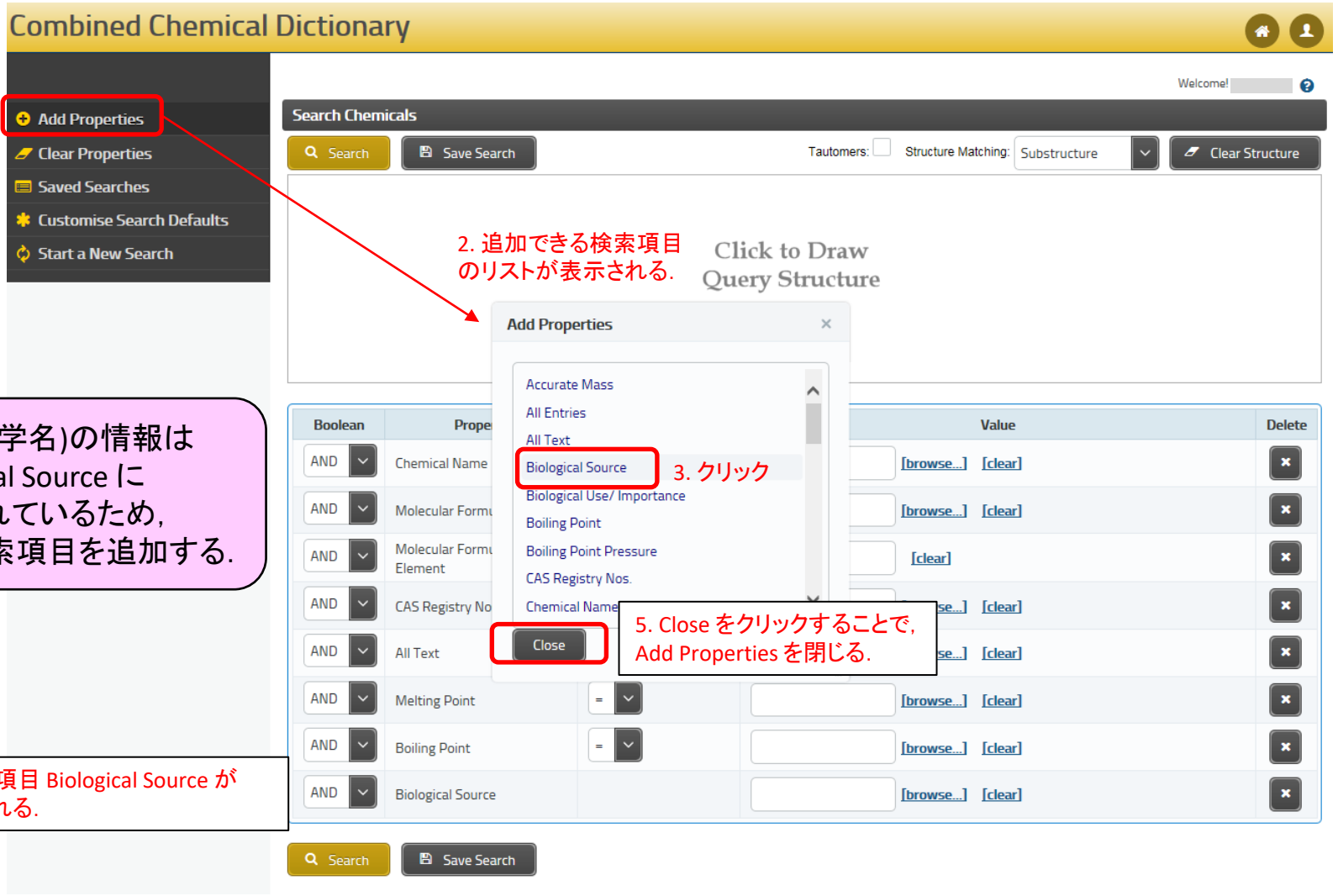
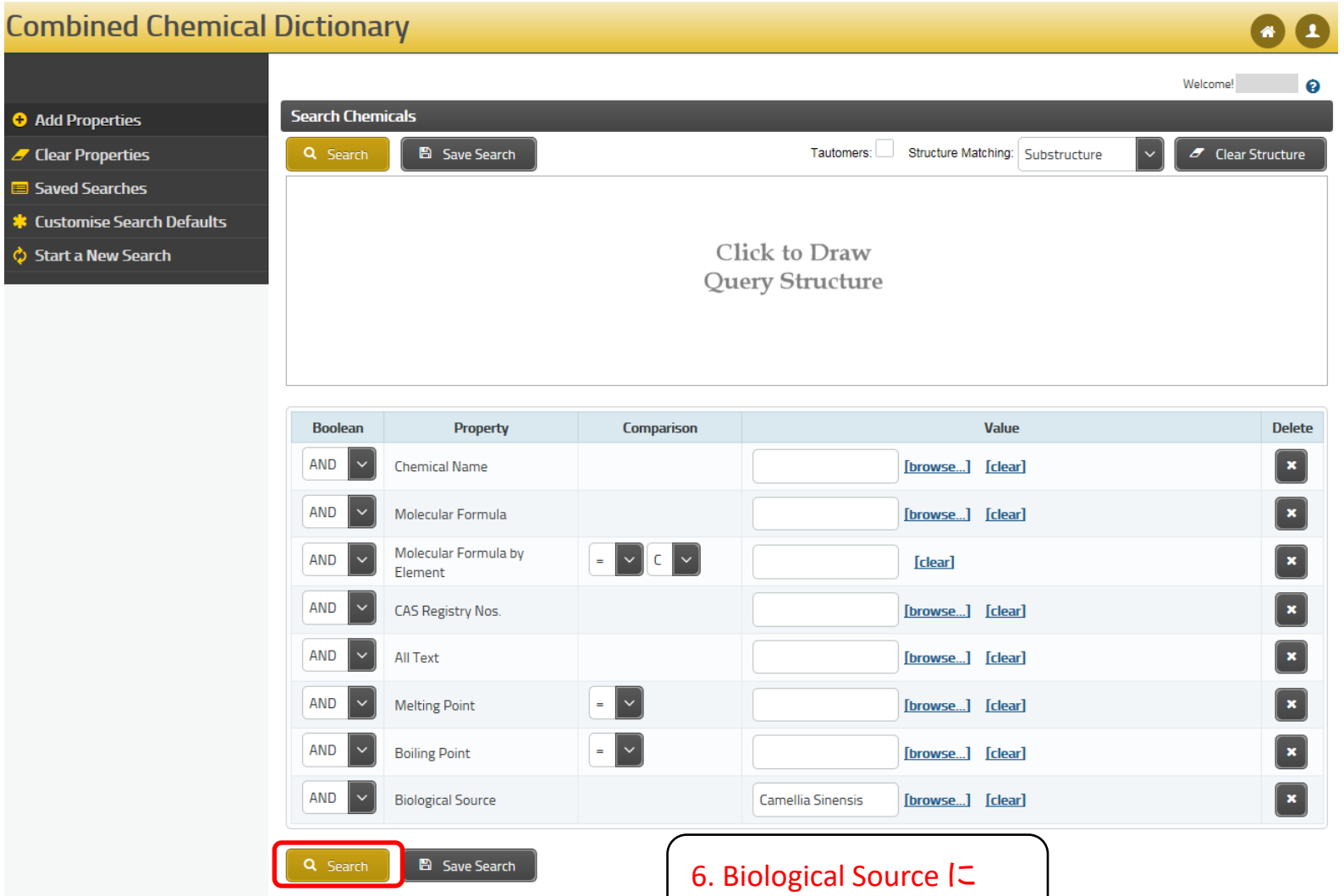
1. 茶 (*Camellia Sinensis*) の含有化合物の検索方法

化合物大辞典にアクセス直後の画面

検索フィールドのカスタマイズ



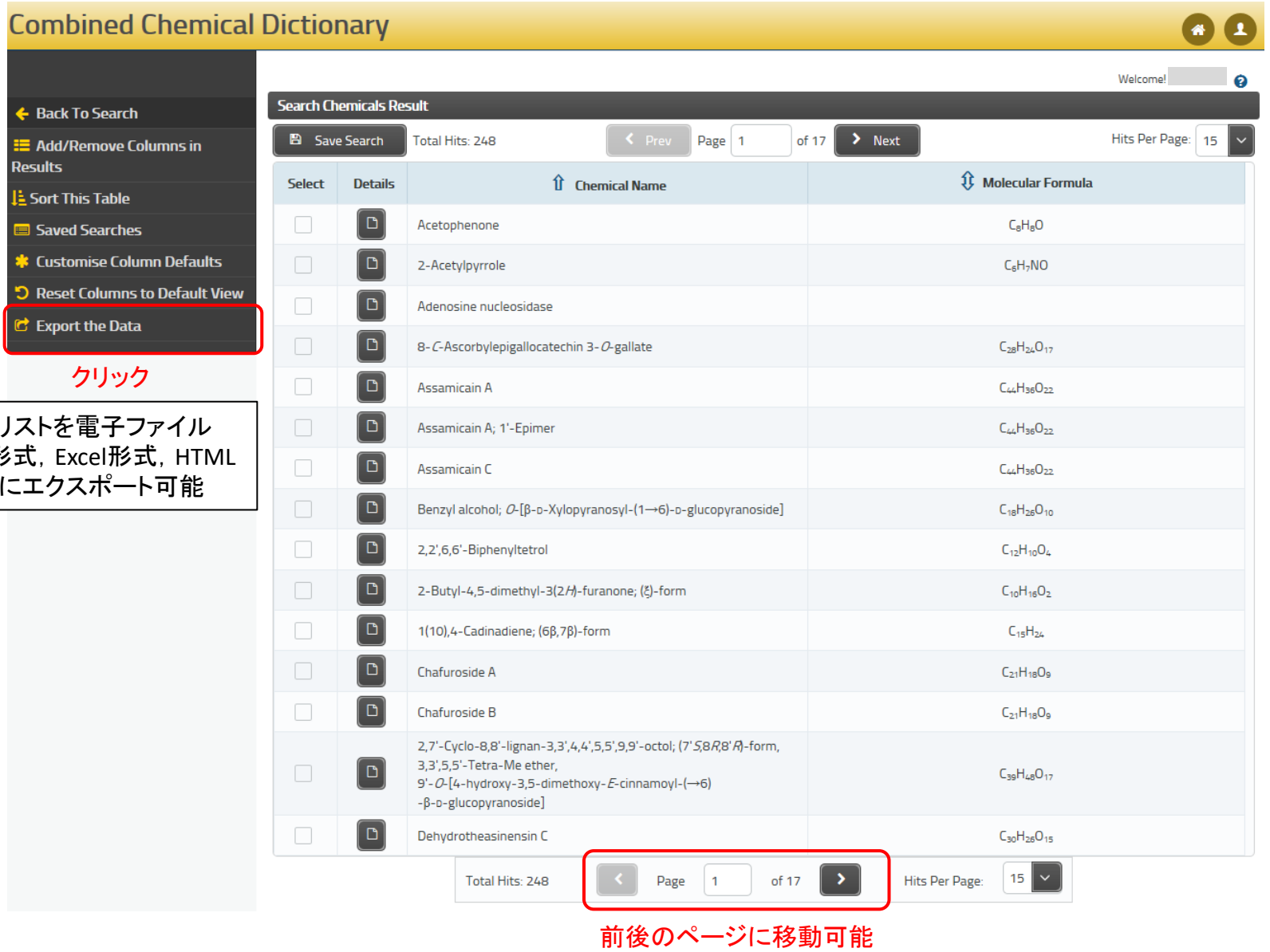
生物種(学名)の入力



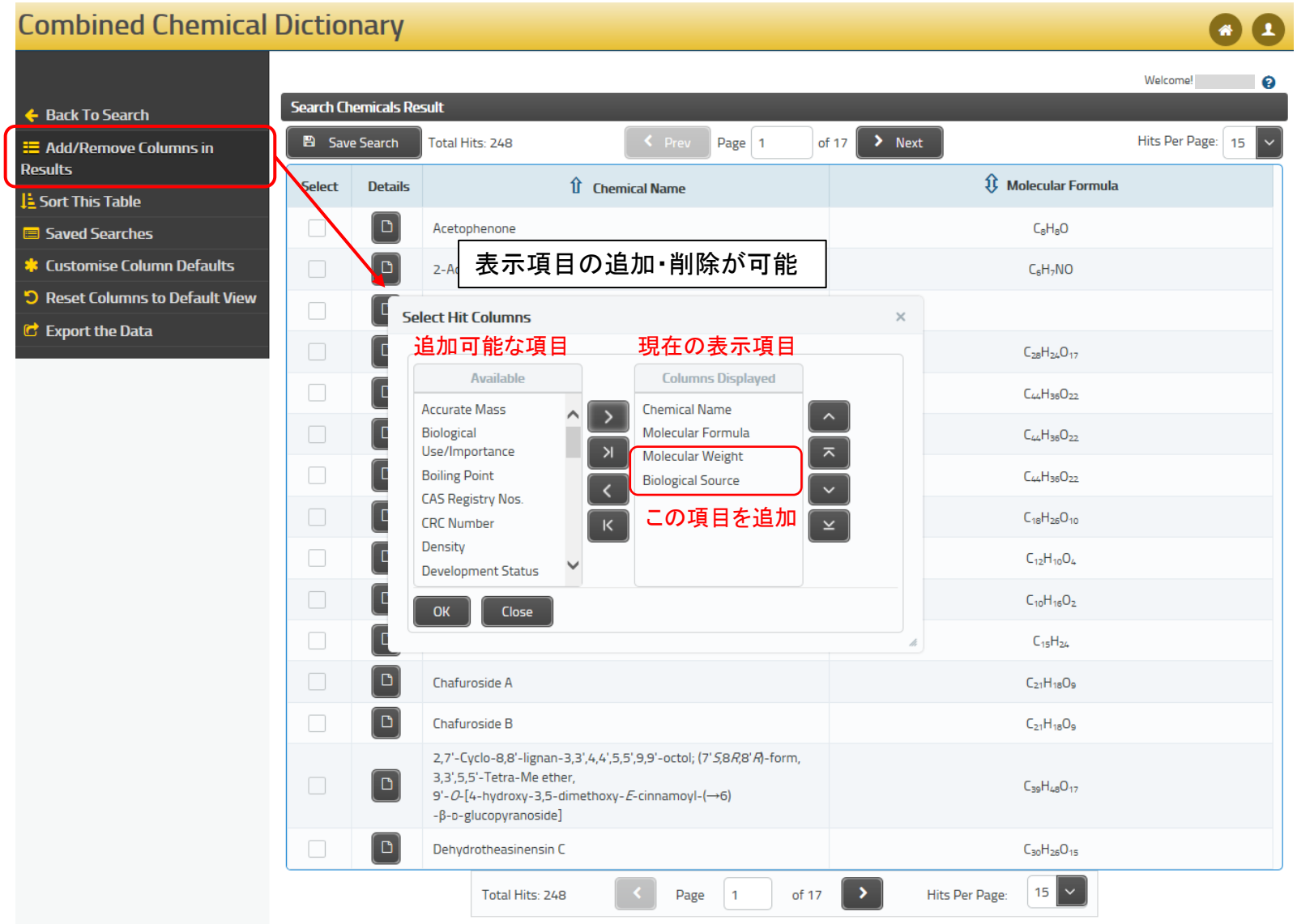
6. Biological Source に
”Camellia Sinensis”を入力

7. Search をクリックすることで，検索！

検索結果(ヒットリスト)の表示

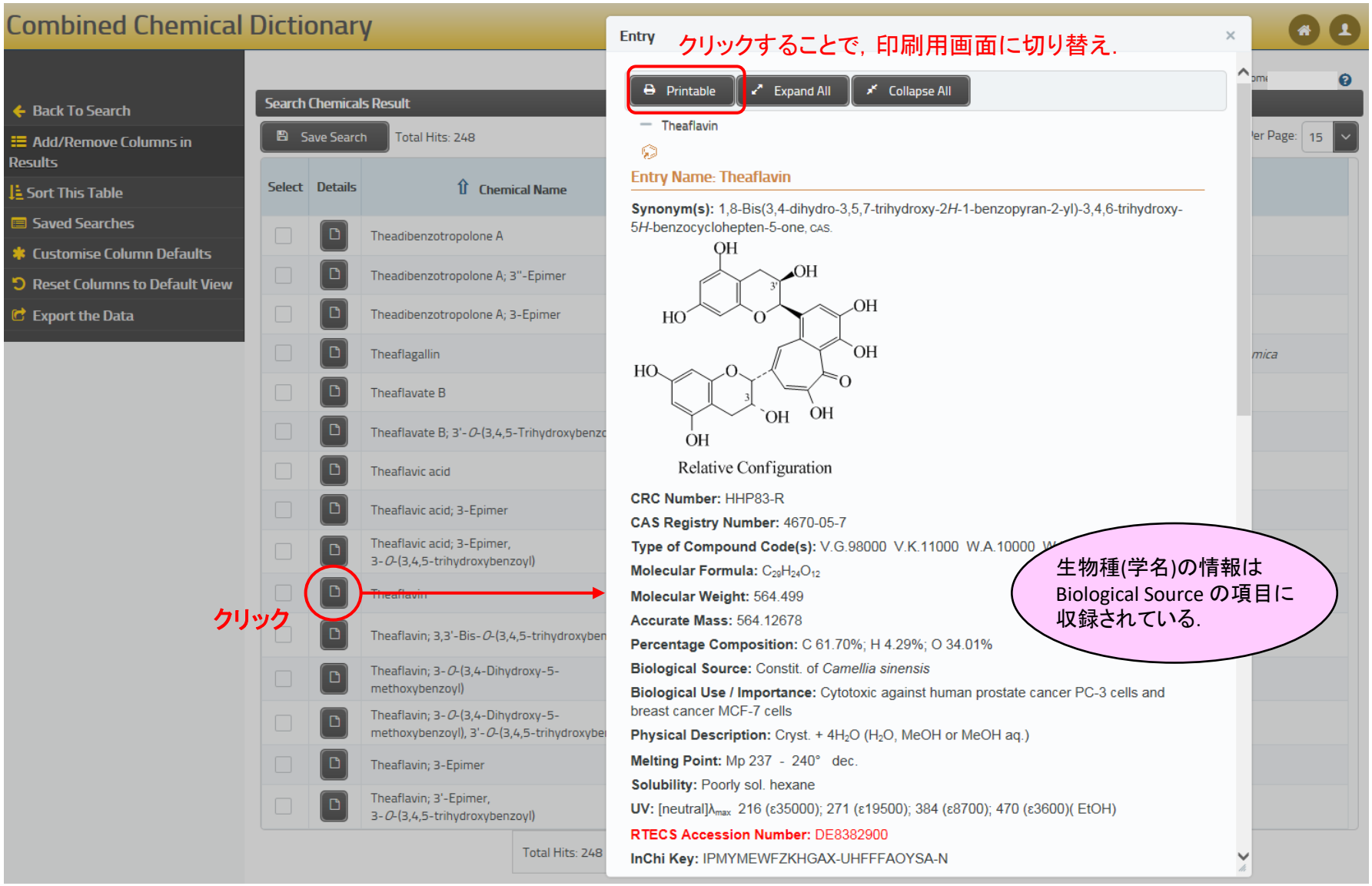


表示項目の追加方法


Combined Chemical Dictionary
Back To Search
Add/Remove Columns in Results
Sort This Table
Saved Searches
Customise Column Defaults
Reset Columns to Default View
Export the Data
クリック
Welcome!
Search Chemicals Result
Save Search
Total Hits: 248
Prev
Page 1 of 17
Next
Hits Per Page: 15
Select
Details
Chemical Name
Molecular Formula
Acetophenone
C8H8O
2-Ac
C6H7NO
表示項目の追加・削除が可能
Select Hit Columns
追加可能な項目
現在の表示項目
Available
Accurate Mass
Biological Use/Importance
Boiling Point
CAS Registry Nos.
CRC Number
Density
Development Status
Columns Displayed
Chemical Name
Molecular Formula
Molecular Weight
Biological Source
この項目を追加
OK
Close
C28H24O17
C44H36O22
C44H36O22
C44H36O22
C18H26O10
C12H10O4
C10H16O2
C15H24
Chafuroside A
C21H18O9
Chafuroside B
C21H18O9
2,7'-Cyclo-8,8'-lignan-3,3',4,4',5,5',9,9'-octol; (7'S,8R,8'R)-form, 3,3',5,5'-Tetra-Me ether, 9'-O-[4-hydroxy-3,5-dimethoxy-E-cinnamoyl-(→6)-β-D-glucopyranoside]
C39H48O17
Dehydrotheasinensin C
C30H26O15
Total Hits: 248
Page 1 of 17
Hits Per Page: 15

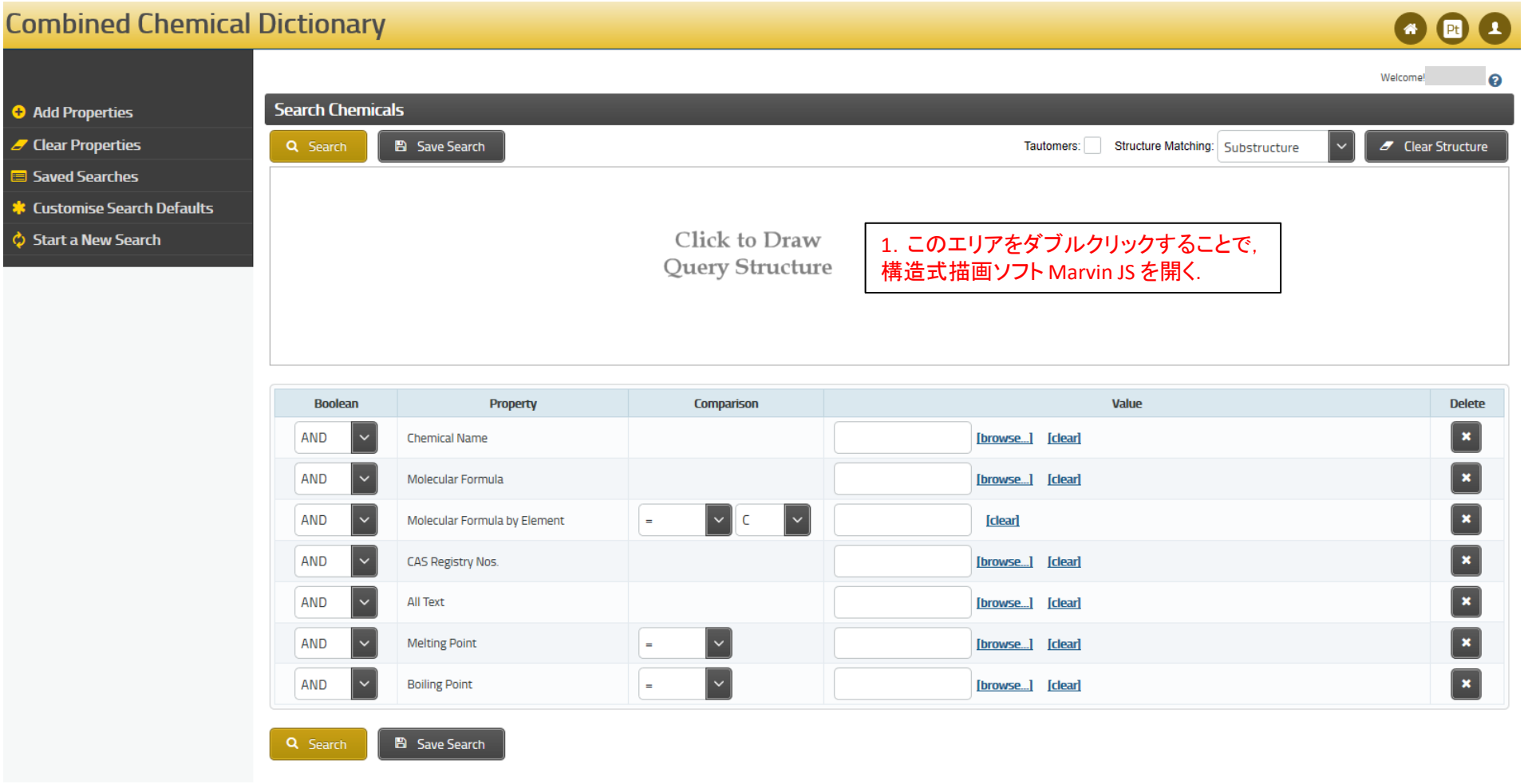
項目追加後のヒットリスト

2. 化合物のレコード表示方法

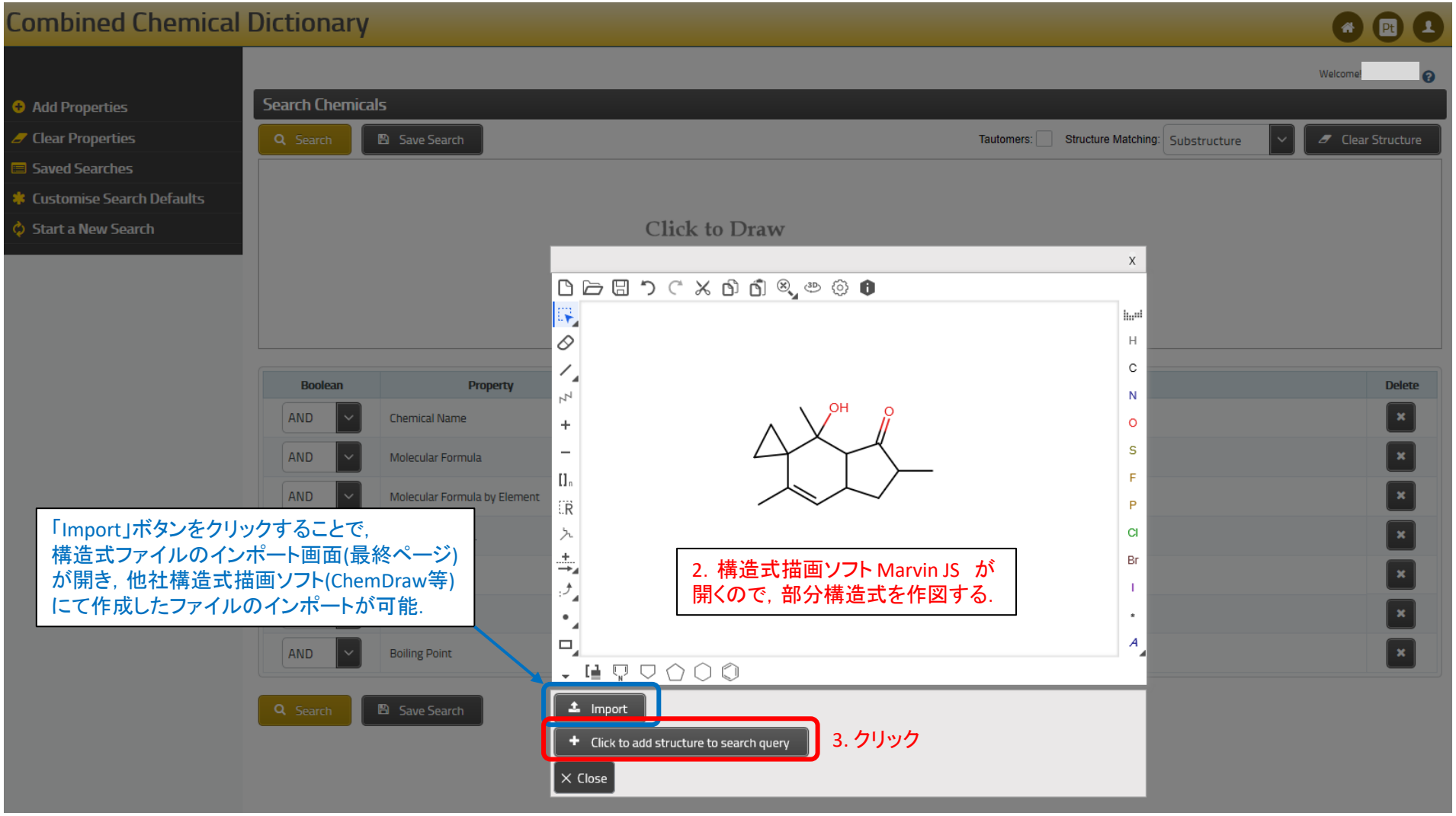


3. 部分構造検索の方法

検索画面

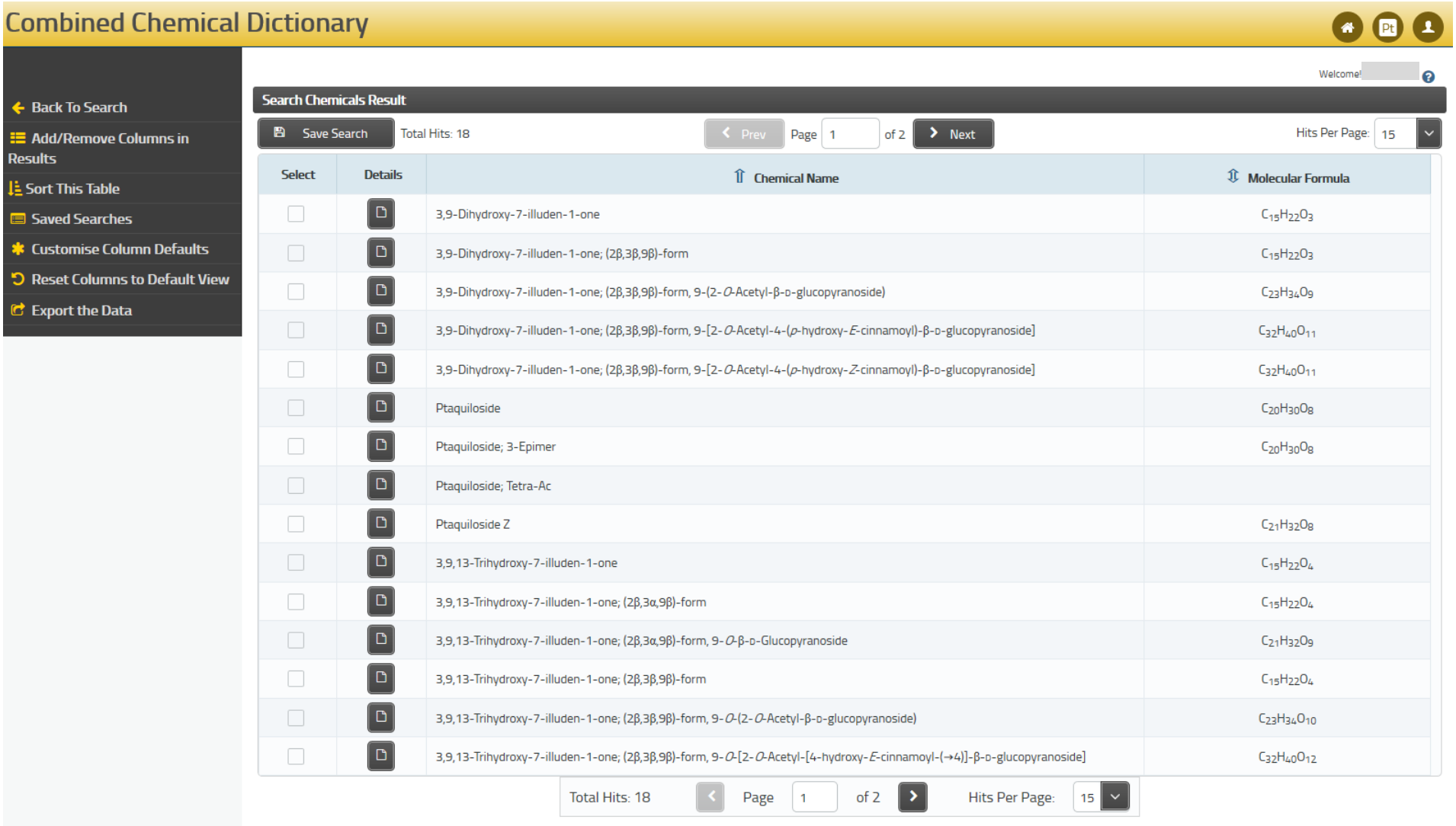


部分構造式の作図


Combined Chemical Dictionary
Add Properties
Clear Properties
Saved Searches
Customise Search Defaults
Start a New Search
Search Chemicals
Search
Save Search
Tautomers:
Structure Matching:
Substructure
Clear Structure
Click to Draw
Boolean
Property
Delete
AND
Chemical Name
Molecular Formula
Molecular Formula by Element
Boiling Point
「Import」ボタンをクリックすることで，
構造式ファイルのインポート画面(最終ページ)
が開き，他社構造式描画ソフト(ChemDraw等)
にて作成したファイルのインポートが可能.
2. 構造式描画ソフト Marvin JS が
開くので，部分構造式を作図する.
Import
Click to add structure to search query
3. クリック
Close

部分構造式の入力と検索

検索結果(ヒットリスト)の表示



構造式ファイルのインポート画面