



2020年3月 https://scifinder-n.cas.org/



SciFinderⁿ 収録内容

■ SciFinderⁿ 概要

特長	 ・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 ・全 CAS 登録番号 (CAS RN[®])を収録した世界最大の化学物質データベース を収載.物質科学関連分野の情報収集に強い ・化学物質の合成ルート探索機能 Retrosynthesis Planner (P.17)を搭載 ・特許明細書へのスムーズなアクセスを可能とする PatentPak (P.8),および詳細 な合成手順を表示する MethodsNow Synthesis (P.16)を搭載
主な収録文献	 ・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),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 (CAplus)	● 生化学 36% 応用化学 25% 物理・無機・分析化学 24% 高分子化学 9% 有機化学 6%
収録化学物質	有機化合物 無機化合物 核酸,タンパク質 配位化合物 ポリマー 合金

■ SciFinder[®] で検索可能な情報

		(2020	年 3 月現在)
情報種類	収録内容	収録件数	収録年代
	化学および周辺分野の文献【CAplus】	5,100 万件以上	1808 年~
	生物医薬分野の文献情報【MEDLINE】	3,000 万件以上	1946 年~
诰 女	フルクーシュ様浩を今む特許【MAPPAT】	52 万件以上(特許)	1061 年~
		120 万件以上(マルクーシュ構造)	1301 4 13
	古い年代の化学分野の文献情報	300 万件以上	1830 年~
	【ChemZent】(オプション契約者のみ)	300 NHXT	1969 年
化学物質	化学物質名, CAS RN®, 分子式, 化学構造式,	2 億 2800 万姓以上	1800 年
	配列,物性データ,スペクトルなど【REGISTRY】		初頭~
	文献中の有機化学反応情報【CASPEACT】	1 億件以上(反応)	1840 年~
反応		180 万件以上(文献数)	
	合成文献情報【CAplus 由来】	1,400 万件以上	1907 年~
試変力々ログ	試薬力タログ情報【CHEMCATS】	世界の試薬供給業者から	随時更新
四天77日7		提供されたカタログ数百種	NE 147 文 初
規制	世界中の既存化学物質リストなど【CHEMLIST】	39 万件以上	1979 年~

■ 収録件数の変遷





検索初期画面

■ 検索初期画面

SciFinder"	* saved 🕓 History	Account:	
Search 检索項日	保友 检索履网	My CAS Profile	
		What's New?	ヘルプ
& All Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, etc.		Log Out	Log Out
Substances Enter a query	C	Draw Q	
A Reactions			
References 入力ボックス	構造作	乍図	
T Suppliers	ツー	ル	
December 3, 2019 1:17 PM Retrosynthesis: Retrosynthesis:		Open Plan	
0		Complete	
1:17 PM			
As Drawn (0). Substructure (9.694). Similarity (13K)	Edit	Rerun Search	
$\mathcal{L}_{\mathcal{O}} = \mathcal{L}_{\mathcal{O}}$			
November 28, 2019			
1:26 PM			
References: JP11097450 (1)	Edit	Rerun Search	

•	All 検索	→ P.3
•	References 検索(文献情報)	→ P.5
•	原文献の入手(PatentPak, Full Text)	→ P.8
•	Substances 検索(化学物質情報)	→ P.9
•	参考 : 化学構造検索の検索タイプ	→ P.13
•	参考 : マルクーシュ構造検索(MARPAT)	→ P.14
•	Reactions 検索(反応情報)	→ P.15
•	参考 :Retrosynthesis Planner	→ P.17
•	Suppliers 検索(カタログ情報)	→ P.19
•	参考 : Bioactivity Indicator と Target Indicator	→ P.20
•	回答の共有,保存,アラート	→ P.21
•	回答のダウンロード	→ P.22
•	検索履歴	→ P.22
•	ホームページ	→ P.23

Search	a dan kada b	入力	」ボックス		検索
& All	Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, e	tc.			
	caffeine	•		× 🔘 (oraw 🤇
A Reactions				R	_
References		CAS 豆球奋 入力	亏(CAS RN	~), 	
🛱 Suppliers					
SCIFINDER ⁿ	All - caffeine		× Ø Draw	۹ *	0
← Return to Home	-				
Show only	& All Answer Types	type			
Reactions (1,172)	Top two answers by relevance nonreach answer	type.			
References (97,407)	Substances (1)	化学物質	躗 情報		
Suppliers (150)	1				
	58-08-2				
各回答の表示					
(新しいタブで)	oty				
表示可能)	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂				
	Caffeine				
	■ 70K ▲ 1,172				
	Niew All Cubetrance				
	A Reactions (1.172)	토다	書 - 48		
	Scheme 1 (3 Reactions)	八 101	FI FIX		
	. 1 .	0,	0	1	Steps: 1
	XX + \	ls_0	→ \\	N	Yield: 74-99
	• Na		ON	Ň	
	E Suppliers (6)	Suppliers (43)	📜 Suppliers (142)	
	Expand Scheme				
		±₽.№	主 未已		
	(Crerences (97,407)	く医生	F ŦK		
	Caffeine and sports performance				
	By: Burke, Louise M. Applied Physiology, Nutrition, and Metabolism	(2008), 33(6), 1319-1334	l'Language: English. Datak	oase: CAplus	
	View Abstract ~				
	Full Text 🕶	O Substance (1)	A Reactions (m	• Cited By (142)	O Citation M
	2				
	Caffeine				
	By: Dews, P. B. Annual Review of Nutrition (1982), 2, 323-41 1	anguage: English, Datab	ase: CAplus		
	View Abstract ~				1210
	Full Text 🕶	Substance (1)		66 Cited By (52)	O Citation M
	View All References				
		コンダロク	1月 半区		
	Suppliers (150)				
	Supplier (150)	Substance	Purity Pu	rchasing Details	Availabili
	Supplier (150)	Substance	Purity Pu	rchasing Details	Availabili

■ 構造を入力して検索する場合は、Draw ボタンをクリックして、作図ツールで作図します.

Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, etc.		構造作図ツールの記動
Enter a query	Draw Q	

・ 作図ツールは、2 種類から選択できます.



・ 作図した構造が表示された状態で、検索を実行します.

Search	the second s		
& All	Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, etc.		
☑ Substances	Enter a query	🖉 Edit 🗕 🔍	検索実行
A Reactions		0 0 0 0	
References		IJJ	
😭 Suppliers		0- ~~ ~~	
		Edit Drawing Remove	

■ 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。

Search	Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, etc.			λεί • U5250590111836 × ⊘ Draw Q ★ ⊙ L
A AI O Substances A Reactions ■ References ★ Suppliers	Search by Keyword. CAA BIA. Pateent Number, etc.	> Oray	Restore to Home Sobord State Advantage Ad	<section-header> A • 0.00000111000 P</section-header>
				PATENTPAK • Full Text • O Substances (16) A Reactions (4)

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、および特許番号から検索します。
 - ・キーワード,特許番号

Search		
& All	Search by Keyword, Substance Name, CA	AS RN, Patent Number, etc.
☑ Substances	argan o	× 🕜 Draw
A Reactions	argan oil	
References	Argan tree Argon oxide (ArO)	検索語候桶の表示 (サジェスト機能)
😭 Suppliers	Argon oxide, ion(1+) Lipofructyl Argan LS 9779	

- キーワードを組み合わせる場合は、演算子 (AND, OR, NOT) を利用できます.
- 複数の特許番号を検索する場合は、特許番号をスペースで区切って入力します。

• 著者名, 雑誌書誌情報, 機関名

		Advanced Reference Search
Search	Constant of Constant Street	Use up to ten search criteria to make your Reference search.
& All	Search by Keyword, Substance Name. CAS RN, Patent Number, etc.	Author — 著者名
O Substances	Enter a query	Author Name (Last, First Middle)
A Reactions	Us Advanced search or Author, Journal, or Organization	Tubert JA
References	Advanced Search	Add Another Author
🛱 Suppliers		AND
		雑誌書誌情報
		Journal Name
		Volume Issue Starting Page 雑
		Title Word(s) 巻 号 開始ペー
		Ex: Anshiotic
		Add Another Journal
		AND
		Organization ● 機関名
		Ei: Bayer, Dupont
		Add Another Organization

- 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.



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.



原文献の入手 (PatentPak, Full Text)

■ PatentPak ボタンから Viewer をクリックすると、主要な化学物質の記載位置が分かる 特許明細書が表示されます。



- 原報を入手する場合は、Full Text リンクをクリックします.
 - ・ View all Sources をクリックすると、原報へのすべてのリンクが表示されます.

椎応調く	ての場合				
Characterizati	on, sensorial evalu	ation and moisturi	zing efficacy of n	anolipidgel forn	nulations
By: Estanqueiro, M International Journ View Reference De	.; Conceicao, J.; Amaral, M al of Cosmetic Science (2 tail	M. H.; Sousa Lobo, J. M. 2014), 36(2), 159-166 Lar	nguage: English, Datab	ase: CAplus	
View Abstract ~					
Full Text +		Q Substances (8)	a hourse(0)	66 Cited By (6)	② Citation Map
DOI View all Sources By: Boucetta, Kenz	A 2001: 雑誌 View	に 情報への直接 all Sources	接リンク	sal women?	
たまの+	原報	へのすべての	リンク	pda, Yanya	
特許のは	易合	へのすべての	リンク	juda, ranya	
特許のな Lip compositic By: Debeaud, Rosh World Intellectual J View Reference De	易合 Sanak; Imbert, Regine Property Organization, W tail	へのすべての Inverse emulsions c	のリンク comprising a hum 7-02 Language: Engli	hectant sh, Database: CAplus	
特許のは Lip compositio By: Debeaud, Rosh World Intellectual I View Reference De View Abstract ~	原報 易合 ons in the form of i anaki Imbert, Regine Property Organization, W tail	へのすべての inverse emulsions c	ロリンク comprising a hum 7-02 Language: Engli	nectant	
特許の加 Lip compositio By: Debeaud, Rosh World Intellectual I View Reference De View Abstract ~ PATENTPAK -	原報 易合 ons in the form of l anak; Imbert, Regine Property Organization, W tail	へのすべての Inverse emulsions c (02015097185 A1 2015-0: O Substances (39)	ロリンク comprising a hum 7-02 Language: Engli	ectant sh, Database: CAplus	O Citation Map
特許のは Lip compositio By: Debeaud, Rosh World Intellectual I View Reference De View Abstract ~ PATENTPAK -	原報 易合 ons in the form of i anak; Imbert, Regine Property Organization, W tail Full Text ・ Espacenet View all Sources	へのすべての Inverse emulsions c (02015097185 A1 2015-0: O Substances (39) Espacenet	リンク comprising a hum 7-02 Language: Engli していたいのかい。 : 欧州特許F	eectant sh, Database: CAplus ・・ Cited By(1) テのサイト	Citation Map

Substances 検索(化学物質情報)

- 化学物質検索は、化学物質の構造式、名称、CAS 登録番号 (CAS RN[®])、分子式等から 検索します.
 - ・化学物質名, CAS 登録番号 (CAS RN®)

Search		
& All	Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, et	
O Substances	caffeine	× 🖉 Draw 🔍
A Reactions	Caffeine substance	e Pro
References	Caffeine citrate Caffeine, citrate (1:1)	ー 検索語候補の表示
🖌 Suppliers	Caffeine benzoate sodium Caffeine sodium benzoate	(リノエスト版化)
	Caffeine, compd. with sodium benzoate	

- 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 スペースで区切って入力します.
- 化学構造式

& All	Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.	
O Substances	Enter á query	C Edit -
A Reactions	Use Advanced Search for Molecular Formula, Substance Property, or Experimental Spectra	0
References		T T T
Suppliers	(マルクーシュ構造の検索も可能(P.14)	•
	https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/	dit Drawing Remo

- 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 (P.14).
- ・ 分子式,物性値,スペクトルピーク値

Search		E Deferencer		
& All	search Advanced S	Search	Molecular Formula Enter one Molecular Formula.	分子式
O Substances	Enter a quer		EX: C6H6 (C8H8)x	
A Reactions	Us Advanced Search for Morecular	Formula	C22H26CuH205.C2H3N Add Another Molecular Formula	
References			AND	
🛱 Suppliers			Substance Property Enter Val	物性値
			- Select One -	
			Add Another Property	
			AND	スペクト
			Experimental Spectra Select Spectrum Enter Val	ピーク値
			- Select One -	
			Add Another Spectra	

■ 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.13 を参照)



• 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.

cture Match	ibstances (1,226)		Sort: Relevance 🗸 View Partial 🗸
Drawn (18)	References 🕶 🚊 Reactions 🕶 🎽 Suppli	ers •	🐺 💌 ★ Save
bstructure (6,795)			
nilarity (13K)	1 2	01.5	3
Juze Structure Precision	2088208-	91-5 ×	2086337-11-1
HO	но но	And Internet	HO 13- 0 0
r by		the state	ye ye
Commercial Availability	HO	H	HOT
Substance Detail	of 1.226)		Next +
References (2,943)	62) 実 Suppliers (117) 日	連情報へのリング	7 🖟 💌 \star Save
305-01-1			
CAS RN [®]	HO	0 .0 .	
			一構造図
分子式	HU		
CoHeOr			
2H-1-Benzopyran-2-one, 6,7-dihydroxy-		基本物性值	
Mail Dhistori Desperator	Malua		
Molecular Weight	178.14	- Condition	
Melting Point (Experimental)	276 °C		
Boiling Point (Predicted)	469.7±45.0 °C	Press: 760 To	ar .
Density (Experimental)	1.56 g/cm ³		
pKa (Predicted)	7.74±0.20	Most Acidic T	emp: 25 °C
Experimental Properties Spectra			
V Other Names	化学物質名		Expand Air Collapse Air
- Cunerimental Desperties			
Experimental Properties	天则初住他		
Experimental Spectra	美測スヘクトル		
¹ H NMR ¹³ C NMR	Hesero NMR IR	Mass	Raman UV and Visible
		O Proton NMR Sp	ectrum Detail (Sof5)
View Proton NMR Spectrum			
			If
View Proton NMR Spectrum		➡	
Proton NMR Spectrum - 10 Sources			
Sources	スペクトルの出典		
(1) Copyright Blo-Rad Laboratories. All Rig	hts Reserved.		
(4) Spectral data were obtained from Adva	anced Chemistry Development, Inc.		
(5) Razdan, T. K.; Phytochemistry, (1987), 2	(6(7), 2063-9, CAplus		
(6) Shi, Shuyun; Journal of Chromatograph	iy A, (2008), 1209(1-2), 145-152, CAplus		
(7) Liu, Renmin; Journal of Chromatograph	ıy A, (2005), 1072(2), 195-199, CAplus		
u Prodictor Proportion	고 拍 收益性		
Fredicted Properties			
 Predicted Spectra 	予想スペクトル	14-14-14-14-14-14-14-14-14-14-14-14-14-1	
Bioactivity Indicators Bioactivity Indicators	oactivity Indicator (P.20)	the site of the site of the site of	- + P
 Target Indicators 	Target Indicator (P.20)	Spectrum Summary	Conditions
✓ Regulatory Information	既存化学物質リスト情報	Spectrum ID 11phy10n1_36	i.H Working Frequency 400 MHz
 Additional Details 		Peak Data 7,86, 6.97, 6.74	4, 6,16 ppm Solvent DM50-d ₆ (2206-27-1)
		Source Spectral data v	were obtained from

- ・ すべての化学物質に関する関連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関連情報を取得する場合には、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。





参考: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 つの検索タイプで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	・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
(完全一致検索)	・互変異性体も含む
Substructure	・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
(部分構造検索)	物質を検索する
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



参考:マルクーシュ構造検索(MARPAT)

■ 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 (他 1) R⁶ R⁵ Q R⁴ R³ R²

(式中、 R¹ と R² は同一または異なって水素またはアルキル基を示すが、少なくとも一つ はアルキル基である。 R³ と R⁴ と R⁵ と R⁶ は同一または異なって水素または水酸基を示す が、少なくとも一つは水酸基である。但し、 R¹ が水素, R² がメチル基, R³ が水素, R⁴ が水素, R⁵ が水酸基, R⁶ が水素の場合を除く)

■ 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.

õõ All	Search by Substance Name, CAS KN, Patent Number, etc.	
Substances	Enter a query	🖉 Edit 🗕 🔾
A Reactions	Use Advanced Search for Molecular Formula, Substance Property, or Experimental Spectra	0. 0. 0. 0
References		III
😭 Suppliers		
		Edit Drawing Remov

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。



Reactions 検索(反応情報)

■ 反応検索は、化学物質名、CAS RN®、および構造質問式等から実行します.

Search	Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patr	構造作図	ツールの起動
O Substances	Enter a query	C Edit	S I Ser or or you serve to a.
A Reactions			C + Eb X + R +
References	物質名称,特許番号	ထ₂−ထိ	
🐂 Suppliers	からも検索可能		
		Edit Drawing Remove	
		Create Retrosynthesis Plan	
Recent Search History		Set Plan Options	Carrell Zith, Carles Zithan, Challerse Tron Original Constraints
Retrosynt	hesis Planner (P 17)		
↓ Rotrosynt			
逆合成解析を	行い、化学物質の合成ルートを	を自動的に構築する機	能です.
予想反応を含	めた合成ルートを提案できます		

■ 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.



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. スキームの詳細情報を見るには、回答一覧で、Expand Scheme をクリックします.

- Experimental Protocols をクリックすると、詳細な実験項情報が表示されます.



参考:Retrosynthesis Planner

- Retrosynthesis Planner 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。
 - Reactions 画面からスタートする場合
 - Reactions 画面で生成物の構造を作図します. OK をクリックして構造作図ツールを 閉じた後,構造図の下に表示される Create Retrosynthesis Plan をクリックします.

Search		
& All	Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.	
O Substances	Enter a query	💋 Edit 🔺 🔍
A Reactions		* >-/
References		a A.
🐂 Suppliers		Alment
		Edit Drawing Remove
		Create Retrosynthesis Plan
		Set Plan Options

- 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 Create Retrosynthesis Plan をクリックします.

	R ⁿ Substances • Enter a query	Edit -	Q * 0 *
A CAS SOLUTION	CAS RN 876251-00-7		×
 Similarity 	CAS Name		D .
85-89 (9)	N-[3-[3,7-Dihydro-6-(1H-indol-3-yl)		for the
80-84 (17)	oxoimidazo[1,2-a]p		
75-79 (2)		(5)	10-6-(1H-indol-3-yl)-2-(1-
70-74 (12)			3-oxoimidazo[1,2-a]
65-69 (26)			the second se
60-64 (293)		NNN	1 E
 Commercial Availabilit 	y		Reaction
Available (2)	Substance Detail		NH ₂
Not Available (7)	Reactions (4)		а та с
~ Reaction Role	A Suptherize (2)	NH NH	NH
Product (4)	Synthesize (S)	Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)	and the
Reactant (2)	Create Retrosynthesis Plan		4.
~ Reference Role	References (7)		Canal T.
Analytical Study (3)	📜 Suppliers (2)	🖉 Edit Structure 🗕 Reset 🕂 🐺	stereochemistry shown
Biological Study (5) Preparation (5)	N-[3-[3,7-Dihydro-6-[1H-ind -1-methylpropyl]-3-oxoimic	ol-3-yl)-2-[(15) methylpropyl)-3-oxoimidazo[1,2-ø] lazo[1,2-ø]p pyrazi	Guanidine, [3-[3,7-dihydro-2-[(15)-1- methylpropy]]-3-oxo-6-(4,5,6,7-tetrah

- ・ 予測合成ルートの作成には時間がかかる場合があります. そのような場合には, いったん他の 検索を行ったり, SciFinder[®]の画面を閉じて終了することもできます.
 - 合成ルートの作成が完了すると、メールが配信されます.メール中のリンクから、 合成プランを直接表示できます.

<u>作成した Retrosynthesis Plan の呼び出し</u>

作成した	Retrosynt	thesis Plan	は, ★	(保存した回答)	や	③ (検索履歴)	から呼び出すことが
できます.	作成した	Retrosynth	esis Plan	の有効期間は	90	 日間です.	

- Retrosynthesis 画面には Overview と Steps のタブが表示され, 既知反応は赤色で, 予測反応は緑色で表示されます.
 - ・ Overview タブには、合成ルートの全体図と、反応全体の収率や入手可能な試薬とその概算 価格が表示されます.



- Steps タブには, Overview で表示された合成ルートの各ステップの情報が表示されます.
 - 各ステップの反応の詳細や出典情報を確認する場合は Evidence をクリックします.
 - 別の合成ルートを検討したい場合には、Alternative Steps または (四) (四) をクリックします。
 表示された代替反応中の Select をクリックすると、選択した反応を組み込んだ合成 ルートに変わります。



Suppliers 検索(カタログ情報)

■ 化学物質の市販カタログ情報を簡単に探せます。

Search by Substance Name, CAS RN, etc.	
Coumarin 540	× 🕢 Draw Q
Coumarin 540A 使 密 語 医 桶 の 表 示 Coumarin 440 (サジェスト機 能)	構造質問式で検索すると
Coumarin 504	一 元 至 一 政 検 案 ぐ ビットした 物質に 関 するカタログ 情 義
	Search by Substance Name, CAS RN, etc. Coumarin 540 Coumarin 540 Coumarin 540 Coumarin 504 Coumarin 504

- 回答は、カタログ業者のアルファベット順に表示されます。
 - ・

 ・
 と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.



参考: Bioactivity Indicator と Target Indicator

- ・ 化学物質レコードには Bioactivity Indicator と Target Indicator が収録されています.
 - Bioactivity Indicator 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 Indicator 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.

	са 3(S Registry Number D5-01-1		
		F		0 0
	~	Predicted Spectra		
Bioactivity Indicator	•^	Bioactivity Indicators	References (74) Q Substances - A Reaction	Anti-inflammatory agents に関して 記載されている可能性のある文献
		Antitumor agents (120)		記載でしている可能性のある人族
Target Indicator	•	Target Indicators Apoptosis-regulating proteins Bax proteins (24)	Esculetin inhibits the inflamm macrophages and adipocytes By: Kim, Younghwa: Park, Yooheon: Na Food & Function (2014), 5(9), 2371-237 View Abtract ×	natory response by inducing heme oxygenase-1 in cocultured s imkoong. Seulg: Lee, Junsoo 7 Language: English, Database: CAplus
	0	Bcl-2 proteins (23) Cell cycle regulatory proteins Cyclin D1 (10)	Full Text •	Substances (4) Substances (4) Generating (10) Generating (10) Generating (10) Generating (10)
		Chromoproteins Cytochrome c (18) Enzymes Alanine aminotransferase (18) Aldehyde reductase (11) Arachidonate 5-lipoxygenase (16) Arachidonate lipoxygenase (11) Caspase-3 (32)	Anti-oxidative and nitric oxid the fruits of Actinidia arguta By: Lim, Hyun-Woo; Kang, Seung Jin; PA Natural Product Sciences (2006), 12(4), View Abstract ~ Full Text ~	e production inhibitory activities of phenolic compounds from ark, Min; Yoon, Jung-Hye; Han, Byeong-Hoon; Chol, Sun-Eun; Lee, Min-Won 221-225 Language: English, Database: CAplus Substances (B)
		Caspase-8 (10) Caspase-9 (18) Catalase (11) Cucloxydenase (18)	Mechanism and effect of escu disease	uletin in an experimental animal model of inflammatory bowel
		Cyclooxygenase 1 (10) Cyclooxygenase 2 (14) Glutathione peroxidase (11) Lipoxygenase, general (11) Mitacos activitade percini kinaco 1 (12)	References (18) Q Substances - 2	Cytochrome c への作用に関して 記載されている可能性のある文献
		Mitogen-activated protein kinase 1 (12) Poly(ADP-ribose) polymerase (13) Protein kinase Akt (11) Superoxide dismutase (21) Xanthine oxidase (10) Metallogroteins	I Esculetin, a natural coumarin associated mitochondrial app human breast cancer cells By: Chang, Hong Tai; Chau, Chiang-Tin Tumor Biology (2016), 37(4), 4665-4678 View Abstract ~	n compound, evokes Ca ²⁺ movement and activation of Ca ²⁺ - optotic pathways that involved cell cycle arrest in ZR-75-1 g; Lin, You-Sheng; Shieh, Pochuen; Kuo, Dalh-Huang; Jan, Chung-Ren; Liang, Wei-Zhe 8 Language: English, Database: CAplus
	D	Cytochrome c (18) Phosphoproteins p53 (protein) (11)	Full Text •	Substances (8) A mainteen no 44 Cited By (12) O Citation Map
		p53 (protein) (11)	Esculetin induces mitochond By: Yang, Jeong-Veh; Della-Fera, Mary A Apoptosis (2006), 11(8), 1371-1378 La View Abstract ~	ria-mediated apoptosis in 3T3-L1 adipocytes inne; Baile, Clifton A. nguage: English, Database: Caplus
	~	Regulatory Information	Full Text 👻	O Substances (6)
		:	3	
			Esculetin induces apoptosis of	of SMMC-7721 cells through IGF-1/PI3K/Akt-mediated

回答の共有,保存,アラート

- 検索結果は、他のユーザーと共有したり、保存することができます.
 - •検索結果を共有する場合には、一覧で 🔽 をクリックします.
 - 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、同一機関内のユーザーに限定されます.
 - Save をクリックすると検索式を保存できます。
 - 得られた回答を保存したい場合には、保存したい回答にチェックを入れて Save をクリック します。
 - 設定時に "As Available" (更新毎), "Weekly" または "Monthly" 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.



- 保存した回答やアラートの回答は ★ マークをクリックして確認します.



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.

Based on your query, we've	References	(120)	۲ ۲ ۲		View: No Abstract
returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set?		A married - 66 Citeoroy			🕽 🗢 🗴 Save
Learn about result relevance.	Ont Combination of arga	n oil and phospholipids for	the dev	Download Results PDF Rich Text (.rtf)	posome-
Filter by	like formulation able By: Manca, Maria Letizia; M	e to improve skin hydration atricardi, Pietro; Cencetti, Claudia; P	eris, Jose E	Download Detailed Results	udia; Escribano,
Document Type	Elvira; Zaru, Marco; Fadda, I International Journal of Pha	Anna Maria; Manconi, Mana armaceutics (Amsterdam, Netherlan	ds) (2016),	Excel (.xisx)	ih, Database:
 Journal (9) Patent (111) 	CAplus View Abstract ~			PDF (max 100) Quarter((typ)	
Review (3)	Full Text -	Substance (1)	A Po	Rich Text (.rtf)	② Citation Map
Clinical Trial (1)			_	Tagged (.txt)	
Letter (1)	2		l		
~ Language	Combination of arga	n oll and phospholipids for	the deve	elopment of an effective	liposome-

- ・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 1,000 件です.
- 累積 5,000 件を超えて回答をダウンロードし、電子的に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、1 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、History をクリックします.

回答の 種類を限定	Filter by	() Search Hist	OTV row		Ţ	履歴の削除
		Selected	(50) (50)			
		January 9, 2020				百炷壶
		 1:34 PM Substances 	Patent Markush: As Drawn (48) Substructure (522)	1	Rerun	FT TX X
	* Date Start Date mm/ddyyyy to mm/dd/yyy く January, 2020 SU MO TU WE TH FR 54 5 6 7 8 9 10 H 日日は15 H6 11 除する場合 に選択		200200GUre (222)		Edit S	earch ● 検索式の
		January 8, 2020				編 果
		4:47 PM				
		A Reactions	As Drawn (0) Substructure (1.497) Similarity (14K)	&-8	Edit S	earch
		3:40 PM				
			As Drawn (237) Substructure (2.963)		Rerun	Search



■ 化学情報協会のホームページでは、SciFinder[®] の技術資料や自習用ツールを多数掲載して おります.





