

CAS IP Finder, powered by STN™  
**CASBIOACTIVITY™ ファイル**

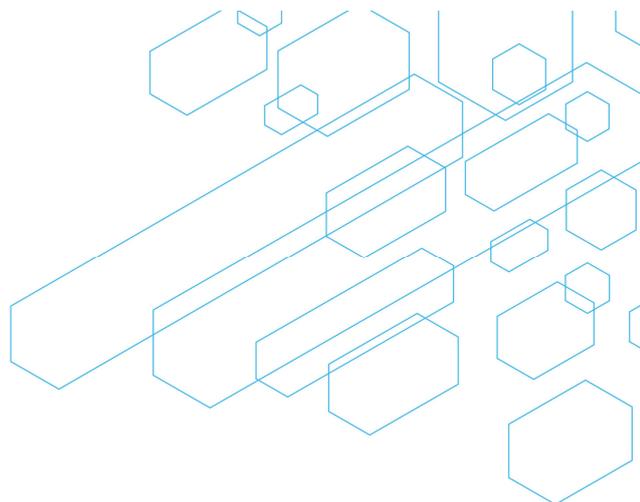
化学情報協会 情報事業部  
202603

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## 目次

- CAS の生物活性データ
- CASBIOACTIVITY ファイル概要
- レコード構成と表示例
- 検索例





# CAS の生物活性データ

3 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# CAS の生物活性データ

## CAS Life Sciences Data

医薬品開発において有用な CAS の新たなデータコンテンツ

**CAS Life Sciences Data**

When making new life sciences discoveries, complete, connected data is crucial for success. Dive deep into relationships between diseases, targets, and novel molecules with the world's most trusted and reliable source of scientific information, the CAS Content Collection™.

生命科学の新たな発見を行うには、完全でつながりのあるデータが成功の鍵となります。世界で最も信頼され、信頼性の高い科学情報源である「CASコンテンツコレクション™」を活用し、疾患・標的・新規化合物の関係性を深く探求しましょう。

<https://www.cas.org/cas-data/life-sciences-data>

4 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.

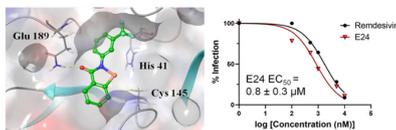


# CASの生物活性データの特長

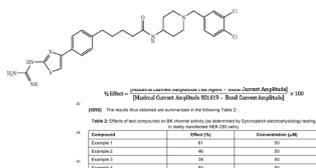
- 生物活性データ
  - **SAR** (構造活性相関) : 例 :  $IC_{50}$ 、 $K_i$ 、 $ED_{50}$ 、% of inhibition
  - **ADME** (吸収、分布、代謝、排泄) : 例 :  $C_{max}$ 、 $T_{1/2}$ 、AUC
  - **Toxicity** (毒性) : 例 :  $LD_{50}$ 、 $LC_{50}$ 、 $LDLo$
- 雑誌論文、特許からCASがデータを**収集・整理**
- リガンド (物質)、ターゲット (対象となる受容体など)、測定データの種類とその値、対象疾患、収録源など

# CASの生物活性データの特長

## 雑誌論文



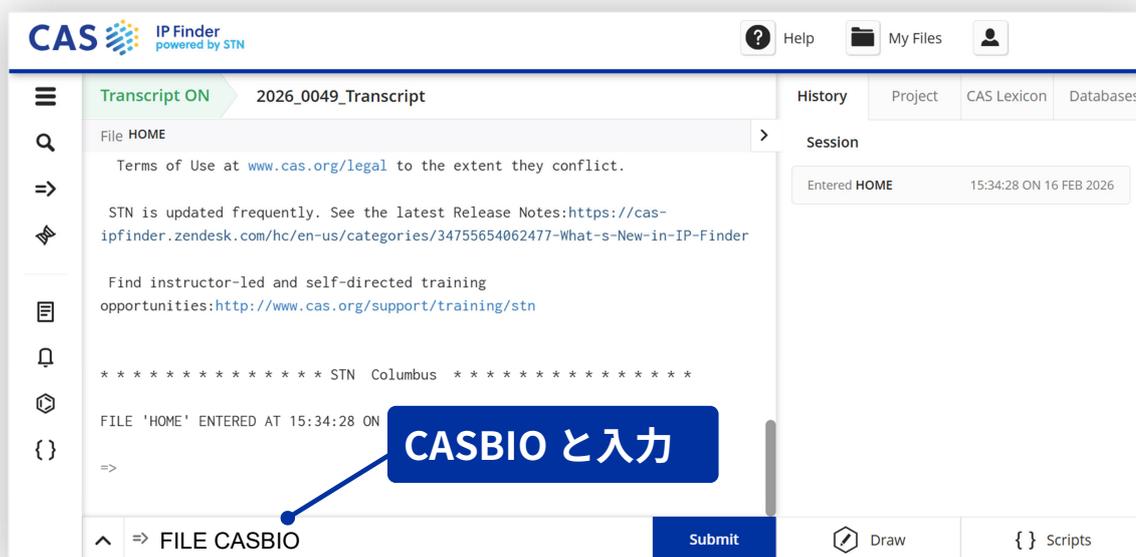
## 特許



## CASBIOACTIVITY ファイル

様々な出典、様々な形式で散らばる  
生物活性データや物質データを  
CASが人手で収集・整理・関連付け

# 生物活性データを CAS IP Finder で提供



7 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## CASBIOACTIVITY ファイル概要

8 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# ファイル概要

## CASBIOACTIVITY (CASBIOACTIVI)

- 製作者：CAS
- レコード構成：物質 (リガンド) 単位
- 収録源：特許および雑誌論文から CAS が人手で収集したデータ
- 収録範囲：関連分野の査読された 7,000誌以上の科学雑誌  
1902年から現在までの世界主要国を含む特許
- 収録件数：599 万以上 (2026 年 2 月現在)
- 更新頻度：週 2 回
- 収録内容：生物活性アッセイを報告する特許および学术论文の書誌情報  
報告された生物活性アッセイに関する情報 (CAS RN® を含む)  
構造活性相関 (SAR) 特性、ADME 特性、毒性 (TOXICITY) 特性に関する情報  
化学構造 (または構造関連特性) と生物活性 (または標的特性) の関連把握に必要な情報
- サマリーシート：<https://www.cas.org/training/documentation/stn/database-summary-sheets>

# CASBIOACTIVITY ファイルの特長

- レコードは物質単位
- 出典情報に **Locator (記載位置) 情報** を収録
- **多数の検索フィールド**があり、**近接演算子**を用いて複数の条件を組み合わせた検索も可能



## レコード構成と表示例

11 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## レコード構成

1 レコード = 1 物質 (リガンド)

物質同定情報 (構造は収録なし)	CAS RN® CN (CA Index Name) InChI InChI Key
構造活性関連データ	<b>SAR PROPERTIES</b> (1) 出典、記載位置 ターゲット、機能、パラメータ、 数値、疾患、生物種、アッセイ (2) 出典、記載位置 ターゲット、機能、パラメータ、 数値、疾患、生物種、アッセイ :

出典ごとに  
データを収録

ADME データ	<b>ADME PROPERTIES</b> ADME データ 1 ADME データ 2 :
毒性データ	<b>TOX PROPERTIES</b> 毒性データ 1 :

SAR、ADME、TOX の  
3つの項目に分けて収録

12 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# 収録されているデータについて

- CASBIOACTIVITY ファイルのレコード数 (2026年2月現在)
  - 構造活性相関 (SAR) データを持つレコード : 588 万件
  - ADME データを持つレコード : 25 万件
  - 毒性データを持つレコード : 18 万件
- CASBIOACTIVITY ファイルにデータが収録されている文献数 (CPlus ファイルで確認)
  - 53 万件以上 (雑誌論文: 46 万件、特許 : 7 万件)

# 表示形式

表示形式	表示フィールド	入力例
ADMEPROP	RN, CN, ED, INCH, INKY, available ADME データ	D ADMEPROP
SARPROP	RN, CN, ED, INCH, INKY, available SAR データ	D SARPROP
TOXPROP	RN, CN, ED, INCH, INKY, available TOX データ	D TOXPROP
HIT	RN, CN, ED, INCH, INKY, HIT タームを含むフィールド	D HIT
ACNT	ACNT (ADME データ数)	D ACNT
SCNT	SCNT (SAR データ数)	D SCNT
TCNT	TCNT (TOC データ数)	D TCNT

- HIT 表示形式でヒット部分のみを表示するのがおすすめ
- レコードに含まれているデータ数は => D ACNT SCNT TCNT で確認できる

# SAR データ

## SARPROP 表示形式

PARAMETER や VALUE は文献に記載の値 (orig:) と標準化 (normalized) された値 (norm:) が収録されている

Ligand RN: 911417-87-3  
 Ligand Entry Date: 26 Jun 2025  
 Chemical Name: Acetamide, 2-[3-[4-(1H-indazol-5-ylamino)-2-quinazolinyloxy]phenoxy]N-(1-methylethyl)- (CA Index Name)  
 Ligand InChI String: InChI=1S/C26H24N6O2/c1-16(2)28-24(33)15-34-20-7-5-6-17(13-20)25-30-23-9-4-3-8-21(23)26(31-25)29-19-10-11-22-18(12-19)14-27-32-22/h3-14,16H,15H2,1-2H3,(H,27,32)(H,28,33)(H,29,30,31)  
 Ligand InChI Key: GKHIWNAUVKXIIY-UHFFFAOYSA-N  
 Property Files: ADMEPROP, SARPROP

データの記載位置を収録

### SAR PROPERTIES

SARPROP Assay Count: 324

(1) US 20100144707 A1,(CAPLUS equivalent basic WO2006105081-A2,2006:1031390),Locator: Example 82 (Page No: 54)

(3) Nat Chem Biol, 2011, 7, 200,(CAPLUS,2011:222149),MEDLINE,21336281

収録源 (/SREF)

ターゲット (/STNM)	ターゲットの CAS RN® (/STRN)	機能 (/SAFN)	パラメータ (/SPAM)	値 (/SAVL)	生物種 (/SAOR)	アッセイの表示 (次スライド参照)	
TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Calcium/calmodulin-dependent protein kinase type 1	141467-21-2		orig:pKi, norm:Ki	orig:<5.3, norm:> 5.01187 μM			Assay
Macrophage colony-stimulating factor 1 receptor			orig:pKi, norm:Ki	orig:<5.6, norm:> 2.51189 μM	疾患 (/SADS)		Assay

# SAR - アッセイの詳細

Assay ボタンをクリックすると、詳細情報が表示される

**Assay Details** ×

(3) Assay 1: Calcium/calmodulin-dependent protein kinase type 1

SAR Ligand RN: 911417-87-3

SAR Target Name: Calcium/calmodulin-dependent protein kinase type 1

SAR Target RN: 141467-21-2

SAR Parameter: orig:pKi, norm:Ki

SAR Value: orig:<5.3, norm:> 5.01187 μM

SAR Assay Name: Inhibition of CAMK1 Kinase Activity

SAR Assay Type: Enzyme

SAR Assay Procedure: In vitro Kinase Assays: Recombinant protein kinases were either commercially obtained or expressed using the FastBac baculovirus expression system (GIBCO BRL, Gaithersburg, MD) and purified using either nickel (his-tag) or glutathione (GST) affinity chromatography. Kinase assays were conducted in 24 [micro] volumes on 384-well microplates using TECAN liquid-handling automation. Ser/Thr-kinase :

SAR Bio Type: in vitro

SAR Reference: Nat Chem Biol, 2011, 7, 200,(CAPLUS,2011:222149),MEDLINE,21336281

アッセイ名 (/SANM)

アッセイタイプ (/SATP)

評価手順 (/SAPR)

# ADME データ

## ADMEPROP 表示形式

Ligand RN: 371242-69-2  
 Ligand Entry Date: 26 Jun 2025  
 Chemical Name: 4(3H)-Quinazolinone, 2-[(6-amino-9H-purin-9-yl)methyl]-5-methyl-3-(2-methylphenyl)- (CA Index Name)  
 Ligand InChI String: InChI=1S/C22H19N7O/c1-13-6-3-4-9-16(13)29-17(27-15-8-5-7-14(2)18(15)22(29)30)10-28-12-26-19-20(23)24-11-25-21(19)28/h3-9, 11-12H, 10H2, 1-2H3, (H2, 23, 24, 25)  
 Ligand InChI Key: GNMHRHGTIBRNSM-UHFFFAOYSA-N  
 Property Files: ADMEPROP, SARPROP

### ADME PROPERTIES

ADMEPROP Assay Count: 9

(2) Indian Journal of Pharmaceutical Sciences, (2017), 79, (6), 994-1000, (CAPLUS, 2020:1433066)

収録源  
(/AREF)

ターゲット (/ATNM)	機能 (/AAFN)	値 (/AAVL)	疾患 (/AADS)	生物種 (/AAOR)			
TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
			orig:Tmax	orig:0.57 h	asthma	Mus	Assay
			norm:Cmax	orig:816.89 ng/mL, norm:0.81689 µg/mL	asthma	Mus	Assay

アッセイの表示

ターゲットの  
CAS RN® (/ATRNL)

パラメータ  
(/APAM)

# ADME - アッセイの詳細

**Assay** ボタンをクリックすると、詳細情報が表示される

**Assay Details** ×

(2) Assay 1

ADME Ligand RN: 371242-69-2

ADME Parameter: orig:Tmax

ADME Value: orig:0.57 h

ADME Assay Name: Pharmacokinetic analysis

ADME Assay Type: Functional

ADME Assay Procedure: Pharmacokinetic study

ADME Disease: asthma

ADME Organism: Mus

ADME Bio Type: in vivo

ADME Reference: Indian Journal of Pharmaceutical Sciences, (2017), 79, (6), 994-1000, (CAPLUS, 2020:1433066)

ADME Ligand Dose: 1 Mg/kg

ADME Route of Administration: Endotracheal

ADME Assay Based Locator: Table 3

Close

アッセイ名 (/AANM)

アッセイタイプ (/AATP)

評価手順 (/AAPR)

# TOX データ

## TOXPROP 表示形式

Ligand RN: 912444-00-9  
 Ligand Entry Date: 26 Jun 2025  
 Chemical Name: 1H-Benzimidazole-7-carboxamide, 2-[(2R)-2-methyl-2-pyrrolidinyl]- (CA Index Name)  
 Ligand InChI String: InChI=1S/C13H16N4O/c1-13(6-3-7-15-13)12-16-9-5-2-4-8(11(14)18)10(9)17-12/h2,4-5,15H,3,6-7H2,1H3,(H2,14,18)(H,16,17)/t13-m/s1  
 Ligand InChI Key: JNAHVYVRKWKWKQ-CYBMUJFWSA-N  
 Property Files: ADMEPROP, SARPROP, TOXPROP

TOX PROPERTIES

TOXPROP Assay Count: 73  
 (1) Oral Oncology, (2014), 50, (7), 662-669,(CAPLUS,2014:610881)

ターゲット (/TTNM)	機能 (/TAFN)	値 (/TAVL)	疾患 (/TADS)	生物種 (/TAOR)			
TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Poly(ADP-ribose) polymerase	58319-92-9	orig:DNA damage	norm:Slightly increased	head and neck cancer	Homo sapiens	Assay	
Poly(ADP-ribose) polymerase	58319-92-9	orig:DNA damage	norm:Resulted in higher DNA damages in a dose-dependent manner	head and neck cancer	Homo sapiens	Assay	

ターゲットの CAS RN® (/TTRN)      パラメータ (/TPAM)

収録源 (/TREF)

アッセイの表示

19 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# TOX - アッセイの詳細

Assay ボタンをクリックすると、詳細情報が表示される

Assay Details

(1) Assay 1

TOX Ligand RN: 912444-00-9  
 TOX Target Name: Poly(ADP-ribose) polymerase  
 TOX Target RN: 58319-92-9  
 TOX Parameter: orig:DNA damage  
 TOX Value: norm:Slightly increased  
 TOX Assay Name: Comet assay  
 TOX Assay Type: Functional  
 TOX Toxicity Type: Genotoxicity  
 TOX Assay Procedure: Alkaline comet assay  
 TOX Disease: head and neck cancer  
 TOX Cell: UMSCC-22A  
 TOX Organism: Homo sapiens  
 TOX Bio Type: in vitro  
 TOX Reference: Oral Oncology, (2014), 50, (7), 662-669,(CAPLUS,2014:610881)  
 TOX Ligand Dose: 30-60 μM  
 TOX Assay Based Locator: Figure 5

アッセイ名 (/TANM)

アッセイタイプ (/TATP)

評価手順 (/TAPR)

20 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# 近接演算子

Ligand RN: 911417-87-3

SAR PROPERTIES

SARPROP Assay Count: 324

(1) US 20100144707 A1,(CAPLUS equivalent basic W02006105081-A2,2006:1031390),Locator: Example 82 (Page No: 54)

(2) Annu. Rep. Med. Chem., 2008, 43 ( ), 87-102,(CAPLUS,2009:1536883),Locator: Compound 47

TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Rho-associated protein kinase 1		Inhibitor	norm:IC50	orig:24000 nM, norm:24 μM	cardiovascular system disease		Assay (P)
Rho-associated protein kinase 2		Inhibitor	norm:IC50	orig:105 nM, norm:0.105 μM	cardiovascular system disease		Assay (P)

(L) : 同一出典情報内

(P) : 同一測定データ(同一行)内

(3) Nat Chem Biol, 2011, 7, 200,(CAPLUS,2011:222149),MEDLINE,21336281

TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Calcium/calmodulin-dependent protein kinase type 1	141467-21-2		orig:pKi, norm:Ki	orig:<5.3, norm:> 5.01187 μM			
Macrophage colony-stimulating factor 1 receptor			orig:pKi, norm:Ki	orig:<5.6, norm:> 2.51189 μM			Assay

# 検索例

# 検索例 1

CAS RN® 3098355-69-9 の IC<sub>50</sub> (半数阻害濃度) のデータを確認する

```
=> FILE CASBIO

=> S 3098355-69-9/RN AND IC50/SPAM
L1      1 3098355-69-9/RN AND IC50/SPAM

=> D HIT      ← HIT 表示形式でヒット部分のみを表示できる
L1  ANSWER 1 OF 1 CASBIOACTIVI COPYRIGHT 2026 ACS on STN
RN  3098355-69-9 CASBIOACTIVI
Ligand RN: 3098355-69-9
Ligand Entry Date: 03 Nov 2025      ← 入力日 (/ED)
Chemical Name: Quinazoline, 8-(4-chloro-6-methoxy-2-benzothiazolyl)-6-methyl- (CA Index Name)      ← CA 索引名 (/CN)
Ligand InChI String: InChI=1S/C17H12ClN3OS/c1-9-3-10-7-19-8-20-15(10)12(4-9)17-21-16-13(18)5-11(22-2)6-14(16)23-17/h3-8H,1-2H3
Ligand InChI Key: FYUWMIVUCRSKAY-UHFFFAOYSA-N      ← InChI Key (/INKY)
Property Files: SARPROP      ← 収録されているデータの種類 (/PF)
```

# 検索例 1 (つづき)

SAR PROPERTIES

SAR (構造活性相関データ)

SARPROPERTIES Assay Count: 2

(1) European Journal of Medicinal Chemistry, (2024), 280,, 116980, CAPLUS,2024:2314127, Locator: Compound 8a

Target Name	Target RN	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	ASSAY
Proteinase-activated receptor 4		Inhibitor	norm:IC50	orig:72.31 nM, norm:0.07231 μM			Assay

ターゲット名

HIT 表示形式ではヒットタームを含むアッセイのデータのみが表示される

数値検索は不可

アッセイの詳細 (次ページ)

記載位置

CAplus のレコード番号

テーブル形式でデータが見やすい

# 検索例 1 (つづき)

**Assay** ボタンをクリックすると、詳細情報が表示される

### Assay Details

(1) Assay 1: Proteinase-activated receptor 4

SAR Ligand RN:	3098355-69-9
SAR Target Name:	Proteinase-activated receptor 4
SAR Function:	Inhibitor
SAR Parameter:	norm:IC50
SAR Value:	orig:72.31 nM, norm:0.07231 μM
SAR Assay Name:	Platelet aggregation assay
SAR Assay Type:	Functional
SAR Assay Procedure:	IC50 was determined for the compounds against PAR4 AP WP aggregation by using the Platelet aggregation assay.
SAR Bio Type:	in vitro
SAR Reference:	European Journal of Medicinal Chemistry, (2024), 280,, 116980,(CAPLUS,2024:2314127),Locator: Compound 8a

Close

25 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



# 検索例 2

統合失調症 (Schizophrenia) の治療を目的としたプロスタグランジン-エンドペルオキシドシンターゼ 2 阻害作用についての構造活性相関 (SAR) データを有する物質を探す

=> FILE CASBIO

=> S PROSTAGLANDIN G/H SYNTHASE-2/STNM (P) INHIBITOR/SAFN (P) SCHIZOPHRENIA/SADS  
L1 587 PROSTAGLANDIN G/H SYNTHASE-2/STNM (P) INHIBITOR/SAFN (P) SCHIZOPHRENIA/SADS

=> D HIT ← HIT 表示形式でヒット部分のみを表示できる

(P) で同一データ内に限定できる

- ターゲット : /STNM
- 機能 : /SAFN
- 対象疾患 : /SADS

L1 ANSWER 1 OF 587 CASBIOACTIVI COPYRIGHT 2026 ACS ON STN

Ligand RN: 2252251-54-8

Ligand Entry Date: 26 Jun 2025

Chemical Name: Acetamide, 2-amino-N-[4-[[[2-amino-3-cyano-1-(cyclopropylmethyl)-1H-indol-5-yl]oxy]phenyl]- (CA Index Name)

Ligand InChI String: InChI=1S/C21H21N5O2/c22-10-18-17-9-16(7-8-19(17)26(21(18)24)12-13-1-2-13)28-15-5-3-14(4-6-15)25-20(27)11-23/h3-9,13H,1-2,11-12,23-24H2,(H,25,27)

Ligand InChI Key: MLJKHSWYZHQWGO-UHFFFAOYSA-N

Property Files: SARPROP

26 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## 検索例2 (つづき)

SAR PROPERTIES

SARPROP Assay Count: 33

(1) Bioorg. Med. Chem. Lett., 2018, 28 (19), 3231-3235, (CAPLUS, 2018:1634505), MEDLINE, 30170942, Locator: Compound 9 (Page No: 3233, Table No: 2)

TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Prostaglandin G/H synthase 2		Inhibitor	norm:Ki	norm:4.76 μM	schizophrenia		Assay

ターゲット  
(/STNM)

機能  
(/SAFN)

疾患  
(/SADS)

近接演算子を利用し、複数の条件を組み合わせて検索できる

## 参考：ターゲット名の検索

プロスタグランジン-エンドペルオキシドシンターゼ2 (prostaglandin-endoperoxide synthase 2) は、PTGS2、cyclooxygenase-2、COX-2 などとも呼ばれる

CASBIOACTIVITY ファイルのターゲット名 (STNM) に収録されている名称が分からない場合、CAplus ファイルの CA Lexicon の UF (非優先語) や REGISTRY ファイルの化学物質名 (CN) を参考にするとよい。

- CAplus ファイルの CA Lexicon の例

```
=> FILE CAPLUS
=> E PTGS2/CT ← 略語の PTGS2 を /CT で調べる
E#  FREQUENCY  AT  TERM
---  -
E1      0      2  PTGS NUCLEASE/CT
E2      0      2  PTGS1/CT
E3      0      2 --> PTGS2/CT
:
=> E E3+MAX
E1      0      --> Ptg2/CT ↓ 統制語
E2      0      --> USE Cyclooxygenase 2/CT
***** END *****
```

```
=> E E2+UF ← E2 について UF (非優先語) を表示
E1      0      --> Cyclooxygenase 2/CT
E2      UF  Arachidonate cyclooxygenase 2/CT
E3      UF  COX 2/CT
E4      UF  COX-2/CT
E5      UF  COX2/CT
E6      UF  Cyclooxygenase COX-2/CT
E7      UF  Cyclooxygenase II/CT
E8      UF  MeSH ID: D051546/CT:
E9      UF  PTGS2/CT
E10     UF  Prostaglandin G/H synthase-2/CT
E11     UF  Prostaglandin H synthase-2/CT
:
***** END *****
```

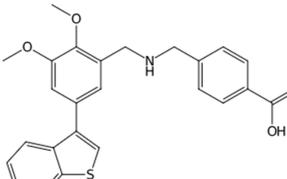
## 参考：ターゲット名の検索 (つづき)

### • REGISTRY ファイルの化学物質名 (CN) の例

<pre>=&gt; FILE REGISTRY =&gt; E PTGS2/CN ← 略語の PTGS2 を /CN で EXPAND E1      1      PTGS1/CN E2      1      PTGS1 PROTEIN (MOUSE STRAIN FVB/N CLONE               IMAGE:3968136 GENE PTGS1)/CN E3      1 --&gt; PTGS2/CN ← 化学物質名でヒットがある : =&gt; S E3      ← E 番号で検索 L1      1      PTGS2/CN =&gt; D</pre>	<pre>L1 ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2026 ACS on STN RN  329900-75-6  REGISTRY ED  Entered STN:  04 Apr 2001 CN  Cyclooxygenase 2 (CA INDEX NAME) OTHER NAMES: CN  Arachidonate cyclooxygenase 2 CN  COX 2 CN  COX-2 CN  COX2 CN  Cyclooxygenase COX-2 CN  Cyclooxygenase II CN  MeSH ID: D051546 CN  Prostaglandin endoperoxidase synthase 2 CN  Prostaglandin endoperoxide H synthase-2 CN  Prostaglandin endoperoxide synthase-2 CN  Prostaglandin endoperoxide synthetase 2 CN  Prostaglandin G/H synthase-2 CN  Prostaglandin H synthase-2 CN  Proteins, PTGS2 CN  PTGS2 MF  Unspecified :</pre>
---	---

## REGISTRY ファイルとの連携

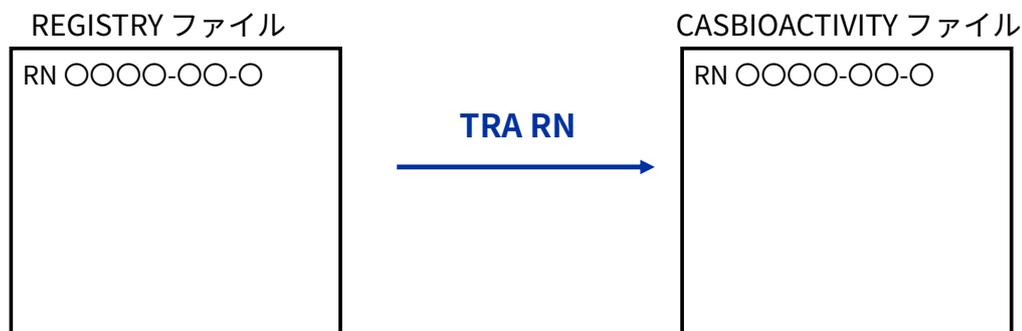
<pre>RN  3055274-43-3  REGISTRY ED  Entered STN:  20 Sep 2024 CN  Benzoic acid, 4-[[[(5-benzo[b]thien-3-yl)-2,3-       dimethoxyphenyl)methyl]amino]methyl]- (CA INDEX NAME) MF  C25 H23 N O4 S INCH InChI=1S/C25H23NO4S/c1-29-22-12-18(21-15-31-23-6-4-3-5-20(21)23)11-       19(24(22)30-2)14-26-13-16-7-9-17(10-8-16)25(27)28/h3-12,15,26H,13-14H2,1-       2H3,(H,27,28) INKY AFGYXLCJSJFJMZ-UHFFFAOYSA-N SR   CA LC   STN Files:  CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASREACT, TOXCENTER</pre>	<p>CASBIOACTIVI/LC で CASBIOACTIVITY ファイルに収録 されている物質に限定できる</p>
--	---



:

# REGISTRY ファイルとの連携

REGISTRY ファイルから CASBIOACTIVITY ファイルへのクロスオーバー検索は TRANSFER コマンドで行う



## 検索例 3

配列長 7-9 のペプチドで、メラノコルチン受容体に対して活性を示すものを探す

=> FILE REGISTRY	← REGISTRY ファイルに入る
=> S 7-9/SQL AND PS/FS L1 2162103 7-9/SQL AND PS/FS	← 配列長 (/SQL) で限定し、さらにファイルセグメント (/FS) でタンパク質 (Protein Sequence:PS) に限定する
=> S L1 AND CASBIO?/LC L2 18160 L1 AND CASBIO?/LC	← CASBIOACTIVITY ファイルに収録がある物質に限定する
=> FILE CASBIO	← CASBIOACTIVITY ファイルに入る
=> TRA L2 RN L3 TRANSFER L2 1- RN : 18160 TERMS L4 18160 L3	← TRANSFER コマンドで L2 の物質の CAS RN® を抽出・検索 ← 抽出したタームの集合 ← 抽出したターム (L3) で検索
=> S L4 AND MELANOCORTIN/STNM L5 1336 L4 AND MELANOCORTIN/STNM	← ターゲット名 (/STNM) で限定

# 検索例3 (つづき)

## L5 でヒットした回答の例

Ligand RN: 3088437-49-1  
Ligand Entry Date: 22 Dec 2025

SAR PROPERTIES

SARPROP Assay Count: 8  
(1) WO 2025123059 A1, CAPLUS,2025:1321667, Locator: Compound H2

TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Melanocortin receptor 3		Antagonist	norm:EC50	orig:141.73 nM, norm:0.14173 µM	alcohol use disorder; opioid abuse		Assay

Ligand RN: 1350017-65-0  
Ligand Entry Date: 26 Jun 2025  
Chemical Name: L-Tryptophanamide, L-tyrosyl-L-arginyl-D-cysteiny-L-α-glutamyl-L-histidyl-L-phenylalanyl-L-arginyl-N-[(1S)-2-hydroxy-1-(mercaptomethyl)ethyl]-, cyclic (3-8)-disulfide (CA Index Name)

SAR PROPERTIES

SARPROP Assay Count: 4  
(1) Curr. Top. Med. Chem., 2007, 7 (11), 1052-1067 MEDLINE,17584126, Locator: Compound 91

TARGET NAME	TARGET RN	FUNCTION	PARAMETER	VALUE	DISEASE	ORGANISM	ASSAY
Melanocortin receptor 3		Agonist	norm:Ki	orig:>500 nM, norm:> 0.5 µM	inflammation	Homo sapiens	Assay

33 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



## CAplus、MEDLINE ファイルとの連携

- ヒットしたデータの出典のみを確認したい場合は、Reference フィールド中の CAplus ファイルのレコード番号 (AN) を用いて検索するとよい
- CASBIOACTIVITY ファイルには MEDLINE ファイルに収録されている文献由来のデータも含まれる
  - Reference フィールドに PubMed ID が含まれているので、MEDLINE ファイルでドキュメント番号 (/DN) で検索するとよい

34 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.





# 参考 : CAplus ファイルで CASBIOACTIVITY ファイル への収録の有無を確認する

CAplusファイルで、/FA フィールドを利用して、その文献が CASBIOACTIVITY  
ファイルに収録されているかどうかを確認できる

=> FILE CAPLUS

=> S 10.1021/jm400813y/DOI ← ある文献について DOI で検索  
L1 1 10.1021/JM400813Y/DOI

=> S L1 AND SAR/FA ← SAR/FA で SAR データが CASBIOACTIVITY ファイルに収録されているか  
L2 1 L1 AND SAR/FA 確認できる

=> S L1 AND ADME/FA ← 同様に、ADME/FA で ADME データ、TOX/FA で TOX データの有無を  
L3 1 L1 AND ADME/FA 確認できる

=> S L1 AND TOX/FA  
L4 0 L1 AND TOX/FA

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp