

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.



情報検索に何をお使いですか？

文献検索には
PubMed (NLM 作成) や
Google Scholar (Google 作成) をご利用でしょうか？

配列検索には、
NCBI (NLM 作成) をご利用でしょうか？

CAS 作成の CAS SciFinder も医学分野の情報検索に役立ちます



CASとは

100年以上にわたり世界に科学情報を提供

- 米国化学会の一部門
- 1907 年設立
- 世界中の科学情報を収集
- 人手で整理した高品質な情報を提供
- 科学情報技術の先駆者として高度な AI 技術も開発
- CAS 製品は世界の企業・大学で利用されている

PHARMA
48 of the
TOP 50
pharma companies¹

ACADEMIC
100 of the
TOP 100
universities²

GOVERNMENT
10 of the
TOP 10
global patent offices³

BIOTECH
25 of the
TOP 25
biotech companies⁴

CHEMICAL
44 of the
TOP 50
chemical companies⁵

1. <https://cdn.sanity.io/files/0vv8moc6/pharmexec/339f103f01e043f652e39f8c0e72f3795fb71f60.pdf>
PharmaceuticalExecutive_June2022_watermark.pdf
2. <https://www.shanghairanking.com/rankings/gras/2022/RS0103>
3. <https://www.wipo.int/edocs/pubdocs/en/wipo-pub-943-2021-en-wipo-ip-facts-and-figures-2021.pdf>
4. <https://www.genengnews.com/a-lists/top-25-biotech-companies-of-2022/>
5. <https://cen.acs.org/business/finance/CENs-Global-Top-50-2022/100/i26>

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
- 薬理学的データ、ADMET 等の生物活性データへのアクセス



本日の内容

- CAS SciFinder の概要
- 文献検索
- 配列検索
- Q&A

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SCIFINDER の概要

6

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SciFinder とは

CAS 作成の研究者向け情報検索ツール

文献情報

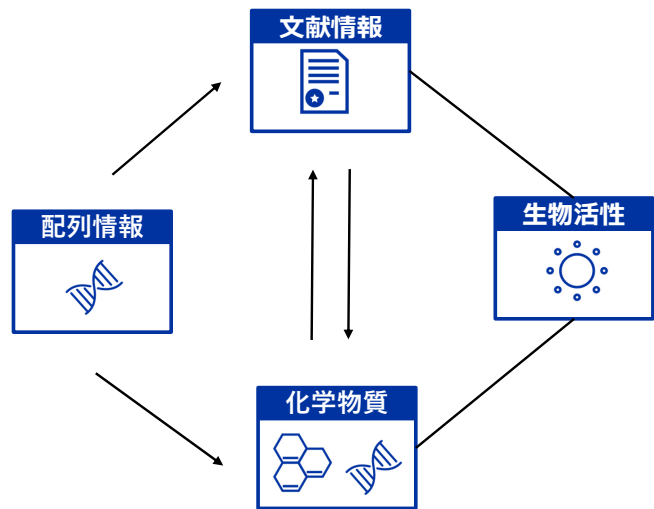
- CAS 作成：化学および周辺分野の雑誌論文、特許
- NML 作成：生物医学分野の論文（PubMed）

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

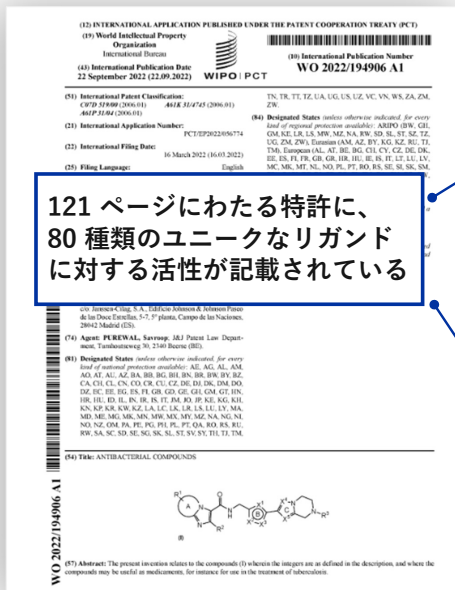
生物活性データ

- Pharmacological Data（薬理学的データ）
- ADMET（吸収、分布、代謝、排泄、毒性）



CAS SciFinder の生物活性データ

薬理学的データ、ADMET 情報を文献単位または物質単位で確認



Pharmacological Data（薬理学的データ）					
Ligand	TRRGET	PROCEDURE	PARAMETER	VALUE	UNIT
2839655-35-3	Potassium voltage-gated channel subfamily H member 2	Microsomal stability assay	IC50	30	μ m
2839655-73-9	Potassium voltage-gated channel subfamily H member 2	Microsomal stability assay	IC50	20.4	μ m

ADMET（吸収、分布、代謝、排泄、毒性）					
Ligand	TYPE	PROCEDURE	PARAMETER	VALUE	UNIT
2839655-73-9	Metabolism	Pharmacokinetic parameter was determined	CL(int)	231	μ L/min/mg
2839655-73-9	Metabolism	Pharmacokinetic parameter was determined	t1/2	0.275	hr
2839655-73-9	Toxicity	Mitochondrial toxicity assay	Mitochondrial toxicity	25	



文献検索

9

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SciFinder の文献情報

原文献の要点をまとめた資料 (二次資料)

原文献



CAS のスタッフが
人手で作成

世界 50 以上の言語の
文献の二次情報を
英語で作成し収録

CAS SciFinder の文献情報

タイトル

抄録 (Abstract)

ジャーナル名、著者名、
所属機関名など

統制語索引 (主題)

物質索引

生物活性データ

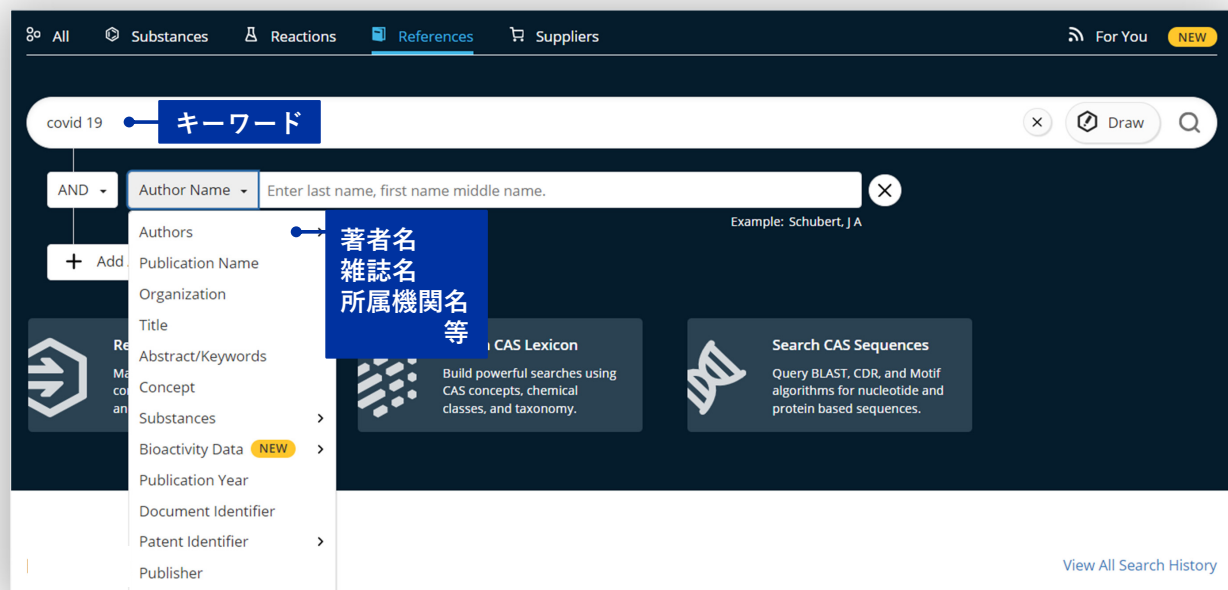
10

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS SciFinder の文献検索 - 検索画面

様々な観点から検索可能

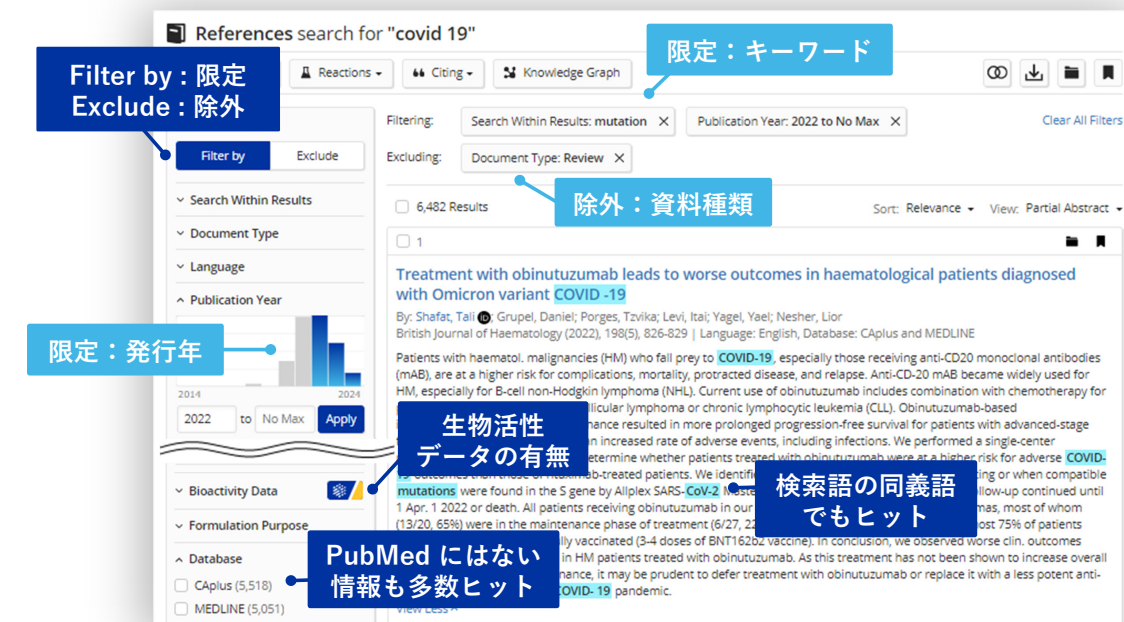


11 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



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



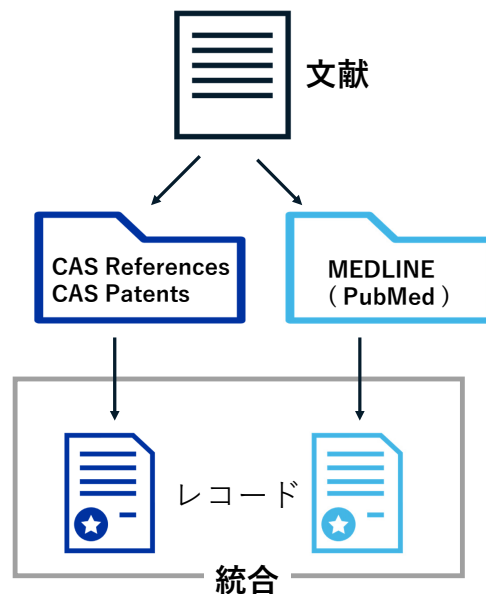
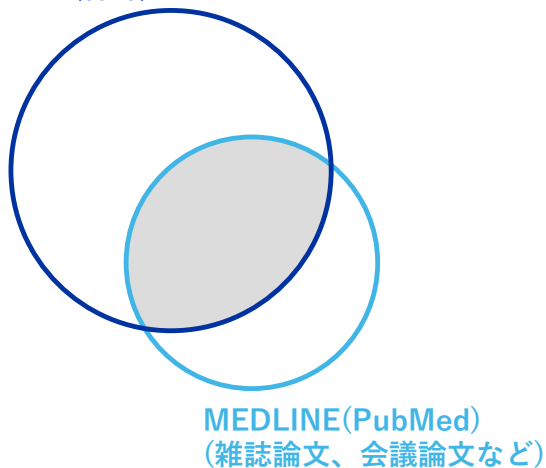
12 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



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)



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 screenshot shows a search result for the paper: "The substitutions L50F, E166A, and L167F in SARS-CoV-2 3CLpro are selected by a protease inhibitor in vitro and confer resistance to nirmatrelvir". The page includes a list of authors, the DOI (10.1128/mbio.02815-22), and a brief abstract. On the left, there is a sidebar with links to 'Concepts', 'Substances', 'Pharmacological Data', and 'Cited Documents'. At the bottom, there is a section for 'Publication Information' and 'Journal'. A blue box on the right side of the page contains the text: 'CAS のアナリストが新規性、有用性などを簡潔にまとめた抄録を新たに作成する場合がある'.

内容が把握しやすいように人手で整理されたデータ

15 © 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

16 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved



文献中で報告された生物活性データを確認できる

文献中で報告された生物活性データを確認できる

物質 (Ligand) ごとに
各情報を整理して収録

アッセイデータ

文献中で報告された化学物質の詳細情報も確認できる

文献中で報告された化学物質の詳細情報も確認できる

物質詳細情報へのアクセス

文献中で報告された
薬理学的データ

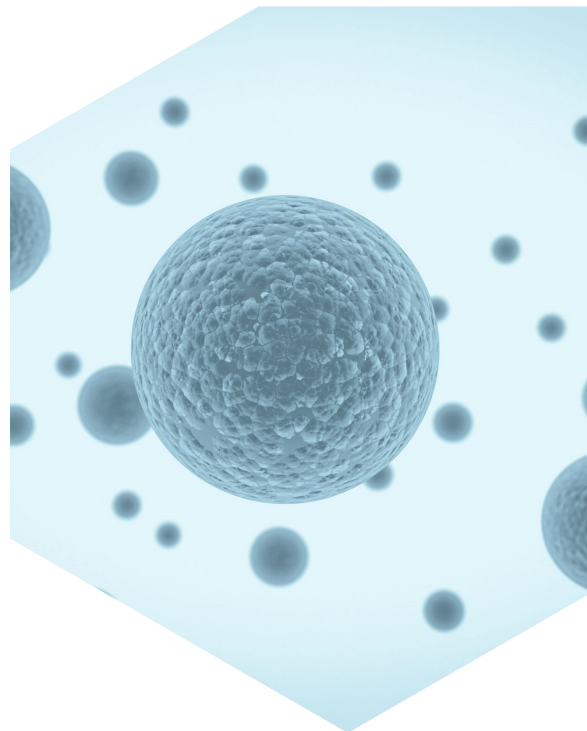
物質詳細情報では様々な資料で報告された薬理学的データ、ADMET をまとめて確認できる

デモンストレーション

新型コロナウイルスの突然変異に関する論文を検索

検索の流れ

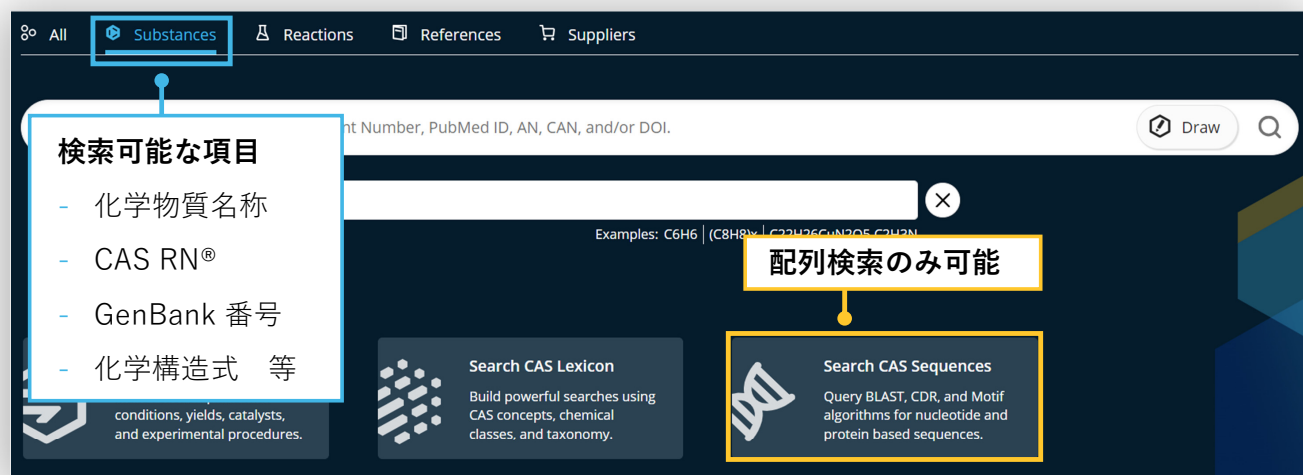
- キーワード検索：Covid 19
- 絞り込み①：search within results 「mutation」
- 絞り込み②：Publication Year (発行年)
- 絞り込み②：Document Type (資料種類)
- 表示順：Relevance
- 結果の確認 (二次情報)
- 原文献の取得
- 関連情報の確認



配列検索

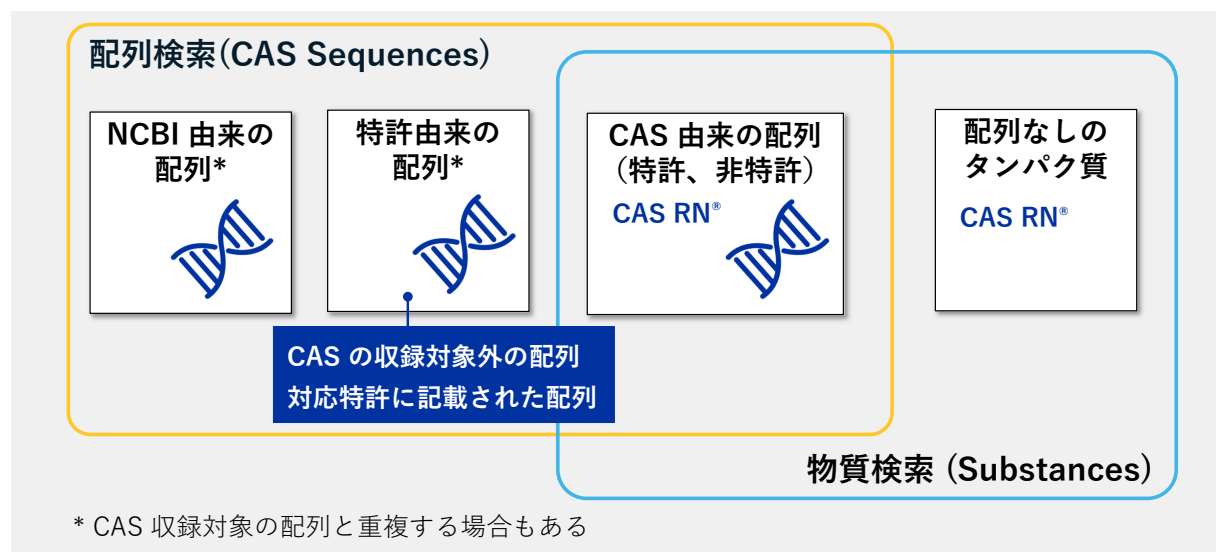
CAS SciFinder の物質検索

様々な角度から物質を検索できる



CAS SciFinder で検索できる核酸・タンパク質情報

検索対象によって、配列/物質検索を選択する



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

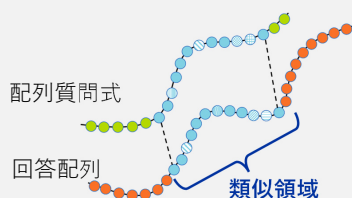


CAS SciFinder の配列検索の種類

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

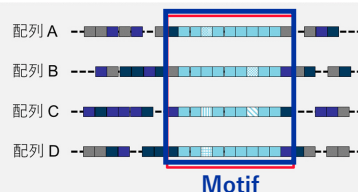
抗体と T 細胞受容体の CDR を指定した検索



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

The screenshot shows the 'Search CAS Sequences' page. Annotations include:

- .txt もしくは .fasta 形式での呼び出し**: Points to the 'Upload Sequence (.fasta or .txt)' button.
- 配列質問式**: Points to the 'Sequence Type' dropdown, currently set to 'Nucleotide'.
- 回答配列**: Points to the 'Search Within' section, which includes 'Nucleotides', 'Proteins', and 'Include NCBI Sequences'.
- パラメータの設定**: Points to the 'Advanced Sequence Search' section, which includes fields for 'Alignment Identity %', 'Query Coverage %', 'Word Size', 'BLAST Algorithm', 'E-Value', 'Match with Gaps?', 'Gap Costs', 'Reward for Match, Penalty for Mismatch', and 'Exclude Low Complexity Regions'.



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

The screenshot shows the 'Query Details' page for a search. Annotations include:

- .xlsx / .fasta 形式でダウンロード可能**: Points to the download icons in the top right corner.
- 期待値**: Points to the 'E-Value' filter in the left sidebar.
- 様々な計算値**: Points to the 'Query Coverage %', 'Subject Coverage %', and 'Alignment Identity %' filters in the left sidebar.
- 配列長**: Points to the 'Sequence Length' filter in the left sidebar.
- 生物種 (NCBI 由来の配列に限定)**: Points to the 'Organisms' filter in the left sidebar.
- アライメントの概要図**: Points to the alignment summary diagram showing the query and subject sequences.
- 回答配列の詳細**: Points to the 'Alignment' tab in the results section.
- 出典文献情報**: Points to the 'References' tab in the results section.
- 不一致コードを確認しやすい**: Points to the alignment data table, which shows the query sequence (Q) and subject sequence (S) with mismatches highlighted.



様々なフィルターによる絞り込みが可能



新型コロナウイルスのワクチンである Abdavomeran に類似した配列を検索する

[illegible]

まとめ

CAS SciFinder は医学分野の情報検索に役立つ

- 便利な検索機能、フィルターを使ってPubMed の情報を含む化学分野の網羅的な文献検索が可能
- NCBI 由来の配列を含む網羅的な配列検索が可能
ヒットした配列情報も分かりやすく表示
- 薬理学的データ、ADMET など、関連情報にもスムーズにアクセス可能



JAICI ヘルプデスク

Tel : 0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

Mail : support@jaici.or.jp

Thank you

Connect with us at cas.org

 linkedin.com/company/cas

 [@CASchemistry](https://twitter.com/CASchemistry)

