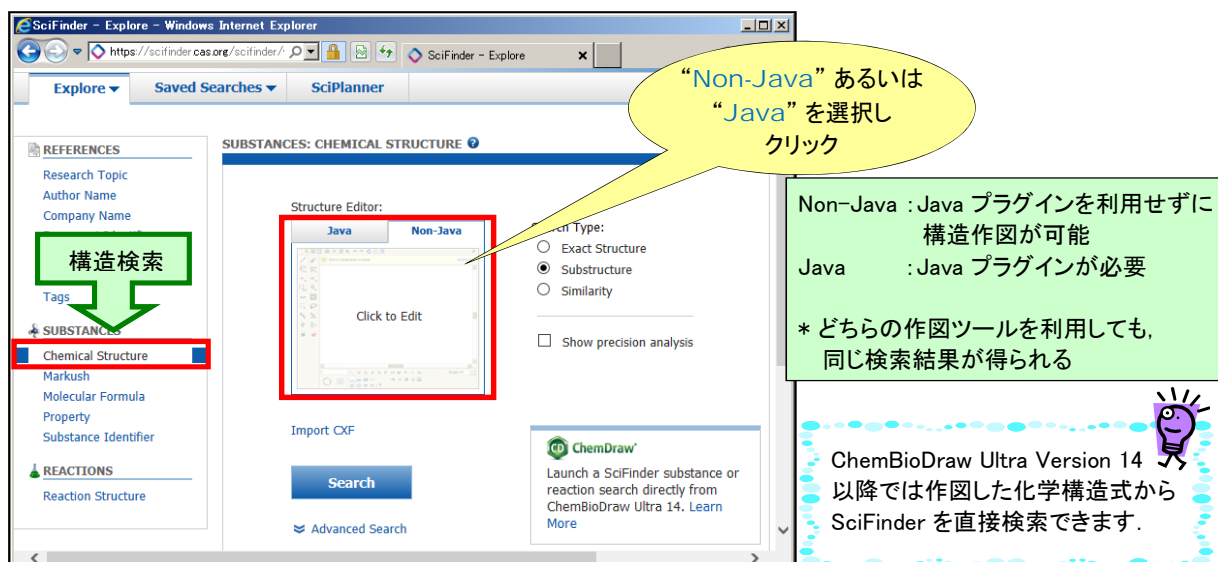


化学構造検索

- 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

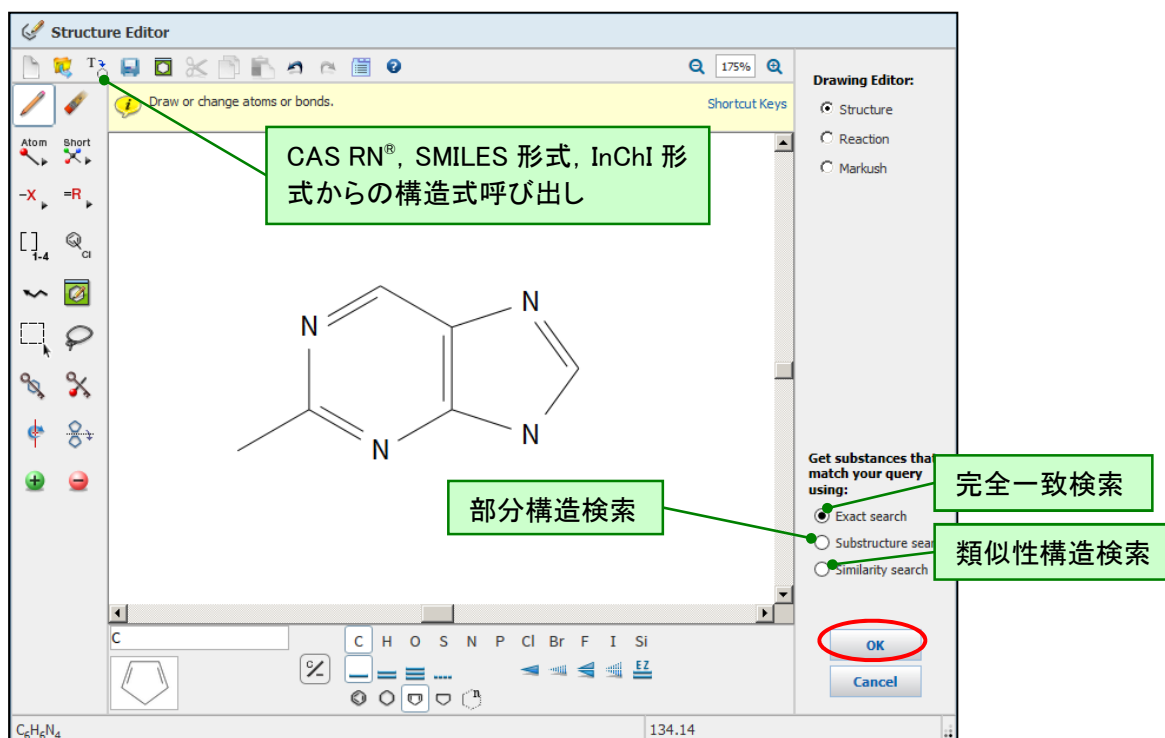
構造検索

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 RN®, SMILES 形式, InChI 形式からの構造式呼び出し

部分構造検索

完全一致検索

類似性構造検索

・CASRN®, 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。

The screenshot shows the SciFinder interface with a chemical structure editor and search options. The 'Search' button is circled in red. Below it, the 'Advanced Search' link is visible. On the right, there are checkboxes for search types: Exact Structure (selected), Substructure, and Similarity. There are also checkboxes for 'Show precision analysis' and 'Always Show'.

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。

The screenshot shows the SciFinder search results page. The search results are sorted by Relevance. The 'Search' button is highlighted with a red box. The 'Advanced Search' link is also visible. The search results are displayed in a grid format, showing chemical structures and their corresponding CAS numbers and names.

完全一致でヒットした化学物質

回答件数

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。

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

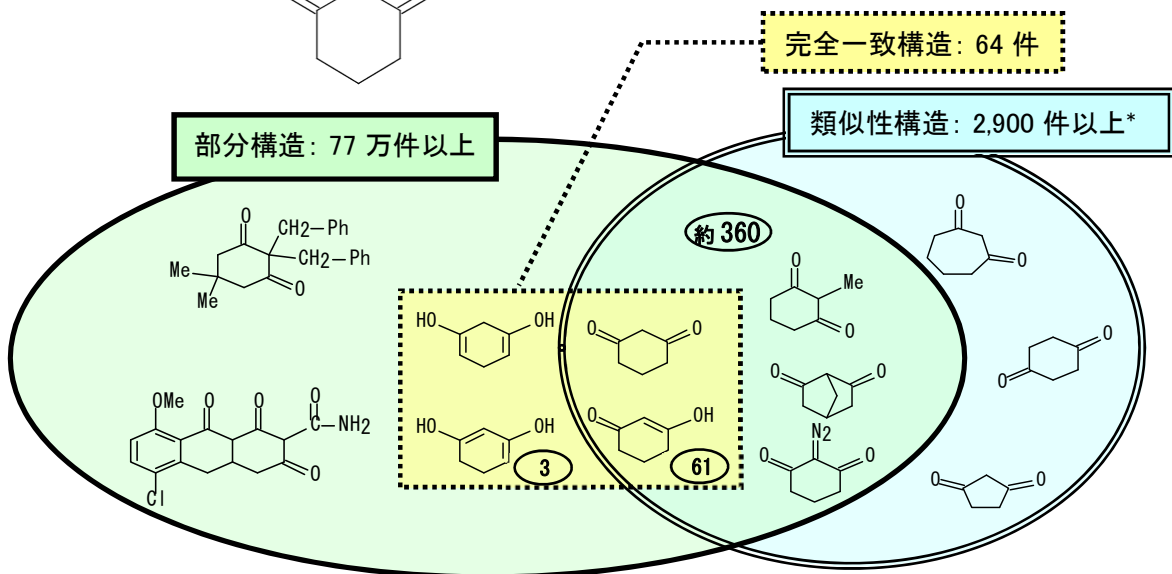
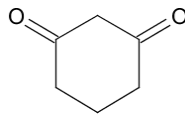
構造検索タイプについて

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が大きい物質 (類似度が低くなるため)

検索タイプ間の関係

検索式の例:

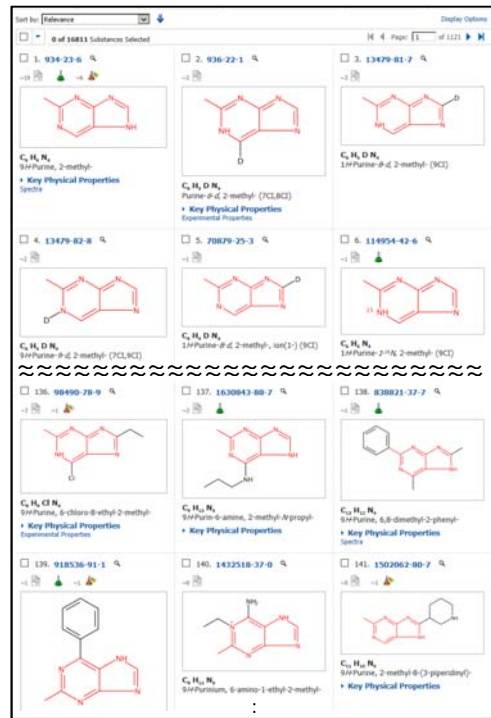


* 類似性スコア 65 以上

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】

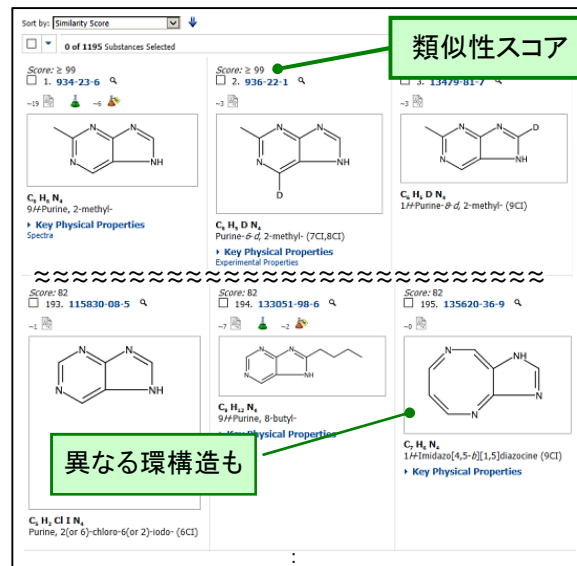
- Tanimoto アルゴリズムに基づいてスコアを計算し、最初にスコアごとの件数を表示します。検索結果の表示は類似性スコアの高い順です。
- 環の大きさや, 元素の種類が異なっている場合もヒットしますので, 当初想定していなかったような構造が見つかる場合があります。

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。