



SCIFINDER[®]
A CAS SOLUTION

構造検索 3 種の使い分け

JAICI
化学情報協会

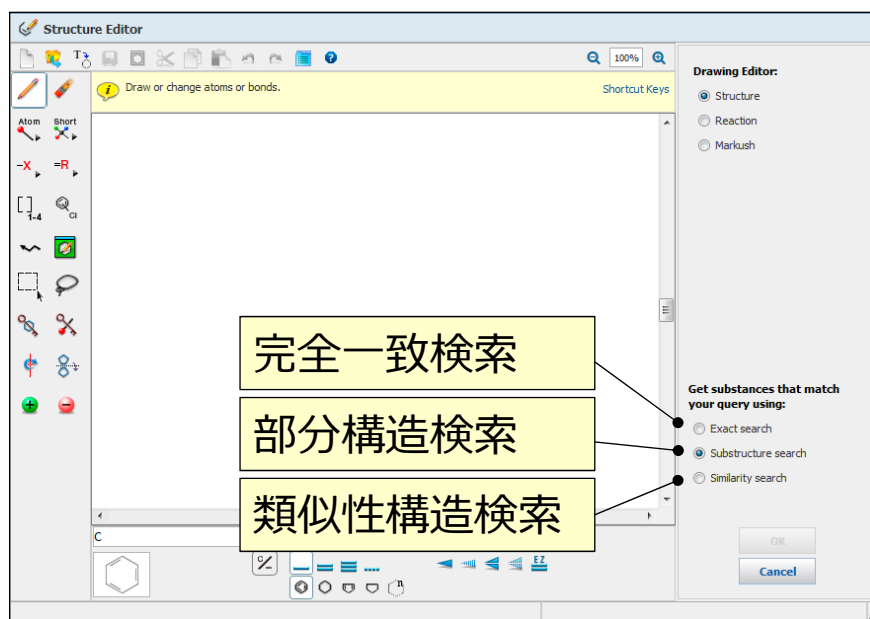
2

本日の内容

- 3 種の構造検索タイプの違い
- 各検索タイプごとの特長と利用シーン
 - 完全一致検索
 - 部分構造検索
 - 類似性構造検索

SciFinder の構造検索

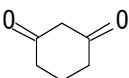
構造作図画面上で構造検索のタイプを指定します

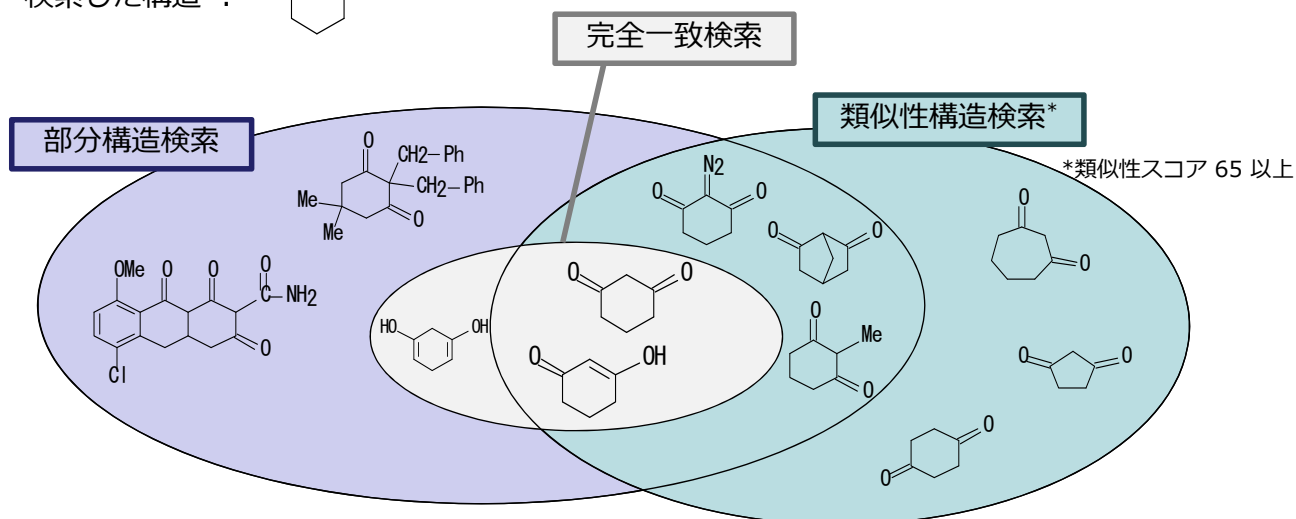


3 種の構造検索タイプの違い

検索タイプ	得られる回答	得られない回答
完全一致検索	・ 作図した構造通りの物質, およびそれを含む多成分物質	・ 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
部分構造検索	・ 作図した構造を骨格に含む 物質 (置換基がついていても よい)	・ 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)
類似性構造検索	・ 作図した構造と構成元素, 置換基の種類や位置, 環の 大きさ等が異なっているが類似 の構造を有する物質	・ 類似構造を含んでるが 類似部分以外の構造が大き い物質 (類似度が低くなるため)

各検索タイプで得られる回答

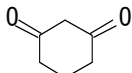
検索した構造：


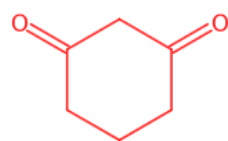


① 完全一致検索

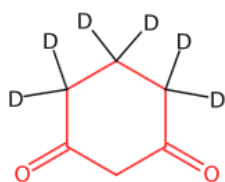
- 作図した構造に完全に一致する物質
- 下記のような物質も回答に含まれます
 - イオン, ラジカル, 同位体元素置換体
 - 互変異性体
 - 多成分物質
 (塩, 水和物, 混合物, ポリマーなど)

ヒットする回答の例

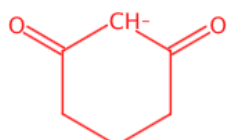
検索した構造：



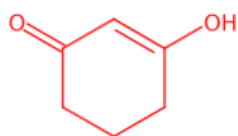
完全に一致



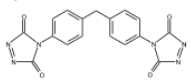
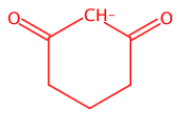
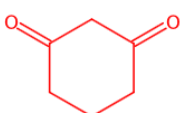
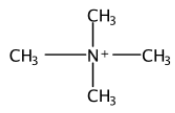
同位体で置換



イオン



互変異性体

<p>32351-20-5 C₁₇H₁₀N₆O₄</p> 	<p>112208-90-9 C₆H₇O₂</p> 
<p>504-02-9 C₆H₈O₂</p> 	<p>51-92-3 C₄H₁₂N</p> 

ポリマー

塩

多成分物質

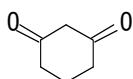
完全一致検索の利用シーン

- 構造が分かっているが CAS 登録番号や名称が分からない物質を検索したい
- ある医薬品について、塩や溶媒和物、混合物等も含めて検索したい

② 部分構造検索

- 作図した構造を骨格に含む物質がすべてヒット
- 追加の置換基がついていてもよい
- 完全一致検索の回答はすべて部分構造検索の回答に含まれます

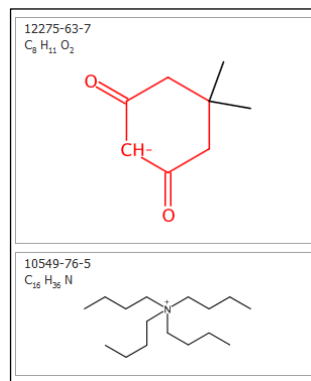
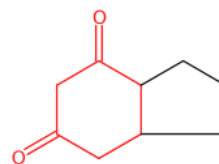
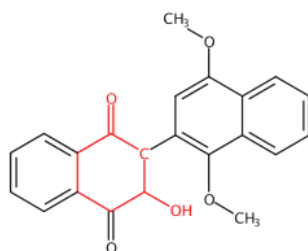
ヒットする回答の例

検索した構造：

完全一致検索で
得られる回答
(スライド7)

+

作図した構造を骨格に含む
物質がすべてヒット



部分構造検索の利用シーン

- ある骨格を部分構造として有する物質をすべて検索したい

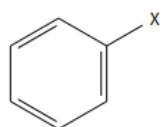
誘導体を含めて幅広く物質を探せるので、一番よく利用されている検索タイプ！



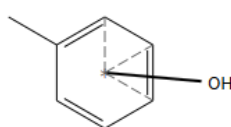
- 様々な作図ツールを利用して検索したい

完全一致，類似性構造検索では利用不可

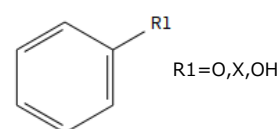
<例>



可変原子
(例：X (ハロゲン))



可変置換位置



R1=O,X,OH

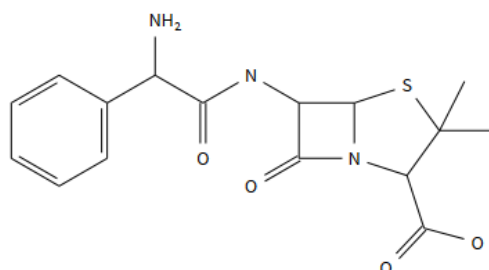
R グループ

JAICI
化学情報協会

*作図ツールについては下記の e-ラーニングを参照
「効率的に構造検索！作図ツールを使いこなそう」
<http://www.jaici.or.jp/SCIFINDER/elearning/index.html>

検索例

下記の構造について，完全一致検索および部分構造検索を行う



JAICI
化学情報協会

■ 互変異性体を除く

Show precision analysis に
チェックを入れて検索実行

Select All Deselect All	
1 of 2 Precision Candidates Selected	Substances
<input checked="" type="checkbox"/> Conventional Exact	43
<input type="checkbox"/> Closely Associated Tautomers and Zwitterions	21
<input type="checkbox"/> Loosely Associated Tautomers and Zwitterions	0
<input type="checkbox"/> Other	0

[Get Substances](#)

作図通りの構造のみの回答

狭義の互変異性体等を含めた回答

広義の互変異性体等を含めた回答

その他の回答

互変異性体を含めるか
どうかを選択できる

■ 多成分物質を除く

■ 同位体を含む物質を除く

③ 類似性構造検索

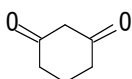
- 作図した構造と一致していなくても類似していればヒット
- 類似性はアルゴリズムに基づき数値化(類似性スコア)

8 of 9 Similarity Candidates Selected	Substances
<input checked="" type="checkbox"/> ≥ 99 (most similar)	43
<input checked="" type="checkbox"/> 95-98	5
<input checked="" type="checkbox"/> 90-94	2
<input checked="" type="checkbox"/> 85-89	20
<input checked="" type="checkbox"/> 80-84	91
<input checked="" type="checkbox"/> 75-79	261
<input checked="" type="checkbox"/> 70-74	1140
<input checked="" type="checkbox"/> 65-69	1555
<input type="checkbox"/> 0-64 (least similar)	2197

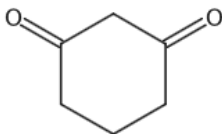
Get Substances

← 回答に含めるスコア値の範囲を指定できます

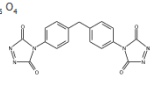
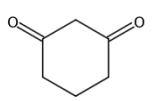
ヒットする回答の例

検索した構造：

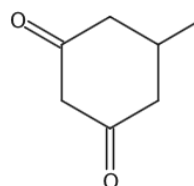
Score: ≥ 99



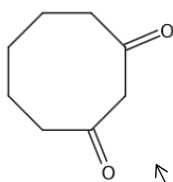
Score: ≥ 99

32351-20-5 C ₁₇ H ₁₀ N ₄ O ₄	
504-02-9 C ₆ H ₈ O ₂	

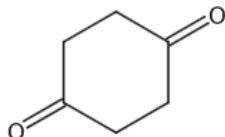
Score: 86



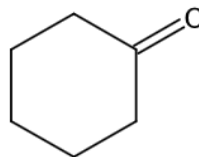
Score: 88



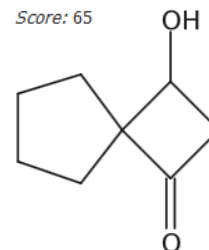
Score: 83



Score: 74



Score: 65



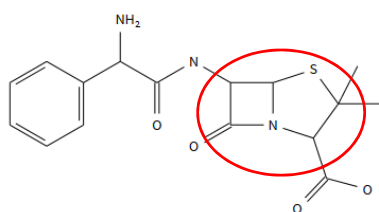
環の大きさや置換基の位置が異なる構造もヒット

作図した置換基をすべて含まなくてもヒット

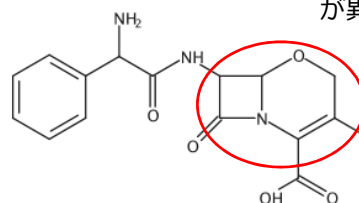
類似性構造検索の利用シーン

- 部分構造検索では回答が得られない/
少ない場合
- 予想できる範囲外の構造のバリエーションを探索したい

例：検索した構造



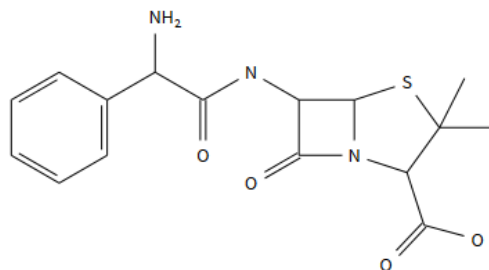
環の大きさ，構成元素等
が異なる構造もヒット



JAICI
化学情報協会

検索例

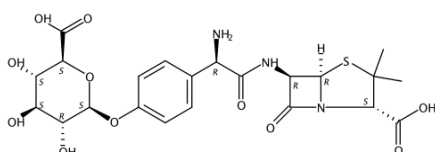
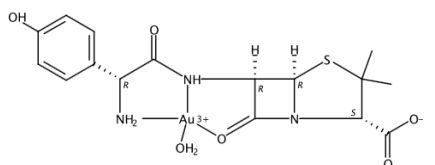
下記の構造について，類似性構造検索を行う



JAICI
化学情報協会

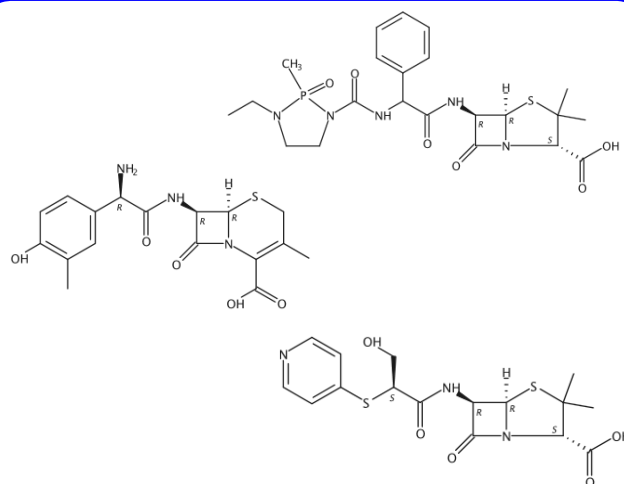
部分構造検索と類似性構造検索

部分構造検索	1,701 件
類似性構造検索 (類似度75以上)	10,287 件



部分構造検索のみでヒットした回答
(613 件)

JAICI
化学情報協会



類似性構造検索のみでヒットした回答
(9,199 件)

• Na

まとめ

- 完全一致検索は作図した構造通りの物質がヒットします
 - 互変異性体や多成分物質もヒット
- 部分構造検索はある骨格を持つ物質をまとめて探せます
- 類似性構造検索は部分構造検索ではヒットしない「似た形」の物質も探せます

JAICI
化学情報協会



次回のインターネットセミナー

2016年11月16日(水)
11:00 ~ 11:20

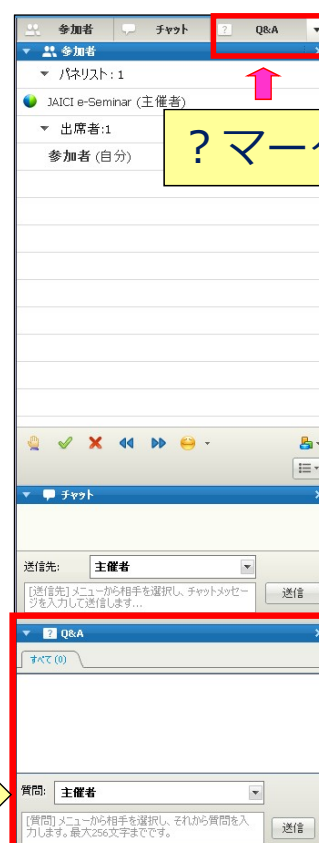
試薬カタログ情報の活用

ご参加をお待ちしております

JAICI
化学情報協会

ご質問はございませんか？

- 質問事項は Q&A ボックスに入力して、「主催者」宛てに送信してください。
 - Q&A ボックスは ? マークのアイコンをクリックすると表示されます。
- ご質問に対する回答は、Q&A 欄への返信または音声にてお送りします。
 - 時間の都合上、すべてのご質問にお答えできない場合がございます。予めご了承ください。
- 複雑なご質問の場合は、ヘルプデスク (0120-003-462, support@jaici.or.jp) へ直接ご連絡ください。



JAICI
化学情報協会

主催者