

統合データベース講習会：AJACS町田

日時：2018年12月14日（金）14:40-16:00

会場：協和発酵キリン株式会社 東京リサーチパーク

タイトル：「化合物データベース」

原案・資料作成：公益財団法人野口研究所

山田一作（やまだいっさく） issaku@noguchi.or.jp

本日の紹介・資料作成：研究開発法人 科学技術振興機構

バイオサイエンスデータベースセンター

櫛田達矢（くしだたつや） kushida@biosciencedbc.jp

内容

1. 概要
2. 関連データ
3. 表記
4. ファイル形式
5. 使ってみよう
6. ツール
7. ChEMBL – UniChem
8. 化合物DB統合

} PubChem

1. 概要

化合物データベース

- 化合物とは？
化合物には有機化合物や無機化合物が含まれます。 本講習会で扱う化合物は、主に原子数1000以下の低分子有機化合物
- 化合物データベースのリスト
Integbioデータベースカタログ
<https://integbio.jp/dbcatalog/?lang=ja>

- 文部科学省、厚生労働省、農林水産省、経済産業省による、生命科学系データベース統合のための合同ポータルサイト内のDBカタログ事業

- 生命科学系データベースを一覧から探す -

Integbioデータベースカタログ

English

 integbio.jp

全条件をリセット

一覧内を検索する 検索

一覧を絞り込む

生物種

- + 動物 (663)
- + 植物 (297)
- + 原生生物 (60)
- + 菌類 (107)
- + 真正細菌 (161)
- 古細菌 (52)
- ウイルス (55)

タグ<対象>

- ゲノム/遺伝子 (509)
- cDNA/EST (256)
- 遺伝的多様性 (134)
- エビジェネティクス (11)
- DNA (97)
- RNA (135)
- タンパク質 (399)
- 糖質 (40)
- 脂質 (7)
- 代謝物 (78)
- 化学物質 (74)
- 薬 (70)
- 細胞/オルガネラ (94)
- 個体/種 (360)
- 健康/疾患 (371)

- 閉じる

データベースのレコード一覧 (全 1661件)

最初へ 前へ 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 次へ 最後へ

TogoVar: 日本人ゲノム多様性統合データベース

運用機関: 国立研究開発法人科学技術振興機構 バイオサイエンスデータベースセンター

生物種: *Homo sapiens*

説明: 日本人ゲノム配列の個人による違い (バリアント) とそれに関係する疾患情報などを収集・整理したデータベースです。NBDCヒトデータベース/Japanese Genotype-phenotype Archive (JGA)に登録中... [詳細へ](#)

科学技術用語辞典解析辞書

運用機関: 国立研究開発法人科学技術振興機構 バイオサイエンスデータベースセンター

生物種: *Homo sapiens*

説明: 形態素解析エンジンMeCab (<http://taku910.github.io/mecab/>) のための科学技術分野の専門用語を集めたユーザー辞書です。JSTソースラス(2015年版)の見出し語と同義語の他、JSTのJ-GLOBALに... [詳細へ](#)

KEGG NETWORK Database

運用機関: 京都大学 化学研究所 バイオインフォマティクスセンター

生物種: *Homo sapiens*

説明: 病気を分子ネットワークがやらいだ状態とみなし、疾患に関連したヒトゲノム・遺伝子のバリエーションを、シグナル伝達をはじめとした様々なネットワークのバリエーションとして知識集約した... [詳細へ](#)

MGeND: Medical genomics Japan Variant Database

運用機関: 京都大学 大学院医学研究科

生物種: *Homo sapiens*

説明: 日本人の臨床データと遺伝子変異データとを結びつけて収集・公開するオープンアクセスのデータベースです。「がん」「希少・難治性疾患」「感染症」「認知症」「難聴」の疾患領域を対象としています... [詳細へ](#)

Computational metabolomics

運用機関: 特定国立研究開発法人理化学研究所 環境資源科学研究センター

生物種:

説明: メタボロミクスおよびリビドミクスに活用できるツール集です。あらゆるタイプのクロマトグラフィー/質量分析法 (GC / MS, GC-MS / MS, LC / MS, およびLC-MS / MSなど) をサポートする「MS-D... [詳細へ](#)

DropViz

並べ替え: レコード公開順 ↗

メニュー

- ホーム
- 本カタログについて
- 更新履歴
- データベース関係マップ
- ダウンロード
- お問い合わせ
- 類似サイトリンク集

新着情報

2018/06/19: 1件のレコードを追加しました。

2018/06/05: 1件のレコードを追加しました。

2018/05/29: 1件のレコードを追加しました。

2018/05/22: 10件のレコードを追加しました。

2018/05/08: 3件のレコードを追加しました。

本カタログの使い方



統合TVにて解説動画が公開されています (2017年10月04日版)

■ 国内

- 生命科学系データベースを一覧から探す -

Integbioデータベースカタログ

English

 integbio.jp

全条件をリセット

一覧内を検索する 検索

一覧を絞り込む

生物種

- + 動物 (11)
- + 植物 (3)
- + 原生生物 (2)
- + 菌類 (0)
- + 真正細菌 (0)
- 古細菌 (0)
- ウイルス (0)

タグ<対象>

- ゲノム/遺伝子 (3)
- cDNA/EST (0)
- 遺伝的多様性 (0)
- エビジェネティクス (0)
- DNA (1)
- RNA (2)
- タンパク質 (4)
- 糖質 (3)
- 脂質 (2)
- 代謝物 (12)
- 化学物質 (52)**
- 薬 (8)
- 細胞/オルガネラ (0)
- 個体/種 (5)
- 健康/疾患 (14)

- 閉じる

タグ<データの種類>

- 表現型 (1)
- バイオリソース (1)
- 手法 (5)
- + 読みを見る

稼動状況

- 稼動中
- 休止
- 公開停止中
- 運用終了

地域

- 日本
- 日本以外の国・地域

データベースのレコード一覧 (全 1661件)

最初へ 前へ 1 2 次へ 最後へ

AJCSD: ASEAN-Japan Chemical Safety Database

運用機関: 独立行政法人製品評価技術基盤機構

生物種:

説明: 日ASEAN化学物質管理データベース (ASEAN-Japan Chemical Safety Database : AJCSD) は、日ASEAN経済産業協力委員会 (AMEICO) 化学ワーキンググループ (WG-Ci) の合意に基づき、日本とASEAN各... [詳細へ](#)

AIST-MeRAM: 汎用生態リスク評価管理ツール

運用機関: 国立研究開発法人産業技術総合研究所

生物種: *Actinopterygii* | *Chondrichthyes* | *Crustacea* | *Rhodophyta* | *Chlorophyta* | ...

説明: MeRAM (ミラム) は、誰でも簡単に使える、かつ、無料で入手できる、化学物質生態リスク評価管理ツールです。PCにMeRAMをインストールすれば、生態リスク評価や統計処理などの特別な知識がなく... [詳細へ](#)

ChemTHEATRE

運用機関: 愛媛大学

生物種:

説明: 環境内、特に生物中の化学物質濃度情報を収集したデータベースです。論文や公的機関によるレポートによる情報を統一された書式で登録しています。各データセットには実験方法に関する情報 (... [詳細へ](#)

Metabolite Ecology DB

運用機関: 富山先端科学技術大学院大学

生物種:

説明: 物質の代謝物を分布模式、生物活性ごとに分類し、代謝物、代謝物質の生態学的活性とその対象生物という関係を検索できるデータベースです。代謝物名、代謝物が存在する生物・組織、カテゴリ... [詳細へ](#)

NPedia (Natural Products Encyclopedia) 化合物検索

運用機関: 国立研究開発法人理化学研究所

生物種:

説明: 理化学研究所の天然化合物バンク (RIKEN NPdep) に登録されている化合物を検索するデータベースです。化合物の名称、CAS番号、分子量、構造、InChi情報等を収録しています。生理活性やスペ... [詳細へ](#)

話題の食品・成分

運用機関: 国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所

生物種:

説明: 「話題の食品・食品成分」は、「特定保健用食品」「ビタミン」「ミネラル」等についての情報を提供しています。「特定保健用食品」では、特定の保健機能が国によって確認され、認可を受けた... [詳細へ](#)

健康食品の安全情報・被害関連情報

運用機関: 国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所

生物種:

説明: いわゆる「健康食品」を原因とする、国内外における過去ならびに最新の健康被害の事例を紹介します。成分名や製品名、注意喚起や勧告を出した機関名等を検索欄に入れ、関連情報を絞り込む... [詳細へ](#)

SSCI-Net: 皮膚安全性症例情報ネット

運用機関: 一般社団法人ASCI-Net

生物種: *Homo sapiens*

説明: 化粧品などによる皮膚の健康被害や安全性についての症例を登録し調査解析するためのデータベースです。皮膚科関連学会員の医療施設、日本皮膚科学会専門医研修施設より症例情報を登録す... [詳細へ](#)

並べ替え: レコード公開順 ↗

メニュー

- ホーム
- 本カタログについて
- 更新履歴
- データベース関係マップ
- ダウンロード
- お問い合わせ
- 類似サイトリンク集

新着情報

2018/06/19: 1件のレコードを追加しました。

2018/06/05: 1件のレコードを追加しました。

2018/05/29: 1件のレコードを追加しました。

2018/05/22: 10件のレコードを追加しました。

2018/05/08: 3件のレコードを追加しました。

本カタログの使い方



統合TVにて解説動画が公開されています (2017年10月04日版)

■ 日本以外の国地域

- 生命科学系データベースを一覧から探す -

Integbioデータベースカタログ

English



全条件をリセット

一覧内を検索する

一覧を絞り込む

生物種

- + 動物 (4)
- + 植物 (0)
- + 原生生物 (0)
- + 細菌 (0)
- + 真正細菌 (0)
- 古細菌 (0)
- ウイルス (2)

タグく対象>

- ゲノム/遺伝子 (4)
- cDNA/EST (0)
- 遺伝的多様性 (0)
- エビジェネティクス (0)
- DNA (0)
- RNA (0)
- タンパク質 (6)
- 糖質 (2)
- 脂質 (1)
- 代謝物 (5)

化学物質 (22)

- 薬 (6)
- 細胞/オルガネラ (0)
- 個体/種 (0)
- 健康/疾患 (7)

- 閉じる

タグくデータの種類>

- 表現型 (0)
- バイオリソース (0)
- 手法 (1)

+ 続きを見る

稼動状況

- 稼動中
- 休止
- 公開停止中
- 運用終了

地域

- 日本
- 日本以外の国・地域**

データベースのレコード一覧 (全 1661件)

カテゴリ: 化学物質 地域: 日本以外の国・地域

並べ替え: レコード公開順

メニュー

- ホーム
- 本カタログについて
- 更新履歴
- データベース関係マップ
- ダウンロード
- お問い合わせ
- 類似サイトリンク集

新着情報

2018/06/19: 1件のレコードを追加しました。

2018/06/05: 1件のレコードを追加しました。

2018/05/29: 1件のレコードを追加しました。

2018/05/22: 10件のレコードを追加しました。

2018/05/08: 3件のレコードを追加しました。

本カタログの使い方

Integbio.jp
データベースカタログ
の使い方 2017

統合TVにて解説動画が公開されています (2017年10月04日版)

SuperSweet

運用機関: Charité - Universitätsmedizin Berlin

生物種: *Homo sapiens*

説明: 人工、天然の甘味料化合物のデータベースです。甘味を感じさせる炭水化物および類似化合物の情報と、ヒト甘味受容体構造モデルについての記述を収録しています。化合物の情報は分子構造、シ... 詳細へ

ChemProt

運用機関: Center for Biological Sequence Analysis, Department of Systems Biology, Technical University of Denmark

生物種:

説明: ChemProtは、化学物質-タンパク質-疾患間の関係について複数の無償および商用データベースからの情報をまとめた統合データベースです。化学物質名や標準的タンパク質名、化学物質の構造に基づ... 詳細へ

FragmentStore

運用機関: Charite - University Medicine Berlin, Institute for Physiology, Structural Bioinformatics Group

生物種:

説明: FragmentStoreは代謝産物、薬品、毒物である低分子化合物から作成した化合物断片(フラグメント)のデータベースです。FragmentStoreでは、フラグメントの2D構造、分子量や回転可能な結合数など... 詳細へ

Database for Anti-HIV Compounds

運用機関: National Institute of Allergy and Infectious Diseases

生物種: *Homo sapiens* / *Human immunodeficiency virus*

説明: 抗HIV化合物、HIV治療薬に関する情報を集めたデータベース。データベースに登録されている情報は、主な文献の調査を継続して行い、収集したものである。Webサイトは、次の6つのセクション... 詳細へ

ITER: International Toxicity Estimates for Risk

運用機関: National Library of Medicine

生物種:

説明: 世界の信頼ある研究グループから寄せられた600以上の化学物質の人体に及ぼすリスク情報を収載しています。詳細へ

GENETOX: Genetic Toxicology Data Bank

運用機関: National Library of Medicine

生物種:

説明: 3,000以上の化学物質の遺伝毒性テストデータを収載しています。各物質について、実施された試験方法、ホスト、試験結果、文献情報等を確認できます。 詳細へ

DART: Developmental and Reproductive Toxicology Database

運用機関: National Library of Medicine

生物種:

説明: 生殖毒性試験に関する文献データを収載したデータベースです。 詳細へ

TOXLINE: Toxicology Literature Online

運用機関: National Library of Medicine

生物種:

説明: 毒性に関する文献データを収載したデータベースです。 詳細へ

CCRIS: Chemical Carcinogenesis Research Information System

運用機関: National Library of Medicine

生物種:

説明: 国立がん研究所の化学物質がん毒性データベース。腫瘍プロモーター、抑制因子などについての情報収集

- 本講習会ではPubChemの使い方を説明します。

PubChem Substance

運用機関: National Center for Biotechnology Information

生物種:

説明: 薬物名や分子量、SubstanceIDやCompoundIDなどで薬物の情報を検索することができるサイトです。医薬品名やその効能、LogP値などの物性値も掲載されています。また、類似構造を持つ別の化合物... 詳細へ

PubChem Compound

運用機関: National Center for Biotechnology Information

生物種:

説明: 化合物名や分子量、CompoundIDなどで化合物の情報を検索することができるサイトです。医薬品名やその効能、LogP値などの物性値も掲載されています。また、類似構造を持つ別の化合物の検索も... 詳細へ

PubChem BioAssay

運用機関: National Center for Biotechnology Information

生物種:

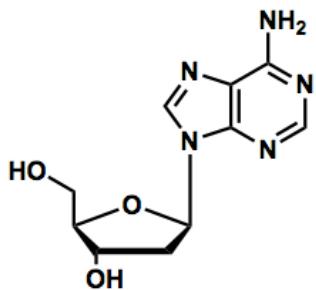
説明: 化合物を用いた実験結果を参照できるサービスです。どの様な目的で行った実験か、どの様なデータを取得したか、用いた複数の化合物データがPubChemIDと結びついて閲覧することができます。使... 詳細へ

- PubChem Substance
- PubChem Compound
- PubChem BioAssay

2. 関連データ

化学構造式

- 原子の元素記号と単結合（一重線）、二重結合（二重線）、三重結合（三重線）を組み合わせて分子構造を表す。



- デオキシアデノシン

物性値（沸点、融点、溶解度）

バイオアッセイ

化合物同定

- 核磁気共鳴分光法
- 質量分析法

安全性

- 有害性情報、法規制情報など
 - 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (NITE) 化学物質総合情報提供システム
 - 化学物質の番号や名称等から、有害性情報、法規制情報及び国際機関によるリスク評価情報等を検索することができるシステム
 - https://www.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/srhInput
- 化学物質等安全データシート (Safety Data Sheet, SDS)
 - 一般社団法人日本試薬協会 SDS検索
 - <https://www.j-shiyaku.or.jp/Sds>

その他

3. 表記

- IUPAC命名法
 - 化合物を命名する際の基本となる、国際純正・応用化学連合 (International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC) の命名法
 - 化学構造式が複雑な化合物になると正しい命名をするのが簡単ではない。
 - 日本語による化合物命名法
 - http://cicsj.chemistry.or.jp/14_5/hata.html
 - (2*R*,3*S*,5*R*)-5-(6-aminopurin-9-yl)-2-(hydroxymethyl)oxolan-3-ol
- 慣用名
 - デオキシアデノシン
 - 2'-deoxyadenosine

- ID
 - PubChem Compound CID
 - 0-9の数字のみでを利用
 - PubChem Substance SID
 - 0-9の数字のみでを利用
 - CAS 登録番号
 - その他のデータベースのID
- SMILES
 - C1[C@H]([C@H](O[C@H]1N2C=NC3=C2N=CN=C3N)CO)O
 - 混合物の場合 CO.CCO.OCCC.C1CCCC1.C2=CC=CC=C2
- CTFile (Molfile, SDfile)
 - 古くから利用されている。バージョンとしてV2000とV3000がある。一般的にはV2000が利用されているが、原子数、結合数が各999個までの制限がある。V3000にはこの制限はない。
 - ファイル形式の説明でもう少し詳しく説明します。
- IUPAC International Chemical Identifier (InChITM)
 - InChI=1S/C10H13N5O3/c11-9-8-10(13-3-12-9)15(4-14-8)7-1-5(17)6(2-16)18-7/h3-7,16-17H,1-2H2,(H2,11,12,13)/t5-,6+,7+/m0/s1
- InChIKey
 - OLXZPDWKRNYJJZ-RRKCRQDMA-N

4. ファイル形式

- .smi
 - SMILESを格納、複数行にSMILESを記載することで一つのファイルに複数の化学構造を記述することができる。

```
CO
CCO
OCCC
C1CCCC1
C2=CC=CC=C2
```

1	CO
2	CCO
3	OCCC
4	C1CCCC1
5	C2=CC=CC=C2

- .mol

```

6 5 0    0 0 0 0 0 0999 V2000
2.5369 -0.2500  0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.4030  0.2500  0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.7130 -0.2869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.9399  0.5600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.0930  0.7869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.0000  0.0600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0 0 0
1 6 1 0 0 0 0
2 3 1 0 0 0 0
2 4 1 0 0 0 0
2 5 1 0 0 0 0
M END

```

```

1      887
2      -OEChem-07031813262D
3
4      6 5 0    0 0 0 0 0 0999 V2000
5      2.5369 -0.2500  0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6      3.4030  0.2500  0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
7      3.7130 -0.2869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
8      3.9399  0.5600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
9      3.0930  0.7869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
10     2.0000  0.0600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
11     1 2 1 0 0 0 0 0
12     1 6 1 0 0 0 0
13     2 3 1 0 0 0 0
14     2 4 1 0 0 0 0
15     2 5 1 0 0 0 0
16 M END

```

- .sdf

```

887
-OEChem-07031813262D

6 5 0    0 0 0 0 0 0999 V2000
2.5369 -0.2500  0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.4030  0.2500  0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.7130 -0.2869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.9399  0.5600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.0930  0.7869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.0000  0.0600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0 0 0
1 6 1 0 0 0 0
2 3 1 0 0 0 0
2 4 1 0 0 0 0
2 5 1 0 0 0 0
M END

```

> <PUBCHEM_COMPOUND_CID>

887

> <PUBCHEM_IUPAC_INCHI>
InChI=1S/CH40/c1-2/h2H,1H3

> <PUBCHEM_IUPAC_INCHIKEY>
OKKJLVBELUTLKV-UHFFFAOYSA-N

\$\$\$\$

888

-OEChem-07031813262D

```

6 5 0    0 0 0 0 0 0999 V2000
2.5369 -0.2500  0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
...
...
$$$$

```

```

1 887
2 -OEChem-07031813262D
3
4 6 5 0    0 0 0 0 0 0999 V2000
5   2.5369  -0.2500  0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6   3.4030  0.2500  0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
7   3.7130  -0.2869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
8   3.9399  0.5600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
9   3.0930  0.7869  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
10  2.0000  0.0600  0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
11  1 2 1 0 0 0 0 0
12  1 6 1 0 0 0 0
13  2 3 1 0 0 0 0
14  2 4 1 0 0 0 0
15  2 5 1 0 0 0 0
16 M END
17 > <PUBCHEM_COMPOUND_CID>
18 887
19
20 > <PUBCHEM_IUPAC_INCHI>
21 InChI=1S/CH4O/c1-2/h2H,1H3
22
23 > <PUBCHEM_IUPAC_INCHIKEY>
24 OKKJLVBELUTLKV-UHFFFAOYSA-N
25
26 $$$$

```

- 他の形式例

5. 使ってみよう

PubChem

- PubChemとは？
 - 統合TVを見てみましょう
 - 2017-12-08 PubChemを利用して化学物質やアッセイの結果を調べる 2017
 - <http://togotv.dbcls.jp/20171208.html>

PubChemを利用して化学物質やアッセイの結果を調べ...

Compound Summary for CID

Gefitinib

STRUCTURE VENDORS DRUG INFO PHARMACOLOGY LITERATURE PATENTS BIOACTIVITIES

PubChem CID: 123631

Chemical Names: Gefitinib; 184475-35-2; Iressa; ZD1839; Irressat; N-(3-Chloro-4-fluorophenyl)morpholinopropoxy)quinazolin-4-amine More...

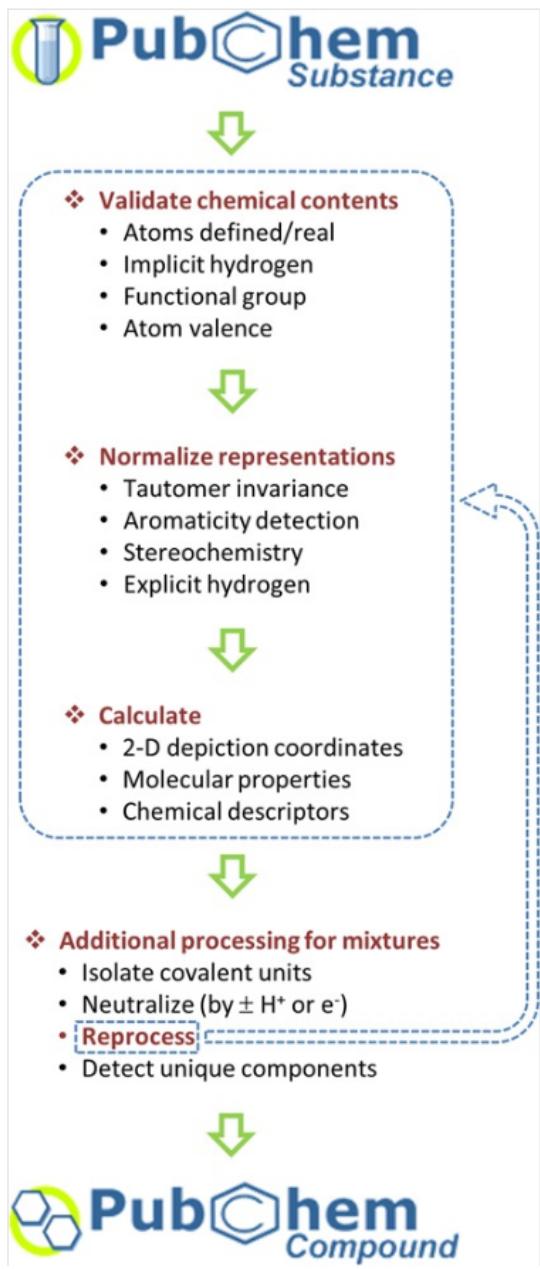
Molecular Formula: C₂₀H₂₂ClF₂N₂O₂

主要なContentsはこちらから移動することもできます

TOGO TV

- Compound, Substance, BioAssay
 - Substance SID (SubstanceID)
 - Compound CID (CompoundID)

- BioAssay AID (AssayID)



- Data Sources
- Chemical structure representation in PubChem

ブラウザからの利用

化合物のページ

- ゲフィチニブ (Gefitinib)
- beta-D-Glucopyranose

データの取得方法

PubChem's PUG (Power User Gateway)

- PUG-REST
 - URL

[https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/<input specification>/<operation specification>/\[<output specification>\]\[?<operation_options>\]](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/<input specification>/<operation specification>/[<output specification>][?<operation_options>])

- レコード検索

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sourceid/DTP.NCI/747285/SDF>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sourceid/DTP.NCI/747285/PNG>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/SDF>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/PNG>

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/SDF?record_type=3d

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/PNG?record_type=3d&image_size=small

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/name/aspirin/SDF>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/inchikey/BPGDAMSIGCZLK-UHFFFAOYSA-N/SDF>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/1000/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/1000/CSV?sid=26736081,26736082,26736083>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/1000/concise/CSV>

- Compound Property Tables

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1,2,3,4,5/property/MolecularFormula,MolecularWeight,InChIKey/CSV>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1,2,3,4,5/property/MolecularFormula,MolecularWeight,InChIKey/JSON>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1,2,3,4,5/property/IsomericSMILES,XLogP,TPSA,HBondDonorCount,HBondAcceptorCount,RotatableBondCount,AtomStereoCount,BondStereoCount/JSON>

- Synonyms

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/name/aspirin/synonyms/JSON>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/smiles/CCCC/synonyms/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sid/53789435/synonyms/TXT>

- Description

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1983/description/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1983/description/JSON>

- SIDS / CIDS / AIDS

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/name/glucose/sids/XML>

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/name/glucose/sids/XML?list_return=listkey

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/name/glucose/cids/XML?list_return=grouped

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/name/glucose/cids/XML?list_return=flat

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sourceall/MLSMR/sids/JSON?list_return=listkey

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sourceall/R%26D%20Chemicals/sids/XML?list_return=listkey

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sid/123061,123079/cids/XML?cids_type=all

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/sids/JSON>

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/192180/cids/TXT?cids_type=component

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/aids/JSON?aids_type=active

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/sids/JSON?sids_type=component

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/2244/cids/TXT?cids_type=same_connectivity

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/21145249/cids/XML?cids_type=parent

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/1000/sids/XML?sids_type=inactive

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/504526/sids/JSON?sids_type=doseresponse

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/type/doseresponse/aids/JSON>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/sourceall/DTP.NCI/aids/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/xref/PatentID/EP0711162A1/sids/XML>

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/name/myxalamid/cids/XML?name_type=word

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/name/myxalamid/cids/XML?name_type=complete

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/target/genesymbol/USP2/aids/TXT>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/target/gi/116516899/aids/JSON>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/activity/EC50/aids/TXT>

- o Assay Description

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/490/description/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/490/description/JSON>

- o Assay Targets

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/490,1000/targets/ProteinGI,ProteinName,GenelD,GeneSymbol/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/490,1000/targets/ProteinGI,ProteinName,GenelD,GeneSymbol/JSON>

- o Assay Summary

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1000,1001/assaysummary/CSV>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sid/104234342/assaysummary/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sid/104234342/assaysummary/JSON>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/1000/summary/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/1000/summary/JSON>

- o Assay Dose-Response

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/504526/doseresponse/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/504526/doseresponse/CSV?sid=104169547,109967232>

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/assay/aid/602332/sids/XML?sids_type=doseresponse&list_return=listkey

- o Classification

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sid/1917/classification/XML>

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/1983/classification/JSON?classification_type=original

- o XRefs

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/substance/sid/127378063/xrefs/PatentID/XML>

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/name/viox/xrefs/RegistryID,RN,PubMedID/JSONP>

- Example Scripts
 - [pug_rest_scripts_nar_2018.zip](#)
- PUG-SOAP
 - web service definition language (WSDL)
 - https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug_soap/pug_soap.cgi?wsdl
 - PUG SOAP Client Help
 - https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug_soap/client_help.html



PUG SOAP Client Help

On this page we share some of our experiences and tricks for working with some common SOAP clients. The samples provided should be ready to run, and hopefully will help first time users get started quickly. The clients that we have tested to date are listed below; more may be added in the future or by specific request.

Please select a client:

- Taverna 1.x
- Taverna 2.x
- Pipeline Pilot
- Java (with Axis)
- Java (with Axis2)
- Python (with ZSI)
- C# .NET 2.0 (Visual Studio 2005)
- Visual Basic .NET 2.0 (Visual Studio 2005)
- Perl (SOAP::Lite)

We have made every effort to design PUG SOAP to work as broadly and generically as possible. But since the SOAP clients are out of PubChem's control, we cannot guarantee that every version of every client will work the same way, or that any given client will be compatible. Please contact NCBI's help desk at info@ncbi.nlm.nih.gov with any comments, suggestions, or questions. Provided we have access to the same client software, we will try to help with specific issues.

Detailed help on PUG SOAP is available at https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug_soap.

[Write to Helpdesk](#) | [Disclaimer](#) | [Privacy statement](#) | [Accessibility](#) | [Data Citation Guidelines](#)

PubChemRDF

- RESTful Interface

```
curl -L -H "Accept: text/rdf" -o CID2244.rdf http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244  
http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244.rdf  
http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244.html  
http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244.turtle  
http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244.json  
http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244.jsonld  
http://rdf.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/compound/CID2244.ntriples
```

- Query RESTful Interface

```
https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=synonym&name=aspirin  
https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=synonym&name=aspirin&contain=true  
https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=synonym&name=aspirin&return=compound  
https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=synonym&name=aspirin&format=json  
https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=substance&predicate=rdf:type&offset=10000
```

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=synonym&pred=rdf:type&obj=sio:CHEMINF_000561

https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/rdf/query?graph=synonym&pred=rdf:type&object=sio:CHEMINF_000446,sio:CHEMINF_000447&offset=1275000

- Classification Browser

* オントロジーや分類法から、化合物のデータセットを絞り込み、絞り込んだデータセットをダウンロードすることができます。

i. 右の classification をクリック

The screenshot shows the main interface of the PubChem website. At the top, there is a navigation bar with links: Databases >, Upload, Services >, Help, more >, Today's Statistics >. To the right of the navigation bar are social media sharing icons for Facebook, Twitter, Google+, and RSS feed.

The central feature is the large "PubChem" logo with a hexagonal "C" icon. Below the logo is a search bar with three tabs: BioAssay, Compound, and Substance. To the right of the search bar are "Go" and "Advanced" buttons. Below the search bar is a link "Try the PubChem Search Beta".

A message box in the center states: "New! PubChem BioAssay Tools, a legacy collection of bioactivity analysis services, will be retired on Nov. 1, 2018. [Read more...](#)" with a "more ..." link and an RSS icon.

On the right side, there is a sidebar titled "Classification" which contains a vertical list of tools: BioAssay Tools, Structure Search, 3D Conformer Tools, Structure Clustering, Classification, Upload, Download, and PubChem FTP. Each item has a small icon next to it.

At the bottom of the page, there are links to "Write to Helpdesk", "Disclaimer", "Privacy Statement", "Accessibility", "Data Citation Guidelines", "National Center for Biotechnology Information", "NLM | NIH | HHS", and "more ...".

ii. Select classification から、データセットを選ぶ。

PubChem Classification Browser

Browse PubChem data using a classification of interest, or search for PubChem records annotated with the desired classification/term (e.g., MeSH: phenylpropionates, or Gene Ontology: DNA repair). [More...](#)

The screenshot shows the 'Select classification' dropdown menu open, displaying various classification options:

- MeSH**: MeSH Tree
- CAMEO Chemicals**: CAMEO Chemical Reactivity Classification
- ChEBI**: ChEBI Ontology
- ChEMBL**: Target Tree
- ChemIDplus**: ChemIDplus Chemical Information Classification
- ENZYME**: Enzyme Classification
- EPA Safer Choice**: EPA Safer Chemical Ingredients Classification
- FDA Pharm Classes**: FDA Pharmacological Classification
- Gene Ontology**
- IUPHAR/BPS Guide to Pharmacology**
- DHARMACOLOGY**: Target Category
- Humanities Category**

On the right side, there is a search bar labeled 'Search selected classification by Keyword' with an 'Enter' button. Below it is a section titled 'Display zero count nodes?' with 'PubMed' and 'Yes' (selected) or 'No' buttons.

iii. 今回はChEBIを選択してみます。

The screenshot shows the 'Select classification' dropdown menu with 'ChEBI' selected. The main interface remains the same, with the search bar and classification description visible.

PubChem Classification Browser

Help

Browse PubChem data using a classification of interest, or search for PubChem records annotated with the desired classification/term (e.g., MeSH: phenylpropionates, or Gene Ontology: DNA repair). [More...](#)

The screenshot shows the 'Select classification' dropdown menu with 'ChEBI' selected. The main interface includes a search bar for 'Search selected classification by Keyword' and a 'Classification description (from ChEBI)' section stating 'The ChEBI Ontology is a structured classification of the entities contained within ChEBI'. It also includes sections for 'Data type counts to display' (with 'Substance' selected), 'Display zero count nodes?' (with 'Yes' selected), and 'Filter by Entrez History'.

Browse ChEBI Tree

- ▼ ChEBI Ontology [?](#) [↗](#) **97,801**
 - ▶ chemical entity [?](#) [↗](#) **97,797**
 - ▶ role [?](#) [↗](#) **34,091**
 - ▶ subatomic particle [?](#) [↗](#) **9**

iv. Data type counts to display で、 Substance と Compound を切り替えると、下のカウントの数値が変わります。

v. Treeの ▶ をクリックして、目的のセットを探します。

Browse ChEBI Tree



vi. 5.以外の方法として、Search selected classification byで、Keywordを選択（デフォルト）で、キーワード（ここでは、glycolipid）を入力しSearchします。

NCBI

PubChem Classification Browser

Help

Browse PubChem data using a classification of interest, or search for PubChem records annotated with the desired classification/term (e.g., MeSH: phenylpropionates, or Gene Ontology: DNA repair). More...

Select classification Search selected classification by

ChEBI Keyword glycolipid Search Clear

Classification description (from ChEBI)
The ChEBI Ontology is a structured classification of the entities contained within ChEBI. More...

Data type counts to display Display zero count nodes? View type Page size

None Substance Compound Yes No Tree List 10 20 50 100 200

ChEBI Search for KEYWORD glycolipid ×

Results 1 to 10 of 67

1 2 3 4 5 6 7

1. sulfoglycolipid 35
A sulfate ester of a glycolipid.

+ Classification:
ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > lipid > sulfolipid > sulfoglycolipid

2. 3-O-hydroxyphthioceranoyl-2-O-palmitoyl-2'-O-sulfo-alpha,alpha-trehalose 1
A sulfoglycolipid in which alpha,alpha-trehalose, sulfated at the 2'-position, is acylated at the 2-position with palmitic acid, and at the 3-position with a hydroxyphthioceranoic acid (an octamethyl-branched dextrogyre C32 long chain where the stereochemistry at all methyl branches is L).

+ Classification:
ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > lipid > sulfolipid > sulfoglycolipid > 3-O-hydroxyphthioceranoyl-2-O-palmitoyl-2'-O-sulfo-alpha,alpha-trehalose

3. 2,3-dipalmitoyl-2'-sulfo-alpha,alpha-trehalose 1
A sulfoglycolipid in which alpha,alpha-trehalose, sulfated at the 2'-position, is diacylated at the 2- and 3-positions with palmitic acid.

+ Classification:
ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity >

vii. Classification の左のプラスのアイコンをクリックします。

ChEBI Search for KEYWORD glycolipid ×

Results 1 to 10 of 67

1 2 3 4 5 6 7

1. sulfoglycolipid 35
A sulfate ester of a glycolipid.

+ Classification:
ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > lipid > sulfolipid > sulfoglycolipid

viii. 展開された状態で、ブラウザの検索機能で glycolipid を検索します。

... search for keyword **glycolipid**

glycolipid 4 / 47 ▲ ▼ ×

Results 1 to 10 of 67

1 2 3 4 5 6 7

1. sulfoglycolipid ↗ 35

A sulfate ester of a **glycolipid**.

Classification:

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > lipid > sulfolipid > sulfoglycolipid

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > lipid > liposaccharide > **glycolipid** > sulfoglycolipid

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > heteroorganic entity > organochalcogen compound > organooxygen compound > ester > sulfuric ester > carbohydrate sulfate > sulfoglycolipid

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > heteroorganic entity > organochalcogen compound > organooxygen compound > carbohydrates and carbohydrate derivatives > carbohydrate derivative > carbohydrate sulfate > sulfoglycolipid

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > heteroorganic entity > organochalcogen compound > organooxygen compound > carbohydrates and carbohydrate derivatives > carbohydrate derivative > liposaccharide > **glycolipid** > sulfoglycolipid

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > chalcogen molecular entity > organochalcogen compound > organooxygen compound > ester > sulfuric ester > carbohydrate sulfate > sulfoglycolipid

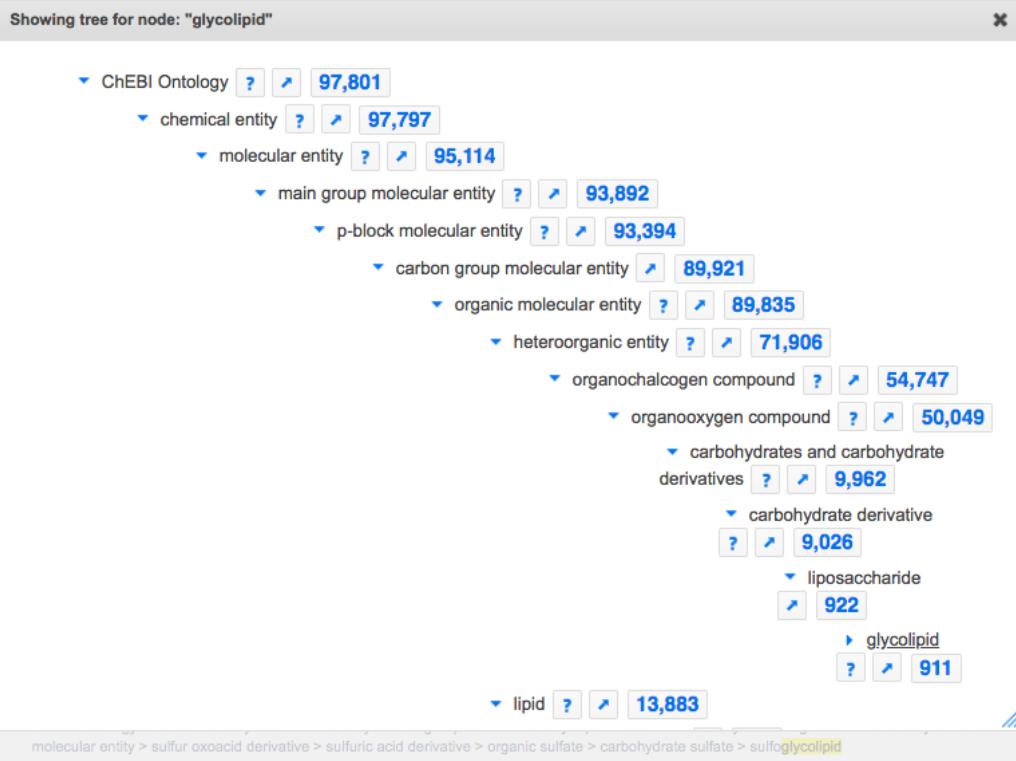
ix. 検索した glycolipid をクリックすると、ウインドウが開きます。 glycolipid の左の青い数字をクリックします。

1. sulfoglycolipid ↗ 35

A sulfate ester of a **glycolipid**.

Classification:

ChEBI Ontology > chemical entity > molecular entity > main group molecular entity > p-block molecular entity > carbon group molecular entity > organic molecular entity > lipid > sulfolipid > sulfoglycolipid



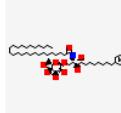
x. 検索（選択）された化合物のリストが表示されます。右の Structure Download をクリックします。

NCBI Resources How To Sign in to NCBI

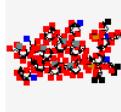
PubChem Substance PubChem Substance Search Help

Summary 20 per page Sort by Default order Send to: Filters: Manage Filters

Links from pchierarchy Items: 1 to 20 of 911 << First < Prev Page 1 of 46 Next > Last >>

1.  CHEBI:139221; N-[(1S,2S,3R)-1-[(alpha-D-galactopyranosyloxy)methyl]-2,3-dihydroxy-10-phenyldecyl]hexacosanamide; N-[(2S,3S,4R)-1-(alpha-D-galactopyranosyloxy)-3,4-dihydroxy-11-phenylundecan-2-yl]hexacosanamide ...
Source: ChEBI
Deposit Date: 2018-01-01 Available Date: 2018-01-01 Modify Date: 2018-01-01
SID: 350080125 [CID: 131953077]
[Summary](#) [PubChem Same Compound](#)

2.  CHEBI:37637; (alpha-D-Mannosyl)8-beta-D-mannosyl-diacylchitobiosyldiphosphodolichol; alpha-Man-(1->2)-alpha-Man-(1->2)-alpha-Man-(1->3)-[alpha-Man-(1->2)-alpha-Man-(1->3)-[alpha-Man-(1->2)-alpha-Man-(1->6)]-alpha-Man-(1->6)]-beta-Man-(1->4)-beta-GlcNAc-(1->4)-alpha-GlcNAc(PP-Dol)
Source: ChEBI
Deposit Date: 2018-01-01 Available Date: 2018-01-01 Modify Date: 2018-01-01
SID: 350080124 [CID: 45266871]
[Summary](#) [PubChem Same Compound](#)

3.  P_Penneri_12 LPS core region; CHEBI:136274; alpha-D-GalN-(1->4)-[alpha-DD-Hep-(1->2)]-alpha-D-GalA-(1->3)-[alpha-LD-Hep-(1->7)]-alpha-LD-Hep6PEtn-(1->3)-[beta-D-Glc-(1->4)]-alpha-LD-Hep-(1->5)-[alpha-Kdo-(2->4)][beta-L-Arap4N-(1->8)]-alpha-Kdo-(2->6)-lipid A ...
Source: ChEBI
Deposit Date: 2017-04-12 Available Date: 2017-04-12 Modify Date: 2017-04-12
SID: 332875751
[Summary](#)

Actions on your results
Structure Clustering Cluster structures based on structural similarity
Structure Download Download the structures in various formats
Pathways Analyze pathways containing the compounds

Refine your results • What's this?
BioMedical Annotation BioSystems (35)

Find related data Database: Select Find Items

Recent activity Turn Off Clear
PubChem Substances from Classification for pchi PubChem Substance

xi. 検索（選択）した化合物のリストをダウンロードするためのサイトが開きます。必要に応じでformatなどを変更し、Download ボタンを押します。

NCBI PubChem Download Service PubMed | Entrez | Structure | PubChem | Help

PubChem > Download Service

PubChem Download Service

Download the records in the format selected below: [?](#)

SDF Choose a format [?](#)

Gzip Choose a compression type [?](#)

Retrieve 3D records/images? [?](#)

Number of 3D conformers per CID [?](#)

Save this job in XML format (e.g. for PUG) [?](#)

[Write to Helpdesk](#) | [Disclaimer](#) | [Privacy statement](#) | [Accessibility](#) | [Data Citation Guidelines](#)

xii. 自動的に選択した形式でデータのダウンロードが開始されます。この場合は、ファイル名 4363722229543774033.sdf.gz としてダウンロードされます。

The screenshot shows the NCBI PubChem Download Service page. At the top, there's a logo for NCBI and PubChem. Below it, a message says "Download queue status: Done". It provides a link to the file: "ftp://ftp-private.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/.fetch/23/4363722229543774033.sdf.gz". There are also links to "Write to Helpdesk", "Disclaimer", "Privacy statement", "Accessibility", and "Data Citation Guidelines".

xiii. ダウンロードされたファイルを解凍すると、エディタなどでデータを見ることができます。

xiv. データセットとして、Gene Ontology: biological process を選択してみます。Data typeとして、PubMed, Gene, Protein, Taxonomyが選択できるようになります。

The screenshot shows the PubChem Classification Browser. At the top, there's a navigation bar with the NCBI logo, a title "PubChem Classification Browser", and a "Help" link. Below the title, a sub-instruction says "Browse PubChem data using a classification of interest, or search for PubChem records annotated with the desired classification/term (e.g., MeSH: phenylpropionates, or Gene Ontology: DNA repair). More...". The main interface has two search boxes: "Select classification" (set to "Gene Ontology: Biological Process") and "Search selected classification by" (set to "Keyword"). Below these are buttons for "Enter desired search term" and "Search". A "Classification description (from Gene Ontology)" section explains what a biological process is. It was last updated on 04/17/2018 16:16:44. Under "Data type counts to display", the "Gene" button is selected. There are also buttons for "Display zero count nodes?", "Yes" (selected) and "No". The main content area shows a hierarchical tree of biological processes. The root node is "Biological Process" with 41,764 entries. Other nodes include "behavior" (1,854), "biological adhesion" (1,729), "biological phase" (26,847), "cell aggregation" (42), "cell killing" (126), and "cell proliferation" (1,330).

xv. ここでは、Geneを選択し、Biological Process > metabolic process > glycosylation を選択してみます。

- ▼ metabolic process ? ↗ 22,319
 - ▶ adaptive thermogenesis ? ↗ 43
 - ▶ biosynthetic process ? ↗ 9,053
 - ▶ catabolic process ? ↗ 4,287
 - ▶ cellular metabolic process ? ↗ 19,763
 - ▶ collagen metabolic process ? ↗ 136
 - ▶ demethylation ? ↗ 118
 - ▶ glycosylation ? ↗ 520
 - ▶ hormone metabolic process ? ↗ 438
 - ▶ hydrogen metabolic process ? ↗
 - ▶ methylation ? ↗ 634

xvi. glycosylationの右の「520」をクリックすると、新しいウインドウが開きます。Geneのリストが表示されます。

Gene IDのリンクをクリックすると詳細画面を見ることができます。

Name/Gene ID	Description	Location	Aliases
B3GNT10 ID: 100288842	UDP-GlcNAc:betaGal beta-1,3-N-acetylglucosaminyltransferase 10 (putative) [Homo sapiens (human)]	Chromosome 9, NC_000009.12 (120793496..120801728)	
QST4 ID: 100128731	oligosaccharide transferase complex subunit 4, non-catalytic [Homo sapiens (human)]	Chromosome 2, NC_000002.12 (27070472..27071699, complement)	
CG34452 ID: 5740876	uncharacterized protein [Drosophila melanogaster (fruit fly)]	Chromosome 3L, NT_037436.4 (15686352..15687902, complement)	Dmel_BP1049, CG33999, Dmel CG34452, Dmel(CG33999
CG34451 ID: 5740612	uncharacterized protein [Drosophila melanogaster (fruit fly)]	Chromosome 3L, NT_037436.4 (15688517..15692047, complement)	Dmel_CG33999, Dmel CG34451, Dmel(CG33999
CG34057 ID: 3885645	uncharacterized protein [Drosophila melanogaster (fruit fly)]	Chromosome 3L, NT_037436.4 (897380..898772)	Dmel_CG13904, Dmel CG34057, dC1GalT6
CG33774	uncharacterized protein	Chromosome 2P	Dmel

○ SDFを選択した場合の例

```

350080125
-OEChem-07041809452D

59 60 0 1 0 0 0 0 0999 V2000
15.5021 -26.1389 0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
17.2204 -26.1388 0.0000 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
...
13.7741 -22.6873 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
14.6327 -23.1842 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 12 1 0 0 0 0
1 15 1 0 0 0 0
...
56 57 1 0 0 0 0
57 58 1 0 0 0 0
58 59 1 0 0 0 0
M END
...
> <PUBCHEM_SUBSTANCE_ID>
350080125

> <PUBCHEM_EXT_DATASOURCE_NAME>
ChEBI

> <PUBCHEM_EXT_DATASOURCE_REGID>
CHEBI:139221

```

```
> <PUBCHEM_SUBSTANCE_SYNONYM>
CHEBI:139221
N-[(1S,2S,3R)-1-[(alpha-D-galactopyranosyloxy)methyl]-2,3-dihydroxy-10-phenyldecyl]hexacosanamide
N-[(2S,3S,4R)-1-(alpha-D-galactopyranosyloxy)-3,4-dihydroxy-11-phenylundecan-2-yl]hexacosanamide
N-[(2S,3S,4R)-1-(alpha-D-galactosyloxy)-3,4-dihydroxy-11-phenylundecan-2-yl]hexacosanamide
```

...
\$\$\$\$
350080124
-OEChem-07041809452D
...

○ SMILESを選択した場合の例

- 化学構造がSMILESへ変換できない場合は、ID(SID)のみ出力されます。

- PubChem FTP

- FTPサイトからデータセットをダウンロードすることができます。
i. 右の PubChem FTP をクリック

PubChem

[BioAssay](#)
[Compound](#)
[Substance](#)
[Go](#) [Limits](#) [Advanced](#)
[Try the PubChem Search Beta](#)

New PubChem BioAssay Tools, a legacy collection of bioactivity analysis services, will be retired on Nov. 1, 2018. [Read more...](#)

[more ...](#)


[Write to Helpdesk](#) | [Disclaimer](#) | [Privacy Statement](#) | [Accessibility](#) | [Data Citation Guidelines](#)
National Center for Biotechnology Information
NLM | NIH | HHS

ii. FTPサイトが表示されます。

/pubchem/ のインデックス

[親ディレクトリ]

名前	サイズ	更新日
Bioassay/		2015/07/13 9:00:00
Compound/		2013/10/22 9:00:00
Compound_3D/		2016/04/11 9:00:00
Other/		2015/07/06 9:00:00
RDF/		2018/06/11 23:30:00
README	1.7 kB	2016/11/04 9:00:00
Substance/		2010/07/24 9:00:00
Target/		2017/03/10 9:00:00
data_spec	0 B	2011/07/14 9:00:00
presentations/		2016/03/04 9:00:00
publications/		2016/01/20 9:00:00
specifications/		2014/03/24 9:00:00

iii. アッセイデータの例、AID-AID.zip のリストが表示されます。必要なデータをクリックするとダウンロードできます。

/pubchem/Bioassay/CSV/Data/ のインデックス

[親ディレクトリ]

名前	サイズ	更新日
0000001_0001000.zip	405 MB	2016/12/06 9:00:00
0001001_0002000.zip	755 MB	2017/11/11 9:00:00
0002001_0003000.zip	559 MB	2018/03/17 1:03:00
0003001_0004000.zip	582 kB	2016/12/29 9:00:00
0004001_0005000.zip	668 kB	2016/12/30 9:00:00
0005001_0006000.zip	653 kB	2016/12/31 9:00:00
0006001_0007000.zip	604 kB	2016/12/31 9:00:00
0007001_0008000.zip	492 kB	2017/06/07 9:00:00
0008001_0009000.zip	483 kB	2016/12/30 9:00:00
0009001_0001000.zip	470 kB	2017/06/07 9:00:00

iv. 以下のようにディレクトリをたどると、Compoundの2018-06-28更新データをSDF形式でダウンロードできます。ダウンロードしたデータは、上述のように解凍することでエディタなどでデータを見るることができます。

/pubchem/Compound/Daily/2018-06-28/SDF/ のインデックス

↑ [親ディレクトリ]

名前	サイズ	更新日
Compound_056825001_056850000.sdf.gz	1.7 kB	2018/06/28 16:35:00
Compound_129000001_129025000.sdf.gz	398 kB	2018/06/28 16:35:00
Compound_134600001_134625000.sdf.gz	9.7 kB	2018/06/28 16:35:00
README-Compound-SDF	1.5 kB	2018/06/28 19:15:00

6. ツール

化合物をコンピュータで扱うためのソフトウェア

- データベースとは別の話なので、興味がある人はリンクなどを参考ください。これらのツールを利用すると簡単なデータベースを自分で作ることができます。構造の類似度の計算や構造検索、ファイル形式変換、図の生成などが可能です。

- [Open Babel](#)
- [RDKit](#)
- [Chemistry Development Kit \(CDK\)](#)

分子表示

- PubChem 3D Viewer
 - 右の 3D Conformer Tools をクリック

The screenshot shows the main interface of the PubChem website. At the top, there's a navigation bar with links for Databases, Upload, Services, Help, more, and Today's Statistics. To the right of the navigation are social media sharing icons (Facebook, Twitter, Google+, RSS, and a message icon). The central feature is the large blue "PubChem" logo with a hexagonal atom symbol. Below the logo is a search bar with three tabs: BioAssay, Compound, and Substance. To the right of the search bar are buttons for "Go" and "Advanced". A message box at the bottom left informs users that the PubChem BioAssay Tools will be retired on Nov. 1, 2018. At the very bottom, there's a footer with links to Write to Helpdesk, Disclaimer, Privacy Statement, Accessibility, Data Citation Guidelines, National Center for Biotechnology Information, NLM, NIH, and HHS.

* 表示したいCIDまたはSIDを入力し、Viewをクリック

Visualize: [Conformer](#) [Superposition](#) [Saved View](#) [?](#)

Compound

Enter: CID List: (separated by space/.:/tab/\n)

CID File: ファイルを選択 選択されていません

Entrez Compound History: #3 Search "2'-deoxyadenosine", count: 1 (Refresh)

Option: View All diverse conformers

Conformer

Enter: Conformer Id List: (64-bit hex code or CID.Conf_id separated by space/.:/tab/\n)

Conformer Id File: ファイルを選択 選択されていません

Substance

Enter: SID List: (SID or SID.version, separated by space/.:/tab/\n)

SID File: ファイルを選択 選択されていません

Entrez Substance History: #6 Search 276246574[uid], count: 1 (Refresh)

[View](#) [Clear](#) [Save](#)

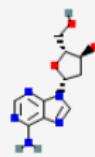
The PubChem3D viewer allows you to visualize and interact with chemical structures with 3-D information available within PubChem.
It is part of the [PubChem3D layer](#). To cite or learn more about the PubChem3D project:

 [Bolton, et al. "PubChem3D: a new resource for scientists." J Cheminform. 2011 Sep 20;3\(1\):32.](#)

[Write to Helpdesk](#) | [Disclaimer](#) | [Privacy statement](#) | [Accessibility](#) | [Data Citation Guidelines](#)

* 表示されるウインドウで、化合物のコンフォマーの構造を見ることができます。また、左のツールをクリックして、画像やデータの保存することができます。

CID 13730
(Similar 3D: 5596*)



Conformer 2 of 10, LID: 2 (Similar 3D: 1922) |◀|◀|▶|▶|

Rotation



Speed



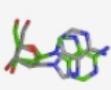
Hydrogen



Size



Comparison to Default Conformer



*: compound records similar to this CID using the first nine diverse conformers per CID.

[Pc3D Viewer Download](#)

The PubChem3D viewer allows you to visualize and interact with chemical structures with 3-D information available within PubChem. It is part of the [PubChem3D layer](#). To cite or learn more about the PubChem3D project:

 [Bolton, et al. "PubChem3D: a new resource for scientists." J Cheminform. 2011 Sep 20;3\(1\):32.](#)

[Write to Helpdesk](#) | [Disclaimer](#) | [Privacy statement](#) | [Accessibility](#) | [Data Citation Guidelines](#)

■ [GLmol - Molecular Viewer on WebGL/Javascript](#)

- <http://webglmol.osdn.jp/gl/mol/viewer.html>

a. サイトを開く

2POR

STRUCTURE OF PORIN REFINED AT 1.8 ANGSTROMS RESOLUTION



b. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/13730> のダウンロード、3D ConformerのSDFで Display をクリックします。

NIH U.S. National Library of Medicine National Center for Biotechnology Information

PubChem OPEN CHEMISTRY DATABASE

Compound Summary for CID 13730

2'-Deoxyadenosine

STRUCTURE VENDORS PHARMACOLOGY **LITERATURE** PATENTS BIOACTIVITIES

PubChem CID: 13730
Chemical Names: 2'-deoxyadenosine; Deoxyadenosine; 958-09-8; 2-Deoxyadenosine; (2R,3S,5R)-5-(6-amino-9H-pyrimidin-2-yl)-1,2-dihydroxy-3-methyl-6-oxohexane
Molecular Formula: C₁₀H₁₃N₅O₃

Download Share Help

Data used to display this page
2D Structure
3D Conformer

SDF	Save	Display
JSON	Save	Display
XML	Save	Display
ASN.1	Save	Display

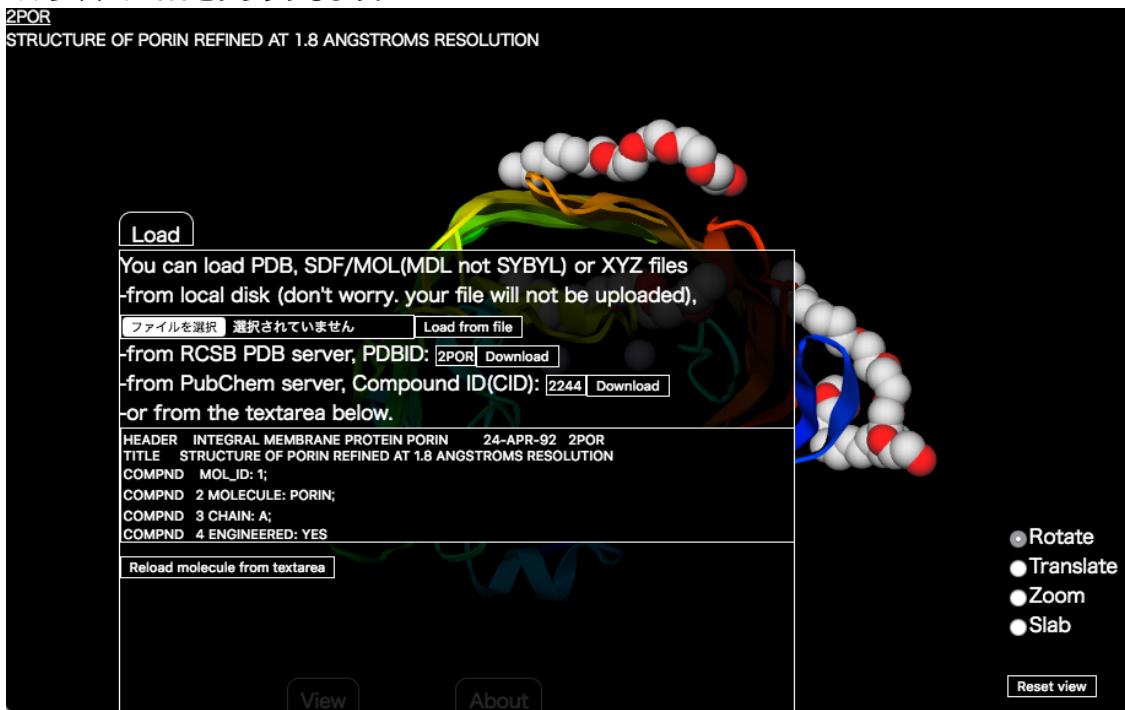
NCBI Linkout
Related Compounds with Annotation
Substances by Category

c. 表示されたSDFデータをクリップボードにコピーします。

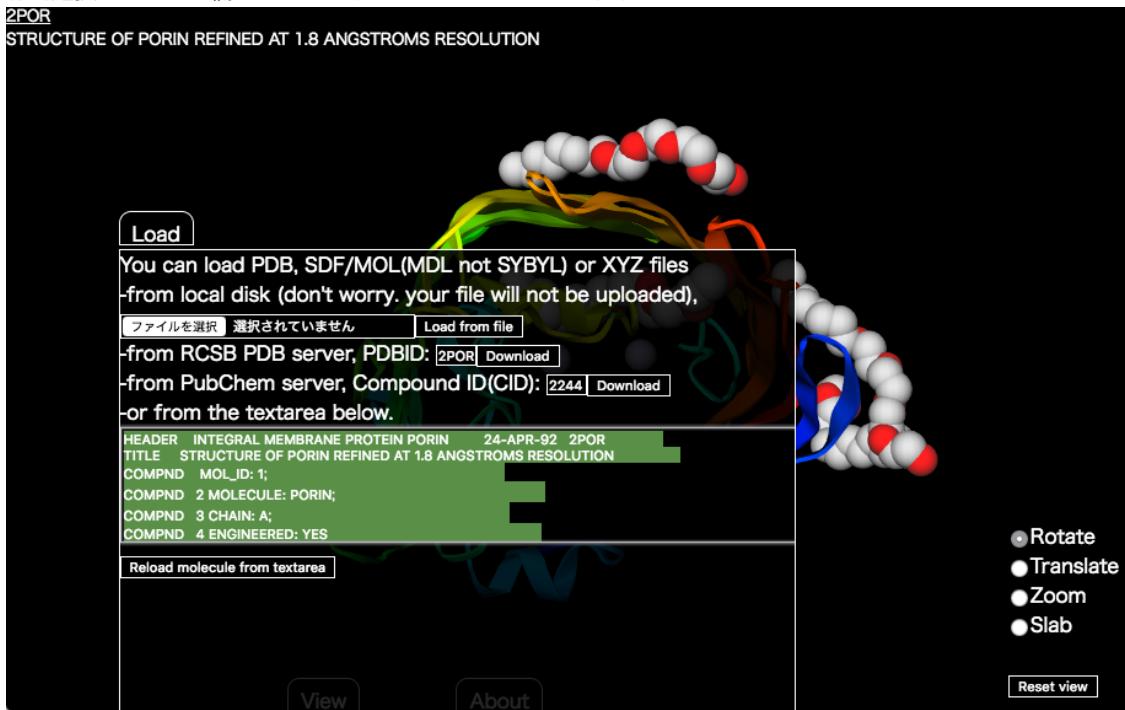
← → ⌂ ⌂ 保護された通信 | https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/13730/record/SDF?record_type=3d&response_type=display

13730

d. 1のサイトの Loadをクリックします。



e. 緑で選択された入力欄に、コピーしたSDFデータをペーストします。



f. Reload molecule from textarea♦ をクリックして、SDFデータを読み込みます。

選択されていません

Load

You can load PDB, SDF/MOL(MDL not SYBYL) or XYZ files
-from local disk (don't worry, your file will not be uploaded),
[ファイルを選択] 選択されていません Load from file
-from RCSB PDB server, PDBID: 2POR Download
-from PubChem server, Compound ID(CID): 2244 Download
-or from the textarea below.

> <PUBCHEM_COORDINATE_TYPE>
2
5
10
\$\$\$\$

Reload molecule from textarea

View About Reset view

- Rotate
- Translate
- Zoom
- Slab

g. Load をクリックして、メニューをたたみます。

Load View About Reset view

- Rotate
- Translate
- Zoom
- Slab

h. Rotate, Translate, Zoom, Slab を選択して、適当に分子の表示を変更してください。

- ID変換サービス
 - リンク自動管理システム (Hyperlink Management System)
 - <http://biodb.jp/>

7. ChEMBL – UniChem -

- ChEMBL - EMBL-EBI <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
 - UniChem: 画面左のリストから移動

The screenshot shows the ChEMBL homepage with a prominent Marvin JS interface for drawing chemical structures. The interface includes a toolbar, a canvas for drawing, and a periodic table element selector. Above the interface, there is a search bar and navigation links for Compounds, Targets, Assays, Documents, Cells, Tissues, and Activity Source Filter. A yellow banner at the top right encourages users to check out the New Interface (Beta). The left sidebar contains links to various EMBL-EBI services like UniChem, SureChEMBL, and Malaria Data. A 'CHEMBL Statistics' section provides key figures: DB: ChEMBL_24, Targets: 12,091, Compound records: 2,275,906, Distinct compounds: 1,828,820, Activities: 15,207,914, Publications: 69,861, and Release Notes.

The screenshot shows the ChEMBL homepage with a large circular diagram in the center. The diagram consists of three main colored circles: a red circle at the top labeled '1.1M Assays', a teal circle at the bottom labeled '1.8M Compounds', and a smaller pink circle to the left labeled '12K Targets'. Smaller circles within these larger ones provide more granular data points: a dark green circle for '11K Drugs', a light green circle for '69K Documents', and a small pink circle for '1.7K Cells'. To the right of the diagram, there is a brief description of ChEMBL as a manually curated database of bioactive molecules with drug-like properties, mentioning its role in aiding drug discovery. Below the diagram, there is a footer banner with cookie consent information and a 'I agree, dismiss this banner' link.

- UniChem <https://www.ebi.ac.uk/unichem/>
 - 各化合物DBの化合物IDとInChIおよびInChIKey情報のマッピング情報を提供する。
 - 現在、35種類の化合物DBの情報を集録（例、Nikkaji, KEGG, PubChem, ChEMBL）
 - InChIKeyをキーとして、各化合物DBの化合物IDを網羅的に収集するのに適している。例、RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N

The screenshot shows the UniChem search interface. At the top, there's a navigation bar with links to Services, Research, Training, About us, and a search bar. Below the navigation is the UniChem logo and the text "UniChem". A sidebar on the left contains links to Home, Search, Web Services, Connectivity Search, Sources, General Info (Background, Getting in touch, FAQ, Downloads, Connectivity Info, Other), Analysis (Top Level Stats, Structures by Source, Overlaps, FULIK, FIHB, SCFB), and News, Our Impact, Contact us, Intranet.

The main content area has a "Query UniChem..." section with a text input containing the InChIKey RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N. Below the input are three radio buttons: "src_compound_id", "InChI", and "InChIKey". A "Submit Query" button is at the bottom of this section. Below this is an "Example Queries" section featuring the EU-OpenScreen logo.

At the bottom of the page is a footer with links to Services (By topic, By name (A-Z), Help & Support), Research (Overview, Publications, Research groups, Postdocs & PhDs), Training (Overview, Train at EBI, Train outside EBI, Train online, Contact organisers), Industry (Overview, Members Area, Workshops, SME Forum, Contact Industry programme), and About us (Overview, Leadership, Funding, Background, Collaboration). There are also links for News, Our Impact, Contact us, and Intranet.

The screenshot shows the UniChem search results table. The header includes "Show: 50 ▾ entries", "Apply filter", and "...to whole table". The table has columns: src_id, Source Name, src_compound_id, Currently Assigned, LR *, UCI **, and Standard InChIkey. The first few rows of data are:

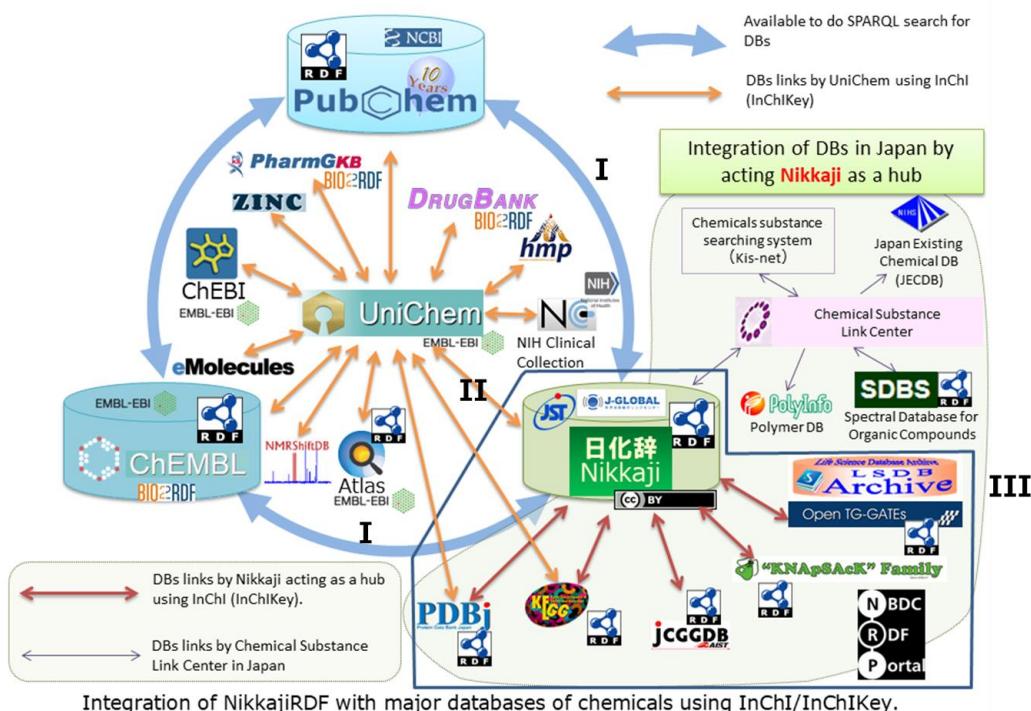
src_id	Source Name	src_compound_id	Currently Assigned	LR *	UCI **	Standard InChIkey
1	chembl	CHEMBL113	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
3	pubt	CFF	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
7	chebi	27732	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
12	atlas	caffiene	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
15	surechembl	SCHEMBL6671	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
2	drugbank	DB02021	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
4	gtopdb	407	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
6	kegg_ligand	C07481	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
9	zinc	ZINC000000001084	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
9	zinc	ZINC000001084	No	12-MAR-2012	39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
10	emolecules	493944	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
10	emolecules	27517656	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
11	lbi	FSDC77C5C625DA4D47B71059235AE	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
14	tdsair	3265A9V33BE	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
17	pharmgkb	PA448710	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
18	hmdb	HMDB0001947	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
18	hmdb	HMDB01847	No	13-AUG-2017	39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
21	pubchem_liparma	14772978	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
22	pubchem	28119	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
23	mcule	MCULE-3362813910	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
24	mnistfb2	10016316	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
25	lincs	L5M-2026	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
26	actor	58-56-2	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
29	nikajj	J2330B	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
31	bindingdb	10649	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
32	comptox	DTXSID00020222	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
34	drugcentral	495	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
36	metabolights	MTBL227732	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
37	brenda	207534	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
37	brenda	207535	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
37	brenda	682	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
37	brenda	7965	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
37	brenda	51265	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>
38	itea	27732	Yes		39562	<chem>RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N</chem>

At the bottom of the table, it says "Showing 1 to 34 of 34 entries".

cookies, and the limited processing of your personal data in order to function. By using the site you are agreeing to this as outlined in our Privacy Notice and Terms of Use.

8. 化合物DB統合の取り組み

- 化合物オープンデータの日米欧 (NikkajiRDF, PubChem, ChEMBL) での統合
 - I. 共通の書式、オントロジーを用いたRDFによる統合
 - II. InChIKey (InChI)による化合物DB間マッピング
 - III. 国内な化合物DB, 研究成果の統合



- 日本化学物質辞書(日化辞) <http://doi.org/10.15079/NIKKAIJ>
 - 有機化合物辞書データベース。
 - 構造情報あり：構造が明確な物質
 - 構造不確定等：構造が不明または未定の物質
 - 混合物等：混合物、ラセミ化合物や、相対立体配置をもつ化合物等
 - 日化辞が提供する情報
 - 日本語名、英語名、法規制番号、構造情報、用途語（例、抗癌剤、角質溶解薬など）など
 - J-Globalによりインターネット上で無料一般公開。名称検索、構造検索、および文献、特許、研究課題の情報収集が可能

<http://stirdf.jst.go.jp/cde/nikkaji/J2.875.845F>

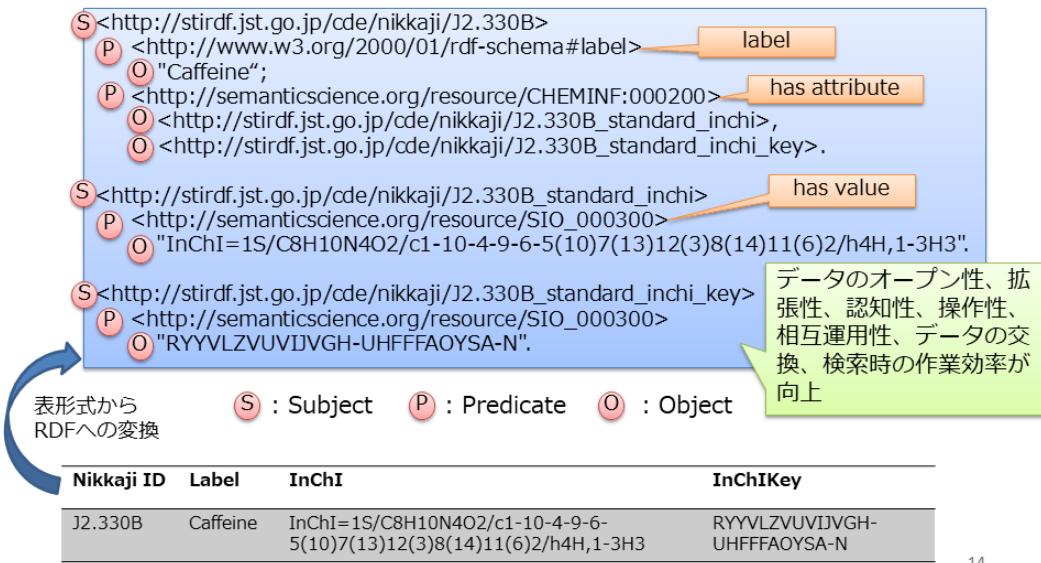


ライフサイ
エンス分野
でよく使わ
れている

主要な化合物データベースの化合物の登録数
(2018年7月9日現在)

Database	No. of Chemical Substances
PubChem (Compound)	96,400,206
ChEMBL	2,275,906
ChEBI	54,810
KEGG compound	18,354
ChemSpider	67,000,000
CAS	142,000,000
ChemIDplus	400,000
JST化学物質 (Nikkaji)	3,716,864

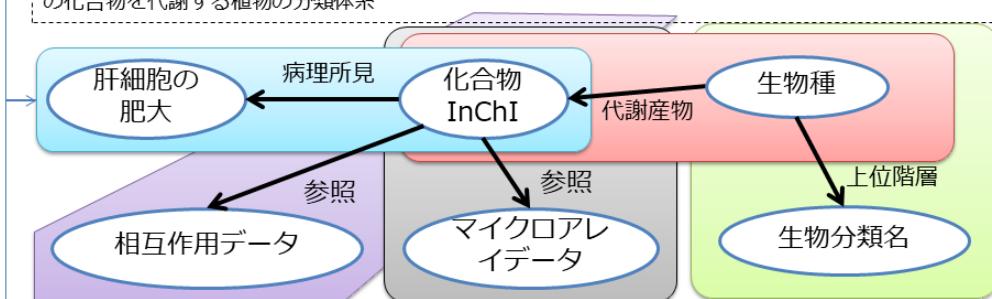
【I】 NBDC版日化辞RDFのデータ構造の例 国際的に主要な化合物DBであるPubChem, ChEMBL, ChemspiderのRDFで採用している標準的なオントロジーSIO (Semanticscience Integrated Ontology)およびCHEMINF (Chemical Information Ontology)を使い、化合物のInChIおよびInChIKeyなどの情報をRDF化した。



14

RDFを使うとどのような統合検索が可能か？

検索例：ラットで肝臓の細胞肥大を引き起こす化合物の相互作用データやマイクロアレイデータおよびその化合物を代謝する植物の分類体系



検索式

```

SELECT ?化合物 ?生物種 ?生物分類名 ?実験データ
WHERE {
    ?化合物 病理所見 肝細胞の肥大.
    ?生物種 代謝産物 ?化合物.
    ?生物種 上位階層 ?生物分類名.
    optional {
        ?化合物 参照 ?実験データ.
    }
}

```

SPARQL
(RDFデータのクエリ言語) で
グラフパターンを記述

簡単な検索式で、データベース間にまたがる情報収集が可能

<https://integbio.jp/rdf/?view=detail&id=nikkaji>

NikkajiRDF (NBDC RDF Portal内)

The screenshot shows the NBDC NikkajiRDF portal interface. On the left, there's a sidebar with navigation links: Details, Specification, Statistics, Schema, and SPARQL examples. A red box highlights 'SPARQL エンドポイント' (SPARQL endpoint) pointing to the 'Specification' section. Another red box highlights 'データダウンロード' (Data download) pointing to the 'Download file' section where 'nikkaji.taz' is listed. A third red box highlights 'スキーマ図' (Schema diagram) pointing to a large, complex graph on the right labeled 'メタデータ' (Metadata). The graph visualizes the data structure, showing various nodes and their relationships.

各RDFデータには、
詳細なメタデータや
内部構造を示すス
キーマ図が付与され
ている他、サンプル
クエリが用意されそ
のまま実行可能

21

<http://doi.org/10.18908/lsdba.nbdc01530-02-000>

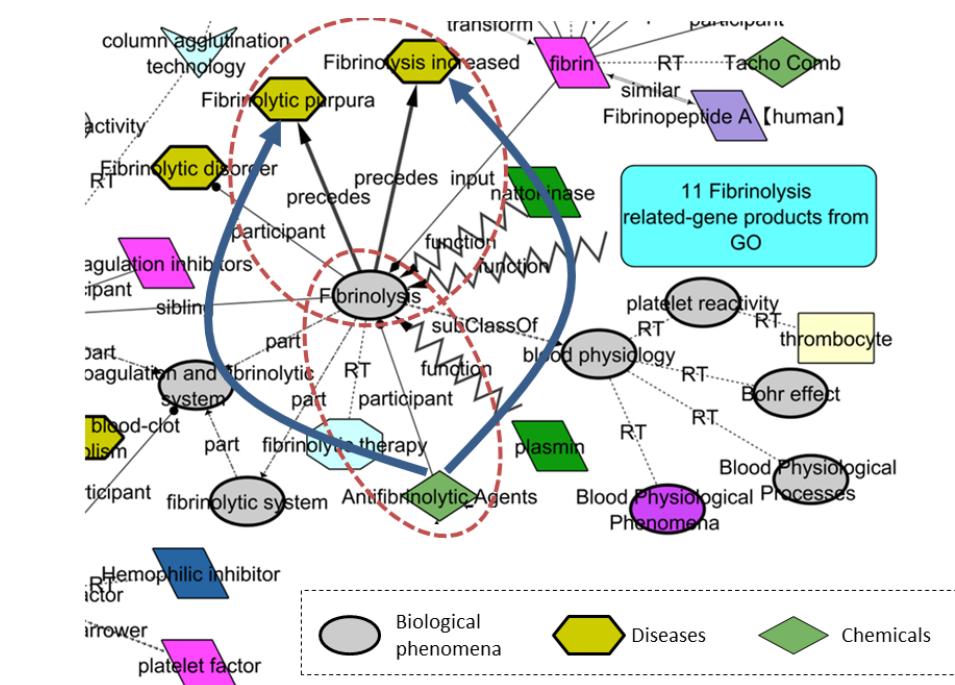
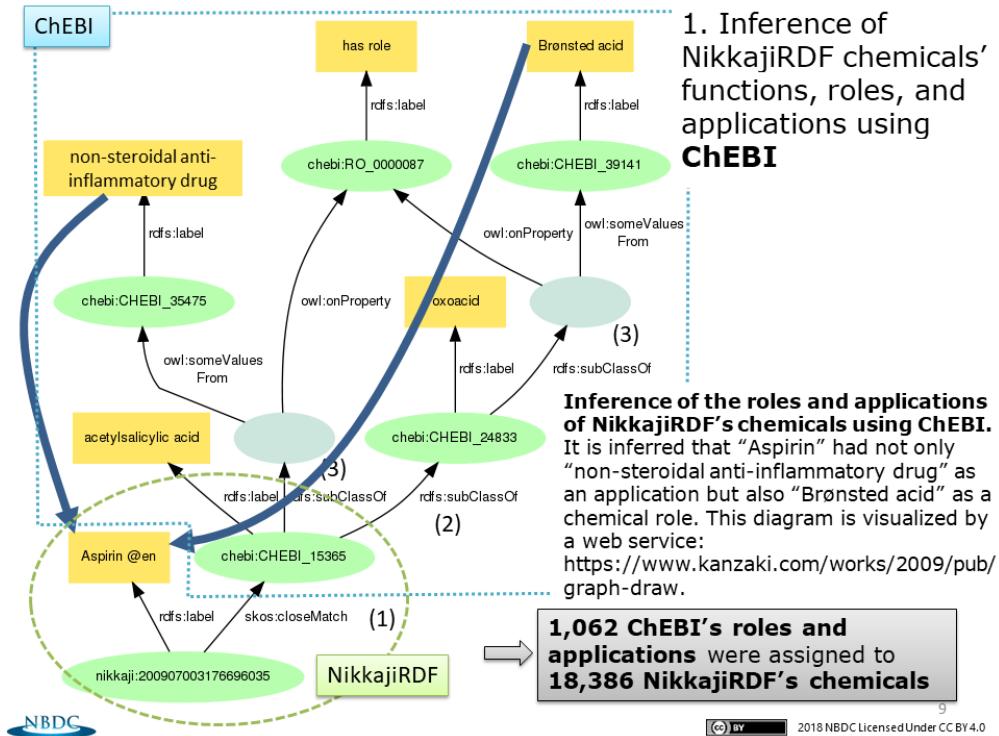
生命科学系データベースアーカイブ

データセットを長期
間安定に維持保管し、
データ説明（メタ
データ）を統一して
検索を容易にすると
共に、利用許諾条件
などの明示を行うこと
で、多くの人が容
易にデータへアクセスし
ダウンロードを行えるよう
にするサービス

142件のデータデー
タベース、約500件
のデータセットを収
録（2018年11月現
在）。

The screenshot shows the LSDB Archive website. At the top, there's a search bar with 'nikkaji' and a '詳細検索' (Advanced search) button. Below the search bar is a table with two rows of search results. The first row is for 'NBDC NikkajiRDF' (データベース名: NBDC NikkajiRDF, データベース運用場所: オリジナルサイト, 代表者: -, データベースカテゴリ: 化合物, 生物種: -, 請約 (キーワードを太字表示): 日本化学会質評書 (日化誌 Nikkaji) のデータを化学会質評書のRDF記述式標準となつてはオントロジーを用いて RDF化したデータベース). The second row is for '日化誌 InChI対応表' (データベース名: 日化誌 InChI対応表, データベース運用場所: オリジナルサイト, 代表者: -, データベースカテゴリ: 化合物, 生物種: -, 請約 (キーワードを太字表示): 日本化学会質評書 (日化誌 Nikkaji) の化成物とInChIおよびInChIKeyの対応に際するデータベース). There are also buttons for '新アーカイブ情報' (New archive information), '当アーカイブの使い方' (How to use the archive), and '全データをエクスポート' (Export all data).

オントロジーおよびナレッジグラフを用いた化合物機能の推論
https://doi.org/10.1007/978-3-030-04284-4_26



A part of Fibrinolysis network. This graph is visualized using Cytoscape (<http://www.cytoscape.org/>).  2018