

CAS SciFinder®

2024 年前半の強化のまとめ

化学情報協会 情報事業部

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



本日の内容

最近の強化

- References（文献）の強化
- Substances（物質）の強化
- Reactions（反応）の強化
- 共有機能の強化
- その他の強化

Q&A

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



最近の強化

2024 年 2 月～2024 年 6 月

References の強化

強化内容	時期
For You 機能の強化	2024/2
CAS Lexicon の強化	2024/3
文献 (Reference) 検索の詳細情報画面のデザイン変更	2024/3
文献詳細ページで反応情報が表示されるように	2024/4

文献検索の詳細情報画面のデザイン変更

画面左側に利用可能なコンテンツのリンクを表示

Novel catalysts with a silylene ligand for hydrosilylation

18 37 0 Citation Map

In this Reference

- IPC Data
- CAS Concepts
- Substances
- Reactions
- Cited Documents

By: Baceiredo, Antoine; Kato, Tsuyoshi; Rodriguez, Ricardo; Nakata, Norio; Marrot, Sebastien; Saint-Jalmes, Laurent

is the use, as a catalyst, in particular in hydrosilylation, of a metal complex comprising at least one metal of columns 8, 9 and 10 of the periodic table and one or a plurality of ligands, characterized in that at least

Keywords: catalyst; silylene ligand; hydrosilylation

PatentPak PDF Get Prior Art Analysis Full Text

Publication Information • Patent View Less

Patent Number	Publication Date	Application Number	Application Date	Kind Code
WO2015004397	2015-01-15	WO2014-FR51788	2014-07-11	A1

Assignee	Source	Database Information	Language
Bluestar Silicones France SAS, France Centre National de la Recherche Scientifique	World Intellectual Property Organization CODEN: PIXXD2	AN: 2015:82775 CAN: 162:225364 CAplus	French

書誌情報

文献検索の詳細情報画面のデザイン変更

文献詳細ページで反応情報が表示されるように

▼ CAS Concepts

▼ Substances

▲ Reactions

31-249-CAS-15072521

文献中の反応情報一覧を取得

Steps: 1 Yield: 96%

収率の高い順に表示

1.1 Catalysts: Stereoisomer of [1,3-bis(η²-ethenyl)-1,1,3,3-tetramethyldisiloxane][η²-(2*F*)-1⁺...]
Solvents: Xylene; 20 min, 72 °C

31-309-CAS-4573245

Steps: 1 Yield: 92%

1.1 Catalysts: *p*-Toluenesulfonic acid
Solvents: Toluene; 72 h, 135 °C

CAS Lexicon の強化

検索式を作成するためのガイドが表示されるように

The screenshot shows the 'Search CAS Lexicon' interface. A search bar contains 'covid 19'. Below the search bar, a list of concepts is displayed, including 'COVID-19', 'Critical COVID-19', 'Severe COVID-19', 'COVID-19 vaccine', 'COVID-19-associated', 'Non-severe COVID-19', 'Long COVID', and 'X-linked immunodeficiency'. A callout box titled 'Long COVID' provides a definition: 'About one third of COVID-19 patients have prolonged symptoms and impairment, such as fatigue, sleep difficulties, and muscle weakness, after the acute phase. These symptoms may last from weeks to months.' The interface also shows a 'Search Concept' button and a 'Search' button. A 'Step 1' callout points to the search results, and a 'Step 2' callout points to the 'Add to Query' button. The bottom navigation bar includes 'Retrosynthetic Analysis', 'Search CAS Lexicon', and 'Search CAS Sequences'.

7 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



(参考) 統制語とは

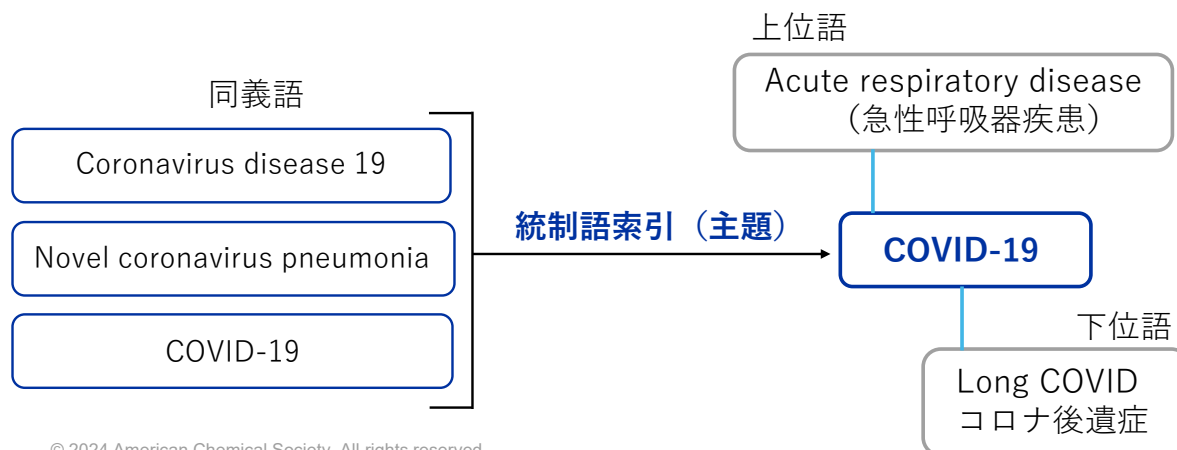
統制語を利用することで網羅的な検索が可能

統制語

- 統制語は一つの概念を一つの語で表現するように統制された語

統制語のシソーラス

- 統制語は上位語・下位語、同義語などの階層関係を有している



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

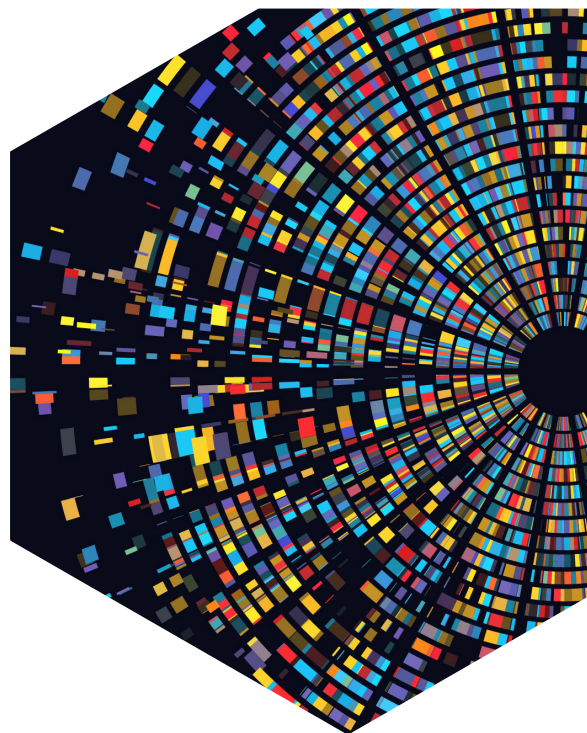


CAS Lexiconとは

CAS が収集した文献情報由来の統制語シソーラス

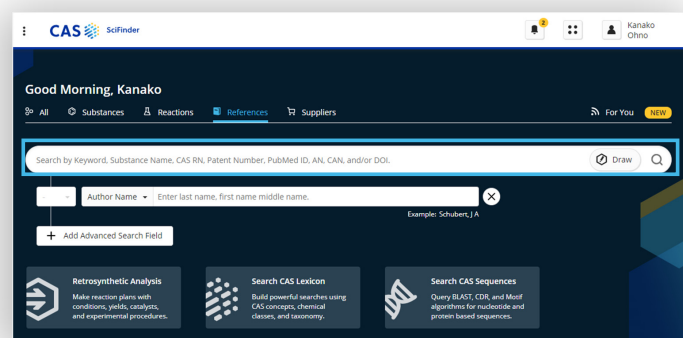
CAS Lexicon を使った検索のメリット

- 主題に限定した的確な文献検索が可能
- 目的の統制語だけでなく、下位語や関連語も含めての検索が可能



(参考) 文献検索の仕組み

キーワード検索は検索対象が広い、網羅的な検索



検索対象

タイトル

抄録 (Abstract)

ジャーナル名、著者名、
所属機関名など

統制語索引 (主題)

物質索引 (物質)

(参考) 検索の仕組み

統制語（主題）を用いた検索は、索引のみを検索対象とするため適合性が高い



デモンストレーション

下記の統制語を含む文献を検索する

主題となるキーワード

— モノクローナル抗体 (mAb)

OR

— RNA ワクチン (RNA vaccine)

AND

— 新型コロナウイルスワクチン (Covid 19 vaccine)

Substances の強化

強化内容	
保護基のショートカットが利用可能に	2024/3
構造検索のロジック改善	2024/3
GHS 情報の表示に関する強化	2024/3



GHS 情報の表示に関する強化

フィルターにより特定の内容に限定した表示が可能に

^ GHS Hazard Statements

コード

概要

有害性クラス/区分

情報源

Code ▾ ▴	Hazard Statement ^2 ▾ ▴	Class ^1 ▾ ▴	Source ▾ ▴
H333	May be harmful if inhaled	Toxicity (Inhalation) Category 5	Expert Curated
H301	Toxic if swallowed	Toxicity (Oral) Category 3	New Zealand Hazardous Substances and New Organisms (HSNO) Act - Classification of Chemicals
H301	Toxic if swallowed	Toxicity (Oral) Category 3	Expert Curated
H301	Toxic if swallowed	Toxicity (Oral) Category 3	European Chemical Agency (ECHA) Classification&Labelling Inventory - Notified classification and labelling - most serious notifications
H302	Harmful if swallowed	Toxicity (Oral) Category 4	Japan GHS Classifications (Japanese)
H302	Harmful if swallowed	Acute Toxicity (Oral) Category 4	Expert Curated

フィルター

Filter Hazard Statement

☐ Causes serious eye irritation (4)

☐ Harmful if swallowed (3)

☐ May cause allergic or asthmatic symptoms or breathing difficulties if inhaled (3)

Apply

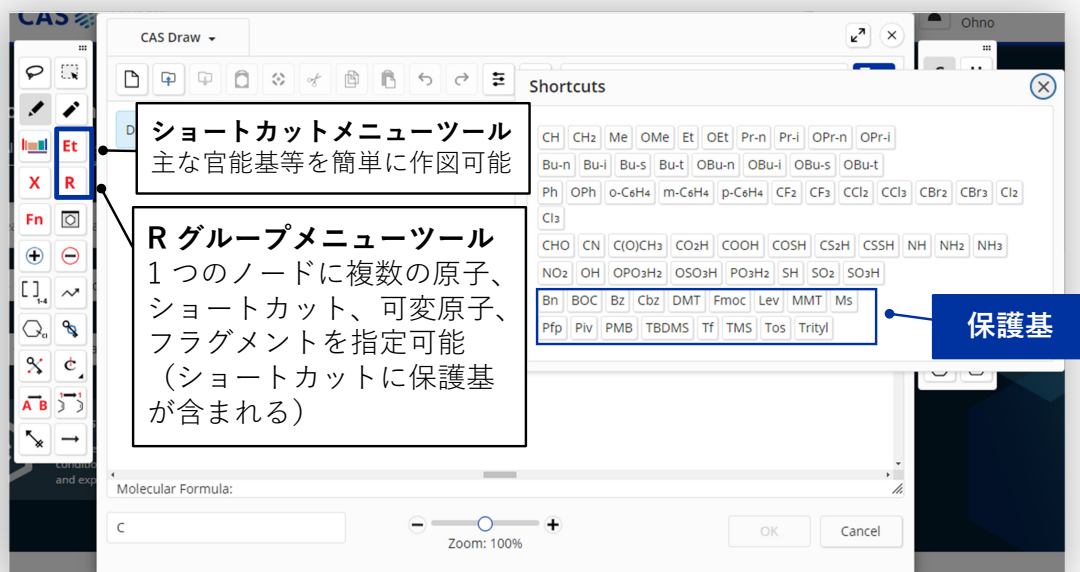
Clear All

GHS :化学品の分類および表示に関する世界調和システム
The Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals



保護基のショートカットが利用可能に

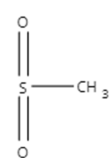
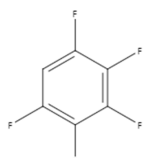
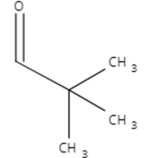
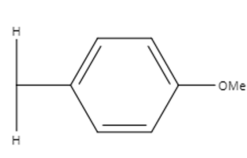
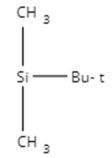
Boc, Cbz, TMS などの保護基がショートカットメニューに追加

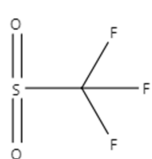
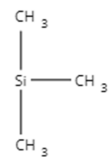
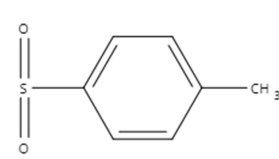
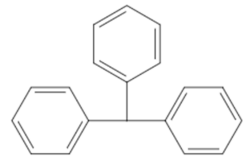


保護基の一覧 (1/2)

Bn	BOC	Bz	Cbz
DMT	Fmoc	Lev	MMT

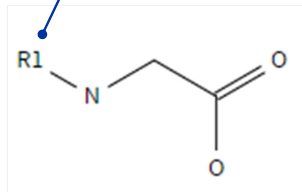
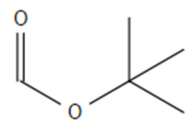
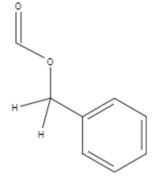
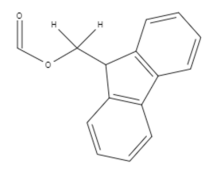
保護基の一覧 (2/2)

Ms	Pfp	Piv	PMB	TBDMS
				

Tf	TMS	Tos	Trityl
			

デモンストレーション

R グループに複数の保護基を指定した構造検索

Boc, Cbz, Fmoc	BOC	Cbz	Fmoc
			

Reactions の強化

強化内容	
反応検索結果に出願人情報を表示	2024/2
Reactions 検索 – テキスト検索の強化	2024/3

Reactions 検索 – テキスト検索の強化

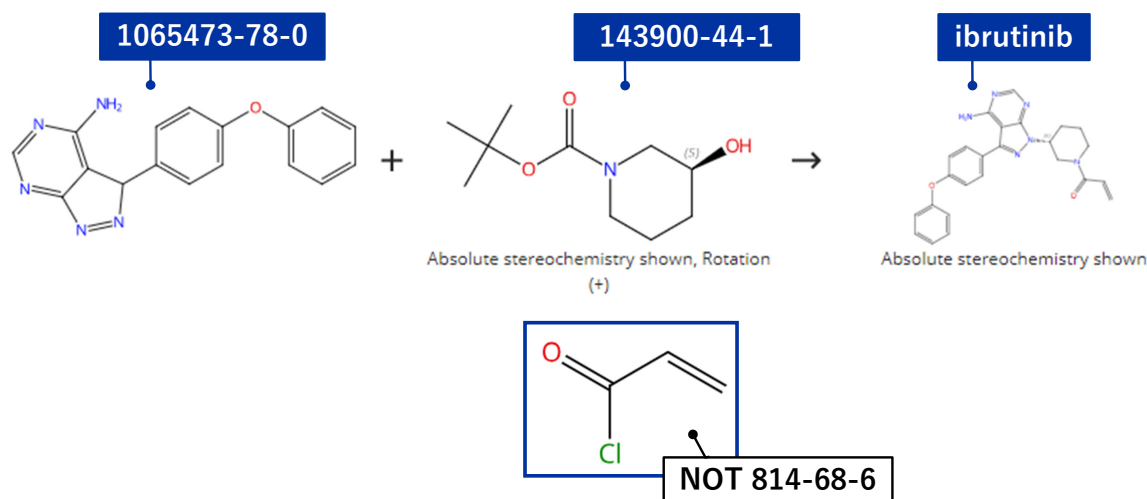
複数の語を使った検索、ブール演算子、フレーズを使った検索が可能に

- 複数語を使った検索
物質名と物質名
物質名と CAS RN®
物質 (物質名または CAS RN®) と文献識別子
文献識別子と CAS Reaction Number
- ブール演算子
AND, OR, NOT
- フレーズを使った合成反応検索
Synthesis of , Preparation of , Production of
上記のフレーズの後に生成物の名称や
CAS RN® を入力して検索
フレーズの後ろに from 反応物 と入力すると、
指定した反応物と生成物の反応がヒットする

デモンストレーション

フレーズ、複数語、ブール演算を使った検索

Synthesis of ibrutinib from (1065473-78-0 and 143900-44-1 not 814-68-6)



21 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



共有機能の強化

強化内容	
プロジェクト共有機能の追加	2024/1
アラートの強化	2024/3
回答の共有手順の変更	2024/3
文献 (References) 検索の各レコードに Project/Save 用アイコンを追加	2024/6

22 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



プロジェクト機能

選択した文献、物質をプロジェクト単位で管理可能

References search for "covid 19"

2 Selected 502,526 Results

1 Dexamethasone in the management of covid-19.

2 COVID 19 and its mental health

プロジェクト機能

選択した複数のレコードをプロジェクトに登録

レコード1件をプロジェクトに登録

新規プロジェクトとして登録

既存プロジェクトとして登録

プロジェクト共有機能

作成したプロジェクトを他のユーザーに共有可能

CAS SciFinder

References Enter a query...

Return to Home

Alerts (11) Saved (46) History (7663) Projects (2)

プロジェクトの保存先

プロジェクトの編集・共有等

共有先のユーザーの役割を指定

Project Collaborators

Add project collaborators using an email address...

People with access (2)

Name	Role	Access
Kanako Ohno (You)	Administrator	Editor
support@jaici.or.jp (Pending)	Viewer	Viewer

Save Cancel

(参考) <https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/14535531467405-Projects-Overview>

アラート機能

設定した検索式を決められた頻度で自動検索し、最新情報を配信

References search for "suzuki reaction"

Save Results

Name

Please provide a name for your search

Search Options

☒ Query Only ☐ Selected Answers ☐ All Answers (Up to 20,000)

Add Existing Tags (Optional)

No tags defined

New Tag (Optional)

Add tag name

Tag Color

Light Blue

Alerts

Frequency

As Available

Add Email(s)

Add Recipient(s)

Save Cancel

複数のメールアドレスを登録可能

Save and Alert

Add to Project

Share Results

Copy Search to Clipboard

アラート機能

最新情報はメールもしくは CAS SciFinder から確認

SciFinder-n Alert Results for References

SciFinder-n Alert Processing <no-reply@cas.org>

宛先

CAS SciFinder

New research has been added!

1 refrigerants (1)

View Result in SciFinder

Dehumidifying device

By: Hori, Tatsuya

World Intellectual Property Organization (2024) | Japanese

View Saved Items

最新情報をメールで確認
詳細はリンクをクリックし
CAS SciFinder で確認

CAS SciFinder

Good Morning,

All Substances Reactions References Suppliers

Search by CAS Reaction Number, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.

Draw

Return to Home

Alerts (1) Saved (46) History (8150) Projects (2) Downloads (36)

Hi here are your latest Alerts...

NEW June 18, 2024

New content has been added for:

refrigerants

References

View New Results

最新情報をCAS SciFinder で確認

回答の共有

検索結果は他のユーザーと共有可能

References search for "covid 19"

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Filter Behavior: Filter by Exclude

Search Within Results: Search for up to 3 text strings within the result set. Enter a query... Search

Searching for... vaccine Clear All

Document Type: Journal (64K)

Filtering: Search Within Results: vaccine

2,401 Results

1

Assessment of booster vaccination of COVID 19 and its impact on health thereof using artificial intelligence, it can be termed into two categories data collected from social medias to find the general opinion of people about booster vaccination and checking authenticity of news about booster dose using Natural Language processing algorithms (NLP) algorithms. NLP are further used to categorize the emotions, public opinions of the people from keywords, images and videos collected from social media websites, blogs, articles and other vlogs. The trustworthy of...

Assignee: Unknown
India, IN202231020781 A 2022-05-06 | Language: English, Database: CPlus

View More

PatentPak Full Text

Substances (0) Reactions (0) Citing (0) Citation Map

リンクをメールで共有
CAS SciFinder から直接送信

URL をコピー
URL をクリップボードにコピー

Save and Alert
Share Results
Copy Search to Clipboard

共有機能の違い

機能	メリット
プロジェクト	複数人で文献、物質情報を管理できる
アラート	検索せずに最新情報を確認できる
回答の共有	複数人で文献、物質、反応、カタログ情報を共有できる。共有された検索式の編集も可能



その他の強化

強化内容	
All Answers / Selected answers で保存した回答の呼び出し方法の変更	2024/3
Downloads ページの追加	2024/5
Project に保存した文献、物質レコードのダウンロードが可能に	2024/6
Settings で日時の表示形式が選択可能に	2024/6

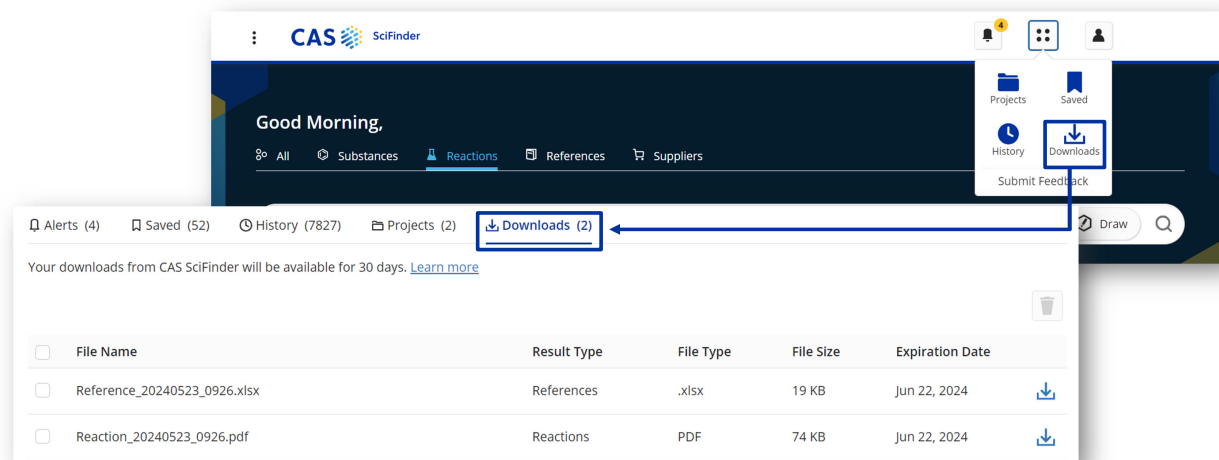
保存した回答の呼び出し方法の変更

All Answers / Selected answers で保存した回答の呼び出し方法の変更

The screenshot shows the CAS SciFinder web interface. At the top, there's a navigation bar with the CAS logo, a search bar, and a user menu. Below the navigation bar, there are tabs for Alerts (0), Saved (46), History (8150), Projects (2), and Downloads (36). The 'Your Saved Items' section is active, showing a list of saved items. A blue box highlights the 'All/Selected Answers' option, and a blue arrow points to it with the text '保存した回答を表示' (Display saved answers). A blue button labeled '再検索' (Search again) is also visible.

Downloads ページの追加

過去 30 日分のダウンロードファイルが保存



※構造作図画面、Citation Map、物質のモーダルウィンドウからエクスポートしたファイルは Downloads ページには含まれない。

※実測および予想スペクトルイメージデータのエクスポートファイルは現時点では Downloads ページに含まれないが今後追加される予定

31

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



JAICI ヘルプデスク

Tel : 0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

Mail : support@jaici.or.jp

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



Thank you

Connect with us at cas.org

 linkedin.com/company/cas

 [@CASchemistry](https://twitter.com/CASchemistry)

