

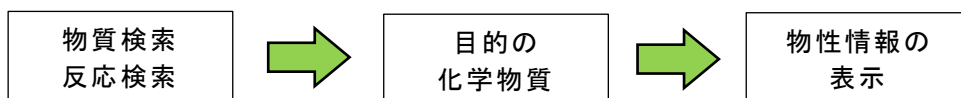
* 目次 *

物性情報

検索の流れ	2
CAS SciFinder [®] に収録される物性情報	3
物性情報のダウンロード	7
物性値およびスペクトルピーク値からの検索	8

検索の流れ

CAS SciFinder[®] では、化学物質の物性情報を確認できる。



■ 物質検索から物性情報を確認する

The screenshot shows the 'Substances (1)' search results page. The CAS Registry Number '58-08-2' is highlighted in a red box. Below it is the chemical structure of Caffeine (C₈H₁₀N₄O₂) and statistics: 70K References, 1,216 Reactions, and 141 Suppliers. A red arrow points to the 'Substance Detail' page for the same CAS number. The detail page shows the chemical structure and a table of key physical properties:

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	194.19	-
Melting Point (Experimental)	238 °C	-

■ 反応検索の結果から物性情報を確認する

The screenshot shows the 'Reactions (853)' search results page. A reaction scheme is displayed with the caffeine molecule highlighted in a red box. A red arrow points to a pop-up 'Substance Detail' window for Caffeine. The window shows the chemical structure and a list of actions: Reactions (1,216), Synthesize (180), Create Retrosynthesis Plan, References (70K), and Suppliers (141). The 'Substance Detail' title is highlighted in a red box.

■ CAS SciFinderⁿ に収録される物性情報

Substance Detail (1 of 1,128)

References (64K) Reactions (1,358) Suppliers (135)

CAS Registry Number
58-08-2

主要物性値
分子量, 沸点, 融点, pKa, 密度が
1 データずつ表示される
(実測物性値優先).

リンクをクリックすると, 詳細
(レコード下に収録されている物性
情報の該当箇所)が表示される

C8H10N4O2
1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-, (9CI, ACl)

Key Physical Properties		Value	Condition
Molecular Weight	分子量	194.19	-
Melting Point (Experimental)	融点	238 °C	-
Boiling Point (Predicted)	沸点	416.8±37.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Experimental)	密度	1.23 g/cm ³	Temp: 18 °C
pKa (Predicted)	pKa	0.52±0.70	Most Basic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

Expand All | Collapse All

- Other Names and Identifiers
- Experimental Properties ① **実測物性値**
- Experimental Spectra ② **実測スペクトル**
- Predicted Properties ③ **予測物性値**
- Predicted Spectra ④ **予測スペクトル**

物性情報
クリックすると, 詳細情報が
表示される

CAS SciFinderⁿ に収録される物性情報

2021年9月

内容	実際に測定されたデータ			ソフトウェアで計算したデータ	
	① EXPERIMENTAL PROPERTIES (実測物性値)	② EXPERIMENTAL SPECTRA (実測スペクトル)		③ PREDICTED PROPERTIES (予想物性値)	④ PREDICTED SPECTRA (予想スペクトル)
収録形態	数値	文献情報	チャート(図)	数値	チャート(図)
物性の数	13種類	約200種類	12種類	20種類	2種類
収録対象	単成分・多成分物質			単成分物質	

■ ① EXPERIMENTAL PROPERTIES - 実測物性値

- ・ 実際に測定して得られたデータ
- ・ 数値が収録されている場合と、データが収録されている文献情報が表示される場合がある

Experimental Properties

種類ごとにタブで表示

Property	Value	Condition	Source
Median Lethal Dose	355 mg/kg	Organism: rat; Route: oral	(1) APC
Median Lethal Dose	265 mg/kg	Organism: rat; Route: subcutaneous	(2) CAS
Median Lethal Dose	246 mg/kg	Organism: 数値を収録	(1) APC
Median Lethal Dose	230 mg/kg	Organism: 数値を収録	(1) APC
Median Lethal Dose	220 mg/kg	Organism: rat; Route: subcutaneous	(2) CAS
Median Lethal Dose	200 mg/kg	Organism: rat; Route: oral	(3) CAS
Median Lethal Dose	155 mg/kg	Organism: rat; Route: subcutaneous	(2) CAS
Median Lethal Dose	127 mg/kg	Organism: mouse; Route: oral	(1) APC
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion) - 22 Sources	See Full Text		(4-25) CAS
Half-Life (Biological) - 8 Sources	See Full Text	See full text 文献情報を収録	(26-33) CAS
LC50 - 3 Sources	See Full Text		(34-36) CAS
LD50 - 2 Sources	See Full Text		(37-38) CAS
NOAEL/LOAEL - 1 Source	See Full Text		(39) CAS

Sources

(1) (2000), 1280 pages, CPlus
 (2) Warszawski, Ditz; Biology of the Neonate, (1978), 34(1-2), 68-71, CPlus
 (3) Varma, Shambhu D.; Molecular Vision, (2010), 16, 2626-2633, CPlus

物性値の出典
 リンクをクリックすると
 レコードが表示される

- ・ 数値が収録されている実測物性値は 13 種類

物性	内容	物性	内容
Boiling Point	沸点	Magnetic Moment	磁気モーメント
Density	密度	Melting Point	融点
Electric Conductance	コンダクタンス	Optical Rotatory Power	旋光度
Electric Conductivity	電気伝導率	Refractive Index	屈折率
Electric Resistance	電気抵抗	Glass Transition Temperature	ガラス転移温度
Electric Resistivity	比電気抵抗	Tensile Strength	引張強度
LD50	50% 致死量		

・ 出典 (収録源)

- CAS SciFinder[®] に収録した文献 (CAS)
- Infochem (IC)
- The National Library of Medline (NLM)
- Syracuse Research Corporation of Syracuse (SRC)
- The National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH)
- Ashgate Publishing Co. (APC)
- Gelest Inc. (GELEST)

* () 内は Note の記載

■ ② EXPERIMENTAL SPECTRA - 実測スペクトル

- ・ 実際に測定して得られたスペクトル情報
- ・ チャート（図）が収録されている場合と、スペクトルが収録されている文献情報が表示される場合がある

The screenshot shows the 'Experimental Spectra' section of a database. At the top, there are tabs for different spectral types: ¹H NMR, ¹³C NMR, Hetero NMR, IR, Mass, Raman, UV and Visible, and Additional Spectra. A red box highlights the 'Experimental Spectra' header, and another red box points to the tabs with the text '種類ごとにタブで表示' (Display by type in tabs). Below the tabs is a table listing spectra. A red box highlights the 'View Proton NMR Spectrum' links, with the text '文献情報を収録' (Literature information is recorded). Below the table, there are 'Sources' listed: (1) Spectral data were obtained from Enamine Ltd., (2) "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan), and (3) Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc. A red box points to the 'View Proton NMR Spectrum' link for source (4-13) IC, CAS, with the text 'スペクトルの出力' (Spectrum output). Below this is a detailed view of a 'Proton NMR Spectrum Detail' for Caffeine (58-08-2). The detail view shows the chemical structure, CAS Name, Conditions (Solvent: Trifluoroacetic acid (76-05-1)), and Spectrum Summary (Spectrum ID: 5811_2_702.H, Peak Data: 8.88, 4.26 (9H), 3.78 (9H), 3.5 (9H) ppm, Source: Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc.). A red box points to the 'Spectrum Summary' section, with the text 'スペクトル情報の出典' (Source of spectrum information). A red box also points to a download icon in the top right corner of the detail view, with the text 'スペクトルの出力' (Spectrum output).

- ・ チャート（図）が表示可能なスペクトルは 12 種類

- ¹H-NMR - ¹³C-NMR - ¹⁷O-NMR - ²⁹Si-NMR - IR - Raman
 - ¹¹B-NMR - ¹⁵N-NMR - ¹⁹F-NMR - ³¹P-NMR - Mass - UV and Visible

- ・ 出典（収録源）

- CAS SciFinder[®] に収録した文献（CAS） - バイオ・ラッド ラボラトリーズ（BIORAD）
 - Wiley (WSA, WSR, WSS) - 産業総合研究所（AIST）
 - ACD Labs (ACD) - Enamine Ltd (ENAMINE)

* () 内は Note の記載

- ③ PREDICTED PROPERTIES - 予想物性値
- ④ PREDICTED SPECTRA - 予想スペクトル
 - ・ 構造データの結合表から ACD Labs のソフトウェアを用いて得られた物性データとスペクトルを収録

^ Predicted Properties
種類ごとにタブで表示

Property	Value	Condition	Source
Bioconcentration Factor	1.0	pH 1; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 2; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 3; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 4; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 5; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 6; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 7; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 8; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 9; Temp: 25 °C	(1) ACD
Bioconcentration Factor	1.0	pH 10; Temp: 25 °C	(1) ACD

Sources
(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 (© 1994-2020 ACD/Labs)

^ Predicted Spectra
ACD Labs のソフトウェアで計算した物性値やスペクトル

¹H NMR ¹³C NMR

View Proton NMR Spectrum

Sources
(1) Predicted NMR data calculated using Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs) Software V11.01 (© 1994-2020 ACD/Labs)

- ・ 20 種類の予想物性値を収録

物性	内容	物性	内容
Bioconcentration Factor	生物濃縮係数	logP	オクタノール - 水分配係数の対数値
Boiling Point	沸点	Molecular Weight	分子量
Density	密度	Molar Volume	モル体積
Enthalpy of Vaporization	蒸発エンタルピー	Mass Intrinsic Solubility	固有質量溶解度
Flash Point	引火点	Mass Solubility	質量溶解度
Freely Rotatable Bonds	回転可能な結合数	Molar Intrinsic Solubility	固有モル溶解度
H Acceptors	水素受容基数	Molar Solubility	モル溶解度
H Donors	水素供与基数	pKa	酸塩基解離定数 (pKa)
Koc	有機炭素吸着係数	Polar Surface Area	極性表面積
LogD	pH を考慮したオクタノール - 水分配係数の対数値	Vapor Pressure	蒸気圧

物性情報のダウンロード

- 📄 をクリックすると、Excel 形式で物性情報をダウンロードできる。

Substance Detail (1 of 1)

References (70K) Reactions (1,245) Suppliers (141)

CAS Registry Number
58-08-2

C₈H₁₀N₄O₂
1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-

Download Details
PDF
Download Image
PNG
Download Properties
Excel (.xlsx)
Download Structure
CXF
MOL
SDFile (.sdf)

CAS Registry Number	CAS Display Name	Type	Category
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Experimental	Thermal
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological
204443-32-3	1-Butyl-3,9-dihydro-3,9-dimethyl-1H-purine-2,6-dione	Predicted	Biological

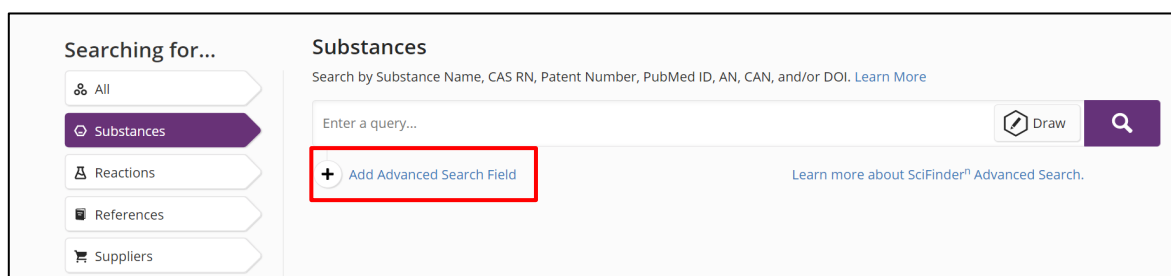
複数の物質を一度にダウンロードすると物質ごとにタブが作成される

- 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。
- 物性情報の一回あたりの最大ダウンロード数は 100 件(物質数)。

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。

物性値およびスペクトルピーク値からの検索

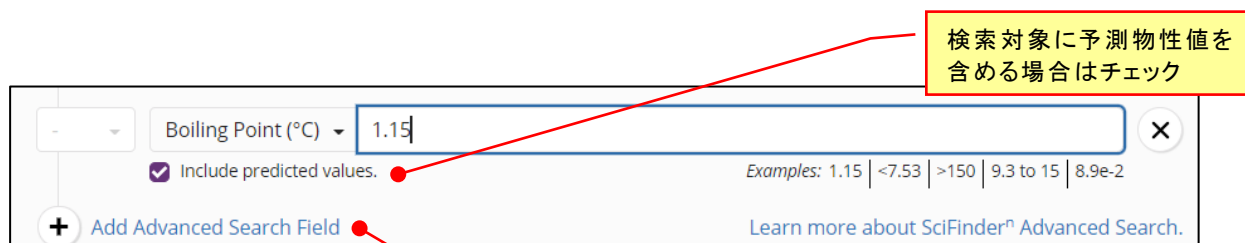
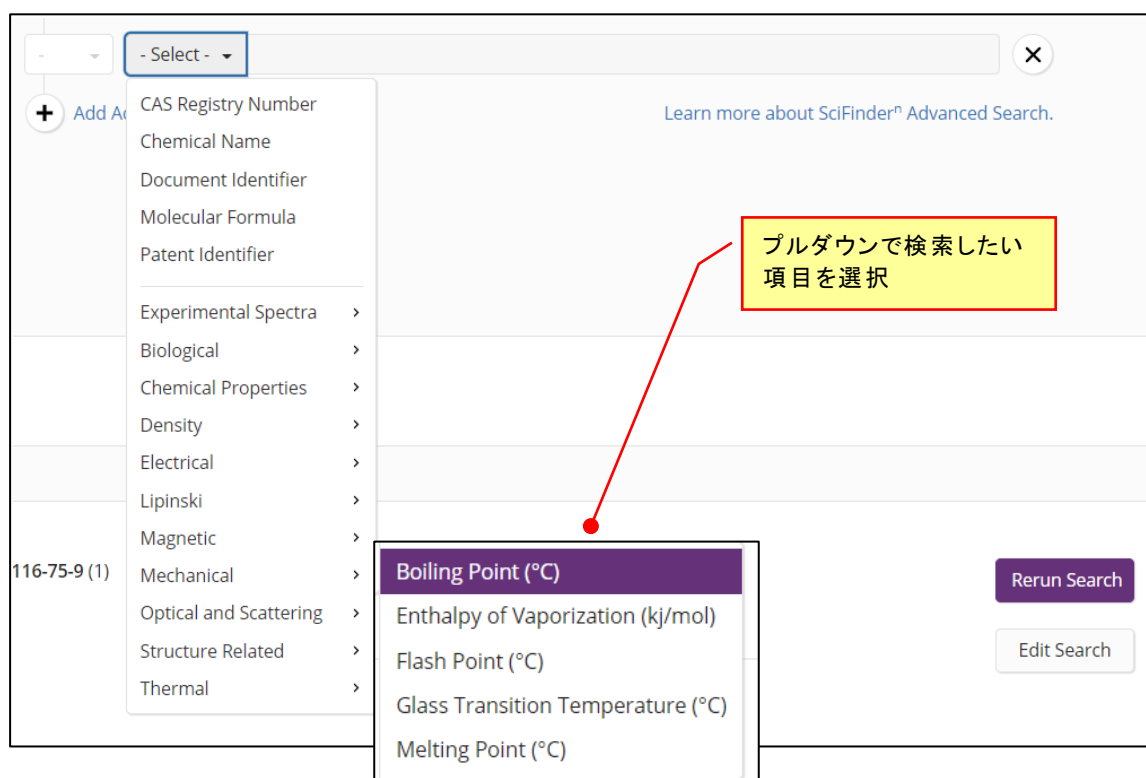
- Substance の Advanced Search から、物性値やスペクトルピーク値を使った検索が可能



■ 物性値からの検索

- 実測物性値もしくは予測物性値を基に、物性値から物質を検索することができる

Advanced Substance Search



複数の項目を掛け合わせた検索も可能

■ スペクトルピーク値からの検索

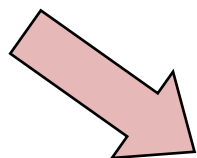
- ・ 実測スペクトルのピークデータを対象に、スペクトルピーク値から物質を検索できる

プルダウンで検索したい項目を選択

Examples: 8.03, 7.2, 2.63 | 5.95, 7 to 8.5 | 6.3

Learn more about SciFinder[®] Advanced Search.

入力した値に対して、Proton NMR の場合は ± 0.2 ppm, その他は ± 2ppm の範囲を含めて検索が実行される



Substances (1,719)

Sort: Relevance View: Partial

References Reactions Suppliers

<p>1</p> <p>354116-75-9</p> <p><chem>C18H22N2O7</chem> 1H-Indole-1-carboxylic acid, 5-(2,2-dimethyl-1-oxopropoxy)-2,3-dihydro-2-methyl-2-oxo-1H-indole-1-carboxylate</p> <p>1 Reference 1 Reaction 0 Suppliers</p>	<p>2</p> <p>55360-95-7</p> <p><chem>C14H7Cl3O4</chem> 2H,10H-Pyrano[2,3-f][1,3]benzodioxin-2-one, 3-chloro-4-methyl-8,10-bis(trichloro-...</p> <p>1 Reference 1 Reaction 0 Suppliers</p>	<p>3</p> <p>1318240-84-4</p> <p><chem>C27H27N5O5S3</chem> L-Cysteine, N-((3-hydroxy-2-quinolinyl) carbonyl)-5-methyl-D-cysteinylglycyl-N,S-...</p> <p>Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)</p> <p>Protein/Peptide Sequence Sequence Length: 4</p> <p>2 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>
--	--	---

Proton NMR Spectrum Detail (1 of 1)

354116-75-9

C18H22N2O7

CAS Name
Methyl 5-(2,2-dimethyl-1-oxopropoxy)-2,3-dihydro-3-methyl-3-(2-nitroethyl)-2-oxo-1H-indole-1-carboxylate

Conditions
Working Frequency
300 MHz
Solvent
Chloroform-d (865-49-6)

Spectrum Summary
Spectrum ID
GHET01_3_14.H

Peak Data
7.98, 7.06, 6.98, 4.22 (2H), 4.04 (3H), 2.68, 2.48, 1.51 (3H), 1.37 (9H) ppm

Source
Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc.

ACD 社,Willy 社が提供する実測スペクトルの Peak Data を対象に検索が実行され、回答が得られる