

# SciFinder Scholar™ 2006

## - ご使用の前に -

Windows® 版

---

2005 年 8 月



# SciFinder Scholar™ 2006 を 使用する前に

SciFinder Scholar 2006 へようこそ！この資料では、多彩な化学および関連科学分野の情報の検索および解析機能を提供する SciFinder Scholar の概要および基本的な機能を紹介します。

トピック：	詳細は次のページでご覧になれます。
SciFinder Scholar の機能	4
SciFinder Scholar の内容	5-7
オプション機能	8
必要なハードウェアとソフトウェア	9-10
SciFinder Scholar の起動	11
検索 (Explore)	12
検索 (Locate)	13
目次の閲覧	14
SciFinder Scholar ヘルプとリソース	15

## SciFinder Scholar の機能

SciFinder Scholar 2006 の新機能：

- ナビゲーションの向上 – 検索およびロケート機能への効率的なアクセス
- 類似構造の検索 – 構造質問式をデータベースのすべての物質と照らし合わせ、類似性スコアの高い物質を検索
- 新しい構造および反応作画ツール
  - 可変置換位置ツール – 環上のどこに置換基を置くかを定義
  - 繰り返しグループツール – 置換基の鎖の長さおよび環のサイズを特定
- 構造検索用フィルタ – 以下の物質に限定できます：
  - 特定の物質のクラス
  - 単一成分の物質
  - 市販の物質
  - 少なくともひとつの関連文献のある物質
  - 特定の研究タイプ
- 反応結果で質問式をハイライト – 表示された反応で質問構造を容易に確認
- 関連情報を示す新しいインジケータ – 反応式の物質をクリックすることで逆合成情報、参考文献、物質の情報、市販品情報、規制情報をすばやく検索
- 中間反応段階の表示の向上 – ひと目で多段階反応のすべてのステップを見ることが出来ます
- 反応の収録内容を追加
  - 年から現在までの反応の反応条件（たとえば、時間、温度、圧力、pH）を閲覧
  - 生成物の混合比を閲覧
  - 反応中のすべての異性体を閲覧
- 書誌情報による検索 – タイトル中の単語、著者／発明者名、雑誌名、発行日、特許出願番号などの 1 つ以上の書誌情報から特定の文献をすばやく検索
- 重複文献の除去 – MEDLINE® と CAplus<sup>SM</sup> の回答の重複除去がすばやくでき、また自動的に重複を除くよう設定することもできます

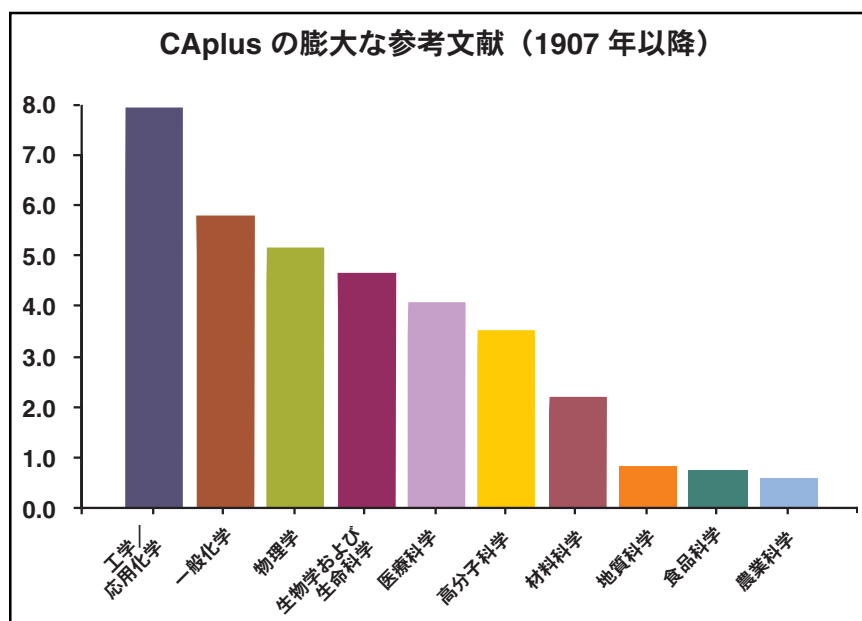
SciFinder Scholar には次の機能もあります。

- 化学構造（部分構造を含む）、反応構造、研究トピック、著者名、企業名または機関名などによる検索
- 回答セットの並べ替え、解析、および絞り込み
- 引用文献へのリンク
- 物質の回答から詳細なレコード、参考文献、3 次元モデル、市販品情報、規制情報、および反応へのリンク
- 結果の保存と印刷
- ChemPort® Connection<sup>SM</sup> を介して、全文データにアクセス
- 科学雑誌の目次の閲覧
- インターネットリソースへのリンク

## SciFinder Scholar の内容

SciFinder Scholar では、Chemical Abstracts Service (CAS) が作成したデータベース、および National Library of Medicine の MEDLINE データベースに含まれる情報を検索します。レコードはすべて英語です。

CAplus データベースは、1907 年から現在までの 150 ケ国、9,500 以上の雑誌から 2,500 万件を超える文献情報を収録しています。加えて、1907 年以前の 21,600 件のレコードも収録しています。文献の情報は、雑誌、特許、学会の講演集、学位論文、技術報告書、単行本などです。特許は 50 以上の特許発行機関から発行されたものを収録しています。CAplus は、科学、生物学、工学および関連する科学など、広範囲にわたる科学関連情報を網羅しています。



MEDLINE データベースでは、70 カ国 4,780 誌を超える生物医学分野の文献を網羅しています。MEDLINE には、OLDMEDLINE データベースからのデータも含め、1950 年以降の 1,500 万件を超える生物医学文献が収録されています。MEDLINE に入れ込むための索引作業が終了していない、IN-PROCESS のレコードも含まれています。

莫大な文献情報源に加え CAS REGISTRY<sup>SM</sup> データベースでは、2,600 万を超える有機および無機化合物と、5,600 万を超える配列にアクセスすることができます。これらのレコードには、構造式、化合物名、分子式、物性などが収録されています。

CASREACT<sup>®</sup> データベースでは、1840 年以降の雑誌や特許から 1000 万件を超える 一段階および多段階反応の情報にアクセスできます。SciFinder Scholar では、出典情報と共に、反応物、試薬、生成物および反応条件などを含む反応情報が収録されています。

多くの物質について、CHEMCATS<sup>®</sup> および CHEMLIST<sup>®</sup> データベースから、化学物質供給源および規制情報が得られます。900 万を超える製品について、供給業者の住所、価格などのカタログ情報を、900 以上の化学物質カタログおよびライブラリから引き出すことができます。1979 年以降の 238,000 件を超える規制情報レコードから、物質同定情報、物質台帳収載状況、情報源、およびコンプライアンス情報にアクセスできます。

データベースや内容の詳細については、CAS ウェブサイト、[www.cas.org](http://www.cas.org) をご覧ください。

SciFinder Scholar で検索できる情報は次の通りです。

- **文献情報**

- タイトル
- 著者／発明者名
- 企業名／機関名／特許出願人
- 発行年
- 情報源、発行日、出版社、巻、号、ページ、CODEN、ISSN
- 特許情報（特許、出願、優先権および関連特許情報など）
- 抄録
- 索引
- 補足語
- 引用文献
- 文献中の物質および反応

- **物質情報**

- 化学物質名
- CAS 登録番号®
- 分子式
- 構造式
- 配列情報（GenBank® 由来および特許出典情報を含む）
- 物性データ
- 化学物質供給業者のカタログからの市販品情報
- 規制情報
- 編集者のメモ
- 物質が収録されている文献
- 物質が関与する反応
- 物質に関連する追加情報が収録されている STN データベース  
リスト

- **反応情報**

- 反応物、試薬、生成物、触媒、溶媒および反応条件を含む反応式
- 反応が収録されている文献
- 反応関与物質についての追加反応、参考文献、物質の詳細、市販品  
情報、および規制情報

## オプション機能

SciFinder Scholar のオプション機能を以下に簡単に説明しています。機能の詳細については、SciFinder Scholar オンラインヘルプをご覧ください。

### SciFinder 部分構造検索モジュール

SciFinder 部分構造検索モジュール (SSM) をオプションとして購入できます。このモジュールによって次のことが行えます。

- 部分構造を指定した構造検索
- 類似性構造検索
- 様々な可変基や R-基の作図、例えば原子、ショートカット、可変グループ基などのリスト
- 特定な部位および結合における置換および環縮合の阻止
- 回答数予測のための結果の Preview 機能とサンプル回答の表示
- 指定した構造検索とその結果の解析
- 置換基および R-基の構成による分析
- 物性値で構造回答セットを分析

### 3 次元構造モデリング

Accelrys 社より提供されている Discovery Studio™ Viewer 製品 (DS ViewerPro または DS ViewerLite) を SciFinder Scholar とともに使用することで、3 次元構造モデルを見ることができます。Viewer 製品は高性能な分子表示アプリケーションであり、3 次元構造を深く理解できるようにモデルを操作することができます。



## 必要なハードウェアとソフトウェア

**コンピュータ**：最低でも Pentium クラスまたは同等のプロセッサを搭載した PC。

- Microsoft® Windows® 98、Me、2000、XP または NT 4.0。
- Windows 98、Me または NT 4.0 には最低メモリ容量 32 MB (RAM)、推奨メモリ 64 MB 以上。Windows 2000 または XP では最低メモリ 64 MB 以上、XP では推奨メモリ 128 MB (RAM) 以上。
- 最低ハードディスク容量 70 MB (ページファイルメモリを含まず)、推奨 80-85 MB (インストールには最低 150 MB が必要)。  
Microsoft Internet Explorer での SciFinder Scholar ツールバーの使用にはさらに 25 MB の空きディスク容量が必要です (インストールには 75 MB 必要)。  
(Microsoft .NET ソフトウェアがインストールされている必要があります)。
- インターネットによる CAS への TCP/IP ネットワークレベルの接続、さらにポート 210 を通じて CAS への Z39.50 アプリケーションレベルの接続が使用できること。  
ChemPort® Connection<sup>SM</sup> を介して全文および CAS サーバーのオンラインヘルプファイルにアクセスするにはポート 80 を通じて HTTP アプリケーションレベルに接続可能なことが必要です。

**モニタ**：SVGA カラーモニタ、最低解像度 800x600、推奨 1024x768 以上、最低 256 色。

**プリンタ**：高品質グラフィックプリンタ、例えば、レーザーやインクジェットが推奨されます。

## 追加ソフトウェア

**ウェブブラウザ** : Microsoft® Internet Explorer (MSIE) 、バージョン 4 またはそれ以降。Netscape® Navigator または Communicator、バージョン 4 かそれ以降。Mozilla Firefox™、バージョン 1.0。

インターネットブラウザは、ChemPort を介して全文へのアクセス、オンラインヘルプへのアクセス、または「Tools」メニューからインターネットリソースへのアクセスに必要です。

- 文献リンク (Reference Linking) などの ChemPort の幾つかの機能を使用するためにはプラグインが Netscape、Firefox のプラグインまたはコンポーネントフォルダにインストールされている必要があります。このプラグインは、SciFinder Scholar 2006 インストール時に自動的にインストールされます。
- オンラインヘルプおよび ChemPort 中の機能を使うには、Java™ および JavaScript™ を使用可能にしておく必要があります。
- ChemPort 文献リンクを使うには、MSIE 内で ActiveX を使用可能にしておく必要があります。
- ChemPort の機能の一部を使用するには Cookies を許可する必要があります。

**Adobe® Reader®** : バージョン 4.0 以降。

Adobe Readerは、CAS ウェブサイトおよび ChemPort を介して得る PDF 文書を表示するのに必要です。Reader は [www.adobe.com](http://www.adobe.com) からダウンロードできます。

**Discovery Studio™ ViewerPro または ViewerLite** : Windows バージョン 3.5 以降。

Accelrys 社より提供されている Discovery Studio Viewer 製品は、構造結果の 3 次元分子モデルを見ることができるビジュアル化ツールです。

- DS ViewerPro は Accelrys のウェブページ、[www.accelrys.com/products/dstudio/](http://www.accelrys.com/products/dstudio/) で入手できます。
- Accelrys 社の DS ViewerLite のサポートは終了していますが、CAS の [my.cas.org](http://my.cas.org) から無料で提供されています。ただし DS ViewerLite は「現状のまま」で提供されており、どのような保証もありません。

インストール後 DS ViewerPro または DS ViewerLite プログラムを一回起動させ、SciFinder が 3 次元モデルを表示するために使用する Windows Registry エントリを作成させてください。

## SciFinder Scholar の起動

SciFinder Scholar 2006 をインストールする際は、サイト管理者にご相談ください。適切にインストールできれば、ログオンして検索を開始できます。

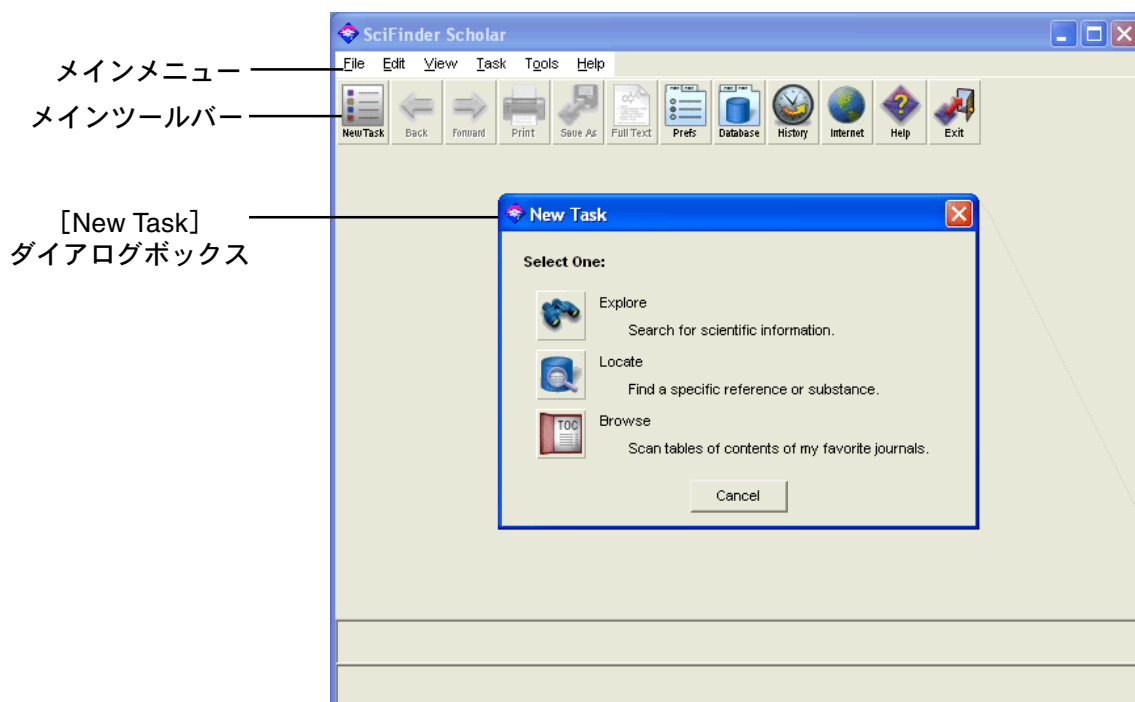
以下の手順に従って SciFinder Scholar を起動します。

1. インストール時に作成した「SciFinder Scholar」アイコンをダブルクリックします。または、スタート > プログラム > SciFinder Scholar 2006 を選択します。

SciFinder Scholar のスプラッシュ画面が表示され、次いでライセンス契約（License Agreement）が表示されます。

2. 契約要綱に同意する場合は、[Accept] をクリックして検索を開始します。

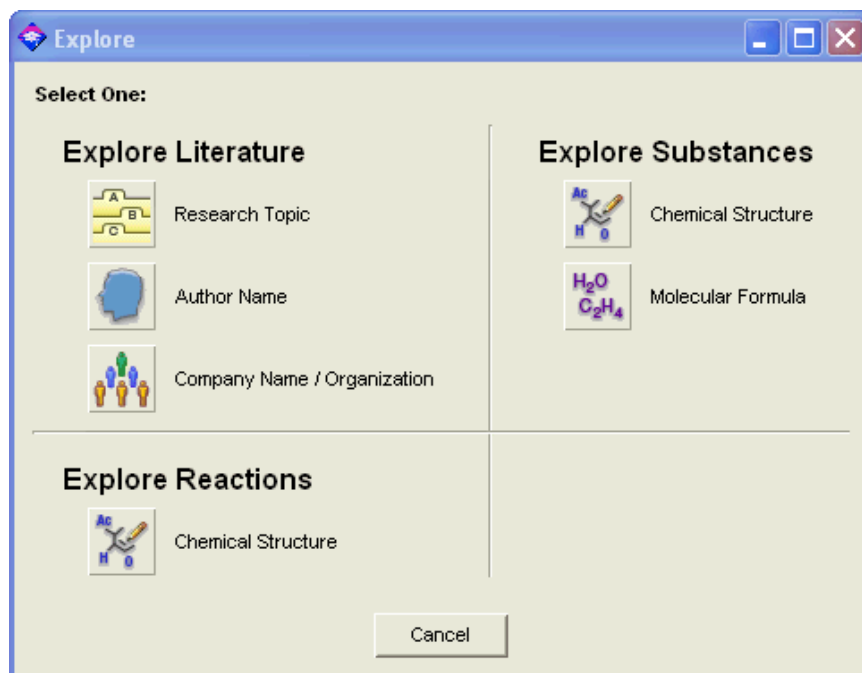
SciFinder Scholar のメインウィンドウが表示されます。その画面には、メインメニュー、メインツールバーおよび [New Task] ダイアログボックスがあります。



3. [New Task] ダイアログボックスのオプションから 1 つを選択します。

## 検索 (Explore)

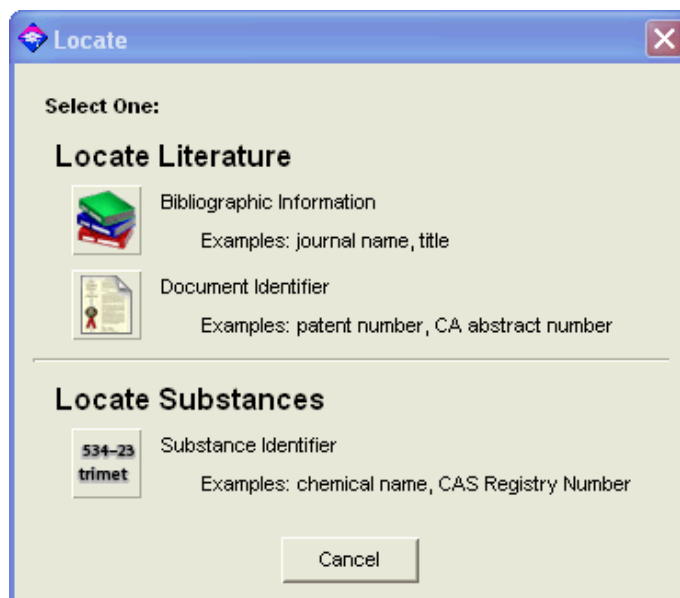
Explore 機能では CAS データベースだけではなく MEDLINE データベースでも検索が可能です。



実行したいタスクのアイコンをクリックして、必要な情報を入力してください。検索機能の詳細については、SciFinder Scholar オンラインヘルプをご覧ください。

## 検索 (Locate)

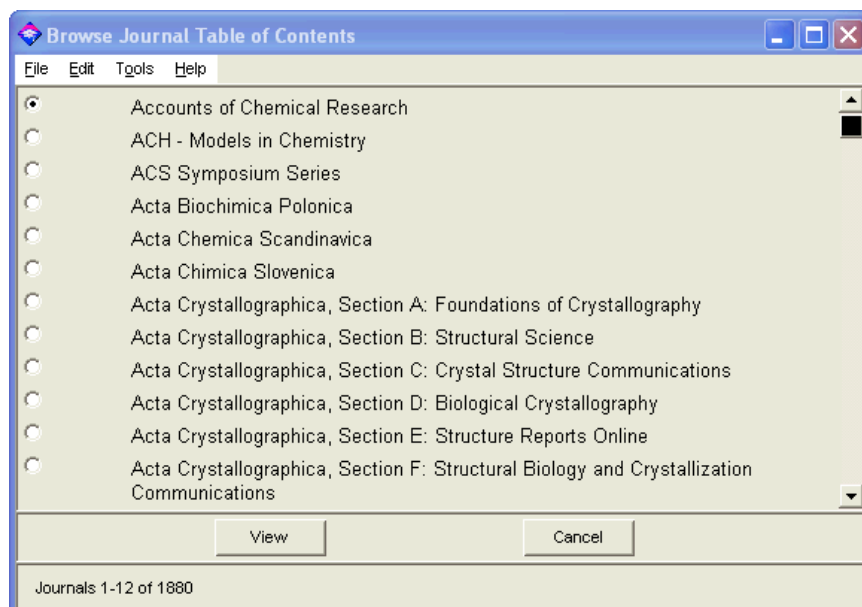
Locate 機能では、書誌情報およびレコード番号の 1 つ以上の情報に基づいて適切な文献をすばやく検索します。物質名および CAS 登録番号から特定物質を検索することも可能です。



実行したいタスクのアイコンをクリックして必要な情報を入力してください。Locate 機能の詳細については、SciFinder Scholar オンラインヘルプをご覧ください。

## 目次の閲覧

CAS データベースに収録されている約 1,900 の主要科学雑誌のリスト及びそれらの雑誌の目次を閲覧することができ、雑誌によっては全文オプションにアクセスできます。



目次を閲覧するには、雑誌名を選択し、[View] をクリックします。目次閲覧機能の詳細については、SciFinder Scholar オンラインヘルプをご覧ください。

## SciFinder Scholar ヘルプとリソース

### SciFinder Scholar オンラインヘルプ

検索のヒント、トラブルシューティング情報および使い方の例へのリンクを含む総括的なヘルプファイルは、SciFinder Scholar 内にあります。

ヘルプファイルにアクセスするには、メインツールバーにある [Help] ボタンをクリックしてください。または、[Help] メニューから [SciFinder Scholar Help] を選択します。

<F1> キーを押すと、操作状況ごとのヘルプが表示されます。

### SciFinder Scholar ウェブサイト

SciFinder Scholar に関する詳細な情報は、<http://www.jaici.or.jp/sci/SCHOLAR/index.html> をご覧ください。簡単な操作例、およびより効果的に SciFinder Scholar の検索を行うのに役立つ、操作上の一連のヒントにアクセスするには [Resources] をクリックしてください。

これらや他の SciFinder Scholar リソースに迅速にアクセスするには、メインツールバーにある [Internet] ボタンをクリックするか、[Tools] メニューにある [Internet] オプションを選択します。興味あるリソースを選択し、[OK] をクリックします。

### 追加の技術サポート

SciFinder Scholar へのご質問、技術サポートの必要性、またはご意見がある場合は、まずは学内のサイト管理者にご相談ください。

