

HOW TO

SciFinder (Web 版) の新機能紹介



2010年3月

SciFinder®の今回のバージョンアップでは、新たな構造作図機能、反応検索および結果の表示、回答集合の演算など様々な機能が強化されました。また検索パフォーマンスも向上しましたので、SciFinder をより快適にお使いいただくことができますようになりました。

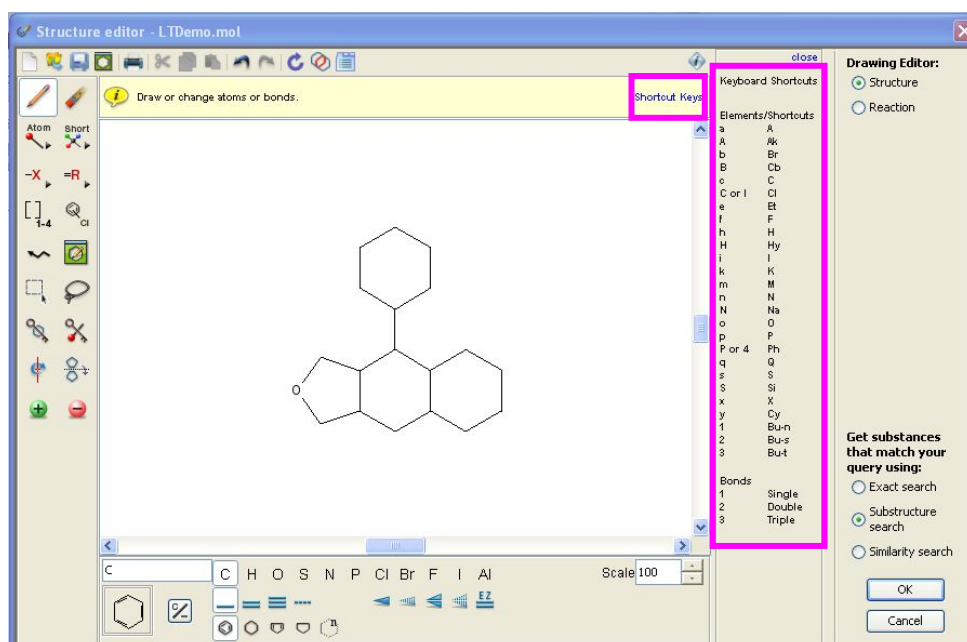
◇構造作図画面の新機能

キーボードショートカット* および ChemDraw からのペースト

1. ペンシルツールのキーボードショートカット機能を使うと、作図した構造にある原子や結合をマウスでハイライトしキー入力するだけで修正することができます。

(構造作図画面の右上にある Shortcut Keys をクリックすると、キーボードショートカットのリストが表示されます)

2. 結合をクリックすると結合次数(単結合、二重結合、三重結合)が変えられます。
3. 炭素原子を選択した状態で、作図した構造上の炭素原子をクリックすると結合を一つ伸ばすことができます。
4. ChemDraw で描いた構造式を SciFinder の構造作図画面にペーストできます。 ※1※2



※1 100%正確にコピー＆ペーストできるとは限りませんので、必要に応じて修正した上で検索してください。

※2 Macintosh をご利用の場合、現時点では OS 10.4 および 10.5 が対応しています。将来的に OS 10.6 にも対応予定です。

* Web 版独自の機能です。

◇反応検索と回答表示の新機能

反応に関与しない官能基の指定

反応に関与しない官能基 (Non-participating Functional group) とは、反応の前後で何も変化しない官能基です。

反応に関与しない官能基の指定は検索前の限定機能、もしくは検索後の絞込機能で行えます。

反応式を作図後、リストの中から反応に関与しない官能基を選択します。

Reaction Structure substructure > reactions (122)

Explore Reactions

Reaction Structure Reaction Structure

Search

Click image to change structure or view detail

Search type: Allow variability only as specified Substructure

Solvent(s) Select Solvents

Non-participating Functional Group(s)

Close NEW

View: All 217

1 Selected Clear Selections

- Ketimine
- KETONES
- Lactam
- Lactone
- Mesityl
- Metal Arene
- Metal Carbene
- Metal Carbonyl
- Metal Cyclopentadienyl
- Metal Halide
- Metal Hydride

Reactions must have all selections any selection

たとえばラク톤を反応に関与しない官能基に指定して反応検索(部分構造)を行うと、より絞った検索結果が得られます。

Reaction Structure substructure with limiters > reactions (108)

Reactions Get References Find Additional NEW! Combine Answer Sets

108 Reactions 0 Selected Keep Selected Remove Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Entry Order Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 7 8 Display: [Icons]

1. Reaction Detail Link Similar Reactions

EtSH +
1.1 R: BF₃·Et₂O, S: CH₂Cl₂, rt → -15°C, 1 h, -15°C
1.2 R: C₅H₅N, 10 min, -15°C

Absolute stereochemistry.
Rotation (-).

Absolute stereochemistry.

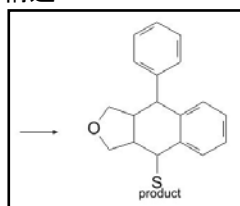
Additional Reactions 機能は、反応検索では得られない合成情報を追加表示するための機能です。

質問構造には適合しているが、反応検索では得られなかった物質に関する化学合成情報 (Synthetic preparation のルールが付与) を文献データベースから見つけてきます。なお原料や条件等については回答には直接表示されませんので、文献で確認します。

右では、まず生成系のみ作図した反応検索を実行し、122 反応が得られた例を示しています。

次に、画面上部の Find Additional Reactions をクリックします。

質問構造



反応検索



Additional Reactions 機能

Additional Reactions 機能によりさらに 187 の合成情報が得られ^{※3}、もとの結果とあわせると、回答は 309 件になりました。

Additional Reactions 機能で得られた回答(レコード)には反応条件や反応物の情報は記載されておりません。

なお、結果の解析は可能です。

※3 当初の反応検索で生成物としてヒットした物質の追加の合成情報は、Additional Reactions 機能で得られる回答には含まれません。このような情報を得たい場合には、あらかじめ物質の化学構造検索を実行した後、Get References オプションで「Preparation」による限定を行って得られる文献を参照ください。

* Web 版独自の機能です。

反応表示の強化 – 物質のカタログ情報*

反応物および生成物のうち、
カタログ情報が存在する物質
にはカタログアイコンが表示さ
れるようになりました。

The screenshot shows the 'Reaction Structure' software interface. The main window displays a chemical reaction with a reactant that has a small catalog icon (a yellow triangle with a 'C') next to it. The reaction conditions are: 1.1. $\text{Ri:BP}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$, $\text{Ri:CH}_2\text{Cl}_2$, $\text{rt} \sim -15^\circ\text{C}$; 1.2. $\text{Ri:C}_6\text{H}_6$, 10 min, -15°C . The analysis panel on the right shows the following catalyst counts: Et₃N: 9, (EtO)P(=O)CN: 4, AcOH: 3. A 'Show More' button is visible at the bottom of the analysis panel.

アイコン※4をクリックする
と、直接カタログ情報が表
示されます。

The screenshot shows the 'Commercial Sources' panel. It lists 74 commercial sources for Podophyllotoxin. The first six sources are:

- 3B Scientific Corporation Product List (Supplier Name: 3B Scientific Corporation, Catalog Publication Date: 1 Jan 2010, Order Number: HSL000105, Quantity: 5g, 518-28-5 Podophyllotoxin)
- ABCR Product List (Supplier Name: ABCR GmbH KG, Catalog Publication Date: 11 Apr 2007, Order Number: AB167099, Quantity: 25 mg, 518-28-5 (-)-Podophyllotoxin)
- ACC Corp. Chemical Compounds Catalog (Supplier Name: American Custom Chemicals Corp., Catalog Publication Date: 21 May 2009, Order Number: HSL000105, Quantity: 100mg, 1g, 10g, 100g, 518-28-5 Podophyllotoxin)
- Acros Organics (Supplier Name: Thermo Fisher Scientific, Catalog Publication Date: 12 May 2008, Order Number: 22841, Quantity: 100mg, 518-28-5 Podophyllotoxin)
- AK Scientific Product Catalog (Supplier Name: AK Scientific, Inc., Catalog Publication Date: 1 Jan 2010, Order Number: 70716, Quantity: 100g, 1g, 25g, 5g, 518-28-5 Podophyllotoxin)
- ALDRICH (Supplier Name: Sigma-Aldrich, Catalog Publication Date: 1 Jan 2010, Order Number: 856447, Quantity: 1 g, 518-28-5 Podophyllotoxin)

※4 アイコンが表示される物質はカタログ情報のある物質の中で、反応中の役割が生成物もしくは反応物の場合のみです(触媒や溶媒にはアイコンは表示されません)。触媒や溶媒のカタログ情報を表示する場合は、物質をクリックし、現れるポップアップメニューから Commercial Sources を選択してください。

This screenshot illustrates the workflow for accessing catalog information. A context menu is shown over a catalog icon on a reactant. The 'Commercial Sources' option is highlighted in pink. This leads to a detailed view of commercial sources for Dichloromethane (CH₂Cl₂), listing 7 suppliers such as AMRR Product List, Alfa Aesar, and Acros Organics.

* Web 版独自の機能です。

◇よく利用する試薬・化成品供給業者(Preferred Suppliers)の指定*

詳細情報の表示

会社名をクリックして、試薬情報の詳細を表示します。

Create Keep Me Posted Reaction Structure substructure > reactions (122) > commercial sources (74) > ALDRICH

Commercial Sources

74 Commercial Sources 1 Selected Keep Selected Remove Selected Print Export

Select All Deselect All Sort by: Catalog Name Answers per Page [20] 1 2 3 4

- 1. 3B Scientific Corporation Product List
Supplier Name: 3B Scientific Corporation, Catalog Publication Date: 1 Jan 2010
Order Number: 382-5384, Quantity: 5g
518-28-5 Podophyllotoxin
[Link](#)
- 2. ABCR Product List
Supplier Name: ABCR GmbH KG, Catalog Publication Date: 11 Apr 2007
Order Number: AB167899, Quantity: 25 mg
518-28-5 (-)-Podophyllotoxin
[Link](#)
- 3. ACC Corp. Chemical Compounds Catalog
Supplier Name: American Custom Chemicals Corp., Catalog Publication Date: 21 May 2009
Order Number: HBL0000185, Quantity: 100mg, 1g, 10g, 100g
518-28-5 Podophyllotoxin
[Link](#)
- 4. Acros Organics
Supplier Name: Thermo Fisher Scientific, Catalog Publication Date: 12 May 2008
Order Number: 22841, Quantity: 100mg
518-28-5 Podophyllotoxin
[Link](#)
- 5. AK Scientific Product Catalog
Supplier Name: AK Scientific, Inc, Catalog Publication Date: 1 Jan 2010
Order Number: 70719, Quantity: 100g, 1g, 25g, 5g
518-28-5 Podophyllotoxin
[Link](#)
- 6. ALDRICH
Supplier Name: Sigma-Aldrich, Catalog Publication Date: 1 Jan 2010
Order Number: 858447, Quantity: 1 g
518-28-5 Podophyllotoxin
[Link](#)

よく利用する供給業者の指定

新設された Status 項目をクリックして Preferred を選択すると、よく利用する供給業者として指定できます。

逆に、Non Preferred を選択することもできます。初期設定は Unclassified です。

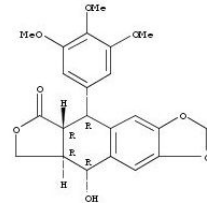
Create Keep Me Posted Reaction Structure substructure with limiters > reactions (108) > commercial sources (74) > ALDRICH

Commercial Source Detail

Link Print Export Previous Next

6. ALDRICH

Catalog Information Catalog Publication Date: 1 Jan 2010 Order Number: 858447 Quantity: 1 g, Price: contact supplier	Substance Information CAS Registry Number: 518-28-5 Podophyllotoxin
--	--



Absolute stereochemistry. Rotation (-).

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

Supplier Name	Address	Contact Information	Status
Sigma-Aldrich	P O Box 14508 St. Louis, MO 63178 USA	Phone: 1-800-325-3010 Phone: 1-314-771-5765 Phone: 1-314-771-5750 (Call Collect) Fax: 1-800-325-5052 Fax: 1-314-771-5757 Web: http://www.sigma-aldrich.com Please see website for additional locations around the world.	Status <small>NEW</small> Preferred Non Preferred Unclassified

* Web 版独自の機能です。

一覧画面での、よく利用する供給業者の閲覧

よく利用する供給業者として指定した情報は保存され、その後の別物質の表示の際にも注記が付与されます。

さらにソートおよび解析で利用することもできます。

Commercial Sources

83 Commercial Sources 0 Selected Keep Selected Remove Selected Print Export

This chemical supplier information is provided on an "as is" basis. Please consult the suppliers for current information regarding pricing, regional availability, available quantities, purities, etc. THERE ARE NO WARRANTIES OF ANY KIND, EITHER EXPRESSED OR IMPLIED. ACS is not liable for any loss of profit, goodwill or any other damages arising out of the use of this information.

Select All Deselect All Sort by: Supplier Preference Answers per Page [20] 1 2 3 4 5

32. ALDRICH ✓ Catalog is associated with a preferred supplier(s)
Supplier Name: Sigma-Aldrich, Catalog Publication Date: 24 Nov 2009
Order Number: 290734, Quantity: N/A
280-57-9 Dabco(R) 33-LV
Link

4. Fluka ✓ Catalog is associated with a preferred supplier(s)
Supplier Name: Sigma-Aldrich, Catalog Publication Date: 24 Nov 2009
Order Number: 33480, Quantity: 100g, 500g
280-57-9 1,4-Diazabicyclo[2.2.2]octane purum, ≥95.0% (NT)
Link

3. SIAL ✓ Catalog is associated with a preferred supplier(s)
Supplier Name: Sigma-Aldrich, Catalog Publication Date: 24 Nov 2009
Order Number: D27802, Quantity: 25g, 100g, 500g, 2kg
280-57-9 1,4-Diazabicyclo[2.2.2]octane ≥99%
Link

79. SIGMA ✓ Catalog is associated with a preferred supplier(s)
Supplier Name: Sigma-Aldrich, Catalog Publication Date: 24 Nov 2009
Order Number: D2522, Quantity: 25g, 100g, 500g
280-57-9 1,4-Diazabicyclo[2.2.2]octane

Analyze by: Supplier Preferences

Click bar to view only those commercial sources within the current answer set.

SIGMA-ALDRICH, ST. LOUIS, USA 4

VWR INTERNATIONAL, LLC, WEST CHESTER, USA 4

Unclassified 74

Non Preferred 1

Show More

よく利用する供給業者情報の編集

Preferences に My Suppliers というオプションが用意されました。

よく利用する供給業者情報の追加・削除を行うには、Add/Edit Suppliers をクリックします。

My Suppliers Add/Edit Suppliers

Return to Preferences

Preferred Suppliers (1) Click 'x' to remove supplier from preferred list.

Supplier Name	City	Country
AURORA FINE CHEMICALS LLC	SAN DIEGO	USA

Non-Preferred Suppliers (0) Click 'x' to remove supplier from non-preferred list.

You currently have no Non Preferred suppliers.
To add suppliers to a list, click Add/Edit Suppliers, then locate a supplier, and designate a preference.

Add/Edit Suppliers をクリックするとポップアップが現れます。

Supplier Name に追加・削除を行いたい供給業者の英語名を入力し、Find をクリックします。

供給業者の情報が表示されます。Preferred を選択すると、よく利用する供給業者として指定できます。

逆に、Non Preferred を選択することもできます。初期設定は Unclassified です。

Add/Edit Suppliers

Supplier Name: Tokyo Chemical Industry Find
Example: DuPont

Supplier Name	City Country	Status
TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD. (TOKYO KASEI KOGYO CO., LTD.) (OVERSEAS SALES OFFICE)	TOKYO JAPAN	Preferred
TOKYO CHEMICAL INDUSTRY UK LTD	OXFORD UNITED KINGDOM	Non Preferred

Save Cancel

◇その他の機能の利便性向上

表示した回答の Combine への利用

これまでは、Combine 機能を利用するためには、組み合わせたい回答をすべてサーバ上に保存する必要がありました。

機能強化により、検索直後の回答を、サーバ上に保存済みの回答と組み合わせることができるようになりました。

この機能を利用するためには、まず検索を実行し、表示画面上部の「Combine Answer Sets」をクリックします。

Reactions Save Print Export

77 Reactions 0 Selected Keep Selected Remove Selected Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 Display: [Icons]

1. Reaction Detail

Oc1ccc(O)c(C=O)c1 + iPrBr + Oc1ccc(O)c(C=O)c1 + C#CC(C)(C)C(C)(C)C + CC(=O)OC +

Oc1ccc(O)c(C=O)c1 + t-BuSi(C)(C)C#C + Oc1ccc(O)c(C=O)c1

converging, R:K₂CO₃, R:mCPBA, R:NaOH, R:I₂, R:Cu(OAc)₂, R:DMF, R:Disodium carbonate, R:LiCl, R:AlCl₃, R:NH₄Cl, R:Br₂, R:Na₂S₂O₃, R:NaHCO₃, R:BuLi, R:MnO₂, C:Pd(OAc)₂, C:Pd(PPh₃)₄, S:DHF, S:CH₂Cl₂, S:H₂O, S:MeOH, S:AcOH, S:C₅H₅N, S:ClCH₂CH₂Cl, S:Dioxane, S:THF

Combine Answer Sets ウィンドウが表示されますので、組み合わせたい回答を選択し、演算のタイプを選択し、Combine を実行します。

Combine Answer Sets

Select saved answer set(s) to combine with your current answer set (295):

reaction Answer Set Details	Date Saved
<input type="checkbox"/> quercetin as reactant (11551) Reaction Structure substructure > reactions (11551)	Jun 16, 2009
<input type="checkbox"/> quercetin as product (2233) Reaction Structure substructure > reactions (2233)	Jun 16, 2009
<input checked="" type="checkbox"/> caffeine reactions limited by water as a solvent (2162) Reaction Structure substructure with limiters > reactions (2162)	May 28, 2009

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 (295)** that are not in **caffeine reactions limited by water as a solvent (2162)**
- Exclude Include only answers from **caffeine reactions limited by water as a solvent (2162)** that are not in **Current answer set (295)**

OR 演算 (和集合)

AND 演算 (積集合)

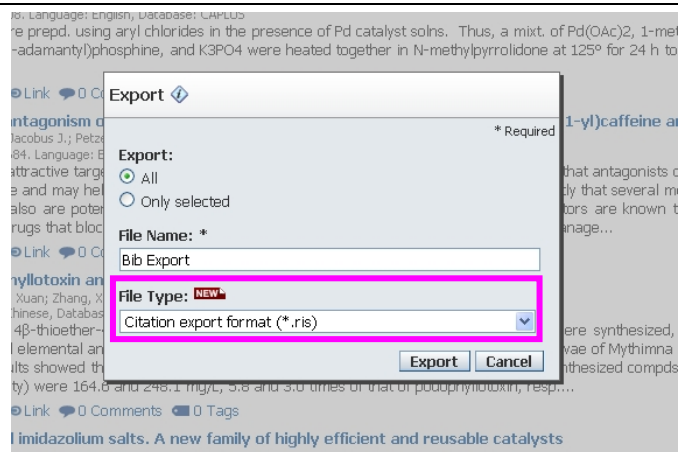
NOT 演算 (差集合)

NOT 演算 (差集合)

文献情報の ris 形式による保存*

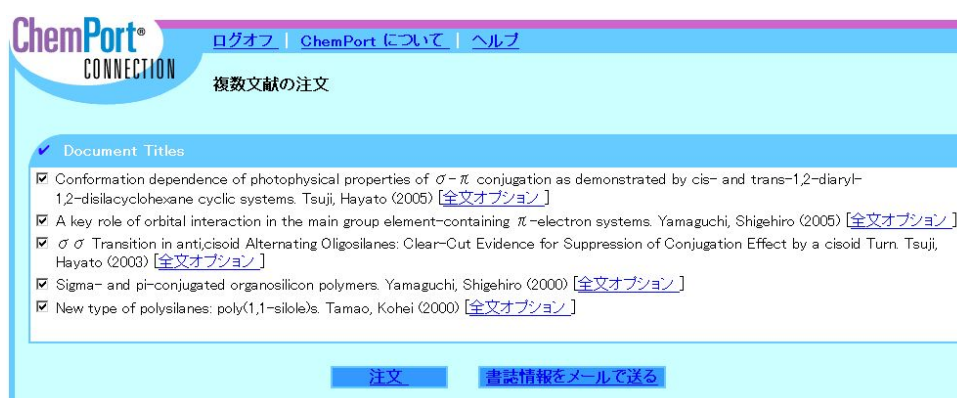
文献情報のダウンロード (Export) で、Citation export format (*.ris) 形式が用意されました。

これにより、EndNote® や Reference Manager® といった文献管理ソフトに、フィルタを使わず簡単に情報を取り込めるようになりました。



複数文献の原報発注*

CAS への原報複写サービス (FAX) を、複数の文献についても一度に発注できるようになりました。



sfr ファイルの akx ファイルへの変換

SciFinder (クライアント版) で作成した SciFinder 形式 (sfr 形式) の回答保存ファイルが、SciFinder Web 形式 (akx 形式) の回答保存ファイルへ変換できるようになりました。

以下のサイトにアクセスしてご利用ください。

<https://scifinder.cas.org/utills/sfr2akx/>

複数の sfr ファイルを zip 形式で圧縮すれば、一度に複数の sfr ファイルを変換できます。

詳しくは、以下の URL 資料 (SciFinder 回答保存ファイル変換ツールについて) をご覧ください。

http://www.jaici.or.jp/sci/ref/sfweb_convert.pdf

* Web 版独自の機能です。

◇SciFinder (Web 版) のエラーにつきまして

ケース1: SciFinder (Web 版) にアクセスできない

症状:

ブラウザの「お気に入り」から SciFinder (Web 版) にアクセスしている場合、左記のエラー (HTTP 500 内部サーバー エラー)によりアクセスできない。

HTTP Status 500 - System error

type Status report

message System error

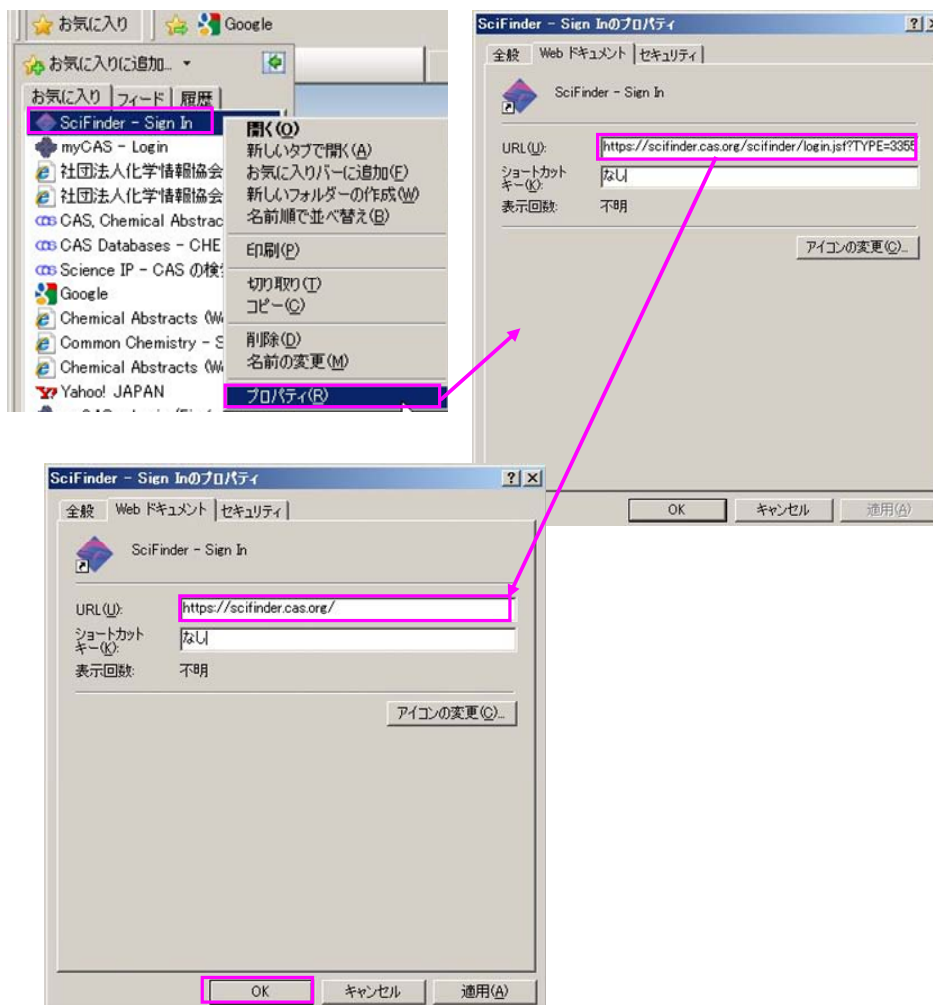
description The server encountered an internal error (System error) that prevented it from fulfilling this request.

JBoss Web/2.1.3.GA

解決方法:

お気に入りに登録された URL を <https://scifinder.cas.org> に編集してください。

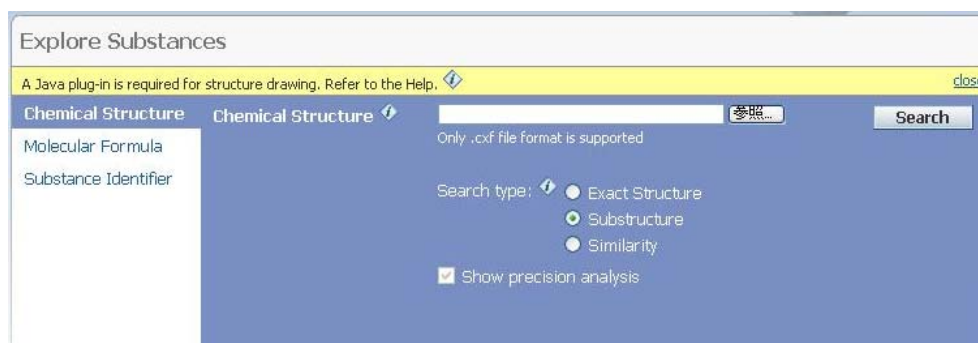
※ お気に入りに登録される URL は <https://scifinder.cas.org> とはならず長い URL が登録されます。この長い URL は、その都度発生する時限的な URL であり、まれに SciFinder (Web 版)へアクセスできなくなる原因になります。



ケース2: Java をインストールしているにも関わらず、構造作図モジュールが立ち上がらない場合

症状:

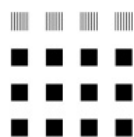
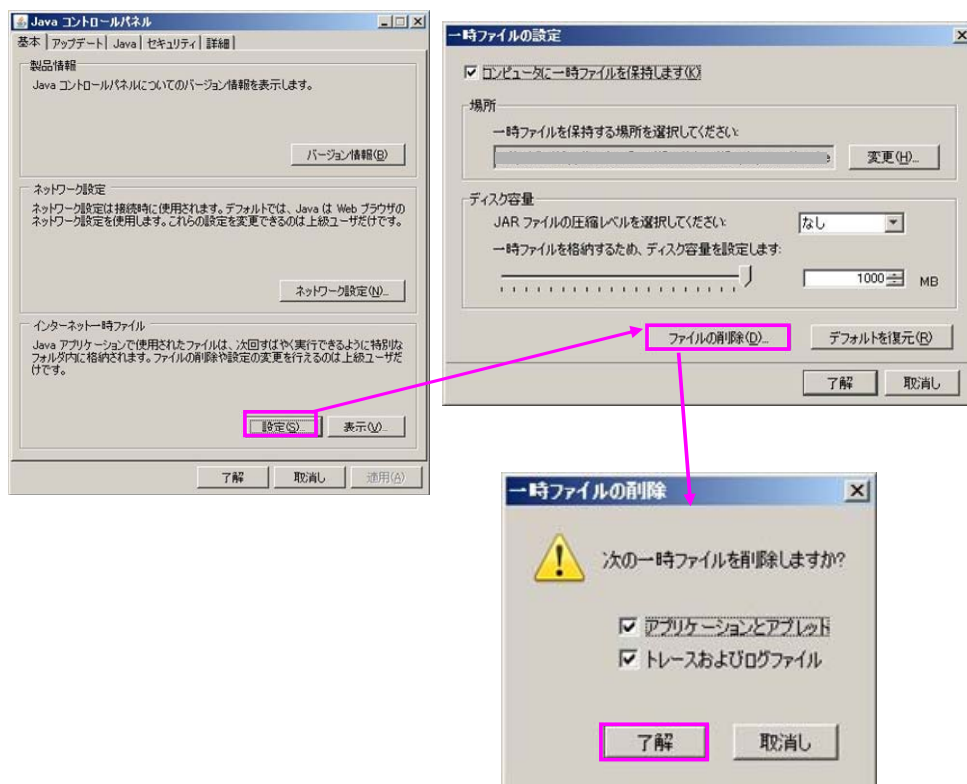
バージョンアップが行われた後、それまで問題なく構造作図ができていた場合でも、左記の画面のような Java が対応していない旨のメッセージが出る。



解決方法:

Java のキャッシュを下記の手順によりクリアしてください。

- ①ブラウザを終了させる。
- ②「コントロールパネル」の「Java」を開く。
- ③「基本」タブの一番下部にある「インターネット一時ファイル」項目の中に表示されている「設定」をクリックする。
- ④画面の下部にある「ファイルの削除」をクリックする。
- ⑤次の画面で聞かれる削除項目にチェックを入れ「了解」をクリックする。
- ⑥ブラウザを再起動する。



JAICI 社団法人 化学情報協会

情報事業部 ヘルプデスク

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-3600

URL: www.jaici.or.jp

E-mail: support@jaici.or.jp