



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

JAICI
化学情報協会

P02	① 研究者向け情報ソリューション CAS SciFinder Discovery Platform™ CAS SciFinder Discovery Platform™
P03 - P07	② 研究者向け検索ツール CAS SciFinder® CAS SciFinder®
P08	③ 分析情報検索ツール CAS Analytical Methods™ CAS Analytical Methods™
P09	④ 製剤・配合検索ツール CAS Formulus® CAS Formulus®
P10	⑤ 化学物質規制情報検索ツール CAS Chemical Compliance Index™ CAS Chemical Compliance Index™
P11	⑥ 知財・情報担当者向け情報ソリューション STN IP Protection Suite™ STN IP Protection Suite™
P12 - P15	⑦ 知財・情報担当者向け検索ツール CAS STNext® CAS STNext®
P16	⑧ 特許モニタリングツール FIZ PatMon FIZ PatMon
P17	⑨ 特許事務所・調査会社向けの CAS STNext® 契約プラン CAS STNext Search Service™
P18	⑩ Reprints Desk が提供する原報複写サービス Article Galaxy Article Galaxy
P19	⑪ JAICI 辞書サービス JAICI Science Dictionary Pro
P20	⑫ JAICI 機械翻訳サービス JAICI ProTranslator EXPRESS-Light
P21 - P22	⑬ JAICI 機械翻訳サービス JAICI AutoTrans
P23 - P24	⑭ 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
P25	⑮ CAS RN® を使用するためのライセンスプログラム CAS 登録番号 (CAS RN®) ライセンスプログラム
P26	⑯ 企業製品カタログ登録サービス CAS Chemical Supplier Insights SM CAS Chemical Supplier Insights SM
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 化合物データベース CHEMnetBASE
P33 - P34	㉑ 医薬・化学・バイオの特許調査サービス SHIPS 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™

化学・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、化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

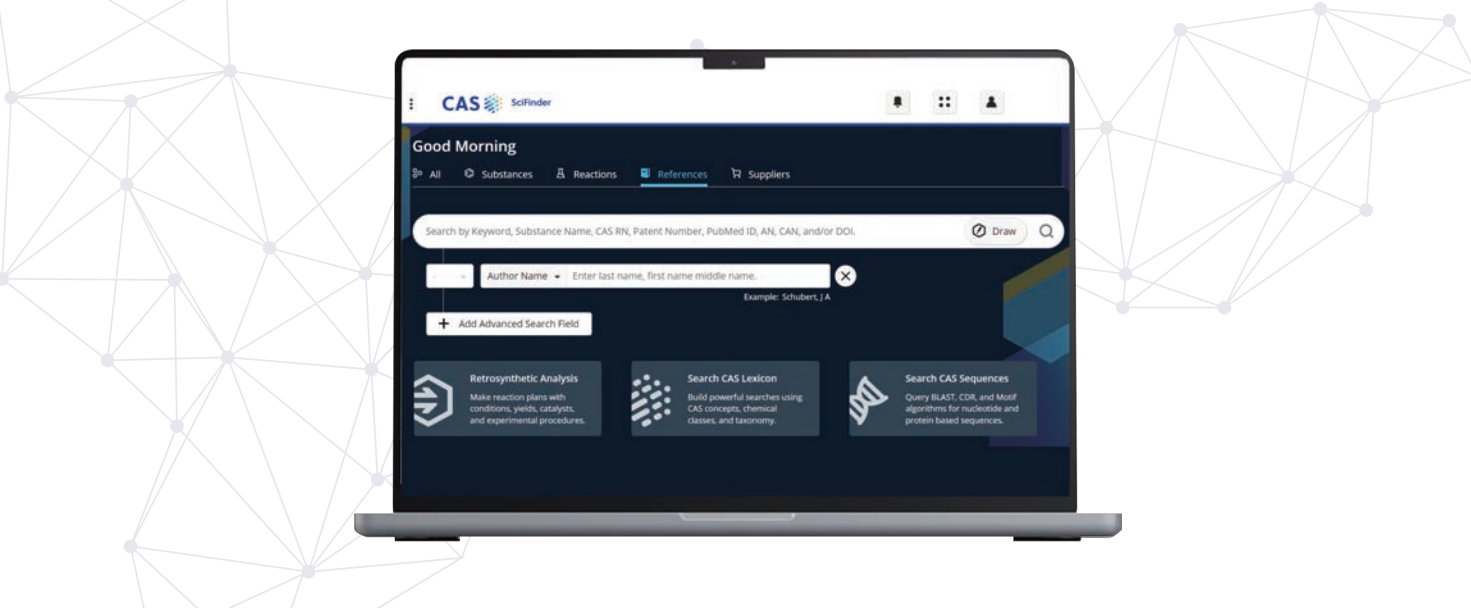
TEL:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp



CAS SciFinder® 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、化学に関係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。

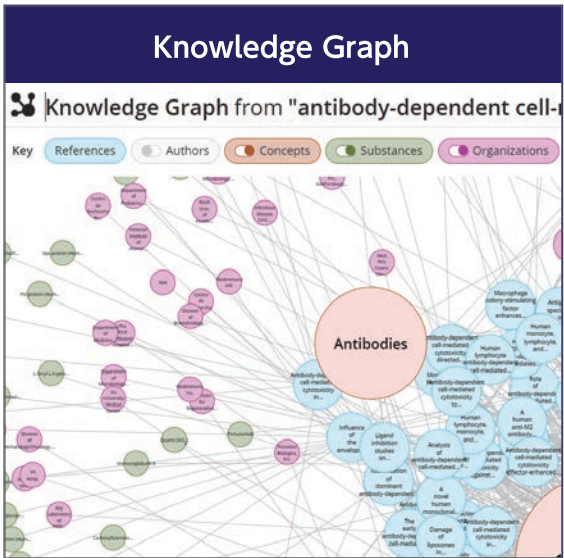


主要コンテンツ

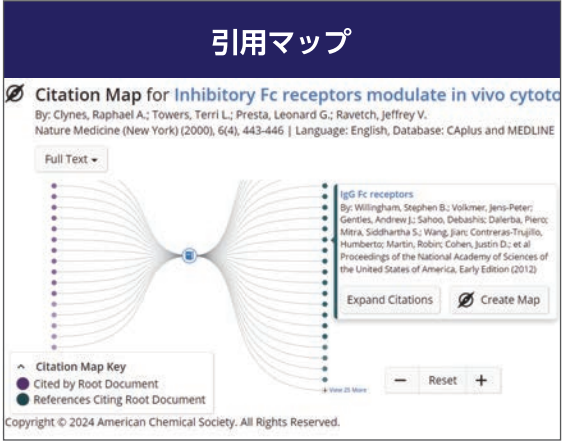
文献	- 化学・化学工学関連分野の学術論文 100 ヶ国以上の特許発行機関から発行された世界中の特許 - 医学・生物学論文（PubMed 由来）
化学物質	- CAS 登録番号（CAS RN®）が付与されているすべての物質 - 特許中の一般式構造（マルクーシュ構造）
反応	- 有機化学、有機金属化学分野を中心とした反応情報 - 反応スキーム、実験項情報、収率、溶媒、触媒
試薬カタログ	市販化学物質製品のカタログ
化学物質の法規制	化審法をはじめとする世界中の規制情報
製剤・配合情報	幅広い製剤・配合情報コレクション
分析情報	詳細な分析手順、測定機器、バリデーションデータ

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。



引用文献と被引用文献をまとめて表示。関連文献の把握に役立ちます。

共有・ダウンロード・アラート

共有

CAS SciFinder® の検索結果は、直接同僚に送付可能。容易に情報を共有できます。

ダウンロード

検索結果は PDF、RIS、XLSX、RTF などの形式でダウンロードでき、文献管理ツールや他のソフトへのインポートに対応しています。

アラート

最新情報をすぐに、忘れずに入手するためには、アラート登録が有効です。

ChemZent

最も古いドイツ語の化学抄録誌である Chemisches Zentralblatt の英語版デジタルアーカイブ。1830 年から 1969 年に発行された約 300 冊相当の貴重な情報です。

※教育機関以外のユーザーはオプション契約が必要です。

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

また、AI ベースの検索機能「Prior Art Analysis」を使えば、どなたでも簡単に先行技術文献検索を行います。



[References](#) Enter a query...

Method for analyzing amino acid sequence of peptides by MS/MS

In this Reference

- [IPC Data](#)
- [CAS Concepts](#)
- [Substances](#)

By: Hashimoto, Masaru; Chiba, Hiroshi; Gyokuzan, Katak

The method of analyzing amino acid sequence of a peptide using a tandem mass spectrometer (MS/MS) can reliably attribute individual signal to N-terminal fragment ion series or C-terminal fragment ion series while observing any of signals of the N-terminal fragment ions and C-terminal fragment ions. Using mass difference resulting from difference in or presence or absence of labeling for N-terminal amino group of a peptide to be analyzed, an ion signal having m/z value differing by the mass difference or absence of labeling for the N-terminal fragment ion; and an ion signal having the same m/z value is attributed to the C-terminal fragment ion.

Keywords: peptide sequencing tandem MS hydroxy/benzotriazole N terminal labeling

[PatentPak Viewer](#)
[Get Prior Art Analysis](#)
[Full Text >](#)

[Publication Information](#)

Patent

[View Less](#)

Patent Number	Publication Date	Application Number	Application Date	Kind Code
JP2016004032	2016-01-12	JP2014-126748	2014-06-19	A

Assignee

Hirotski University, Japan
Tohoku Chemical Co., Ltd.

Source

Japan
CODEN: JKOXAF

Database Information

AN: 2016:50060
CAN: 164:171267
Cplus

Language

japanese

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
JP2016004032	japanese	A	PDF PDF+ Viewer	2016-01-12	JP2014-126748	2014-06-19

[Expand All](#) | [Collapse All](#)

IPC Data

CAS Concepts

Substances

1854981-49-9

C₉H₆N₃O₂
1H-Benzotriazol-1-yl acetate-2,2,2-d₃

PatentPak

Role: Analytical Reagent Use, Synthetic Preparation, Analytical Study, Uses, Preparation

1854981-49-9

C₉H₆N₃O₂
1H-Benzotriazol-1-yl acetate-2,2,2-d₃

PatentPak

Role: Analytical Reagent Use, Analytical Study, Uses

Notes: (un)substituted lower alkyl, lower alkoxy, carbonyl, or N-alkylarylamino derivatives

18355-05-0

C₈H₇N₃O₂
1-Acetoxybenzotriazole

PatentPak

Role: Analytical Reagent Use, Synthetic Preparation, Analytical Study, Uses, Preparation

18355-05-0

C₈H₇N₃O₂
1-Acetoxybenzotriazole

PatentPak

Role: Analytical Reagent Use, Analytical Study, Uses

Notes: (un)substituted lower alkyl, lower alkoxy, carbonyl, or N-alkylarylamino derivatives

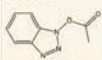
特許調査をより円滑にする
CAS PatentPak®

CAS Patent Pak

2024 2024 2024 2024 2024

Key Substances in Patent

CAS RN
183593-95-9D

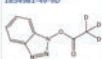


(2R)-substituted (lower allyl), lower allylic, carboxyl, or N-allyl-delta-lactams derivative.

Analyst Markup Locations (3)

[View Page 2](#)

CAS RN
183593-95-9D

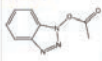


(2R)-substituted (lower allyl), lower allylic, carboxyl, or N-allyl-delta-lactams derivative.

Analyst Markup Locations (1)

[View Page 2](#)

CAS RN
183593-95-9D



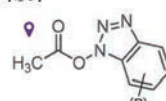
(2R)-substituted (lower allyl), lower allylic, carboxyl, or N-allyl-delta-lactams derivative.

Analyst Markup Locations (3)

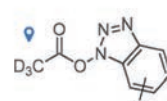
[View Page 10](#)

下記の記事で表される 1-ヒドロキシベンゾトリアゾールエステルを用いて行う請求項に記載の方法。

【化 1】



(R¹n)



(R²n)

【式中、R¹は、同一または異なる、置換基を有していてもよい低級アルキル基、低級アルコキシ基、カルボキシ基、N、N-二低級アルキルアミノ基のいずれかを示す。R²は、同一または異なる、0～3の置換基を示す。】

【請求項 5】

解析対象とするペプチドが有するN末端アミノ基に付するアセチル化と重アセチル化を上記の化学式で表される 1-ヒドロキシベンゾトリアゾールエステルの塩 1：1 の混合物（モル比）をペプチドに対して反応させることで行う請求項 1 記載の方法。

【請求項 6】

さらに以下の 3 つのステップを少なくとも含んでなる請求項 1 記載の方法。

- (4) 解析対象とするペプチドに対してそのC末端カルボキシ基に対してラベル化を行うペプチドのスペクトル
- (5) 解析対象とするペプチドのスペクトルを基準とするペプチドのスペクトルと対象のスペクトルを取捨

**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**

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™

Substances | Enter a query...

Patent Markush search for drawn structure

References

Filter

Save

Patent Markush Match

As Drawn (7/95)

Substructure (5,402)

Filter Behavior

☒ Filter ☐ Exclude

Patent Office

- ☐ World Intellectual Property Organization (35)
- ☐ United States (37)
- ☐ European Patent Organization (35)
- ☒ Japan (2)
- ☐ Canada (2)

[View All](#)

CA Section

- ☐ Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Radiographic Processes (307)
- ☐ Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atoms) (37)
- ☐ Organic Chemistry (35)

Filtering: Patent Office: Japan CA Section: Biochemical Methods

☐ 5 Results

☒ 1

JP2016004032



JP2004045292



Method for analyzing amino acid sequence of peptides by MS/MS

Byr Hashimoto, Masaru Chiba, Hiroshi Otsukawa, Katalo Japan, JP200404032 A 2016-01-13 Language: Japanese, Database: Caplit
Aigawa Hiroshi University Fukuoka Chemical Co., Ltd.

Patent claim 4

PatentPat **Full Text**

There are no notes to display for this structure.

☒ 2

Novel metal complex, and its use in protein amino acid sequence



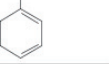
特許中のマルクシェ構造を
対象にした検索ができます

There are no notes to display for this structure.

特許中のマルクシェ構造を
対象にした検索ができます

 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。



Edit Drawing Remove

☐ Search Patent Markush


[Substances](#)

Return to Home

Substances search for drawn structure

Structure Match

Analyze Structure Precision

Chemescape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemescape.

Filter Behavior

Search Within Results

Reaction Role

☐ Product (8,091)
☐ Reactant (1,834)
☐ Reagent (1)
☐ Catalyst (11)

14,271 Results

Sort: Relevance View: Partial

☐ 1 4632-51-3  C₁₅H₁₂S 2-(4-Methyl-1-naphthalenyl)thiophene 88 References 87 Reactions 8 Suppliers	☐ 2 14559-17-2  C₁₅H₁₂S 2-(4-Methyl-1-naphthalenyl)thiophene 4 References 2 Reactions 0 Suppliers	☐ 3 1064187-66-1  C₁₅H₁₂S 2-(4-Methyl-1-naphthalenyl)thiophene 4 References 4 Reactions 4 Suppliers
☐ 4 1413394-25-8  C₁₅H₁₂S 2-(4-Methyl-1-naphthalenyl)thiophene 2 References 7 Reactions 1 Supplier	☐ 5 211796-83-7  C₁₄H₁₀OS 5-(2-Thienyl)-2-naphthanol 2 References 13 Reactions 3 Suppliers	☐ 6 58256-11-4  C₁₅H₁₂S 2-(4-Methyl-1-naphthalenyl)thiophene 9 References 4 Reactions 3 Suppliers

[illegible]

試薬カタログ情報

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	212.30	-
Boiling Point (Experimental)	188 °C	Press: 0.5 Torr
Density (calculated)	1.1794 g/mL (20 °C)	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

Experimental Properties | Spectra

Expand All | Collapse All

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Thermal

Property	Value	Condition	Source
Boiling Point	188 °C	Press: 1 Torr	(1) CAS
Boiling Point	188 °C	Press: 0.5 Torr	(2) CAS
Boiling Point	188 °C	Press: 0.5 Torr	(3) CAS

Source(s)

(1) Spectrochimica Acta Journal of the American Chemical Society (1958), 12, 571-7; C1495.

(2) Denmark, Scott G., Journal of Organic Chemistry (2008), 73(4), 1440-1451; C1495.

(3) Denmark, Scott G., Organic Letters (2006), 8(4), 761-765; C1495.

物性、スペクトル

- Details by Country/International & Other Lists
 - Country/Region Information Available
- European Union
 - Summary
 - Inventory Status on REACH
 - List of Pre-Registered Substances
 - <https://echa.europa.eu/substance-information/-/substanceinfo/100.005.368>
 - Inventory Status on EINECS
 - Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990
 - Regulatory List Numbers
 - EC No.: 205-904-0
 - EINECS No.: 205-904-0
- Viet Nam
 - Summary
 - Inventory Status on VNECI
 - Vietnam Draft National Chemical Inventory

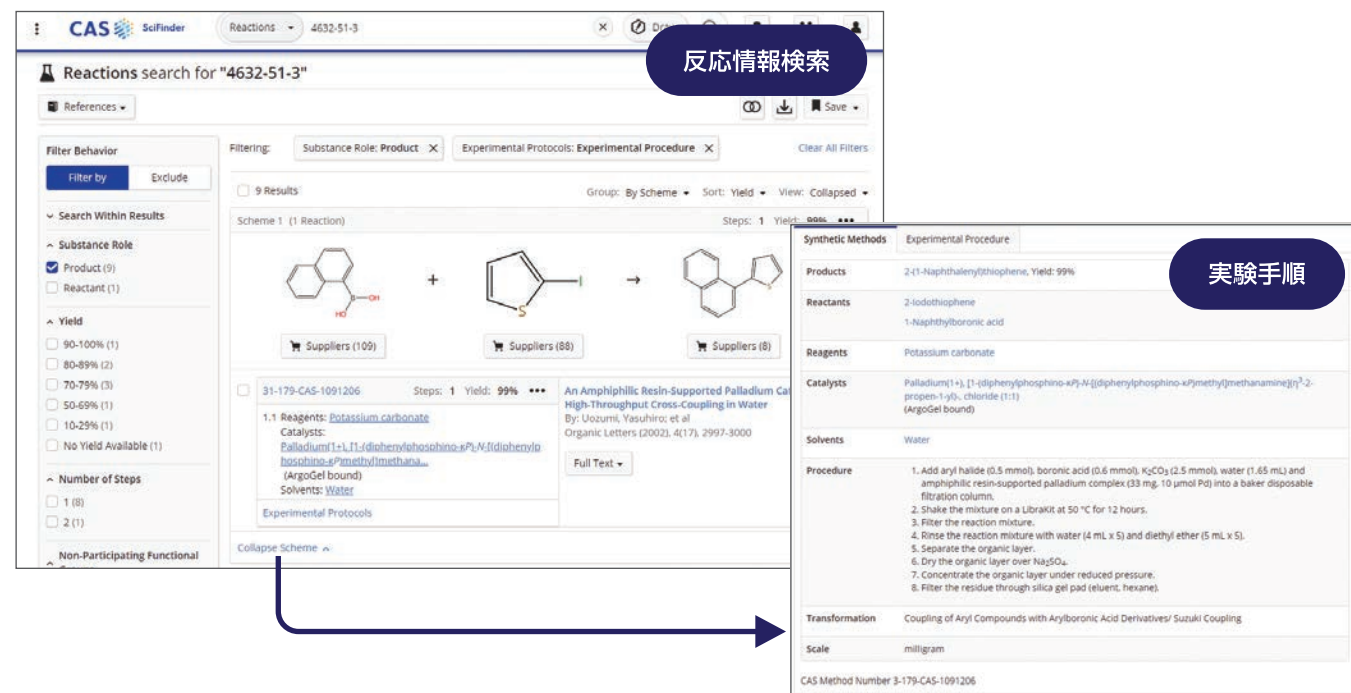
法規別情報

構造類似性による特許解析

直観的な化学反応検索と逆合成解析で合成研究者をサポート

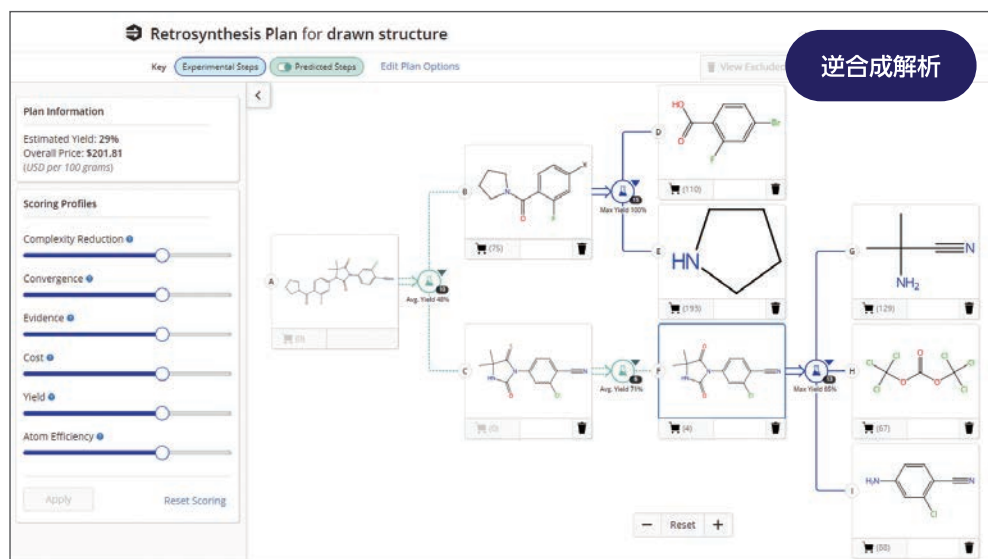
 化学反応

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 (Retrosynthesis Planner)

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。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™

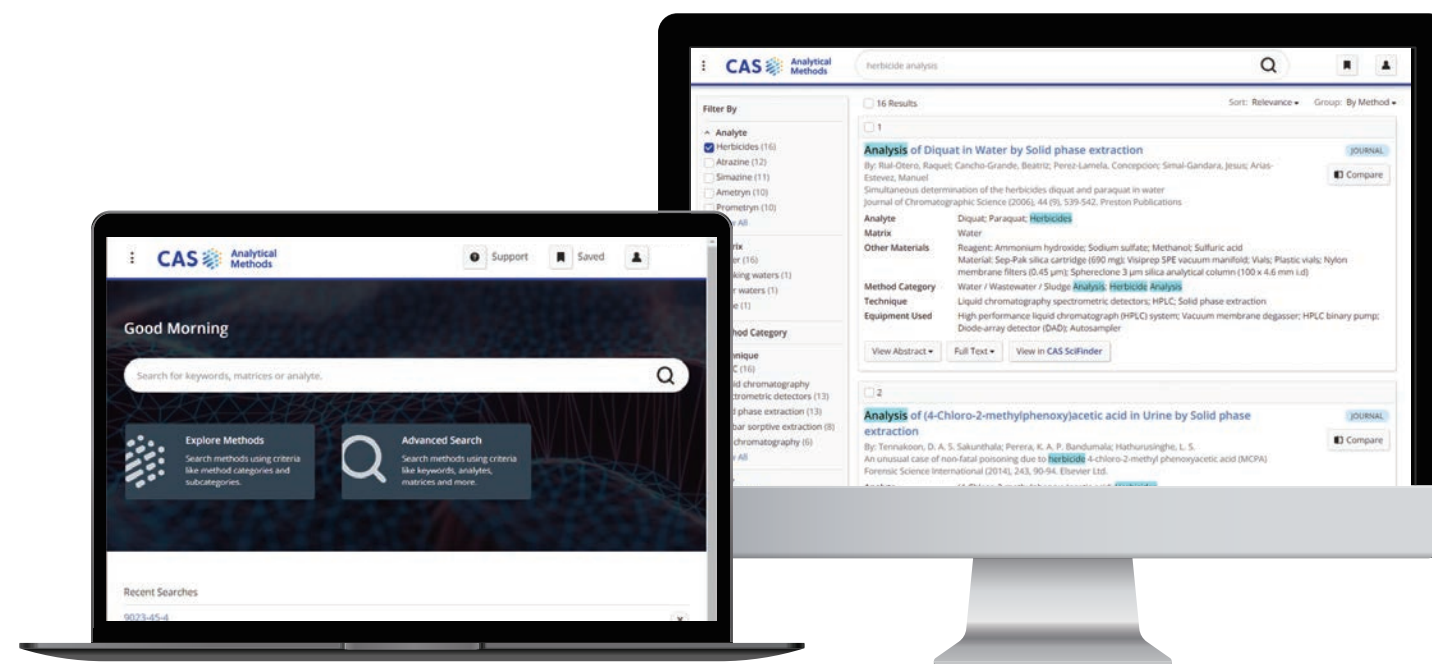
詳細な分析情報の入手に



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

何百万もの開示された手順から
メソッドの詳細に簡単にアクセ
スでき、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。

製剤・配合に関する情報収集を効率的に

CAS Formulus® は、製剤・配合に特化した検索ツールです。

The image displays two computer monitors showing the CAS Formulus software interface. The laptop on the left shows the 'Good Morning' dashboard with navigation links for 'Formulations' and 'Ingredients', and buttons for 'Formulation Designer' and 'Advanced Search'. The desktop monitor on the right shows a search results page for 'omeprazole' with a table of components and a 'JOURNAL' section.

Formulation Designer Table:

Component	Function	Amount Reported
Group: Omeprazole coated pellets	-	230.11 mg/tablet
Omeprazole	-	40 mg/tablet
No. 30/95 sugar spheres	-	40 mg/tablet

JOURNAL
 Formulation and optimization of delayed release MUPS (Multiple unit particulate system) tablets of omeprazole
 Pharmacia Sinica
 Language: English
[View in CAS SciFinder](#)



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。



目的や形態、有効成分を選択して、製剤テンプレートを手に入れます。



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。

世界中の化学物質規制情報をまとめて把握できる検索ツール



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。

- 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

CAS

Chemical Compliance Index

History

Saved And Alerts

Search

Substance

Pigment Red 254

Pigment Red 254

Furniture, Pigmentary with nitrobenzyl, tri- chlorobenzene / group Description.

☐ Substance is a component

+ Add Search Criteria

Search

Clear All

Batch Entry

CAS Registry Number: 84632-65-5
Formula: C₁₄H₁₀(Cl)₂N₂O₂

Inventory Name	Inventory	Language
Pyrrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4-dione, 3,6-bis(4-chlorophenyl)-2,5-dihydro-	DSL, NDxC, PICCS, TSCA	
Pyrrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4-dione,3,6-bis(4-chlorophenyl)-2,5-dihydro-	IECSC	
3,6-Bis(p-chlorophenyl)-2,5-dihydropyrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4-dione	DSL	French
1,4-bis(4-chlorophenyl)-2,5-dihydropyrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-3,6-dione	REACH	
3,6-bis(4-chlorophenyl)-1H,2H,4H,5H-pyrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4-dione	REACH	
Cromoghtal DPP Red BO	ELINCS	
Cromoghtal DPP Red BP	ELINCS	
Igazin DPP root BO	ELINCS	
Rosao Igazin DPP BO	ELINCS	
Rouge Igazine DPP BO	ELINCS	
3,6-Bis(4-chlorophenyl)-2,5-dihydropyrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4-dione	ENCS	
Pyrrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4-dione, 3,6-bis(4-chlorophenyl)-2,5-dihydro-	AIRC	
C.I. Pigment Red 254	AREC, PICCS, VNECI	
3,6-Bis(4-chlorophenyl)pyrrol[3,4- <i>c</i>]pyrrole-1,4(2H,5H)-dione	VNECI	
Pigment Red 254	TDCA	

Regulatory Synonyms

1,4-Dioxo-3,6-bis(4-chlorophenyl)pyrrol[3,4-*c*]pyrrole
1,4-Dioxo-3,6-bis(4-chlorophenyl)pyrrol[3,4-*c*]pyrrole
1254 DPP Red 254
3,6-Bis(4-chlorophenyl)-1,4-diketopyrrol[3,4-*c*]pyrrole
BIC-CF
C.I. 56110
C.I. PR 254
CFP-FF 449R
CFR 6742
Chromoline Red 6156
[View all 84 Regulatory Synonyms](#)

Details by Country/International & Other Lists

Harmonized Tariff Code
Harmonized Tariff Code: 320417

Australia

Canada

China

European Communities/European Union

Japan

Summary

Inventory Status On ENCS
Japanese Gazette
Contained within class: Low Molecular Heterocyclic Organic Compounds.
Regulatory List Number
ENCS No.: 6-0586

Japanese Regulatory Lists and Data

New Zealand

Philippines

South Korea

Taiwan

Thailand

United States

Vietnam

物質ごと国・地域別の規制情報
まとめられています

Copyright © 2024 American Chemical Society. All Rights Reserved.

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。

STN IP Protection Suite™

知財・情報担当者向け情報ソリューション

STN IP Protection Suite™ とは？

STN IP Protection Suite™ は、知財専門家や情報担当者などの
緻密な調査ニーズに対応するためのソリューションです。

化学分野だけでなく、幅広い分野の情報検索に有効です。

STN IP Protection Suite™ に含まれるサービス

CAS STNext®

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 patents ファミリー
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
です。

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

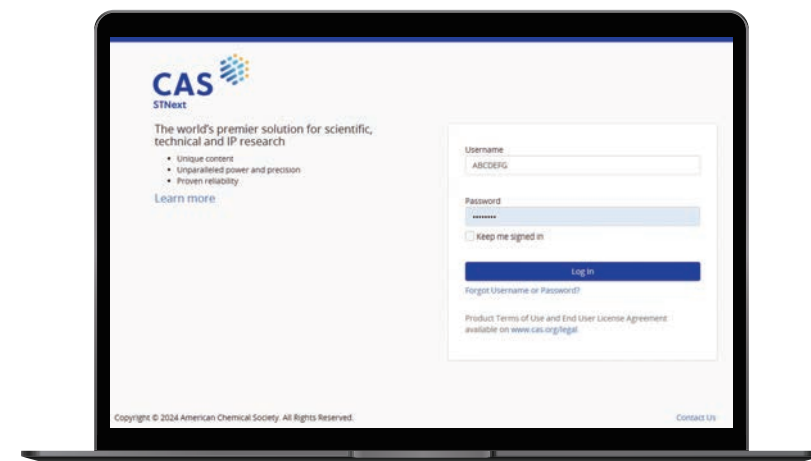
TEL:0120-003-462 Email:support@jaici.or.jp

CAS STNext®

知財・情報担当者向け検索ツール

CAS STNext® とは？

CAS STNext® は特許、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です。
長きにわたり、世界中の特許庁や企業の情報専門家に
より、最前線で活用されています。



高品質な情報

データベース製作元が責任を
もって編集した高品質な情報を
提供



強力な検索機能

キーワード検索のほか、化学構造
検索、配列検索、重複文献除去
機能など多彩な機能を搭載

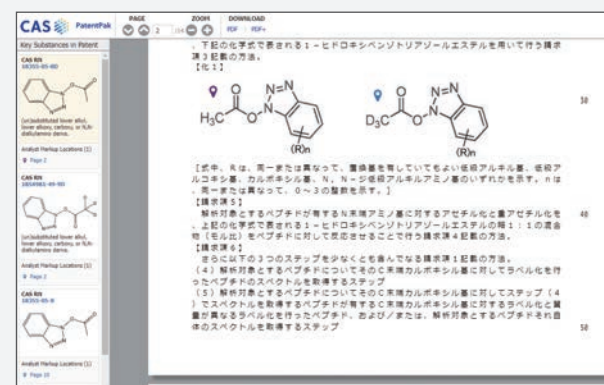


充実したサポート

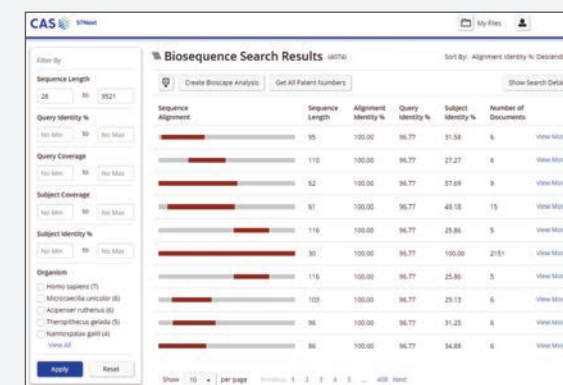
毎月、講習会やセミナーを開催。
専門のヘルプデスクスタッフが
手厚くサポートします。

CAS STNext® 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 Biosequence Search



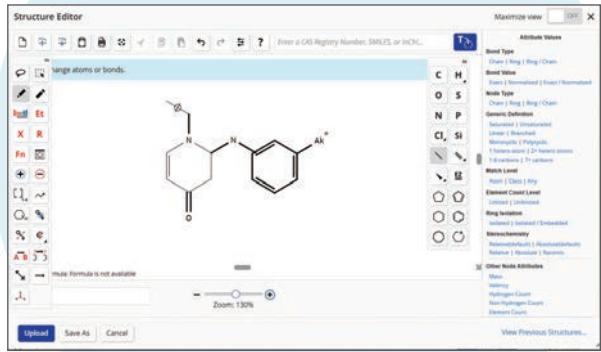
特長

知財・情報担当者向けの検索ツールである CAS STNext® では、網羅的かつ的確な検索を実現するための検索機能や検索項目が利用できるのが特長です。検索結果は Excel や Word などの形式でまとめてダウンロードできます。

主な検索機能

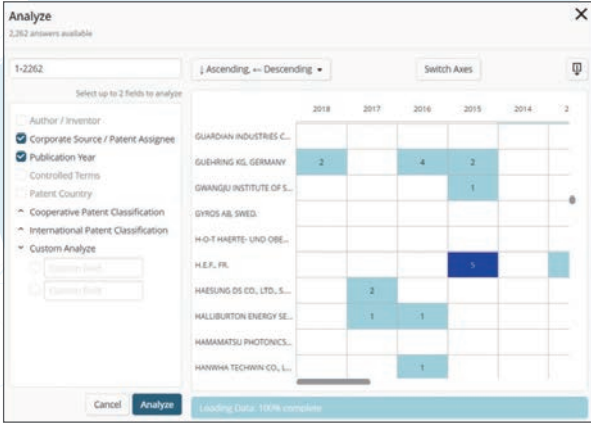
- 近接演算子・ブール演算子
- 官能基反応検索
- 先行技術文献検索
- 配列検索
- 化学構造検索
- 数値検索
- マルクシェ構造検索
- 物性値検索
- 化学反応検索
- テキスト中の数値検索

化学物質を構造から精密に検索
化学構造検索



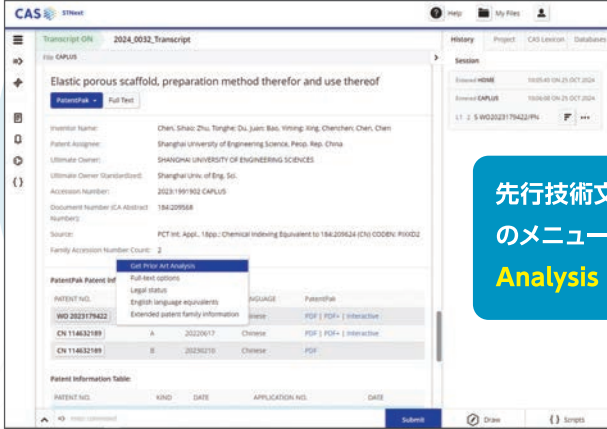
検索結果の解析

Analyze



クリックするだけ先行技術文献検索

Prior Art Analysis



先行技術文献検索は特許番号
のメニューから **Get Prior Art
Analysis** を選択するだけ

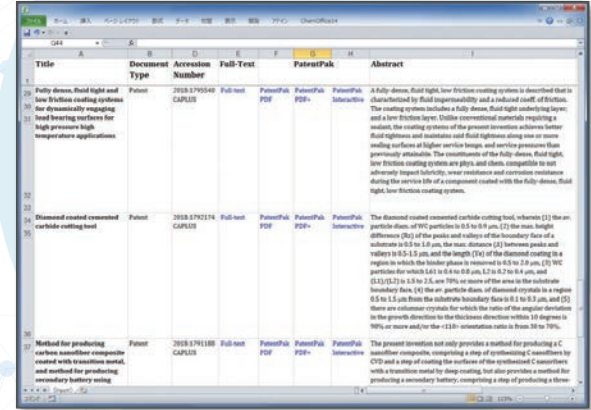
物性値、テキスト中の数値も
数値検索



ヒトが嘔吐する**最低毒性濃度が
30ppm 以下**の物質の毒性情報

検索結果のまとめ、情報共有に

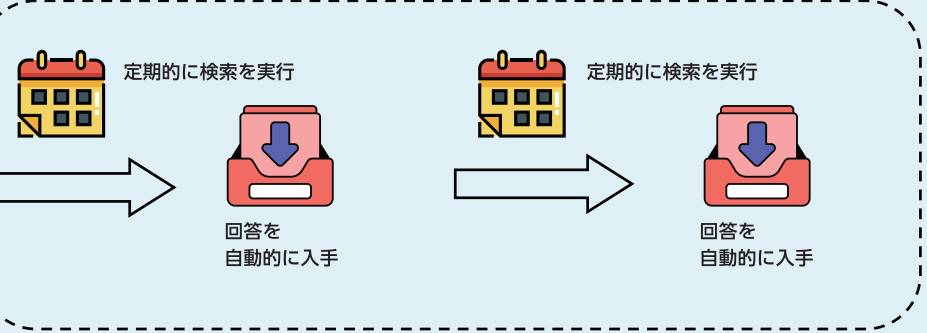
レポート作成・ダウンロード



継続的な情報入手
アラート



アラートを登録



FIZ PatMon

特許モニタリングツール

代表的なデータベース

分野	データベース名	内容
化学	CAplus	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
	CIN	化学産業に関するビジネス情報
	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
	PQSciTech	エンジニアリングからライフサイエンスに及ぶ科学技術分野の文献と特許
医学・薬学	ADISCTI	医薬品、薬物治療、副作用、および医薬品の経済性評価に関する文献
	ADISINSIGHT	開発中の医薬品に関するレポートの全文。医薬品名称や薬理活性コード、開発段階の情報など
	ADISNEWS	生物医学に関する文献、会議やシンポジウムで報告された医薬品・治療に関する情報
食品	FSTA	食品の加工と製造に関する世界中の文献と特許
化粧品	KOSMET	科学技術の研究と調査に重点をおいた、化粧品と香料に関する文献
ポリマー	APOLLIT	プラスチック、ゴム、繊維の生産、加工、およびポリマーの基礎物理的・化学的性質に関する文献
	RAPRA	プラスチック、ゴム、接着剤、高分子に関する文献、特許、企業ディレクトリ情報
工学	COMPENDEX	工学分野の広範囲な文献。統制語
	INSPEC	物理学、電気・電気工学、物理学周辺領域に関する文献
	1MOBILITY	自動車工学の分野における、自動推進車両の規格や仕様に関する文献
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
反応情報	CASREACT	CA ファイル収録の文献、特許から選択した有機化学反応情報
	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
規制	CHEMLIST	既存化学物質リストを含む各国の化学物質規制情報
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ー構造
	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

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、所有者の変更、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。

CAS STNext® Search Service

特許事務所・調査会社向けの CAS STNext® 契約プラン

CAS STNext® Search Service とは？

CAS STNext® Search Service (SSVP) は、特許事務所や調査会社向けの契約プランです。
利用上限ありの年間契約プランで、Clarivate のファイルを除く全データベースが対象になります。

CAS STNext® を使用した高品質な特許調査をクライアントに提供したい場合は、本プランをご検討ください。



通常より 検索をお得に

お客様の調査内容に応じて、最適なお見積りをご提案します。



契約期間は 柔軟に対応

官公庁の入札案件や期間限定プロジェクトなど、一定期間に検索ニーズがある場合もご相談ください。それに応じた契約をご提案します。



オプション追加で さらに充実した検索を

Clarivate のコンテンツをオプションとして本プランに含めることができます。

CAS PatentPak®, Biosequence Search の追加も承ります。

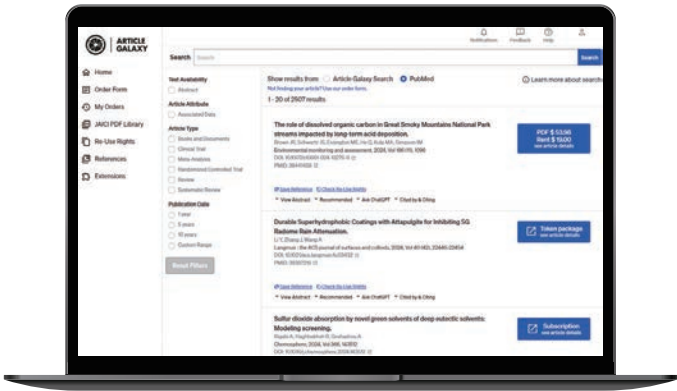
Article Galaxy

Reprints Desk が提供する原報複写サービス

Article Galaxy とは？

Article Galaxy は、世界中の学術論文や特許を、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®, CAS STNext® 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。

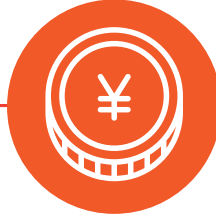
他で入手困難な中国語、韓国語など多言語の文献入手もサポートします。



早い

大部分の学術論文は 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

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

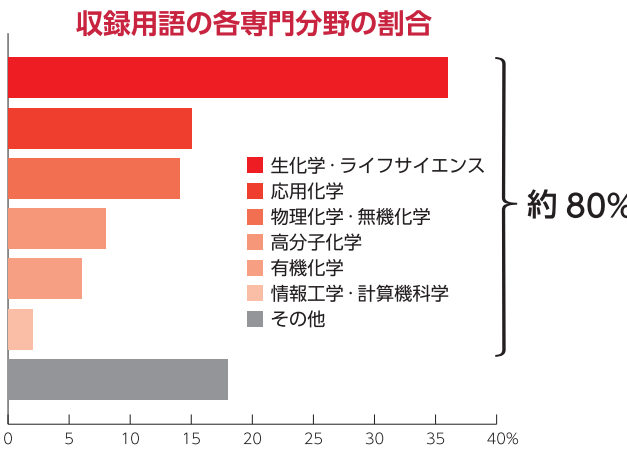
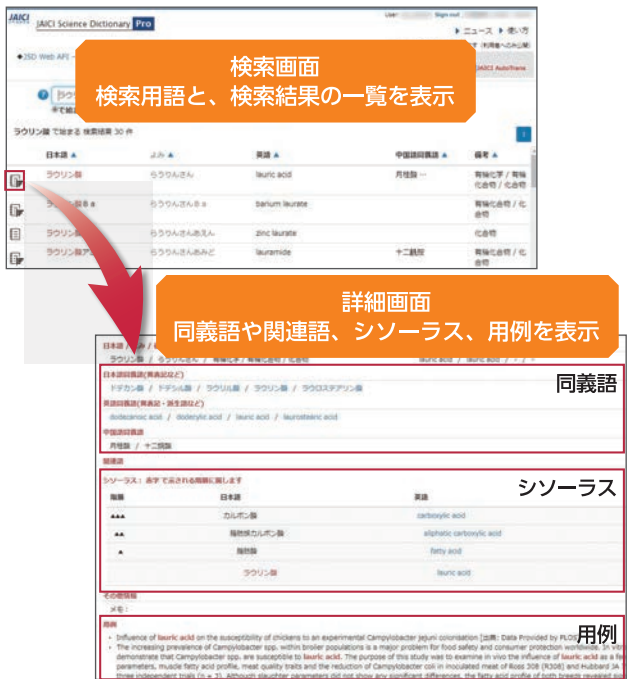
JAICI Science Dictionary Pro

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 STNext® / 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

 JSD Pro

情報技術部

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



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

生成 AI 技術により用語集や翻訳メモリを文脈に合わせてうまく適用することで、より精度の高い翻訳を行えます。

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 2024 年 12 月現在のものです

※ご紹介内容は、全て 2024 年 12 月現在のものです

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がない正確な翻訳

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

*1 国立研究開発法人情報通信研究機構 *2 日本特許翻訳株式会社 (npat) 提供

活用例

CAS STNnext® 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
CPlus、WPI に対応

Chk	PatSpre ad発注	PatSpre ad発注	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 oxide precursor integrated dielectric layer	誘電体層の金属酸化物前駆体が被覆された蛍光体粒子を製造する分散型無機電界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	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界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、分散型無機電界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いる。分散型無機電界発光素子は、金属酸化物前駆体で被覆された蛍光体の粒子状の蛍光体を、透明電極と上部電極との間に配置することにより、発光層と誘電体層とが一体化されている。

クリックで PatSpread 翻訳発注

原文の隣へ和訳を挿入

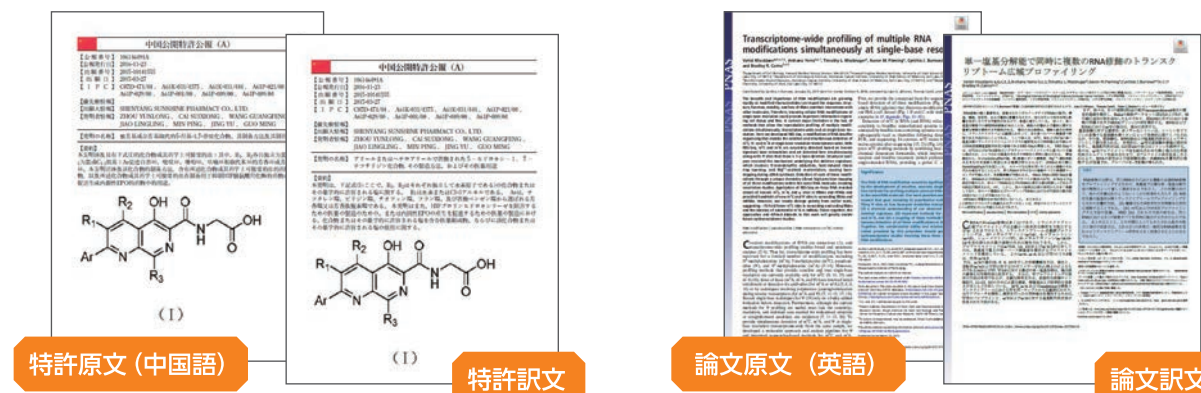
化合物名に対応した高精度な機械翻訳で、効果的なスクリーニングをサポートします。

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



同一レイアウトで見比べながら内容把握

OCR 变换機能

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

[illegible]

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



情報技術部

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



※ご紹介内容は、全て 2024 年 12 月現在のものです

CAS 登録番号サービス

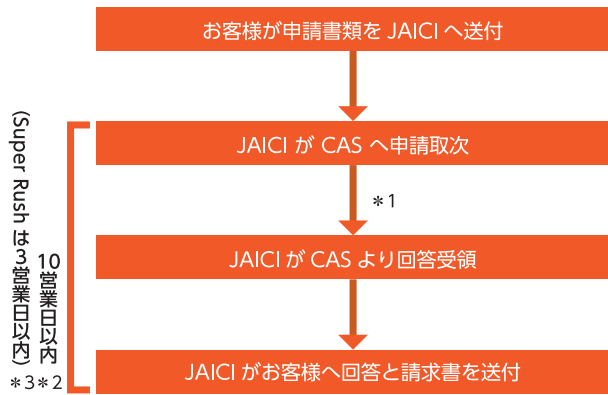
お手持ちの物質の正式名称と CAS 登録番号 (CAS RN®) を提供いたします

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 STNext® 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となりますが、ご依頼のお客さま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】



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。

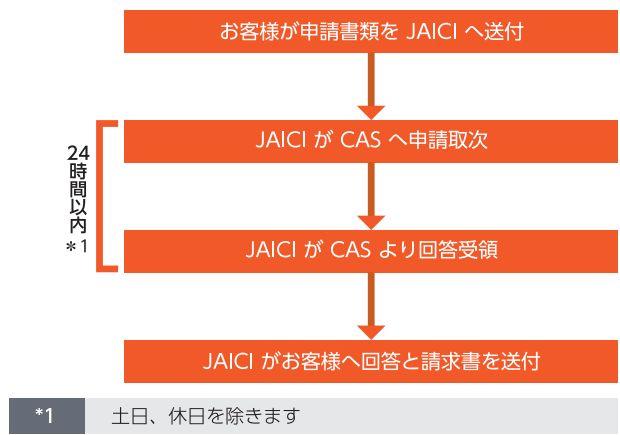
IES サービス (Inventory Expert Service)

- 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 STNext® 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 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。
- 化学物質を特定するためのユニークな番号です。
 - 番号自体には化学的な意味はありません。

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®) ライセンスプログラム

自社サービスで CAS RN® を使用するためのライセンスプログラム

CAS 登録番号 (CAS RN®) ライセンスプログラムとは？

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

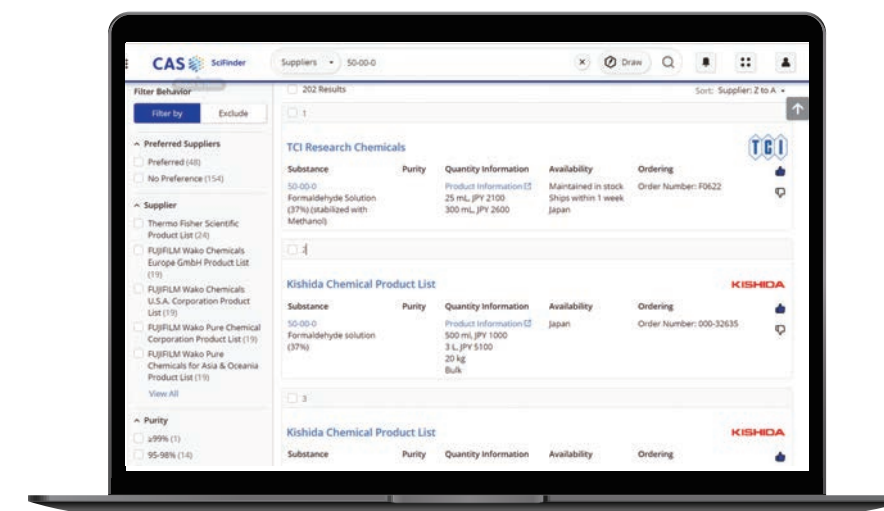
CAS Chemical Supplier InsightsSM

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® や CAS STNext® 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

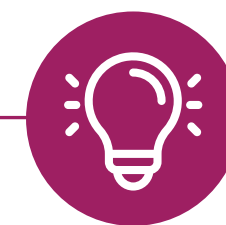
CAS SciFinder® の検索結果から市販化学物質情報を表示すると、一覧に自社取扱い製品がリストアップされます。

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

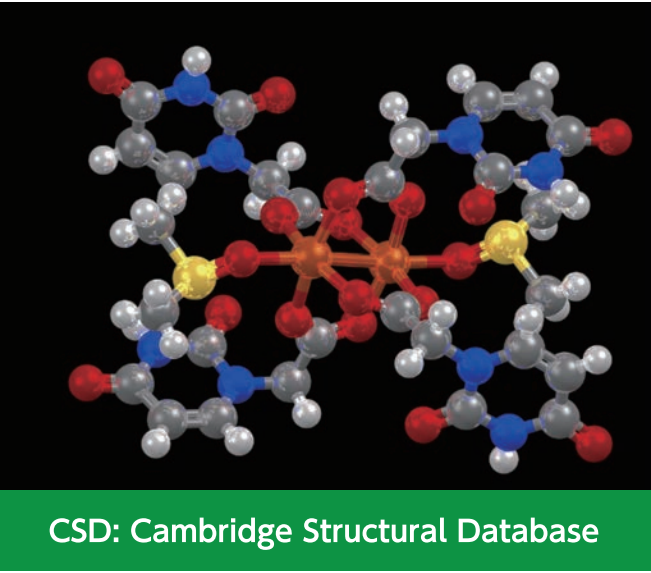
CAS SciFinder® で会社ロゴを表示させたり、自社取扱い製品を優先して表示させるオプションを選択することで、ユーザーへの訴求力を高めることが可能です。

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(2020 年 12 月 CSD-System より改名)。
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(Pipeline Pilot、KNIME component にも一部対応)。マテリアルズ・インフォマティクスにご活用ください(企業のみ)。



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:130 万件 (1923～) (2024 Release)
更 新:年 1 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)

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。
Biososteric 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

CSD のデータを基にした分子ジオメトリーのライブラリー。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	GOLD SuperStar SB, LB Virtual Screening Ligand Overlay CSD CrossMiner Macromolecule Hub	Hydrate & Solvate Analyser H-Bond Propensity Co-crystal Design Packing Feature Searching Materials tools 他	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。
※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 などを Drug Discovery にご活用ください。2024 年より、CSD と PDB の結合部位の構造を検索する Macromolecule Hub が追加されました(企業のみ)。

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 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(企業のみ)。

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。

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(企業のみ)。

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(企業、アカデミック共通)。

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有機金属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 ファイル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:30.7 万件 (1913 ~) (2024 年秋リリース)
更新:年 2 回、年約 1.5 万件追加
頒布形態:ローカルインストール版(年間定額契約)、web 版(年間定額契約)
使用可能機種:Windows (ローカルインストール版)、web 環境 (web 版)

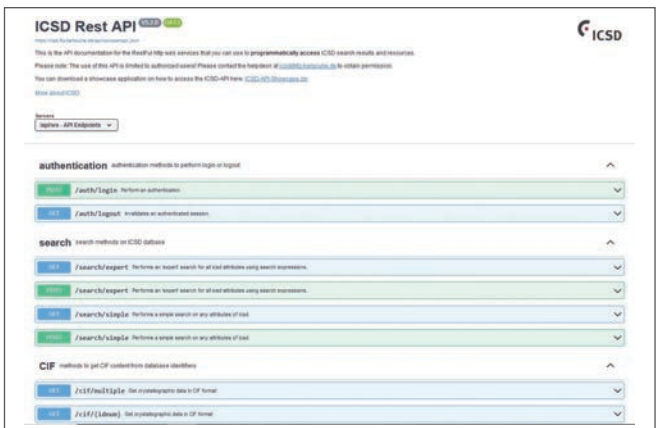
ICSD API

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 ファイルや結晶学データの 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 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 ファイル、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、書誌情報等



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

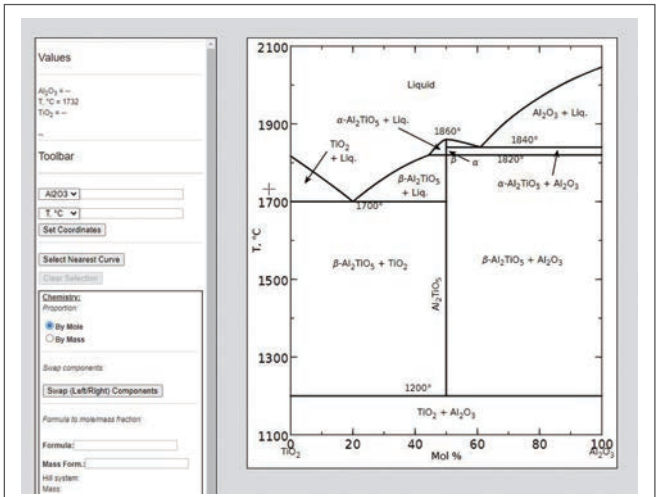
セラミックスやガラスなど、無機材料の相図(状態図)を収録しています。各相図には、セラミックスの専門家による解説文が付されており、応用例に関する情報も得ることができます。データの質を落とすことなく、相図の成分軸の反転や単位変換(重量%からモル%へ、またはその逆)が可能な相図解析ソフトウェアが附属しています。含有元素や成分、書誌情報などから検索できます。USB 版では、旧バージョンからのアップグレードが可能です(割引料金適用)。

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~) (2024 年 4 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)

MPDS 無機材料データベース

無機材料データの世界最大級のリポジトリであり、相図(状態図)、結晶構造、材料特性を収録しています。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。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:無機材料の名称、結晶学データ、3 次元原子座標値、相図、各相の化学式、物性値、書誌情報
件数:相図 7 万件、結晶構造 50 万件、物性値 99 万件 (2024 年 8 月リリース)
更新:年 1 回
頒布形態:web 版(年間定額契約)



PHASE:ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams



MPDS:ASM Materials Platform for Data Science

お問い合わせ先

科学データ情報室

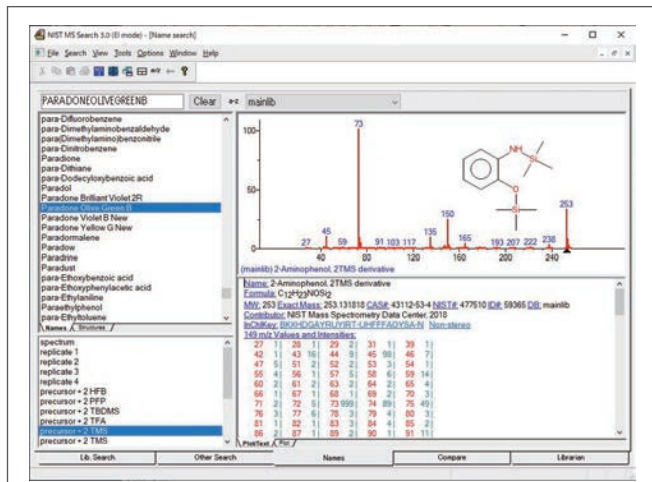
TEL:03-5978-3622 Email:crystal@jaici.or.jp

質量分析のアドバンスツール



NIST23

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)。



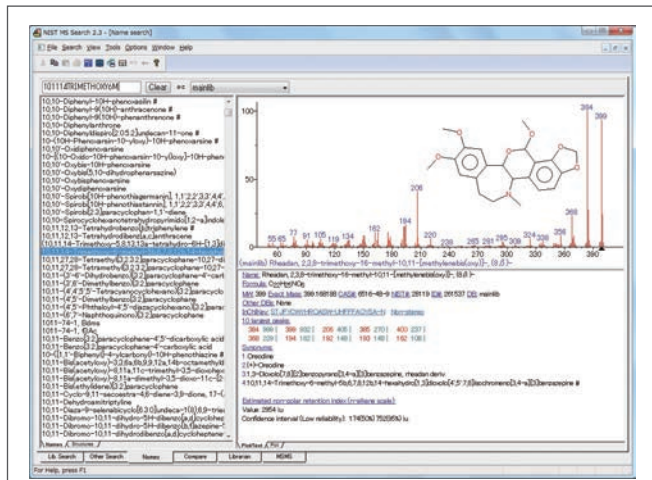
NIST23

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: DVD (オリジナル版、買取)、USB (解析ソフト対応版、買取)
使用可能機種: Windows



Wiley Registry 2023

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
頒布形態:USB (買取)
使用可能機種:Windows

化合物データベース

化学・薬学・農学に関する基礎研究のベーシックツール

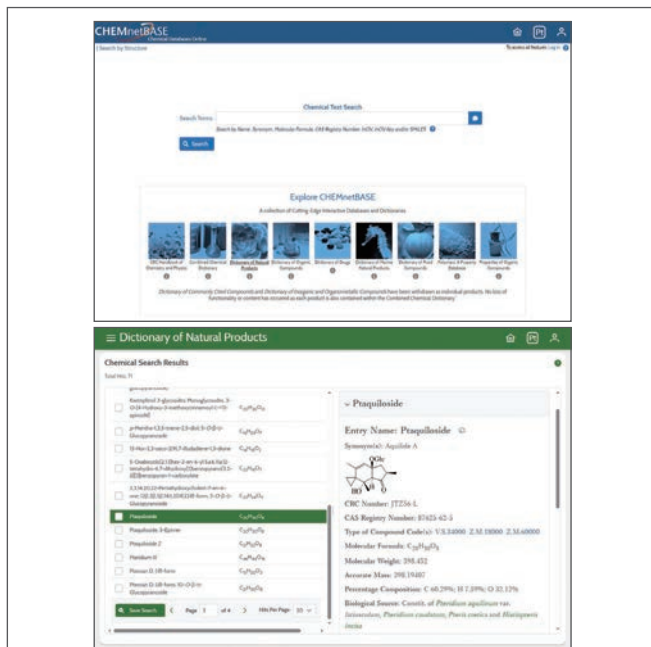


CHEMnetBASE



CHEMnetBASE

CHEMnetBASE は、天然物、食品成分、ポリマー等の物性などに関する 9 種類のオンライン辞典が利用できる化合物データベースで、化学・薬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だすといった、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。



CHEMnetBASE

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
73 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
36 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。
- 医薬品化合物辞典 Dictionary of Drugs
6.2 万件以上の医薬品化合物の情報を収録。
- 海洋天然物辞典 Dictionary of Marine Natural Products
7.4 万件以上の海洋天然物情報を収録。
- 食品化合物辞典 Dictionary of Food Compounds
9.2 万件以上の食品中の化合物情報を収録。
- 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。
- 有機化合物の物性データベース 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

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。
- 知財部の方をはじめ、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 STNext[®]、JP-NET、PatBase など)。
- CAS STNext[®] を使用した配列検索、構造検索、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。

その他調査 …… 文献調査、物質関連調査 (配列検索、構造検索、ポリマー検索)、CAS STNext[®] 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

- JP-NET ● HYPAT-i2 ● PatBase ● Patentfield
- CAS STNext[®] ● 各国特許庁サイト ● その他

非特許文献データベース

- CAS STNext[®] ● 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
- 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、電話会議等、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

〒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。

