

CAS SciFinder<sup>®</sup> トピック

# 2023 年強化内容のまとめ

**JAICI**  
化学情報協会

**CAS**  
A division of the  
American Chemical Society

## Contents

### ◆ 最近の強化

- レイアウトの強化
- References の強化
- Substancesの強化
- Reactions / Retrosynthesisの強化
- Sequences の強化
- その他の強化

### ◆ まとめ

## 最近の強化

### レイアウトの強化

3

| 分類 | 内容                  | 時期      |
|----|---------------------|---------|
| 表示 | Help ページの変更         | 2023/5  |
|    | ★ ホーム画面の変更          | 2023/8  |
|    | ★ 構造中のヘテロ原子の色付け     | 2023/8  |
|    | ★ All 検索結果画面デザインの変更 | 2023/11 |
|    | メニューアイコンの追加         | 2024/1  |
|    | 1 ページあたりの回答件数の増加    | 2024/1  |

★の項目を資料に掲載

## ホーム画面の変更

4

表示 全体的な操作性と直感性の向上のために、ホーム画面を変更

The screenshot shows the CAS SciFinder home page. Annotations include:

- 検索項目** (Search Item): Points to the search bar area.
- 逆合成解析** (Retrosynthetic Analysis): Points to the 'Retrosynthetic Analysis' section.
- 統制語検索** (Search CAS Lexicon): Points to the 'Search CAS Lexicon' section.
- 配列検索** (Search CAS Sequences): Points to the 'Search CAS Sequences' section.

Key elements on the page include the CAS SciFinder logo, navigation tabs (All, Substances, Reactions, References, Suppliers), a search bar with a 'Draw' button, and three main search categories: Retrosynthetic Analysis, Search CAS Lexicon, and Search CAS Sequences.

© 2024 化学情報協会

## All 検索結果画面デザインの変更

5

表示 最小限のスクロールですべての検索結果を確認できる

The screenshot shows the search results page for a drawn structure (Caffeine). Annotations include:

- 化学物質情報** (Chemical Substance Information): Points to the chemical structure and properties section.
- 各回答の表示** (Display of each answer): Points to the 'All' tab in the results section.
- 反応情報** (Reaction Information): Points to the 'Reactions for drawn structure' section.
- カタログ情報** (Catalog Information): Points to the 'Key Physical Properties' section.
- 文献情報** (Literature Information): Points to the 'References for drawn structure' section.

Key elements on the page include the CAS SciFinder logo, search bar, and detailed information for the drawn structure, including chemical structure, molecular weight, melting point, density, and references.

© 2024 化学情報協会

表示 ヘテロ原子が色が付き表示になり化学物質の構造を把握しやすくなった

3 Results Sort: Relevance View: Partial

1

35524-64-2

C10H9NOS2  
Spiro[1,3-dithiolane-2,2'-(2H)indol]-3'(1'H)-one

2 References 2 Reactions 2 Suppliers

2

1228079-39-7

C9H7Cl2N4OSSb  
(7-4)-Dichloro[2-(1,3-dihydro-3-oxo-2H-indol-2-ylidene)hydrazinecarbothio

1 Reference 2 Reactions 1 Suppliers

3

1368316-43-1

C9H6F3NO  
1,2-Dihydro-5-(trifluoromethyl)-3H-indol-3-one

1 Reference 1 Reactions 3 Suppliers

ヘテロ原子は CPK 配色に準拠した色で表示される

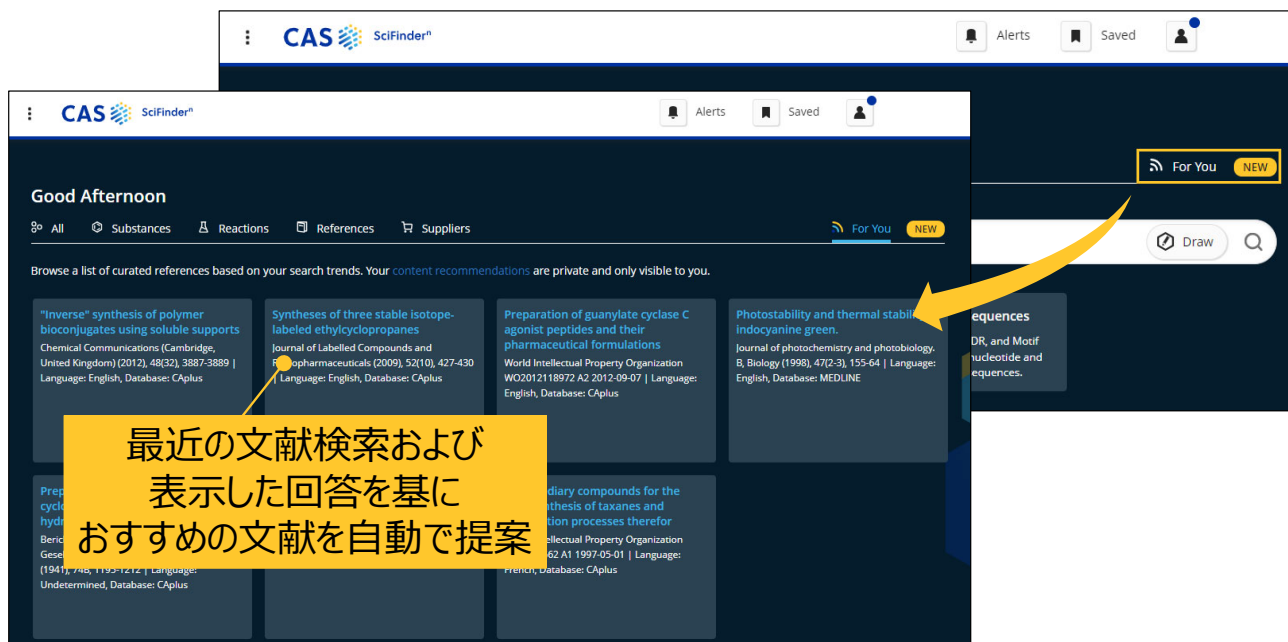
© 2024 化学情報協会

| 分類 | 内容                                  | 時期      |
|----|-------------------------------------|---------|
| 検索 | ORCID iD 検索の強化                      | 2023/3  |
|    | ★ 類似文献の情報追加                         | 2023/3  |
|    | Bioactivity Data が検索可能に             | 2023/3  |
|    | ★ 国際特許分類 (IPC) が検索可能に               | 2023/5  |
|    | References 検索での化学物質名検索精度の改善         | 2023/7  |
| 機能 | Citation Map の強化 (文献集合を取得するアイコン追加等) | 2023/5  |
|    | Knowledge Graph の強化 (検索ボックスの追加等)    | 2023/7  |
|    | ★ For You の搭載                       | 2023/12 |
| 表示 | 検索結果一覧で特許レコードに特許出願人情報が表示されるように      | 2024/1  |

★の項目を資料に掲載

© 2024 化学情報協会

機能 ホーム画面の右側に表示される For You からおすすめの文献を確認



© 2024 化学情報協会

## (参考) 関連文献の取得

一つの文献を起点に、様々な関連文献を取得できる

NEW

### Similar References

- 類似文献 -

タイトル、抄録、CAS 索引を基に類似文献を提案

### Prior Art Analysis

- 先行技術文献 -

AI により先行技術文献を自動検索できる

### Cited Document

- 引用文献 -

### Citing Document

- 被引用文献 -



Citation Map

© 2024 化学情報協会

検索

References の詳細ページに類似文献へのリンクを追加

- 新たなレコメンデーション技術によって類似文献を表示

**Experimental and Computational Study of the Catalytic Asymmetric 4π-Electrocyclization of N-Heterocycles**

Substances (51) Reactions (23) Citing (43) Citation Map

By: Raja, Sadiya; Nakajima, Masaki; Rueping, Magnus

The 1st asym. metal-catalyzed Nazarov cyclization of N-heterocycles was developed. The use of a chiral catalyst allows the enantioselective electrocyclization of N-heterocycles under mild conditions and the corresponding products were obtained in good yields with excellent enantio- and diastereoselectivity. The reaction mechanism are explained by computational studies.

Keywords: computational catalysis asym electrocyclization nitrogen heterocycle; electrocyclization; indole alkaloids

View Source Full Text

**最大 500 件まで類似文献を取得できる**

Get Similar References

**Similar References** NEW

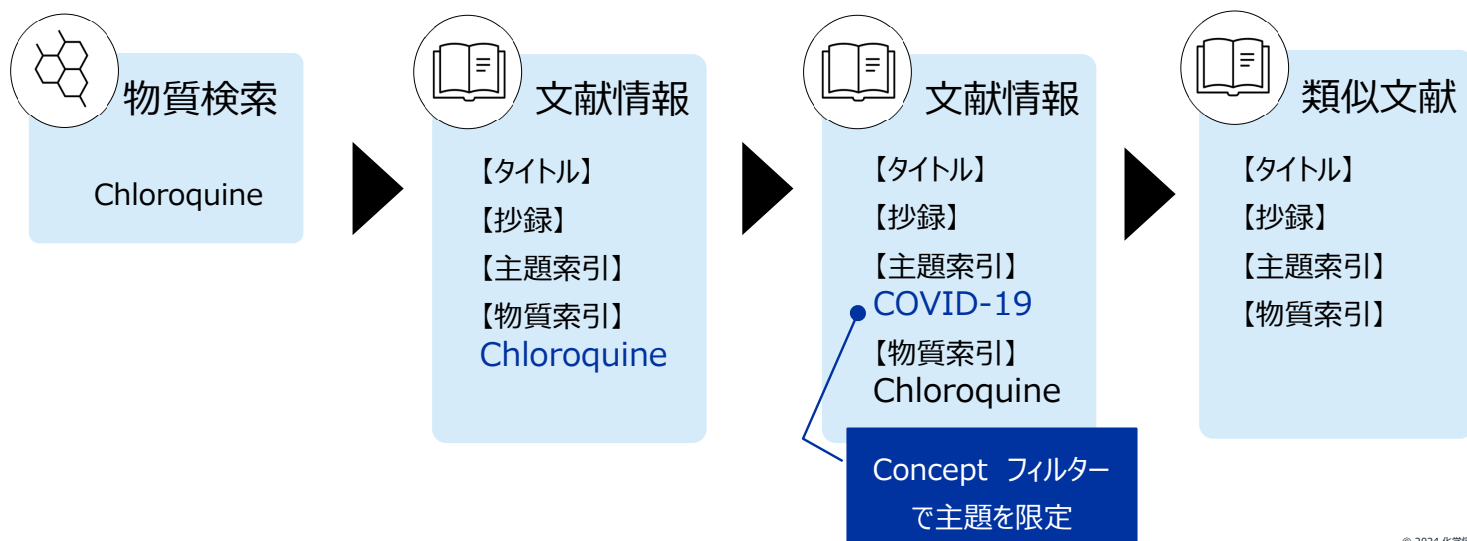
- Computational evaluation of asymmetric Diels-Alder reactions of vinylboranes with chiral dienes  
Tetrahedron Letters (2005), 46(14), 2461-2464 | Language: English, Database: CPlus
- Stereochemical Study of a Transannular Michael Reaction Cascade  
Journal of Organic Chemistry (2012), 77(20), 8933-8945 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE
- Computational and experimental study of the reactions of dicyanoazomethine ylides with dipolarophiles  
Abstracts of Papers, 221st ACS National Meeting, San Diego, CA, United States, April 1-5, 2001 (2001), CHED-427 | Language: English, Database: CPlus

© 2024 化学情報協会

## デモンストレーション①

11

クロロキン（Chloroquine）と新型コロナウイルス（COVID-19）について報告した文献を検索し、得られた回答とその類似文献を確認する



© 2024 化学情報協会

## 検索 Patent Identifier の IPC Code より国際特許分類が検索可能に

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

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

+ Add Publication Name

Organization

Title

Abstract/Keywords

Concept

Substances

Bioactivity Data NEW

Publication Year

Document Identifier

Patent Identifier

Patent Number

IPC Code

Recent Search

View All Search History

・メイングループを 4 桁に桁合わせして入力  
(例 : C09D11/00 → C09D0011/00)

・複数の IPC を入力する場合は、カンマまたはセミicolonで区切る

・AND 演算は、Add Advanced Search Field で入力ボックスを追加する

© 2024 化学情報協会

## (参考) IPC (国際特許分類) とは

- 発明を技術分野別に表した国際的に統一された分類
- WIPO (世界知的所有権機関) が管理
- セクション、クラス、サブクラス、メイングループ、サブグループと階層別に細分化

例 : グリーン冷媒関連の IPC

### C09

染料 ; ペイント ; つや出し剤 ; 天然樹脂 ; 接着剤 ; 他に分類されない組成物 ; 他に分類されない材料の応用

### C09K

他に分類されない応用される物質 ; 他に分類されない物質の応用

### C09K5/00

伝熱, 熱交換または蓄熱用物質, 例. 冷媒 ; 燃焼以外の化学反応によって熱または冷気を発生させるための物質 [ 2 ]

### C09K5/02

・使用時に物理的状態の変化を伴う物質 [ 2 ]

### C09K5/04

・液体から気体またはその逆の状態変化によるもの [ 2 ]



協会

## 冷媒に関する特許を キーワードと IPC から検索する

【Keyword】 Refrigerants

メイングループを 4 桁に桁合わせして入力

【IPC】 C09K0005/04

例：冷媒関連の IPC

### C09

染料；ペイント；つや出し剤；天然樹脂；接着剤；他に分類されない組成物；他に分類されない材料の応用

### C09K

他に分類されない応用される物質；他に分類されない物質の応用

### C09K5/00

伝熱，熱交換または蓄熱用物質，例．冷媒；燃烧以外の化学反応によって熱または冷気を発生させるための物質 [ 2 ]

### C09K5/02

・ 使用時に物理的状態の変化を伴う物質 [ 2 ]

### C09K5/04

・ 液体から気体またはその逆の状態変化によるもの [ 2 ]

## IPC 検索のメリット

想定していたキーワード検索ではヒットしなかった特許が見つかる

Eco-friendly ice pack composition, ice pack containing the same, and manufacture method thereof

Substances (7) Reactions (0) Citing (0) Citation Map

PATENT

Patent Number  
KR2581060

Publication Date  
2023-09-21

Application Number  
KR2023-54486

Application Date  
2023-04-26

Kind Code  
B1

Assignee  
Kliment Co., Ltd., Korea, Republic of

Source  
Korea, Republic of  
CODEN: KRXXFC

Database Information  
AN: 2023:1962857  
Caplus

By: Lee, Yong Jae

The title eco-friendly ice pack composition includes a solvent for maintaining a room temperature state, starch dispersed in the solvent and stirred with the solvent after being added to the solvent, sodium chloride dissolved in the solvent and stirred with the solvent after being added to the solvent, and microbial capsule stirred with the solvent after being injected in the solvent, and dispersed in the solvent. The microbial capsule includes a core part including a porous carrier including biodegradable polymer and a supporting material including photosynthetic microorganisms supported on the porous carrier, and a shell part surrounding the surface of the core part. According to one embodiment, it is possible to provide the eco-friendly ice pack composition to maintain high cooling performance at the same time ensuring eco-friendly property.

Keywords: eco friendly ice pack microbial capsule

PatentPak PDF Get Prior Art Analysis Full Text

環境にやさしい保冷剤の  
製造方法に関する特許

Patent Family

| Patent    | Language | Kind Code | PatentPak Options | Publication Date | Application Number | Application Date |
|-----------|----------|-----------|-------------------|------------------|--------------------|------------------|
| KR2581060 | Korean   | B1        | PDF               | 2023-09-21       | KR2023-54486       | 2023-04-26       |

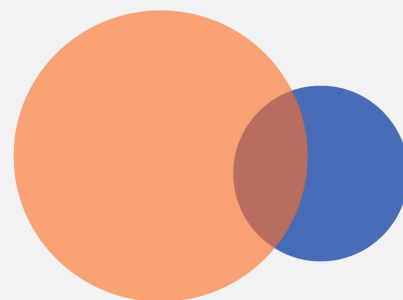
Expand All | Collapse All

IPC Data

IPC でヒット

| Patent    | Class | Patent Family Classification Codes                     |
|-----------|-------|--------------------------------------------------------|
| KR2581060 | IPC   | C09K 0005/04; C12N 0001/04; C12N 0001/20; C12N 0011/04 |

## ヒットした回答のイメージ図



キーワード検索 97,738

IPC検索 20,210

| 分類    | 内容                                              | 時期      |
|-------|-------------------------------------------------|---------|
| 検索    | ★ Bioactivity Data が検索可能に                       | 2023/3  |
| 機能    | Substances - フィルター機能強化 (Reference Availability) | 2023/3  |
|       | ★ 物質 検索結果のフィルター追加 (LogP, 官能基)                   | 2023/5  |
|       | 物質レコードがプロジェクトに追加可能に                             | 2023/5  |
|       | ★ 芳香環の数 (Aromatic Ring Count) フィルターの追加          | 2023/7  |
|       | ★ Structure Activity Relationships の強化          | 2023/12 |
| コンテンツ | ★ GHS 情報の追加                                     | 2023/7  |
|       | 作図画面でのエラーの原因確認が容易に                              | 2023/8  |
|       | ★ 物質の実測物性値の収録拡大                                 | 2023/9  |
|       | 物質の実測スペクトルに溶媒情報が表示されるように                        | 2023/9  |
|       | ★ 物質の実測物性値の収録拡大                                 | 2023/10 |
|       | ダウンロード結果に文献数、反応数、サプライヤー数を表示                     | 2023/10 |
|       | 構造作図画面の大きさの変更が可能に                               | 2023/10 |
|       | GHS Hazard 情報の改善                                | 2023/11 |
|       | GHS 情報の強化 (クラス (区分) データの追加)                     | 2024/1  |

★の項目を資料に掲載

© 2024 化学情報協会

## GHS (化学品の分類および表示に関する世界調和システム) 情報の追加

17

コンテンツ 有害性の区分を表すピクトグラム、および GHS Hazard Statements 危険有害性情報コード (H コード) の情報が追加

CAS Registry Number: 71-43-2

242K 440K 180

c1ccccc1

C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>  
Benzene (BCL 9CL ACI)

Regulatory Information

GHS Hazard Statements

Additional Details

有害性の区分を表すピクトグラム



| Code | Hazard Statement                                  | Class                             | Source                                                                                                                                   |
|------|---------------------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| H412 | Harmful to aquatic life with long lasting effects | Chronic Aquatic Hazard Category 3 | China Classification Information Sheet of Hazardous Chemicals                                                                            |
| H412 | Harmful to aquatic life with long lasting effects | Chronic Aquatic Hazard Category 3 | European Chemical Agency (ECHA) Classifications&Labelling inventory - Notified classification and labelling - most serious notifications |
| H412 | Harmful to aquatic life with long lasting effects |                                   |                                                                                                                                          |
| H411 | Toxic to aquatic life with long lasting effects   |                                   |                                                                                                                                          |
| H411 | Toxic to aquatic life with long lasting effects   |                                   |                                                                                                                                          |

GHS Hazard Statements  
危険有害性情報コード (H コード)

フィルターにも追加  
絞り込みに活用可能

### GHS Hazard Statements

- ☐ H319: Causes serious eye irritation (496)
- ☐ H315: Causes skin irritation (493)
- ☐ H335: May cause respiratory irritation (448)
- ☐ H302: Harmful if swallowed (397)
- ☐ H303: May be harmful if swallowed (163)

[View All](#)

© 2024 化学情報協会

コンテンツ

新しい物性値が追加され、現在は 42 種の物性値を収録

| Category   | Experimental Property  | (和訳)          |
|------------|------------------------|---------------|
| Acoustic   | Sound Velocity         | 音速            |
| Biological | Median Lethal Dose     | LD50(50% 致死量) |
| Chemical   | Electric Dipole Moment | 電気双極子モーメント    |
|            | Ka                     | 酸解離定数(Ka)     |
|            | Kb                     | 塩基解離定数(Kb)    |
|            | pKa                    | pKa           |
|            | pKb                    | pKb           |
|            | Solubility             | 溶解度           |
| Density    | Surface Tension        | 表面張力          |
|            | Vapor Pressure         | 蒸気圧           |
| Density    | Density                | 密度            |

\* 2023 年に追加された物性値を赤字で表記

コンテンツ

新しい物性値が追加され、現在は 42 種の物性値を収録

| Category               | Experimental Property  | (和訳)    |
|------------------------|------------------------|---------|
| Electrical             | Dielectric Constant    | 誘電率     |
|                        | Electric Conductance   | コンダクタンス |
|                        | Electric Conductivity  | 電気伝導率   |
|                        | Electric Resistance    | 電気抵抗    |
|                        | Electric Resistivity   | 電気抵抗率   |
| Flow and Diffusion     | Viscosity (Dynamic)    | 粘度      |
|                        | Viscosity (Kinematic)  | 動粘度     |
| Magnetic               | Magnetic Moment        | 磁気モーメント |
| Mechanical             | Elongation at Break    | 破断伸び    |
|                        | Elongation at Yield    | 降伏点伸び   |
|                        | Tensile Strength       | 引張強度    |
| Optical and Scattering | Optical Rotatory Power | 旋光度     |
|                        | Refractive Index       | 屈折率     |

\* 2023 年に追加された物性値を赤字で表記

コンテンツ 新しい物性値が追加され、現在は 42 種の物性値を収録

| Category | Experimental Property                | (和訳)      |
|----------|--------------------------------------|-----------|
| Thermal  | Autoignition Temperature             | 自然発火温度    |
|          | Boiling Point                        | 沸点        |
|          | Combustion Enthalpy                  | 燃焼エンタルピー  |
|          | Critical Point                       | 臨界点       |
|          | Entropy                              | エントロピー    |
|          | Flash Point                          | 引火点       |
|          | Formation Enthalpy                   | 生成エンタルピー  |
|          | Free Energy of Formation             | 生成自由エネルギー |
|          | Glass Transition Temperature         | ガラス転移温度   |
|          | Heat Capacity                        | 熱容量       |
|          | Melting Point                        | 融点        |
|          | Phase Transition Enthalpy            | 相転移エンタルピー |
|          | Phase Transition Entropy             | 相転移エントロピー |
|          | Phase Transition Temperature         | 相転移温度     |
|          | Superconducting Critical Temperature | 超電導臨界温度   |
|          | Thermal Conductivity                 | 熱伝導率      |
|          | Thermal Expansion Coefficient        | 熱膨張率      |
|          | Triple Point                         | 三重点       |

\* 2023 年に追加された物性値を赤字で表記

© 2024 化学情報協会

## 物質検索のフィルターの追加

機能 物質検索の結果をより様々な観点から絞り込み可能に

The screenshot displays a chemical search interface with several filters on the left and search results on the right. The filters include:

- Molecular Weight**: LogP (with input fields for No Min, to, No Max, and an Apply button; Available Range: 0.727 to 3.927).
- Stereochemistry**
- Element**
- Functional Group**: A list of functional groups with checkboxes, including Amine (530), Secondary amine (530), Alkene (95), Aldehyde (93), and Halide (90). A "View All" link is present.
- Aromatic Rings**: A list of aromatic rings with checkboxes, including 1 (8), 3 (136), 4 (44), 5 (37), and 6 (33). A "View All" link is present.
- Substance Class**

The search results on the right show chemical structures and associated data. Key annotations include:

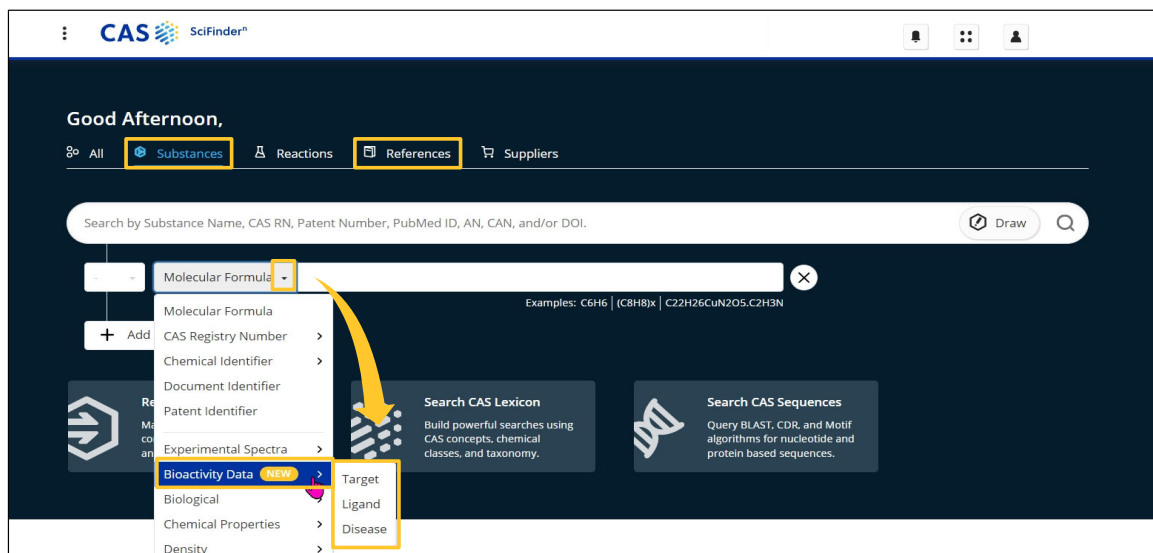
- LogP (オクタノール - 水分分配係数の対数値) (予想物性値) の値**: Points to the LogP filter.
- Functional group (官能基) の種類**: Points to the Functional Group filter.
- 芳香環の数**: Points to the Aromatic Rings filter.
- 文献の有無**: Points to the "Reference Availability" filter, which has options for "Available (545)" and "Not Available (14)".

Search results include chemical structures and data for various compounds, such as 9H-Carbazole, 9H-Carbazole-1,2,3,4-d<sub>4</sub>, and 9H-Carbazole-1,3,6,8-d<sub>4</sub>. Each result shows the chemical formula, name, and associated data like References, Reactions, and Suppliers.

© 2024 化学情報協会

検索

References/Substances の Advanced Search から、Target、Ligand、Disease を指定して検索できるように



© 2024 化学情報協会

## デモンストレーション③

23

アセチルコリンエステラーゼに作用するリガンド物質を検索する

【Bioactivity Data / Target】

Acetylcholinesterase

(アセチルコリンエステラーゼ)

アセチルコリンエステラーゼに作用する  
リガンド物質が回答として得られる

フィルターを用いた回答の絞り込み

アルツハイマー病はアセチルコリン（神経伝達物質）の減少が原因  
アセチルコリンを分解するアセチルコリンエステラーゼ阻害剤が有効

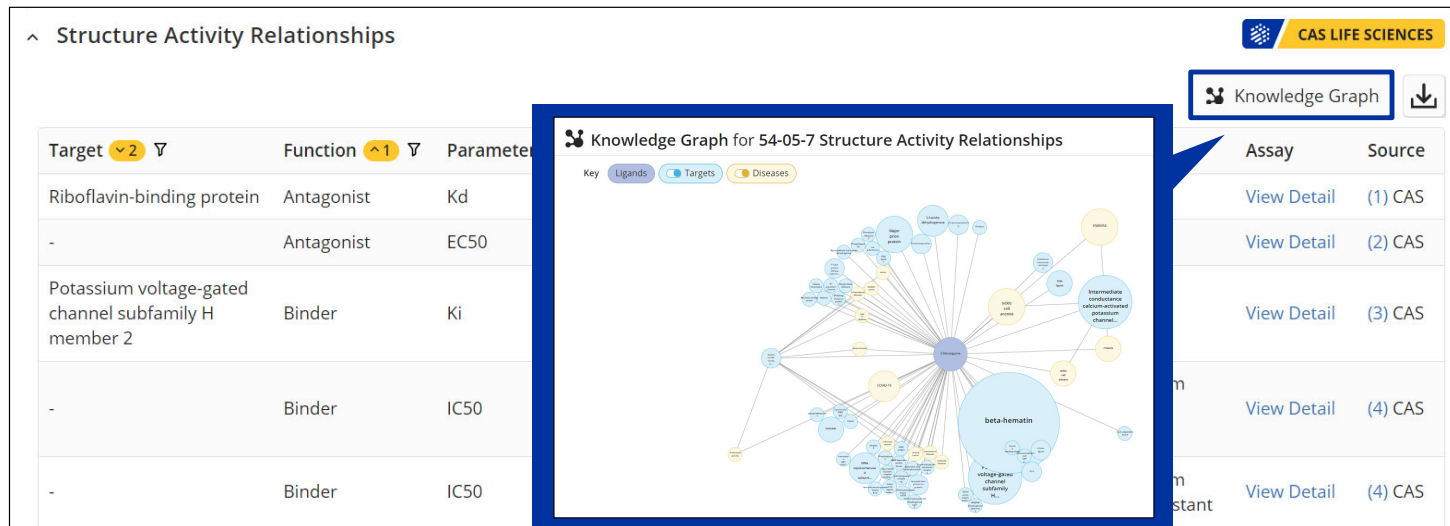


(引用) 認知症ねっと  
<https://info.ninchisho.net/medicine/m10>

© 2024 化学情報協会

## 機能

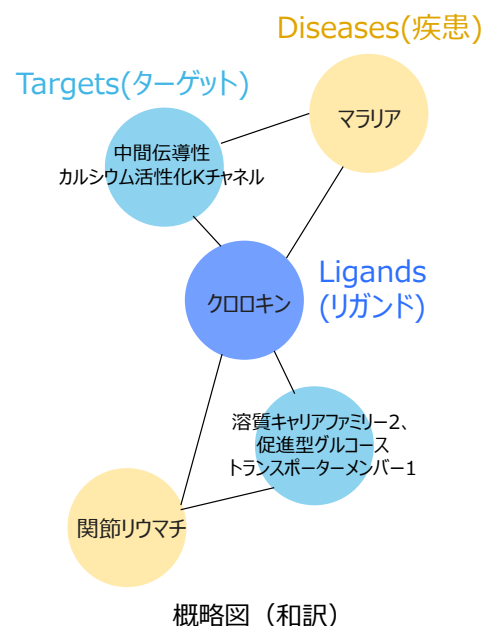
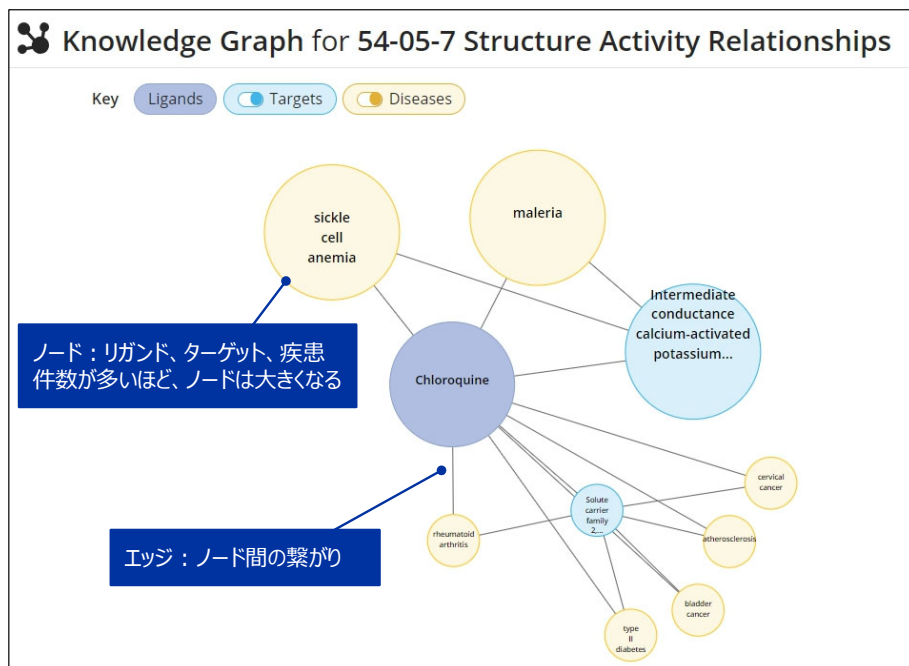
物質の Structure Activity Relationships (SAR : 構造活性相関) データ欄に Knowledge Graph が追加



© 2024 化学情報協会

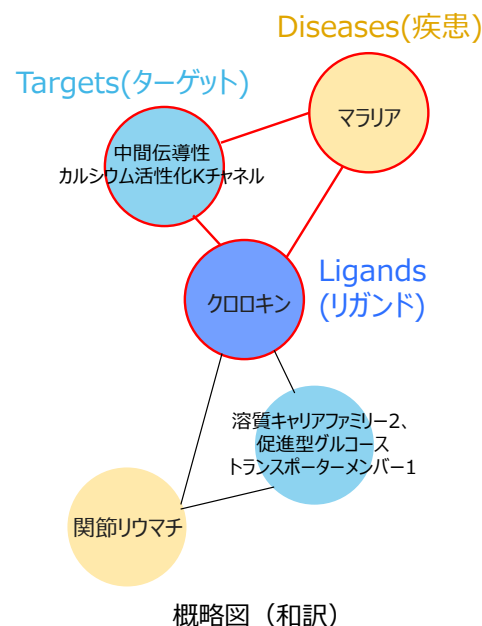
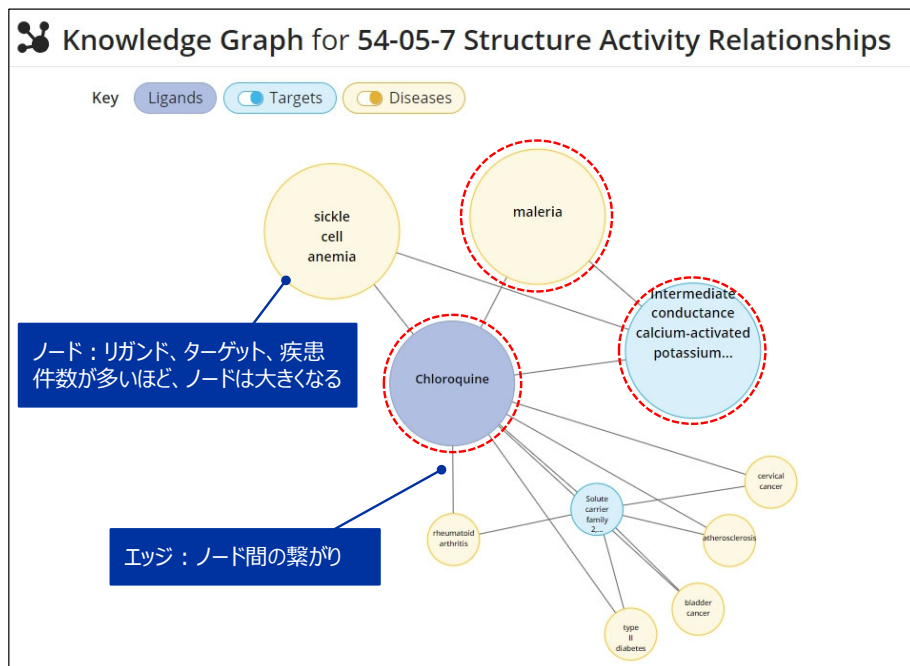
## 機能

特定のリグランドに関連する共通の標的や疾患をすぐに確認できる

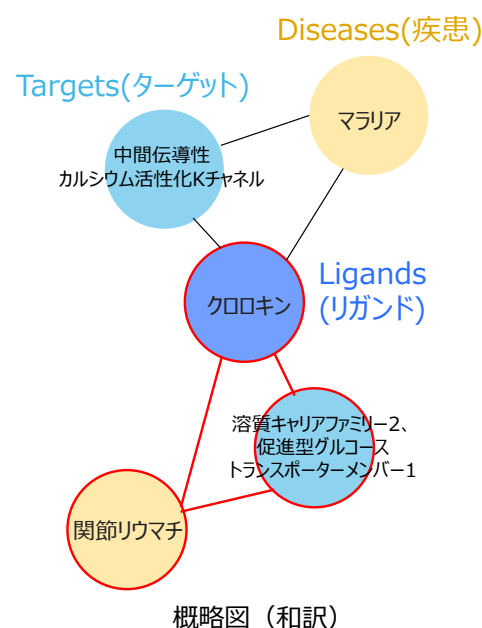
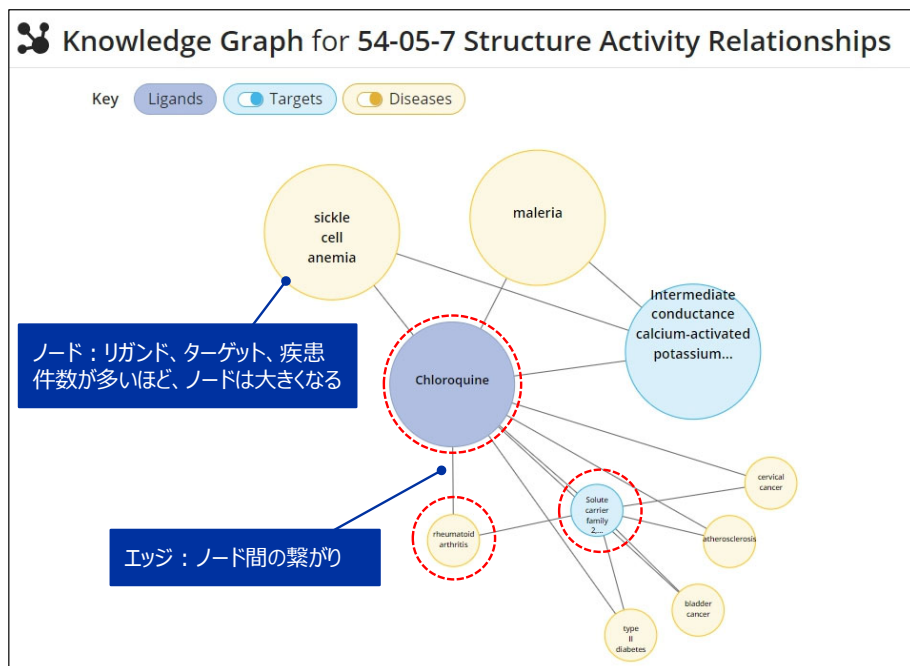


© 2024 化学情報協会

機能 特定のリグランドに関連する共通の標的や疾患をすぐに確認できる



機能 特定のリグランドに関連する共通の標的や疾患をすぐに確認できる



| 分類    | 内容                                                       | 時期      |
|-------|----------------------------------------------------------|---------|
| 検索    | ★ Reactions 検索結果から各反応ごとに類似反応を検索可能に                       | 2023/9  |
| 機能    | ★ Reactions 検索結果のダウンロードの強化<br>(V3000 形式の RDfile (.rdf) ) | 2023/2  |
|       | ★ Reactions 検索結果のソートの強化                                  | 2023/3  |
|       | フィルターに Reaction Scale を追加(Reactions)                     | 2023/5  |
|       | ★ Reactions 検索結果が RTF 形式でダウンロード可能に                       | 2023/10 |
|       | マッピングを指定した反応検索で多段階反応がヒットするように                            | 2023/10 |
| コンテンツ | CAS Retrosynthesis の Evidence の表示の強化                     | 2023/9  |
|       | CAS Retrosynthesis における立体化学反応に関する<br>ルールの改善              | 2023/11 |

★の項目を資料に掲載

© 2024 化学情報協会

## Reactions 検索結果のダウンロードの強化

29

機能 RTF 形式、V3000 形式の RDfile (.rdf) でダウンロードが可能に

RDFile V3000  
大きな分子や  
立体化学にも対応

Rich Text(.rtf)  
編集可能なファイル

Download Reaction Results

File Type

PDF

RDFile v2000 (.rdf)

RDFile v3000 (.rdf)

Rich Text (.rtf)

Reaction\_20231221\_1348

Only the first 500 reaction s

Select Quantity

☒ All Results

☐ Selected Results

☐ Range (ex. 2 to 20)

to

Include

☒ Task History

☐ Experimental Procedure

☐ Synthetic Methods

Download Cancel

Learn more about downloads.

© 2024 化学情報協会

機能 Transformation Name、反応数の昇順/降順でソート可能に

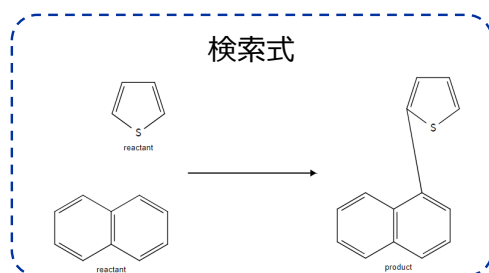
The screenshot shows the CAS SciFinder Reactions search interface. The search criteria are set to "Structure Match" with "Substructure (14K)" selected. The results are displayed in a list format, showing the "Transformation Name" and "Reaction Count". The "Sort" dropdown is set to "Reaction Count: Descending". The first result is "Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives". The chemical reaction scheme shows the coupling of an aryl compound (Ar-Y) with an arylboronic acid derivative (Ar<sup>1</sup>-B(OR)<sub>2</sub>). The reaction conditions are Y = OCOR', OSO<sub>2</sub>R', Halogen.

Annotations in the image include:

- 反応タイプ別に表示 (Display by reaction type)
- Transformation Name
- 反応数 (Reaction count)
- Reaction Count: Descending
- Reaction Count: Ascending
- Transformation Name: A to Z
- Transformation Name: Z to A

## (参考・従来からの機能) 類似反応検索

検索した反応式と同様の反応中心をもつ類似反応を検索できる



Structure Match

As Drawn (0)

Substructure (14K)

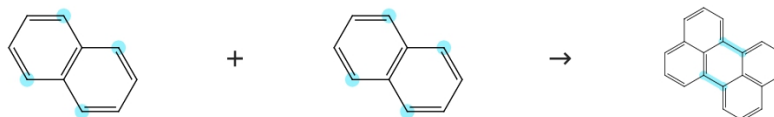
Similarity (18K)

Similarity

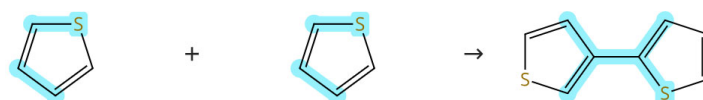
Broad (18K) Medium (983) Narrow (177)

Broad (広い) :

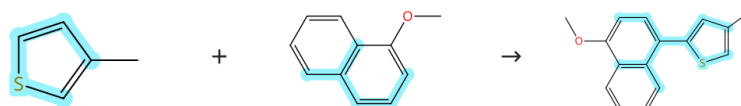
反応中心のみが比較され、左の例では 18,544 件の回答が得られた



Medium (中間) : 反応中心および隣接する原子・結合が比較され、左の例では 983 件の回答が得られた



Narrow (狭い) : 反応中心および反応中心に対して α 位および β 位の原子・結合が比較され、左の例では 177 件の回答が得られた



## 検索 Reactions 検索結果から各反応ごとに類似反応を検索可能に

Similarity の選択

Get Similar Reactions

Set Reaction Similarity

Broad (658,653) Reaction centers only

Medium (14,175) Reaction centers plus adjacent atoms and bonds

Narrow (219) Reaction centers plus extended atoms and bonds

Get Reactions Cancel

Reactions similar to 31-614-CAS-34354482

658,653 Results

Group: By Scheme Sort: Relevance View: Expanded

Scheme 1 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 100% \*\*\*

1.1 Reagents: Cesium carbonate Catalysts: Palladium (W30 anion exchange resin) Solvents: Dimethylacetamide 3.5 h, 80 °C

Development of a Unique Heterogeneous Palladium Catalyst for the Suzuki-Miyaura Reaction using (Hetero)aryl Chlorides and Chemoselective Hydrogenation

By: Ichikawa, Tomohiro; et al Advanced Synthesis & Catalysis (2017), 359(13), 2269-2279

(参考 : Help) <https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/19669803324301-Get-Similar-Reactions>

## デモンストレーション④

1. 下記の物質の合成反応を検索し回答を確認する
2. 回答として得られた反応式の類似反応を検索する

検索式

CAS RN®: 943321-66-2

得られた回答

類似反応

| 分類 | 内容                          | 時期      |
|----|-----------------------------|---------|
| 表示 | 配列検索の表記変更                   | 2023/1  |
| 検索 | 配列 (Sequences) 検索上限の増加      | 2023/1  |
| 機能 | ★ 非特許文献を含めた配列の出典文献の一括検索が可能に | 2023/5  |
|    | ★ 配列検索結果で配列を選択して文献を得ることが可能に | 2023/11 |

★の項目を資料に掲載

機能 非特許文献を含めた配列の出典文献の一括検索が可能になり、  
選択した配列の文献のみを得ることも可能に

非特許文献を含めた  
出典文献の一括検索

The screenshot displays the NCBI BLAST search results interface. At the top, the title "Sequences search for your query" is visible. Below the title, there are tabs for "All Results" and "Selected Results". The "Selected Results" tab is active, showing a list of 39 results. A blue box highlights the "3 Selected" button, indicating that 3 results are selected. Below this, a table shows the alignment of the query sequence (1) with the subject sequence (1). The alignment is shown as a horizontal bar with a green segment representing the match. The alignment identity is 100%, with 21 matches and 0 mismatches. The alignment data shows a BLAST score of 42 and an E-value of 0.0127671. A blue box highlights the "References" tab, indicating that the selected sequences' reference information is being viewed. The left sidebar contains information about the BLAST algorithm used (BLASTn), NCBI inclusion status, alignment identity (80%), query coverage (90%), E-value (10), match with gaps (No), gap costs (Existence 5, Extension 2), word size (11), and a link to "Create Bioscape Analysis".

| 分類 | 内容                              | 時期     |
|----|---------------------------------|--------|
| 機能 | 検索履歴の削除の操作性向上                   | 2023/2 |
|    | ★ プロジェクト作成が可能に                  | 2023/3 |
|    | ★ 設定画面 (Settings) の追加           | 2023/5 |
|    | 検索履歴 (History) の削除方法変更          | 2023/5 |
|    | ★ フィルター項目のカスタマイズが可能に            | 2023/7 |
|    | 興味のある研究分野の設定によっては、生物活性データ表示が上部に | 2023/8 |
|    | Supplier 検索結果の Sort 項目の追加       | 2023/9 |
|    | ★ プロジェクト共有機能の追加                 | 2024/1 |

★の項目を資料に掲載

## プロジェクトの作成が可能に

機能 選択した文献、物質をプロジェクト単位で管理可能に

References search for "benoxaprofen AND carprofen AND ibuprofen"

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Filter Behavior: Filter by Exclude

Search Within Results

Document Type: Journal (34), Patent (252), Review (2), Report (1)

Substance Role: Biological Study (261), Uses (234)

100 Selected 286 Results

1

Photobinding of drugs to

By: Miranda, M. A.; Castell, J. V.; Go

Toxicology in Vitro (1995) 9(4), 499

cells

of the

covalently bound to cells. This also

View More

Full Text

Add to Project

Project Name: Anti-Inflammatory Drugs

Project Color: Yellow

Project Description (Optional): benoxaprofen AND carprofen AND ibuprofen references

Existing Projects: Select up to one project

Lithium Ion Battery - recycling

Microplastics - Environmental Monitoring

Save Cancel

Save and Alert

Save

Add to Project

Project Name: Anti-Inflammatory Drugs

Project Color: Yellow

Project Description (Optional): benoxaprofen AND carprofen AND ibuprofen references

Existing Projects: Select up to one project

Lithium Ion Battery - recycling

Microplastics - Environmental Monitoring

Save Cancel

作成済みのプロジェクトに追加

新規のプロジェクトとして登録

機能 作成したプロジェクトを他のユーザーと共有可能に

The screenshot shows the CAS SciFinder interface. A 'Project Collaborators' dialog is open, showing a list of users with access. A blue box highlights the 'Remove Access' button, with a callout stating '共有先のユーザーの役割を指定' (Specify the role of the user to be shared with). Another blue box highlights the 'Share Project' option in the project menu, with a callout stating 'プロジェクトの編集・共有等' (Edit, share, etc. of the project). The background shows a project titled 'Anti-Inflammatory Drugs' with a search query 'benoxaprofen AND carprofen AND ibuprofen references'.

© 2024 化学情報協会

## Settings (設定画面) の追加

機能 フィルター、ソートなどをカスタマイズしてより使いやすく

The screenshot shows the 'Settings' page in the CAS SciFinder interface. A blue box highlights the 'Settings' option in the user menu, with a callout stating 'で Settings を選択' (Select Settings). Another blue box highlights the 'Alert Preferences' section, with a callout stating 'アラートで新しい回答が配信されたときにメールを受け取るか設定可能' (Can set whether to receive email when a new answer is distributed by alert). A third blue box highlights the 'Manually Apply Filters' toggle, with a callout stating '設定を ON にすると、フィルターによる絞り込みのタイミングを自分でコントロール可能に' (When set to ON, you can control the timing of filtering by filters). A fourth blue box highlights the 'Customize Result Filter Order' section, with a callout stating 'フィルターの表示の有無および順序をカスタマイズできる' (Can customize the presence and order of filter display). A fifth blue box highlights the 'Display CAS Index Name' toggle, with a callout stating '設定を ON にすると、Substances 検索結果一覧画面に表示される化学物質名称が CA 索引名になる' (When set to ON, the chemical substance names displayed on the Substances search results list screen will be the CA index names). A sixth blue box highlights the 'Show Structures on Reference Detail' toggle, with a callout stating '設定を OFF にすると、文献 (References) の詳細画面中の索引物質 (Substances) を構造図を含めずにコンパクトに表示できる' (When set to OFF, the index substances (Substances) in the detail screen of the literature (References) can be displayed compactly without the structural diagram).

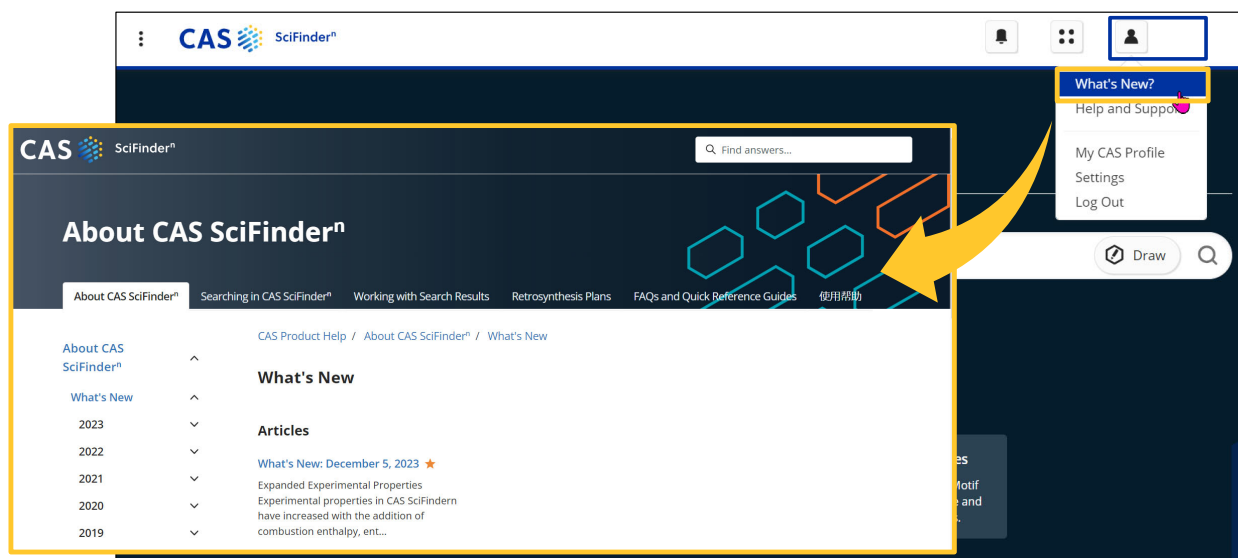
© 2024 化学情報協会

# まとめ

## 最新の強化は What's New で

41

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



The screenshot shows the CAS SciFinder website. In the top right corner, there is a user icon. A yellow arrow points from this icon to a dropdown menu labeled 'What's New?'. The dropdown menu contains the following options: 'What's New?', 'Help and Support', 'My CAS Profile', 'Settings', and 'Log Out'. The 'What's New?' option is selected, and the page content shows a list of articles under the heading 'What's New'. The articles are listed by year, with 2023 at the top. The first article is titled 'What's New: December 5, 2023' and mentions 'Expanded Experimental Properties'.

<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/cas-scifinder-n/>  
CAS SciFinder<sup>n</sup> トップページ – ニュース（日本語）

CAS SciFindern 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！

