

## 2つの縮合位置を限定した化合物の検索方法

**Question** : 2つの縮合位置を限定して化合物を検索することができますか？

**Answer** : 各々の縮合位置を指定して検索し、2つの検索結果の集合演算をすることで検索できます。

検索例：ベンゼン環側の縮合を許容して、かつチオフェン環側の縮合は除外して検索する

<p>Step 1</p> <p>まず、チオフェン側に縮合構造を持つ化合物を検索する。【検索式 1】</p> <p>MarvinSketch でベンゾチオフェン骨格を描き、チオフェン環に結合を描く。</p>	
<p>Step 2 - 3</p> <p>2つの炭素原子を選択し、「Reaxys Generics」アイコンをクリックする。</p>	
<p>Step 4 - 5</p> <p>「A」を選択し、「Close」をクリックする。</p>	
<p>Step 6</p> <p>Generic Group「A」とチオフェン環の間の結合を「In Ring」に設定する。</p>	

## Step 7

描いた構造式を Reaxys で検索すると、「チオフェン側に縮合構造を持つ化合物」が検索される。【検索結果 1】

## Step 8

次に、ベンゾチオフェン環を持つすべての化合物を検索する。【検索式 2】  
「ベンゾチオフェン環を持つすべての化合物」が検索される。【検索結果 2】

## Step 9 - 13

検索終了後、「History」をクリックし、【検索結果 2】から【検索結果 1】を Exclude する。  
この操作により、「ベンゾチオフェン環を持つすべての化合物」の中から、チオフェン環側には縮合を持たないものを抽出することができる。

Hitset ID	Chemical Structure	Substances	Substructure
10	<chem>c1ccc2c(c1)sc2</chem>	63991	Substances: Substructure: on all atoms
11	<chem>c1ccc2c(c1)sc3c2sc3</chem>	12839	Substances: Substructure: on all atoms