

CAS STNext® と CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索の違い

■ CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索とは？

CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索機能を利用すると、研究者自身が簡単に MARPAT ファイルを検索することができる。REGISTRY ファイルを検索対象とする通常の構造検索と併用することで、より網羅性の高い化学物質関連の特許調査が可能になる。

ただし CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索は、STN の MARPAT ファイルについて知識のない研究者でも手軽に利用できるようにするため、STN とは回答の表示方法や検索条件の指定に違いがある。

■ CAS STNext® と CAS SciFinder[®] の検索条件の違い

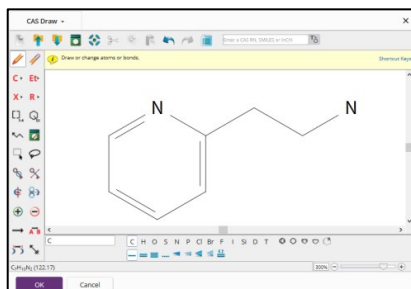
CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索は、STN の構造作図プラグインでデフォルトの設定で作図し、すべての環に孤立化を指定した場合とほぼ同等の結果となる。ノードと結合の種類(環・鎖)、マッチレベル、元素数レベルはすべて STN のデフォルトと同じ条件で検索される。結合次数は各システムで解釈が若干異なるため、CAS STNext® と CAS SciFinder[®] で得られる回答は完全には一致しないこともある。

1. 環の孤立化・鎖結合の属性

CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索では、自動的にすべての環は「孤立環」、鎖結合の属性は「鎖」に固定され、変更はできない。

○ : ヒットする × : ヒットしない

【構造質問式】



原報中の構造	STN	CAS SciFinder [®]
	○	○
	○ *1	×
	○	○
	○ *2	×

*1 STN ではデフォルトの設定(環は孤立または非孤立)でヒットする。

*2 STN では鎖結合の属性「環」でヒットする。

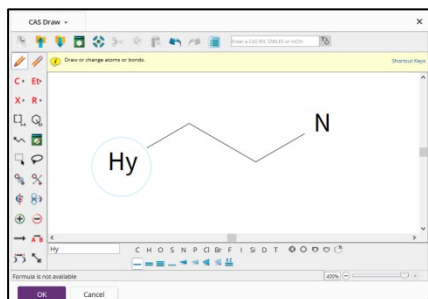


CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索ではすべての環は「孤立」、鎖結合の属性は「鎖」に固定されており、変更はできない。

2. 環構造, Hy, Cy, Cb のマッチレベル

CAS SciFinderⁿ のマルクーシュ構造検索では、構造質問式中の環構造, Hy, Cy, Cb のマッチレベルは「原子 (ATOM)」に固定されており、変更はできない。

【構造質問式】



原報中の構造	STN	CAS SciFinder ⁿ
	○	○
 R ₁ = heterocycle	○ *3	×

*3 STN では Hy のマッチレベル「クラス」でヒットする。

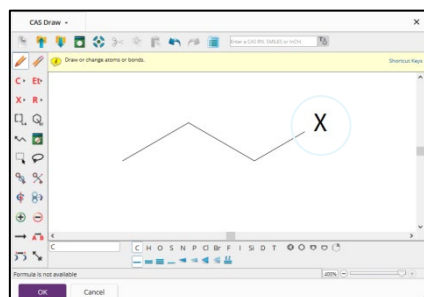


CAS SciFinderⁿ のマルクーシュ構造検索では、構造質問式中の環構造, Hy, Cy, Cb のマッチレベルは「原子 (ATOM)」に固定され、変更はできない。

3. 可変原子 (X, M, A, Q) のマッチレベル

CAS SciFinderⁿ のマルクーシュ構造検索では、構造質問式中の鎖状構造にある可変原子 (X, M, A, Q) のマッチレベルは「クラス」に固定されており、変更はできない。

【構造質問式】



原報中の構造	STN	CAS SciFinder ⁿ
	○	○
 R ₂ = halogen	○ *4	○

*4 STN では X のマッチレベル「クラス」でヒットする。

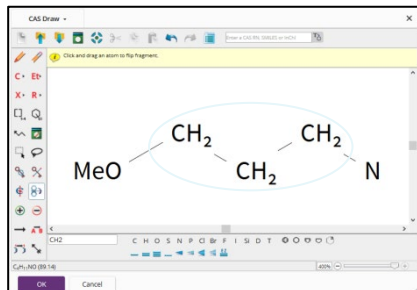


CAS SciFinderⁿ のマルクーシュ構造検索では、構造質問式中の鎖状構造にある可変原子 (X, M, A, Q) のマッチレベルは「クラス」に固定され、変更はできない。

4. 鎖状構造のマッチレベルと元素数レベル

CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索では、鎖上のノードのマッチレベルは「クラス」、元素数レベルは「限定」に固定されており、変更はできない。また、構造質問式中の一般式記号「Ak」に元素数を指定できない。

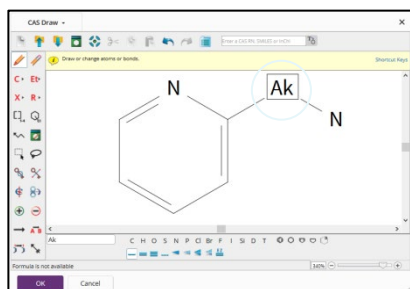
【構造質問式】



原報中の構造	STN	CAS SciFinder [®]
-CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	○	○
-Alkylene (C ₁₋₅)-	○	○
- Alkylene - (炭素数の記載なし)	○ *5	✗

*5 STN では元素数レベル「非限定」でヒットする。

【構造質問式】



原報中の構造	STN	CAS SciFinder [®]
	○	○
	○	○
	○ *6	○

*6 STN で Ak に元素数を指定した場合は、元素数レベル「非限定」でヒットする。



CAS SciFinder[®] のマルクージュ構造検索では、鎖上のノードのマッチレベルは「クラス」、元素数レベルは「限定」に固定され、変更はできない。また、構造質問式中の一般式記号「Ak」に元素数を指定できない。

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