

# View Record

- 1 แสดงรูปแบบข้อมูลบทความ Full Text เช่น รูปแบบไฟล์ PDF หรือ HTML และ Citation แสดงถึงจำนวนครั้งที่บทความนี้ได้รับการอ้างอิง
- 2 การจัดการข้อมูลบรรณานุกรม หรือ ข้อมูลที่ใช้อ้างอิง เช่น เลือก RIS คลิกที่ More Options คือ การดาวน์โหลดรายการข้อมูลที่ใช้อ้างอิงบทความนี้ไปยังโปรแกรมจัดการบรรณานุกรม เช่น EndNote เป็นต้น

RETURN TO ISSUE | < PREV ARTICLE NEXT >

## Development of a Chemical Structure Comparison Method for Integrated Analysis of Chemical and Genomic Information in the Metabolic Pathways

Masahiro Hattori, Yasushi Okuno, Susumu Goto and Minoru Kanehisa

View Author Information ▾

Cite this: *J. Am. Chem. Soc.* 2003, 125, 39, 11853-11865  
Publication Date: September 6, 2003  
<https://doi.org/10.1021/ja036030u>  
Copyright © 2003 American Chemical Society  
RIGHTS & PERMISSIONS

Article Views: 1943 | Altmetric: - | Citations: 266  
LEARN ABOUT THESE METRICS

Share | Add to | Export

Citation  
Citation and abstract  
Citation and references  
+ More Options

Read Online | PDF (406 KB)

Supporting Info (8) »

SUBJECTS: Chemical structure, Genomics, ▾

### Abstract

Cellular functions result from intricate networks of molecular interactions, which involve not only proteins and nucleic acids but also small chemical compounds. Here we present an efficient algorithm for comparing two chemical structures of compounds, where the chemical structure is treated as a graph consisting of atoms as nodes and covalent bonds as edges. On the basis of the concept of functional groups, 68 atom types (node types) are defined for carbon, nitrogen, oxygen, and other atomic species with different environments, which has enabled detection of biochemically meaningful features. Maximal common subgraphs of two graphs can be found by searching for maximal cliques in the association graph, and we have introduced heuristics to accelerate the clique



# Download Citation

- 1 เลือกรูปแบบประเภทไฟล์ที่ต้องการดาวน์โหลด
- 2 เลือกข้อมูลที่ต้องการดาวน์โหลด
- 3 แสดงข้อมูลรายการบทความที่ต้องการดาวน์โหลด
- 4 คลิกที่ปุ่ม Download Citation(s)

### Download Citation

Download a citation file in RIS format that can be imported by all major citation management software, including BibTex, EndNote, ProCite, RefWorks, and Reference Manager.

Select Citation Manager/File Format:

- RIS (ProCite, Reference Manager)
- BibTex

Include:

- Citation for the content below
- Citation and references for the content below
- Citation and abstract for the content below

Tips for downloading citations

Download Citation(s)

### Content

1. Development of a Chemical Structure Comparison Method for Integrated Analysis of Chemical and Genomic Information in the Metabolic Pathways  
Masahiro Hattori, Yasushi Okuno, Susumu Goto, and Minoru Kanehisa\*  
*Journal of the American Chemical Society* 2003 125 (39), 11853-11865  
DOI: 10.1021/ja036030u

## ● การใช้เครื่องหมายช่วยในการสืบค้น ●

Truncation (\*) ใช้ละตัวอักษรตั้งแต่ศูนย์กลางขึ้นไปสามารถวางในตำแหน่งกลางหรือท้ายคำได้ เช่น colo\*r => colour, color

Quotation marks "..." ใช้ค้นหากลุ่มคำเพื่อให้ได้ตรงตามที่พิมพ์ค้นหา เช่น "artificial intelligence" => artificial intelligence

Parentheses (...) ใช้เพื่อจัดกลุ่มหรือจัดลำดับการสืบค้นก่อนหลัง เช่น (wom?n OR female) AND leader\* AND "educational administration"



บริษัท บุก โปสโมชั่น แอนด์ เซอร์วิส จำกัด

8 ซอยกรุงเทพกรีฑา 8 แยก 8 หัวหมาก บางกะปิ กรุงเทพมหานคร 10240 Tel.(662) 769 3888 Fax.(662) 379 5182 <http://www.book.co.th>



ACS Publications

คู่มือการใช้ฐานข้อมูล

● Most Trusted. ● Most Cited. ● Most Read.

## Browse

- 1 คลิกหน้าปกวารสารตามอักษร A-Z เพื่อดูวารสารตามรายชื่อ

**Browse Publications**  Grid View  List View  Browse by Subject

- 2 คลิก List View จากนั้นเลือก Subjects เพื่อดูวารสารตามสาขา

**Browse Publications**  Grid View  List View  Browse by Subject

CONTENT TYPES

All Types

Journals

Books and Reference

News

Accounts of Chemical Research

ACS Central Science

ACS Chemical Health & Safety

ACS ES&T Water

ACS Omega

ACS Sensors

Analytical Chemistry

Chemical Reviews

Environmental Science & Technology

Environmental Science & Technology Letters

Journal of Agricultural and Food Chemistry

Journal of Chemical Education

แสดงรายชื่อวารสารได้เรียงตามตัวอักษร A-Z และแบ่งแยกตามหัวเรื่องหรือ Subject

SUBJECTS

Analytical

Applied

Biological

Materials Science & Engineering

Organic-Inorganic

Physical

## ACS Journals

เป็นฐานข้อมูลวารสารอิเล็กทรอนิกส์จากสำนักพิมพ์ The American Chemical Society ครอบคลุมสาขาวิชาเคมีและสาขาอื่นๆ ที่เกี่ยวข้อง มีวารสารให้บริการจำนวนไม่น้อยกว่า 45 รายชื่อ ข้อมูลย้อนหลังตั้งแต่ปี 1996 – ปัจจุบันประกอบด้วยรายการทางบรรณานุกรม สารระสังเขป และเอกสารฉบับเต็มรูปแบบ HTML และ PDF

## Keyword Search

- 1 พิมพ์คำค้นหรือคีย์เวิร์ด (Keyword)/DOI (Digital Object Identifier)
- 2 หรือค้นหาบทความจากข้อมูลอ้างอิง เช่น ชื่อวารสาร(Journals) ฉบับที่ (Volume No.) หรือ เลขหน้า (Page Number) เป็นต้น
- 3 เลือกปุ่มแว่นขยายเพื่อทำการสืบค้น

## Search Results

- 1 แสดงจำนวนรายการผลลัพธ์การสืบค้น
- 2 เลือกจำกัดผลการสืบค้น เฉพาะประเภทข้อมูลที่ต้องการ
- 3 แสดงคีย์เวิร์ดที่พบ โดยการเน้นคำด้วยสีเทา
- 4 แสดงเนื้อหาฉบับเต็มรูปแบบ PDF (PDF Full Text) เช่น บทคัดย่อ (Abstract)
- 5 แสดงรูปแบบการจัดเรียงผลลัพธ์จากการสืบค้น
- 6 คลิกที่ Refine Search แสดงตัวเลือกเพิ่มเติมในการกรองผลลัพธ์

## Refine Search

- 1 กรองด้วยการเพิ่มคีย์เวิร์ดในช่องคำค้น หรือ คลิกที่เครื่องหมาย + เพื่อเพิ่มช่องคีย์เวิร์ด หรือ คลิกช่อง Anywhere เพื่อเลือกจำกัดการสืบค้นเฉพาะเขตข้อมูล
- 2 Access Type เลือกประเภทการเข้าถึงเนื้อหา หรือ PDF Full Text
- 3 Publication Date คือ เลือกจำกัดเฉพาะรายการตามเวลาที่ตีพิมพ์เผยแพร่
- 4 เลือก Filter by issue type แสดงเฉพาะรายการผลลัพธ์ที่เป็นบทความเผยแพร่ก่อนตัวเล่มหรือเอกสารต้นฉบับที่ได้รับการยอมรับแล้ว