

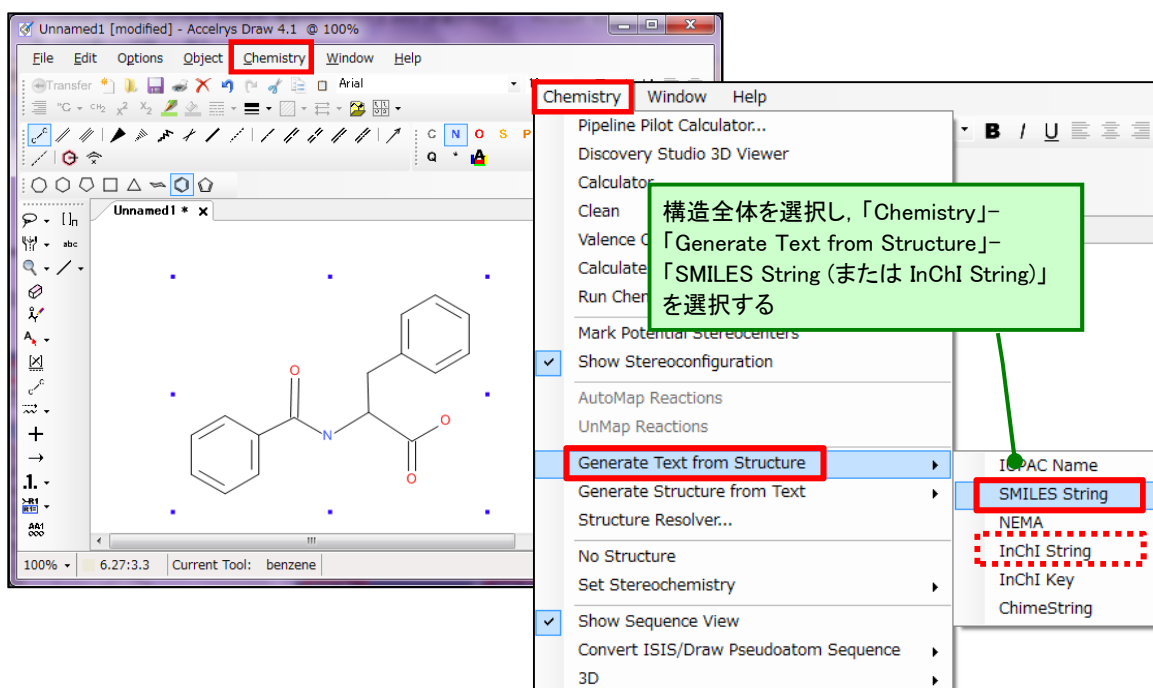
他ツールの構造を使った構造検索

➤ 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。

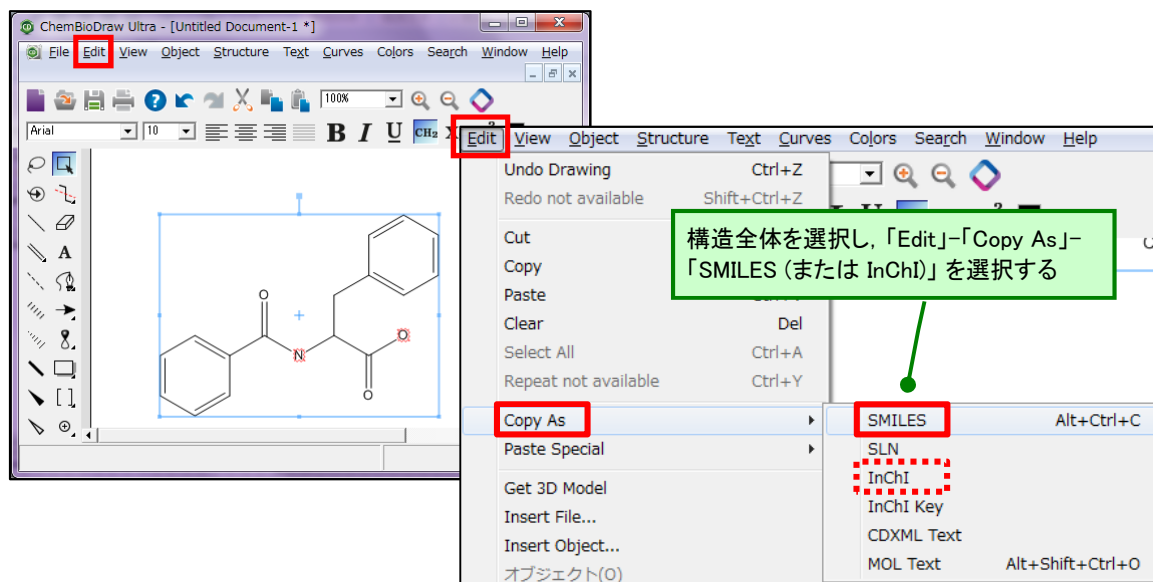
- ① 他ツールで作図した構造を SMILES 形式 または InChI 形式としてコピーし、SciFinder の構造作図画面に貼り付けます。
- ② ChemBioDraw Ultra Version 14 以降で作図した構造を直接 SciFinder で検索します。

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」

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
CCCCO
InChI=1S/C3H8O/c1

CAS RN® 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

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