

CAS SciFinder®

# 立体化学構造の検索

化学情報協会 情報事業部  
202602

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## 目次

- CAS SciFinder の構造検索
- 絶対配置と相対配置
- 立体結合選択ツール
- Stereochemistry フィルター
- Stereochemistry を指定した時の回答例
- EZ 結合

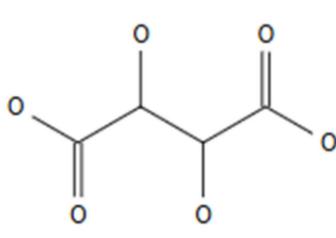
© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# 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

検索式



Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Structure Match

As Drawn (17K)

Substructure (38K)

Similarity (87K)

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

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

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

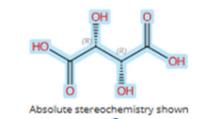
Product (11K)

Reactant (1,174)

Reagent (67)

Catalyst (80)

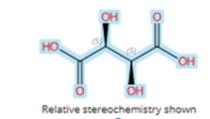
Solvent (11)



87-69-4

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>6</sub>  
(+)-Tartaric acid

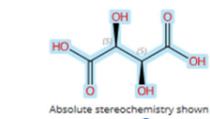
**(R、R)絶対配置**



133-37-9

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>6</sub>  
dl-Tartaric acid

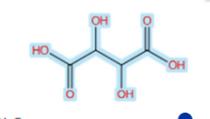
**(S、S)相対配置**



147-71-7

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>6</sub>  
D-Tartaric acid

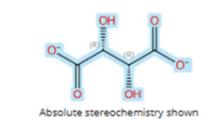
**(S、S)絶対配置**



526-83-0

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>6</sub>  
2,3-Dihydroxybutanedioic acid

**立体情報なし**



3715-17-1

C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>6</sub>  
Tartrate

1,209 References 17 Reactions 2 Suppliers

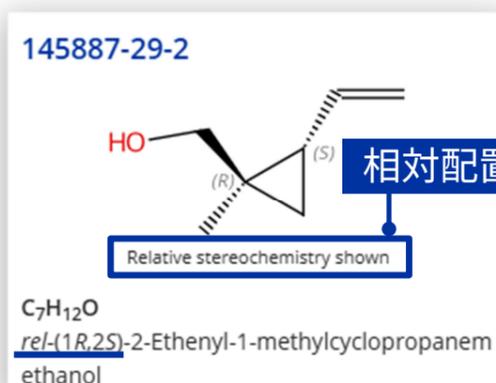
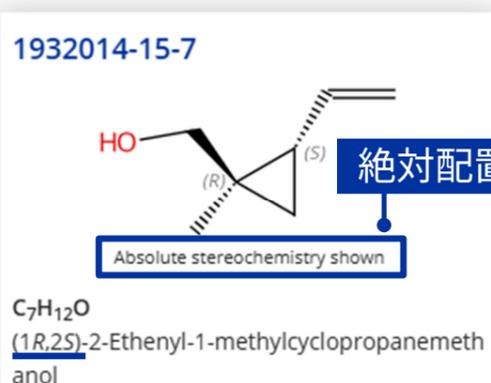


147-73-9

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>6</sub>  
meso-Tartaric acid

**(S、R)相対配置**

## 絶対配置と相対配置



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關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

# 立体結合選択ツール

立体を作図して検索すると、Stereochemistry フィルターが利用できるようになる

The image shows a workflow for searching for a specific stereoisomer. On the left, a drawing toolbar includes a wedge icon. A central box labeled "検索式" (Search Formula) shows a tartaric acid derivative with both hydroxyl groups on wedges. An arrow points from this structure to the search results page. On the search page, the "Stereochemistry" filter is expanded, and "Absolute Stereo Match" is selected. A blue callout box labeled "(S,S)絶対配置" (Absolute configuration (S,S)) points to the first search result, which is D-Tartaric acid. The search results list includes various stereoisomers of tartaric acid, such as the enantiomer and diastereomers.

5 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# Stereochemistry フィルター

The screenshot shows the "Stereochemistry" filter menu with the following options:

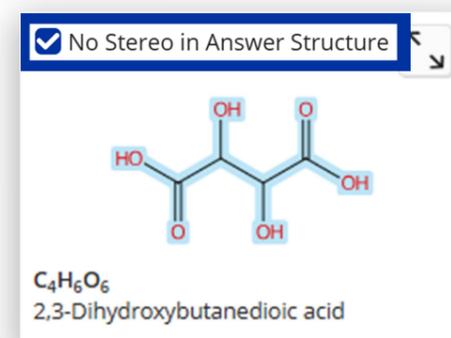
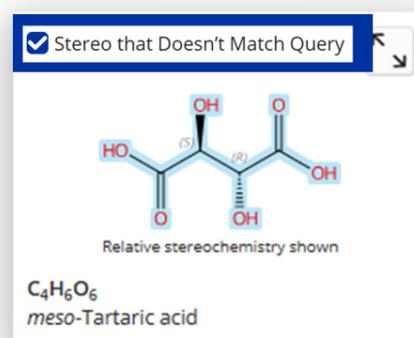
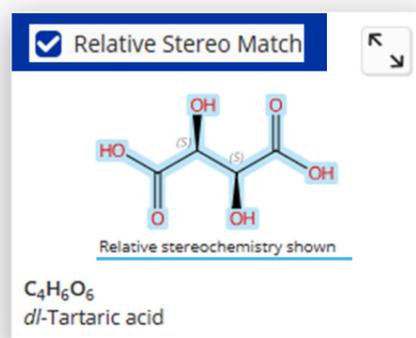
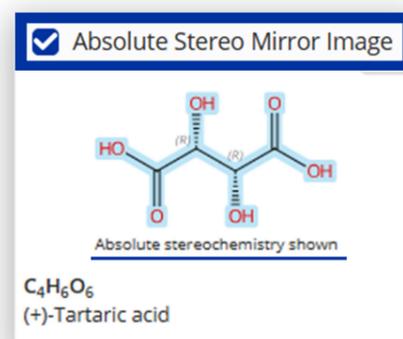
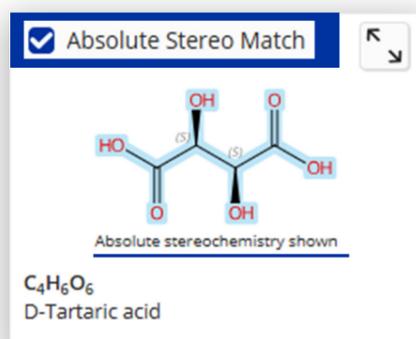
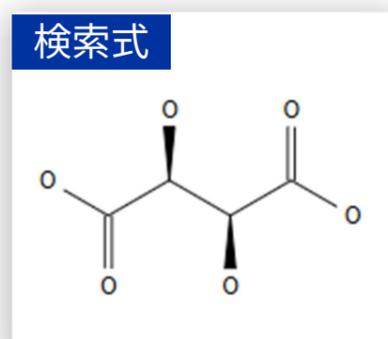
- Absolute Stereo Match (2,409)
- Absolute Stereo Mirror Image (14K)
- Relative Stereo Match (579)
- Stereo that Doesn't Match Query (170)
- No Stereo in Answer Structure (75)

- 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

6 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# Stereochemistry を指定した時の回答例



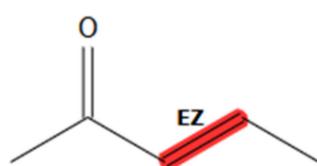
## EZ 結合

立体を指定して検索すると、Stereochemistry フィルターが利用できるようになる



### • 操作方法

EZ 結合のアイコンをクリックし、立体を指定したい結合を指定する



EZ を指定すると、二重結合の上に EZ の文字が表示される

### • 得られる回答

検索結果のスクリーンショット:

- Stereochemistry**
  - Double Bond Geometry As Drawn (6) **3102-33-8**
  - No Stereo in Answer Structure (35) **625-33-2**
- Stereochemistry**
  - Stereo that Doesn't Match Query (3) **3102-32-7**

各結果の構造例:

- 作図通りの立体構造 (Double bond geometry shown) **3102-33-8**
- 立体情報を持たない物質 **625-33-2**
- 作図と一致しない立体構造 (Double bond geometry shown) **3102-32-7**

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)

