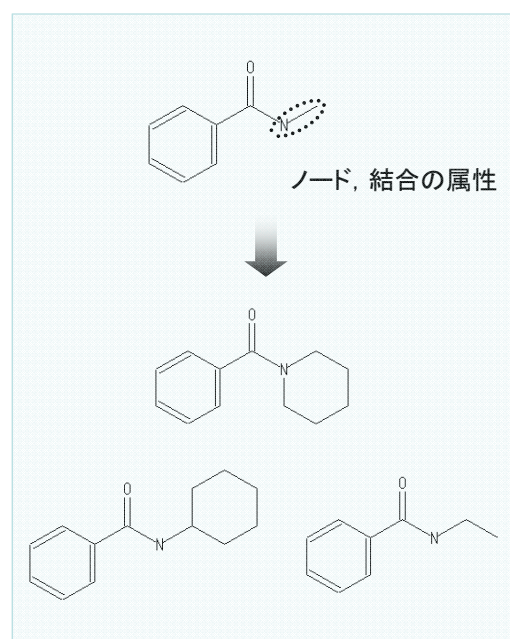
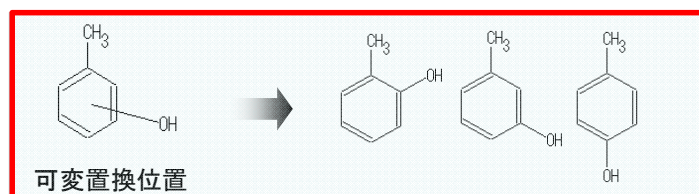
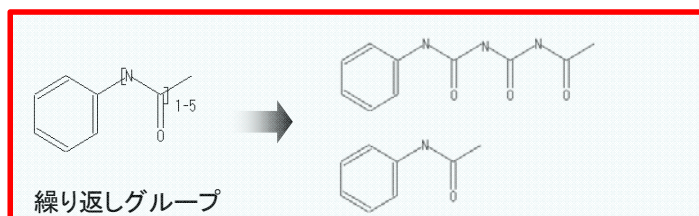
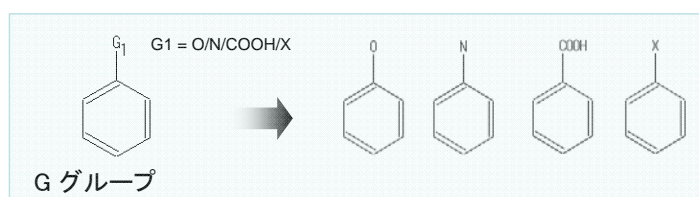


# STN インターネットセミナー

## 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



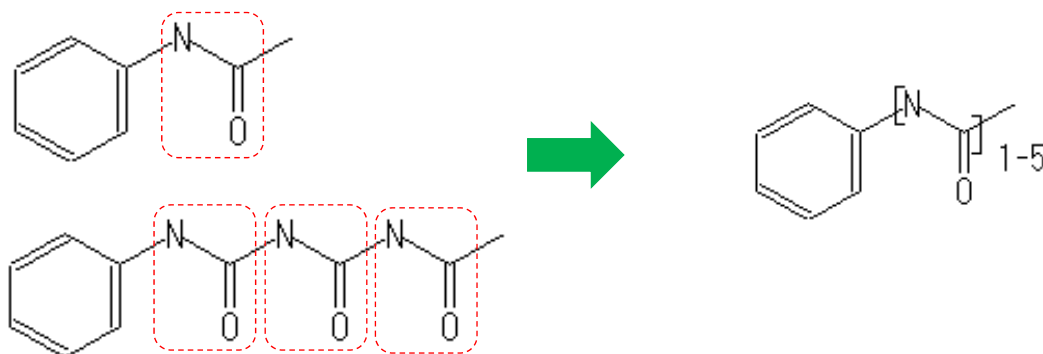
**JAICI**  
化学情報協会

## 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

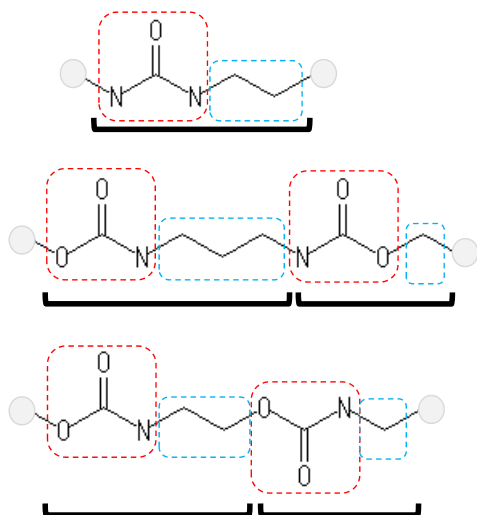
## 繰り返しグループとは？

- ・ 繰り返しを含む構造をまとめて作図できる機能である。

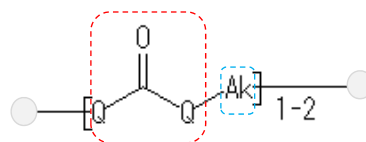


# 繰り返しグループの活用方法1

## 鎖の場合



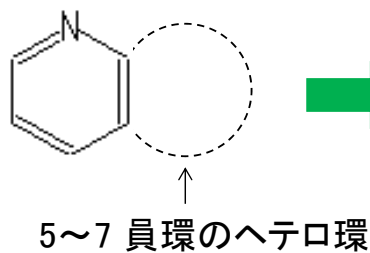
作図例



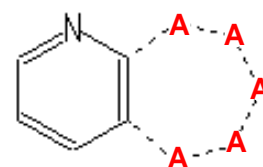
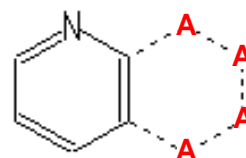
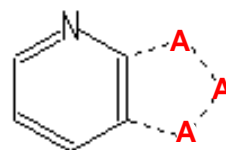
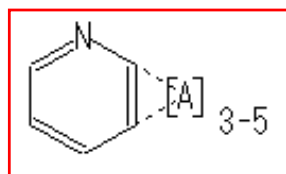
Q は C,H 以外の元素, Ak は鎖式炭素

# 繰り返しグループの活用方法2

## 環の場合

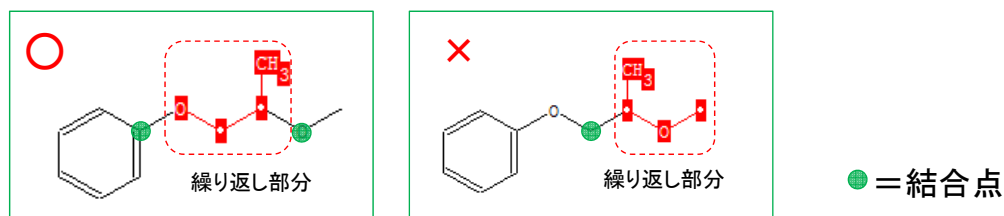


作図例

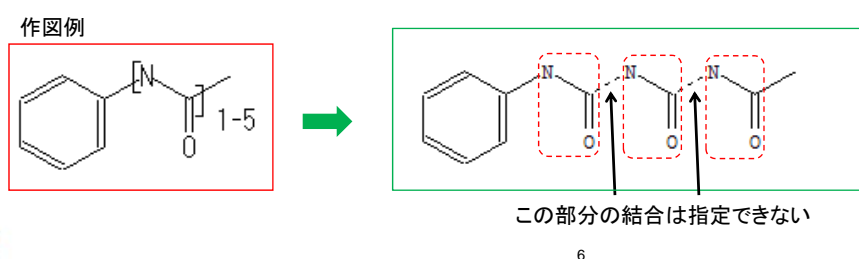


## 繰り返しグループの注意点

- 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

① 選択ツール

② 選択

③ 作図メニュー

④ 繰り返しグループ範囲を入力  
0~20を指定可能

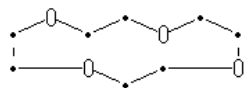
繰り返しグループ範囲  
最小: 2 最大: 5  
キャンセル

繰り返しグループを指定します

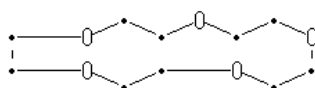
C8 H9 N O

## 検索例1

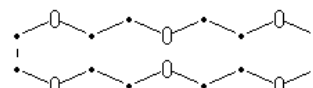
### ・ ク라운エーテル骨格を持つ物質の検索



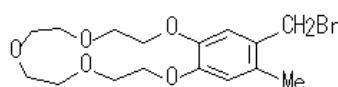
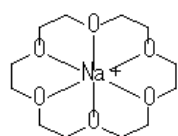
12-Crown-4-ether



15-Crown-5 ether

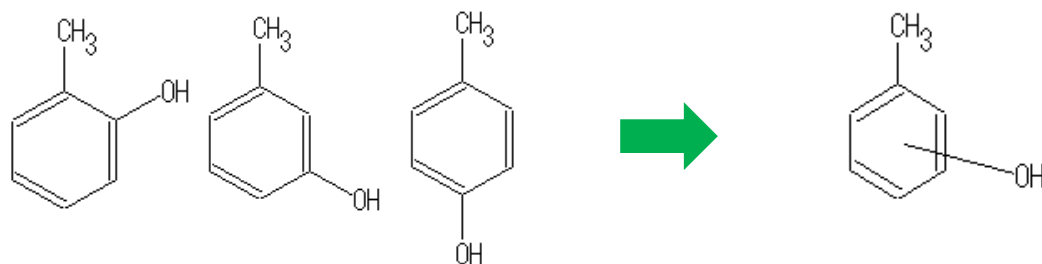


18-Crown-6 ether



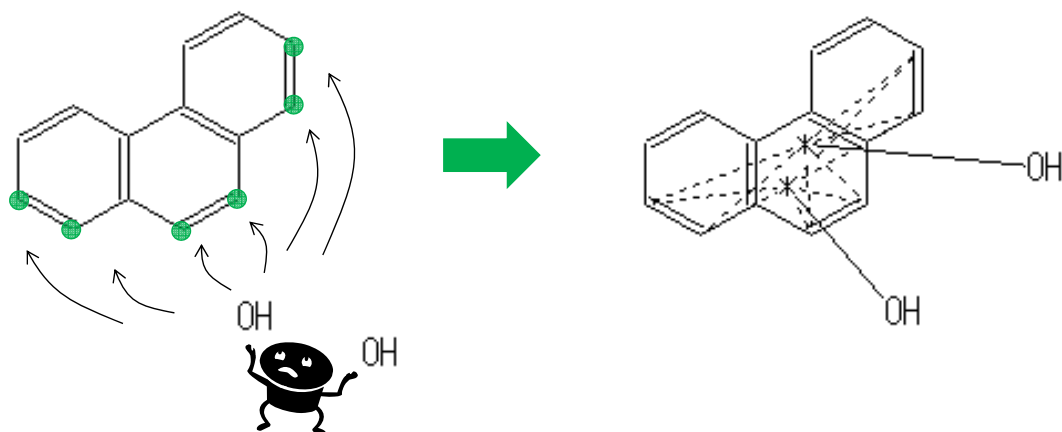
## 可変置換位置とは？

- ・ 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。



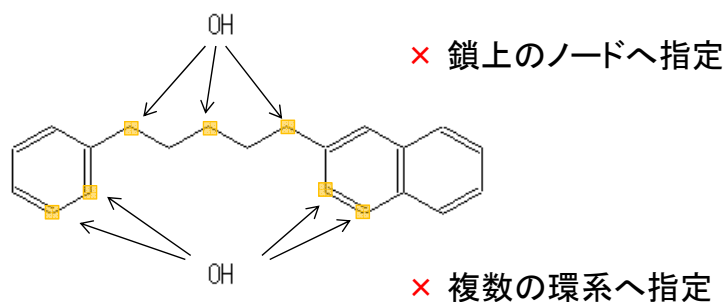
## 可変置換位置の活用法

- 「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

① 選択ツール

② 骨格と置換基を選択

③ 作図メニュー

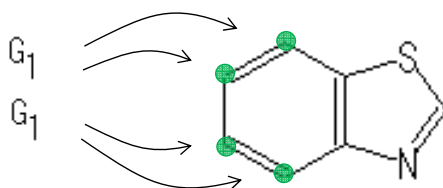
④ 可変置換位置 (VPA) を選択

JAICI  
化学情報協会

12

## 検索例2

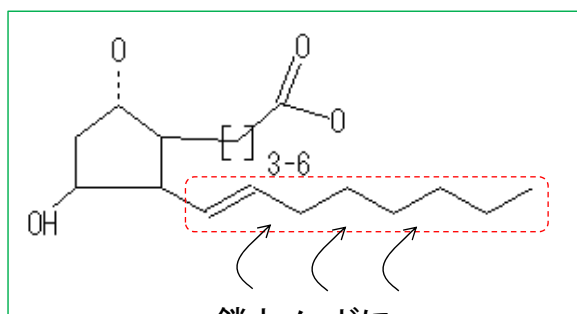
- ベンゼン環部分に, OH, COOH, NH<sub>2</sub> のいずれかが二つ置換した構造の検索



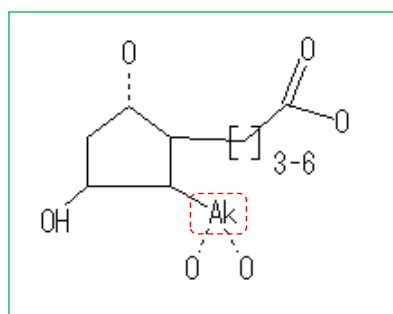
G<sub>1</sub> = OH, COOH, NH<sub>2</sub>

## 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](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>