

CAS SciFinder[®] トピック (最近の強化)

化学情報協会 情報事業部

// 本日の内容

2

◆ 最近の強化

- References の強化
- Substances の強化
- Substances・References の強化
- Reactions の強化
- Retrosynthesis の強化
- Sequences の強化
- その他の強化

◆ まとめ

最近の強化

References の強化

4

分類	内容	時期
検索	★CAS Lexicon 機能の追加	2022/5
	★Precision Search を導入	2022/10
	Advanced Search の強化 - 複数入力、演算機能の追加	2022/1
	ORCID iD による著者名の検索・表示	2022/3
機能	★Prior Art Analysis の搭載	2021/12
	★新解析ツール Knowledge Graph を搭載	2022/9
	Citation Map の強化	2022/1
	ソート項目にアクセッション番号を追加	2022/1
	GetFTR フルテキストリンクの追加	2022/3
コンテンツ	☆CAS Bioactivity Data (Preview) の提供開始	2022/12
	特許の優先権情報の追加	2022/3
	CAS PatentPak 配列の記載位置情報の付与開始	2022/1

★の項目を資料に掲載 ☆は Substances・References の強化で紹介

CAS が開発した AI ベースの類似特許検索エンジンを使用して、自動的に先行技術文献を検索する機能

1. Get Prior Art Analysis をクリックする

Process for preparing oxycodone having reduced levels of 14-hydroxycodine

Substances (15) Reactions (18) Citing (5) Citation Map

PATENT

Patent Number: WO2008070658
 Publication Date: 2008-06-12
 Application Number: WO2007-US86375
 Application Date: 2007-12-04
 Kind Code: A1
 Assignee: Noramco Inc, United States
 Source: World Intellectual Property Organization
 CODEN: PIXXD2

By: Cox, D. Phillip; Zhang, Yong; Zhang, Wen-Chung; James, Karen E.

The present invention is directed to processes for preparing oxycodone base (I) having less than 10 ppm of 14-hydroxycodine (II) or oxycodone hydrochloride (I-HCl) having less than 50 ppm of II. The process comprises: (a) heating I having more than 100 ppm II with a sulfite (e.g., sodium hydrosulfite, sodium bisulfite, sodium metabisulfite) in and alc./water solution under basic conditions to a temperature of at least 85° for at least 30 min.; and (b) isolating oxycodone base having less than 10 ppm of II.

Chemical structures I and II are shown.

Keywords: oxycodone hydrochloride preparation; hydroxycodine n

Buttons: PatentPak Viewer, **Get Prior Art Analysis**, Full Text

Patent Family Table:

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2008070658	English	A1	PDF PDF+ Viewer	2008-06-12	WO2007-US86375	2007-12-04

© 2023 化学情報協会

- メールアドレスを入力し Submit をクリックする。
- 検索が完了すると通知が届く。

Prior Art Analysis

SciFinder® will search for all relevant information and send you a Prior Art Analysis based on this document. You can view the status of the request in your Recent Search History and on the History Page. You may continue to search while the analysis is processing.

Email Address: support@jaici.or.jp

Buttons: **Submit**, Cancel

CAS SciFinder®

Your Prior Art Analysis is Complete

This analysis is based on the reference:

Process for preparing oxycodone having reduced levels of 14-hydroxycodine
 By: Cox, D. Phillip, Zhang, Yong, Zhang, Wen-Chung, James, Karen E.
 World Intellectual Property Organization | English | WO2008070658

Here are the top similar documents based on your request. You can view all references in SciFinder®.

Reducing the amount of 14-hydroxycodine in oxycodone hydrochloride compositions by hydrogenation
 By: Chapman, Robert, Rider, Lonn S., Hong, Qi, Kyle, Donald, Kueper, Robert
 United States | English | US20050222188

A method of preparation of oxycodone
 By: Sraparek, Vladislav, Račkovska, Lubica, Proksa, Bohumil
 World Intellectual Property Organization | English | WO2006019264

Preparation of oxycodone
 By: Casimir, Michael Lawrence, Chung, Joon-Seon, Kaskany, Erno M., Luo, Jin
 United States | English | US20060111383

Showing the Top Documents

Buttons: **View all results in**

Annotations: メール通知例, 関連度の高い順に表示

すべての回答を確認するには、View all results in SciFinder® をクリック

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/workshop-events/#seminar>
 (動画) 一歩進んだ文献検索のヒント - CAS Lexicon、Prior Art Analysis の活用

© 2023 化学情報協会

文献集合について、様々な観点の相関関係を見出すことができるグラフを自動的に作成する機能

1. Knowledge Graph ボタンをクリックする

The screenshot shows the 'Knowledge Graph' feature in a search interface. A red box highlights the 'Knowledge Graph' button in the top navigation bar. An arrow points from this button to a large, complex network graph on the right side of the screen. The graph consists of numerous nodes (circles) of various colors and sizes, connected by lines (edges). A sidebar on the left contains filter options for 'References', 'Authors', 'Substances', 'Concepts', and 'Organizations', each with a toggle switch. Below this is a 'Filter Behavior' section with 'Filter by' and 'Exclude' options, and a list of document types (Journal, Review, Conference) and languages (English). The main content area shows a list of search results, with the first one selected and its details expanded.

解析の観点
 ・著者
 ・索引物質
 ・Concepts
 ・所属機関

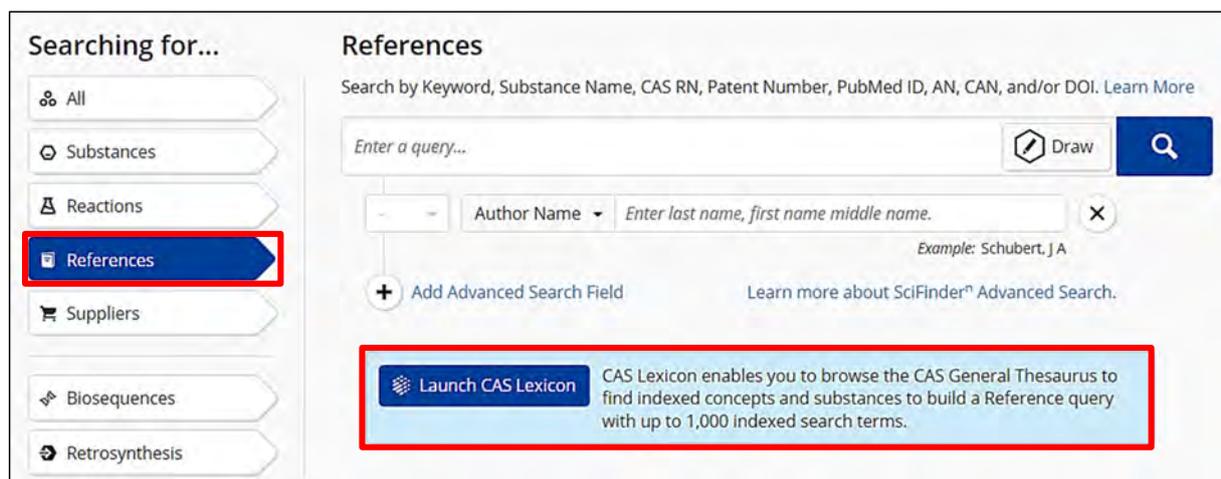
ノード：文献、所属機関名、著者名、Concept、索引物質
 件数が多いほど、ノードは大きくなる
 (文献のノードの大きさは一定)

This detailed view of the Knowledge Graph interface includes several annotations. A red box highlights the 'Knowledge Graph Key' and 'Filter Behavior' sections. A blue callout box explains that node size represents the number of items (documents, authors, etc.), with document nodes having a fixed size. Another blue callout box points to a node and says 'ノードをクリックし、詳細情報を確認' (Click the node to check detailed information). A third blue callout box points to an edge and says 'エッジ：ノード間の繋がり' (Edge: Connection between nodes). A white callout box points to a specific node and displays its details: 'Preparation and Catalytic Activity of Thermosensitive Ga₂O₃ Nanorods' by Kumar, Vijay Bhooshan; Mishra, Rahul Kumar; Pulidindi, Indra Neel; Porat, Ze'ev; Luong, John H. T.; Gedanken, Aharon. Energy & Fuels (2016). Below this, a chemical structure of 5-Hydroxymethylfurfural is shown with its SMILES string: OCC1=CC=C(C=C1)O.

フィルターで絞り込み再解析

CAS Lexicon で統制語を調べて、検索語として使用できるようになった

- 統制語を用いると、主題を表す索引を対象とした的確な検索ができる



Searching for...

- All
- Substances
- Reactions
- References**
- Suppliers
- Biosequences
- Retrosynthesis

References

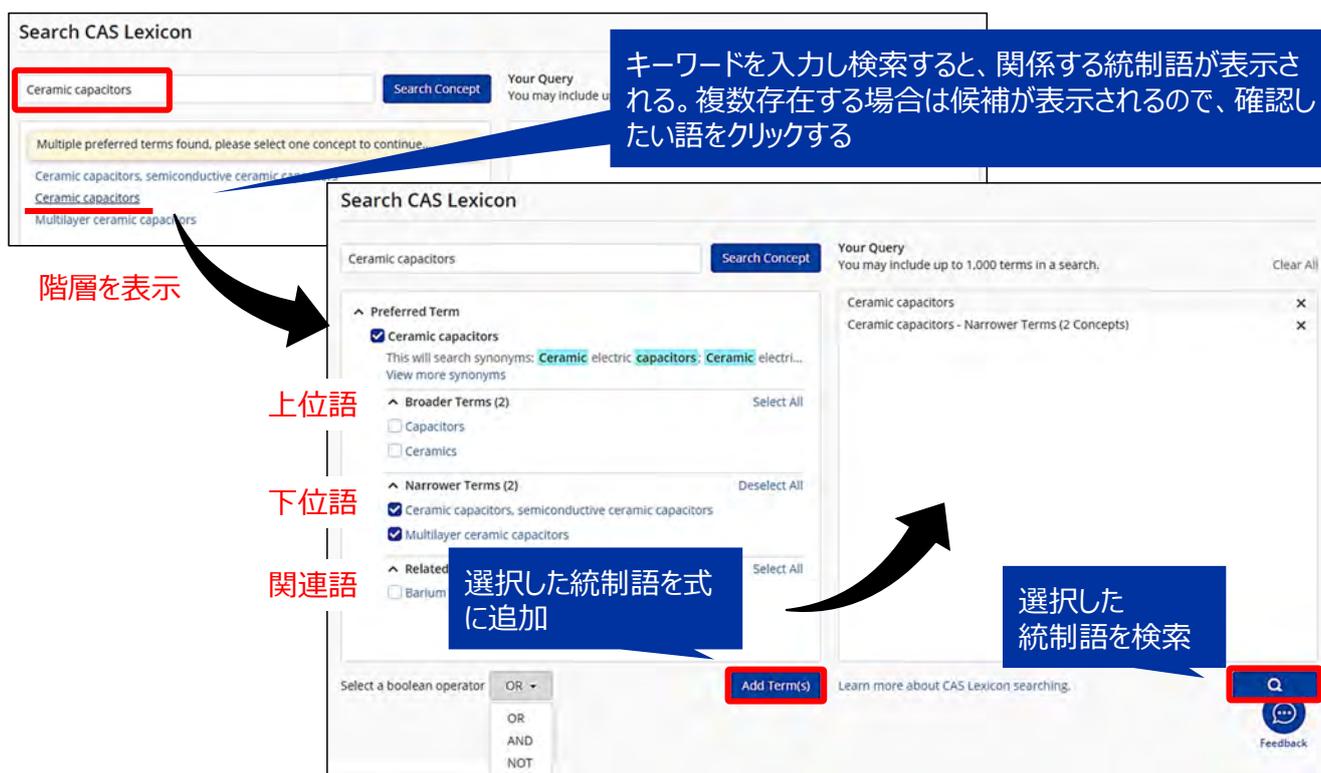
Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More

Enter a query...

Author Name Enter last name, first name middle name. Example: Schubert, J A

Launch CAS Lexicon CAS Lexicon enables you to browse the CAS General Thesaurus to find indexed concepts and substances to build a Reference query with up to 1,000 indexed search terms.

© 2023 化学情報協会



Search CAS Lexicon

Ceramic capacitors

Search Concept Your Query You may include up to 1,000 terms in a search.

Multiple preferred terms found, please select one concept to continue.

Ceramic capacitors, semiconductive ceramic capacitors

Ceramic capacitors

Multilayer ceramic capacitors

階層を表示

上位語

下位語

関連語

キーワードを入力し検索すると、関係する統制語が表示される。複数存在する場合は候補が表示されるので、確認したい語をクリックする

Search CAS Lexicon

Ceramic capacitors

Search Concept Your Query You may include up to 1,000 terms in a search.

Clear All

Preferred Term

Ceramic capacitors

This will search synonyms: Ceramic electric capacitors; Ceramic electri...

View more synonyms

Broader Terms (2)

Capacitors

Ceramics

Narrower Terms (2)

Ceramic capacitors, semiconductive ceramic capacitors

Multilayer ceramic capacitors

Related

Barium

Select a boolean operator OR AND NOT

Select All Deselect All

選択した統制語を式に追加

選択した統制語を検索

Add Term(s)

Learn more about CAS Lexicon searching.

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/workshop-events/#seminar>
 (動画) 一歩進んだ文献検索のヒント - CAS Lexicon、Prior Art Analysis の活用

© 2023 化学情報協会

CAS Lexicon に含まれるマルチタームを検索した場合、検索語をフレーズとして認識し検索するようになった

- 的確かつ件数を抑えた検索結果が得られるようになった
- CAS Lexicon に含まれないマルチタームについては Precision Search は働かない

The screenshot shows the CAS search interface. On the left, under 'Searching for...', the 'References' tab is selected and highlighted with a red box. The search input field contains 'acid rain'. Below the input, the search results are listed: 'Acid rain', 'Acid rainwater', and 'Acid rain waters'. The 'References' section title is also visible at the top of the search area.

© 2023 化学情報協会

Substances の強化

12

分類	内容	時期
検索	★成分の CAS RN [®] での検索が可能に	2022/3
	★作図したフラグメントを R グループに指定可能に (CAS Draw)	2022/12
	InChI Key の検索が可能に	2022/4
	Advanced Search の強化 - 複数入力、演算機能の追加	2022/1
機能	★Element フィルターの追加	2022/5
	MOL V3000, SDF V3000 形式でのダウンロード	2022/5
	作図した構造をテンプレートとして保存可能に (CAS Draw)	2022/4
	ダウンロード機能の強化 (Substances 検索)	2022/3
コンテンツ	☆CAS Bioactivity Data (Preview) の提供開始	2022/12

★の項目を資料に掲載 ☆は Substances・References の強化で紹介

© 2023 化学情報協会

Substances 検索の Advanced Search において、成分 CAS 登録番号 (CAS RN®) から検索可能に

- ある特定の成分を含む物質を簡単に検索できる
(例：アクリル酸とブタジエンを含む多成分物質を検索)

© 2023 化学情報協会

作図したフラグメントを R グループに指定可能に

作図したフラグメント (部分構造) を R グループに指定できるようになった

1. 基本骨格と R グループに含めたいフラグメントを作図する
2. **Fn** アイコンをクリックし、フラグメントの結合点を選択する

1. 基本骨格とフラグメントを作図

© 2023 化学情報協会

3. **R** アイコンをクリックし、R-Group Definitions で Fragments から含めたいフラグメントを選択する
4. R を作図する

© 2023 化学情報協会

Element フィルターの追加

化学物質に含まれる元素で絞り込みが可能になった

© 2023 化学情報協会

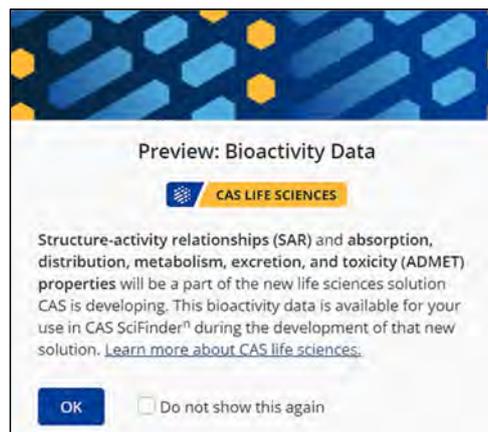
分類	内容	時期
コンテンツ	★CAS Bioactivity Data (Preview) の提供開始 - 詳細情報に CAS Bioactivity Data を収録 - フィルターに Bioactivity Data を追加 - データのフィルターおよびソートの追加	2022/12 2023/1

★の項目を資料に掲載

CAS Bioactivity Data (Preview) の提供開始

文献・物質の詳細情報に CAS Bioactivity Dataが収録された

- Structure Activity Relationships (SAR : 構造活性相関)
- Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion Data (ADME : 吸収、分布、代謝、排泄)
- Toxicity (毒性)



Substances レコード

CAS Registry Number: 900574-40-5

Reference (1) Reaction (1) Suppliers (1)

This substance contains CAS Bioactivity data, such as SAR, ADME, or Toxicity tables. Explore this information below. [Learn more about CAS life sciences.](#)

C29H33ClN6O3
Propanamide, N-[4-[[[5-chloro-2-methoxyphenyl]amino]carbamoyl]pyridin-2-ylmethyl]-N-(1-phenylethyl)-

データのダウンロード

データのフィルターおよびソートの追加

出典文献のリンク (文献情報)

Assay Data のリンク

Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay	Source
c-Kit proteins	Modulator	IC50	<= 1 μM	-	-	View Detail	(1) CAS
c-Kit proteins	-	IC50	<= 1 μM	breast neoplasia, endometrial cancer, colon cancer, macular degeneration, diabetic retinopathy	-	View Detail	(1) CAS
EphB4 receptors	Modulator	IC50	<= 1 μM	-	-	View Detail	(1) CAS
Ephrine EPHB4	-	IC50	<= 1 μM	breast neoplasia, macular degeneration	-	View Detail	(1) CAS
Platelet derived growth factor PDGFRB	-	IC50	<= 1 μM	breast neoplasia, macular degeneration	-	View Detail	(1) CAS
Platelet-derived growth factor receptor β	Modulator	IC50	<= 1 μM	-	-	View Detail	(1) CAS
Vascular endothelial growth factor receptor 2	Modulator	IC50	<= 1 μM	-	-	View Detail	(1) CAS
Vascular endothelial growth factor VEGFR-2	-	IC50	<= 1 μM	breast neoplasia, macular degeneration	-	View Detail	(1) CAS

(1) Mitchell, Scott A.; World Intellectual Property Organization, WO2006076593 A1 20060720

© 2023 化学情報協会

References レコード

Preparation of 1,3 substituted diaryl ureas, particularly N-phenyl-N'-[1-[(pyridin-4-yl)methyl]-1H-indolyl]ureas, as modulators of kinase activity

Substances (193) Reactions (144) Citing (2) Citation Map

PATENT

Patent Number: WO2006076593

Publication Date: 2006-07-20

Application Number: WO2006-US1272

Application Date: 2006-01-13

Kind Code: A1

This reference contains CAS Bioactivity data, such as SAR, ADME, or Toxicity tables. Explore this information below. [Learn more about CAS life sciences.](#)

By: Mitchell, Scott A.; Danca, Mihaela Diana; Blomgren, Peter A.; Desimone, Robert W.; Pippin, Douglas A. I.; Brittelli, David R.

Certain chem. entities chosen from compounds I [R = 0-2 substituents independently selected from OH, NO₂, CN, (un)substituted hetero/aryl, etc.; R²CCR³ = (un)substituted fused 5- to 7-membered heteroaryl ring; R² = (un)substituted aryl; R³, R⁴ = independently H, (un)substituted alkyl, hetero/aryl with provisos, and their pharmaceutically acceptable salts, solvates, crystal forms, chelates, non-covalent complexes, prodrugs, and mixtures thereof, useful in treating patients suffering from certain diseases and disorders responsive to angiogenic kinase modulation, which comprise administering to such patients an amount of at least one chem. entity

出典文献のレコードには Ligand (CAS RN®) ごとにデータが収録されている

Ligand	Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay
900574-03-0	c-Kit proteins	-	IC50	<= 1 μM	breast neoplasia, endometrial cancer, colon cancer, macular degeneration, diabetic retinopathy	-	View Detail
900574-40-5	c-Kit proteins	Modulator	IC50	<= 1 μM	-	-	View Detail

© 2023 化学情報協会

Substances/References の検索結果を Bioactivity Data の有無で限定できる

SAR : 構造活性相関
 ADME : 吸収、分布、代謝、排泄
 Toxicity : 毒性

© 2023 化学情報協会

Reactions の強化

分類	内容	時期
表示	反応の詳細ページのレイアウト変更	2022/11
検索	★CAS Reaction Number の検索が可能に	2022/11
	生成物を作図していない場合でも多段階反応が含まれるように	2022/11
機能	★グルーピングの強化 - 反応タイプ (Transformation)	2022/12
	ソートの強化 - 反応ステップ数 - 収率 - 発行年	2022/9 2022/6
	フィルターの強化 - Reaction Mapping (マッピング情報の有無) - 所属機関	2022/11 2022/12
	反応結果一覧のレコードから反応質問式の作図が可能に (Send to Structure Editor)	2022/6
	反応検索結果の Save All Answers および Combine 機能が利用可能に	2022/4

★の項目を資料に掲載

© 2023 化学情報協会

グルーピングの強化 - 反応タイプ (Transformation)³

グルーピングに反応タイプが追加された。目的の反応タイプに絞って、回答を効率的に確認できる

The screenshot shows a search results page with a dropdown menu on the left. The dropdown menu has four options: "By Scheme", "By Document", and "By Transformation" (which is highlighted in blue). An arrow points from the "By Transformation" option to the main results area. The results are grouped into four categories:

- Group 1: "Hydrolysis or Hydrogenolysis of Carboxylic Esters or Thioesters" (26 related reactions). It shows a reaction scheme where an ester reacts with H₂O to form a carboxylic acid and R¹-YH, or with H₂ to form a carboxylic acid and R¹-H. Y = O, S.
- Group 2: "Hydrolysis or Hydrogenolysis of Amides/ Imides/ Carbamates" (6 related reactions). It shows a reaction scheme where an amide reacts with H₂O to form a carboxylic acid and R-NH₂, or with H₂ to form R-NH₂.
- Group 9: "Uncategorized Single-Step Reactions" (11 related reactions).
- Group 10: "Multi-Step and Product-Only Reactions" (390 related reactions).

Two blue callout boxes provide additional information:

- Callout 1: "一段階反応について反応タイプごとに分類" (Classification by reaction type for single-step reactions).
- Callout 2: "分類されなかった一段階反応と多段階反応は、リストの一番下に表示" (Unclassified single-step reactions and multi-step reactions are displayed at the bottom of the list).

© 2023 化学情報協会

CAS Reaction Number の検索が可能に

24

CAS Reaction Number で検索するとその反応を含む多段階反応を検索できる

The screenshot shows a search interface with a search bar containing "31-352-CAS-14285399". Below the search bar, there are two main reaction schemes:

- Scheme 1 (1 Reaction):** Shows a single reaction with a yield of 90%. The reagents are Sodium hydroxide and the solvent is Ethanol, with a reaction time of 3 h at 55 °C. A blue callout box labeled "CAS Reaction Number" points to the search bar.
- Multi-Step Reaction for Scheme 3, Reaction 1:** Shows a multi-step reaction sequence. The first step has a yield of 85% and the second step has a yield of 90%. A red dashed box highlights the second step.
- Multi-Step Reaction for Scheme 4, Reaction 1:** Shows a multi-step reaction sequence. The first step has a yield of 100% and the second step has a yield of 85%. A red dashed box highlights the second step.

© 2023 化学情報協会

分類	内容	時期
検索	★代替ステップの表示 - 似た反応をグループ化して表示 - 代替ステップの選択肢に Exclude This Step を追加	2022/3

The image shows a workflow for viewing alternative reaction steps. On the left, a reaction scheme is shown with a red circle around a step. A callout box labeled '代替ステップの表示' (Display Alternative Steps) points to a menu with three options: 'View All Alternatives (71)', 'View Evidence (1)', and 'Exclude This Step'. An arrow points from this menu to a detailed view of the alternatives. This view shows a list of reaction steps (1 of 19, 2 of 19, 2.1, 2.2) with chemical structures, evidence counts, and average yields. A red box highlights the 'Hide 4 similar Alternatives' button in the second step's interface.

© 2023 化学情報協会

分類	内容	時期
表示	★配列検索の表記を Biosequences から Sequences に変更	2023/1
検索	★配列検索上限を 10 万件に強化	2023/1
	★配列質問式入力に関する強化 - EMBL - GCG - Genbank 形式	2022/11
機能	★フィルターの強化 - Sequence Length (配列長) - Organisms (生物名)	2022/6 2022/1
	★配列検索結果の共有	2022/3
	Sequences Search の結果に技術レポート (Report) および電子出版 (Preprint) 情報を追加	2022/1
	1,000 件以上の関連特許が存在する配列の References ボタンがグレースアウトするよう変更	2022/5
	FASTA 形式のダウンロードが可能に	2022/3

★の項目を資料に掲載

© 2023 化学情報協会

分類	内容	時期
表示	概要がわかりやすいヘッダー・タブの記載に	2022/6
	Alert と Saved のアイコン変更	2022/12
	検索履歴 (History) 表示の強化	2022/1
機能	★Save All 機能の追加	2022/1
	★Combine 機能の強化	
	- 表示している検索結果と保存質問式・回答の演算	2022/6
	- 保存した質問式同士を Combine した結果をさらに別の質問式や回答集合と Combine 可能に	2022/1
	ダウンロード結果に回答番号を付与	2022/1
	ハイライト情報を含めたダウンロード	2022/3
	詳細な検索履歴のダウンロード	2022/9
Task History のダウンロード	- 構造質問式関連の内容の表示	2022/3
	CAS STNext との連携機能の搭載	2022/6

★の項目を資料に掲載

Save All 機能の追加

Save Options で All answers を選択すると、最大 2 万件までの検索結果を回答集合として保存可能に

- 回答にチェックをつけて SAVE する必要がなくなった

Save and Alert

Save Results and Create Alert x

Name

Save Options

Query Only

All Answers (Up to 20,000)

Alert Frequency

No Alerts

As Available

Weekly

Monthly

Add Existing Tags (Optional)

No tags defined

New Tag (Optional)

Cancel

2 万件を超える回答の場合、
選択している並び順 (Sort) に
基づいて最初の 2 万件が保存される

表示している検索結果と、保存した質問式・回答の演算が可能に

表示している検索結果

Component	Ratio
O	x
Al	x

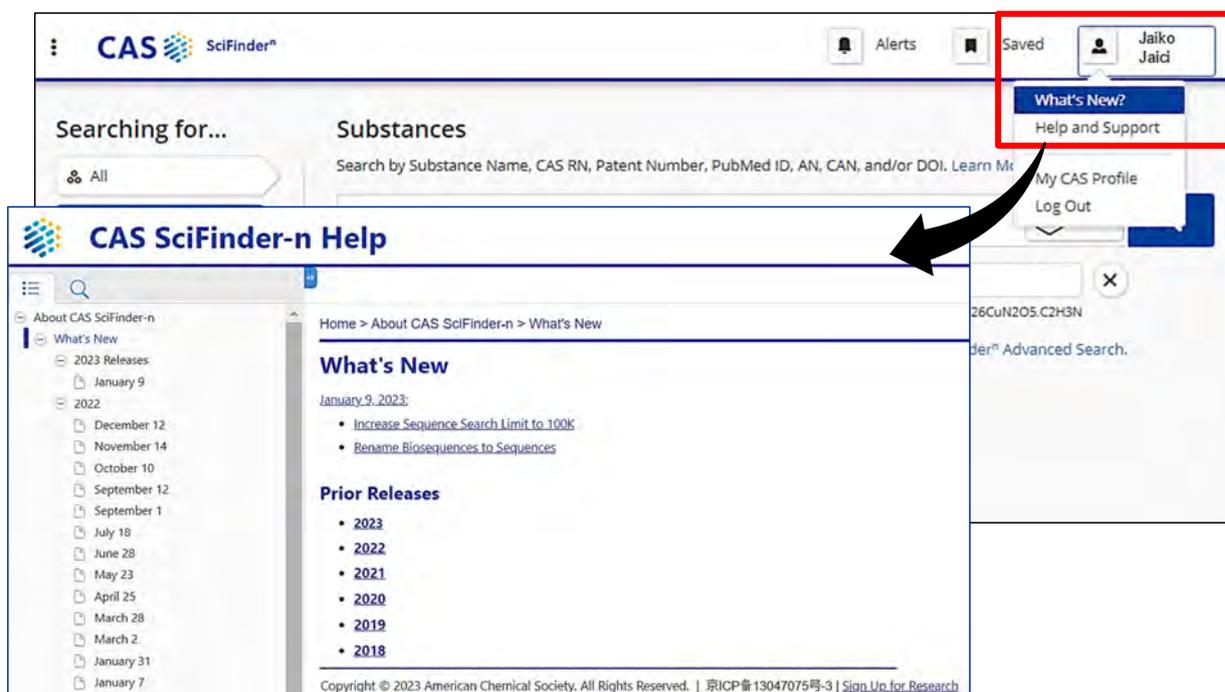
Combine

保存した質問式・回答

Item	Query	Date
<input checked="" type="checkbox"/> Al ₂ O ₃	Query	January 11, 2023
<input checked="" type="checkbox"/> Al O	Query	January 11, 2023

まとめ

What's New は強化をまとめたページ。画面右上の  から確認できる



© 2023 化学情報協会

まとめ

34

CAS SciFinder-n は使いやすいツールになるよう今後も強化をおこないます。

今回ご紹介した強化の中には、ユーザーの声を反映させたものがあります。

お気づきの点、改善のご要望などありましたら、ヘルプデスクまで！



© 2023 化学情報協会