


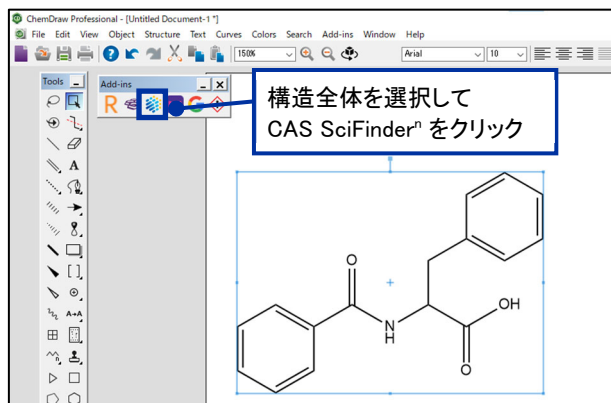
ChemDraw からの直接検索

■ ChemDraw Professional の作図画面から直接 CAS SciFinder[®] を検索

ChemDraw Professional v.18.2* 以降では、CAS SciFinder[®] の構造作図画面を経由することなく、直接 CAS SciFinder[®] を検索することができる。

* ChemDraw についての詳細は PerkinElmer の HP にてご確認ください。

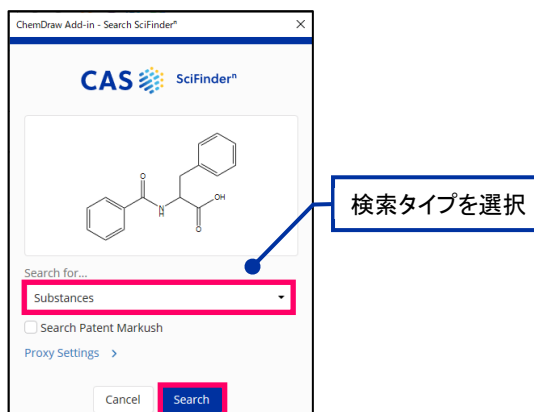
ChemDraw Professional の構造作図画面で CAS SciFinder[®] のボタン  をクリックするか、Add-ins メニューから Search SciFinder[®] を選択。



検索タイプ (Substances, Reactions, References, Suppliers) を選択するダイアログが表示される。

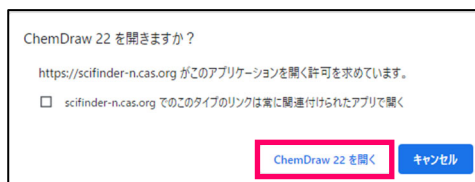
プルダウンから検索したい情報を選択し、Search をクリック。

- CAS SciFinder[®] にログインしていない場合はユーザーネームとパスワードの入力を求められるので、入力しログインする。

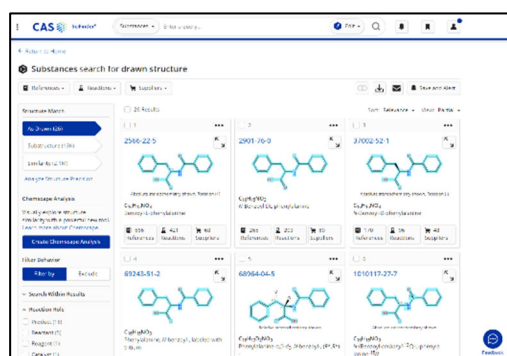


ChemDraw リンクのダイアログが表示されたら、「ChemDraw 22* を開く」をクリック。

* 利用中の version の数字が表示される。



CAS SciFinder[®] で検索が行われ、結果が表示される。



他ツールの構造を使った検索

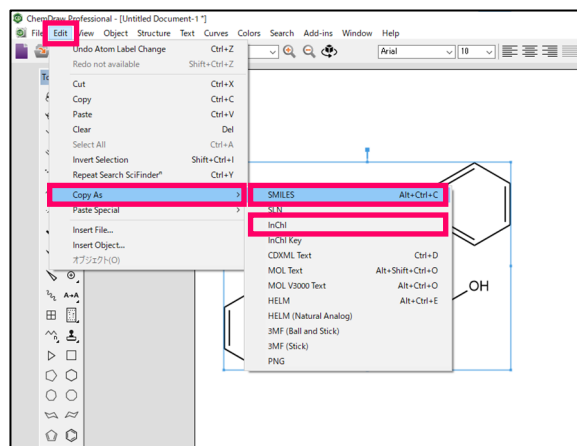
■ SMILES または InChI 形式の情報を利用

他ツールで作図した構造を SMILES 形式 または InChI 形式でコピーし、CAS SciFinder[®] の構造作図画面に貼り付けると構造を呼び出すことができる。


ChemDraw

構造全体を選択し、Edit メニューの Copy As から SMILES (または InChI) を選択。

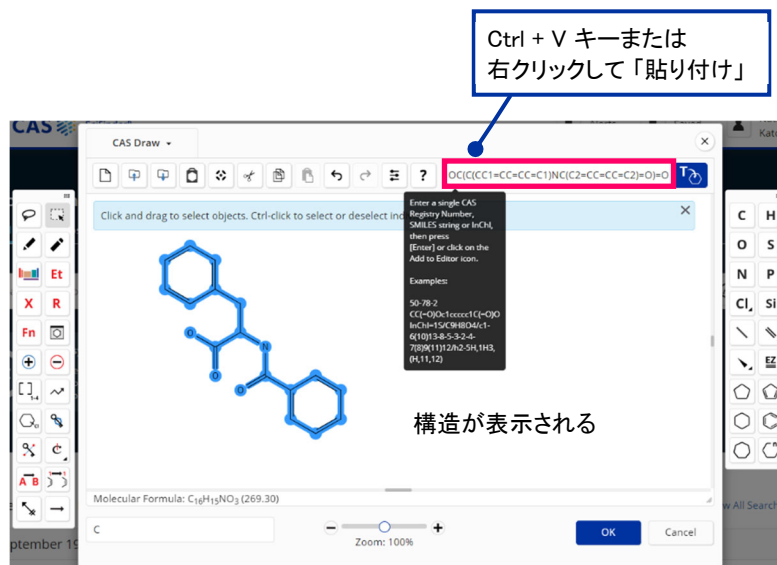
* BIOVIA Draw でも SMILES 形式 または InChI 形式でコピーできる。



CAS SciFinder[®]

CAS SciFinder[®] の構造作図画面を起動後、画面右上の入力ボックス*にコピーした SMILES または InChI のデータを貼り付けて、 をクリック。

* CAS 登録番号 (CAS RN[®]) を入力して、構造を呼び出すこともできる。



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

202309