
STN インターネットセミナー

環系データを使ってみよう！ (第1回)



本日の内容

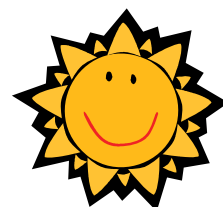
- ・ 環系データ (Ring System Data) とは
- ・ 環系データの見方
- ・ 主な検索フィールド
- ・ 検索例



環系データとは

- ・ **REGISTRY** ファイルに収録されている,
環に関する特徴 (構成元素や環のサイズ
など) を**表形式**でまとめたデータ
- ・ 構造検索をせずに, “ある特徴を持つ環“
を含む物質を探すことができる

こんなときに便利！

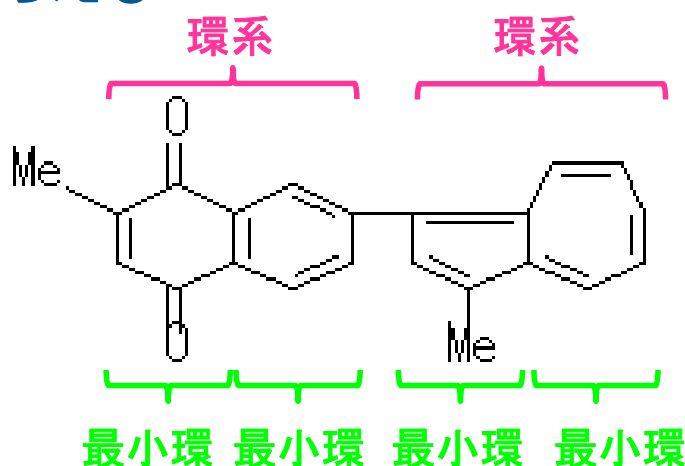


- ・ **作図が難しい特徴の環を検索したい**
〈例〉N を 1-2 個含む 7 員環
- ・ **安価に特徴的な環を含む化合物を
検索したい**
- ・ **構造検索で INCOMPLETE を回避したい**

環系データで検索した集合を母集合にしてサブセット検索
を行うことで INCOMPLETE が回避できる場合がある

“環系” “最小環” の考え方

- 1つの構造でも、間に鎖結合があると別の「環系」ととらえる
- 環系の中のそれぞれの環を「最小環」ととらえる



2つの環系
4つの最小環

環系データの見方

- RSD 表示形式で表示する

RSD/FA 環系データあり
NO RSD/FA 環系データなし
に限定可能

<例 1>

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
--------------------------	--------------------------	-------------------------	---------------------------	------------------------	-------------------------

C4N2	N2C4	6	C4N2	46.169.6	1
------	------	---	------	----------	---

C4N0-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8N0	591.397.10	1
---------	-----------	-----	------	------------	---

環系の
元素式

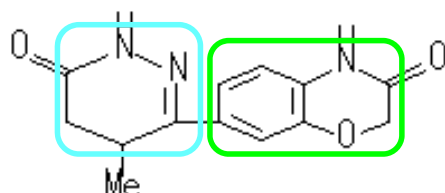
環系の
元素配列

環系の環
の大きさ

環系式

環系
識別子

環系
の存在数

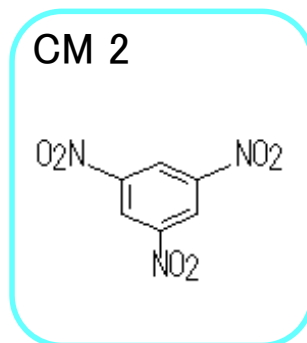
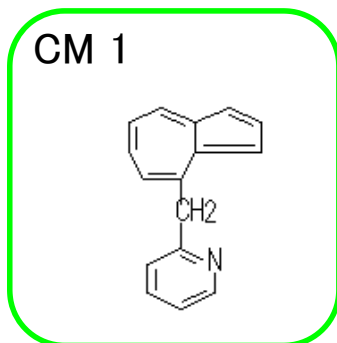


データは環系ごと

〈例 2〉 多成分物質

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1 in CM 2
C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	1 in CM 1
C5-C7	C5-C7	5-7	C10	602.1.36	1 in CM 1



成分ごとに分けて
収録される

主な検索フィールド

- EA (Elemental Analysis) : 環系の元素式
- ES (Elemental Sequence) : 環系の元素配列
- SZ (Size of the Rings) : 環の大きさ
- REL (Ring Element) : 環系内の構成元素種

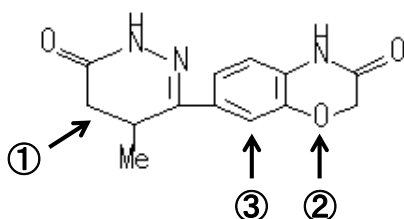
EA (Elemental Analysis)

- 環系を構成する最小環ごとの**元素式**をハイフンで結合したデータ

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
	ES	SZ	RF	RID	Count
① C4N2	N2C4	6	C4N2	46.169.6	1
C4NO-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8NO	591.397.10	1

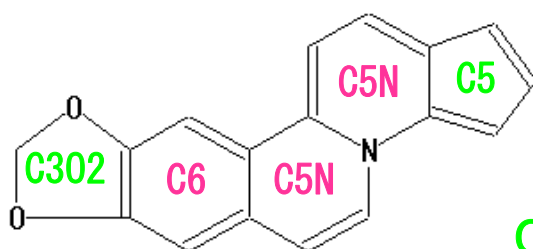
JAICI
化学情報協会



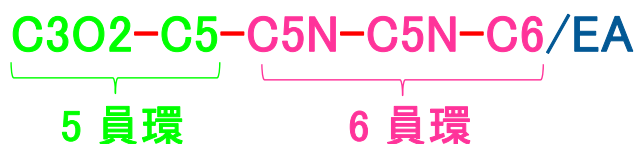
9

EA フィールドの表記規則

- 各最小環の組成を **Hill** 方式で表記
- 少数員数**から順次ハイフンで区切って表記
- 員数が同じ場合は、**アルファベット・数値の小さい方**を前に



各最小環の結合順になって
いるわけではない



JAICI
化学情報協会

10

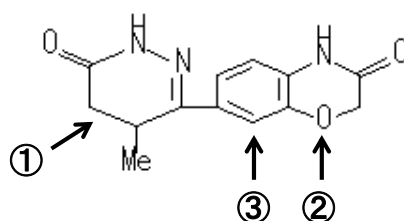
ES (Elemental Sequence)

- 環系を構成する最小環ごとの**元素配列**（**元素の並び順**）をハイフンで結合したデータ

Ring System Data

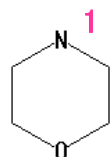
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N2 ①	N2C4	6	C4N2	46.169.6	1
C4NO-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8NO	591.397.10	1

② ③



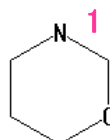
ES フィールドの表記規則

- ヘテロ原子を起点**とする（複数のヘテロ原子がある場合はアルファベット順）



NC2OC2

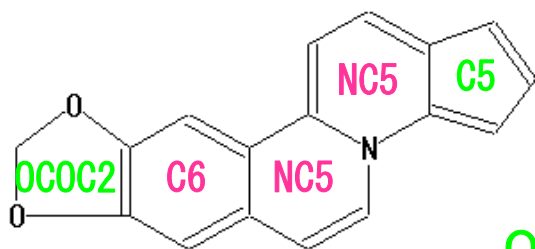
- 次のヘテロ原子が近い方向に記述**する



NCOC3

ES フィールドの表記規則 (続き)

- 少数員数からハイフンでつなぐ (同じ員数の場合は炭素数の少ない順)



/EA よりも限定的な検索が可能

OCOC2-C5-NC5-NC5-C6/ES
 5 員環 6 員環

<比較>

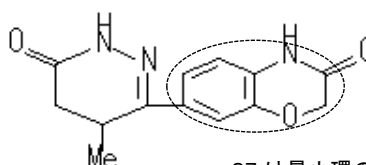
C3O2-C5-C5N-C5N-C6/EA

SZ (Size of the Rings)

- 環系を構成する最小環の大きさをハイフンで結合したデータ

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N2	N2C4	6	C4N2	46.169.6	1
C4NO-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8NO	591.397.10	1



SZ は最小環の大きさを表す
周囲の 10 員環は考慮されない

存在数の指定

- ・ /EA, /ES, /SZ とも, **存在数**を合わせて指定することが可能
- ・ **同一成分中**の存在数をカウントする

<例>

- => S 2 C5N2/EA ← C5N2 環を同一成分中に 2 つ含む物質を検索
- => S 2-4 C5N2/EA ← C5N2 環を同一成分中に 2-4 個含む物質を検索
- => S >=2 C5N2/EA ← C5N2 環を同一成分中に 2 個以上含む物質を検索

範囲指定検索もできる

注) 等号つき不等号は, 不等号が左側にくるように入力しないと正しく検索できない
× => S =>2 C5N2/EA

REL (Ring Element)

- ・ 環系を構成する**元素の種類**を指定できる
- ・ 環系内での**存在数**を合わせて指定できる

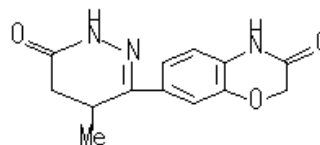
Ring System Data

検索対象はここ

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N2	N2C4	6	C4N2	46. 169. 6	1
C4NO-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8NO	591. 397. 10	1

=> S 4 C/REL ← 4 個の C を含む環系

=> S >=1 O/REL ← 1 個以上の O を含む環系



近接演算子

- ・ 同一成分内に限定する場合は (P) 演算子
 - ・ 同一環系内に限定する場合は (S) 演算子
- * AND 演算子は物質全体
(単成分物質の場合は, (P) と AND は同等)

	Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count	
AND	(S) C6	C6	6	C6	46.150.18	1 in CM 2] (P)
	(S) C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	1 in CM 1	
	(S) C5-C7	C5-C7	5-7	C10	602.1.36	1 in CM 1	

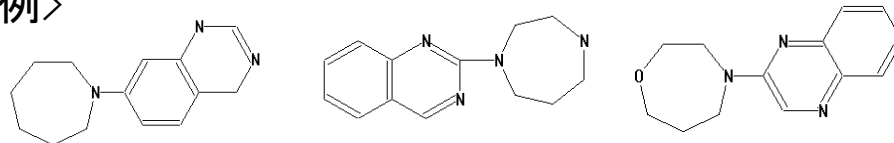
検索例 1

構造検索では一度に
検索するのは難しい



- ・ C6 環と C4N2 環の縮合環
 - ・ N が 1-2 個の 7員環
- を 1 成分中に含む化合物を検索する

<例>



最小環の構成元素とその数のみが
決まっている (N の位置は不定)

→ /EA で検索

環系内の特定元素の数を指定

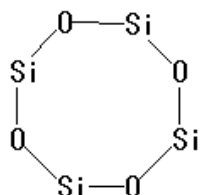
→ /REL で検索

JA 環の大きさを指定
化学情報協会

→ /SZ で検索

検索例 2

- ・ シクロテトラシロキサン環を 2 つ有する単成分物質を検索する



特徴的な環なら構造検索を使わなくても環データで安価に検索できる



環系の元素配列が決まっている → /ES で検索

参考資料

- ・ リフレッシュセミナーテキスト
「REGISTRY ファイル - 検索テクニック」
<http://www.jaici.or.jp/stn/ref-registry.pdf>



検索例 1

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

① C6 環と C4N2 環の縮合環を /EA で検索

=> E C6-C4N2/EA ← 入力ルールに従わないとヒットしない

E1 1 C6-C4MOSE2-C4MOSE2/EA
E2 2 C6-C4MOTE2/EA
E3 0 --> C6-C4N2/EA
E4 430 C6-C4N2O/EA
E5 5 C6-C4N2O-C6O/EA

=> E C4N2-C6/EA ← 員数が同じ場合、数字の小さい方が先

E1 5 C4N2-C5SE-C6/EA
E2 5 C4N2-C5S1/EA
E3 1243556 --> C4N2-C6/EA
E4 8 C4N2-C6-C10/EA
E5 3 C4N2-C6-C10N/EA

* C4N2 と C6 なので C4N2 が前にくる

=> S E3 ← E 番号で検索

L1 1243556 C4N2-C6/EA

② N が 1-2 個の 7 員環を検索 (環の大きさ : /SZ, 環系内の特定元素の数 : /REL)

=> S 7/SZ(S)1-2 N/REL ← 同一環系内に限定する場合は (S) 演算子を利用する

L2 493835 7/SZ(S)1-2 N/REL

① と ② の環系が同一成分内にある物質を検索

=> S L1(P)L2 ← 同一成分内に限定する場合は (P) 演算子を利用する

L3 9150 L1(P)L2

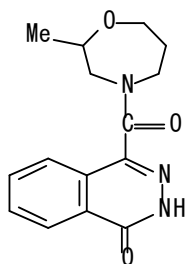
=> S L3(P)2/CNRS ← 成分内に環系が2つという限定

L4 21024478 2/CNRS
1275 L3(P)2/CNRS

* ここでは、C4N2-C6 環と 7 員環 以外の環系を含まないという限定を行った
*/CNRS = 成分内の環系の数

=> D SCAN ← ヒットした回答を SCAN 表示形式で確認

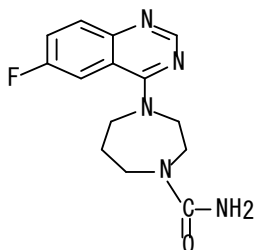
L4 1275 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
IN 1(2H)-Phthalazinone, 4-[(tetrahydro-2-methyl-1,4-oxazepin-4(5H)-yl)carbonyl]-
MF C15 H17 N3 O3



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

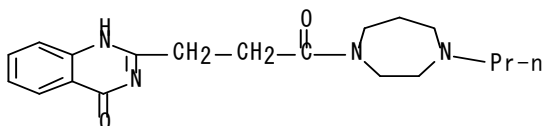
L4 1275 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
 IN 1H-1,4-Diazepine-1-carboxamide, 4-(6-fluoro-4-quinazoliny)hexahydro-
 MF C14 H16 F N5 O



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L4 1275 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
 IN 4(3H)-Quinoxalinone, 2-[3-(hexahydro-4-propyl-1H-1,4-diazepin-1-yl)-3-oxopropyl]-
 MF C19 H26 N4 O2



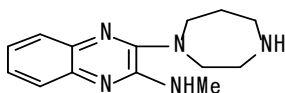
SCAN や IDE 表示形式では RSD
 は表示されない

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D IDE RSD 10 ← 10 件目の回答を IDE RSD 表示形式で表示

L4 ANSWER 10 OF 1275 REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
 RN 1421109-97-8 REGISTRY
 ED Entered STN: 15 Feb 2013
 CN 2-Quinoxalinamine, 3-(hexahydro-1H-1,4-diazepin-1-yl)-N-methyl- (CA INDEX
 NAME)
 MF C14 H19 N5
 CI COM
 SR CA



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C5N2	NC2NC3	7	C5N2	110.130.1	1
C4N2-C6	NC2NC2-C6	6-6	C8N2	591.359.15	1

検索例 2

=> FILE REGISTRY

・ 元素の並び順が決まっている環系を /ES で検索

=> E 2 OSIOSIOSIOSI/ES 5 ← 存在数を含めた EXPAND はできない

E1 1 *NPBN/ES

E2 1 *NZNN/ES

E3 0 --> 2 OSIOSIOSIOSI/ES

E4 1 ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2-ACC2/ES

E5 1 ACCALC-ACCALC/ES

=> S 2 OSIOSIOSIOSI/ES ← 同一成分中に 2 個のシクロテトラシロキサン環を含む物質を検索

20012476 2/ES. CNT

6982 OSIOSIOSIOSI/ES

L1 341 2 OSIOSIOSIOSI/ES

(2/ES. CNT (T) OSIOSIOSIOSI/ES)

=> S L1 AND 1/NC ← 1 成分に限定

128851538 1/NC

L2 186 L1 AND 1/NC

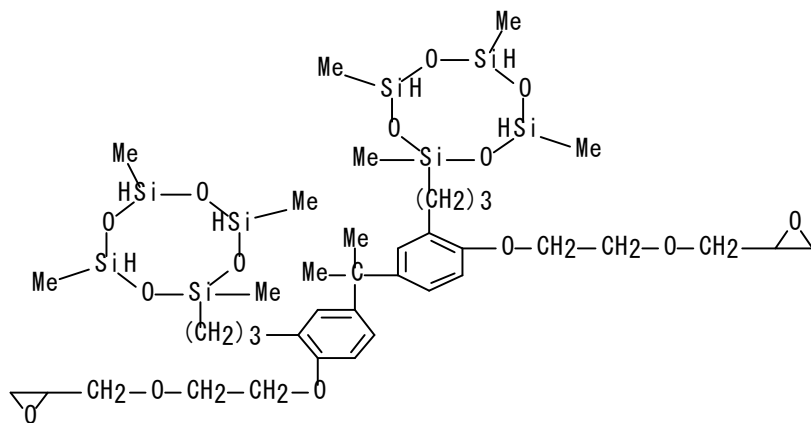
=> D SCAN ← ヒットした回答を SCAN 表示形式で確認

L2 186 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN Cyclotetrasiloxane, 2,2'-[(1-methylethylidene)bis[[6-[2-(2-oxiranylmethoxy)ethoxy]-3,1-phenylene]-3,1-propanediyl]]bis[2,4,6,8-tetramethyl-

MF C39 H72 O14 Si8

CI COM



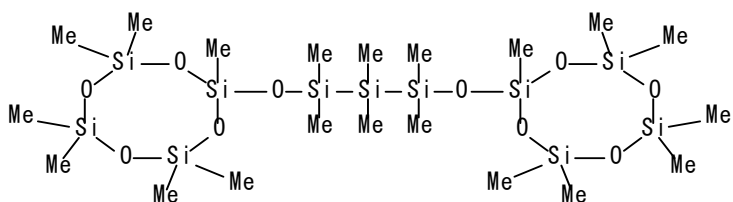
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2 186 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN Cyclotetrasiloxane, 2,2'-[(1,1,2,2,3,3-hexamethyl-1,3-trisilanediyloxy)]bis[2,4,4,6,6,8,8-heptamethyl-

MF C20 H60 O10 Si11



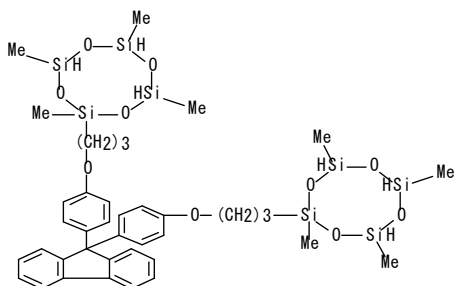
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D IDE RSD

← 1 件目を IDE RSD 表示形式で表示

L2 ANSWER 1 OF 186 REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
 RN 1409933-03-4 REGISTRY
 ED Entered STN: 03 Dec 2012
 CN Cyclotetrasiloxane, 2,2'-[9H-fluoren-9-ylidenebis(4,1-phenyleneoxy-3,1-propanediyl)]bis[2,4,6,8-tetramethyl- (CA INDEX NAME)
 MF **C39 H58 O10 Si8**
 CI COM
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	2
O4Si4	OSiOSiOSiSi	8	O4Si4	209.351.1	2
C5-C6-C6	C5-C6-C6	5-6-6	C13	1839.6.36	1