

CAS SciFinderⁿ 構造作図ガイド

2023 年 3 月

<https://scifinder-n.cas.org/>

構造作図画面	1
構造作図画面のツールパレット	2
ペンシルツール	3
ショートカットメニューツール	3
X メニューツール	3
R グループメニューツール / R グループ結合点ツール	4
繰り返しグループツール	6
可変置換位置ツール	7
Lock Ring ツール	8
Lock Atoms ツール	9
参考 : ChemDraw Professional からの直接検索	10
参考 : 他ツールの構造を使った検索	11
サポート	12

構造作図画面

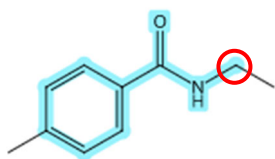
- Draw ボタンをクリックすると、構造作図ツールが起動します。

The screenshot shows the CAS SciFinder web interface. At the top, there's a search bar and a 'Draw' button highlighted with a red box. A large blue arrow points from the 'Draw' button to the 'CAS Draw' tool interface below. The 'CAS Draw' interface includes a toolbar on the left with various drawing tools, a central canvas showing a chemical structure (N-methylbenzamide), and a right-hand panel with element and ring libraries. Several blue callout boxes provide instructions:

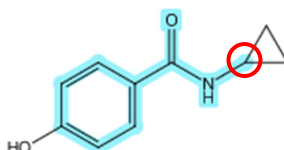
- 構造作図画面は CAS Draw または ChemDoodle から選択できます (The structure drawing screen can be selected from CAS Draw or ChemDoodle).
- CAS RN®, SMILES, InChI から構造を呼び出して利用できます (Structures can be called up and used from CAS RN®, SMILES, or InChI).
- エクスポート (Export)
- インポート (Import)
- Undo (直前の操作の取り消し) (Undo (cancel the previous operation))
- Redo (取り消した操作のやり直し) (Redo (redo the canceled operation))
- クリックするとさらにメニューが表示され、Lock Ring、Lock Atoms、回転、反転ツールが選択できます (Clicking will display a further menu, and Lock Ring, Lock Atoms, rotation, and flip tools can be selected).
- 拡大/縮小 (Zoom in/out)

参考: CAS SciFinder[®] で上図の構造を Substructure 検索した結果には、下記 (1)~(3) のすべてが含まれます。

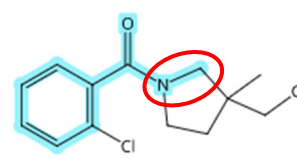
(1) 赤で示したノードが鎖の一部になる回答



(2) 赤で示したノードが環の一部になる回答



(3) 赤で示した結合が環の一部になる回答



鎖結合は環の一部になる物質もヒットします。鎖結合が環の一部になることを禁止したい場合は Lock Ring ツールを使います。

構造作図画面のツールパレット

- ツールパレットには、化学構造を作図するためのツールがあります。▲が付いているボタンをクリックするとさらに選択メニューが表示されます。




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		反応ロールツール*2	
原子マッピングツール*2		Lock Ring 選択ツール	クリックするとさらにメニューが表示される Lock Ring ツール*1 Lock Atoms ツール 回転 反転
反応鎖サイトツール*2		反応矢印ツール*2	

*1 マルケージ構造検索では構造全体に対して自動的に適用されます
 *2 化学反応式用のツールです (参照: [反応検索のテクニック](#))

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	クリックするとさらにメニューが表示される 二重結合 三重結合 不定結合 (結合次数を問わない)
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	


ペンシルツール

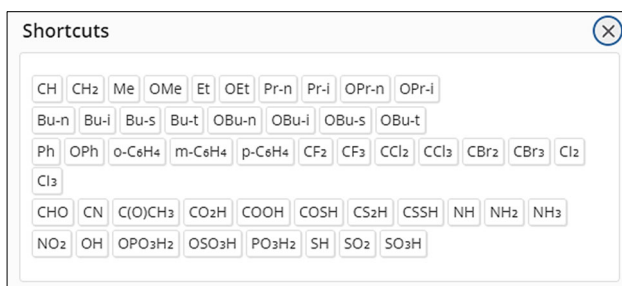
■ ノードや結合を作図する際に使用します。

-  をクリックし、作図します。デフォルトは、ノードは炭素原子、結合は単結合です。
 - すでに作図した構造のノードを変更したい場合は、原子パレットや原子メニューツールから目的のノードを選択し、変更したいノードにカーソルを合わせ、赤くハイライトさせた状態でクリックします。
 - すでに作図した構造の結合次数を変更したい場合は、 を選択した状態で変更したい結合にカーソルを合わせ、赤くハイライトさせた状態でクリック* を繰り返します。
 から目的の結合を選択し、変更したい結合をクリックすることでも変更できます。
 * 単結合 → 二重結合 → 三重結合 → 単結合の順に変更されます。

ショートカットメニューツール

■ ショートカットを作図する際に使用します。

-  をクリックするとショートカットが表示され、主要な官能基等を簡単に作図できます。




ポイント：

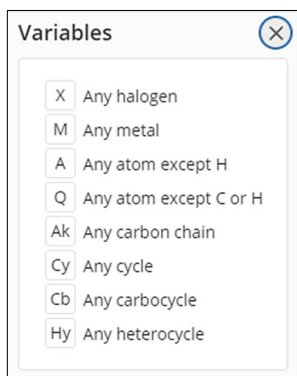
ショートカットの Ph を使用して Substructure 検索すると、ベンゼン環に置換基が付かない回答 (C6H5-) のみが得られます。置換基がついたベンゼン環の回答も検索したい場合はショートカットを利用せず、ベンゼン環を作図してください。

X メニューツール

■ 可変原子を作図する際に使用します。

-  をクリックすると、可変原子の一覧が表示されます。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ます。

ハロゲン
金属
H 以外の原子
C, H 以外の原子
鎖式炭素
任意の環
炭素環
ヘテロ環



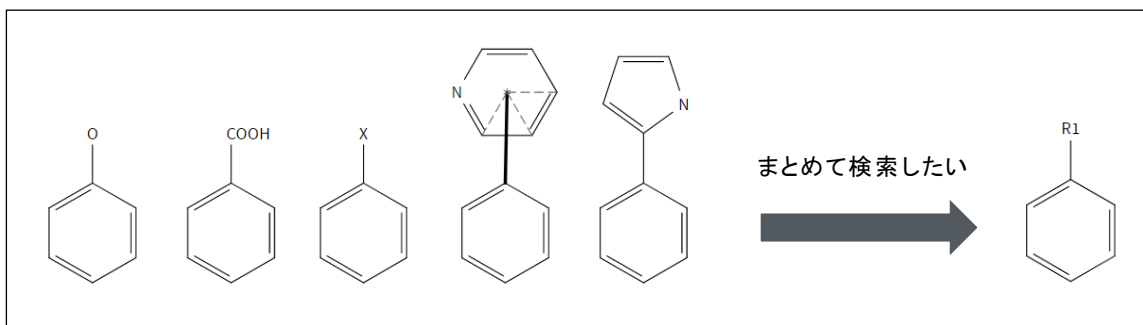
ポイント：

Ak (炭素鎖) を作図するとデフォルトでは四角で囲まれた状態になります。これは、置換が禁止されていることを意味し、置換基が付かない直鎖、枝分かれ、あるいは不飽和の炭素鎖に限定されます。

Ak の置換を許容するには、Lock Atoms ツール (後述) をクリックした後、該当する Ak の上にカーソルを移動させてからクリックし、四角の囲みを外します。

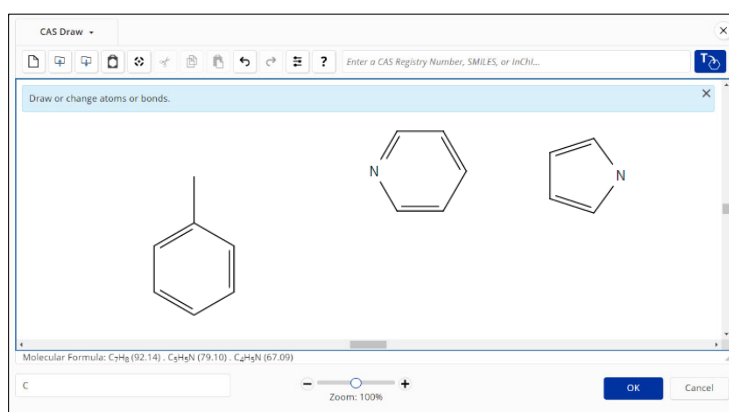
R グループメニューツール / R グループ結合点ツール

- 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する際に使用します。



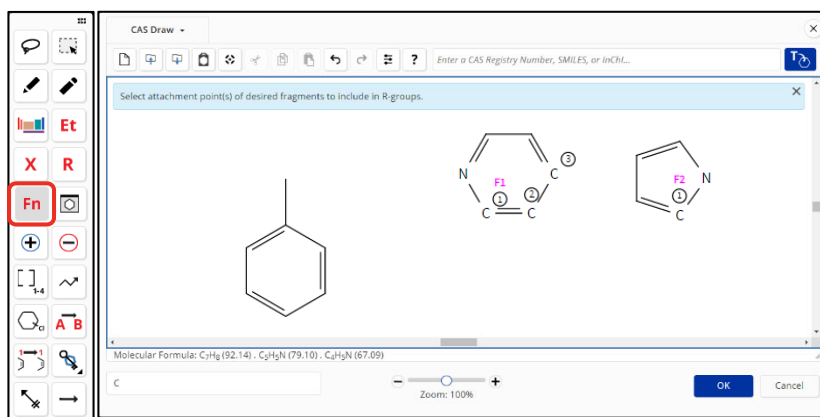
■ 作図方法

- ① 基本骨格を作図します。原子、ショートカット、可変原子にない置換基は、フラグメントとして基本骨格から離して作図します。



- ② **Fn** をクリックして、フラグメントに結合位置を指定します。

一つのフラグメントに複数の結合位置を指定すると、「指定した位置のどこかで結合する」という作図になります。



- ③ **R** をクリックし R グループメニューを表示します。

- ④ R1 の定義を指定します。入力ボックスに元素記号等を手入力するか、Atoms、Variables、Shortcuts、Fragments の一覧から選択します。

R グループの選択

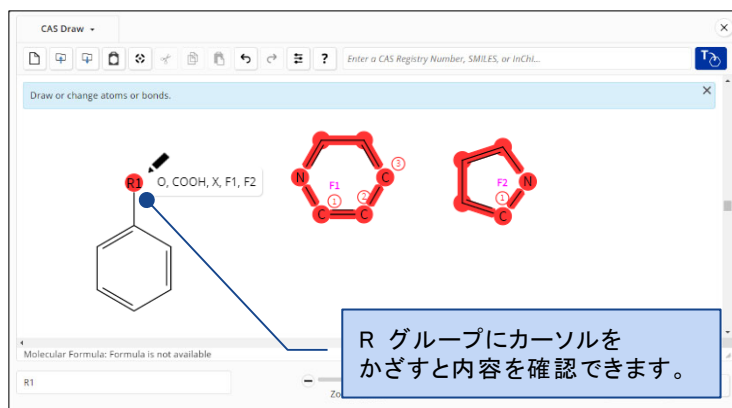
最大 20 個の R グループ (R1-R20) を指定できます。

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) の値を指定できます

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ません

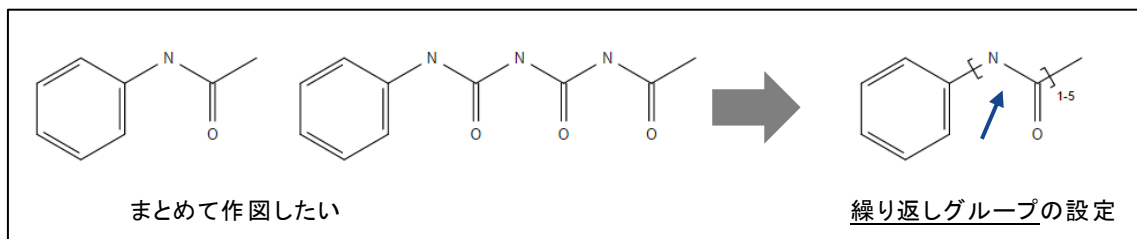
- ⑤ R1 の定義を指定したら、ペンシルツールで R1 を作図します。



R グループにカーソルをかざすと内容を確認できます。


繰り返しグループツール

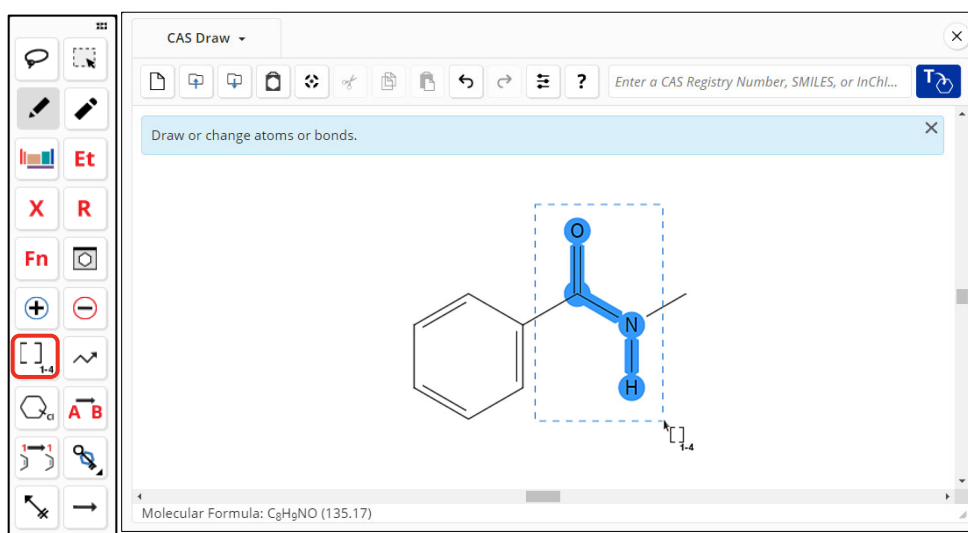
- 繰り返し単位を含む構造* を作図する際に使用します。



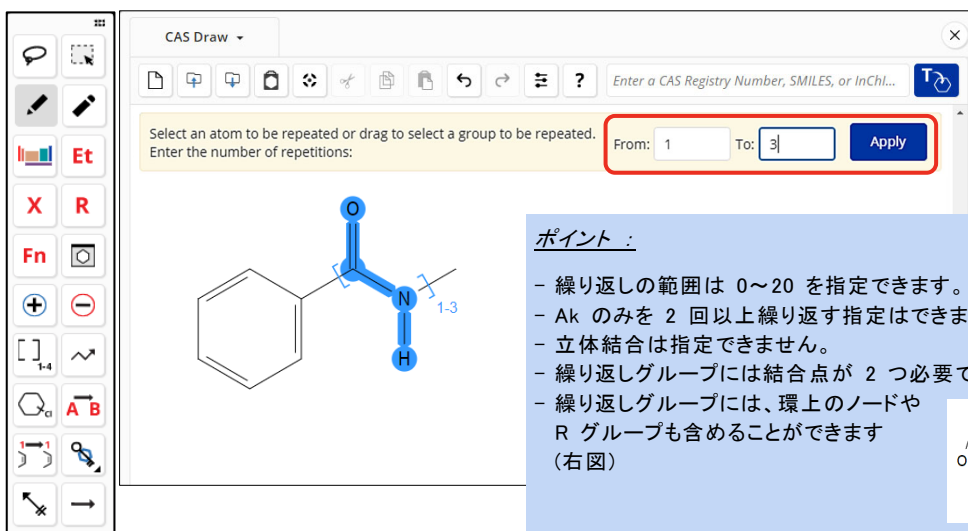
* ポリマーの繰り返し単位（重合度）を指定するためのツールではありません

■ 作図方法

- ① 繰り返し部分を含めて基本骨格を作図します。
- ②  をクリックし、繰り返し部分をドラッグします。

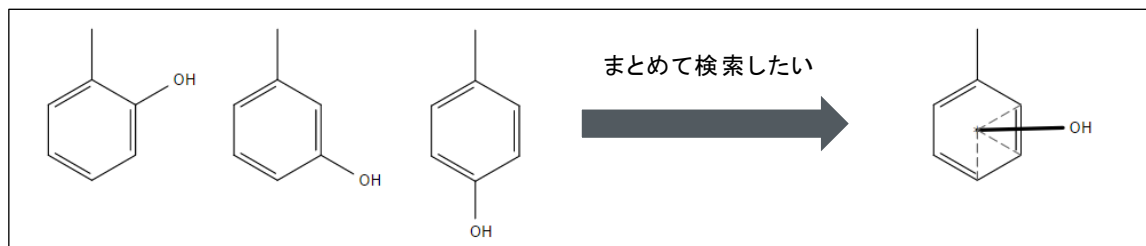


- ③ 作図画面上部のボックスに繰り返し数を入力して「Apply」をクリックします。




可変置換位置ツール

■ 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際に使用します。



■ 作図方法



- ① 基本骨格と置換基を離して作図します。
- ②  をクリックし、置換基をクリックして結合位置までドラッグします。
- ③ ② の操作を繰り返し、結合位置を複数 (2 箇所以上) 指定します。

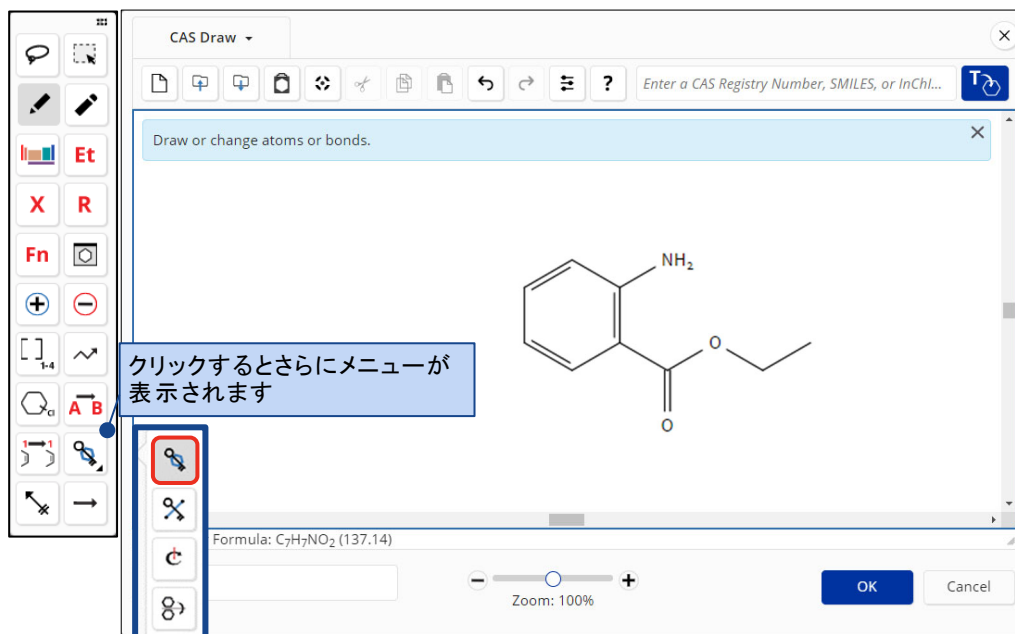
ポイント：

- 各置換基の結合先は 20 箇所まで指定できます。
- 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です。
- 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できません。
- 複数の置換基に可変置換位置を指定したい場合は、置換基を必要な数だけ作図し、各置換基に対して可変置換位置を指定します。

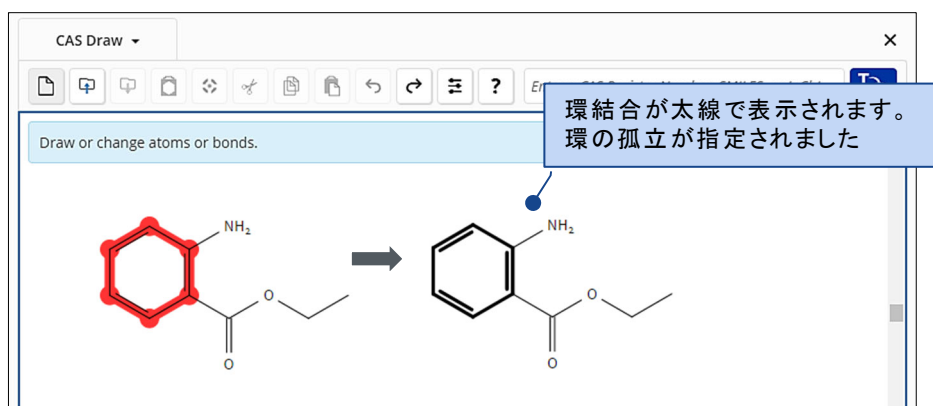
Lock Ring ツール

- 環の縮合を禁止する際に使用します（環の孤立化）(A)。
また、鎖結合が環の一部になることを禁止する際にも使用します（B）。

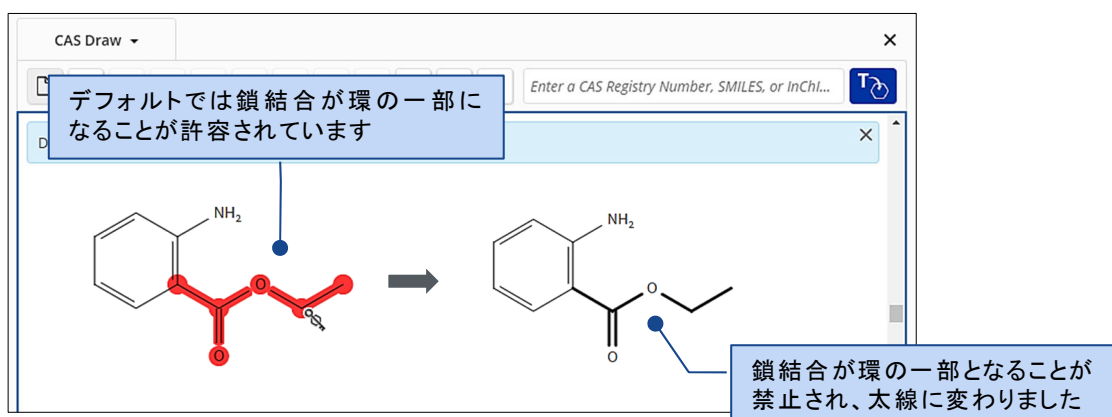
①  をクリックします。さらにメニューが表示されるので、 をクリックします。



② (A) 孤立を指定したい環にカーソルを合わせてクリックします。





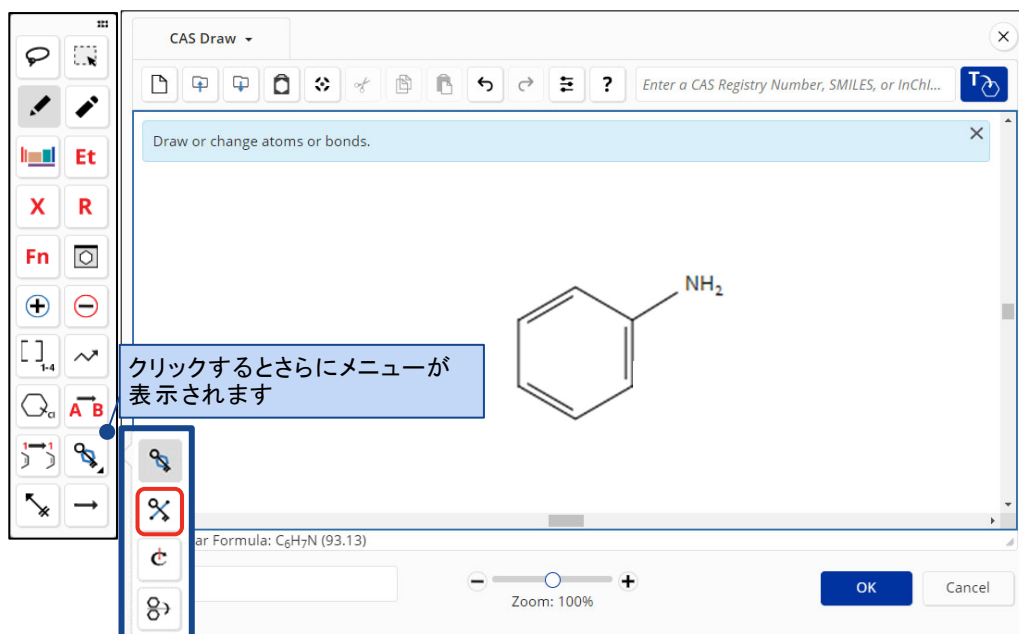
(B) 環の一部になることを禁止したい鎖結合をクリックします。



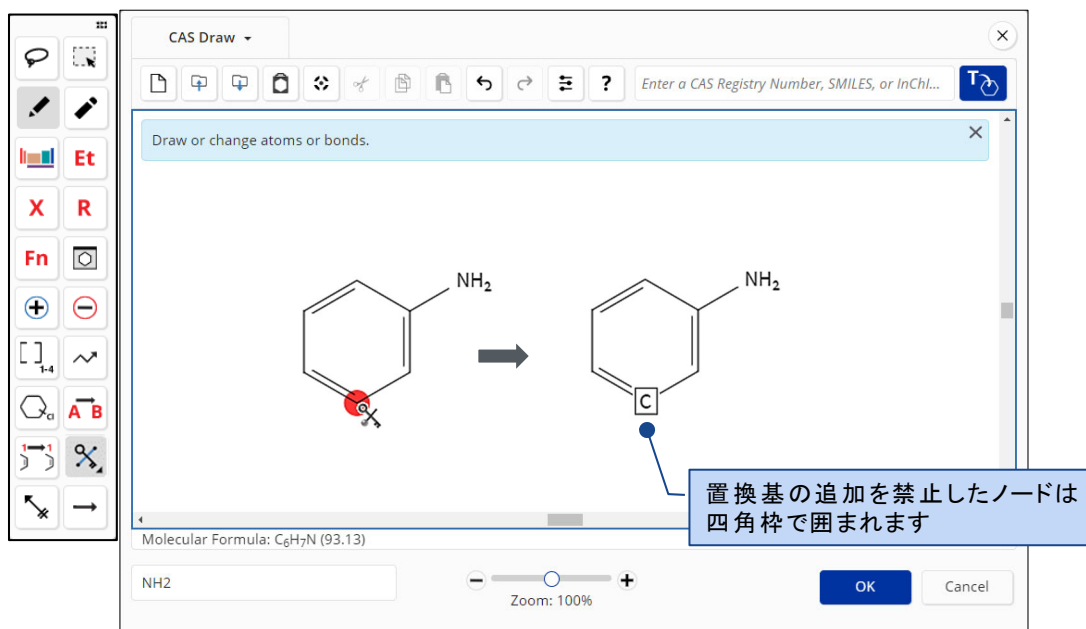
Lock Atoms ツール

■ 特定のノードへの置換基の追加を禁止する際に使用します。

- ①  をクリックします。さらにメニューが表示されるので、 をクリックします。




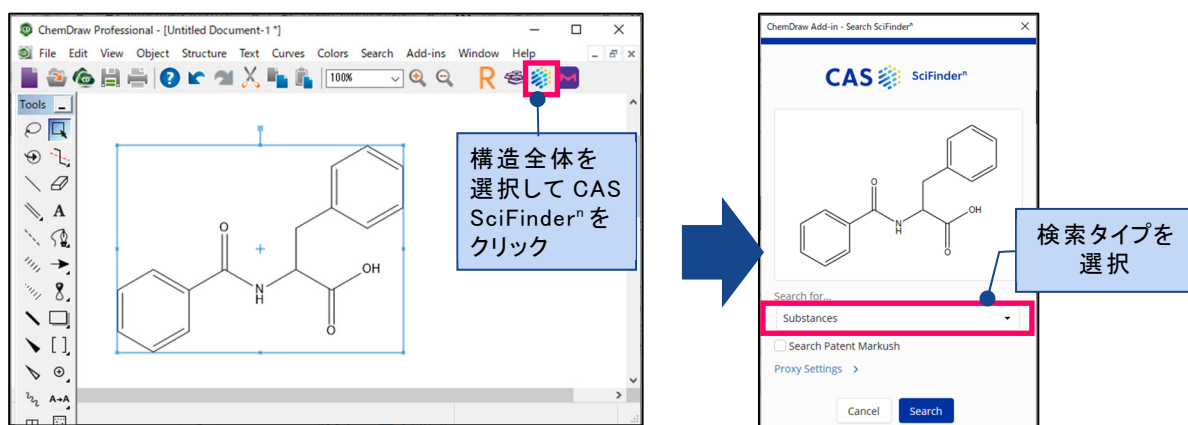
- ② 置換基の追加を禁止したいノードにカーソルを合わせ、クリックします。



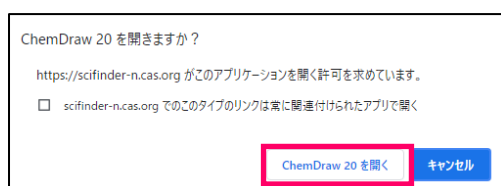
参考 : ChemDraw Professional からの直接検索

- ChemDraw Professional v18.2 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[®] で検索することができます。

- ① 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[®] を選択します。
- ② 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ので、プルダウンメニューから検索したい情報を選択し、Search をクリックします。

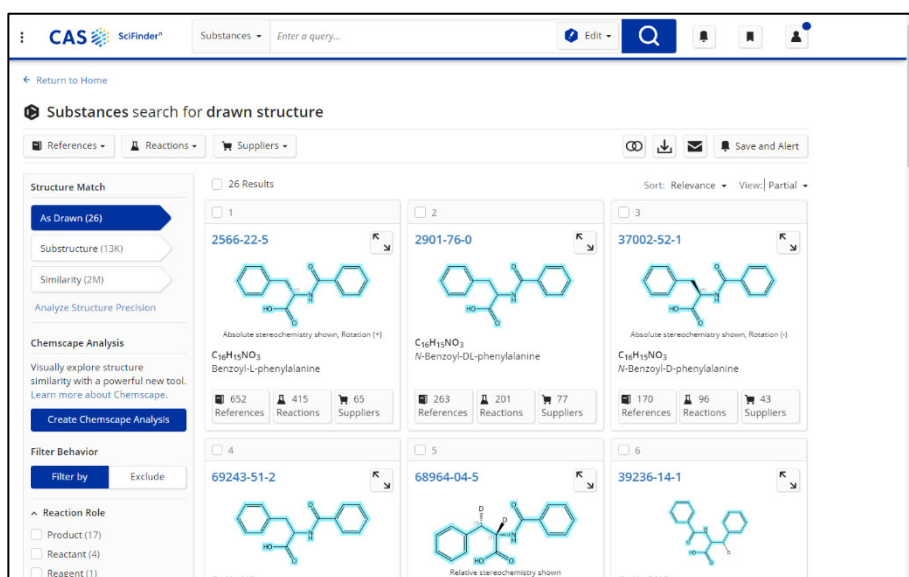


- ③ ChemDraw リンクのダイアログが表示されたら「ChemDraw 20* を開く」をクリックします。



* 利用中のバージョンが表示されます

- ④ CAS SciFinder[®] で検索が行われ、結果が表示されます。
ChemDraw についての詳細は Perkin Elmer の HP にてご確認ください。



参考：他ツールの構造を使った検索

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

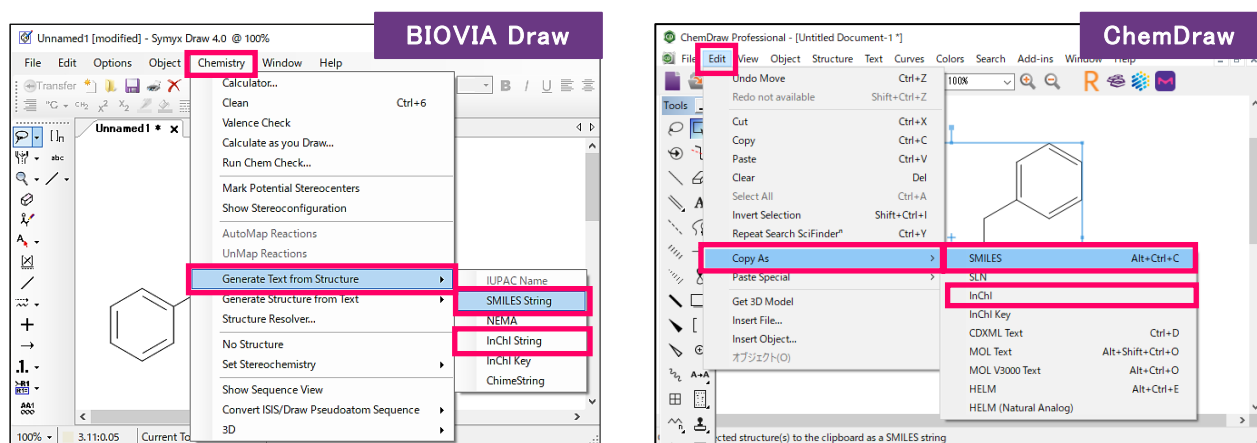
① 他ツールで作図した構造を SMILES 形式または InChI 形式で保存します。


－ BIOVIA Draw の場合（左）

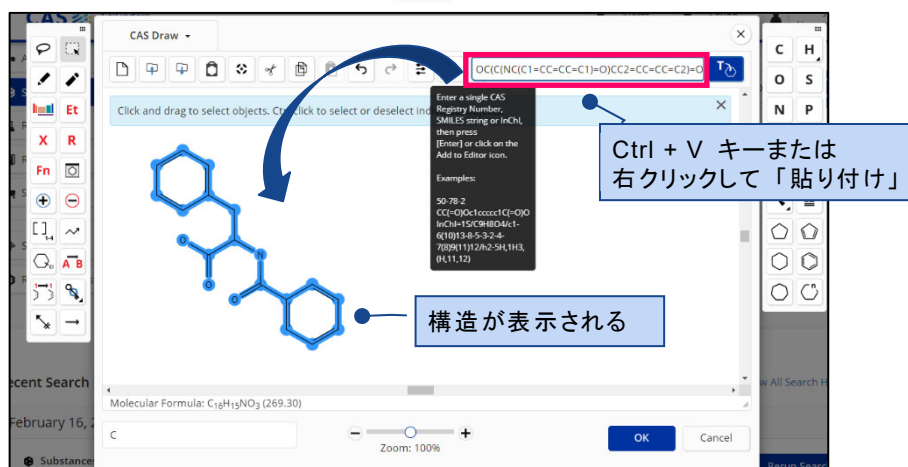
Chemistry メニューの Generate Text from Structure から SMILES String または InChI String を選択します。

－ ChemDraw の場合（右）


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



② CAS SciFinder[®] の構造作図画面を起動し、画面右上の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  をクリックします。



サポート

- CAS SciFinder[®] 画面右上の  より What's New? と Help and Support を利用できます。



- 化学情報協会のホームページでは、CAS SciFinder[®] のユーザーマニュアルや動画を多数掲載しております。

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/cas-scifinder-n/documents/>

ユーザーマニュアル

検索ガイド (基本操作) | 文献検索 | 化学物質検索 | 反応検索 | 解析機能・その他 | 設定 | 利用環境 | 講習会、セミナー | 操作方法の動画 (YouTube)

検索ガイド (基本操作)

- CAS SciFinder[®] 検索ガイド (PDF/入門動画/太字編動画)
- CAS SciFinder[®] 構造作図ガイド (PDF/動画)
- CAS SciFinder[®] Search Guide (English)

CAS SciFinder Discovery Platform

CAS SciFinder[®]

- 概要
- 追加コンテンツ
- ユーザーマニュアル**
- ニュースレター
- よくあるご質問

各種技術資料を掲載

- 検索ガイド
- 構造作図ガイド
- テーマ別資料
- セミナー資料
- 動画

CAS SciFinder[®] オンライン講習会

CAS SciFinder[®] の基本的な操作やトピック別の検索についてご紹介するオンライン形式の講習会です。
お気軽にご参加ください。

<https://www.jaici.or.jp/workshop-events/cas-sf-webinar/>



ヘルプデスク (平日 9:00~17:00)

検索方法に関するご質問について、専門スタッフがお答えします。
お困りのことがありましたらお気軽にご利用ください。

TEL 0120-003-462

e-メール support@jaici.or.jp