



## ChemFinder V20.0 操作練習資料

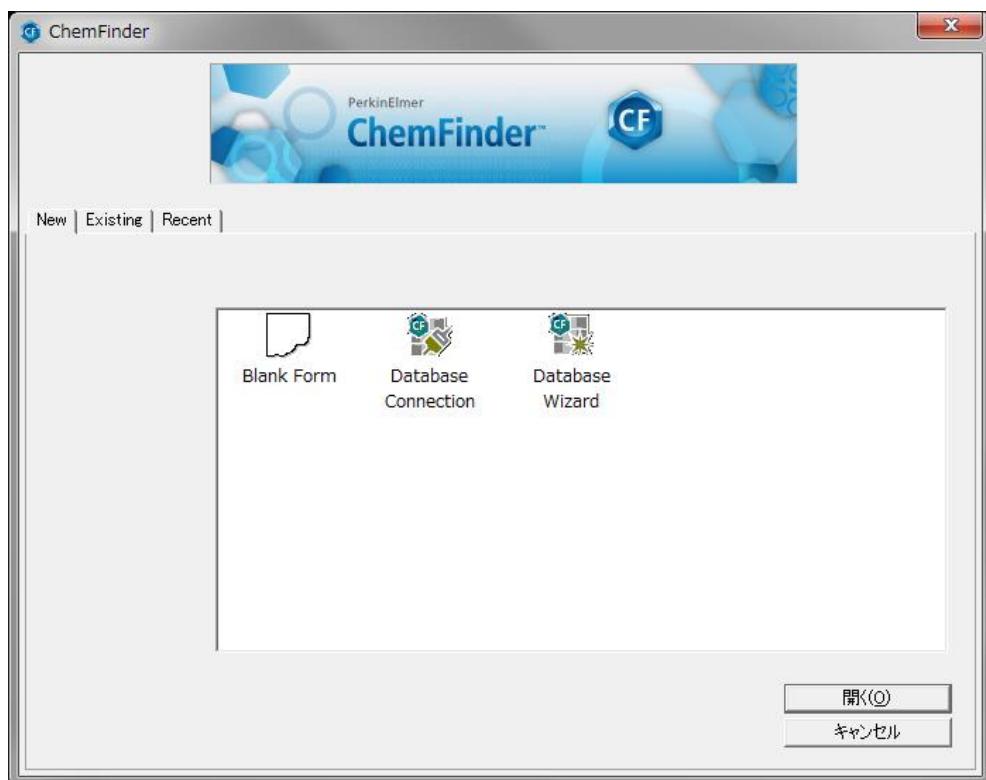
2020年12月21日 改訂

化学情報データベースは、研究所などで保管された薬品の管理、実験結果の収集などに用いられています。データベースは、複数のテーブルから構成され、内容はテーブルの中に保存されています。ChemFinder は、化学構造や反応情報などの化学情報データの参照、登録、更新、解析を行うために開発された化学情報データベース管理ソフトウェアです。

1. Windows のスタートメニューから ChemFinder を起動してください。

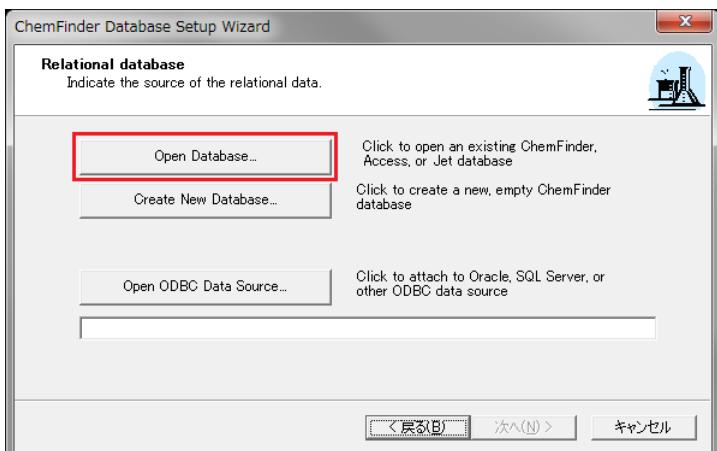
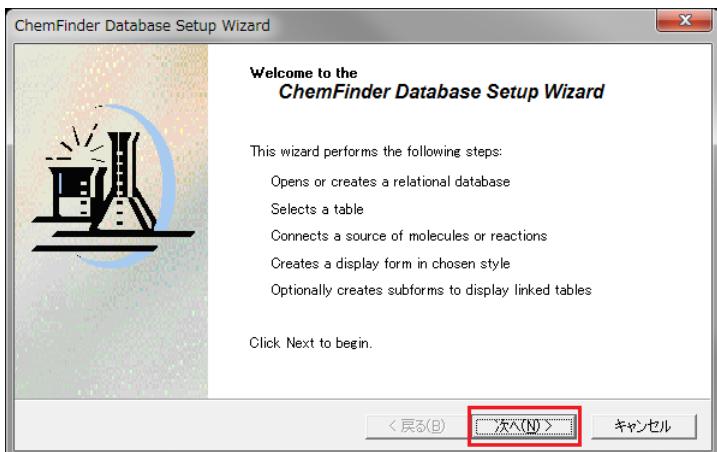
スタート > プログラム > ChemOffice 2020 > ChemFinder 20.0

2. ChemFinder を起動すると、以下のような画面が表示されます。この起動画面には、新しいデータベースを作成(New)、すでに存在するデータベースを選択(Existing)、最近使用したデータベースを選択(Recent)の 3 つのタブがあります。この中から適切な対象を選択します。New タブを選択すると、何も設定していない空白の ChemFinder 表示画面だけ(Blank Form)、同様の空白の ChemFinder 表示画面とデータベースとの関連を設定する画面(Database Connection)、データベース構築ガイド(Database Wizard)が表示されます。Database Wizard を選択すると既存のデータベースから自動的に適切な表示画面が作成できます。



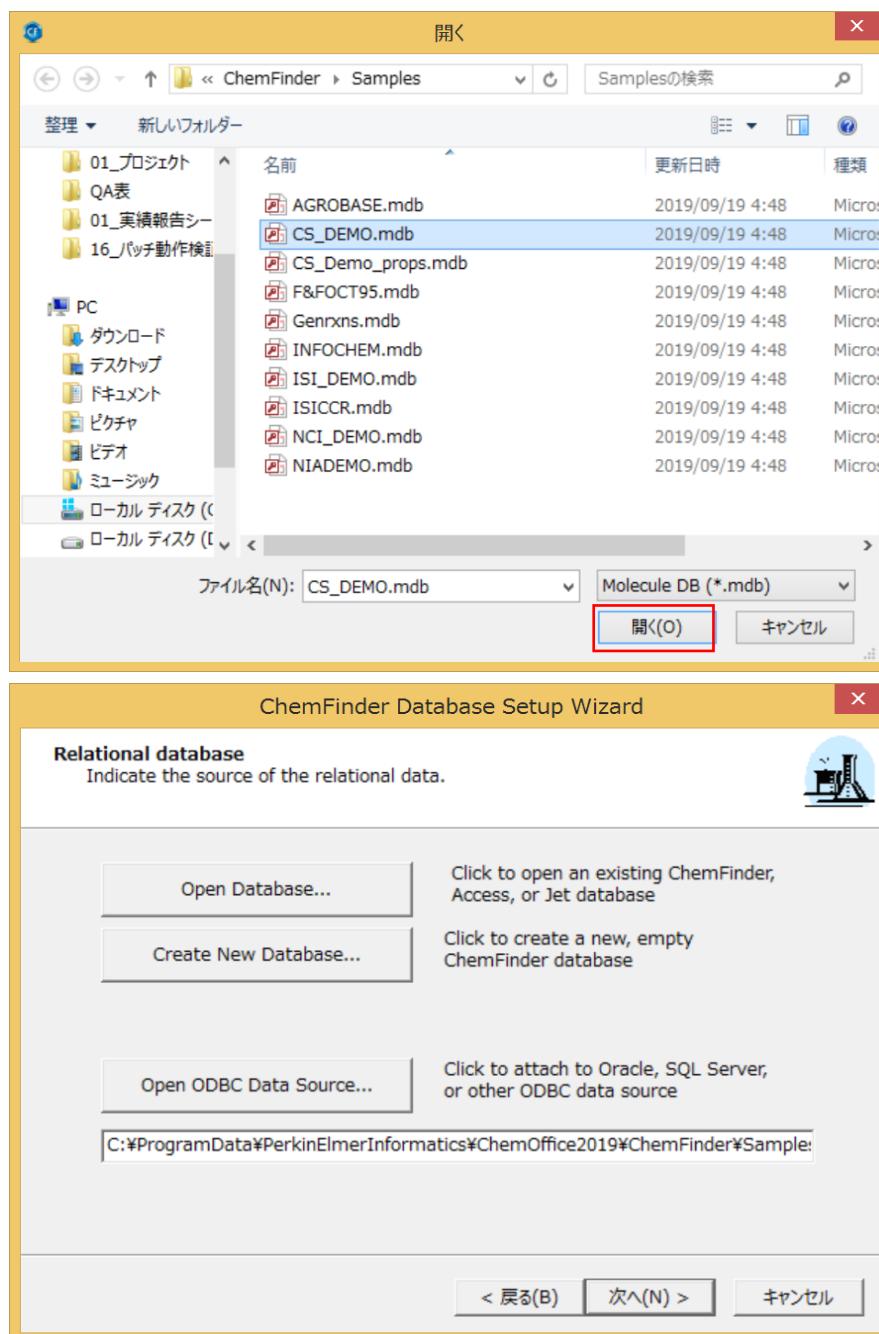
### 3. データベース構築ガイド(Database Wizard)について説明します。

3.1. Database Wizard を選択して、開くをクリックします。最初のダイアログボックスが表示されたら、次へをクリックします。表示された画面では、既存のデータベース(Open database),新しいデータベースの作成(Create New database)、Oracle Database 連携(CS Oracle Cartridge)、ODBC 外部データベース連携(Open ODBC data source)、が選択できます。今回の練習では、既存のデータベースに対して表示画面を作成するので、Open databases を選択します。



### 3.2. Open Database を選択し、

C:\ProgramData\PerkinElmerInformatics\ChemOffice2020\ChemFinder\Samples ディレクトリを指定し、CS\_DEMO.MDB を選択して開くをクリックし、次へをクリックします。



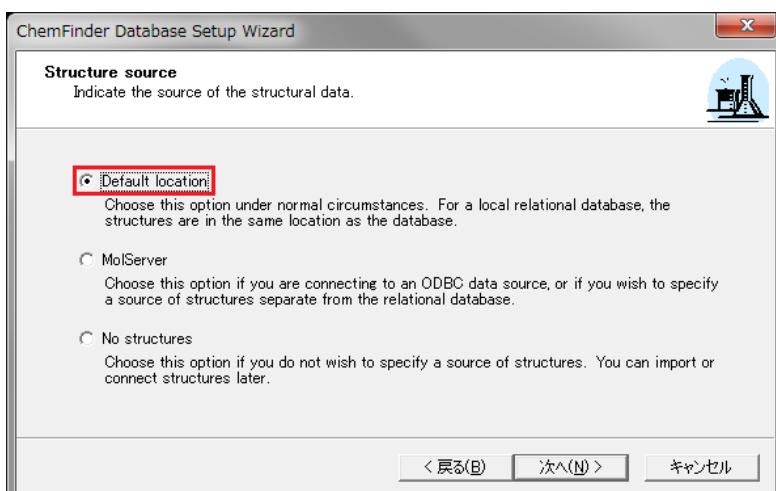
3.3. ChemFinder の表示画面とデータベースに含まれるテーブルとの関連を設定します。ここで、サンプルのデータベースに MolTable と Synonyms という 2 つのテーブルがあることに注意してください。今回は、MolTable を選択し、次へをクリックします。(もうひとつの Synonyms テーブルは、ひとつの化合物に対して複数の名前(別名)を登録するためのテーブルなので、通常はサブフォームとして定義します。)



3.3.1. 表示画面とデータベース、テーブルの関係は、以下の通りです。

表示画面	-----	データベース(実体)
ChemFinder フォーム	-----	MolTable テーブル
サブフォーム	-----	Synonyms テーブル
ボックス	-----	フィールド

3.4. データベースをどこに保存するかを指定する場合は、省略値(Default location)を選択し、次へをクリックします。



3.5. この画面では ChemFinder フォームに表示するフィールドを選択し、どのような体裁で表示するのかを指定します。ここでは、以下のように指定します。

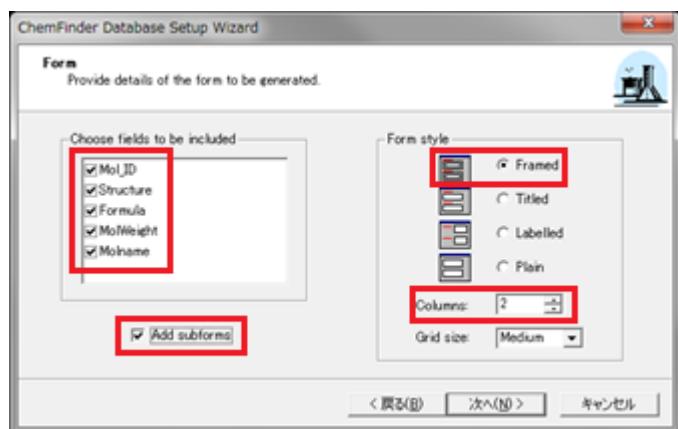
3.5.1. Choose fields to be included :全て選択

3.5.2. Add subforms :選択

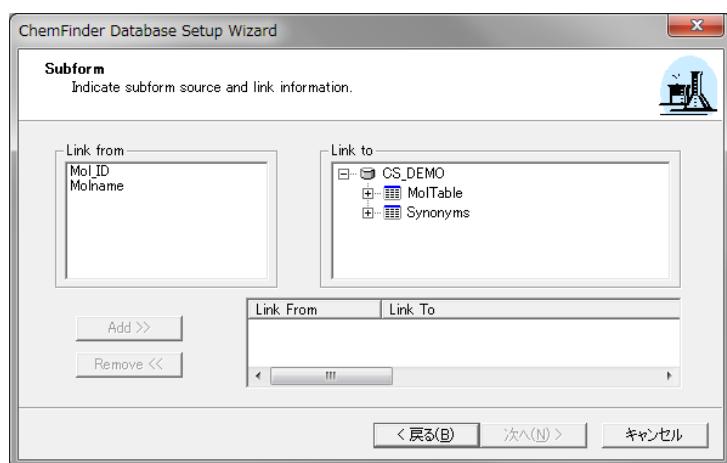
3.5.3. Framed :Framed

3.5.4. Columns :2

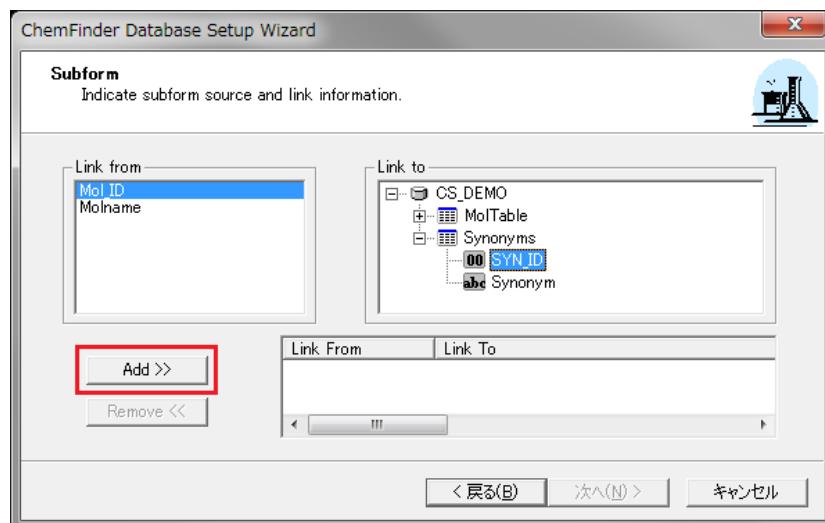
もうひとつの追加テーブル(Synonyms)のデータは、サブフォーム(subforms)に表示されます。デフォルトでは Add Subforms にチェックが入っていないため、チェックを入れます。サブフォームの設定画面に移行するために、次へをクリックします。



3.6. サブフォームに表示するフィールドとメインフォームとサブフォームの 2 つのデータを関連付ける方法を指定します。

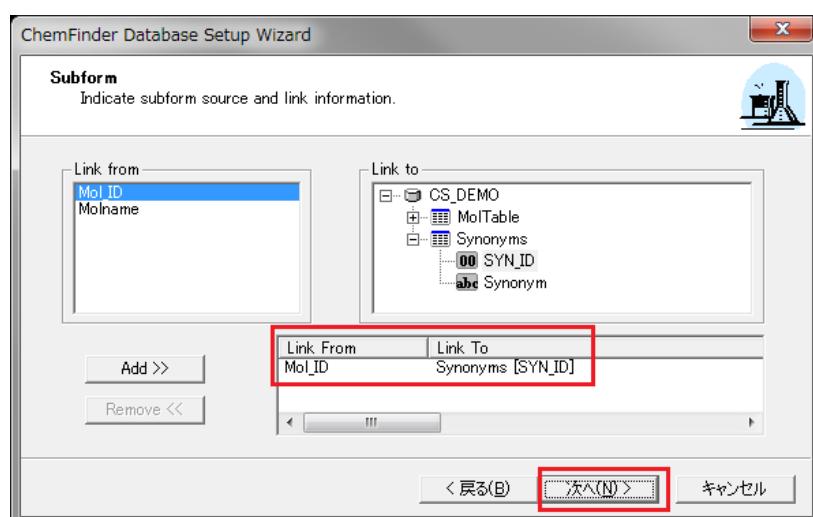


- 3.6.1. Link from 側は Mol\_ID を選択し、Link to 側は Synonyms > SYN\_ID フィールドを選択してから Add をクリックします。

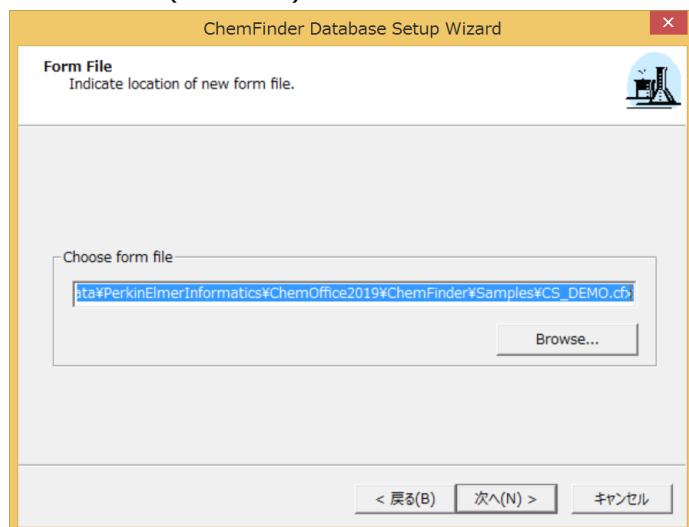


- 3.6.2. これで、二つのテーブルの関連付けができました。

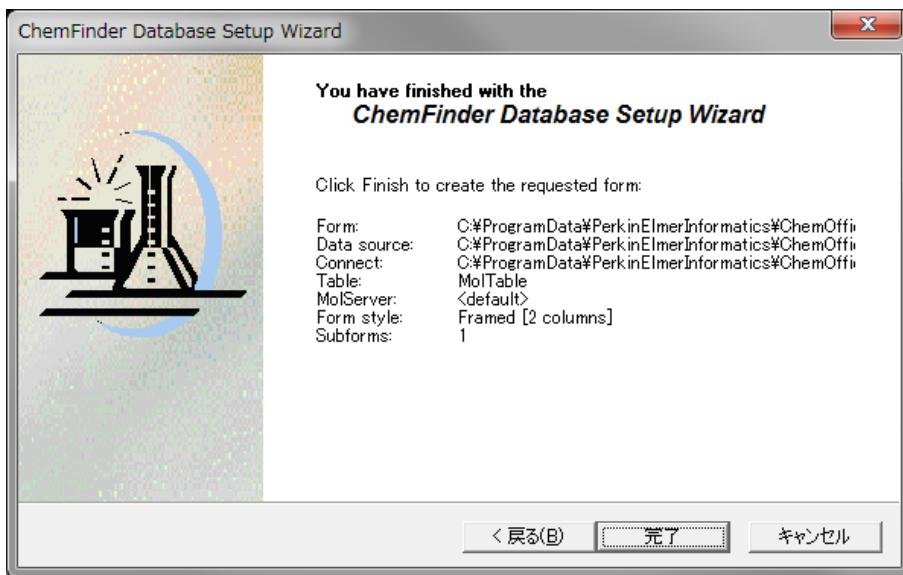
次へをクリックします。



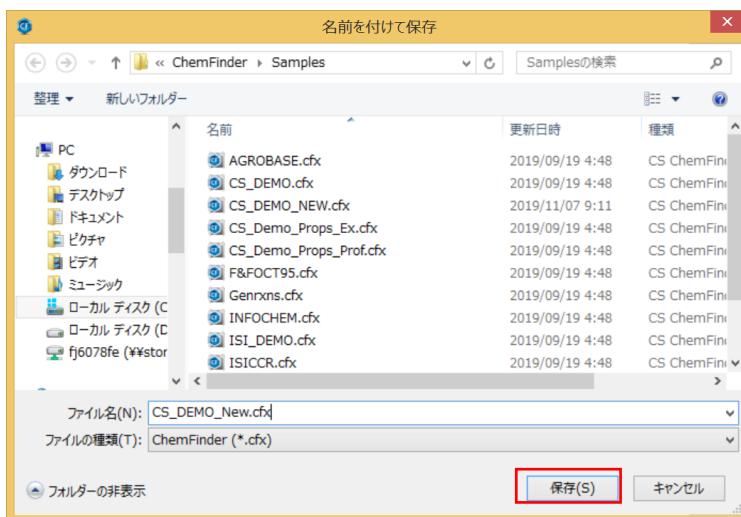
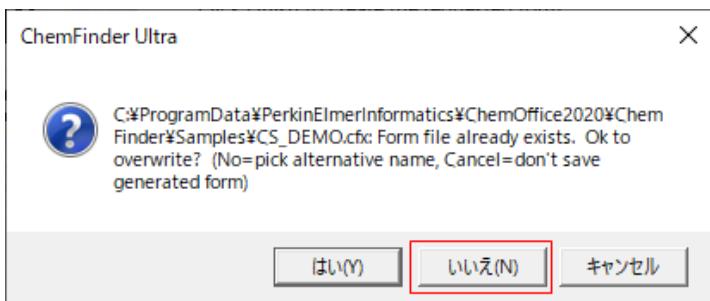
- 3.7. Form ファイル(表示画面)の作成場所を指定し次へをクリックします。



- 3.8. 設定概要のページが表示されたら、完了をクリックして、作成されたフォームを確認してください。画面には、最初の登録データが表示されているはずです。



- 3.9. 完了をクリックすると、CS\_DEMO.cfx は、既に存在していると言うメッセージが表示されますので、いいえをクリックし、別の名前(CS\_DEMO\_New.cfx など)で保存してください。

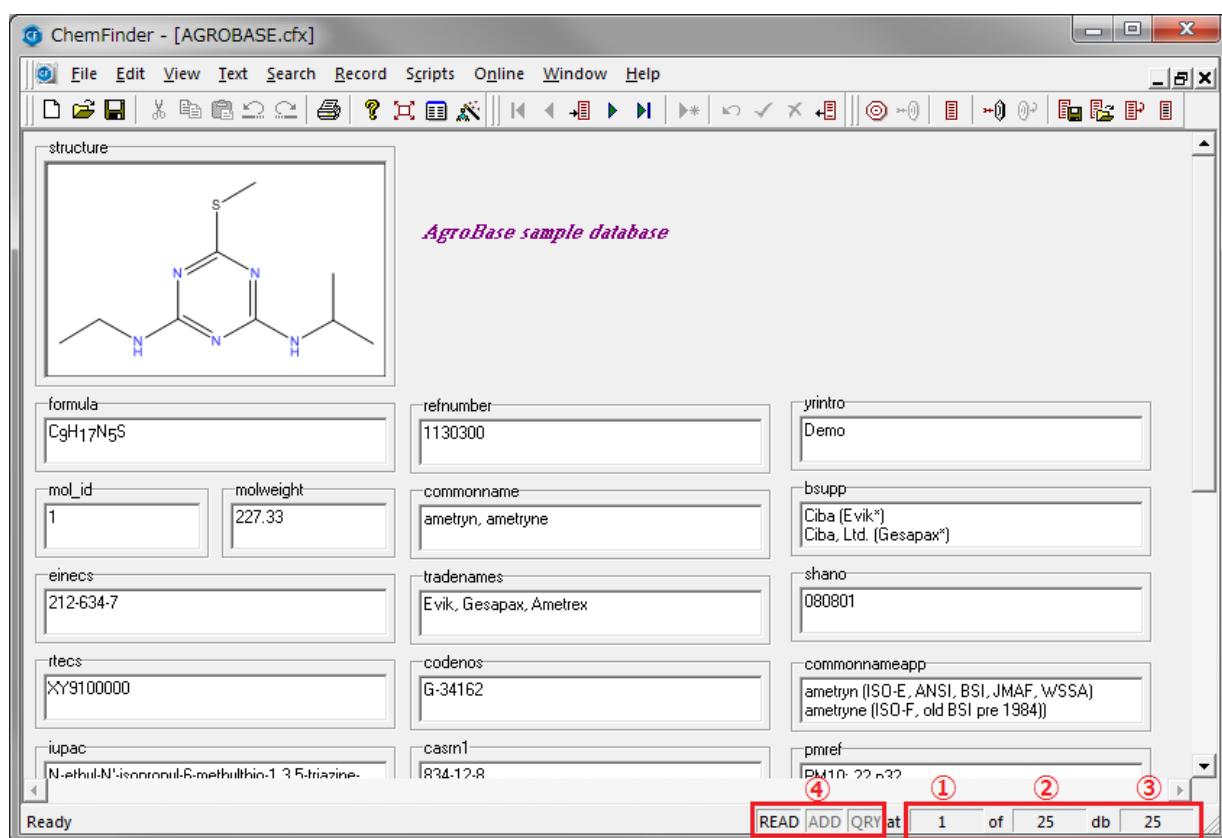


4. 画面右下に表示されている数字は、①現在表示中のレコード番号、②表示対象になっているレコード件数(現在のレコード件数)、③データベース全体のレコード件数です。最初にフォームを開いたときには、現在のレコード件数とデータベース全体のレコード件数は一致しています。そして、検索を行うと現在のレコード件数は、検索結果の集合に含まれる件数に変わります。

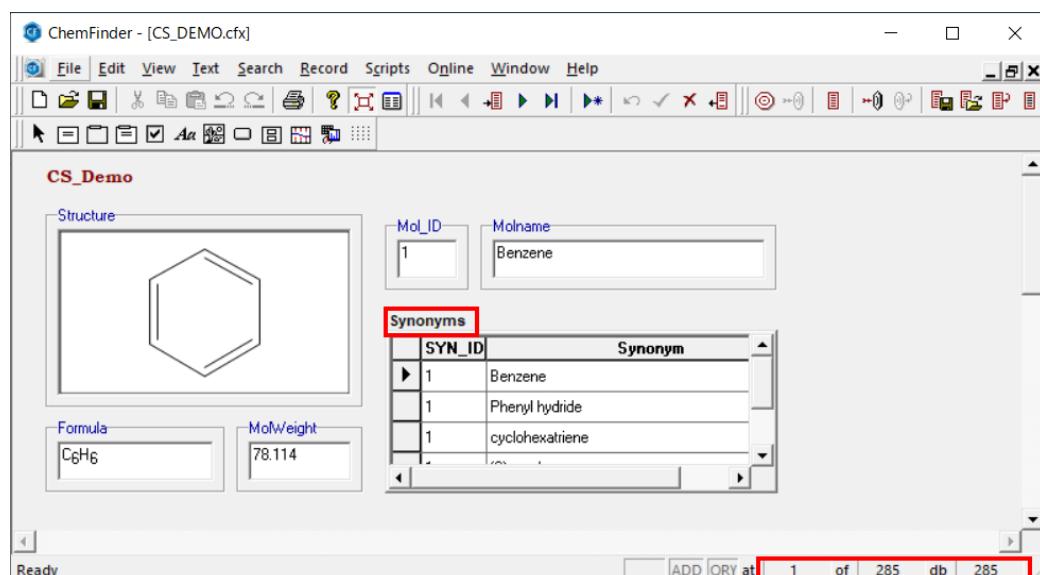
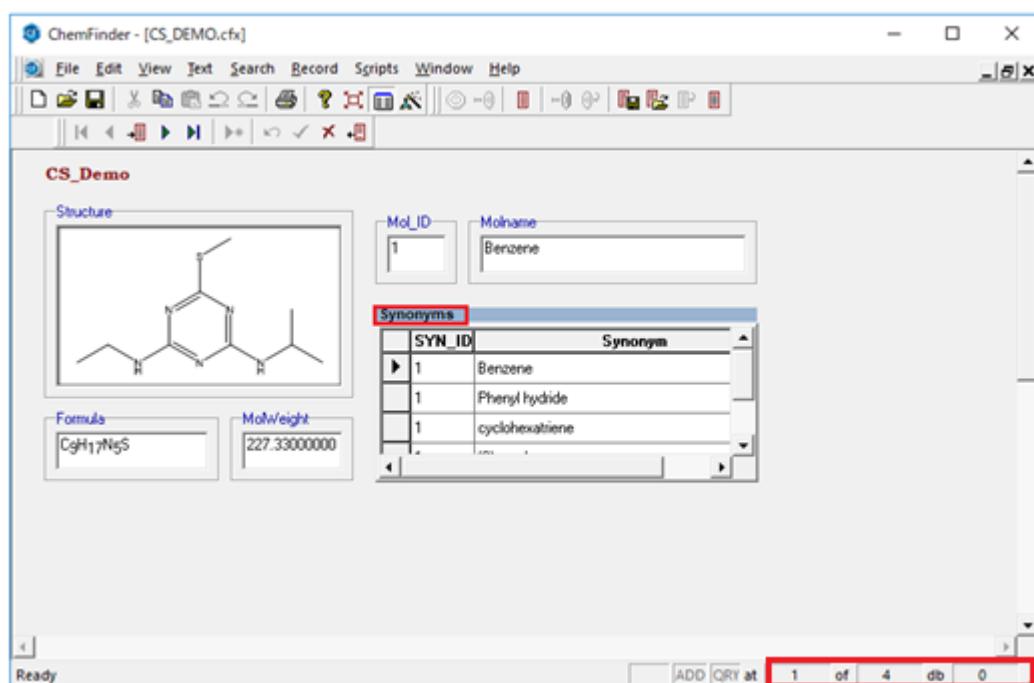
3つの件数の表示の横には、④データベースの状態を表すインジケータがあります。データベースが読み取り専用で開かれている時には、READと表示されています。データベースに新しいデータを登録している時には、ADDが表示されています。検索を行う時には、QRYが表示されています。

#### 4.1. 表示説明

- ① 現在のレコード番号
- ② 現在のレコード件数
- ③ データベース全体のレコード件数
- ④ データベースのステータス
  - READ：読み取り専用フォーム
  - ADD：新しいレコードの入力時
  - QRY：検索式の入力時



4.2. Synonyms の場所をクリックすると件数表示が変わります。



5. ChemFinder のツールバーは、結合したり、切り離したりできます。ツールバーの上にマウスを置くと簡単な説明が表示されます。

5.1. メインツールバー(Main toolbar)は、新しくフォームを作成、ファイルを開く、作業状態の保存、編集、印刷、ヘルプ表示、フォーム編集、データベースガイドの起動が行えます。



5.2. レコードツールバーは、データベースに含まれるデータの参照、更新の確定、更新の取り消し、レコードの削除が行えます。



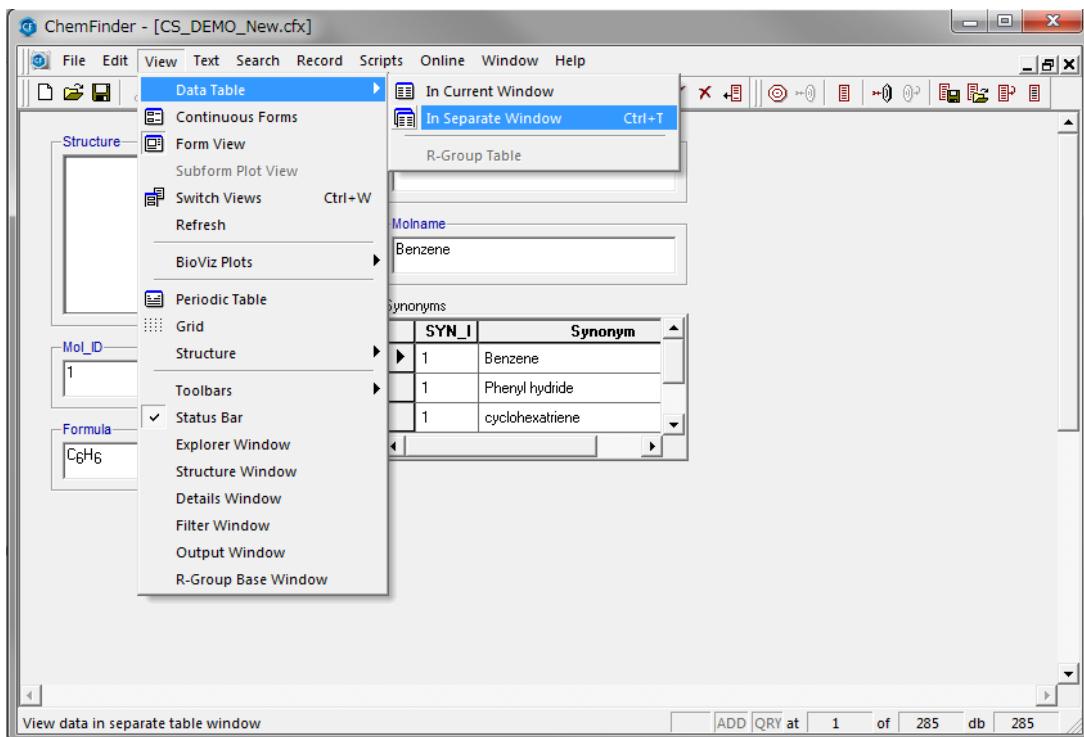
5.3. 検索ツールバーは、検索モードへの移行、検索の実行、直前の質問式を元に戻す、検索結果の保存、検索パラメータの変更が行えます。



5.4. フォームツールバーは、フォーム上のデータボックスの作成、ラベル、テキスト、絵、ボタン、サブフォームの追加が行えます。



6. 表形式にデータを表示するには、View > Data Table > In Separate Window を選択します。この表形式は、フォームに含まれるフィールドとデータを表示します。



- 6.1. 特定のレコードを表示したい場合は、表の該当レコード表の左端をクリックします。表のカラム幅を変更したい場合には、最上部のタイトル行の区切り記号の上にカーソルを置くと、カーソルの形が変わるのでドラッグしてカラムの幅を変えます。同様の操作で、行の幅も変えられます。

The screenshot shows a separate data table window titled 'CS\_DEMO\_New.cfx:2'. The table has five columns: Structure, Mol ID, Formula, MelWeight, and Molname. The data is as follows:

Structure	Mol ID	Formula	MelWeight	Molname
	1	C6H6	78.114	Benzene
	2	C6H5Br	157.01	Bromobenzene
	3	C4H10	68.075	Furan

7. ChemFinder で、化学構造を基にして検索するには、ChemDraw を用いて目的の構造を描きます。

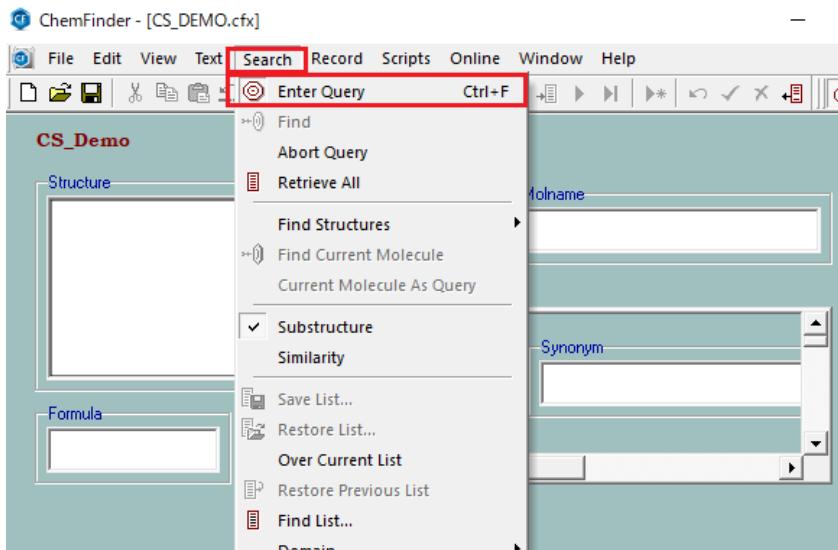
この検索では、以下 3 種類の条件で検索が可能です。

### 7.1. 検索条件

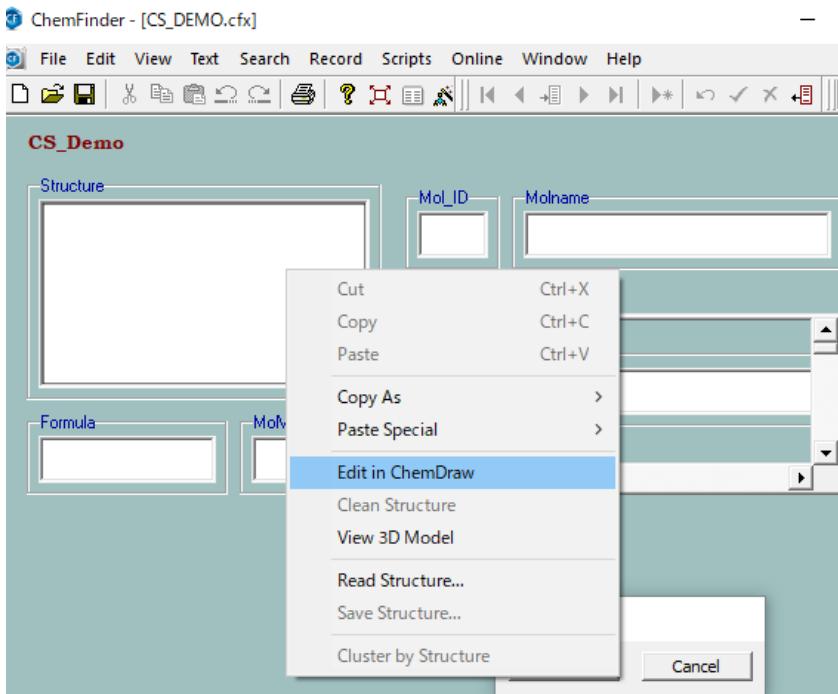
- ・描いた構造そのものを持つ
- ・描いた構造骨格を部分的に持つ
- ・描いた構造に似た構造を持つ

### 7.2. CS\_DEMO データベースを用いてプロパン骨格を構造の一部に持つものを検索します。

Search > Enter Query を選択するか、Search ツールバーの Enter Query ボタンをクリックします。



7.3. フォームは検索モードになり、表示データが消え、検索用の構造や条件を入力できるようになります。フォームが初期化されたら、構造用のボックスを右クリックして表示されるメニューから Edit in ChemDraw を選択します。これで、ChemDraw の画面が開きます。



7.4. 開いた ChemDraw の描画領域にプロパンを描きます。ChemDraw を閉じると、描画した構造が ChemFinder に反映されます。

The image consists of two screenshots demonstrating the integration between ChemDraw and ChemFinder.

The top screenshot shows the ChemDraw Professional interface. A propene molecule ( $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$ ) is drawn in the central workspace. The ChemDraw toolbar and menu bar are visible at the top. The drawing is currently selected, indicated by a blue selection box around the entire structure.

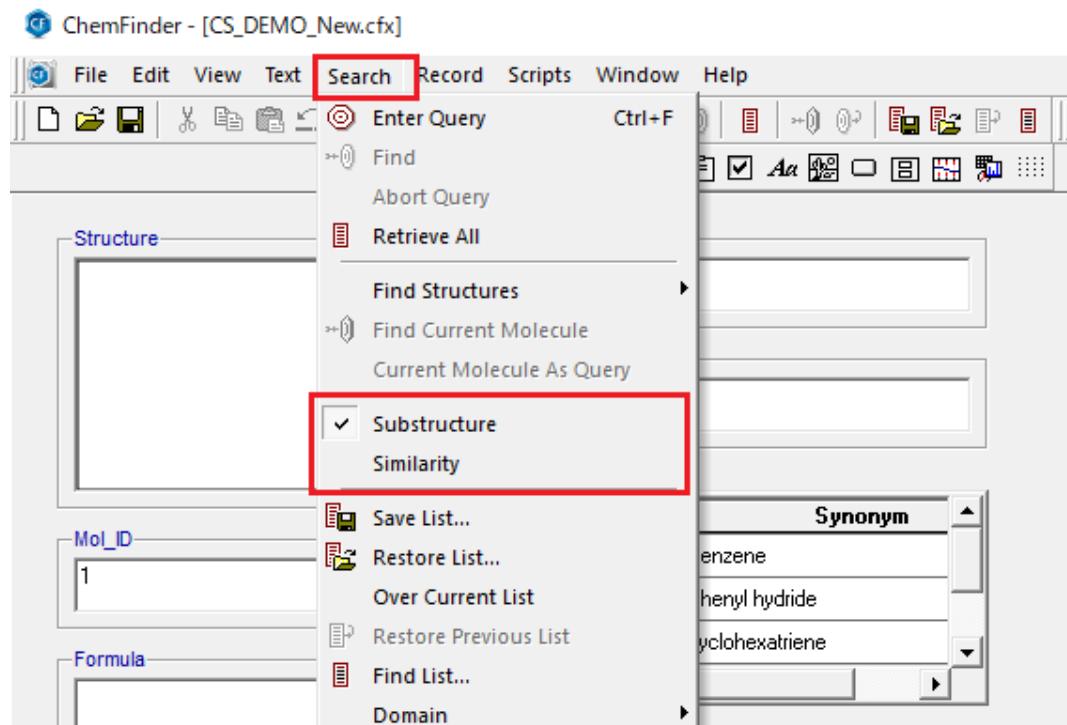
The bottom screenshot shows the ChemFinder - [CS\_DEMO.cfx] interface. It displays the propene structure from ChemDraw. Below the structure, there are input fields for "Mol\_ID" and "Molname". To the right, there is a "Synonyms" section with fields for "SYN\_ID" and "Synonym". At the bottom, a "Query Mode" dialog box is open with "Search" and "Cancel" buttons.

7.5. 部分構造式検索を行うには、Search > Substructure が選択され、Search > Similarity が非選択になっていることを確認します。

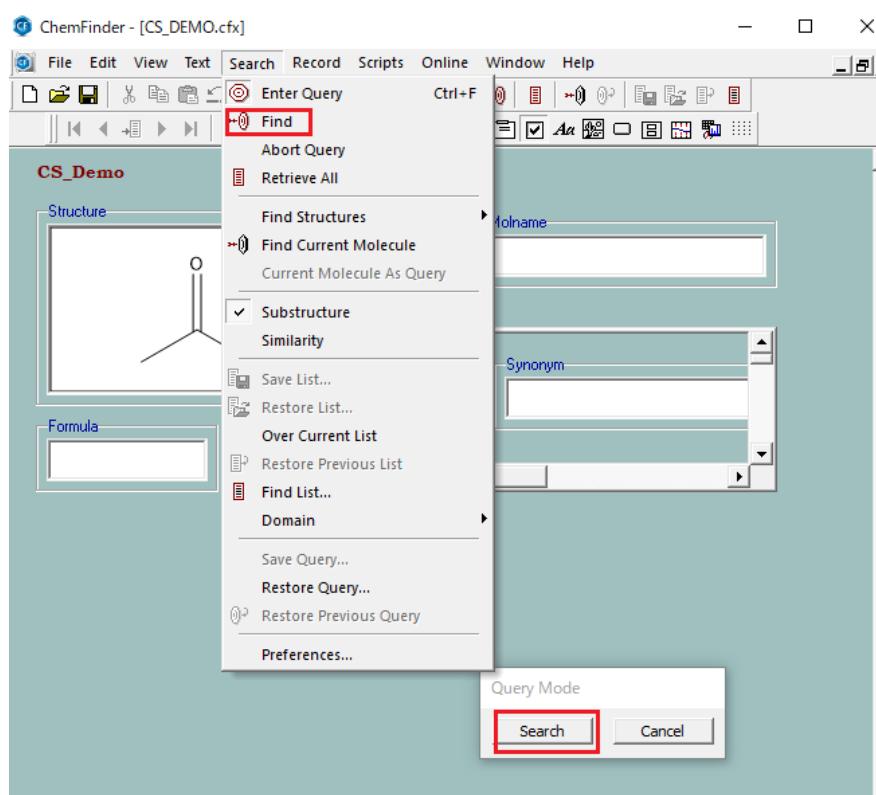
#### 7.5.1. View メニューの中部に以下オプションが表示されています。

Substructure : 部分構造式のみを検索

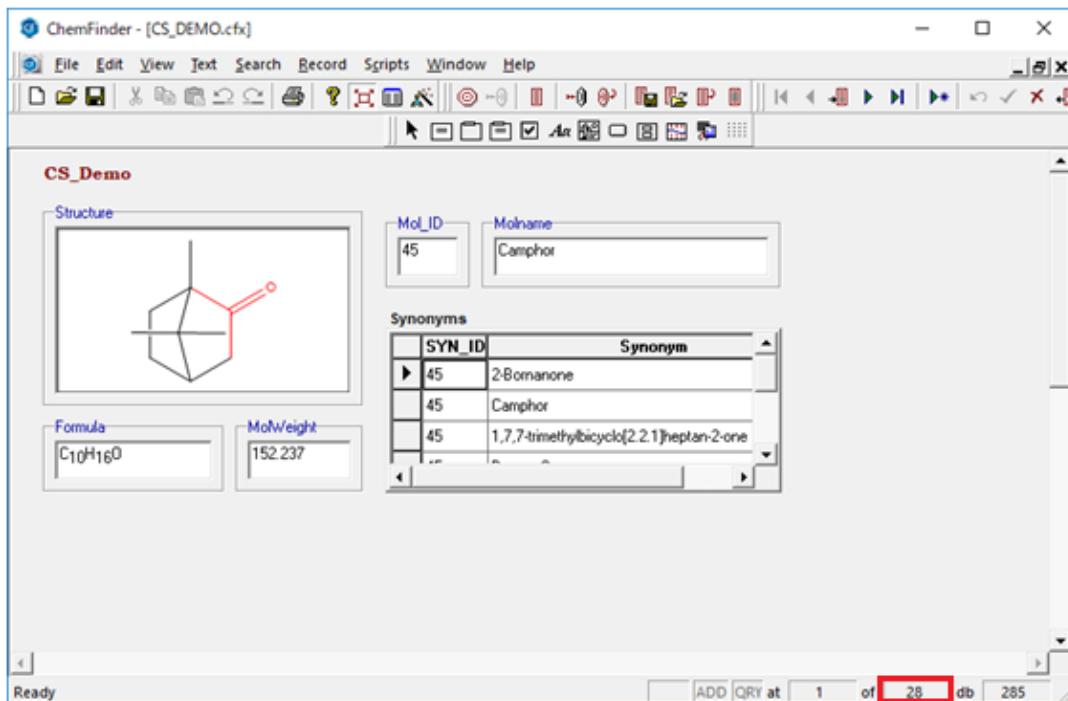
Similarity : 類似した構造式のみの検索



7.6. Search > Find を選択するか、ポップアップの Search ボタンをクリックするか、Find ボタンをクリックします。

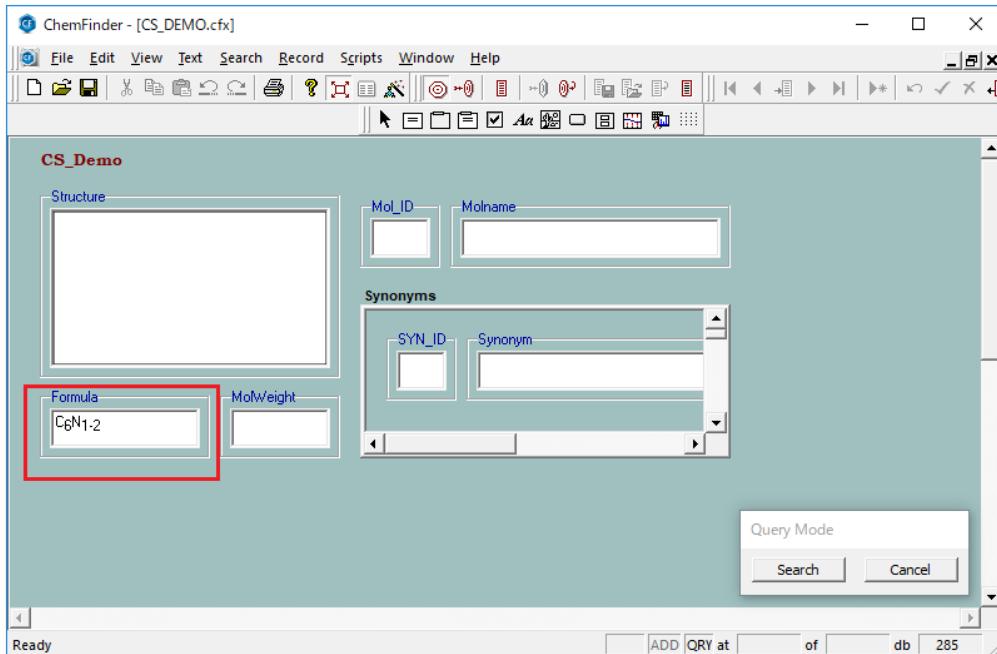


7.7. 部分検索においては、分子の一致部分が赤く表示されます。この検索では、プロパン骨格を持つ構造が 28 件ヒットします。

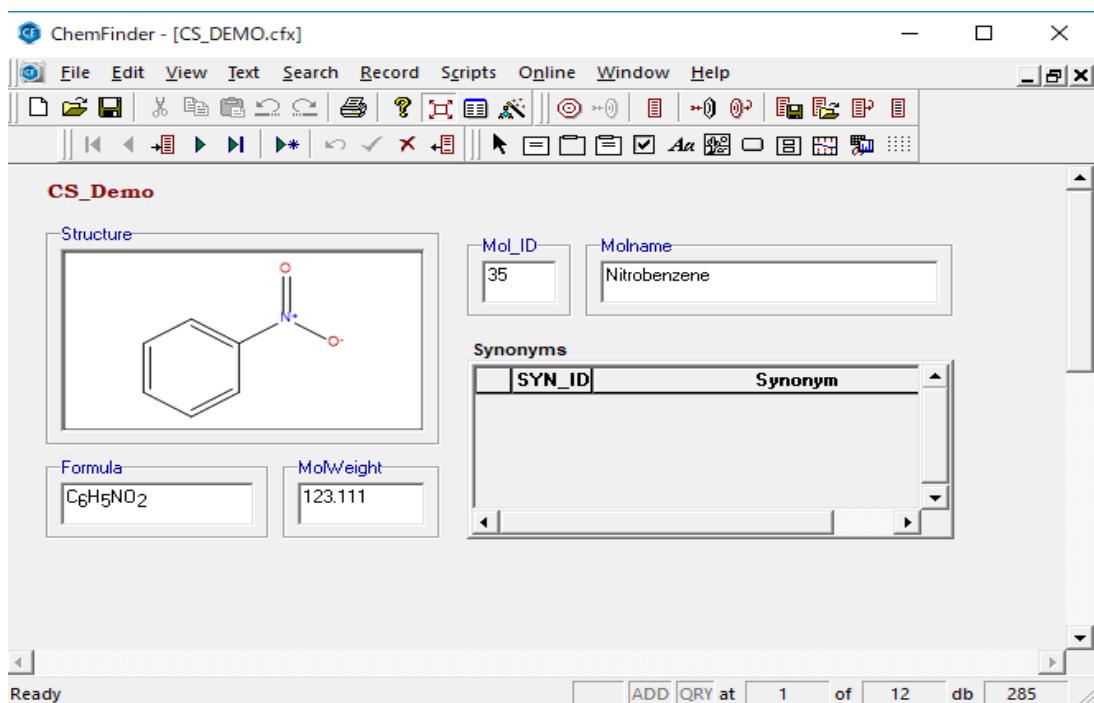


8. 次に分子式検索を説明します。フォームの表示をクリアするために Search > Enter Query を選択するか、Search ツールバーの Enter Query ボタンをクリックします。

8.1. Formula データボックスをクリックして C<sub>6</sub>N<sub>1-2</sub> を入力し、Find ボタンか Enter をクリックすると検索を開始します。これは、組成式に 6 個の炭素原子と 1 個又は 2 個の窒素を持つことを指定しています。

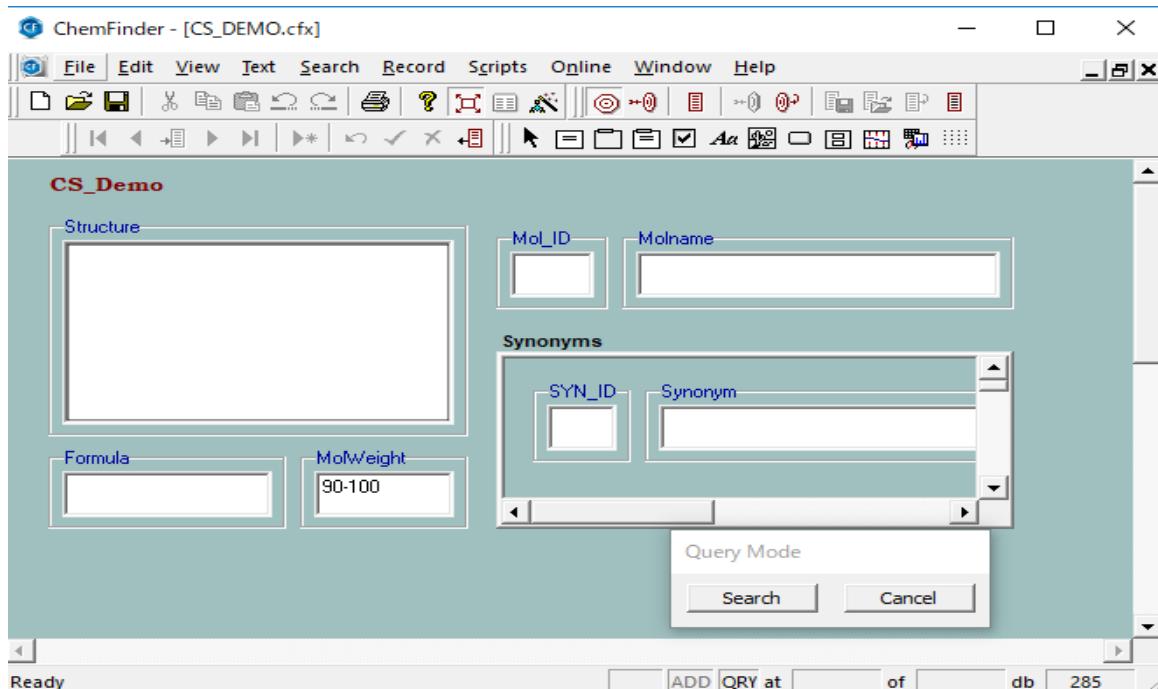


8.2. この検索では組成式に 6 個の炭素原子と 1 個又は 2 個の窒素を持つものが 12 件ヒットしました。

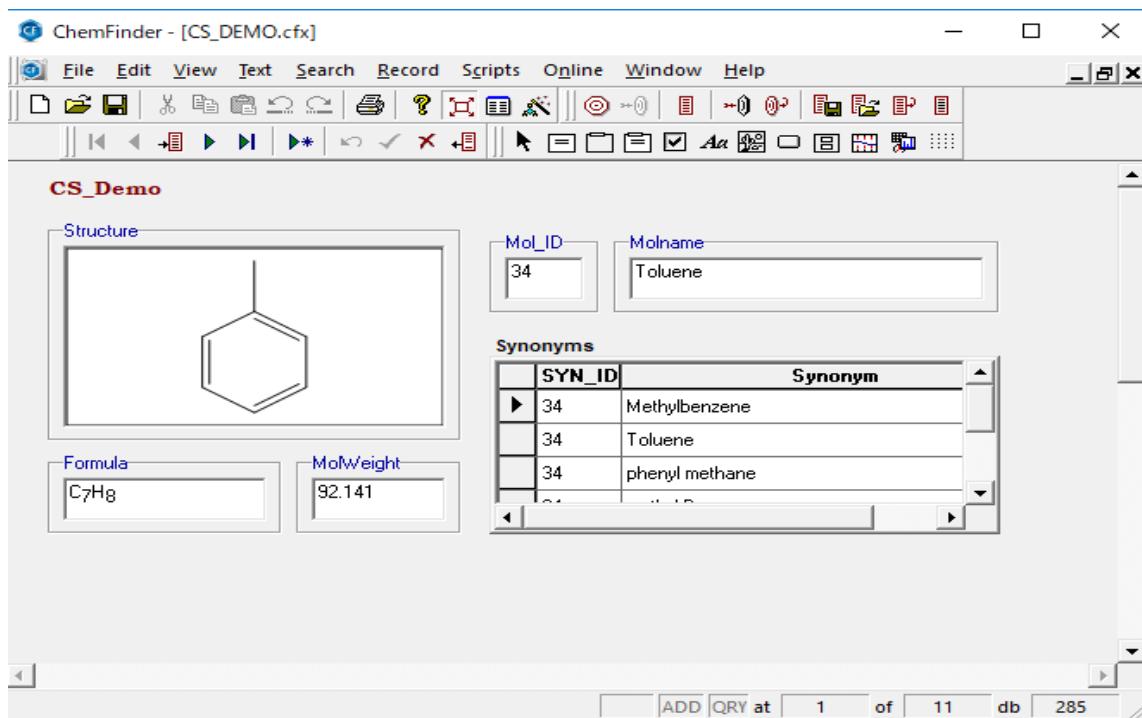


9. 数値検索は正確な数値又は、幅を持った値を検索します。この練習では、CS\_DEMO データベースに含まれる分子量が 90 から 100 までの化合物を検索します。フォームの表示をクリアするために Search > Enter Query を選択するか、Search ツールバーの Enter Query ボタンをクリックします。

9.1. MolWeight ボックスをクリックして 90-100 を入力します。

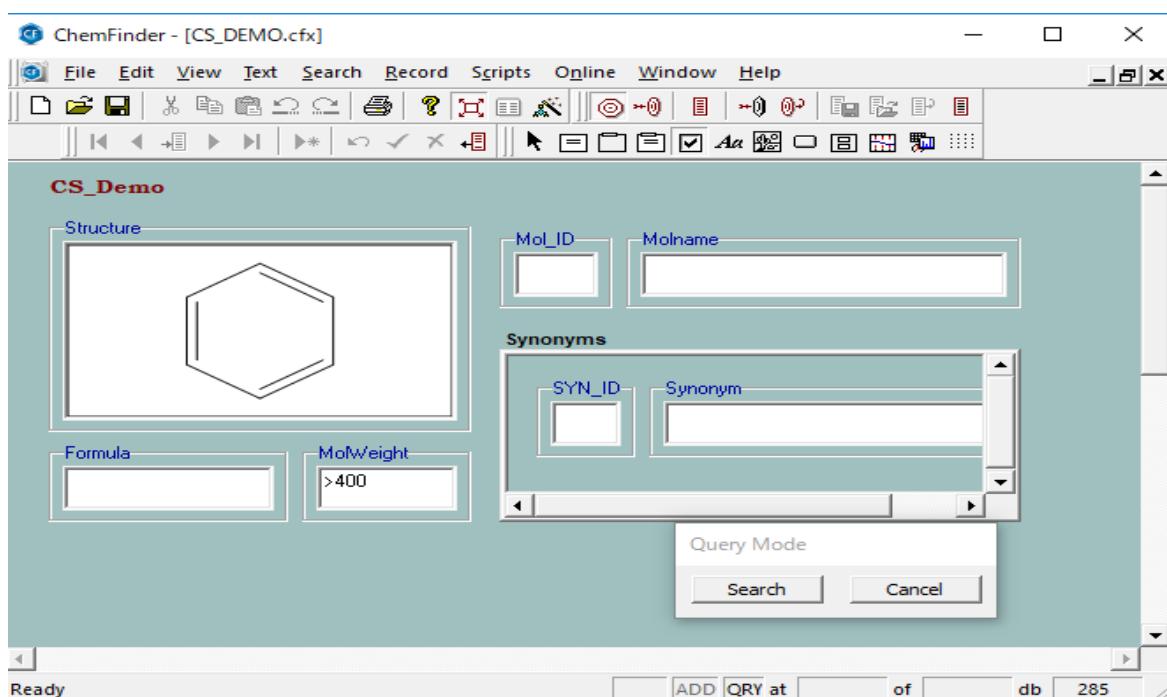


- 9.2. Find ボタンをクリックすると分子量が 90 から 100 の範囲にある化合物が 11 件ヒットします。

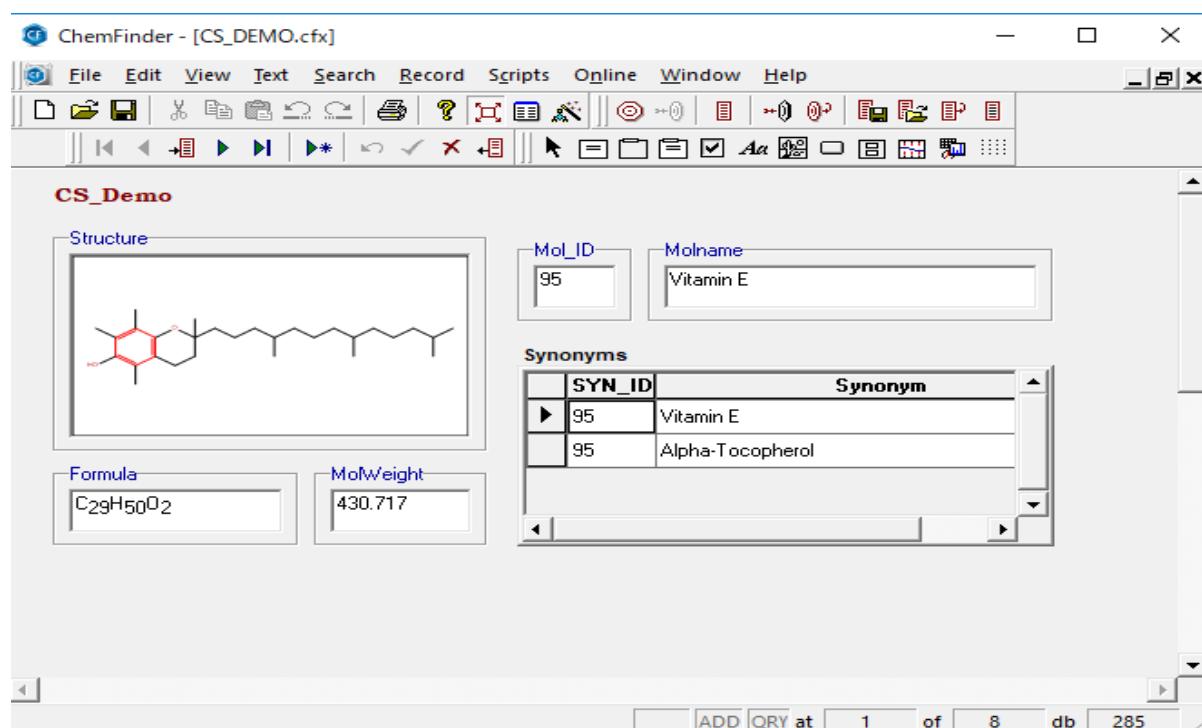


10. 分子構造とテキストなどのようにいくつかの組み合わせを使用することにより、複合検索が可能になります。例として、ベンゼン骨格を持ち、分子量が 400 を越えるものを検索します。フォームの表示をクリアするために Search > Enter Query を選択するか、Search ツールバーの Enter Query ボタンをクリックします。

- 10.1. 構造データボックスを右クリックで表示されるメニューから Edit in ChemDraw を選択します。ChemDraw ウィンドウが開くので、benzene を描き、ChemFinder のフォームに移すために ChemFinder ウィンドウをクリックします。MolWeight データボックスをクリックして、>400 を入力します。

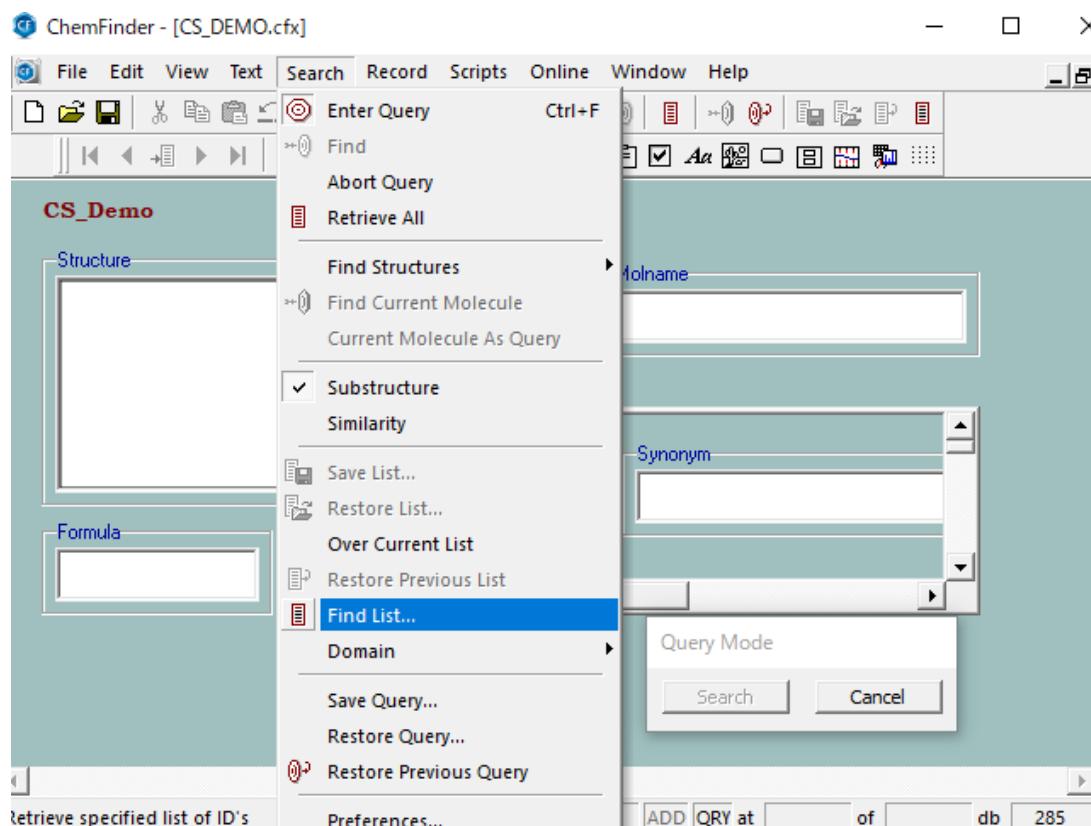


10.2. Find ボタンのクリック等で検索を実行すると 8 件ヒットします。

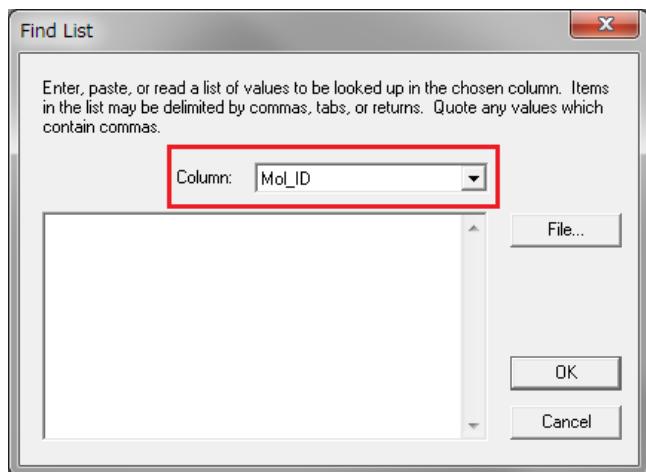


11. Find List コマンドを使用すれば、構造式以外のフィールドに特定の値を持つレコードを取り出します。

11.1. Search > Find List を選ぶと、Find List メニューが表示されます。

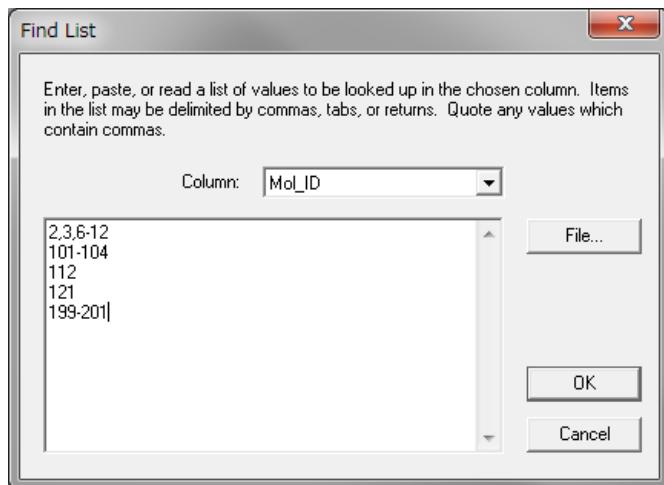


11.2. カラム選択ボックスで検索したい対象を選択します。

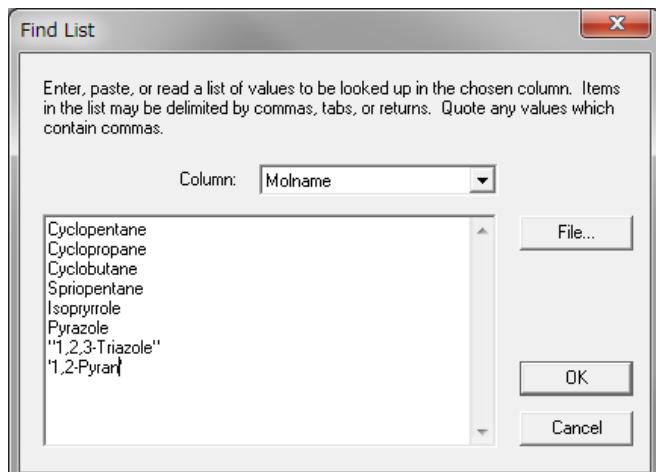


11.3. テキストボックスでは、コンマ、行(行区切りは、Ctl-Enter)で区切ったテキストを使用できます。また、クリップボードも利用できるので、Excel からコピーペーストも可能です。

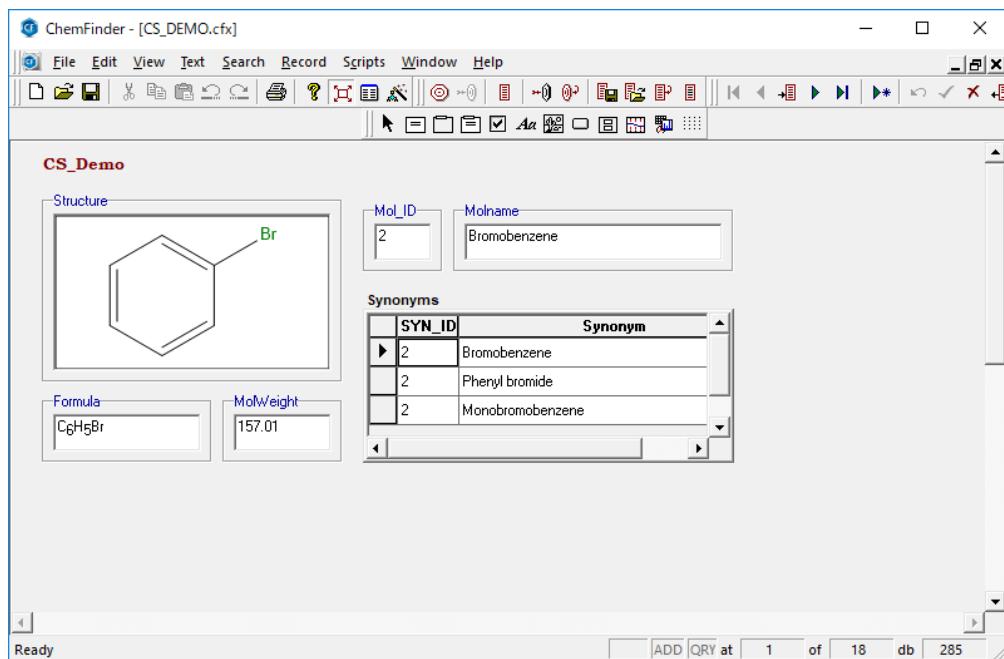
11.3.1. カラムが整数の場合は、以下のようにハイフンを含めば幅のある値を指定できます。



11.3.2. テキスト検索でコンマを含む場合には“や”で囲んでください。実数やテキストでの検索ではハイフンは使用できません。



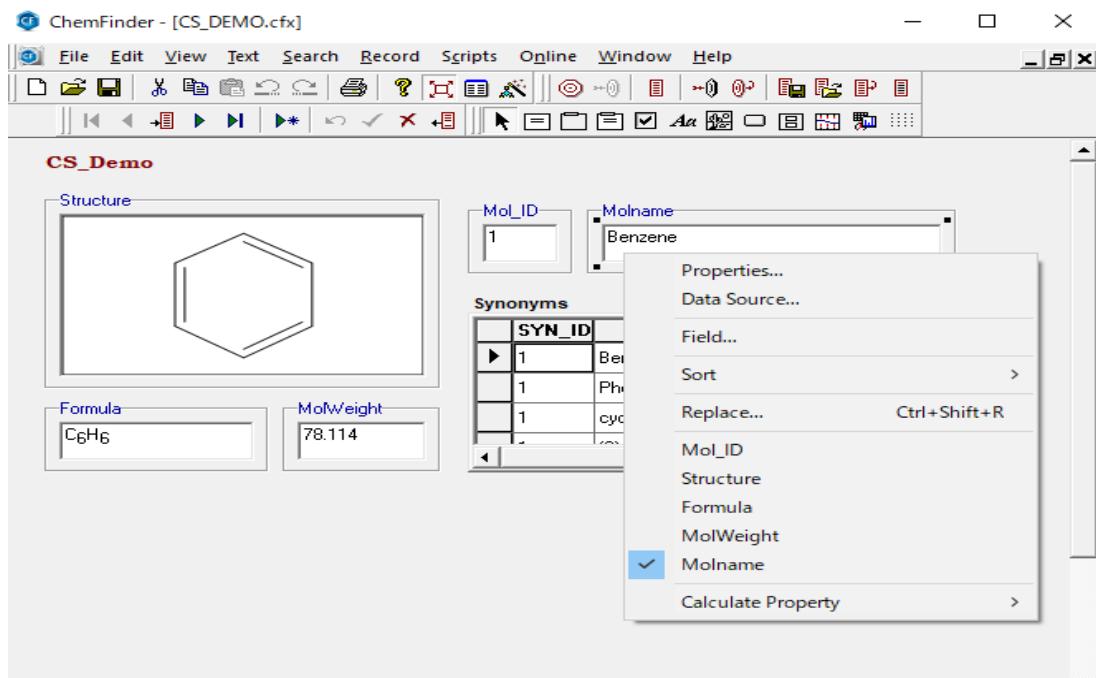
### 11.3.3. OK をクリックし、検索を実行します。



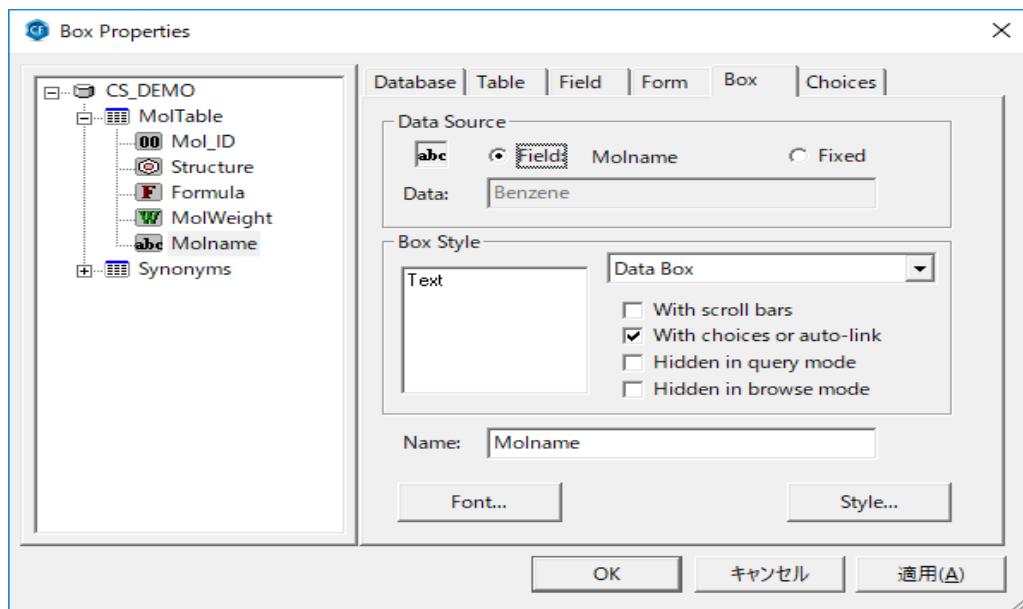
## 12. その他の機能

12.1. ChemFinder では、あらかじめ登録したデータを選択することにより、データを登録することができます。この機能を使用すれば、データを打ち込む手間が省け、打ち間違いを無くすことができます。この機能は、ボックスの新しい属性として指定できます。例として、Molname データボックスに対して設定してみます。

12.1.1. Form ツールバーから選択ツール を選びます。Molname データボックス右クリックをして、Properties を選択します。



### 12.1.2. Box > Box Style > With choices or auto-link にチェックを入れます。

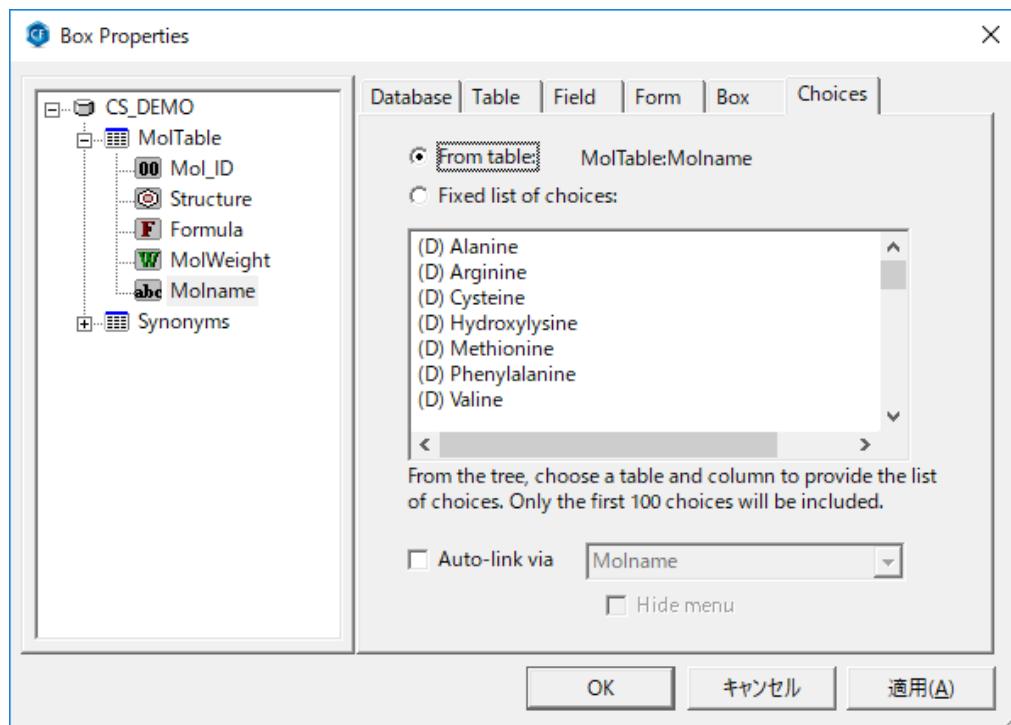


### 12.1.3. データの登録には以下 2 種類あります。

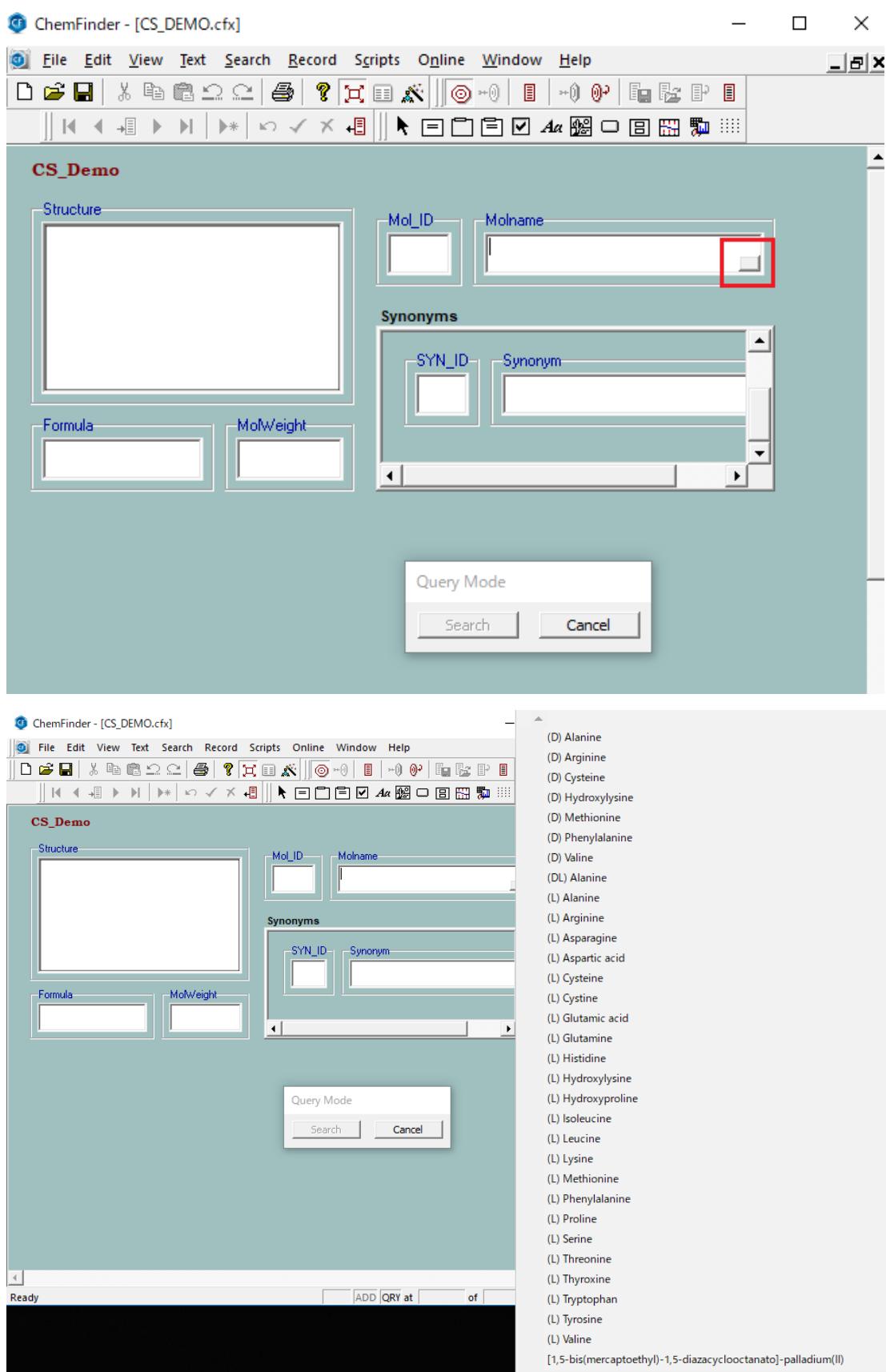
今回は例として Form table を選択します。from table を選択して OK をクリックします。この場合、特別な分子名を素早く検索するのに便利です。

#### 12.1.3.1 Form table : データベースのテーブルから取得したリストを使用する

#### 12.1.3.2 Fixed list of choices : データボックスメニュー用にリストを作成する

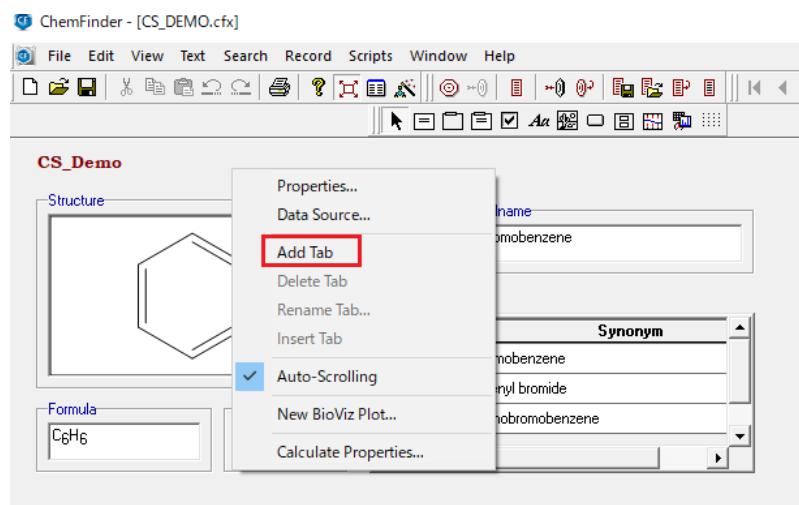


12.1.4. Search > Enter Query を選択するか、Search ツールバーの Enter Query ボタンをクリックし、Search 画面を表示させた後、分子名データボックスの右下をクリックします。すると、検索用の名前の一覧が表示されます。

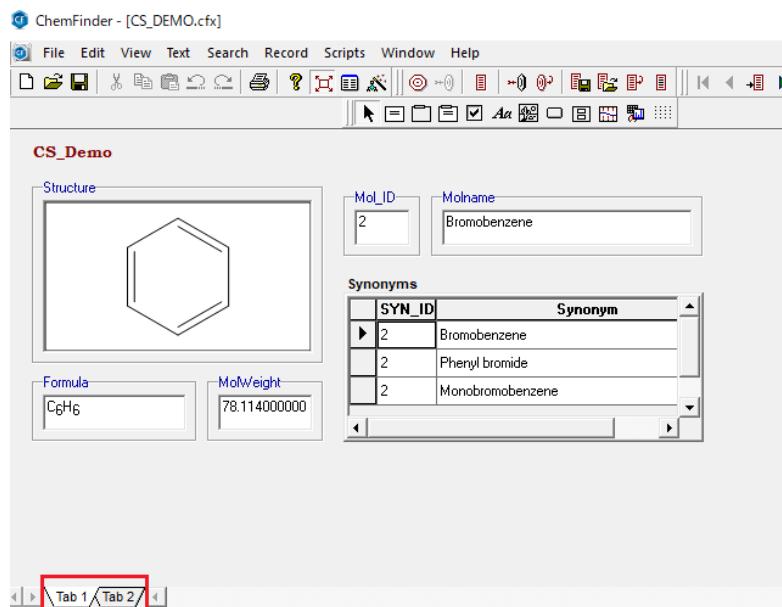


12.2. データを見やすくするためにタブ形式のフォームが利用できます。大きなフォームを表示する時にいちいちスクロールする必要が無く、タブで表示の切り替えが可能です。各々のタブでは、フォーム形式やテーブル形式が使用できます。

12.2.1. フォームの何も記載が無いところを右クリックし表示されたメニューから Add Tab をクリックします。



12.2.2. フォーム左下にタブが表示されます。



12.3. ChemFinder では、Structure Data files(SDFFiles)と Reaction Data files(RDFFiles)形式で直接書き出したり、読み込んだりできます。SDFFiles や RDFFiles は、化学構造とデータを含んでるので、ChemFinder は、入力データに応じてデータベース内に適切なフィールドを作成します。RDFFiles は、階層構造で複雑です。RDFFiles を読み込む時には、ChemFinder は、データを階層的なフォームに変換し、新しいテーブルやデータリンクを作成します。

富士通及び本資料に関する問い合わせ先：

富士通株式会社

ソーシャルデザイン事業本部

デジタルラボ事業部

ChemOffice シリーズ製品担当

郵便番号 144-0052

東京都大田区蒲田 5 丁目 37 番 1 号

ニッセイアロマスクエア 4 階

電話 03-6424-9659

E-mail [contact-pki@cs.jp.fujitsu.com](mailto:contact-pki@cs.jp.fujitsu.com)

デスクトップ製品の技術的な問い合わせ先：

PerkinElmer 社

[informatics.support@perkinelmer.com](mailto:informatics.support@perkinelmer.com)

ソフトウェアのインストールと設定に関するご質問および製品に関するご質問については、

<http://www.perkinelmer.com/informatics/support/contact>

のサポートフォームに記入をしてください。

(サポートフォームは日本語で記入いただけます。)

以上