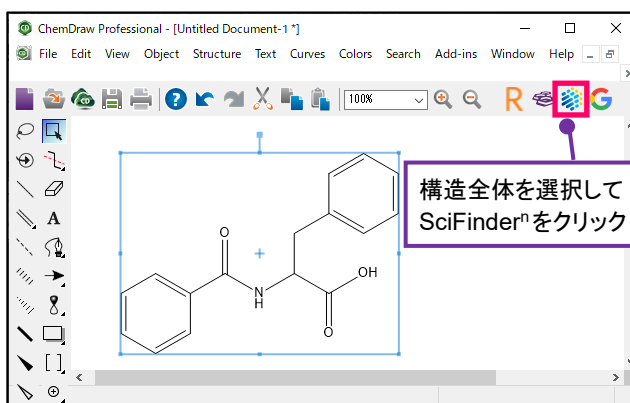


ChemDraw からの直接検索

■ ChemDraw Professional の作図画面から直接 CAS SciFinder[®] を検索

ChemDraw Professional v.18.2 以降* では CAS SciFinder[®] の構造作図画面を経由することなく、直接 CAS SciFinder[®] を検索することができる。

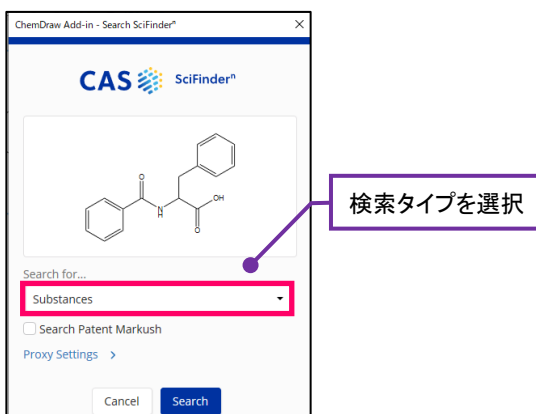
ChemDraw Professional の構造作図画面で CAS SciFinder[®] のボタン  をクリックするか、Add-ins メニューから Search SciFinder[®] を選択。



検索タイプ (Substances, Reactions, References, Suppliers) を選択するダイアログが表示される。

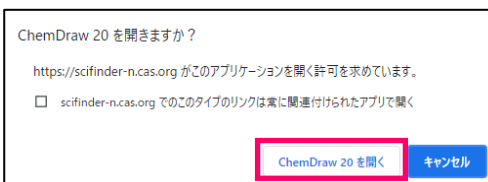
プルダウンから検索したい情報を選択し、Search をクリック。

* CAS SciFinder[®] にログインしていない場合はユーザーネームとパスワードの入力を求められるので、入力しログインする。

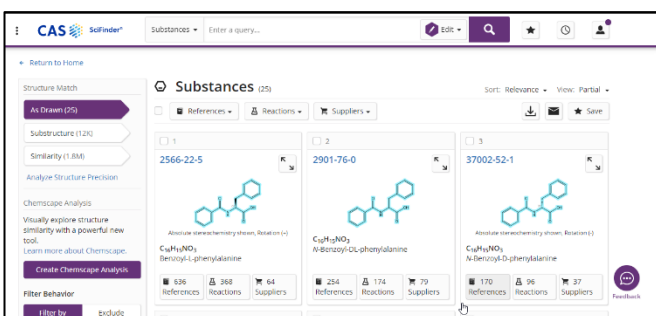


ChemDraw リンクのダイアログが表示されたら、「ChemDraw 20* を開く」をクリック。

* 利用中の version の数字が表示される。



CAS SciFinder[®] で検索が行われ、結果が表示される。



* ChemDraw についての詳細は PerkinElmer の HP にてご確認ください。

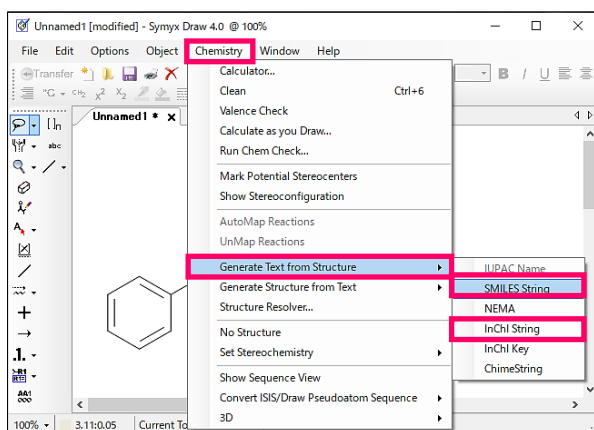
他ツールの構造を使った検索

■ SMILES または InChI 形式の情報を利用

他ツールで作図した構造を SMILES 形式 または InChI 形式でコピーし、CAS SciFinderⁿ の構造作図画面に貼り付けると構造を呼び出すことができる。

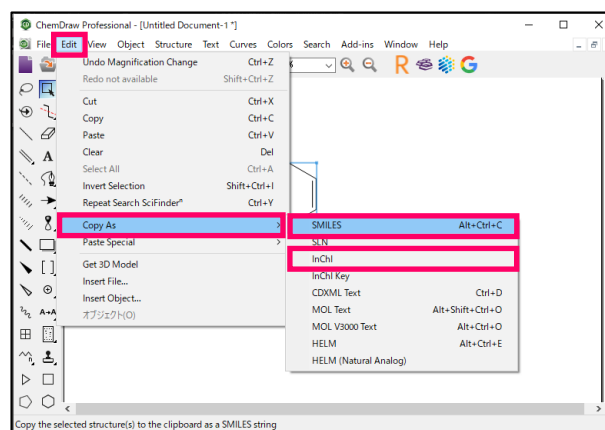
Accelrys Draw

Chemistry メニューの Generate Text from Structure から SMILES String (または InChI String) を選択





ChemDraw

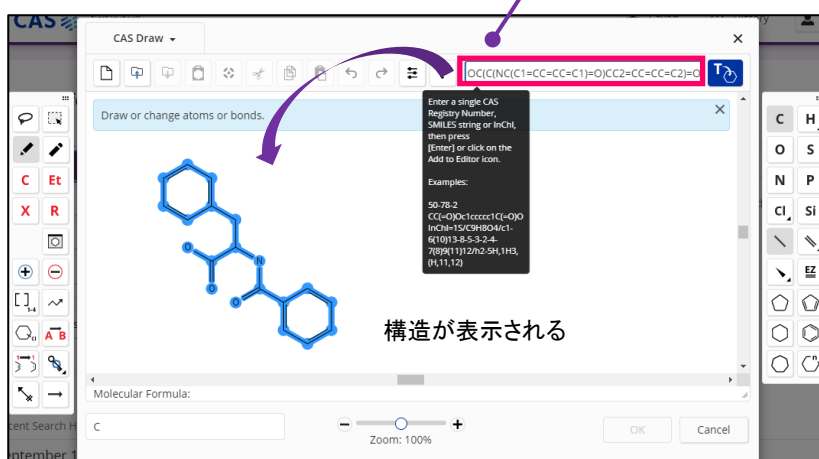
構造全体を選択し、Edit メニューの Copy As から SMILES (または InChI) を選択



CAS SciFinderⁿ

CAS SciFinderⁿ の構造作図画面を起動後、画面右上の  ボックスにコピーした SMILES または InChI のデータを貼り付けて、  をクリック。

* CAS 登録番号 (CAS RN[®]) を入力して、構造を呼び出すこともできる。



JAICI
化学情報協会

情報事業部
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090
URL: www.jaici.or.jp
E-mail: support@jaici.or.jp

202109