 SciFinder®
インターネットセミナー

SciFinder 塩・錯体の検索方法

JAICI
化学情報協会

2014年2月



1

本日の内容

塩や錯体の検索でお困りでないでしょうか？

よくわからない
構造が表示され
る…？

構造検索すると
関係ないものも
ヒット…？



どのように作図
すればよい…？

JAICI
化学情報協会

2

よくわからない構造が表示される…？

➤ 文献詳細情報の CAS 登録番号をクリック

REFERENCE DETAIL [Get Substances](#) [Get Related Citations](#) [Get Full Text](#)

[Return](#)

The anti-inflammatory agents aspirin and salicylate inhibit the activity of IκB kinase-β

By: Yin, Min-Jean; Yamamoto, Yumi; Gaynor, Richard B.

NF-κB comprises a family of cellular transcription factors that are involved in the inducible expression of genes that regulate the inflammatory response. NF-κB is sequestered in the cytoplasm by inhibitory protein IκB. IκB is made up of two kinases, IKK-α and IKK-β, which phosphorylate IκB, leading to its degradation and translocation of NF-κB to the nucleus. IKK kinase activity is stimulated when cells are exposed to proinflammatory stimuli. Here we demonstrate that the anti-inflammatory agents aspirin and salicylate specifically inhibit IKK-β activity in vitro and in vivo. The mechanism of aspirin and salicylate inhibition of IKK-β is mediated in part by their specific inhibition of IKK-β, thereby preventing activation of NF-κB and subsequent pathogenesis of the inflammatory response.

Indexing

Pharmacology (Section1-7)

Concepts

Transcription factors

NF-κB (nuclear factor κB); anti-inflammatory agents aspirin and salicylate inhibit IκB kinase-β

Biological study, unclassified; Biological study

Anti-inflammatory agents

anti-inflammatory agents aspirin and salicylate inhibit IκB kinase-β

Substances

50-78-2 Aspirin

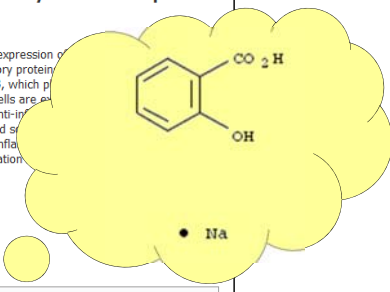
54-21-7 Sodium Salicylate

anti-inflammatory agents aspirin and salicylate inhibit IκB kinase-β

Biological activity or effector, except adverse; Biological study, unclassified; Therapeutic use; Biological study; Uses

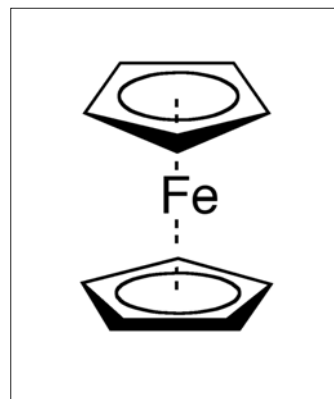
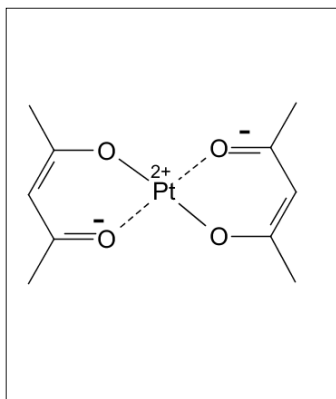
159606-08-3 IκB-β kinase

anti-inflammatory agents aspirin and salicylate inhibit IκB kinase-β



どのように作図すればよい…？

➤ 有機金属錯体は作図が困難…？



本日の内容

1. 塩の登録ルールと検索方法
2. 錯体の登録ルールと検索方法
3. エラーへの対処
4. まとめ

本日の内容

1. 塩の登録ルールと検索方法
2. 錯体の登録ルールと検索方法
3. エラーへの対処
4. まとめ

塩の登録ルール

(1) 金属塩以外の塩(アミン塩, オニウム塩など)

➤ 由来する酸成分 + 塩基成分で登録



JAICI
化学情報協会

研究者のイメージ	実際の登録
	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ <ul style="list-style-type: none"> • HCl
	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$

7

塩の登録ルール

(2) 金属塩の場合

➤ フリーの有機成分 + 金属で登録が原則



JAICI
化学情報協会

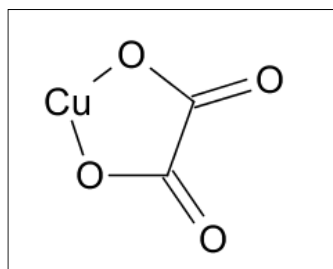
研究者のイメージ	実際の登録
	<ul style="list-style-type: none"> ● Na
	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$ <ul style="list-style-type: none"> • 1/4 Ti(IV)

8

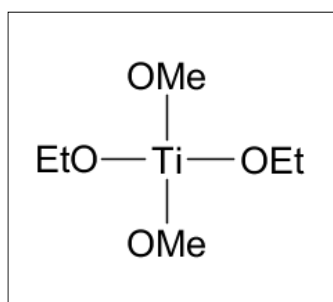
塩の登録ルール

(2) 金属塩の場合(つづき)

➤ 例外 (環状構造)



➤ 例外 (有機成分が2種類以上)



検索にあたって

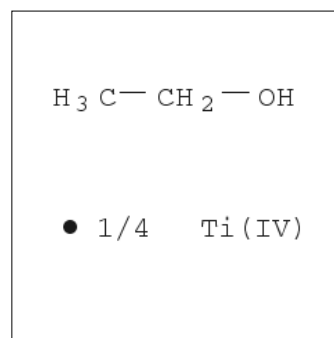
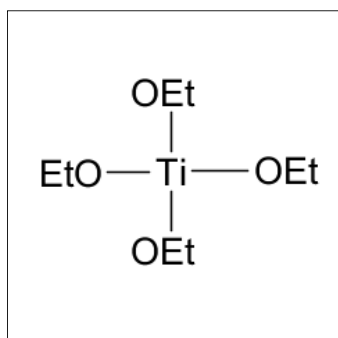
それぞれの登録ルールはあるが...

- SciFinder では作図した構造が幅広く解釈され、きちんとヒットする

★作図した構造★ ≠ ★実際の登録★



例えば...



ヒット

★作図した構造★ ≠ ★実際の登録★



SciFinder®

マジック



JAICI
化学情報協会

11

デモンストレーション

JAICI
化学情報協会

12

塩の検索ポイント

(1)基本は研究者のイメージを構造作図してOK

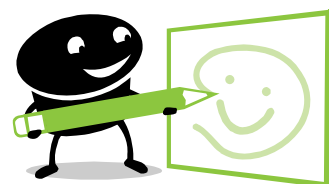
(2)ノイズは成分限定で除ける

Single component

(3)電荷は指定しなくてよい

(4)文献数も参考に

→必要なもの、可能性のあるものを取捨選択



本日の内容

1. 塩の登録ルールと検索方法

2. 錯体の登録ルールと検索方法

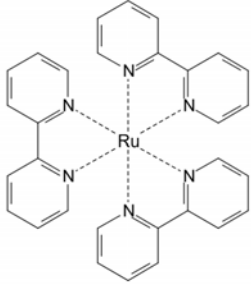
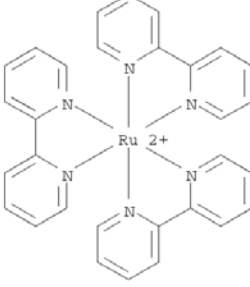
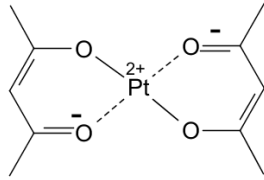
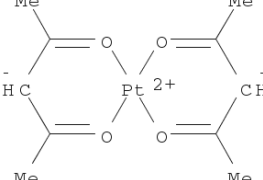
3. エラーへの対処

4. まとめ

錯体の登録ルール

(1)メタロセン化合物以外

- 金属と非金属の結合は単結合で表記が原則

研究者のイメージ	実際の登録
	
	

15

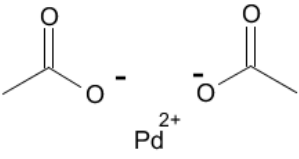
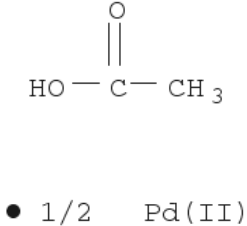


JAICI
化学情報協会

錯体の登録ルール

(1)メタロセン化合物以外(つづき)

- 一部、配位子 + 金属成分の形で多成分物質として登録されることも

研究者のイメージ	実際の登録
	



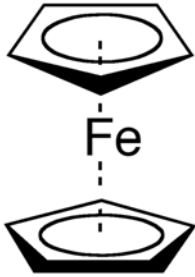
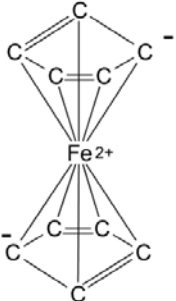
JAICI
化学情報協会

16

錯体の登録ルール

(2) メタロセン化合物

- 中心金属と配位子の炭素が単結合で表記

研究者のイメージ	実際の登録
	



検索にあたって

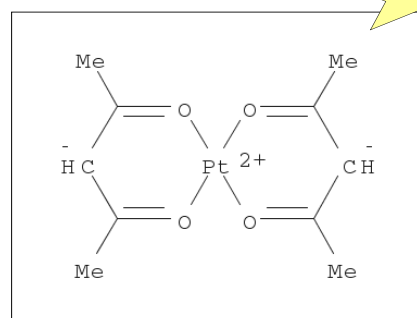
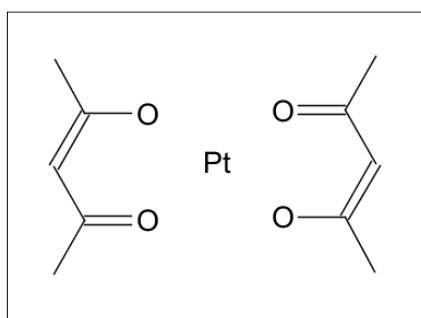
それぞれの登録ルールはあるが...

- SciFinder では作図した構造が幅広く解釈され、きちんとヒットする

★作図した構造★ ≠ ★実際の登録★



例1: 配位子と金属を離してもヒット

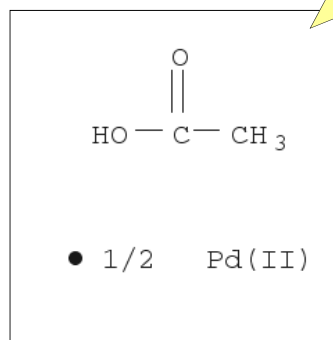
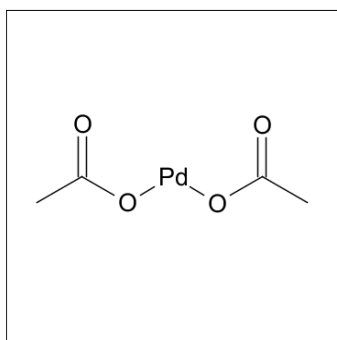


★作図した構造★ ≠ ★実際の登録★

SciFinder® マジック



例2: 結合を描いても多成分登録物質がヒット

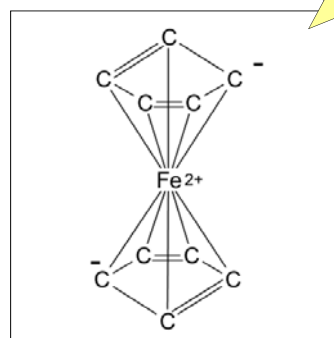
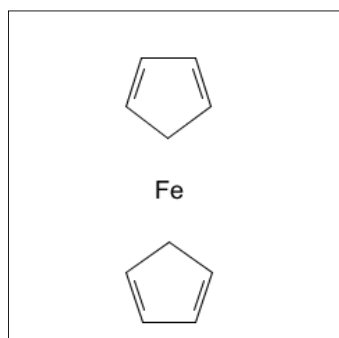


★作図した構造★ ≠ ★実際の登録★

SciFinder® マジック



例3:配位子と金属を離してもヒット



ヒット

★作図した構造★ ≠ ★実際の登録★

SciFinder®マジック



JAICI
化学情報協会

21

デモンストレーション

JAICI
化学情報協会

22

錯体の検索ポイント

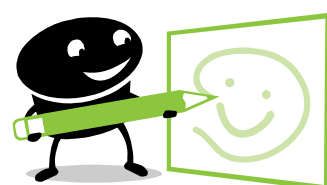
(1)基本は研究者のイメージを構造作図してOK

(2)ノイズは成分限定や結合作図で除ける

(3)電荷は指定しなくてよい Single component

(4)文献数も参考に

→必要なもの、可能性のあるものを取捨選択



本日の内容

1. 塩の登録ルールと検索方法

2. 錯体の登録ルールと検索方法

3. エラーへの対処

4. まとめ

作図でエラーが表示されることも



エラーは気にしない

➤ 複数の構造式を書いた場合



➤ 標準原子価を超えた場合



➤ 結合と結合が重なった場合 (交点は炭素原子ではない)



本日の内容

1. 塩の登録ルールと検索方法

2. 錯体の登録ルールと検索方法

3. エラーへの対処

4. まとめ

SciFinder 塩・錯体の検索方法

(1)基本は研究者のイメージを構造作図してOK

(2)ノイズは成分限定で除ける

(3)電荷は指定しなくてよい

(4)文献数も参考に

→必要なもの、可能性のあるものを取捨選択

