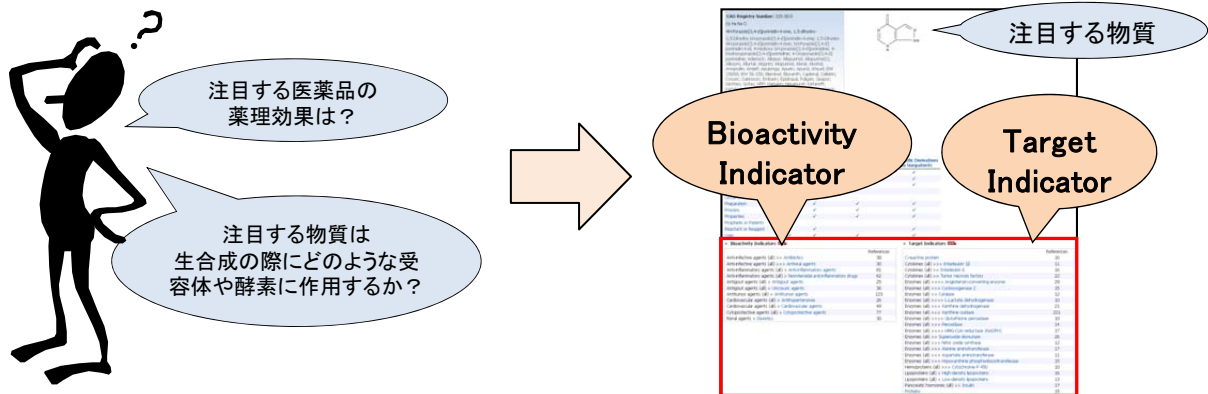


SciFinder の生物活性関連情報について

2012 年 1 月

1. Bioactivity Indicator と Target Indicator とは？

Bioactivity Indicator は物質がどのような生物活性(例: 抗生物質, 血管収縮剤など)をもつ可能性が高いかを示し, Target Indicator はその物質がどのような受容体や酵素(例: α -アミラーゼ, 前立腺特異抗原など)に作用する可能性が高いかを示すものである。




従来, 注目する物質の生物活性などを調べるには, 物質検索後に文献検索し, 得られた文献を確認する必要があった。Bioactivity Indicator と Target Indicator を利用すると, 注目する物質の詳細情報を表示するだけで, 手早くその物質の生物活性や作用する受容体・酵素などが把握できる^{※2}。

■ 例 : アロプリノール (Allopurinol) の Bioactivity Indicator と Target Indicator

Bioactivity Indicators <small>NEW</small>	References	Target Indicators <small>NEW</small>	References
Anti-infective agents (all) >> Antibiotics	38	C-reactive protein	16
Anti-infective agents (all) >>> Antiviral agents	30	Cytokines (all) >>> Interleukin 1 β	11
Anti-inflammatory agents (all) > Anti-inflammatory agents	81	Cytokines (all) >> Interleukin 6	16
Anti-inflammatory agents (all) > Nonsteroidal anti-inflammatory drugs	62	Cytokines (all) >>> Tumor necrosis factors	22
Antigout agents (all) > Antigout agents	25	Enzymes (all) >>>> Angiotensin-converting enzyme	29
Antigout agents (all) > Uricosuric agents	36	Enzymes (all) >>>> Cyclooxygenase 2	15
Antitumor agents (all) > Antitumor agents	123	Enzymes (all) >> Catalase	12
Cardiovascular agents (all) > Antihypertensives	26	Enzymes (all) >>>> L-Lactate dehydrogenase	10
Cardiovascular agents (all) > Cardiovascular agents	49	Enzymes (all) >>> Xanthine dehydrogenase	21
Cytoprotective agents (all) > Cytoprotective agents	77	Enzymes (all) >>>> Xanthine oxidase	221
Renal agents > Diuretics	30	Enzymes (all) >>>> Glutathione peroxidase	10
		Enzymes (all) >>>> Peroxidase	14
		Enzymes (all) >>>> HMG-CoA reductase (NADPH)	17
		Enzymes (all) >>> Superoxide dismutase	26
		Enzymes (all) >>> Nitric oxide synthase	12
		Enzymes (all) >>> Alanine aminotransferase	17
		Enzymes (all) >>> Aspartate aminotransferase	11
		Enzymes (all) >>> Hypoxanthine phosphoribosyltransferase	15
		Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450	10
		Lipoproteins (all) >>> High-density lipoproteins	16
		Lipoproteins (all) >> Low-density lipoproteins	13
		Pancreatic hormones (all) >>> Insulin	17
		Proteins	15

抗炎症薬,
尿酸排せつ薬,
抗癌剤 など

キサンチンオキシダーゼ,
インスリンなど

 **ポイント**
Bioactivity Indicator と Target Indicator を見るだけで,
注目する物質の生物活性に関する情報が手早く把握できる。

2. 文献検索への活用

Bioactivity Indicator と Target Indicator を見てさらに詳しい内容が知りたい場合, Indicator をクリックするだけで, 注目する物質に関連する特定の生物活性や受容体・酵素などへの作用が記載された文献情報を検索できる※2.

The screenshot shows two columns of indicators. The 'Bioactivity Indicators' column lists various drug classes like Antibiotics, Anticancer agents, etc. The 'Target Indicators' column lists enzymes and proteins, with 'Xanthine oxidase' highlighted in red. Below, a list of references is shown, with the first two entries being:

1. Treatment of gout using sodium 2-(5-bromo-4-(1-cyclopropylsulfamoyl-1-yl)-th-1,2,4-triazol-3-ylthio)acetate. @Full text
By Min, Jeff; Qu, Barry D; Gardel, Jean-Luc
From PCT Int. Appl. (2011), WO 2011/26952 A2 20111013. | Language: English, Database: CAPLUS
2. Application of arachidonic acid as xanthine oxidase inhibitor for preparation of drugs for treating hyperuricemia and gout. @Full text
By Wang, Changli; Li, Yali; Chen, Minhui; Li, Hengqian; Wang, Yuzong
From Fenng Zhuanl Shenqng (2011), CN 102135214 A 20110727. | Language: Chinese, Database: CAPLUS



ポイント

興味を持った生物活性に関する文献情報がワンクリックで検索できる。

3. 物質解析への活用

Bioactivity Indicator や Target Indicator を解析に用いると, 解析結果を見るだけで注目する物質群の生物活性や作用する受容体・酵素などの傾向が手早く把握できる。

The screenshot shows a chemical structure analysis interface. On the left, a chemical structure is displayed, and a red box highlights the 'Substructure search' button. An arrow points to the right, where a search results page is shown. A stick figure character is thinking, with two speech bubbles asking questions about the pharmacological effects and anticancer agents of the substances.

注目する骨格を有する物質群はどのような薬理効果をもつのか？

注目する骨格を有する物質群の中で抗癌剤に使われている物質はどれか？

従来, 構造検索などで注目する骨格を有する物質群を表示し, その物質群の生物活性に関する傾向を把握するには非常に手間がかかった。

■ Bioactivity Indicator を用いた物質解析

画面右側の解析項目より Bioactivity Indicators を選択し、解析を実行する。

抗がん剤, 抗感染薬, 抗炎症薬, 中枢神経系薬など

Bioactivity Indicator	Count
Antitumor agents (all)	570
Natural products MD pharmaceutical	526
Anti-infective agents (all)	314
Anti-inflammatory agents (all)	297
Nervous system agents (all)	250
Antidiabetic agents	243
Cardiovascular agents (all)	190
Cytoprotective agents (all)	159
Immune agents (pharmaceutical)	98
Enzyme inhibitors (all)	94

Bioactivity Indicator	Count
<input checked="" type="checkbox"/> Antitumor agents (all)	574
<input type="checkbox"/> Natural products MD pharmaceutical	545
<input type="checkbox"/> Anti-infective agents (all)	315
<input type="checkbox"/> Anti-inflammatory agents (all)	297
<input type="checkbox"/> Nervous system agents (all)	250
<input type="checkbox"/> Antidiabetic agents	244
<input type="checkbox"/> Cardiovascular agents (all)	198
<input type="checkbox"/> Cytoprotective agents (all)	159
<input type="checkbox"/> Immune agents (pharmaceutical)	98
<input type="checkbox"/> Enzyme inhibitors (all)	95

解析が実行されると画面右側に物質の上位 10 件の Bioactivity Indicator が表示される。さらに全体の傾向を把握するために、上位 10 件以下の Bioactivity Indicator を表示する場合、Show More をクリックする。解析結果より、事前に知りえなかった生物活性が把握できる可能性がある。

さらに、特定の Bioactivity Indicator にチェックを付け、Apply をクリックすると、その生物活性を示す物質群のみを選択的に表示できる※²。

Substances: 13308 Substances (0 Selected)
574 Substances with the Bioactivity Indicator: Antitumor agents (all) are displayed

Substance Detail 203: 134-64-3 (Component: 7690-51-9)
Substance Detail 217: 1429-30-7 (Component: 13270-60-5) Cis H3 O3 Cl
Substance Detail 265: 1132901-64-6 (Component: 1133003-73-2) Cis H3 O3 Cl

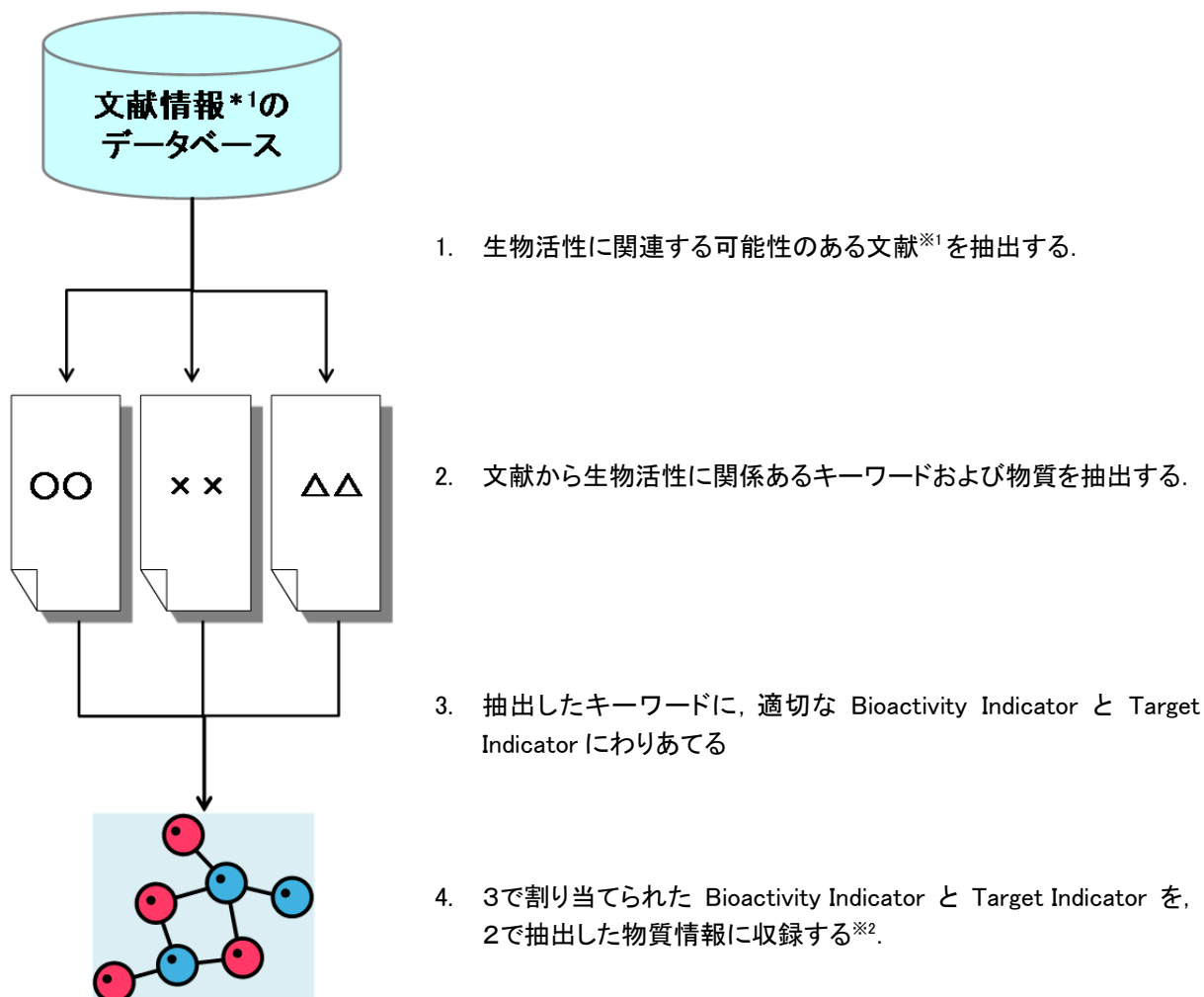
※※ 同じ手順で Target Indicator を用いた解析も行うことができる。

ポイント

解析結果を見るだけで注目する物質群の生物活性の傾向を手早く把握できる。また、思わぬ生物活性に気づく可能性がある。

さらに、膨大な物質群の中から興味ある生物活性を示す物質のみ選択的に確認できる。

参考 Bioactivity Indicator と Target Indicator の収録方法



※1 Bioactivity Indicator と Target Indicator の収録源の文献情報は CAS が作成した CAplus ファイルのみ。MEDLINE ファイルは収録対象外。

※2 同一文献中の物質情報と生物活性に関するキーワードを結びつけているため、直接関連性がない情報を結びつけることもある。すなわち、Bioactivity Indicator や Target Indicator は該当する活性の可能性を示すもので、必ずしも活性を有するとは限らない。

JAICI
化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
TEL: 0120-003-462
E-mail: support@jaici.or.jp

CAS[®]

A division of the American Chemical Society