

収録範囲	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 化学的データ</li> <li>・ 電気化学的作用</li> <li>・ 電気的および磁氣的性質</li> <li>・ 物質同定情報</li> <li>・ 多成分系データ</li> <li>・ 光学的性質</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 薬理学および生態学的データ</li> <li>・ 物理的および機械的性質</li> <li>・ 反応データ</li> <li>・ 安全性データ</li> <li>・ スペクトルデータ</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 凝集状態</li> <li>・ 構造およびエネルギーパラメータ</li> <li>・ 熱力学的性質</li> <li>・ 輸送現象</li> </ul>
ファイル種類	構造, ファクト情報		
特徴	アラート (自動 SDI 検索)	利用不可	
	CAS 登録番号	<input checked="" type="checkbox"/> ページイメージ	<input type="checkbox"/> STN AnaVist <input type="checkbox"/>
	Keep & Share	<input type="checkbox"/> 中間一致・ 後方一致検索	<input type="checkbox"/> STN Easy <input checked="" type="checkbox"/>
	練習用ファイル	<input type="checkbox"/> 構造図	<input checked="" type="checkbox"/> STN Viewer <input type="checkbox"/>
レコード内容	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 有機化学物質単位のレコードには, Handbook of Organic Chemistry by Friedrich Beilstein および 1771 年以降の有機化学分野の主要 176 誌から厳密に検討, 評価された文献情報を収録.</li> <li>・ 有機化学物質単位のレコードには CAS 登録番号, 構造図, 分子式などが含まれており, 全て検索および表示が可能.</li> <li>・ 物理的, 化学的データ, 特定物質の薬理学および生態学的データについても検索, 表示が可能.</li> <li>・ ドイツ語のテキストを含んでいるフィールドも存在する.</li> </ul>		
レコード数	10,864,115 物質レコード (2011 年 11 月)		
収録年代	1771 年以降		
更新頻度	年 4 回		
言語	英語, ドイツ語		
データベース 製作者	Elsevier Information Systems GmbH Theodor-Heuss-Allee 108 60486 Frankfurt am Main Germany Phone: +49 69 5050 4252 Fax: +49 69 5050 4254	著作権保有者:	Elsevier Properties SA Espace de l'Europe 3 CH-2000, Neuchâtel Switzerland
データベース 提供者	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		

### 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

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

収録源	<ul style="list-style-type: none"> <li>・有機化学分野の雑誌 176 誌</li> <li>・Handbook of Organic Chemistry (by F. Beilstein)</li> </ul>
検索補助 資料	<ul style="list-style-type: none"> <li>・講習会テキスト <a href="https://www.jaici.or.jp/seminar/text.php">https://www.jaici.or.jp/seminar/text.php</a></li> <li>・STN 技術資料 <a href="http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_01.html">http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_01.html</a></li> <li>・オンラインヘルプ =&gt; HELP DIRECTORY ですべての利用可能なヘルプメッセージが表示されます</li> <li>・STNGUIDE ファイル STN の各ファイルの最新版サマリーシートの全情報と料金表をオンラインで参照できます</li> </ul>
利用可能な クラスター	<ul style="list-style-type: none"> <li>・CASRNS</li> <li>・NUMERIC</li> <li>・STRUCTURE</li> </ul>
関連データ ベース	BABS ファイル – ReaxysFile 中の参照文献 (1980 年以降発行) について, 標題, 抄録, 書誌情報を提供.
価格	<ul style="list-style-type: none"> <li>・STN 料金表 <a href="http://www.jaici.or.jp/stn/tariff/plindex.html">http://www.jaici.or.jp/stn/tariff/plindex.html</a></li> <li>・オンライン上での確認 (=&gt; HELP COST)</li> </ul>

サマリーシートを初めてご覧になる方は, 「サマリーシートの見方」をご参照ください.

## 検索フィールド

このファイルには後方一致検索可能なフィールドはありません。

## 物質同定情報

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
なし または/BI	基本索引 (ADSM. PA <sup>1)</sup> , ASSM. PA <sup>1)</sup> , AUN, AZE. PA <sup>1)</sup> , BSPM. PA <sup>1)</sup> , CDER <sup>1)</sup> , CN <sup>1)</sup> , COMPN <sup>1)</sup> , CPEM. PA <sup>1)</sup> , EDM. PA <sup>1)</sup> , ENEM. PA <sup>1)</sup> , HHDG. CN <sup>1)</sup> , INP <sup>1)</sup> , LLSM. PA <sup>1)</sup> , LSSM. PA <sup>1)</sup> , LVSM. PA <sup>1)</sup> , MECM. PA <sup>1)</sup> , ODM. PA <sup>1)</sup> , POT. PRO <sup>1)</sup> , RSTR. PA <sup>1)</sup> , SOLM. PA <sup>1)</sup> , TRAM. PA <sup>1)</sup> , XREF. CN <sup>1)</sup> , およびすべて の xx.KW フィールドからの 切出し語, さらに ADSM. PAAN, ASSM. PAAN, AZE. PAAN, AN, BSPM. PAAN, CDER. AN, COMPAN, CPEM. PAAN, EDM. PAAN, ENEM. PAAN, FAN, HHDG. AN, LLSM. PAAN, LSSM. PAAN, LVSM. PAAN, MECM. PAAN, ODM. PAAN, POT. PAN, RSTR. PAAN, SOLM. PAAN, TRAM. PAANフィールド中の レコード番号と ベーシック優先 CAS 登録番 号 (BPR), CAS 登録番号 (RN), 分子式 (MF), および フラグメント分子式 (FMF))	S ETHYL S C106H146036 S 8086664	ADSM, ASSM, AUN, AZE, BPR, AN, BSPM, CDER, CN, COMPAN, COMPN, CPEM, EDM, ENEM, FAN, FMF, HHDG, INP, LLSM, LSSM, ODM, POT, LVSM, MECM, MF, RSTR, TRAM, RN, STR, SOLM, XREF, フィールドコード <sup>2)</sup>
/BIPED	薬理学および生態学的データ の基本索引 (すべてのPEDフィールド: BIO, BIOD, COEV, ECDH, ECDP, ECTD, ECTOX, EOD, EXCA, PHARM, USCからの 切出し語)	S (AQUA? TOX?)/BIPED	BIO, BIOD, COEV, ECDH, ECDP, ECTD, ECTOX, EOD, EXCA, PHARM, USC

(続く)

## 物質同定情報 (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/AKW	ALL Keywords	S CHEMICAL SHIFTS/AKW	. KW
/AN	レコード番号	S 1915876/AN	AN
/ATC	原子数 <sup>3)</sup>	S 34-36/ATC	FMF, MF
/BPR	ベーシック優先 CAS 登録番号	S 106-24-1/BPR	BPR
/CHA	電荷 <sup>3)</sup>	S -1<CHA	LSF
/CN	化学物質名 <sup>1)</sup>	S CHOLESTEROL/CN	AUN <sup>4)</sup> , CN
/CNS	化学物質名称セグメント <sup>1)</sup>	S CHOLESTERYL/CNS	CN
/COMPAN	組成物:成分レコード番号 <sup>3)</sup>	S 5811/COMPAN	COMPAN
/COMPC	組成物:成分濃度	S 85?/COMPC	COMPC
/COMPN	組成物:成分名称	S POLYVINYLPYRROLIDONE/COMPN	COMPN
/CONSID	構造 ID <sup>3)</sup>	S 1003/CONSID	CONSID
/CTYPE	化学物質タイプ	S ETHYLENE/CNS AND POLYMER? /CTYPE	CTYPE
/DED	データ入力日	S 1990?/DED	DED
/DUPD	データ更新日	S 2001/07/25/DED	
/ELC	元素数 (全体の) <sup>3)</sup>	S 2000/10/24/DUPD	DUPD
/ELR. XX	元素比	S 5/C AND 5/ELC	FMF, MF
/ELS	元素記号	S 2/ELR.HC AND 0.5/ELR.OC	MF
/FA	フィールドの存在 <sup>5)</sup>	S 0/ELS AND SE/ELS	MF
/FAN	フラグメントレコード番号 <sup>3)</sup>	S ISOELECTRIC POINT/FA	FA <sup>6)</sup>
/FMF	フラグメント分子式	S 1073/FAN	FAN
/FNA	フィールドの非存在	S C6H1206/FMF	FMF, MF
/FS	ファイルセグメント	S ALCOHOL/CNS AND BP/FNA	表示されない
/HSO	ハンドブック記事 (収録源)	S L1 AND STEREO COMPOUND/FS	FS
/LN	Lawson 番号 <sup>3)</sup>	S 3-01-00-00034/HSO	HSO
/LSF	示性式	S 22/LN	LN
/MF	分子式	S "CH20(1+)" /LSF	LSF
/MW	分子量 <sup>3)</sup>	S C4H9N5.H304P/MF	MF
または/FW	(分子式量)	S 3000>MW	MW
/NF	フラグメントの数 <sup>3)</sup>	S 3/NF	MF
/PG	周期律グループ	S (A3 AND A6)/PG	表示されない
/PH	物性の階層	S MASS SPECTRUM/PH	
/RN	CAS 登録番号	S 100-03-8/RN	RN
/UP	STN データ更新日	S L1 AND 20020701-20020731/UP	表示されない
/元素記号	元素数 (各元素の) <sup>3)</sup>	S 5/CL	MF

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) キーワード (KW) の付くすべてのフィールドコードを含みます。

3) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

4) CN フィールドは化学物質名 (CN) と Autonom 名 (AUN) を含みます。

5) 表示フィールドがレコードに存在するかを調べるために使用します。

6) Display FA はレコードのすべての表示可能フィールドコードを表示します。

## 書誌情報

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/AU	著者名 <sup>1)</sup>	S SHARPLESS?/AU	<sup>2)</sup>
/BABSAN	BABS レコード番号	S 5500103/BABSAN	BABSAN
/DT	資料種類 <sup>1)</sup>	S PATENT/DT	表示されない
/ISN	国際標準(資料)番号 (CODEN) <sup>1)</sup>	S JACSAT/ISN	<sup>2)</sup>
/JT	雑誌名 <sup>1)</sup>	S TETRAHEDRON/JT	<sup>2)</sup>
/JTW	CODENのない雑誌名	S "JOURNAL OF THE SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS"/JTW	<sup>2)</sup>
/LA	言語 (コードとテキスト)	S JA/LA	表示されない
/PA	特許出願人 <sup>1)</sup>	S BASF/PA	<sup>2)</sup>
/PC	特許発行国	S US/PC	<sup>2)</sup>
/PN	特許番号 <sup>1)</sup>	S DE 670683/PN	<sup>2)</sup>
/PY	発行年 <sup>1), 3)</sup>	S JACSAT/ISN AND 2000	<sup>2)</sup>
/URES	出典 (非標準形式)	/PYS PERKIN?/URES	<sup>2)</sup>

1) 物質レコード中の書誌情報を限定したい場合は検索フィールドコードに “.SUB” を付加します。(例: /JT.SUB). また反応データ中の書誌情報を検索したい場合には “.RX” を付加します。(例: /AU.RX).

2) 出典情報は検索語を含むフィールド中に含まれます。出典情報中の “BABSNNNNN” という形式の番号により BABS ファイルへリンクされている場合があります。STN on the Webで ReaxysFile ファイルを使用した場合は、この BABS 番号は BABS ファイル中の出典文献へ確実にハイパーリンクされていますので、番号をクリックするだけです。

3) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 構造検索語

検 索 語	入 力 例
STRUCTURE コマンドまたは STN Express/STN on the Web の アップロード機能を用いて作成された構造質問式の L 番号 (L 番号間のブール演算も可能) <sup>1)</sup>	SEARCH L1 CSS FUL S L1 NOT L2
SCREEN コマンドを用いて作成されたスクリーンセットの L 番号 (L 番号間のブール演算も可能) <sup>1)</sup>	S L3 OR L4
STRUCTURE コマンドまたは STN Express/STN on the Web の アップロード機能を用いて作成された構造質問式の L 番号と、 SCREEN コマンドを用いて作成されたスクリーンセットの L 番号の組合せ (L 番号間のブール演算も可能) <sup>1)</sup>	S L1 NOT L3

1) 構造検索結果の回答セットの L 番号は、辞書検索や物性検索の項目と組み合わせることができます。  
(例: S L1 AND AMINO または S L3 AND IR?/FA)

## 構造検索のタイプ

SEARCH コード	種 類 <sup>1)</sup>	内 容	入 力 例
SSS	Substructure 部分構造検索 (デフォルト)	構造質問式を含む物質を検索 置換可能なすべての位置に追加の 置換基が結合してもよい 他の成分が含まれてもよい	SEARCH L1 SSS FUL S L2 OR L3 SSS SAM S L7 SSS RAN
CSS	Closed Substructure 閉構造部分構造検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索 置換を許容したすべての位置に追加の 置換基が結合してもよい 他の成分が含まれてもよい	SEARCH L1 CSS FUL S L2 NOT L3 CSS S L4 OR L5 CSS RAN
FAM	Family ファミリー検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索 他の成分が含まれてもよい	S L6 FAM SAM
EXA	Exact 完全一致検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索	SEA L5 EXA FUL

## 構造検索の範囲

構造検索の際にスクリーンを通過した候補化合物の集合に L 番号を付けるには、検索実行の前に =>SET EXTEND ON あるいは =>SET EXTAND ON PERM と設定します。あるいは、SEARCH コマンドと同じ行に EXTEND と入力しても同様の機能が働きます。

本機能の詳細は、=>HELP SET EXTEND でご覧いただけます。

SEARCH コード	種 類	内 容	入 力 例
SAM	Sample サンプル検索 (デフォルト)	ファイルの固定された一部 (5%)を検索	SEARCH L3 EXA SAM S L6 NOT L7 SSS SAM
FUL	Full フルファイル検索	ファイル全体(100%)を検索	S L5 OR L8 SSS FUL
RAN	Range 範囲指定検索	ユーザーが指定した範囲内で 検索	S L4 RAN=(5471081,) S L3 FAM RAN=(77542, 80001)
SUB SAM	Subset Sample サブセットサンプル検索	ReaxysFile の検索で得られた 回答セットをさらに サンプル検索	S L7 CSS SUB=L5 SAM
SUB RAN	Subset Range サブセット範囲指定 検索	ReaxysFile の検索で得られた 回答セットをさらに 範囲指定検索	S L3 SUB=L2 RAN=(, 72810)
SUB FUL	Subset Full サブセットフルファイル 検索	ReaxysFile の検索で得られた 回答セットをさらに フルファイル検索	S L8 SUB=L6 FAM FUL

## 化学的データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/CDER	化学的誘導体 <sup>1)</sup>	S HYDRAZONE/CDER	CDER
/CDER. AN	誘導体 AN <sup>2)</sup>	S 5845535/CDER. AN	CDER
/CDER. COM	誘導体コメント <sup>1)</sup>	S BENZIMIDAZOLE/CDER. COM	CDER
/INP	天然物からの単離 <sup>1)</sup>	S LEAVES/INP	INP
/INP. COM	コメント <sup>1)</sup>	S DEXTROROTATORY/INP. COM	INP
/OS	その他の収録源	S MERCK INDEX/OS	XREF
または/XREF. SO			
/PUR	精製 (法) <sup>1)</sup>	S ALCOHOL/CNS AND ACETYLTATION/PUR	PUR
/RSTR	関連構造 <sup>1)</sup>	S CONSTITUTION/RSTR	RSTR
/RSTR. COM	コメント <sup>1)</sup>	S HANDBOOK/RSTR. COM	RSTR
/RSTR. PAAN	参照 AN <sup>2)</sup>	S 1581/RSTR. PAAN	RSTR
/RSTR. PA	参照物質 <sup>1)</sup>	S OESTRADIOLDIMETHYLETHER/RSTR. PA	RSTR
/XREF. CN	相互参照資料 化学物質名称 <sup>1)</sup>	S N-BENZOYL-4-PIPERIDONE/XREF. CN	XREF
/XREF. DTP	データタイプ	S 6279685/AN(P) IR/XREF. DTP	XREF
/XREF. ID	外部アクセス ID	S ALDRICH/XREF. SO AND 250619/XREF. ID	XREF

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 生態学的データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/BIO. A	生物学的作用	S 5 DAY?/BIO. A	BIO
/BIO. AR	蓄積半減期	S 0.882 PER HOUR/BIO. AR	BIO
/BIO. BC	蓄積速度定数	S 0.03/BIO. BC	BIO
/BIO. C	生物濃縮係数 (BCF)	S 0.03-58 .MY.G/BIO. C	BIO
/BIO. ER	濃度	S 1.1 PER DAY/BIO. ER	BIO
/BIO. EX	排出速度定数	S 5 DAY?/BIO. EX	BIO
/BIO. H	暴露時間	S 28 DAY?/BIO. H	BIO
/BIO. LOG	排出半減期	S CA. 0.5/BIO. LOG	BIO
/BIO. MAG	BCFの対数	S 20/BIO. MAG	BIO
/BIO. ME	生物学的濃縮	S FOOD/BIO. ME	BIO
/BIO. MON	媒体	S LEUKOCYTES/BIO. MON	BIO
/BIO. MR	生態検査	S (FISH(W)BRAIN(W) ACETYLCHOLINESTERASE)/BIO. MR	BIO
/BIO. SP	方法, 注釈	S (SALMO(W)SOLAR)/BIO. SP	BIO
/BIO. T	生物種	S 10-15/BIO. T	BIO
/BIOD. AN	温度 <sup>2), 3)</sup>	S 8612787/BIOD. AN	BIOD
/BIOD. C	生分解	S 1 G/L/BIOD. C	BIOD
/BIOD. COM	分解生成物 AN <sup>2)</sup>	S (FURTHER(W)DEGRADATION(W) PRODUCT)/BIOD. COM	BIOD
/BIOD. D	濃度	S 28-36/BIOD. D	BIOD
/BIOD. DP	コメント <sup>1)</sup>	S (CARBOXYLATED(W)ALIPHATIC(W) ALCOHOL)/BIOD. DP	BIOD
/BIOD. EX	分解速度	S 8 WEEK?/BIOD. EX	BIOD
/BIOD. H	分解生成物 <sup>1)</sup>	S 40?/BIOD. H	BIOD
/BIOD. IN	暴露時間	S (ACTIVATED(W)SLUDGE)/BIOD. IN	BIOD
/BIOD. MR	半減期	S (SEWAGE(W)TREATMENT)/BIOD. MR	BIOD
/BIOD. T	接種物	S 20/BIOD. T	BIOD
/BIOD. TYP	方法, 注釈	S AEROBIC/BIOD. TYP	BIOD
/COEV. BC	温度	S (FAT(W)BASIS)/COEV. BC	COEV
/COEV. CC	タイプ	S 0-20.420 MG/KG DRY WT/COEV. CC	COEV
/COEV. LO	環境への濃縮	S LAKE MICHIGAN/COEV. LO	COEV
/COEV. ME	バックグラウンド濃度	S TOLUENE/CN AND SOIL/COEV. ME	COEV
/COEV. MR	汚染濃度	S (FISH?(S)CAPTURE?(S)APRIL(S) 1996)/COEV. MR	COEV
/COEV. SP	場所	S FISH/COEV. SP	COEV
/ECDH. AN	媒体	S ECDH/FA	ECDH
/ECDH. C	方法, 注釈	S 647116/ECDH. AN	ECDH
/ECDH. COM	非生物的分解, 加水分解	S 0.21 PPM/ECDH. C	ECDH
/ECDH. D	分解生成物 AN <sup>2)</sup>	S (FURTHER(W)DEGRADATION(W) PRODUCT?)/ECDH. COM	ECDH
/ECDH. DP	濃度	S 100/ECDH. D	ECDH
/ECDH. EX	コメント <sup>1)</sup>	S OCTACHLORODIBENZOFURAN/ECDH. DP	ECDH
/ECDH. H	分解速度	S 24 HOUR?/ECDH. EX	ECDH
/ECDH. MR	分解生成物 <sup>1)</sup>	S 0.533333-16.5/ECDH. H	ECDH
/ECDH. PH	暴露時間	S GC/ECDH. MR	ECDH
/ECDH. RC	半減期	S 1.01/ECDH. PH	ECDH
/ECDH. T	方法, 注釈	S 1.15 PER HOUR/ECDH. RC	ECDH
/ECDH. TYP	pH値	S 10/ECDH. T	ECDH
	速度定数	S OXIDATION/ECDH. TYP	ECDH
	温度		
	タイプ		

(続く)

## 生態学的データ (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/ECDP. AN	非生物的分解, 光分解 分解生成物 AN <sup>2)</sup>	S 1446588/ECDP. AN	ECDP
/ECDP. C	濃度	S 5.9 PPM/ECDP. C	ECDP
/ECDP. COM	コメント <sup>1)</sup>	S (DEGRADATION(W)PRODUCT?)/ECDP. COM	ECDP
/ECDP. D	分解速度	S 80/ECDP. D	ECDP
/ECDP. DP	分解生成物 <sup>1)</sup>	S HEXACHLOROBENZENE/ECDP. DP	ECDP
/ECDP. EX	暴露時間	S 3 HOUR?/ECDP. EX	ECDP
/ECDP. H	半減期	S 1/ECDP. H	ECDP
/ECDP. MR	方法, 注釈	S H202/ECDP. MR	ECDP
/ECDP. PH	pH値	S PHOTOOXIDATION/ECDP. TYP (P) 2.8/ECDP. PH	ECDP
/ECDP. RC	速度定数	S 0.005-2.473 min <sup>-1</sup> /ECDP. RC	ECDP
/ECDP. T	温度	S 600/ECDP. T	ECDP
/ECDP. TYP	タイプ	S PHOTOLYSIS/ECDP. TYP	ECDP
/ECS. 5	土壌中での安定性 散逸時間50	S 1332/ECS. 5	ECS
/ECS. 9	散逸時間90	S (25(W)DAY?)/ECS. 9	ECS
/ECS. C	濃度	S 50 MG/KG/ECS. C	ECS
/ECS. CE	カチオン交換速度	S "11.45 C MOL (P+T) KG <sup>-1</sup> "/ECS. CE	ECS
/ECS. D	散逸	S 33/ECS. D	ECS
/ECS. EX	暴露時間	S (64(W)DAY?)/ECS. EX	ECS
/ECS. HU	湿度	S 0.3-2.7 PERCENT/ECS. HU	ECS
/ECS. MB	微生物量	S 9.8E7 CFU/G/ECS. MB	ECS
/ECS. MR	方法, 注釈	S (SOIL(2W)HOLIDAY(W)BEACH)/ECS. MR	ECS
/ECS. OC	有機炭素量	S (50(W)PERCENT)/ECS. OC	ECS
/ECS. PH	pH値 <sup>2)</sup>	S 2-5/ECS. PH	ECS
/ECS. T	温度 <sup>2), 3)</sup>	S 20>ECS. T	ECS
/ECS. TYP	タイプ	S (SANDY(W)LOAM)/ECS. TYP	ECS
/ECTD. ME	生態学的移動性: 輸送および分布 媒体	S WATER-AL203/ECTD. ME	ECTD
/ECTD. MR	方法, 注釈	S (SOLID(W)PHASE(W)EXTRACTION) /ECTD. MR	ECTD
/ECTD. RE	結果	S (SORPTION(W)ISOTHERM)/ECTD. RE	ECTD
/ECTD. TYP	タイプ	S ADSORPTION/ECTD. TYP	ECTD
/ECTOX. AN	生態毒性 代謝産物 AN <sup>2)</sup>	S 2242347/ECTOX. AN	ECTOX
/ECTOX. C	濃度	S 3-10 .MY. G/L/ECTOX. C	ECTOX
/ECTOX. COM	コメント <sup>1)</sup>	S (FURTHER(W)METABOL?)/ECTOX. COM	ECTOX
/ECTOX. E	効果	S ABSORPTION/ECTOX. E	ECTOX
/ECTOX. EP	効果のエンドポイント	S (GROWTH(W)INHIBITION)/ECTOX. EP	ECTOX
/ECTOX. EX	暴露時間	S 10 DAY?/ECTOX. EX	ECTOX
/ECTOX. FD	詳細	S TEQ/ECTOX. FD	ECTOX
/ECTOX. KD	投与種類	S SOIL/ECTOX. KD	ECTOX
/ECTOX. META	代謝産物 <sup>1)</sup>	S TNT/CN AND 4-METHYL-3,5- DINITRO-ANILINE/ECTOX. META	ECTOX
/ECTOX. MR	方法, 注釈	S (CHOICE(W)BIOASSAY)/ECTOX. MR	ECTOX
/ECTOX. RA	適用経路	S PERORAL/ECTOX. RA	ECTOX
/ECTOX. RE	結果	S (EFFECTS(2W)OVARIES)/ECTOX. RE	ECTOX
/ECTOX. S	性別	S FEMALE/ECTOX. S	ECTOX
/ECTOX. SP	生物種またはテスト系	S (EISENIA(W)FOETIDA)/ECTOX. SP	ECTOX
/ECTOX. TYP	タイプ	S LC50/ECTOX. TYP	ECTOX
/ECTOX. V	タイプの値	S CA. 0.2 NKAT/MG PROTEIN/ECTOX. V	ECTOX
/EXCA. HE	汚染評価 汚染対象	S (DISTRIBUTION(S)WATER)/EXCA. HE	EXCA
/EXCA. SO	汚染源	S OIL/EXCA. SO	EXCA

(続く)

## 生態学的データ (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/EOD. C	酸素要求量	S 1.5 G/EOD. C	EOD
	濃度		
/EOD. D	酸素要求量	S 290.7/EOD. D	EOD
/EOD. MR	方法, 注釈	S (STANDARD (2W) METHOD?)/EOD. MR	EOD
/EOD. RAT	BOD5/COD比率	S 0.98/EOD. RAT	EOD
/EOD. RE	適応	S DOC/EOD. RE	EOD
/EOD. TYP	タイプ	S COD/EOD. TYP	EOD

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

3) デフォルト単位はセ氏です。

## 実験用途と操作

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/USC. COM	物質用途	S LIGHT/USC. COM	USC
	コメント <sup>1)</sup>		
/USC. LH	実験用途と操作 <sup>1)</sup>	S (POLYMERIC (2W) SURFACTANT)/USC. LH	USC
/USC. PT	用途の形態	S (DETECTION (2W) PENICILLIN (2W) MILK) /USC. PT	USC

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

## 薬理学データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/PHARM. AN	代謝産物 AN <sup>2)</sup>	S 8407954/PHARM. AN	PHARM
/PHARM. C	濃度	S 10 MG/KG/PHARM. C	PHARM
/PHARM. COM	コメント <sup>1)</sup>	S ANTIFUNGAL/PHARM. COM	PHARM
/PHARM. E	効果	S ACUTE TOXICITY ORAL/PHARM. E	PHARM
/PHARM. EP	効果のエンドポイント	S (CELL (W) DEATH)/PHARM. EP	PHARM
/PHARM. EX	暴露時間	S YEAR/PHARM. EX	PHARM
/PHARM. FD	詳細	S ELECTROPHYSIOLOGICAL/PHARM. FD	PHARM
/PHARM. H	半減期	S "2 HOUR (S)"/PHARM. H	PHARM
/PHARM. KD	投与種類	S DAILY/PHARM. KD	PHARM
/PHARM. META	代謝産物 <sup>1)</sup>	S PYRENE/CN AND PYREN-1-OL/PHARM. META	PHARM
/PHARM. MR	方法, 注釈	S (IN (W) VITRO)/PHARM. MR	PHARM
/PHARM. RA	適用経路	S EPICUTANEOUS/PHARM. RA	PHARM
/PHARM. RE	結果	S (DOSE (W) DEPENDEN? (P) CYTOTOXICITY) /PHARM. RE	PHARM
/PHARM. S	性別	S FEMALE/PHARM. S	PHARM
/PHARM. SP	生物種またはテスト系	S BACTERIA/PHARM. SP	PHARM
/PHARM. TYP	タイプ	S BENZENE/CN AND LD50/PHARM. TYP	PHARM
/PHARM. V	タイプの値	S EC50/PHARM. TYP (P) 0.1 MG/L/PHARM. V	PHARM

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 反応データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/BIRX	反応の基本索引 (RX. CAT, RX. CL, RX. COM, RX. COND, RX. PRO, RX. RCT, RX. RGT, RX. SOL, RX. SRCT, RX. SUBJ, RX. TYP, およびすべての反応関与物質の レコード番号 (RX. PAN, RX. RAN, RX. SRAN) からの切出し語) <sup>1)</sup>	S CONDENSATION/BIRX	RX
/FA. RX /RX. AAN	反応フィールドの存在 すべての反応レコード番号 (RX. PAN, RX. RAN, および RX. SRAN からのレコード番号を 含む) <sup>2)</sup>	S REACTION DOCUMENTS/FA. RX S 50000/RX. AAN	表示されない RX
/RX. CAT	触媒 <sup>3)</sup>	S SNBR2/RX. CAT	RX
/RX. CL	反応分類 <sup>3)</sup>	S (CHEMICAL (W) BEHAVIOUR)/RX. CL	RX
/RX. COM	コメント <sup>1), 3)</sup>	S (CRYSTALLINE (W) SUBSTANCE)/RX. COM	RX
/RX. COND	その他の条件 <sup>1), 3)</sup>	S ICEWATER/RX. COND	RX
/RX. ID	反応 ID <sup>2)</sup>	S 5418675/RX. ID	RX
/RX. NVAR	反応詳細の数 <sup>2)</sup>	S 2/RX. NVAR	RX
/RX. P	圧力 <sup>2), 3), 4)</sup>	S 1-25/RX. P	RX
/RX. PAN	生成物 AN <sup>2)</sup>	S 4885619/RX. PAN	RX
/RX. PH	pH値 <sup>2), 3)</sup>	S RX. PH<1	RX
/RX. PRO	生成物 <sup>1)</sup>	S "CHLORPROMAZINE N+-GLUCURONIDE CHLORIDE"/RX. PRO	RX
/RX. PRT	プロトタイプの反応 <sup>3)</sup>	S CATALYST?/RX. PRT	RX
/RX. RAN	反応物 AN <sup>2)</sup>	S 5026/RX. RAN	RX
/RX. RCT	反応物 <sup>1)</sup>	S L-PROLINE/RX. RCT	RX
/RX. RGT	試薬 <sup>1), 3)</sup>	S ACETONE/RX. RGT	RX
/RX. RID	反応詳細反応 ID <sup>3)</sup>	S 1000. 2/RX. RID	RX
/RX. SNR	ステージ数 <sup>3)</sup>	S 2/RX. SNR	RX
/RX. SOL	溶媒 <sup>3)</sup>	S CH2CL2/RX. SOL	RX
/RX. SRAN	ステージ反応物 AN <sup>2), 3)</sup>	S 742586/RX. SRAN	RX
/RX. SRCT	ステージ反応物 <sup>1), 3)</sup>	S MALONALDEHYDE/RX. SRCT	RX
/RX. SUBJ	研究主題 <sup>3)</sup>	S KINETICS/RX. SUBJ	RX
/RX. T	温度 <sup>2), 3), 5)</sup>	S -100 - -10/RX. T	RX
/RX. TIM	時間 <sup>3)</sup>	S "2. 0 HOUR (S)"/RX. TIM	RX
/RX. TYP	反応タイプ <sup>3)</sup>	S POLYMERIZATION/RX. TYP	RX
/RX. YD	収率 <sup>2), 3), 6)</sup>	S 99. 99/RX. YD	RX
/RX. YDT	収率データ <sup>3), 6)</sup>	S "1 G (AN=1864069)"/RX. YDT	RX

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

3) 反応の詳細は、検索語がそのフィールドが存在するならば QRD 形式で表示されます。

4) デフォルト単位は Torr です。

5) デフォルト単位はセ氏です。

6) /RX. YD と /RX. YDT フィールドに記されている収率は同一です。しかし、数値検索可能な収率フィールド (/RX. YD) はすべての反応レコードに存在するわけではありません。

## ■ スーパー検索フィールド

必要な情報が含まれる一つまたはそれ以上のフィールドを検索するときは、スーパー検索フィールドを利用します。スーパー検索フィールドを利用すると、クロスファイルおよびマルチファイル検索が簡単に実行できます。スーパー検索フィールドで EXPAND は利用できません。代わりに個々のフィールドで EXPAND してください。

スーパー検索フィールド	検索されたフィールド	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/AAN	/AN, /COMPAN, /FAN, /AZE. PAAN, /CPEM. PAAN, /ENEM. PAAN, /EDM. PAAN, /BSPM. PAAN, /ADSM. PAAN, /ASSM. PAAN, /LVSM. PAAN, /LLSM. PAAN, /LSSM. PAAN, /MECM. PAAN, /TRAM. PAAN, /ODM. PAAN, /RSTR. PAAN, /HHDG. AN, /POT. PAN, /CDER. AN, /PHARM. AN, /ECTOX. AN, /BIOD. AN, /ECDH. AN, /ECDP. AN	全てのレコード番号	S 1915876/AAN	ADSM, ASSM, AZE, BIOD, AN, BSPM, CDER, COMPAN, CPEM, ECDH, ECDP, ECTOXEDM, ENEM, FAN, HHDG, LLSM, LSSM, LVSM, MECM, ODM, PHARM, POT, RSTR, SOLM, TRAM
/AJT /RX	/JT, /JTW, /URES /RX. RCT, /RX. RGT, /RX. PRO, /RX. SUBJ, /RX. SOL, /RX. CAT, /RX. TYP, /RX. PRT, /RX. SRCT	全ての雑誌標題 反応	S IMMUNOCHEMISTRY/AJT	<sup>1)</sup> RX

- 1) 出典情報は検索語を含むフィールド中に含まれます。出典情報中の“BABSNNNNN”という形式の番号により BABS ファイルへリンクされている場合があります。STN on the Web で ReaxysFile ファイルを使用した場合は、この BABS 番号は BABS ファイル中の出典文献へ確実にハイパーリンクされていますので、番号をクリックするだけです。

## 電気のおよび磁気的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/DIC	比誘電率 <sup>1)</sup>	なし	S 2-2.2/DIC	DIC
/DIC.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/DIC.COM	DIC
/DIC.F	周波数 <sup>1)</sup>	Hz	S 50000/DIC.F	DIC
/DIC.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 20.5/DIC.T	DIC
/DICS	静電誘電率 <sup>1)</sup>	なし	S 2.3-2.301/DICS	DICS
/DICS.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S POLARISATION/DICS.COM	DICS
/DICS.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S DICS.T>20	DICS
/ELE.COM	電気的データ コメント <sup>2)</sup>	-	S PHENOL/ELE.COM	ELE
/ELE.KW	キーワード	-	S PIEZOELECTRICITY/ELE.KW	ELE
/MAG.COM	磁気的データ コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/MAG.COM	MAG
/MAG.KW	キーワード	-	S MAGNETIC MOMENT/MAG.KW	MAG
/MSUS	磁化率 <sup>1)</sup>	cm**3/mol*E6	S 0-410/MSUS	MSUS
/MSUS.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S RANGE/MSUS.COM	MSUS
/MSUS.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 20-25/MSUS.T	MSUS

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 電気化学的作用

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/DE	解離指数 (pk) <sup>2)</sup>	なし	S 1.5-1.55/DE	DE
/DE.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/DE.COM	DE
/DE.MET	測定法	-	S CONDUCTOMETRIC/DE.MET	DE
/DE.SOL	溶媒	-	S D20/DE.SOL	DE
/DE.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S DE.T>180	DE
/DE.TYP	タイプ	-	S THERMODYNAMIC/DE.TYP	DE
/ELCB.COM	電気化学的作用 コメント <sup>1)</sup>	-	S GAS/ELCB.COM	ELCB
/ELCB.KW	キーワード	-	S PROTON AFFINITY/ELCB.KW	ELCB
/IEP	等電点 pH <sup>2)</sup>	-	S IEP>5.5	IEP
/IEP.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/IEP.COM	IEP
/IEP.SOL	溶媒	-	S H20/IEP.SOL	IEP
/POT.COM	電気化学的特性 コメント <sup>1)</sup>	-	S CYCLOVOLTAMMETRY/POT.COM	POT
/POT.KW	キーワード	-	S OXIDATION POTENTIAL/POT.KW	POT
/POT.PAN	生成物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 2827/POT.PAN	POT
/POT.PH	pH値 <sup>2)</sup>	なし	S 1-7/POT.PH	POT
/POT.PRO	生成物	-	S PHENYLENEDIAMINE/POT.PRO	POT
/POT.SOL	溶媒	-	S METHANOL/POT.SOL	POT
/POT.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S POT.T<-10	POT
/XS.COM	クロスセクション コメント <sup>1)</sup>	-	S ELEKTRONEN/XS.COM	XS
/XS.KW	キーワード	-	S COLLISION CROSS-SECTION /XS.KW	XS

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 多成分系データ (MCS)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ADSM.COM	吸着 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/ADSM.COM	ADSM
/ADSM.KW	キーワード	-	S ENTHALPY OF ADSORPTION /ADSM.KW	ADSM
/ADSM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S TRITON X-100/ADSM.PA	ADSM
/ADSM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 2343266/ADSM.PAAN	ADSM
/ADSM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 0.5-20/ADSM.P	ADSM
/ADSM.SOL	溶媒	-	S H2SO4/ADSM.SOL	ADSM
/ADSM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 100/ADSM.T	ADSM
/ASSM.COM	会合 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S ACIDIC SOLUTION/ASSM.COM	ASSM
/ASSM.KW	キーワード	-	S ASSOCIATION WITH COMPOUND /ASSM.KW	ASSM
/ASSM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 0.5-1.5/ASSM.P	ASSM
/ASSM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S IMIDAZOLE PERCHLORATE /ASSM.PA	ASSM
/ASSM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 54438/ASSM.PAAN	ASSM
/ASSM.SOL	溶媒	-	S CDCL3/ASSM.SOL	ASSM
/ASSM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S ASSM.T>100	ASSM
/AZE.C	共沸混合物 (MCS) 濃度	-	S 60.11 MOL-PERCENT/AZE.C	AZE
/AZE.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/AZE.COM	AZE
/AZE.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 199.8/AZE.P	AZE
/AZE.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S DODECANE/AZE.PA	AZE
/AZE.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1697175/AZE.PAAN	AZE
/AZE.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20-25/AZE.T	AZE
/BSPM.COM	界面現象 コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/BSPM.COM	BSPM
/BSPM.KW	キーワード	-	S SURFACE TENSION/BSPM.KW	BSPM
/BSPM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 0-750060/BSPM.P	BSPM
/BSPM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S METHANOL/BSPM.PA	BSPM
/BSPM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1098229/BSPM.PAAN	BSPM
/BSPM.SOL	溶媒	-	S H2O/BSPM.SOL	BSPM
/BSPM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 100/BSPM.T	BSPM
/CPEM.COM	複雑な相平衡 コメント <sup>1)</sup>	-	S DEPENDENCE/CPEM.COM	CPEM
/CPEM.KW	キーワード	-	S PHASE EQUILIBRIUM/CPEM.KW	CPEM
/CPEM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 30000-40000/CPEM.P	CPEM
/CPEM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S (NAPHTHALENE AND WATER) /CPEM.PA	CPEM
/CPEM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1421310/CPEM.PAAN	CPEM
/CPEM.SOL	溶媒	-	S H2O/CPEM.SOL	CPEM
/CPEM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20/CPEM.T	CPEM
/CMC	臨界ミセル濃度 <sup>2)</sup>	g/L	S 0.025/CMC	CMC
/CMC.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/CMC.COM	CMC
/CMC.SOL	溶媒	-	S H2O/CMC.SOL	CMC
/CMC.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 0.025/CMC AND 40/CMC.T	CMC
/EDM.COM	電気的データ コメント <sup>1)</sup>	-	S CONCENTRATION/EDM.COM	EDM
/EDM.KW	キーワード	-	S DIELECTRIC CONSTANT/EDM.KW	EDM
/EDM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S TETRATRIACONTAN-1-OL/EDM.PA	EDM
/EDM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1798829/EDM.PAAN	EDM
/EDM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20-30/EDM.T	EDM

(続く)

## 多成分系データ (MCS) (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ENEM.COM	エネルギーデータ (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S CYCLOHEXANON/ENEM.COM	ENEM
/ENEM.KW	キーワード	-	S ENTHALPY OF SOLUTION/ENEM.KW	ENEM
/ENEM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 2-20/ENEM.P	ENEM
/ENEM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S 1,4-DIOXANE/ENEM.PA	ENEM
/ENEM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 969148/ENEM.PAAN	ENEM
/ENEM.SOL	溶媒	-	S TOLUENE/ENEM.SOL	ENEM
/ENEM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 25-30/ENEM.T	ENEM
/HNC	Henry定数 (MCS)	Pa*m**3/mol	S 20-30/HNC	HNC
/HNC.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S CONSTANT/HNC.COM	HNC
/HNC.LOG	Henry定数の対数 <sup>2)</sup>	-	S -5.72/HNC.LOG	HNC
/HNC.SOL	溶媒	-	S H20/HNC.SOL	HNC
/HNC.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 25/HNC.T	HNC
/LLSM.COM	液-液系 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/LLSM.COM	LLSM
/LLSM.KW	キーワード	-	S LIQUID/LIQUID PHASE DIAGRAM /LLSM.KW	LLSM
/LLSM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 0-10000/LLSM.P	LLSM
/LLSM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S TETRACHLOROMETHANE/LLSM.PA	LLSM
/LLSM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1098295/LLSM.PAAN	LLSM
/LLSM.SOL	溶媒	-	S DIMETHYLSULFOXIDE/LLSM.SOL	LLSM
/LLSM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 5-10/LLSM.T	LLSM
/LSSM.COM	固-液系 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/LSSM.COM	LSSM
/LSSM.KW	キーワード	-	S PHASE TRANSITION TEMPERATURE?/LSSM.KW	LSSM
/LSSM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 0-20000/LSSM.P	LSSM
/LSSM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S STRYCHNIDIN-10-ONE/LSSM.PA	LSSM
/LSSM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 52979/LSSM.PAAN	LSSM
/LSSM.SOL	溶媒	-	S NAPHTHALENE/LSSM.SOL	LSSM
/LSSM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S LSSM.T>200	LSSM
/LVSM.COM	気-液系 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/LVSM.COM	LVSM
/LVSM.KW	キーワード	-	S CRITICAL VOLUME/LVSM.KW	LVSM
/LVSM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 19000-90000/LVSM.P	LVSM
/LVSM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S ACETALDEHYDE/LVSM.PA	LVSM
/LVSM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 506007/LVSM.PAAN	LVSM
/LVSM.SOL	溶媒	-	S PROPAN-1-OL/LVSM.SOL	LVSM
/LVSM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 120/LVSM.T	LVSM
/MECM.COM	機械的および物理的特性 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S DIAGRAM/MECM.COM	MECM
/MECM.KW	キーワード	-	S ISOTHERMAL COMPRESS? /MECM.KW	MECM
/MECM.P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 1-10/MECM.P	MECM
/MECM.PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S OCTAN-1-OL/MECM.PA	MECM
/MECM.PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1697461/MECM.PAAN	MECM
/MECM.SOL	溶媒	-	S HCL/MECM.SOL	MECM
/MECM.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 25-65/MECM.T	MECM

(続く)

## 多成分系データ (MCS) (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ODM. KW	光学データ (MCS) キーワード	-	S KERR CONSTANT/ODM. KW	ODM
/ODM. PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S PHENOL/ODM. PA	ODM
/ODM. PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 969616/ODM. PAAN	ODM
/POW	オクタノール/水分配率 (POW) (MCS) <sup>2)</sup>	-	S 1.5-2/POW	POW
/POW. LOG	POWの対数 <sup>2)</sup>	-	S -0.9- -0.7/POW. LOG	POW
/POW. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20/POW. T	POW
/SLB	溶解度 (MCS) <sup>2)</sup>	g/L	S SLB<0.0001	SLB
/SLB. COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S PH/SLB. COM	SLB
/SLB. RAT	溶媒の比率	-	S (6(P)1)/SLB. RAT	SLB
/SLB. SAT	飽和	-	S (PURE AND SOLVENT)/SLB. SAT	SLB
/SLB. SOL	溶媒	-	S DIETHYL ETHER/SLB. SOL	SLB
/SLB. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 10/SLB. T	SLB
/SLBP	溶解度積 (MCS) <sup>2)</sup>	-	S SLBP<0.00002	SLBP
/SLBP. COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/SLBP. COM	SLBP
/SLBP. RAT	溶媒の比率	-	S (30(P)PERCENT)/SLBP. RAT	SLBP
/SLBP. SOL	溶媒	-	S H20/SLBP. SOL	SLBP
/SLBP. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 25/SLBP. T	SLBP
/SOLM. COM	溶液作用 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S PRESSURE/SOLM. COM	SOLM
/SOLM. KW	キーワード	-	S MISCIBILITY/SOLM. KW	SOLM
/SOLM. P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 780-850/SOLM. P	SOLM
/SOLM. PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S XYLITOL/SOLM. PA	SOLM
/SOLM. PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 2049713/SOLM. PAAN	SOLM
/SOLM. SOL	溶媒	-	S TETRAHYDROFURAN/SOLM. SOL	SOLM
/SOLM. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20/SOLM. T	SOLM
/TRAM. COM	輸送現象 (MCS) コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/TRAM. COM	TRAM
/TRAM. KW	キーワード	-	S DYNAMIC VISCOSITY/TRAM. KW	TRAM
/TRAM. P	圧力 <sup>2)</sup>	Torr	S 0-800000/TRAM. P	TRAM
/TRAM. PA	対象物 <sup>1)</sup>	-	S ETHANOL/TRAM. PA	TRAM
/TRAM. PAAN	対象物 AN <sup>2)</sup>	なし	S 1718733/TRAM. PAAN	TRAM
/TRAM. SOL	溶媒	-	S PYRIDINE/TRAM. SOL	TRAM
/TRAM. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 9.9/TRAM. T	TRAM

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

光学的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CDIC.COM	円偏光二色性 コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/CDIC.COM	CDIC
/CDIC.SOL	溶媒	-	S CHCL3/CDIC.SOL	CDIC
/MUT	変旋光 <sup>2)</sup>	deg	S 10-20/MUT	MUT
/MUT.C	濃度	-	S 0.7 G/100ML/MUT.C	MUT
/MUT.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/MUT.COM	MUT
/MUT.LEN	光路長 <sup>2)</sup>	cm	S MUT.LEN>10	MUT
/MUT.SOL	溶媒	-	S H2O/MUT.SOL	MUT
/MUT.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 21/MUT.T	MUT
/MUT.TIM	時間	-	S 1 DAY?/MUT.TIM	MUT
/MUT.TYP	タイプ	-	S M/MUT.TYP	MUT
/MUT.W	波長 <sup>2)</sup>	nm	S 589/MUT.W	MUT
/OPT.COM	光学 コメント <sup>1)</sup>	-	S ACETON/OPT.COM	OPT
/OPT.KW	キーワード	-	S LINEAR DICHROISM/OPT.KW	OPT
/ORD.COM	旋光分散 コメント <sup>1)</sup>	-	S CYCLOHEXANOL/ORD.COM	ORD
/ORD.SOL	溶媒	-	S ETHANOL/ORD.SOL	ORD
/ORP	旋光度 <sup>2)</sup>	deg	S 39.65-40/ORP	ORP
/ORP.C	濃度	-	S 1 MOL/L/ORP.C	ORP
/ORP.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S ACETAMIDE/ORP.COM	ORP
/ORP.LEN	光路長 <sup>2)</sup>	cm	S 10/ORP.LEN	ORP
/ORP.SOL	溶媒	-	S BENZENE/ORP.SOL	ORP
/ORP.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20/ORP.T	ORP
/ORP.TYP	タイプ	-	S ALPHA/ORP.TYP	ORP
/ORP.W	波長 <sup>2)</sup>	nm	S 578/ORP.W	ORP
/RI	屈折率 <sup>2)</sup>	-	S 1.00056/RI	RI
/RI.COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/RI.COM	RI
/RI.T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 0/RI.T	RI
/RI.W	波長 <sup>2)</sup>	nm	S 586/RI.W	RI

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

安全性データ

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/FP.T	引火点 温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 105/FP.T	FP
/FP.TYP	テストのタイプ	-	S DIN/FP.TYP	FP

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 物理的および機械的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CMP. COM	圧縮率 コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/CMP. COM	CMP
/CMP. KW	キーワード	-	S ADIABATIC COMPRESSIBILITY /CMP. KW	CMP
/DEN	液体密度 <sup>2)</sup>	g*cm**3	S 1/DEN	DEN
/DEN. COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S ALCOHOL/DEN. COM	DEN
/DEN. RT	基準温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 10/DEN. RT	DEN
/DEN. T	測定温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20/DEN. T	DEN
/MEC. COM	機械的性質 コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/MEC. COM	MEC
/MEC. KW	キーワード	-	S VISCOSITY/MEC. KW	MEC
/SOUND. COM	音響特性 コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/SOUND. COM	SOUND
/SOUND. KW	キーワード	-	S VELOCITY OF SOUND/SOUND. KW	SOUND
/ST	表面張力 <sup>2)</sup>	g/s**2	S 1.9-2/ST	ST
/ST. COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/ST. COM	ST
/ST. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20-22/ST. T	ST
-	その他の情報 <sup>3)</sup> (物理的および化学的性質)	-	S FINFO/FA	FINFO

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

3) ReaxysFile では詳細をカバーしていない物理的、化学的特性に関する引用を含んでいます。

## スペクトルデータ

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ESR. COM	ESR(電子スピン共鳴)スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S (INORGANIC AND COMPOUNDS) /ESR. COM	ESR
/ESR. KW	キーワード	-	S SPECTRUM/ESR. KW	ESR
/ESR. NUI	カップリング核	-	S 2D/ESR. NUI	ESR
/ESR. SOL	溶媒	-	S CH2CL2/ESR. SOL	ESR
/ESR. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 19-20/ESR. T	ESR
/FLU. COM	蛍光スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/FLU. COM	FLU
/FLU. KW	キーワード	-	S MAXIMA/FLU. KW	FLU
/FLU. SOL	溶媒	-	S ACETONITRILE/FLU. SOL	FLU
/FLU. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 25/FLU. T	FLU
/IR. COM	IR(赤外)スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S PH/IR. COM	IR
/IR. KW	キーワード	-	S FINE STRUCTURE OF IR BANDS /IR. KW	IR
/IR. SOL	溶媒	-	S CHCL3/IR. SOL	IR
/IR. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S IR. T>50	IR
/LUM. COM	発光スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S (TEMPERATURE AND DEPENDE?) /LUM. COM	LUM
/LUM. KW	キーワード	-	S LUMINESCENCE QUENCHING /LUM. KW	LUM

(続く)

## ■ スペクトルデータ (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/MS. COM	MASS(質量)スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S METASTABLE/MS. COM	MS
/MS. KW	キーワード	-	S FRAGMENTATION PATTERN/MS. KW	MS
/NMR. COM	NMR(核磁気共鳴)スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S (AMBIENT AND TEMPERATURE) /NMR. COM	NMR
/NMR. F	周波数 <sup>2)</sup>	MHz	S 50/NMR. F	NMR
/NMR. KW	キーワード	-	S 2D-NMR/NMR. KW	NMR
/NMR. NUC	核種	-	S 31P/NMR. NUC	NMR
/NMR. NUI	カップリング核	-	S (1H and 13C)/NMR. NUI	NMR
/NMR. SOL	溶媒	-	S CDCL3/NMR. SOL	NMR
/NMR. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 20-22/NMR. T	NMR
/NQR. COM	NQR(核四重極共鳴)スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S (NQR AND ABSORPTION)/NQR. COM	NQR
/NQR. KW	キーワード	-	S NUCLEAR QUADRUPOLE RESONANCE /NQR. KW	NQR
/NQR. NUC	核種	-	S 35CL/NQR. NUC	NQR
/OSM. COM	その他の分光法 コメント <sup>1)</sup>	-	S SHIFTS/OSM. COM	OSM
/OSM. KW	キーワード	-	S PHOTOELECTRON SPECTRUM /OSM. KW	OSM
/PHO. COM	りん光スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S HANDBOOK/PHO. COM	PHO
/PHO. KW	キーワード	-	S TRIPLET STATE LIFETIME /PHO. KW	PHO
/PHO. SOL	溶媒	-	S ETHANOL/PHO. SOL	PHO
/PHO. T	温度 <sup>2)</sup>	セ氏	S 25/PHO. T	PHO
/RAS. COM	ラマンスペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S (GASEOUS AND MATRIX)/RAS. COM	RAS
/RAS. KW	キーワード	-	S RAMAN INTENSITIES/RAS. KW	RAS
/RAS. SOL	溶媒	-	S KBR/RAS. SOL	RAS
/ROT. COM	回転スペクトル コメント <sup>1)</sup>	-	S ROTATIONS DISPERSION/ROT. COM	ROT
/ROT. KW	キーワード	-	S ROTATIONAL SPECTRUM/ROT. KW	ROT
/UVS. AM	紫外・可視スペクトル 吸収極大 <sup>2)</sup>	nm	S 139-139.1/UVS. AM	UVS
/UVS. COM	コメント <sup>1)</sup>	-	S (ACIDIC AND SOLUTION) /UVS. COM	UVS
/UVS. KW	キーワード	-	S ABSORPTION MAXIMA/UVS. KW	UVS
/UVS. EAC	吸光/吸収係数 <sup>2)</sup>	1/mol*cm	S 4.4/UVS. EAC	UVS
/UVS. SOL	溶媒	-	S CYCLOHEXANE/UVS. SOL	UVS

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

## 凝集状態

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CDEN	結晶	g/cm**3	S 5-5. 1/CDEN	CDEN
/CDEN.COM	結晶密度 <sup>1)</sup> コメント <sup>2)</sup>	-	S ORTHORHOMBISCH?/CDEN.COM	CDEN
/CDEN. T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 293 K/CDEN. T	CDEN
/CPD	結晶性状 色およびその他の性質の記述	-	S GLAS?/CPD	CPD
/CPD.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CPD.COM	CPD
/CRYPH.COM	結晶相 コメント <sup>2)</sup>	-	S ANISOTROPIC/CRYPH.COM	CRYPH
/CRYPH. KW	キーワード	-	S CRYSTAL STRUCTURE? /CRYPH. KW	CRYPH
/CRYPH. T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 14. 85/CRYPH. T	CRYPH
/CSG	結晶空間群	-	S P212121/CSG	CSG
/CSG.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CSG.COM	CSG
/CSYS	結晶系	-	S MONOCLINIC/CSYS	CSYS
/CSYS.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S (LABILE(P)FORM)/CSYS.COM	CSYS
/CTP	結晶の転移点 <sup>1)</sup>	セ氏	S 100. 05-100. 1/CTP	CTP
/CTP. CM	相状態の変化	-	S GLASS/CTP. CM	CTP
/CTP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CTP.COM	CTP
/DP	分解点 <sup>1)</sup>	セ氏	S 0-10/DP	DP
/DP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S CRYSTALLIZATION/DP.COM	DP
/DP. SOL	溶媒	-	S PROPAN-2-OL/DP. SOL	DP
/MP	融点 <sup>1)</sup>	セ氏	S 250-260/MP	MP
/MP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S DECOMPOSITION/MP.COM	MP
/MP. SOL	溶媒	-	S XYLENE/MP. SOL	MP
/SP	昇華点 <sup>1)</sup>	セ氏	S SP>=500	SP
/SP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S (MELTING(P)FORM)/SP.COM	SP
/SP. P	圧力 <sup>1)</sup>	Torr	S 1/SP. P	SP
/TP	三重点 <sup>1)</sup>	セ氏	S 218. 85/TP	TP
/TP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S BAR/TP.COM	TP
	液体			
/BP	沸点 <sup>1)</sup>	セ氏	S BP>200	BP
/BP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S BADTEMPERATUR/BP.COM	BP
/BP. P	圧力 <sup>1)</sup>	Torr	S 1/BP. P	BP
/LIQPH.COM	液相 コメント <sup>2)</sup>	-	S AETHANOL/LIQPH.COM	LIQPH
/LIQPH. KW	キーワード	-	S SELF-ASSOCIATION IN SOLUTION/LIQPH. KW	LIQPH
/LPTP	液相の転移点 <sup>1)</sup>	セ氏	S 20/LPTP	LPTP
/LPTP. CM	相状態の変化	-	S (NEMATIC(P)ISOTROPIC) /LPTP. CM	LPTP
/LPTP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/LPTP.COM	LPTP
	気体			
/CRD	臨界密度 <sup>1)</sup>	g/cm**3	S 0. 2-0. 2022/CRD	CRD
/CRD.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CRD.COM	CRD
/CRP	臨界圧力 <sup>1)</sup>	Torr	S CRP>760 MBAR	CRP
/CRP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CRP.COM	CRP
/CRT	臨界温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 500-600/CRT	CRT
/CRT.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CRT.COM	CRT
/CRV	臨界体積 <sup>1)</sup>	cm**3/mol	S 210/CRV	CRV
/CRV.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CRV.COM	CRV
/GP.COM	気相 コメント <sup>2)</sup>	-	S (SATURATED(P)LIQ?)/GP.COM	GP
/GP. KW	キーワード	-	S FUGACITY/GP. KW	GP
/VP	蒸気圧 <sup>1)</sup>	Torr	S 4-5/VP	VP
/VP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S EQUATION/VP.COM	VP
/VP. T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S VP>80 and VP. T<5	VP

- 1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。  
2) ドイツ語で記述されている場合があります。

### 構造およびエネルギーパラメータ

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CIP.COM	電子の結合 コメント <sup>2)</sup>	-	S (EXCITED(P) STATE)/CIP.COM	CIP
/CIP.KW	キーワード	-	S ELECTRON AFFINITY/CIP.KW	CIP
/CNF.OBJ	立体配座 研究の目的	-	S CONFORMER EQUILIBRIUM/CNF.OBJ	CNF
/DFM.COM	分子の変形 コメント <sup>2)</sup>	-	S ACETONITRIL?/DFM.COM	DFM
/DFM.KW	キーワード	-	S FORCE CONSTANTS/DFM.KW	DFM
/DM	双極子モーメント <sup>1)</sup>	D	S 1-1.22/DM	DM
/DM.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S CONCENTRATION/DM.COM	DM
/DM.KW	キーワード	-	S QUADRUPOLE MOMENT/DM.KW	DM
/DM.MET	測定法	-	S DIELECTRIC/DM.MET	DM
/DM.SOL	溶媒	-	S CCL4/DM.SOL	DM
/DM.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 20>DM.T	DM
/EBC	立体配座のエネルギー障壁 <sup>1)</sup>	J/mol	S 1000<=EBC	EBC
/EBC.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S ROTATION/EBC.COM	EBC
/EBC.TYP	障壁タイプ	-	S CF3/EBC.TYP	EBC
/EBC.SOL	溶媒	-	S TOLUENE/EBC.SOL	EBC
/EDIS	解離エネルギー <sup>1)</sup>	J/mol	S 12000-14000/EDIS	EDIS
/EDIS.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S DISSOZIATIONSENERGIE /EDIS.COM	EDIS
/EDIS.TYP	結合タイプ	-	S (P(P)H)/EDIS.TYP	EDIS
/GEO.COM	原子間距離と角度 コメント <sup>2)</sup>	-	S METHOD/GEO.COM	GEO
/GEO.KW	キーワード	-	S "INTERATOMIC DISTANCES(P) ANGLES"/GEO.KW	GEO
/IP	イオン化ポテンシャル <sup>1)</sup>	eV	S 7-8/IP	IP
/IP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S VERTICAL/IP.COM	IP
/IP.MET	測定法	-	S PHOTOIONIZATION/IP.MET	IP
/POL.COM	電気的分極 コメント <sup>2)</sup>	-	S (TIME(P)DEPENDENCE)/POL.COM	POL
/POL.KW	キーワード	-	S ELECTRON POLARIZATION/POL.KW	POL

- 1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。  
2) ドイツ語で記述されている場合があります。

### 熱力学的物性

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CP	定圧熱容量 (CP) <sup>1)</sup>	J/mol*K	S 500-501/CP	CP
/CP.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CP.COM	CP
/CP.T	温度 <sup>1)</sup>	F	S CP.T>500	CP
/CP0	定圧熱容量 (CP0) <sup>1)</sup>	J/mol*K	S 200>CP0	CP0
/CP0.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S DETERMIN?/CP0.COM	CP0
/CP0.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 200-220/CP0.T	CP0
/CV	定容熱容量 (CV) <sup>1)</sup>	J/mol*K	S 113/CV	CV
/CV.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/CV.COM	CV
/CV.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 113/CV.T AND 25/CP	CV

(続く)

## 熱力学的物性 (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/HCOM	燃焼エンタルピー <sup>1)</sup>	J/mol	S HCOM>-100000	HCOM
/HCOM.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/HCOM.COM	HCOM
/HCOM.P	圧力 <sup>1)</sup>	Torr	S 760/HCOM.P	HCOM
/HCOM.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 25/HCOM.T	HCOM
/HFOR	生成エンタルピー <sup>1)</sup>		S 808052/HFOR	HFOR
/HFOR.COM	コメント <sup>2)</sup>	J/mol	S HANDBOOK/HFOR.COM	HFOR
/HFOR.P	圧力 <sup>1)</sup>	-	S 759-761/HFOR.P	HFOR
/HFOR.T	温度 <sup>1)</sup>	Torr	S HFOR.T<10	HFOR
/HFUS	融解エンタルピー <sup>1)</sup>	セ氏	S 1000-2000/HFUS	HFUS
/HFUS.COM	コメント <sup>2)</sup>	J/mol	S HANDBOOK/HFUS.COM	HFUS
/HHDG	水素化エンタルピー <sup>1)</sup>	-	S 153362/HHDG	HHDG
/HHDG.AN	生成物 AN <sup>1)</sup>	-	S 1862856/HHDG.AN	HHDG
/HHDG.COM	コメント <sup>2)</sup>	J/mol	S HANDBOOK/HHDG.COM	HHDG
/HHDG.CN	生成物名称 <sup>2)</sup>	なし	S PHENYL-CYCLOOCTANE/HHDG.CN	HHDG
/HHDG.T	温度 <sup>1)</sup>	-	S 24.9/HHDG.T	HHDG
/HPT	相転移エンタルピー <sup>1)</sup>	セ氏	S 650-700/HPT	HPT
/HPT.COM	コメント <sup>2)</sup>	J/mol	S (HEXAGONAL(P)CUBIC)/HPT.COM	HPT
/HSUB	昇華エンタルピー <sup>1)</sup>	-	S HSUB<40000	HSUB
/HSUB.COM	コメント <sup>2)</sup>	J/mol	S HANDBOOK/HSUB.COM	HSUB
/HSUB.T	温度 <sup>1)</sup>	-	S 25/HSUB.T	HSUB
/HVAP	蒸発エンタルピー <sup>1)</sup>	セ氏	S 90000>HVAP	HVAP
/HVAP.COM	コメント <sup>2)</sup>	J/mol	S HANDBOOK/HVAP.COM	HVAP
/HVAP.P	圧力 <sup>1)</sup>	-	S 250>HVAP.P	HVAP
/HVAP.T	温度 <sup>1)</sup>	Torr	S 20-25/HVAP.T	HVAP
/OTHE.COM	その他の熱力学データ コメント <sup>2)</sup>	セ氏	S HANDBOOK/OTHE.COM	OTHE
/OTHE.KW	キーワード	-	S HEAT OF COMBUSTION AT CONSTANT VOLUME/OTHE.KW	OTHE

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) ドイツ語で記述されている場合があります。

## 輸送現象

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/BV	体積粘性率 <sup>1)</sup>	g/cm*s	S 52-54/BV	BV
/BV.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S CONCENTRATION/BV.COM	BV
/BV.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 40-60/BV.T	BV
/DV	粘性率 <sup>1)</sup>	g/cm*s	S 1.58-1.59/DV	DV
/DV.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S RANGE/DV.COM	DV
/DV.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 20/DV.T	DV
/KV	動粘性率 <sup>1)</sup>	cm**2/s	S 1.9988-1.9999/KV	KV
/KV.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/KV.COM	KV
/KV.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 10/KV.T	KV
/SDIF	自己拡散係数 <sup>1)</sup>	cm**2/s	S SDIF>=25	SDIF
/SDIF.COM	コメント <sup>2)</sup>	-	S HANDBOOK/SDIF.COM	SDIF
/SDIF.T	温度 <sup>1)</sup>	セ氏	S 100/SDIF.T	SDIF
/TRAN.COM	輸送データ コメント <sup>2)</sup>	-	S PRESSURE/TRAN.COM	TRAN
/TRAN.KW	キーワード	-	S THERMAL CONDUCTIVITY/TRAN.KW	TRAN

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) ドイツ語で記述されている場合があります。

## 表示形式

ReaxysFile には、物質レコード（化学物質単位）と反応レコード（反応単位）の 2 種類のレコードが収録されています。反応レコードの回答表示は、RX 表示形式のみ使用できます。

回答の表示をする際は、下記の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やカンマで区切ってください。フィールドは指定された順序で表示されます。

入力例；=> D L1 1-5 BIB ABS

=> D L1 TI, AU, SO, CS, AB

個別の表示フィールドコードおよびスーパーフィールドコードを用いて表示すると、最大 20 データが表示されます。フィールド中のすべてのデータを表示する際は、個別の表示フィールドコードに F を付けて表示します（表示料金は同じ）。


入力例；=> D BP MP ECTOX 最大 20 データを表示

=> D FBP FMP FECTOX すべてのデータを表示（推奨）

## カスタム表示形式


形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
ADSM	Adsorption (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	吸着 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D ADSM
AN	Accession Number	レコード番号	D AN
ASSM	Association (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	会合 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D ASSM
AUN	Autonom Name	Autonom 名	D AUN
AZE	Azeotropes (MCS) (Table containing Value, Temperature, Pressure, Concentration, and Azeotrope AN, References, Notes)	共沸混合物 (MCS) (値, 温度, 圧力, 濃度, 対象物 AN, 出典, 注記を含む表)	D AZR
BIO	Biological Behaviour (Species, Media, Concentration, Exposure Period, Temperature, Log BCF, Bioconcentration Factor (BCF), Accumulation Half-Life Time, Accumulation Rate Constant, Elimination Half-Life Time, Elimination Rate Constant, Method, Remarks, Biomagnification, Notes, References)	生物学的性質 (生物種, 媒体, 濃度, 暴露時間, 温度, BCF の対数, 生物濃縮係数 (BCF), 蓄積半減期, 蓄積速度定数, 排出半減期, 排出速度定数, 方法, 注記, 生物学的濃縮, 注記, 出典)	D BIO
BIOD	Biodegradation (Type, Inoculum, Concentration, Degradation Product AN, Degradation Rate, Exposure Period, Temperature, Half-Life Time, Method, Remarks, Notes, References)	生分解 (タイプ, 接種物, 濃度, 分解生成物レコード番号, 分解速度, 暴露時間, 温度, 半減期, 測定法, 注記, 注記, 出典)	D 3 BIOD
BP	Boiling Point (Table containing Value, Pressure, References, Notes)	沸点 (圧力, 出典, 注記を含む表)	D L3 BP
BPR	Basic Preferred Registry Number	ベーシック優先 CAS 登録番号	D BPR
BSPM	Boundary Surface Phenomena (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	界面現象 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D BSPM
BV	Bulk Viscosity (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	体積粘性率 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D BV
CDEN	Density of the Crystal (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	結晶の密度 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D CDEN
CDER	Chemical Derivative (Derivative AN, Derivative, Notes, References)	誘導体 (誘導体 AN, 誘導体, 注記, 出典)	D CDER
CDIC	Circular Dichroism (Solvent, Notes, References)	円偏光二色性 (溶媒, 注記, 出典)	D L1 CDIC

(続く)

 カスタム表示形式 (続き)


形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
CIP	Electron Binding (Description, Notes, References)	電子の結合 (キーワード, 注記, 出典)	D CIP
CMC	Critical Micelle Concentration (MCS) (Table containing Value, Solvent, Temperature, References, Notes)	臨界ミセル濃度 (MCS) (値, 溶媒, 温度, 出典, 注記を含む表)	D CMC
CMP	Compressibility (Description, Notes, References)	圧縮率 (キーワード, 注記, 出典)	D CMP
CN	Chemical Name	化学物質名	D CN
CNF	Conformation (Object of Investigation, References)	立体配座 (研究の目的, 出典)	D CNF
COEV	Concentration in Environment (Species, Location, Contamination Concentration, Background Concentration, Method, Remarks, Notes, References)	環境への濃縮 (生物種, 場所, 汚染濃度, バックグラウンド濃度, 方法, 注釈, 注記, 出典)	D COEV
COMPAN	Composition: Component AN	混合物:成分 AN	D COMPAN
COMPN	Composition: Component Name	混合物:成分名称	D COMPN
CONSID	Constitution ID	構造 ID	D CONSID
CP	Heat Capacity CP (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	定圧熱容量 CP (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D L2 CP
CPO	Heat Capacity CPO (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	定圧熱容量 CPO (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D CPO
CPD	Crystal Property Description (Color + Other Properties, Notes, References)	結晶性状の記述 (色およびその他の性質, 注記, 出典)	D CPD
CPEM	Complex Phase Equilibria (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	複雑な相平衡 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D CPEM L7 2
CRD	Critical Density (Table containing Value, References, Notes)	臨界密度 (値, 出典, 注記を含む表)	D CRD
CRP	Critical Pressure (Table containing Value, References, Notes)	臨界圧力 (値, 出典, 注記を含む表)	D CRP
CRT	Critical Temperature (Table containing Value, References, Notes)	臨界温度 (値, 出典, 注記を含む表)	D CRT
CRV	Critical Volume (Table containing Value, References, Notes)	臨界体積 (値, 出典, 注記を含む表)	D CRV
CRYPH	Crystal Phase Description (Description, Temperature, Notes, References)	結晶相 (キーワード, 温度, 注記, 出典)	D CRYPH
CSG	Crystal Space Group (CSG, Notes, References)	結晶空間群 (CSG, 注記, 出典)	D CSG
CSYS	Crystal System (CSYS, Notes, References)	結晶系 (CSYS, 注記, 出典)	D CSYS
CTP	Crystal Transition Point (Table containing Value, Change of Modification, References, Notes)	結晶の転移点 (値, 相状態の変化, 出典, 注記を含む表)	D L8 CTP
CTYPE	Compound Type	化学物質タイプ	D CTYPE
CV	Heat Capacity CV (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	定容熱容量 CV (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D CV
DE	Dissociation Exponent (Table containing Value, Dissociation Group, Temperature, Solvent, Method, Type, References, Notes)	解離指数 (値, 解離基, 温度, 溶媒, 測定法, タイプ, 出典, 注記を含む表)	D DE
DED	Data Entry Date	データ入力日	D DED
DEN	Liquid Density (Table containing Value, Temperature, References, Temperature, References, Notes)	液体密度 (値, 温度, 基準温度, 出典, 注記を含む表)	D DEN

(続く)

 カスタム表示形式 (続き)

形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
DFM	Molecular Deformation (Description, Notes, References)	分子の変形 (キーワード, 注記, 出典)	D DFM
DIC	Dielectric Constant (Table containing Value, Temperature Frequency, References, Notes)	比誘電率 (値, 温度, 周波数, 出典, 注記を 含む表)	D DIC
DICS	Dielectric Static Constant (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	静電誘電率 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D DICS
DM	Dipole Moment (Table containing Value, Temperature, Method, Solvent, Description, References, Notes)	双極子モーメント (値, 温度, 測定法, 溶媒, キーワード, 出典, 注記 を含む表)	D DM L5
DP	Decomposition Point (Table containing Value, Solvent, References, Notes)	分解点 (値, 溶媒, 出典, 注記を含む表)	D DP
DUPD	Data Update Date	データ更新日	D DUPD
DV	Dynamic Viscosity (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	粘性率 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D DV
EBC	Energy Barrier of Conformation (Table containing Value, Barrier Type, Solvent, References, Notes)	立体配座のエネルギー障壁 (値, 障壁タイプ, 溶媒, 出典, 注記を含む表)	D EBC
ECDH	Abiotic Degradation, Hydrolysis (Type, Concentration, Degradation Rate, Exposure Period, Temperature, pH-Value, Degradation Product AN, Degradation Product, Rate Constant, Half-Life Time, Method, Remarks, Notes, References)	非生物学的分解, 加水分解 (タイプ, 濃度, 分解速度, 暴露時間, 温度, pH 値, 分解生成物 AN, 分解生成 物, 速度定数, 半減期, 方法, 注釈, 注記, 出典)	D ECDH
ECDP	Abiotic Degradation, Photolysis (Type, Concentration, Degradation Rate, Exposure Period, Temperature, Rate Constant, Half-Life Time, pH-Value, Degradation Product AN, Degradation Product, Method, Remarks, Notes, References)	非生物学的分解, 光分解 (タイプ, 濃度, 分解速度, 暴露時間, 温度, 速度 定数, 半減期, pH値, 分解生成物 AN, 分解生成 物, 方法, 注釈, 注記, 出典)	D ECDP
ECS	Stability in Soil (Type, Concentration, Dissipation, Dissipation Time 50, Dissipation Time 90, Exposure Period, Temperature, pH-Value, Humidity, Organic Carbon, Cation Exchange Rate, Microbial Biomass, Method, Remarks, Notes, References)	土壌中での安定性 (タイプ, 濃度, 散逸, 散逸時間50, 散逸時間90, 暴露時間, 温度, pH 値, 湿度, 有機 炭素量, カチオン交換 速度, 微生物量, 方法, 注釈, 注記, 出典)	D ECS
ECTD	Ecological Mobility: Transport and Distribution (Type, Media, Results, Method, Remarks, References)	生態学的移動性: 輸送および 分布 (タイプ, 媒体, 結果, 方法, 注釈, 出典)	D ECTD
ECTOX	Ecotoxicology (Effect, Endpoint of Effect, Species or Test-System, Sex, Route of Application, Concentration, Kind of Dosing, Exposure Period, Method, Remarks, Further Details, Type, Value of Type, Results, Metabolite AN, Metabolite, Notes, References)	生態毒性 (効果, 効果の エンドポイント, 生物種 またはテスト系, 性別, 適用経路, 濃度, 投与種類, 暴露時間, 方法, 注釈, 詳細, タイプ, タイプの値, 結果, 代謝産物 AN, 代謝 産物, 注記, 出典)	D ECTOX
EDIS	Energy of Dissoziation (Table containing Value, Bond Type, References, Notes)	解離エネルギー (値, 結合 タイプ, 出典, 注記を含む 表)	D EDIS

(続く)

 カスタム表示形式 (続き)


形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
EDM	Electrical Data (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Temperature, Notes, References)	電気的データ (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 温度, 注記, 出典)	D EDM
ELCB	Electrochemical Behaviour Description (Description, Notes, References)	電気化学的作用の詳細 (キーワード, 注記, 出典)	D ELCB 5
ELE	Electrical Data (Description, Notes, References)	電気的データ (キーワード, 注記, 出典)	D ELE
ENEM	Energy Data (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	エネルギーデータ (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D ENEM
EOD	Oxygen Demand (Type, Related to, Oxygen Demand, Ratio BOD5/COD, Concentration, Method, Remarks, References)	酸素要求量 (タイプ, 適応, 酸素要求量, BOD5/COD比率, 濃度, 方法, 注記, 出典)	D EOD
ESR	ESR Data (Description, Coupling Nuclei, Solvent, Temperature, Notes, References)	ESR (電子スピン共鳴) スペクトル (キーワード, カップリング核, 溶媒, 温度, 注記, 出典)	D ESR
EXCA	Exposure Assessment (Exposure AN, Sources, References)	汚染評価 (汚染物質 AN, 汚染源, 出典)	D EXCA
FA	Field Available in the record	フィールドの存在	D FA
FAN	Fragment AN	フラグメントレコード番号	D FAN
FINFO	Further Information (References)	その他の情報 (出典)	D FINFO
FLU	Fluorescence (Table containing Description, Solvent, Temperature, References, Notes)	蛍光スペクトル (キーワード, 溶媒, 温度, 出典, 注記を含む表)	D FLU
FMF <sup>1)</sup>	Fragment Molecular Formula	フラグメント分子式	D FMF
FP	Flash Point (Table containing Temperature, Type of Test, References)	引火点 (温度, テストのタイプ, 出典を含む表)	D FP
FS	File Segment	ファイルセグメント	D FS
GEO	Interatomic Distance and Angle (Description, Notes, References)	原子間距離と角度 (キーワード, 注記, 出典)	D GEO
GP	Gas Phase (Description, Notes, References)	気相 (キーワード, 注記, 出典)	DISPLAY L5 GP
HCOM	Enthalpy of Combustion (Table containing Value, Temperature, Pressure, References, Notes)	燃焼エンタルピー (値, 温度, 圧力, 出典, 注記を含む表)	D HCOM
HFOR	Enthalpy of Formation (Table containing Value, Temperature, Pressure, References, Notes)	生成エンタルピー (値, 温度, 圧力, 出典, 注記を含む表)	D HFOR
HFUS	Enthalpy of Fusion (Table containing Value, References, Notes)	融解エンタルピー (値, 出典, 注記を含む表)	D HFUS
HHDG	Enthalpy of Hydrogenation (Table containing Value, Product AN, Product Name, Temperature, References, Notes)	水素化エンタルピー (値, 生成物 AN, 生成物名称, 温度, 出典, 注記を含む表)	D HHDG
HNC	Henry Constant (MCS) (Table containing Value, Log, Temperature, Solvent, References, Notes)	Henry定数 (MCS) (値, 対数, 温度, 溶媒, 出典, 注記を含む表)	D HNC

(続く)

## ■ カスタム表示形式 (続き)


形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
HPT	Enthalpy of Phase Transition (Table containing Value, References, Notes)	相転移エンタルピー (値, 出典, 注記を含む表)	D L8 HPT
HSO	Handbook Citation	ハンドブック記事 (収録源)	D HSO
HSUB	Enthalpy of Sublimation (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	昇華エンタルピー (値, 温度, 出典, 注記を 含む表)	D HSUB
HVAP	Enthalpy of Vaporization (Table containing Value, Temperature, Pressure, References, Notes)	蒸発エンタルピー (値, 温度, 圧力, 出典, 注記を含む表)	D HVAP
IEP	Isoelectric Point (Table containing Value, Solvent, References, Notes)	等電点 (値, 溶媒, 出典, 注記を含む表)	D IEP
INP	Isolation from Natural Product (INP, Notes, References)	天然物からの単離 (天然物 からの単離, 注記, 出典)	D INP
IP	Ionization Potential (Table containing Value, Method, References, Notes)	イオン化ポテンシャル (値, 測定法, 出典, 注記を 含む表)	D IP
IR	Infrared Spectrum (Table containing Description, Solvent, Temperature, References, Notes)	IR (赤外) スペクトル (キーワード, 溶媒, 温度, 出典, 注記を含む表)	D IR
KV	Kinematic Viscosity (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	動粘性率 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D KV 17
LIQPH	Liquid Phase Description (Description, Notes, References)	液相の詳細 (キーワード, 注記, 出典)	D LIQPH
LLSM	Liquid/Liquid System (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	液-液系 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D LLSM
LN	Lawson Number	Lawson 番号	D LN
LPTP	Transition Point of Liquid Modification (Table containing Value, Change of Modification, References, Notes)	液相の転移点 (値, 相状態の変化, 出典, 注記を含む表)	D LPTP
LSF	Linearized Structure Formula	示性式	D LSF
LSSM	Liquid/Solid System (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	固-液系 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D 2 LSSM
LUM	Luminescence (Description, Notes, References)	発光スペクトル (キーワード, 注記, 出典)	D LUM
LVSM	Liquid/Vapour System (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	気-液系 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D 5 LVSM
MAG	Magnetic Data (Description, Notes, References)	磁気的データ (キーワード, 注記, 出典)	D MAG
MEC	Mechanical Property (Description, Notes, References)	機械的特性 (キーワード, 注記, 出典)	D MEC
MECM	Mechanical & Physical Property (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvent, Temperature, Pressure, Notes, References)	機械的および物理的特性 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D MECM L3
MF	Molecular Formula	分子式	D MF

(続く)

 カスタム表示形式 (続き)

形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
MP	Melting Point (Table containing Value, Solvent, References, Notes)	融点 (値, 溶媒, 出典, 注記を含む表)	D MP
MS	Mass Spectrum (Description, Notes, References)	マススペクトル (キーワード, 注記, 出典)	D MS
MSUS	Magnetic Susceptibility (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	磁化率 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D MSUS
MUT	Mutarotation (Table containing Value, Type, Concentration, Length of Path, Solvent, Wavelength, Temperature, Time, References, Notes)	変旋光 (値, タイプ, 濃度, 光路長, 溶媒, 波長, 温度, 時間, 出典, 注記を含む表)	D MUT
MW (FW)	Molecular Weight	分子量	D MW
NMR	Nuclear Magnetic Resonance (Description, Nucleus, Coupling Nuclei, Solvent, Temperature, Frequency, Notes, References)	NMR (核磁気共鳴) スペクトル (キーワード, 核種, カップリング核, 溶媒, 温度, 周波数, 注記, 出典)	D NMR L1 1
NQR	Nuclear Quadrupole Resonance (Description, Nucleus, Notes, References)	NQR (核四重極共鳴) スペクトル (キーワード, 核種, 注記, 出典)	D NQR
ODM	Optical Data (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Notes, References)	光学データ (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 注記, 出典)	D ODM
OPT	Optics (Description, Notes, References)	光学 (キーワード, 注記, 出典)	D OPT
ORD	Optical Rotatory Dispersion (Solvent, Notes, References)	旋光分散 (溶媒, 注記, 出典)	D ORD
ORP	Optical Rotatory Power (Table containing Value, Type, Concentration, Length, Solvent, Rotary Wavelength, Temperature, References, Notes)	旋光度 (値, タイプ, 濃度, 光路長, 溶媒, 波長, 温度, 出典, 注記を含む表)	D ORP
OSM	Other Spectroscopic Methods (Description, Notes, References)	その他の分光法 (キーワード, 注記, 出典)	D OSM
OTHE	Other Thermodynamic Data (Description, Notes, References)	その他の熱力学データ (キーワード, 注記, 出典)	D OTHE
PHARM	Pharmacological Data (Effect, Endpoint of Effect, Species or Test-System, Sex, Type, Value of Type, Route of Application, Concentration, Kind of Dosing, Exposure Period, Method, Remarks, Further Details, Results, Metabolite AN, Metabolite, Notes, References)	薬理学データ (効果, 効果のエンドポイント, 生物種またはテスト系, 性別, タイプ, タイプの値, 適用経路, 濃度, 投与種類, 暴露時間, 方法, 注釈, 詳細, 結果, 代謝産物 AN, 代謝産物, 注記, 出典)	D L3 PHARM
PHO	Phosphorescence (Table containing Description, Solvent, Temperature, References, Notes)	りん光スペクトル (キーワード, 溶媒, 温度, 出典, 注記を含む表)	D PHO
POL	Electrical Polarizability (Description, Notes, References)	電気的分極 (キーワード, 注記, 出典)	D POL
POT	Electrochemical Characteristics (Description, Solvent, pH-Value, Temperature, Product AN, Product, Notes, References)	電気化学的特性 (キーワード, 溶媒, pH 値, 温度, 生成物 AN, 生成物, 注記, 出典)	D POT

(続く)

 カスタム表示形式 (続き)

形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
POW	Partition octan-1-ol/water (MCS) (Table containing Value, Log, Temperature, References)	オクタノール水分配率 (MCS) (値, 対数, 温度, 出典を 含む表)	D POW
PUR	Purification (PUR, References)	精製 (法) (精製(法), 出典)	D L4 PUR
RAS	Raman Spectrum (Description, Solvent, Notes, References)	ラマンスペクトル (キーワード, 溶媒, 注記, 出典)	D RAS
RI	Refractive Index (Table containing Value, Temperature, Wavelength, References, Notes)	屈折率 (値, 温度, 波長, 出典, 注記を含む表)	D RI
RN	CAS Registry Number	CAS 登録番号	D RN
ROT	Rotational Spectrum (Description, Notes, References)	回転スペクトル (キーワード, 注記, 出典)	D ROT
RSTR	Related Structure (Related Structure, Referenced AN, Referenced Compound, Notes, References)	関連構造 (関連構造, 参照物質 AN, 参照物質, 注記, 出典)	D L2 RSTR
RXPRO <sup>2)</sup> (PRE)	Reactions with the searched substance as a product	検索物質が生成物である反応	D L4 RXPRO
RXREA <sup>2)</sup> (REA)	Reactions with the searched substance as a reactant	検索物質が反応物である反応	D RXREA 1-2
SDIF	Self-Diffusion Coefficient (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	自己拡散係数 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D SDIF L17
SLB	Solubility (MCS) (Table containing Value, Saturation, Temperature, Solvent, Ratio of Solvents, References, Notes)	溶解度 (MCS) (値, 飽和, 温度, 溶媒, 溶媒の比率, 出典, 注記を含む表)	D SLB
SLBP	Solubility Product (MCS) (Table containing Value, Temperature, Solvent, Ratio of Solvents, References, Notes)	溶解度積 (MCS) (値, 温度, 溶媒, 溶媒の比率, 出典, 注記を含む表)	D SLBP
SOLM	Solution Behaviour (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvents, Temperature, Notes, Pressure, References)	溶液作用 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 注記, 圧力, 出典)	D SOLM
SOUND	Acoustic Property (Description, Notes, References)	音響特性 (キーワード, 注記, 出典)	D SOUND
SP	Sublimation Point (Table containing Value, Pressure, References, Notes)	昇華点 (値, 圧力, 出典, 注記を含む表)	D SP
ST	Surface Tension (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	表面張力 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D ST
STR	Structure	構造図	D STR
TP	Triple Point (Table containing Value, References, Notes)	三重点 (値, 出典, 注記を含む表)	D TP
TRAM	Transport Phenomena (MCS) (Description, Partner AN, Partner, Solvents, Temperature, Pressure, Notes, References)	輸送現象 (MCS) (キーワード, 対象物 AN, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, 注記, 出典)	D TRAM
TRAN	Transport Data (Description, Notes, References)	輸送データ (キーワード, 注記, 出典)	D L1 TRAN
USC	Use of Compound (Laboratory Use and Handling, Use Pattern, Notes, References)	物質用途 (実験用途と操作, 用途の形態, 注記, 出典)	D USC

(続く)

## ■ カスタム表示形式 (続き)

形式	英語名	内容	入力例
UVS	UV and Visible Spectrum (Table containing Description, Solvents, Absorption Maxima, Ext./Abs. Coeff., References, Notes)	紫外・可視スペクトル (キーワード, 溶媒, 吸収極大, 吸光/吸収係数, 出典, 注記を含む表)	DISPLAY 1 UVS
VP	Vapour Pressure (Table containing Value, Temperature, References, Notes)	蒸気圧 (値, 温度, 出典, 注記を含む表)	D VP
XREF	Crossfile Reference (Data Type, Crossfile Source, Name, External Access ID, References)	相互参照資料 (データタイプ, その他の収録源, 化学物質名称, 外部アクセス ID, 出典)	D XREF
XS	Cross Section (Description, Notes, References)	クロスセクション (キーワード, 注記, 出典)	D XS

1) 一つのフラグメントから構成されている化合物では, FMF は MF と一致し, MF だけが表示されます.

2) 物質あるいは物質情報の検索時に使用します. RX は検索語に関係なくすべての反応を表示するために使われます.

## ■ 定型表示形式

ReaxysFile には, 物質レコード (化学物質単位) と反応レコード (反応単位) の 2 種類のレコードが収録されています. 反応レコードの回答表示は, RX 表示形式のみ使用できます.

表示形式	内容	入力例
ALL <sup>1)</sup>	すべての表示フィールド (CHE, IDE, MCS, PED, PHY, RX)	DISPLAY ALL
ALLP	そのレコードの全ての特許出典情報	D ALLP
ALLREF	そのレコードの全ての出典情報	D ALLREF
BABSAN	そのレコードの全ての BABS ファイルの AN	D BABSAN
CHE <sup>2)</sup>	化学的データ (RSTR, INP, CDER, PUR, XREF)	D CHE
IDE <sup>2)</sup>	物質同定情報 (AN, BPR, RN, CN, AUN, LSF, FMF <sup>1)</sup> , MF, MW, FAN, LN, FS, CTYPER, CONSID, HSO, COMPAN, COMPC, COMPN, DED, DUPD, STR, FA)	DISPLAY L1 IDE
RX <sup>2), 3), 4)</sup>	反応 (反応 ID, 反応物 AN, 反応物, 生成物 AN, 生成物, 反応詳細の数, 反応詳細 (反応詳細反応 ID, 反応分類, 収率, ステージ数, 試薬, ステージ反応物, 触媒, 溶媒, 時間, 温度, 圧力, pH 値, 研究主題, プロトタイプ反応, その他の条件, 注記, 出典)) (RXPRO, RXREA)	D RX 1-3 D FRX
MCS <sup>1)</sup>	多成分系 (SOL, LLSM, LSSM, LVS, MECM, TRAM, ENEM, EDM, ODM, ADSM, ASSM, BSPM)	D MCS
LVS <sup>2)</sup>	気-液系データ (MCS) (LVSM, AZE, CPEM)	D LVS
SOL <sup>2)</sup>	溶液作用 (MCS) (SLB, SLBP, SOLM, CMC, HNC, POW)	D SOL
PED <sup>2)</sup>	薬理学および生態学的データ (PHARM, ECO)	D PED
ECO <sup>2)</sup>	生態学的データ (ECTO, EXCA, COEV, ECTD, BIO, BIOD, ECDH, ECDP, ECS, EOD, USC)	D ECO

(続く)

## 定型表示形式 (続き)

表示形式	内 容	入 力 例
PHY <sup>1)</sup>	物理的特性 (ECB, ELEP, FINFO, MAGP, MECP, OPTP, SAG, SEP, SF, SPE, THE, TRA)	D PHY L6
ECB <sup>2)</sup>	電気化学的作用 (ELCB, DE, IEP, POT, XS)	D ECB
ELEP <sup>2)</sup>	電気的特性 (DICS, DIC, ELE)	D ELEP
MAGP <sup>2)</sup>	磁気的特性 (MSUS, MAG)	D L3 MAGP
MECP <sup>2)</sup>	物理的および機械的特性 (DEN, MEC, CMP, SOUND, ST)	D L9 1-3 MECP
OPTP <sup>2)</sup>	光学特性 (RI, OPT, ORP, MUT, ORD, CDIC)	D OPTP
SAG <sup>1)</sup>	凝集状態 (CRY, GAS, LIQ)	D SAG L3
CRY <sup>2)</sup>	結晶 (CPD, MP, CRYPH, DP, SP, TP, CTP, CSYS, CSG, CDEN)	D CRY
GAS <sup>2)</sup>	気体 (CRT, CRP, CRD, CRV, VP, GP)	D GAS
LIQ <sup>2)</sup>	液体 (BP, LIQPH, LPTP)	D LIQ
SEP <sup>2)</sup>	構造およびエネルギーパラメータ (CNF, GEO, DM, POL, DFM, EBC, EDIS, IP, CIP)	D SEP
SF <sup>2)</sup>	安全性データ (AIT, FP)	D SF L8
SPE <sup>1)</sup>	スペクトルデータ (NMR, ESR, NQR, ROT, IR, RAS, UVS, LUM, FLU, PHO, OSM, MS)	D SPE
THE <sup>2)</sup>	熱力学的特性 (HCOM, HFOR, HHDG, HFUS, HVAP, HSUB, HPT, CP, CPO, CV, OTHE)	D THE
TRA <sup>2)</sup>	輸送現象 (DV, KV, BV, SDIF, TRAN)	D TRA

- 1) 存在するフィールドの合計が課金されます。
- 2) 1 フィールド分の表示料が課金されます。
- 3) 反応レコードの表示は、RX 表示形式のみ使用できます。
- 4) 物質レコードを表示する際に F 付きで指定すると、すべてのデータが表示されます (例: => D FRX)。

網がけ はおおすすめの定型表示形式です。

### 1 フィールド分の表示料で表示できるスーパーフィールド

これらのスーパーフィールド中の表示フィールドは、同時に指定すると 1 フィールド分の表示料金が適用されます。スーパーフィールドコードに F を付けて表示することはできないため、スーパーフィールド中のすべてのデータを表示する際は、スーパーフィールドに含まれる個別の表示フィールドコードに F を付けて表示します。

入力例 : => D ELEP	各物性項目の最大 20 データずつを表示	} いずれも 1 フィールド分 の表示料金
=> D DIC DICS ELE	各物性項目の最大 20 データずつを表示	
=> D FDIC FDICS FELE	各物性項目のすべてのデータを表示 (推奨)	

スーパー フィールドコード	内 容	入 力 例
CHE	化学的データ	CDER (誘導体), INP (天然物からの単離), PUR (精製), RSTR (関連構造), XREF (相互参照資料)
CRY	結晶	CDEN (結晶の密度), CPD (結晶性状の記述), CRYPH (結晶相), CSG (結晶空間群), CSYS (結晶系), CTP (結晶の転移点), DP (分解点), MP (融点), SP (昇華点), TP (三重点)
ECB	電気化学的作用	DE (解離指数), ELCB (電気化学的作用の詳細), IEP (等電点), POT (電気化学的特性), XS (クロスセクション)
ECO	生態学的データ	BIO (生物学的性質), BIOD (生分解), COEV (環境への濃縮), ECDH (非生物学的分解, 加水分解), ECDP (非生物学的分解, 光分解), ECS (土壌中での安全性), ECTD (生態学的移動), ECTOX (生態毒性), EOD (酸素要求量), EXCA (汚染評価), USC (物質用途)
ELEP	電気的特性	DIC (比誘電率), DICS (静電誘電率), ELE (電気的データ)
GAS	気体	CRD (臨界密度), CRP (臨界圧力), CRT (臨界温度), CRV (臨界体積), GP (気相), VP (蒸気圧)
LIQ	液体	BP (沸点), LIQPH (液相の詳細), LPTP (液相の転移点)
LVS	気-液系データ	AZE (共沸混合物), CPEM (複雑な相平衡), LVSM (気-液系)
MAGP	磁気的特性	MAG (磁気的データ), MSUS (磁化率)

(続く)

## 1 フィールド分の表示料で表示できるスーパーフィールド (続き)

スーパー フィールドコード	内 容	入 力 例
MECP OPTP PED SEP SF SOL THE TRA	物理的および 機械的特性 光学特性 薬理学および 生態学的データ 構造および エネルギー パラメータ 安全性データ 溶液作用 熱力学的特性 輸送現象	CMP (圧縮率), DEN (液体密度), MEC (機械的特性), SOUND (音響特性), ST (表面張力) CDIC (円偏光二色性), MUT (変旋光), OPT (光学), ORD (旋光分散), ORP (旋光度), RI (屈折率) ECO (生態学的データ), PHARM (薬理学データ) CIP (電子の結合), CNF (立体配座), DFM (分子の変形), DM (双極子モーメント), EBC (立体配座のエネルギー障壁), EDIS (解離エネルギー), GEO (原子間距離と角度), IP (イオン化ポテンシャル), POL (電気的分極) AIT (自然発火点), FP (引火点) CMC (臨界ミセル濃度), HNC (Henry 定数), POW (オクタノール水分分配係数), SLB (溶解度), SLBP (溶解度積), SOLM (溶解作用) CP (定圧熱容量), CPO (標準定圧熱容量), CV (定容熱容量), HCOM (燃焼エンタルピー), HFOR (生成エンタルピー), HFUS (融解エンタルピー), HHDG (水素化エンタルピー), HPT (相転移エンタルピー), HSUB (昇華エンタルピー), HVAP (蒸発エンタルピー), OTHE (その他の熱力学的データ) BV (体積粘性率), DV (粘性率), KV (動的粘性率), SDIF (自己拡散係数), TRAN (輸送データ)

## ヒットタームに関する表示形式

すべてのフィールドでヒットタームハイライト機能が利用できます。(検索時にハイライト機能が ON になっていることが必要です)

表示形式	内 容	入 力 例
HIT	ヒットタームを含むすべてのフィールド	D HIT 1-3
QRD (デフォルト)	IDE, HIT	D L7 1 5

## SELECT, ANALYZE および SORT フィールド

SELECT/ANALYZE コマンドは抽出・解析用のコマンドです。

入力例 ; => SEL L1 RN (回答セット L1 の回答全件から CAS 登録番号を抽出する)

=> ANA L1 1- PN (回答セット L1 の回答全件から特許番号を抽出する)

詳細は, STN リフレッシュセミナーテキスト「STN コマンド応用 (2007.8)」をご参照ください。

[http://www.jaici.or.jp/stn/stn\\_doc\\_03.html](http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_03.html)

SORT コマンドは指定したフィールドのアルファベット順または数値順に検索結果を並び替えるコマンドです。入力例 ; => SORT L1 PD (回答セット L1 の回答全件を発行日の古い順に並び替える)

○は SELECT/ANALYZE/SORT 可能なコード, × は不可能なコードです。

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内 容	ANALYZE/SELECT <sup>1)</sup>	SORT
ADSM. PAAN	吸着 (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
AN	レコード番号	○	×
ASSM. PAAN	会合 (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
AUN	Autonum 名	○	×
AZE. PAAN	共沸混合物 (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
BABSAN	BABS レコード番号	○	×

(続く)

## SELECT, ANALYZE および SORT フィールド (続き)

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内 容	ANALYZE/SELECT <sup>1)</sup>	SORT
BIOD. AN	生分解:分解生成物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
BPR	ベーシック優先 CAS 登録番号	○	×
BSPM. PAAN	界面現象 (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
CDER. AN	化学的誘導体:誘導体 AN	○ <sup>2)</sup>	×
CN	化学物質名	○	×
COMPAN	組成物:成分 AN	○	×
CONSID	構造 ID	○	×
CPEM. PAAN	複雑な相平衡:対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
CTYPE	化合物タイプ	○	×
DED	データ入力日	○ <sup>3)</sup>	×
ECDH. AN	非生成物分解, 加水分解:分解生成物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
ECDP. AN	非生成物分解, 光分解:分解生成物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
ECTOX. AN	生態毒性:代謝産物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
EDM. PAAN	電気的データ:対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
ENEM. PAAN	エネルギーデータ (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
FAN	フラグメント AN	○	×
FMF	フラグメント分子式	○	×
FS	ファイルセグメント	○	×
FW	分子式量	○ <sup>4)</sup>	×
HHDG. AN	水素化エンタルピー:生成物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
HSO	ハンドブック記事 (収録源)	○	×
LN	Lawson 番号	○	×
LSF	示性式	○	×
LLSM. PAAN	液-液系:対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
LSSM. PAAN	固-液系:対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
LVSM. PAAN	気-液系:対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
MF	分子式	○ (デフォルト)	×
MECM. PAAN	機械的および物理的性質 (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
MW	分子量	○	×
ODM. PAAN	光学的データ (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
OS		○ <sup>5)</sup>	×
PHARM. AN	薬理学データ:代謝産物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
PN	特許番号	○	×
POT. PAN	電気化学的性質:生成物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
RN	CAS 登録番号	○	×
RSTR. PAAN	関連構造:参照 AN	○ <sup>2)</sup>	×
RX. PAN	反応:生成物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
RX. RAN	反応:反応物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
RX. SOL	反応:反応溶媒	○ <sup>2)</sup>	×
RX. SRAN	反応:ステージ反応物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
SOLM. PAAN	溶液作用:対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
TAUTID	互変異性体 ID	○	×
TRAM. PAAN	輸送現象 (MCS):対象物 AN	○ <sup>2)</sup>	×
UP	STN 更新日	○ <sup>2)</sup>	×
XREF. SO	その他の収録源	○	×

1) ヒットタームだけを抽出するには, HITを使います. 例: SEL HIT RN

2) SELECT HIT および ANALYZE HIT は利用できません.

3) SELECT で抽出されたタームに /ED が付与されます.

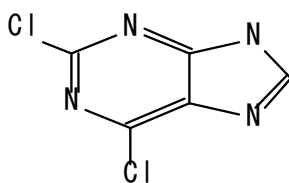
4) SELECT で抽出されたタームに /MW が付与されます.

5) SELECT で抽出されたタームに /XREF. SO が付与されます.

## サンプルレコード

## IDE 表示形式

レコード番号	Accession Number (AN):	610966
ベーシック優先 CAS 登録番号	Basic Pref. RN (BPR):	5451-40-1
CAS 登録番号	CAS Reg. No. (RN):	5451-40-1
化学物質名	Chemical Name (CN):	2,6-dichloro-9H-purine, 2,6-Dichloropurine, 2,6-dichloro-7(9)H-purine, 2,6-dichloro-1H-purine, 2,6-dichloropurine
Autonom 名	Autonom Name (AUN):	2,6-Dichloro-9H-purine
示性式	Lin. Struct. Formula (LSF):	C2NHCHNCNCNC12
分子式	Molec. Formula (MF):	C5 H2 Cl2 N4
分子量	Molecular Weight (MW):	189.004
化学物質タイプ	Compound Type (CTYPE):	heterocyclic
ハンドブック記事 (収録源)	Handbook Citation (HSO):	5-26, 6-26
入力日	Entry Date (DED):	1988/11/28
更新日	Update Date (DUPD):	2009/10/23



## フィールドの存在 Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BRP	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	5
AUN	Autonomname	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formular Weight	1
CTYPE	Compound Type	1
HSO	Handbook Citation	2
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
DE	Dissociation Exponent	2
ELCB	Electrochemical Behaviour	1
FINFO	Further Information	1
MP	Melting Point	3
MS	Mass Spectrum	1
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	5
PHARM	Pharmacological Data	2
UVS	UV and Visible Spectrum	2
XREF	Crossfile Reference	2

## This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	306
RXREA	Substance is Reaction Reactant	303
RXPRO	Substance is Reaction Product	3