

**STN INTERNATIONAL**

リフレッシュセミナー

# REGISTRY ファイル -構造検索テクニック

---



## \* 目 次 \*

### A 構造作図のポイント

構造検索コマンド .....	1
構造作図の基本 - 構造作図画面 .....	2
構造作図の基本 - 便利な作図機能 .....	4
複数の構造質問式を用いた検索 .....	5
参考 : 構造検索の料金 .....	6
検索例 ~ 複雑な構造質問式の作図 .....	7
検索例 1 : 複雑な構造質問式の作図 (1) .....	8
検索例 2 : 複雑な構造質問式の作図 (2) .....	12
参考 : サブセット検索を利用した NOT 演算 .....	15
分野別作図のポイント - ポリマー .....	16
分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物 .....	27
分野別作図のポイント - 配位化合物 .....	35

### B 立体化学構造検索

REGISTRY ファイルの立体化学情報 .....	43
立体化学情報を含むレコード例 .....	44
立体化学情報を含む構造質問式の作図 .....	46
立体結合を作図する時の注意点 .....	47
絶対立体配置と相対立体配置の指定 .....	48
立体化学構造検索の流れ .....	49
検索例 : フラボノイド配糖体の生物学的研究に関する調査 .....	50
参考 : CAplus/CA ファイルでの糖類の索引方針 .....	55
幾何異性体の検索 .....	56
その他の光学活性化合物の検索 .....	58
参考 : 立体化学構造検索が可能なファイル .....	60

### C INCOMPLETE になった時の対処方法

対処方法のまとめ .....	61
構造検索のしくみとシステム制限 .....	62
① BATCH 検索 .....	64
② スクリーンを利用した検索 .....	66
③ サブセット検索 .....	68
④ RANGE 検索 (範囲指定検索) .....	70
参考 : PROJECTED ANSWERS が 0 TO 0 の場合 .....	72



## A 構造作図のポイント

構造質問式を作成する際には、検索対象物質の構造がどのように登録されているかを理解しておくことが重要です。この章では構造作図の基本と、分野別の作図のポイントをご紹介します。



## A 構造作図のポイント

### 構造検索コマンド

■ 構造検索とは、検索語の一つとして構造質問式 (L#) を使った検索である。

- ・ 構造検索可能な物質は、水素以外の構成元素数が 252 以下で構造が確定している物質。
- ・ 構造検索コマンド (L# はアップロードした構造質問式の L 番号)

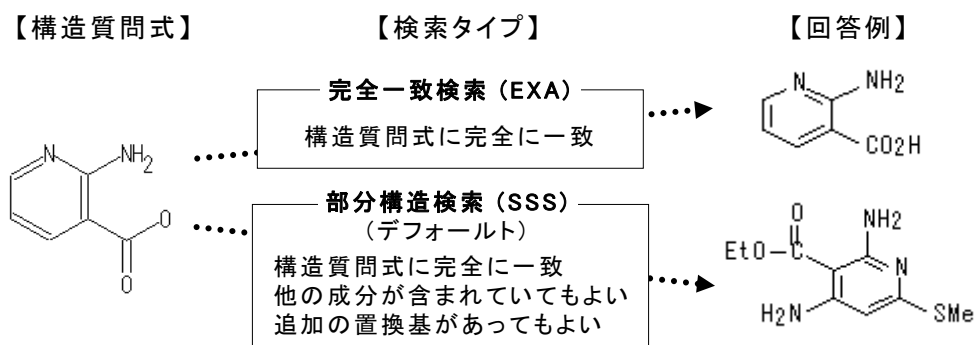
=> **S** **L#** **検索タイプ** **検索範囲**

\* デフォルト

- 検索タイプ : 部分構造検索 (SSS)
- 検索範囲 : サンプル検索 (SAM)

#### - 構造検索のタイプ

検索タイプを指定することで、「作図した構造と完全に一致する」、「作図した部分構造を含む化学物質」などの条件を指定することができる。



検索タイプ		内容	入力例
EXA	完全一致検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索	=> <u>S L1 EXA</u> => <u>S L1 EXA FUL</u>
FAM	ファミリー検索	(EXA の回答に加えて) 他の成分が含まれていてもよい	=> <u>S L1 FAM</u> => <u>S L1 FAM FUL</u>
CSS	閉構造部分構造検索	(FAM の回答に加えて) 可変構造質問式を使用できる 特定の位置に置換基を含めることができる	=> <u>S L1 CSS</u> => <u>S L1 CSS FUL</u>
SSS	部分構造検索 (デフォルト)	(CSS の回答に加えて) 追加の置換基が存在してもよい	=> <u>S L1</u> => <u>S L1 FUL</u>

\* EXA, FAM 検索では可変構造質問式 (X, Ak, G グループ など) は使用できない。

#### - 構造検索の検索範囲

検索範囲		内容	入力例
SAM	サンプル検索 (デフォルト: 無料)	ファイルの一部 (5%) をテスト的に検索	=> <u>S L1</u> => <u>S L1 SAM</u>
FUL	フルファイル検索	ファイルのすべて (100%) を検索	=> <u>S L1 FUL</u> => <u>S L1 EXA FUL</u>
RAN	RANGE 検索	指定した CAS 登録番号の範囲を検索	=> <u>S L1 RAN=</u> <u>943986-60-5,</u>

## A 構造作図のポイント

### 構造作図の基本 - 構造作図画面

#### ■ 構造作図画面

構造作図 - [構造 (1) \*Standard\*]

ファイル(E) 編集(E) 作図(D) テンプレート(T) 質問式定義(Q) 表示(P) 設定(N) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

ペンシルツール：ノードや結合を変更する。環や鎖を作図することもできる

リングツール：環を作図する。右クリックで 6 員環  
(左ボタンで作図 → 飽和環, 右ボタンで作図 → ベンゼン環)

チェーンツール：鎖を作図する。右クリックで 1 炭素鎖

消しゴムツール：ノードや結合などを削除する

選択ツール：ノードや結合を選択する

投げ縄ツール：選択した部分をドラッグして移動

テキストツール：メモ書き用。原子やショートカットの作図には使用しない

- ダブルクリックで複数回使用
- ツールパレットの内容は右クリックで変更可能

リセットボタン (炭素 / 単結合に戻す)

原子の選択

Symbol: Si

H  
O  
N  
P  
Si  
C  
Br  
F

OK 除く キャンセル

水 2010/01/20 15:00:12

設定

化学的内容 レイアウト 保存時 警告 色/フォント 作図

VPA を表示

メチル基表示:  
 CH3  
 Me

限定  
 結合アルゴリズムを使う  
 反応を表示

Markush マッチレベル既定値

環ノード:  
 クラス  
 原子

鎖ノード:  
 クラス  
 原子

例

OK キャンセル

設定画面  
表示内容や作図条件  
をカスタマイズできる



## A 構造作図のポイント

### 構造作図の基本 - 構造作図画面

**ショートカット**

- CH3
- CH2
- CH
- Et
- n-Pr
- i-Pr
- n-Bu
- i-Bu
- s-Bu
- t-Bu
- Ph
- CF2
- CF3
- CCl2
- CCl3
- CBr2
- CBr3
- Cl2
- n-BuO
- OH
- SH
- MeO
- EtO
- n-PrO
- i-PrO
- n-BuO
- CO2H
- COOH
- COSH
- CS2H
- CSSH
- PO3H2
- CHO
- C(O)CH3
- NH
- NH2
- NH3
- NO2

**ショートカットメニュー**

- ・ CO2H と COOH に検索上の違いはない
- ・ Ph は C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> (無置換フェニル基) を表す
- ・ ここにない官能基は原子と結合で作図する

**可変原子選択**

- "X" ハロゲン
- "A" H 以外の元素
- "Q" C,H 以外の元素
- "M" 金属
- "Cb" 炭素環系
- "Cy" 環系
- "Hy" ヘテロ環系
- "Id" 'イミ' ノード (閉マウ)
- "Ak" 炭素鎖

**可変原子選択メニュー**

**結合選択メニュー**

**原子選択メニュー**

- C
- Ac
- Ca
- Er
- In
- Na
- Po
- Se
- Tm
- H
- Ag
- Od
- Eu
- Ir
- Nb
- Pr
- Sm
- U
- O
- Am
- Oe
- Fe
- K
- Nd
- Pt
- Sn
- V
- S
- Al
- Cf
- Fm
- Kr
- Ne
- Pu
- Sr
- W
- N
- Ar
- Cm
- Fr
- La
- Ni
- Ra
- T
- Xe
- P
- As
- Co
- Ga
- Li
- No
- Rb
- Ta
- Yb
- Si
- At
- Cr
- Ge
- Lu
- Np
- Re
- Tb
- Y
- Cl
- Au
- Cs
- Gd
- Lr
- Os
- Rh
- Tc
- Zn
- Br
- Ba
- Cu
- He
- Md
- Pa
- Rn
- Te
- Zr
- F
- Be
- D
- Hf
- Mg
- Pb
- Ru
- Th
- I
- Bi
- Dy
- Hg
- Mn
- Pd
- Sb
- Ti
- B
- Bk
- Es
- Ho
- Mo
- Pm
- Sc
- Tl

**“除く” にチェックを入れて作図すると、特定の原子と水素を除いた検索ができる**

## A 構造作図のポイント

### 構造作図の基本 - 便利な作図機能

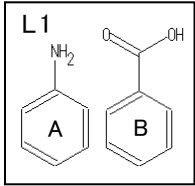
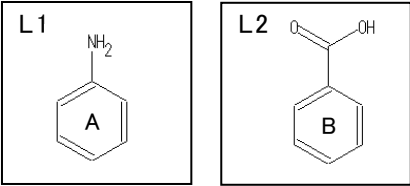
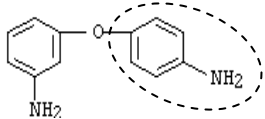
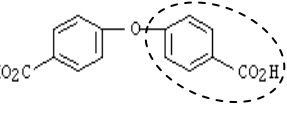
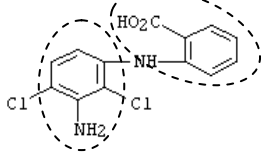
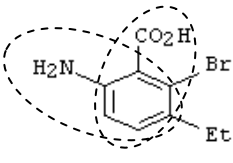
- SSS および CSS 検索では以下の作図機能を利用できる。

作図機能	内容
	作図上の留意点
環の孤立化	指定した環系への縮環を禁止する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 孤立に指定すると、追加の縮環およびスピロ型結合が禁止される。</li> <li>・ 環上のどれか一つのノードに指定すればよい。</li> </ul>
繰り返しグループ	指定した部分を含む繰り返し構造を検索する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 繰り返し範囲は 0 ~ 20 から選択する。</li> <li>・ 繰り返しにより生じる結合の次数は不定となる。</li> </ul>
可変置換位置 (VPA)	特定の環系に対する置換基の可変な結合位置を指定できる。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 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。</li> <li>・ 複数の置換基の存在を指定する場合は、必要な数の置換基を作図し、それぞれに VPA を指定する。</li> </ul>
G グループ	一つのノードに複数の原子、ショートカット、可変原子、フラグメントを指定できる。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 2 点の結合点をもつフラグメントを含める場合は、構造質問式ファイルの保存時に向きを指定する。</li> <li>・ G グループの中に VPA を指定したフラグメントを含めることはできない。</li> </ul>
ノードの属性	ノードが環上、鎖上、環または鎖上に存在することを指定する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 特に指定しない限り、デフォルトの状態では環上のノードは「環」、鎖上のノードは「鎖」に指定される。</li> <li>・ 網羅的に検索する場合は環/鎖に変更する必要がある。</li> <li>・ ノードの属性を変更しても、そのノードに係わる結合の属性は変更されない。</li> </ul>
結合の属性	結合が環上、鎖上、環または鎖上に存在することを指定する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 特に指定しない限り、デフォルトの状態では環上の結合は「環」、鎖上の結合は「鎖」に指定される。</li> <li>・ 網羅的に検索する場合は環/鎖に変更する必要がある。</li> <li>・ 結合の属性を変更すると、両端のノードの属性も変更される。</li> </ul>
一般式属性	一般式グループ記号 (Cb, Cy, Hy, Ak) について大まかな特徴を指定する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ ヘテロ原子の数、炭素原子数が元素数の内容と矛盾しないように指定する。</li> <li>・ 鎖式炭素 (Ak) において、イソプロピル基、イソブチル基は直鎖と認識される。</li> </ul>
元素数	一般式グループ記号 (Cb, Cy, Hy, Ak) について特定元素の存在数を指定する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 一般式属性の内容と矛盾しないように指定する。</li> <li>・ Cb に炭素原子数 2 以下、Ak に炭素原子数 0 を指定することはできない。</li> </ul>
結合非水素数	特定のノードに結合する水素以外のノードについて、数と結合の属性を指定する。
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 構造質問式中で既に結合しているノードの数、結合の属性を含めて指定する。</li> <li>・ CSS では置換基を許容、SSS では制限するために利用するとよい。</li> </ul>

## A 構造作図のポイント

### 複数の構造質問式を用いた検索

- 多成分物質を検索したり、単一の構造図では表現しきれない場合には、複数の構造質問式を組み合わせる。
- 作図および演算の仕方と得られる回答（○：ヒットする / ×：ヒットしない）

	同一画面中に 離して作図	別々に作図		
			L1 AND L2	L1 OR L2
A, B が別成分に分かれて存在 CM 1  CM 2 	×	○	○	×
A, B が同一成分中に 独立して存在 	○	○	○	×
A, B が重複して存在 	×	○	○	×
A の構造のみが存在	×	×	○	○
B の構造のみが存在	×	×	○	×

\* L1 NOT L2 では、A の構造が含まれていてもヒットしない場合があることに注意する。

## A 構造作図のポイント

参考：構造検索の料金

### ■ REGISTRY/ZREGISTRY ファイルの検索料金

(2010年2月現在)

		REGISTRY	ZREGISTRY
接続時間料		5,300 円	無料
辞書検索料		690 円	752 円
構造検索料 サンプル検索		無料	無料
構造検索料 フルファイル検索	完全一致検索 (EXA)	8,090 円	9,050 円
	ファミリー検索 (FAM)	9,420 円	9,960 円
	部分構造検索 (SSS) 閉構造部分構造検索 (CSS)	11,400 円	12,600 円
	構造検索語料 <sup>1)</sup>	12,600 円	13,200 円
構造検索料 サブセット検索 <sup>2)</sup> ・範囲指定検索 <sup>3)</sup>		5,700 円	5,700 円

1) 部分構造・閉構造部分構造検索では、構造の L 番号 1 件につき検索語料が課金される

2) 構造検索のみの回答セットに対してサブセット検索を実行する場合

3) 検索対象が 100,000 物質以内での料金。それを超える場合はフルファイル検索の料金となる

#### ・ 部分構造検索 (SSS), 閉構造部分構造検索 (CSS)

- 構造検索料の他に、使用する構造質問式に対して検索語料が課金される。

=> S L1 FUL

● 検索語料 1 語分 + 部分構造検索料  
(12,600 円 + 11,400 円 = 24,000 円)

=> S L1 AND L2 FUL

● 検索語料 1 語分 + 部分構造検索料  
(12,600 円 + 11,400 円 = 24,000 円)  
\* AND および NOT で構造質問式を組み合わせた場合は、検索語料は 1 語分になる

=> S L1 OR L2 FUL

● 検索語料 2 語分 + 部分構造検索料  
(12,600 円 × 2 + 11,400 円 = 36,600 円)  
\* 複数の構造質問式を OR するより、G グループなどで一つの構造質問式にまとめて検索する方が経済的である

#### ・ 完全一致検索 (EXA), ファミリー検索 (FAM)

- それぞれのタイプの構造検索料のみが課金される (構造検索語料は課金されない)。

=> S L1 EXA FUL

● 完全一致検索料 (8,090 円)

=> S L1 FAM FUL

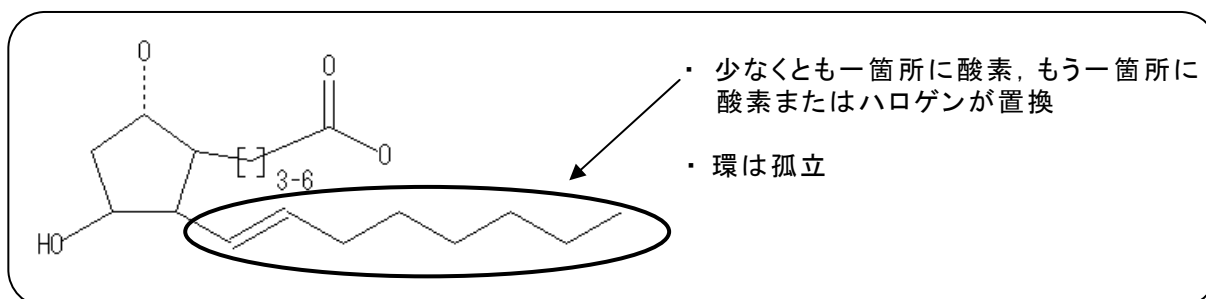
● ファミリー検索料 (9,420 円)

- 構造質問式の OR 演算はできない。

## A 構造作図のポイント

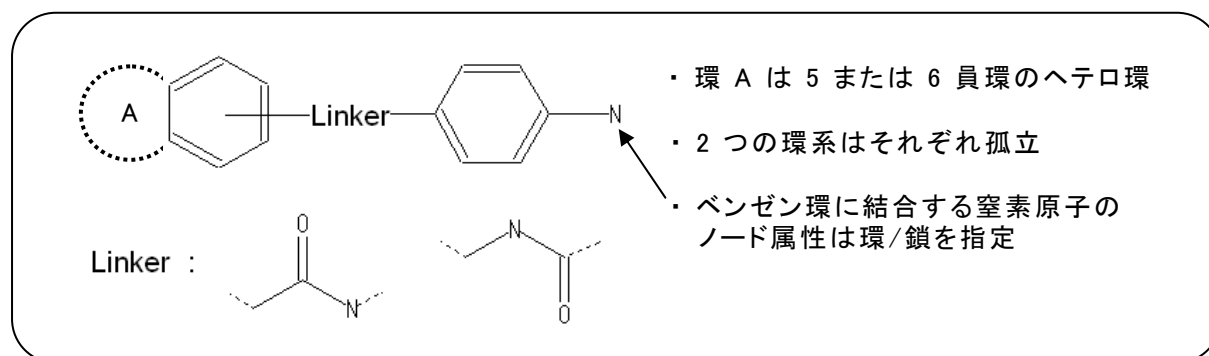
### 検索例 ～ 複雑な構造質問式の作図

#### ■ 検索例 1 : 下記の条件を満たす構造を検索する



[作図案]

#### ■ 検索例 2 : 下記の条件を満たす構造を検索する

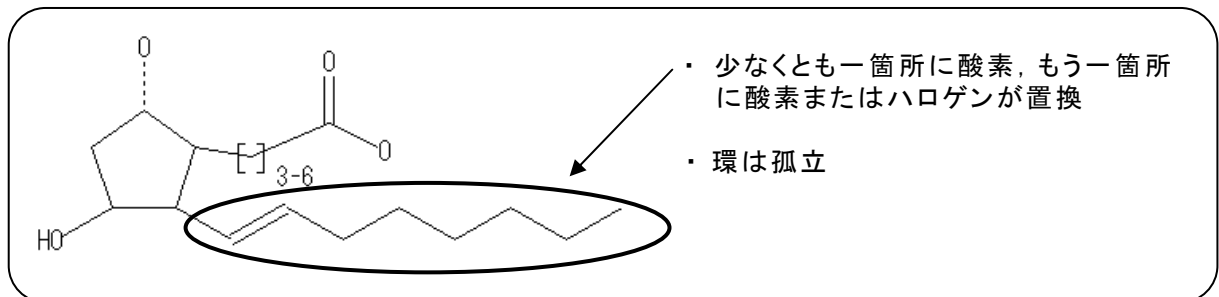


[作図案]

## A 構造作図のポイント

### 検索例 1 : 複雑な構造質問式の作図 (1)

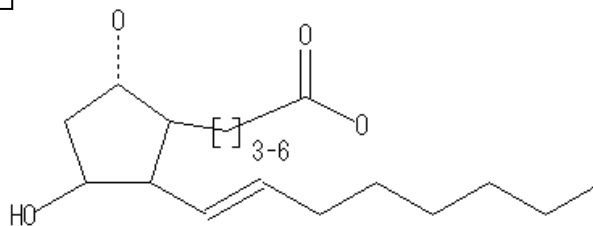
#### ■ 検索例 1 : 下記の条件を満たす構造を検索する



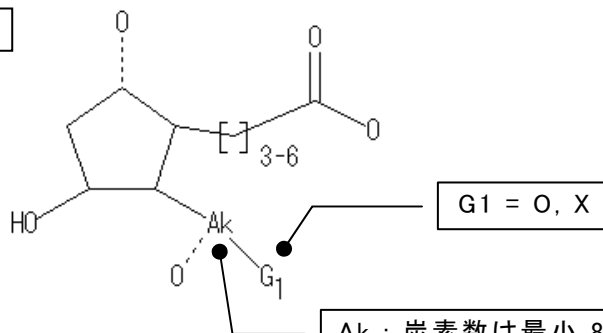
#### ・ 作図のポイント

- 可変置換位置 (VPA) は鎖ノードに対しては利用できないため, 鎖式炭素を作図した構造 A と, 置換基の存在を指定した構造 B を作図し, 二つの構造質問式を AND 演算すれば, 同一成分中で構造の重なりがある化合物が得られる可能性が高い.

構造 A



構造 B



\* 構造 A, B ともに環の孤立化を指定

## A 構造作図のポイント

### 検索例 1 : 複雑な構造質問式の作図 (1)

=> FILE REGISTRY

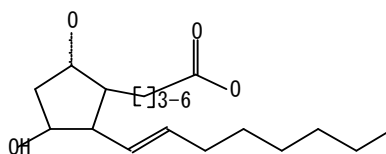
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\Queries\...

L1        STRUCTURE UPLOADED ●—— 構造 A をアップロード (L1)

=> D\_QUE

L1                    STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

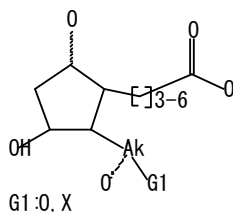
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\Queries\...

L2        STRUCTURE UPLOADED ●—— 構造 B をアップロード (L2)

=> D\_QUE

L2                    STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1 AND L2        ← AND 演算してサンプル検索を実行 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 10:04:27 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -        871 TO ITERATE

100.0% PROCESSED        871 ITERATIONS

36 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:    ONLINE    \*\*COMPLETE\*\*

BATCH    \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS:        15650 TO        19190

PROJECTED ANSWERS:            360 TO            1080

L3                    36 SEA SSS SAM L1 AND L2

## A 構造作図のポイント

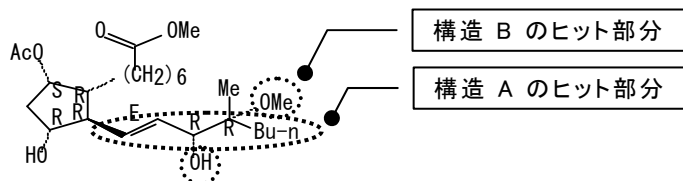
### 検索例 1 : 複雑な構造質問式の作図 (1)

=> D SCAN

← 回答を確認 (無料)

L3 36 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Prost-13-en-1-oic acid, 9-(acetyloxy)-11,15-dihydroxy-16-methoxy-16-methyl-, methyl ester, (9 $\alpha$ ,11 $\alpha$ ,13E,15R,16R)-(9CI)  
 MF C25 H44 O7

Absolute stereochemistry.  
 Double bond geometry as shown.



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

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

=> S L1 AND L2 FUL

← フルファイル検索を実行 (24,000 円)

FULL SEARCH INITIATED 10:04:53 FILE 'REGISTRY'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 17145 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 17145 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.01

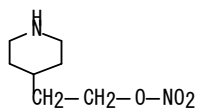
633 ANSWERS

L4 633 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN

L4 633 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Prost-13-en-1-oic acid, 11,15-dihydroxy-16-methoxy-16-methyl-9-oxo-, (11 $\alpha$ ,13E,15R,16R)-, compd. with 2-(4-piperidiny)ethyl nitrate (1:1)  
 MF C22 H38 O6 . C7 H14 N2 O3

CM 1



CM 2

Absolute stereochemistry.  
 Double bond geometry as shown.



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

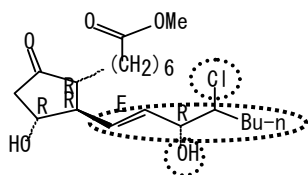


## A 構造作図のポイント

### 検索例 1 : 複雑な構造質問式の作図 (1)

L4 633 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Prost-13-en-1-oic acid, 16-chloro-11,15-dihydroxy-9-oxo-, methyl ester,  
 (11 $\alpha$ ,13E,15R)- (9CI)  
 MF C21 H35 Cl O5

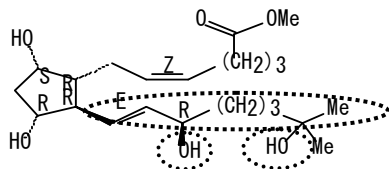
Absolute stereochemistry.  
 Double bond geometry as shown.



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

L4 633 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Prosta-5,13-dien-1-oic acid, 9,11,15,19-tetrahydroxy-19-methyl-, methyl  
 ester, (5Z,9 $\alpha$ ,11 $\alpha$ ,13E,15R)- (9CI)  
 MF C22 H38 O6

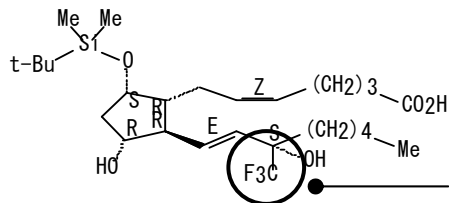
Absolute stereochemistry.  
 Double bond geometry as shown.



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

L4 633 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Prosta-5,13-dien-1-oic acid, 9-[[[(1,1-dimethylethyl)dimethylsilyl]oxy]-  
 11,15-dihydroxy-15-(trifluoromethyl)-,  
 (5Z,9 $\alpha$ ,11 $\alpha$ ,13E,15S)-( $\pm$ )- (9CI)  
 MF C27 H47 F3 O5 Si

Relative stereochemistry.  
 Double bond geometry as shown.



ノイズ (ハロゲンが直接結合していない)

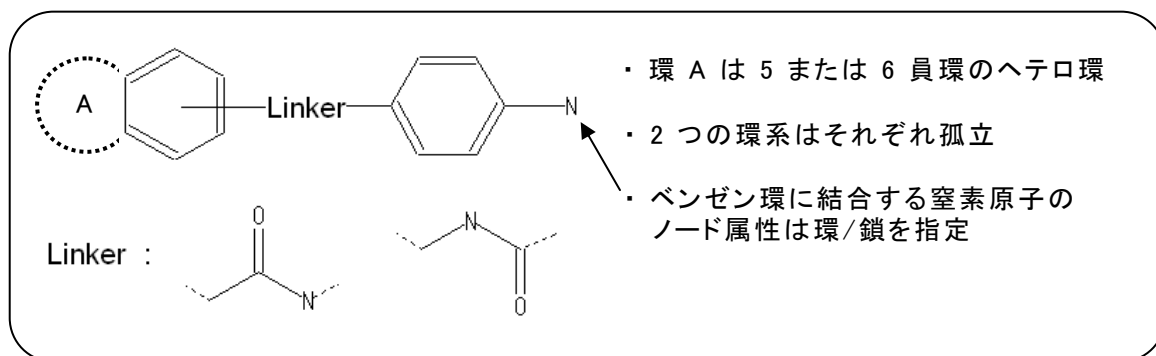
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

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

## A 構造作図のポイント

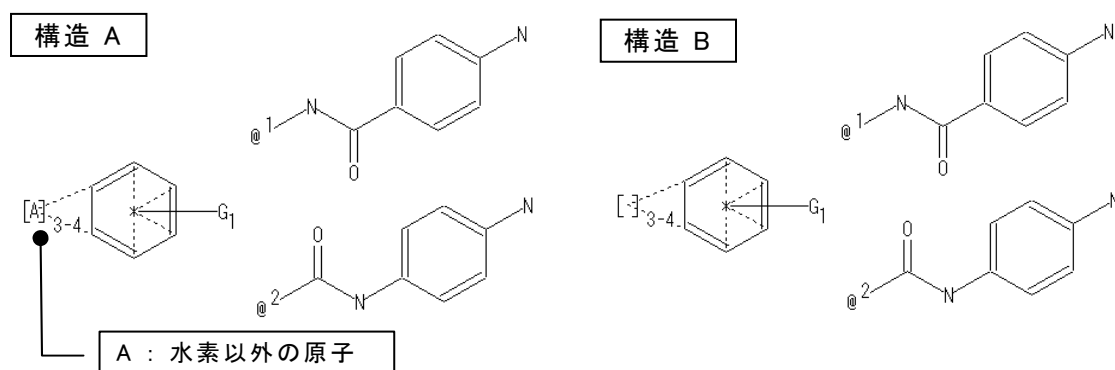
### 検索例 2 : 複雑な構造質問式の作図 (2)

#### ■ 検索例 2 : 下記の条件を満たす構造を検索する

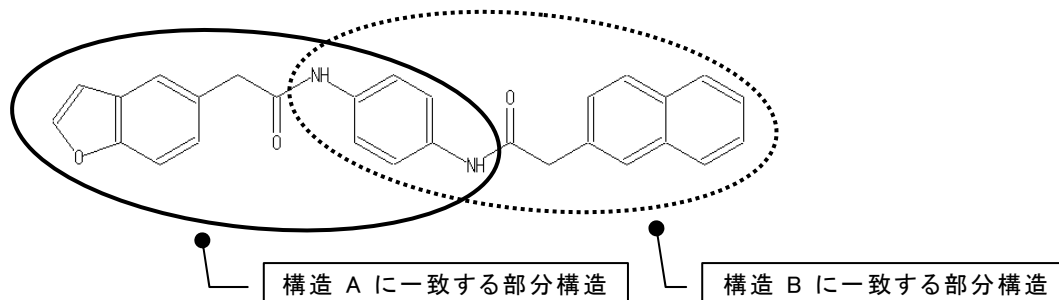


#### ・ 作図のポイント

- 環の大きさを可変にする場合は、環上のノードに繰り返しグループを設定する。
- ヘテロ環部分に A (水素以外) を用いて作図すると、炭素のみからなる環もヒットするが、構造 B を用いて NOT 演算するとヘテロ環に限定できる。



- ただし、構造 B を NOT 演算すると、下記のように必要な構造 A と構造 B を同時に含む物質はヒットしない。



除かれる物質を確認したい場合は、構造 A の検索結果を母集合として、構造 B でサブセット検索した回答を NOT する (→ P. 15 参照)

## A 構造作図のポイント

### 検索例 2 : 複雑な構造質問式の作図 (2)

=> FILE REGISTRY

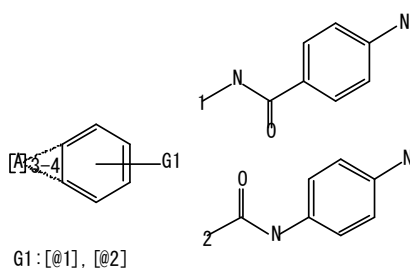
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAIC\My documents\STN Express 8.4\Queries\...

L1      STRUCTURE UPLOADED      ●—— 構造 A をアップロード (L1)

=> D\_QUE

L1                  STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

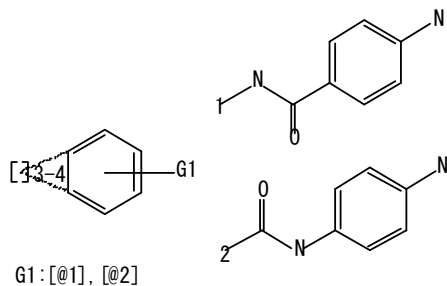
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAIC\My documents\STN Express 8.4\Queries\...

L2      STRUCTURE UPLOADED      ●—— 構造 B をアップロード (L2)

=> D\_QUE

L2                  STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1 NOT L2   ← L2 を NOT してサンプル検索 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:31:01 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -      35983 TO ITERATE

5.6% PROCESSED      2000 ITERATIONS

1 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

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

PROJECTED ITERATIONS:            708315 TO      731005

PROJECTED ANSWERS:                105 TO         613

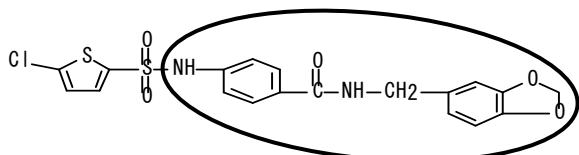
L3                  1 SEA SSS SAM L1 NOT L2

A 構造作図のポイント

検索例 2 : 複雑な構造質問式の作図 (2)

=> D SCAN ← 回答を確認 (無料)

L3 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Benzamide, N-(1,3-benzodioxol-5-ylmethyl)-4-[[[(5-chloro-2-thienyl)sulfonyl]amino]-  
 MF C19 H15 Cl N2 O5 S2



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

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L1 NOT L2 FUL ← L2 を NOT してフルファイル検索 (24,000 円)

FULL SEARCH INITIATED 11:31:32 FILE 'REGISTRY'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 719221 TO ITERATE

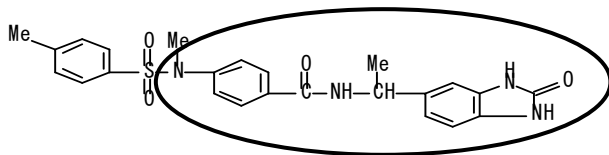
100.0% PROCESSED 719221 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.24

406 ANSWERS

L4 406 SEA SSS FUL L1 NOT L2

=> D SCAN

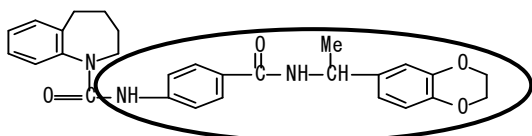
L4 406 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Benzamide, N-[1-(2,3-dihydro-2-oxo-1H-benzimidazol-5-yl)ethyl]-4-[methyl[(4-methylphenyl)sulfonyl]amino]-  
 MF C24 H24 N4 O4 S



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

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

L4 406 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN 1H-1-Benzazepine-1-carboxamide, N-[4-[[[1-(2,3-dihydro-1,4-benzodioxin-6-yl)ethyl]amino]carbonyl]phenyl]-2,3,4,5-tetrahydro-  
 MF C28 H29 N3 O4



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

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

## A 構造作図のポイント

参考：サブセット検索を利用した NOT 演算

- ある構造を含む物質を除いて構造検索する際に、除かれる物質を確認したい場合は、サブセット検索を利用する。
  - ・ 必要な構造で検索した回答セットを母集合として、除きたい構造でサブセット検索する。SCAN 表示形式などで必要なものが含まれていないか確認してから、元の集合から NOT する。
  - ・ 複数の構造質問式の L 番号を NOT 演算して構造検索を実行すると、除かれる物質を確認できない。
- 検索例 2 と同じ構造質問式で実行した例

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAIC\My documents\STN Express 8.4\...

L1        STRUCTURE UPLOADED

=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAIC\My documents\STN Express 8.4\...

L2        STRUCTURE UPLOADED

=> S L1                      ← 必要な構造でサンプル検索 (無料)

:

L3                      4 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                  ← 必要な構造でフルファイル検索 (24,000 円)

:

L4                      618 SEA SSS FUL L1

=> S L2 SUB=L4 SAM        ← 除きたい構造でサブセット検索 (サンプル検索：無料)

:

L5                      19 SEA SUB=L4 SSS SAM L2

=> S L2 SUB=L4 FUL        ← 除きたい構造でサブセット検索 (フルファイル検索：5,700 円)

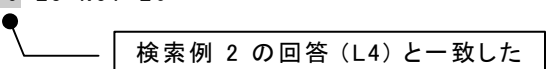
:

L6                      212 SEA SUB=L4 SSS FUL L2

=> D SCAN                      ← 除かれる物質の構造を確認する

=> S L4 NOT L6              ← 元の集合から NOT する

L7                      406 L3 NOT L6



検索例 2 の回答 (L4) と一致した

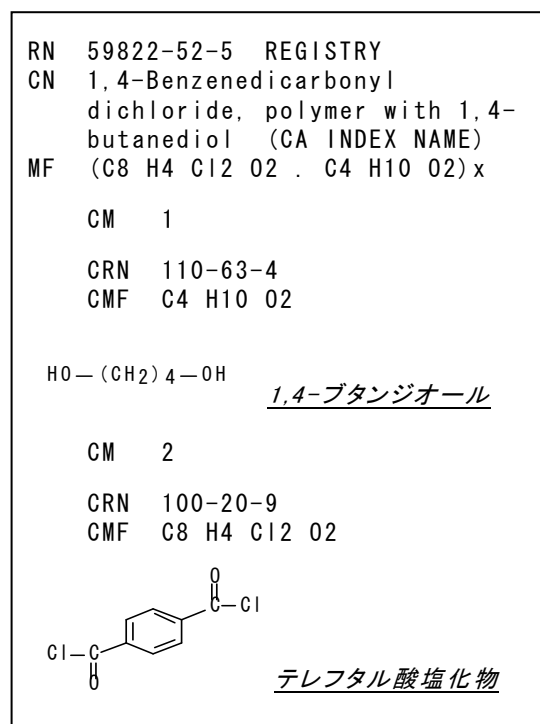
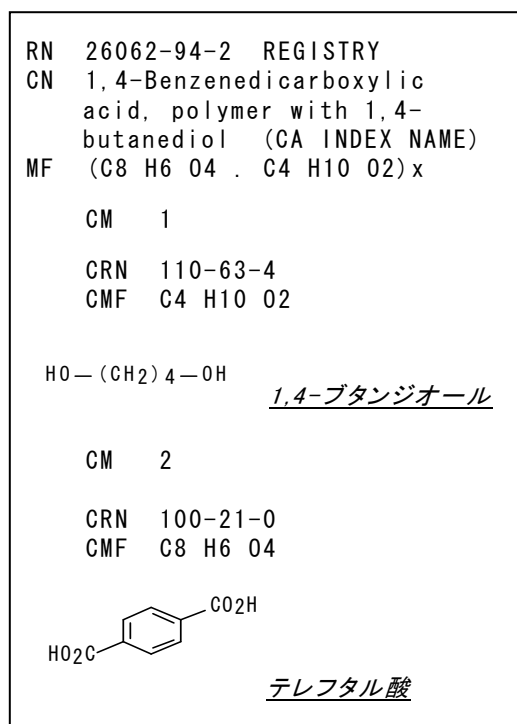
\* 構造検索結果に対するサブセット検索の料金が別途課金される。

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

■ REGISTRY ファイルに登録されている大部分のポリマーは、主鎖を構成する原料モノマーに基づいて登録されている。

- ・ 重合後のポリマーが同じでも、原料モノマーが違えば異なる CAS 登録番号が付与される。
- ・ レコード例：ポリブチレンテレフタレート



\* 一部のポリマーには、繰り返し単位 (SRU) 登録のレコードも存在する。

### ■ 構造検索のポイント

- ・ モノマー単位登録のポリマーを検索する場合は、モノマーの構造を作図する。
- ・ 各モノマーは別成分として登録されているため、別々に作図して AND 検索する。
- ・ スクリーンを利用して検索対象をポリマーに限定する。
- ・ 構造検索した後に、必要に応じて POLYLINK コマンドを実行する。

#### 参考：REGISTRY ファイルにおけるポリマーの定義

REGISTRY ファイルでは、以下の物質がポリマーとして登録されている。

- ・ 重合度が 11 以上の物質、あるいは重合度不明の物質
- ・ 重合度が 10 以下であっても、重合後の構造が不明なオリゴマー

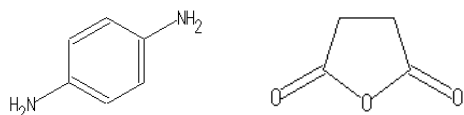
## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

#### ■ モノマー単位登録のポリマーを構造検索する際の手順

##### Step 1

モノマーの構造を別々に作図して、それぞれ構造質問式ファイルとして保存する。

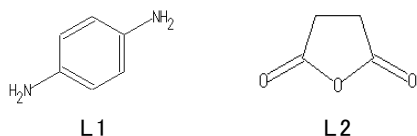


\* 重合後の構造しか分からない場合は、重合反応で変化しないと考えられる部分構造を作図する。



##### Step 2

REGISTRY ファイルに入り、すべての構造質問式ファイルをアップロードする



\* ファイルの選択画面で複数ファイルを選択すると、一括でアップロードすることができる。



##### Step 3

スクリーンコマンドでポリマーのスクリーンを作成する

=> SCR 2043  
L3      SCREEN CREATED

\* スクリーンを利用すると、構造検索の対象物質をあらかじめポリマーに限定することができる。



##### Step 4

構造質問式およびスクリーンの L 番号を AND 演算して、サンプル検索する。  
回答を確認して問題がなければ、フルファイル検索を実行する。

=> S L1 AND L2 AND L3      ... L4  
=> D SCAN  
=> S L1 AND L2 AND L3 FUL      ... L5



##### Step 5

必要に応じて POLYLINK コマンドを実行する。

=> POLYLINK L5      \* POLYLINK コマンドを実行すると、原料が異なる同一ポリマー、繰返し単位 (SRU) 登録のポリマーをまとめて検索できる。

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

■ 構造検索の際にスクリーンを利用すると、構造検索の対象物質をあらかじめ限定できる。

#### ・ スクリーン利用のメリット

- FULL FILE PROJECTIONS が INCOMPLETE になりにくくなる。
- 構造検索の回答が適合性の高いものに限定される。
- スクリーンの利用に追加の課金はかからない。  
\* ただし、スクリーンの L 番号のみで検索すると、通常の構造検索料金が課金される。

#### ・ スクリーンの利用方法

##### ① SCREEN コマンドでスクリーンセットを作成する

=> SCR [スクリーン番号]  
=> SCR [スクリーン番号] OR [スクリーン番号]    ⇨ スクリーンセットの L 番号が  
=> SCR [スクリーン番号] AND [スクリーン番号]    作成される

(注) SCREEN コマンドの中で NOT は使用できない。NOT 演算が必要な場合は各々 L 番号を作成して検索時に NOT する (② 参照)

##### ② 構造質問式の L 番号と組み合わせて検索する

=> S [構造質問式の L 番号] AND [スクリーンの L 番号]    ← そのスクリーンに限定  
=> S [構造質問式の L 番号] NOT [スクリーンの L 番号]    ← そのスクリーンを除く  
=> S [構造質問式の L 番号] AND [スクリーンの L 番号] NOT [スクリーンの L 番号]

(注) 演算子 AND と NOT の両方を使用する場合は、AND を先に指定する

#### ・ ポリマー検索に利用する主なスクリーン

番号	内容	番号	内容
2043	ポリマー一般	2127	2 成分以上
2067	ホモポリマー, コポリマー	2077	3 成分以上
2068	SRU ポリマー	2078	4 成分以上

\* その他のスクリーンは P. 66 または CAS FILES ポケットガイド参照

[www.jaici.or.jp/stn/pdf/cas\\_pocket.pdf](http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/cas_pocket.pdf)

- ・ 成分数が決まっている場合は、構造検索時にスクリーンで限定するとよい。構造検索の回答を辞書検索で限定するよりも経済的である。

=> S L1 AND L2 AND L3 AND L4 NOT L5    ← 2 成分のポリマーに限定して検索

L1, L2 : 構造質問式の L 番号                      L4 : 2 成分以上のスクリーン (2127)  
L3 : ポリマーのスクリーン (2043)                L5 : 3 成分以上のスクリーン (2077)

- エステル化剤, エーテル化剤を成分に含む後処理ポリマー, 多段階重合ポリマーなどを検索する場合は、成分数の指定に注意する。



## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

■ ポリマー分類用語を用いると、大まかなポリマーの種類で簡単に限定することができる。

・ REGISTRY ファイルのポリマーのレコードには、結合を機械的に解析して付与されたポリマー分類用語が収録されている。

・ ポリマー分類用語による検索のメリット

- ポリエーテル、ポリエステルなど、ポリマーの種類を簡単に検索できる。
- 重合反応によって生成する結合の構造も検索することができる。

・ レコード例

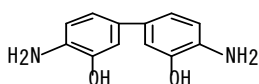
```
RN 27056-66-2 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1,3-Benzenedicarbonyl dichloride, polymer with 4,4'-diamino
   [1,1'-biphenyl]-3,3'-diol (CA INDEX NAME)
   :
MF (C12 H12 N2 O2 . C8 H4 Cl2 O2)x
CI PMS, COM
```

PCT Polyamide, Polyamide formed, Polybenzoxazole, Polybenzoxazole formed, Polyester, Polyester formed

CM 1

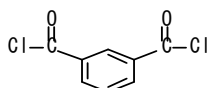
ポリマー分類用語

```
CRN 2373-98-0
CMF C12 H12 N2 O2
```



CM 2

```
CRN 99-63-8
CMF C8 H4 Cl2 O2
```



ポリマー分類用語は以下の 2 種類の結合を解析して付与されている

FORMED なしの用語 : (例 Polyamide など)  
主鎖に元から存在する結合、および重合反応によって生成する(と推定し得る)結合

FORMED つきの用語 : (例 Polyamide formed など)  
重合反応によって生成する(と推定し得る)結合

・ 入力方法

=> **S** ポリマー分類用語/PCT

\* ポリマー分類用語による検索  
984 円 (2010 年 2 月現在)

\* ポリマー分類用語のリスト : [www.jaici.or.jp/stn/pdf/pct.pdf](http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/pct.pdf)

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

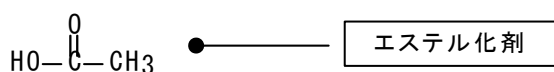
■ 後処理ポリマーは、後処理の方法によって検索方法が異なる点に注意する。

- ・ エステル化されたポリマーは、エステル化剤を含めて登録されている。

#### - レコード例

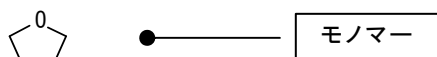
RN 414866-37-8 REGISTRY  
ED Entered STN: 13 May 2002  
CN Furan, tetrahydro-, homopolymer, monoacetate (9C1) (CA INDEX NAME)  
:  
MF (C4 H8 O)x . C2 H4 O2  
PCT Polyether, Polyether formed  
:

CM 1  
CRN 64-19-7  
CMF C2 H4 O2



CM 2  
CRN 24979-97-3  
CMF (C4 H8 O)x  
CCI PMS

CM 3  
CRN 109-99-9  
CMF C4 H8 O



4 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
4 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

#### ・ その他の後処理ポリマー

- 塩素化、アルキル化、アミド化、イミド化、ウレタン化、加水分解、スルホン化などの後処理を加えたポリマーには、原則として独自の CAS 登録番号は付与されず、後処理前のポリマーとして登録される。
- CAplus/CA ファイルで文献を調査する場合は、後処理前のポリマーの構造を検索して、/D をつけてクロスオーバーし、後処理に関するキーワードで限定する。

\* 後処理ポリマーについての詳細は、講習会テキスト「ポリマー検索法」参照

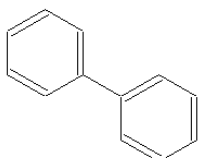
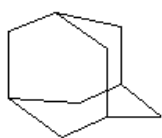
## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

#### ■ 検索例：アダマンタン骨格およびビフェニル骨格を持つポリアミドの用途を調査する

##### ポイント

- ・ アダマンタン、ビフェニルが含まれるモノマーを想定し、それぞれの骨格を作図する。



\* 環の孤立化を指定

- ・ ポリマー分類用語を利用してポリアミドに限定する。
- ・ CAplus/CA ファイルにクロスオーバー検索して、用途について述べられている文献・特許に限定する。

=> FILE REGISTRY

=>

Uploading c:\¥Documents and Settings¥JAIC|

L1       STRUCTURE UPLOADED

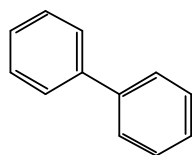
=>

Uploading c:\¥Documents and Settings¥JAIC|

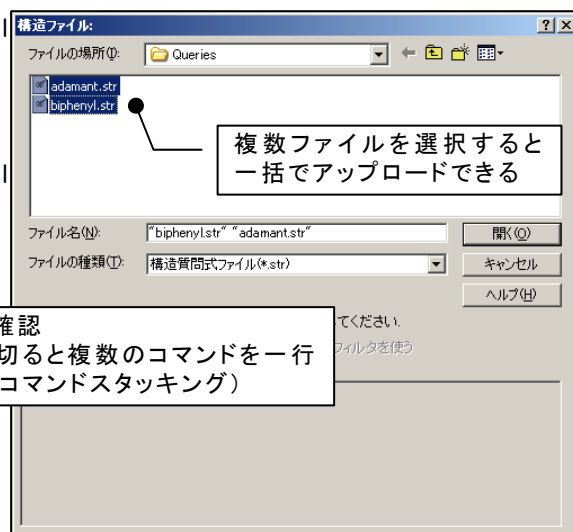
L2       STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1;D QUE L2

L1                   STR

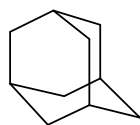


構造質問式の確認  
セミコロンで区切ると複数のコマンドを一行  
に入力できる(コマンドスタッキング)



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

L2                   STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

=> SCR 2043 ← ポリマー一般のスクリーンを作成 (無料)  
L3 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 AND L3 ← すべてのモノマーとスクリーンの L 番号を AND 演算する (サンプル検索)  
SAMPLE SEARCH INITIATED 17:56:28 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 33 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 33 ITERATIONS 10 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 316 TO 1004  
PROJECTED ANSWERS: 11 TO 389

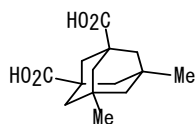
L4 10 SEA SSS SAM L1 AND L2 AND L3

=> D\_SCAN

L4 10 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN Tricyclo[3.3.1.1<sup>3,7</sup>]decane-1,3-dicarboxylic acid, 5,7-dimethyl-, polymer  
with 4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-3,3'-diol (9C1)  
MF (C14 H20 O4 . C12 H12 N2 O2)x  
CI PMS

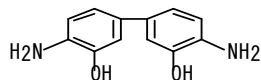
#### \*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

CM 1



POLYLINK コマンドを実行すると、原料が異なる同一ポリマーや、SRU ポリマーが得られる

CM 2



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

スクリーンの利用に追加の料金はかからない

=> S L1 AND L2 AND L3 FUL ← フルファイル検索 (24,000 円)  
FULL SEARCH INITIATED 09:25:58 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 706 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 706 ITERATIONS 134 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L5 134 SEA SSS FUL L1 AND L2 AND L3

=> POLYLINK L5 ← POLYLINK を実行して実質的に同一のポリマーを集める (3,840 円)  
L6 152 POLYLINK L5

=> S L6 AND POLYAMIDE/PCT ← ポリマー分類用語でポリアミドに限定する (984 円)  
L7 61 L6 AND POLYAMIDE/PCT

## A 構造作図のポイント

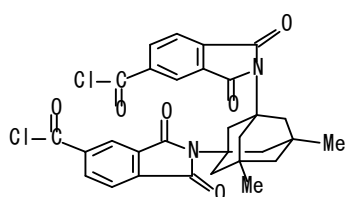
### 分野別作図のポイント - ポリマー

=> D\_SCAN

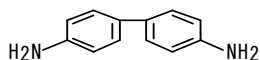
L7 61 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN 1H-Isoindole-5-carbonyl chloride, 2,2'-(5,7-dimethyltricyclo[3.3.1.1<sup>3,7</sup>]decane-1,3-diyl)bis[2,3-dihydro-1,3-dioxo-, polymer with [1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine (9CI)  
 MF (C30 H24 Cl2 N2 O6 . C12 H12 N2)x  
 CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

CM 1



CM 2

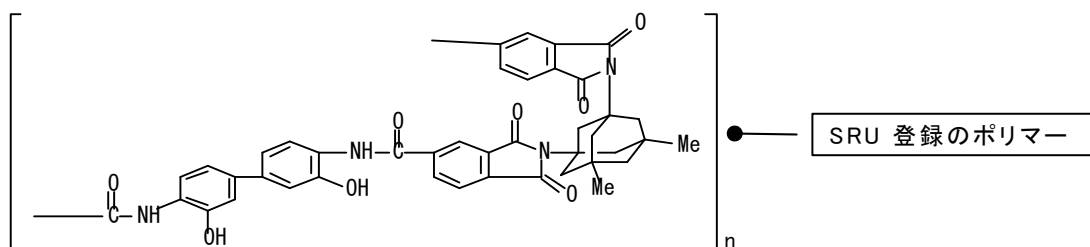


\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

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

L7 61 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Poly[(1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-5,2-diyl)(5,7-dimethyltricyclo[3.3.1.1<sup>3,7</sup>]decane-1,3-diyl)(1,3-dihydro-1,3-dioxo-2H-isoindole-2,5-diyl)carbonylimino(3,3'-dihydroxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)iminocarbonyl] (9CI)  
 MF (C42 H34 N4 O8)n  
 CI PMS

\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*



A 構造作図のポイント

分野別作図のポイント - ポリマー

=> FILE CAPLUS

=> S L7/USES ← 用途に関する文献に限定してクロスオーバー (290 円)  
 L8 12 L7/USES  
 (L7 (L) USES/RL)

=> SEL CT ← 用途を調べるために全件から統制語を抽出 (49 円 × 12 = 588 円)  
 E1 THROUGH E33 ASSIGNED

・ SELECT コマンドは、回答番号を省略すると全件が抽出対象となる  
 ・ 件数が多い場合は ANALYZE コマンドを利用する

=> D SEL ← 抽出した統制後を表示する (無料)

E1	11	CARDO POLYMERS/CT	
E2	7	POLYAMIDES, PREPARATION/CT	
E3	6	DIELECTRIC FILMS/CT	← 誘電性フィルム
E4	6	POLYBENZOXAZOLES/CT	
E5	5	POLYETHERS, PREPARATION/CT	
E6	5	POLYIMIDES, PREPARATION/CT	
E7	4	ELECTRIC INSULATORS/CT	← 絶縁体
E8	3	POLYBENZIMIDAZOLES/CT	
E9	3	POLYMERIZATION/CT	
E10	3	SEMICONDUCTOR DEVICES/CT	← 半導体
E11	2	COATING MATERIALS/CT	← コーティング材料
E12	2	FLUOROPOLYMERS, PREPARATION/CT	
E13	2	HEAT-RESISTANT MATERIALS/CT	← 耐熱性材料
E14	2	PLASTIC FILMS/CT	← プラスチックフィルム
E15	1	AMINES, USES/CT	

=> D 5 6 BIB ABS HITSTR ← 5, 6 件目の書誌情報, 抄録, ヒットした物質の構造を表示 (729 円 × 2 = 1,458 円)

L8 ANSWER 5 OF 12 CAPLUS COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 AN 2006:844432 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 145:250416  
 TI Porous polymers with good heat resistance and low dielectric constant, solvent-soluble prepolymers and their compositions for them, insulator films comprising them, and their manufacture  
 TIJP プレポリマー、プレポリマー組成物、空孔構造を有する高分子量重合体及び絶縁膜  
 [原題]  
 IN Horai, Akira; Yonezawa, Fumiko  
 PA Daicel Chemical Industries, Ltd., Japan  
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 42pp.  
 CODEN: JKXXAF  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
	-----		-----	-----	-----
PI	JP 2006219558	A	20060824	JP 2005-33089	20050209
PRAI	JP 2005-33089		20050209		

AB The prepolymers, useful for semiconductor devices, are prepared by reacting compds. A with compds. B comprising combinations of ≥2 species selected from tetrafunctional, trifunctional, and bifunctional compds., wherein (I) the both compds. have ≥2 functional groups/clusters in a mol. and (II) functional groups/clusters of A and B are bonded/polymerized to give porous polymers. Thus, 2.00 g 3,3'-dihydroxybenzidine, 2.36 g adamantanedicarbonyl chloride, and 0.036 g adamantanetetracarboxylic acid tetrachloride were polymerized in N,N-dimethylacetamide in the presence of NEt3 at ice-cold to

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

IT **905975-77-1P**, 1,3-Adamantanedicarbonyl chloride-1,3,5,7-adamantanetetracarboxylic acid tetrachloride-3,3'-dihydroxybenzidine copolymer  
 RL: DEV (Device component use); IMF (Industrial manufacture); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); **USES (Uses)** (solvent-soluble prepolymers for porous insulator films with good heat resistance and low dielec. constant)

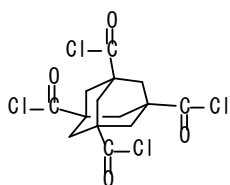
RN 905975-77-1 CAPLUS

CN Tricyclo[3.3.1.13,7]decane-1,3,5,7-tetracarboxyl tetrachloride, polymer with 4,4'-diamino[1,1'-biphenyl]-3,3'-diol and tricyclo[3.3.1.13,7]decane-1,3-dicarbonyl dichloride (9Cl) (CA INDEX NAME)

CM 1

CRN 137494-82-7

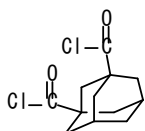
GMF C14 H12 Cl4 O4



CM 2

CRN 29713-15-3

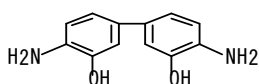
GMF C12 H14 Cl2 O2



CM 3

CRN 2373-98-0

GMF C12 H12 N2 O2



モノマーの構造

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - ポリマー

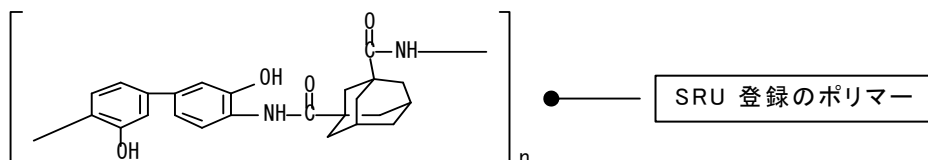
L8 ANSWER 6 OF 12 CAPLUS COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 AN 2005:429474 CAPLUS Full-text<<LOGINID::20100127>>  
 DN 142:483086  
 TI Preparation of prepolymers and copolymers having structure containing holes for electrically insulating films with good heat resistance and mechanical properties  
 TIJP 良い耐熱性と機械的性質による電氣的絶縁フィルムのための空孔を含む構造を持っているプレポリマーと共重合体の調製 [機械翻訳]  
 IN Takaragi, Akira; Funaki, Yoshinori; Hashimoto, Jiichiro  
 PA Daicel Chemical Industries, Ltd., Japan  
 SO PCT Int. Appl., 79 pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 FAN. CNT 2

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2005044899	A1	20050519	WO 2004-JP15870	20041020

AB Title prepolymers with weight average mol. weight 200-100,000 are prepared by reaction of two compds. having  $\geq 2$  functional groups. One compound has a carboxyl or an amino group as a functional group, and the other compound has two amino groups, an amino and a hydroxyl group, an amino and a mercapto group, or two carboxyl groups as functional groups. Thus, 119 mmol 3,3'-diaminobenzidine and 7.8 mmol 1,3,5,7-adamantanetetracarboxylic chloride were reacted to give a prepolymer, 3.00 g of the resulting imidazole precursor was mixed with 0.552 g 1,3,5,7-adamantanetetracarboxylic acid in 20.13 g dimethylacetamide, spin-coated onto a silicon wafer, heated at 300° for 30 min and 400° for 30 min to give a crosslinked imidazole film with d. 1.05 g/cm<sup>3</sup> and dielec. constant 2.3.

IT **851538-24-4P** **851538-25-5P** **851538-26-6P**  
**851538-27-7P** **851538-28-8P** **851727-31-6P**  
 RL: IMF (Industrial manufacture); PRP (Properties); RCT (Reactant); TEM (Technical or engineered material use); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent); **USES (Uses)**  
 (prepolymer or crosslinked; preparation of prepolymers and polymers having structure containing holes for elec. insulating films with good heat resistance and mech. properties)

RN 851727-31-6 CAPLUS  
 CN Poly[iminocarbonyltricyclo[3.3.1.1<sup>3,7</sup>]decane-1,3-diylcarbonylimino(3,3'-dihydroxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)] (9CI) (CA INDEX NAME)



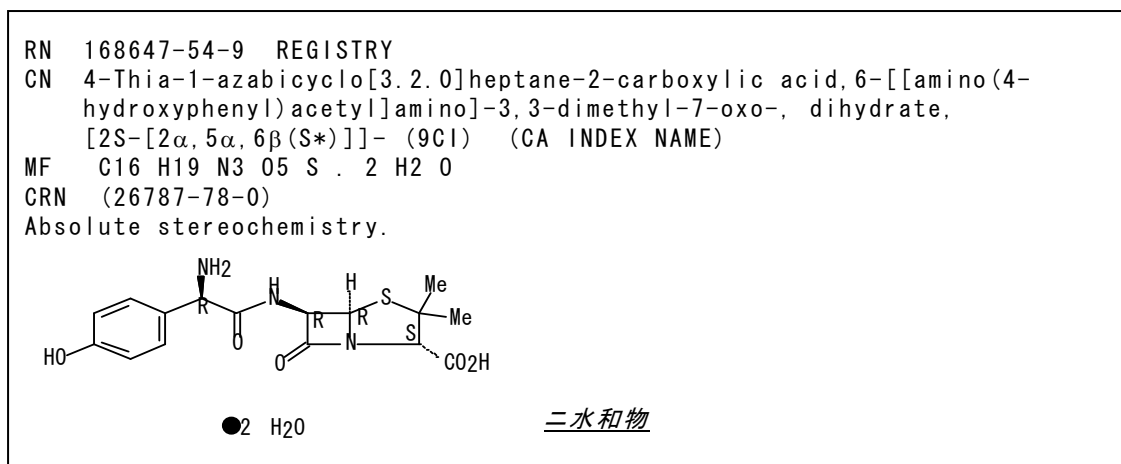
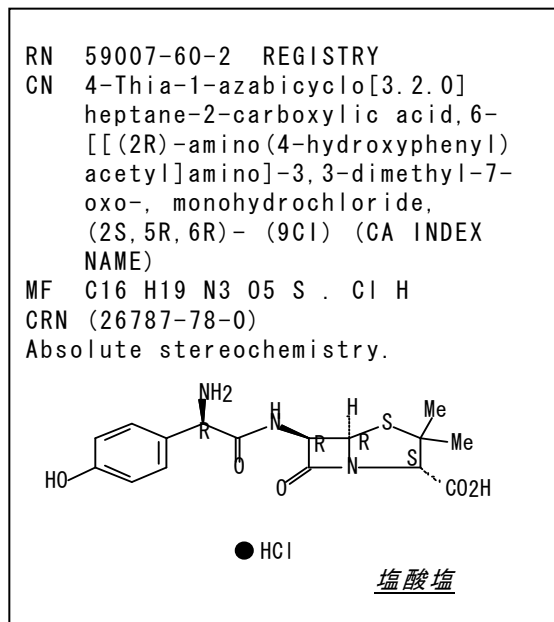
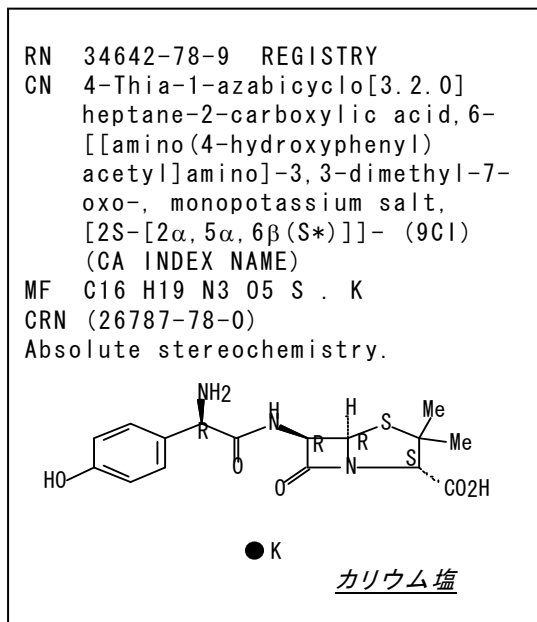
OSC.G 1 THERE ARE 1 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (2 CITINGS)  
 RE. CNT 14 THERE ARE 14 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT



## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

- REGISTRY ファイルでは, 大部分の塩や水和物, 溶媒和物は多成分物質として登録されている.



### ■ 構造検索のポイント

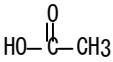
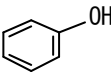
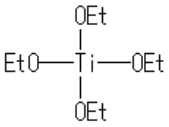
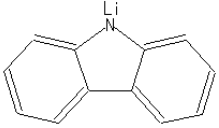
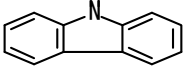
- ・ カルボン酸の塩は, 基本的に遊離の酸と金属の多成分物質として登録されているため, 酸と金属を同一画面には作図しない.
- ・ フリー体だけを作図して多成分物質を含む構造検索 (FAM, CSS, SSS) を実行すれば, 塩や溶媒和物などの多成分物質をまとめて検索できる.
- ・ 構造検索の段階で塩などに限定する場合は, 各成分を別々に作図したものをアップロードして, AND 演算して検索する.

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

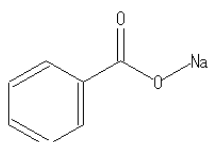
#### ■ 多成分物質として登録される塩

- ・ ヘテロ原子 (O, S, Se, Te, N, P, As) に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成した塩は, 置換前の成分と金属の多成分物質として登録される。
- ・ 例 : カルボン酸, 硝酸, 硫酸, アルコール類, フェノール類などの金属塩

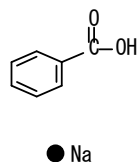
文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{CH}_3\text{COONa}$	IN Acetic acid, sodium salt (1:1) MF C2 H4 O2 . Na CI COM  ● Na <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">             実際の構造よりも              水素が一つ多い           </div>
$\text{PhONa}$	IN Phenol, sodium salt (1:1) MF C6 H6 O . Na CI COM  ● Na
	IN Ethanol, titanium(4+) salt (4:1) MF C2 H6 O . 1/4 Ti CI COM $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$ ● 1/4 Ti(IV)
	IN 9H-Carbazole, lithium salt (1:1) MF C12 H9 N . Li  ● Li

- ・ 酸と金属は別成分に分かれているため, ヘテロ原子に金属を直接結合させたり, 同一画面中に酸と金属を作図するとヒットしない。

[作図例]



[REGISTRY ファイル中の構造]



## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

- ・ アミン類の塩や第四級アンモニウム塩は通常, 多成分物質として登録される。  
(ただし, 塩化アンモニウムは単一成分として登録される)
- 第一, 二, 三級アミンの塩 : 少なくとも一つ以上の水素を持つアミン類の塩の分子式は中性の塩基と中性の酸からなる多成分物質として収録される。

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{EtNH}_3^{\oplus} \text{Cl}^{\ominus}$	IN Ethanamine, hydrochloride (1:1) MF C2 H7 N . Cl H CI COM $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ ● HCl
$\text{EtNH}_3^{\oplus} \text{CH}_3\text{COO}^{\ominus}$	IN Ethanamine, acetate (1:1) MF C2 H7 N . C2 H4 O2 CI COM CM 1 $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ CM 2 $\text{HO}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$

- 第四級アンモニウム塩 : 水素を含まない四級化したアミンの塩の分子式は, 電荷を帯びた塩基成分と酸成分からなる多成分物質として収録される。

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{Et}_4\text{N}^{\oplus} \text{Cl}^{\ominus}$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1) MF C8 H20 N . Cl CI COM $\begin{array}{c} \text{Et} \\   \\ \text{Et}-\text{N}^{\oplus}-\text{Et} \\   \\ \text{Et} \end{array}$ ● Cl-
$\text{Et}_4\text{N}^{\oplus} \text{CH}_3\text{COO}^{\ominus}$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, acetate (1:1) MF C8 H20 N . C2 H3 O2 CI COM CM 1 $-\text{O}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$ CM 2 $\begin{array}{c} \text{Et} \\   \\ \text{Et}-\text{N}^{\oplus}-\text{Et} \\   \\ \text{Et} \end{array}$

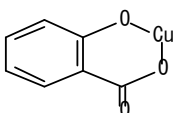
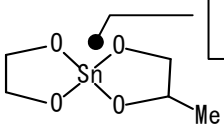
## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

#### ■ 単成分物質として登録される塩

##### ・ 環状構造をとる塩

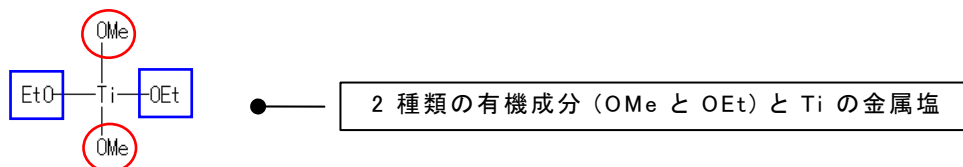
- 水素が多価金属に置換されて環を形成する.
- ヘテロ原子に金属が直接結合し, 環状構造になるのは 5 員環または 6 員環の場合である. ただし金属 Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の場合は環のサイズの制限はない.

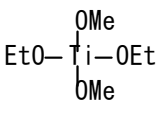
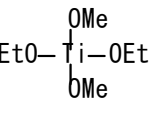
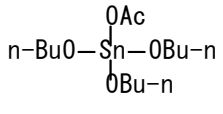
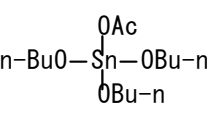
IN MF CI	Copper, [2-(hydroxy-kO)benzoato(2-)-kO]- C7 H4 Cu O3 COM		分子式は金属を含めたすべての原子で Hill 方式にしたがって組み立てる
IN MF	1,4,6,9-Tetraoxa-5-stannaspiro[4.4]nonane, 2-methyl- C5 H10 O4 Sn		環ノード, 環結合となるため, 構造作図の際には属性の指定に注意する

##### ・ 2 種類以上の有機成分を含む化合物と可変原子価金属との塩

- 2 種類以上の有機成分と金属の塩の場合は, 金属と有機成分のヘテロ原子が結合し, 単成分で登録される.

例 :

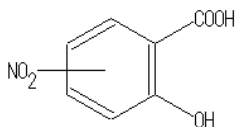


文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
	IN Titanium, diethoxydimethoxy-, (T-4)- (9CI) MF C6 H16 O4 Ti 
	IN Stannane, (acetyloxy)tributoxy- (9CI) MF C14 H30 O5 Sn 

## A 構造作図のポイント

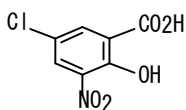
### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

- 検索例 : 下記のニトロサリチル酸誘導体について, 金属塩と水和物を検索する.

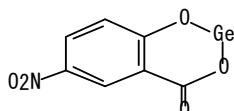


#### ポイント

- ・ 塩と水和物をまとめて検索するため, 金属や水は作図しない.
- ・ 塩は単成分登録と多成分登録の両方が想定されるため, どちらもヒットするよう作図する.



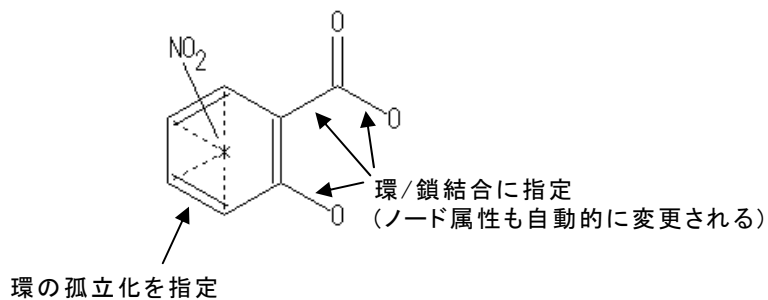
● Na



- 環状の塩を形成する部分は, ノードおよび結合の属性を「環/鎖」に指定する.

- ・ ベンゼン環に環の孤立化を指定するとベンゼン環への縮環は禁止されるが, カルボン酸と隣接する水酸基部分の結合の属性を環/鎖に指定することによって, 環状の塩をヒットさせることができる.

[作図例]



## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

=> FILE REGISTRY

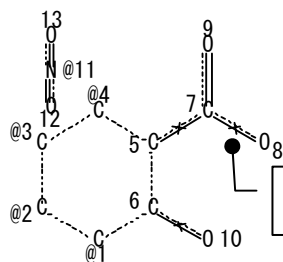
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My

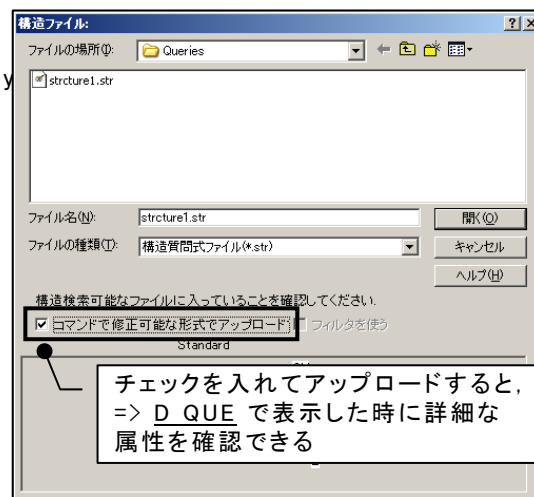
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



x 印のついた結合の属性は「環/鎖」



チェックを入れてアップロードすると、=> D QUE で表示した時に詳細な属性を確認できる

VPA 11-1/2/3/4 S

NODE ATTRIBUTES:

NSPEC	IS R	AT	1
NSPEC	IS R	AT	2
NSPEC	IS R	AT	3
NSPEC	IS R	AT	4
NSPEC	IS RC	AT	5
NSPEC	IS RC	AT	6
NSPEC	IS RC	AT	7
NSPEC	IS RC	AT	8
NSPEC	IS C	AT	9
NSPEC	IS RC	AT	10
NSPEC	IS C	AT	11
NSPEC	IS C	AT	12
NSPEC	IS C	AT	13
DEFAULT MLEVEL IS ATOM			
MLEVEL	IS CLASS	AT	7 8 9 10 11 12 13
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED			

ノード属性は「環/鎖」(Ring/Chain)

GRAPH ATTRIBUTES:

RSPEC I ← 環は孤立 (Isolated)  
NUMBER OF NODES IS 13

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L1 ← サンプル検索を実行 (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 178821 TO 190339  
PROJECTED ANSWERS: 2631 TO 4197

L2 37 SEA SSS SAM L1

## A 構造作図のポイント

分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

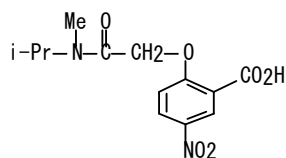
=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行 (24,000 円)  
 FULL SEARCH INITIATED 14:15:04 FILE 'REGISTRY'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 185168 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 185168 ITERATIONS 3265 ANSWERS  
 SEARCH TIME: 00.00.02

L3 3265 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3 3265 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Benzoic acid, 2-[2-[methyl(1-methylethyl)amino]-2-oxoethoxy]-5-nitro-  
 MF C13 H16 N2 O6



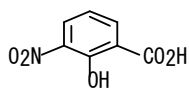
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

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

=> S L3 AND M/ELS ← 金属を含む物質に限定する (690 円)  
 L4 381 L3 AND M/ELS

=> D SCAN

L4 381 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Benzoic acid, 2-hydroxy-3-nitro-, sodium salt (1:1)  
 MF **C7 H5 N O5 . Na**



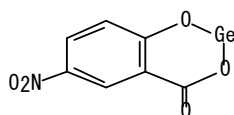
●Na

● — 多成分登録の塩

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

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

L4 381 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN 4H-1,3,2-Benzodioxagermin-2-ylidene, 6-nitro-4-oxo- (9Cl)  
 MF **C7 H3 Ge N O5**

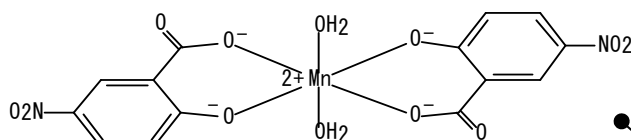


● — 単成分登録の塩

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 塩, 水和物, 溶媒和物

L4 381 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Manganate(2-), diaquabis[2-hydroxy-5-nitrobenzoato(2-)-01,02]- (9CI)  
 MF **C14 H10 Mn N2 O12**  
 CI CCS, COM

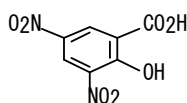


この検索では配位化合物もヒットする

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

=> S L3 AND H2O ← 成分分子式で水を含む物質に限定する (690 円)  
 L5 71 L3 AND H2O

L5 71 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Benzoic acid, 2-hydroxy-3,5-dinitro-, hydrate (1:1)  
 MF **C7 H4 N2 O7 . H2 O**



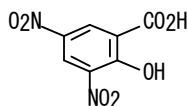
一水和物の回答

● H2O

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

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

L5 71 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Benzoic acid, 2-hydroxy-3,5-dinitro-, neodymium(3+) salt, hydrate (3:2:14)  
 MF **C7 H4 N2 O7 . 14/3 H2 O . 2/3 Nd**



金属塩の水和物  
 (第1成分の係数を1とするため, 第2成分以降の係数が分数になることもある)

● 2/3 Nd(III)

● 14/3 H2O

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

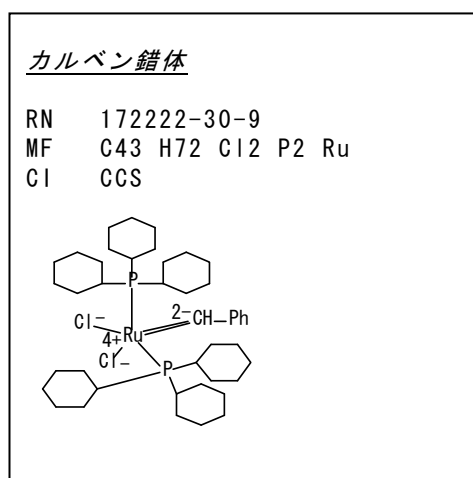
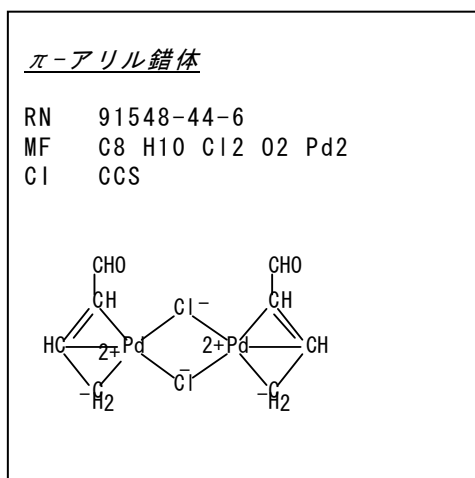
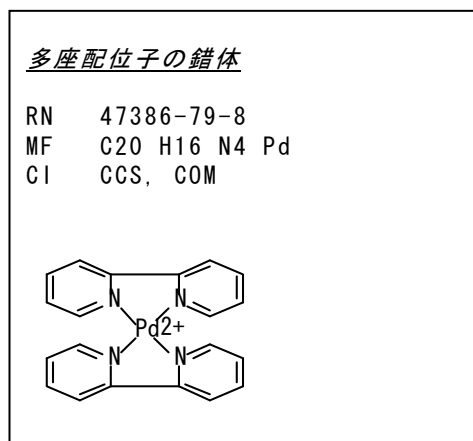
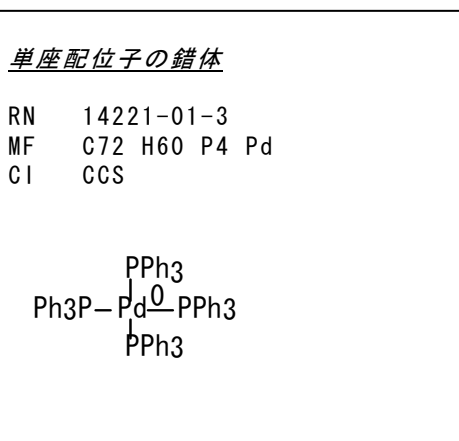


## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 配位化合物

- REGISTRY ファイルの配位化合物は、中心金属と配位子が結合で結ばれた単成分の構造で登録されている。(配位化合物を含む多成分物質も存在する)

#### ・ 配位化合物のレコード例



#### ■ 構造検索のポイント

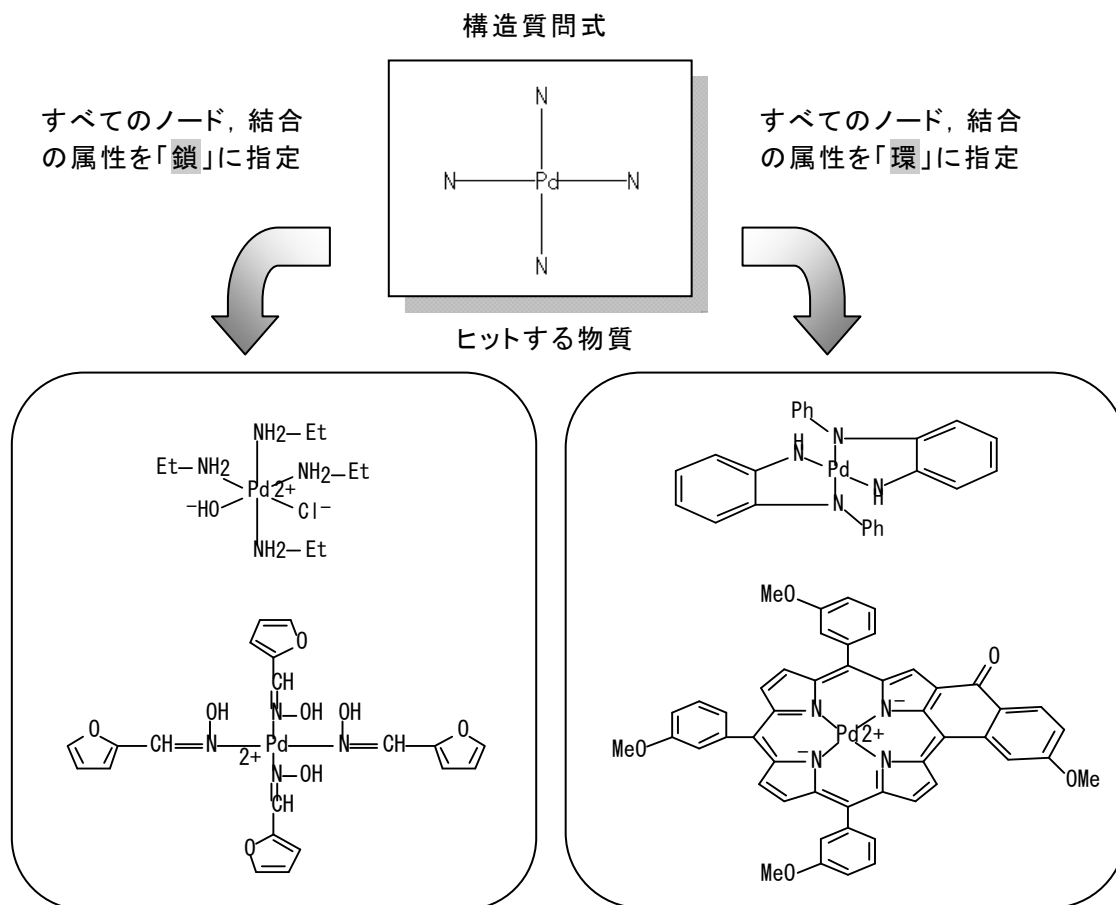
- ・ 中心金属と配位子は同一成分中に存在するため、同じ構造作図画面に作図する。
- ・ 中心金属のノード属性、および配位子と配位結合の結合属性(環/鎖)に注意する。
- ・ 配位子結合の様式が不明な場合や、位置を特定しない場合は、結合を作図しない。

## A 構造作図のポイント

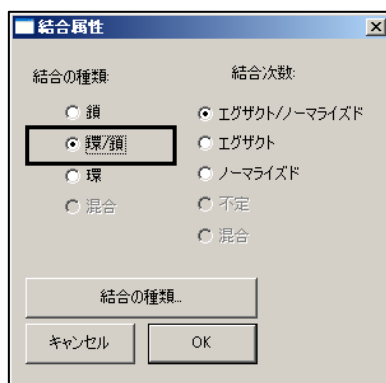
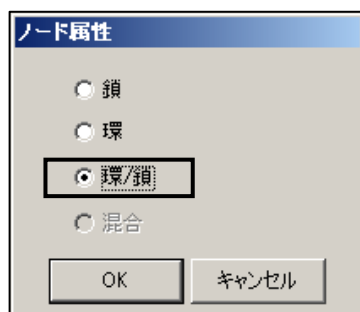
### 分野別作図のポイント - 配位化合物

■ 配位化合物を構造検索する場合は、ノードおよび結合の属性に注意して作図する。

- ・ ノードの属性、結合の属性の指定によって、得られる回答が異なる。



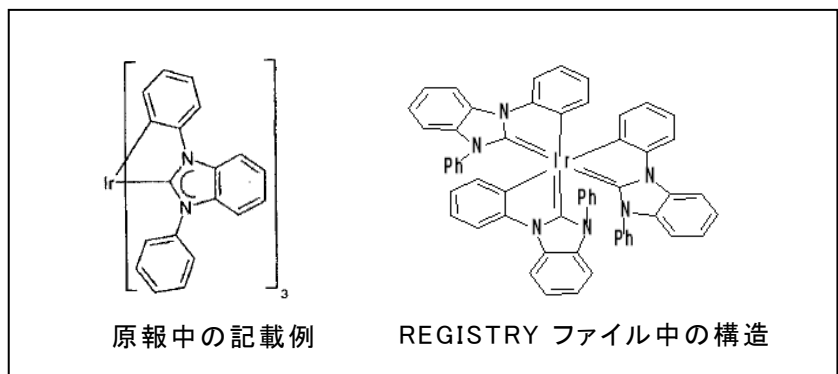
- ・ デフォルトの設定では、鎖状構造を作図すると鎖ノード/鎖結合、環状構造を作図すると環ノード/環結合に自動指定されるため、必要に応じて変更する。
- ・ 網羅的に検索する場合は、ノードおよび結合の属性を「環/鎖」に指定する。



## A 構造作図のポイント

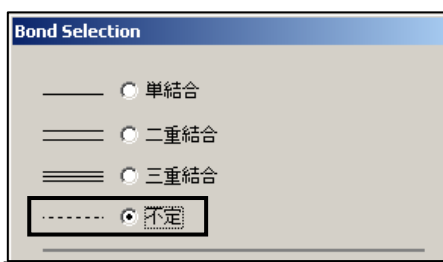
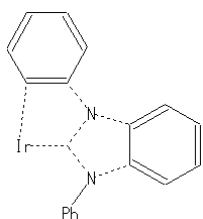
### 分野別作図のポイント - 配位化合物

- 共役系配位子などのように結合次数が不確定な場合は、不定結合で作図する。
  - ・ REGISTRY ファイルでは、共役系は電子が局在化した構造で登録されている。



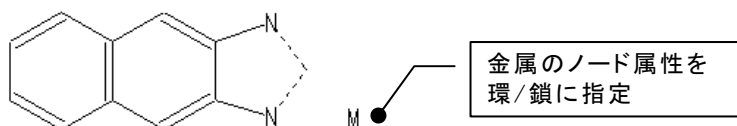
- ・ 登録されている構造に合った結合次数で作図すればヒットするが、どこが二重結合になっているかは分からない場合は、不定結合を利用して作図する。

- 作図例

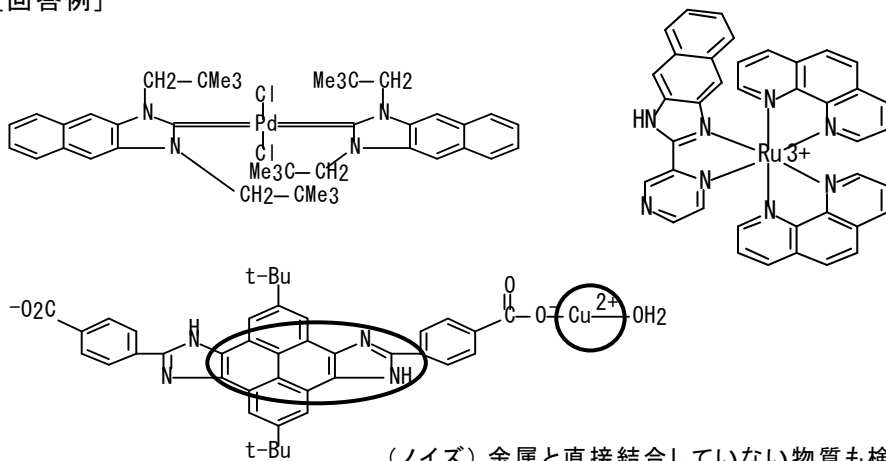


- 結合位置が不明な場合や特に指定しない場合は、中心金属と配位子を離して作図する。

[作図例]



[回答例]

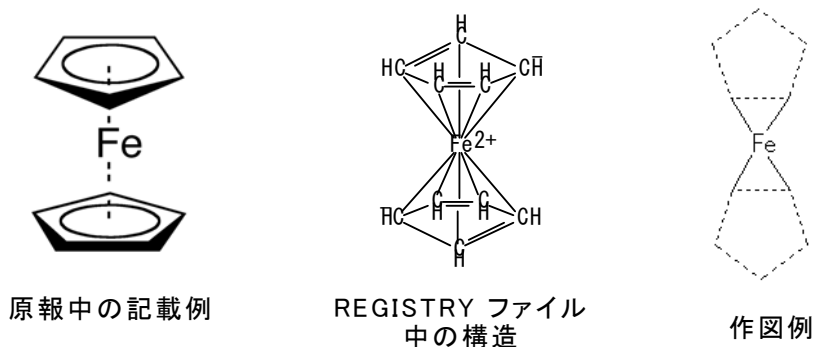


## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 配位化合物

#### ■ 特殊な配位子をもつ配位化合物の作図

- ・  $\pi$ -アリル錯体, メタロセンの作図
  - REGISTRY ファイルでは,  $\pi$ -アリル錯体やメタロセンは, 中心金属と各々の炭素原子が結合した構造で登録されている.
  - 金属と配位子間の結合は環結合で作図する.

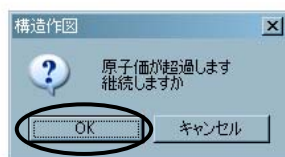
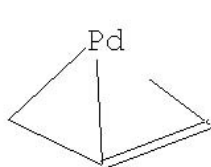


- ・ 電荷のある配位子の作図
  - 電荷は作図する必要はない. 電荷を作図せずに構造検索すると, 電荷のないものとあるものの両方が検索される.

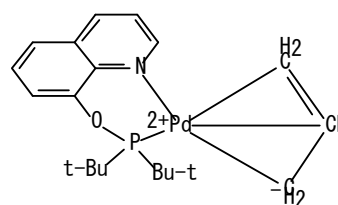
#### ■ 標準でない原子価の構造の作図

- ・ 標準でない原子価で作図しようとすると, エラーメッセージが表示されるが, 検索対象物質に応じた適切な構造であれば, 「OK」ボタンをクリックしてそのまま作図してよい.

[作図例]



[回答例]



## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 配位化合物

■ 配位化合物に限定して構造検索する場合は、スクリーンを利用する.

- ・ 単純な構造の配位子のみを作図した場合や、対称性の高い構造を作図した場合は、フルファイル検索の予想が INCOMPLETE になりやすいため、配位化合物のスクリーン (2049) で検索対象を限定する.
- ・ 配位化合物を成分に含む多成分物質は、配位化合物のクラス識別子 (CCS/CI) でヒットさせることができないが、スクリーンではヒットする.

- 配位化合物を成分に含む多成分物質の例

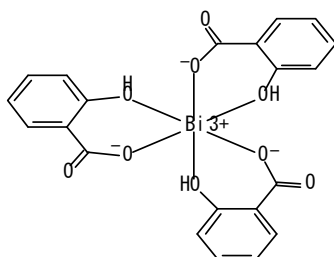
RN 850754-38-0 REGISTRY  
ED Entered STN: 19 May 2005  
CN Bismuth, tris[2-(hydroxy-κO)benzoato-κO]-, compd. with  
2-hydroxybenzoic acid monosodium salt (1:4) (9CI) (CA INDEX NAME)  
MF C21 H15 Bi O9 . 4 C7 H6 O3 . 4 Na  
SR CA  
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT

CM 1

CRN 19034-57-2  
CMF C21 H15 Bi O9

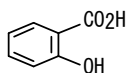
CCI CCS

成分 1 は配位化合物だが、この多成分物質のレコードを => S\_CCS/CI でヒットさせることはできない。ただし、スクリーン 2049 を利用した構造検索ではヒットさせることができる



CM 2

CRN 54-21-7 (69-72-7)  
CMF C7 H6 O3 . Na



● Na

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

## A 構造作図のポイント

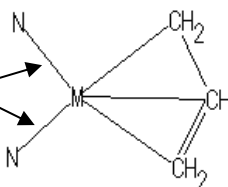
### 分野別作図のポイント - 配位化合物

- 検索例 : ジアミン配位子をもつ  $\pi$ -アリル錯体を検索する. 回答が多ければ, パラジウムを含む物質に限定する.

#### ポイント

- ・ ジアミン配位子は二座配位となり金属を含む環状構造をとるため, 結合の属性を「環」に変更する.
- ・ 負電荷は作図しなくてよい.

配位結合の属性を「環」に変更する  
(デフォルトは「鎖」)



=> FILE REGISTRY

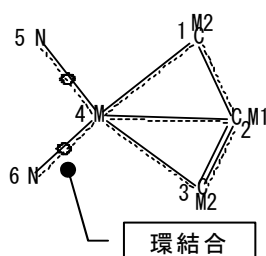
=>

Uploading C:\¥Documents and Settings¥JAICI¥My documents¥STN Express 8.4¥...

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D.QUE

L1 STR



NODE ATTRIBUTES:

HCOUNT	IS	M2	AT	1
HCOUNT	IS	M1	AT	2
HCOUNT	IS	M2	AT	3
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
DEFAULT	MLEVEL	IS	ATOM	
DEFAULT	ECLEVEL	IS	LIMITED	

} 窒素原子 (ノード 5, 6) の属性も環 (Ring) に変更されている

## A 構造作図のポイント

### 分野別作図のポイント - 配位化合物

=> S L1 ← サンプル検索 (無料)  
SAMPLE SEARCH INITIATED 13:57:02 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 26404 TO ITERATE

7.6% PROCESSED 2000 ITERATIONS 5 ANSWERS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 518354 TO 537806  
PROJECTED ANSWERS: 833 TO 1807

L2 5 SEA SSS SAM L1

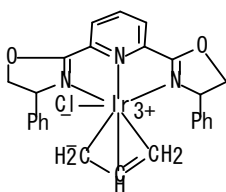
=> S L1 FULL ← フルファイル検索 (24,000 円)  
FULL SEARCH INITIATED 13:57:18 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 524374 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 524374 ITERATIONS 1271 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.03

L3 1271 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3 1271 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN Iridium(1+), [2,6-bis[(4R)-4,5-dihydro-4-phenyl-2-oxazolyl]-  
κN3]pyridine-κN]chloro(η3-2-propen-1-yl)-  
MF C26 H24 Cl Ir N3 O2  
CI CCS, COM



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

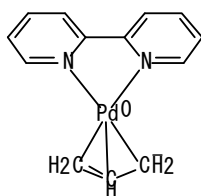
A 構造作図のポイント

分野別作図のポイント - 配位化合物

=> S L3 AND PD/ELS ← パラジウムを含む物質に限定 (690 円)  
L4 656 L3 AND PD/ELS

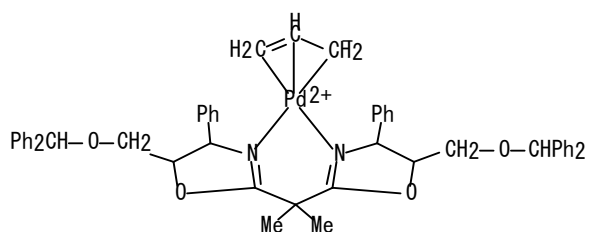
=> D SCAN

L4 656 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN Palladate(1-), (2,2'-bipyridine-κN1,κN1')(η3-2-propenyl)-  
MF **C13 H13 N2 Pd**  
CI CCS, COM



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

L4 656 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN Palladium(1+), [(4R,4'R,5S,5'S)-2,2'-(1-methylethylidene)bis[5-[(diphenylmethoxy)methyl]-4,5-dihydro-4-phenyloxazole-κN3]](η3-2-propenyl)- (9CI)  
MF **C52 H51 N2 O4 Pd**  
CI CCS, COM



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



## *B* 立体化学構造検索

特定の立体異性体に限定して検索する場合は、立体化学構造検索を利用します。この章では、REGISTRY ファイルでの立体化学構造検索についてご紹介します。



## B 立体化学構造検索

### REGISTRY ファイルの立体化学情報

■ REGISTRY ファイルには、立体化学情報が収録されているレコードがある。

- ・ おもな立体化学情報の種類

内容	名称や構造中に表示される立体化学情報
絶対立体配置	R, S
相対立体配置	CIS, TRANS, ENDO, EXO, SYN, ANTI, E, Z, $\alpha$ , $\beta$ , R(S)-rel
旋光性	(+), (-), (+-)
標準化された立体母核	ANDROST, CHOLEST, PREGN, YOHIMBAN など
アミノ酸および炭水化物	D, L, DL, ERYTHRO, THREO など
立体化学を含む慣用名	ERYTHROMYCIN など
配位化合物	T-4, OC-6, SP-4 など

\* 立体化学情報をもつが、その情報が構造検索できない物質もある。

- ・ 立体化学情報が異なる物質、立体化学情報のない物質にはそれぞれ異なる CAS 登録番号が付与される。

- 例 : アラニン

- ・ L-アラニン : 56-51-7
- ・ D-アラニン : 338-69-2
- ・ DL-アラニン : 302-72-7

- CAplus/CA ファイルでは、原資料の記載にもとづき、必要な索引に応じた CAS 登録番号のみが収録される。

■ 立体化学情報のないレコードには下記のようなものがある。

- ・ 立体化学が不明な物質
- ・ 原資料中に立体化学に関する記述がない物質（天然由来の物質は推定する場合がある）
- ・ 不斉中心が一つしかないラセミ体

## B 立体化学構造検索

### 立体化学情報を含むレコード例

- 立体化学情報は CA 索引名 (IN) フィールドと構造図中に表示される。

- ・ 構造図中に立体化学の表示される物質は、立体化学情報の構造検索が可能で、ファイルセグメント (FS) フィールドに STEREOSEARCH と表示される。

- 絶対立体配置のレコード例

```

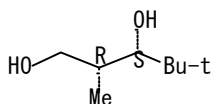
RN 245122-25-2 REGISTRY
ED Entered STN: 26 Oct 1999
CN 1,3-Pentanediol, 2,4,4-trimethyl-, (2R,3S)- (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C8 H18 O2
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER
  
```

立体化学情報は CA 索引名の最後に記述される

立体化学構造検索が可能な物質を示すファイルセグメント

Absolute stereochemistry.

絶対立体配置



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

```

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
  
```

- 相対立体配置のレコード例

```

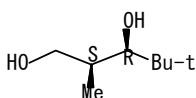
RN 121054-25-9 REGISTRY
ED Entered STN: 09 Jun 1989
CN 1,3-Pentanediol, 2,4,4-trimethyl-, (2R,3S)-rel- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN 1,3-Pentanediol, 2,4,4-trimethyl-, (R*,S*)-
FS STEREOSEARCH
DR 103668-46-8
MF C8 H18 O2
SR CA
LC STN Files: BEILSTEIN*, CA, CAPLUS, CASREACT
(*File contains numerically searchable property data)
  
```

相対立体配置の場合は rel- が付記される

旧命名法では \* (アスタリスク記号) が付記されていた

Relative stereochemistry.

相対立体配置



\*\*PROPERTY DATA AVAIL

```

4 REF
4 REF
  
```

Absolute stereochemistry (絶対立体配置) のレコード

不斉中心を構成する置換基や原子の空間的配置が明確になっている物質

Relative stereochemistry (相対立体配置) のレコード

複数の不斉中心がある場合に、それぞれの絶対立体配置の相対的關係のみが分かっている物質。(2R, 3S)-rel と表示されている物質は、絶対立体配置が (2R, 3S) または (2S, 3R) の両方の可能性がある。

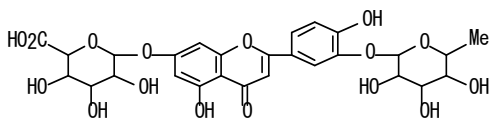
## B 立体化学構造検索

### 立体化学情報を含むレコード例

#### ■ 立体化学情報を持つが、その情報が構造検索できない物質

- ・ 名称のみに立体化学情報が記述されている場合

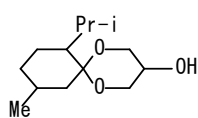
RN 65627-87-4 REGISTRY  
CN  $\beta$ -D-Glucopyranosiduronic acid,  
2-[3-[(6-deoxy- $\alpha$ -L-mannopyranosyl)oxy]-4-hydroxyphenyl]-5-hydroxy-4-oxo-4H-1-benzopyran-7-yl (9CI) (CA INDEX NAME)



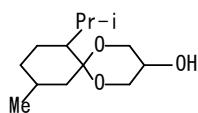
このように登録されているのは大部分が古いレコードで、現在は基本的に構造中にも立体化学情報が含まれる

- ・ 立体化学情報が不完全である場合

RN 138604-09-8 REGISTRY  
CN 1,5-Dioxaspiro[5.5]undecan-3-ol, 10-methyl-7-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CA INDEX NAME)



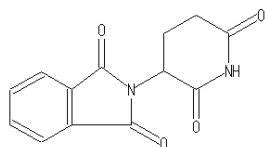
RN 138602-89-8 REGISTRY  
CN 1,5-Dioxaspiro[5.5]undecan-3-ol, 10-methyl-7-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CA INDEX NAME)



R, S などの立体配置は不明であるが、それぞれ立体配置が異なる単一の立体異性体であることが原文献に記載されていたために、個別の CAS 登録番号が付与された物質

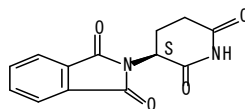
このように索引される例：  
文献中でラセミ体を光学分割しているが、それぞれの立体配置までは決定されていない場合

平面構造式を作図して構造検索すると、構造中に立体化学情報を含むレコードと、含まないレコードの両方が検索される。

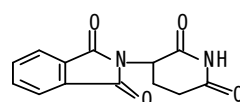


構造質問式

RN 841-67-8  
Absolute stereochemistry. Rotation (-).



RN 50-35-1



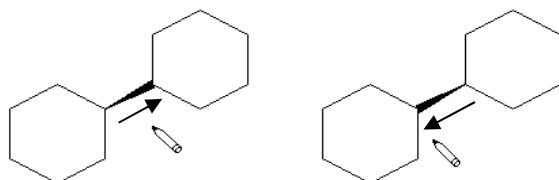
## B 立体化学構造検索

### 立体化学情報を含む構造質問式の作図

- ある特定の立体異性体に限定して調査する場合は、立体化学構造検索を行う。
- 立体化学情報を含む構造質問式の作図には、立体結合を利用する。

結合の種類を選択して、既存の結合を上書きするか、新しく結合を作図する

- ・ 立体結合の向きを指定する場合は、ペンシルツールでドラッグして作図する。

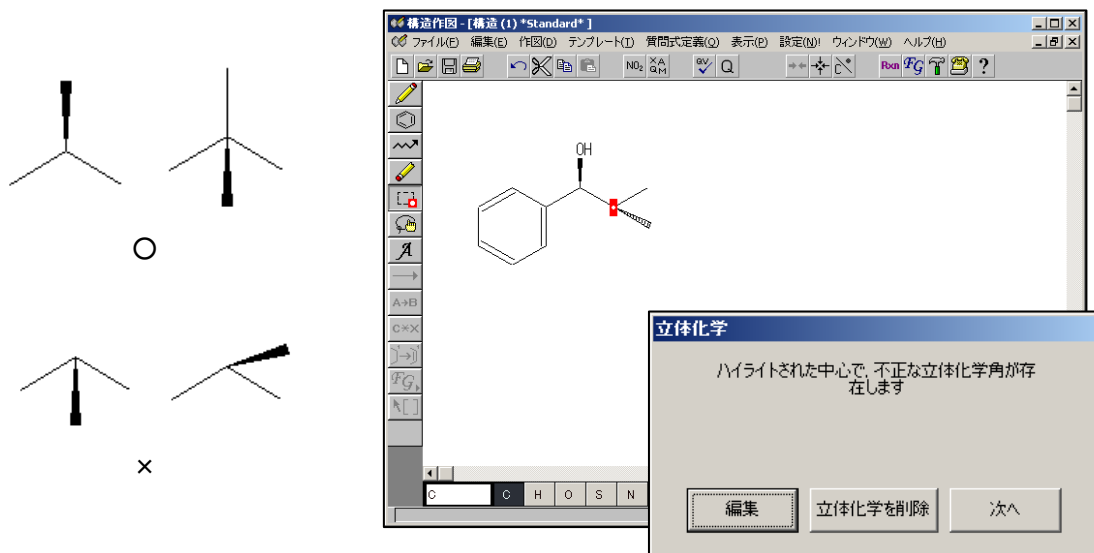


## B 立体化学構造検索



### 立体結合を作図する時の注意点

#### ■ 結合の角度











- 2本の平面結合または環骨格で平面を定義して、1本または2本の立体結合を正四面体構造になるよう作図する。結合の角度が正しくない場合は STN Express が立体構造を認識できず、質問式のチェックでエラーが表示される。



#### ■ 結合の種類

- 不定立体結合 (  ) は、立体化学のみが不定の意味で、結合次数は単結合である。したがって検索上は単結合 (  ) と同じになる。

The screenshot shows the 'Bond Selection' dialog box. It lists various bond types with radio buttons for selection. The options are:

- Single bond (  )  単結合
- Double bond (  )  二重結合
- Triple bond (  )  三重結合
- Indefinite bond (  )  不定
- Indefinite stereochemical bond (  )  結合次数、立体化学ともに不定
- Wedge bond (  )  面の上への結合
- Dash bond (  )  面の下への結合
- Wedge double bond (  )  面の上への二重結合
- Dash double bond (  )  面の下への二重結合
- Wavy stereochemical bond (  )  立体化学のみ不定で結合次数は単結合

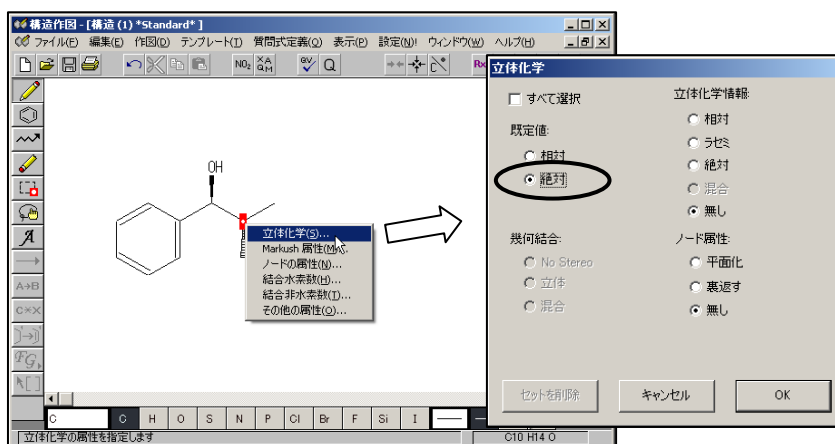
Buttons at the bottom: キャンセル (Cancel), 複数回使用 (Use multiple times), 1回使用 (Use once).

## B 立体化学構造検索

### 絶対立体配置と相対立体配置の指定

- デフォルトの設定（立体化学の既定値 - 相対）で検索すると、絶対立体配置のレコードと相対立体配置のレコードの両方が検索される。

- ・ 絶対立体配置が一致する回答のみに限定する場合は、立体化学の既定値を「絶対」に変更する。



\* 既定値は構造質問式全体に影響するため、いずれか一つのノードに指定すればよい。

- 構造質問式, 既定値の設定とヒットする回答 (○ : ヒットする / × : ヒットしない)

構造質問式		REGISTRY ファイル中のレコード		
構造図	既定値	 Absolute stereochemistry	 Relative stereochemistry	
	絶対	○	×	×
	相対	○	○	
	絶対	×	×	×
	相対	○	○	
	絶対	×	×	×
	相対	×	×	
	-	○	○	○



## B 立体化学構造検索

### 立体化学構造検索の流れ

- 立体化学構造検索は、以下の流れで行う。

#### Step 1

立体化学情報を含む構造質問式，平面の構造質問式の両方を作図しておく



#### Step 2

平面の構造質問式でサンプル検索，フルファイル検索する



#### Step 3

Step 2 の回答を母集合として，立体化学情報を含む構造質問式でサブセット検索\*する  
\* 構造検索のみの回答に対するサブセット検索は，割引料金となる (5,700 円)



#### Step 4

=> S L# NOT STEREOSEARCH/FS で Step 2 の回答を立体構造検索できない物質に限定して，SCAN 表示形式で内容を確認する



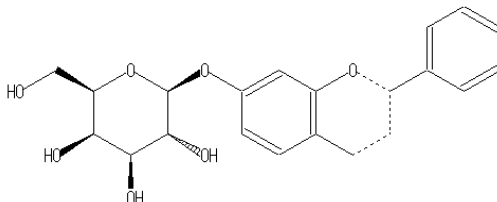
#### Step 5

Step 4 の回答中に必要な立体の物質が含まれていれば，部分名称などから検索して Step 3 の回答と OR 演算する

## B 立体化学構造検索

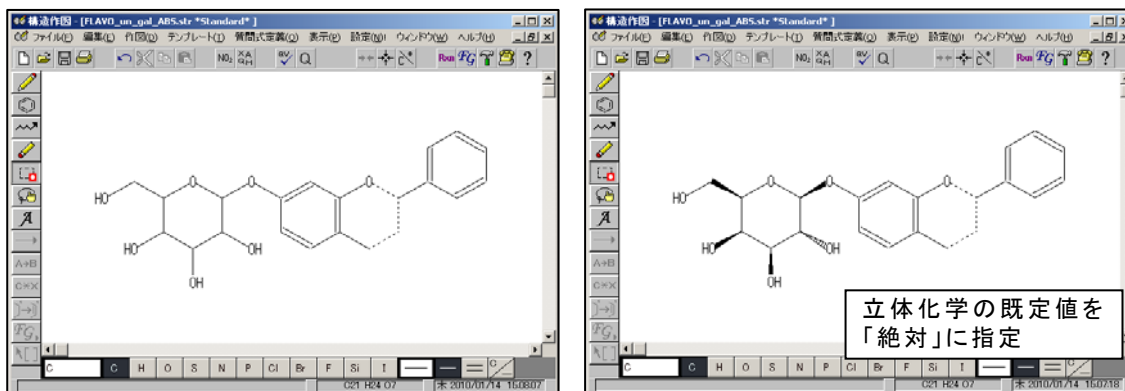
検索例：フラボノイド配糖体の生物学的研究に関する調査

- 検索例：下記の構造のフラボノイド配糖体 ( $\beta$ -D-ガラクトース誘導体) について、生理活性などの生物学的研究に関する文献を調査する。



### ポイント

- ・ 平面構造，立体構造の両方の構造質問式を作図しておく。



- ・ 平面構造で検索した回答を母集合として、立体構造でサブセット検索を行う。
- ・ 立体化学情報を構造検索できないレコードも確認する。

=> FILE REGISTRY

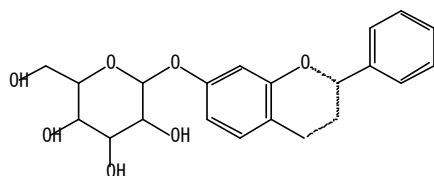
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\...

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



● 平面構造の構造質問式をアップロード

Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

## B 立体化学構造検索

検索例：フラボノイド配糖体の生物学的研究に関する調査

=> S L1 ← サンプル検索 (無料)  
SAMPLE SEARCH INITIATED 16:50:40 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 611 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 611 ITERATIONS 50 ANSWERS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 10737 TO 13703  
PROJECTED ANSWERS: 948 TO 1972

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← フルファイル検索 (24,000 円)  
FULL SEARCH INITIATED 16:51:04 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 12234 TO ITERATE

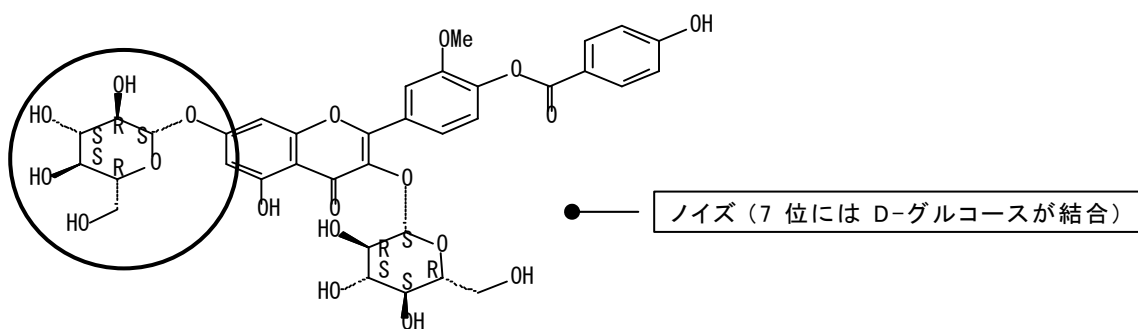
100.0% PROCESSED 12234 ITERATIONS 1487 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L3 1487 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN ← 回答を確認 (無料)

L3 1487 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN Benzoic acid, 4-hydroxy-, 4-[3,7-bis(β-D-glucopyranosyloxy)-5-hydroxy-  
4-oxo-4H-1-benzopyran-2-yl]-2-methoxyphenyl ester  
MF C35 H36 O19

Absolute stereochemistry.



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

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

## B 立体化学構造検索

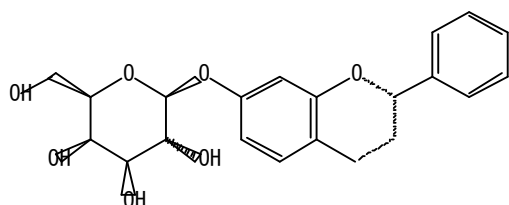
検索例：フラボノイド配糖体の生物学的研究に関する調査

=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\Queries...

=> D\_QUE

L4 STR



立体構造の構造質問式  
をアップロード

Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L4 SUB=L3 SAM ← 平面構造でのフルファイル検索の回答を母集合としたサブセット検索  
(サンプル検索; 無料)

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):	ONLINE	**COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):	948 TO	1972
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):	6 TO	266

L5 6 SEA SUB=L3 SSS SAM L4

=> S L4 SUB=L3 FUL ← フルファイル検索を実行 (5,700 円)

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 17:28:02 FILE 'REGISTRY'  
FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 1487 TO ITERATE

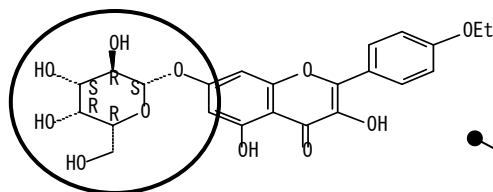
100.0% PROCESSED 1487 ITERATIONS 100 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L6 100 SEA SUB=L3 SSS FUL L4

=> D\_SCAN

L6 100 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN 4H-1-Benzopyran-4-one, 2-(4-ethoxyphenyl)-7-(β-D-galactopyranosyloxy)-  
3,5-dihydroxy-  
MF G23 H24 O11

Absolute stereochemistry.



目的の立体化学の回答  
(7 位に D-ガラクトースが結合)

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

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

## B 立体化学構造検索

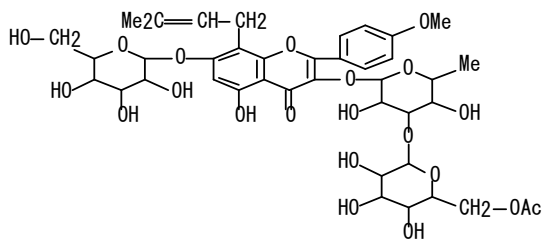
検索例：フラボノイド配糖体の生物学的研究に関する調査

=> S L3 NOT STEREOSEARCH/FS ← 平面構造での検索結果から立体構造検索可能なレコードを除く  
L7 152 L3 NOT STEREOSEARCH/FS

=> S L7 AND GALACTO ← 部分名称検索でガラクトースが含まれている物質に限定 (690 円)  
L8 17 L7 AND GALACTO

=> D SCAN

L8 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN 4H-1-Benzopyran-4-one, 3-[[3-O-(6-O-acetyl-β-D-galactopyranosyl)-6-deoxy-α-L-mannopyranosyl]oxy]-7-(β-D-glucopyranosyloxy)-5-hydroxy-2-(4-methoxyphenyl)-8-(3-methyl-2-butenyl)- (9CI)  
MF C41 H52 O21



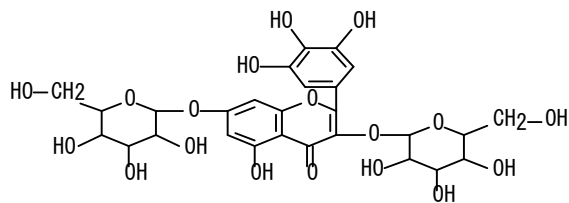
ノイズ (ガラクトースは 3 位に結合)

構造中に立体化学情報は含まれていない

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

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):16 ← 残り全件を確認

L8 17 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN 4H-1-Benzopyran-4-one, 7-(β-D-galactopyranosyloxy)-3-(β-D-glucopyranosyloxy)-5-hydroxy-2-(3,4,5-trihydroxyphenyl)- (9CI)  
MF C27 H30 O18



目的物質 (7 位にガラクトースが結合)

全件の構造と CA 索引名を確認し、目的とする物質の名称にはすべて 7-(β-D-galactopyranosyloxy) が含まれることが分かった

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

:

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L8 AND 7(2W)GALACTO ← 部分名称で限定 (690 円 × 2 = 1,380 円)  
L9 4 L8 AND 7(2W)GALACTO

=> S L6 OR L9 ← 立体構造検索の回答と合わせる  
L10 104 L6 OR L9

=> FILE CAPLUS

=> S L10/BIOL ← 生物学的研究に関する文献に限定してクロスオーバー  
L11 144 L10/BIOL (CAS ロールによる限定 : 290 円)  
(L10 (L) BIOL/RL)

B 立体化学構造検索

検索例：フラボノイド配糖体の生物学的研究に関する調査

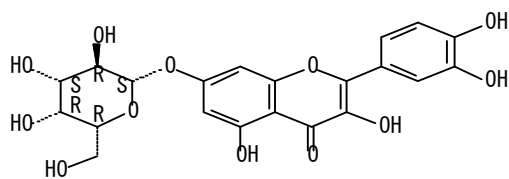
=> D 2 BIB ABS HITSTR ← 2 件目の書誌情報, 抄録, ヒットした物質の構造を表示 (729 円)

L11 ANSWER 2 OF 144 CAPLUS COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 AN 2009:916997 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 151:218670  
 TI Immunostimulatory activities of flavonoid glycosides and their use as adjuvants  
 TIJP フラボノイド配糖体の免疫賦活作用. アジュバントとしてのその使用 [機械翻訳]  
 IN Lim, Eng-Kiat; Kaye, Paul; Bowles, Dianna Joy  
 PA The University of York, UK  
 SO PCT Int. Appl., 44 pp.  
 CODEN: PIXXD2  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	WO 2009093007	A2	20090730	WO 2009-GB131	20090116
	WO 2009093007	A3	20091126		
PRAI	GB 2008-1032	A	20080121		

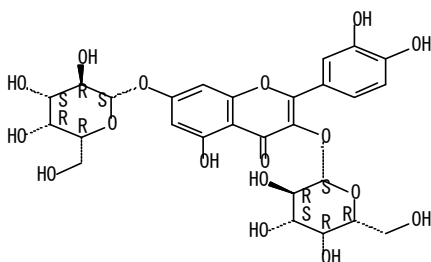
AB Glycosides of flavonoids including resveratrol and quercetin are shown to have an immunostimulatory effect and so may be used as adjuvants in vaccines. The immunostimulatory glycosides are partial or complete glycosides of the  
 IT **59985-52-3**, Quercetin 7-O-galactoside **125591-69-7**  
 RL: THU (Therapeutic use); **BIOL (Biological study)**; USES (Uses)  
 (as immunostimulant; immunostimulatory activities of flavonoid glycosides and their use as adjuvants)  
 RN 59985-52-3 CAPLUS  
 CN 4H-1-Benzopyran-4-one, 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-7-(β-D-galactopyranosyloxy)-3,5-dihydroxy- (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.



RN 125591-69-7 CAPLUS  
 CN 4H-1-Benzopyran-4-one, 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,7-bis(β-D-galactopyranosyloxy)-5-hydroxy- (CA INDEX NAME)

Absolute stereochemistry.



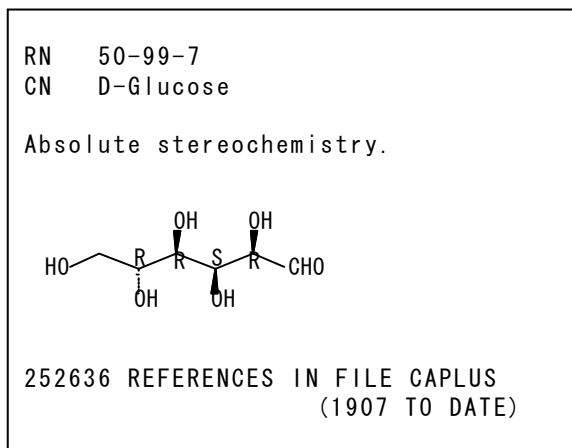
## B 立体化学構造検索

参考：CAPLUS/CA ファイルでの糖類の索引方針

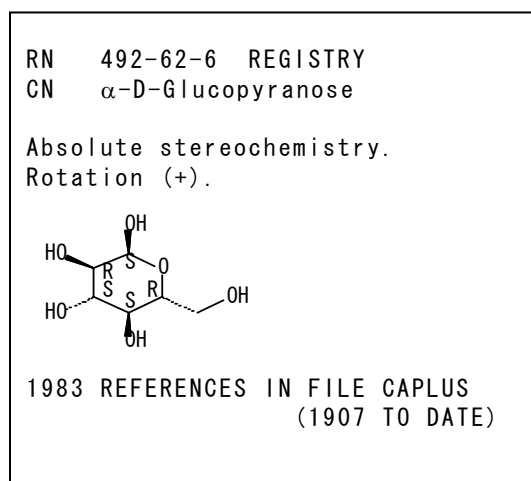
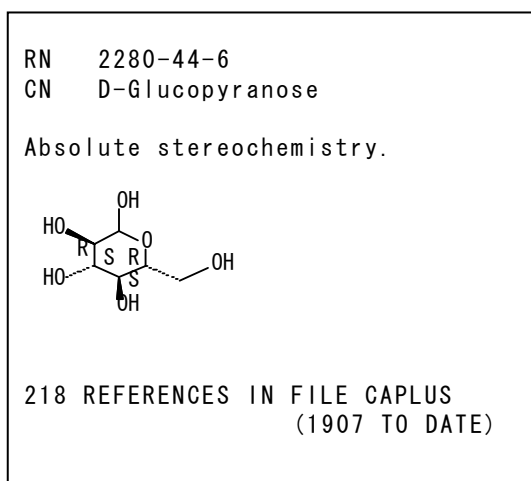
- 原資料中で、アノマー位の立体化学 ( $\alpha$ -D-,  $\beta$ -D- など) が明記されているか、置換やエステル化などで環構造に固定されていない限り、鎖状構造として索引される。

・ 例：D-グルコース

- 鎖状構造



- 環状構造 (原資料中で特に明記されている場合に索引)



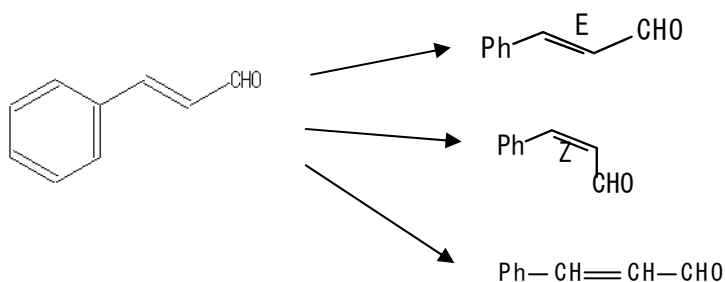
・ 環状、鎖状の両方を構造検索する方法

- 環/鎖結合を利用して一つの構造質問式にまとめる。  
\* ノイズが多く含まれる可能性がある。
- 環状、鎖状の二種類の構造質問式を作成して OR 演算する。  
\* 構造検索語料が 2 語分課金される。

## B 立体化学構造検索

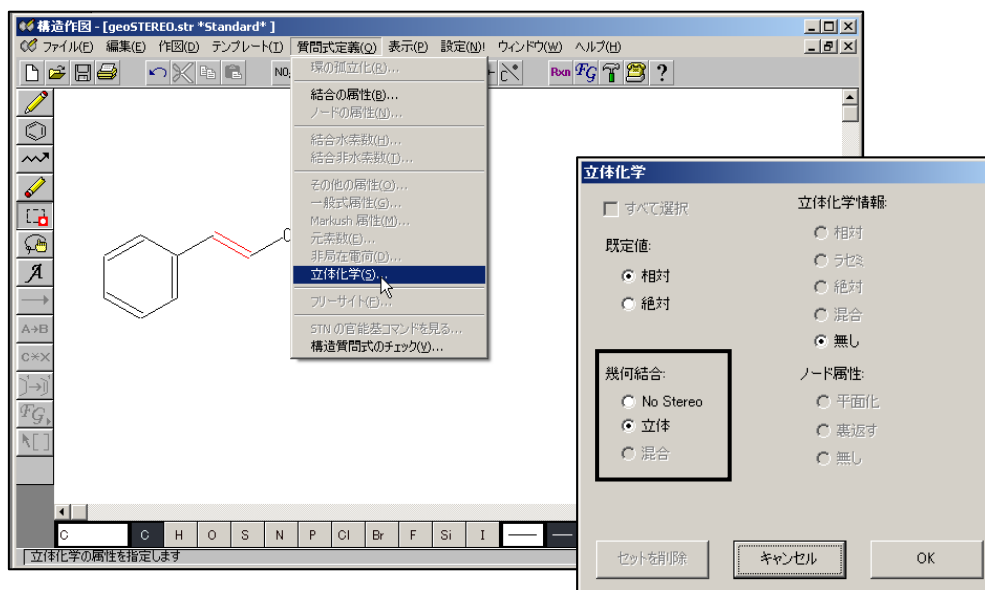
### 幾何異性体の検索

- 非対称の二重結合を作図し、デフォルトの設定 (No Stereo) で検索すると、作図した構造と逆の幾何異性体、および E/Z の情報のないレコードも検索される。



- 特定の幾何異性体に限定して検索する場合は、幾何結合のオプションを「立体」に指定する。

- ・ E, Z ではなく、作図した構造と一致するものに限定するかを指定する。
- ・ 二重結合をハイライトする → 質問式定義 → 立体化学 → 幾何結合オプションを選択



- ・ 幾何結合の設定とヒットするレコード (○ : ヒットする / × : ヒットしない)

	作図通りの幾何異性体	作図と逆の幾何異性体	立体化学情報なし
No Stereo (デフォルト)	○	○	○
立体	○	×	×



## B 立体化学構造検索

### 幾何異性体の検索

#### ■ CIS, TRANS や E, Z などの名称による限定は、あまり有効ではない

##### ・ CIS / TRANS

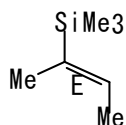
2 つの置換基の相対的な位置関係を示すもので、3 置換以上のオレフィンでは構造を明確に定義できない。

##### ・ E / Z

CA 索引名では 1E, 3Z のように位置を示す番号と併記されるが、部分名称検索では数字とアルファベットを切断して検索できないため、両方を正しく入力しないとヒットしない。

```
RN 10111-13-4 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Silane, trimethyl[(1E)-1-methyl-1-propenyl]- (9CI) ← 1E でヒット
OTHER CA INDEX NAMES: (E ではヒットしない)
CN Silane, trimethyl(1-methyl-1-propenyl)-, (E)-
CN Silane, trimethyl(1-methylpropenyl)-, (E)- (8CI) ← E でヒット
OTHER NAMES:
CN cis-2-Trimethylsilylbut-2-ene
CN Trimethyl(trans-1-methyl-1-propenyl)silane } ← 命名法により cis/trans
FS STEREOSEARCH } が異なる場合がある
MF C7 H16 Si
LC STN Files: BEILSTEIN*, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CHEMINFORMRX,
SPECINFO
(*File contains numerically searchable property data)
```

Double bond geometry as shown.



#### ■ デフォルトの設定 (No Stereo) で検索して、必要としない方の異性体が多く含まれる場合や、必要な異性体のみ限定する時に、Stereo を指定した構造でサブセット検索する。

## B 立体化学構造検索

### その他の光学活性化合物の検索

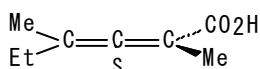
#### ■ アレン誘導体

- 一部のレコードには立体化学情報が収録されているが、その情報を構造検索することはできない。

##### - 立体化学情報のあるレコード

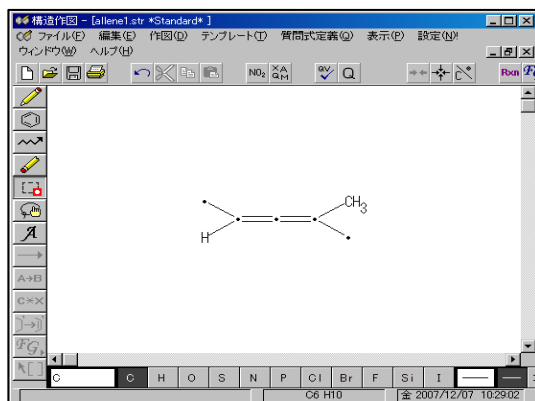
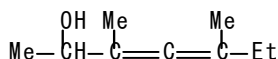
RN 107865-16-7 REGISTRY  
ED Entered STN: 02 May 1987  
CN 2,3-Hexadienoic acid, 2,4-dimethyl-, (S)- (9CI) (CA INDEX NAME)  
FS STEREOSEARCH  
MF C8 H12 O2  
SR CA  
LC STN Files: CA, CAPLUS

Absolute stereochemistry.

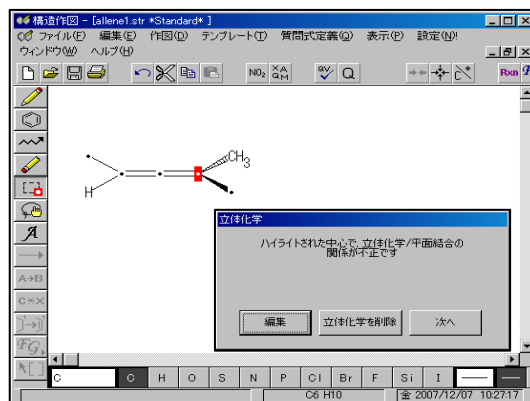


##### - 立体化学情報のないレコード

RN 27971-57-9 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984  
CN 3,4-Heptadien-2-ol, 3,5-dimethyl- (CA INDEX NAME)  
MF C9 H16 O  
LC STN Files: CA, CAPLUS



構造質問式は平面構造で作図する



二重結合をもつノードに立体結合は作図できない

## B 立体化学構造検索

### その他の光学活性化合物の検索

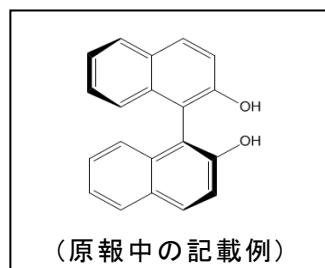
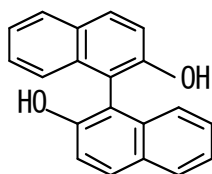
#### ■ アトロプ異性体

- 立体化学情報は名称中のみに収録されており、立体化学構造検索はできない。

例：ビナフトール誘導体

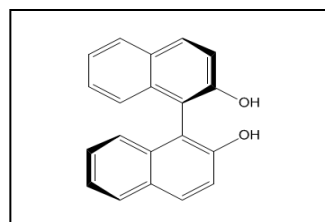
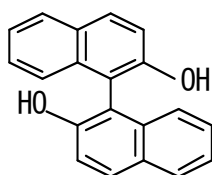
RN 18531-99-2 REGISTRY

CN [1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol, (1S)- (CA INDEX NAME)



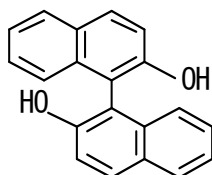
RN 18531-94-7 REGISTRY

CN [1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol, (1R)- (CA INDEX NAME)



RN 602-09-5 REGISTRY

CN [1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol (CA INDEX NAME)



- 特定の異性体に限定する場合は、R や S などの表記を部分名称検索する。

RN 18531-99-2 REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN [1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol, (1S)- (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN [1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol, (S)-

:

(1S)- (CA INDEX NAME)

(S)-

"1S" は "S" ではヒットしない。  
他の名称で "S" のつくものが  
収録されていればヒットする

## B 立体化学構造検索

参考：立体化学構造検索が可能なファイル

■ STN で立体化学情報を構造検索できるのは、REGISTRY ファイルと ReaxysFile ファイルのみである。

■ CASREACT ファイルでは、構造検索において立体化学情報は無視して検索される。

・ 下記の方法で検索すると、特定の立体異性体に関する反応を検索することができる。

- 特定の立体異性体の CAS 登録番号を、反応物や生成物として検索する。
- REGISTRY ファイルで立体構造検索した回答セットをクロスオーバー検索する。
- 検索例

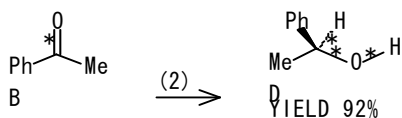
=> FILE CASREACT

=> S 98-86-2/RCT (L) 1445-91-6/PRO ← 必要な立体異性体の CAS 登録番号で検索  
L1 710 98-86-2/RCT (L) 1445-91-6/PRO (953 円 × 2 = 1,906 円)

=> D 1 FHIT ← 最初にヒットした反応を表示 (301 円)

L1 ANSWER 1 OF 710 CASREACT COPYRIGHT 2010 ACS on STN

RX(2) OF 3 ... B ==> D

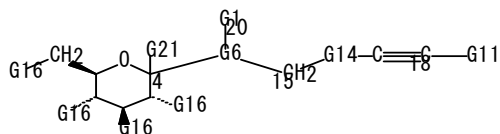


RX(2) RCT B **98-86-2**  
PRO D **1445-91-6**  
SOL 50-99-7 D-Glucose  
CON 1.5 days, room temperature  
NTE biotransformation, Mucor mucedo used, 96% ee, stereoselective

■ MARPAT ファイルでは、構造検索では立体化学情報は無視して検索される。

・ 立体化学構造を収録しているレコード例

MSTR 1



G1 = H / F / Cl / Br / I / alkyl <containing 1-4 C> /  
alkynyl <containing 2-6 C> / alkoxy <containing 1-4 C>  
(subst. by alkenyl <containing 2-4 C>) /  
:

## *C INCOMPLETE* になった時の対処方法

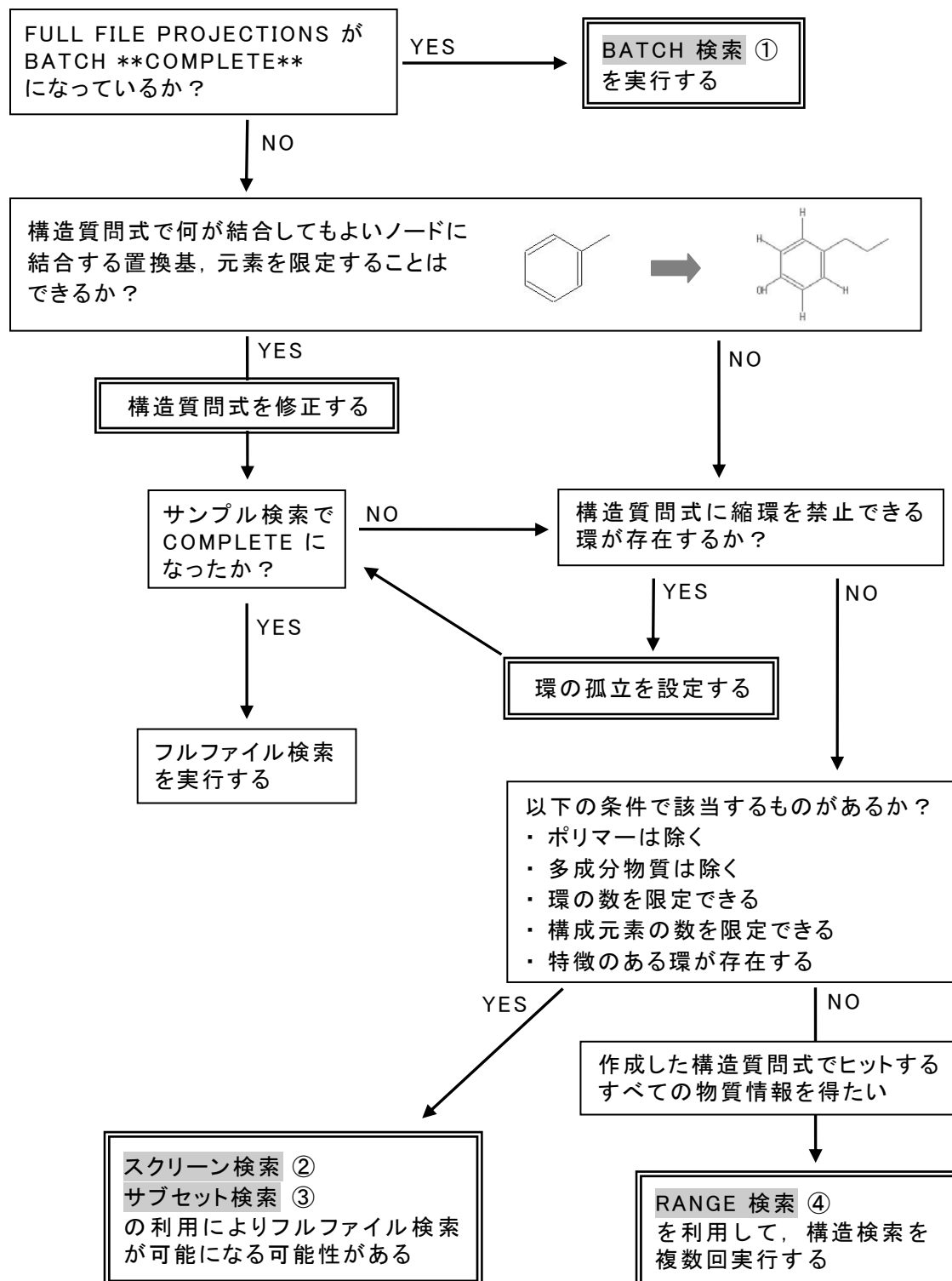
サンプル検索の結果、FULL FILE PROJECTIONS が ONLINE  
\*\*INCOMPLETE\*\* になった時の対処方法をご紹介します。



## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### 対処方法のまとめ

- サンプル検索の結果 FULL FILE PROJECTIONS が INCOMPLETE になった場合は、下記のフローを参考にして、検索手法や構造質問式を見直す。

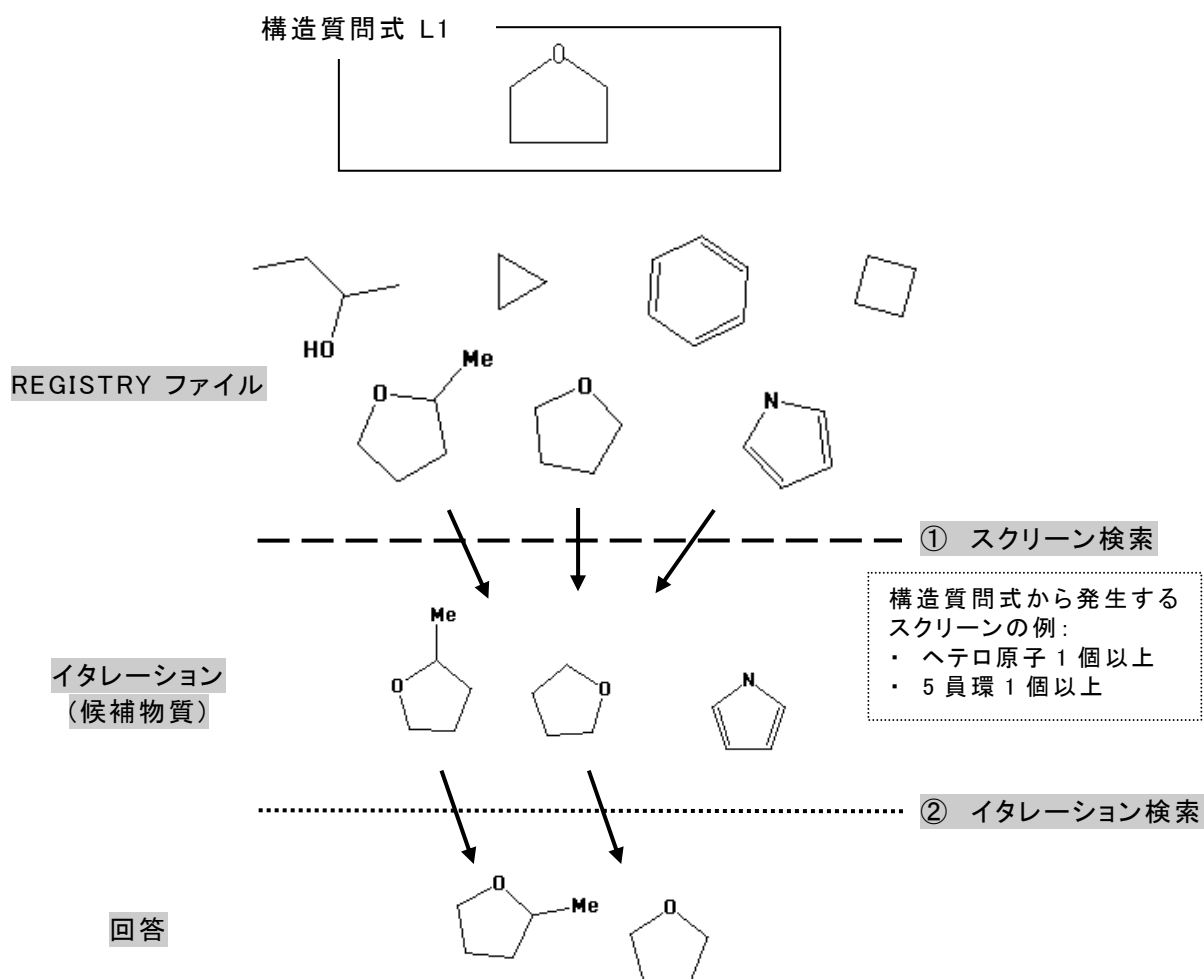


## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### 構造検索のしくみとシステム制限

#### ■ 構造検索のしくみ

- ・ 構造検索はスクリーン検索, イタレーション検索の二段階で実行されている。
  - スクリーン検索 : 作図した構造と大まかな特徴が一致する化学物質の集合を作成する。  
(条件は構造質問式から自動発生, スクリーンコマンドで追加も可能)
  - イタレーション検索 : スクリーン検索を通過した候補物質 (イタレーション) について, 作図した構造と適合するかを詳細にチェックする。



#### 構造検索のシステム制限

イタレーション検索で照合できる物質数には, ファイルごとに上限がある。



## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### 構造検索のしくみとシステム制限

#### ■ REGISTRY ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	オンライン検索		BATCH 検索
	サンプル検索	フルファイル検索	フルファイル検索
イタレーション数	2,000 件	2,000,000 件	3,000,000 件
回答数	50 件	2,000,000 件	3,000,000 件

- ・ PROJECTED ITERATIONS (予想候補物質) の数が、システム制限値を超えた場合に、FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*INCOMPLETE\*\* となる。
- ・ そのままフルファイル検索を実行すると、システム制限値以降の候補物質は検索しないまま終わってしまうため、ファイル中の全物質を検索できない。

#### ■ サンプル検索の結果の見方 (ファイル中の 5% を検索)

- ① SAMPLE SEARCH INITIATED 19:37:07
- ② SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 2656 SUBSTANCES TO ITERATE
- ③ 77.0% PROCESSED 2000 ITERATIONS 50 ANSWERS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
- ④ SEARCH TIME: 00.00.19

```

⑤ FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
⑥ BATCH **COMPLETE**
⑦ PROJECTED ITERATIONS: 23821 TO 28139
⑧ PROJECTED ANSWERS: 3619 TO 5421
    
```

⑨ L2 50 SEA SSS SAM L1

- ① サンプル検索を始めた時間
- ② スクリーン検索を通過した化合物数
- ③ イタレーション検索した化合物数と回答数
- ④ サンプル検索時間
- ⑤ フルファイル検索の予想 (ONLINE)
- ⑥ フルファイル検索の予想 (BATCH)
- ⑦ フルファイル検索のイタレーション検索対象化合物数の予想
- ⑧ フルファイル検索の回答数の予想
- ⑨ サンプル検索の回答数

- ・ イタレーション検索対象数がシステム制限を越えると予想した場合に、INCOMPLETE と表示される。

```

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **INCOMPLETE**
                        BATCH **INCOMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS: 4195985 TO 4250095
PROJECTED ANSWERS: 1436658 TO 1468792
    
```

構造質問式を修正する場合は、この数値がシステム制限内におさまるようにする

## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### ① BATCH 検索

■ BATCH 検索を利用すると、構造質問書をシステムに登録することで、コンピュータの利用度の少ない時に一括して構造検索を行わせることができる。

- ・ 回答は 1 ~ 2 日後にオンラインで見ることができる。
- ・ BATCH 検索料金はオンライン構造検索料金と同額。追加料金はかからない。

■ BATCH 検索では、オンラインでの構造検索に比較してシステム制限が緩和される。

- ・ サンプル検索の結果の PROJECTED ITERATIONS と PROJECTED ANSWERS が、ともに 3,000,000 件以内であれば、BATCH 検索を利用できる。

```
-----  
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **INCOMPLETE**  
                        BATCH   **COMPLETE**  
PROJECTED ITERATIONS:   2657115 TO 2700485  
PROJECTED ANSWERS:     34906 TO   40100  
-----
```

■ バッチ検索を指定するには、質問式の L 番号を使う。

- ・ 構造質問式、スクリーンセット、両者を結合した質問式、あるいはこれらによって得られた回答の L 番号が使える。

■ BATCH コマンド入力例

```
=> BATCH  
ENTER QUERY L# FOR BATCH REQUEST OR (END): L2  
ENTER BATCH REQUEST NAME OR (END): STR1/B  
ENTER TYPE OF SEARCH (SSS), CSS, FAMILY, OR EXACT: .  
ENTER SCOPE OF SEARCH (FULL) OR RANGE: .  
QUERY 'L2' HAS BEEN SAVED AS BATCH REQUEST 'STR1/B'
```

← 質問式の L 番号  
← 注文名/B  
← 検索のタイプ  
← 検索の範囲

ピリオドを入力すると、括弧で囲まれている値が指定される

- ・ 以下のようにまとめて入力することもできる。

```
=> BATCH L2 STR1/B SSS FULL  
QUERY 'L2' HAS BEEN SAVED AS BATCH REQUEST 'STR1/B'
```

## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### ① BATCH 検索

#### ■ BATCH 検索の回答表示

- ・ 検索が実行されるまでは, => D SAVED/B で質問式が確認できる.
- ・ BATCH 検索が終了すると /B のついた質問式は削除される.

=> D SAVED/B

NAME	CREATED	NOTES/TITLE
STR1/B	20 JAN 2010	BATCH REQUEST FOR FILE REGISTRY

#### ■ BATCH 検索指示を取り消すには DELETE コマンドを使う.

=> DEL STR1/B  
DELETE STR1/B? (Y)/N:Y  
STR1/B DELETED

#### ■ 検索が実行されると, 回答は BATCH 検索登録時につけた名前に /A がついた回答セットとして保存される.

=> FILE REGISTRY

=> D SAVED/A

NAME	CREATED	NOTES/TITLE
CASREA66/A	25 DEC 2009	308 ANSWERS IN FILE CASREACT
SALT/A	15 JAN 2010	8750 ANSWERS IN FILE REGISTRY
STR1/A	20 JAN 2010	7027 ANSWERS IN FILE REGISTRY

#### ■ 保存されている回答セットは ACTIVATE コマンドで呼び出して表示する.

=> ACT STR1/A  
L1 STR  
L2 7027 SEA FILE=REGISTRY SSS FUL L1

=> D SCAN

L2 7027 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
IN 3-Pyridinecarboxylic acid, 2-[[3-(1,1-dimethylethyl)-1-(3-fluoro-2-methylphenyl)-1H-pyrazol-5-yl]amino]-6-methyl- (9CI)  
MF C21 H23 F N4 O2

BATCH 検索で得られた回答 (例 STR1/A) は, 削除しない限り恒久保存となり, 毎月保管料が課金される (125 円, 1 回答セット・1 ヶ月あたり). 回答セットの恒久保存が不要な場合は, DELETE コマンドで削除する.

## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### ② スクリーンを利用した検索

■ スクリーンを利用して検索条件を追加すると、イタレーション検索の候補物質数を絞り込むことができ、FULL FILE PROJECTIONS \*\* INCOMPLETE \*\* を回避できる可能性がある。

・ 特に、以下に示す Graph Modifier (GM) スクリーンは、システムによって自動発生されないため、これらを利用すると検索対象の絞込みに有効である。

#### ・ Graph Modifier スクリーン

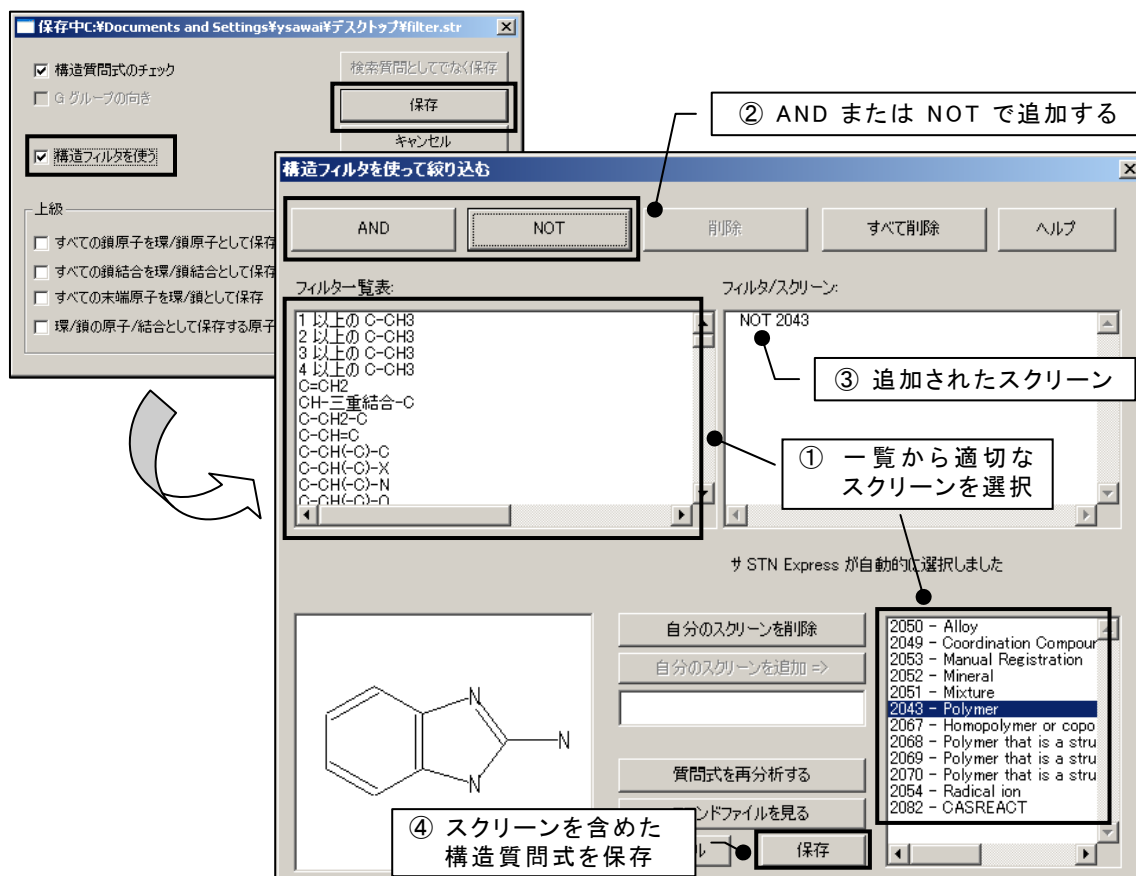
番号	内容	頻度			
[構造上の特徴]					
2039	異常質量 - すべての同位体	0.97 %			
2045	重水素	0.49 %			
2046	三重水素およびそれ以上の水素同位体 (4H, 5H など)	0.06 %			
2047	結合位置の不明な同位体	0.05 %			
2041	異常結合価	32.34 %			
2040	すべての電荷	12.50 %			
2042	非局在化している (delocalized) 電荷	0.10 %			
2076	互変異性体 (Tautomer)	39.88 %			
[多成分物質]					
2127	2 成分以上	18.61 %			
2077	3 成分以上	7.24 %			
2078	4 成分以上	4.55 %			
2079	single atom fragment (SAF)	6.69 %			
[クラス識別子コード] (一物質が複数のコードを持つこともある)					
2050	合金	3.22 %			
2049	配位化合物	8.16 %			
2048	定義のあいまいな (Incompletely defined) 化学物質	1.43 %			
2071	構造不明 (分子式のみ)	0.21 %			
2072	結合位置不明	0.99 %			
2073	エステル化位置不明	0.14 %			
2074	水素化位置不明	0.10 %			
2052	鉱物	0.05 %			
2051	混合物 (名称中に mixt. with がある)	0.29 %			
2043	ポリマー (一般)	4.18 %			
2067	ホモポリマー・コポリマー [(A) <sub>x</sub> , (A.B) <sub>x</sub> , etc.]	3.20 %			
2068	structural repeating units (SRU) で表されるポリマー	1.48 %			
2069	末端基のある SRU [X-(-Y-) <sub>n</sub> -Z]	0.52 %			
2070	末端基のない SRU [-(-Y-) <sub>n</sub> -]	1.00 %			
2054	ラジカル・イオン	0.23 %			
[その他]					
2082	CASREACT に収録されている物質	14.04 %			
[最小環の数]					
1838	1 環以上	86.17 %	1843	6 環以上	10.11 %
1839	2 環以上	72.82 %	1844	7 環以上	6.54 %
1840	3 環以上	53.05 %	1845	8 環以上	5.01 %
1841	4 環以上	33.05 %	1846	10 環以上	3.12 %
1842	5 環以上	17.59 %	1847	15 環以上	1.13 %

## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### ② スクリーンを利用した検索

■ STN Express の構造フィルタを利用すると、オフラインで簡単にスクリーンを指定できる。

- ・ 構造質問式の保存時に、「構造フィルタを使う」にチェックを入れて保存する。



- ・ スクリーンを含めた構造質問式をアップロードすると、スクリーンコマンドが自動実行される。

=> FILE REGISTRY

```

=> ....Testing the current file....$ screen
ENTER SCREEN EXPRESSION OR (END):end
=> screen 2043
L1    SCREEN CREATED
=>
Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\...
L2    STRUCTURE UPLOADED
=> que L2 NOT L1
L3    QUE L2 NOT L1
=> S L3
  
```

アップロード時に自動実行される内容

← 最後の L 番号を使って構造検索する

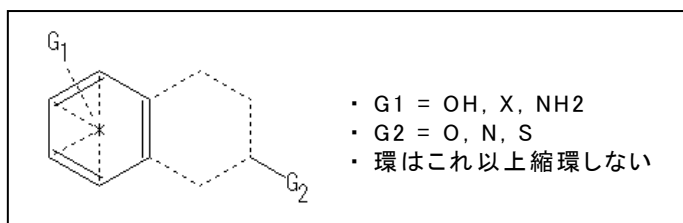
## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### ③ サブセット検索

■ 構造質問式の修正やスクリーンを利用しても COMPLETE にならない場合は、辞書検索で作成した集合を母集合としてサブセット検索すると、COMPLETE になる場合がある。

- ・ 辞書検索で構造検索のイタレーション数のシステム制限値以下の集合を作成することができれば、それを母集合とするサブセット検索では、構造質問式を修正することなく確実にフルファイル検索を COMPLETE させることができる。

■ 検索例：下記の構造の物質を検索する。



=> FILE REGISTRY

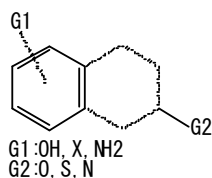
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\...

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*INCOMPLETE\*\* ← ONLINE, BATCH とともに  
BATCH \*\*INCOMPLETE\*\* INCOMPLETE

PROJECTED ITERATIONS: 3095851 TO 3142589

PROJECTED ANSWERS: 78804 TO 86514

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S C6-C6/ES ← 環系データで検索 (690 円)

L3 1557960 C6-C6/ES

環系の元素配列 (/ES) フィールドで、炭素 6 - 炭素 6 の環系をもつ物質に限定して、構造検索のシステム制限内の集合を作成することができた

\* 環系データ検索に関する参考資料  
[www.jaici.or.jp/stn/ref-registry.pdf](http://www.jaici.or.jp/stn/ref-registry.pdf)

C INCOMPLETE になった時の対処方法

③ サブセット検索

=> S L1 SUB=L3 SAM ← 辞書検索の回答を母集合としてサブセット検索 (サンプル検索)  
 SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 14:00:50 FILE 'REGISTRY'  
 SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 61079 TO ITERATE

3.3% PROCESSED 2000 ITERATIONS 50 ANSWERS  
 INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
 SEARCH TIME: 00.00.01

COMPLETE になった

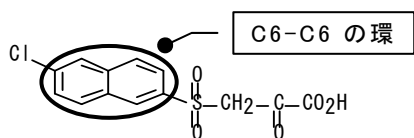


PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): ONLINE **\*\*COMPLETE\*\***  
 PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 1206832 TO 1236328  
 PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 64305 TO 71289

L4 50 SEA SUB=L3 SSS SAM L1

=> D SCAN ← 回答を確認

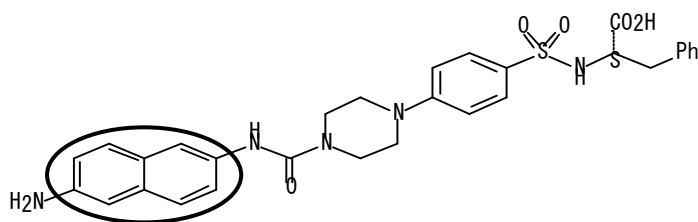
L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN Propanoic acid, 3-[(6-chloro-2-naphthalenyl)sulfonyl]-2-oxo-  
 MF C13 H9 Cl O5 S



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

L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN L-Phenylalanine, N-[[4-[4-[[[6-amino-2-naphthalenyl)amino]carbonyl]-1-piperazinyl]phenyl]sulfonyl]-  
 MF C30 H31 N5 O5 S

Absolute stereochemistry.



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

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

=> S L1 SUB=L3 FUL ← フルファイル検索を実行 (24,000 円)  
 FULL SUBSET SEARCH INITIATED 14:02:37 FILE 'REGISTRY'  
 FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 1222764 TO ITERATE

辞書検索を含む検索結果を母集合としたサブセット検索は、フルファイル検索の料金が課金される

100.0% PROCESSED 1222764 ITERATIONS 92992 ANSWERS  
 SEARCH TIME: 00.00.12

L5 92992 SEA SUB=L3 SSS FUL L1

## C INCOMPLETE になった時の対処方法

### ④ RANGE 検索 (範囲指定検索)

- サンプル検索の結果、FULL FILE PROJECTIONS が ONLINE, BATCH とともに **\*\*INCOMPLETE\*\*** であっても、RANGE 検索を利用してフルファイル検索を複数回実行すれば、すべての回答を得ることができる。

- ・ ただし、必ず PROJECTED ITERATIONS の数を確認し、何回フルファイル検索を行う必要があるのかを事前に確認する。

```
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **INCOMPLETE**
                        BATCH   **INCOMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:   3095851 TO 3142589
PROJECTED ANSWERS:     78804 TO 86514
```

イタレーション数の制限は 2,000,000 なので、2 回程度フルファイル検索が必要

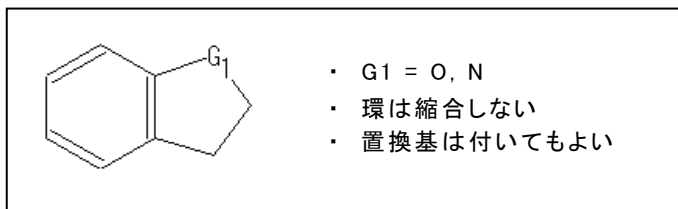
### ■ 入力方法

=> S L# RAN=RN1,RN2

\* RN1 ~ RN2 の CAS 登録番号範囲の物質を検索

- \* RANGE 検索にサンプル検索はない。
- \* 検索対象範囲が 10 万物質未満の場合は範囲指定検索料金 (5,700 円)、それ以上の場合はフルファイル検索の料金が課金される。

### ■ 検索例: 以下の構造を有する物質を検索する



=> FILE REGISTRY

=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My documents\STN Express 8.4\...

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

:

```
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **INCOMPLETE**
```

```
BATCH   **INCOMPLETE**
```

```
PROJECTED ITERATIONS:   3040495 TO 3086825
```

```
PROJECTED ANSWERS:     515715 TO 535119
```

← ONLINE, BATCH とともに INCOMPLETE

2 回程度フルファイル検索が必要と予想される

L2 50 SEA SSS SAM L1



C INCOMPLETE になった時の対処方法

④ RANGE 検索 (範囲指定検索)

=> S L1 FUL ← 普通にフルファイル検索を実行する (24,000 円)  
 FULL SEARCH INITIATED 14:25:34 FILE 'REGISTRY'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 3063111 TO ITERATE  
 65.3% PROCESSED 2000000 ITERATIONS 341459 ANSWERS  
 INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.12

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*INCOMPLETE\*\*  
 BATCH \*\*INCOMPLETE\*\*  
 PROJECTED ITERATIONS: 3063111 TO 3063111  
 PROJECTED ANSWERS: 520799 TO 525127

スクリーン検索の結果、候補物質は  
 3,063,111 物質  
 しかしイタレーション検索のシステム  
 制限値 2,000,000 物質までで検索  
 は終了し、341,459 件が得られた

L3 341459 SEA SSS FUL L1

構造検索は、新規に登録された物質から順に遡って (CAS 登録番号の大きい順に) 検索される。  
 したがって、検索が中断されたレコードまでの検索は完全に行われているため、その物質以降の  
 範囲で RANGE 検索を実行してファイル全体の検索を完了させる。

=> D 341459 RN ← 最後にヒットした物質の CAS 登録番号を調べる

L3 ANSWER 341459 OF 341459 REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 RN 723292-14-6 REGISTRY

=> S L1 RAN=, 723292-14-6

その CAS 登録番号より前の物質 (より古い物質)  
 を対象に検索 (24,000 円)

RANGE MORE THAN 100,000. WILL BE BILLED AS A FULL FILE SEARCH.  
 INITIATE SEARCH? Y/(N):Y ↑ 検索対象が 10 万件以上のためフルファイル検索の料金となる  
 RANGE SEARCH INITIATED 14:28:27 FILE 'REGISTRY'

RANGE SCREEN SEARCH COMPLETED - 1063958 TO ITERATE  
 100.0% PROCESSED 1063958 ITERATIONS 159200 ANSWERS  
 SEARCH TIME: 00.00.06

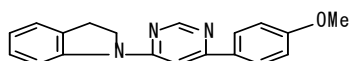
L4 159200 SEA RAN=(, 723292-13-5) SSS L1

イタレーション検索が完全に  
 終了したメッセージ

=> S L3-L4 ← 2 回分の検索結果をまとめる  
 L5 500659 (L3 OR L4)

=> D SCAN

L5 500659 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2010 ACS on STN  
 IN 1H-Indole, 2,3-dihydro-1-[6-(4-methoxyphenyl)-4-pyrimidinyl]-  
 MF C19 H17 N3 O



RANGE 検索は、検索対象範囲が 10 万  
 物質未満の場合は割引料金となる。入力  
 した範囲が 10 万物質以上のため、フル  
 ファイル検索の料金になる

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

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

## C INCOMPLETE になった時の対処方法

参考：PROJECTED ANSWERS が 0 TO 0 の場合

- サンプル検索の結果で PROJECTED ANSWERS が 0 TO 0 の場合でも、フルファイル検索を実行すると回答が得られることがある。

- ・ PROJECTED ANSWERS の数値は、データベース中の 5% を検索した結果の確率等から予想した件数であるため、フルファイル検索の回答件数と一致しないことがある。
- ・ 予想回答数が 0 件だった場合は、フルファイル検索の前に SET EXTEND ON コマンドを設定しておくとうい。フルファイル検索の回答が 0 件になった場合でも、スクリーン検索を通過した候補物質の情報を得ることができる。

=> FILE REGISTRY

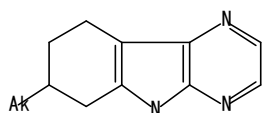
=>

Uploading C:\Documents and Settings\JAICI\My Documents\STN Express 8.4\...

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

L1 STR



=> S L1

```

:
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:   2038 TO 3442
PROJECTED ANSWERS:      0 TO 0
    
```

L2 0 SEA SSS SAM L1 ← 予想回答件数が 0 件だった

=> SET EXT ON ← フルファイル検索を実行する前に SET コマンドを入力する  
SET COMMAND COMPLETED

=> S L1 FUL

L3 2638 SEA SSS FUL L1 EXTEND ← 候補物質の集合が作成される

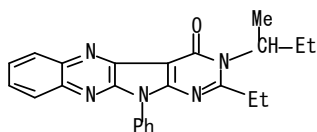
CANDIDATE STRUCTURE SEARCH COMPLETED - 2638 TO ITERATE

L4 0 SEA SSS FUL L1 ← フルファイル検索の回答件数は 0 件だった

=> D L3 SCAN

```

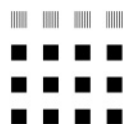
L3 2638 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2010 ACS on STN
IN  INDEX NAME NOT YET ASSIGNED
MF  C24 H23 N5 0
    
```



● ———— スクリーンの条件のみに適合した物質

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





## **JAICI** 社団法人 化学情報協会

### 情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル  
サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: [customer@jaici.or.jp](mailto:customer@jaici.or.jp)

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)

FAX: 03-5978-3600 URL: [www.jaici.or.jp](http://www.jaici.or.jp)