

REGISTRY ファイル – 構造検索の改善方法

目次

REGISTRY ファイルの構造検索と注意点	2
スクリーン検索	4
(SCREEN DICTIONARY の使い方を含む)	
辞書検索	16
サブセット検索	24
検索例	25
(検索は, 2003 年に実行)	
複数の構造質問式の利用の注意点	39

REGISTRY ファイルの構造検索と注意点

① サンプル検索の FULL FILE PROJECTIONS を COMPLETE にする方法

方法1	スクリーン番号の利用	<= MARPAT ファイル ×	(無視)
方法2	構造の特定 (スクリーンの自動発生)	<= MARPAT ファイル ○	(無視)
方法3	サブセット検索 (辞書検索)	<= MARPAT ファイル ×	(利用不可)
方法3'	サブセット検索 (構造)	<= MARPAT ファイル ○	(利用可能)
方法4	別構造のと演算	<= MARPAT ファイル ×	(利用不可)
方法5	結合を厳密に指定する. ノードを追加する	<= MARPAT ファイル ○	(利用可能)

② 構造検索結果の絞込み

- 方法1 辞書検索
- 方法2 構造検索 (サブセット)
- 方法3 文献情報による絞りこみ (REGISTRY → CAPLUS → REGISTRY)

注意点 :

1. NOT 演算の危険性

スクリーンでの NOT 演算は、物質全体に影響を及ぼすため、ターゲットの部分構造以外の部分構造への影響が考えられる。また多成分物質の場合、ターゲットの成分以外の別成分に影響を及ぼす可能性が考えられる。

2. 成分数限定の危険性 (単成分物質に限定した場合の漏れに注意する)

多成分物質の登録

- 新規物質の場合 ——> 各単成分物質の同時に登録される。

- * 例外 多成分物質の成分の1つが SAF の場合、他の成分の MAF (多原子フラグメント) は、単成分物質として登録されない。その結果、SAF を含む多成分物質レコード中に、成分物質の CRN (成分 CAS 登録番号) が存在しない場合が生じる。また、成分数を1成分に限定した場合には、回答に含まれないことになる。その MAF 物質そのものが後で登録された場合には、多成分物質のレコードの CRN フィールドにその CAS 登録番号が追加入力される。

SAF : 任意の数の水素原子と
0 個または 1 個の非水素
原子のみからなる成分のこ
とである。それ以外の成分
は、MAF (多原子フラグメ
ント) になる。
SAF の例 : H, Cl, HCl,
Na, H₂O など

```
RN 114807-95-3  REGISTRY
CN Ethanesulfonic acid, 2-(octyloxy)-, sodium
   salt (9CI) (CA INDEX NAME)
MF C10 H22 O4 S . Na
SR CA
LC STN Files:  CA,  CAPLUS,  USPATFULL
```

Me—(CH₂)₇—O—CH₂—CH₂—SO₃H

● Na

3. CI フィールド利用時の問題 (CCS/CI)

配位化合物には、通常クラス識別子 (CI) の CCS が索引される。ただし、配位化合物を一つの成分とする多成分物質に対して配位化合物の CCS は索引されない。

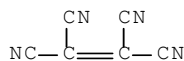
CCS/CI で限定した回答には、下記の多成分物質は含まれないので注意が必要である。なお、成分クラス識別子 (CCI) は検索できない。

```
RN 12116-72-2 REGISTRY
CN Ferrocene, compd. with ethenetetracarbonitrile (1:1) (8CI, 9CI) (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Ethenetetracarbonitrile, compd. with ferrocene (1:1) (8CI, 9CI)
CN Iron, dicyclopentadienyl-, compd. with ethenetetracarbonitrile (7CI)
DR 63537-20-2
MF C10 H10 Fe . C6 N4
LC STN Files: CA, CAOLD, CAPLUS, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, USPATFULL
```

CM 1

CRN 670-54-2

CMF C6 N4



CI フィールドが存在していない

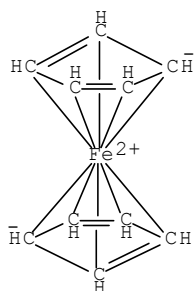
CM 2

CRN 102-54-5

CMF C10 H10 Fe

CCI **CCS**

成分クラス識別子には、
配位化合物 (CCS) が
索引されている



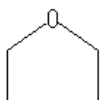
4. IDS 化合物の漏れ (オンライントピックス 1994 年 9 月号, 10 月号, 1997 年 10 月号 参照)

スクリーン検索

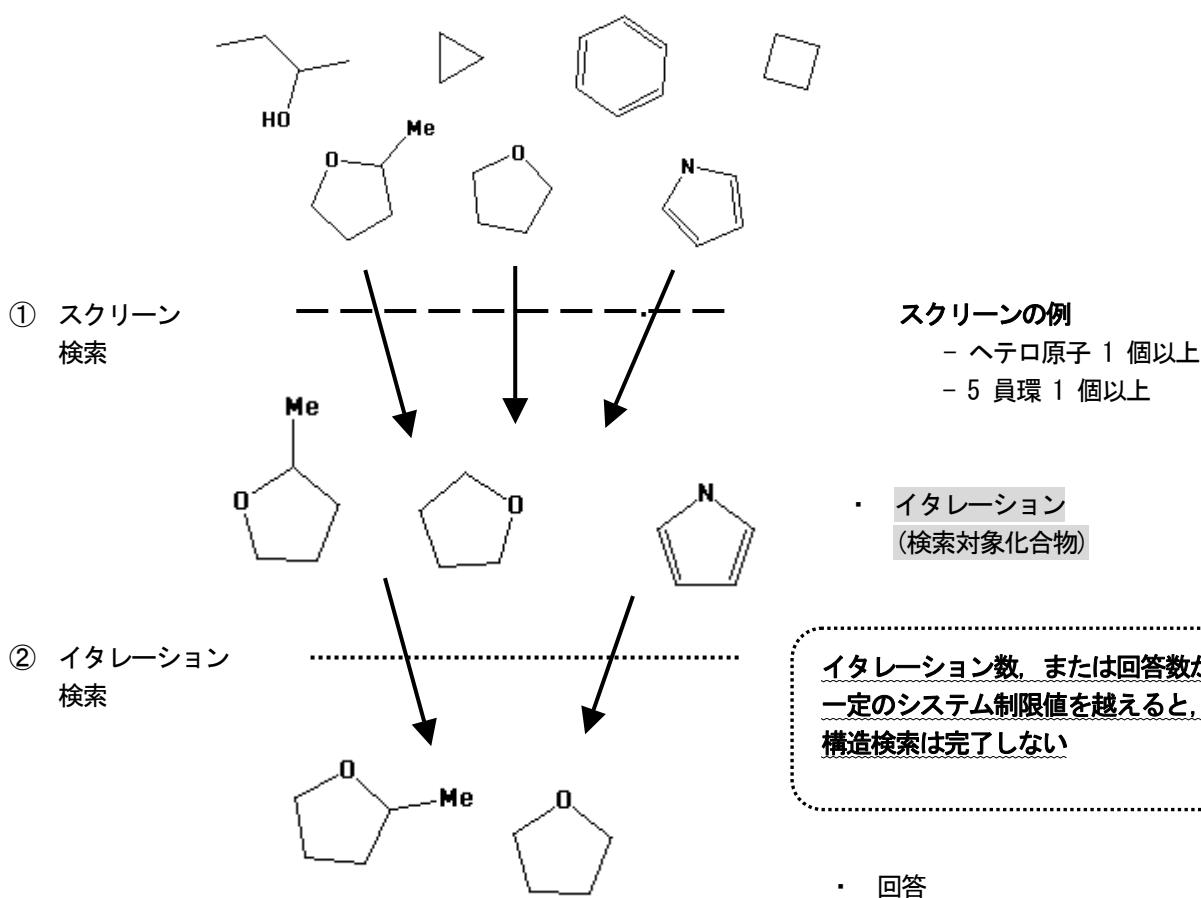
- 構造検索は、スクリーン検索とイタレーション検索の 2 段階で実行される。構造検索時には、構造上のいろいろな特徴を表す数字のコードである「スクリーン番号」が自動的に選択されスクリーン検索が実行される。
 - * 自動的に選択されないスクリーン番号を構造質問式と組み合わせて検索することができるが、利用時には様々な注意が必要である。

- ・ 構造検索の仕組み

- 構造質問式 L1



- 構造検索 (=> S L1)



- ・ REGISTRY ファイルの構造検索におけるシステム制限値

検索	オンライン検索		バッチ検索*
	サンプル検索	フルファイル検索	フルファイル検索
制限値			
イタレーション数*	1,000 件	400,000 件	600,000 件
回答数	50 件	400,000 件	600,000 件

* バッチ検索とは、構造質問式をシステムに登録しておき、コンピュータの利用度の少ない時に一括して行わせる検索のこと。オンライン検索に比較してシステム制限が緩和される。

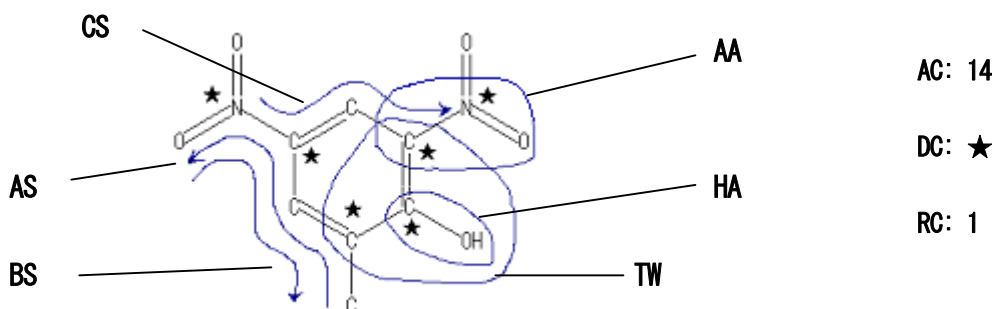
● スクリーン番号

- 12 種類の 2,100 を超えるスクリーンが利用できる。
(ただし、現在、スクリーン番号の 2058 から 2066 までの立体等に関するスクリーンは利用できない。)

種類	名称	概要と例	■	自動発生
AA	Augmented Atom	中心原子の回りの環境 (結合している非水素原子とその結合) 1642 AA N -1C -20 ★ 中心原子に結合する全置換基を定義する必要はない	×	○
HA	Hydrogen Augmented Atom	AA に水素を付加したもの ★ 中心原子に結合した水素の数は固定 1700 HA OH -1C	△	△
TW	Twin Augmented Atoms	結合する二つの原子上の水素について記述 ★ 2 つの原子に結合した水素数は固定 1832 TW C *4C *4C -10H	△	×
AS	Atom Sequence	4 ~ 6 の原子配列 71 AS C -C *C *C -N -0	×	○
BS	Bond Sequence	4 ~ 6 の原子間の結合の配列 (原子は非特定) 882 BS A -2A -1A *4A *4A -1A	×	○
CS	Connectivity Sequence	原子に結合している非水素原子の個数と原子間の結合の配列 (3 ~ 6) 700 CS 3 -3 *2 *3 -3 ★ 非水素原子の数は固定	×	△
AC	Atom Count	同一成分中の非水素原子の最少数 1904 AC 14	×	○
DC	Degree of Connectivity	中心原子に結合している非水素原子の最少数 2113 DC 5 3	×	○
RC	Ring Count	同一成分中の最小環の数 (例: ビスフェノールは 2, ナフタレン環は 2) 1838 RC 1	△	○
TR	Type of Ring	最小環の形状と縮合の状態 1867 TR DDDDD	×	△
EC	Element Count	同一成分中の元素 (水素以外) の最少数	△	△
GM	Graph Modifier	同一成分中の特別な構造上の特徴。ただし、成分数と一部の化合物クラスは、物質全体に働く。	△	×

■ STN Express のフィルタ機能を利用して指定することができる。

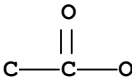
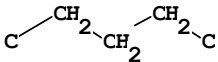
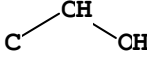
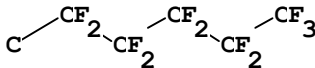
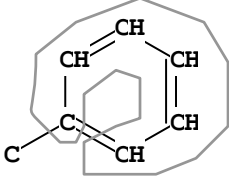
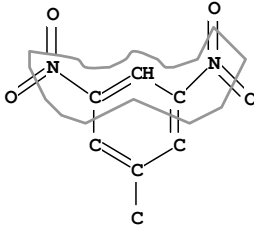
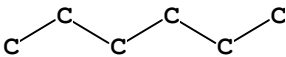
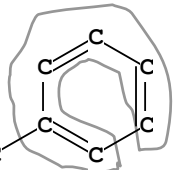
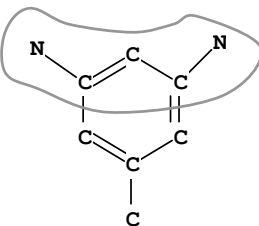
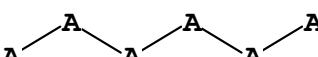
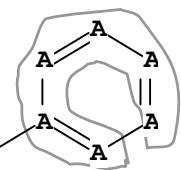
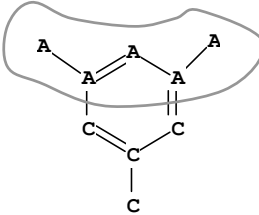
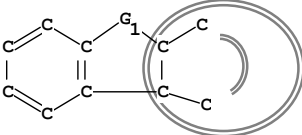
- 注意 1) 通常、自動発生するスクリーンであっても、一般式記号や可変原子、G グループで定義されたノードに対しては自動発生しない。
- 注意 2) スクリーンは、各成分の構造に対して働く (例外として GM スクリーンの成分数、化合物クラスに関するスクリーンは物質全体に働く。ただし、ポリマーと配位化合物については成分に対しても働く)。従って、複数のスクリーンを演算した場合、多成分物質では、必ずしも同一成分中での条件になるとは限らない。



● スクリーンが自動発生しにくい構造質問式

- ・ 鎖状構造のみの構造
- ・ G グループを利用した構造
- ・ 可変基（可変原子，一般式グループ）を利用した構造

● 有効なスクリーンの使い方

作図した構造の特徴的な部分	条件と有効なスクリーン	
 <p>特徴的な官能基が存在する</p>	AA スクリーン	
 <p>水素数が固定されている炭素鎖が存在する</p>	HA スクリーン	
 <p>水素数が固定されている炭素鎖に OH, CH3, NH2, SH が存在する (OH の代わりに CH3, NH2, SH)</p>	TW スクリーン	
 <p>全置換基が決定している配列</p>  	<p>特に、環と側鎖から構成されている配列を利用すると有効である</p>	GS スクリーン
 <p>元素が特定されている配列</p>  		AS スクリーン
 <p>結合が特定されている配列</p>  		BS スクリーン
 <p>特定部位にのみ環が縮合する場合</p>	<p>TR スクリーン</p> <p>GS スクリーン, AS スクリーン, BS スクリーン</p>	

作図した構造の特徴的な部分	条件と有効なスクリーン
構造質問式中に、置換基が完全に定義できるノードが多数存在する	DC スクリーン
構造質問式中のノードに、水素以外の置換基がこれ以上結合しない場合	AC スクリーン (対応する辞書検索機能あり)
構造質問式中に、多数の環が存在している場合	RC スクリーン (対応する辞書検索機能あり)
構造質問式中に、多数の特定元素が存在している場合 例 1. 多数の炭素が作図している場合 (作図している炭素の数を最小数としてスクリーンを利用する) 例 2. C, H 以外の元素を多数作図している場合	EC スクリーン (対応する辞書検索機能あり。 ただし、SAF に関する限定は、スクリーンのみ有効)
構造質問式に、異常原子量、異常結合価、電荷を持つ原子が存在している場合	GM スクリーン (対応する辞書検索機能なし)
成分数 (物質全体)	GM スクリーン (辞書検索でも限定可能)
化合物クラス (物質全体、ただし、ポリマーと配位化合物は成分のみに定義されていても検索できる)	GM スクリーン (辞書検索でも限定可能。 ただし、ポリマーと配位化合物についてはスクリーンの方が有効。)

注意：スクリーンは、構造全体に有効であるため特定の部分構造に対してのみ有効にすることはできない。
多成分物質の場合、特定の成分にそのスクリーンを限定することはできない。

● 指定方法

① スクリーンコマンドの利用

- 複数のスクリーン番号は、AND または OR で結合することができる。

入力例： => SCR 2049
 => SCR 2043 OR 2127

- 構造質問式とスクリーンの L 番号は、以下のように入力するのが有効である。

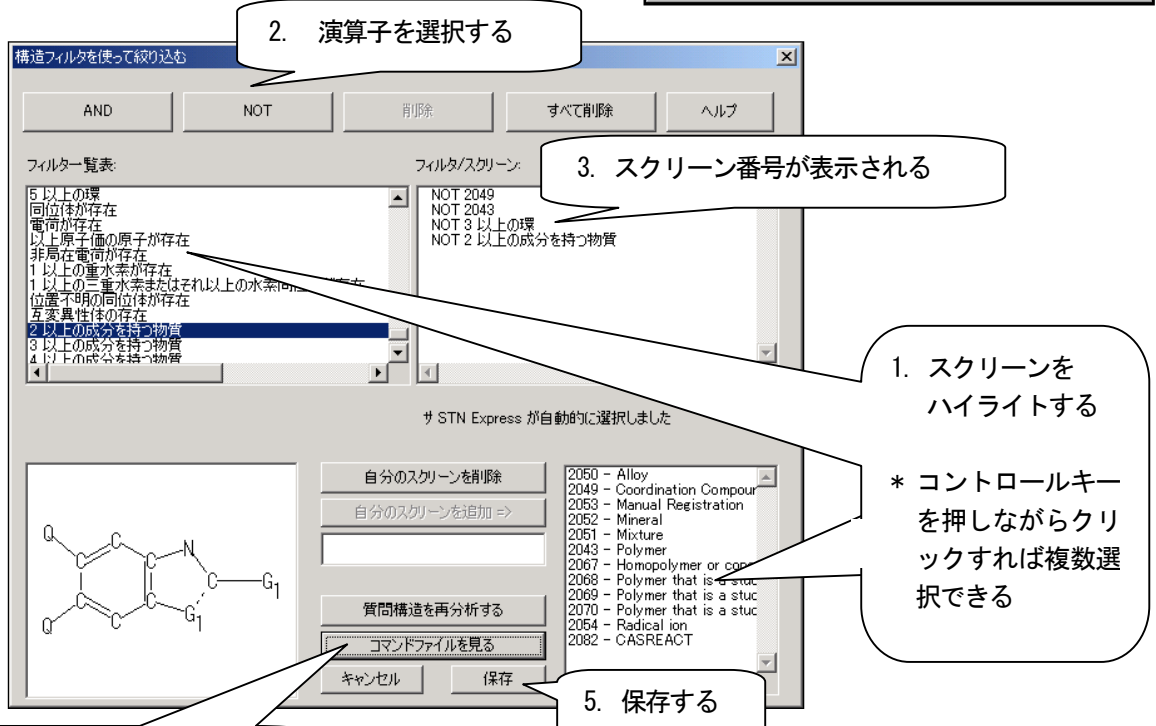
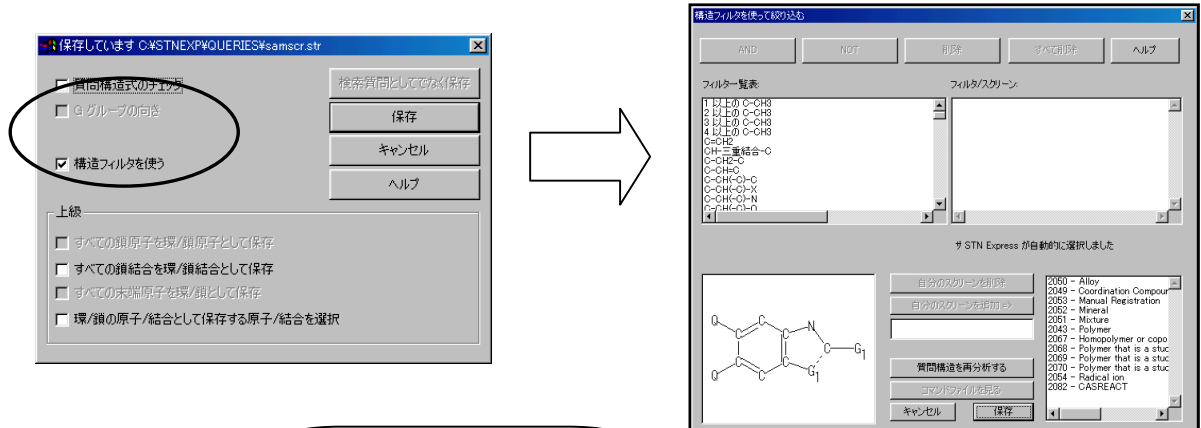
=> S ① AND ② NOT ③

- ① 単独または複数の構造質問式の L 番号
- ② 単独または AND 演算で結合したスクリーン番号の L 番号
- ③ 単独または OR 演算で結合したスクリーン番号の L 番号

注意 => S L1 AND L2 NOT L3 NOT L4 (L1 は構造質問式, L2-L4 は、スクリーン) と入力した場合は、
(L2 NOT L3 NOT L4) の条件にあう化学物質が検索対象となるため、目的とする構造検索が実行されない。
また、多数のスクリーン番号を利用しても、構造検索の改善には有効ではない。多くても、5-6 個のスクリーン番号の利用が有効である。

② STN Express のフィルタの利用

- 構造質問式保存時に、下記の「保存しています」ダイアログボックスが表示されたら、「構造フィルタを使う」にチェックを入れ、「保存」をクリックする。「構造フィルタを使って絞り込む」ダイアログボックスが表示される。



4. 作成された質問式の確認

```

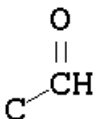
C:\Program Files\stnexp\Queries\samscr.tmp
send "...Testing the current file...$ screen"
wait
for "THIS COMMAND" goto @errmsg
for "." goto @cleanup
for 5 seconds goto @errmsg1
@cleanup
send "end"
goto @upload
@errmsg
echo "Please change to a suitable file and repeat your upload"
echo ""
exit
@errmsg1
echo ""
echo "Your upload attempt failed, please try again"
echo ""
exit
@upload
=>screen 2049 OR 2043 OR 1840 OR 2127 *)_line1
upload lnum_line2 <C:\Program Files\stnexp\Queries\samscr.str>
=>que_line2 NOT_line1
    
```

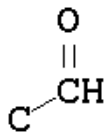

● SCREEN DICTIONARY (スクリーン辞書) の使い方

- AA, HA, TW, AS, BS, CS, RC, TR, AC, DC, EC, GM の順序で記載されている。
- AA, HA, TW, AS, BS の各スクリーンは、元素記号のアルファベット順、次に下記の結合順序に従って表示されている。

結合の表し方	
* 環結合	-鎖結合
*1 環の単結合	-1 鎖の単結合
*2 環の二重結合	-2 鎖の二重結合
*3 環の三重結合	-3 鎖の三重結合
*4 環のノーマライズ結合	-4 鎖のノーマライズ結合
空白 任意の結合	
SCREEN DICTIONARY に表示される記載順位	
なし > * > *1 > *2 > *3 > *4 > - > -1 > -2 > -3 > -4	

原子の表現としては、X はハロゲン、A は水素以外の任意の原子、M は金属を表す。

- 表示例  を 2 個以上持つことを意味するスクリーン番号

Screen Number	Fragment Definition	Freq. %
1305	CH -1C -2O	0.10
↓	↓	↓
スクリーン番号	定義	頻度
↓	↓	↓
スクリーンの種類	下記の構造を示す	このスクリーン番号は、複数の定義を表している (別の定義にもこの番号が付与されている)。
↓	↓	↓
数 (以上を表す。1 は表記しない)		

Screen dictionary の記載順序

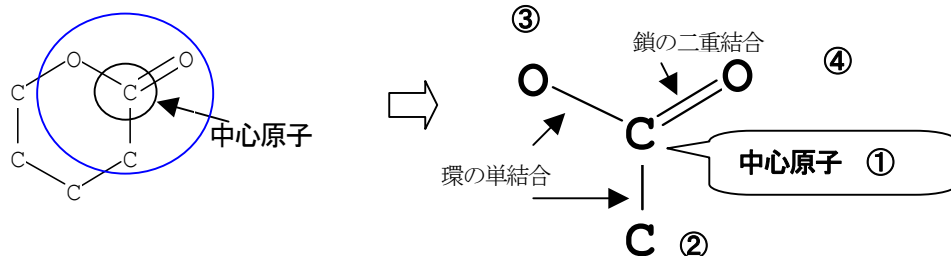
- ① 中心原子と結合している複数の原子の記載順序は、アルファベット順である。
- ② 同じ原子の場合、結合の優先順位に従って記載される。

なし > * > *1 > *2 > *3 > *4 > - > -1 > -2 > -3 > -4

■ 特定の原子の周りの環境を表すスクリーン (3 種)

AA スクリーン

中心原子に結合した非水素原子の種類と、その間の結合を表す。



① の中心原子 C は、環の単結合で ② の炭素 (C) と結合、環の単結合で ③ の酸素 (O)、鎖の二重結合で ④ の酸素と結合している。

中心原子①	環単結合	②	環単結合	③	鎖結合	④
C	* 1	C	* 1	O	- 2	O



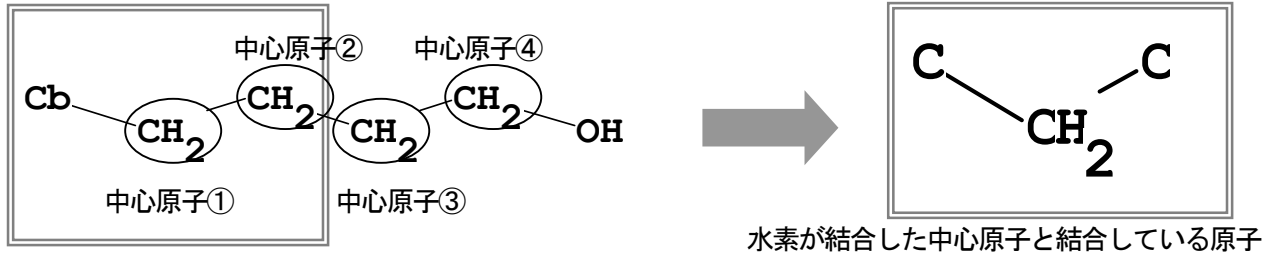
C *1C *1O -2O のスクリーンはないため、これよりも広い定義を意味する C *C *O -O を利用する

● 該当する Screen Dictionary での記載

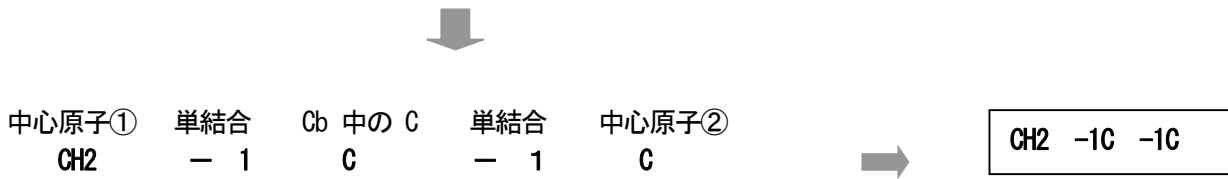
		①	②	③	④
1310	AA	C	* C	* O	- O

HA スクリーン

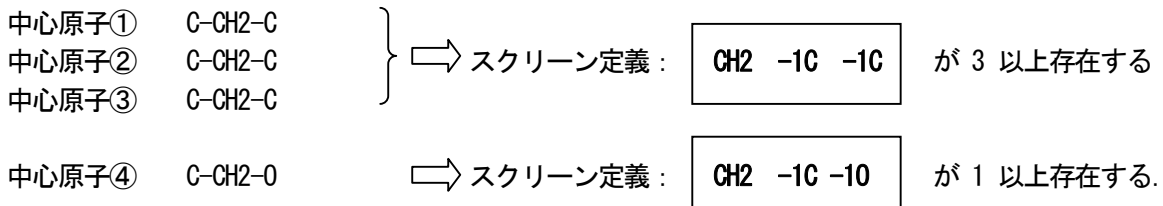
中心原子に結合する正確な水素の数とその原子に結合した非水素原子の種類とその間の結合を表す。



中心原子①のCH₂は、Cb中のC(炭素)と単結合で結合、②のCと単結合で結合している。



中心原子②, 中心原子③も同様である。

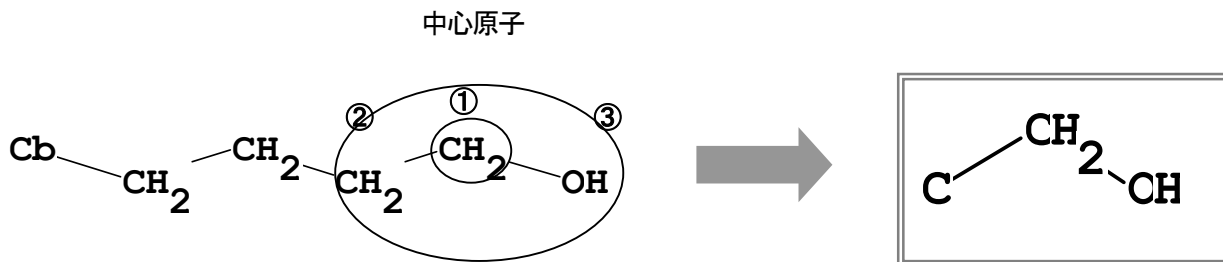


● 該当する Screen Dictionary での記載

1008	HA	3	CH ₂	-1 C	-1 C
1297	HA		CH ₂	-1 C	-1 O

TW スクリーン

中心原子・炭素に結合する水素の正確な数と、その炭素に結合している CH₃, NH₂, OH, SH とその間の結合を表す。



中心原子①の CH₂ は、②の C と単結合で結合、さらに③の OH と単結合で結合している。

中心原子① 単結合 ② の原子 単結合 ③ の原子

CH₂ - 1 C - 1 OH → CH₂ -1C -1OH

スクリーン定義： CH₂ -1C -1OH が 1 以上存在する。

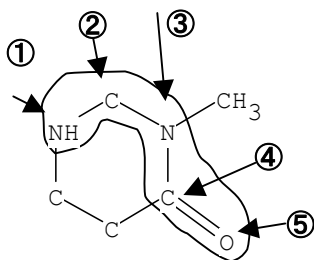
● 該当する Screen Dictionary での記載

1836 TW CH₂ -1 C -1 OH

■ 原子の配列を表すスクリーン (3 種)

AS スクリーン

配列中の 4-6 の原子と結合 (環または鎖) を表す。



構造の中で特徴的な原子配列を切り出し、SCREEN DICTIONARY に対応する配列を探す。必ずしもすべての配列が存在しているわけではない。ここでは、N をスタート地点とし、C-N-C=O の配列を探す。

構造図より → ① N ② 環結合 C ③ 環結合 N ④ 環結合 C ⑤ 鎖結合 O
スクリーン定義 → N * C * N * C - O

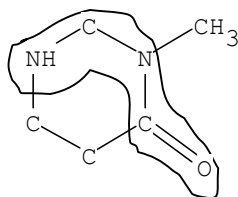
● 該当する Screen Dictionary での記載

426 AS N * C * N * C - O

BS スクリーン

配列中の結合についてその次数（単結合，二重結合，三重結合，ノーマライズ）と結合タイプ（環または鎖）を表す。

原子は，任意の元素（水素以外）として A で表す。



構造図より →
スクリーン定義 →

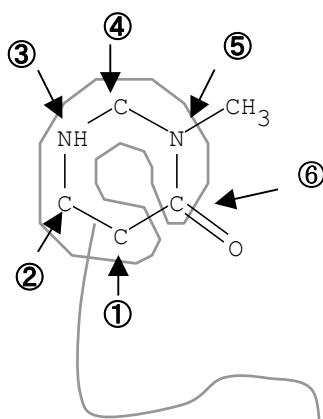
①	②	③	④	⑤
A	環結合 A	環結合 A	環結合 A	鎖結合 A
A	*1 A	*1 A	*1 A	-2 A

● 該当する Screen Dictionary での記載

764 BS A *1 A *1 A *1 A -2A

CS スクリーン

配列中の原子の結合手数(非水素原子との結合手数)とその間の結合のタイプ
(3 ~ 6 の原子の正確な結合手数の列)



結合手数とは，水素以外の結合している原子の個数で表す。
結合次数は関係ない。

例：③ の N は，② と ④ の 2 つの相手と結合している
ので，結合手数は，2 となる。

注意) 結合する非水素原子の数は固定されてしまうので注意する。

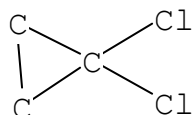
例えば，② の炭素の手数を 2 にすれば，② の炭素に置換基が結合している回答は
含まれない。

構造図より	→	①	②	③	④	⑤	⑥			
スクリーン定義	→	2	*	2	*	2	*	3	*	3

● 該当する Screen Dictionary での記載

600 CS 2 * 2 * 2 * 2 * 3 * 3

注) ヘテロ原子を含む長い経路か，環と鎖を結合している長い経路を探す。次に各経路を 4-6 個の長さの配列に分解して調べる。その時に，任意の原子が同一の経路の中に 2 度でてくることはない。



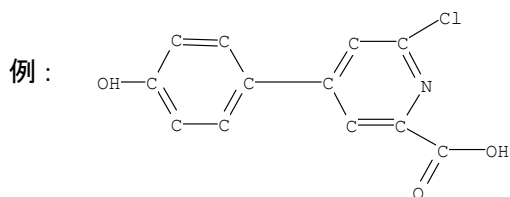
1,1-ジクロロシクロプロパンは

AS -Cl * C * C * C -Cl を用いることはできない

■ 構造的な特徴を表すスクリーン (6 種)

AC スクリーン

同一成分中の非水素原子の最少数を表す



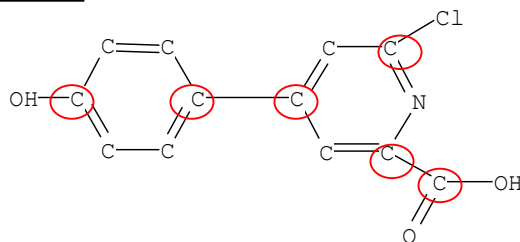
上記の構造の非水素原子数（水素を除く原子の数）は、17 である。
AC スクリーンには、17 以上がないため、16 以上を使用する。

1905 AC 16 ← 16 以上である 1905 を使用する
1906 AC 18

DC スクリーン

中心原子に結合した非水素原子の最少数と構造中に存在する数を表す。

例：



3 個の非水素原子と結合している原子が 6 個存在する。

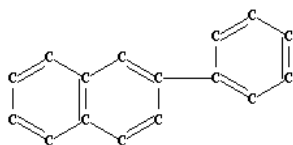
2113 を使用する

2113 DC 5 3 ← 3 個以上の非水素原子と結合している原子が 5 個以上存在する
2114 DC 7 3 ← 3 個以上の非水素原子と結合している原子が 7 個以上存在する

RC スクリーン

成分内の最小環の数を表す。（辞書検索の /CNR フィールドと同じ）

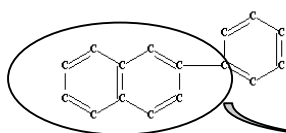
例：



最小環の合計は、3 個なので、1840（最少環 3 個以上）を利用する。

1840 RC 3 ← 最小環 3 個以上（辞書検索では、3<=CNR）

最小環の数え方：環系内の環の数は、環結合の数から環内原子の数を差し引き、1 を加えれば求められる。



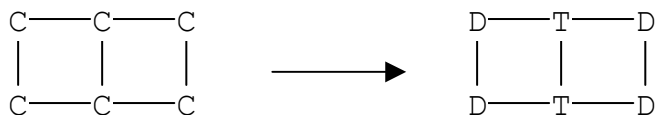
$$11 \text{ (結合)} - 10 \text{ (原子)} + 1 = 2$$

TR スクリーン

最小環の形状と縮合の状態を表す。

最小環 (3-7 員環) ごとに D と T を利用して環の原子配列を表す。
配列順序は, アルファベット順, DDDDTT > TDDDDT

D : 2 個の環の原子に結合している原子を表す。
T : 3 個以上の環の原子に結合している原子を表す。



最小環ごとにアルファベット順で表すと DDTT と DDTT になる。

1853 TR DDTT ← DDTT の最小環が 1 個以上

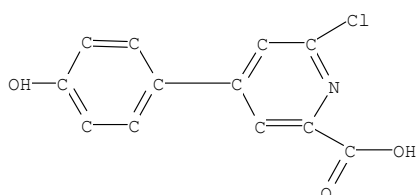
1854 TR 2 DDTT ← DDTT の最小環が 2 個以上

* この場合は 1854 を利用する

EC スクリーン

同一成分中の元素の最少数を表す。

原子 (H, D, T を除く) の最少数を指定する。



作図した炭素数は, 12.

C	1	
	4	199
	6	1943
	8	1944
	10	1945
	12	1946 ← 12 個以上の炭素を含む 1946 を利用する

GM スクリーン

特別な構造上の特徴を表す。構造中の SAF の存在を指定できる。

異常原子量, 異常結合価, 電荷を持つ原子の存在を指定できる。

成分数, 化合物クラス (ポリマー, 配位化合物は除く) は, 物質全体に対して機能する。

GM (Graph Modifier Element) スクリーンと EC スクリーンは, SCREEN DICTIONARY の中で次のように記載されている。

	またはそれ以上	結合表中の原子	単原子フラグメント		
	↓	↓	↓		
	"or-more"	Element Count	Graph Modifier	EC or GM	
	Count	(CT Graph)	(SAF)	(CT + SAF)	
Br	1		2030	0.90 %	1938 5.17 %
	2	1939		1.49 %	

辞書検索 (サブセット検索および回答の絞りこみに有効な検索フィールド)

■ 辞書検索の利点

① 複数の条件を限定するときに有効である.

(P) 演算子を利用して複数の条件を同一成分内に限定することができる (スクリーンでは不可).

(S) 演算子を利用して複数の条件を同一の環系内に限定することができる.

② スクリーンにない条件を限定できる.

- 構成元素の限定 /ELF フィールド

- 環データ

(/GNR フィールドは, RC スクリーンで代用できる. また, TR スクリーンに対応する辞書検索フィールドは存在しない)

■ 検索フィールド

- ・ 特に有効な辞書検索フィールド
(検索フィールドの一覧は, ポケットガイド参照)

① クラス識別子コードの利用

/CI フィールド (コードの一覧は, CAS FILES ポケットガイド参照)

② 分子式関連フィールド

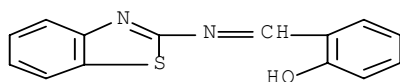
- 成分数を限定 /NC フィールド
- 特定元素の存在を限定 /ELS フィールド
- 特定元素の数 /元素記号
- 元素種の数限定 /ELC フィールド (成分内)
/ELC.SUB フィールド (物質全体)
- 構成元素の限定 /ELF フィールド

(P) 演算子を利用して,
同一成分内の情報に限定する
ことができる.

=> S C H N O S/ELF (P) 2/N

- 入力例

CM1



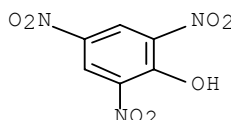
MF C14 H10 N2 O S .

S/ELS

5/ELC

C H N O S/ELF

CM2



C6 H3 N3 O7

N/ELS

4/ELC

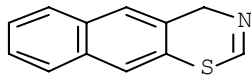
C H N O/ELF

5/ELC.SUB

③ 環データ検索の利用

■ 環データ表示例

- 縮合環の例：4H-ナフト[2,3-e]-1,3-チアジン (CAS RN：324-85-6)



環系：全体
最小環：環系を構成する個々の環

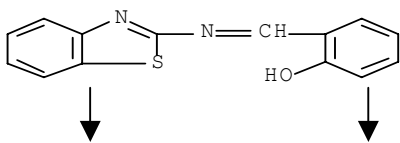
Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4NS-C6-C6	NCSC3-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.41.1	1



- 環系の数 /NRS フィールド (物質全体)
- 最小環の数 /CNRS フィールド (同一成分内)
- 各環系を構成する最小環の数 /NR フィールド (物質全体)
- 環系の元素式 /CNR フィールド (同一成分内) <== RC スクリーン
- 環系の元素配列 /NRRS フィールド
- 環系の環の大きさ /EA フィールド (環系全体)
- 環系識別子 /EAS フィールド (最小環)
- 環系の元素配列 /ES フィールド (環系全体)
- 環系の環の大きさ /ESS フィールド (最小環)
- 環系識別子 /SZ フィールド (環系全体)
- 環系の元素配列 /SZS フィールド (最小環)
- 環系の環の大きさ /RID フィールド (環系全体)*

CM1



環系全体

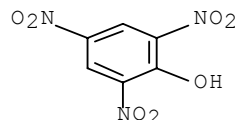
2/NRRS
5-6/SZ

333.521.14/RID

成分全体

2/CNRS
3/CNR

CM2



環系全体

1/NRRS
6/SZ

46.150.18/RID*

成分全体

1/CNRS
1/CNR

物質全体 3/NRS 4/NR

■ 環系識別子

* 環系識別子 (RID) は各々の環系に対して付与されたユニークなコードである。

(骨格) . (元素の位置) . (結合次数)

注意点 1 : 同じ骨格, 同じ元素位置をもつ環系でも, 環に結合する置換基によって, 異なる場合があるのでヘテロ環を利用する場合は, 特に注意する. 検索もれの危険がある場合は, 結合次数は指定しないで検索する.

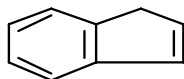
注意点 2 : 環系識別子は, 環の形を特定してしまうため, 縮合環は検索できない.

縮合環も考慮する場合は, 最小環の元素式 (/EAS) および 最小環の元素配列 (/ESS) などを利用する. また, 環系識別子のようにオンラインで事前に調べる必要がないので, 場合によっては, 環系の元素式 (/EA) および環系の元素配列 (/ES) も有効である.

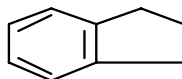
- 環系識別子の調べ方 : 目的の環系を含む化学物質のレコードを検索し, 環データ (RSD) を表示する (検索には, 化学物質名称検索, 構造検索のサンプル検索などが有効である).

● 環系識別子 (RID) の例

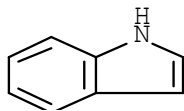
Indene: 333. 70. 45
(CAS RN : 95-13-6)



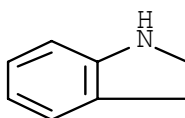
Indane: 333. 70. 44
(CAS RN : 496-11-7)



1H-Indole: 333. 151. 57
(CAS RN : 120-72-9)



2,3-Dihydro-1H-indole: 333. 151. 54
(CAS RN : 496-15-1)



● 検索例 : ナルボマイシンと同じ 14 員環系を持つ化合物

=> S NARBOMYCIN/CN

L1 1 NARBOMYCIN/CN

名称を /CN フィールドで検索する

=> D RN RSD

環データ (RSD) を表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN

RN 6036-25-5 REGISTRY

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring Formula	Ring Identifier	RID	Ring Occurrence
EA	ES	SZ	RF		RID	Count
C50	OC5	6	C50	46.157.1	1	
C130	OC13	14	C130	2576.4.3	1	

目的の環系識別子コード

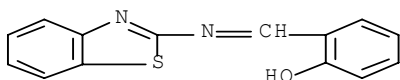
=> S 2576. 4. 3/RID

L2 228 2576. 4. 3/RID

/RID フィールドで検索

■ 元素式, 元素配列

CM1



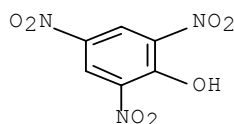
C3NS-C6/EA
(C3NS/EAS, C6/EAS)

NCSC2-C6/ES
(NCSC2/ESS, C6/ESS)

C6/EA
(C6/EAS)

C6/ES
(C6/ESS)

CM2



C6/EA
(C6/EAS)

C6/ES
(C6/ESS)

● 元素式 (EA) の表記規則

- ① 各々の最小環の組成を Hill 方式で表記

例 : C6 C5N2 C5NS

- ② 各々の最小環の組成を, 少数員環から順次ハイフンで区切って表記

例 : C5-C6-C6N/EA C5-C6-C6-C6N/EA C4N-C6-C5N2/EA

- ③ 同じ大きさの環が存在する場合には, 左側よりアルファベット・数値の少ない順で表記

例 : C5N-C5O-C5S C3NO-C3NS C4N2-C5N-C6 C3NS-C3N2 *

* C3NS は "C3N1S1" と書き換えて, アルファベット・数値順で比較する.

例 : C3NS → C 3 N 1 S 1

C3N2 → C 3 N 2

● 検索例 : C3, C4N, C6 を各 1 個含む縮合環化合物 (縮合環, /EA の検索例)

⇒ E C3-C4N-C6/EA 5

E1 6 C3-C4N-C5O/EA
E2 2 C3-C4N-C5O-C6/EA
E3 517 → C3-C4N-C6/EA
E4 3 C3-C4N-C6-C5N2/EA
E5 874 C3-C4N-C6-C6/EA

C3-C4N-C6 を /EA フィールドで EXPAND する

⇒ S E3

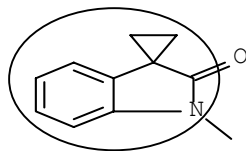
L1 517 C3-C4N-C6/EA

E3 を検索

⇒ D 1 102 RN STR

1 番目の回答の RN STR を表示

L1 ANSWER 1 OF 517 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
RN 544709-52-6 REGISTRY



(CH₂)₆-CO₂H

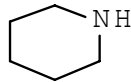
● 元素配列 (ES) の最小環の表記規則

- ① 単一元素のみから成る環

C6
N6

- ② ヘテロ環はヘテロ原子を起点として元素配列を表記する.

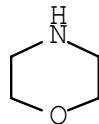
NC5



(CAS RN: 110-89-4)

- ③ 2種のヘテロ原子がある場合は、起点とすべきヘテロ原子をアルファベット順で決定する.

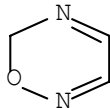
NC2OC2



(CAS RN: 110-91-8)

- ④ アルファベット順で最も優先度の高いヘテロ原子が二つ以上ある場合には、より近くに他のヘテロ原子の存在する方を起点とする.

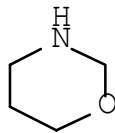
NOCNC2



(CAS RN: 34359-13-2)

- ⑤ 回る方向によって元素配列が異なる場合は、起点により近い位置に他のヘテロ原子の存在する方向に回って、元素配列を決定する.

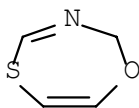
NCOC3



(CAS RN: 14558-49-7)

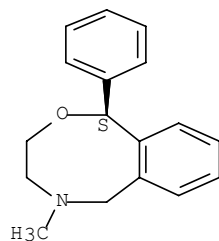
- ⑥ 起点とすべきヘテロ原子から同じ位置に 2 種のヘテロ原子がある場合はアルファベット順で回る方向を決定する.

NCOC2SC



(CAS RN: 51272-26-5)

● 検索例：下図の構造を持つ化合物の CAS 登録番号 (/ES の検索例)



特徴ある環系に注目
この環系の ES は C6-NC2OC4

=> E C6-NC2OC4/ES 5

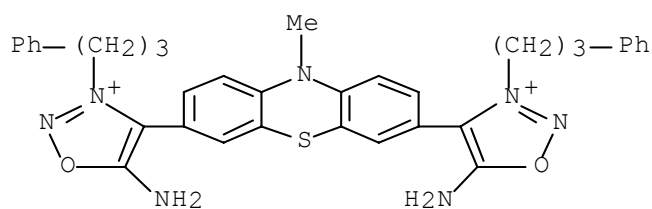
C6-NC2OC4 を /ES フィールドで EXPAND する

E1	2	C6-NC2OC3OC5/ES
E2	2	C6-NC2OC3SC3/ES
E3	197	C6-NC2OC4/ES
E4	4	C6-NC2OC4OC2/ES
E5	3	C6-NC2OC4OC2NC2SC2NC2SC2/ES

■ その他の環に関する検索フィールド

検索フィールド名 検索フィールドコード	定 義	入 力 例 *
環系式 /RF Ring System Formula	環系の構成元素 (Hill 方式) と その成分内の存在数	S C12NS/RF S 1 C12NS/RF S C2N2O/RF
環系の構成元素式 /RELF Ring Elemental Formula	環系を構成するすべての元素の種 類 (環系式から数を削除) とその 成分内の存在数	S C N S/RELF S 1 C N S/RELF S C N O/RELF S 2 C N O/RELF
環系の構成元素種 /REL Ring Element	環系を構成する個々の元素種と, その環系内の存在数	S S/REL S 1 S/REL S N/REL S 2 N/REL
環系の異なる元素の種類数 /RELC Ring Element Count	環系を構成する異なる元素の種類 の数	S 3/RELC S 1/RELC
環系の原子数 /RATC Ring Atom Count	環系を構成する原子数の総和	S 14/RATC S 5/RATC S 6/RATC

* 入力例は以下の化合物を想定



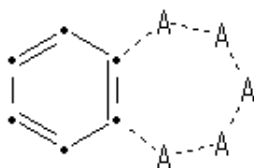
(CAS RN: 141914-74-1)

● 2 C1-

■ は主な検索フィールド

■ 環データにおける (S) 演算子の利用例

検索例： 次の骨格を持ち、ヘテロ原子が 2 個含まれる環系を持つ化合物



=> FILE REGISTRY

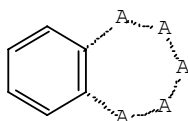
=>

Uploading C:\AAA\RID1.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

L1 STR



点線の結合は、不定

構造検索サンプル検索 (無料) を行う

Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:01:59 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 6577 TO ITERATE

15.2% PROCESSED 1000 ITERATIONS

50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 126680 TO 136400

PROJECTED ANSWERS: 95860 TO 104342

L2 50 SEA SSS SAM L1

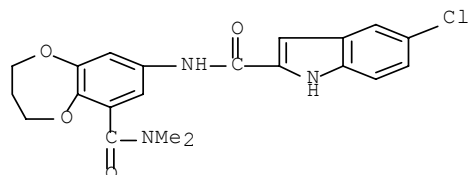
=> D 1 RSD STR

1 件, RSD STR 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 50 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4N-C6	NC4-C6	5-6	C8N	333.151.57	1
C6-C5O2	C6-OC2OC3	6-7	C9O2	937.195.3	1



RID の骨格のコードを確認する

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> S 937/RID (S) 2 Q/REL

113672 937/RID
6753707 2/REL. CNT
13246978 Q/REL
5080986 2 Q/REL

(2/REL. CNT (T) Q/REL)

L3 59791 937/RID (S) 2 Q/REL

937/RID : 環系識別子コード (骨格のみ)

2 Q/REL : ヘテロ原子 2 個含む環系

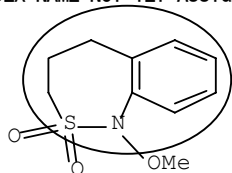
(S) 演算子 : 同一環系内

=> D 1-2 RN IN STR RSD

L3 ANSWER 1 OF 59791 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN

RN 593288-14-3 REGISTRY

IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

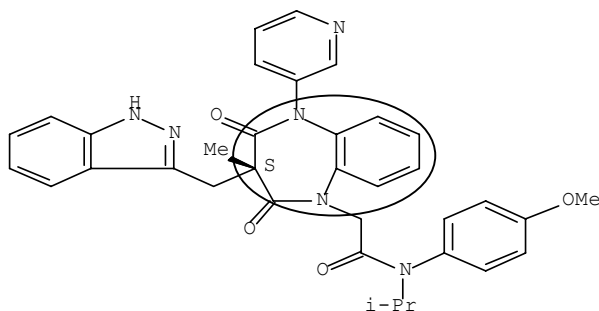
Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6-C5NS	C6-NSC5	6-7	C9NS	937	382.3 1

L3 ANSWER 2 OF 59791 REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN

RN 592509-97-2 REGISTRY

IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED

Absolute stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Ring System Data

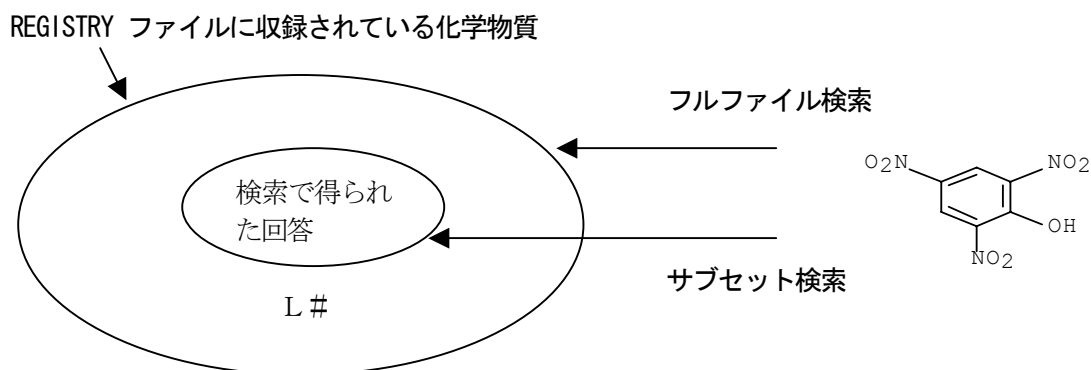
Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C5N	NC5	6	C5N	46.156.30	1
C3N2-C6	N2C3-C6	5-6	C7N2	333.161.31	1
C6-C5N2	C6-NC2NC3	6-7	C9N2	937	168.6 1

サブセット検索

■ サブセット検索の利用

回答セットの L 番号の中に含まれる化学物質を検索対象として、構造検索することを SUBSET 検索という。

・ 検索の範囲

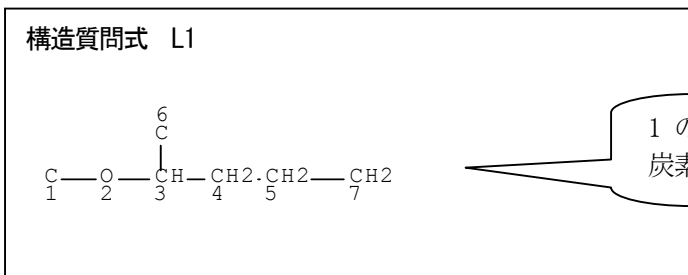


・ サブセット検索の利点

- ① 特定の構造質問式で回答の絞り込みができる。
- ② 得られた回答をグループ分けすることができる。
- ③ フルファイル検索が完全に終了しない構造検索に対して、予め、検索対象を絞り込んでおくことができる。

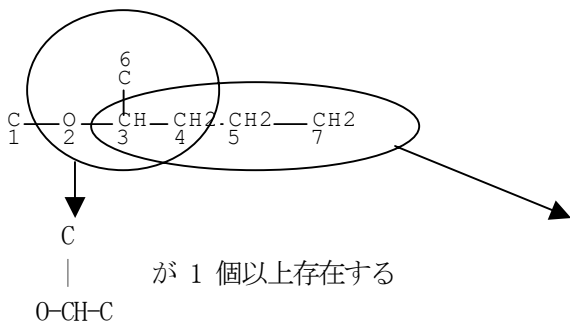
検索例

■ 検索例 1 : 鎖状構造の構造質問式の検索例 (HA スクリーン)



1 の炭素は、環内の炭素でも鎖上の炭素でもよい

鎖状構造の部分構造に対しては、有効なスクリーンが作成されにくい。
炭素に水素が結合している場合には、HA、TW スクリーンを利用する。



1149 HA CH -1C -1C -10

1007 HA 2 CH2 -1C -1C

=> SCR 1007 ← 1007 のスクリーン番号のみ利用
L2 SCREEN CREATED

=> SCR 1007 AND 1149 ← 1007 と 1149 の両方の条件を満たす物質に関するスクリーン
L3 SCREEN CREATED

=> S L1 ← スクリーンを利用せずに構造検索する
SAMPLE SEARCH INITIATED 09:48:52 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 34856 TO ITERATE

2.9% PROCESSED 1000 ITERATIONS 50 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE**
BATCH **INCOMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 685984 TO 708256
PROJECTED ANSWERS: 60740 TO 67530

L4 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 AND L2 ← 1007 のスクリーンを利用して構造検索する

SAMPLE SEARCH INITIATED 09:49:00 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 26732 TO ITERATE

3.7% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

50 ANSWERS

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

← バッチ検索が COMPLETE になった

PROJECTED ITERATIONS: 524874 TO 544406
PROJECTED ANSWERS: 58679 TO 65357

← 60 万を下回ったため、BATCH が COMPLETE になった

L5 50 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> S L1 AND L3

SAMPLE SEARCH INITIATED 09:49:05 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 18633 TO ITERATE

5.4% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

50 ANSWERS

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

← オンライン検索で、COMPLETE になった

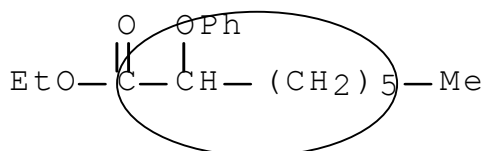
PROJECTED ITERATIONS: 364496 TO 380824
PROJECTED ANSWERS: 55264 TO 61750

← 40 万を下回ったため、オンライン検索が COMPLETE になった

L6 50 SEA SSS SAM L1 AND L3

=> D SCAN

L6 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Octanoic acid, 2-phenoxy-, ethyl ester (9CI)
MF C16 H24 O3

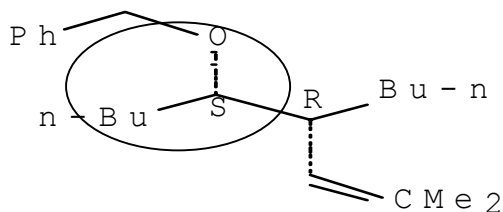


****PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT****

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

L6 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Benzene, [[[1R, 2S)-1-butyl-2-(2-methyl-1-propenyl)hexyl]oxy]methyl]-
, rel- (9CI)
MF C21 H34 O

Relative stereochemistry.

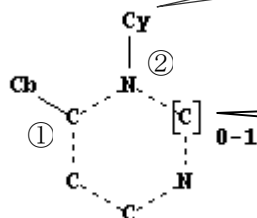


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

■ 検索例 2 : 繰り返しを利用した構造質問式の検索例 (AA スクリーン)

● スクリーンとサブセット検索の利用

構造質問式 L1



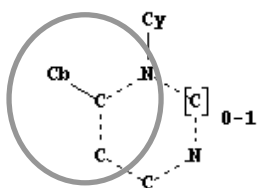
2 の N と直接結合する 8 の CY (環一般) 中の原子は、炭素である

0-1 の炭素の繰り返し
0 の場合は、5 員環、1 の場合は、6 員環になる

点線の結合は、不定の結合を意味する

この構造は、① と ② のノードに特徴があるため、そのノードの環境を AA スクリーンで限定して検索する。

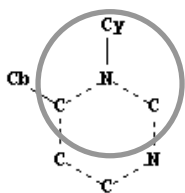
① の炭素を中心原子とするスクリーン



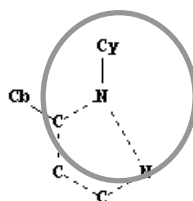
1099 AA C *C -C *N

② の窒素を中心原子とするスクリーン

6 員環の場合



5 員環の場合



1607 AA N *C *C -C 1616 AA N C C N

=> S L1 ← スクリーンを利用しない場合
SAMPLE SEARCH INITIATED 10:45:37 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 99243 TO ITERATE

1.0% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

16 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE**
BATCH **INCOMPLETE**

← オンライン検索が INCOMPLETE になる

PROJECTED ITERATIONS: EXCEEDS 1000000
PROJECTED ANSWERS: EXCEEDS 29367

L2 16 SEA SSS SAM L1

=> SCR 1607 OR 1616
L3 SCREEN CREATED

← ② の窒素に関するスクリーン (必ず, OR 演算子を利用する)

=> SCR 1099
L4 SCREEN CREATED

← ① の炭素に関するスクリーン

=> S L1 AND L3

← 窒素に関するスクリーンを構造質問式に演算する

SAMPLE SEARCH INITIATED 10:46:23 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 68107 TO ITERATE

← スクリーン を通過して化学物質の件数は少なくなっている

1.5% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

24 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE**
BATCH **INCOMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: EXCEEDS 1000000
PROJECTED ANSWERS: EXCEEDS 30266

← オンライン検索で INCOMPLETE である

L5 24 SEA SSS SAM L1 AND L3

=> S L1 AND L3 AND L4

← 炭素に関するスクリーンと窒素に関するスクリーンを構造質問式に演算する

SAMPLE SEARCH INITIATED 10:46:35 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 28493 TO ITERATE

3.5% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

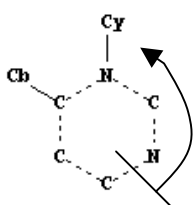
50 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 559781 TO 579939
PROJECTED ANSWERS: 26776 TO 31348

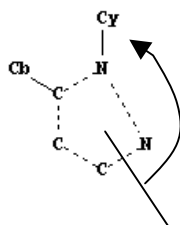
← BATCH 検索では COMPLETE になった

L6 50 SEA SSS SAM L1 AND L3 AND L4

● 辞書検索結果を利用してサブセット検索する



NCNC3/ES



N2C3/ES

← /ES フィールドを利用した場合には、
環は孤立する。孤立させないためには
/ESS フィールドでの検索になる

=> S NCNC3/ES OR N2C3/ES

596055 NCNC3/ES
368667 N2C3/ES

L7 953656 NCNC3/ES OR N2C3/ES

=> S L1 AND L3 AND L4 SUB=L7 SAM

SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 10:48:54 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 17136 TO ITERATE

5.8% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

27 ANSWERS

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): ONLINE **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 334889 TO 350551
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 7963 TO 10543

L8 27 SEA SUB=L7 SSS SAM L1 AND L3 AND L4

=> S L1 AND L3 AND L4 SUB=L7 FUL

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 10:49:00 FILE 'REGISTRY'

FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 345041 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 345041 ITERATIONS

22449 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.05

L9 22449 SEA SUB=L7 SSS FUL L1 AND L3 AND L4

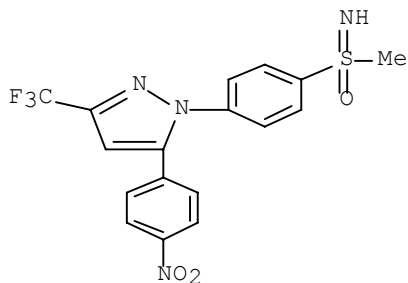
=> D SCAN

L9 22449 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN

IN Sulfoximine, S-methyl-S-[4-[5-(4-nitrophenyl)-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrazol-1-yl]phenyl]- (9CI)

MF C17 H13 F3 N4 O3 S

CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

■ 検索例 3 : G グループを利用した構造質問式の検索例 (TR スクリーン)

- 縮合環の検索 : この場合は, 環系識別子コードを利用したサブセット検索はできない. また, 環内のノードが G グループであるため, 環上のノードを利用する /EA, /ES でのサブセット検索, AA スクリーンなどは, OR 演算を多用する必要がある. この構造のように, 5 員環の縮合に特徴がある場合, TR スクリーンを利用すると効果的である.

構造質問式 L1

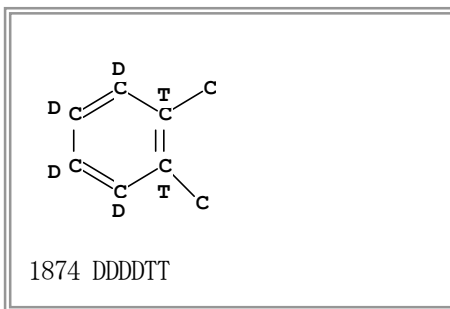
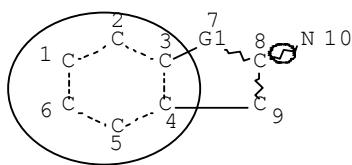
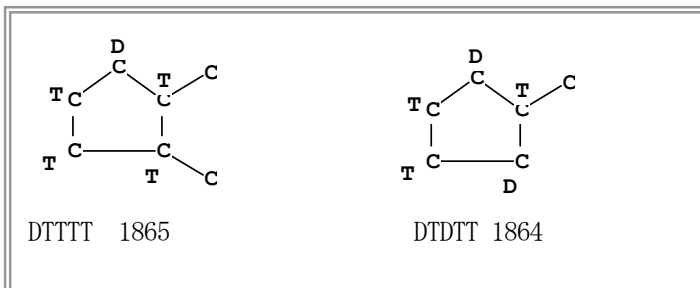
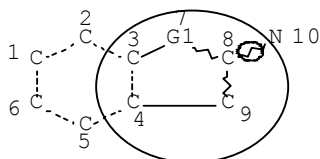
検索条件 : 7 番のノードには, これ以上環は縮合しない

8 番のノードと 10 番のノードの結合は, 環結合である

9 番のノードの置換基は, 環または鎖を形成する

G1 は, N, O, C である.
環は孤立していても, 孤立していなくてもよい.

- D: ノードに結合している環結合の数が 2.
- T: ノードに結合している環結合の数が 3.



=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:02:28 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 28271 TO ITERATE

3.5% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

36 ANSWERS

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

PROJECTED ITERATIONS: 555380 TO 575460
PROJECTED ANSWERS: 18442 TO 22268

L2 36 SEA SSS SAM L1

=> SCR 1865 OR 1864
L3 SCREEN CREATED

=> SCR 1874
L4 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L3 AND L4
SAMPLE SEARCH INITIATED 17:03:23 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 8339 TO ITERATE

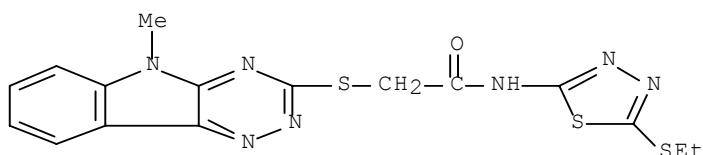
12.0% PROCESSED 1000 ITERATIONS 50 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 161309 TO 172251
PROJECTED ANSWERS: 19547 TO 23481

L5 50 SEA SSS SAM L1 AND L3 AND L4

=> D SCAN

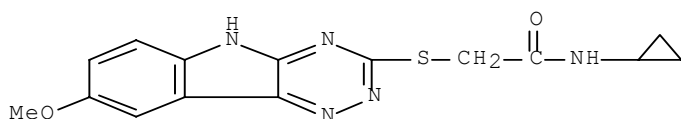
L5 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Acetamide, N-[5-(ethylthio)-1,3,4-thiadiazol-2-yl]-2-[(5-methyl-5H-1,2,4-triazino[5,6-b]indol-3-yl)thio]- (9CI)
MF C16 H15 N7 O S3



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

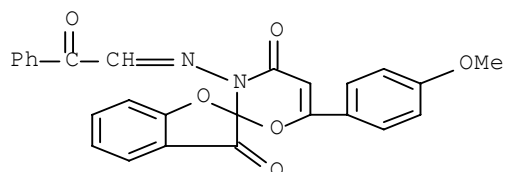
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 2

L5 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Acetamide, N-cyclopropyl-2-[(8-methoxy-2H-1,2,4-triazino[5,6-b]indol-3-yl)thio]- (9CI)
MF C15 H15 N5 O2 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

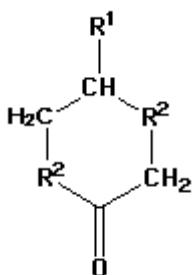
L6 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Spiro[benzofuran-2(3H),2'-[2H-1,3]oxazine]-3,4'(3'H)-dione, 6'-(4-methoxyphenyl)-3'-[(2-oxo-2-phenylethylidene)amino]- (9CI)
MF C26 H18 N2 O6



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

■ 検索例 4 : サブセット検索 (/ESS フィールドの使用)

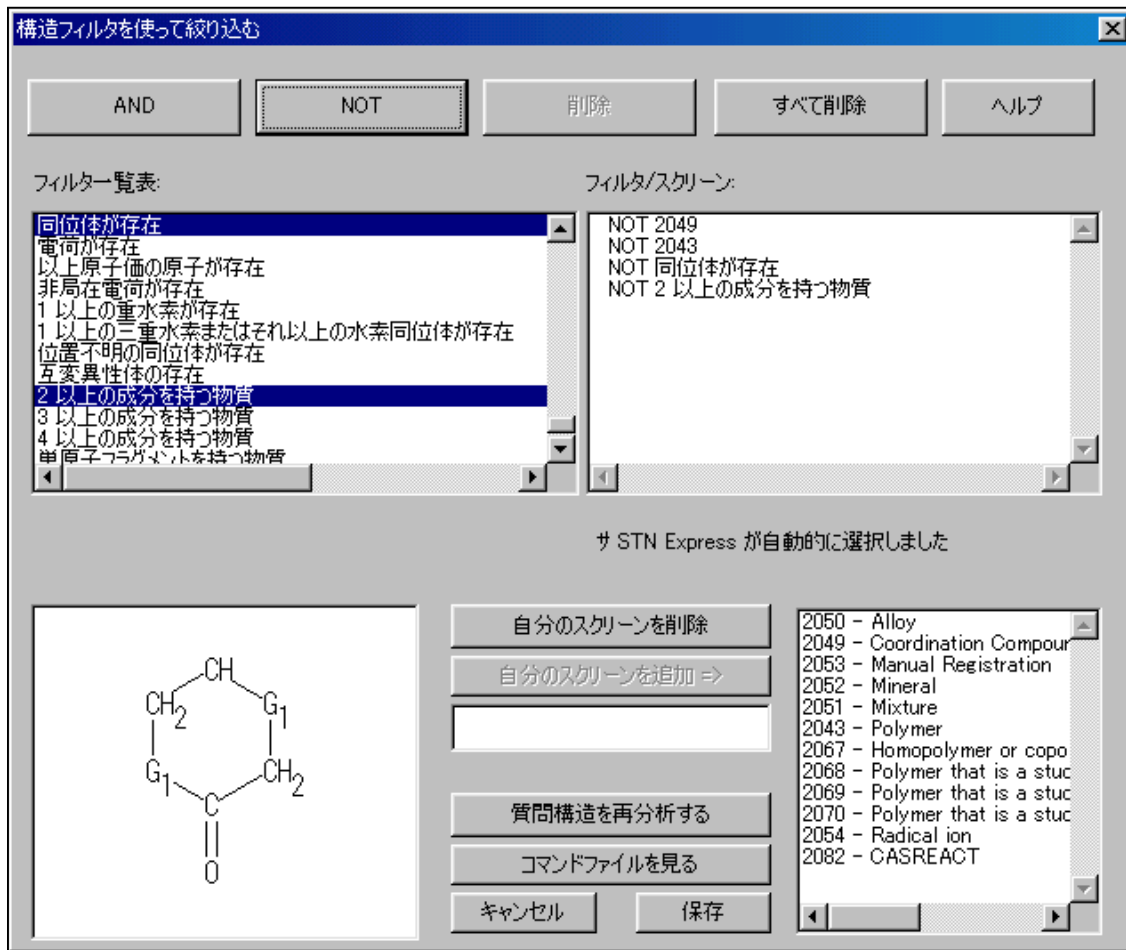


検索条件 :

- R¹ は何でもよい
- R² は O または N-R¹
- 2 成分以上, ポリマー, 配位化合物, 同位体標識化合物を除く

- Gk グループを使用した構造質問式では, スクリーンが発生しにくいいため, サンプル検索での FULL FILE PROJECTION が INCOMPLETE になることがある. その際, 環データを利用して, サブセット検索することにより, フルファイル検索を COMPLETE にすることができる.

● STN Express の構造フィルタを使ってスクリーンを作成する。



=> FILE REGISTRY

=> ...Testing the current file... screen
ENTER SCREEN EXPRESSION OR (END):end

=> screen 2049 OR 2043 OR 2039 OR 2127
L1 SCREEN CREATED

=>
Uploading C:\Program Files\STNEXP\QUERIES\ring.str

L2 STRUCTURE UPLOADED

=> que L2 NOT L1

L3 QUE L2 NOT L1

=> S L3

SAMPLE SEARCH INITIATED 09:33:45 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 39233 TO ITERATE

2.5% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

7 ANSWERS

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE** ← スクリーン番号を利用して、INCOMPLETE が表示される
BATCH **INCOMPLETE**

PROJECTED ITERATIONS: 772888 TO 796432
PROJECTED ANSWERS: 4498 TO 6486

L4 7 SEA SSS SAM L2 NOT L1

スクリーン番号の L1 と構造質問式の L2,
さらにスクリーンと構造質問式の L 番号が
演算された L3 の質問式が作成される

=> FILE REGISTRY

=> ...Testing the current file... screen
ENTER SCREEN EXPRESSION OR (END):end

=> screen 2049 OR 2043 OR 2039 OR 2127
L1 SCREEN CREATED

=>
Uploading C:\Program Files\STNEXP\QUERIES\ring.str

L2 STRUCTURE UPLOADED

=> que L2 NOT L1

L3 QUE L2 NOT L1

=> S L3

SAMPLE SEARCH INITIATED 09:33:45 FILE 'REGISTRY'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 39233 TO ITERATE

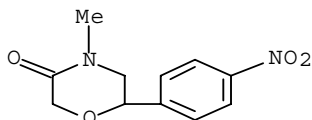
2.5% PROCESSED 1000 ITERATIONS 7 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE ****INCOMPLETE**** ← フルファイル検索できない
BATCH ****INCOMPLETE****
PROJECTED ITERATIONS: 772888 TO 796432
PROJECTED ANSWERS: 4498 TO 6486

L4 7 SEA SSS SAM L2 NOT L1

=> D SCAN

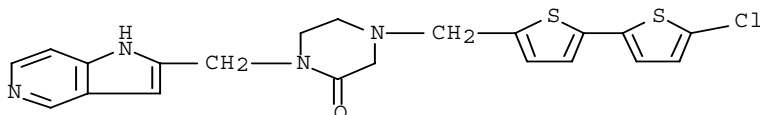
L4 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2002 ACS
IN 3-Morpholinone, 4-methyl-6-(4-nitrophenyl)- (9Cl)
MF C11 H12 N2 O4



****PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT****

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

L4 7 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2002 ACS
IN Piperazinone, 4-[(5'-chloro[2,2'-bithiophen]-5-yl)methyl]-1-(1H-pyrrolo[3,2-c]pyridin-2-ylmethyl)- (9Cl)
MF C21 H19 Cl N4 O S2

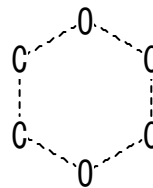
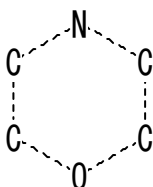
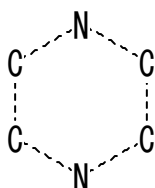


****PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT****

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END ← SCAN 表示を終了

● 環データを使って辞書検索を行い、その回答セットに対してサブセット検索を実行する。

- ・ 環データの検索フィールドについては、CAS FILES ポケットガイド参照。
- ・ 環データ等 REGISTRYファイルでの辞書検索の詳細については、「REGISTRY ファイル辞書検索」講習会にて説明。



=> S NC2NC2/ESS OR NC2OC2/ESS OR OC2OC2/ESS

559702 NC2NC2/ESS

251470 NC2OC2/ESS

50657 OC2OC2/ESS

L5 848803 NC2NC2/ESS OR NC2OC2/ESS OR OC2OC2/ESS

=> S L3 SUB=L5

← L5 をサブセットに L3 を検索

ENTER SUBSET SEARCH SCOPE - SAMPLE, FULL, RANGE, OR (END):SAM ← サンプル検索

SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 09:35:32 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 6172 TO ITERATE

16.2% PROCESSED 1000 ITERATIONS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

50 ANSWERS

フルファイル検索が出来る

ONLINE ****COMPLETE****

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 118734 TO 128146

PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 6822 TO 9224

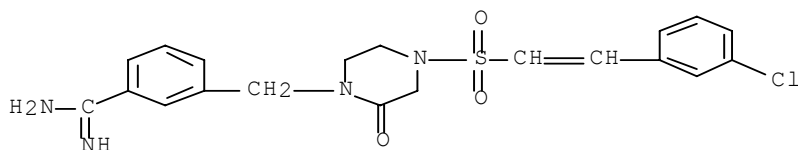
L6 50 SEA SUB=L5 SSS SAM L2 NOT L1

=> D SCAN

L6 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2002 AC

IN Benzenecarboximidamide, 3-[[4-[[2-(3-chlorophenyl)ethenyl]sulfonyl]-2-oxo-1-piperazinyl]methyl]- (9CI)

MF C20 H21 Cl N4 O3 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

=> S L3 SUB=L5 FUL

← フルファイル検索を実行

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 09:37:47 FILE 'REGISTRY'

FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 124204 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 124204 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.02

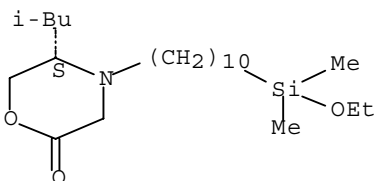
4534 ANSWERS

L7 4534 SEA SUB=L5 SSS FUL L2 NOT L1

=> D 1 30

L7 ANSWER 1 OF 4534 REGISTRY COPYRIGHT 2002 ACS
RN 443694-49-3 REGISTRY
CN 2-Morpholinone, 4-[10-(ethoxydimethylsilyl)decyl]-5-(2-methylpropyl)-,
(5S)-(9CI) (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C22 H45 N O3 Si
SR CA
LC STN Files: CAPLUS

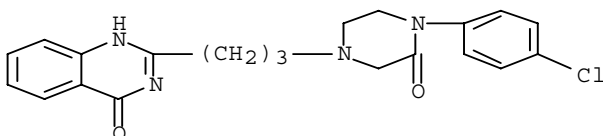
Absolute stereochemistry.



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1967 TO DATE)

L7 ANSWER 30 OF 4534 REGISTRY COPYRIGHT 2002 ACS
RN 437997-70-1 REGISTRY
CN 4(1H)-Quinazolinone, 2-[3-[4-(4-chlorophenyl)-3-oxo-1-piperazinyl]propyl]-
(9CI) (CA INDEX NAME)
FS 3D CONCORD
MF C21 H21 Cl N4 O2
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

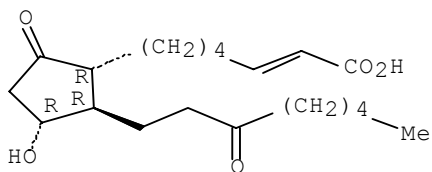
1 REFERENCES IN FILE CA (1967 TO DATE)

1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1967 TO DATE)

=> D SCAN

L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Prost-2-en-1-oic acid, 11-hydroxy-9,15-dioxo-, (11 α)- (9CI)
MF C20 H32 O5

Absolute stereochemistry.
Double bond geometry unknown.

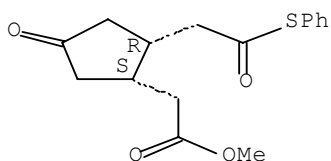


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2003 ACS on STN
IN Cyclopentaneacetic acid, 4-oxo-2-[2-oxo-2-(phenylthio)ethyl]-, methyl ester, (1S-cis)- (9CI)
MF C16 H18 O4 S

Absolute stereochemistry.

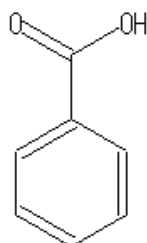


PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

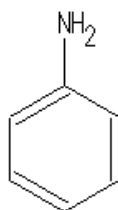
複数の構造質問式の利用の注意点

- 構造検索のとき、二つの構造を同一画面上に描く場合と、別の構造質問式として作成し、AND 演算する場合とは得られる回答が異なる。

構造 A

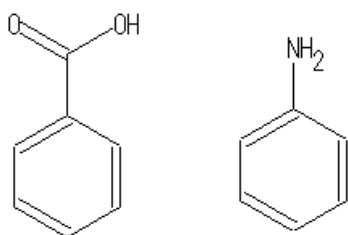


構造 B



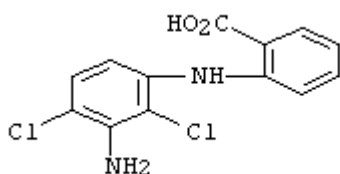
① A と B が同じ構造質問式中にある場合

- ・ A と B が同一成分内の同一構造内に存在する物質が検索される。ただし、A の構造と B の構造の重なりはない。
- ・ 構造質問式 L1



- ・ 検索式 => S L1 FUL
- ・ 回答例 (同一構造内にあり、重なりはない)

IN Benzoic acid, 2-[(4-amino-2,5-dichlorophenyl)amino]- (9CI)
MF C13 H10 Cl2 N2 O2

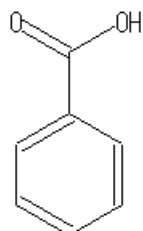


② A と B が別の構造質問式に分かれている場合

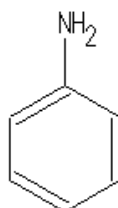
A と B が同一物質内に存在する物質が検索される。したがって、A と B がそれぞれ多成分物質の別の成分である場合も含めて検索される。

また、A の構造と B の構造の重なりがあるものも検索される。

構造質問式 L1



構造質問式 L2



● 検索式 => S L1 AND L2 FUL

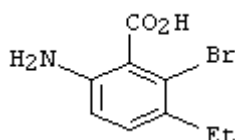
● 回答例

- 同一構造内にあり、重なりはない (前述の ① の回答)

- 同一構造内にあり、重なりがある

IN Benzoic acid, 6-amino-2-bromo-3-ethyl- (9CI)

MF C9 H10 Br N O2



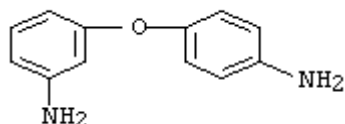
- 別成分の構造中にある

IN Benzoic acid, 4,4'-oxybis-, polymer with 3-(4-aminophenoxy)benzenamine (9CI)

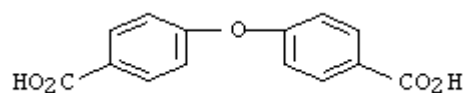
MF (C14 H10 O5 . C12 H12 N2 O)x

CI PMS

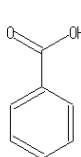
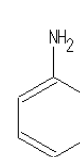
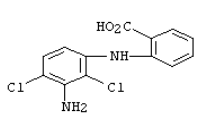
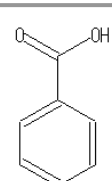
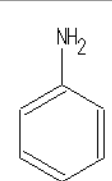
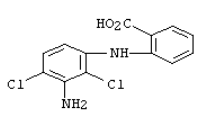
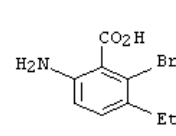
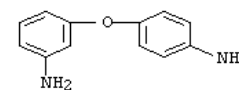
CM 1



CM 2



■ 部分構造フラグメントと構造質問式の演算による回答の違い（まとめ）

構造質問式	同一成分中 (重なりなし)	同一成分中 (重なりあり)	別成分中 (各構造が、それぞれ 別成分中に存在する)
<p style="text-align: center;">構造質問式 L1</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 10px; display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;">   </div> <p style="text-align: center;">構造フラグメントA 構造フラグメントB</p>	<p style="text-align: center;">○</p>  <p style="text-align: center;">同一成分中に、 構造フラグメント A, B を両方含む</p>	<p style="text-align: center;">×</p>	<p style="text-align: center;">×</p>
<p style="text-align: center;">構造質問式 L1</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 10px; display: flex; justify-content: center; align-items: center; margin-bottom: 20px;">  </div> <p style="text-align: center;">構造質問式 L2</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 10px; display: flex; justify-content: center; align-items: center;">  </div>	<p style="text-align: center;">○</p>  <p style="text-align: center;">同一成分中に、 構造質問式 L1, L2 を両方含む</p>	<p style="text-align: center;">○</p> 	<p style="text-align: center;">○</p> <p>CM 1</p>  <p>CM 2</p> 