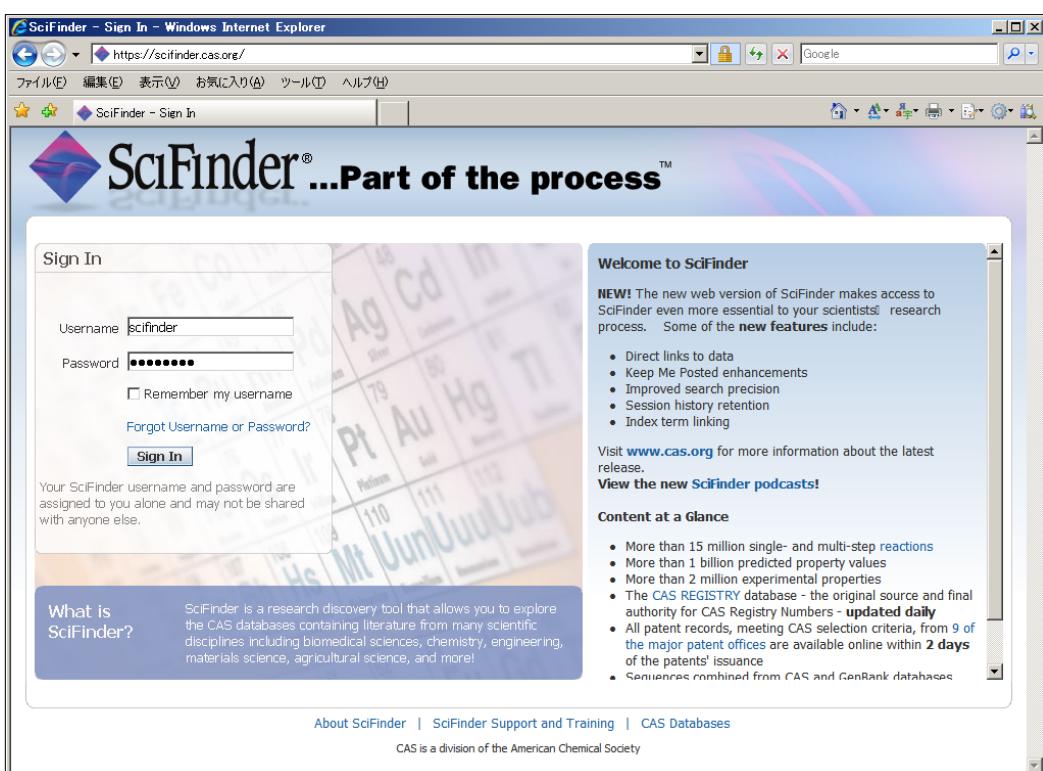


SciFinder

(Web 版)

説明会資料

2009 年 1 月



ご注意

- ・自らの研究以外の目的に利用することはできません
- ・データの過剰ダウンロードは禁止されています



JAICI 社団法人 化学情報協会

情報事業部 ヘルプデスク

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-3600
URL: www.jaici.or.jp
E-mail: support@jaici.or.jp

目次

◆ SciFinder の概要	2
◆ SciFinder が提供する情報	3
◆ レコード例	
➤ 文献情報 (CAplus)	4
➤ 物質情報 (REGISTRY)	5
➤ 化学反応情報 (CASREACT)	7
➤ カタログ情報 (CHEMCATS)	8
➤ 既存化学物質台帳情報 (CHEMLIST)	9
➤ 文献情報 (MEDLINE)	10
◆ SciFinder の検索	
➤ SciFinder (Web 版)へのアクセス	11
➤ SciFinder (Web 版)の終了	11
➤ SciFinder の検索全体像	12
➤ SciFinder の検索初期画面	
- 文献検索 初期画面	13
- 物質検索 初期画面	14
- 反応検索 初期画面	14
➤ 研究トピックの検索	15
- ChemPort Connection (原文献へのリンク)	17
- 検索結果の限定・解析機能 (Analyze/Refine)	19
- Categorize 機能	21
- 関連情報の抽出機能	22
- 情報共有機能 (リンク機能)	23
➤ 化学物質検索 (化学物質名称, CAS 登録番号)	24
- 化学物質関連情報へのリンク機能	25
➤ 化学物質検索 (分子式)	26
➤ 化学物質検索 (化学構造式)	27
- 完全一致検索ヒット例	28
- 部分構造検索ヒット例	29
- 類似性検索ヒット例	29
- 各検索タイプで得られる回答の違い	30
- 検索タイプ間の関係	30
- 検索結果の限定・解析機能 (Analyze/Refine)	31
➤ 化学反応検索	32
- 参考 「反応しない官能基」の指定	35
- 検索結果の限定・解析機能 (Analyze/Refine)	36
➤ 著者名検索	37
➤ 会社名(大学名)検索	38
➤ 文献情報からの検索	38
➤ Keep Me Posted 機能	39
➤ 検索結果の保存	41
➤ 検索結果の印刷	43
➤ Combine 機能	44
◆ APPENDIX	
➤ 参考情報: SciFinder ユーザ事例	47
➤ Chemical Abstracts が収載する文献情報	48
➤ Chemical Abstracts 収録分野 (セクション一覧表)	49
◆ SciFinder の利用環境	51
◆ 利用サポート (ヘルプデスクのご案内)	51

SciFinder の概要

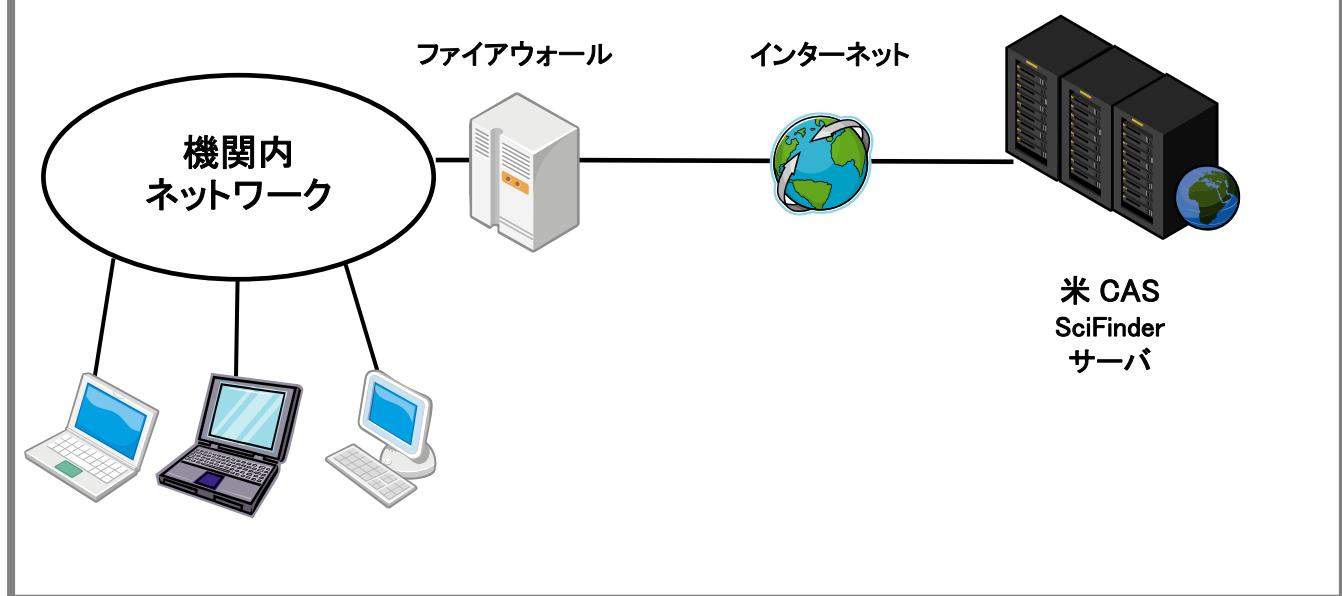
- ◆ SciFinder (Web 版)は、化学を中心とする医薬、生化学、物理、工学等の科学情報を必要とする研究者が、自ら利用することを想定したオンライン検索サービスです。現在、世界中の企業・大学・研究機関の研究者によって研究・開発の最前線で標準的なツールとして活用されており、このたび Web 版のリリースがなされました。



- ◆ 世界最大級の情報量を誇る CAS データベースが完全に統合されていますので、広範囲な研究領域に対応できます。また、優れたインターフェイスにより、膨大な情報からすばやく必要な情報を見つけることができます。

利用形態

研究者が日常利用している、機関内ネットワークに結合した PC からブラウザで SciFinder サイトにアクセスし、インターネット経由で CAS の SciFinder 用サーバで様々な処理がなされます。Web 版では、以前のようなソフトのインストールなどのセットアップ作業は不要です。



SciFinder が提供する情報

SciFinder では以下の情報群(データベース)から必要な情報を取り出すことができます.

(2008 年 12 月現在)

情報の種類	収録情報
文献情報	1808 年以降の 3,000 万件以上の、論文や特許の抄録付き文献情報 [CAplus ファイル] *2
化学物質情報	1907 年以降の論文や特許に現れた 4,000 万件以上の有機・無機 化学物質および 6,000 万件以上のタンパク質・核酸の情報 [REGISTRY ファイル]*1
有機化学反応 情報	1840 年以降の論文や特許に記載された有機化学反応情報(1,600 万の 一段階反応および多段階反応) [CASREACT ファイル]
試薬・化成品 カタログ情報	950 社から発行された 1,000 種のカタログの、約 2,500 万件の試薬・化成 品のカタログ情報 [CHEMCATS ファイル]
既存化学物質 台帳の情報	日本、米国、EU、カナダ、韓国、オーストラリア、スイス、フィリピン、 イスラエル、台湾、ニュージーランドの既存化学物質台帳の情報および 各種規制情報 [CHEMLIST ファイル]
医学文献情報	1949 年以降の 1,800 万件以上の論文の抄録付き文献情報 [MEDLINE ファイル]

*1 CA (Chemical Abstracts) の化学物質索引(Chemical Substance Index)に収載されたすべての化学物質および GENBANK に登録されている核酸が収録されています.

*2 CA に収録されているすべての文献、および CA が情報源とする定期刊行物(約10,000 誌)のうち主要な約 1,900 誌については、1994 年後半以降、化学的要素の少ない論文も含めすべての記事が収録されています。なお、これらの主要誌からの情報はこれらが CAS に到着後一週間以内に SciFinder で検索できます。

また、主要国が発行する特許(日本、米国、ドイツ、イギリス、フランス、ロシア、ヨーロッパ特許、カナダ、PCT 出願)については、CA 収録外の特許も幅広く収録すると共に、公開された 2 日後に書誌情報と抄録が、27 日以内に索引(CA 収録特許のみ)が検索できます。

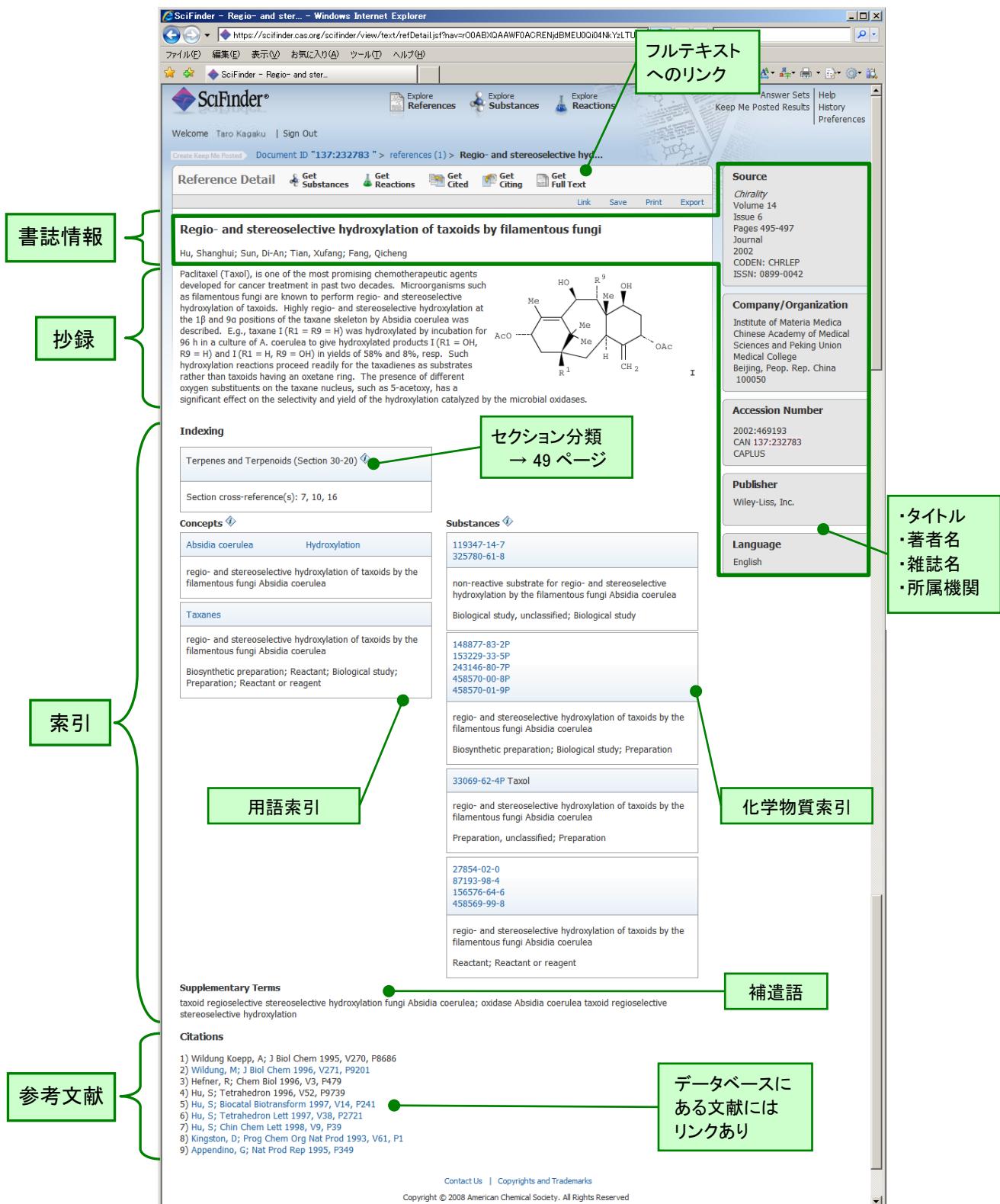
採録されている主要雑誌は以下のサイトをご覧下さい(p48 も参照).

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/caplus/corejournals.html>

なお、この 1,900 誌から採録された情報が当データベースの約 50% を占めています。

レコード例

◆ 文献情報 (CAplus ファイル)



レコード例

◆ 物質情報（REGISTRY ファイル）

CAS 登録番号

リンクボタン（次ページ）

**物質名称
(CASの正式名称、
慣用名など)**

分子式

文献種別一覧

Role	Nonspecific Derivatives from Patents		Nonspecific Derivatives from Nonpatents	
	Patents	Nonpatents		
Analytical study	✓	✓	✓	✓
Biological study	✓	✓	✓	✓
Combinatorial study		✓		
Formation, nonpreparative	✓	✓		✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence	✓	✓		✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓

予想物性値

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Conditions	Notes	Top
Bioconcentration Factor	1.0	pH 1 Temp: 25 °C	(48)	
Bioconcentration Factor	1.0	pH 2 Temp: 25 °C	(48)	
Bioconcentration Factor	1.0	pH 3 Temp: 25 °C	(48)	
Bioconcentration Factor	1.0	pH 4 Temp: 25 °C	(48)	

実測物性値

Experimental Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Optical and Scattering Spectra Structure-related Thermal

Biological Properties	Value	Conditions	Notes	Top
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text	1 of 10	(2) CAS	
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 5	(15) CAS	
LC50	See full text	1 of 2	(21) CAS	
LD50	See full text	1 of 2	(22) CAS	
Median Lethal Dose(LD50)	355 mg/kg	Organism: rat Route: oral	(25) APC	
Median Lethal Dose(LD50)	265 mg/kg	Organism: rat Route: subcutaneous	(26) CAS	

物性値出典

参照文献タグ

数値データ

**スペクトル表示
(次ページ)**

**スペクトル表示
(次ページ)**

(1) Rahman, M. Mizanur; Journal of Chromatography, A 2006, V1119(1-2), P105-114 CAPLUS
 (2) Jansson, Rasmus; Journal of Pharmaceutical Sciences 2008, V97(6), P2324-2339 CAPLUS
 (3) WSS: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
 (4) Li, Ning; Tianran Chanwu Yanji Yu Kafa 2003, V15(3), P208-211 CAPLUS
 (5) Lehmann, Christian W.; Chemistry–A European Journal 2007, V13(10), P2908-2911 CAPLUS
 (6) "Hazardous Substances Data Bank" data are provided by the National Library of Medicine (US)
 (7) Pozharskii, A. F.; Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii 1989, (2), P221-7 CAPLUS
 (8) Pinto, Susana S.; Journal of Chemical Thermodynamics 2006, V38(12), P1515-1522 CAPLUS

レコード例

【リンクボタン】



文献へのリンクボタン → 4 ページ



反応へのリンクボタン → 7 ページ

その物質が関与する反応を検索することができます。



カタログ情報へのリンクボタン → 8 ページ

カタログ情報(供給業者, 価格, 包装単位)を直ちに見ることができます。



既存化学物質台帳情報・規制情報へのリンクボタン → 9 ページ

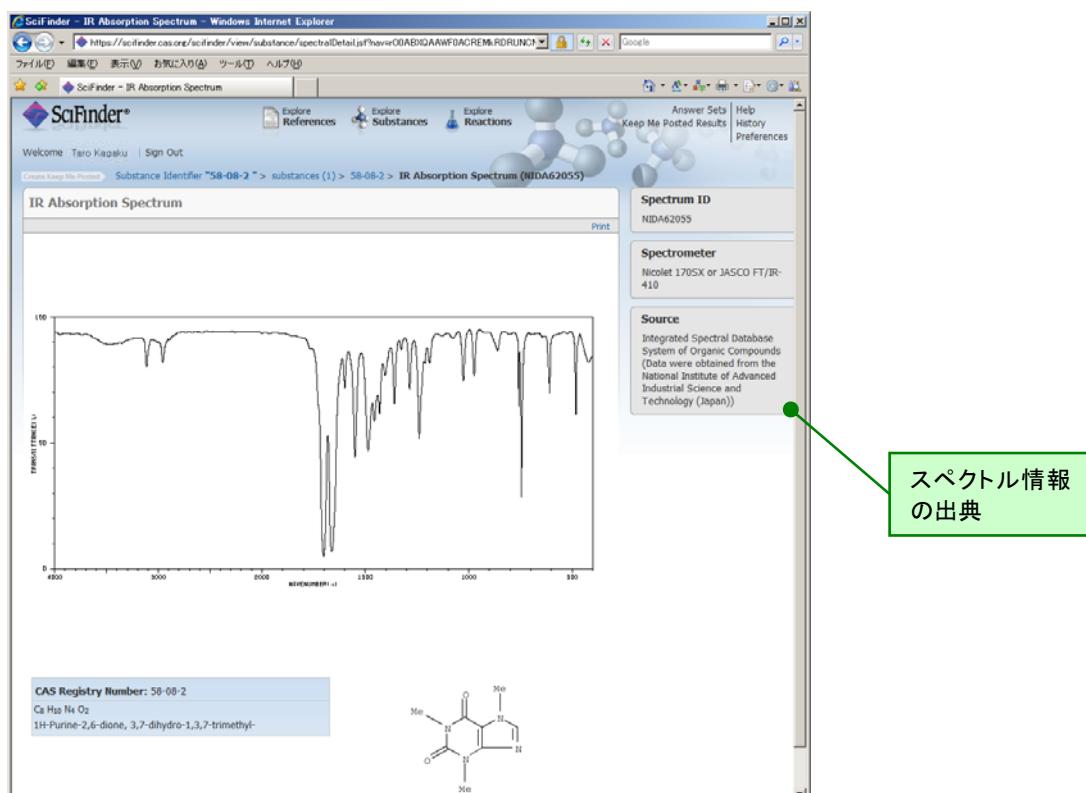
日本, 米国, EU, カナダ, 韓国, オーストラリア, スイス, フィリピン, イスラエル, 台湾, ニュージーランドのいずれかの国・地域の既存化学物質台帳の情報(日本の化審法番号や EINECS 番号など)や各国や地域での規制情報を見ることができます。ただし台帳情報は、CAS 登録番号の付与された化学物質に限定されるので、総称名物質の多い日本や韓国 の台帳上の収載の有無をこれのみで判断することはできません。

【スペクトル表示】

物性値中の “See spectrum” をクリックするとスペクトルが表示されます。

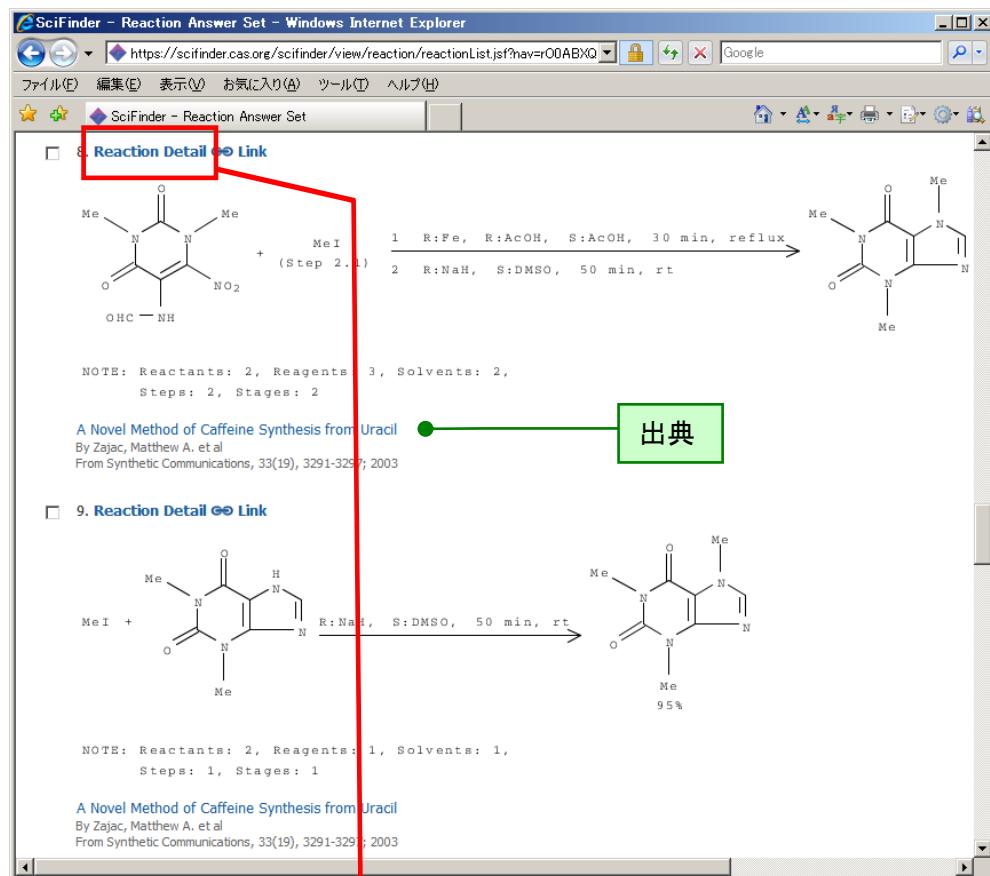
<現在表示可能なスペクトル値>

- ^1H -NMR
- ^{13}C -NMR
- ^{19}F -NMR
- ^{29}Si -NMR
- ^{31}P -NMR
- IR
- MASS
- ラマン

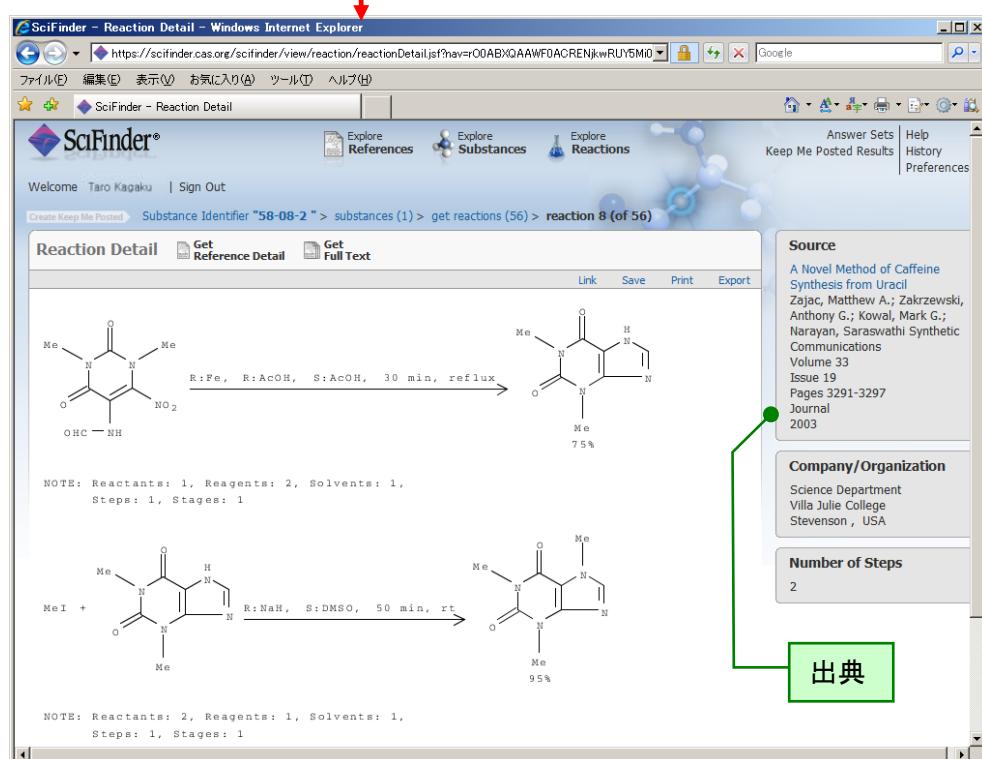


レコード例

◆ 化学反応情報 (CASREACT ファイル)

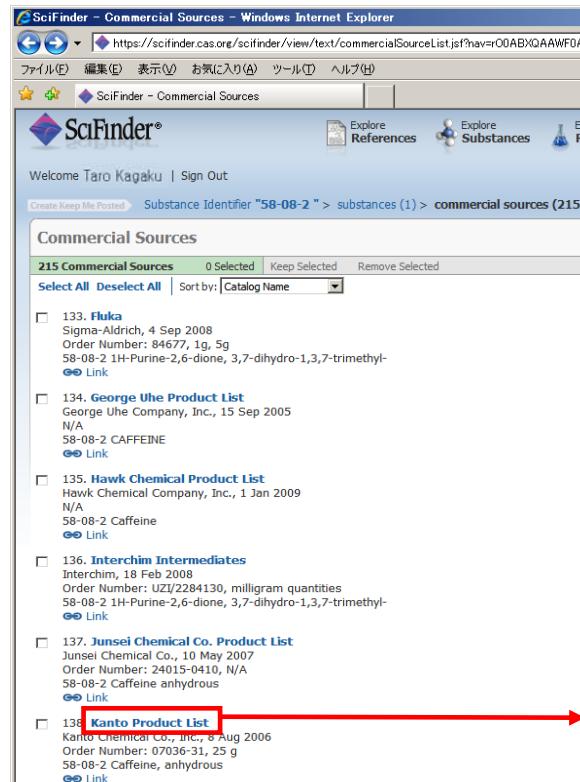


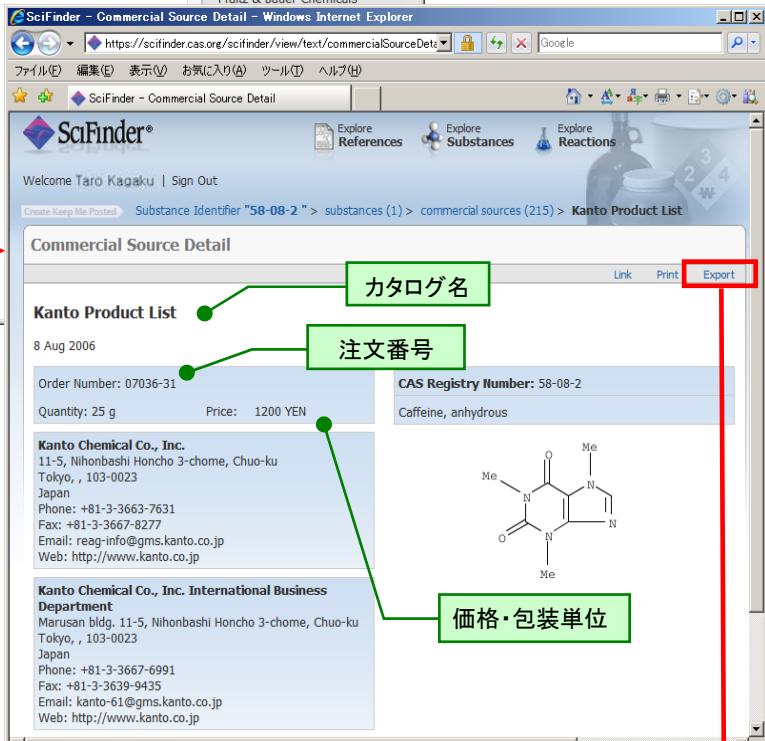
【中間ステップの表示】

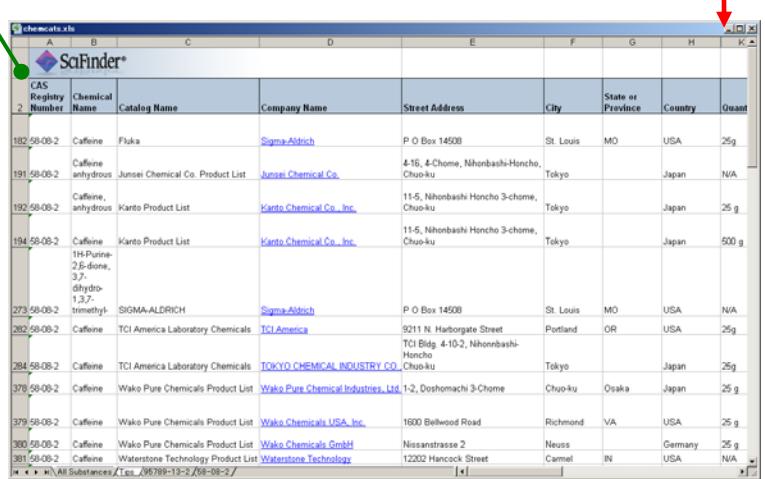


レコード例

◆ カタログ情報 (CHEMCATS ファイル)







※複数物質の一括出力も可能

カタログ情報へのデータ搭載は無料で可能です。
ご興味がございましたら、弊協会情報技術部（TEL:03-5978-3606）まで、お問い合わせください。

※<http://www.jaici.or.jp/chemcats/chemcats.htm>

レコード例

◆ 既存化学物質台帳情報（CHEMLIST ファイル）

台帳上の情報

CAS 登録番号

化学物質名

規制リスト番号

各国の規制情報

The screenshot shows the SciFinder interface for regulatory information. A green bracket on the left groups sections under '台帳上の情報' (Account Information), which include:

- CAS 登録番号 (CAS Registry Number):** 87061-04-9
- 化学物質名 (Chemical Name):** 1,2-Propanediol, 3-[[(5-methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]- (TSCA, DSL, AICS, ASIA-PAC, NZIoC)
- 規制リスト番号 (Regulatory List Number):** EINECS No.: 289-296-2, ENCS No.: 3-3857

A green bracket on the right groups sections under '各国の規制情報 (Regulatory Information for Various Countries)', which include:

- Inventory Status:** On TSCA Inventory, July 2008 TSCA Inventory, EPA Flags: P Commenced PMN, On DSL, Supplement to Canada Gazette, Part I, January 26, 1991, On ENCS, Japanese Gazette. Contained within class: Low Molecular Carbo-monocyclic Organic Compounds.
- Regulatory Inventories:** U.S. EPA Regulations - TSCA, U.S. FDA Regulations, European Community Regulations, Asian and Pacific Rim Regulatory Lists and Data
- U.S. EPA Regulations - TSCA:** Inventory Update Rule, <http://www.epa.gov/oppt/iur/index.htm> (2004). This chemical was reported under the TSCA Inventory Update Rule for the 2002 reporting period.
- U.S. FDA Regulations:** FDA Priority-Based Assessment of Food Additives
- European Community Regulations:** Official Journal of the European Union, No L 97 (05 Apr 2006). This substance is listed in Section 1, Annex I (Cosmetic Ingredients other than Perfume and Aromatic Raw Material) of Commission Directive 2006/257/EC, an amendment of Section 5a of Commission Directive 76/768/EEC which establishes the

Chemical structure shown: HO-CH₂-CH(Me)-CH₂-O-Pr-i

レコード例

◆ 文献情報 (MEDLINE ファイル)

SciFinder – Deposition and ... – Windows Internet Explorer
 ファイル(E) 編集(I) 表示(U) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
 SciFinder – Deposition and ...

Welcome Taro Kagaku | Sign Out
 Create Keep Me Posted Document ID "11543083" > references (1) > Deposition and renal handling ...
 Reference Detail Get Substances Get Reactions Get Cited Get Citing Get Full Text
 Link Save Print Export

Deposition and renal handling of urinary electrolytes from rats during spaceflight
 Wade C E; Baer L A; Belisle W A; Ortiz R M; Vasques M F
 To study renal handling of urinary electrolytes from male Fisher 344 rats during spaceflight, waste pads were obtained from cages flown in space and from cages used for ground controls. Pads were obtained from cages in which animals were group-housed (n=6 animals/cage) (Animal Enclosure Module; AEM) for 12 days or individually housed (2 animals/divided cage) (Research Animal Holding Facility; RAHF) for 19 days. Pads were washed, and extracts analyzed for sodium, potassium, chloride, calcium, and creatinine concentrations. It was observed that spaceflight reduced the absolute concentrations of electrolytes deposited onto the pads. When adjustments were made for deposition on all cage surfaces during flight, electrolyte and creatinine concentrations were similar to those of controls. Specifically, there were no differences in the sodium-, potassium-, and chloride-to-creatinine ratios of flight and control animals, suggesting no difference in the renal handling of these electrolytes during spaceflight. The calcium-to-creatinine ratio of urine on flight waste pads was reduced, suggesting an increase in reabsorption. From these analyses, the renal handling of sodium, potassium, and chloride does not appear to be altered in rats during spaceflight, while that of calcium may be. Deposition of urine on all surfaces of the cages during spaceflight should be considered in the design of future animal habitats, and in future analyses of waste pad constituents.

Indexing

Concepts

- Check Tags: Male
- Animals
- Calcium: UR, urine
- Creatinine: UR, urine
- Electrolytes: UR, urine**
- Kidney: PH, physiology
- Potassium: UR, urine
- Rats, Inbred F344
- Sodium: UR, urine
- Water-Electrolyte Balance: PH, physiology

Housing, Animal

Space Flight: IS, instrumentation

Weightlessness

Substances

Registry Numbers
60-27-5 (Creatinine)
7440-09-7 (Potassium)
7440-23-5 (Sodium)
7440-70-2 (Calcium)

Chemical Names
Electrolytes

Supplementary Terms

nasa center arc; nasa discipline regulatory physiology

Source
Journal of gravitational physiology : a journal of the International Society for Gravitational Physiology
 Volume 6
 Issue 2
 Pages 25-31
 (COMPARATIVE STUDY); Journal; Article; (JOURNAL ARTICLE); (RESEARCH SUPPORT, U.S. GOVT, NON-P.H.S.)
 1999
 ISSN: 1077-9248
 Journal Code: 9437868
 United States

Company/Organization
 Life Science Division, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA 94035, USA.

Email
 cwade@mail.arc.nasa.gov

Accession Number
 2001661664
 PubMed ID: 11543083
 MEDLINE

Language
 English

索引語

CAS 登録番号索引

Copyright © 2008 American Chemical Society. All Rights Reserved

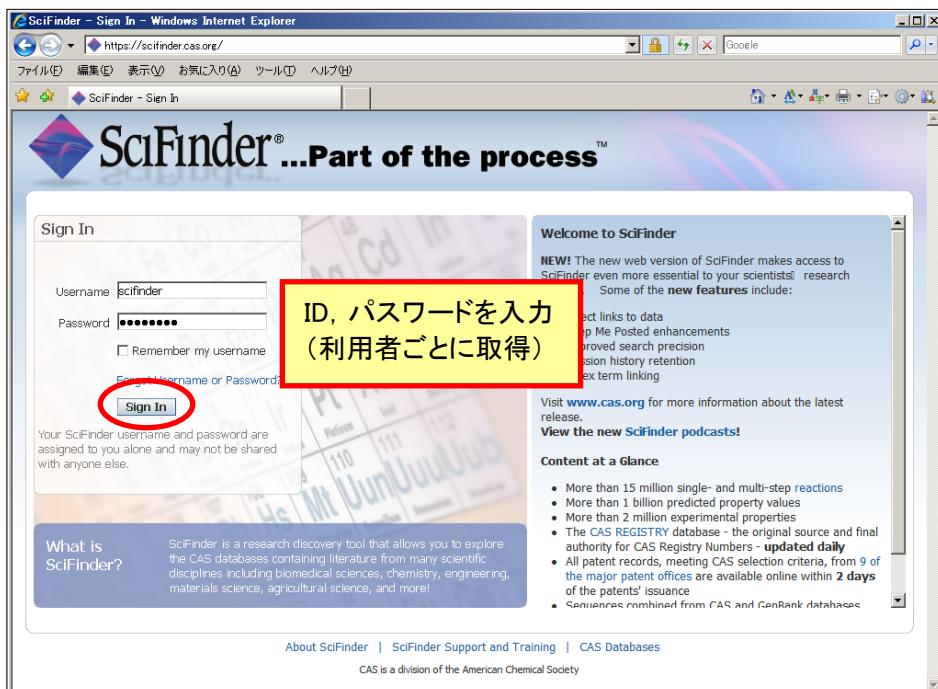
• タイトル
 • 著者名
 • 雜誌名
 • 所属機関

SciFinderへのアクセス

◆ SciFinder (Web版)へのアクセス

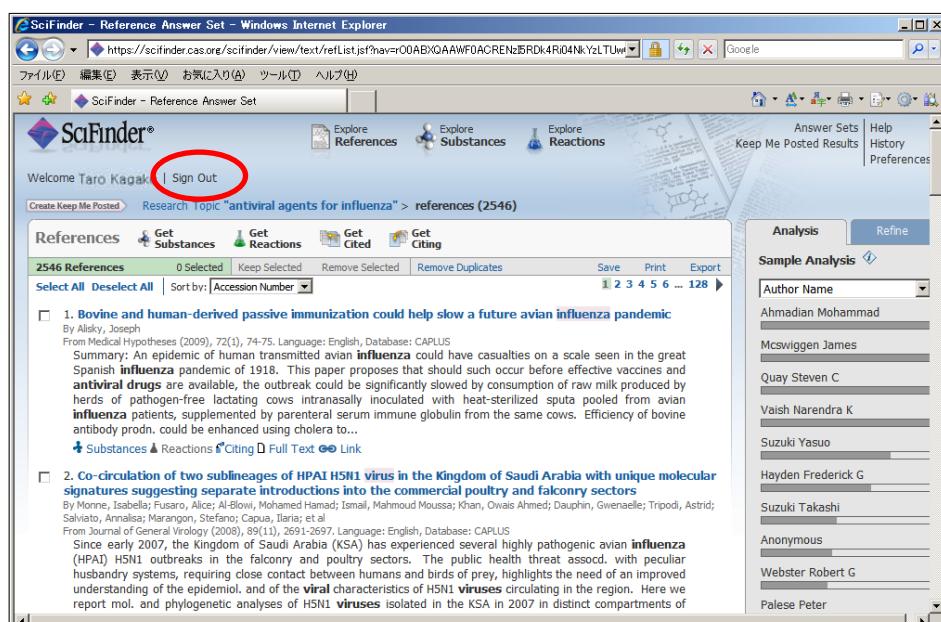
アクセス先 URL: <https://scifinder.cas.org>

以下の画面が表示されたら、ID・パスワードを入力して Sign In ボタンをクリックしてください。ID・パスワードの入手法については、管理者にお問い合わせください。この資料の最終ページに、システム要件を記載しています。



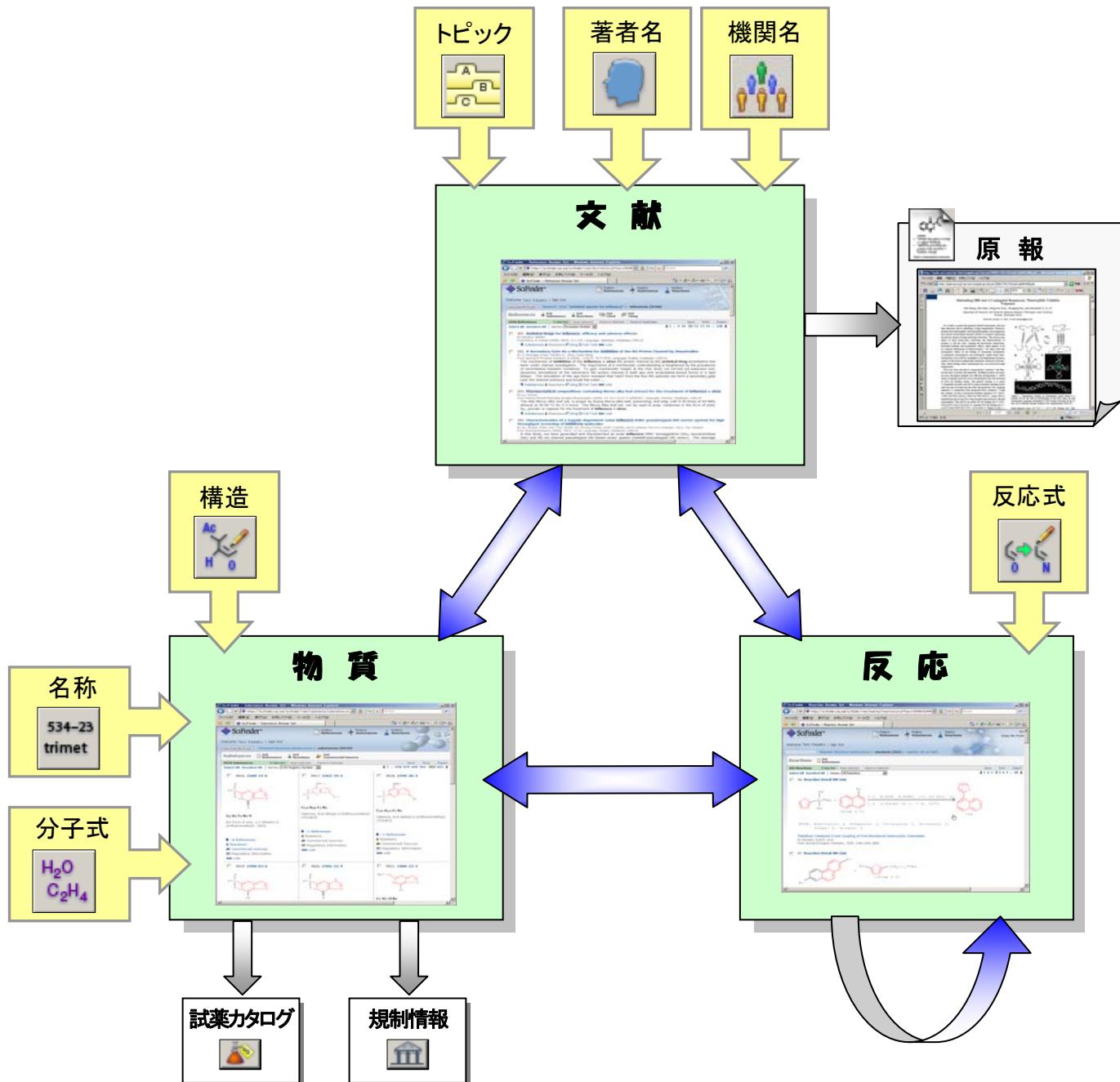
◆ SciFinder (Web版)の終了

終了後は Sign Out をクリックしてください。



SciFinder の検索概要

◆ SciFinder の検索全体像（イメージ）



※2008年12月現在、配列検索からの検索、雑誌の目次閲覧は利用できません。

SciFinder の検索概要

◆ SciFinder の検索初期画面:

- SciFinder では、研究上必要な化学物質や論文・特許の情報が入手できます。
- まずは検索項目(文献・物質・反応)を選択します。

【 文献検索 初期画面 】

The screenshot shows the SciFinder Explore References interface. At the top, there's a navigation bar with links like 'Explore Substances' and 'Explore Reactions'. On the right, there are 'Answer Sets' and 'Keep Me Posted Results' sections. The main area is titled 'Explore References' and contains various search filters: 'Research Topic', 'Publication Year(s)', 'Document Type(s)', 'Language(s)', 'Author Name', and 'Company Name'. Examples for each filter are provided. A 'Search' button is located at the top right of the search area. To the left of the search filters, a green box with an upward arrow contains the text '検索項目を選択' (Select search items). A blue hand icon points to the 'Explore References' button in the top navigation bar.

文献検索項目

- Research Topic → 研究トピックの検索（キーワード）
- Author Name → 著者名検索
- Company Name → 会社名(大学名)検索
- Document Identifier → 特許番号検索
- Journal → 文献情報からの検索
- Patent → 特許情報からの検索

P.15
P.37
P.38
P.38

SciFinder の検索概要

【 化学物質検索 初期画面 】

Explore Substances

Chemical Structure **Molecular Formula** **Substance Identifier**

Characteristic(s)

- Single component
- Commercially available
- Included in reference(s)

Class(es)

- Alloys
- Coordination compounds
- Incompletely defined
- Mixtures
- Polymers
- Organics, and others not listed

Studies

- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or Reagent

Answer Sets

- 20081021REAsample
- SSM sample
- Similarity sample
- influenza references
- sample
- Cplus1
- REGstr1
- ref1
- Autosaved Substance Set

Keep Me Posted Results

- antiviral agents from SFweb
- Nov 22, 2008 (48)
- Nov 15, 2008 (43)
- Nov 08, 2008 (38)

物質検索項目

- Chemical Structure → 化学構造式
- Molecular Formula → 分子式
- Substance Identifier → 化学物質名称, CAS 登録番号

P.27

P.26

P.24

【 化学反応検索 初期画面 】

P.32

Explore Reactions

Reaction Structure

Classification(s)

- Biotransformation
- Catalyzed
- Chemoselective
- Combinatorial
- Electrochemical
- Gas-phase
- Non-catalyzed
- Radiochemical
- Regioselective
- Stereoselective

Source(s)

- Any source
- Patents only
- Sources other than patents

Publication Year(s)

Examples: 1995, 1995 - 1999, 1995 ~ - 1995

Number of Steps

Examples: 1, 1 - 3, 1 ~ - 3

Answer Sets

- 20081021REAsample
- SSM sample
- Similarity sample
- influenza references
- sample
- Cplus1
- REGstr1
- ref1
- Autosaved Substance Set

Keep Me Posted Results

- antiviral agents from SFweb
- Nov 22, 2008 (48)
- Nov 15, 2008 (43)
- Nov 08, 2008 (38)

研究トピックの検索

◆ 研究トピックの検索（キーワード）<CAplus ファイル, MEDLINE ファイル>



➤ 検索テーマを表現する適切な英語のフレーズを入力するだけで検索できます。

- ① 興味をもつキーワードを英語のフレーズで入力します。ここでは「インフルエンザ用の抗ウイルス剤(antiviral agents for influenza)」の検索をしてみます。

※大文字・小文字の区別はありません。
※キーワード間の結合には、
前置詞のほか AND, OR, NOT が
使えます。
※「?」や「*」といった記号は質問式には
使用しないでください。

- ② 適合率の高い検索式から、広い検索式まで何通りかの検索式による回答数が表示されるのでその中から目的に合った検索式を選択します。

- (1) “antiviral agents”と “influenza”が
1 単語(もしくはスペース)空いて、
並んでいる。
(2) 同義語、異なる語形(品詞による違
い、単複など)、略語、米・英綴り違
いを考慮。
(3) 同一センテンス内
(タイトル内、抄録センテンス内、同
一索引内、セミコロンで区切られた
補足語範囲内)
(4) 同一レコード中
(タイトル、抄録、索引、補足語)

- ③ “Get References” ボタンをクリックすると、該当する文献リストが表示されます。

クリックしてソート
できます
Accession Number
Accession Number
Author Name
Publication Year
Title

回答件数

研究トピックの検索

- ④ 抄録などの詳しい情報を表示する場合は、タイトルをクリックします。

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer
 ファイル(E) 編集(B) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
 Welcome Taro Kagaku | Sign Out
 Create Keep Me Posted Research Topic "antiviral agents for influenza" > references (2546)
 References Get Substances Get Reactions Get Cited Get Citing
 2546 References 0 Selected Keep Selected Remove Selected Remove Duplicates Save Print Export
 Select All Deselect All Sort by: Accession Number 1 ... 9 10 11 12 13 14 ... 128
 □ 201. Antiviral drugs for influenza: efficacy and adverse effects
 By Kawana, Akihiko
 From Kokyu to Junkan (2008), 56(3), 311-315. Language: Japanese, Database: CAPLUS
 + Substances ▲ Reactions Citing Full Text Link
 □ 202. A Secondary Gate As a Mechanism for Inhibition of the M2 Proton Channel by Amantadine
 From Journal of Physical Chemistry B (2008), 112(27), 7977-7979. Language: English, Database: CAPLUS
 The mechanism of inhibition of the influenza A virus M2 proton channel by the antiviral drug amantadine has been under intense investigation. The importance of a mechanistic understanding is heightened by the prevalence of amantadine-resistant mutations. To gain mechanistic insight at the mol. level, we carried out extensive mol. dynamics simulations of the tetrameric M2 proton channel in both apo and amantadine-bound forms in a lipid bilayer. The simulation of the apo form revealed that Val27 from the four M2 subunits can form a secondary gate near the channel entrance and break the water ...
 + Substances ▲ Reactions Citing Full Text Link
 □ 203. Pharmaceutical compositions containing Morus alba leaf extract for the treatment of influenza a virus
 By Liu, Guiyun
 From Faming Zhanli Shengqing Gongkai Shuomingshu (2008), CN 101172127 A 20080507. Language: Chinese, Database: CAPLUS
 The title Morus alba leaf ext. is prep'd. by drying Morus alba leaf, pulverizing, and extg. with 5-20 times of 40-98% ethanol at 30-80 °C for 2 h twice. The Morus alba leaf ext. can be used to prep. medicines in the form of solid, q., powder or capsule for the treatment of influenza A virus.
 + Substances ▲ Reactions Citing Full Text Link
 □ 204. Characterization of a trypsin-dependent avian influenza H5N1-pseudotyped HIV vector system for high throughput screening of inhibitory molecules
 By Ao, Zhujun; Patel, Ami; Tran, Kayle; He, Xinying; Fowke, Keith; Coombs, Kevin; Kobasa, Darwyn; Koblinger, Gary; Yao, Xiaoqian
 From Antiviral Research (2008), 79(1), 12-18. Language: English, Database: CAPLUS
 In this study, we have generated and characterized an avian influenza H5N1 hemagglutinin (HA), neuraminidase (NA) and M2 ion channel pseudotyped HIV-based vector system (HaNaM-pseudotyped HIV vector). The cleavage

クリックすると
重複文献除去が
可能です
(10,000 件以下)

SciFinder - A Secondary Gat... - Windows Internet Explorer
 ファイル(E) 編集(B) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
 Welcome Taro Kagaku | Sign Out
 Create Keep Me Posted Research Topic "antiviral agents for influenza" > references (2546) > A Secondary Gate As a Mechanism for Inhibition of the M2 Proton Channel by Amantadine
 Reference Detail Get Substances Get Reactions Get Cited Get Citing Get Full Text
 A Secondary Gate As a Mechanism for Inhibition of the M2 Proton Channel by Amantadine
 Yi, Myunggi; Cross, Timothy A.; Zhou, Huan-Xiang
 The mechanism of inhibition of the influenza A virus M2 proton channel by the antiviral drug amantadine has been under intense investigation. The importance of a mechanistic understanding is heightened by the prevalence of amantadine-resistant mutations. To gain mechanistic insight at the mol. level, we carried out extensive mol. dynamics simulations of the tetrameric M2 proton channel in both apo and amantadine-bound forms in a lipid bilayer. The simulation of the apo form revealed that Val27 from the four M2 subunits can form a secondary gate near the channel entrance and break the water wire in the channel. This results in the physis occlusion and the elimination of hydrogen-bonding partners for water mols. In the presence of amantadine, Val27 is replaced by the drug mol. lying just below form an extended blockage, which breaks the water wire in the channel. The location and orientation of amantadine inside of the channel pore as found in our simulation. The location and orientation of amantadine inside of the channel pore as found in our simulation. The location and orientation of amantadine inside of the channel pore as found in our simulation. The location and orientation of amantadine inside of the channel pore as found in our simulation. The location and orientation of amantadine inside of the channel pore as found in our simulation.

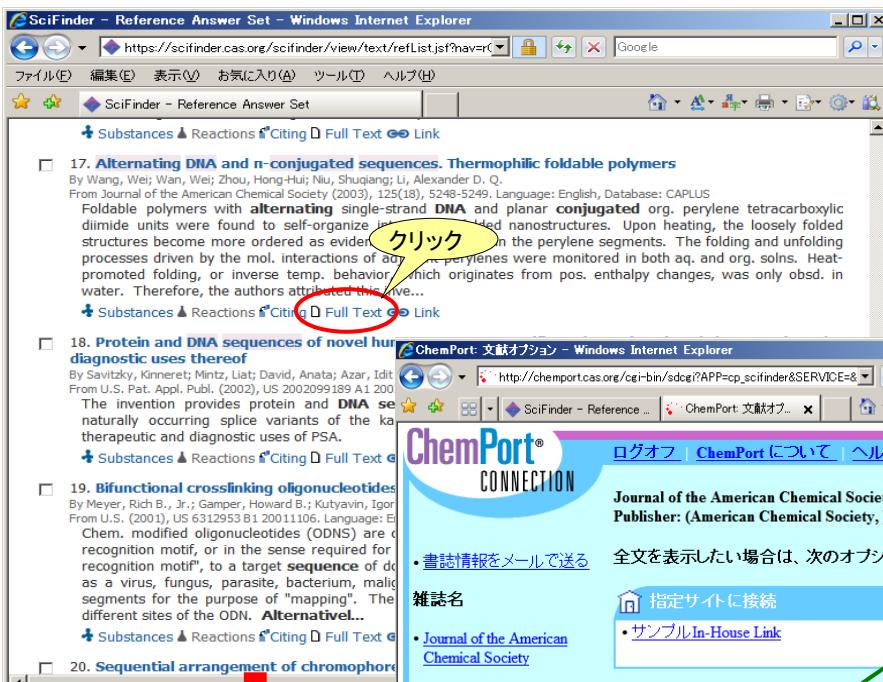
文献中の CAS 登録番号をクリックすると物質情報が表示されます

SciFinder - CAS Registry Number 768-94-5 - Windows Internet Explorer
 ファイル(E) 編集(B) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
 Welcome Taro Kagaku | Sign Out
 Create Keep Me Posted Results Help History Preferences
 Substance Detail Get References Get Reactions Get Commercial Sources Get Regulatory Information Link Save Print
 CAS Registry Number: 768-94-5
 C10 H17 N
 Tricyclo[3.3.1.13,7]decan-1-amine
 1-Adamantanamine (6CI,8CI) ; (Adamantan-1-yl)amine ; 1-Adamantanamine ; 1-Adamantylamine ; 1-Amantadamine ; Adamantanamine ; Adamantamine ; Adamantanamine ; Adamantylamine ; Amantadine ; NSC 341865 ; Tricyclo[3.3.1.13,7]decan-1-amine
 Component
 Document Types: Conference, Dissertation, Journal, Patent, Report
 Role Patents Nonpatents Nonspecific Derivatives from Patents Nonspecific Derivatives from Nonpatents
 Analytical study ✓ ✓ ✓ ✓
 Biological study ✓ ✓ ✓ ✓
 Biological study, unclassified; E

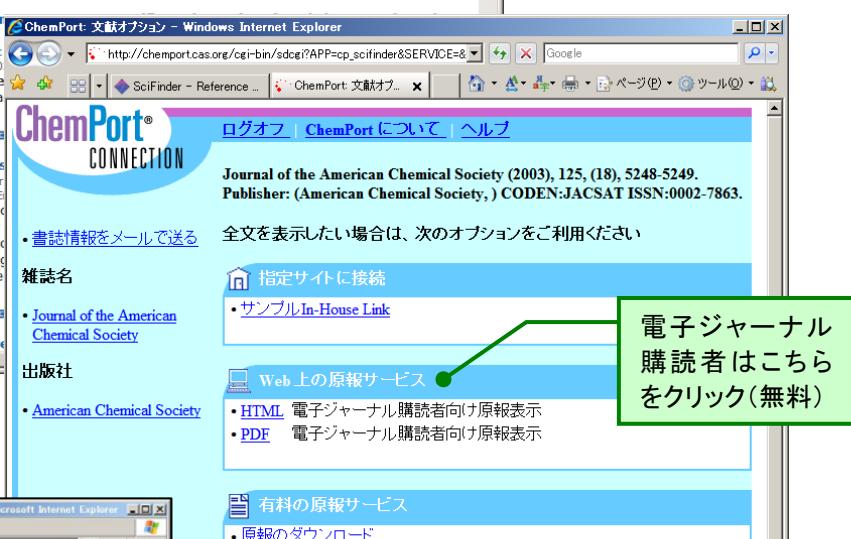
原文献へのリンク機能

- 回答として得られた文献リスト中の Full Text (書類)リンクボタンをクリックすると、ChemPort を経由して以下のことができます。

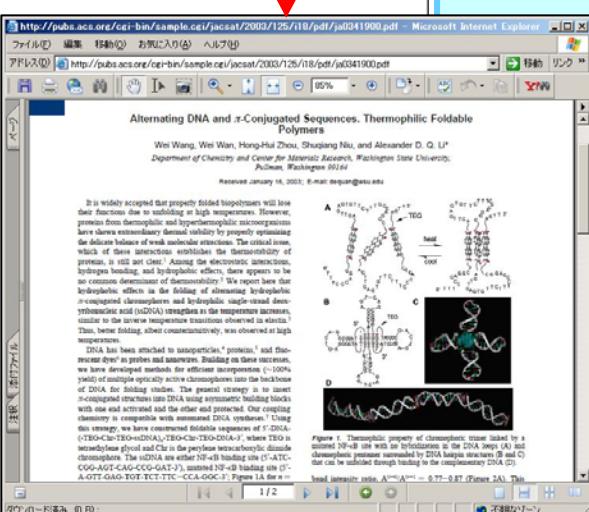
- 米国化学会(ACS), 英国王立化学会(RSC), Academic Press, Elsevier, Wileyなどの大手学術出版社(360社)が発行する電子ジャーナルで提供されている約7,400誌の掲載論文については、電子ジャーナルの購読者に限り無料でHTMLまたはPDF形式で表示することができます。リンクされている出版社の最新リストは、ChemPortのホームページ(<http://chemport.cas.org/>)でご確認いただけます。
- ACS, RSC, Springer-Verlag, Kargerなど14社が発行する雑誌の論文は、購読者でなくとも個別の料金で見ることができます(Pay-per-view)。この場合の料金は、翌月請求となります(企業版のみ)。
- 一部の雑誌および特許明細書については、ChemPort Connection画面を経ずに、直接フルテキストを表示することができます。



直接表示される
ケースもあります



電子ジャーナル
購読者はこちら
をクリック(無料)



電子ジャーナル
非購読者はこちら
をクリック(有料)*

※有料リンクは大学版では
表示されません

原文献へのリンク機能

- 米国特許商標庁 (USPTO, <http://www.uspto.gov/>, HTML 形式および TIFF 形式), ヨーロッパ特許庁 (EPO, esp@cenet, PDF 形式), 日本特許庁 (JPO), 韓国特許情報院 (KIPI), 中国国家知識産権局 (Sipo) のホームページから、米国、日本、スイス、ドイツ、EP、フランス、英国、PCT、韓国、中国などの特許明細書を無料で表示することができます。
- MicroPatent 社の Global TOPS 購読者は、MicroPatent 社が提供する特許明細書の全文を無料で表示することができます。
- 一部の特許明細書は、全文を有料で表示することができます (Pay-per-view). この場合、料金は翌月請求となります(企業版のみ)。

**直接表示される
ケースもあります**

クリック

**ヨーロッパ特許庁
へのリンク(無料)**

**電子公報の表示
(有料)***

**CAS への原報コピー
サービス(有料)***

**esp@cenet では、
Original Documents
タブをクリックすると
明細書がPDF書類
で表示される**

***有料リンクは大学版では
表示されません**

文献回答の限定・解析機能

■ 検索結果の限定・解析機能 (Analyze/Refine)

- 各種検索によって得られた文献の回答集合に対して、12種のデータに基づく解析 (Analyze)を行った後、必要に応じてそれらで限定することや、7種の観点で絞り込み (Refine) ができます。

The screenshot shows the SciFinder interface with the following components:

- Top Bar:** Shows the SciFinder logo, navigation links like "Explore References", "Explore Substances", and "Explore Reactions".
- Search Results:** A list of 2546 references. The first few items are:
 1. Bovine and human-derived passive immunization could help solve a future avian influenza pandemic.
 2. Co-circulation of two sublineages of HPAI H5N1 virus in the Kingdom of Saudi Arabia with unique molecular signatures suggesting separate introductions into the commercial poultry and turkey sectors.
 3. Structure of influenza hemagglutinin in complex with an inhibitor of membrane fusion.
 4. Oseltamivir (Tamiflu) combination therapy for highly pathogenic H5N1 influenza virus infection in mice.
- Analysis/Refine Buttons:** Buttons for "Analysis" and "Refine" are highlighted with red boxes.
- Sample Analysis:** A dropdown menu showing "Author Name" selected, with a list of names: Ahmadian Mohammad, Mcswiggen James, Quay Steven C, Vaish Narendra K, Suzuki Yasuo, Hayden Frederick G, Suzuki Takashi, Anonymous, Webster Robert G, Palese Peter. A "Show Full Analysis" button is circled in red.
- Refine by:** A section with radio buttons for "Research Topic", "Author Name", "Company Name", "Document Type", "Publication Year", "Language", and "Database". "Research Topic" is selected. A "Refine" button is circled in red.
- Refine by Research Topic:** A text input field for "Research Topic" with examples: "The effect of antibiotic residues on dairy products" and "Photocyanation of aromatic compounds".
- CA Section:** A green box containing a list of categories: Author Name, CAS Registry Number, CA Section Title, Company/Organization, Database, Document Type, Index Term, CA Concept Heading, Journal Name, Language, Publication Year, Supplementary Terms. "Author Name" is highlighted in blue.
- Analysis Buttons:** Buttons for "Analysis" and "Refine" are shown again.
- Annotations:**
 - A yellow box labeled "解析機能" (Analysis Function) points to the "Analysis" button.
 - A yellow box labeled "絞込検索" (Refinement Search) points to the "Refine" button.
 - A yellow box labeled "Categorize機能へ (21ページ参照)" (Refer to page 21 for Categorize function) points to the "Categorize" button.
 - A yellow box labeled "クリックして全データ対象の解析へ (次ページ参照)" (Refer to next page for full data analysis) points to the "Show Full Analysis" button.
 - A green arrow labeled "CAセクション" (CA Section) points to the CA Section list.
 - A green arrow labeled "研究トピック" (Research Topic) points to the "Research Topic" radio button.
 - A green arrow labeled "資料種類" (Material Type) points to the "Database" radio button.

文献回答の限定・解析機能

サンプル解析

全項目解析

クリックして該当項目の選択表示も可能

Analysis - Author Name

Only 500 Authors are displayed.

1 Selected Sort by: Frequency 1 2 3 4 5 6 ... 10

Select bars to view only those references within the current answer set.

- Mcswiggen James 80
- Ahmadian Mohammad 79
- Quay Steven C 79
- Vaish Narendra K 79
- Suzuki Yasuo 46
- Hayden Frederick G 50
- Anonymous 33
- Webster Robert G 31
- Sidwell Robert W 25
- Suzuki Takashi 25

Apply Cancel

チェック項目の選択表示

SciFinder - Reference Answer Set

References Get Substances Get Reactions Get Cited Get Citing

2567 References 0 Selected Keep Selected Remove Selected Save Print Export

46 references with Author Name Suzuki Yasuo are displayed

Select All D Select All Sort by: Accession Number 1 2 3

42. Limited inhibitory effects of oseltamivir and zanamivir on human sialidases

165. Sialyl o(2→3) lactose clusters using carbosilane dendrimer core scaffolds as influenza hemagglutinin blockers

207. In vitro inhibition of human influenza A virus infection by fruit-juice concentrate of Japanese plum (*Prunus mume* Sieb. et Zucc)

ヒント

チェック項目の選択表示後、さらなる解析・絞込を行うためには Select All → Keep Selected により、集合を作成してください。

システム制限情報

- ・解析対象データは最大 20,000 回答
- ・1,000 回答以下の集合は、サンプル解析は表示されない
- ・全項目解析の詳細表示で、頻度順ソートでは最大 500 項目表示

文献回答の限定・解析機能

■ Categorize 機能

- 各種検索によって得られた文献の回答集合に対して、索引されたタームや化学物質を解析することができます。

① 解析したい分類を選択

② タームを選択

選択したタームのリスト

Refine Cancel

♦ システム制限情報
・解析対象データは最大 15,000 回答

* 分類(Category)の定義は Help 画面からご覧いただけます。

Contents Index Search

SciFinder®

Science Categories

Science categories are groups of index terms with common attributes. Categories may consist of general subjects or registered substances. Examples include:

- Anatomical parts of animals
- Substances used in agriculture
- Pollutants

Categories and Index Terms

Choose any of these science category headings to view its member categories and index terms.

All	Analytical chemistry	Biology
Biotechnology	Catalysis	Environmental chemistry
General chemistry	Genetics & protein chemistry	Physical chemistry
Polymer chemistry	Synthetic chemistry	Technology

Copyright © 2008 American Chemical Society. All Rights Reserved.
Last modified: 11/15/2008 08:10:52

文献回答からの関連情報抽出

■ 関連情報の抽出機能

- 文献から関連する物質・反応情報を抽出することができます。

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

チェックを入れる

1 Reference Selected Keep Selected Remove Selected Remove Duplicates Save Print Export

1. Regioselective synthesis of 5-ylidenepyrrol-2(5H)-ones by reaction of transition metal-coordinated bis(imidoyl)chlorides with carbon nucleophiles

By Wuckel, Joerg; Doering, Manfred; Langer, Peter; Becker, Rainer; Goerls, Helmar
From Journal of Organic Chemistry (1999), 64(2), 365-372. Language: English, Database: CAPLUS

A regioselective transition metal mediated domino reaction of carbon nucleophiles, e.g., N=CCH₂CO₂Et, with oxalic acid bis(imidoyl)chlorides, e.g., PhN=C(Cl)(NPh)Cl, is reported. This reaction provides a convenient access to E-configured 5-ylidenepyrrol-2(5H)-ones, e.g., 1. Without the presence of cobalt(II) or nickel(II) salts, open-chained products were obtained. The regioselective cyclization is controlled by the coordination of the nitrogen atoms of the 1,4-diazadiene system to the transition metal.

Substances ▲Reactions ▲Citing □ Full Text □ Link

Get Substances

Retrieves substances for: Selected references

For each reference, retrieve: Selected substances

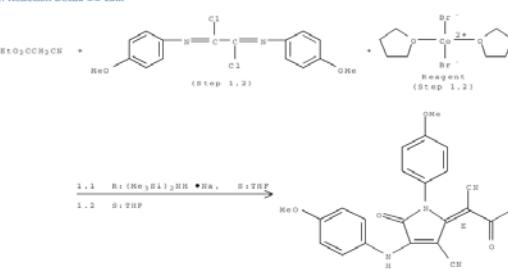
Get Substances Cancel

観点を指定して、抽出対象物質を限定することもできます

SciFinder - Reaction Answer Set - Windows Internet Explorer

この論文で扱われている反応の集合

1. Reaction Detail □ Link

Et₂OCCN₂CH + 

NOTE: stereoselective.
Reactants: 2, Reagents: 2, Solvents: 1,
Step: 1, Stages: 2

Regioselective synthesis of 5-ylidenepyrrol-2(5H)-ones by reaction of transition metal-coordinated bis(imidoyl)chlorides with carbon nucleophiles

By Wuckel, Joerg et al
From Journal of Organic Chemistry, 64(2), 365-372; 1999

2. Reaction Detail □ Link

Et₂OCCN₂CH + 

NOTE: stereoselective.
Reactants: 2, Reagents: 2, Solvents: 1,
Step: 1, Stages: 2

Regioselective synthesis of 5-ylidenepyrrol-2(5H)-ones by reaction of transition metal-coordinated bis(imidoyl)chlorides with carbon nucleophiles

By Wuckel, Joerg et al
From Journal of Organic Chemistry, 64(2), 365-372; 1999

SciFinder - Substance Answer Set - Windows Internet Explorer

この論文で扱われている物質の集合

Substances Get References Get Reactions Get Commercial Sources

29 Substances Selected Keep Selected Remove Selected Save Print Export

16. 204002-58-4 17. 204002-54-0 18. 204002-50-6

C₂₂H₁₆N₄O₅

Acetic acid, 2-cyano-2-[3-cyano-1,5-dihydro-5-oxo-1-phenyl-4-(phenylamino)-2H-pyrrol-2-ylidene]-ethyl ester, (ZE)-

19. 167966-61-2 20. 109735-70-8 21. 104439-07-8

C₁₆H₁₄Cl₂N₂O₄S₂

22. 104439-01-1

C₁₄H₁₀Cl₂N₂O₄

23. 104439-02-2

C₁₄H₁₀Cl₂N₂

システム制限情報

- 物質集合作成・反応集合作成は最大 1,000 回答
- 引用情報検索は最大 500 回答

文献回答からの関連情報抽出

- 注目する文献の引用情報を検索することができます。

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

1. **Regioselective synthesis of 5-ylideneppyrol-2(5H)-ones by reaction of transition metal-coordinated bis(imidoyl) chlorides with carbon nucleophiles**

By Wuckelt, Joerg; Doering, Manfred; Langer, Peter; Beckett, Rainer; Goerls, Helmar
From Journal of Organic Chemistry (1999), 64(2), 365-372. Language: English, Database: CAPLUS

A regioselective transition metal mediated domino reaction of carbon nucleophiles, e.g., $\text{N}=\text{CCH}_2\text{CO}_2\text{Et}$, with oxalic acid-bis(imidoyl)chlorides, e.g., $\text{PhN:CClC(=O)\text{NPf}}$, is reported. This reaction provides a convenient access to E-configured 5-ylideneppyrol-2(5H)-ones, e.g., I. Without the presence of cobalt(II) or nickel(II) salts, open-chained products were obtained. The regioselective cyclization is controlled by the coordination of the nitrogen atoms of the 1,4-diazadiene system to the transition metal.

[Substances](#) [Reactions](#) [Citing](#) [Full Text](#) [Link](#)

この論文著者が引用した参考文献の集合

この論文を引用している文献の集合 (CITATION)

■ 情報共有機能（リンク機能）

- 各レコードに付与された URL を用い、注目する文献を他のユーザと共有することができます。

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

1. **Regioselective synthesis of 5-ylideneppyrol-2(5H)-ones by reaction of transition metal-coordinated bis(imidoyl) chlorides with carbon nucleophiles**

By Wuckelt, Joerg; Doering, Manfred; Langer, Peter; Beckett, Rainer; Goerls, Helmar
From Journal of Organic Chemistry (1999), 64(2), 365-372. Language: English, Database: CAPLUS

A regioselective transition metal mediated domino reaction of carbon nucleophiles, e.g., $\text{N}=\text{CCH}_2\text{CO}_2\text{Et}$, with oxalic acid-bis(imidoyl)chlorides, e.g., $\text{PhN:CClC(=O)\text{NPf}}$, is reported. This reaction provides a convenient access to E-configured 5-ylideneppyrol-2(5H)-ones, e.g., I. Without the presence of cobalt(II) or nickel(II) salts, open-chained products were obtained. The regioselective cyclization is controlled by the coordination of the nitrogen atoms of the 1,4-diazadiene system to the transition metal.

[Substances](#) [Reactions](#) [Citing](#) [Full Text](#) [Link](#)

Copy and paste link for quick access to this reference.
https://scifinder.cas.org/scifinder/view/link_v1/reference.jsf?I=Bm

Create a bookmark, save in a document, or e-mail to a colleague.

クリック

URLをメールに
コピー&ペーストして送信可能

物質情報からの検索

◆ 化学物質検索（化学物質名称, CAS 登録番号）<REGISTRY ファイル>

534-23
trimet

- CAS 登録番号, 名称から物質を検索することができます。

The screenshot shows the SciFinder software interface for exploring substances. In the center, there is a search bar labeled "Substance Identifier(s)" containing the text "taxol ferrocene 73-31-4 human growth hormone E.C. 2.7.3.2". A red circle highlights the "Search" button. A green arrow points from a text box on the right to the search bar, which contains the following instructions:

完全な名称を入力する。
慣用名・商品名などから
も検索可。
(最大 25 項目)

The screenshot shows the SciFinder software interface for viewing substance answer sets. On the left, a list of substances is shown, including "1. 33069-62-4", "2. 12629-01-5", "4. 102-54-5", and "5. 73-31-4". A green arrow points from the detailed view of entry 73-31-4 to another window showing its detailed information.

CAS 登録番号をクリックすると詳細情報が表示されます

The detailed view window shows the following information for CAS Registry Number 73-31-4:

- CAS Registry Number:** 73-31-4
- Chemical Structure:** Indole-3-acetamide derivative (Chem3D diagram)
- Chemical Name:** Acetamide, N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]-
- Properties:** C₁₃H₁₆N₂O₂
- Document Types:** Book, Conference, Dissertation, Journal, Patent, Report
- Role:** Analytical study, Biological study
- Derivatives:**

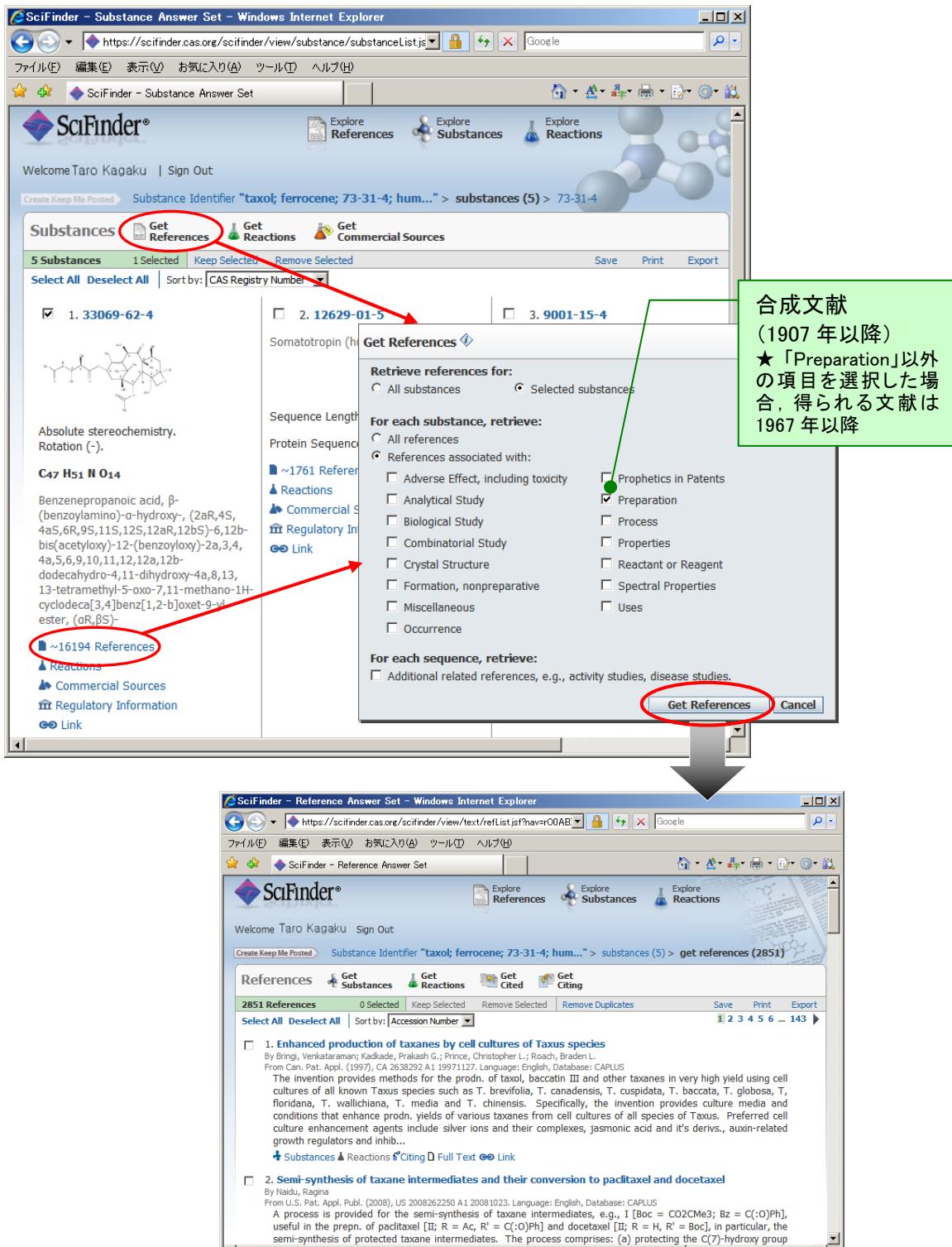
Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical study	✓	✓	✓	✓
biological study	✓	✓	✓	✓

物質情報からの検索

◆ 化学物質関連情報へのリンク機能

➤ 文献情報へのリンク  ~16194 References  Get References

各物質下の書類ボタン(単一物質を対象)、あるいは画面上部の“Get References”リンクボタン(単一物質または複数物質を対象)により、文献を検索することができます。その際、以下の15種の観点によって文献を限定することができます。



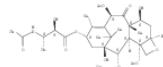
The screenshot illustrates the process of retrieving references for a substance. It shows the main SciFinder interface with a list of substances and a detailed view of one substance's page. A red arrow points from the 'Get References' button in the main header to a modal dialog box titled 'Get References'. This dialog allows users to refine their search by selecting specific reference types. A green box highlights the 'Preparation' checkbox under the 'Selected substances' section. Another red arrow points from the 'Get References' button in the main header to the resulting 'Reference Answer Set' page, which displays a list of 2851 references. A callout box on the right provides context about the search results, stating: '合成文献 (1907年以降) ★「Preparation」以外の項目を選択した場合、得られる文献は1967年以降'.

**合成文献 (1907年以降)
★「Preparation」以外の項目を選択した場合、得られる文献は1967年以降**

Substances  Get References  Get Reactions  Get Commercial Sources

5 Substances 1 Selected | Keep Selected | Remove Selected Save | Print | Export

Select All | Deselect All | Sort by: [CAS Registry Number]

1. 133069-62-4

 Absolute stereochemistry.
 Rotation (-).
C₁₇H₃₁N O₁₄
 Benzenepropanoic acid, β-(benzoylamino)-α-hydroxy-, (2aR,4S,4aS,6R,9S,11S,12S,12aR,12bS)-6,12-bis(acetoxy)-12-(benzoyloxy)-2a,3,4,4a,5,6,9,10,11,12,12a,12b-dodecahydro-4,11-dihydroxy-4a,8,13,13-tetramethyl-5-oxo-7,11-methano-1H-cyclodeca[3,4]benz[1,2-b]oxet-9-yl ester, (αR,βS)-

~16194 References  Reactions  Commercial Sources  Regulatory Information 

2. 12629-01-5
 Somatotropin (h)
 Sequence Length
 Protein Sequence
 ~1761 References  Reactions  Commercial Sources  Regulatory Information 

3. 9001-15-4

Get References

Retrieve references for:
 All substances Selected substances

For each substance, retrieve:
 All references
 References associated with:
 Adverse Effect, including toxicity
 Analytical Study
 Biological Study
 Combinatorial Study
 Crystal Structure
 Formation, nonpreparative
 Miscellaneous
 Occurrence

For each sequence, retrieve:
 Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

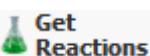
Get References Cancel

Reference Answer Set

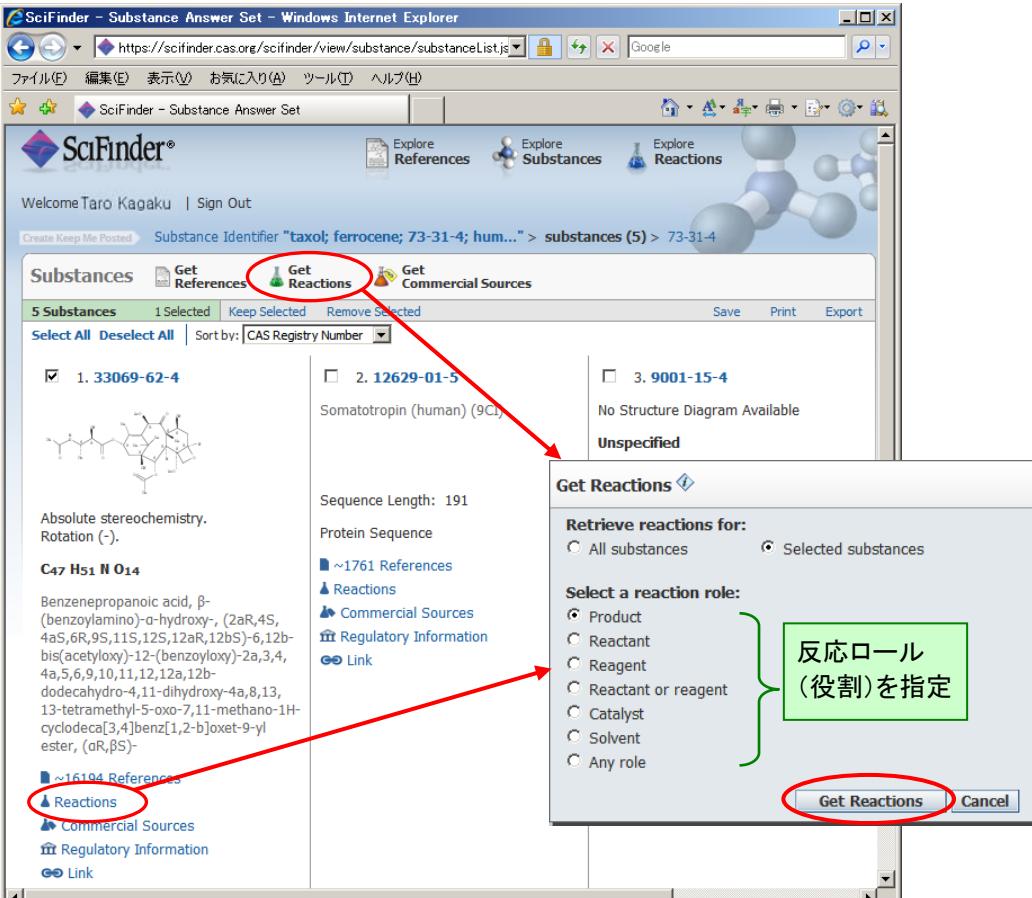
2851 References 0 Selected | Keep Selected | Remove Selected | Remove Duplicates Save | Print | Export

1. Enhanced production of taxanes by cell cultures of *Taxus* species
 By Bringi, Venkataraman; Kadlack, Prakash G.; Prince, Christopher L.; Roach, Braden L.
 From Can. Pat. Appl. (1997), CA 2538292 A1 19971127. Language: English, Database: CAPLUS
 The invention provides methods for the produc...
 2. Semi-synthesis of taxane intermediates and their conversion to paclitaxel and docetaxel
 By Haidu, Rainer
 From U.S. Pat. Appl. Publ. (2008), US 2008262250 A1 20081023. Language: English, Database: CAPLUS
 A process is provided for the semi-synthesis of taxane intermediates, e.g., I [Boc = CO₂Me; Bz = C(=O)Ph], useful in the prep...
 Substances Reactions Citing Full Text Link

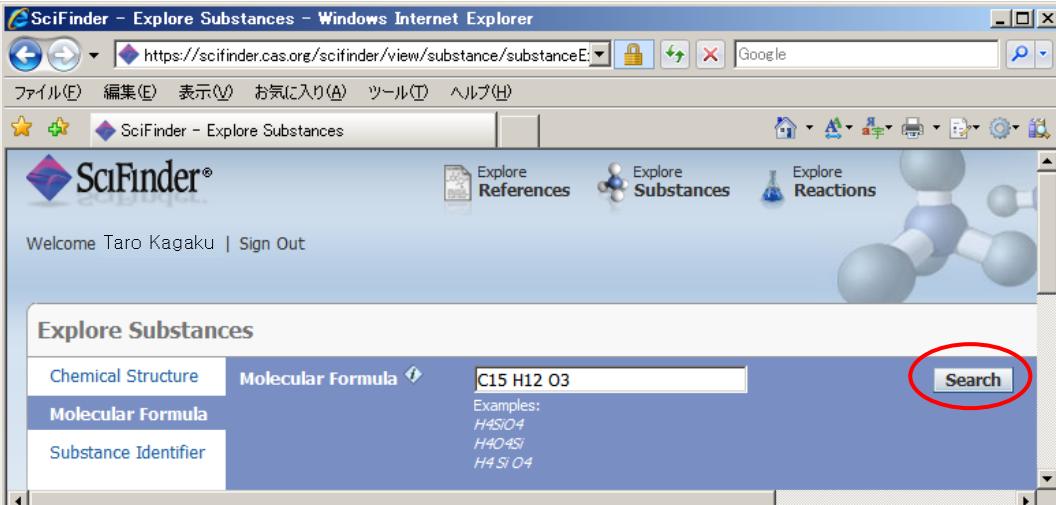
物質情報からの検索

➤ 反応情報へのリンク  Reactions 

各物質下の三角フラスクリンクボタン(単一物質を対象), あるいは画面上部の“Get Reactions”リンクボタン(単一物質または複数物質を対象)により, 化学反応を検索することができます.



◆ 化学物質検索（分子式）<REGISTRY ファイル>



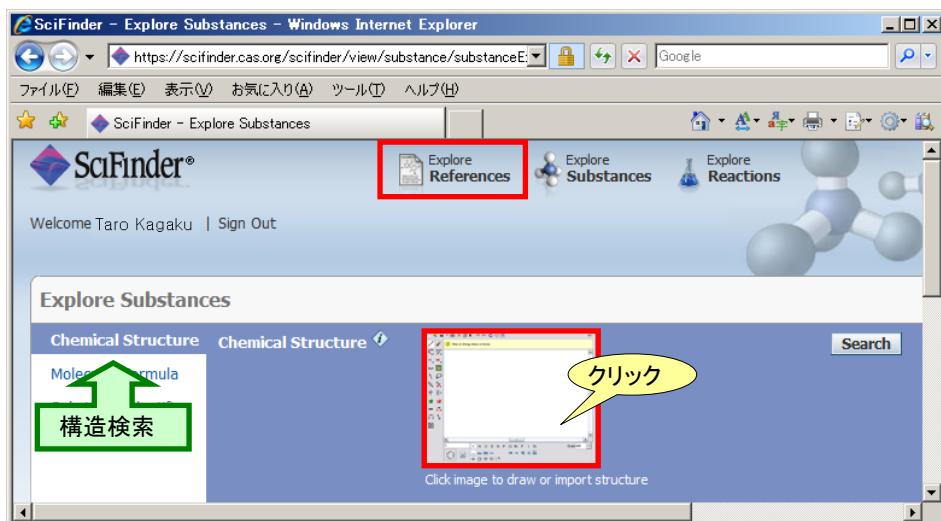
化学構造検索

◆ 化学物質検索（化学構造式）<REGISTRY ファイル>

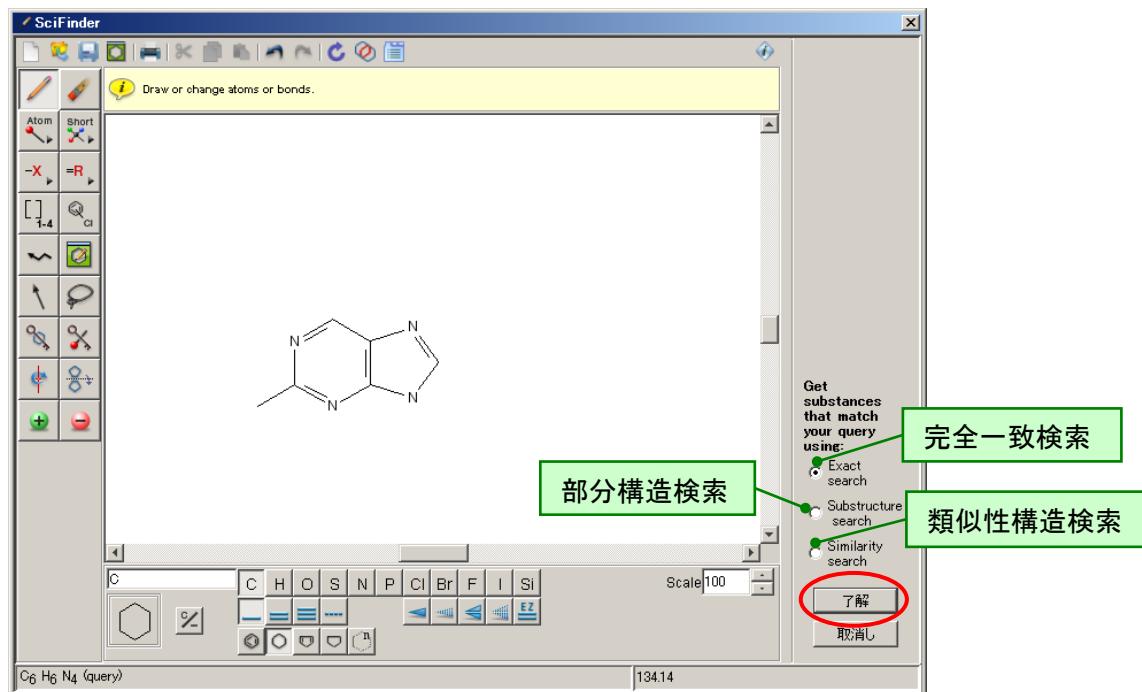


➤ 化学物質を構造から直接検索(塩や混合物、共重合体などを含む)できます。

- ① 構造検索画面を起動します。起動のためには、Java プラグインが必要となります。



- ② 興味のある骨格を作図し、検索条件を選択します。また、mol ファイルの読み込みも可能です。



- 部分構造検索は、作図した構造を含むあらゆる構造を網羅的に検索し、登録の新しい順に表示します。ご利用には部分構造検索オプションの契約が必要となります。
- 類似性構造検索は、構造の類似性が一定以上の構造を検索し、類似性スコアの高い順に表示します。ご利用には部分構造検索オプションの契約が必要となります。

化学構造検索

- ③ 必要に応じて検索対象物質を選択した後、検索を実行します。この画面でポリマーや配位化合物、単成分物質に限定することも可能です。

The screenshot shows the SciFinder interface for exploring substances. In the center, there is a chemical structure of 2-methylpurine. To its right is a 'Search' button, which is circled in red. Below the search bar, there are sections for 'Characteristic(s)', 'Class(es)', and 'Studies', each with several checkboxes. A green bracket on the right side of the interface indicates that limiting search results is also possible.

- ④ 検索結果が表示されます。このあと文献検索を行うこともできます。

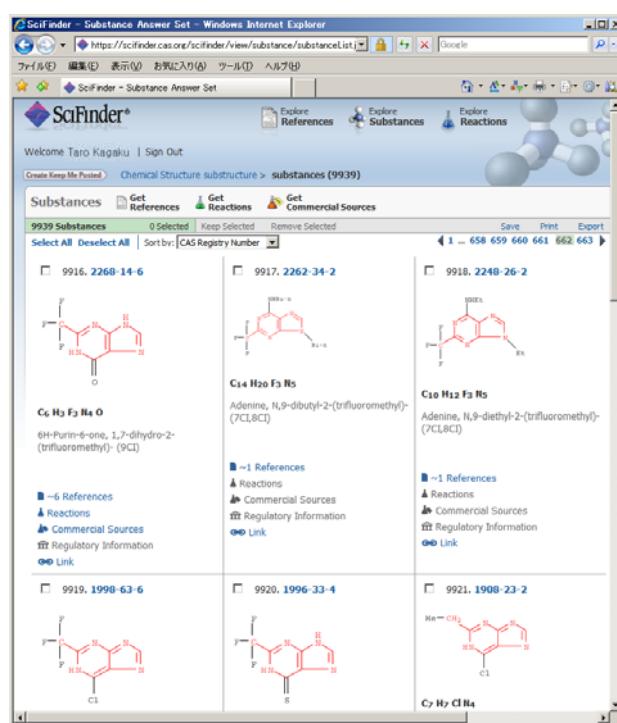
The screenshot shows the SciFinder interface displaying search results for 2-methylpurine. A red box highlights the search results area, which lists eight substances. A green box highlights the sort options, specifically the 'CAS Registry Number' dropdown menu. A green bracket on the left side of the interface indicates the number of answers.

Substance ID	CAS Registry Number	Chemical Structure	Description
1. 857400-19-2	7487-94-7	<chem>C1=CC2=C(N=C2)N=C1</chem>	Purine, 2-methyl-, compd. with HgCl ₂ (SC1)
2. 114954-42-6	934-23-6	<chem>C6H6N4</chem>	1H-Purine-1-15N, 2-methyl- (9CI)
3. 95121-33-8	(Component: 934-23-6)	<chem>C6H6N4</chem>	9H-Purine, 2-methyl-, conjugate acid (1:1)
4. 70879-25-3		<chem>C6H6N4.D</chem>	
5. 13479-82-8		<chem>C6H6N4.D</chem>	
6. 13479-81-7		<chem>C6H6N4.D</chem>	

化学構造検索

【部分構造検索を実行した場合】

- 「ハロゲン」や「アルキル基」、「ヘテロ環」などの可変置換基を構造作図に利用できます。
- 検索結果は別の部分構造、文献の有無、物性情報の有無などで限定することができます(P.31)。
- SciFinder が収載している物質数は世界最大です。物質を取り扱う研究では必須となる強力な検索機能です。



【類似性構造検索を実行した場合】

- Tanimoto アルゴリズムに基づいてスコアを計算し、最初にスコアごとの件数を表示します。
- 環の大きさや、元素の種類が異なっている場合もヒットしますので、当初想定していなかったような構造が見つかる場合があります。

Similarity Candidates		Substances
<input type="checkbox"/>	≥ 99 (most similar)	8
<input type="checkbox"/>	95-98	10
<input type="checkbox"/>	90-94	5
<input type="checkbox"/>	85-89	112
<input type="checkbox"/>	80-84	47
<input type="checkbox"/>	75-79	540
<input type="checkbox"/>	70-74	325
<input type="checkbox"/>	65-69	697
<input type="checkbox"/>	60-64 (least similar)	1432

Get Substances

ヒストグラム

類似性スコア

異なる環構造も

The screenshot shows the SciFinder Substance Answer Set interface. The search term is partially visible. The results list several entries with their chemical structures, CAS numbers, and scores:

- 130. 31441-78-8: Score: 89, C₆H₅NS, Purinethiol
- 131. 59204-60-5: Score: 89, C₆H₅RS, 1H-Pyrimido[4,5-f]-1,3-diazepine (PCl)
- 132. 87332-10-1: Score: 89, Component: 31441-78-8, C₆H₅NS
- 133. 6642-26-8: Score: 85, C₆H₆N₂O, 9H-Purine-8-methanamine, N-methyl-
- 134. 100704-49-2: Score: 85, C₉H₁₂N₂, 9H-Purine-8-methanamine, N-methyl-
- 135. 175530-86-6: Score: 85, C₇H₇NS, 9H-Purine-8-methanamine, N-methyl-

※類似性構造検索では可変原子、R グループなど、あいまいな構造を質問式に使うことはできません。

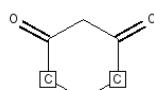
化学構造検索

➤ 各検索タイプで得られる回答の違い

検索タイプ	得られる回答	得られない回答
Exact Search (完全一致構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> 作図した構造どおりの物質およびそれを含む多成分物質(塩、ポリマー、混合物など) 互変異性体 	<ul style="list-style-type: none"> 作図した構造の空いている場所に置換基がついている物質
Substructure Search (部分構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> 作図した構造どおりの物質およびそれを含む多成分物質(塩、ポリマー、混合物など) 互変異性体 作図した構造の空いている場所に置換基の付いた物質 	<ul style="list-style-type: none"> 作図した構造よりも一致する部分の少ない構造(たとえば、エチル基を作図した場合にメチル基はヒットしない)
Similarity Search (類似性構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> 作図した構造どおりの物質およびそれを含む多成分物質(塩、ポリマー、混合物など) 作図した構造と構成元素、置換基の種類、およびその位置が異なっているが類似の構造を有する物質 作図した構造よりも一致する部分が少ないが、類似の構造を有する物質(エチル基を作図して場合メチル基もヒットする) 作図した環構造と環の大きさが異なるもの(6-5 員環を作図して、6-6 員環が得されることもある) 	<ul style="list-style-type: none"> 作図した部分よりも付いている置換基の部分が大きい物質(類似度が低くなるため)

➤ 検索タイプ間の関係

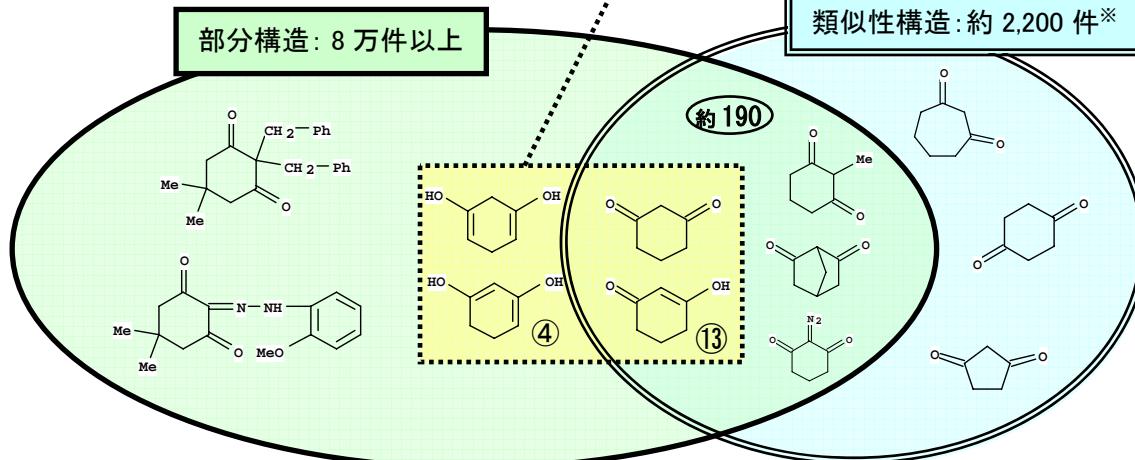
検索式の例:
(C=O 結合は環化禁止、
単成分物質に限定)



完全一致構造: 17 件

部分構造: 8 万件以上

類似性構造: 約 2,200 件*



*類似性スコア 60 以上

化学構造検索

■ 検索結果の限定・解析機能(Analyze/Refine)

- 各種検索によって得られた物質の回答集合に対して、4種のデータに基づく解析(Analyze)を行った後、必要に応じてそれらで限定することや、7種の観点で絞り込み(Refine)ができます。

The screenshot shows the SciFinder interface with several callout boxes highlighting features:

- 解 析 機能**: Points to the "Analysis" tab in the top navigation bar.
- 絞込検索**: Points to the "Refine" tab in the top navigation bar.
- 構 造 式**: Points to the "Chemical Structure" refinement option in the "Refine by:" section.
- カタログ情報の存在**: Points to the "Commercial Availability" checkbox in the "Refine by:" section.
- 物 性 情 報 の 存 在**: Points to the "Property Availability" checkbox in the "Refine by:" section.
- クリックして構造作図**: Points to the "Click image to change structure or view detail" link below the chemical structure diagram.
- システム制限情報**: Points to the "System Limit Information" section at the bottom right.
- クリックして全データ対象の解析へ**: Points to the "Show Full Analysis" button in the "Sample Analysis" panel.

Analysis Tab (Left Panel):

- Sample Analysis: Substances Role dropdown menu. A green box highlights the "Substance Role" option.
- Show Full Analysis button (circled in red).

Refine Tab (Right Panel):

- Refine by: Radio buttons for Chemical Structure, Isotope-Containing, Metal-Containing, Commercial Availability, Property Availability, Reference Availability, and Atom Attachment. The "Chemical Structure" button is selected.
- Only retrieve substances that: Checkboxes for Have references, Are commercially available, Are a single component, Are in specific substance classes, and Appear in specific types of studies. The "Refine" button is circled in red.

Chemical Structure Diagram:

Current Search type: Substructure

Click image to change structure or view detail

System Limit Information

- 解析対象データは最大 20,000 回答
- 1,000 回答以下の集合は、サンプル解析は表示されない
- 全項目解析の詳細表示で、頻度順ソートでは最大 500 項目表示

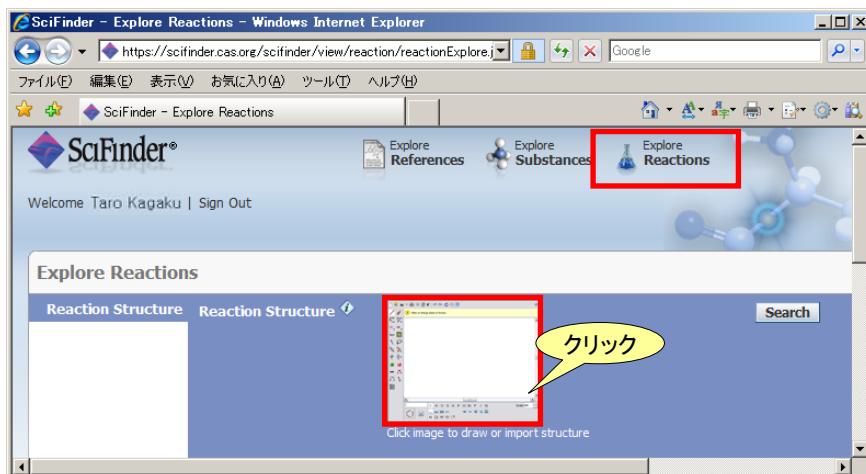
化学反応検索

◆ 化学反応検索 <CASREACT ファイル>

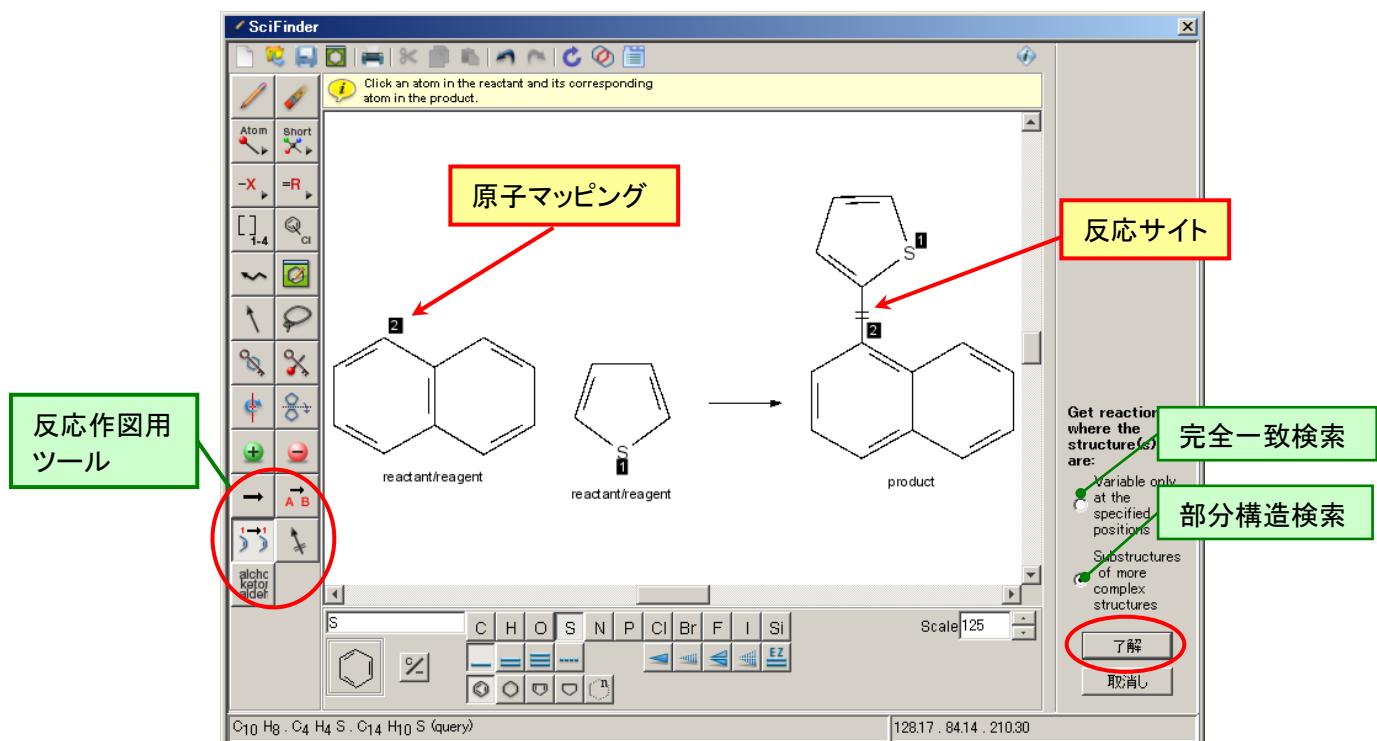


- 化学反応を、生成物、あるいは反応物／試薬を指定し、部分構造で検索できます。
- 反応サイトの指定、反応物と生成物中の原子マッピングにより検索精度を向上できます。
- 反応物、生成物の各々に対して、複数の構造フラグメントを作図することもできます。

① 反応作図画面を起動します。起動のためには、Java プラグインが必要となります。



② 興味のある骨格を作図し、検索条件を選択します。



化学反応検索

- ③ 必要に応じて検索対象物質を選択した後、検索を実行します。この画面で反応情報の由来やステップ数を限定することも可能です。

The screenshot shows the SciFinder interface for exploring reactions. A chemical structure of a substituted benzene ring is displayed in the center. To its right is a red circle highlighting the 'Search' button. Below the search bar, the text 'Current Search type: Substructure' is visible. On the left, there are several filter sections: 'Classification(s)' (checkboxes for Biotransformation, Catalyzed, Chemoselective, Combinatorial, Electrochemical, Gas-phase, Non-catalyzed, Radiochemical, Regioselective, Stereoselective, Photochemical), 'Source(s)' (radio buttons for Any source, Patents only, Sources other than patents), 'Publication Year(s)' (text input field with examples: 1995, 1995 - 1999, 1995 - 1995), and 'Number of Steps' (text input field with examples: 1, 1 - 3, 1 - 3). A green bracket on the right side of the interface points to a green box containing the text '限定も可能' (Limitation is also possible).

- ④ 検索結果が表示されます。反応スキームをクリックすると詳細情報が参照できます。

The screenshot shows the SciFinder interface for reaction answers. At the top, it displays 'Reactions' and 'Get References'. Below this, a list of 262 reactions is shown. A green box labeled '回答件数' (Number of answers) points to the 'Display' dropdown menu, which is set to 'All Reactions'. A green box labeled '文献へのリンク' (Link to reference) points to a yellow speech bubble containing the text 'クリック (次ページへ)' (Click (next page)). Another green box labeled 'クリックして表示形式を切り替えできます (10,000 件以下)' (You can switch the display format by clicking (up to 10,000 items)) points to the same 'Display' dropdown menu. The main area shows a reaction scheme for step 1.2: a substituted silanol reacts with a substituted benzene ring to form a product. The yield is 74%. Below the reaction, a note specifies: Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2. A green box labeled 'Palladium-Catalyzed Cross-Coupling of Five-Membered Heterocyclic Silanlates' points to the reaction title. The bottom section shows another reaction detail for step 2.1.

化学反応検索

- ⑤ 反応詳細画面では、多段階反応の中間体の確認や、各ステップでの収率が確認できます。また、各物質に関する詳細や文献、カタログ情報、反応など様々な情報を検索・表示することができます。

The screenshot shows two windows of the SciFinder software. The top window is titled 'Reaction Detail' and displays a reaction scheme: 1,4-dibromobutene reacts with 1,4-dibromo-2-methylbutene in the presence of NaH and PhMe at room temperature for 10 minutes to yield 1,4-dibromo-2-methyl-3-butene in 74% yield. A green arrow points from the 'Product' link in the reaction details to the 'Reaction Answer Set' window below. The right side of the top window contains source information (Palladium-Catalyzed Coupling of Five-Membered Heterocyclic Silanoles) and company/organization details (Department of Chemistry, University of Illinois Urbana-Champaign). A green box on the right says 'この反応の原料を合成する方法を調べる' (Search for synthesis methods of the reactants).

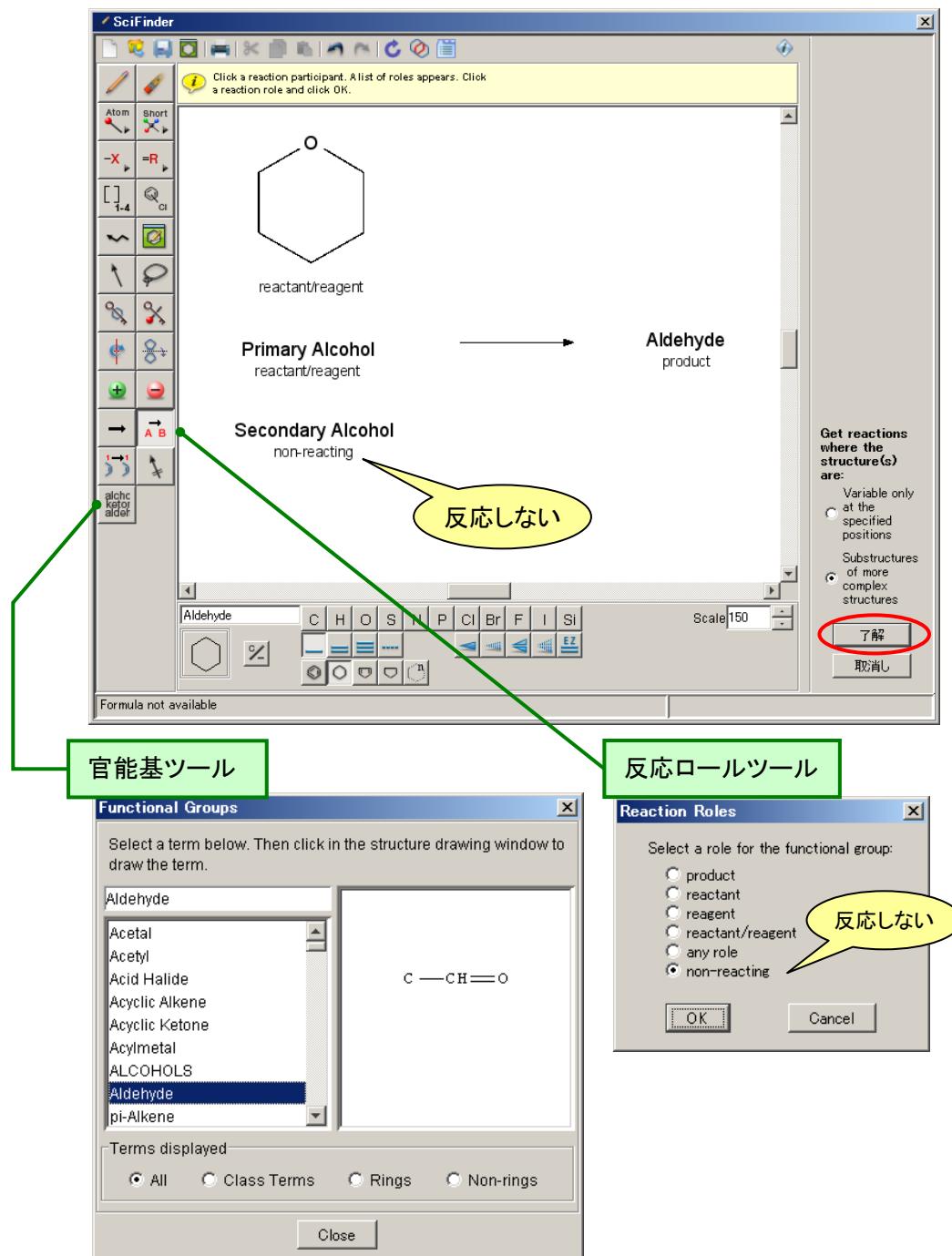
The bottom window is titled 'Reaction Answer Set' and shows a reaction scheme for the synthesis of 1,4-dibromo-2-methyl-3-butene. It uses tetrabutylammonium bromide (Bu4NBr) as a reagent in Et2O and hexane at -70°C for 5 minutes, followed by a workup step at -70°C to rt for 2 hours. A green arrow points from the product structure in the reaction details to this window. A green box on the right says '指定した物質を生成物とする反応' (Reactions that produce the specified substance).

ヒント
化学物質から「Get Reactions」を利用して反応検索も可能。
(→ p.26)

化学反応検索

【参考】

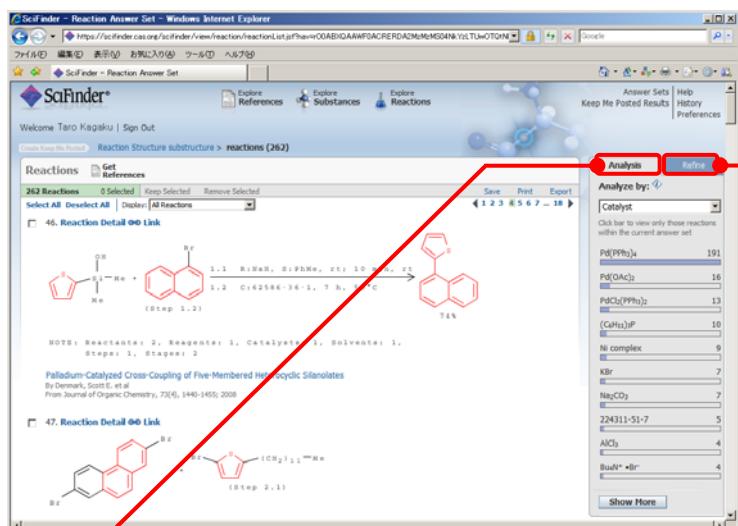
- 官能基名を使えば幅広い検索も可能です。官能基名では、「反応しない官能基」を指定することができます。



化学反応検索

◆ 検索結果の限定・解析機能 (Analyze/Refine)

- 反応検索によって得られた回答集合に対して、10種のデータに基づく解析(Analyze)や5種の観点で絞り込み(Refine)ができます。



解 析 機 能

Analysis Refine

Analyze by: Catalyst

Catalyst Click bar to view only those reactions within the current answer set

Pd(PPh ₃) ₄	91
Pd(OAc) ₂	16
PdCl ₂ (PPh ₃) ₂	13
(C ₆ H ₁₁) ₃ P	10
Ni complex	9
KBr	7
Na ₂ CO ₃	7
224311-51-7	5
AlCl ₃	4
Bu ₄ N ⁺ • Br ⁻	4

Show More

クリックして観点を選択できます

Catalyst Author Name Catalyst Company/Organization Document Type Journal Name Language Number of Steps Product Yield Publication Year Solvent

絞 込 検 索

Analysis Refine

Refine by: Reaction Structure Product Yield Number of Steps Reaction Classification Excluding Reaction Classification

構 造 式 収 率 反応ステップ数 反応分類

クリックして反応作図

Current Search type: Substructure

Refine

♣ システム制限情報

- 解析対象データは最大 20,000 回答
- 1,000 回答以下の集合は、サンプル解析は表示されない
- 全項目解析の詳細表示で、頻度順ソートでは最大 500 項目表示

著者名検索

◆ 著者名検索



- 著者名(特許は発明者)に関する検索では、姓名に対する多用な綴り(例えば、伊藤に対する Ito, Itoh, Itou)を表示し、適切なものを選択して検索することができます。

The screenshot shows two windows of the SciFinder software. The top window is titled 'SciFinder - Explore References - Windows Internet Explorer' and displays a search form for 'Author Name' with fields for Last, First, and Middle names. The 'Search' button is highlighted with a red oval. The bottom window is titled 'SciFinder - Author Candidates - Windows Internet Explorer' and shows a list of author candidates. A green box labeled '可能性のあるものをチェック' (Check the likely ones) points to the checked boxes next to 'ITO T', 'ITO TAKESHI', and 'ITOU TAKESHI'. The 'Get References' button at the bottom is also highlighted with a red oval.

Explore References

Research Topic Author Name

Author Name

Company Name
Document Identifier
Journal
Patent

Author Name Candidates

24 Authors 5 Selected

Select All Deselect All

Author Candidates	References
ETO	1
ETO T	438
ETO T A	4
ETO T K	3
ETO TAKESHI	12
ETO TAKESHI KURT	1
ETTO T L	2
ITO	12
<input checked="" type="checkbox"/> ITO T	4823
<input type="checkbox"/> ITO T A	3
<input type="checkbox"/> ITO T I	20
<input type="checkbox"/> ITO T IM	
<input type="checkbox"/> ITO T K	
<input type="checkbox"/> ITO T M	54
<input type="checkbox"/> ITO T TAJIMA N	1
<input type="checkbox"/> ITO T U	14
<input type="checkbox"/> ITO T Y	4
<input checked="" type="checkbox"/> ITO TAKESHI	947
<input type="checkbox"/> ITOH	3
<input checked="" type="checkbox"/> ITOH T	2617
<input type="checkbox"/> ITOH T J	20
<input checked="" type="checkbox"/> ITOH TAKESHI	202
<input type="checkbox"/> ITOU T	106
<input checked="" type="checkbox"/> ITOU TAKESHI	5

可能性のあるものをチェック

Get References

他の検索

◆ 会社名(大学名)検索



- 著者所属機関名、特許出願人名に含まれる単語の組み合わせで、文献を検索することができます。

The screenshot shows the SciFinder interface for exploring references. A search bar at the top contains the text 'Pfizer'. To the right of the search bar is a red circle highlighting the 'Search' button. On the left, there is a sidebar with various search filters: Research Topic, Company Name, Author Name, Document Identifier, Journal, and Patent. The 'Company Name' filter is currently selected. Below the search bar, there are examples of other companies: 3M and DuPont.

◆ 文献情報からの検索



- 著者名や雑誌名、巻号、ページ数などの断片的な情報から文献を探すことができます。

The screenshot shows the SciFinder interface for exploring references with several search fields highlighted by green boxes and arrows pointing to labels:

- 「雑誌名」 (Journal Name) points to the 'JACS' input field.
- 「巻、号、ページ」 (Volume, Issue, Starting Page) points to the Volume, Issue, and Starting Page input fields.
- 「キーワード (タイトル中のみ)」 (Title Word(s)) points to the 'asymmetric' input field under 'Title Word(s)'.
- 「著者名」 (Author Name) points to the 'Last *' input field under 'Author Name'.
- 「発行年」 (Publication Year(s)) points to the '1990-2000' input field under 'Publication Year(s)'.

To the right of the search fields, a red circle highlights the 'Search' button.

- 雑誌名は“JACS”, “J Am Chem Soc”, “Journal of the American Chemical Society”が使えます。
- 意図しない文献もヒットした場合は、雑誌名で Analyze すれば除けます。

Keep Me Posted 機能

◆ Keep Me Posted 機能 (アラート検索機能)



- あらかじめ登録した質問式を定期的な頻度で検索を自動実行させる Keep Me Posted 機能 (KMP)を利用することで最新の情報を入手することができます。

The screenshot shows the SciFinder interface in Internet Explorer. The search term 'antiviral agents for influenza' has been entered, resulting in 2547 references. A filter has been applied to show only 'Patents only' (676). The results list includes two patent abstracts:

- Method for preparing Chinese medical components-containing candy for preventing influenza virus infection in children
- Nose and throat anti-influenza solution and method of use

Each result provides details such as inventors, publication date, and a link to the full patent document.

The dialog box allows users to define a profile for automatic search updates. Fields include:

- Title: tamiflu related patents
- Description: (empty text area)
- Status: Enabled (radio button selected)
- Exclude previously retrieved references:
- Expiration Date: Dec 8, 2009
- Buttons: Create (highlighted with a red circle), Cancel

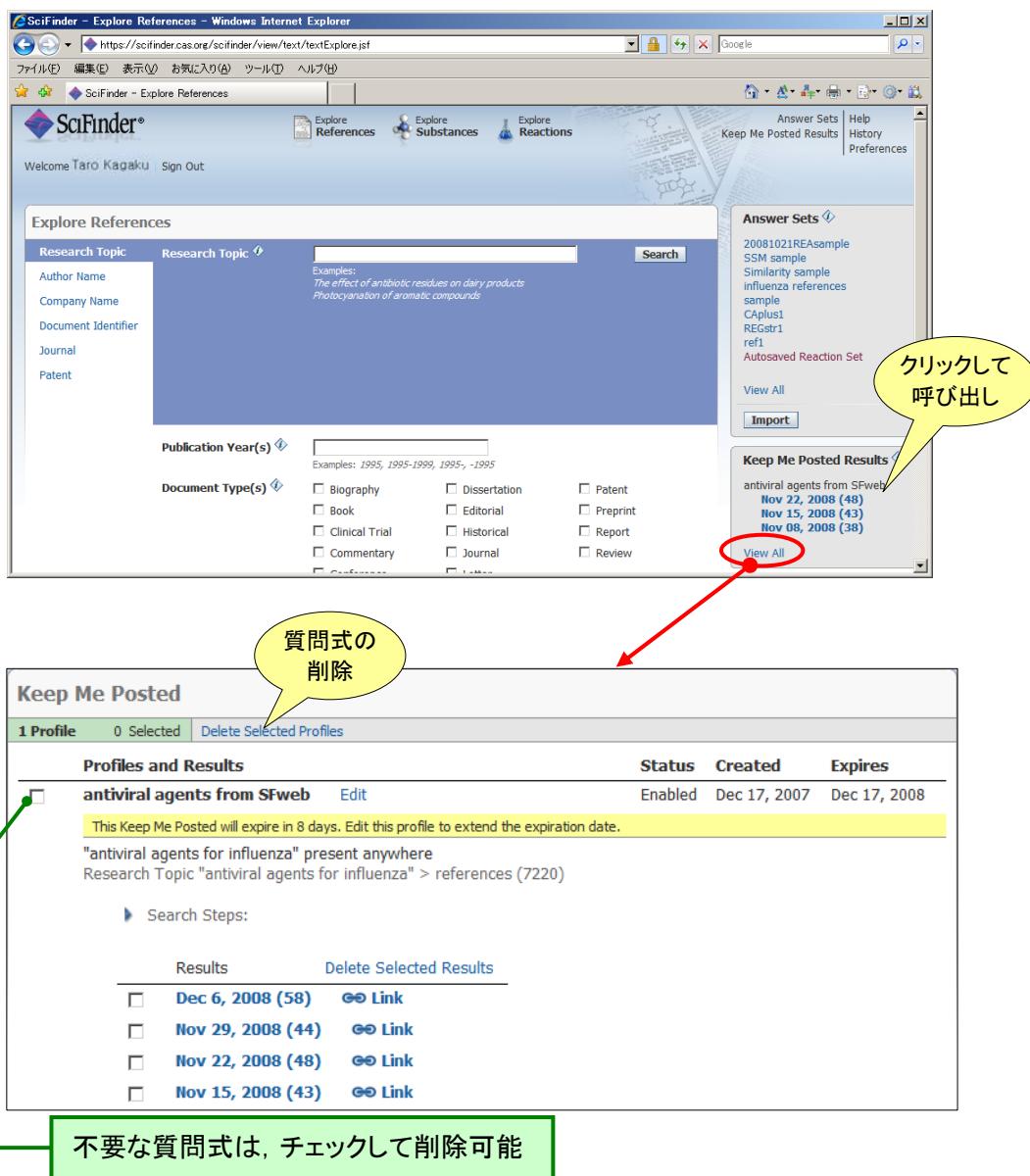
A callout box highlights the expiration date field with the text: "アラート検索終了日を1年以内の日付で指定。入力フォーマットはmmm d, yyyy 例) Dec 8, 2009".

A green box at the bottom left states: "チェックが入っていないと、すでに得られた回答で情報が更新されたものも得られる" (If the checkbox is not checked, information updated in existing answers will not be retrieved).

- 実行頻度は毎週です。
- 検索実行後に、メールでヒット件数を配信できます (Preferences で設定可能。ゼロ件の時は配信なし)。
- メールは、ID 取得時の登録アドレスに配信されます。
- Create Keep Me Posted ボタンがクリックできない回答集合では質問式登録はできません。

Keep Me Posted 機能

● 結果の呼び出し



SciFinder - Explore References - Windows Internet Explorer
https://scifinder.cas.org/scifinder/view/text/textExplore.jsf

ファイル(F) フォルダ(D) 表示(V) お気に入り(H) ツール(T) ヘルプ(H)

SciFinder - Explore References

Welcome Taro Kagaku | Sign Out

Explore References

Research Topic: Examples: The effect of antibiotic residues on dairy products Photocyanation of aromatic compounds

Publication Year(s): Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, 1995

Document Type(s): Biography, Dissertation, Patent, Book, Editorial, Preprint, Clinical Trial, Historical, Report, Commentary, Journal, Review

Answer Sets: 20081021REsample, SSM sample, Similarity sample, influenza references sample, Cplus1, REGsr1, ref1, Autosaved Reaction Set

Keep Me Posted Results: antiviral agents from SFweb Nov 22, 2008 (48), Nov 15, 2008 (43), Nov 08, 2008 (38)

Import, View All

Keep Me Posted

1 Profile 0 Selected Delete Selected Profiles

Profiles and Results

antiviral agents from SFweb Edit

This Keep Me Posted will expire in 8 days. Edit this profile to extend the expiration date.

"antiviral agents for influenza" present anywhere

Research Topic "antiviral agents for influenza" > references (7220)

Search Steps:

Results	Delete Selected Results
<input type="checkbox"/> Dec 6, 2008 (58)	Link
<input type="checkbox"/> Nov 29, 2008 (44)	Link
<input type="checkbox"/> Nov 22, 2008 (48)	Link
<input type="checkbox"/> Nov 15, 2008 (43)	Link

● 配信メールサンプル

見出し : SciFinder "Keep Me Posted" Results
差出人 : SciFinder KMP Processing
送信日時: 2008/11/22 22:11

SciFinder has identified new results that satisfy the following profiles for user Scixxx332:

Profile name	Database(s)	New result count
tamiflu related patents	Medline, Cplus	48

These results are now available for your review using [SciFinder](#).

Keep Me Posted is an automated service. PLEASE DO NOT REPLY TO THIS MESSAGE.

These profiles can be deleted within the Keep Me Posted feature in [SciFinder](#). Please direct questions about this message to your SciFinder Site Administrator. For additional assistance, call CAS at 1-800-753-4227 (614-447-3700 outside North America) or send e-mail to help@cas.org.

回答の保存・印刷

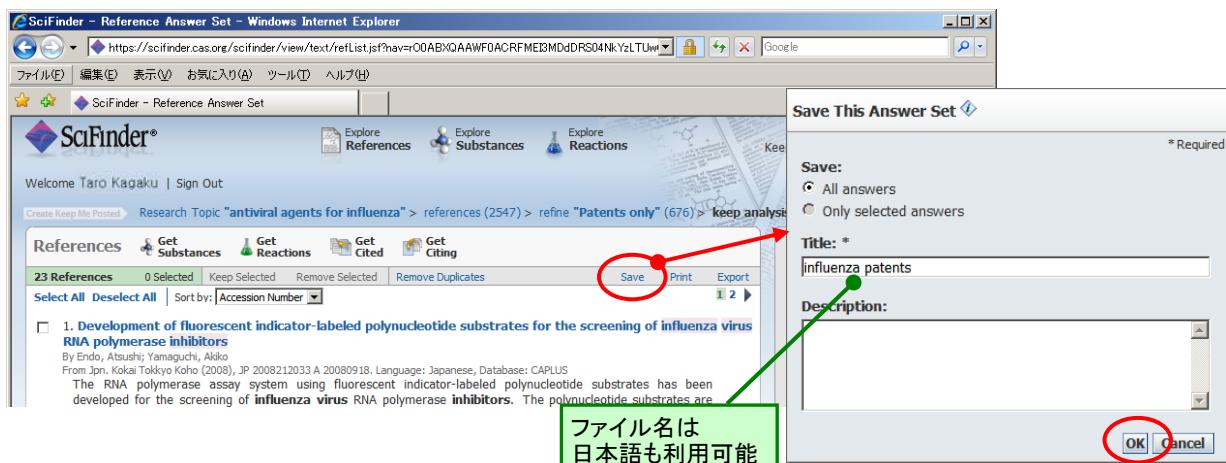
◆ 検索結果の保存

- SciFinder の回答の保存には、三通りの方法があります。

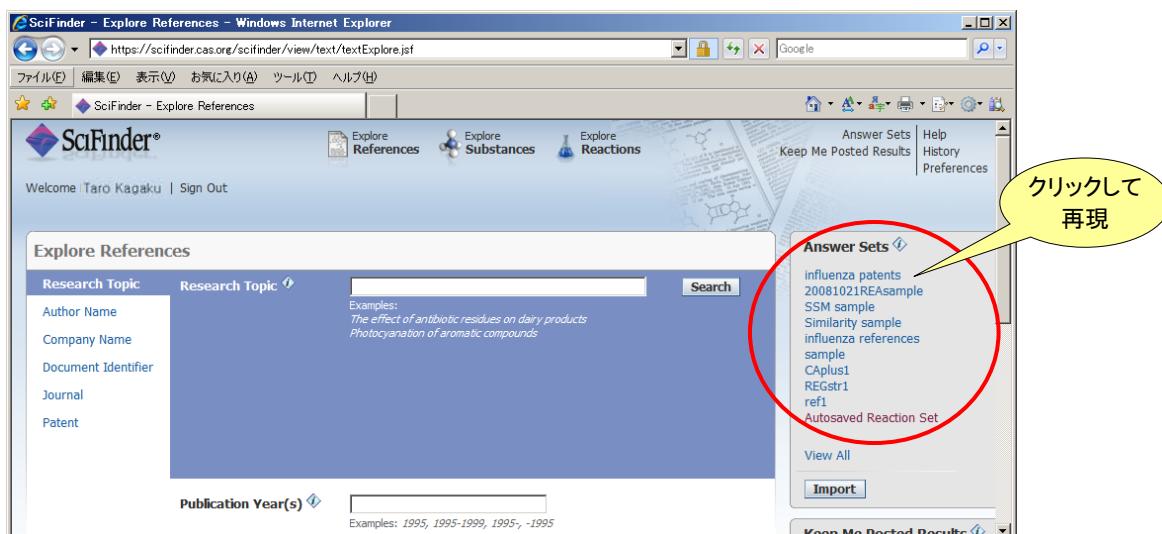
保存方法	① サーバへの保存 【 推奨 】 
説明	サーバ側にデータ保存（企業 100 集合、大学 20 集合まで）
SciFinder での回答の再現	可能
一回あたりの最大保存件数	20,000 件
その他	再現時にヒットした構造はハイライトされるが、テキストのヒットタームハイライトや類似性スコアは表示されない。 操作しない時間が 20 分続いた場合、自動ログアウトされ、その時点で作成されていた回答集合はサーバへ自動保存される。

上限を越える回答を保存したい場合は、Refine 機能で回答を切り分けて絞り込むなどして、一旦回答件数を上限以下にしてから保存してください。

● 回答の保存



● 回答の呼び出し



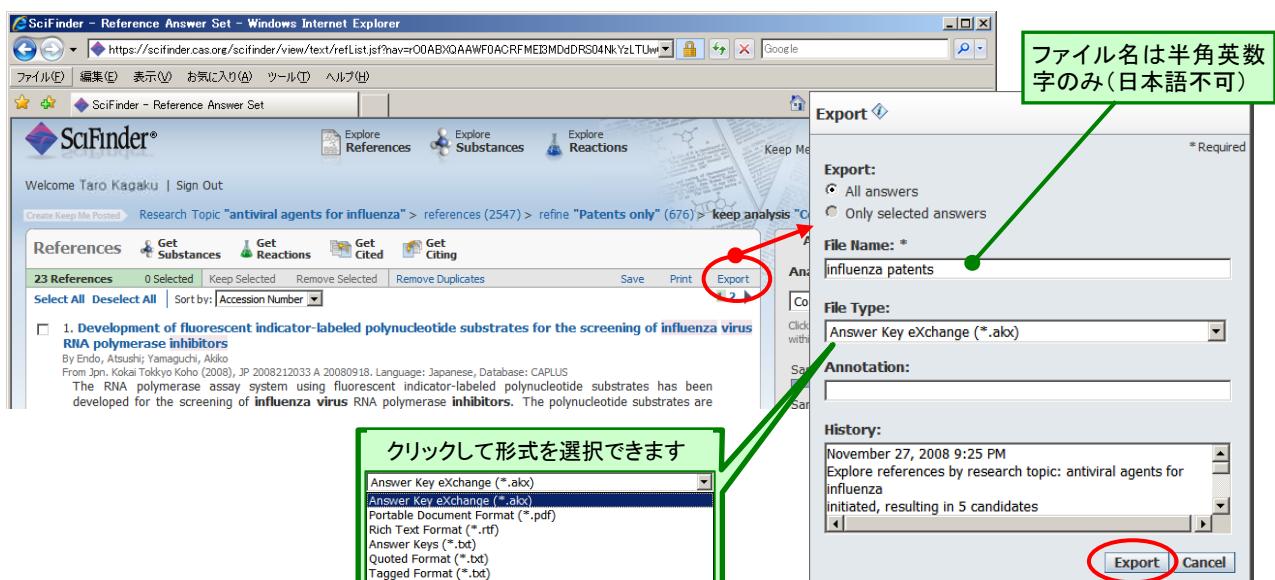
回答の保存・印刷

保存方法	② SciFinder Web 形式 Export	③ ダウンロード Export
説明	後ほど回答を SciFinder で再現できる形式でハードディスクに保存	ハードディスクや各種メディアにデータをダウンロード
ファイル形式	akx (Answers Key eXchange) 形式	PDF 形式 および テキスト形式(コンマ区切り形式、またはタグつき形式)
SciFinder での回答の再現	可能	不可
一回あたりの最大保存件数	20,000 件	500 件 (企業) / 100 件 (大学) *
利用の注意	保存した回答利用に制限あり	ダウンロードしたデータ保存数に制限あり *
その他	質問式は保存されない。ハイライトについては、サーバへの保存と同様。	SciFinder Web 形式に比べ、保存時間がかかり、ファイルサイズが大きくなる

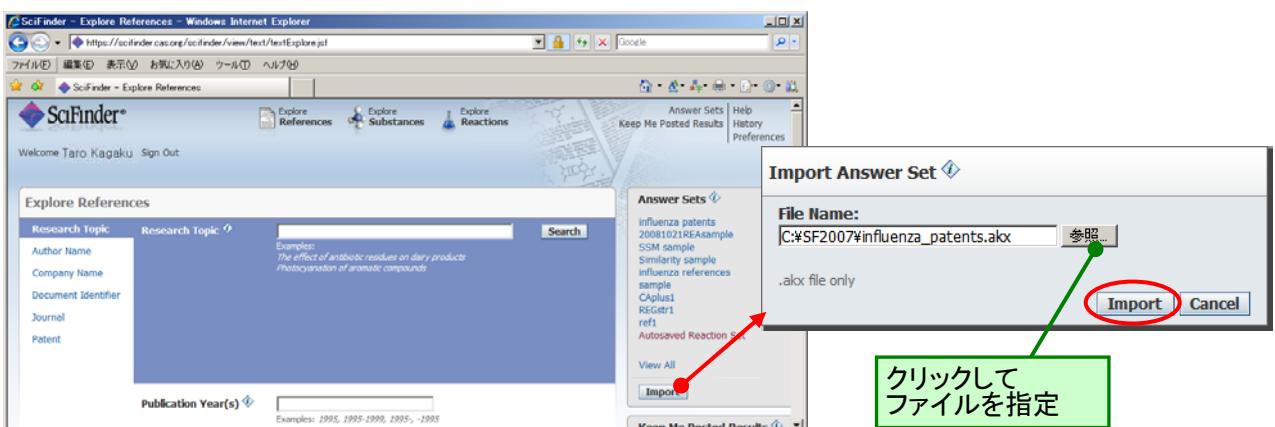
* ダウンロードしたデータの保存数の制限について

③ ダウンロードの場合、累積 5,000 件を超えて回答を保存することは、契約上禁止されています。
不要なデータを削除し 5,000 件を超えないようにしてください。

● 回答の保存



● 回答の呼び出し



回答の保存・印刷

◆ 検索結果の印刷

➤ Print リンクボタンをクリック (Summary 形式 500 件まで, Detail 形式 100 件まで)

印刷例 (文献)

検索履歴も印刷される

print

Print:
 All answers
 Only selected answers

Format:
 Summary
 Detail

Print **Cancel**

印刷例 (物質)

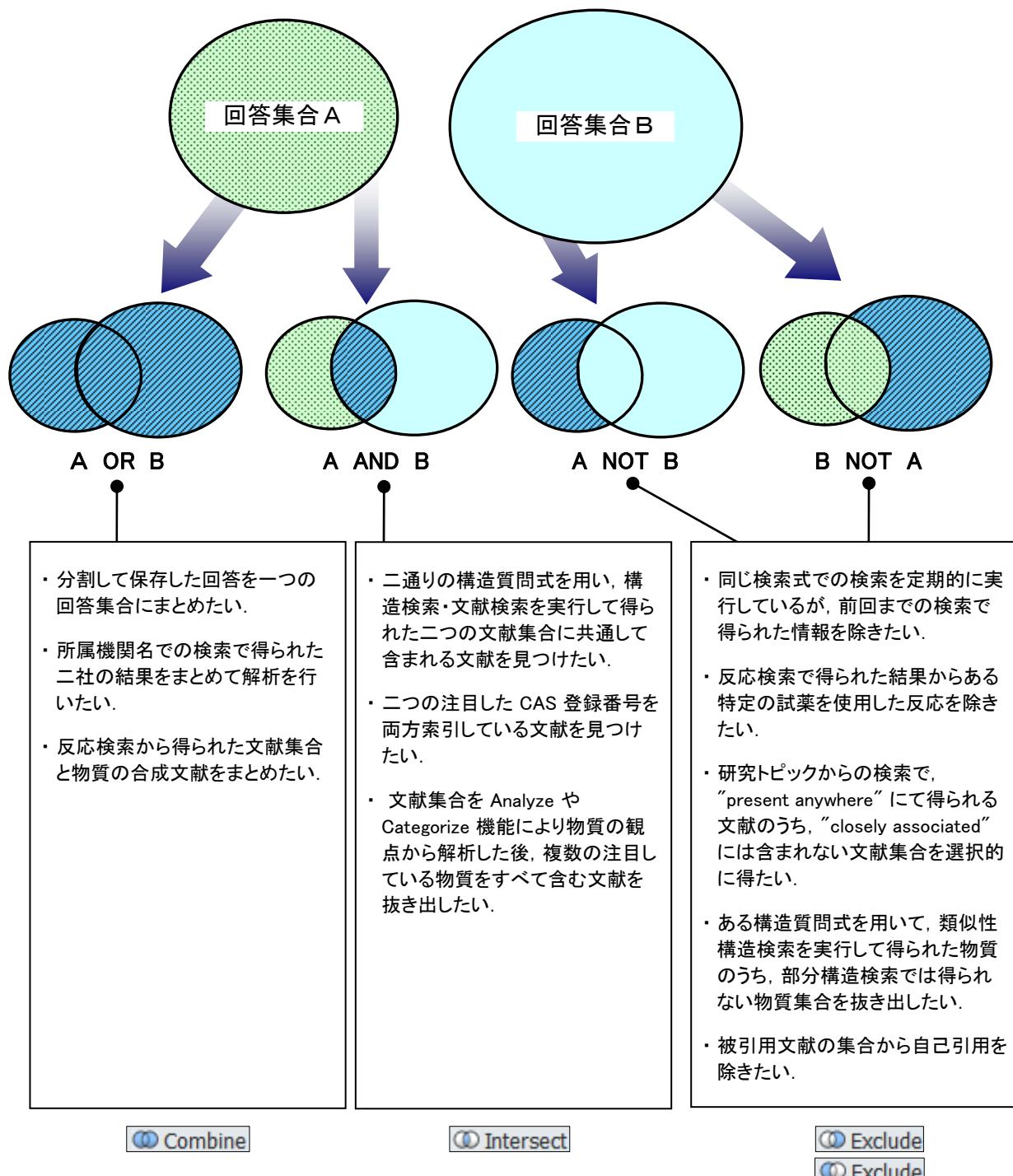
検索履歴も印刷される

印刷例 (反応)

Combine機能

◆ Combine 機能

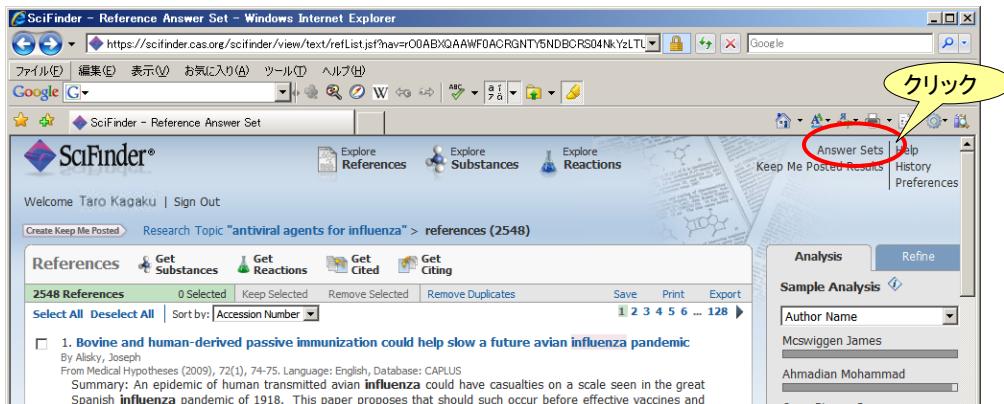
- SciFinder で得られた回答集合同士を演算することができます。この機能を利用することにより、いくつかに分割して保存した回答を一つにまとめたり、以前得られた結果を除き、新たに得られた情報のみを見るようになります。



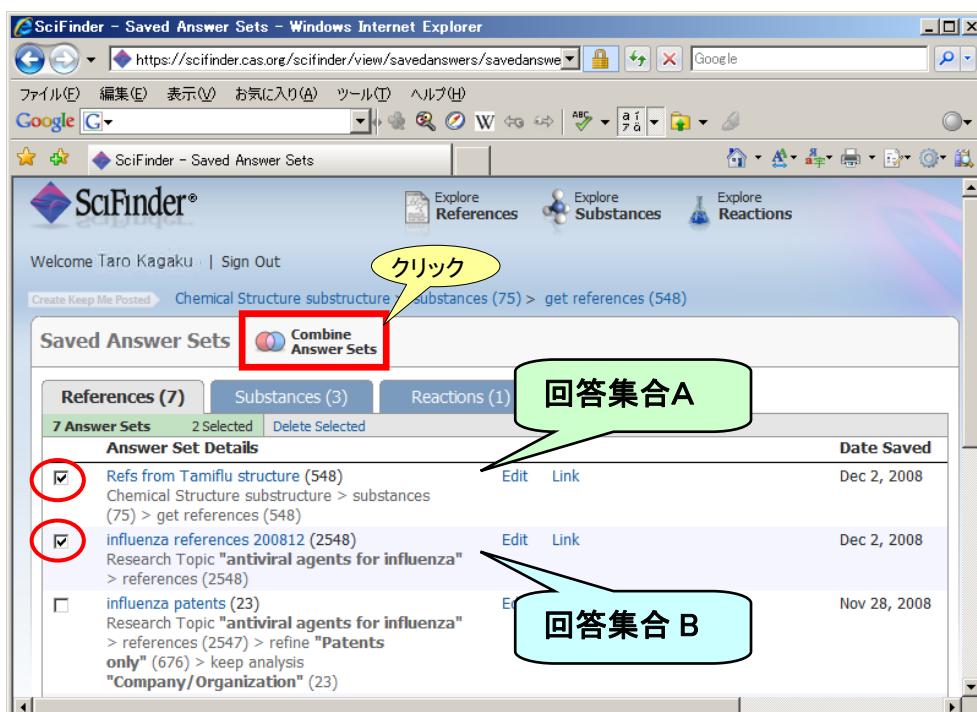
注) 演算できる回答は物質レコードの集合同士、文献レコードの集合同士、反応レコードの集合同士に限られます。

Combine機能

- ① 組み合わせたいすべての回答の集合を、サーバへ保存します(→ p41).
- ② 画面右上の「Answer Sets」をクリックして、回答集合の一覧画面を表示させます.

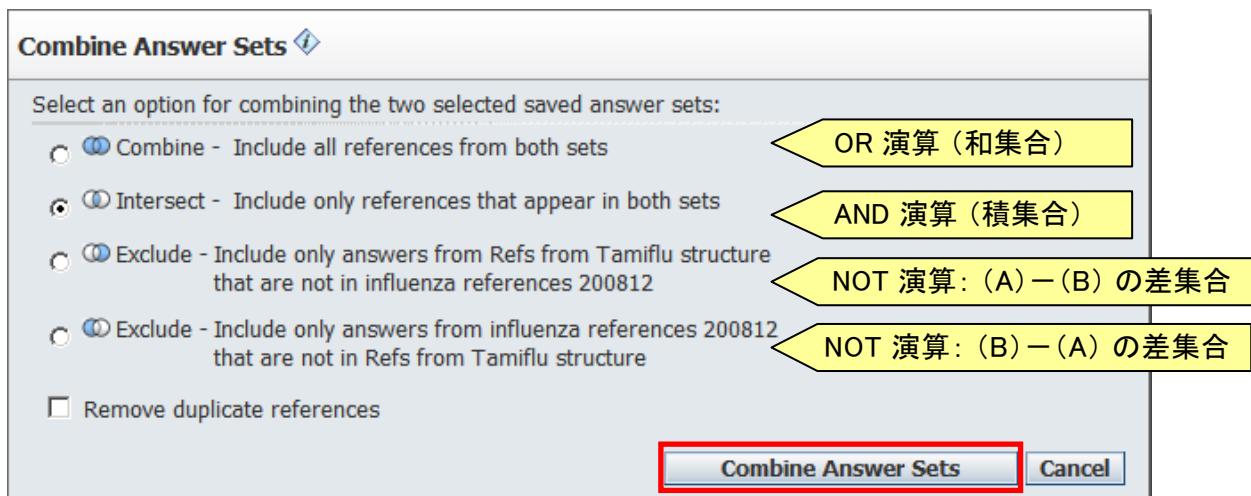


- ③ 組み合わせたい集合すべてにチェックを入れ、「Combine Answer Sets」をクリックします. 3集合以上を選択することも可能です.



Combine機能

- ④ 実行したい演算のタイプを選択します。3集合以上を組み合わせる場合は Exclude (NOT 演算) の選択肢は表示されません(→ p47)。



- ⑤ 演算結果が表示されます。このあと、限定や解析なども可能です。

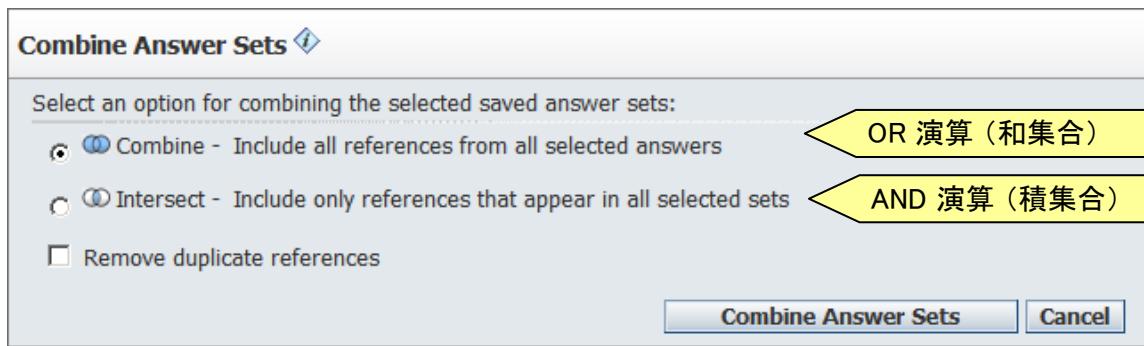
Author Name	Count
Hayden Frederick G	15
Kashiwagi Seizaburo	10
Sugaya Norio	10
Ward Penelope	10
Sidwell Robert W	9
Kim Choung U	8
Webster Robert G	8
Gubareva Larisa V	7

♣ システム制限情報

- ・検索時のハイライトは反映されません。
- ・演算後の集合の Keep Me Posted 登録はできません。
- ・類似性構造検索のスコアは表示されません。

Combine機能

※ 前ページ④にて、3集合以上を選択した場合、演算タイプ選択画面は次のようにになります。



◆ 参考情報：SciFinder ユーザ事例

化学情報協会の SciFinder のサイトでは、SciFinder のユーザ事例をご紹介しております。ぜひご覧ください。取材ご希望の方は、弊協会 情報事業部までお問い合わせください。
<http://www.jaici.or.jp/sci/SCIFINDER/user.html>

JAICI | 製品とサービス | SciFinder | ユーザー事例 | Windows Internet Explorer

JAICI 社団法人 化学情報協会 HOME English

協会案内 製品とサービス 講習会 イベント 資料請求

SciFinder

SciFinder Part of the process.

ユーザー事例

SciFinderをご利用いただいているユーザー事例が雑誌に掲載されました。下記に記事をPDF形式でご用意いたしましたのでご参照ください。

エーザイ(株)	日経サイエンス 2008年8月号掲載
金沢大学	金沢大学附属図書館報「こだま」2008年4月号掲載
リンク・ジェノミクス(株)	日経サイエンス 2008年4月号掲載
独立行政法人理化学研究所	ユーザー事例(実験医学 2008年2月号掲載) シリーズ記事2(実験医学 2008年1月号掲載) シリーズ記事1(実験医学 2007年12月号掲載)
三井農林(株)	日経サイエンス 2008年2月号掲載
新日本理化(株)	日経サイエンス 2007年8月号掲載
(株)ニチロ	日経サイエンス 2007年2月号掲載
セントラル硝子(株)	日経サイエンス 2006年8月号掲載
長瀬産業(株)	日経サイエンス 2006年2月号掲載
石原産業(株)	日経サイエンス 2005年8月号掲載
日本化薬(株)	日経サイエンス 2005年2月号掲載
(株)ナード研究所	日経サイエンス 2004年8月号掲載

APPENDIX

◆ Chemical Abstracts が収載する文献情報

約 10,000 の科学技術雑誌および特許から物質関連の文献情報を選択的に収録しています。化学だけでなく、物理分野から生物分野に至るまで、物質を用いた研究に関する文献を幅広く収載しています。この中で主要 1,900 誌については、1994 年以降のすべての記事を収録しています。

○主要雑誌の例

◆ 物理学分野

- Journal of Applied Physics
- Physical Review (A, B, C, D, E)
- Physical Review Letters
- European Physical Journal (A, B, C, D, E)
- Physics Letters (A, B)
- Journal of Experimental and Theoretical Physics
- Journal of Chemical Physics
- Japanese Journal of Applied Physics (Part 1, 2)

◆ 化学分野

- Journal of the American Chemical Society
- Journal of Physical Chemistry (A, B)
- Macromolecules
- Journal of Organic Chemistry
- Tetrahedron Letters
- Chemistry of Materials
- Journal of the Electrochemical Society
- Solid State Ionics

◆ 環境科学分野

- Chemosphere
- Environmental Pollution (Amsterdam, Netherlands)
- Journal of Environmental Quality
- Environmental Science and Technology
- Environmental Toxicology and Pharmacology
- Journal of Environmental Science & Engineering
- Water Environment Research
- Water Research

◆ 生物学分野

- Cell
- Molecular Biology of the Cell
- Molecular Biology and Evolution
- Journal of Biochemistry
- Plant Physiology
- Journal of Cell Biology
- Brain Research
- Nucleic Acids Research

◆ 薬学分野

- Bioorganic & Medicinal Chemistry
- Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters
- Basic & Clinical Pharmacology & Toxicology
- Chemical & Pharmaceutical Bulletin
- European Journal of Pharmaceutical Sciences
- British Journal of Pharmacology
- Journal of Pharmaceutical Sciences
- Pharmaceutical Development and Technology

◆ 医学分野

- Annual Review of Medicine
- Birth Defects Research, Part A, B
- New England Journal of Medicine
- Clinical and Diagnostic Laboratory Immunology
- Nature Medicine (New York, NY, United States)
- Experimental and Clinical Endocrinology & Diabetes
- Experimental and Molecular Medicine
- Journal of Clinical Investigation

◆ 農学・栄養学分野

- Experimental Animals
- Journal of Insect Physiology
- Journal of Animal Science (Savoy, IL, U. S.)
- Journal of Agricultural and Food Chemistry
- Journal of Oleo Science
- Journal of Nutritional Science and Vitaminology
- Journal of the Science of Food and Agriculture
- Fisheries Science (Carlton, Australia)

◆ 材料工学分野

- Materials Science & Engineering (A, B, C)
- Biomacromolecules
- Journal of Biomedical Materials Research (A, B)
- Journal of Material Science
- International Journal of Hydrogen Energy
- Journal of the American Ceramic Society
- Materials Transactions
- 粉体及び粉末冶金

◆ 電気電子工学分野

- Applied Surface Science
- Ferroelectrics
- IEEE Journal of Quantum Electronics
- Journal of Electronic Materials
- Journal of Vacuum Science & Technology, B
- Quantum Electronics
- Microelectronic Engineering
- Superconductor Science and Technology

◆ 機械工学分野

- Corrosion Science
- Materials Science and Technology
- Journal of Thermophysics and Heat Transfer
- Combustion Science and Technology
- Archivum Combustionis
- ISIJ International
- Wear
- 日本金属学会誌

採録されている主要雑誌の一覧は以下のサイトをご覧下さい

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/caplus/corejournals.html>

A P P E N D I X

◆ Chemical Abstracts 収録分野 (CA セクション一覧表)

- 収録分野はひとつひとつの文献レコードに記載されています(p.4 参照).
- 収録分野を文献の絞り込みに活用することも可能です(p.19 参照).

生化学

1. 薬理学	Pharmacology
2. ホルモン薬理学	Mammalian Hormones
3. 生化学的遺伝学	Biochemical Genetics
4. 毒物学	Toxicology
5. 農芸化学的生物調節剤	Agrochemical Bioregulators
6. 生化学一般	General Biochemistry
7. 酶素	Enzymes
8. 放射線化学	Radiation Biochemistry
9. 生化学の方法	Biochemical Methods
10. 微生物生化学	Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry
11. 植物生化学	Plant Biochemistry
12. 非ほ乳類生化学	Nonmammalian Biochemistry
13. ほ乳類生化学	Mammalian Biochemistry
14. ほ乳類病理生化学	Mammalian Pathological Biochemistry
15. 免疫化学	Immunochemistry
16. 発酵, 工業生物化学	Fermentation and Bioindustrial Biochemistry
17. 食品, 飼料化学	Food and Feed Chemistry
18. 動物栄養	Animal Nutrition
19. 肥料, 土壌, 植物栄養	Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition
20. 歴史, 教育, ドクメンテーション	History, Education, and Documentation

有機化学

21. 有機化学一般	General Organic Chemistry
22. 物理有機化学	Physical Organic Chemistry
23. 脂肪族化合物	Aliphatic Compounds
24. 脂環式化合物	Alicyclic Compounds
25. ベンゼン, ベンゼン誘導体, 縮合ベンゼノイド化合物	Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds
26. 生体分子, 合成類似体	Biomolecules and Their Synthetic Analogs
27. 複素環式化合物(ヘテロ原子1個)	Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)
28. 複素環式化合物(ヘテロ原子2個)	Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)
29. 有機金属, 有機メタロイド化合物	Organometallic and Organometalloidal Compounds
30. テルペン, テルペノイド化合物	Terpenes and Terpenoids
31. アルカロイド	Alkaloids
32. ステロイド	Steroids
33. 炭水化物	Carbohydrates
34. アミノ酸, ペプチド, タンパク質	Amino Acids, Peptides, and Proteins

高分子化学

35. 合成高分子の化学	Chemistry of Synthetic High Polymers
36. 合成高分子の物理的性質	Physical Properties of Synthetic High Polymers
37. プラスチックの製造, 加工	Plastics Manufacture and Processing
38. プラスチックの成型, 用途	Plastics Fabrication and Uses
39. 合成エラストマー, 天然ゴム	Synthetic Elastomers and Natural Rubber
40. 織物	Textiles and Fibers
41. 染料, 蛍光増白剤, 写真増感剤	Dyes, Organic Pigments, Fluorescent Coatings, Inks, and Related Products
42. 塗料, インク, 関連製品	Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products
43. セルロース, リグニン, 紙, その他の木材製品	Industrial Carbohydrates
44. 工業炭水化物	Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes
45. 工業有機化学製品, 皮革, 脂肪, ロウ	Surface-Active Agents and Detergents
46. 界面活性剤, 洗浄剤装置, 工場設備	

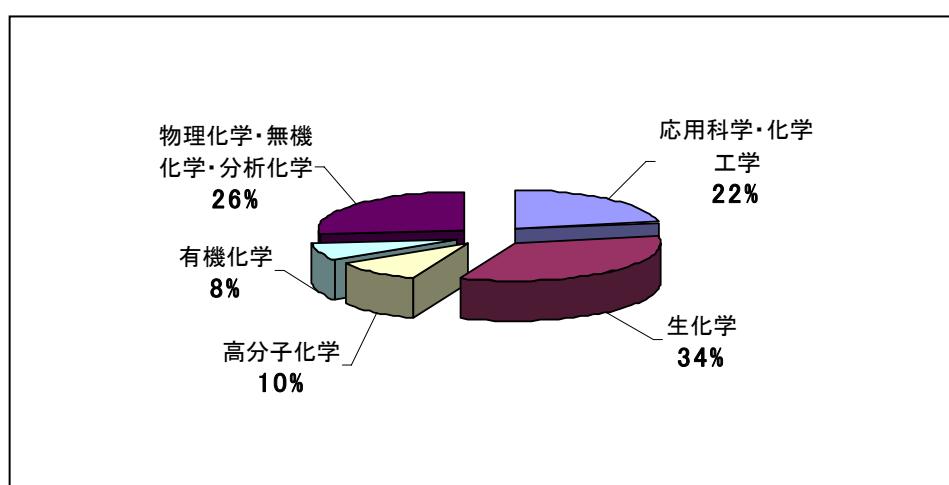
A P P E N D I X

応用化学・化学工学

47. 装置, 工場設備	Apparatus and Plant Equipment
48. 単位操作, プロセス	Unit Operations and Processes
49. 工業無機化学製品	Industrial Inorganic Chemicals
50. 推進薬, 爆薬	Propellants and Explosives
51. 化石燃料, 誘導製品, 関連製品	Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products
52. 電気化学的, 放射及び熱エネルギー工学	Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology
53. 鉱物, 地質化学	Mineralogical and Geological Chemistry
54. 抽出冶金学	Extractive Metallurgy
55. 鉄, 鉄合金	Ferrous Metals and Alloys
56. 非鉄金属, 合金	Nonferrous Metals and Alloys
57. セラミックス	Ceramics
58. セメント, コンクリート, 関連建設材料	Cement, concrete, and Related Building Materials
59. 大気汚染, 産業衛生	Air Pollution and Industrial Hygiene
60. 廃棄物処理, 処分	Waste Treatment and Disposal
61. 水	Water
62. 精油, 化粧品	Essential Oils and Cosmetics
63. 薬剤	Pharmaceuticals
64. 薬剤分析	Pharmaceutical Analysis

物理化学・無機化学・分析化学

65. 物理化学一般	General Physical Chemistry
66. 界面化学, コロイド	Surface Chemistry and Colloids
67. 触媒化学, 反応動力学, 無機反応機構	Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms
68. 相平衡, 化学平衡, 溶液	Phase Equilibria, Chemical Equilibria, and Solutions
69. 熱力学, 熱化学, 热的性質	Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties
70. 原子核現象	Nuclear Phenomena
71. 原子核工学	Nuclear Technology
72. 電気化学	Electrochemistry
73. 光, 電子, 質量分光学, その他の関連する性質	Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties
74. 放射線化学, 光化学, 写真, その他の複写プロセス	Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes
75. 結晶学, 液晶	Crystallography and Liquid Crystals
76. 電気的性質	Electric Phenomena
77. 磁気的現象	Magnetic Phenomena
78. 無機化学薬品, 反応	Inorganic Chemicals and Reactions
79. 無機分析化学	Inorganic Analytical Chemistry
80. 有機分析化学	Organic Analytical Chemistry



SciFinder の利用環境

◆ SciFinder (Web 版) を利用するための条件

- 利用推奨 OS とブラウザ（以下は動作確認済みです）

推奨 OS	推奨ブラウザ
Windows XP Professional ※ (SP1 以降)	Internet Explorer 6.0・7.0 Firefox 2.0・3.0
Windows Vista ※ (Business, Enterprise, Ultimate)	Internet Explorer 7.0 Firefox 2.0・3.0
Mac OS X 10.4.11 以降	Firefox 2.0・3.0 Safari 3.0・3.1・3.2
Mac OS X 10.5 以降	Firefox 2.0・3.0 Safari 3.0・3.1・3.2

※Windows 64ビット版 OS は、サポート対象外です。

- Java および Java スクリプトの有効化
(Java プラグイン(Java Runtime Environment (JRE) 6 Update x)のインストールが必要)
<http://www.cas.org/misc/downloads/jreplugin.html> (英語)
- Cookies の有効化
- ActiveX の有効化 (Internet Explorer の場合)

ActiveX コントロールとプラグイン	Internet Explorer 6.x	Internet Explorer 7.x
ActiveX コントロールとプラグインの実行	有効	有効
ActiveX コントロールに対して自動的にダイアログを表示	無効	無効
スクリプトレットの許可	—	無効
スクリプトを実行しても安全だとマークされていない ActiveX コントロールの実行	有効 or ダイアログを表示	無効
スクリプトを実行しても安全だとマークされている ActiveX コントロールの実行	有効	有効
バイナリビヘイビアとスクリプトビヘイビア	有効	有効
外部メディアプレーヤーを使用しない Web ページの ビデオやアニメーションを表示する	—	無効
署名済み ActiveX コントロールのダウンロード	有効	ダイアログを表示
前回使用されなかった ActiveX コントロールを警告なしで 実行するのを許可する	—	無効
未署名の ActiveX コントロールのダウンロード	有効	無効

◆ 利用サポート（ヘルプデスクのご案内）

SciFinder (Web 版) 利用上、ご不明な点がございましたら、ご遠慮なく弊協会ヘルプデスクまでお問い合わせください。ご質問は電話・FAX・電子メールにて承っております（連絡先は表紙下参照）。