

CAS SciFinder®

医学分野における CAS SCIFINDERを活用した 文献・配列情報検索

化学情報協会 情報事業部

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SciFinder を使うメリット

網羅的でかつ効率的に情報を検索できる

- PubMed の情報を含む化学分野の網羅的な文献検索
- NCBI 由来の配列を含む網羅的な配列検索
- 構造活性相関 (SAR), ADMET 等の
生物活性データへのアクセス



CAS SciFinder とは

CAS 作成の研究者向け情報検索ツール

文献情報

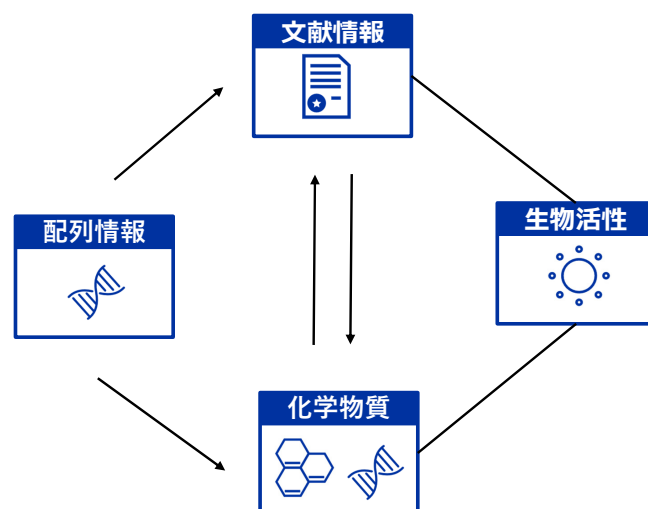
- CAS 作成：化学および周辺分野の雑誌論文、特許
- NML 作成：生物医学分野の論文（PubMed）

配列情報

- NCBI 由来の配列情報
- CAS が独自に収集した配列情報
- 主要国を中心とした 73 ヶ国の特許発行機関の特許から抽出した配列情報

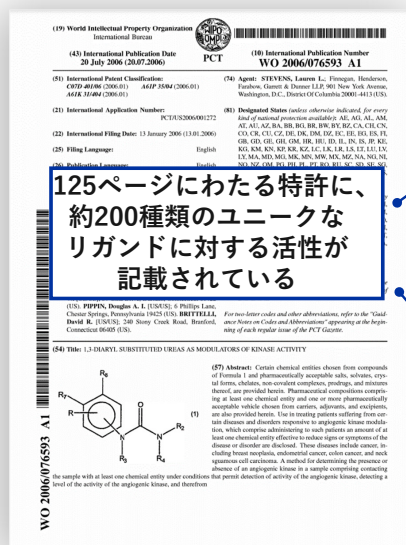
生物活性データ

- 構造活性相関（SAR）
- ADMET（吸収、分布、代謝、排泄、毒性）

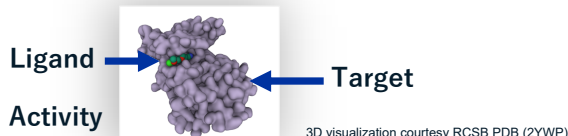


CAS SciFinder の生物活性データ

SAR、ADMET 情報を文献単位または物質単位で容易に確認可能



Structure Activity Relationships (SAR：構造活性相関)



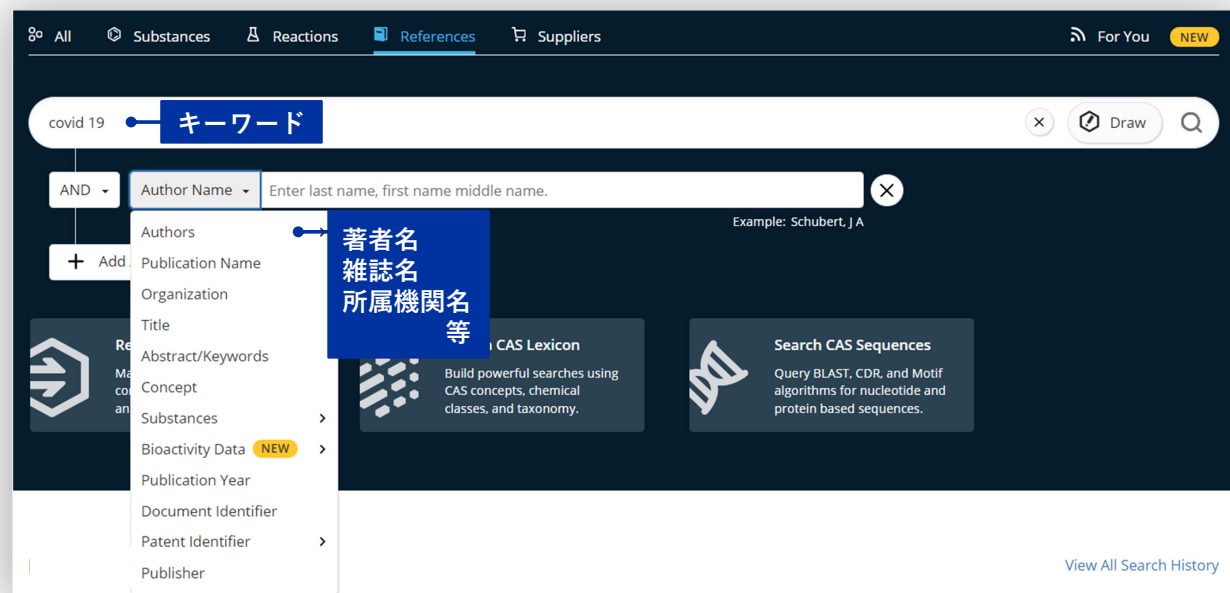
ADMET

(吸収、分布、代謝、排泄、毒性)

TYPE	MEASURE	VALUE	UNIT	SOURCE
Excretion	Urinary glucose excretion	12676	mg	DOG
Excretion	PLASMA CLEARANCE	6	(ml/min)/Kg	DOG
Toxicity	MORTALITY RATE	48.1	%	MYTHIMNA SEPARATE
Toxicity	LD50	105.4	mg/Kg	RAT

CAS SciFinder の文献検索 - 検索画面

様々な観点から検索可能



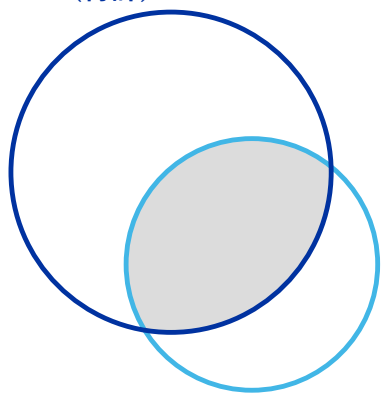
5 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



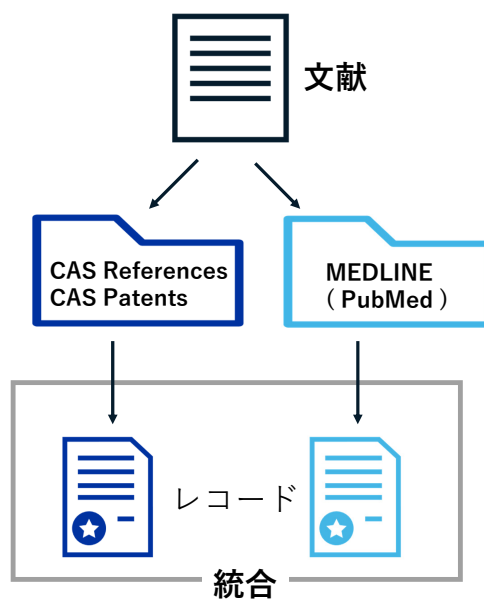
CAS SciFinder の文献情報

収録が重複する場合は、データを統合させる

CAS Reference(雑誌論文、学会会議録など)
CAS Patents (特許)



MEDLINE(PubMed)
(雑誌論文、会議論文など)



6 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SciFinder の文献検索 - 回答一覧画面

フィルターを使った直感的な絞り込みが可能

References search for "covid 19"

限定: キーワード

Filter by: 限定
Exclude: 除外

除外: 資料種類

限定: 発行年

生物活性データの有無

検索語の同義語でもヒット

PubMed にはない情報も多数ヒット

7 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SciFinder の文献情報 - 1

内容が把握しやすいように人手で整理されたデータ

The substitutions L50F, E166A, and L167F in SARS-CoV-2 3CLpro are selected by a protease inhibitor in vitro and confer resistance to nirmatrelvir

各項目へのアクセスリンク

原文献へのアクセス

雑誌名等の情報

8 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



内容が把握しやすいように人手で整理されたデータ

9 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



内容が把握しやすいように人手で整理されたデータ

10 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved



CAS SciFinder の文献情報 - 4

文献中で報告された生物活性データを確認できる

Structure Activity Relationships 構造活性相関(SAR)

物質 (Ligand) ごとに各情報を整理して収録

Ligand	Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay
2628280-40-8	Protease	Inhibitor	IC50	0.23 μM	Viral infection	SARS-CoV-2	View Detail
2628280-40-8	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
2628280-40-8	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
2628280-40-8	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
1809249-37-3	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
1809249-37-3	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
2755777-68-3	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
2755777-68-3	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail
2755777-68-3	Protease	Inhibitor	IC50				View Detail

アッセイデータ

物質詳細情報へのアクセス
様々な資料で報告された物性値や
SAR, ADMET をまとめて確認できる

CAS SciFinder の配列情報

NCBI 由来の配列情報を含めて網羅的に検索できる

配列情報

- NCBI 由来の配列情報
- CAS が独自に収集した配列情報
- 主要国を中心とした 73 ヶ国の特許発行機関の特許から抽出した配列情報

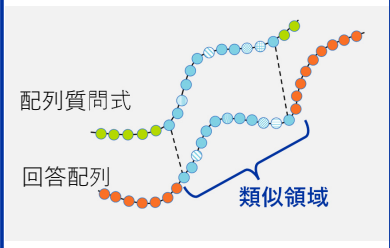


CAS SciFinder の配列検索の種類

配列質問式を使用したBLAST, CDR, Motif の3つの検索が可能

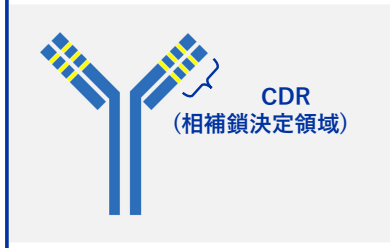
BLAST 配列検索

局所的に類似した配列の検索



CDR 配列検索

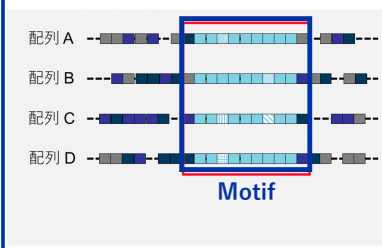
抗体と T 細胞受容体の CDR を指定した検索



CDR : 抗原に特異的な部分

Motif 配列検索

DNA, RNA, タンパク質中の短いパターン配列の検索



Motif : ある一定の機能を持つと期待される特徴的な共通の配列や構造



CAS SciFinder の配列検索 - 検索画面 -

.fasta /.txt 形式で配列情報を呼び出し、検索可能

Search CAS Sequences

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

BLAST

CDR

Motif

Upload Sequence (.fasta or .txt)

Sequence Type:
☒ Nucleotide ☐ Protein

Search Within:
☒ Nucleotides ☐ Proteins

☒ Include NCBI Sequences

Search Sequences

Advanced Sequence Search

Adjust Parameters for Short Sequences | Reset All

Alignment Identity %
80

Match with Gaps?
☐ Yes ☒ No

Gap Costs
Existence 5 Extension 2

Query Coverage %
90

Word Size
11

Reward for Match, Penalty for Mismatch
2, -3

BLAST Algorithm
BLASTn

E-Value
10

Exclude Low Complexity Regions
☐ Yes ☒ No

.txt もしくは .fasta 形式での呼び出し

配列質問式

回答配列

パラメータの設定



CAS SciFinder の配列検索 - 回答一覧画面

様々なフィルターによる絞り込みが可能

.xlsx / .fasta 形式で
ダウンロード可能

The screenshot shows the CAS SciFinder interface with several annotations in Japanese:

- 期待値** (Expectation value): Points to the E-Value filter (0 to 10⁵).
- 様々な計算値** (Various calculated values): Points to the Query Coverage % and Subject Coverage % filters.
- 配列長** (Sequence length): Points to the Sequence Length filter (6 to 44149).
- 生物種 (NCBI 由来の配列に限定)** (Organism (limited to NCBI-derived sequences)): Points to the Organisms filter.
- アライメントの概要図** (Alignment summary diagram): Points to the alignment visualization showing Query and Subject sequences.
- 回答配列の詳細** (Detailed answer sequence): Points to the alignment details section.
- 出典文献情報** (Bibliographic information): Points to the References section.
- 不一致コードを確認しやすい** (Easy to check mismatch codes): Points to the alignment data showing mismatches.

Alignment Data:
BLAST Score: 30
E-Value: 9.79741

Query: 1 GGCTTTGCTC TTCTTCTTGC 20
Subject: 705 GGCTTTGCTC TTCTTCTTGC 724

15 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



医学分野における CAS SciFinderを活用した
文献・配列情報検索 講習会

7月23日(火) 16:00 - 17:00

申し込みはこちら



JAICI ヘルプデスク

Tel : 0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

Mail : support@jaici.or.jp

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

