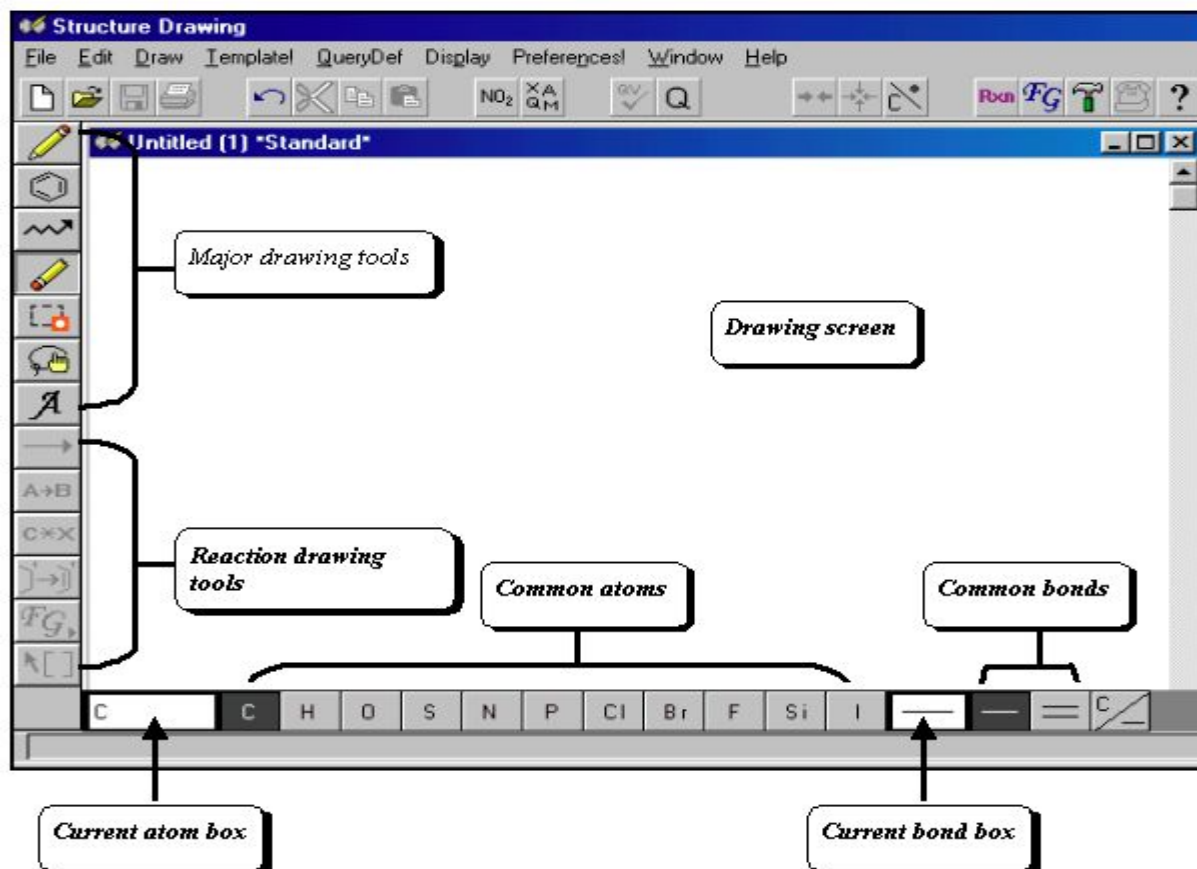


## Pikaohjeita STN rakennehakuun

### 1. Piirtäminen



- Tee koko rakenne valmiiksi kerralla tai
  - Piirrä ensin koko rakenne järjestyksessä käyttäen hiiltä ja yksöissidoksia, ja vaihda sitten atomit ja sidokset oikeiksi
- Käytä hyväksi vasemman palkin rengas- ja ketjutyökaluja.
  - Fuusioituja renkaita voit piirtää useita kerralla (656 tai 6d56), jos mahdollista. Lyhyet ketjut kannattaa piirtää käsin.
  - Renkaan suunnan kääntö: Piirrä rengas + Ympyröi se vasemman palkin lassotyökaluilla + Ota Display/Rotate ja käänä.
  - Rakenneosan siirto: Ympyröi lassotyökalulla ja kun kämmen, niin siirrä.
  - Monimutkaiset rakenteet
    - Tarkista, löytyykö Template-valikosta sopiva perusrakenne.
    - Voit myös käyttää pohjana valmista STN:stä saatua rakennetta (online tai Transcript). Maalaa rakenne tai klikkaa sitä hiiren oikealla.

### Atomit ja sidokset oikeiksi.

- Yleisimmät löytyvät alareunan paletista. Loput Draw-valikosta.
- Valitse kynä aina ennen kuin teet muutoksia yläpalkin valikoiden kautta. esim. jos rengas on valittuna, niin Draw-valikosta valitut Shortcutit tulevat valittuun renkaaseen...
- Varmista, että kynässä näkyy A, kun vaihdat atomia ja – kun vaihdat sidosta. Suorissa ketjuissa kannattaa pitää hiilet näkyvissä, kun vaihtaa atomeja toisiksi. Samoin, jos saat virheilmoituksen.
- Oletukset (C ja yksöissidos) helposti takaisin näpäyttämällä Space Baria.
- Atomien paikan vaihto (OH => HO): Selection Tool + Display/Reverse Shortcut.

### Virheiden korjaus

- Undo(ylhäällä) tai Eraser Tool (vasen palkki) tai Edit tai koko ikkunalle Clear All

## 2. Rakennehaun suoritus

### Mitä haetaan?

- **EXA** = rakenne sellaisenaan + stereoisomeerit + isotooppeja sisältävät
- **FAM** = EXA + suolat + seokset
- **SSS** = EXA + FAM + substituutio avoimissa kohdissa

### Koehaku vai maksullinen haku?

- **SAM** = sample, maksuton koehaku tietokannan osasta
- **FULL** =maksullinen haku koko tietokannasta

### Rakennehaun suoritus

- Piirrä rakenne ja tallenna se.
- **FIL REG**
- Lataa rakenne **Upload Structure Query**
- Tarkista rakenne **D L1**
- Tee koehaku (SAMPLE-haku) **S L1 SSS SAM => L2**
- Tutki tuloksia **D SCAN**
- Tee lopullinen haku **S L1 SSS FULL => L3**
- Tutki tuloksia **D SCAN**
- Siirry (H)CAPLussa **FIL CAPLUS**
- Hae Registryn joukko **S L3**
- Rajaa tarvittaessa esim. rooleilla (**S L3/PREP**) tai patentteihin (**S ... AND P/DT**)
- Tulosta viitteet. Liitä komenttoon **HITSTR. (D IBIB ABS HITSTR 1-)**
- **LOG Y**
- Muuta transkripti Word-muotoon **Results/Export Transcript**

### 3. Osarakennehaaku - Oletuksia ja niiden muuttamista

- **Avoimissa kohdissa saa olla substituutiota**  
=> Jos ei saa, niin piirrä H näkyviin
- **Rengas saa olla myös osana suurempaa rengassysteemiä**  
=> Jos ei saa, niin klikkaa yhtä renkaan atomia hiiren oikealla ja muuta Ring Isolation => Isolated
- **Ketjun atomi saa olla vain ketjussa ja renkaan atomi vain renkaassa**  
=> Jos ei tarvitse olla, niin klikkaa atomia hiiren oikealla ja muuta Node Characteristics => Ring/Chain (Ei välttämättä muuta sidosten määrittystä!)
- **Ketjun sidos saa olla vain ketjussa ja renkaan sidos vain renkaassa**  
=> Jos ei tarvitse olla, niin klikkaa sidosta hiiren oikealla ja muuta Bond Characteristics => Ring/Chain (Muuttaa aina myös atomien määrittäykset!)
- **Tyydytetty vain yksöissidoksia sisältävä 6-rengas saa olla myös normalisoitu eli sisältää kaksoissidoksia (samoin muut tasaluvun hiiliä sisältävät renkaat)**  
=> Jos ei saa, niin ota merkintätyökalu ja merkitse sidokset klikkaamalla Shift alhaalla. Muuta Query Definitionissa Bond Characteristics => Exact
- Erilaisia merkintätapoja
  - **Sidoksen/atomin oletusten muuttaminen** => Klikkaa hiiren oikealla
  - **Useamman sidoksen/atomin oletusten muuttaminen kerralla** => Ota vasemmasta palkista merkintätyökalu ja merkitse haluamasi rakenneosat pitämällä Shift alhaalla. Valitse yläpalkista Query Definition, sieltä haluamasi kohta ja tee muutokset.
- Query Attributes –kuvakkeella (Q) voi tarkistaa, että haluttu muutos tehtiin

## 4. Osarakennehaaku - Substituution kontrollointi

Osarakennehaaku sallii substituution. Substituutiota voidaan kontrolloida.

**Variables** = Ennaltamäärätty ”atomiluokka” (halogeenit) tai rengassysteemi (heterosykli). Cb, Cy ja Hy ja Ak voidaan määrittellä tarkemmin. Ks attributesw.

- X Halogens
- A Atoms except H
- Q Atoms except C, H
- M Metals
- Cb Carbocyclic ring systems
- Cy Ring systems
- Hy Heterocyclic ring systems
- Id “Dummy” node (Polymer)
- Ak Carbon chain

### **Attributes (koskee vain Variable Groupin renkaita Cb, Cy ja Hy sekä hiiliketjua Ak)**

= Ketjujen ja rengassysteemien koostumusten tarkempi määrittäminen

- Attributes-määrittäminen
  - Klikkaa ryhmää hiiren oikealla
  - Valitse Generic Definitions tai Element Count
  - Element Countille lisäksi Add
- **Generic Definitions**
  - Saturation
  - Type of alkyl chain (Linear tai branched)
  - Number of heteroatoms (1 tai >1)
  - Rengassysteemi (Monocyclic tai polycyclic)
  - Carbon count (<=7 tai >7)
- **Element Counts**

Valitut heteroatomit ja lukumäärät heterosyklisissä renkaissa Cb, Cy, Hy.

  - Valitut alkuaineet
  - Kunkin alkuaineen atomien lukumäärä
  - Huom! Muitakin alkuaineita voi olla mukana. Jos et halua tiettyä alkuainetta, niin merkitse sen lukumääräksi 0.

**Repeating groups** = Toistuvien ryhmien määrä

- Toistuva yksikkö esitetään hakasuluissa. Kummallakin puolella oltava Node
- Alaraja voi olla 0 eli että ryhmää ei ole lainkaan.
- Yläraja max 20
- Määrittäminen: Merkitse merkintätyökalulla toistettava ryhmä. Jos useita, niin pidä klikatessa Shift alhaalla. Draw => Repeating Group

**G-groups** = Käyttäjän määrittelemät substituentit

- a) Kun substituentit on saatavilla valmiina: Atoms, Shortcuts, Variables, G-Groups
- Määrittele G-ryhmän substituentit
    - Draw / G-groups /New  
Atoms, Shortcuts tai Variables ja valitse haluamasi => Save
    - Single Use tai Multiple Use
  - Liitä G-ryhmä rakenteeseen
    - Klikkaa määritettävää atomia rakenteessa
- b) Kun joudut itse piirtämään mahdolliset rakenneosat: Fragments
- Piirrä fragmentin rakenne Query-rakenteen kanssa samaan kuvaan
  - Merkitse fragmenttiin, mihin atomiin sidos saa muodostua
    - Draw / G-groups
    - Valitse Point of Attachment ja Single tai Multiple Use
    - Klikkaa liitosatomeja => @
  - Lisää fragmentti G-ryhmään
    - Draw / G-groups / New / Fragments
    - Yksi fragmentti on korostettu. Ruksaa Include this fragment
    - Klikkaa Next fragment => toinen fragmentti tulee valituksi. Ruksaa Include this fragment. Toista tämä kaikille fragmenteille.
    - OK. Save
    - Single Use tai Multiple Use
  - Liitä G-ryhmä rakenteeseen
    - Klikkaa määritettävää atomia rakenteessa

**Variable points of attachment (VPA)** = Renkaan substituentin paikka saa vaihdella

- Substituentti voi olla Atoms, Shortcuts, Variable groups, Fragments, G-groups
- Määrityksen teko
  - Piirrä substituentti erikseen lähelle rengasta ilman sidosta siihen.
  - Ota merkintätyökalu, pidä Shift alhaalla ja merkitse substituentti sekä ne renkaan paikat, joihin se saa liittyä.
  - Draw-valikosta Variable points of attachment. Jos haluat katkoviivat renkaan keskelle, Preferences/Chemistry/Show VPA.