

Markush TOPFRAG (Ver. 3.1) の使い方

(For DWPI Chemical Fragmentation Code)



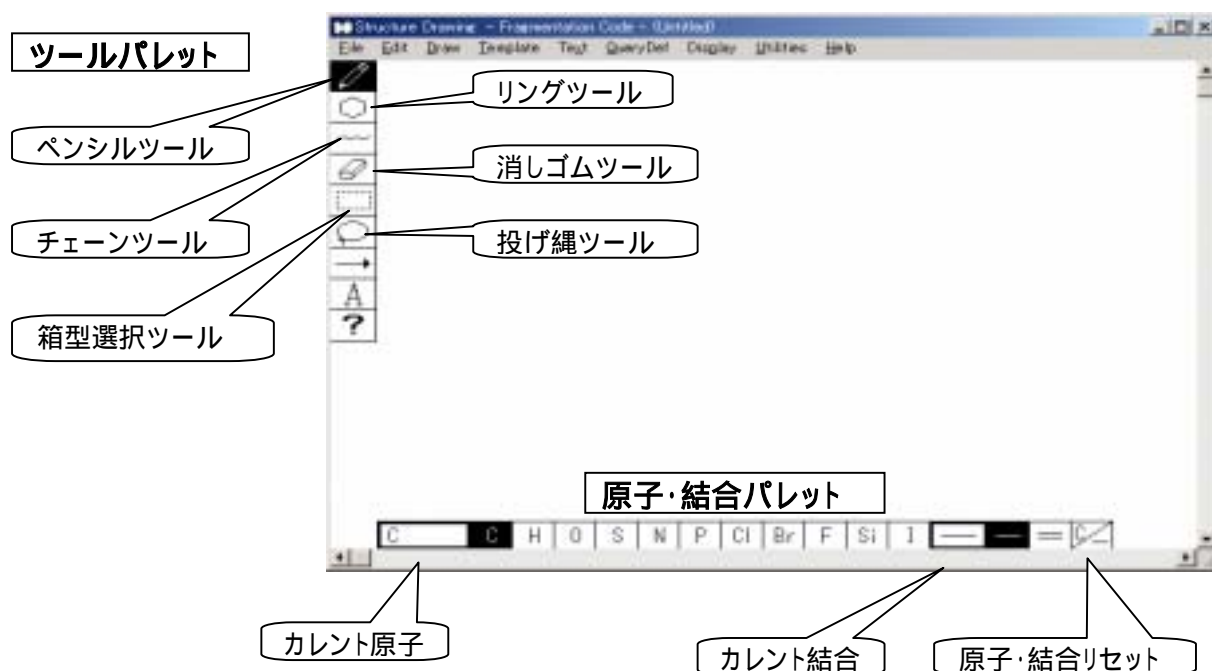
目録

1. Markush TOPFRAG の使い方	-----	3
2. Appendix I. DialogLink (アップロード)	-----	31
3. Appendix II. STN Express (アップロード)	-----	33

Markush TOPFRAG の使い方

Markush TOPFRAG を使って、質問構造式を描画し、フラグメンテーションコード検索式および/または Markush DARC 検索式を生成することができます。

描画 (Structure Drawing) スクリーン

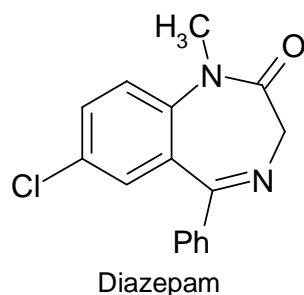


原子・結合パレット

- ・1 回使用の場合はワンクリック、複数回使用する場合はダブルクリックする。
- ・原子・結合リセットを選択すると、カレント原子は炭素に、カレント結合は単結合にリセットされる。

詳細は、「Markush TOPFRAG version 3.1」をご覧ください。

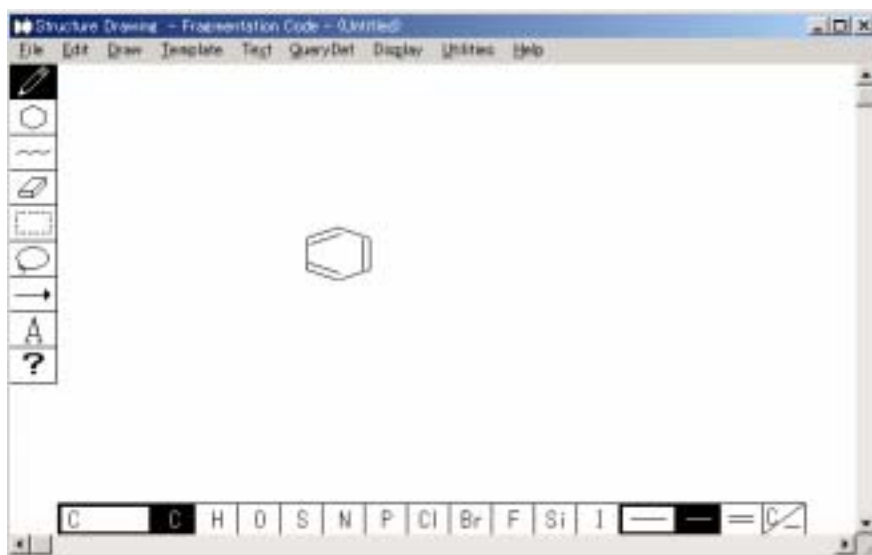
A 5 1. Example 1



ステップ1. MTF のアイコンをダブルクリックして、**Markush TOPFRAG** を起動する。

ステップ2. MTFウインドウの**Query** から**New Structure** を選択する。
構造式のフォーマットを特定するために、**Fragmentation Code** を選択し、**OK** ボタンを押す。

ステップ3. ベンゼン環を描画する。
メニューバーの**Template** をクリックし、**Display** をクリックする。テンプレートのリストの中から、**01aromat** をダブルクリックする。ベンゼン環の原子または結合をクリックすると、カーソルが二重矢印() になる。スクリーン上をクリックすると、ベンゼン環が表示される。

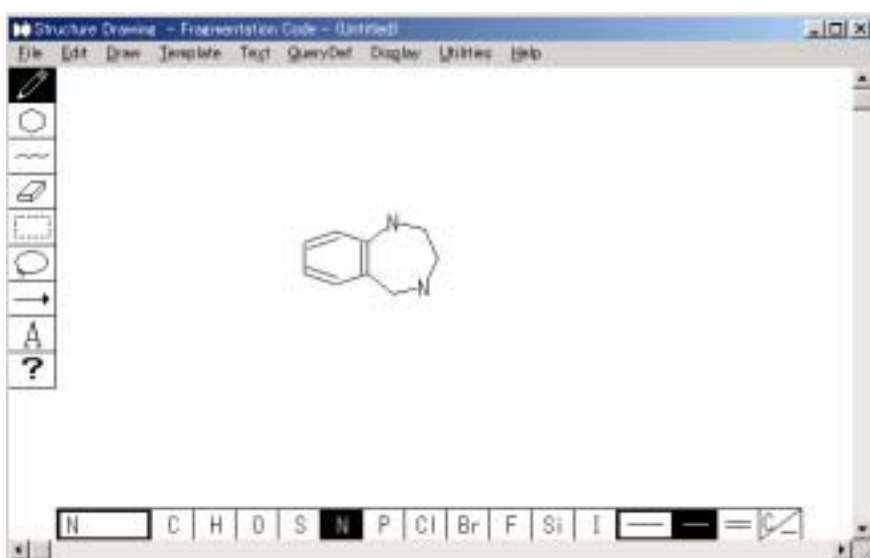


ステップ4. 7員環を描画する。

ツールパレットのリングツールをクリックする。環の大きさのダイアログボックスが表示されるので、7を選択する。OKボタンを押すと、カーソルが六角形に変わる。カーソルを、描画したベンゼン環の二重結合上に移動させ、クリックする。7員環がベンゼン環に縮合する。カーソルを元の形に戻すために、ツールパレットのペンシルアイコンをダブルクリックする(やり直す時は、メニューバーのEditからUndoコマンドを選択する)。

ステップ5. 次に環の原子2個を窒素に変更する。

原子・結合パレットのNをダブルクリックして、カレント原子をNに変更する。環の原子2個をクリックして、Nに変更する。

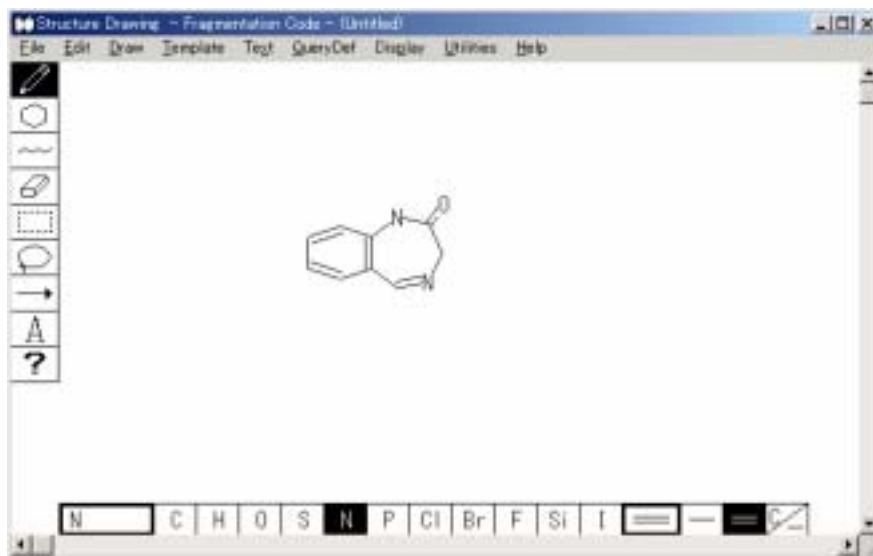


ステップ6. 環の結合1個を二重結合に変更する。

原子・結合パレットの二重結合をダブルクリックする。変更したい結合の中央部をクリックする(原子・結合パレットの二重結合をダブルクリックしたので、結合は二重結合がハイライトされたままである)。

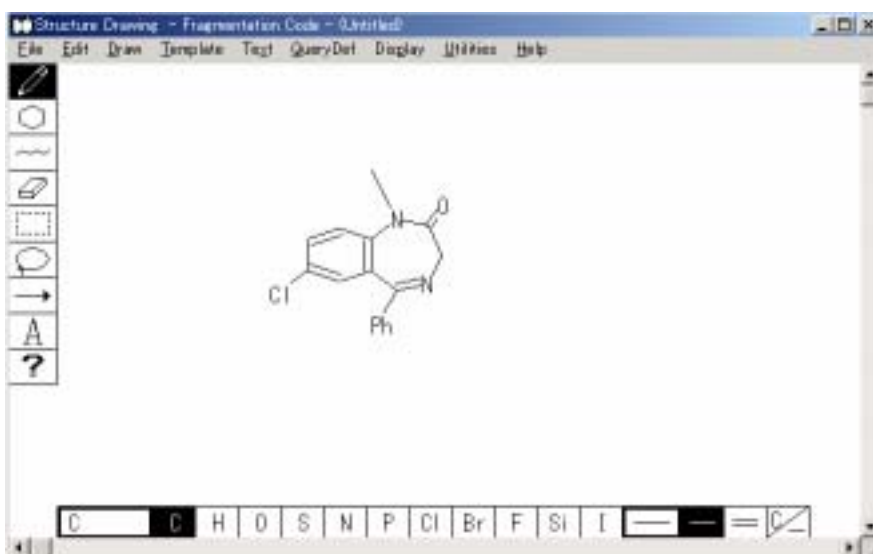
ステップ7. オキシ基を追加する。

原子・結合パレットの **O** をクリックして、カレント原子を **O** に変更する。ペンシルカーソルを2位の環原子に置き、マウスボタンを押さえ、ドラッグする。オキシ基の位置までドラッグしたら、マウスボタンを離す。



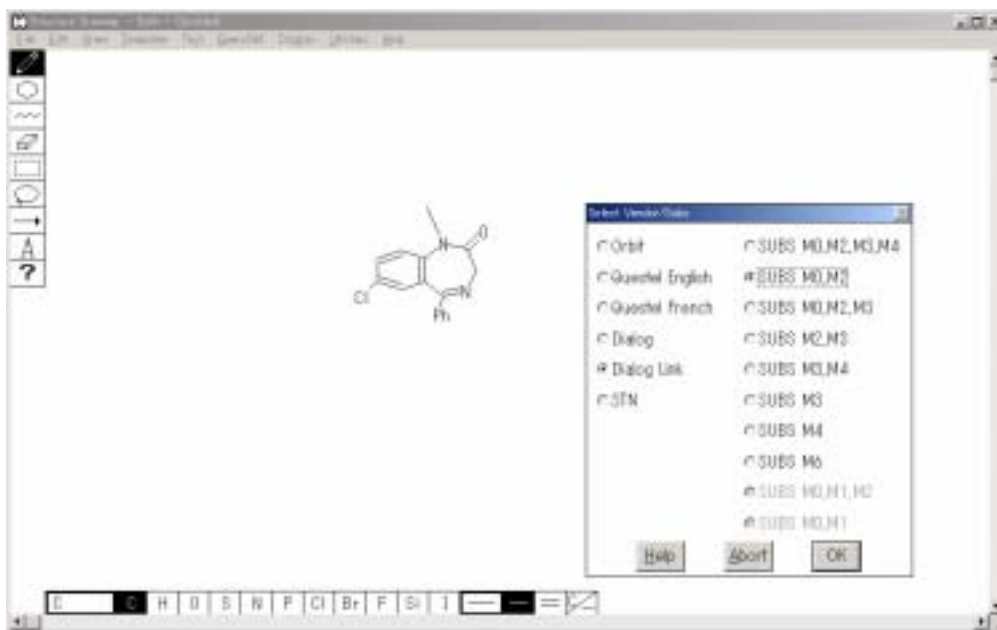
ステップ8. 残りの置換基を追加する。

原子・結合パレットの **C / -** をクリックする (カレント原子が **C** に、カレント結合が **単結合** に変更される)。カーソルを環窒素に置き、マウスをドラッグしてメチル基を結合させる。原子・結合パレットの **Cl** をクリックし、同様にして塩素原子をベンゼン環に結合させる。最後にメニューバーの **Draw** から **Shortcut** を選択し、**Ph** を選択する。 **Single Use** ボタンをクリックし、同様にしてフェニル基を7員環に結合させる。



ステップ9. メニューバーの **Utilities** から **Generate Codes** を選択する。

Select Vendor/Subs ウィンドウが表示されるので、ホストとサブヘディングを選択すると、検索式が発生し、**MTFEDIT** スクリーン上に表示される。



引き続き、検索をDIALOGで行う場合、検索式をコピーして、Appendix 8へ進む。

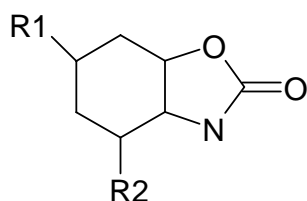
コードの定義を参照する場合は、カーソルを参照したいコード上に移動させ、メニューバーの **Help** から **Code definition** を選択する。

ステップ10. メニューバーの **File** から **Save** (または **Save As**) を選択し、検索式を保存する。
拡張子 .STG のファイル (検索式と構造式を結びつける情報) と、ホストにより異なる拡張子の
検索式ファイルとが作成され、保存される。

DIALOG	.DLG
DIALOGLINK	.SRC
QUESTEL.English	.QLE
STN	.STN

構造式は拡張子 .STR のファイルが作成され保存される。メニューバーの **File** から **Exit MTF**
を選択して、MTFを終了するか、またはメニューバー **File** から **New** を選択して、別の構造
式を描画する。

A 5.2. Example 2

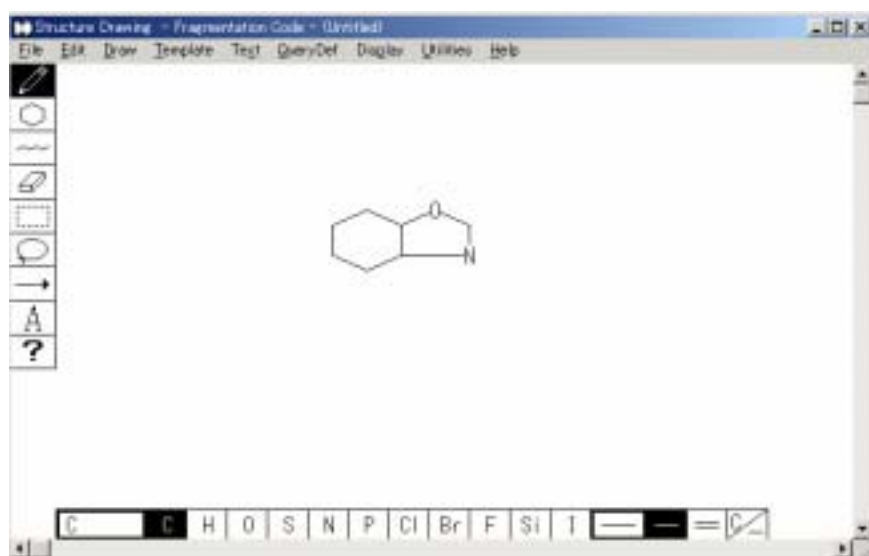


R1=H, NH₂, NHCH₃, N(CH₃)₂
R2=H or any substituent

R1を表わすためにG groupを、R2を表わすためにFree Siteを使用する。

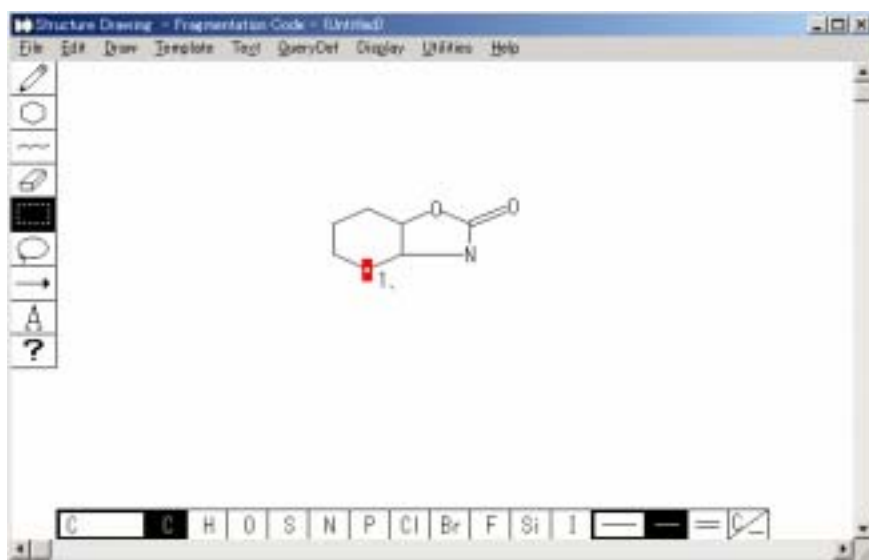
ステップ1. MTFのアイコンをダブルクリックして、メニューバーの **Query** から **New Structure** を選択する。
Fragmentation Code を選択し、**OK** ボタンを押す。

ステップ2. 環系を描画する。
メニューバーの **Template** から **Display** を選択し、テンプレートから **11CNOSR** (炭素、窒素、酸素、及び/又は硫黄を含む環) を選択し、**Open** をクリックする。ベンゾキサゾールの原子または結合をクリックし、カーソルが二重矢印() に変わったら、描画スクリーン上をクリックする。環系の二重結合をすべて単結合に修正するため、ツールパレットの **箱型選択ツール** を選択し、マウスをドラッグして、構造全体を囲む四角形を描く。すべての原子と結合がハイライトされる。原子・結合パレットの **単結合** をクリックする。ツールパレットの **ペンシルツール** を選択すると、結合が単結合に変更される。

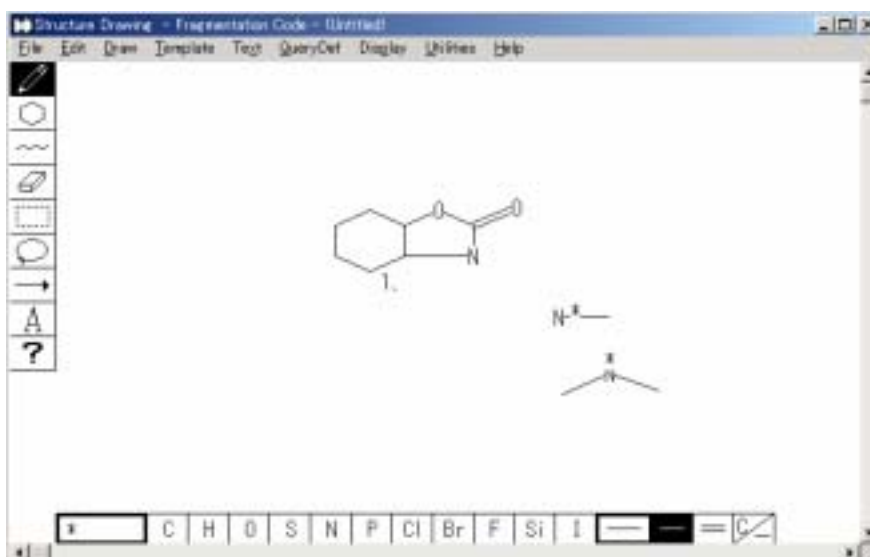


ステップ3. 原子・結合パレットの **O** と **二重結合** をそれぞれクリックし、環炭素からマウスをドラッグして、オキシ基を結合させる。

ステップ4. フリーサイトを設定する。
ツールパレットから **箱型選択ツール** を選択し、フリーサイトを設定する環炭素をクリックする。メニューバーの **QueryDef** から **Free Sites** を選択する。フリーサイトの数(この場合は1)を選択し、**OK** ボタンを押す。フリーサイトが設定された炭素は、フリーサイトのマークがついている。

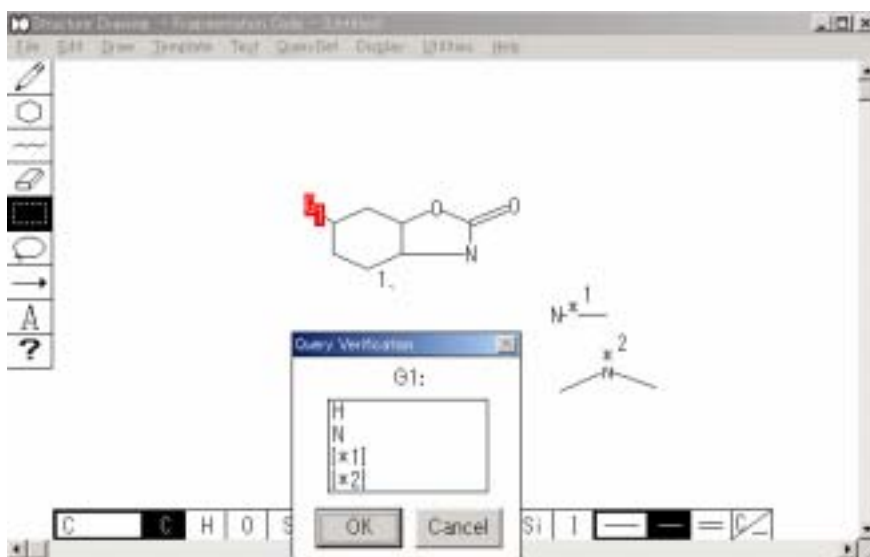


ステップ5. -NHCH_3 と $\text{N(CH}_3)_2$ を、メインの構造とは別に、結合ポイントを示したフラグメントとしてスクリーン上に描画する。まず、**ペンシルツール** を選択しマウスをドラッグして、2原子フラグメントと3原子フラグメントを作成する。続いて、原子・結合パレットの **N** をダブルクリックし、原子2個を窒素に変更する。メニューバーの **Draw** から **G Groups** を選択し、*** points of attachment** と **Multiple Use** を選択する。カーソルを窒素に置き、クリックすると、窒素にアスタリスクが付与され、結合ポイントとなる。



ステップ6. メニューバーの **Draw** から **G-Groups** を選択し、**New** ボタンをクリックしてGグループを定義する。
Atoms をクリックし、HとNの隣のボックスをそれぞれチェックして、水素と窒素を選択する。
OK ボタンをクリックして、**New G-Group Definition** ダイアログボックスに戻る。**Fragments** をクリックすると、第1のフラグメントが表示される。描画スクリーン上の2つのフラグメントが必要なので、**Include All** をクリックする。**OK** ボタンをクリックし、定義を保存するために **Save** をクリックする。**Single Use** をクリックし、描画モードに戻る。カレント原子は自動的にG1に変更されている。G1グループを結合させる炭素原子にカーソルを置き、ドラッグして結合を作成する。

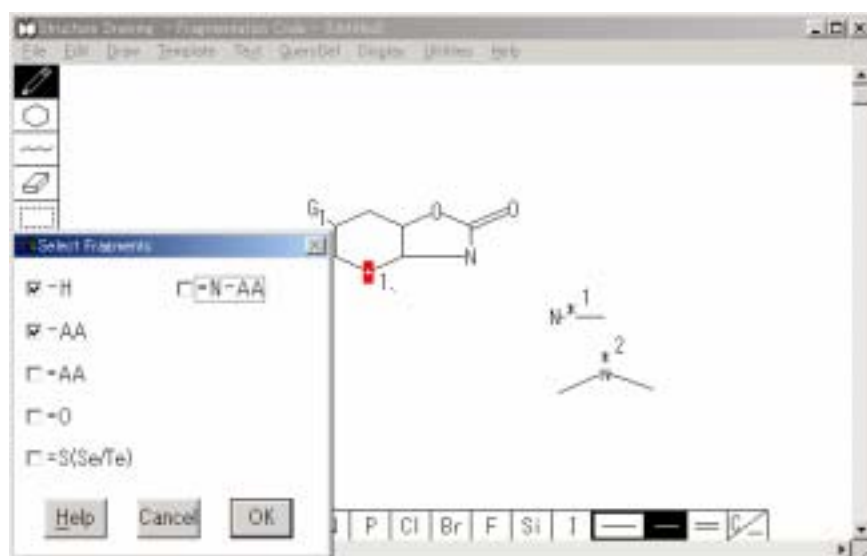
注) Gグループの定義の確認は下記の方法で行う。
メニューバーの **QueryDef** から **Query verification** を選択し、**Select** をクリックする。
G group: contents をクリックして **OK** ボタンを押す。Gグループの定義は移動可能なウインドウに表示される。**OK** ボタンを押して、元の描画モードに戻る。



ステップ7. メニューバーの **Utilities** からの **Generate Codes** を選択し、検索式を発生させる。フリーサイトで許容したい置換基の種類について尋ねるダイアログボックスが表示される。

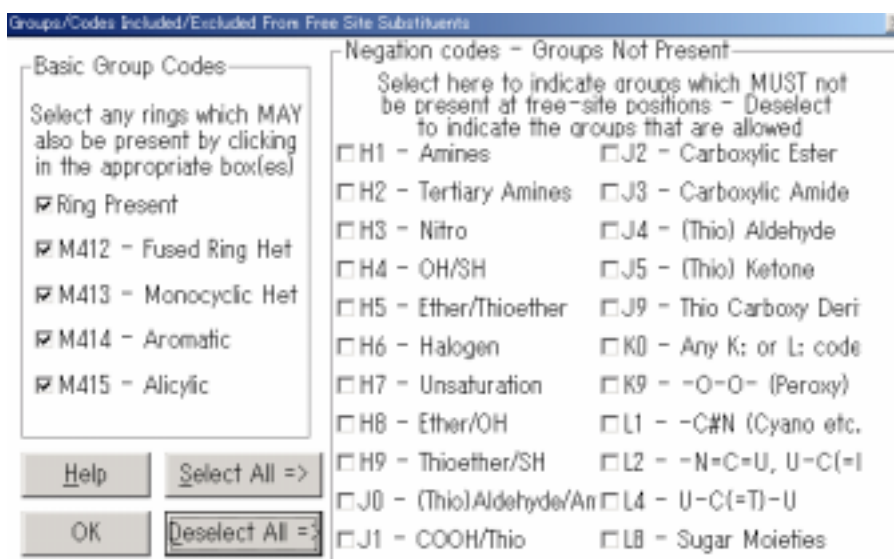
H	置換基なし
AA	単結合経由で置換された原子
=AA	二重結合経由で置換された原子
=O	オキシ基
=S (Se/Te)	チオオキシ基 (セレン又はテルルの類似体)
=N AA	あらゆる原子で置換されたイミノ基

Example2の構造式では、R2は単結合経由で置換されているので、上記2つのオプションのみ必要となる。それ以外の4つのオプションのチェックボックスをクリックして、チェックをはずし、**OK** ボタンを押す。

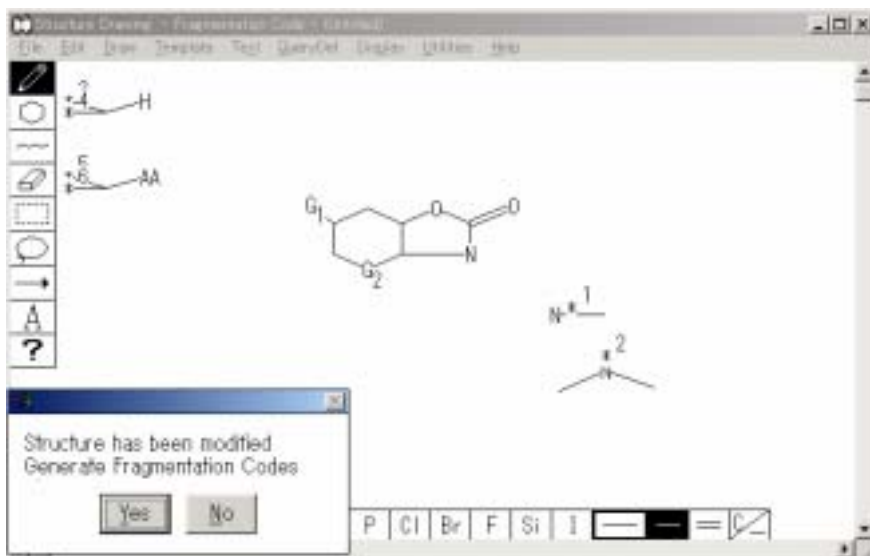


ステップ8. **Groups/Codes Included/Excluded From Free Site Substituents** ウィンドウが現われ、構造全体で許容したい置換基の種類について尋ねてくるので、環の種類とネグーションコードを選択する。R2については「any substituent」以外の情報がないので、**Rings present** をクリックし、全ての環の種類にチェックを入れる。

ステップ9. フリーサイトに結合する置換基はあらゆる種類が考えられるので、**Deselect All** をクリックして、検索式にネグーションコードが含まれないようにする。



ステップ10. **OK** ボタンをクリックすると、「Structure has been modified, generate Fragmentation Codes?」という「Warning」が表示されると同時に描画スクリーンが表示される。フリーサイトの炭素原子は、2つのフラグメントC HとC AAとして定義されたG2に置き換わっている。**Yes** ボタンをクリックする。

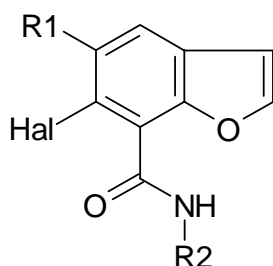


ステップ11. **Select Vendor/Subs** ウィンドウが表示されるので、ホストとサブヘディングを選択し、**OK** ボタンを押す。

ステップ12. 検索式が発生し、**MTFEDIT** スクリーン上に表示される。

ステップ13. メニューバーのFileから**SAVE**を選択し、検索式と構造を保存する。

A 5.3. Example 3



$R_1 = \text{H, OH, methoxy, ethoxy}$

$R_2 = \text{H or any substituent}$

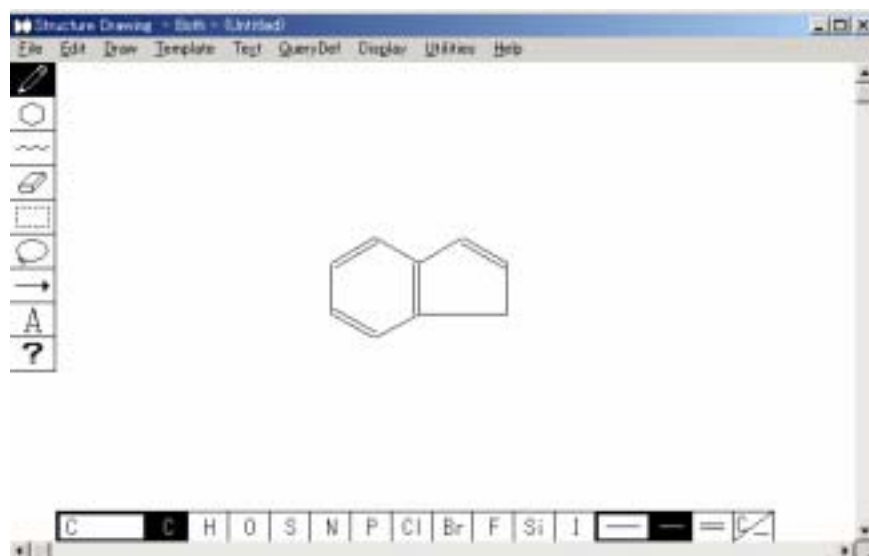
$\text{Hal} = \text{F, Cl, Br, I}$

ステップ1. MTFのアイコンをダブルクリックして、メニューバーの **Query** から **New Structure** を選択する。

Fragmentation Code を選択し、**OK** ボタンを押す。

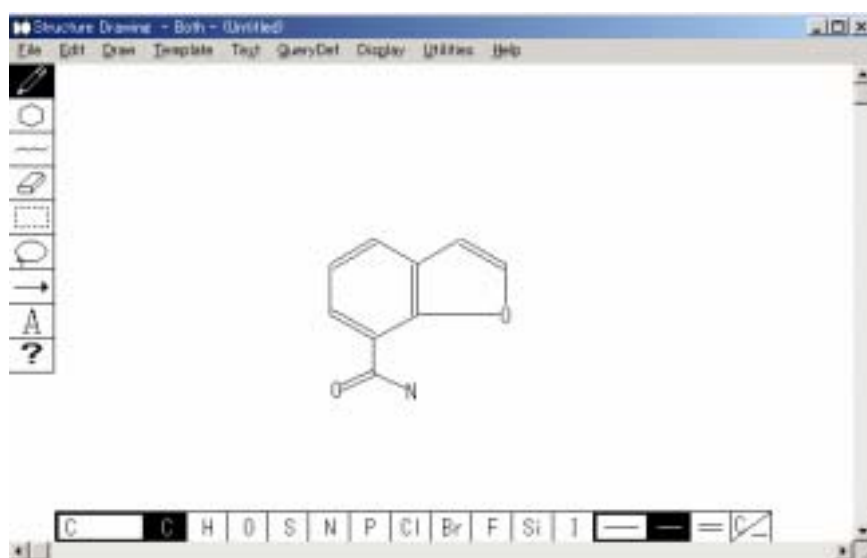
ステップ2. 環系を描画する。

ツールパレットから **リングツール** を選択する。環の大きさを入力する(この場合は6員環と5員環の縮合環なので65と入力する)。**OK** ボタンを押し、描画スクリーンに戻る。六角形となったカーソルをスクリーンの中央でクリックし、環を表示させる。ツールパレットの **ペンシルツール** をクリックして、ツールをペンシルに戻す。原子・結合パレットの **二重結合** をダブルクリックして、カレント結合を二重結合に変更する。二重結合にしたい結合の中央にカーソルを置き、クリックする。スペースバーをクリックするか、または原子・結合パレットの **C/ -** をクリックして、カレント結合を単結合に戻す。



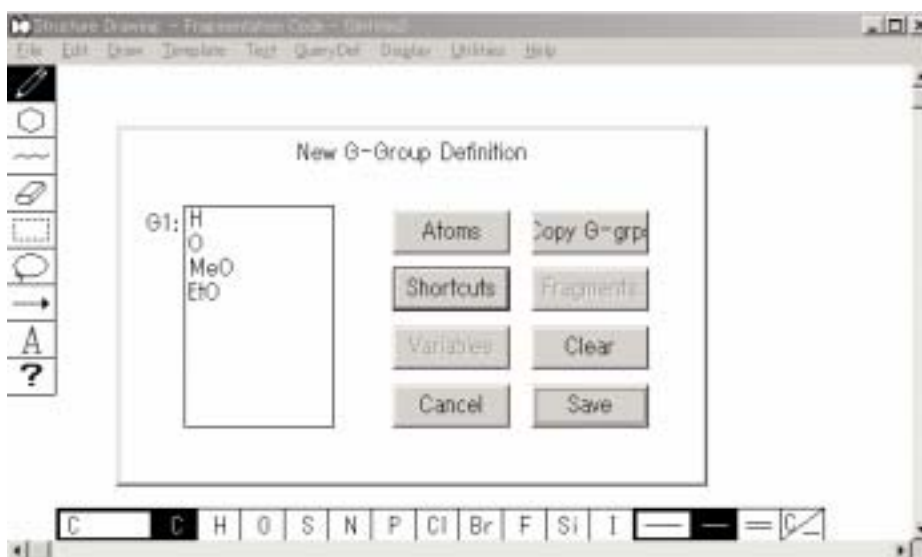
ステップ3. 環原子1個を酸素に変更する。
原子・結合パレットの **O** をクリックし、変更したい原子にカーソルを置き、クリックする。カレント原子は自動的に **C** に戻る。

ステップ4. アミド基を環に結合させる。
アミド基を結合させたい環原子にカーソルを置き、マウスボタンを押したままドラッグして、炭素原子を環に結合させる。原子・結合パレットの **O** 及び **二重結合** をダブルクリックする。環に結合させた炭素にカーソルを置き、マウスボタンをドラッグしてオキシ基を作成し結合させる。カレント結合は自動的に単結合に戻る。原子結合パレットの **N** をクリックし、同様にして窒素を炭素に結合させる。



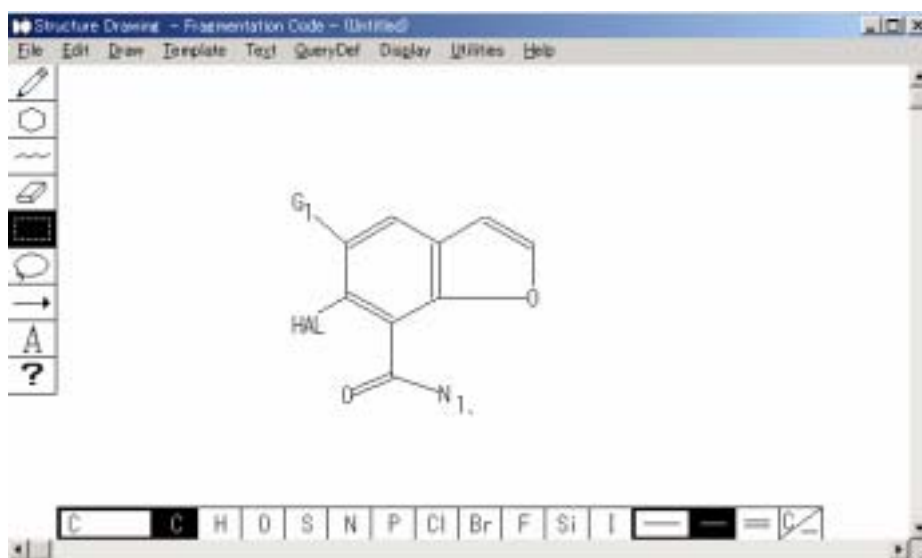
ステップ5. ハロゲンを環に結合させる。
メニューバーの **Draw** から **Other superatoms** を選択し、メニューから **HAL** と **SingleUse** を選択する。環原子にカーソルを置き、マウスボタンをドラッグして結合を作成する。マウスボタンを放すと、HALスーパーアトムが表示される。フラグメンテーションコードの検索式ではHALスーパーアトムによってハロゲンのコードが発生されるが、TOPFRAGはデフォルトで **Narrower Translation (NT)** をHALスーパーアトムに適用している。従って、HALスーパーアトムは特定ハロゲン原子に符合する。すなわち、HALスーパーアトムを用いて発生させた検索式は、塩素または臭素原子等特定のハロゲン原子を索引したレコードを検索する。

ステップ6. G1グループを定義する。
メニューバーの **Draw** から **G-groups** を選択し、さらに **New** を選択する。この場合のG1グループの定義には、単原子(酸素と水素)があるので、**Atoms** をクリックする。原子リストから **O** と **H** のチェックボックスをクリックして選択する。**OK** ボタンを押し、**New G-group Definition** ダイアログボックスに戻る。G1グループの単原子以外はショートカットであるので、**Shortcuts** を選択し、リストから **MeO** および **EtO** を選択し、**OK** ボタンを押す。G1グループの定義がダイアログボックスの左側に表示されたら、**Save** を押す。



ステップ7. **Single Use** をクリックすると描画モードに戻る(カレント原子はG1になっている)。
G1を環に結合させる。G1を結合させたい環原子にカーソルを置き、マウスボタンをドラッグさせる。

ステップ8. 窒素上にフリーサイトを設定する。
まず、ツールパレットから**箱型選択ツール**を選択する。構造式のNをクリックすると、Nがハイライトされる。メニューバーの**QueryDef** から **Free sites** を選択する。窒素上にフリーサイトを1個設定するため、リストから1を選択し、**OK** ボタンを押す。

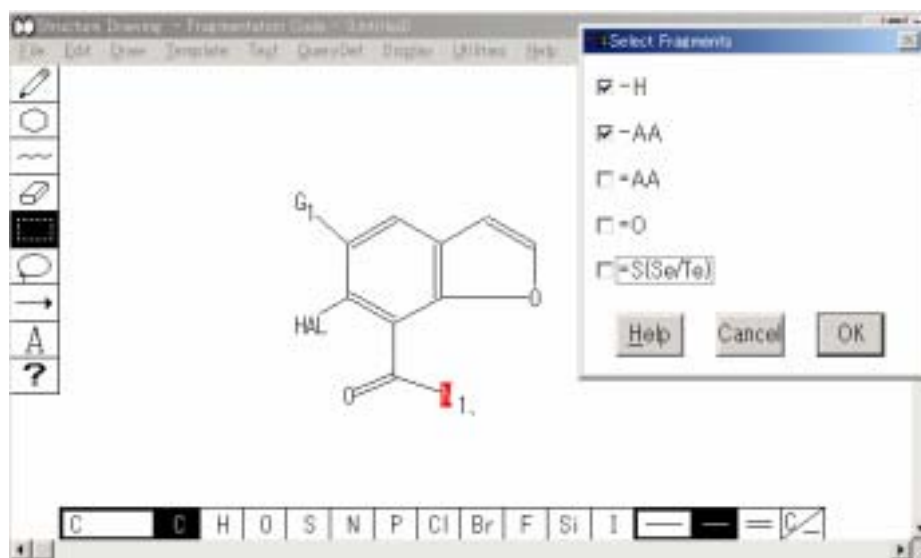


ステップ9. 検索性構造式は完成したので、次にメニューバーの**Utilities** から **Generate Codes** を選択する。

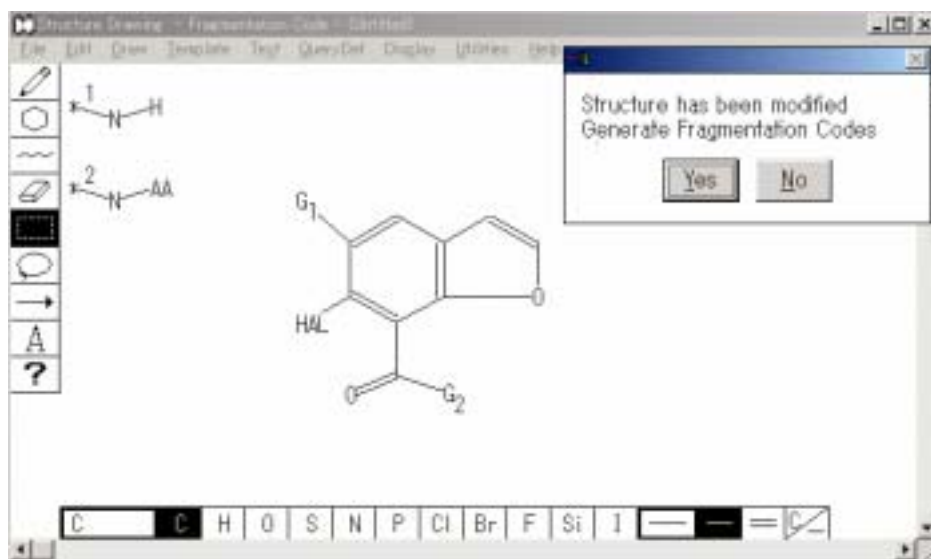
ステップ10. 構造にはフリーサイトが含まれているので、フラグメンテーションコード検索式を発生させる前に、フリーサイトで許容する置換の種類を決定する。**Select Fragments**というダイアログボックスが表示される。表示されているオプションは、フリーサイトに許容される置換の種類である。

H	置換基なし
AA	単結合経由で置換された原子
=AA	二重結合経由で置換された原子
=O	オキシ基
=S, Se, Te	チオオキシ基(セレン又はテルルの類似体)

フリーサイトが設定された窒素上にはHが1つ存在し、R2は単結合で結合されているので、二重結合経由のオプションについては、チェックボックスをクリックしてチェックをはずす。



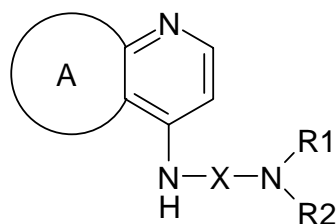
ステップ11. **OK**ボタンを押すと、**Groups/Codes Included/Excluded**ダイアログボックスが表示されるので、構造全体で許容される置換の種類を制限する。**Ring present**は描画した構造式から**孤立して存在する**環を特定するオプションである。フリーサイトにはあらゆる基が存在する可能性があるので、**Rings present**をクリックして、すべての環を選択する。検索式にはネグーションコードを含ませないで、**Deselect All**をクリックし、**OK**ボタンを押す。描画スクリーンが表示される。フリーサイトが設定された窒素はGグループで置き換えられ、検索式の変更を知らせる**Warning**が表示される。**Yes**をクリックする。



ステップ12. SUBSメニューが表示されるので、SUBSを選択する。

ステップ13. 検索式が検索式編集ウインドウに表示される。
[Save] (又は [Save As]) を選んで検索式を保存する。

A 5 4. Example 4



R1, R2 = H, Me

X = 1-4C alkyl ;

A = ring which may be further fuse

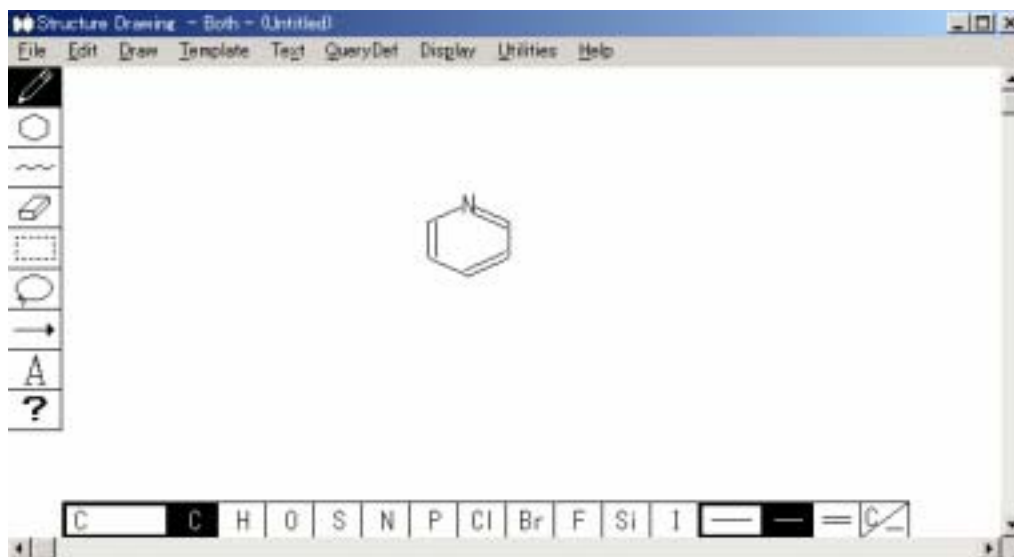
環Aについては、ピリジン環の1位、2位をフリーサイトにする。

ステップ1. MTFのアイコンをダブルクリックして、メニューバーの **Query** から **New Structure** を選択する。

Fragmentation Code を選択し、**OK** ボタンを押す。

ステップ2. 環を描画する。

例えば、メニューバーの **Template** から **Display** を選択する。 **08cnr6.str** を選択し、**Open** をクリックする。ピリジン環の原子または結合をクリックし、カーソルが二重矢印() に変わったら、描画スクリーン上をクリックする。



ステップ3. 窒素置換基を結合させる。

原子・結合パレットのNをクリックして、カレント原子をNに変更し、環炭素からマウスをドラッグして結合を生成させる。

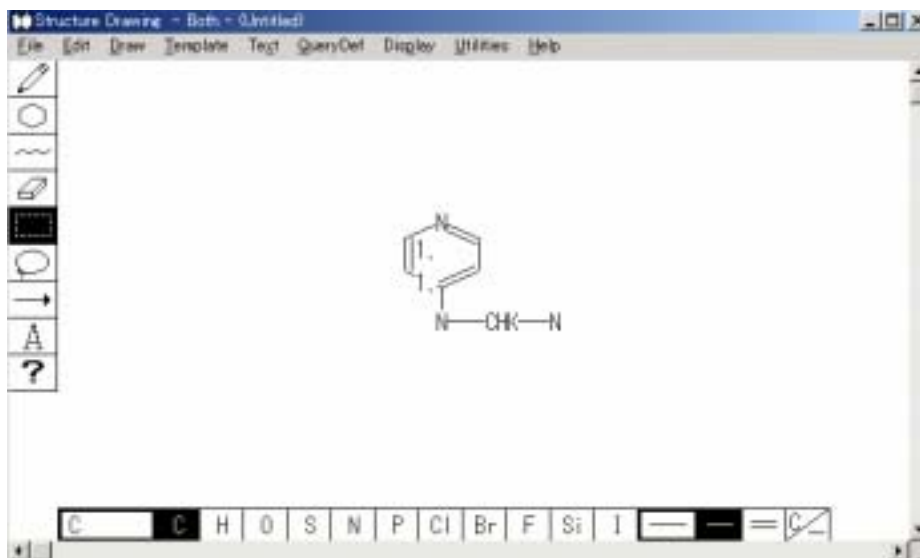
ステップ4. アルキル基を結合させる。

メニューバーの Draw から Chain superatoms を選択し、リストから CHK (アルカン) を選択し Single Use をクリックする。これを窒素に結合させる。アルキル鎖は炭素数1~4個と指定されているので、CHKの定義で属性を制限する。まず、箱型選択ツールを使用してCHKを選択し、メニューバーの QueryDef から Other Attributes を選択する。

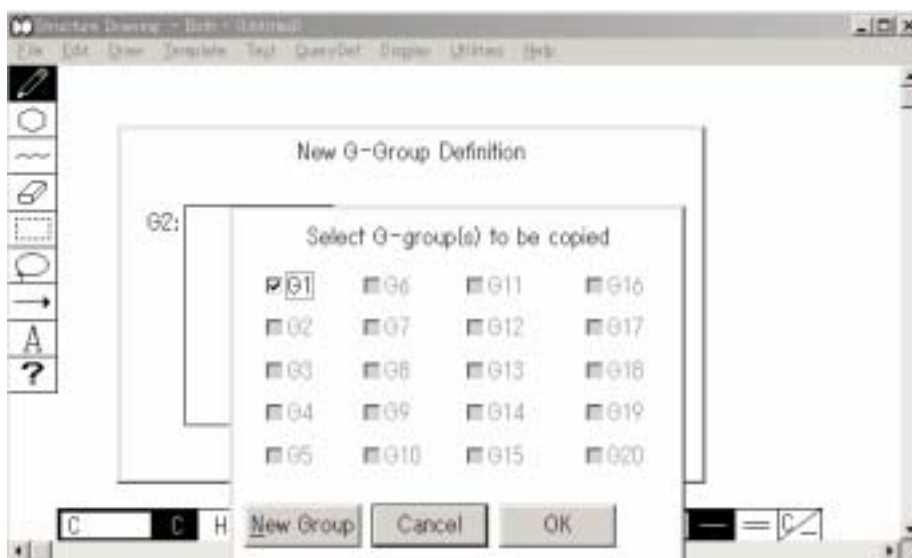
下限(lower bound)はすでに1(デフォルト)になっているので、そのままにする。上限(upper bound)はドロップダウンから4を選択するか、またはテキストボックスをクリックして4を入力して、OK ボタンを押す。ペンシルツールを選択し、原子・結合パレットのNを選択しカーソルをCHKに置きマウスをドラッグする。

ステップ5. フリーサイトを設定する。

フリーサイトにする環原子2個を、Shift キーを押しながら、1個ずつ 箱型選択ツール を使用して選択する (Shift キーを使用すると、複数のノードおよび/または結合を選択できる)。メニューバーの QueryDef から Free sites を選択し、リストから1を選択する。OK ボタンを押すと環原子2個にフリーサイトが付与される。

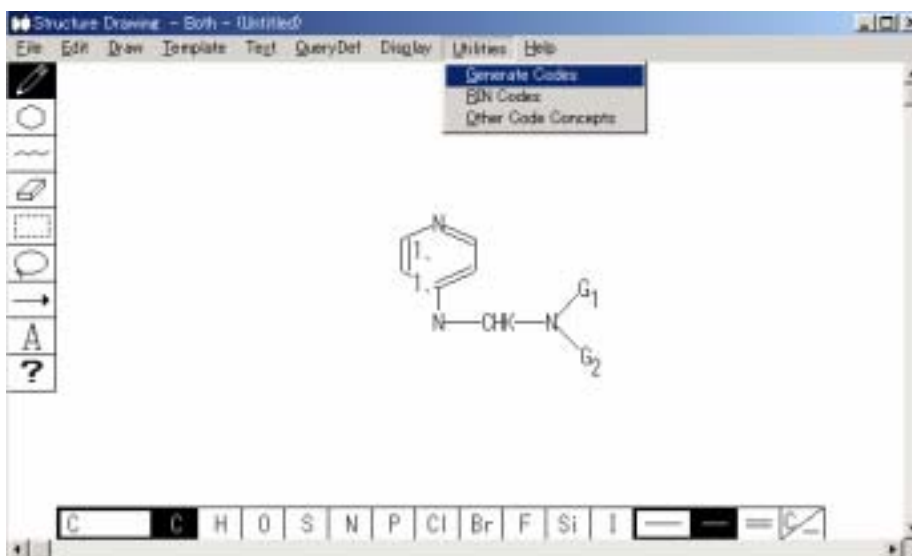


- ステップ6. Gグループを定義する。メニューバーの **Draw** から **G-groups** を選択し、**New** をクリックする。New G-group Definition ダイアログボックスが表示されるので、**Atoms** をクリックし、HとCのチェックボックスをクリックする。**OK** ボタンをクリックし **Save** をクリックして定義を保存する。**Single Use** をクリックすると描画モードに戻り、カレント原子はG1に変更されている。**ペンシルツール** を使用して窒素にG1を結合させる。
- G2を定義する。メニューバーの **Draw** から再び **G-groups** を選択し、**New** をクリックする。G2はG1と同じ定義なので、G1の定義をコピーする。**Copy G grps** をクリックし、**G1** のチェックボックスをクリックする。

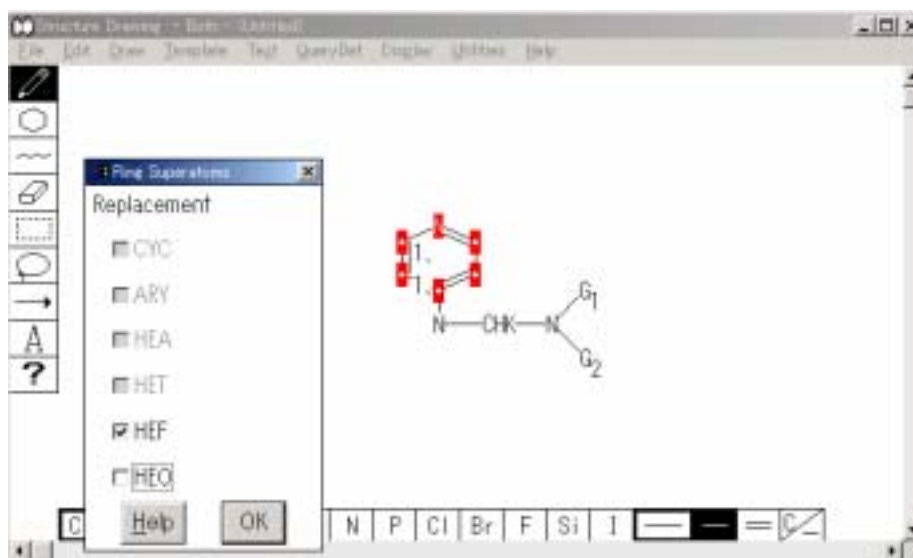


- ステップ7. **OK** ボタン、**Save**、続いて **Single Use** をクリックする。窒素原子にG2を結合させる。

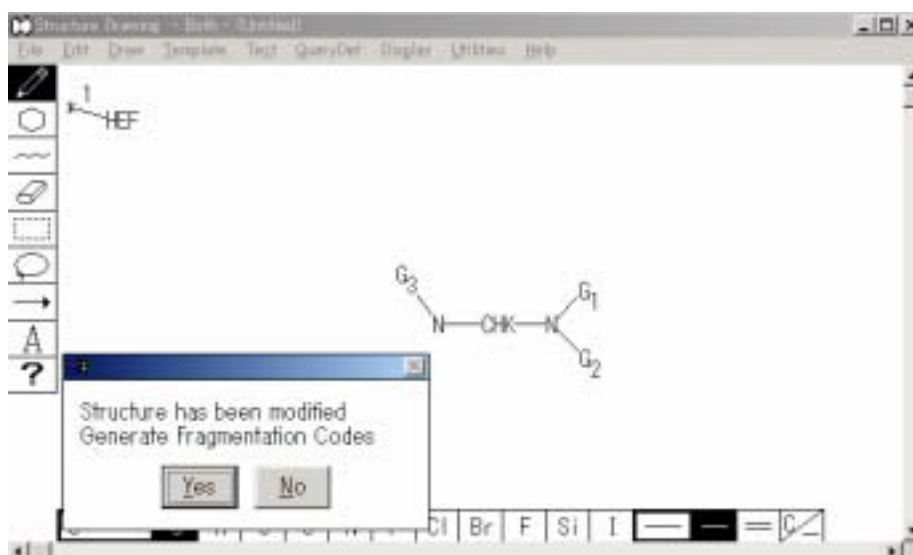
- ステップ8. メニューバーの **Utilities** から **Generate Codes** を選択する。



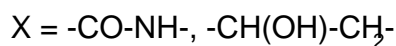
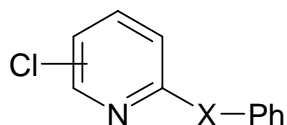
ステップ9. 2個のフリーサイトはハイライトされている。環を形成するか尋ねる **Ring** ウィンドウが表示されるので、**Yes** をクリックする。「Ring superatoms」を選択するダイアログボックスが表示される。縮合環を適切なスーパーアトムに置き換えるため、HEFおよび/またはHEOを選択する（この場合は、HEFのみを選択する）。



ステップ10. 他の環の存在とネグーションコードを定義する。**Rings present** ボックスと全てのオプションをクリックする。ネグーションコードは、**Deselect All** をクリックする。**OK** ボタンをクリックすると、**G group** に置き換わった構造式が表示される。**Warning** ウィンドウが表示されるので、**Yes** ボタンを押す。SUBSを選択し、**Save** 検索式および構造式を保存する。



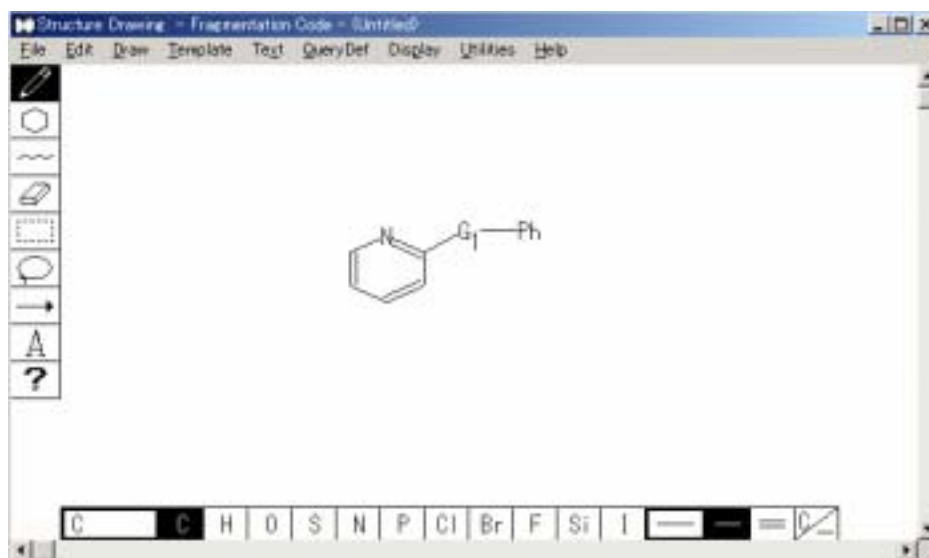
A 5 5. Example 5



ステップ1. 環を描画する。
Example 4.の1、2と同様にして、ピリジン環を描画する。

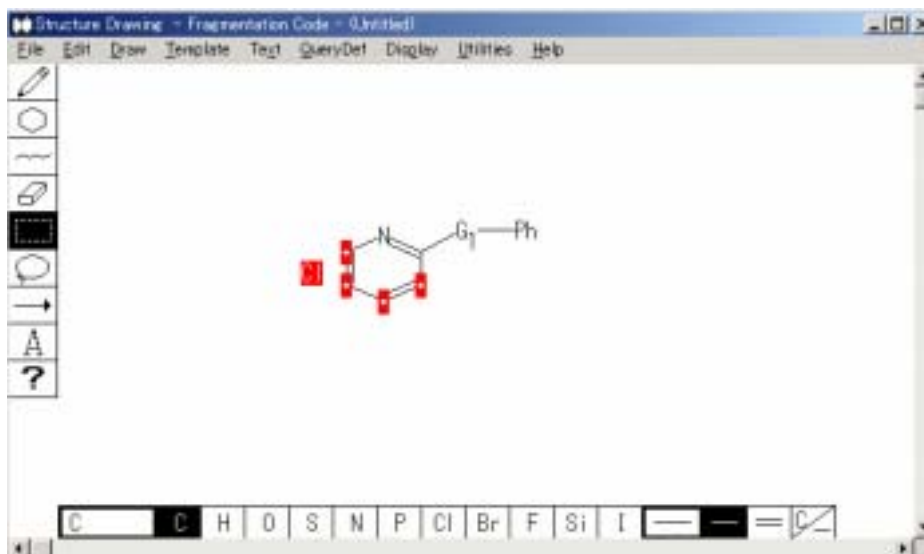
ステップ2. 置換基-G1-Ph を描画する。

カレント原子 ボックスをクリックしてG1と入力し、Single Use をクリックする。ペンシルツールを使用して、G1を環に結合させる。メニューバーの Draw から Shortcut を選択して Ph を選択し、Single Use をクリックする。ペンシルツールを使用して、G1に結合させる。

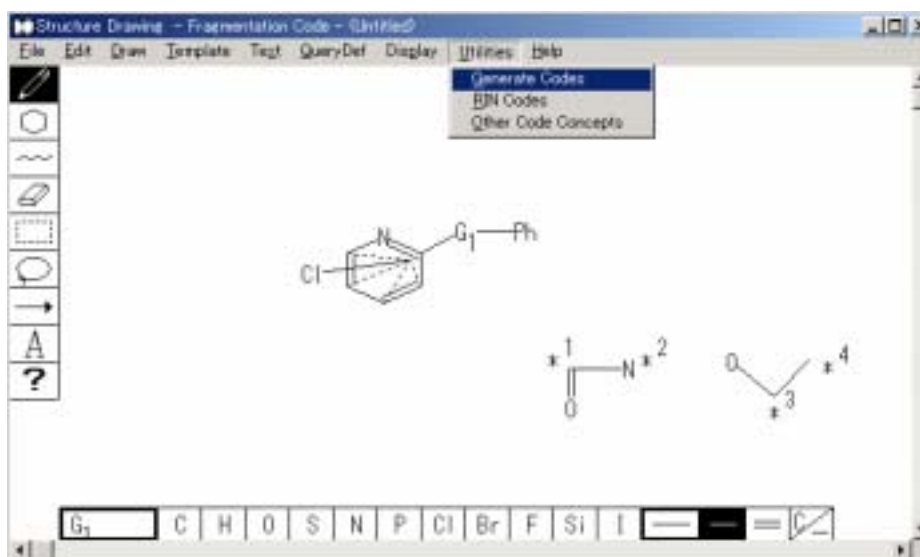


ステップ3. 原子・結合パレットの Cl をクリックして、カレント原子を Cl に変更する。ペンシルツールを使用して、環付近の空白部分に Cl を置く。

ステップ4. 可変結合を定義する。箱型選択ツールをクリックし、Cl を選択してハイライトする。Shift キーを押しながら、Clが置換する可能性のある4個の環炭素をクリックする。

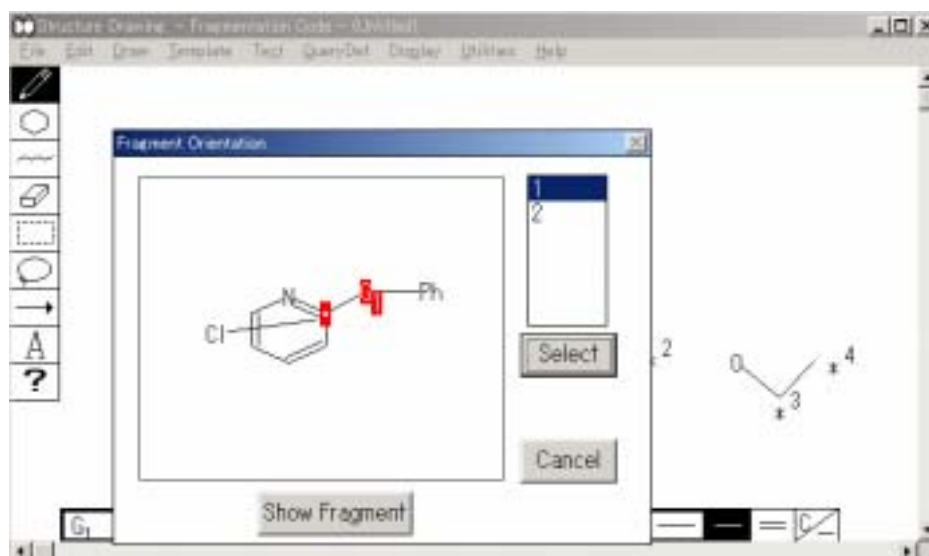


- ステップ5. 4個の環炭素とClがハイライトされると、メニューバーの **Draw** から **Variable point of attachment** を選択する。メニューバーの **Display** から **Show VAP** を選択すると、4個の結合位置と中央部との間が破線で表示される。この検索では、スーパーアトムHEAで索引されてヘテロ環または、ClではなくHALで索引されているレコードは検索されない(HEAおよびHALで索引されたレコードを検索する場合は、**Broader Translation** (BT)属性を環原子とClに適用する)。
- ステップ6. -CO-NH-と-CH(OH)-CH₂-を、メインの構造とは別に、結合ポイントを示したフラグメントとしてスクリーン上に描画する。まず、**ペンシルツール** を選択しマウスをドラッグして、2原子フラグメントと3原子フラグメントを作成する。
2原子フラグメントについては、原子・結合パレットの **N** をクリックし、原子1個をNに変更する。続いて、原子・結合パレットの **O** と **二重結合** を選択し、マウスをドラッグして、オキシ基をもう一方の炭素原子に結合させる。3原子フラグメントについては、原子・結合パレットの **O** をクリックし、原子1個をOに変更する。それぞれのフラグメントに2個の結合ポイントを設定する。**カレント原子** ボックスをクリックして*を入力し **Multiple Use** を選択する。ペンシルツールを使用して、結合ポイントの原子をそれぞれクリックする。
- ステップ7. G1を定義する。メニューバーの **Draw** から **G-groups** を選択し、**New** をクリックする。**Fragments**、続いて **Include all** をクリックする。**OK** ボタンをクリックする。**Save**、続いて **Single Use** をクリックして、描画モードに戻る。



ステップ8. 構造式が完成したので、メニューバーの **Utilities** から **Generate Codes** を選択する。フラグメントの配向を定義するダイアログボックスが表示される。1を選択し、**Show fragment** ボタンをクリックする。

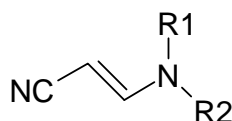
ステップ9. ダイアログボックスの右側には、第1フラグメントの可能な結合ポイント(この場合には1と2)が表示されているので、1を選択し **Select** をクリックする。



ステップ10. 第2のフラグメントの可能な結合ポイントが表示される。同様に3を選び、**Select** をクリックする。

ステップ11. SUBSを選択し、検索式を発生させ **Save** (または **Save As**) で保存する。

A 5.6. Example 6



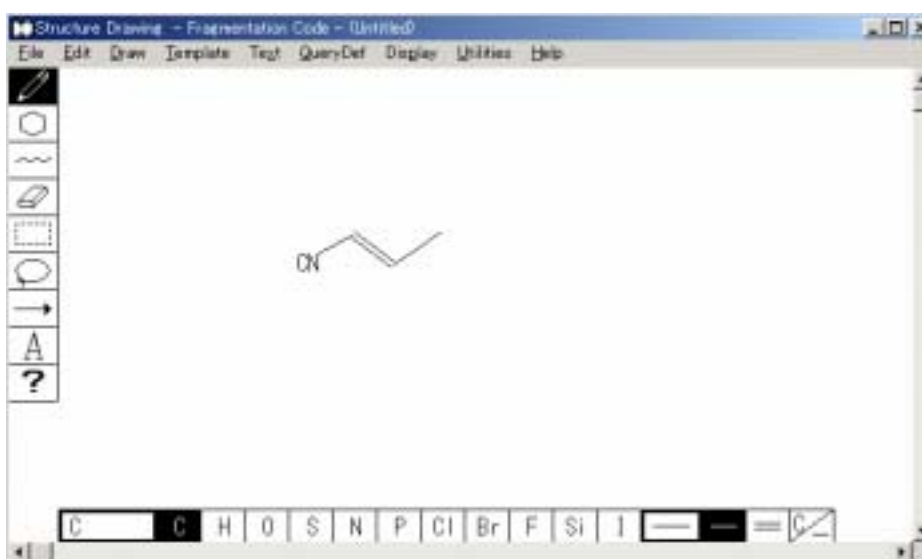
R1, R2 = any substituent including H, or R1 + R2 combine complete a non-aromatic monoheterocycle

ステップ1. MTFのアイコンをダブルクリックして、メニューバーの **Query** から **New Structure** を選択する。

Fragmentation Code を選択し、**OK** ボタンを押す。

ステップ2. 炭素鎖を描画する。

チェーンツール を使用して、4原子鎖を描画する。**ペンシルツール** を選択し、**カレント原子** ボックスをクリックして、CNと入力し、**Single Use** を選択する。4原子鎖の末端原子をクリックしてCNに変更する。カレント結合を二重結合に変更し、4原子鎖の結合1個をクリックして、二重結合に変更する。

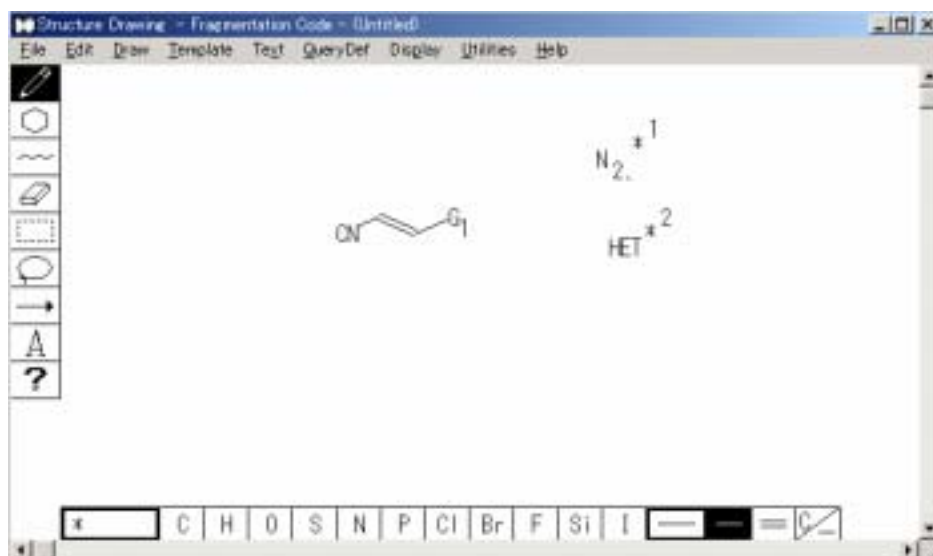


ステップ3. 2個のフリーサイトを有する窒素を、フラグメントとして描画する。カレント原子をNに変更する。

箱型選択ツール を使用して、Nを選択しメニューバーの **QueryDef** から **Free sites** を選択して、フリーサイト2を選択する。

HETをフラグメントとして描画する。カレント原子をHETに変更し、**Single Use** を選択し、スクリーンをクリックする。カレント原子を* (Multiple Use)に変更し、**ペンシルツール** を使用して、フラグメントのNとHETを1回ずつクリックする。

ステップ4. Gグループを定義する。メニューバーの Draw から G-group を選択して、New をクリックする。Fragments、続いて Include All をクリックし、OK ボタンを押す。Save をクリックする。Single Use をクリックし、4原子鎖の末端の炭素原子をクリックして、G1に変更する。

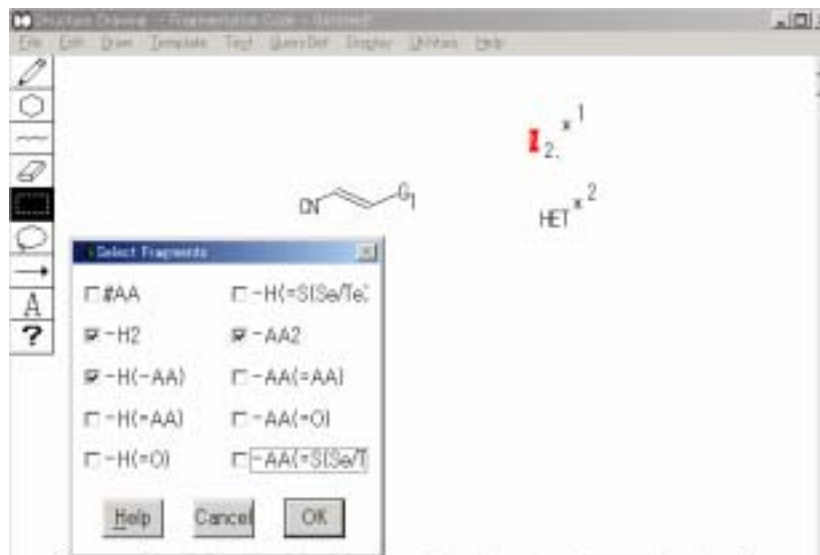


ステップ5. スーパーアトムHETの定義を特定するために属性を指定する箱型選択ツールを使用して、HETを選択し、メニューバーの QueryDef から Other Attributes を選択する。窒素原子の数の下限 (lower bound) を1に変更し、OK ボタンを押す。

The screenshot shows the 'Other Attributes' dialog box. The dialog contains several rows of attributes, each with a label and a dropdown menu. The 'Nitrogen atoms (lower bound)' dropdown is currently set to '1'. The 'OK' and 'Cancel' buttons are visible at the bottom right of the dialog.

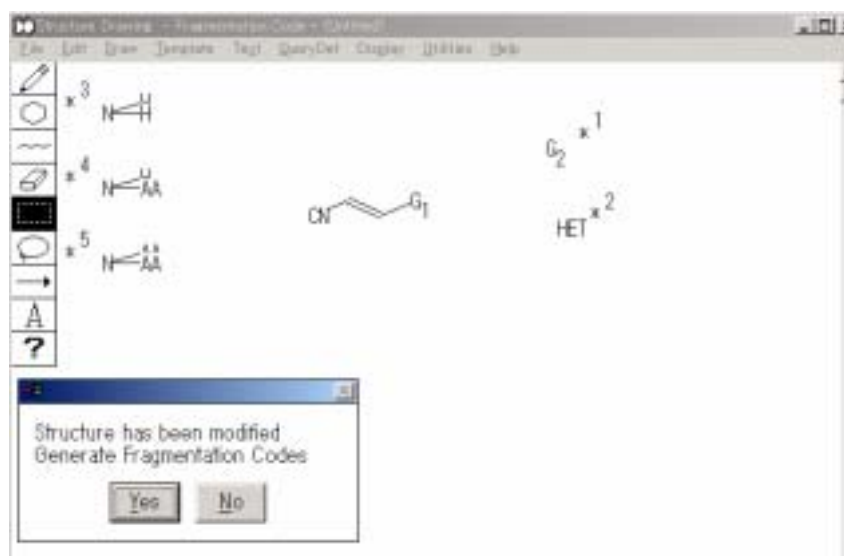
Total heteroatoms (lower)	1
Total heteroatoms (upper)	5+
Oxygen atoms (lower bound)	0
Oxygen atoms (upper bound)	3+
Sulphur atoms (lower bound)	0
Sulphur atoms (upper bound)	4+
Nitrogen atoms (lower bound)	1
Nitrogen atoms (upper bound)	0
Size of rings (lower bound)	2
Size of rings (upper bound)	5+
Substituents attached to	carbon
Saturation	EITHER

ステップ6. メニューバーの **Utilities** から **Generate Codes** を選択する。窒素上より許容する置換の種類を定義するダイアログボックスが表示される。



ステップ7. R1とR2は単結合で結合されているので、単結合以外のオプションはチェックをはずし、**OK** ボタンを押す。

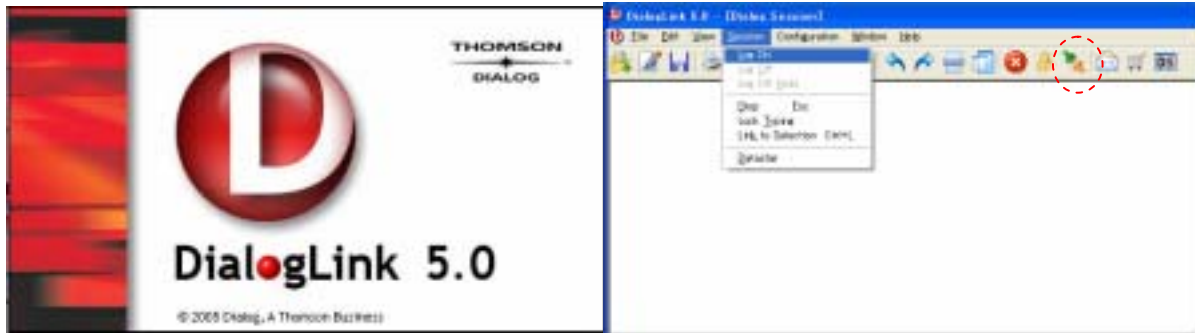
ステップ8. **Groups/Codes Included/Excluded From Free Site Substituents** のダイアログボックスが表示される。R1とR2はいずれの置換基でも良いので、**Deselect all** をクリックして、ネグションコードを全てはずす。環系については **Ring present** をクリックし、続いてBasic Group Codesの全てのオプションにチェックを入れる。**OK** ボタンをクリックすると **Warning** が表示される。



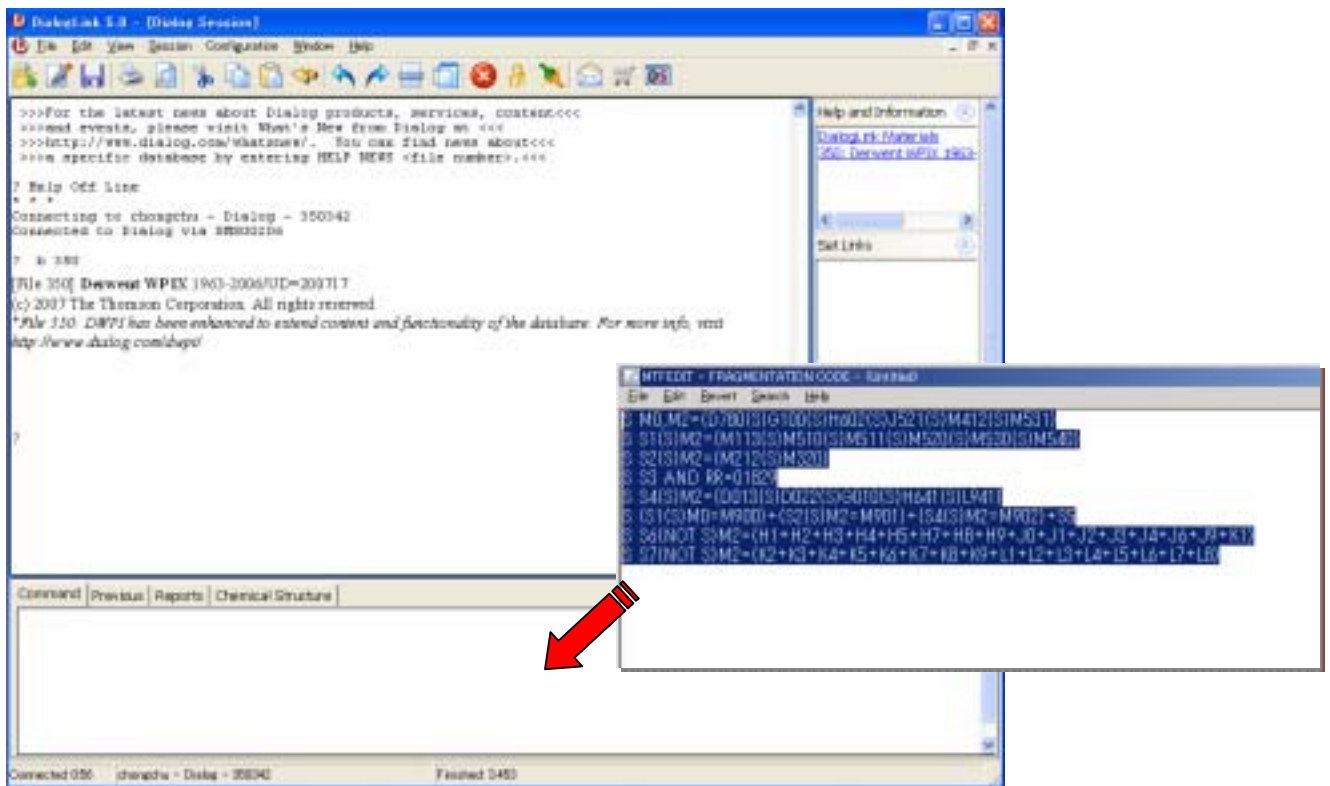
ステップ9. をクリックし、を選択する。 (または) で検索式および構造式を保存する。

Appendix I. DialogLink (アップロード)

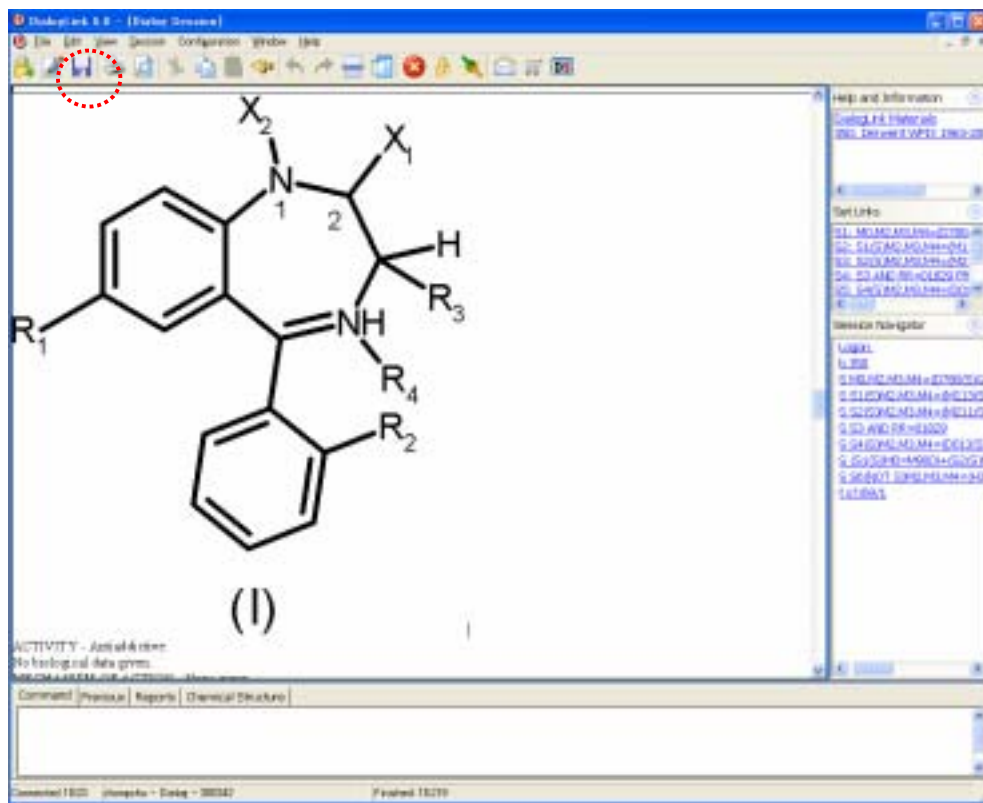
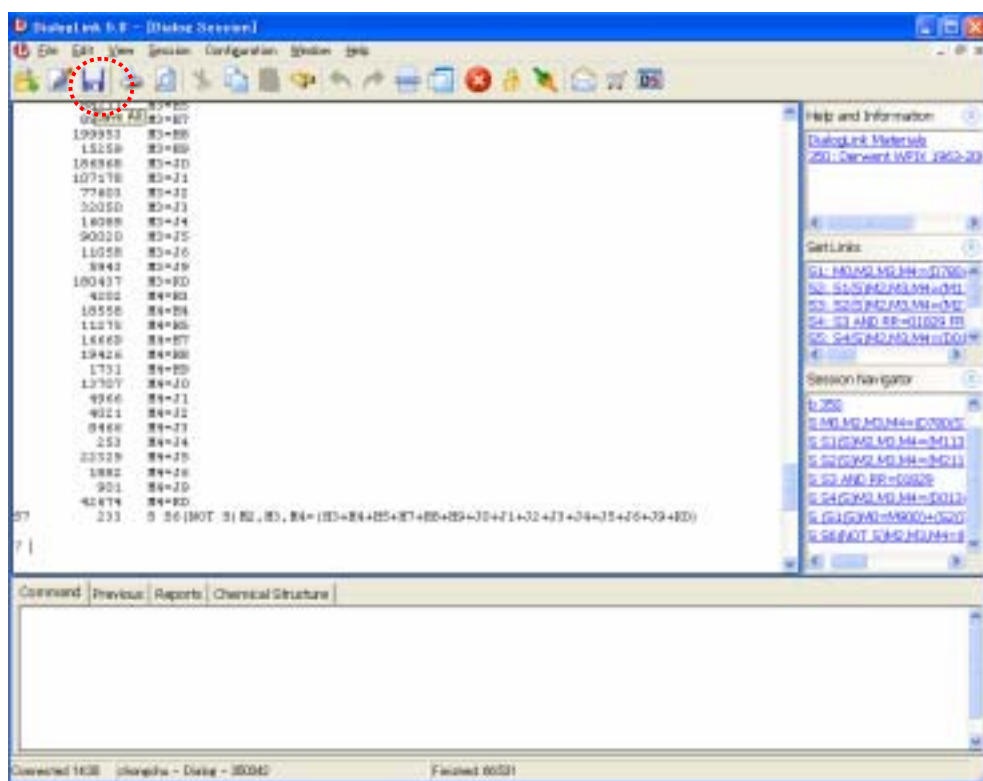
1. DialogLink を起動し、接続する



2. ファイル Derwent World Patents (350, 352)を入力する。
3. Markush Topfrag で発生させた検索式をコピーして、検索窓にペーストする。検索式の一行目にカーソルを合わせて Enter キーを押すと自動的に検索を実行する。

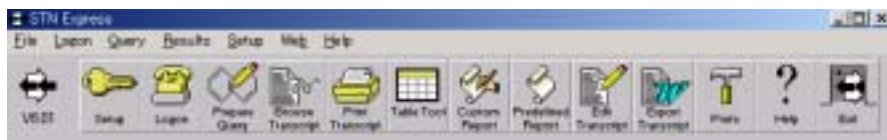


4. 検索が終了後、SAVE アイコンをクリックし、名前をつけて適切な場所に履歴を保存する。

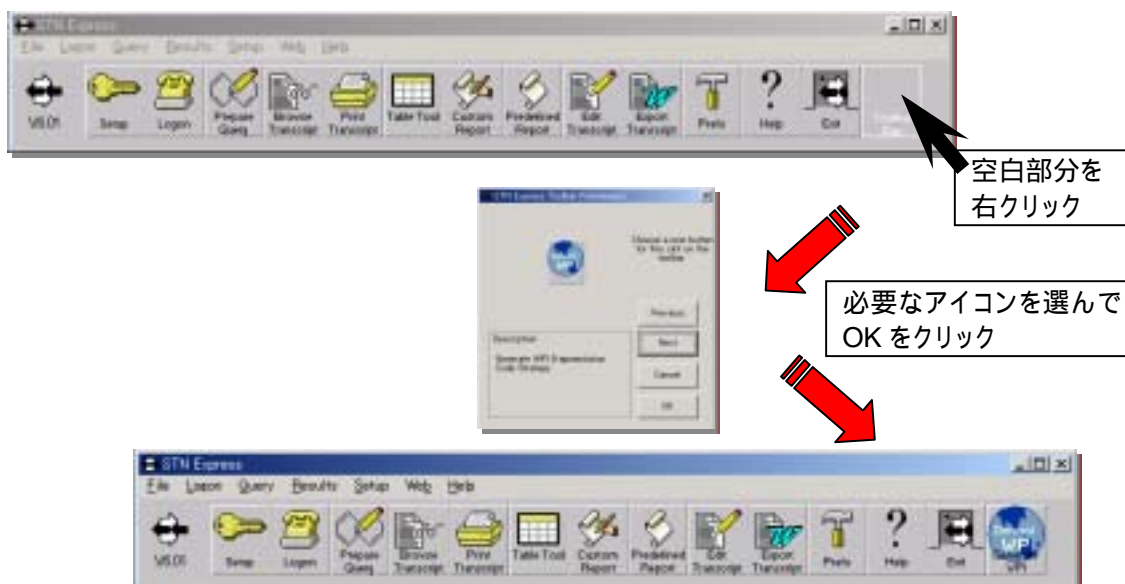


Appendix II. STN Express (アップロード)

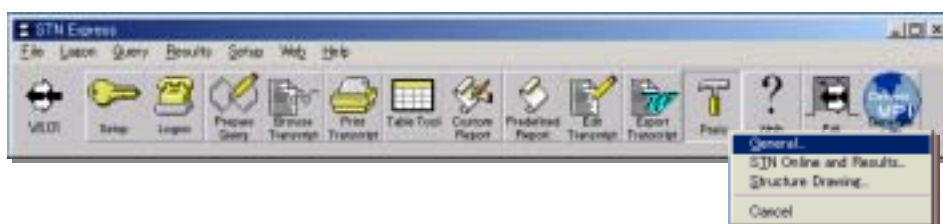
1. STN Expressのアイコンをダブルクリックする。メインメニューが表示される。



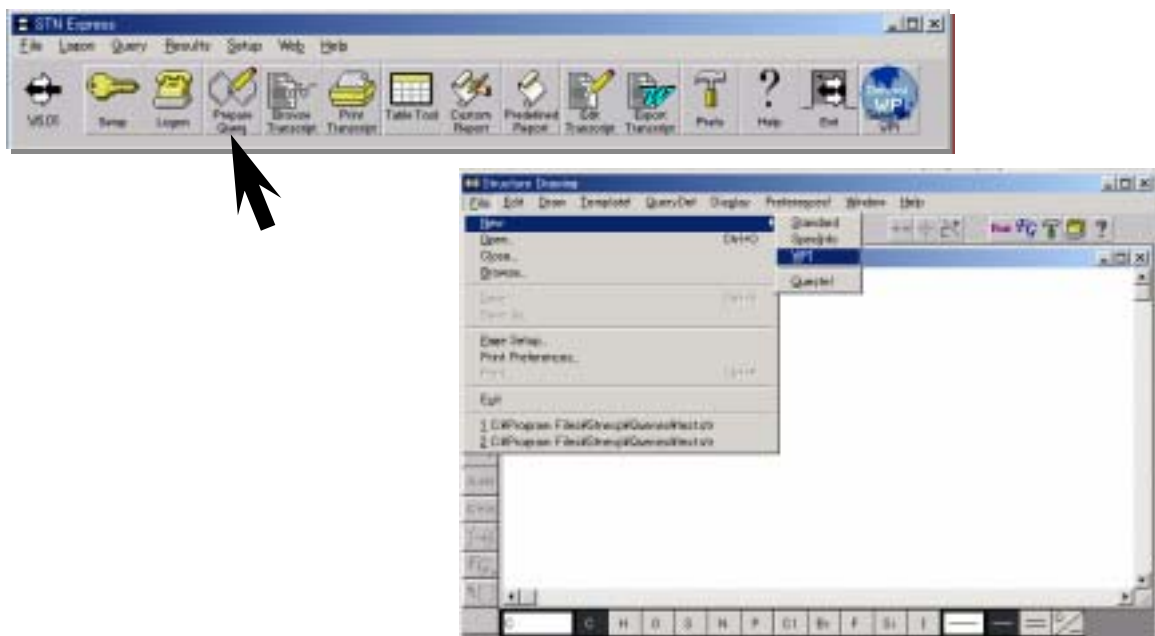
メインメニューバーに、Prepare Structure Query(構造作図)、Browse transcript (検索記録)、Generate WPI(WPIストラテジーの生成)、Edit WPI Strategy(WPIストラテジーの編集)、Other code concepts(WPIストラテジーフラグメンテーションコード(非構造コード))のアイコンがあることを確認する。アイコンが表示されていない場合、メニューバーの空白部分を右クリックし、「STN Express ツールバーのオプション」のダイアログボックスを表示させる。必要なアイコンを選択し、メニューバーに追加する。



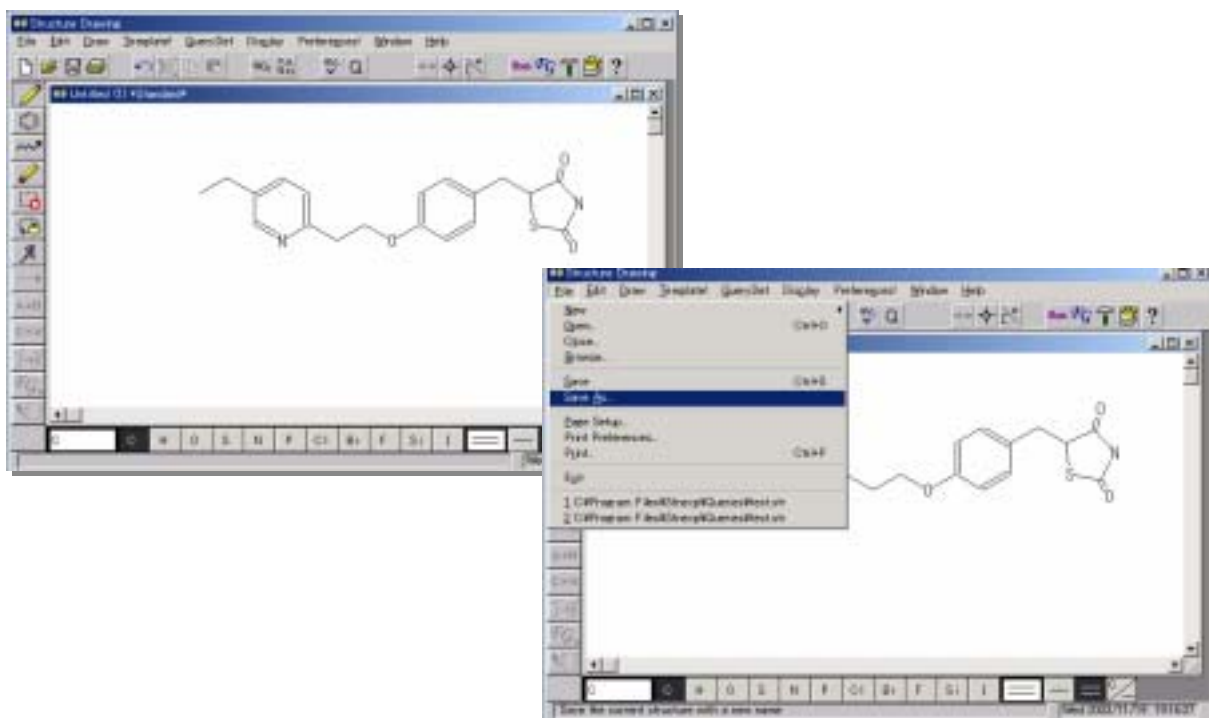
日本語・英語表示の切り替えは、Preferences (オプション) をクリックして「General」(全般) を選択する。Select a Language で選択する。



2. Prepare Structure Query のアイコンをクリックする。「Untitled (1) * Standard」描画スクリーンが出てくる。メニューバーの File(ファイル)の New(新規作成)をプルダウンし、WPI を選択する。



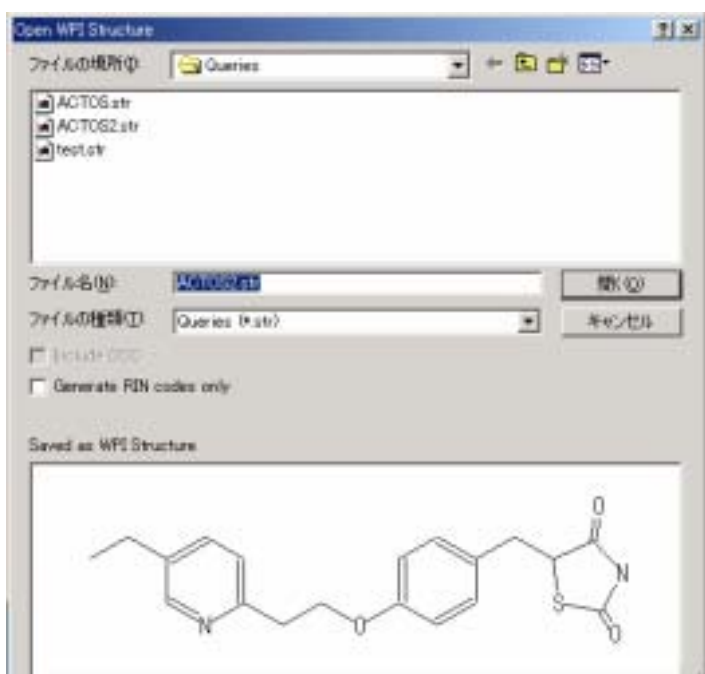
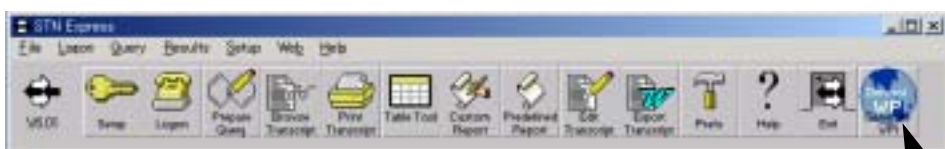
3. 質問構造式を描画する。
描画方法については、Topfrag の描画例をご参照下さい。



4. Save(または Save As(保存)を選択し、ファイル名をつけて保存する。拡張子は「.str」となる。
このとき、Verify Query「質問構造式のチェック」が選択されていると、Query verification「質問構造式のチェック」のダイアログボックスが表示される。Select「選択」を選んで、質問構造式で確認したい項目を選択する。

例えば、isolated(孤立)でも embedded(非孤立)でもよい環を確認する場合は、Rings(環)の孤立/非孤立をチェックする。この作業は属性の確認作業であって**属性を設定する作業ではない**ので、属性の設定は描画時に設定しておく。具体的に、環を描画したとき、箱型選択ツールを使用して、環上のいずれかのノードを選択し、メニューバーの QueryDef から Ring Isolation)を選択し、孤立/非孤立のいずれかを選択する。

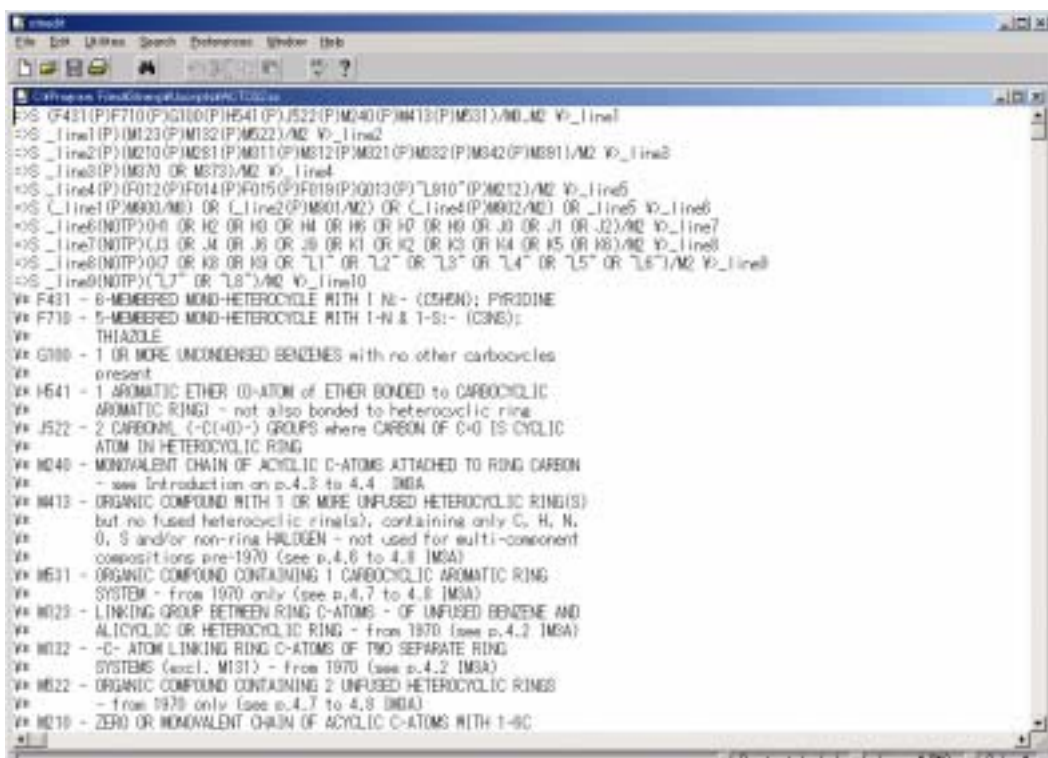
5. 「OK」ボタンを押すと、確認作業が進む。確認作業が終了すると、描画スクリーンに戻る。
6. 描画スクリーンを閉じ、メインメニューに戻る。
7. メインメニューの Generate WPI(WPI ストラテジーの作成)のアイコンをクリックする。3. で保存した質問構造式のファイルを選択する。




8. Select Subs のウィンドウが表示されるので、Subheading を選択する。「OK」ボタンを押す。



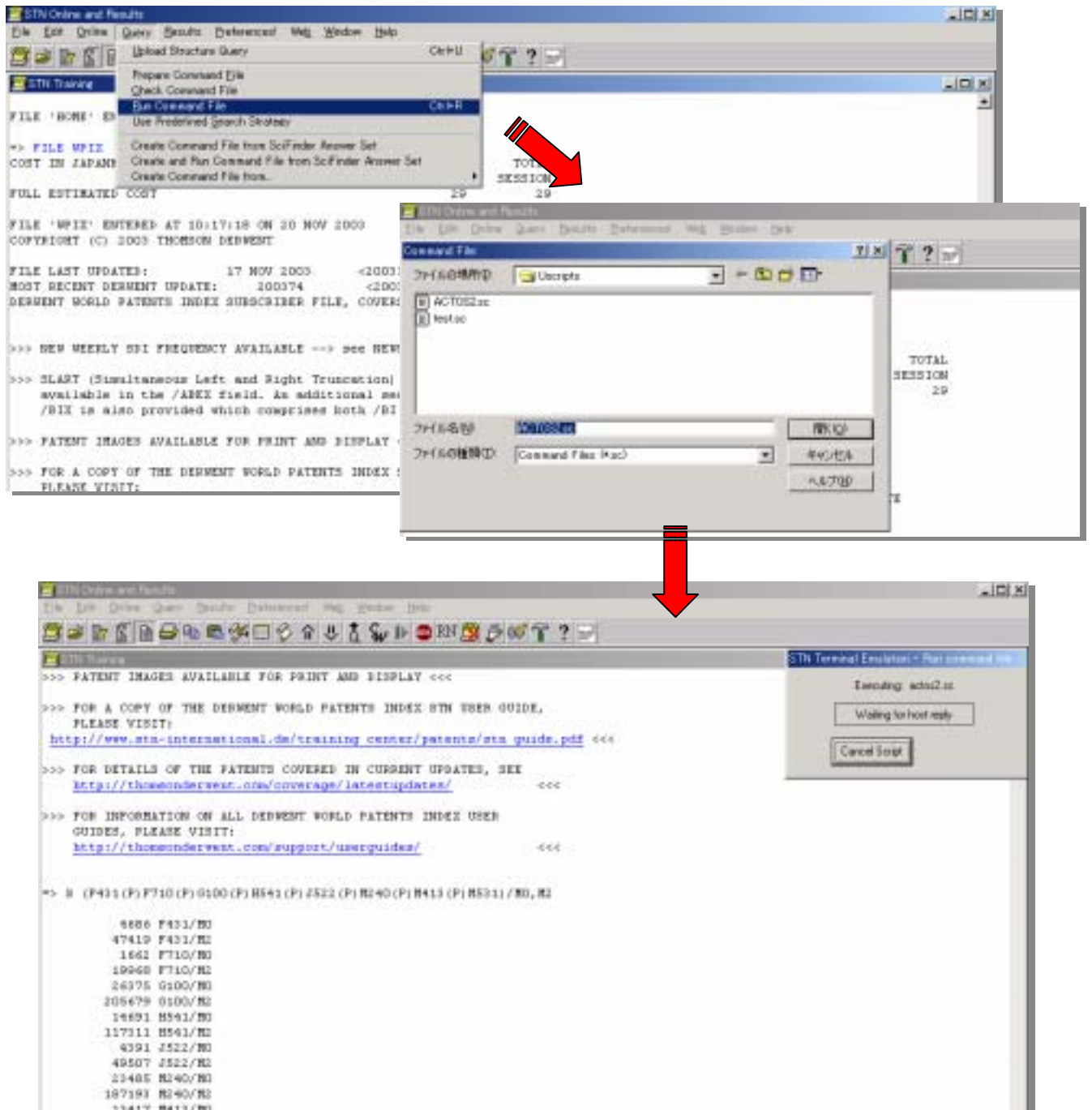
9. フラグメンテーションコード検索式が自動発生するので、必要に応じて修正を行い、Save(または Save As(保存))を選択し、保存する。拡張子は「.sc」となる。



10. 描画スクリーンのメニューバーの電話マーク  をクリックすると、STN に接続される(ただし、あらかじめ Setup(設定)で設定が必要である)。STN に接続されない場合は、File(ファイル)から Exit(終了)を選択し、描画スクリーンを閉じる。メインメニューの Logon(ログオン)をクリックして、STN に接続する。

11. STN に接続したら、ファイル(WPIX)を選択する。

12. Query(質問式) から、Run Command File(コマンドファイルを実行する)を選択する。8. で保存したフラグメンテーションコード検索式のファイルを選択すると、自動的に実行される。
フラグメンテーションコードフィールドを含んだ出力形式: Max または Maxg(イメージ出力)。



本書の内容は全部または一部を無断で転載する事は禁止されています。

ヘルプデスク **03-5218-6531**
フリーコール **0800-888-8855**
E-mail **ts.support.jp@thomson.com**

トムソンコーポレーション株式会社
トムソンサイエンティフィック

(2006.12.10 Edition)