

LCASREACT

LCASREACT ファイル (Chemical Abstracts Reaction Search Service learning file) はCASREACT ファイルの使い方の練習のための反応データベースです。1985年から1988年の Chemical Abstracts (CA) の有機化学セクションに収録された雑誌の化学反応に関する CASREACT ファイルから選ばれたおよそ 471 文献を収録しています。このファイルのレコードは、CA 抄録番号です。ファイルは、文献単位で一段階反応および多段階反応が含まれます。

レコードには、反応物や生成物の構造図、反応物、生成物、試薬、溶媒、触媒のCAS登録番号、多くの生成物に対する収率、および反応についてのテキスト情報などの反応情報が収録されています。反応物、試薬、および生成物は、一つの反応質問式を用いて構造検索できます。ロール、反応部位、および反応物と生成物間の原子のマッピングも構造検索に利用できます。反応に関与するすべての物質のCAS登録番号は単独で、またはロール指示子付きで検索できます。反応に関するテキスト情報と収率も検索できます。レコードには、CAの書誌事項、詳細など化学物質索引と一般事項索引、および抄録も含まれますが、これらはすべて表示および検索できます。

収録内容

CAの有機化学セクション(セクション 21-34)に収録された雑誌および特許から抽出した文献の、すべての一段階および、多段階反応。有機金属および、有機メタロイド化合物(セクション 29)も含まれます。

収録源

1985年から1988年に収録された雑誌

ファイル内容

1985年から1988年まで

更新されません

471文献

10,145件以上の一段階反応

21,477件以上の多段階反応

検索補助資料

Building and Searching Structures on STN

CASREACT User Guide

CA Index Guide

Online Helps (HELP DIRECTORY ですべてのヘルプ・メッセージのリスト。)

CA/CAPreviews/CAOLD Database Description

データベース製作者

Chemical Abstracts Service

2540 Olentangy River Road

P. O. Box 3012

Columbus, OH 43210-0012 USA

データベース代理店

一般社団法人 化学情報協会

〒113 東京都文京区本駒込 6-25-4

中居ビル

電話 0120-003-462

FAX 03-5978-4090

ヨーロッパ

STN カールスルーエ

FIZ Karlsruhe

P.O. Box 2465

76012 Karlsruhe

Germany

Phone: +49-7247-808-555

Fax: +49-7247-808-259

E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de

Internet: www.stn-international.de

日本

STN 東京

一般社団法人 化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

Phone: 0120-003-462 (Help Desk)

: 0120-151-462 (上記以外)

Fax: 03-5978-4090

E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)

customer@jaici.or.jp (上記以外)

Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ

STN コロンバス

CAS

P.O. Box 3012

Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A

CAS Customer Care:

Phone: 800-753-4227 (North America)

614-447-3700 (worldwide)

Fax: 614-447-3751

E-mail: help@cas.org

Internet: www.cas.org

SEARCHおよびDISPLAYフィールド

* 後方一致が利用できるフィールドです。

フィールド	SEARCH コード	SEARCH例	DISPLAY コード
ベーシックインデックス * (すべての反応物、生成物、試薬、溶媒、触媒のCAS登録番号および反応情報、標題(TI),キーワード(KW)索引項目(IT)からの切出し語) ¹⁾	なし (または /BI)	S 50-00-0 S FAILED REACT? S 1313-13-9(L)113973-76-5 S TAUTOMERISM S ?TOXIN?	RX形式 TI,KW,IT
抄録*	/AB	S PHOTOLY?/AB S ?FORM?/AB	AB
レコード番号	/AN	S 109:149648/AN	AN
著者名	/AU	S EVANS, D?/AU	AU
ベーシックインデックスおよび抄録*	/IA	S COUPL?/IA S ?CHEM?/IA	TI,KW,IT,AB
CA 関連セクションの標題とコード	/SX	S 24/SC,SX	SX
CA セクションの標題とコード	/SC	S 24/SC S ALICYCLIC/SC	SC
CA 巻号	/VI	S 107-25/VI	表示されない
触媒	/CAT	S 104-15-4/CAT S L5(L)ANY/CAT	RX形式
CODEN	/CO	S JFLCAR/CO	CO
統制語	/CT (または /CV)	S PORPHYRIN#/CT S POLYMER-SUPPORTED REAGENTS/CT	IT
所属機関名	/CS	S DOW/CS	CS
クロスオーバー・キー	/CK	S JOCEAH-51-26-5153/CK	CK
資料種類	/DT	S J/DT	DT
入力日 ²⁾	/ED	S ED>=910413	表示されない
フィールドの存在	/FA (または /AV)	S DIA/FA S ABS/FA	表示されない
国際標準逐次刊行物番号(ISSN)	/IS	S 0749-1581/IS	IS
言語	/LA	S L1 AND ENG/LA	LA
所属機関の所在地	/LO	S USA/LO AND SLOAN/CS	LO
生成物以外の物質	/NPRO	S 10025-87-3/NPRO	RX形式
反応ステップ数 ²⁾	/NS	S NS>=2 S 109-99-9(L)71-43-2(L)1/NS	表示されない
生成物	/PRO	S 2577-41-5/PRO	RX形式
発行日 ²⁾	/PD	S PD>910301	SO
発行年 ²⁾	/PY	S 1991-1992/PY	PY
反応物	/RCT	S 999-97-3/RCT S 928-49-4/RCT(L)114140-93-1/PRO	RX形式
反応物または試薬	/RRT	S 100-07-2/RRT	RX形式
試薬	/RGT	S 74-88-4/RGT	RX形式
溶媒	/SOL	S 64-17-5/SOL	RX形式
収録源	/SO	S J CATAL/SO	SO
標題	/TI	S REDOX AGENT#/TI	TI
更新日 ²⁾	/UP	S UP>=920323	表示されない
収率 ²⁾	/YD	S 98/YD S L1(A)YD>50 S 138323-01-0/PRO(A)95-100/YD	RX形式
収率データ	/YDT	S NONE/YDT S L5(A)(95-100/YD OR NONE/YDT) S 2577-41-5/PRO(A)(95-100/YD OR NONE/YDT)	表示されない

1) CAS登録番号は、反応情報から抽出されたもので、ITから抽出されたものではありません。

2) 数値演算子または範囲指定検索が利用できるフィールドです。

構造検索項目

項目 ¹⁾	SEARCH 例
STRUCTURE コマンドまたは STN Express を用いて作られた構造のL-番号 (L番号間でブール演算子を使用できる)	S L1 NOT L2 SEARCH L1 CSS FUL
SCREEN コマンドまたは STN Express を用いて作られたスクリーンセットを同時に使用する。(L番号間でブール演算子を使用できる)	S L 3 OR L4
STRUCTURE コマンドまたは STN Express を用いて作られたスクリーンセットを同時に使用する。(L番号間でブール演算子を使用できる)	S L1 NOT L3

1) 構造検索からの回答セットのL番号を、辞書項目と組み合わせることができます。例えば、S L6 (L) ANY/CAT

構造検索の種類

種類	内容	SEARCH コード	SEARCH 例
Substructure 部分構造検索 (デフォルト)	質問式を満足する物質を検索。 他の置換基が結合してもよい。	SSS	SEARCH L1 SSS FUL S L2
Closed Substructure 閉構造部分構造検索	質問式に完全一致する物質を検 索。CONNECTによって許された 位置に置換基が結合していても よい。	CSS	SEARCH L1 CSS FUL SEA L4 CSS

構造検索の範囲

範囲	内容	SEARCH コード	SEARCH 例
Sample (デフォルト)	ファイルの固定した5%を検索	SAM	SEARCH L1 SAM SSS
Full	ファイル全体(100%)を検索	FUL	S L5 SSS FUL
Range	利用者が指定した範囲内で検索	RAN	S L4 RAN=(V112)
Subset Sample	当ファイルで得られた回答セットの中をサ ンプル検索	SUB SAM	S L9 SUB=L8 SAM
Subset Range	当ファイルで得られた回答セットの中をユ ーザが指定した範囲で検索	SUB,RAN	S L12,SUB=L11 RAN=(V112,V113)
Subset Full	当ファイルで得られた回答セット全体 (100%)を検索	SUB FUL	S L2 CSS SUB=L1 FUL

D I S P L A Y 形式

回答のオンライン表示に対して、表示形式を自由に組み合わせることができます。複数のコードは、スペースまたはカンマで区切ることが必要です。フィールドは指定した順に表示されます。

ヒットターム・ハイライトは、AB, AN, CK, KW, IT, TI, およびRXフィールドに付加されます。RXフィールドの中のハイライトは、反応マップおよび反応要約に付加されます。HIT, FHIT, OCC, PATH,FPATH, SPATH, およびFSPATH形式を利用するためには、ハイライトはONであることが必要です。

デフォルト表示形式は、二つの形式からなるFHIT CBIBです。

形式	英語名	内容	入力例
RX RX(n) RXG RXG(n) RXL RXL(n) RXS RXS(n)	Reactions Reaction n Reaction Graphics Reaction n Graphics Reaction Long Reaction n Long Reaction Summary Reaction n Summary	反応 (すべての一段階反応の反応マップ、構造図、反応要約) 反応n (反応nの反応マップ、構造図、反応要約) 反応図 (すべての一段階反応の反応マップ、構造図) 反応図n (反応nの反応マップ、構造図) 反応詳細 (すべての一段階反応の反応マップ、構造図、反応要約) 反応詳細n (反応nのすべての段階の反応マップ、構造図、反応要約) 反応要約 (すべての一段階反応の反応マップ、反応要約) 反応要約n (反応nの反応マップ、反応要約)	D TI RX D RX(3), RX(5) D RXG CBIB D RXG(5) DIS RXL D RXL(8) RXL(13) D TI AU RXS D RXS(13)
AB AN AU CK CO CS DT IS IT KW LA LO PY SC SO SX TI	Abstract Text Accession Number Author Name(s) Crossover Key (CODEN volume, issue, first page) CODEN Corporate Source Document Type ISSN (International Standard Serial Number) Index Entries (correspond to CA Volume Indexes) Keywords Language Location of Corporate Source Publication Year CA Section Title and Code Source (Name of journal volume, issue, pages) CA Section Cross Reference(s) Title of Document	抄録テキスト レコード番号 著者名 クロスオーバー・キー (CODEN、巻、号、最初の頁) CODEN 所属機関名 資料種類 ISSN (国際逐次刊行物番号) 索引項目 (CA 巻末索引に対応) キーワード 言語 所属機関の所在地 発行年 CA セクションの標題と番号 収録源 (雑誌名、巻、号、ページ) CA 関連セクション 文献標題	D AB DISPLAY L2 1-10 AN D AU TI D CK D CO, TI D AU CS D 1,5,10 DT D 1 5 10 IS D KW IT D KW 17 D LA D 2-20 AU CS LO D PY D TI SC D TI AU SO D SC SX D TI RX
ABS ALL BIB CBIB IND SCAN FHIT FPATH FSPATH HIT OCC PATH SPATH	AN, GI, AB AN, TI, AU, CS, LO, SO, SC, SX, DT, CO, IS, PY, LA, OS, GI, AB, KW, IT, RX AN, TI, AU, CS, LO, SO, SC, SX, DT, CO, IS, PY, LA, OS AN, と圧縮型書誌事項 (FHIT CBIBがデフォルト) KW, IT FHIT, TI ヒットした最初の反応マップ、構造図および反応要約 (FHIT CBIBがデフォルト) Full PATH-PATHと反応要約 Full SPATH-SPATHと反応要約 すべてのヒットした反応の反応マップ、構造図および反応要約 すべてのヒットしたフィールドおよび各フィールド中でのヒットタームの頻度数、HIT, PATH, SPATHの中の反応数の一覧表。反応の確認が不完全 (Incomplete) な反応を表示。 最長経路 (PATH) の反応マップと構造図。すべてのヒットした反応を表示する。ただし、そのステップを完全に包含する反応を除く。 短い経路 (PATH) の反応マップと構造図。ヒットした物質が最初と最後のステップにある反応を表示する。ただし、そのステップが他の SPATH に完全に含まれるものを除く。	DIS 2,4,6 CBIB ABS D L2 1-7 ALL D 1-3 BIB DISPLAY L1 1 CBIB D IND D SCAN D FHIT D BIB FPATH D FSPATH D CBIB HIT DIS 1-10 OCC D PATH D SPATH	

S E L E C T および S O R T フィールド

SELECT コマンドは、回答セットの特定フィールドから抽出した語句に E 番号を付与します。

SORT コマンドは、特定フィールドのアルファベットまたは数値順に検索結果を並び替えます。

フィールド	フィールドコード	S E L E C T ¹⁾	S O R T
抄録テキスト	AB	Y ¹⁾	N
レコード番号	AN	Y ¹⁾	N
著者名または発明者	AU	Y	Y
CA 関連セクションコード	SX	Y	Y
CA セクションタイトルおよびコード	SC	Y	Y
CODEN	CO	Y	Y
	CODEN	N	Y
所属機関名	CS	Y	Y
所属機関所在地	LO	Y	Y
クロスオーバー・キー	CK	Y(デフォルト)	Y
資料種類	DT	Y	Y
索引項目	IT	Y ^{1),2)}	N
ISSN (国際逐次刊行物番号)	IS	Y	Y
	ISSN	N	Y
雑誌名	JT	N	Y
キーワード	KW	Y ¹⁾	N
言語	LA	Y	Y
発行日	PD	Y	Y
発行年	PY	Y	Y
n番目の反応情報	RX(n)	Y ^{1),3)}	N
反応情報	RX	Y ^{1),3)}	N
収録源 (雑誌名、巻、号、頁)	SO	Y	N
タイトル	TI	Y ¹⁾	Y

1) 検索結果から検索に使用した語句を抽出する時には HIT を使います。例えば、SEL HIT RX

2) CA 巻末索引に対応します。/BI が付与されます。

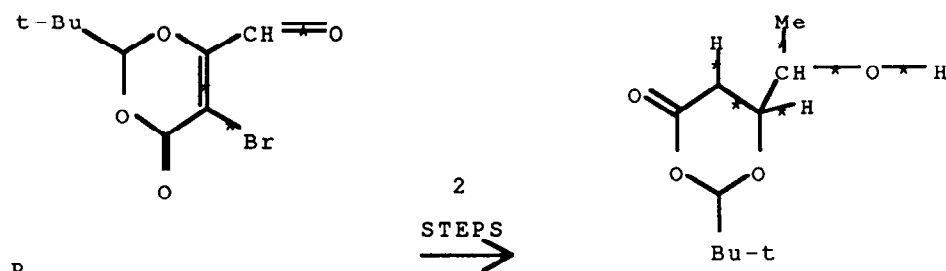
3) CAS 登録番号が抽出され /RX が付与されます。

サンプルレコード

FHIT CBIB (デフォルト) 形式での表示

RX(33) OF 70 COMPOSED OF RX(11), RX(16)

RX(33) ***P*** → ***AU***



P

AU

YIELD 81%

RX(11) RCT P ***116332-70-8***
 RGT AJ 917-54-4 MeLi
 PRO AH 116332-76-4, AI 116332-77-5
 SOL 60-29-7 Et2O

RX(16) RCT AH 116332-76-4
 RGT W 1333-74-0 H2, L 121-44-8 Et3N
 PRO AU ***116332-81-1***
 CAT ***7440-05-3*** Pd
 SOL 141-78-6 AcOEt

CA109(15):128920m Reactions of chiral 2-(tert-butyl)-2H,4H-1,3-dioxin-4-ones bearing functional groups in the 6-position and diastereoselective catalytic hydrogenation to cis-2,6-disubstituted 1,3-dioxan-4-ones. Noda, Yoshihiro; Seebach, Dieter (Lab. Org. Chem., Eidg. Tech. Hochsch., Zurich CH-8092, Switz.). Helv. Chim. Acta, 70(8), 2137-45 (Eng) 1987. CODEN: HCACAV. ISSN: 0018-019X.