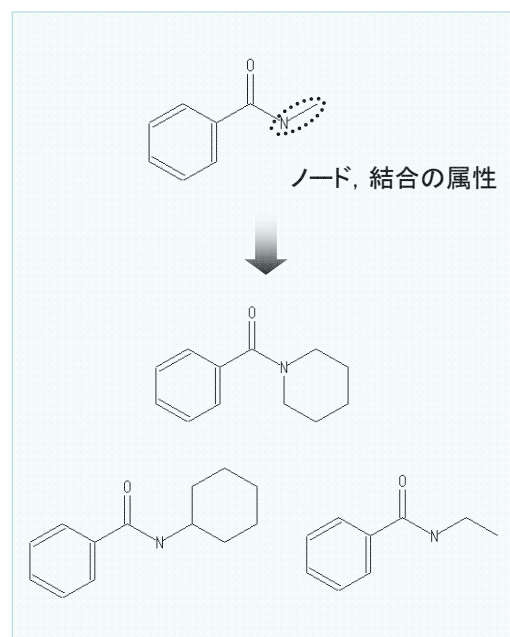
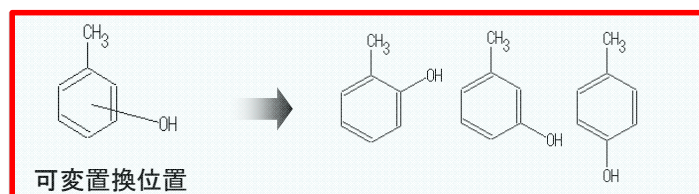
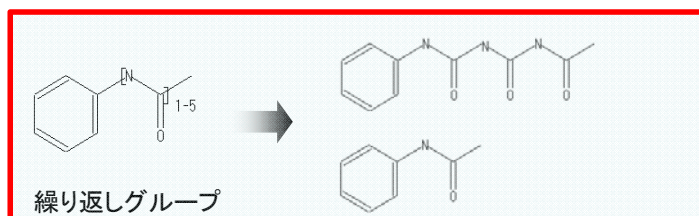
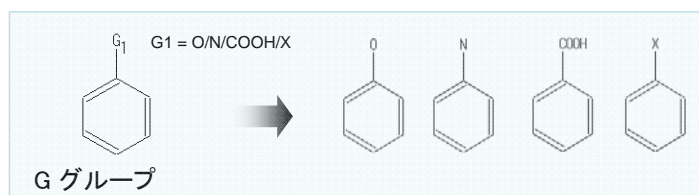


STN インターネットセミナー

STN 構造検索テクニック 便利な作図 (第二回)

JAICI
化学情報協会

STN のさまざまな作図機能



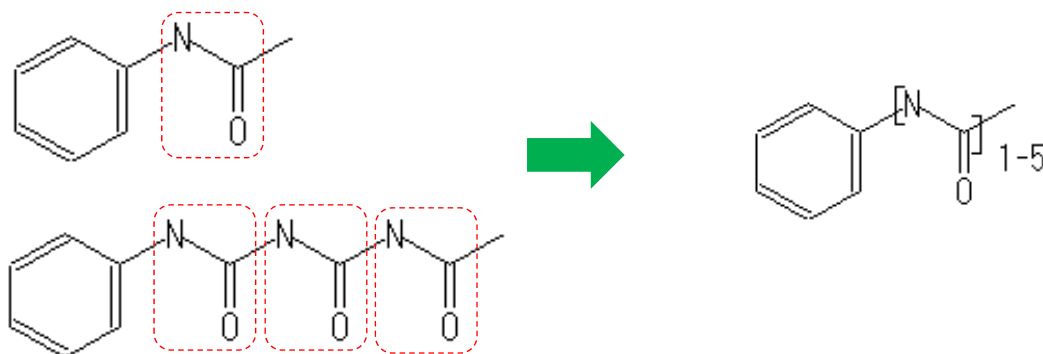
JAICI
化学情報協会

本日の内容

- ・ **繰り返しグループ**
 - 繰り返しグループとは？
 - 活用方法・注意点・作図方法
 - 検索例1
- ・ **可変置換位置**
 - 可変置換位置とは？
 - 活用方法・注意点・作図方法
 - 検索例2

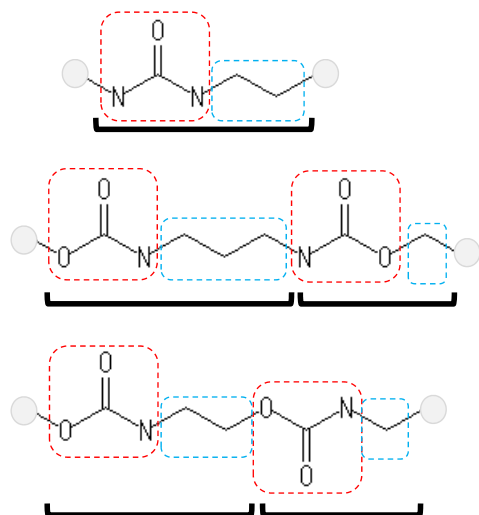
繰り返しグループとは？

- ・ 繰り返しを含む構造をまとめて作図できる機能である。

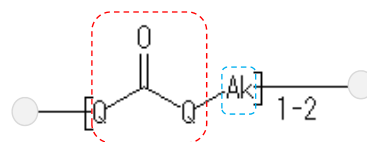


繰り返しグループの活用方法1

鎖の場合



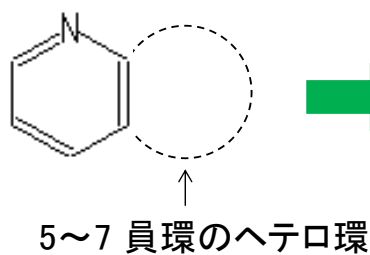
作図例



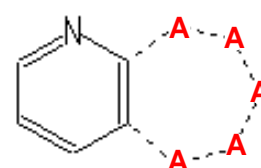
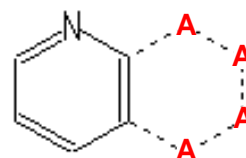
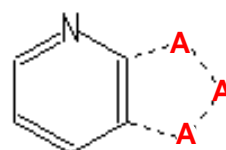
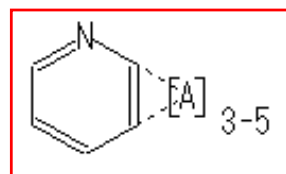
Q は C,H 以外の元素, Ak は鎖式炭素

繰り返しグループの活用方法2

環の場合

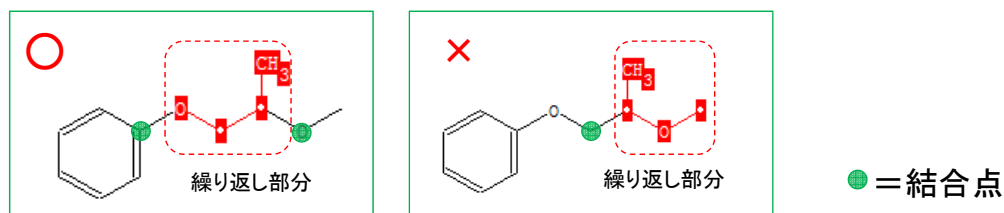


作図例

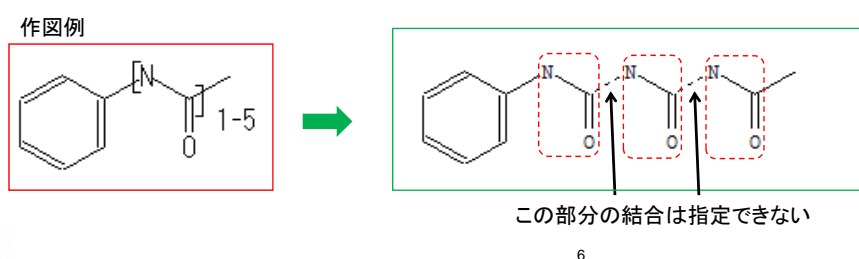


繰り返しグループの注意点

- 繰り返しグループは、結合点が二つ必要



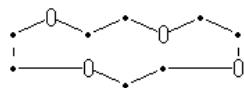
- 繰り返し単位間の結合は指定できない



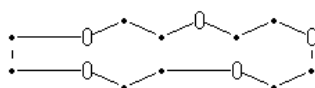
繰り返しグループの作図方法

検索例1

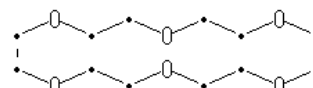
・ ク라운エーテル骨格を持つ物質の検索



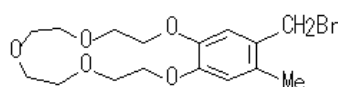
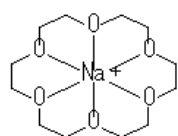
12-Crown-4-ether



15-Crown-5 ether

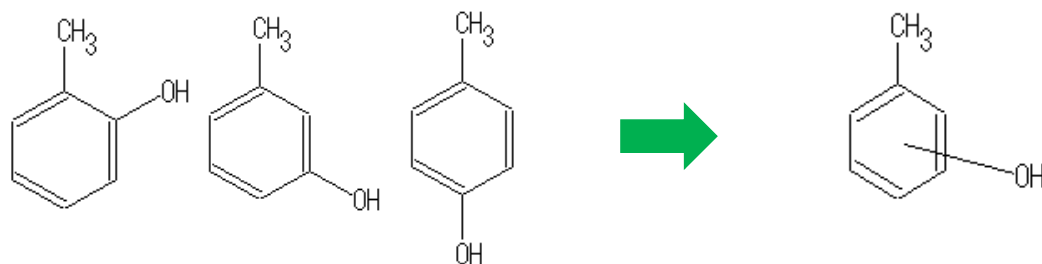


18-Crown-6 ether



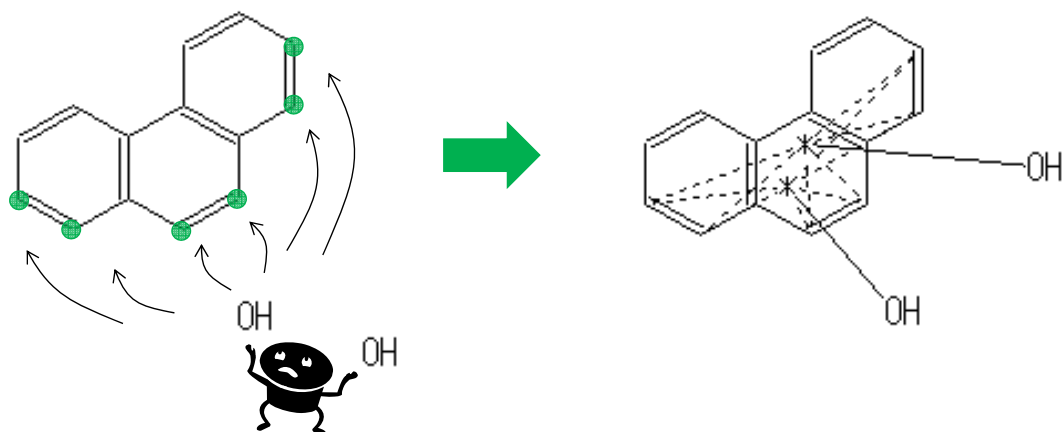
可変置換位置とは？

- ・ 環に対して置換基の可変な結合位置をまとめて作図できる機能である。



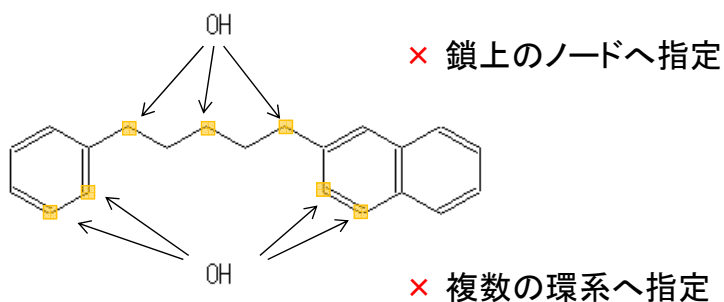
可変置換位置の活用法

- 「どこかに置換する」という限定が簡単にできる。



可変置換位置の注意点

- 結合先として指定できるのは一つの環系上のノードのみ。鎖上のノードや複数の環系上には指定できない。



可変置換位置の作図方法

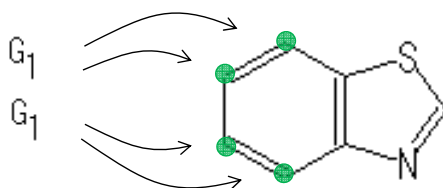
The screenshot shows the JAICI software interface. The menu bar includes 'ファイル(F)', '編集(E)', '作図(D)', 'テンプレート(T)', '質問式定義(Q)', '表示(P)', '設定(N)', 'ウィンドウ(W)', and 'ヘルプ(H)'. The '作図(D)' menu is open, showing options like '結合(B)...', '原子(A)...', 'ショートカット(S)...', '可変原子(V)...', '可変置換位置(VPA)(P)', 'Gグループ(G)...', '鎖スーパーアトム(C)...', '環スーパーアトム(R)...', 'その他のスーパーアトム(O)...', '角カッコ(Q)...', and 'フラグメントを縮合(F)'. The '可変置換位置(VPA)(P)' option is highlighted. A yellow box labeled '③ 作図メニュー' points to the menu. Another yellow box labeled '④ 可変置換位置 (VPA) を選択' points to the highlighted option. On the left, a yellow box labeled '① 選択 ツール' points to the selection tool icon in the toolbar. On the right, a yellow box labeled '② 骨格と置換基を選択' points to a chemical structure of a benzene ring with a methyl group (CH₃) and a hydroxyl group (OH) attached. The atoms in the structure are highlighted with red boxes, indicating they are selected. The status bar at the bottom shows '選択した部分に可変置換位置を指定します' and 'MF 無し'.

JAICI
化学情報協会

12

検索例2

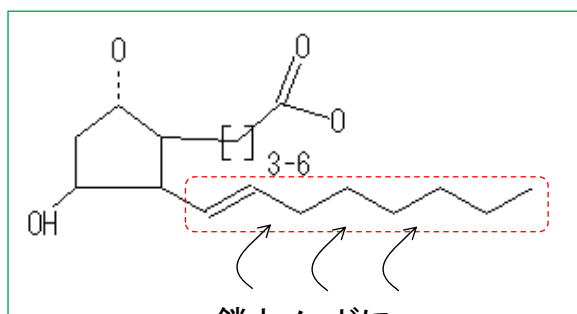
- ベンゼン環部分に, OH, COOH, NH₂ のいずれかが二つ置換した構造の検索



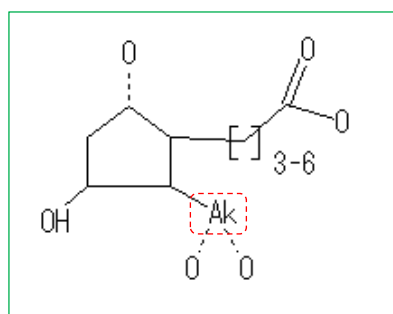
G₁ = OH, COOH, NH₂

参考：鎖上の可変置換位置指定

- 別々に構図質問式をアップロードすると重なった構造も検索される.



鎖上ノードに
酸素を置換させたい



本日のまとめ

- 繰り返しグループ**とは、繰り返しを含む構造をまとめて作図できる機能である
- 可変置換位置**とは、環に対して置換基の可変な結合位置を作図できる機能である.
- これらの機能を使うと**複数の構造をまとめて検索**できるので、**効率的**である.

参考資料

- STN 講習会テキスト
「化学物質検索Ⅱ - 構造」
http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_chem2.pdf
- STN リフレッシュセミナーテキスト
「REGISTRY ファイル - 構造検索テクニック」
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-registrystr.pdf>