

SciFinder (1)

1 はじめに

SciFinderは、米国化学会（ACS）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、工学など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約1,700校（うち国内約180校）の教育機関の研究者に利用されている。また、SciFinderは、ほぼ1~2か月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様々な強化が実施されている。

これから2回にわたり、SciFinderについて紹介する。SciFinderでは他の検索ツールと同様、キーワードや著者名から調べる基本的な検索ももちろんできるが、ここではそれ以外の検索法や機能に関して触れる。今回は、物質関係の検索例を紹介する。

2 リアアップ関連情報の検索例

ここでは、リアップ（RiUP：大正製薬の育毛剤）の名称から物質関連情報を検索する例を紹介する。

SciFinderでは文献、物質、反応の3種類の検索が可能で、該当する検索項目を選択し、実行する。物質名称から検索する際は、“Substance Identifier”を選択し、名称（riup）を入力する。Searchボタンをクリックするとリアップの薬効成分であるミノキシジル（Minoxidil）の回答が得られる。このように正式名称はもちろん、慣用名、商品名、CAS登録番号などからも検索ができる。

物質の詳細画面では、CAS登録番号、分子式、名称、構造式、文献数、物性値（実測、予想）などを見ることができ（図1①）。物質名称一覧を見ると、RiUPが含まれていることがわかる。実測物性値は数値データ、参考文献タグ、スペクトル表示の3方法で記載されている。参考文献タグとは物性値の出典情報のことで、この情報から原文献をたどれば種々の物性情報を得ることができる。またSee Spectrumをクリックすれば¹H-NMRやMASSなどのスペクトルデータも見ることができ（図1②）。

リアップ、つまりミノキシジルを扱っている文献を検索したい場合、各物質情

報の画面上部にあるGet Referencesボタンをクリックする。すると、著者が文献中に記載した物質名にかかわらず、ミノキシジルが索引（索引に関しては後述）されている文献を検索することができる（図1③）。検索の際は、生物学的研究（Biological Study）、分析に関する研究（Analytical Study）など15種の研究観点によって文献を限定することもできる。

また、画面上部の他のリンクボタンを利用すると、ミノキシジルに関する化学反応、試薬カタログ情報などの関連情報も検索できる。

3 化学構造からピンドンとその誘導体に関する検索例

SciFinderでは、名称がわからない場合でも、化学構造式から検索することができる。化学構造式を使っての検索は、完全一致構造検索（Exact Search）、部分構造検索（Substructure Search）、類似性構造検索（Similarity Search）の3種類がある。検索項目の“Chemical Structure”を選んだ状態で、画面中央にあるClick to Editをクリックすると、構造作図画面が表示される。以前はJavaプラグインが必須だったが、現在は

図1 RiUP（ミノキシジル）関連情報の検索例

Java プラグインなしでも作図できるようになった。

今回は、農薬として使われているピンドン (Pindone) と、その構造を骨格に持つ誘導体に関する検索例を紹介する。作図画面にピンドンの構造式を描いた後、検索タイプで部分構造検索 (Substructure Search) を選び OK をクリックする (図 2 ①)。その後、Search ボタンをクリックすると回答が得られる。なお、SciFinder での構造検索は、間もなくリリースされる最新版 ChemBioDraw からも直接可能になる予定である。

図 2 ②に示すように、部分構造検索を行うと、ピンドン (1 件目) およびその構造を骨格に持つ誘導体を合わせて 36 の物質がヒットする。部分構造検索は、目的の化合物の構造が確定していない場合や誘導体も含めた包括的な検索の際に非常に便利で、物質調査に欠かせない機能である。

得られた結果から物質の物性値、スペクトルなどを確認できる点は、前項で紹介したリアップの検索例と同様である。

なお、図 2 ②の検索結果の画面で文献へのリンクボタン (Get References) をクリックすると、検索結果として得られた物質のいずれかが索引されている文献をまとめて調査することもできる。このように、物質名称がわからない場合でも SciFinder では文献、物質を検索できる。他にも、分子式 (Molecular Formula) や物性値 (Property) から検索することも可能である。

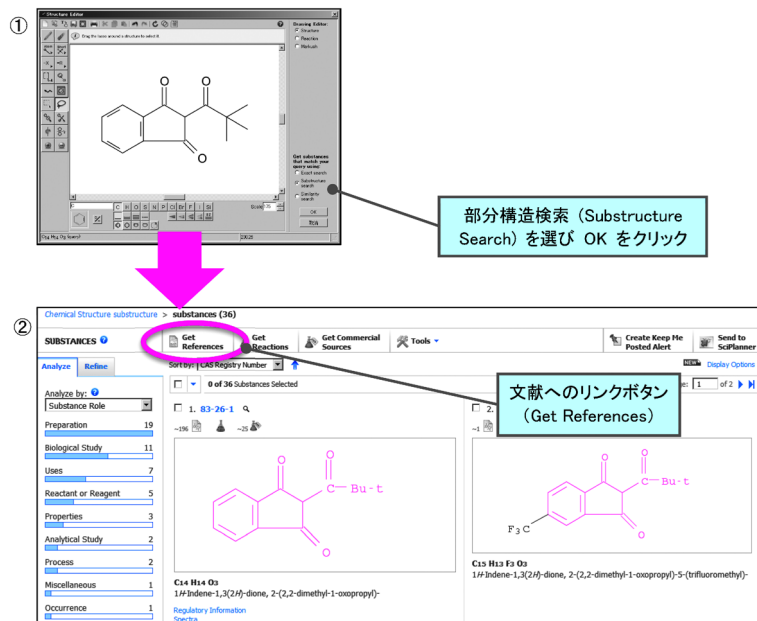


図 2 ピンドンの部分構造検索

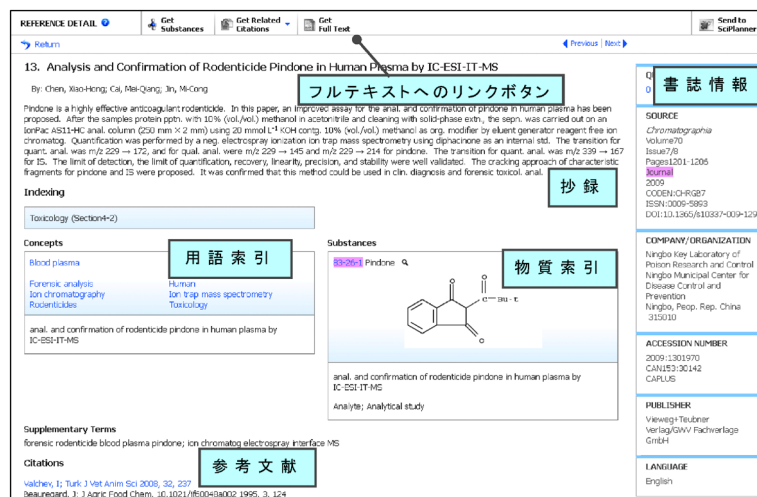


図 3 SciFinder の文献情報

4 SciFinder のデータ作成

ところで、各種検索ツールに収録されている文献情報に違いがあることをご存じだろうか？

通常、キーワード検索で物質名称を入力して文献情報を得ようとした場合、検索漏れが起り、かつノイズが含まれる。これは、テキスト検索では著者が記載した物質名称でないとヒットしないため漏れが生じ、逆にタイトルや抄録中に物質名称があっても、実際にはその物質が主題と関係ない文献がノイズになってしまうためである。

SciFinder では、発表された論文情報を単に電子化しているだけではない。専門のスタッフが文献を読み込み、重要なキーワードおよび化学物質の CAS 登録番号の情報 (「索引」と呼ばれている) を独自データとして人手で付与している。普段は目立たない存在だが、この索引情報は検索において極めて重要な意味をもつ (図 3)。

SciFinder ではこの独自の索引情報があるため、名称や構造検索機能を使い、物質を見つけてしまえば、文献

へのリンクボタン (Get References) を使う上記の手順を行うだけで精度の高い回答が得ることができるのである。

5 使用条件

ご契約のある大学、あるいは企業に所属されている研究者であれば ID を取得できる。大学の場合、アクセスは学内からのみである。なお、ID は個人に発行され、共有はできない。

6 問い合わせ先

日本では化学情報協会 (JAICI) が CAS の総代理店として SciFinder の提供・サポートを行っている。利用に関する問い合わせは情報事業部ヘルプデスク (TEL : 0120-003-462, E-mail : support@jaici.or.jp) まで。

(化学情報協会 新藤大彰)