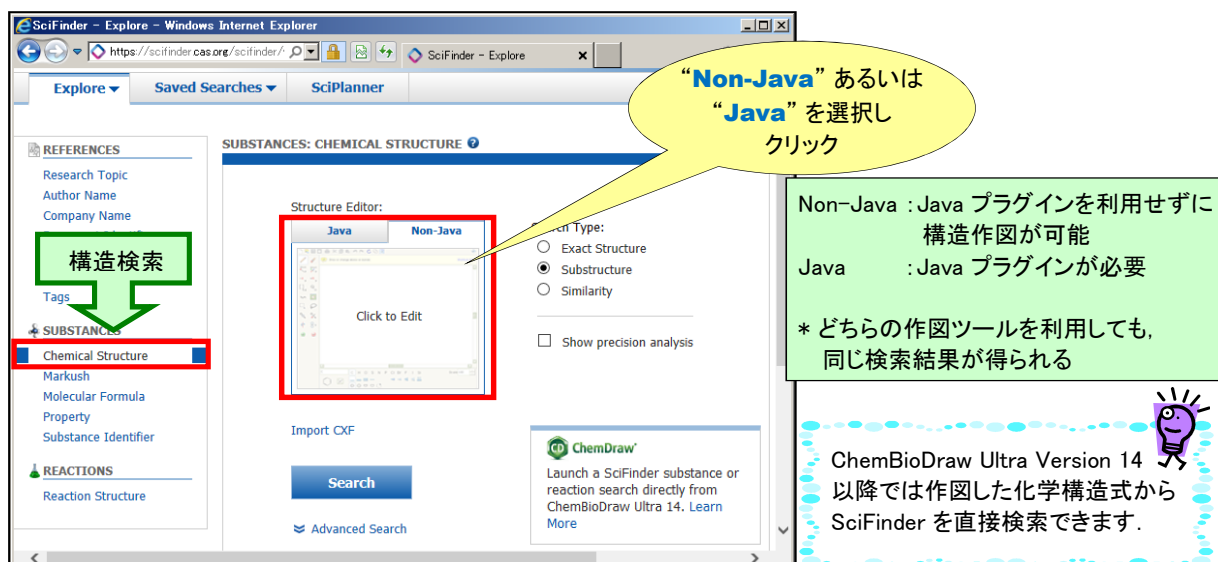


化学構造検索

- 化学物質（塩や混合物，共重合体などを含む）を構造から直接検索できます。

① “Non-Java” タブあるいは “Java” タブを選択し，構造作図画面を起動します。



“Non-Java” あるいは “Java” を選択し クリック

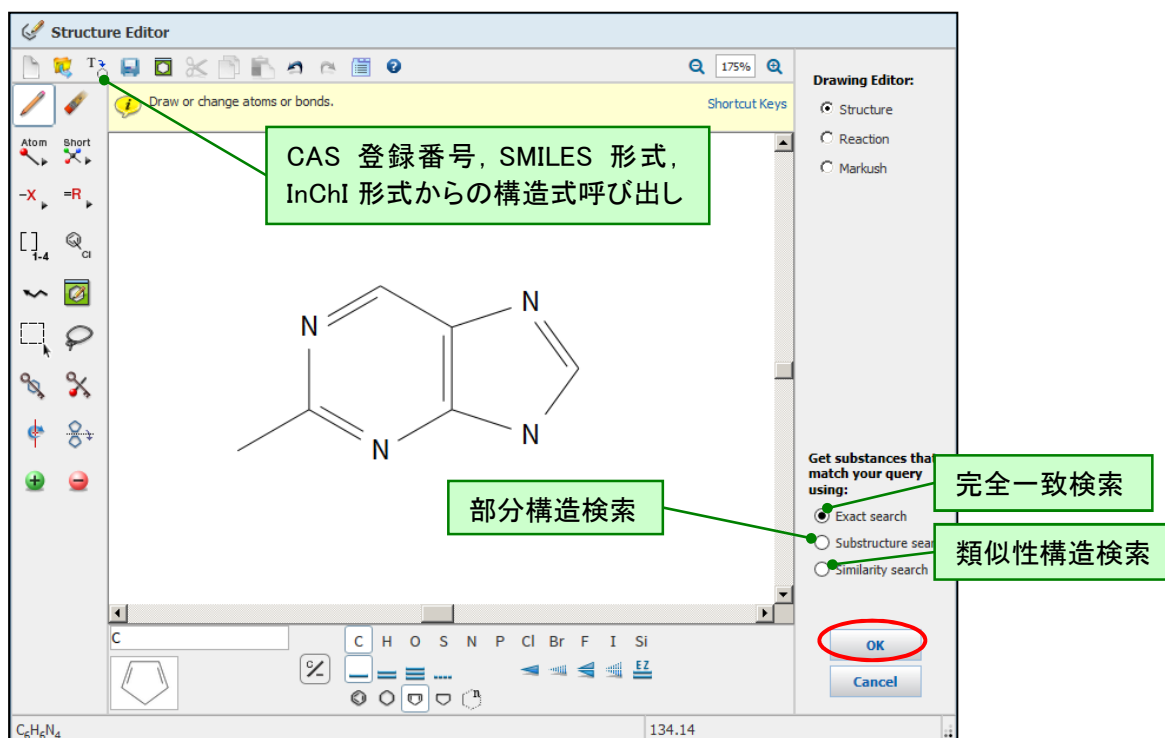
構造検索

Non-Java : Java プラグインを利用せずに 構造作図が可能
 Java : Java プラグインが必要

* どちらの作図ツールを利用しても, 同じ検索結果が得られる

ChemBioDraw Ultra Version 14 以降では作図した化学構造式から SciFinder を直接検索できます。

② 構造を作図し，検索条件を選択します。以下は完全一致検索を選択した例です。



CAS 登録番号, SMILES 形式, InChI 形式からの構造呼び出し

部分構造検索

完全一致検索

類似性構造検索

- CAS 登録番号, SMILES 形式, InChI 形式による化学構造のテキスト表記から構造作図も可能

部分構造検索 : 作図した構造を骨格に持つ物質を網羅的に検索します。
 類似性構造検索 : 構造の類似性が一定以上の物質を検索します。

化学構造検索

- ③ “Search” ボタンをクリックし、検索を実行します。Advanced Search をクリックすると、ポリマーや配位化合物、単成分物質に限定することも可能です。

SciFinder - Explore - Windows Internet Explorer
https://scifinder.cas.org/scifinder/

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

Search Type:
 Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision analysis

ChemDraw
Launch a SciFinder substance or reaction search directly from ChemBioDraw Ultra 14. Learn More

Import CXF

Search

Advanced Search Always Show

Characteristics
 Single component
 Commercially available
 Included in references

Classes
 Alloys
 Coordination compounds
 Incompletely defined
 Mixtures
 Polymers
 Organics, and others not listed

Studies
 Analytical
 Biological
 Preparation
 Reactant or reagent

Advanced Search
をクリックすると
限定項目が表示される

- ④ 検索結果が表示されます。このあと文献検索を行うこともできます。

Explore Saved Searches SciPlanner

Chemical Structure exact > substances (8)

完全一致でヒットした化学物質

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

1 回答件数

Sort by: Relevance 1

2 Display Options

Analyze by: Substance Role

Preparation 5

Properties 3

Reactant or Reagent 2

Biological Study 1

Show More

0 of 8 Substances Selected

1. 934-23-6
~19
~6

2. 936-22-1
~3

3. 13479-81-7
~3

4. 13479-82-8
~2

Cc1ncnc2n(cnc12)N
 $C_9H_8N_4$
9H-Purine, 2-methyl-
Key Physical Properties
Spectra

Cc1ncnc2n(cnc12)N
 $C_9H_7D_1N_4$
Purine-*6-d*, 2-methyl- (7Cl,8Cl)
Key Physical Properties
Experimental Properties

3. 13479-81-7
Cc1ncnc2n(cnc12)N
 $C_9H_7D_1N_4$

4. 13479-82-8
Cc1ncnc2n(cnc12)N
 $C_9H_7D_1N_4$

検索結果は、作図した構造に対する類似度順に表示される

1 回答のソートができる。
(20,000 件以下)
昇順・降順の指定も可能。

Relevance
Relevance
CAS Registry Number
Number of References
Number of Commercial Sources
Molecular Weight
Molecular Formula

2 1 ページあたりの回答の
表示件数 (最大 50 件)
や表示カラム数 (最大
4 列) を変更できる。

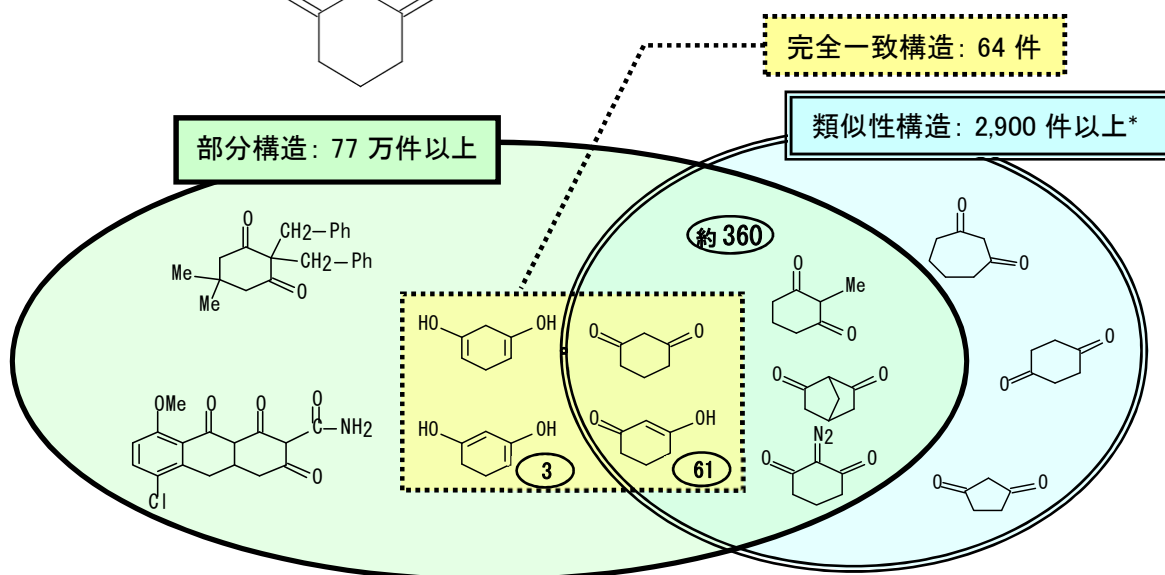
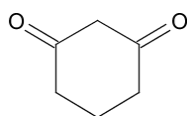
構造検索タイプについて

➤ 各検索タイプで得られる回答の違い

| 検索タイプ | 得られる回答 | 得られない回答 |
|---------------------------------|---|---|
| Exact Search (完全一致構造検索) | <ul style="list-style-type: none"> ・作図した構造どおりの物質, およびそれを含む多成分物質 (塩, ポリマー, 混合物など) ・互変異性体 | <ul style="list-style-type: none"> ・作図した構造の空いている場所に置換基がついている物質 |
| Substructure Search (部分構造検索) | <ul style="list-style-type: none"> ・作図した構造どおりの物質, およびそれを含む多成分物質 (塩, ポリマー, 混合物など) ・互変異性体 ・作図した構造の空いている場所に置換基の付いた物質 | <ul style="list-style-type: none"> ・作図した構造よりも一致する部分の少ない構造 (例: エチル基を作図した場合にメチル基はヒットしない) |
| Similarity Search (類似性構造検索) | <ul style="list-style-type: none"> ・作図した構造どおりの物質, およびそれを含む多成分物質 (塩, ポリマー, 混合物など) ・作図した構造と構成元素, 置換基の種類, およびその位置が異なっているが類似の構造を有する物質 ・作図した構造よりも一致する部分が少ないが, 類似の構造を有する物質 (エチル基を作図した場合メチル基もヒットする) ・作図した環構造と環の大きさが異なるもの (6-5 員環を作図して, 6-6 員環が得られることもある) | <ul style="list-style-type: none"> ・作図した部分よりも付いている置換基の部分の大きい物質 (類似度が低くなるため) |

➤ 検索タイプ間の関係

検索式の例:

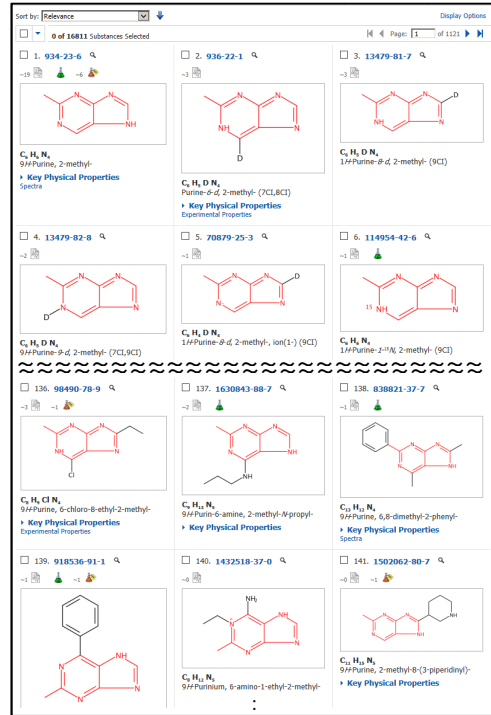


* 類似性スコア 65 以上

構造検索タイプについて

【部分構造検索を実行した場合】

- Tanimoto アルゴリズムに基づき、作図した構造に対する類似度順に表示します (一部例外もあります)。
- 「ハロゲン」や「アルキル基」, 「ヘテロ環」などの可変置換基を構造作図に利用できます。
- 検索結果は別の部分構造, 文献の有無, 物性値, 物性情報の有無などで限定することができます。
- SciFinder が収載している物質数は世界最大です。物質を取り扱う研究では必須となる強力な検索機能です。



【類似性構造検索を実行した場合】

- Tanimoto アルゴリズムに基づいてスコアを計算し、最初にスコアごとの件数を表示します。検索結果の表示は類似性スコアの高い順です。
- 環の大きさや, 元素の種類が異なっている場合もヒットしますので, 当初想定していなかったような構造が見つかる場合があります。

| Select All Deselect All | | Substances |
|---------------------------------------|----------------------|------------|
| 6 of 9 Similarity Candidates Selected | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | ≥ 99 (most similar) | 8 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 95-98 | 10 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 90-94 | 9 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 85-89 | 127 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 80-84 | 77 |
| <input type="checkbox"/> | 75-79 | 964 |
| <input type="checkbox"/> | 70-74 | 486 |
| <input type="checkbox"/> | 65-69 | 1043 |
| <input type="checkbox"/> | 0-64 (least similar) | 2736 |

Get Substances

ヒストグラム

類似性スコア

異なる環構造も

* 類似性構造検索では可変原子, R グループなど, あいまいな構造を質問式に使うことはできません。