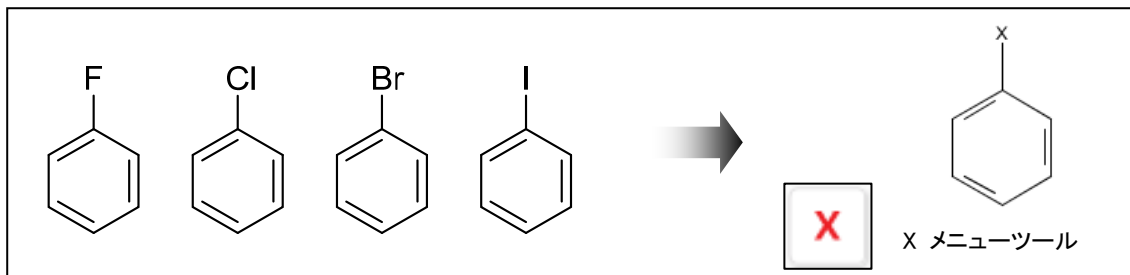


CAS SciFinderⁿ 構造検索のテクニック

■ 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

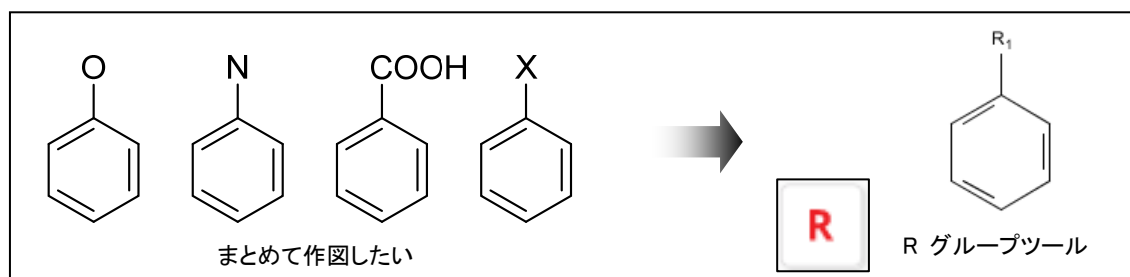


Variables	
<input type="checkbox"/>	X Any halogen
<input type="checkbox"/>	M Any metal
<input type="checkbox"/>	A Any atom except H
<input type="checkbox"/>	Q Any atom except C or H
<input type="checkbox"/>	Ak Any carbon chain
<input type="checkbox"/>	Cy Any cycle
<input type="checkbox"/>	Cb Any carbocycle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

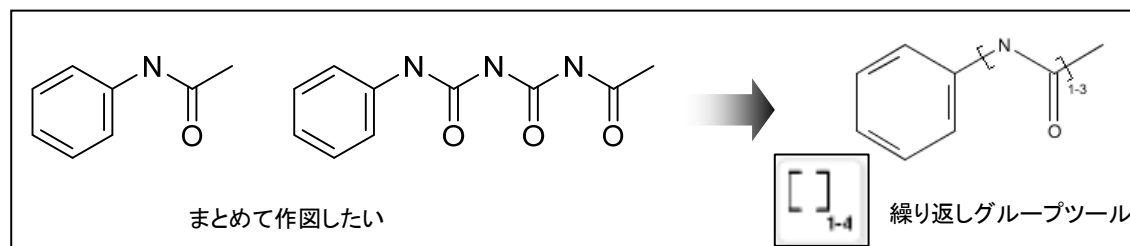
記号	意味	日本語
X	Any halogen	ハロゲン一般 (F, Cl, Br, I, At)
M	Any metal	金属一般 (Ar, As, At, B, Br, C, Cl, F, H, He, I, Kr, N, Ne, O, P, Rn, S, Se, Si, Te, Xe 以外の元素)
A	Any atom except H	H 以外の原子
Q	Any atom except C or H	C, H 以外の原子
Ak	Any alkyl chain	炭素鎖 (Ak の場合, 無置換炭素鎖)
Cy	Any cycle	環 (Cy = Cb + Hy)
Cb	Any carbocycle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

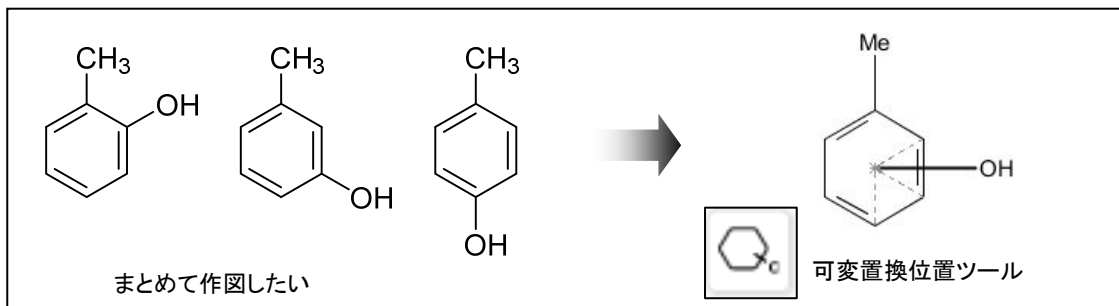
ケース 2 : 一つの場所に複数の原子や X グループ, ショートカットを同時に指定



ケース 3 : 繰り返しの指定

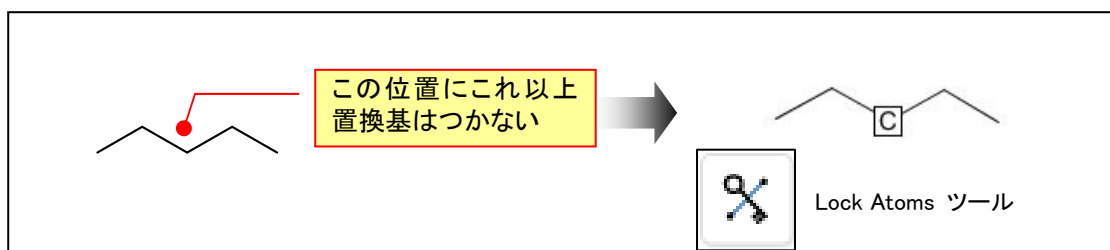


ケース 4 : 環上における複数の置換位置の可能性を指定



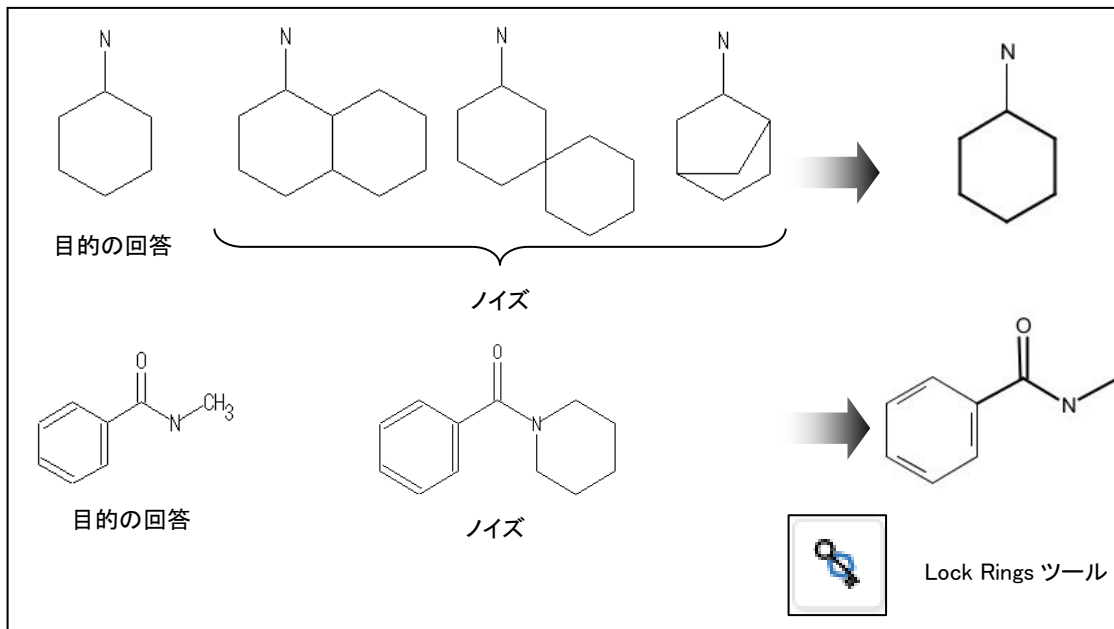
- ポイント : 指定できる母核は一つの環または環系のみ (鎖には指定できない)

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

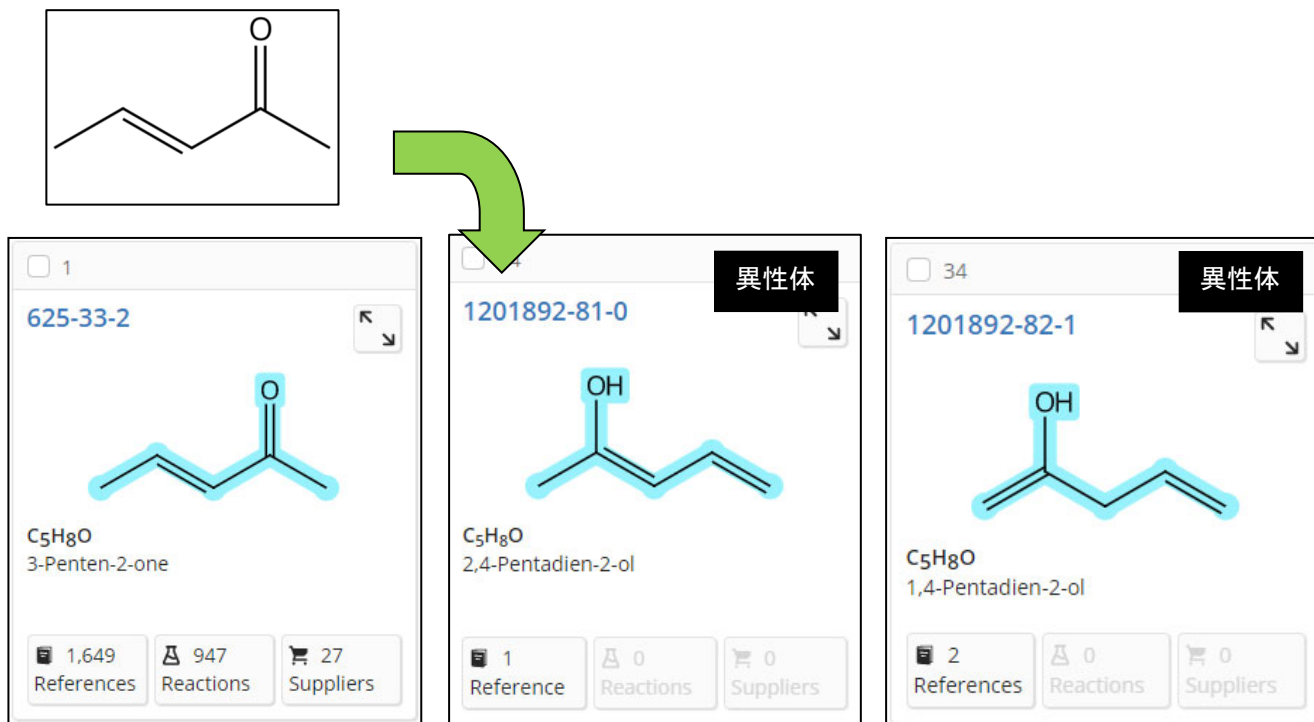
検索結果の構造図をクリック

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？

Return to Home

Structure Match

As Drawn (40)

Substructure (18.8M)

Similarity (6,630)

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemscape.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Substances (40)

Sort: Relevance View: Partial

References Reactions Suppliers

1
625-33-2
C₅H₈O
3-Penten-2-one
1,723 References 1,016 Reactions 34 Suppliers

2
3102-33-8
C₅H₈O
3-Penten-2-one
883 References 693 Reactions 18 Suppliers
Double bond geometry shown (E)

3
3102-32-7
C₅H₈O
3-Penten-2-one
68 References 22 Reactions 3 Suppliers
Double bond geometry shown (Z)

Analyze Structure Precision をクリック

Structure Precision

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
C₅H₈O
3-Penten-2-one
1,723 References 1,016 Reactions 34 Suppliers

2 3102-33-8
C₅H₈O
(E)-3-Penten-2-one
883 References 693 Reactions 18 Suppliers

3 3102-32-7
C₅H₈O
(Z)-3-Penten-2-one
68 References 22 Reactions 3 Suppliers

4 189693-85-4
(C₅H₈O)_n
3-Penten-2-one, homopolymer

5 757960-11-5
C₅H₈O
1-Butenyl, 1-methyl-3-oxo-

6 1381842-33-6
C₅H₈O
3-Penten-2-one, labeled with carbon-13, (E)

※ 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
C₅H₇DO
3-Penten-1-d-2-one
1 Reference 1 Reaction

9 1824725-52-1
C₅H₅D₃O

除きたい

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 on the left and a filter menu on the right. The search result card has a header with a checkbox and the number '4', a button labeled '除きたい', and a search ID '30919-86-9'. It 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, followed by the text '3-Penten-2-one, polymer with styrene'. At the bottom are buttons for 'Reference' (1), 'Reactions' (0), and 'Suppliers' (0). A green arrow points from the search result to the 'Exclude' filter menu. The 'Exclude' menu has a purple header and a 'Substance Class' section with three options: 'Organic/Inorganic Small Molecule (22)', 'Polymer (10)' (which is checked and highlighted with a red box), and 'Salt and Compound With (8)'.

※ 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. It has a 'Number of Components' section with five options: '1 (23)' (checked and highlighted with a red box), '2 (12)', '3 (1)', '4 (2)', and '5 or more (2)'.

注: 「Number of Components」は, 成分数を意味する.