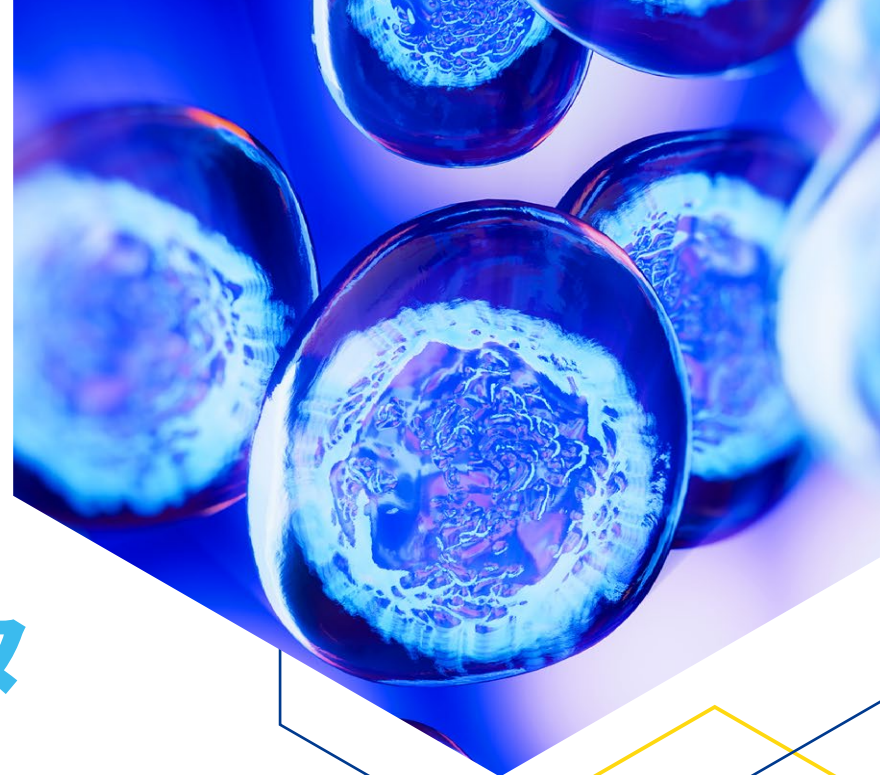


新しいソリューション

CAS BioFinder™ for Academics

創薬科学に関するデータ
探索・研究開発を加速



CAS BioFinder (シーエーエスバイオフィンダー)とは？

創薬科学に関する網羅性の高いデータの蓄積により、
リガンド、標的タンパク質、疾病等の観点から
迅速な回答が得られる新しい製品です。

構造活性相関データ (SAR)、
ADMET (吸収、分布、代謝、排泄、毒性)、
バイオマーカーなどの情報へ
シームレスにアクセス可能です。

フリートライアル 期間：2025/7/14 - 8/29

- CAS SciFinder® ID をお持ちの方なら特別な手続きなく参加できます。
- CAS SciFinder® ID をお持ちでない方はトライアル期間中に取得してください。
- 2025/7/16 に Webinar を開催いたします。

フリートライアル及びWebinarの詳細は
下記のQRコードをご確認ください。



<https://x.gd/SNCRc>



創薬分野の研究・開発において必要な情報を探すのに苦労していませんか？



どのような分子(分子骨格)が目的の疾患や標的に対して活性を示すのか調査したい

Ligand 検索

CAS BioFinder

Ligands search for **diabetes mellitus**

Applied Filters (8): Hydrogen Bond Acceptors: 0 to 10 X Hydrogen Bond Donors: 0 to 10 X Freely Rotatable Bonds: 0 to 10 X Molecular Weight (g/mol): 0 to 500 X Molar Refractivity (m²/mol): 40 to 130 X Number of Aromatics: 20 to 70 X Partition Coefficient (logP): up to 5 X Polar Surface Area (PSA) (Å²): 0 to 140 X

171,302 Results

Sort: Relevance

Chemical structure examples: Ciprofloxacin, Levofloxacin, Ampicillin, Metoprolol, etc.

Scaffolds 検索

CAS BioFinder

Scaffold summary

BWCRQDBBNRCXOW-UHFFFAOYSA-N

Ligands: Pharmacology: Similar Scaffolds

Filters: Rule of 5 Filter Preset

Chemical Filters: R Groups

102 Ligands, 7 Ligands, 6 Ligands, 3 Ligands, 2 Ligands, 2 Ligands, 1 Ligand, 1 Ligand



分子を“創薬的観点”から調査したい

物性値

CAS DRUG

Ciprofloxacin (1-cyclopropyl-7-fluoro-8-piperidin-3-yl-6,8-dihydro-4-oxo-2H-1,4-benzoxazine-3-carboxylic acid)

STATUS: Approval Status: US Approved, Approval Authority: US FDA, Approval Year: 1997, 2004, Originator: Bayer

INDICATIONS: Urinary tract infection, Modality: Curative, Highest phase: Approved, Source: CAS

PRIMARY TARGET: DNA topoisomerase II subunit B, Function: Inhibitor, Source: CAS

Table of properties: H bond acceptors, H bond donors, Molecular weight, Molar refractivity, Number of atoms, Freely rotatable bonds, logP, logS, logBB, Polar surface area, Plasma protein binding, Permeability glycoprotein.

Assay データ

Assay Detail

Ligand: 1,4,4,9,15-tetrahydro-2H-pyrido[4,3-b]indole

Target: Tyrosine-protein kinase JAK2 (Protein)

Gene: JAK2

Assay Type: Binding

Procedure: In vitro inhibitory concentration of the compound (dissolved in DMSO) against recombinant human Janus kinase 2 using 25 nM Ulight-JAK1 (tyr1023) peptide as substrate in presence of 7.5 uM ATP upon incubation in 25 mM HEPES, pH 7.0 for 60 min at RT

Condition: pH 7.0

Function: Inhibitor

Parameter: IC50

pValue: 11.00

Value: $1 \times 10^{-5} - 0.1 \mu\text{M}$

代謝生成物

Felodipine

CAS Registry Number: 72509-76-3

Summary, Pharmacology, ADME, Toxicology, Proteins (47), Diseases (52), Chemicals (10)

Chemical structure examples of metabolites.



分子と標的がどのように相互作用するのか知りたい

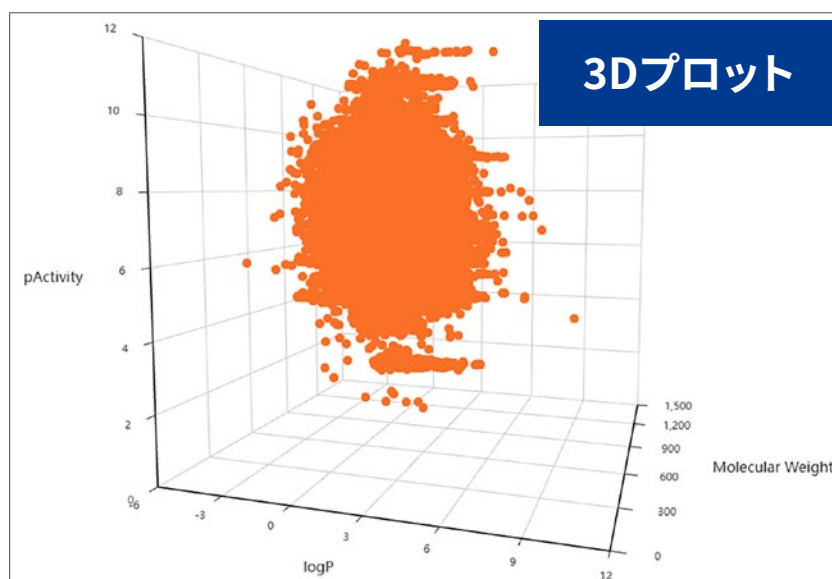
PDB由来のX線構造

6VNE

Chemical structure visualization of a protein-ligand complex.



目的の標的に対する新規分子の生物活性を予測したい



CAS BioFinderを使えば素早く答えを見つけることができます！