

SciFinder の新機能

～マルクーシュ検索と実験項の表示～

石神 祥子*

SciFinder は、Chemical Abstracts Service (CAS) が開発したオンライン検索サービスである。化学関連分野を中心に幅広い科学情報を提供しており、現在世界中の企業および教育機関の研究者に利用されている。SciFinder は機能強化およびシステムの改良を重ね、現在では Web 版の利用が主流になりつつある。本稿では、SciFinder Web 版の最近の強化点として、MARPAT ファイルを対象としたマルクーシュ構造検索と反応情報検索の回答画面における実験項情報の表示について紹介する。

キーワード：SciFinder, SciFinder Web 版, マルクーシュ構造検索, 反応検索, 実験項表示

1. はじめに

SciFinder は、アメリカ化学会の一部門である Chemical Abstracts Service (CAS) が開発したエンドユーザー向けのオンライン検索サービスである。化学関連分野を中心に、医薬、生化学、物理、工学等も含めた幅広い科学情報を提供しており、現在世界中の数十万人の企業研究者および世界 1,700 校（うち国内 170 校）の教育機関の研究者に利用されている。

SciFinder は、1995 年に専用ソフトウェアを使用するシステムとしてサービスを開始した。その後、ソフトウェア版のバージョンアップにともなって機能強化され、2007 年からは Web ブラウザを利用したインターフェース (SciFinder Web 版) の提供を段階的に開始した。現在では Web 版の利用が主流になりつつある。SciFinder Web 版は、ほぼ四半期ごとにバージョンアップが行われ、新たな検索機能の追加を含むさまざまな強化が実施されている¹⁾²⁾³⁾。

本稿では、SciFinder Web 版独自の最近の強化点として、マルクーシュ構造検索と反応情報検索の回答画面における実験項情報の表示について紹介する。

2 マルクーシュ構造検索

2.1 マルクーシュ構造検索とは

マルクーシュ構造とは、化学分野の特許に見られる化学物質の表現法の 1 つであり、複数の選択肢がある置換基について、その選択肢を可変構造式で表したものである。例えば、図 1 にあるマルクーシュ構造が特許に記載されていたと仮定する。マルクーシュ構造には 2 つの置換基があり、各々 2 つの官能基が指定されている。これは仮想的に $2 \times 2 = 4$ 通りの物質を表現していることになる。一方、実施例中には A と B の 2 物質のみ記載されていたとする。

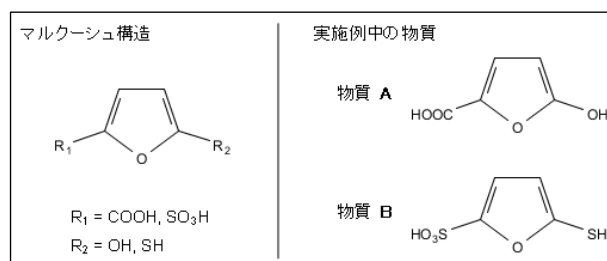


図 1 マルクーシュ構造と実施例中の化合物

通常の SciFinder の構造検索では、特許請求範囲や実施例において具体的に記載されている化学物質（上記の場合は、物質 A および B）が検索対象である。よって、残りの 2 つの構造（例えば $R_1 = \text{COOH}$, $R_2 = \text{SH}$ の構造）で検索した場合には、この特許は見つけれない。一方、2010 年 8 月のバージョンアップにおいて導入されたマルクーシュ構造検索を利用すれば、図 1 で表現されているいずれの置換基の組み合わせの構造を使ってもこの特許が検索できる。

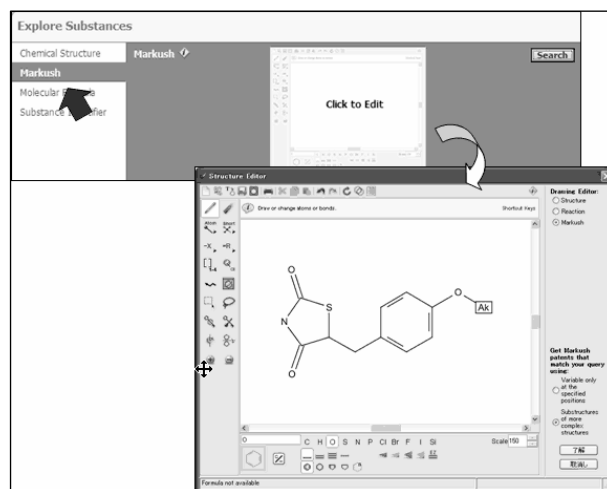


図 2 マルクーシュ構造検索画面と作画画面

*いしがみ さちこ (社)化学情報協会 情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4

Tel. 03-5978-3601

(原稿受領 2011.2.18)

2.2 検索画面と結果

マルクーシュ構造検索の機能はきわめて高度であるが、検索自体は通常の構造検索と同様、容易に行うことができる。物質検索項目の「Markush」から作図画面を起動、構造を作図し（図 2）、「了解」ボタンをクリックすると作図した構造が検索画面に反映される。検索画面で「Search」ボタンをクリックするとマルクーシュ構造検索が実行される。

マルクーシュ構造検索の結果は文献（特許）リストとして表示される（図 3）。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る。

Figure 3 shows a search results page for Markush structures. It displays two patent entries with chemical structures and text descriptions. The second entry includes a detailed description of a compound with substituents R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , and R_5 .

図 3 マルクーシュ構造検索結果

この例では、154 件の文献がヒットした。一方で、同じ構造を使って通常の部分構造検索を実行すると 220 件の文献が見つかった。ヒットした文献の内訳は図 4 のような集合関係になる。斜線部分がマルクーシュ構造検索でのみ見つかった特許、すなわち図 1 で言えば A あるいは B 以外の構造でヒットした特許である。

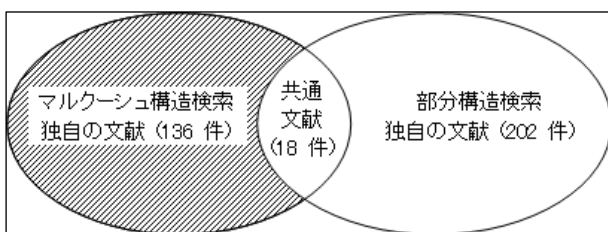


図 4 部分構造検索とマルクーシュ構造検索結果の比較

このように、SciFinder には構造が特定された具体的な化学物質だけでなく、マルクーシュ構造を対象に検索する機能が備えられている。両方の機能を使えば、より多くの特許情報が得られ、新規性調査を行う上で非常に有用なツールであると言える。

3 反応情報の強化

3.1 SciFinder における反応検索

反応検索は SciFinder の主要機能の 1 つである。SciFinder の反応情報には、1840 年以降の雑誌論文や特許に記載された 2,900 万件以上の有機化学反応（一段階反応と多段階反応）と 1,360 件の合成情報が収録されており、化学反応式を使って生成物だけでなく原料や試薬を含めて検索できる。また、完全一致検索（作図した構造に完全に一致）と部分構造検索（作図した構造を部分的に含む）の 2 種類の検索が行えるなど、有機合成化学に関する精度の高い検索ができるのが特徴である。

反応検索を行う際は、まず反応検索の初期画面から作図モジュールを起動し、反応式を作図する。反応式中には、生成物（Product）のほか、反応物（Reactant）/試薬（Reagent）などの指定ができる。反応部位の指定や反応物と生成物の原子の対応付け（マッピング）もでき、よりノイズの少ない確かな検索が実行できる。

Figure 5 shows the SciFinder reaction search interface. It includes the 'Explore Reactions' window with a 'Click to Edit' button and the 'Reaction Editor' window for drawing and editing chemical structures.

図 5 反応検索画面と作図画面

3.2 反応検索結果における実験項の表示

検索を実行すると、回答画面の各レコードには反応スキームや反応条件、出典情報などが表示される。

2010 年 12 月のバージョンアップにおいて、SciFinder の反応情報に一部の雑誌および特許由来の実験項情報が収録されるようになった。実験項情報には、論文中に記載された NMR やマススペクトルなどの物質同定情報も収録されている。情報源は、現在 Journal of the American Chemical Society, Journal of Organic Chemistry などの ACS（米国化学会）が発行する雑誌および最近 5 年間の特許であり、今後さらに拡大する予定である。有機合成分野における ACS 発行誌の重要性は誰しも認めるところであり、化学反応検索をよく利用するユーザーであれば待ちに待った機能といえるであろう。また、解析（Analysis）により実験項情報のある文献とない文献とを分けることができる。さらに、反応物と生成物以外の情報が反応スキーム

図6 反応情報結果画面(実験項表示)

図7 Analysisによる解析

と切り離して表示されるようになっている。

今回の強化によって、詳細な実験条件などをその場で確認できるようになり、反応の取捨選択を手早く行うことができる。

4 おわりに

SciFinder は、特別なトレーニングなしに使えるように設計された検索ツールであり、企業あるいは教育機関を問わず、研究の各局面において活用されている。Web版はリリース以降、年に数回の強化がなされてきているが、今後も同様のペースでコンテンツ、機能の両面でバージョンアップを続ける予定である。なお、開発元のCASは利用ユーザーからの要望を重視しており、本稿で紹介した機能もユーザーから要望の多かった機能であった。要望をお持ちの方は、ぜひ弊協会の営業担当者やヘルプデスクまでお知らせいただきたい。また、CASでは、今後SciFinderの新機能追加はWeb版でのみ実施し、将来的にはサービスをWeb版に一本化することを表明している。クライアント版を利用されている皆様もWeb版独自の機能をご活用いただくためにも、Web版への移行をご検討いただきたい。

SciFinderの最新機能やさまざまな検索方法に関する情報は、化学情報協会ホームページ⁴⁾のほか、メールマガジン「SciFinder ニュースレター」⁵⁾でも紹介している。SciFinderに興味のある方はぜひご登録いただき、有効に活用いただければ幸いである。

参考文献

- 1) SciFinder (Web版)の新機能紹介. 2010年8月.
http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201008.pdf
[accessed 2011-02-20].
- 2) SciFinder (Web版)の新機能紹介. 2010年12月.
http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201012.pdf
[accessed 2011-02-20].
- 3) 福井啓二郎. SciFinder (Web版). 薬学図書館. 2009, vol.54, no.2, p.143-146.
- 4) 化学情報協会ホームページ
<http://www.jaici.or.jp/> [accessed 2011-02-20].
- 5) SciFinder ニュースレター
<http://www.jaici.or.jp/sci/sfnews/> [accessed 2011-02-20].

Product review: Recent enhancements on SciFinder ~Markush searching and display of experimental procedures~. Sachiko ISHIGAMI (Japan Association for International Chemical Information, Information Services and Marketing Division, Nakai Bldg., 6-25-4 Honkomagome, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0021 JAPAN)

Abstract: SciFinder is a research discovery tool that allows you to explore the CAS databases containing breadth of scientific information. SciFinder is currently used by researchers from commercial, governmental, and academic institution all over the world.

Since the release of the web version, SciFinder has been making improvements on a quarterly basis, and now the Web version has become the main platform. In this article, recent enhancements on SciFinder Web version, specifically Markush searching and display of experimental procedure, are discussed.

Keywords: SciFinder / SciFinder Web / Markush structure searching / reaction searching / experimental procedure