

KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

構造と反応の描画

構造と反応の描画

ChemWindow を使用して構造の作成と編集をする方法

目的

ChemWindow は、充実した機能を備えた 2 次元構造描画プログラムです。ChemWindow を使って化学構造を作成し、それを KnowItAll 情報システム全体で化学組成の検索、予測、および報告に使用することができます。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 基本的な ChemWindow のツールを使って構造の作成と編集をする方法
- 作成した構造を保存する方法
- ChemWindow から MS Office 文書に構造を送信する方法


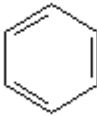

背景


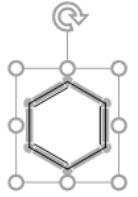
化学構造は、KnowItAll 情報システム全体で化学組成の検索、予測、および報告に使用できます。

KnowItAll 使用アプリケーション



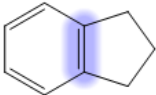



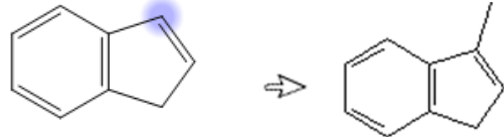
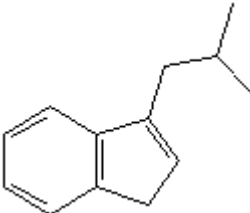
- ChemWindow®

新しい構造の描画を始めます

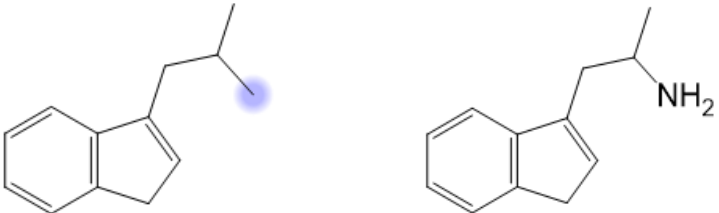
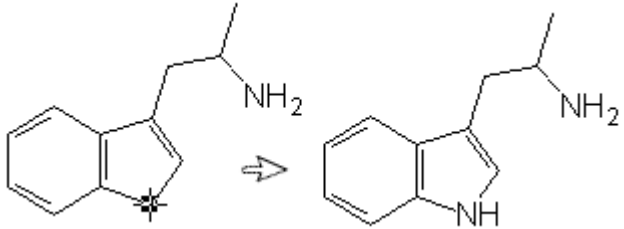
	アクション	結果
1	ベーシックツールボックスにある ChemWindow アイコンをクリックします。	ChemWindow アプリケーションが開き、空の描画パネルが表示されます。
2	ケミストリーツールバーの メインセクション で、ベンゼン環ツール  を選択します。	
3	カーソルを描画領域に移動し、ベンゼン環を描くためにクリックします。	ベンゼン環の構造が描画領域に配置されます。 
4	必要に応じて、ズームツールバーのツールを使用して拡大縮小できます。 注記: View > Zoom Toolbar (表示 > ズームツールバー) を選択すると、ツールバーの表示を切り替えることができます。  Ctrl キーを押しながらスクロールすることでも、素早く拡大縮小できます。	

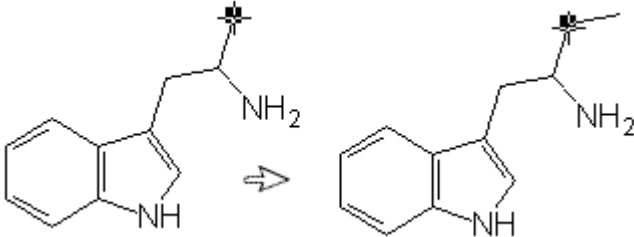
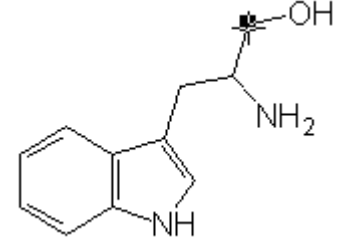
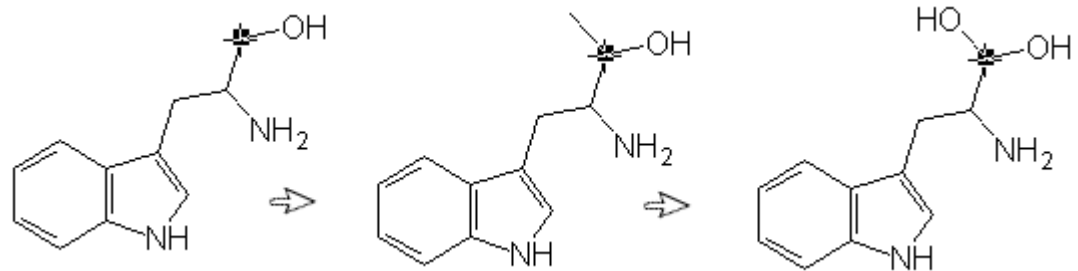
<p>5 Selection ツール  を使用して構造を選択し、ワークスペース内で移動させることができます。</p>	<p>構造が選択されると、グラフィックハンドルが表示されます。</p> 
--	---

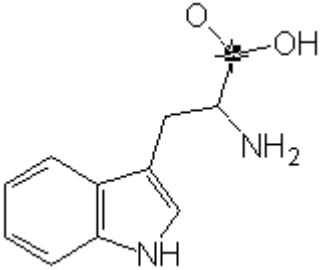
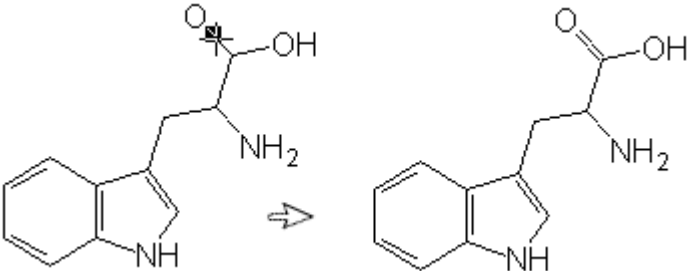
構造に機能を追加

	アクション	結果
1	ケミストリーツールバーから「Cyclopentane ツール」  を選択し、その後、カーソルをベンゼン環のハイライトされた結合に移動します。	
2	クリックして、シクロペンタン環をベンゼン環に結合させます。	
3	描画ツールバーの「Bonds グループ」を開き、その中から「Inside Double Bond ツール」  を選択します。このツールを使って、構造に二重結合を追加します。	
4	次に、「Single Bond ツール」  を選択します。カーソルを、表示されているアトムの当たり判定領域上に移動させます。そして、クリックして単結合を作成します。	 注記: カーソルを離さずにドラッグすることで、結合の向きを制御することもできます。
5	アトムの当たり判定領域上をクリックすることで、単結合を追加し続けることができます。	

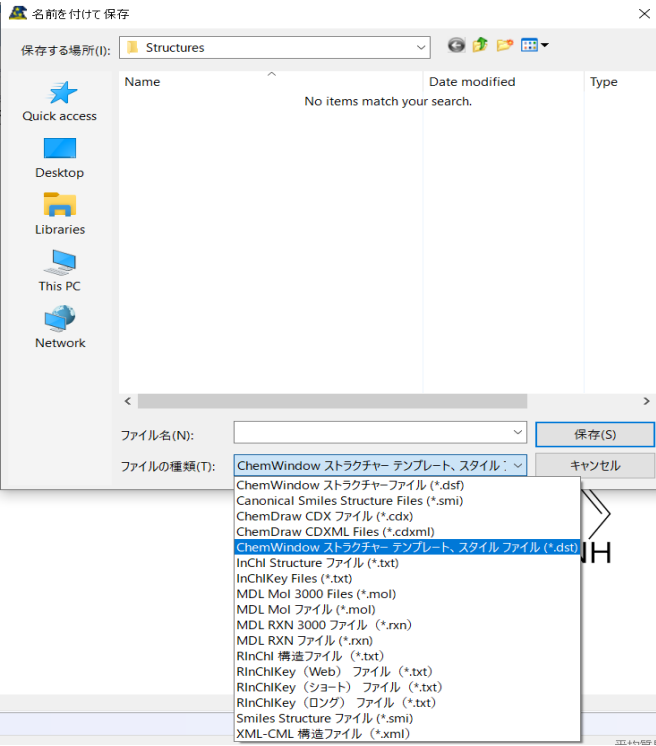
窒素と酸素の原子を追加するためには、ホットキーを使います

	アクション	結果
1	カーソルを末端の炭素の上に移動し、キーボードで「n」を押します。	<p>すると、結合の末端に NH2 と表示されます。</p>  <p>>></p> <p>注記：ホットキーを使うと、数値は自動的に下付き文字で表示されます。ホットキーは、原子に素早くラベルを付けるためのショートカットキーです。</p> <p>また、原子ラベルツールを使用すると、描画に原子を追加することができます。ただし、結合ツールを使用して追加された原子とは異なり、原子ラベル内の原子は実際の構造の一部ではなく、質量や化学式の計算には含まれません。</p>
2	同じ手順を繰り返して、 NH で炭素原子を置き換えます。	

3	<p>まだ単結合ツールが選択された状態で、カーソルを末端の炭素の上に置き、クリックして別の単結合を追加します。</p> 
4	<p>カーソルを動かさずに、キーボードで「o」を押します。</p> 
5	<p>別の単結合を作るために、クリックしてください。</p> <p>「o」を再び押して、ヒドロキシル基を追加します。</p> 


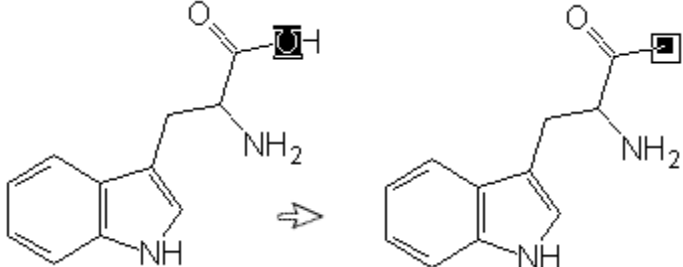
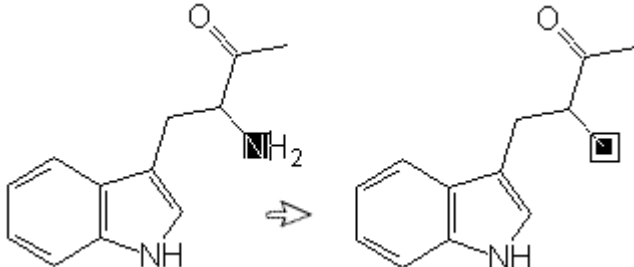

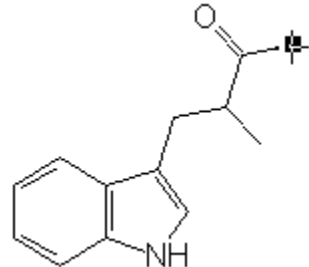
6	<p>さらに一度「o」を押すことで、水素を取り除きます。</p> <p>注記：ホットキーを使うと、水素原子の数をホットキーを繰り返し押すことで調整することができます。</p>	 <p>The diagram shows the chemical structure of tryptophan (indol-3-tryptan-1-amine). A hotkey cursor, represented by a small square with a crosshair, is positioned over the alpha carbon atom of the side chain. This carbon is bonded to a hydrogen atom (H), a hydroxyl group (OH), an amino group (NH₂), and the indole ring system.</p>
7	<p>カーソルを結合のヒットボックスに移動し、クリックして二重結合を作成します。</p>	 <p>The diagram illustrates the transformation of the alpha carbon in tryptophan. On the left, the hotkey cursor is over the alpha carbon. An arrow points to the right, where the structure is shown with a double bond formed between the alpha carbon and the oxygen atom of the hydroxyl group, resulting in a carboxylic acid derivative (tryptophan-3-yl-L-alanine).</p>

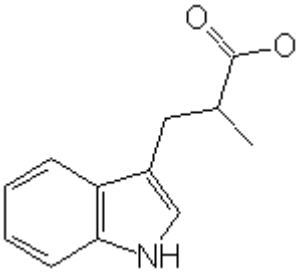

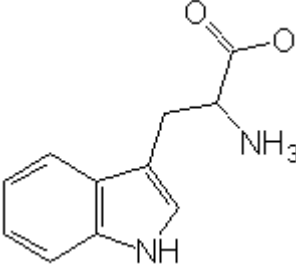

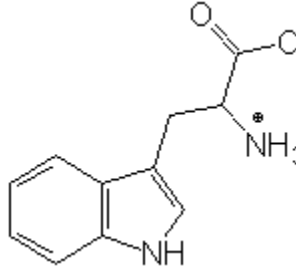
構造を保存


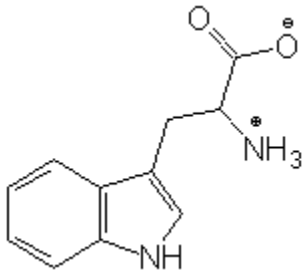
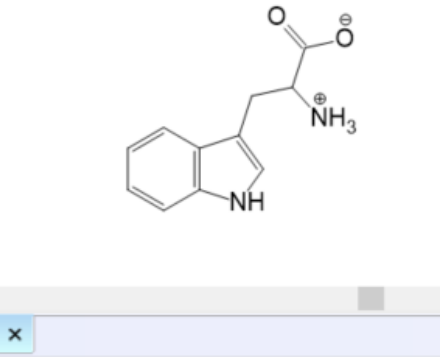
	アクション	結果
1	<p>File > Save (ファイル→保存) を選択します。</p> <p>注記: ツールバーの保存ボタンをクリックするか、Ctrl+S キーを押すこともできます。</p>	<p>「名前を付けて保存」 (Save As) ダイアログボックスが開きます。既定のファイルタイプ (ChemWindow 構造ファイル、.dsf) がすでに選択されており、この構造に使用されます。他のファイルタイプには、ChemWindow Structure Template & Style (.dst) および MDL Mol ファイル (*.mol) があります。</p>  <p><chem>NC(Cc1c[nH]c2ccccc12)C(=O)O</chem></p>

2	構造ファイルを保存したいフォルダに移動し、「tryptophan」というファイル名を入力します。	
3	Save (保存) をクリックします。	構造が保存され、ファイル名が描画タブに表示されます。

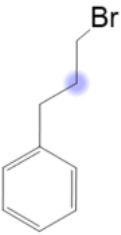

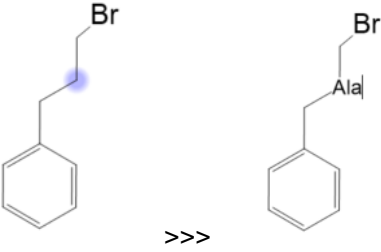
構造を編集し、原子ラベルと原子タグを使用

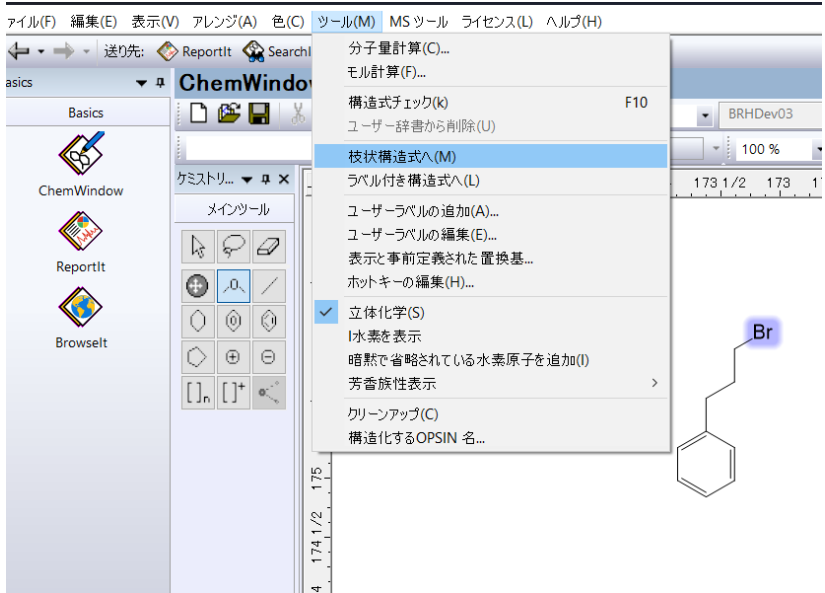
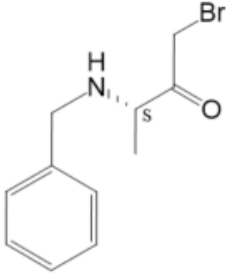
	アクション	結果
1	消しゴムツール  を選択し、ヒドロキシル基を削除するためにクリックします。	
2	アミノ基を削除するためにクリックします。	
3	描画ツールバーの「メイングループ」を開き、原子ラベルツール  を選択します。ヒドロキシル基があった場所をクリックします。	

4	<p>「O」の大文字を入力します。</p> <p>注記: 原子ラベルは大文字と小文字を区別します。</p>	 <p>The image shows a chemical structure of a tryptophan derivative. It consists of an indole ring system (a benzene ring fused to a pyrrole ring) attached to a side chain. The side chain is a 2-amino-3-carboxypropyl group. The carboxylate group is shown as a carbon atom double-bonded to one oxygen atom and single-bonded to another oxygen atom, with a negative charge on the latter. The amino group is shown as a nitrogen atom bonded to three hydrogen atoms.</p>
5	<p>注意: 数字は、テキストスタイルツールバーの「化学式」ツール  が選択されている場合、自動的に下付き文字で表示されます。</p>	 <p>The image shows a chemical structure of a tryptophan derivative, similar to the one in the previous row, but with an ammonium group instead of a carboxylate group. The ammonium group is shown as a nitrogen atom bonded to three hydrogen atoms and a positive charge.</p>
6	<p>正の電荷の原子タグツール  を選択し、原子に正の電荷を追加します。</p>	 <p>The image shows a chemical structure of a tryptophan derivative, similar to the one in the previous row, but with a protonated ammonium group. The ammonium group is shown as a nitrogen atom bonded to three hydrogen atoms and a positive charge, with a small asterisk next to the nitrogen atom.</p>
	<p>ヒント</p>	<p>電荷をクリックしてドラッグすると、電荷の配置をより細かく制御できます。また、ラソツールを使用して電荷を移動することもできます。</p>

	アクション	結果
7	<p>次に、負の電荷の原子タグツール  を使用して酸素原子にマイナスの電荷を追加します。</p>	
8	<p>「ファイル」>「名前を付けて保存」を選択して、構造を「tryptophan2.dsf」というファイル名で保存します。</p>	
9	<p>この描画を閉じるために、下部のタブの「x」をクリックします。</p> <p>ファイルの保存のプロンプトで「No (いいえ)」をクリックします。</p> <p>これにより、新しい空白の ChemWindow 画面が開始されます。</p>	

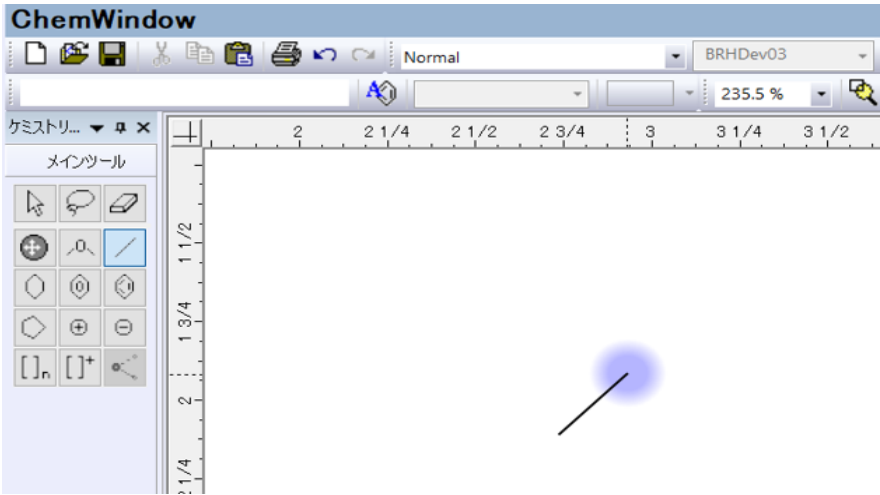
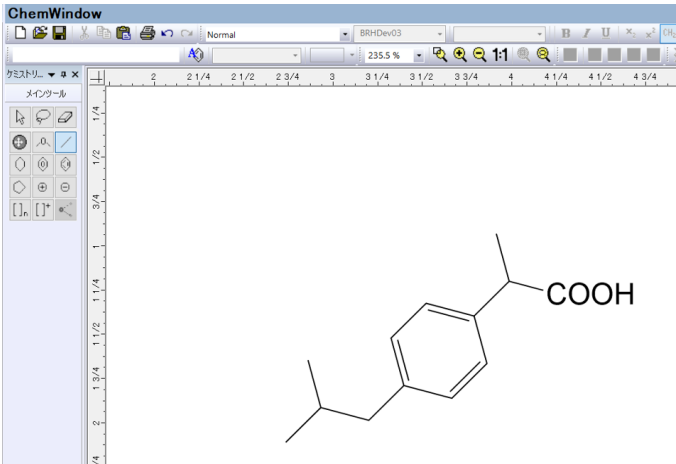
事前定義された置換基を使用

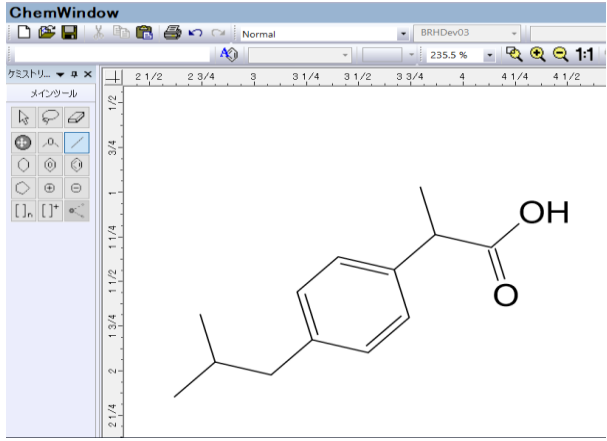
	アクション	結果
1	指定された構造を描画：	
2	<p>ハイライトされた原子に、以下のいずれかの方法で「Ala」というテキストを使ってラベルを付けます：</p> <ul style="list-style-type: none">a) 「メイングループ」の「ラベル」ツール  を使用します。b) 原子をハイライトしたまま Enter キーをクリックする。 <p>注記: 「Ala」は事前に定義された置換基です。</p>	

アクション	結果
3 「Chemistry (化学)」メニューを選択し、「Make Stick Structure (棒状構造を作成)」をクリックします。	 <p>The screenshot shows the ChemWindow interface. The 'Tools' menu is open, and 'Stick Structure' (棒状構造式へ(M)) is highlighted. Other visible options include 'Molecular Weight Calculation' (分子量計算(C)...), 'Molar Calculation' (モル計算(F)...), 'Structure Check' (構造式チェック(K)), 'Remove User from Dictionary' (ユーザー辞書から削除(U)), 'Stick Structure with Label' (ラベル付き構造式へ(L)), 'Add User Label' (ユーザーラベルの追加(A)...), 'Edit User Label' (ユーザーラベルの編集(E)...), 'Show/Hide Predefined Substituents' (表示と事前定義された置換基...), 'Edit Hotkeys' (ホットキーの編集(H)...), 'Stereochemistry' (立体化学(S)), 'Show Hydrogens' (水素を表示), 'Add Omitted Hydrogens' (省略されている水素原子を追加(I)), 'Aromaticity' (芳香族性表示), 'Clean Up' (クリーンアップ(C)), and 'Construct OPSIN Name' (構造化するOPSIN 名...).</p>
4 注記: 事前定義された置換基の一覧を表示するには、「化学」>「事前定義置換基の表示」を選択します。	 <p>The chemical structure shows a benzene ring attached to a nitrogen atom (NH) which is part of an amide group. The nitrogen is bonded to a carbon atom that is also bonded to a sulfur atom (S) and a carbonyl group (C=O). The sulfur atom is bonded to a methyl group (CH3) and a bromomethyl group (CH2Br).</p> <p>上記が展開された構造です。</p>

5	<p>この描画を閉じるために、下部のタブの「x」をクリックします。。</p> <p>ファイルの保存のプロンプトで「No (いいえ)」をクリックします。。</p> <p>これにより、新しい空白の ChemWindow 画面が開始されます。</p>	
---	---	--

ホットキーを使用

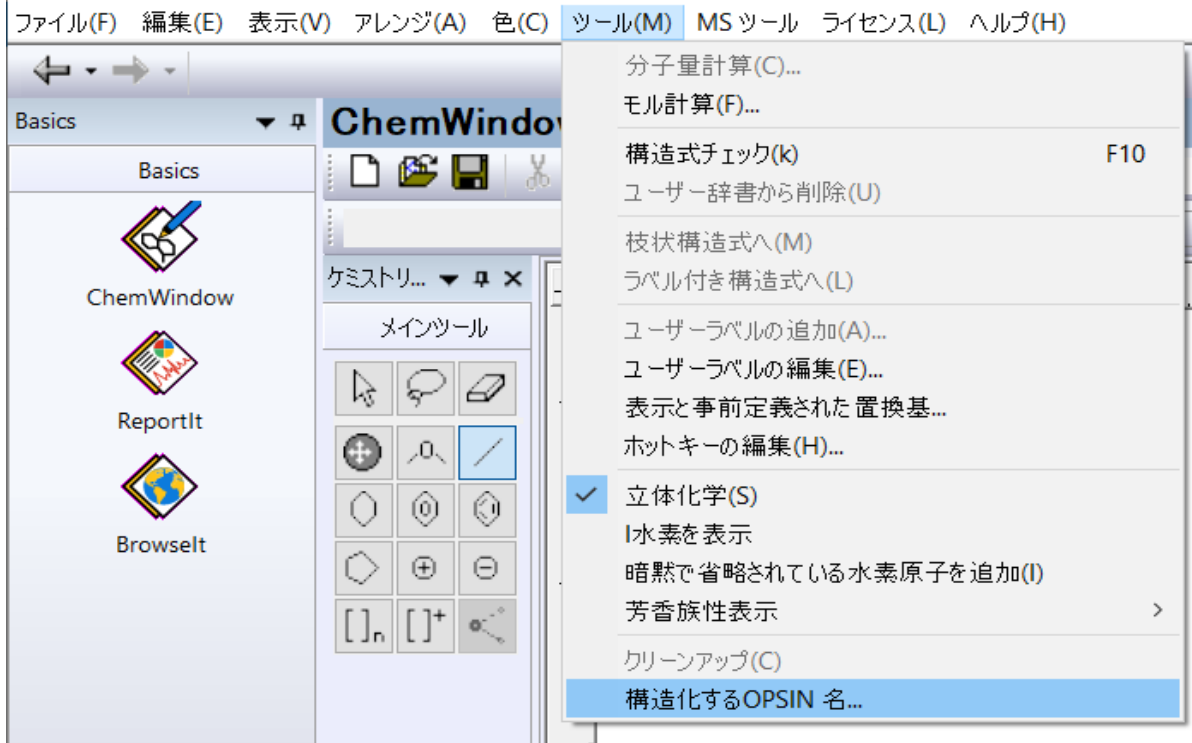
	アクション	結果
1	<p>メインツールボックスから「標準結合ツール」を選択します。</p> <p>構造ペインをクリックして、単結合を挿入します。ボンドの端は自動的にハイライトされます。</p>	 <p>The screenshot shows the ChemWindow interface with a grid. A single bond is being drawn from the origin (0,0) to the point (1,1) on the grid. The bond is highlighted with a blue glow, indicating it is selected.</p>
2	<p>キーボードで次の文字を入力します： 9、1、3、9、Shift キーを押しながら O (大文字の O)。</p> <p>(大文字を使ったホットキーは、Caps Lock キー + 文字ではなく、Shift キー + 文字を使用します。)</p>	 <p>The screenshot shows the ChemWindow interface with the chemical structure of 4-(2-methylpropyl)benzoic acid. The structure consists of a benzene ring with a 2-methylpropyl group at the para position and a carboxylic acid group (-COOH) at the other para position.</p>

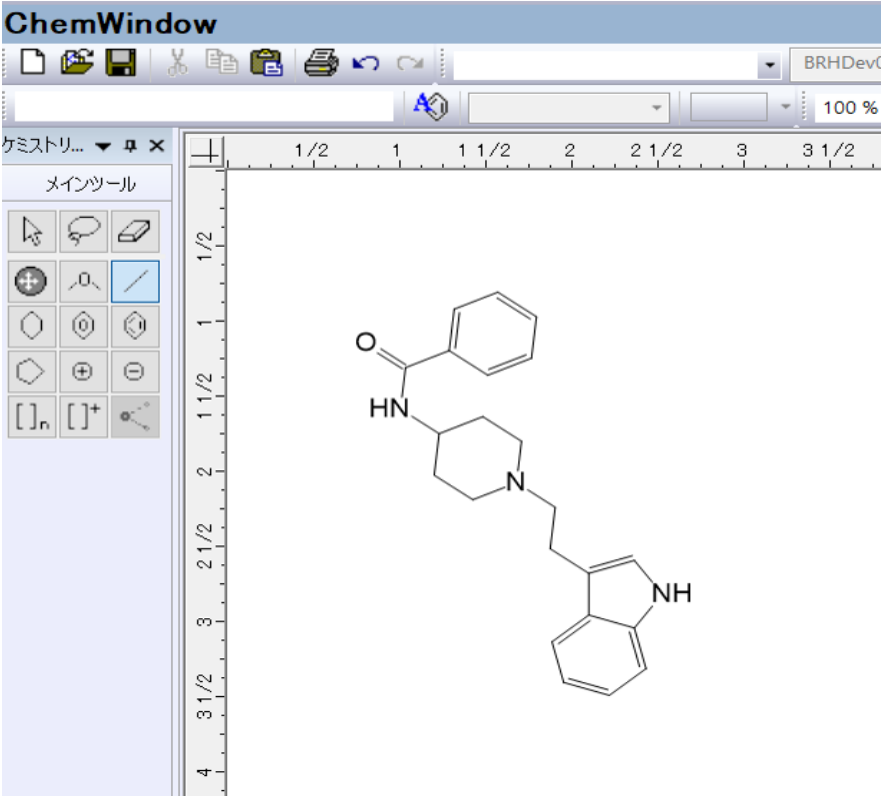
	アクション	結果
3	<p>「Chemistry (化学)」メニューを選択し、「Make Stick Structure (棒状構造を作成)」をクリックします。</p>	 <p>上記が展開された構造です。</p>
4	<p>この描画を閉じるために、下部のタブの「x」をクリックします。</p> <p>ファイルの保存のプロンプトで「No (いいえ)」をクリックします。</p> <p>これにより、新しい空白の ChemWindow 画面が開始されます。</p>	

注記：構造をコピーして MS Office ツールに貼り付けることもできます。この機能については、次のセッションで詳しく説明します。

OPSIN Name2Structure を使用

例 1 - 化学名

	アクション	結果
1	Navigate to Chemistry > OPSIN Name2Structure . 「化学」メニューに移動し、「 OPSIN Name2Structure 」を選択します。	 <p> ファイル(F) 編集(E) 表示(V) アレンジ(A) 色(C) ツール(M) MS ツール ライセンス(L) ヘルプ(H) </p> <p> ← → </p> <p> Basics </p> <p> ChemWindow </p> <p> ReportIt </p> <p> BrowseIt </p> <p> ケミストリ... </p> <p> メインツール </p> <p> 分子量計算(C)... モル計算(F)... 構造式チェック(k) F10 ユーザー辞書から削除(U) 枝状構造式へ(M) ラベル付き構造式へ(L) ユーザーラベルの追加(A)... ユーザーラベルの編集(E)... 表示と事前定義された置換基... ホットキーの編集(H)... <input checked="" type="checkbox"/> 立体化学(S) I水素を表示 暗黙で省略されている水素原子を追加(I) 芳香族性表示 > クリーンアップ(C) 構造化する OPSIN 名... </p>

2	<p>「N-[1-(2-インドール-3-イルエチル)(4-ピペリジル)]ベンズアミド」と入力します。 OK をクリックします。</p>	<p>OPSPIN Name To Structure ×</p> <p>名称(N): <input type="text" value="N-[1-(2-Indol-3-ylethyl)(4-piperidyl)]benzamide"/></p> <p style="text-align: right;"><input type="button" value="OK"/> <input type="button" value="キャンセル"/></p>
3		<p>結果の構造が表示されます。</p> 

4	<p>この描画を閉じるために、下部のタブの「x」をクリックします。</p> <p>ファイルの保存のプロンプトで「No (いいえ)」をクリックします。</p> <p>これにより、新しい空白の ChemWindow 画面が開始されます。</p>	
---	--	--

例 2 - 一般名

同様に手順 1 から 4 を繰り返し、今度は「コレステロール」という一般名を入力します。ChemWindow がそれを構造として表示します。

反応を描く

ChemWindow を使用して、反応を描く方法

目的

ChemWindow を使用して、反応を作成し、それを MS ツールや ReportIt アプリケーションに転送することができます。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 化学反応を描く方法
- MS Office ツールとの連携方法

背景

科学者は KnowItAll の ChemWindow アプリケーションを使用して、実験手順の結果を報告するための反応スキームを作成することができます。この機能は、実験手順の結果を伝える必要があるすべての人にとって役立ちます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

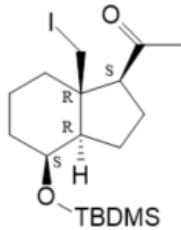
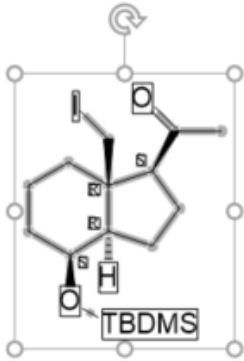
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Reactions


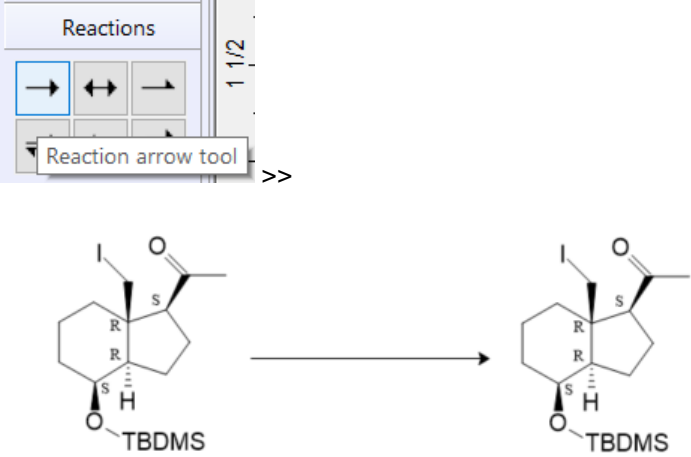
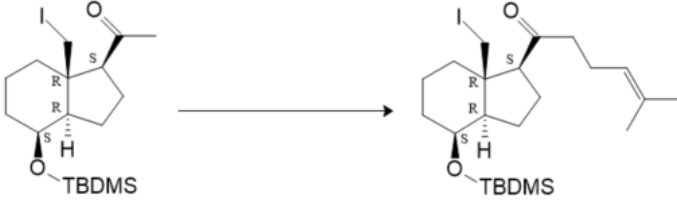
- Reactant.dsf

KnowItAll 使用アプリケーション

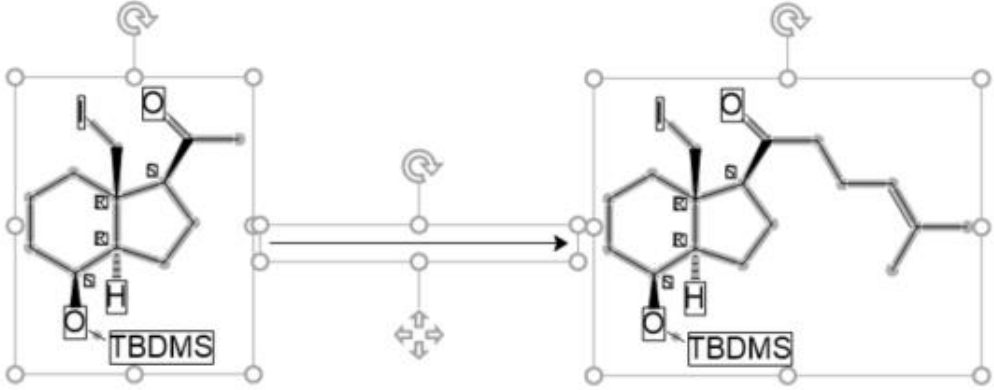
- ChemWindow®

化学反応を描く

	アクション	結果
1	ベーシックツールボックスにある ChemWindow アイコンをクリックします。	ChemWindow アプリケーションを起動すると、空の描画面が表示されます。
2	「化学」 > 「 OPSIN Name2Structure 」 を選択します。 「 Reactant.dsf 」 を選択します。 「 Open 」 をクリックします。	ファイルがワークスペースに表示されます。 
3	構造を選択します。	

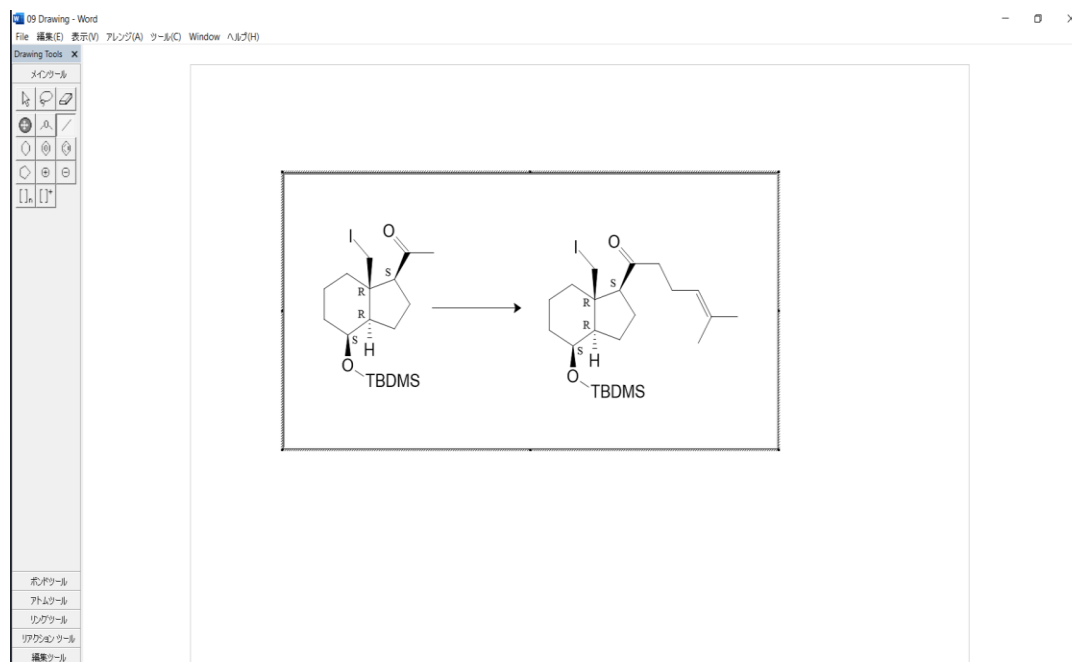
4	<p>「編集」 > 「コピー」を選択します。次に、「編集」 > 「貼り付け」を選択します。</p>	
5	<p>反応ツールボックスから「反応矢印ツール」を選択し、2つの構造の間に矢印を描きます。</p>	
6	<p>右側の構造を生成物に変更します。</p>	

MS Office ツールとの OLE 接続

	アクション	結果
1	構造オブジェクトを選択してコピーします。	
2	MS Word に移動し、貼り付けます。 Word 文書を保存します。 KnowItAll を閉じます。	

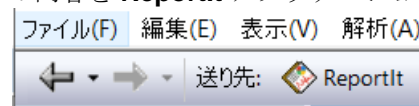
3 MS Word 文書で、保存された KnowItAll オブジェクトをダブルクリックします。

ここから ChemWindow の操作を行うことができます。



注意: 同様の方法で他の MS Office ツールとも連携することができます。

注記: また、構造や反応を含む複雑なテキスト編集を行う場合には、**ChemWindow** の内容を **ReportIt** アプリケーションに転送することをおすすめします。これは、「**Transfer to: ReportIt**」機能を使用して行うことができます。



質量分析計ツール

ChemWindow 内の質量分析計ツールの使用方法

目的

この演習では、質量分析計に特化したツールの使い方を説明します。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 構造の同位体分布を計算する方法
- 元素組成を計算する方法
- MS フラグメンテーションツールの使用方法

背景

科学者は、KnowItAll の ChemWindow アプリケーションを使用して、報告書に反応スキームを追加することができます。この機能は、実験手順の結果を伝える際に、誰にとっても非常に役立つものです。

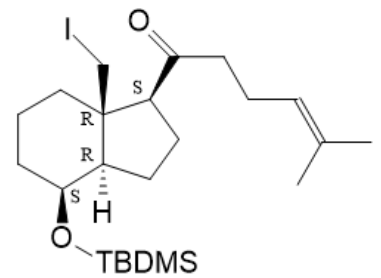
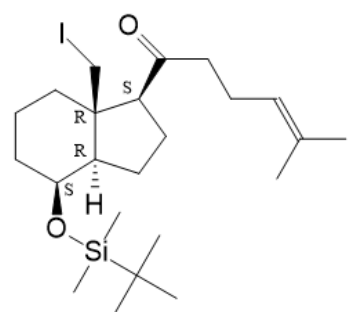
このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

- Structure 2.dsf

KnowItAll 使用アプリケーション

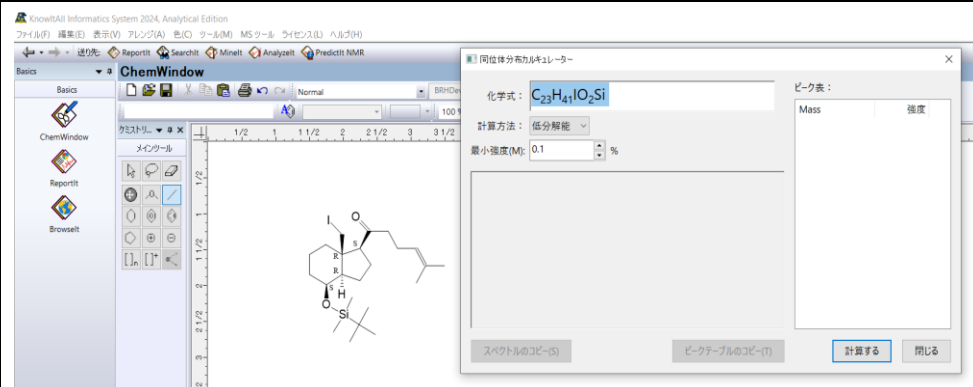
- ChemWindow®

同位体分布

	アクション	結果
1	<p>「ファイル」>「開く」を選び、 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Reactions フォルダに移動します。</p> <p>「Product.dsf」を選択します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	 <p>データベースレコードの構造に対して、同位体分布を計算することができます。</p>
2	<p>化学>「スティック構造を作成」を選択します。</p>	

3 MS ツール > 「Isotopic Distribution (同位体分布) を計算」 を選択します。

ポップアップウィンドウで「計算」をクリックします。



ChemWindow

同位体分布カルキュレーター

化学式: $C_{23}H_{41}O_2Si$

計算方法: 低分解能

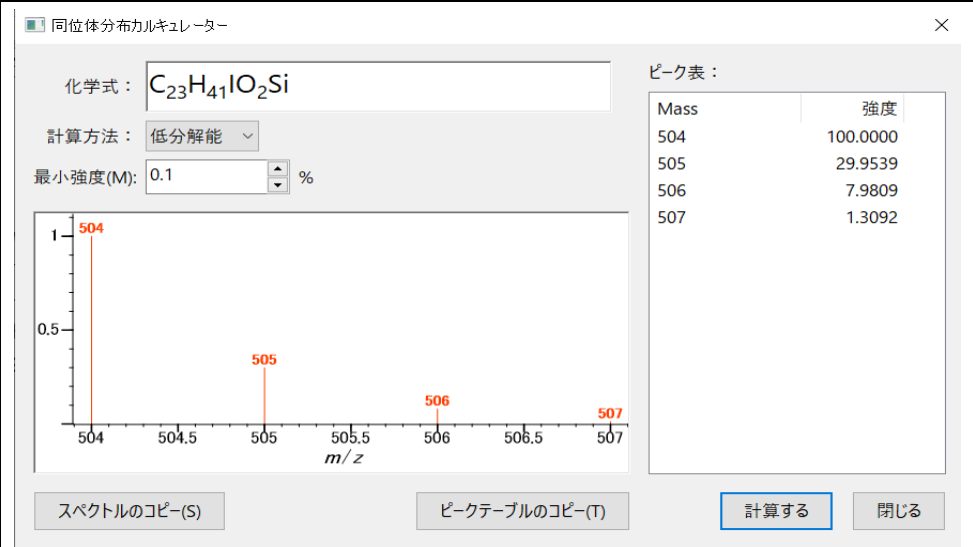
最小強度(M): 0.1 %

ピーク表:

Mass	強度
504	100.0000
505	29.9539
506	7.9809
507	1.3092

計算する 閉じる

4



同位体分布カルキュレーター

化学式: $C_{23}H_{41}O_2Si$

計算方法: 低分解能

最小強度(M): 0.1 %

ピーク表:

Mass	強度
504	100.0000
505	29.9539
506	7.9809
507	1.3092

スペクトルのコピー(S) ピークテーブルのコピー(T) 計算する 閉じる

同位体元素組成

このツールは、データベースのレコード構造とは関連していません。

	アクション	結果																																			
1	「MS ツール」 > 「元素組成を計算」を選択します。	<p>すると、このダイアログが表示されます。</p> <p>元素構成カルキュレーター ×</p> <p>標的質量: <input type="text" value="388"/> ± <input type="text" value="0.5"/> <input type="text" value="u"/></p> <table border="1"><thead><tr><th>元素:</th><th>質量:</th><th>最小カウント:</th><th>最大カウント:</th><th>電荷(C):</th></tr></thead><tbody><tr><td><input type="text" value="C"/></td><td><input type="text" value="12"/></td><td><input type="text" value="1"/></td><td><input type="text" value="20"/></td><td><input type="radio"/> -1 <input checked="" type="radio"/> 0 <input type="radio"/> +1</td></tr><tr><td><input type="text" value="H"/></td><td><input type="text" value="1.0078250322"/></td><td><input type="text" value="1"/></td><td><input type="text" value="36"/></td><td></td></tr><tr><td><input type="text" value="O"/></td><td><input type="text" value="15.994914619"/></td><td><input type="text" value="1"/></td><td><input type="text" value="2"/></td><td></td></tr><tr><td><input type="text" value="I"/></td><td><input type="text" value="126.90447"/></td><td><input type="text" value="0"/></td><td><input type="text" value="1"/></td><td></td></tr><tr><td><input type="text"/></td><td><input type="text"/></td><td><input type="text"/></td><td><input type="text"/></td><td></td></tr><tr><td><input type="text"/></td><td><input type="text"/></td><td><input type="text"/></td><td><input type="text"/></td><td></td></tr></tbody></table> <p><input type="button" value="リセット(E)"/> <input type="button" value="計算する"/> <input type="button" value="閉じる(C)"/></p>	元素:	質量:	最小カウント:	最大カウント:	電荷(C):	<input type="text" value="C"/>	<input type="text" value="12"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="20"/>	<input type="radio"/> -1 <input checked="" type="radio"/> 0 <input type="radio"/> +1	<input type="text" value="H"/>	<input type="text" value="1.0078250322"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="36"/>		<input type="text" value="O"/>	<input type="text" value="15.994914619"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="2"/>		<input type="text" value="I"/>	<input type="text" value="126.90447"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="1"/>		<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>		<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	
元素:	質量:	最小カウント:	最大カウント:	電荷(C):																																	
<input type="text" value="C"/>	<input type="text" value="12"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="20"/>	<input type="radio"/> -1 <input checked="" type="radio"/> 0 <input type="radio"/> +1																																	
<input type="text" value="H"/>	<input type="text" value="1.0078250322"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="36"/>																																		
<input type="text" value="O"/>	<input type="text" value="15.994914619"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="2"/>																																		
<input type="text" value="I"/>	<input type="text" value="126.90447"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="1"/>																																		
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>																																		
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>																																		

2 要素とその出現数を入力し、「計算」をクリックします。

すると、要素の組み合わせが表示されます。

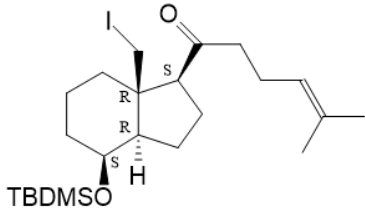
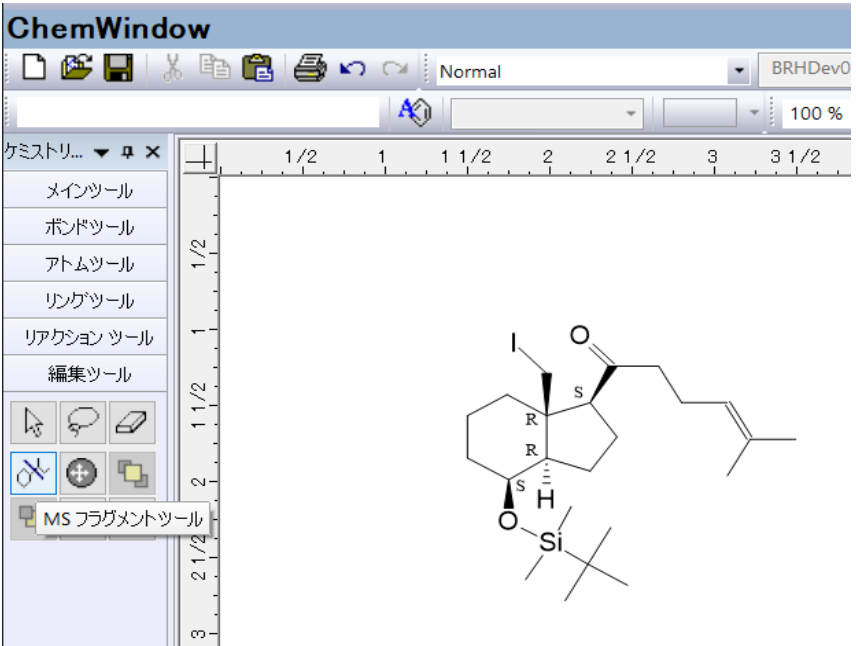
■ 元素構成結果 ×

標的質量: 388 ± 0.5 u
電荷(C): 0 結果カウント 6

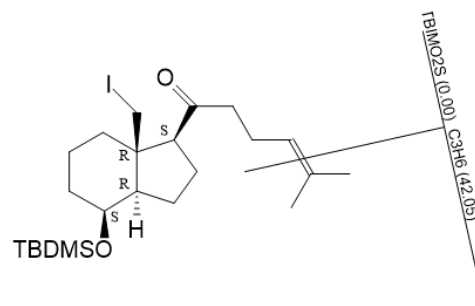
C	H	O	I	m	Δm [u]	Δm [ppm]
18	13	2	1	387.9960	-0.0040	-10.2457
19	17	1	1	388.0324	0.0324	83.5314
20	5	1	1	387.9385	-0.0615	-158.4799
17	25	2	1	388.0899	0.0899	231.7656
19	1	2	1	387.9021	-0.0979	-252.2570
18	29	1	1	388.1263	0.1263	325.5427

クリップボードにコピー(C) 閉じる

MS フラグメンテーション

	アクション	結果
1	<p>ファイル>「開く」を選びます。 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Reactions フォルダに移動します。</p> <p>「Product.dsf」を選択します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	 <p>データベースレコードの構造に対して、同位体分布を計算することができます。</p>
2	<p>編集ツールボックスで、MS フラグメンテーションツールを選択します。</p>	

3



構造を2つのフラグメントに分割することができます。