

CAS SciFinderⁿ 構造検索ガイド

2021 年 11 月

<https://scifinder-n.cas.org/>

構造作図画面	1
構造作図画面のツールパレット	2
ペンシルツール	3
ショートカットメニューツール	3
X メニューツール	3
R グループメニューツール	4
繰り返しグループツール	5
可変置換位置ツール	6
Lock Rings ツール	7
Lock Atoms ツール	8

構造作図画面

- Draw ボタンをクリックすると、作図ツールが起動します。

作図画面は CAS Draw または ChemDoodle を選択可

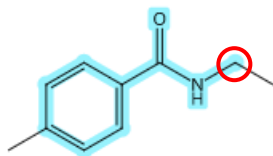
CAS RN®, SMILES, InChI から構造を呼び出して利用できる

クリックするとさらにメニューが表示され、Lock Ring, Lock Atoms, 回転, 反転ツールが選択できる

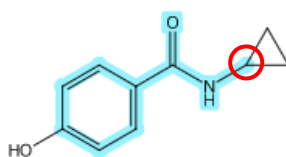
拡大/縮小

参考: CAS SciFinder[®] で上図の構造を Substructure 検索した結果には、下記 (1)~(3) のすべてが含まれます。

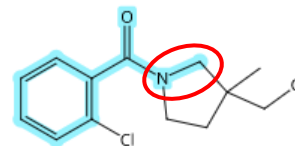
(1) 赤で示したノードが鎖の一部になる回答



(2) 赤で示したノードが環の一部になる回答



(3) 赤で示した結合が環の一部になる回答



鎖結合は環の一部になる物質もヒットします。鎖結合が環の一部になることを禁止したい場合は Lock Ring ツールを使います。

構造作図画面のツールパレット

- ツールパレットには、化学構造を作図するためのツールがあります。▲が付いているボタンをクリックするとさらに選択メニューが表示されます。

投げ縄ツール		選択ツール	
ペンシルツール		消しゴムツール	
原子メニューツール		ショートカットメニューツール	
X メニューツール		R グループメニューツール	
		テンプレートツール	
正電荷ツール		負電荷ツール	
繰り返しグループツール		鎖ツール	
可変置換位置ツール		反応ロールツール*2	
原子マッピングツール*2		Lock Ring 選択ツール	クリックするとさらにメニューが表示される Lock Ring ツール*1 Lock Atoms ツール 回転 反転
反応サイトツール*2		反応矢印ツール*2	


*1 マルクーシュ構造検索では構造全体に対して自動的に適用されます

*2 化学反応式用のツールです (参照: [反応検索のテクニック](#))

炭素		水素選択ツール (H, D, T)
酸素		硫黄
窒素		リン
ハロゲン選択ツール (Cl, F, Br, I)		ケイ素
単結合		結合選択ツール (二重結合, 三重結合, 不定結合)
立体結合選択ツール		EZ 結合
シクロペンタン		シクロペンタジエン
シクロヘキサン		ベンゼン
シクロヘプタン		3~15員環作図ツール


ペンシルツール

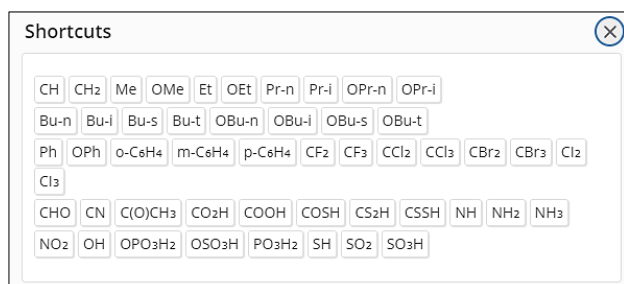
■ ノードや結合を作図する際に使用します。

- ・  をクリックし、作図します。デフォルトは、ノードは炭素原子、結合は単結合です。
 - すでに作図した構造のノードを変更したい場合は、原子パレットや原子メニューツールから目的のノードを選択し、変更したいノードにカーソルを合わせ、赤くハイライトさせた状態でクリックします。
 - すでに作図した構造の結合を変更したい場合は、結合パレットから目的の結合を選択し、変更する結合にカーソルを合わせ、赤くハイライトさせた状態でクリックします。

ショートカットメニューツール

■ ショートカットを作図する際に使用します。


- ・  をクリックするとショートカットが表示され、主要な官能基等を簡単に作図できます。



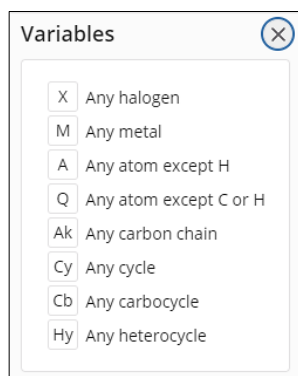
注意：
ショートカットの Ph を使用すると、ベンゼン環に置換基が付かない回答 (C6H5-) のみが得られます。
置換基がついたベンゼン環の回答も検索したい場合は、ショートカットを利用せず、ベンゼン環を作図してください。

X メニューツール

■ 可変原子を作図する際に使用します。

- ・  をクリックすると、可変原子の一覧が表示されます。特定の元素ではなく、可変ノードや一般式グループを作図できます。

ハロゲン
金属
H 以外の原子
C, H 以外の原子
鎖式炭素
任意の環
炭素環
ヘテロ環



注意：
Ak (炭素鎖) を作図するとデフォルトでは四角で囲まれた状態になります。これは、置換が禁止されていることを意味し、置換基が付かない直鎖、枝分かれ、あるいは不飽和の炭素鎖に限定されます。

Ak の置換を許容するには、Lock Atoms ツール (後述) を押下後、該当する Ak の上にカーソルを移動させてからクリックし、四角の囲みを外します。

R グループメニューツール

■ 1 つのノードに複数の原子、ショートカット、可変原子を指定する際に使用します。

① **R** をクリックし R グループメニューを表示します。

② 入力ボックスに元素記号等を手入力するか、Atoms, Variables, Shortcuts の一覧から選択します。

R-Group Definitions

R1: O, S, X

入力ボックス

原子

可変原子

ショートカット

メモ:

- 最大 20 個の R グループ (R1-R20) を指定できます。
- 各 R グループに最大 20 項目 (原子, 可変原子, ショートカット) の値を指定できます。

③ R グループの定義が終了したら、ペンシルツールで作図します。

CAS Draw

Draw or change atoms or bonds.

R1: O, S, X

R-Group Definitions

R1: O, S, X

Variables

X Any halogen

M Any metal

A Any atom except H

Q Any atom except C or H

Shortcuts

CH CH2 Me OMe Et OEt Pr-n Pr-i OPr-n OPr-i

Bu-n Bu-i Bu-s Bu-t OBU-n OBU-i OBU-s OBU-t

Ph OPh o-C6H4 m-C6H4 p-C6H4 CF2 CF3 CCl2 CCl3 CBr2 CBr3 Cl2

Cl3

CHO CN C(O)CH3 CO2H COOH COSH CS2H CSSH NH NH2 NH3

NO2 OH OPO3H2 OSO3H PO3H2 SH SO2 SO3H

Molecular Formula: Formula is not available


R1

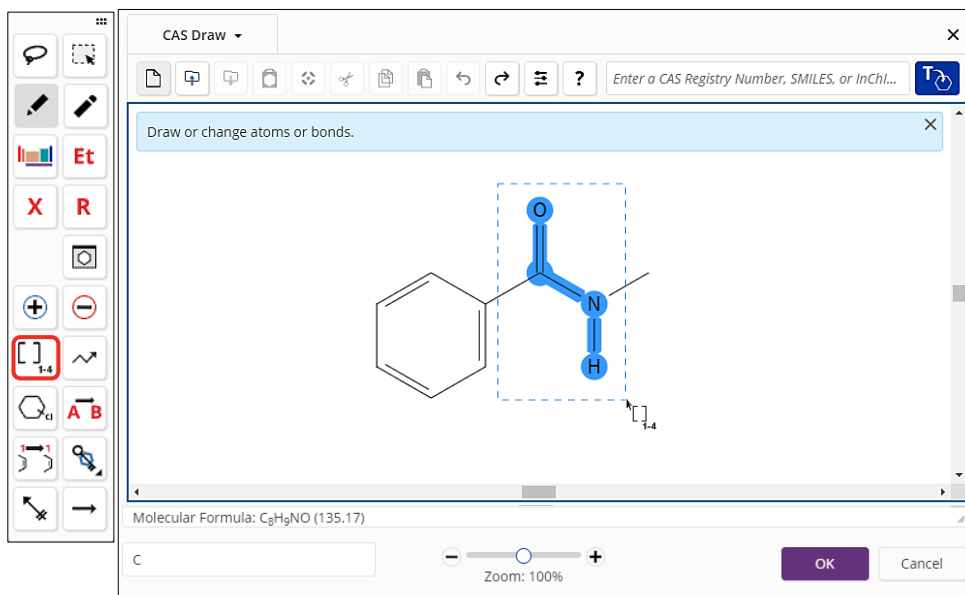
Zoom: 100%

繰り返しグループツール

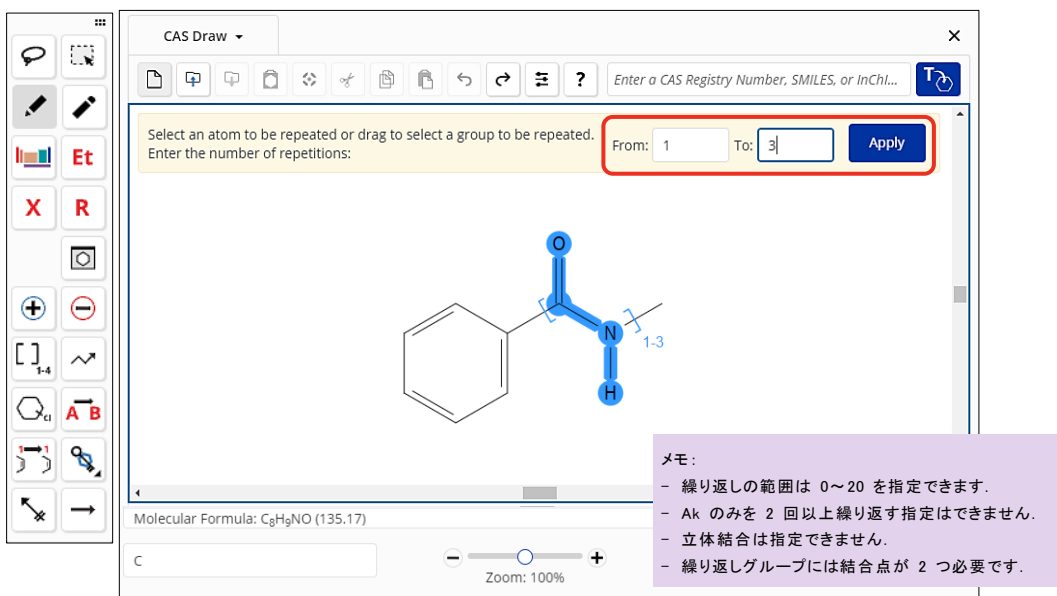
■ 繰り返し単位を含む構造を作図する際に使用します。

① 繰り返し部分を含めて基本骨格を作図します。

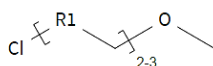
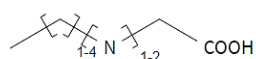
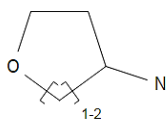
②  をクリックし、繰り返し部分をドラッグします。



③ 作図画面上部のボックスに繰り返し数を入力して「Apply」をクリックします。

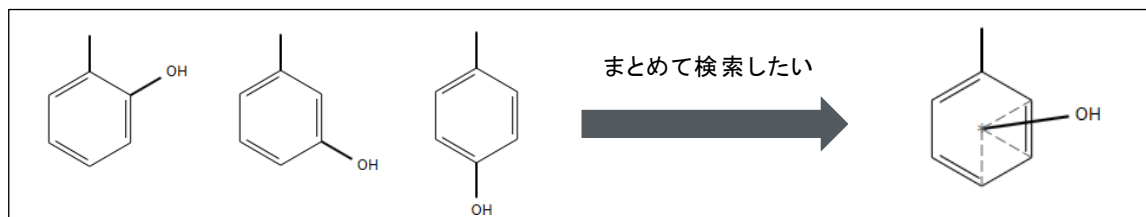


■ その他の作図例




可変置換位置ツール

- 環または 1 つの環系に対して、置換基の可変な結合位置を指定する際に使用します。



■ 作図方法



- ① 基本骨格と置換基を離して作図します。
- ②  をクリックし、置換基をクリックして結合位置までドラッグします。
- ③ ② の操作を繰り返し、結合位置を複数 (2 箇所以上) 指定します。

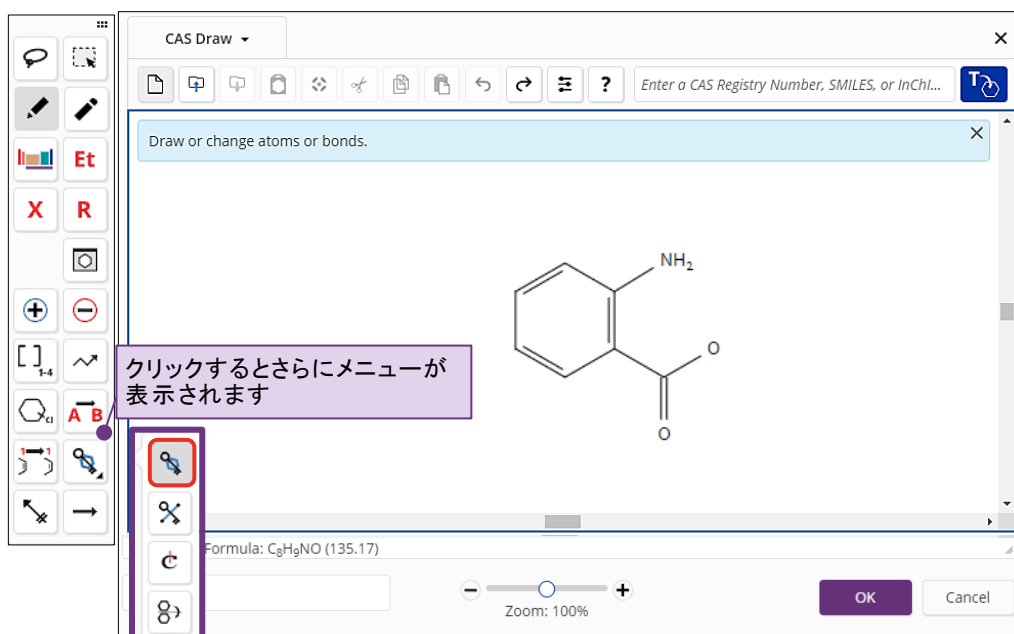
メモ:

- 各置換基の結合先は 20 箇所まで指定できます。
- 置換基の結合先として指定できるのは、1 つの環系上のノードのみです。
- 置換基の結合先にショートカット、金属原子、M、Ak、Cb、Cy、Hy、繰り返しグループ内の原子は指定できません。
- 複数の置換基に可変置換位置を指定したい場合は、置換基を必要な数だけ作図し、各置換基に対して可変置換位置を指定しま

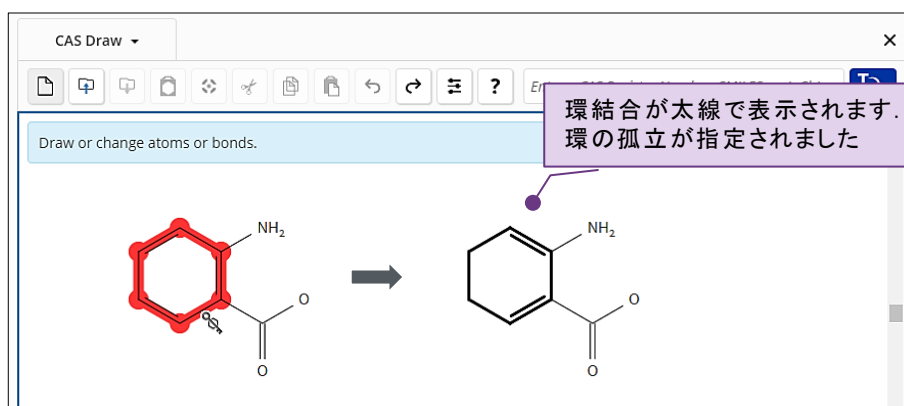
Lock Rings ツール

- 環の縮合を禁止する際に使用します (環の孤立化) (A).
また, 鎖結合が環の一部になることを禁止する際にも使用します (B).

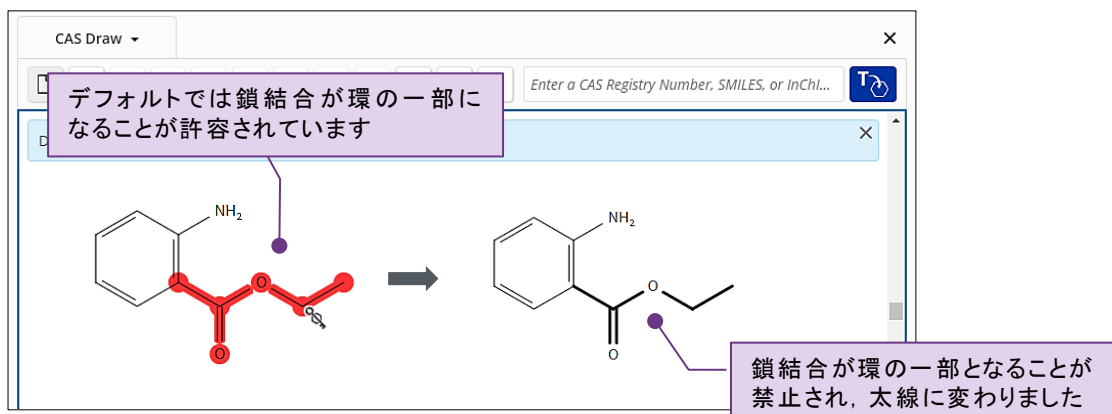
①  をクリックします. さらにメニューが表示されるので,  をクリックします.



② (A) 孤立を指定したい環にカーソルを合わせてクリックします.





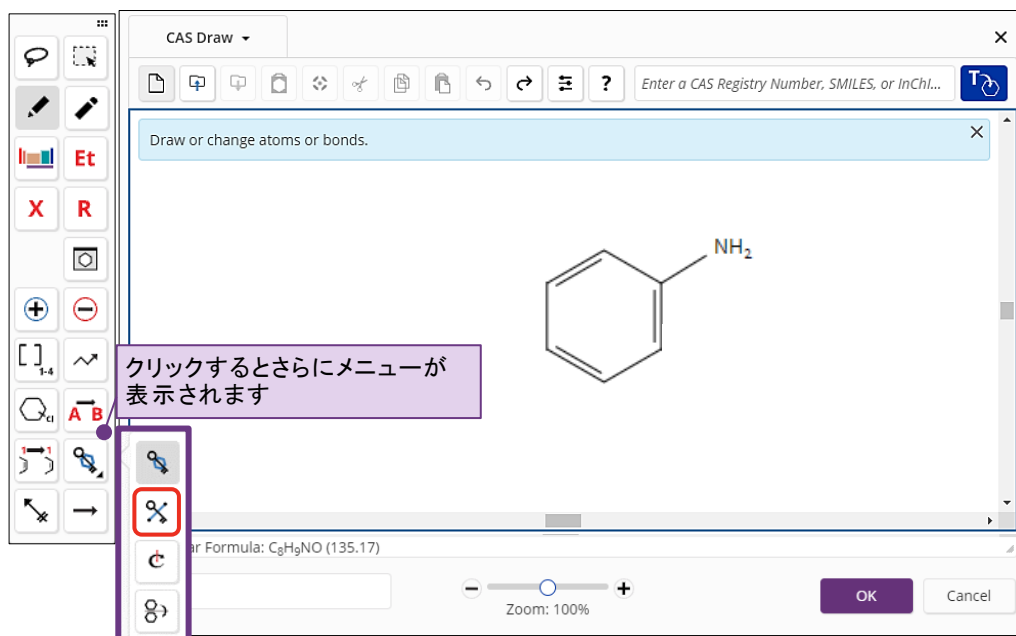
(B) 環の一部になることを禁止したい鎖結合をクリックします.



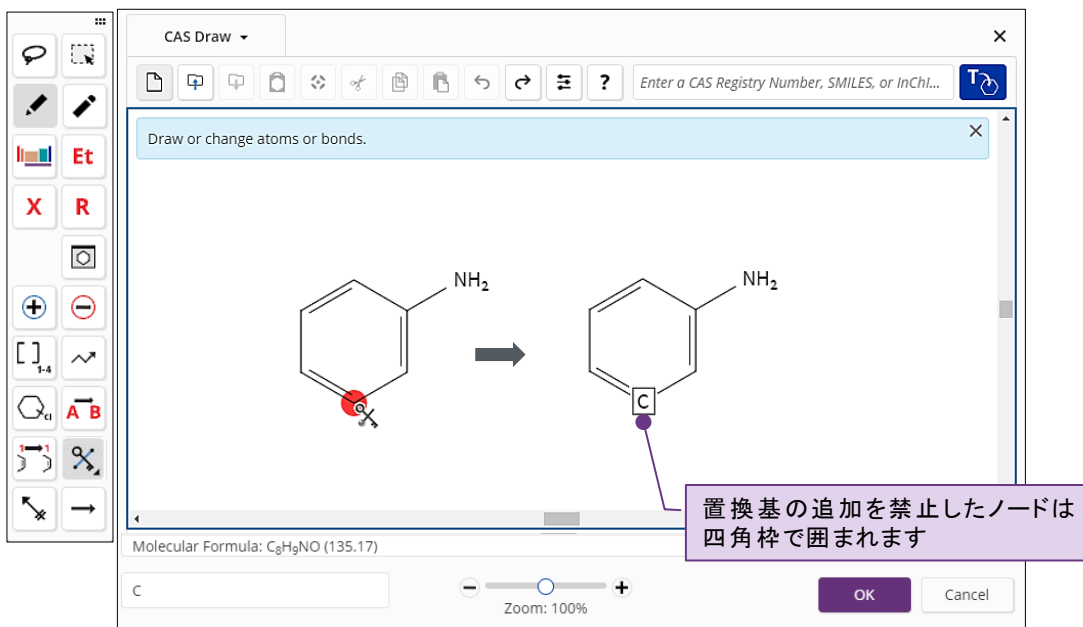
Lock Atoms ツール

- 特定のノードへの置換基の追加を禁止する際に使用します。

- ①  をクリックします。さらにメニューが表示されるので、 をクリックします。



- ② 置換基の追加を禁止したいノードにカーソルを合わせ、クリックします。



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