

SciFinder の新機能

—SciPlanner 機能とソートオプションの強化—

村野 亮*

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、SciPlanner 機能、ソート機能の強化、SciFinder Mobile を紹介する。

キーワード: SciFinder, SciFinder (Web 版), SciPlanner, ソート機能, SciFinder Mobile

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 (クライアント版) 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⁾⁴⁾。

本稿では、SciFinder (Web 版) の最近の強化点として、SciPlanner 機能、ソート機能の強化、SciFinder Mobile を紹介する。

2. SciPlanner 機能

2.1 SciPlanner 機能とは

SciPlanner 機能は、検索結果を視覚的にわかりやすく取りまとめる機能として、2011 年 4 月のバージョンアップでリリースされた。これまで何度かにわけて検索した結果を取りまとめるためには、それぞれの検索結果をダウンロードして手作業で編集する必要があった。SciPlanner 機能を利用すれば、SciFinder 上で検索結果を一画面上に取りまとめることができる。以下に反応検索結果の取りまとめを例に、手順を追って具体的内容を説明する。

まず、回答表示画面にて取りまとめた回答にチェックを入れ、画面上部に表示されている「Send to SciPlanner」をクリックする (図 1)。すると SciPlanner に回答が送信される。

つぎに、画面右上の「SciPlanner」のリンクをクリックすると、ツールが起動し、先ほどチェックを入れた情報が

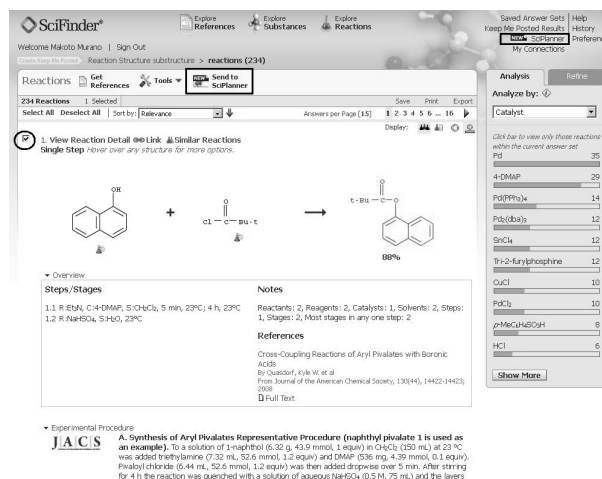


図 1 SciPlanner へのリンク

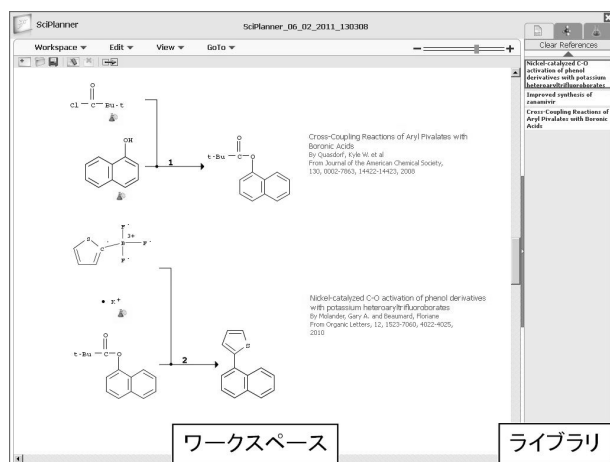


図 2 SciPlanner 画面構成

*むらの まこと 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 中居ビル
Tel. 03-5978-3601 (原稿受領 2011.6.3)

画面右側のライブラリに表示される。この情報を、画面左側のワークスペース上に自由に配置することができる(図2)。別の検索で得られた回答に対しても同様の操作を繰り返せば、一画面上に複数の検索結果が取りまとめることができる。SciPlanner 上には、文献・物質・反応の検索結果いずれも配置可能である。

2.2 合成経路設計への利用

合成ルート探索を行った検索結果を SciPlanner に配置した場合、複数の反応の間で共通の化合物が存在することがある。たとえば、反応 A の生成物が反応 B の反応物となっているような場合である。SciPlanner では、物質をマウスでドラッグして重ね合わせることで反応スキームを一体化することができる(図3)。このように、個別の反応を組み合わせて多段階反応を検討することができる。

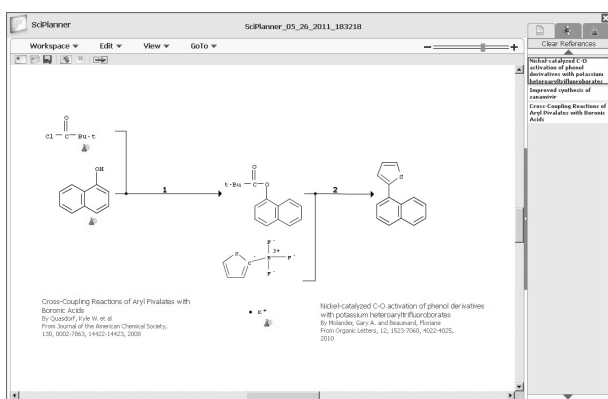


図3 一体化した反応スキーム

2.3 Participant Search 機能

共通する物質が存在しない二つの反応スキームを結合するための機能も用意されている。図4に示すように別々の反応スキーム中、他の反応を用いて結合させたい二つの物

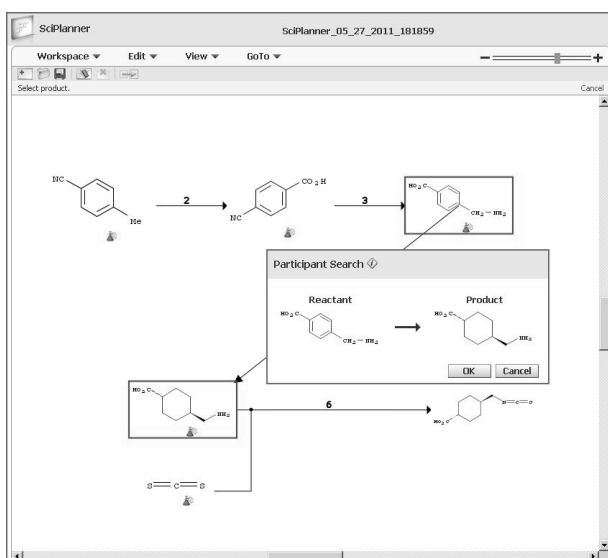


図4 Participant Search 機能

質を指定することにより、それらをつなぐ反応検索が実行される。

2.4 SciPlanner 上でのリンク・検索機能

SciPlanner の特徴の一つは、取りまとめた結果から、さらなる検索を行うことができる点である。図3に示した例を使って SciPlanner に配置した情報から、リンクを含む各種機能について紹介する。

各反応スキームには番号がついており、クリックすると試薬・触媒・溶媒といった反応関与物質および収率情報を確認することができる(図5)。

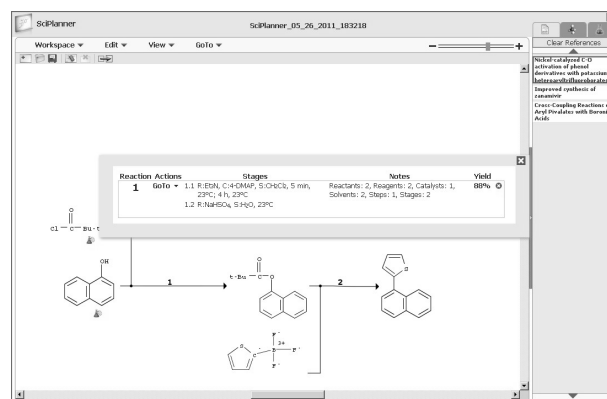


図5 反応条件の表示

また、各物質にはリンクが張られており、マウスを物質に合わせ、右上をクリックするとメニューが表示される(図6)。ここから物質の詳細情報の確認や該当物質が関与するさらなる反応検索の実行が可能である。また、物質の下に三角フラスコアイコンが表示されている物質は、カタログ情報をもつ物質であり、メニューから該当項目を選択すると販売する業者を一覧できる。

なお、物質の右上のルーペアイコンをクリックすると構造式が拡大されるので、複雑な構造式を確認したい場合に利用できる。

ここでは紙面の都合上、化学反応に絞って機能を紹介したが、SciPlanner では文献や物質についても同様に画面上

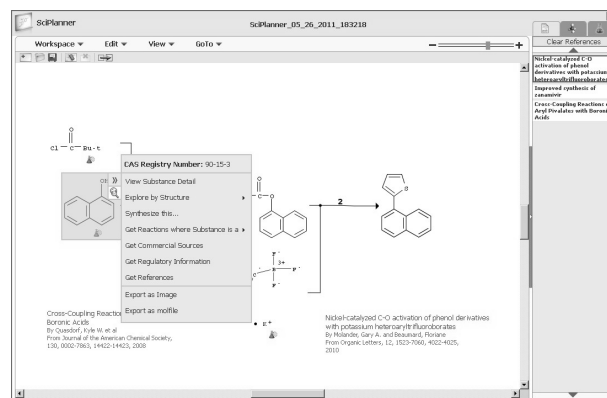


図6 反応関与物質のポップアップメニュー

での自由なレイアウトやリンク・検索機能を利用できるような設計されている。つまり、単にきれいな印刷画面を作るためだけでなく、これまで手書きやワープロソフトでのコピー&ペーストで行ってきた研究のプランニングを支援するために設計されている。ぜひ、現在行っている研究・実験にお役立ていただきたい。

3. その他の機能強化

3.1 反応ソート機能の強化

SciFinder では反応検索の結果は、以前は「新しい順」に表示されていた。これにより、以前に同じ検索を実行した以降に追加された回答を容易に閲覧することができる利点がある。一方、より新しい回答、すなわち最初の方に表示される回答が自分にとって必要度の高いものであるとは限らないため、必要な回答にたどり着くのに手間と時間がかかるという欠点もあった。この課題を解決するために、SciFinder (Web 版) では新たなソート項目が提供されている。

まず反応検索では、2010年12月のバージョンアップの際に作図した構造質問式への「類似順」にソートが可能となり、このソート順がデフォルトに設定された(図7)。これにより、検索直後の状態ですでに適合率の高い順に回答が並ぶことになり、利用者にとって使い勝手が向上した。従来の新しい順に並べるソートオプションも引き続き利用できるもので、新しく追加された反応だけをチェックしたいユーザーはソートオプションを変更すればよい。

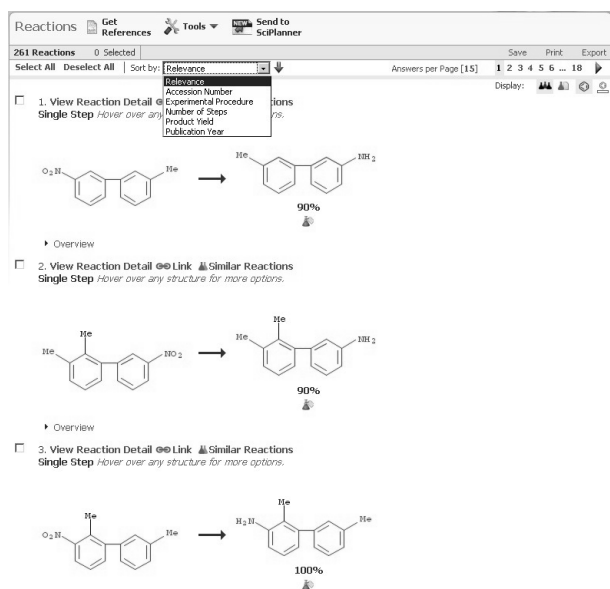


図7 反応検索結果のソート

3.2 文献ソート機能の強化

文献ソートについても、2011年4月のバージョンアップにより強化され、引用文献数によるソートが可能となった(図8)。引用回数が多い文献は、それだけ重要度が高い文献であると考えられるので、得られた文献情報を重要度の

高い順に閲覧することができる。ただし、SciFinder で利用している文献データベースである CPlus ファイルで引用情報が入力されているのは、1994年後半以降の主要雑誌に対してのみである点に注意する必要がある。

図8 文献検索結果のソート

3.3 SciFinder Mobile の提供開始

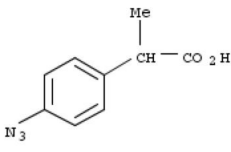
2011年4月から SciFinder Mobile が利用できるようになった。これは近年普及が進んでいるスマートフォン用にデザインされた SciFinder である(図9, 10)。機能は限られているものの、場所を選ばずに検索を行えるメリットがある。

SciFinder Mobile は SciFinder (Web 版) との連携が図られており、SciFinder (Web 版) でオンラインに保存した回答や Keep Me Posted 登録(アラート検索)の結果を SciFinder Mobile で確認することもできる。現時点では1日あたりの閲覧件数は100件までの上限がある。

図9 SciFinder Mobile メニュー画面

iPod 14:24
Substance 1 of 1

CAS Registry Number: 70672-44-5



CA Index Name: Benzeneacetic acid, 4-azido- α -methyl-

References: ~ 8

▼ Show less

Additional Chemical Names 2-(p-Azidophenyl)propionic acid;Azidoprofen

Experimental Property Information:

Property	Value	Condition
Melting Point	54-55 °C	

図 10 SciFinder Mobile 物質表示画面

なお、SciFinder Mobile は企業および大学の定額・エンタープライズ契約により利用しているユーザーが利用対象である。大学での SciFinder Mobile の利用には同時利用者数の制限はない。また IP アドレスによるアクセス制限がないため、学外からでも利用できる。

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。すでに大学では 2011 年末に Web 版のみに一本化されることが決まっている。今回紹介した Web 版独自の機能をご活用いただくためにも、クライアント版を利用されている皆様には 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 の最新情報は、化学情報協会ホームページ⁵⁾のほか、メールマガジン「SciFinder ニュースレター」⁶⁾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たい。ホームページでは、e-ラーニング教材⁷⁾も提供しているので、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 12 月. http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201012.pdf [accessed 2011-06-01].
- 2) SciFinder (Web 版) の新機能紹介. 2011 年 4 月. http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_201104.pdf [accessed 2011-06-01].
- 3) 福井啓二郎. SciFinder (Web 版). 薬学図書館. 2009, vol.54, no.2, p.143-146.
- 4) 石神祥子. SciFinder の新機能 ～マルクージュ検索と実験項の表示～. 情報の科学と技術. 2011, vol.61, no.5, p.207-209.
- 5) 化学情報協会ホームページ <http://www.jaici.or.jp/> [accessed 2011-06-01].
- 6) SciFinder ニュースレター <http://www.jaici.or.jp/sci/sfnews/> [accessed 2011-06-01].
- 7) SciFinder e-ラーニング <http://www.jaici.or.jp/sci/elearning/index.html> [accessed 2011-06-01].

Product review: Recent enhancements on SciFinder –SciPlanner and sort feature–. Makoto MURANO (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 SciPlanner feature, newly available sort options and SciFinder Mobile, are discussed.

Keywords: SciFinder / SciFinder Web / SciPlanner / sort feature / SciFinder Mobile