

---

## 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

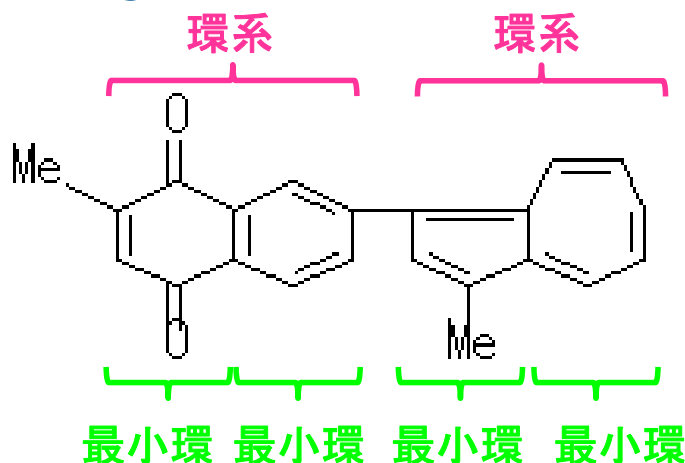
## こんなときに便利！



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

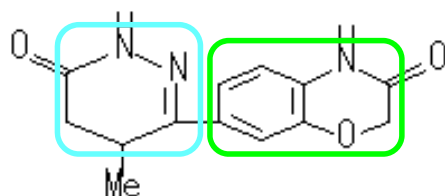
環系の  
元素配列

環系の環  
の大きさ

環系式

環系  
識別子

環系  
の存在数

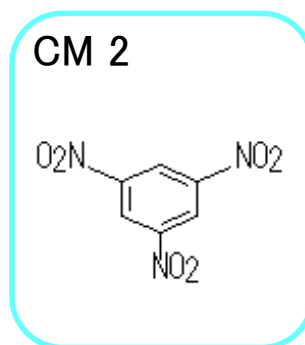
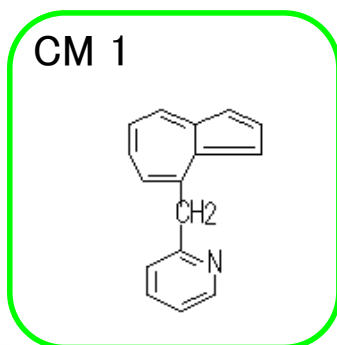


データは環系ごと

## 〈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

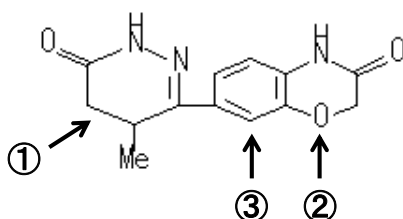
## EA (Elemental Analysis)

- 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

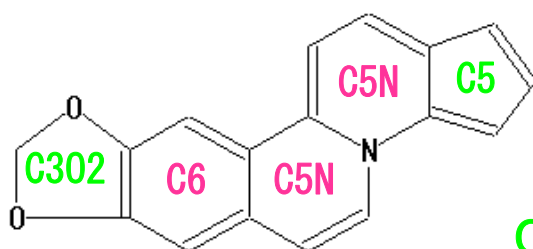
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
	ES	SZ	RF	RID	Count
① C4N2	N2C4	6	C4N2	46.169.6	1
C4NO-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8NO	591.397.10	1

② ↑  
③ ↑

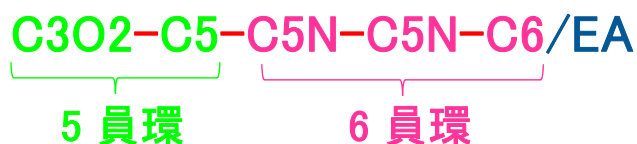


## EA フィールドの表記規則

- 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



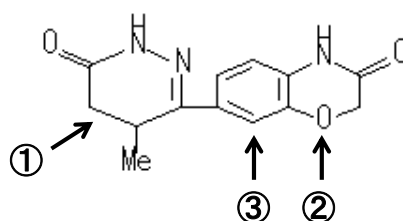
## ES (Elemental Sequence)

- 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

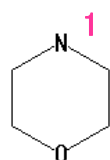
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N2 ①	N2C4	6	C4N2	46.169.6	1
C4NO-C6	NC2OC2-C6	6-6	C8NO	591.397.10	1

② ↑  
③ ↑



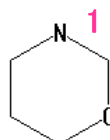
## ES フィールドの表記規則

- 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

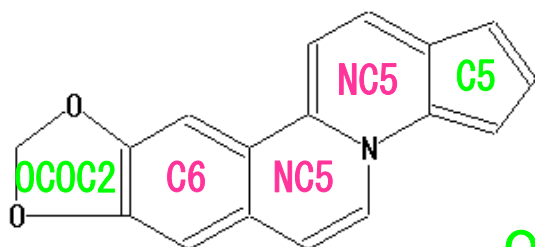
- 次のヘテロ原子が近い方向に記述**する



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>

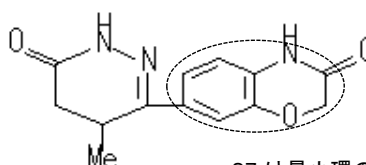
C3O2-C5-C5N-C5N-C6/EA

## 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

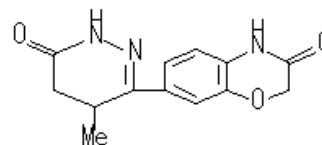
Ring System Data

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)

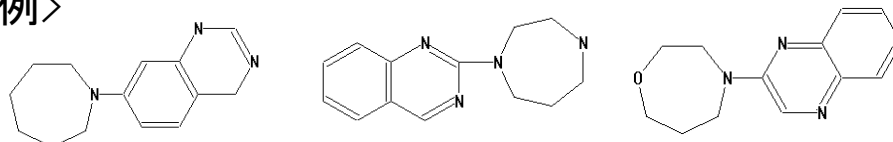
	Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count	
AND	(S) C6	C6	6	C6	46. 150. 18	1 in CM 2	] (P)
	(S) C5N	NC5	6	C5N	46. 156. 30	1 in CM 1	
	(S) C5-C7	C5-C7	5-7	C10	602. 1. 36	1 in CM 1	

## 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

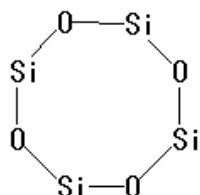
環系内の特定元素の数を指定

→ /REL で検索

→ /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>

