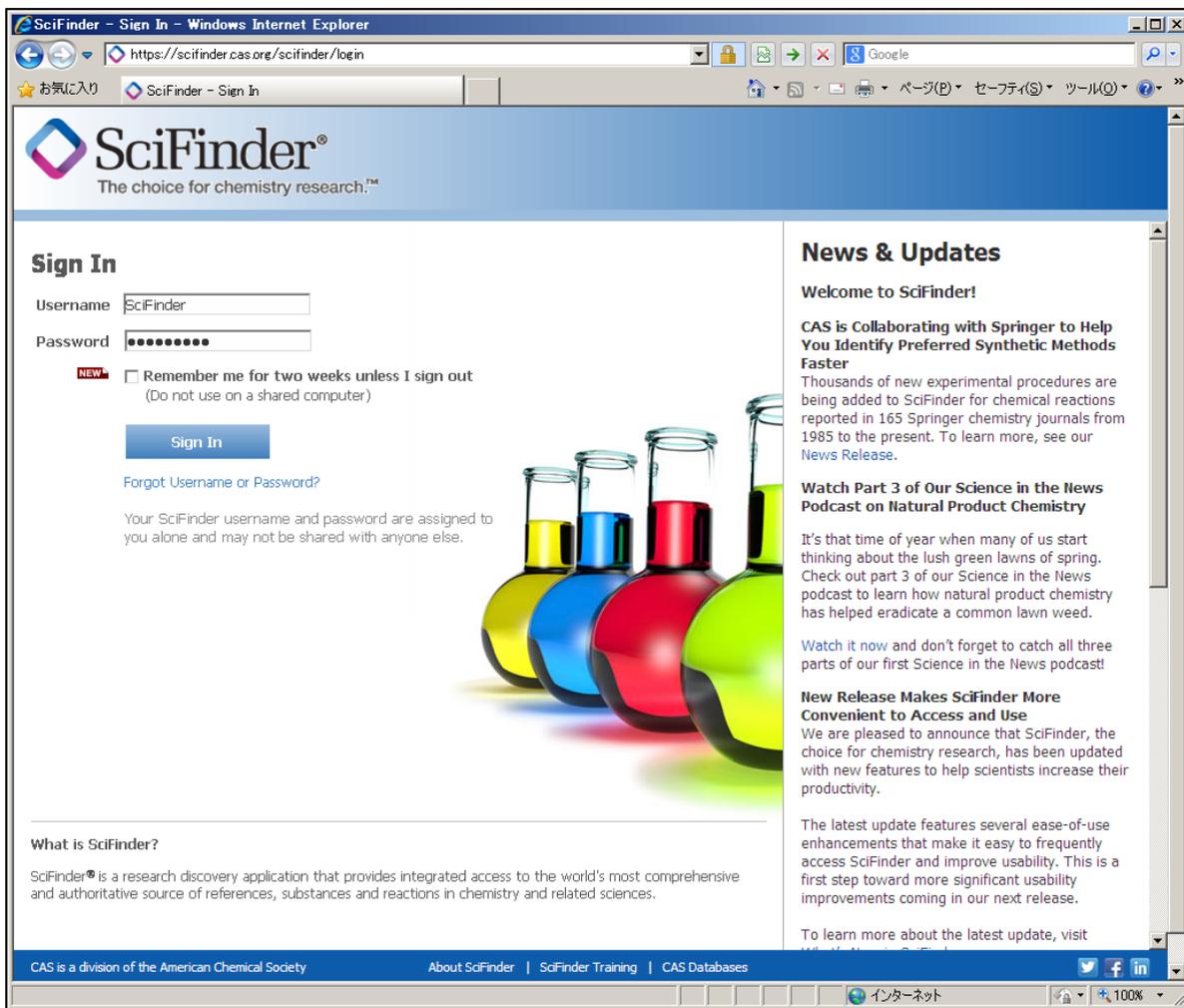




# SciFinder<sup>®</sup>

## 検索ガイド

2014年3月



**Sign In**

Username:

Password:

Remember me for two weeks unless I sign out  
(Do not use on a shared computer)

**Sign In**

[Forgot Username or Password?](#)

Your SciFinder username and password are assigned to you alone and may not be shared with anyone else.

**News & Updates**

**Welcome to SciFinder!**

**CAS is Collaborating with Springer to Help You Identify Preferred Synthetic Methods Faster**

Thousands of new experimental procedures are being added to SciFinder for chemical reactions reported in 165 Springer chemistry journals from 1985 to the present. To learn more, see our [News Release](#).

**Watch Part 3 of Our Science in the News Podcast on Natural Product Chemistry**

It's that time of year when many of us start thinking about the lush green lawns of spring. Check out part 3 of our Science in the News podcast to learn how natural product chemistry has helped eradicate a common lawn weed.

Watch it now and don't forget to catch all three parts of our first Science in the News podcast!

**New Release Makes SciFinder More Convenient to Access and Use**

We are pleased to announce that SciFinder, the choice for chemistry research, has been updated with new features to help scientists increase their productivity.

The latest update features several ease-of-use enhancements that make it easy to frequently access SciFinder and improve usability. This is a first step toward more significant usability improvements coming in our next release.

To learn more about the latest update, visit [What's New in SciFinder](#).

CAS is a division of the American Chemical Society | [About SciFinder](#) | [SciFinder Training](#) | [CAS Databases](#)

<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**<sup>®</sup>

A division of the American Chemical Society

# 目次

◆ SciFinder の概要	2
◆ SciFinder が提供する情報	3
◆ SciFinder の検索全体像	5
◆ レコード例	
➤ 文献情報 (CAplus ファイル)	6
➤ 物質情報 (REGISTRY ファイル)	7
➤ 化学反応情報 (CASREACT ファイル)	9
➤ カタログ情報 (CHEMCATS ファイル)	10
➤ 既存化学物質台帳情報 (CHEMLIST ファイル)	11
➤ 文献情報 (MEDLINE ファイル)	12
◆ SciFinder の検索	
➤ SciFinder へのアクセス	13
➤ SciFinder の検索初期画面	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
- 文献回答の絞り込み・解析 (Analyze/Refine)	19
- Categorize 機能	21
- 文献回答からの関連情報抽出	22
- 引用情報の検索	23
- 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	25
➤ 化学物質検索 (分子式, 物性値)	26
➤ 化学構造検索	27
- 部分構造検索, 類似性構造検索	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
- 物質回答の絞り込み・解析 (Analyze/Refine)	31
- 参考 (マルクーシュ構造検索)	32
➤ 化学反応検索	33
- 反応回答の絞り込み・解析 (Analyze/Refine)	36
- 参考 (「反応しない官能基」の指定)	37
- 参考 (類似反応検索, Additional Reactions)	37
➤ その他の文献検索	38
- 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 Alert (アラート検索)	43
➤ Combine 機能	45
➤ Bioactivity Indicator, Target Indicator	47
➤ SciPlanner	48
◆ APPENDIX	
➤ 収録対象誌例	49
➤ CA セクション一覧表	50
◆ SciFinder の利用環境	51
◆ エラーへの対処法	51
◆ 利用サポート	51

## SciFinder の概要

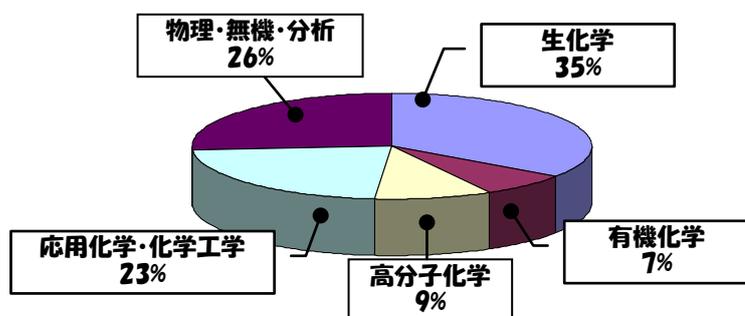
### SciFinder® とは？

- ・CAS 登録番号を持つ**全物質**を収録した**世界最大の物質・文献・反応データベース**
- ・化学構造からも物質検索可能  
→ 網羅性の高い検索が容易！
- ・化学を中心とした**医薬・生化学・物理・工学分野等の情報を収録**  
→ 幅広い分野の情報を入手！
- ・情報の更新は**毎日**  
→ 研究テーマの選択～成果発表まで、常に最新情報を入手！
- ・**研究者向けに開発された情報検索ツール**  
→ 使いやすいインターフェースで効率的な検索が可能！

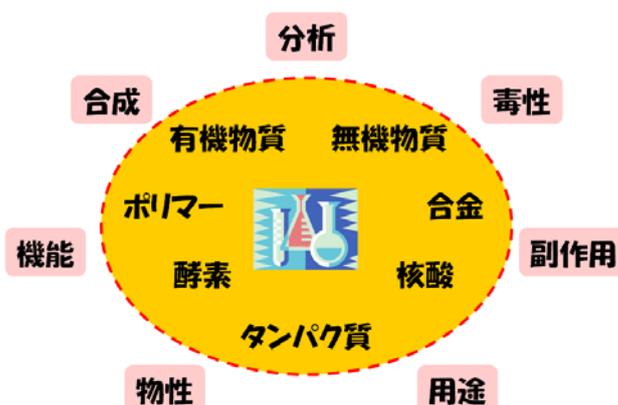
### ◆得られる主な情報



### ◆文献の収録分野 (CAplus)



### ◆検索対象となる分野の例



# 物質科学分野の世界標準ツール！

## 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。

(2014 年 2 月現在)

情報の種類	収録情報
文献情報	1808 年以降の 3,800 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 42 万件以上の特許由来の、100 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 4,700 万件以上の物質情報 ・8,100 万件以上の化学物質(有機物・無機物・ポリマーなど)の情報 ・6,700 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(5,700 万件以上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(1,350 万件以上の反応)
試薬・化成品カタログ情報	約 900 社から発行された 1,000 種、7,300 万件以上の試薬・化成品のカタログ情報 [CHEMCATS ファイル]
既存化学物質リストの情報	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、中国の既存化学物質リストや規制化学物質リストの情報 [CHEMLIST ファイル]
医学文献情報	1946 年以降の 2,300 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 1,500 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/content/references/corejournals>

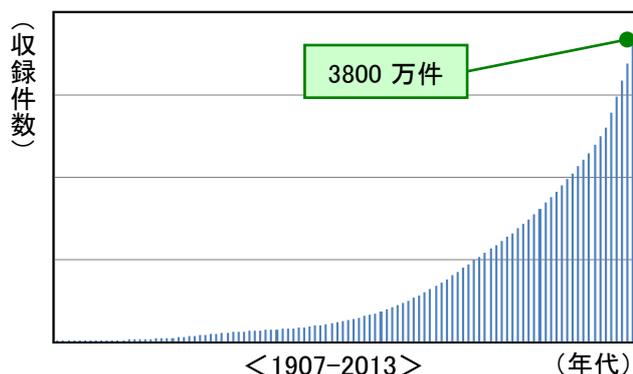
なお、この 1,500 誌から採録された情報が当データベースの約 50% を占めています。

※<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 に掲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。

## SciFinder が提供する情報

### ◆収録文献数の変遷 (CAplus)



### ◆収録物質数の変遷 (REGISTRY)



## SciFinder ラーニングガイド

### ◆資料類

- SciFinder 検索ガイド(本資料)
- SciFinder 構造作図
- 新機能関連の資料等 ([http://www.jaici.or.jp/sci/sci\\_tecdata.htm](http://www.jaici.or.jp/sci/sci_tecdata.htm))



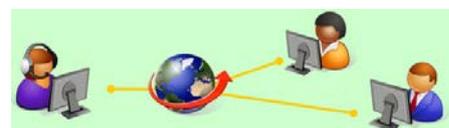
### ◆SciFinder 講習会

- 講師が出張し、説明致します。化学情報協会までご相談ください。



### ◆インターネットセミナー

- 毎月 1 度、様々なテーマのセミナーをインターネット上で開催しています。
  - 時間は 20 分前後で、SciFinder をさらに使いこなしたい方にお勧めです。
  - インターネットに接続した PC があれば、どこからでも受講できます。
- (<http://www.jaici.or.jp/webex/e-seminar.html>)



### ◆e-ラーニング

- インターネット上で操作方法を学ぶことができます。
  - ビデオ形式教材、ブラウザ形式教材(解説を読んでクリックしながら進めるタイプ)があります。
- (<http://www.jaici.or.jp/sci/elearning/index.html>)

### ◆SciFinder ニュースレター

- SciFinder に関する様々な情報をお届けするメールマガジンです。
- (<http://www.jaici.or.jp/sci/sfnews/index.php>)



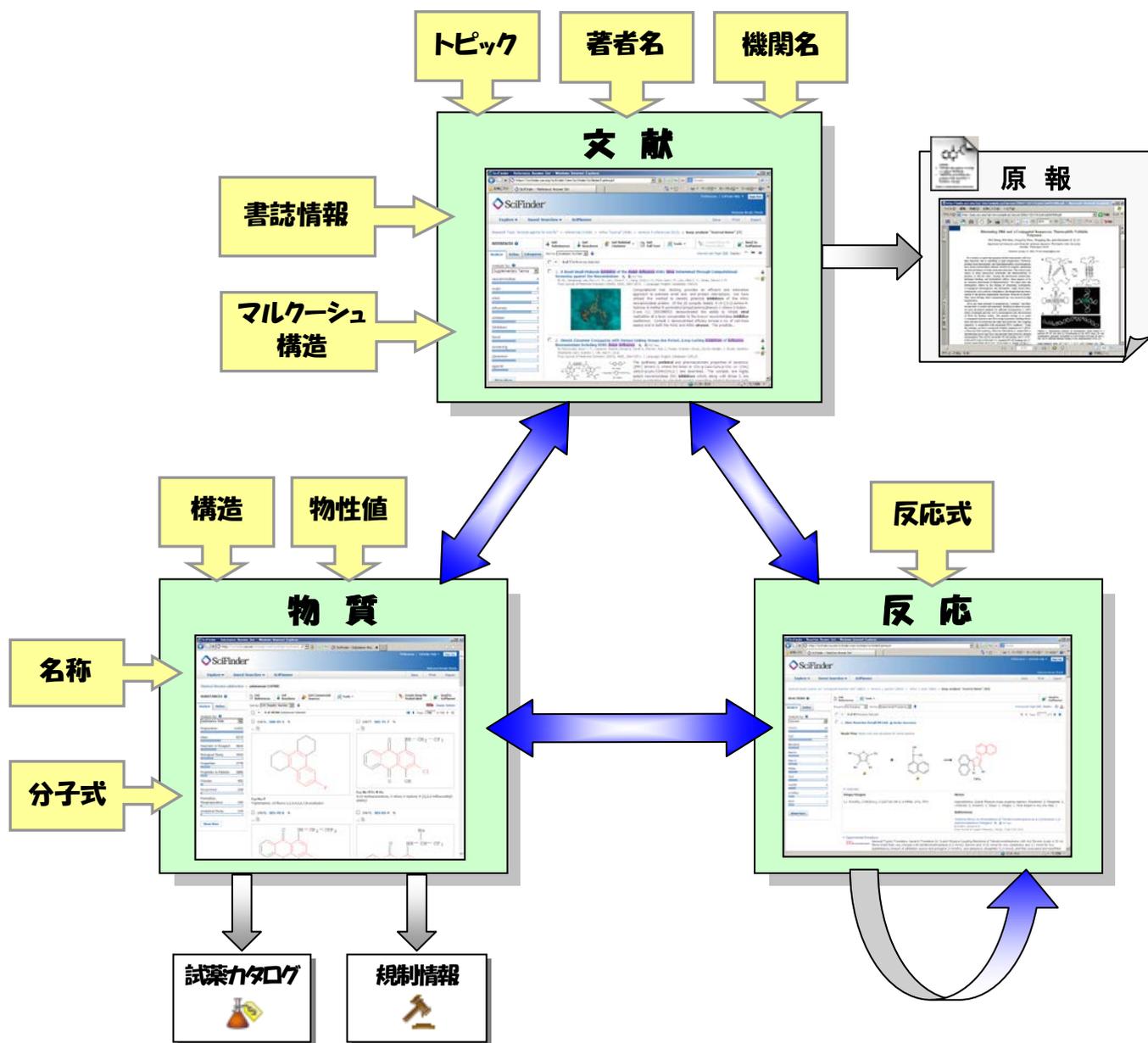
### ◆Twitter

- SciFinder の新機能、セミナー等に関してつぶやいています。
- (<https://twitter.com/casjapan>)



# SciFinder の検索全体像

◆ SciFinder の検索全体像 (イメージ)



レコード例

◆ 文献情報 (CAplus ファイル)

**ヘルプ**

**フルテキストへのリンク**

**書誌情報**

**抄録**

**索引**

**用語索引**

**補遺語**

**データベースにある文献にはリンクあり**

**タグ**

**コメント**

**化学物質索引**

**セクション分類 (p.50)**

**ををクリックすると、物質の構造を確認できる**

**・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; Kasashima, Yoshio; Mino, Takashi; Fujita, Tsutomu

The irradiation of chromone-2-carboxylic esters resulted in the stereo- and regioselective formation of C<sub>2</sub> 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**  
O=C1C=CC(=O)OC1C(=O)OR  $\xrightarrow{h\nu}$  O=C1C=CC(=O)OC1C(=O)OR  
 MeCN  
 $h\nu$  solid state  
 anti-HT dimer 82 - 85%  
 C<sub>2</sub> chiral anti-HH dimer 91- 97%

**Indexing**  
 Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom) (Section28-2)  
**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; Reactant or reagent  
 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

**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

**QUICK LINKS**  
 1 Tag, 1 Comment

**SOURCE**  
 Organic Letters  
 Volume12  
 Issue20  
 Pages4435-4437  
 Journal  
 2010  
 CODEN:ORLEF7  
 ISSN:1523-7060  
 DOI:10.1021/ol101734k

**COMPANY/ORGANIZATION**  
 Department of Applied Chemistry and Biotechnology, Graduate School of Engineering  
 Chiba University  
 Yayoi-cho, Inage-ku, Chiba, Japan 263-8522

**ACCESSION NUMBER**  
 2010:1204018  
 CAN153:505679  
 CAPLUS

**PUBLISHER**  
 American Chemical Society

**LANGUAGE**  
 English

**タグ**  
 1 Tag | Edit Tags 光反応(1)

**コメント**  
 1 Comment Sort by: Newer First | Older First  
 立体選択的発光二重化反応.  
 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.  
 Characters Remaining: 1024

➤ 文献情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

# レコード例

## ◆ 物質情報 (REGISTRY ファイル)

**ヘルプ**

Substance Identifier "58-08-2" > Substances (1) > 58-08-2

**CAS 登録番号** → CAS Registry Number: 58-08-2

**分子式** → C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

**リンクボタン (次ページ)** → Get References, Get Reactions, Get Commercial Sources, Get Regulatory Information

**物質名称 (CASの正式名称, 慣用名など)** → 1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine, 1,3,7-Trimethylxanthine; Caffeine (BCI); 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; Cafalina; Caffedrine; Caffein; Cafipel; DHcplus; Dasin; Diurex; Durvitan; Guaranine; Hycomin; Koffein; Mateina; Methyltheobromine; Midron extra; Miudol; NSC 5036; New Cetamol; No-Doz; Palergot-C; Phensal; Propoxyphene Compound 65; Refreshin; SK 65 Compound; Shape Plus; Stay Alert; Stim; Synalgos; Thein; Theine; Tri-Aqua; Wlgraine

**文献数 (1907-)** → ~30,324 References

**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)** → Bioactivity Indicators

**Target Indicator (p.47)** → Target Indicators

**予想物性値**

Biological Properties	Value	Conditions	Notes
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**

Biological Properties	Value	Conditions	Notes
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** → (1) Li, Yuan-Yuan; Chromatographia 2011, V74(7-8), P523-530 CAPLUS

**数値データ** → Median Lethal Dose(LD50) 355 mg/kg

**物性値出典**

**スペクトル表示 (次ページ)** → Spectra Properties

Spectra Properties	Value	Conditions	Notes
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

➤ 物質情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

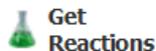
## レコード例

### 【リンクボタン】



Get  
References

文献へのリンクボタン (p.25)



Get  
Reactions

反応へのリンクボタン (p.26)

その物質が関与する反応を検索することができます。



Get Commercial  
Sources

カタログ情報へのリンクボタン (p.10)

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。



Get Regulatory  
Information

既存化学物質リスト・規制化学物質リスト情報へのリンクボタン (p.11)

日本の化審法, 米国の TSCA, EU の REACH など, 各国や地域の既存化学物質リストの情報や規制化学物質リスト情報を見ることができます。

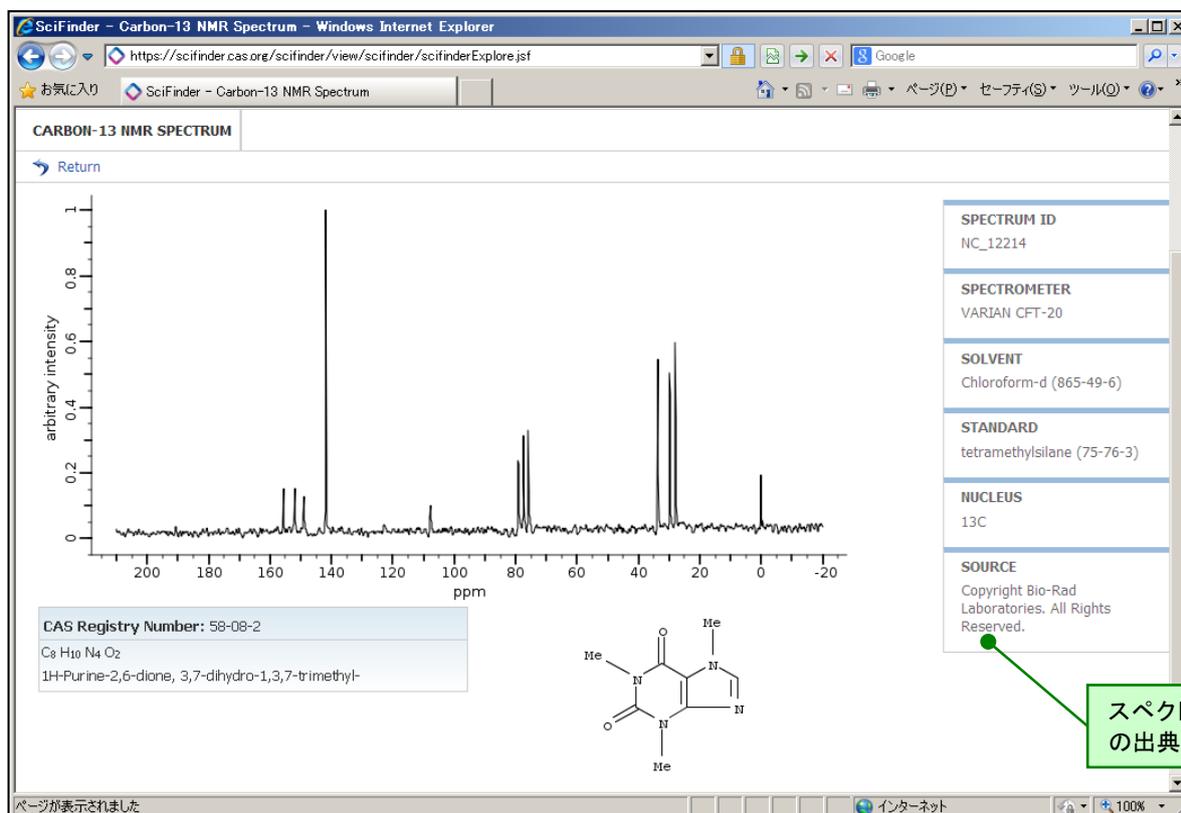
※CAS 登録番号の付与された化学物質に限定されるので, 総称名物質の多い日本や韓国のリスト上の掲載の有無をこれのみで判断することはできません。

### 【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)

REACTION DETAIL

4. 2 Steps *Hover over any structure for more options.*

Steps Stages

**1**

1.1 C: Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, S: PhMe, S: THF, 8 h, 75°C  
 1.2 R: NH<sub>4</sub>Cl, S: H<sub>2</sub>O

Notes  
 Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 2

Yield  
**86%**

Experimental Procedure  
 JOC The Journal of Organic Chemistry  
 General/Typical Procedure: Cross-Coupling Reactions of 2,6-Dichloropurines 1 with Trimethylaluminum (Method B). Me<sub>3</sub>Al (2 M solution in toluene, 0.5 mL, 1 mmol or 2 mL, 4 mmol) was added dropwise to a stirred solution of 1 (3 mmol) and Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (180 mg, 0.15 mmol) in THF under Ar, and the resulting reaction mixture was stirred at 75 °C for 8 h. The workup and isolation was the same as in method A. 2,6-(tetrahydropyran-2-yl)purine (3b). Oil. Yield 86%. FAB MS, m/z (rel. %): 233 (30), 149 (100). <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz): 1.60-1.80 (m, 6 H, CH<sub>2</sub>); 2.75 and 2.78 (2 × s, 2 × 3 H, CH<sub>3</sub>); 3.77 (dt, 1 H, J= 2.4 and 11.6, H-5'a); 4.12-4.16 (m, 1 H, H-5'b); 5.75 (dd, 1 H, J= 10.0 and 2.4, H-1'); 8.14 (s, 1 H, H-8). <sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>, 100.6 MHz): 19.4 and 26.0 (CH<sub>3</sub>); 22.8, 24.9 and 31.9 (CH<sub>2</sub>); 68.7 (CH<sub>2</sub>O); 81.4 (NCHO); 130.8 (C-5); 140.9 (CH-8); 150.4, 158.8 and 162.0 (C-2, C-4 and C-6). Exact mass (FAB HR MS): 233.1414, calculated for C<sub>12</sub>H<sub>17</sub>N<sub>4</sub>O [M+H]: 233.1402. Anal. calculated for C<sub>12</sub>H<sub>16</sub>N<sub>4</sub>O (232.3): C, 62.05; H, 6.94; N, 24.12; found: C, 62.33; H, 6.80; N, 23.88.

**2**

2.1 R: DOWEX 50X8, S: EtOH, S: H<sub>2</sub>O, 1 h, reflux  
 Reactants: 1, Reagents: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 1

Yield  
**68%**

Experimental Procedure  
 JOC The Journal of Organic Chemistry  
 General/Typical Procedure: Cleavage of the THP-Protected Purines (Method E). A mixture of a THP-protected base 2b-4b (0.6-0.8 mmol), Dowex 50X8 (H<sup>+</sup>) (ca. 300 mg), ethanol (50 mL), and water (1 mL) was refluxed for 1 h and then filtered while hot, and the resin was washed with hot ethanol (2 × 50 mL). The combined filtrates were evaporated, and the residue was codistilled with toluene. Crystallization of the

SOURCE  
 An Efficient Synthesis of 2-Substituted 6-Methylpurine Bases and Nucleosides by Fe- or Pd-Catalyzed Cross-Coupling Reactions of 2,6-Dichloropurines  
 Hocek, Michal; Dvorakova, Hana  
 Journal of Organic Chemistry  
 Volume 68  
 Issue 14  
 Pages 5773-5776  
 Journal  
 2003

COMPANY/ORGANIZATION  
 Institute of Organic Chemistry and Biochemistry  
 Academy of Sciences of the Czech Republic  
 Prague, Czech Rep. CZ-16610

NUMBER OF STEPS  
 2

ヘルプ

カタログ情報へのリンク

出典

実験項情報

- 反応情報の詳細・・・上記画面の ⓘ をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

### 【反応情報の実験項収録状況(2014年2月現在)】

#### ◇ 雑誌論文

出版社	雑誌	収録年
ACS	全誌	2000年～
Taylor & Francis	Synthetic Communications	1998年～
	Journal of Coordination Chemistry	
	Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements	
Springer	化学系 165 誌	1985年～
上海有機化学研究所	Youji Huaxue, Huaxue Xuebao	1998年～
Thieme	SYNLETT, SYNTHESIS	1969年～

#### ◇ 特許

公報言語	発行国	収録年
英語	US(アメリカ), EP(ヨーロッパ), WIPO(世界知的所有権機関)	2000年～
日本語	JP(日本), WIPO(世界知的所有権機関)	2008年～
ドイツ語	DE(ドイツ), EP(ヨーロッパ), WIPO(世界知的所有権機関)	

#### ◇ その他

Selected Organic Reactions Database (SORD) 由来の反応情報  
 ※学位論文由来の反応を収録したデータベース

1961年～2009年

# レコード例

## ◆ カタログ情報 (CHEMCATS ファイル)

ヘルプ

Print Export

Substance Identifier "73-31-4" > substances (4) > commercial sources (153)

COMMERICAL SOURCES

Analyze by: Country

USA 90  
People's Republic of China 29  
Germany 22  
United Kingdom 19  
Japan 14  
Belgium 6  
Canada 6  
Russia 6  
India 5  
France 4

Sort by: Supplier Preference

0 of 153 Commercial Sources Selected

1. Alfa Aesar Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: Alfa Aesar A Johnson Matthey Company, Catalog Publication Date: 1 Jan 2014  
Order Number: J62452  
Quantity: N/A  
73-31-4 Melatonin

2. TCI America Fine Chemicals Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: TCI America, Catalog Publication Date: 30 Aug 2013  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, 5 g  
73-31-4 Melatonin

3. TCI Europe Fine Chemicals Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: TCI Europe N.V., Catalog Publication Date: 30 Aug 2013  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, 5 g  
73-31-4 Melatonin

4. TCI Fine Chemicals Catalog is associated with a preferred supplier(s)  
Supplier Name: Tokyo Chemical Industry Co., Ltd. (Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd.), Catalog Publication Date: 30 Aug 2013  
Order Number: M1105  
Quantity: 1 g, 5 g  
73-31-4 Melatonin

試薬購入ページへの直接リンク

日本に所在する業者および代理店のみの表示も可能 (p.19, 20)

## 【詳細情報の表示】

カタログ名

注文番号

価格・包装単位

よく利用する業者

4. TCI Fine Chemicals

Catalog Information  
Catalog Publication Date: 30 Aug 2013  
Order Number: M1105  
Purity: >98.0%(LC)(N)  
Grade: GR  
Quantity: 1 g, Price: ¥8000  
Quantity: 5 g, Price: ¥24000

Substance Information  
CAS Registry Number: 73-31-4  
CAS Index Name: Acetamide, N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]-  
Chemical Name: Melatonin  
N-Acetyl-5-methoxytryptamine

Catalog Suppliers

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@TCIchemicals.com Web: http://www.tcichemicals.com/en/ap/	Preferred
Tokyo Kasei Hambai Co., Ltd. (Japan Sales Office)	TCI Bldg. 4-10-2, Nihonbashi-Honcho Chuo-ku Tokyo, 103-0023 Japan	Phone: +81-(0)3-3668-0489 Fax: +81-(0)3-3668-0520 Email: sales@TCIchemicals.com Web: http://www.tcichemicals.com/ja/	Preferred
Tokyo Kasei Hambai Osaka Office (Osaka Sales Office)	Dai-Ni Nakai Bldg. 1-1-21, Kojima-cho, Chiyoda-ku, Osaka, 540-0001 Japan	Phone: +81-(0)6-6228-1155 Fax: +81-(0)6-6228-1158 Web: TCIchemicals.com	Unclassified

Chemical Name	Supplier Name	City	Country	Quantity	Price	Order Number
Melatonin 4882%	2011 TCI Fine Chemicals	Portland	USA	1 g	¥8000	M1105
Melatonin 4882%	2011 TCI Fine Chemicals	Tokyo	Japan	5 g	¥24000	M1105
Melatonin 4882%	2011 TCI Fine Chemicals	Tokyo	Japan	5 g	¥24000	M1105
Melatonin 4882%	2011 TCI Fine Chemicals	Osaka	Japan	5 g	¥24000	M1105
Melatonin (5L) 98%	Beta Pharma Scientific Product Ltd.	Branford	USA	1kg	¥308	36-14822
Melatonin 98%	AK Scientific Product Catalog	Union City	USA	1g	¥18	28828
Melatonin 98%	AK Scientific Product Catalog	Union City	USA	2g	¥30	28828
Melatonin 98%	AK Scientific Product Catalog	Union City	USA	5g	¥60	28828
N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]acetamide	Santa Cruz Biotechnology Product Ltd.	San Diego	USA	1 g	¥100	44-00741

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です

カタログ情報のデータ搭載は無料です。  
ご興味ございましたら、化学情報協会  
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>

➤ カタログ情報の詳細・・・上記画面の ? をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

## レコード例

### ◆ 既存化学物質リスト情報 (CHEMLIST ファイル)

The screenshot shows the SciFinder Regulatory Information Detail page for Cyclopentanone (CAS Registry Number: 120-92-3). The page is annotated with green boxes and lines pointing to specific information:

- CAS 登録番号** (CAS Registration Number): Points to the CAS Registry Number: 120-92-3.
- 化学物質名** (Chemical Name): Points to the list of names in various languages, including Cyclopentanone (English, French), Cyclopentanon (German), and cyclopentanona (Spanish).
- 規制リスト番号** (Regulation List Number): Points to the Regulatory List Number section, which includes EC No.: 204-435-9, EINECS No.: 204-435-9, ENCS No.: 9-2108, ECL Serial No.: KE-09302, and SWISS No.: G-4394.

Additional sections on the page include:

- File Segment:** Lists regulatory agencies such as AUSTRALIA: AICS, CANADA: DSL, WHMIS, CHINA: IECSC, EU: CLP, REACH, JAPAN: ENCS, KOREA: ECL, NEW ZEALAND: NZIoC, PHILIPPINES: PICCS, SWITZERLAND: SWISS, and USA: DOT, STATE, TSCA.
- Confidentiality Status:** Public.
- Harmonized Tariff Code:** 291429 (EU Customs Code CN: 29142900).
- Inventory Status:** Lists various regulatory inventories including TSCA, IECSC, China, DSL, Canada, REACH, EINECS, ENCS, Japanese Gazette, AICS, Australian Inventory, ECL, Korean Existing Chemicals List, SWISS, Gifftliste 1, Toxic Category 5, PICCS, Philippines Inventory, NZIoC, and New Zealand Inventory.
- Regulatory Inventories:** Lists U.S. EPA Regulations - TSCA, U.S. DOT Regulations, Canadian Regulations, European Community Regulations, and Miscellaneous Regulations.
- Inventory Update Rule:** Provides information on reporting periods for the TSCA Inventory Update Rule (IUR) for 2012 and 2006.

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 page for a document with ID 6146344. The title is "Beta-adrenoceptor blocker pharmacokinetics and the oral contraceptive pill" by Kendall M J, Jack D B, Quarterman C P, Smith S R, Zaman R. The abstract discusses higher AUC and Cmax values for metoprolol, oxprenolol, and propranolol in groups receiving low-dose oestrogen-ethinyl oestradiol oral contraceptive, but notes that statistical significance was only reached for metoprolol AUC. The oral contraceptive had no detectable effects on tmax and t1/2 values.

Annotations on the page include:

- ヘルプ** (Help) pointing to the SciFinder logo.
- 書誌情報** (Bibliographic Information) pointing to the title and authors.
- 抄録** (Abstract) pointing to the abstract text.
- 索引** (Indexing) pointing to the Concepts and Substances sections.
- CAS 登録番号索引** (CAS Registry Numbers Index) pointing to the Registry Numbers table.
- 索引語 (MeSH ターム)** (Indexing Terms (MeSH Terms)) pointing to the Supplementary Terms section.
- 参考文献** (References) pointing to the Citations section.
- ・タイトル** (Title), **・著者名** (Author Name), **・雑誌名** (Journal Name), and **・所属機関** (Institution) pointing to the SOURCE information.

※PubMed で検索対象となるデータです

### ◆ 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 with various navigation options and news. Annotations include:

- 新機能資料など** (New Feature Materials, etc.) pointing to the "新機能情報" (New Feature Information) section, which lists updates like "2014年1月 <Non-Javaに月グループシール追加>" and "2014年1月 <Non-Javaに月グループシール追加>".
- ユーザーインタビュー** (User Interview) pointing to the "ユーザーインタビュー" section, which features a testimonial from a young researcher.

## SciFinder へのアクセス

### ◆ SciFinder へのアクセス

下記 URL にアクセスし、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。



### ◆ SciFinder の終了



### ◆ Remember Me 機能(ログイン情報の記憶)

**Sign In**

Username

Password

Remember me for two weeks unless I sign out  
(Do not use on a shared computer)

**Sign In**

Forgot Username or Password?

Your SciFinder username and password are assigned to you alone and may not be shared with anyone else.

ログイン時に Remember Me にチェックを入れると、Sign Out 以外で終了した場合、ID・パスワードを入力なしで再アクセスできます。  
(最後の利用から 14 日間以内)

**注意：共有して利用されるパソコンでは利用しないでください。**

## SciFinder の検索初期画面

### ◆ SciFinder の検索初期画面：

➤ まずは検索項目を選択します。

文献検索

物質検索

反応検索

Explore をクリックし、検索項目を選択することもできる

#### 【 文献検索項目 】

• Research Topic	→ 研究トピックの検索（キーワード）	p.15
• Author Name	→ 著者名検索	p.38
• Company Name	→ 会社名(大学名)検索	p.39
• Document Identifier	→ 文献・特許番号検索	p.39
• Journal	→ 雑誌情報からの検索	p.39
• Patent	→ 特許情報からの検索	
• Tags	→ タグを付与した文献の検索	

#### 【 化学物質検索項目 】

• Chemical Structure	→ 化学構造式	p.27
• Markush	→ マルクーシュ構造検索	p.32
• Molecular Formula	→ 分子式	p.26
• Property	→ 物性値	p.26
• Substance Identifier	→ 化学物質名称, CAS 登録番号	p.24

#### 【 化学反応検索項目 】

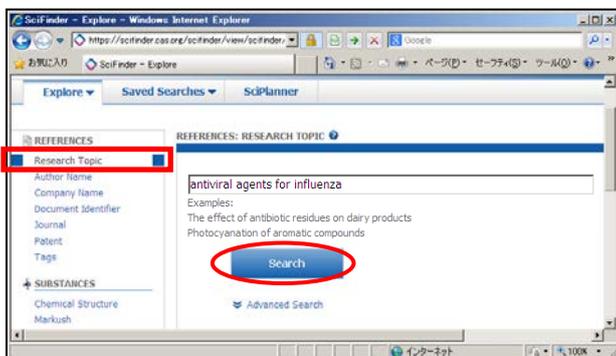
• Reaction Structure	→ 化学反応式	p.33
----------------------	---------	------

## 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>

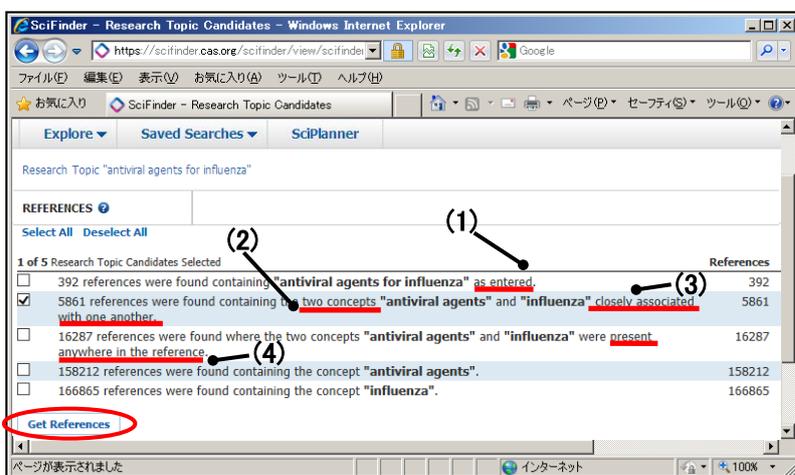
➢ 検索テーマを表現する適切な英語の文章を入力して検索を行います。

- ① キーワードを英語のフレーズで入力します。例として「インフルエンザ用の抗ウイルス剤 (antiviral agents for influenza)」の検索を実行します。



※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

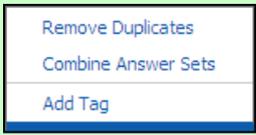
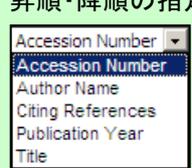
をクリックすると、抄録全文や物質索引を確認できる

抄録

物質索引

## 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 検索経過が表示される
- 2 Tools メニューから Remove Duplicates を選択すると重複文献除去※が可能。(10,000 件以下)  

- 3 回答のソートができる。(20,000 件以下)昇順・降順の指定も可能。  

- 4 1 ページあたりの回答の表示件数(最大 100 件)や文献の表示形式(抄録なし/部分表示/完全表示)を変更できる。

**2596. Method for preparing human influenza-avian influenza tetraivalent combined vaccine**

By: Zhu, Zhiyong  
 Assignee: Zhejiang Provincial Center for Disease Prevention and Control, Peop. Rep. China; Zhejiang Tianyuan Bio-Pharmaceutical Co.

The title combined vaccine mainly comprises human influenza virus H1N1 vaccine, human influenza virus H3N2 vaccine, human influenza virus B vaccine, and avian-human influenza virus H5N1 vaccine, with their consns. of (by hemagglutinin) 20-40 μg/ml, resp. The combined vaccine solves the problem of difficult avian influenza vaccine vaccination, and can prevent human influenza at the same time. Four indexes (ovalbumin, endotoxin, total protein content, and the ratio of total protein to hemagglutinin) closely related with side effects of the combined vaccine are lower than those of present vaccines, thus having high safety.

Patent No.	Kind	Date	Application No.	Date
CN 101450207	A	Jun 10, 2009	CN 2008-10163763	Dec 31, 2008

**Substances**

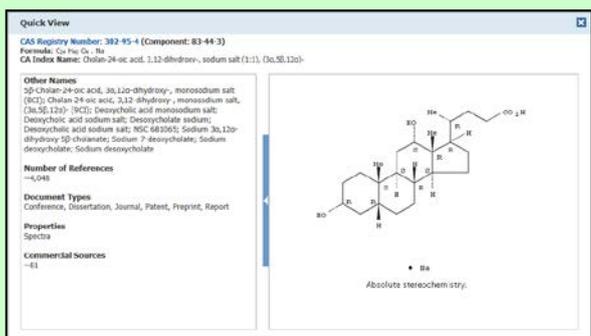
- 122-99-6 Phenoxyethanol
- 302-95-4 Sodium deoxycholate
- 9005-65-6 Tween 80

prep. human influenza-avian influenza tetraivalent combined vaccine

Other use, unclassified; Uses

クリックして同じ用語索引をもつ文献検索ができる

🔍 をクリックすると、物質の構造などを簡単に確認できる。また、CAS 登録番号をクリックすると、物質の詳細情報にリンクする(p.7 参照)。



※自動で重複文献除去を行う設定は、画面右上の Preferences をクリックし、Automatically remove duplicate MEDLINE answers のボックスにチェックを入れ、OK をクリックする

## 原文献へのリンク機能(CAS Full Text Options)

- ◆ 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, 大手学術出版社 (360 社) 発行の電子ジャーナルで提供されている約 7,400 誌の掲載論文は, HTML または PDF 形式で表示することができます (電子ジャーナル購読者のみ)。
  - 購読者でなくても, “有料の原報サービス”の項目から文献を取り寄せることができます。この場合の料金は, 翌月請求となります (企業のみ)。

原報のダウンロード: 原報を PDF で即時にダウンロード  
 原報複写注文: 携携する原報複写サービスサイト (FIZ AutoDoc) にリンク

直接表示されるケースもあります

電子ジャーナルへのリンク(無料)

有料の原報サービス

※大学では表示されません

原報複写サービスに関しては,  
 化学情報協会 情報事業部  
 (TEL: 0120-151-462)  
 までお問い合わせください。  
[http://www.jaici.or.jp/DDS/dds\\_2.htm](http://www.jaici.or.jp/DDS/dds_2.htm)

## 原文献へのリンク機能(CAS Full Text Options)

- 米国特許商標庁 (USPTO), ヨーロッパ特許庁 (EPO, Espacenet), 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, PCT, EP, ドイツ, フランス, 英国, 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。
- 一部の米国特許は, ワンクリックで即時に全文 PDF ファイルのダウンロードが開始されます。
- 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。
- 管理者のカスタマイズにより, 各種フルテキストサービスへ直接リンクすることもできます。

**SciFinder - Production of c... - Windows Internet Explorer**

Research Topic "suzuki coupling" > references (15422) > Production of carrier-peptide ...

REFERENCE DETAIL

Get Substances | Get Related Citations | **Get Full Text** | Get PDF

36. Production of carrier-peptide conjugates using carrier proteins co...

By: Young, Travis; Schultz, Peter G.  
Assignee: The Scripps Research Institute, USA

Provided are methods of making carrier polypeptides that include incorporating a first unnatural amino acid into a target polypeptide variant, and reacting the first and second unnatural amino acid are also provided. Thus, p-acetylphenylalanine is incorporated into human serum albumin (HSA) position 1 or 6 of either human thrombospondin 1 (TSP1) or AβT-510. HSA-TSP1 and HSA-AβT-510 aminoxyacetyl-L-lysyl moieties via oxime ligation. In addition, orthogonal translation systems in which produce carrier and target polypeptide variants comprising unnatural amino acids are provided. These systems with novel or improved biological properties, reduced toxicity, enhanced activities, and/or increased half-life.

Patent No.	Kind	Date	Applicant
US 8637306	B2	Jan 28, 2014	US 2009
US 20100297693	A1	Nov 25, 2010	
WO 2009075847	A2	Jun 18, 2009	WO 2009
WO 2009075847	A3	Sep 11, 2009	
US 20090197339	A1	Aug 6, 2009	US 2008

Priority Application

US 2008-316370	A2	Dec 10, 2008	
----------------	----	--------------	--

**CAS Full Text Options: 文献オプション - Windows Internet Explorer**

ログオフ | ヘルプ | JAICI図書館ヘルプ

Production of carrier-peptide conjugates using chemically reactive unnatural amino acids  
U.S. (2010), 57 pp., Cont.-in-part of Appl. No. PCT/US2008/013568. CODEN:USXXAM; US8609383

- 書誌情報をメールで送る
- JAICI (Library2)
- Espacenet
  - Homepage
  - Search page
- USPTO
  - Homepage
  - Search page

Web 上の原報サービス

- ✓ USPTO 米国特許商標庁 (USPTO)
- ✓ Espacenet ヨーロッパ特許庁 (EPO)

✓ = 認証済み  
! 米国特許商標庁のイメージ表示には Image viewer plug-in が必要です。

有料の原報サービス

- 原報のダウンロード
- 原報複写注文

直接表示されるケースもあります

ヨーロッパ特許庁へのリンク(無料)

電子公報の表示(有料)\*

有料の原報複写サービス\*

\*大学では表示されません

**Espacenet - Original document - Windows Internet Explorer**

Original document: US2010297693 (A1)

Production of carrier-peptide conjugates using chemically reactive unnatural amino acids

United States  
Patent Application Publication  
Young et al.  
Pub. No.: US 2010/0297693 A1  
Pub. Date: Nov. 25, 2010

PRODUCTION OF CARRIER-PEPTIDE CONJUGATES USING CHEMICALLY REACTIVE UNNATURAL AMINO ACIDS

Foreign Application Priority Data

US 2008/013568 A1 (2008-06-11)

Publication Classification

Int. Cl. C12P 21/00 (2006-01-01)

C12N 1/00 (2006-01-01)

U.S. CL. 435/403; 530/402; 435/321

ABSTRACT

Provided are methods of making carrier polypeptide that include incorporating a first unnatural amino acid into a target polypeptide variant, and reacting the first and second unnatural amino acids to produce the conjugate. Conjugates produced using the provided methods are also provided. In addition, orthogonal translation systems in which produce carrier and target polypeptide variants comprising unnatural amino acids are provided.

ヒント

Get PDF ボタンの表示される米国特許情報は, クリックすると全文 PDF ファイルのダウンロードが開始される。

## 文献回答の絞り込み・解析

### ◆ 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analyze/Refine)

- 各種検索によって得られた文献の回答集合に対して、12種のデータに基づく解析 (Analyze) や、7種の観点で絞り込み (Refine) ができます。

**Categorize 機能 (p.21 参照)**

**解析機能**

Analyze by:	Count
Publication Year	690
2010	690
2011	686
2012	668
2013	596
2009	507
2008	441
2007	333
2006	257
2005	177
2001	166

**絞り込検索**

**会社・大学名**

**※資料種類**

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

**クリックして、解析の詳細表示 (次ページ参照)**

## 文献回答の絞り込み・解析

サンプル解析  
(20,000 件超)

全項目解析  
(20,000 件以下)

Sample Analysis:

- Asano Masaharu
- Bentley J
- Chevalier Veronique
- Dubois Philippe
- El Fray Miroslawa
- Feng Yan
- Ito Hiroshi
- Khan Saad A
- Kobashi Toshiyuki
- Korshak V V

クリックして該当項目の  
選択表示もできる

Analyze by:

Quay Steven C	84
Vaish Narendra K	84
Mcswiggen James	83
Ahmadian Mohammad	80
Gubareva Larisa V	65
Suzuki Yasuo	64
Hayden Frederick G	61
Webster Robert G	48
Anonymous	46
Smee Donald F	43

Show More

Analyze - Author Name

17467 Items 4 Selected

Sort by:

Page: 99 of 350

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

- Hayashi Shintaro 1
- Hayashi Toshimitsu 9
- Hayashi Yoshihito 2
- Hayashi Yujiro 2
- Hayashi Yuzuru 5
- Hayata Taishi 2
- Hayden F 1
- Hayden F G 18
- Hayden Frederick 8
- Hayden Frederick G 61

PDF, Excel に  
Export できる

Apply Cancel

チェック項目の選択表示

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

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

Keep Analysis

Research Topic "antiviral agents for influenza" > references (5861) > refine "Journal" (4029)

REFERENCES

Analyze by:

Quay Steven C	84
Vaish Narendra K	84
Mcswiggen James	83
Ahmadian Mohammad	80
Gubareva Larisa V	65
Suzuki Yasuo	64
Hayden Frederick G	61
Webster Robert G	48
Anonymous	46
Smee Donald F	43

Show More

101. A Prospective Intervention Study on Higher-Dose Oseltamivir Treatment in Adults Hospitalized With Influenza A and B Infections

840. Experimental human influenza: observations from studies of influenza antivirals

932. Combination Antiviral Therapy for Influenza: Predictions From Modeling of Human Infections

ヒント

チェック項目の選択表示後、別の観点を掛け合わせる解析・絞り込みを行うためには、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 件を越える回答の集合は、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

## Categorize 機能

### ◆ Categorize 機能

- 文献の回答集合に対して、選択したキーワード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 SciFinder 'Categorize' dialog box. Annotations include:

- ① 解析したい分類を選択 (Select the classification you want to analyze) - points to the 'Biotechnology' category in the 'Category' column.
- ② キーワード(物質)を選択 (Select keywords (substances)) - points to the 'Zanamivir' index term in the 'Index Terms' column.
- 大分類 (Major Classification) - points to the 'Biotechnology' category heading.
- 索引 (Index) - points to the 'Zanamivir' index term.
- 選択した索引のリスト (List of selected index terms) - points to the 'Selected Terms' list on the right.

The 'Selected Terms' list contains: Zanamivir, Oseltamivir, Antibodies and Immunoglobulins, Amantadine, Rimantadine, Tamiflu, Antibodies, monoclonal, Peptides, Hemagglutinins, Ribavirin, siRNA, Antibodies, neutralizing, Neuraminidase, and Antibodies, chain.

・解析対象データは最大 15,000 回答



### ● オンライン日本語ヘルプ

- 🔗 をクリックすると、オンラインヘルプ画面をご覧ください。
- 「日本語」の表示がある項目は、日本語のオンラインヘルプを参照できます。

The screenshot shows the SciFinder online help page in Japanese. Annotations include:

- 「日本語」をクリック (Click 'Japanese') - points to the '日本語' link in the top right corner.
- 別の項目も参照できる (You can also refer to other items) - points to the '手続' (Procedure) section.

The '手続' section contains the following steps:

1. 文献リスト画面で、Analysis タブの下にある **Categorize** ボタンをクリックします。
2. 大分類をクリックします。
3. 表示されるリストから、分類を選択します。

## 文献回答からの関連情報抽出

### ◆ 関連情報の抽出機能

➢ 文献から関連する物質・反応情報を抽出することができます。

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

Research Topic "phosphine free and suzuki coup..." > references (138) > refine "2000-" (131)

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Get Full Text Tools

Analyze Refine Categorize Sort by: Citing References 1 of 131 References Selected

Analyze by: Author Name

51. Phosphine-Free Suzuki-Miyaura Cross-Coupling in Aqueous Media Enables Access to 2-C-Aryl-Glycosides

By Cobo, Isidro; Matheu, M. Isabel; Castillon, Sergio; Bouteira, Omar; Davis, Benjamin G. From Organic Letters (2012), 14(7), 1728-1731. | Language: English, Database: CAPLUS

52. Suzuki-Miyaura cross-coupling of arenediazonium salts catalyzed by alginate/gellan-stabilized palladium nanoparticles under aerobic conditions in water

By Cacchi, Sandro; Caponetti, Eugenio; Casadei, Maria Antonietta; Di Giulio, Andrea; Fabrizi, Giancarlo; Forte, Giovanni; Goggiamani, Antonella; Moreno, Sandra; Paolucci, Patrizia; Petrucci, Francesco; et al From Green Chemistry (2012), 14(2), 317-320. | Language: English, Database: CAPLUS

Get Substances 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
- Preparation
- Process
- Properties
- Prophetic in Patents
- Reactant or Reagent
- Uses

Get Cancel

親点を指定して、抽出対象物質を限定することもできる

SciFinder - Reaction Answer Set - Windows Internet Explorer

Research Topic "phosphine free and suzuki coup..." > references (138) > refine "2000-" (131) > get reactions (40)

REACTIONS

Analyze Refine Group by: No Grouping Sort by: Number of Steps

0 of 40 Reactions Selected

1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step Hover over any structure for more options.

Reaction scheme showing a Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction with a yield of 85%.

Overview

Steps/Stages

1.1 R<sub>2</sub>P-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>SO<sub>3</sub>H, Si-Cl<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 12 h, reflux

Notes

regioselective, Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Phosphine-Free Suzuki-Miyaura Cross-Coupling in Aqueous Media Enables Access to 2-C-Aryl-Glycosides

By Cobo, Isidro et al From Organic Letters, 14(7), 1728-1731, 2012

Experimental Procedure

2. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step Hover over any structure for more options.

Reaction scheme showing a Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction.

この論文で扱われている反応の集合

SciFinder - Substance Answer Set - Windows Internet Explorer

Research Topic "phosphine free and suzuki coup..." > references (138) > refine "2000-" (131) > get substances (18)

SUBSTANCES

Analyze Refine Sort by: CAS Registry Number

0 of 18 Substances Selected

Analyze by: Substance Role

Preparation 18

Reactant or Reagent 18

Process 12

Analytical Study 11

Combinatorial Study 11

Properties 11

Prophetic in Patents 11

Biological Study 10

Uses 10

Formation, Nonpreparative 7

Show More

1. 56-09-7

2. 98-80-6

3. 1692-25-7

4. 1765-93-1

5. 3375-21-3

6. 5720-07-0

この論文で扱われている物質の集合

物質集合作成・反応集合作成は最大 1,000 回答

## 引用情報の検索

- 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 Related Citations

Get Citing

Get Citing

引用情報検索は最大 500 回答

この論文中で著者が引用した参考文献、または特許の審査官引用文献の集合

この文献を引用している論文・特許の集合 (CITATION)

## ● 情報共有機能 (リンク機能)

- 各レコードに付与された URL を用い、注目する文献を他のユーザー(同一機関限定)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

Phosphine-Free Palladium Catalyzed Mizoroki-Heck Reaction Using Hydrazone as a Ligand

By: Mino, Takashi; Shirae, Yoshiaki; Sasaki, Youusuke; Sakamoto, Masami; Fujita, Tsutomu

Glyoxal bis(hydrazone)s [e.g., R<sup>1</sup>R<sup>2</sup>NN=CH=CH=NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, R<sup>1</sup>/R<sup>2</sup> = -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-] and 2-pyridyl hydrazone 2-PyCH=NN(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> were prep'd. and exam'd. for the Mizoroki-Heck cross-coupling reaction of aryl halides and olefins. An optimization study revealed that PdCl<sub>2</sub>(MeCN)<sub>2</sub>[(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>NN=CH=CH=NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>] was an efficient phosphine-free catalyst system which produced the Mizoroki-Heck coupling products in good yields for a variety of substrates.

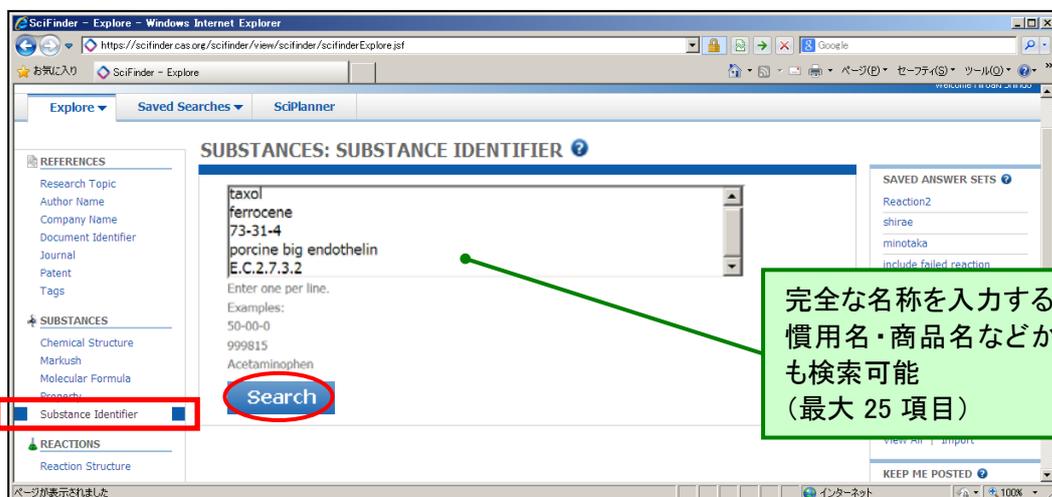
Rc1ccc(X)cc1 + R'CH=CH2 >> R1c1ccc(cc1)C=C(R')R'

X = I: DMF, 80 °C  
X = Br or Cl: NMP, TBAB, 120 °C

## 化学物質検索

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

➢ CAS 登録番号, 名称から物質を検索することができます。



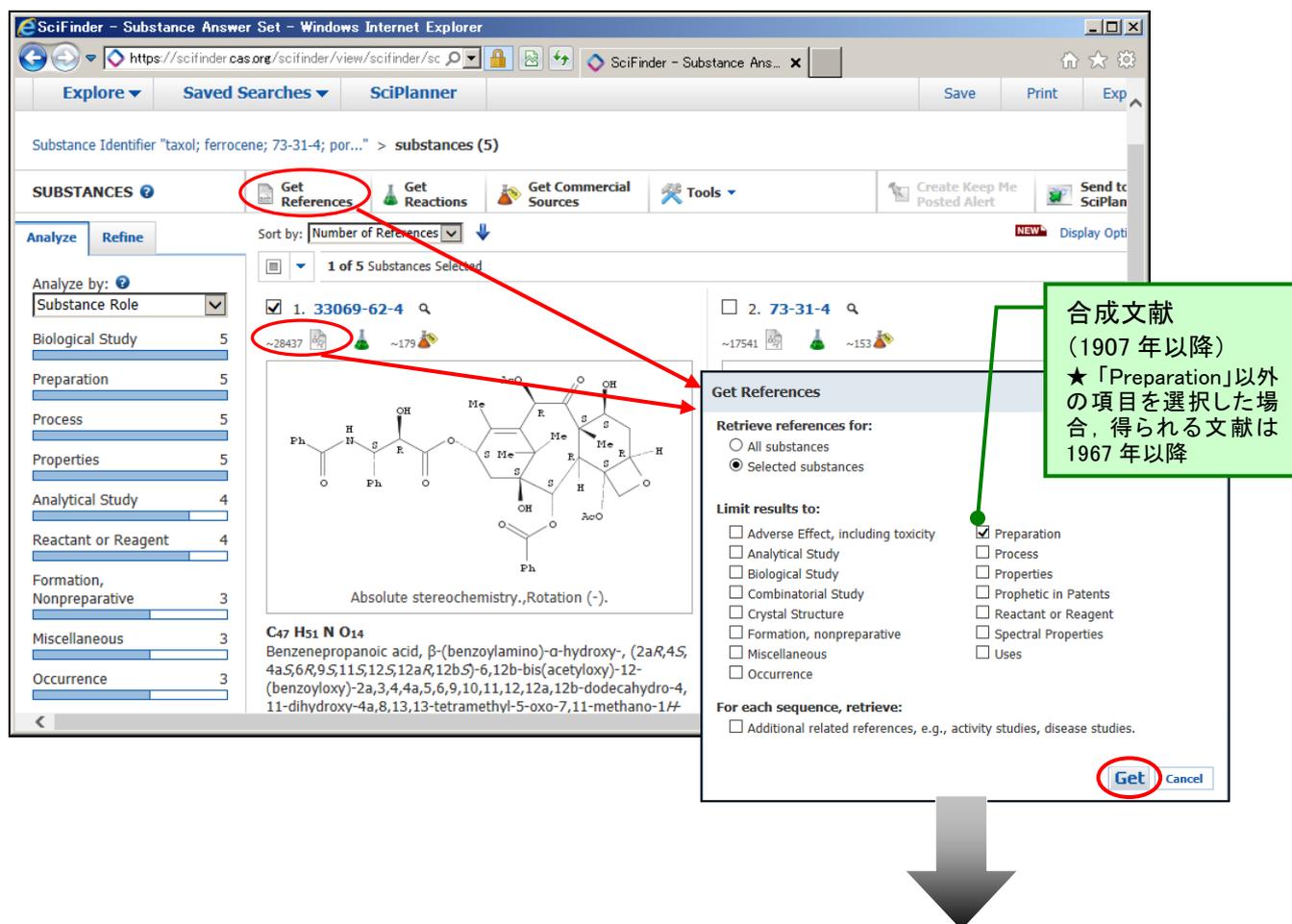
CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative	✓	✓	✓	✓
Miscellaneous	✓	✓	✓	✓
Occurrence	✓	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents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

## 化学物質関連情報へのリンク

### ◆ 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.



Get References

Retrieve references for:

- All substances
- Selected substances

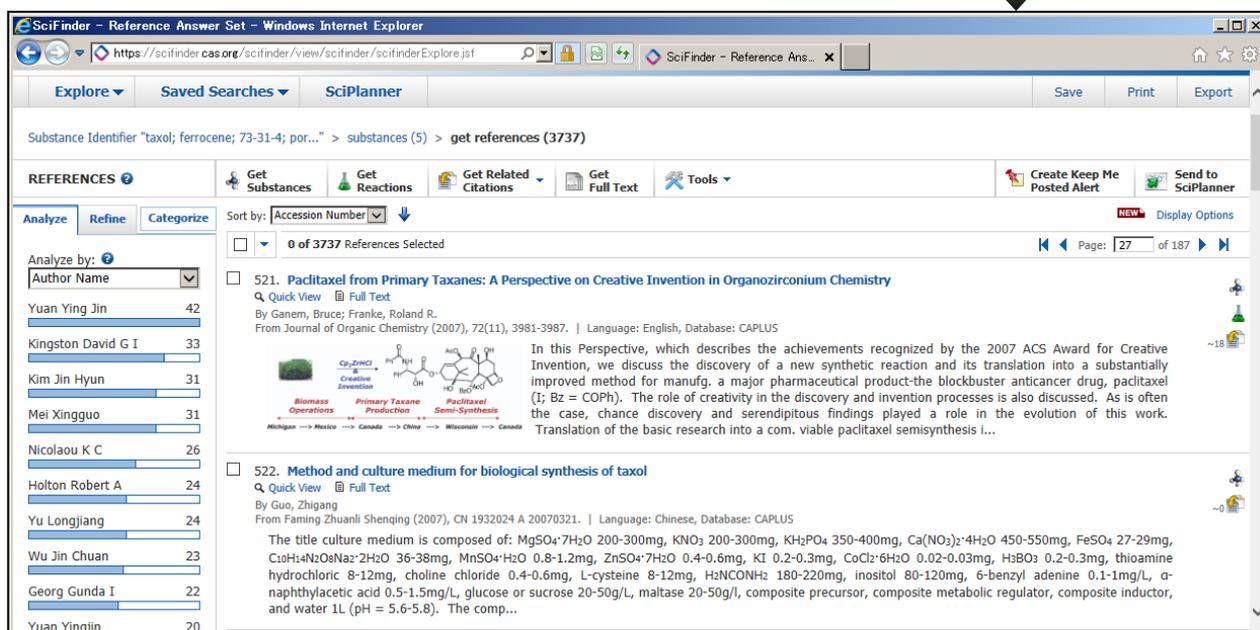
Limit results to:

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

For each sequence, retrieve:

- Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

Get Cancel



SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

Substance Identifier "taxol; ferrocene; 73-31-4; por..." > substances (5) > get references (3737)

REFERENCES

Sort by: Accession Number

0 of 3737 References Selected

521. **Paclitaxel from Primary Taxanes: A Perspective on Creative Invention in Organozirconium Chemistry**  
 Q Quick View Full Text  
 By Ganem, Bruce; Franke, Roland R.  
 From Journal of Organic Chemistry (2007), 72(11), 3981-3987. | Language: English, Database: CAPLUS

In this Perspective, which describes the achievements recognized by the 2007 ACS Award for Creative Invention, we discuss the discovery of a new synthetic reaction and its translation into a substantially improved method for manuf. a major pharmaceutical product-the blockbuster anticancer drug, paclitaxel (1; Bz = C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>). The role of creativity in the discovery and invention processes is also discussed. As is often the case, chance discovery and serendipitous findings played a role in the evolution of this work. Translation of the basic research into a com. viable paclitaxel semisynthesis i...

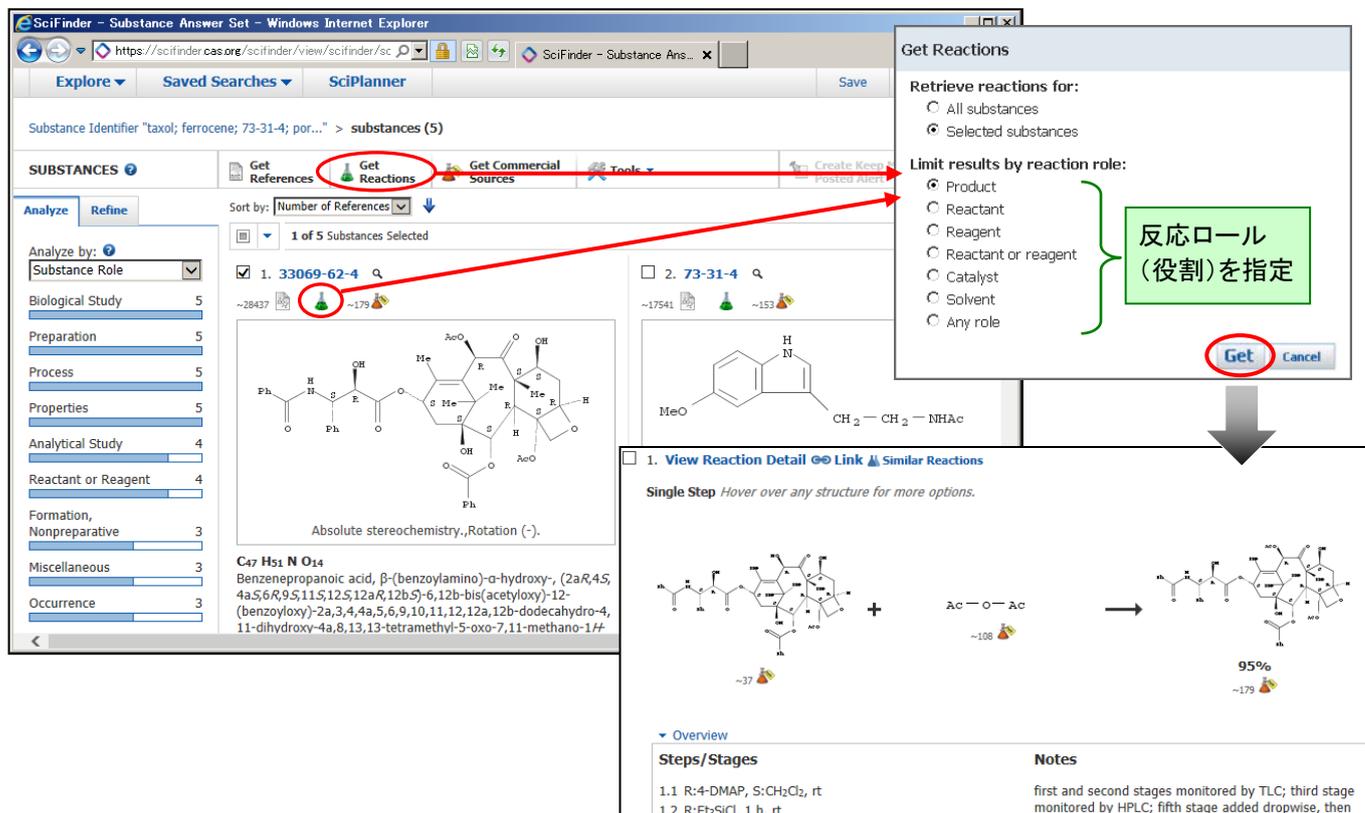
522. **Method and culture medium for biological synthesis of taxol**  
 Q Quick View Full Text  
 By Guo, Zhigang  
 From Faming Zhuanli Shenqing (2007), CN 1932024 A 20070321. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

The title culture medium is composed of: MgSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O 200-300mg, KNO<sub>3</sub> 200-300mg, KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> 350-400mg, Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O 450-550mg, FeSO<sub>4</sub> 27-29mg, C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub>Na<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O 36-38mg, MnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O 0.8-1.2mg, ZnSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O 0.4-0.6mg, KI 0.2-0.3mg, CoCl<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O 0.02-0.03mg, H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> 0.2-0.3mg, thioamino hydrochloric 8-12mg, choline chloride 0.4-0.6mg, L-cysteine 8-12mg, H<sub>2</sub>NCONH<sub>2</sub> 180-220mg, inositol 80-120mg, 6-benzyl adenine 0.1-1mg/L, *o*-naphthylacetic acid 0.5-1.5mg/L, glucose or sucrose 20-50g/L, maltase 20-50g/l, composite precursor, composite metabolic regulator, composite inductor, and water 1L (pH = 5.6-5.8). The comp...

## 化学物質関連情報へのリンク

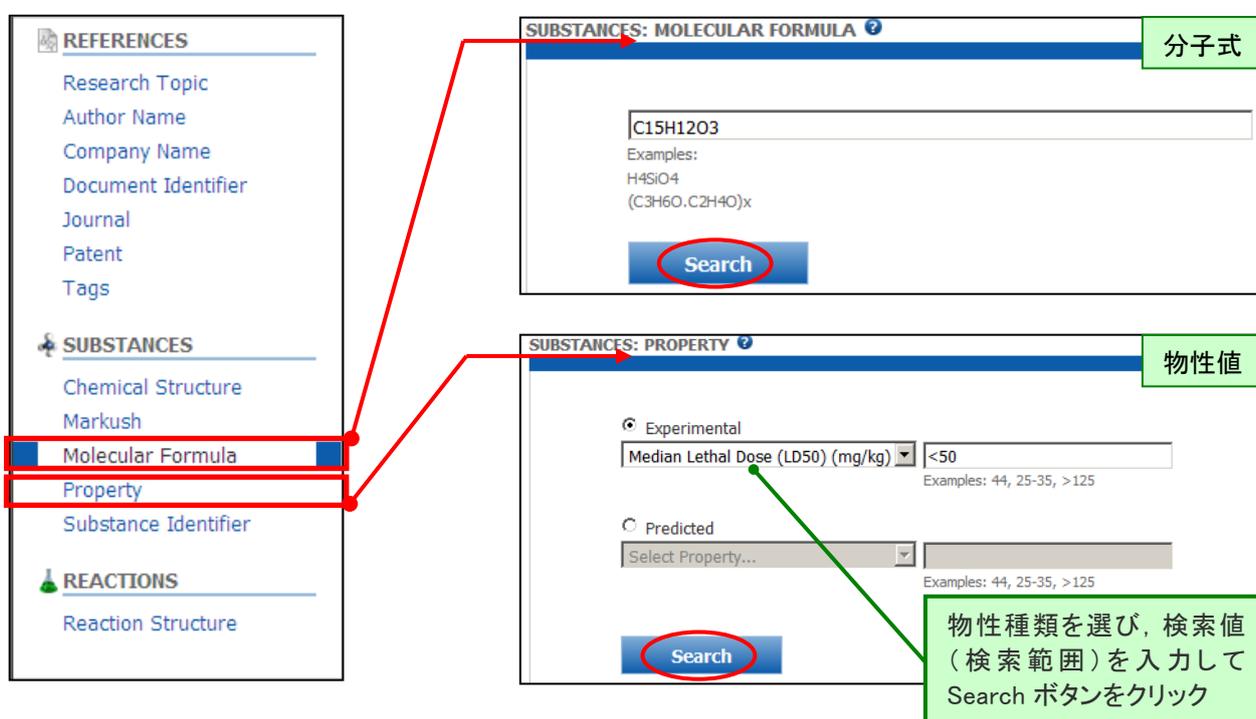
### ➤ 反応情報へのリンク

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.



The screenshot shows the SciFinder interface with a search for 'ferrocene'. A 'Get Reactions' dialog box is open, allowing users to filter results by reaction role. A green box highlights the 'Limit results by reaction role:' section with the text '反応ロール(役割)を指定' (Specify reaction role). The 'Get' button in the dialog is circled in red. Below the dialog, the 'View Reaction Detail' for a specific reaction is shown, including the chemical structures of the reactants and products, the yield (95%), and the reaction conditions (Steps/Stages and Notes).

### ◆ 化学物質検索 (分子式, 物性値) <REGISTRY ファイル>



The screenshot shows the SciFinder search interface. On the left, a sidebar menu lists search options: REFERENCES, SUBSTANCES, and REACTIONS. Under SUBSTANCES, 'Molecular Formula' and 'Property' are highlighted with red boxes. On the right, two search panels are shown. The top panel, 'SUBSTANCES: MOLECULAR FORMULA', has a search box containing 'C15H12O3' and a 'Search' button circled in red. The bottom panel, 'SUBSTANCES: PROPERTY', has a dropdown menu set to 'Experimental' and a search box containing 'Median Lethal Dose (LD50) (mg/kg) <50'. A green box with an arrow points to the search box with the text '物性種類を選び, 検索値(検索範囲)を入力して Search ボタンをクリック' (Select property type, enter search value (search range), and click Search button). The 'Search' button in this panel is also circled in red.

## 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(塩や混合物, 共重合体などを含む)を構造から直接検索できます。

① “Java”タブあるいは“Non-Java”タブを選択し, 構造作図画面を起動します。

構造検索

“Java”あるいは  
“Non-Java”を選択し  
クリック

Java : Java プラグインが必要  
Non-Java : Java プラグインを利用せずに  
構造作図が可能\*

※現時点では一部機能に未対応だが,  
将来的には全ての機能に対応予定

② 構造を作図し, 検索条件を選択します。以下は完全一致検索を選択した例です。

CAS 登録番号などからの  
構造式呼び出し

Java プラグインを利用した  
作図画面の例

完全一致検索

類似性構造検索

部分構造検索

OK

- Java プラグイン版では, mol 形式, cxf 形式ファイルの読み込みや, バージョンによっては ChemBioDraw, ISIS Draw (Accelrys Draw) からのペーストも可能
- CAS 登録番号, 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

部分構造検索 : 作図した構造を骨格に持つ物質を網羅的に検索します。  
類似性構造検索 : 構造の類似性が一定以上の物質を検索します。  
(検索タイプの違いについては p.30 を参照)

## 化学構造検索

- ③ “Search”ボタンをクリックし、検索を実行します。Advanced Search をクリックすると、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。

Advanced Search  
をクリックすると  
限定項目が表示される

- ④ 検索結果が表示されます。このあと文献検索を行うこともできます。

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

1 回答のソートができる。  
(20,000 件以下)  
昇順・降順の指定も可能。

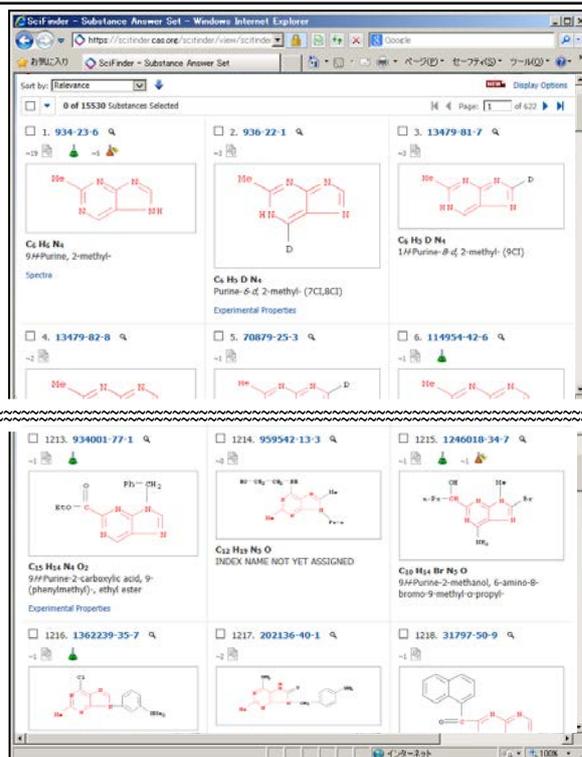
Relevance  
CAS Registry Number  
Number of References  
Molecular Weight  
Molecular Formula

2 1 ページあたりの回答の  
表示件数(最大 50 件)や  
表示カラム数(最大 4 列)  
を変更できる。

## 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。



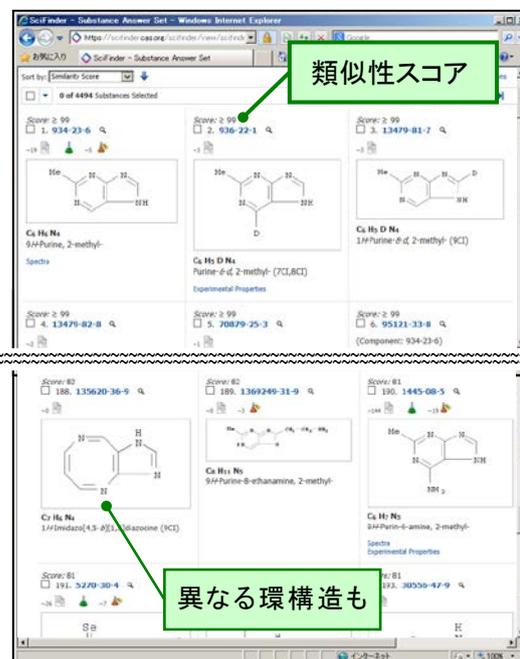
### 【類似性構造検索を実行した場合】

- 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。

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。



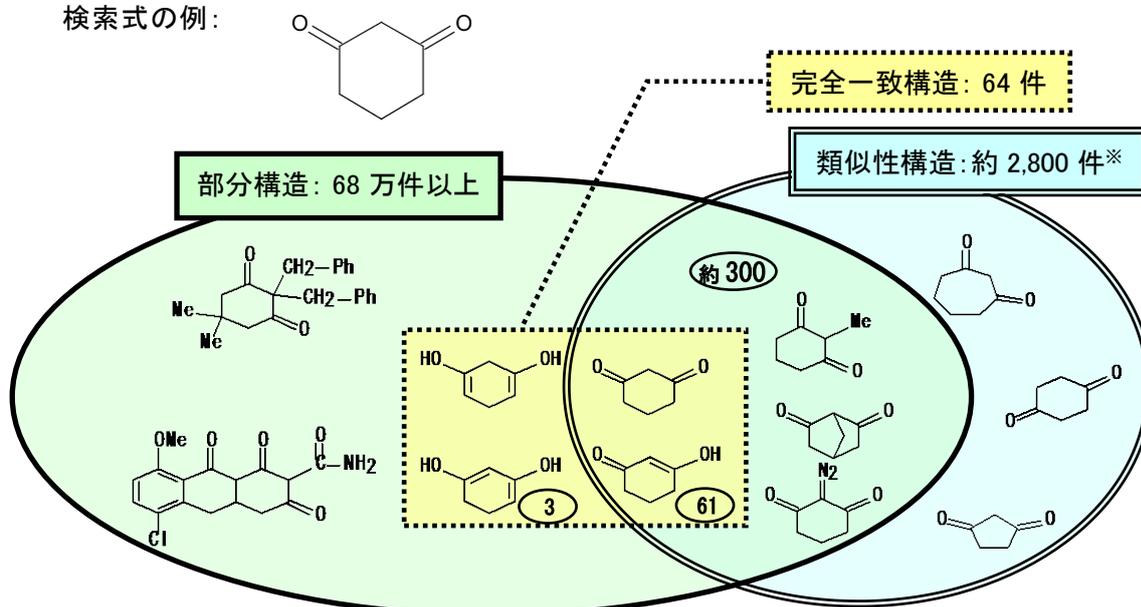
## 化学構造検索

➤ 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:



※類似性スコア 65 以上

## 物質回答の絞り込み・解析

### ◆ 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analyze/Refine)

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

**絞り込み検索**

**解析機能**

**構造式**

**カタログ情報の存在**

**物性情報の存在**

**クリックして構造作図**

**クリックすると観点を選擇できる**

**Show More**

**クリックして解析の詳細表示**

**Refine**

**Structure Editor:**

**Java Non-Java**

**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

**Substance Role**

- Bioactivity Indicators
- Commercial Availability
- Elements
- Reaction Availability
- Substance Role
- Target Indicators

**Antitumor agents (all) 2625**

**Nervous system agents (all) 2512**

**Anti-inflammatory agents (all) 1786**

**Cardiovascular agents (all) 1608**

**Immune agents (pharmaceutical) 1603**

**Anti-infective agents (all) 1433**

**Receptor agonists (all) 1107**

**Antidiabetic agents 1090**

**Cytoprotective agents (all) 858**

**Enzyme inhibitors (all) 280**

**・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**

## 参考(マルクーシュ構造検索)

### 【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、特許クレーム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。

The screenshot shows the SciFinder interface for a Markush search. On the left, under 'SUBSTANCES', the 'Markush' option is highlighted with a red box. A green arrow points to it with the text 'マルクーシュ構造検索'. Below this, the 'Search' button is circled in red. The main area shows a chemical structure editor with 'Non-Java' selected and a search type of 'Substructure'.

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(p.16 参照)にすると、構造が表示されることもあります。

The screenshot shows the SciFinder search results page. The 'Display Options' button is circled in red. The first result is '1. Pyrrolyl-hydroxamates for use in the prevention and/or treatment of bacterial infections'. The second result is '2. Ion-conductive polymeric compound for electrochemical cells'. Both results include chemical structures and abstracts.

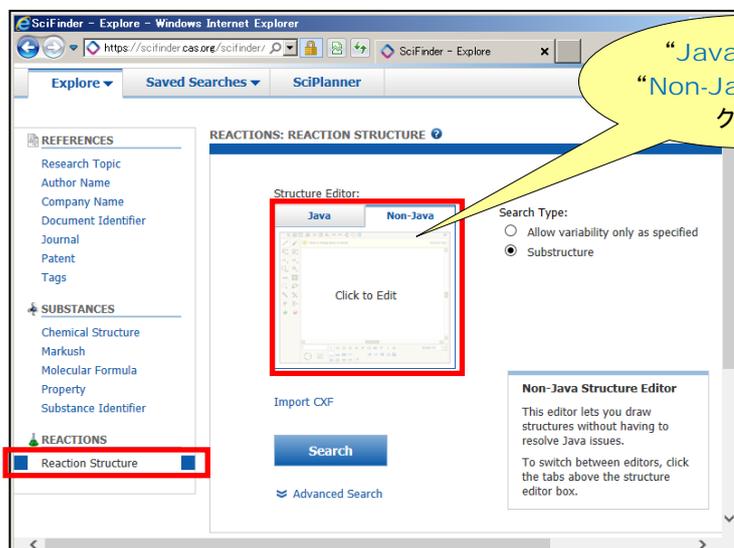
- マルクーシュ構造検索の詳細 [http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb\\_markush.pdf](http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_markush.pdf)

## 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。
- 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。

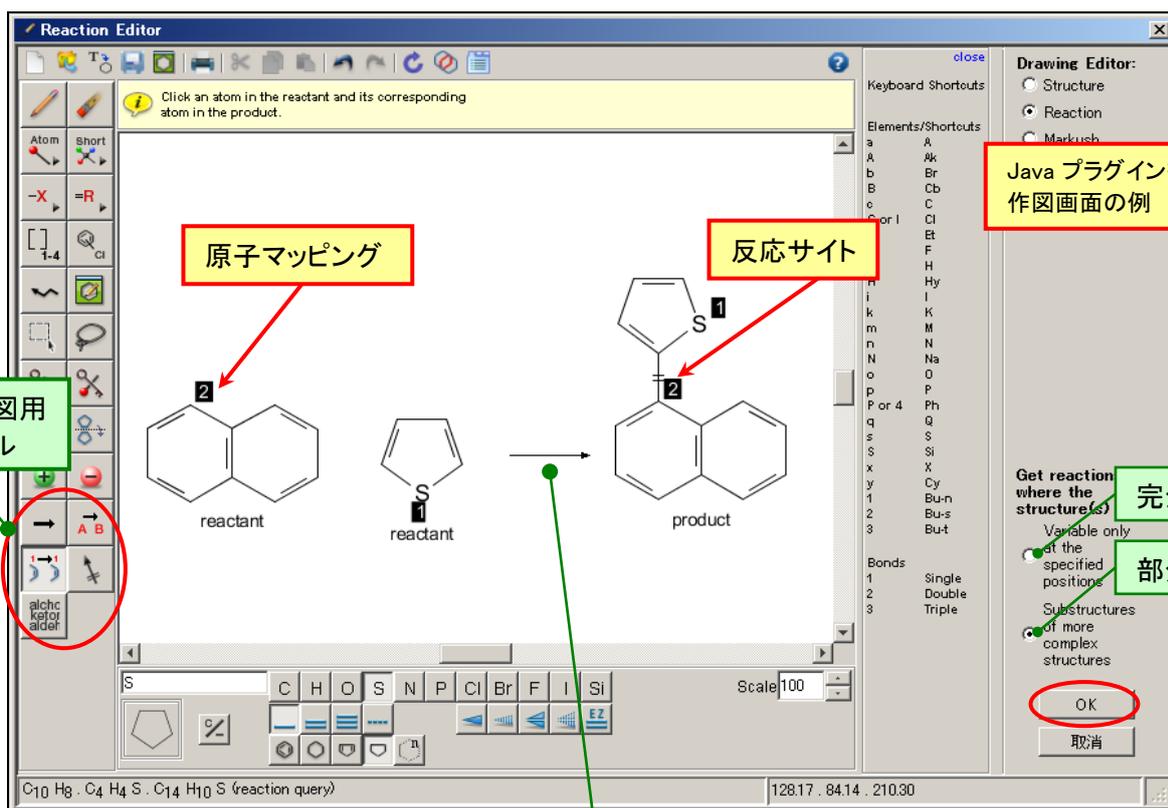
① “Java”タブあるいは“Non-Java”タブを選択し、反応作図画面を起動します。



Java : Java プラグインが必要  
Non-Java: Java プラグインを利用せずに  
構造作図が可能※

※現時点では一部機能に未対応だが、  
将来的には全ての機能に対応予定

② 反応式を作図し、検索条件を選択します。



Java プラグインを利用した  
作図画面の例

完全一致検索

部分構造検索

Get reaction where the structure(s)

Variable only at the specified positions

Substructures of more complex structures

OK

取消

矢印を描き、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 “Search”ボタンをクリックし、検索を実行します。Advanced Search をクリックすると、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。

**Advanced Search**  
をクリックすると  
限定項目が表示される

**溶媒の種類**

**反応に関与しない官能基**

- 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。

1 反応タイプ別、あるいは文献単位別にグルーピングできる。(10万件以下)

2 回答のソートができる。(20,000件以下)昇順・降順の指定も可能。

3 1ページあたりの回答の表示件数(最大50件)や反応式以外の情報の表示・非表示を選択できる。

回答件数

クリックして詳細情報へ

カタログ情報へのリンク

実験項情報

文献情報へのリンク

## 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。

C : 62586-36-1

物質の名称や構造, CAS 登録番号にカーソルを合わせ, 🔍 をクリックすると, 物質情報が確認できる

第 1 段階

第 2 段階

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。

この反応の原料を合成する方法を調べる。  
Synthesize this... をクリックしても同様の結果が得られる。

指定した物質を生成物とする反応

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)

## 反応回答の絞り込み・解析

### ◆ 検索結果の絞り込み・解析機能 (Analyze/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 (Analyze) や 6 種の観点で絞り込み (Refine) ができます。

SciFinder - Reaction Answer Set - Windows Internet Explorer

REACTIONS

Analyze Refine

Group by: [No Grouping] Sort by: [Relevance]

0 of 1397 Reactions Selected

1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step Hover over any structure for more options.

Chemical reaction scheme showing a Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction with a yield of 99%.

Overview

Steps/Stages

1.1 C: Pd(OAc)<sub>2</sub>, C: 564483-18-7, S: BuOH, 15 min, 25°C  
1.2 R: CsOH, S: H<sub>2</sub>O, 1 h, 25°C

Notes

alternative preparation shown, in-situ generated catalyst, Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction, Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 2, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2, Most stages in any one step: 2

References

Room-temperature Suzuki-Miyaura coupling of heteroaryl chlorides and tosylates

解析機能

絞り込み検索

Analyze Refine

Analyze by: ?

Catalyst

Pd(PPh <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	681
PdCl <sub>2</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	177
Pd(OAc) <sub>2</sub>	108
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub>	99
CuI	86
131274-22-1	60
PPh <sub>3</sub>	48
95464-05-4	37
53199-31-8	31
4-DMAP	27

Show More

クリックすると観点を選択できる

Reagent (New)

Author Name

Catalyst

Company-Organization

Complete Iterations

Document Type

Experimental Procedure

Journal Name

Language

Number of Steps

Product Yield

Publication Year

Reagent (New)

Solvent

クリックして  
解析の詳細表示

Analyze Refine

Refine by: ?

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Structure Editor:

Java Non-Java

Click image to change structure or view detail.

Search type: Substructure

Refine

反応式

収率

反応ステップ数

反応分類

反応に関与しない官能基

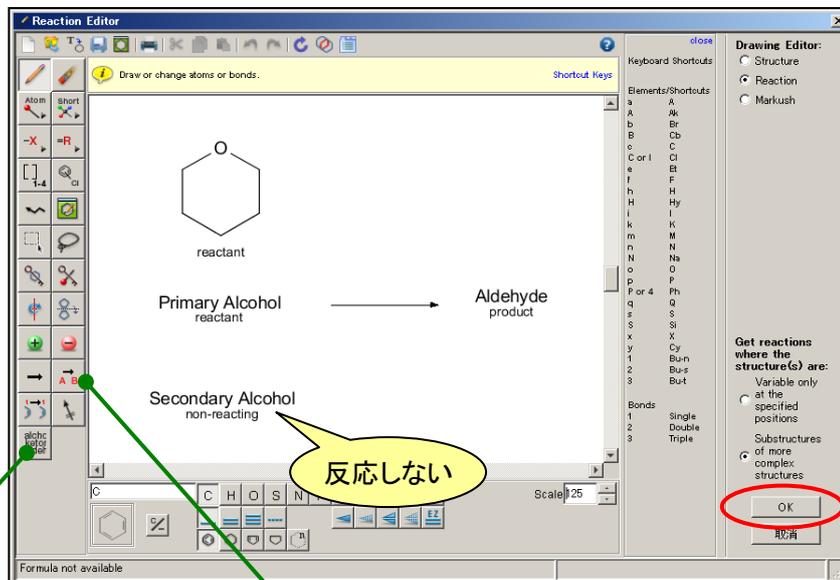
クリックして  
反応作図

- ・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

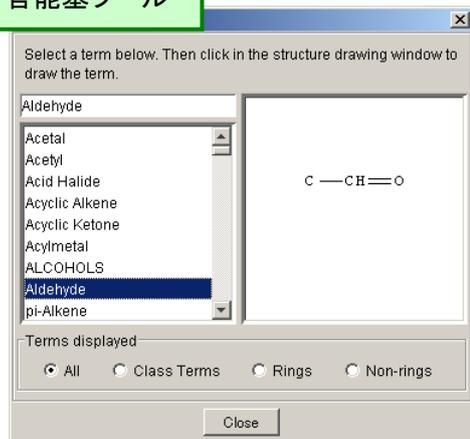
参考

【参考】

官能基名を使えば幅広い検索も可能です。  
また、「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

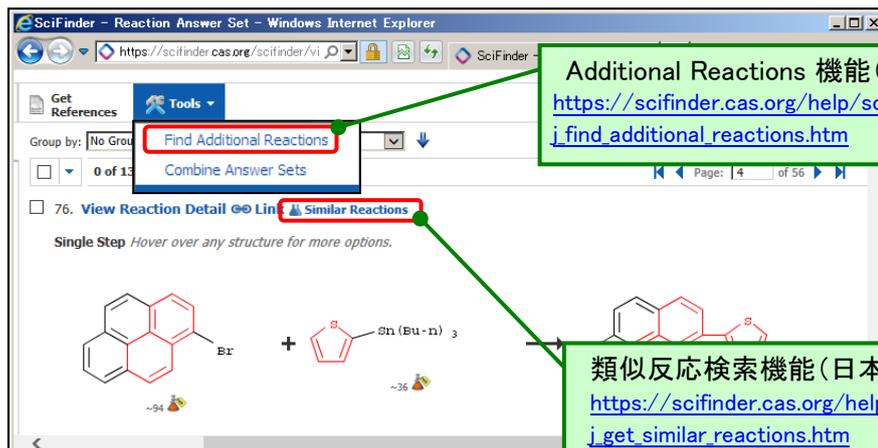


反応ロールツール



※p.34 ③の「反応に関与しない官能基」から指定することも可能です

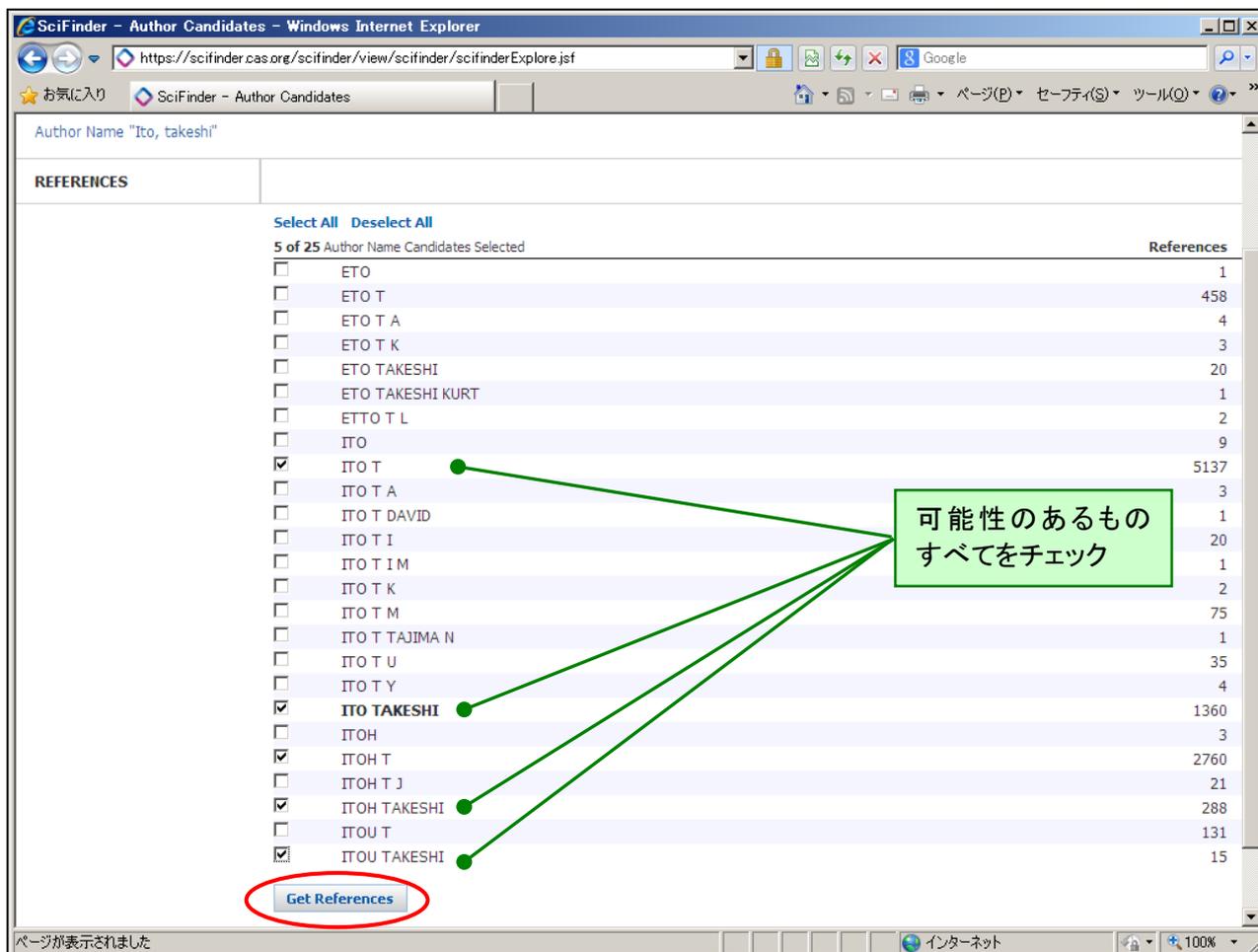
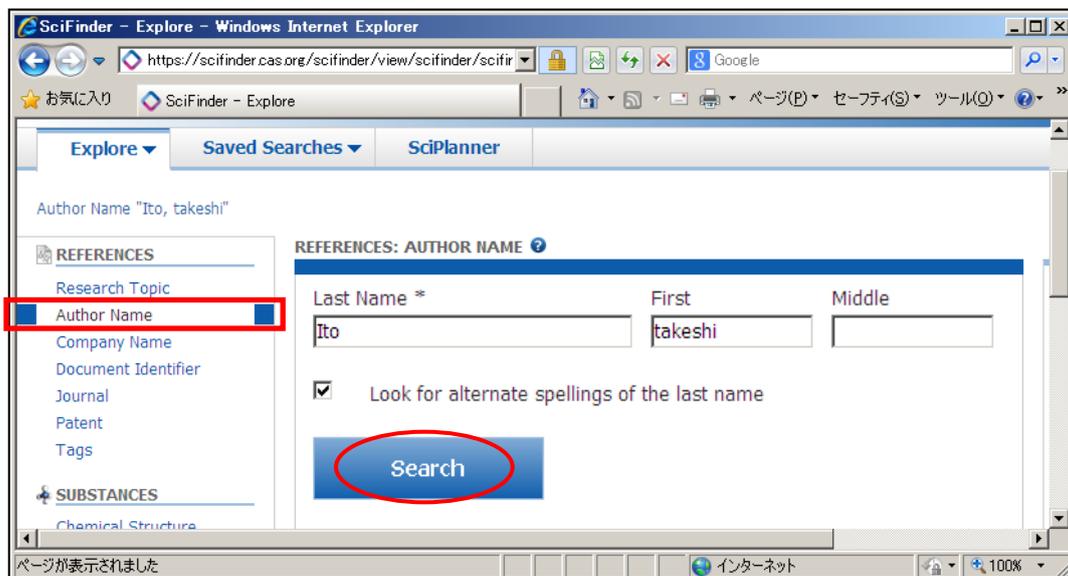
➤ 一段階反応に対しては類似反応検索が実行できます。また、さらなる合成情報を追加表示する Additional Reactions 機能もあります。詳細は下記ヘルプページをご参照ください。



## その他の文献検索

### ◆ 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。

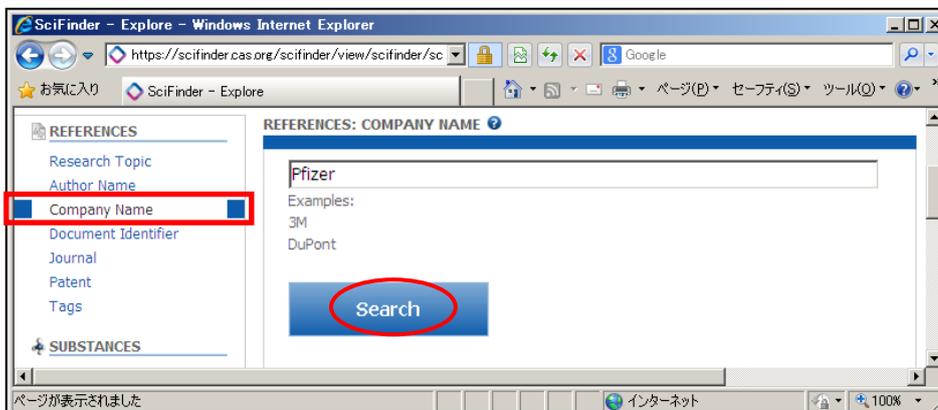


\* 検索結果のノイズを減らすために、著者名検索を行った後、所属機関名等で絞込みを行うことをお勧めします

## その他の文献検索

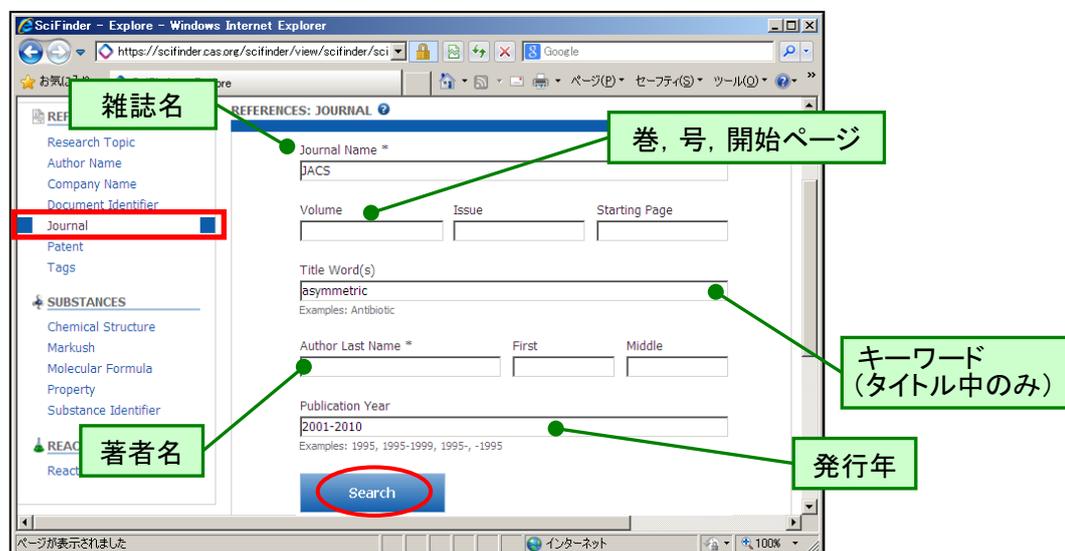
### ◆ 会社名(大学名)検索

- 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.

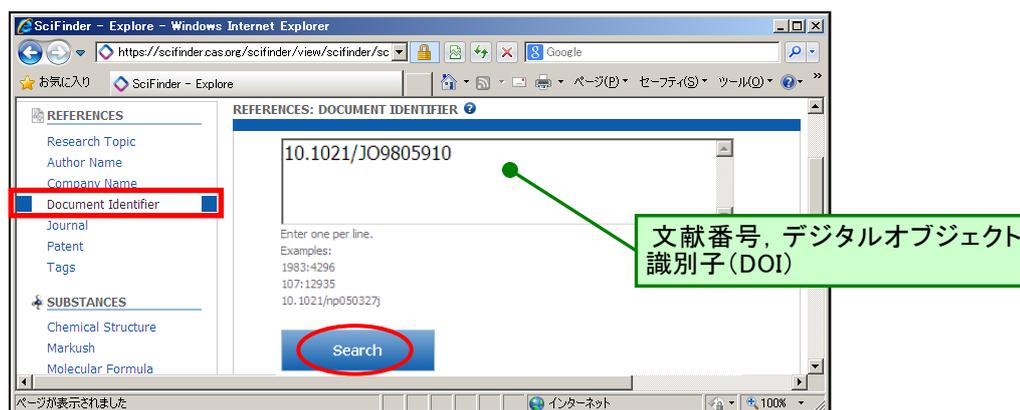


### ◆ 文献情報からの検索

- 著者名や雑誌名, 巻, 号, 開始ページなどの断片的な情報から検索することができます.



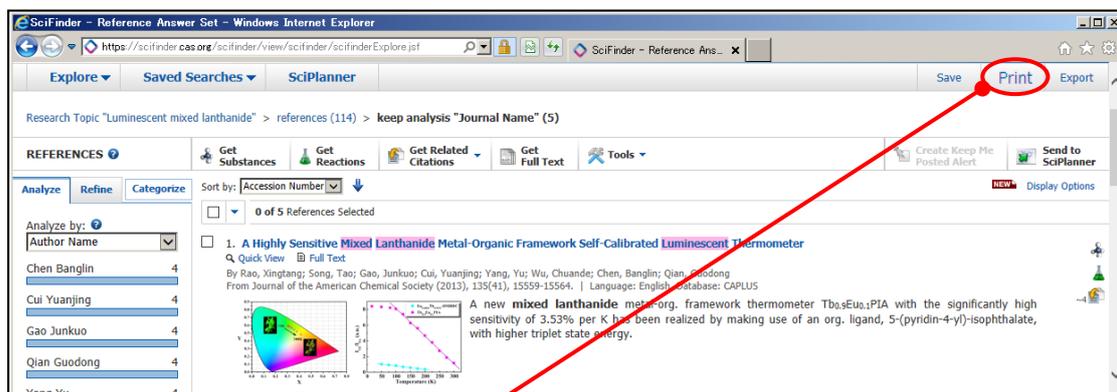
- 雑誌名は正式名称のほか, “JACS”, “J Am Chem Soc”等の略語が使えます.
- 意図しない文献もヒットした場合には, 雑誌名での Analyze (p.20)で限定できます.



## 検索結果の印刷

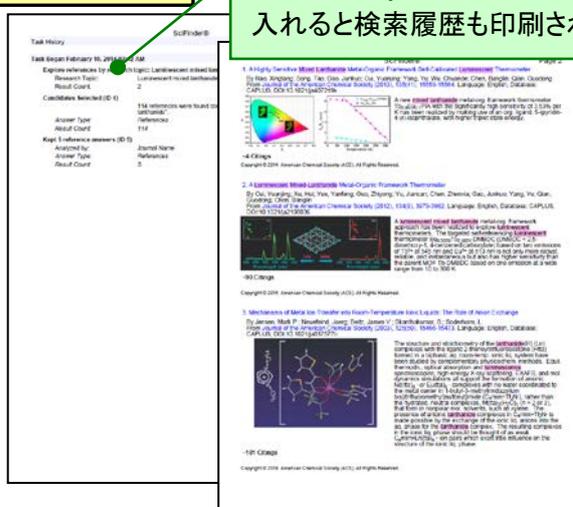
### ◆ 検索結果の印刷

➤ 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)

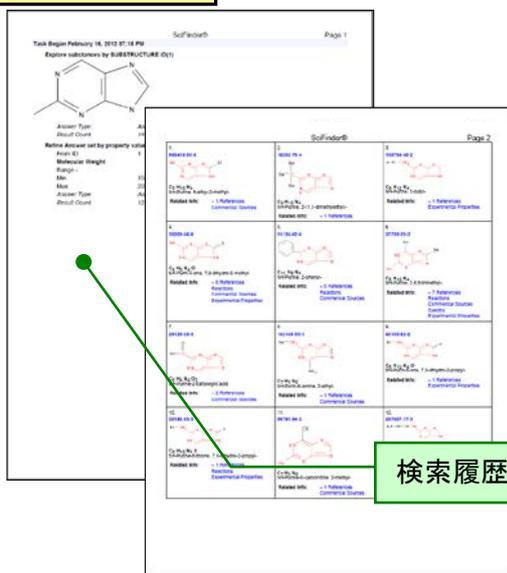


### 印刷例 (文献)

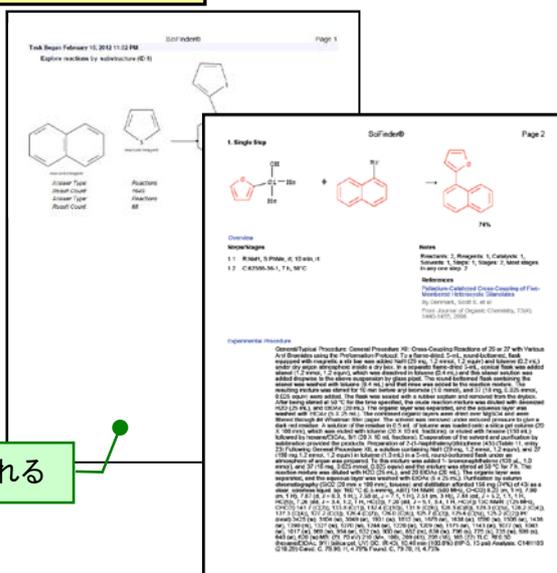
Task History にチェックを入れると検索履歴も印刷される



### 印刷例 (物質)



### 印刷例 (反応)



検索履歴も印刷される

## 検索結果の保存

### ◆ 検索結果の保存

➢ SciFinder の検索結果の保存には、三通りの方法があります。

保存方法	① サーバーへの保存【推奨】 Save
説明	サーバー側にデータ保存 (企業ユーザ 100 集合/ID, 大学ユーザ 50 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ーへ自動保存される。

20,000 件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 20,000 件以下にしてから保存してください。

### ● サーバーへの回答保存

Save This Answer Set

Save:  All answers  Only selected answers

Title: \*  
influenza patents

Description:  
インフルエンザの抗ウイルス剤に関する特許

OK Cancel

ファイル名, コメントは日本語も利用可能

### ● サーバーからの回答の呼び出し

すべての保存回答

SAVED ANSWER SETS

SAVED SEARCHES

0 of 26 Reference Answer Sets Selected

References (26)	Substances (18)	Reactions (9)
<input type="checkbox"/> influenza patents (1685) インフルエンザの抗ウイルス剤に関する特許 Research Topic "antiviral agents for influenza" > references (5873) > refine "Patents only" (1685)	Edit	Link
<input type="checkbox"/> Neuraminidase inhibitor SF (4302)	Edit	Link

SAVED ANSWER SETS

- Reaction2
- shirae
- minotaka
- include failed reaction with patent families
- polypropylene
- heck
- kouzou5
- kouzou4
- 33069-62-4
- Autosaved Substance Set

View All | Import

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)

回答は文献・物質・反応ごとにタブで分けられている

## 検索結果の保存

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、サーバーへの保存と同様。	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。

### ● ダウンロード (Export)

ファイル名は半角英数字のみ(日本語不可)

クリックしてファイルを指定

### ● SciFinder Web 形式で保存した回答の呼び出し

クリックしてファイルを指定

## Keep Me Posted Alert

### ◆ Keep Me Posted Alert 機能（アラート検索機能）

- 実行した検索についてその後も定期的に情報を入手したい場合、Keep Me Posted Alert 機能をご利用ください。検索が定期的に自動実行され、最新情報を簡単に入手できます。

The screenshot shows the SciFinder interface with a search for "antiviral agents for influenza" resulting in 1685 references. The "Create Keep Me Posted Alert" button is highlighted with a red circle. A red arrow points from this button to the "Create Keep Me Posted Profile" dialog box shown in the next image.

**Create Keep Me Posted Profile**

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

**Description:**

Characters Remaining: 1024

**Duration**  
Expires On: Jan 24, 2014 Change

**Frequency**  
Send updates once every

Exclude previously retrieved references.

**Search Strategy:**

- 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
- 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)

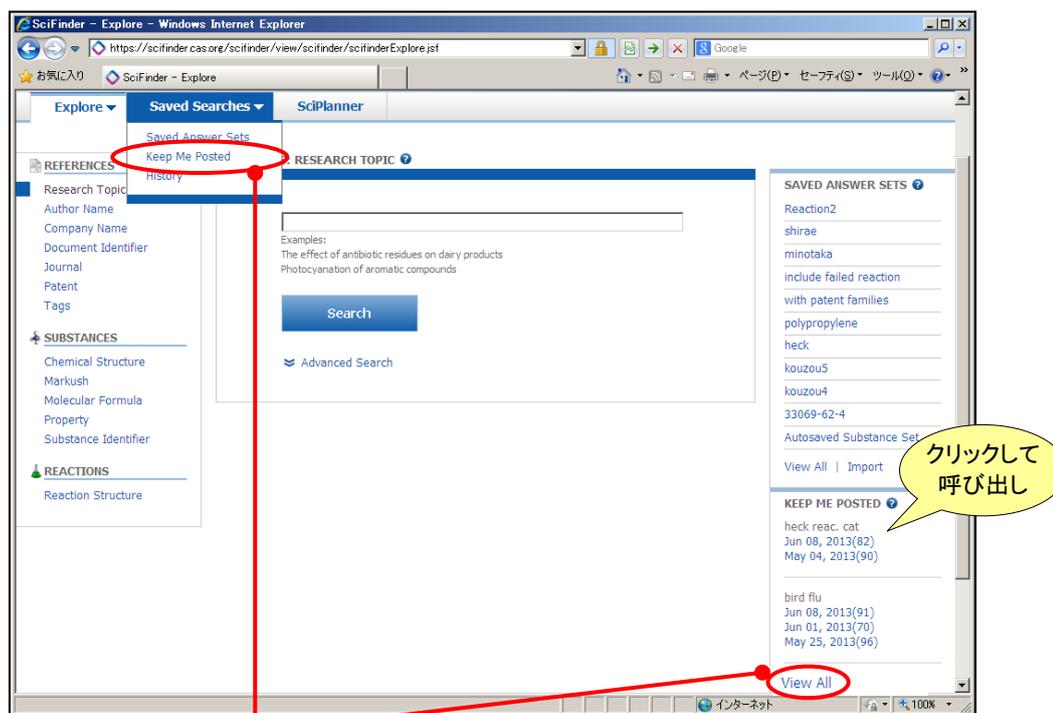
検索頻度の指定(毎週または毎月)

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

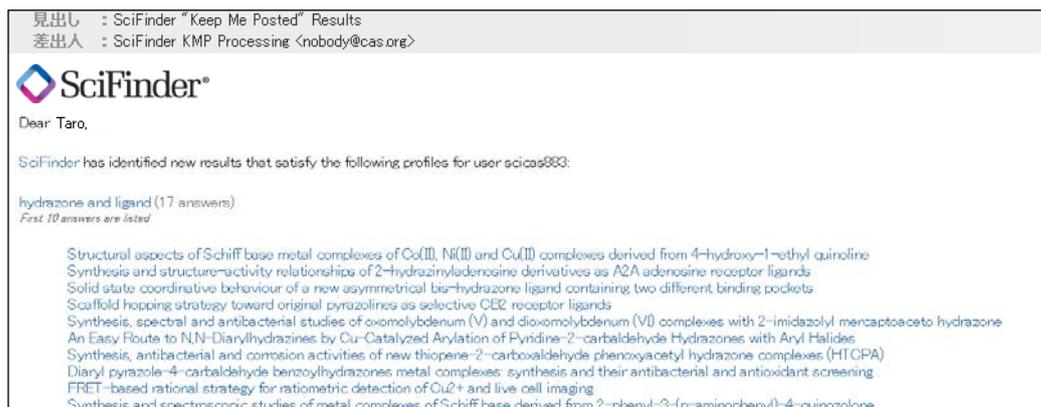
- 自動で検索実行された際に、ヒット件数をメールで受信できます（ゼロ件の時は配信なし）。
- メールは、ID 取得時の登録アドレスに配信されます。
- Create Keep Me Posted Alert ボタンをクリックできない回答集合では質問式登録はできません。

## Keep Me Posted Alert

- アラート検索結果の呼び出し



- 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 10 件分のタイトルも配信)



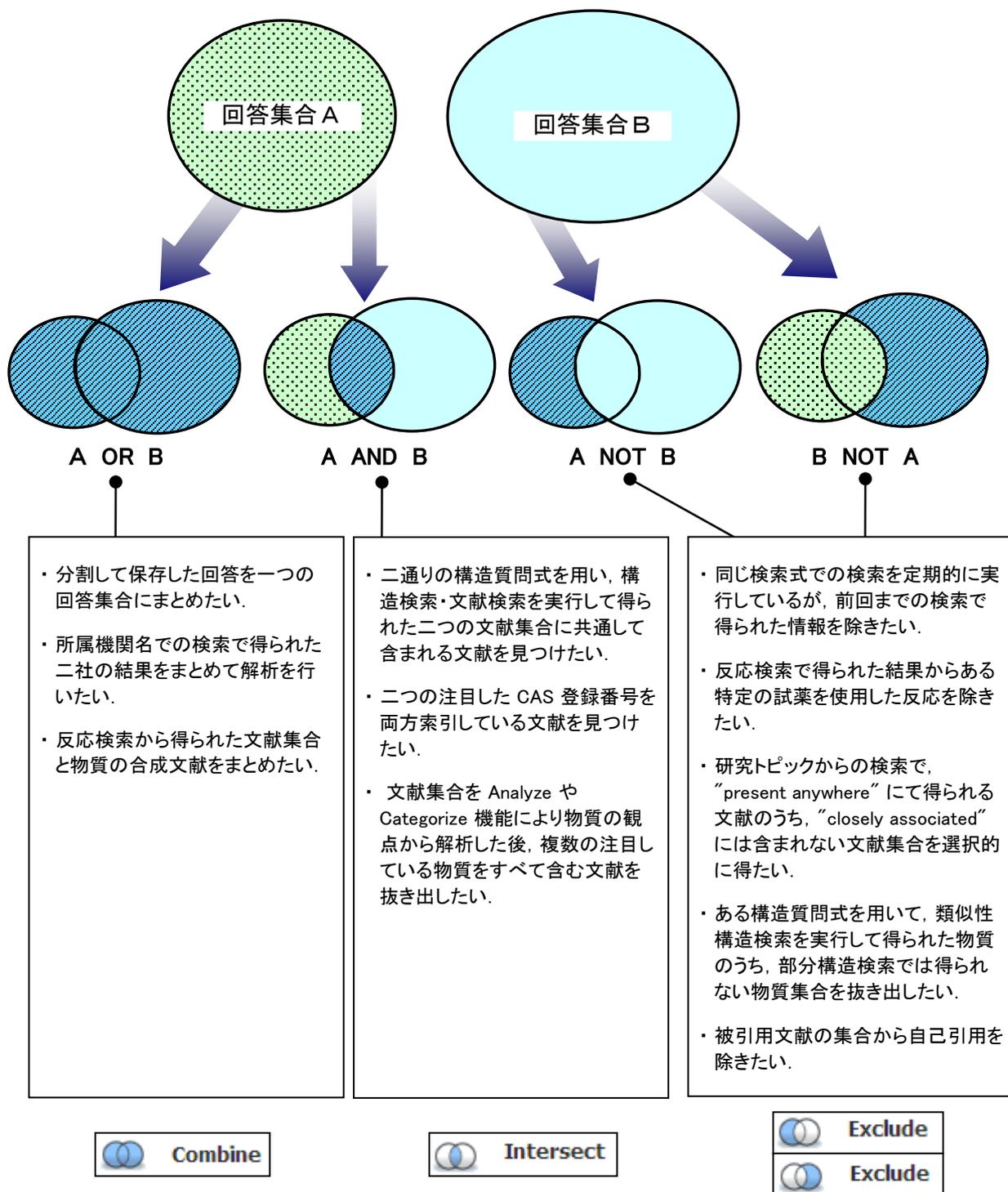
- Keep Me Posted 機能の詳細...

上記ヘルプページへのリンク  をクリックし、表示されるヘルプページ右上の日本語をクリック

## Combine 機能

### ◆ Combine 機能

- SciFinder で得られた回答集合同士を演算することができます。この機能を利用することにより、いくつかに分け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、あらかじめサーバーへ保存します(→ p.41).
- ② Tools メニュー内の「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.

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

Research Topic "suzuki coupling" > references (15402) > refine "nickel catalysis" (386)

Tools

- Remove Duplicates
- Combine Answer Sets
- Add Tag

261. **Nickel-Catalyzed trans-Alkynylboration of Alkynes via Activated**  
 By Yamamoto, Akshiko; Suginome, Michinori  
 From Journal of the American Chemical Society (2005), 127(45), 15706-15707. | Language: English, Database: CAPLUS

Reaction of (diisopropylamino)chloroboryl ethers of alkynols with alkynylstannanes in the presence of nickel catalysts afforded formal trans-alkynylboration products in good yields. Thus, Ni(cod)<sub>2</sub>/PPh<sub>3</sub> catalyzed reaction of iPr<sub>2</sub>NB(Cl)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>C≡CET with Bu<sub>2</sub>SnC≡CPh in PhMe followed by base mediated treatment with pinacol and acetic anhydride gave 85% AcOCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>C(B(pin))<sub>2</sub>C≡C≡CPh. The products were isolated as pinacol

- 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。

Combine Answer Sets

Select saved answer set(s) to combine with your current answer set (386):

26 Answer Sets 1 Selected

- IGZO (2260) Apr 29, 2013
- heck reaction (4469) Jan 24, 2013
- phosphine free (1155) Jan 24, 2013
- sonogashira reaction and copper (910) Jan 24, 2013

Select an option for combining the answer sets:

- Combine Include all answers from both sets
- Intersect Include only answers that appear in both sets
- Exclude Include only answers from current answer set (386) that are not in heck reaction (4469)
- Exclude Include only answers from heck reaction (4469) that are not in current answer set (386)

Combine Answer Sets Cancel

- 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。

SciFinder - Reference Answer Set - Windows Internet Explorer

Research Topic "suzuki coupling" > references (15402) > refine "nickel catalysis" (386) > Combine Reference Answer Sets "heck reaction (4469)" (51)

REFERENCES

Sort by: Accession Number

0 of 51 References Selected

16. **Cu-Catalyzed Carbon-Heteroatom Coupling Reactions un**  
 Bases  
 By Huang, Yao-Bing; Yang, Chu-Ting; Yi, Jun; Deng, Xiao-Jian; Fu, Yao; |  
 From Journal of Organic Chemistry (2011), 76(3), 800-810. | Language:

Resin-bound or ammonium-type salts in tetraalkylphosph bases. With th coupling with

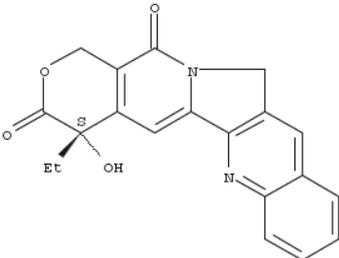
- ・ 検索時のハイライトは反映されない
- ・ 演算後の集合の Keep Me Posted Alert 登録は不可
- ・ 類似性構造検索のスコアは表示されない
- ・ 保存した回答同士の演算も可能

## Bioactivity Indicator, Target Indicator

### ◆ Bioactivity Indicator, Target Indicator

- Bioactivity Indicator, Target Indicator 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:** 7689-03-4  
C20H16N2O4  
 1H-Pyrano[3',4':6,7]indolizino[1,2-b]quinoline-3,14(4H,12H)-dione, 4-ethyl-4-hydroxy-, (4S)-  
 1H-Pyrano[3',4':6,7]indolizino[1,2-b]quinoline-3,14(4H,12H)-dione, 4-ethyl-4-hydroxy-, (S)-; Camptothecin (7CI); (+)-Camptothecin; (+)-Camptothecin; (S)-(+)-Camptothecin; (S)-Camptothecin; 20(S)-Camptothecin; 20(S)-Camptothecin; Camptothecin; Camptothecin; MAG-CPT; NSC 94600; d-Camptothecin



Absolute stereochemistry, Rotation (+).

~6,138 References  
 Document Types: Book, Conference, Dissertation, Journal, Patent, Preprint, Report

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Reactions	✓	✓	✓	✓
Uses	✓	✓	✓	✓

**Bioactivity Indicators**

Category	References
Anti-infective agents (all) >> Antibiotics	221
Anti-infective agents (all) >> Antiviral agents	115
Anti-infective agents (all) >> Fungicides	50
Anti-inflammatory agents (all) > Anti-inflammatory agents	157
Anti-inflammatory agents (all) > Antirheumatic agents	66
Antiproliferative agents (all) > Antiproliferative agents	52
Antitumor agents (all) > Alkylating agents MD biological	213
Antitumor agents (all) > Antiangiogenic agents	172
Antitumor agents (all) > Antitumor agents	2310

**Target Indicators**

Category	References
Apoptosis-regulating proteins (all) > Apoptosis-regulating proteins	14
Apoptosis-regulating proteins (all) > Bax proteins	52
Apoptosis-regulating proteins (all) > Bcl-2 proteins	82
Apoptosis-regulating proteins (all) > Bcl-x proteins	41
Apoptosis-regulating proteins (all) > Inhibitor of apoptosis proteins	25
Cell cycle regulatory proteins (all) > Cell cycle regulatory proteins	17
Cell cycle regulatory proteins (all) > Checkpoint kinase 1	41

Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | Get Full Text | Tools | Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

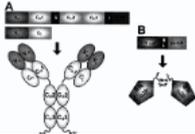
Sort by: Accession Number

0 of 115 References Selected

1. Targeting interferon-λ with antibodies potently enhances anti-tumor and anti-viral activities

Quick View | Full Text | PDF

By Chang, Chien-Hsing; Goldenberg, David M.; Liu, Donglin  
 From U.S. Pat. Appl. Publ. (2013), US 20130136718 A1 20130530. | Language: English, Database: CAPLUS



The authors disclose the therapeutic use of dock-and-lock technol. for forming complexes of interferon-λ with an antibody or antigen-binding antibody fragment. In one example, Fab-DDD2 modules, derived from the humanized antibodies hRS7 (anti-Trop2), hMN15 (anti-CEACAM6), hL243 (anti-HLA-DR) or c225 (chimeric anti-EGFR), were dimerized and linked with AD2-IFN-λ1 to produce the immunocytokines (E1)-λ1, (15)-λ1, (C2)-λ1 and (c225)-L1, resp. The authors obsd. that the hRS7 Fab dimer in

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 : α-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

### ◆ SciPlanner (サイプランナー)

- 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。

The image shows the SciFinder SciPlanner interface. At the top, the 'SciPlanner' tab is highlighted with a red circle. Below it, a list of reactions is shown, with the 'View Reaction Detail' option checked. A red arrow points from this option to a detailed reaction scheme in the SciPlanner workspace. The workspace shows a multi-step synthesis of an axially chiral aminophosphine. The reaction scheme includes reagents like  $\text{Ph}_2\text{P}-\text{Ph}$ ,  $\text{K}^+$ , and  $\text{H}_2\text{O}$ . A red box highlights the 'Send to SciPlanner' button in the top right of the reaction list. Three green boxes labeled '文献タブ' (Literature tab), '物質タブ' (Substance tab), and '反応タブ' (Reaction tab) are positioned above the workspace. A red arrow points from the 'Send to SciPlanner' button to the workspace. The workspace has a 'ワークスペース' (Workspace) label at the bottom left and a 'ライブラリ' (Library) label at the bottom right. A red box highlights the 'Clear Reactions' button in the top right of the workspace.

- ・ 取りまとめた結果はダウンロード可能
- ・ 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 1000
- ・ 1つの物質が関与できる反応数は 6
- ・ プロジェクトの共有も可能(最小単位の同一研究グループ内)

- SciPlanner 機能の詳細

[http://www.jaici.or.jp/sci/elearning/sciplanner\\_JP.htm](http://www.jaici.or.jp/sci/elearning/sciplanner_JP.htm)

## APPENDIX (収録対象誌例)

### ◆ SciFinder [CAplus ファイル] が収録する文献情報

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録しています。この中で主要 1,500 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

#### ◆ 化学分野

- Journal of the American Chemical Society
- Journal of Physical Chemistry (A, B, C)
- 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 (Oxford, United Kingdom)
- Journal of Environmental Quality
- Environmental Science & 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, C)
- New England Journal of Medicine
- Clinical and Vaccine Immunology
- Nature Medicine (New York, NY, United States)
- Experimental and Clinical Endocrinology & Diabetes
- Experimental & Molecular Medicine
- Journal of Clinical Investigation

#### ◆ 農学・栄養学分野

- Experimental Animals
- Journal of Insect Physiology
- Journal of Animal Science (Champaign, 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 (Tokyo, Japan)

#### ◆ 材料工学分野

- Materials Science & Engineering (A, B, C)
- Biomacromolecules
- Journal of Biomedical Materials Research (A, B)
- Journal of Materials 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 (A, 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/content/references/corejournals>

## 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 생물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
高分子化学	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
	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	工業炭水化水素	Industrial Carbohydrates
	応用化学・化学工学	45	工業有機化学製品, 皮革, 脂肪, ロウ
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
物理化学・無機化学・分析化学		61	水
	62	精油, 化粧品	Essential Oils and Cosmetics
	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	磁氣的現象	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 の利用推奨 OS とブラウザ

- ・ 動作確認済みの環境

(2014 年 2 月現在)

推奨 OS	推奨ブラウザ			
	Internet Explorer	Firefox	Safari	Google Chrome
Windows XP Professional (SP1 以降)	7.0・8.0	26.0 以上 24.0 (ESR <sup>※1</sup> )	—	31.0 以上
Windows Vista (Business, Enterprise, Ultimate)	7.0・8.0・9.0			
Windows 7	8.0 以上			
Windows 8	10.0 (デスクトップ版)			
Windows 8.1	11.0 (デスクトップ版)			
Mac OS X 10.6(10.6.2 以降)	—		5.0・5.1	31.0 以上 <sup>※2</sup>
Mac OS X 10.7			5.1・6.0・ 6.1	
Mac OS X 10.8			6.0・6.1	
Mac OS X 10.9			6.0	

※1 Firefox の ESR (法人向け延長サポート版) について

<http://www.mozilla.jp/business/downloads/>

※2 Java プラグインを利用した構造作図ツールは起動しない

### ◆ ブラウザの設定

- ・ Java スクリプトの有効化
- ・ Cookies の有効化
- ・ ActiveX の有効化 (Internet Explorer の場合)

### ◆ 構造作図ツール

- ・ Non-Java 作図ツール : 追加の設定は不要
- ・ Java プラグインを利用した作図ツール : Java プラグインのインストールが必要

最新版は Java 公式サイトからダウンロード

<http://www.java.com/ja/>

Java Runtime Environment (JRE) Version 7 update 51 以上が推奨.  
Java コントロールパネルの「セキュリティ」タブ中にある例外サイトに  
SciFinder の URL (<https://scifinder.cas.org/>) の追加が必要.

### ◆ 最新の推奨環境

- ・ <http://www.cas.org/products/scifinder/system-requirements-web> (CAS サイト: 英語)
- ・ <http://www.jaici.or.jp/sci/SCIFINDER/require.html> (化学情報協会サイト: 日本語)

### ◆ 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)

### ◆ 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).