

CAS SciFinder®

2024 年後半の強化のまとめ

化学情報協会 情報事業部
2025/01

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



本日の内容

各検索の強化

- References（文献）の強化
- Substances（物質）の強化
- Reactions（反応） / CAS Retrosynthesis（逆合成解析）の強化
- Supplier（試薬カタログ）の強化

テキスト検索の強化

- 自然言語サポート
- ユーザーの意図を認識
- 直観的な画面表示

まとめ



各検索の強化

2024年7月～2024年12月

Referencesの強化

強化内容	時期
CAS Lexiconの強化	2024/8
検索結果のダウンロードの強化	2024/8
回答の表示順がユーザーごとに最適化	2024/9
Are You Looking for References? の搭載	2024/10

CAS Lexicon の強化

CAS Lexicon を使って検索した際、検索に使ったすべてのタームが Search History (検索履歴) ページおよび検索履歴のダウンロードファイルに含まれるようになりました

Recent Search History (検索履歴) View All Search History

January 8, 2025

各タームに含まれるキーワードも表示される

References CAS Lexicon (6,584 Results)

9:52 AM 統制語 Severe acute respiratory syndrome-related coronavirus - Preferred Concept
上記の統制語の下位語 Severe acute respiratory syndrome-related coronavirus - Narrower Concepts (2)
Severe acute respiratory syndrome coronavirus
Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2

OR 統制語 OR COVID-19 - Preferred Concept
上記の統制語の下位語 COVID-19 - Narrower Concepts (1)
Long COVID

COVID-19 と COVID-19 の下位語 (Long COVID) を検索に使用した

AND 統制語 AND RNA vaccines - Preferred Concept
上記の統制語の関連語 RNA vaccines - Related Concepts (1)
RNA

[View Less](#)

Rerun Search
Edit Search



検索結果のダウンロードの強化

References 検索の結果をダウンロードする際、反応情報 (Reactions) を含めたダウンロードが可能になった

文献検索結果のダウンロード方法

ダウンロードされたデータ

Download Reference Details

File Type

- PDF
- Excel (.xlsx)
- PDF
- Quoted (.txt)
- Rich Text (.rtf)
- Tagged (.txt)
- Substances

PDF または RTF 形式を選択

Reactions
 Formulations
 Analytical Methods
 Citations

Reactions をチェック

Download

反応情報

CAS SciFinder

Reference Detail

CAS Reaction Number: 31-177-CAS-861

CAS SciFinder の反応レコード

Reaction Overview

Step	Yield	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	92%	Et3SiLi	Palladium diacetate	N-Methyl-2-pyrrolidone	403 K

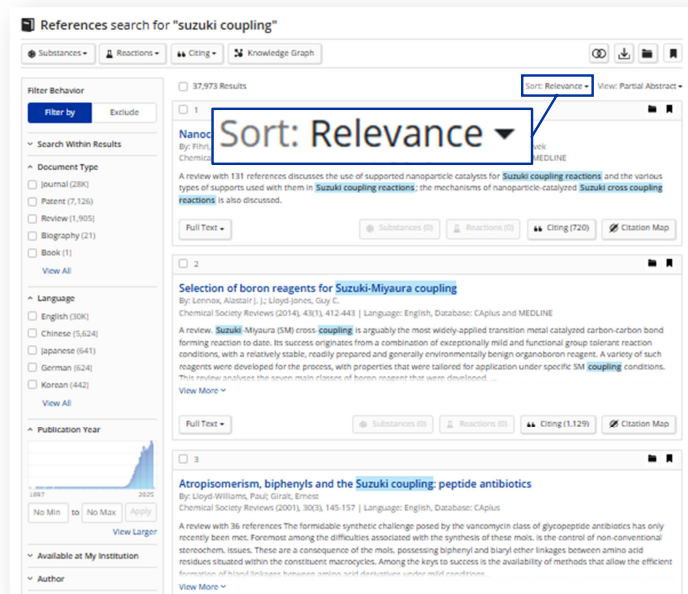
ダウンロードファイルには、反応スキームではなく CAS SciFinder の反応レコードへのリンクが含まれる

反応情報



回答の表示順がユーザーごとに最適化

文献検索の Relevance (関連度) がユーザーの検索履歴に基づいて判断されるように



ポイント

- 最近の検索傾向に基づき、ユーザーの関心分野に一致する回答が上位に表示される
- 得られる回答数には影響しない

(参考) 文献検索における関連度の指標

- ヒットした検索語の数
- 検索語の記載位置
- 被引用回数
- ヒットした回答中の被引用回数
- ユーザーの検索履歴

等々



7 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

Substances の強化

強化内容	時期
Polymer Class フィルター追加	2024/7
テキスト検索の強化	2024/9
分子式検索の強化	2024/11

8 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



Polymer Class フィルターの追加

特定の種類のポリマーを検索する際、迅速かつ効率的な絞り込みが可能に

– ポリマーのレコード例

CAS Registry Number: 25014-10-2

281 11 0

80-62-6
C₅H₈O₂

78-79-5
C₅H₈

(C₅H₈O₂.C₅H₈)_x

Components: 2
2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester, polymer with 2-methyl-2-propenoate

Polymer Class Terms
Polyacrylic, Polyolefin

**Polymer Class
(ポリマー分類用語)**

– 物質検索の回答一覧画面

Substances search for "80-62-6" Component RN

References Reactions Suppliers

Filter Behavior
Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

Reference Role

Polymer Class

- Polyacrylic (148K)
- Polystyrene (45K)
- Polyether (39K)
- Polyvinyl (36K)
- Polyether (27K)

View All

Filtering: Polymer Class: Polyacrylic X

148,068 Results

1

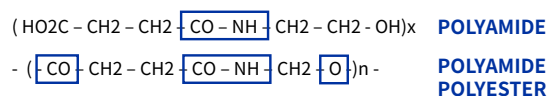
733035-11-5

(C₅H₈O₂.C₄H₆O₂)_x

Polymer Class (ポリマー分類用語) とは

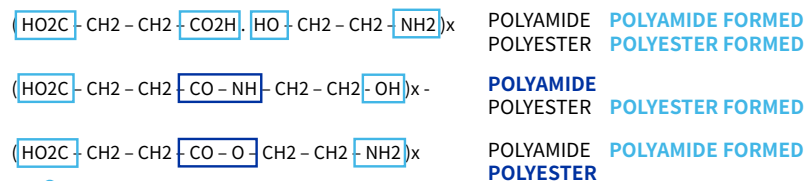
各ポリマーの構造をコンピュータ・アルゴリズムによって解析し、結合の種類に基づいて付与されるコード

– 主鎖に存在する結合による分類



ポリマーの主鎖 (backbone) となる構造中に元々、存在する結合による分類

– 重合反応によって生成する結合による分類



重合反応によって生成する(と推定し得る)結合による分類

* FORMED なしの用語とともに、FORMED 付のポリマー分類用語も収録

(参考) ポリマー分類用語一覧

AMINO RESIN	POLYAMINE	POLYONENE	POLYSULFONAMIDE
CHLOROPOLYMER	POLYANHYDRIDE	POLYISOCYANURATE	POLYSULFONE
DOUBLE STRAND	POLYAZOMETHINE	POLYKETONE	POLYTHIOESTER
EPOXY RESIN	POLYBENZIMIDAZOLE	POLYNUCLEOTIDE	POLYTHIOETHER
FLUOROPOLYMER	POLYBENZOXAZOLE	POLYOLEFIN	POLYUREA
MANUAL COMPONENT	POLYCARBODIIMIDE	POLYOTHER	POLYURETHANE
MANUAL REGISTRATION	POLYCARBONATE	POLYOTHER ONLY	POLYVINYL
PHENOLIC RESIN	POLYCYANURATE	POLYPHENYL	
POLYACETYLENE	POLYESTER	POLYPHOSPHAZENE	
POLYACRYLIC	POLYETHER	POLYQUINOXALINE	
POLYAMIC ACID	POLYHYDRAZINE	POLYSTYRENE	
POLYAMIDE	POLYIMIDE	POLYSULFIDE	

(参考) ポリマー分類用語一覧

FORMED 付きポリマー分類用語

POLYAMIC ACID FORMED	POLYHYDRAZINE FORMED	POLYTHIOETHER FORMED
POLYAMIDE FORMED	POLYIMIDE FORMED	POLYUREA FORMED
POLYAMINE FORMED	POLYONENE FORMED	POLYURETHANE FORMED
POLYANHYDRIDE FORMED	POLYISOCYANURATE FORMED	
POLYAZOMETHINE FORMED	POLYKETONE FORMED	
POLYBENZIMIDAZOLE FORMED	POLYPHENYL FORMED	
POLYBENZOXAZOLE FORMED	POLYPHOSPHAZENE FORMED	
POLYCARBODIIMIDE FORMED	POLYQUINOXALINE FORMED	
POLYCARBONATE FORMED	POLYSULFIDE FORMED	
POLYCYANURATE FORMED	POLYSULFONAMIDE FORMED	
POLYESTER FORMED	POLYSULFONE FORMED	
POLYETHER FORMED	POLYTHIOESTER FORMED	

デモンストレーション

1,4-Diacetylenebenzene (935-14-8) をモノマーを含むポリフェニルを検索する

The screenshot shows the CAS search interface. On the left, the search bar is set to "Component RN" with the value "935-14-8". A dropdown menu is open, showing "Component RN" selected. A blue callout box points to this dropdown with the text "Component RN : 成分の CAS RN®". On the right, the search results page is shown, filtered by "Polymer Class: Polyphenyl". A blue callout box points to the "Polymer Class" filter with the text "Polymer Class フィルター*". The search results show 84 results, with the first result being "76135-48-3".

*フィルターで、FORMED なしの用語を選択した場合には、FORMED 付きの用語も含まれる

デモンストレーション-回答の例-

1,4-Diacetylenebenzene をモノマーを含むポリフェニルが得られた

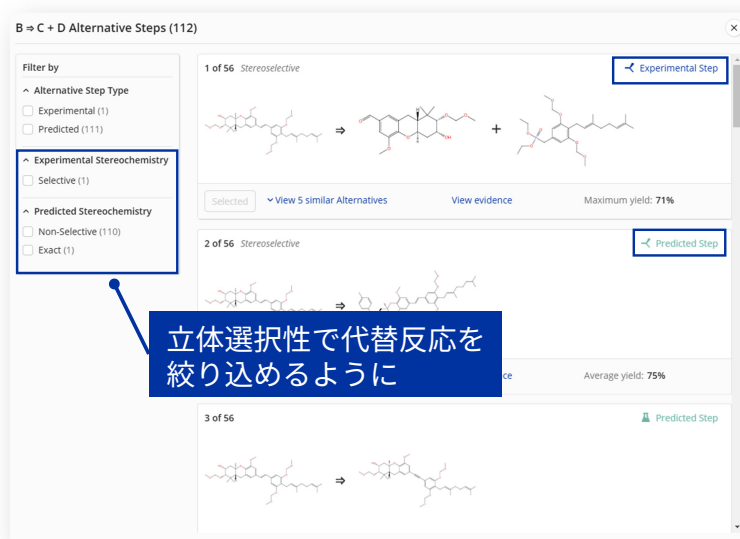
The screenshot shows the CAS Registry Number page for 76135-48-3. The page displays the chemical structure of 1,4-Diacetylenebenzene (C₁₀H₆) and its polymer class terms: Polyacetylene, Polyphenyl, and Polyphenyl formed. A blue callout box points to the chemical structure with the text "1,4-Diacetylenebenzene". Another blue callout box points to the "Polyphenyl" term with the text "ポリフェニル".

Reactions / CAS Retrosynthesis の強化

強化内容	時期
反応検索 - テキスト検索の強化	2024/7
逆合成解析 - 立体化学関連の強化	2024/8
逆合成解析 - 価格情報が限定的または不完全な市販品を含む逆合成プランの概算費用の算出精度が向上	2024/8
反応検索における分子式検索の強化	2024/11
Are You Looking for Reactions? の搭載	2024/12
Synthetic Depth の削除	2024/12
Plan Options と Scoring Profile の改善	2024/12

逆合成解析 - 立体化学関連の強化

- 立体化学のラベリングの精度がより精密に (この強化を反映して、Evidence の関連度 ランキングを更新)
- ユニークな立体選択的反応の収録が 30% 拡大
- Alternative Steps のフィルターに Experimental Stereochemistry / Predicted Stereochemistry を追加



The screenshot displays the 'B → C + D Alternative Steps (112)' interface. On the left, a 'Filter by' section includes 'Alternative Step Type' (Experimental (1), Predicted (111)), 'Experimental Stereochemistry' (Selective (1)), and 'Predicted Stereochemistry' (Non-Selective (110), Exact (1)). The main area shows three alternative steps. Step 1 is labeled '1 of 56 Stereoselective' and is marked as an 'Experimental Step'. Step 2 is labeled '2 of 56 Stereoselective' and is marked as a 'Predicted Step'. A blue callout box points to the 'Experimental Stereochemistry' filter with the text: '立体選択性で代替反応を絞り込めるように' (To narrow down alternative reactions by stereoselectivity).

逆合成解析 - Synthetic Depth の削除

CAS Retrosynthesis の解析条件変更：反応ステップ数の制限撤廃

Plan Information

Estimated Yield: 16%
Overall Price: \$3,358,051.26
(USD per 100 grams)

Retrosynthesis Plan for drawn structure

Powered by ChemPlanner®

Key Experimental Steps Predicted Steps Edit Plan Options

View Excluded Options Save

提示されるプランの候補が増え、多くのステップを必要とする大きな分子の合成ルートが解析が可能に

Suppliers の強化

強化内容	時期
テキスト検索の強化	2024/9
回答一覧画面と詳細ページのデザイン変更	2024/9
分子式検索の強化	2024/11

回答一覧画面と詳細ページのデザイン変更

情報がより分かりやすく表示されるように

回答一覧画面

Suppliers search for "caffeine"

Filter Behavior: Filter by (selected), Exclude

Filtering: Country/Region: Japan

32 Results

Supplier	Substance	Purity	Quantity Information	Availability	Ordering
FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation Product List	S8-08-2 Caffeine	95-98%	Product Information	Japan	Order Number: 035-06795
Kishida Chemical P	S8-08-2 Caffeine	95-98%	Product Information	Japan	Order Number: 000-13332
TCI Research Chemicals	S8-08-2 Caffeine	95-98%	Product Information	Maintained in stock	Order Number: C2042

Callout: 詳細ページへアクセスしやすいように

詳細ページ

KANTO CHEMICAL

Supplier Contact Information

Web	https://www.kanto.co.jp	Address	KANTO CHEMICAL CO., INC. 2-1, Nihonbashi Muromachi 2-chome Chuo-ku Tokyo, 103-0022 Japan
Order	Product Information	Other Contact Information	Reagent Division (International Business Department)
Email	kanto-61@gms.kanto.co.jp		
Phone	+81-3-6214-1092		
Fax	+81-3-3241-1053		

Item Details

Chemical Name	Caffeine
Order Number	10816-1A
Quantity Information	500 g, JPY 33330
Stock Status	Synthesis on demand
Pricing Information last update	18 Dec 2024

Callout: 情報が整理され確認しやすく

テキスト検索の強化

2024年7月～2024年12月

テキスト検索の強化

強化内容	時期
反応 (Reactions) 検索 - テキスト検索の強化	2024/7
物質 (Substances) 検索 - テキスト検索の強化	2024/9
カタログ情報 (Suppliers) 検索 - テキスト検索の強化	2024/9
Are You Looking for References? の搭載	2024/10
物質、反応、カタログ検索における分子式検索の強化	2024/11
Are You Looking for Reactions? の搭載	2024/12

テキスト検索の強化の効果

CAS コンテンツや機能からエフォートレスに優れた回答が得られるように

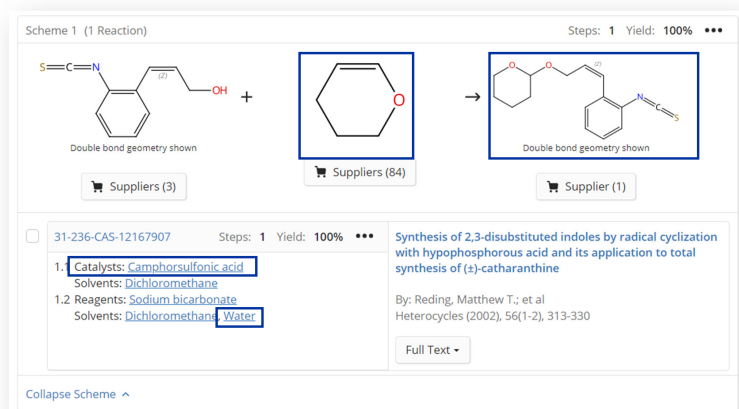
- 自然言語サポート
 - テキスト検索の強化
- ユーザーの意図を認識
 - Are You Looking for References / Reactions?
- 直観的な画面表示
 - 分子式検索の強化



反応検索 - テキスト検索の強化

反応タイプ名、化合物クラス名、官能基名、溶媒/試薬/触媒を含む反応中での役割などを認識したテキスト検索が可能になりました

例：Camphorsulfonic acid catalyzed conversion of 3,4-Dihydro-2H-pyran to 224315-46-2 in water



上記の検索式は、下記のように分類される

- 触媒 (Catalyst):
Camphorsulfonic acid
- 反応物 (reactant):
3,4-dihydro-2H-pyran
- 生成物 (product):
224315-46-2 (CAS 登録番号 (CAS RN®))
- 溶媒 (solvent):
Water

前置詞等を使用した反応ロールの指定

- 生成物： Synthesis of ... / Preparation of ... / to ...
- 反応物： Conversion of ... / from ... / {transformation} of ...
- 溶媒： in ...
- 触媒： Catalyzed by ... / ... catalyzed
- 試薬： Mediated by ... / promoted by ...
- 検索例

SUZUKI COUPLING OF BROMOBENZENE

反応物

Camphorsulfonic acid catalyzed conversion of 3,4-Dihydro-2H-pyran to 224315-46-2 in water

触媒

反応物

生成物

溶媒

* CAS RN® 224315-46-2: Tetrahydro-2-[[[2Z]-3-(2-isothiocyanatophenyl)-2-propen-1-yl]oxy]-2H-pyran

デモンストレーション

ブロモベンゼンを反応物とする鈴木カップリング反応

Retrosynthetic Analysis
Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.

Search CAS Lexicon
Build powerful searches using CAS concepts, chemical classes, and taxonomy.

Search CAS Sequences
Query BLAST, CDR, and Motif algorithms for nucleotide and protein based sequences.

- to, by, of などの前置詞を使用し、反応ロールを指定
- 官能基名も利用可能
- 元素名を使用した広範な触媒グループの指定

デモンストレーション - 回答の例 -

ブロモベンゼンを反応物とする鈴木カップリング反応が得られた

CAS Reaction Number: 31-179-CAS-23675085

Get Similar Reactions

Reaction Overview
Steps: 1 Yield: 100%

JOURNAL
In situ grown palladium nanoparticles on polyester fabric as easy-separable and recyclable catalyst for Suzuki-Miyaura reaction

Step 1

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	Potassium carbonate	Palladium	Ethanol Water	90 min, 50 °C

Transformations
1. Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling

Reaction Notes
green chemistry, solid-supported catalyst, Suzuki-Miyaura coupling, polyester fabric supported-palladium prepared and used as catalyst

Transformations, Reaction Notes に反応名称 (人名反応) が収録されている

物質検索 - テキスト検索の強化 (1/2)

官能基名や化合物クラス名からの物質検索が可能に

官能基名からの検索

- Functional Group フィルターに含まれる計 65 種類が利用可能

The screenshot shows a search interface for 'nitriles' with 13,603,506 results. A 'Filter Behavior' sidebar on the left has the 'Functional Group' filter expanded, showing a list of categories such as Nitrile (13.6M), Halide (7.3M), Alkene (6.3M), Cyclic alkene (5.4M), Ether (4.6M), and View All. The main results area displays a grid of chemical structures and their associated data, including molecular formulas, names, and counts for references, reactions, and suppliers.

Functional Group

物質検索 - テキスト検索の強化 (2/2)

官能基名や化合物クラス名からの物質検索が可能に

化合物クラス名からの検索

- CAS Lexicon の化合物クラス名に含まれる下位語 (Narrow Concepts) の化学物質が検索対象になる

The screenshot shows a search interface for 'Aliphatic ketones' with 2 results. The results are displayed in a grid with chemical structures and associated data. A 'Filter Behavior' sidebar on the left is visible, showing various filter options like 'Search Within Results', 'Reaction Role', and 'Reference Role'.

参考 : CAS Lexicon

The screenshot shows the CAS Lexicon search interface for 'Aliphatic ketones'. It displays a 'Preferred Concept' (Aliphatic ketones) and a list of 'Broader Concepts' (Ketones). A blue box highlights the 'Narrower Concepts' section, which includes '2-Heptanone' and '2-Octanone'. A blue callout box with an arrow points to this section, labeled 'Narrow Concept'.

デモンストレーション

Nitriles に属する物質を検索する

The screenshot shows the CAS search interface with the 'Substances' tab highlighted. The search bar contains 'Nitriles'. Below the search bar, there are filters for 'AND' and 'Molecular Formula'. A button labeled 'Add Advanced Search Field' is visible. The top navigation bar includes 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. The right side of the top bar shows 'For You' and a 'NEW' badge.

検索対象

- 物質名称、Notes (索引者による補足情報)
- 官能基名
- 化合物クラス名

29 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



デモンストレーション - 回答の例 -

官能基名と化合物クラスでヒットした回答が広く得られた

The screenshot shows the search results for 'Nitriles'. The search bar contains 'Nitriles'. The results are displayed in a grid format. The first three results are:

Result ID	Chemical Name	Molecular Formula	References	Reactions	Suppliers
75-05-8	Acetonitrile	C ₂ H ₃ N	185K	2.3M	447
107-13-1	Acrylonitrile	C ₃ H ₃ N	82K	44K	78
78-67-1	Azobisisobutyronitrile	C ₈ H ₁₂ N ₄	50K	198K	47

30 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



Are You Looking for References? の搭載

検索質問式から文献情報を必要としている意図が分かる場合に
文献情報へのナビゲーションが表示されるようになった

— 検索した文献 (DOI) に反応情報がない場合

Reactions search for "10.1039/c1cs15079k"

Are you looking for this Reference?
Nanocatalysts for Suzuki cross-coupling reactions

特定の文献に
スムーズにアクセス

No results found

We couldn't find any results. Please update your search query and try again.

[Download Task History](#) for this search.

— 検索した文献 (DOI) に反応情報がある場合

Are you looking for this Reference?
Highly active catalysts for the Suzuki coupling of aryl chlorides

Reactions search for "10.1039/b105394a"

同じ文献情報にアクセス

10 Results

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Yield

50-69% (2)

No Yield Available (8)

Number of Steps

1 (9)

2 (1)

Non-Participating Functional Groups

Ether (3)

Scheme 1 (1 Reaction)

Steps: 1 Yield: 63%

Suppliers (144)

Suppliers (3)

31-614-CAS-26383062

Steps: 1 Yield: 63%

1.1 Reagents: Cesium carbonate
Solvents: 1,4-Dioxane

Highly active catalysts for the Suzuki coupling of aryl chlorides
By: Bedford, Robin B.; et al
Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom) (2001), (17), 1540-1541

Full Text

Are You Looking for Reactions? の搭載

検索質問式から反応情報を必要としている意図が分かる場合に
反応情報へのナビゲーションが表示されるようになった

1370848 Reactions were found that match your search.

View All Reactions

References search for "suzuki coupling"

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Yield

90-100% (103K)

80-89% (118K)

70-79% (128K)

50-69% (175K)

30-49% (100K)

View All

Number of Steps

1 (1.3M)

Non-Participating Functional Groups

37,973 Results

Sort: Relevance

1

Nanocatalysts for Suzuki cross-coupling reactions
By: Fihri, Aziz; Bouhrara, Mohamed; Nekouei-shahraki, Bijan; Basset, Jean-Marie; Polshettiwar, Vivek
Chemical Society Reviews (2011), 40(10), 5181-5203 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE

A review with 131 references discusses the use of supported nanoparticle catalysts for Suzuki coupling reactions; the mechanisms of nanoparticle-catalyzed reactions is also discussed.

Full Text

Substances (0) Reactions (0) Citing (0)

2

Selection of boron reagents for Suzuki-Miyaura coupling
By: Lennox, Alastair J.; Lloyd-Jones, Guy C.

1,370,848 Results

Group: By Scheme Sort: Relevance View: Expanded

Scheme 1 (19 Reactions)

Steps: 1 Yield: 98-100%

Suppliers (122)

Suppliers (74)

Suppliers (40)

31-179-CAS-12086025

Steps: 1 Yield: 100%

1.1 Reagents: Potassium carbonate
Catalysts: (SP-4-1)-Bis(acetatoxy)bis(N'-butyl-N,N,N',N'-tetramethylguanidine-x%)/palladium
Solvents: Ethanol, Water; 20 h, 80 °C

Experimental Protocols

Guanidine/Pd(OAc)₂-Catalyzed Room Temperature Suzuki Cross-Coupling Reaction in Aqueous Media under Aerobic Conditions
By: Li, Shenghai; et al
Journal of Organic Chemistry (2007), 72(11), 4067-4072

Full Text

Transformations

1. Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling

Reaction Notes

Suzuki coupling

物質、反応、カタログ検索における分子式検索の強化

メインの検索バーに分子式を入力して検索できるように

The screenshot displays the CAS search interface. At the top, there are navigation tabs for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. A search bar contains the molecular formula 'C2H4O2.Na'. A blue callout box with white text says '検索タイプの指定が不要' (No need to specify search type). Below the search bar, there are filters for 'AND' and 'Molecular Formula'. A dropdown menu is open, showing 'Substances search for "C2H4O2.Na"'. The search results are displayed in a grid format, showing three results for 'C2H4O2.Na'. Each result includes a chemical structure, the molecular formula, the number of components, the component RN, and the name of the substance. For example, the first result is 'Sodium acetate' with component RN 64-19-7. The second result is 'Acetic-1-13C acid, sodium salt' with component RN 1563-79-7. The third result is 'Sodium [2-13C]acetate' with component RN 1563-80-0. Each result also has buttons for 'References', 'Reactions', and 'Suppliers'.

33 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



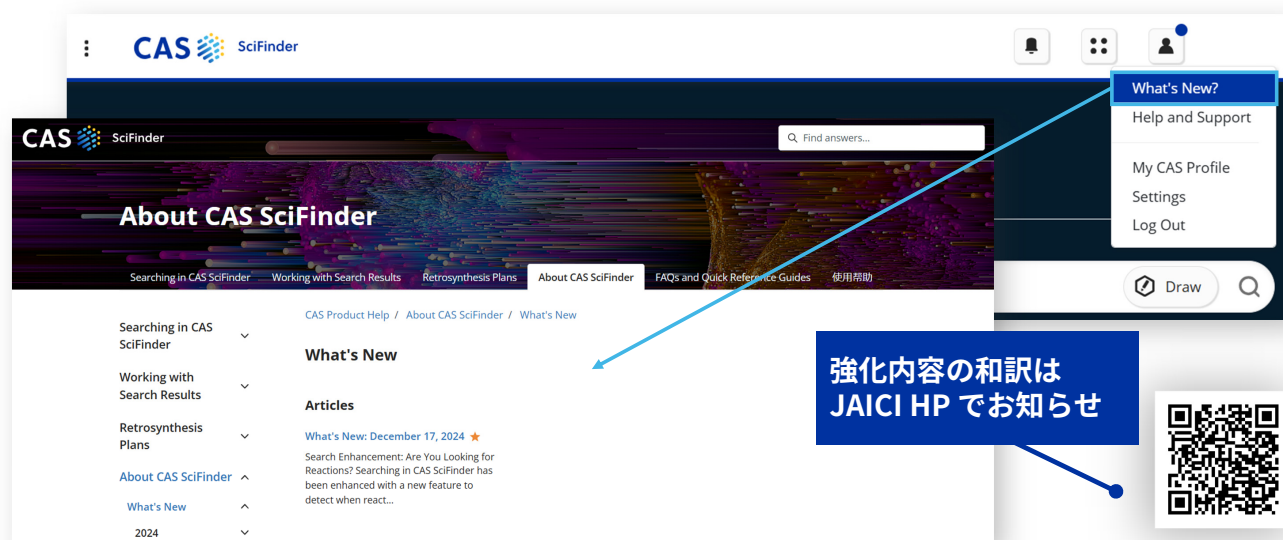
まとめ

34 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.




最新の強化は What's New で

画面右上の  から最新の強化を確認できる



強化内容の和訳は
JAICI HP でお知らせ



<https://www.jaici.or.jp/news/cas-scifinder/>

35 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

36 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



Thank you

Connect with us at cas.org

 linkedin.com/company/cas

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

