

Vol.37

秋号

# STNews

## TOPICS

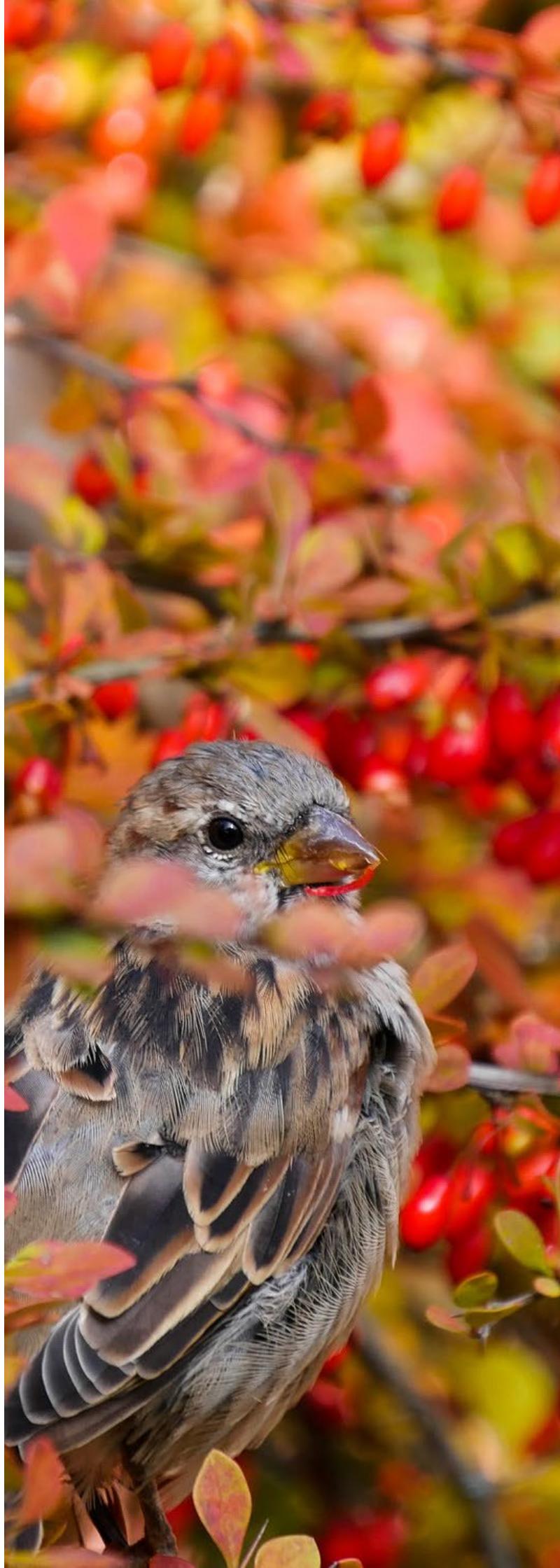
[STNext における  
立体作図](#)

---

[データベースニュース  
スタッフ紹介  
ひとこと](#)

**STN**<sup>®</sup>

2021年10月1日 化学情報協会発行



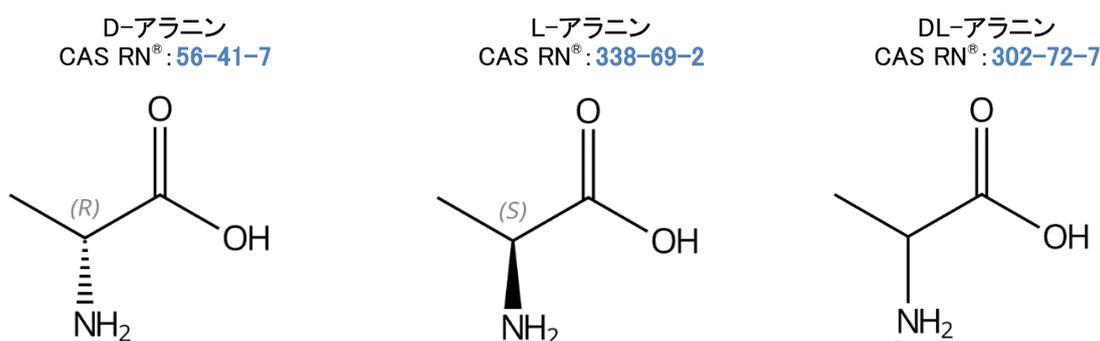
# STNnext<sup>TM</sup> における 立体作図

STNnext の作図ツールには、可変置換位置や繰り返しグループなど誘導体検索に便利な様々な機能が搭載されています。今回は、それらの多様な作図機能の中から、2021 年 7 月に強化された、立体配置の作図についてご紹介いたします。

## ■ REGISTRY ファイルの立体化学情報

REGISTRY ファイルでは、立体化学情報も化学物質の識別に使用されており、立体異性体や立体化学情報の無い物質にはそれぞれ異なる CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) が付与されています。

### 例) REGISTRY ファイルにおけるアラニンの登録



DL-アラニンのように不斉中心が一つしかないラセミ体は立体化学情報をもたない

ただし、キラル化合物の 2 種類のエナンチオマーが等量存在するラセミ体に加え、下記のような場合は立体化学情報を含みません。

- ・ 立体化学が不明
- ・ 出典元に立体化学に関する情報がない

### ● REGISTRY ファイルに収録されている主な立体化学情報

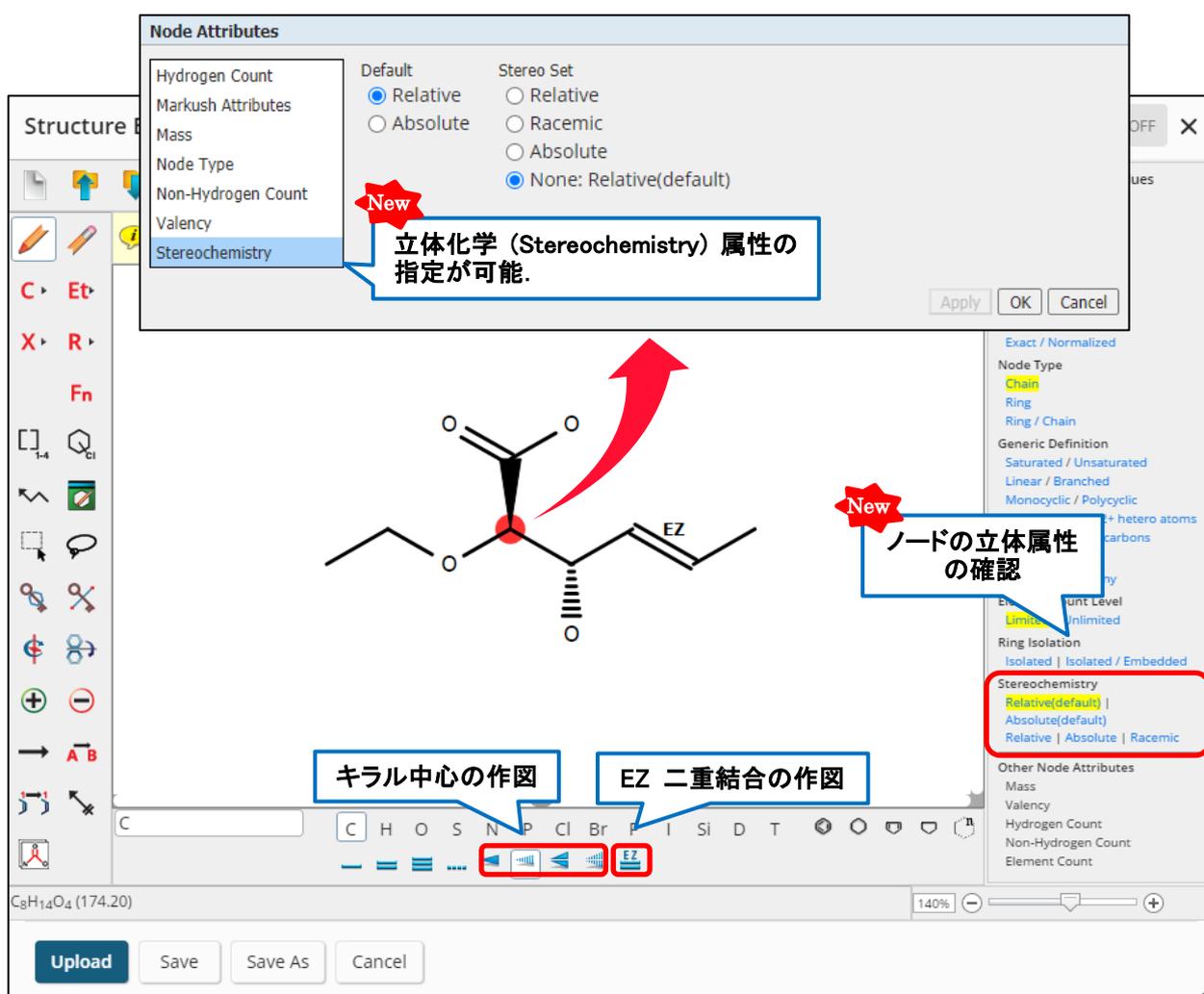
下記の立体化学情報が、レコードに収録されている構造情報に反映されている場合は立体構造検索が可能です。

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

## ■ 立体に関する作図機能

STNext の作図ツールでは、幾何異性体を持つ二重結合（E-Z 表示）とキラル中心を作図するための立体結合の作図ができます。さらに 2021 年 7 月の強化で絶対配置と相対配置のデフォルトを設定できるようになりました。

### ● STNext の立体作図機能



The screenshot displays the 'Node Attributes' dialog box in the STNext software. The 'Stereochemistry' section is highlighted, showing options for 'Default' (Relative, Absolute, None: Relative(default)) and 'Stereo Set' (Relative, Racemic, Absolute, None: Relative(default)). A red starburst with the word 'New' is placed next to the 'None: Relative(default)' option, with a callout box stating '立体化学 (Stereochemistry) 属性の指定が可能。' (Stereochemistry attribute specification is possible).

The main window shows a chemical structure with a chiral center (red dot) and an E-Z double bond. A red arrow points to the chiral center, and a callout box says 'キラル中心の作図' (Chiral center drawing). Another callout box points to the double bond, saying 'EZ 二重結合の作図' (E-Z double bond drawing). A third callout box points to the 'Stereochemistry' dropdown in the right-hand panel, which is set to 'Relative(default)', with a red starburst and the text 'ノードの立体属性の確認' (Check node stereochemistry).

The bottom toolbar includes buttons for 'C', 'H', 'O', 'S', 'N', 'P', 'Cl', 'Br', 'I', 'Si', 'D', 'T', and a dropdown menu currently set to 'EZ'. The status bar shows the molecular formula C8H14O4 (174.20) and a zoom level of 140%.

### ● 絶対配置と相対配置

2021 年 7 月の強化で設定できるようになった立体化学属性には、絶対配置（Absolute Stereochemistry）と相対配置（Relative Stereochemistry）があり、それぞれ下記の内容の構造が検索結果として得られます。

相対配置 (Relative Stereochemistry)	絶対配置または相対配置で登録されたレコードを検索。 ジアステレオマーを除く構造がヒットする（光学異性体もヒットする）。
絶対配置 (Absolute Stereochemistry)	絶対配置（Absolute Stereochemistry）で登録されたレコードを検索。 作図した立体配置通りの構造がヒットする。

## ■ RIGISTRY ファイルの立体化学情報を含むレコード

立体化学情報は CA 索引名や構造図中に示されます。構造図中に立体化学情報が表示される物質は、ファイルセグメント (/FS) フィールドに STEREOSEARCH と表示され、立体作図機能を利用した構造質問式による検索が可能です。

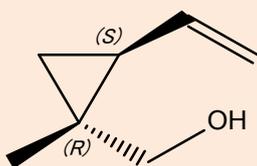
### ● レコード例

#### ・ 絶対配置のレコード

```
RN 1932014-15-7 REGISTRY
ED Entered STN: 15 Jun 2016
CN Cyclopropanemethanol, 2-ethenyl-1-methyl-, (1R,2S)- (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C7 H12 O
SR Chemical Catalog
Supplier: FCH Group
```

立体化学構造検索が可能な物質を示すファイルセグメント

CA 索引名中の立体化学情報



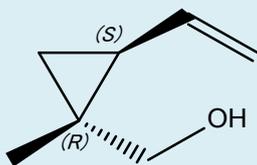
絶対配置

Absolute stereochemistry shown

#### ・ 相対配置のレコード

```
RN 145887-29-2 REGISTRY
ED Entered STN: 12 Feb 1993
CN Cyclopropanemethanol, 2-ethenyl-1-methyl-, (1R,2S)-rel- (CA INDEX NAME)
FS STEREOSEARCH
MF C7 H12 O
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS
```

相対配置の場合は rel- が付与されている



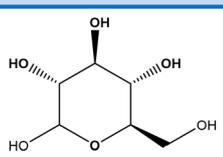
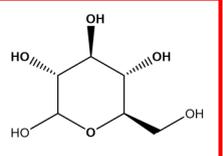
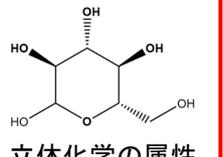
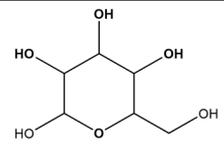
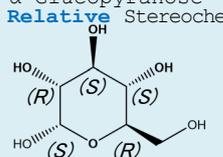
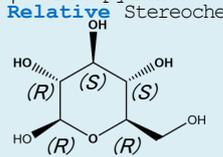
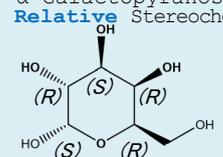
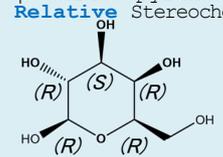
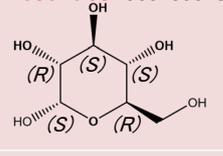
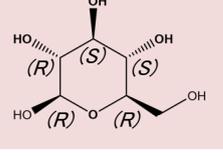
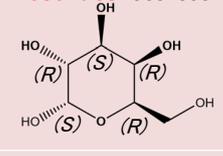
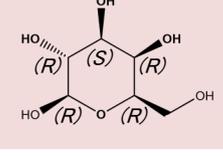
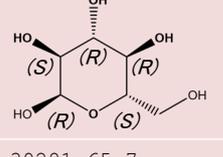
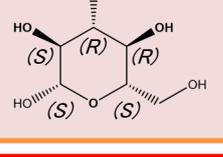
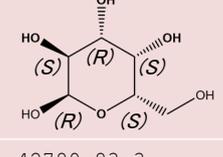
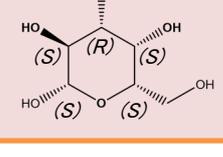
相対配置

Relative stereochemistry shown

## ■ 相対配置 (Relative) と絶対配置 (Absolute) の指定

立体化学 (Stereochemistry) のノード属性のデフォルトは相対配置 (Relative) です。つまり、下図の例では青い太線で囲った範囲の回答が得られます。作図した通りの絶対配置の回答に限定したい場合は、Default または Stereo Set で Absolute を指定します。

### ● Stereochemistry の指定でヒットするレコードの違い (例 : グルコース)

作図方法	立体化学の属性	ヒットするレコード (例: グルコース)	ヒットするレコード (例: ガラクトース)
<b>立体結合で作図*</b>  立体化学の属性 <b>Relative</b> Relative・Absolute を問わず 立体配置通りの構造とその 光学異性体がヒットする	<b>立体結合で作図(D体)</b>  立体化学の属性 <b>Absolute</b> Absolute で登録された 作図した立体配置通りの 構造がヒットする	<b>立体結合で作図(L体)</b>  立体化学の属性 <b>Absolute</b>	<b>平面結合で作図</b>  立体を作図しない場合 立体を含まない構造と すべての立体異性体 を検索できる
		<b>グルコース</b> 34685-56-8 α-Glucopyranose <b>Relative</b> Stereochemistry  34685-57-9 β-Glucopyranose <b>Relative</b> Stereochemistry 	<b>ガラクトース</b> 32445-46-8 α-Galactopyranose <b>Relative</b> Stereochemistry  32445-47-9 β-Galactopyranose <b>Relative</b> Stereochemistry 
		492-62-6 α-D-Glucopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry  492-62-6 β-D-Glucopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry 	3646-73-9 α-D-Galactopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry  7296-64-2 β-D-Galactopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry 
		492-66-0 α-L-Glucopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry  39281-65-7 β-L-Glucopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry 	12772-65-5 α-L-Galactopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry  42789-83-3 β-L-Galactopyranose <b>Absolute</b> Stereochemistry 

Stereo Set で部分的に立体属性を変更することで  を検索できる。 => p.6 検索例

\* α β を考慮しないため 1 位は平面結合で作図

◇ 検索例： Stereo Set を利用した  $\alpha$ ,  $\beta$ 型の L-グルコース/ガラクトースの検索

Stereochemistry の Default の設定で構造全体の立体化学属性を Relative または Absolute に指定すると、グルコースのジアステレオマーであるガラクトースを検索することはできません。ガラクトースも含めて検索する場合は、立体を作図しないか、Stereo Set でノードごとの立体化学属性を変更します。ここでは、検索例として p.5 でオレンジ色の太線で囲んだ L 体のグルコースと L 体のガラクトースのみ検索する場合の作図方法をご紹介します。

● 作図の流れ

- 1 位を平面結合で描いた L-グルコース (または L-ガラクトース) を作図し、Stereochemistry の Default を **Absolute** に変更します。Default の立体化学属性は作図した構造のすべてのキラルノードに適用されます。

① 右クリックで Node Attributes を開く

② Default を **Absolute** に変更する

③ OK で設定を適用する

作図画面

$\alpha$ ,  $\beta$  の両方を検索するため 1 位は平面結合で作図する

Node Attributes

Hydrogen Count  
Markush Attributes  
Mass  
Node Type  
Non-Hydrogen Count  
Valency  
Stereochemistry

Default  
 Relative  
 Absolute

Stereo Set  
 Relative  
 Racemic  
 Absolute  
 None: Absolute(default)

Changing the default value will amend all nodes with a default stereo set.

Apply **OK** Cancel

2. グルコースとガラクトースは 4 位の立体結合の配向の違いであるため、4 位の Stereochemistry の Stereo Set を **Relative** に変更します。

① Stereo Set を **Relative** に変更する

② OK で設定を適用する

作図画面

Node Attributes

Hydrogen Count  
Markush Attributes  
Mass  
Node Type  
Non-Hydrogen Count  
Valency  
Stereochemistry

Default  
 Relative  
 Absolute

Stereo Set  
 Relative  
 Racemic  
 Absolute  
 None: Absolute(default)

Apply **OK** Cancel

2, 3, 5 位の立体属性

**Absolute** (絶対配置)

Stereochemistry  
 Relative(default) |  
 Absolute(default)  
 Relative | Absolute | Racemic

4 位の立体属性

**Relative** (相対配置)

Stereochemistry  
 Relative(default) |  
 Absolute(default)  
 Relative | Absolute | Racemic

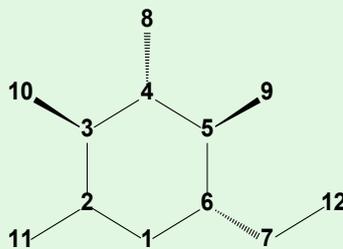
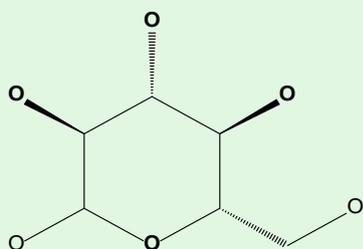
● 検索

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2021\_0354\_Structure ← p.6 で作図した構造をアップロード



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6

Chain Nodes : 7 8 9 10 11 12

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1

:

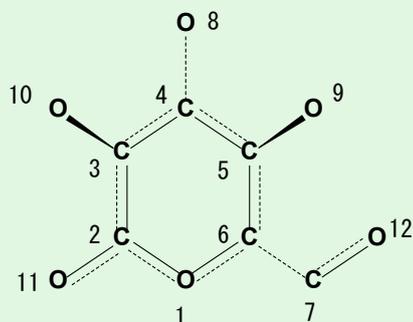
L1 STRUCTURE UPLOADED

D QUE L# で作図した立体情報を表示できる

デフォルトで表示される属性には  
立体情報は含まれない

=> D QUE L1

L1 STR



立体属性

STEREO ATTRIBUTES:

STEREO DEFAULT ABSOLUTE

NUMBER OF CHIRAL CENTERS IS 4

SS1 REL 5

← デフォルトの Stereochemistry の設定 (*Absolute*)

← キラルノードの数 (4 個)

← Stereo Set の設定 (5 番のノードが *Relative*)

=> S L1 EXA

← サンプル検索

:

L2 0 SEA EXA SAM L1

=> S L1 EXA FUL

← フルファイル検索

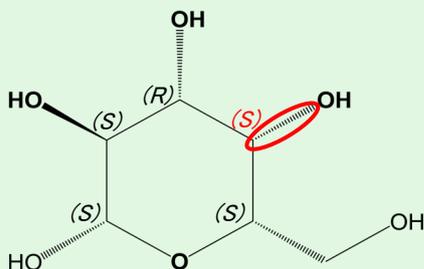
:

L3 8 SEA EXA FUL L1

=> D L3 SAM 3 5 7 8

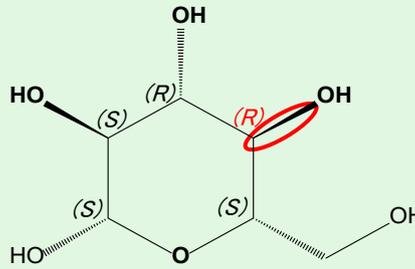
← 3, 5, 7, 8 番目の回答を SAM 表示形式で出力

L3 ANSWER 3 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN  
 IN  **$\beta$ -L-Galactopyranose**  
 MF C6 H12 O6



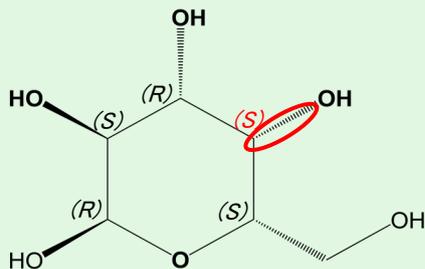
Absolute stereochemistry shown

L3 ANSWER 5 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN  
 IN  **$\beta$ -L-Glucopyranose**  
 MF C6 H12 O6



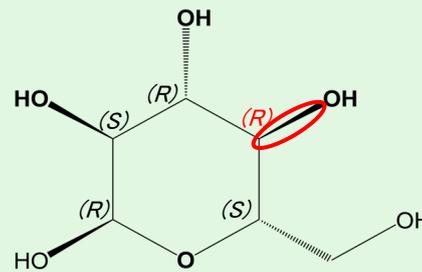
Absolute stereochemistry shown

L3 ANSWER 7 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN  
 IN  **$\alpha$ -L-Galactopyranose**  
 MF C6 H12 O6



Absolute stereochemistry shown

L3 ANSWER 8 OF 8 REGISTRY COPYRIGHT 2021 ACS on STN  
 IN  **$\alpha$ -L-Glucopyranose**  
 MF C6 H12 O6



Absolute stereochemistry shown

4 位の立体結合が R 配置である L-グルコースと S 配置である L-ガラクトースの両方がヒットしている

## ■ まとめ

- すべての立体異性体を検索する場合：平面結合で作図する
- 作図した通りの立体配置とその光学異性体を検索する場合：Default を **Relative** で作図する (デフォルト)
- 作図した通りの立体配置が一致する構造を検索する場合：Default を **Absolute** で作図する
- 部分的に Relative/Absolute を設定する場合：**Stereo Set** でノードの立体化学属性を変更する

## EMBASE ファイル

### - Emtree 語のオンラインシソーラス更新

EMBASE ファイルは、生物医学および薬学医学領域の世界中の文献を収録する文献データベースです。

2021 年 9 月に、EMTREE 語のオンラインシソーラスの更新が行われ、新規 drug terms 92 個、non-drug terms 589 個 (medical device terms 37 個を含む) が追加されました。2021 年 9 月時点で、90,776 個の統制語と 493,000 個以上の非優先語がオンラインシソーラスに含まれています。

新規に追加された語および変更された語のリストは Elsevier 社のサイトの「[Emtree terms added and changed 2021 V3](#)」および「[Emtree release notes, 2021 V3](#)」をご確認ください。

なお、ファイル全体の索引語の書き換えは、不定期に実行されます。このため、非優先語 (オンラインシソーラス中の UF で表示されるターム) のレコードがある場合は、UF も含めて検索してください。また、アラート (自動 SDI 検索) の質問式の見直しを行い、必要があれば変更してください。

## NTIS ファイル

### - リロード

NTIS ファイルは、米国政府およびその他の国の政府が資金援助を行った研究・開発および技術プロジェクトの報告書を収録するデータベースです。

2014 年 11 月以降更新を停止していましたが、このたびリロードされ、最新情報が入手可能になりました。今後は毎週更新されます。リロードに伴う主な強化・変更点は下記の通りです。

#### ◇ 収録期間

1964 年 ~ 現在

◇ 標題 (/TI)、抄録 (/AB) フィールドで後方一致検索、中間一致検索が可能に

#### ◇ テキスト中の数値検索機能 (Version 3.3)

テキスト中の数値を物性の種類とリンクさせて検索できる機能が搭載されました。検索できる物性値は 59 種類

です。物性の種類と検索フィールドは NTIS ファイルに入り => HELP NPS と入力すると確認できます。

#### ◇ アラート

更新再開に伴い、アラートが設定可能になりました。アラート実行頻度は毎週 (デフォルト) または毎月です。

#### ◇ 特許関連検索フィールドの削除

特許の収録数が少なく、情報の標準化もされていないため、特許関連の下記の検索フィールドが削除されました。

- /PN: 特許番号

- /AP: 出願番号

## RUFULL ファイル

### - リリース

ロシア特許、ユーラシア特許、旧ソビエト連邦 (旧ソ連) 特許の英語全文データベースである RUFULL ファイルが、STN に新規搭載されました。

#### ◇ 収録範囲

下記の特許の英語全文データが収録されています。

- 1992 年以降のロシア特許

- 1996 年以降のユーラシア特許

- 1924-1992 年の旧ソ連特許

2021 年 9 月時点で 114 万件以上のロシア特許、およそ 6 万件以上のユーラシア特許、142 万件以上の旧ソ連特許が収録されています。

- 更新は週 1 回です。

- ロシア特許は公報発行後約 6 日後、ユーラシア特許は公報発行後約 9 日後に収録されます。

#### ◇ 収録内容

レコードは出願単位です。

- 書誌情報 (標題, 出願人, 発明者, 代理人, 特許番号, 出願情報, 優先権出願情報, 関連出願情報)

- 特許分類

- 抄録

- 詳細な説明

- クレーム

- Key Terms

## ◇ 英語翻訳

標題は人手翻訳です。抄録，詳細な説明，クレームは機械翻訳または対応特許由来です。

## ◇ 主な特許種別

特許種別	内容
EAA1	公開特許（サーチレポート付き）
EAA2	公開特許（サーチレポートなし）
EAA3	サーチレポート
EAB1	特許
RUA	特許出願
RUA3	サーチレポート
RUC	登録特許 -2000000
RUC1	登録特許 2000001-
RUC2	登録特許 2000001-（二次公報）
RUU1	実用新案証明書
SUA1	発明者証
SUA2	追加発明者証
SUA3	特許

\* その他の特許種別の詳細は，RUFULL ファイルに入り => HELP KIND と入力してご確認ください。

## ◇ 検索

### - 特許出願人検索

検索フィールド	内容
/PA	特許出願人
/PAS	特許出願人，標準形式 すべての特許出願人について，LTD や AG などによるバリエーションを除外して標準化した特許出願人情報
/PAN	特許出願人，統制形式 約 3,000 機関について特許出願人情報を統制したデータ
/PASS	/PA, /PA.T, /PAS, /PAN を同時に検索するスーパー検索フィールド

### - Key Terms (/KT)

Key Terms (/KT) は，言語学および統計学的手法を用いて，英語の特許全文中から機械的に抽出した 1-5 単語からなる名詞句で，STN が独自に付与しています。同一 Key Terms 内に限定するには (S) 演算子を使用します。Key Terms は基本索引 (/BI またはなし) に含まれます。

### - テキスト中の数値検索機能 (Version 3.3)

テキスト中の数値を物性の種類とリンクさせて検索できる機能が搭載されています。検索できる物性値は 59 種類です。物性の種類と検索フィールドは RUFULL ファイルに入り => HELP NPS と入力すると確認できます。

### - 特許分類

検索フィールド	内容
/IPC	国際特許分類
/CPC	共通特許分類

\* 発明の特徴を複数の CPC (共通特許分類) の組み合わせにより表現した CPC コンビネーションセット (C-Sets) も収録されています。CPC コンビネーションセットの検索方法は RUFULL ファイルに入り => HELP CPC で確認できます。

\* IPC および CPC はシソーラスが利用できます。

### - 更新コード

検索フィールド	内容
/UP (更新日)	入力日とすべての更新日
/UPTX (更新日, テキスト)	全文 (詳細な説明, クレーム) の更新日

### - 関連出願情報 (RLI フィールド)

PCT 経由の場合は PCT 出願番号，分割出願の場合は親出願の出願番号が RLI フィールドに収録されます。

## ◇ 表示形式

- デフォルトの表示形式は STD.M 表示形式です。

- RUFULL ファイルのレコードは出願単位です。全公報の情報を表示するには，表示形式の後ろに .M を付けてください。

=> D BIB.M

.M 付きの表示形式では全公報の情報が表示されます。

=> D BIB

.M を付けないと，最新公報の情報のみ表示されます。

## ◇ アラートの実行頻度

毎週 (デフォルト) または毎月です。

## STNext

### - 構造作図, レポート, アラートの強化, Biosequences Search の強化

STNext は Classic STN のすべてのコンテンツにアクセスできる Web インターフェースです。

#### 1. 構造作図の強化

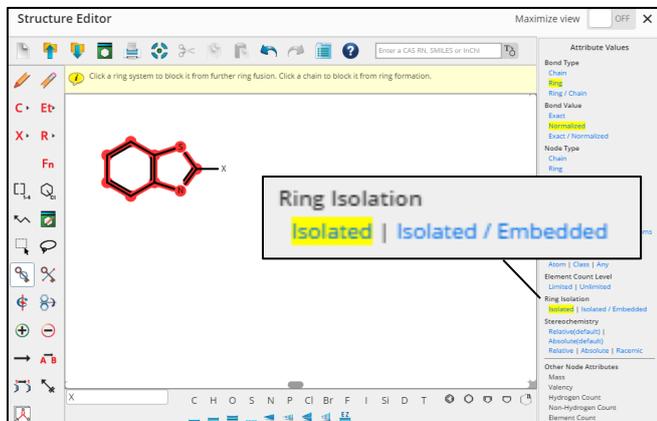
##### 構造作図画面の最大化が可能に

構造作図画面の右上に Maximize view ボタンが追加されました。ON にすると、ブラウザウィンドウのサイズに合わせた最大の大きさで構造作図画面を開けます。恒久設定のため、作図画面を閉じてても設定は保持されます。

従来通り、構造作図画面右下の角をドラッグしてサイズを変更することも可能です。その場合、Maximize view 設定は自動的に OFF になります。

##### 環の孤立/非孤立の確認が簡単に

構造作図画面右側の属性パネルに Ring Isolation の項目が追加され、環の孤立 (Isolated) と非孤立 (Isolated/Embedded) を確認できるようになりました。



また、構造をアップロードした時に自動的に表示される構造質問式の属性に Isolated Ring Nodes の項目が追加され、孤立に指定した環系のノード番号が表示されるようになりました。これにより、Transcript においても、環の孤立/非孤立の属性を簡単に確認できるようになりました。

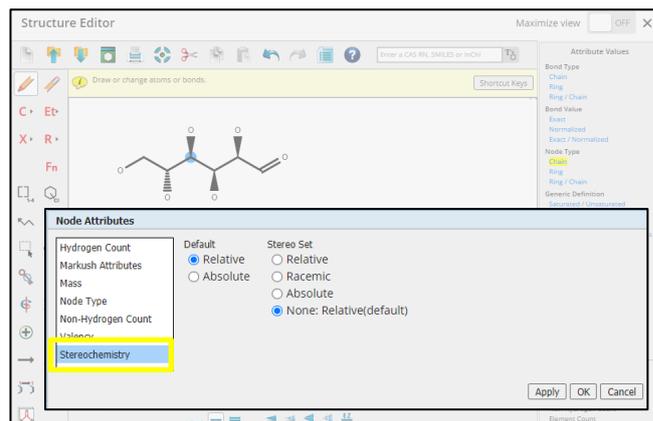
##### 立体化学構造のより詳細な指定が可能に

立体化学構造を含む構造質問式で検索すると、従来は Relative (相対立体配置) で検索され、作図画面上で設定の変更ができませんでしたが、構造質問式の不斉中心炭

素を右クリックして、立体化学 (Stereochemistry) 属性の指定ができるようになりました。

#### ◇ Default の立体化学を指定

Stereochemistry の Default で Relative (相対立体配置) または Absolute (絶対立体配置) を選択できます。この Default の指定は構造質問式全体に影響します。また、恒久設定のため作図画面を閉じてても設定は保持されます。

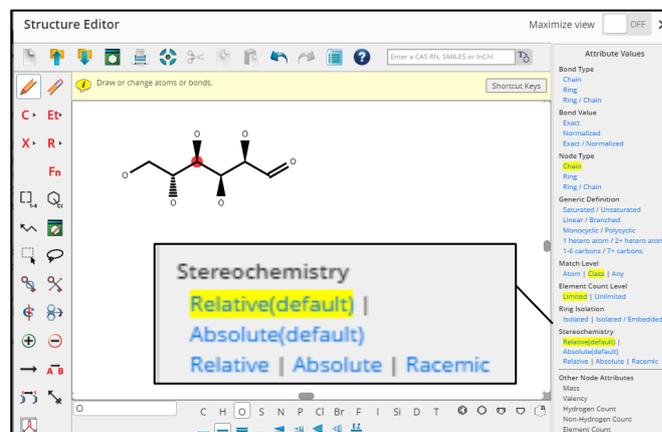


- Default を Relative に指定すると、絶対立体配置と相対立体配置のレコードの両方が回答に含まれます。
- Default を Absolute に指定すると、絶対立体配置が一致する回答のみが得られます。

#### ◇ 一部の不斉中心だけ Default 以外の設定にする場合

すべて Absolute で、一か所だけ Relative にしたい場合などは、Stereochemistry の Stereo Set の項目で指定します。

また、構造作図画面の属性パネルに Stereochemistry の項目が追加され、立体化学属性を簡単に確認できるようになりました。



## 炭素の表示を変更可能に

構造作図画面の上部にある Preferences アイコンから、炭素の表示を変更できるようになりました。デフォルトの Angles (炭素非表示) の他に、Dots (ドット) や Cs (C) で表示できます。

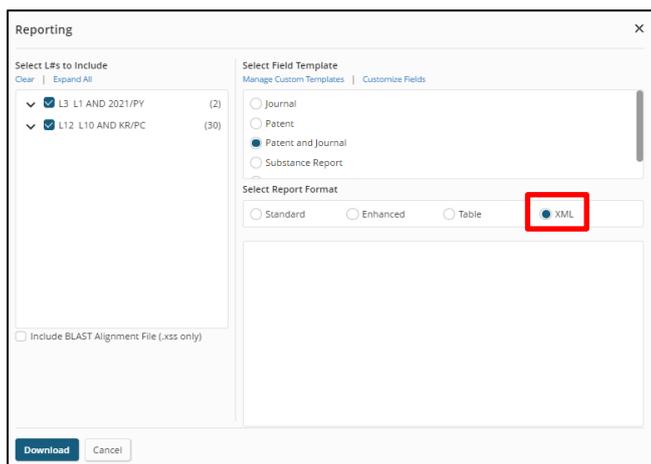
## 結合の重なるの警告を表示

結合が重なっている場合、「Overlaps detected」という警告が表示されるようになりました。

## 2. レポートの強化

### XML 形式でのダウンロードが可能に

STNext では、Transcript (セッション記録) を基に必要な情報を選んで、レポートや表を作成できます。フォーマットに XML 形式が追加されました。XML 形式を選択すると .xml ファイルが ZIP 形式でダウンロードされます。図がある場合は、図も .zip ファイルに含まれます。



### 自動で含まれていたフィールドが選択可能に

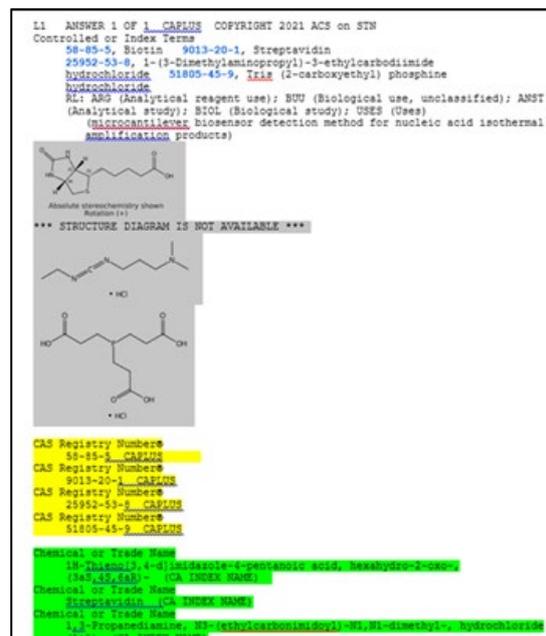
下記のフィールドはレポートに自動的に含まれていましたが、レポートに含めるかどうかをカスタムテンプレート作成時に選択できるようになりました。

- Answer Line (データベース名も含む)
- Title
- Accession Number (Full-text リンクも含む)
- Document Type
- Language
- PatentPak Links

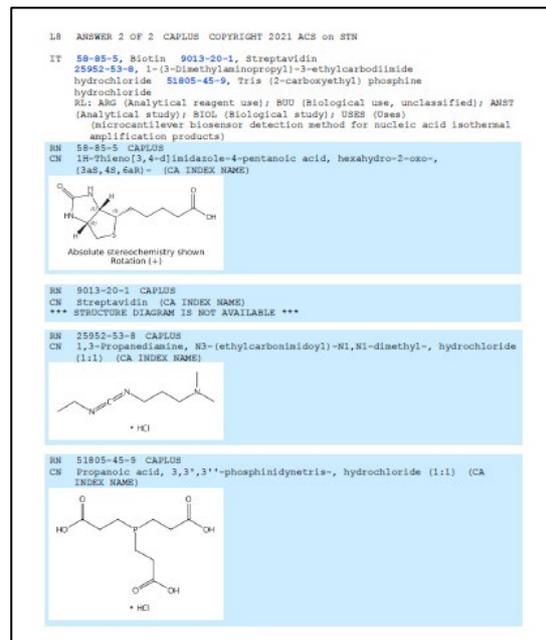
## HITSTR 表示形式の出力を含むレポートやテーブルの改善 (CPlus/CA ファイル)

HITSTR 表示形式で出力した Transcripts (セッション記録) の内容と同様に、レポートやテーブルでも、関連する IT (索引), RN (CAS RN®), CN (CA 索引名), STR (構造) がセットで表示されるようになりました。

### ◇ 強化前



### ◇ 強化後



### 3. アラートの強化

STNext の Alert Settings 機能が強化されました。

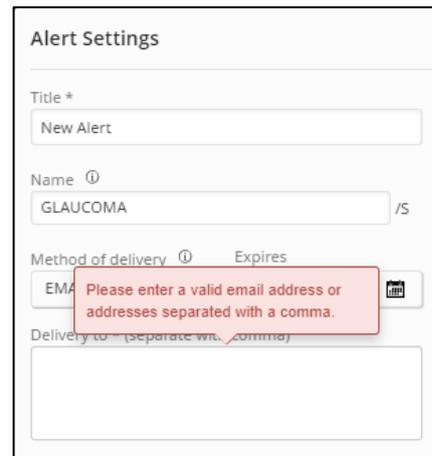
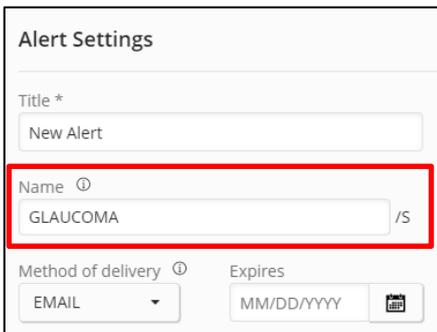
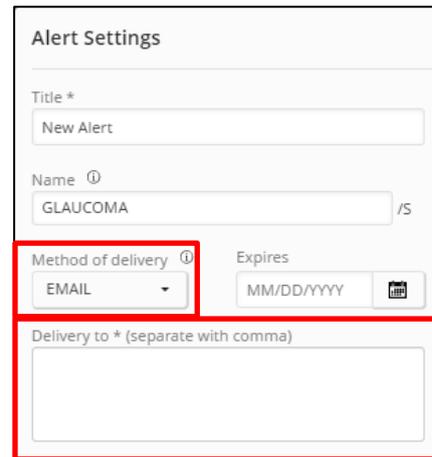
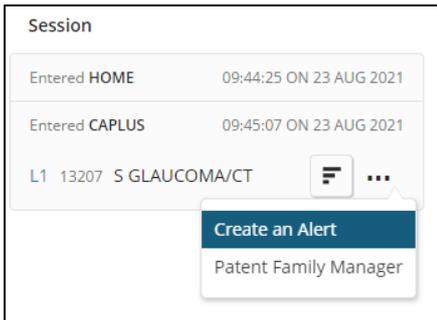
#### Alert Settings 画面でアラート登録名を設定可能に

History タブの Create an Alert メニューからアラートを登録する際、Alert Settings 画面でアラート登録名を入力できるようになりました。

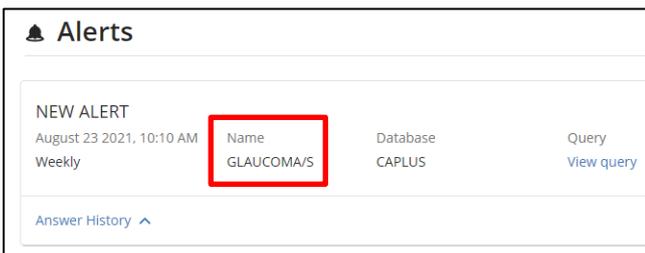
- アラート登録名は、アルファベットで始まる 12 文字以内の半角英数字にしてください。
- 空白の場合はシステムが自動的にアラート登録名を付与します。
- アラート登録名はアラート登録時にのみ設定可能です。登録後に変更はできません。

#### E-mail アドレスの入力漏れに対してエラーメッセージが表示されるように

アラートの入手方法として EMAIL または RSS を選択した場合、E-mail アドレスの入力が必要です。E-mail アドレスが未入力の場合、エラーメッセージが表示されるようになりました。



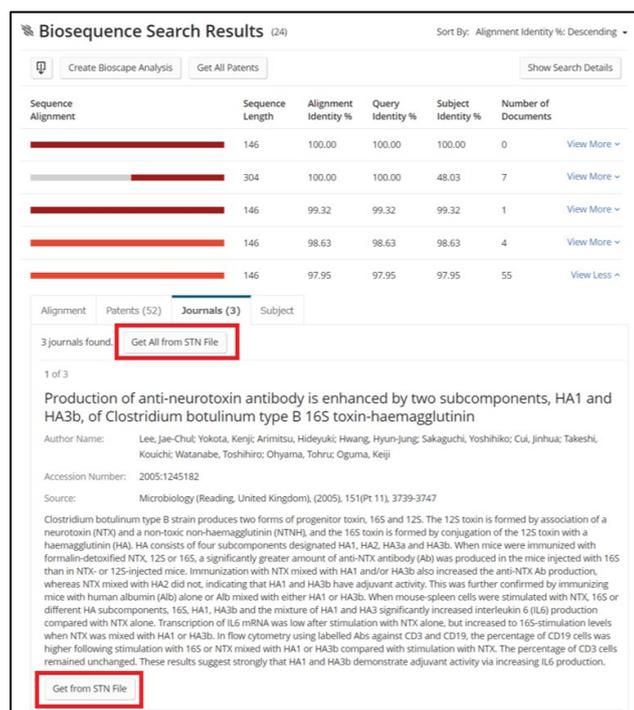
アラート登録名は My Files > Alerts で確認できます。



## 4. Biosequences Search の強化

Biosequences Search の回答に Journal のタブが追加され、配列の由来となった非特許文献の書誌情報を確認できるようになりました。

- Journal タブには、最大 10 件までの非特許文献情報が表示されます。
- Get All from STN File ボタンをクリックすると、ヒットした配列の由来となった非特許文献情報を最大 5,000 件まで一括して CAplus または HCAplus ファイルで検索できます。
- Get from STN File ボタンをクリックすると、ヒットした配列の由来となった各非特許文献情報を CAplus または HCAplus ファイルで検索できます。



**Biosequence Search Results** (24) Sort By: Alignment Identity %: Descending

Sequence Alignment	Sequence Length	Alignment Identity %	Query Identity %	Subject Identity %	Number of Documents	
	146	100.00	100.00	100.00	0	<a href="#">View More</a>
	304	100.00	100.00	48.03	7	<a href="#">View More</a>
	146	99.32	99.32	99.32	1	<a href="#">View More</a>
	146	98.63	98.63	98.63	4	<a href="#">View More</a>
	146	97.95	97.95	97.95	55	<a href="#">View Less</a>

3 journals found.

1 of 3

**Production of anti-neurotoxin antibody is enhanced by two subcomponents, HA1 and HA3b, of Clostridium botulinum type B 16S toxin-haemagglutinin**

Author Name: Lee, Jae-Chul; Yokota, Kenji; Arimitsu, Hideyuki; Hwang, Hyun-Jung; Sakaguchi, Yoshihiko; Cui, Jinhua; Takeshi, Kouichi; Watanabe, Toshihiro; Ohyama, Tohru; Oguma, Keiji

Accession Number: 2005:1245182

Source: Microbiology (Reading, United Kingdom), (2005), 151(Pt 11), 3739-3747

Clostridium botulinum type B strain produces two forms of progenitor toxin, 16S and 12S. The 12S toxin is formed by association of a neurotoxin (NTX) and a non-toxic non-haemagglutinin (NTNH), and the 16S toxin is formed by conjugation of the 12S toxin with a haemagglutinin (HA). HA consists of four subcomponents designated HA1, HA2, HA3a and HA3b. When mice were immunized with formalin-detoxified NTX, 12S or 16S, a significantly greater amount of anti-NTX antibody (Ab) was produced in the mice injected with 16S than in NTX- or 12S-injected mice. Immunization with NTX mixed with HA1 and/or HA3b also increased the anti-NTX Ab production, whereas NTX mixed with HA2 did not, indicating that HA1 and HA3b have adjuvant activity. This was further confirmed by immunizing mice with human albumin (Alb) alone or Alb mixed with either HA1 or HA3b. When mouse-spleen cells were stimulated with NTX, 16S or different HA subcomponents, 16S, HA1, HA3b and the mixture of HA1 and HA3 significantly increased interleukin 6 (IL6) production compared with NTX alone. Transcription of IL6 mRNA was low after stimulation with NTX alone, but increased to 16S-stimulation levels when NTX was mixed with HA1 or HA3b. In flow cytometry using labelled Abs against CD3 and CD19, the percentage of CD19 cells was higher following stimulation with 16S or NTX mixed with HA1 or HA3b compared with stimulation with NTX. The percentage of CD3 cells remained unchanged. These results suggest strongly that HA1 and HA3b demonstrate adjuvant activity via increasing IL6 production.



# スタッフ紹介



あかはね ひろき  
**赤羽 洋紀**

情報事業部  
マーケティンググループ



2021年7月に情報事業部マーケティンググループに配属となりました。赤羽 洋紀（あかはね ひろき）と申します。

大学時代は繊維学部で応用化学を専攻していました。研究室ではカーボンナノチューブへの官能基付加による水素吸着の相互作用エネルギーに関して計算化学に基づいた理論研究を行っていました。Spartan を使用して官能基を付加させたカーボンナノチューブを構造最適化し、Gaussian を使用して水素との相互作用エネルギーを計算するといった研究内容でした。

大学卒業後、化学とは無縁の地元の企業に就職し、マラソンに携わる仕事に約6年間従事してきました。そこでは、海外メーカーの計測機器の責任者として機器の導入から運用までのフェーズを経験させていただきました。また、HTML/CSS/JavaScript によるホームページの編集や Illustrator、Photoshop といったツールを使用する機会が多く、幅広い業務内容だったため、とても充実した日々を過ごしてきました。

しかしコロナ禍以降、前職の業務が立ち行かなくなり、今後の人生を考えたときにもう一度、一から挑戦したいという気持ちが強くなり、転職することを決意しました。

その際、軸にしていたのが、営業・化学・IT だったため、ご縁があり、化学情報協会へ入社することになりました。

こうして化学に携わるのは約6年ぶりですが、学生時代のことを思い出して、とても充実した日々を過ごしています。様々な製品・サービスがありますが、まずは CAS SciFinder<sup>®</sup> を使いこなせるようになり、そこをひとつのきっかけにして製品のことを深く理解していきたいと考えています。また、STN についてはまだまだ覚えなければならないことが多いですが、早く STN を習得し、ご利用者の皆様に近づけるよう邁進していきます。

今後は技術営業として、お客様に良い製品・サービスをご提供できるよう日々努力してまいります。どうぞよろしくお願いいたします。



STN へようこそ

# ひとこと広場



## 『立体パズル』

家族が自分では作る気がないのに、「インテリアとして可愛い！」と言って木製の立体パズルを買ってきます。作るのは私です。これまでに観覧車、馬車、気球などを作りました。木製の立体パズルは薄い板からピースを外し、ピース同士をはめ込む作業をします。この作業で指先が痛くなることがあります。また細いピースや曲線のピースを扱うときはピースが折れないか心配です。そのため作業は大変なのですが、出来上がったものは確かにインテリアとして可愛いです。

テクニカルグループ AT



## 『夏の勘違い』

私は暑さに憧れがあります。理由は、過去の体験によるものです。私は、高校を卒業するまで八戸市に住んでいました。北東北の太平洋側には、夏に冷たい北風（ヤマセ）が吹きます。当時、テレビの中に映る方が半袖を着ているのはオシャレのためだと思っていました。海水浴についても、北東北の海は入るだけで震えるぐらい冷たいため、テレビの中で楽しそうに海に入る方を見て、「すごい忍耐力だ」と感じていました。徐々に涼しくなり暑さが恋しくなると、ふと思い出します。

マーケティンググループ YC



## 『ケーブルトレイ』

在宅勤務では当初リビングや子供の机で仕事していましたが、さすがに効率が悪いので、専用の机や椅子を少しずつ買いそろえました。PCなどの機器が増えると気になるのがコンセントやACアダプターなどの配線。ゴチャゴチャしてきます。というわけで「ケーブルトレイ」なるものを買って机の下につけてみました。木ネジでの取り付けは10分ほど。机周りがすっきりして掃除もしやすい。机の下に居場所ができた犬も幸せそう。気に入ったのでリビングにある机にもつけました。お勧めです！

事業戦略グループ KF



STN 東京サービスセンター



---

STN サービスセンター

STN 東京 (日本)

化学情報協会  
東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル  
Tel:0120-003-462  
Email:support@jaici.or.jp  
Web:www.jaici.or.jp

STN コロンバス (北アメリカ)

CAS  
Columbus, OH 43210-0012 U.S.A  
Tel:61-447-3700  
Email:help@cas.org  
Web:www.cas.org

STN カールスルーエ (ヨーロッパ)

FIZ Karlsruhe  
76012 Karlsruhe Germany  
Tel:+49-7247-808-555  
Email:helpdesk@fiz-karlsruhe.de  
Web:www.stn-international.de