

SciFinder®

インターネットセミナー

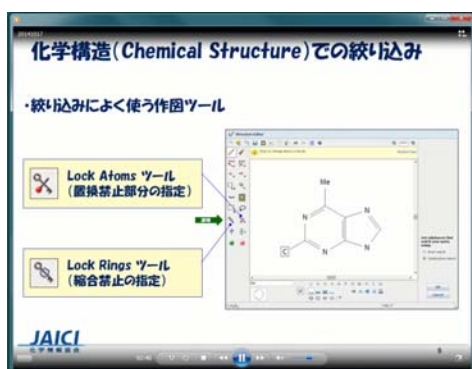
物質回答の絞り込みや解析(2)



JAICI
化学情報協会

1

第1回は構造による物質回答の絞り込みにフォーカス



SciFinder e-ラーニング

検索



トピック別(インターネットセミナー録画セッション)

| 文献検索 | レベル | 時間, サイズ |
|------------------------------|-----|------------------|
| ● 著者名・組織名の効率的な検索法 | ★ | 約 23 分 (10.5 MB) |
| ● 特許情報の読み方 | ★ | 約 23 分 (7.45 MB) |
| ● より高精度な文献検索 | ★★ | 約 18 分 (10.5 MB) |
| ● キーワード検索の活用 | ★★ | 約 32 分 (10.4 MB) |
| ● Categorize 機能(文献のテーマ調査や分類) | ★★ | 約 21 分 (9.03 MB) |
| 化学物質検索 | レベル | 時間, サイズ |
| ● 構造検索 3 種の使い分け | ★★ | 約 24 分 (10.9 MB) |
| ● 構造検索あれこれ: 作図ツールの紹介 | ★ | 約 23 分 (5.89 MB) |
| ● 物質回答の絞り込みや解析(1) 構造編 New | ★★ | 約 20 分 (9.59 MB) |
| ● ポリマー検索 | ★★ | 約 16 分 (4.42 MB) |
| ● 無機化合物の検索 | ★★ | 約 27 分 (7.37 MB) |
| ● 塩・錯体の検索方法 | ★★ | 約 29 分 (12.2 MB) |
| ● マルクーシュ構造検索(1) | ★★★ | 約 22 分 (6.01 MB) |
| ● マルクーシュ構造検索(2) | ★★★ | 約 24 分 (5.95 MB) |

**本セッションでは、構造の観点以外での
絞り込み・解析を紹介致します。**



本セッションの流れ

- 1. 絞り込みの項目**
- 2. 解析の項目**
- 3. 検索例**
- 4. まとめ**

本セッションの流れ

1. 絞り込みの項目

2. 解析の項目

3. 検索例

4. まとめ

絞り込みの項目

絞り込み

Chemical Structure

Isotope-Containing

Metal-Containing

Commercial Availability

Property Availability

Property Value

Reference Availability

Atom Attachment

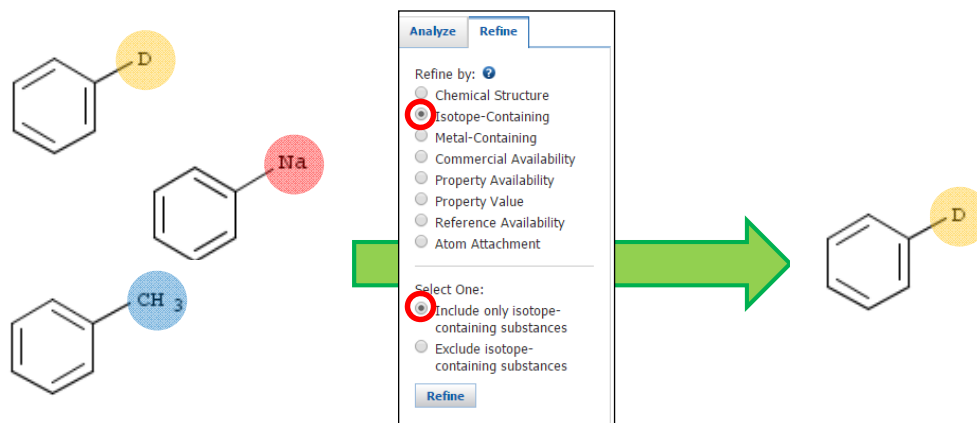
構造系以外の6つの観点にフォーカス

★ Chemical Structure, Atom Attachment での絞り込みについては、e-ラーニングをご参照ください。
<http://www.jaici.or.jp/SCIFINDER/elearning/index.html>

Refine by Isotope-Containing

絞り込み

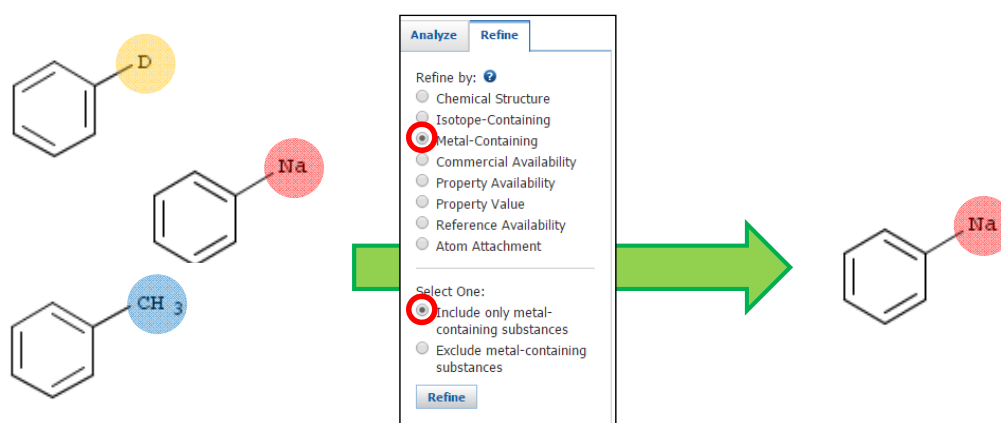
⇒ 同位体を含む物質のみ or
同位体を含まない物質



Refine by Metal-Containing

絞り込み

⇒ 金属原子を含む物質のみ or
金属原子を含まない物質



Refine by Property Availability

⇒物性情報の有無

絞り込み

沸点(実測値): 238-240°C

沸点(実測値): 171-175°C

沸点(実測値): 記載なし

沸点(実測値): 238-240°C

沸点(実測値): 171-175°C

JAICI
化学情報協会

Refine by:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability**
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Retrieve substances with:

- Any property
- Any predicted property
- Any experimental property
- Any selected experimental property**
- Boiling point
- Density
- Electric conductance/resistance
- Glass transition temperature
- IR spectrum
- Magnetic moment
- Mass spectrum
- Median lethal dose (LD50)
- Melting point
- NMR spectrum
- Optical rotatory power
- Raman spectrum
- Refractive index
- Tensile strength

物性情報のある物質

予想物性情報のある物質

実測物性情報のある物質

特定の実測物性情報のある物質

9

Refine by Property Value

⇒物性値

絞り込み

沸点(実測値): 238-240°C

沸点(実測値): 171-175°C

沸点(実測値): 記載なし

沸点(実測値): 171-175°C

JAICI
化学情報協会

Refine by:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value**
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select Properties

Refine by Property Value

Select a property on the left, and specify values or limits on the right. Repeat for multiple properties.

Properties - 1 selected

- Boiling Point**
- Melting Point
- H Acceptors
- H Donors
- Molecular Weight
- logP
- Freely Rotatable Bonds
- Bioconcentration Factor
- Boiling Point
- Density
- Enthalpy of Vaporization
- Flash Point
- H Acceptor/Donor Sum
- Koc
- logD
- Mass Intrinsic Solubility
- Mass Solubility
- Molar Intrinsic Solubility
- Molar Solubility

チェックを入れる

Specify range (°C):

170 to 175

Min: -273. Max:

Pressure (Torr):

Min: 0.0 Max:

物性値を入力

10

Refine by Commercial / Reference Availability

絞り込み

Commercial Availability

Reference Availability

カタログ情報
の有無



文献の有無



Analyze Refine

Refine by: ?

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select One:

- Commercially available
- Not commercially available

Refine

Analyze Refine

Refine by: ?

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Retrieve substances with:

- 1 or more references
- 0 references

Refine

本セッションの流れ

1. 絞り込みの項目
2. 解析の項目
3. 検索例
4. まとめ

Bioactivity Indicators

Commercial Availability

Elements

Reaction Availability

Substance Role

Target Indicators

4つの観点に
フォーカス

Bioactivity / Target Indicators については、
e-ラーニングをご参照ください。
<http://www.jaici.or.jp/SCIFINDER/elearning/index.html>

● 生物活性情報の調べ方 ★ 約18分 (8.00MB)

化学情報協会

Analyze by Elements ⇒ 物質を構成する元素

Analyze by: Elements

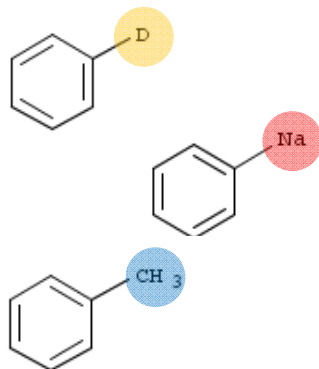
| | |
|----|---|
| C | 3 |
| H | 3 |
| D | 1 |
| Na | 1 |

クリックで
絞り込みも可

Analyze by Substance Role

⇒ 文献中での物質の役割

解析



Analyze Refine

Analyze by: Substance Role

| | |
|---------------------------|---|
| Formation, Nonpreparative | 3 |
| Preparation | 3 |
| Process | 3 |
| Properties | 3 |
| Reactant or Reagent | 3 |
| Uses | 3 |
| Analytical Study | 2 |
| Biological Study | 2 |
| Combinatorial Study | 1 |
| Miscellaneous | 1 |

Show More

文献中での物質の役割？

解析

3. Determination of benzene series in soil of arid regions by gas chromatography-mass spectrometry with headspace extraction

By: Li, Pan; Wen, Fang; Su, Yuhong; Cheng, Yan

A detection method of gas chromatog.-mass spectrometry with static headspace extrn.(HSGC/MS)was established to detect benzene series(BTEX) in soil of arid regions. In order to carefully characterize the performance of the detection method, several affecting parameters were studied in detail, such as equil. temp., equil. time and the addn. amt. of matrix modifying soln. The recoveries and precisions of the method were calcd. Results showed that the optimize conditions for headspace procedure were 5mL of matrix modifying soln., equil. temp. 45°C and equil. time 10min. Under these conditions, correlation coeffs. between BTEX concns. and peak areas ranged 0.996-0.999. The av. recoveries of benzene, toluene, ethylbenzene and m, p-xylene were 81.5%, 86.7%, 94.4%, 99.9% with the relative std. deviations(RSD, n=6) being 6.62%, 5.43%, 4.51% and 4.28%. The limits of detection(signal to noise ratio(S/N)=3)were 0.076-0.204µg/kg. The limits of quantification(S/N=10) were 0.254-0.681µg/kg. The method is simple, accurate, reliable and sensitive, and it would provide tech. support for monitoring and management of soil contaminated with BTEX in arid regions.

Indexing

Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition (Section19)

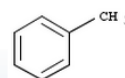
Concepts

Gas chromatography-mass spectrometry Soils

detrn. of benzene series in soil of arid regions by gas chromatog.-mass spectrometry with headspace extrn.

Substances

71-43-2 Benzene [Q](#)
100-41-4 Ethylbenzene [Q](#)
108-88-3 Toluene [Q](#)



detrn. of benzene series in soil of arid regions by gas chromatog.-mass spectrometry with headspace extrn.

Analyte; Analytical study

分析に関する研究



Analyze by Commercial / Reaction Availability

解析

Commercial Availability

Reaction Availability

カタログ情報の有無



反応情報収録の有無



Analyze Refine

Analyze by: ?
Commercial Availability

Not Commercially Available 10322

Commercially Available 4277

Show More

Analyze Refine

Analyze by: ?
Reaction Availability

Referenced in a Reaction 7647

Not Referenced in a Reaction 6952

Show More

解析の Show More

解析

出現頻度が多い順

アルファベット順

Analyze Refine

Analyze by: ?
Elements

| | |
|----|-------|
| H | 14511 |
| C | 14504 |
| O | 12389 |
| N | 4393 |
| P | 4219 |
| Cl | 3988 |
| S | 3310 |
| Si | 1077 |
| F | 777 |
| Br | 501 |

Show More

Analyze - Elements

49 Items 0 Selected Export

Sort by: Frequency

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

| | | |
|--------------------------|----|-------|
| <input type="checkbox"/> | H | 14511 |
| <input type="checkbox"/> | C | 14504 |
| <input type="checkbox"/> | O | 12389 |
| <input type="checkbox"/> | N | 4393 |
| <input type="checkbox"/> | P | 4219 |
| <input type="checkbox"/> | Cl | 3988 |
| <input type="checkbox"/> | S | 3310 |
| <input type="checkbox"/> | Si | 1077 |
| <input type="checkbox"/> | F | 777 |
| <input type="checkbox"/> | Br | 501 |

スクロールで全件閲覧

Analyze - Elements

49 Items 2 Selected Export

Sort by: Natural Order

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

| | | |
|-------------------------------------|----|-------|
| <input type="checkbox"/> | Ag | 4 |
| <input type="checkbox"/> | Al | 20 |
| <input type="checkbox"/> | As | 198 |
| <input type="checkbox"/> | B | 94 |
| <input type="checkbox"/> | Ba | 4 |
| <input type="checkbox"/> | Br | 501 |
| <input type="checkbox"/> | C | 14504 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | Ca | 8 |
| <input type="checkbox"/> | Co | 1 |
| <input type="checkbox"/> | Cl | 3988 |

Excel or PDF でエクスポート



本セッションの流れ

1. 絞り込みの項目

2. 解析の項目

3. 検索例

4. まとめ

検索例①

分子式が $C_{10}H_{19}N_3O$ の物質のうち、以下の物性値を有するものに絞り込む。

0.5 - 1.0 Torr にて沸点が 80 - 120°C の物質

任意の回答 1 件をエクスポートする。



検索例②

屈折率(実測値)が 1.7 以上で金属元素を含み、
試薬カタログ情報がある物質を調査する。
さらに、Al または Zn の一方または両方を含む
物質に限定する。



本セッションの流れ

1. 絞り込みの項目
2. 解析の項目
3. 検索例
4. まとめ

まとめ



- **構造以外の観点で物質回答を絞り込み！**
- **解析機能も便利！**