

# CAS SciFinder® 構造作図ガイド

化学情報協会 情報事業部  
202412

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## 目次

### 構造作図画面の説明

- 構造作図画面の説明
- ツールパレット一覧

### 構造検索のタイプ

- 構造検索のタイプ
- 構造検索のタイプによる回答の違い

### 構造検索のしくみ

- 包括的な回答集合を作るしくみ
- 作図通りの構造に限定する方法
- フィルターの紹介

### 便利な構造作図ツールの紹介

#### 構造情報の活用

- 回答の構造情報を利用した作図
- CAS RN® 等を使った構造の呼び出し
- ChemDraw など他のツールの構造を使った検索
- テンプレートツール

#### 立体情報を含む構造の検索



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

# 構造作図画面の説明

3 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## 構造作図画面の説明

Draw ボタンをクリックすると、構造作図ツールが起動



4 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## ツールパレット一覧 (1/2)

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	
Rグループ結合点ツール		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		Lock Ring	
Lock Atoms ツール		回転	
反応ロールツール*		原子マッピングツール*	
反応サイトツール*		反応矢印ツール*	



回転

反転

\* 反応検索で使用するツール (参照: [https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf\\_reaction.pdf](https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_reaction.pdf))

5 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## ツールパレット一覧 (2/2)

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	
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	



二重結合

三重結合

不定結合  
(結合次数は問わない  
詳細はスライド 17)

6 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

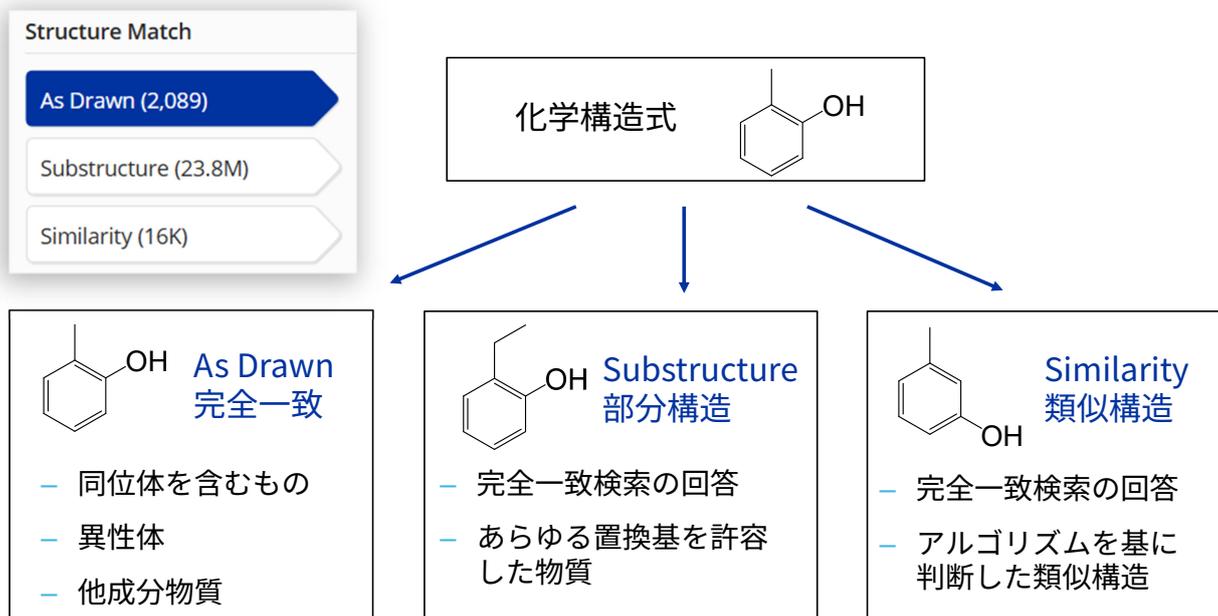


# 構造検索のタイプ

構造検索のタイプ / 構造検索のタイプによる回答の違い

# 構造検索のタイプ

化学構造検索を行うと、3つの検索タイプでの構造検索が同時に実行される



# 構造検索のタイプによる回答の違い

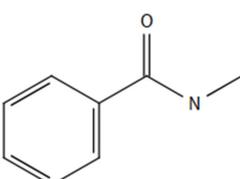
検索タイプ	特徴
As Drawn (完全一致検索)	<ul style="list-style-type: none"><li>- 作図した構造どおりの物質、およびそれを含む多成分物質を検索する</li><li>- 互変異性体も含む</li><li>- 可変原子やRグループなどの可変構造質問式を利用できる</li></ul>
Substructure (部分構造検索)	<ul style="list-style-type: none"><li>- 完全一致検索の回答に加えて、作図した構造にあらゆる置換基を許容した物質を検索する</li><li>- 可変原子やRグループなどの可変構造質問式を利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

\* Tanimoto アルゴリズムに基づき類似性スコアを計算する

## (参考) Substructure

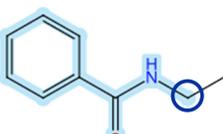
部分構造検索の回答には、作図した構造が環の一部になるものも含まれる

化学構造式

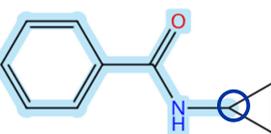


得られる回答の例

614-17-5



15205-35-3



○のノードが鎖の一部になる      ○のノードが環の一部になる

111164-84-2



○の結合が環の一部になる

**ポイント**  
鎖結合は環の一部になる物質もヒットする。  
鎖結合が環の一部になることを禁止したい場合は  
Lock Ring ツールを使用する (スライド 30)

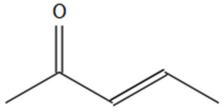
# 構造検索のしくみ

包括的な回答集合を作るしくみ / 作図通りの構造に限定する方法  
フィルターの紹介

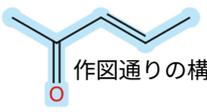
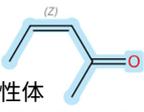
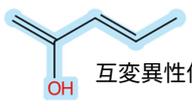
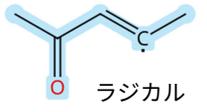
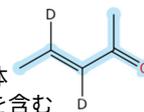
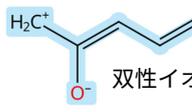
# 包括的な回答集合を作るしくみ

完全一致検索、部分構造検索では、下記のような物質が回答に含まれる

- 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

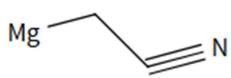
化学構造式 

完全一致検索で得られる回答の例

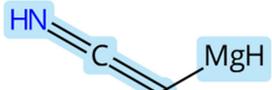
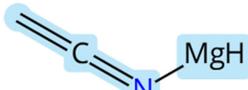
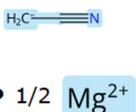
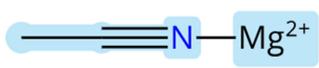
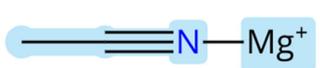
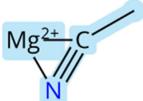
625-33-2  作図通りの構造	3102-32-7  立体異性体 Double bond geometry shown	2015228-91-6  互変異性体
757960-11-5  ラジカル	2895442-96-1  同位体 元素を含む	712342-45-5  双性イオン

# (例) 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

化学構造式 

完全一致検索で得られる回答の例

- 99749-06-1 
- 238407-12-0 
- 99749-07-2 
- 58855-10-0 
- 19511-75-2 
- 373600-05-6 
- 57450-24-5 

# 作図通りの構造に限定する方法

Analyze Structure Precision フィルターを利用する

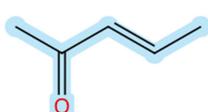
Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Structure Match

- As Drawn (44)
- Substructure (23.1M)
- Similarity (6,761)
- Analyze Structure Precision

44 Results

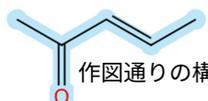
625-33-2 

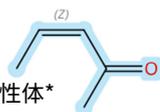
Structure Precision

- Conventional Results (22)
- Tautomers and Zwitterions (22)

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

Conventional Results に含まれる回答の例

625-33-2 

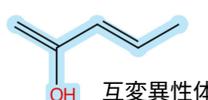
3102-32-7 

作図通りの構造 立体異性体\*

Double bond geometry shown

同位体元素を含む物質、原料モノマーの構造が一致するポリマー等も回答に含まれる

Tautomers and Zwitterions に含まれる回答の例

2015228-91-6 

712342-45-5 

互変異性体 双性イオン

\* 作図通りの立体構造を持つ物質に指定したい場合はEZ結合を使用する (スライド 46)

# フィルターの紹介

回答から同位体元素を含むもの、ポリマーを除く際はフィルターを活用

## Filter Behavior

Filter by

Exclude

- Filter by : 限定条件
- Exclude : 除く条件

- 同位体元素を含むものを除く

Filter by

### ^ Isotopes

- Containing Isotopes (5)
- Not Containing Isotopes (17)

- ポリマーを除く

Exclude

### ^ Substance Class

- Polymer (6)
- Salt and Compound With (6)
- Organic/Inorganic Small Molecule (5)

- 成分数で限定する

Filter by

### ^ Number of Components

- 1 (5)
- 2 (5)
- 3 (1)

# 便利な構造作図ツールの紹介

# 結合選択ツール

結合次数を指定せずに作図したい場合は不定結合を使用する

化学構造式

得られる回答の例

14339-33-4

610272-24-7

1785532-31-1

# 原子メニューツール

特定の元素を作図できる

Atoms

H He

Li Be B C N O F Ne

Na Mg Al Si P S Cl Ar

K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr

Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe

Cs Ba \* Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn

Fr Ra \*\*

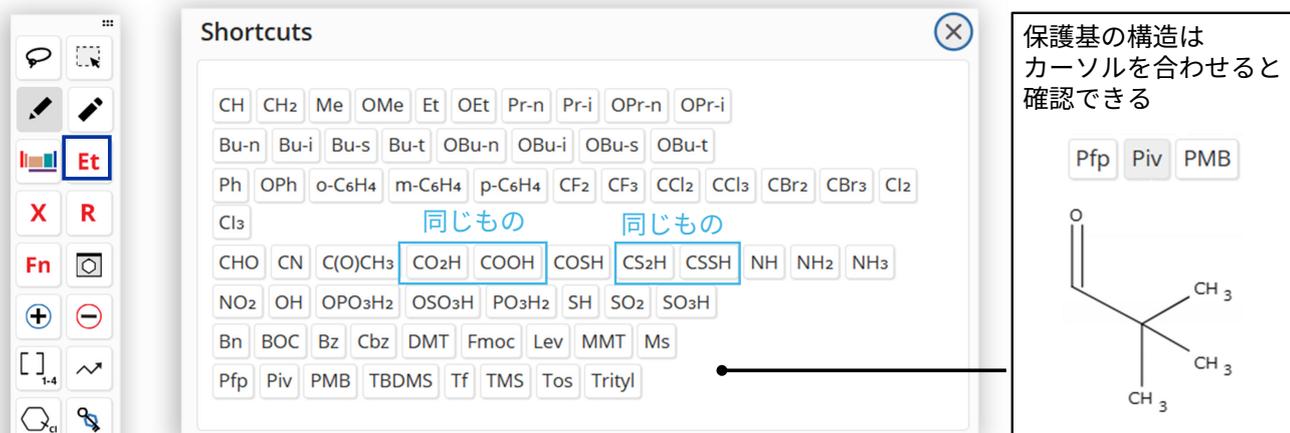
\*Lanthanides La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu

\*\*Actinides Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr

Isotopes D T 重水素も作図可能

# ショートカットメニューツール

主要な官能基や保護基を簡単に作図できる



保護基の構造はカーソルを合わせると確認できる

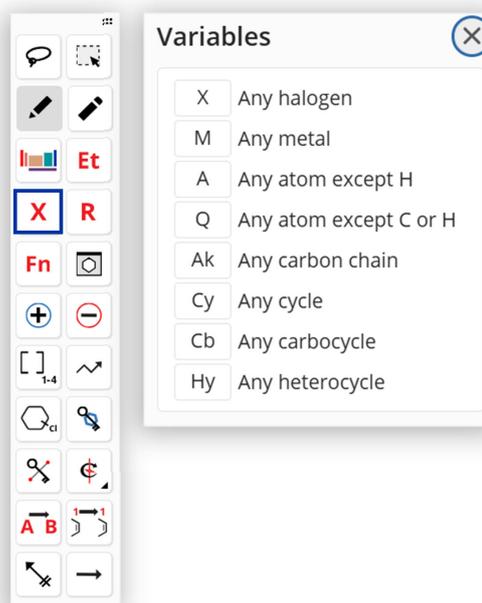
Pfp Piv PMB

同じもの 同じもの

ポイント  
ショートカットの Ph を使用して Substructure 検索すると、ベンゼン環に置換基が付かない回答 (C6H5-) のみが得られる。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、ベンゼン環を作図する。

# Xメニューツール(1/2)

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る

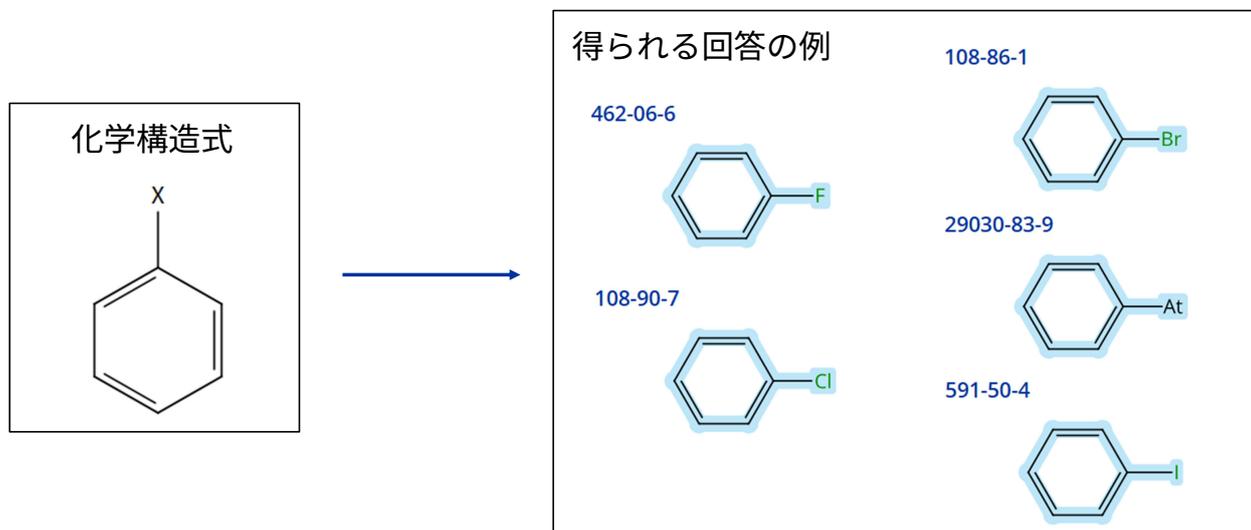


記号	定義	内容
X	Any halogen	ハロゲン一般 (F, Cl, Br, I, At)
M	Any metal	金属一般 (Ar, As, At, B, Br, C, Cl, F, H, He, I, Kr, N, Ne, O, P, Rn, S, Se, Si, Te, Xe 以外の元素)
A	Any atom except H	H 以外の原子
Q	Any atom except C or H	C, H 以外の原子
Ak	Any carbon chain	炭素鎖 (デフォルトでは無置換炭素鎖*)
Cy	Any cycle	環 (Cy = Cb + Hy)
Cb	Any carbocycle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

\* Lock Atoms ツールを使用すると置換基を許容する Ak も作図可能 (スライド 32-33 参照)

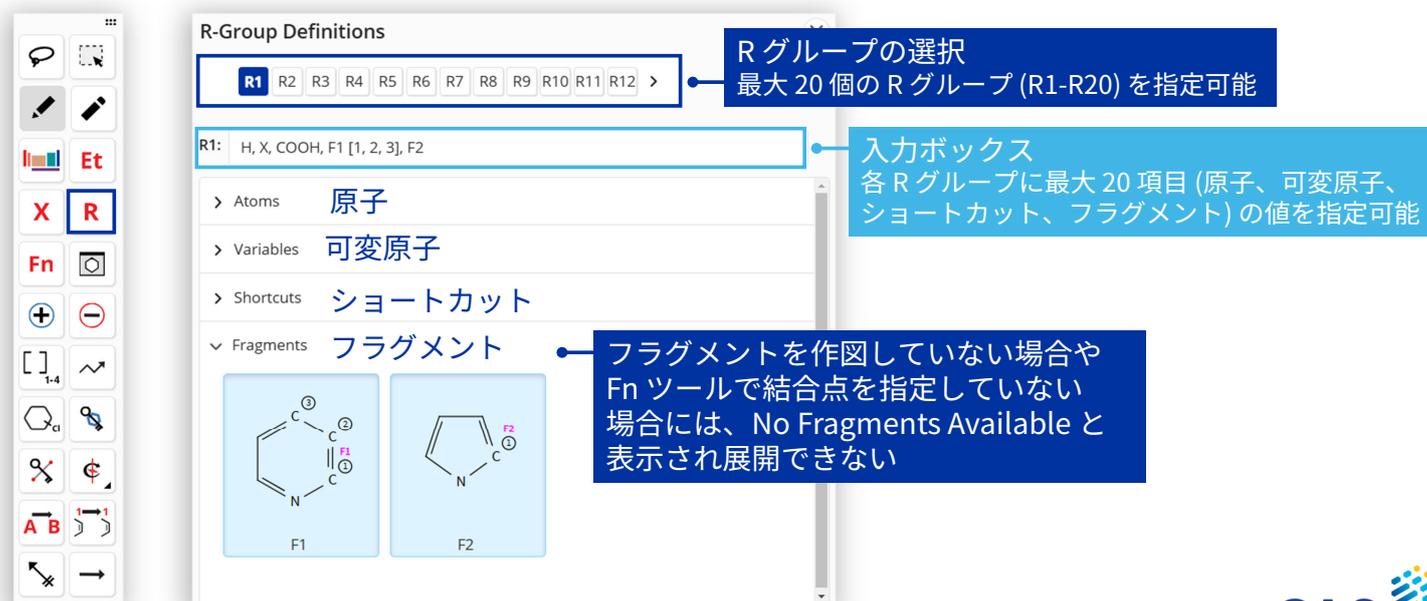
## Xメニューツール(2/2)

(例) X と作図すると、ハロゲン一般 (F, Cl, Br, I, At) をまとめて検索できる



## Rグループメニューツール(1/2)

1つのノードに複数の原子、ショートカット、可変原子、フラグメントを指定



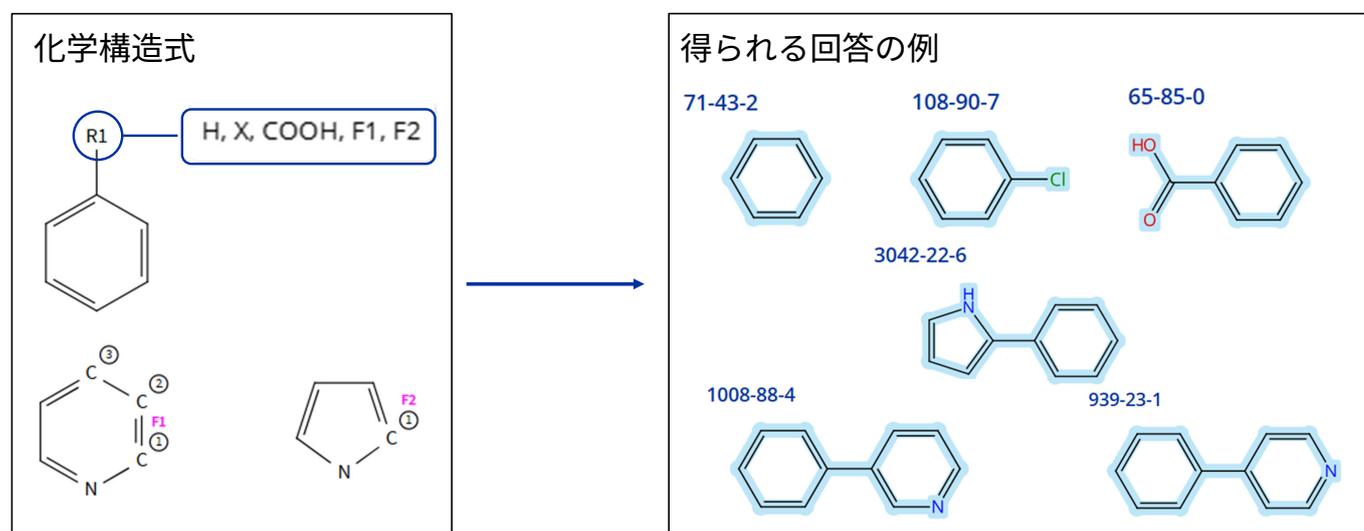
Rグループの選択  
最大 20 個の R グループ (R1-R20) を指定可能

入力ボックス  
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、フラグメント) の値を指定可能

フラグメントを作図していない場合や Fn ツールで結合点を指定していない場合には、No Fragments Available と表示され展開できない

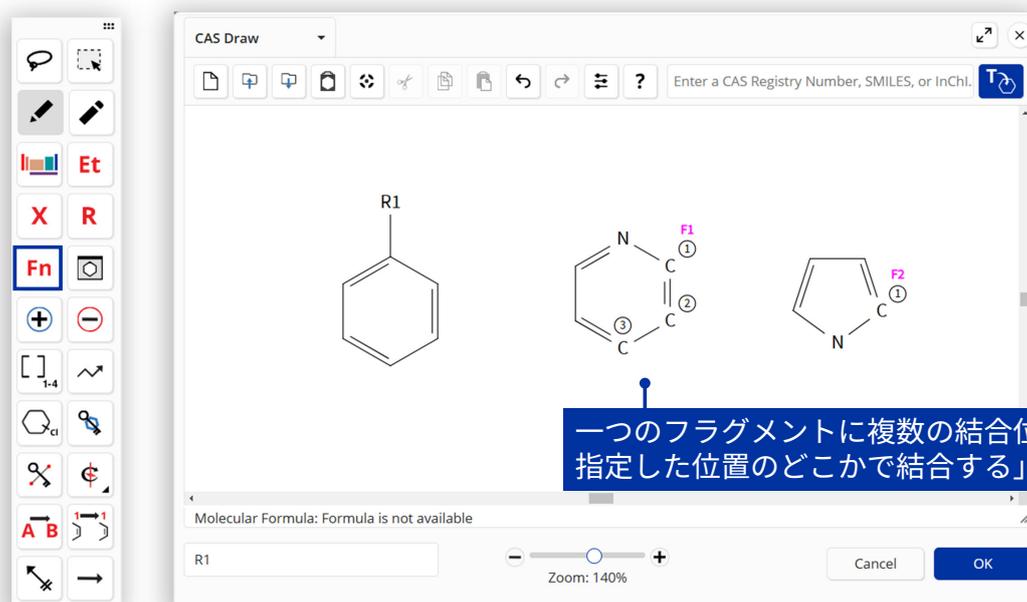
## Rグループメニューツール (2/2)

ペンシルツールでR1 を作図すると、定義したものをまとめて検索できる



## Rグループ結合点ツール

作図した構造に結合点を指定する (Rグループに追加する)



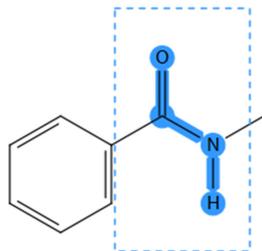
# 繰り返しグループツール (1/3)

繰り返し単位を含む構造\* をまとめて作図できる



## 操作方法

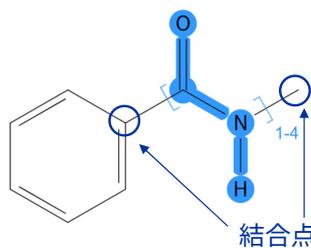
① 繰り返し部分を含めて基本骨格を作図し、 $[ ]_{1-4}$  をクリックし、繰り返し部分をドラッグする



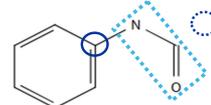
② 作図画面上部のボックスに繰り返し数を入力して「Apply」をクリックする

Select an atom to be repeated or drag to select a group to be repeated.  
Enter the number of repetitions:

From: 1 To: 4 Apply



繰り返しグループには結合点が2つ必要

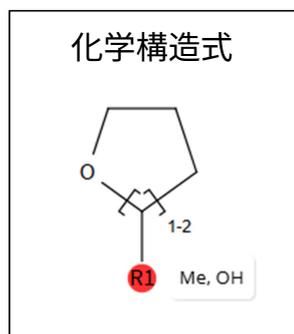


結合点が一つかない場合は繰り返しの指定はできない

\* ポリマーの繰り返し単位 (重合度) を指定するためのツールではない

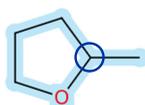
# 繰り返しグループツール (2/3)

環上のノードや R グループも含めることができる

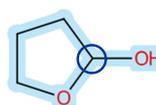


## 得られる回答の例

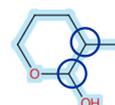
96-47-9



5371-52-8



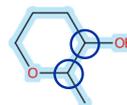
68258-41-3



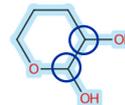
15990-88-2



30448-25-0



86728-74-7

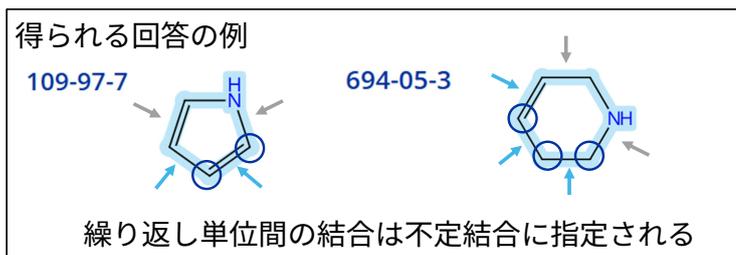
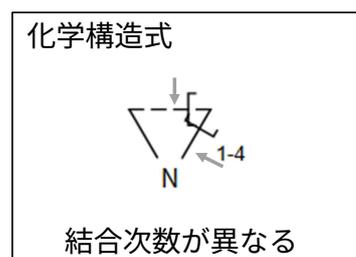
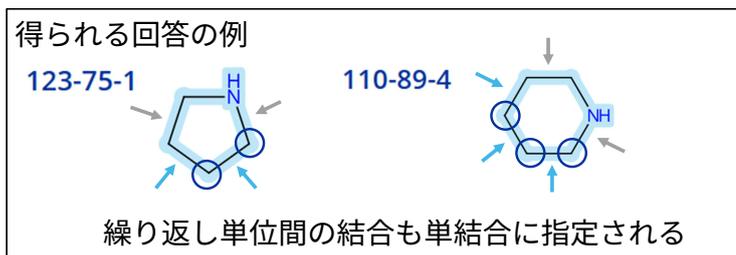
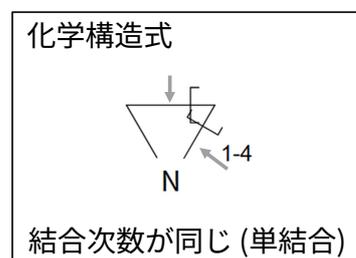


## ポイント

- 繰り返しの範囲は 0~20 を指定できる
- Ak のみを 2 回以上繰り返す指定はできない
- 立体結合は指定できない

## 繰り返しグループツール (3/3)

繰り返し単位の間での結合次数は、両側の結合次数が影響する



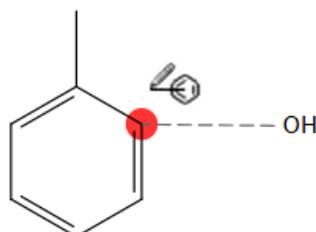
## 可変置換位置ツール (1/2)

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

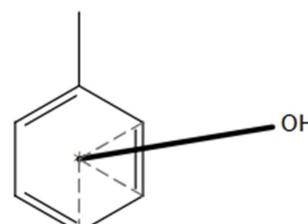


### 操作方法

① 基本骨格と置換基を離して作図し、 を選択し、置換基をクリックして結合位置までドラッグする

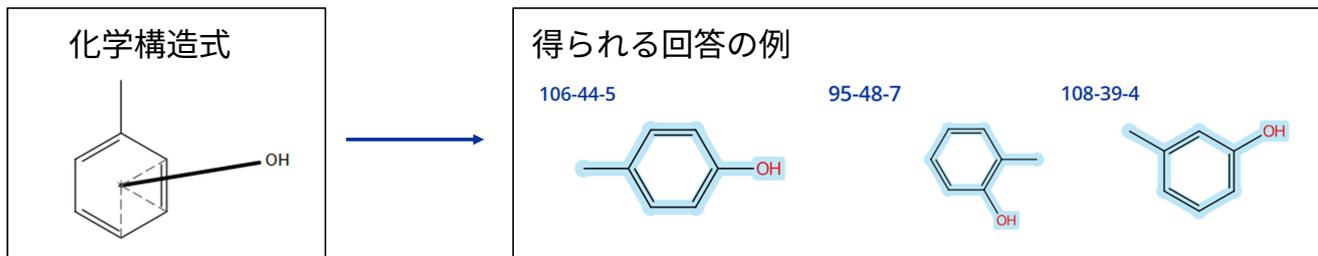


② ①の操作を繰り返し、結合位置を複数 (2箇所以上) 指定する



## 可変置換位置ツール (2/2)

(例) o-, m-, p-クレゾールをまとめて検索する

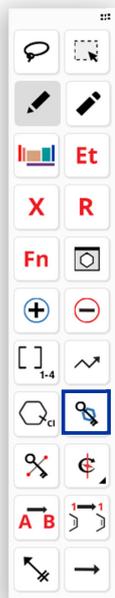


### ポイント

- 各置換基の結合先は20箇所まで指定できる
- 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
- 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不可
- 二つ以上の置換基が結合する場合は、置換基を必要な数だけ作図して、それぞれに可変置換位置を指定する

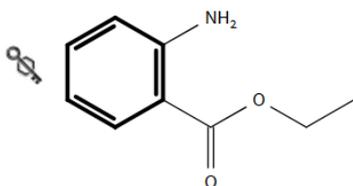
## Lock Ring ツール (1/2)

環の縮合を禁止する、もしくは鎖結合が環の一部になることを禁止する



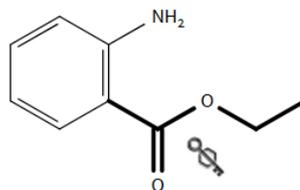
### - 操作方法

孤立を指定したい環にカーソルを合わせてクリックする



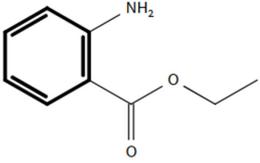
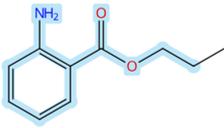
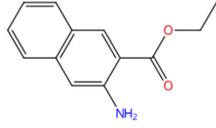
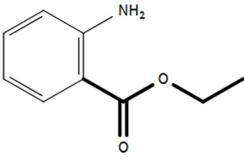
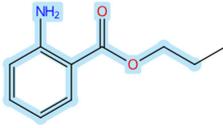
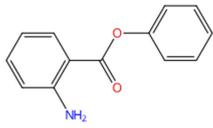
環の孤立を指定すると、環結合が太線で表示される

環の一部になることを禁止したい鎖結合をクリックする



デフォルトでは鎖結合が環の一部になることが許容されている

## Lock Ring ツール (2/2)

<p>化学構造式</p> 	→	<p>得られる回答の例</p> <p>30954-98-4</p> 	<p>除かれる回答の例</p> <p>5959-54-6</p> 
<p>化学構造式</p> 	→	<p>得られる回答の例</p> <p>30954-98-4</p> 	<p>除かれる回答の例</p> <p>10268-69-6</p> 

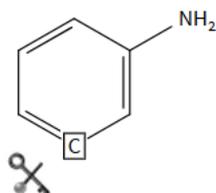
## Lock Atoms ツール (1/2)

特定のノードへの置換基の追加を禁止する



### 操作方法

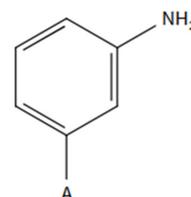
置換基の追加を禁止したいノードにカーソルを合わせ、クリックする



置換基の追加を禁止したノードは四角枠で囲まれる

### 参考: 特定の位置に置換基を指定

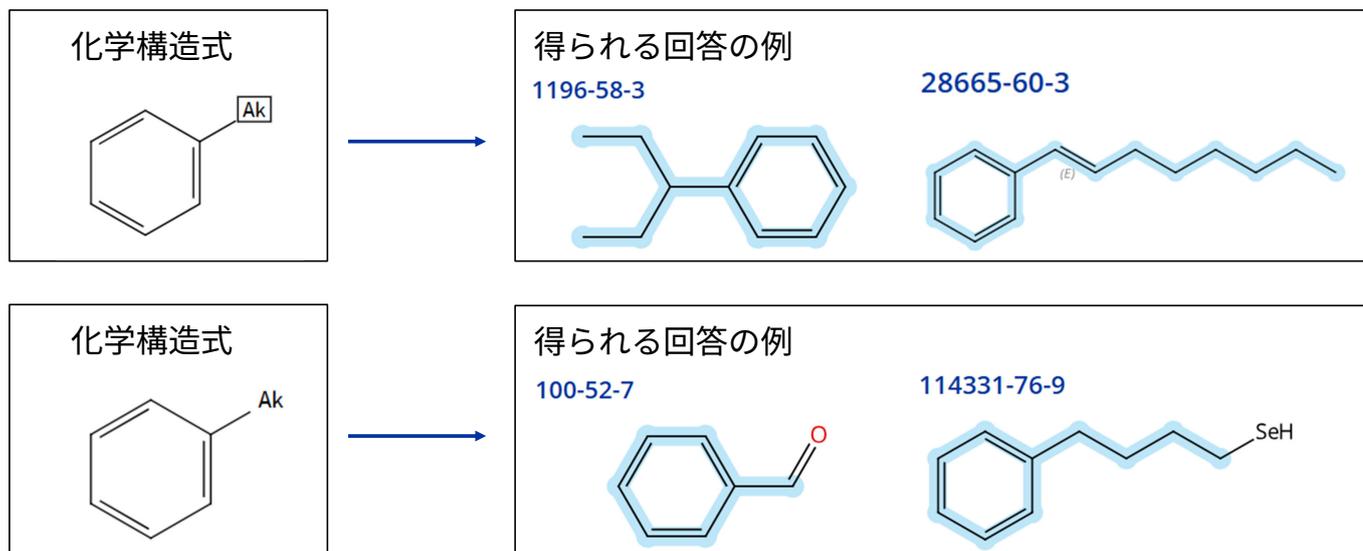
特定の位置に置換基があると指定したい場合は X メニューツールの A (H 以外の原子) を使用する



A の位置に必ず置換基があるという指定になる

## Lock Atoms ツール (2/2)

例) Ak (炭素鎖) はデフォルトでは無置換炭素鎖になっている



## 構造情報の活用

回答の構造情報を利用した作図 / CAS RN<sup>®</sup> 等を使った構造の呼び出し  
ChemDraw など他のツールの構造を使った検索 / テンプレートツール

# 回答の構造情報を利用した作図

物質 / 反応検索結果の構造図をクリックし、Edit Structure を選択する

The image shows a sequence of steps in the CAS interface. On the left, a search result for CAS RN 14339-33-4 (3-Chloro-1H-pyrazole) is displayed. A blue box highlights the chemical structure, and a blue arrow points to the 'Edit Structure' button in the 'CAS Draw' window. The 'CAS Draw' window shows the structure being edited, with the 'Edit Structure' button highlighted. The molecular formula is  $C_3H_3ClN_2$  (102.52).

# CAS RN<sup>®</sup> 等を使った構造の呼び出し

構造作図画面右上のテキストボックスに CAS RN<sup>®</sup> 等を入力する

The image shows the CAS Draw interface with a text box containing the CAS RN 1985606-14-1. A blue box with white text is overlaid on the screen, reading 'CAS RN<sup>®</sup>、SMILES、InChI から構造を呼び出す'. The molecular formula is  $C_{27}H_{23}F_2N_3O_7S$  (571.56).

- 他ツールで作図した構造を SMILES 形式または InChI 形式で保存することで CAS SciFinder で呼び出すことも可能

The image shows the BIOVIA Draw interface with the 'Generate Text from Structure' menu option highlighted. The menu options are: IUPAC Name, SMILES String, NEMA, InChI String, InChI Key, and ChimeString.

# ChemDraw Professional からの直接検索

ChemDraw Professional v18.2 以降では直接検索が可能

構造全体を選択してクリック

ChemDraw Professional

検索タイプを選択

検索タイプを選択

クリック

クリック

検索結果

CAS SciFinder

37 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



# テンプレートツール (1/2)

アルカロイド、アミノ酸などテンプレートに登録された構造を簡単に作図できる

② 作図画面上でクリック

① 目的の構造を選択

Templates

Search for a structure...

- > Alkaloid (9)
- > Amino Acid (25)
- > Bicarboyclic (8)
- > Carbohydrate (7)
- > Coordination (14)
- > Cycloalkane (13)
- > Miscellaneous (6)
- > Monocarboyclic (19)
- > N-containing (19)

Molecular Formula:  $C_{18}H_{27}N$  (257.42)

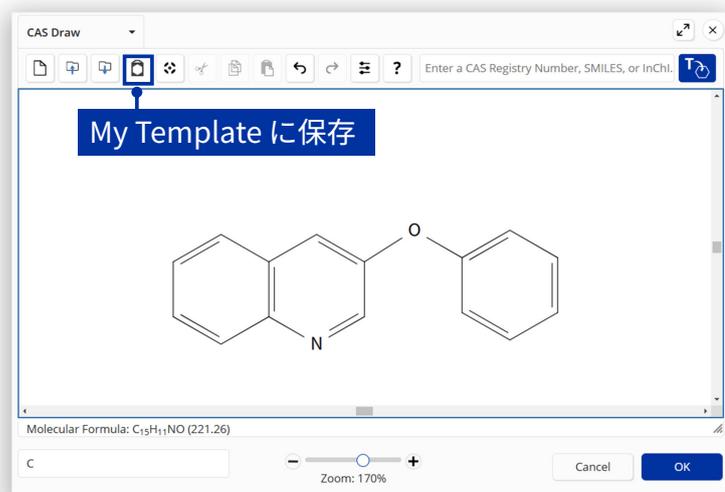
Zoom: 100%

38 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



# テンプレートツール (2/2)

作図した構造を My Template として保存可能



Templates

Search for a structure...

- > Polycarbocyclic (13)
- > S-containing (6)
- > Steroid (7)
- ✓ My Templates (1)
  - Upload Template (.cxf)

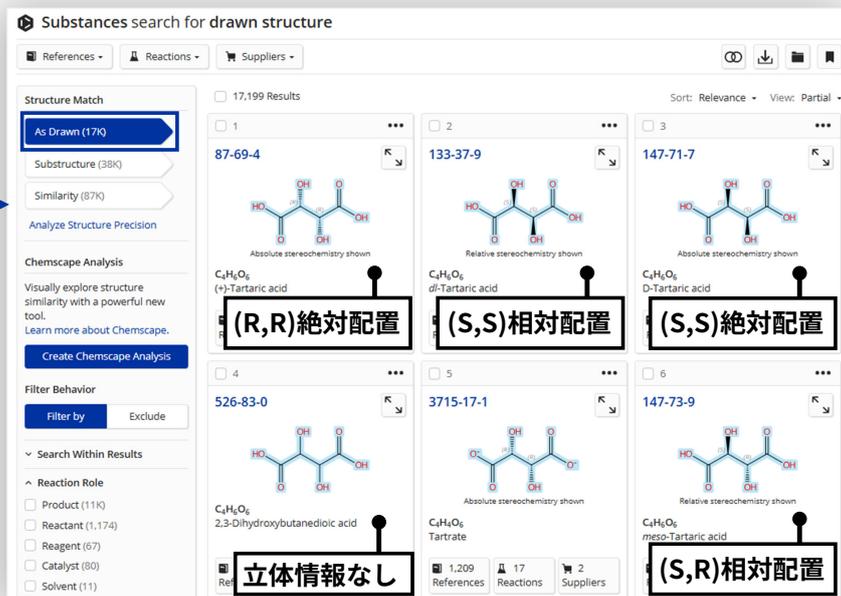
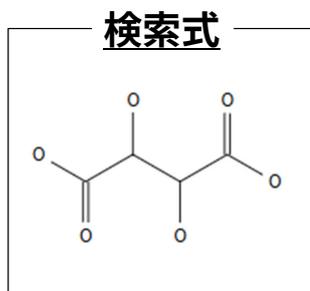
test structure

他のツールで作図した構造も .cxf 形式でアップロード可能

## 立体情報を含む構造の検索

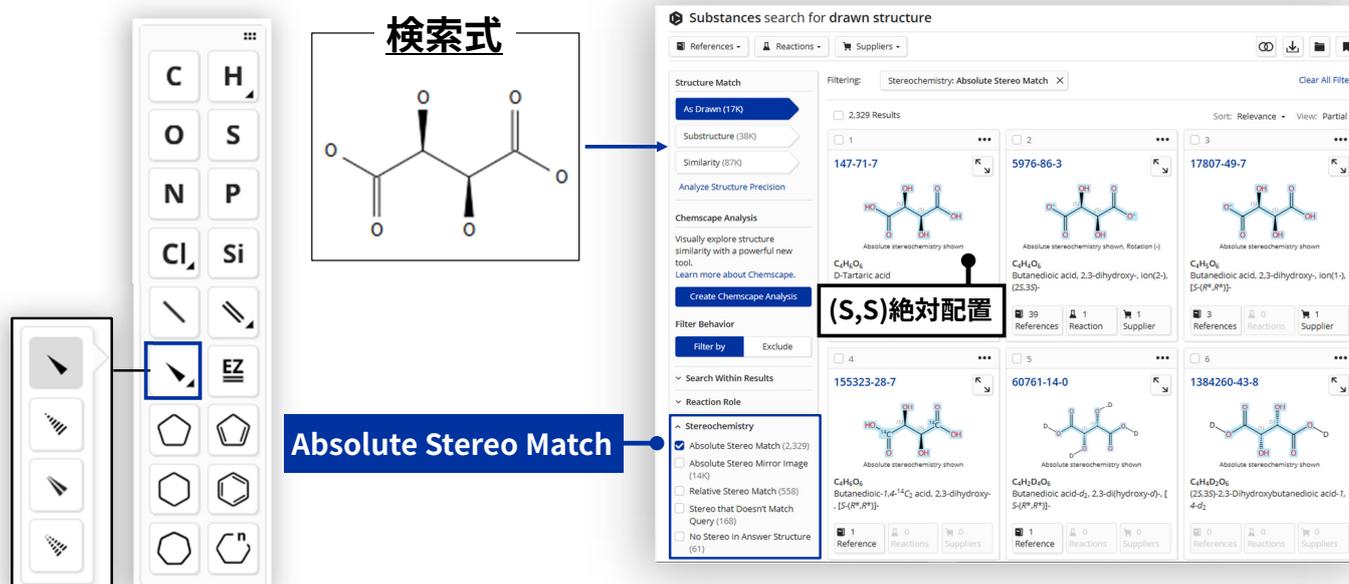
# CAS SciFinderの構造検索

検索式で立体を指定しない場合、回答には立体異性体が含まれる



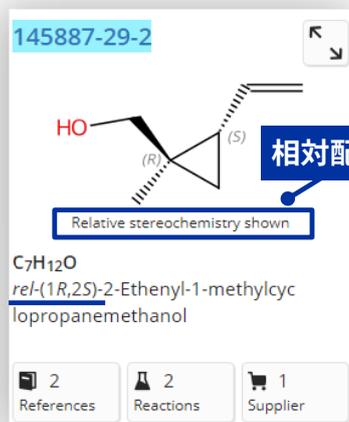
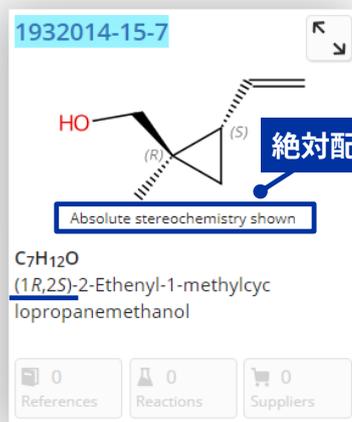
# 立体結合選択ツール

立体を指定して検索すると、Stereochemistry フィルターが有効になる



# 絶対配置と相対配置

絶対配置 (Absolute Stereochemistry) と相対配置 (Relative Stereochemistry) の登録がある



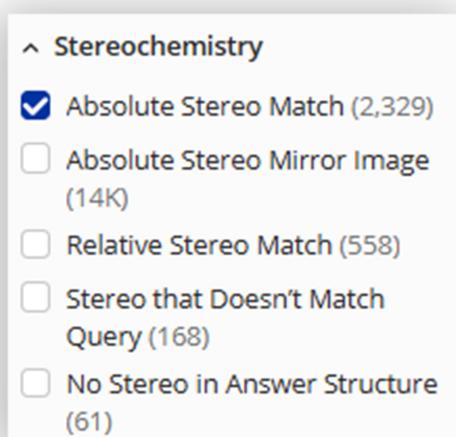
絶対立体配置とは

- 不斉中心を構成する置換基や原子の空間的配置が明確になっている物質

相対立体配置とは

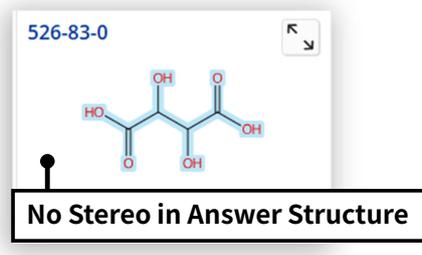
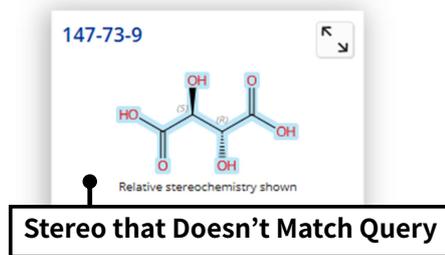
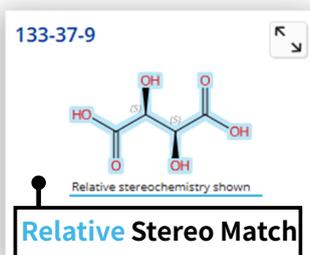
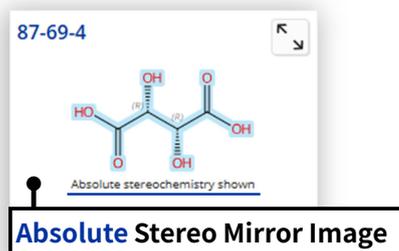
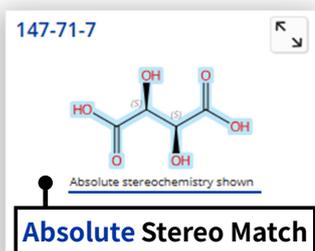
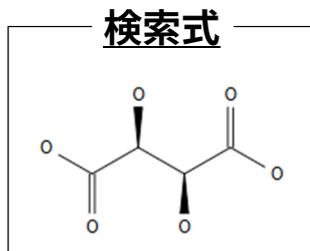
- 複数の不斉中心がある場合に、それぞれの絶対配置の相対的關係のみが分かっている物質
- rel-(1R, 2S)と表示されている物質は、絶対立体配置が (1R, 2S) または (1S, 2R) の両方の可能性がある

# Stereochemistry フィルター



- Absolute Stereo Match  
作図した通りの立体配置が絶対的に一致する構造
- Absolute Stereo Mirror Image  
作図した絶対配置の鏡像異性体
- Relative Stereo Match  
作図した通りの立体配置が相対的に一致する構造
- Stereo that Doesn't Match Query  
作図した通りの立体配置が一致しない構造
- No Stereo in Answer Structure  
立体情報を持たない構造

# Stereochemistry を指定した時の回答例

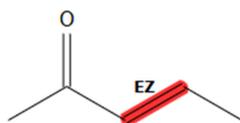


## EZ 結合

立体を指定して検索すると、Stereochemistry フィルターが有効になる

### 操作方法

EZ 結合のアイコンをクリックし、立体を指定したい結合を指定する



EZ を指定すると、二重結合の上に EZ の文字が表示される

### 得られる回答

Stereochemistry filters:

- Double Bond Geometry As Drawn (6) 3102-33-8
- No Stereo in Answer Structure (35) 625-33-2
- Stereo that Doesn't Match Query (3) 3102-32-7

Results:

- 作図通りの立体構造 (E) 3102-33-8
- 立体情報を持たない物質 625-33-2
- 作図と一致しない立体構造 (Z) 3102-32-7

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



# Thank you

Connect with us at [cas.org](https://cas.org)

 [linkedin.com/company/cas](https://linkedin.com/company/cas)

 [@CASchemistry](https://twitter.com/CASchemistry)

