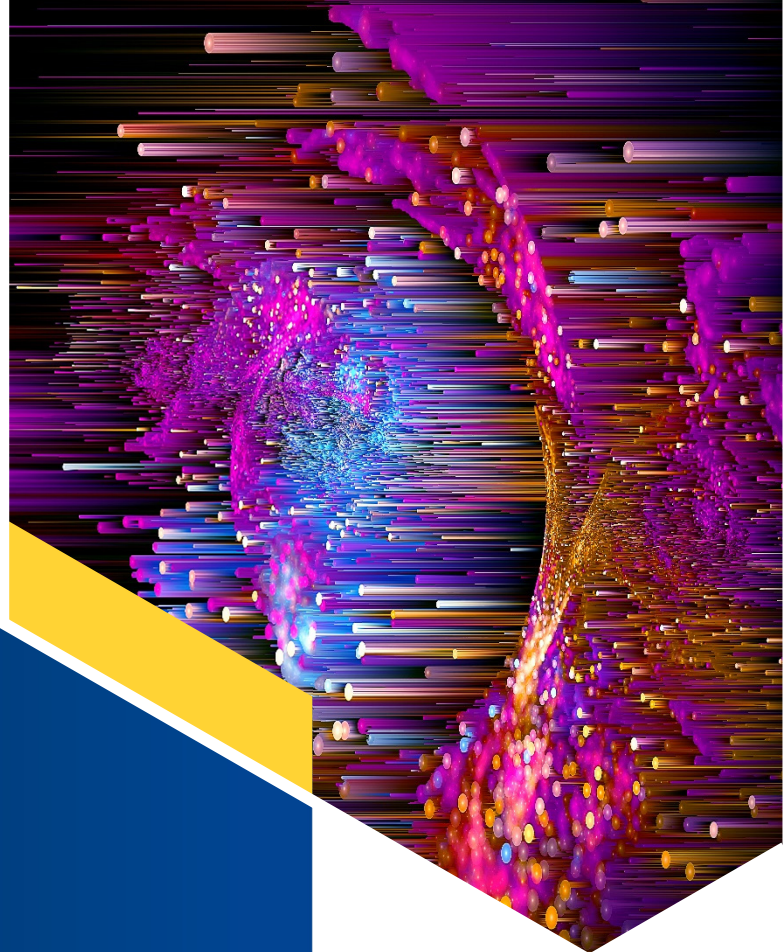


CAS SciFinder®

検索ガイド

2025 年 3 月

<https://scifinder-n.cas.org/>



目次

CAS SciFinder の特長	1
検索初期画面	2
設定 (Settings)	3
All 検索	4
References 検索 (文献情報)	6
原文献の入手 (CAS PatentPak®, Full Text, GetFTR)	10
先行技術文献検索機能 Prior Art Analysis	11
統制語を用いた文献検索 CAS Lexicon	12
文献の相関解析機能 Knowledge Graph	13
Substances 検索 (化学物質情報)	14
Bioactivity Indicators と Target Indicators	18
CAS Life Sciences Data	19
化学構造検索の検索タイプ	20
マルクーシュ構造検索	21
参考 : 配列検索	22
Reactions 検索 (反応情報)	23
CAS Retrosynthesis (逆合成解析ツール)	26
Suppliers 検索 (カタログ情報)	28
回答の保存、アラート	29
回答の共有	31
プロジェクト機能	31
回答のダウンロード	32
検索履歴	32
参考 : CAS SciFinder 収録内容	33

化学情報協会 (JAICI) ホームページ
(ユーザーマニュアルや動画、よくあるご質問など)
<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/>



CAS SciFinder オンライン講習会スケジュール
<https://www.jaici.or.jp/workshop-events/cas-sf-webinar/>



ヘルプデスク (平日 9:00 - 17:00)
TEL 0120-003-462
e-mail support@jaici.or.jp
お問い合わせフォーム <https://www.jaici.or.jp/inquiry/helpdesk/>



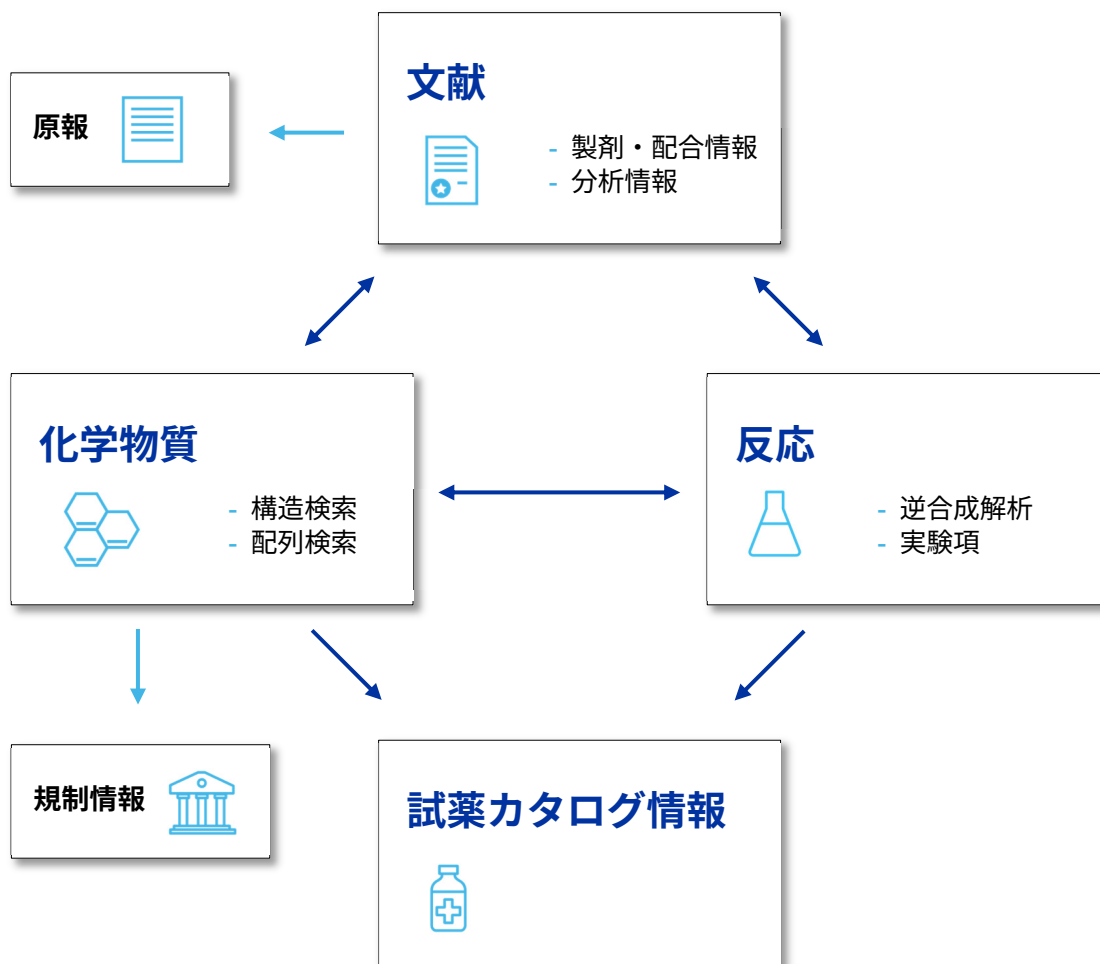
CAS SciFinder の特長

CAS SciFinder は、研究者向けに開発された CAS データベースの情報検索ツールです。

- 文献、化学物質、反応情報などを収録
- すべての CAS 登録番号 (CAS RN®)* を収録した世界最大の物質データベースを収録
* CAS が付与している、化学物質を特定するためのユニークな番号
- 物質科学関連分野の情報収集に強い
- 世界中の企業や大学の理系主要学部 (理学、工学、薬学、農学など) で利用

CAS SciFinder では、文献情報、化学物質情報、反応情報、カタログ情報を検索できます。

- 各情報は CAS RN® を介して相互にリンクしています。



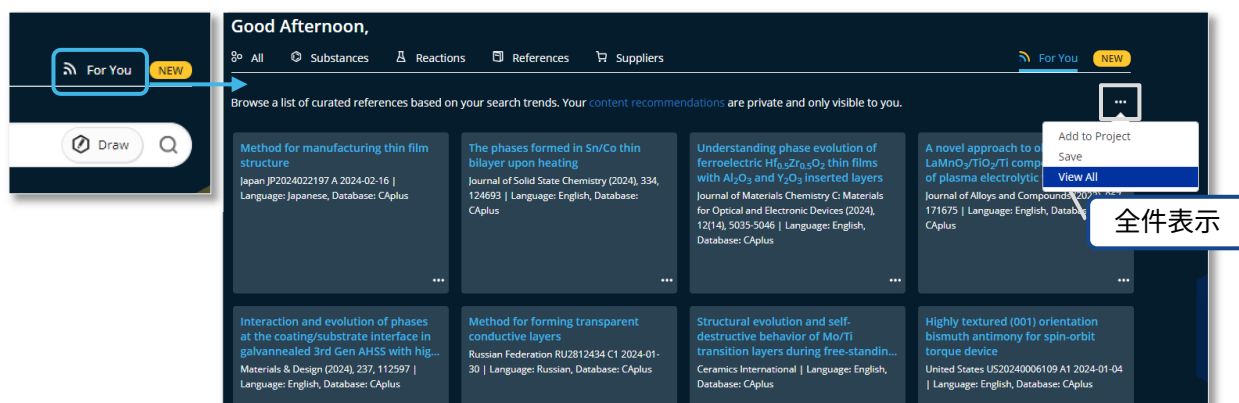
検索初期画面

検索初期画面



*3 For You

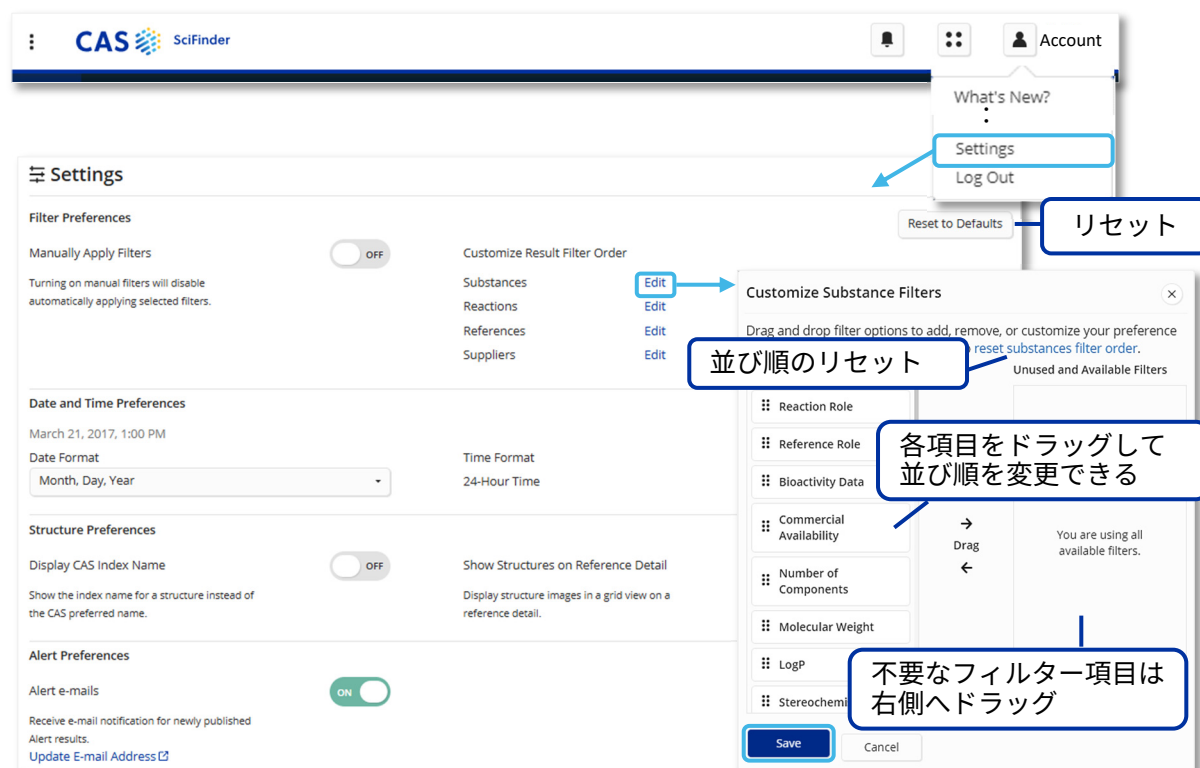
For You は検索履歴に基づき、おすすめ文献を提案する機能です。



* 直近で検索を行っていない場合は、For You タブが表示されません。または、おすすめ文献を特定するための直近の検索情報がない場合は For You タブが表示されません。

設定 (Settings)

設定 (Settings) 画面でフィルター項目などの設定を変更することができます。



設定項目	内容
Manually Apply Filters	ON フィルターにチェックを入れた後、Apply Filters ボタンをクリックして絞り込み検索を実行する OFF フィルターにチェックを入れると自動的に絞り込み検索が実行される
Customize Result Filter Order	表示されるフィルター項目やフィルターの順番をカスタマイズできる。詳細は上記参照
Date Format	CAS SciFinder 内の日時の表示形式を「Month, Day, Year」「Day, Month, Year」「Year, Month, Day」から選択できる
Time Format	ON 24 時間表記 (例 18:00) OFF 12 時間表記 (例 6: 00 PM)
Display CAS Index Name	ON Substances 検索の結果画面に CAS index name (CAS 命名法に基づいた名称) が表示される OFF Substances 検索の結果画面に CAS preferred name (CAS が選択した名称) が表示される
Show Structures on Reference Detail	ON 文献レコードの Substances (化学物質索引) に物質の構造が表示される OFF 文献レコードの Substances (化学物質索引) に物質の構造が表示されない (CAS RN [®] 、化学物質名、Role (物質の文献中での役割を表すコード) のみ表示され、構造はマウスを CAS RN [®] に合わせると表示される)
Alert Preferences	ON アラートの結果をメールで通知する OFF アラートの結果をメールで通知しない

All 検索

All 検索では、化学物質情報、反応情報、文献情報、およびカタログ情報をまとめて検索できます。

The image shows the CAS SciFinder 'All' search interface. At the top, there are tabs for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. The 'All' tab is selected. Below the tabs is a search bar with the text 'caffeine'. To the right of the search bar is a 'Draw' button and a search icon. A callout box points to the search bar with the text '入力ボックス' (Input box). Another callout box points to the search icon with the text '検索実行' (Execute search). Below the search bar, there are three sections: 'Retrosynthetic Analysis', 'Build powerful searches using CAS concepts, chemical classes, and taxonomy.', and 'Query BLAST, CDR, and Motif algorithms for nucleotide and protein based sequences.' A callout box points to the search bar with the text 'キーワードや CAS RN®, 特許番号等を入力' (Enter keywords, CAS RN®, patent numbers, etc.).

The search results page for 'caffeine' is shown below. It has tabs for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. The 'All' tab is selected. The results are organized into four main sections: 'Chemical Information' (化学物質情報), 'Reactions for "caffeine"' (反応情報), 'References for "caffeine"' (文献情報), and 'Suppliers' (カタログ情報). The 'Chemical Information' section shows the chemical structure of caffeine (C₈H₁₀N₄O₂) and its key physical properties. The 'Reactions' section shows a reaction scheme for the synthesis of caffeine. The 'References' section shows a list of references, including 'Caffeine consumption' and 'Caffeine and Adenosine'. A callout box points to the tabs with the text '各回答の表示 (新しいタブで表示可能)' (Display each answer (can be displayed in a new tab)).

Chemical Information (化学物質情報)

58-08-2

CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C

C₈H₁₀N₄O₂
Caffeine

73K 1,816 134 View Spectra

Key Physical Properties

Molecular Weight	Melting Point	Boiling Point (Predicted)
194.19	178 °C (sublm)	416.789±37.00 °C
Density	pKa (Predicted)	Press: 760.00 Torr
1.23 g/cm ³	0.523±0.70	
Temp: 18 °C	Most Basic Temp: 25 °C	

Reactions for "caffeine" (反応情報)

31-031-CAS-20807747

Steps: 1 Yield: 99%

CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C + COS(=O)(=O)OC → CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C

References for "caffeine" (文献情報)

Caffeine consumption

By: Barone, J. J.; Roberts, H. R.
Food and Chemical Toxicology (1996), 34(1), 119-29 | Language: English, Database: CApius and MEDLINE

Caffeine and Adenosine

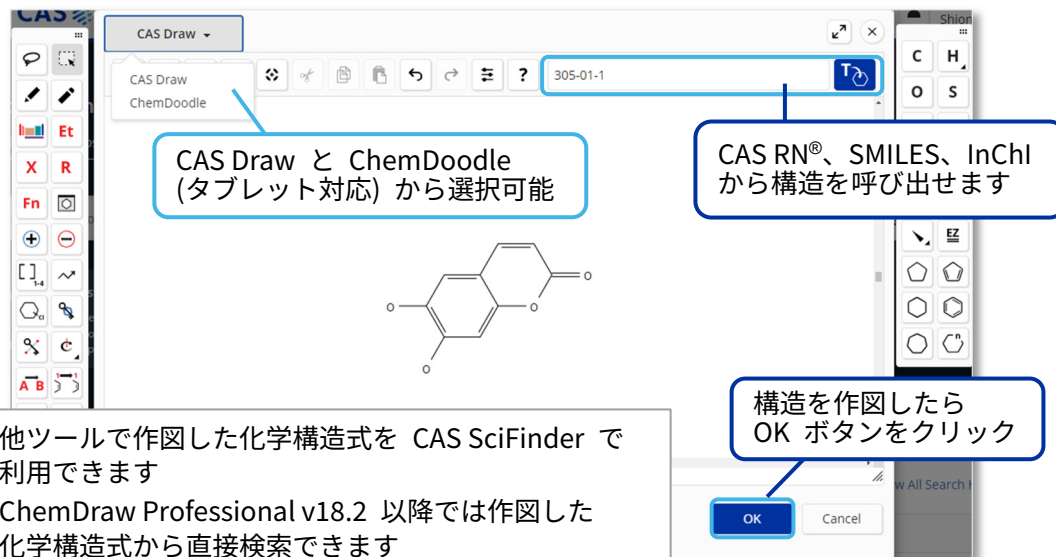
By: Ribeiro, Joaquim A.; Sebastiao, Ana M.
Journal of Alzheimer's Disease (2010), 20(Suppl. 1), S3-S15 | Language: English, Database: CApius and MEDLINE

* カタログ情報の検索結果は上部の Suppliers ボタンをクリックすると表示されます。

化学構造式から検索する場合は、Draw ボタンをクリックして、作図ツールで作図します。



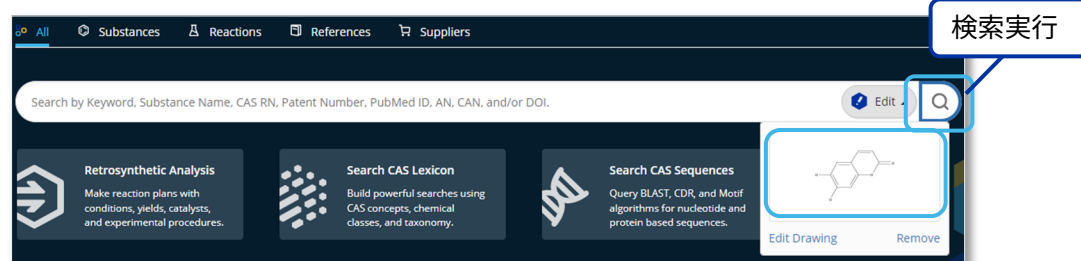
- 作図ツールは、2 種類から選択できます。



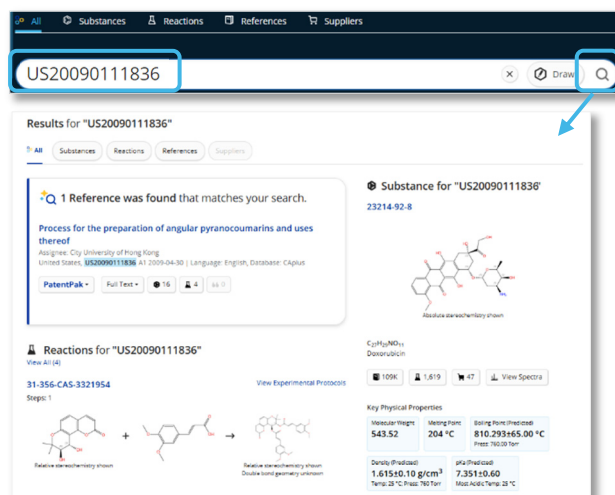
- 他ツールで作図した化学構造式を CAS SciFinder で利用できます
- ChemDraw Professional v18.2 以降では作図した化学構造式から直接検索できます

https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_str.pdf

- 作図した構造が表示された状態で、検索を実行します。



特許番号を検索すると、特許情報のほか、特許中に記載のある化学物質や反応に関する情報が表示されます。



References 検索 (文献情報)

文献情報は、キーワードのほか、著者名、雑誌書誌情報 (雑誌名、巻、号、開始ページなど)、機関名、文献識別子等から検索できます。

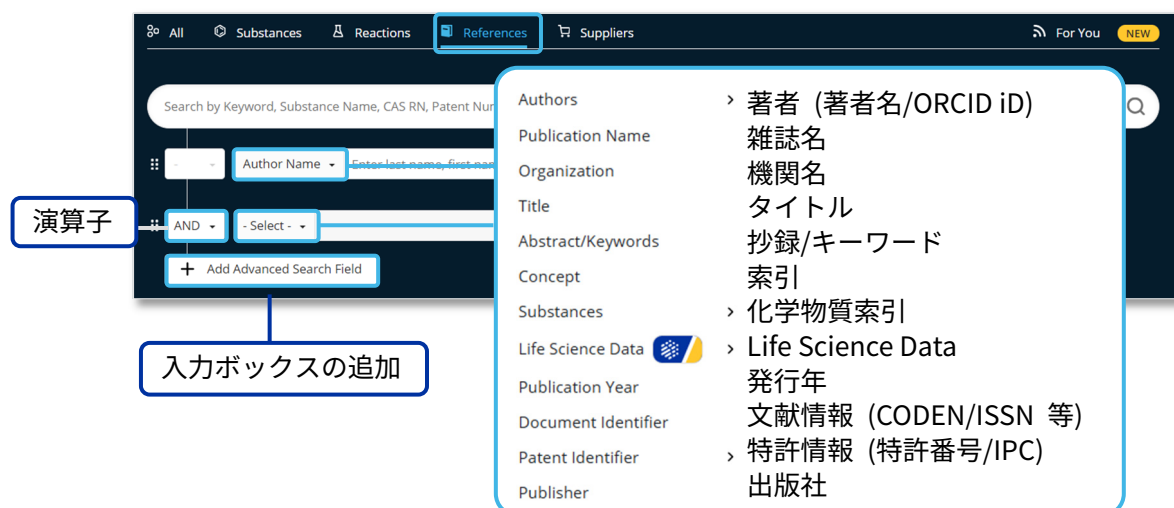
キーワード、文献識別子 (特許番号、DOI、レコード番号など)



- キーワードを組み合わせる場合は、演算子 (AND, OR, NOT) やワイルドカード (*, ?) を利用できます (https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_boolean.pdf 参照)。
- メインの入力ボックスは、タイトル、抄録、索引、文献識別子等を対象に検索します。これ以外の情報や項目を指定して検索する場合は、以下をご参照ください。

Advanced Search (著者名、機関名、雑誌名、発行年等)

- メインボックス下のプルダウンから、著者名、機関名、雑誌名等の検索ができます。
- Add Advanced Search Fields をクリックすると、下に入力ボックスが追加されます。著者名、機関名、雑誌名等、複数の条件をまとめた検索ができます。
- メインの入力ボックスと、Advanced Search Fields を組み合わせた検索も可能です。
- 複数の条件を組み合わせて検索する場合には演算子 (AND、OR、NOT) を指定します。



参考 : IPC (国際特許分類) の入力

- メイングループを 4 桁に桁合わせします。
- アスタリスク (*) を利用して前方一致検索ができます。
(例 : C09D11/00 は C09D*, C09D0011*, C09D0011/00* の検索式でヒットします)

回答は関連度 (Relevance) 順に表示されます。

Sort を使って回答の並び順を変更できます。

左側のフィルターを使って、回答を絞り込むことができます。

フィルター
Filter by: 限定条件
Exclude: 除く条件

キーワード

資料種類

言語

発行年

所蔵雑誌リスト
著者名
所属機関名
雑誌名
主題 (統制語)
CA セクション
分析・配合情報
Life Science Data
配合の目的
データベース

絞り込みの内容

回答の並び替え

キーワード: vaccine

資料種類: 雑誌、特許

原文献へのリンク (P.10)

引用・被引用マップの表示

フィルター結果のダウンロード

任意のページの表示

References search for "COVID-19"

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Filtering: Search Within Results: vaccine X Document Type: 2 Selected X

72,283 Results

1

COVID-19 and neuromuscular disorders
By: Guidon, Amanda C.; Amato, Anthony A.
Neurology (2020), 94(22), 959-969 | Language: English, Database: CPlus

2019 (COVID-19) pandemic has potential to di... s. In a short period of time, it has already caused... ly have lasting effects on the field. This article reviews (1) potential neuromuscular complications of COVID-19-related risk for patients with preexisting neuromuscular disease. (2) evidence for management of immunosuppressive and immunomodulatory therapies. (4) evidence for

View More

Substances (2) Reactions (0) Citing (189) Citation Map

Sort: Relevance View: Partial Abstract

Relevance
Times Cited
Accession Number: Ascending
Accession Number: Descending
Publication Date: Newest
Publication Date: Oldest

関連情報へのリンク

An overview of COVID-19
By: Shi, Yu; Wang, Gang; Cai, Xiao-peng; Deng, Jing-wen; Zheng, Lin; Zhu, Hai-hong; Zheng, Min; Yang, Bo; Chen, Zhi
Journal of Zhejiang University, Science, B (2020), 21(5), 343-360 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE

A review. Abstract: Pneumonia caused by severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) infection emerged in Wuhan City, Hubei Province, China in Dec. 2019. By Feb. 11, 2020, the World Health Organization has declared the disease as coronavirus disease 2019 (COVID-19). COVID-19 is often with pulmonary involvement and is highly contagious. It is highly susceptible to infection. With the rapid spread of the virus, the disease has become a global health threat.

View More

Full Text

Substances (0) Reactions (0) Citing (245) Citation Map

3

The cytokine storm and COVID-19
By: Hu, Biying; Huang, Shaoying; Yin, Lianghong
Journal of Medical Virology (2021), 93(1), 250-256 | Language: English

A review. Coronavirus disease 2019 (COVID-19), which began in Wuhan, China, has spread to many countries and poses a serious threat to public health. More than 4 million cases of COVID-19 have been confirmed as of 11 March 2020. The disease is caused by the novel coronavirus SARS-CoV-2, which primarily spreads through respiratory droplets and contact. A cytokine storm is associated with COVID-19 severity and is also a common feature of the disease.

View More

Full Text

Substances (0) Reactions (0) Citing (994) Citation Map

4

Covid-19 - navigating the uncharted
By: Fauci, Anthony S.; Lane, H. Clifford; Redfield, Robert R.
New England Journal of Medicine (2020), 382(13), 1268-1269 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE

Achieving a better understanding of the pathogenesis of COVID-19 will be invaluable in navigating our responses in this uncharted area. Furthermore, genomic studies could delineate host factors that predispose persons to acquisition of infection and disease progression.

View More

Full Text

Substances (0) Reactions (0) Citing (994) Citation Map

Download filter data from this result set.

Prev 1 2 3 4 5 ... 723 Next Go to Page:

タイトルをクリックすると、文献の詳細情報が表示されます。

雑誌レコード

被引用文献検索

抄録 (要旨)

利用可能なコンテンツのリンク

原文献へのリンク(P10)

書誌情報

類似文献

類似文献の検索 (最大回答数 500 件)

主題索引 (統制語)

物質索引

分析情報

引用情報

詳細の表示

引用文献検索

CAS のアナリストが原報の全文を読み込み、文献の趣旨や強調点を基に下記を収録

- キーワード (統制語)
- 重要な化学物質
- 製剤・配合情報
- 分析情報

医薬系の雑誌論文には、PubMed の索引 (統制語) も収録

CAS による索引 (CAS References CAS Patents 由来)

PubMed の索引 (MEDLINE 由来)

* 引用・被引用文献検索の詳細は https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_citation.pdf 参照

* CAS が収集した化学物質や生体分子の分析手法に関する情報の詳細は下記を参照
<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/cas-analytical-methods/>

特許レコード

Methods and compositions comprising ATM kinase inhibitors in combination with other agents for the treatment of viral infections such coronavirus infection

67 15 0 Citation Map

In this Reference By: Betz, Ulrich

The present invention encompasses an ATM kinase inhibitor (e.g. 8-(1,3-dimethyl-1H-pyrazol-4-yl)-1-(Ra)-(3-fluoro-5-methoxypyridin-4-yl)-7-methoxy-3-methyl-1,3-dihydroimidazo[4,5-c]quinolin-2-one) and methods of preparation and use for the treatment of coronavirus infections, including COVID-19, alone or in combination with one or more addnl. therapeutic agents. In another aspect the addnl. therapeutic agent is selected from anti-inflammatories, antibiotics, anti-coagulants, antiparasitic agent, antiplatelet agents, angiotensin converting enzyme (ACE) inhibitors, angiotensin II receptor blockers, beta-blockers, statins and other combination cholesterol lowering agents, specific cytokine inhibitors, complement inhibitors, antibodies, anti-VEGF treatments, JAK inhibitors, immunomodulators, glutamate receptor antagonists, diuretics, muscle relaxants, and antiviral medications.

Keywords: antiviral ATM kinase inhibitor or viral infection coronavirus COVID19 treatment

Prior Art Analysis (P.11)

PatentPak Viewer Get Prior Art Analysis Full Text View in CAS Formulus

CAS PatentPak® へのリンク (P.10)

特許ファミリー

Publication Information View More

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2021254982	English	A1	PDF PDF+ Viewer	2021-12-23	WO2021-EP66020	2021-06-15
CA3184498	English	A1	PDF	2021-12-23	CA2021-3184498	2021-06-15

Priority Application

Priority Application Number	Publication Date
EP2020-180884	2021-06-15

Patent Family の 1 行目の公報に基づいて抄録と索引を作成

国際特許分類 (IPC)

IPC Data

Patent	Class	Patent Family Classification Codes
WO2021254982	IPC1	A61K 0031/4745; A61K 0045/06; A61P 0031/14
	IPC1	A61K 0031/4745; A61K 0045/06; A61P 0031/14
	IPC1	A61K 0031/4745; A61K 0045/06; A61P 0031/14

主題 (統制語) 索引

CAS Concepts

Chemical Substances

Substance	Chemical Structure	Chemical Formula	Role
20091-04-5		$C_{19}H_{14}BrFN_4O_3$	Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reagent, Preparation
2020091-03-4		$C_{17}H_{12}BrFN_4O_3$	Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reagent, Preparation
2020091-02-3		$C_{16}H_{14}BrFN_4O_2$	Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reagent, Preparation
2020091-01-2		$C_{16}H_{12}BrFN_4O_4$	Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reagent, Preparation

物質記載ページへのリンク (CAS PatentPak)

Reactions

31-614-CAS-31082795

Steps: 1 Yield: 99%

1.1 Reagents: Hydrogen
Catalysts: Nickel
Solvents: Methanol; 30 min, rt

Formulations

Formulation Title

Pharmaceutical Composition for Treating Coronavirus Infection: Anticoronaviral Agents

View All Formulations

詳細の表示

*CAS が収集した製剤・配合情報情報の詳細は下記を参照

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/cas-formulus/>

先行技術文献検索機能 Prior Art Analysis

Prior Art Analysis は、対象の特許について CAS SciFinder が自動的に「先行技術文献」を検索する機能です。

特許レコードの詳細表示画面で「Get Prior Art Analysis」ボタンをクリックし、メールアドレスを入力後 Submit をクリックします。

特許レコードの詳細画面

先行技術文献検索
Get Prior Art Analysis

PatentPak Viewer Get Prior Art Analysis Full Text

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2008070658	English	A1	PDF PDF+ Viewer	2008-06-12	WO2007-US86375	2007-12-04
AU2007329453	English	A1	PDF	2008-06-12	AU2007-329453	2007-12-04

検索初期画面下の Recent Search History または History ページに、Prior Art Analysis の履歴が表示されます。「View Results」をクリックすると回答が表示されます。

Recent Search History 直近の検索履歴

View All Search History 検索履歴

View Results

Complete

References from Prior Art Analysis for "Process for preparing oxycodone having reduced levels of 14-hyd..."

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Filter Behavior Filter by Exclude

Search Within Results

Document Type

- Journal (94)
- Patent (90)
- Clinical Trial (9)

Language

- English (151)
- Undetermined (13)
- German (6)
- Japanese (4)
- French (2)

View All

Publication Year

184 Results

Sort: Relevance View: Partial Abstract

1

Reducing the amount of 14-hydroxycodone in oxycodone hydrochloride compositions by hydrogenation

Assignee: Euro-Celtique S.A.
United States, US20050222188 A1 2005-10-06 | Language: English, Database: CAlplus

In certain embodiments the invention is directed to a process for preparing oxycodone having less than 25 ppm of 14-hydroxycodone by hydrogenation. For example, oxycodone was mixed with Pd/C catalyst, and isopropanol/water 182.2 g, and heated to 100°C for 18 hours to yield 14-hydroxycodone to 8 ppm.

PatentPak Full Text Substances (15)

2

A method of preparation of oxycodone

Assignee: Zentiva, A.S.
World Intellectual Property Organization, WO2006019364 A1 2006-02-23 | Language: English, Database: CAlplus

A method of preparation of oxycodone (I) was disclosed and comprised reacting thebaine II (R = Me) or a thebaine derivative, such as II (R = alkyl, benzyl, alkylaryl) with hydrogen peroxide or peroxyacids in the presence of oxalic acid in admixture with acetic or formic acid to form a crystalline precipitate of 14-hydroxycodone oxalate salt, conversion of the oxalate to 14-hydroxycodone free base, and finally, catalytic hydrogenation of the free base to yield I. Oxycodone was further transformed to its hydrochloride salt, which is used as the active ingredient in analgesic pharmaceutical...

View More

PatentPak Full Text Substances (9) Reactions (4) Citing (5) Citation Map

検索結果には、特許と非特許の情報が含まれます。結果の Relevance のソートは、解析に基づくスコア順に並んでいる

Prior Art Analysis を用いた先行技術文献調査

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/documents/reference/>

統制語を用いた文献検索 CAS Lexicon

CAS Lexicon は、CAS が収集した文献情報由来の統制語シソーラスです。統制語やその同義語、上位語、下位語の確認や、調べた統制語を利用して文献を検索できます。

統制語とは、一つの概念を一つの語で表現するようデータベース中で統制された語で、文献レコードの Concepts に収録されています。

CAS Lexicon を利用すると、主題（統制語）を対象とした的確な検索ができます。

The image shows a sequence of three screenshots from the CAS Lexicon web application, illustrating the search process for the term "Ceramic capacitors".

- Top Screenshot:** The main navigation bar includes "All", "Substances", "Reactions", "References", and "Suppliers". The search bar prompts the user to "Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI". Below the search bar, there are three main search categories: "Retrosynthetic Analysis", "Search CAS Lexicon" (highlighted with a blue box and an arrow pointing down), and "Search CAS Sequences".
- Middle Screenshot:** The "Search CAS Lexicon" page shows the input field containing "Ceramic capacitors" and a "Search Concept" button. A message states "Multiple preferred concepts found; please select one to continue." Below this, a list of concepts is shown: "Ceramic capacitors" (highlighted with a blue box), "Ceramic capacitors, semiconductive ceramic capacitors", and "Multilayer ceramic capacitors". A blue arrow points from the highlighted concept to the next screenshot. A callout box on the right explains: "関連する統制語が複数存在する場合は候補が表示されるので、適切な統制語を選択する" (When multiple related controlled terms exist, candidates are displayed, so select the appropriate controlled term).
- Bottom Screenshot:** This screenshot shows the detailed search results for "Ceramic capacitors". It includes sections for "Preferred Concept" (with "Ceramic capacitors" selected), "Broader Concepts (2)" (Capacitors, Ceramics), "Narrower Concepts (2)" (Ceramic capacitors, semiconductive ceramic capacitors; Multilayer ceramic capacitors), and "Related Concepts (1)" (Barium titanate). Callouts identify these as "統制語" (Controlled Term), "同義語" (Synonym), "上位語" (Broader Term), "下位語" (Narrower Term), and "関連語" (Related Term). A callout box on the left states: "複数の統制語を検索式に追加する場合演算子を選択可能" (When adding multiple controlled terms to the search query, operators can be selected). A callout box on the right states: "選択した統制語の検索式 (1,000 タームまで)" (Search query for the selected controlled term (up to 1,000 terms)). At the bottom, there are buttons for "AND", "OR", "NOT", "Add to Query", "Clear Query", and "Search". A callout box on the right explains: "選択した統制語を検索式に追加" (Add the selected controlled term to the search query) and "検索実行" (Execute search).

(CAS Lexicon) 統制語を用いた文献検索

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/documents/reference/>

文献の相関解析機能 Knowledge Graph

Knowledge Graph は、検索で得られた文献情報について、著者名、所属機関名、キーワードや索引物質の相関をビジュアル化する機能です。

References 検索結果の一覧画面にある「Knowledge Graph」 ボタンをクリックするとグラフが作成されます。一度に解析できる文献は 150 件までです。

The image displays the CAS SciFinder Knowledge Graph interface. At the top, the search results for "References search for 2 Advanced Fields" are shown, with filters for "Organization: University of Oxford" and "Concept: COVID-19". A list of results is visible, including a paper titled "Immune responses and clinical outcomes after COVID-19 vaccination in patients with liver disease and liver transplant recipients".

Below the search results, a detailed Knowledge Graph is visualized. The graph shows nodes (circles) representing authors, concepts, substances, and organizations, connected by edges (lines) representing relationships. Annotations explain the graph components:

- 再解析用のフィルター** (Filter for re-analysis): A sidebar on the left allows filtering by document type, language, publication year, available at institution, author, organization, publication name, and concept. It also includes a "Filter Content Report" and a "Download filter data from this result set" button.
- 解析の観点** (Analysis perspective): A legend on the right lists the categories used in the graph: 著者名 (Author name), Concepts, 索引物質 (Index substance), and 所属機関名 (Institution name).
- エッジ (線): ノード間の繋がり** (Edge (line): Connection between nodes): A label pointing to the lines connecting the nodes in the graph.
- ノード (円): 件数が多いほど、ノードは大きくなる (文献のノード (水色) の大きさは一定)** (Node (circle): The more items, the larger the node. (The size of the literature node (light blue) is constant)): A label explaining that the size of the nodes represents the number of items, with a note that literature nodes are a constant size.
- ノードをクリックして概要を確認** (Click on the node to check the summary): A label pointing to a node, indicating that clicking it provides more details.

The graph visualization includes a sidebar on the left with a "Filter Behavior" section (Filter by, Exclude) and a "Search Within Results" section (Document Type: Journal (13), Review (1), Clinical Trial (2)). The main graph area shows a complex network of nodes and edges, with a search bar at the top right labeled "Search the graph...".

Substances 検索 (化学物質情報)

Substances では、化学物質名、CAS RN[®]、化学構造式、分子式等から化学物質を検索できます。

化学物質名、CAS RN[®]



- 複数の CAS RN[®] や化学物質名を使って検索する場合は、CAS RN[®] や化学物質名を半角スペースで区切って入力します。
- 化学物質名検索では、Notes (索引者による補足情報) も検索対象となります。

化学構造式

- Search Patent Markush にチェックを入れて検索すると、特許中のマルクーシュ構造 (クレームに記載されている化学構造の一般式) を検索できます。

分子式、物性値、スペクトルピーク値

- メインボックス下のプルダウンメニューから選んで検索します。



回答を絞り込むには、左側のフィルターを使用します。

- 構造検索では、目的の検索タイプの回答を Structure Match から選択します。
(検索タイプの違いについては P.20 を参照)

The screenshot shows the CAS SciFinder search results page for a drawn structure. The interface is annotated with several callouts:

- 完全一致検索** (Exact Search): Points to the 'Structure Match' section.
- 部分構造検索** (Partial Structure Search): Points to the 'Substructure' option under Structure Match.
- 類似性構造検索** (Similarity Structure Search): Points to the 'Similarity' option under Structure Match.
- フィルター** (Filter): A box containing 'Filter by: 限定条件' (Filter by: Limiting conditions) and 'Exclude: 除く条件' (Exclude: Exclude conditions).
- 反応中の役割** (Role in reaction): Points to the 'Reaction Role' filter section.
- 文献中の役割** (Role in literature): Points to the 'Reference Role' filter section.
- カタログ情報の有無** (Presence/absence of catalog information): Points to the 'Commercial Availability' filter section.
- 立体化学** (Stereochemistry): Points to the 'Stereochemistry' filter section.
- 官能基** (Functional group): Points to the 'Functional Group' filter section.
- 芳香環** (Aromatic ring): Points to the 'Aromatic Rings' filter section.
- クラス識別子** (Class identifier): Points to the 'Substance Class' filter section.
- ポリマー分類用語** (Polymer classification terminology): Points to the 'Polymer Class' filter section.
- 同位体元素の有無** (Presence/absence of isotopic elements): Points to the 'Isotopes' filter section.
- 実測物性値** (Measured physical properties): Points to the 'Experimental Property' filter section.
- 実測スペクトル** (Measured spectrum): Points to the 'Experimental Spectrum' filter section.
- P.18**: Points to the 'GHS Hazard Statements' filter section.
- P.18**: Points to the 'Bioactivity Indicator' filter section.
- 規制されている国/地域** (Regulated countries/regions): Points to the 'Regulatory Data by Country/Region' filter section.
- 規制情報のリスト** (List of regulatory information): Points to the 'Regulatory Data by List' filter section.
- 文献情報の有無** (Presence/absence of literature information): Points to the 'Reference Availability' filter section.
- 関連情報へのリンク** (Link to related information): Points to the 'References', 'Reactions', and 'Suppliers' links for a specific result.
- 絞込みの内容** (Content of narrowing down): Points to the 'Filtering' section showing 'Number of Components: 1'.
- 構造検索結果の場合に選択** (Selection in the case of structure search results): Points to the 'Structure Match' section.
- 構造の類似性による特許解析機能 (Chemscap Analysis)** (Patent analysis function based on structural similarity (Chemscap Analysis)): Points to the 'Chemscap Analysis' section, which includes a 3D bar chart visualization and a link to https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_chemscap.pdf.
- さらに構造で絞り込める** (Can be further narrowed down by structure): Points to the 'Draw' button in the 'Filter Behavior' section.
- 試薬として販売されている** (Available for sale as reagents): Points to the 'Supplier' link for a specific result.
- フィルター結果のダウンロード** (Download filter results): Points to the 'Download filter data from this result set' button.
- 任意のページの表示** (Display of any page): Points to the 'Go to Page:' input field at the bottom.

回答一覧画面で CAS RN® をクリックすると、詳細な化学物質情報が表示されます。

Substances search for drawn structure

References - Reactions - Suppliers

Structure Match: As Drawn (35), Substructure (9,001), Similarity (22K), Analyze Structure Precision

Filtering: Commercial Availability: Available X Clear All Filters

3,275 Results

Sort: Relevance View: Partial

1 305-01-1 2 2088208-91-5 3 2086337-11-1

Chemscape Analysis

CAS Registry Number: 305-01-1 CAS RN®

3,754 263 111 View in CAS BioFinder

関連情報へのリンク

分子式

$C_9H_6O_4$

2H-1-Benzopyran-2-one, 6,7-dihydroxy- (9CI, ACI)

構造図

基本物性値

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	178.14	-
Melting Point (Experimental)	276 °C	-
Boiling Point (Predicted)	469.693±45.00 °C	Press: 760.00 Torr
Density (Experimental)	1.56 g/cm³	-
pKa (Predicted)	7.740±0.20	Most Acidic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

Other Names and Identifiers

Chemical Name

Experimental Properties

Experimental Spectra

View Proton NMR Spectrum (Image Available)

View Proton NMR Spectrum (Image Available)

Sources

スペクトルの出典

(1) Sigma-Aldrich Co. LLC. (Spectral Data were obtained from John Wiley & Sons, Inc.)

(2) Copyright Bio-Rad Laboratories. All Rights Reserved.

Proton NMR Spectrum for 305-01-1

305-01-1

$C_9H_6O_4$

CAS Name Esculetin

Conditions

Working Frequency 300 MHz

Solvent Chloroform-d (85.5-49.4) DMSO-d₆ (239.8-27.1)

Spectrum Summary

Spectrum ID SLSR-004261

Source Sigma-Aldrich Co. LLC. (Spectral Data were obtained from John Wiley & Sons, Inc.)

Pharmacological Data

ADME

Toxicity

P.19 参照

Predicted Properties

Predicted Spectra

Bioactivity Indicators

Target Indicators

P.18 参照

Regulatory Information

GHS Hazard Statements

Additional Details

既存化学物質リスト情報*

危険有害性情報コード

* 詳細は https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_regulatory.pdf 参照

物質に対する関連情報（文献情報、反応情報、カタログ情報）を取得するには、References、Reactions、Suppliers ボタンをクリックします。

- すべての化学物質に関する情報を取得する場合には、All Results をクリックします。
- 一部の化学物質に関する情報を取得する場合には、回答のチェックボックスにチェックを入れて Selected Results をクリックします。

文献情報 反応情報 カタログ情報

Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Substances search for drawn structure

References from Substances

Get References for Substances

All Results Selected Results

全件対象 選択した回答のみ

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool. Learn more about Chemscape.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Substance Role

Biological Study (6,353)

Uses (2,404)

Analytical Study (1,573)

Preparation (1,359)

Properties (821)

View All

92-61-5

C₁₀H₈O₄

Scopoletin

6,111 References 431 Reactions 112 Suppliers

776-86-3

C₁₀H₈O₄

Isoscoopoletin

520 References 43 Reactions 69 Suppliers

2733215-24-0

C₁₀H₅D₃O₄

0 References 0 Reactions 1 Supplier

目的の化学物質に関する文献情報

選択した化学物質の文献中の役割で限定できる

一部の化学物質を対象とする場合

化学物質ごとの情報を得る場合

Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Reactions from Substances

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Substance Role

Product (223)

Reactant (439)

Reagent (29)

Catalyst (15)

Yield

90-100% (74)

80-89% (64)

70-79% (62)

50-69% (91)

30-49% (44)

Scheme 1 (2 Reactions)

Absolute stereochemistry shown

Suppliers (93)

31-614-CAS-26278135

Steps: 1 Yield: 100%

1.1 Catalysts: Glucosidase, B

Solvents: Water; 12 h, pH 6.0, 50 °C

1.2 Reagents: Methanol

目的の化学物質に関する反応情報

Suppliers from Substances

Filter Behavior

Filter by Exclude

Preferred Suppliers

Preferred (4)

No Preference (287)

Supplier

LGC Product List (10)

KANTO CHEMICAL

Substance

92-61-5

Scopoletin

Purity

Quantity Information

Product Information

50 mg, JPY 12760

Availability

Synthesis on demand

Japan

Ordering

Order Number: 30290-1A

目的の化学物質に関するカタログ情報

Bioactivity Indicators と Target Indicators

物質の詳細情報に Bioactivity Indicators と Target Indicators が収録されています。

- Bioactivity Indicators は、その化学物質が持つ可能性のある生物活性を示します。
例：抗がん剤、血小板凝集阻害剤など
- Target Indicators は、その化学物質が作用する可能性のある受容体や酵素を示します。
例： α -アミラーゼ、ドーパミン受容体など
- 各 Indicator 中のリンクをクリックすると、生物活性や受容体・酵素などに関して記載されている可能性のある文献情報を取得できます。

CAS Registry Number: 305-01-1

3,747 263 110 View in CAS BioFinder

物質の詳細情報

$C_9H_6O_4$
2H-1-Benzopyran-2-one, 6,7-dihydroxy- (9CI, ACI)

Bioactivity Indicators

- Anti-infective agents
- Antibacterial agents (51)
- Anti-inflammatory agents (135)
- Antitumor agents (162)

Target Indicators

- Apoptosis-regulating proteins
 - Bax proteins (36)
 - Bcl-2 proteins (38)
- Bacterial proteins
 - Lipopolysaccharides (14)
- Cell cycle regulatory proteins
 - Cyclin D1 (14)
- Chromoproteins
 - Cytochrome c (24)
- Coiled-coil proteins
 - Transcription factor STAT3 (15)
- Secreted proteins
 - Soluble tumor necrosis factors (19)
- Signaling proteins
 - Caspase-9 (23)
 - Epidermal growth factor receptors (13)
- Transport proteins
 - Cytochrome c (24)
- Tumor antigens
 - p53 (protein) (21)
- Tumor suppressor proteins
 - p53 (protein) (21)

References from Bioactivity Indicator

Filter Behavior: Filter by Exclude

Search Within Results

Document Type

- Journal (105)
- Patent (30)
- Review (12)
- Clinical Trial (1)

Language

- English (112)
- Chinese (13)

135 Results

1

Anti-inflammatory agents に関して記載されている可能性のある文献

Intestinal anti-inflammatory activity of esculetin and 4-methylsculetin in the trinitrobenzenesulfonic acid model of rat colitis

By: Wiraicenis, Aline; Seto, Leonardo N.; Di Sassi, Luiz C. Chemico-Biological Interactions (2010), 186(2), 211-218 | Language: English, Database: CAPIUS and MEDLINE

Coumarins comprise a broad class of phenolic compounds that influences the formation and scavenging of reactive oxygen species and the processes involving free radical-mediated injury. In light of the antioxidant and anti-inflammatory properties of esculetin and 4-methylsculetin, the aim of this study was to investigate the effects of these compounds in an experimental model of rat colitis induced by trinitrobenzenesulfonic acid (TNBS). For this purpose, macroscopic (diarrhoea, extension of lesion, colonic weight/length ratio, and damage score) and biochemical (myeloperoxidase, IL-1, IL-6, IL-8, IL-10, IL-12, IL-13, IL-17, IL-18, IL-22, IL-23, IL-24, IL-25, IL-26, IL-27, IL-28, IL-29, IL-30, IL-31, IL-32, IL-33, IL-34, IL-35, IL-36, IL-37, IL-38, IL-39, IL-40, IL-41, IL-42, IL-43, IL-44, IL-45, IL-46, IL-47, IL-48, IL-49, IL-50, IL-51, IL-52, IL-53, IL-54, IL-55, IL-56, IL-57, IL-58, IL-59, IL-60, IL-61, IL-62, IL-63, IL-64, IL-65, IL-66, IL-67, IL-68, IL-69, IL-70, IL-71, IL-72, IL-73, IL-74, IL-75, IL-76, IL-77, IL-78, IL-79, IL-80, IL-81, IL-82, IL-83, IL-84, IL-85, IL-86, IL-87, IL-88, IL-89, IL-90, IL-91, IL-92, IL-93, IL-94, IL-95, IL-96, IL-97, IL-98, IL-99, IL-100, IL-101, IL-102, IL-103, IL-104, IL-105, IL-106, IL-107, IL-108, IL-109, IL-110, IL-111, IL-112, IL-113, IL-114, IL-115, IL-116, IL-117, IL-118, IL-119, IL-120, IL-121, IL-122, IL-123, IL-124, IL-125, IL-126, IL-127, IL-128, IL-129, IL-130, IL-131, IL-132, IL-133, IL-134, IL-135, IL-136, IL-137, IL-138, IL-139, IL-140, IL-141, IL-142, IL-143, IL-144, IL-145, IL-146, IL-147, IL-148, IL-149, IL-150, IL-151, IL-152, IL-153, IL-154, IL-155, IL-156, IL-157, IL-158, IL-159, IL-160, IL-161, IL-162, IL-163, IL-164, IL-165, IL-166, IL-167, IL-168, IL-169, IL-170, IL-171, IL-172, IL-173, IL-174, IL-175, IL-176, IL-177, IL-178, IL-179, IL-180, IL-181, IL-182, IL-183, IL-184, IL-185, IL-186, IL-187, IL-188, IL-189, IL-190, IL-191, IL-192, IL-193, IL-194, IL-195, IL-196, IL-197, IL-198, IL-199, IL-200, IL-201, IL-202, IL-203, IL-204, IL-205, IL-206, IL-207, IL-208, IL-209, IL-210, IL-211, IL-212, IL-213, IL-214, IL-215, IL-216, IL-217, IL-218, IL-219, IL-220, IL-221, IL-222, IL-223, IL-224, IL-225, IL-226, IL-227, IL-228, IL-229, IL-230, IL-231, IL-232, IL-233, IL-234, IL-235, IL-236, IL-237, IL-238, IL-239, IL-240, IL-241, IL-242, IL-243, IL-244, IL-245, IL-246, IL-247, IL-248, IL-249, IL-250, IL-251, IL-252, IL-253, IL-254, IL-255, IL-256, IL-257, IL-258, IL-259, IL-260, IL-261, IL-262, IL-263, IL-264, IL-265, IL-266, IL-267, IL-268, IL-269, IL-270, IL-271, IL-272, IL-273, IL-274, IL-275, IL-276, IL-277, IL-278, IL-279, IL-280, IL-281, IL-282, IL-283, IL-284, IL-285, IL-286, IL-287, IL-288, IL-289, IL-290, IL-291, IL-292, IL-293, IL-294, IL-295, IL-296, IL-297, IL-298, IL-299, IL-300, IL-301, IL-302, IL-303, IL-304, IL-305, IL-306, IL-307, IL-308, IL-309, IL-310, IL-311, IL-312, IL-313, IL-314, IL-315, IL-316, IL-317, IL-318, IL-319, IL-320, IL-321, IL-322, IL-323, IL-324, IL-325, IL-326, IL-327, IL-328, IL-329, IL-330, IL-331, IL-332, IL-333, IL-334, IL-335, IL-336, IL-337, IL-338, IL-339, IL-340, IL-341, IL-342, IL-343, IL-344, IL-345, IL-346, IL-347, IL-348, IL-349, IL-350, IL-351, IL-352, IL-353, IL-354, IL-355, IL-356, IL-357, IL-358, IL-359, IL-360, IL-361, IL-362, IL-363, IL-364, IL-365, IL-366, IL-367, IL-368, IL-369, IL-370, IL-371, IL-372, IL-373, IL-374, IL-375, IL-376, IL-377, IL-378, IL-379, IL-380, IL-381, IL-382, IL-383, IL-384, IL-385, IL-386, IL-387, IL-388, IL-389, IL-390, IL-391, IL-392, IL-393, IL-394, IL-395, IL-396, IL-397, IL-398, IL-399, IL-400, IL-401, IL-402, IL-403, IL-404, IL-405, IL-406, IL-407, IL-408, IL-409, IL-410, IL-411, IL-412, IL-413, IL-414, IL-415, IL-416, IL-417, IL-418, IL-419, IL-420, IL-421, IL-422, IL-423, IL-424, IL-425, IL-426, IL-427, IL-428, IL-429, IL-430, IL-431, IL-432, IL-433, IL-434, IL-435, IL-436, IL-437, IL-438, IL-439, IL-440, IL-441, IL-442, IL-443, IL-444, IL-445, IL-446, IL-447, IL-448, IL-449, IL-450, IL-451, IL-452, IL-453, IL-454, IL-455, IL-456, IL-457, IL-458, IL-459, IL-460, IL-461, IL-462, IL-463, IL-464, IL-465, IL-466, IL-467, IL-468, IL-469, IL-470, IL-471, IL-472, IL-473, IL-474, IL-475, IL-476, IL-477, IL-478, IL-479, IL-480, IL-481, IL-482, IL-483, IL-484, IL-485, IL-486, IL-487, IL-488, IL-489, IL-490, IL-491, IL-492, IL-493, IL-494, IL-495, IL-496, IL-497, IL-498, IL-499, IL-500, IL-501, IL-502, IL-503, IL-504, IL-505, IL-506, IL-507, IL-508, IL-509, IL-510, IL-511, IL-512, IL-513, IL-514, IL-515, IL-516, IL-517, IL-518, IL-519, IL-520, IL-521, IL-522, IL-523, IL-524, IL-525, IL-526, IL-527, IL-528, IL-529, IL-530, IL-531, IL-532, IL-533, IL-534, IL-535, IL-536, IL-537, IL-538, IL-539, IL-540, IL-541, IL-542, IL-543, IL-544, IL-545, IL-546, IL-547, IL-548, IL-549, IL-550, IL-551, IL-552, IL-553, IL-554, IL-555, IL-556, IL-557, IL-558, IL-559, IL-560, IL-561, IL-562, IL-563, IL-564, IL-565, IL-566, IL-567, IL-568, IL-569, IL-570, IL-571, IL-572, IL-573, IL-574, IL-575, IL-576, IL-577, IL-578, IL-579, IL-580, IL-581, IL-582, IL-583, IL-584, IL-585, IL-586, IL-587, IL-588, IL-589, IL-590, IL-591, IL-592, IL-593, IL-594, IL-595, IL-596, IL-597, IL-598, IL-599, IL-600, IL-601, IL-602, IL-603, IL-604, IL-605, IL-606, IL-607, IL-608, IL-609, IL-610, IL-611, IL-612, IL-613, IL-614, IL-615, IL-616, IL-617, IL-618, IL-619, IL-620, IL-621, IL-622, IL-623, IL-624, IL-625, IL-626, IL-627, IL-628, IL-629, IL-630, IL-631, IL-632, IL-633, IL-634, IL-635, IL-636, IL-637, IL-638, IL-639, IL-640, IL-641, IL-642, IL-643, IL-644, IL-645, IL-646, IL-647, IL-648, IL-649, IL-650, IL-651, IL-652, IL-653, IL-654, IL-655, IL-656, IL-657, IL-658, IL-659, IL-660, IL-661, IL-662, IL-663, IL-664, IL-665, IL-666, IL-667, IL-668, IL-669, IL-670, IL-671, IL-672, IL-673, IL-674, IL-675, IL-676, IL-677, IL-678, IL-679, IL-680, IL-681, IL-682, IL-683, IL-684, IL-685, IL-686, IL-687, IL-688, IL-689, IL-690, IL-691, IL-692, IL-693, IL-694, IL-695, IL-696, IL-697, IL-698, IL-699, IL-700, IL-701, IL-702, IL-703, IL-704, IL-705, IL-706, IL-707, IL-708, IL-709, IL-710, IL-711, IL-712, IL-713, IL-714, IL-715, IL-716, IL-717, IL-718, IL-719, IL-720, IL-721, IL-722, IL-723, IL-724, IL-725, IL-726, IL-727, IL-728, IL-729, IL-730, IL-731, IL-732, IL-733, IL-734, IL-735, IL-736, IL-737, IL-738, IL-739, IL-740, IL-741, IL-742, IL-743, IL-744, IL-745, IL-746, IL-747, IL-748, IL-749, IL-750, IL-751, IL-752, IL-753, IL-754, IL-755, IL-756, IL-757, IL-758, IL-759, IL-760, IL-761, IL-762, IL-763, IL-764, IL-765, IL-766, IL-767, IL-768, IL-769, IL-770, IL-771, IL-772, IL-773, IL-774, IL-775, IL-776, IL-777, IL-778, IL-779, IL-780, IL-781, IL-782, IL-783, IL-784, IL-785, IL-786, IL-787, IL-788, IL-789, IL-790, IL-791, IL-792, IL-793, IL-794, IL-795, IL-796, IL-797, IL-798, IL-799, IL-800, IL-801, IL-802, IL-803, IL-804, IL-805, IL-806, IL-807, IL-808, IL-809, IL-810, IL-811, IL-812, IL-813, IL-814, IL-815, IL-816, IL-817, IL-818, IL-819, IL-820, IL-821, IL-822, IL-823, IL-824, IL-825, IL-826, IL-827, IL-828, IL-829, IL-830, IL-831, IL-832, IL-833, IL-834, IL-835, IL-836, IL-837, IL-838, IL-839, IL-840, IL-841, IL-842, IL-843, IL-844, IL-845, IL-846, IL-847, IL-848, IL-849, IL-850, IL-851, IL-852, IL-853, IL-854, IL-855, IL-856, IL-857, IL-858, IL-859, IL-860, IL-861, IL-862, IL-863, IL-864, IL-865, IL-866, IL-867, IL-868, IL-869, IL-870, IL-871, IL-872, IL-873, IL-874, IL-875, IL-876, IL-877, IL-878, IL-879, IL-880, IL-881, IL-882, IL-883, IL-884, IL-885, IL-886, IL-887, IL-888, IL-889, IL-890, IL-891, IL-892, IL-893, IL-894, IL-895, IL-896, IL-897, IL-898, IL-899, IL-900, IL-901, IL-902, IL-903, IL-904, IL-905, IL-906, IL-907, IL-908, IL-909, IL-910, IL-911, IL-912, IL-913, IL-914, IL-915, IL-916, IL-917, IL-918, IL-919, IL-920, IL-921, IL-922, IL-923, IL-924, IL-925, IL-926, IL-927, IL-928, IL-929, IL-930, IL-931, IL-932, IL-933, IL-934, IL-935, IL-936, IL-937, IL-938, IL-939, IL-940, IL-941, IL-942, IL-943, IL-944, IL-945, IL-946, IL-947, IL-948, IL-949, IL-950, IL-951, IL-952, IL-953, IL-954, IL-955, IL-956, IL-957, IL-958, IL-959, IL-960, IL-961, IL-962, IL-963, IL-964, IL-965, IL-966, IL-967, IL-968, IL-969, IL-970, IL-971, IL-972, IL-973, IL-974, IL-975, IL-976, IL-977, IL-978, IL-979, IL-980, IL-981, IL-982, IL-983, IL-984, IL-985, IL-986, IL-987, IL-988, IL-989, IL-990, IL-991, IL-992, IL-993, IL-994, IL-995, IL-996, IL-997, IL-998, IL-999, IL-1000, IL-1001, IL-1002, IL-1003, IL-1004, IL-1005, IL-1006, IL-1007, IL-1008, IL-1009, IL-1010, IL-1011, IL-1012, IL-1013, IL-1014, IL-1015, IL-1016, IL-1017, IL-1018, IL-1019, IL-1020, IL-1021, IL-1022, IL-1023, IL-1024, IL-1025, IL-1026, IL-1027, IL-1028, IL-1029, IL-1030, IL-1031, IL-1032, IL-1033, IL-1034, IL-1035, IL-1036, IL-1037, IL-1038, IL-1039, IL-1040, IL-1041, IL-1042, IL-1043, IL-1044, IL-1045, IL-1046, IL-1047, IL-1048, IL-1049, IL-1050, IL-1051, IL-1052, IL-1053, IL-1054, IL-1055, IL-1056, IL-1057, IL-1058, IL-1059, IL-1060, IL-1061, IL-1062, IL-1063, IL-1064, IL-1065, IL-1066, IL-1067, IL-1068, IL-1069, IL-1070, IL-1071, IL-1072, IL-1073, IL-1074, IL-1075, IL-1076, IL-1077, IL-1078, IL-1079, IL-1080, IL-1081, IL-1082, IL-1083, IL-1084, IL-1085, IL-1086, IL-1087, IL-1088, IL-1089, IL-1090, IL-1091, IL-1092, IL-1093, IL-1094, IL-1095, IL-1096, IL-1097, IL-1098, IL-1099, IL-1100, IL-1101, IL-1102, IL-1103, IL-1104, IL-1105, IL-1106, IL-1107, IL-1108, IL-1109, IL-1110, IL-1111, IL-1112, IL-1113, IL-1114, IL-1115, IL-1116, IL-1117, IL-1118, IL-1119, IL-1120, IL-1121, IL-1122, IL-1123, IL-1124, IL-1125, IL-1126, IL-1127, IL-1128, IL-1129, IL-1130, IL-1131, IL-1132, IL-1133, IL-1134, IL-1135, IL-1136, IL-1137, IL-1138, IL-1139, IL-1140, IL-1141, IL-1142, IL-1143, IL-1144, IL-1145, IL-1146, IL-1147, IL-1148, IL-1149, IL-1150, IL-1151, IL-1152, IL-1153, IL-1154, IL-1155, IL-1156, IL-1157, IL-1158, IL-1159, IL-1160, IL-1161, IL-1162, IL-1163, IL-1164, IL-1165, IL-1166, IL-1167, IL-1168, IL-1169, IL-1170, IL-1171, IL-1172, IL-1173, IL-1174, IL-1175, IL-1176, IL-1177, IL-1178, IL-1179, IL-1180, IL-1181, IL-1182, IL-1183, IL-1184, IL-1185, IL-1186, IL-1187, IL-1188, IL-1189, IL-1190, IL-1191, IL-1192, IL-1193, IL-1194, IL-1195, IL-1196, IL-1197, IL-1198, IL-1199, IL-1200, IL-1201, IL-1202, IL-1203, IL-1204, IL-1205, IL-1206, IL-1207, IL-1208, IL-1209, IL-1210, IL-1211, IL-1212, IL-1213, IL-1214, IL-1215, IL-1216, IL-1217, IL-1218, IL-1219, IL-1220, IL-1221, IL-1222, IL-1223, IL-1224, IL-1225, IL-1226, IL-1227, IL-1228, IL-1229, IL-1230, IL-1231, IL-1232, IL-1233, IL-1234, IL-1235, IL-1236, IL-1237, IL-1238, IL-1239, IL-1240, IL-1241, IL-1242, IL-1243, IL-1244, IL-1245, IL-1246, IL-1247, IL-1248, IL-1249, IL-1250, IL-1251, IL-1252, IL-1253, IL-1254, IL-1255, IL-1256, IL-1257, IL-1258, IL-1259, IL-1260, IL-1261, IL-1262, IL-1263, IL-1264, IL-1265, IL-1266, IL-1267, IL-1268, IL-1269, IL-1270, IL-1271, IL-1272, IL-1273, IL-1274, IL-1275, IL-1276, IL-1277, IL-1278, IL-1279, IL-1280, IL-1281, IL-1282, IL-1283, IL-1284, IL-1285, IL-1286, IL-1287, IL-1288, IL-1289, IL-1290, IL-1291, IL-1292, IL-1293, IL-1294, IL-1295, IL-1296, IL-1297, IL-1298, IL-1299, IL-1300, IL-1301, IL-1302, IL-1303, IL-1304, IL-1305, IL-1306, IL-1307, IL-1308, IL-1309, IL-1310, IL-1311, IL-1312, IL-1313, IL-1314, IL-1315, IL-1316, IL-1317, IL-1318, IL-1319, IL-1320, IL-1321, IL-1322, IL-1323, IL-1324, IL-1325, IL-1326, IL-1327, IL-1328, IL-1329, IL-1330, IL-1331, IL-1332, IL-1333, IL-1334, IL-1335, IL-1336, IL-1337, IL-1338, IL-1339, IL-1340, IL-1341, IL-1342, IL-1343, IL-1344, IL-1345, IL-1346, IL-1347, IL-1348, IL-1349, IL-1350, IL-1351, IL-1352, IL-1353, IL-1354, IL-1355, IL-1356, IL-1357, IL-1358, IL-1359, IL-1360, IL-1361, IL-1362, IL-1363, IL-1364, IL-1365, IL-1366, IL-1367, IL-1368, IL-1369, IL-1370, IL-1371, IL-1372, IL-1373, IL-1374, IL-1375, IL-1376, IL-1377, IL-1378, IL-1379, IL-1380, IL-1381, IL-1382, IL-1383, IL-1384, IL-1385, IL-1386, IL-1387, IL-1388, IL-1389, IL-1390, IL-1391, IL-1392, IL-1393, IL-1394, IL-1395, IL-1396, IL-1397, IL-1398, IL-1399, IL-1400, IL-1401, IL-1402, IL-1403, IL-1404, IL-1405, IL-1406, IL-1407, IL-1408, IL-1409, IL-1410, IL-1411, IL-1412, IL-1413, IL-1414, IL-1415, IL-1416, IL-1417, IL-1418, IL-1419, IL-1420, IL-1421, IL-1422, IL-1423, IL-1424, IL-1425, IL-1426, IL-1427, IL-1428, IL-1429, IL-1430, IL-1431, IL-1432, IL-1433, IL-1434, IL-1435, IL-1436, IL-1437, IL-1438, IL-1439, IL-1440, IL-1441, IL-1442, IL-1443, IL-1444, IL-1445, IL-1446, IL-1447, IL-1448, IL-1449, IL-1450, IL-1451, IL-1452, IL-1453, IL-1454, IL-1455, IL-1456, IL-1457, IL-1458, IL-1459, IL-1460, IL-1461, IL-1462, IL-1463, IL-1464, IL-1465, IL-1466, IL-1467, IL-1468, IL-1469, IL-1470, IL-1471, IL-1472, IL-1473, IL-1474, IL-1475, IL-1476, IL-1477, IL-1478, IL-1479, IL-1480, IL-1481, IL-1482, IL-1483, IL-1484, IL-1485, IL-1486, IL-1487, IL-1488, IL-1489, IL-1490, IL-1491, IL-1492, IL-1493, IL-1494, IL-1495, IL-1496, IL-1497, IL-1498, IL-1499, IL-1500, IL-1501, IL-1502, IL-1503, IL-1504, IL-1505, IL-1506, IL-1507, IL-1508, IL-1509, IL-1510, IL-1511, IL-1512, IL-1513, IL-1514, IL-1515, IL-1516, IL-1517, IL-1518, IL-1519, IL-1520, IL-1521, IL-1522, IL-1523, IL-1524, IL-1525, IL-1526, IL-1527, IL-1528, IL-1529, IL-1530, IL-1531, IL-1532, IL-1533, IL-1534, IL-1535, IL-1536, IL-1537, IL-1538, IL-1539, IL-1540, IL-1541, IL-1542, IL-1543, IL-1544, IL-1545, IL-1546, IL-1547, IL-1548, IL-1549, IL-1550, IL-1551, IL-1552, IL-1553, IL-1554, IL-1555, IL-1556, IL-1557, IL-1558, IL-1559, IL-1560, IL-1561, IL-1562, IL-1563, IL-1564, IL-1565, IL-1566, IL-1567, IL-1568, IL-1569, IL-1570, IL-1571, IL-1572, IL-1573, IL-1574, IL-1575, IL-1576, IL-1577, IL-1578, IL-1579, IL-1580, IL-1581, IL-1582, IL-1583, IL-1584, IL-1585, IL-1586, IL-1587, IL-1588, IL-1589, IL-1590, IL-1591, IL-1592, IL-1593, IL-1594, IL-1595, IL-1596, IL-1597, IL-1598, IL-1599, IL-1600, IL-1601, IL-1602, IL-1603, IL-1604, IL-1605, IL-1606, IL-1607, IL-1608, IL-1609, IL-1610, IL-1611, IL-1612, IL-1613, IL-1614, IL-1615, IL-1616, IL-1617, IL-1618, IL-1619, IL-1620, IL-1621, IL-1622, IL-1623, IL-1624, IL-1625, IL-1626, IL-1627, IL-1628, IL-1629, IL-1630, IL-1631, IL-1632, IL-1633, IL-1634, IL-1635, IL-1636, IL-1637, IL-1638, IL-1639, IL-1640, IL-1641, IL-1642, IL-1643, IL-1644, IL-1645, IL-1646, IL-1647, IL-1648, IL-1649, IL-1650, IL-1651, IL-1652, IL-1653, IL-1654, IL-1655, IL-1656, IL-1657, IL-1658, IL-1659, IL-1660, IL-1661, IL-1662, IL-1663, IL-1664, IL-1665, IL-1666, IL-1667, IL-1668, IL-1669, IL-1670, IL-1671, IL-1672, IL-1673, IL-1674, IL-1675, IL-1676, IL-1677, IL-1678, IL-1679, IL-1680, IL-1681, IL-1682, IL-1683, IL-1684, IL-1685, IL-1686, IL-1687, IL-1688, IL-1689, IL-1690, IL-1691, IL-1692, IL-1693, IL-1694, IL-1695, IL-1696, IL-1697, IL-1698, IL-1699, IL-1700, IL-1701, IL-1702, IL-1703, IL-1704, IL-1705, IL-1706, IL-1707, IL-1708, IL-1709, IL-1710, IL-1711, IL-1712, IL-1713, IL-1714, IL-1715, IL-1716, IL-1717, IL-1718, IL-1719, IL-1720, IL-1721, IL-1722, IL-1723, IL-1724, IL-1725, IL-1726, IL-1727, IL-1728, IL-1729, IL-1730, IL-1731, IL-1732, IL-1733, IL-1734, IL-1735, IL-1736, IL-1737, IL-1738, IL-1739, IL-1740, IL-1741, IL-1742, IL-1743, IL-1744, IL-1745, IL-1746, IL-1747, IL-1748, IL-1749, IL-1750, IL-1751, IL-1752, IL-1753, IL-1754, IL-1755, IL-1756, IL-1757, IL-1758, IL-1759, IL-1760, IL-1761, IL-1762, IL-1763, IL-1764, IL-1765, IL-1766, IL-1767, IL-1768, IL-1769, IL-1770, IL-1771, IL-1772, IL-1773, IL-1774, IL-1775, IL-1

CAS Life Sciences Data

文献・物質の詳細情報に CAS Life Sciences Data* として、Pharmacological Data (薬理学データ)、ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion: 吸収、分布、代謝、排泄) および Toxicity (毒性) が収録されています。

CAS Registry Number: 305-01-1

物質の詳細情報

3,747 263 110 View in CAS BioFinder

リガンドに関する共通の標的や疾患の相関をビジュアル化する機能

Pharmacological Data

Assay Data

出典情報

(1) Wang, Cai Yi; Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry (2019), 34(1), 753-760, CAsplus and MEDLINE

ADME

ダウンロード

フィルターおよびソート

Toxicity

文献の詳細情報

Method of modulating stress-activated protein kinase system

51 10 5 Citation Map

In this Reference

By: Blatt, Lawrence M.; Seiwert, Scott D.; Beigelman, Leonid; Radhakrishnan, Ramachandran

Disclosed are methods of modulating a stress activated protein kinase (SAPK) system with an active compound, wherein the active compound exerts its effect on the SAPK system and wherein the contacting is conducted at a SAPK-modulating

リガンド (CAS RN®) ごとにデータを収録

Pharmacological Data

ADME

Toxicity

Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay	Source
Bifunctional epoxide hydrolase 2	Inhibitor	Inhibition rate	>100 %	Vascular disease	Human	View Detail	(1) CAS
Bifunctional epoxide hydrolase 2	Inhibitor	IC50	4.5 μM	Vascular disease	Human	View Detail	(1) CAS
Bifunctional epoxide hydrolase 2	Inhibitor	Ki	10.2 μM	Vascular disease	Human	View Detail	(1) CAS

Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay	Source
-	-	Metabolic activity	Reduction in metabolic activity observed	Cancer	-	View Detail	(1) CAS
-	-	Metabolic activity	Reduction in metabolic activity not observed	Cancer	-	View Detail	(1) CAS

Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay	Source
Protein-lysine 6-oxidase	Inhibitor	Toxicity	Ligand revealed protective effect at MTT reduction test	-	-	View Detail	(1) CAS

Ligand	Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay
914918-88-0	Mitogen-activated protein kinase 14	Inhibitor	EC50	~ 1 × 10 ⁻⁵ μM	-	HOMO SAPIENS	View Detail

* CAS Life Sciences Data へのアクセス条件は、契約により異なります。詳しくはお問合せください。

化学構造検索の検索タイプ

化学構造検索を行うと、下記の 3 タイプの構造検索が同時に実行されます。

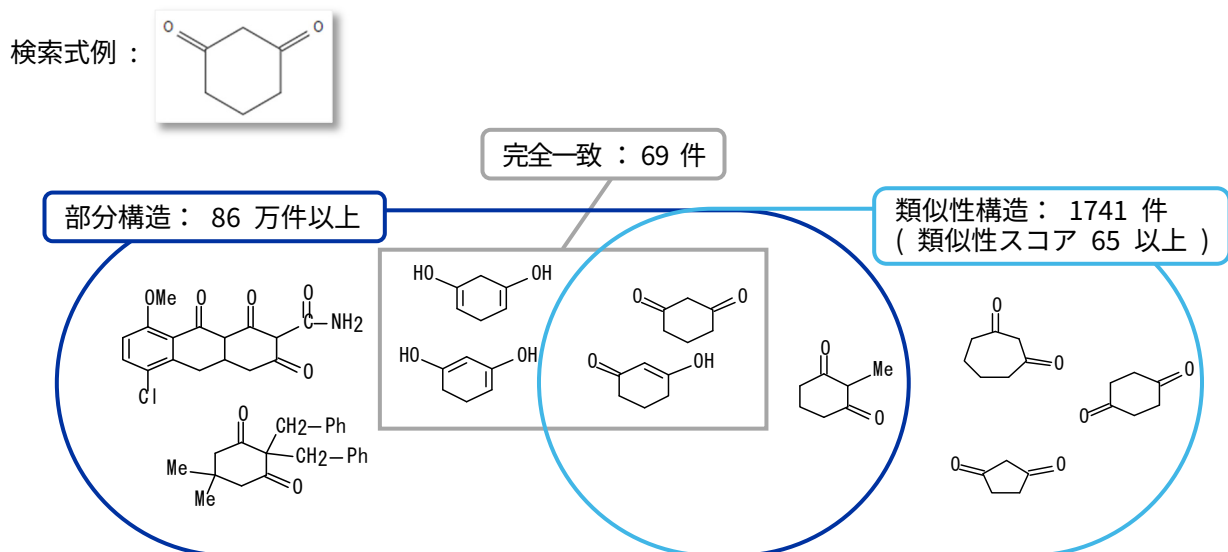
検索後に、目的の検索タイプの回答を Structure Match から選択します。

検索タイプによる回答の違い

検索タイプ	特徴
As Drawn (完全一致検索)	作図した構造どおりの物質、およびそれを含む多成分物質を検索する 互変異性体も含む
Substructure (部分構造検索)	完全一致検索の回答に加えて、作図した構造にあらゆる置換基を許容した物質を検索する - 鎖上のノードが鎖または環の一部となる物質が得られる
Similarity* (類似性構造検索)	作図した構造どおりの物質、および作図した構造と類似する物質を検索する - 作図した元素の種類や位置が異なる物質も得られる - 作図した構造を完全に含まない物質も得られる (例：エチル基を作図した場合にメチル基が得られることもある) - 作図した環構造と異なる物質も得られる (例：6-5 員環を作図して、6-6 員環が得られることもある)

* Tanimoto アルゴリズムに基づき類似性スコアを計算します。

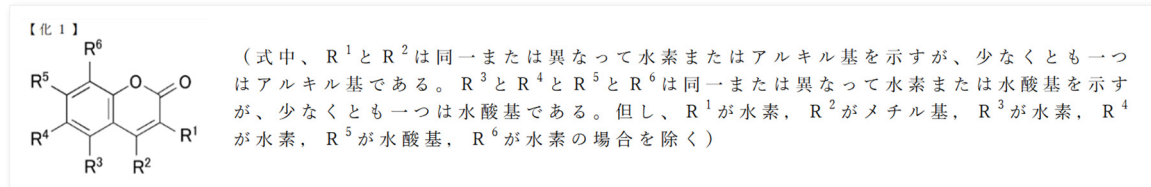
検索タイプ間の関係



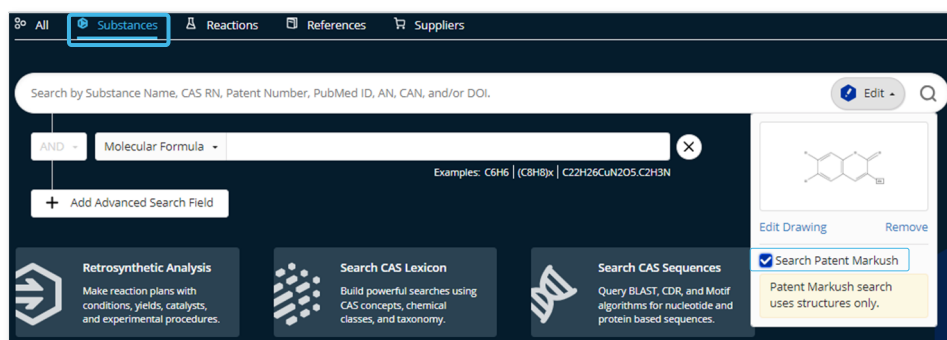
マルクーシュ構造検索

マルクーシュ構造では、特許クレーム中に記載されている化学構造の一般式（マルクーシュ構造）を対象に検索を行うことができます。

例：JP 2007063193



マルクーシュ構造は、構造検索の際に **Search Patent Markush** にチェックを入れて検索します。



同じ特許から複数のマルクーシュ構造がヒットした場合は、ヒットしたすべてのマルクーシュ構造が表示されます。

完全一致検索

部分構造検索

特許レコードの表示

特許中の記載位

原報の表示

特許レコード

Ak の説明
(炭素数 1~4 のアルキル鎖)

Patent Markush Match

As Drawn (151)

Substructure (488)

Filter Behavior

Filter by

Exclude

Patent Office

World Intellectual Property Organization

Japan (32)

United States (13)

China (13)

European Patent Office (7)

In this Reference

IPC Data

CAS Concepts

Substances

Formulations

CA Section

Pharmacology

Radiation Chemistry

Photochemistry

Photography

Reprography

Heterocyclic Compounds

Hetero Atoms

Pharmaceuticals (12)

Biochemical Methods (8)

Filter Content Report

Download filter data from this result set.

JP2007063193

Hyaluronic acid formation inhibitors containing coumarins, and their compositions

Assignee: Hiroaki University

Japan, JP2007063193 A 2007-03-19

Patent claim 1

PatentPak

Full Text

19: alkyl

HU46315

Preparation of coumarin derivatives as drug and pesticide intermediates

Assignee: Nitrochemia Hungary, HU46315

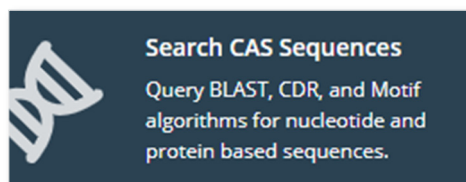
Patent claim 1

Full Text

19: alkyl <containing 1-4 C>

参考：配列検索

CAS Sequences から配列質問式を使って検索することができます。



- BLAST ホモロジー検索：局所的に類似した配列を検索するプログラム
- CDR 配列検索：抗体と T 細胞受容体の CDR を指定して検索するプログラム
- Motif 配列検索：DNA、RNA、タンパク質中の短いパターン配列を検索するプログラム

Search CAS Sequences CAS LIFE SCIENCES

Enter a protein or nucleotide string, or upload a .fasta or .txt file. [Learn more about CAS Sequences.](#)

BLAST CDR Motif

検索プログラムの指定

配列質問式のファイル (.fasta または .txt) をアップロードすることも可能

Upload Sequence (.fasta or .txt)

Sequence Type: Nucleotide Protein

Search Within: Nucleotides Proteins

Include NCBI Sequences

Search Sequences

検索式の配列タイプを選択

回答のタイプを選択

NCBI 由来の配列の有無

パラメータの変更

Advanced Sequence Search

Sequences search for your query

References

検索条件

BLAST Search Details

Sequence Type: Nucleotide

Search Within: Nucleotides

BLAST Algorithm: BLASTn

NCBI Included: No

Alignment Identity: 80%

Query Coverage: 90%

E-Value: 10

Match with Gaps?: No

Gap Costs: Existence 5

Extension 2

Word Size: 11

Bioscape Analysis

Visually explore sequence similarity with a new tool. [Learn more about Bioscape.](#)

Create Bioscape Analysis

フィルター

Filter by

E-Value

0 to 10⁶

Query Coverage %

0 to 100

Subject Coverage %

0 to 100

Alignment Identity %

0 to 100

Sequence Length

128 to 117194

Query Details

TGATATTTTGAAGAAGGAGCTGCTGAGATGAACAAGAGGTCTTTCAAGTA

View More

134 Results

Sort: Alignment Identity View: Expanded

Alignment Identity: 100%

Matches: 51

Mismatches: 0

アライメントの概略図

アライメントの類似性

回答配列の詳細

出典文献の詳細

Alignments

Alignment Data

BLAST Score: 102

E-Value: 3.47861e-18

0 1 TGATATTTT GAAGAAGG AGCTGAGAT GAACAAGG TCTTTCAAGT A 51

S 190 TGATATTTT GAAGAAGG AGCTGAGAT GAACAAGG TCTTTCAAGT A 240

アライメントの詳細

配列の類似性による特許解析機能 (Bioscape Analysis)

CAS Sequences の検索手順、Bioscape Analysis 機能、核酸・ペプチド・タンパク質の検索方法の詳細は https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_bioseq.pdf を参照

* 配列検索へのアクセス条件は、契約により異なります。詳しくはお問合せください。

Reactions 検索 (反応情報)

反応検索は、化学物質名、CAS RN®、キーワード、および構造質問式等から実行します。



CAS Retrosynthesis

逆合成解析を行い、化学物質の合成ルートを自動的に構築する機能です。予測反応を含めた合成ルートを提案できます。

https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_retrosynthesis.pdf

検索が終了したら、目的の検索タイプの回答を **Structure Match** から選択します。収率等の条件で絞り込む場合には、左側のフィルターを使用します。

回答はデフォルトではスキームごとにグループ化されて表示されます (By Scheme)。

- 反応物と生成物が同じ反応は、出典が異なる場合でも同一スキームにまとめて表示されます。

This screenshot shows the CAS SciFinder interface with search results for 417 items. The results are grouped by scheme. Key features highlighted include:

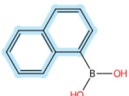
- スキームごとの表示** (Display by Scheme): A button to view results grouped by reaction scheme.
- 回答の並べ替え** (Sort Answers): A dropdown menu for sorting results by Relevance, Publication Date (Newest/Oldest), Yield, Number of Steps (Ascending/Descending), etc.
- 反応サマリー** (Reaction Summary): A section showing the reaction scheme, steps, and yield (e.g., Steps: 1, Yield: 99%).
- 反応の詳細の表示** (Display Reaction Details): A section showing reagents, catalysts, solvents, and experimental protocols.
- 文献情報** (Literature Information): A section showing the full text and citation details.

- By Document にすると、ヒットした反応スキームを文献単位で確認できます。
- By Transformation にすると、ヒットした反応スキームを反応タイプ単位で確認できます。

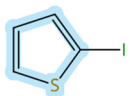
This screenshot shows the CAS SciFinder interface with search results for 417 items. The results are grouped by transformation type. Key features highlighted include:

- By Document**: A button to view results grouped by document.
- By Transformation**: A button to view results grouped by reaction type.
- 文献情報の表示** (Display Literature Information): A section showing the full text and citation details.
- すべての反応スキームの表示** (Display All Reaction Schemes): A button to view all reaction schemes.
- 反応タイプの表示** (Display Reaction Type): A section showing the reaction type and related reactions.
- 該当する反応スキームの表示** (Display Relevant Reaction Schemes): A section showing the relevant reaction schemes.

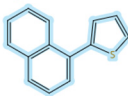
Scheme 2 (3 Reactions) Steps: 1 Yield: 90-99% ...



Suppliers (113)



Suppliers (89)



Suppliers (6)

31-179-CAS-1091206 Steps: 1 Yield: 99% ...

1.1 Reagents: [Potassium carbonate](#)

Catalysts: [Palladium\(1+\), 1,1-\(diphenylphosphino-kP\)-N-\[\(diphenylphosphino-kP\)methyl\]methana...](#)
(ArgoGel bound)

Solvents: [Water](#)

[Experimental Protocols](#)

An Amphiphilic Resin-Supported Palladium Catalyst for High-Throughput Cross-Coupling in Water

By: Uozumi, Yasuhiro; et al
Organic Letters (2002), 4(17), 2997-3000

[Full Text](#)

Experimental Protocols	
Synthetic Methods	Experimental Procedure
Products	2-(1-Naphthalenyl)thiophene, Yield: 99%
Reactants	2-Iodothiophene 1-Naphthylboronic acid
Reagents	Potassium carbonate
Catalysts	Palladium(II)-di(diphenylphosphino)chloride (1:1) (AroGel bound) [1]
Solvents	Water
Procedure	- Add aryl halide (0.5 mmol), boronic acid (0.6 mmol), K_2CO_3 (2.5 mmol), water (1.65 mL) and thiophenyl-supported palladium complex (33 mg, 10 μmol Pd) into a baker disposable filtration column. - Shake the mixture on a Librakit at 50 °C for 12 hours. - Filter the reaction mixture. - Rinse the reaction mixture with water (4 mL x 5) and diethyl ether (5 mL x 5). - Separate the organic layer. - Dry the organic layer over Na_2SO_4. - Concentrate the organic layer under reduced pressure. - Filter the residue through silica gel pad (eluent, hexane).
Transformation	Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling

The diagram illustrates the relationship between different levels of experimental information. At the top, a box labeled 'Experimental Protocols' has a blue arrow pointing down to a box labeled 'Experimental Procedure'. To the left of the 'Experimental Procedure' box is a box labeled 'Synthetic Methods'. Below these boxes, on the left, is the 'OL Organic Laboratories' logo. To the right of the logo is the text 'General/Typical Procedure: Palladium-catalyzed cross-coupling reaction. The reaction mixture was charged with Pd(PPh3)4 (0.1 mmol, 0.1 g) and the reaction mixture was stirred at 100 °C for 12 h. The reaction mixture was filtered, rinsed with water (4 mL x 5) and diethyl ether (5 mL x 5). The organic layer was separated, dried over Na2SO4 and concentrated under reduced pressure. The residue was filtered through silica gel (eluent, hexane) to give 7. Yield 99%.' The text '原報由来の実験項情報 (Experimental Procedure)' is written in large, bold, black characters over the right side of the diagram.

Synthetic Methods	
雑誌論文等	2000 年～
ACS	: Journal of Medicinal Chemistry, Journal of the American Chemical Society
Springer	: Catalysis Letters
Taylor & Francis	: Journal of Coordination Chemistry
Elsevier	: Tetrahedron
RSC	: Chemical Science
Wiley	: Angewandte Chemie
WO 特許 (英語)	2010 年～

など約 180 誌由来の情報

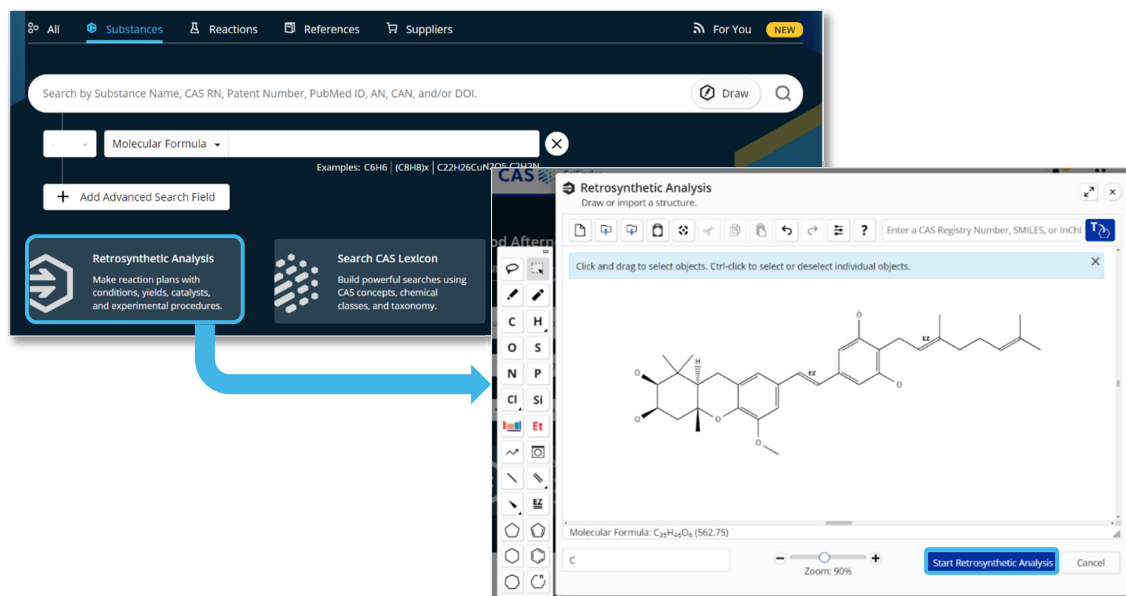
雑誌論文等	主に 1998 年～
ACS	: 全誌
Taylor & Francis	: Synthetic Communications, Journal of Coordination Chemistry など
Springer	: 化学系 165 誌 (1985 年～)
上海有機化学研究所	: Youji Huaxue, Huaxue Xuebao
Thieme	: SYNLETT (1989 ～ 2013 年), SYNTHESIS (1980 ～ 2013 年)
SORD	: Selected Organic Reactions Database (学位論文由来、1961～2011 年)
下記の言語の特許	2000 年～
英語	: アメリカ、ヨーロッパ、WIPO、カナダ、イギリス
日本語	: 日本、WIPO
ドイツ語	: ドイツ、ヨーロッパ、WIPO

CAS Retrosynthesis (逆合成解析ツール)

CAS Retrosynthesis は、化学物質の合成ルートを自動的に調べて提案する「逆合成解析ツール」です (詳細は https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_retrosynthesis.pdf 参照)。

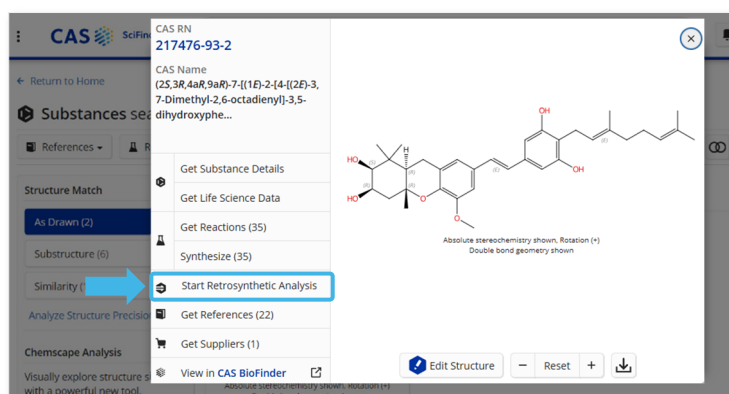
検索初期画面からスタートする場合

- 検索初期画面で Retrosynthetic Analysis をクリックし、生成物の構造を作図します。その後、Start Retrosynthetic Analysis をクリックします。



Substance Window からスタートする場合

- 検索結果やレコード中の構造図をクリックすると Substance Window が表示されます。左側に表示される Start Retrosynthetic Analysis をクリックします。



- 予測反応ルートの解析には時間がかかる場合があります。解析の途中でも、他の検索を行ったり CAS SciFinder を終了したりすることもできます。

作成した Retrosynthesis Plan の呼び出し

- 作成した Retrosynthesis Plan は、☰ (メニュー) の Saved (保存した回答) および History (検索履歴) から呼び出すことができます。作成した Retrosynthesis Plan の有効期間は 30 日間です。

Start Retrosynthetic Analysis をクリックすると Plan Options 画面が開きます。

The screenshot shows the 'Retrosynthesis Plan Options for drawn structure' window. Callouts point to various features:

- 予測反応の作成ルール** (Prediction reaction creation rules): Points to the 'Set Rules Supporting Predicted Reactions' section with radio buttons for Common, Uncommon, and Rare.
- 反応物のコスト (最大値)** (Reactant cost (maximum)): Points to the 'Set Starting Materials Cost Limit' section with a text input set to 1000 and a USD/mol dropdown.
- 結合の指定** (Bond specification): Points to the 'Break and Protect Bonds (Optional)' section, which includes 'Break Bond' and 'Protect Bond' buttons and a chemical structure with a highlighted bond.
- チェックを入れると、合成ルートの作成完了時にメールが配信される** (If checked, an email will be sent when the synthesis route is complete): Points to the 'Email me when my plan is complete' checkbox.

A 'Continue to Retrosynthesis Plan' button is at the bottom left.

各種設定をして Create Retrosynthesis Plan ボタンをクリックすると、合成ルートの作成が始まります。

Retrosynthesis 画面では、既知反応は青色で、予測反応は緑色で表示されます。

The screenshot shows the 'Retrosynthesis Plan for drawn structure' window. Callouts point to various features:

- 反応全体の収率** (Overall reaction yield): Points to the 'Plan Information' section showing 'Estimated Yield: 4%' and 'Overall Price: \$2,218,136.43 (USD per 100 grams)'.
- 全体の価格** (Overall price): Points to the same 'Plan Information' section.
- 設定の変更** (Change settings): Points to the 'Edit Plan Options' button.
- 予測反応の表示** (Display predicted reaction): Points to a green dashed arrow in the reaction scheme.
- 各ステップの情報** (Information for each step): Points to a sidebar menu icon in the top right.
- 代替反応の選択** (Select alternative reaction): Points to an 'Alternative Steps' button in the reaction scheme.

A legend box at the bottom left defines symbols: a solid blue arrow for '既知反応' (Known reaction), a green dashed arrow for '予測反応' (Predicted reaction), and a blue circle with a plus sign for '立体選択反応' (Stereochemical reaction).

画面左側には、反応全体の収率とその概算価格が表示されます。

右上の をクリックすると、合成ルートの各ステップの情報が表示されます。

- Evidence: 各ステップの反応の詳細や出典情報を確認できます。
- Alternative Steps: 別の合成ルートを検討したい場合に代替反応を選択します。

Suppliers 検索 (カタログ情報)

化学物質の市販カタログ情報は、化学物質名、CAS RN®、分子式および構造質問式から検索します。

- 📍 をクリックして緑色マークにすると、そのカタログ業者を優先的に表示できます。
- 左側のフィルターを使うと回答を絞り込むことができます。
- カタログの詳細情報は、カタログ名をクリックします。

回答の保存、アラート

Save ボタンをクリックし Save and Alert を選択すると、検索式等の保存やアラート登録ができます。

検索式/回答の保存

- Search Options で “Query Only” (検索式)、“Selected Answers” (選択した回答) または “All Answers” (全回答) を選択することで、3 種類の保存が可能です。検索式はフィルターの条件も含めて保存されます。全回答の保存は最大 2 万件までです。
- 検索式や回答を保存することで Combine 機能 (演算) を利用できます。

アラート (自動 SDI 検索) の登録

- 設定した頻度で検索式を自動検索し、最新情報をメール等で配信するサービスです。
- アラートを登録する場合には、Alerts を ON にします。
- Frequency で “As Available” (更新毎)、“Weekly” (毎週) または “Monthly” (毎月) を選択して Save をクリックすると、アラート (自動 SDI 検索) を設定できます。
- 他のユーザーにも最新情報を配信する場合には Add Email(s) にメールアドレスを入力します。

The screenshot shows the 'Save Results' dialog box in CAS SciFinder. The search query is 'lactobacillus or lacticaseibacillus'. The 'Name' field contains 'lactobacillus'. The 'Search Options' section has three radio buttons: 'Query Only' (selected), 'Selected Answers', and 'All Answers (Up to 20,000)'. Below this, there is a section for 'Add Existing Tags (Optional)' with checkboxes for 'aluminium oxide' and 'calcium titanate'. A 'New Tag (Optional)' section includes a text field for 'Add tag name' and a 'Tag Color' dropdown set to 'Light Blue'. At the bottom, there is an 'Alerts' toggle switch (currently off) and 'Save' and 'Cancel' buttons. A callout box labeled '保存またはアラート' points to the 'Save and Alert' button in the top right. Another callout box labeled '保存名またはアラート名' points to the 'Name' field. A third callout box labeled 'Search Options*' points to the 'Search Options' section. A fourth callout box labeled '目印としてタグを設定することも可能' points to the 'Add Existing Tags' section. A fifth callout box labeled 'アラートの設定 (Alerts を ON にする)' points to the 'Alerts' toggle switch. A sixth callout box labeled '全回答の保存例' points to the 'All Answers' radio button. A seventh callout box labeled '自分用のアラートの場合には入力不要' points to the 'Add Email(s)' field.

* Query Only はフィルターの条件を含めた検索式のみが保存されます。

保存した回答やアラートの結果はメニューアイコンの  (Saved) でまとめて確認できます。
アラートの結果は  (Alerts) から確認できます。

- Rerun Search ボタンによる再検索は、再検索日の最新の検索結果が得られます。
- 選択した回答 (Selected Answers) または全回答 (All Answers) を保存した場合は、保存名のリンクをクリックして保存した回答を表示します。



The screenshot shows the CAS SciFinder web interface. Key features and annotations include:

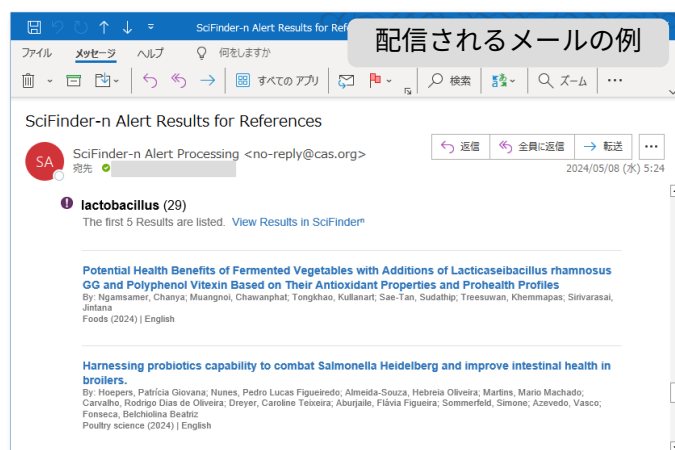
- Navigation Bar:** Alerts, Saved (470), History (10345), Projects (15), Downloads (3), and a Download button.
- Filter by:**
 - Result Type:** Patent Markush (10), Reactions (34), References (292), Retrosynthesis (19), Substances (115).
 - Alerts:** Unviewed (24), Alerts Set (50), No Alerts (420).
 - Tags:** webinar (12).
- Search Results:**
 - carboxylic acid:** Reactions | February 12, 2025, 9:38 AM. Annotation: 保存名またはアラート名 (検索式の保存の場合、リンクはつかない) (Save name or alert name (if saved as a search formula, the link will not be available)).
 - lactobacillus:** References | February 12, 2025, 9:35 AM. Annotation: 保存した回答の表示 (Display saved answers).
 - Leaf extracts:** References | February 12, 2025, 9:34 AM.
 - Suzuki Coupling:** Reactions | February 12, 2025, 9:07 AM.
- Combine Saved Results:** A button to combine results. Annotation: 保存した回答あるいは検索式の演算 https://seminar.jaici.or.jp/doc/sf_combine.pdf (Saved answers or search formula calculation).
- Alerts for OLED:** A pop-up window showing alert results. Annotations:
 - アラートの回答 (Alert answer)
 - アラートの結果の確認 (Check alert results)
 - アラートの設定 (Alert settings)
- View Multiple Results:** A button to view multiple results. Annotation: View Multiple Results から複数の回答をまとめて表示できる (Can display multiple answers together from View Multiple Results).
- Mange Results:** A button to manage results. Annotation: Mange Results から不要になった回答の削除や既読に変更できる (Can delete unnecessary answers or mark as read from Mange Results).

登録したアラートはメールでも配信！

設定画面 (Settings) で Alert Preferences を ON にすると、登録したアラートで新しい回答が配信された際にメールで受け取ることができます。



The screenshot shows the Settings page with the Alert Preferences toggle switch turned ON. A blue arrow points from the Settings page to the email notification example.



The screenshot shows an email notification from SciFinder-n. The subject is "SciFinder-n Alert Results for References". The email contains a list of results, including "lactobacillus (29)" and "Potential Health Benefits of Fermented Vegetables with Additions of Lactobacillus rhamnosus GG and Polyphenol Vitexin Based on Their Antioxidant Properties and Prohealth Profiles".

回答の共有

検索結果は、他のユーザーと共有することができます。

- 検索結果を共有する場合には、検索結果一覧の Save ボタンをクリックし、“Share Results” または “Copy Search to Clipboard” を選択します。
- 使用したキーワードや化学構造式、フィルターの絞り込みを含めて共有できます。
- 共有は、同一契約内のユーザーに限定されます。



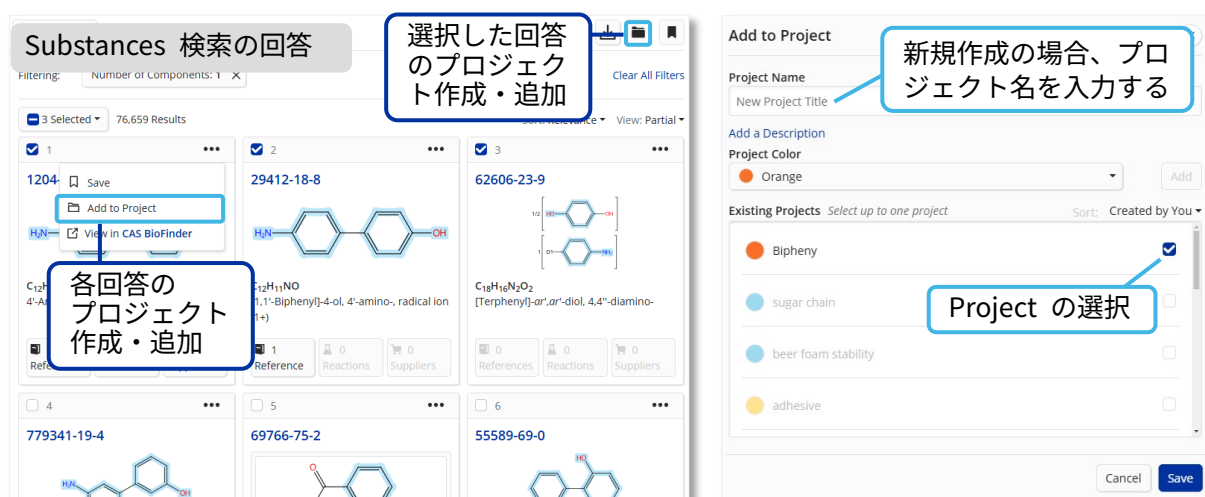
プロジェクト機能

文献 (References) および物質 (Substances) の回答をプロジェクトごとにまとめ、保存・管理できます。プロジェクトは、他のユーザーと共有できます。

詳細はオンラインヘルプ (<https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/14535531467405-Projects-Overview>) をご参照ください。

プロジェクトの作成・追加

- 各回答の ... の Add to Project、またはプロジェクトに追加したい回答にチェックを入れた後に Save ボタンから Add to Project を選択します。



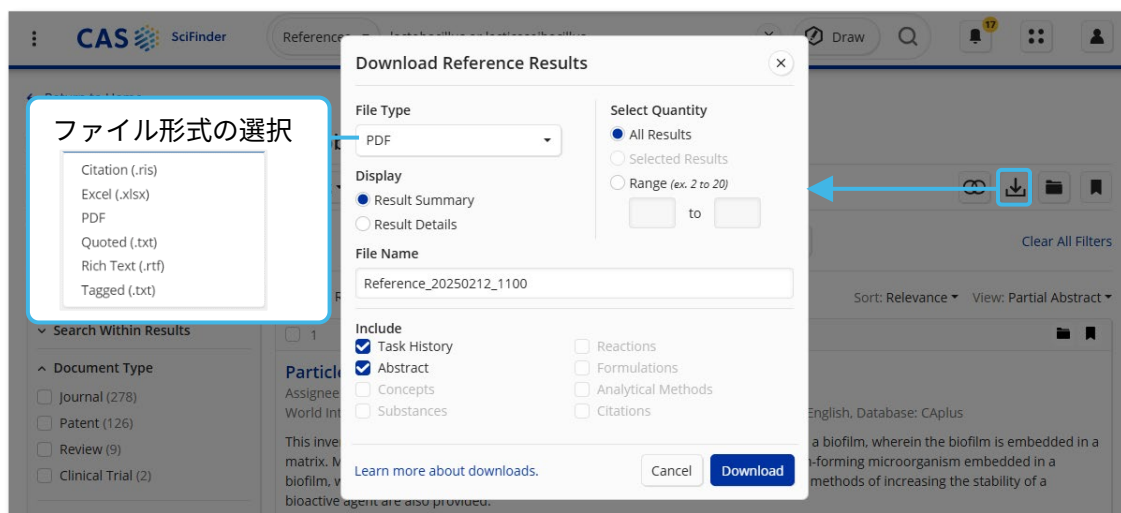
作成したプロジェクトの確認・共有

作成したプロジェクトは、メニューアイコンの  (Project) をクリックして確認できます。

- 作成したプロジェクトは、各プロジェクトの ... の Share Project で他のユーザーと共有できます。

回答のダウンロード

検索結果は様々な形式でダウンロードできます。



ダウンロードした回答は、最小単位の同一研究グループ内でのみ共有可能です。

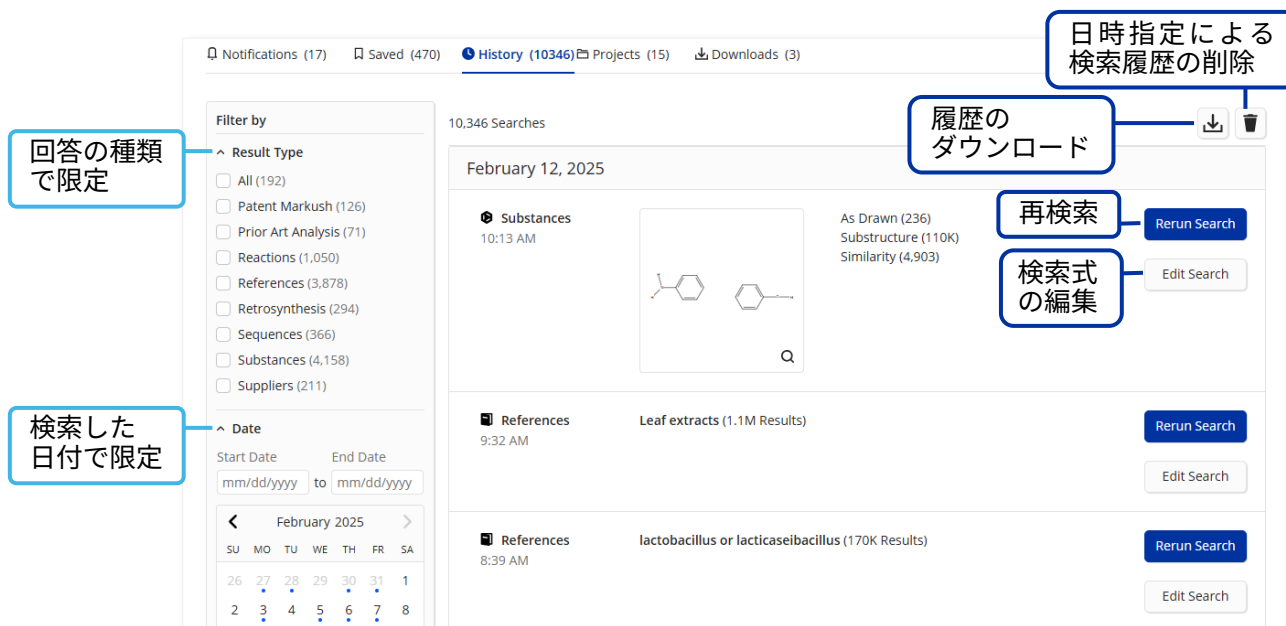
一回あたりの最大ダウンロード件数は 100 件または 500 件です (形式により異なる)。

累積 5,000 件を超えて回答をダウンロードし保存することは契約上禁止されています。不要なデータは削除し、一人あたりの保存件数が 5,000 件を超えないようにしてください。

検索履歴

検索履歴を表示するには、メニューアイコンの  (History) をクリックします。

History に保存される検索式には、絞り込みの内容 (フィルター情報) は含まれません。

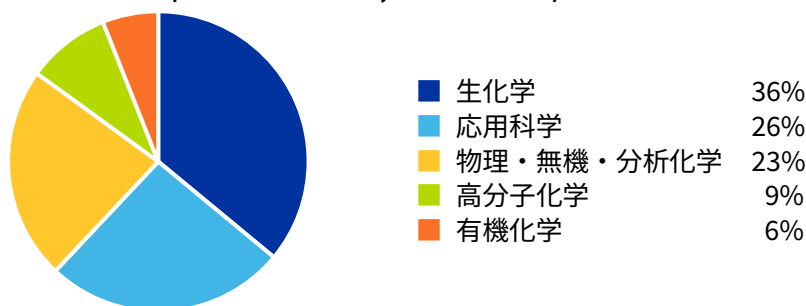


参考 : CAS SciFinder 収録内容

CAS SciFinder 主な収録情報

- 世界 50 以上の言語の文献情報を英語で収録
- 雑誌
 - 科学技術分野の論文誌 (数千誌)*
* 主要 1,500 誌の書誌情報は CAS 到着後 1 週間以内に収録
 - 生物医薬分野の論文誌 (数千誌)
- 特許
 - 化学および周辺分野の世界中の特許*
* 主要国の特許の書誌情報は、特許公開後 2 日以内、抄録・索引は 27 日以内に収録

収録文献の分野 (CAS References, CAS Patents)



収録化学物質

有機化合物、核酸・タンパク質、ポリマー、無機化合物、配位化合物、合金

CAS SciFinder で検索可能な情報

(2025 年 2 月現在)

情報種類	収録内容	収録件数	収録年代
文献	化学および周辺分野の文献 【CAS References, CAS Patents】	6,500 万件以上	1808 年～
	生物医薬分野の文献情報 【MEDLINE】	3,800 万件以上	1946 年～
	マルクーシュ構造を含む特許 【CAS Markush】	60 万件以上 (特許)	1961 年～
	古い年代の化学分野の文献情報 【ChemZent®】*	300 万件以上	1830 年～ 1969 年
化学物質	化学物質名、CAS RN®、分子式、化学構造式、配列、物性データ、スペクトルなど 【CAS REGISTRY®】	2 億 9,400 万件以上	1800 年 初頭～
反応	文献中の有機化学反応情報 【CAS Reactions】	1 億 5,900 万件以上 (反応) 240 万件以上 (文献)	1840 年～
試薬カタログ	試薬カタログ情報 【CAS Commercial Sources】	世界の試薬供給業者から 提供されたカタログ数百種	随時更新
規制	世界中の既存化学物質リストなど	40 万件以上	1980 年～

* ChemZent へのアクセス条件は、契約により異なります。詳しくはお問合せください。

JAICI について

一般社団法人化学情報協会 (JAICI) は、化学技術情報の流通を図るため 1971 年に設立されました。米国 CAS をはじめ世界各国の情報機関などと協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして、大学・企業などの情報取得・分析から研究・開発までを支援しています。

CAS SciFinder に関するお問い合わせ先
<https://www.jaici.or.jp/inquiry/>

About CAS

CAS connects the world's scientific knowledge to accelerate breakthroughs that improve lives. We empower global innovators to efficiently navigate today's complex data landscape and make confident decisions in each phase of the innovation journey. As a specialist in scientific knowledge management, our team builds the largest authoritative collection of human-curated scientific data in the world and provides essential information solutions, services, and expertise. Scientists, patent professionals, and business leaders across industries rely on CAS to help them uncover opportunities, mitigate risks, and unlock shared knowledge so they can get from inspiration to innovation faster. CAS is a division of the American Chemical Society. Connect with us at **cas.org**