



化学情報協会 総合カタログ

Contribute to the Advancement of Science and
Technology in Japan and the Rest of the World
as a Portal to Chemical Information

P02	① 研究者向け科学情報ソリューション CAS SciFinder Discovery Platform™
P03 - P07	② 研究者向け科学情報検索ツール CAS SciFinder®
P08	③ 分析情報検索ツール CAS Analytical Methods™
P09	④ 製剤・配合検索ツール CAS Formulus®
P10	⑤ 化学物質規制情報検索ツール CAS Chemical Compliance Index™
P11 - P12	⑥ 創薬情報検索ツール CAS BioFinder™
P13	⑦ 知財・情報担当者向け科学情報ソリューション STN IP Protection Suite™
P14 - P16	⑧ 知財・情報担当者向け科学情報検索ツール CAS IP Finder, powered by STN™
P17	⑨ 特許モニタリングツール FIZ PatMon
P18	⑩ Reprints Desk が提供する原報複写サービス Article Galaxy
P19 - P20	⑪ CAS 登録番号サービス 化学物質命名サービス・IES サービス (Inventory Expert Service)・CAS Registry Lookup サービス
P21	⑫ CAS RN® を使用するためのライセンス CAS 登録番号 (CAS RN®) ライセンス
P22	⑬ 企業製品カタログ登録サービス CAS Chemical Supplier Insights™
P23 - P24	⑭ JAICI 機械翻訳サービス JAICI AutoTrans
P25	⑮ JAICI 機械翻訳サービス JAICI ProTranslator EXPRESS-Light
P26	⑯ JAICI 辞書サービス JAICI Science Dictionary Pro
P27 - P28	⑰ 有機系結晶構造データベースと関連ソフト CSD-Core / CSD-Discovery / CSD-Materials / CSD-Enterprise
P29 - P30	⑱ 無機材料関連データベース ICSD / PHASE / MPDS
P31	⑲ 質量スペクトルデータベース NIST23 / Wiley Registry 2023
P32	⑳ オンライン辞典 CHEMnetBASE
P33 - P34	㉑ 医薬・化学・バイオの特許調査サービス 知財情報センター (SHIPS)

※カタログ内で記載している会社名及び商品名は商標または登録商標です。
※カタログ内本文中では、TM、®マークは明記しておりません。

製品・サービスについての情報は、化学情報協会ホームページでもご覧いただけます。
<https://www.jaici.or.jp/solutions/>

CAS SciFinder Discovery Platform™

科学・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™ とは？

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、科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 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

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 Chemical Compliance Index™

物質規制情報の検索ツール

世界の規制情報を一括検索

※教育・政府機関は、オプション契約が必要です。

お問い合わせ先

情報事業部

サービス全般

TEL:0120-151-462 Email:customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク

TEL:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp



CAS SciFinder®

科学・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® とは？

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。



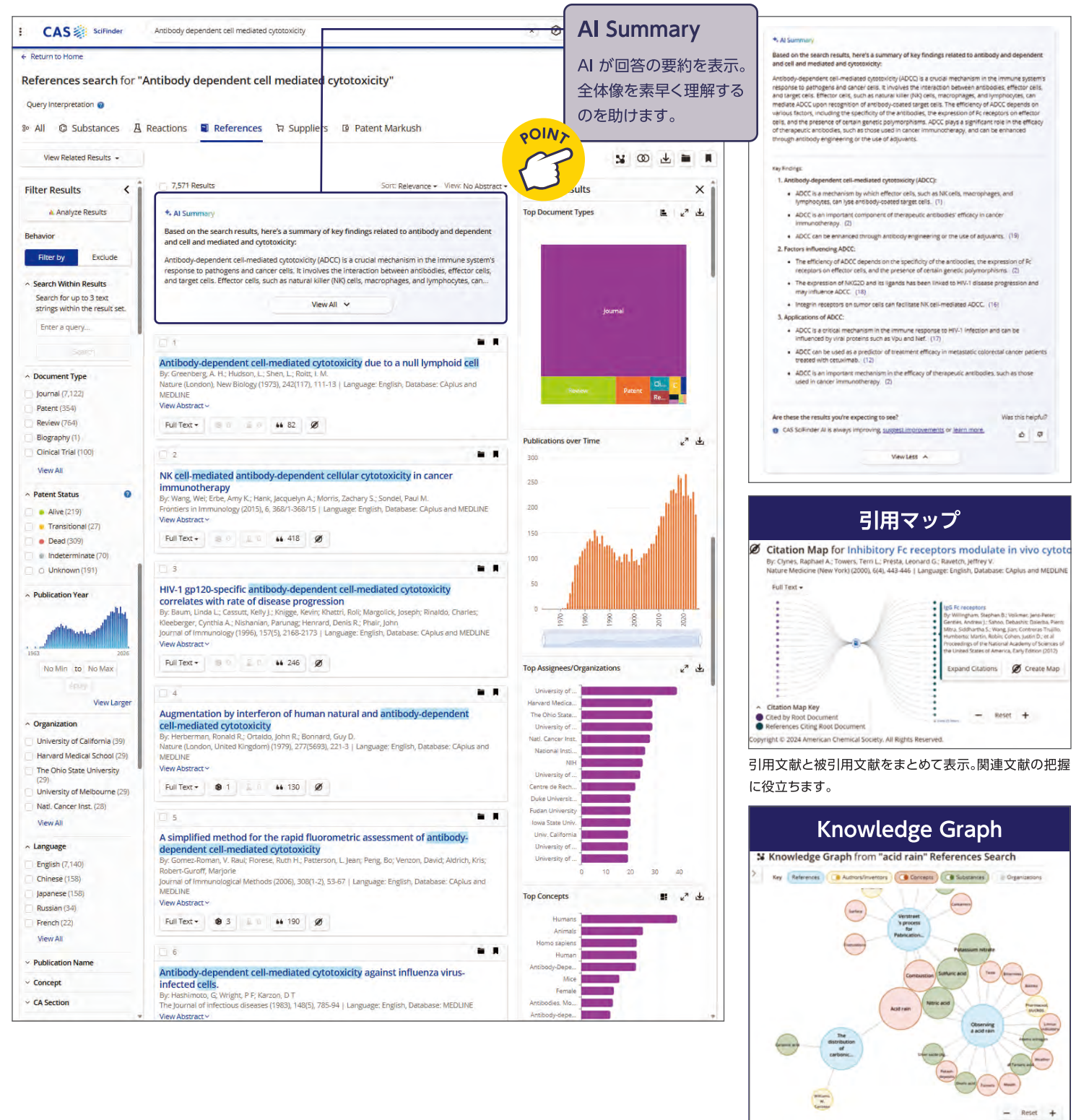
主要コンテンツ

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、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。



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。

特許の先行技術文献検索を自動検索、特許明細書は物質記載位置付きで確認

特許情報

世界 100ヶ国以上の国や特許発行機関から発行された特許とそのファミリー情報を収録。特許ステータスを確認しながら、条件に応じた絞り込み検索が可能です。

さらに、AI ベースの検索機能がユーザーをサポート。特許調査の初心者でも簡単に先行技術文献を調べることができます。

特許情報

特許ファミリー

クレーム

特許分類

Pharmaceutical composition comprising esketamine and duloxetine for treatment of NMDAR antagonist-responsive disorder

In this Patent

Claims

Classifications

CAS Concepts

Substances

Inventor: Javitt, Daniel C.

The invention relates to a combination treatments for use in treatment of NMDAR antagonist-responsive disorders such as depression, which can simultaneously alleviate the anxiogenic side effects of certain antidepressant and antipsychotic medications, thereby enabling continued and improved antidepressant and antipsychotic treatment; and method for treatment of NMDAR-antagonist responsive disorders while simultaneously reducing medicament side effects, particularly anxiety, akathisia, and associated suicidality. The pharmaceutical composition comprises essentially of two pharmaceutically active agents, wherein the first pharmaceutically active agent is a ketamine agent, and the second pharmaceutically active agent is an antidepressant agent.

Keywords: esketamine duloxetine pharmaceutical composition NMDAR antagonist responsive disorder treatment

PatentPakGet Prior Art AnalysisFull Text

Patent

Patent Number	Publication Date	Application Number	Application Date	Kind Code
US20250302825	2025-10-02	US2025-19234366	2025-06-11	A1

Assignee: GlyTech LLC, United States

Source: United States
CODEN: USXXCO

Database Information: AN: 2025-2412687
CAN: 192-250864
CAPus

Language: English

Patent Number	Publication Date	Application Number	Application Date	Patent Status	Status Date		
US20250302825 A1	English	PatentPak PDF	2025-10-02	US2025-19234366	2025-06-11	Alive	2025-10-09
CA2826180 A1	English	PatentPak PDF	2012-08-09	CA2012-2826180	2012-01-30	Alive	2020-11-20
WO2012104852 A1	English	PatentPak PDF	2012-08-09	WO2012-1450034	2012-01-30	Dead	2020-12-02
IL227611 A	English		2013-09-30	IL2012-227611	2012-01-30	Unknown	-
EP2670409 A1	English		2013-12-11	EP2012-709702	2012-01-30	Indeterminate	2020-11-06
EP2670409 B1	English	PatentPak PDF	2018-04-18	EP2012-709702	2012-01-30	Indeterminate	2020-11-06
ES2673956 T3	Spanish	PatentPak PDF	2018-06-26	ES2012-709702	2012-01-30	Alive	2020-11-21
CA2826180 C	English	PatentPak PDF	2020-09-01	CA2012-2826180	2012-01-30	Alive	2020-11-20
US20140018348 A1	English	PatentPak PDF	2014-01-16	US2013-13936198	2013-07-07	Alive	2020-11-21
US9737531 B2	English	PatentPak PDF	2017-08-22	US2013-13936198	2013-07-07	Alive	2020-11-21
CA2878565 A1	English		2014-01-16	CA2013-2878565	2013-07-09	Dead	2022-04-28
WO2014011590 A2	English	PatentPak PDF	2014-01-16	WO2013-US49653	2013-07-09	Dead	2020-12-02
WO2014011590 A3	English	PatentPak PDF	2014-02-27	WO2013-US49653	2013-07-09	Dead	2020-12-02
WO2015011590 A1	English	PatentPak PDF	2015-02-19	AU2013-288827	2013-07-09	Alive	2020-11-21

Claims text may be based on automatic Optical Character Recognition processes.

1

What is claimed is:

A pharmaceutical composition for treatment of an NMDAR antagonist-responsive disorder, consisting essentially of two pharmaceutically active agents, wherein the first pharmaceutically active agent is a ketamine agent, and the second pharmaceutically active agent is an antidepressant agent.

2

The pharmaceutical composition of claim 1, wherein the ketamine agent is racemic (R,S) ketamine, S-ketamine (esketamine), or R-ketamine (arketamine), and wherein the ketamine agent is formulated for provision at an acutely or intermittent dose of 0.08-8.0 mg/kg.

3

The pharmaceutical composition of claim 2, wherein the ketamine and antidepressant agents are formulated for oral administration.

4

The pharmaceutical composition of claim 2, wherein the ketamine agent is formulated for parenteral administration, and the antidepressant agent is formulated for oral administration.

5

The pharmaceutical composition of claim 1, wherein the ketamine agent and antidepressant agent are both formulated for parenteral administration.

6

The pharmaceutical compositions of claim 5, wherein the parenteral administration is intravenous, intramuscular, subcutaneous, transmucosal, intranasal, transpulmonary, intraperitoneal or rectal administration.

7

The pharmaceutical composition of claim 1, wherein the antidepressant agent is an SNRI, SSRI, TeCA, NDRI, or atypical antipsychotic.

8

The pharmaceutical composition of claim 4, wherein the antidepressant agent is duloxetine formulated at a dose of 0.32-32 mg/kg, venlafaxine formulated at a dose of 0.32-32 mg/kg, mirtazapine formulated at a dose of 0.08-8 mg/kg or bupropion formulated at a dose of 0.08-8.0 mg/kg.

9

The pharmaceutical composition of claim 1, wherein the NMDAR responsive disorder is selected from the group consisting of major depression, bipolar depression, OCD, PTSD, and pain syndromes.

10

A method for treatment of an NMDAR antagonist-responsive disorder comprising: administering to a subject in need thereof therapeutically effective amounts of a first compound and a second compound, wherein the first compound is a ketamine agent and the second is an antidepressant agent comprising an antidepressant or an atypical antipsychotic.

11

The method of claim 10, wherein the antidepressant is an SNRI, SSRI, TeCA, NDRI or atypical antipsychotic.

wherein the antidepressant agent is duloxetine formulated at a dose of 0.32-32 mg/kg, venlafaxine formulated at a dose of 0.32-32 mg/kg, mirtazapine formulated at a dose of 0.08-8.0 mg/kg, or bupropion formulated at a dose of 0.08-8.0 mg/kg.

Patent	Classification	Codes
US20250302825 A1	IPC	A61K 31/496; A61K 31/06; A61K 31/13; A61K 31/13B; A61K 31/381; A61K 31/42; A61K 31/431; A61K 31/4525; A61K 31/519; A61K 31/55;

特許調査をより円滑にする

CAS PatentPak®

物質記載位置付で特許明細書を確認

物質のリストも入手できます

一般式で記載された特許明細書中の化合物調査を実現

CAS Markush™

特許中のマルクシェ構造を

対象にした検索ができます

特許ステータス

Patent Status ?

Alive

Dead

Unknown

Indeterminate

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。物性、規制、試薬カタログ情報をシームレスに入手できます。

Chemical Structure

Edit DrawingRemove

Search Patent Markush

CAS SciFinder

Enter a query...

View Related Results

Filter Results

Structure Match

As Drawn (1)

Substructure (154)

Similarity (5,388)

Analyze Structure Precision

Behavior

Filter byExclude

Search Within Results

Reaction Role

Reference Role

Life Science Data

Commercial Availability

Number of Components

73 Results

58256-10-3

681470-10-0

1048345-02-3

217658-88-3

217659-00-2

500311-22-8

Suppliers for 4632-51-3

Filter Results

Preferred Suppliers

Quantity

Party

Shipping Details

Availability

Test Catalog Information

Key Physical Properties

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Thermal

Property

Value

Condition

Source

Pharmacological Data

Target

Function

Parameter

Value

Disease

Organism

Assay

Source

Details by Country/International & Other Lists

Country/Region Information Available

European Union

Inventory Status on REACH

Inventory Status on EINECS

Regulatory List Numbers

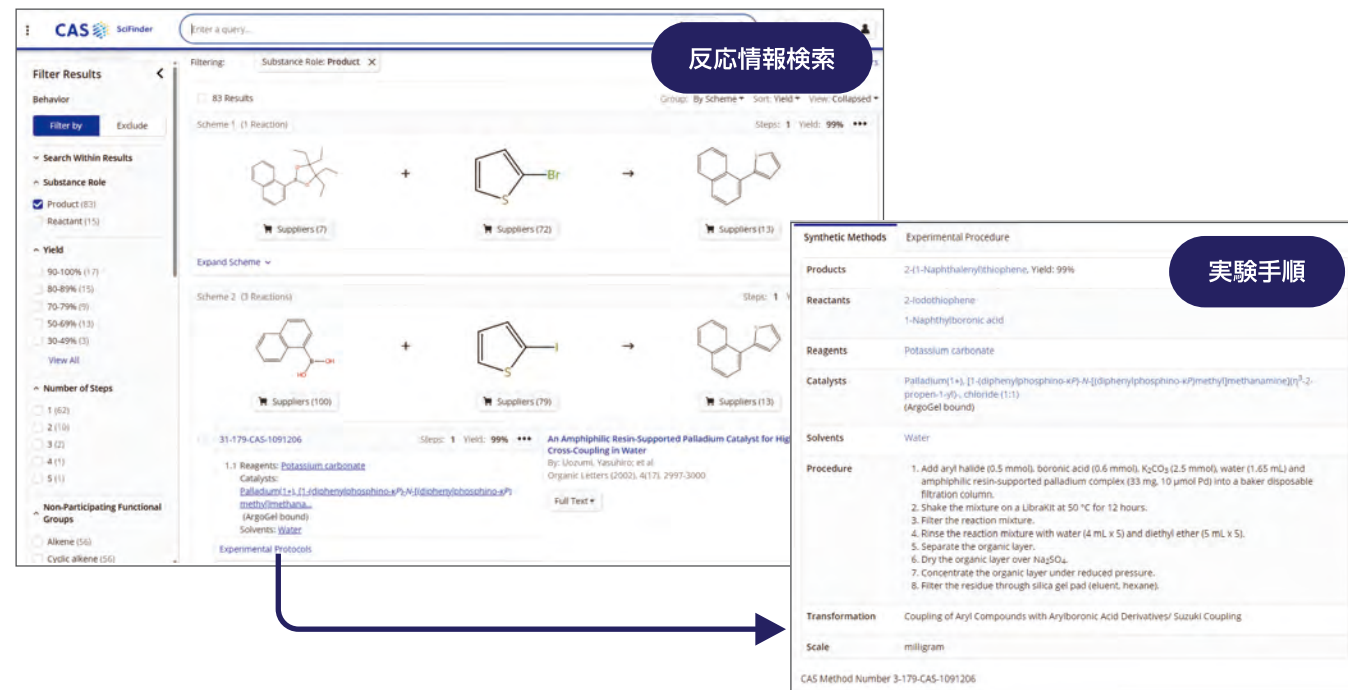
Viet Nam

Inventory Status on VNECI

Bioactivity Data

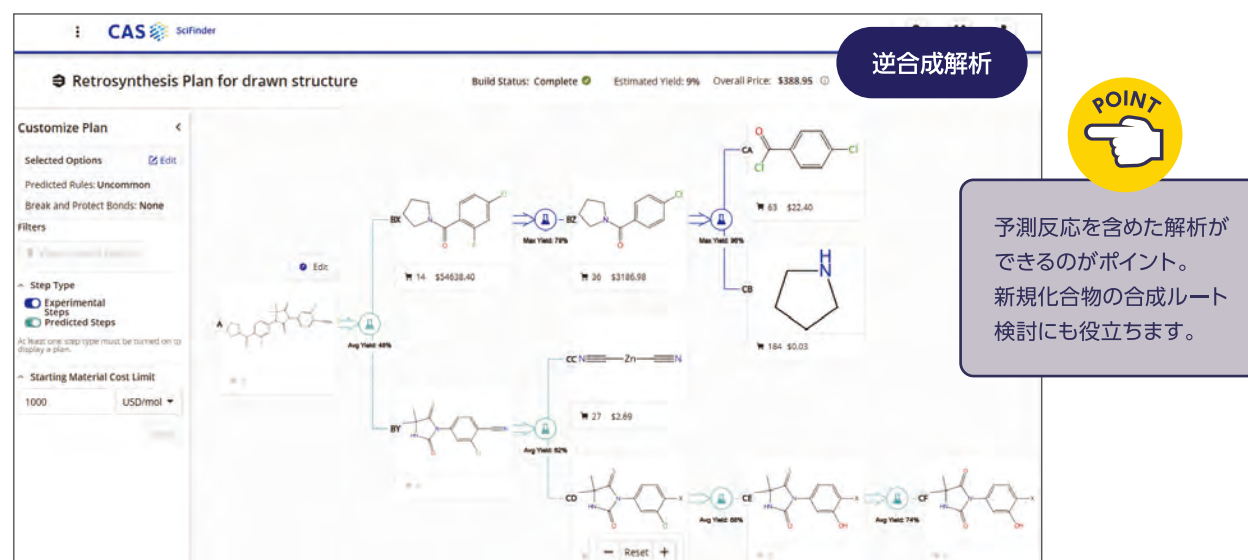
 化学反応

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。



逆合成解析 (CAS Retrosynthesis)

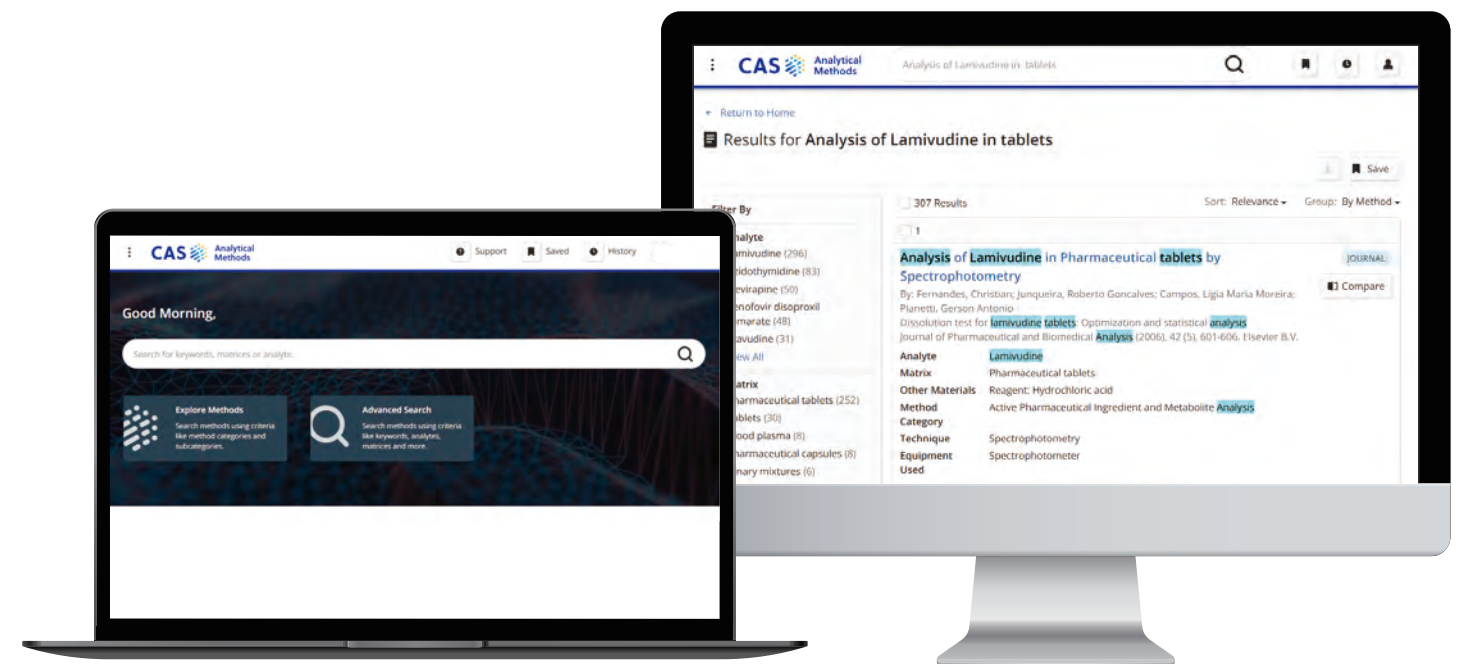
CAS 独自の Computer-Aided Synthetic Design (CASD) に基づいて逆合成解析を行い、化学物質の合成ルートを自動的に構築。リアルタイムでルート変更でき、既知・予想の反応も含めた新たな合成ルートの立案を効率的にサポートします。



CAS Analytical Methods™ とは？

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できます。



調査時間を短縮

何百万もの公開された手順から
内容を簡単に確認でき、時間を
節約できます。



比較

複数の分析方法を並べて比較することで、主な類似点と相違点を即時に把握できます。



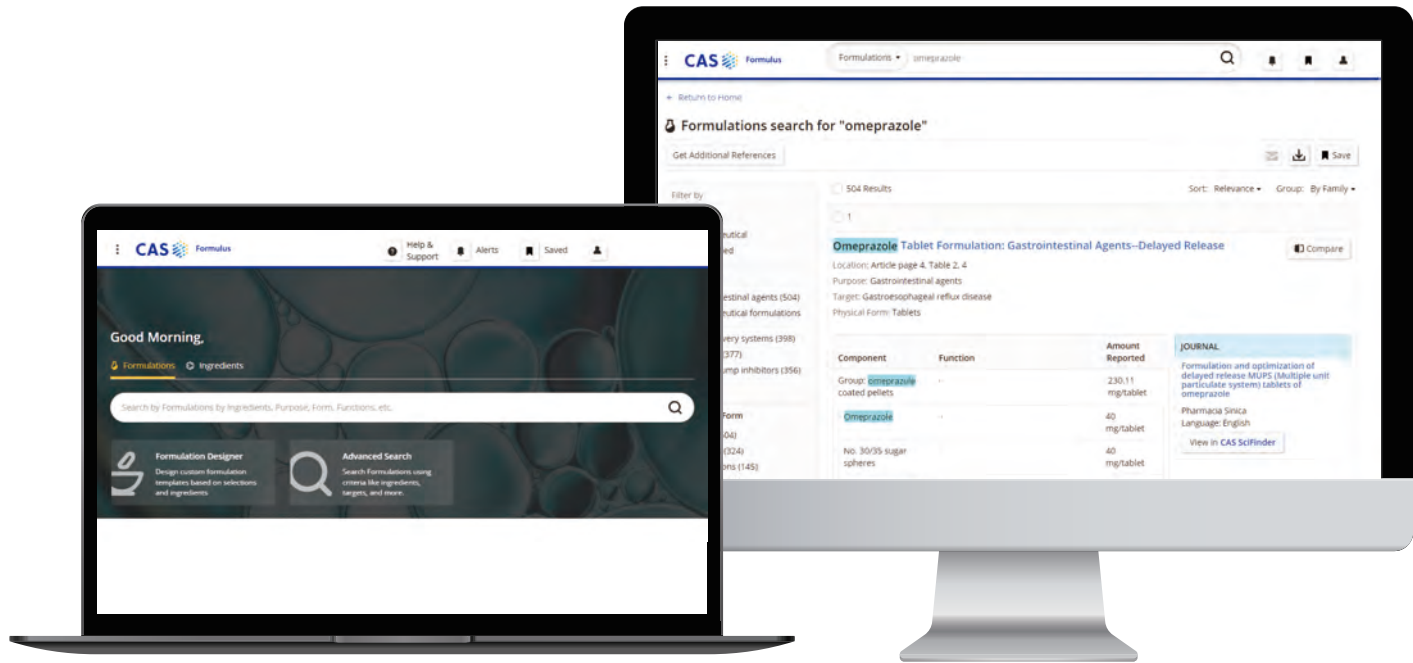
広範囲な収録

薬理学、HPLC、食品分析、天然物単離分析、水質分析など、多岐にわたる分野から分析手法を収録しています。

CAS Formulus® とは？

CAS Formulus® は、製剤・配合に特化した検索ツールです。

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入手で収集、整理して集積した世界最大のデータ群を検索できます。

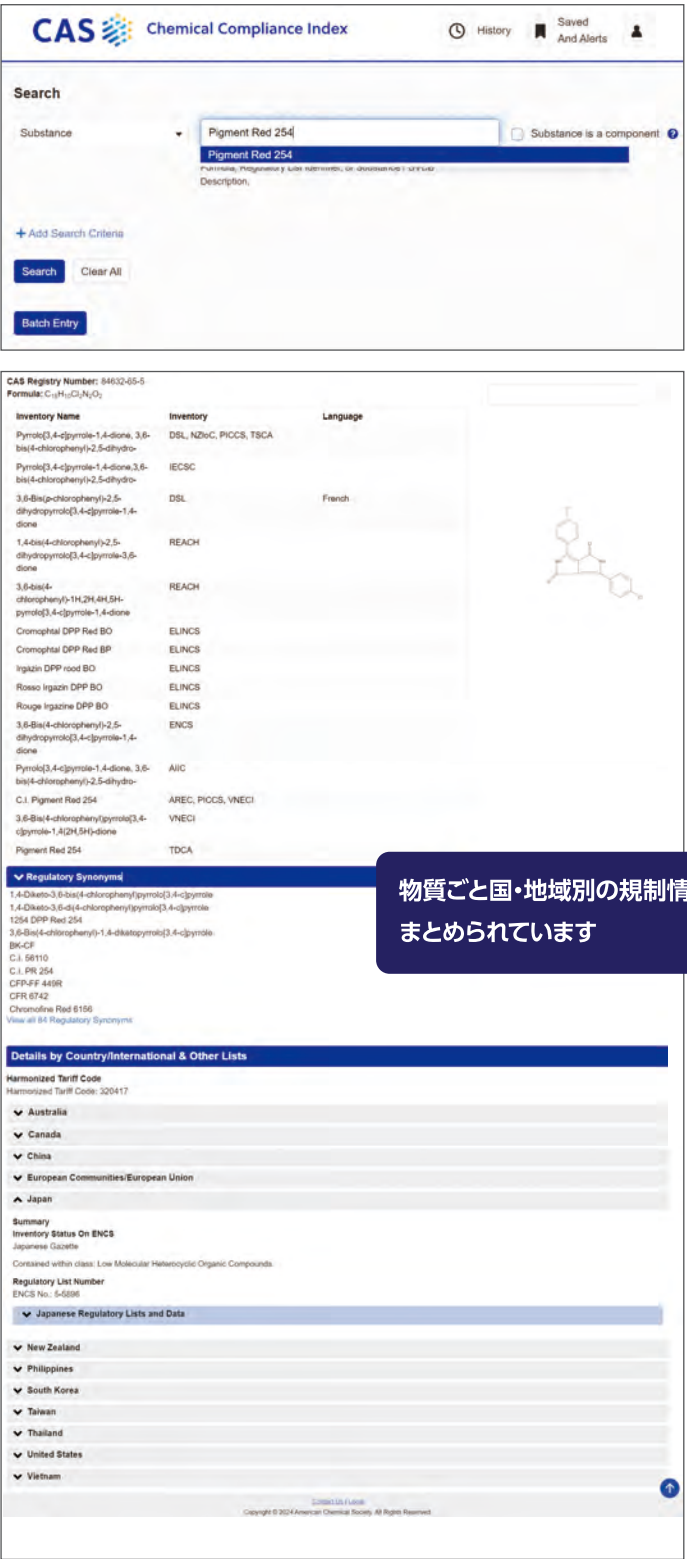


CAS Chemical Compliance Index™ とは？

CAS 登録番号 (CAS RN®) を管理する CAS が提供する化学物質規制情報検索ツールです。化学物質の製造、輸出入、輸送、販売などの際に必要な世界中の規制に関する情報を簡単に検索できます。

主な収録情報

- 日本
化審法の既存化学物質リスト、労働安全衛生法、PRTR および化学物質の管理促進法（化管法）優先評価化学物質リスト
- 中国
中国現有化学物質名録
輸出入が制限されている有害物質リスト
- 台湾
Taiwan Chemical Substance Inventory
台湾有害化学物質リスト
- 韓国
韓国既存化学物質目録
韓国有害化学物質排出目録
- EU
REACH, EINECS
- 米国
TSCA, EPA Regulations, FDA Regulations
DOT Regulations, OSHA Regulations
- フィリピン
フィリピン化学品・化学物質リスト
優先化学物質リスト
- マレーシア
有害物質届出・報告制度 参照リスト
- シンガポール
有害物質リスト
- タイ
有害物質法
- ベトナム
ベトナム国家化学物質インベントリー
- メキシコ
国家化学物質インベントリー
- カナダ
カナダ国内物質リスト
カナダ非国内物質リスト
- オーストラリア
オーストラリア既存化学物質リスト
- ニュージーランド
ニュージーランド化学物質リスト



物質ごと国・地域別の規制情報が
まとめられています

※教育・政府機関は、オプション契約が必要です。

効率よく検索

化学物質 (名称、CAS RN®) や配合成分、機能、用途などの情報から、製剤・配合データを検索できます。

データを効果的に視覚化

目的や形態、有効成分を選択して、製剤テンプレートを入手できます。

規制・関連情報も

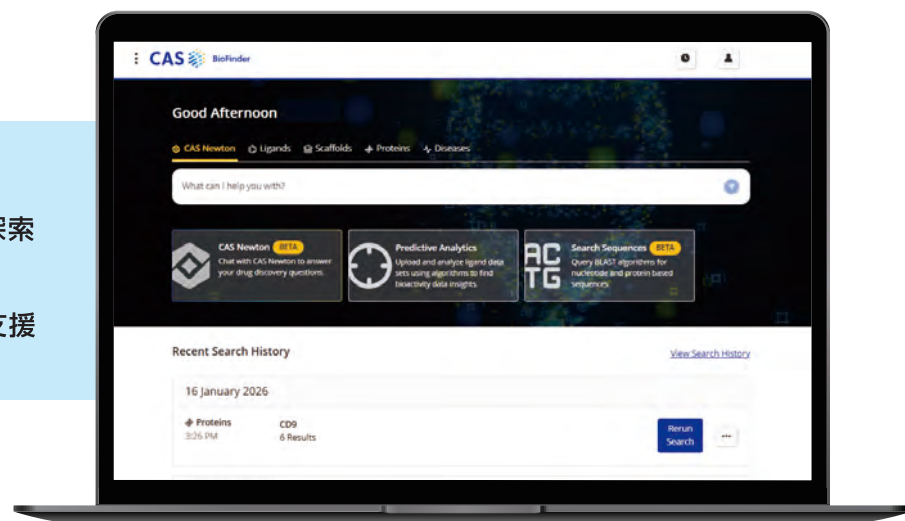
製造コストに関わる各成分の価格情報や規制情報 (FDA Orange Book、Japan Approved Drugs、EMA Excipients など)を確認できます。

CAS BioFinder とは？

CAS BioFinder は、創薬科学者に必要なデータを総合的に提供する情報ソリューションです。リガンド、タンパク質、疾患、バイオマーカー、ADMET など の創薬に必要なデータをひとつのプラットフォームで提供。複数のツールやサイト検索を使い分ける必要がなくなります。

利用シーン

- ・創薬初期段階での候補化合物探索
- ・副作用・代謝物予測
- ・抗体薬物複合体（ADC）設計支援

会話型 AI エージェント
CAS Newton

創薬研究をより効率的に進めるために設計された 会話型 AI エージェントを搭載。膨大な CAS データを活用し、自然な文章での質問に対して科学的に裏付けられた回答を提供します。

what are promising ligands that selective inhibit PI3K?

Based on the comprehensive analysis of the database, here are the most promising ligands that selectively inhibit PI3K:

FDA-Approved PI3K Inhibitors

Idelalisib (CAL-101)

Idelalisib [1] is a highly selective PI3K inhibitor approved by the FDA in 2014:

- Target: PI3K (PIK3CD)
- Potency: IC50 = 0.9-87 nM (excellent potency range)
- Selectivity: >100-fold selective for PI3Ks over other isoforms
- Clinical Use: Approved for chronic lymphocytic leukemia
- Mechanism: ATP-competitive inhibitor that blocks PI3K signaling in malignant B cells

Copanlisib (Aliqopa)

Copanlisib [2] is a pan-PI3K inhibitor with preferential activity:

- Targets: All PI3K isoforms (α, β, γ, δ) with preference for α and δ
- Clinical Use: Approved for relapsed follicular lymphoma
- Administration: Intravenous infusion

Highly Potent Experimental Ligands

PI3K Inhibitors (Pyrimido-benzodiazepine Series)

The most potent compounds target PDK1 (PDK1), a key downstream effector of PI3K:

Top Compounds by Potency:

- Compound 1027039413 [3]: IC50 = 0.11 nM
- Compound 1349102528 [4]: IC50 = 0.12 nM
- Compound 1347872900 [5]: IC50 = 0.15 nM

These compounds feature a pyrimido-benzodiazepine core with various urea substituents, providing exceptional potency in the sub-nanomolar range.

Sources

15 Results

[1] Idelalisib
CAS Registry Number: 1347872900
Active inhibitor of adenosine-5'-triphosphate...

[2] Copanlisib
CAS Registry Number: 1347872900
Active inhibitor of adenosine-5'-triphosphate...

[3] 6,6'-bis(2,2,2-trifluoroethyl)-2,2'-bipyridine
CAS Registry Number: 1347872900
Active inhibitor of adenosine-5'-triphosphate...

[4] 6,6'-bis(2,2,2-trifluoroethyl)-2,2'-bipyridine
CAS Registry Number: 1347872900
Active inhibitor of adenosine-5'-triphosphate...

[5] 6,6'-bis(2,2,2-trifluoroethyl)-2,2'-bipyridine
CAS Registry Number: 1347872900
Active inhibitor of adenosine-5'-triphosphate...

AI 駆動型の予測モデル
Predictive Analytics

AI が化合物の活性や薬物動態（ADMET）を自動で予測し、創薬プロセスを効率化します。これにより、実験前に有望な候補を絞り込み、開発コストと時間を大幅に削減できます。

Bromocriptine_2

Ligands Pharmacology

Show Structures ON

Ligand	Target	Organism	Known pAct	Predicted pAct	Confidence	MLM	SAS	SEA	SIM	XPI
25614-03-3	5-hydroxytryptamine receptor 1B	Rattus norvegicus	-	10.52	0.49	-	-	-	Active: 10.52	-
25614-03-3	5-hydroxytryptamine receptor 1D	Canis lupus familiaris	-	8.71	0.49	-	-	-	-	-
25614-03-3	D(2) dopamine receptor	Mus musculus	-	8.64	0.27	-	-	-	-	-
25614-03-3	5-hydroxytryptamine receptor 1D	Homo sapiens	-	8.47	0.49	-	-	-	-	-

Similarity-Based Method (SIM) Substantiation

Extended-Connectivity Fingerprint 4 Feature-Pair Distributions

Similarity ranges: 0.70-0.75, 0.75-0.80, 0.80-0.85, 0.85-0.90, 0.90-0.95, 0.95-1.00

Num of Neighbours

Avg pActivity

Low pActivity High pActivity

Ligand	Target	Predicted pactivity	Confidence
1092364-38-9	Epidermal growth factor receptor	8.50	0.54

基本骨格から最適解を導く
スキヤフォールド (骨格) 検索

化合物の基本骨格(スキヤフォールド)をもとに、標的タンパク質や活性を効率的に探索できます。構造活性相関（SAR）解析も視覚的に行えるため、最適な化合物設計に役立ちます。

置換基の解析

R6

構造活性相関の解析

Matched Molecular Pairs

1164494-80-7 (9S,10S,11S,13R)-2,3,10,11,12,13-Hexahydro-10-methoxy-9-methyl-11-(methylamino)-9,13-dihydro-1,2-dioxepine-1,2-dione

1400744-14-0 (9S,10R,11R)-2,3,10,11,12,13-Hexahydro-10-methoxy-9-methyl-11-(methylamino)-9,13-dihydro-1,2-dioxepine-1,2-dione

pActivity: 7.40

pActivity: 8.47

STN IP Protection Suite™

知財・情報担当者向け科学情報ソリューション

STN IP Protection Suite™ とは？

STN IP Protection Suite™ は、特許検索の初級者から情報検索の専門家まで、幅広い特許調査ニーズに応える総合的な検索ソリューションです。

科学技術分野の情報検索ツールである CAS IP Finder, powered by STN™ を中心に、特許・論文・化学物質・配列情報など、約 100 種のデータベースを活用したグローバルな調査を実現します。

STN IP Protection Suite™ に含まれるサービス

CAS IP Finder, powered by STN™

科学技術分野の情報担当者向け検索サービス

特許、雑誌論文、医薬品、化学物質、CAS 登録番号 (CAS RN®)、配列、物性データを含む、広範な科学技術分野の検索サービス

技術革新に必要な強力な IP 検索を提供

FIZ PatMon

特許モニタリングサービス

簡単な設定で、全技術分野を包括する世界中の特許情報を対象に、注目する特許の Patent Family の発行、およびその法的状況をモニタリングできる特許モニタリングサービス

特許のモニタリングを効率よく

CAS Search GuardSM

コンサルタントサービス

CAS の IP エキスパートが対応する特許調査のコンサルタントサービス

包括的なインサイトを提供

お問い合わせ先

情報事業部

サービス全般

TEL:0120-151-462 Email:customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク

TEL:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp

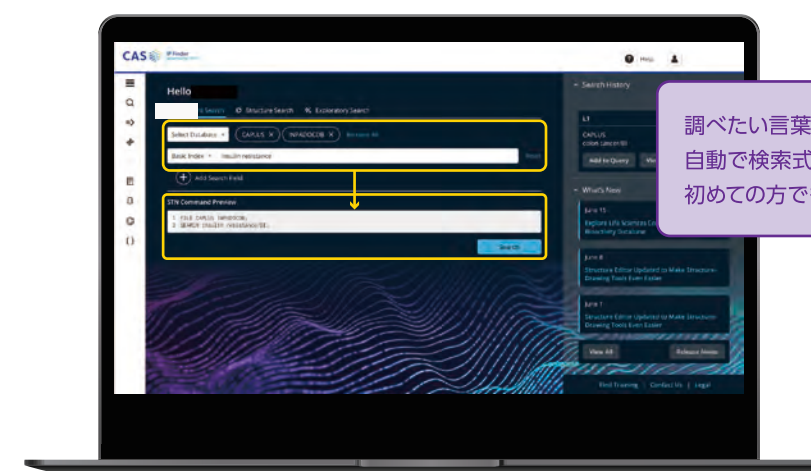
CAS IP Finder, powered by STN™

知財・情報担当者向け科学情報検索ツール

CAS IP Finder, powered by STN™ とは？

CAS IP Finder, powered by STN™ は、世界最大級の科学・特許情報検索プラットフォームです。世界中の科学技術分野の特許や雑誌論文の専門データベースを網羅し、化学構造式や化学反応式を用いた高精度の検索を行うことができます。

化学物質の新規性調査や、化学物質関連の特許に関する侵害予防調査には欠かせません。



調べたい言葉を入力するだけで OK。
自動で検索式が作成されるので、
初めての方でもすぐに使いこなせます。



代表的なデータベース

化学	Cplus	化学および周辺分野の文献 (学術論文・特許ほか)。CAS RN® による化学物質索引
	AGRICOLA	農業およびその関連分野の文献
	SciSearch	科学、技術、生物、医薬分野の世界中の文献とその引用文献
ライフサイエンス	BIOSIS	生物および生物医学分野の広範囲な文献。主要概念、生物系統分類コードなどの索引
	EMBASE	生物医学および薬学医学領域の文献。統制語 (EMTREE 語) による索引
	MEDLINE	生物医学の広い分野のすべての領域の文献。統制語 (MeSH ターム) による索引
食品	FSTA	食品の加工と製造に関する世界中の文献と特許
化学物質・物性	CAS REGISTRY	化学物質のデータベース。CAS RN®、名称、構造、分子式、物性値、核酸・タンパク質の配列情報
	REAXYSFILESUB	化学物質の物性情報、反応情報
毒性	RTECS	医薬品、農芸化学物質などの化学物質の毒性データとその出典情報
	TOXCENTER	毒性に関する文献
特許	INPADOC	世界の特許および実用新案の書誌情報と対応特許情報
	MARPAT	CA ファイル収録特許のクレーム中または発明の詳細な説明中のマルクシェ構造
	PCTFULL	PCT 出願の書誌情報、抄録、クレーム、図面、全文
	USPATFULL	米国特許 (最初に発行された公報) の書誌情報、抄録、クレーム、全文
	WPI	世界の特許の書誌情報、対応特許情報、抄録、図面、索引、独自分類、クレーム、引用情報など

知財・情報担当者向けの検索ツールである CAS IP Finder, powered by STN™ では、網羅的かつ確な検索を実現するため機能が豊富です。

探索から発見へ。AIが導く新たな知
AI 探索型検索 (Exploratory Search)

CAS 独自の AI 技術を活用し、膨大な情報の中から関連性の高い文献を自動で分析して検索。

単なる検索結果ではなく、新しい視点やアイデアを得るための情報を入手するのに役立ちます。

利用シーン

- ・先行技術文献の調査
- ・研究開発のアイデア探索
- ・特許出願動向の深堀り



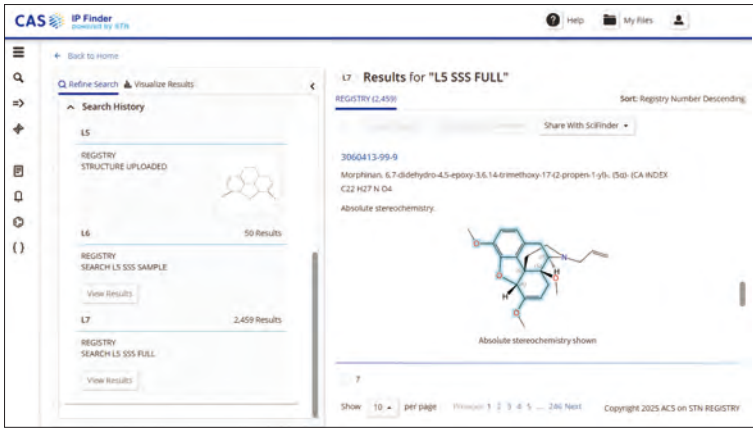
構造式で探す、確かな情報
化学構造検索

分子構造や化学反応式を作図して、関連する化学物質や特許・文献情報を検索できる機能です。

キーワードや分類検索では見つけにくい情報も、構造型を使うことで確実に調査できます。

利用シーン

- ・新規化合物の確認
- ・類似構造を持つ化合物の検索
- ・既存化学物質の CAS RN® の調査



主な検索機能

- ・近接演算子・ブール演算子
- ・官能基反応検索
- ・配列検索
- ・数値検索
- ・物性値検索
- ・テキスト中の数値検索

- ・先行技術文献検索
- ・化学構造検索
- ・マルクワッシュ構造検索
- ・化学反応検索

数字の裏にある情報を読み解く
データ解析

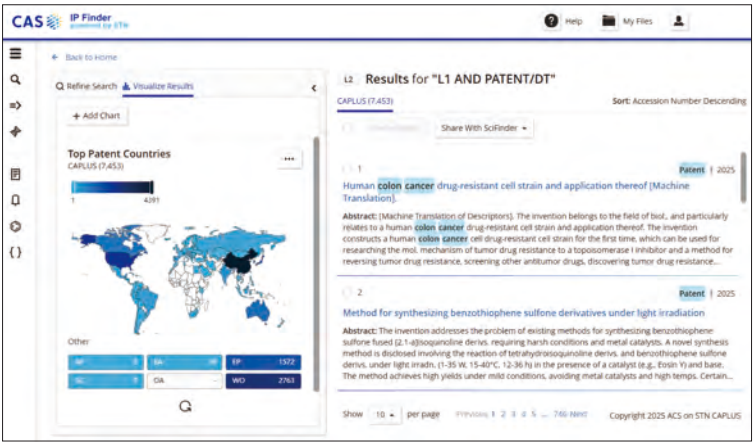
膨大なデータを「価値ある情報」に変えるために、検索結果を解析する機能を搭載。

著者、所属機関/特許出願人、特許国などのデータを迅速かつ直感的に分析し、すばやい意思決定をサポートします。



膨大な情報を、一目で理解
検索結果画面

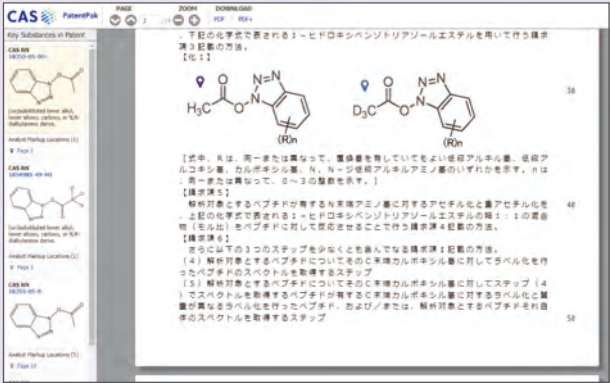
膨大な検索結果を、より見やすく、より理解しやすくするために、検索結果とデータ解析結果を同一画面中に表示します。



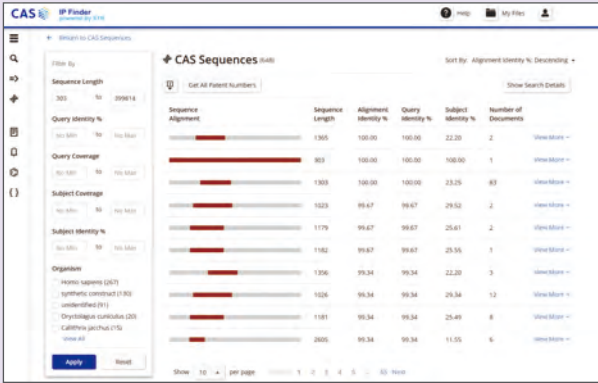
視覚化・絞り込み・比較を直感的に行えるため、情報検索の効率を飛躍的に向上させます。

CAS IP Finder, powered by STN™ と連携して使えるサービス

特許調査をより円滑にする
CAS PatentPak®



23 億件以上の配列情報を一括検索
CAS Sequences



FIZ PatMon とは？

FIZ PatMon は、公報発行や法的状況の変化をウォッチングするためのツールです。特許番号から簡単にモニタリングを設定するだけで、対応特許情報や法的状況の変化などの動きがあればメールが配信されます。

FIZ PatMon には、管理者や閲覧可能な関係者数の制限がないため、機関内で広くご利用いただけます。



特許に動きがあったときは
メールでお知らせ



信頼性の高いデータ

FIZ Karlsruhe が修正を加えた高品質の INPADOC データをもとに、国内・国外問わず、パテントファミリーの公報および法的状況を監視できます。



柔軟な設定

異議申立、ライセンス、権利者の変更、取り下げ、付与に関するアラートを取得し、特許と実用新案の両方のステータスインジケータを確認できます。



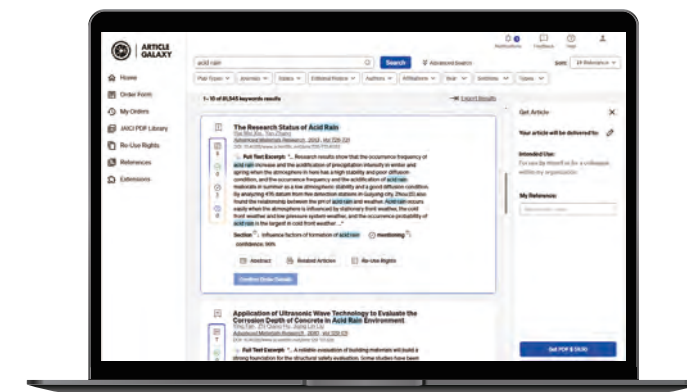
社内の情報共有に

モニタリング結果は、定期的にメールで配信され、社内の情報共有が容易に行えます。

Article Galaxy とは？

Article Galaxy は、世界中の学术论文や特許を、即時にオンラインで提供する文献複写サービスです。

CAS SciFinder® をはじめとする CAS 提供の検索ツールだけでなく PubMed やその他のウェブサイトともシームレスに連携することができ、研究者がどこでどのようにして見つけた文献でも、オープンアクセス、購入価格、レンタル価格などを画面内で確認し、即時に発注できます。



広いカバレッジ

40,000 誌以上の学術雑誌、書籍、レポート、会議録を入手できます。

他で入手困難な中国語、韓国語など多言語の文献入手もサポートします。



早い

大部分の学术论文は PDF で即時ダウンロード可能。

必要な学術文献や特許に 24 時間アクセスできます。



日本円での請求書払い

著作権を含めた料金を発注前に確認可能。日本円で請求します。

代理店手数料はありません。

お問い合わせ先

情報事業部

サービス全般

TEL:0120-151-462 Email:customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク

TEL:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp

CAS 登録番号サービス

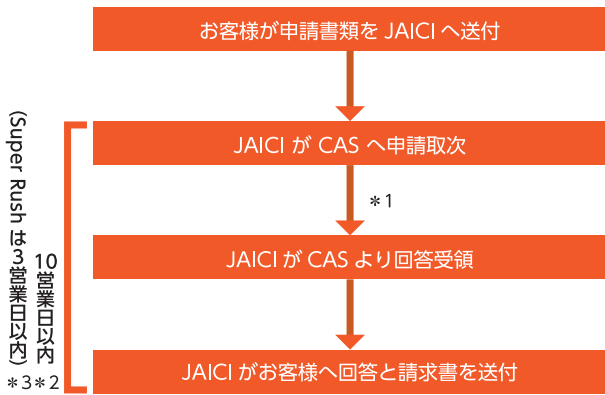
お手持ちの物質の正式名称と CAS 登録番号 (CAS RN®) を提供いたします

CA 索引名や CAS 登録番号 (CAS RN®) を取得したい

CAS 登録番号サービスでは、固有の化学組成を持つ物質に CA 索引名 (CA Index Name) をアサインし、新規物質の場合にはご希望により CAS 登録番号 (CAS RN®) をアサインいたします。二種類のサービスがございますので、ご利用目的に合わせてご選択ください。

なお CAS RN® がアサインされますと、化学物質の情報は CAS IP Finder, powered by STN™ の REGISTRY ファイルや CAS SciFinder® 等のデータベースで公開されることになりますが、ご依頼のお客様情報と関連づけられることはありません。

【CAS 登録番号サービスの流れ】



図中の所要日数は米国 CAS における調査時間の目安です。

*1	申請内容に不明瞭な点があった場合、JAICI を介して CAS とお客様のやり取りが発生することがあります。(回答までの日数および調査時間に影響します)
*2	調査に必要な情報が全て揃ってからの所要日数です。CAS とのやり取りが発生した場合には、この限りではありません。
*3	時差等の影響もあるため、日本国内では 5 営業日以内となります。

化学物質命名サービス

- お客様からご提示いただいた化学物質の情報をもとに、CAS 命名法 (CAS で定められた化学物質の命名規則) に則った CA 索引名のご提供
- ご希望により、CAS RN® の付与
- サービスの回答書は、WHO の国際一般名称 (International Nonproprietary Names: INN) や米国一般名 (U.S. Adopted Names: USAN) 申請時の添付書類としてご利用いただけます。

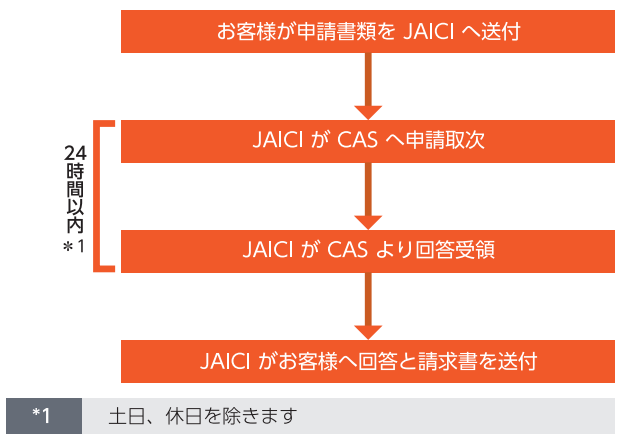
IES サービス (Inventory Expert Service)

- 米国環境保護庁 (EPA) に有害物質規制法 (TSCA) に基づく製造前届出 (PMN) の申請を行う際に必要な CA 索引名のご提供
- ご希望により、CAS RN® の付与
- 特急オプション (Super Rush) により、3 営業日*3 以内に回答をお届け
- 将来、PMN 申請を検討される可能性がある物質につきましては、IES サービスのご利用がお勧めです。

既知の物質名または CAS 登録番号 (CAS RN®) から CAS REGISTRY 情報を確認したい

お手持ちの物質につきまして、REGISTRY ファイルでの登録内容を照会したい場合には CAS Registry Lookup サービスをご利用ください。当サービスではお客様からご提示いただいた英語名称または CAS 登録番号 (CAS RN®) による検索を行います。

【CAS Registry Lookup サービスの流れ】



CAS Registry Lookup サービス

- 物質名または CAS RN® から REGISTRY ファイルの完全一致検索結果をご提供
- ご提供情報: CAS RN®, 化学物質名、分子式、化学構造図など
- 24 時間以内に調査結果をご回答
- CAS IP Finder, powered by STN™ のご契約なしで、REGISTRY ファイルの検索結果を手軽に入手可能。

CAS 登録番号 (CAS RN®) とは

CAS 登録番号 (CAS Registry Number®: CAS RN®) は、世界的に利用されている、個々の化学物質に固有の識別番号です。CAS RN® 自体には化学的な意味はありませんが、一つの物質あるいは分子構造に様々な体系名、一般名、商品名、慣用名などが存在する場合にも間違いなく同定できる手段となっています。CAS RN® は、CAS (シーエーエス) の作成するすべてのデータベースに用いられているほか、他の多くの公的・私的データベースや化学物質台帳にも利用されています。

お問い合わせ先

情報技術部

CAS 登録番号サービス係

TEL:03-5978-3606 FAX:03-5978-4095
Email:special-service@jaici.or.jp



CAS 登録番号 (CAS RN®) ライセンス

自社サービスで CAS RN® を使用するためのライセンス

CAS 登録番号 (CAS RN®) ライセンスとは？

CAS 登録番号 (CAS RN®) とは、世界的に利用されている、個々の化学物質に固有の識別番号であり、CAS が管理しています。現在、データベース、試薬カタログ、辞典類などに掲載されているほか、各国の規制リストや法規制上の番号としても広く利用されています。

CAS RN® を自社のウェブサイトやサービス、紙媒体などで使用して外部に提供するには、CAS RN® の年間使用ライセンス (CAS Registry Number Verified Partner Program) の取得が必要です。

外部公開の例

- ・CAS RN® を含めた製品情報を自社で取り扱うカタログや Web 媒体に掲載
- ・CAS RN® を組み込んだ自社開発システムを外部顧客に提供
- ・機関で CAS RN® を含んだリストを外部に公開

自社取扱いの化学物質を CAS SciFinder® などに掲載できる CAS Chemical Supplier InsightsSM (企業製品カタログ登録サービス) をご利用の場合には当ライセンスが含まれます。

ライセンスを取得していただく

- ・CAS RN® の適正な使用が認められ、自社製品・サービスの信頼性が向上します。
- ・Verification オプションを活用することで、精度の高い CAS RN® 情報をお客様に提供します。

Verification オプション

自社製品に含まれる CAS RN® が正確であるかを確認するための検証作業オプション (Verification) です。検証済み製品には「CAS RN® 検証済み」のロゴを媒体に掲載できます。



お問い合わせ先

情報事業部

サービス全般

TEL:0120-151-462 Email:customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク

TEL:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp

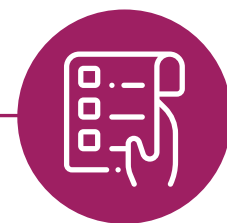
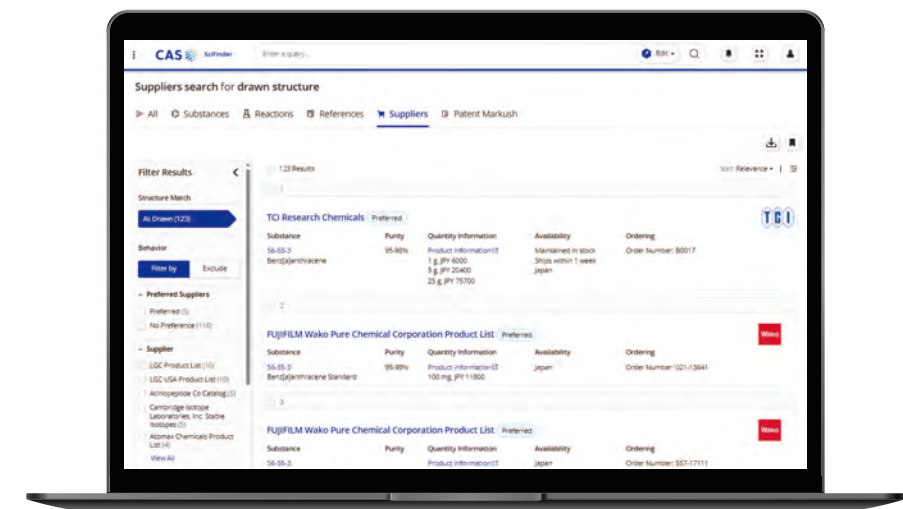
CAS Chemical Supplier InsightsSM

ビジネスの可能性を広げる企業製品カタログ登録サービス

CAS Chemical Supplier InsightsSM とは？

CAS Chemical Supplier InsightsSM は、自社取扱い製品 (市販化学品) をアピールすることを目標に、製品情報を CAS のデータベースに掲載するプログラムです。

CAS SciFinder® をはじめとする CAS 提供の検索ツールを通じて、世界中の研究者・科学者に、正確な CAS 登録番号 (CAS RN®) と共に、自社製品の最新情報を提供することができます。



購買層へのアピール

CAS SciFinder® の検索結果から市販化学物質情報を表示すると、一覧に自社取扱い製品がリストアップされます。

リストには、自社 Web サイトへの直接リンクを含めることができ、利用者に対し製品の購買を促すことができます。



インサイトを得る

貴社のカタログのパフォーマンスと化学品に関する詳細なレポートをお届けします。



視認性を高める

CAS SciFinder® で会社ロゴを表示させたり、自社取扱い製品を優先して表示させるオプションを選択することで、ユーザーへの訴求力を高めることが可能です。

JAICI AutoTrans

化学物質表記に強い！特許・文献に最適な機械翻訳サービス

JAICI AutoTrans とは？

JAICI AutoTrans は、JAICI 独自の化合物表記翻訳技術を組み入れた機械翻訳サービスです。
海外特許・文献を日本語で内容把握できる翻訳メニューを豊富にご用意しています。

特長

さまざまな工夫で高精度な機械翻訳を実現

JAICI 独自技術の化合物表記翻訳

- 英語・中国語 (簡体字 / 繁体字)・日本語の化合物名に適用
- 訳抜けやロカントの崩れない正確な翻訳

特許・科学技術文献に強い翻訳エンジン

- NICT*1 が開発した特許用及び汎用エンジン、サイエンスエンジン、DeepL 等を採用
- 大量の特許・科学技術文献から学習

特許特有の文章構造に対応

- 原文の前編集*2により、訳漏れ・誤訳を大幅軽減
- 長文や箇条書きの構文崩れや数値抜けを防止

セキュアな環境

翻訳内容の機密性を保持

- SSL 対応、専用データセンターでの翻訳処理
- 原文・翻訳データの蓄積、他目的への流用なし

活用例

CAS IP Finder, powered by STN™ 検索結果でのスクリーニング効率化

検索結果ファイルをそのままアップロード、見やすい一覧表に整形し、表題・抄録に和訳を挿入。

精読したい特許があればワンクリックで全文翻訳の発注が可能です。

ファイル翻訳：AutoTrans Excel 一覧ファイル
CAplus、WPI に対応

Chemical	PatSpread	PatSpread表示	レコード番号 (AN)	Full-Text	特許番号	発明の名称/標題	発明の名称/標題 (翻訳)	要約/抄録	要約/抄録 (翻訳)
			2009:523804	Full-Text	US20090110908A1 KR2009041639A JP2009105044A	Method of manufacturing dispersion type inorganic electroluminescence device having phosphor particle coated with metal oxide precursor integrated dielectric layer	誘電体層の金属酸化物前駆体が被覆された分散型無機電発光素子の製造方法	method of manufacturing a dispersion type inorganic electroluminescence device and a dispersion type inorganic electroluminescence device including a light-emitting layer and a dielectric layer, which are integrated, are disclosed. The method is directed to the manufacture of a dispersion type inorganic electroluminescence device, in which phosphor particles are coated with a metal oxide precursor using ultrasonic waves, after which the phosphor particles coated with the metal oxide precursor are dispersed in a dielectric layer.	分散型無機EL素子と発光体層と誘電体層とを含む分散型無機電発光素子の製造方法であって、一体化されている。開示されている。本方法は、分散型無機電発光素子の製造を目的とする。蛍光体粒子は、超音波を用いた金属酸化物前駆体を金属酸化物前駆体が被覆された蛍光体粒子は、透明電極と上部電極との間に配置され、発光層と誘電体層とが一体化されて形成される。無機電発光素子は、金属酸化物前駆体が被覆された蛍光体粒子の蛍光体を、透明電極と上部電極との間に配置されることにより、発光層と誘電体層とが一体化されたもの

クリックで PatSpread 翻訳発注

原文の隣へ和訳を挿入

化合物名に対応した高精度な機械翻訳で、効果的なスクリーニングをサポートします。

外国特許・科学技術文献の内容把握

特許全文や科学技術論文・CAS SciFinder® の検索結果を、同一レイアウトの原文と訳文で見比べながら読解。

PatSpread 翻訳：全文 PDF ファイル
US/EP/CN/TW/KR/DE/WO (英・中・韓・独・仏) に対応

DocSpread II 翻訳：英語・中国語・韓国語・ドイツ語・フランス語の科学技術論文

特許原文 (中国語)

特許訳文

論文原文 (英語)

論文訳文

同一レイアウトで見比べながら内容把握

OCR 変換機能

イメージ PDF に OCR 処理を行い、DOCX ファイルを提供。主要言語を含む 37 言語に対応。

各種データベース検索結果のスクリーニング効率化

貴社で運用中の SDI など、各種データベースからの検索結果 Excel 表に和訳を簡単に付与。確認対象が大量にある場合、億劫になりやすい内容確認をよりスムーズに。和訳付与 (挿入) 自体の代行もご要望により対応します。

汎用ワークシート翻訳：納品 Excel ファイル

英語原文

和訳挿入

和訳挿入

翻訳対象言語 (英語 / 中国語 / 韓国語) を自動判定し、和訳を挿入

お問い合わせ先

JAICI AutoTrans

情報技術部

TEL:03-5978-3606
Email: autotrans@jaici.or.jp



※ご紹介内容は、全て 2026 年 1 月現在のものです

JAICI ProTranslator EXPRESS-Light

高品質の機械翻訳を下訳に！人手で仕上げる訳文編集機能付き機械翻訳サービス

JAICI ProTranslator EXPRESS-Light とは？



JAICI ProTranslator EXPRESS-Light は高品質の機械翻訳を下訳として利用し、翻訳文書の仕上げを簡便に行えるサービスです。翻訳支援ツールとの連携、蓄積してきた用語集の使用、ご自身で学習させた翻訳エンジン、逆翻訳の結果からエンジンの選択など、翻訳環境を自分でカスタマイズできます。



「翻訳を仕上げる」ための機能

翻訳言語方向が充実	● 英⇄日, 中⇄日, 韓⇄日, 欧州言語*1 ⇄日, アジア言語⇄日 *1 欧州言語: フランス語・ドイツ語・スペイン語・ポルトガル語・イタリア語・オランダ語・ポーランド語・ロシア語
原文のレイアウトを保持した翻訳	● PDF / DOCX / PPTX / XLSX / XML / CSV / HTML / TXT / XLIFF / TMX ファイルに対応
翻訳支援 (CAT) ツールと連携	● ご自身の用語集や対訳文を翻訳に利用 ● 原文レイアウトを確認しながら編集可能
文章に応じて翻訳エンジンを自動選択	● 特許向けエンジン・文献向けエンジン・貴社専用エンジン*ほか ● 文の特徴に最も適したエンジンで高品質の翻訳 * オプションご契約の場合
JAICI 独自の化合物表記翻訳を適用	● 英語・中国語(簡体字・繁体字)・日本語の化合物名に対応

OCR 変換機能

イメージ PDF を JAICI ProTranslator EXPRESS-Light で翻訳可能なテキストデータ (DOCX ファイル) に変換します。

生成 AI オプションで、翻訳文書作成を効率化

PostEditPro®は、用語集や翻訳メモリなどを学習した生成AIが人に代わって機械翻訳結果を自動後編集し、翻訳文書を仕上げます。

お問い合わせ先

情報技術部

TEL: 03-5978-3606
Email: autotrans@jaici.or.jp

※ご紹介内容は、全て 2026 年 1 月現在のものです

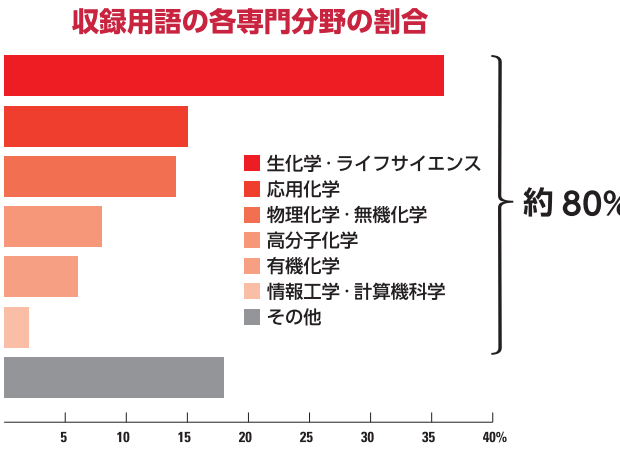
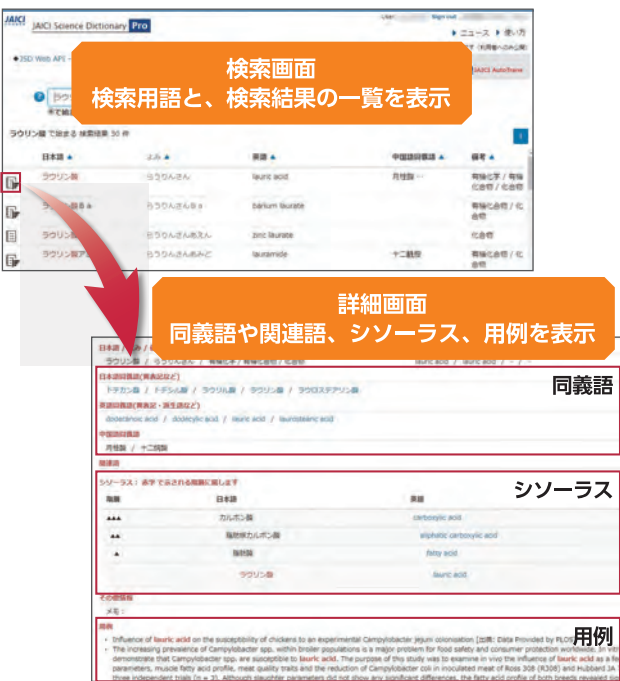
JAICI Science Dictionary Pro

専門用語豊富なシソーラス付き辞書

JAICI Science Dictionary Pro (JSD Pro) とは？



化学・ライフサイエンスを中心とした、科学技術用語のシソーラス付日英 / 英日辞書です。国内外の論文及び特許情報から集めた専門用語を収録しています。



CAS IP Finder, powered by STN™ / CAS SciFinder® / CAS 関連製品をご契約の方は、契約特典として JAICI Science Dictionary Pro を無償®でご利用いただけます。※一部利用制限があります。

お問い合わせ先

情報技術部

TEL: 03-5978-3606
Email: jsd@jaici.or.jp

※ご紹介内容は、全て 2026 年 1 月現在のものです

活用方法

- ・英和 / 和英辞書として
 - 特許や文献中の英単語の調査に
 - 日本語から英語の検索語の調査に
- ・より多様な対訳や検索語の発見ツールとして
 - 同義語: 網羅性の高い検索に
 - シソーラス上位語: より広範囲の検索に
 - シソーラス下位語: 検索結果の絞り込みに
 - 関連語: より広いテーマの検索に
 - 用例: 意味をより正確に捉えたいときに英文作成などの参考に

中国語同義語表示

- ・検索結果一覧に、対訳 (日英 / 英日) と中国語同義語を表示
- ・中国語文献などを原文で検索する際の補助として

定期的なコンテンツ強化

- ・専門用語の追加
 - 対訳だけでなく、分野に関連する情報も
- ・同義語 / シソーラス情報の拡充
 - 日本語・英語の異表記・派生語など
 - シソーラス情報は日本語と英語のセットで

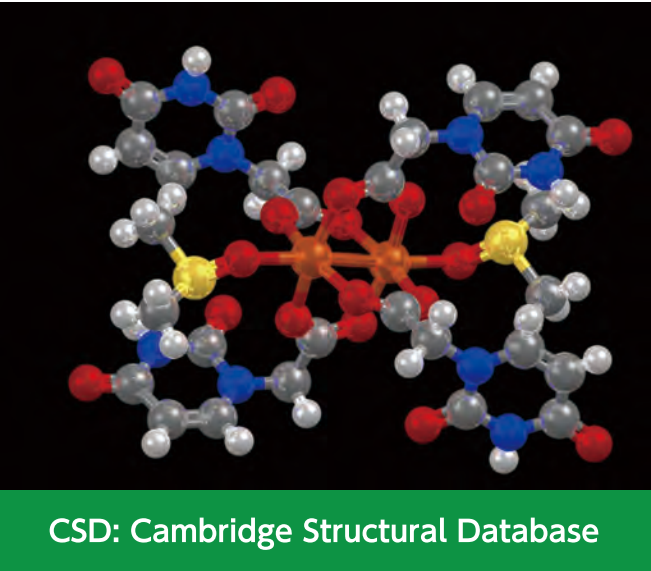
有機系結晶構造データベースと関連ソフト

ケンブリッジ結晶構造データベース (CSD)

CSD-Core

X 線・中性子線回折で解析した有機化合物・有機金属化合物の結晶構造データベースです。

論文に報告されている構造のほか、CCDC に直接登録された構造も含み、in-house データの追加も可能です。2D/3D 構造検索ができる ConQuest、結晶構造の表示や統計解析を行う Mercury も付属しています。速報性重視でインストール不要の WebCSD や、in-house データの追加が行える On-Site WebCSD もご利用いただけます。また、CSD Python API により、自在なデータ抽出やワークフローの構築が可能になりました。マテリアルズ・インフォマティクスにご活用ください。



製 作:ケンブリッジ結晶学データセンター(The Cambridge Crystallographic Data Centre:CCDC、英)

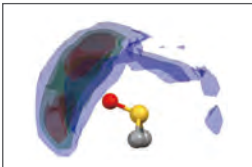
内 容:化合物名称・分子式、2 次元構造図、結合表、3 次元原子座標、結晶学データ、書誌情報、実験条件、Drug ID、DOI リンク

件 数:137 万件 (1923～) (2025 Release)

更 新:年 3 回。定期的に追加データをダウンロード、年約 6 万件追加

頒 布 形 態:ローカルインストール・一部 web 対応 (年間定額契約)

使用可能機種:Linux、Windows、macOS (一部のソフトのみ)

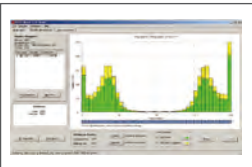


IsoStar

CSD と PDB のデータから抽出した非結合原子間相互作用のライブラリー。注目している分子中心 (central group) が官能基 (contact group) とどのように相互作用しているかを 3D 分布で表示します。

Bioisosteric 変換、ドッキング結果の検証、結晶内パッキングの確認等に活躍します。

PDB:Protein Data Bank



Mogul

CSD のデータを基にした分子ジオメトリのライブラリー。注目している各部位 (結合長、結合角、ねじれ角) を、同様の結合様式を持つ分子構造の実測値のヒストグラムとして表示します。

配座の妥当性の確認、PDB 中のリガンド構造の確認、最適な配座を持つ分子の設計等に活用されています。

コンテンツ	CSD Data ConQuest, Mercury IsoStar, Mogul WebCSD, Hermes On-Site WebCSD CSD Python API	Conformer Generator Full Interaction Maps 一部、CSD Python API	GOLD SuperStar SB, LB Virtual Screening Ligand Overlay CSD CrossMiner Macromolecule Hub 一部、CSD Python API	Hydrate & Solvate Analyser H-Bond Propensity Co-crystal Design Packing Feature Searching Materials tools 他 一部、CSD Python API	Surface Analysis Potential Slip Planes Morphology Calculation
製品名					
CSD-Core	*				
CSD-Discovery	*	*	*		
CSD-Materials	*	*		*	
CSD-Particle					*
CSD-Enterprise	*	*	*	*	

※パッケージのコンテンツは、予告なく変更される場合がございます。ご了承ください。

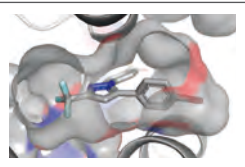
※アカデミック向けには、上記と異なる構成で配布されています。詳細は、大阪大学蛋白質研究所までお問い合わせください。

※粉末結晶構造解析ソフト DASH は、2021年11月にオープンソース化しました。

ファクトデータとアプリケーションで、創薬や機能材料の研究開発を支えます。

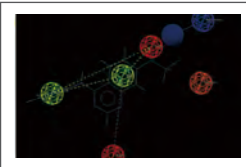
CSD-Discovery

ライフサイエンス系アプリケーションのパッケージ。CSD-Core に加え、ドッキングプログラムとして定評のあるGOLD、タンパク質表面の相互作用を map 表示する SuperStar、LBDD 用アプリケーションである Ligand Overlay などDrug Discovery にご活用ください。2024 年より、CSD と PDB のリガンド結合部位の構造を検索する Macromolecule Hub が追加されました。



GOLD

GA 法に基づいたタンパク質とリガンドのドッキングソフト。CSD 中の配座や分子間相互作用を考慮したエネルギー関数を使用することで精度を高めています。精密ドッキングからスクリーニングまで、創薬研究者に定評のあるソフトです。多様な束縛条件、スコア関数、Ensemble ドッキングやリスコアも可能です。



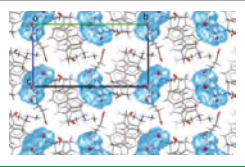
CSD-CrossMiner

CSD や PDB に対し、直感的に条件指定し、pharmacophore 検索の結果がその場で得られるツールです。重原子、水分子などの点定義、芳香環や水素結合などの方向性を伴う feature 定義が可能です。

リード化合物の最適化、scaffold 変換等、ご活用ください。

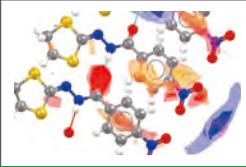
CSD-Materials

マテリアル系アプリケーションのパッケージ。CSD-Core に加え、結晶多形解析ツール Hydrogen Bond Propensity、HydrateAnalyser や Aromatics Analyser などから構成される結晶構造の理解や固体物性の研究に役立つ基本セットです。2024 年、AutoFIDEL を用いた粉末回折パターンと最適化した結晶構造のマッチングを行う機能が追加されました。130 万件を超える結晶構造から得た情報を、共結晶スクリーニングに活用するためのツールも付属しています。



Hydrate Analyser

結晶格子中で水分子が占有できるスペースを計算・表示します。水和物の水素結合ネットワークや水分子の空間環境、水素結合の傾向を考察するのに最適です。Solvate Analyser は、各自で溶媒分子を定義し、パッキングを見やすく表示します。



Full Interaction Maps

前述の IsoStar ライブラリを基に、分子構造全体で、相互作用が生じやすい場所を立体的に表示し、これらが結晶充填環境で満たされているかどうかを確認できます。

対象分子の充填環境を定性的に評価するのに最適なツールです。

CSD-Particle

上記パッケージソフトへのオプション (有償) として、結晶表面分析の可視化、スリップ面の特定と解析、晶系予測といった各種バルク解析が行えます。

CSD-Enterprise

CSD-Discovery と CSD-Materials を組み合わせたフルセット。アカデミック向けには大阪大学蛋白質研究所より配布されています。

お問い合わせ先

科学データ情報室

TEL:03-5978-3622 Email:crystal@jaici.or.jp

無機材料関連データベース

結晶構造 / 相図データベース

ICSD 無機結晶構造データベース

X 線・中性子・電子線回折による構造解析や理論計算から得られた
鉱物・セラミックス・金属間化合物など、無機化合物と元素の結晶
構造データを収録しています。また、無機材料向けの物性をもつ
金属有機化合物や一部に有機配位子をもつ化合物も収録されて
います。全てのレコードは製作元の専門スタッフによる検証を
経て収録されています。検索ソフトと結晶構造表示ソフトの他、
検索した結晶構造の原子間距離や角度、粉末 X 線回折パター
ンの計算ソフトが付いています。含有元素、組成式、結晶学デー
タ、鉱物名、キーワード、ANX formula、ICDD の PDF 番号など
から検索できます。検索結果は、CIF 形式での出力が可能です(ダウ
ンロード数には年間上限あり)。ICSD API を ICSD Web の追加
オプションで契約することが可能です。

製 作:FIZ Karlsruhe (独)
内 容:無機化合物の名称、分子式、3 次元原子座標値、結晶学データ、書誌情報
件 数:32.7 万件 (1913 ～) (2025 年秋リリース)
更 新:年 2 回、年約 2.0 万件追加
頒 布 形 態:年間定額契約
使用可能機種:Windows (ICSD Desktop)、Web 環境 (ICSD Web)

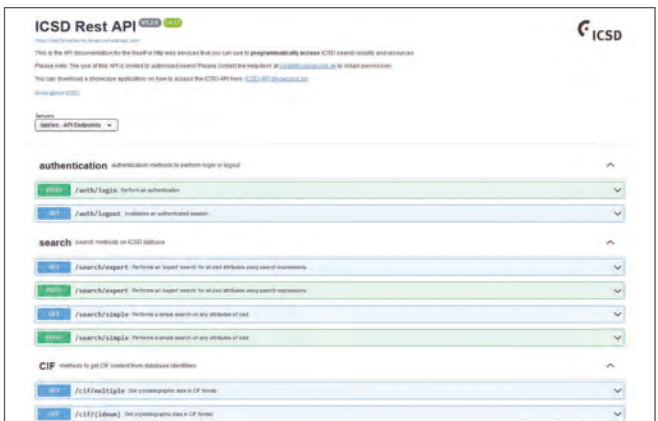
ICSD API

ICSD API (Application Programming Interface) は、ICSD の
追加オプションとしてご契約いただけます。ICSD 付属のインター
フェイスを経由せずに ICSD のデータに直接アクセスし、データ
を迅速に大量ダウンロードすることができます。ダウンロード数
は無制限で、全件ダウンロードも可能です。新材料探索を目的に
したマテリアルズ・インフォマティクスや第一原理計算の大規模計算
等のため、大量の結晶データが必要な方におすすめです。自作の
スクリプトにより、必要なレコードのみまたは全レコードの CIF や
結晶学データの CSV ファイル等をダウンロードしてください。

製 作:FIZ Karlsruhe (独)
頒 布 形 態:Web 版 (REST API) ・ ICSD Web 本体の追加オプションとして契約 (年間定額契約)
ダウンロード可能ファイル: CIF、結晶学データの CSV、結合長・結合角の CSV 結晶構造の JPEG、粉末回折パターンの JPEG、粉末回折の x-y
データの CSV



ICSD: Inorganic Crystal Structure Database



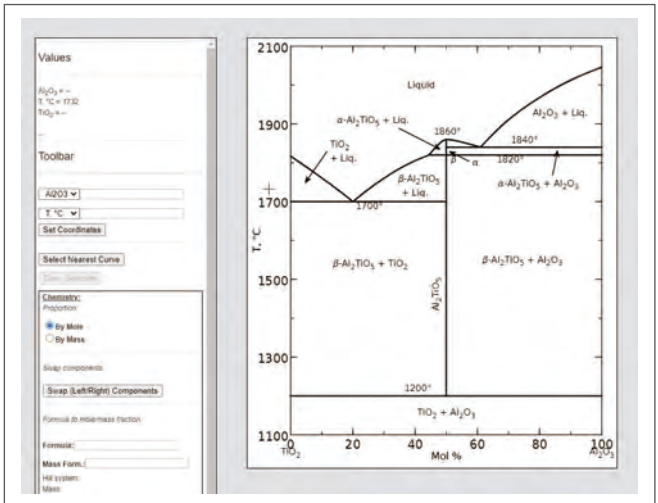
ICSD API

無機材料の研究・設計・開発に広く利用されている決定版

PHASE セラミックス相図データベース

セラミックスやガラスなど、無機材料の相図(状態図)を収録して
います。各相図には、セラミックスの専門家による解説文が付され
ており、応用例に関する情報も得ることができます。データの質
を落とすことなく、相図の成分軸の反転や単位変換(重量%から
モル%へ、またはその逆)が可能な相図表示ソフトウェアが付属し
ています。ユーザフレンドリーなインターフェースにより含有元素や
成分、書誌情報などから相図を簡単に検索できます。USB 版では、
旧バージョンからのアップグレードが可能です(割引料金適用)。

製 作:The American Ceramic Society (ACerS、米)、NIST (米)
内 容:セラミックス、無機系材料の名称、相図、各相の化学式、書誌情報
件 数:3.3 万件 (1898～) (2025 年 5 月リリース)
更 新:年 1 回、年約 4 百件追加
頒 布 形 態:USB 版(買取)、Web 版(年間定額契約)
使用可能機種:Windows (USB 版)、Web 環境 (Web 版)



PHASE: ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams

MPDS 無機材料データベース

合金など、無機材料の相図(状態図)、結晶構造、材料特性を収録
した世界最大級のレポジトリです。通常版では、簡潔な検索イン
ターフェイスを活用して、材料情報を詳細に調べることができま
す。相図は、画像ファイルだけでなく、機械学習に適したJSON形
式でのダウンロードも可能です。API 版を契約すると、機械学習
やシミュレーションに適したテキスト形式のデータセットも作成
できます。

製 作:ASM International (米)
内 容:合金、無機系材料の名称、相図、各相の化学式、結晶学データ、
3次元原子座標値、物性、書誌情報
件 数:相図 7 万件、結晶構造 50 万件、
物性値 99 万件 (2025 年 6 月リリース)
更 新:年 1 回
頒 布 形 態:Web 版(年間定額契約)



MPDS: ASM Materials Platform for Data Science

お問い合わせ先

科学データ情報室

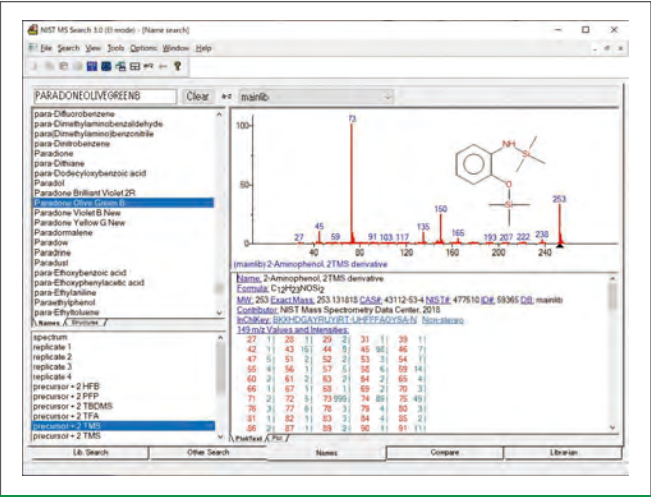
TEL:03-5978-3622 Email:crystal@jaici.or.jp

質量スペクトルデータベース

質量分析のアドバンスツール



実測の電子イオン化質量スペクトルが収録されたデータベースで、全てのスペクトルや構造は専門家によって厳しく検証されています。また、in-house のデータを追加して利用できます。スペクトルデータや化合物名、分子式から検索し、化合物の同定にご利用頂けます。スペクトル、2D 構造式の表示も可能です。2023 年 6 月リリースの NIST23 では、NIST20 と比べて EI スペクトルが約 4 万件増加し、MS/MS スペクトルは 60 %以上増加しました。頒布形態としては、付属の NIST MS Search3.0 に内蔵された状態で提供されるオリジナル版と他社の解析ソフトにもインポート可能な仕様の解析ソフト対応版(Wiley 社提供)の 2 種類があります。旧版からのアップグレードが可能です(割引料金適用)。

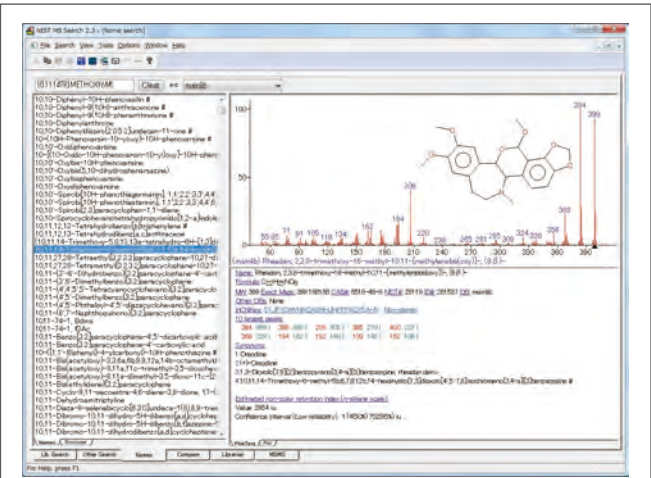


NIST23

製 作:米国国立標準技術研究所 (NIST) 、米国国立衛生研究所 (NIH) 、米国環境保護庁 (EPA) 、Wiley (米、解析ソフト対応版)
内 容:化合物名、分子式、化学構造式、CAS 登録番号 (CAS RN®) 、質量スペクトルデータ、RI 値(保持指標)/GC 測定条件
件 数:EI 法 39 万件、MS/MS 法 240 万件、RI 49 万件
頒 布 形 態: USB (買取)
使用可能機種: Windows



Wiley 社が独自に収集した、EI スペクトルのデータベースです。世界最大級の網羅性を誇り、NIST23 と比べ、2 倍以上の EI スペクトル・化合物を収録しています。データ形式は NIST23 と同じものを採用していますので、NIST23 からの移行もスムーズです。他社の質量分析データシステムにも対応しています。NIST23 との統合版もあり、EI スペクトル数が 118 万件以上収録されています。さらなる同定率の向上を実現したい方におすすめです。旧版からのアップグレードが可能です(割引料金適用)。



Wiley Registry 2023

製 作:Wiley (米)
内 容:化合物名、分子式、化学構造式、CAS 登録番号 (CAS RN®) 、質量スペクトルデータ、InChIKey 、化学品分類情報、Kovats Retention Index (計算値)、Splash ID
件 数:EI スペクトル 87 万件 (Wiley Registry 2023) / 118 万件 (Wiley Registry 2023・NIST23 統合版)
頒 布 形 態:USB (買取)
使用可能機種:Windows

オンライン辞典

化学・薬学・農学に関する基礎研究のベーシックツール



天然物、食品成分、ポリマーなど、9 分野のオンライン辞典から構成されている化合物データベースで、化学・薬学・農学の研究現場で活用されています。各辞典には、論文等で報告された化合物の名称、構造式、物性、生物学的起源、安全性情報などが収録されており、部分構造での検索が可能です。特に天然物辞典は、生物種(学名)での検索も可能であり、生物試料中の化合物同定に活用できるなど、天然物研究者から定評があります。また、出典文献情報が精選されているため、ヒットした大量の文献情報から目的の文献を探し出すといった、他の文献検索ツールを使う際にはよくある煩雑な作業から解放されます。検索結果については、各種ファイル形式で出力できます。なお、CHEMnetBASE にある全ての辞典をセットで契約できるほか、利用したい辞典のみ個別に契約することも可能です。

製 作:Taylor & Francis Group / CRC Press 社(英、米)
内 容:化合物名、分子式、化学構造式、各種物性(融点、沸点、UV 等)、CAS 登録番号 (CAS RN®) 、毒性 (LD₅₀ 値)、生物学的起源、生理活性、主要な文献情報
更 新:年 2 回(化合物大辞典・天然物辞典)、年 1 回(その他)
頒 布 形 態:Web 版(年間定額契約)、一部 ASCII 版あり(年間定額契約)

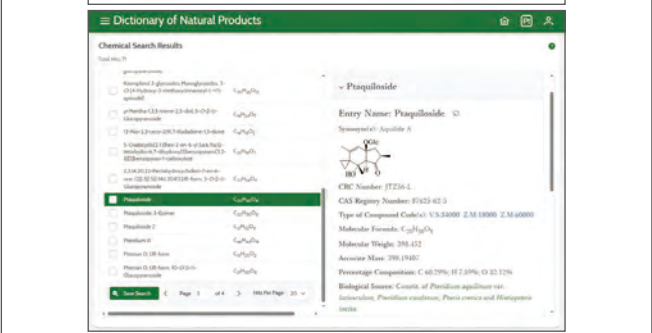
データベースラインナップ

- CRC 物理化学データハンドブック CRC Handbook of Chemistry and Physics
2.6 万件以上の無機化合物と有機化合物の物性を収録。
- 化合物大辞典 Combined Chemical Dictionary
74 万件の天然物、有機化合物、医薬品、無機化合物と有機金属化合物の情報を収録。ASCII 版あり。
- 天然物辞典 Dictionary of Natural Products
37 万件以上の天然物情報を収録。ASCII 版あり。
- 有機化合物辞典 Dictionary of Organic Compounds
33 万件以上の有機化合物情報を収録。
- 医薬分子辞典 Dictionary of Drugs
6.2 万件以上の医薬品の情報を収録。
- 海洋天然物辞典 Dictionary of Marine Natural Products
7.7 万件以上の海洋天然物情報を収録。
- 食品成分辞典 Dictionary of Food Compounds
9.4 万件以上の食品含有成分の情報を収録。
- ポリマー物性データベース Polymers:A Property Database
1.1 千件以上のポリマーの物性(92 種類)と 1.2 万件以上のモノマー情報(20 種類)を収録。
- 有機化合物小辞典 Properties of Organic Compounds
3 万件以上の有機化合物のスペクトルデータ(EI-MS、IR、NMR など)を数値データとして収録。

お問い合わせ先

科学データ情報室

TEL:03-5978-3622 Email:crystal@jaici.or.jp



CHEMnetBASE

知財情報センター (SHIPS)

医薬・化学・バイオの特許調査サービス

SHIPS の特長

1. 医薬・化学・バイオに特化した高い専門性

- 製薬・化学系企業出身、薬学博士など高度専門知識を有するスタッフ陣が調査を担当いたします。
- 知財部の方のもとより、研究部門の方からも高い評価をいただいております。

2. 高度な検索技術

- 調査テーマに応じて使用データベースを選択します（CAS IP Finder, powered by STN™、JP-NET、PatBase など）。
- CAS IP Finder, powered by STN™ を使用した構造検索、配列検索、ポリマー検索には定評があります。

3. きめ細やかな対応

- お客様のご希望に柔軟に対応いたします。
- 一件一件丁寧に読み込みを行います。

調査内容

- 侵害予防調査** …… 分類やキーワードだけでなく、CAS RN® や統制語を用いて複数のデータベースを検索します。また公報スクリーニング結果には定評があります。
- 無効資料調査** …… 50 を超える文献データベースを用いて非特許文献も網羅的に調査できます。
- 先行技術調査** …… 先行文献の存否を調査し、貴社の特許取得（国内外出願時、審査請求時など）をお手伝いいたします。
- 技術動向調査** …… 解析ソフトでは対応できないご希望の観点に沿って調査いたします。調査結果の解析およびマップ化も対応しています。
- SDI 調査** …… ご指定の頻度で検索、スクリーニングなどを実施し結果を納品いたします。種々の形式（スクリーニングのみ、貴社フォーマット報告書など）に対応いたします。
- AI特許調査** …… AI特許検索・分析ツールを用いて特許調査を行います。
- その他調査** …… 文献調査、物質関連調査（構造検索、配列検索、ポリマー検索）、CAS IP Finder, powered by STN™ のアラート登録なども承っています。

使用システム

特許文献データベース

- CAS IP Finder, powered by STN™
- PatBase
- JP-NET
- Patentfield
- 各国特許庁サイト
- その他

非特許文献データベース

- CAS IP Finder, powered by STN™
- JDreamIII
- 明日の新薬
- その他



調査実績

主なお客様

- 企業（製薬、化学、食品・飲料、化粧品、資源・エネルギーなど）
- 研究所
- 大学
- 公的機関
- 特許事務所

主な対応技術分野

- 医薬 ● 診断薬 ● 製剤 ● 抗体 ● 遺伝子 ● 細胞
- 再生医療 ● 生体適合性材料 ● 農薬 ● 化粧品
- パーソナルケア用品 ● 食品 ● 飲料 ● ポリマー
- 電池 ● レジスト ● 有機 EL ● 電子材料 ● 無機材料
- 生分解性材料 ● バイオマス ● リサイクル ● 環境
- エネルギー

調査の流れ

お客様 SHIPS

① 調査のお問い合わせ

弊協会 HP よりダウンロードできる「調査見積依頼フォーム」にご記入の上、メール添付にてお送りください。ご希望に応じて秘密保持誓約書、秘密保持契約書 各雛型の準備もごございます。

② インタビュー

調査内容の詳細確認および適切な調査方針を立てるため、事前のインタビューを行っております。Web 会議、面談等、ご希望の形式にてお客様とのコミュニケーションを大切にしております。

③ お見積書送付

インタビューから、おおよそ 1 週間程度でご提示しております。調査内容やご予算に応じて、いくつかのパターンでお見積りすることが可能です。

④ ご発注

ご発注は、メール、貴社フォーマットのご発注書などいずれでも承っております。

⑤ 調査（検索・スクリーニング）

ご希望に応じて中間報告することも可能です。ご発注内容に基づき調査（検索、スクリーニング）を実施いたします。検索+リスト作成のみ、スクリーニングのみなどのご依頼も受け付けております。

⑥ 調査報告書作成

報告書類の一例として、調査報告書（調査目的、検索式、調査結果など）、特許 / 文献リスト（書誌情報、抽出した根拠となる記載のメモなど）があります。

⑦ 納品

納品方法をご指定いただけます（オンラインストレージサーバー経由、メール添付など）。納品の後、請求書を発行いたします。



お問い合わせ先



知財情報センター
(SHIPS)

TEL:0120-921-997 FAX:03-5978-3643
Email:ships@jaici.or.jp



化学情報協会

一般社団法人化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル

TEL:03-5978-3608 FAX:03-5978-3600

URL:www.jaici.or.jp



交通のご案内

- JR山手線「駒込駅」南口徒歩4分
- 東京メトロ南北線「駒込駅」1番出口徒歩3分
- 都営地下鉄三田線「千石駅」徒歩9分



UD FONT
by MORISAWA

見やすいユニバーサル
デザインフォントを
採用しています。

