

**付録 9 演習問題の解答・解説**

注) 解答例における検索結果のヒット件数や所在は、変わることがあります。

- 3.2-1** 野依良治氏 (Noyori R) が、「ANGEW. CHEM. INT. EDIT.」という雑誌に投稿したケトン (Ketone) の立体選択的水素化 (stereoselective hydrogenation) に関するレビュー文献を探す。

**解答**

「General Search」で検索する。検索対象分野と期間は最初の設定のまま、「TOPIC」に「Ketone\* AND stereoselective hydrogenation」, 「AUTHOR」に「Noyori R\*」と入力する。

「SOURCE TITLE」は、「full source titles list」において「ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION」という雑誌タイトルを検索し、検索画面に入力する。

さらに絞り込むため、文献の種類を「Review」として検索すると、求める文献がヒットする。

答えとなる文献のタイトルは、「Asymmetric catalysis by architectural and functional molecular engineering : Practical chemo- and stereoselective hydrogenation of ketones」。

- 3.2-2** 東北大学工学研究科・工学部所属の研究者が発表した走査 (型) トンネル顕微鏡 (STM : scanning tunneling microscope) に関する文献の中で、最も引用されている文献を調べる。

**解答**

「General Search」で検索する。検索対象分野と期間は最初の設定のまま、「TOPIC」に「STM OR scanning tunneling microscope」と入力する。

「ADDRESS」は略語を使うため、「abbreviations help」から「University」と「Engineering」のそれぞれの略語を確認し、「Tohoku Univ SAME Eng\*」と入力して、検索する。

該当文献が一覧表示されるので、「SORT」の「Times Cited」を選択して並び替え、一番上に来たものが求める文献となる。

答えとなる文献のタイトルは、「DEPENDENCE OF THIN-OXIDE FILMS QUALITY ON SURFACE MICROROUGHNESS」。

**3.2-3** 下記の文献を引用している文献を網羅的に探す。また、それらの文献を分析し、どのような研究分野に影響を与えているか調べる。

GREENBERG M, JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY,  
1985, 260 (26), 14101-14110

### 解答

まず該当文献を「Cited Reference Search」で検索する。各項目はバリエーションを考慮し、「CITED AUTHOR」は「cited author index」を参考にして「Greenberg\*」, 「CITED WORK」は省略形を使うため、「cited work index」または「view the Thomson ISI list of journal」を参考にして「J\* BIO\* CH\*」と入力し、「CITED YEAR」は入力しない。

各項目を入力後、「SEARCH」をクリックすると、該当文献候補の一覧が簡略表示されるので、該当文献を探し「View record」をクリックする。

表示される「Full Record」で「GREENE LA」と「ZIFF EB」という共著者名を確認したら画面左上の「<< Return to Cited Reference Index」をクリックして一覧に戻る。

バリエーションに注意しながら該当文献と思われるものすべてをチェックし、「FINISH SEARCH」をクリックして、検索結果集合#1を作成する。

同様に共著者名でも「Cited Reference Search」を行い、それぞれの集合を作成する（集合#2と#3）。その際バリエーションに注意する。

次に、「Advanced Search」（または「Search History」）を選択する。「#1 OR #2 OR #3」という集合検索を実行すると、求める集合#4が得られる。

答えとなる文献数は、813件。

次に「Results Analysis」でそれら文献の分析を行う。「Advanced Search」（または「Search History」）画面上で集合#4のヒット件数である「812」をクリックして、それら文献を一覧表示し、画面右側の「ANALYZE」をクリックする。

分析項目および表示方法の設定は「Select field to rank by」は「Subject Category」、 「Analyze」は「All(up to 2000 records)」として、「ANALYZE」をクリックすると、研究分野による分析結

果が表示される。

答えとなる研究分野は、「BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY」や「NEUROSCIENCES」など。

- 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。通常はこれ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**

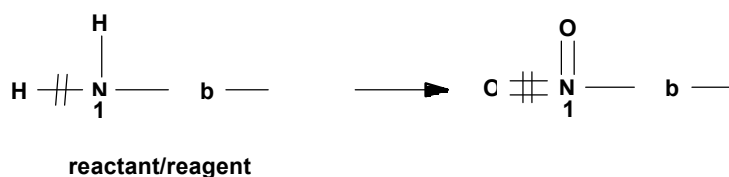
Caffeine は正式な索引名称ではないが、『SciFinder Scholar』ではこうした慣用名からの検索もできる。物質検索項目の「Substance Identifier」から名称で検索する。CAS登録番号 58-08-2 というものがヒットする。顕微鏡アイコンから詳細情報を確認する。合成法は、検索結果画面の下にある「Get Reactions」ボタン、もしくは「A B」というアイコンをクリックし、反応の役割から「Product」を選択し「OK」すると、50件程度のヒットがある。この方法で合成情報が少ないときは、「Get Reactions」の代わりに隣の「Get References」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

**3.4-1** 「癌の歴史」に関するレビュー記事を探す。**解答**

任意の MEDLINE データベースを選択し、「cancer」などのキーワードで検索する。入力した検索語に相当する統制語「Neoplasms」が表示されるので、それを選択し「Continue」ボタンをクリックする。シソーラスの該当部分が表示され「Neoplasms」がチェックされているので、そのまま「Continue」ボタンをクリックする。

下位件名 (Subheadings) の一覧が表示されるので、「hi - History」を選択して「Continue」ボタンをクリックすると、「癌の歴史」に関する文献全体が検索結果として得られる。

さらに「Review Articles」で限定をして検索すると、求めるレビュー記事が得られる。

**3.4-2** 「脳死」に関する文献で、2004 年に発表された抄録付きの英語文献に限定して探す。**解答**

「脳死」という用語が分からないので、とりあえず「brain」などのキーワードで検索する。それに関する件名の一覧が表示されるのでそれを調べると、「BRAIN DEATH」が該当する件名であることが分る。「BRAIN」ではノイズが多くなるのでチェックを外し、「BRAIN DEATH」だけに

チェックをつけて「Continue」ボタンをクリックする。

下位件名が選択できる画面となるが、ここでは特に限定せずに「Continue」ボタンをクリックして検索結果を得る。

「Abstracts」, 「English Language」をチェックし、Publication Year を「2004」と指定して検索すると、求める文献が得られる。

前の検索履歴を消したい時は、「Delete Searches」をクリックして不要な検索結果を削除します。

- 3.4-3** 「中枢神経系 (central nervous system)」の解剖に関する文献で、2000 年以降に発表されたレビュー記事を探す。

### 解答

「central nervous system」というキーワードで検索するとそれが統制語となっているので、そのまま「Continue」ボタンをクリックする。「解剖」を意味する下位件名「/ah - Anatomy & History」を選択し「Continue」ボタンをクリックすると検索集合が得られる。

「Review Articles」をチェックし、Publication Year を「2000-2005」と指定して検索すると、求める文献が得られる。

- 3.4-4** 玉井信教授 (Tamai M) が共著者となっていて、「Japanese Journal of Ophthalmology」誌に掲載された文献を探す。

### 解答

「Author」アイコンで著者名検索画面に切り替えて、「tamai m」と入力して検索する。「tamai m」のほかに「tamai ma」という著者名の形もあるので、念のためそれもチェックし検索する。

次に「Journal」アイコンで雑誌名検索画面に切り替えて、「Japanese Journal of Ophthalmology」というタイトルで検索する。そのタイトルがチェックされているので、そのまま検索する。

両者の検索結果が得られたところで、「Combine」アイコンで履歴検索に切り替える。2つの検索集合をチェックし「Continue」ボタンをクリックすると、求める文献が検索できる。

**3.5-1** 「院内感染」に関して記述した、東北大学所属研究者の文献を探す。

**解答** BASIC 検索のキーワード入力欄に、「院内感染」「東北大学」と入力して検索を行なうと、求める文献が検索できる。

**3.5-2** 「エイズ」の概略を知るため、総説記事に限定して文献を探す。

**解答** BASIC 検索のキーワード入力欄に「エイズ」と入力する。総説記事に限定するために、検索対象の限定で論文種類「総説」を選び検索すると、求める文献が検索できる。

**3.5-3** 上記の「エイズ」総説記事で、看護学分野の文献に限定して文献を探す。

**解答** 上記 3.5-2 の検索結果に対して、「絞り込み検索画面へ」ボタンをクリックして「絞り込み検索画面」を表示する。この画面で分類「看護」を指定し、「絞り込み」ボタンをクリックすると求める文献が検索できる。

**3.5-4** 「エイズ」総説記事で、院内感染についての言及した文献を探す。

**解答** ADVANCED 検索画面で、検索結果を使った履歴検索を行なう。まず「エイズ」、「院内感染」というキーワードで検索結果を作成しておく。次に、両方の検索結果のチェックボックスを選択し、検索対象の限定で論文種類「総説」を選んで「履歴検索実行」ボタンをクリックすると、求める文献が検索できる。

上記 3.5-3 までの検索結果を使って探す場合は、まず BASIC 検索画面から ADVANCED 検索画面に移る。「エイズ」の総説記事の検索結果は得られているので、更に「院内感染」というキーワードで検索結果を得る。最後に、この2つの検索結果を選択して「履歴検索実行」ボタンをクリックすると、同様に求める文献が検索できる。

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。

### 解答

「Text Search」で「caffeine AND  $C_8H_{10}N_4O_2$ 」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。

「ID Properties」内の「Chemical Name」に「caffeine」と入力し、「OK」をクリックする。

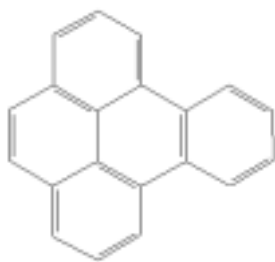
メイン画面に戻るので、「EDS」のテキストボックス内に「cn=caffeine」という検索式がコピーされているのを確認し、画面右下の「Display as」を「Substances」とし、「Start Search」をクリックする。

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。

反応情報がそれぞれの文献情報ともを一覧表示されるが、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。  
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。  
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。