

# CAS SciFinder Discovery Platform™ for Academics

化学・ライフサイエンス分野の研究者向けの総合的な情報ソリューション

CAS SciFinder Discovery Platform™ は、情報調査にかかる時間を減らし、研究者をサポートするための総合的な検索ソリューションです。

「いち早く」、「網羅的」かつ「的確」に目的の学術論文や特許、化学物質、反応情報を得ることができ、化学関連分野の研究において有用です。



## CAS SciFinder Discovery Platform™ に含まれるサービス

### CAS SciFinder®

研究者の情報ニーズに応える総合的な情報検索ツール

化学をはじめ物質科学分野全般に対応した情報検索ツールです。

文献、化学物質、反応情報、物性、規制情報を幅広く把握することができます。

人手で収集した情報で研究をスピードアップ

### CAS Analytical Methods™

分析情報の検索ツール

他の科学者の経験からプロセスを学ぶ

### CAS Formulus®

製剤・配合情報の検索ツール

安全かつ競争力のある製品の開発に

### お問い合わせ先



一般社団法人 化学情報協会

情報事業部

TEL 0120-151-462

Email customer@jaici.or.jp

### ChemZent®

Chemisches Zentralblatt の  
英語版データベース

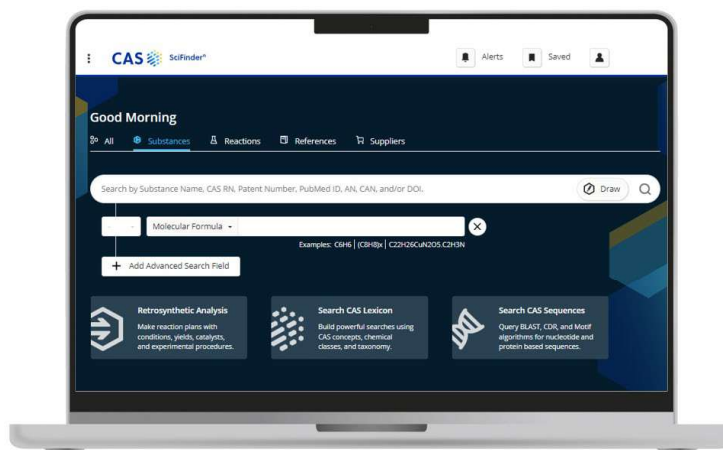
化学史上重要なコンテンツを提供

# CAS SciFinder®

化学・ライフサイエンス分野の研究者向け情報検索ツール

CAS SciFinder® (サイファインダー) は、CAS が提供する科学情報検索ツールです。物質の反応や合成などの基礎化学研究から医薬品、材料開発にわたる研究開発の最前線で利用されています。

世界中の論文・特許はもちろん、化学物質およびその規制情報や試薬カタログ情報など、化学に関する情報を網羅的に検索できます。CAS の専門家が注目すべき概念や化学物質に注釈をつけることによって、関連性やトレンドを見つけやすくなっています。



## 主要コンテンツ

### 文献

- ・ 化学・化学工学関連分野の学術論文
- ・ 100ヶ国以上の特許発行機関から発行された世界中の特許
- ・ 医学・生物学論文 (PubMed 由来)

### 化学物質

- ・ CAS 登録番号 (CAS RN®) が付与されているすべての物質
- ・ 特許中の一般式構造 (マルクーシュ構造)

### 反応

- ・ 有機化学、有機金属化学分野を中心とした反応情報
- ・ 反応スキーム、実験項情報、収率、溶媒、触媒

### 試薬カタログ

- ・ 市販化学物質製品のカタログ

### 化学物質の法規制

- ・ 化審法をはじめとする世界中の規制情報

### 製剤・配合情報

- ・ 幅広い製剤・配合情報コレクション

### 分析情報

- ・ 詳細な分析手順、測定機器、バリデーションデータ

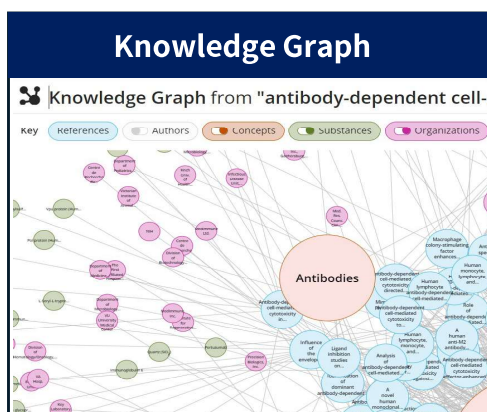
# 目的の雑誌論文・特許をすばやく発見、解析で新たな知見を得る

## 文献情報 (雑誌論文、特許、会議録、書籍)

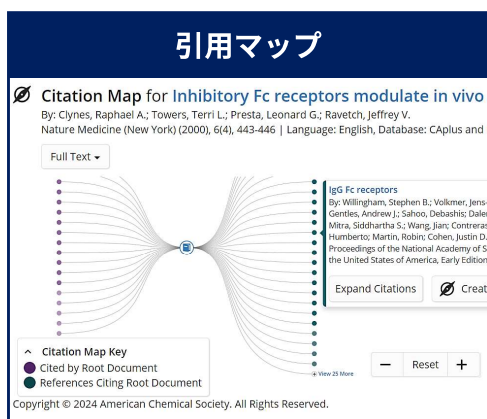
キーワード、著者名、書誌情報など様々な情報から文献を検索。回答を関連度の高い順に並べることで最適解のすばやい入手を実現します。さらに解析機能を利用して、検索結果を俯瞰することで、新たな知見を得ることができます。

The screenshot shows the CAS SciFinder interface with search results for "antibody-dependent cell-mediated cytotoxicity". The results are filtered to 13,676 items. Three results are visible:

- Result 1:** "Inhibitory Fc receptors modulate in vivo cytotoxicity against tumor targets" by Clynes, Raphael A.; Towers, Terri L.; Presta, Leonard G.; Ravetch, Jeffrey V. (Nature Medicine, 2000). Cited 2,239 times.
- Result 2:** "IgG subclasses and allotypes: from structure to effector functions" by Vidarsson, Gestur; Dekkers, Gillian; Rispens, Theo (Frontiers in Immunology, 2014). Cited 1,722 times.
- Result 3:** "MPDL3280A (anti-PD-1) treatment leads to clinical activity in metastatic bladder cancer" by Powles, Thomas; Eder, Joseph Paul; Finn, Gregg D.; Brar, Hari S.; Lonot, Yohann; Cruz, Cristina; Barlow, Joaquin; Burris, Howard A.; Petrylak, Daniel R.; Teng, Seng-leng; et al. (Nature, 2014). Cited 1,704 times.



所属機関、著者、キーワードや索引物質などの相関をビジュアル化。



引用文献と被引用文献をまとめて表示。関連文献の把握に役立ちます。

## 共有・ダウンロード・アラート

### 共有

CAS SciFinder® の検索結果は、直接同僚に送付可能。容易に情報を共有できます。

### ダウンロード

検索結果はPDF、RIS、XLSX、RTFなどの形式でダウンロードでき、文献管理ツールや他のソフトへのインポートに対応しています。

### アラート

最新情報をすぐに、忘れずに入手するためには、アラート登録が有効です。

## ChemZent®

最も古いドイツ語の化学抄録誌である Chemisches Zentralblatt の英語版デジタルアーカイブ。1830年から1969年に発行された約300冊相当の貴重な情報です。

The screenshot shows a search result in the ChemZent digital archive. The reference is titled "Ultraviolet absorption spectra of Nitroxylderivaten" by Freeman, Jeremiah P.; Stevens, Travis E. The abstract discusses the UV spectra of various nitroxy derivatives, including trans- and cis- isomers of nitroxybenzyl and nitroxyethyl groups. The ChemZent logo and a "Full Text" button are visible at the bottom.

# すべてのCAS RN®を収録している唯一の化学物質データベース

## 化学物質

化学構造図、化学物質名、CAS RN®だけでなく、分子式や物性値、PubMed ID や特許番号などの文献識別情報からも化学物質を検索可能。検索で見つけた物質から、文献、反応、物性値、スペクトル、生物活性データ、試薬カタログなど、様々な関連情報をシームレスに入手できます。

The screenshot shows the CAS Scifinder interface for searching substances by drawn structure. The search results are displayed in a grid of six cards, each representing a different chemical structure. Each card includes the CAS number, the chemical name, the molecular formula, and a list of references, reactions, and suppliers. The search filters on the left include 'Structure Match', 'ChemScape Analysis', 'Filter Behavior', and 'Reaction Role'.

The screenshot displays the 'Physical Properties' and 'Spectra' section for a substance. It includes a table of key physical properties such as Molecular Weight, Boiling Point, and Density. A graph shows the experimental properties and spectra, with a peak at 165 °C. The 'Other Names and Identifiers' section is also visible.

The screenshot displays the 'ADMET' section for a substance. It includes a table of ADMET data with columns for Target, Function, Parameter, Value, Disease, Organism, Assay, and Source. The table lists various parameters such as Absorption rate constant, AUC, and Inhibitor, along with their corresponding values and sources.

The screenshot displays the '試薬カタログ' (Reagent Catalog) section. It includes a table of reagents with columns for Supplier, Substance, Purity, Purchasing Details, and Availability. The table lists reagents such as 4632-51-3 and 4632-51-3, along with their respective suppliers and purchasing details.

## タンパク質・核酸

配列質問式を使って、核酸・タンパク質・アミノ酸配列を検索できます。生物、ライフサイエンス、薬学、医学などの研究にも役立ちます。

The screenshot shows the 'Sequences search for your query' section. It includes a search box for the sequence 'GCGTTTGCTCTCTCTCTGCG'. The search results show a BLAST search for the sequence, with a BLAST score of 42 and an E-value of 0.00487972. The alignment shows a perfect match between the query and the subject sequence.

## 化学反応

化学構造、化学物質名、CAS RN® だけでなく、PubMed ID や特許番号などの文献識別情報からも反応検索ができます。得られた反応情報は、収率、ステップ数、試薬、触媒、溶媒など様々な側面からフィルタリング可能。詳細な実験手順の入手までサポートします。

**反応検索**

Reactions search for "4632-51-3"

Filtering: Substance Role: Product X Experimental Protocols: Experimental Procedure X Clear All Filters

9 Results Group: By Scheme Sort: Yield View: Collapsed

Scheme 1 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 99%

1,1 Reagents: Potassium carbonate  
Catalysts: Palladium(1+), [1-(diphenylphosphino)P]-N-(diphenylphosphino)-P-methylmethane... (ArgoGel bound)  
Solvents: Water

**実験手順**

Products	2-(1-Naphthalenyl)thiophene, Yield: 99%
Reactants	2-Iodothiophene 1-Naphthylboronic acid
Reagents	Potassium carbonate
Catalysts	Palladium(1+), [1-(diphenylphosphino)P]-N-(diphenylphosphino)-P-methyl(methanamine)1-2-propen-1-yl-, chloride (1:1) (ArgoGel bound)
Solvents	Water
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Add aryl halide (0.5 mmol), boronic acid (0.6 mmol), <math>K_2CO_3</math> (2.5 mmol), water (1.65 mL) and amphiphilic resin-supported palladium complex (33 mg, 10 <math>\mu</math>mol Pd) into a baker disposable filtration column.</li> <li>2. Shake the mixture on a Librakit at 50 °C for 12 hours.</li> <li>3. Filter the reaction mixture.</li> <li>4. Rinse the reaction mixture with water (4 mL x 5) and diethyl ether (5 mL x 5).</li> <li>5. Separate the organic layer.</li> <li>6. Dry the organic layer over <math>Na_2SO_4</math>.</li> <li>7. Concentrate the organic layer under reduced pressure.</li> <li>8. Filter the residue through silica gel pad (solvent: hexane).</li> </ol>
Transformation	Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling
Scale	milligram
CAS Method Number	3-179-CAS-1091206

## 逆合成解析 (Retrosynthesis Planner)

CAS 独自の Computer-Aided Synthetic Design (CASD) に基づいて逆合成解析を行い、化学物質の合成ルートを自動的に構築。新たな合成ルートの立案を効率的にサポートします。

Retrosynthesis Plan for drawn structure Powered by ChemPlanner®

Key: Experimental Steps Predicted Steps Edit Plan Options View Excluded Options Save

Plan Information  
Estimated Yield: 29%  
Overall Price: \$201.81 (USD per 100 grams)

Scoring Profiles  
Complexity Reduction  
Convergence  
Evidence  
Cost  
Yield  
Atom Efficiency

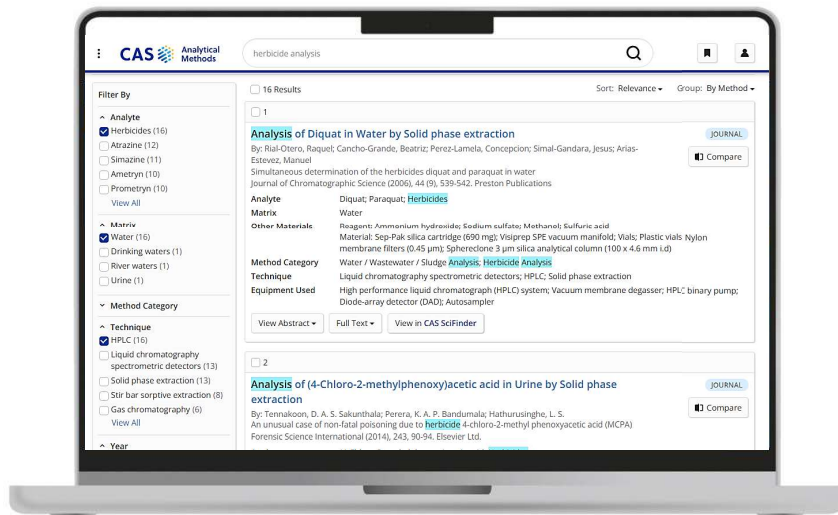
Apply Reset Scoring

Reset +

# CAS Analytical Methods™

詳細な分析情報の入手に

CAS Analytical Methods™ は、CAS が保有する膨大な文献コレクションから、分析手順に関する情報を抽出したプロトコルデータベースです。キーワードやカテゴリーのほか、分析機器やマトリックスなどの詳細な条件から分析手法を検索したい場合に最適です。



# CAS Formulus®

製剤・配合に関する情報収集を効率的に

CAS Formulus® では、CAS が特許、雑誌、医薬品添付文書 (NML DailyMed など) から製剤・配合に関する情報を人手で収集、整理して集積した世界最大のデータを検索できます。通常の文献検索では的確に検索できない製剤・配合情報を調べたい場合や配合設計に便利です。

