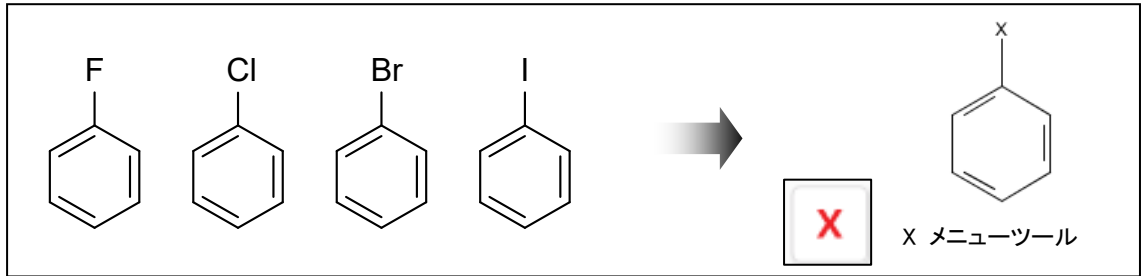


■ 構造作図ツール

CAS SciFinderⁿ では、誘導体検索に便利な様々な機能を搭載している。

ケース 1 : 特定の原子グループの指定

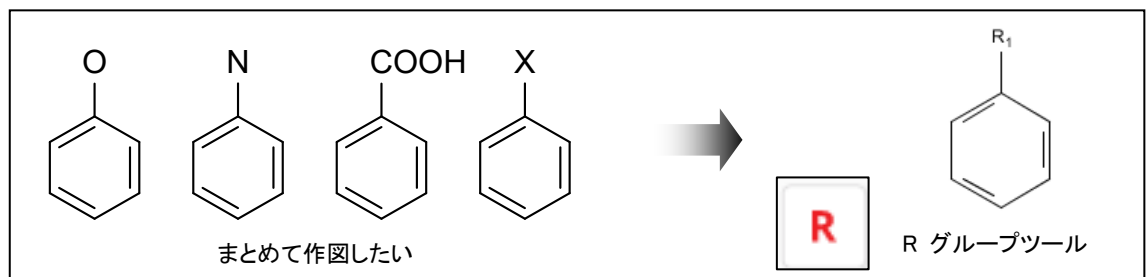


Variables	
<input type="checkbox"/>	X Any halogen
<input type="checkbox"/>	M Any metal
<input type="checkbox"/>	A Any atom except H
<input type="checkbox"/>	Q Any atom except C or H
<input type="checkbox"/>	Ak Any carbon chain
<input type="checkbox"/>	Cy Any cycle
<input type="checkbox"/>	Cb Any carbocycle
<input type="checkbox"/>	Hy Any heterocycle

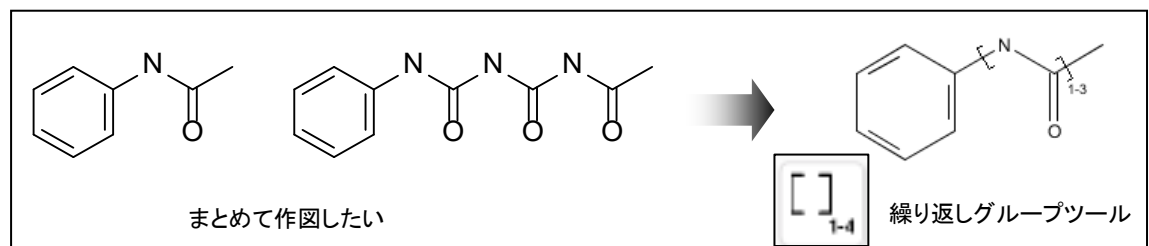
記号	意味	日本語
X	Any halogen	ハロゲン一般 (F, Cl, Br, I, At)
M	Any metal	金属一般 (Ar, As, At, B, Br, C, Cl, F, H, He, I, Kr, N, Ne, O, P, Rn, S, Se, Si, Te, Xe 以外の元素)
A	Any atom except H	H 以外の原子
Q	Any atom except C or H	C, H 以外の原子
Ak	Any alkyl chain	炭素鎖 (Ak の場合, 無置換炭素鎖)
Cy	Any cycle	環 (Cy = Cb + Hy)
Cb	Any carbocycle	炭素環
Hy	Any heterocycle	ヘテロ環

● ポイント : A を用いると, その位置に必ず置換基があるという指定になる。

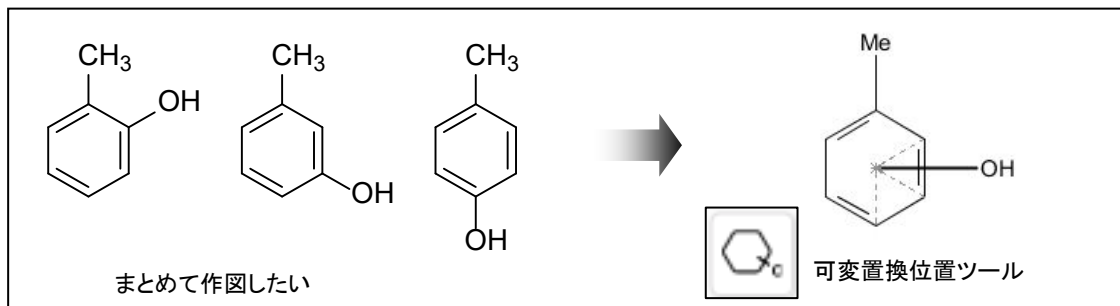
ケース 2 : 一つの場所に複数の原子や X グループ, ショートカットを同時に指定



ケース 3 : 繰り返しの指定

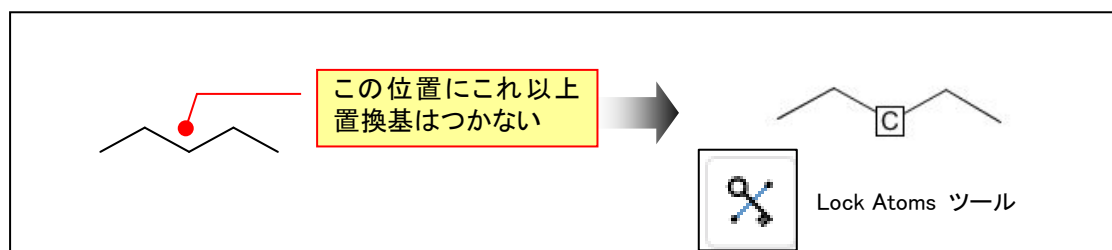


ケース 4 : 環上における複数の置換位置の可能性を指定



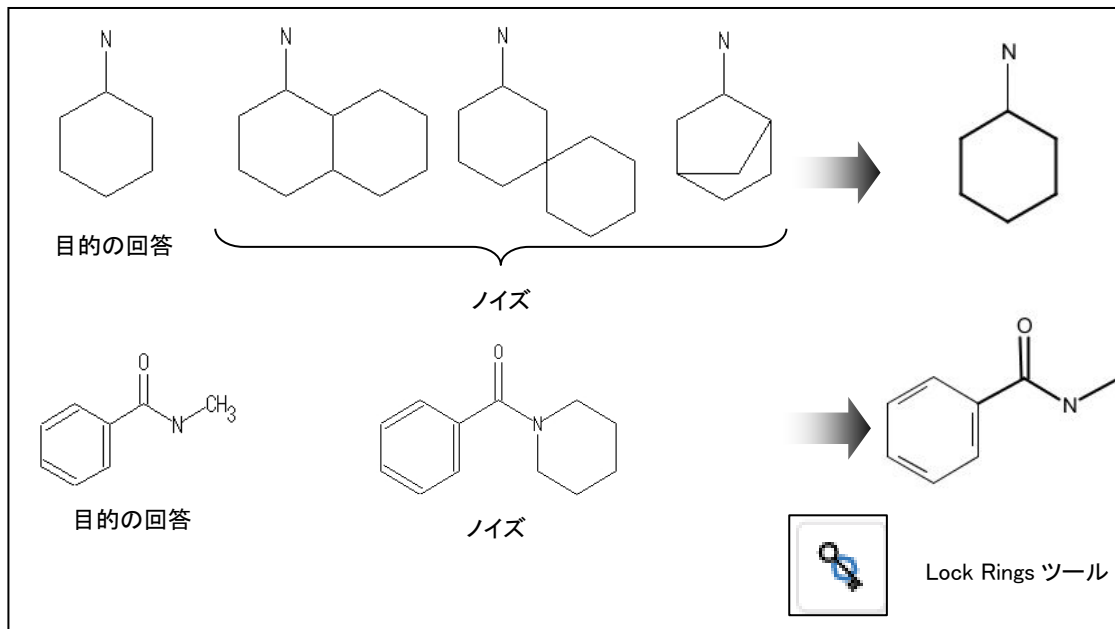
- ポイント : 指定できる母核は一つの環または環系のみ (鎖には指定できない)

ケース 5 : 部分的に置換を禁止する指定



- ポイント : 二価の硫黄原子 (-S-) に限定する時に用いると便利

ケース 6 : 作図した環に対して、縮合 (スピロ結合含む) や架橋はしない, 結合が環の一部にはならない指定



※ 各ツールの作図方法は「CAS SciFinder[®] の構造作図」参照.

■ 既存の構造情報を利用した作図

CAS 登録番号(CAS RN[®]), SMILES 形式または InChI 形式による構造表記からの構造作図

ダイアログボックスをクリック

ダイアログボックスに CAS 登録番号 (CAS RN[®]), SMILES などを入力し をクリック

物質, 反応検索結果の構造を利用した作図

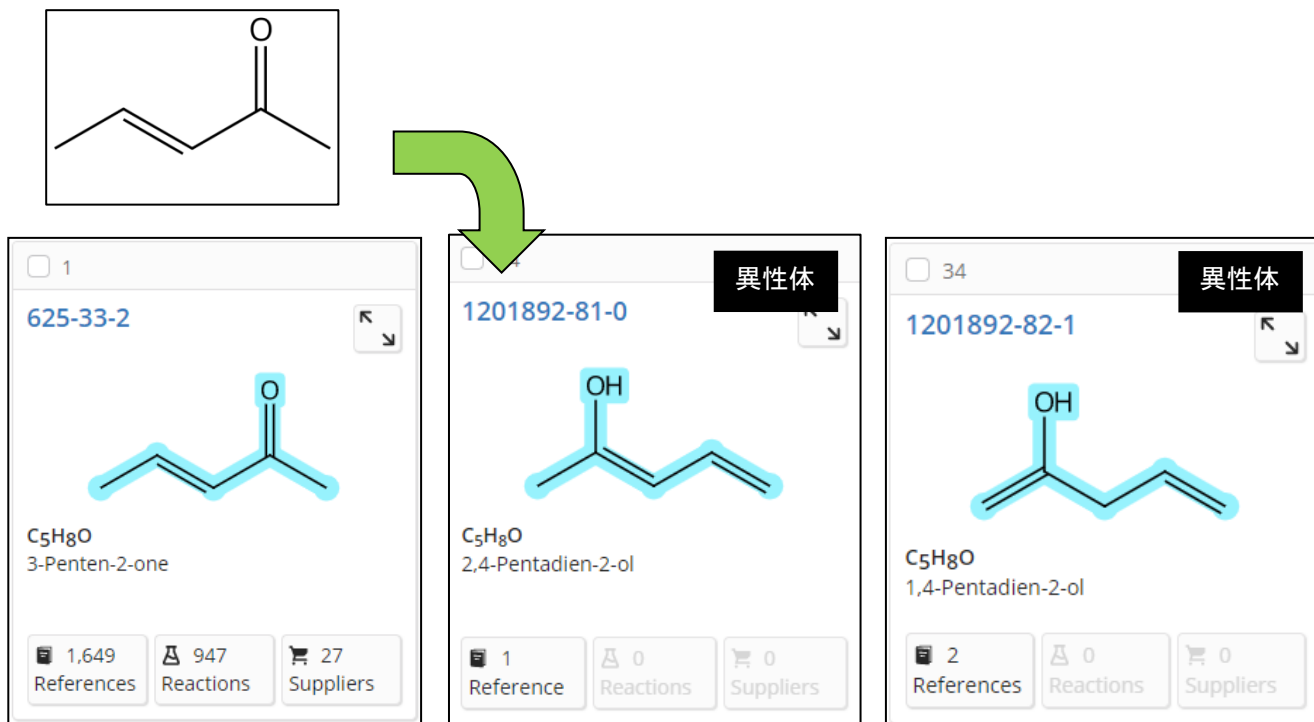
検索結果の構造図をクリック

Edit Structure をクリック

■ 質問式に一致しない構造が回答に含まれた場合（検索精度による限定）

構造質問式と回答例

CAS SciFinder[®] では構造検索時に Smartsearch (「CAS SciFinder[®] の構造作図」参照) が働き, 構造質問式に関連する物質を網羅的に検索する (回答の正確さよりも漏れのない検索を優先). たとえば下記構造で完全一致検索を行うと, 下図のように二重結合の位置が異なる異性体も回答として得られる.



構造質問式どおりの物質のみを限定するには？

The screenshot shows the CAS SciFinder interface for a search of 40 substances. The left sidebar contains filters: Structure Match (As Drawn (40), Substructure (18.8M), Similarity (6,630), Analyze Structure Precision), Chemscape Analysis, and Filter Behavior. The main results area shows three substances:

- 1: 625-33-2, 3-Penten-2-one, C₅H₈O. 1,723 References, 1,016 Reactions, 34 Suppliers.
- 2: 3102-33-8, (E)-3-Penten-2-one, C₅H₈O. 883 References, 693 Reactions, 18 Suppliers.
- 3: 3102-32-7, (Z)-3-Penten-2-one, C₅H₈O. 68 References, 22 Reactions, 3 Suppliers.

A red box highlights 'Analyze Structure Precision' in the filters, and a yellow box highlights the same text in the results area with the instruction 'Analyze Structure Precision をクリック'.

Conventional Results (21)
 Tautomers and Zwitterions (19)

Conventional Results をチェック。
 (構造作図どおりの検索で得られた回答)

Structure Match

As Drawn (40)

Substructure (18.8M)

Similarity (6,630)

Structure Precision

Conventional Results (21)

Tautomers and Zwitterions (19)

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.
Learn more about Chemscape.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Commercial Availability

Available (3)

Not Available (18)

Reaction Role

Substances (21)

Sort: Relevance View: Partial

References Reactions Suppliers

1 625-33-2
CCC(=O)C=C
 C_5H_8O
 3-Penten-2-one
 1,723 References 1,016 Reactions 34 Suppliers

2 3102-33-8
CCC(=O)C=C
 C_5H_8O
 (E)-3-Penten-2-one
 Double bond geometry shown
 883 References 693 Reactions 18 Suppliers

3 3102-32-7
CCC(=O)C=C
 C_5H_8O
 (Z)-3-Penten-2-one
 Double bond geometry shown
 68 References 22 Reactions 3 Suppliers

4 189693-85-4
CCC(=O)C=C
 $(C_5H_8O)_n$
 3-Penten-2-one, homopolymer
 References Reactions Suppliers

5 757960-11-5
CCC(=O)C=C
 C_5H_8O
 1-Butenyl, 1-methyl-3-oxo-
 References Reactions Suppliers

6 1381842-33-6
CCC(=O)C=C
 C_5H_8O
 3-Penten-2-one, labeled with carbon-13,
 References Reactions Suppliers

※ 同位体を除くには、Filter by(選択した項目に限定)から「Isotopes」フィルターで Not Containing Isotopes をチェックするか、Exclude(選択した項目を除外)から「Isotopes」フィルターで Containing Isotopes をチェックする。

8 26649-67-2
CCC(=O)C=C
 C_5H_7DO
 3-Penten-1-d-2-one
 1 Reference 1 Reaction **除きたい**

9 1824725-52-1
CCC(=O)C=C
 $C_5H_5D_3O$
 References Reactions Suppliers

Filter by

Isotopes

Containing Isotopes (5)

Not Containing Isotopes (35)

Exclude

Isotopes

Containing Isotopes (5)

Not Containing Isotopes (35)

※ ポリマーを除くには, Exclude(選択した項目を除外)から「Substance Class」フィルターで Polymer をチェックする.

The image shows a search result card for a chemical compound. At the top, there is a checkbox with the number '4' and a black button labeled '除きたい' (I want to exclude). Below this is the CAS number '30919-86-9'. The card displays two chemical structures: 3-penten-2-one and styrene. Below the structures, the formula $(C_8H_8.C_5H_8O)_x$ and 'Components: 2' are shown. The name '3-Penten-2-one, polymer with styrene' is listed. At the bottom, there are three buttons: 'Reference' (with a book icon and '1'), 'Reactions' (with a flask icon and '0'), and 'Suppliers' (with a shopping cart icon and '0'). A green arrow points from this card to a 'Filter by' menu. The menu has a purple header 'Exclude' and a sub-header '^ Substance Class'. It contains three options: 'Organic/Inorganic Small Molecule (22)' (unchecked), 'Polymer (10)' (checked and highlighted with a red box), and 'Salt and Compound With (8)' (unchecked).

※ Filter by(選択した項目に限定)から「Number of Components」フィルターで 1 にチェックを入れると, 単一成分物質に限定することができる.

The image shows a 'Filter by' menu with a purple header. Below the header is a sub-header '^ Number of Components'. There are five options listed: '1 (23)' (checked and highlighted with a red box), '2 (12)', '3 (1)', '4 (2)', and '5 or more (2)'. Each option has a checkbox next to it.

注: 「Number of Components」は, 成分数を意味する.

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