

ScienceDirect から化合物・反応データベース Reaxys へのリンク

ScienceDirect の化学分野のジャーナルに、構造式ファイルの MOL ファイルや、国際標準コードの InChIKey 情報が搭載されはじめました。この搭載により、論文や主要化合物の発見のしやすさが向上するだけではなく、論文中の化合物の一覧表示や、化合物・反応データベース Reaxys や Google など他のデータベースでの再検索も可能となって、論文情報の付加価値がますます高まりました。

対応するジャーナルは、最初は *Tetrahedron* と *Bioorganic & Medicinal Chemistry* の 2 誌ですが、今後他の化学ジャーナルにも拡張していく予定です。なお、この機能は、論文の著者が、必要な MOL ファイルを補助データとして提出した場合に有効になります。

Abstract

There is an urgent need for novel therapeutics possessing new modes of action to treat tuberculosis (TB) infections. In this study we report on the synthesis and biological evaluation of a series of pyrido[2,3,4-*k*]acridin-6-one alkaloids related to the anti-TB (MIC 0.35 μ M) but cytotoxic (IC₅₀ < 0.14 μ M) marine natural product ascididemin (1). The most interesting compounds identified were 21 and 24, which were found to inhibit the growth of *Mycobacterium tuberculosis* (Mtb) H₃₇-Rv with MIC 2.0 μ M, but with negligible cytotoxicity towards Vero and P388 cells (IC₅₀ > 25 μ M). Another analogue (10) was evaluated against a range of singly-drug-resistant strains of Mtb and was found to exhibit no cross-resistance. These results suggest that the pyrido[2,3,4-*k*]acridin-6-one skeleton may provide a useful scaffold for future studies directed towards possible anti-TB drugs.

Graphical abstract

Compound	H ₃₇ Rv MIC	Vero cytotox. IC ₅₀
Ascididemin	0.35 μ M	< 0.14 μ M
21	0.34 μ M	6.80 μ M
24	2.0 μ M	> 25 μ M

Author's Key Structures in this Article

powered by reaxys®

	Search in Reaxys InChIKey Search		C ₂₄ H ₂₀ N ₄ O ₃ S (444.514) Search in Reaxys InChIKey Search
	Search in Reaxys InChIKey Search		Search in Reaxys InChIKey Search
	Search in Reaxys InChIKey Search		Search in Reaxys InChIKey Search

Keywords: Tuberculosis; Natural Products; Ascididemin; pyridoacridine

GTOVVTXGQQQEHU-UHFFFAOYSA-N; HBALHLONFUQOEK-UHFFFAOYSA-N; RBQLBPU/AQKGLZ-UHFFFAOYSA-N; DWDBKAGCMXLHIL-UHFFFAOYSA-N; YHTZRIQZBJKQIY-UHFFFAOYSA-N; BTAIBXHSXUJFN-UHFFFAOYSA-N; HPWOKHWRKMOHQ-UHFFFAOYSA-N; KPUHYSXFTFNEN-UHFFFAOYSA-N; CGNVPMILBSMLZHH-UHFFFAOYSA-N; GLQGTGZBHNQVDM-UHFFFAOYSA-N; NXDFBOPJSSHYHP-UHFFFAOYSA-N; HGZPBFITQYPTPF-UHFFFAOYSA-N

該当する論文では、論文ページの Graphical abstract と InChI キーの間に「Author's Key Structures in this Article」というボックスが表示され、著者が指定した化合物の構造式が表示されます。

Search Reaxys

このリンクをクリックすると、下の中間画面が表示されます。検索条件を指定し、[OK] ボタンをクリックすると、Reaxys の検索が実行されます。この機能を利用するためには、Reaxys のご契約が必要です。

Search in Reaxys as:

Compound
 Product of a reaction
 Starting material of a reaction

As drawn
 Substructure

Close | OK

reaxys®

1 substance with 11 labels

Structure	Chemical Name	Number of Substances	Number of Labels	Label
	ascidin (20-uracil, 4-ethyl-2-thio-1H-imidazo[4,5-b]pyridin-6-one)	1	11	Structure

InChIKey Search

このリンクをクリックすると、下の中間画面が表示されます。InChIKey をキーとして、Reaxys および Google を検索することができます。完全一致検索、および立体異性体と標識化合物を含む検索が可能です。Reaxys の検索には、Reaxys のご契約が必要です。

注：InChI は、立体構造を含めた化合物の構造を一意的に記述することを目的に国際純正・応用化学連合 (IUPAC) と米国国立標準技術研究所 (NIST) が策定した標準です。

IUPAC International Chemical Identifier

InChIKey: GTOVVTXGQQQEHU-UHFFFAOYSA-N

Search exact structure
in Reaxys
in Google

Search structure, including stereoisomers and labelled compounds
in Reaxys
in Google

🔍 をクリックすると、構造式を拡大表示することができます。

📄 をクリックすると、構造式を各種フォーマットで保存することができます。

Save structure as

Bitmap Image
 Molfile
 SMILES
 InChI String
 InChI Key

Cancel | OK