CAS SciFinder^n トピック
(ライフサイエンス)

化学情報協会　情報事業部

本日の内容

- ◆ CAS SciFinder^n とは
- ◆ CAS SciFinder^n の文献情報
- ◆ CAS SciFinder^n の物質情報
  - Bioactivity Indicator
  - Target Indicator

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^{n} とは

CAS SciFinder^{n} をご存じですか？

合成屋さんのツール
でしょ？

いつも PubMed を
使っているし・・？

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^n とは

◆ CAS が研究者向けに開発した科学情報検索ツール

➢ **文献データベース**

- CAS References (CAplus) : 化学分野
- MEDLINE : 生物医学分野 (PubMed の情報)

➢ **物質データベース**

CAS REGISTRY : 世界最大の化学物質データベース

➢ **CAS Biosequences**

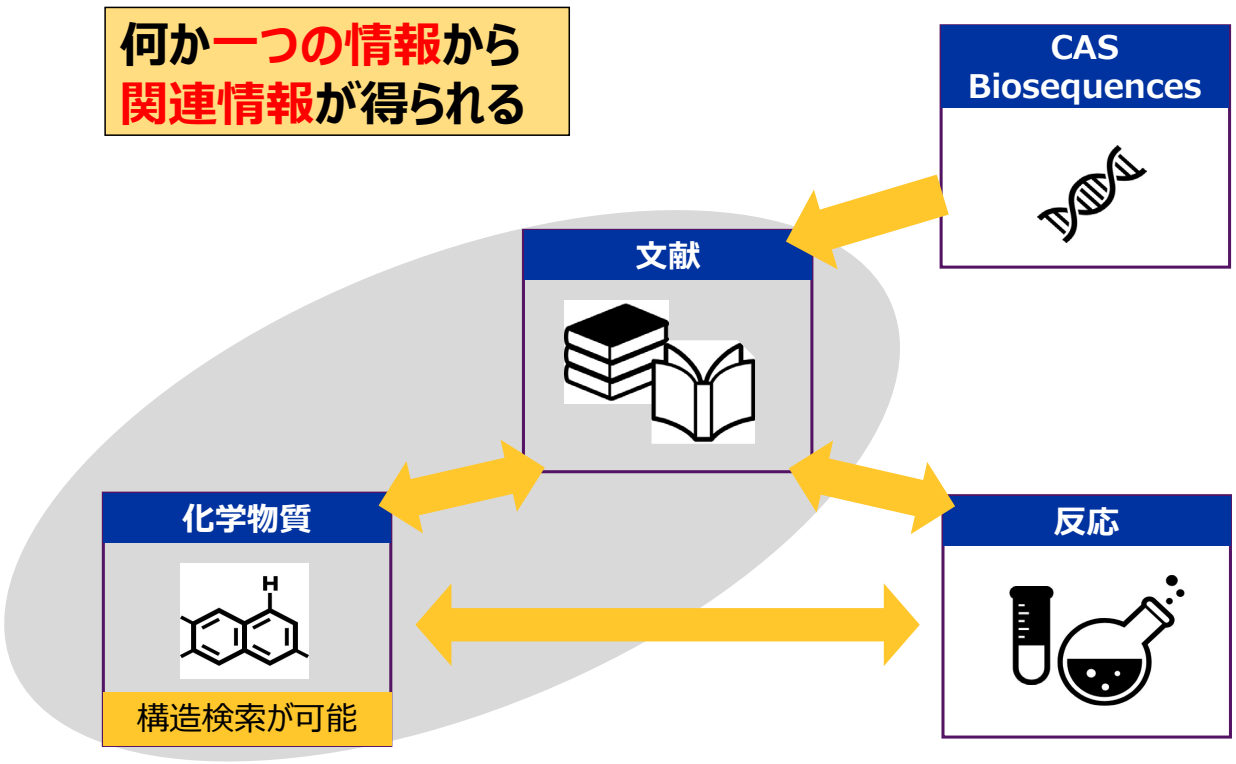
核酸・タンパク質の配列検索 (BLAST、CDR、Motif)

https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/cas-scifinder-n/features/biosequences-search/

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^n とは

◆ CAS SciFinder^n 全体像のイメージ



© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^{n} の文献情報

CAS SciFinder^{n} の文献データベース

(2022 年 11 月)

	CAS References (CAplus)	MEDLINE
製作者	CAS (Chemical Abstracts Service)	米国国立医学図書館（NLM）
収録期間	1808 年～	1946 年～
収録件数	5,900 万件以上	3,400 万件以上
収録分野	化学および周辺分野	生物医学分野 （歯学、看護学、獣医学を含む）
特長	・世界中の文献情報を収録 ・世界中の特許情報*を収録 ・統制語による索引 ・CAS RN® による化学物質索引	・世界中の文献情報を収録 (PubMed の情報) ・統制語 (MeSH ターム) による索引 ・UNII コードから変換された CAS RN® を収録

* 63 特許発行機関が発行する化学および周辺分野の特許

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^n の文献情報

A toxic organic solvent-free technology for the preparation of PEGylated paclitaxel nanosuspension based on human serum albumin for effective cancer therapy

書誌情報

Substances (6) | Reaction (1) | Citing (18) | Citation Map | Save

JOURNAL

Source
International Journal of Nanomedicine
Volume: 10
Pages: 7397-7412
Journal; Article; Research Support, Non-U.S. Gov't
2015
DOI: 10.2147/ijn.s92697

CODEN: IJNNHQ
E-ISSN: 1178-2013
ISSN-L: 1176-9114

Database Information
AN: 2016:1136792
CAN: 170:565714
PubMed ID: 26715846
CAplus and MEDLINE

両方のデータベースに収録されている

Company/Organization
Dove Medical Press Ltd.

Language
English

By: Yin, Tingjie; Dong, Lihui; Cui, Bei; Wang, Lei; Yin, Lifang; Zhou, Jianping; Huo, Meirong

Clin., paclitaxel (PTX) is one of most commonly prescribed therapies against a wide range of solid neoplasms. Despite its success, the clin. applicability of PTX (Taxol) is severely hampered by systemic toxicities induced by Cremophor EL. While attempts to bypass the need for Cremophor EL have been developed through platforms such as Abraxane, nab relies heavily on the use of organic solvents, namely, chloroform. The toxicity introduced by residual chloroform poses a potential risk to patient health. To mitigate the toxicities of toxic organic solvent-based manufacture methods, we have designed a method for the formulation of PTX nanosuspensions (PTX-PEG [polyethylene glycol]-HSA [human serum albumin]) that eliminates the dependence on toxic organic solvents. Coined the solid-dispersion technol., this technique permits the dispersion of PTX into PEG skeleton without the use of organic solvents or Cremophor EL as a solubilizer. Once the PTX-PEG dispersion is complete, the dispersion can be formulated with HSA into nanosuspensions suitable for i.v. administration. Addnl., the incorporation of PEG permits the prolonged circulation through the steric stabilization effect. Finally, HSA-mediated targeting permits active receptor-mediated endocytosis for enhanced tumor uptake and reduced side effects. By eliminating the need for both Cremophor EL and organic solvents while simultaneously increasing antitumor efficacy, this method provides a superior alternative to currently accepted methods for PTX delivery.

抄録

Keywords: PEGylated paclitaxel nanosuspension HSA cancer therapy toxic organic solvent; human serum albumin; nanosuspension; paclitaxel; polyethylene glycol; solid-dispersion technology

Open Access | Full Text

Expand All | Collapse All

Concepts

Absorption	pH
Antitumor agents	Pharmaceutical intravenous injections
Apoptosis	Pharmaceutical solids
Biological uptake	Pharmaceutical suspensions
Castor oil, ethoxylated Role: Modifier or Additive Use; Therapeutic Use	Polydispersity

CAplus の統制語索引

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^n の文献情報

MEDLINE® Medical Subject Headings

Albumin-Bound Paclitaxel Qualifier: chemistry; pharmacology	Humans
Animals	Mice
Antineoplastic Agents Qualifier: chemistry; pharmacology	Micelles
Cell Line, Tumor	Nanomedicine
Chemistry, Pharmaceutical Qualifier: methods	Polyethylene Glycols Qualifier: chemistry
Green Chemistry Technology	Suspensions

MEDLINE の統制語索引 (MeSH ターム)

Substances

Substances (6)

33069-62-4
Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)
$C_{47}H_{51}NO_{14}$
Taxol
Role: Nanomaterial, Synthetic Preparation, Therapeutic Use, Preparation, Biological Study, Uses

25322-68-3
$(C_2H_4O)_nH_2O$
Polyethylene glycol
Role: Modifier or Additive Use, Nanomaterial, Synthetic Preparation, Therapeutic Use, Uses, Preparation, Biological Study
Notes: reaction products with HSA and paclitaxel

7647-14-5
ClNa
Sodium chloride
Role: Modifier or Additive Use, Therapeutic Use, Uses, Biological Study

1133-64-8

67-66-3

50-99-7

CAplus と MEDLINE の化学物質索引 (CAS RN®)

© 2022 化学情報協会

検索例 1

◆ mRNA ワクチンの安定性に関する文献を検索する

- CAplus と MEDLINE の文献情報が得られる
- 検索と同時に解析が行われ、解析結果をフィルターで確認できる
- Concepts フィルターで統制語を確認し、興味のあるターム (脂質ナノ粒子) で絞り込み検索

© 2022 化学情報協会

CAS SciFinder^{n} の物質情報

ある物質に関して知りたい情報は？

CAS 登録番号は？
構造は？物性は？

薬理効果はある？
抗がん剤？睡眠薬？糖尿病治療薬？

どのような受容体や
酵素に作用する？

© 2022 化学情報協会

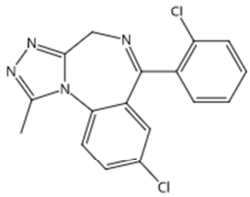
CAS SciFinder^n の物質情報

CAS Registry Number: 28911-01-5

References (3,262) | Reactions (31) | Suppliers (32)

CAS RN®

CAS SciFinder^n の
物質情報



注目する物質
(トリアゾラム)

分子式

$C_{17}H_{12}Cl_2N_4$

化学物質名

4*H*-[1,2,4]Triazolo[4,3-*a*][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-chlorophenyl)-1-methyl- (9CI, ACI)

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	343.21	-
Melting Point (Experimental)	233-235 °C	-
Boiling Point (Predicted)	535.6±60.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.46±0.1 g/cm^3	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	2.29±0.40	Most Basic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

Expand All | Collapse All

その他の化学物質名

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

実測物性値とスペクトル

Experimental Spectra

© 2022 化学情報協会

Bioactivity Indicator

Bioactivity Indicators

- Anti-infective agents
  - Antiviral agents (63)
  - Fungicides (55)
- Anti-inflammatory agents (74)
- Antidiabetic agents (51)
- Antitumor agents (66)
- Nervous system agents
  - 5-HT reuptake inhibitors (60)
  - Analgesics (129)
  - Anesthetics (50)
  - Anticonvulsants (127)
  - Antidepressants (182)
  - Antipsychotics (150)
  - Anxiolytics (185)
  - Central nervous system stimulants (63)
  - Hypnotics and Sedatives (310)
  - Opioids (97)
  - Psychotropics (50)
- Neuromuscular agents
  - Muscle relaxants (66)
- Receptor antagonists
  - Antihistamines (73)

抗感染症薬

抗がん剤

受容体拮抗薬

Bioactivity Indicator

当レコードの物質 (トリアゾラム) が
有する可能性が高い生物活性

© 2022 化学情報協会

Target Indicator

Target Indicators

- Chromoproteins
  - Cytochrome P450 CYP11B1 (10)
  - Cytochrome P450 CYP1A1 (15)
  - :
- Cytokines
  - Interleukin 6 (11)
- Enzymes
  - Alanine aminotransferase (16)
  - Alkaline phosphatase (14)
  - :
- Ligand-binding proteins
  - 5-HT receptors (10)
  - 5-HT2A receptors (16)
  - :
- Membrane proteins
  - Benzodiazepine receptors (47)
  - GABAA receptors (65)
- Metalloproteins
  - Cytochrome P450 CYP11B1 (10)
  - Cytochrome P450 CYP1A1 (15)
  - :
- Nuclear proteins
  - Pregnane X receptors (14)
- Plant-specific proteins
  - Aspartate aminotransferase (16)
- RNA formation factors
  - Pregnane X receptors (14)
- Signaling proteins
  - 5-HT receptors (10)
  - 5-HT2A receptors (16)
  - Pregnane X receptors (14)

酵素のアルカリフォスターゼに作用する

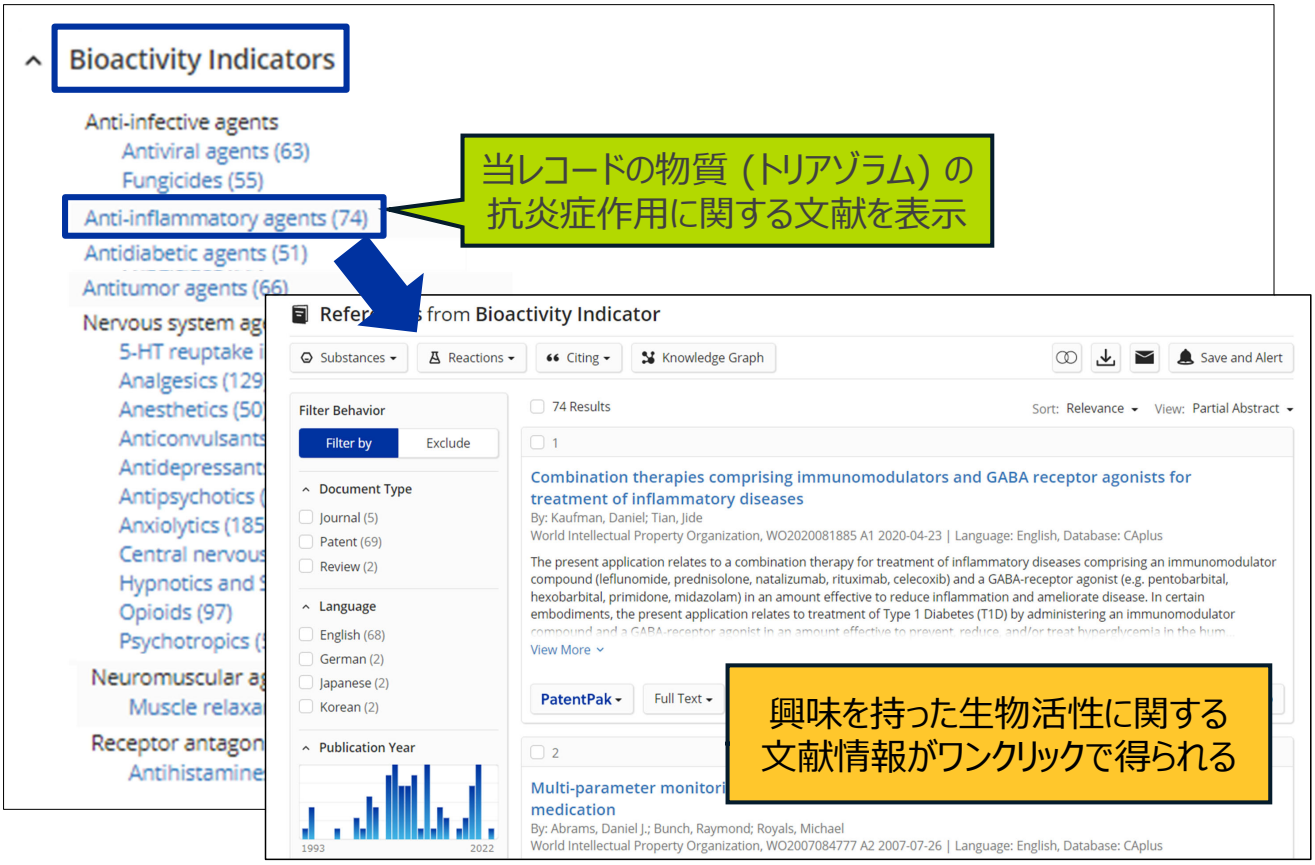
膜タンパク質の $GABA_A$ 受容体に作用する

Target Indicator

当レコードの物質 (トリアゾラム) が
作用する可能性が高い受容体や酵素

© 2022 化学情報協会

文献を得るにはリンクをクリック



© 2022 化学情報協会

検索例 2

◆ フェキソフェナジンの生物活性や作用する受容体・酵素について調べる

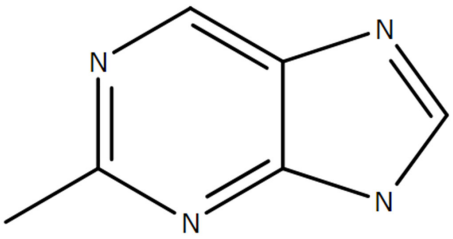
- ➢ CAS SciFinder^{n} で物質名称検索を行う
- ➢ 物質情報内にある
  Bioactivity Indicator と Target Indicator を確認する

© 2022 化学情報協会

検索例 3

◆ 下記の骨格を有する物質群は、どのような薬理効果を持つのかを調べる

- CAS SciFinder^{n} で構造検索を行い、部分構造検索の結果を表示する
- Bioactivity Indicator フィルターの解析結果を確認する



© 2022 化学情報協会

参考：生物活性関連情報の収録方法

◆ 生物活性に関連する文献から、生物活性に関するキーワードおよび化学物質を抽出し、抽出したキーワードに対して適切な Bioactivity Indicator と Target Indicator を割り当て、物質情報中に収録する

文献情報

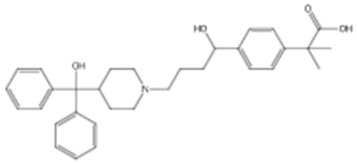
Concepts (統制語索引)

- Anti-inflammatory agents
- **Dermatitis**
- Histamine H1 receptors
- **Toxicity**

Substances (化学物質索引)

- **83799-24-0**
- **66357-35-5**

83499-24-0 の物質情報



Bioactivity Indicator

- Anti-inflammatory agents

Target Indicator

- Histamine H1 receptors

＊同一文献中の化学物質情報と、生物活性関連のキーワードを結び付けているため、直接関連しない情報同士が結びつくことがある

© 2022 化学情報協会

まとめ

- CAS SciFinder^{n} は、化学分野だけでなく、生物医学分野の文献データベース MEDLINE (PubMed の情報) も収録している

- 検索と同時に解析が行われるため、即時に解析結果を確認したり、解析結果のタームを使って絞り込み検索を行える

- 注目する物質の Bioactivity Indicator (有する可能性が高い生物活性) と Target Indicator (作用する可能性が高い受容体や酵素) を確認できる

© 2022 化学情報協会