

3.7 CrossFire (Beilstein/Gmelin)

3.7.1 CrossFire (Beilstein/Gmelin) とは

『CrossFire』(クロスファイア)とは、『Beilstein』(バイルシュタイン)と『Gmelin』(グメリン)という2つのデータベースを機能的に検索できる検索システムです。有機化合物を体系的に収録する『Beilstein Handbook of Organic Chemistry』(1881年創刊)と、無機化学・有機金属化学の全書として名高い『Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry』(1817年創刊)をそれぞれ基礎とするこの2つのデータベースからは、化合物情報や反応情報のほか文献情報も入手可能です。

(1) 概要

項目	内容説明	
分野	化学、物理学、材料科学、薬理学、医学、生物学など	
提供機関	MDL Information Systems	
収録対象	学術雑誌論文、会議録、特許、学位論文などに掲載された化合物情報、反応情報およびその文献情報	
対象誌と範囲	『Beilstein』	上記ハンドブックの収録情報(1771~1980) 有機化学系の学術雑誌約175誌(1981~)
	『Gmelin』	上記ハンドブックの収録情報(1772~1974) 無機化学・有機金属化学系の学術雑誌約62誌(1975~)
更新頻度	年4回	
URL	専用ソフトで利用。附属図書館ウェブサイトよりダウンロード可能。	
利用方法	図書館内の専用パソコン。同時アクセスは全学で ユーザまで。研究室での利用は要申請。	
備考	詳細は http://www.library.tohoku.ac.jp/dbsi/crossfire/	

(2) 特徴

専門家により選定された200年以上に渡るデータが蓄積されており、随所に張り巡らされたリンクをたどることで、ある化合物について報告された広範囲な情報を網羅的に収集可能です。また、キーワード検索だけでなく、物性情報や構造式、反応式から検索ができ、さまざまな角度から化学情報を得ることができます。

3.7.2 検索のスタート

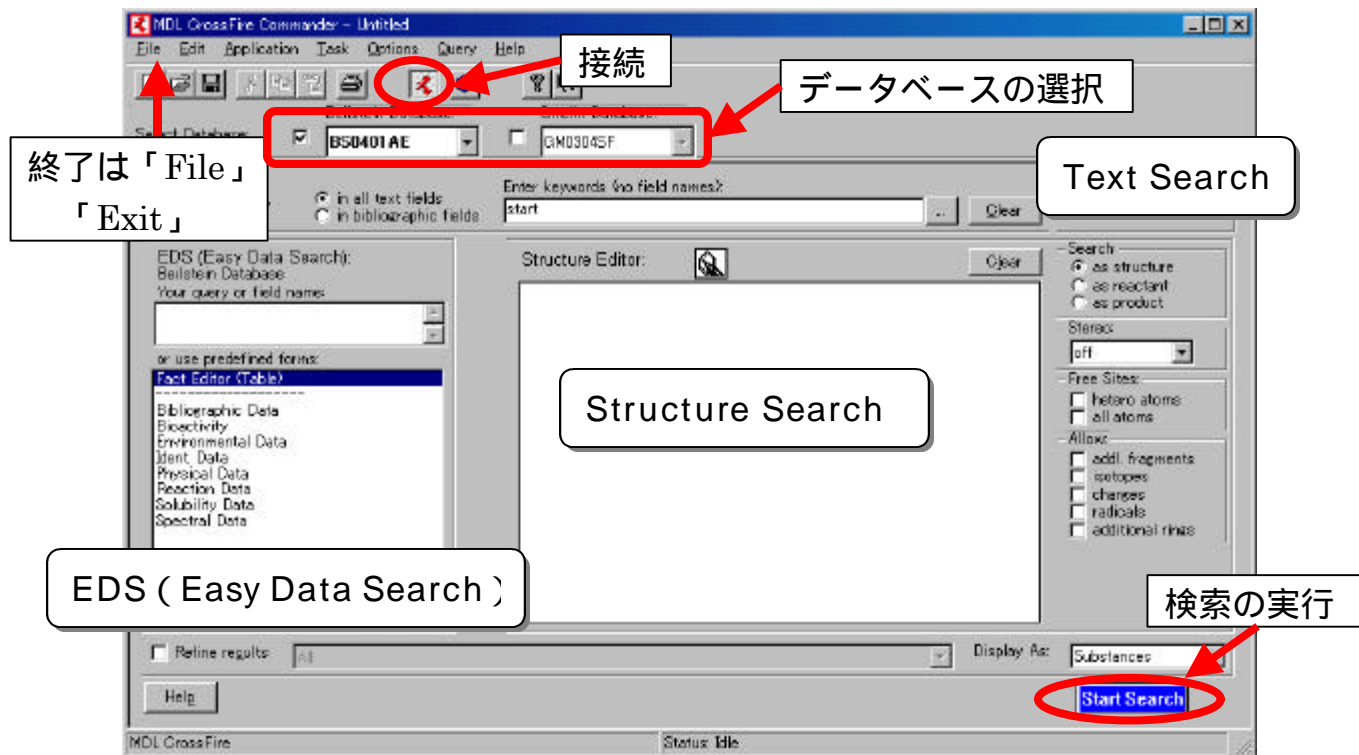
ここではまず『CrossFire』の基本的な利用方法について説明します。

接続とデータベースの選択

『CrossFire Commander』(専用ソフト)を起動すると、下記の画面が表示されます。まずサーバに接続するため、「CrossFire」ボタンをクリックしてください。サーバに接続されると、データベースが選択可能となりますので、検索したいデータベースをチェックします。2つ同時に選択することも可能です。

検索方法の選択と実行

目的に合わせて検索方法を選択します。検索方法は、「Text Search」(キーワードによる検索)、「Structure Search」(構造や反応からの検索)、「EDS (Easy Data Search)」(物性情報やキーワードからの検索)の3種類あり、組み合わせて検索することも可能です。検索の実行は、画面右下の「Start Search」をクリックします。



次ページ以降では、実際の検索例を用いて3つの検索方法について説明します。

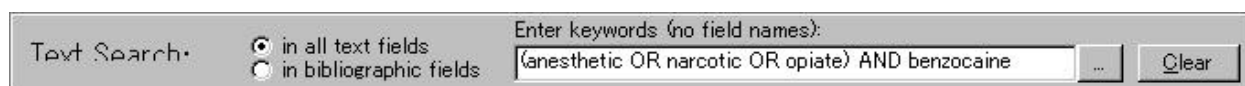
3.7.3 化合物情報の検索

ここでは「Text Search」を例に、化合物情報の基本的な検索方法を説明します。

例題 1 麻酔剤 (anesthetic, narcotic, opiate) として使われるベンゾカイン (benzocaine) の沸点を『Beilstein』と『Gmelin』で調べる。

キーワードの入力

テキストボックスに検索式を入力します。分子式や CAS 登録番号などでも検索可能です。ここでは「(anesthetic OR narcotic OR opiate) AND benzocaine」と入力し、「in all text fields」を選択して、画面右下の「Start Search」をクリックします。



文献情報のみ検索したい場合は「in bibliographic fields」

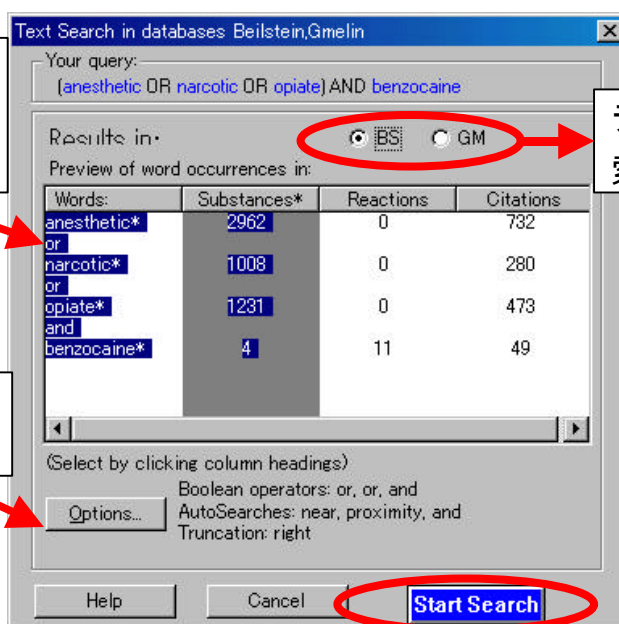
検索式の設定と実行

各単語ごとに各項目 (化合物・反応・文献情報) におけるヒット件数が表示されます。ここではすべての単語を反転させたまま、「Substances」をクリックし、「Start Search」をクリックします。

検索式からはず
したい検索語は
反転を解除

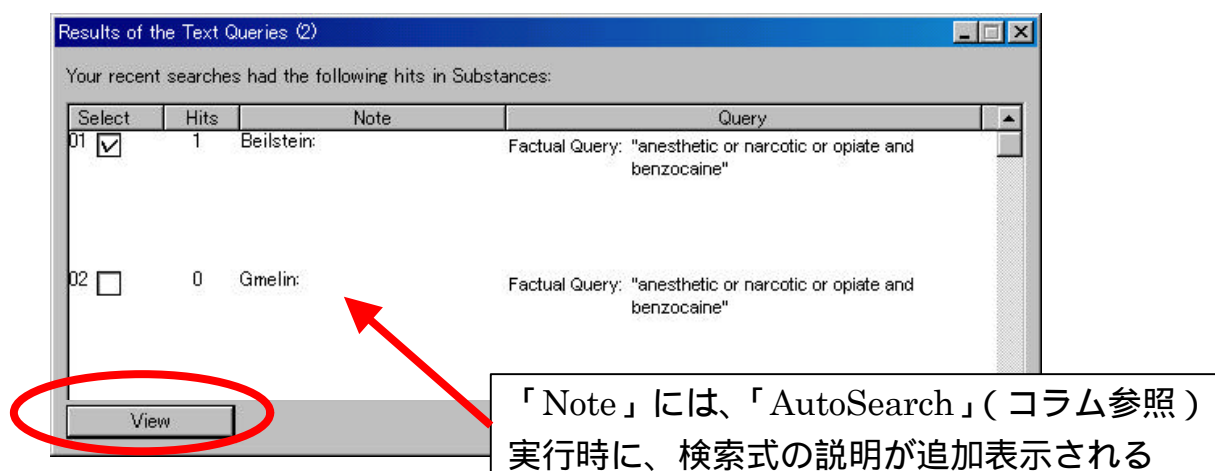
データベースごとの検
索結果の切り換え表示

「Word search options」
コラム参照



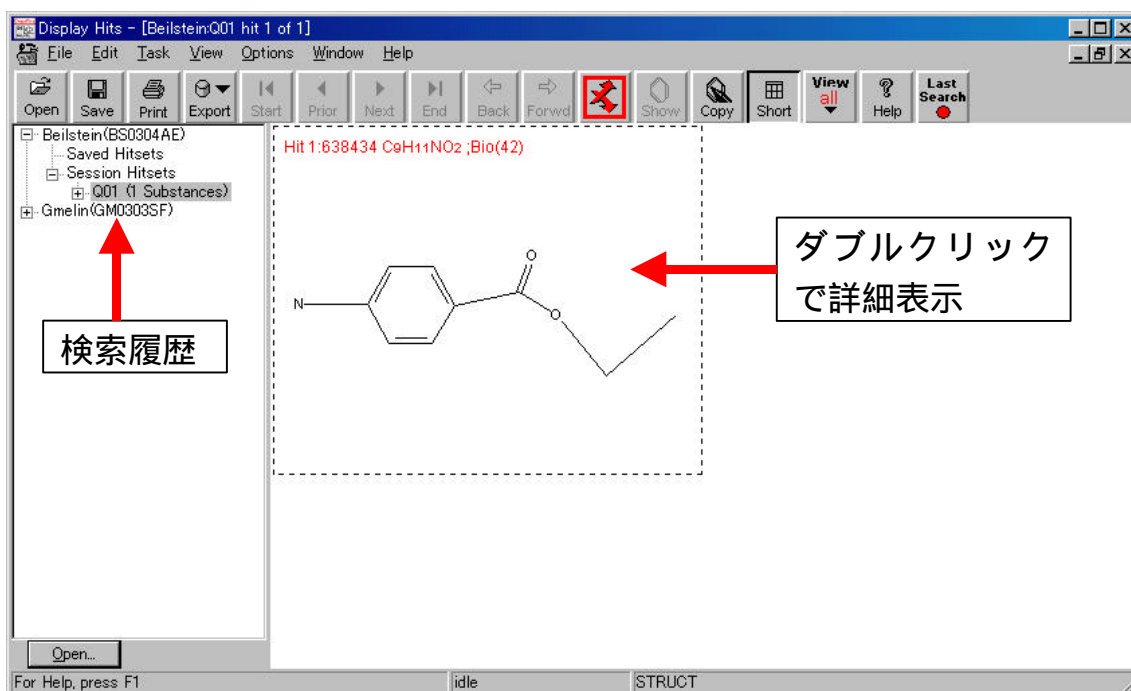
検索式と検索結果候補の一覧

「Hits」にヒット件数、「Note」にデータベース名、「Query」に実行した検索式が表示されます。ここでは『Beilstein』に1件ヒットしたので、検索結果を表示するため、チェックが入っているのを確認し「View」をクリックします。



検索結果の一覧表示「Display Hits」

検索結果が画面右側に一覧表示されるので、詳細表示したいものをダブルクリックします。画面左側にはすべての検索結果が、データベースごとにツリー型で蓄積されています。蓄積された検索結果は、左クリックで表示の切り替えが可能です。



検索結果の詳細表示「Display Hits」

選択した化合物に関する情報が一画面中表示されるので、「Field Availability List」中のコードをクリックし、各データにジャンプします。また、各データには随所にリンクが張られており、他の化合物や反応および文献情報にアクセス可能です。

検索画面に戻る

Field Availability List 1-10 of 46

Code	Field Name	Occ.
PHAR	Bioactivity: Pharmacological Data	39
ECI	Ecological Data: Ecotoxicology	3
RX	Reaction	1278
XREF	Crossfile Reference	11
DERIV	Derivative	33
PURIF	Purification	1
EMOM	Electrical Moment	5
DEFOR	Molecular Deformation	1
CRYSD	Crystal Property Description	2
MELT	Melting Point	38

Field Availability List 11-20 of 46

Code	Field Name	Occ.
CALPH	Calorimetric Data	2
BP	Boiling Point	3
LIQPH	Liquid Phase	1
SOLM	Self-diffusion	1

沸点のコード「BP」をクリックすると該当データにジャンプ

保存、印刷、各種エクスポートなど

化合物同定情報
(「Substance」)
 ■ CAS 登録番号
 ■ 化学名
 ■ 分子式
 など

収録データリスト
 ■ 薬理学データ
 ■ 環境データ
 ■ 反応情報
 ■ 各種物性情報
 など

Boiling Point 1-3 of 3

VALUE (BP) C	Pressure (P) Torr	Note	Ref.
141 - 143	0.8	1	
310		1	2
182.8 - 183.9	14	2	3

Note 1: Handbook
 Note 2: Handbook
 Ref. 1: [4738726](#) [LINK](#) ; Journal, Gnet, JPMSME, J. Pharm. Sci., 53, 1964, 1268.
 Ref. 2: [7222082](#) [LINK](#) ; Journal, Curtius, JPCEAC, J. Prakt. Chem., <2> 95, 1917, 341.
 Ref. 3: [2167985](#) [LINK](#) ; Journal, Kohrsusch, Stockmar, MOCBOT, Monatsb. Chem., 66, 1935, 316, 324.

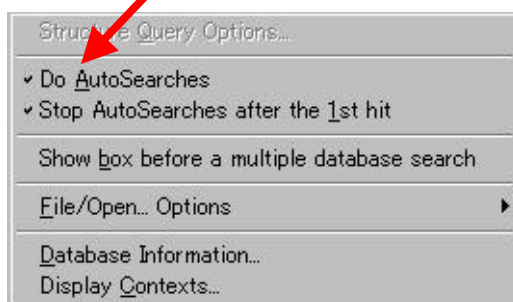
Liquid Phase
 Description: Association in the liquid state

沸点データ
 ■ 数値
 ■ 文献情報

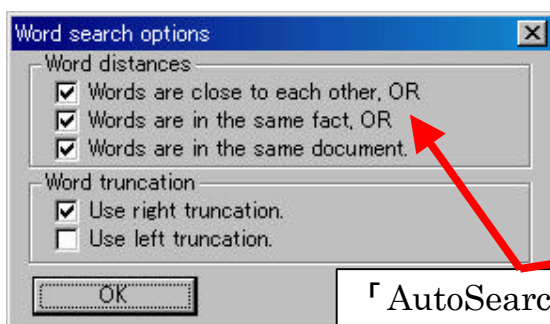
🏠 : 各データから「Substance」にジャンプ
 : チェックすると、印刷や保存の対象となる
 : 対象データの保存やエクスポートなど

コラム AutoSearch

『CrossFire』には、「AutoSearch」という簡単に幅広い検索を行いたいときに有用な機能があります。この機能を使うと、「Text Search」の場合は、各キーワード同士を「near proximity and」の順に自動的に結んで、「Structure Search」の場合は、「original query free sites on hetero atoms free sites on all atoms allow extra rings」の順に条件を自動的に設定して検索します。「AutoSearch」は、ツールバー上の「Query」から「Do AutoSearches」をチェックすることで実行可能です。また、「Stop AutoSearches after the 1st hit」をチェックすると、「AutoSearch」を行う際に1件でもヒットした時点で、それ以降の検索は中止されます。



「Text Search」



「Structure Search」

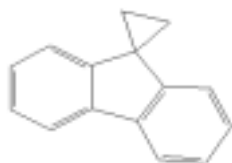


「AutoSearch」の設定はそれぞれ変更可能

3.7.4 反応情報と文献情報の検索

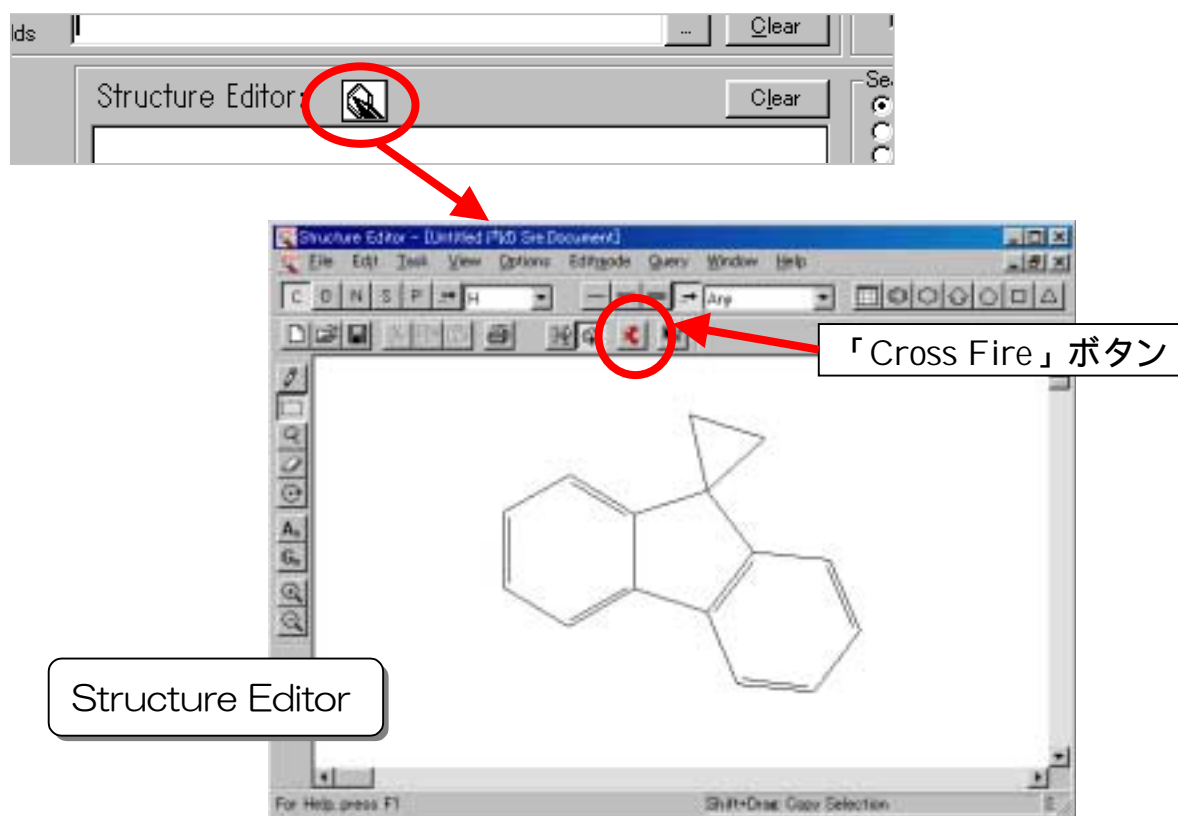
ここでは「Structure Search」を使って、物質構造から化合物を検索し、その反応情報と文献情報を調べる方法を説明します。

例題 2 以下の化合物を『Beilstein』で調べ、その反応情報と文献情報を調べる。



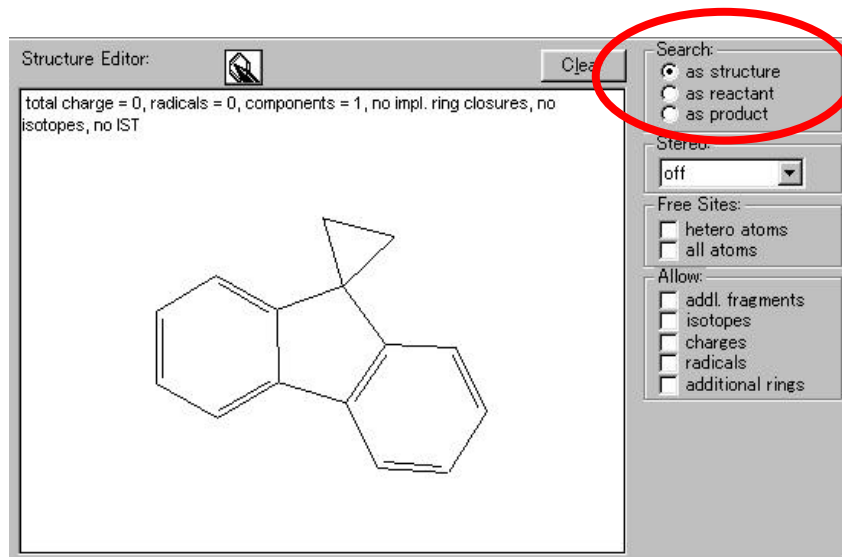
① 作図

画面中央のアイコンをクリックし、「Structure Editor」を起動して作図します。作図後、Editor 画面内の「CrossFire」ボタンをクリックすると、メイン画面に図がコピーされます。別途作図ソフト「ISIS / Draw」がインストールされている場合、ツールバー上の「Options」 「Structure Editors」から切り替えて利用可能です。



検索条件の設定

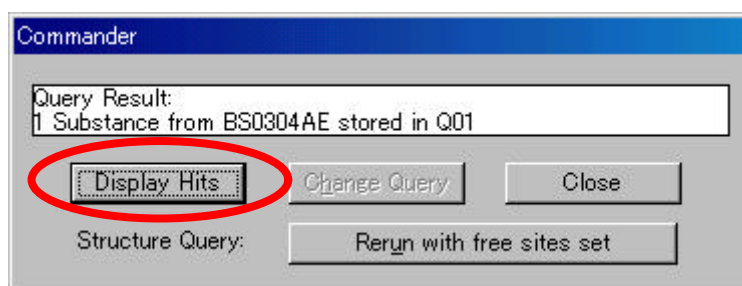
作図した構造について必要に応じて各検索条件を設定し、メイン画面右下の「Start Search」をクリックします。ここでは完全一致検索で化合物を検索するため、「as structure」にのみチェックを入れて検索します。



条件項目	内容説明
Search	作図した構図の役割を化合物、反応物、生成物のどれにするか
Stereo	絶対立体配置、相対立体配置、ラセミ体を検索対象とするかどうか
Free Sites	ヘテロ原子、もしくはすべての原子による置換を許すかどうか
Allow	フラグメントを含む化合物、同位体、イオン性化合物、ラジカル性化合物、環の縮合を許した化合物を検索対象とするかどうか

ヒット件数の表示

ヒット件数が表示されるので、「Display Hits」をクリックします。以下のダイアログは化合物が1件ヒットし、その検索結果は「Q01」として蓄積されたことを意味しています。



検索結果の表示と変換

ヒットした化合物が「Display Hits」画面に表示されます。ここでは、化合物・反応・文献情報を相互に変換できる「Convert」機能を使って、化合物情報から反応情報や文献情報へとアクセスします。この機能で得られた情報は、1つの検索結果として画面左側にツリー型で蓄積され、左クリックでそれぞれの情報にアクセス可能です。

右クリック

Substances (化合物情報)

Convert a Hit or Hitset

Convert

- the Current Hit No. 1 of Q01
- the Entire Hitset Q01

To a new hitset of all referenced

Reactions

Reactions

Citations

OK Help Cancel

Reactions (反応情報)

Citations (文献情報)

ダブルクリックすると、反応の詳細、反応中の化合物情報、関連する文献情報を一覧表示

ダブルクリックすると、書誌情報、抄録、文献中の化合物情報、反応情報を一覧表示

3.7.5 物性情報からの検索

ここでは「EDS (Easy Data Search)」を使って、物性情報やキーワードからフォームを用いて化合物情報を検索する方法を説明します。

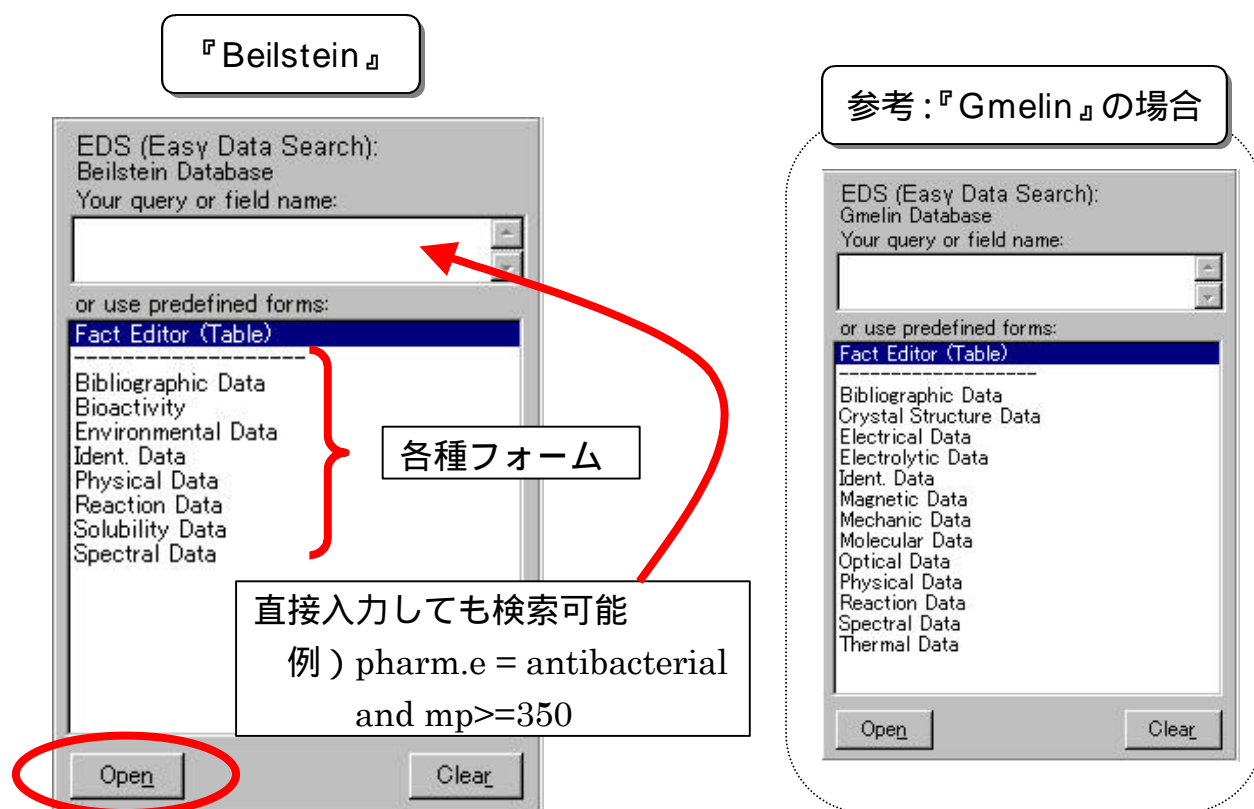
例題 3 抗菌性 (antibacterial) という薬理効果 (pharmacological effect) を有し、融点が 350 以上の化合物を『Beilstein』で調べる。

検索方法の選択

「EDS」のフォーム一覧の中にある「Fact Editor (Table)」をダブルクリック、または反転させた状態で「Open」をクリックします。

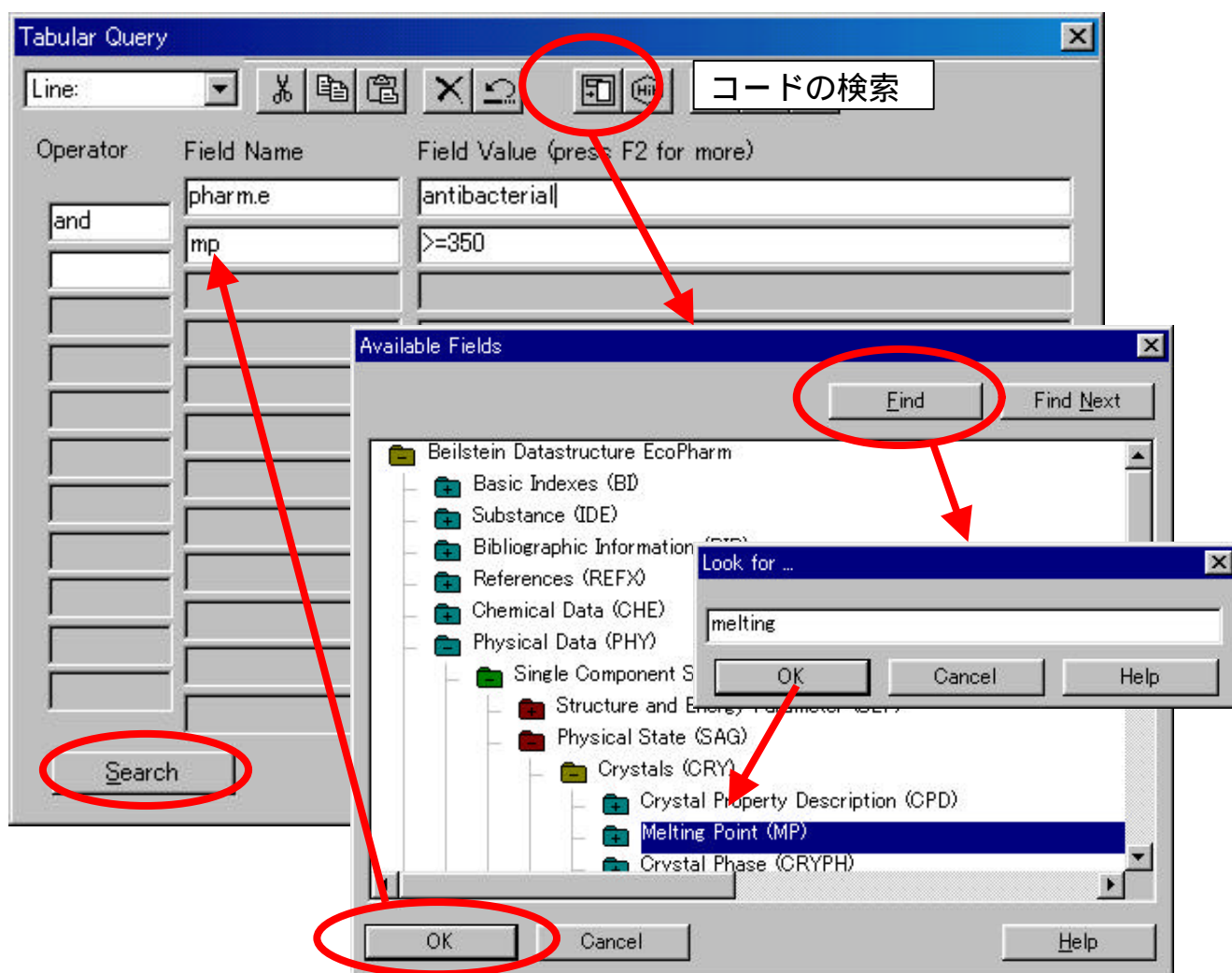
■ 検索のポイント

検索項目が異なるため「EDS」では『Beilstein』と『Gmelin』の2つのデータベースを同時に選択することはできません。また、主要なデータについては予め定義されているフォームを使ってより簡単に検索可能です。



物性情報の入力

「Field Name」に検索項目のコード（薬理効果のコード「PHARM.E」と融点のコード「MP」）、「Field Value」に物性情報（抗菌性「antibacterial」と融点「>=350」）そして「Operator」に演算子（「and」）を入力し、「Search」をクリックします。コードはアイコンをクリックして表示される「Available Field」から検索可能で、演算子は「and」、「near」、「next」、「not」、「or」、「proximity」が使用可能です。



ヒット件数の表示と検索結果の表示

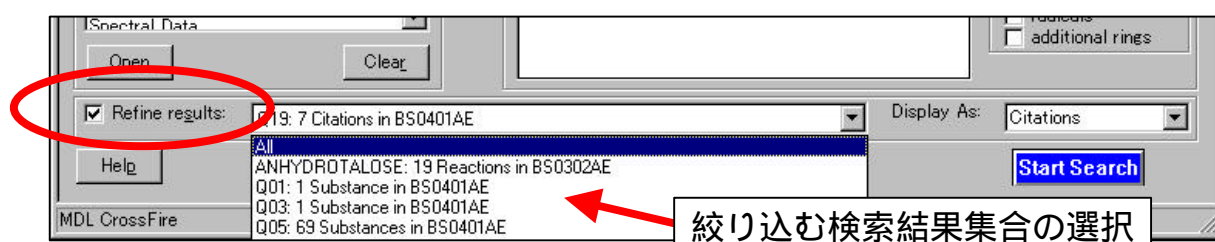
3.7.4 と同様のダイアログが表示されるので、「Display Hits」をクリックしてください。詳細表示については3.7.3 を参照してください。

3.7.6 その他の機能

ここでは『CrossFire』をより使いこなすための機能を紹介します。

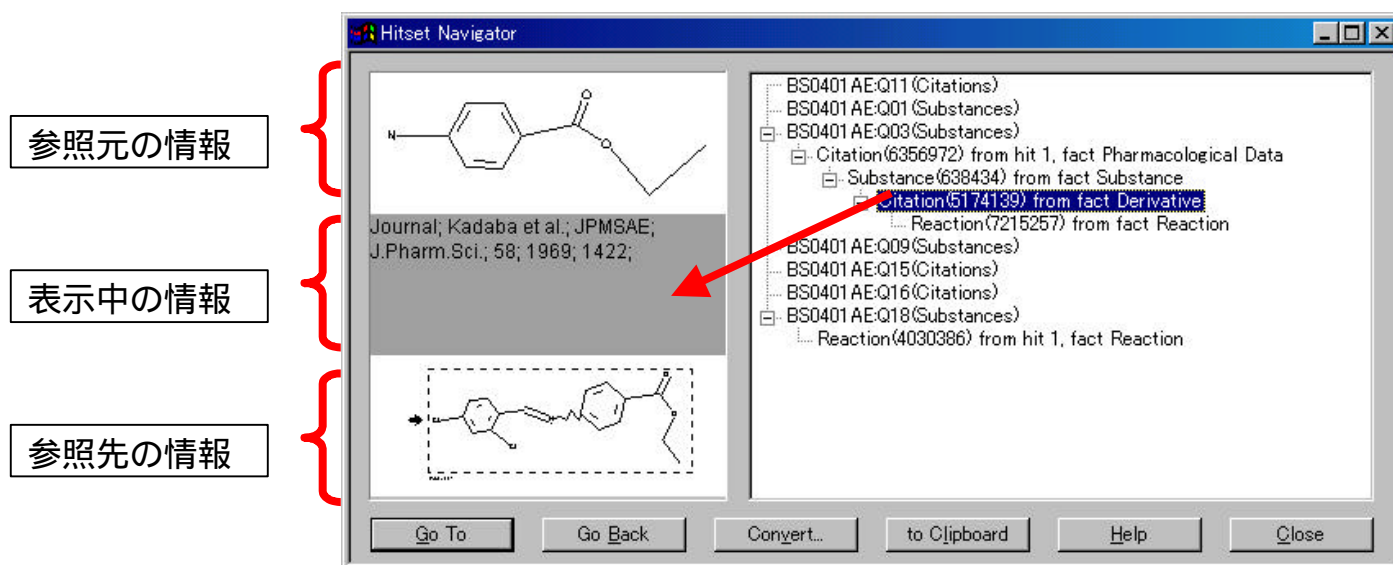
(1) 検索結果集合の絞り込み

「EDS (Easy Data Search)」では、検索結果集合を物性情報やキーワードで絞り込むことも可能です。メイン画面左下の「Refine results」をチェックして、検索結果集合を選択すると、その集合を検索対象として「EDS」を実行できます。

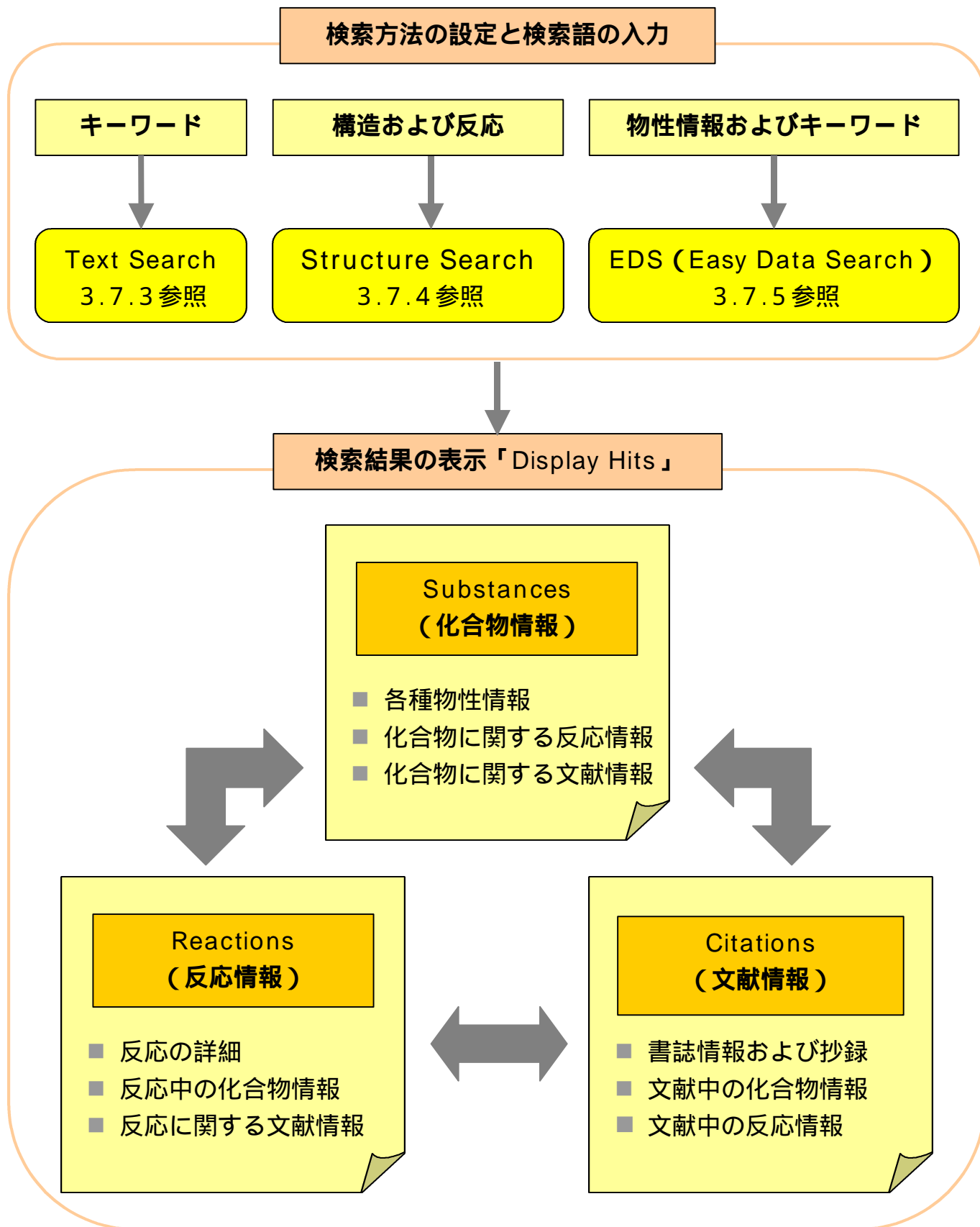


(2) 各情報の階層表示

「Display Hits」画面において、次々とリンクをたどりさまざまな情報を入手できるのが『CrossFire』の有用な特徴の1つですが、複数の新しい画面が次々と展開するため、どの情報をどの情報から参照したのかが判断しにくくなってしまいます。そこで、ツールバー上の「View」から「Hitset Navigator」を実行すると、表示した情報の一覧がツリー型に表示され、各情報の階層関係を把握することができます。



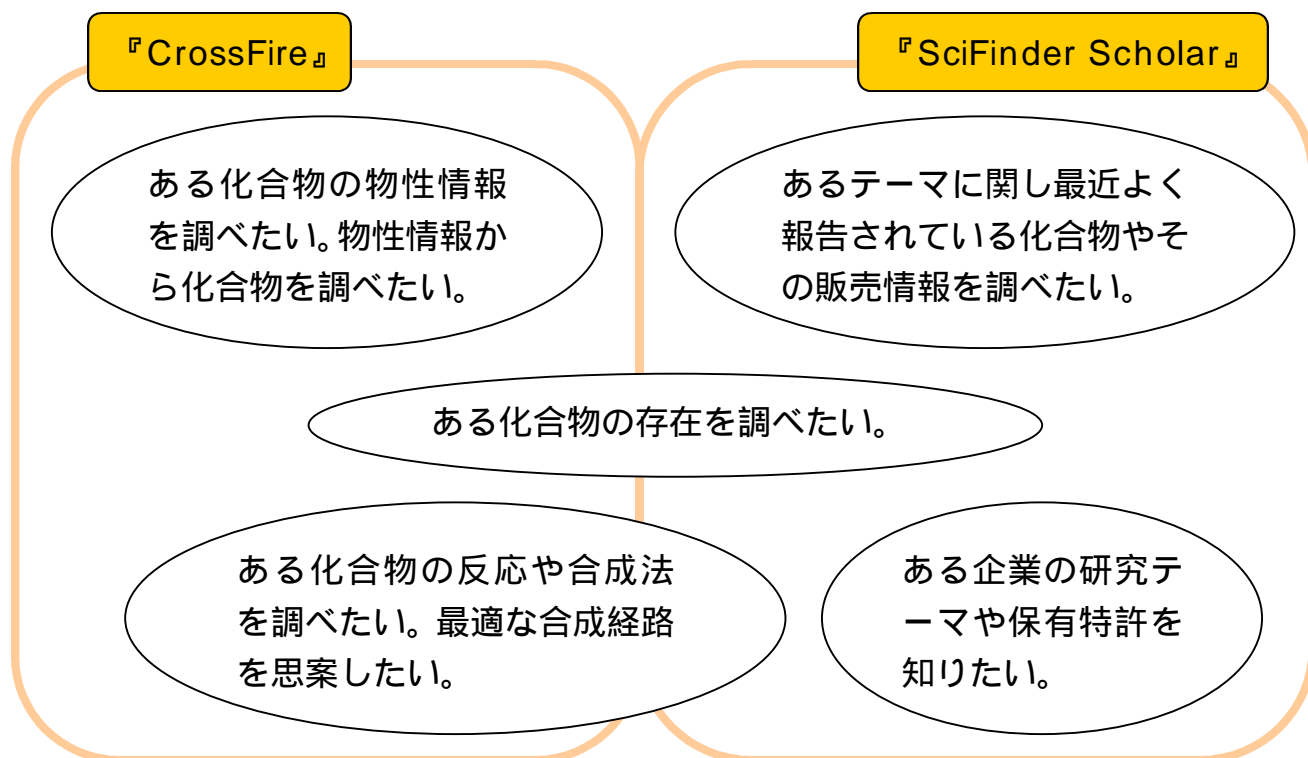
3.7.7 全体図



3.7.8 『CrossFire』と『SciFinder Scholar』

『CrossFire』と『SciFinder Scholar』はいずれも化学系の有用なデータベースですが、その特性は大きく異なるため、目的に合わせて使い分ける必要があります。

項目		CrossFire	SciFinder Scholar
収録形態		化合物中心 (化合物ごとに広範囲な情報を集約)	文献中心 (文献を網羅的に収録し、文献に化合物情報を関連付けている)
収録情報	化合物	1,000 万件 (1771 ~)	有機・無機 2,300 万件 (1957 ~) (たんぱく質・核酸 4,110 万件)
	反応	1,140 万件 (1771 ~)	760 万件 (1840 ~)
	抄録	170 万件 (1975 ~)	2,370 万件 (1840 ~)
	物性	4,000 万件 (650 種)	110 万件 (実測) 4.2 億件 (計算)
	特許	13 万件 (1925 ~ 1980)	430 万件 (1907 ~)
更新頻度		年 4 回	毎日
追加化合物		80 万件 / 年	1,550 万件 / 年
特徴	情報の性質	歴史性と信頼性	新規性と網羅性
	検索補助	各情報間の豊富なリンク	分析機能と絞り込み機能

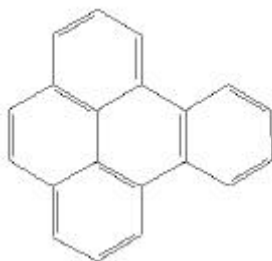


演習問題

- 3.7-1 カフェイン (caffeine, $C_8H_{10}N_4O_2$) の合成方法を『Beilstein』で調べる。

ヒント : 「EDS (Easy Data Search)」を使う。

- 3.7-2 以下の構造を部分構造として有し、融点が 190 前後の化合物を、すべての原子の置換を許すが、環の縮合は制限して『Beilstein』で調べる。



ヒント : 「Structure Editor」と「EDS (Easy Data Search)」を組み合わせて検索する。

- 3.7-3 塩化カリウム (potassium chloride, KCl) の 80 前後の水に対する溶解度を『Gmelin』で調べる。

ヒント : 条件の設定は「proximity」を使う。

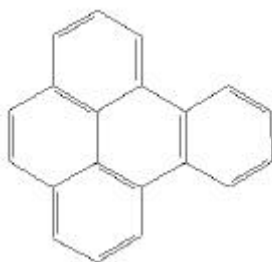
付録 演習問題の解答・解説

3.7-1 カフェイン (caffeine, C₈H₁₀N₄O₂) の合成方法を『Beilstein』で調べる。

解答

「Text Search」で「caffeine AND C₈H₁₀N₄O₂」と入力して検索してもよいが、ここではより簡単な「EDS (Easy Data Search)」で検索する。『Beilstein』を選択し、「EDS」内の「Ident. Data」をダブルクリックすると、入力フォームが表示されるので、「ID Properties」内の「Chemical Name」に「caffeine」と入力し、「OK」をクリックする。メイン画面に戻るので、「EDS」のテキストボックス内に「cn=caffeine」という検索式がコピーされているのを確認し、画面右下の「Display as」を「Substances」とし、「Start Search」をクリックする。検索結果が「Display Hits」に表示されるので、ダブルクリックでその詳細を表示し、「Field Availability List」内の「RX」というコードをクリックすると、反応情報がそれぞれの文献情報ともに一覧表示されるが、この時点では「reactant」としての反応も含まれている。そこで、ツールバー上の「View」から「Reaction View」「Substance as Product」を選択し、求める情報のみ表示する。ヒット件数は 97 件。

3.7-2 以下の構造を部分構造として有し、融点が 190 前後の化合物を、すべての原子の置換を許すが、環の縮合は制限して立体は考慮せずに『Beilstein』で調べる。

**解答**

『Beilstein』を選択し、「Structure Editor」で作図する。メイン画面にその図をコピーしたら、右側の検索条件項目を「Search」は「as structure」、 「Stereo」は「off」、 「Free Sites」は「all atoms」とそ

それぞれ設定し、「Allow」は「additional rings」以外にチェックを入れる。次に、「EDS」内の「Physical Data」をダブルクリックして入力フォームを表示し、「Melting Point」の欄に「=」「188-192」と入力して、「OK」をクリックする。メイン画面に戻るので、「EDS」のテキストボックス内に「(mp=188-192 or dp=188-192)」(「dp」は「decomposition point」) という検索式がコピーされているのを確認し、画面右下の「Display as」を「Substances」とし、「Start Search」をクリックすると、検索結果が「Display Hits」に表示される。求める化合物は CAS 登録番号が 53156-64-2 の化合物。

3.7-3 塩化カリウム (potassium chloride, KCl) の 80 前後の水に対する溶解度を『Gmelin』で調べる。

解答

『Gmelin』を選択し、「EDS」内の「Fact Editor (Table)」をダブルクリックする。表示されるフォームの1行目に、「Field Name」は「mf」(「cn」)、「Field Value」は「clk」(「potassium chloride」)と入力する。分子式の入力はHill方式に従う。「Operator」に「and」と入力したら、「Field Value」に「slb.sol」、「Field Value」に「water」と入力し、さらに「Operator」に「proximity」、「Field Value」に「slb.t」、「Field Value」に「78-82」と続けて入力して、「Search」をクリックする。塩化カリウムがヒットし、「Display Hits」に表示されるので、その詳細を表示するが、通常の詳細表示の設定では塩化カリウムに関する広範囲な情報が一画面上に表示され、求める情報を探し出すのが煩雑になってしまう。そこで、ツールバー上の「View」から「Hit only」を選択し、求める情報のみ表示する。ヒット件数は3件。