依良治 (Noyori Ryoji) 先生のケトンの立体選択的水素化 (stereoselective hydrogenation) に関する文献を一件調べなさい。(Refine を使う)

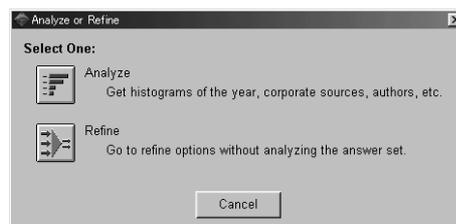
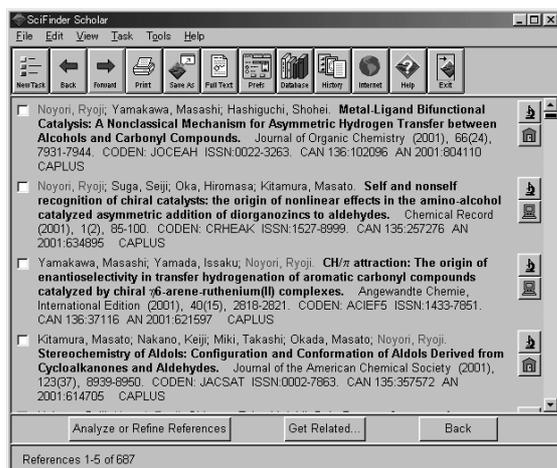
解答例



1. Last name に NOYORI, First name に RYOJI を入力して「OK」をクリック。

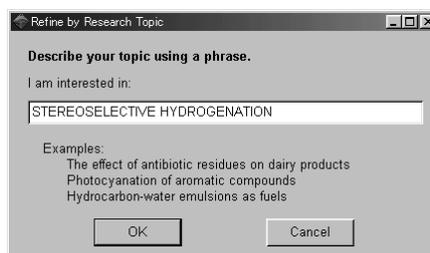
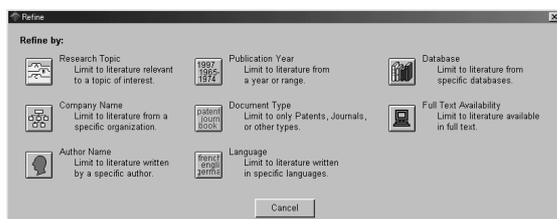


2. 候補が示される。ここでは NOYORI R も選択して「Get References」をクリック。



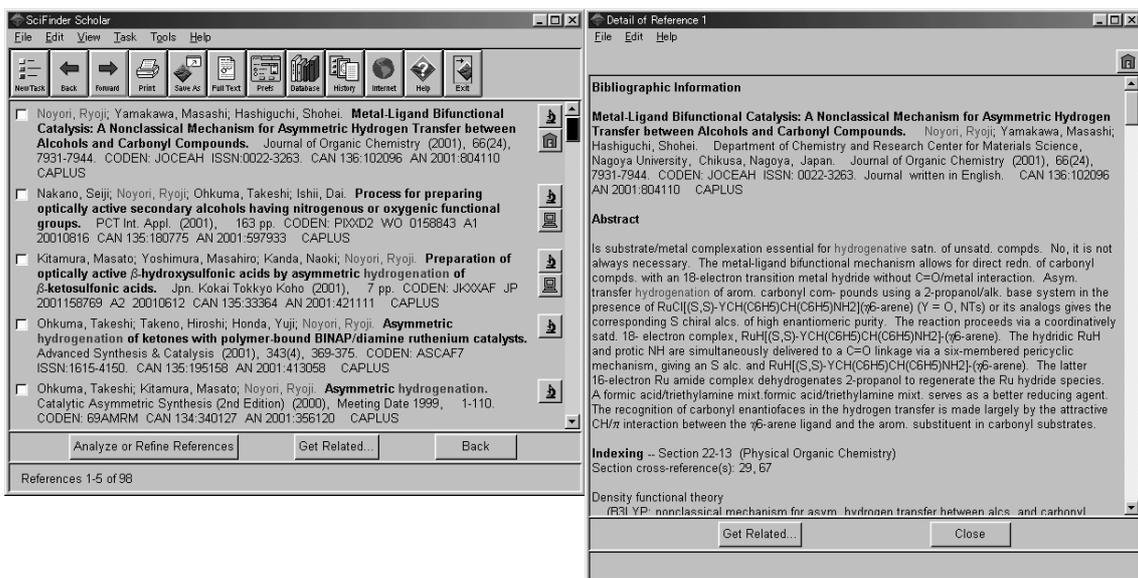
3. 687 件の回答があった。これを絞り込むために、「Analyze or Refine References」をクリック。

4. Analyze と Refine の選択画面で  をクリック。

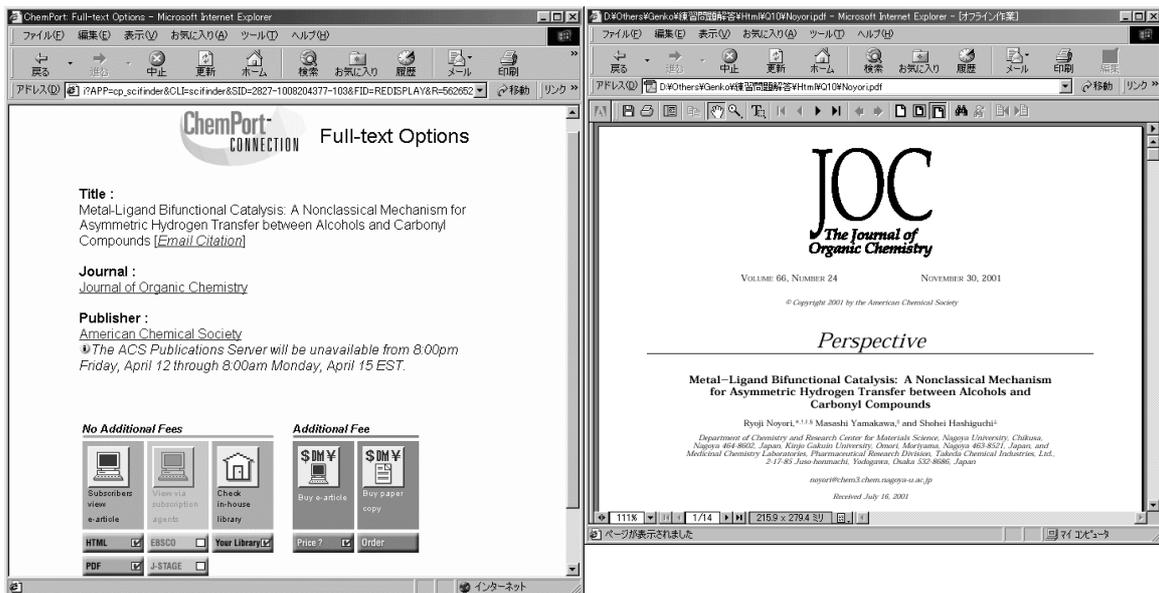


5. Refine の項目が示されるので、ここでは  をクリック。

6. STEREOSELECTIVE HYDROGENATION と入力して「OK」をクリック。



7. 98 件の回答が得られた。一番先頭の文献の  をクリックすると回答が表示される。



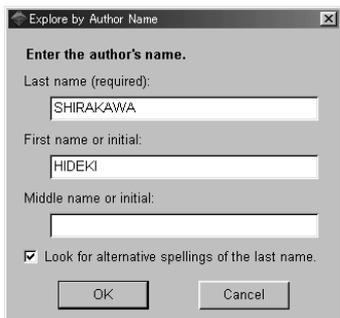
8.  または  アイコンをクリックすると ChemPort の画面が開く。

9. この電子ジャーナルを図書館または個人で購読している場合は「HTML」または「PDF」のボタンをクリックすると全文が表示される (この場合は PDF)。

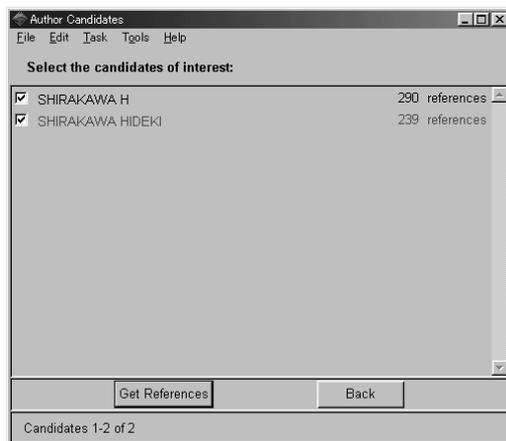
問題 A-3

白川英樹 (Shirakawa Hideki) 先生のポリアセチレン (polyacetylene) に関する一番古い文献 (リストの一番最後の文献) を調べなさい。 (Analyze で東工大を選択)

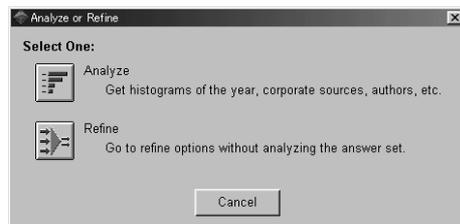
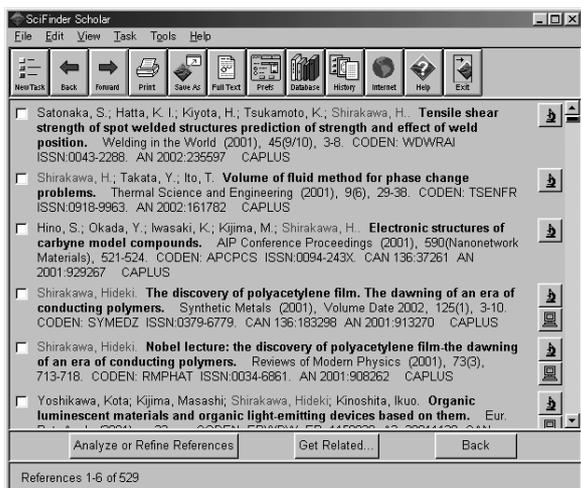
解答例



1. Last name に SHIRAKAWA, First name に HIDEKI を入力して「OK」をクリック。

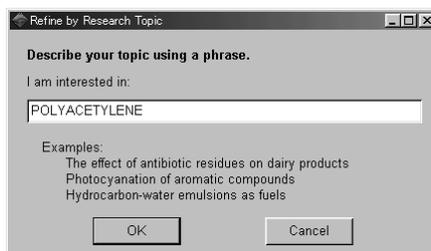
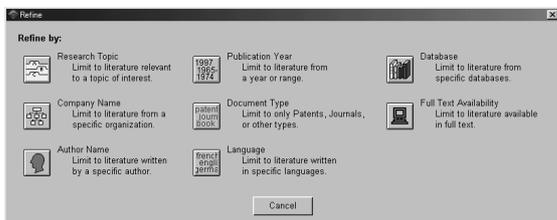


2. 候補が示される。ここでは SHIRAKAWA H も選択して「Get References」をクリック。



3. 529 件の回答があった。これを絞り込むために、「Analyze or Refine References」をクリック。

4. Analyze と Refine の選択画面で

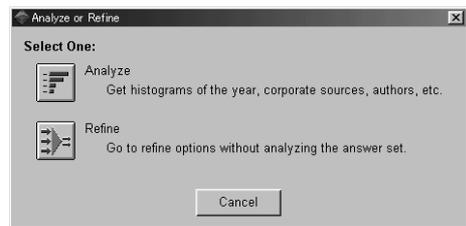
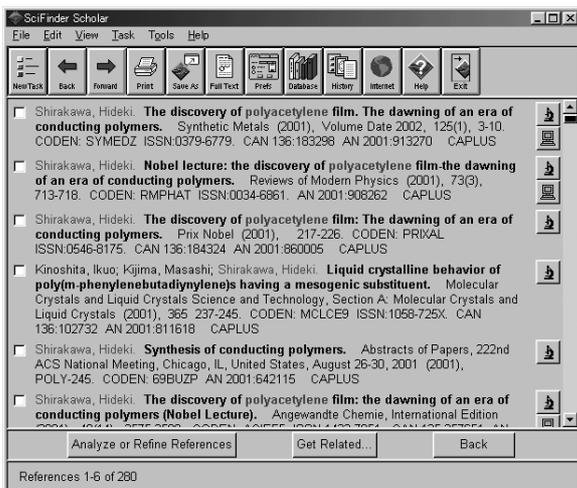


5. Refine の項目が示されるので、ここでは



をクリック。

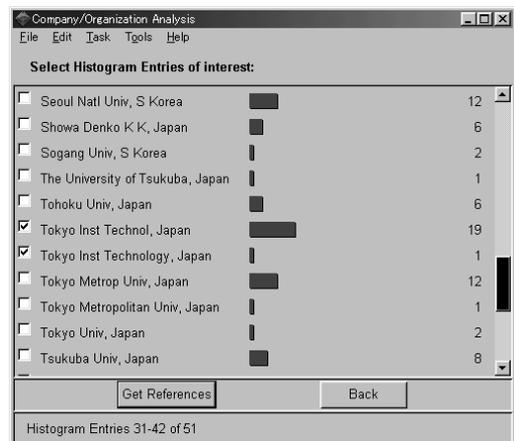
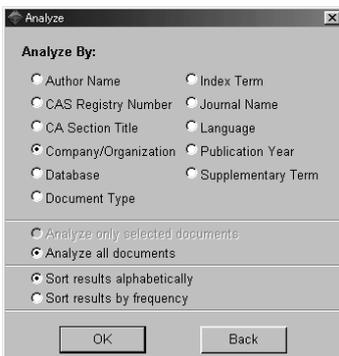
6. POLYACETYLENE と入力して「OK」をクリック。



7. 280 件の回答が得られた。東京工業大学 (Tokyo Institute of Technology) の文献に限定するために、再度「Analyze or Refine References」をクリック。

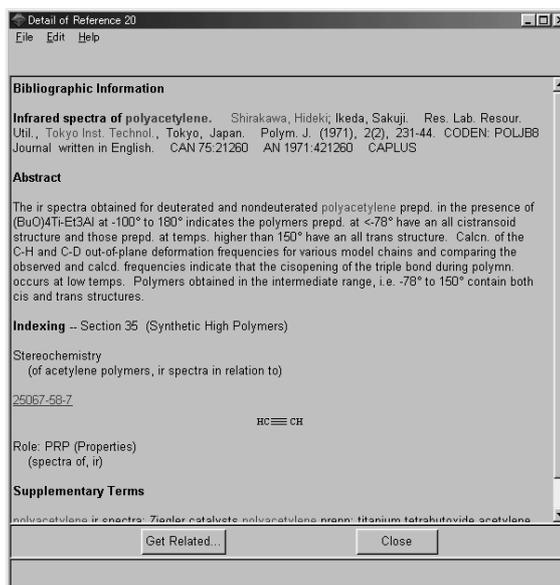
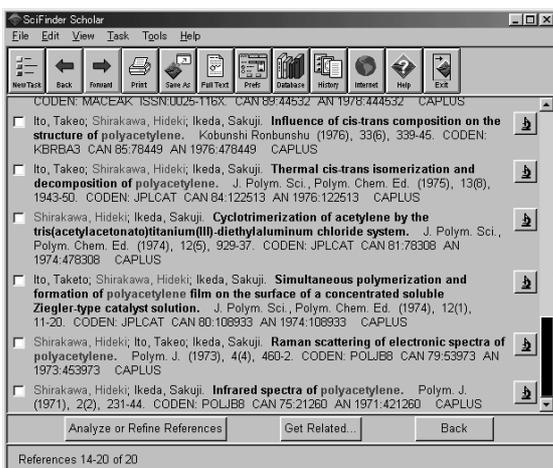


8. Analyze と Refine の選択画面で をクリック。



9. ここでは「Company/Organization」で Analyze することにし、結果はアルファベット順に表示することとする。

10. 機関名 (大学名) が表示されたので、Tokyo Inst Technol, Japan と Tokyo Inst Technology, Japan を選択し、「Get References」をクリック。



11. 20 件の回答が得られた。一番最後の文献の



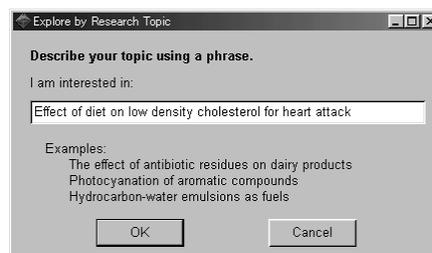
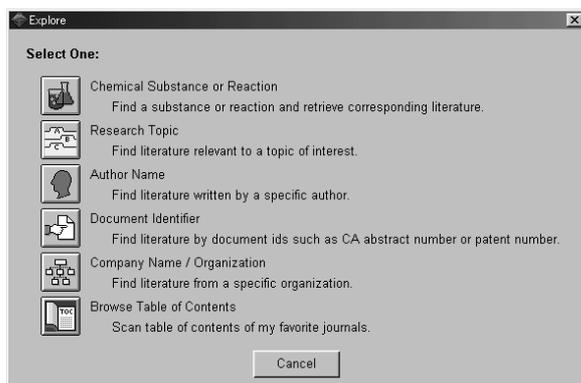
をクリックすると回答が表示される。

問題 B (Research Topic)

問題 B-1

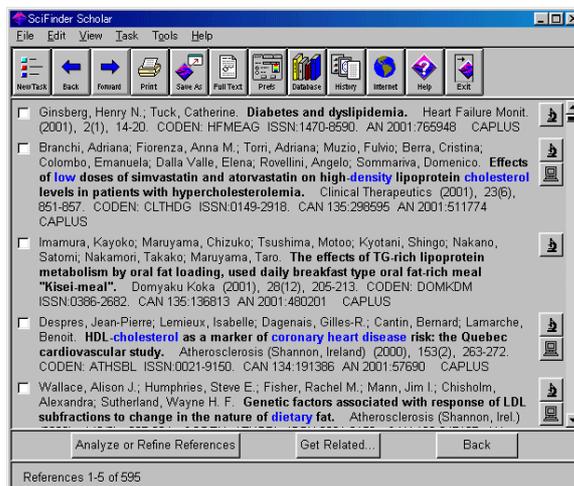
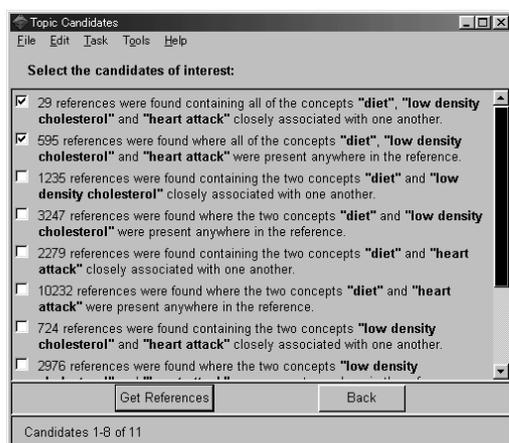
狭心症 (heart attack) における低密度コレステロール (low density cholesterol) に対する食事療法 (diet) の効果について、一番文献の多い著者の文献を一件調べなさい。(Author Name で Analyze する, anonymous は除くこと)

解答例



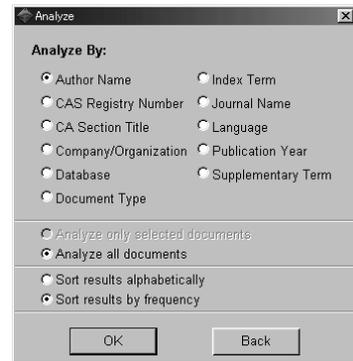
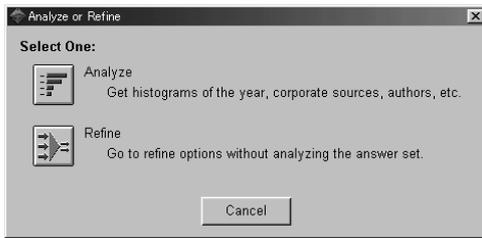
1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. トピック欄に「effect of diet on low density cholesterol for heart attack」と入力、「OK」をクリック (前置詞は何でも良いが、概念の切れ目を示すために必要)。



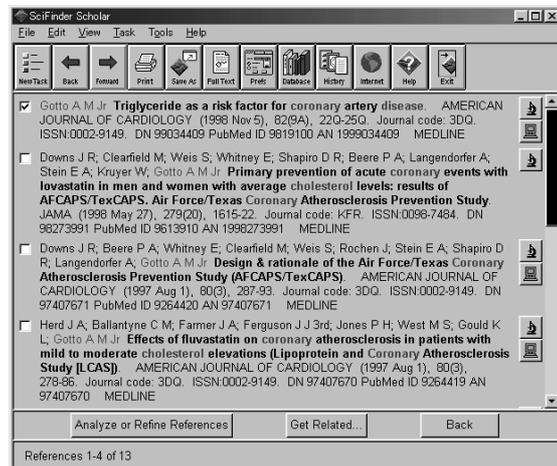
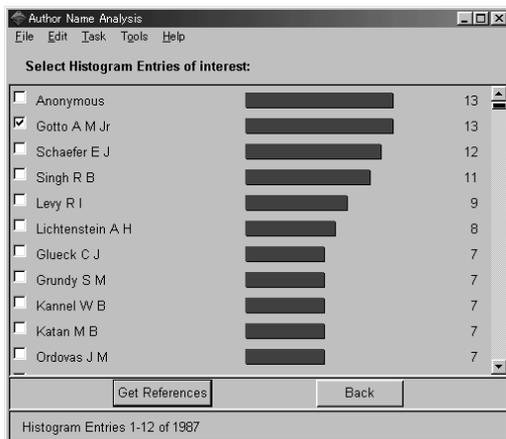
3. 検索の候補が示された。29 文献には diet, low density cholesterol, heart attack の三つの概念が密接に関連して記述されている。595 件の文献には三概念がレコードのどこかに記述されている。この二つの候補を選択し、「Get References」をクリック。

4. 595 件の回答が得られた。ヒットした語は青くハイライトされている。著者の分布を調べるため、「Analyze or Refine References」をクリック。

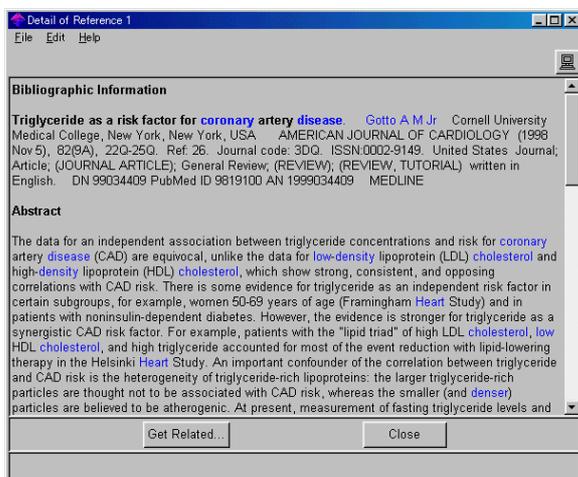


5. Analyze と Refine の選択画面で  をクリック。

6. ここでは Author Name で Analyze し、結果は多い順 (by frequency) に表示することとする。



7. Anonymous (無記名) を除くと、一番文献が多い著者は Gott A. M. Jr. なので、これを選択し、「Get References」をクリック。

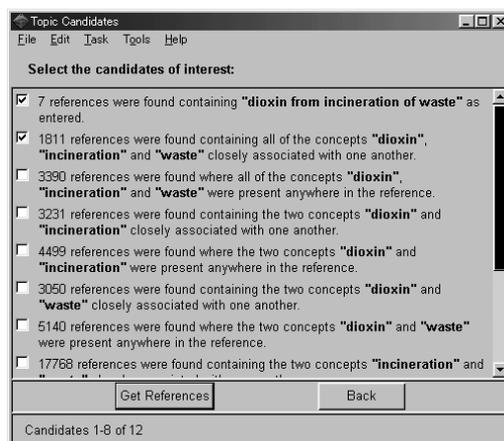
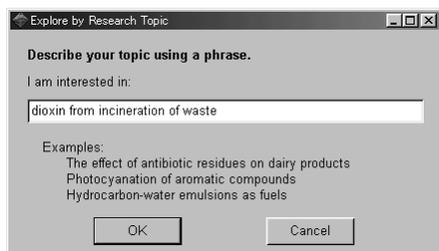


8. 13 件の回答があった。一番先頭の文献の  をクリックすると回答が表示される。ヒットした語は青くハイライトされている。

問題 B-2

ごみ (waste) の焼却 (incineration) とダイオキシン (dioxin) の関係に関する総説 (General Review) を一件調べなさい。 (Analyze を使う)

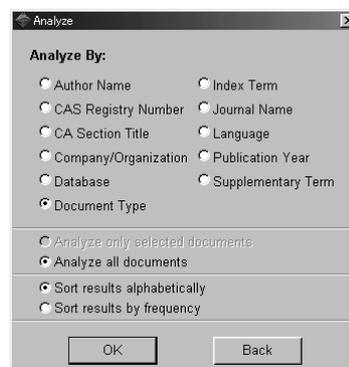
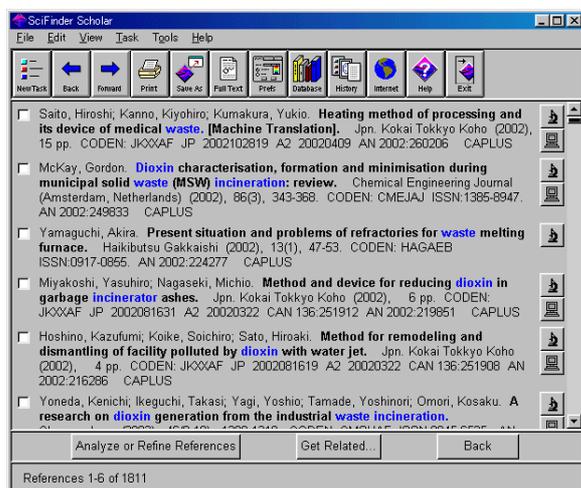
解答例



1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. トピック欄に「dioxin from incineration of waste」と入力、「OK」をクリック。

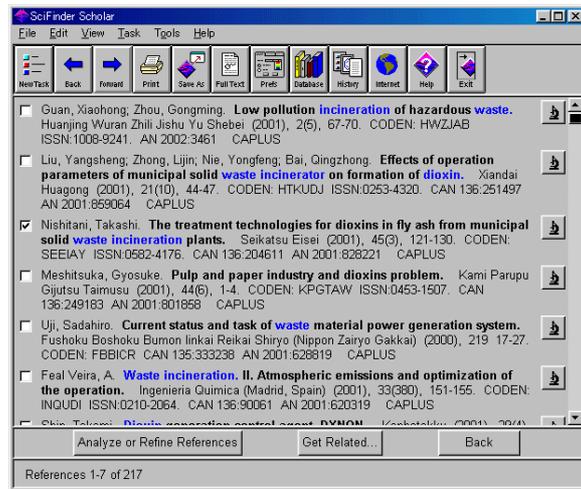
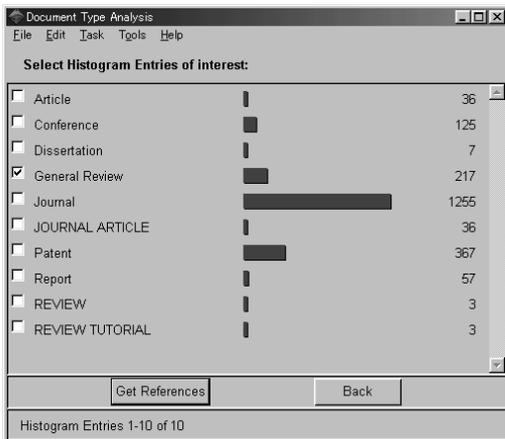
3. 検索の候補が示された。7 文献には dioxin from incineration of waste という語句がそのとおり記述されている。1811 文献には dioxin, incineration, waste の三つの概念が密接に関連して記述されている。3390 件の文献には三概念がレコードのどこかに記述されている。先頭の二つの候補を選択し、「Get References」をクリック。



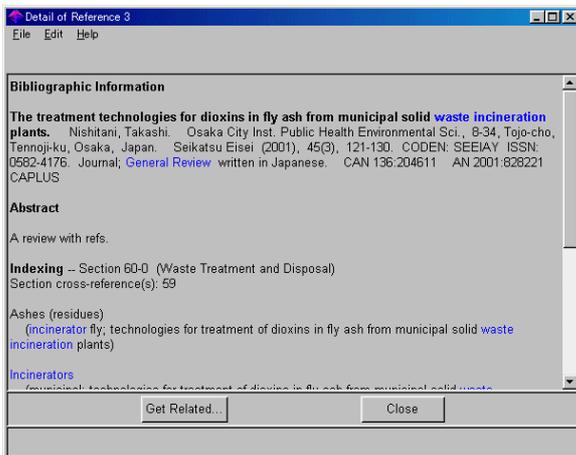
4. 595 件の回答が得られた。ヒットした語は青くハイライトされている。総説に絞るため、「Analyze or Refine References」をクリック。

5. Analyze と Refine の選択画面で  をクリック。

6. ここでは Document Type で Analyze し、結果は alphabet 順に表示することとする。



7. General Review を選択し、「Get References」をクリック。217 件の回答が得られた。

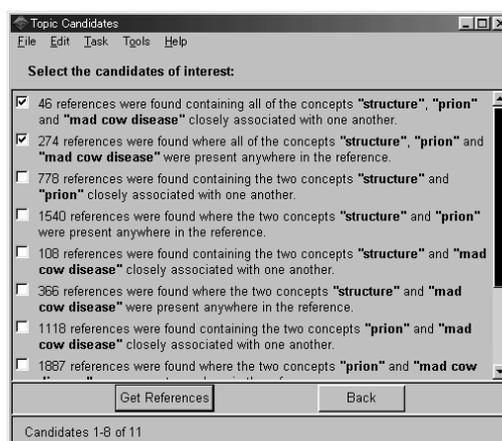
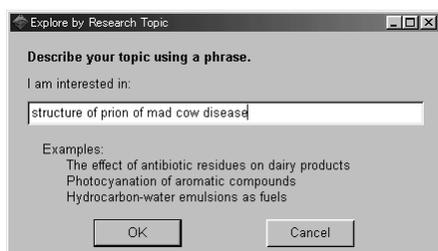


8.  をクリックし、回答のひとつを表示した。

問題 B-3

狂牛病 (mad cow disease) とプリオン (prion) の構造 (structure) についての日本語の文献を一件調べなさい。(Analyze を使う)

解答例

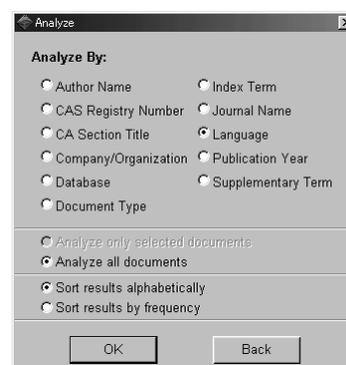
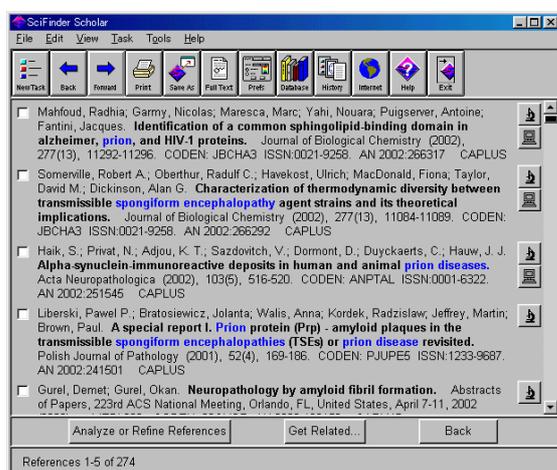


1. SciFinder Scholar のトップメニューで をクリック。



2. トピック欄に「structure of prion of mad cow disease」と入力、「OK」をクリック。

3. 検索の候補が示された。46 文献には structure, prion, mad cow disease の三つの概念が密接に関連して記述されている。274 件の文献には三概念がレコードのどこかに記述されている。この二つの候補を選択し、「Get References」をクリック。

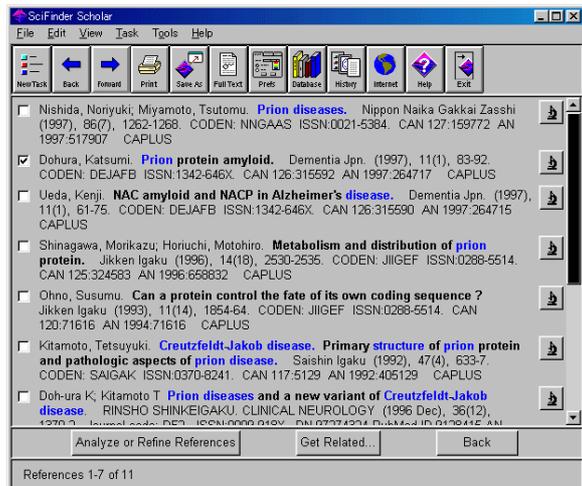
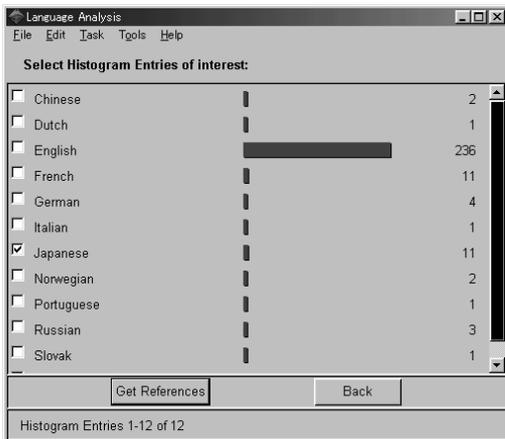


4. 274 件の回答が得られた。ヒットした語は青くハイライトされている。日本語文献に絞るため、「Analyze or Refine References」をクリック。



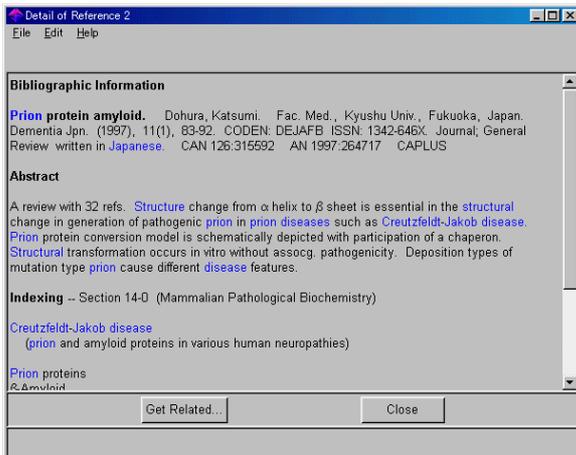
5. Analyze と Refine の選択画面で をクリック。

6. ここでは Language で Analyze し、結果は alphabet 順に表示することとする。



7. Japanese を選択し、「Get References」をクリック。

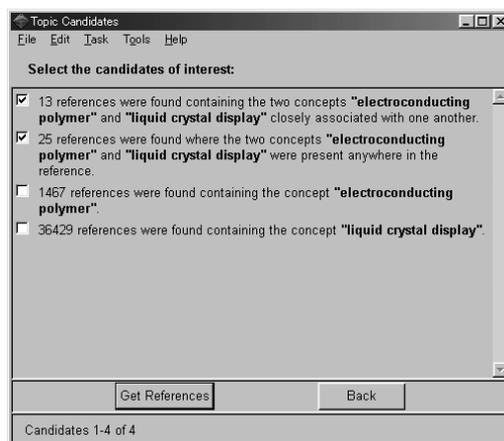
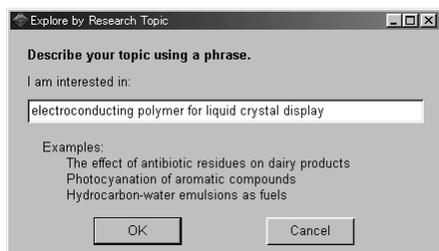
8. 11 件の回答が得られた。  をクリックすると回答が表示される。ヒットした語は青くハイライトされている。



問題 B-4

導電性ポリマー (electroconducting polymer) の液晶ディスプレイ (liquid crystal display) への応用に関する日本特許を一件調べなさい。(Analyze を使う)

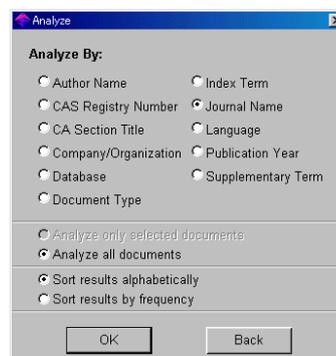
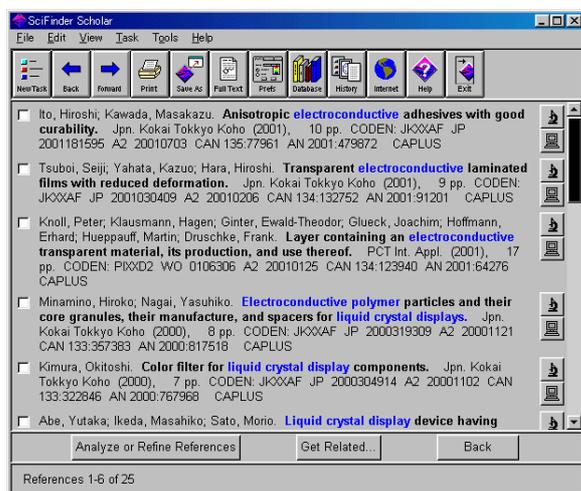
解答例



1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. トピック欄に「electroconducting polymer for liquid crystal display」と入力、「OK」をクリック。

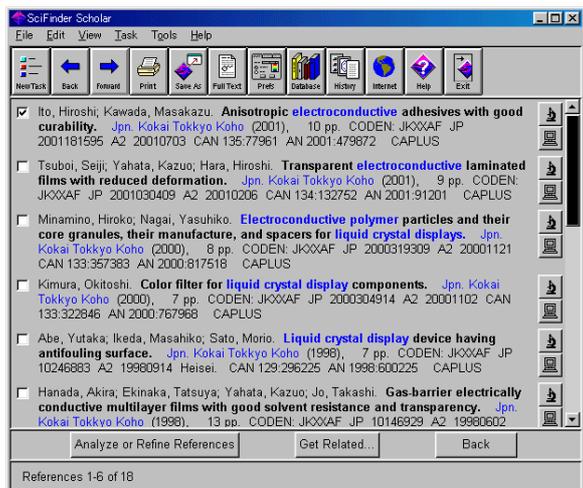
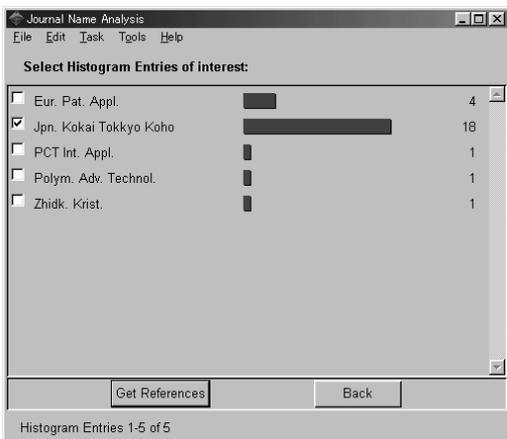
3. 検索の候補が示された。13 文献には electroconducting polymer, liquid crystal display の二つの概念が密接に関連して記述されている。25 件の文献には二概念がレコードのどこかに記述されている。この二つの候補を選択し、「Get References」をクリック。



4. 25 件の回答が得られた。ヒットした語は青くハイライトされている。日本特許に絞るため、「Analyze or Refine References」をクリック。

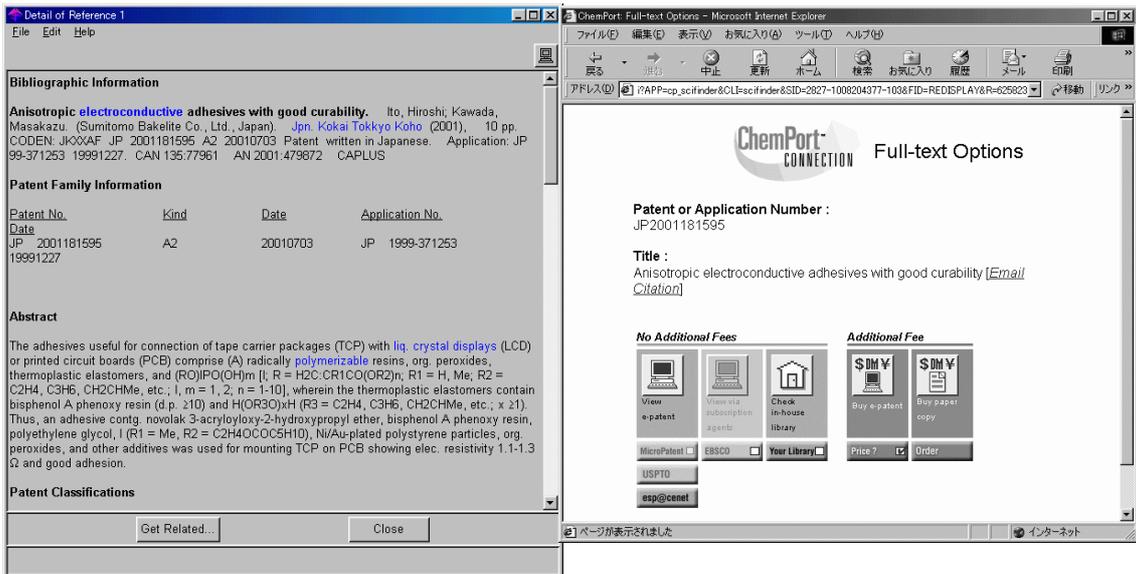
5. Analyze と Refine の選択画面で  をクリック。

6. ここでは Journal Name で Analyze し、結果は alphabet 順に表示することとする。



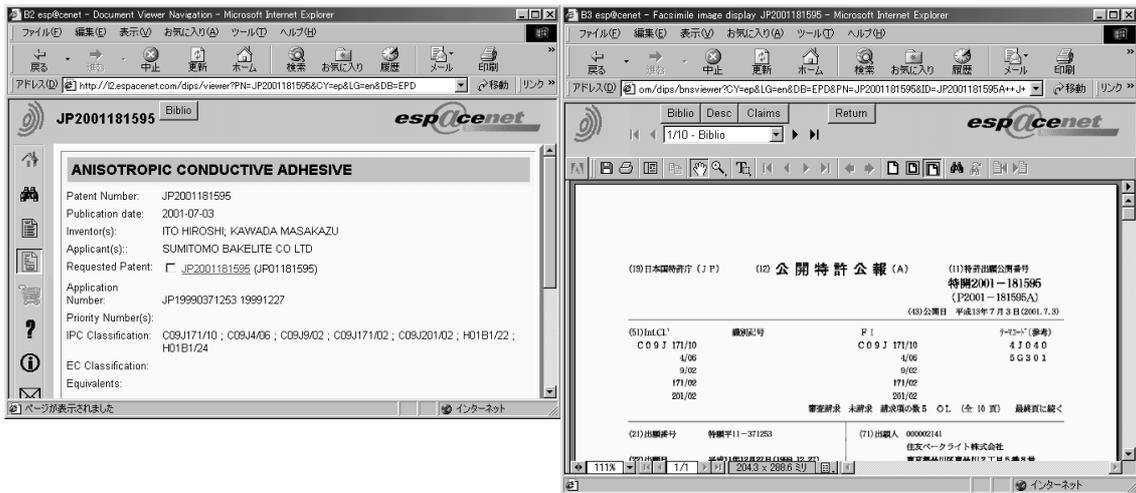
7. Jpn. Kokai Tokkyo Koho を選択し、「Get References」をクリック。

8. 16 件の回答が得られた。  をクリックすると回答が表示される。ヒットした語は青くハイライトされている。



9.  アイコンをクリックすると ChemPort の画面が開く。

10. esp@cenet のアイコンをクリックすると欧州特許庁のページにリンクする。



11. 特許番号がハイライトされているので、これをクリック.

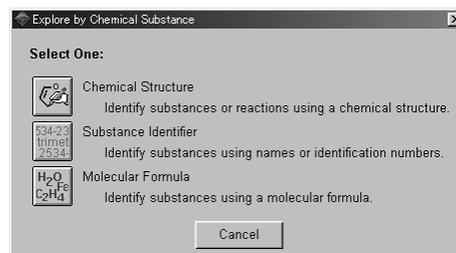
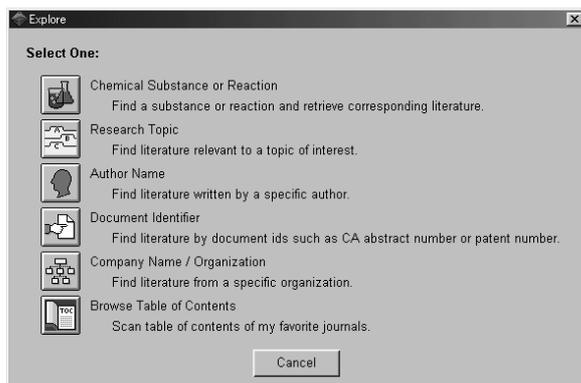
12. 特許の PDF が表示される.

問題 C (Chemical Substance or Reaction – Substance Identifier)

問題 C-1

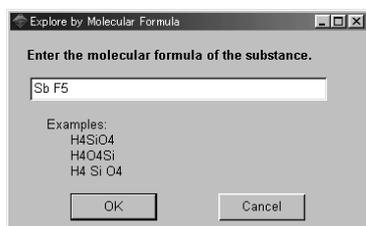
Antimony fluoride の用途 (Uses) に関する文献を一件調べなさい (分子式で調べるのがよい, 名前で調べるときは Antimony pentafluoride を使う必要がある).

解答例



1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック.

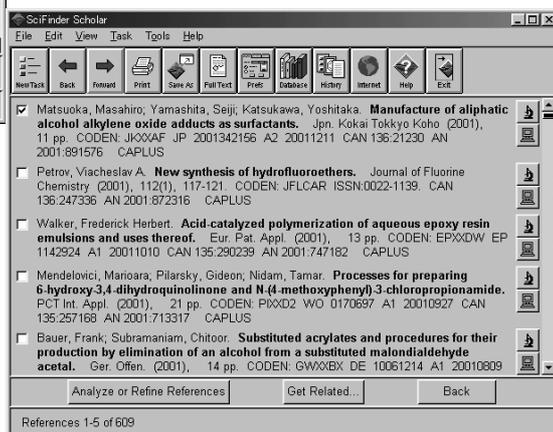
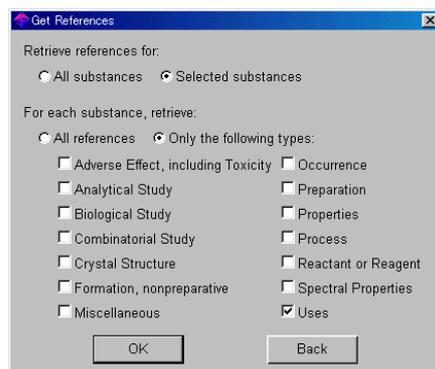
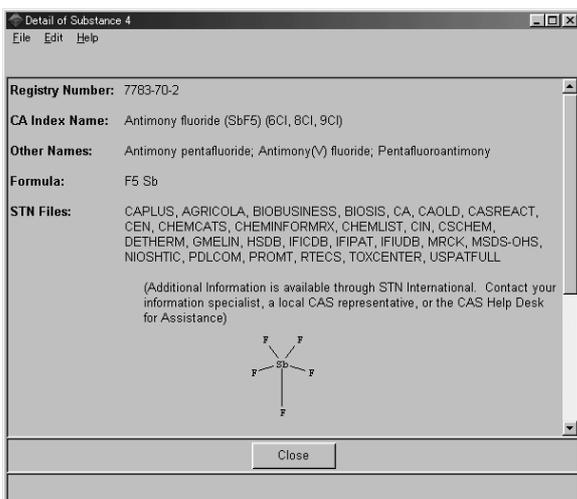
2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック.



3. 分子式の欄に「Sb F5」と入力して「OK」をクリック (SbF5 のようにくっつけるとあいまいになる場合があるので, スペースを入れるのが好ましい).

4. 四件の化合物が表示された. 最後のもの [7783-70-2] が探しているものと思われる.

 をクリックすると詳細が表示される.

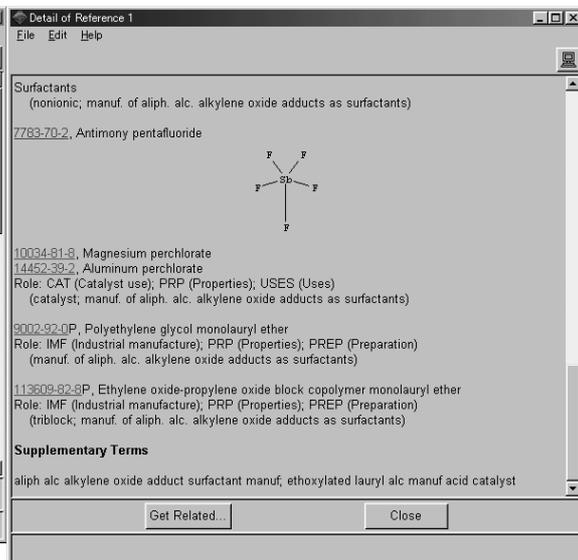
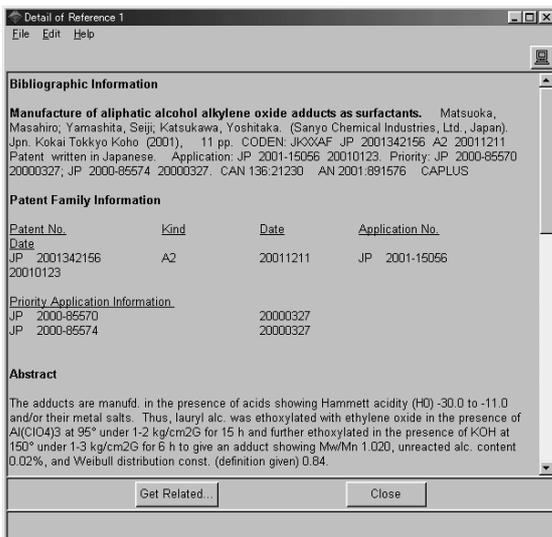


5. 名前からもこの化合物で間違いがないので、一旦「Close」をクリックして閉じる。

6. 「Get References」をクリック。

7. 選択画面になるので、「Selected substances」, 「Only the following types」をクリックし、「Uses」を選択する。「OK」をクリック。

8. 609 件の文献が得られた。  をクリックすると文献の詳細が表示される。

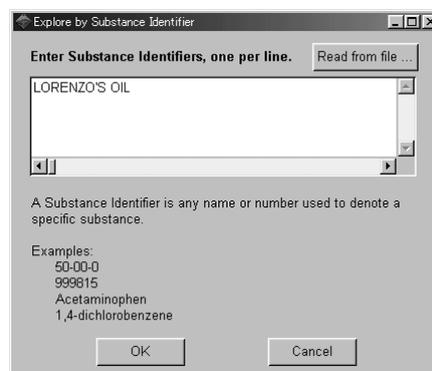
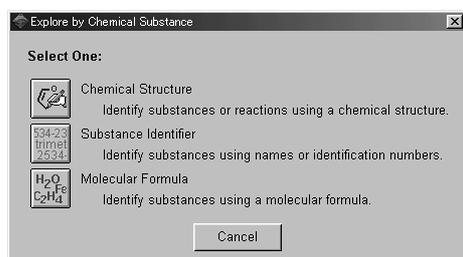


9. 文献レコードの下の方を見ていくと、Antimony pentafluoride の索引項目が表示されており、alkylene oxide 製造の catalyst として使用されていることがわかる。

問題 C-2

ロレンツォの油 (Lorenzo's oil) の合成 (Preparation) に関する文献を一件調べなさい。

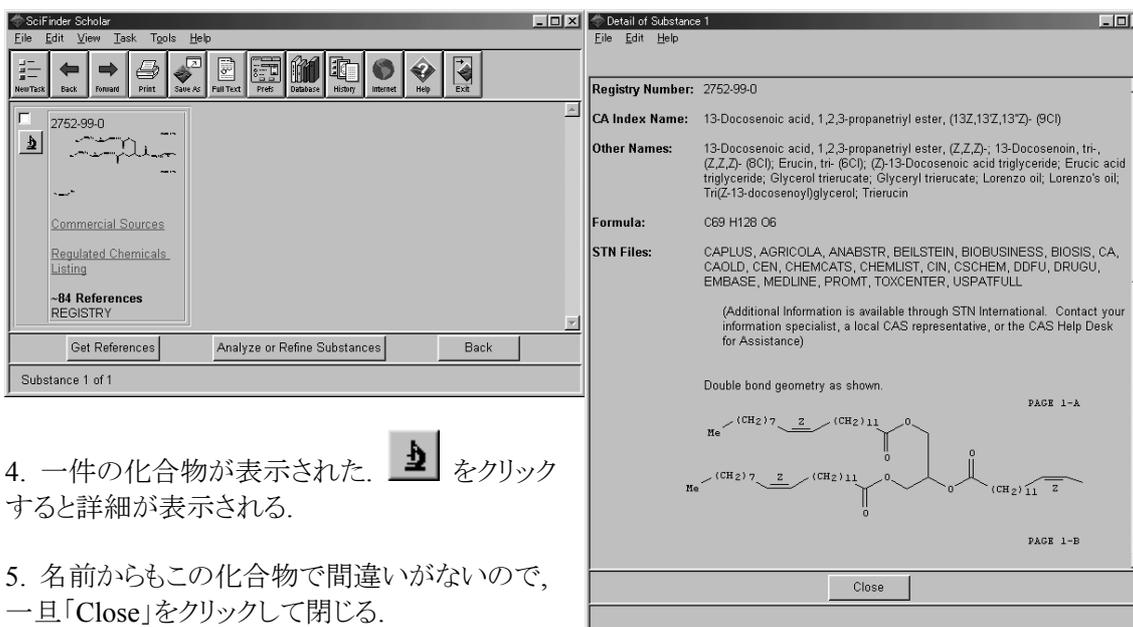
解答例



1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック。

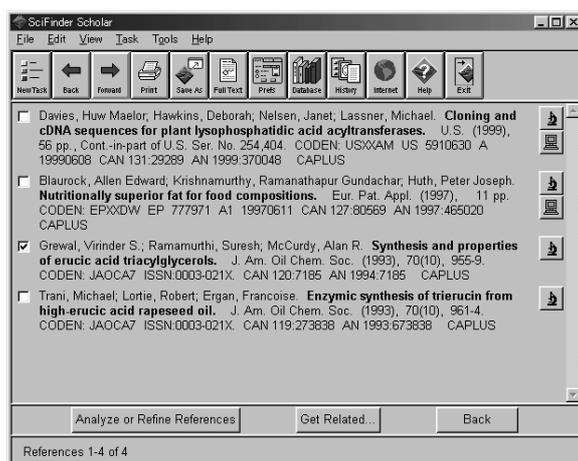
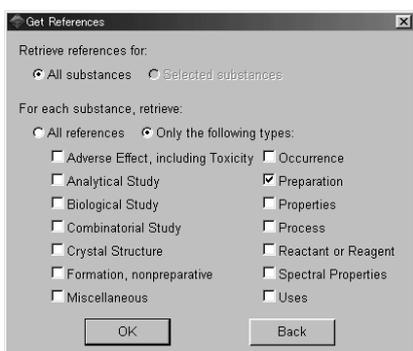
3. 名称の欄に「LORENZO'S OIL」と入力して「OK」をクリック。



4. 一件の化合物が表示された。  をクリックすると詳細が表示される。

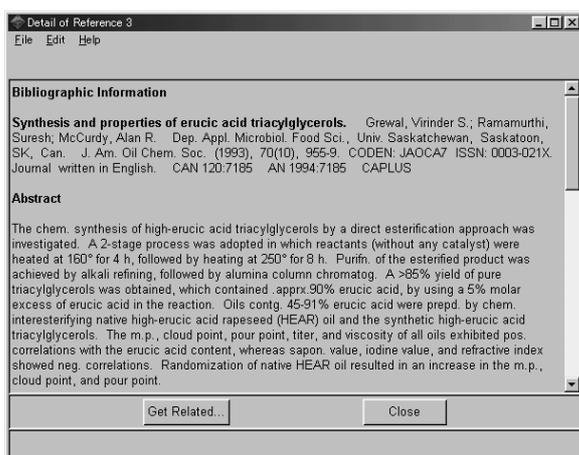
5. 名前からもこの化合物で間違いがないので、一旦「Close」をクリックして閉じる。

6. 「Get References」をクリック。



7. 選択画面になるので、「All substances」、「Only the following types」をクリックし、「Preparations」を選択する。「OK」をクリック。

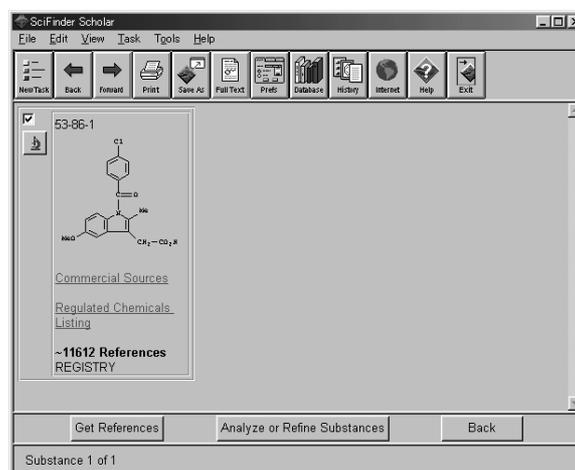
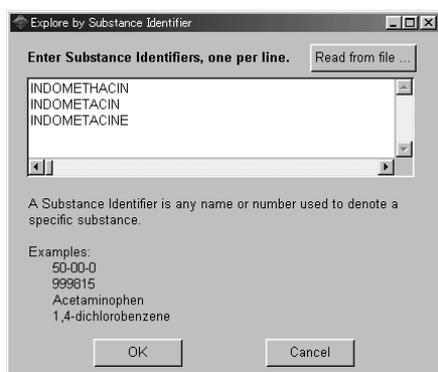
8. 四件の文献が得られた。  をクリックすると文献の詳細が表示される。



問題 C-3

Indomethacin の毒性 (Toxicity) に関する文献を一件調べなさい。

解答例



1. SciFinder Scholar のトップメニューで



をクリック。

2. Explore by Chemical Substance のメニューで



をクリック。

3. 名称の欄に「INDOMETHACIN」と入力して「OK」をクリック (綴りに不安があるときは、複数の綴りを入力するとよい)。

4. 一件の化合物が表示された。

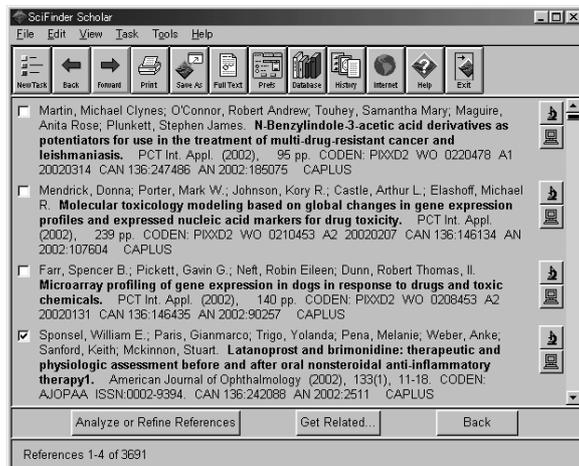
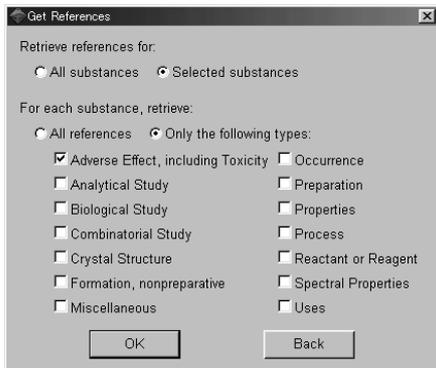


をクリックすると詳細が表示される。

PROPERTY	VALUE	CONDITION	NOTE
H donors	1		ACD (1)
H acceptors	5		ACD (1)
Molecular Weight	357.79		ACD (1)
logP	3.105+/-0.372		ACD (1)
logD	3.10	pH 1	ACD (1)
logD	2.88	pH 4	ACD (1)
logD	0.30	pH 7	ACD (1)
logD	-0.53	pH 8	ACD (1)
logD	-0.99	pH 10	ACD (1)
pKa	4.17 +/-0.20	Most Acidic	ACD (1)
Molar Solubility	Sparingly Soluble	pH 1	ACD (1)
Molar Solubility	Sparingly Soluble	pH 4	ACD (1)
Molar Solubility	Slightly Soluble	pH 7	ACD (1)
Molar Solubility	Slightly Soluble	pH 8	ACD (1)
Molar Solubility	Soluble	pH 10	ACD (1)

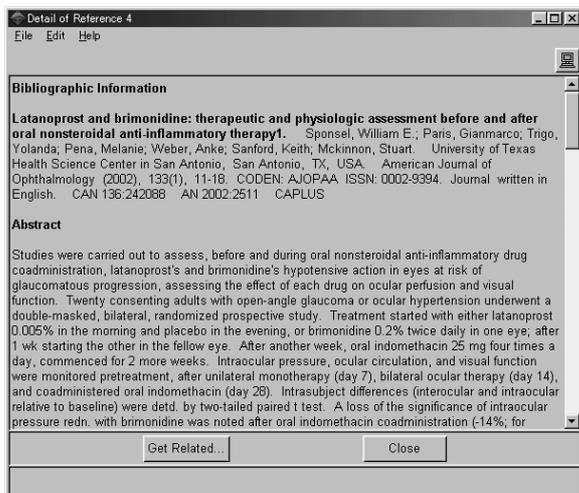
5. 回答の下の方には計算された物性データが記載されている。名前からもこの化合物で間違いがないので、一旦「Close」をクリックして閉じる。

6. 「Get References」をクリック。



7. 選択画面になるので、「All substances」、「Only the following types」をクリックし、「Adverse Effect, including Toxicity」を選択する。「OK」をクリック。

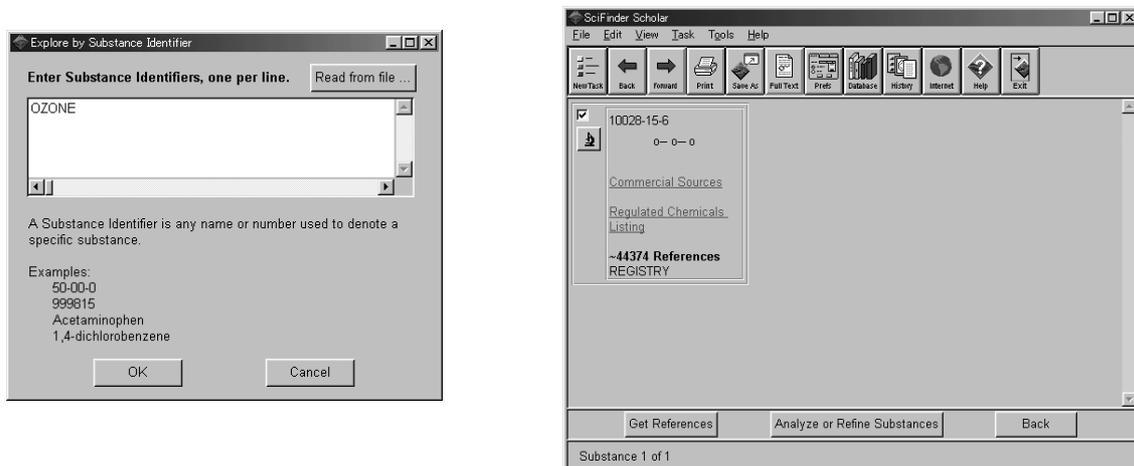
8. 3691 件の文献が得られた。  をクリックすると文献の詳細が表示される。



問題 C-4

Ozone の分析 (Analytical Study) に関する文献を一件調べなさい。

解答例

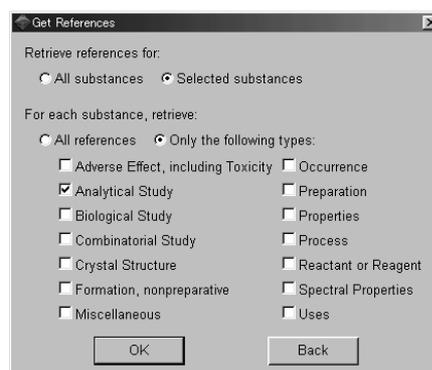
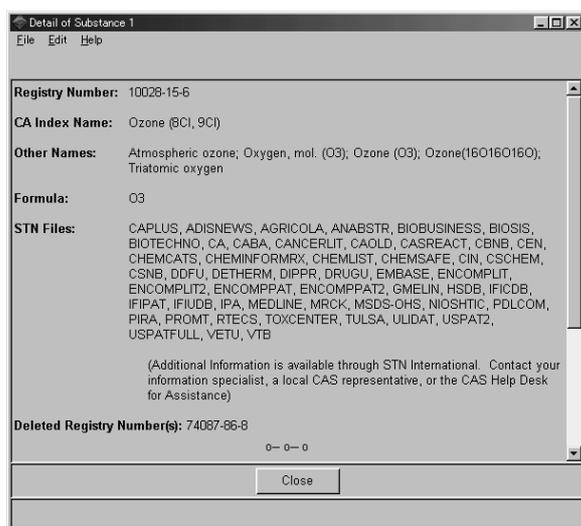


1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック。

3. 名称の欄に「OZONE」と入力して「OK」をクリック。

4. 一件の化合物が表示された。  をクリックすると詳細が表示される。



5. 名前からもこの化合物で間違いがないので、一旦「Close」をクリックして閉じる。

6. 「Get References」をクリック。

7. 選択画面になるので、「All substances」、「Only the following types」をクリックし、「Analytical Study」を選択する。「OK」をクリック。

The image shows two windows from the SciFinder Scholar application. The left window, titled 'SciFinder Scholar', displays a list of search results. The first result is selected and checked. The right window, titled 'Detail of Reference 1', shows the full details of the selected patent.

Search Results (Left Window):

- Mori, Yoshihiko, Hashino, Masatoshi, Isomura, Kinzo, Nakaya, Kenji, Minegishi, Torataro, Mizuno, Kenichiro, Takahashi, Kazutaka, Kadokawa, Noriaki. **Method and device for water treatment using ozone with membrane filtration.** Jpn. Kokai Tokkyo Koho (2002), 6 pp. CODEN: JKXXAF JP 2002086193 A2 20020326 AN 2002:228392 CAPLUS
- Kono, Takashi. **Apparatus for treatment of swimming pool water with ozone and UV radiation.** Jpn. Kokai Tokkyo Koho (2002), 4 pp. CODEN: JKXXAF JP 2002086168 A2 20020326 CAN 136:252194 AN 2002:228368 CAPLUS
- Kawarabayashi, Takao. **Easy water analyzer using enzymic reaction.** Jpn. Kokai Tokkyo Koho (2002), 12 pp. CODEN: JKXXAF JP 2002085052 A2 20020326 AN 2002:228115 CAPLUS
- Chowdhury, Sudhir. **Method and device for detecting ozone-consuming agents.** PCT Int. Appl. (2002), 38 pp. CODEN: PIXXD2 WO 0217975 A1 20020307 CAN 136:221795 AN 2002:171737 CAPLUS
- Yagi, Shigeru. **Ozone analyzer.** Jpn. Kokai Tokkyo Koho (2002), 9 pp. CODEN: JKXXAF JP 2002062257 A2 20020226 CAN 136:204531 AN 2002:155065 CAPLUS

Reference Detail (Right Window):

Bibliographic Information

Method and device for water treatment using ozone with membrane filtration. Mori, Yoshihiko, Hashino, Masatoshi, Isomura, Kinzo, Nakaya, Kenji, Minegishi, Torataro, Mizuno, Kenichiro, Takahashi, Kazutaka, Kadokawa, Noriaki. (Asahi Chemical Industry Co., Ltd., Japan; Isomura Hosui Mfg. Co., Ltd.; NKK Corp.; Fuji Electric Co., Ltd.) Jpn. Kokai Tokkyo Koho (2002), 6 pp. CODEN: JKXXAF JP 2002086193 A2 20020326 Patent written in Japanese. Application: JP 2000-286344 20000921. AN 2002:228392 CAPLUS

Patent Family Information

Patent No.	Kind	Date	Application No.
JP 2002086193	A2	20020326	JP 2000-286344
20000921			

Abstract

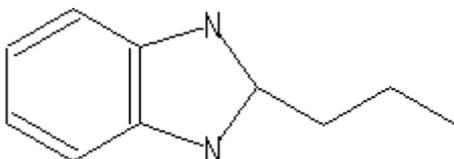
The method is carried out by adding oxidizer and Mn sand filtration of the original water to remove Mn for lowering Mn concn. in the water, injection of ozone to the water via an ozone injection device, membrane filtration of the water to obtain filtrate, and activated carbon treatment of the filtrate to obtain treated water having 0.01-10 mg/L residual ozone.

8. 4283 件の文献が得られた。  をクリックすると文献の詳細が表示される。

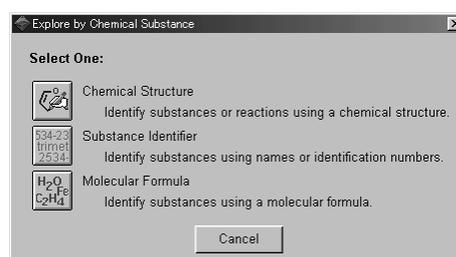
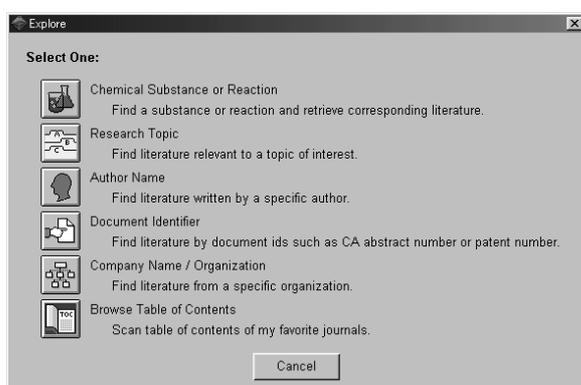
問題 D (Chemical Substance or Reaction – Chemical Structure)

問題 D-1

次の化合物 (exact match) に関する文献を一件調べなさい。

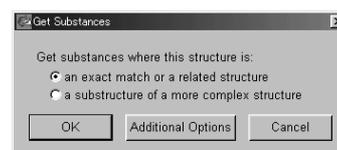
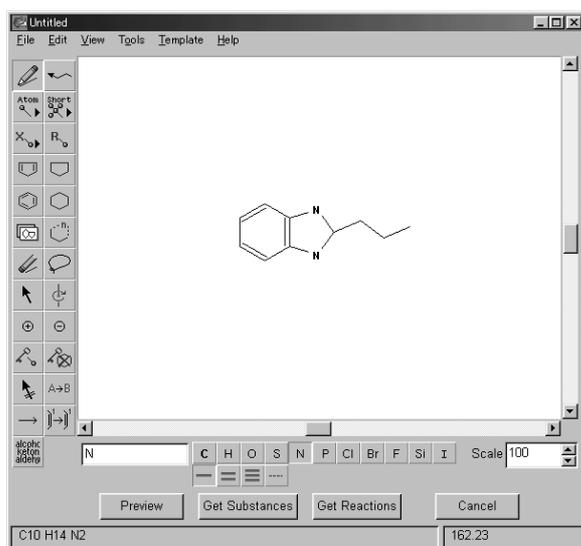


解答例



1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック。



3. 構造作図画面が表示されるので、各種ツールを使って構造を作図。

4. 構造が作図できたら「Get Substances」をクリックすると、選択画面となるので、exact match を選択し、「OK」をクリック。

Registry Number: 216432-58-5

CA Index Name: 1H-Benzimidazole, 2,3-dihydro-2-propyl-, (9CI)

Formula: C10H14N2

STN Files: CAPLUS, CA, CASREACT

(Additional Information is available through STN International. Contact your information specialist, a local CAS representative, or the CAS Help Desk for Assistance)

PROPERTY	VALUE	CONDITION	NOTE
H donors	2		ACD (1)
H acceptors	2		ACD (1)
Molecular Weight	162.23		ACD (1)
logP	2.224+/-0.264		ACD (1)
Freely Rotatable Bonds	2		ACD (1)
logD	-0.28	pH 1	ACD (1)
logD	0.06	pH 4	ACD (1)
logD	2.12	pH 7	ACD (1)
logD	2.21	pH 8	ACD (1)
logD	2.22	pH 10	ACD (1)
pKa	6.44+/-0.20	Most Basic	ACD (1)
Molar Solubility	Very Soluble	pH 1	ACD (1)
Molar Solubility	Soluble	pH 4	ACD (1)
Molar Solubility	Sparsingly Soluble	pH 7	ACD (1)
Molar Solubility	Sparsingly Soluble	pH 8	ACD (1)
Molar Solubility	Sparsingly Soluble	pH 10	ACD (1)

4. 一件の化合物が表示された。 をクリックすると詳細が表示される。

5. 一旦「Close」をクリックして閉じる。

6. 「Get References」をクリック。

7. 選択画面になるので、「Selected substances」、「All references」を選択する。「OK」をクリック。

8. 一件の文献が得られた。 をクリックすると文献の詳細が表示される。

Bibliographic Information

Intermediates in the reaction of o-phenylenediamine with carbonyl compounds and their subsequent conversions. Zelenin, K. N.; Ukraintsev, I. V.; Alekseev, V. V. Academy of Military Medicine, St. Petersburg, Russia. Chem. Heterocycl. Compd. (N. Y.) (1998), 34(3), 329-333. CODEN: CHCCAL ISSN: 0009-3122. Journal written in English. CAN 130:25049 AN 1998:676609 CAPLUS

Abstract

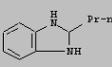
The reaction of o-phenylenediamine with aldehydes and ketones was studied using PMR spectroscopy. The reaction begins with the formation of monoimines, isolated in condensations with arom. aldehydes, which are cyclized to the corresponding benzimidazolines. Thus, reaction of 1,2-(H2N)2C6H4 with MeCHO gave the intermediate 2-H2NC6H4N-CHMe which was quant. converted over several hours to 2-methylbenzimidazoline. The benzimidazolines were converted in the reactions involving aldehydes and pinacolone into 2-substituted benzimidazoles, but with acetone and acetophenone give 2,3-dihydro-1H-benzo[b]-1,4-diazepines.

Indexing -- Section 28-21 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))

Cyclocondensation reaction
(intermediates in condensation reactions of o-phenylenediamine with carbonyl compds. to form benzimidazolines and benzodiazepines)

Get Related... Close

216432-57-4P
216432-58-5P



216432-59-6P
216432-60-9P
216432-61-0P
216432-62-1P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
(benzimidazoline intermediates in condensation reactions of o-phenylenediamine with carbonyl compds.)

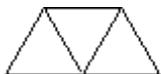
67-64-1, Acetone, reactions
75-07-0, Acetaldehyde, reactions
75-97-8, tert-Butyl methyl ketone
78-84-2, Isobutanol
95-54-5, 1,2-Benzenediamine, reactions
98-86-2, Acetophenone, reactions
100-52-7, Benzaldehyde, reactions

Get Related... Close

9. レコードの下の方を見るとこの化合物の索引が示されている。反応中間体であることがわかる。

問題 D-2

次の構造を含む化合物 (substructure) の合成に関する文献を一件調べなさい。

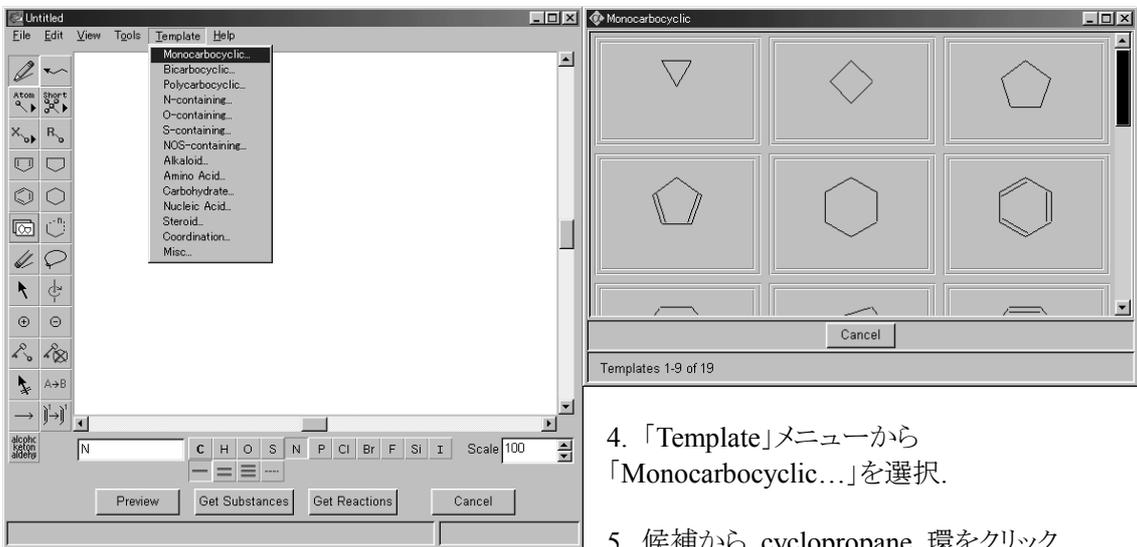


解答例

1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック。

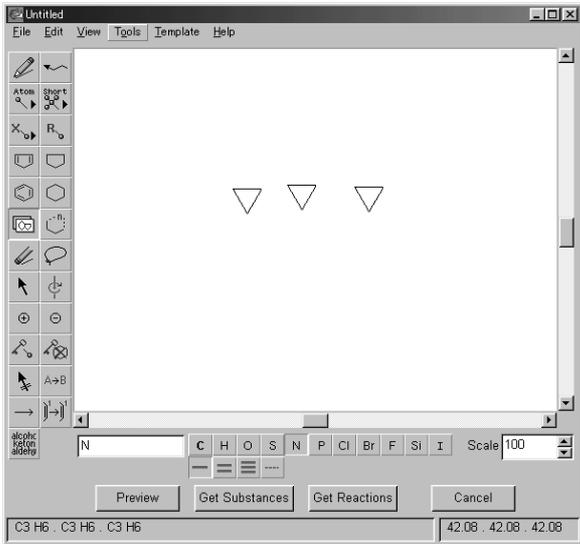
3. 構造作図画面が表示されるので、各種ツールを使って構造を作図する。この構造はたとえば次のように作図することもできる。



The screenshot shows the SciFinder Scholar interface. The 'Template' menu is open, and 'Monocarbocyclic...' is selected. The 'Monocarbocyclic' panel is also visible, showing various ring templates. The 'Cyclopropane' ring is highlighted in the panel.

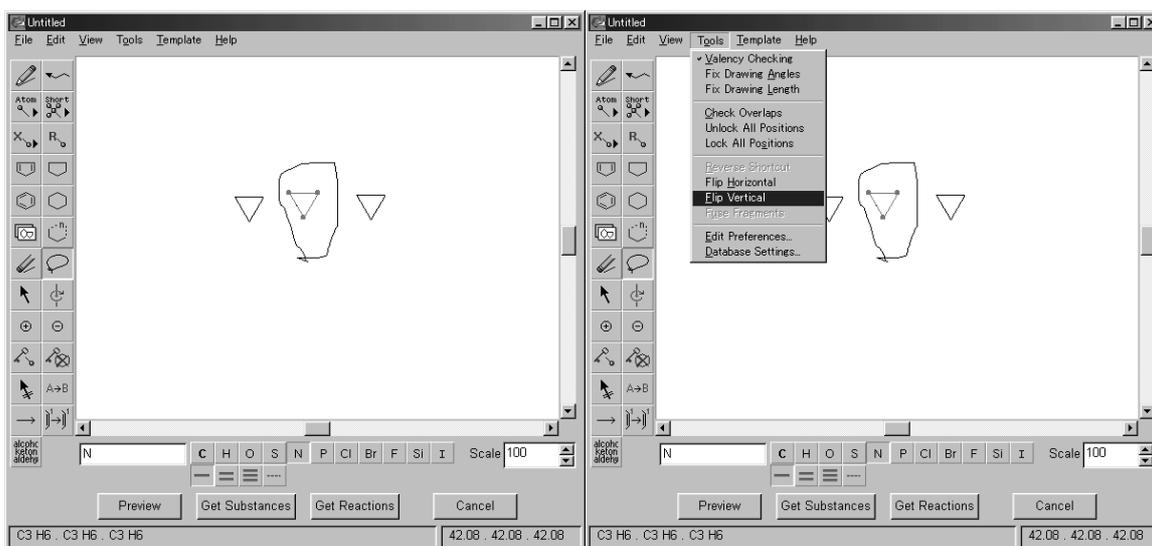
4. 「Template」メニューから「Monocarbocyclic...」を選択。

5. 候補から cyclopropane 環をクリック。



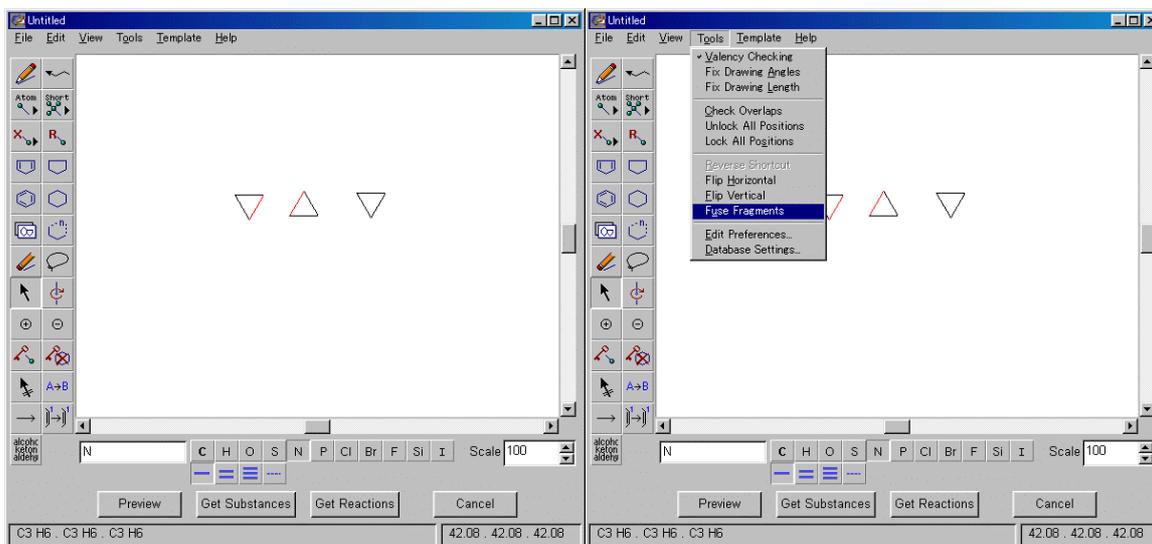
The screenshot shows the SciFinder Scholar interface with the cyclopropane ring drawn on the canvas. The status bar at the bottom indicates the structure is C3H6.

6. 画面をクリックすると cyclopropane 環が作図できた。



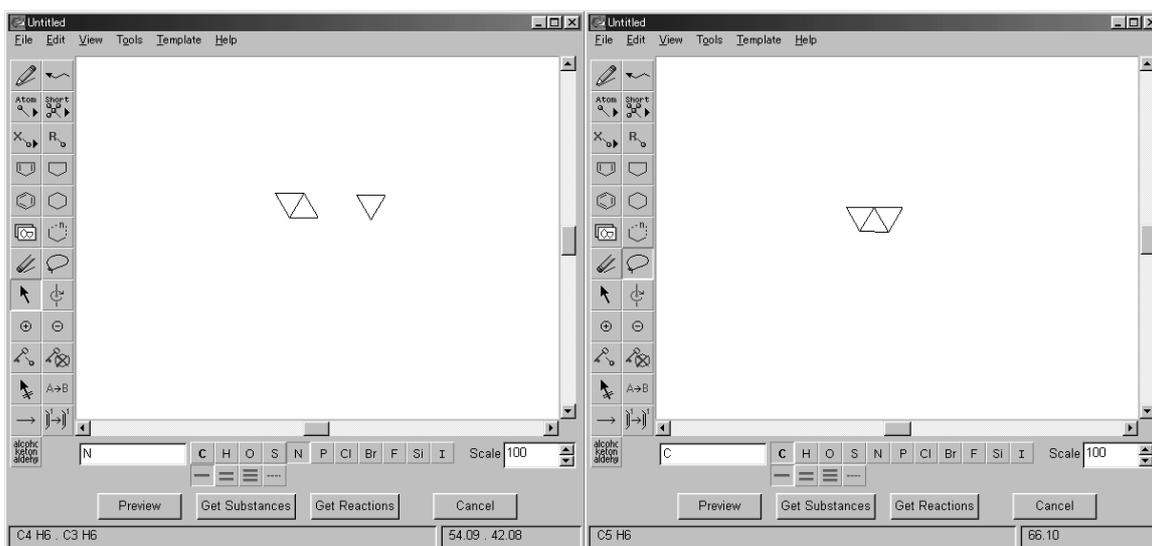
7. 中央の cyclopropane 環を反転するために、まず、 をクリックして、環の周りを線で囲む。

8. 「Tools」メニューから「Flip Vertical」を選択すると環が上下に反転する。

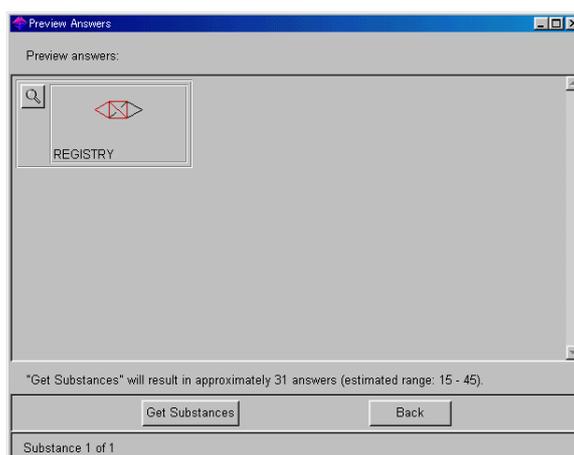
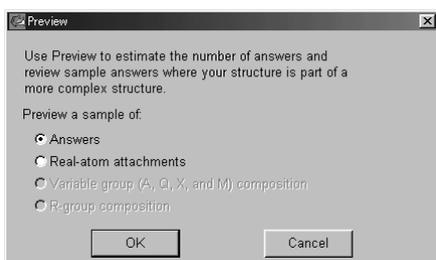


9. cyclopropane 環同志を縮合するため、 をクリックして縮合する結合を Shift キーを押しながら選択する。選択された結合は赤くハイライトされる。

10. 「Tools」メニューから「Fuse Fragments」を選択すると、選択された結合が縮合する。



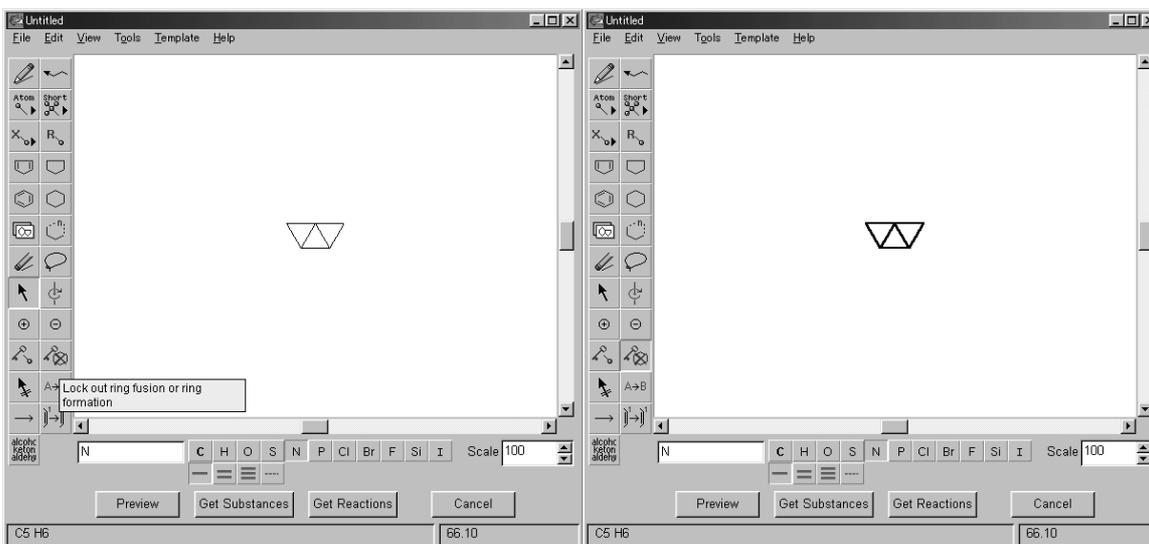
11. これを繰り返して、もうひとつの cyclopropane 環も縮合させる。



12. 構造が作図できたら、「Preview」をクリック。

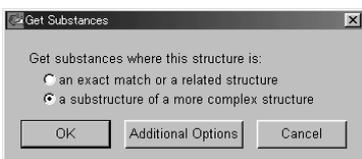
13. 「Preview」の画面で「Answers」を選択し、「OK」をクリック。

14. 予想回答件数は 31 と示され、回答例が表示される。この構造には作図した構造が含まれているが、より大きい環系となっている。このような大きな環系を除くため、もとの作図画面にもどって、縮合を禁止することにする。



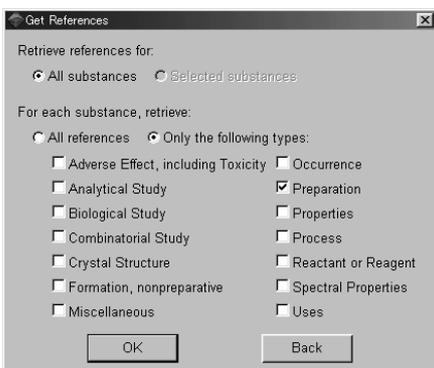
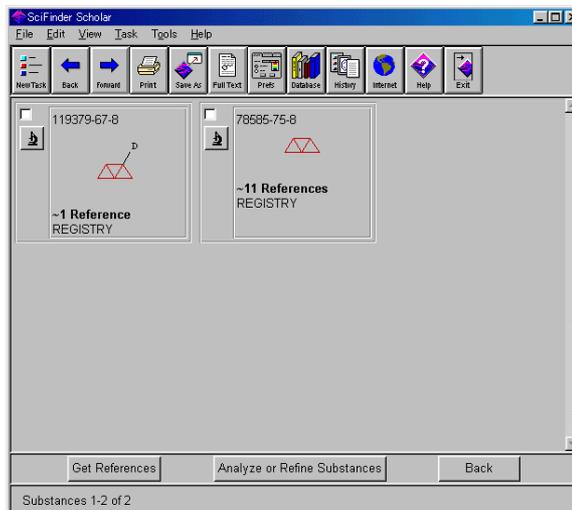
15. 環の縮合を禁止するには  をクリックする (元に戻すときはもう一度クリック)。

16. 縮合が禁止されると、結合が太く表示される。本番の検索をするために「Get Substances」をクリック。

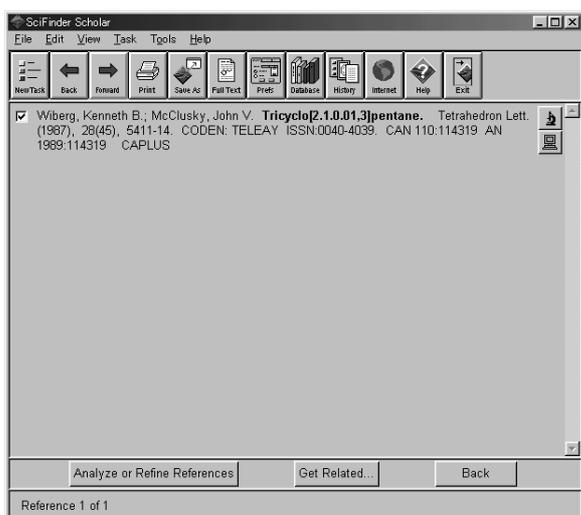


17. substructure を選択して、「OK」をクリック。

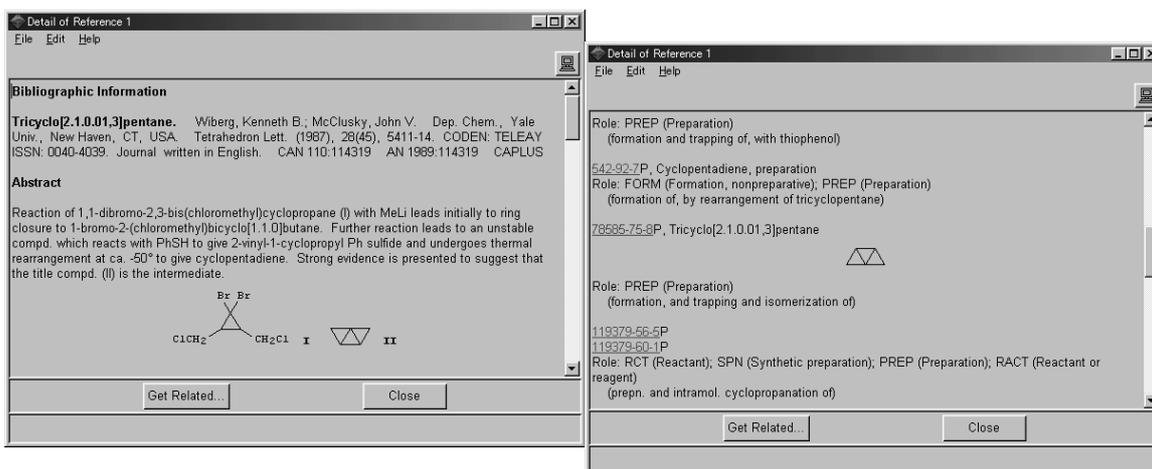
18. 二件の回答が得られた。片方は重水素の入った異性体である。文献を見るために「Get References」をクリック。



19. 「All substances」, 「Only the following types」をクリックし、「Preparation」を選択する。「OK」をクリック。



20. 一件の文献が得られた。  をクリックすると文献の詳細が表示される。



21. 文献レコードの下の方を見ていくと、この化合物の索引項目が表示され、preparation の文献であることが確認できた。

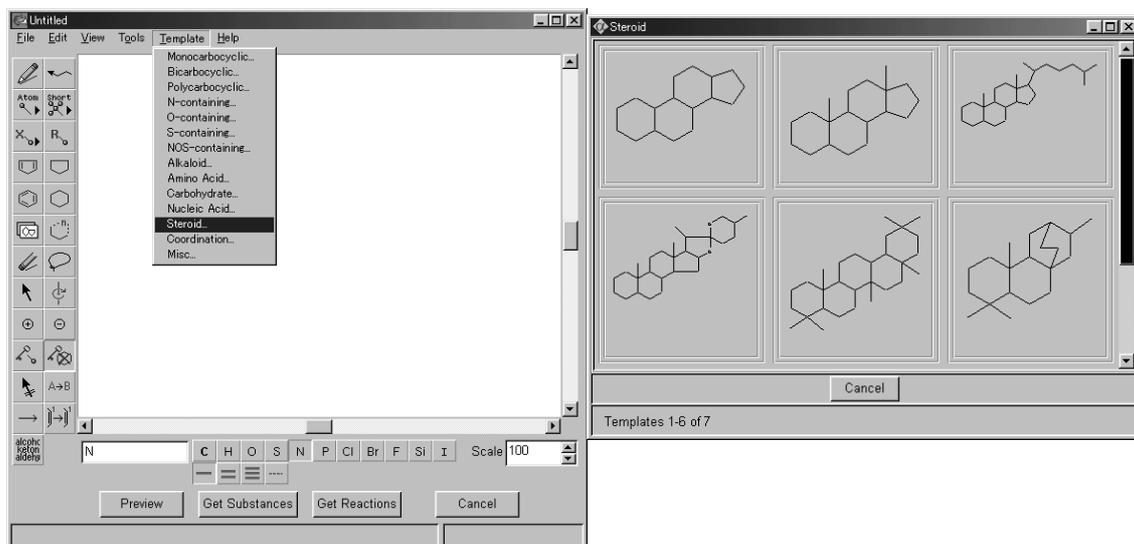
問題 D-3

Template で steroid を選択し、任意の骨格を選択して作図画面に移しなさい。これを substructure で検索したのち、回答の構造のひとつを調べなさい。

解答例

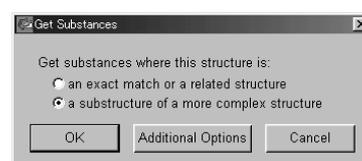
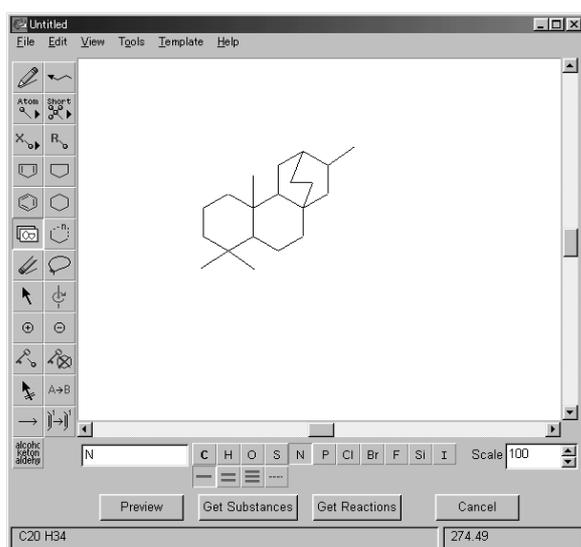
1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック。



4. 構造作図画面の「Template」メニューから「Steroid...」を選択。

5. 候補から適当な環を選択してクリック。



6. 画面をクリックするとその環が作図できた。

7. 「Get Substances」をクリック。

8. substructure を選択し、「OK」をクリック。

The screenshot shows the SciFinder Scholar interface. On the left, a grid of six chemical structures is displayed, each with a '-1 Reference' label. On the right, the 'Detail of Substance 1' window is open, showing the following information:

- Registry Number: 403984-38-3
- CA Index Name: 17-Noratis-15-ene-13,14-dicarboxylic acid, 16-(1-methylethyl)-18-(4-morpholinyl)-18-oxo-, diethyl ester, (4 α ,8 α ,12 α ,13S,14R)- (9CI)
- Formula: C₃₂H₄₉N O₆
- STN Files: CAPLUS, CA
- Absolute stereochemistry.

Below this information is a 3D ball-and-stick model of the molecule. At the bottom, a table lists properties:

PROPERTY	VALUE	CONDITION	NOTE
H donors	0		ACD (1)
H acceptors	7		ACD (1)
Molecular Weight	543.73		ACD (1)
logP	6.722+/-0.699		ACD (1)

9. 740 件の回答があった。一番目の化合物の  をクリックすると、その化合物の詳細が表示される。

10. 文献を見るため、一旦「Close」をクリックして閉じる。

11. 「Get References」をクリック。

The 'Get References' dialog box is shown with the following options:

- Retrieve references for:
 - All substances
 - Selected substances
- For each substance, retrieve:
 - All references
 - Only the following types:

Under 'Only the following types', the following checkboxes are visible:

- Adverse Effect, including Toxicity
- Analytical Study
- Biological Study
- Combinatorial Study
- Crystal Structure
- Formation, nonpreparative
- Miscellaneous
- Occurrence
- Preparation
- Properties
- Process
- Reactant or Reagent
- Spectral Properties
- Uses

The screenshot shows the SciFinder Scholar interface with a list of references. The first reference is selected:

Tolstikov, A. G.; Karpyshev, N. N.; Tolstikova, O. V.; Khlebnikova, T. B.; Salnikov, G. E.; Mamatyuk, V. I.; Gatilov, Yu. V.; Bagryanskaya, I. Yu. **Derivatives of L-pimic acid in the synthesis of chiral organophosphorus ligands from decahydrophenanthrene series.** Russian Journal of Organic Chemistry (Translation of Zhurnal Organicheskoi Khimii) (2001), 37(6), 1134-1148. CODEN: RJOCEQ ISSN:1070-4260. CAN 136:247677 AN 2001:917002 CAPLUS

12. 選択画面になるので、「Selected substances」、「All references」を選択する。「OK」をクリック。

13. 一件の文献が得られたので、 をクリックすると文献の詳細が表示される。

The 'Detail of Reference 1' window shows the following information:

Bibliographic Information

Derivatives of L-pimic acid in the synthesis of chiral organophosphorus ligands from decahydrophenanthrene series. Tolstikov, A. G.; Karpyshev, N. N.; Tolstikova, O. V.; Khlebnikova, T. B.; Salnikov, G. E.; Mamatyuk, V. I.; Gatilov, Yu. V.; Bagryanskaya, I. Yu. Boreskov Institute of Catalysis, Siberian Division, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia. Russian Journal of Organic Chemistry (Translation of Zhurnal Organicheskoi Khimii) (2001), 37(6), 1134-1148. CODEN: RJOCEQ ISSN: 1070-4260. Journal written in English. CAN 136:247677 AN 2001:917002 CAPLUS

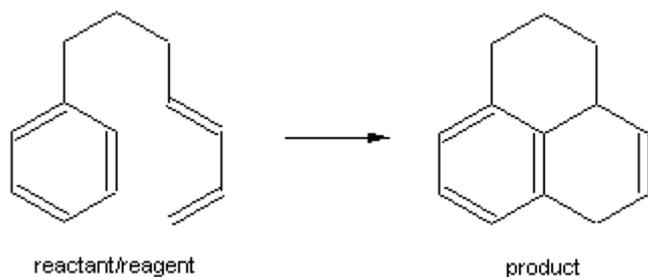
Abstract

Starting with maleopimic and fumaropimic acids, 3 chiral decahydrophenanthrene-contg. organophosphorus ligands were prepd. Cationic complexes of Rh(I) prepd. from these ligands and [Rh(COD)Cl]₂ were tested as asym. hydrogenation catalysts for unsatd. precursors of N-acetylphenylalanine and its derivs. Thus, a sample of L-DOPA was prepd. in 27% optical purity by asym. hydrogenation and subsequent acid hydrolysis of (Z)-2-acetylamino-3-(3,4-dimethoxy-1-phenyl)-2-propenoic acid. The abs. configuration and structure of the starting maleopimic acid was detd. by x-ray crystallog.

Indexing - Section 29-13 (Organometallic and Organometalloidal Compounds)

問題 D-4

次の反応に関する文献を一件調べなさい。



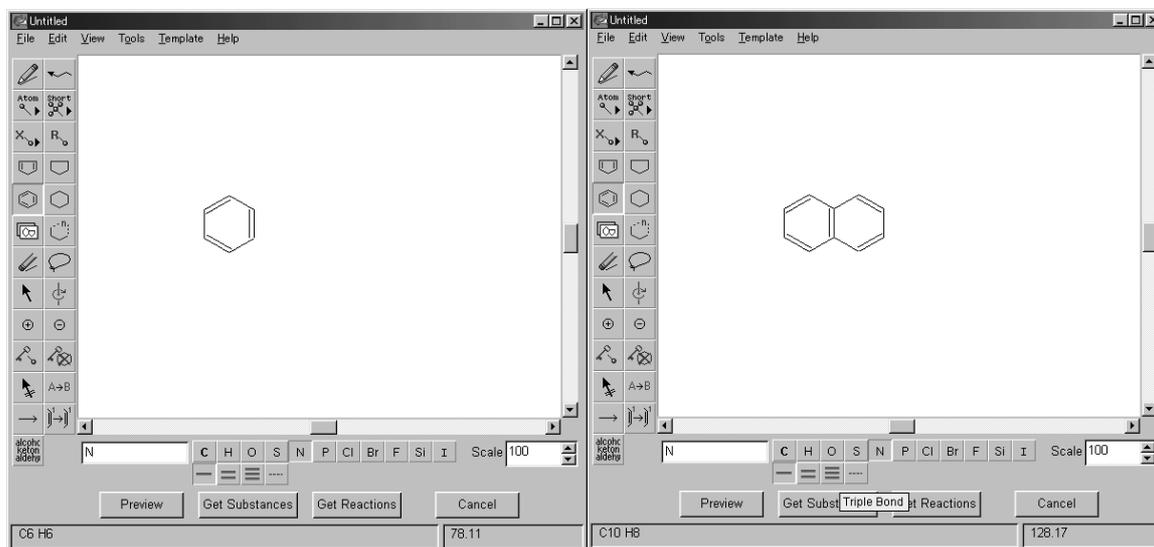
(テキストの構造は二重結合の位置に誤りがあったので、訂正する。テキストの構造でも検索は可能)

解答例

1. SciFinder Scholar のトップメニューで  をクリック。

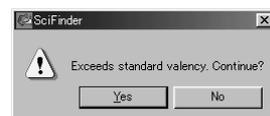
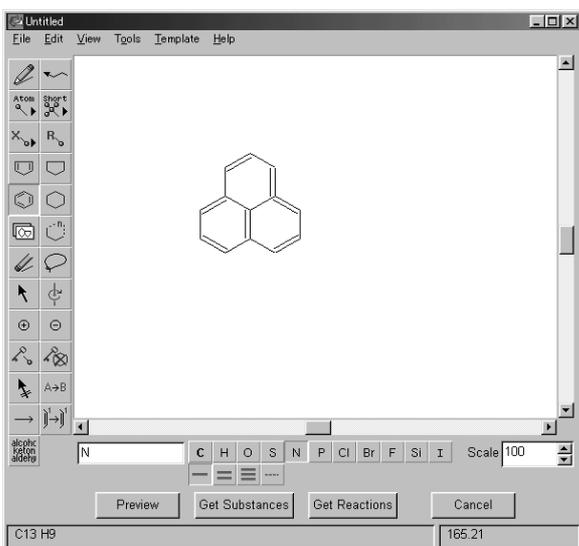
2. Explore by Chemical Substance のメニューで  をクリック。

3. 構造作図画面が表示されるので、各種ツールを使って構造を作図する。この構造はたとえば次のように作図することもできる。

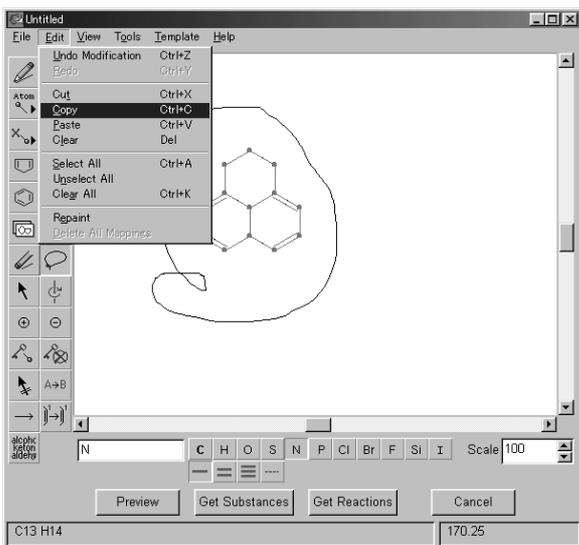
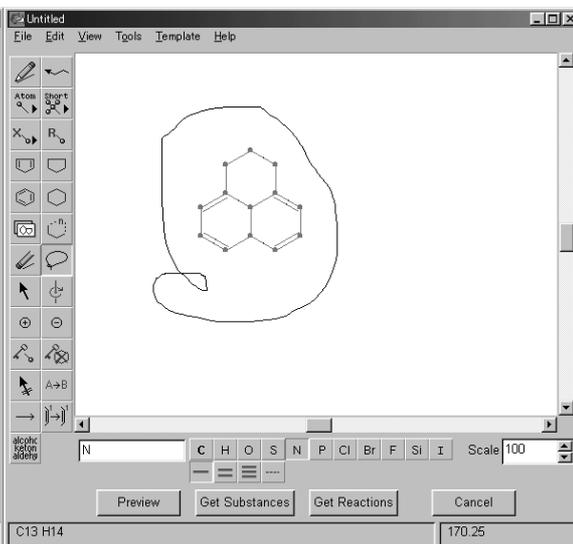
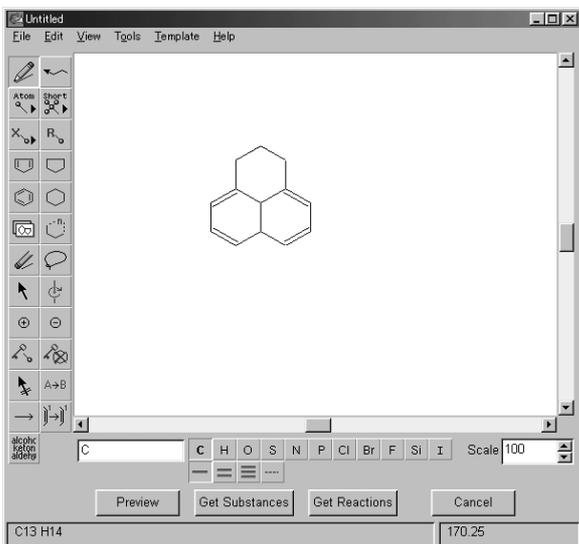


4. 左のツールから  を選択し、画面上でクリックして、ベンゼン環を作図。

5. 今作図したベンゼン環の結合の上でもう一度クリックすると、縮合した形で作図できる。



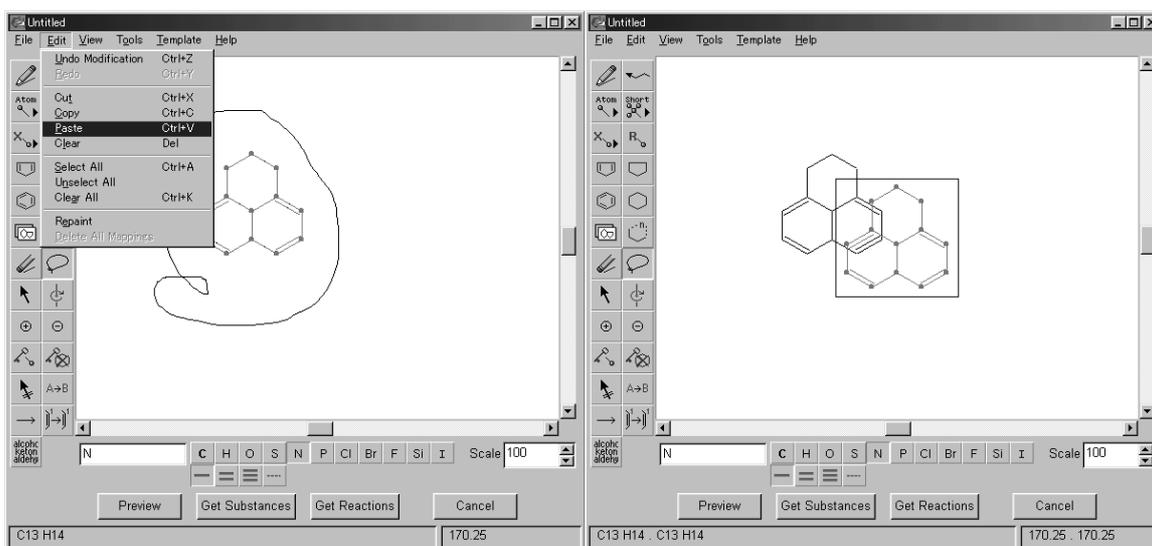
6. もう一度結合の上でクリックすると、更に縮合した環が作図できる. この時、結合価が超過するという警告がでるが、無視する.



7. 結合を修正する.

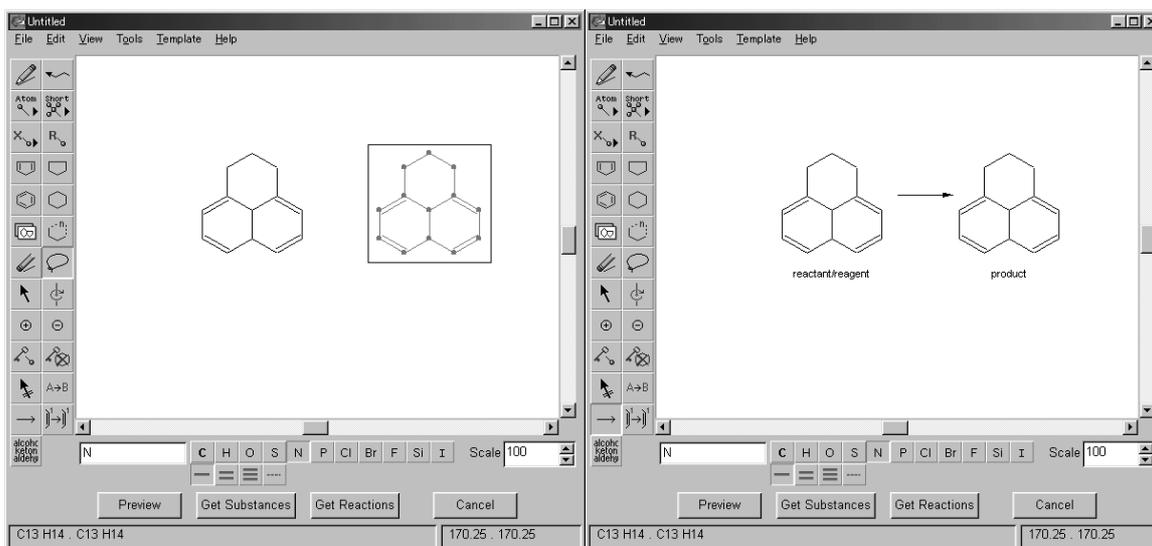
8. ツールをクリックして、環を囲む.

9. 「Edit」メニューから「Copy」を選択.

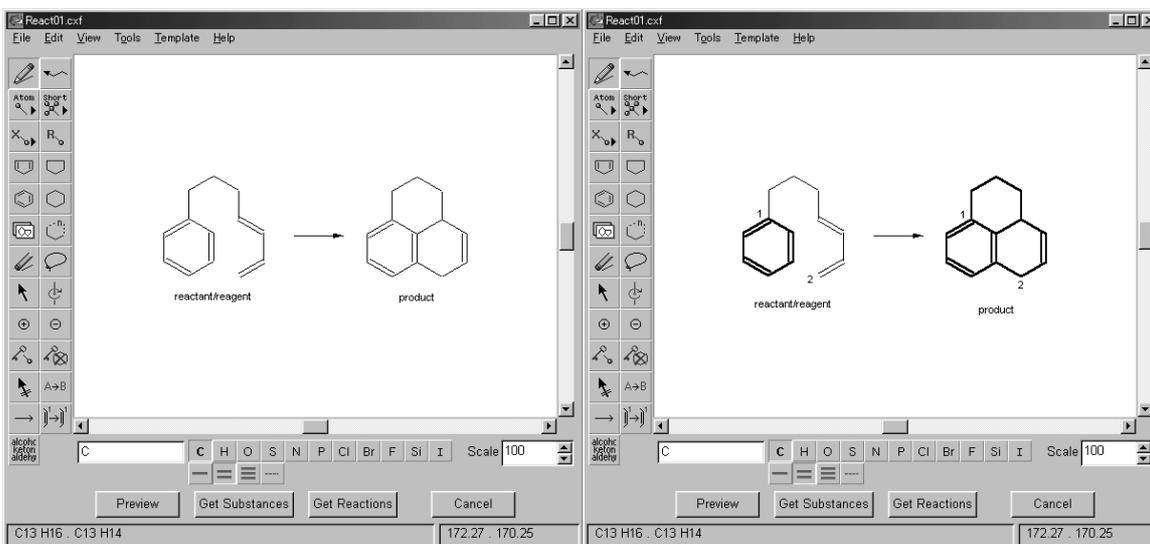


10. 「Edit」メニューから「Paste」を選択すると、コピーされた構造が貼り付けられる。

11. この状態でドラッグして、適当な場所まで移動する。



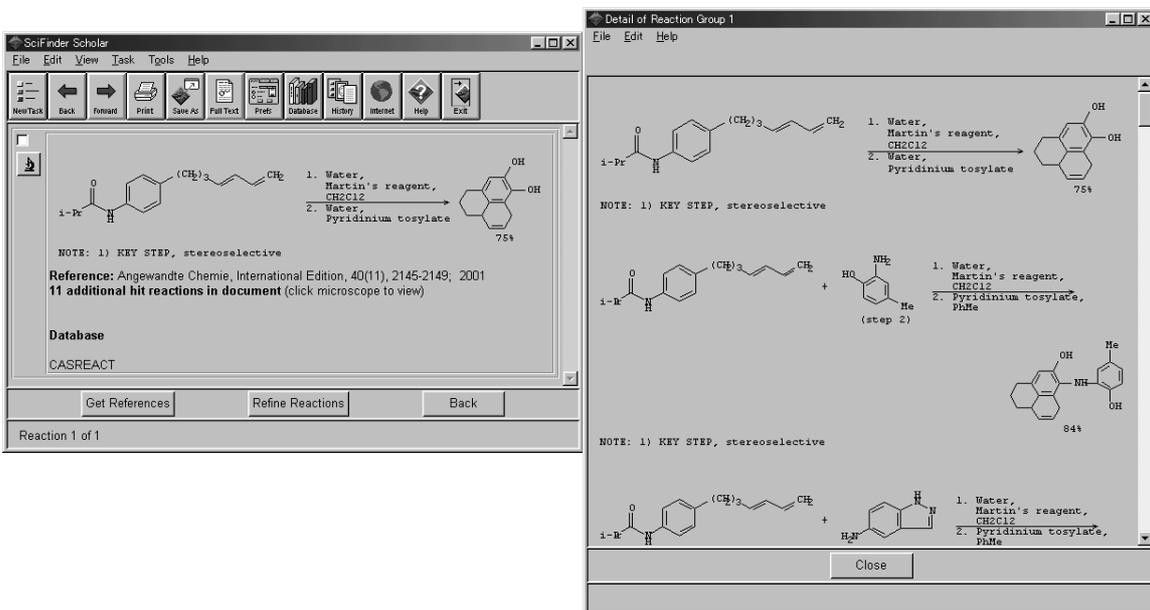
12.  を選択して、二つの構造の間に線を引くと、自動的に反応の矢印となり、reactant/reagent, product の指定がおこなわれる。



14. 構造の詳細を修正.

15.  をクリックしたのち、両方の構造で対応する原子をクリックし、対応番号を振る (マップ).

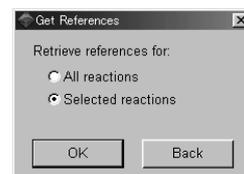
16.  をクリックして環の縮合を禁止し、「Get Reactions」をクリック.



16. 一件回答が得られた.  をクリックするとその論文中のすべてのヒットした反応が表示される.

17. 文献の詳細を見るには一旦「Close」をクリックして、「Get References」をクリック.

18. 「Selected reactions」を選択して、「OK」をクリック.



The screenshot shows the SciFinder Scholar interface. The left pane displays a search result for 'Tricyclo[2.1.0.01,3]pentane' by Wiberg, Kenneth B., and McClusky, John V. The right pane shows the detailed reference information, including the title 'Rapid access to complex molecular architectures via o-azaquinones', authors, journal information, and an abstract describing the synthesis of complex analogs I and II of pseudopterosin and elisabethin natural products.

19. 一件の文献が得られたので、 をクリックすると文献の詳細が表示される。