
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2回)



JAICI
化学情報協会

2013年5月

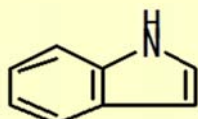
本日の内容

- ・ 環系データ (Ring System Data) とは
- ・ ① 環の数を指定した検索
検索例 1
- ・ ② 環系識別子を用いた検索
検索例 2

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

例：120-72-9



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N-C6	NC4-C6	5-6	C8N	333.151.57	1

こんなときに便利！

構造質問式では
指定できない検索

作図した以外の
環構造は不要



① 環の数を指定した検索

特徴的な環構造の検索

ステロイド骨格を持つ
化合物を検索したい



② 環系識別子を用いた検索

本日の内容

- ・ 環系データ (Ring System Data) とは
- ・ ① 環の数を指定した検索
検索例 1
- ・ ② 環系識別子を用いた検索
検索例 2

① 環の数を指定した検索

作図した以外に
環構造は不要



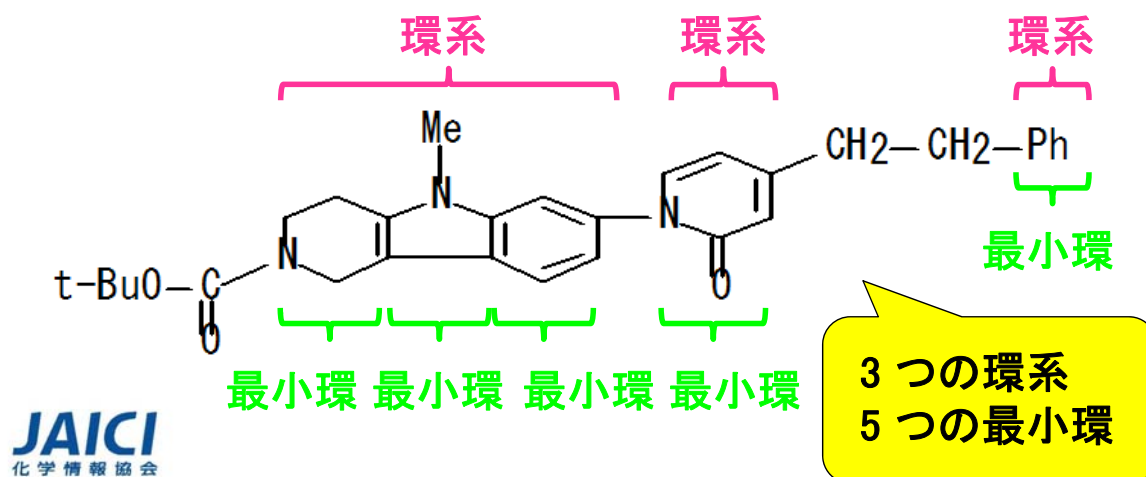
環の数が 3-5 個のアセン
誘導体を検索したい



環系・最小環の数で検索

“環系”と“最小環”

- ・ 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

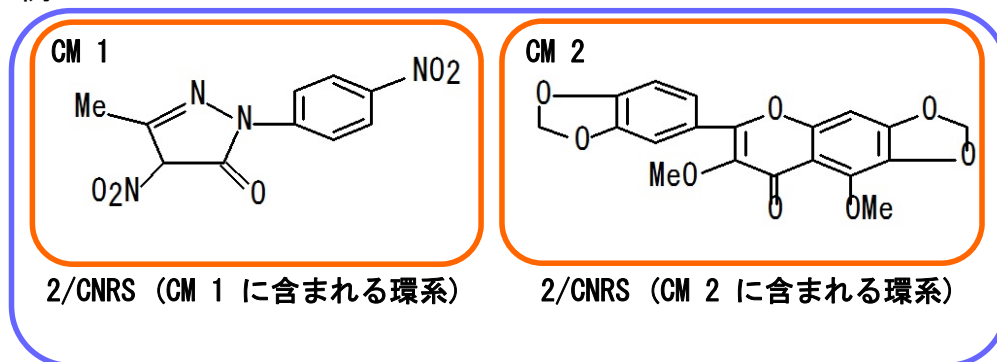


7

環系の数を指定した検索

- ・ /CNRS (成分内の環系の数)
- ・ /NRS (物質内の環系の数)

例 : 857243-28-8

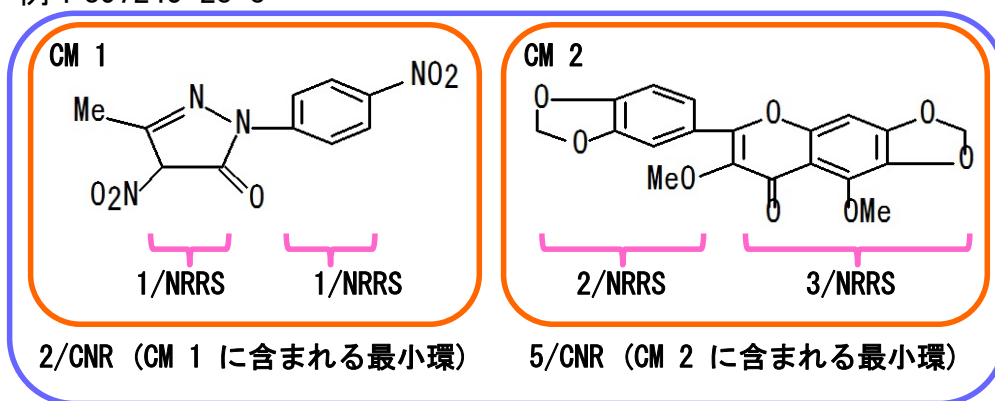


4/NRS (物質全体に含まれる環系)

最小環の数を指定した検索

- ・ /NRRS (環系内の最小環の数)
- ・ /CNR (成分内の最小環の数)
- ・ /NR (物質内の最小環の数)

例 : 857243-28-8

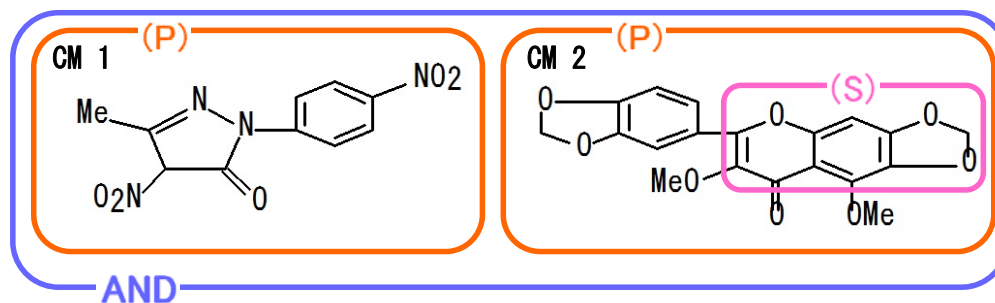


7/NR (物質全体に含まれる最小環)

環系データにおける近接演算子

- ・ 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

例 : 857243-28-8



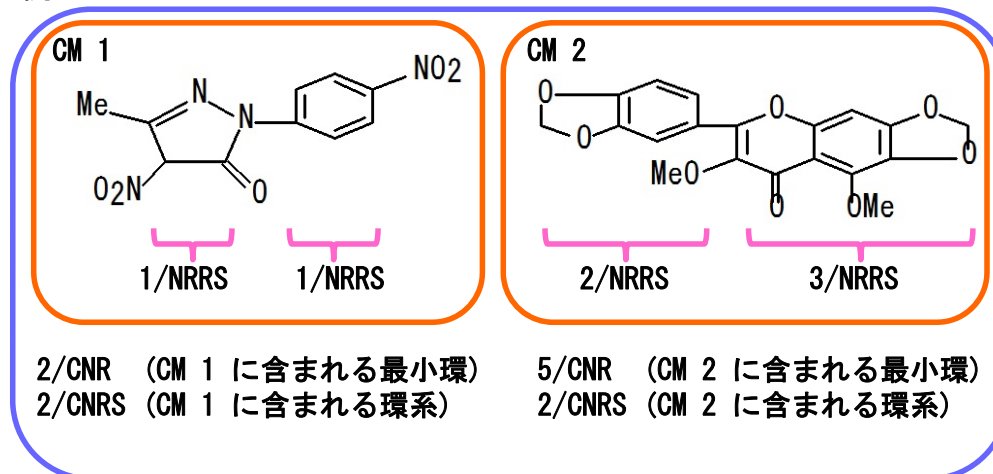
「2 個の最小環から成る環系」と
「3 個の最小環から成る環系」を
同一成分中にもつ化合物

入力例

=> S 2/NRRS (P) 3/NRRS

環の数を指定した検索 ～ まとめ

例：857243-28-8

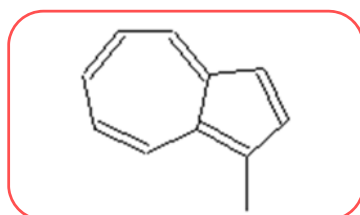


7/NR (物質全体に含まれる最小環)

4/NRS (物質全体に含まれる環系)

検索例 1

- 下記の構造を持つ誘導体の検索



〈検索条件〉

環はこれ以上縮合しない

置換基に環状の構造は含まない

単成分物質

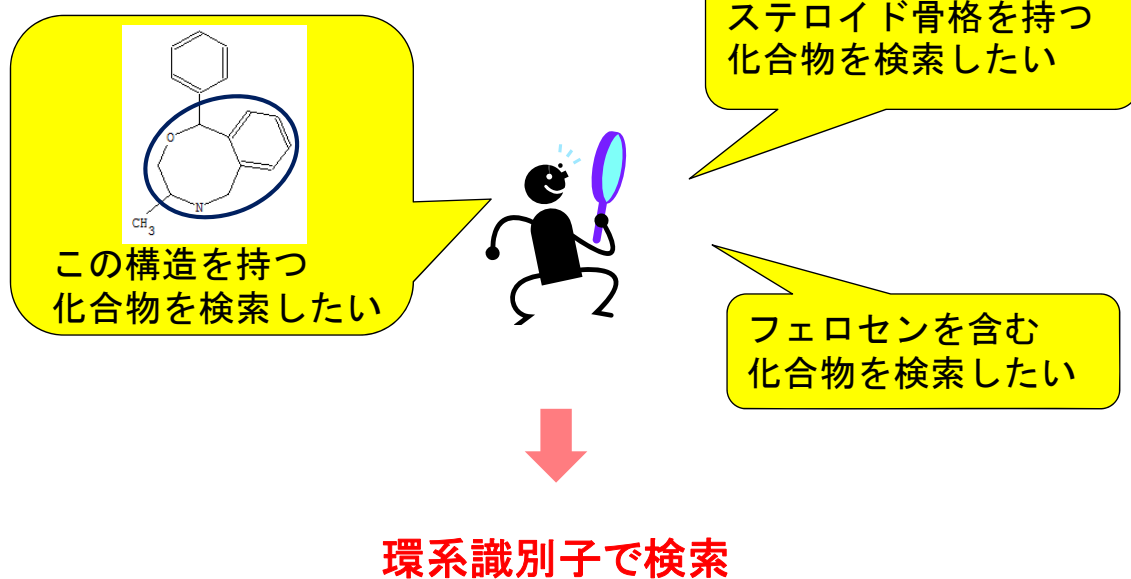
構造質問式で
指定できない

➡ 物質全体の環系の数 (/NRS) で限定

本日の内容

- ・ 環系データ (Ring System Data) とは
- ・ ① 環の数を指定した検索
検索例 1
- ・ ② 環系識別子を用いた検索
検索例 2

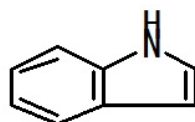
② 環系識別子を用いた検索



環系識別子とは

- 各環系の**骨格・元素の位置・結合回数**に着目して付与されたユニークなコード
- /RID** フィールドで検索する

例：120-72-9



Ring System Data

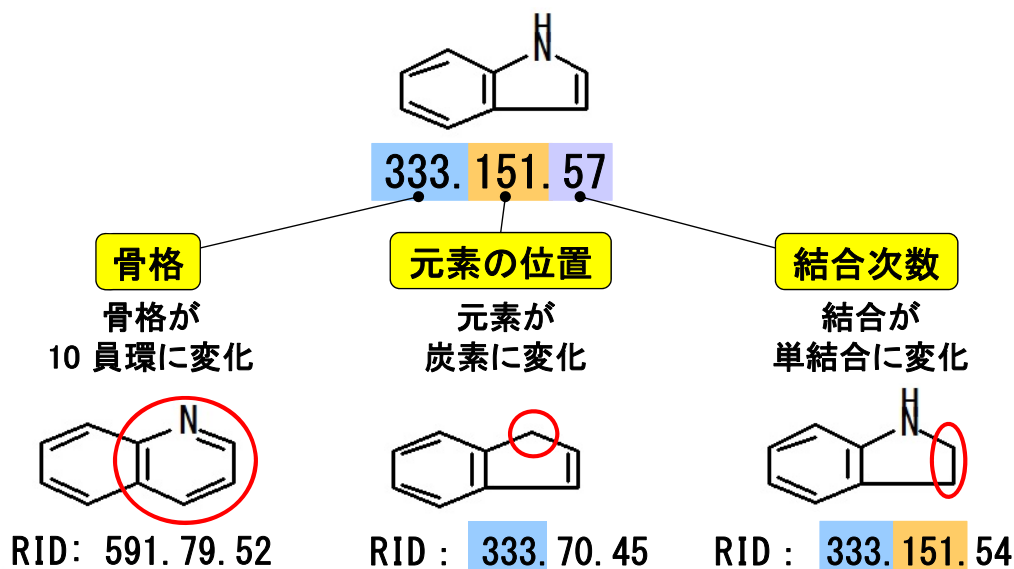
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N-C6	NC4-C6	5-6	C8N	333.151.57	1

環系識別子

/RID の存在数

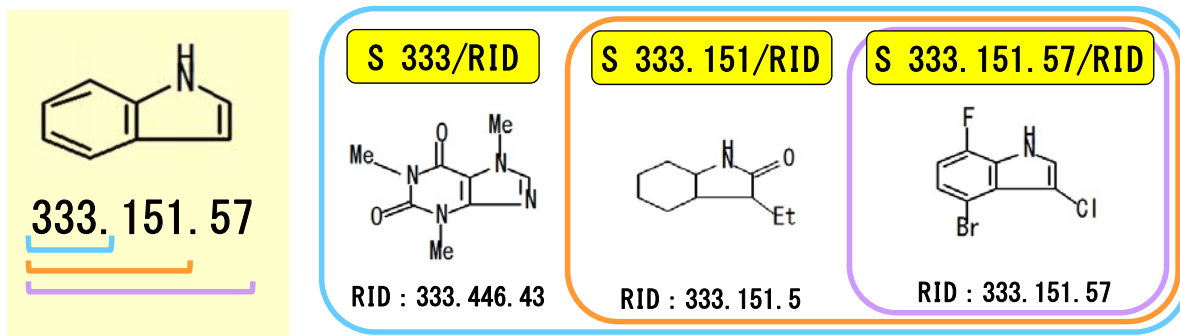
環系識別子の例

- 骨格・元素の位置・結合回数**の違いによりコードが変化する

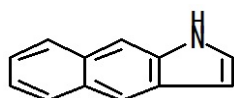


環系識別子の検索方法

- 骨格のみ指定
- 骨格・元素位置を指定
- 骨格・元素位置・結合次数を指定



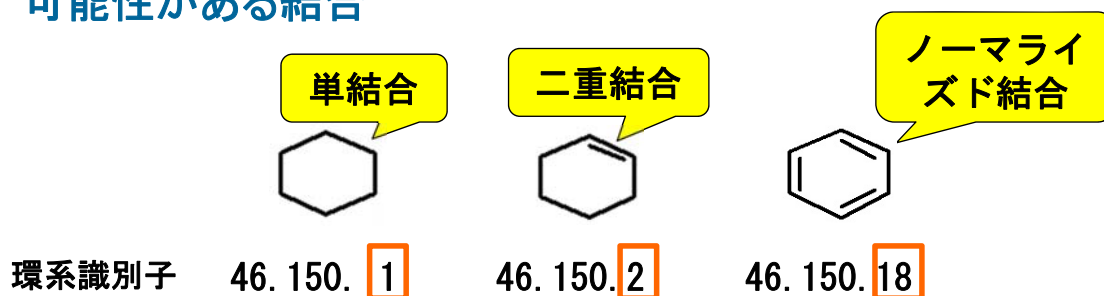
【注意】 さらに他の環が縮環した構造はヒットしない



結合次数とは

- 単結合・二重結合・ノーマライズド結合* の違いを示す

* 互変異性などにより、二重結合の位置が変化する可能性がある結合



【ポイント】 結合の種類が変わる可能性がある場合には結合次数を指定せずに検索する

環系識別子の調べ方

① 調べたい環構造を持つ化合物を検索 *

⇒ S (CAS 登録番号)

⇒ S (完全名称)/CN

⇒ S L# (サンプル検索) L# : 構造質問式

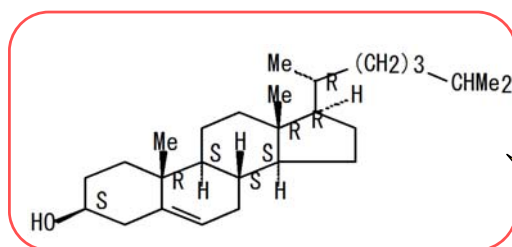
* LREGISTRY ファイルでも可

② RSD 表示形式で環系データを表示

⇒ D RSD

検索例 2

- ・ コレステロール (57-88-5) と同じ構造を持つ化合物の検索



CAS 登録番号が
わかっている

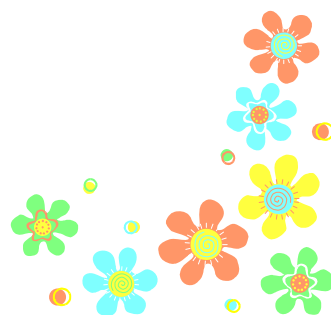
① /RN で検索

② RSD 表示形式で表示 → 環系識別子を確認

③ 環系識別子を /RID 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>



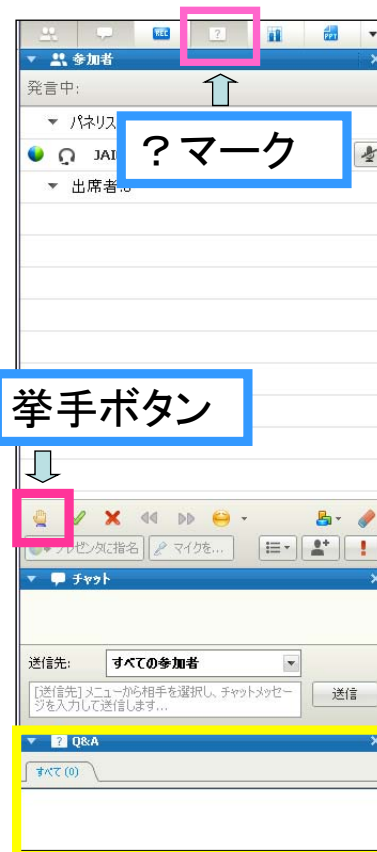
今後のインターネットセミナー

開催月	内容
6月	合成文献検索のポイント
7月	かんたんアラート登録

ご質問はございませんか？



- 質問事項は **Q&A ボックス**に入力して、「主催者」宛てに送信してください。
* Q&A ボックスは ? マークのアイコンをクリックすると表示されます。
- ご質問に対する回答は、Q&A 欄への返信または音声にてお送りします。
* 時間の都合上、セミナー中にすべてのご質問にお答えできない場合があります。
- 複雑なご質問の場合は、ヘルプデスクまでご連絡ください



検索例 1

=> FILE REGISTRY

① 部分構造検索

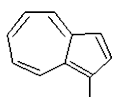
=>

Uploading C:\Users\¥xxxxx¥xxxxx¥EXA.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using the Structure Drawing program.

=> S L1

← 部分構造検索 (サンプル検索)

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:52:56 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 794 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 794 ITERATIONS

50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

 BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 14190 TO 17570

PROJECTED ANSWERS: 9537 TO 12343

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

← 部分構造検索 (フルファイル検索)

FULL SEARCH INITIATED 11:53:11 FILE 'REGISTRY'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 15179 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 15179 ITERATIONS

10302 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

L3 10302 SEA SSS FUL L1

② 単成分物質に限定 (成分数 : /NC)

=> S L3 AND 1/NC

L4 8793 L3 AND 1/NC

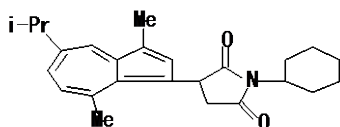
=> D SCAN

← ヒットした回答を SCAN 表示形式で確認

L4 8793 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN 2,5-Pyrrolidinedione, 1-cyclohexyl-3-[3,8-dimethyl-5-(1-methylethyl)-1-azulenyl]-

MF C25 H31 N O2



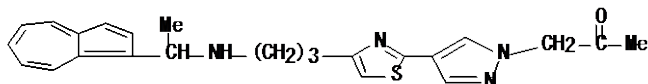
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1) : 2

L4 8793 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN 2-Propanone, 1-[4-[4-[3-[[1-(1-azulenyl)ethyl]amino]propyl]-2-thiazolyl]-1H-pyrazol-1-yl]-

MF C24 H26 N4 O S

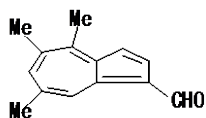


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L4 8793 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN 1-Azulenecarboxaldehyde, 4,5,7-trimethyl-

MF C14 H14 O



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

③ 物質内に 1 個の環系を含む化合物を検索 → 環状の置換基を持つ化合物を除く (物質全体の環系の数 : /NRS)

=> S L4 AND 1/NRS

L5 3139 L4 AND 1/NRS

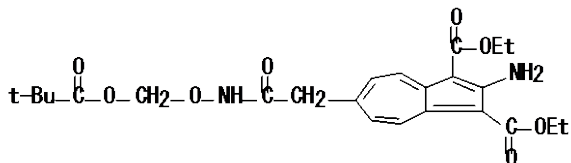
=> D SCAN

← ヒットした回答を SCAN 表示形式で確認

L5 3139 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN 1,3-Azulenedicarboxylic acid, 2-amino-6-[2-[[(2,2-dimethyl-1-oxopropoxy)methoxy]amino]-2-oxoethyl]-, 1,3-diethyl ester

MF C24 H30 N2 O8



* 物質全体の環系の数で限定したため、追加の置換基は鎖状のものに限定された

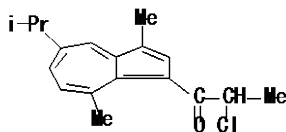
PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1) : 2

L5 3139 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN 1-Propanone, 2-chloro-1-[3,8-dimethyl-5-(1-methylethyl)-1-azulenyl]-

MF C18 H21 Cl O

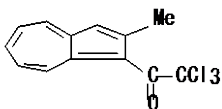


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L5 3139 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

IN Ethanone, 2,2,2-trichloro-1-(2-methyl-1-azulenyl)-

MF C13 H9 Cl3 O



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

検索例 2

① コレステロール (57-88-5) の環系識別子を確認

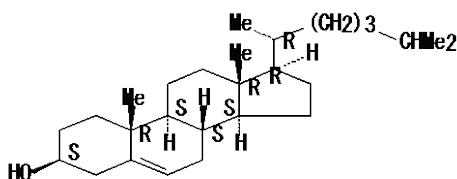
=> FILE LREGISTRY ← LREGISTRY ファイルに入る

=> S 57-88-5
L1 1 57-88-5
(57-88-5/RN)

=> D STR RSD ← RSD 表示形式で環系識別子を確認

L1 ANSWER 1 OF 1 LREGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN

Absolute stereochemistry.



Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C5-C6-C6-C6	C5-C6-C6-C6	5-6-6-6	C17	4432.3.5	1

環系識別子

② コレステロールの骨格を持つ化合物の検索 (環系識別子 : /RID)

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルで検索する

=> E 4432.3.5/RID
E1 1 4432.3.498/RID
E2 1 4432.3.499/RID
E3 50350 --> 4432.3.5/RID
E4 9 4432.3.50/RID
E5 3 4432.3.500/RID
E6 2 4432.3.501/RID
E7 1 4432.3.502/RID
E8 2 4432.3.503/RID
E9 1 4432.3.504/RID
E10 1 4432.3.505/RID
E11 1 4432.3.506/RID
E12 2 4432.3.507/RID

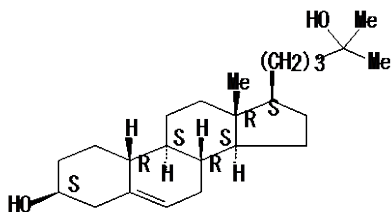
=> S E3 ← コレステロールの環系識別子で検索
L2 50350 4432.3.5/RID

=> D_SCAN

← ヒットした回答を SCAN 表示形式で確認

L2 50350 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
IN Estr-5-ene-17β-butanol, 3-hydroxy-α,α-dimethyl-, (3β,17β)-
MF C24 H40 O2

Absolute stereochemistry.

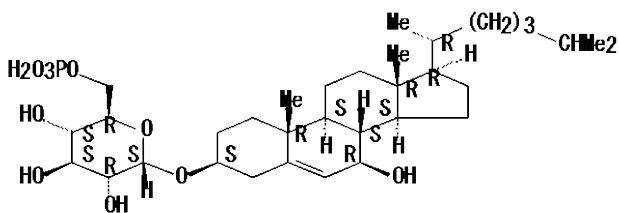


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

L2 50350 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
IN α-D-Glucopyranoside, (3β,7β)-7-hydroxycholest-5-en-3-yl, 6-(dihydrogenphosphate)
MF C33 H57 O10 P

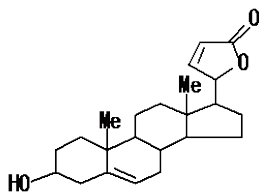
Absolute stereochemistry.



* コレステロールの骨格に鎖結合を介して環状の置換基を持つ化合物もヒットする

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L2 50350 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2013 ACS on STN
IN 21-Norchola-5,22-dien-24-oic acid, 3,20-dihydroxy-, γ-lactone, (3β,20R)- (9CI)
MF C23 H32 O3



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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