

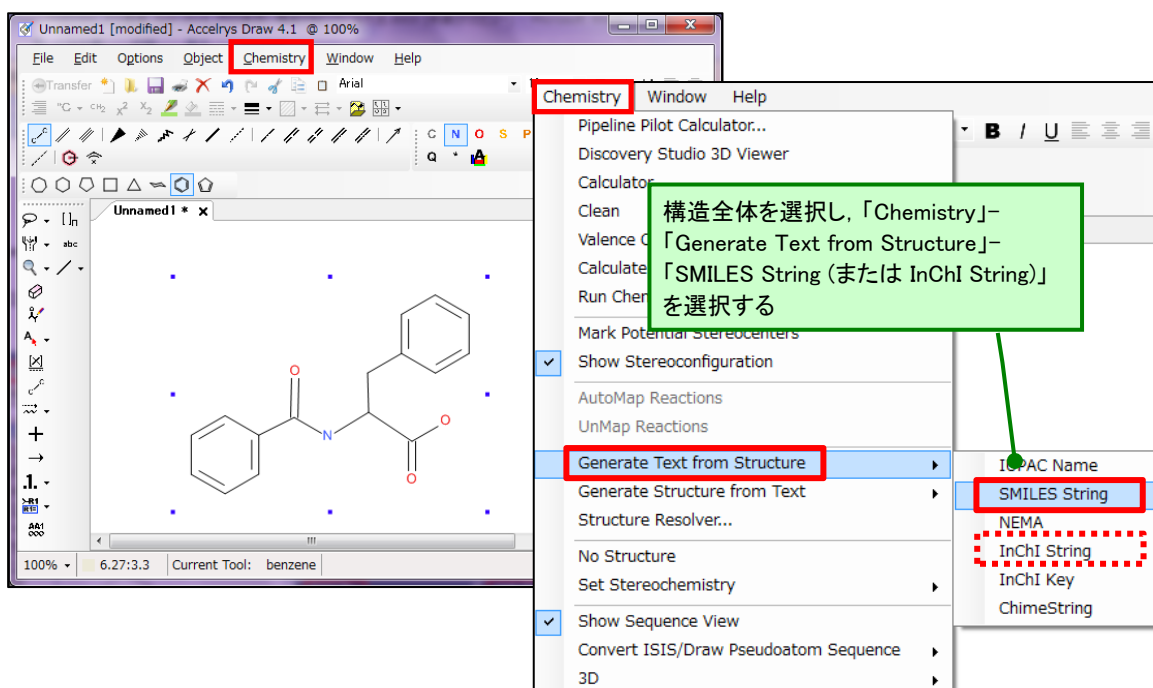
他ツールの構造を使った構造検索

➤ SciFinder 以外のツールで作図した構造を利用するには下記の 2 つの方法があります。

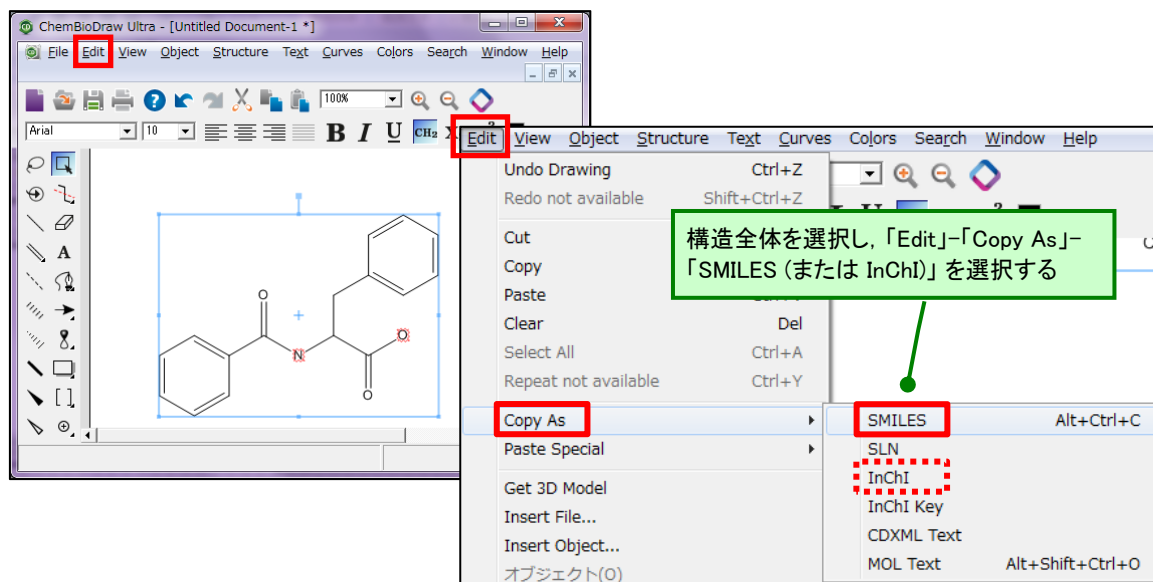
- ① 他ツールで作図した構造を SMILES 形式 または InChI 形式としてコピーし、SciFinder の構造作図画面に貼り付けます。
- ② ChemBioDraw Ultra Version 14 以降で作図した構造を直接 SciFinder で検索します。

① 他ツールで作図した構造を SMILES 形式 または InChI 形式としてコピーし、SciFinder の構造作図画面に貼り付けます。

・ 例 1 : Accelrys Draw の場合



・ 例 2 : ChemBioDraw の場合



他ツールの構造を使った構造検索

SciFinder の構造作図画面を起動

Ctrl + V キーもしくは右クリックから「貼り付け」

Add to Editor

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

CAS登録番号の入力も可能

構造が表示されます

② ChemBioDraw Ultra **Version 14 以降**で作図した構造を直接 SciFinder で検索します。

ChemBioDraw Ultra

ChemBioDraw で作図し、構造全体を選択

検索タイプを選択

Search SciFinder

Substance Search:
 Substructure
 Exact Structure

Reaction Search (Substructure):
 Selected Structure(s) are Products
 Selected Structure(s) are Reactants

構造検索

反応検索

SciFinder

SciFinder で検索が行われ、結果が表示されます

Substances (783)

1. 149874-72-6

2. 161642-75-7

3. 161642-76-8

4. 120011-94-1