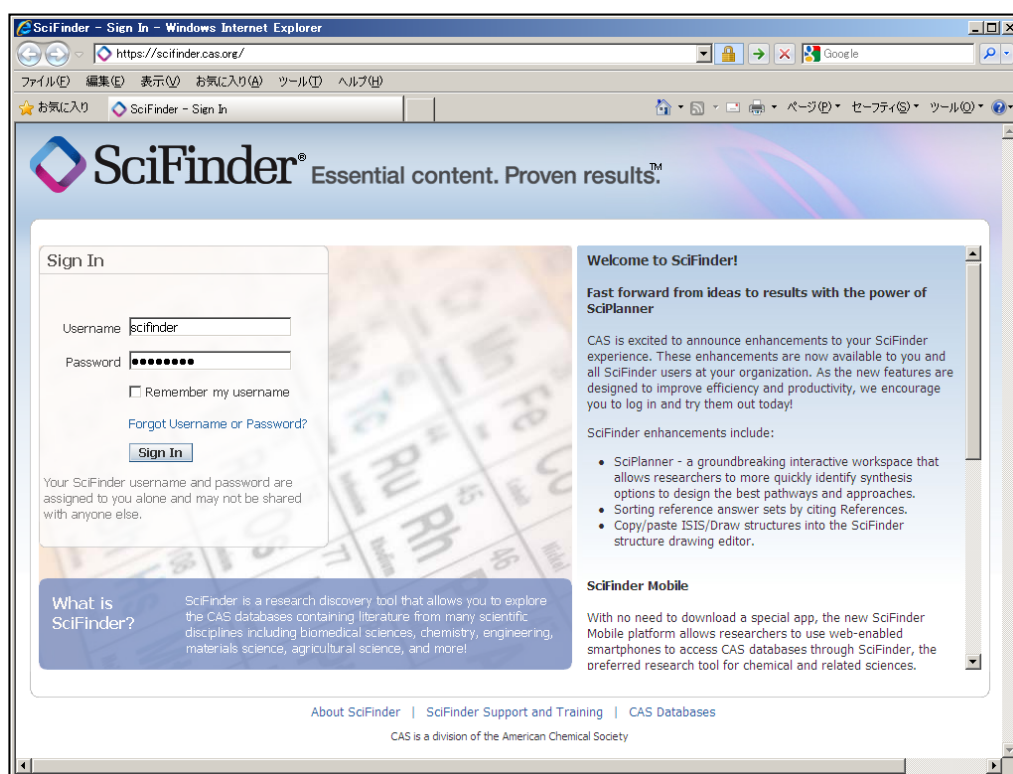


# SciFinder (Web 版) 説明会資料

2012 年 3 月



<https://scifinder.cas.org>

## 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**  
化学情報協会

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

**CAS**®

A division of the American Chemical Society

# 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 ファイル)	4
➢ 物質情報 (REGISTRY ファイル)	5
➢ 化学反応情報 (CASREACT ファイル)	7
➢ カタログ情報 (CHEMCATS ファイル)	8
➢ 既存化学物質台帳情報 (CHEMLIST ファイル)	9
➢ 文献情報 (MEDLINE ファイル)	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
- 原文献へのリンク機能 (CAS Full Text Options)	17
- 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analysis/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
- 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analysis/Refine)	31
- 参考 (マルクーシュ構造検索)	32
➢ 化学反応検索	33
- 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analysis/Refine)	36
- 参考 (「反応しない官能基」の指定)	37
➢ 著者名検索	38
➢ 会社名(大学名)検索	39
➢ 文献情報からの検索	39
➢ 検索結果の印刷	40
➢ 検索結果の保存	41
➢ Keep Me Posted 機能	43
➢ Combine 機能	45
➢ Bioactivity Indicator, Target Indicator	47
➢ SciPlanner 機能	48
◆ APPENDIX	
➢ SciFinder [CAplus ファイル]が収載する文献情報	49
➢ CA セクション一覧表	50
◆ SciFinder の利用環境	51
◆ 利用サポート	51
◆ 参考	51

## SciFinder の概要

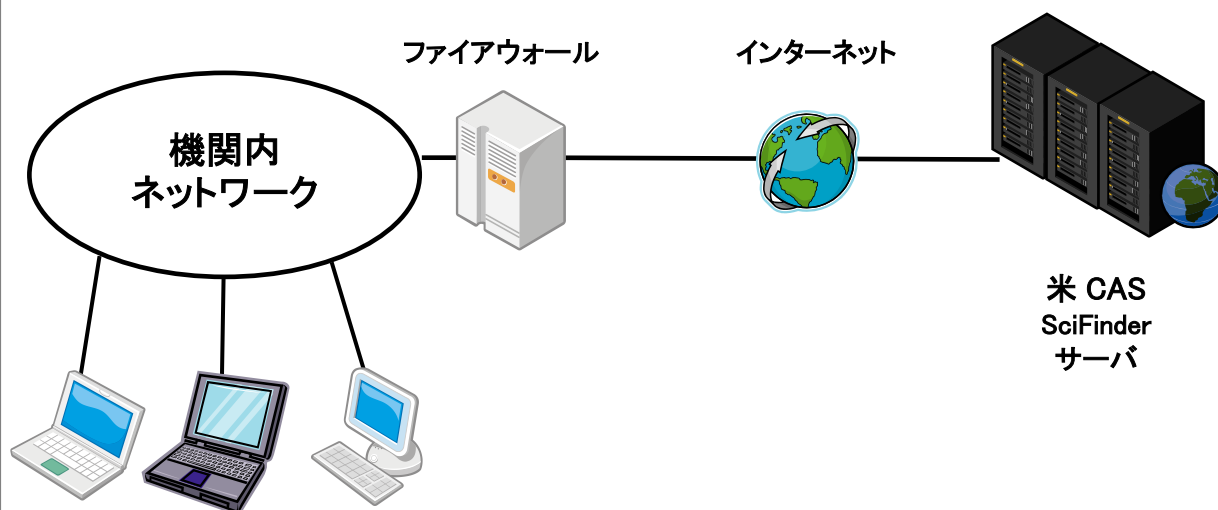
- ◆ SciFinder (Web 版) は、化学を中心とする医薬、生化学、物理、工学等の科学情報を必要とする研究者が、自ら利用することを想定したオンライン検索サービスです。現在、世界中の企業・大学・研究機関の研究者によって研究・開発の最前線で標準的なツールとして活用されています。



- ◆ 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出すことができます。

### 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。

(2012 年 3 月現在)

情報の種類	収録情報
文献情報	1808 年以降の 3,500 万件以上の、論文や特許の抄録付き文献情報 [CAplus ファイル] ※ <sup>1</sup>
	1961 年以降の 37 万件以上の特許由来の、90 万件以上の化学構造の一般式(マルクーシュ構造) [MARPAT ファイル] ※ <sup>2</sup>
化学物質情報	1907 年以降の論文や特許に現れた 1 億 2,800 万件以上の物質情報 ・6,500 万件以上の化学物質(有機物・無機物・ポリマーなど)の情報 ・6,500 万件以上の配列(タンパク質・核酸)の情報 [REGISTRY ファイル] ※ <sup>3</sup>
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(3,900 万の一段階反応および多段階反応) [CASREACT ファイル]
	CAplus 由来の合成情報(1,400 万反応)
試薬・化成品カタログ情報	1,100 社から発行された 1,200 種のカatalogの、約 6,300 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、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	1946 年以降の 2,100 万件以上の論文の抄録付き文献情報 [MEDLINE ファイル]

※<sup>1</sup> CA (Chemical Abstracts) 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 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ください(p.49 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。

※<sup>2</sup> 特許中のマルクーシュ構造を対象に検索を行うことができます。結果は文献(特許)リストとして表示されます。

※<sup>3</sup> CA に収載されたすべての化学物質、GENBANK に登録されている核酸および Web 上で公開されたデータベース上の物質などが収録されています。



## レコード例

### ◆ 文献情報 (CAplus ファイル)

SciFinder - Exclusive photo... - Windows Internet Explorer

https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf

フルテキストへのリンク

・タイトル  
・著者名  
・雑誌名  
・所属機関

書誌情報

Exclusive photodimerization reactions of chromone-2-carboxylic esters depending on reaction media

By: Sakamoto, Masami; Yagishita, Fumitoshi; Kanehiro, Masayuki; Kasahima, Yoshio; Mino, Takashi; Fujita, Tsutomu

The irradiation of chromone-2-carboxylic esters resulted in the stereo- and regioselective formation of C2 chiral anti-HH dimers from the triplet excited state. On the contrary, photolysis in the solid-state gave anti-HT dimers exclusively controlled by mol. arrangement in the crystal.

抄録

Chemical reaction scheme showing the photodimerization of chromone-2-carboxylic esters. The reaction involves irradiation (hν) in MeCN solution to form a C2 chiral anti-HH dimer (91-97% yield) and irradiation in the solid state to form an anti-HT dimer (82-85% yield).

Indexing

Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom) (Section 28-2)

セクション分類 → 50 ページ

Concepts

Cyclodimerization

photochem.; photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

Esterification

photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

Substances

14736-31-3P  
18398-73-7P  
113850-93-4P

crystal structure; photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

Properties; Reactant; Synthetic preparation; Preparation; Reactant or reagent

1250416-16-0P  
1250416-19-3P  
1250416-23-9P

crystal structure; photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

Properties; Synthetic preparation; Preparation

67-63-0 Isopropanol, reactions  
4940-39-0  
39079-62-4

photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

Reactant; Reactant or reagent

51085-94-0P  
1250416-21-7P  
1250416-22-8P

photodimerization of chromonecarboxylic esters in soln. and solid state

Synthetic preparation; Preparation

用語索引

補遺語

Supplementary Terms

chromonecarboxylic ester photodimerization

Citations

Inoue, Y; Chem Rev 1992, 92, 741  
Inoue, Y; Chiral Photochemistry 2004, 11, 129  
Grosch, B; Chiral Photochemistry 2004, 11, 315  
Sakamoto, M; Chiral Photochemistry 2004, 11, 415

データベースにある文献にはリンクあり

索引

タグ

コメント

立休遊動が光二重化反応.

Posted February 06, 2012 11:16 PM  
Last Modified February 06, 2012 11:16 PM

Add Comment: Maximum of 1024 characters per comment; 50 comments per reference.

Save

Characters Remaining: 1024

➤ タグ・コメント機能の詳細

[http://www.jaici.or.jp/sci/sfweb\\_2009new.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/sfweb_2009new.pdf)

## レコード例

### ◆ 物質情報 (REGISTRY ファイル)

SciFinder - CAS Registry Number 58-08-2 - Windows Internet Explorer

https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf

リンクボタン (次ページ)

CAS 登録番号

CAS Registry Number: 58-08-2

分子式

C8H10N4O2

物質名称 (CAS の正式名称, 慣用名など)

1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-  
Caffeine (8CI); 1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine; 1,3,7-Trimethylxanthine; 3,7-Dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione; 7-Methyltheophylline; Alert-Pep; Asia migrine; Cafalgine; Cafeina; Caffedrine; Caffein; Cafipel; DHCPplus; Dasin; Diurex; Durvitan; Guaranine; Hycomine; Koffein; Mateina; Methyltheobromine; Midron extra; Miudol; NSC 5036; New Cetamol; No-Doz; Palergot-C; Phensal; Propoxyphene Compound 65; Refresh'n; SK 65 Compound; Shape Plus; Stay Alert; Stim; Synalgos; Thein; Theine; Tri-Aqua; Wigraine

Deleted CAS Registry Numbers: 71701-02-5, 95789-13-2

文献数 (1907-)

~28,201 References

Document Types: Book, Conference, Dissertation, Journal, Patent, Preprint, Report

文献種別一覧

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Combinatorial Study	✓	✓		
Formation, Nonpreparative	✓	✓		✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence	✓	✓		✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓			
Reactant or Reagent	✓	✓		✓
Uses	✓		✓	✓

Bioactivity Indicator (p.47)

Target Indicator (p.47)

Bioactivity Indicators

Anti-infective agents (all) >>> Antibacterial agents	References
Anti-infective agents (all) >>> Antibacterial agents	39
Anti-infective agents (all) >>> Antibiotics	51
Anti-infective agents (all) >>> Antiviral agents	54

Target Indicators

Cell cycle regulatory proteins (all) > Checkpoint kinase 1	References
Cell cycle regulatory proteins (all) > Checkpoint kinase 1	14
Cell cycle regulatory proteins (all) > Cyclin dependent kinase inhibitors	12

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	(55)	
Bioconcentration Factor	1.0	pH 2 Temp: 25 °C	(55)	
Bioconcentration Factor	1.0	pH 3 Temp: 25 °C	(55)	
Bioconcentration Factor	1.0	pH 4 Temp: 25 °C	(55)	

実測物性値

Experimental Properties: Biological Chemical Density Interface 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 15	(2) CAS	
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 6	(15) CAS	
LCS0	See full text	1 of 3	(21) CAS	
LD50	See full text	1 of 2	(22) CAS	
Median Lethal Dose(LD50)	355 mg/kg	Organism: rat Route: oral	(26) APC	
Median Lethal Dose(LD50)	265 mg/kg	Organism: rat Route: subcutaneous	(27) CAS	

参照文献タグ

数値データ

Spectra Properties	Value	Conditions	Notes	Top
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(3) WSS	
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(4) AIST	
Carbon-13 NMR Spectrum	See full text	1 of 3	(5) CAS	
IR Absorption Spectrum	See spectrum		(4) AIST	
IR Absorption Spectrum	See spectrum		(4) AIST	
IR Absorption Spectrum	See spectrum		(17) BIORAD	

スペクトル表示 (次ページ)

物性値出典

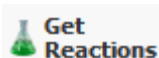
(1) Rahman, M. Mizanur; Journal of Chromatography, A 2006, V1119(1-2), P105-114 CAPLUS  
(2) Jansson, Rasmus; Journal of Pharmaceutical Sciences 2008, V97(6), P2324-2339 CAPLUS  
(3) WSS: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)  
(4) AIST: Integrated Spectral Database System of Organic Compounds. (Data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan))  
(5) Abuhijleh, A. Latif; Journal of Organometallic Chemistry 2009, V694(22), P3590-3596 CAPLUS  
(6) Lehmann, Christian W.; Chemistry--A European Journal 2007, V13(10), P2908-2911 CAPLUS  
(7) "Hazardous Substances Data Bank" data are provided by the National Library of Medicine (US)  
(8) Pozharskii, A. F.; Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii 1989, (2), P221-7 CAPLUS  
(9) Pinto, Susana S.; Journal of Chemical Thermodynamics 2006, V38(12), P1515-1522 CAPLUS

## レコード例

### 【リンクボタン】

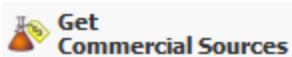


文献へのリンクボタン → 4 ページ



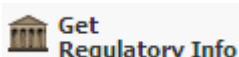
反応へのリンクボタン → 7 ページ

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)を直ちにすることができます。



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

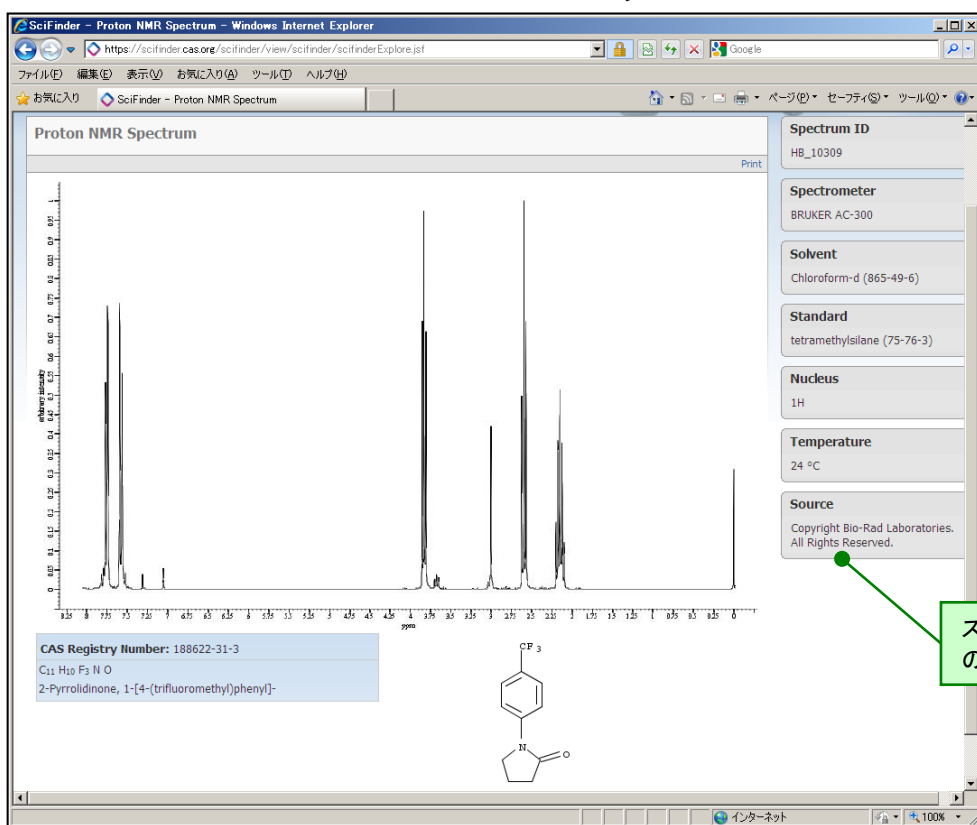
日本, 米国, EU, カナダ, 韓国, オーストラリア, スイス, フィリピン, イスラエル, 台湾, ニュージーランドのいずれかの国・地域の既存化学物質台帳の情報(日本の化審法番号や EINECS 番号など)や各国や地域での規制情報(REACH など)を見ることができます。ただし台帳情報は, CAS 登録番号の付与された化学物質に限定されるので, 総称名物質の多い日本や韓国の台帳上の収載の有無をこれのみで判断することはできません。

### 【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＞

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



## レコード例

### ◆ 化学反応情報 (CASREACT ファイル)

The screenshot displays the SciFinder interface for a chemical reaction. The main reaction scheme shows the conversion of a dihydrothiophene derivative and a naphthalene derivative into a 3-nitro-2-substituted thiophene. The interface includes a sidebar with a list of reagents and catalysts, a 'View Reaction Detail' button, and a 'Link' button. A red arrow points from the 'Link' button to the 'Reaction Detail' page shown in the second screenshot.

**1. View Reaction Detail** [Link](#)

2 Steps never over any stages for more options.

**Overview**

**Steps/Stages**

1.1 R:Et<sub>3</sub>N, S:CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, overnight, rt  
2.1 R:p-Chloranil, R:Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 4 min, 125°C

**Notes**

1) stereoselective, 2) microwave irradiation, no solvent, Reactants: 2, Reagents: 3, Solvents: 1, Steps: 2, Stages: 2, Most stages in any one step: 1

**References**

Facile Synthesis of 3-Nitro-2-substituted Thiophenes  
By O'Connor, Cornelius J. et al  
From Journal of Organic Chemistry, 75(8), 2534-2538; 2010  
[Full Text](#)

**Experimental Procedure**

**Step 1**

1.2.1.2 5-Naphthalen-1-yl-4-nitrotetrahydrothiophen-3-ol (9a): Prepared as per procedure A using (E)-1-(2-nitrovinyl)naphthalene (760 mg, 3.30 mmol), 2,5-dihydroxy-1,4-dithiane (380 mg, 2.52 mmol) and triethylamine (92 µL, 0.66 mmol). Flash chromatography, initially flushing with a 1:1 hexane-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> solvent system and subsequent elution with 20% EtOAc in hexane gave compound 9a (900 mg, 3.27 mmol, 99% yield) as a 1:1.4 mixture of diastereoisomers. R<sub>f</sub> all isomers (25% EtOAc/hexane) 0.21; <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 3.03 (br. s, 1H, OH maj), 3.12 (br. s, 1H, OH min), 3.15 (dd, J = 2.8, 11.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> min), 3.20 (dd, J = 8.1, 10.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> maj), 3.37 (dd, J = 7.0, 10.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> maj), 3.51 (dd, J = 4.7, 11.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> min), 5.04-5.15 (m, 2H, H<sub>3</sub> both isomers), 5.35-5.44 (m, 2H, H<sub>4</sub> both isomers), 5.80 (d, J = 9.1 Hz, 1H, H<sub>5</sub> maj), 6.04 (d, J = 8.8 Hz, 1H, H<sub>5</sub> min), 7.43-7.50 (m, 2H, H<sub>3</sub> both isomers), 7.50-7.55 (m, 2H, H<sub>6</sub> both isomers), 7.55-7.63 (m, 2H, H<sub>7</sub> both isomers), 7.68 (d, J = 7.2 Hz, 1H, H<sub>2</sub> maj), 7.77 (d, J = 7.2 Hz, 1H, H<sub>2</sub> min), 7.80-7.83 (m, 2H, H<sub>4</sub> both isomers), 7.84-7.92 (m, 2H, H<sub>5</sub> both isomers), 8.08 (d, J = 8.5 Hz, 1H, H<sub>8</sub> maj), 8.21 ppm (d, J = 8.5 Hz, 1H, H<sub>8</sub> min); <sup>13</sup>C NMR (151 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 34.4 (C2 maj), 35.6 (C2 min), 44.3 (C5 min), 45.2 (C5 maj), 75.0 (C3 min), 77.5 (C3 maj), 93.2 (C4 min), 95.8 (C4 maj), 122.5 (C8 min), 122.9 (C8 min), 124.0 (C2 min), 124.2 (C2 maj), 125.3 (C3 min), 125.4 (C3 maj), 126.2 (C6 both isomers), 126.9 (C7 both isomers), 129.0 (C5 min), 129.1 (C5 maj), 129.1 (C4 min), 129.3 (C4 maj), 131.2 (q, C9 maj), 131.6 (q, C9 min), 132.4 (q, C1 maj), 132.6 (q, C1 min), 133.9 ppm (q, C10 both isomers); IR  $\nu_{max}$ : 3417 (OH), 3050, 2941, 1598, 1547 (NO<sub>2</sub>), 1369, 1092, 1041, 775, 735 cm<sup>-1</sup>; HRMS (m/z-EI) calcd for C<sub>14</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>3</sub>S (M)<sup>+</sup> 275.0616, found 275.0615.

**Step 2**

1.3.1.2 2-Naphthalen-1-yl-3-nitrothiophene (9b): Prepared as per procedure C using compound 9a (120 mg, 0.44 mmol), oven dried acidic alumina (2.00 g) and chloranil (150 mg, 0.62 mmol). Compound 9b (71 mg, 0.28 mmol, 64% yield) was isolated as a yellow solid. m.p. 113-118 °C; R<sub>f</sub> (10% EtOAc/hexane) 0.40; <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 7.41 (d, J = 5.7 Hz, 1H, H<sub>5</sub>), 7.44-7.49 (m, 1H, H<sub>7</sub>), 7.50-7.57 (m, 4H, H<sub>2</sub>, H<sub>3</sub>, H<sub>6</sub>, H<sub>8</sub>), 7.79 (d, J = 5.7 Hz, 1H, H<sub>4</sub>), 7.93 (d, J = 8.1 Hz, 1H, H<sub>5</sub>), 7.97 ppm (d, J = 7.7 Hz, 1H, H<sub>4</sub>); <sup>13</sup>C NMR (151 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 124.3 (C4), 124.7 (C5), 124.8 (C6), 124.9 (C3), 126.4 (C8), 127.1 (C7), 128.20 (C2), 128.24 (q, C1), 128.6 (C5), 130.2 (C4), 131.8 (q, C9), 133.3 (q, C10), 133.9 ppm (q, C10 both isomers); IR  $\nu_{max}$ : 3417 (OH), 3050, 2941, 1598, 1547 (NO<sub>2</sub>), 1369, 1092, 1041, 775, 735 cm<sup>-1</sup>; HRMS (m/z-EI) calcd for C<sub>14</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>3</sub>S (M)<sup>+</sup> 275.0616, found 275.0615.

カタログ情報へのリンク

出典

実験項情報

【中間ステップの表示】

The screenshot displays the SciFinder 'Reaction Detail' page. It shows the reaction scheme with two steps. The first step involves the reaction of a dihydrothiophene derivative with a naphthalene derivative to form an intermediate. The second step involves the reaction of the intermediate with p-chloranil and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> to form the final product, 3-nitro-2-substituted thiophene. The page includes a 'Source' section with the journal information and a 'Company/Organization' section with the research group details. A red arrow points from the 'Link' button in the first screenshot to this page.

**Reaction Detail** [Get Reference Detail](#) [Get Full Text](#) [Send to SciPlanner](#)

[Return](#) [Link](#) [Save](#) [Print](#) [Export](#)

**1. 2 Steps** Hover over any structure for more options.

**Steps/Stages**

**1** 1.1 R:Et<sub>3</sub>N, S:CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, overnight, rt **Notes** stereoselective, Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1 **Yield** 99%

**Experimental Procedure**

1.2.1.2 5-Naphthalen-1-yl-4-nitrotetrahydrothiophen-3-ol (9a): Prepared as per procedure A using (E)-1-(2-nitrovinyl)naphthalene (760 mg, 3.30 mmol), 2,5-dihydroxy-1,4-dithiane (380 mg, 2.52 mmol) and triethylamine (92 µL, 0.66 mmol). Flash chromatography, initially flushing with a 1:1 hexane-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> solvent system and subsequent elution with 20% EtOAc in hexane gave compound 9a (900 mg, 3.27 mmol, 99% yield) as a 1:1.4 mixture of diastereoisomers. R<sub>f</sub> all isomers (25% EtOAc/hexane) 0.21; <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 3.03 (br. s, 1H, OH maj), 3.12 (br. s, 1H, OH min), 3.15 (dd, J = 2.8, 11.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> min), 3.20 (dd, J = 8.1, 10.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> maj), 3.37 (dd, J = 7.0, 10.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> maj), 3.51 (dd, J = 4.7, 11.9 Hz, 1H, H<sub>2</sub> min), 5.04-5.15 (m, 2H, H<sub>3</sub> both isomers), 5.35-5.44 (m, 2H, H<sub>4</sub> both isomers), 5.80 (d, J = 9.1 Hz, 1H, H<sub>5</sub> maj), 6.04 (d, J = 8.8 Hz, 1H, H<sub>5</sub> min), 7.43-7.50 (m, 2H, H<sub>3</sub> both isomers), 7.50-7.55 (m, 2H, H<sub>6</sub> both isomers), 7.55-7.63 (m, 2H, H<sub>7</sub> both isomers), 7.68 (d, J = 7.2 Hz, 1H, H<sub>2</sub> maj), 7.77 (d, J = 7.2 Hz, 1H, H<sub>2</sub> min), 7.80-7.83 (m, 2H, H<sub>4</sub> both isomers), 7.84-7.92 (m, 2H, H<sub>5</sub> both isomers), 8.08 (d, J = 8.5 Hz, 1H, H<sub>8</sub> maj), 8.21 ppm (d, J = 8.5 Hz, 1H, H<sub>8</sub> min); <sup>13</sup>C NMR (151 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 34.4 (C2 maj), 35.6 (C2 min), 44.3 (C5 min), 45.2 (C5 maj), 75.0 (C3 min), 77.5 (C3 maj), 93.2 (C4 min), 95.8 (C4 maj), 122.5 (C8 min), 122.9 (C8 min), 124.0 (C2 min), 124.2 (C2 maj), 125.3 (C3 min), 125.4 (C3 maj), 126.2 (C6 both isomers), 126.9 (C7 both isomers), 129.0 (C5 min), 129.1 (C5 maj), 129.1 (C4 min), 129.3 (C4 maj), 131.2 (q, C9 maj), 131.6 (q, C9 min), 132.4 (q, C1 maj), 132.6 (q, C1 min), 133.9 ppm (q, C10 both isomers); IR  $\nu_{max}$ : 3417 (OH), 3050, 2941, 1598, 1547 (NO<sub>2</sub>), 1369, 1092, 1041, 775, 735 cm<sup>-1</sup>; HRMS (m/z-EI) calcd for C<sub>14</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>3</sub>S (M)<sup>+</sup> 275.0616, found 275.0615.

**2** 2.1 R:p-Chloranil, R:Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 4 min, 125°C **Notes** microwave irradiation, no solvent, Reactants: 1, Reagents: 2, Steps: 1, Stages: 1 **Yield** 64%

**Experimental Procedure**

1.3.1.2 2-Naphthalen-1-yl-3-nitrothiophene (9b): Prepared as per procedure C using compound 9a (120 mg, 0.44 mmol), oven dried acidic alumina (2.00 g) and chloranil (150 mg, 0.62 mmol). Compound 9b (71 mg, 0.28 mmol, 64% yield) was isolated as a yellow solid. m.p. 113-118 °C; R<sub>f</sub> (10% EtOAc/hexane) 0.40; <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 7.41 (d, J = 5.7 Hz, 1H, H<sub>5</sub>), 7.44-7.49 (m, 1H, H<sub>7</sub>), 7.50-7.57 (m, 4H, H<sub>2</sub>, H<sub>3</sub>, H<sub>6</sub>, H<sub>8</sub>), 7.79 (d, J = 5.7 Hz, 1H, H<sub>4</sub>), 7.93 (d, J = 8.1 Hz, 1H, H<sub>5</sub>), 7.97 ppm (d, J = 7.7 Hz, 1H, H<sub>4</sub>); <sup>13</sup>C NMR (151 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 124.3 (C4), 124.7 (C5), 124.8 (C6), 124.9 (C3), 126.4 (C8), 127.1 (C7), 128.20 (C2), 128.24 (q, C1), 128.6 (C5), 130.2 (C4), 131.8 (q, C9), 133.3 (q, C10), 133.9 ppm (q, C10 both isomers); IR  $\nu_{max}$ : 3417 (OH), 3050, 2941, 1598, 1547 (NO<sub>2</sub>), 1369, 1092, 1041, 775, 735 cm<sup>-1</sup>; HRMS (m/z-EI) calcd for C<sub>14</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>3</sub>S (M)<sup>+</sup> 275.0616, found 275.0615.

**Source**

Facile Synthesis of 3-Nitro-2-substituted Thiophenes  
O'Connor, Cornelius J.;  
Royhouse, Mark D.; Przybyl, Anna M.; Wall, Michael D.;  
Southern, J. Mike  
Journal of Organic Chemistry  
Volume 75  
Issue 8  
Pages 2534-2538  
Journal  
2010

**Company/Organization**

Centre for Synthesis and  
Chemical Biology, School of  
Chemistry, Trinity College  
University of Dublin  
Dublin 2, Ire.

**Number of Steps**

2

出典

## レコード例

### ◆ カタログ情報 (CHEMCATS ファイル)

Commercial Sources

169 Commercial Sources 0 Selected Keep Selected Remove Selected

Select All Deselect All Sort by: Supplier Preference ↑

Answers per Page [20] 1 2 3 4 5 6

Analyze by: Country

USA 97  
People's Republic of China 39  
Germany 18  
United Kingdom 17  
Japan 8  
Belgium 6  
India 5  
Russia 5

1. Acros Organics Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: Thermo Fisher Scientific Brand: Acros Organics, Catalog Publication Date: 11 Aug 2011  
Order Number: 12536  
Quantity: 1g, 5g, 250mg  
73-31-4 Melatonin

2. Kanto Product List Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: Kanto Chemical Co., Inc., Catalog Publication Date: 27 Oct 2011  
Order Number: 12536-1A  
Quantity: 250 mg, 1 g  
73-31-4 Melatonin

3. Wako Pure Chemicals Product List Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: Wako Pure Chemical Industries, Ltd., Catalog Publication Date: 11 Jan 2012  
Order Number: 596-06911  
Quantity: 1g, 100mg  
73-31-4 Melatonin, Crystalline

4. 2011 TCI AMERICA Fine Chemicals  
Supplier Name: TCI America, Catalog Publication Date: 20 Oct 2011  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, 5 g  
73-31-4 Melatonin, ≥98.0%

5. 2011 TCI EUROPE Fine Chemicals  
Supplier Name: TCI EUROPE N.V., Catalog Publication Date: 20 Oct 2011  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, 5 g  
73-31-4 Melatonin, ≥98.0%

6. 2011 TCI Fine Chemicals  
Supplier Name: TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD. (TOKYO KASEI KOGYO CO., LTD.) (Overseas Sales Office), Catalog Publication Date: 20 Oct 2011  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, 5 g  
73-31-4 Melatonin, ≥98.0%

7. 2011 TCI Shanghai Fine Chemicals

### 【詳細情報の表示】

Commercial Source Detail

6. 2011 TCI Fine Chemicals

Catalog Information  
Catalog Publication Date: 20 Oct 2011  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, Price: ¥8000  
Quantity: 5 g, Price: ¥24000

Substance Information  
CAS Registry Number: 73-31-4  
Chemical Name: Melatonin, ≥98.0%  
N-Acetyl-5-methoxytryptamine

Catalog Suppliers  
Below are the contributing supplier(s) to this catalog.

Supplier Name	Address	Contact Information	Status
TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD. (TOKYO KASEI KOGYO CO., LTD.) (Overseas Sales Office)	TCI Bldg. 4-10-2, Nihonbashi-Honcho Chuo-ku, Tokyo, 103-0023 Japan	Phone: +81-3-5640-8878 Fax: +81-3-5640-8902 Email: globalbusiness@tokyokasei.co.jp Web: http://www.tci-asia-pacific.com	Preferred
TOKYO KASEI HAMBAI CO., LTD. (Japan Sales Office)	3-1-13, Nihonbashi-Honcho Chuo-ku, Tokyo, 103-0023 Japan	Phone: 03-3241-0573 Fax: 03-3246-2094 Email: sales@tokyokasei.co.jp Web: http://www.tokyokasei.co.jp	Preferred
TOKYO KASEI Osaka Office	Japan	Phone: 06-6228-1155 06-6228-1158	Unclassified

Excel フォーマット  
での出力も可能

※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  
無料です。  
ご興味ございましたら、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>

- 「よく利用する業者」の詳細
- 試薬購入ページへの直接リンク機能

[http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_new2010a.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_new2010a.pdf)

[http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_201202.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201202.pdf)

## レコード例

### ◆ 既存化学物質台帳情報 (CHEMLIST ファイル)

**Regulatory Information Detail**

CAS Registry Number: 87061-04-9

1,2-Propanediol, 3-[[5-methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]-  
(TSCA, DSL, AICS, ASIA-PAC, NZIoC)  
3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]propane-1,2-diol  
(English, French) (DSL, REACH, EINECS)  
3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]propan-1,2-diol  
(German) (EINECS)  
3-[[5-metil-2-(1-metiletil)ciclohexil]oxi]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  
EU: REACH  
JAPAN: ENCS  
NEW ZEALAND: NZIoC  
USA: FDA, TSCA

**Confidentiality Status**

Public

**Regulatory List Number**

EC No.: 289-296-2  
EINECS No.: 289-296-2  
ENCS No.: 3-3857

**Inventory Status**

On TSCA Inventory  
January 2011 TSCA Inventory  
EPA Flags:  
P. Commenced PMN  
On DSL  
Supplement to Canada Gazette, Part I, January 26, 1991  
On REACH  
List of Pre-Registered Substances, March 2009  
Registration Date: 30-NOV-2010.  
On EINECS  
Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990  
On ENCS  
Japanese Gazette. Contained within class: Low Molecular Carbo-monocyclic Organic Compounds.  
On AICS  
Australian Inventory of Chemical Substances, June 1996 Ed  
On ASIA-PAC  
On NZIoC  
New Zealand Inventory of Chemicals, 2006

**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**

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

==== European Community Regulations =====

**European Community Legislation**

Internet: [ec.europa.eu/food/food/chemicalsafety/flavouring](http://ec.europa.eu/food/food/chemicalsafety/flavouring) (2010).  
This substance is listed in the Register of Flavouring Substances pursuant to Article3(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.

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

CAS 登録番号

化学物質名

規制リスト番号

台帳上の  
情報

各国の  
規制情報



## レコード例

### ◆ 文献情報 (MEDLINE ファイル)

The screenshot shows a SciFinder record for a paper titled "Beta-adrenoceptor blocker pharmacokinetics and the oral contraceptive pill" by Kendall M J, Jack D B, Quarterman C P, Smith S R, and Zaman R. The record is displayed in a web browser window.

**Annotations:**

- 書誌情報** (Bibliographic Information): Points to the title and authors.
- 抄録** (Abstract): Points to the abstract text.
- 索引** (Indexing): Points to the "Indexing" section, which includes "Concepts" and "Substances".
- CAS 登録番号索引** (CAS Registry Number Index): Points to the "Substances" section, which lists CAS numbers for Metoprolol, Acebutolol, and Propranolol.
- 索引語** (Indexing Terms): Points to the "Supplementary Terms" section.
- 参考文献** (References): Points to the "Citations" section, which lists references.
- ・タイトル** (Title): Points to the title.
- ・著者名** (Author Name): Points to the authors.
- ・雑誌名** (Journal Name): Points to the journal information.
- ・所属機関** (Institution): Points to the journal information.

### ◆ 参考情報: 化学情報協会の SciFinder のサイトでは, さまざまな情報を提供しています. SciFinder トップページ <http://www.jaici.or.jp/sci/SCIFINDER/>

The screenshot shows the SciFinder homepage, which provides various services and information. The page is divided into several sections, including "SciFinder (Web 版)" and "SciFinder ニュースレター".

**Annotations:**

- 新機能資料など** (New features and materials, etc.): Points to the "SciFinder (Web 版)" section, which lists various services and resources.
- ユーザーインタビュー** (User Interview): Points to the "ユーザーインタビュー" section, which features a video interview with a user.

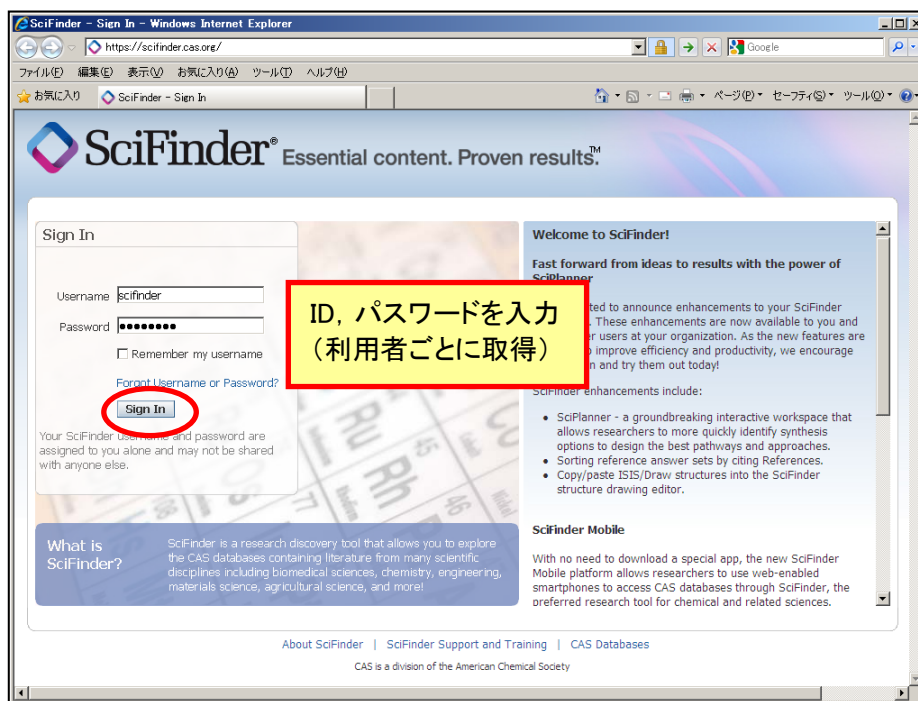


## SciFinder へのアクセス

### ◆ SciFinder (Web 版) へのアクセス

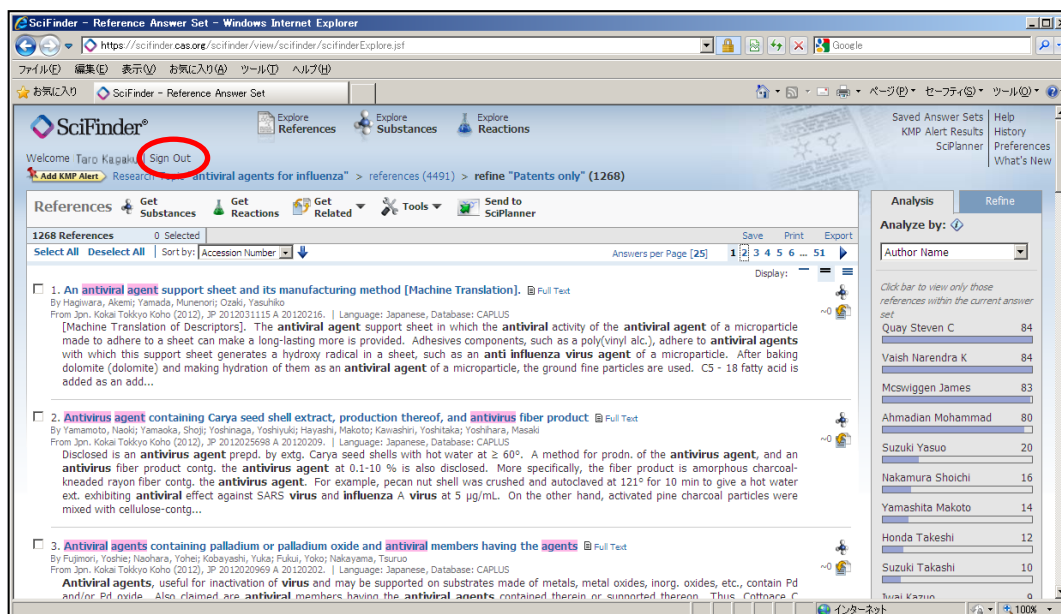
アクセス先 URL: <https://scifinder.cas.org>

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。



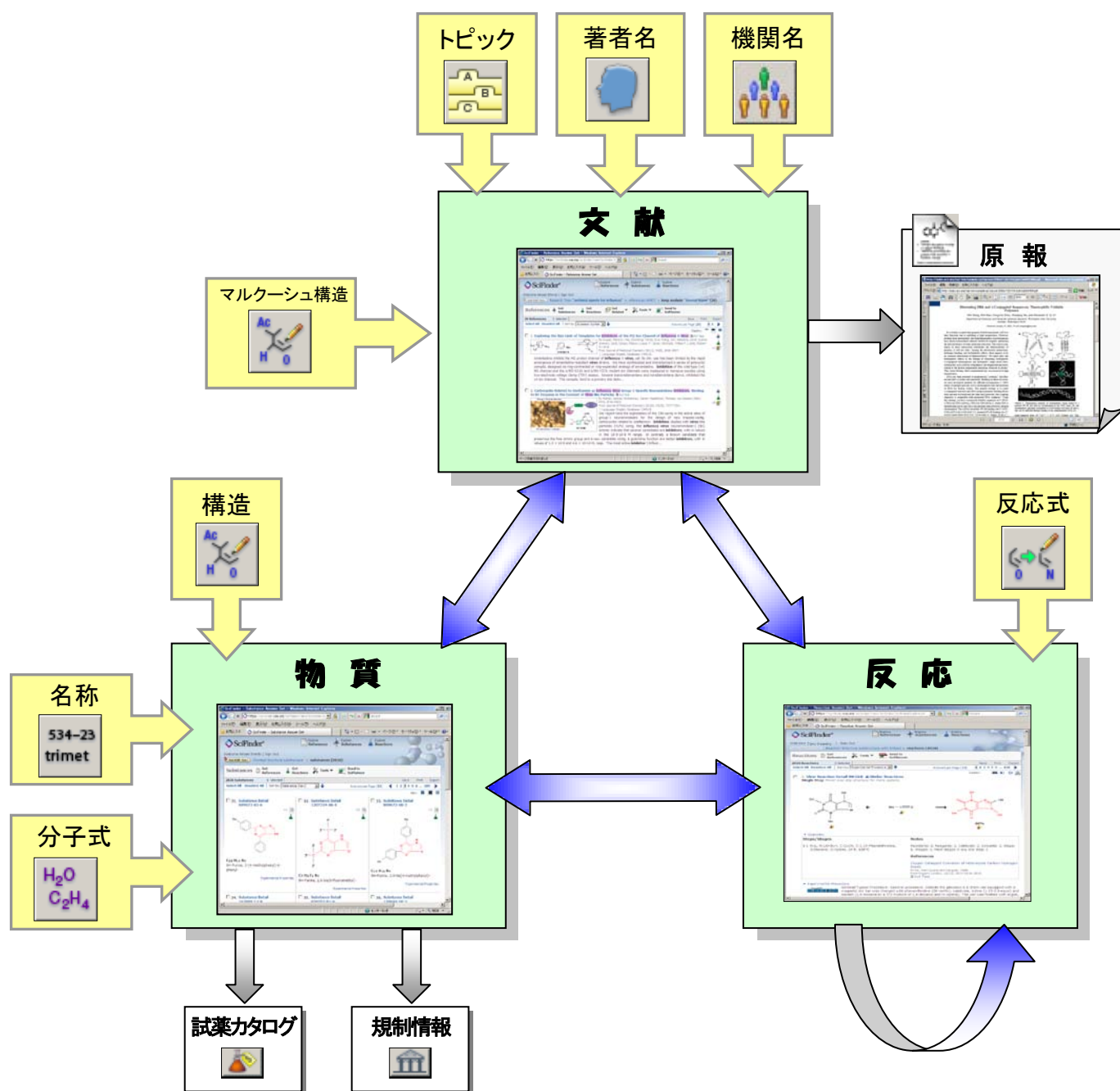
### ◆ SciFinder (Web 版) の終了

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）



## 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' page. A green arrow points to the '文献検索' (Literature Search) button. Another green arrow points to the '検索項目を選択' (Select search criteria) section, which includes a list of search criteria: Author Name, Company Name, Document Identifier, Journal, Patent, and Tags. The right sidebar contains sections for 'Saved Answer Sets', 'Keep Me Posted Results', and 'My Connections'.

### 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 → 文献・特許番号検索
- Journal → 雑誌情報からの検索
- Patent → 特許情報からの検索

p.15

p.38

p.39

## SciFinder の検索概要

### 【 化学物質検索 初期画面 】



#### 物質検索項目

- Chemical Structure → 化学構造式
- Markush → 化学構造式(マルクーシュ構造検索)
- Molecular Formula → 分子式
- Substance Identifier → 化学物質名称, CAS 登録番号

p.27

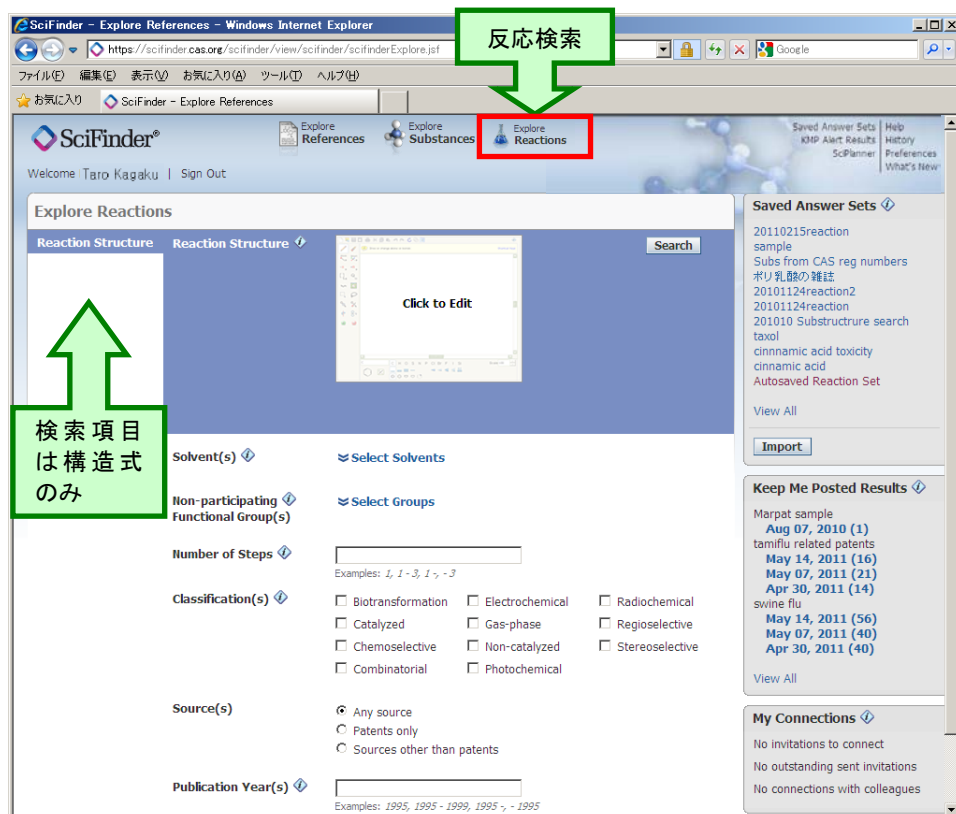
p.32

p.26

p.24

### 【 化学反応検索 初期画面 】

p.33



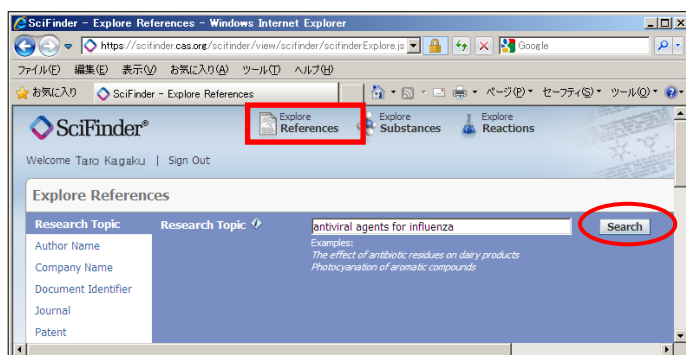
## 研究トピックの検索

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



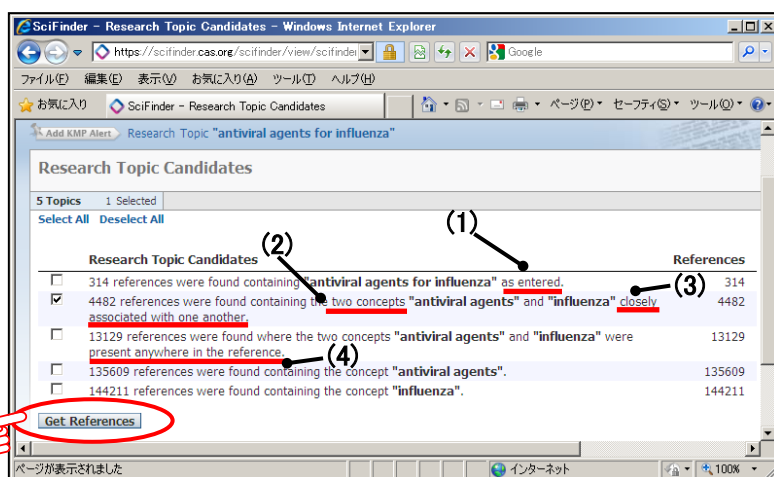
➤ 検索テーマを表現する適切な英語の文章を入力して検索を行います。

- ① 興味があるテーマの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)」の検索を試みます。



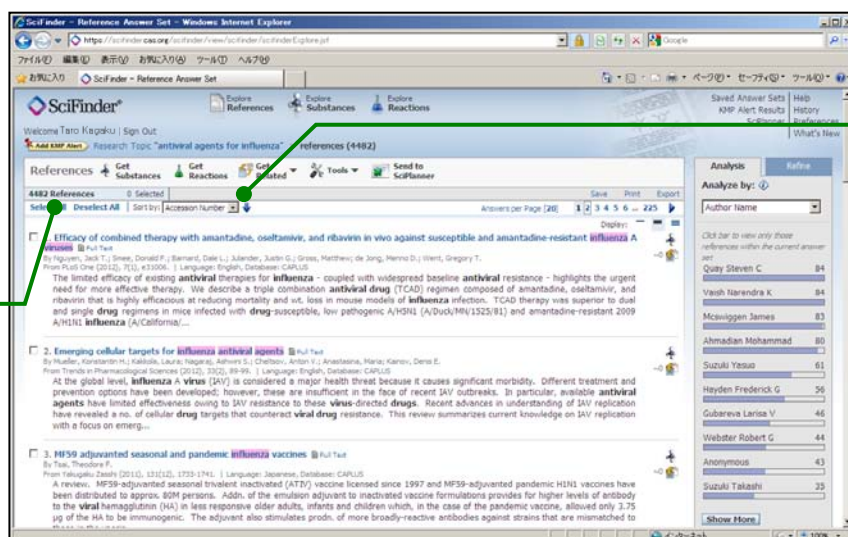
※大文字・小文字の区別はない  
※キーワード間の結合には、  
前置詞のほか AND, OR, NOT が  
使用可能  
※「?」や「\*」といった記号は質問式には  
使用不可

- 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。



回答件数

クリックしてソートできる  
(20,000 件以下)  
昇順・降順の指定も可能

Accession Number  
Author Name  
Citing References  
Publication Year  
Title



## 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。

1. Search results are displayed.

2. From the Tools menu, select 'Remove Duplicates' to remove duplicate documents (up to 10,000 items).

3. Click to change the number of items per page (up to 100 items).

4. Click to change the document display format (Full Text, Abstract, etc.).

※自動で行う設定にも変更できます  
[http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_201008.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201008.pdf)

1. Click on the title to view the full text.

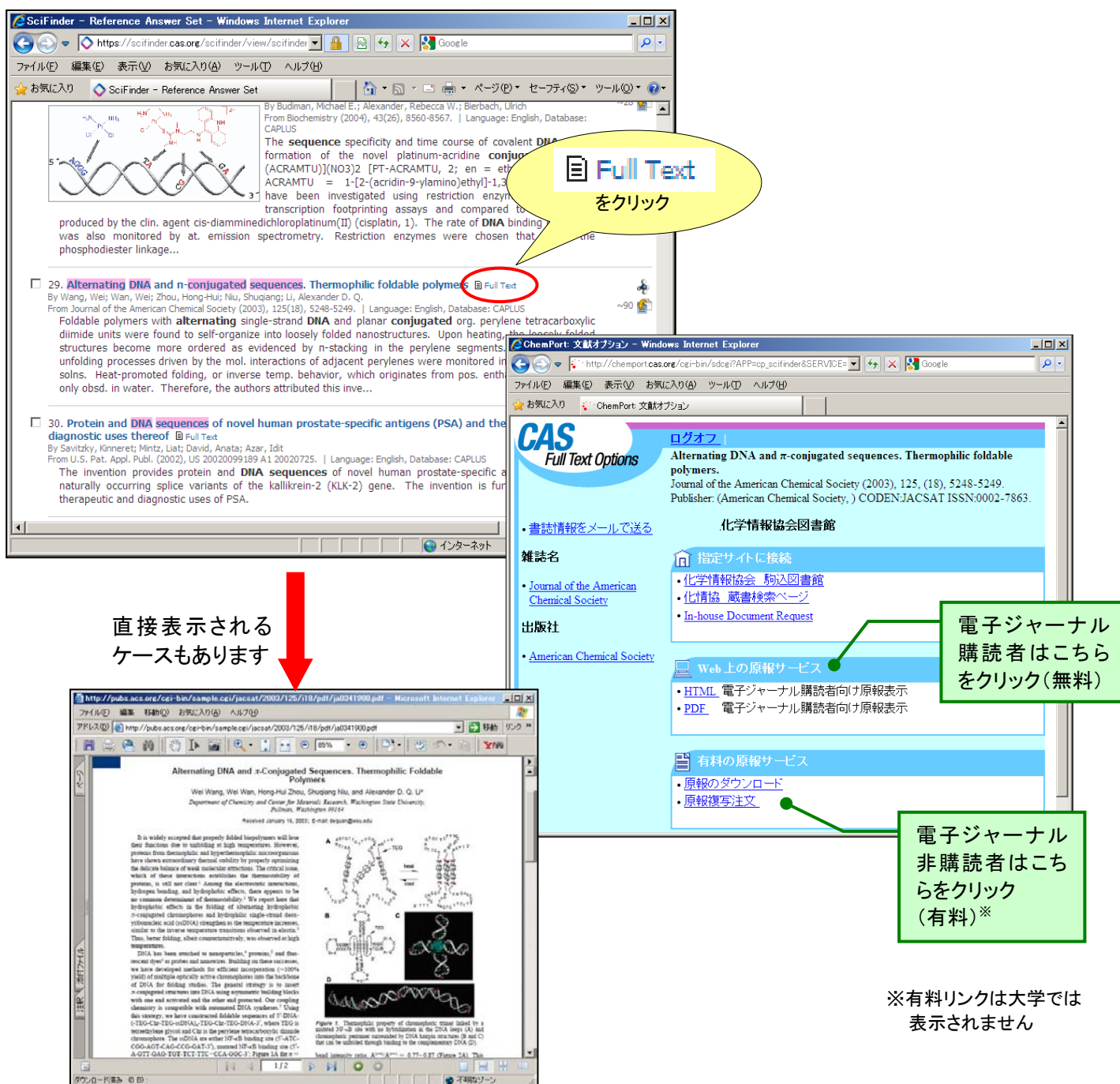
2. Click on the CAS Registry Number (196618-13-0) to view the substance information.

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る

クリックして  
同じ用語索引をもつ  
文献検索ができる

## 原文献へのリンク機能

- 回答として得られた文献リストまたは文献詳細画面中の Full Text (書類) リンクボタンをクリックすると、CAS Full Text Options 画面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であれば HTML または PDF 形式で表示することができます。
- 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 (企業のみ)。
- 一部の雑誌および特許明細書については、直接フルテキストを表示することができます。





## 原文献へのリンク機能

- 米国特許商標庁 (USPTO, <http://www.uspto.gov/>), ヨーロッパ特許庁 (EPO, [esp@cenet](mailto:esp@cenet)), 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, 同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 (企業のみ)。

**SciFinder 画面:** 検索結果の「Get Full Text」ボタンが赤い円で囲まれ、「クリック」という注釈が付いています。

**ChemPort 画面:** 「CAS Full Text Options」セクションで、以下のようなサービスが紹介されています:

- 化学情報協会図書館
- Esp@cenet
- Homepage
- Web上の原報サービス
  - esp@cenet: ヨーロッパ特許庁 (EPO) の特許明細書表示
  - 認証済み
- 有料の原報サービス
  - 原報のダウンロード
  - 原報複写注文

右側の緑色の注釈ボックス:

- 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)\*

下部の Espacenet 画面:

「Original document: WO 2004037225 (A2)」と表示されています。左側のメニューで「Original Document」が選択されています。

緑色の注釈ボックス:

- 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

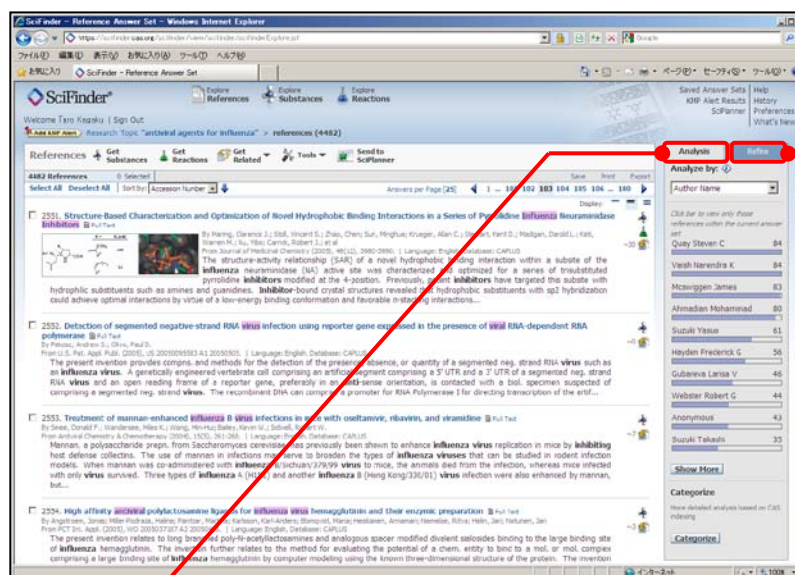
下部の緑色の注釈ボックス:

※有料リンクは大学では表示されません

## 文献回答の絞り込み・解析機能

### ■ 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analysis/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 (Analysis) や、7 種の観点で絞り込み (Refine) ができます。



**解析機能**

**Analysis**   **Refine**

Analyze by: Author Name

Click bar to view only those references within the current answer set

Quay Steven C	84
Vaish Narendra K	84
Mcswiggen James	83
Ahmadian Mohammad	80
Suzuki Yasuo	61
Hayden Frederick G	56
Gubareva Larisa V	46
Webster Robert G	44
Anonymous	43
Suzuki Takashi	35

**Show More**

**Categorize**  
More detailed analysis based on CAS indexing

**Categorize**

**絞り込み検索**

**Analysis**   **Refine**

**Refine by:**

- ☒ Research Topic
- ☐ Author Name
- ☐ Company Name
- ☐ Document Type
- ☐ Publication Year
- ☐ Language
- ☐ Database

**Research Topic**

Examples:

*The effect of antibiotic residues on dairy products*

*Photocyanation of aromatic compounds*

**Refine**

クリックして観点を選択できます

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

会社・大学名

クリックして、解析の詳細表示 (次ページ参照)

Categorize 機能へ (21 ページ参照)

**※資料種類**

**Document Type(s)**

- ☐ Biography
- ☐ Book
- ☐ Clinical Trial
- ☐ Commentary
- ☐ Conference
- ☐ Dissertation
- ☐ Editorial
- ☐ Historical
- ☐ Journal
- ☐ Letter
- ☐ Patent
- ☐ Preprint
- ☐ Report
- ☐ Review

## 文献回答の絞り込み・解析機能

サンプル解析  
(20,000 件超)

全項目解析  
(20,000 件以下)

クリックしてソート  
できる

Sample Analysis: ⓘ

Author Name

De Clercq Erik	
Anonymous	
De Clercq E	
Shigeta Shiro	
Balzarini J	
Balzarini Jan	
Yamamoto Naoki	
Bacher Gerald	
Bevec Dorian	
Cavalli Fabio	

Analyze by: ⓘ

Author Name

Click bar to view only those references within the current answer set

Quay Steven C	84
Vaish Narendra K	84
Mcswiggen James	83
Ahmadian Mohammad	80
Suzuki Yasuo	61
Hayden Frederick G	56
Subareva Larisa V	46
Webster Robert G	44
Anonymous	43
Suzuki Takashi	35

Show More

Analysis - Author Name ⓘ

13324 Items 4 Selected Export

Sort by: Natural Order 1 ... 74 75 76 77 78 79 ... 267

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

<input type="checkbox"/> Hayashi Shintaro	1
<input type="checkbox"/> Hayashi Toshimitsu	4
<input type="checkbox"/> Hayashi Yoshihito	2
<input type="checkbox"/> Hayashi Yujiro	2
<input type="checkbox"/> Hayashi Yuzuru	5
<input checked="" type="checkbox"/> Hayden F	1
<input checked="" type="checkbox"/> Hayden F G	17
<input checked="" type="checkbox"/> Hayden Frederick	7
<input checked="" type="checkbox"/> Hayden Frederick G	56
<input type="checkbox"/> Hayward Andrew	1

Apply Cancel

クリックして該当項目の  
選択表示もできる

チェック項目の選択表示

Scifinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

References 4487 References 0 Selected

11 references with the Author Names Hayden F, Hayden F G, Hayden Frederick, ... are

Keep Analysis Clear Analysis

select All Deselect All Sort by: Accession Number

142. Antiviral Therapy for Influenza: Challenging the Status Quo. [In: Clin. Infect. Dis., 2006; 46(Suppl. 1)] [Erratum to document cited in CA150:322550] @ Full Text

1243. Surveillance for neuraminidase inhibitor resistant influenza viruses in Japan, 1996-2007 @ Full Text

1466. Seasonal influenza in adults and children - diagnosis, treatment, chemoprophylaxis, and institutional outbreak management: clinical practice guidelines of the infectious diseases society of America @ Full Text

1493. Influenza virus @ Full Text

Analyze by: ⓘ

Author Name

Click bar to view only those references within the current answer set

Quay Steven C	84
Vaish Narendra K	84
Mcswiggen James	83
Ahmadian Mohammad	80
Suzuki Yasuo	61
Hayden Frederick G	56
Subareva Larisa V	46
Webster Robert G	44
Anonymous	43
Suzuki Takashi	35

Show More

Categorize

ヒント

チェック項目の選択表示後、  
別の観点の掛け合わせる解析・  
絞り込むためには、まずは  
**Keep Analysis** をクリックする。

- ・解析対象データは最大 20,000 回答
- ・20,000 件を超える回答の集合は、  
サンプル解析のみ表示される
- ・解析の詳細表示画面で、  
頻度順ソートでは最大 1,000 項目表示
- ・絞り込み機能では回答の件数に上限はない

## 文献回答の絞り込み・解析機能

### ■ Categorize 機能

- 文献の回答集合に対して、選択したタームや化学物質に関する文献に絞り込むことができます。

The screenshot shows the 'Categorize' window with the following components and annotations:

- ①解析したい分類を選択** (Select the category you want to analyze): Points to the 'Category' list where 'Substances in medicine (3492)' is selected.
- ②タームを選択** (Select terms): Points to the 'Index Terms' list where several terms like 'Zanamivir', 'Oseltamivir', and 'Amantadine' are checked.
- 大分類** (Major Category): Points to the 'Category Heading' list where 'Biotechnology' is selected.
- 索引** (Index): Points to the 'Index Terms' list.
- 選択したタームのリスト** (List of selected terms): Points to the 'Selected Terms' panel showing 'Biotechnology > Substances in medicine (7 Terms)'.
- OK/Cancel buttons**: Located at the bottom right, with 'OK' circled in red.

Biotechnology > Substances in medicine > 7 Index Term(s) Selected

・解析対象データは最大 15,000 回答

\* 分類 (Category) の定義はオンラインヘルプ画面からご覧いただけます。

The screenshot shows the 'SciFinder Help' page for 'Science Categories'. It includes a table of categories and index terms. An annotation points to the 'Analytical chemistry' link in the table.

Categories and Index Terms		
<a href="#">All</a>	<a href="#">Analytical chemistry</a>	<a href="#">Biology</a>
<a href="#">Biotechnology</a>	<a href="#">Catalysis</a>	<a href="#">Environmental chemistry</a>
<a href="#">General chemistry</a>	<a href="#">Genetics &amp; protein chemistry</a>	<a href="#">Physical chemistry</a>
<a href="#">Polymer chemistry</a>	<a href="#">Synthetic chemistry</a>	<a href="#">Technology</a>

**確認したい項目をクリック** (Click the item you want to check): Points to the 'Analytical chemistry' link.



## 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。

チェックを入れる

Get References

Get Reactions

Get Substances

Retrieve substances for:

- ☐ All references
- ☐ Selected references

Limit results to:

- ☐ Adverse Effect, including toxicity
- ☐ Analytical Study
- ☐ Biological Study
- ☐ Combinatorial Study
- ☐ Formation, nonpreparative
- ☐ Miscellaneous
- ☐ Occurrence
- ☐ Prophetic in Patents
- ☐ Preparation
- ☐ Process
- ☐ Properties
- ☐ Reactant or Reagent
- ☐ Uses

Get

観点を指定して、  
抽出対象物質を  
限定することも  
できる

Substances

29 Substances 0 Selected

16. Substance Detail 204002-50-4

17. Substance Detail 204002-50-6

18. Substance Detail 204002-50-6

19. Substance Detail 167966-61-2

20. Substance Detail 109735-70-8

21. Substance Detail 104439-07

この論文で  
扱われている  
物質の集合

Reactions

6 Reactions 0 Selected

1. View Reaction Detail 66%

2. View Reaction Detail 74%

この論文で  
扱われている  
反応の集合

・物質集合作成・反応集合作成は  
最大 1,000 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。

チェックを入れる

Get Citing

引用情報検索は最大 500 回答

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、注目する文献を同一機関の他のユーザと共有することができます。リンク機能は物質や反応、保存した回答についても利用できます。

Link をクリック

URL をメールにコピー＆ペーストして送信可能

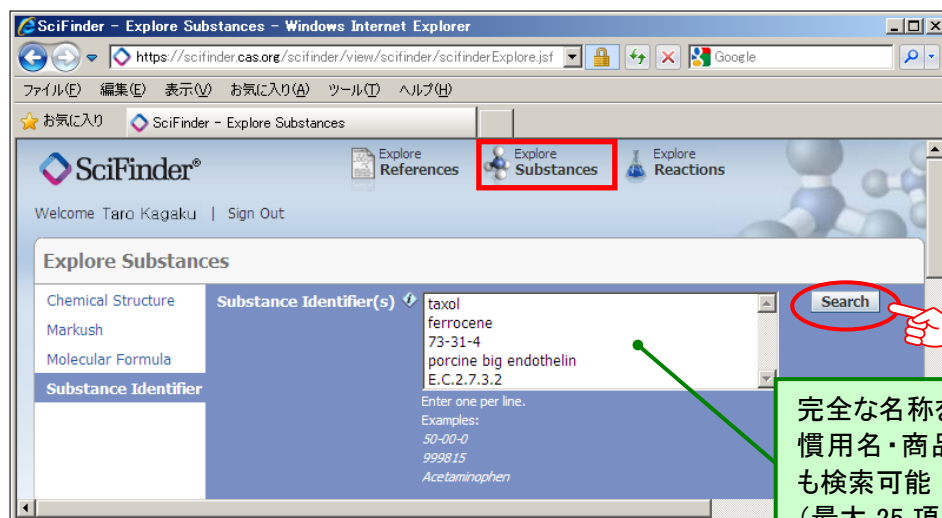
Copy and paste link for quick access to this result.  
[https://scifinder.cas.org/scifinder/view/link\\_v1/reference.html?l=...](https://scifinder.cas.org/scifinder/view/link_v1/reference.html?l=...)  
 Create a bookmark, save in a document, or e-mail to a colleague.

## 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.



**Substance Detail 120796-99-8**

Substance  
Image  
Cannot Be  
Displayed  
120796-99-8

**C193 H289 N49 O58 S5**  
Endothelin 1 (swine), big (9CI)  
Protein Sequence  
Sequence Length: 39

**Substance Detail 33069-62-4**

Absolute stereochemistry, Rotation (-).

**C47 H51 N O14**  
Benzenepropanoic acid, β-(benzoylamino)-α-hydroxy-, (2aR,4S,4a,5,6R,9S,11S,12S,12aR,12bS)-6,12b-bis(acetyloxy)-12-(benzoyloxy)-2a,3,4,4a,5,6,9,10,11,12,12a,12b-dodecahydro-4,11-dihydroxy-4a,8,13-tetramethyl-5-oxo-7,11-methano-1-cyclodeca[3,4]benz[1,2-b]oxet-9-ester, (αR,βS)-

**Substance Detail 102-54-5**

**C13 H16 N2 O2**  
Acetamide, N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]-

**Substance Detail 73-31-4**

**C13 H16 N2 O2**  
Acetamide, N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]-

**Substance Detail**

CAS Registry Number: 73-31-4  
C13 H16 N2 O2  
Acetamide, N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]-  
Acetamide, N-[2-(5-methoxyindol-3-yl)ethyl]- (6CI,8CI); 3-(2-Acetamidophenyl)-5-methoxyindole; 5-Methoxy-N-acetyltryptamine; Circadin; Melatol; Melatonin; Melatonin; Melovine; N-Acetyl-5-methoxytryptamine; N-[2-(5-Methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]acetamide; N-[2-(5-Methoxyindol-3-yl)ethyl]acetamide; NSC 113928; NSC 36423; Regulon

~15,829 References

Document Types: Book, Conference, Dissertation, Journal, Patent, Preprint, Report

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonpatent Derivatives from Patents	Nonpatent Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative	✓	✓	✓	✓
Miscellaneous	✓	✓	✓	✓
Occurrence	✓	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓	✓	✓	✓
Reactant or Reagent	✓	✓	✓	✓
Uses	✓	✓	✓	✓

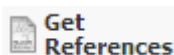
► Bioactivity Indicators **100%**    ► Target Indicators **100%**



## 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



各物質下の書類リンクボタン(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, 特定の観点によって文献を限定することもできます。

The screenshot shows the SciFinder Substance Answer Set interface. The top navigation bar includes 'Substances', 'Get References', 'Get Reactions', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. A red circle highlights the 'Get References' button. Below it, a list of substances is shown, with the first one selected. A red arrow points from the 'Get References' button to a modal dialog titled 'Get References'. The dialog has two sections: 'Retrieve references for:' with radio buttons for 'All substances' and 'Selected substances' (selected), and 'Limit results to:' with checkboxes for various criteria. A green box on the right highlights the 'Preparation' checkbox, with text indicating that selecting it filters for literature from 1967 onwards. The 'Get' button in the dialog is also circled in red.

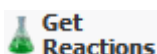
合成文献  
(1907 年以降)  
★「Preparation」以外の項目を選択した場合, 得られる文献は 1967 年以降

The screenshot shows the SciFinder Reference Answer Set interface. The top navigation bar includes 'References', 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. The main area displays a list of references, with the first one selected. The right sidebar shows an 'Analysis' section with a table of author names and their corresponding reference counts.

Author Name	Count
Yuan Ying Jin	42
Kingston David G I	32
Mei Xingguo	31
Holton Robert A	24
Nicolaou K C	24
Wu Jin Chuan	23
Georg Gunda I	22
Kim Jin Hyun	22

## 物質情報からの検索

### ➤ 反応情報へのリンク



各物質下の三角フラスコリンクボタン(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。

Get Reactions

Retrieve reactions for:

- ☐ All substances
- ☒ Selected substances

Limit results by reaction role:

- ☒ Product
- ☐ Reactant
- ☐ Reagent
- ☐ Reactant or reagent
- ☐ Catalyst
- ☐ Solvent
- ☐ Any role

反応ロール(役割)を指定

Get Cancel

1

### ◆ 化学物質検索 (分子式) <REGISTRY ファイル>

SciFinder®

Welcome Taro Kagaku | Sign Out

Explore Substances

Chemical Structure

Markush

Molecular Formula

Substance Identifier

Molecular Formula

C15 H12 O3

Examples:

H4SiO4

H4O4Si

H4SiO4

Search

1

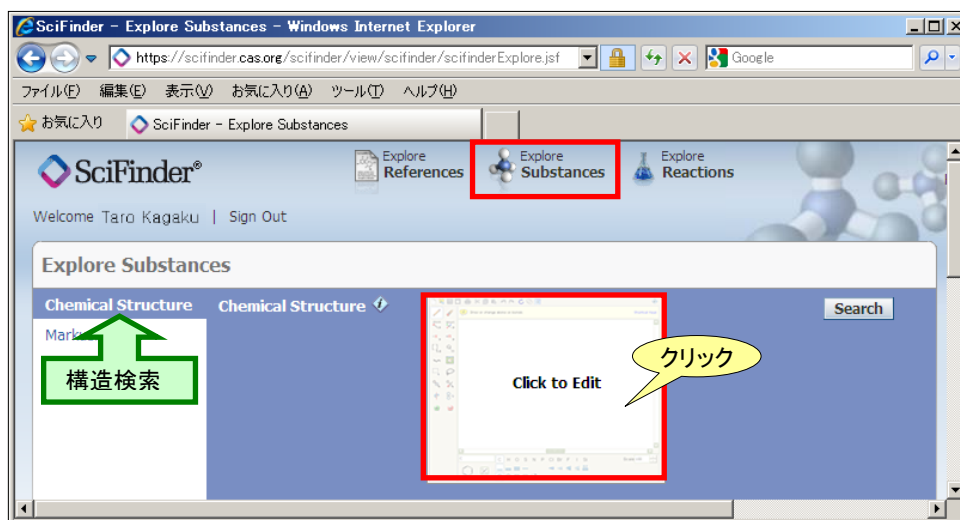
## 化学構造検索

### ◆ 化学物質検索（化学構造式）＜REGISTRY ファイル＞

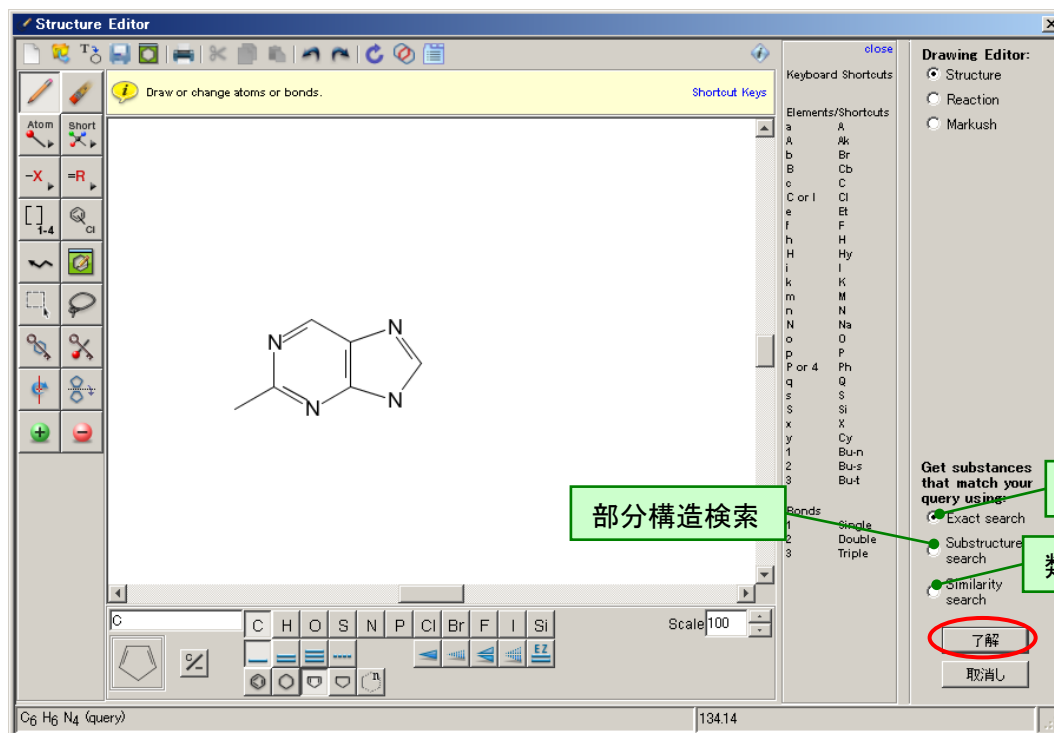


➤ 化学物質を構造から直接検索(塩や混合物, 共重合体などを含む)できます。

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。mol 形式ファイルの読み込みや ChemDraw, ISISDraw からのペーストも可能です。また, SMILES 形式, InChI 形式による化学構造のテキスト表記から構造作図も可能です。以下の例では完全一致検索を選択しています。



- 部分構造検索は, 作図した構造を骨格に持つ物質を網羅的に検索します。ご利用には部分構造検索オプションの契約が必要です。
- 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ます。ご利用には部分構造検索オプションの契約が必要です。

## 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。

SciFinder® - Explore Substances - Windows Internet Explorer

https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/Explore.jsf

Welcome Taro Kagaku | Sign Out

Explore Substances

Chemical Structure

Markush  
Molecular Formula  
Substance Identifier

Search

Search type: ☒ Exact Structure  
☐ Substructure  
☐ Similarity

Show precision analysis

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

限定も可能

- ③ 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。

完全一致でヒットした化学物質

8 Substances 0 Selected

Select All Deselect All Sort by: Relevance (New)

1

2

3

4

5

6

回答件数

クリックしてソートできる  
(20,000 件以下)  
昇順・降順の指定も可能

1 クリックして  
ページあたりの  
表示件数を変更  
できる  
(最大 50 件)

2 クリックして、  
表示カラム数  
を変更できる  
(最大 4 列)

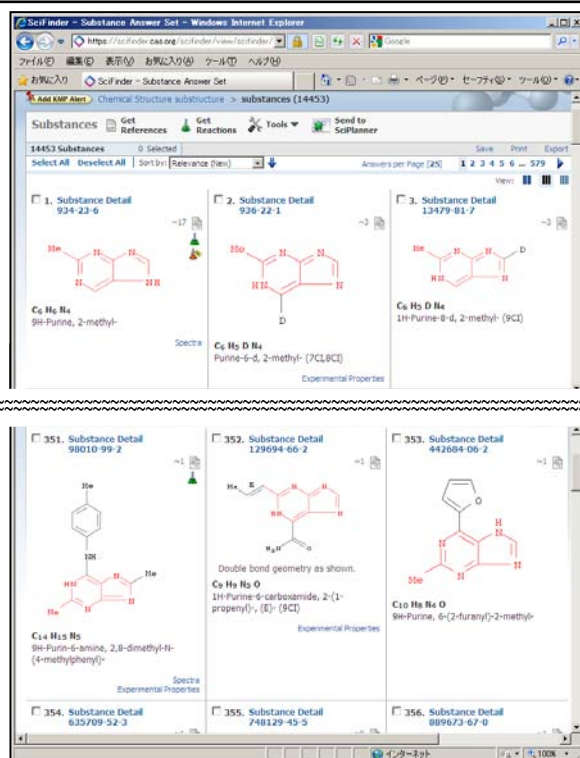
検索結果は、作図した構造に対する類似度順に表示される

## 化学構造検索

### 【部分構造検索を実行した場合】



- Tanimoto アルゴリズムに基づき、作図した構造に対する類似度順に表示します。(一部例外もあります。)
- 「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、物性値、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】



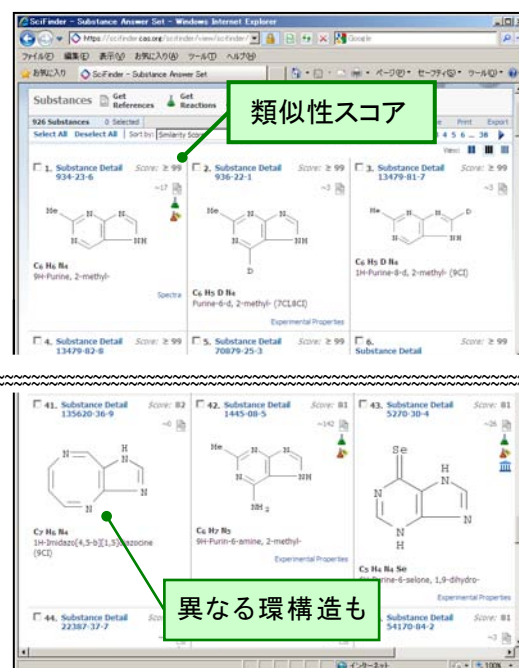
- Tanimoto アルゴリズムに基づいてスコアを計算し、最初にスコアごとの件数を表示します。検索結果の表示は類似性スコアの高い順です。
- 環の大きさや、元素の種類が異なっている場合もヒットしますので、当初想定していなかったような構造が見つかる場合があります。

#### ヒストグラム

Similarity Candidates	Substances
<input checked="" type="checkbox"/> ≥ 99 (most similar)	8
<input checked="" type="checkbox"/> 95-98	10
<input checked="" type="checkbox"/> 90-94	5
<input checked="" type="checkbox"/> 85-89	118
<input checked="" type="checkbox"/> 80-84	52
<input checked="" type="checkbox"/> 75-79	851
<input type="checkbox"/> 70-74	349
<input type="checkbox"/> 65-69	765
<input type="checkbox"/> 0-64 (least similar)	1849

Get Substances

※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。





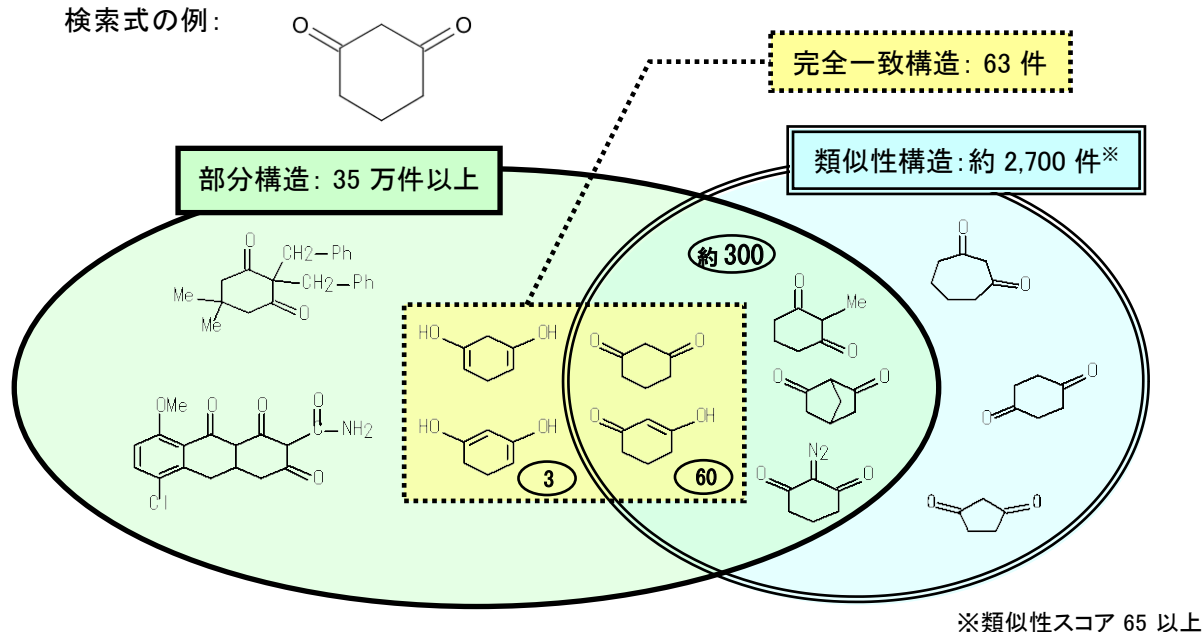
## 化学構造検索

### ➤ 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"> <li>・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)</li> <li>・互変異性体</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・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</li> </ul>
Substructure Search (部分構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> <li>・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)</li> <li>・互変異性体</li> <li>・作図した構造の空いている場所に置換基の付いた物質</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・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)</li> </ul>
Similarity Search (類似性構造検索)	<ul style="list-style-type: none"> <li>・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)</li> <li>・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</li> <li>・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(エチル基を作図した場合メチル基もヒットする)</li> <li>・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 員環が得られることもある)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・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)</li> </ul>

### ➤ 検索タイプ間の関係

検索式の例:



## 化学構造検索

### ■ 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analysis/Refine)

- 各種検索によって得られた物質の回答集合に対して、6 種のデータに基づく解析 (Analysis) や、8 種の観点で絞り込み (Refine) ができます。

**絞込検索**

**解析機能**

**Analysis**

Analyze by:

Bioactivity Indicators (New)

Click bar to view only those substances within the current answer set

Nervous system agents (all) 2444

Antitumor agents (all) 2350

Anti-inflammatory agents (all) 1592

Immune agents (pharmaceutical) 1452

Cardiovascular agents (all) 1433

Anti-infective agents (all) 1329

Receptor agonists (all) 1051

Antidiabetic agents 945

Cytoprotective agents (all) 817

Enzyme inhibitors (all) 258

**Show More**

クリックして観点を選択できます

- Bioactivity Indicators (New)
- Bioactivity Indicators (New)
- Commercial Availability
- Reaction Availability
- Substance Role
- Target Indicators (New)

**Refine**

Refine by:

☒ Chemical Structure **構造式**

☐ Isotope-Containing

☐ Metal-Containing

☐ Commercial Availability

☐ Property Availability

☐ Property Value

☐ Reference Availability

☐ Atom Attachment

**カタログ情報の存在**

**物性情報の存在**

**Chemical Structure:**

Click image to change structure or view detail

Search type: **Substructure**

**Only retrieve substances that:**

☐ Have references

☐ Are commercially available

☐ Are a single component

☐ Are in specific substance classes

☐ Are in specific types of studies

**Refine**

クリックして構造作図

クリックして解析の詳細表示

・解析対象データは最大 20,000 回答

・解析の詳細表示で、頻度順ソートでは最大 500 項目表示

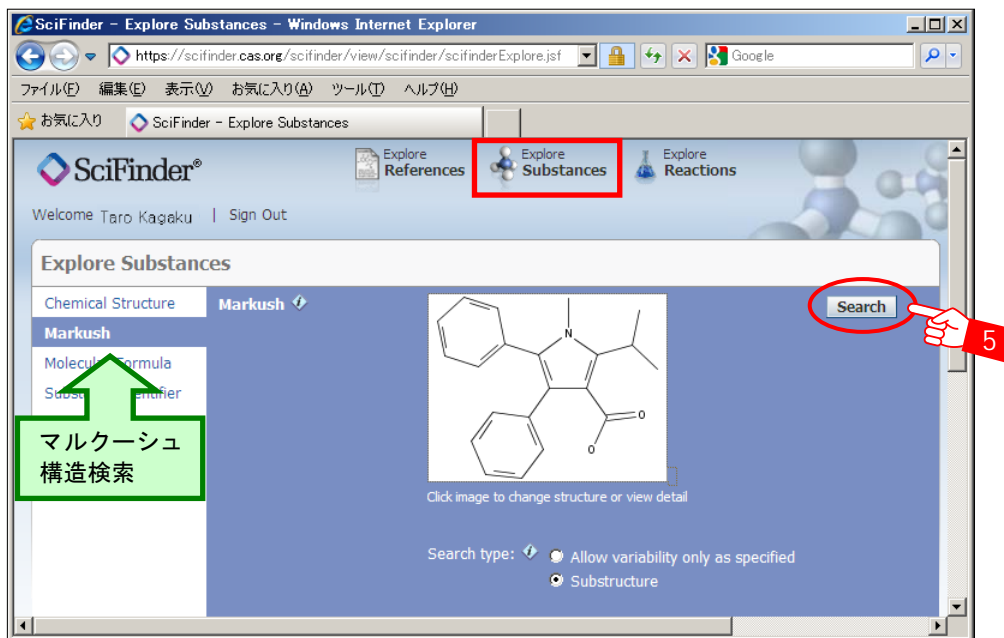
・絞り込み機能では回答の件数に上限はない



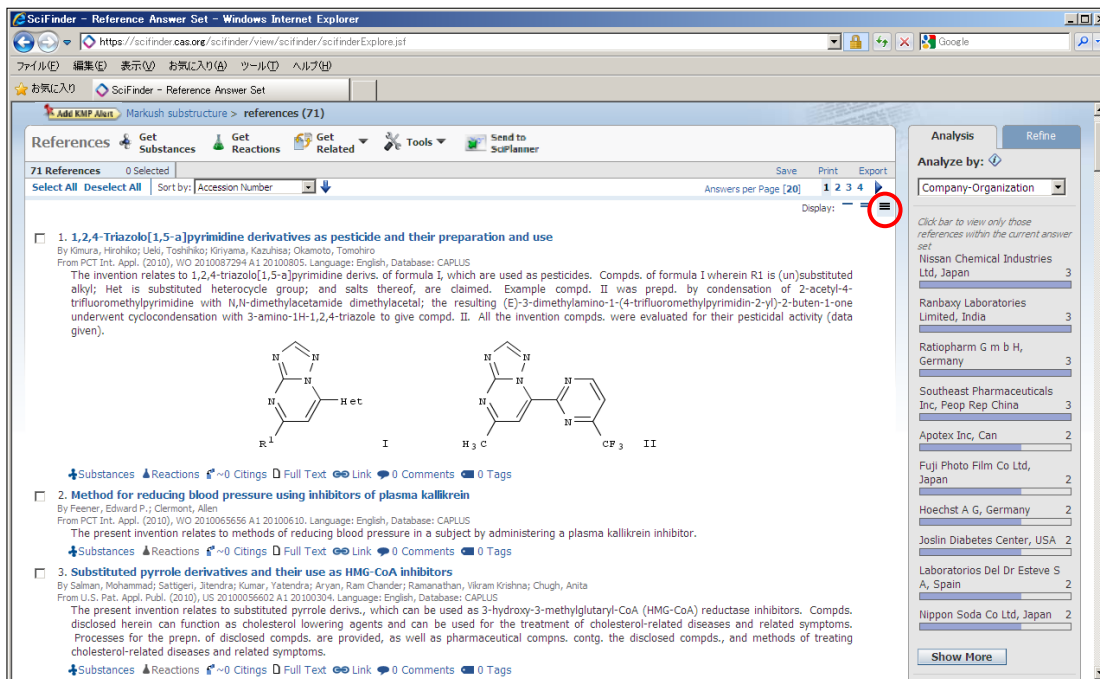
## 化学構造検索

### 【参考】

- マルクーシュ構造検索を使えば、より幅広い特許検索が可能です。この検索では、特許中に記載されている化学構造の一般式(マルクーシュ構造)を対象に検索を行うことができ、従来の構造検索では得られない特許情報が得られます。



検索結果は文献(特許)リストとして表示されます。これらの特許の明細書には、作図した構造を含むマルクーシュ構造が収録されています。抄録を完全表示にすると、構造が表示されることもあります。



- マルクーシュ構造検索の詳細 [http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_markush.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_markush.pdf)

●マルクーシュ構造検索のご利用は、部分構造検索オプションの契約が必要です。

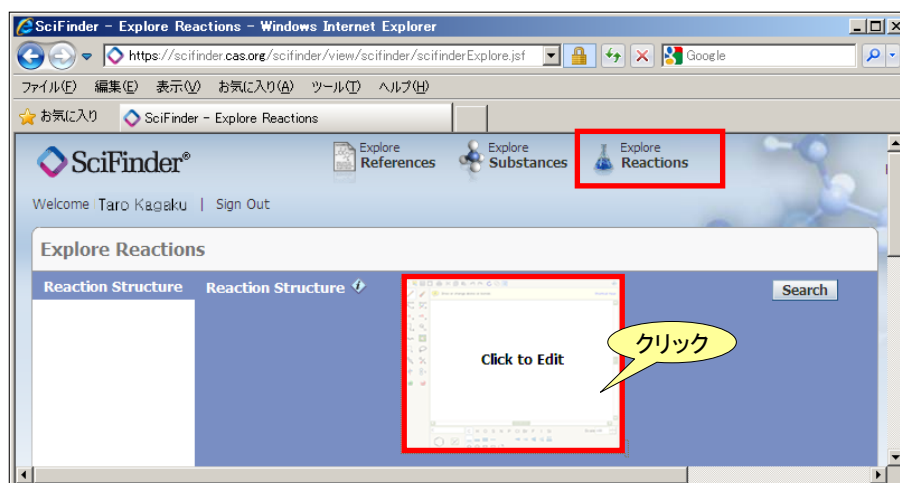
## 化学反応検索

### ◆ 化学反応検索 <CASREACT ファイル>

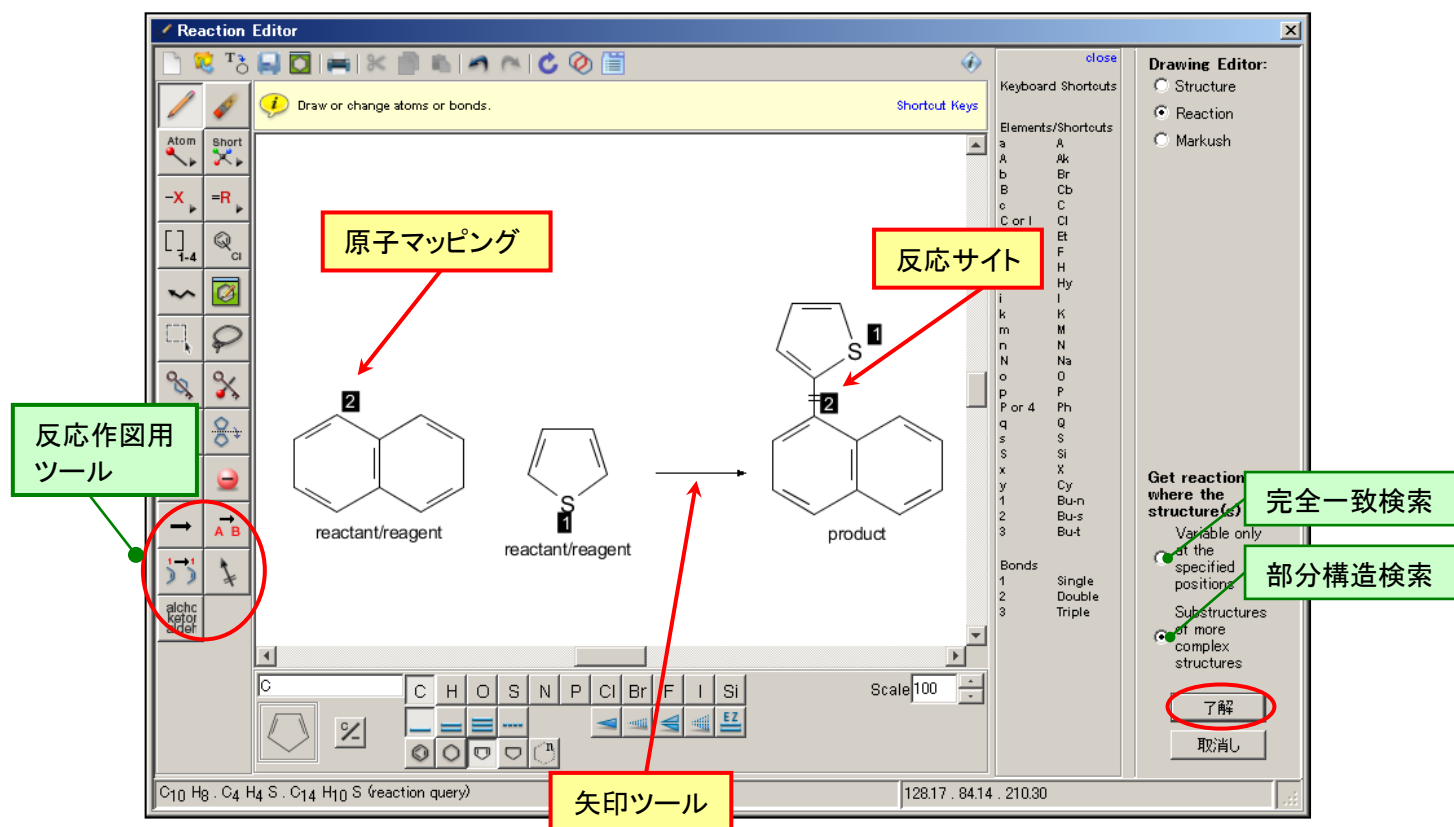


- 化学反応を、生成物、あるいは反応物／試薬を指定し、部分構造で検索できます。
- 反応サイトの指定、反応物と生成物中の原子マッピングにより検索精度を向上できます。
- 反応物、生成物の各々に対して、複数の構造フラグメントを作図することもできます。

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。



反応矢を描き、物質の役割を指定する(反応物、生成物など)

## 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。

- ④ 検索結果が類似度の順に表示されます。“Reaction Detail”リンクをクリックすると詳細情報が参照できます。また、“Overview”, “Experimental Procedure”は、▼をクリックすることで表示・非表示を選択できます。

## 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。

**Reaction Detail**

12. 2 Steps Hover over any structure for more options.

**Step 1**

Stages: 1.1 R:Br<sub>2</sub>, S:CHCl<sub>3</sub>, 45 min, 0°C; rt; 3 h, reflux; 1.2 R:NaOH, S:H<sub>2</sub>O, 6 h, reflux

Notes: Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2

Yield: 87%

**Step 2**

Stages: 2.1 R: Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, S: PhMe, 30 min, 20°C; 2.2 R: K<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>, S: H<sub>2</sub>O, 24 h, 100°C

Notes: Suzuki coupling, Reactants: 1, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2

Yield: 63%

**Source**

Regioselective palladium(0)-catalyzed cross-coupling reactions and metal-halide exchange reactions of tetrahalothiophene: optimization, scope and limitations

Tung, Dang Thanh; Tuan, Dang Thanh; Rasool, Nasir; Villinger, Alexander; Reinkens, Helmut; Fischer, Christine; Langer, Peter

Advanced Synthesis & Catalysis Volume 351

Issue 10

Pages 1595-1609

Journal

2009

**Company/Organization**

Institut fuer Chemie

Universitaet Rostock

Rostock, Germany 18059

**Number of Steps**

2

⑥ 各反応関与物質に付与されたリンクから、物質の詳細や文献、カタログ情報、反応などの情報をさらに検索・表示できます。

**Reaction Answer Set**

301. View Reaction Detail Link

3 Steps Hover over any structure for more options.

CAS Registry Number: 831-28-7

View Substance Detail

Explore by Structure

Synthesize this...

Get Reactions where Substance is a

Get Commercial Sources

Get Regulatory Information

Get References

Export as Image

Export as molfile

Send to SciPlanner

Product

Reactant

Reagent

Reactant/Reagent

Catalyst

Solvent

Any Role

**Overview**

Steps/Stages

1.1 R: s-BuLi, S: THF, S: Me(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>Me, -78°C; overnight, rt

1.2 R: (Me<sub>2</sub>N)<sub>3</sub>P=O, S: THF, 40 h, reflux

2.1 R: TMEDA, R: s-BuLi, S: THF, S: Me(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>Me, 3, Stages: 6, Most stages in

**Single Step** Hover over any structure for more options.

1.1 R: NaH, S: DMF, 0°C; 4 h, rt

1.2 rt; 10 h, rt

Notes: Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2

Complexes based on bis(naphthoxy)thiophene ligands for the polymerization of ethylene and alpha-olefins

By Carpenter, Jean-Francois et al

From PCT Int. Appl., 2009106458, 03 Sep 2009

D Full Text

**Experimental Procedure**

A. Preparation of 2-(methoxymethoxy) naphthalene. To a suspension of 5.0 g of NaH (208.33 mmol) in 150 mL of DMF under argon flow were added 20.0 g of solid 2-hydroxynaphthalene (138.7 mmol) at a temperature of 0 °C, by small portions. The suspension was kept under stirring for 4 h at room temperature, 17.8 g of methoxymethyl chloride (221.2 mmol) were added slowly, and the reaction

**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)

指定した物質を生成物とする反応

## 化学反応検索

### ◆ 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analysis/Refine)

- 反応検索によって得られた反応の回答集合に対して、11 種のデータに基づく解析 (Analysis) や 6 種の観点で絞り込み (Refine) ができます。

解析機能

絞り込み検索

クリックして観点を選択できます

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

クリックして  
解析の詳細表示

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

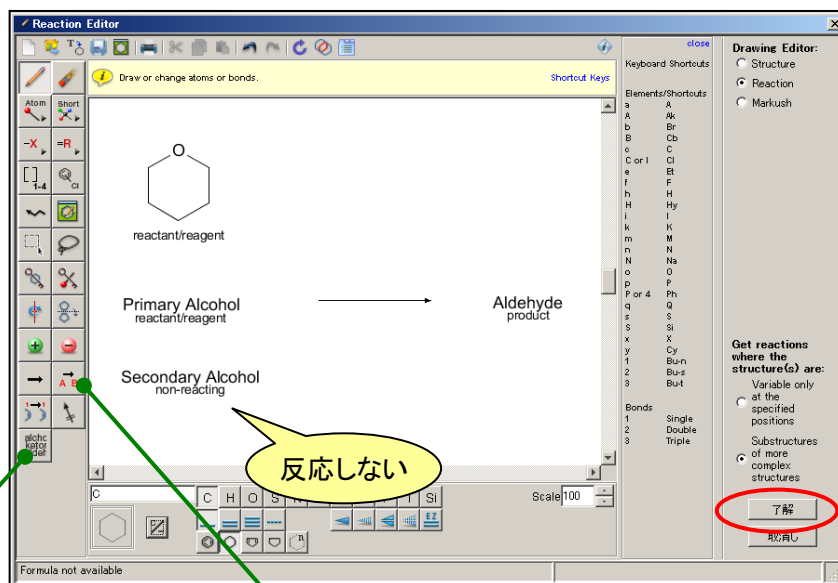
- ・解析対象データは最大 20,000 回答
- ・解析の詳細表示で、頻度順ソートでは最大 1,000 項目表示
- ・絞り込み機能では回答の件数に上限はない



## 化学反応検索

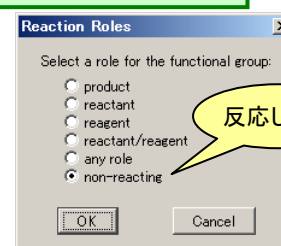
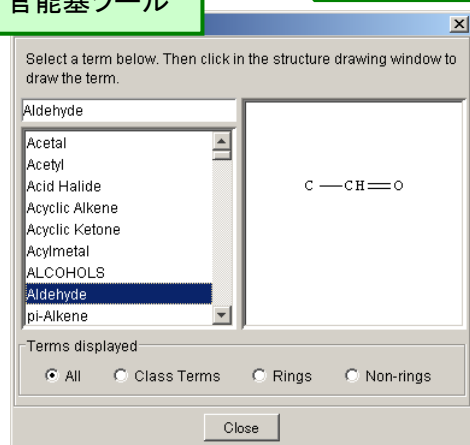
### 【参考】

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

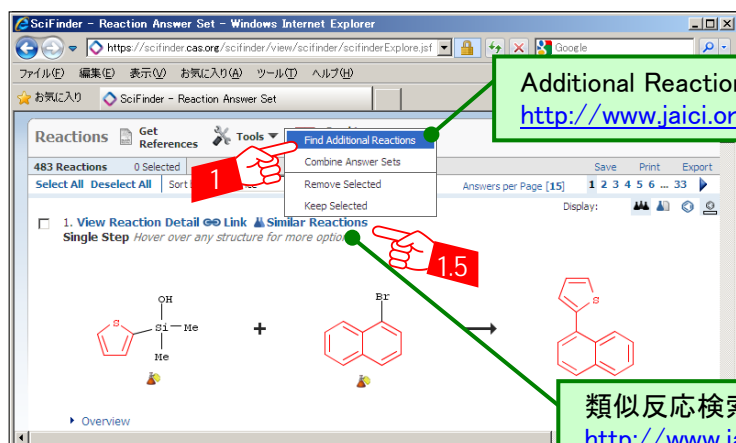


官能基ツール

反応ロールツール



- 一段階反応に対しては類似反応検索が実行できます。また、さらなる合成情報を追加表示する Additional Reactions 機能もあります。詳細は弊協会サイトの資料をご参照ください。



Additional Reactions 機能

[http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_new2010a.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_new2010a.pdf)

類似反応検索機能

[http://www.jaici.or.jp/sci/sfweb\\_2009new.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/sfweb_2009new.pdf)

## 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。

SciFinder - Explore References - Windows Internet Explorer

https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf

SciFinder - Explore References

Welcome Taro Kagaku | Sign Out

Explore References | Explore Substances | Explore Reactions

Research Topic | Author Name | Company Name | Document Identifier | Journal | Patent

Author Name: Ito Takeshi

Search

Look for alternative spellings of the last name

SciFinder - Author Candidates - Windows Internet Explorer

https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf

SciFinder - Author Candidates

Create Keep Me Posted | Author Name "Ito, Takeshi"

Author Name Candidates

25 Authors 5 Selected

Select All Deselect All

Author Name Candidates	References
<input type="checkbox"/> ETO	1
<input type="checkbox"/> ETO T	449
<input type="checkbox"/> ETO T A	4
<input type="checkbox"/> ETO T K	3
<input type="checkbox"/> ETO TAKESHI	16
<input type="checkbox"/> ETO TAKESHI KURT	1
<input type="checkbox"/> ETTO T L	2
<input type="checkbox"/> ITO	18
<input checked="" type="checkbox"/> ITO T	4990
<input type="checkbox"/> ITO T A	3
<input type="checkbox"/> ITO T DAVID	1
<input type="checkbox"/> ITO T I	20
<input type="checkbox"/> ITO T I M	1
<input type="checkbox"/> ITO T K	2
<input type="checkbox"/> ITO T M	62
<input type="checkbox"/> ITO T TAJIMA N	1
<input type="checkbox"/> ITO T U	25
<input type="checkbox"/> ITO T Y	4
<input checked="" type="checkbox"/> ITO TAKESHI	1174
<input type="checkbox"/> ITOH	3
<input checked="" type="checkbox"/> ITOH T	2688
<input type="checkbox"/> ITOH T J	20
<input checked="" type="checkbox"/> ITOH TAKESHI	237
<input type="checkbox"/> ITOU T	124
<input checked="" type="checkbox"/> ITOU TAKESHI	13

Get References

可能性のあるものをすべてをチェック

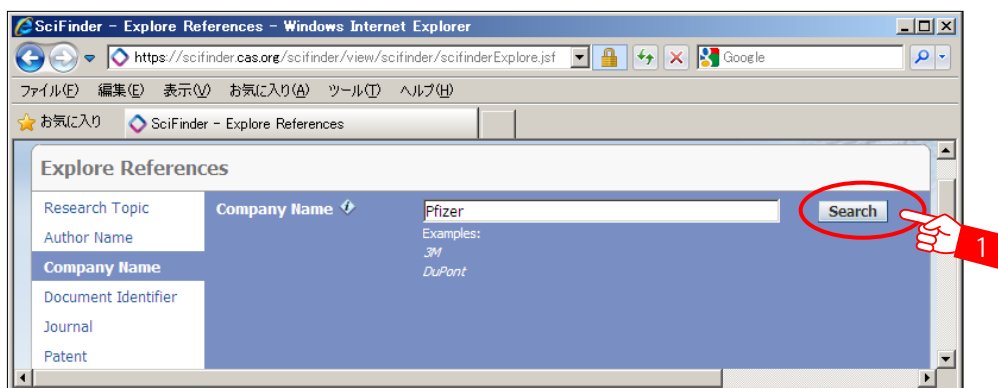
\* 検索結果のノイズを減らすために、著者名検索を行った後、所属機関名等で絞り込みを行うことをお勧めします

## その他の検索

### ◆ 会社名(大学名)検索



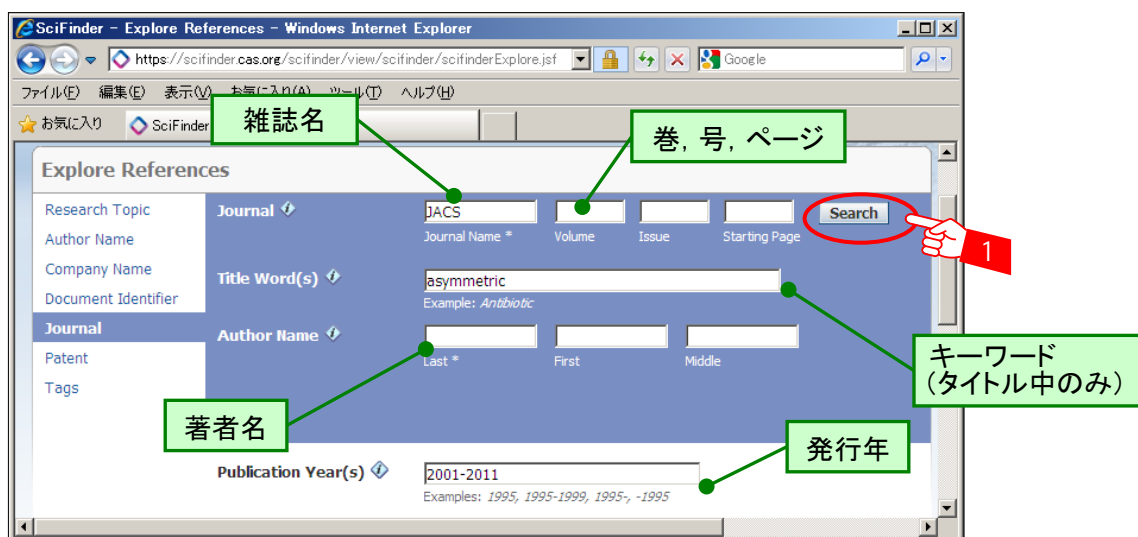
- 著者所属機関名, 特許出願人名に含まれる単語の組み合わせで, 文献を検索することができます。



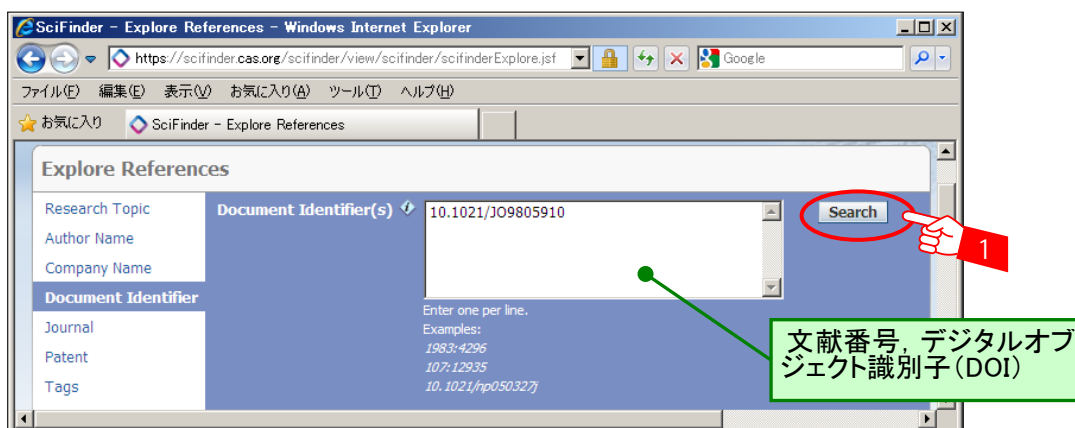
### ◆ 文献情報からの検索



- 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。



- 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には, 雑誌名で Analysis することで除けます。

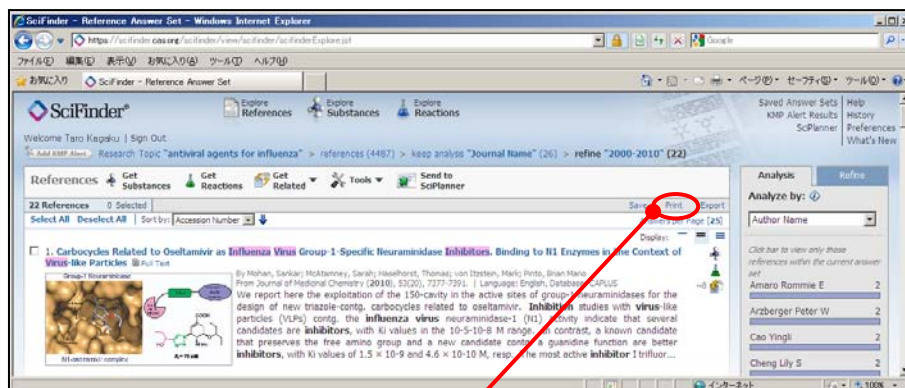


## 回答の印刷

### ◆ 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) PDF 形式で出力したファイルを印刷するため, PDF 閲覧ソフトが必要です。

### 印刷例 (文献)



**Print**

**Print to PDF:**

☒ All  
☐ Selected  
☐ Range

Example: 2-20

**Format:**

☐ Summary without abstracts  
☐ Summary with partial abstracts  
☒ Summary with full abstracts  
☐ Detail (full record)

**Title:**

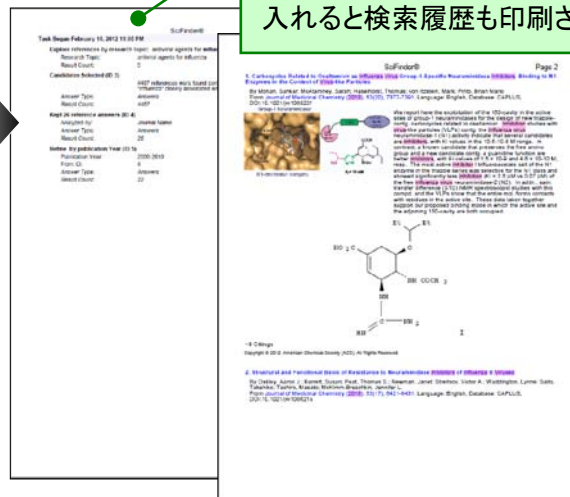
**Include:**

☒ Task History  
☐ Tags  
☐ Comments

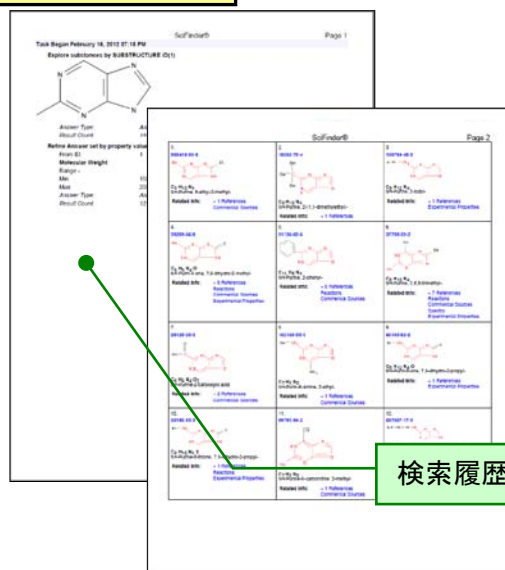
**検索履歴**

**Print** **Cancel**

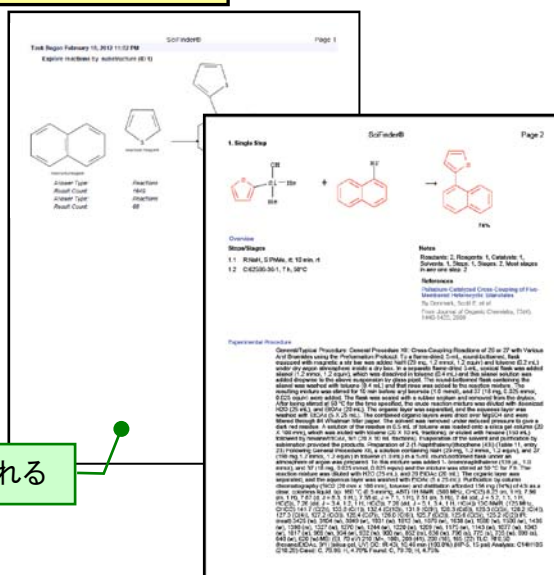
Task History にチェックを入れると検索履歴も印刷される



### 印刷例 (物質)



### 印刷例 (反応)



検索履歴も印刷される

## 回答の保存

### ◆ 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 (企業ユーザ 100 集合/ID, 大学ユーザ 20 集合/ID 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。 一定時間操作しなかった場合、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

Save This Answer Set

Save:

- ☒ All answers
- ☐ Only selected answers

Title: \*

Influenza patents

Description:

OK Cancel

### ● 回答の呼び出し

すべての保存回答

クリックして再現

最新 10 件

クリックして、各集合の情報共有も可能 (関連項目 → p.23).

Reference Answer Set Details	Date Saved
20110215Reaction (13) Reaction Structure structure variable only at specified positions > reactions (15) > get references (13)	Feb 15, 2011
sample (13473) Substance Identifier "7777-77-7; 100-01-6" > substances (2) > get references (13473)	Feb 15, 2011
ポリ乳酸の精製 (3526) Substance Identifier "polylactic acid" > substances (1) > 26100-51-6 > get references (12949) > refine "Journal" (3526)	Dec 16, 2010
cinnamic acid toxicity (84) Chemical Structure exact > substances (1018) > refine "exact" (71) > get references (84)	May 28, 2010
sunscreen ref (99)	May 28, 2010



## 回答の保存

保存方法	② SciFinder Web 形式 <a href="#">Export</a>	③ ダウンロード <a href="#">Export</a>
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, テキスト形式 (RTF, コンマ区切り, タグつき), RIS 形式など
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 (Summary 形式) ※ 100 件 (Summary 形式以外) ※
利用の注意	保存した回答は最小単位の同一研究グループ内のみで共有可能	保存した回答は最小単位の同一研究グループ内のみで共有可能
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, 個人あたりの保存件数が 5,000 件を超えないようにしてください.

### ● 回答の保存

Export

For:

Citation Manager

Offline review

Saving locally

Details:

File Name: \*

Reference\_03\_27\_2012\_180002

Format:

Include:

ファイル名は半角英数字のみ(日本語不可)

### ● 回答の呼び出し (SciFinder Web 形式)

Import Answer Set

File Name:

C:\SF2010\influenza patents.akx

Import

Only .akx file format is supported.

OK Cancel

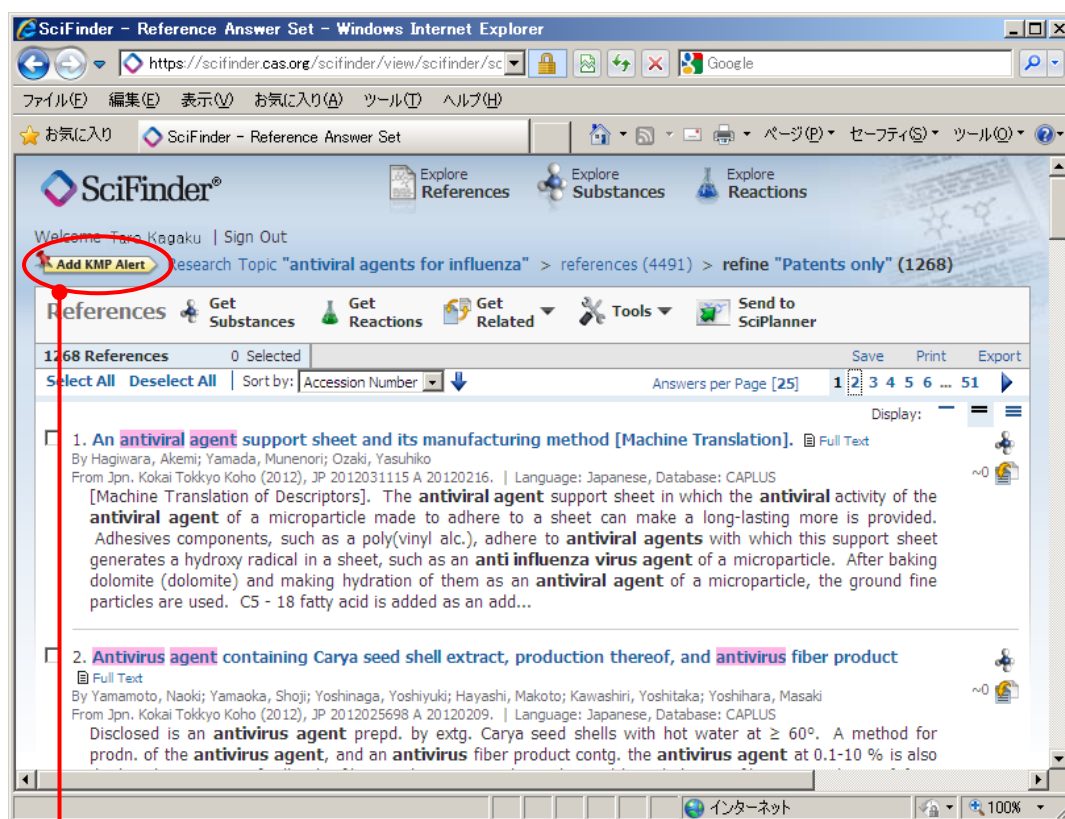
クリックしてファイルを指定

## 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書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簡単に入手することができます。



**Create Keep Me Posted Profile**

**Title:** \*  
antiviral agents for influenza

**Description:**  
[Text area]  
Characters Remaining: 1024

**Duration**  
Expires On: Feb 17, 2013 [Change](#)

**Frequency**  
Send updates once every

☐ Exclude previously retrieved references.

**Search Strategy:**

1. Explore references by research topic: **antiviral agents for influenza**  
**Candidates Selected:**  
References which contain the two concepts "antiviral agents" and "influenza" closely associated with one another
2. Reference refine by document type: **Patents only**

**クリックして、アラート検索終了日を指定(1年以内)**

**実行頻度の指定**

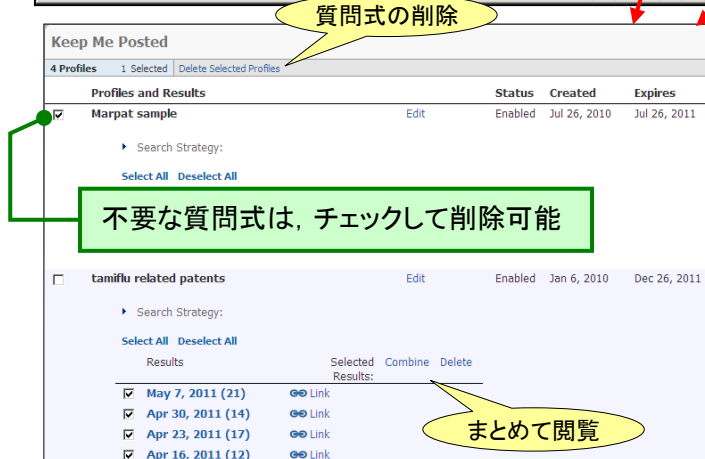
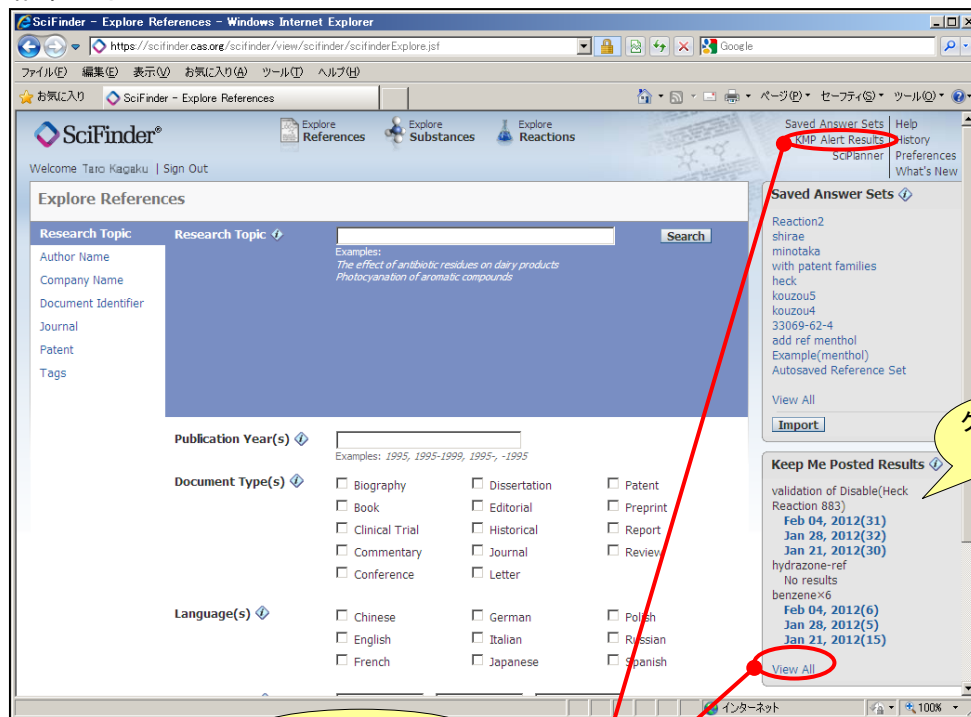
**Create**

チェックを入れると、すでに得られた文献または物質は、情報が更新されても新しい回答には含まれない

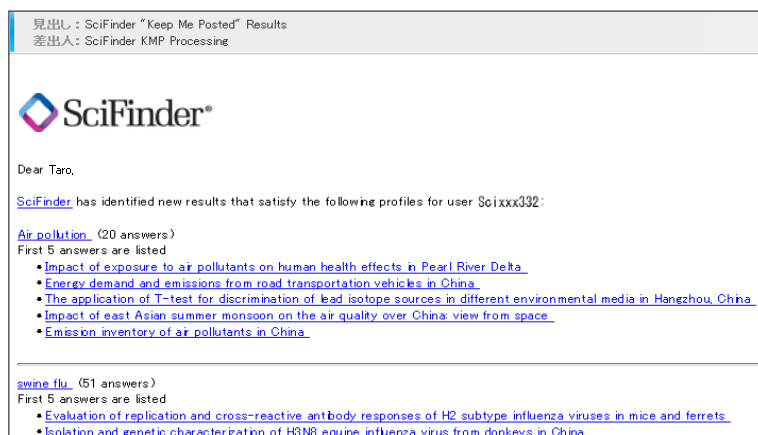
- 実行頻度は毎週または毎月です。
- 自動で検索実行された際に、ヒット件数をメールで受信できます（ゼロ件の時は配信なし）。
- メールは、ID 取得時の登録アドレスに配信されます。
- Create Keep Me Posted ボタンがクリックできない回答集合では質問書登録はできません。

## Keep Me Posted 機能

### ● 結果の呼び出し



### ● 受信メールサンプル (HTML メールを閲覧できるメールソフトでは最新5件分のタイトルも配信)



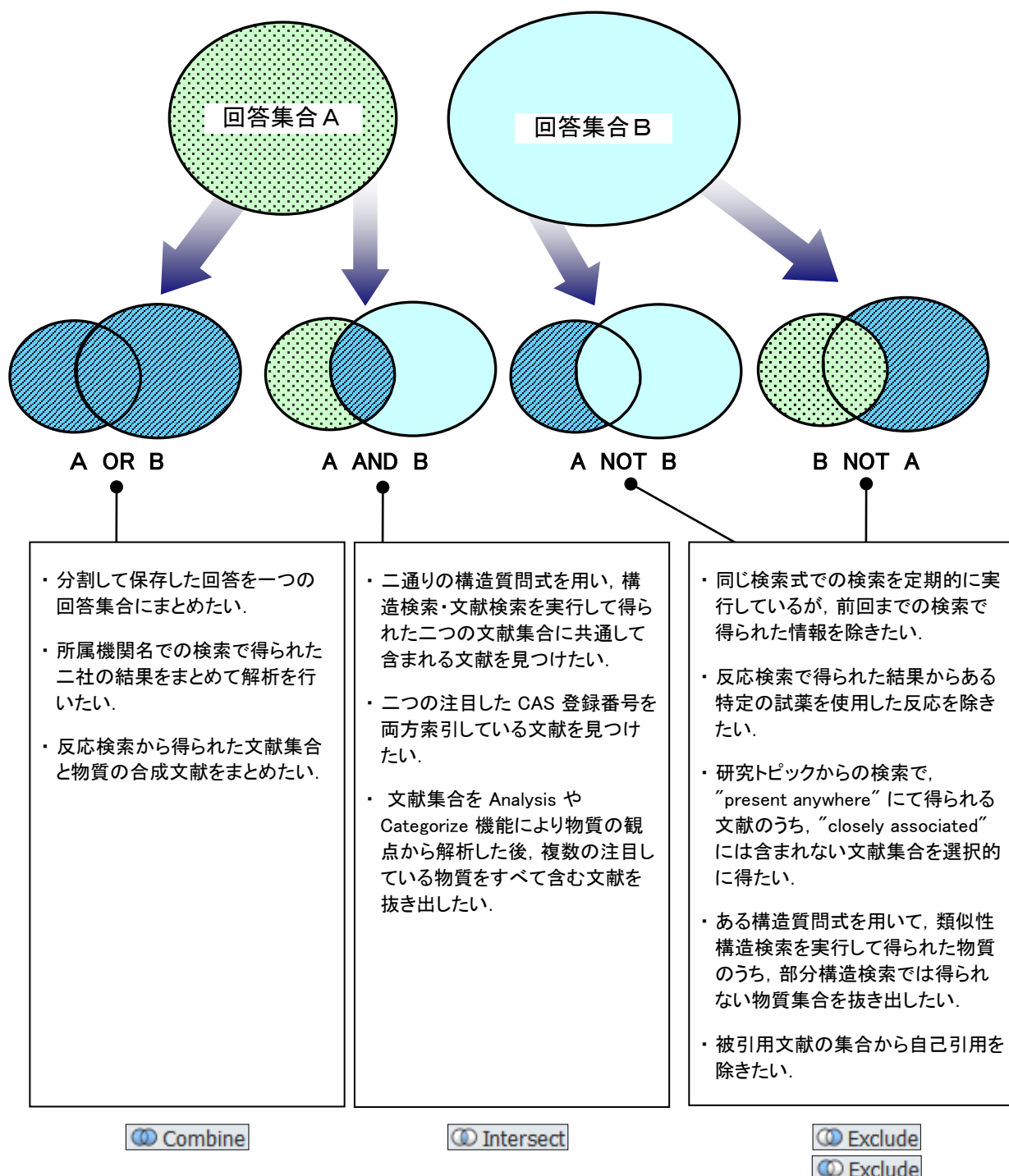
➤ Keep Me Posted 機能の詳細

[http://www.jaici.or.jp/sci/sfweb\\_kmp.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/sfweb_kmp.pdf)

## Combine 機能

### ◆ Combine 機能

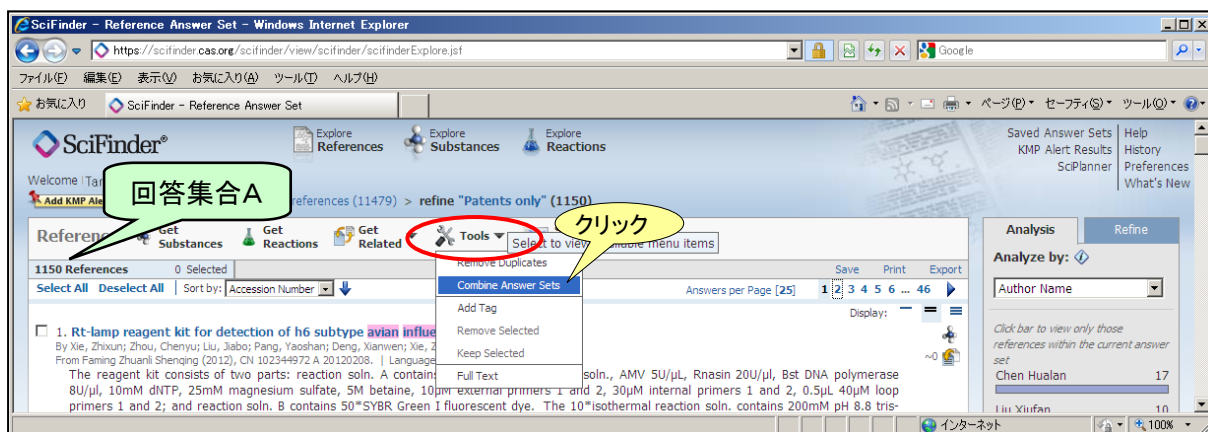
- SciFinder で得られた回答集合同士を演算することができます。この機能を利用することにより、いくつか分割して保存した回答を一つにまとめたり、以前得られた結果を除き、新たに得られた情報のみを見ることができるようになります。



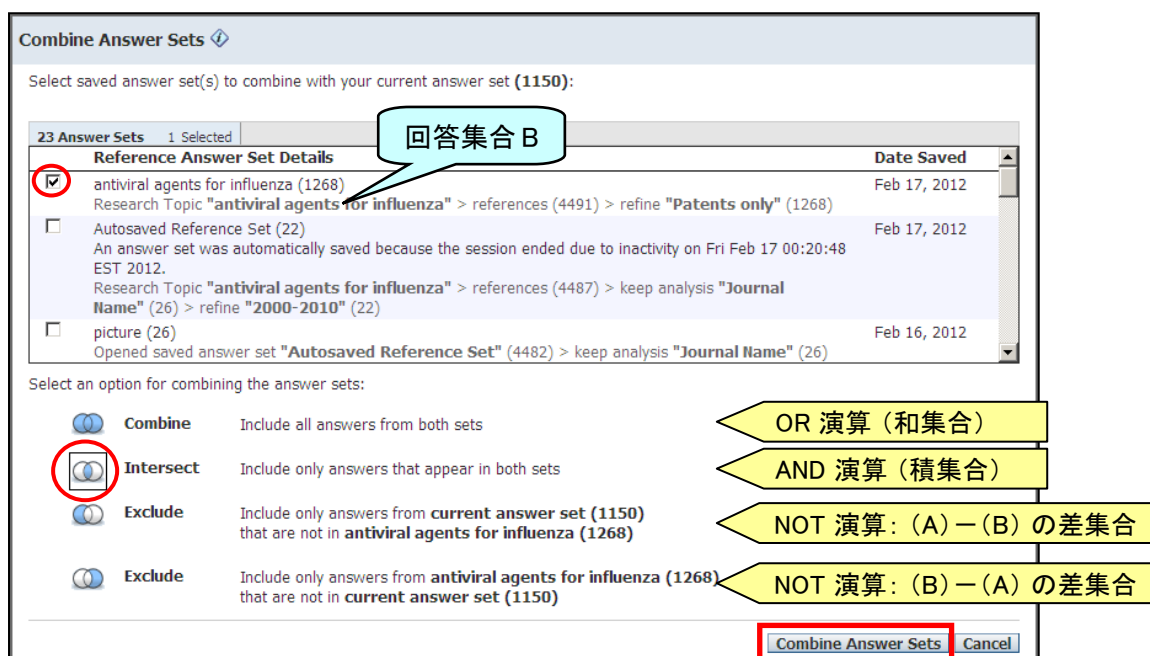
注) 演算できる回答は物質レコードの集合同士、文献レコードの集合同士、反応レコードの集合同士に限られます。

## Combine 機能

- ① 組み合わせたい回答の集合を、あらかじめサーバへ保存します(→ p.41)。
- ② 画面上の「Combine 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にチェックを入れ、実行したい演算のタイプを選択し、「Combine Answer Sets」をクリックします。複数の集合を選択することも可能です。



- ④ 演算結果が表示されます。このあと、絞り込みや解析なども可能です。



- ・ 検索時のハイライトは反映されない
- ・ 演算後の集合の Keep Me Posted 登録は不可
- ・ 類似性構造検索のスコアは表示されない
- ・ 保存した回答どうしの演算も可能



## Bioactivity Indicator, Target Indicator

### ◆ Bioactivity Indicator, Target Indicator

- Bioactivity Indicator, Target Indicator の情報を用いることにより、物質の生物活性に関する文献調査や、物質回答全体の生物活性に関連する傾向、および作用する受容体や酵素の傾向が把握できます。

CAS Registry Number: 28911-01-5  
C<sub>17</sub>H<sub>12</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>4</sub>  
4H-[1,2,4]Triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-chlorophenyl)-1-methyl-  
4H-s-Triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(o-chlorophenyl)-1-methyl- (8CI); 8-Chloro-1-methyl-6-(o-chlorophenyl)-4H-s-triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine; D II-18-2; Halcion; Novodorm; Songar; Triazolam; U 33030

~1,742 References

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative	✓	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓	✓	✓	✓
React	✓	✓	✓	✓
Uses	✓	✓	✓	✓

**Bioactivity Indicators**

Category	References
Nervous system agents (all) >> Hypnotics and Sedatives	149
Nervous system agents (all) >>> Antidepressants	47
Nervous system agents (all) >>>> Antipsychotics	27
Nervous system agents (all) >>>>> Anxiolytics	64

**Target Indicators**

Category	References
Enzymes (all) >>> Monoamine oxidase	13
Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450	27
Hemoproteins (all) >>>> Cytochrome P 450 3A4	38
Receptors (all) >>>>> GABAA receptors	48
Receptors (all) >>>>>> 5-HT receptors	1
Receptors (all) >>>>>>> Benzodiazepine	43

References

48 References 0 Selected

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

1. Anticonflict and reinforcing effects of triazolam + pregnanolone combinations in rhesus monkeys [Full Text]  
By Fischer, Bradford D.; Rowlett, James K.  
From Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics (2011), 337(3), 805-811. | Language: English, Database: CAPLUS  
Combinations of pos. modulators of benzodiazepine and neuroactive steroid sites on GABAA receptors were shown to act in an additive or supra-additive manner depending on the endpoint under study, but they were not assessed on exptl. induced conflict or drug self-administration. The present study examd. the interactive effects of the benzodiazepine triazolam and the neuroactive steroid pregnanolone in a rhesus monkey conflict procedure (a model of anxiolysis) and on a progressive-ratio schedule of drug self-administration (a model of abuse potential). Both triazolam and pregnanolone decreased...

2. Physiological doses of progesterone potentiate the effects of triazolam in healthy, premenopausal women [Full Text]  
By Babalonis, Shanna; Lile, Joshua A.; Martin, Catherine A.; Kelly, Thomas H.  
From Psychopharmacology (Heidelberg, Germany) (2011), 215(3), 429-439. | Language: English, Database: CAPLUS  
Rationale: Gender plays a crit. role in the effects of drugs and drug abuse liability. Biol. factors, including ovarian hormones, may contribute to gender differences in drug abuse. Predlin. and some clin. research suggests that progesterone and its metabolites have activity at the GABAA receptor and may

**Bioactivity Indicator** : 該当の物質が有する可能性の高い生物活性を表すキーワード  
(例 : 抗癌剤, 血小板凝集阻害剤)

**Target Indicator** : 該当の物質が作用する可能性の高い受容体や酵素を表すキーワード  
(例 :  $\alpha$ -アミラーゼ, ドーパミン受容体)

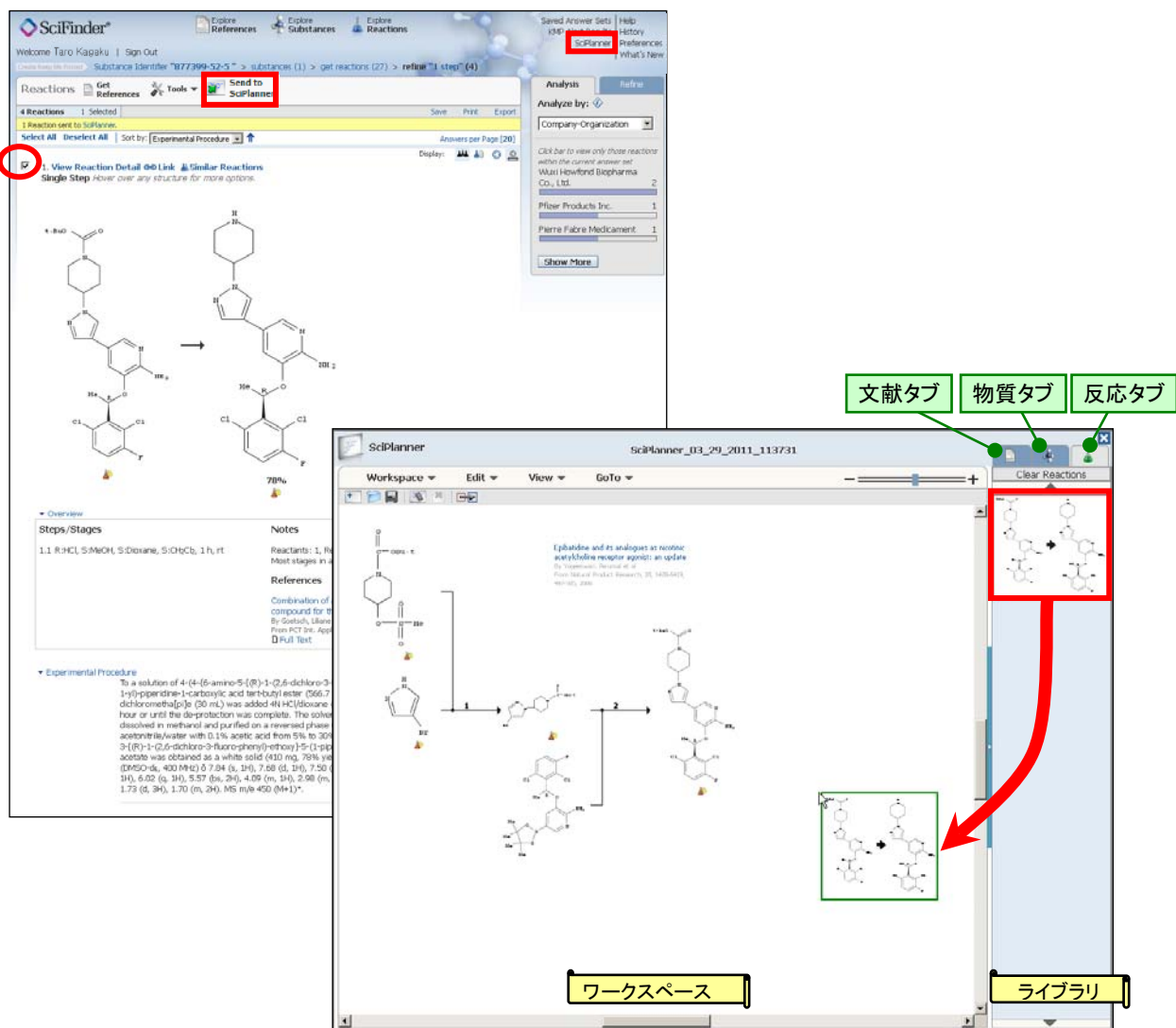
※ Bioactivity Indicator, Target Indicator は CAS 作成の文献情報の索引を元に作成されています。

- Bioactivity Indicator, Target Indicator の詳細 <http://www.jaici.or.jp/sci/ref/bioact.pdf>

## SciPlanner 機能

### ◆ SciPlanner (サイプランナー)機能

- SciFinder で得られた文献・物質・反応検索結果を一画面上にわかりやすく取りまとめられます。同じ物質に関わる複数の反応を一つの反応スキームとして取りまとめたり、配置した情報からさらなる検索を行うことも可能です。



- ・ Internet Explorer 6 では利用できない
- ・ ライブラリ内に保管できるオブジェクト数は 100
- ・ 1 つのワークスペースに配置できるオブジェクト数は 200
- ・ 1 人が保管できる SciPlanner プロジェクト数は 20
- ・ 1 つの物質が関与できる反応数は 6

### ➤ SciPlanner 機能の詳細

[http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_201104.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201104.pdf)

## APPENDIX (収録対象誌例)

### ◆ SciFinder [CAplus ファイル] 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

### ➤ 主要雑誌の一覧

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

# APPENDIX (CAセクション一覧表)

➤ 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	哺乳動物ホルモン	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 Biochemistry
	11	植物生化学	Plant Biochemistry
	12	非哺乳類生化学	Nonmammalian Biochemistry
	13	哺乳類生化学	Mammalian Biochemistry
	14	哺乳類病理生化学	Mammalian Pathological Biochemistry
	15	免疫化学	Immunochemistry
	16	発酵, 工業生化学	Fermentation and Bioindustrial Chemistry
	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 個以上)	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	Terpenes and Terpenoids
	31	アルカロイド	Alkaloids
	32	ステロイド	Steroids
	33	炭水化物	Carbohydrates
高分子化学	34	アミノ酸, ペプチド, タンパク質	Amino Acids, Peptides and Proteins
	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
	41	染料, 蛍光増白剤, 写真, 増感剤	Dyes, Fluorescent Brighteners and Photographic Sensitizers
	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	工業炭化水素	Industrial Carbohydrates
	45	工業有機化学製品, 皮革, 脂肪, ロウ	Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats and Waxes
応用化学・化学工学	46	界面活性剤, 洗剤	Surface-Active Agents and Detergents
	47	装置, 工場設備	Apparatus and Plant Equipment
	48	単位操作, プロセス	Unit Operations and Processing
	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, Derivative and Related Products
	52	電気化学的, 放射およ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
物理化学・無機化学・分析化学	63	薬剤	Pharmaceuticals
	64	薬剤分析	Pharmaceutical Analysis
	65	物理化学一般	General Physical Chemistry
	66	界面化学, コロイド	Surface Chemistry and Colloids
	67	触媒作用, 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	電気的現象	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		
	Internet Explorer	Firefox	Safari
Windows XP Professional (SP1 以降)	7.0・8.0	3.6・4.0・5.0 6.0・7.0・8.0 9.0・10.0	—
Windows Vista (Business, Enterprise, Ultimate)	7.0・8.0・9.0		—
Windows 7	8.0・9.0		—
Mac OS X 10.5(10.5.8 以降)	—		4.0・5.0
Mac OS X 10.6(10.6.2 以降)	—		4.0・5.0・5.1
Mac OS X 10.7	—		5.1

- ・ Java および Java スクリプトの有効化  
(Java プラグイン(Java Runtime Environment (JRE))バージョン6 推奨)  
<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 7・8・9 共通設定
ActiveX コントロールとプラグインの実行	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
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	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
バイナリビヘイビアとスクリプトビヘイビア	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	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	無効

### ◆ 利用サポート

- ・ SciFinder の利用上、ご不明な点がございましたら、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（連絡先は表紙をご覧ください）。

### ◆ 参考

- ・ SciFinder ニュースレター <http://www.jaici.or.jp/sci/sfnews/index.php>
- ・ 自習用教材 (SciFinder e-Learning) <http://www.jaici.or.jp/sci/elearning/index.html>
- ・ エラーへの対処法 [http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_trouble.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_trouble.pdf)