

### 3.3 SciFinder Scholar

#### 3.3.1 SciFinder Scholar とは

##### (1) 概要

『SciFinder Scholar』では、従来『Chemical abstracts』に収録されてきた化学情報を中心に、『MEDLINE』の文献情報も合わせて検索できます。(『MEDLINE』については3.4参照)

1907年創刊の『Chemical abstracts』(以下CA)は、化学やその関連分野の研究成果をほぼ網羅的に収録し、提供し続けてきた抄録誌です。その収録データはやがて『STN International』や『Dialog』、『JOIS』などといったオンラインデータベースサービスからも利用できるようになりました。もっとも当初は、専門的な訓練が必要なコマンド方式による検索や、料金も利用のたびに課金される従量制が一般的でした。

1995年に公開された『SciFinder』は、研究者がより手軽に化学情報を利用できることを目指したデータベースサービスです。データベース検索のための専門的な知識を必要としない仕組みやシンプルな画面などに特徴があり、料金も年間定額制がとられています。

項目	内容説明
分野	化学および化学工学を中心に、物理、医薬、生命、農学など
提供機関	CAS(Chemical Abstracts Service)
収録対象	学術雑誌論文、会議録、特許、学位論文、テクニカル・レポートなど
対象誌	化学分野は約9,000誌(150か国)
範囲	文献情報1907年～(1840～1906年のINPIレコード(ヨーロッパ特許関係)600件含む)。ほか右記参照
更新頻度	毎日
URL	専用のソフトをダウンロードして利用
利用方法	研究室単位で利用申請。経費負担あり。同時アクセスは全学で5ユーザまで。図書館に利用できるパソコンあり。
備考	詳細は <a href="http://www.library.tohoku.ac.jp/dbsi/scifinder/">http://www.library.tohoku.ac.jp/dbsi/scifinder/</a>

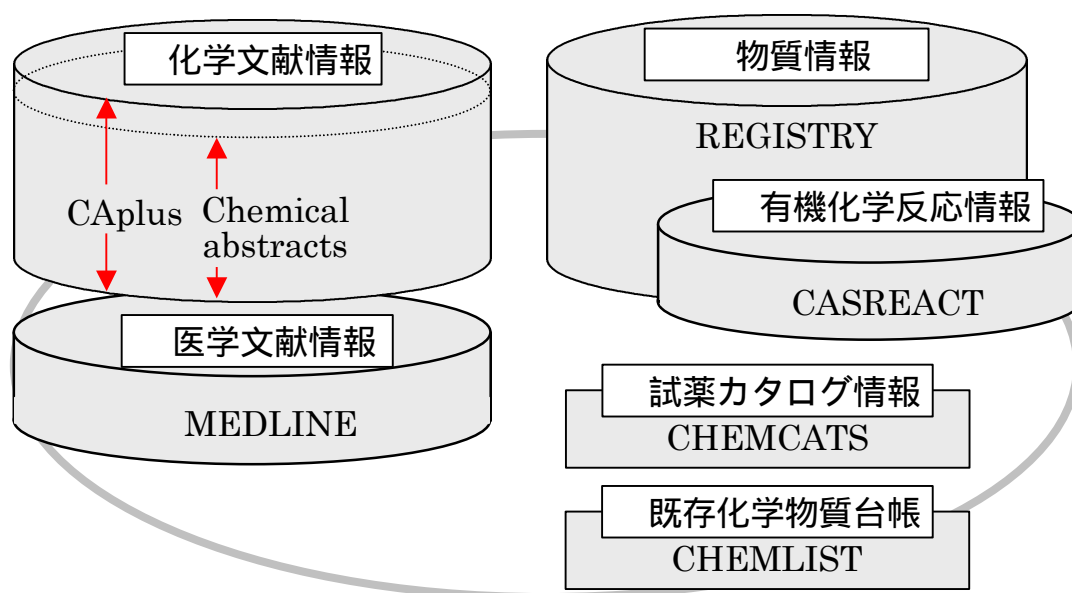
本学研究室単位で利用可能な『SciFinder Scholar』は『SciFinder』の大学版です。(核酸・タンパク質の配列検索や研究動向の分析、SDI サービスなど『SciFinder』の一部機能に利用できないものがあります。)

## (2) SciFinder Scholar で調べられる情報

『SciFinder Scholar』では、CA 収録の文献情報を 1907 年から通して検索できると同時に、CA には収録していないいくつかの情報を得ることができます。

『SciFinder Scholar』の文献データを構成するのは CAplus ファイルと MEDLINE ファイルです。CAplus ファイルには CA のほか、主要誌を中心に CA が対象としなかった文献や記事も収録し、最近ではこれが全体の 10%程度を占めます。また主に CA 収録対象となった文献をもとに作成されてきた物質情報や有機化学反応情報、そのほか試薬の販売カタログ情報なども付加されています。

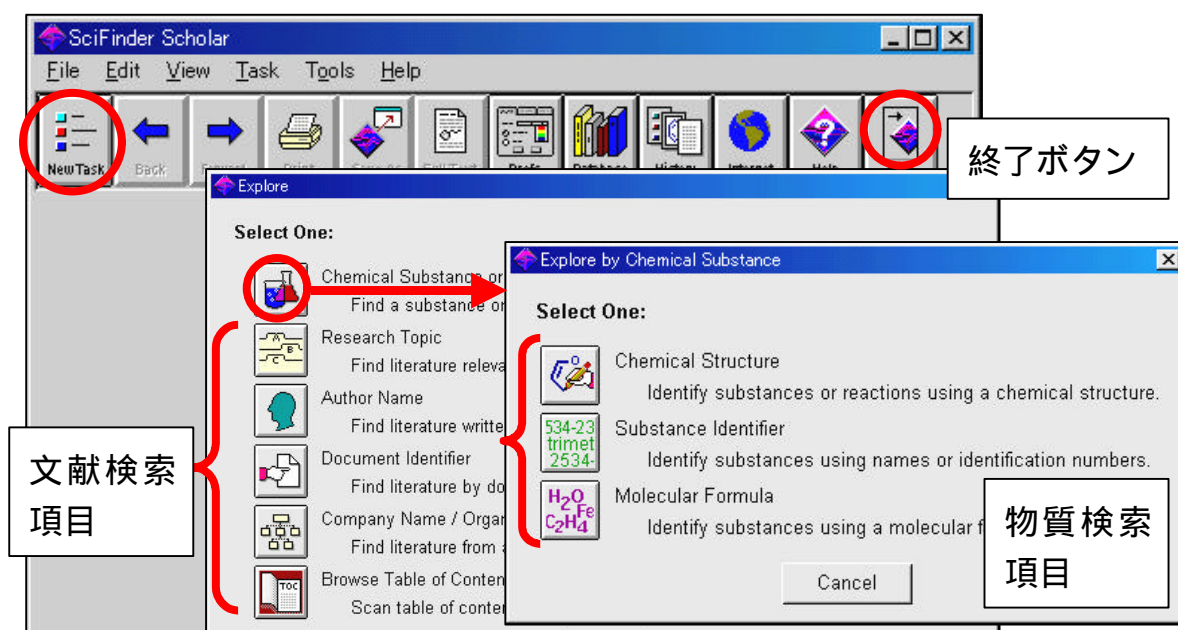
- 化学文献情報 - 化学および関連分野の論文、特許など (1907~)
- 物質情報 - 化合物およびタンパク質・核酸情報 (1957~)
- 有機化学反応情報 - 論文や特許に現れた反応情報 (1840~)
- 試薬カタログ情報 - 700 社 800 種のカタログの注文番号や価格情報
- 既存化学物質台帳 - 日米韓 EU ほか、輸入に必要な規制情報
- 医学文献情報 - 『MEDLINE』収録情報 (1953~)



図表 3.3-1 『SciFinder Scholar』で調べられる情報

### (3) 検索できる項目

『SciFinder Scholar』の専用ソフトを起動すると、検索を始めるための「Explore」画面があらわれます。目的や手持ちの情報に合わせて適当な検索項目を選びます。検索には、大きく文献検索と物質検索の2つの流れがあります。



図表 3.3-2 検索項目選択画面

#### **コラム** インターナショナルな『Chemical Abstracts』

1900年代初頭の『Chemical Abstracts』(CA)創刊当時、化学の一般的な抄録誌といえばドイツの『Chemisches Zentralblatt』(1856~1969)でした。当時のヨーロッパ、特にドイツ中心の研究状況のなかで、アメリカの研究成果が正当に評価されていないと感じた研究者やACS(米国化学会)によって新たにCAが刊行されました。

現在のCAの特徴のひとつに国際性があります。収録情報の約7割、利用者の約6割がアメリカ以外の国によって占められ、扱われる言語は50種のほります。抄録作成には分散方式もとられ、日本では(社)化学情報協会がその一端を担っています。最近では研究文献の約20%、特許文献に限れば約40%を日本が占めています。

検索項目の種類		説明	入力例
物質 検索 項目	物質の構造  (Chemical Structure)	物質を構造図から検索します。作図は ISIS/DRAW など専用ソフトで作成したのも利用できます。	
	物質の名称 ・番号 (Substance Identifier)	物質を CA 索引名(正式名称)から検索します。	2-Naphthalenecarboxylic acid
		その他の名称から検索。	Isonaphthoic acid
		CAS 登録番号から検索。	93-09-4(93094)
分子式  (Molecular Formula)	物質を分子式から検索します。原子は種類のみまとめれば順不同で可。	C11H8O2 O2C11H8 O2 C11 H8	
文献 検索 項目	研究課題  (Research Topic)	文献を主題から検索します。入力は文章のかたちにします。	[I am interested in] composition for Polymer-dispersed liquid crystal
	著者名  (Author Name)	文献を著者名から検索します。綴りの違いも考慮した検索ができます。	Tanaka (Last name) K (First name or initial)
	文献番号  (Document Identifier)	CA 抄録番号から検索。	122:252283 (CAN)
		アクセッション番号から。	1995:508066 (AN)
		特許番号から。	JP07026265
所属機関  (Company Name / Organization)	文献を所属機関名から検索します。大学名、企業名などが利用できます。	Tohoku Univ, Japan Seiko Epson Corp, Japan Sony Corp, Japan	
目次一覧  (Browse Table of Contents)	主要誌の 1994 年以降の目次や抄録が見られます。	雑誌タイトルを一覧から選択。	

図表 3.3-3 検索項目の種類と入力例

### 3.3.2 文献検索

#### (1) 文献検索の基本的な流れ


文献を探す基本的な流れを、研究課題(「Research Topic」)の検索例で紹介します。

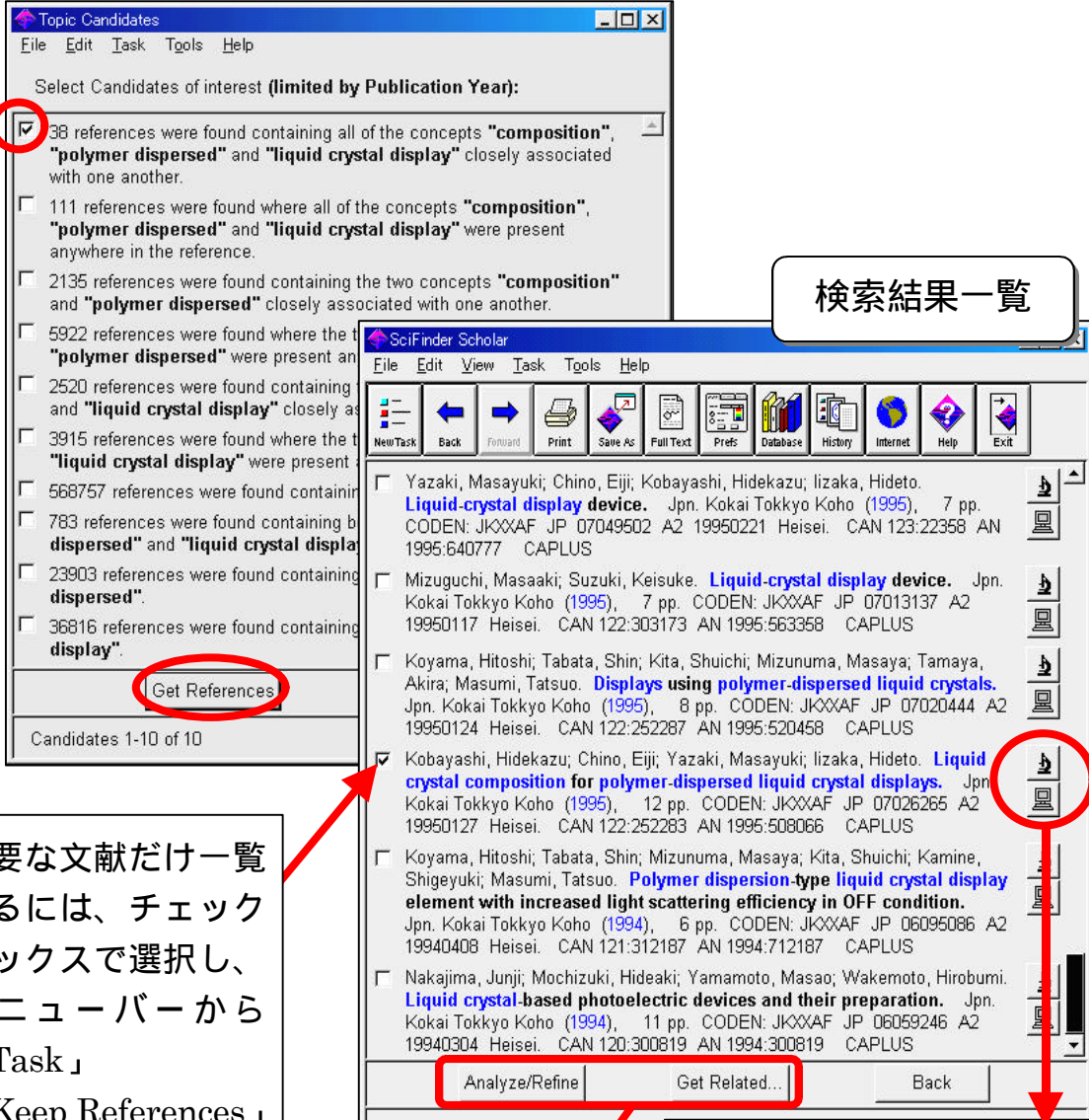
**例題** 高分子分散型液晶表示の組成について書かれた 1994 年以降の文献を集めたい。

入力ボックスには「I am interested in」という導入文句がありますので、この文章を完成させるようにいくつかのフレーズを続けます。入力したところで、「Additional Options」ボタンをクリックします。出版年や著者などの条件指定ができますので、必要に応じて項目をチェックし条件を加えます。

以下の項目が用意されています。

- 出版年
- 資料種別
- 使用言語
- 著者名
- 所属機関名

「OK」ボタンをクリックすると、検索結果の前に以下の画面があらわれます。この画面では、入力した文章に含まれる概念の結びつき方の違いによって、結果集合の候補が一覧されます。最も適した集合にチェックし、「Get References」ボタンで検索結果一覧を表示します。詳細情報は  アイコンから確認します。




The image shows two overlapping windows from the SciFinder Scholar software. The 'Topic Candidates' window on the left lists various search criteria with checkboxes. The 'References' window on the right displays a list of search results with associated icons.


**検索結果一覧**

必要な文献だけ一覧するには、チェックボックスで選択し、メニューバーから「Task」「Keep References」

ヒット件数

3.3.4 参照

 **詳細情報 (次ページ)**

 **フルテキスト情報**  
(CAS 提供のポータルサイト「ChemPort」から、契約電子ジャーナルやウェブに公開のフルテキストヘルク。)

文献詳細情報（特許文献の例）

**Bibliographic Information**

**Liquid crystal composition for polymer-dispersed liquid crystal displays.** Kobayashi, Hidekazu; Chino, Eiji; Yazaki, Masayuki; Iizaka, Hideto. (Seiko Epson Corp, Japan). Jpn. Kokai Tokkyo Koho (1995), 12 pp. CODEN: JKXXAF JP 07026265 A2 19950127 Heisei. Patent written in Japanese. Application: JP 93-168196 19930707. CAN 122:252283 AN 1995:508066 CAPLUS

**Patent Family Information**

Patent No.	Kind	Date	Application No.
JP 07026265 19930707	A2	19950127	JP 1993-168196

Priority Application  
JP 1993-168196 1993

**Abstract**

The title photoresist compn. contains 1-5% I [R = alkyl, alkoxy, alkylamino; X = F, Cl, CN] or II [R = alkyl, alkoxy, alkylamino, X = F, Cl, CN] in a host liq. crystal. Low driving potential and light resistance are superior and the compn. is useful in laptop computers.

I

II

**Patent Classifications**

**Main IPC:** C09K019-56. **Secondary IPC:** C09K019-20; C09K019-22; C09K019-30; C09K019-32; C09K019-38; C09K019-46; C09K019-60; G02F001-13. **Additional IPC:** G02F001-1333.

**Indexing** -- Section 74-13 (Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes)

Liquid crystals  
(compn.; polymer dispersed)

Optical imaging devices  
(liq.-crystal, low-voltage drive, light-resistant)

92-94-4D, p-Terphenyl, cyano-, derivs.  
93-09-4D, 2-Naphthoic acid, derivs., cyanophenyl or cyanobiphenyl ester  
98-89-5D, Cyclohexanecarboxylic acid, derivs., cyanophenyl and cyanobiphenyl esters  
118-90-1D, o-Toluic acid, derivs., cyanophenyl or cyanobiphenyl esters  
767-00-0D, 4-Cyanophenol, derivs., ester with cyclohexanecarboxylic acid  
873-74-5D, 4-Cyanoaniline, derivs., amides with benzoic acid derivs.  
4854-84-6D, 4-Amino-4'-cyanobiphenyl, derivs., amides  
19812-93-2D, 4-(4'-Cyanophenyl)phenol, cyclohexanecarboxylic acid esters  
Role: TEM (Technical or engineered material use); USES (Uses)  
(liq. crystal compn. contg.)

**Supplementary Terms**

liq crystal compn cyanophenyl cyanobiphenyl ester, display liq crystal polymer dispersion

Get Related... Close

- 論文タイトル
- 著者名
- 所属機関名
- 収録資料名
- 言語
- CA 抄録番号 (CAN)
- アクセッション番号 (AN)
- 特許情報 など

- 抄録

- 特許分類 4.5 参照

- 索引情報

- 参照物質

アクセッション番号  
図表 3.3-5 参照

CA セクション  
3.3.6 参照

3.3.4 参照

## (2) 検索項目詳細 (文献検索)

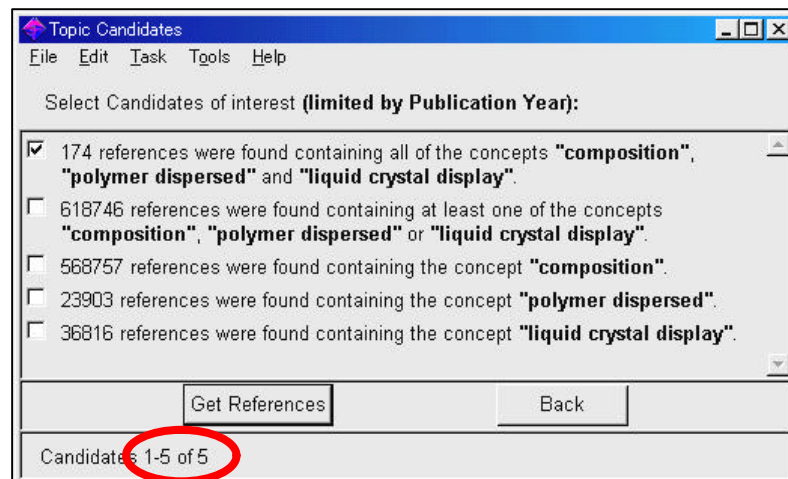
### 研究課題 (「Research Topic」) からの検索



基本的な流れは(1)で簡単に紹介しました。ここでは注意点をいくつかあげます。入力の際は論理演算やトランケーションは使いません。品詞の単数形・複数形、動詞の時制による語尾変化、米英の綴りの違いなどは自動で考慮されます。

- 単語の羅列をさけ、前置詞や接続詞を用いた文章の形にすることで、検索結果の精度が変わります。同じ語を用いた以下の2例を比較してください。

例) composition and polymer-dispersed liquid crystal display で検索



例) composition of polymer-dispersed liquid crystal display で検索

(1) の検索結果集合の候補一覧を参照。

- and や or でつないだ複数単語の修飾は以下のように個別に行います。

例) numeric and bibliographic data

numeric data and bibliographic data

- 異なる言い回しも考慮したいときは以下のように()で付加します。

例) the milk production of cow(cattle,bovines) (1つのカッコに3つまで)



## 著者名 (「Author」) からの検索



著者名には Last name が必須です。それ以外は必要に応じて入力します。同姓同名が多く個人を特定しにくいなどのときは、「Analyze / Refine」機能による所属や分野 (CA セクション 3.3.6 参照) での絞り込みが有効です。3.3.4 (2)参照

「Johnson, D.A.」  
で検索

Enter the author's name.  
Last name (required): johnson  
First name or initial: d  
Middle name or initial: a  
 Look for alternative sp  
OK

Author Candidates  
File Edit Task Tools Help

Select Candidates of interest:

<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSEN DORRIT	1 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON	11 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON D	1166 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON D A	665 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON D A G	2 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON D A W	1 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON D JR	16 references
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON DABNEY	
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON DAISY	
<input checked="" type="checkbox"/>	JOHNSON DALE	

候補一覧では、検索もれをふせぐために Last name のみのかたちや似た綴りもピックアップされます。全て選択するときは「Edit」「Select All」。

図表 3.3-4 著者名検索画面

## 文献番号 (「Document Identifier」) からの検索



一度検索した文献については、その文献を特定するための個別の番号をひかえておくとなるときにすぐに再検索できます。(例中のデータ末は収録データベース名)

例) Kobayashi, Hidekazu; Chino, Eiji; Yazaki, Masayuki; Iizaka, Hideto.  
Liquid crystal composition for polymerdispersed liquid crystal displays.  
Jpn. Kokai Tokkyo Koho (1995), 12 pp. CODEN: JKXXAF JP07026265  
A2 19950127 Heisei. CAN 122:252283 AN 1995:508066 CAPLUS

例) Pawelczyk T; Lowenstein J M Inhibition of phospholipase C delta by hexadecylphosphorylcholine and lysophospholipids with antitumor activity. BIOCHEMICAL PHARMACOLOGY (1993 Jan 26), 45(2), 493-7. Journal code: 0101032. ISSN:0006-2952. DN 93168196  
 PubMed ID 8435099 AN 93168196 MEDLINE

番号の種類	説明	例中の表記
アクセシオン番号	『SciFinder Scholar』の個々の文献データに与えられた番号。	1995:508066 93168196
CA 抄録番号	『Chemical abstracts』中の抄録番号。右の例の場合、122 は収録巻。	122:252283
特許番号	先頭の 2 つのアルファベットは発行国コード。JP は日本。( 4.5 参照 )	JP07026265
PMID	『PubMed』で用いられる ID。	8435099

図表 3.3-5 検索できる番号の種類

### 機関名 (「Company Name / Organization」) からの検索



ある大学はどんな研究分野が盛んか、またある企業はどんな技術分野に強いのかといったことなどが知りたいときに利用できます。

著者の特定など絞り込み項目としても有効です。

例) 「tohoku univ」と入力すると次のようなかたちが検索されます。

Tohoku University, Japan / Tohoku Univ, Japan /  
 Tohoku University Graduate School of Medicine, Japan /  
 Tohoku Pharmaceutical University, Japan...

例) 「seiko Epson」と入力すると次のようなかたちが検索されます。

Seiko Epson Corp, Japan / Seiko Epson Corporation, Japan...

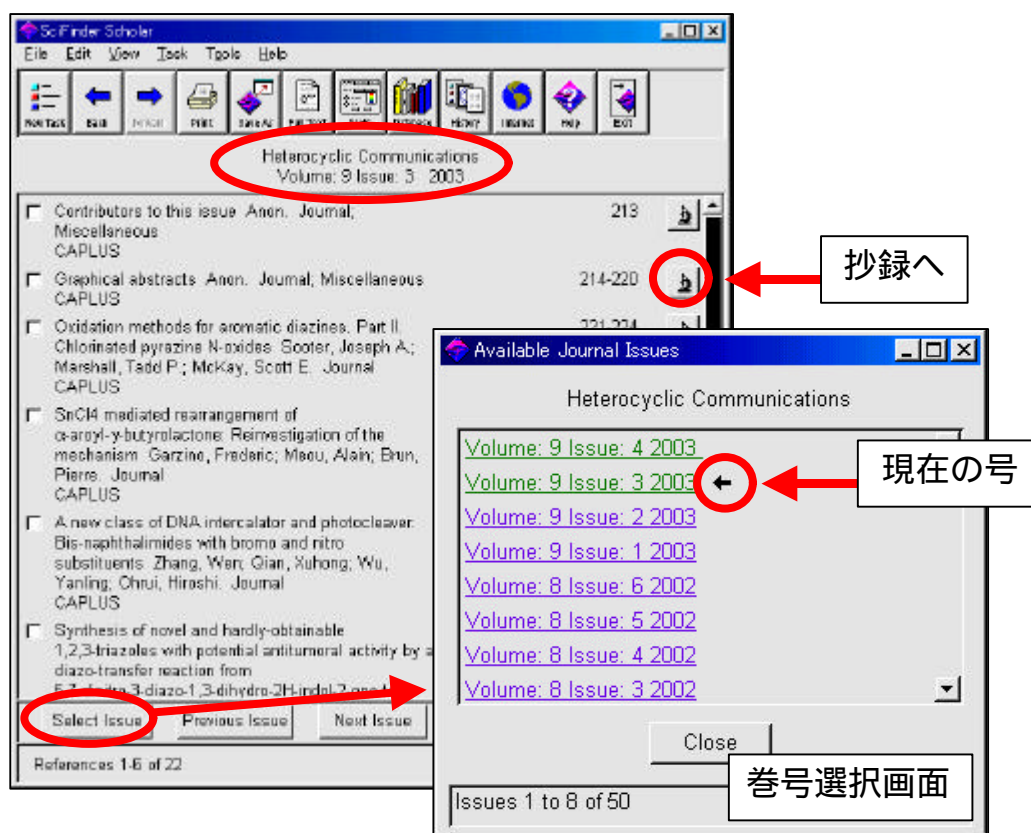
目次一覧(「Browse Table of Contents」)からの検索



主要誌 1,700 タイトルの目次や抄録を、1994 年から見ることができます。

雑誌タイトルは表示されたアルファベット一覧から選択します。スクロールで探しますが、タイトルからピックアップする方法もあります。ピックアップするためには、メニューバーの「Edit」から「Find」で入力ボックスが開き、ひとつづきのフレーズとして入力します。「Edit」「Find Again」で次候補をピックアップしていきます。

例)「journal of applied physics」(「journal applied physics」ではヒットしない)



図表 3.3-6 論文目次一覧画面



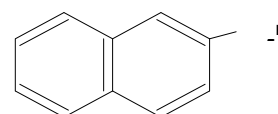
### 3.3.3 物質検索

物質検索では、物質の名称や構造から検索を始められます。  
得られた物質情報から、その物質に関する文献や反応情報も参照できます。

#### (1) 物質検索の基本的な流れ

物質検索の基本的な流れを、構造検索(「Chemical Structure」)を例に紹介します。

**例題** 右の物質の名称と CAS 登録番号を知りたい。



ベンゼン環を作図したいのでパレットのベンゼン環アイコンをクリックします。  
マウスを作図画面へ移し、描きたい位置へあわせ、その場でクリックします。

さらにもうひとつのベンゼン環を結合させるため、結合部へマウスを合わせると、  
結合部の色が反転しますのでクリックします。

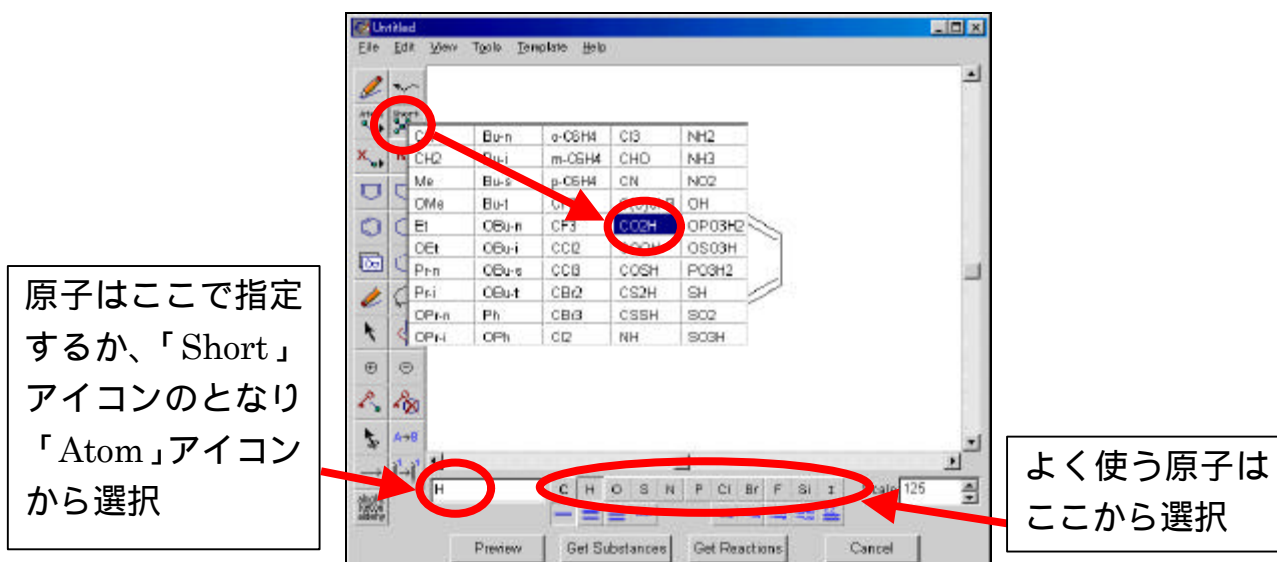
作図パレット  
図表 3.3-10 参照

修正はパレットの  
消しゴムツールで。  
操作を元に戻すときはメニューバーの「Edit」「Undo Insertion」。

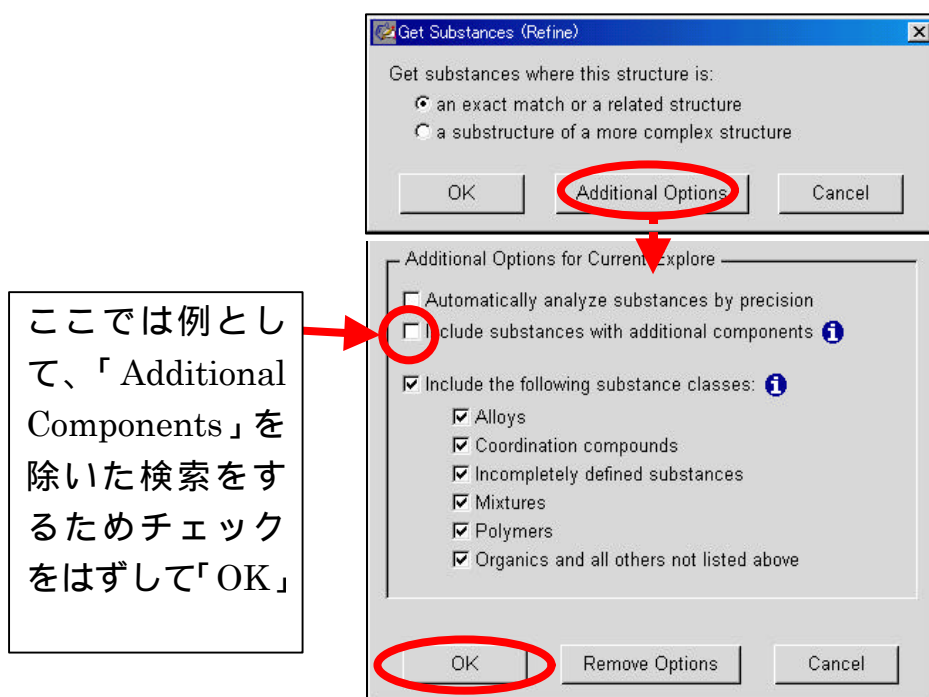
分子式


分子量

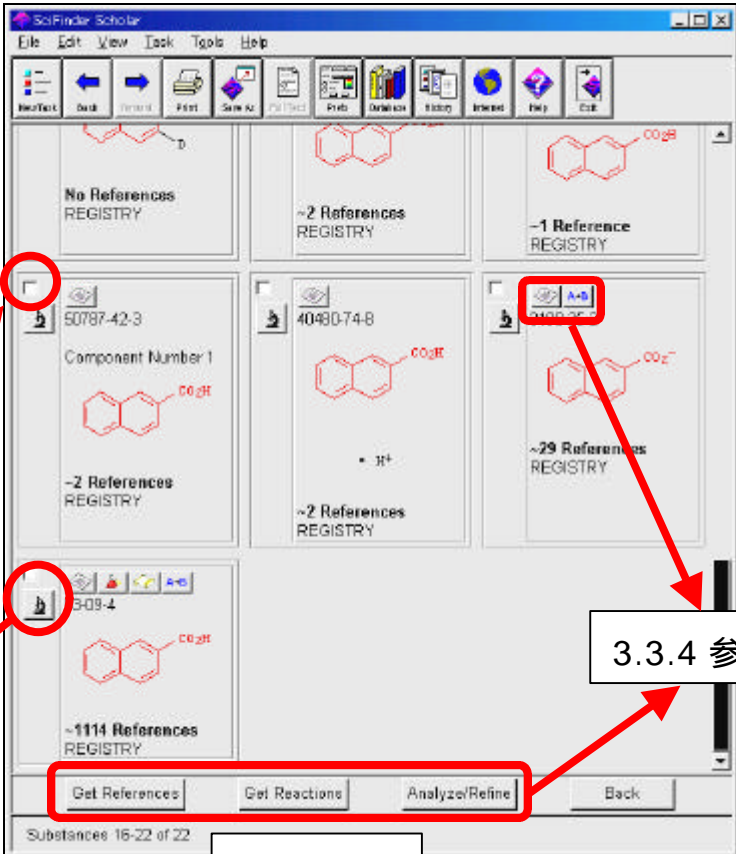
原子の結合を図に追加します。CO<sub>2</sub>Hはショートカットが用意されていますので「Short」アイコンから選択できます。クリックし、あらわれた表からドラッグで選びます。選んだらマウスを結合箇所にあて、そこを始点にドラッグします。




作図後「Get Substances」ボタンで以下のダイアログボックスがあらわれます。完全一致（「an exact match or a...」）を選択し、さらにここでは「Additional Options」からある程度絞り込みをかけ「OK」します。



作図した物質と構造が完全に一致する物質が検索されます。これには異性体や電荷をもつもの、前画面の「Additional Options」で除かなかった合金や配位化合物、混合物、ポリマーなどが含まれます。検索結果は CAS 登録番号順(コラム参照)に新しいものから表示されますので、同じ構造をもつものの中でも基本となる物質は、通常は一覧の下の方にあります。詳細情報は  アイコンから確認します。



必要な文献だけ一覧するには、チェックボックスを選択し、メニューバーから「Task」「Keep Substances」

 **詳細情報**  
(次ページ)

3.3.4 参照

ヒット件数

### コラム REGISTRY とは

『SciFinder Scholar』の物質情報は、REGISTRY と呼ばれるデータベースファイルに収録されています。3.3.1(2)参照

REGISTRY は、『Chemical Abstracts』の物質索引を効率的に作成するといういわば内部利用を目的に 1960 年代から登録が始まりました。登録された物質に機械的与えられた番号が CAS 登録番号です。1 物質につき 1 番号が付与され、これにより煩雑な名称を用いることなく物質を特定できます。

物質詳細情報

**3.3.4 参照**

**CAS 登録番号**

Registry Number: 93-09-4

Formula: C11 H8 O2

CA Index Name: 2-Naphthalenecarboxylic acid (9CI)

Other Names: 2-Naphthoic acid (8CI);  $\beta$ -Naphthalenecarboxylic acid;  $\beta$ -Naphthoic acid; 2-Carboxynaphthalene; 2-Maythic acid; 2-Naphthylcarboxylic acid; Isonaphthoic acid; NSC 59901

**計算値**

-- Properties --

Property	Calculated Value	Condition	Note
Bioconc. Factor	140	pH 1	(1) ACD
Bioconc. Factor	85.8	pH 4	(1) ACD
Bioconc. Factor	1	pH 7	(1) ACD
Bioconc. Factor	1	pH 8	(1) ACD
Bioconc. Factor	1	pH 10	(1) ACD
Boiling Point	332.9±11.0 °C	Press: 760 Torr	(1) ACD
Enthalpy of Vap.	60.77±3.0 kJ/mol		(1) ACD
Flash Point	151.3±25.1 °C		(1) ACD
H acceptors	2		(1) ACD
H donors	1		(1) ACD
Koc	1190	pH 1	(1) ACD
Koc	733	pH 4	(1) ACD
Koc	1.99	pH 7	(1) ACD
Koc	1	pH 8	(1) ACD
Koc	1	pH 10	(1) ACD
logD	3.12	pH 1	(1) ACD
logD	2.91	pH 4	(1) ACD
logD	0.35	pH 7	(1) ACD
logD	-0.50	pH 8	(1) ACD
logD	-0.97	pH 10	(1) ACD
logP	3.125±0.208		(1) ACD
Molar Solubility	Sparingly Soluble	pH 1	(1) ACD
Molar Solubility	Sparingly Soluble	pH 4	(1) ACD
Molar Solubility	Soluble	pH 7	(1) ACD
Molar Solubility	Very Soluble	pH 8	(1) ACD
Molar Solubility	Very Soluble	pH 10	(1) ACD
Molecular Weight	172.18		(1) ACD
pKa	4.20±0.20	Most Acidic	(1) ACD
Vapor Pressure	5.63E-5 Torr	Temp: 25 °C	(1) ACD

**実測値**

Property	Experimental Value	Condition	Note
Melting Point	186 °C		(2) IC
Melting Point	180-183 °C		(3) IC

Notes:  
 (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD) Software Solaris V4.67 (© 1994-2004 ACD)  
 (2) Bergman, J., *Journal of Organometallic Chemistry* 1979, V175(2), P233-7  
 (3) Kajigaeshi, Shoji, *Synthesis* 1985, (6-7), P674-5

-- Resources --

References: ~1114

**物性情報**

**典拠文献**

**参考文献数**

## (2) 検索項目詳細 (物質検索)

### 構造 (「Chemical Structure」) からの検索



物質の構造や反応を作図し、検索に用いることができます。名称のわからないものや、特定の構造から物質を調べるときに便利です。作図パレットでは、特定の結合の置換禁止やマッピング、反応物質間の役割指定など条件指定できます。

構造検索には、物質情報を得るためのものと、反応情報を得るためのものがあります。物質情報を得るためのものには、さらに完全一致検索と部分構造検索があります。完全一致検索は(1)で紹介した流れになります。

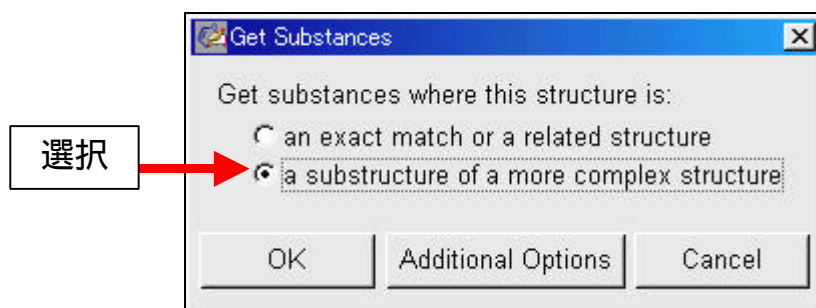
物質情報を得る	{	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ 完全一致検索：作図した構造に完全に一致する物質を検索。異性体、ポリマーなども含む。</li> <li>■ 部分構造検索：上記に加え、作図した構造を部分として持つすべての物質を含む。</li> </ul>
反応情報を得る		<ul style="list-style-type: none"> <li>■ 反応検索：作図した構造の物質を、反応の役割を指定し検索。</li> </ul>

#### ■ 完全一致検索

(1)の基本的な流れを参照してください。

#### ■ 部分構造検索

部分構造検索を行うには、(1) で、ダイアログボックスの「a substructure of a more complex structure」を選択します。



図表 3.3-7 部分構造検索の選択画面



部分構造検索では、作図した構造が単純であるほどヒット件数が多くなり、目的の物質を見つけるのが難しくなります。

ただ『SciFinder Scholar』では、検索結果を絞り込むための機能が充実していますので、はじめはそのまま単純な構造で検索を行い、次にその結果から不要なものを取り除いてゆくという流れが効果的です。検索結果から不要なものを取り除くときは「Analyze/Refine」機能(3.3.4(2)参照)を使います。

例) ヒット件数が多いので作図に新たな条件を加える。

「Analyze/Refine」 「Refine」 「Chemical Structure」 作図画面に新たな条件を追加(結合の追加、環と鎖の孤立など)

例) ヒット件数が多いので環骨格の種類で絞り込み(構造に環が含まれるとき)

「Analyze/Refine」 「Analyze」 「Ring skeletons」 検索結果に含まれる物質の環骨格の種類から絞り込み

## ■ 反応検索

反応検索では、物質検索のようにある1つの物質を作図し、その合成法やこれが試薬となる反応などを調べることができます。また、はじめから反応に関わる複数の物質を作図し、それぞれの反応の役割を指定した検索もできます。

作図パレット 図表 3.3-11 参照

Acetyl  
non-reacting

reactant/reagent

product

役割の個別指定

反応の役割を自動で割り当て

官能基を選択し画面へ追加

Functional Groups

Select a term below. Then click in the structure drawing window to draw the term.

Acetyl

Acetal

Acid Halide

Acyclic Alkene

Acyclic Ketone

Acylmetal

ALCOHOLS

Aldehyde

pi-Alkene

Terms displayed

All Class Terms Rings Non-rings

A>B

keton aldehy

C H O S N P Cl Br F Si I Scale 12

Preview Get Substances Get Reactions Cancel

図表 3.3-8 複数の物質による反応作図例

作図後「Get Reactions」ボタンを押します。

**物質作図から**

**反応作図から**

Get Reactions - Role Definition

Get Reactions where this structure is:

- a Product
- a Reactant
- a Reagent
- a Reactant or product
- Anywhere in the reaction

**反応の役割を指定**

OK

Get Reactions

Get reactions where the structure(s) are:

- variable only at the specified positions
- substructures of more complex

無指定の置換位置についてすべて水素の場合は「variable only...」を、あらゆる置換を許す場合は「substructures of more..」を選択。


























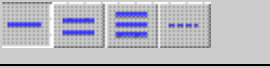

OK

SciFinder Scholar

検索結果中の物質をクリックすると、その物質に関する情報が参照できます。ここから反応をさかのぼることもできます。

図表 3.3-9 反応検索の流れ

■ 作図パレットボタン説明

種類	説明	種類	説明
	原子の結合を描画		1~30 までの結合鎖を描画 逆折れは[Shift]を押しながら
	原子を周期律表から選択		よく使う結合のショートカット を表から選択
	ハロゲンや金属、任意の環など可変 原子を選択		任意の置換基のグループを作成 1 グループは最大 20 まで
	シクロペンタンジエン環の描画		シクロペンタン環の描画
	ベンゼン環の描画		シクロヘキサン環の描画
	メニューバーの「Template」で選択 したテンプレートを利用		3~15 の炭素原子からなる単環を 描画
	修正したい箇所を消去		フリーハンドで範囲指定し、選択 した図の移動、コピーなどが可能
	枠線で範囲指定すると、図の移動、 コピーなどが可能		選択した図を回転
	結合上に正電荷をおき、クリックで 電荷を増加		結合上に負電荷をおき、クリック で電荷を増加
	置換基の追加禁止		環の縮合や、鎖が環の一部になる のを禁止（環・鎖の孤立）
	反応によって状態が変化する結合 部を指定（反応検索のみ）		反応の役割を指定。Product、 Reactant など。（反応検索のみ）
	矢印の向きを利用し反応の役割を 自動で割り当て（反応検索のみ）		数字ラベル付与により、反応前後 の原子の対応関係をマッピング （反応検索のみ）
	官能基名の利用 （反応検索のみ）		
		結合の指定。左から「単重結合」「二重結合」「三重結合」「不定」。	
		結合の立体指定（幾何異性体など）。左から「単結合上」「単結合下」「二重結合上」「二重結合下」「二重結合の EZ」。	

図表 3.3-10 作図パレットボタン説明



## 分子式 (「Molecular Formula」) からの検索



幅広く物質を探し出すときなど分子式から検索できます。

原子の表記順は、種類別に数さえまとめれば特に決まりはありません。「Co」(コバルト)や「CO」(一酸化炭素)など、大文字小文字については通常の表記に従い、「CO<sub>2</sub>」であれば「C O<sub>2</sub>」のように原子間へスペースを入れれば確実に検索できます。

ポリマーを検索するときは、構成するモノマーの表記に注意が必要です。モノマーは Hill 方式( )で並びかえ、複数のモノマー同士は「.(ピリオド)」で区切ります。

Hill 方式：分子式の記述法。原子の数をまとめた後、炭素(C)を含む化合物については C、H、残りアルファベット順、炭素を含まない化合物はすべてアルファベット順に記述する。

種類	モノマー例	入力例
ホモポリマー	H <sub>2</sub> C=CH-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> )X
共重合体	CH <sub>3</sub> CO-O-CH=CH <sub>2</sub> H <sub>2</sub> C=CH-Cl H <sub>2</sub> C=CH-F	(C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> .C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl.C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> F)X 各モノマーをピリオドで区切る。
モノマーが酸との塩 のとき	CH <sub>3</sub> COONa	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> .Na 分子式を金属と他の部分に分け、 非金属部分に H を加えて遊離酸の 分子式とする。
モノマーがアミン類 との塩のとき	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> -NH-Cl	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N.HCl H を N から離しアニオン (Cl) に 移動させ、2 つの部分に分ける。

図表 3.3-12 ポリマーの入力例

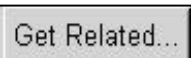





### 3.3.4 検索結果の活用

『SciFinder Scholar』を使いこなすためには検索結果の活用が重要になります。

検索結果画面のリンクボタンをたどることで、関連する情報を得たり、文献検索結果から物質情報へ、反対に物質検索結果から文献情報を参照することができます。

また『SciFinder Scholar』はさまざまな可能性を考慮した、できるだけ漏れの無い検索を行うため、事後的に不要なものを取り除く絞り込み機能が充実しています。

#### (1) 各種情報へのリンク

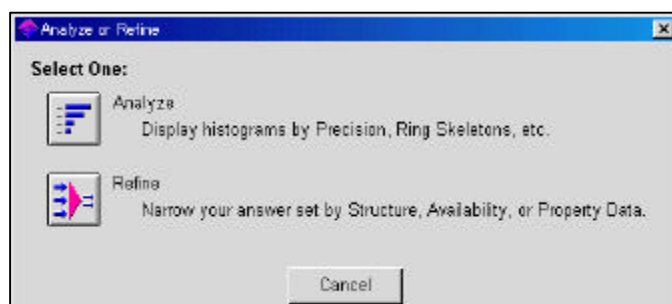
-  (3.3.2(1)、3.3.3(1)の検索結果画面参照)  
関連情報へのリンクボタン。「被引用文献」「引用文献」「物質情報」「反応情報」「Web情報」いずれかの項目を選択。
-  (3.3.2(1)、3.3.3(1)の検索結果画面参照)  
参考文献へのリンクボタン。物質検索結果からは、参考文献の種類を分野や反応、用途などから限定できる。
- 物質検索結果の各種リンクボタン(3.3.3(1)参照)
  -  参考文献へ。画面下「Get References」ボタンに同じ。
  -  販売カタログ情報へ。
  -  既存化学物質台帳(規制情報)へ。
  -  反応情報へ。画面下「Get Reactions」ボタンに同じ。

#### **コラム** CAS (キャス: Chemical Abstracts Service)

『Chemical Abstracts』作成の中心的役割を担うCASは、ACS(米国化学会)の情報サービスを担当する独立採算部門です。スタッフは1,000人を超え、化学分野や諸言語に通じた専門家の手によって抄録の作成が行われています。CASはデータ作成機関であるばかりでなく、データ提供事業を自ら行う点にも特徴があります。『STN International』や『SciFinder』もこのひとつです。

## (2) 検索結果の分析・絞り込み

検索結果画面にある **Analyze/Refine** ボタンから以下のような画面があらわれます。



図表 3.3-13 「Analyze/Refine」ダイアログボックス

「Analyze」と「Refine」いずれでも絞り込みができますが、「Refine」の方が検索時間が短くてすむので、絞り込みの目的や範囲がはっきりしているときはなるべくこちらを優先するのがよいでしょう。

分析や絞り込みに用意されている項目は、検索の種類によって異なります。

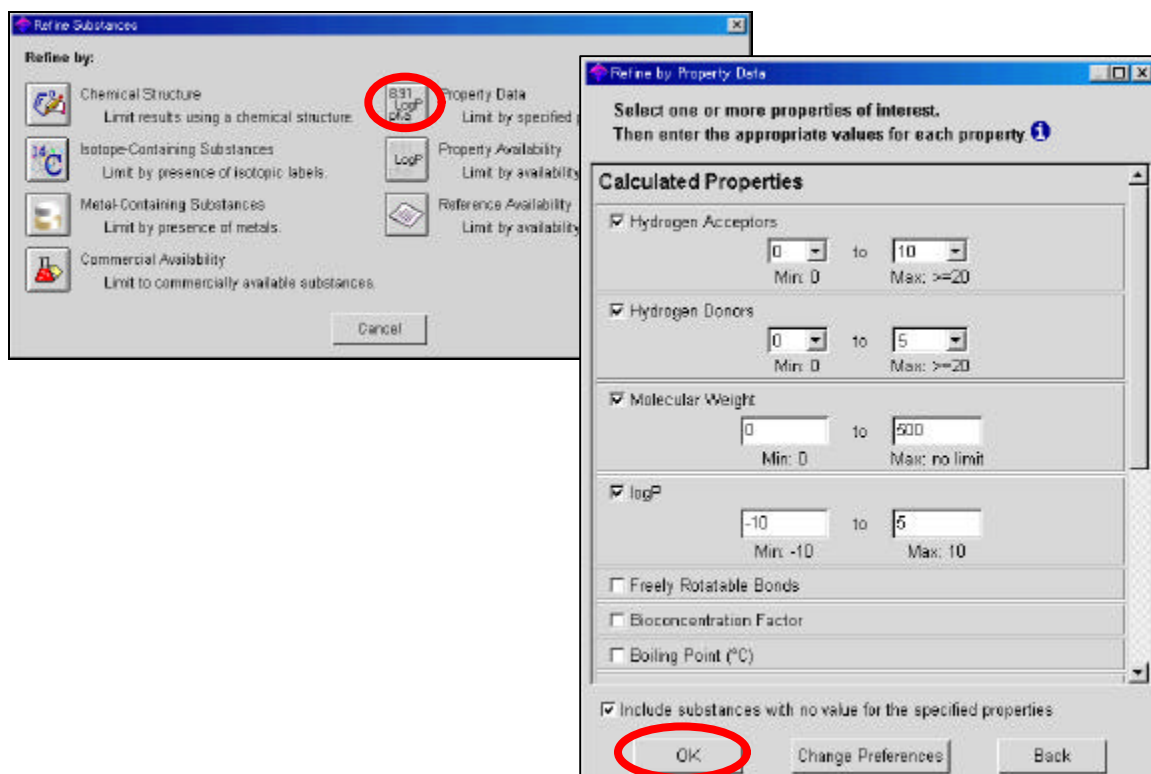
### ■ Refine

Refine 機能を使うと検索結果を、選択した切り口から絞り込むことができます。

検索の種類	Refine で使用できる絞り込み項目
文献検索結果	研究課題、機関名、著者、出版年、文献の種類、言語、収録データベース、全文情報の有無
物質検索結果	構造、同位体の有無、金属原子の有無、試薬カタログ情報の有無、物性値、物性値の有無、文献情報の有無
反応検索結果	構造などの追加、収率、反応段階数（単段階・多段階）、反応の種類

図表 3.3-14 「Refine」で使用できる項目

例) 物質検索結果を物性値から絞り込むときの画面



図表 3.3-15 物性値による絞り込み画面

#### ■ Analyze

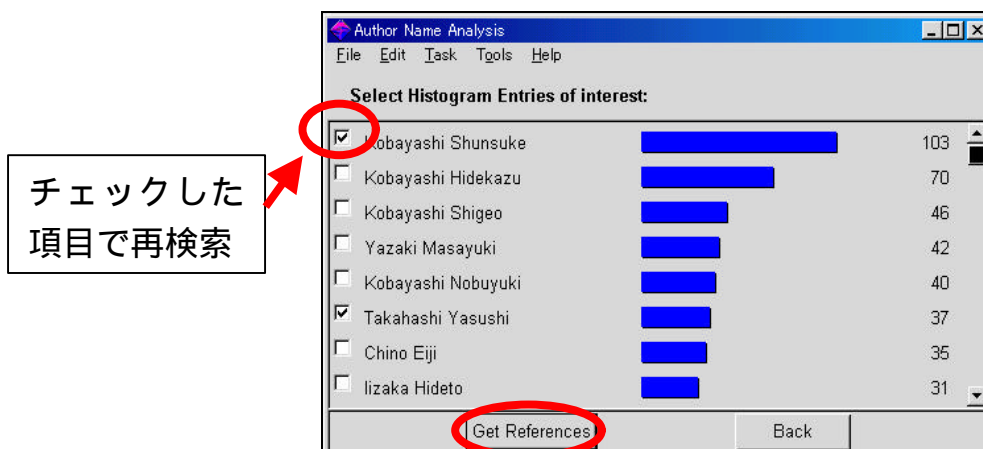
Analyze 機能を使うと検索結果を、選択した切り口によって視覚的に評価・分析することができます。グラフなどからそのまま絞り込みも行えます。

検索の種類	Analyze で使用できる分析項目
文献検索結果	著者、CAS 登録番号、CA セクション、機関名、収録データベース、文献の種類、CA 索引名、収録誌、言語、出版年、キーワード
物質検索結果	置換基の種類、可変グループ (A, Q, X, M のいずれか)、設定した R グループに含まれる原子、検索精度 (検索に含めた範囲)、環構造、立体構造
反応検索結果	触媒、溶媒、著者、機関名、文献の種類、反応段階数 (単段階・多段階)、収率、収録誌、言語、出版年

図表 3.3-16 「Analyze」で使用できる項目

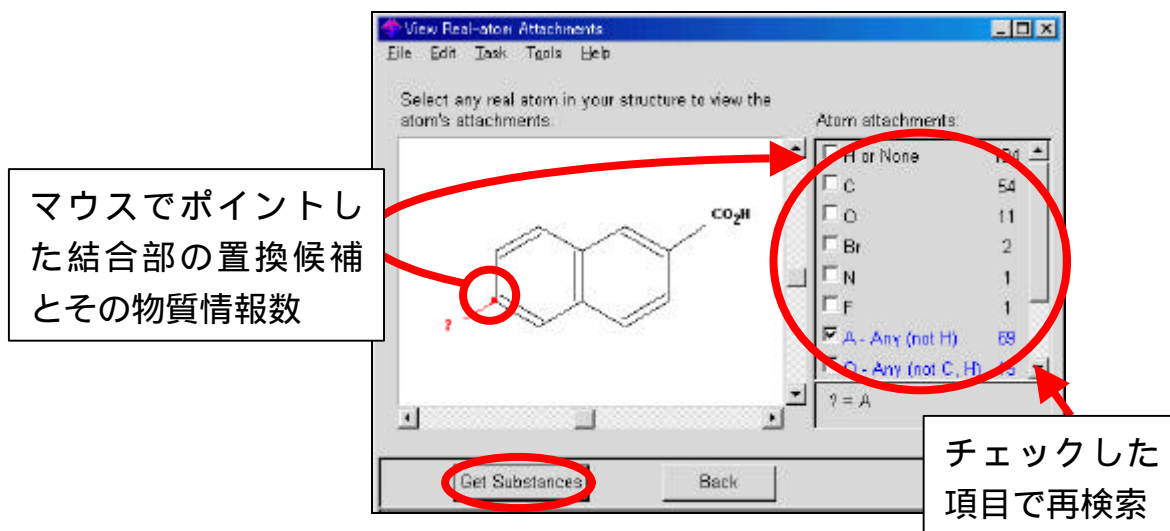


例) 文献検索結果を著者名で分析したときの画面



図表 3.3-17 著者名による分析画面例

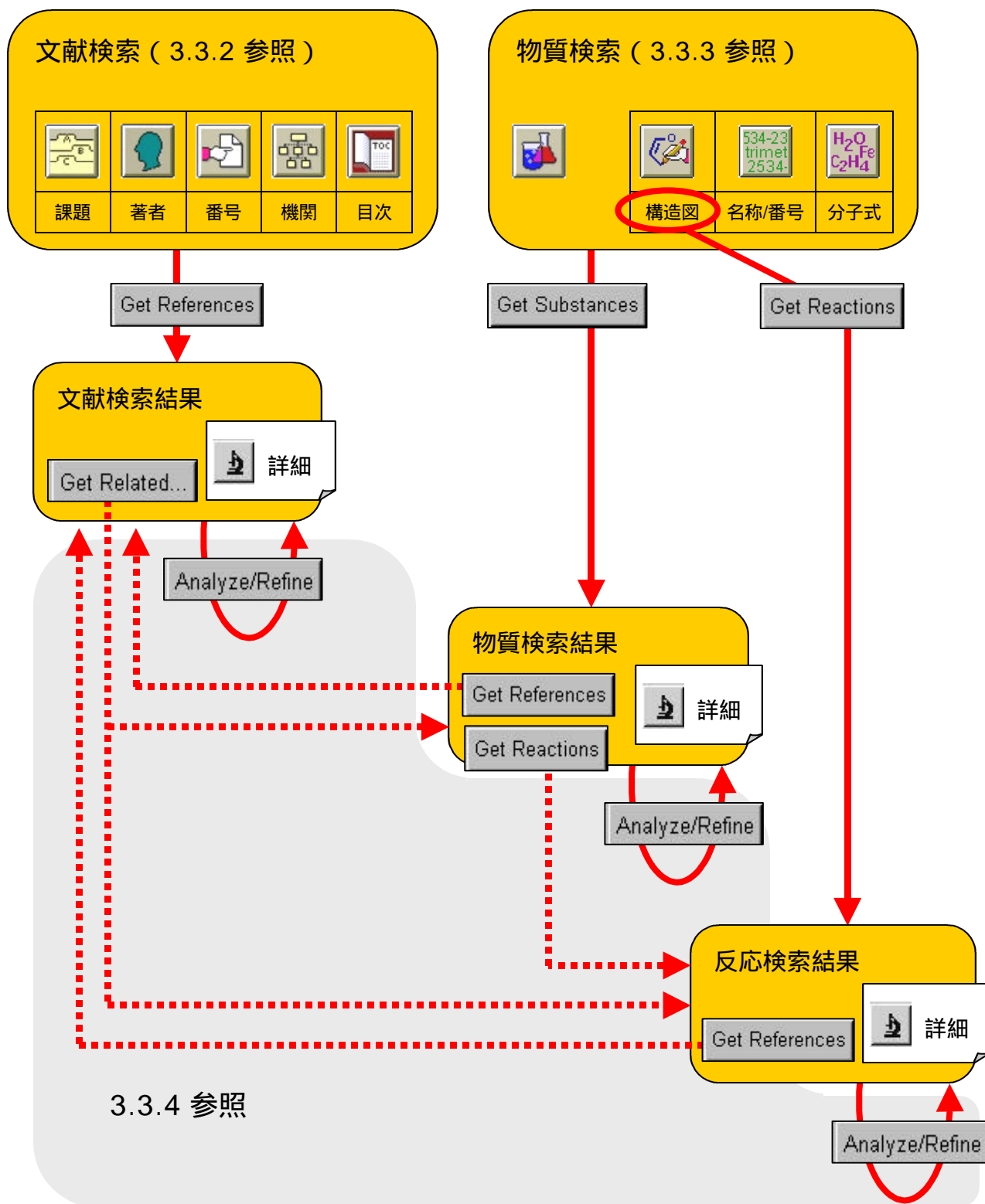
例) 物質検索結果を置換基で分析したときの画面



図表 3.3-18 置換基による分析画面例

### 3.3.5 検索の全体図

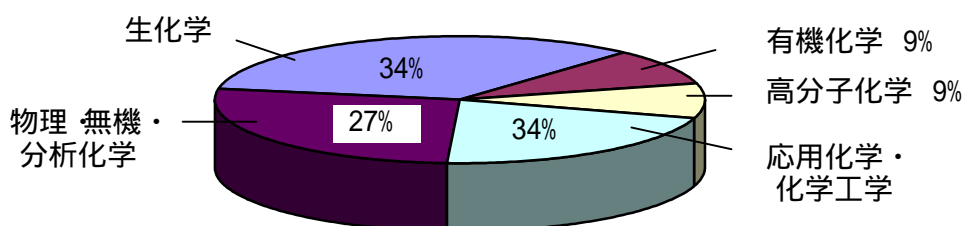
以下は、『SciFinder Scholar』検索の全体の大きな流れを示したものです。



### 3.3.6 CA セクション

もともと週刊の抄録誌である CA は、以下の 5 分野と、これをさらに細分化した 80 セクションから内容が構成されています。『SciFinder Scholar』では文献検索結果をこの CA セクションで絞り込むことができます(3.3.4(2)「Analyze」参照)。

近年は生化学分野の占める割合が大きくなっています。



#### BIOCHEMISTRY

1. Pharmacology
2. Mammalian Hormones
3. Biochemical Genetics
4. Toxicology
5. Agrochemical Bioregulators
6. General Biochemistry
7. Enzymes
8. Radiation Biochemistry
9. Biochemical Methods
10. Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry
11. Plant Biochemistry
12. Nonmammalian Biochemistry
13. Mammalian Biochemistry
14. Mammalian Pathological Biochemistry
15. Immunochemistry
16. Fermentation and Bioindustrial Biochemistry
17. Food and Feed Chemistry
18. Animal Nutrition

19. Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition
20. History, Education, and Documentation

#### ORGANIC CHEMISTRY

21. General Organic Chemistry
22. Physical Organic Chemistry
23. Aliphatic Compounds
24. Alicyclic Compounds
25. Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds
26. Biomolecules and Their Synthetic Analogs
27. Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)
28. Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)
29. Organometallic and Organometalloidal Compounds
30. Terpenes and Terpenoids
31. Alkaloids
32. Steroids
33. Carbohydrates
34. Amino Acids, Peptides, and Proteins

<p><b>MACROMOLECULAR CHEMISTRY</b></p> <p>35. Chemistry of Synthetic High Polymers</p> <p>36. Physical Properties of Synthetic High Polymers</p> <p>37. Plastics Manufacture and Processing</p> <p>38. Plastics Fabrication and Uses</p> <p>39. Synthetic Elastomers and Natural Rubber</p> <p>40. Textiles and Fibers</p> <p>41. Dyes, Organic Pigments, Fluorescent Brighteners, and Photographic Sensitizers</p> <p>42. Coatings, Inks, and Related Products</p> <p>43. Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products</p> <p>44. Industrial Carbohydrates</p> <p>45. Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes</p> <p>46. Surface-Active Agents and Detergents</p> <p><b>APPLIED CHEMISTRY AND CHEMICAL ENGINEERING</b></p> <p>47. Apparatus and Plant Equipment</p> <p>48. Unit Operations and Processes</p> <p>49. Industrial Inorganic Chemicals</p> <p>50. Propellants and Explosives</p> <p>51. Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products</p> <p>52. Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology</p> <p>53. Mineralogical and Geological Chemistry</p> <p>54. Extractive Metallurgy</p> <p>55. Ferrous Metals and Alloys</p> <p>56. Nonferrous Metals and Alloys</p> <p>57. Ceramics</p>	<p>58. Cement, concrete, and Related Building Materials</p> <p>59. Air Pollution and Industrial Hygiene</p> <p>60. Waste Treatment and Disposal</p> <p>61. Water</p> <p>62. Essential Oils and Cosmetics</p> <p>63. Pharmaceuticals</p> <p>64. Pharmaceutical Analysis</p> <p><b>PHYSICAL, INORGANIC, AND ANALYTICAL CHEMISTRY</b></p> <p>65. General Physical Chemistry</p> <p>66. Surface Chemistry and Colloids</p> <p>67. Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms</p> <p>68. Phase Equilibriums, Chemical Equilibriums, and Solutions</p> <p>69. Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties</p> <p>70. Nuclear Phenomena</p> <p>71. Nuclear Technology</p> <p>72. Electrochemistry</p> <p>73. Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties</p> <p>74. Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes</p> <p>75. Crystallography and Liquid Crystals</p> <p>76. Electric Phenomena</p> <p>77. Magnetic Phenomena</p> <p>78. Inorganic Chemicals and Reactions</p> <p>79. Inorganic Analytical Chemistry</p> <p>80. Organic Analytical Chemistry</p>
---	--

**演習問題**

**3.3-1** C. Brown and J. Jones, J. Appl. Phys., 86, 3333, 1999 の文献タイトルと抄録を確認したい。(文献検索)

ヒント：手持ちの情報からは著者名での検索ができる。検索結果が膨大になる場合は必要に応じて絞り込みを行う。最近の論文なので目次一覧から探してみるのもよい。

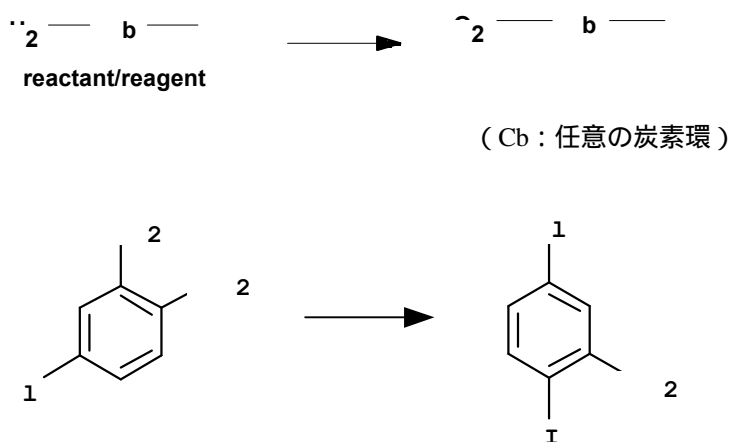
**3.3-2** カフェイン (Caffeine) の構造と合成法が知りたい。(物質検索)

ヒント：まず構造が知りたいので物質情報を確認する。そこから合成法を得るために用意されているリンクを利用する。

**3.3-3** 次のアミノ基 (NH<sub>2</sub>) をニトロ基 (NO<sub>2</sub>) にかえる反応情報を集めたい。(反応検索)



ヒント：構造図から反応情報を得るための検索を行う。ただし のように作図しただけでは、 のように、NH<sub>2</sub>がNO<sub>2</sub>になったものではない反応も含まれてしまう。



**3.3-1** C. Brown and J. Jones, J. Appl. Phys., 86, 3333, 1999 の文献タイトルと抄録を確認したい。(文献検索)

**解答** Brown, C.という著者名から検索してみる。膨大な結果件数になるので「Analyze/Refine」機能を活用する。(3.3.4(2)参照)ここでは出版年か他に分かっている著者名を条件として加える。通常はこの段階でかなり絞り込めるが、雑誌タイトルが絞り込みの条件として必要なときは「Analyze」の「Journal Name」の項目を利用する。収録タイトルの一覧表示はアルファベット順を選択すると探しやすい。答えは”Accurate determinatio of the temperature ...” で始まる論文。なお今回の文献は目次一覧からも確認できる。

**3.3-2** カフェイン (Caffeine) の構造と合成法が知りたい。(物質検索)

**解答** Caffeine は正式な索引名称ではないが、『SciFinder Scholar』ではこうした慣用名からの検索もできる。物質検索項目の「Substance Identifier」から名称で検索。CAS 登録番号 58-08-2 というものがヒットする。顕微鏡アイコンから詳細情報を確認する。合成法は、検索結果画面の下にある「Get Reactions」ボタン、もしくは「A B」というアイコンをクリックし、反応の役割から「Product」を選択し「OK」。50 件程度のヒットがある。この方法で合成情報が少ないときは、「Get Reactions」の代わりに隣の「Get References」から「Preparation」をチェックして「OK」。合成に関する文献を表示させる。

**3.3-3** 次のアミノ基 ( $\text{NH}_2$ ) をニトロ基 ( $\text{NO}_2$ ) にかえる反応情報を集めたい。(反応検索)



**解答** まず のように反応を作図し「Get Reactions」。このときあらわれるダイアログボックスでは「substructures of more...」を選択。(3.3.3(2)参照) 検索結果を確認すると 850 件程度で のようなものもふくまれてしまうので、原子の対応関係を指定するマッピングや、反応部位の指

定の追加が必要である。「Refine」「Chemical Structure」ではじめの構造図に下の のような追加修正を加えると(図表 3.3-10 参照)、必要と思われる反応 50 件程度まで絞り込むことができる。

