



# 効率的に構造検索！ 作図ツールを使いこなそう

**JAICI**  
化学情報協会

1

## 本日の内容

1. 基本の作図ツール
2. 検索条件を広げるためのツール
3. 検索条件を限定するためのツール
4. 他の情報を使った作図



## 本日の内容

1. 基本の作図ツール
2. 検索条件を広げるためのツール
3. 検索条件を限定するためのツール
4. 他の情報を使った作図



## Non-Java を選択

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner

REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure**
- Markush
- Molecular Formula
- Property
- Substance Identifier

REACTIONS

- Reaction Structure

SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE ⓘ

Structure Editor:

Java Non-Java

Click to Edit

Search Type:

- Exact Structure
- Substructure
- Similarity

Show precision analysis

ChemDraw  
Launch a SciFinder substance  
ChemBioDraw Ultra 14. Lea

Import CXF

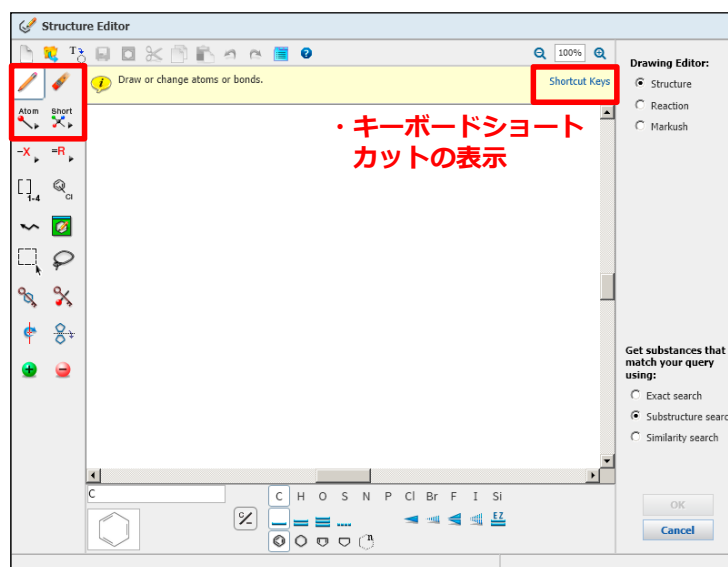
Search

Java プラグインを利用しない構造作図ツール







# 1. 基本の作図ツール



- ・ペンシルツール
- ・消しゴムツール
- ・原子メニューツール
- ・ショートカットメニューツール



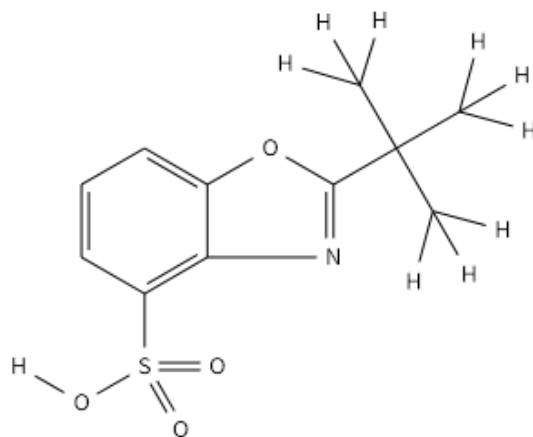
## まずはこれらのツールから

アイコン	内容
	<b>ペンシルツール</b> ・ ノードや結合を描く
	<b>消しゴムツール</b> ・ ノードや結合を削除する (一操作やり直す時  )
	<b>原子メニューツール</b> ・ 周期表から原子を選択して作図する
	<b>ショートカットメニューツール</b> ・ ショートカットを作図する
	<b>キーボードのショートカットの表示</b> ・ キーボードのキーを使って作図する

 リセットボタン

# デモンストレーション

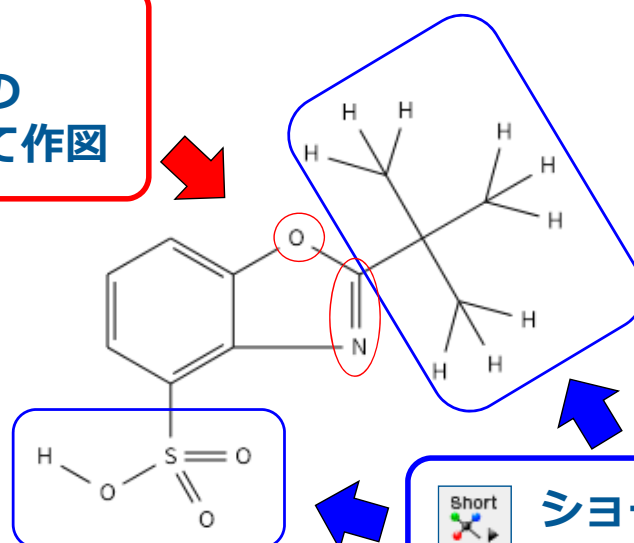
- 下記の構造を作図する



# 注目ポイント

Shortcut Keys

キーボードの  
キーを使って作図



ショートカット  
ツールで作図

## 本日の内容

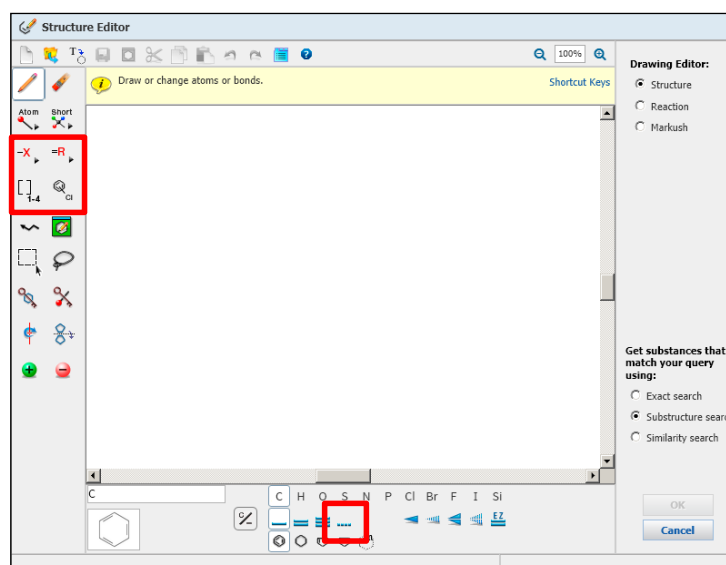
1. 基本の作図ツール
2. 検索条件を広げるためのツール
3. 検索条件を限定するためのツール
4. 他の情報を使った作図



## 2. 検索条件を広げるためのツール





- ・ X メニューツール
- ・ R グループツール
- ・ 繰り返しグループツール
- ・ 可変置換位置ツール






・ 結合パレットの不定結合

## 便利な作図ツール

アイコン	内容																
	<p><b>X メニューツール</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>可変原子を作図する</li> </ul> <table border="1" data-bbox="502 436 758 728"> <tr><td>X</td><td>Any halogen</td></tr> <tr><td>M</td><td>Any metal</td></tr> <tr><td>A</td><td>Any atom except H</td></tr> <tr><td>Q</td><td>Any atom except C or H</td></tr> <tr><td>Ak</td><td>Any alkyl chain</td></tr> <tr><td>Cy</td><td>Any cycle</td></tr> <tr><td>Cb</td><td>Any carbocycle</td></tr> <tr><td>Hy</td><td>Any heterocycle</td></tr> </table> <p> <b>X</b> : ハロゲン  <b>M</b> : 金属  <b>A</b> : H 以外の元素  <b>Q</b> : C,H 以外の元素  <b>Ak</b> : 炭素鎖  <b>Cy</b> : 環系  <b>Cb</b> : 炭素環系  <b>Hy</b> : ヘテロ環系         </p>	X	Any halogen	M	Any metal	A	Any atom except H	Q	Any atom except C or H	Ak	Any alkyl chain	Cy	Any cycle	Cb	Any carbocycle	Hy	Any heterocycle
X	Any halogen																
M	Any metal																
A	Any atom except H																
Q	Any atom except C or H																
Ak	Any alkyl chain																
Cy	Any cycle																
Cb	Any carbocycle																
Hy	Any heterocycle																
	<p><b>R グループツール</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>原子, ショートカット, 可変原子から 2-20 種類を組み合わせて定義した R グループを作図する時に使用する</li> </ul>																

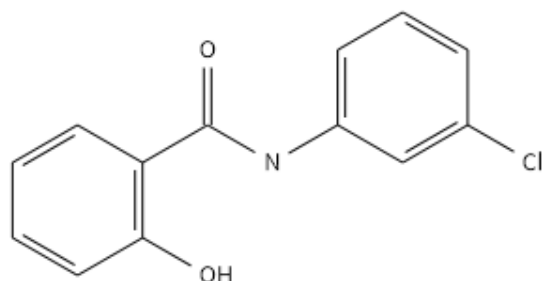
## 便利な作図ツール

アイコン	内容
	<p><b>繰り返しグループツール</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>繰り返し単位を含む構造を作図する</li> </ul>
	<p><b>可変置換位置ツール</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>環または環系における置換基の可変な位置を指定する</li> </ul>
	<p><b>不定結合</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>不定結合を指定する</li> </ul>

- スライド 10-11 のツールのうち「不定結合」以外の作図ツールは、完全一致検索で利用できない。

## デモンストレーション

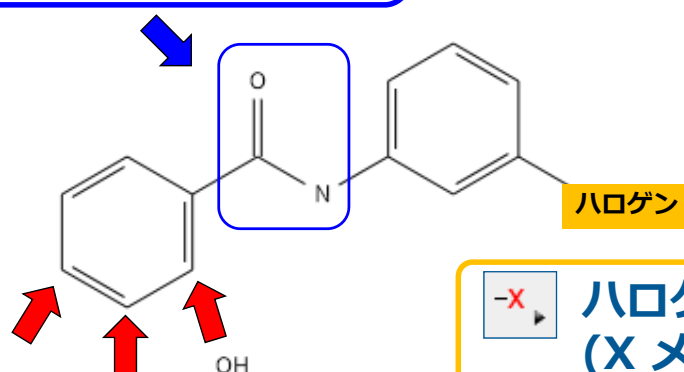
- 下記構造の検索条件を広げて作図する



## 注目ポイント



この部分が繰り返す  
(繰り返しグループツール)



ハロゲンを含む  
(X メニューツール)



どこかに OH 基が置換  
(可変置換位置ツール)

## 本日の内容

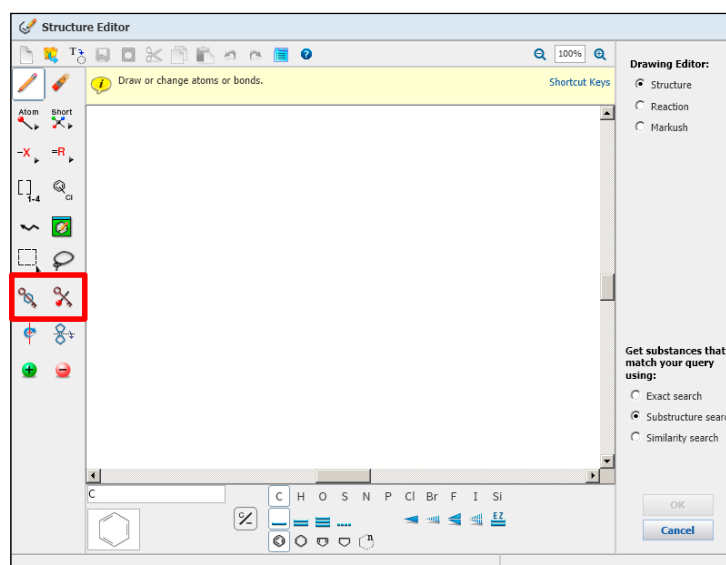
1. 基本の作図ツール
2. 検索条件を広げるためのツール
3. **検索条件を限定するためのツール**
4. 他の情報を使った作図



## 3. 検索条件を限定するためのツール


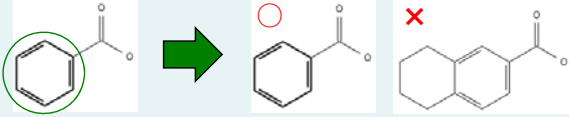
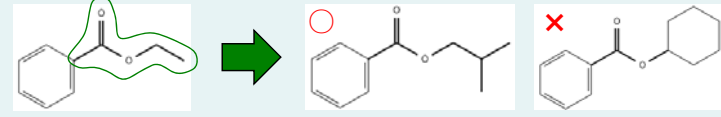



- Lock Rings ツール
- Lock Atom ツール



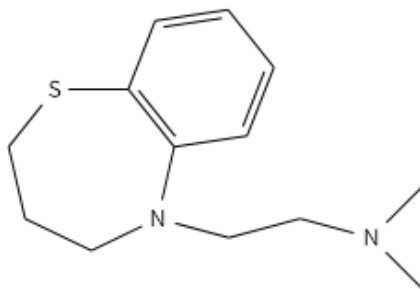


## 便利な作図ツール

アイコン	内容
	<p><b>Lock Rings ツール</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>環の縮合を禁止し，孤立させる</li> </ul>  <ul style="list-style-type: none"> <li>鎖が環の一部となることを禁止する</li> </ul> 
	<p><b>Lock Atom ツール</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>特定のノードに対する置換基の追加を禁止する</li> </ul>

## デモンストレーション

- 下記の構造を検索し，検索条件を Refine で限定する



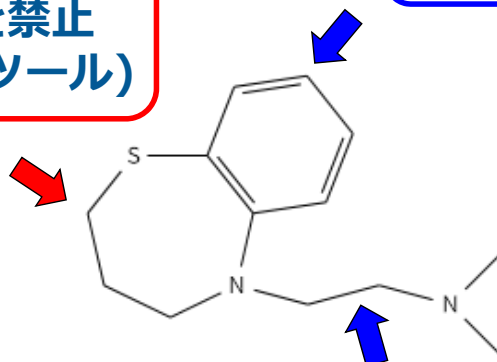
## 注目ポイント



特定ノードへの  
置換基の追加を禁止  
(Lock Atom ツール)



環の縮環を禁止  
(Lock Ring ツール)



鎖が環の一部になる  
ことを禁止  
(Lock Ring ツール)

## 本日の内容

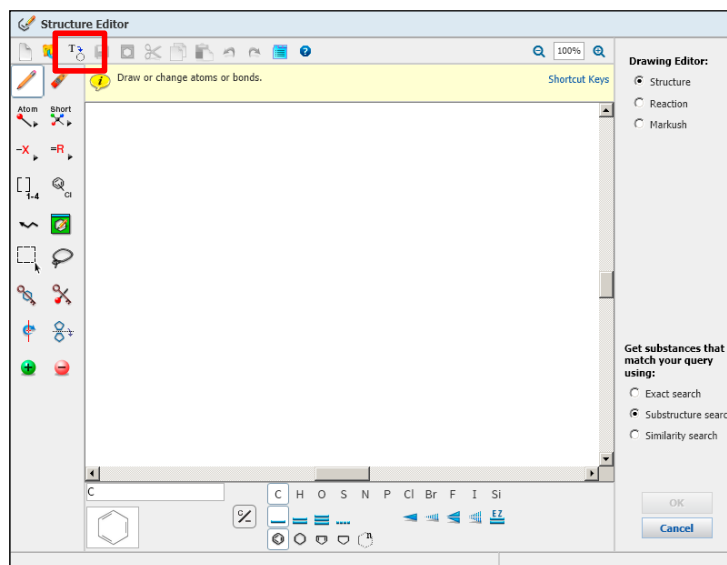
1. 基本の作図ツール
2. 検索条件を広げるためのツール
3. 検索条件を限定するためのツール
4. **他の情報を使った作図**



## 4. 他の情報を使った作図

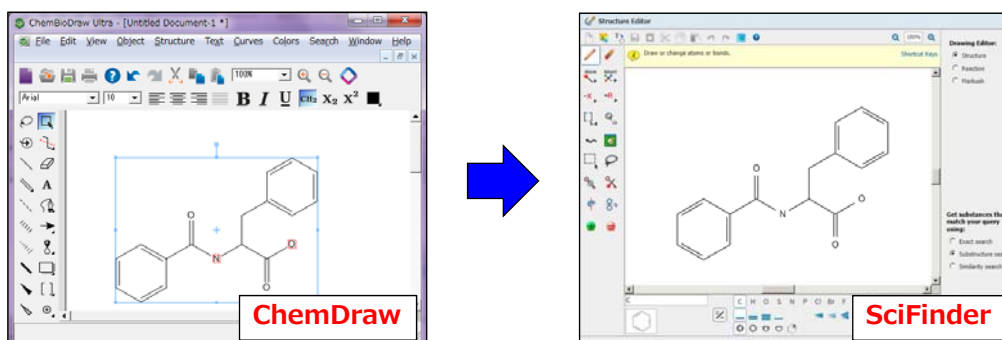


- CAS 登録番号, SMILES, InChI から構造を呼び出すツール



## 他のツールで作図した構造を利用

- ChemDraw や Accelrys Draw で作図した構造を SciFinder で利用する



SMILES あるいは InChI を  
利用する


## • ChemDraw の場合

The screenshot shows the ChemBioDraw Ultra software interface. A chemical structure is selected in the main window. The 'Edit' menu is open, and the 'Copy As' option is highlighted. The 'Copy As' submenu is also open, showing 'SMILES' as the selected option. Other options in the submenu include SLN, InChI, InChI Key, CDXML Text, and MOL Text. Callouts indicate the steps: 1. 構造全体を選択 (Select the entire structure), 2. Edit (Click Edit), 3. Copy As (Click Copy As), and 4. コピー (Click SMILES).

## • Accelrys Draw の場合

The screenshot shows the Accelrys Draw software interface. A chemical structure is selected in the main window. The 'Chemistry' menu is open, and the 'Generate Text from Structure' option is highlighted. The 'Generate Text from Structure' submenu is also open, showing 'SMILES String' as the selected option. Other options in the submenu include IUPAC Name, NEMA, InChI String, InChI Key, and ChimeString. Callouts indicate the steps: 1. 構造全体を選択 (Select the entire structure), 2. Chemistry (Click Chemistry), 3. Generate Text from Structure (Click Generate Text from Structure), and 4. コピー (Click SMILES String).

# SMILES, InChI を利用した作図

1.  をクリック

SciFinder

2. 貼り付け

作図完了!

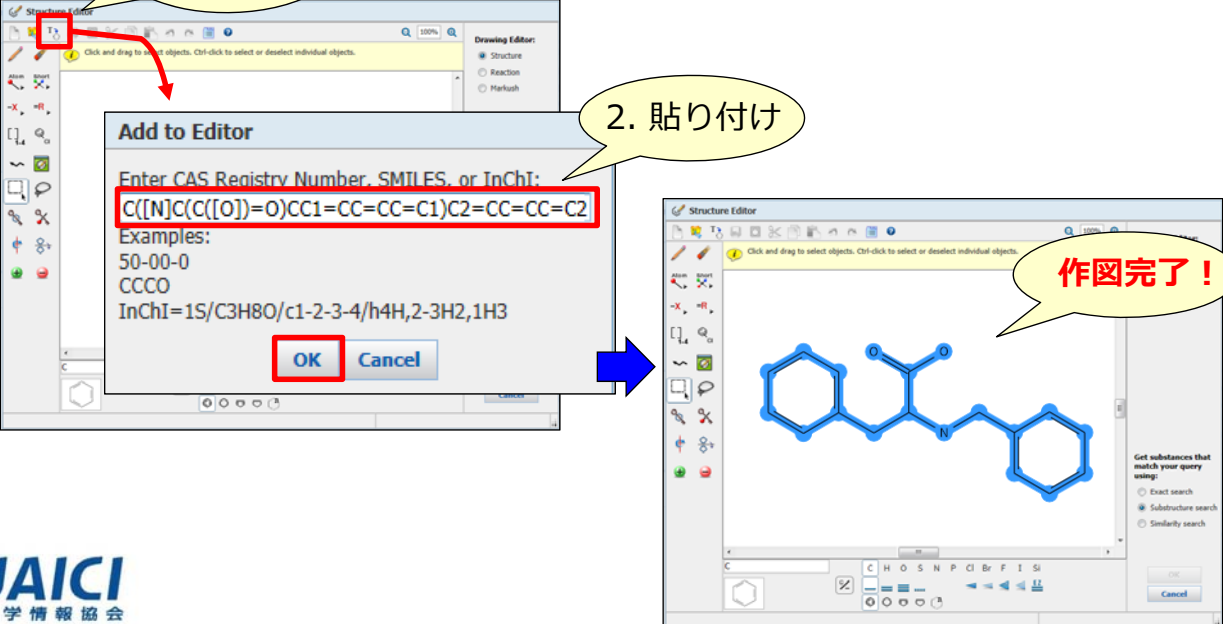
Enter CAS Registry Number, SMILES, or InChI:  
C([N]C(C([O])=O)CC1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2  
 Examples:  
 50-00-0  
 CCCO  
 InChI=1S/C3H8O/c1-2-3-4/h4H,2-3H2,1H3

OK Cancel

Structure Editor

Get substances that match your query using:  
 Exact search  
 Substructure search  
 Similarity search

JAICI  
化学情報協会



## まとめ

- 構造作図ツールを使いこなせば、**構造検索が効率的に**できます！

