

CAS SciFinderⁿ 化学構造検索の検索タイプ

- 化学構造検索を行うと、下記の 3 つの検索タイプでの構造検索が同時に実行されます。

The screenshot shows the CAS SciFinder interface. On the left, three search types are listed in blue boxes: '完全一致検索' (As Drawn), '部分構造検索' (Substructure), and '類似性構造検索' (Similarity). On the right, the search results are displayed under the heading 'Substances (167)'. Three result cards are visible, each with a chemical structure and a 'View Detail' button. The first card is for '50-02-2', the second for '23495-06-9', and the third for '2305607-27-4'.

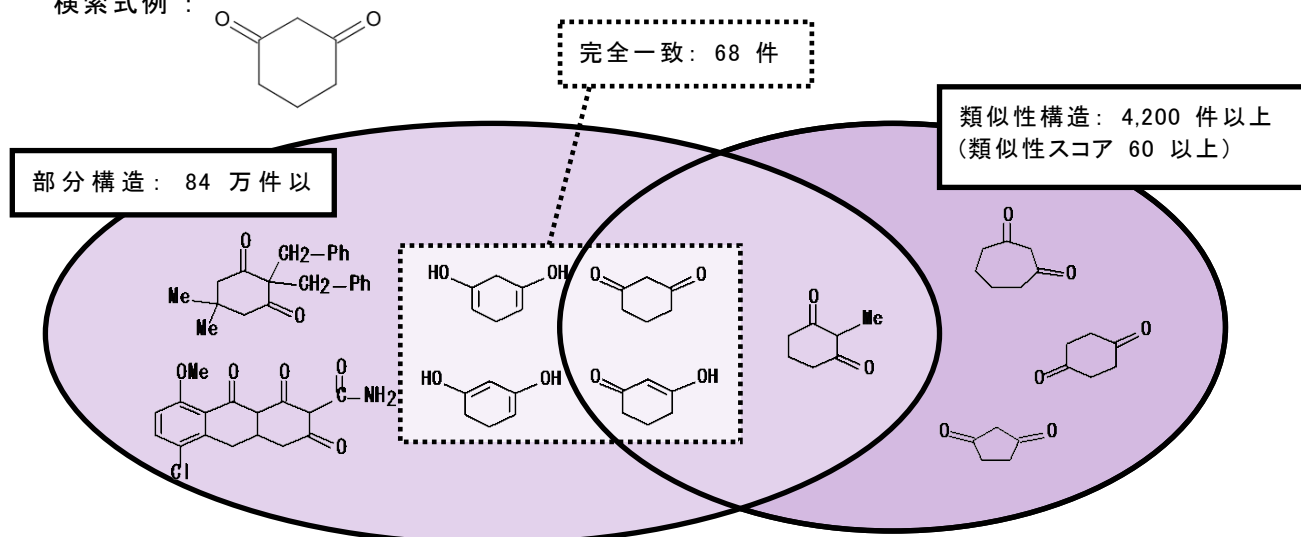
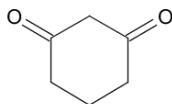
- 検索タイプによる回答の違い

検索タイプ	特徴
As Drawn (完全一致検索)	<ul style="list-style-type: none"> ・ 作成した構造どおりの物質、およびそれを含む多成分物質を検索する ・ 互変異性体も含む ・ 可変原子や R グループなどの可変構造質問式を利用できる
Substructure (部分構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> ・ 完全一致検索の回答に加えて、作成した構造にあらゆる置換基を許容した物質を検索する ・ 可変原子や R グループなどの可変構造質問式を利用できる
Similarity* (類似性構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> ・ 作成した構造どおりの物質、および作成した構造と類似する物質を検索する <ul style="list-style-type: none"> - 作成した元素の種類や位置が異なる物質も得られる - 作成した構造を完全に含まない物質も得られる (例：エチル基を作成した場合にメチル基が得られることもある) - 作成した環構造と異なる物質も得られる (例：6-5 員環を作成して、6-6 員環が得られることもある)

* Tanimoto アルゴリズムに基づき類似性スコアを計算します。

- 検索タイプ間の関係

検索式例：



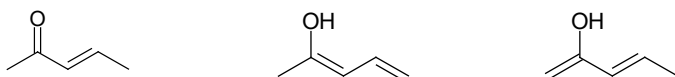
構造検索のしくみ

■ CAS SciFinder[®] の As Drawn (完全一致検索), Substructure (部分構造検索) では, 包括的な回答集合を作成するための検索のしくみが働きます(Smartsearch). 具体的には, 下記のような物質が回答に含まれます.

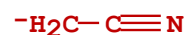
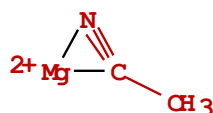
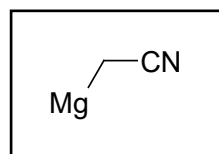
- ・ 立体異性体
- ・ 互変異性体 (ケト-エノール異性を含む)
- ・ 双性イオン
- ・ 電荷をもつ化合物
- ・ 混合物, 塩
- ・ ラジカル, ラジカルイオン
- ・ 同位体元素を含む物質
- ・ 配位化合物
- ・ 原料モノマーの構造が一致するポリマー

■ 例

- ・ ケト-エノール体 : 下記のいずれかを作図すればほかの構造を考慮して検索



- ・ 金属を含む構造質問式 : 金属原子が他の位置に移動した物質, 金属原子との結合がない物質も含めて検索



■ Analyze Structure Precision フィルターを利用すると, 構造作図どおりの検索で得られた回答のみに限定できます.

^ Structure Precision

Conventional Results (166)

Tautomers and Zwitterions (1)

構造作図どおりの検索で得られた回答

互変異性体や双性イオン

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 中層ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090

URL: www.jaici.or.jp

E-mail: support@jaici.or.jp