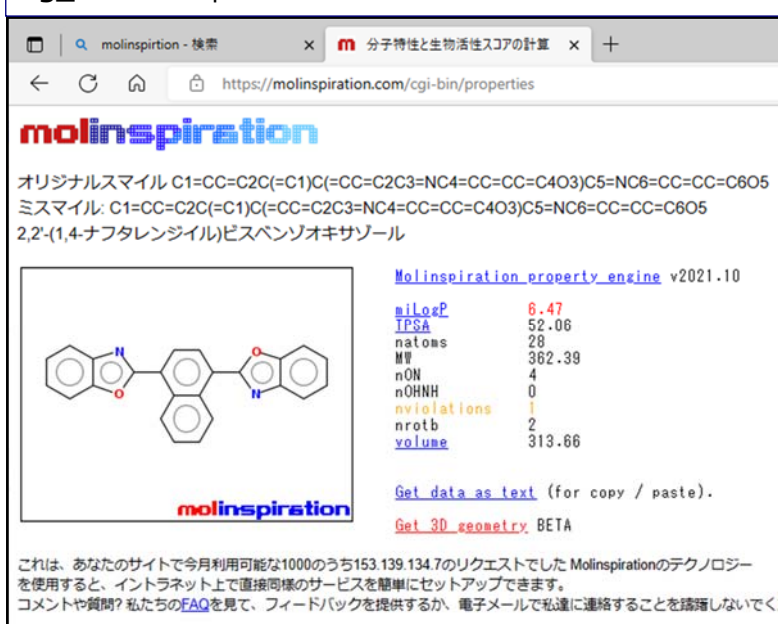


Title : SML6を使いこなすためのPubChem + molinspirationの操作法
Fig_01:PubChemデータベース NIH_国立衛生研究所の利用

Fig_02:Molinspiration データベースの利用


SML6は自前の化学データベースとしてMDCtec社のChemprofilerを使用しています。しかしSML6が必要とする情報がすべてこのDBに収録されている訳ではありません。

AKTSはSML6をより有効に使用するために

- ① PubChemデータベース および
- ② molinspiration の使用が不可欠です。

その目的は下記のA,B,Cの3項目です。

A: 拡散係数を求めるために移行モデルとしてWelle式を使用すると**モル体積**情報が必要です。

B: 極性スケール・アプローチするにはLog_Pow値が必要です。

C: 分配係数の予測にPowアプローチを使用するにはLog_Pow値が必要です。

PubChemのURLは

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>

molinspirationのURLは

<https://molinspiration.com/cgi-bin/properties>

molinspirationにより、化学特性情報を検索する場合、2023年7月まではSMILES表記により探索が可能でした。しかし2023年8月以降からSMILES表記の入力画面が削除され、代わって化学構造の2D表示を書き込む操作に変更されました。有機合成に不可欠なツールのChemDrawを使い慣れた人であれば問題がなくても、SML6ユーザにとって、これは難易度の高い操作でした。

解決策が判明しました！ 入力画面にSDF、MOL



SMILES表記にはSMLを連想させるのでちょっと微笑みたい気分になります。


Chemical Property (化学特性情報) を探索する操作手順

- ① 移行物質(migrant)や疑似溶媒(simulant)のCAS Noを調べます。
- ② <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> を起動して、CAS.Noを入力 PubChemにより、検索物質のいわゆるSMILES記法を調べます。
- ③ 探索物質のSMILES記法が得られたら 探索入力画面に“SMILES表記”を Pasteします。
- ④ <https://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties> が起動して Fig_02に示すような、Chemical Property(分子特性) が表示されます。

2023年8月までは上記の操作で分子特性情報が得られました。

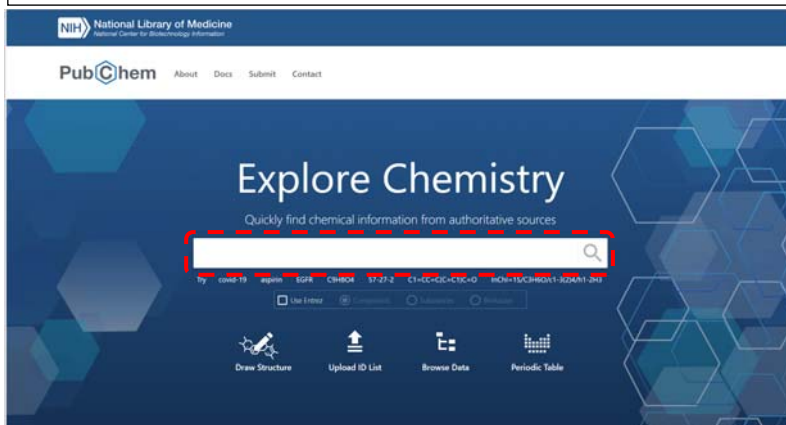
2023_08以降は次ページに示すSDFファイル、あるいはMOLファイルを使って Chemical Propertyを探索する操作方法を次ページ以降に説明します。なおSDF (Structure Design File) やMOL (拡張子.mol) はSMILES表記と似たもので、これらのファイルは化学構造の線形表示法と云われるものです。これらの情報はPubChemから得ることができます。

PubChemとMolinspirationを合わせて化学特性情報をゲットできます。

SML6のマスターDB(Profiler)にはPow値が設定されていない移行物質があります。こうした場合、molinspirationを使って欠落しているマスターDBに情報を追加し、UserDBを構築することが可能です。

Title : SML6を使いこなすためのPubChem + molinspirationの操作法

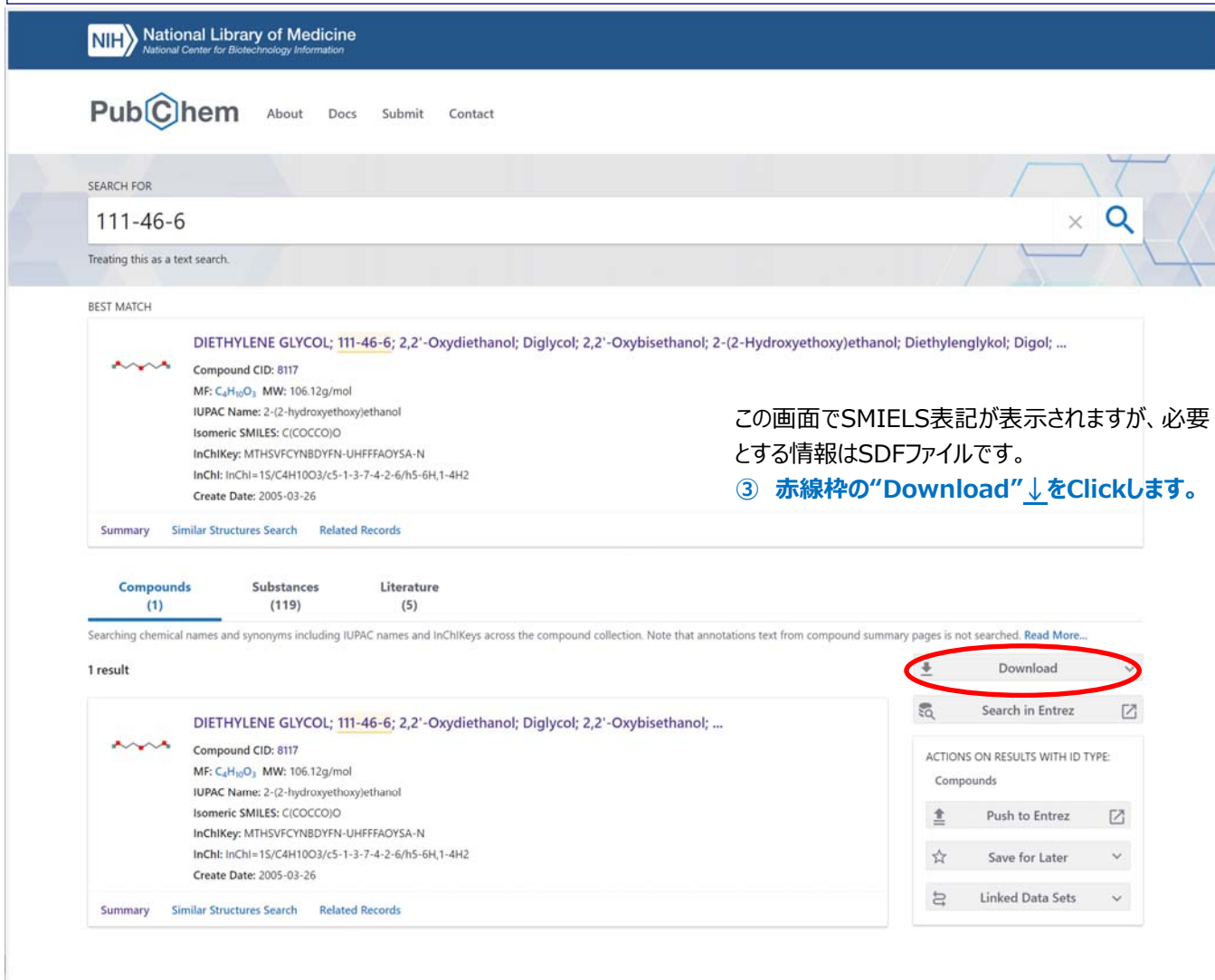
Fig_03: PubChemデータベースを立ち上げた時の初期画面



操作法を説明するために、前ノートのSML6-15で使用した移行物質のジエチレン・グリコール CAS.No 111-46-6のモル体積とLog_Powの値を探索します。

- ① PubChemを起動するには <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> を立ち上げます。 Fig_03が表示されます。
- ② 赤破線枠にCAS No.の“111-46-6”を入力します。

Fig_04: CAS.No 111-46-6を入力してEnter後の表示画面

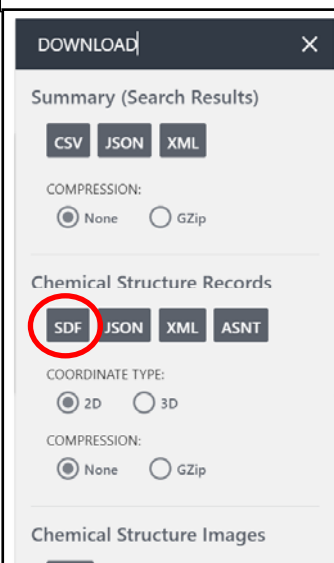


この画面でSMILES表記が表示されますが、必要とする情報はSDFファイルです。

- ③ 赤線枠の“Download” ↓ をClickします。

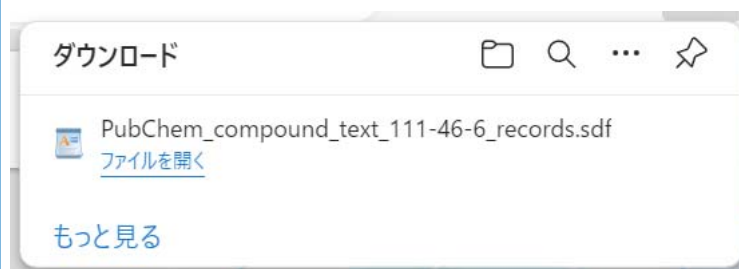
SML6のマスターDB(Profiler)にはPow値が設定されていない移行物質があります。こうした場合、molinspirationを使って欠落しているマスターDBに情報を追加し、UserDBを構築することが可能です。

Title : SML6を使いこなすためのPubChem + molinspirationの操作法

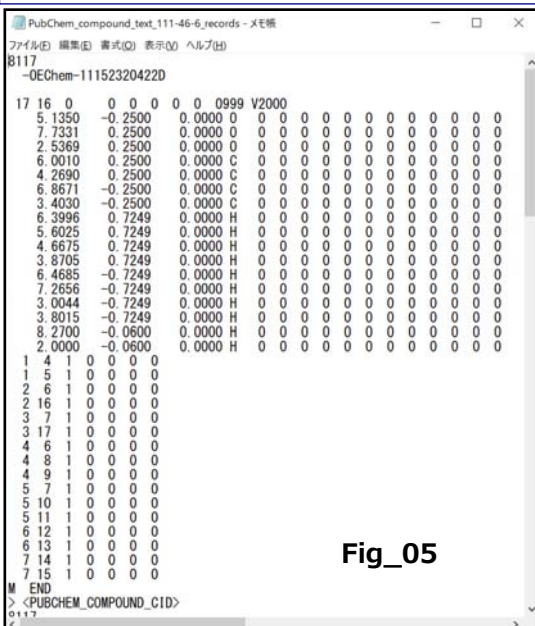


Fig_03:Downloadの↓ をクリックすると左図が表示されます。

- ⑤ 目標とする情報はSDF (Structure Design File) です。
赤線枠のSDF をクリックします。
Download が開始されます。
PubChemデータベースからSDFファイルを手に入れることができました。



Fig_05: CAS.No 111-46-6を入力してEnter後の表示画面



Fig_05

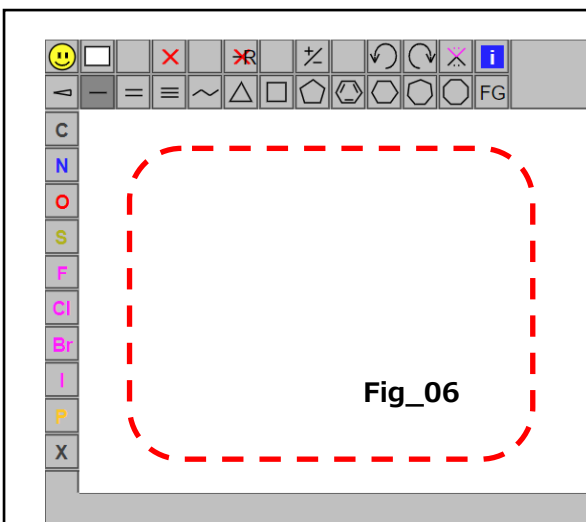
- ⑥ DownloadされたファイルはTXTファイルのようです。
ワードパッドあるいはメモ帳で表示させます。左図はメモ帳の表示例です。
ここで表示させる意味はないのですが、111-46-6分子の化学構造がテキストとして確認できました。

SDFファイル名は CAS.Noが入っているので識別が容易です。
PubChem_compound_text_111-46-6_records.sdf

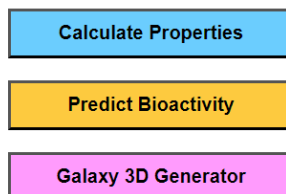
- ⑦ 次にmolinspirationを起動します。
molinspirationのURLは
<https://molinspiration.com/cgi-bin/properties>

下図はmolinspirationの起動後の画面です。

- ⑧ ここで赤破線枠内にカーソルを置いてRight_Clickします。



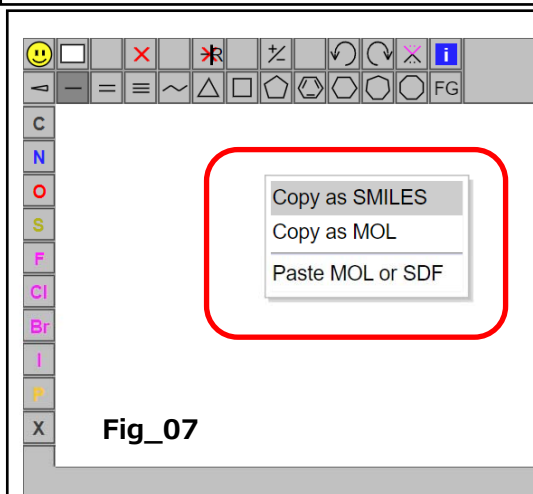
Fig_06



[Molinspiration home](#)
[Molinspiration products and services](#)
[Molinspiration services FAQ](#)
[Terms of service](#)

Title : SML6を使いこなすためのPubChem + molinspirationの操作法

- ⑥ 右Click後に赤線枠が表示されます。
最下段の Paste MOL or SDF が 化学構造ファイルをPasteすれば入力が可能です。
- ⑥ CAS.No 111-46-6 の化学構造ファイルのPubChem_compound_text_111-46-6_records.sdf ファイルをコピーします。



Calculate Properties

Predict Bioactivity

Galaxy 3D Generator

[Molinspiration home](#)

[Molinspiration products and services](#)

[Molinspiration services FAQ](#)

[Terms of service](#)

© Molinspiration Cheminformatics 2023

従来のmolinspirationはSMILES表記を入力して検索するシステムでしたが、現在はMOL,SDFファイルを入力して検索するように変更されています。

このSDFファイル入手するために“PubChem”を利用します。

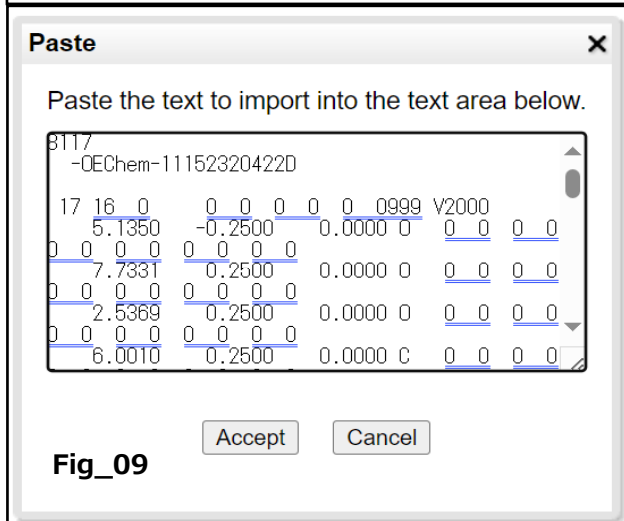


Fig_08

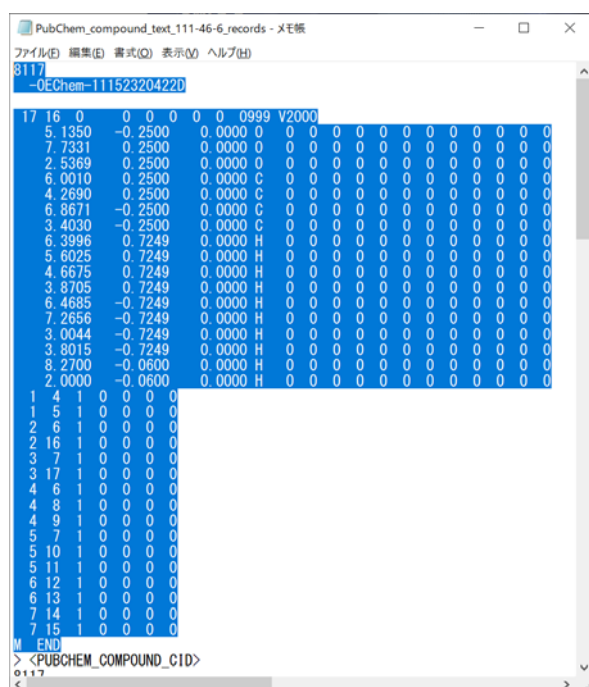
- ⑦ Paste MOL or SDF を Clickします。

- ⑧ 左図が表示されるので赤破線枠内にSDFファイルを Pasteします。

ただしPasteするときはFig_05のテキスト表示した状態でテキストファイルをペーストすることが必要です。
SDFファイルをコピーしてからペーストするものではありません。



Fig_09

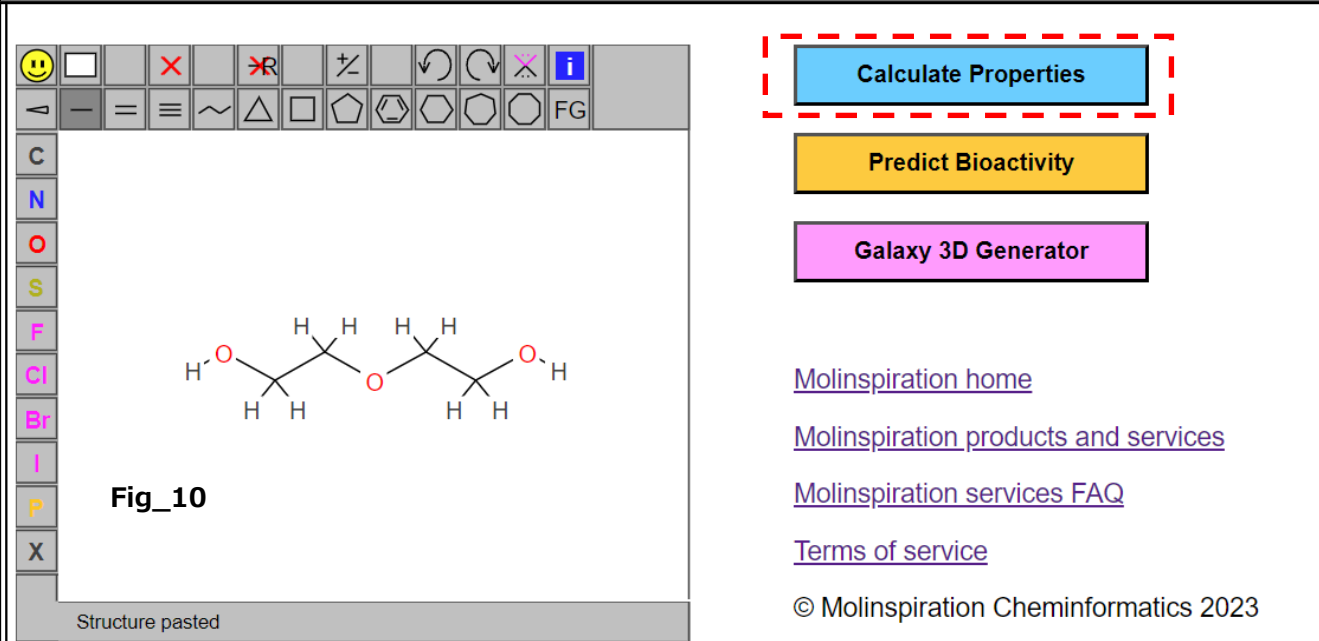


テキストをベタコ

- ペーストしてからペーストすることが必要です。
Copy & Pasteしたら、Accept をclickします。

Title : SML6を使いこなすためのPubChem + molinspirationの操作法

Fig_10 SDFファイルをテキストファイルで表示して、これをCopy & Paste してacceptをクリックするとComplete_完了です。ジエチレン・グリコールの化学構造をChemDrawのような操作をしなくてもSDFファイルをコピーすることで化学特性を探索するための入力作業が完了しました。最後に赤破線枠のCalculate Properties をクリックします。



Structure pasted

Calculate Properties

Predict Bioactivity

Galaxy 3D Generator

[Molinspiration home](#)

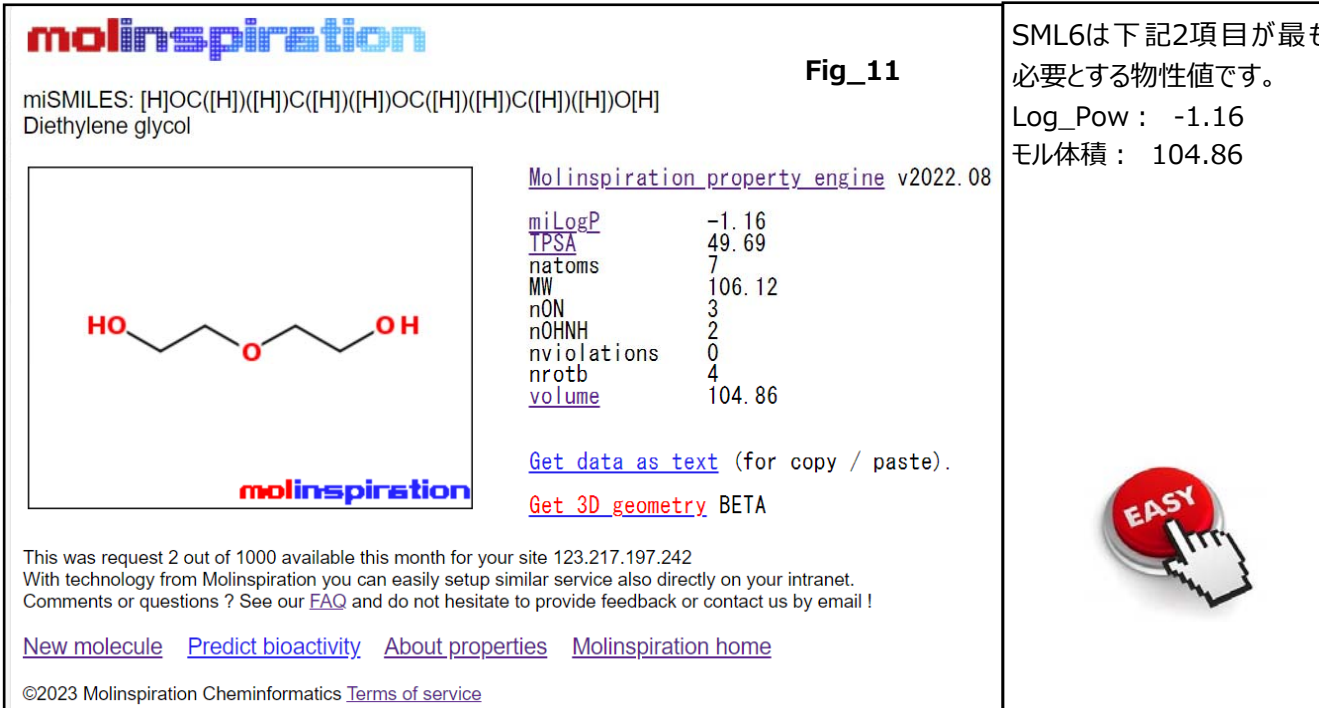
[Molinspiration products and services](#)

[Molinspiration services FAQ](#)

[Terms of service](#)

© Molinspiration Cheminformatics 2023

Fig_11: CAS.No 111-46-6 の Chemical Properties が表示されます。



molinspiration

miSMILES: [H]OC([H])([H])C([H])([H])OC([H])([H])C([H])([H])O[H]
Diethylene glycol

Fig_11

[Molinspiration property engine](#) v2022.08

miLogP	-1.16
TPSA	49.69
natoms	7
MW	106.12
nON	3
nOHNH	2
nviolations	0
nrotb	4
volume	104.86

[Get data as text](#) (for copy / paste).

[Get 3D geometry](#) BETA

This was request 2 out of 1000 available this month for your site 123.217.197.242
With technology from Molinspiration you can easily setup similar service also directly on your intranet.
Comments or questions ? See our [FAQ](#) and do not hesitate to provide feedback or contact us by email !

[New molecule](#) [Predict bioactivity](#) [About properties](#) [Molinspiration home](#)

©2023 Molinspiration Cheminformatics [Terms of service](#)

EASY

SML6のマスターDB(Profiler)にはPow値が設定されていない移行物質があります。こうした場合、**molinspiration**を使って欠落しているマスターDBに情報を追加し、**UserDB**を構築することが可能です。