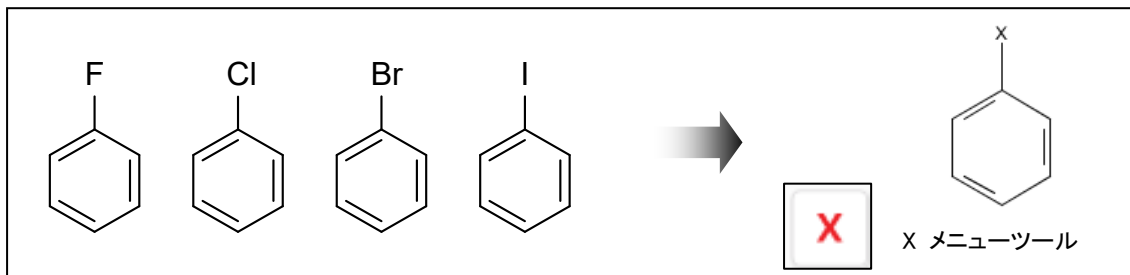


## ■ 構造作図ツール

CAS SciFinder<sup>n</sup> では、誘導体検索に便利な様々な機能を搭載している。

### ケース 1 : 特定の原子グループの指定



**Variables** ×

X Any halogen

M Any metal

A Any atom except H

Q Any atom except C or H

Ak Any carbon chain

Cy Any cycle

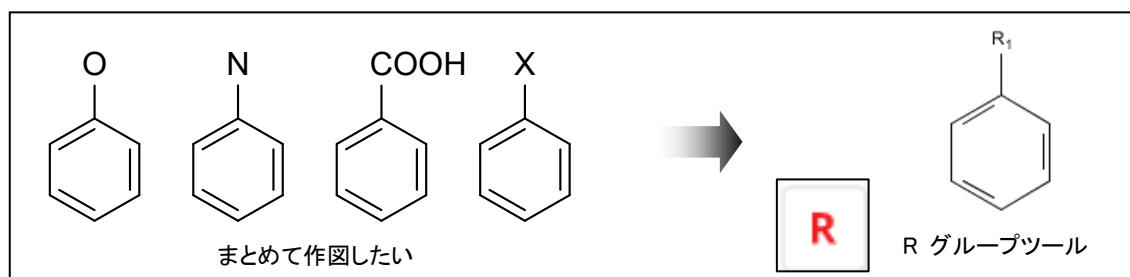
Cb Any carbocycle

Hy Any heterocycle

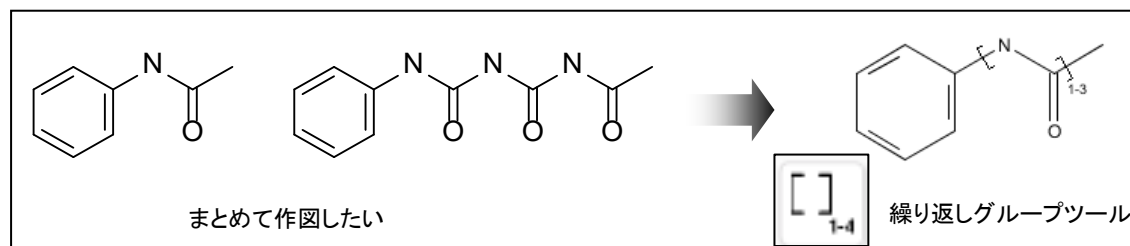
記号	意味	日本語
X	Any halogen	ハロゲン一般 (F, Cl, Br, I, At)
M	Any metal	金属一般 (Ar, As, At, B, Br, C, Cl, F, H, He, I, Kr, N, Ne, O, P, Rn, S, Se, Si, Te, Xe 以外の元素)
A	Any atom except H	H 以外の原子
Q	Any atom except C or H	C, H 以外の原子
Ak	Any alkyl chain	炭素鎖 (Ak の場合, 無置換炭素鎖)
Cy	Any cycle	環 (Cy = Cb + Hy)
Cb	Any carbocycle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

● ポイント : A を用いると, その位置に必ず置換基があるという指定になる。

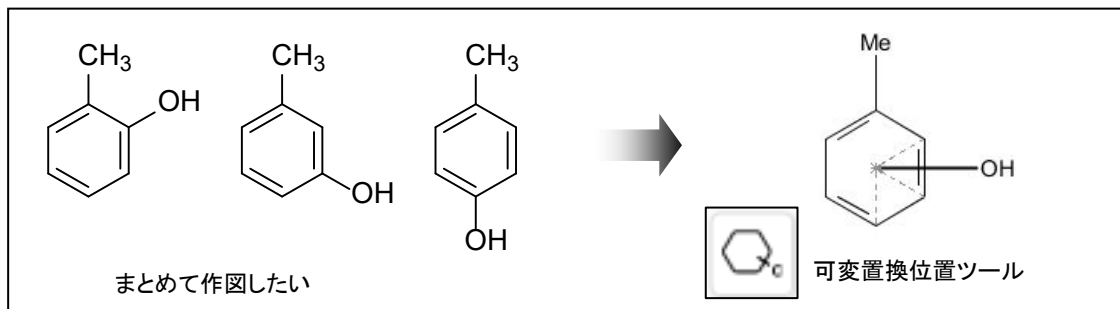
### ケース 2 : 一つの場所に複数の原子や X グループ, ショートカットを同時に指定



### ケース 3 : 繰り返しの指定

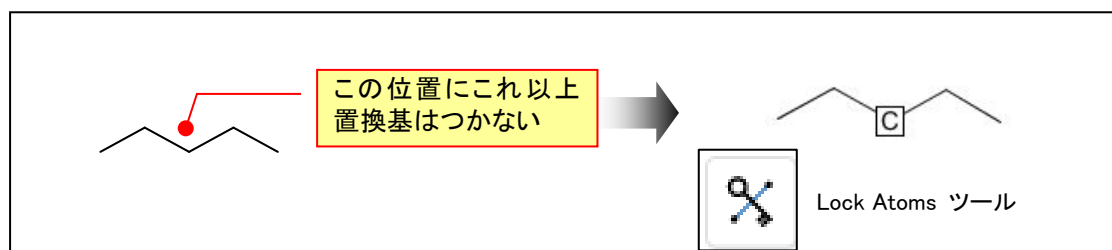


ケース 4 : 環上における複数の置換位置の可能性を指定



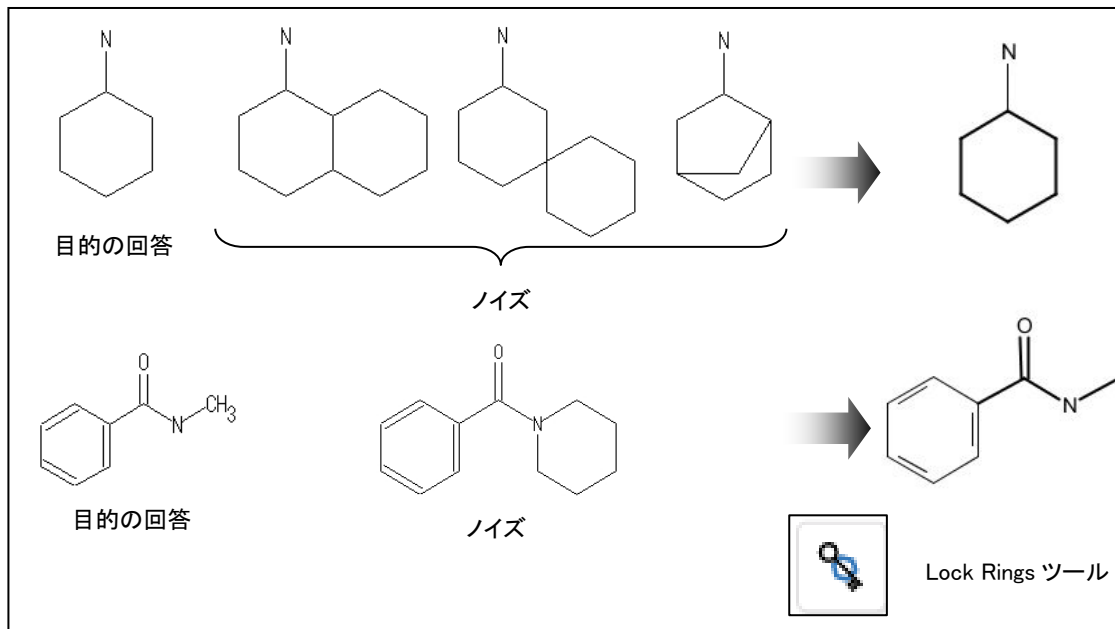
- ポイント : 指定できる母核は一つの環または環系のみ (鎖には指定できない)

ケース 5 : 部分的に置換を禁止する指定



- ポイント : 二価の硫黄原子 (-S-) に限定する時に用いると便利

ケース 6 : 作図した環に対して、縮合 (スピロ結合含む) や架橋はしない、結合が環の一部にはならない指定



※ 各ツールの作図方法は「CAS SciFinder<sup>®</sup> の構造作図」参照。

■ 既存の構造情報を利用した作図

CAS 登録番号(CAS RN<sup>®</sup>)、SMILES 形式または InChI 形式による構造表記からの構造作図

ダイアログボックスをクリック

ダイアログボックスに CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>)、SMILES などを入力し をクリック

物質、反応検索結果の構造を利用した作図

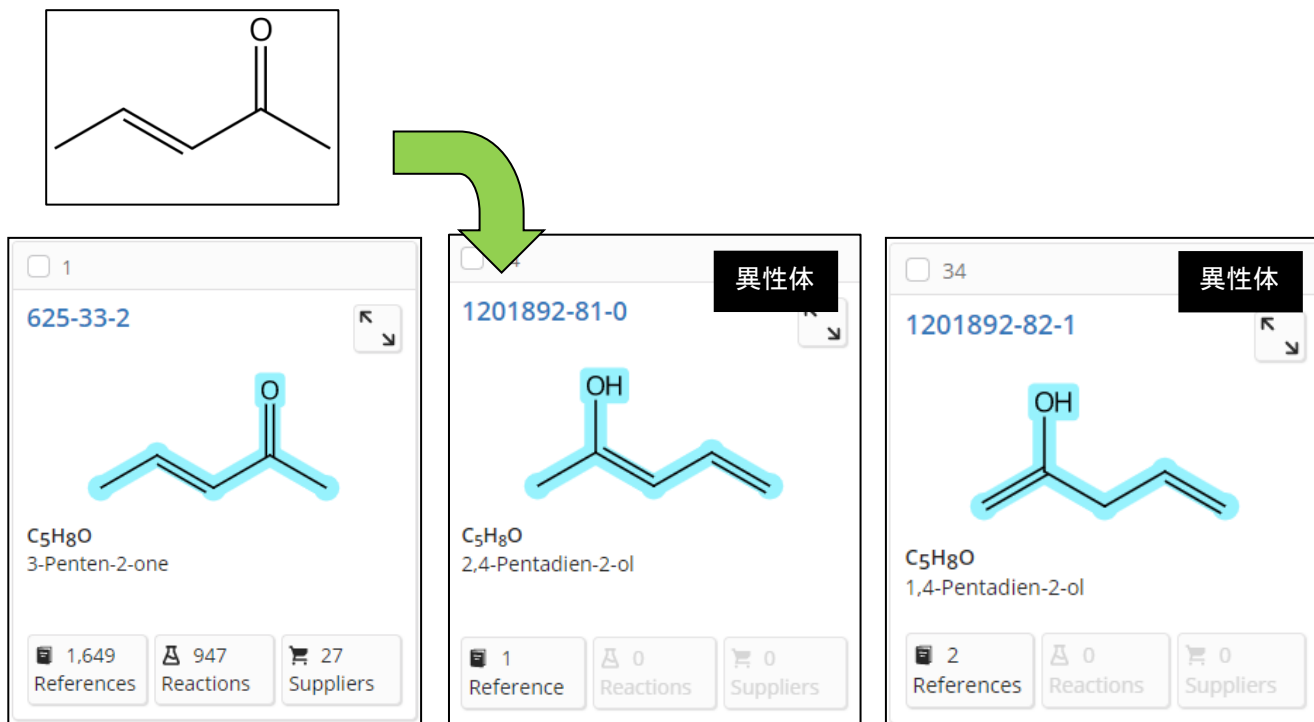
検索結果の構造図をクリック

Edit Structure をクリック

■ 質問式に一致しない構造が回答に含まれた場合（検索精度による限定）

構造質問式と回答例

CAS SciFinder<sup>®</sup> では構造検索時に Smartsearch (「CAS SciFinder<sup>®</sup> の構造作図」参照) が働き、構造質問式に関連する物質を網羅的に検索する (回答の正確さよりも漏れのない検索を優先)。たとえば下記構造で完全一致検索を行うと、下図のように二重結合の位置が異なる異性体も回答として得られる。



構造質問式どおりの物質のみを限定するには？

The screenshot shows the 'Substances search for drawn structure' interface. On the left, the 'Structure Match' section is expanded, showing various search criteria. The 'Analyze Structure Precision' option is highlighted with a red box and a red arrow. A yellow box with the text 'Analyze Structure Precision をクリック' (Click Analyze Structure Precision) is overlaid on the interface. The search results show 44 results, with three results displayed:

- Result 1:** CAS 625-33-2, 3-Penten-2-one, C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O. 32 Suppliers.
- Result 2:** CAS 3102-33-8, 3-Penten-2-one, C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O. Double bond geometry shown (E). 32 Suppliers.
- Result 3:** CAS 3102-32-7, (Z)-3-Penten-2-one, C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O. Double bond geometry shown (Z). 69 References, 23 Reactions, 6 Suppliers.

^ Structure Precision

Conventional Results (22)

Tautomers and Zwitterions (22)

Conventional Results をチェック。  
(構造作図どおりの検索で得られた回答)

Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Structure Match

As Drawn (44)

Substructure (21.8M)

Similarity (6,702)

^ Structure Precision

Conventional Results (22)

Tautomers and Zwitterions (22)

Chemscrape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool. Learn more about Chemscrape.

Create Chemscrape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

22 Results

Sort: Relevance View: Partial

1 625-33-2 C=CC(=O)C  
C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O  
3-Penten-2-one  
References: 1,804 Reactions: 1,075 Suppliers: 34

2 3102-33-8 C=CC(=O)C  
C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O  
(E)-3-Penten-2-one  
Double bond geometry shown  
References: 932 Reactions: 735 Suppliers: 32

3 3102-32-7 C=CC(=O)C  
C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O  
(Z)-3-Penten-2-one  
Double bond geometry shown  
References: 69 Reactions: 23 Suppliers: 6

4 189693-85-4 C=CC(=O)C

5 757960-11-5 C=CC(=O)C

6 2895442-96-1 C=CC(=O)C

※ 同位体を除くには、Filter by(選択した項目に限定)から「Isotopes」フィルターで Not Containing Isotopes をチェックするか、Exclude(選択した項目を除外)から「Isotopes」フィルターで Containing Isotopes をチェックする。

8 26649-67-2 C=CC(=O)C  
C<sub>5</sub>H<sub>7</sub>DO  
3-Penten-1-d-2-one  
Reference: 1 Reaction: 1 Suppliers: 0

9 1824725-52-1 C=CC(=O)C  
C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>D<sub>3</sub>O  
References: 0 Reactions: 0 Suppliers: 0

除きたい

Filter by

^ Isotopes

Containing Isotopes (6)

Not Containing Isotopes (38)

Exclude

^ Isotopes

Containing Isotopes (6)

Not Containing Isotopes (38)

※ ポリマーを除くには、Exclude(選択した項目を除外)から「Substance Class」フィルターで Polymer をチェックする。

The image shows a search result card for the chemical 30919-86-9. The card includes a chemical structure, the formula  $(C_8H_8.C_5H_8O)_x$ , and the name '3-Penten-2-one, polymer with styrene'. Below the card are buttons for 'Reference', 'Reactions', and 'Suppliers'. A green arrow points from the card to an 'Exclude' filter menu. In this menu, under the 'Substance Class' section, the 'Polymer (12)' option is checked and highlighted with a red box.

※ Filter by(選択した項目に限定)から「Number of Components」フィルターで 1 にチェックを入れると、単一成分物質に限定することができる。

The image shows the 'Filter by' menu. Under the 'Number of Components' section, the option '1 (25)' is checked and highlighted with a red box. Other options include '2 (12)', '3 (3)', '4 (2)', and '5 or more (2)'.

注: 「Number of Components」は、成分数を意味する。

**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](http://www.jaici.or.jp)  
E-mail: [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)