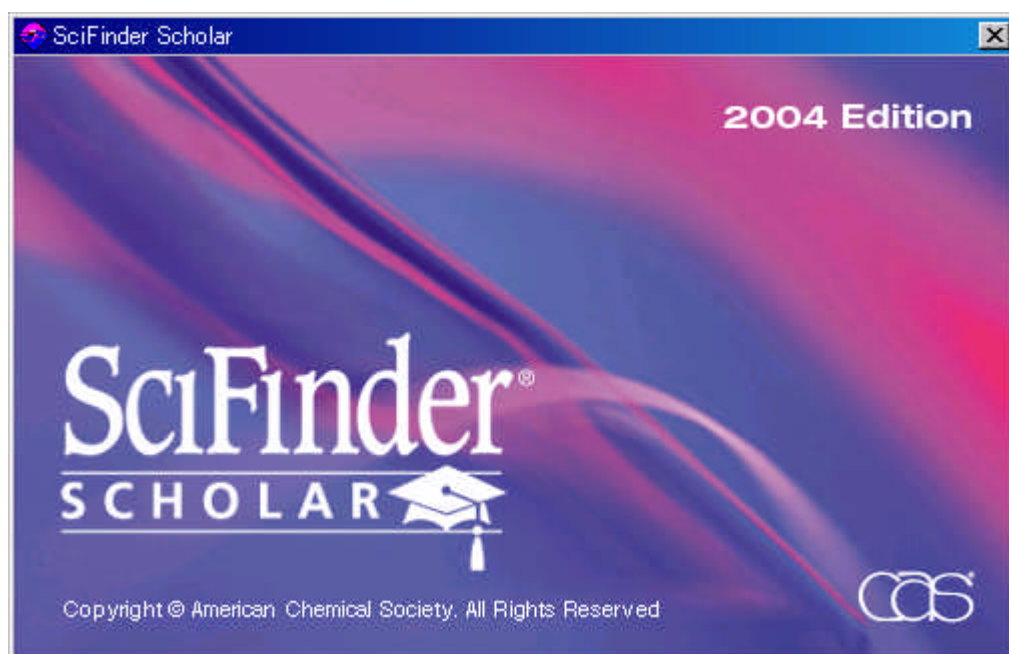


SciFinder Scholar 説明会資料

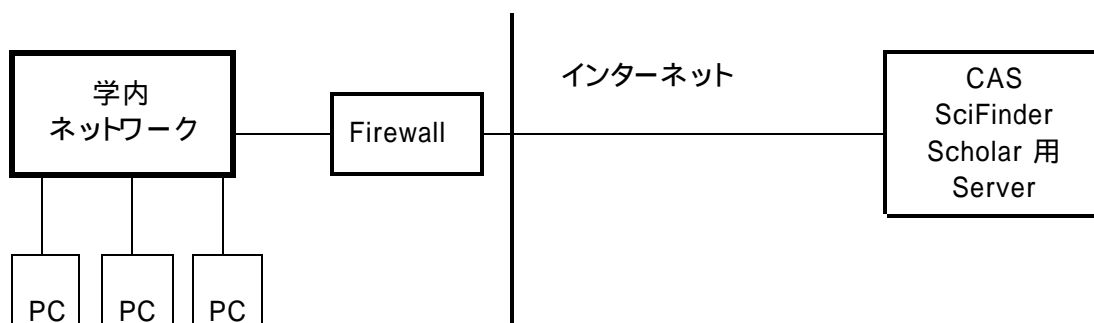
2003 年 11 月



STN/CAS <http://www.jaici.or.jp/>
■■■■ 社団法人 化学情報協会
■■■■
JAICI
〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル
ヘルプデスク TEL: 03-5978-3601 E-mail: helpdesk@jaici.or.jp
その他 TEL: 03-5978-3621 E-mail: cas-stn@jaici.or.jp
FAX: 03-5978-3600

SciFinder Scholar の概要

- ◆ SciFinder Scholar 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大学研究者が、自ら利用することを想定したエンドユーザー向けのオンライン検索サービスです。従来のオンライン検索とは異なり、研究者のデスクトップ・ツールとして気軽に利用できる情報ツールとして開発されました。
- ◆ 研究者が、CAS の化学データベースを研究業務の一環として自由に使いこなすことを目指した、全く新しいコンセプトのシステムです。目的に従って、ポイント& クリックを繰り返すだけで以下のような情報に到達できます。
 - 創造・思考、発見を刺激する化学情報への簡便なアクセス。
 - 科学者が必要とする多様な研究トピックに関する適切な情報。
- ◆ 検索のためのソフトウェアとCAS データベースが完全に統合されているので、データベースを全く意識することなく、目的の情報にアクセスすることができます。
- ◆ 特別なトレーニング無しで使うことを想定していますので、コマンド類は一切使いません。自然な流れで一連の操作が直感的に行えるように様々な工夫を凝らした、GUI (Graphical User Interface) をベースにしたクライアント- サーバ型のシステムを採用しています。
- ◆ 利用形態：研究者が日常利用している、学内ネットワークに結合した PC にSciFinder Scholar 専用のクライアント用ソフト* をインストールし、インターネット経由で CAS の SciFinder Scholar 用サーバにアクセスしていただきます。CAS の SciFinder Scholar 用サーバで、検索式の作成など様々な処理がなされます。



* Netscape Communicator や MS Internet Explorer のような WWW 用ブラウザソフトではありません。

SciFinder Scholar が提供する情報

- ◆ SciFinder Scholar 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。

(2003 年 11 月現在)

情報の種類	収 録 情 報
化学物質情報	1957 年以降の論文や特許に現れた 2,200 万件以上の有機・無機化学物質および 3,500 万件以上のタンパク質・核酸の情報 [REGISTRY ファイル]*1
文献情報	1907 年以降の 2,310 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
有機化学反応情報	1907 年以降の論文や特許に記載された有機化学反応情報 (10 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	700 社から発行された 800 種のカatalogの、約 630 万件の試薬・化成品のカatalog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	1958 年以降の 1,350 万件以上の論文の抄録付き文献情報 [MEDLINE ファイル]

*1 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 Chemical Abstracts に収録されているすべての文献、および Chemical Abstracts が情報源とする定期刊行物 (約 8,000 誌) のうち主要な約 1,700 誌以上については、1994 年後半以降、化学的要素の少ない論文も含めて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 Scholar で検索できます。Chemical Abstracts 収録文献については、その後索引が追加されます。なお、この 1,700 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。

SciFinder Scholarが提供する情報

◆ 物質の情報の例 (REGISTRY ファイルのレコード例)

リンクボタン (次ページ)

CAS 登録番号

分子式

CAS の正式名称

慣用名など, その他の名称

物性値 (計算)

物性値 (実測)

物性値の出典

文献数 (1907 -)

Registry Number: 69-08-2

Formula: C8 H10 N4 O2

CA Index Name: 1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl- (BC)

Other Names: Caffeine (BC), 1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine; 1,3,7-Trimethylxanthine; 3,7-Dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione; 7-Methylxanthine; Alan-Pap; Caffeina; Cafedrine; Caffen; Cafpet; Damin; DHCplus; Durex; Donitan; Gusamine; Hycomine; Jofarin; Malaina; Methyltheobromine; Mudd; No-Dot; NSC 5036; Phosfat; Propoxyphane; Compound 65; Reheehi; Shupa Plus; SK 65 Compound; Stay Alert; Stim; Synalges; Ther; Thene; Tri-Aqua; Wigraine

Properties

Property	Calculated Value	Condition	Note
Bioconc. Factor	1	pH 1	(1) ACC
Bioconc. Factor	1	pH 4	(1) ACC
Bioconc. Factor	1	pH 7	(1) ACC
Bioconc. Factor	1	pH 8	(1) ACC
Bioconc. Factor	1	pH 10	(1) ACC
Boiling Point	416.8±37.0 °C	Press: 760.0 Torr	(1) ACC
Enthalpy of Vap.	67.01±3.0 kJ/mol		(1) ACC
Flash Point	206.9±47.7 °C		(1) ACC
H acceptors	3		(1) ACC
H donors	0		(1) ACC
K _{oc}	6.27	pH 1	(1) ACC
K _{oc}	21.5	pH 4	(1) ACC
K _{oc}	21.5	pH 7	(1) ACC
K _{oc}	21.5	pH 8	(1) ACC
K _{oc}	21.5	pH 10	(1) ACC
logD	-0.62	pH 1	(1) ACC
logD	-0.06	pH 4	(1) ACC
logD	-0.06	pH 7	(1) ACC
logD	-0.06	pH 8	(1) ACC
logD	-0.06	pH 10	(1) ACC
logP	-0.061±0.351		(1) ACC
Molar Solubility	Soluble	pH 1	(1) ACC
Molar Solubility	Soluble	pH 4	(1) ACC
Molar Solubility	Soluble	pH 7	(1) ACC
Molar Solubility	Soluble	pH 8	(1) ACC
Molar Solubility	Soluble	pH 10	(1) ACC
Molecular Weight	194.19		(1) ACC
pKa	1.39±0.70	Most Basic	(1) ACC
Vapor Pressure	3.72E-7 Torr	Temp: 25.0 °C	(1) ACC

Experimental Values

Property	Experimental Value	Condition	Note
Melting Point	234-236 °C		(1) IC
Melting Point	234 °C		(1) IC
Melting Point	233-234 °C		(1) IC
Melting Point	232-235 °C		(1) IC
Melting Point	223-224 °C	Sol: tetrahydrofuran (100.0%)	(1) IC

Notes:

- (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD) Software Suite V4.67 (©1994-2003 ACD)
- (2) Hiyari, Bang, EP 319554 A2 1998
- (3) Badet, Bernard, Bulletin de la Société Chimique de France 1954, (11-12, Pt. 2), P431-4
- (4) Tanabe, Toshizumi, Bulletin of the Chemical Society of Japan 1976, V49(11), P3224-6
- (5) Jansen, de Wit, Helmut, Zeitschrift für Chemie 1969, V25(7), P253-4
- (6) Yamauchi, Kiyoshi, Journal of Organic Chemistry 1975, V40(3), P365-6

References: ~18726

STN Files: CAPLUS, AGRISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, AQUIRE, BEILSTEIN, BIOBUSINESS, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CANCERLIT, CAOLD, CASREACT, CBMS, GEN, CHEMCASTS, CHEMINFORMRX, CHEMUST, CIN, CSCHEM, CSNS, ODFU, DETHERM, DIOGENES, DIPP, DRUGU, EMBASE, GMEIN, HCOOC, HSCB, IFICB, FIRAT, IFUGB, IPA, MEDLINE, MRCK, MSDS-OHS, NAPRALERT, NIOSHTC, POLCOM, PIRA, PROMT, RTECS, SPECINFO, TOXICENTER, UUDAT, USAN, USPAT2, USPATFULL, VETU, VTB

(Additional information is available through STN International. Contact your information specialist, a local CAS representative, or the CAS Help Desk for Assistance.)

Deleted Registry Number(s): 95789-13-2, 71701-02-5

Database: REGISTRY

Close

SciFinder Scholar が提供する情報

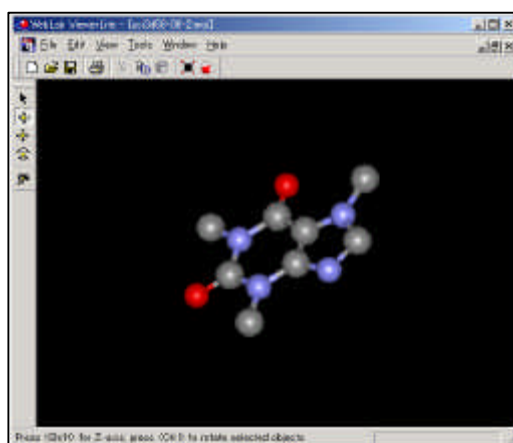
➤ リンクボタン



文献へのリンクボタン 5 ページ



三次元構造モデル表示 (Windows 版のみ : Accelrys ViewerLite のインストールが必要)



カタログ情報へのリンクボタン 6ページ



既存化学物質台帳情報 規制情報へのリンクボタン 7ページ



反応へのリンクボタン 12ページ

SciFinder Scholar が提供する情報

◆ 文献情報の例 (CAplus ファイルのレコード例)

書誌情報

抄録

索引

参考文献

Bibliographic Information
Regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by filamentous fungi. Hu, Shanghai; Sun, D.-An; Tian, Xufang; Fang, Qichang. Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Medical Sciences and Peking Union Medical College, Beijing, Peop. Rep. China. Chirality (2002), 14(6), 495-497. CODEN: CHIRLEP ISSN: 0898-0042. Journal written in English. :CAN 137,232/63 AN 2002-469133 :CAPLUS

Abstract
 Paclitaxel (Taxel), is one of the most promising chemotherapeutic agents developed for cancer treatment in past two decades. Microorganisms such as filamentous fungi are known to perform regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids. Highly regio- and stereoselective hydroxylation at the 13 and 9a positions of the taxane skeleton by *Abisidia coenulea* was described. E.g., taxane I (R1 = R9 = H) was hydroxylated by incubation for 56 h in a culture of *A. coenulea* to give hydroxylated products I (R1 = OH, R9 = H) and I (R1 = H, R9 = OH) in yields of 58% and 8%, resp. Such hydroxylation reactions proceed readily for the taxoides as substrates rather than taxoids having an oxetane ring. The presence of different oxygen substituents on the taxane nucleus, such as 5-acetoxy, has a significant effect on the selectivity and yield of the hydroxylation catalyzed by the microbial oxidases.

Chemical Structure

Indexing - Section 30-20 (Terpenes and Terpenoids)
 Section cross-referentials: 7, 10, 16

Hydroxylation
 (biol.) regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*

Abisidia coenulea
 (regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*)

Taxanes
 Role: BPN (Biosynthetic preparation); RCT (Reactant); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
 (regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*)

119347-14-7
135750-61-6
 Role: BBU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
 (non-reactive substrate for regio- and stereoselective hydroxylation by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*)

148677-93-7P
151226-31-5P
143146-60-7P
458570-01-8P
458570-01-8P
 Role: BPN (Biosynthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation)
 (regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*)

11069-62-4P, Taxol
 Role: PHJ (Preparation, unclassified); PREP (Preparation)
 (regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*)

27854-02-0
37193-98-4
158576-66-6
458570-01-8
 Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
 (regio- and stereoselective hydroxylation of taxoids by the filamentous fungi *Abisidia coenulea*)

Supplementary Terms
 taxoid regioselective stereoselective hydroxylation fungi *Abisidia coenulea*; oxidase *Abisidia coenulea*
 taxoid regioselective stereoselective hydroxylation

Citations
 1) Wildung Koapp, A. J Biol Chem 1995; 270, 8686
 2) Wildung, M. J Biol Chem 1995; 271, 9201
 3) Hefner, R. Chem Biol 1996; 3, 479
 4) Hu, S. Tetrahedron 1996; 52, 9759
 5) Hu, S. Biosci Biotechnol 1997; 14, 241
 6) Hu, S. Tetrahedron Lett 1997; 38, 2221
 7) Hu, S. Chin Chem Lett 1996; 2, 39
 8) Kingston, D. Prog Chem Org Nat Prod 1993; 61, 1
 9) Appendix, D. Nat Prod Rep 1995; 349

・タイトル
著者名
所属機関
雑誌名

セクション分類
27 ページ

用語索引

化学物質索引

補遺語

データベース
にあるものは
リンクあり

SciFinder Scholar が提供する情報

◆ 化学反応情報の例 (CASREACT ファイルのレコード例)

SciFinder Scholar

File Edit View Task Tools Help

Reaction 1: 2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine + NaOCl, NaOH → 2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine-2,4,6-trisulfonate

NOTE: Description: 2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine-2,4,6-trisulfonate; Reagents: NaOCl, NaOH; Conditions: 1 day; Steps: 1; Stages: 1

Bulletin of the Chemical Society of Japan, 50(6), 1510-12, 1977
CASREACT

Reaction 2: 2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine + NaOH → 2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine-2,4,6-trisulfonate

NOTE: Classification: Heterocycle formation; Hydrolysis; Ring cleavage; Reagents: NaOH; Conditions: 1 day; Steps: 1; Stages: 1

Journal of the Chemical Society (Section D): Chemical Communications, (16), 905-6, 1962
CASREACT

Get References Analyze Reactions Back

Records 228-229 of 249

出典

◆ カタログ情報の例 (CHEMCATS ファイルのレコード例)

Sources for 17455-13-9

File Edit Help

Publication Date: 15 Aug 2003
Order Number: 15,665-1
Chemical Name: 18-Crown-6
Registry Number: 17455-13-9
CHEMCATS

☐ Catalog Name: TOKYO KASEI KOGYO (TOKYO Kasei Kogyo)
Quantity: 25 g
5 g
Publication Date: 27 Jun 2003
Order Number: C0860
Chemical Name: 18-Crown-6-Ether
Synonym: 1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane
Registry Number: 17455-13-9
CHEMCATS

☐ Catalog Name: Cognis Product List
Quantity: various
Publication Date: 12 Nov 2002
Chemical Name: 18-crown-6
Registry Number: 17455-13-9
CHEMCATS

☐ Catalog Name: Interchim Intermediates
Quantity: milligram quantities
Publication Date: 9 Jul 2002
Order Number: 0171-0030
Chemical Name: 1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane
Synonym: Also sold under Interchim order number(s) F0265-0481
Registry Number: 17455-13-9
CHEMCATS

☐ Catalog Name: Carlsberg Product List
Quantity: N/A
Publication Date: 15 Apr 2002
Chemical Name: 18-Crown-6
Registry Number: 17455-13-9
Carlsberg Product List

Close

Sources 15-19 of 37

Detail of Source 16

File Edit Help

Catalog Name: TOKYO KASEI KOGYO (TOKYO Kasei Kogyo)

Publication Date: 27 Jun 2003

Order Number: C0860

Chemical Name: 18-Crown-6-Ether

Synonym: 1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane

Registry Number: 17455-13-9

Pricing: Quantity: 25 g, Price: 8400 Yen
Quantity: 5 g, Price: 2750 Yen

Company Info: Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd.
4-10-1 Nishinbashi-Honcho
Chuo-ku
Tokyo, 103-0023
Japan
Phone: +81-3-5651-5172
Fax: +81-3-5640-8022
Email: international@tokyokasei.co.jp
Web: http://www.tokyokasei.co.jp

Close

カタログ名

注文番号

価格・包装単位

SciFinder Scholar が提供する情報

◆ 既存化学物質台帳情報の例 (CHEMLIST ファイルのレコード例)

Accession Number: 75194 CHEMLIST

CAS Registry Number: 87061-04-9

Chemical Name
 1,2-Propanediol, 3-[[5-methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]- (TSCA, DSL, AICS, ASIA-PAC)
 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]propane-1,2-diol (English, French) (DSL, EINECS)
 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]propan-1,2-diol (German) (EINECS)
 3-[[5-methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]propano-1,2-diol (Spanish) (EINECS)
 3-(p-Menth-3-yloxy)-1,2-propanediol (ENCS)
 3-(1-Menthoxyl)-1,2-propanediol
 TK 10

File Segment
 ASIA-PACIFIC: ASIA-PAC; AUSTRALIA: AICS; CANADA: DSL; EEC: EINECS; JAPAN: ENCS; USA: FDA, TSCA

Confidentiality Status
 Public

Regulatory List Number
 EINECS No.: 209-296-2
 ENCS No.: 3-3857

Inventory Status
 On TSCA Inventory
 July 2003 Inventory Tape
 EPA Flags:
 P: Commenced PMN
 On DSL
 Supplement to Canada Gazette, Part I, January 26, 1991
 On EINECS
 Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990
 On ENCS
 Japanese Gazette: Contained within class: Low Molecular Carbo-mono-cyclic Organic Compounds
 On AICS
 Australian Inventory of Chemical Substances, June 1996 Ed.
 On ASIA-PAC

U. S. FDA Regulations
FDA Priority Based Assessment of Food Additives
 FDA Priority-Based Assessment of Food Additives
 Priority-Based Assessment of Food Additives (PAFA) File, FDA Center for Food Safety and Applied Nutrition (CFSAN) (1998)
 Listed Name(s): 3-(1-Menthyl)oxy]propane-1,2-diol

European Community Regulations
European Community Legislation
 European Community Legislation
 Official Journal of the European Communities, No. L 49 (20 Feb 2002).
 This substance is listed in the Register of Flavouring Substances pursuant to Article 3(1) of Regulation EC No. 2232/96 (28 Oct 1996) that lays down a procedure for flavouring substances used or intended for use in or on foodstuffs.
 Listed Name(s): 3-(1-Menthoxyl)propane-1,2-diol
 FL number: 02.224
 FEMA No.: 3784
 Chemical Group: 30
 European Community Legislation
 Official Journal of the European Communities, No. L 132 (01 Jun 1996).
 Publication of commission Decision 96/335/EC of 8 May 1996 establishing an inventory and a common nomenclature of ingredients employed in cosmetic products in accordance with Article 6(1) of the cosmetic products Directive 76/768/EEC. This substance is listed in section I.
 INCI Name: MENTHOXYPROPANEDIOL
 Function: additives
 European Community Legislation
 Official Journal of the European Communities, No. L 84 (27 Mar 1999).
 This substance is listed in the Register of Flavouring Substances pursuant to Article 3(1) of Regulation EC No. 2232/96 (28 Oct 1996) that lays down a procedure for flavouring substances used or intended for use in or on foodstuffs. Adopted February 23, 1999.
 Listed Name(s): 3-(1-Menthoxyl)propane-1,2-diol
 FEMA No.: 3784

Asian and Pacific Rim Regulatory Lists and Data
Supplemental Data from the Japanese ENCS
 Supplemental Data from the Japanese ENCS
 Slightly (or not) accumulated in living things

Database: CHEMLIST

Close

Regulated Chemicals Listing 1 of 1

台帳上の
情報

各国の規制
情報

CAS 登録番号

化学物質名

規制リスト番号

SciFinder Scholar が提供する情報

◆ 文献情報の例 (MEDLINE ファイルのレコード例)

Detail of Reference 1

File Edit Help

Bibliographic Information

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 Life Science Division, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA 94035, USA. cwade@mail.arc.nasa.gov J Gravit Physiol (1999 Oct), 6(2), 25-31. Journal code: 9437868. ISSN:1077-9248. United States. Journal; Article; (JOURNAL ARTICLE) written in English. DN 20601834 PubMed ID [11543083](#) AN 2001661664 MEDLINE

Abstract

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.

Controlled Terms

Check Tags: Animal; Comparative Study; Male; Support, U.S. Gov't, Non-P.H.S.

- Calcium: ME, metabolism
- Calcium: UR, urine
- Creatinine: ME, metabolism
- Creatinine: UR, urine
- Electrolytes: ME, metabolism
- *Electrolytes: UR, urine
- *Housing, Animal
- Kidney: PH, physiology
- Potassium: ME, metabolism
- Potassium: UR, urine
- Rats
- Rats, Inbred F344
- Sodium: ME, metabolism
- Sodium: UR, urine
- *Space Flight: IS, instrumentation
- *Water-Electrolyte Balance: PH, physiology
- *Weightlessness

Supplementary Terms

nasa center arc; nasa discipline regulatory physiology

Registry Numbers

- [60-27-5](#) (Creatinine)
- [7440-09-7](#) (Potassium)
- [7440-23-5](#) (Sodium)
- [7440-70-2](#) (Calcium)

Chemical Names

0 (Electrolytes)

Get Related... Close

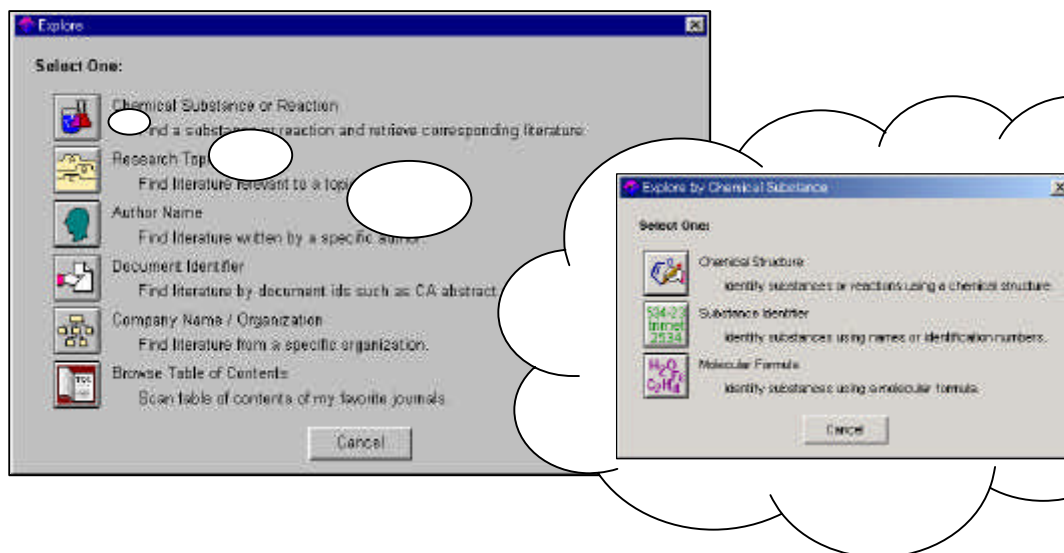
Annotations:

- 書誌情報 (Bibliographic Information)
- 抄録 (Abstract)
- 索引 (Controlled Terms)
- 索引語 (Indexing Terms)
- CAS 登録番号索引 (CAS Registry Numbers)

SciFinder Scholar の検索

◆ SciFinder Scholar の検索：

- SciFinder Scholar では、直感的なポイント& クリックで、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。



 化学物質検索	 構造検索 化学反応検索	文献検索
	 名称検索 CAS 登録番号検索	文献検索 文献検索
	 分子式検索	文献検索
 研究トピック検索		
 著者名検索		
 CA 抄録番号，特許番号検索		
 著者所属機関，特許出願人検索		
 目次の縦覧		

SciFinder Scholar の検索

◆ 化学物質検索

- 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。
- ISIS/DRAW, ChemDraw, ChemWindow, STN Express 等で作図した構造を SciFinder Scholar での構造作図に利用することもできます。

ヒットした化学物質

文献数

Get Substances

部分構造検索オプション

- 部分構造検索では 作図した構造を含むあらゆる構造 を網羅的に検索できます。


完全一致検索

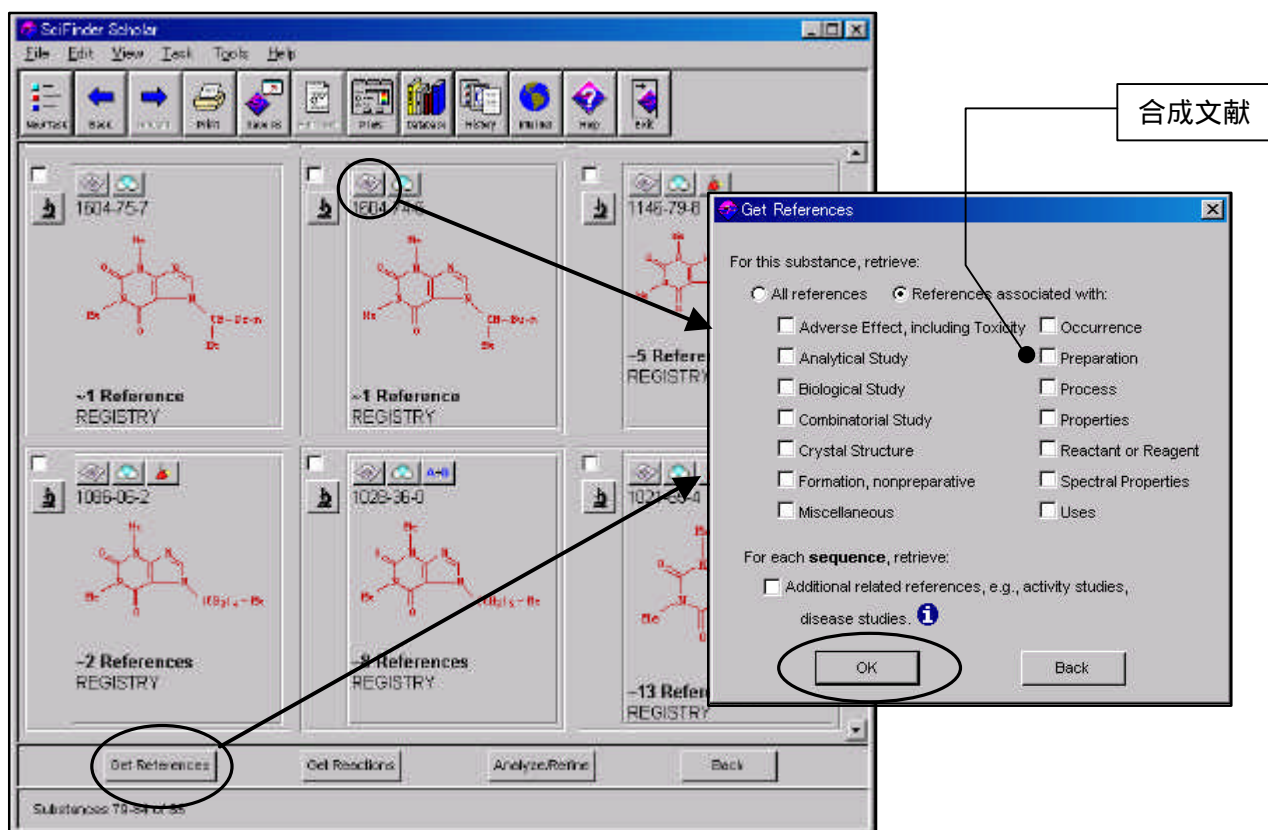
部分構造検索

- 「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で利用できます。
- 検索の結果は, さらに立体化学情報, 置換基の種類, 別の部分構造, 文献の有無, 物性値, 結合の定義のあいまいさなどで解析, 限定することができます。

SciFinder Scholar の検索

◆ 化学物質 関連情報 , 文献検索

-  ボタン , あるいは “Get References ” ボタンにより , 得られた化学物質に関する文献を , 自然な流れで以下の 14 種の観点によって限定することができます .



- 回答として得られた化学物質にボタンがある場合は , それぞれ以下の情報を得ることができます .



計算値を基にした構造の 3次元表示ができます (Windows 版のみ) .



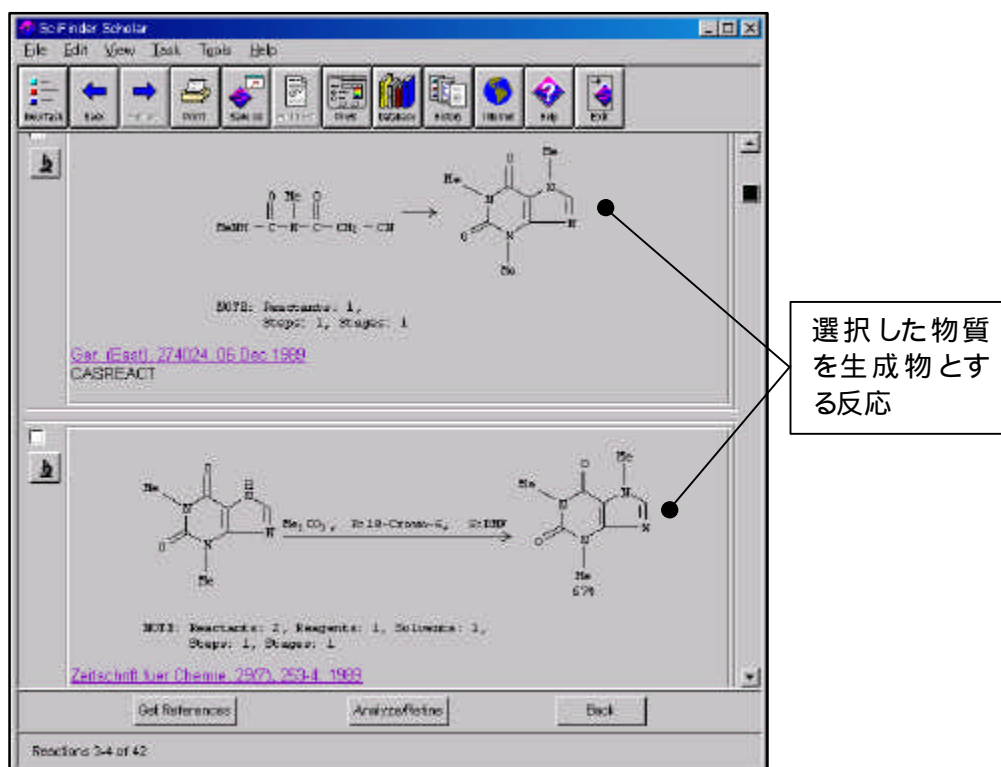
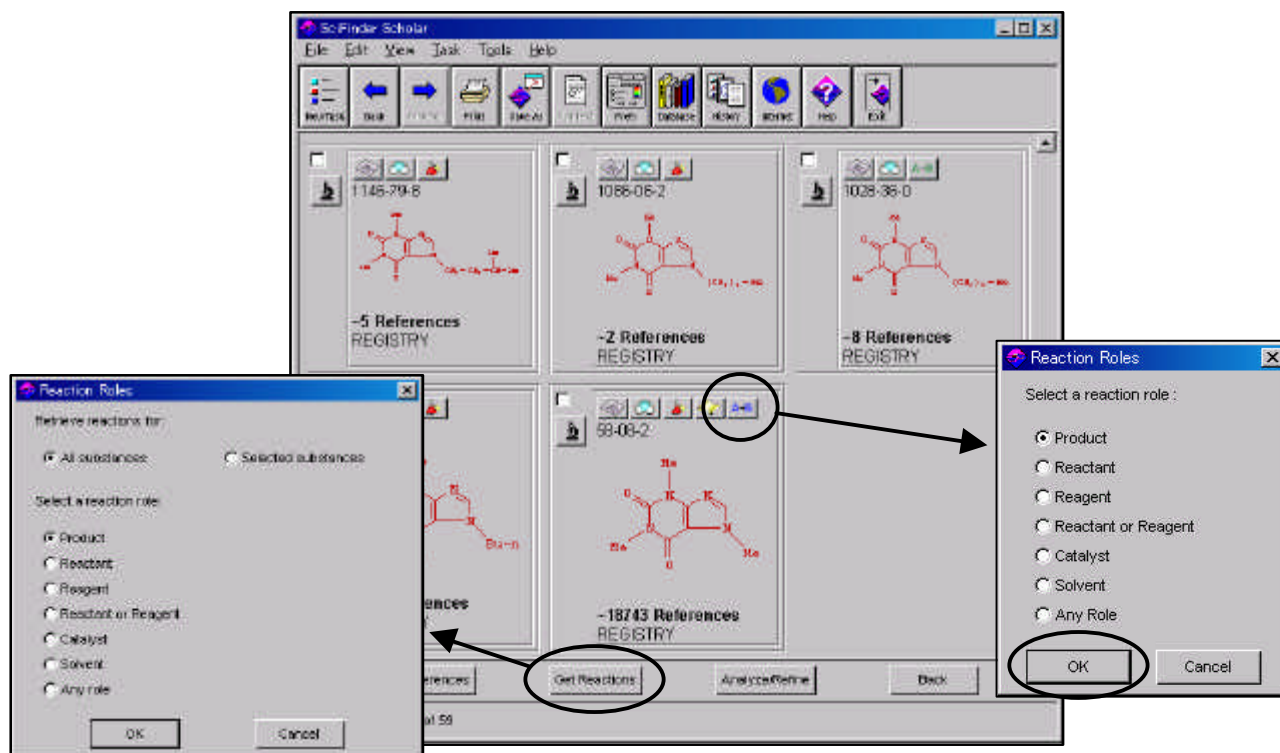
カタログ情報 (供給業者 , 価格 , 包装単位) を直ちにすることができます .



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 .

SciFinder Scholar の検索

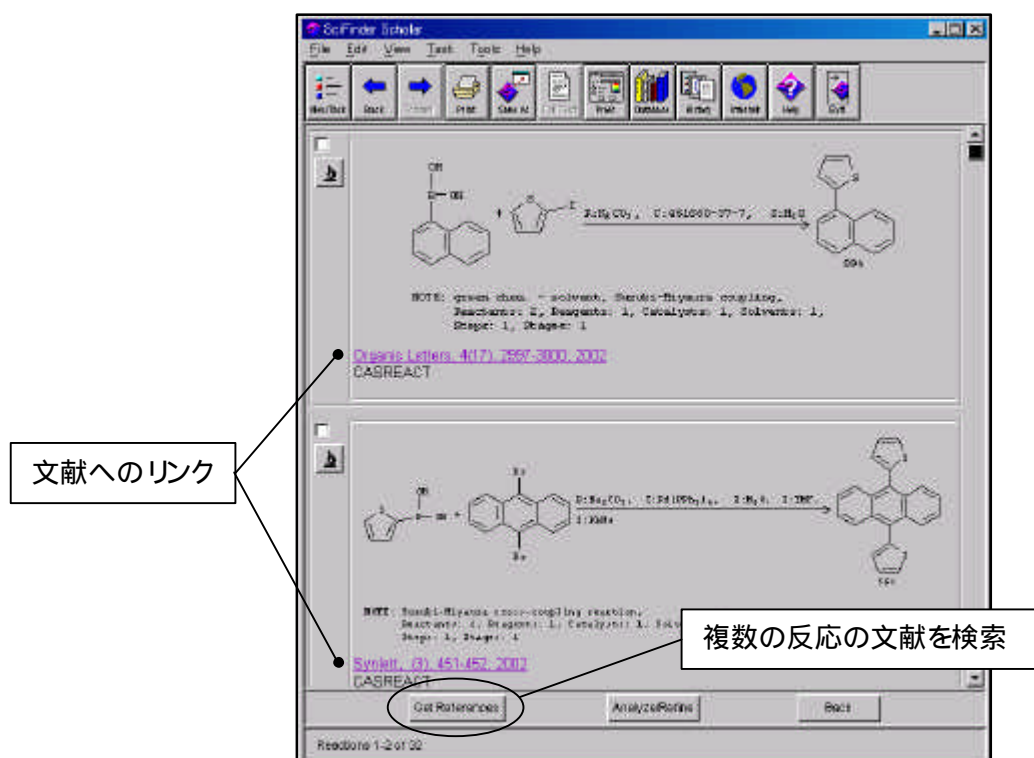
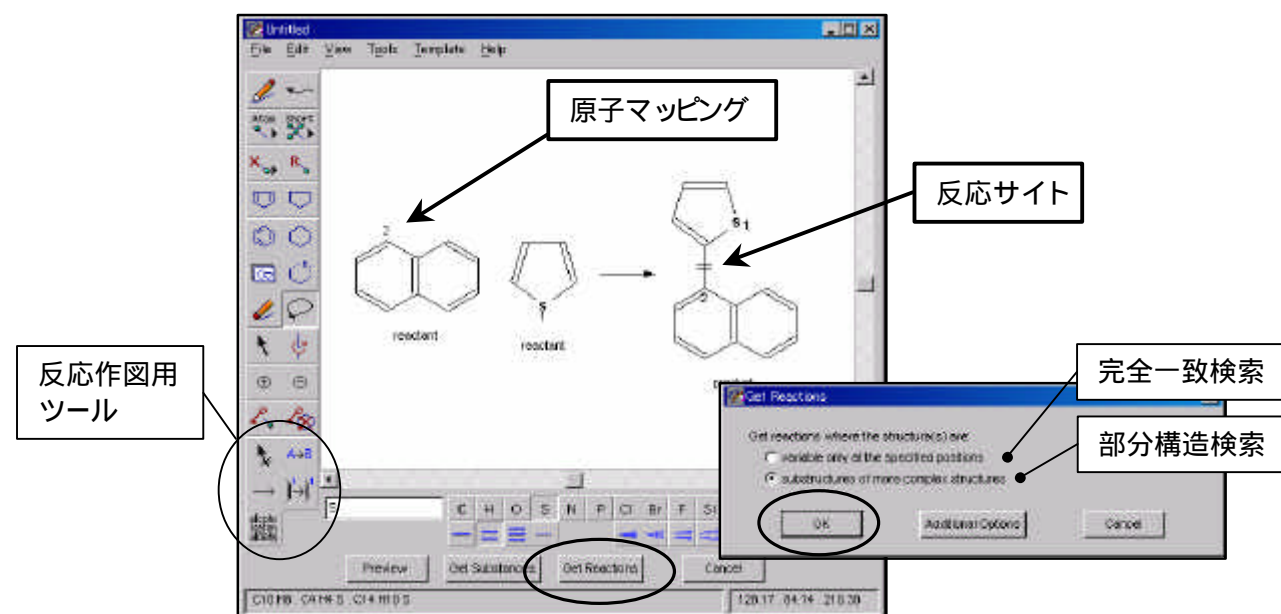
- A-8** それぞれの化学物質から化学反応を検索することができます。
 “Get Reactions” ボタンを使うと複数の物質を選択できます。



SciFinder Scholar の検索

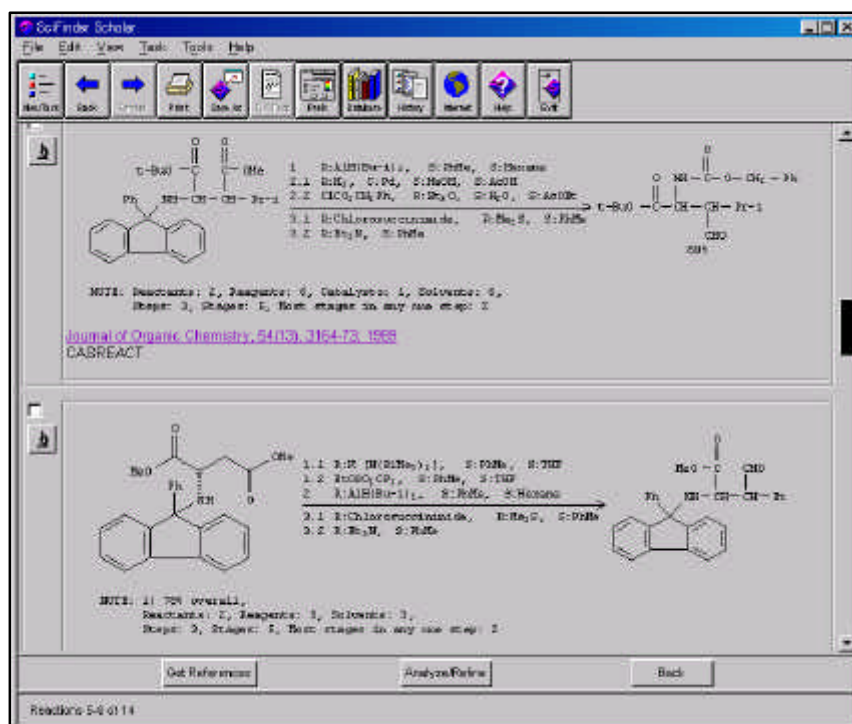
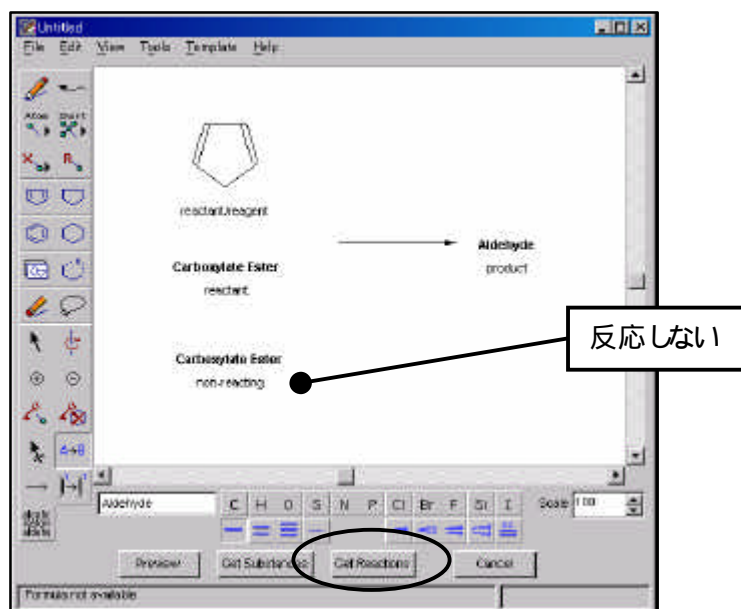
◆ 化学反応検索

- 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 .



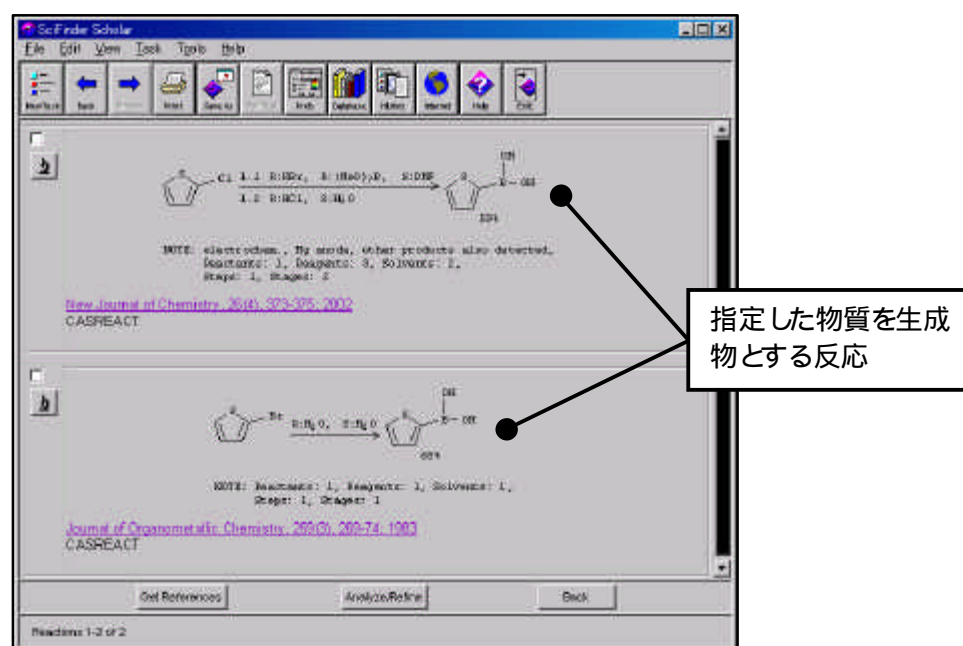
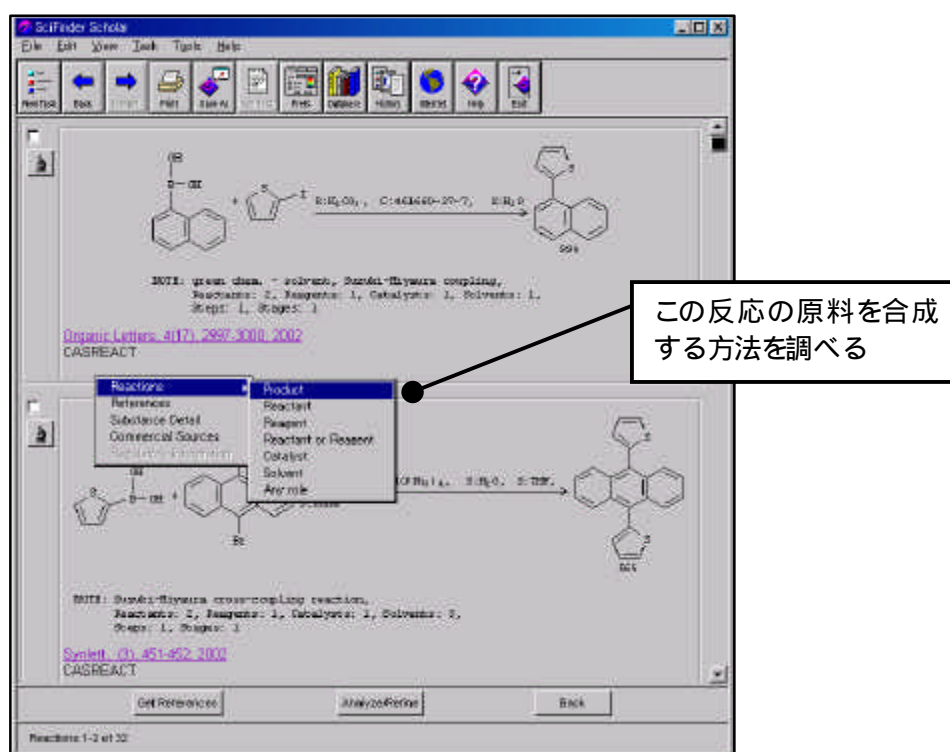
SciFinder Scholar の検索

- 幅広い検索をするために官能基名を使った検索が可能です。官能基名では、反応しない官能基を指定することもできます。



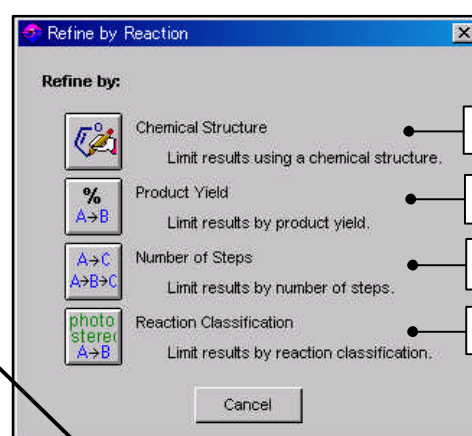
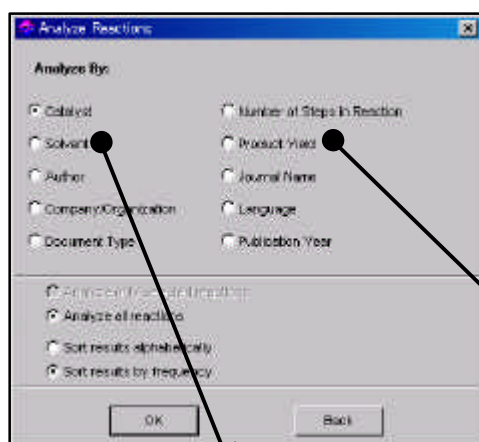
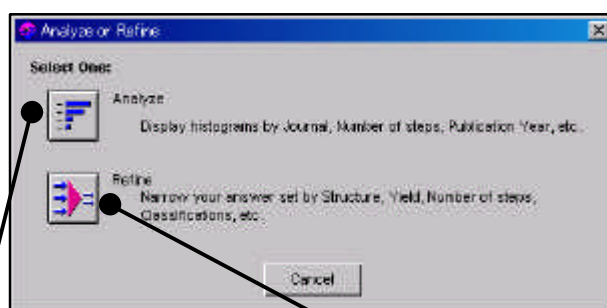
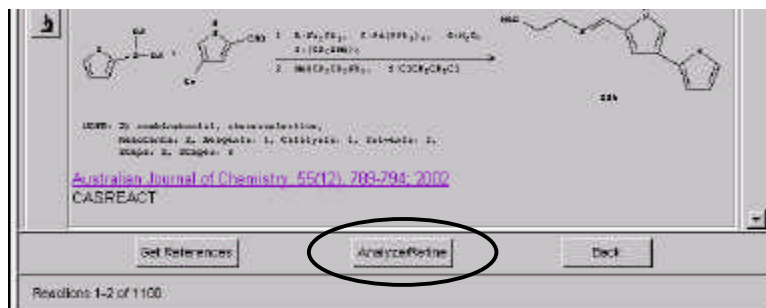
SciFinder Scholar の検索

- 反応検索結果の反応関与物質をクリックすれば、その物質から他の反応ロール (生成物, 反応物, 試薬, 触媒, 溶媒など) を指定して、更に検索を継続できます。



SciFinder Scholar の検索

- 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4種の観点で絞り込み (Refine) ができます.



構造

収率

ステップ数

反応分類

溶媒の種類



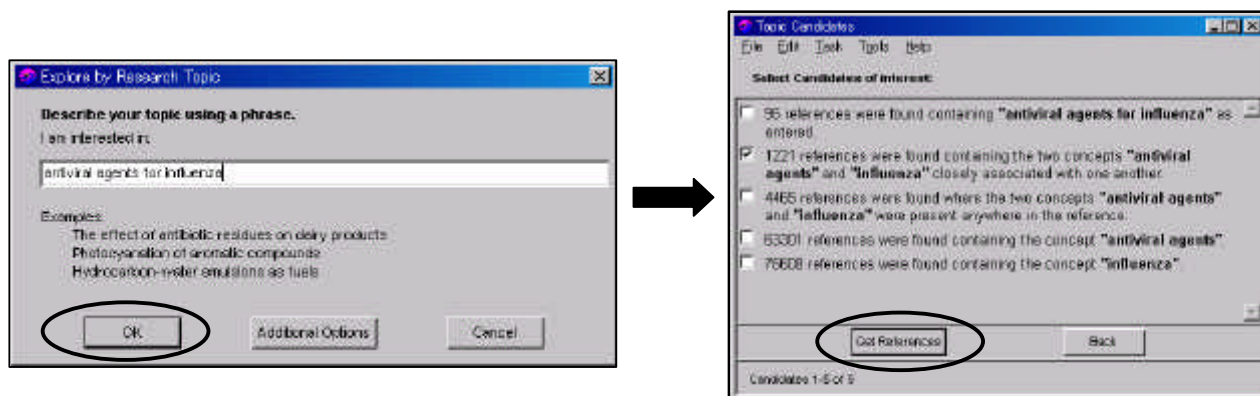
反応収率の分布



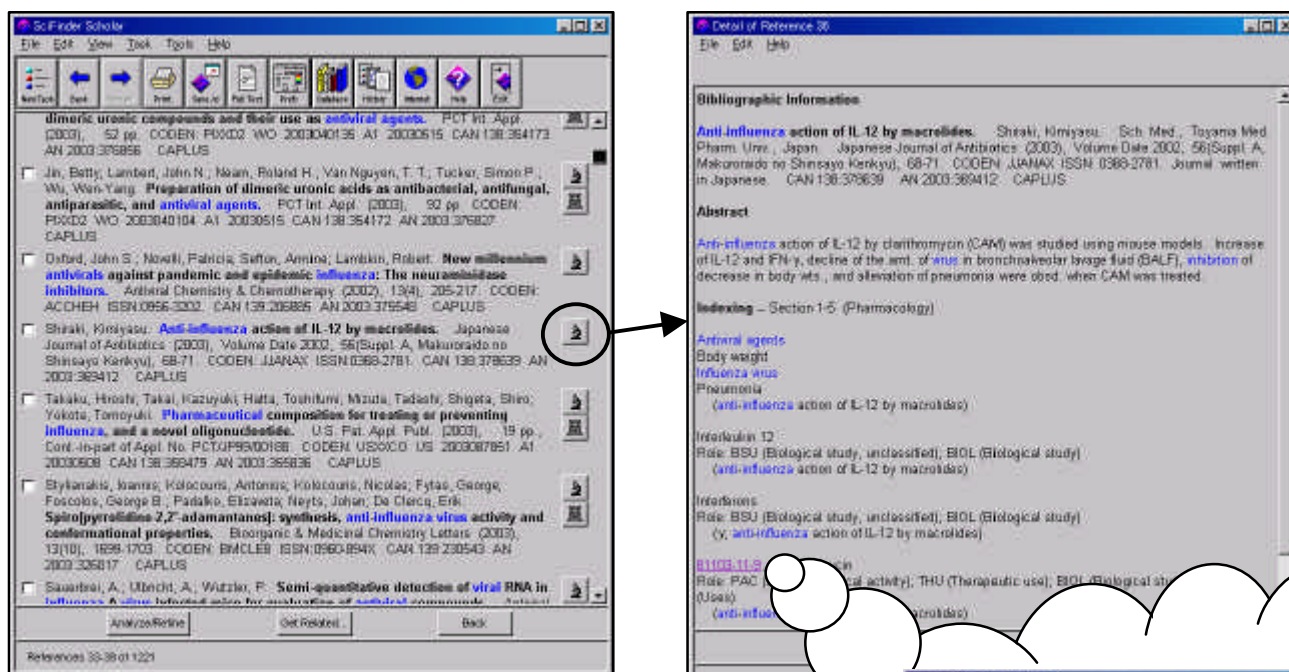
SciFinder Scholar の検索

◆ 研究トピックの検索

- 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。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回答を選択することができます。



- '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。抄録などの詳しい情報情報を見たい場合は、顕微鏡アイコンをクリックします。

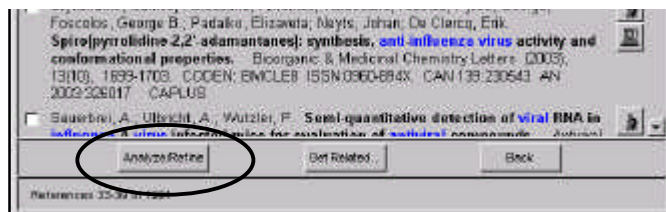


- 表示した文献に索引された CAS 登録番号は、REGISTRY ファイルのデータとリンクされているので、その番号をクリックするだけで名称や構造などを表示できます。

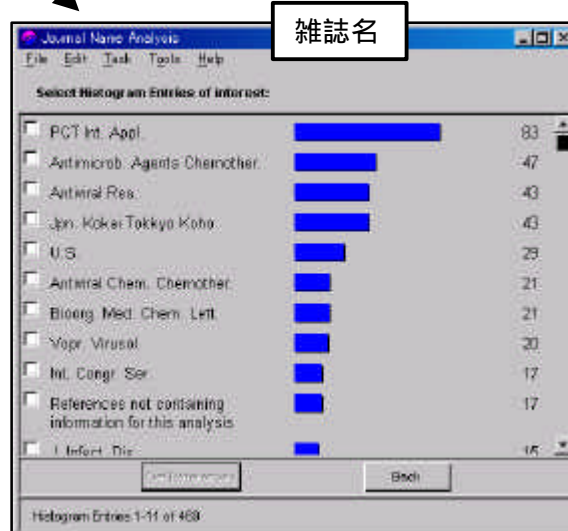
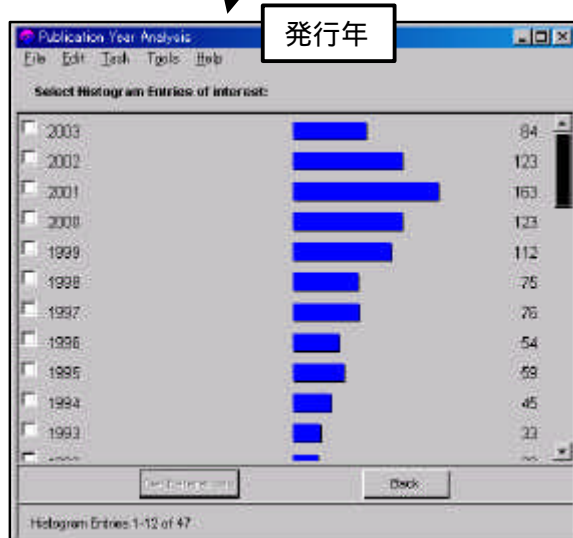
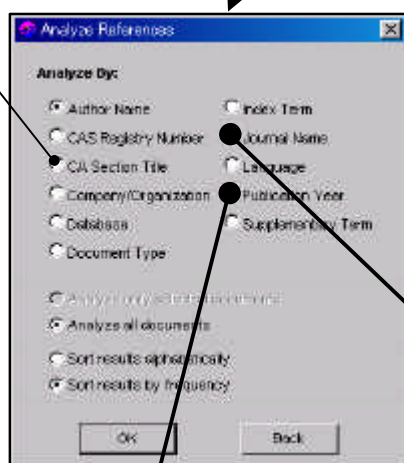
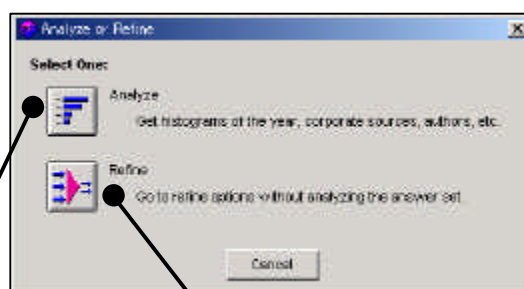
SciFinder Scholar の検索

◆ 検索結果の限定・解析機能

- 各種検索によって得られた文献の回答集合に対して, 11 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, 8種の観点で絞り込み (Refine) ができます.

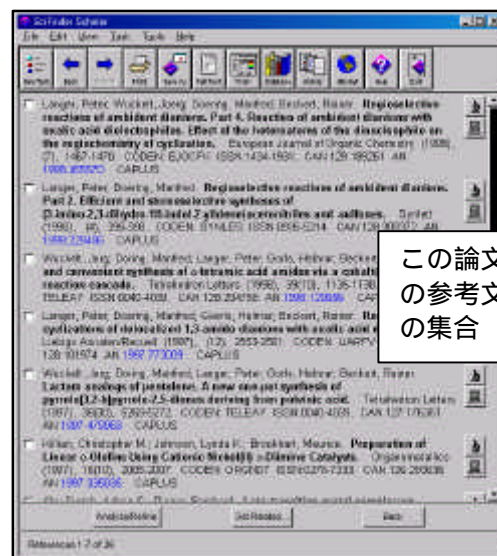
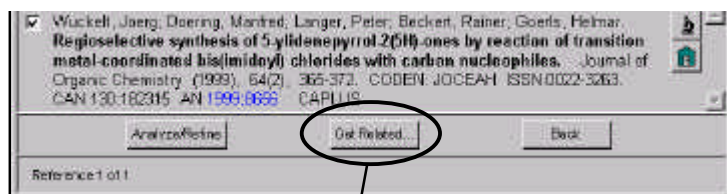


CA セクション
(p.27)

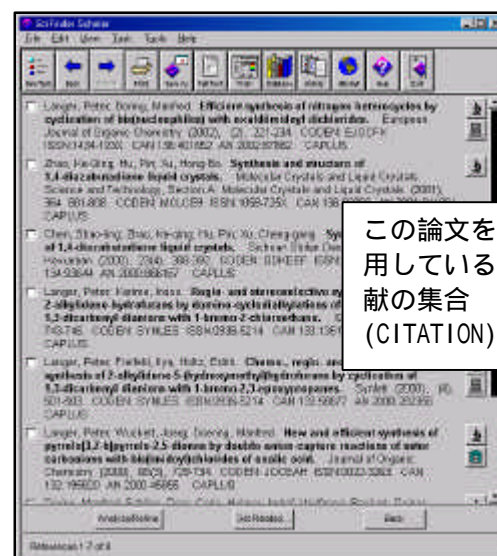
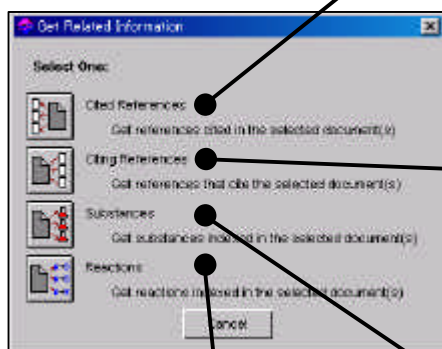


SciFinder Scholar の検索

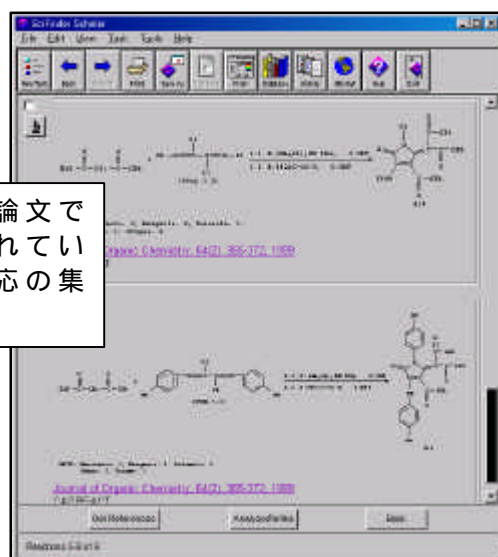
- 文献から各種関連情報を見つけることができます。



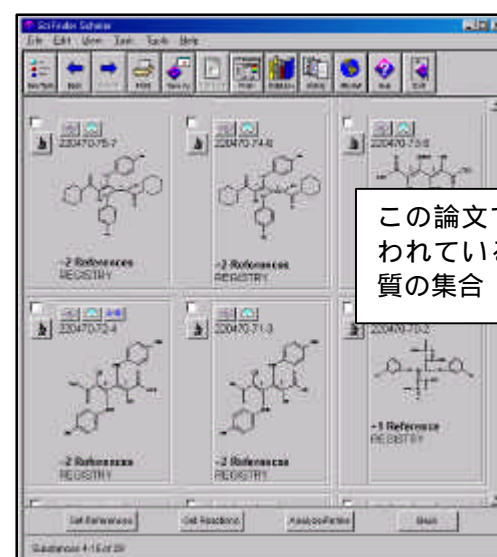
この論文中の参考文献の集合



この論文を引用している文献の集合 (CITATION)



この論文で扱われている反応の集合

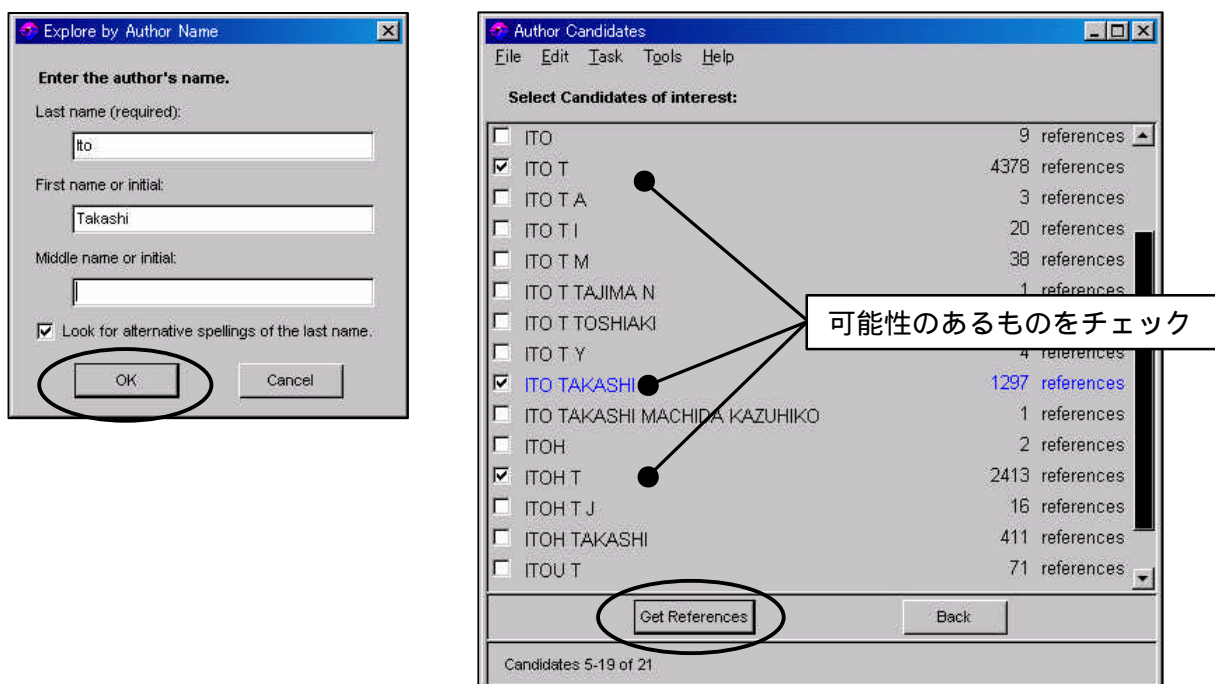


この論文で扱われている物質の集合

SciFinder Scholar の検索

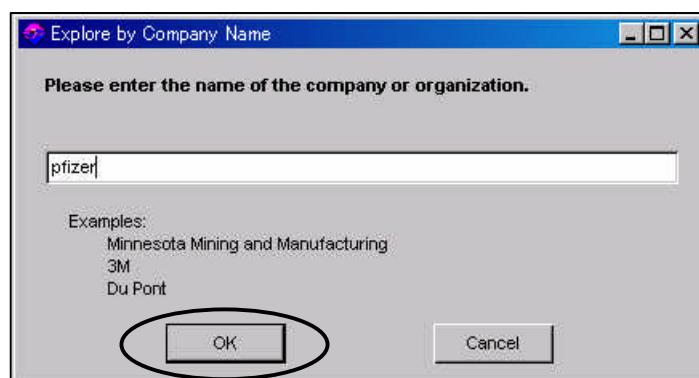
◆ 著者名検索

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



◆ 著者所属機関 特許出願人検索

- 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 .



SciFinder Scholar の検索

◆ 雑誌の最新号の目次の参照

- 文献情報の情報源である雑誌 (約 8,000 誌) のうち主要な約 1,800 誌について, 最新号の目次を参照し, さらに書誌情報, 抄録, 索引を見ることができます。

雑誌一覧

目次

抄録

フルテキスト
p.23

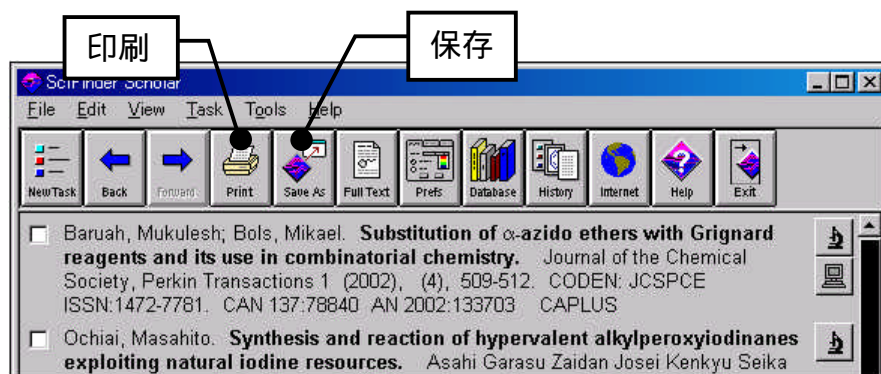
別の号の指定

Available Journal Issues
Nucleic Acids Research
Volume 31, Issue 21, 2003
Volume 31, Issue 20, 2003
Volume 31, Issue 19, 2003
Volume 31, Issue 18, 2003
Volume 31, Issue 17, 2003
Volume 31, Issue 16, 2003
Volume 31, Issue 15, 2003
Volume 31, Issue 14, 2003
Volume 31, Issue 13, 2003
Volume 31, Issue 12, 2003
Volume 31, Issue 11, 2003
Volume 31, Issue 10, 2003
Volume 31, Issue 9, 2003
Volume 31, Issue 8, 2003
Volume 31, Issue 7, 2003
Volume 31, Issue 6, 2003
Issues 1 to 18 of 221

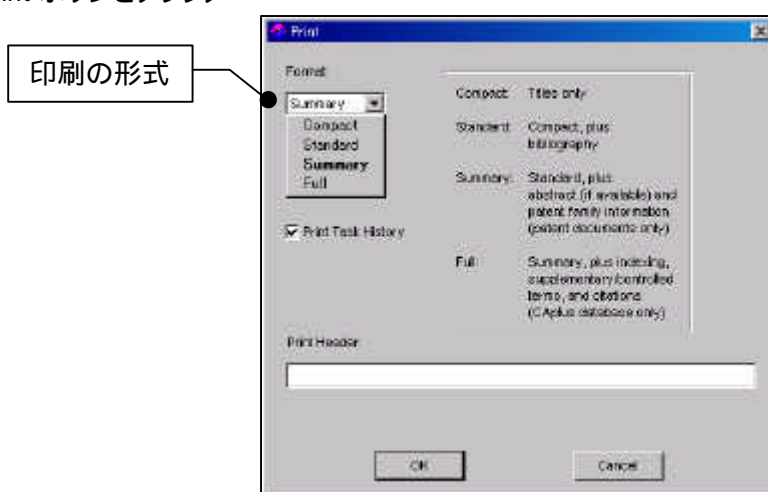
SciFinder Scholar の検索

◆ 検索結果の印刷と保存

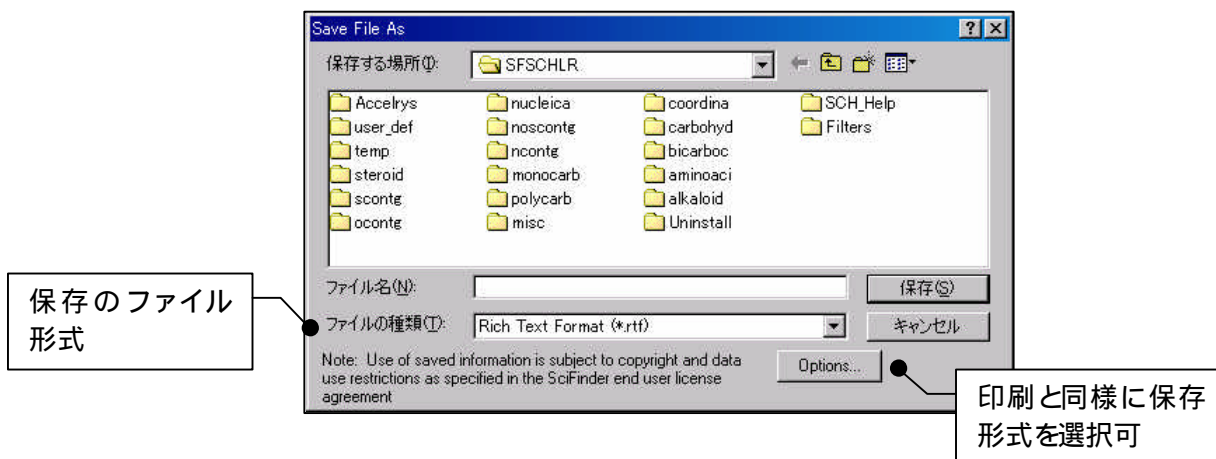
- 回答は ,印刷や txt 形式 , rtf 形式などでダウンロードできます .



- Print ボタンをクリック



- Save As ボタンをクリック .保存の上限は 1つのファイルあたり100 件です .



ChemPort Connection (原文献へのリンク)

- ◆ 回答として得られた文献リスト中の E-document (パソコン)アイコンが付いている文献は, ChemPort へリンクし, 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, Springer-Verlag, Elsevier, Wiley などの大手学術出版社 (208 社) が発行する電子ジャーナルで提供されている雑誌論文については, 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. 出版社の最新リストは, ChemPort のホームページ(<http://jst.chemport.org>) でご確認いただけます.

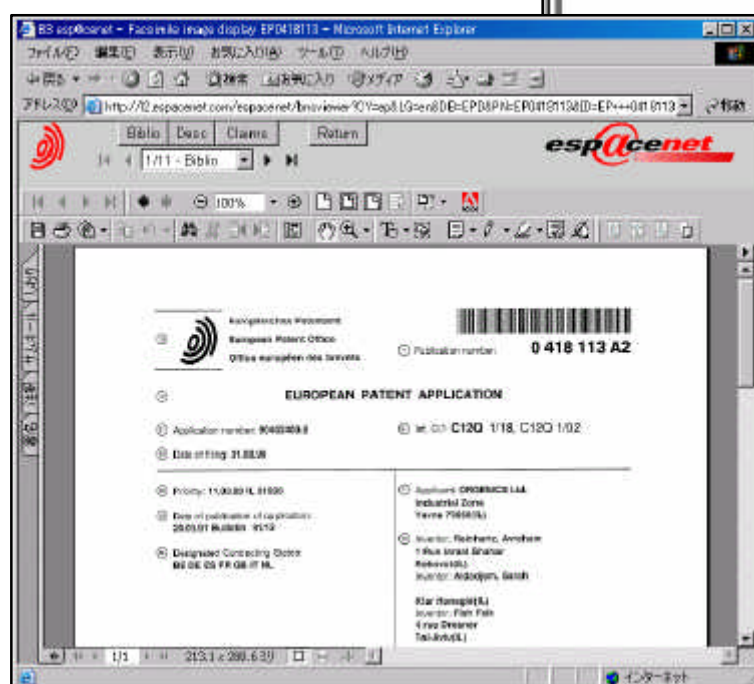
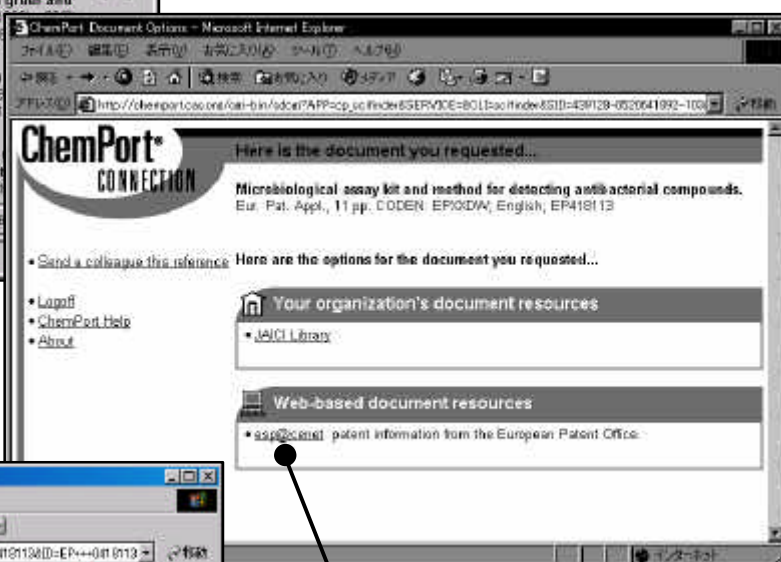
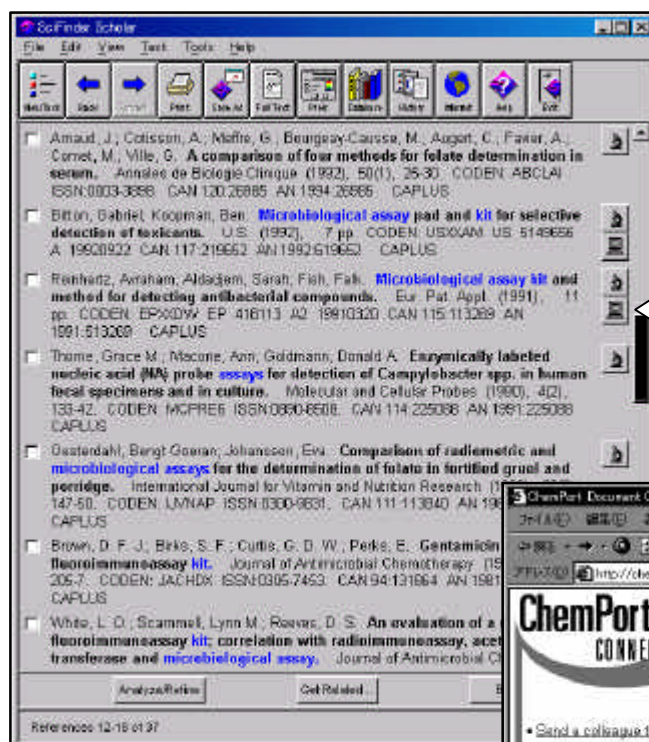
The image illustrates the process of accessing a full-text document through ChemPort. It consists of three main screenshots:

- Search Results:** A screenshot of the 'SciFinder Scholar' interface showing a list of search results. One result is highlighted with a white box and an arrow pointing to the 'E-document' icon (a computer monitor with a document).
- ChemPort Connection Dialog:** A screenshot of the 'ChemPort Connection' dialog box. It displays the document title: 'Alternating DNA and π -conjugated sequences. Thermophilic foldable polymers.' and provides options to 'Send a colleague this reference' or 'Here are the options for the document you requested...'. The 'Web-based document resources' section shows 'HTML from the publisher' and 'PDF from the publisher' as available options.
- Full-Text Article:** A screenshot of the full-text article page for 'Alternating DNA and π -Conjugated Sequences, Thermophilic Foldable Polymers' by Wei Wang, Wei Wan, Hong-Hu Zhou, Shuang-Mu, and Alexander D. Q. Li. The article is from the 'Journal of the American Chemical Society' (2003, 125(18), 5245-5249). The article content includes an abstract and a figure showing DNA structures.

A text box with an arrow pointing to the 'HTML from the publisher' link in the ChemPort dialog box contains the text: 電子ジャーナル購読者はこちらをクリック (無料) (For electronic journal subscribers, click here (free)).

ChemPort Connection (原文献へのリンク)

- 米国特許商標庁 (USPTO ,<http://www.uspto.gov/> ,HTML 形式および TIFF 形式)とヨーロッパ特許庁 (EPO ,esp@cenet ,PDF 形式) のホームページから,米国,スイス,ドイツ,EP,フランス,英国,日本,PCT などの特許明細書を無料で表示することができます。

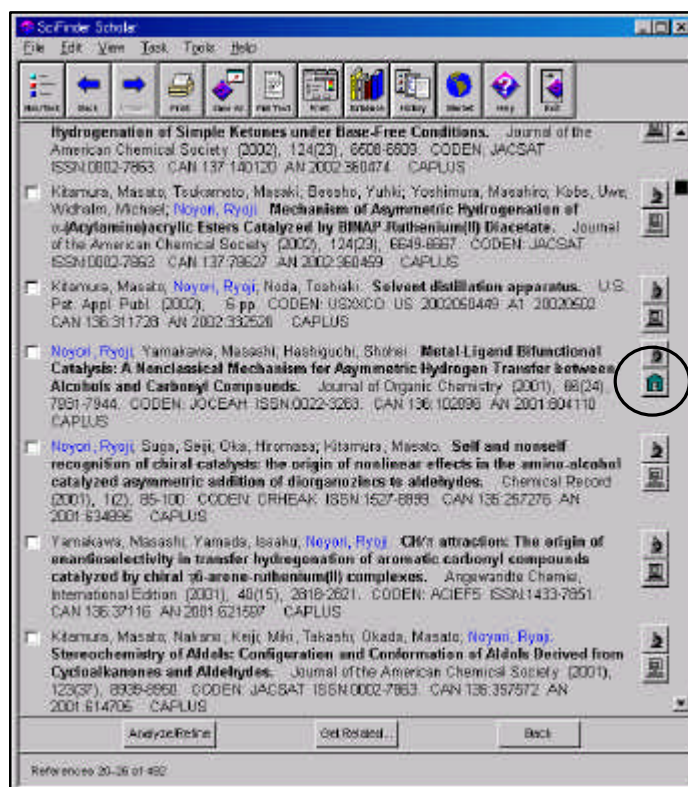


ヨーロッパ特許庁
へのリンク (無料)

ChemPort Connection (原文献へのリンク)

- ◆ My Library 機能を設定すれば ,学内の所蔵雑誌に収録されている文献に対して ,識別用のアイコン (ハウスアイコン)を付けることができます .

➤ 事前に対象雑誌のISSNのリストを登録する必要があります .



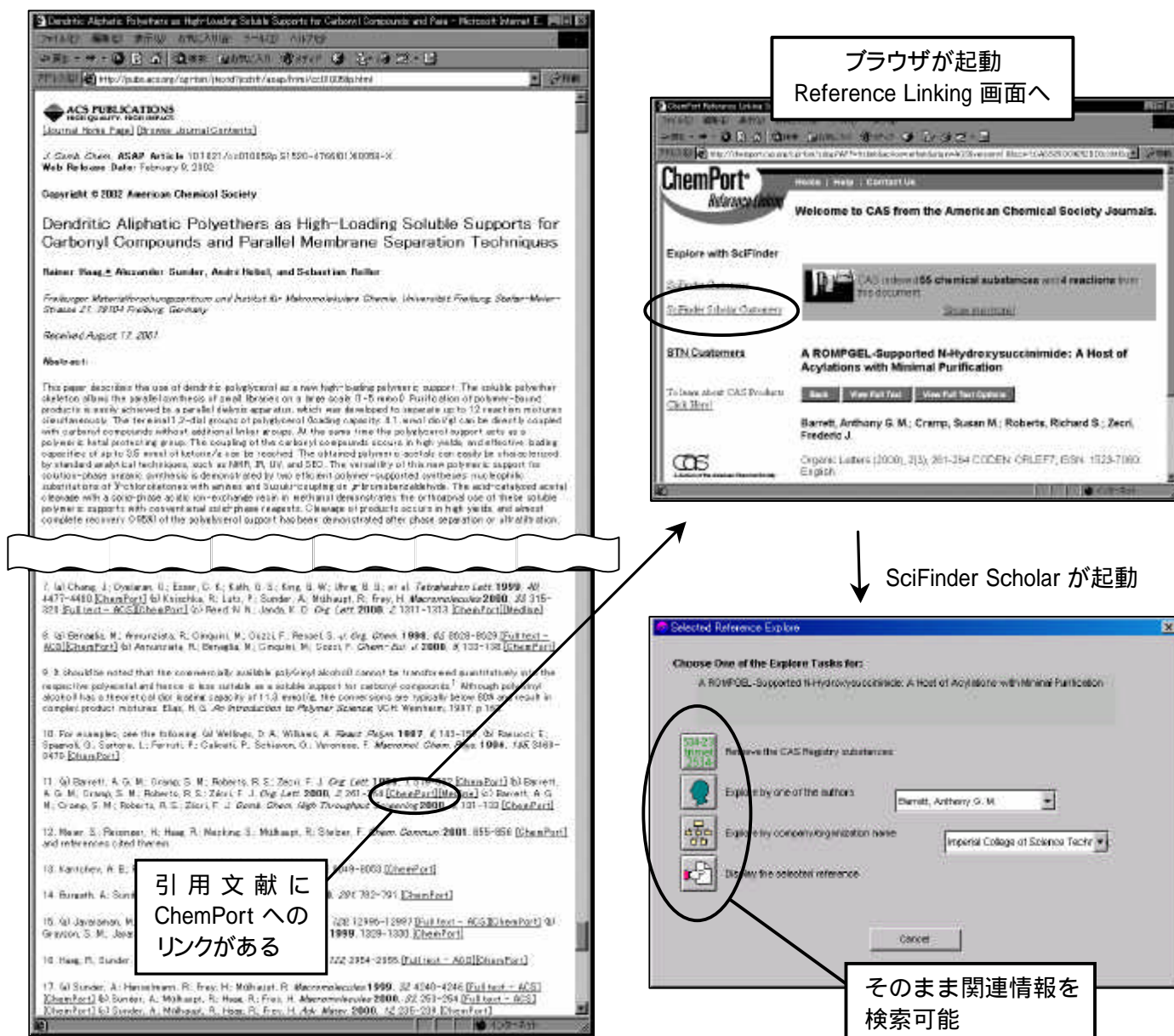
ChemPort Reference Linking

- ◆ SciFinder Scholar の検索結果から電子ジャーナルへリンクするのとは逆に、電子ジャーナル中の関連情報を SciFinder Scholar 上で検索することができます。

- 現在この機能が利用できるのは、以下の出版社が提供する電子ジャーナル。

- ACS Publications
- Springer-Verlag
- American Institute of Physics
- Academic Press/IDEAL
- The Royal Society of Chemistry
- Institute of Physics
- International Union of Crystallography
- CatchWord

例 :ACS Publications の電子ジャーナル



Chemical Abstracts 収録分野（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.5 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.18 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. 酵素	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，ドキュメンテーション	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. 繊維	Textiles and Fibers
41. 染料，蛍光増白剤，写真増感剤	Dyes, Organic Pigments, Fluorescent Brighteners, and Photographic Sensitizers

Chemical Abstracts 収録分野（セクション一覧表）

42. 塗料，インク，関連製品	Coatings, Inks, and Related Products
43. セルロース，リグニン，紙，その他の木材製品	Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products
44. 工業炭水化物	Industrial Carbohydrates
45. 工業有機化学製品，皮革，脂肪，ロウ	Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes
46. 界面活性剤，洗浄剤装置，工場設備	Surface-Active Agents and Detergents

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，熱的性質	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

化学情報協会ホームページ

化学情報協会の SciFinder Scholar のサイトでは、さまざまな情報を提供しています。

• SciFinder Scholar トップページ

<http://www.jaici.or.jp/sci/SCHOLAR/index.html>

SciFinder Scholar - Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

JAICI
社団法人 化学情報協会



技術資料

検索例・操作方法

- LEARNING CENTER
- Solutions

サービス時間

必要なシステム環境

テクニカルサポート

- EndNote など

よくあるご質問

Chemistry Plus

さらに豊富な情報を

新しい!
Scholar チャートリアル

ご注文ならびに料金などの SciFinder Scholar に関する詳細は、電話または電子メールにて承っております。

SciFinder® Scholar™



教えるにも
教わるにも
ベストな選択

SciFinder Scholar
2004 年版

新機能は [こちらで](#) 

製品概要

SciFinder Scholar は現在、世界で最も正確で包括的な化学および関連科学情報を提供する学生および教職員向けデスクトップ型検索ツールです。

- 特別なトレーニングは必要ありません
- 次の CAS データベースなどの多様な科学情報にアクセスできます
 - 雑誌論文および特許論文
 - 化学物質情報
 - 化学反応情報
 - その他様々な情報

SciFinder Scholar は CAS データベースと MEDLINE を検索する様々な方法を提供します。

何ができるか

SciFinder Scholar - 世界をリードする教職員および学生向けの科学情報リソース - は、次の機能を提供します。

- 最も正確で包括的な化学および関連科学情報にアクセスできるので、時間が節約でき研究能率が上がります。
- 学生に実際の検索処理を行わせることで実務を経験させることができます。
- 自分のデスクからコンピュータを使用して CAS データベースの検索が簡単に実行できます。
- ライバルの研究をモニターできます。
- 関連情報を簡単に検索できるので、問題解決へより創造的にアプローチできます。

SciFinder Scholar 2004 - 新機能

- 化合物クラスを用いた構造検索 (SSM のみ)
- 部分構造検索 (SSM) のための絞り込みオプション
- 関連する反応情報をよりすばやく検索
- 化学物質の検索結果から関連する反応情報入手

これら SciFinder Scholar の検索ツールや他の様々な検索ツールのサンプルは [CAS Learning Center](#) をご覧ください。

[SciFinder と SciFinder Scholar](#)へ | [JAICI トップページ](#)へ



お問い合わせは **社団法人 化学情報協会**

〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル
FAX : 03-5978-3600
Copyright © 2003 JAICI

29

化学情報協会ホームページ

- CAS LEARNING CENTER SciFinder Scholar Resources
<http://www.jaici.or.jp/sci/SCHOLAR/resources.html>

SciFinder Scholar - CAS Learning Center - Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

CAS LEARNING CENTER

SciFinder® Scholar Resources

SciFinder Scholar により、学生および研究者は世界をリードする科学情報源にアクセスできます。次の検索例は、SciFinder Scholar を初めて使用する場合だけでなく、すでに使用経験がある方にも役立ちますので、ぜひご覧ください。

SEE HOW IT WORKS

以下の方法で簡単に検索できます。

- ・ キーワード
 - 関連化学物質情報の入手
- ・ 書誌情報/特許番号
- ・ 著者名
- ・ 会社名/機関名
- ・ 化学物質名/CAS 登録番号®
- ・ 化学構造検索 (完全一致・ファミリー検索)
 - 関連する合成・反応情報の入手
- ・ 化学構造検索 (部分構造検索; SSM)
 - 絞り込みオプション
 - 化合物クラスを用いた構造検索
 - 立体構造分析機能
- ・ 反応 (反応構造・官能基)
- ・ 目次の閲覧

的確な検索のためのパワフルなツール

- ・ 絞り込みツール (Refine)
- ・ Analyze ツール
- ・ 物性値
- ・ 化学物質規制情報・供給業者情報
- ・ 引用文献リンク
- ・ 全文リンク (ChemPort)

SciFinder Scholar 2004 の新機能もご覧ください。

SCIFINDER SCHOLAR SOLUTIONS

SciFinder Scholar をより効果的に利用するために、以下の検索例をご覧ください。

完全な目次はこちらです。

- ・ 部分構造検索
2,300 万件以上の有機および無機物質からなる REGISTRY ファイルが検索できます。
- ・ 反応検索
合成に関する様々な情報から検索を進めることができます。
- ・ ポリマー検索
ポリマーに関する最新かつ最多の文献情報を得られます。

TRAINING AT YOUR COMPUTER

新しい!
Scholar チュートリアル

SciFinder Scholar のパワフルな特徴や有効な利用法を学ぶことができます。

SciFinder Scholar トップページへ | JAICI トップページへ



お問い合わせは 社団法人 化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル
FAX: 03-5978-3600
Copyright (c) 2003 JAICI

ハード・ソフト , 利用環境

◆ SciFinder Scholar を利用するためのハードウェア , ソフトウェアの条件

➤ 端末として下記の条件を満たす Windows PC か Macintosh を利用します .

コンピュータ	Windows PC	Macintosh
メモリ (RAM)	Windows 95/98/Me/NT4.0 最低 32 MB 64 MB 以上推奨 Windows 2000/XP 最低 64 MB XP では 128 MB 以上推奨	15 MB 以上 17 MB 以上推奨
モニタ	SVGA カラーモニター	13 インチ以上のカラーモニター
CPU	Pentium プロセッサ	Power PC
OS	Windows 95/98/Me/2000/XP Windows NT 4.0	MacOS 7.6.1, 8.x, 9.x, OS X (OS 9 クラシック環境)
必要な HD 容量	最低 30 MB 50 MB 以上推奨	30-40 MB
Web ブラウザ	Netscape Communicator or Navigator 4.x 以上 Microsoft Internet Explorer 4.x 以上	