

# CAS SciFinder® 構造検索ガイド

化学情報協会 情報事業部  
202602

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## 目次

### 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 Tips

- 構造検索結果に含まれる回答
- ChemDraw Professional からの直接検索
- 作図通りの構造に限定する方法
- フィルターのモード

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.

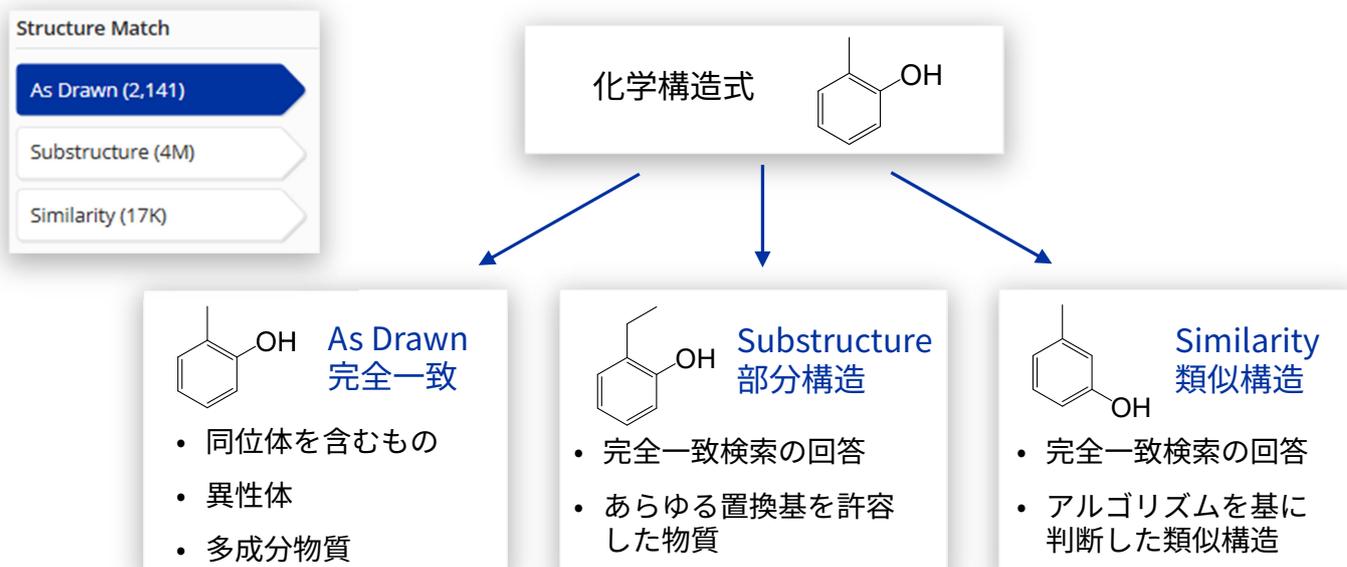


# 構造検索のタイプ

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	特長
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>

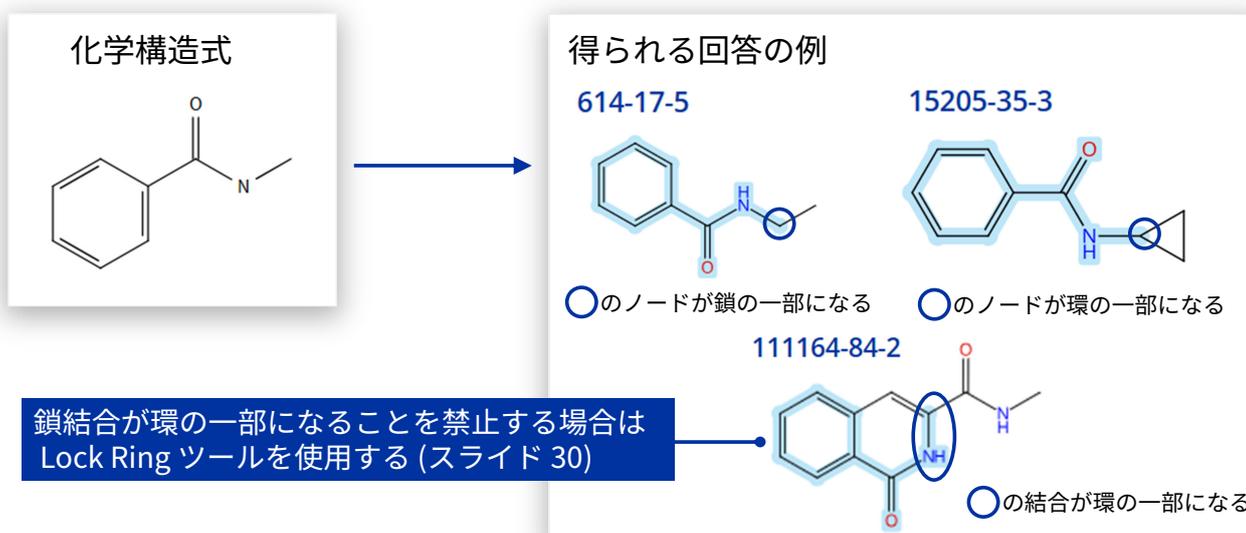
\* Tanimoto アルゴリズムに基づき類似性スコアを計算する

5 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## 【参考】 Substructure (部分構造検索)

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



6 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# 構造検索の TIPS

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

7 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.

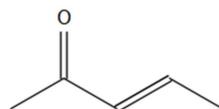


## 構造検索結果に含まれる回答

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

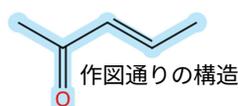
- 立体異性体
- 互変異性体 (ケト-エノール異性を含む)
- 双性イオン
- 電荷をもつ化合物
- ラジカル、ラジカルイオン
- 同位体元素を含む物質
- 混合物、塩
- 配位化合物
- 原料モノマーの構造が一致するポリマー

化学構造式

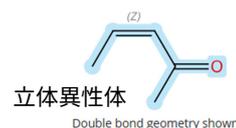


完全一致検索で得られる回答の例

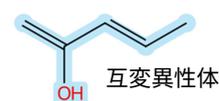
625-33-2



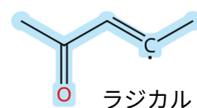
3102-32-7



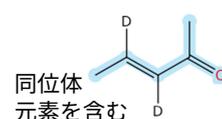
2015228-91-6



757960-11-5



2895442-96-1



712342-45-5



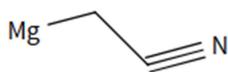
8 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# 例：金属を含む構造質問式

金属原子との結合位置が異なる物質、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

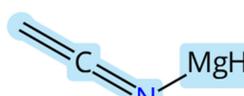
99749-06-1



238407-12-0



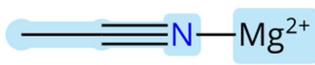
99749-07-2



58855-10-0



19511-75-2



373600-05-6



57450-24-5

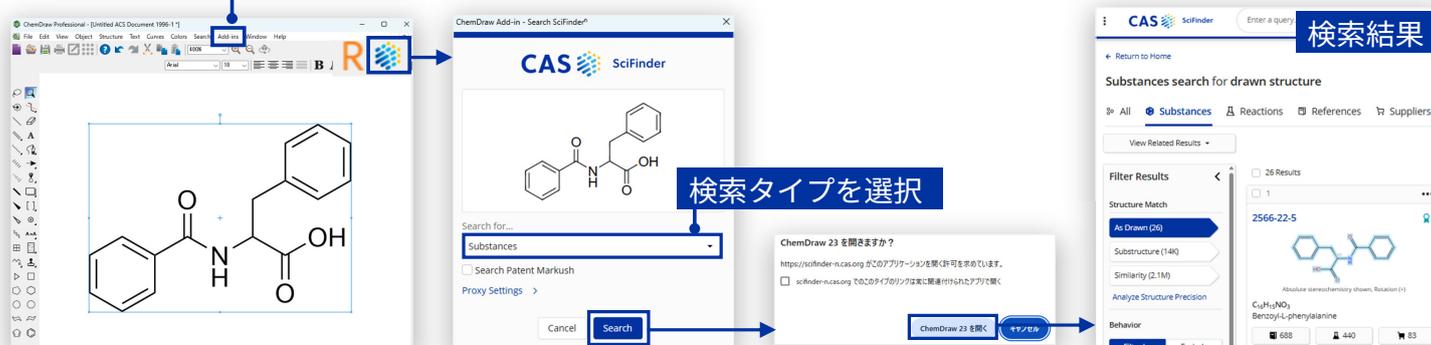


• 1/2 Mg<sup>2+</sup>

# ChemDraw Professional からの直接検索

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

Add-ins から検索可能



# 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

Filter Results < 44 Results

Structure Match

As Drawn (44)

Substructure (23.5M)

Similarity (6,785)

Analyze Structure Precision

Structure Precision

Conventional Results (22)

Tautomers and Zwitterions (22)

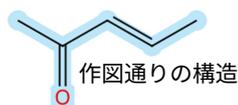
構造作図どおりの検索で得られた回答

互変異性体や双性イオン

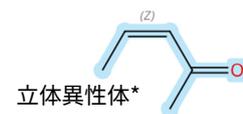
Draw

## Conventional Results に含まれる回答の例

625-33-2



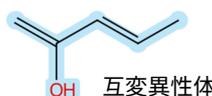
3102-32-7



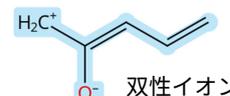
同位体元素を含む物質、原料モノマーの構造が一致するポリマー等も回答に含まれる

## Tautomers and Zwitterions に含まれる回答の例

2015228-91-6



712342-45-5



\* 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)

# フィルターのモード

Filter by と Exclude

Substances search for drawn structure

All Substances Reactions References Suppliers Patent Markush

View Related Results

Behavior

Filter by Exclude

Filtering: Isotopes: Not Containing Isotopes

Excluding: Substance Class: Polymer

同位体元素を含まない物質に限定 (Filter by)

ポリマーを除く (Exclude)

Filter by : 限定条件

Exclude : 除く条件

Search Within Results

84 Results

Sort: Relevance View: Partial

1 2 3

9-89-6 64482-88-8 64482-89-9

C5H4N4O2 Xanthine

C5H3N4O2 1H-Purine-2,6-dione, 3,9-dihydro-, ion(1-)

C5H2N4O2 1H-Purine-2,6-dione, 3,9-dihydro-, ion(2-)

14K 288 127 6 0 1 5 0 0

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

© 2026 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)

