

**STN INTERNATIONAL**

リフレッシュセミナー

# **REGISTRY ファイル — 検索テクニック**

---



# 目次

## A 環系データ検索

環系データ.....	1
環系データの種類.....	4
環データフィールド.....	9
環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS).....	12
検索例 1.....	15
環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS).....	18
検索例 2.....	23
検索例 3.....	28
環系の環の大きさ (/SZ), 最小環の大きさ (/SZS).....	32
最小環の数 (/NRRS, /NR, /CNR), 環系の数 (/NRS, /CNRS).....	34
環系式 (/RF, /RATC, /REL, /RELC, /RELF).....	35
環系識別子 (/RID).....	38
参考: ノーマライズド結合.....	42
検索例 4.....	47
近接演算子, ブール演算子.....	50
環系データ間の関係.....	55
トランケーション.....	56

## B よくあるご質問

概要.....	57
成分数の注意.....	58
演算子利用のこつ.....	61
名称.....	62
分子式.....	63
検索例 1.....	66
検索例 2.....	67
検索例 3.....	68
検索例 4.....	69
参考: 周期律グループコード.....	70
参考: 組成が不明な物質も含めて検索する場合.....	71
構造.....	72
標識化合物の検索.....	74
参考: 標識化合物の検索のまとめ / 同位体元素と環系識別子.....	77
検索例 1:.....	78
検索例 2:.....	80
検索例 3:.....	82
検索例 4:.....	84
参考: 構造検索で標識化合物を検索するときのノイズ.....	85
参考: 標識化合物を除くときの注意.....	87

## APPENDIX

ポリマーの元素式 (/ELF) の数え方.....	91
分子式量の算出方法.....	93
分子式量の検索のポイント.....	95



## A 環系データ検索

REGISTRY ファイルでは、環構造を含む化合物レコードに環系データを収録しています。環系データは検索可能であり、特徴的な環構造を含む化合物の検索にたいへん有効です。この章では、環系データの内容を説明し、検索方法をご紹介します。



## A 環系データ検索

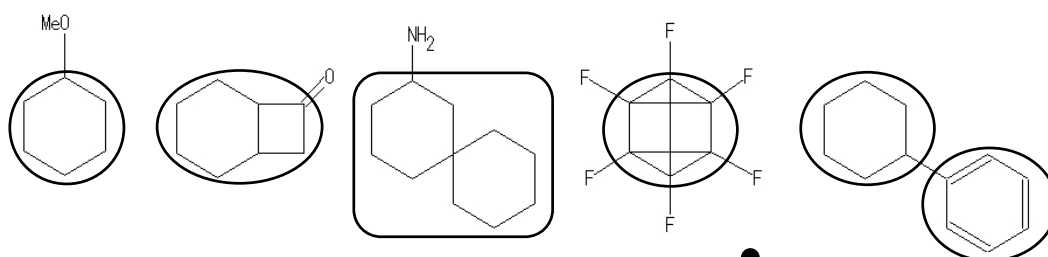
### 環系データ

■ REGISTRY ファイルでは、環を有する化学物質のレコードに、環に関するデータ（環系データ：Ring System Data）が収録されている。

- ・ 環系データを利用すると、環の特徴を利用した検索ができる。

#### 利用できる環系データの例

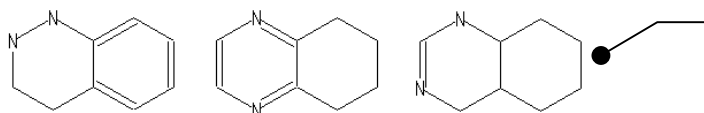
- 環の大きさ（例：3 員環，4 員環，.....）
- 環を構成する元素（例：窒素 1 個，炭素 5 個からなる環）
- 環の数（例：3 つの環を含む物質） など



#### ■ 環系データの利点

- ・ 構造検索および名称検索では困難な検索ができる。
  - 特定の組成の環を含む物質が簡単に検索できる。

例：C4N2 環と C6 環の縮合している化合物をまとめて検索する



環系データは置換基を除く環特有のデータ

構造作図できない、または、作図したとしても Incomplete になりやすい

- 環の大きさや、環に含まれる構成元素も検索できる。

例：炭素と窒素からなる環で、8 員環以上の環を持つ物質

- 環の存在数を指定することも可能。

例：ベンゼン環を 1 個～ 3 個有する物質を検索する

- ・ 構造検索のサンプル検索で Incomplete になってしまった時に、環系データ検索の結果を利用してサブセット検索を行い、Incomplete を回避する。

#### ■ 環系データの表示

- ・ 環系データは、定型表示形式 FIDE、カスタム表示形式 RSD 表示形式で表示できる。SCAN, IDE 表示形式では環系データは表示されない。

## A 環系データ検索

### 環系データ

#### ■ 表示例 (FIDE 表示形式)

RN 32779-36-5 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Pyrimidine, 5-bromo-2-chloro- (7  
 OTHER NAMES:  
 CN 2-Chloro-5-bromopyrimidine  
 CN 5-Bromo-2-chloropyrimidine  
 FS 3D CONCORD  
 MF C4 H2 Br Cl N2  
 LC STN Files: BEILSTEIN\*, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CSCHEM,  
 SPECINFO, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL  
 (\*File contains numerically searchable property data)  
 DT.CA CAplus document type: Journal; Patent  
 RL.P Roles from patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)  
 RL.NP Roles from non-patents: BIOL (Biological study); PREP (Preparation);  
 PRP (Properties); RACT (Reactant or reagent); NORL (No role in record)

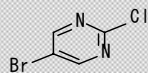
#### FIDE 表示形式

- 環データや物性値を含む「物質に関するすべての情報」が表示される

#### Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C4N2	NCNC3	6	C4N2	46.195.39	1

#### 環データ



#### Experimental Properties (EPROP)

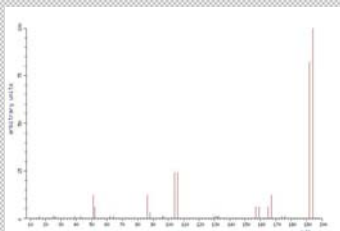
PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	95 deg C	Press: 15 Torr	(1) CAS
Melting Point (MP)	78-78.6 deg C	Solv: hexane	(4) CAS
		(110-54-3)	

#### 実測物性値

(1) Brown, D. J.; Australian Journal of Chemistry 1964 V17(7) P794-802 [CAPLUS](#)

(4) Hughes, Gregory; Organic & Biomolecular Chemistry 2003 V1(17) P3069-3077 [CAPLUS](#)

#### Mass Spectra



Spectrum ID: ID\_WID-DLO-090429-0  
 Number Of Peaks: 27  
 Nominal Mass: 192  
 Source: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)



## A 環系データ検索

### 環系データ

Experimental Property Tags (ETAG)		参照文献タグ	
PROPERTY	NOTE		
IR Spectra	(1) CAS		
Mass Spectra	(1) CAS		
Melting Point	(1) CAS		
Proton NMR Spectra	(1) CAS		
(1) Sharma, Sanjay; Liquid Crystals 2003 V30(4) P451-461 CAPLUS			
Predicted Properties (PPROP)		計算物性値	
PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	6.34	pH 1 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	291.6+/-13.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	1.859+/-0.06 g/cm**3	760 Torr	(1)
Enthalpy of Vap. (HVAP)	50.97+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	130.1+/-19.8 deg C		(1)
Polar Surface Area (PSA)	25.78 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	3.38E-03 Torr	25 deg C	(1)
(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V8.14 ((C) 1994-2006 ACD/Labs)			
See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.			
178 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)			
178 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)			
1 REFERENCES IN FILE GAOLD (PRIOR TO 1967)			

■ 環系データの有無は、FA フィールドで区別できる。

=> FILE REGISTRY

=> E RSD/FA 5

E1	704458	RLD/FA	
E2	536304	RR/FA	
E3	29705576	--> RSD/FA	← 環系データ有り
E4	419	RSDU/FA	
E5	9468956	SAME SEQUENCE/FA	

=> E NO RSD/FA 5

E1	208307	NMR SPECTRA/FA	
E2	63384228	NO RING SYSTEM DATA/FA	
E3	63384228	--> NO RSD/FA	← 環系データ無し
E4	11980812	NOTE/FA	
E5	11980812	NTE/FA	

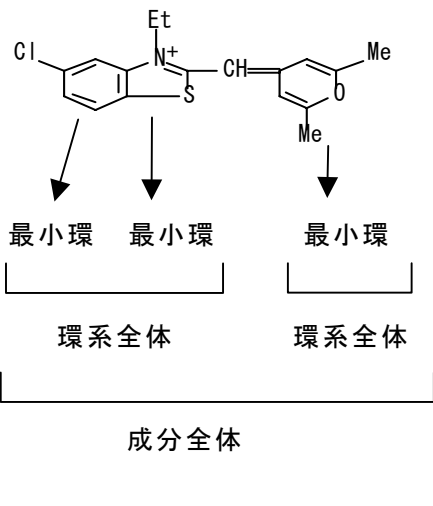
## A 環系データ検索

### 環系データの種類

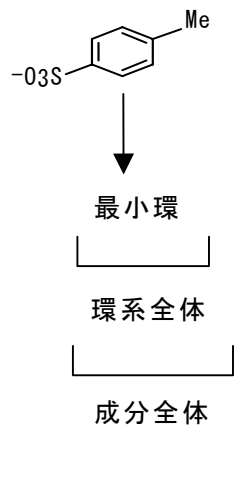
#### ■ 最小環, 環系全体, 成分全体, 物質全体について

RN 106395-35-1 REGISTRY

CM 1



CM 2



#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
(C6)	(C6)	(6)	C6	46.150.18	1 in CM 2
(C50)	(OC5)	(6)	C50	46.157.4	1 in CM 1
(C3NS)(C6)	(NCSC2)(C6)	(5)(6)	C7NS	333.521.14	1 in CM 1

- ○ : 最小環
- □ (dotted) : 環系全体 ; 同一環系内に限定する際は (S) 演算子を使う
- □ (dashed) : 成分全体 ; 同一成分内に限定する際は (P) 演算子を使う
- □ (solid) : 物質全体 ; 物質全体で限定する際に AND 演算子を使う

## A 環系データ検索

### 環系データの種類

#### ■ 環系データ (RSD) の種類

- ・ 環系データは RSD フィールド (Ring System Data) に表示される。

- EA (Elemental Analysis)	: 環系の元素式
- ES (Elemental Sequence)	: 環系の元素配列
- SZ (Size of the Rings)	: 環系の環の大きさ
- RF (Ring System Formula)	: 環系式
- RID (Ring Identifier)	: 環系識別子
- RID Occurrence Count	: 環系の存在数

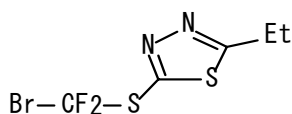
#### ■ EA, ES, SZ は最小環 (環系を構成する最も小さな環) をハイフンでつないで記述される。

- ・ EA (環系の元素式) は、各環系を構成する最小環ごとの構成元素 (Hill 方式) をハイフンで結合したデータを表す。
- ・ ES (環系の元素配列) は、各環系を構成する最小環ごとの元素配列をハイフンで結合したデータを表す。
- ・ SZ (環系の環の大きさ) は、各環系を構成する最小環の大きさをハイフンで結合したデータを表す。

#### ■ RF, RID, RID Occurrence Count は環系全体に対する記述。

#### ■ レコード例 (STR RSD 表示形式)

- ・ 単環のレコード例 (RN : 134888-82-7)

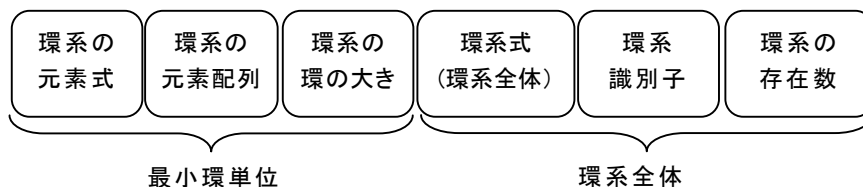


単環では EA = RF である

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

Ring System Data

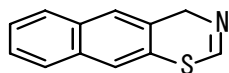
Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence Count
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C2N2S	N2CSC	5	C2N2S	16.578.5	1



## A 環系データ検索

### 環系データの種類

- 縮合環のレコード例 (RN : 324-85-6)



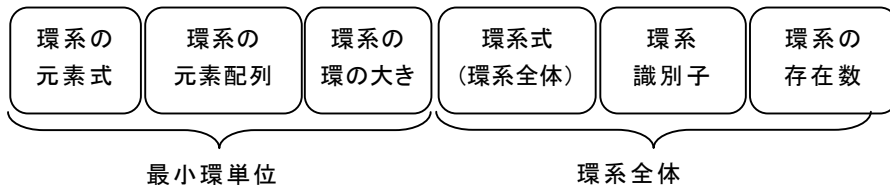
最小環 : 環系を構成する個々の環  
環系 : 環全体

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

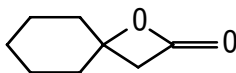
#### Ring System Data

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

最小環は 3 個の 6 員環である  
(周囲の 14 員環は考慮しない)



- スピロ環系化合物のレコード例 (RN : 1483-09-6)



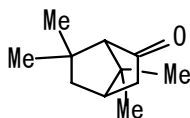
最小環は 4 員環と 6 員環である

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

#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C30-C6	OC3-C6	4-6	C80	298.41.1	1

- 架橋環系化合物のレコード例 (RN : 21093-45-8)



最小環は 2 個の 5 員環である  
(これらを含む 6 員環は考慮しない)

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

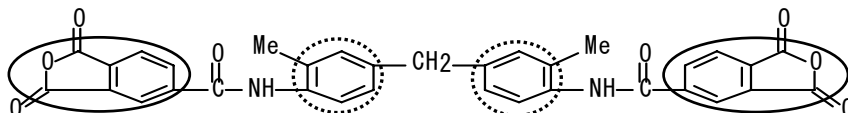
#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C5-C5	C5-C5	5-5	C7	103.10.1	1

## A 環系データ検索

### 環系データの種類

- 同一成分内に異なる複数の環系を有する化合物のレコード例 (RN : 839728-48-2)



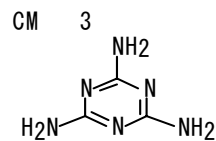
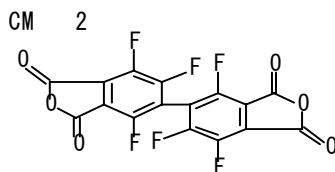
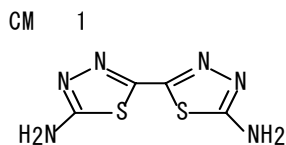
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

#### Ring System Data

同一成分中に異なる環系が含まれる場合は、  
各環系について環系データが収録される

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count	
C6	C6	6	C6	46.150.18	2	の環系データ
C40-C6	OC4-C6	5-6	C80	333.84.17	2	の環系データ

- 別成分に異なる複数の環系を有する化合物のレコード例 (RN : 695186-03-9)



別成分中に環系が含まれる場合は、  
成分番号ごとに各環系の環系データが収録される

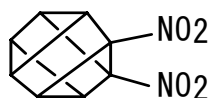
#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3N3	NCNCNC	6	C3N3	46.492.16	1 in CM 3
C40-C6	OC4-C6	5-6	C80	333.84.17	2 in CM 2
C2N2S	N2CSC	5	C2N2S	16.578.6	2 in CM 1

## A 環系データ検索

### 環系データの種類

- カゴ状化合物のレコード例 (RN : 99393-46-1)



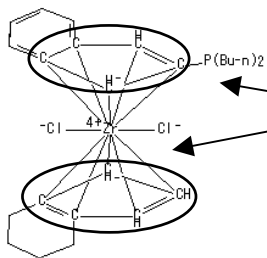
最小環は 5 個の 4 員環である  
(これらを含む 8 員環は考慮しない)

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

#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4-C4-C4-C4- C4	C4-C4-C4-C4- C4	4-4-4-4-4	C8	187.8.1	1

- 配位化合物のレコード例 (RN : 868530-72-7)



この環は 10 個の最小環 ZrC2 と 2 個の最小環 C6 からなる  
C5 としては登録されない

#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C2Zr-C2Zr-	ZrC2-ZrC2-	3-3-3-3-3-3-	C18Zr	5449.8.4	1
C2Zr-C2Zr-	ZrC2-ZrC2-	3-3-3-3-6-6			
C2Zr-C2Zr-	ZrC2-ZrC2-				
C2Zr-C2Zr-	ZrC2-ZrC2-				
C2Zr-C2Zr-C6-	ZrC2-ZrC2-C6-				
C6	C6				

## A 環系データ検索

### 環データフィールド

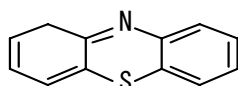
#### ■ 元素式, 元素配列, 環の大きさに関する検索フィールド

検索フィールド名 検索フィールドコード	定義	入力例 *4
<b>元素式 (EA)</b>		
環系の元素式 *1 *2 *3 /EA Elemental Analysis For Ring System	<環系全体> 環系を構成する最小環ごとの元素式 (EAS) をハイフンで結合したデータおよび成分内での存在数	S C4NS-C6-C6/EA S 1 C4NS-C6-C6/EA S C4NS-C6-#/EA S C4NS-C6-C#/EA
最小環の元素式 *1 *2 *3 /EAS Elemental Analysis For Smallest Ring	<最小環> 環系を構成する各最小環の元素式 (Hill 方式) および環系内での存在数	S C4NS/EAS S 1 C4NS/EAS S C6/EAS S 2 C6/EAS
<b>元素配列 (ES)</b>		
環系の元素配列 *1 *2 *3 /ES Elemental Sequence For Ring System	<環系全体> 環系を構成する最小環ごとの元素配列 (ESS) をハイフンで結合したデータおよび成分内での存在数	S NC2SC2-C6-C6/ES S 1 NC2SC2-C6-C6/ES
最小環の元素配列 *1 *2 *3 /ESS Elemental Sequence For Smallest Ring	<最小環> 環系を構成する各最小環の元素配列および環系内での存在数	S NC2SC2/ESS S 1 NC2SC2/ESS S C6/ESS S 2 C6/ESS
<b>環の大きさ</b>		
環系の環の大きさ *1 *2 *3 /SZ Size for the Ring System	<環系全体> 環系を構成する最小環の大きさ (SZS) をハイフンで結合したデータおよび成分内での存在数	S 6-6-6/SZ S 1 6-6-6/SZ S 6-6-#/SZ
最小環の大きさ *1 *2 /SZS Ring Size of Smallest Ring	<最小環> 最小環の環のサイズおよび環系内での存在数	S 6/SZS S 3 6/SZS

は主な検索フィールド

- \*1 同一環系内に限定する際は (S) 演算子を使う。
- \*2 同一成分内に限定する際は (P) 演算子を使う。
- \*3 トランケーションを利用できる。
- \*4 入力例は下記の化合物 (単成分物質) を想定。

RN : 261-86-9



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NS-C6-C6	NC2SC2-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.272.10	1

## A 環系データ検索

### 環データフィールド

#### ■ 環系および最小環の存在数に関する検索フィールド

検索フィールド名 検索フィールドコード	定義	入力例 *4
<b>最小環の数</b>		
環系内の最小環の数 *1 *2 /NRRS Number of Rings in Ring System	<最小環> 環系を構成する最小環の数	S 3/NRRS S 1/NRRS
物質内の最小環の数 (物質全体) /NR Number of Smallest Rings	<物質全体> 物質全体に含まれる最小環の数	S 7/NR S 6-8/NR S NR<=7
成分内の最小環の数 *2 *3 /CNR Number of Smallest Rings in a Component	<同一成分内> 各成分に含まれる最小環の数	S 7/CNR S 6-8/CNR S CNR<=7
<b>環系の数</b>		
物質内の環系の数 (物質全体) /NRS Number of Ring Systems	<物質全体> 物質全体に含まれる環系の数	S 5/NRS S 5-7/NRS S NRS>=5
成分内の環系の数 *2 *3 /CNRS Number of Ring Systems in a Component	<同一成分内> 各成分に含まれる環系の数	S 5/CNRS S 4-6/CNRS S CNRS>=5

■ は主な検索フィールド

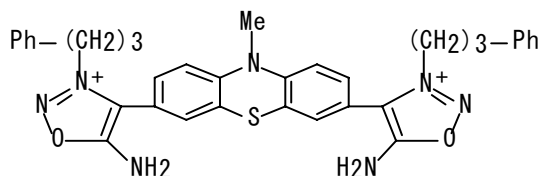
\*1 同一環系内に限定する際は (S) 演算子を使う。

\*2 同一成分内に限定する際は (P) 演算子を使う。

\*3 一つの成分に限定したフィールドコードには成分 (Component) を示す文字 “C” が付与される。

\*4 入力例は下記の化合物を想定。

RN : 141914-74-1



#### ●2 C1-

##### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C2N2O	N2O C2	5	C2N2O	16.262.6	2
C6	C6	6	C6	46.150.18	2
C4NS-C6-C6	NC2SC2-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.272.18	1



## A 環系データ検索

### 環データフィールド

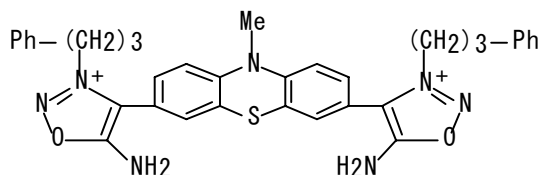
#### ■ 環系式, 環系識別子に関する検索フィールド

検索フィールド名 検索フィールドコード	定義	入力例 *4
<b>環系式</b>		
環系式 /RF Ring System Formula *1 *2 *3	<環系全体> 環系の構成元素 (Hill 方式) と成分内での存在数	S C12NS/RF S 1 C12N#/RF S C2N2O/RF S 2 C2N2O/RF
環系内の原子数 /RATC Ring Atom Count *1 *2	<環系全体> 環系を構成する原子数の総和	S 14/RATC S 5/RATC S 6/RATC
環系内の構成元素種 /REL Ring Element *1 *2	<環系全体> 環系を構成する元素の種類 (元素記号) および環系内での存在数	S S/REL S 1 S/REL S N/REL S 2 N/REL
環系内の異なる元素の種類数 /RELC Ring Element Count *1 *2	<環系全体> 環系を構成する異なる元素の種類数	S 3/RELC S 1/RELC
環系の構成元素式 /RELF Ring Elemental Formula *1 *2 *3	<環系全体> 環系を構成するすべての元素の種類 (環系式から各元素の存在数を削除) および成分内での存在数	S C N S/RELF S 1 C N S/RELF S C N O/RELF S 2 C N #/RELF
<b>環系識別子</b>		
環系識別子 /RID Ring Identifier *1 *2 *3	<環系全体> 詳細は後述	

■ は主な検索フィールド

- \*1 同一環系内に限定する際は (S) 演算子を使う.
- \*2 同一成分内に限定する際は (P) 演算子を使う.
- \*3 トランケーションを利用できる.
- \*4 入力例は下記の化合物を想定.

RN : 141914-74-1



#### ●2 C1-

##### Ring System Data

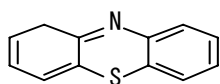
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C2N2O	N2OC2	5	C2N2O	16.262.6	2
C6	C6	6	C6	46.150.18	2
C4NS-C6-C6	NC2SC2-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.272.18	1

## A 環系データ検索

### 環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS)

- 環系の元素式は, /EA (Elemental Analysis For Ring System)で, 最小環の元素式は /EAS (Elemental Analysis For Smallest Ring) で検索できる.

例 : RN 261-86-9



#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NS-C6-C6	NC2SC2-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.272.10	1

- ○ : 最小環の元素式 C4NS/EAS, C6/EAS, C6/EAS
- □ : 環系の元素式 C4NS-C6-C6/EA

- ・ /EAS は環系を構成する各最小環の元素式. 元素は Hill 方式で表記する.
- ・ /EA は, 環系を構成する最小環ごとの構成元素 (Hill 方式) をハイフンで結合したデータで各環系を表すフィールドである.

#### ■ EA フィールドの表記規則

- ① 各々の最小環の組成を Hill 方式で表記 (= EAS)

例 : C6 C5N2 C5NS

- ② 各々の最小環の組成を, 少数員環から順次ハイフンで区切って表記

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

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

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

\* C3NS は "C3N1S1" とみなして, アルファベット・数値順で比較する.

例 : C3NS → C 3 N 1 S 1  
C3N2 → C 3 N 2

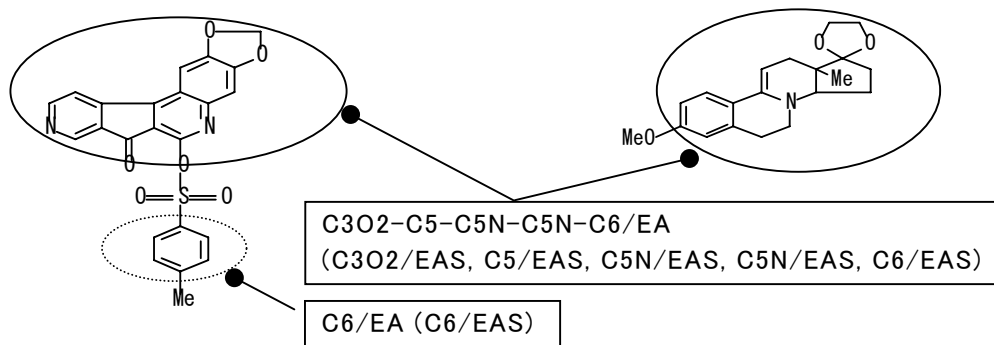
## A 環系データ検索

環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS)

### ■ レコード例

RN 511307-88-3

RN 18114-08-4



### ■ /EA, /EAS の検索上のポイント

- ・ /EA フィールドでは環系の中の各環の出現順序は示していない。したがって /EA フィールドは特定の組成の環を含む構造を、環の結合状態の如何にかかわらず検索するのに有効な手段である。
- ・ /EA フィールドは孤立した環系を検索する。つまり、他の環系と縮合しない。
- ・ /EAS フィールドで検索すると、指定した環が孤立環として、またはより大きい環の一部として存在する環が検索される。

例 : => S C6/EAS

← 少なくとも一つの C6 環を含む環系の検索

### ■ 存在数

- ・ /EA の存在数は、単成分物質、あるいは多成分物質の一つの成分中で環系の元素式の出現数を指定するものである。/EA フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。

例 : => S 4 C4N-C6/EA

← 孤立した C4N-C6 環系を成分内に 4 個含む物質を検索

- ・ /EAS の存在数は、一つの環系の中における最小環の元素式の出現数を指定するものである。/EAS フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。

例 : => S 2 C5N/EAS

← 2 つの C5N 環を持つ環系を含む成分の検索

- ・ /EA, /EAS では存在数を指定しなければ指定した式が一つ以上あるものが検索される。

## A 環系データ検索

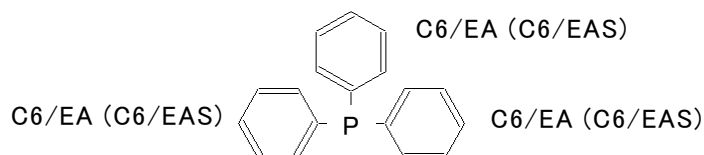
### 環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS)

- /EA, /EAS では存在数を入力するときには数値演算子や範囲を利用することができる.

例 : => S 2-4 C5N2/EA      ← 孤立した C5N2 環系を成分内に 2~4 個含む物質  
 => S >5 C5N2/EA      ← 孤立した C5N2 環系を成分内に 6 個以上含む物質  
 => S <=2 C5N2/EA      ← 孤立した C5N2 環系を成分内に 2 個以下含む物質

#### ■ 存在数の注意点

- /EA の存在数は単成分物質, あるいは多成分物質の一つの成分中の数, /EAS の存在数は一つの環系中の数である. そのため, 存在数の数え方に違いがある.
- レコード例 : Triphenylphosphine (RN 603-35-0)



#### Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	3

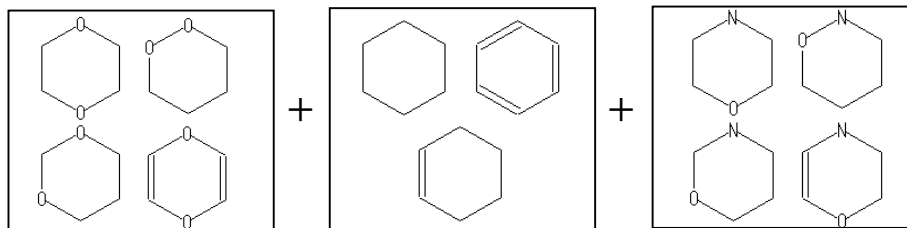
L1            1 S 603-35-0  
 L2            0 S L1 AND 1 C6/EA  
 L3            1 S L1 AND 3 C6/EA      ← /EA は同一成分中より C6/EA は 3 個  
 L4            1 S L1 AND 1 C6/EAS      ← /EAS は一つの環系の中より C6/EAS は 1 個  
 L5            0 S L1 AND 3 C6/EAS

## A 環系データ検索

環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS)

- 検索例 1: 炭素 4 個, 酸素 2 個を含む 6 員環と炭素 6 個のみからなる 6 員環, および炭素 4 個, 窒素と酸素を各 1 個含む 6 員環より下記の各条件を満たす化合物を検索する.

例えば,



### ・ 条件

- ① 3 個の環からなる化合物 (それ以上の環は縮合しない) を検索する.
- ② 環系に少なくとも 3 個の環 (縮合してもよい) からなる化合物を検索する.
- ③ ②でさらに, 炭素 4 個, 硫黄 1 個からなる環系が同一成分中にある化合物に限定する.

- ① 3 個の環からなる化合物 (それ以上の環は縮合しない) を検索する.

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E C4NO-C4O2-C6/EA 5

E1	2	C4NO-C4O2-C5N-C6-C6/EA
E2	23	C4NO-C4O2-C5O/EA
E3	26 -->	C4NO-C4O2-C6/EA
E4	2	C4NO-C4O2-C6-C5N2/EA
E5	2	C4NO-C4O2-C6-C6-C6-C6/EA

3 個以上の環は縮合しないので,  
/EA を利用できる  
C4NO-C4O2-C6 を /EA フィールドで  
EXPAND する

=> S E3

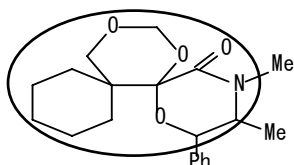
← E3 を検索する

L1 26 C4NO-C4O2-C6/EA

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L1 26 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 1, 14, 16-Trioxa-4-azadispiro[5.0.5.4]hexadecan-5-one, 3, 4-dimethyl-2-phenyl-  
, (2R, 3S, 6R) - (9C1)  
MF C20 H27 N O4



SCAN 表示形式には環系データは  
含まれない

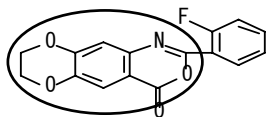
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 25

## A 環系データ検索

環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS)

L1 26 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
 MF C16 H10 F N O4



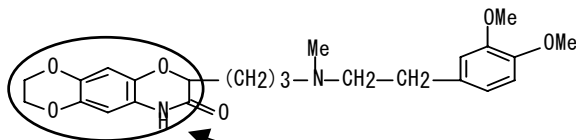
\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

:

=> D L1 RN STR RSD 20

← RSD 表示形式で環系データを表示する  
 RN STR RSD 表示形式 (223 円/件)

L1 ANSWER 20 OF 26 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 RN 212578-36-4 REGISTRY



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE

孤立した C4NO-C4O2-C6 環系が  
 得られた

Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C4NO-C4O2-C6	NC2OC2-OC2OC2-C6	6-6-6	C1ON03	2508.958.1	1

② 環系少なくとも 3 個の環 (縮合してもよい) からなる化合物を検索する.

=> S (C4NO(S)C4O2(S)C6)/EAS  
 692661 C4NO/EAS  
 318645 C4O2/EAS  
 25368441 C6/EAS  
 L2 166 (C4NO(S)C4O2(S)C6)/EAS

縮合してもよいので /EA は使用できない  
 このような場合は, /EAS を利用する  
 同一環系に限定する際は (S) 演算子を利用する

=> S L2 NOT L1  
 L3 140 L2 NOT L1

← ① 以外の物質を確認する

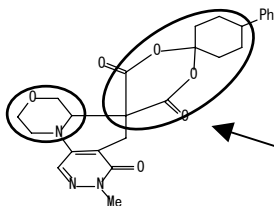
## A 環系データ検索

環系の元素式 (/EA), 最小環の元素式 (/EAS)

=> D\_SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L3 140 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Dispiro[cyclohexane-1,2'-[1,3]dioxane-5',6''(4''H)-  
 pyridazino[4',5':5,6]pyrido[2,1-c][1,4]oxazine]-4',4'',6'-trione,  
 3'',5'',6''a,7'',9'',10''-hexahydro-3''-methyl-4-phenyl-, (4S,6''aR)- (9CI)  
 MF C25 H27 N3 O6

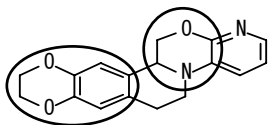


/EAS フィールドで検索したので、指定した 3 個の環を含むより大きな環系もヒットする

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

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

L3 140 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN [1,4]Dioxino[2,3-g]pyrido[3',2':5,6][1,4]oxazino[3,4-a]isoquinoline,  
 6,7,10,11,13b,14-hexahydro-  
 MF C17 H16 N2 O3



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

③ ②でさらに、炭素 4 個、硫黄 1 個からなる環系が同一成分中にある化合物に限定する。

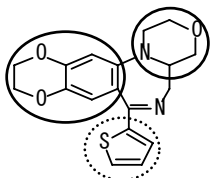
=> S L2(P)C4S/EA  
 853476 C4S/EA  
 L4 1 L2(P)C4S/EA

C4S 環を同一成分中に限定する際は (P) 演算子を利用する

=> D RN STR RSD

← RSD 表示形式で環系データを表示する  
 RN STR RSD 表示形式 (223 円/件)

L4 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 RN 105138-24-7 REGISTRY



C4S 環が ② の環系と同一成分中に存在する化合物がヒットする

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

Ring System Data

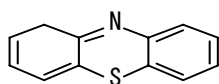
Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4S	SC4	5	C4S	16.145.3	1
C4NO	NC2OC2-	6-6-6-7	C14N2O3	6091.32.1	1
C5N2	OC2OC2-C6-				
	NC2NC3				

## A 環系データ検索

### 環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

- 環系の元素配列は、/ES (Elemental Sequence) で、最小環の元素配列は /ESS (Elemental Sequence For Ring System) で検索できる。

例 : RN 261-86-9



#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NS-C6-C6	NC2SC2-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.272.10	1

- ○ : 最小環の元素配列 NC2SC2/ESS, C6/ESS, C6/ESS
- □ : 環系の元素配列 NC2SC2-C6-C6/ES

- ・ /ESS は環系を構成する各最小環の元素配列を収録している。
- ・ /ES は、構成する最小環ごとの元素配列をハイフンで結合したデータで各環系を表すフィールドである。

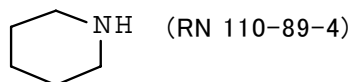
#### ■ ESS フィールドの表記規則

- ① 単一元素のみから成る環は、EA と同様に表記する。

C6  
N6

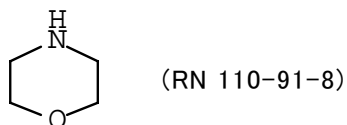
- ② ヘテロ環はヘテロ原子を起点として元素配列を表記する。

NC5



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

NC2OC2



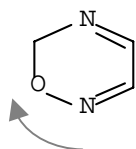


## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

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

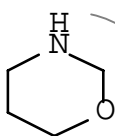
NOCNC2



(RN 34359-13-2)

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

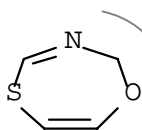
NCOC3



(RN 14558-49-7)

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

NCOC2SC



(RN 51272-26-5)

### ■ ES フィールドの表記規則

- ① ESS フィールドの表記規則 ① ~ ⑥ に沿う。

#### ② 環の順序

- 1) 環の式の配列は小さい環から大きい環への順序である。

例 : OCOC2-NC5-C7

- 2) 同じ大きさの環が 2 個以上あるときは炭素数の小さい順に表記する。

例 : NCOC2-NC4

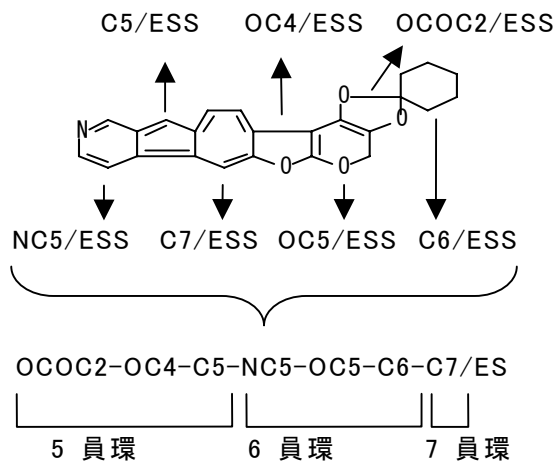
- 3) 環の大きさが同じで、炭素数も同じ場合は、左側よりアルファベット・数値の少ない順で表記する。

例 : NOC4-O2C4    NOC4-N2C4

## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

### ■ レコード例 (RN 65636-52-4)



- ・ 5員環では炭素の数が, OCOC2 の場合 C3, OC4 の場合 C4 となるため, OCOC2-OC4-C5 の配列になる.
- ・ 6員環では炭素の数が, NC5, OC5 の場合 C5 となり, N O のアルファベット順で, NC5-OC5-C6 の配列になる.

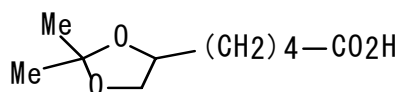
### ■ /ES, /ESS の検索上のポイント

- ・ /ES フィールドは環系の中の環の配列を示さない. したがって /ES フィールドは特定の組成と原子配列を持つ環を含む構造を, 環系の結合状態に関わらず検索するのに有効な手段である.
- ・ /ES フィールドは孤立した環系を検索する. つまり, 他の環系と縮合しない.
- ・ /ESS フィールドで検索すると, 指定した環が孤立環として, またはより大きい環の一部として存在する環が検索される.

例 : => S OCOC2/ESS

← 孤立した OCOC2 環あるいは少なくとも一つの OCOC2 環を含む環系の検索

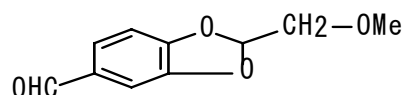
RN 949097-41-0



OCOC2/ES  
(OCOC2/ESS)

C3O2/EA  
(C3O2/EAS)

RN 958996-23-1



OCOC2-C6/ES  
(OCOC2/ESS, C6/ESS)

C3O2-C6/EA  
(C3O2/EAS, C6/EAS)

## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

### ■ 存在数

- /ES の存在数は、単成分物質、あるいは多成分物質の一つの成分中で環系の元素配列の出現数を指定するものである。/ES フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。

例 : => S 2 OC2OC2-C6/ES ← 孤立した OC2OC2-C6 環系を成分内に 2 個含む物質の検索

- /ESS の存在数は、一つの環系の中で最小環の元素配列の出現数を指定するものである。/ESS フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。

例 : => S 2 NC5/ESS ← 環系内に 2 個の NC5 環含む物質の検索

- /ES, /ESS では存在数を指定しなければ指定した式が一つ以上あるものが検索される。
- /ES, /ESS では存在数を入力するときには数値演算子や範囲を利用することができる。

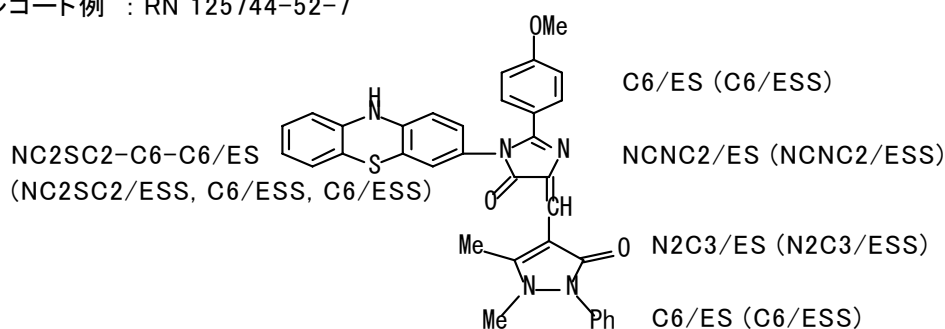
例 : => S 2-4 OC2OC2-C6/ES ← 孤立した OC2OC2-C6 環系を成分内に 2~4 個含む物質の検索

=> S >3 NCSC3/ESS ← 環系内に NCSC3 環系が 4 個以上含む物質の検索

### ■ 存在数の注意点

- /ES の存在数は単成分物質、あるいは多成分物質の一つの成分中の数、/ESS の存在数は一つの環系中の数である。そのため、存在数の数え方に違いがある。

- レコード例 : RN 125744-52-7



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C3N2	N2C3	5	C3N2	16.165.9	1
C3N2	NCNC2	5	C3N2	16.195.2	1
C6	C6	6	C6	46.150.18	2
C4NS-C6-C6	NC2SC2-C6-C6	6-6-6	C12NS	2508.272.18	1

## A 環系データ検索

### 環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

- ESS の存在数は, 各環系ごとにカウントをする. そのため, NC2SC2-C6-C6 環系から C6/ESS は 2 個, C6 環系から C6/ESS は 1 個となるので, 存在数は 1 または 2 でヒットする.

L1	1 S 125744-52-7	
L2	0 S L1 AND 1 C6/ES	
L3	1 S L1 AND 2 C6/ES	← 同一成分中に C6/ES は 2 個
L4	0 S L1 AND 4 C6/ES	
L5	1 S L1 AND 1 C6/ESS	← C6 環系から C6/ESS が 1 個
L6	1 S L1 AND 2 C6/ESS	← NC2SC2-C6-C6 環系から C6/ESS が 2 個
L7	0 S L1 AND 4 C6/ESS	



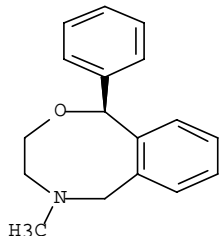
#### ・/EAS と /ESS の違い

/ESS は最小環に存在しなければならない元素だけでなく, その配列順序まで指定する点で /EAS より特定性が高くなる.

## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

### ■ 検索例 2 : 下記の物質を検索する.



この物質を検索する手法として以下の 2 通りがある

- ① 構造検索 (EXA 検索をする)
- ② 分子式検索 (絞込みの方法として部分名称検索や環系データを使用する)

どの手法が効率的で経済的か？

#### ① 構造検索

=> FILE REGISTRY

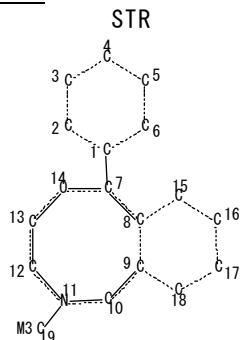
← REGISTRY ファイルに入る

=> Uploading C:\\$STNEXP\Queries\PRA2.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

L1



=> D QUE L# と入力すると, アップロードした構造質問式を確認できる (無料)

NODE ATTRIBUTES:

```

HCOUNT IS M3 AT 19
NSPEC IS R AT 1
NSPEC IS R AT 2
NSPEC IS R AT 3
NSPEC IS R AT 4
NSPEC IS R AT 5
NSPEC IS R AT 6
NSPEC IS R AT 7
    
```

: 省略

```

NSPEC IS R AT 13
NSPEC IS R AT 14
NSPEC IS R AT 15
NSPEC IS R AT 16
NSPEC IS R AT 17
NSPEC IS R AT 18
NSPEC IS C AT 19
    
```

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

MLEVEL IS CLASS AT 19

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED

NUMBER OF NODES IS 19

STEREO ATTRIBUTES: NONE

A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

=> S L1 EXA ← サンプル検索 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 16:44:25 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 0 ITERATIONS 0 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 0 TO 0  
PROJECTED ANSWERS: 0 TO 0

L2 0 SEA EXA SAM L1

=> S L1 EXA FULL ← フルファイル検索  
FULL SEARCH INITIATED 16:44:33 FILE 'REGISTRY' (EXA 検索は 7,790 円)  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 23 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 23 ITERATIONS 6 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

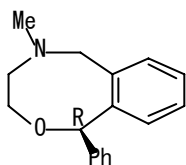
L3 6 SEA EXA FUL L1

構造検索は効率的だが, 検索料が高額になる  
(検索料 : 7,790 円)

=> D SCAN

L3 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-5-methyl-1-phenyl-, (1R)-  
MF C17 H19 N O  
CI COM

Absolute stereochemistry.

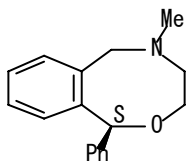


\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 5

L3 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-5-methyl-1-phenyl-, (1S)-  
MF C17 H19 N O  
CI COM

Absolute stereochemistry. Rotation (+).



← 目的物

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

:

## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

### ②-1 分子式検索 (絞込みとして部分名称を使用する)

```

=> E C17H19NO/MF 5
E1 1 C17H19NN1O6.H2O/MF
E2 1 C17H19NN1OS4/MF
E3 2867 --> C17H19NO/MF
E4 2 C17H19NO.1/2C4H4O4/MF
E5 1 C17H19NO.1/2C6H4O4S/MF

=> S E3
L4 2867 C17H19NO/MF

=> S L4 AND PHENYL?
16089710 PHENYL?
L5 2042 L4 AND PHENYL?

=> S L5 AND METHYL?
20029329 METHYL?
L6 1545 L5 AND METHYL?
  
```

← 分子式 (/MF) を EXPAND で確認

← E3 を検索

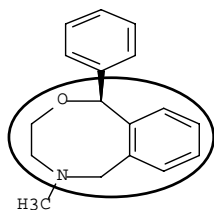
← 部分名で回答を絞り込む

← L5 の回答件数が多い場合は、さらに部分名で回答を絞り込む

部分名で検索する場合は、なるべく検索漏れをおこさないように、CA 索引名に含まれる部分名を利用する

今回の検索例では、分子式で検索し、部分名称で絞り込みを行っても件数が多数あり、数十件に絞り込むことは困難であるため非効率的である  
(検索料 : 670 × 3 = 2,010 円)

### ②-2 分子式検索 (絞込みとして環系データを使用する)



特徴のある環系に注目する  
この環系の元素配列は C6-NC2OC4

```

=> E C6-NC2OC4/ES 5
E1 2 C6-NC2OC3OC5/ES
E2 2 C6-NC2OC3SC3/ES
E3 357 --> C6-NC2OC4/ES
E4 4 C6-NC2OC4OC2/ES
E5 3 C6-NC2OC4OC2NC2SC2NC2SC2/ES

=> S L4 AND E3
357 C6-NC2OC4/ES
L7 9 L4 AND C6-NC2OC4/ES
  
```

← C6-NC2OC4/ES を EXPAND で確認

← 分子式検索を行い、絞込みとして環系データを利用する

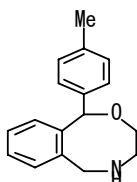
A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L7 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN 1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-1-(4-methylphenyl)-  
 MF **C17 H19 N O**



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

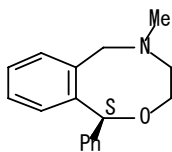
全ての回答を確認するために、  
残りの 8 件も表示して確認する

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):8

L7 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN 1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-5-methyl-1-phenyl-, (1S)-  
 MF **C17 H19 N O**  
 CI COM

Absolute stereochemistry. Rotation (+).

目的の物質が見つかったら、IN フィールド中の  
名称を /CN フィールドで検索する



=> E 1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-5-methyl-1-phenyl-, (1S)-/CN 5  
 E1 1 1H-2,5-BENZOAZOCINE, 3,4,5,6-TETRAHYDRO-5-METHYL-1-PHENYL-/CN  
 E2 1 1H-2,5-BENZOAZOCINE, 3,4,5,6-TETRAHYDRO-5-METHYL-1-PHENYL-, (1R)-/CN  
 E3 1 --> 1H-2,5-BENZOAZOCINE, 3,4,5,6-TETRAHYDRO-5-METHYL-1-PHENYL-, (1S)-/CN  
 E4 1 1H-2,5-BENZOAZOCINE, 3,4,5,6-TETRAHYDRO-5-METHYL-1-PHENYL-, (R)-/CN  
 E5 1 1H-2,5-BENZOAZOCINE, 3,4,5,6-TETRAHYDRO-5-METHYL-1-PHENYL-, (S)-/CN

=> S E3

L8 1 "1H-2,5-BENZOAZOCINE, 3,4,5,6-TETRAHYDRO-5-METHYL-1-PHENYL-, (1S)-"/CN

今回の検索では、分子式の検索で絞込みに /ES を使用すると効率的で  
 経済的であった  
 (分子式検索料も含めて考えると、②-2 の検索料 : 670 × 3 = 2,010 円)



A 環系データ検索

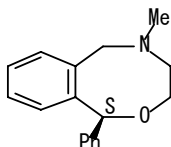
環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

=> D IDE RSD

← IDE RSD 表示形式 (317円/件)

L8 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 RN 110011-82-0 REGISTRY  
 ED Entered STN: 29 Aug 1987  
 CN **1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-5-methyl-1-phenyl-, (1S)-**  
 (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN 1H-2,5-Benzoxazocine, 3,4,5,6-tetrahydro-5-methyl-1-phenyl-, (S)-  
 OTHER NAMES:  
 CN (+)-Nefopam  
 FS STEREOSEARCH  
 MF C17 H19 N O  
 CI COM  
 SR CA  
 LC STN Files: BEILSTEIN\*, BIOSIS, CA, CAPLUS, IPA, TOXCENTER, USPATFULL  
 (\*File contains numerically searchable property data)

Absolute stereochemistry. Rotation (+).



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

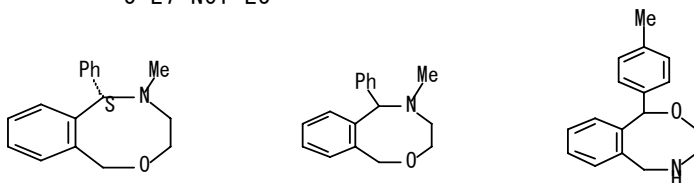
28 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 28 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C6-C6NO	C6-NC2OC4	6-8	C10NO	1401.18.2	1

参考 : ②-2 の環系データを利用した結果 (9 件) から ① の構造検索の結果 (6 件) を除いた構造 (3 件) は下記の通りである

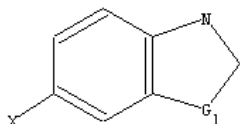
=> S L7 NOT L3  
 L9 3 L7 NOT L3



## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

■ 検索例 3 : 下記の構造を持つ化合物を検索する.



G1 : 炭素, 酸素, 窒素のいずれか

X : ハロゲン

環は縮合してもよい

置換基は何があってもよい

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading C:\¥STNEXP¥Queries¥pra4.str

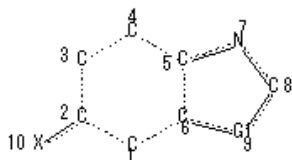
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

← => D QUE L# と入力するとアップロードした構造質問式を確認できる (無料)

L1 STR

O 11 N 12 C 13



VAR G1=11/12/13

NODE ATTRIBUTES:

NSPEC IS R AT 1

NSPEC IS R AT 2

:

NSPEC IS R AT 8

NSPEC IS R AT 9

NSPEC IS C AT 10

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

MLEVEL IS CLASS AT 10

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED

NUMBER OF NODES IS 13

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L1

← サンプル検索 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 13:37:26 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 51793 TO ITERATE

3.9% PROCESSED 2000 ITERATIONS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*INCOMPLETE\*\***

BATCH **\*\*COMPLETE\*\***

PROJECTED ITERATIONS: 1022281 TO 1049439

PROJECTED ANSWERS: 66374 TO 73466

L2 50 SEA SSS SAM L1

FULL FILE PROJECTIONS が ONLINE で INCOMPLETE で, BATCH では COMPLETE である

このため回答を得るには, BATCH 検索をするか, オンライン検索を実行する場合はスクリーンやサブセット検索を用いて INCOMPLETE を回避する必要がある

## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

- ・ FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避するため, 今回はサブセット検索を利用する.

① 最小環の元素配列を検索する (辞書検索の回答セットを作成する).

② 辞書検索 ① の回答セットをサブセットにして, 構造検索を実行する.

- ・ サブセット検索を利用すると FULL FILE PROJECTION INCOMPLETE を回避したり, 限定した構造で二次構造検索ができる.

- ・ サブセット検索は, 回答集合の L 番号の中をさらに構造検索する機能である.

- サブセットに指定できる回答セット

構造検索のみの回答セット L 番号

辞書検索のみの回答セット L 番号

構造検索 + 辞書検索の回答セット L 番号

- 入力方法

=> S L 番号 検索タイプ SUB=L 番号 検索範囲

構造質問式

構造検索タイプ

SSS, CSS

FAM, EXA

サブセットにする

回答セットの

L 番号

検索範囲

SAM (サンプル検索)

FULL (フルファイル検索)

RANGE (範囲指定検索)

\* 検索範囲は必ず入力  
する



サブセット検索 (フルファイル検索)

構造検索の回答セットのみ : 割引適用 (5,480 円/回)

辞書検索の回答セットのみ : 割引なし

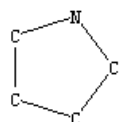
辞書検索 + 構造検索の回答セット : 割引なし

## A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

- 最小環の元素配列を考える

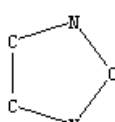
- 構造 L1 の最小環の構造は G1 = C, O, N で以下の 3 通り考えられる。



NC4/ESS



NCOC2/ESS



NCNC2/ESS

=> S NC4/ESS OR NCNC2/ESS OR NCOC2/ESS

4079798 NC4/ESS

2057911 NCNC2/ESS

496471 NCOC2/ESS

L3 6277755 NC4/ESS OR NCNC2/ESS OR NCOC2/ESS

75% OF LIMIT FOR TOTAL ANSWERS REACHED

3 通りの最小環の元素配列を /ESS  
フィールドで検索する

=> S L1 SUB=L3 SAM

SAMPLE SUBSET SEARCH INITIATED 13:39:00 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 29904 TO ITERATE

回答セット (L3) をサブセットにして  
構造 (L1) をサンプル検索する

6.7% PROCESSED 2000 ITERATIONS  
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)  
SEARCH TIME: 00.00.01

50 ANSWERS

COMPLETE になった

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

587738 TO 608422

PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET):

14727 TO 18167

L4 50 SEA SUB=L3 SSS SAM L1

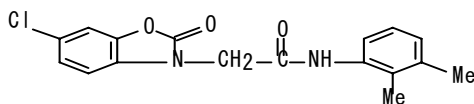
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L4 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN 3(2H)-Benzoxazoleacetamide, 6-chloro-N-(2,3-dimethylphenyl)-2-oxo-

MF C17 H15 Cl N2 O3



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

フルファイル検索を実行

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

(注) 辞書検索をサブセットにしたフルファイル  
検索は通常の SSS 検索料金が課金される

=> S L1 SUB=L3 FULL

FULL SUBSET SEARCH INITIATED 13:40:04 FILE 'REGISTRY'

FULL SUBSET SCREEN SEARCH COMPLETED - 601092 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 601092 ITERATIONS  
SEARCH TIME: 00.00.02

65212 ANSWERS

L5 65212 SEA SUB=L3 SSS FUL L1

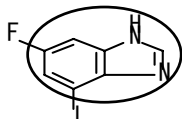
A 環系データ検索

環系の元素配列 (/ES), 最小環の元素配列 (/ESS)

=> D RN STR RSD 1 10 20

← RN STR RSD 表示形式 (223 円/件)

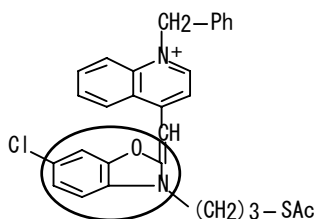
L5 ANSWER 1 OF 65212 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
RN 1000308-33-7 REGISTRY



Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C3N2-C6	<b>NCNC2</b> -C6	5-6	C7N2	333.401.37	1

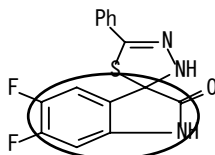
L5 ANSWER 10 OF 65212 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
RN 1000180-86-8 REGISTRY



Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C3NO-C6	<b>NCOC2</b> -C6	5-6	C7NO	333.471.12	1
C5N-C6	NC5-C6	6-6	C9N	591.79.52	1

L5 ANSWER 20 OF 65212 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
RN 960377-28-0 REGISTRY



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

Ring System Data

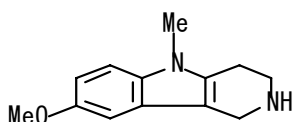
Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1
C2N2S-C4N-C6	N2CSC- <b>NC4</b> -C6	5-5-6	C9N3S	1661.65.4	1

## A 環系データ検索

環系の環の大きさ (/SZ), 最小環の大きさ (/SZS)

- 環系の環の大きさは, /SZ (Size for the Ring System) で, 最小環の環の大きさは /SZS (Ring Size of Smallest Ring) で検索できる.

例 : RN 618910-07-9



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4N-C5N-C6	NC4-NC5-C6	5-6-6	C11N2	1839.27.7	1

- ○ : 最小環の大きさ 5/SZS, 6/SZS, 6/SZS
- □ : 環系の大きさ 5-6-6/SZ

- ・ SZS は環系を構成する個々の最小環の大きさを収録している.
- ・ SZ は環系を構成する個々の最小環の大きさをハイフンで結合したデータを収録している.

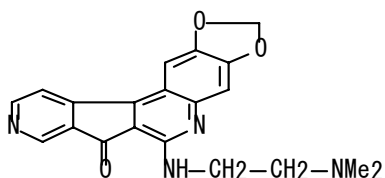
### ■ SZ フィールドの表記規則

- ・ 環の大きさの昇順に表記する.

例 : 4-5-6-6-7

- ・ 環の連結の順序は示さない.

### ■ レコード例 (RN 511307-87-2)



5 個の最小環の大きさは左から右へ 6/SZS, 5/SZS, 6/SZS, 6/SZS, 5/SZS であり, 環系の環の大きさは 5-5-6-6-6/SZ である

## A 環系データ検索

### 環系の環の大きさ (/SZ), 最小環の大きさ (/SZS)

#### ■ /SZ, /SZS の検索上のポイント

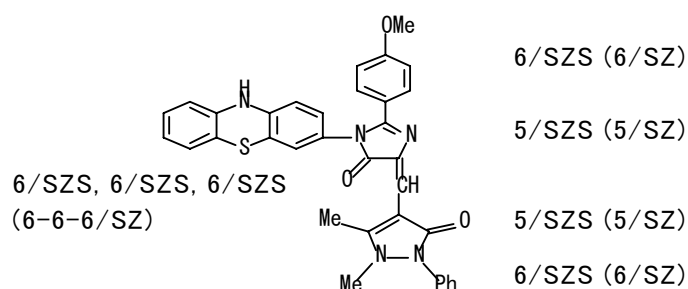
- ・ /SZ フィールドは環系内の環の連結の順序を示さず、環の大きさを示している。したがって /SZ フィールドは特定の大きさの環が任意の順に結合している構造の検索に便利である。
- ・ /SZ フィールドは孤立した環系を検索する。つまり、他の環系と縮合しない。
- ・ /SZS フィールドで検索すると、指定された環が孤立環として、またはより大きい環の一部として存在する環が検索される。

#### ■ 存在数

- ・ /SZ の存在数は、単成分物質、あるいは多成分物質の一つの成分中で環系の環の大きさの出現数を指定するものである。/SZ フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。
- ・ /SZS の存在数は、一つの環系の中で最小環の大きさの出現数を指定するものである。/SZS フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。
- ・ /SZ, /SZS では存在数を指定しなければ、指定した式が一つ以上あるものが検索される。

#### ■ 存在数の注意点

- ・ /SZ の存在数は単成分物質、あるいは多成分物質の一つの成分中の数、/SZS の存在数は一つの環系の中での数である。そのため、存在数の数え方に違いがある。
- ・ レコード例 (RN 125744-52-7)



- 上記の化合物の存在数は SZ の場合、同一成分中で考えるため、2 5/SZ あるいは 2 6/SZ でヒットするが、SZS の場合は一つの環系で考えるので、1 5/SZS, 1 6/SZS あるいは 3 6/SZS でヒットする。

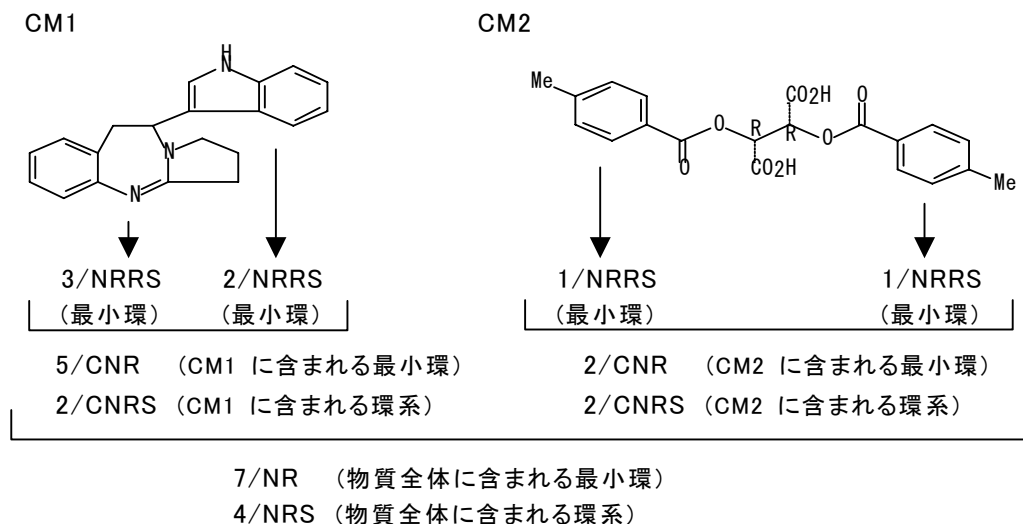
L1	1 S 125744-52-7	
L2	0 S L1 AND 1 6/SZ	
L3	1 S L1 AND 2 6/SZ	← SZ は同一成分中より 2 6/SZ でヒット
L4	1 S L1 AND 1 6/SZS	← SZS は一つの環系より 1 6/SZS でヒット
L5	0 S L1 AND 2 6/SZS	
L6	1 S L1 AND 3 6/SZS	← SZS は一つの環系より 3 6/SZS でヒット

## A 環系データ検索

最小環の数 (/NRRS, /NR, /CNR), 環系の数 (/NRS, /CNRS)

### ■ 最小環および環系の数え方

例 : RN 36821-63-3



### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	2 in CM 2
C4N-C6	NC4-C6	5-6	C8N	333.151.57	1 in CM 1
C4N-C6-C5N2	NC4-C6-NCNC4	5-6-7	C12N2	2515.59.1	1 in CM 1

### ■ 最小環の数に関する検索フィールド

- ・ 環系を構成する最小環の数は /NRRS (Number of Rings in Ring System) で検索できる。
- ・ 各成分に含まれる最小環の数は /CNR (Number of Smallest Rings in a Component) で検索できる。
- ・ 物質全体に含まれる最小環の数は /NR (Number of Smallest Rings) で検索できる。

### ■ 環系の数に関する検索フィールド

- ・ 各成分に含まれる環系の数は /CNRS (Number of Ring Systems in a Component) で検索できる。
- ・ 物質全体に含まれる環系の数は /NRS (Number of Ring System) で検索できる。

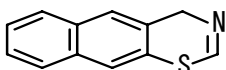


## A 環系データ検索

環系式 (/RF, /RATC, /REL, /RELC, /RELF)

### ■ 環系式に関する検索フィールド

例 : RN 324-85-6



Ring System Data

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

- C12NS : 環系

- 原子数の総和は 14 である (14/RATC)
- 環系を構成する元素は C と N と S である. (C/REL, N/REL, S/REL)
- 環系を構成する異なる元素は C, N, S の 3 種類 (3/RELC)
- 環系の構成元素式は環系式 (RF) より数を削除した式 (C N S/RELF)

#### ・ /RF (環系式 : Ring System Formula)

- 環系の構成元素 (Hill 方式) を含む.
- 環を構成する原子のみを考慮し, 環に結合している水素その他の原子は数えない.

#### ・ /RATC (環系内の原子数 : Ring Atom Count)

- 環系を構成する原子数の総和.
- /RF フィールドの原子の合計数が /RATC フィールドに収録される.

#### ・ /REL (環系内の構成元素種 : Ring Element)

- 環系を構成する元素の種類.
- /RF フィールドに含まれる各元素が /REL フィールドに収録される.



ヘテロ原子を含む環系には **Q/REL** を利用できる.



例えば, Morpholine は C/REL, N/REL, O/REL でヒットし, またヘテロ原子 N, O が含まれているため, Q/REL でもヒットする.

金属原子を含む環系には **M/REL** を利用できる.

ハロゲン原子を含む環系には **X/REL** を利用できる.

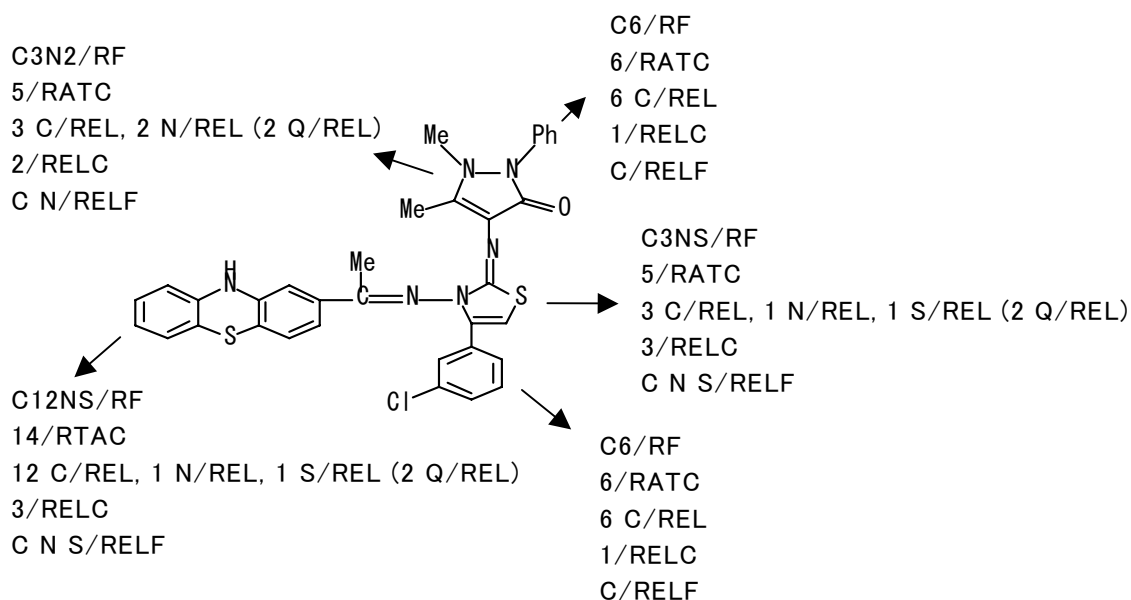
\* Q, M, X の定義については後述

## A 環系データ検索

環系式 (/RF, /RATC, /REL, /RELC, /RELF)

- ・ /RELC (環系内の異なる元素の種類数 : Ring Element Count)
  - 環系を構成する異なる元素の数を収めた数値フィールド.
- ・ /RELF (環系の構成元素式 : Ring Elemental Formula)
  - 環系を構成するすべての元素の種類.
  - /RF フィールドから各元素に対する数値を除いたものと同じになる.

### ■ レコード例 (RN 474765-95-2)



### ■ 存在数

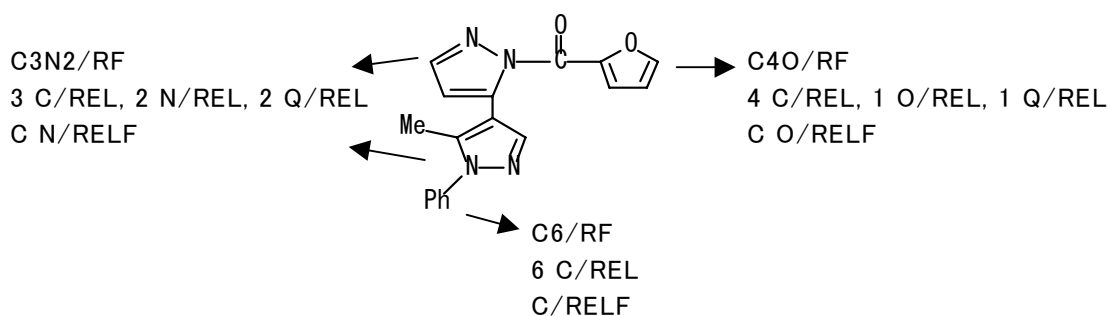
- ・ /RF, /RELF の存在数は単成分物質あるいは多成分物質の一つの成分中の環系式または環系の構成元素式の出現数を指定するものである。
- ・ /REL の存在数は一つの環系中の構成元素種の出現数を指定するものである。
- ・ /RF, /REL, /RELF フィールドは検索語の前にその存在数をつけることができる。存在数を入力する場合には任意の数値演算子や範囲を利用することができる。
- ・ 存在数を指定しなければ、/RF, /REL, /RELF フィールドで指定した語が一つ以上あるものが検索される。

## A 環系データ検索

環系式 (/RF, /RATC, /REL, /RELC, /RELF)

### ■ 存在数の注意点

- /RF, /RELF の存在数は単成分物質, あるいは多成分物質の一つの成分中の数, /REL の存在数は一つの環系中の数である. そのため, 存在数の数え方に違いがある.
- レコード例 (RN 957333-13-0)



- 上記の化合物の存在数は /RF の場合, C3N2 環が同一成分中に 2 個あるため, 2 C3N2/RF となる. /RELF の場合も同一成分中で数えるため, 2 C N/RELF となる. それに対して, /REL は一つの環系で考えるので, N/REL を検索式に使用すると存在数は 2 でヒットする (2 より大きいとヒットしない). さらに, ヘテロ原子を含む環系より Q/REL を利用できる. C4O 環より酸素原子 1 個より 1 Q/REL でヒット, C3N2 環より窒素原子 2 個より 2 Q/REL でヒットする.

L1	1 S 957333-13-0	
L2	0 S L1 AND 1 C3N2/RF	
L3	1 S L1 AND 2 C3N2/RF	← 同一成分中に C3N2 環が 2 個含まれる
L4	0 S L1 AND 1 C N/RELF	
L5	1 S L1 AND 2 C N/RELF	← C3N2 環が同一成分中に 2 個あるので, 構成元素式 C N/RELF も 2 でヒットする
L6	0 S L1 AND >2 N/REL	
L7	1 S L1 AND 2 N/REL	← 一つの環系ごとに考え C3N2 環より 2 N/REL
L8	1 S L1 AND 1 Q/REL	← 一つの環系ごとに考え C4O 環より 1 Q/REL
L9	1 S L1 AND 2 Q/REL	← 一つの環系ごとに考え C3N2 環より 2 Q/REL



#### REGISTRY ファイルの Q, X, M の定義

Q : C, H 以外の元素

X : ハロゲン (F, CL, BR, I, At)

M : 金属\*

\* 金属とは, 下記の元素を除くすべての元素を指す

Ar As At B Br C Cl F H He I Kr N Ne O P Rn S Se Si Te Xe

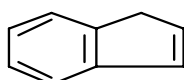
## A 環系データ検索

### 環系識別子 (/RID)

- 環系識別子 (RID : Ring System Identifier) は各環系の骨格, 元素の位置, 結合次数に着目して付与されたユニークなコードである。

- 環系識別子は 2 つのピリオドで 3 箇所に分かれており, 骨格, 元素の位置, 結合次数 (単結合, 二重結合, 三重結合, ノーマライズド結合 (\*)) を表す。

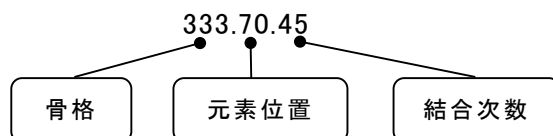
例 : RN 324-85-6



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C5-C6	C5-C6	5-6	C9	333.70.45	1

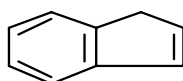
- 333.70.45 : 環系



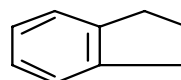
(\* ) ノーマライズド結合については参考参照

- 環系識別子の例 (RID 333. XX. XXX の化合物)

Indene : 333.70.45  
(RN 95-13-6)

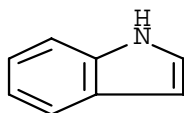


Indane : 333.70.44  
(RN 496-11-7)

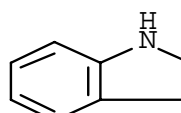


RID : 333.70

1H-Indole : 333.151.57  
(RN 120-72-9)

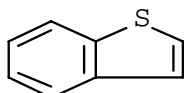


2,3-Dihydro-1H-indole : 333.151.54  
(RN 496-15-1)

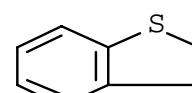


RID : 333.151

Benzo[b]thiophene : 333.246.11  
(RN 95-15-8)



2,3-Dihydro-benzo[b]thiophene : 333.246.10  
(RN 4565-32-6)



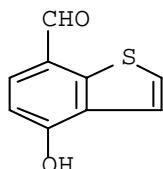
RID : 333.246

## A 環系データ検索

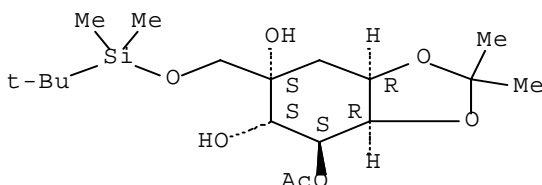
### 環系識別子 (/RID)

■ 環系識別子は /RID フィールドで検索する。下記の 3 レベルで検索できる。

① 骨格のみ指定した検索 ⇒ S 333/RID

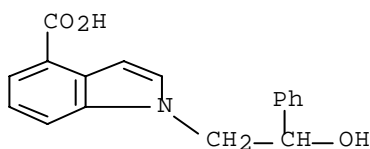


(RN 199339-71-4)

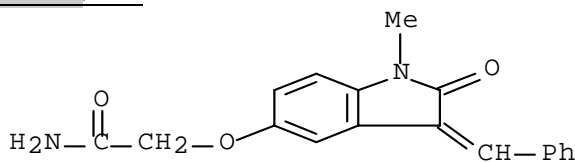


(RN 199338-58-4)

② 骨格と元素位置を指定した検索 ⇒ S 333.151/RID

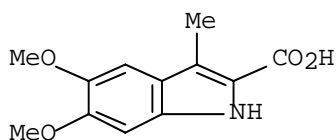


(RN 192997-35-6)

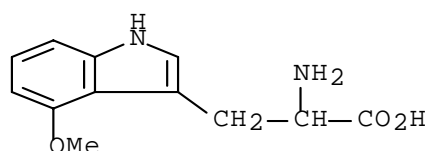


(RN 197008-33-6)

③ 骨格, 元素位置, および結合次数を指定した検索 ⇒ S 333.151.57/RID



(RN 186703-89-9)



(RN 199540-73-3)

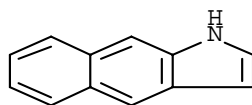
注: 元素位置あるいは結合次数のみで検索することはできない。  
「骨格のみ」「骨格と元素位置」「骨格, 元素位置, 結合次数」での検索となる。

・ ① ② の場合でも前方一致記号は不要



・ 環系識別子の検索では, さらに別の環が縮合した環系を持つ化合物は検索されない (部分構造検索との相違点)。

例:



← 333.151/RID では,  
このような化合物はヒットしない  
(RN 268-58-6)

## A 環系データ検索

### 環系識別子 (/RID)

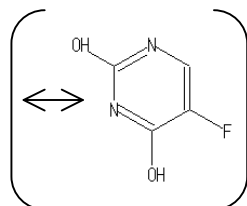
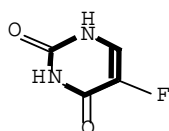
#### ■ 環系識別子の調べ方

- ・ 調べたい環系を持つ化合物の名称や CAS 登録番号等で検索し、環系データを表示する。
- ・ REGISTRY ファイルで 構造検索のサンプル検索して、環系データを表示する。あるいは、LREGISTRY ファイルで構造検索し、環系データを表示する。
- ・ 環系の元素式 (/EA) または元素配列 (/ES) で検索し、環系データを表示する。

#### ■ 環系識別子コードの検索のポイント

- ・ 下記の 3 化合物の環系はすべて同じように見えるが、ノーマライズド結合の存在によって環系識別子の最後の部分が異なる。(ノーマライズド結合を太線で示している)

- RN 51-21-8

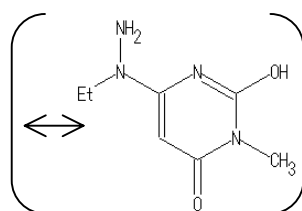
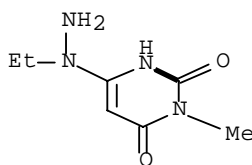


環内の結合

- 単結合数 : 0
- 二重結合数 : 0
- ノーマライズド結合 : 6

環系識別子 : 46.195.39

- RN 144294-61-1

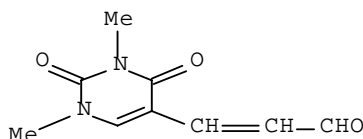


環内の結合

- 単結合数 : 4
- 二重結合数 : 1
- ノーマライズド結合 : 1

環系識別子 : 46.195.20

- RN 145693-78-3



環内の結合

- 単結合数 : 5
- 二重結合数 : 1
- ノーマライズド結合 : 0

環系識別子 : 46.195.18

- ・ 環内にノーマライズド結合の可能性のあるヘテロ環を環系識別子 (/RID) で検索する場合は、結合次数によって変化する部分を指定せずに検索する。

例 : => S 46.195.39/RID ではなく => S 46.195/RID で検索

## A 環系データ検索

### 環系識別子 (/RID)

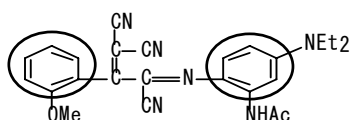
#### ■ 存在数

- ・ /RID の存在数は、単成分物質、あるいは多成分物質の一つの成分中で指定した環系識別子を持つ環系の出現数を指定するものである。/RID フィールドでは検索語の前にその存在数をつけることができる。
- ・ /RID では存在数を指定しなければ指定した環系が一つ以上あるものが検索される。

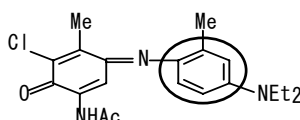
#### ■ レコード例

RN 960623-30-7 REGISTRY

CM 1



CM 2



Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C6	C6	6	C6	46.150.9	1 in CM 2
C6	C6	6	C6	46.150.18	2 in CM 1 1 in CM 2

/RID の存在数

- ・ /RID の存在数は、同一成分中の数である。上記の物質は CM1 よりフェニル基が 2 つ、CM 2 よりフェニル基が 1 つある。そのため、上記の物質は 2 46.150.18/RID または 1 46.150.18/RID でヒットする。

L1 1 S 960623-30-7  
 L2 1 S L1 AND 1 46.150.18/RID ← CM 2 のフェニル基の /RID の存在数でヒット  
 L3 1 S L1 AND 2 46.150.18/RID ← CM 1 のフェニル基の /RID の存在数でヒット  
 L4 0 S L1 AND 3 46.150.18/RID

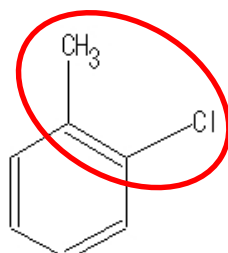
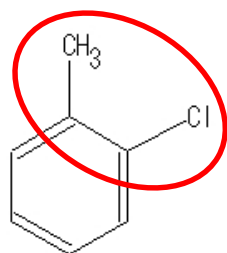
## A 環系データ検索

参考：ノーマライズド結合

### 参考：ノーマライズド結合

- ノーマライズド結合とは、偶数員環中の単結合と二重結合の交互結合、および互変異性結合などに指定される結合タイプである。

例：二置換ベンゼン誘導体



左の二つは同じ物質だけれど二重結合の位置が異なる。



そのままだと、システムは違う物質として認識してしまう

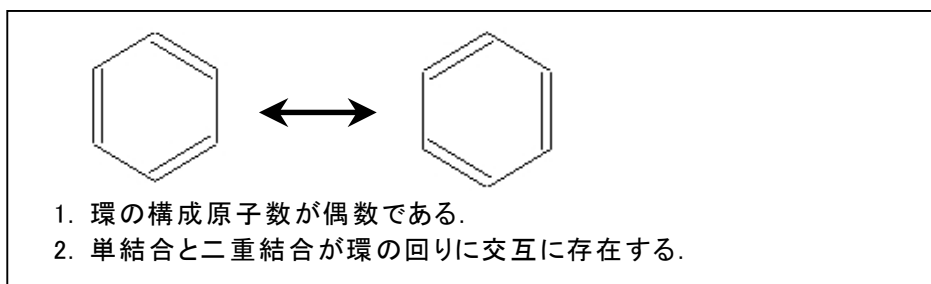


こういった作図上、一見異なる物質に見えるが、実際は同じである物質をシステムに「同じ物質である」と、できる限り認識させるために開発されたのがノーマライズド結合である。（作図したどおりの結合は、エグザクト結合と呼ばれる）

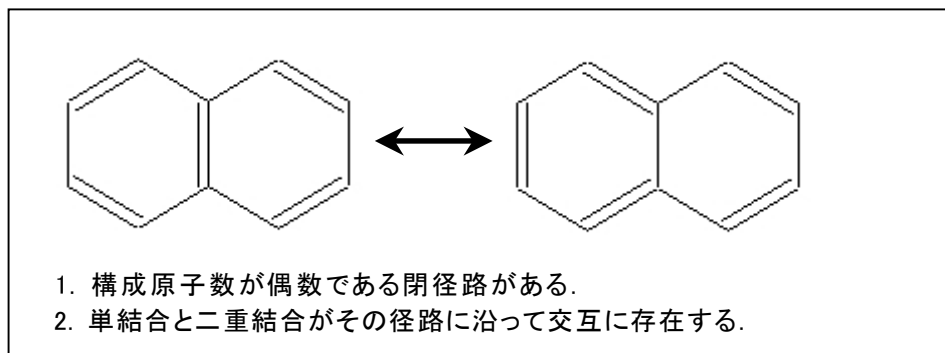
- ・ ノーマライズド結合は、化学的に等価な結合に用いられることが多いが、等価な結合すべてではない。ノーマライズド結合は環、そして互変異性とともに、厳密に定義されている。

### ■ ノーマライズド結合の例 - 環

- ・ 次の条件を満たす単環のすべての結合はノーマライズド結合として登録されている。



- ・ 縮合環の結合は、次の場合ノーマライズド結合として登録されている。





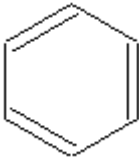

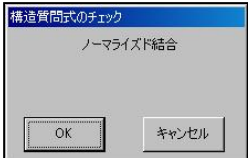
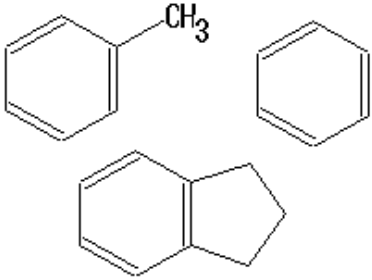
## A 環系データ検索

参考：ノーマライズド結合

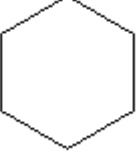

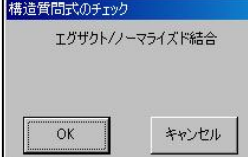
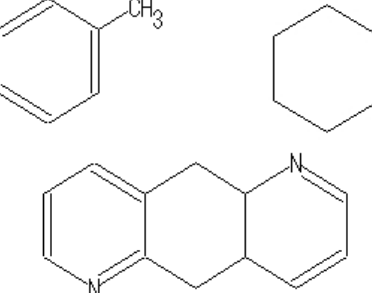
■ STN Express/STN on the Web の構造作図 plug-in で作図するとノーマライズド結合を認識し、自動的に結合タイプが指定される。

- ・ STN Express ではあらゆる可能性を考慮して、自動的にエグザクト/ノーマライズド結合が指定されているので、構造検索のときは気にしなくてもよい。
- ・ 自動的に指定された結合タイプを変更したい場合は、結合属性画面で変更する。
- ・ STN Express の自動的指定例

[例 1：ベンゼン環]

作図した構造図	結合次数	回答例
	 	

[例 2：シクロヘキサン環]

作図した構造図	結合次数	回答例
	 	



シクロヘキサンを作図すると、SSS 検索のとき、どうしてベンゼン環がヒットするのですか？

シクロヘキサン環に、もしベンゼン環が縮合した場合、その縮合部分の結合は、ノーマライズド結合になります。つまり、縮合を許容している場合、すべての結合について、ノーマライズド結合の可能性があるため、シクロヘキサンだけでなくベンゼン環もヒットします。

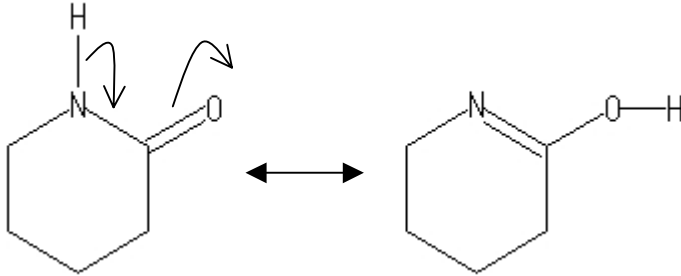
なお、ノーマライズド結合は、二重結合ではありませんので、シクロヘキサンを作図しても、シクロヘキ「セン」環はヒットしません。

ベンゼン環などがいない場合は、シクロヘキサンを作図した後、縮合を禁止する設定（環の孤立、結合非水素数の指定）をしましょう。

## A 環系データ検索

参考：ノーマライズド結合

### ■ ノーマライズド結合の例 - 互変異性 (Tautomer)



- ・ 次の定義に合致する互変異性結合は ノーマライズド結合として登録されている。



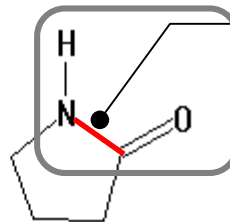
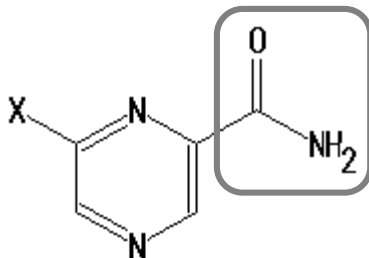
1. 中心原子が 2 個のヘテロ原子 に結合している。

中心原子 (②) : C, N, P, As, Sb, S, Se, Te, Cl, Br, I

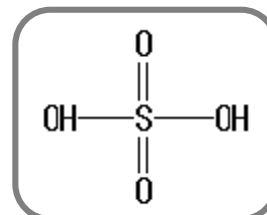
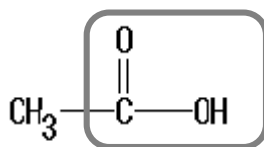
ヘテロ原子 (①, ③) : N, O, S, Se, Te

2. 中心原子 (②) と一方のヘテロ原子との結合は 二重結合 である。
3. 中心原子 (②) ともう一方のヘテロ原子との結合は 単結合 で表記でき、そのヘテロ原子には 水素、水素の同位体、または 電荷 がある。

- ・ 互変異性のノーマライズド結合の例 (環は環の孤立を指定)



環結合のうち、この部分  
だけノーマライズド結合  
になる



## A 環系データ検索

参考：ノーマライズド結合

■ 環系識別子を用いる場合、ある結合が、エグザクト結合のみか、ノーマライズド結合のみか、あるいは、エグザクト/ノーマライズド結合の両方の可能性があるかどうかで、最後の桁まで指定するかどうか決まる。

- ・ 環結合中、一つでも エグザクト/ノーマライズド結合両方の可能性を含む環結合がある場合は、最後の桁まで入力しない。
- ・ ノーマライズド結合を含む可能性があるかどうかは、STN Express/STN on the Web の構造作図 plug-in で大まかに確認することができる\*。

構造作図 - [構造 (1) \*Standard\*]

ファイル(F) 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)

環の孤立化(B)...  
結合の属性(B)...  
ノードの属性(B)...  
結合水素数(H)...  
Markush 属性(M)...  
元素数(E)...  
非局在電荷(Q)...  
立体化学(S)...  
フリーサイト(F)...  
STN の対応基コア・物を見る

構造質問式のチェック(W)...

環系識別子を用いて検索する  
環構造を作図する  
このとき、環の孤立化も設定する

構造質問式のチェック

すべて  選択

結合  鎖  ノード  鎖  
 環/鎖  環/鎖  
 環  環  
 エグザクト/ノーマライズド  原子価  
 エグザクト  結合水素数  
 ノーマライズド  結合非水素数  
 マッチレベル  
 元素数  
 限定

環  孤立/非孤立  G グループ  フラグメントの向き  
 孤立  内容

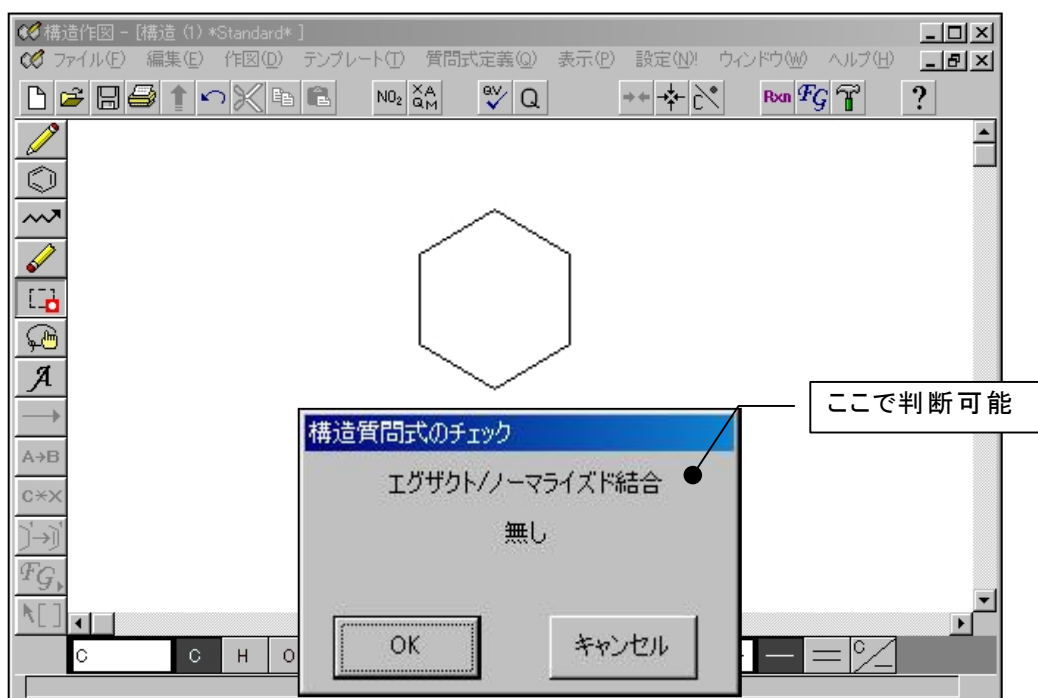
立体  ノードを表示  
 結合  
 幾何中心  
 不斉中心  
 立体化学情報

キャンセル OK

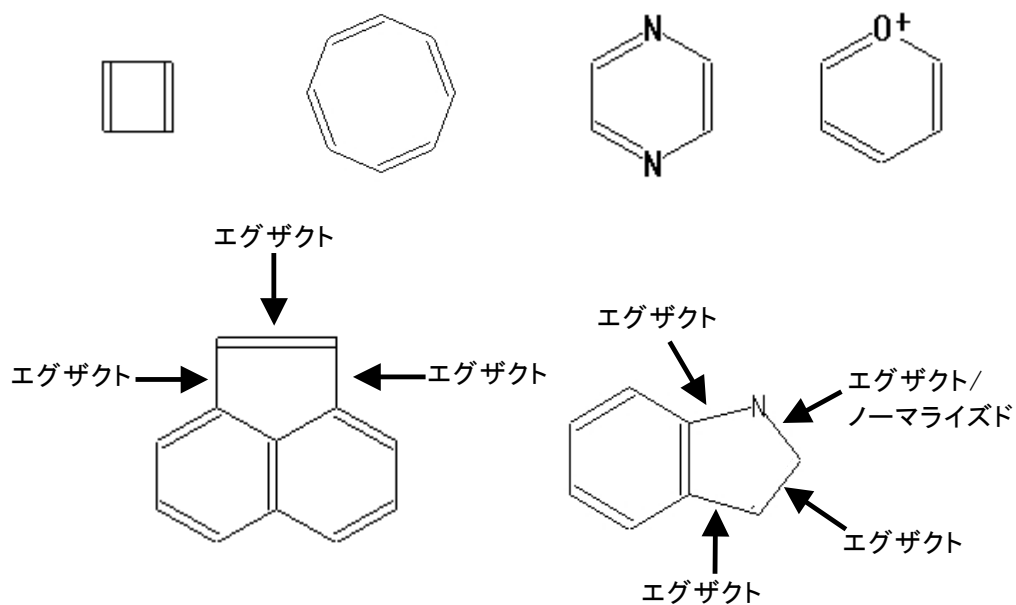
\* STN Express/STN on the Web 構造作図 plug-in の限界上、理論上はエグザクト結合しか考えられない場合でも、エグザクト/ノーマライズド結合として認識される場合もある

## A 環系データ検索

参考：ノーマライズド結合



\* 参考 結合の種類と環の関係 (すべて環は環の孤立化, また置換基がつく可能性がある場合)

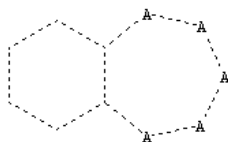


\* → のないところは, すべてノーマライズド結合

## A 環系データ検索

環系識別子 (/RID)

- 検索例 4 : ヘテロ原子が 2 個含まれる下記の環構造を持ち、物質全体として下記の環以外を含まない化合物を検索する。



A の何れか 2 箇所にヘテロ原子を持つ構造を構造検索で行うことは困難である



環系データを利用すると検索できる

=> FILE LREGISTRY

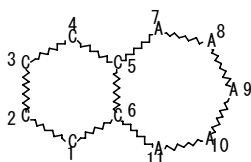
=>

Uploading C:\¥STNEXP¥Queries¥PRA3.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

L1 STR



NODE ATTRIBUTES:

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

DEFAULT MLEVEL IS ATOM

DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

**RSPEC I**

NUMBER OF NODES IS 11

STEREO ATTRIBUTES: NONE

練習用ファイル LREGISTRY ファイルで構造検索し、環系データを調べる

← => D QUE L# と入力すると、アップロードした構造質問式を確認できる (無料)

← 環がこれ以上は縮合しないので環の孤立を指定

参考 : LREGISTRY ファイル

- LREGISTRY ファイルは REGISTRY ファイルの練習用ファイルである。
- LREGISTRY ファイルは REGISTRY ファイルの一部のレコードが収録されている。
- 安価な接続時間料金 (2,000 円/1 時間) だけで、検索語料・表示料は無料である。

## A 環系データ検索

### 環系識別子 (/RID)

=> S L1

← サンプル検索 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:40:32 FILE 'LREGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 32 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 32 ITERATIONS

28 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.01

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

PROJECTED ITERATIONS: 302 TO 978

PROJECTED ANSWERS: 244 TO 876

練習用ファイル LREGISTRY ファイルではフルファイル検索も無料で実行できる  
 今回の検索ではサンプル検索の結果から環系識別子を得られるのでフルファイル検索を省略している

L2 28 SEA SSS SAM L1

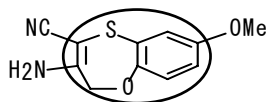
=> D RN IN STR RSD 1-2

← RSD 表示形式で環系識別子を確認する

L2 ANSWER 1 OF 28 COPYRIGHT 1985 ACS on STN

RN 112632-45-8 LREGISTRY

IN 2H-1,5-Benzoxathiepin-4-carbonitrile, 3-amino-7-methoxy-



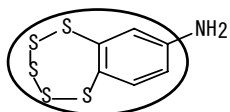
#### Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6-C50S	C6-0C2SC3	6-7	C90S	937. 202.2	1

L2 ANSWER 2 OF 28 COPYRIGHT 1985 ACS on STN

RN 106089-75-2 LREGISTRY

IN 7-Benzopentathiepinamine (9CI)



結合次数 (単結合, 二重結合, 三重結合, ノーマライズド結合) が違ってても, また含まれるヘテロ元素の数が違ったとしても骨格が同じなので, 骨格の環系識別子は 937 である

#### Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6-C2S5	C6-S5C2	6-7	C6S5	937. 216.2	1

## A 環系データ検索

### 環系識別子 (/RID)

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 937/RID(S)2 Q/REL(S)C6/EAS  
 178567 937/RID  
 11831380 2/REL.CNT  
 21956040 Q/REL  
 8995659 2 Q/REL  
 (2/REL.CNT (T) Q/REL)  
 25383040 C6/EAS  
 L3 92246 937/RID(S)2 Q/REL(S)C6/EAS

(S) 演算子 : 同一環系内  
 937/RID : 環系識別子コード (骨格のみ)  
 2 Q/REL : ヘテロ原子 2 個含む環系  
 937/RID(S)2 Q/REL のみの検索だと, ヘテロ原子 2 個が 6 員環, 7 員環の何れに含まれていてもよいことになる  
 そのため, 6 員環は炭素のみから成る環であることを示す C6/EAS を検索式に含める

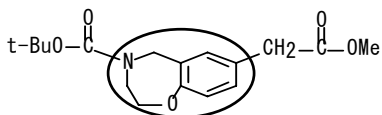
=> S L3 AND 1/NRS  
 7616379 1/NRS  
 L4 9426 L3 AND 1/NRS

物質全体で質問式の構造しか持たないので, 物質全体の環系の数は 1 である

=> D L4 2 4 RN IN STR RSD

← *RN IN STR RSD* 表示形式 (223 円/件)

L4 ANSWER 2 OF 9426 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 RN 960305-61-7 REGISTRY  
 IN 1,4-Benzoxazepine-7(5H)-acetic acid, 4-[(1,1-dimethylethoxy)carbonyl]-2,3-dihydro-, methyl ester

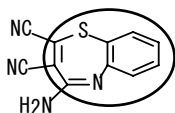


\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

#### Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6-C5N0	C6-NC2OC3	6-7	C9NO	937.108.1	1

L4 ANSWER 4 OF 9426 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 RN 959756-63-9 REGISTRY  
 IN 1,5-Benzothiazepine-2,3-dicarbonitrile, 4-amino-



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

#### Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6-C5NS	C6-NC2SC3	6-7	C9NS	937.183.6	1

## A 環系データ検索

### 近接演算子, ブール演算子

■ 環系データの検索では, 使用する演算子により検索範囲が異なる.

- ・ (S) 演算子 : 同一環系内に限定する.
- ・ (P) 演算子 : 同一成分内に限定する.
- ・ AND 演算子 : 同一物質に限定する.

■ (S) 演算子

=> S 検索語/環データフィールド\* (S) 検索語/環データフィールド\*

・ 利用できるフィールド

/EA (環系の元素式)	/EAS * (最小環の元素式)	/ES (環系の元素配列)
/ESS * (最小環の元素配列)	/SZ (環系の環の大きさ)	/SZS * (最小環の環の大きさ)
/NRRS (環系内の最小環の数)	/RF (環系式)	/RATC (環系内の原子数)
/REL * (環系内の構成元素種)	/RELF (環系の構成元素式)	/RID (環系識別子)
/RELC (環系内の異なる元素の種類)		

・ 利用上のポイント

- (S) 演算子を使用すると同一環系内に限定できる.

例 : 3 個の環からなる縮合環で, この環系が炭素, 窒素, 酸素から構成されているならば, 3/NRRS(S)C N O/RELF と環系内の最小環の数と環系の構成元素式を (S) 演算子を使用することにより同一環系内の条件に絞ることができる.

- 上記の表中の \* が付与されたフィールド (/EAS, /ESS, /SZS, /REL) は環系を構成する一部のデータである. したがって, これらのフィールドではフィールドが同じもの同士を (S) 演算子で組み合わせて同一の環系に限定できる.

例 : ある環系に元素配列 NCNC3 環と NC5 環が含まれる場合は, NCNC3/ESS(S)NC5/ESS で検索できる.

- 上記の表中の \* が付与されていないフィールドのデータは環系全体から考えられている. したがって, 同じ環データフィールド同士を (S) 演算子で組み合わせることはできない.

例 : C4NS-C6-C6/EA ならば 1 個の C4NS と 2 個の C6 からなる環系であり, それ以上は縮合しない. つまり, EA フィールドのデータは既に同一環系内に限定されている. したがって, 検索語/EA (S) 検索語/EA のように EA 同士を (S) 演算子で組み合わせることはできない.



## A 環系データ検索

### 近接演算子, ブール演算子

- (S) 演算子を利用できないフィールドは /NR, /CNR, /NRS, /CNRS フィールドである。

/NR, /NRS フィールドは物質全体に関係し, /CNR, /CNRS フィールドは物質の一つの成分に関係している。これらのフィールドは, (S) 演算子を使って個々の環系に対する他のフィールドを組み合わせることで特定の環系に対する指定を行うことはできない。(S) 演算子を使ってもシステムはこれを AND 演算子と解釈し, 物質全体に対する指定と見なす。

例 : => S C40-C6-C6-C6/EA(S)5-8/CNR

PROXIMITY OPERATOR LEVEL NOT CONSISTENT WITH  
FIELD CODE - 'AND' OPERATOR ASSUMED '6-C6-C6/EA(S)5-8/CNR'

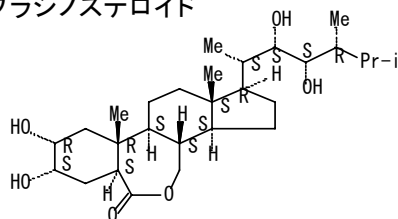
6660 C40-C6-C6-C6/EA  
4853315 5-8/CNR  
L1 1453 C40-C6-C6-C6/EA(S)5-8/CNR

EA (環系の元素式) と CNR (成分内の最小環の数) の検索では (S) 演算子を利用できないので, システムが自動的に AND 演算子で結果を出している

### ・ 利用例

- ① ブラシノステロイド類またはこれら 4 つの環から成る環系を含む類似物質の検索で, 環系に更に他の環が縮合してもよい。

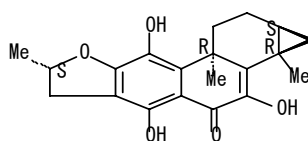
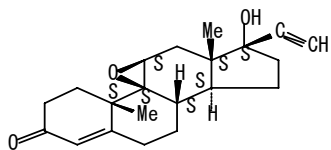
ブラシノステロイド



=> S (2 C6(S)C5(S)C6O)/EAS

- ② 環系が, 3 員環, 5 員環, 3 個の 6 員環から成り, 炭素原子 17 個, 酸素原子 1 個を含み他の元素を含まない環を持つ物質を検索する。

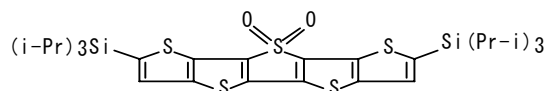
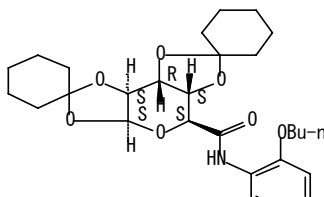
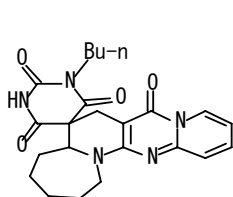
例 :



=> S 3-5-6-6-6/SZ(S)C17O/RF

- ③ 最小環 5 個から成り, 非炭素原子 5 個を含み (他の原子はすべて炭素), かつ非炭素原子はすべて同一 (酸素原子 5 個あるいは窒素原子 5 個のように) である環系を含む化合物を検索する。

例 :



=> S 5/NRRS(S)(C(S)5 Q)/REL(S)2/RELC

## A 環系データ検索

### 近接演算子, ブール演算子

#### ■ (P) 演算子

=> S 検索語/環データフィールド (P) 検索語/環データフィールド

#### ・利用できるフィールド

/EA * (環系の元素式)	/EAS * (最小環の元素式)	/ES * (環系の元素配列)
/ESS * (最小環の元素配列)	/SZ * (環系の環の大きさ)	/SZS * (最小環の環の大きさ)
/NRRS * (環系内の最小環の数)	/CNR (成分内の最小環の数)	/CNRS (成分内の環系の数)
/RF * (環系式)	/RATC * (環系内の原子数)	/REL * (環系内の構成元素種)
/RELC * (環系内の異なる元素の種類)	/RELF * (環系の構成元素式)	/RID * (環系識別子)

#### ・利用上のポイント

- (P) 演算子を使用すると, 単成分物質または多成分物質の同一成分内に限定できる.

例 : C40 環 1 個と C6 環 3 個が任意の形で結合した環系を含み, 単成分物質または多成分物質の一成分内の範囲で他に 1 ~ 3 個の環系を含む物質ならば, C40-C6-C6-C6/EA(P)2-4/CNRS と環系の元素式と成分内の環系の数を (P) 演算子を使用することにより同一成分内に限定できる.

- 上記の表中の \* が付与されたフィールドのデータは最小環または環系全体から考えられている. そのため, 同じ環データフィールド同士を (P) 演算子で組み合わせて同一成分内に限定できる.

例 : 炭素のみから成る 6 員環と炭素 4 個, 窒素 1 個および酸素 1 個から成る 6 員環が同一成分中に含まれる場合は, 環系の元素式を使用して C6/EA(P)C4NO/EA で検索できる.

- 上記の表中の \* が付与されていないフィールド (/CNR, /CNRS) のデータは同一成分内から考えられている. したがって, 同じ環データフィールド同士を (P) 演算子で組み合わせることはできない.

例 : 2/CNRS は, 同一成分中に 2 個の環系を持ち, それ以上の環系は存在しない. つまり, CNRS フィールドのデータは既に同一成分内に限定されている. したがって, 検索語/CNRS(P)検索語/CNRS のように CNRS 同士を (P) 演算子で組み合わせることはできない.

## A 環系データ検索

### 近接演算子, ブール演算子

- (P) 演算子を利用できないフィールドは /NR, /NRS フィールドである。

/NR, /NRS フィールドは物質全体に関係している。そのため、これらのフィールドでは、(P) 演算子を使って、他の環データフィールドと組み合わせても同一成分中に限定できない。(P) 演算子を使ってもシステムはこれを AND 演算子と解釈し、物質全体に対する指定と見なす。

例 : => S C40-C6-C6-C6/EA(P)5-8/NR

PROXIMITY OPERATOR LEVEL NOT CONSISTENT WITH  
FIELD CODE - 'AND' OPERATOR ASSUMED '6-C6-C6/EA(P)5-8/CNR'

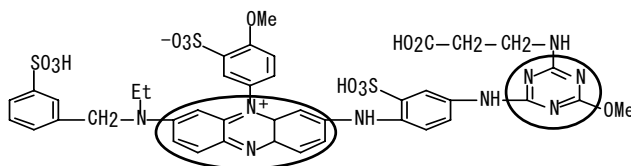
6660 C40-C6-C6-C6/EA  
4981249 5-8/NR  
L1 1513 C40-C6-C6-C6/EA(P)5-8/NR

EA (環系の元素式) と NR (物質内の最小環の数) の検索では (P) 演算子を利用できないので、システムが自動的に AND 演算子で結果を出している

### ・ 利用例

- ① 環の原子配列が NCNCNC である 6 員環と、2 つの C6 環と原子配列 NC2NC2 の環が縮合している環系が同一成分中にある物質を検索する。

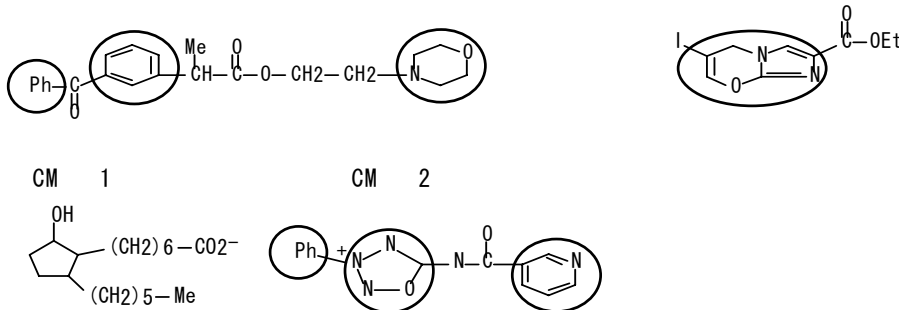
例 :



=> S NCNCNC/ES(P)NC2NC2-C6-C6/ES

- ② 炭素, 窒素, 酸素のみから成る環系を 1 つ含み、同成分中に、最小環 2 ~ 3 個を含む物質を検索する。

例 :




=> S 1 C N O/RELF(P)2-3/CNR

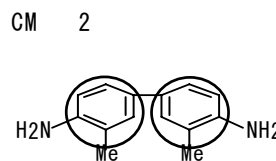
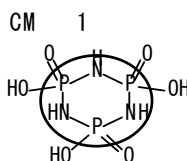
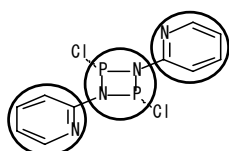
## A 環系データ検索

### 近接演算子, ブール演算子

#### ■ AND 演算子

- ・ 利用できるフィールド
  - 環系データのすべての検索フィールド（環データフィールドの項を参照）に使用できる。
- ・ 利用上のポイント
  - AND 演算子を使用すると、物質全体を対象にした検索になる。
  - /NR（物質内の最小環の数）, /NRS（物質内の環系の数）フィールドは、物質全体に関するもので、(S) 演算子・(P) 演算子ともに使用できないが、AND 演算子は利用できる。
  -  環データフィールドと環データ以外のフィールド（分子式、名称など）を組み合わせる場合は、(S) 演算子・(P) 演算子を利用できず、ブール演算子（AND, OR, NOT）のみが使える。
- ・ 利用例
  - ① 窒素とリンのみから成る環系を少なくとも 1 個含み、構造全体の中の最小環の数が 3 であるような物質を検索する。

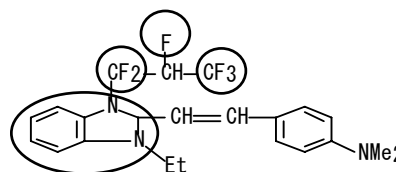
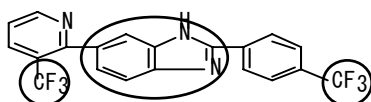
例：



=> S N P/RELF AND 3/NR

- ② 炭素、水素、窒素、フッ素（フッ素は 5 個以上含む）のみからなる単成分物質で、ベンゾイミダゾール環系を持つ化合物を検索する。

例：



=> S 333.401/RID AND C H F N/ELF(P)F>=5 AND 1/NC

## A 環系データ検索

### 環系データ間の関係

#### ■ 各環系データの包含関係



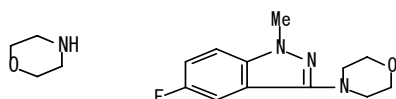
- ・ 例 : Morpholine (RN 110-91-8) に関する各環データ間の関係



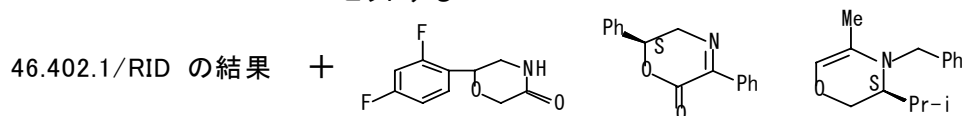
#### Ring System Data

Elemental Analysis EA	Elemental Sequence ES	Size of the Rings SZ	Ring System Formula RF	Ring Identifier RID	RID Occurrence Count
C4NO	NC2OC2	6	C4NO	46.402.1	1

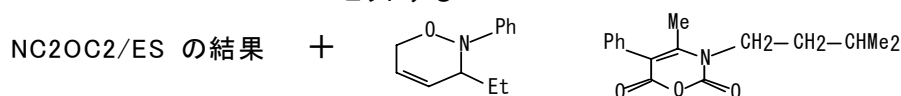
- 46.402.1/RID の検索結果 : Morpholine の骨格, 組成の位置, 結合次数と同じ環を持つ化合物がヒットする.



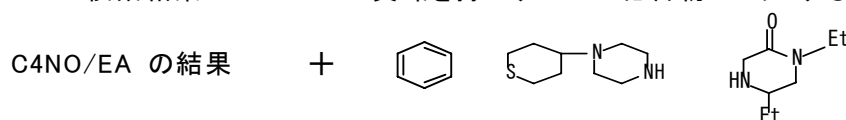
- NC2OC2/ES の検索結果 : 6 員環で, 元素配列 が NC2OC2 であるすべての化合物がヒットする.



- C4NO/EA の検索結果 : 炭素 4 個と窒素, 酸素が各 1 個からなる 6 員環がすべてヒットする.



- 6/SZ の検索結果 : 6 員環を持つすべての化合物がヒットする.



## A 環系データ検索

### トランケーション

- 一部の環データフィールドではトランケーションを利用できる.

- ・ 利用できるフィールド

/EA (環系の元素式)	/EAS (最小環の元素式)	/ES (環系の元素配列)
/ESS (最小環の元素配列)	/SZ (環系の環の大きさ)	/RF (環系式)
/RELF (環系の構成元素式)	/RID (環系識別子)	

- ・ 使用できるトランケーション

記号	内容
?	何文字でもよい (0 以上の文字列)
#	1 文字または無し (0 または 1 文字)
!	ちょうど 1 文字

- ・ 検索例

- ① => S C6-C6###/EA の検索  
C6-C6NS/EA, C6-C6-C6/EA などがヒットする.
- ② => S C6-C6-C6-C6-?/EA の検索  
C6-C6-C6-C6-C6/EA, C6-C6-C6-C6-C6-C6/EA, C6-C6-C6-C6-C6O/EA などがヒットする.
- ③ => S 8!/SZ の検索  
元素の種類を問わず 80 ~ 89 個の原子からなる一つの孤立環を含む物質がヒットする.

## B よくあるご質問

REGISTRY ファイルに関するよくあるご質問についてご紹介します.





## B よくあるご質問

### 概要

#### ■ REGISTRY ファイルに関するよくあるご質問

- ヘルプデスクによくあるお問い合わせについて、検索のポイントや注意点をご紹介します。

Q1> 成分で検索したら、目的の化合物が得られないことがありました。どうしてですか？

A1> 成分の数は、分子式がベースです。CM # の数ではありません。



成分数の注意

Q2> 同一成分中に限定したいのですが、どうしたらよいですか？

A2> 分子式検索フィールド、環系データフィールドでは近接演算子を用いることで同一成分中に限定することができます。

化学構造検索では、同一画面に作図することにより限定できます。

なお、名称検索では同一成分中に限定することはできませんが、便利な演算子があります。



演算子の利用のこつ

- L 名称検索フィールド
- L 分子式関連フィールド
- L 化学構造式

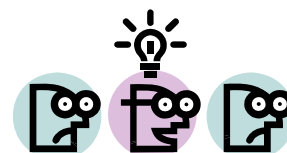
Q3> 標識化合物の検索方法を教えてください。

A3> 部分名称検索や、分子式関連検索フィールドで、標識化合物を検索することができます。

また、構造検索ではスクリーンを用いることで、標識化合物のみを得ることが可能です。



標識化合物の検索



B よくあるご質問

成分数の注意

Q1> 成分数で検索したら、目的の化合物が得られないことがありました。どうしてですか？

A1> 成分の数は、分子式がベースです。CM # の数ではありません。

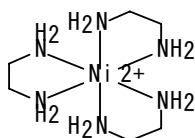


■ REGISTRY ファイルには、単成分物質と多成分物質が存在する。

・ 単成分物質

RN 15390-99-5 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Nickel(2+), tris(1,2-ethanediamine-κN, κN')-, (OC-6-11)- (9CI)  
 (CA INDEX NAME)

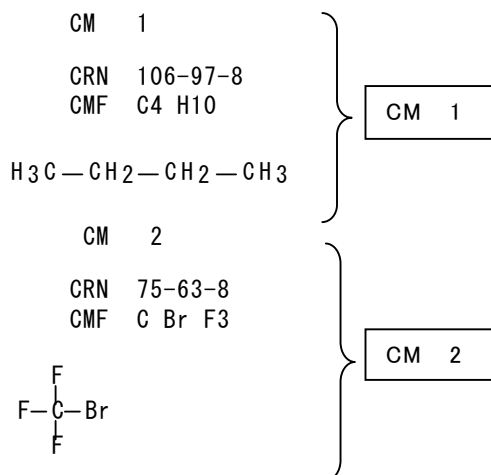
MF C6 H24 N6 Ni ●————— 1 成分 (1/NC)  
 CI CCS, COM  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, GMELIN\*, TOXCENTER  
 (\*File contains numerically searchable property data)



・ 多成分物質：成分数 (/NC) は、分子式の . (ドット) の数 + 1

RN 172039-58-6 REGISTRY  
 ED Entered STN: 09 Jan 1996  
 CN Butane, mixt. with bromotrifluoromethane (9CI) (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:

MF C4 H10 . C Br F3 ●————— 2 成分 (2/NC)  
 CI MXS  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS



B よくあるご質問

成分数の注意

RN 944259-21-6 REGISTRY  
 ED Entered STN: 08 Aug 2007  
 CN 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 2-[bis(1-methylethyl)amino]ethyl ester,  
 polymer with oxirane, methyl ether, diblock (CA INDEX NAME)

OTHER NAMES:

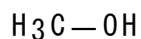
CN 2-(N,N-Diisopropylamino)ethyl methacrylate-ethylene oxide diblock  
 copolymer monomethyl ether

MF  $(C_{12}H_{23}N_2O_2) \cdot (C_2H_4O)_x \cdot C_4H_8O$  ● 3 成分 (3/NC)

CM 1

CRN 67-56-1

CMF C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O



CM 2

CRN 773075-01-7

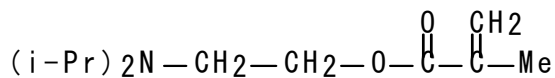
CMF  $(C_{12}H_{23}N_2O_2 \cdot C_2H_4O)_x$

CCI PMS

CM 3

CRN 16715-83-6

CMF C<sub>12</sub>H<sub>23</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>



CM 4

CRN 75-21-8

CMF C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O



CM 1

CM 2 は, CM 3,4  
からなる

RN 956131-32-1 REGISTRY

ED Entered STN: 28 Nov 2007

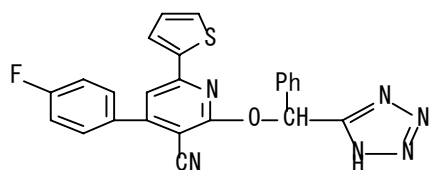
CN 3-Pyridinecarbonitrile, 4-(4-fluorophenyl)-2-(phenyl-2H-tetrazol-5-ylmethoxy)-6-(2-thienyl)-, sodium salt (1:1) (CA INDEX NAME)

MF  $C_{24}H_{15}F N_6 O S \cdot Na$  ● 2 成分 (2/NC)

SR CA

LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

CRN (956130-53-3)



● Na



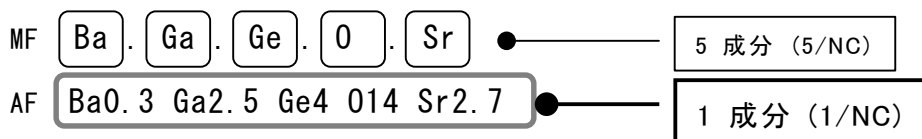
CM 1, 2, 3, 4 ...の数字は, 成分数とは異なる

## B よくあるご質問

### 成分数の注意

- 分子式 (MF) の他に、非優先分子式 (AF) を持つレコードも存在する。

RN 955129-93-8 REGISTRY  
 ED Entered STN: 20 Nov 2007  
 CN Barium gallium germanium strontium oxide (Ba0.3Ga2.5Ge4Sr2.7014) (CA INDEX NAME)

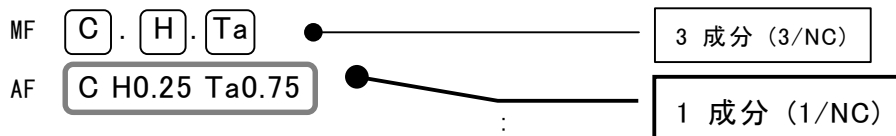


Component	Ratio	Component Registry Number
O	14	17778-80-2
Ge	4	7440-56-4
Ga	2.5	7440-55-3
Ba	0.3	7440-39-3
Sr	2.7	7440-24-6

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

- ・ AF (非優先分子式) を持つレコードには、複数の成分数が存在する。AF は、より正確な組成を表すための分子式。
  - AF を有する物質には、金属間化合物、表形式無機化合物、原子番号が 104 以上の元素をその化合物、ドット分離の分子式を持つ塩を含む繰り返し構造単位、電荷を持つ物質で可能な電荷の位置が 2 箇所以上あるものなどがある。
  - したがって、成分数を限定するときは、NOT 演算子ではなく、AND 演算子で絞り込んだほうがよい。

RN 957130-72-2 REGISTRY  
 ED Entered STN: 07 Dec 2007  
 CN Hydrogen tantalum carbide (H0.25Ta0.75C) (CA INDEX NAME)



Component	Ratio	Component Registry Number
H	0.25	12385-13-6
C	1	7440-44-0
Ta	0.75	7440-25-7



TA を含む多成分物質を検索する際、=> S TA/ELS NOT 1/NC と入力するとこのレコードはヒットしない。

=> S TA/ELS AND 2<=NC と入力する

B よくあるご質問

演算子の利用のこつ

Q2> 同一成分中に限定したいのですが、どうしたらよいですか？

A2> 分子式検索フィールド、環系データフィールドでは近接演算子を用いることで同一成分中に限定することができます。

化学構造検索では、同一画面に作図することにより限定できます。

名称検索では同一成分中に限定することはできませんが、便利な演算子があります。



■ REGISTRY ファイルでは、近接演算子を利用すると、同一成分中に限定することができる。

- ・ 近接演算子は、基本的に同じカテゴリーに属する検索フィールド同士のみ可能。  
まったく異なる検索フィールド同士を掛け合わせて、同一成分中に限定することはできない。

例： 分子式関連フィールド (/ELS と /PG) 同士は可能 => S N/ELS (P) B3/PG

分子式関連フィールド (/ELS) と環系データ関連フィールド (/RID) は不可

■ REGISTRY ファイルでの代表的な演算子の範囲

AND

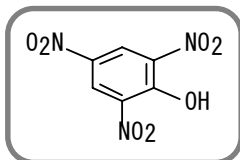
RN 16824-78-5 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984 (L)  
CN Phenol, 2,4,6-trinitro-, calcium salt (2:1) (CA INDEX NAME)

CN Calcium dipicrate (L)

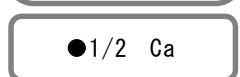
CN Calcium picrate  
DR 143457-12-9 (P) (P)

MF C6 H3 N3 O7 1/2 Ca

GRN (88-89-1)



一つの  
構造質問式



一つの  
構造質問式

Ring System Data

Elemental Analysis	Elemental Sequence	Size of the Rings	Ring System Formula	Ring Identifier	RID Occurrence
EA	ES	SZ	RF	RID	Count
C6	C6	6	C6	46.150.18	1

(P)

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 名称

■ 同一「名称中」に限定する場合には、(L) 演算子を用いる。

- ・ 部分名称検索では、同一成分中に限定することはできない。
- ・ 同一名称中に「同じ」名称セグメントが 2 箇所以上含まれる場合は、(XA) 演算子を用いる。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S CHLOR? (XA) CHLOR? ← CHLOR? を名称中に 2 つ以上含むものを検索

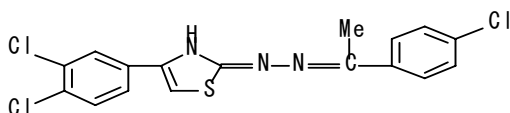
6363506 CHLOR?

6363506 CHLOR?

L1 697644 CHLOR? (XA) CHLOR?

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認 (無料)

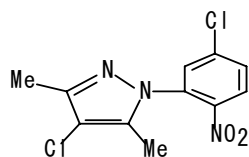
L1 697644 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2007 ACS on STN  
IN Ethanone, 1-(4-**chlor**ophenyl)-, 2-[4-(3,4-di**chlor**ophenyl)-2-thiazolyl]hydrazone  
MF C17 H12 Cl3 N3 S



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

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

L1 697644 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2007 ACS on STN  
IN 1H-Pyrazole, 4-**chlor**o-1-(5-**chlor**o-2-nitrophenyl)-3,5-dimethyl-  
MF C11 H9 Cl2 N3 O2



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

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

(L) 演算子では、同じ名称セグメントが 2 箇所以上に含まれるという指定はできない。

=> S CHLOR? (L) CHLOR?

6363506 CHLOR?

6363506 CHLOR?

L2 6363506 CHLOR? (L) CHLOR?

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 分子式

■ 多くの分子式関連フィールドでは、(P) 演算子で同一成分中に限定することができる。

- ・ 多成分物質のことを考慮したうえで、(P) あるいは AND を使い分けるとよい。

ある元素の存在を表す /ELS フィールドを用いた場合、

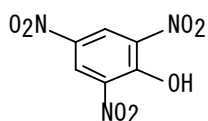
=> S C/ELS AND CA/ELS と入力すると下のレコードはヒットする (同一「物質」中の指定)

=> S C/ELS (P) CA/ELS と入力すると下のレコードはヒットしない (同一「成分」中の指定)

RN 16824-78-5 REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984  
CN Phenol, 2,4,6-trinitro-, calcium salt (2:1) (CA INDEX NAME)  
OTHER CA INDEX NAMES:  
CN Phenol, 2,4,6-trinitro-, calcium salt (9C1)  
CN Picric acid, Ca deriv. (6C1)  
CN Picric acid, calcium salt (8C1)  
OTHER NAMES:  
CN Calcium dipicrate  
CN Calcium picrate  
DR 143457-12-9

(P) (P)  
MF C6 H3 N3 O7 . 1/2 Ca

CI COM  
LC STN Files: BEILSTEIN\*, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, GSCHEM, TOXCENTER,  
USPATFULL  
(\*File contains numerically searchable property data)  
CRN (88-89-1)



●1/2 Ca

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

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 分子式

#### ■ 分子式関連フィールドを用いた検索

- ・ STN には、様々な分子式関連フィールドが用意されているので、幅の広い検索が可能。

例：CHNO のみからなり、さらにその N は三つ以上存在する物質を検索する。

=> S C H N O/ELF (P) 3<=N (元素式と特定元素数を組み合わせた検索)

#### ■ 主な分子式関連検索フィールド一覧

検索フィールド	定義	登録単位	(P)	入力例
完全分子式 * /MF	物質全体の完全な分子式	物質	×	S C4H11N02. C3F6/MF
成分分子式 * /BI または なし	各成分ごとの分子式	成分	×	S C4H11N02 S C3F6
元素式 /ELF	各成分ごとの構成元素 (分子式*から数を除いたデータ)	成分	○	S C H N O/ELF S C F/ELF
元素種 /ELS	成分中の特定元素または グループ元素 (X,M) の存在	成分	○	S N/ELS S N/ELS (P) O/ELD S N/ELS AND F/ELS
多成分物質に対する 元素種 /ELS.MCF	多成分物質中の特定元素, または グループ元素 (X,M) の存在 (異なる成分に限定した検索が可能)	物質	×	S (N(XA)F)/ELS. MCF S (S(XA)S)/ELS. MCF
元素数 /ELC	各成分ごとの異なる元素の種類数	成分	○	S 4/ELC S 2/ELC
物質に対する元素数 /ELC.SUB	物質全体の異なる元素の種類数	物質	×	S 5/ELC. SUB
特定元素数 /元素記号	各成分ごとの特定元素の数	成分	○	S 1/N S 1/N (P) 2/0
成分数 /NC	物質全体の成分数 (分子式中のピリオドの数 + 1)	物質	×	S 2/NC
原子数 /ATC	各成分ごとの原子数の総和	成分	○	S 18/ATC S 9/ATC
分子式量 /FW	各成分ごとの分子量 (除ポリマー)	成分	○	S 105/FW S 100-150/FW
周期律グループ /PG	周期律表に基づくグループ元素	成分	○	S A7/PG S A5/PG
元素比 /ELR.xy	各成分内の C, H, N, O の元素 比 (x/y)	成分	○	S 0.5/ELR. N0

\* Hill 方式で入力する (存在数が 1 の場合は, 1 を省略)

**炭素を含む物質** : 炭素 (C), 水素 (H), その他の元素 (アルファベット順)

**炭素を含まない物質** : すべてのアルファベット順に表記





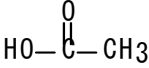

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 分子式

#### ■ 分子式関連フィールドを用いて検索するときの注意点

- 分子式関連フィールドのデータは、各「成分」ごとに登録されているデータと、「物質全体」ごとに登録されているものがあるので、その違いに留意し、数や原子のカウント方法を間違えないようにする。

RN 5153-63-9 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Acetic acid, compd. with pyridine (1:1) (CA INDEX NAME)  
 OTHER CA INDEX NAMES:  
 CN Pyridine, acetate (6CI, 7CI, 8CI)  
 OTHER NAMES:  
 CN Acetic acid pyridinyl salt  
 CN Pyridinium acetate  
 DR 138513-60-7  
 MF C5 H5 N . C2 H4 O2  
 CI COM

<p>CM 1</p> <p>CRN 110-86-1</p> <p>CMF C5 H5 N</p> 		<p>C/ELS H/ELS N/ELS          C H N/ELF          5/C 5/H 1/N          3/ELC          11/ATC          79/FW</p>	<p>2/NC          4/ELC.SUB          (N (XA) O)/ELS.MCF          C5H5N.C2H4O2/MF</p>
<p>CM 2</p> <p>CRN 64-19-7</p> <p>CMF C2 H4 O2</p>  <p>91 REFERENCES          91 REFERENCES          14 REFERENCES</p>		<p>C/ELS H/ELS O/ELS          C H O/ELF          2/C 4/H 2/O          3/ELC          8/ATC          60/FW</p>	

- 成分ごとに登録されているほとんどの検索フィールドは、(P) 演算子で同一成分中に限定することができる。

\* 間違えた入力例 (上記のレコードをヒットさせるための間違った検索式)

成分分子式 (/BI) の検索で /MF を用いる => S C5H5N/MF AND C2H4O2/MF

物質全体での元素式で /ELF を用いる => S C H N.C H O/ELF

=> S C H N O/ELF

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 検索例 1

- 検索例 1: 炭素 (C), 水素 (H), 窒素 (N), 酸素 (O), リン (P) を同一成分中に含む (他の元素が入っていても可) 物質の検索.



....を含む (他の元素が入っていても可) というときは, /ELS を用いるとよい.  
各元素が必ず同一成分中に入っているものに限るには, (P) 演算子を利用.

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

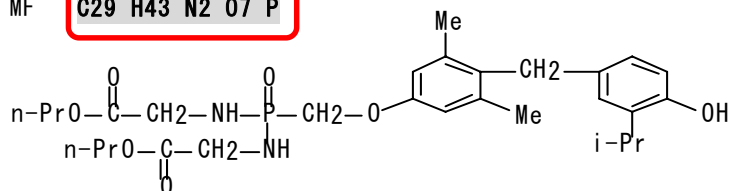
=> S (C (P) H (P) N (P) O (P) P)/ELS  
L1 671449 (C (P) H (P) N (P) O (P) P)/ELS

← *C H N O P* が同一成分中に入っている物質を検索

=> D SCAN MF STR

← *SCAN* 表示形式の *MF* と *STR* だけを表示 (無料)

L1 071449 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
MF C29 H43 N2 O7 P

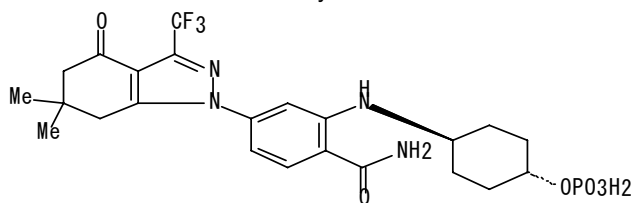


\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

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

L1 071449 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
MF C23 H28 F3 N4 O6 P Na

Relative stereochemistry.



● Na

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

=> S L1 AND 1/NC

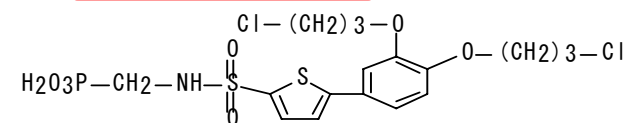
← 一成分に限定する

L2 567909 L1 AND 1/NC

=> D SCAN MF STR

← *SCAN* 表示形式の *MF* と *STR* だけを表示 (無料)

L2 567909 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
MF C17 H22 C12 N O7 P S2



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

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 検索例 2

- 検索例 2: 炭素 (C), 水素 (H), 窒素 (N), 酸素 (O) のみからなり (他の元素は含まない), 分子量が 100-200 の単成分物質の検索.



ある成分が, .....のみからなる (他の元素は含まない) 場合は, /ELF を用いるとよい. 分子式 (成分ごと) から求めた理論上の分子量は, /FW (分子式量) で検索可能. /FW を用いると自動的にポリマーなどの繰り返しを含む物質は検索対象外になる. (APPENDIX 参照)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

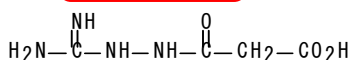
=> S C H N O/ELF (P) 100-200/FW  
L1 588286 C H N O/ELF (P) 100-200/FW

ELF は, 各原子の間にスペースを入力  
同一成分中に限定する場合は, (P)

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

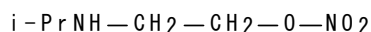
L1 588286 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
MF **C4 H8 N4 O3**



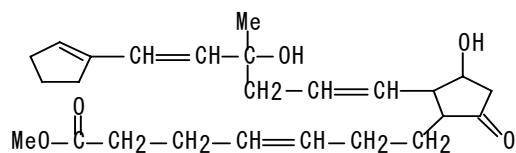
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L1 588286 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 4-Heptenoic acid, 7-[2-[6-(1-cyclopenten-1-yl)-4-hydroxy-4-methyl-1,5-hexadien-1-yl]-3-hydroxy-5-oxocyclopentyl]-, methyl ester, compd. with 2-[(1-methylethyl)amino]ethyl nitrate (1:1)  
MF **C25 H36 O5** . **C5 H12 N2 O3**

CM 1



CM 2



多成分物質の場合, /ELF, /FW は,  
各「成分」でヒットした物質が回答  
として得られる

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

=> S L1 AND 1/NC

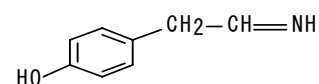
← 一成分に限定

L2 428845 L1 AND 1/NC

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L2 428845 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
MF **C8 H9 N O**  
C1 COM



HOW MANY MORE ANSWERS DO



分子量 (/MW) は, 予想物性値のデータのため, データが収録されていない場合も多い. (約 2,490 万物質 2008 年 2 月現在)  
また, 物性値フィールドのデータのため, (P) 演算子は利用できない  
=> S C H N O/ELF (P) 100-200/MW

L1 0 C H N O/ELF (P) 100-200/MW

B よくあるご質問

演算子の利用のこつ - 検索例 3

■ 検索例 3: 二つの成分からなるポリマーでどちらの成分にもフッ素を含む物質の検索.



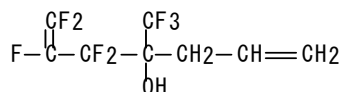
それぞれ別の成分にある元素が入っていることを指定するには、/ELS.MCF フィールドで (XA) 演算子を利用する. このとき、回答は自動的に多成分物質に限定される.

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る  
=> S (F(XA)F)/ELS.MCF AND 2/NC AND PMS/CI ← 各成分に F を含む 2 成分ポリマーを検索  
L1 4787 (F(XA)F)/ELS.MCF AND 2/NC AND PMS/CI

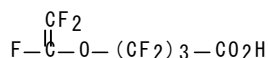
=> D SCAN MF CI STR ← *SCAN* 表示形式の MF と CI と STR だけを表示 (無料)

L1 4787 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
MF (C8 H6 F8 O . C6 H F9 O3)x  
CI PMS

CM 1



CM 2



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

\* 三つ以上の元素を指定する場合、必ずしも各成分毎に、指定した元素が入るわけではないので注意。(ノイズが生じる)

=> S (F(XA)F(XA)F)/ELS.MCF AND PMS/CI  
L1 15469 (F(XA)F(XA)F)/ELS.MCF AND PMS/CI

=> D SCAN IN MF CI

L1 15469 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 2-fluoro-, 1,1-dimethylethyl ester, polymer with tetrafluoroethene and 2,3,3-trifluoro- $\alpha$ , $\alpha$ -bis(trifluoromethyl)bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-methanol (9CI)  
MF (C10 H7 F9 O . C7 H11 F O2 . C2 F4)x  
CI PMS

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

L1 15469 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Butanoic acid, 2,2,3,3,4,4-hexafluoro-4-[(trifluoroethenyl)oxy]-, polymer with 1,1,2,3,3-pentafluoro-4-(trifluoromethyl)-1,6-heptadien-4-ol (9CI)  
MF (C8 H6 F8 O . C6 H F9 O3)x  
CI PMS

ノイズ

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

## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 検索例 4

- 検索例 4: ストロンチウム (Sr), 銅 (Cu), 酸素 (O), ランタノイド (LNTH) を含み, 他の元素を含まない物質の検索.



無機物質 (合金・表形式無機化合物など) で, 複数の元素からなる場合, 各元素は多成分として登録されているので, 検索するときは, AND 演算子を利用する.  
 ランタノイドといったような, 元素周期表に基づいたグループ元素の検索は /PG を用いる.  
 無機物質の元素数を限定するには, /ELC.SUB (「物質全体」の異なる元素の種類数) を用いるとよい.

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S (SR AND CU AND O)/ELS AND LNTH/PG  
 L1 9604 (SR AND CU AND O)/ELS AND LNTH/PG

← Sr, Cu, O, ランタノイドからなる物質を検索

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L1 9604 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Copper lanthanum strontium zinc oxide (Cu<sub>0.6-1</sub>La<sub>1.99</sub>Sr<sub>0.01</sub>Zn<sub>0-0.404</sub>)  
 MF **Cu . La . O . Sr . Zn**  
 CI TIS

Component	Ratio
O	4
Zn	0 - 0.4
Cu	0.6 - 1
Sr	0.01
La	1.99

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

=> S L1 AND 4/ELC.SUB  
 L2 1085 L1 AND 4/ELC.SUB

← 4 種類の元素のみからなる物質に限定する

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L2 1085 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Copper holmium strontium oxide (Cu<sub>24</sub>Ho<sub>4</sub>Sr<sub>10041</sub>)  
 MF **Cu . Ho . O . Sr**  
 CI TIS

Component	Ratio
O	41
Ho	4
Cu	24
Sr	10

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

⇒ S (SR AND CU AND O)/ELS AND LNTH/PG AND 4/NC のように成分数を用いた場合は, 他の元素が入る場合がある. 例 BO<sub>3</sub> . Cu . La . Sr (RN 949114-92-5)

B よくあるご質問

参考： 周期律グループコード

参考： 周期律グループコード

- 周期律グループは /PG (Periodic Group) フィールドで検索する.

=> S A1/PG ← アルカリ金属を含むすべての物質

=> S A7/PG ← ハロゲンを含むすべての物質

- 周期律グループ表 (分類には炭素と水素は含まれていない)

A1		A2															A8					
Li	Be														He							
3	4														2							
Na		Mg															A3	A4	A5	A6	A7	A8
11	12														B		N	O	F	Ne		
K		Ca		B3	B4	B5	B6	B7	← B8 →	B1	B2	A3	A4	A5	A6	A7	A8					
19	20	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr					
37	38	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36					
Rb		Sr															A3	A4	A5	A6	A7	A8
55	56	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe					
87	88	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54					
Cs		Ba															A3	A4	A5	A6	A7	A8
57	58	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn					
89	88	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86					
Fr		Ra															A3	A4	A5	A6	A7	A8
87	88	Ac																				
																	A3	A4	A5	A6	A7	A8
																	A3	A4	A5	A6	A7	A8
																	A3	A4	A5	A6	A7	A8

LNTN	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
ACTN	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
SHEL	104														

## B よくあるご質問

参考：組成が不明な物質も含めて検索する場合

### 参考：組成が不明な物質も含めて検索する場合

- 組成が不明な成分が存在すると、分子式データには、UNSPECIFIED と記載される。

そのため、分子式関連フィールドを用いると、分子式データが存在しないため組成が不明な化学物質は検索できない。

例えば、無機物質の検索の場合は、/ELC.SUB を使用して元素数を指定するが、組成が不明な物質も合わせて検索する場合は、UNSPECIFIED/ELC.SUB も用いて検索する。(指定した元素以上を含む物質を検索したい場合に特に有効である。)

- 検索例：Y (イットリウム) と Zr (ジルコニウム) を含み、必ず他の元素を含む無機化合物の検索。

=> S (Y AND ZR)/ELS AND 3<=ELC.SUB ← Y, Zr の他にその他の元素も含む物質の検索  
L1 6141 (Y AND ZR)/ELS AND 3<=ELC.SUB

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認 (無料)

L1 6141 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
MF **Mg . Sr . Y . Zn . Zr**  
CI AYS

Component	Component Percent
Mg	98
Zr	0.6
Sr	0.5
Y	0.2
Zn	0.2

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

=> S (Y OR YTTRIUM) (L) (ZR OR ZIRCONIUM) AND UNSPECIFIED/ELC.SUB  
L2 201 (Y OR YTTRIUM) (L) (ZR OR ZIRCONIUM) AND UNSPECIFIED/ELC.SUB

=> D SCAN

L2 201 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008  
IN **Yttrium zirconium oxide (Y0.06Zr0.9701**  
**Y0.06Zr0.9702.03,Ni,WC (9CI)**  
MF **C W . Ni . Unspecified**  
CI AYS, MAN



UNSPECIFIED の物質は分子式フィールドに現れないので、名称と元素記号を基本索引で検索する

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

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

=> S L1 OR L2  
L3 6342 L1 OR L2

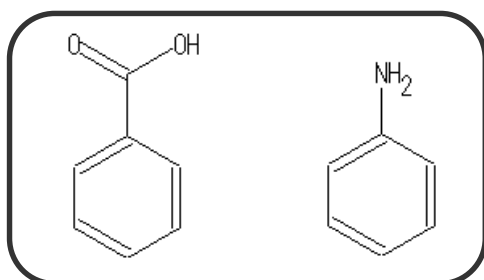
## B よくあるご質問

### 演算子の利用のこつ - 構造

■ 構造検索で同一成分中に限定するには、同一画面上に作図する。

- ・ ただし、作図したフラグメント同士に重なりがある場合には、ヒットしない

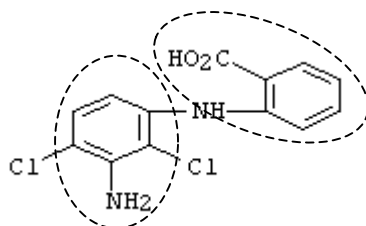
構造質問式 L1



検索式 => S L1 FUL

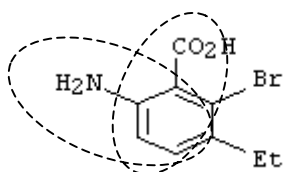
回答例 (同一構造内にあり、重なりはない)

IN Benzoic acid, 2-[(4-amino-2,5-dichlorophenyl)amino]- (9C1)  
MF C13 H10 Cl2 N2 O2



- 同一構造内にあっても上記の検索では検索できない例 (作図した構造に重なりがある)

IN Benzoic acid, 6-amino-2-bromo-3-ethyl- (9C1)  
MF C9 H10 Br N O2





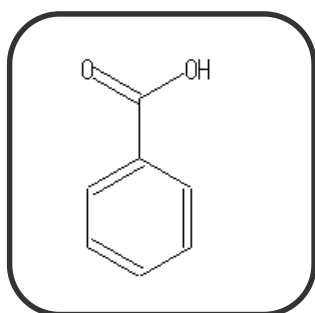
B よくあるご質問

演算子の利用のこつ - 構造

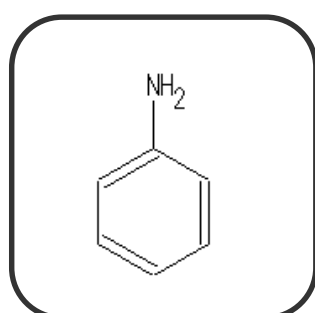
■ フラグメントを別々の構造質問式に作図した後 AND 検索すると、下記の物質が検索される。

- ・ 作図したフラグメントが、同一成分中に含まれるもの（重なりがあってもよい）
- ・ 作図したフラグメントが、別々のフラグメントに含まれる多成分物質

構造質問式 L1



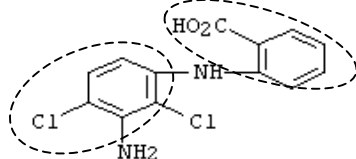
構造質問式 L2



検索式 => S L1 AND L2 FUL

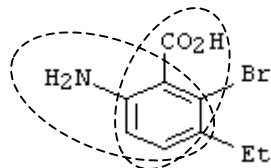
回答例（同一構造中にあり、重なりがない）

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



回答例（同一構造中にあり、重なりがある）

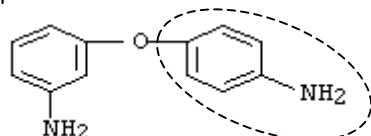
IN Benzoic acid, 6-amino-2-bromo-3-ethyl- (9CI)  
MF C9 H10 Br N O2



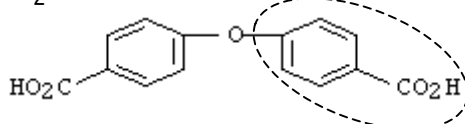
回答例（別成分）

IN Benzoic acid, 4,4'-oxybis-, polymer with 3-(4-aminophenoxy)benzenamine (9CI)  
MF (C14 H10 O5 . C12 H12 N2 O)x

CM 1



CM 2



## B よくあるご質問

### 標識化合物の検索

Q3> 標識化合物の検索方法を教えてください

A3> 部分名称検索や、分子式検索フィールドで標識化合物のみを検索することができます。  
また、構造検索では、スクリーンを用いることで標識化合物のみを得ることも可能です



■ REGISTRY ファイルでは、分子式検索や構造検索を行うと、同位体元素も含めて検索する。

例：分子式 (C2H4O2/MF) で検索すると、下記のような標識化合物もヒットする。

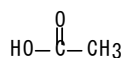
=> FILE REGISTRY

=> S C2H4O2/MF

L1 133 C2H4O2/MF

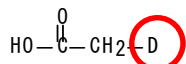
=> D SCAN

L1 133 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Acetic acid  
MF C2 H4 O2  
CI COM



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

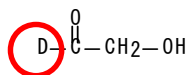
L1 133 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Acetic-d acid (6CI, 7CI, 9CI)  
MF C2 H3 **D** O2  
CI COM



L1 133 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Glycoaldehyde-2-C14 (5CI)  
MF C2 H4 O2



L1 133 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Acetaldehyde-1-d, 2-hydroxy- (9CI)  
MF C2 H3 **D** O2



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

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



分子式検索や構造検索では通常（デフォルト）の検索で自動的に標識化合物が得られるので、標識化合物も回答に含めたい場合は、そのまま検索すればよい。

## B よくあるご質問

### 標識化合物の検索

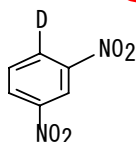
#### ■ ある特定の標識化合物のみを検索するときのポイント

- ・ 標識化合物に限定した検索を行うには、**標識化合物に共通する特徴**を利用して、検索を行う必要がある。そのためには、同位体を含む物質の登録を知ることが非常に重要である。
- ・ 標識化合物を検索する場合、多数の検索語を使用すると、高額になるので注意する。

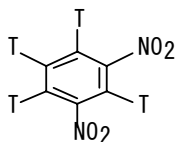
#### ■ 水素同位体を含む物質について


- 1) 水素同位体の位置と数が明確な場合、名称や、分子式中に“D”“T”と表記されている

CN Benzene-d, 2,4-dinitro- (9CI) (CA INDEX NAME)  
MF C6 H3 D N2 O4



CN Benzene-1,2,3,5-t4 dinitro- (6CI) (CA INDEX NAME)  
MF C6 N2 O4 T4



 D や T を用いて分子式検索を行うと、これらの物質を検索できる 例: D/ELS, T/ELS, 4/T

\* 名称検索だとノイズが入る場合が多い。例: 光学活性の D/L

- 2) 水素同位体の位置や数が不明な場合、名称中に labeled with deuterium (tritium) と表記されている。

CN Methanol, labeled with deuterium (9CI) (CA INDEX NAME)

MF C H3 D O

IL H-2

数が明確な場合、分子式に反映されている

H3C-OH

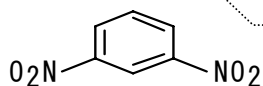
IL (位置不明の同位体) フィールド: H-2 が 1 個 (表示専用)

CN Benzene, m-dinitro-, labeled with deuterium (8CI) (CA INDEX NAME)

MF C6 H4 N2 O4

IL XH-2

数が不明な場合、分子式には情報がない



IL: H-2 が X 個 (数が不明) (表示専用)



deuterium (tritium) で部分名称検索を行うと、位置不明・数不明の水素同位体を検索できる。

## B よくあるご質問

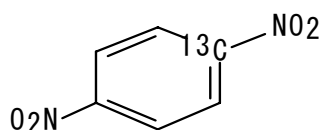
### 標識化合物の検索

#### ■ そのほかの同位体を含む物質について

- 1) 同位体の位置と数が明確な場合、名称中に“質量数元素記号”で表記されている  
なお、分子式には、同位体元素についての標記はない。

CN Benzene-**13C**, 1,4-dinitro- (9CI) (CA INDEX NAME)  
MF C6 H4 N2 O4 ●

分子式には同位体元素の記述はない

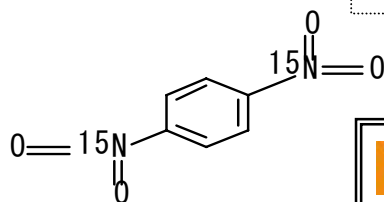


CN Benzene, 1,4-di(nitro-**15N**)- (9CI) (CA INDEX NAME)  
OTHER NAMES:

CN 1,4-Dinitrobenzene-**15N2**

MF C6 H4 N2 O4 ●

分子式には同位体の記述はない



13C のように，“質量数元素記号”で、部分名称検索を行うと、検索できる 例：13C/BI または なし

\* ノイズが入る場合がある 例：多環骨格を有する物質  
7H-Dibenzo[*c,g*]fluorene-13b,13c(5H,7aH)-diol. 6.6a.8.9-tetrahydro-

- \* 一部古い命名法でのみ命名されている物質の場合には，“元素名質量数”（例 C13）で登録されている（5CI-8CI）。

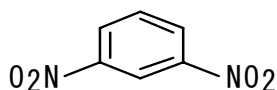
- 2) 同位体の位置や数が不明な場合、名称中に“labeled with 元素名-質量数”が表記されている。

CN Benzene, 1,3-dinitro-, **labeled with carbon-14** (9CI) (CA INDEX NAME)

MF C6 H4 N2 O4 ●

IL XC-14

分子式には同位体の記述はない



Carbon など元素名を直接入力すると、指定した同位体元素の位置や数が不明なものを検索できる。質量数で限定したい場合は、それもあわせて入力する。

\* ノイズが入る場合は、labeled (1W) carbon と入力するとよい。  
例：carbon と入力すると、同位体だけでなく“carbon”そのものもヒット

## B よくあるご質問

### 標識化合物の検索

#### 参考：標識化合物の検索のまとめ

■ 水素同位体 (D, T) を網羅的に検索するには,

- 1) 位置と数が明確な場合: D/ELS, T/ELS
- 2) 位置と数が不明確なものも含める場合: DEUTERIUM, TRITIUM

■ そのほかの元素の同位体の場合

- 1) 元素の数と位置が明確な場合: “質量数元素記号” 例: 13C
  - 古い命名法も検索する場合: 元素記号質量数 (L) (5CI OR 6CI OR 7CI OR 8CI)  
例: C13 (L) (5CI OR 6CI OR 7CI OR 8CI)
- 2) 元素の位置や数が不明な場合: “LABELED (1W) 元素名” あるいは “元素名”
  - 質量数を限定する場合: “元素名-質量数” 例: CARBON-13/BI



標識化合物の検索は、検索語料が課金されやすいので注意する

例外: 単一元素からなる物質, 成分がある場合は, 元素名, isotope of mass 質量数のみ CA 索引名に収録されている場合がある.

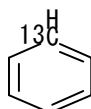
```
RN 952102-05-5 REGISTRY
ED Entered STN: 31 Oct 2007
CN Molybdenum, isotope of mass 100 (100Mo2+) (CA INDEX NAME)
MF Mo
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS

100Mo2+
```

#### 参考：同位体元素と環系識別子

■ 環系識別子は, 元素種類, 位置によって値が異なるが, 質量数によっては変化しない.

RN 71-43-2	RN 6998-50-1
IN Benzene	IN Benzene-13C



RID 46.150.18	RID 46.150.18
---------------	---------------



環系識別子を用いて検索すると、自動的に環系中に同位体元素を含む物質を検索する

B よくあるご質問

標識化合物の検索 — 検索例 1

■ 検索例 1:  $^{18}\text{F}$  で標識された化学物質を調査する



水素同位体以外の同位体を含む物質の場合は、部分名称を使った検索を行う

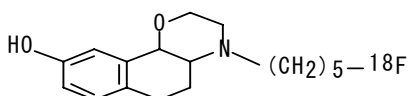
- ① 質量数元素記号 (18F)
- ② 元素名-質量数 (FLUORINE-18)
- ③ 元素記号質量数 (F18) (L) (5CI OR 6CI OR 7CI OR 8CI)

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S 18F? ← 質量数元素記号で、 $^{18}\text{F}$  の位置や数が明記された物質を検索する  
L1 3866 18F?

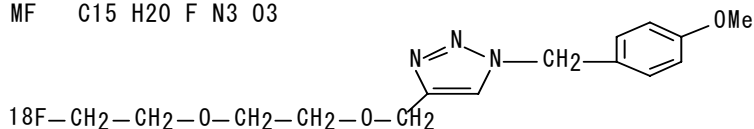
=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する (無料)

L1 3866 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 2H-Naphtho[1,2-b]-1,4-oxazin-9-ol, 4-[5-(fluoro-18F)pentyl]-  
3,4,4a,5,6,10b-hexahydro-  
MF C17 H24 F N O2



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

L1 3866 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 1H-1,2,3-Triazole, 4-[[2-[2-(fluoro-18F)ethoxy]ethoxy]methyl]-1-[(4-methoxyphenyl)methyl]-  
MF C15 H20 F N3 O3



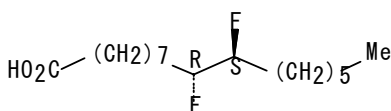
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S FLUORINE-18 ←  $^{18}\text{F}$  の数や位置が不明な物質を検索する  
L2 44 FLUORINE-18  
(FLUORINE (W) 18)

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する (無料)

L2 44 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Hexadecanoic acid, 9,10-difluoro-, labeled with fluorine-18,  
(9R,10S)-rel- (9CI)  
MF C16 H30 F2 O2

Relative stereochemistry.



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

B よくあるご質問

標識化合物の検索 — 検索例 1

=> S L1 OR L2 ← <sup>18</sup>F の標識化合物をまとめる  
L3 3902 L1 OR L2

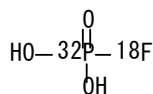
=> S F18 (L) (5C1 OR 6C1 OR 7C1 OR 8C1)  
L4 2 F18 (L) (5C1 OR 6C1 OR 7C1 OR 8C1)

=> S L3 OR L4 ← <sup>18</sup>F の標識化合物をまとめる  
L5 3903 L3 OR L4

=> S L5 NOT L3 ← 古い命名法みの名称を含む <sup>18</sup>F の物質を検索する  
L6 1 L5 NOT L3

=> D ← IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
RN 860180-47-8 REGISTRY  
ED Entered STN: 15 Aug 2005  
CN **Phosphorofluoridic-F18-P32 acid, sodium salt** (6C1) (CA INDEX  
NAME)  
MF F H2 O3 P . Na  
SR CAS EARLY REGISTRATIONS  
LC STN Files: CA, CAPLUS  
CRN (860345-40-0)



● Na



古い命名法みの名称が収録されている物質もあわせて検索  
ノイズを減らすため、累積索引コードを (L) 演算子で組み合わせる

=> S FLUORINE (2W) MASS 18  
L7 3 FLUORINE (2W) MASS 18

=> D SCAN

L1 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN **Fluorine, isotope of mass 18, atomic**  
MF F

18F

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

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

\* 水素以外の同位体の検索では、部分名称検索を用いるので、REGISTRY ファイルに登録されたばかりのレコードは、名称自体が収録されていないため、検索対象外となる。

\* 現在、CAS では、新命名法に基づく化学物質名称を付与しなおしている。この付与が完了すれば、古い命名法の検索 (③) は行わなくてもよい。

\* 原子によっては、ノイズが入る。


例: 13C (7H-Dibenzo[c,g]fluorene-13b,13c(5H,7aH)-diol, 6,6a,8,9-tetrahydro-もヒット)

単一元素からなる物質、成分の同位体も含めて検索する場合はこの式もあわせるとよい

## B よくあるご質問

### 標識化合物の検索 — 検索例 2

#### ■ 検索例 2: 同位体標識化合物を除いたジヒドロキシベンゼンの検索

 同位体の登録には、様々な形式がある。しかし、絞り込む母集合に必ずしもすべての形式で登録された同位体があるわけではない。  
(例: 重水素しか母集合に含まれていなかった場合など)

そのため、検索する際は、母集合の回答を SCAN 表示形式で表示し、どのタイプの標識化合物が含まれているのかを確認してから、絞り込むと検索語料の節約になる。

labeled を用いると、位置不明の同位体をまとめて検索することができる。元素の種類は問わない検索の時に用いると、検索語料の節約になる。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E C6H6O2/MF ← 分子式で EXPAND する

E1	1	C6H6O18S6.8H2O.6NA/MF
E2	2	C6H6O18W2/MF
E3	320	--> C6H6O2/MF
E4	1	C6H6O2.(C3H6O)X/MF
E5	1	C6H6O2.(C4H8O)X/MF

=> S E3 ← E 番号で検索する

L1 320 C6H6O2/MF

=> S L1 AND 46.150.18/RID ← 環系識別子を用いてベンゼン環を有するものに限定

L2 72 L1 AND 46.150.18/RID

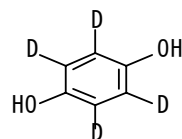
=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L2 72 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN 1,4-Benzene-2,3,5,6-d4-diol (9CI)

MF **C6 H2 D4 O2**

C1 COM



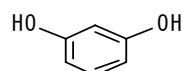
ジヒドロキシベンゼンにはさまざまな同位体標識化合物が存在

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

L2 72 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN 1,3-Benzenediol, **labeled with carbon-14** (9CI)

MF **C6 H6 O2**

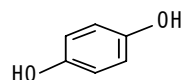


L2 72 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN 1,4-Benzenediol, **labeled with deuterium** (9CI)

MF **C6 H6 O2**

C1 COM

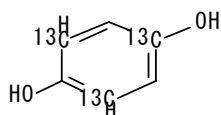




B よくあるご質問

標識化合物の検索 — 検索例 2

L2 72 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Hydroquinone-1,3,5-<sup>13</sup>C<sub>3</sub> (7CI)  
 MF **C6 H6 O2**



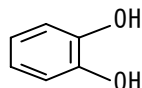
13C, 14Cなどをまとめて検索する場合は、!を使うと検索語料の節約になる。  
 13C2など、13Cが、二個以上置換している場合も考慮して?を最後につける

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

=> S L2 NOT ((D OR T)/ELS OR LABELED OR !1C?) ← SCAN 表示形式で見つけた標識化合物の特徴  
 L3 11 L2 NOT ((D OR T)/ELS OR LABELED OR !1C?) ← 使って除く

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

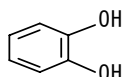
L3 11 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN 1,2-Benzenediol  
 MF **C6 H6 O2**  
 CI COM



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

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

L3 11 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN 1,2-Benzenediol, radical ion(1-) (9CI)  
 MF **C6 H6 O2**  
 CI RIS



L3 11 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Benzenediol  
 MF **C6 H6 O2**  
 CI IDS, COM



2 (D1-OH)

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

L3 11 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Hydroperoxide, phenyl  
 MF **C6 H6 O2**

HO-O-Ph

← ノイズ

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

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

=> S L3 NOT ION  
 L4 5 L3 NOT ION

← イオンやラジカルイオンを除く




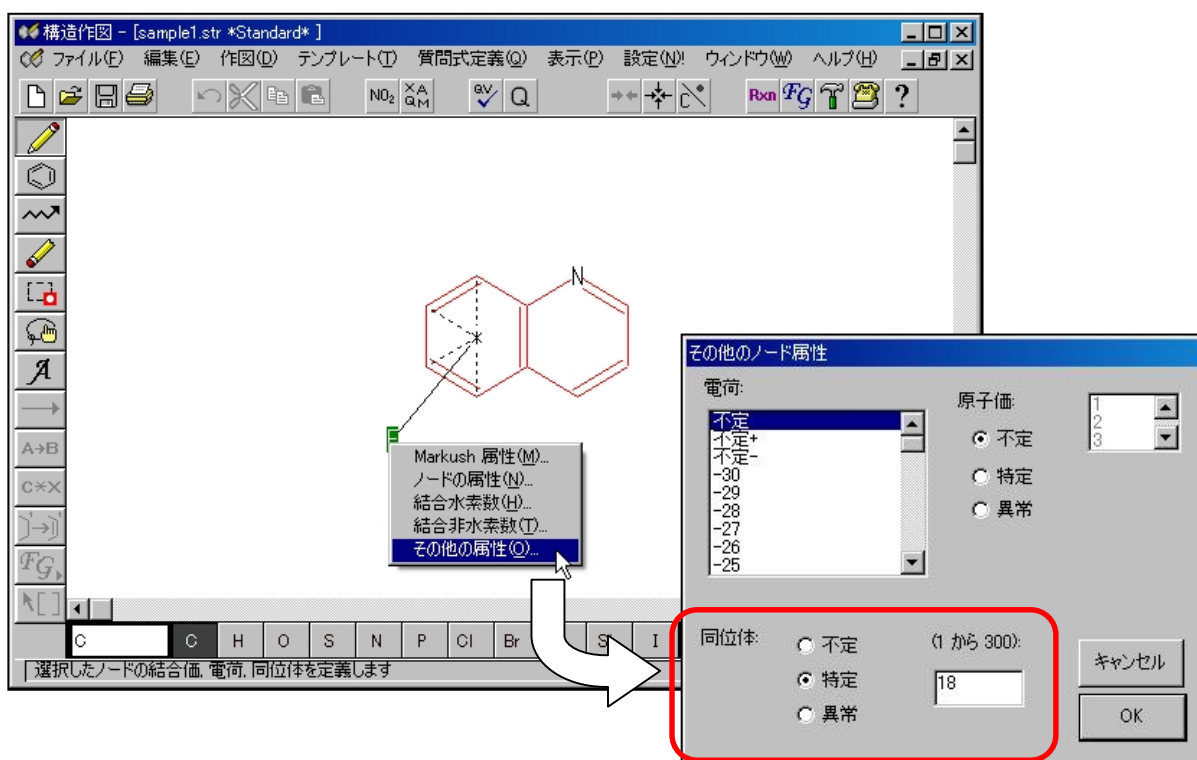
イオンやラジカルイオンは、ion と検索できる

B よくあるご質問

標識化合物の検索 — 検索例 3

■ 検索例 3:  $^{18}\text{F}$  を有する, ある化学物質誘導体の検索

 特定の同位体のみ含む構造検索を行う場合には, 作図画面で指定する.



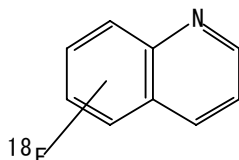
=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading C:\¥STNEXP¥Queries¥sample1.str  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1 ← アップロードした構造を確認する (無料)

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1 ← サンプル検索 (無料)

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

PROJECTED ITERATIONS: 104123 TO 112957

PROJECTED ANSWERS: 1 TO 152

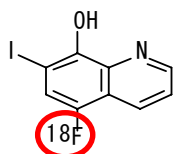
L2 1 SEA SSS SAM L1

B よくあるご質問

標識化合物の検索 — 検索例 3

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L2 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 8-Quinololinol, 5-(fluoro-18F)-7-iodo- (9CI)  
MF C9 H5 F I N O

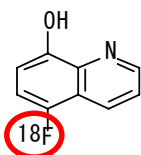


ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L1 FUL ← フルファイル検索  
L3 6 SEA SSS FUL L1

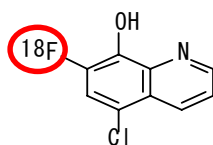
=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L3 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 8-Quinololinol, 5-(fluoro-18F)- (9CI)  
MF C9 H6 F N O



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

L3 6 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 8-Quinololinol, 5-chloro-7-(fluoro-18F)- (9CI)  
MF C9 H5 Cl F N O



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

## B よくあるご質問

### 標識化合物の検索 — 検索例 4

#### ■ 検索例 4: ある構造を有する標識化合物の検索



構造検索でスクリーン 2039 を指定すると、すべての同位体元素を含む構造検索が可能

2039 異常質量 - すべての同位体

2045 重水素

2046 三重水素およびそれ以上の水素同位体

2047 結合位置不明の同位体

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading C:\¥STNEXP¥Queries¥sample2.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> SCR 2039 ← スクリーン 2039 を作成する

L2 SCREEN CREATED

=> S L1 AND L2 ← スクリーンを使ったサンプル検索 (無料)

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

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 33 TO 447

PROJECTED ANSWERS: 1 TO 80

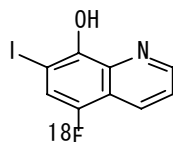
L3 1 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認 (無料)

L3 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN 8-Quinololinol, 5-(fluoro-18F)-7-iodo- (9Cl)

MF C9 H5 F I N O



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L1 AND L2 FUL ← スクリーンを使ったフルファイル検索

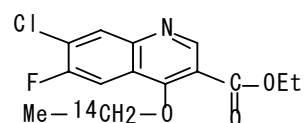
L4 11 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認 (無料)

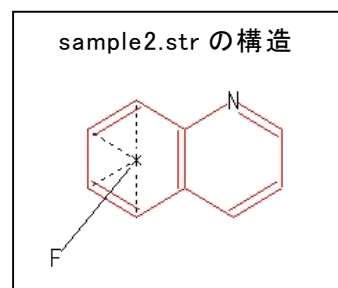
L4 11 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN

IN 3-Quinolincarboxylic acid, 7-chloro-4-(ethoxy-1-14C)-6-fluoro-, ethyl ester (9Cl)

MF C14 H13 Cl F N O3



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



## B よくあるご質問

参考：構造検索で標識化合物を検索するときのノイズ

### 参考：構造検索で標識化合物を検索するときのノイズ

- ・ 質量数を指定,あるいはスクリーンを用いて標識化合物に限定したにもかかわらず,回答にノイズが入る場合がある.

同位体の位置や数が不明な場合,構造に同位体に関する情報は収録されていない.検索モレが生じないように,これらの位置や数が不明な同位体については,すべて回答に含まれる.

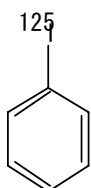
ノイズを除くには,部分名称検索などで絞り込むとよい

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=>  
Uploading C:\STNEXP\Queries\sample3.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1 ← アップロードした構造を確認する  
L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

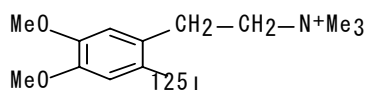
=> S L1 ← サンプル検索 (無料)  
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 211645 TO 224155  
PROJECTED ANSWERS: 2309 TO 3791

L2 28 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← フルファイル検索  
L3 2334 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する (無料)

L3 2334 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Benzeneethaninium, 2-(iodo-125I)-4,5-dimethoxy-N,N,N-trimethyl- (9CI)  
MF C13 H21 I N O2  
CI COM



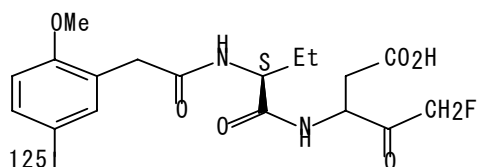
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 3

B よくあるご質問

参考：構造検索で標識化合物を検索するときのノイズ

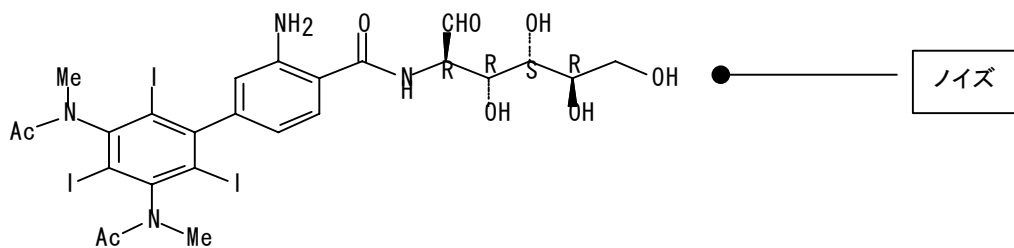
L3 2334 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Pentanoic acid, 5-fluoro-3-[[[2S]-2-[[[5-(iodo-125I)-2-methoxyphenyl]acetyl]amino]-1-oxobutyl]amino]-4-oxo- (9CI)  
 MF C18 H22 F I N2 O6

Absolute stereochemistry.

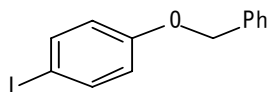


L3 2334 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN D-Glucose, 2-[[[3',5'-bis(acetylmethylamino)-3-amino-2',4',6'-triodo[1,1'-biphenyl]-4-yl]carbonyl]amino]-2-deoxy-, labeled with iodine-123 (9CI)  
 MF C25 H29 I3 N4 O8

Absolute stereochemistry.



L3 2334 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 IN Benzene, 1-iodo-4-(phenylmethoxy)-, labeled with carbon-14 (9CI)  
 MF C13 H11 I O



● ————— ノイズ

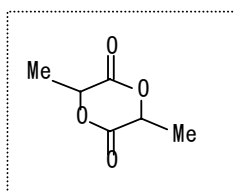
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

## B よくあるご質問

参考： 標識化合物を除くときの注意

### 参考： 標識化合物を除くときの注意

- ・ 部分名称や分子式関連フィールド、あるいはスクリーン検索で NOT 演算子を利用し、標識化合物を除くときは、注意が必要である。
- ・ 多成分物質から標識化合物を除く時、NOT 演算子を利用すると、「分子全体」を見て除くので、目的の成分には同位体が含まれていなくても他の成分に含まれていると除かれてしまう。

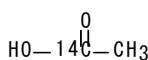


例えば、左の図を構造検索する際、標識化合物を除くため、スクリーン 2039 を NOT すると、RN 148463-97-2 は得られない

RN 148463-97-2 REGISTRY  
IN 1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,6-dimethyl-, homopolymer, acetate-1-14C (9C1)  
MF (C6 H8 O4)x . C2 H4 O2

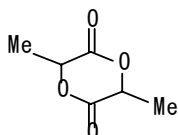
\*\*RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK\*\*

CM 1



CM 2

CM 3



- ・ TRA RN /CRN コマンドを利用すれば、そういった多成分物質も回答として得ることができる
- ・ 検索例： 標識化合物を除いたある構造を有する誘導体の検索

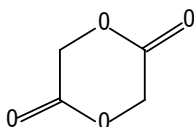
=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=>  
Uploading C:¥STNEXP¥Queries¥sample4.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE ← アップロードした構造を確認する (無料)

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

## B よくあるご質問

参考： 標識化合物を除くときの注意

=> SCR 2039 ← スクリーン 2039 を作成する  
L2 SCREEN CREATED

=> S L1 NOT L2 ← スクリーンを使ったサンプル検索 (無料)  
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 52010 TO 58310  
PROJECTED ANSWERS: 2685 TO 4265

L3 50 SEA SSS SAM L1 NOT L2

=> S L1 NOT L2 FUL ← スクリーンを使ったフルファイル検索  
L4 3262 SEA SSS FUL L1 NOT L2

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L4 3262 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN INDEX NAME NOT YET ASSIGNED  
MF (C6 H10 O2 . C6 H8 O4)x . 1/4 Unspecified

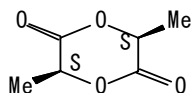
CM 1

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

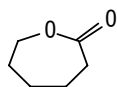
CM 2

CM 3

Absolute stereochemistry.



CM 4



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

=> S L4 AND 1/NC  
L5 236 L4 AND 1/NC

=> TRA RN /CRN  
L6 TRANSFER L5 1- RN : 236 TERMS  
L7 3096 L6/CRN



まず一成分に限定 (AND 1/NC) してから  
TRA RN /CRN を使う

=> S L4 OR L7 ← L4 と L7 の回答をあわせる  
L8 3265 L4 OR L7

=> S L7 NOT L4 ← TRA RN /CRN コマンドを使うことにより, 得られた物質  
L9 3 L8 NOT L4



## B よくあるご質問

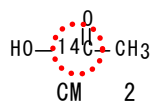
参考： 標識化合物を除くときの注意

=> D\_SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

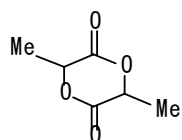
L9 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN 1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,6-dimethyl-, homopolymer, acetate-1-14C (9CI)  
MF (C6 H8 O4)x . C2 H4 O2

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

CM 1



CM 3

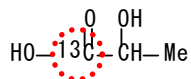


他の成分に標識化合物が含まれていた  
ため除かれてしまったレコード

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

L10 3 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
IN Propanoic-1-13C acid, 2-hydroxy-, monosodium salt, polymer with  
(3R, 6R)-3,6-dimethyl-1,4-dioxane-2,5-dione (9CI)  
MF (C6 H8 O4 . C3 H6 O3 . Na)x  
CI PMS

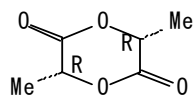
CM 1



● Na

CM 2

Absolute stereochemistry.



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



## *APPENDIX*



APPENDIX

ポリマーの元素式 (/ELF) の数え方

■ モノマー単位ポリマーの元素式は、各成分の分子式から導き出した元素式になる。

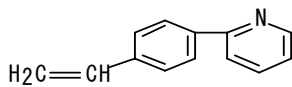
・ モノマー単位ポリマー (末端基がない場合)

RN 960493-99-6 REGISTRY  
MF (C13 H11 N . C5 H8 O2) x

CM 1

CRN 69135-05-3

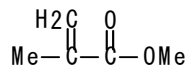
CMF C13 H11 N → C H N/ELF



CM 2

CRN 80-62-6

CMF C5 H8 O2 → C H O/ELF



モノマー単位ポリマーは、各成分の元素式を AND 演算すれば、末端基あり/なしをまとめて検索することができる。

・ モノマー単位ポリマー (末端基がある場合)

RN 266306-43-8 REGISTRY  
MF (C4 H6 O2 . C2 H8 N2) x . x C H3 I

CM 1

CRN 74-88-4

CMF C H3 I → C H I/ELF



CM 2

CRN 26937-01-9

CMF (C4 H6 O2 . C2 H8 N2) x → C H O . C H N/ELF

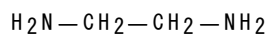
CCI PMS

\* かっこ ( ) と x は除く

CM 3

CRN 107-15-3

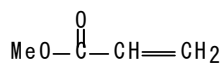
CMF C2 H8 N2 → C H N/ELF



CM 4

CRN 96-33-3

CMF C4 H6 O2 → C H O/ELF



## APPENDIX

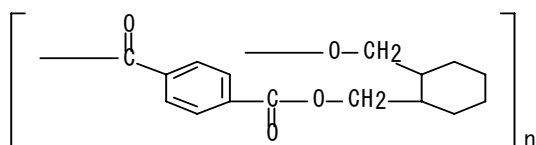
### ポリマーの元素式 (/ELF) の数え方

■ SRU ポリマーの元素式は、全体の分子式から導き出した元素式になる。

- ・ SRU ポリマーは（末端基がない場合）

ED Entered STN: 14 Nov 2007  
 CN Poly(oxymethylene-1,2-cyclohexanedimethylenecarbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN 1,2-Cyclohexanedimethanol-terephthalic acid copolymer, SRU  
 MF (C16 H18 O4)<sub>n</sub> ➡ C H O/ELF  
 CI PMS \* かつこ ( ) と n は除く  
 PGT Polyester  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

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

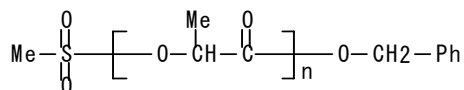


1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- ・ SRU ポリマーは（末端基がある場合）

RN 943344-63-6 REGISTRY  
 ED Entered STN: 25 Jul 2007  
 CN Poly[oxy(1-methyl-2-oxo-1,2-ethanediyl)], α-(methylsulfonyl)-ω-(phenylmethoxy)- (CA INDEX NAME)  
 OTHER NAMES:  
 CN Polylactide benzyl ester mesylate, SRU  
 MF (C3 H4 O2)<sub>n</sub> C8 H10 O3 S ➡ C H O/ELF  
 CI PMS “(C H O)<sub>N</sub> C H O S”/ELF  
 PGT Polyester  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, USPATFULL

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



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



SRU ポリマーは、繰り返し単位の元素式を用いれば、末端基あり/なしをまとめて検索することができる。

## APPENDIX

## 分子式量の算出方法

■ 分子式量 (/FW) は、各「成分」ごとに下記の標準原子量に基づいて値を算出し、その後小数点以下一桁まで丸める。

例:  $Cd_{0.86}TeZn_{0.14}$   $(0.86 \times 112.5) + (1 \times 128) + (0.14 \times 65) = 233.85 \rightarrow 233.8$

元素	元素記号	標準原子量	元素	元素記号	標準原子量
Actinium	Ac	227	Dysprosium	Dy	162.5
Aluminum	Al	27	Einsteinium	Es	254
Americium	Am	243	Erbium	Er	167
Antimony	Sb	122	Europium	Eu	152
Argon	Ar	40	Fermium	Fm	253
Arsenic	As	75	Fluorine	F	19
Astatine	At	210	Francium	Fr	223
Barium	Ba	137	Gadolinium	Gd	157
Berkelium	Bk	247	Gallium	Ga	70
Beryllium	Be	9	Germanium	Ge	72
Bismuth	Bi	209	Gold	Au	197
Boron	B	11	Hafnium	Hf	178.5
Bromine	Br	80	Helium	He	4
Cadmium	Cd	112.5	Holmium	Ho	165
Calcium	Ca	40	Hydrogen	H	1
Californium	Cf	249	Indium	In	115
Carbon	C	12	Iodine	I	127
Cerium	Ce	140	Iridium	Ir	192
Cesium	Cs	133	Iron	Fe	56
Chlorine	Cl	35.5	Krypton	Kr	84
Chromium	Cr	52	Lanthanum	La	139
Cobalt	Co	59	Lawrencium	Lr	257
Copper	Cu	63.5	Lead	Pb	207
Curium	Cm	247	Lithium	Li	7
Deuterium	D	2	Lutetium	Lu	175

## APPENDIX

## 分子式量の算出方法

元素	元素記号	標準原子量	元素	元素記号	標準原子量
Magnesium	Mg	24	Ruthenium	Ru	101
Manganese	Mn	55	Samarium	Sm	150
Mendelevium	Md	256	Scandium	Sc	45
Mercury	Hg	200.5	Selenium	Se	79
Molybdenum	Mo	96	Silicon	Si	28
Neodymium	Nd	144	Silver	Ag	108
Neon	Ne	20	Sodium	Na	23
Neptunium	Np	237	Strontium	Sr	88
Nickel	Ni	59	Sulfur	S	32
Niobium	Nb	93	Tantalum	Ta	181
Nitrogen	N	14	Technetium	Tc	98
Nobelium	No	254	Tellurium	Te	128
Osmium	Os	190	Terbium	Tb	159
Oxygen	O	16	Thallium	Tl	204
Palladium	Pd	106	Thorium	Th	232
Phosphorus	P	31	Thulium	Tm	169
Platinum	Pt	195	Tin	Sn	119
Plutonium	Pu	242	Titanium	Ti	48
Polonium	Po	210	Tritium	T	3
Potassium	K	39	Tungsten	W	184
Praseodymium	Pr	141	Uranium	U	238
Promethium	Pm	147	Vanadium	V	51
Protactinium	Pa	231	Xenon	Xe	131
Radium	Ra	226	Ytterbium	Yb	173
Radon	Rn	222	Yttrium	Y	89
Rhenium	Re	186	Zinc	Zn	65
Rhodium	Rh	103	Zirconium	Zr	91
Rubidium	Rb	85.5			



## APPENDIX

### 分子式量の検索のポイント

- 分子式量 (/FW) はすべての物質の各「成分」について登録されているわけではないので、注意する。

- ・ 組成が不明な物質は、分子式が UNSPECIFIED なので、検索できない。

組成が不明な物質を成分として含む場合は、組成の明らかな成分のみ /FW で検索できる。

- ・ 多成分物質を成分として持つ場合は、それぞれの単成分ごとの成分の分子式量のみ /FW で検索できる。
- ・ ポリマー（モノマー単位ポリマー、SRU ポリマー両方）やオリゴマーなど、分子式に繰り返して表記されている物質は、分子式量 (/FW) で検索すると除かれてしまう。

そのため、モノマーの分子量から、それを原料とするポリマーを検索することはできない。



単成分物質の分子式量を用いると、ポリマーを除く組成の明らかな物質が検索可能

レコード例： 組成が不明な物質を含む多成分物質

RN 960081-65-6 REGISTRY  
ED Entered STN: 07 Jan 2008  
CN Chitosan, N-(1-oxododecyl), 6-(3-carboxypropyl) ether (CA INDEX NAME)  
MF C4 H8 O3 . Unspecified  
CI COM  
PCT Manual registration  
SR CA  
LC STN Files: CA, CAPLUS, TOXCENTER

CM 1

CRN 57407-12-2  
CMF Unspecified  
CCI PMS, MAN



なし

\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

CM 2

CRN 591-81-1  
CMF C4 H8 O3



104/FW

$\text{HO}-(\text{CH}_2)_3-\text{CO}_2\text{H}$

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


APPENDIX

分子式量の検索のポイント


レコード例：多成分物質を成分として持つ物質

RN 960508-87-6 REGISTRY  
MF C237 H324 N6 O27 P12 Pt6 . 3 C14 H15 N . 3 C H F3 O3 S . 6 C F3 O3 S

CM 1  
CRN 960507-81-7  
CMF C237 H324 N6 O27 P12 Pt6 . 6 C F3 O3 S

 6120/FW

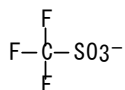
CM 2  
CRN 960507-00-0  
CMF C237 H324 N6 O27 P12 Pt6  
CCI CCS, MAN

 5226/FW


\*\*\* STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE \*\*\*

CM 3  
CRN 37181-39-8  
CMF C F3 O3 S

 149/FW

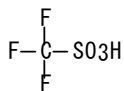


CM 4  
CRN 960245-64-1  
CMF C14 H15 N . C H F3 O3 S

 347/FW

CM 5  
CRN 1493-13-6  
CMF C H F3 O3 S

 150/FW



CM 6  
CRN 103-49-1  
CMF C14 H15 N


 197/FW



APPENDIX

分子式量の検索のポイント

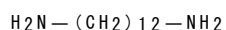
レコード例：モノマー単位ポリマー

RN 139038-93-0 REGISTRY  
MF (C16 H6 O6 . C12 H28 N2)x  494/FW

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

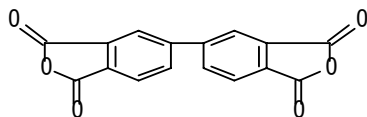
CM 1

CRN 2783-17-7  
CMF C12 H28 N2  200/FW



CM 2

CRN 2420-87-3  
CMF C16 H6 O6  294/FW

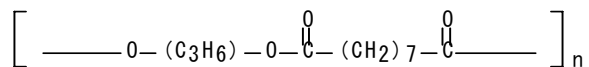


\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

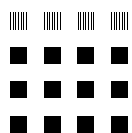
レコード例：SRU ポリマー

RN 9060-47-3 REGISTRY  
MF (C12 H20 O4)n  228/FW

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



単成分物質の分子式量を用いると、ポリマーを除く組成の明らかな物質が検索可能



# **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)