

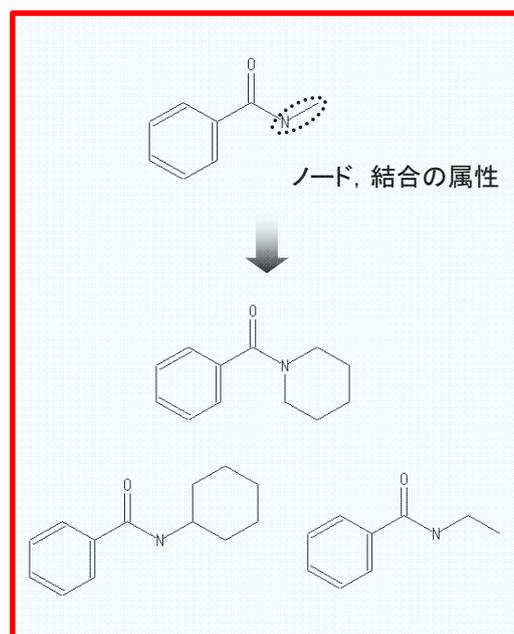
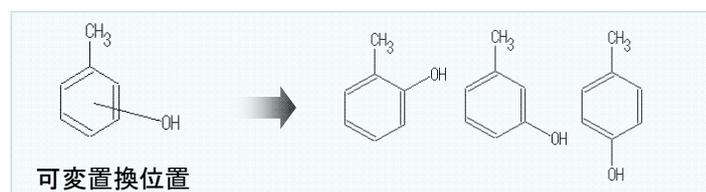
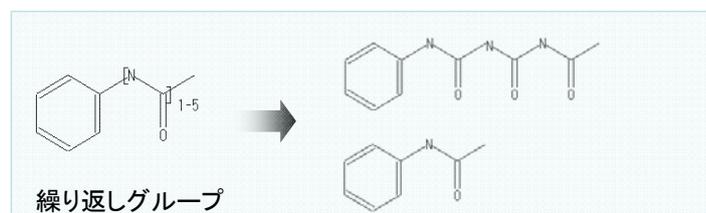
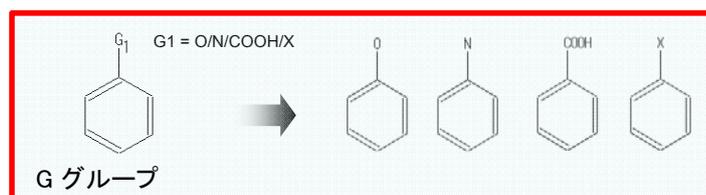
## インターネットセミナー

# 構造検索テクニック – 便利な作図

**JAICI**  
化学情報協会

1

## STN のさまざまな作図機能



**JAICI**  
化学情報協会

2

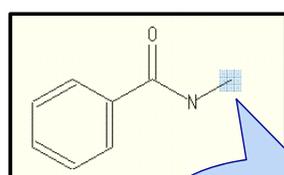
## 本日の内容

- ・ ノード\*の属性
- ・ 結合の属性  
〈検索例 1〉
- ・ G グループの作図
  - 原子やショートカットを含める
  - 作図した構造を含める〈検索例 2〉

\* ノード：作図した構造中の各原子のこと

## ノードの属性

- ・ ノードが「環上, 鎖上, 環または鎖上」にあることを指定する



構造質問式

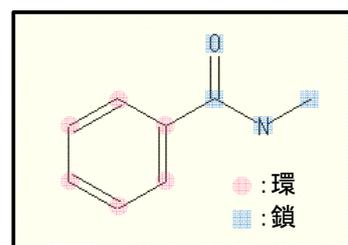
このノードの属性を指定

得られる回答 (○:ヒットする, ×:ヒットしない)

ノードの属性	鎖	○	×
	環	×	○
	環/鎖	○	○

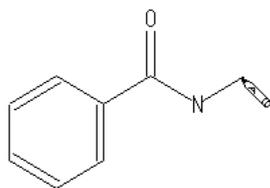
## ノードの属性

- ノードの属性は作図した構造により、自動的に指定される



- 必要に応じてノードの属性を変更する

① ノードにポインタを合わせて右クリック



② ポップアップメニューで「ノードの属性」を選択

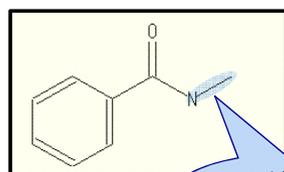


③ 属性を選択する



## 結合の属性

- 結合の種類 (環, 鎖, 環または鎖) を指定する



構造質問式

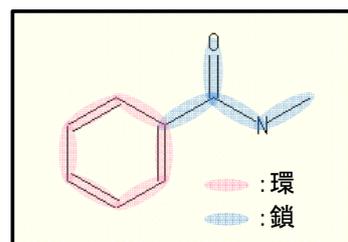
この結合の属性を指定

得られる回答 (○:ヒットする, ×:ヒットしない)

結合の属性	鎖	○	×
	環	×	○
	環/鎖	○	○

## 結合の属性

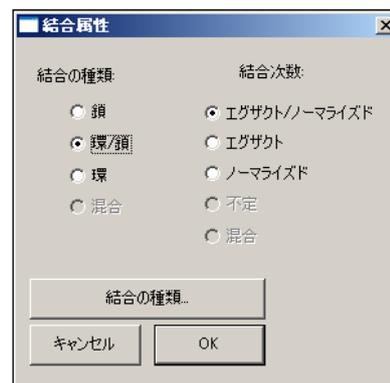
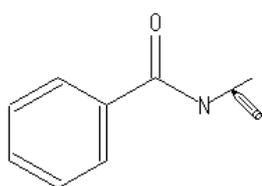
- 結合の属性は作図した構造により、自動的に指定される



- 必要に応じて結合の属性を変更する

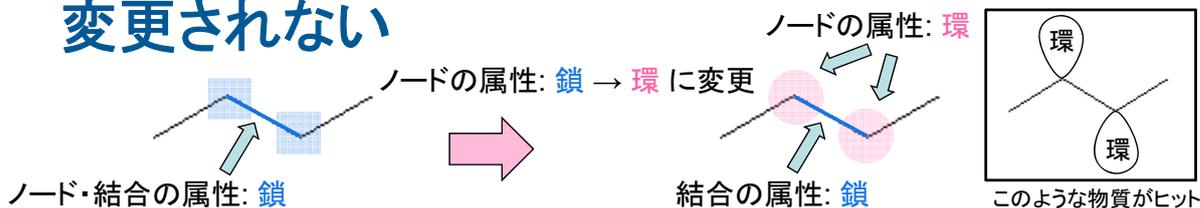
① 結合にポインタを合わせて右クリック

② 表示されるダイアログボックスで属性を選択する



## 属性を指定する際の注意点

- ノードの属性を変更しても、結合の属性は変更されない

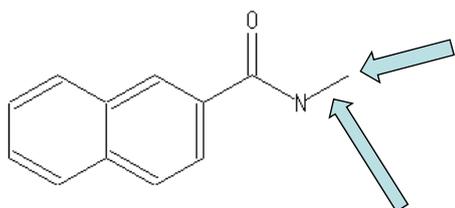


- 結合の属性を変更すると、結合上のノードの属性も変更される



## 検索例 1

- 以下の構造を作図し、ノードおよび結合の属性を変更して検索する



ノードの属性

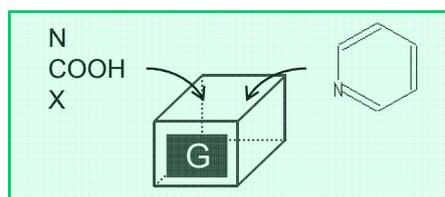
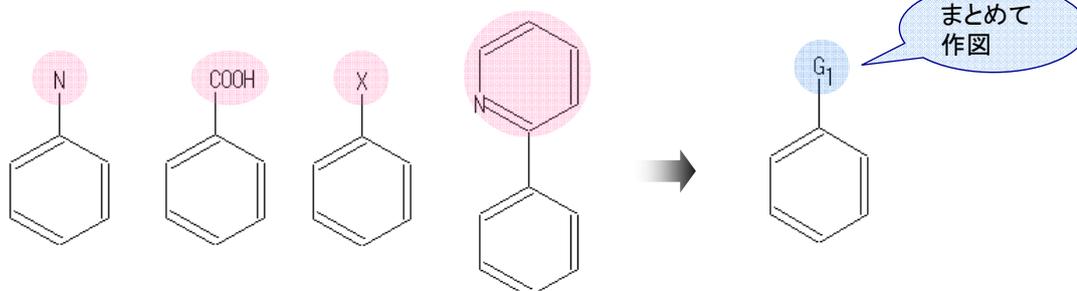
- 鎖 (デフォルト) で検索
- 環/鎖 に変更して検索

結合の属性

- 鎖 (デフォルト) で検索
- 環/鎖 に変更して検索

## G グループ – 概要

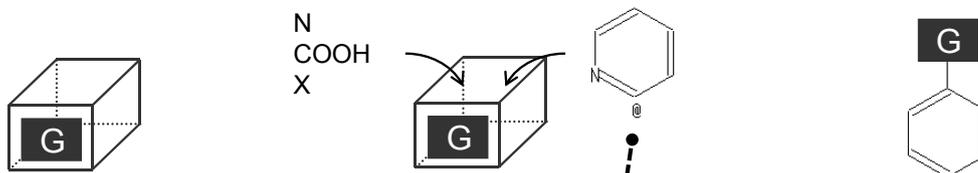
- 一つのノードに複数の原子やショートカット、フラグメント\*を指定できる



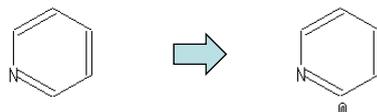
\* フラグメント: G グループに含めるために作図した構造

# G グループ – 作図の流れ

- ① G グループを作成する
- ② G グループの中身を決める
- ③ G グループを作図する



G グループに作図した構造を含める場合は  
事前に作図し、結合位置 (@) を指定する



# G グループの作図 – 基礎編 (1)

- ① 新しい G グループを作成する

1. 「作図」メニューから「G グループ」を選択する

G グループの部分は C で作図しておく

2. 「新規作成」をクリックする

## G グループの作図 - 基礎編 (2)

### ② G グループの中身を選択して保存する

1. 選択した原子, ショートカット, 可変原子が G グループに入る.

2. 「保存」をクリックして, 中身を保存する.

**JAICI**  
化学情報協会

13

## G グループの作図 - 基礎編 (3)

### ③ G グループを作図する

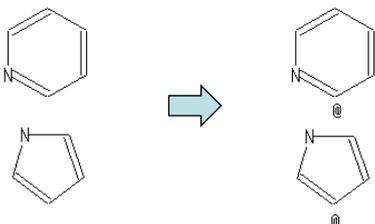
保存した G グループ

「1回使用」または「複数回使用」をクリックする

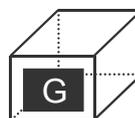
14

# G グループ – 応用編 ～ フラグメント ～

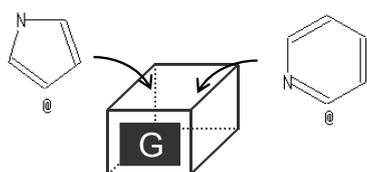
① G グループに含めるフラグメントを作図し、結合位置 (@) を指定する



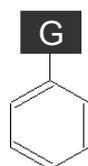
② G グループを作成する



③ G グループの中身を決める

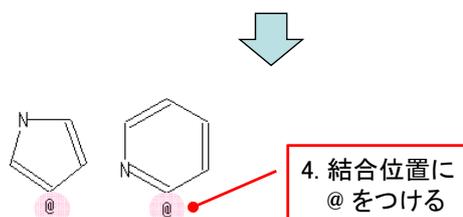


④ G グループを作図する



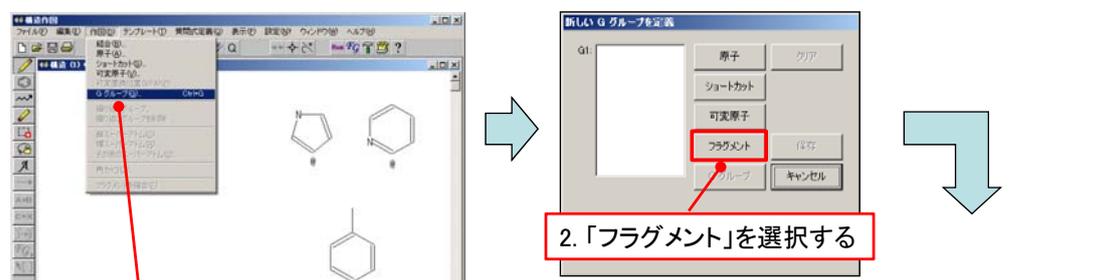
# G グループの作図 – 応用編 (1)

① G グループに含めるフラグメントを作図して @ をつける



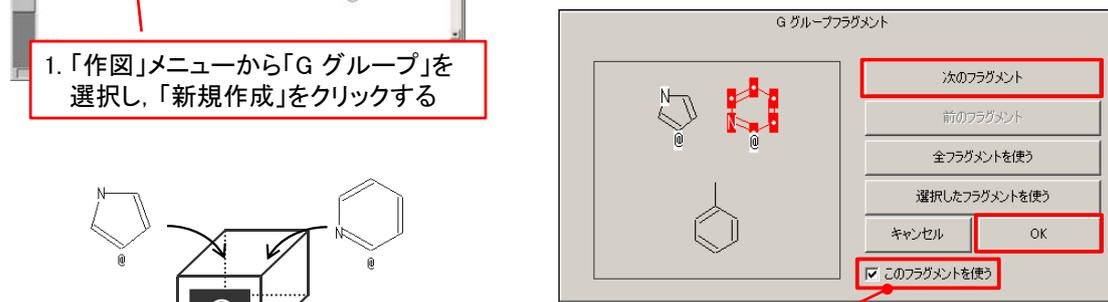
## G グループの作図 – 応用編 (2)

② G グループを作成し、フラグメントを指定する

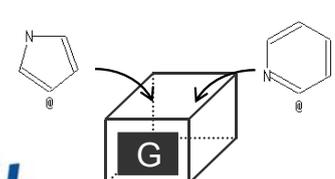


1. 「作図」メニューから「G グループ」を選択し、「新規作成」をクリックする

2. 「フラグメント」を選択する



3. 「このフラグメントを使う」にチェックを入れ、すべて指定したら「OK」をクリックする

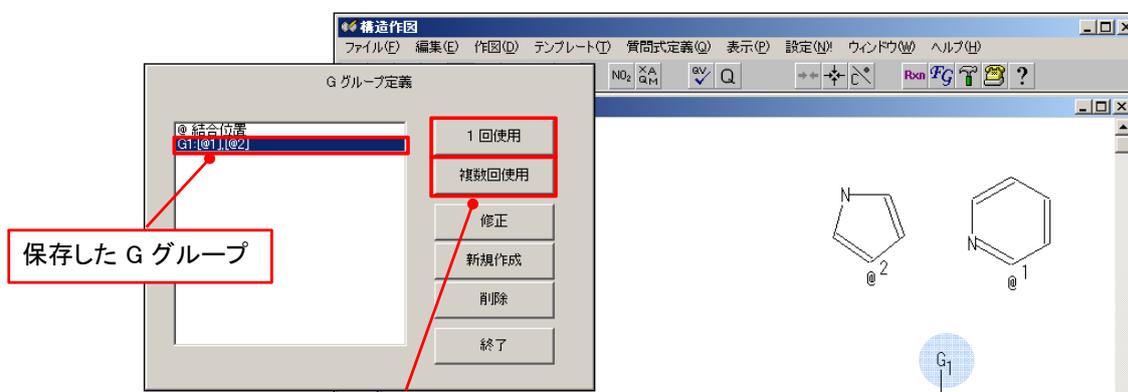


JAICI  
化学情報協会

17

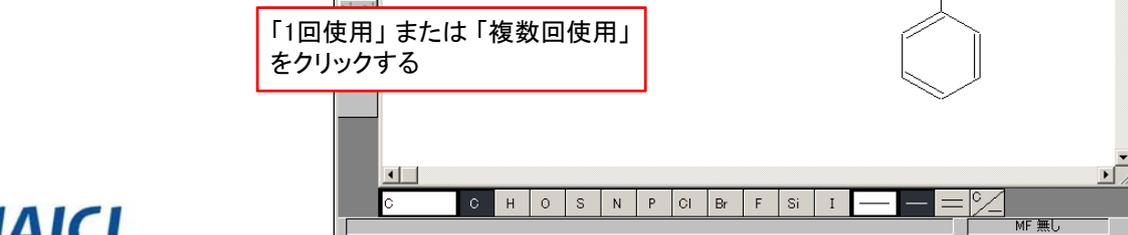
## G グループの作図 – 応用編 (3)

③ G グループを作図する



保存した G グループ

「1回使用」または「複数回使用」をクリックする

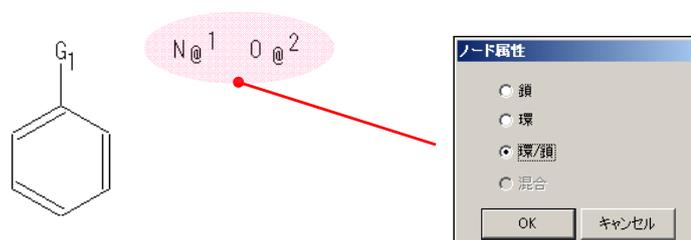


JAICI  
化学情報協会

18

## G グループの注意点 (1)

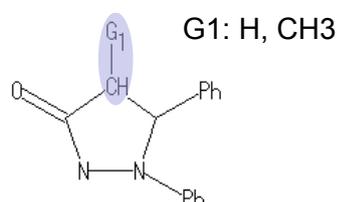
- G グループのノードの属性は、鎖上にあれば「鎖」、環上にあれば「環」と指定されている
- G グループのノード属性は、直接変更できない。ノード属性を指定する場合は、G グループに含める原子やショートカットをフラグメントとして作図して指定する



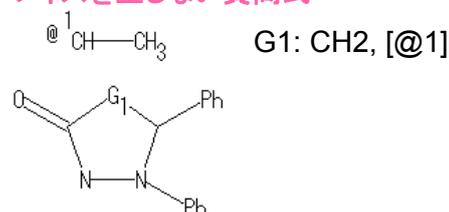
## G グループの注意点 (2)

- G グループ内に水素を指定すると、ノイズを生じる場合がある
  - G グループに結合するノードに水素が結合する可能性がある場合
  - 目的の物質が漏れることはない

ノイズを生じる質問式

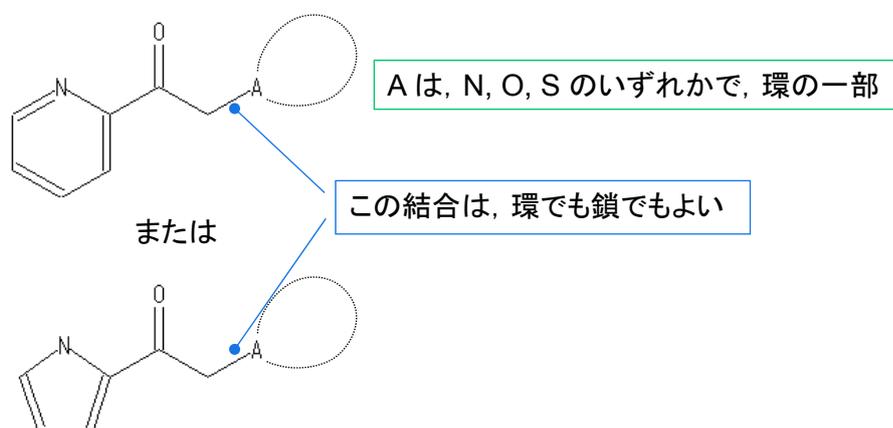


ノイズを生じない質問式



## 検索例 2

- 以下の構造をもつ物質を検索する



## まとめ

- ノードの属性, 結合の属性は, 作図した構造により自動的に指定される. 鎖で作図した特定のノード/結合が環の一部になる回答を得るには, 属性を適切に変更する
- G グループには, 原子やショートカット, フラグメントを含めることができる. 一回で複数の構造をまとめて検索できるので, 経済的に検索できる

## 参考資料

- 化学物質検索 II - 構造

[http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text\\_chem2.pdf](http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_chem2.pdf)

## ご質問はございませんか？



- 質問事項は Q&A ボックスに入力して、「主催者」宛てに送信してください。
  - \* Q&A ボックスは ? マークのアイコンをクリックすると表示されます。
- ご質問に対する回答は、Q&A 欄への返信または音声にてお送りします。
  - \* 時間の都合上、セミナー中にすべてのご質問にお答えできない場合があります。
- 複雑なご質問の場合は、ヘルプデスクまでご連絡ください

