

インターネットセミナー

構造検索テクニック – 結合非水素数



JAICI
化学情報協会

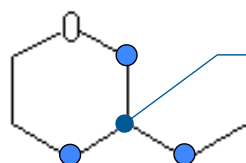
1

本日の内容

- ・ 結合非水素数とは
- ・ 結合非水素数の指定とヒットする回答例
- ・ 結合非水素数の指定方法, 注意点
- ・ 検索例
 - 環の特定の位置に縮環を許容
 - 無置換のアルキル基

結合非水素数とは

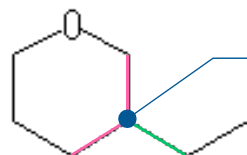
- 特定のノード (原子) に結合する水素以外のノードの数



3つのノードに結合している

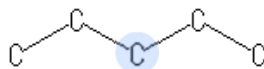
- 結合の属性 (環・鎖・環/鎖) を指定できる

— : 環結合
— : 鎖結合



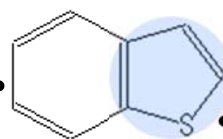
2つの環結合と1つの鎖結合

結合非水素数の指定でできること



中心の炭素以外は置換基の数は問わない

この炭素はさらに2つの非水素原子と結合する



6員環はさらに縮環してもよい

鎖状の置換基はあってもよい

5員環はこれ以上縮環しない

結合非水素数の指定内容

非水素ノードの数

結合非水素数の指定	指定範囲	内容
不定 (デフォルト)		結合する非水素ノードの数は問わない
特定	ちょうど	結合する非水素ノードの数はちょうど n 個
	最小	結合する非水素ノードは n 個以上
	最大	結合する非水素ノードは n 個以下

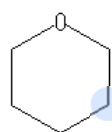
指定したノードからの結合の属性

指定範囲	内容
鎖	指定したノードからの鎖結合の数
環	指定したノードからの環結合の数
環/鎖	指定したノードからの鎖結合と環結合の合計数

- ・ すでに結合しているノードの数, 結合の種類を含める
- ・ 結合の次数 (単結合, 二重結合など) は問わない

結合非水素数の指定とヒットする回答 (1)

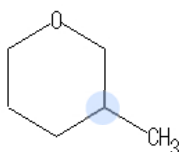
構造質問式



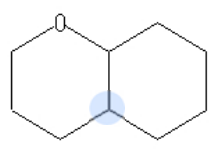
← 「環/鎖, ちょうど 3」

環または鎖結合で結合する非水素ノード数がちょうど 3

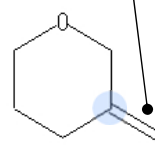
ヒットする構造



鎖: 1
環: 2
環/鎖: 3



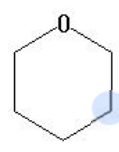
鎖: 0
環: 3
環/鎖: 3



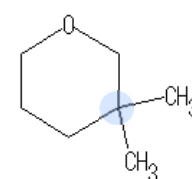
鎖: 1
環: 2
環/鎖: 3

結合次数は問わない

ヒットしない構造



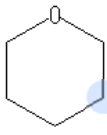
鎖: 0
環: 2
環/鎖: 2



鎖: 2
環: 2
環/鎖: 4

結合非水素数の指定とヒットする回答 (2)

構造質問式

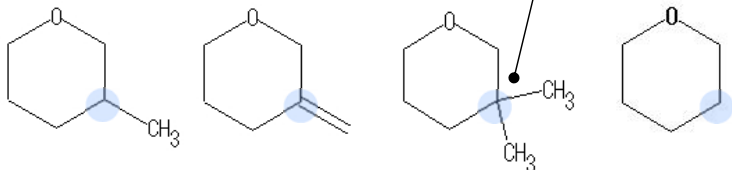


「環, ちょうど 2」

環結合で結合する非水素
ノード数がちょうど 2

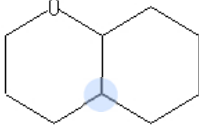
鎖結合で結合するノードの数は制限していない
ため、鎖結合の置換基はいつでも良い

ヒットする構造



鎖:1 環:2 環/鎖:3	鎖:1 環:2 環/鎖:3	鎖:2 環:2 環/鎖:4	鎖:0 環:2 環/鎖:2
---------------------	---------------------	---------------------	---------------------

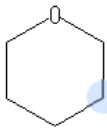
ヒットしない構造



鎖:0 環:3 環/鎖:3

結合非水素数の指定とヒットする回答 (3)

構造質問式

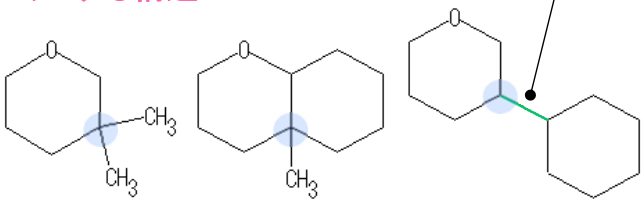


「鎖, 最小 1」

鎖結合で結合する非水素
ノード数が 1 以上

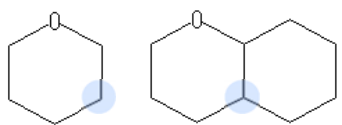
環ノードに結合しているが、結合は鎖結合

ヒットする構造



鎖:2 環:2 環/鎖:4	鎖:1 環:3 環/鎖:4	鎖:1 環:2 環/鎖:3
---------------------	---------------------	---------------------

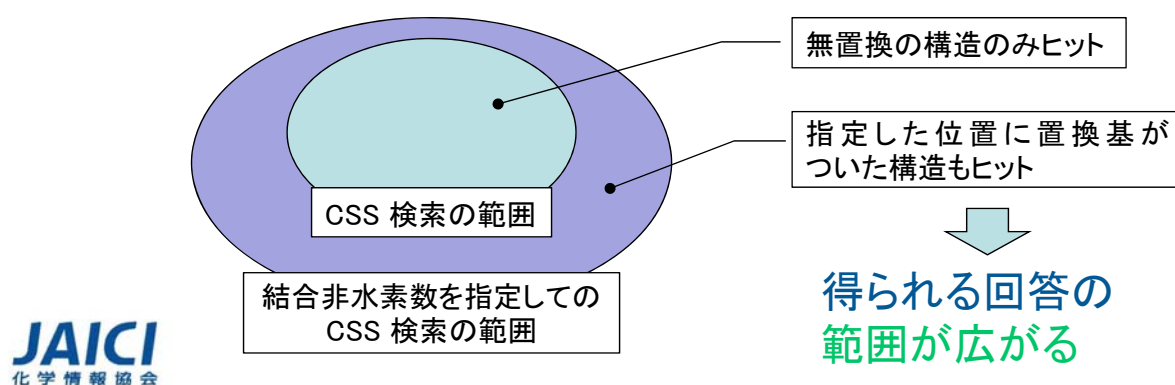
ヒットしない構造



鎖:0 環:2 環/鎖:2	鎖:0 環:3 環/鎖:3
---------------------	---------------------

検索タイプと結合非水素数

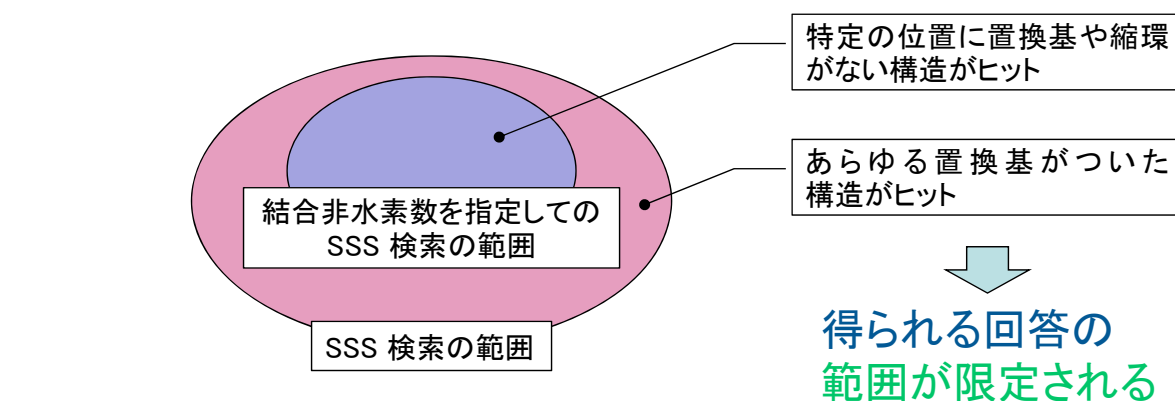
- 結合非水素数の指定は、検索タイプより優先する
 - CSS 検索で結合非水素数を指定すると、特定の位置に置換基や縮環を許容する



9

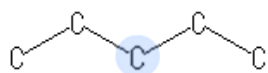
検索タイプと結合非水素数

- SSS 検索で結合非水素数を指定すると、特定の位置の置換基の数や縮環の有無を限定できる

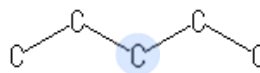


10

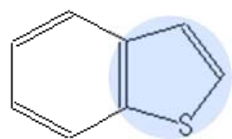
結合非水素数の指定



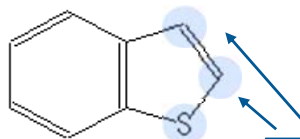
この炭素はさらに 2 つの
非水素原子と結合する



結合非水素数を
「ちょうど 4, 環/鎖」
に指定



5 員環はこれ以上
縮環しない



結合非水素数を
「ちょうど 2, 環」
に指定

結合非水素数の指定方法 (1)

①結合非水素数を指定したい
ノード上で右クリック

②ポップアップメニューから
「結合非水素数」を選択

③結合非水素数を指定

結合非水素数

特定 不定

ちょうど 鎖

最小 環

最大 環/鎖

混合

個数 (0 から 16):

キャンセル OK

結合非水素数の指定方法 (2)

The screenshot shows the '構造 (1) *Standard*' window with a chemical structure of a benzene ring fused to a five-membered ring. A yellow callout box labeled '①' points to a node in the five-membered ring, stating: 「結合非水素数を指定したいノードを Shift + クリックでまとめて選択」. A second yellow callout box labeled '②' points to the '結合非水素数(T)...' option in the '質問式定義(Q)' menu, stating: 「「質問式定義」メニューから「結合非水素数」を選択」. A third yellow callout box labeled '③' points to the '結合非水素数' dialog box, which has '特定' selected and the value '2' entered in the '個数' field, stating: 「結合非水素数を指定」.

JAICI
化学情報協会

13

活用例 - 無置換のアルキル基を検索

- Ak に結合非水素数を指定すると, アルキル基上の置換基数を限定できる

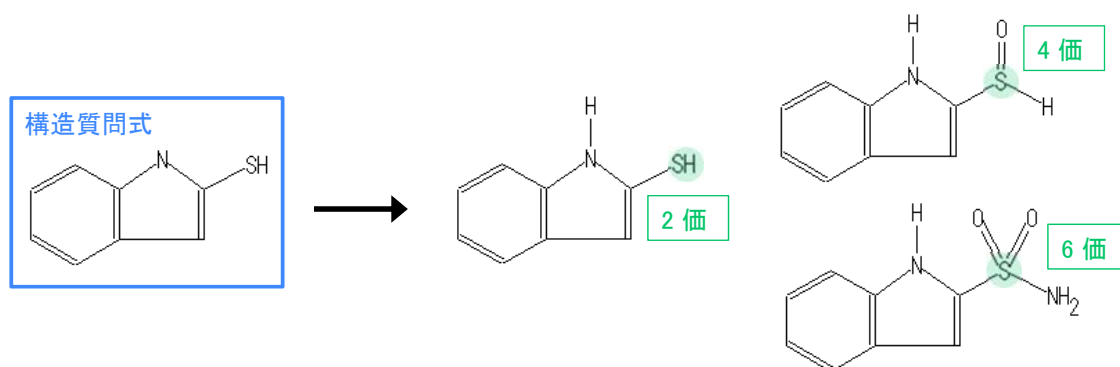
The diagram shows a chemical structure of a benzene ring with a carbonyl group attached to an oxygen atom, which is further attached to an 'Ak' group. A blue circle highlights the 'Ak' group, with a callout box stating: 「結合非水素数を「ちょうど 1, 環/鎖」に指定」. Below this, a box labeled '【条件】' contains the text: 「アルキル基は無置換. その他の元素は置換基があってもよい」.

A dashed box contains the text: 「Ak に結合非水素数を指定せずに SSS 検索を実行すると, アルキル基上に置換基をもつ物質もヒットする」. Below this text is a chemical structure of a substituted benzene ring with a nitro group (O2N) and a side chain: Cl-CH2-CH(Cl)-CH2Cl. The side chain is highlighted with a blue circle.

14

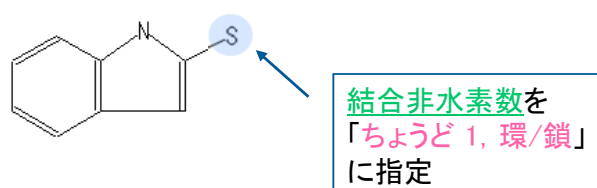
活用例 - チオール基 (-SH) を検索

- ・ ショートカット記号 SH の注意点
 - ショートカット記号 SH を作図して SSS 検索すると, 4 価, 6 価の構造もヒットする



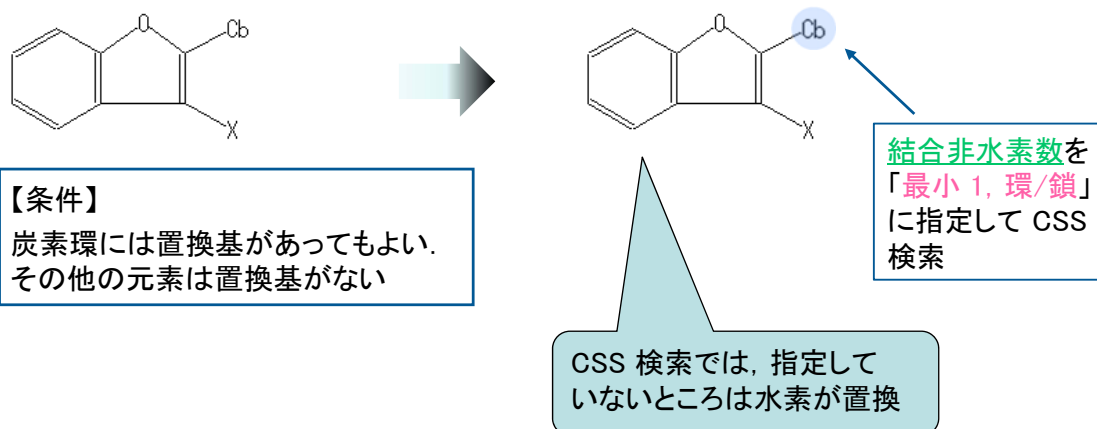
活用例 - チオール基 (-SH) を検索

- チオール基のみを検索したい場合は, ショートカット (SH) は使わずに, S 原子で作図する
- S 原子に結合非水素数「ちょうど 1, 環/鎖」を指定する



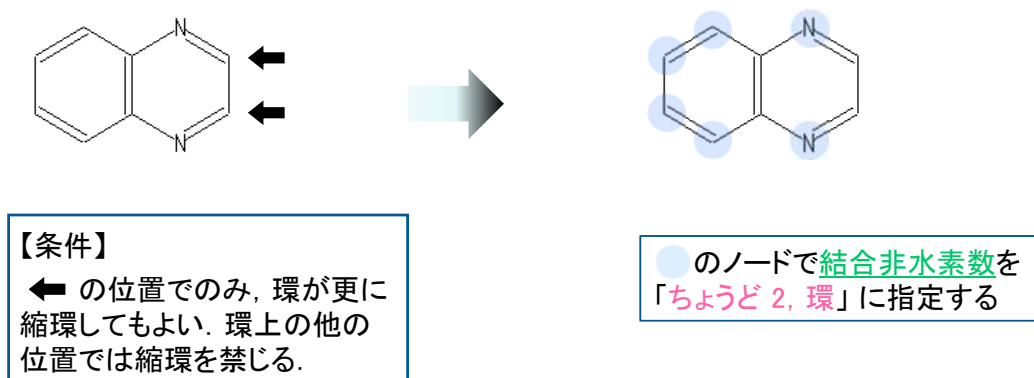
活用例 – CSS 検索

- CSS 検索で結合非水素数を指定すると、**特定の位置に縮環や置換基を許容できる**



活用例 – 環系の特定の位置に縮環を許容

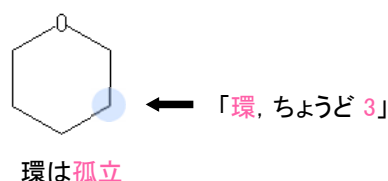
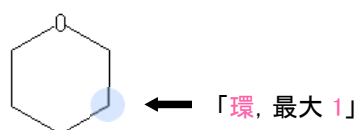
- 縮環させたくないところに結合非水素数を指定して SSS 検索を実行する
- 結合非水素数は「**環結合**」の数を指定する



結合非水素数を指定する際の注意点

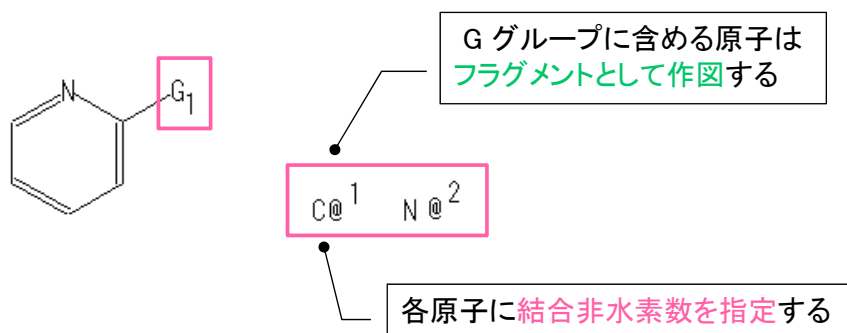
- 結合非水素数を指定する際は、結合の属性、環の孤立化の設定と矛盾しないようにする

矛盾した指定の例



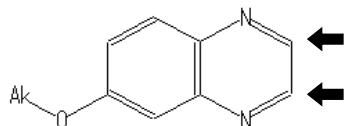
結合非水素数を G グループに指定する際の注意点

- G グループに含める原子や一般式グループをフラグメントとして作図し、そのフラグメントに結合非水素数を指定する



検索例

- 下記の条件を満たす物質を検索する



【条件】

← の位置でのみ縮環してもよい
アルキル基は無置換である
指定していないところは、何が置換してもよい

画面を切り替えますので
しばらくお待ちください

まとめ

- 結合非水素数は、特定のノードに結合する
水素以外のノードの数である
 - 結合の次数は問わない
 - 結合の属性を指定できる
- 結合非水素数を指定すると、置換基数を
限定したり、特定の位置に縮環を許容する
ことができる

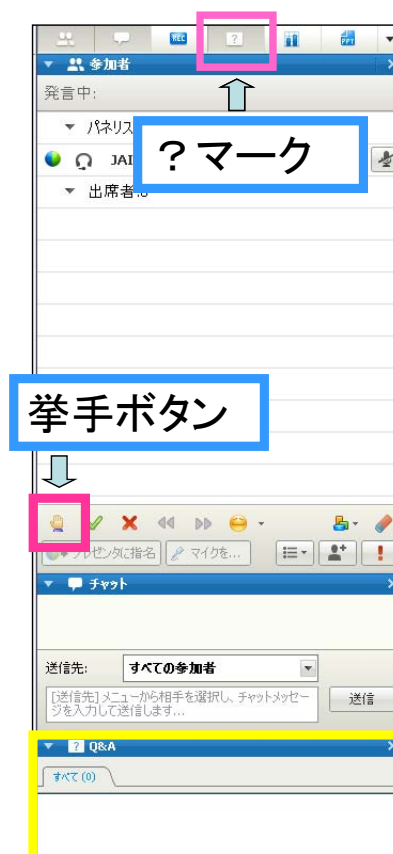
参考資料

- ・ 化学物質検索 II – 構造
http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_chem2.pdf
- ・ REGISTRY ファイル – 検索テクニック 2
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-registry2.pdf>

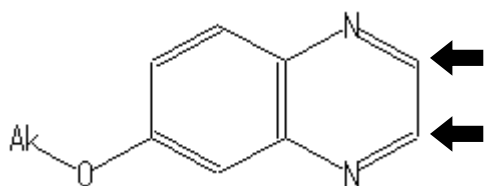
ご質問はございませんか？



- 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： 下記の条件を満たす物質を検索する



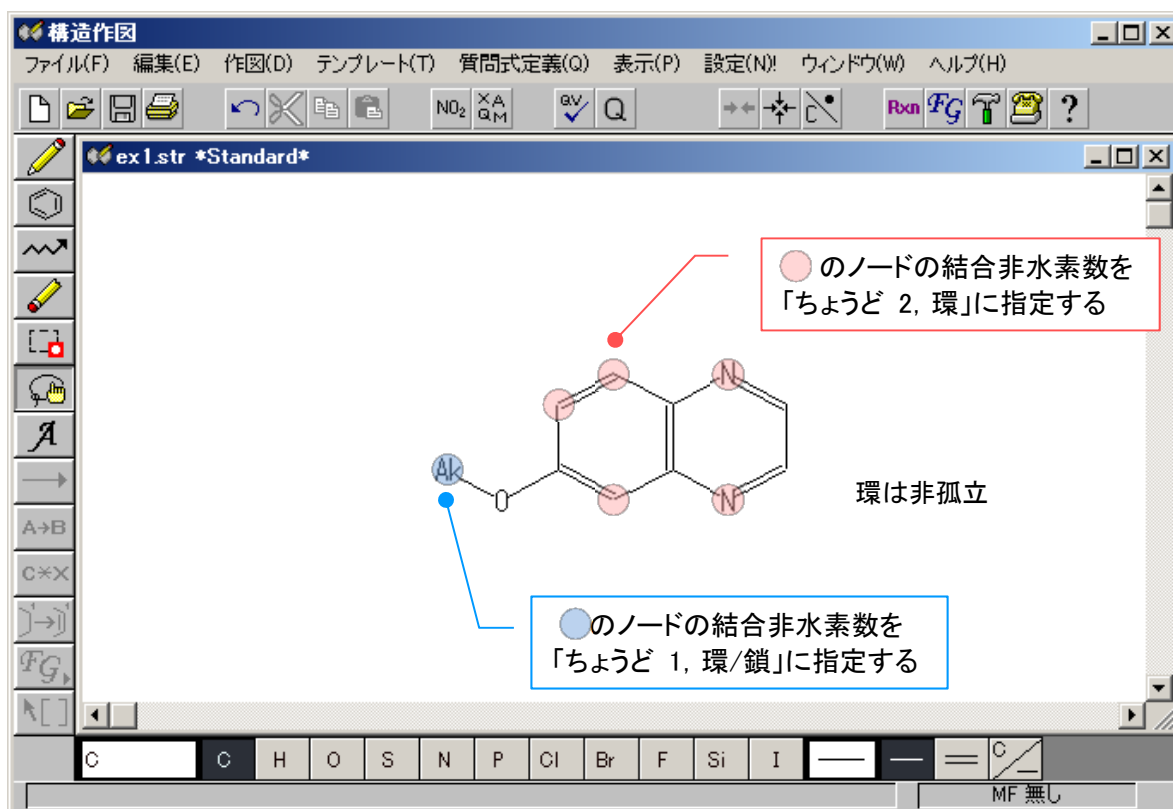
【条件】

- ・ ← の位置でのみ、環が縮環してもよい。
- ・ アルキル基 (Ak) は無置換である。
- ・ 指定していないところは、何が置換してもよい。

【検索のポイント】

- ・ 指定していないところは、何が置換してもよいので、SSS 検索を行う。
- ・ 環の一部のみ縮環を許容するので、「環の孤立化」は指定できない。縮環を禁止する部分の結合非水素数を「ちょうど 2, 環」に指定する。
- ・ 無置換の Ak は、結合非水素数を「ちょうど 1, 環/鎖」に指定する。

構造作図



検索

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading C:\Users\¥...\¥ex1.str

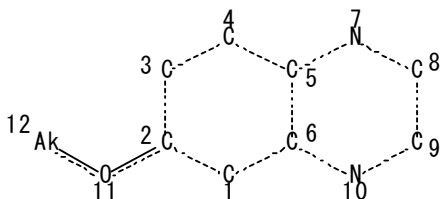
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

← アップロードした構造を確認する

L1

STR



NODE ATTRIBUTES:

```

NSPEC IS R AT 1
NSPEC IS R AT 2
NSPEC IS R AT 3
NSPEC IS R AT 4
NSPEC IS R AT 5
NSPEC IS R AT 6
NSPEC IS R AT 7
NSPEC IS R AT 8
NSPEC IS R AT 9
NSPEC IS R AT 10
NSPEC IS C AT 11
NSPEC IS C AT 12

```

構造をアップロードする際に、「コマンドで修正可能な形式でアップロード」にチェックを付けると、=> D QUE で構造質問式を表示したときに属性が表示される

```

CONNECT IS E2 R AT 1
CONNECT IS E2 R AT 3
CONNECT IS E2 R AT 4
CONNECT IS E2 R AT 7
CONNECT IS E2 R AT 10
CONNECT IS E1 RC AT 12

```

← 結合非水素数の設定

記号の意味

CONNECT : 結合非水素数
M : 最小 X : 最大 E : ちょうど
R : 環 C : 鎖 RC : 環または鎖

例) CONNECT IS E2 R AT 1
1位の原子の結合非水素数は「ちょうど 2, 環」

```

DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL IS CLASS AT 11 12
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

```

GRAPH ATTRIBUTES:

```

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
NUMBER OF NODES IS 12

```

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L1

← サンプル検索を実行する

```

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:35:31 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 1132 TO ITERATE

```

```

100.0% PROCESSED 1132 ITERATIONS 50 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

```

```

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
                        BATCH **COMPLETE**

```

```

PROJECTED ITERATIONS: 20622 TO 24658
PROJECTED ANSWERS: 3367 TO 5113

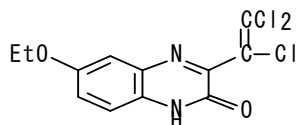
```

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN

← *SCAN* 表示形式で回答を確認する

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN 2(1H)-Quinoxalinone, 6-ethoxy-3-(1,2,2-trichloroethenyl)-
MF C12 H9 Cl3 N2 O2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

=> S L1 FUL

← フルファイル検索を実行する

FULL SEARCH INITIATED 14:36:19 FILE 'REGISTRY'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 22442 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 22442 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

4096 ANSWERS

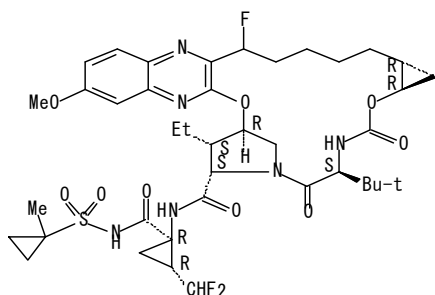
L3 4096 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

← *SCAN* 表示形式で回答を確認する

L3 4096 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
MF C40 H53 F3 N6 O9 S

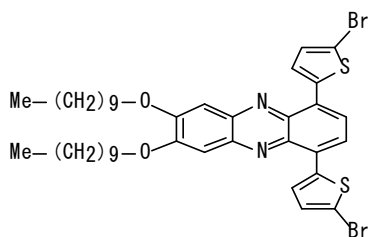
Absolute stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):3

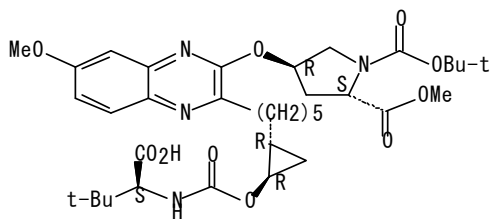
L3 4096 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
L3 4096 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN Phenazine, 1,4-bis(5-bromo-2-thienyl)-7,8-bis(decyloxy)-
MF C40 H50 Br2 N2 O2 S2
CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

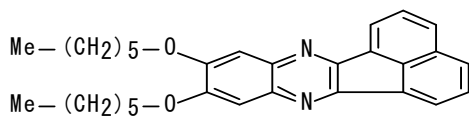
L3 4096 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
 IN 1,2-Pyrrolidinedicarboxylic acid, 4-[[[3-[5-[(1R,2R)-2-[[[(1S)-1-carboxy-2,2-dimethylpropyl]amino]carbonyl]oxy]cyclopropyl]pentyl]-7-methoxy-2-quinoxalinyloxy]-, 1-(1,1-dimethylethyl) 2-methyl ester, (2S,4R)-
 MF C35 H50 N4 O10

Absolute stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

L3 4096 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
 IN Acenaphtho[1,2-b]quinoxaline, 9,10-bis(hexyloxy)-
 MF C30 H34 N2 O2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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