

化学情報協会 情報事業部 202412

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



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
 © 2024 American Chemical Society. All rights reser

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





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



CAS

CASS Adivision of the American Chemical Society



ツールパレット一覧(2/2)





© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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

CAS



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)	 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 互変異性体も含む 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
Substructure (部分構造検索)	 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 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
Similarity* (類似性構造検索)	 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 作図した元素の種類や位置が異なる物質も得られる 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) 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)
* Tanimoto アルゴリズムに 9 © 2024 American Chemical	基づき類似性スコアを計算する Society. All rights reserved.

(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







11 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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 (ケトー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



CAS

CAS

(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



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





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 by:限定条件 **Filter Behavior** Exclude:除く条件 Filter by Exclude 同位体元素を含むものを除く - ポリマーを除く - 成分数で限定する Filter by Exclude Filter by ^ Isotopes ^ Number of Components Substance Class Containing Isotopes (5) Polymer (6) 1 (5) Not Containing Isotopes (17) Salt and Compound With (6) 2 (5) Organic/Inorganic Small 3(1) Molecule (5) CAS

15 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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





Н															He
Li Be										В	С	Ν	0	F	Ne
Na Mg										Al	Si	Ρ	S	Cl	Ar
K Ca S	ic Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb Sr	Y Zr	Nb	Мо	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Те	T	Xe
Cs Ba	* Hf	Та	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	TI	Pb	Bi	Po	At	Rr
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	Isotopes D T			▲ 重水素も作図可能											

CASS A dision of the American Chemical Society

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





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

P	E.N	Variables		記号	定義	内容			
		X	Any halogen	Х	Any halogen	ハロゲン一般 (F,Cl,Br,I,At)			
	Et I	Μ	Any metal			金属一般 (Ar,As,At,B,Br,C,Cl,F,			
		Α	Any atom except H	М	Any metal	H, He, I, Kr, N, Ne, O, P, Rn, S, Se,			
X	XR	Q	Any atom except C or H			Si,Te,Xe 以外の元素)			
Fn	0	Ak	Any carbon chain	А	Any atom except H	H以外の原子			
€	Θ	Cy	Any cycle	Q	Any atom except C or H	C,H 以外の原子			
[] 1-4	~*	Hy	Any heterocycle	Ak	Any carbon chain	炭素鎖 (デフォルトでは無置換炭素鎖*)			
\bigcirc	�			Су	Any cycle	環 (Cy = Cb + Hy)			
%	¢			Cb	Any carbocycle	炭素環			
A B	1→1			Hy	Any heterocycle	ヘテロ環			
^∗	\rightarrow			* Lock	Atoms ツールを使用すると置持	奥基を許容する 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





21 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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



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



繰り返しグループツール(3/3)

繰り返し単位の間の結合次数は、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



CAS

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



- 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

CAS

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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



Lock Ring ツール(2/2)



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 P ... 置換基の追加を禁止したいノードに 1 カーソルを合わせ、クリックする l**el** Et X R Fn 🔿 [], ~ Q. 🗞 置換基の追加を禁止したノードは **% €** 四角枠で囲まれる AB ⁵≽

- 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[®] 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



CAS RN[®] 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® 等を入力する



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

Ø Unnamed1 [modified] - Symyx E	BIOVIA Draw				
File Edit Options Object	Chemistry Window Help	DIOVIADIAW			
$\begin{array}{c c} \textcircled{\begin{tabular}{c} \hline \hline \\ \hline \end{array} \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \textcircled{\begin{tabular}{c} \hline \\ \hline \end{array} \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \hline \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \hline \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \hline \end{array} \begin{array}{c} \hline \end{array} \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \hline \end{array} \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \hline \end{array} \end{array} \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \hline \end{array} $	Calculator Clean	- ■ / U ■ =			
↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓	Valence Check Calculate as you Draw Run Chem Check Mark Potential Stereocenters Show Stereoconfiguration AutoMap Reactions UnMap Reactions	4 b			
	Generate Text from Structure	IUPAC Name			
+	Generate Structure from Text Structure Resolver	SMILES String NEMA			
→ 1. • >er	No Structure Set Stereochemistry	InChI String InChI Key ChimeString			
AA1 C 100% - 3.11:0.05 Current To	Show Sequence View Convert ISIS/Draw Pseudoatom Seq 3D	uence			



ChemDraw Professional からの直接検索

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



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



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



39 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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



43 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

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関係のみが
 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 (2,329)
- Absolute Stereo Mirror Image (14K)
- Relative Stereo Match (558)
- Stereo that Doesn't Match Query (168)
- No Stereo in Answer Structure (61)

- 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







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



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

in linkedin.com/company/cas









