



STN 新プラットフォームの 構造作図



JAICI
化学情報協会

1

本日の内容

- 構造検索の概要
- 基本的な構造の作図
- 便利な作図機能
- 属性の指定

本日の内容

- 構造検索の概要
- 基本的な構造の作図
- 便利な作図機能
- 属性の指定

構造検索可能なファイル

収録対象	ファイル名	収録内容
特定物質	REGISTRY	化学物質および核酸・タンパク質の物質同定情報, 物性データ
	DCR	DWPI ファイルの特許から収録された特定物質の同定情報
	REAXYSFILESUB	REAXYSFILEBib ファイルの文献から収録された物質の同定情報
マルクーシュ構造	MARPAT	CAplus ファイルの特許から収録されたマルクーシュ構造
	DWPIM	DWPI ファイルの特許から収録されたマルクーシュ構造

* ご契約内容により利用可能なデータベースは異なります

構造検索の流れ

① データベース選択

② 作図ツール起動

③ 構造質問式を作図

④ OK をクリック

⑤ コマンドの入力*

⑥ 検索を実行

STR 番号が付与され
STRUCTURE タブに
表示される

* 構造をアップロードするとデフォルトの条件で
コマンドが自動的に入力される

構造検索コマンド

STR 番号/検索タイプ, 検索範囲

検索タイプ

コード	検索タイプ
SSS	部分構造検索 (デフォルト)
CSS	閉構造部分構造検索
FAM	ファミリー検索
EXA	完全一致検索

検索範囲

コード	検索範囲
FUL	フルファイル検索 (デフォルト)

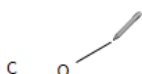
本日の内容

- 構造検索の概要
- 基本的な構造の作図
- 便利な作図機能
- 属性の指定

基本的な構造の作図 ① 垂直ツール

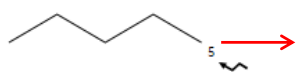
ペンシルツール

- ・クリックで原子，ドラッグで結合を作図
- ・作図した原子や結合の変更



鎖ツール

- ・ドラッグで炭素鎖を作図



消しゴムツール

- ・ノードや結合の削除

テンプレートツール

Templates

Enter 3 or more characters...

- miscellaneous (0)
- Monocarbocyclic (19)
- N-containing (19)
- NOS-containing (10)
- Nucleic Acid (5)
- O-containing (11)
- Polycarbocyclic (13)
- Rings (4)**
 - Benzene
 - Cyclohexane
 - Cyclopentadiene
 - Cyclopentane
- S-containing (6)
- Steroid (7)
- User-Defined (0)

Close

主な環骨格やアミノ酸などの構造

基本的な構造の作図 ① 垂直ツール

原子メニューツール

ショートカットツール

Xメニューツール

変原子

- ハロゲン
- 金属
- H 以外
- C, H 以外

一般式グループ記号

- 炭素鎖
- 任意の環
- 炭素環
- ヘテロ環

Variables

X	Any halogen
M	Any metal
A	Any atom except H
Q	Any atom except C or H
Ak	Any alkyl chain
Cy	Any cycle
Cb	Any carbocycle
Hy	Any heterocycle

Shortcuts

CH	CH ₂	Me	OMe	Et	OEt	Pr-n	Pr-i	OPr-n
OPr-i	Bu-n	Bu-i	Bu-s	Bu-t	OBU-n	OBU-i		
OBU-s	OBU-t	Ph	o-C ₆ H ₄	m-C ₆ H ₄	p-C ₆ H ₄			
CF ₂	CF ₃	CCl ₂	CCl ₃	CBr ₂	CBr ₃	Cl ₂	Cl ₃	
CHO	CN	C(O)CH ₃	CO ₂ H	COOH	COSH	CS ₂ H		
CSSH	NH	NH ₂	NH ₃	NO ₂	OH	OPO ₃ H ₂		
OSO ₃ H	PO ₃ H ₂	SH	SO ₂	SO ₃ H				

* Me や Ph は無置換

基本的な構造の作図 ② 水平ツール

よく使う原子

- その他の原子は (原子メニュー) から選択

選択されている原子

選択されている環

リセットボタン

- 炭素/単結合に戻す

リングパレット

- で任意のサイズの環を作図

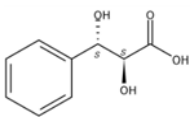
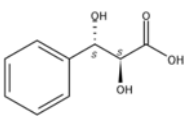
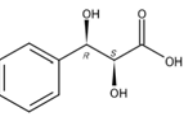
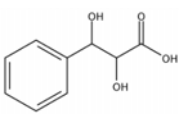
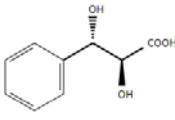
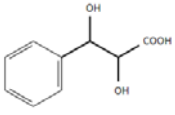
結合パレット

立体結合パレット

Ring Description

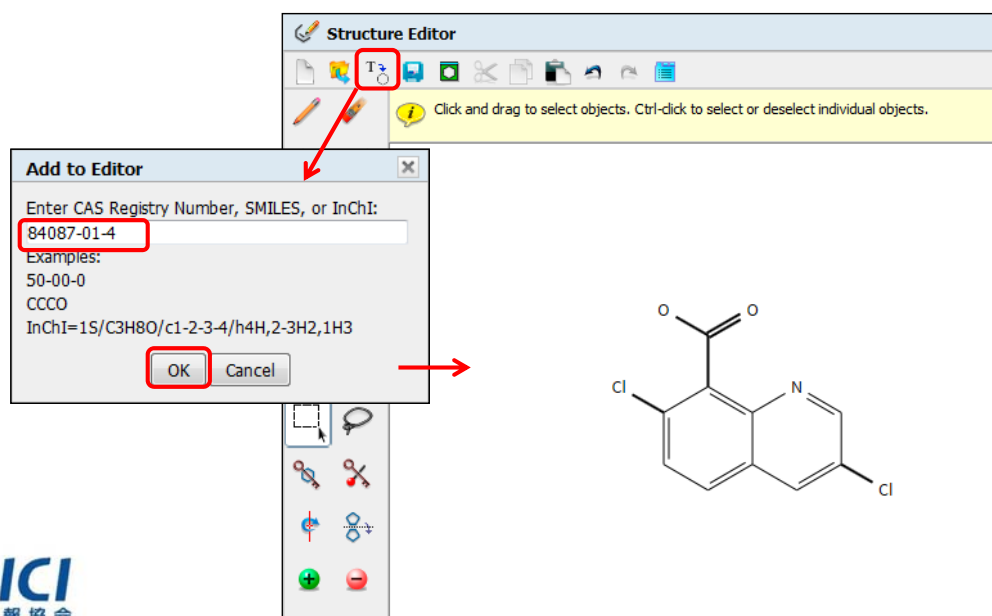
7

- 立体結合で作図した場合、構造検索コマンドの入力方法により回答が異なる。
 - **,ABS** を付加 → 絶対立体配置の一致する回答のみが得られる
 - **,REL** を付加 → 相対・絶対立体配置が一致する回答が得られる
 - 指定なし → 立体化学が異なる回答、平面構造の回答も得られる

構造検索		回答			
構造質問式	コマンド	 Absolute stereochemistry	 Relative stereochemistry	 Absolute stereochemistry	
	<u>STR#/SSS,FUL,ABS</u>	○	×	×	×
	<u>STR#/SSS,FUL,REL</u>	○	○	×	×
	<u>STR#/SSS,FUL</u>	○	○	○	○
	<u>STR#/SSS,FUL</u>	○	○	○	○

構造図の呼び出し

- CAS 登録番号, SMILES, InChI キーから構造図の呼び出しが可能



Structure Editor

Add to Editor

Enter CAS Registry Number, SMILES, or InChI:

84087-01-4

Examples:

50-00-0

CCCC

InChI=1S/C3H8O/c1-2-3-4/h4H,2-3H2,1H3

OK Cancel

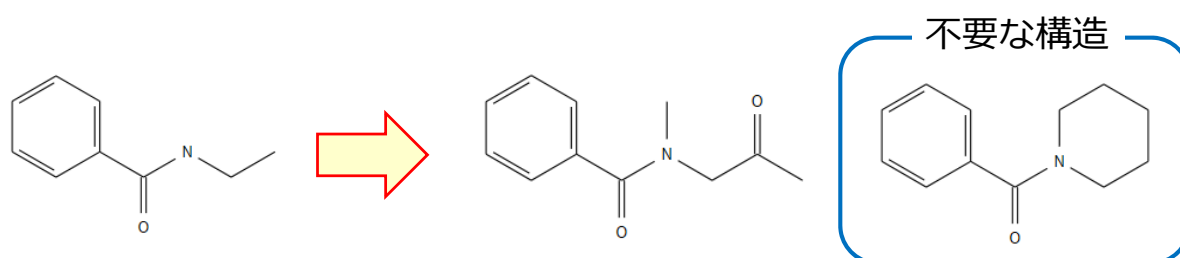
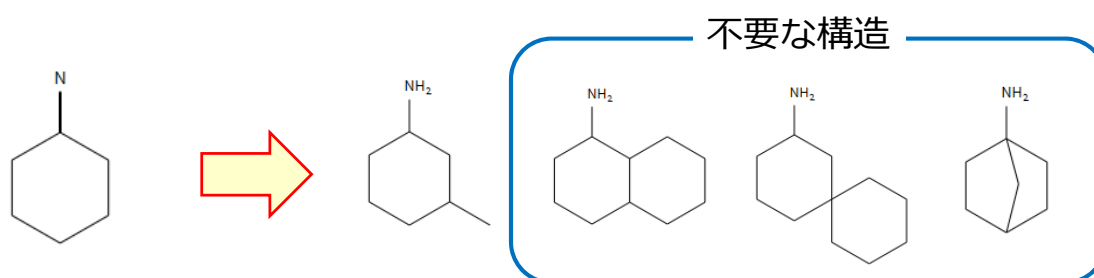
Chemical structure: 6-chloro-2-(2,4-dichlorophenyl)quinoline-3-carboxamide

本日の内容

- 構造検索の概要
- 基本的な構造の作図
- 便利な作図機能
- 属性の指定

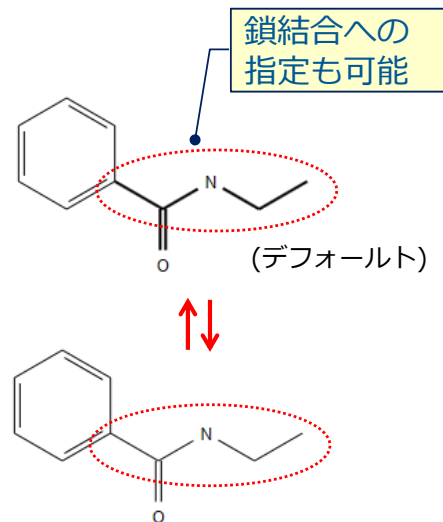
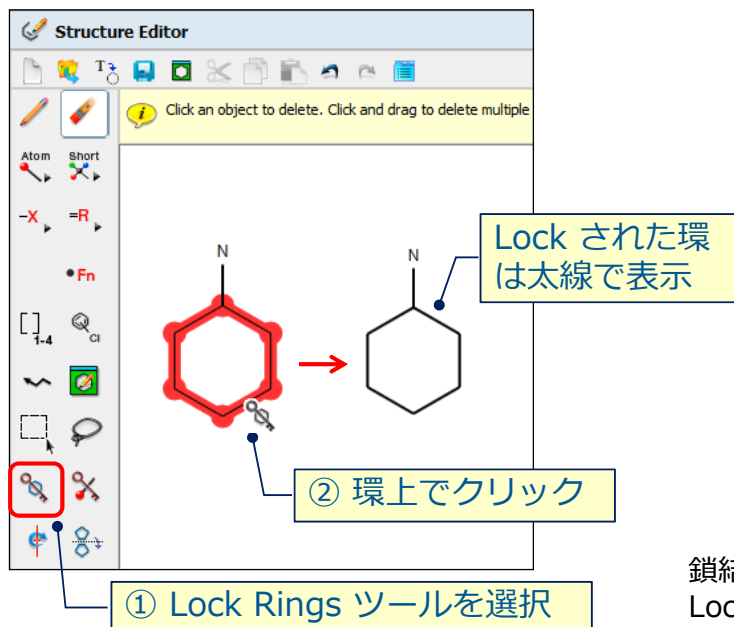
Lock Rings ツール

- 指定した環・鎖への縮環を禁止



Lock Rings の指定方法

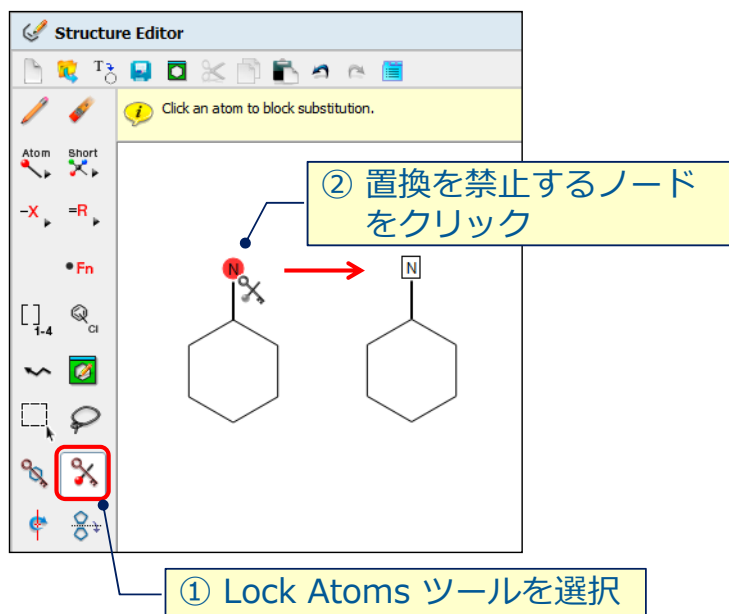
- Lock Rings ツールで環または鎖をクリック



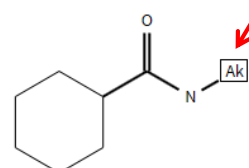
鎖結合は作図したままのデフォルトで Lock Rings が適用されている

Lock Atoms ツール

- 指定したノードへの置換基の追加を禁止



一般式グループにも指定可能



繰り返しグループツール

- ある構造単位を指定した回数繰り返す

① 繰り返しグループツールを選択

② 繰り返し範囲を指定

③ 繰り返し回数の範囲を指定して Apply をクリック

可変置換位置ツール

- 環または 1 つの環系に対する可変な置換位置を指定

① 可変置換位置ツールを選択

② 離して作図した置換基から置換位置に向かってドラッグ

鎖上や複数の環系への指定は不可

結合点の指定

- 作図したフラグメントを含める場合は
あらかじめ結合点を指定する

① 結合点ツール
を選択

② 主骨格と離して作図したフラグメントに
結合点を指定する

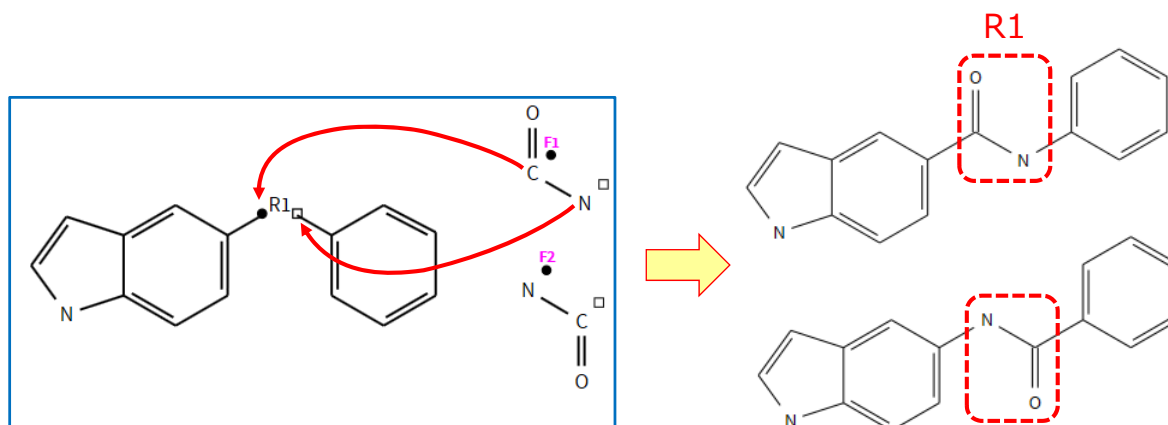
③ R-グループツールで
Fragments を選択

④ R-グループに含めたい
フラグメントを選択

⑤ R-グループを作図

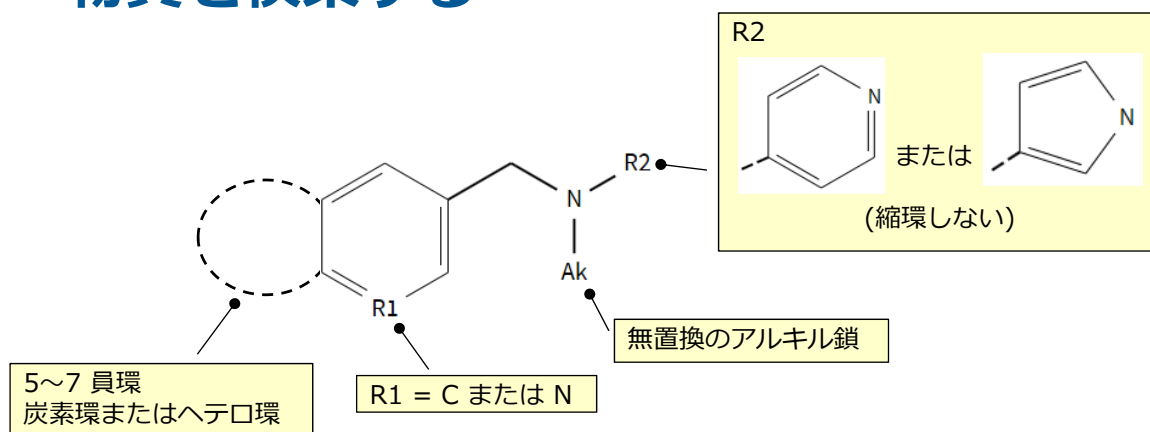
結合点を 2 箇所もつフラグメント

-  結合点ツールでフラグメント上の
2 つの結合点を指定する



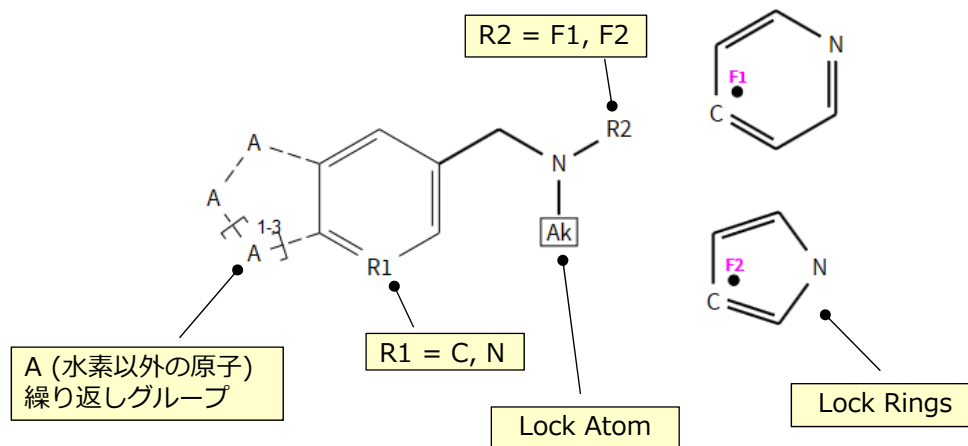
デモンストレーション

- REGISTRY ファイルで下記の条件の物質を検索する



デモンストレーション

- 作図例

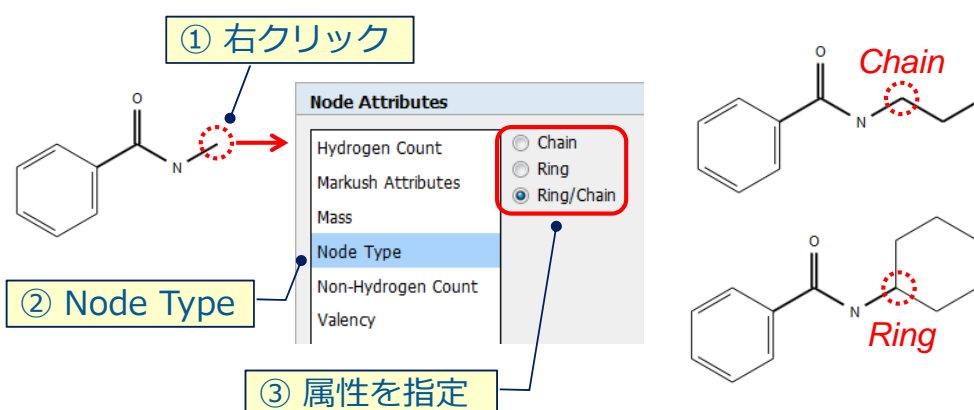


本日の内容

- 構造検索の概要
- 基本的な構造の作図
- 便利な作図機能
- 属性の指定

ノードの属性 (Node Type)

- ノードが環上, 鎖上, 環または鎖上にあることを指定



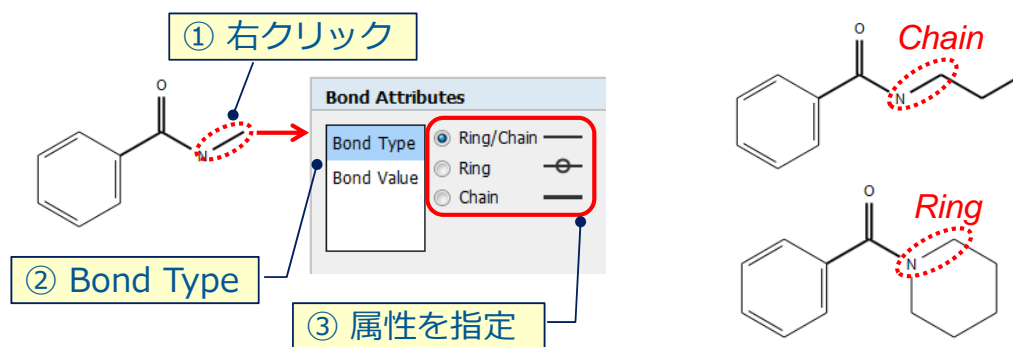
作図したままのデフォルトでは鎖上のノードは **Chain**



環上の回答も必要な場合は **Ring/Chain** に変更

結合の属性 (Bond Type)

- 結合が環上, 鎖上, 環または鎖上にあることを指定



作図したままのデフォルトでは鎖上の結合は **Chain**



環上の回答も必要な場合は **Ring/Chain** に変更

一般式属性 (Generic Definition)

- 一般式グループ記号 (Hy, Cb, Cy, Ak) の特徴を指定

① 右クリック

② Generic Definition

* デフォルトは **Any (不定)**

Node Attributes		
Element Counts	Saturation: 飽和度	Type of Chain: 鎖の種類
Generic Definition: Carbon Chains	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Unsaturated 不飽和 <input type="radio"/> Saturated 飽和	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Branched 分岐鎖 <input type="radio"/> Linear 直鎖
Markush Attributes	Number of Carbon Atoms: 炭素数	
Non-Hydrogen Count	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Less than 7 7 未満 <input type="radio"/> 7 or more 7 以上	

Node Attributes		
Element Counts	Saturation: 飽和度	Type of Ring System: 環の種類
Generic Definition: Heterocycles	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Unsaturated <input type="radio"/> Saturated	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Monocyclic 単環 <input type="radio"/> Polycyclic 多環
Markush Attributes	Number of Hetero Atoms: ヘテロ原子数	Number of Carbon Atoms: 炭素数
Non-Hydrogen Count	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Exactly 1 ちょうど 1 <input type="radio"/> 2 or more 2 以上	<input checked="" type="radio"/> Any <input type="radio"/> Less than 7 <input type="radio"/> 7 or more

元素数 (Element Counts)

- 一般式グループ記号に元素の種類と数を指定

② Element Counts

③ Specific を選択

⑤ 条件を追加

① 右クリック

④ 元素の種類と数を指定

* デフォルトは Any (不定)

複数の元素を指定する場合は ④, ⑤ を繰り返す

結合非水素数

- 指定したノードに対する非水素ノードの結合数とその属性を指定する

結合非水素数	ヒットする回答			
環/鎖結合 ちょうど 3	×	○	×	○
環結合 ちょうど 2	○	○	○	×

結合非水素数の指定方法

- 非水素ノードへの結合の属性と数を指定する

① 右クリック

② Non-Hydrogen Count

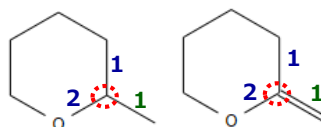
③ Specific を選択

④ 結合の属性と数を指定

環または鎖 ちょうど 2

結合次数は問わない

* デフォルトは Any (不定)



環 : 2
鎖 : 1
環/鎖 : 3

属性表示パネル

- ポインタをノードに重ねると指定されている属性が、属性名に重ねると対応するノードがハイライトされる

デフォルトと異なる属性が指定されているノードには * を表示

Attribute Values

Bond Type
Chain
Ring
Ring / Chain

Bond Value
Exact
Normalized
Exact / Normalized

Node Type
Chain
Ring
Ring / Chain

Generic Definition
Saturated / Unsaturated
Linear / Branched
Monocyclic / Polycyclic
1 hetero atom / 2+ hetero atoms
0-6 carbons / 7+ carbons

Match Level
Atom
Class
Any

Element Count Level
Limited
Unlimited

Other Node Attributes
Mass
Valency
Hydrogen Count
Non-Hydrogen Count
Element Count: N: 1-2

Attribute Values

Shortcut Keys

Bond Type
Chain
Ring
Ring / Chain

Bond Value
Exact
Normalized
Exact / Normalized

Node Type
Chain
Ring
Ring / Chain

Generic Definition
Saturated / Unsaturated
Linear / Branched
Monocyclic / Polycyclic
1 hetero atom / 2+ hetero atoms
0-6 carbons / 7+ carbons

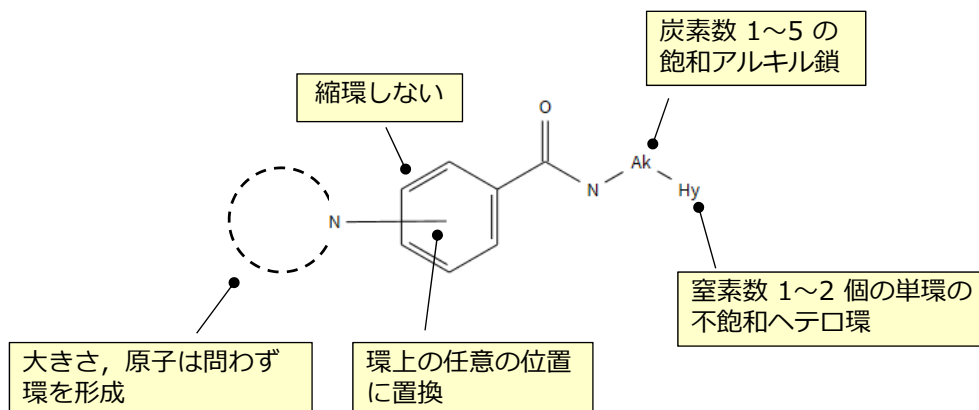
Match Level
Atom
Class
Any

Element Count Level
Limited
Unlimited

Other Node Attributes
Mass
Valency
Hydrogen Count
Non-Hydrogen Count
Element Count

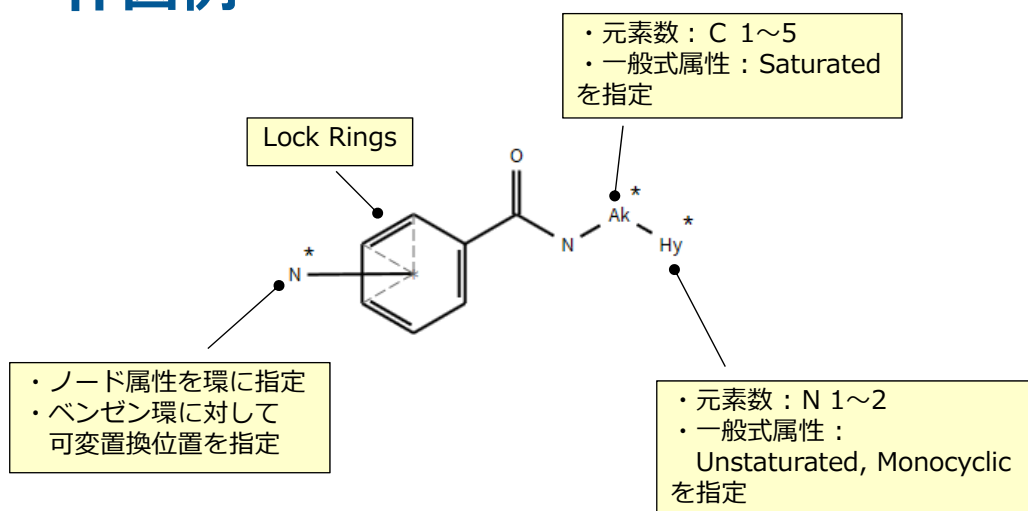
デモンストレーション

- REGISTRY ファイルで下記の条件の物質を検索する



デモンストレーション

- 作図例



まとめ

- 便利な作図機能，属性の指定により複数の構造をまとめて検索したり，不要な回答を除くことが可能！
- 作図ツールを使いこなして効率的に検索しましょう！

参考資料

- 構造作図ガイド
 - <http://www.jaici.or.jp/newstn/pdf/structure.pdf>
- 構造作図チュートリアル
 - <http://www.jaici.or.jp/newstn/elearning.html>