

**STN INTERNATIONAL**

**REACTION SEARCH WORKSHOP**

**反応情報検索**

---



# 反応情報検索

## WORKSHOP

March 2011

© 2011

**JAICI**  
化学情報協会



## \* 目次 \*

### A 概要

STN の反応情報検索 .....	1
ファイルの比較 .....	2
レコード例 .....	4
検索機能の比較 .....	6

### B CASREACT ファイル

概要 .....	7
収録範囲 .....	8
反応の収録形式 .....	9
レコード例 .....	10
CAS 登録番号検索 .....	12
検索例 - CAS 登録番号検索 .....	14
表示形式 .....	16
検索例 .....	18
反応質問式による構造検索 - 概要 .....	24
反応質問式の作成 - ロール .....	25
反応質問式の作成 - 反応部位 .....	28
反応質問式の作成 - マッピング .....	30
参考：自動マッピング .....	32
構造検索例 .....	33
Verification が不完全な回答 .....	39
構造検索時の注意 .....	40
官能基検索 .....	42
官能基検索の演算子 .....	43
官能基検索の料金 .....	44
検索例 - 官能基検索 .....	45
参考：サブセット検索 .....	52
参考：CAplus/CA ファイルの反応情報 .....	55
まとめ .....	58

### C ReaxysFile ファイル

概要 .....	59
レコード構成 .....	60
反応情報の検索と表示 .....	61
レコード例 .....	62
物質レコードの検索方法 .....	64
物質レコードからの反応情報の表示 .....	65
化学物質名称検索 .....	66
参考：REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索 .....	68
CAS 登録番号検索 .....	70
回答の確認・絞り込み方法 .....	71
分子式検索 .....	72
構造検索 .....	74
参考：REGISTRY ファイルの構造データを利用した構造検索 .....	77
反応レコードの検索 .....	80

## 練習問題

練習問題 .....	85
練習問題 1 (CASREACT ファイル: CAS 登録番号検索) .....	87
練習問題 2 (CASREACT ファイル: 構造検索) .....	88
練習問題 3 (CASREACT ファイル: 構造検索) .....	89
練習問題 4 (CASREACT ファイル: 官能基検索) .....	90
練習問題 5 (ReaxysFile ファイル) .....	91

## APPENDIX

CASREACT ファイル - 構造検索時の注意 .....	95
CASREACT ファイル - CA 由来のレコードの収録基準 .....	96
CASREACT ファイル - 1990 年以前の収録雑誌 .....	98
CASREACT ファイル - 構造図が表示されない化合物 .....	100
ReaxysFile ファイル - ハンドブックの構成 .....	101
ReaxysFile ファイル - 多成分物質 .....	102
ReaxysFile ファイル - 異性体 .....	105
ReaxysFile ファイル - 生体分子, 混合物, ポリマー .....	106
PS ファイル - 概要 .....	108
PS ファイル - レコード例 .....	109
PS ファイル - 検索例 .....	111

## A 概要

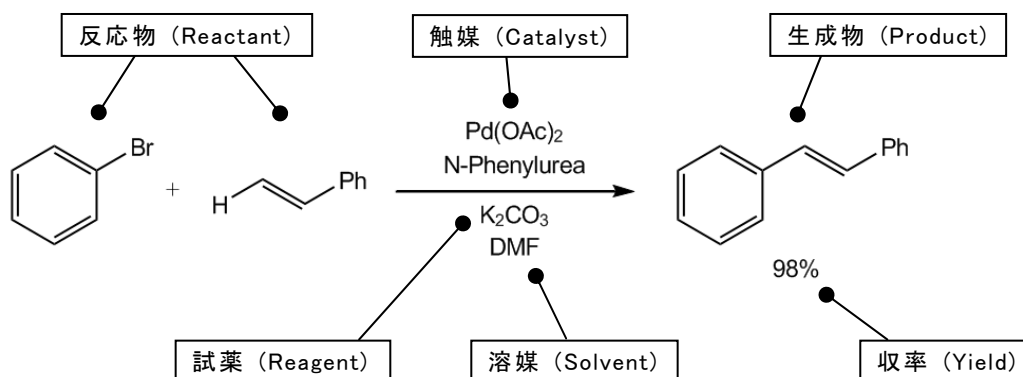
STN には、反応情報を検索できるファイルが複数搭載されており、目的に合わせて適切なファイルを選択することが重要です。ここでは、各ファイルの特徴をご紹介します。



## STN の反応情報検索

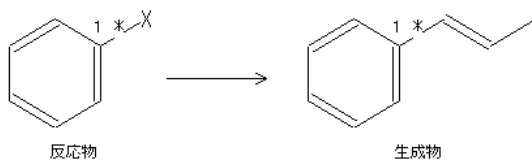
- STN には反応情報を検索できるファイルが複数搭載されており、反応に関するさまざまな情報が収録されている。

- ・ 反応データベースに収録されている代表的な反応情報



- ・ 反応データベースでは、収録されている情報を利用して様々な条件で検索ができる。
- ・ CASREACT ファイルでの検索例

- 反応質問式による構造検索



← 反応物と生成物の部分構造を検索

- 反応物や生成物の登録番号による検索

⇒ S 108-86-1/RCT (L) 103-30-0/PRO

← CAS 登録番号による検索

- 官能基による検索

⇒ S PRIMARY AMINE/FG.RXN (S) NITRO/FG.FORM

← 一級アミンをニトロ基に変換する反応

- 溶媒を限定した検索

⇒ S L1 (L) 68-12-2/SOL

← DMF が溶媒の反応

(CAS 登録番号 68-12-2)

- 収率を限定した検索

⇒ S L2 (A) 80<=YD

← 80% 以上の反応に限定



ファイルによって収録源、収録内容、利用できる検索機能などが異なるため、目的に合わせて適切なファイルを選択する。

## ファイルの比較

■ STN で反応情報を検索できるファイル

□ 代表的なファイル

	CASREACT	ReaxysFile	ChemInformRX
製作者	Chemical Abstracts Service (CAS)	Elsevier Information Systems GmbH	FIZ CHEMIE BERLIN
概要	1840 年以降に発行された雑誌および特許に由来する有機化学反応情報を収録	有機化学分野における、化学物質同定情報、およびファクト(物性)データ、反応データを収録	化学反応分野の二次情報誌 Cheminform に収録された、有機化合物および有機金属化合物の反応情報と、その文献情報を収録
収録源	CA 収録の特許、雑誌論文 Infochem 社のデータ Wiley 社のデータ INPI の反応データベース	Handbook of Organic Chemistry by Friedrich Beilstein 有機化学分野の雑誌 176 誌	Cheminform に収録された雑誌
収録内容	一段階および多段階反応  構造図(反応物、生成物)  反応情報 (反応関与物質の情報、 収率、反応条件など)  CA ファイルの文献情報	化学物質同定情報  構造図(反応物、生成物)  ファクト(物性)データ  反応情報 (収率、反応条件など)  書誌情報	一段階および多段階反応  構造図(反応物、生成物)  反応情報 (収率、反応条件など)  書誌情報、抄録
収録年代	1840 年以降	1771 年以降	1991 年以降
収録件数	120 万件以上(文献数) 4,300 万件以上(反応数)	1,080 万件以上(化学物質) 940 万物質以上に反応情報	17 万件以上(文献数) 120 万件以上 (1 段階反応数)
レコード単位	文献単位	化学物質単位 反応単位	文献単位
更新頻度	毎週	年 4 回	年 4 回
特徴	1991 年以降は合成的に意義のある反応を選択  ロールやマッピングを指定した反応式検索が可能  官能基名による検索が可能  <b>【B 章】</b>	収録期間が長い  物質レコードと反応レコードが存在する  反応情報以外にも豊富なファクトデータを収録  <b>【C 章】</b>	CASREACT ファイルと同等の検索機能を有しているため、同じ検索式を使った補完的な検索が容易  構造による無料のサンプル検索が可能

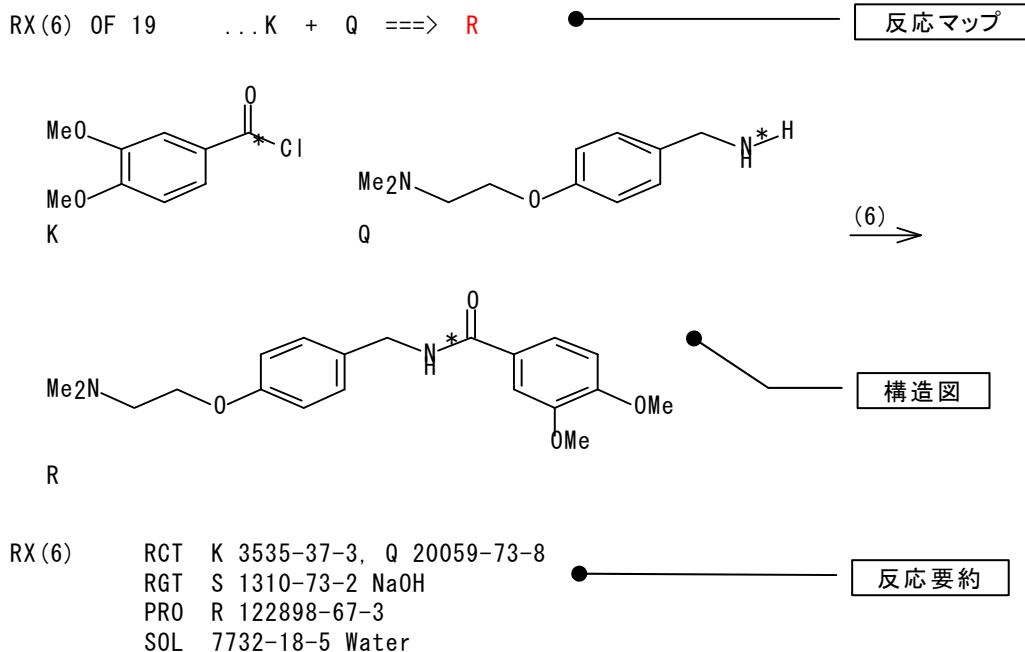
(2011 年 3 月現在)

DJSMONLINE/DJSMDs	PS	CAplus/CA
Thomson Reuters	Georg Thieme Verlag Thieme Chemistry	Chemical Abstracts Service (CAS)
Derwent Journal of Synthetic Methods に採録された有機化学反応情報を収録	世界中の上市された主要な医薬品に関するデータベース。合成法も収録	世界中の科学技術分野の学術論文、単行本および特許を収録する文献データベース
180 以上の雑誌 41 特許発行機関の特許	FDA, WHO, 特許, 有機化学分野の出版物, データベース	世界中の科学技術分野の学術論文, 55 ヶ国, 4 国際機関の特許など
一段階および多段階反応  反応情報 (反応関与物質, 収率, キーワード)  書誌情報, 抄録  冊子体ページイメージ	化学物質同定情報  薬効, 適応症, 製剤  反応情報 (合成スキーム, 反応中間体)  書誌情報	書誌情報, 抄録  索引情報  反応中の役割を表す CAS ロール
1975-2009 年	1957 年以降	1808 年以降 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているのは 1907 年以降)
109,300 件以上	2,400 物質以上 8,200 反応以上	510 万件以上 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているレコード数)
反応単位	医薬品単位	文献単位
不定期	年 2 回	毎日
反応情報に関するキーワード索引が充実しているため, 官能基名や反応名による検索が可能  独自の反応分類を収録  反応図をイメージデータで表示可能	対象を医薬品に限定した検索が可能  合成スキーム全体をイメージデータで表示  構造検索が可能  医薬品の CAS 登録番号付与率は 100% <b>【Appendix】</b>	REGISTRY ファイルで反応関与物質を検索してクロスオーバー検索  化学物質索引に付与された CAS ロールで反応中の役割を指定  <b>【B 章】</b>

## レコード例

■ 収録されている反応情報の出力形式は、ファイルによって異なる。

・ CASREACT ファイル (FHIT 表示形式)



・ ReaxysFile ファイル (RX 表示形式)

Reaction:  
 RX  
 Reaction ID (.ID): 3810523  
 Reactant AN (.RAN): 783596, 2210230  
 Reactant (.RCT): 3,4-dimethoxy-benzoyl chloride, 4-(2-dimethylamino-ethoxy)-benzylamine  
 Product AN (.PAN): 5384115  
 Product (.PRO): N-<4-(2-dimethylamino-ethoxy)-benzyl>-3,4-dimethoxy-benzamide  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

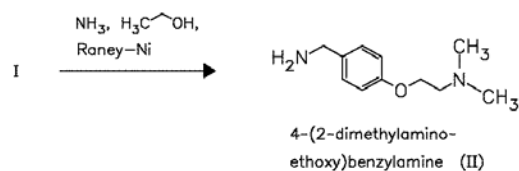
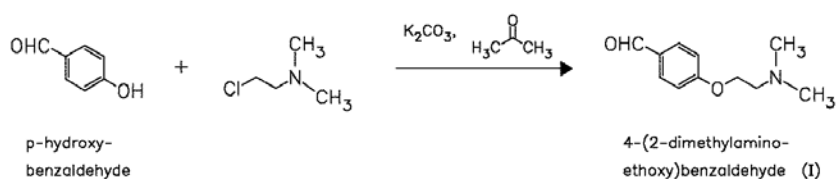
Reaction Details:  
 RX  
 Reaction RID (.RID): 3810523.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Reagent (.RGT): Et3N  
 Solvent (.SOL): CHCl3  
 Time (.TIM): 2 hour(s)  
 Other Conditions (.COND): Ambient temperature  
 Note(s) (.COM): Yield given  
 Reference(s):  
 1. Sakaguchi, Jun; Nishino, Hiroyuki; Ogawa, Nobuo; Iwanaga, Yuji; Yasuda, Shingo; et al., Chem. Pharm. Bull., CODEN: CPBTAL, 40(1), <1992>, 202-211; BABS-5644163

反応物と生成物

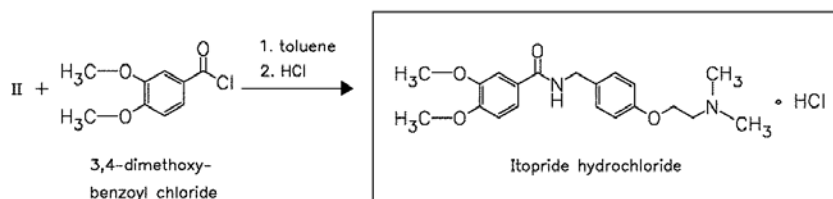
反応条件

出典情報

## ・ PS ファイル (PRED 表示形式)



合成スキーム



中間体情報

INT			
RN. INT	MF. INT	CN. INT	
3535-37-3	C9H9ClO3	3,4-dimethoxybenzoyl chloride; Benzoyl chloride, 3,4-dimethoxy-	
15182-92-0	C11H15NO2	4-[2-(dimethylamino)ethoxy]benzaldehyde; Benzaldehyde, 4-[2-	
20059-73-8	C11H18N2O	(dimethylamino)ethoxy]-4-(2-dimethylaminoethoxy)benzylamine; Benzenemethanamine, 4-[2-	
107-99-3	C4H10ClN	(dimethylamino)ethoxy]-2-(dimethylamino)ethyl chloride; Ethanamine, 2-chloro-N,N-dimethyl-	
123-08-0	C7H6O2	p-salicylaldehyde; Benzaldehyde, 4-hydroxy-	

## RE

preparation and formulation:  
synthesis of intermediate II:

- (1) EP 306 827 (Hokuriku Pharmaceutical Co.; appl. 15.3.1989; J-prior. 1.9.1988, 5.9.1987, 22.9.1987, 29.9.1987, 5.10.1987).
- (2) US 2 879 293 (Hoffmann-La Roche; 1957).

出典情報

## 検索機能の比較

ファイル名	検索対象	構造検索	反応式検索	CAS 登録番号検索 <sup>*1</sup>	ファイル固有の番号検索	官能基検索
CASREACT	反応物	○	○	○	CAS 登録番号検索	○
	生成物	○		○		○
	試薬	○		○		○
	触媒	×	×	△		×
	溶媒	×		△		×
ReaxysFile	反応物	○	×	△	○	×
	生成物	○		△	○	
	試薬	×		×	○	
	触媒	×		×	○	
	溶媒	×		×	○	
ChemInformRX	反応物	○	○	△	○	×
	生成物	○		△	○	
	試薬	○		△	○	
	触媒	×	×	△	○	
	溶媒	×		△	○	
DJSMONLINE DJSMDS	反応物	○ <sup>*3</sup>	○ <sup>*3</sup>	×	○	△ <sup>*4</sup>
	生成物	○ <sup>*3</sup>			○	
	試薬	×	×		×	
	触媒	×			○	
	溶媒	×			○	
PS	中間体	○ <sup>*3</sup>	○ <sup>*3</sup>	○	-	×
	最終生成物	○ <sup>*3</sup>				
CAplus/CA	反応物	△ <sup>*2</sup>	×	○	CAS 登録番号検索	×
	生成物	△ <sup>*2</sup>		○		
	試薬	△ <sup>*2</sup>		○		

\*1 △の項目は CAS 登録番号の付与が完全ではない。

\*2 REGISTRY ファイルで構造検索した結果をクロスオーバーする。

\*3 サンプル検索は利用できない。

\*4 反応に関する索引情報のキーワード検索を利用する。

## *B CASREACT ファイル*

CASREACT ファイルには 4,300 万以上の化学反応情報（一段階反応・多段階反応を含む）が収録されています。CASREACT ファイルを使った効果的な検索方法をご紹介します。



## 概要

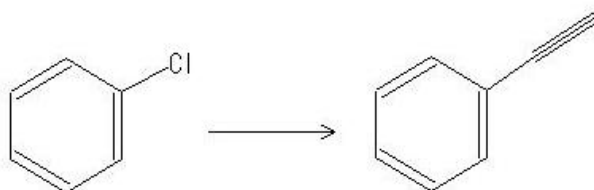
- CASREACT ファイルは、化学反応を収録するデータベースである。化学反応情報をさまざまな手法で検索することができる。

- ・ CAS 登録番号を使った検索（注意：化学物質名称からの検索は不可）

例：トルエン（108-88-3）からフェノール（108-95-2）の合成

- ・ 反応質問式を使った構造検索

例：以下の反応を検索



- ・ 官能基用語を使った検索

例：ケトンからアルコールへの還元反応

- ・ 上記の反応検索の結果に対し、さまざまな条件を組み合わせることができる。

項目	フィールド
収率	/YD, NONE/YDT (CAS 登録番号検索・構造検索) /FG.YD, NONE/FG.YDT (官能基検索)
酵素反応	(ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE
溶媒	/SOL
触媒	/CAT (ANY/CAT で触媒を使っている反応すべてに限定)
CA の一部の書誌情報	/JT (雑誌名), /PY (発行年), /DT (資料種類) など

- CASREACT ファイルには、練習用ファイル (LCASREACT) がある。割安な接続時間料 (1,800 円/時) だけで反応検索等の練習を行うことができる (2011 年 3 月現在の料金)。

- CASREACT ファイルの主な検索料金一覧 (2011 年 3 月現在)

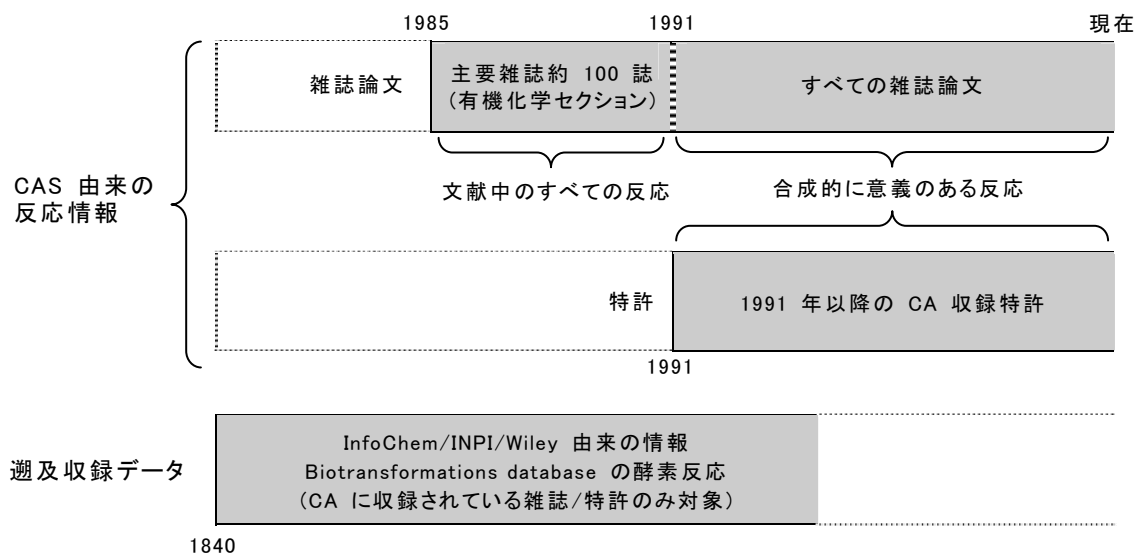
項目	料金
検索語料：CAS 登録番号	961 円
検索語料：REGISTRY ファイルからクロスオーバーした L 番号	4,000 円
検索語料：テキスト	276 円
構造検索料 (SSS, CSS)	16,000 円
官能基検索料	10,100 円

## 収録範囲

■ CASREACT ファイルは Chemical Abstracts Service (CAS) が提供する化学反応データベースで、CAS 作成の反応情報に加えて、InfoChem 社、Wiley 社および INPI (フランス特許庁) 由来の反応情報も収録している。

- ・ CAS の収録基準 (APPENDIX 参照) に合致した反応が収録されている。
  - ポリマーの反応や工業的反応はあまり収録されていない。
- ・ 一段階、および多段階の合成反応が収録されている。
  - 反応に関与するすべての化合物が索引されている (CA ファイルとの相違点)。
  - 原文献に記述されていれば、収率、反応条件、安全性に関する情報 (キーワード) も検索・表示できる。

### ■ 収録源の年代変遷



- ・ CAS 由来の反応情報は 1985 年以降で、それ以前の情報は InfoChem/INPI/Wiley\* 由来の反応情報などを遡及収録している。
- ・ 遡及収録されたデータについても、以下の機能が利用できる。
  - すべての反応関与物質に CAS 登録番号が付与されている。  
(INPI, Wiley 由来の反応中には、触媒と溶媒の CAS 登録番号の収録が不完全なものがある)
  - ロール、反応部位、マッピングを指定した検索、および官能基検索ができる。

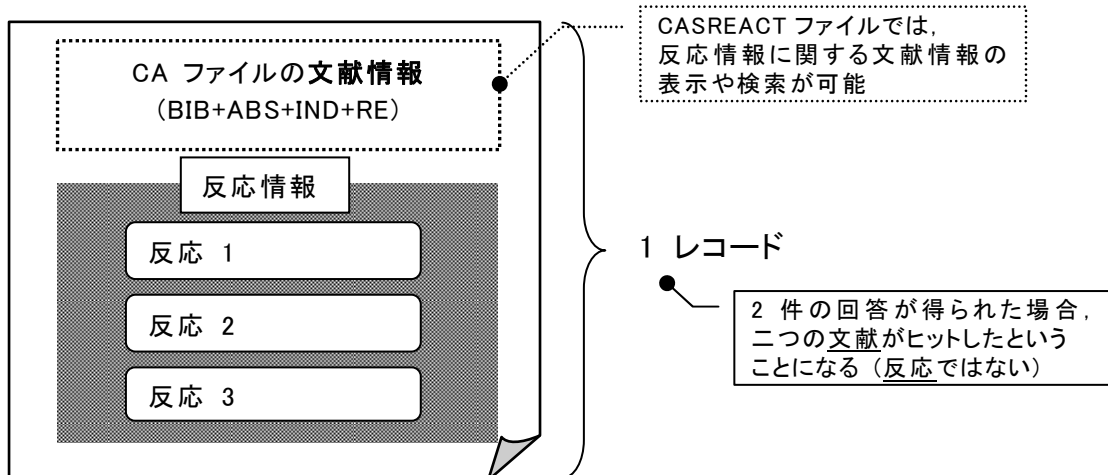
#### \* Wiley 社由来の反応情報の出典

- Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (EROS) : e-EROS 2001 年版
  - Organic Syntheses : 1921 - 2006 年
  - Organic Reactions : 1946 - 2006 年
- ・ 遡及収録されたデータは、=> S NONCAS/FS で限定することができる。

## 反応の収録形式

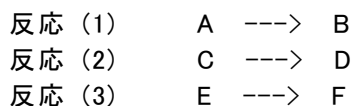
- レコードは文献単位であり、1 件のレコードは 1 件の文献に対応する。

- ・ 各レコードには、CA ファイルからの文献情報と CASREACT ファイル特有の化学反応情報が収録されている。



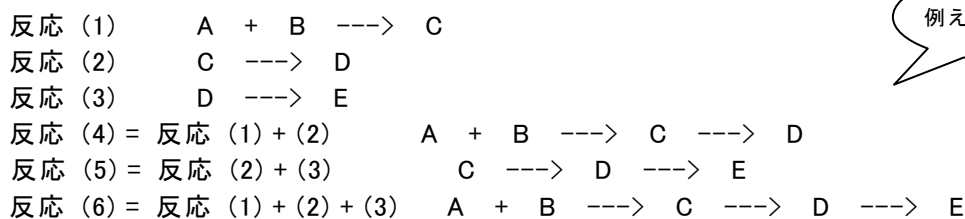
- 収録する反応情報の例

- ・ 一段階反応のみを報告した文献



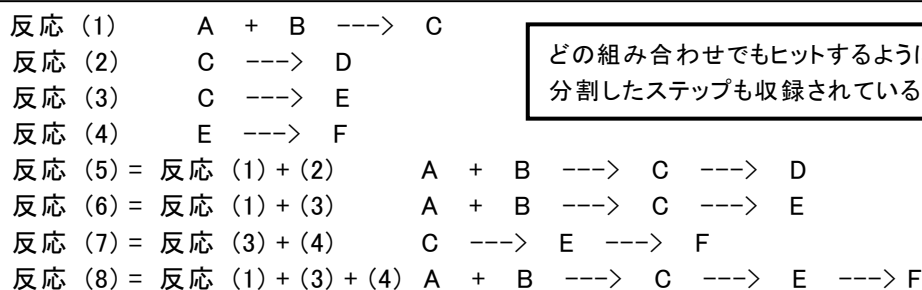
例えば、新規反応を  
開発した論文など

- ・ 多段階反応 A + B ----> C ----> D ----> E を報告した文献



例えば、全合成

- ・ 分岐多段階反応 A + B ----> C -----> D  
|  
----> E ----> F を報告した文献



どの組み合わせでもヒットするように、  
分割したステップも収録されている。

例えば、誘導体合成

## レコード例

レコード番号 AN 132:222457 CASREACT Full-text  
 標題 TI Photochemical process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane  
 発明者 IN Ollivier, Jean; Drutel, Damien  
 特許出願人 PA Elf Atochem S.A., Fr.  
 収録源 SO Eur. Pat. Appl., 7 pp.  
 CODEN: EPXXDW

資料種類 DT Patent  
 言語 LA French

国際特許分類 IPC1 C07D0201-04 [ICM, 6]; C07D  
 IPCR C07D0227-00 [I, C\*]; C07D0

CA セクション GC 27-21 (Heterocyclic Compo  
 Section cross-reference(s

関連特許 FAN. CNT 1  
 ファミリー数 PATENT NO. KIND DA

特許情報 PI EP 989118 A1 20  
 EP 989118 B1 20011024  
 R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT,  
 IE, SI, LT, LV, FI, RO  
 FR 2784103 A1 20000407 FR 1998-11734 19980921  
 FR 2784103 B1 20001208  
 :  
 US 6194570 B1 20010227 US 1999-400996 19990921  
 優先権情報 PRAI FR 1998-11734 19980921  
 抄録 AB Lauryl lactam, useful as a monomer (no data), is prepared in high yield and  
 selectivity by the photochem. nitrosation of cyclododecane with a nitrosation  
 agent (e. g., nitrosyl chloride) and hydrogen chloride in an organic solvent (e. g.,  
 chloroform) to produce the oxime of cyclododecanone which is then subjected to  
 a Beckmann rearrangement in the presence of methanesulfonic acid.  
 補遺語 ST lauryl lactam prepn cyclododecane reaction; photochem nitrosation  
 cyclododecane prepn cyclododecanone oxime; Beckmann rearrangement  
 cyclododecanone oxime prepn lauryl lactam  
 索引 IT Beckmann rearrangement  
 (of cyclododecanone oxime in the presence of methanesulfonic acid for  
 the preparation of lauryl lactam)  
 IT Nitrosation  
 (photochem.; of cyclododecane with nitrosyl chloride in the prepn of  
 cyclododecanone oxime)  
 IT 75-75-2, Methanesulfonic acid  
 RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 67-66-3, Chloroform, CASREACT ファイルでは検索できない  
 RL: NUU (Other use, unclassified); USES (Uses)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 294-62-2, Cyclododecane 2696-92-6, Nitrosyl chloride 7647-01-0,  
 Hydrogen chloride, reactions  
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 946-89-4P, Cyclododecanone oxime  
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
 (Reactant or reagent)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 947-04-6P, Lauryl lactam  
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)

引用文献数 RE. CNT 2 THERE ARE 2 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORDRE  
 引用文献 RE  
 (1) Ato Chimie Sa; FR 2417501 A 1979 CAPLUS  
 (2) Montecatini, S; FR 1335822 A 1963 CAPLUS

CA ファイルとほぼ同じ文献情報

CA ファイルと同じ検索フィールドを使って絞り込みが可能。  
 例 : 特許に限定する (=) S L1 AND P/DI)

CASREACT ファイルで検索できない情報

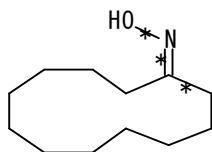
- ・ 対応特許情報
- ・ IPC
- ・ IT フィールド中の CAS 登録番号と CAS ロール
- ・ 引用文献情報

反応マップ

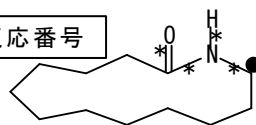
RX(1) OF 3 ... A ==> B

全部で 3 件の反応情報が収録されており、この反応は 1 番目  
... は、前後の反応の存在を示す

反応図



反応番号



\* は反応部位を示す

(1)

YIELD 99%

一段階反応

反応要約  
反応物  
試薬  
生成物  
触媒  
溶媒  
注記

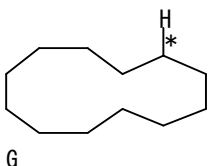
RX(1) RCT A 946-89-4  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-  
PRO B 947-04-6  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3  
NTE photochem.

生成物の下に収率が  
表示されることもある

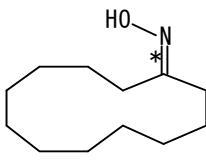
反応関与物質は CAS 登録番号  
で索引される

生成物、反応物だけでなく、試薬や溶媒、  
触媒や反応条件なども表示される

RX(2) OF 3 G ==> A...



(2)

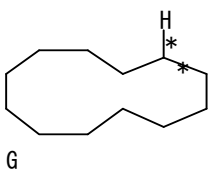


一段階反応

RX(2) RCT G 294-62-2  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO A 946-89-4  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3, 7732-18-5 Water

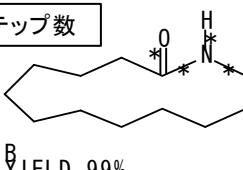
RX(3) OF 3 COMPOSED OF RX(2), RX(1)  
RX(3) G ==> B

多段階反応の場合、構成する  
一段階反応の反応番号がわかる  
例：反応(2)と(1)をあわせた反応



2 STEPS

ステップ数



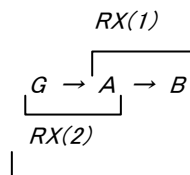
YIELD 99%

多段階反応

RX(2) RCT G 294-62-2  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO A 946-89-4  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3, 7732-18-5 Water

多段階反応の場合、反応要約を  
見ることで、反応の流れがわかる

RX(1) RCT A 946-89-4  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO B 947-04-6  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3  
NTE photochem.



RX(3)

## CAS 登録番号検索

- CAS 登録番号に、以下の役割 (ROLE) を指定して、反応情報を検索することができる。

よく使われるロール

/RCT	反応物 (Reactant)	/RRT	反応物または試薬 (Reactant or Reagent) (/RCT, RGT)
/RGT	試薬 (Reagent)		
/PRO	生成物 (Product)		
/NPRO	生成物以外の物質 (NonProducts) (/RCT, RGT, SOL, CAT)		
/SOL	溶媒 (Solvent)		
/CAT	触媒 (Catalyst)		* ANY/CAT で触媒反応に限定可能

\* ロールを指定しない場合には、すべてのロールが検索対象になる。

- ・ 化学物質名称からは検索できない (反応データには名称が入っていない)。
- ・ 溶媒と触媒の指定は、CAS 登録番号でのみ検索可能 (構造検索, 官能基検索は不可)。

- ロールを指定した検索法には、以下の 2 通りがある (料金は 2011 年 3 月現在)。

- ・ CAS 登録番号に、直接ロールを指定する方法 (961 円/CAS 登録番号)
  - DR (削除された CAS 登録番号) を使った場合、現行の CAS 登録番号はヒットしない。
  - CAS 登録番号が不明な場合は、REGISTRY ファイルで調べる (P. 15 参照)。

=> S 50-00-0/RRT ← ホルムアルデヒドを反応物または試薬とする反応  
L1 20870 50-00-0/RRT

=> S 50-00-0/RCT ← ホルムアルデヒドを反応物とする反応  
L2 19828 50-00-0/RCT

- ・ REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号 に、ロールを指定する方法 (4,000 円/L 番号)
  - 回答セットは構造検索と辞書検索、どちらの結果でもよい。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

⋮  
=> S FORMALDEHYDE/CN  
L3 1 FORMALDEHYDE/CN

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

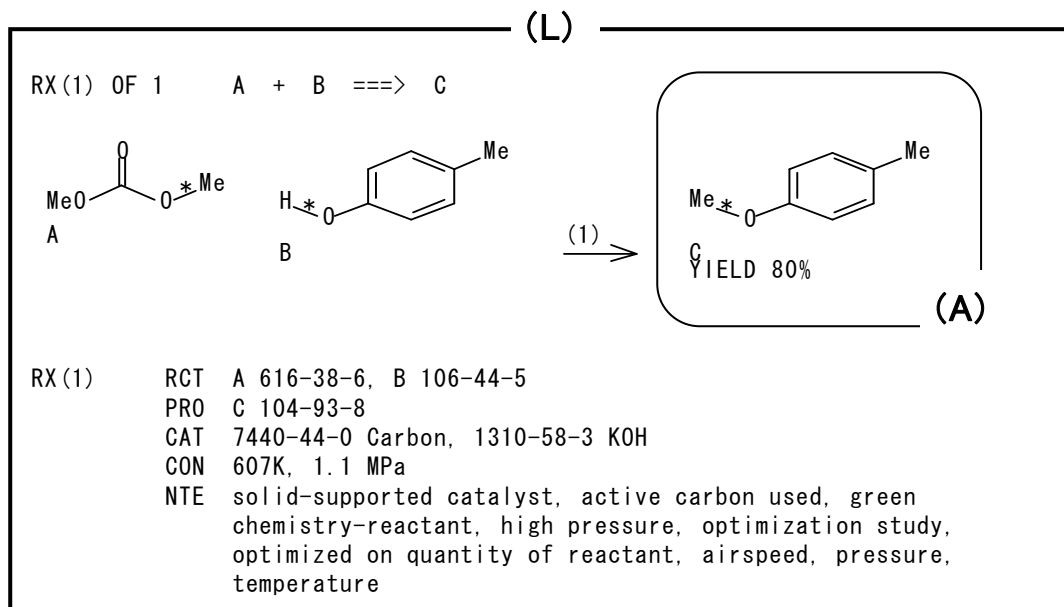
⋮  
=> S L3/RRT ← ホルムアルデヒドを反応物または試薬とする反応  
L4 20870 L3/RRT



REGISTRY ファイルから CASREACT ファイルへのクロスオーバー検索は高額のため注意。

- ・ 5 物質以上の場合 → REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号にロールを指定する。
- ・ 4 物質以下の場合 → CASREACT ファイルで CAS 登録番号に直接ロールを指定する。

## ■ CASREACT ファイルの演算子の図解

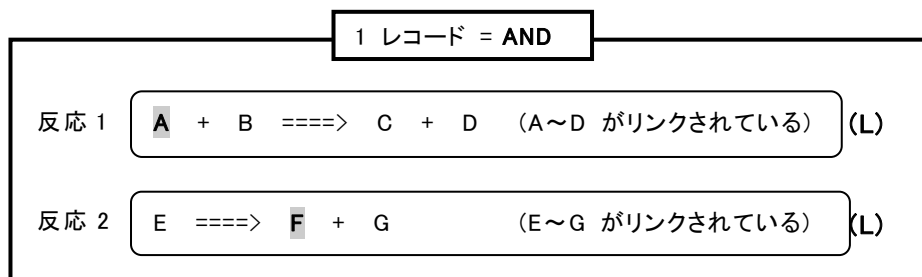


- ・ 同一反応中に限定する場合は、(L) 演算子を使う。  
(反応ステップ数 (/NS) や、触媒の存在 (ANY/CAT) も (L) 演算子を用いる)
  - => S 616-38-6/RCT (L) 104-93-8/PRO (L) 7440-44-0/CAT
  - => S 616-38-6/RCT (L) ANY/CAT (L) 1/NS
- ・ 収率 (/YD) と生成物をリンクする場合には (A) 演算子、それ以外は (L) 演算子を用いる。
  - => S 104-93-8/PRO (A) 80<=YD
  - => S 104-93-8/RRT (L) 80<=YD
- ・ 発行年などの CA ファイルの文献情報とリンクする場合は AND 演算子を用いる。
  - => S 104-93-8/PRO AND P/DT

## 【注意】 AND 演算子について

反応情報（生成物、反応物等や収率）同士をリンクする場合に、AND 演算子を用いるとノイズが含まれるので注意する。CASREACT ファイルは、1 レコードが 1 文献のため、同一レコード中に多くの反応を収録している。そのため、AND 演算子を用いると、「同じ文献中に存在する反応」が検索対象になり、ノイズが含まれる。したがって、CASREACT ファイルの反応情報検索では、近接演算子を利用する。

例 : => S 物質 A の CAS 登録番号/RCT AND 物質 F の CAS 登録番号/PRO



## 検索例 - CAS 登録番号検索

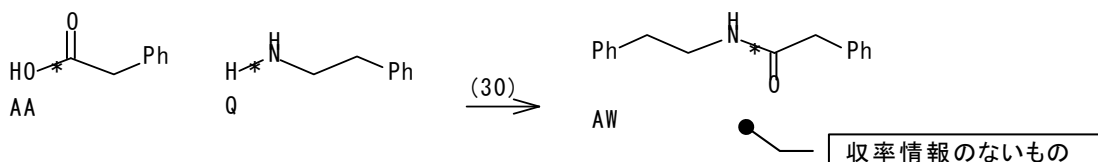
■ 検索例 : *N*-phenylethyl-2-phenylacetamide (5460-60-6) の合成法を検索する.

- ・ 収率が 80% 以上の反応に限定する.
- ・ 反応物/試薬に phenylpyruvic acid (156-06-9) を用いている反応に限定する.

=> FILE CASREACT                      ← CASREACT ファイルに入る  
=> S 5460-60-6/PRO                      ← 5460-60-6 が生成物の反応を検索する  
L1                      17 5460-60-6/PRO  
=> D FHIT 6 8                              ← 6 番目と 8 番目の回答を FHIT 表示形式で表示する

L1 ANSWER 6 OF 17 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

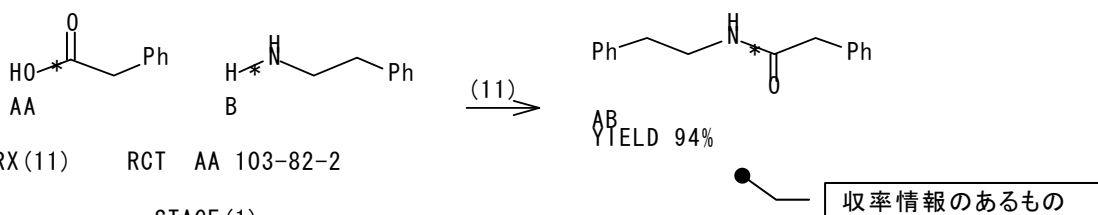
RX(30) OF 36    AA + Q ==> **AW**



RX(30)    RCT AA 103-82-2, Q 64-04-0  
RGT J 26386-88-9 (PhO)2P(O)N3, K 121-44-8 Et3N  
PRO AW **5460-60-6**  
SOL 68-12-2 DMF  
CON SUBSTAGE(1) room temperature -> -10 deg C  
SUBSTAGE(2) 2 hours, -10 deg C  
SUBSTAGE(3) 15 hours, 20 deg C

L1 ANSWER 8 OF 17 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(11) OF 193    AA + B ==> **AB**



RX(11)    RCT AA 103-82-2  
STAGE(1)  
RGT D 79-37-8 (COCl)2  
CAT 68-12-2 DMF  
SOL 75-09-2 CH2Cl2  
STAGE(2)  
RCT B 64-04-0  
RGT E 121-44-8 Et3N  
CAT 1122-58-3 4-DMAP  
SOL 75-09-2 CH2Cl2  
PRO AB **5460-60-6**  
NTE combinatorial

=> S L1 (A) 80<=YD  
L2 7 L1 (A) 80<=YD

← 収率が 80% 以上の反応に限定する

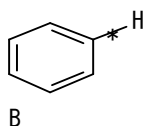
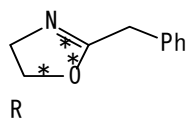
収率情報のない反応も含めるには  
(A) (80<=YD OR NONE/YDT) と入力

=> D FHIT 7

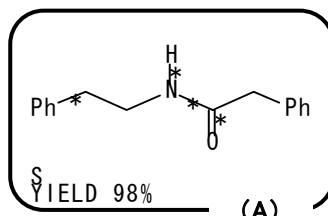
← 7 番目の回答を FHIT 表示形式で表示する

L2 ANSWER 7 OF 7 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(10) OF 16 R + B ==> **S**



(10) →



RX(10) RCT R 10431-95-5, B 71-43-2  
RGT D 7446-70-0 AlCl3  
PRO S **5460-60-6**  
SOL 71-43-2 Benzene

=> S L2 (L) 156-06-9/RRT  
L3 3 L2 (L) 156-06-9/RRT

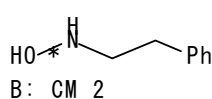
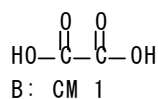
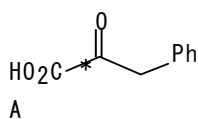
← phenylpyruvic acid (156-06-9) が反応物/試薬の  
反応に限定する

=> D FHIT 3

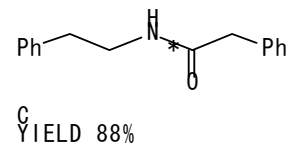
← 3 番目の回答を FHIT 表示形式で表示する

L3 ANSWER 3 OF 3 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(1) OF 10 **A** + B ==> **C**



(1) →



RX(1) RCT A **156-06-9**, B 300843-77-0

PRO C **5460-60-6**

SOL 68-12-2 DMF

CON 15 hours, 40 deg C

NTE chemoselective, optimized on solvent, alternate solvents also  
give good yield, optimization study, regioselective

(L)



CAS 登録番号が不明な場合には, REGISTRY ファイルで検索した結果から SELECT コマンド  
で抽出した E 番号を使って検索する (4 物質以下の場合). 5 物質以上の場合には L 番号 を  
クロスオーバーする.

=> FILE REGISTRY

=> S FORMALDEHYDE/CN  
L1 1 FORMALDEHYDE/CN

← REGISTRY ファイルで名称から検索する

=> SEL RN  
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

← CAS 登録番号を抽出する

=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

=> S E1/RRT  
L2 20870 50-00-0/RRT

← 抽出した E 番号を使って CAS 登録番号検索

## 表示形式

■ CASREACT ファイルには、CA ファイルと同じ文献情報（書誌情報、抄録、索引、引用情報）が収録されている。

■ ALL 表示形式以外は CAplus/CA ファイルと同じ表示形式が利用できる。  
ただし、FBIB、FAM 表示形式は使用できない。

- ・ ALL 表示形式では、文献情報とすべての一段階反応が表示される。  
情報量が非常に多い場合があるので、通常は利用しない。
- ・ 回答を表示する際、FCRDREF、CRDREF、CRDREF(n) 以外の表示形式の場合は、文献の書誌情報（どの文献にその反応が記載されているか）が表示されないため、BIB (STD) 表示形式と反応情報の表示形式を組み合わせるとよい。

### ■ 反応情報の表示

- ・ 表示形式の選び方のポイント

- 「ヒットした最初の反応」か「ヒットしたすべての反応」か

CASREACT ファイルは、1 レコード = 1 文献のため、一つのレコードに多くの反応が収録されている場合がある。そのため、1 件の回答にヒットした反応を多く含む場合がある。それらをすべて表示させるかどうかで、表示形式を決める。

ただし、「すべてのヒットした反応」を選んだ場合、下記のような反応を収録しているレコードでは、同じ反応が何度も表示されるので注意（ $\Rightarrow$  の反応がすべて表示される）。

A + B  $\rightarrow$  C  $\rightarrow$  D  $\rightarrow$  E を合成法を報告した文献で、  
ヒットした反応が A + B  $\rightarrow$  C の場合。

$\Rightarrow$	反応 (1)	A + B $\rightarrow$ C	FHIT 表示形式では (1) のみ HIT 表示形式では (1), (4), (6)
	反応 (2)	C $\rightarrow$ D	
	反応 (3)	D $\rightarrow$ E	
$\Rightarrow$	反応 (4) = 反応 (1) + (2)	A + B $\rightarrow$ C $\rightarrow$ D	
	反応 (5) = 反応 (2) + (3)	C $\rightarrow$ D $\rightarrow$ E	
$\Rightarrow$	反応 (6) = 反応 (1) + (2) + (3)	A + B $\rightarrow$ C $\rightarrow$ D $\rightarrow$ E	

- 「ヒットした」反応か、ヒットしていない反応も含めるか

CASREACT ファイルは、1 レコード= 1 文献のため、多くの反応を収録している。したがって、すべての反応を表示させる場合は、表示が非常に長くなる場合がある。

例：SSRX はヒットしていない反応も表示できる。

## ■ 主な表示形式

\*   このテキストで紹介する表示形式

形式	表示内容
FCRD	ヒットした最初の反応の反応物, 生成物の構造図と試薬, 触媒, 溶媒の一画面表示 (コンパクト表示)
FCRDREF	FCRD と原資料 (SO, PY) (デフォルト)
SCAN (無料)	FCRD と標題 (回答番号は指定できない)
FHIT	ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, 反応要約 (First HIT)
HIT	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約, ヒットタームを含むフィールド
OCC	ヒットタームを含むフィールド名 (反応番号) と各フィールドにおけるヒットタームの頻度数 (OCCurrence)
RX	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
RXG	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図
RXS	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 反応要約
RX(n)	反応 n の反応マップ, 構造図, 反応要約
RXG(n)	反応 n の反応マップ, 構造図
RXS(n)	反応 n の反応マップ, 反応要約
SSRX	すべての一段階反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
SSRX(n)	一段階反応 n の反応マップ, 構造図, 反応要約
CRD	ヒットしたすべての反応のコンパクト表示
CRD(n)	反応 n のコンパクト表示
CRDREF	CRD と原資料 (SO, PY)
CRDREF(n)	反応 n のコンパクト表示と原資料 (SO, PY)
PATH	ヒットした反応のうち, 最もステップ数の多い反応の反応マップと構造図 (検索式によって表示される反応経路は異なる)
SPATH	ヒットした反応のうち, 最もステップ数の少ない反応の反応マップと構造図 (検索式によって表示される反応経路は異なる)
FPATH	PATH に反応要約が追加 (Full PATH)
FSPATH	SPATH に反応要約が追加 (Full SPATH)

反応マップ:

```
... A ==> B
```

反応要約 :

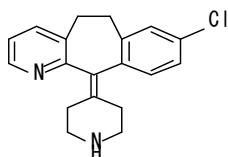
```
RCT G 294-62-2
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl
PRO A 946-89-4
:
```

コンパクト表示 : 反応部位 (\*) 等が表示されないコンパクトな反応式の表示

## 検索例

- 検索例 : Clarinex と Clarinex を含む多成分物質の合成法を検索する。

(料金は 2011 年 3 月現在)



CASREACT ファイルでは、多成分物質を構成する個々の成分 CAS 登録番号で検索できない。したがって、塩などの多成分物質を検索する場合は、REGISTRY ファイルで検索した回答セットをクロスオーバー検索するとよい。

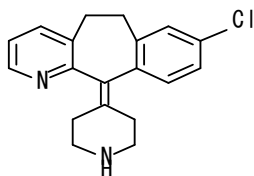
=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S CLARINEX/CN ← 化学物質名称で検索する

L1 1 CLARINEX/CN

=> D ← デフォルトの表示形式で表示する

```
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
RN 100643-71-8 REGISTRY
ED Entered STN: 01 Mar 1986
CN 5H-Benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine,
   8-chloro-6,11-dihydro-11-(4-piperidinylidene)- (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN 8-Chloro-11-(4-piperidylidene)-6,11-dihydro-5H-benzo[5,6]cyclohepta[1,2-
   b]pyridine
CN Aeriux
CN Allex
CN Azomyr
CN Clarinex
CN Descarboethoxyloratadine
CN Desloratadine
CN Neoclarityn
CN NSC 675447
CN Opulis
CN Sch 34117
DR 381727-28-2
MF C19 H19 Cl N2
CI COM
SR CA
LC STN Files: ADISINSIGHT, ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO,
   CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CIN, DDFU, DRUGU, EMBASE,
   IMSPATENTS, IMSRESEARCH, IPA, MEDLINE, MRCK*, PATDPASPC, PS,
   REAXYSFILE*, RTECS*, TOXCENTER, USAN, USPAT2, USPATFULL
   (*File contains numerically searchable property data)
```



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

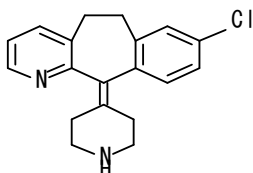
795 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 13 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
 800 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> S 100643-71-8/CRN ← 多成分物質を検索するため、成分 CAS 登録番号検索する (無料)  
L2 44 100643-71-8/CRN

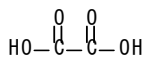
=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L2 44 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
IN 5H-Benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine,  
8-chloro-6,11-dihydro-11-(4-piperidinylidene)-, ethanedioate, sodium salt  
(1:?:?)  
MF C19 H19 Cl N2 . x C2 H2 O4 . x Na

CM 1



CM 2



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L1 OR L2 ← 医薬品単体と多成分物質をまとめる  
L3 43 L1 OR L2

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

=> S L3/PRO ← /PRO を付与すると、生成物の反応に限定  
L4 18 L3/PRO 注) ロールを指定せずに L 番号をクロスオーバーすると、その物質が関与しているすべての反応がヒットする

=> S L4 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) ← 収率で限定する  
L5 15 L4 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) 注) 収率データがないレコードを含めて検索する場合は、NONE/YDT を OR する



初めに、SCAN 表示形式を用いて、ヒットした検索結果を確認するとよい。

=> D SCAN

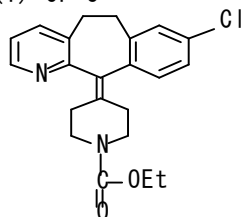
L5 15 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Process for the preparation of a polymorphic crystal of rupatadine free base

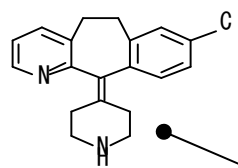
SCAN 表示形式 (無料, ランダム表示)

標題とヒットした最初の反応の構造図 (コンパクト表示)

RX (1) OF 3



KOH, Water, EtOH →



収率情報のないレコード

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

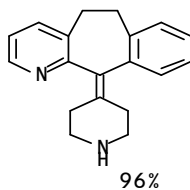
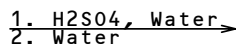
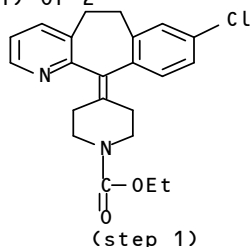
■ よく使われる有料の表示形式 - FCRDREF, FHIT, FPATH 表示形式

(料金は 2011 年 3 月現在)

=> D 8

L5 ANSWER 8 OF 15 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(1) OF 2



FCRDREF 表示形式 (396 円)  
(デフォルト)

ヒットした最初の反応の構造図  
(コンパクト表示) と原資料

REF: Indian Pat. Appl., 2003MU00406, 11 Feb 2005  
CON: STAGE(1) 3 hours, 100 - 105 deg C; 105 deg C -> room temperature  
STAGE(2) cooled

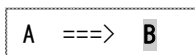


FCRDREF 表示形式と BIB FCRD は同じ表示料金のため、タイトルや著者、所属機関等の情報も同時に表示する場合は、BIB FCRD 表示形式を用いるとよい。

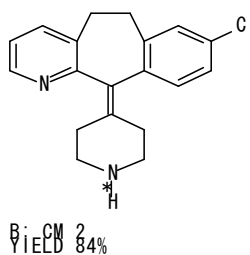
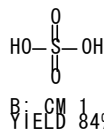
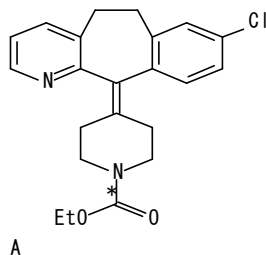
=> D 13-14 FHIT

L5 ANSWER 13 OF 15 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(1) OF 4



反応マップ



FHIT 表示形式 (308 円)

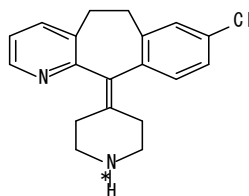
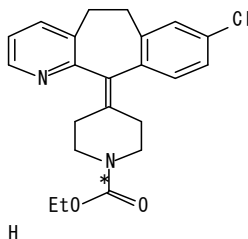
ヒットした最初の反応の構造図,  
反応マップ, 反応要約

RX(1) RCT A 79794-75-5  
RGT C 7664-93-9 H2SO4  
PRO B 432543-82-3  
SOL 7732-18-5 Water

反応要約  
(ルールと CAS 登録番号)

L5 ANSWER 14 OF 15 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(19) OF 283 ... H ==> AC...



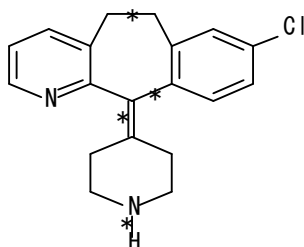
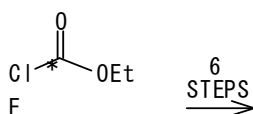
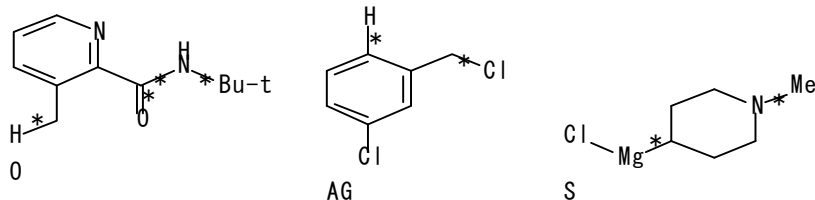
RX(19) RCT H 79794-75-5  
PRO AC 100643-71-8

=&gt; D 14 FPATH

L5 ANSWER 14 OF 15 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on S  
 RX (252) OF 283 COMPOSED OF RX (22), RX (8), RX (11), RX (5)  
 RX (252) O + AG + S + E ==> AC

FPATH 表示形式 (474 円)

ヒットした反応のうち、最もステップ数  
 の多い反応の反応マップと構造図  
 (検索式によって表示される反応経路  
 は異なる)



AC

FPATH 表示形式の効果的な利用方法

- ・ 反応物のみ指定して検索する場合に利用

その反応物からどのような最終化合物が文献中で  
 合成されたかが、すぐにわかる。

- ・ 生成物のみ指定して検索する場合に利用 (表示例)

文献中で、どのような反応物 (原料) から合成されて  
 いるかが、すぐにわかる。

RX (22)	RCT	O 32998-95-1, AG 620-20-2
	PRO	M 107285-30-3
RX (8)	RCT	M 107285-30-3
	PRO	N 31255-57-9
RX (11)	RCT	S 63463-36-5, N 31255-57-9
	PRO	I 130642-50-1
RX (5)	RCT	I 130642-50-1
	PRO	G 38092-89-6
RX (4)	RCT	G 38092-89-6, E 541-41-3
	PRO	H 79794-75-5
RX (19)	RCT	H 79794-75-5
	PRO	AC <b>100643-71-8</b>

● FPATH 表示形式の場合は、  
 この RX(19) のみ表示される



FPATH 表示形式と反応要約が表示されない PATH 表示形式は同じ料金。反応要約には、合成  
 中間体や試薬の CAS 登録番号も表示されるため、反応ルートがわかりやすい。

■ RX (n) 表示形式は, FPATH 表示形式で表示した各ステップの詳細を表示するのに便利.

=> D 14 RX(22) RX(8) RX(11) RX(5) RX(4) RX(19)

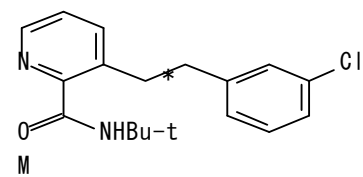
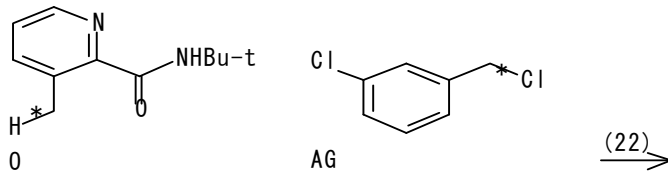
L5 ANSWER 14 OF 15 CASREACT COPYRIGHT 2011 AGS of

RX (n) 表示形式 (560 円)

指定した反応番号の反応マップ,  
構造図, 反応要約

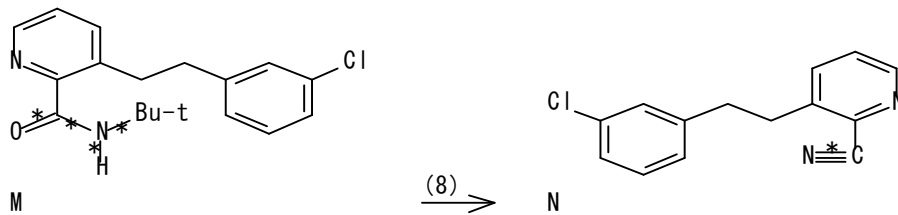
\* 1 行に入力すれば 1 回分の課金

RX(22) OF 283 0 + AG ==> M...



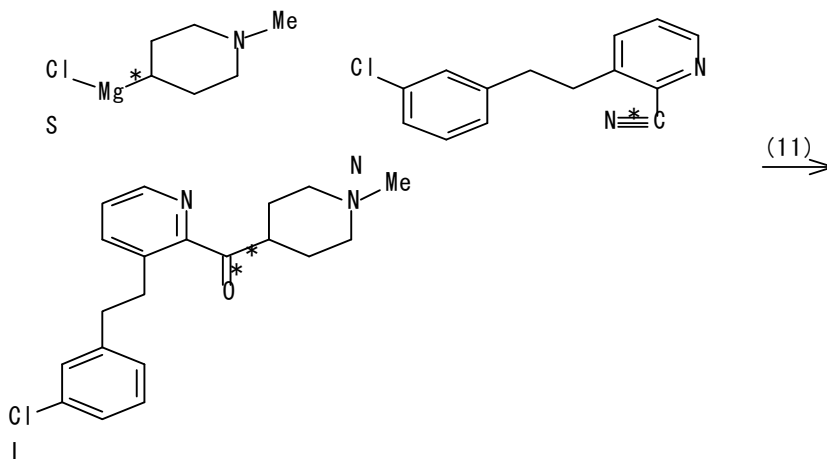
RX(22) RCT 0 32998-95-1, AG 620-20-2  
PRO M 107285-30-3

RX(8) OF 283 ... M ==> N...



RX(8) RCT M 107285-30-3  
PRO N 31255-57-9

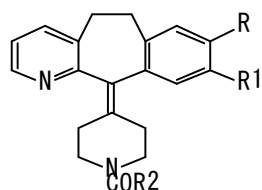
RX(11) OF 283 ... S + N ==> I...



- 文献情報が必要な場合は、BIB 表示形式などを組み合わせて表示する。

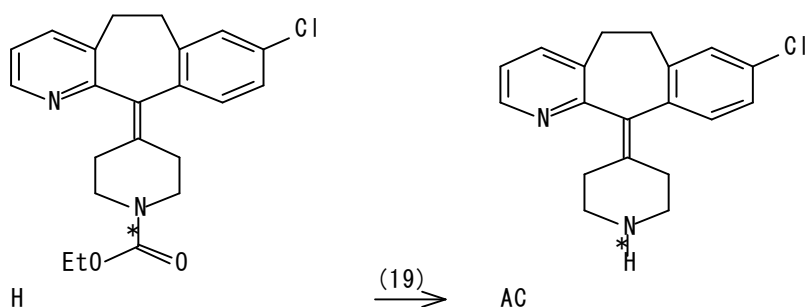
=> D 14 BIB ABS FHIT

L5 ANSWER 14 OF 15 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
 AN 114:42525 CASREACT [Full-text](#)  
 TI Dual antagonists of platelet-activating factor and histamine.  
 Identification of structural requirements for dual activity of  
 N-acyl-4-(5,6-dihydro-11H-benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridin-11-  
 ylidene)piperidines  
 AU Piwinski, John J.; Wong, Jesse K.; Green, Michael J.; Ganguly, Ashit K.;  
 Billah, M. Motasim; West, Robert E., Jr.; Kreutner, William  
 CS Dep. Chem. Res., Schering-Plough Corp., Bloomfield, NJ, 07003, USA  
 SO Journal of Medicinal Chemistry (1991), 34(1), 457-61  
 CODEN: JMCMAR; ISSN: 0022-2623  
 DT Journal  
 LA English  
 GI



AB The title compds. I (R = H, Me, OMe, OH, Br, Cl, F; R1 = H, Cl, F; R2 = H, Me, Et, Pr, CMe3, OEt, Ph) were prepared from the N-Me derivs. by demethylation-acylation. I are dual antagonists of platelet activating factor (PAF) and histamine. A number of structural features are identified which are necessary for PAF antagonist activity. Acylation of the piperidine N is required for appreciable activity with small acyl groups being optimal. Less conformationally constrained analogs and those lacking either N atom exhibit little or no anti-PAF activity. The H1-antihistamine activity can be adjusted utilizing substitution in the benzo ring. I (R = Cl, R1 = H, R2 = Me) was selected for clin. trials.

RX(19) OF 283 ...H ==> **AC**...

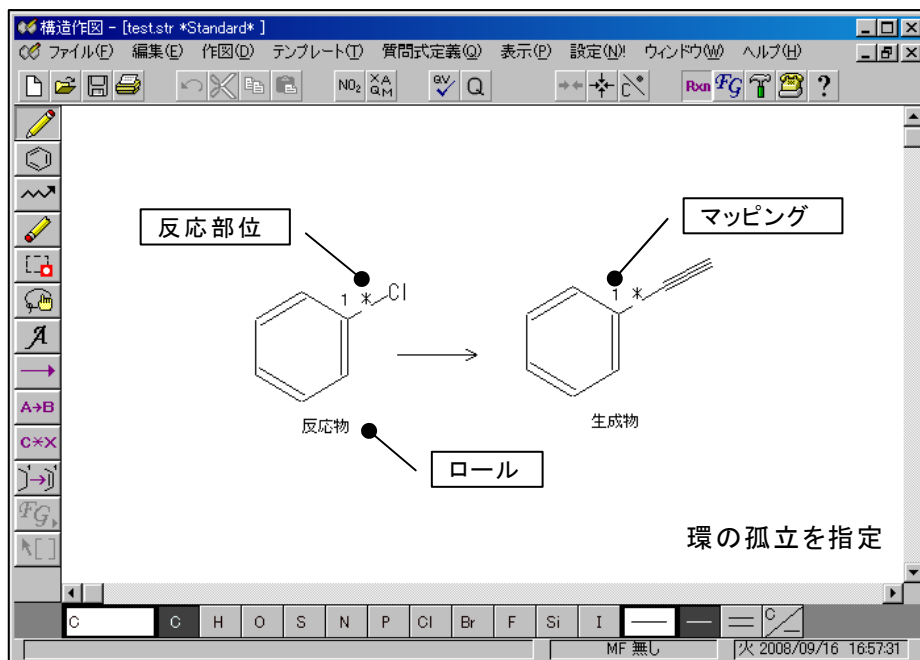


RX(19) RCT H 79794-75-5  
 PRO AC **100643-71-8**

## 反応質問式による構造検索 - 概要

■ CASREACT ファイルでは、反応質問式を使った構造検索ができる。

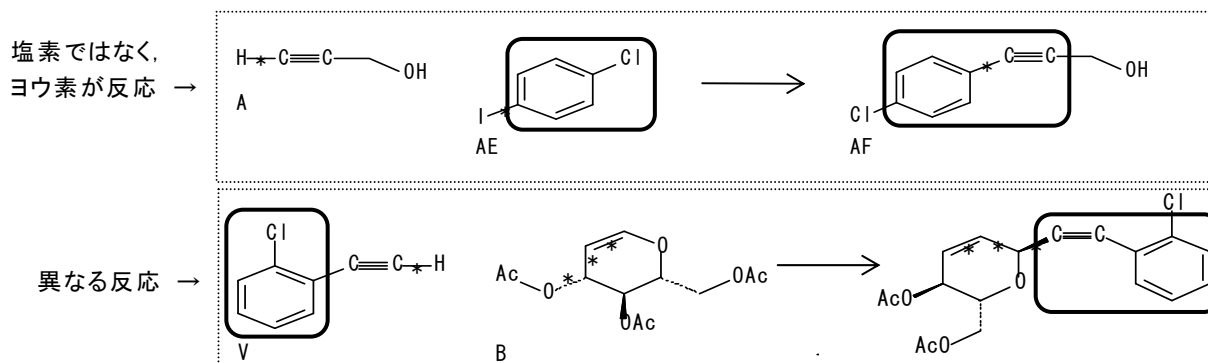
■ 作図例（クロロベンゼン誘導体からアルキニルベンゼン誘導体の合成反応の検索）



### ・ 反応質問式による構造検索のポイント



- 一つの反応質問式中に、反応物、生成物、試薬を独立した構造フラグメントとして作図する（反応物のみ、生成物のみ、試薬のみも作図可能。溶媒、触媒は不可）。
- 作図した構造に対して、任意のルール（反応物・生成物・試薬）が付与される。特定のルールに変更したい場合は、ルールツールで指定する。
- 必要に応じてマッピング（反応物と生成物中の対応する原子の指定）や、反応部位（反応する結合）を指定する。

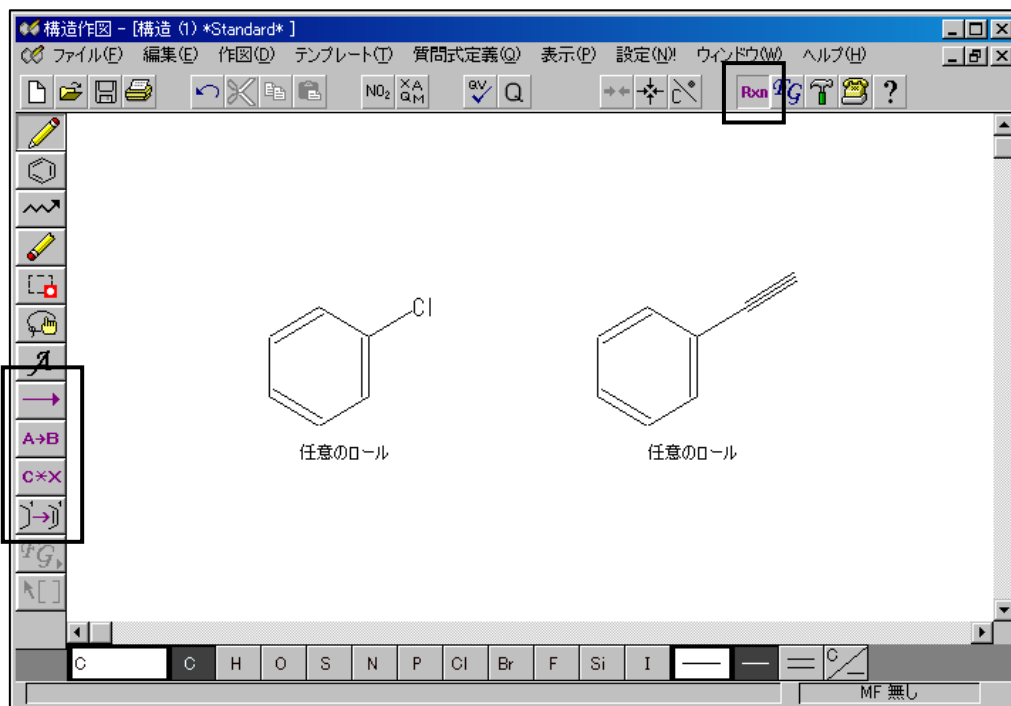
マッピングや反応部位を指定しないと、下図のようなノイズが含まれる場合がある。





- 立体構造検索や同一成分内に限定した検索はできない。

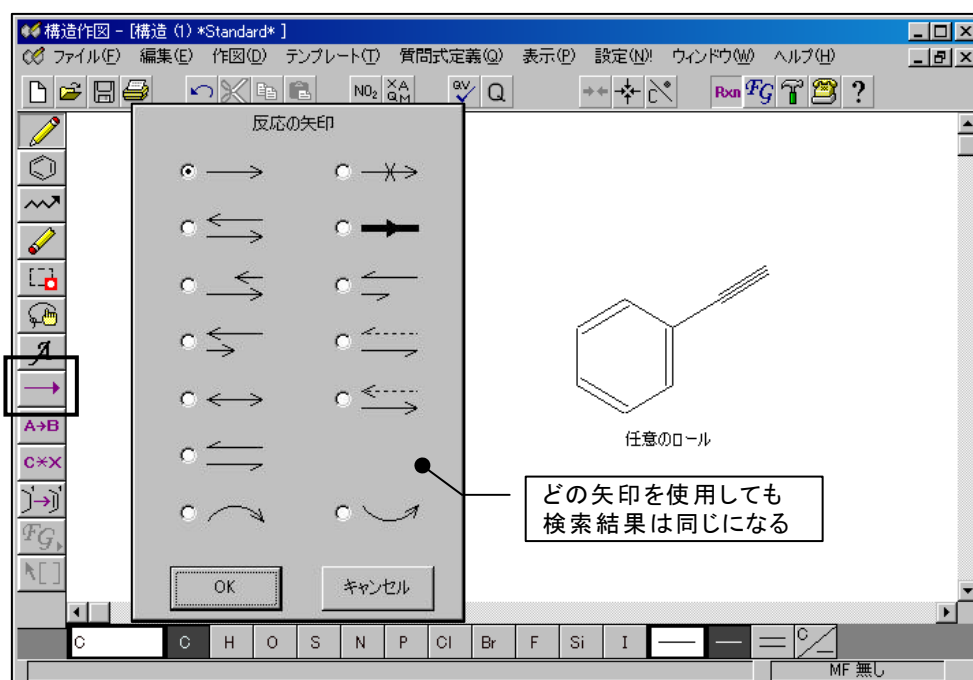
## 反応質問式の作成 - ロール

- 反応質問式作図ツール **Rxn** をクリックすると、ツールパレットの反応矢印ツール  , 反応ロールツール **A→B** , 反応部位ツール **C×X** , マッピングツール  が利用可能になる。

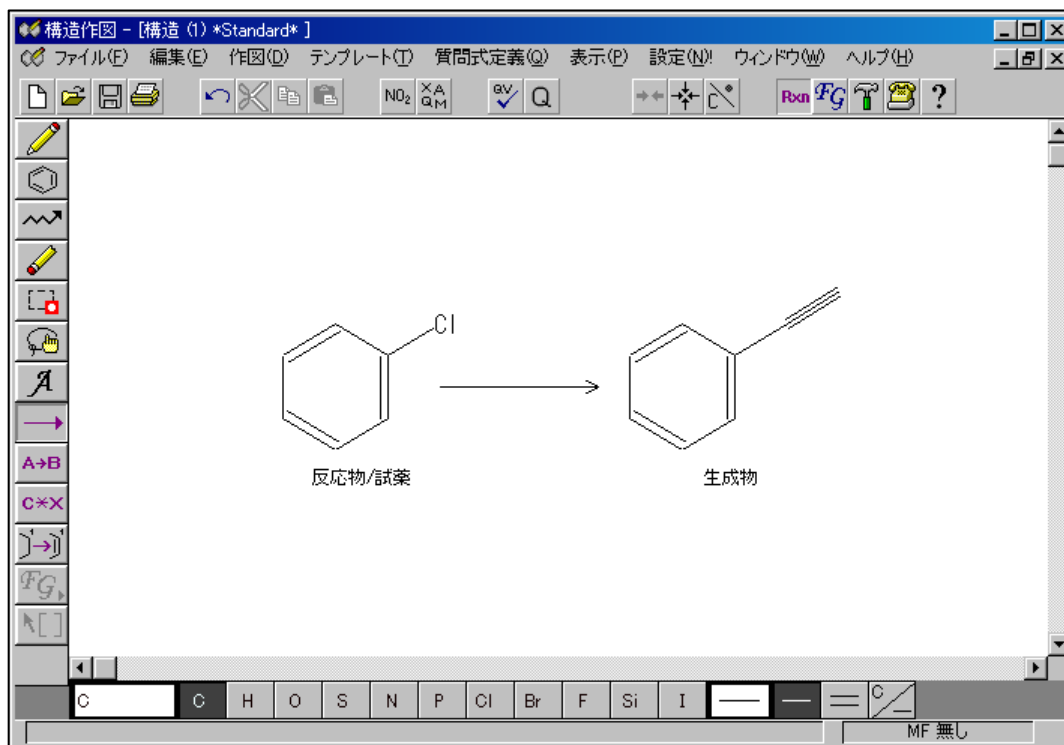


- ロール（役割：生成物，反応物，試薬）の簡易指定には、反応矢印ツール  を使用する。

- ① 反応矢印ツール  をクリックすると、反応の矢印ダイアログボックスが表示される。矢印の種類を選び、OK をクリックする。

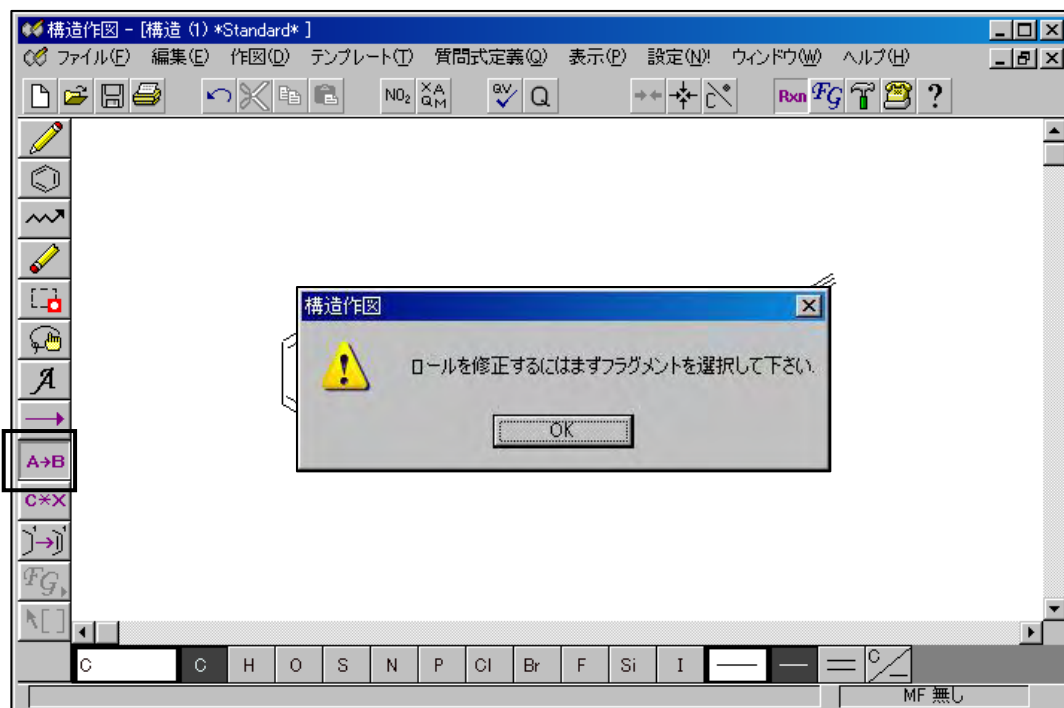


- ② マウスをドラッグしながら矢印を描く。矢印を引く向きにしたがって“反応物/試薬”と“生成物”のロールが付与される。反応矢印自体は検索の対象にならない。

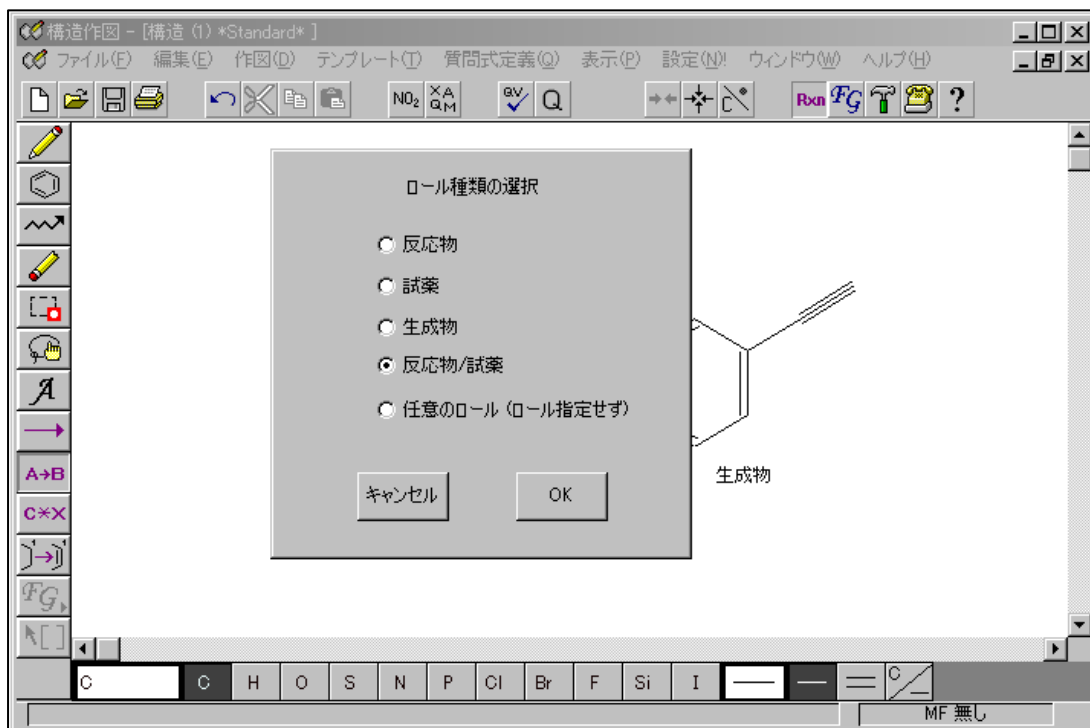


- 反応矢印で自動的に指定された各構造フラグメントのロール（各物質の役割）は、反応ロールツール **A→B** で、変更することができる。

- ① 反応ロールツール **A→B** をクリックすると、フラグメントを先に指示するようメッセージが表示されるので **OK** をクリックする。

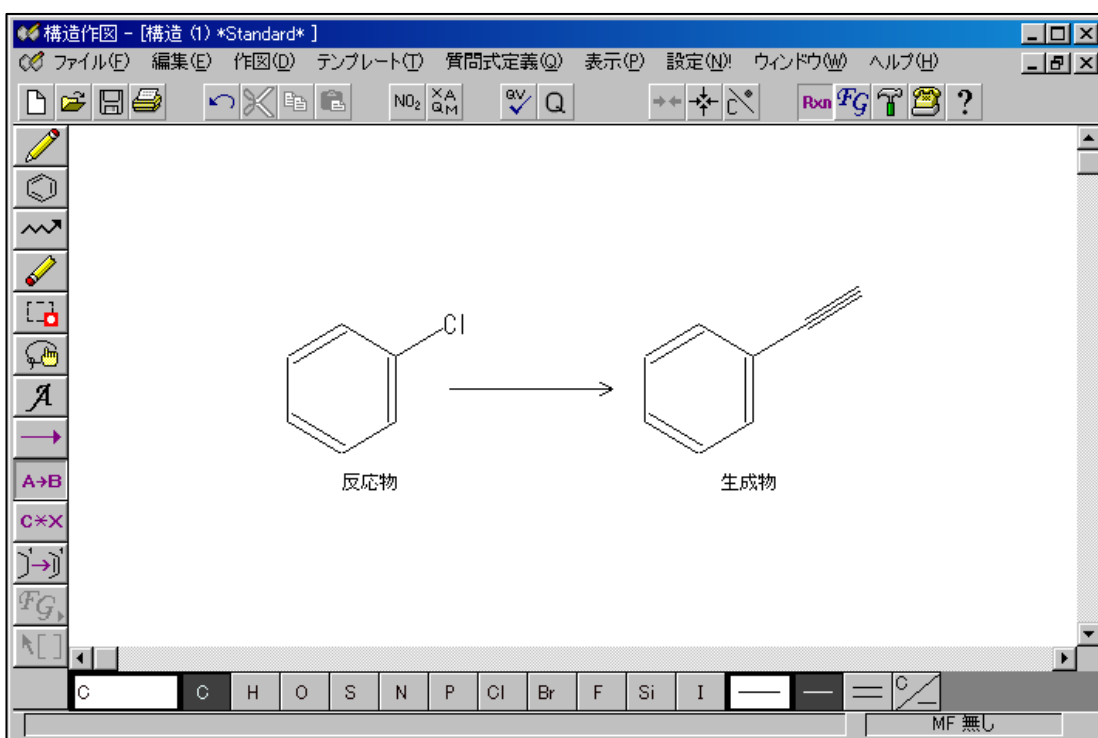


- ② ロールを指定したフラグメントのいずれかのノードをクリックすると、ロール種類の選択ダイアログボックスが表示される。



\* 「試薬」のロールが付与されたフラグメントは、マッピングや反応サイトの指定が無視される。そのため、「反応物/試薬」を選ぶと、検索結果にノイズが含まれることがある。精度の高い検索を行う場合には、「反応物」のロールを指定する方がよい。

- ③ 指定するロールを選択し、OK をクリックすると選択したロールが構造フラグメントの下に表示される。



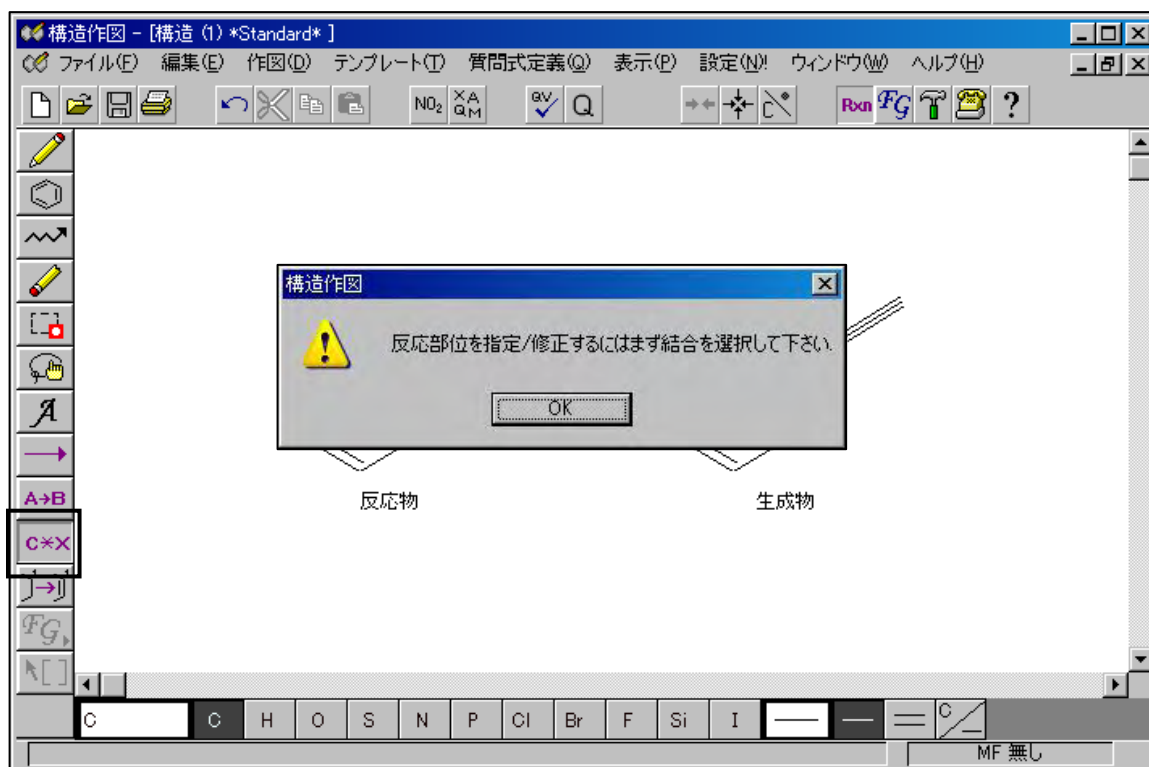
## 反応質問式の作成 - 反応部位

■ 反応によって変化する結合部位の指定には、反応部位ツールを使用する。

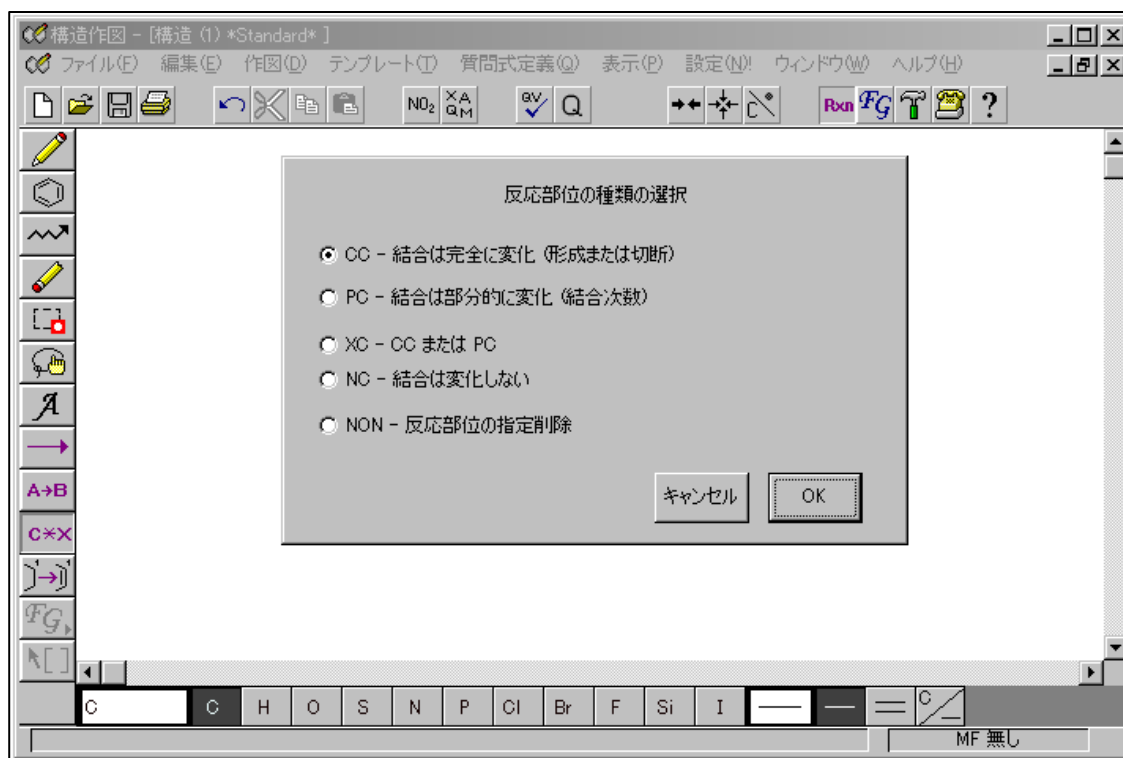
- ・ 反応部位は、反応物と生成物の構造フラグメント中にすでに存在する結合に対して指定する。
- ・ 反応部位は試薬の結合には指定できない。“反応物または試薬”の結合に指定すると反応物だけが反応部位情報と照合され、試薬の検索では無視される。
- ・ 反応部位で指定する値

反応部位	定義	例
CC	結合は反応によって完全に変化する (Completely Changed). → いずれか一端のノードが変化する。結合の形成または切断。	$C=O \rightarrow C=N$
PC	結合は部分的に変化する (Partially Changed). → 結合の種類は変わるが、ノードは両端とも不変。	$C=O \rightarrow C-O$
XC	結合は完全または部分的に変化する (CC または PC)。	$C=O \rightarrow C=N$ $C=O \rightarrow C-O$
NC	結合は変化しない (No Change). 指定位置は反応に関与しない。	$C=O \rightarrow C=O$
NON	反応部位は特に指定しない。	

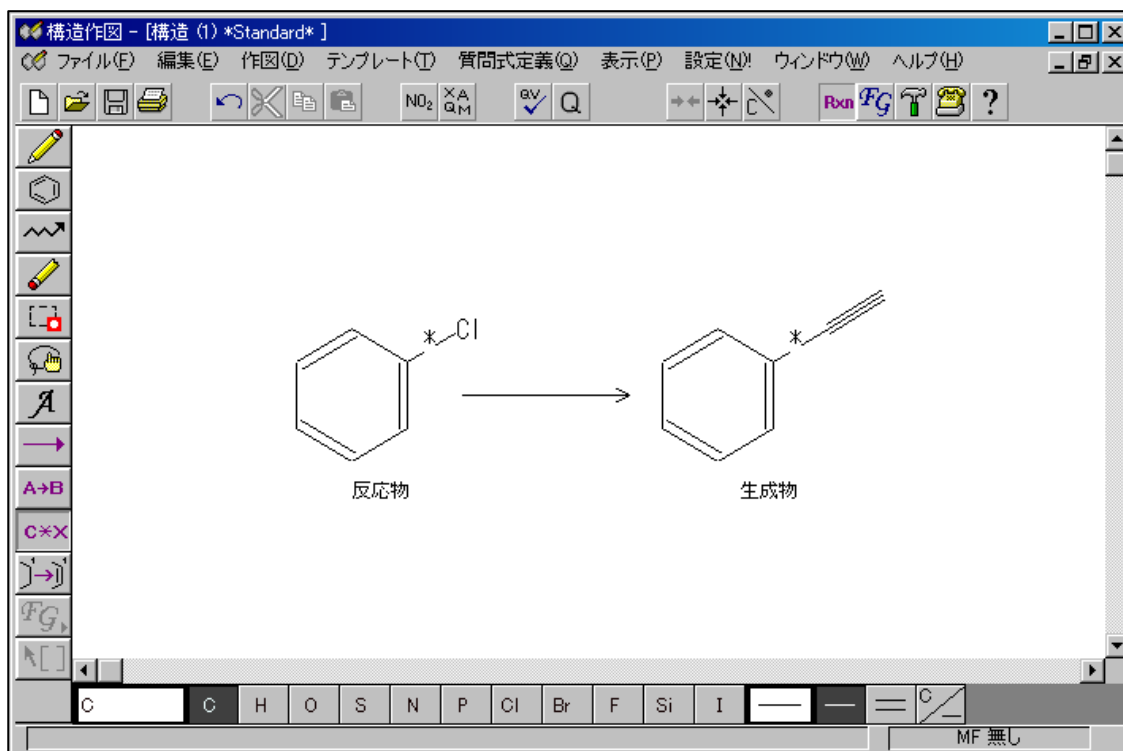
- ① 反応部位を指定するには、反応部位ツール **C\*X** をクリックする。指定する部位を先に指示するようメッセージが表示されるので OK をクリックする。



- ② 反応部位を指定する結合をクリックすると、「反応部位の種類を選択」ダイアログボックスが表示される。指定する反応部位の値を選択し、OK をクリックする。




- ③ 指定した結合に、アスタリスクが付与される。

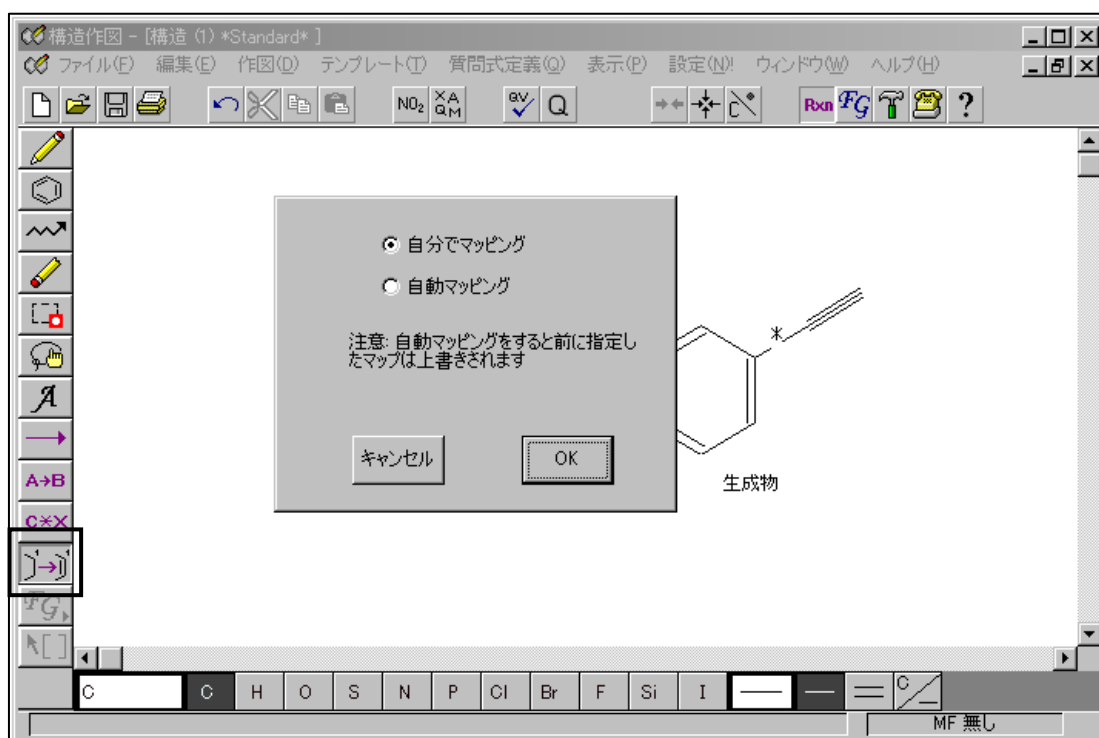


- \* 反応物/生成物中に反応に関与する結合が複数ある場合は、反応に関与するすべての結合に対して反応部位を指定せず、主な結合に付与するほうがよい。

## 反応質問式の作成 - マッピング

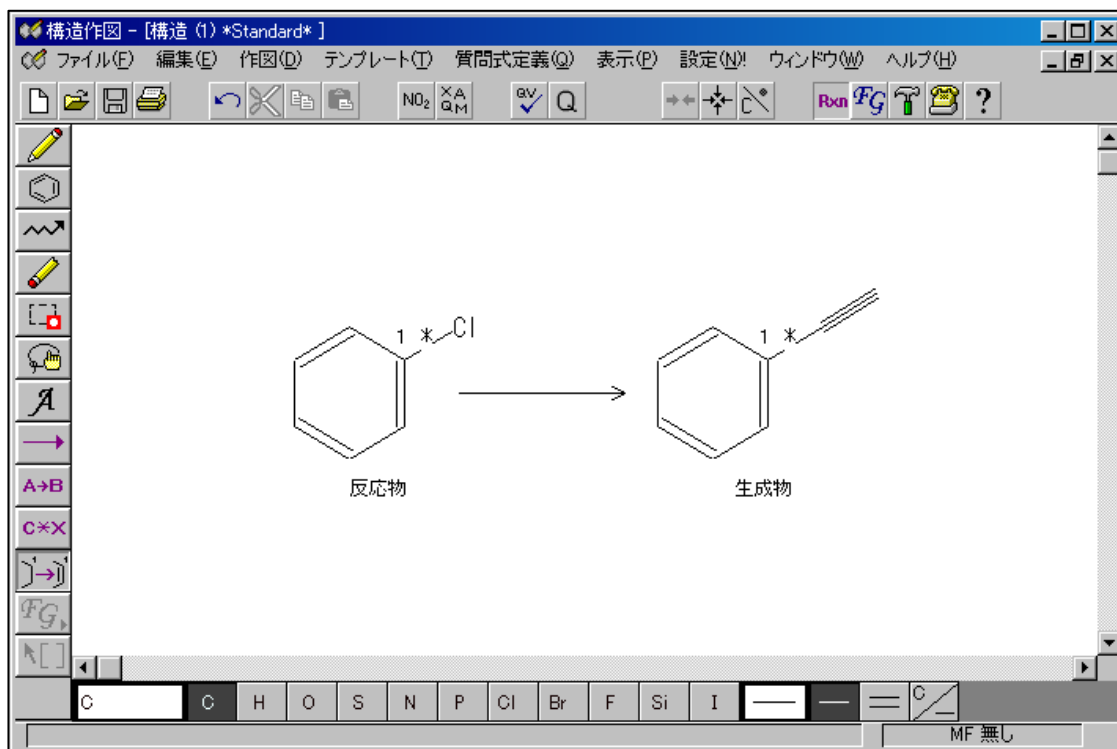
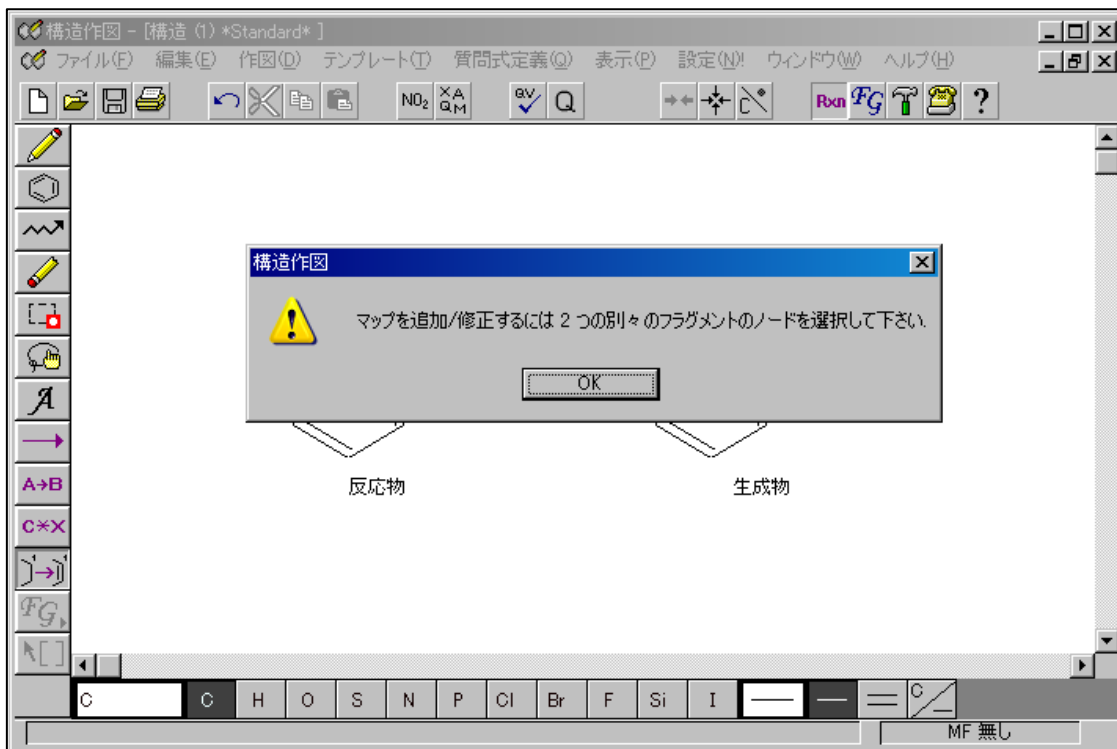
- 反応物と生成物中の対応する原子の指定には、マッピングツールを使用する。
  - ・ マッピングは、異なる構造フラグメント内の同じ元素記号に対してのみ指定できる。
  - ・ 構造フラグメント A から 構造フラグメント B へのマッピング可能なロールの組み合わせ。
    - フラグメント A : 反応物 (RCT), 反応物または試薬 (RRT)  
(試薬の場合は、マッピングを無視した検索が実行される。)
    - フラグメント B : 生成物 (PRO)
  - ・ ショートカット記号, Gk ノード, 一般式グループ (Ak, Hy など) には使用できない。
  - ・ 繰り返しグループ中のノードにはマッピングを使用できない。

- ① マッピングを指定するには、マッピングツール  をクリックする。  
“自分でマッピング”か“自動マッピング”を選択するダイアログボックスが表示されるので、どちらかを選び OK をクリックする。



- \* 構造中のすべての原子にマッピング情報が存在するわけではないので、すべてのノードに指定するのではなく、反応部位の周辺に数点付与するとよい。

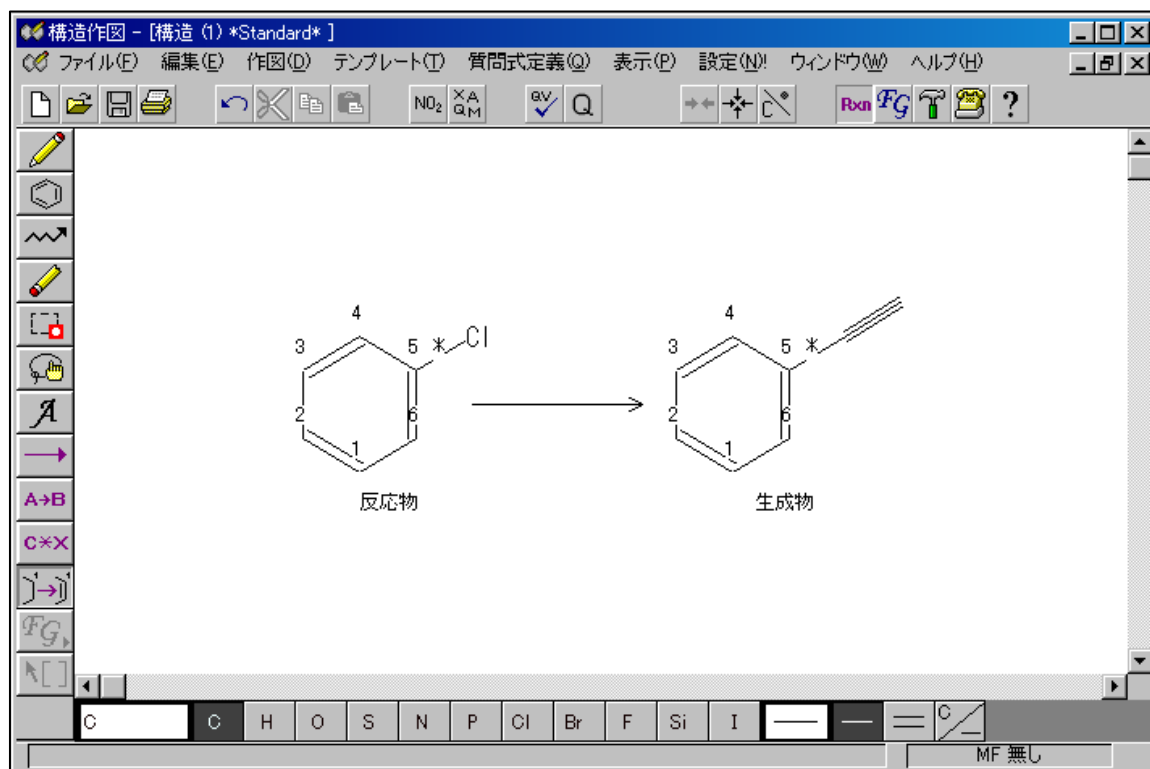
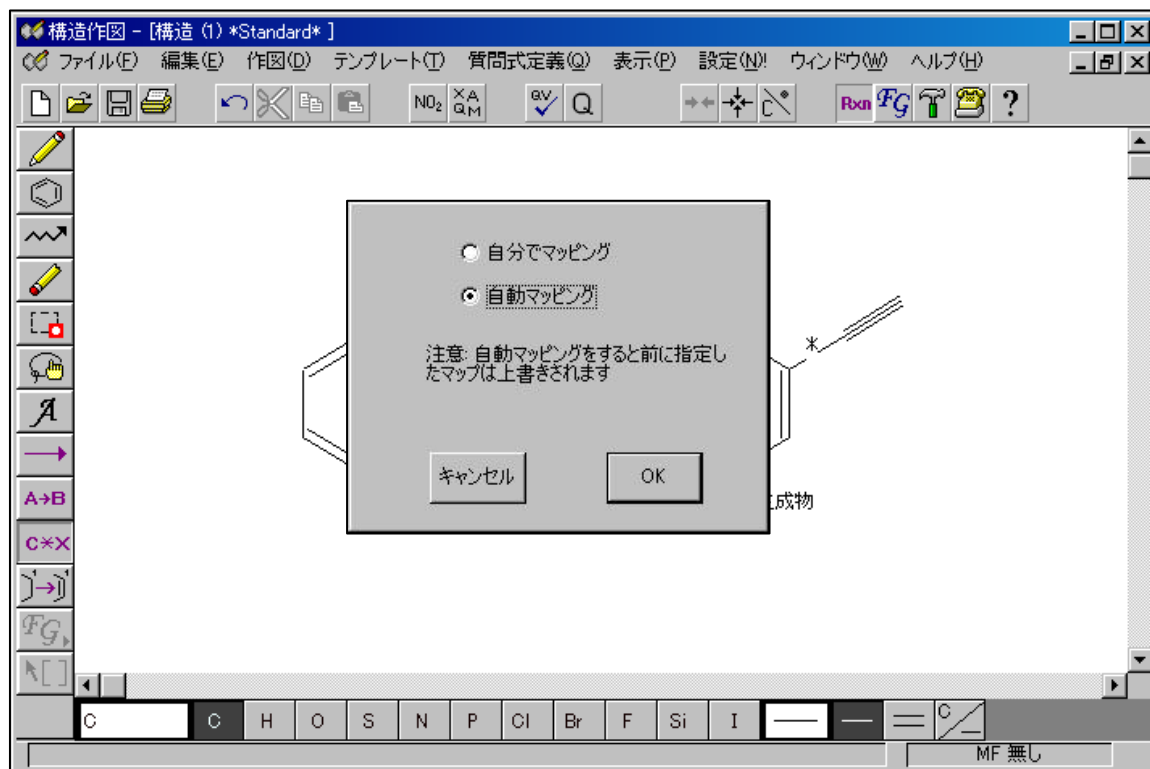
- ② “自分でマッピング” を選択すると、マッピングをするノードを指定するようメッセージが表示されるので OK をクリックする。ポインタは X 印に変わる。  
構造フラグメント中の対応する二つの原子をクリックすると、両原子に同じ番号が付く。



- 反応質問式の作図が終わったら、ファイルを保存する。

## 参考：自動マッピング

- “自動マッピング”では反応物中の原子と生成物中の原子の対応関係がアルゴリズムによって決められ、対応する原子に同一の番号が付与される。



- \* 構造中のすべての原子にマッピング情報が存在するわけではないので、すべてのノードに指定する自動マッピングより、「自分でマッピング」で、反応部位の周辺を数点マッピングする方がよい。

## 構造検索例

### ■ 反応質問式を使った構造検索の入力方法

=> **S Ln\*** **検索タイプ** **検索範囲**

- \* Ln は反応質問式
- \* 一部スクリーンも利用できる。

### ■ 構造検索のタイプ (EXACT 検索と FAMILY 検索は利用不可)

検索タイプ	内容
部分構造検索 SSS (デフォルト)	反応質問式を部分構造とする物質の反応を検索する。 追加の置換基があってもよい。
閉構造部分構造検索 CSS	反応質問式に完全に一致する物質*の反応を検索する。 → 作図していないところは、すべて水素が置換した検索。

\* 置換基を含める場合には、結合非水素数 (CONNECT) で指定する。

### ■ 構造検索の範囲

検索範囲	内容
SAMPLE (デフォルト)	ファイルの 5% をテスト的に検索する (無料)。
FULL	ファイルのすべて (100%) を検索する。
RANGE	ユーザーが指定した範囲内または最近のデータに限定して検索する。

### ■ CASREACT ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	オンライン検索・サブセット検索			バッチ検索	
	サンプル	フルファイル	範囲指定	フルファイル	範囲指定
Verification 数 (反応の確認)	5,000	1,000,000	1,000,000	1,500,000	1,500,000
回答数 (文献数)	50	1,000,000	1,000,000	1,500,000	1,500,000

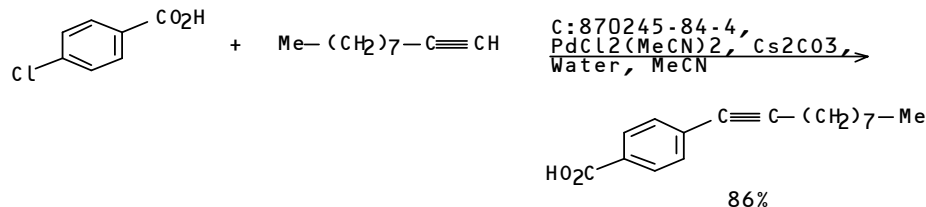


=> D\_SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L2 7 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 General catalysts for the Suzuki-Miyaura and Sonogashira coupling reactions of aryl chlorides and for the coupling of challenging substrate combinations in water

RX(27) OF 32



NOTE: in-situ generated catalyst, Sonogashira coupling reaction

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END=> S\_L1\_FUL ← フルファイル検索する

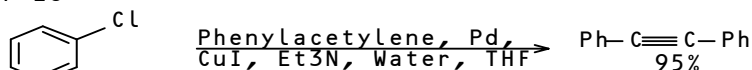
L3 130 SEA SSS FUL L1 ( 783 REACTIONS)

=> D\_SCAN ← 無料の表示形式でヒットした回答を表示して確認する

L3 130 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Layered double hydroxides supported nanopalladium catalysts for Heck-, Suzuki, Sonogashira-, and Stille-type coupling reactions of haloarenes

RX(18) OF 26



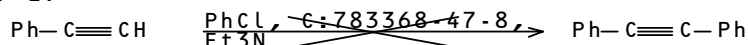
NOTE: Sonogashira Coupling, solid supported catalyst, nanopalladium catalyst was used

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

L3 130 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Copper-free monomeric and dendritic palladium catalysts for the Sonogashira reaction: Substituent effects, synthetic applications, and the recovery and re-use of the catalysts

RX(14) OF 29



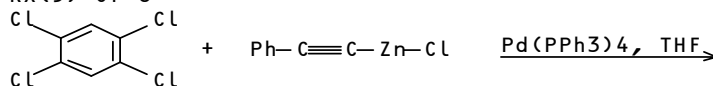
NOTE: failed reaction

進行しない反応も検索される

L3 130 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Cross-coupling of polychloroarenes with phenylboronic acid and organozinc compounds catalyzed by palladium complexes

RX(5) OF 6



SSS 検索では、作図した構造に、さらに置換基がついた化合物を含む反応もヒットする

NOTE: regioselective, in-situ generated reactant, other product(s) also detected

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

## 応用テクニック



化学反応式で検索した反応検索の結果は、さまざまな方法で絞り込むことができる。  
絞り込み検索を行うときは、近接演算子に注意する。

=> S L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)  
L4 67 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)

生成物を作図した構造検索結果に  
収率をかけあわせる場合には  
(A) 演算子を用いる\*

=> D SCAN

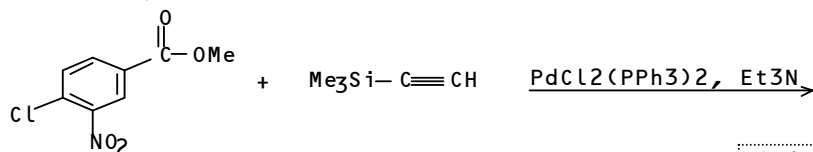
← 無料の表示形式でヒットした回答を表示して確認する

収率

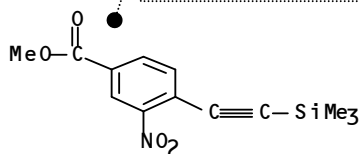
L4 67 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 6-Substituted indoles from o-halonitrobenzenes

RX(1) OF 50



収率の表記がない反応

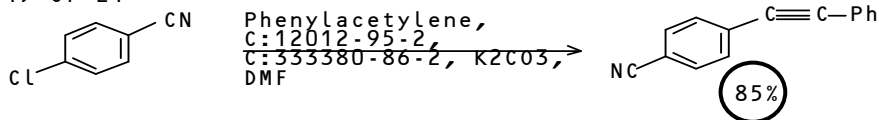


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

L4 67 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Palladium-tetraphosphine complex: an efficient catalyst for the coupling of aryl halides with alkynes

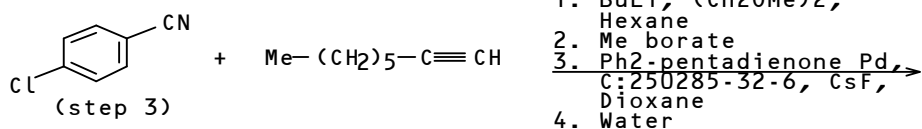
RX(4) OF 21



L4 67 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Efficient Suzuki-Miyaura coupling reactions between lithium alkynyltrimethylborates and aryl chlorides

RX(1) OF 9



NOTE: Suzuki-Miyaura cross-coupling, optimization study, optimized on catalytic system

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

\* 生成物を作図していない場合や、ほかのキーワード等で絞り込んだあとに収率をかけあわせる場合には、(L) 演算子を利用する。

## 応用テクニック



CAS 登録番号検索を併用して、回答を溶媒や触媒、試薬、反応物、生成物で限定できる。ただし、溶媒、触媒の CAS 登録番号が収録されていないレコードは除かれるので注意。

=> S L4 (L) 109-99-9/SOL  
L5 13 L4 (L) 109-99-9/SOL

THF 溶媒 (109-99-9) に限定する

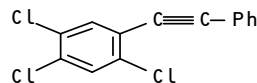
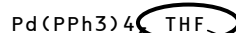
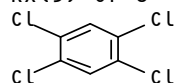
溶媒

=> D SCAN

L5 13 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Cross-coupling of polychloroarenes with phenylboronic acid and organozinc compounds catalyzed by palladium complexes

RX(5) OF 6



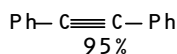
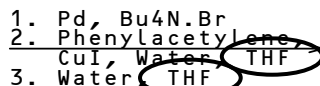
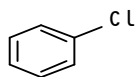
NOTE: regioselective, in-situ generated reactant, other product(s) also detected

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L5 13 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Synthesis of Surface Organopalladium Intermediates in Coupling Reactions: The Mechanistic Insight

RX(37) OF 44 - 3 STEPS



NOTE: 1) melt

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END



反応ステップ数は数値検索フィールドなので、範囲指定検索ができる。

例：二段階以下の反応ステップ数に限定 => S L1 (L) 2>=NS

=> S L5 (L) 1/NS  
L6 7 L5 (L) 1/NS

一段階反応に限定する

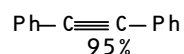
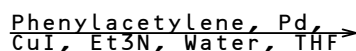
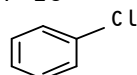
反応ステップ数

=> D SCAN

L6 7 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Layered double hydroxides supported nanopalladium catalysts for Heck-, Suzuki, Sonogashira-, and Stille-type coupling reactions of haloarenes

RX(18) OF 26



NOTE: Sonogashira Coupling, solid supported catalyst, nanopalladium catalyst was used

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D BIB ABS FHIT 1-7

← 回答全件を BIB ABS FHIT 表示形式で表示する

L6 ANSWER 1 OF 7 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
 AN 147:9651 CASREACT [Full-text](#)  
 TI A process for C-C coupling reaction of haloarenes using reusable  
 heterogeneous nanopalladium(0) catalyst  
 IN Choudary, Boyapati Manoranjan; Sateesh, Madhi; Chowdari, Naidu Sreenivasa;  
 Kantam, Mannepalli Lakshmi; Sreedhar, Bojja  
 PA Council of Scientific and Industrial Research, India  
 SO Indian Pat. Appl., 22pp. CODEN: INXXBQ

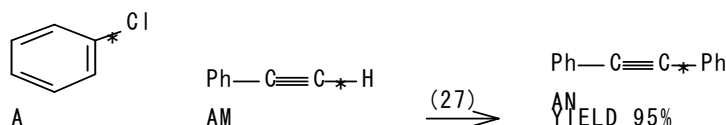
DT Patent  
 LA English

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	IN 2002DE01060	A	20050128	IN 2002-DE1060	20021022
PRAI	IN 2002-DE1060		20021022		

AB A process for C-C coupling reaction of haloarenes using ligand free reusable heterogeneous nanopalladium(0) catalyst, which comprises reacting haloarene with an organic reagent selected from olefins, arylboronic acids, phenylacetylene and tin reagent in a polar solvent in the presence of base and heterogeneous nanopalladium(0) catalyst, at thermal or microwave irradiation, at a temperature ranging between 20-150°C for a period of 0.5 to 48 h under nitrogen atmospheric, filtering the above aid reaction mixture followed by extraction and washing the resultant mass to obtain the desired C-C coupling compds. Heck coupling of aryl chlorides with olefins in the presence of nanopalladium yielded trans-stilbenes. Biaryls were obtained from the Suzuki coupling or aryl

RX(27) OF 35 A + AM ==&gt; AN



RX(27) RCT A 108-90-7, AM 536-74-3  
 RGT AO 121-44-8 Et3N  
 PRO AN **501-65-5**  
 CAT 7440-05-3D Pd, 7681-65-4 CuI  
 SOL 7732-18-5 Water, **109-99-9** THF  
 CON SUBSTAGE(1) 2 hours, room temperature  
 SUBSTAGE(2) 30 hours, 80 deg C  
 NTE Sonogashira coupling, solid-supported catalyst

L6 ANSWER 2 OF 7 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
 AN 146:361031 CASREACT [Full-text](#)  
 TI A process for the preparation of novel reusable heterogeneous  
 nanopalladium (0) catalyst useful for C-C coupling reaction of haloarenes  
 IN Sateesh, Madhi; Choudary, Boyapati Manoranjan; Kantam, Mannepalli Lakshi;  
 Sreedhar, Bojja; Chowdari, Naidu Sreenivasa  
 PA Council of Scientific and Industrial Research, India  
 SO Indian Pat. Appl., 21pp.  
 CODEN: INXXBQ

DT Patent  
 LA English

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	IN 2002DE01061	A	20050128	IN 2002-DE1061	20021022
PRAI	IN 2002-DE1061		20021022		

OS MARPAT 146:361031

AB Disclosed is a process for the preparation of a ligand free reusable heterogeneous nanopalladium (0) catalyst useful for the C-C coupling reaction

## Verification が不完全な回答

- CASREACT ファイルで構造検索を実行すると、まれに Verification が不完全な回答が含まれることがある。

```

=> $ L1 FUL          ← フルファイル検索を実行する
FULL SEARCH INITIATED 15:26:34
SCREENING COMPLETE - 10139 REACTIONS TO VERIFY FROM 2331 DOCUMENTS

100.0% DONE 10139 VERIFIED      16 HIT RXNS (    2 INCOMP)      8 DOCS
SEARCH TIME: 00.00.02
                                     ↑
                                     Verification が不完全な反応が 16 件中 2 つある
L3          8 SEA SSS FUL L1 (    16 REACTIONS)
                                     ↑ 回答の中には Verification が不完全な反応も含まれている
  
```

- Verification が不完全な反応とは、作図した反応式と一致するかどうかをシステムが判断できなかった反応である。大きく分けて以下の二種類がある。
  - ・ ファイル中のすべての反応が完全なマッピングおよび反応部位の情報を持っているとは限らない。そのため、それらの情報がそもそも反応中に存在しなかったため、最終的な適合性の確認ができなかった場合。
    - このような回答は、回答を表示した際、次のようなメッセージが表示される。

表示	内容
VERIFICATION INCOMPLETE - REACTION SITE DATA UNAVAILABLE	反応部位が照合不可
VERIFICATION INCOMPLETE - REACTION MAP DATA UNAVAILABLE	マッピングが照合不可
VERIFICATION INCOMPLETE - REACTION MAP AND SITE DATA UNAVAILABLE	反応部位およびマッピングが照合不可

- ・ 反応の確認 (VERIFICATION) 時間内に検索が終わらなかった場合。

- Verification が不完全な回答は => \$ Ln/COM または => \$ Ln/COMPLETE (Ln は構造検索結果) で除くことができる (無料)。

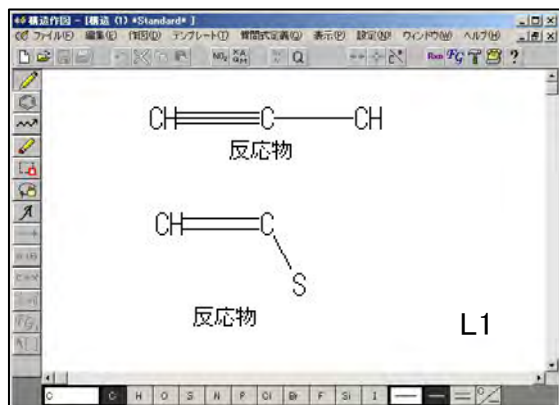
```

=> $ L3/COM          ← Verification が完全 (COMPLETE) な回答に限定
L4          7 L3/COM
  
```

## 構造検索時の注意

- CASREACT ファイルの構造検索では、複数のフラグメントに同じロールを指定して検索することができるが、同一成分中や異なる成分中という指定はできない。したがって、期待していない回答（ノイズ）が得られることがある。

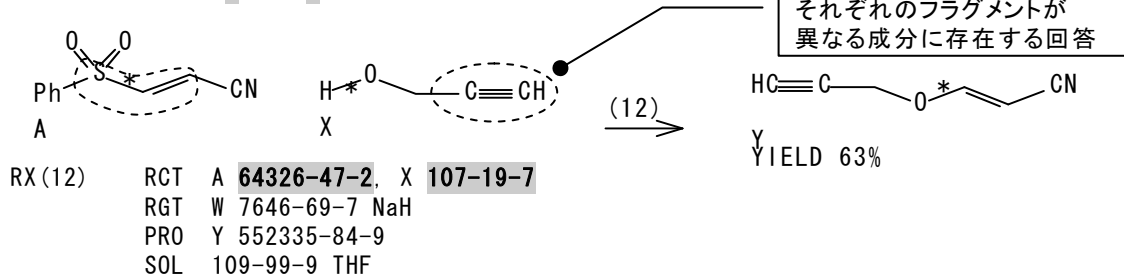
- 検索例：下記の反応質問式（L1）を検索する。



=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る  
 => S L1 ← サンプル検索をする（無料）  
 L2 3 SEA SSS SAM L1 ( 230 REACTIONS)  
 => S L1 FUL ← フルファイル検索をする  
 L3 139 SEA SSS FUL L1 ( 2150 REACTIONS)  
 => D FHIT 70 80 ← 70 番目と 80 番目の回答を FHIT 表示形式で表示する

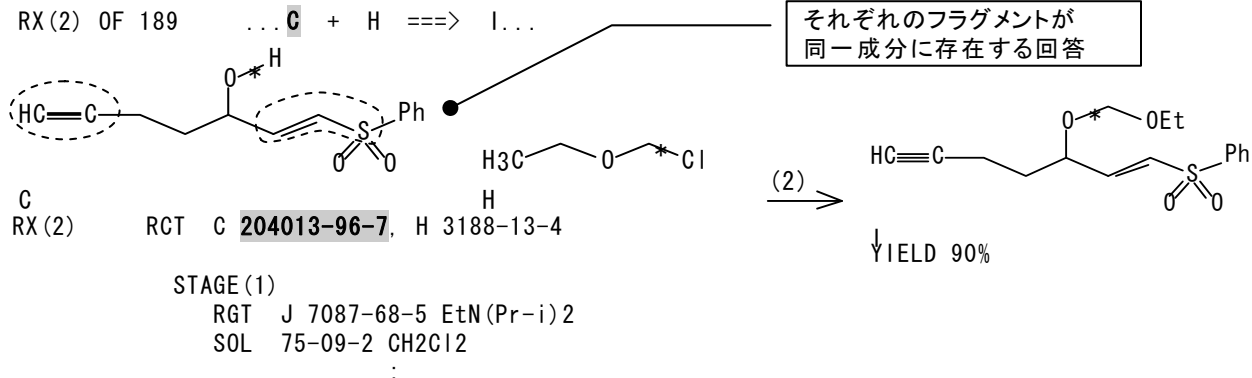
L3 ANSWER 70 OF 139 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(12) OF 16 A + X ==> Y

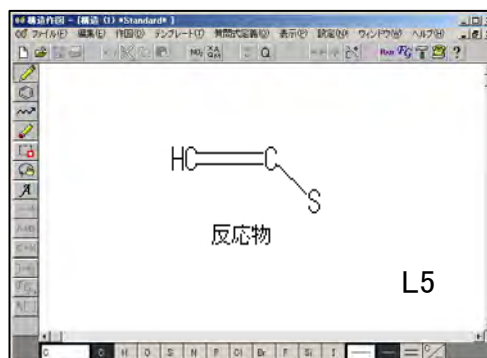
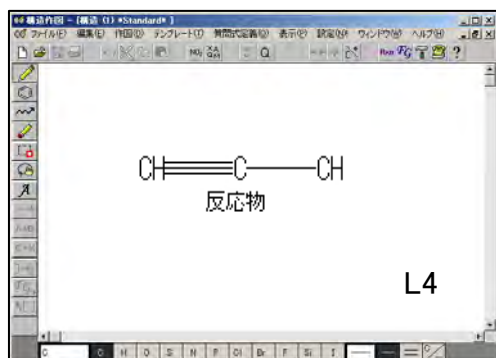


L3 ANSWER 80 OF 139 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX(2) OF 189 ... C + H ==> I...



- フラグメントごとに別々の反応質問式ファイルを作成し、AND 検索すると、フラグメント同士が重なった回答も得られる。



=&gt;

Uploading C:\Documents and Settings\...¥STN Express 8.4¥Queries¥B-3.str

L4        STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE                    ← 反応質問式を表示して確認する (無料)

L4                            STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

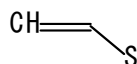
=&gt;

Uploading C:\Documents and Settings\...¥STN Express 8.4¥Queries¥B-4.str

L5        STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE                    ← 反応質問式を表示して確認する (無料)

L5                            STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L4 AND L5 SAM       ← サンプル検索する (無料)

L6                            3 SEA SSS SAM L4 AND L5 ( 230 REACTIONS)

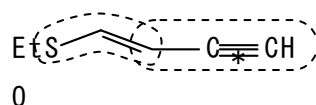
=> S L4 AND L5 FUL       ← フルファイル検索する

L7                            158 SEA SSS FUL L4 AND L5 ( 2189 REACTIONS)

=> D 122 FHIT               ← 122 番目の回答を FHIT 表示形式で表示する

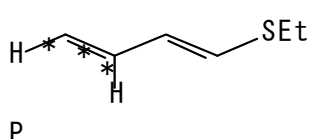
L7    ANSWER 122 OF 158   CASREACT   COPYRIGHT 2011 ACS on STN

RX (8) OF 18        0    ==&gt;    P



0

(8) →



P

フラグメント同士に重なりのある回答

RX (8)        RCT 0 **1609-42-3**  
 PRO    P 10574-85-3

## 官能基検索

- CASREACT ファイルでは、反応物、試薬、生成物中の官能基の名称を使って反応情報を検索できる。

例：アミノ基からニトロ基への反応

注) 溶媒および触媒については、官能基検索を使うことができない。

- 官能基用語は約 200 種あり、反応関与化合物の構造を解析して付与されている。

- ・ 官能基用語は、大きく分けて以下の 3 種類がある。
  - 通常の官能基用語 (NITRO, PRIMARY AMINE など)
  - 一般的なヘテロ環を表す官能基用語 (1,2-C3N2 など)
  - 複数の官能基を組み合わせた官能基クラス用語 (ALCOHOLS など)

- 官能基検索フィールド

検索フィールド	内容
/FG.RXN (Functional Group Reactant)	反応した官能基
/FG.FORM (Functional Group Formed)	生成した官能基
/FG.NON (Nonreacting Functional Group)	反応しない官能基
/FG.RCT (Reactant Functional Group)	反応物中の官能基
/FG.PRO (Product Functional Group)	生成物中の官能基
/FG.RGT (Reagent Functional Group)	試薬中の官能基
/FG (/FG.PRO, /FG.RGT, /FG.RCT)	官能基一般
/FG.YD (Yield Functional Group)	官能基-収率
NONE/FG.YDT	官能基-収率情報なし

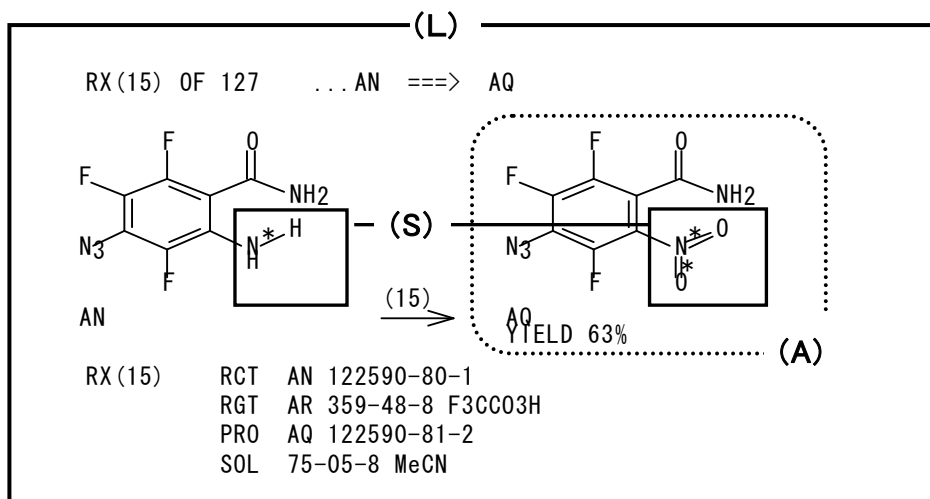
- 入力例

- ・ 第一級アミンが反応して、ニトロ基に変化する反応  
=> S PRIMARY AMINE/FG. RXN (S) NITRO/FG. FORM
- ・ ハロゲン基が反応して、第三級アルコールが生成する反応  
=> S HALIDES/FG. RXN (L) TERTIARY ALCOHOL/FG. FORM
- ・ ペルオキシ酸基を持つ試薬を用いる反応。ただし、反応物中のアジド基は変化しない反応  
=> S AZIDE/FG. NON (L) PEROXY ACID/FG. RGT
- ・ ニトロ基が生成する反応で 80 % 以上の収率または収率情報のない反応  
=> S NITRO/FG. FORM (A) (80=<FG. YD OR NONE/FG. YDT)

## 官能基検索の演算子

### ■ 官能基検索の演算子

- ・ 有効な演算子は、CAS 登録番号検索、反応検索とほぼ共通であるが、官能基検索では、更にマッピングを指定する際に (S) 演算子を利用する。
- ・ 演算子の図解



- ・ (S) 演算子 ← 官能基検索にのみ利用する演算子
  - 同一反応（一段階反応および多段階反応）中の反応物と生成物の指定した官能基が何らかの形で反応しており、少なくとも一つの原子が共通に存在すること（マッピング）を条件として検索する場合。
- ・ (L) 演算子
  - 共通の原子が存在しない官能基変換反応の場合。
  - 反応しない官能基の存在を指定する場合。
  - 試薬中の官能基と反応物や生成物を組み合わせて検索する場合。
  - 反応ステップ数 (/NS), CAS 登録番号検索と組み合わせる場合。
- ・ (A) 演算子
  - 生成物中の官能基 (/FG.FORM または /FG.PRO) とその収率を組み合わせる場合。
- ・ AND 演算子
  - 書誌情報、抄録の情報と組み合わせて検索する場合。

## 官能基検索の料金

### ■ 官能基検索料 (料金は 2011 年 3 月現在)

- ・ 官能基検索料は, 1 検索「語」ではなく, 1「検索 (SEARCH)」あたりに対して課金される.

- 複数の官能基を利用して検索する場合は, なるべく一つの質問式で指定する.

=> S PRIMARY AMINE/FG. RXN (S) NITRO/FG. FORM ← 1 回分の官能基検索料が課金される

=> S PRIMARY AMINE/FG. RXN

=> S NITRO/FG. FORM

=> S L1 (S) L2

} 官能基検索料が二回分課金される

- ・ 収率に関するフィールド (/FG.YD, /FG.YDT) については, 官能基検索料ではなく通常の検索語料が課金される.

### ■ 経済的な使い方

- ・ 検索結果が 0 件でも官能基検索料は課金される. STNindex を利用すれば, 接続時間料金のみで, あらかじめ回答件数を確認できる.

=> IND CASREACT LGASREACT ← STNindex に入るには 2 つ以上のファイルを指定する

=> S PRIMARY AMINE/FG. RXN (S) NITRO/FG. FORM ← ヒット件数を確認する (無料)  
621 FILE CASREACT ← CASREACT ファイルの回答件数

1 FILES HAVE ONE OR MORE ANSWERS, 2 FILES SEARCHED IN STNINDEX

L1 QUE PRIMARY AMINE/FG. RXN (S) NITRO/FG. FORM

=> FILE CASREACT

=> S L1 ← L 番号で検索する  
L2 447 PRIMARY AMINE/FG. RXN (S) NITRO/FG. FORM

### ■ オンラインでの官能基用語の調べ方

- ・ 官能基名にどのようなものがあるかを確認するためには, 各々の検索フィールドで EXPAND する. ただし, 官能基一般の /FG フィールドでは EXPAND できない.

=> E ACETAL/FG. RCT 5 ← 反応物中の官能基フィールド

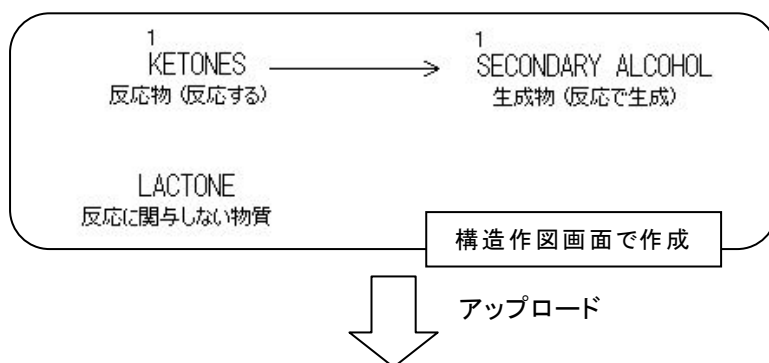
E1	1010	1, 4-C4S2/FG. RCT
E2	3234	1, 4-C5N2/FG. RCT
E3	53320	--> ACETAL/FG. RCT
E4	129066	ACETYL/FG. RCT
E5	77870	ACID HALIDE/FG. RCT

- ・ 官能基用語の一覧は => HELP FGA, 官能基クラス用語の一覧と定義は => HELP FGC と入力すると表示される.

## 検索例 - 官能基検索

■ 構造作図画面から官能基検索の質問式を作成することができる。

- ・ フィールドコードや演算子を調べずに、オフラインで簡単に作成できる。
- ・ ロールやマッピングを指定すると、適切なフィールドコードや近接演算子を使った質問式が自動作成される。




=> que LACTONE/fg.non (L) (KETONES/fg.rxn (S) SECONDARY ALCOHOL/fg.form)

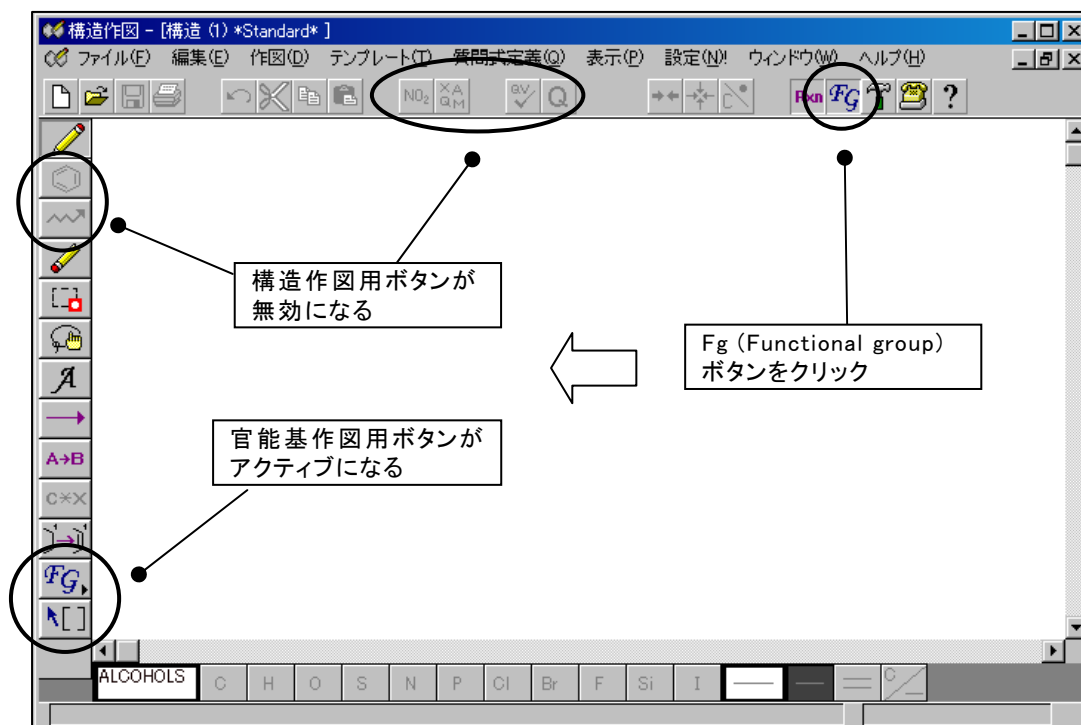
L1 QUE LACTONE/FG.NON (L) (KETONES/FG.RXN (S) SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM)


↑ 質問式が自動作成される

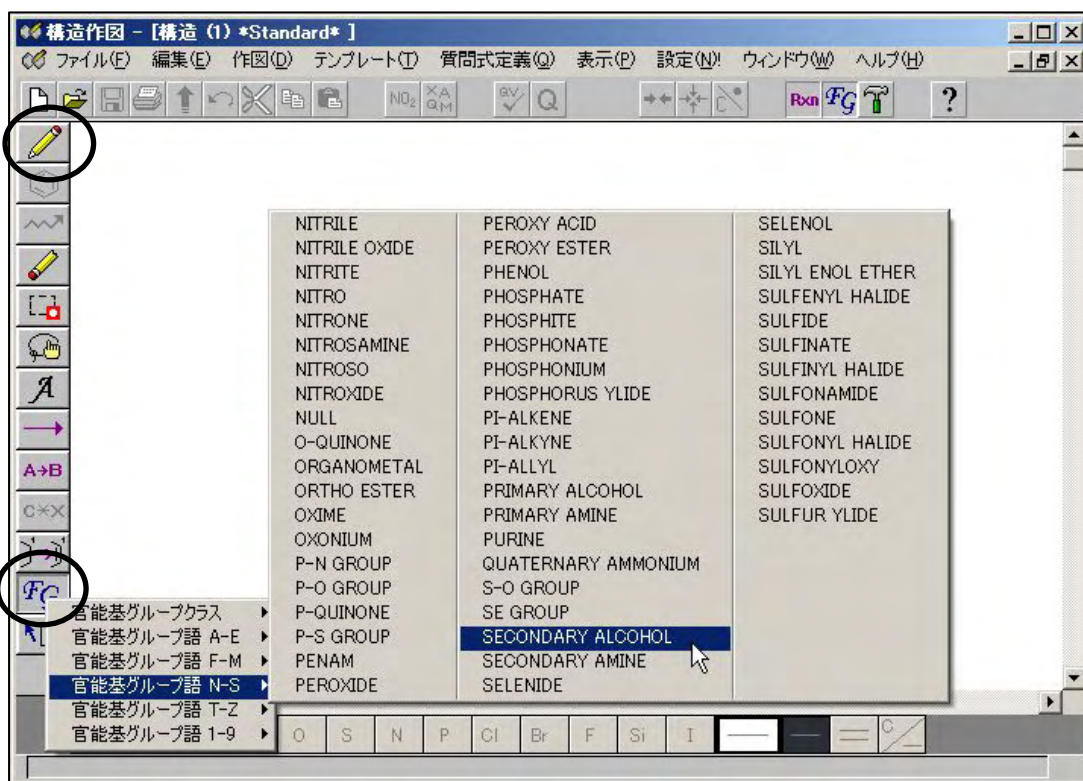
(注) 収率条件 (/FG.YD, NONE/FG.YDT) による限定は作図できない。

■ 検索例 : ラクトン存在下、ケトンを第二級アルコールへ還元する反応を検索する。

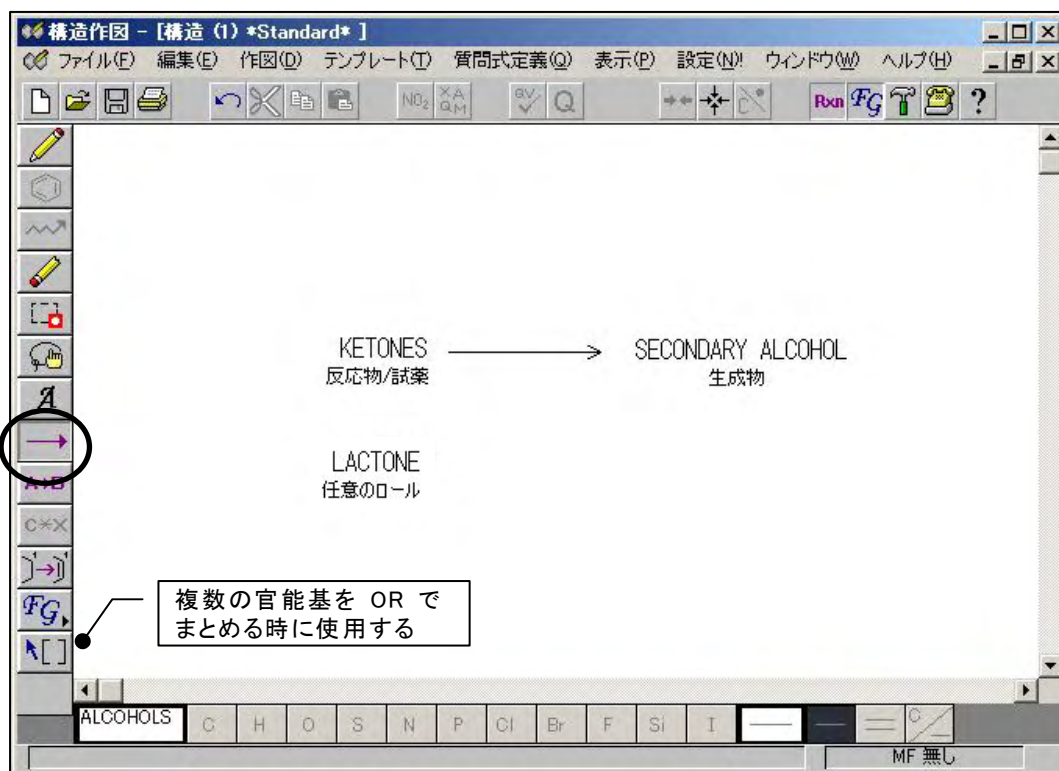
- ①  をクリックして、官能基検索式作成モードに切り替える。



- ②  ボタンを押して表示されるグループ名にポインタを合わせると、官能基名のリストが表示される。官能基名を選択したら、ペンシルツールで作図する。



- ③ 必要な官能基をすべて入力して、矢印を作図する（マウスをドラッグする向きにしたがってロールが自動変更される）。



- ④ ロールの変更が必要な官能基にそれぞれロールを指定する。官能基グループのロールでは、その官能基が反応に関与するかどうかの指定もできる。

The screenshot shows the '構造作図 - [構造 (1) \*Standard\*]' window. The main workspace displays a chemical reaction: KETONES (反応物 (反応する)) → SECONDARY ALCOHOL (生成物 (反応で生成)). Below it, LACTONE (反応に関与しない物質) is shown. The 'A→B' button in the left toolbar is circled. A dialog box titled '官能基グループのロール選択' is open, listing various roles. The '反応に関与せず' option is selected and circled.

ロール	説明
<input type="radio"/> 反応物	グループは反応物中に存在
<input type="radio"/> 反応物 (反応する)	グループは反応物中に存在し、反応に関与
<input type="radio"/> 試薬	グループは試薬中に存在
<input type="radio"/> 反応物/試薬	グループは反応物または試薬中に存在
<input type="radio"/> 生成物	グループは生成物中に存在
<input type="radio"/> 生成物 (反応で生成)	グループは生成物中に存在し、反応で生成
<input type="radio"/> 任意のロール	グループは反応物、試薬、生成物のどれかに存在
<input checked="" type="radio"/> 反応に関与せず	グループは反応に関与しない

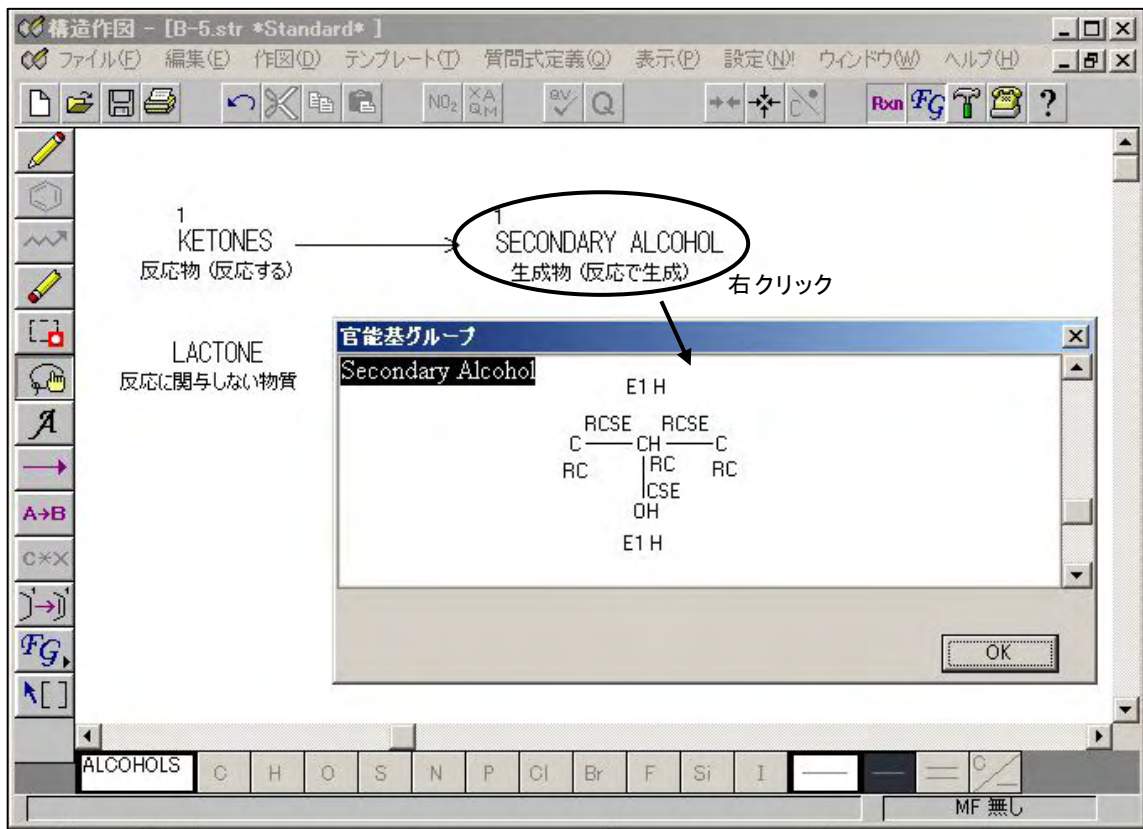
- ⑤ マッピングツールをクリックしてから対応する官能基名をクリックして、マッピングを指定する。

The screenshot shows the '構造作図 - [構造 (1) \*Standard\*]' window. A dialog box titled 'マップ番号 1' is open, showing '次へ', '前へ', and 'マップを終了' buttons. The main workspace displays the same chemical reaction as in the previous screenshot. The 'A→B' button in the left toolbar is highlighted. The 'KETONES' and 'SECONDARY ALCOHOL' labels are highlighted in red, and the number '1' is placed above each label, indicating the mapping.

- ⑥ 作成が完了したら、ファイルを保存する。

⑦ 質問式の確認

- ・ 入力した官能基名を右ボタンクリックすると、対応する構造の定義を確認できる。



- ・ 質問式を保存してから「質問式定義 → STN の官能基コマンドを見る」を実行すると、アップロードされる質問式の確認ができる。



## ⑧ STN に接続して CASREACT ファイルに入り、保存した質問式をアップロードする。

The screenshot shows a terminal window titled 'STN オンライン結果 - [Telnet-RSA (Secure Session)]'. The terminal output includes the following text:

```

=> FILE CASREACT
COST IN JAPANESE YEN

FULL ESTIMATED COST

FILE 'CASREACT' ENTERED AT 14:40:00 ON 03
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR CUSTOM
COPYRIGHT (C) 2011 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Copyright of the articles to which records
held by the publishers listed in the PUBLI
for records published or updated in Chemi
26, 1996), unless otherwise indicated in t

FILE CONTENT:1840 - 30 Jan 2011 VOL 154 IS
New CAS Information Use Policies, enter HE

CASREACT now has more than 22.7 million s
reactions.

CASREACT contains reactions from CAS and f
(1974-1999) provided by InfoChem; INPI dat
Biotransformations database compiled unde
Professor Dr. Klaus Kieslich; organic reac
1996-2006 John Wiley & Sons, Ltd., John W
Organic Reactions Inc., and Organic Synthe
license. All Rights Reserved.

This file contains CAS Registry Numbers for easy and accurate substance

```

The file upload dialog box shows the file 'B-5.str' selected in the 'Files' list. The 'File name' field contains 'B-5.str' and the 'File type' is set to '構造質問式ファイル(\*.str)'. The 'Open' button is highlighted with a red circle.

```

=> que LACTONE/fg.non (L) (KETONES/fg.rxn (S) SECONDARY ALCOHOL/fg.form)
      ↑ 自動実行される
L1  QUE LACTONE/FG.NON (L) (KETONES/FG.RXN (S) SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM)

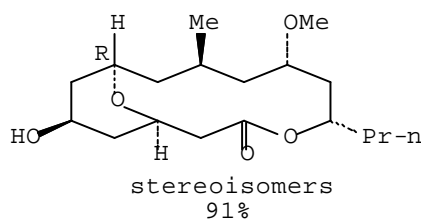
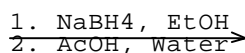
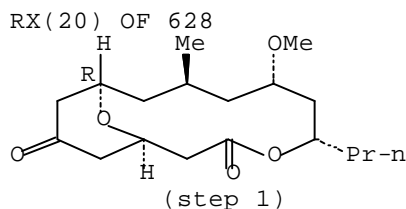
=> S L1                                ← L 番号で検索する
L2  1332 LACTONE/FG.NON (L) (KETONES/FG.RXN (S) SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM)

=> S L2 (L) 1/NS                        ← 一段階反応に限定する
L3  1229 L2 (L) 1/NS

=> D SCAN                               ← SCAN 表示形式で表示する (無料)
L3  1229 ANSWERS  CASREACT  COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1  Total Synthesis of the Antiproliferative Macrolide (+)-Neopeltolide

```



NOTE: key intermediate, stereoselective

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

## 応用テクニック



官能基検索の結果も様々な情報で絞り込むことができる。

例：酵素を用いた立体選択的な反応（CAS 登録番号検索，構造検索の結果にも利用可）

=> S L3 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE ●  
L4 535 L3 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE

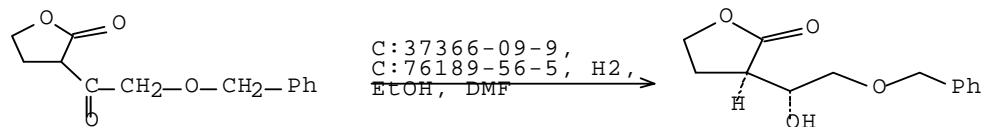
立体選択性に関する記述のある反応に限定

=> D SCAN

L4 535 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Production method of hexahydrofurofuranol derivative, intermediate therefor and production method thereof

RX(25) OF 185



NOTE: stereoselective

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L4 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE ●  
L5 30 L4 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE

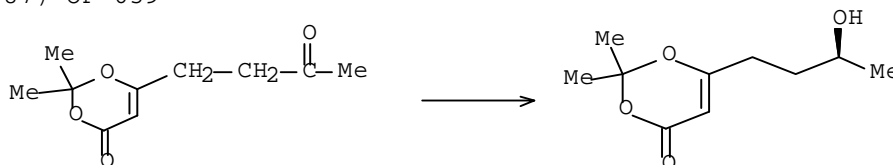
酵素反応に限定

=> D SCAN

L5 30 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Enantioselective reduction of ketones

RX(87) OF 659



NOTE: stereoselective, biotransformation, Saccharomyces cerevisiae whole cells used, Baker's yeast, Reduction, Selective

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

(注) ノート (/NTE) フィールドには，反応条件，反応タイプ，安全性に関する情報などの記述がある。

- ・ 反応条件の例 \*      NTE Temp. -35.degree      NTE high pressure
- ・ 反応タイプの例      NTE photochem.      NTE biotransformation  
                                 NTE enzymic
- ・ 安全性情報の例      NTE safety - danger of explosion  
                                 NTE health hazard

ノートフィールド中の用語は，著者の記述に基づき収録されているため，網羅性はない。また，用語が統制されていないため，使用する場合はトランケーションや同義語を利用して，幅広く検索するとよい。場合によっては基本索引も併用するとよい。

\* 2003 年以降，温度などの反応条件は CON フィールドに収録されるようになったため検索できない。

## 応用テクニック



収率や CAS 登録番号, 書誌情報などでも絞り込むことができる.

例 : 90% 以上あるいは収率の記載のない反応で特許に記載のある反応

=> S L3 (L) (90<=FG.YD OR NONE/FG.YDT) ●  
L6 826 L3 (L) (90<=FG.YD OR NONE/FG.

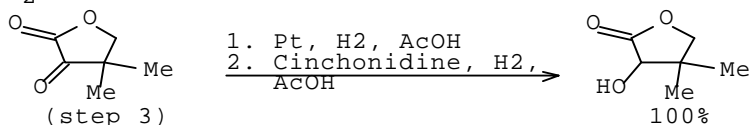
収率と /FG.FORM を直接リンクする際は (A) 演算子, それ以外は (L) 演算子を用いる. (注 : 官能基検索では (S) 演算子と (A) 演算子の併用は不可. 自動的に AND 演算子に置き換えて検索される)

=> D SCAN

L6 826 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

TI Shape-Selective Enantioselective Hydrogenation on Pt Nanoparticles

RX(2) OF 2



NOTE: stereoselective, solid-supported catalyst, 61% ee, silica-supported platinum used as catalyst, reaction carried out in absence of chiral modifier decreased conversion, stainless steel reactor used, increased pressure and decreased temperature decreased reaction time

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L6 AND P/DT ●  
L7 146 L6 AND P/DT

資料種類などの CA の書誌情報と  
かけ合わせる場合は AND 演算子

=> D 2 BIB FHIT ← 2 番目の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する

L7 ANSWER 2 OF 146 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

AN 153:456364 CASREACT [Full-text](#)

TI Improved process for the preparation of prostaglandins and analogues thereof

IN Karusala, Nageswara Rao; Chavhan, Bhausahab; Potla, Murali Krishna;

Jebbaraj, Rathinapandian; Gosula, Veera Venkata Satya Surya Appala

Narasimha Tataj; Gosula, Shiva Kumar; Burma, Prabhakara Rao; Datta, Debashish

PA Matrix Laboratories Ltd., India

SO PCT Int. Appl., 29pp.

CODEN: PIXXD2

DT **Patent**

LA English

FAN. CNT 1

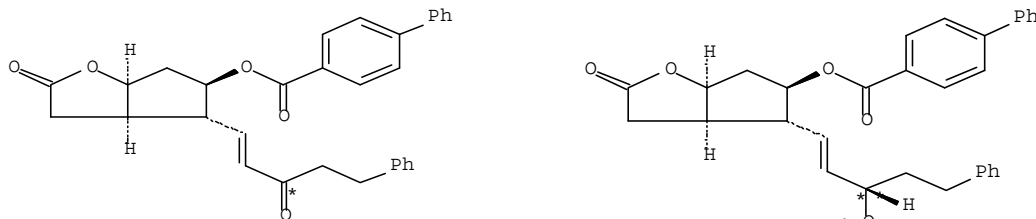
PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
WO 2010109476	A2	20100930	WO 2010-IN26	20100118

PI WO 2010109476 A2 20100930 WO 2010-IN26 20100118

W: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ,

PRAI IN 2009-CH121 20090119

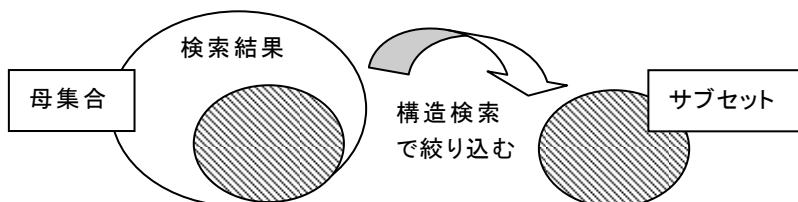
RX(5) OF 171 ... 0 ==> S...



RX(5) RCT 0 **41639-72-9**

## 参考：サブセット検索

- サブセット検索は、回答集合の L 番号の中をさらに構造検索する機能である。



- ・ 構造・官能基検索結果に対するサブセット検索は非常に安い料金が適用されるため、経済的に構造検索することができる。

- CASREACT ファイルのサブセット料金 (2011 年 3 月現在)

項目	料金
構造検索料金	16,000 円
構造検索結果に対するサブセット検索	2,010 円
官能基検索の結果に対するサブセット検索	2,010 円
テキスト検索の結果に対するサブセット検索	16,000 円



### 効果的な利用法

- ・ 構造検索で得られた回答が多く、さらに反応質問式で限定して検索する場合。
- ・ 構造検索の結果、INCOMPLETE が表示された場合。
- ・ 官能基検索の結果を、特定の構造を含む反応に限定する場合。

### ■ 入力方法

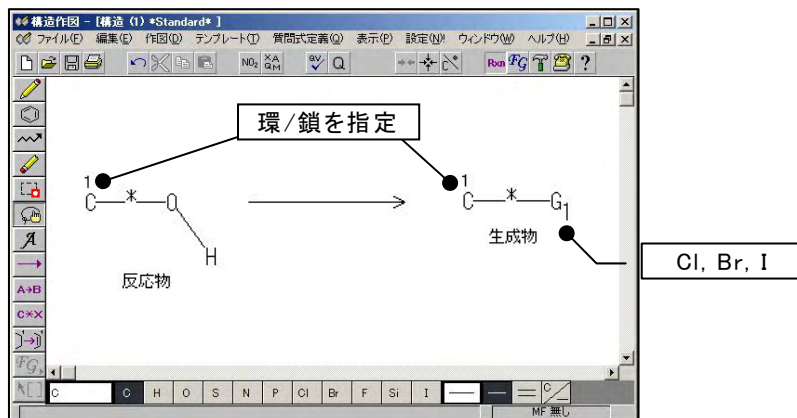
=> S L# SSS SUB=L@ SAM

L# : 反応質問式  
 SSS : 検索のタイプ  
 SUB=L@ : 母集合の指定  
 SAM : 検索範囲の指定

検索対象範囲 (母集合) を SUB=L@ で指定する。  
 これを入力しないと、全ファイル対象の検索になる

- ・ サブセット検索に限り、サンプル検索でも検索の範囲 (SAM) を必ず入力する。
- ・ 構造検索の結果をサブセット検索する場合は、必ずフルファイル検索の L 番号の結果を母集合に指定する。

- 検索例：下記の反応を検索する (INCOMPLETE の回避方法として利用).



=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルへ入る

=>

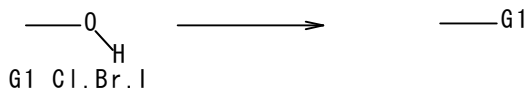
Uploading C:\Documents and Settings\¥...¥STN Express 8.4¥Queries¥B-6.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1

← 反応質問式を表示して確認する (無料)

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

← サンプル検索を行う (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*INCOMPLETE\*\***  
 BATCH **\*\*INCOMPLETE\*\***  
 PROJECTED VERIFICATIONS: 4127808 TO 4178552  
 PROJECTED ANSWERS: 39327 TO 44683

● INCOMPLETE のため  
フルファイル検索できない

L2 27 SEA SSS SAM L1 ( 857 REACTIONS)

=> S ALCOHOLS/FG.RXN (L) HALIDES/FG.FORM ← 官能基検索を行う  
 L3 53289 ALCOHOLS/FG.RXN (L) HALIDES/FG.FORM

官能基検索の結果の  
サブセット検索を行うと  
COMPLETE になった。

=> S L1 SSS SUB=L3 SAM

← サブセット検索のサンプル検索を行う (無料)

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): ONLINE **\*\*COMPLETE\*\***  
 PROJECTED VERIFICATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 371842 TO 388278  
 PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 21007 TO 25019

L4 50 SEA SUB=L3 SSS SAM L1 ( 962 REACTIONS)

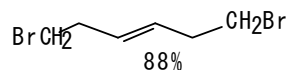
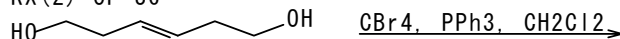
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する (無料)

L4 50 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Synthesis and Topological Conversion of an 8-shaped Poly(THF) Having a  
Metathesis-Cleavable Unit at the Focal Position

RX(2) OF 36

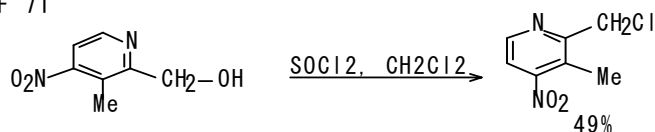


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L4 50 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Synthetic studies connected with the preparation of H<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPase inhibitors rabeprazole and lansoprazole

RX(7) OF 71



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L1 SSS SUB=L3 FUL ← サブセット検索のフルファイル検索を行う  
 100.0% DONE 478047 VERIFIED 97965 HIT RXNS ( 476 INCOMP) 23488 DOCS  
 SEARCH TIME: 00.00.19  
 L5 234885 SEA SUB=L3 SSS FUL L1 ( 97965 REACTIONS)

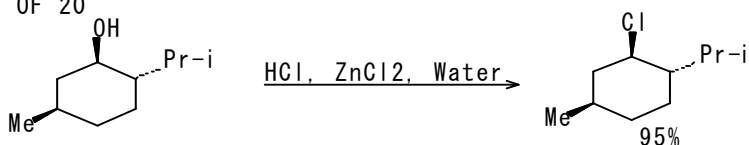
=> S L5/COM ← Verification が完了した回答に限定する (無料)  
 L6 23256 L5/COM

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する (無料)

L6 23256 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Process for the preparation of flavoring agent menthanecarboxamides with high cooling effect

RX(1) OF 20

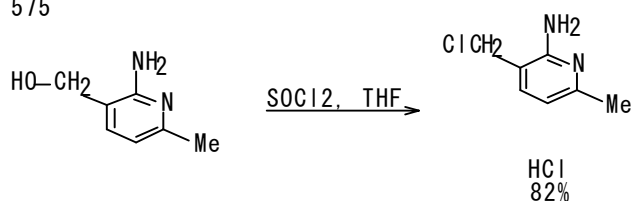


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L6 23256 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Synthesis, in vitro and in vivo activity of thiamine antagonist transketolase inhibitors

RX(6) OF 575

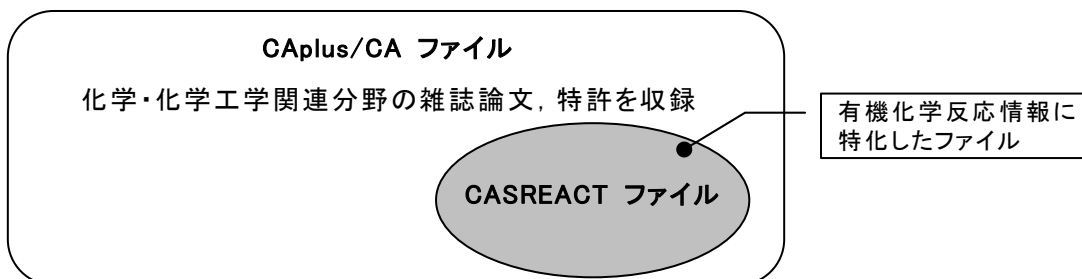


NOTE: exothermic reaction, slow addn. of alc.

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

## 参考 : CAplus/CA ファイルの反応情報

### ■ CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイルの関係 (文献情報の比較)



### ■ CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較 (2011 年 3 月現在)

項目	CASREACT	CAplus/CA
収録年	1840 年以降	1808 年以降 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているのは 1907 年以降)
収録数	67 万件 (レコード数) 4,300 万件 (一段階・多段階反応数)	510 万件 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているレコード数)
対象となる文献・特許	狭い (CA に収録されている一部のレコード)	CA 収録対象の化学・化学関連分野
索引方針	合成的に意義のある反応を選択 * 以下の収録源からはすべての反応を収録 ・ 1985 - 1990 年までの反応情報 ・ CAS 以外のデータベース由来の情報  単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない。	主題に関連した, 重要あるいは新規性/進歩性のある物質  (生成物については, 基本的に物性データが必要. ただし, 一部の主要国特許中の生成物については物性データは不要.)
特徴	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 反応に関与するすべての物質情報 (反応物, 生成物, 試薬, 溶媒, 触媒) を収録.</li> <li>・ 収率も原文に記載があれば収録.</li> <li>・ 上記の情報を利用した, 精密な反応検索が可能.</li> <li>・ ポリマーの重合反応, 工業的合成法はあまり収録されていない.</li> <li>・ 基本的な合成法は最近では収録対象外. (1991 年以降, CAS は合成的に意義のある反応のみを選択して収録.)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 幅広く合成文献を検索できる.</li> <li>・ 昔からよく利用されている基本的な合成法も調べることができる.</li> <li>・ CAS ロールを用いれば, ある程度の反応検索が可能.</li> <li>・ 著者が強調していない限り, 試薬, 溶媒, 触媒は索引されない.</li> <li>・ 収率情報は収録されていない.</li> </ul>



CASREACT ファイルは, CAplus/CA ファイルに比べて対象となる文献, 特許は少ないが, CAplus ファイルとは索引方針が異なるので, CASREACT ファイルにのみ収録されている反応情報がある.

- CAplus/CA ファイルでは、CASREACT ファイルの収録対象には含まれていない年代や分野の文献情報も含めて幅広く検索できる。
- 化学物質は CAS 登録番号で索引 (IT) フィールドに索引されているため、生成物や反応物を指定した検索を実行するには、REGISTRY ファイルで物質を検索した回答セットの L 番号に /P や CAS ロールをつけて検索する (REGISTRY ファイルの回答セットは、構造検索の結果でも辞書検索の結果でもどちらでもよい)。
- CAplus/CA ファイルで検索する場合、反応物と生成物は AND 演算で組み合わせる。

=> S 反応物の L 番号/RCT AND 生成物の L 番号/P

\* L 番号は REGISTRY ファイルの回答セット

- ・ ただし、反応ごとに索引されていないため、回答にノイズが含まれる場合がある。

- 反応文献検索に用いる主な CAS ロール

ロール	内容	備考	
/RACT	反応物または試薬	/RCT, /RGT を含む上位のスーパーロール	
	/RCT	反応物 (Reactant)	1967 年以降のレコードに付与
	/RGT	試薬 (Reagent)	2002 年以降のレコードに付与
/PREP	生成物 (Product)	CAS 登録番号に対する接尾辞 P と対応するスーパーロール (以下の /BMF ~ /PNU を含む) 1907 年以降のレコードに付与	
	/BMF	生化学的工業生産	1967 年以降のレコードに付与
	/BPN	生化学的合成	
	/BYP	副生成物 (By-product)	
	/CPN	コンビナトリアル・ケミストリーによる合成	2002 年以降のレコードに付与
	/IMF	化学的工業生産	1967 年以降のレコードに付与
	/PUR	精製	
	/SPN	化学合成	
	/PNU	上記以外の製造	
/CAT	触媒 (Catalyst)	1967 年以降のレコードに付与	



CAplus/CA ファイルで CAS 登録番号に CAS ロールを付けて検索すると、CAS 登録番号に対しても検索語料が課金される。REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索の方が、経済的に検索できる (料金は 2011 年 3 月現在)。

=> S 121-73-3/RCT AND 108-42-9/PREP (291 円 × 4 語分 = 1,164 円)

■ 検索例 : 3-クロロニトロベンゼン (121-73-3) から 3-クロロアニリン (108-42-9) を得る反応.

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る  
=> S 121-73-3 ← 反応物の CAS 登録番号を検索する (無料)  
L1 1 121-73-3  
(121-73-3/RN)  
=> S 108-42-9 ← 生成物の CAS 登録番号を検索する (無料)  
L2 1 108-42-9  
(108-42-9/RN)

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る  
=> S L1/RCT AND L2/P ← REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号に  
1846 L1 CAS ロールを指定して検索する  
3544025 RCT/RL  
663 L1/RCT  
(L1 (L) RCT/RL)  
383 L2/P  
L3 178 L1/RCT AND L2/P

CAS ロールには 291 円の検索語料が課金される。  
(2011 年 3 月現在)  
REGISTRY ファイルの L 番号/P の検索は無料。

=> D 2 BIB HITIND ← 2 番目の回答を BIB HITIND 表示形式で表示する

L3 ANSWER 2 OF 178 CAPLUS COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
AN 2010:1076997 CAPLUS [Full-text](#)  
DN 153:385795  
TI Method for synthesis of halogenated aromatic amine via highly selective  
liquid phase hydrogenation under solvent-free conditions  
TIJP 無溶媒条件の下の非常に選択的な液相水素化を経由したハロゲン化芳香族アミンの  
合成のための方法 [機械翻訳]  
IN Li, Xiaonian; Lu, Chunshan; Lv, Jinghui; Yuan, Junfeng; Ma, Lei; Zhang,  
Qunfeng; Shi, Yumei; Xu, Xiaoliang  
PA Zhejiang University of Technology, Peop. Rep. China  
SO Faming Zhuanli Shenqing, 13pp.  
CODEN: CNXXEV  
DT Patent  
LA Chinese  
FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 101811973	A	20100825	CN 2010-10153731	20100423
PRA	CN 2010-10153731		20100423		
OS	CASREACT 153:385795			CASREACT ファイルにも 収録されている文献	
IPC	C07C0209-36 [I, A]; C07C0209-00 [I, C*]; B01J0023-44 [I, A]				
IPCR	C07C0209-00 [I, C]; C07C0209-36 [I, A]; B01J0023-44 [I, C]; B01J0023-44 [I, A]; C07C0211-00 [I, C]; C07C0211-52 [I, A]				
CC	45-4 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)				
IT	83-42-1, 6-Chloro-2-nitrotoluene 88-73-3, o-Chloronitrobenzene 89-61-2, 2,5-Dichloronitrobenzene 99-54-7, 3,4-Dichloronitrobenzene 100-00-5, p-Chloronitrobenzene 121-73-3, m-Chloronitrobenzene 315-14-0, 2,4,6-Trifluoronitrobenzene 350-46-9, p-Fluoronitrobenzene				

RL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)  
(method for synthesis of halogenated aromatic amine via highly selective  
liquid phase hydrogenation under solvent-free conditions)  
IT 95-51-2P 95-76-1P 95-82-9P 106-47-8P, preparation  
**108-42-9P** 348-54-9P 363-81-5P 367-25-9P 367-30-6P  
371-40-4P 372-19-0P 626-43-7P 3862-73-5P 4519-40-8P 5509-65-9P  
163733-96-8P

RL: SP...  
(m... active  
li...  
CAplus/CA ファイルでの合成文献検索の詳細は、下記の資料を参照。  
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-synth.pdf>

## まとめ

- CASREACT ファイルでは反応物, 生成物, 試薬などを指定した検索ができる。

	構造検索 <sup>*1</sup>	CAS 登録番号	REGISTRY からの クロスオーバー検索	官能基検索 <sup>*2</sup>
反応物	○	○	○	○
生成物	○	○	○	○
試薬	○	○	○	○
触媒	×	△ <sup>*3</sup>	△ <sup>*3</sup>	×
溶媒	×	△ <sup>*3</sup>	△ <sup>*3</sup>	×

\*1 反応物, 生成物, 試薬を一つの構造質問式で作図できる。

\*2 反応物, 試薬, 生成物中の官能基名による検索。

\*3 遡及追加されたレコードの一部は, 触媒と溶媒の CAS 登録番号の収録が不完全であるため, これらの情報を指定して検索すると, ヒットしない場合がある。

- CASREACT ファイルで利用できる検索

		検索フィールドなど	内容
文献情報		CA ファイルの全フィールド (引用情報と CAS 登録番号, CAS ロール, /IPC, 対応特許情報は除く)	
		/BI (デフォルト)	基本索引 (反応要約中の CAS 登録番号, 標題, 抄録, 補足語, 索引語, 反応情報中の単語)
反応情報	CAS 登録番号検索	/NS /NTE /YD NONE/YDT	反応のステップ数 反応注記 収率 収率データなし
		/RCT /RGT /RRT /PRO /NPRO /CAT /SOL	反応物 試薬 反応物または試薬 (/RCT, RGT) 生成物 生成物以外の物質 (/RCT, /RGT, /SOL, /CAT) 触媒 溶媒
	構造検索	ロール	反応物 試薬 生成物 反応物/試薬 任意のロール (ロール指定せず)
		反応部位	結合が完全に変化 結合が部分的に変化 結合が完全または部分的に変化 結合は変化しない 反応部位は特に指定しない
		マッピング	反応物と生成物中の対応する原子の指定
官能基検索	/FG.RXN /FG.FORM /FG.NON /FG.RCT /FG.PRO /FG.RGT /FG /FG.YD NONE/FG.YDT	反応した官能基 生成した官能基 反応しない官能基 反応物中の官能基 生成物中の官能基 試薬中の官能基 官能基一般 (/FG.PRO, /FG.RGT, /FG.RCT) 官能基-収率 官能基-収率データなし	

## *C ReaxysFile* ファイル

ReaxysFile ファイルでの反応情報の検索についてご紹介します。



## 概要

- ReaxysFile ファイルは、有機化学分野における主要な化学構造、ファクト（物性）情報、反応情報を収録するデータベースである。

- データベース製作者：Elsevier Information Systems GmbH

### ■ 収録源

収録年代	物質数	収録情報	出典情報	収録源
1771-1959	約 110 万件以上	Friedrich Beilstein 発行の Handbook of Organic Chemistry 主編, 第 I-IV 増補編に対応.	Handbook Data	雑誌 特許* 単行本
1960-1979	約 300 万件以上	融点, 沸点, 密度, 屈折率, 天然物からの単離, 化学的誘導体のデータを収録. その他の物理的・化学的性質は原文献への参照情報を収録.	原文献の情報	雑誌 特許*
1980-	約 510 万件以上	すべてのフィールドにデータと出典情報を収録. 薬理的・環境学的物性データも合わせて収録.	原文献の情報	雑誌

\* 特許の収録は系統的ではない。

- 更新頻度：年 4 回 リロード（アラート不可）

### ■ 収録対象化合物：有機化合物および有機金属化合物

- ・ 構造既知化合物
- ・ 化学的または物理学的データの報告されている化合物
- ・ 炭素と金属原子が  $\sigma$  結合で結合している有機金属化合物
- ・ 生体分子（炭水化物，酵素，ホルモンなど），混合物，ポリマー
  - 多成分物質，異性体，生体分子，混合物，ポリマーの登録（2000 年以降）については，APPENDIX 参照。

### ■ 未収録の炭素含有化合物

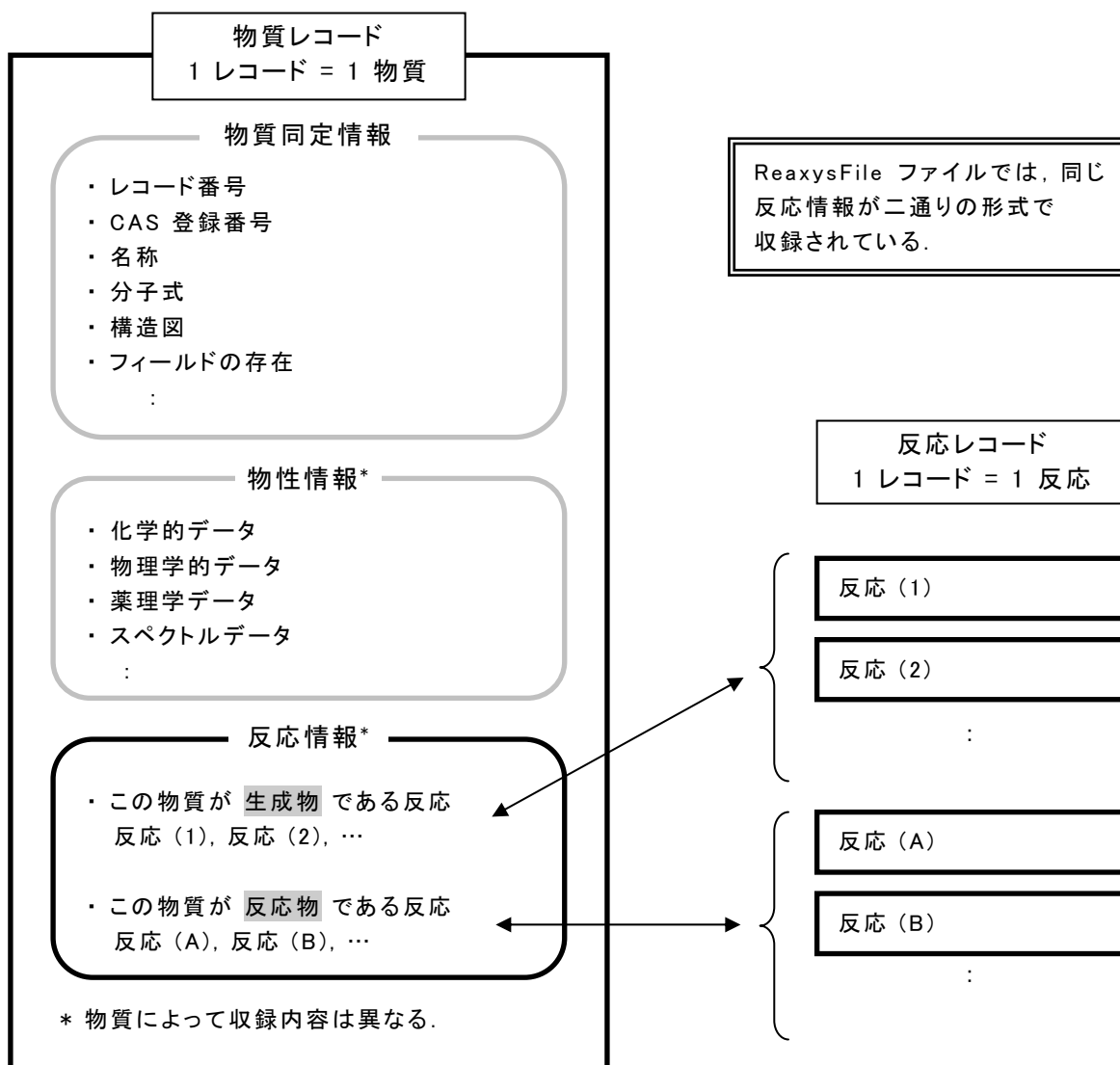
- ・ CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 炭酸塩
- ・  $\pi$  結合で配位している有機金属化合物（不飽和結合で配位している有機化合物と遷移金属との錯体）

## レコード構成

- ReaxysFile ファイルには、以下の 2 種類のレコードが収録されている。

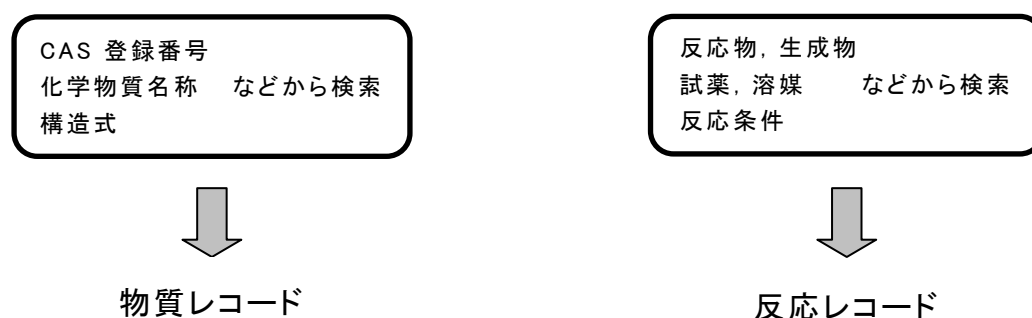
物質レコード	1 化学物質が 1 レコード
	化学物質の同定情報、物性（ファクト）情報、反応情報が収録されている。
反応レコード	1 反応が 1 レコード
	物質レコードに収録されている反応が、1 反応 = 1 レコードとして収録されている。

- ReaxysFile ファイルのレコード構成

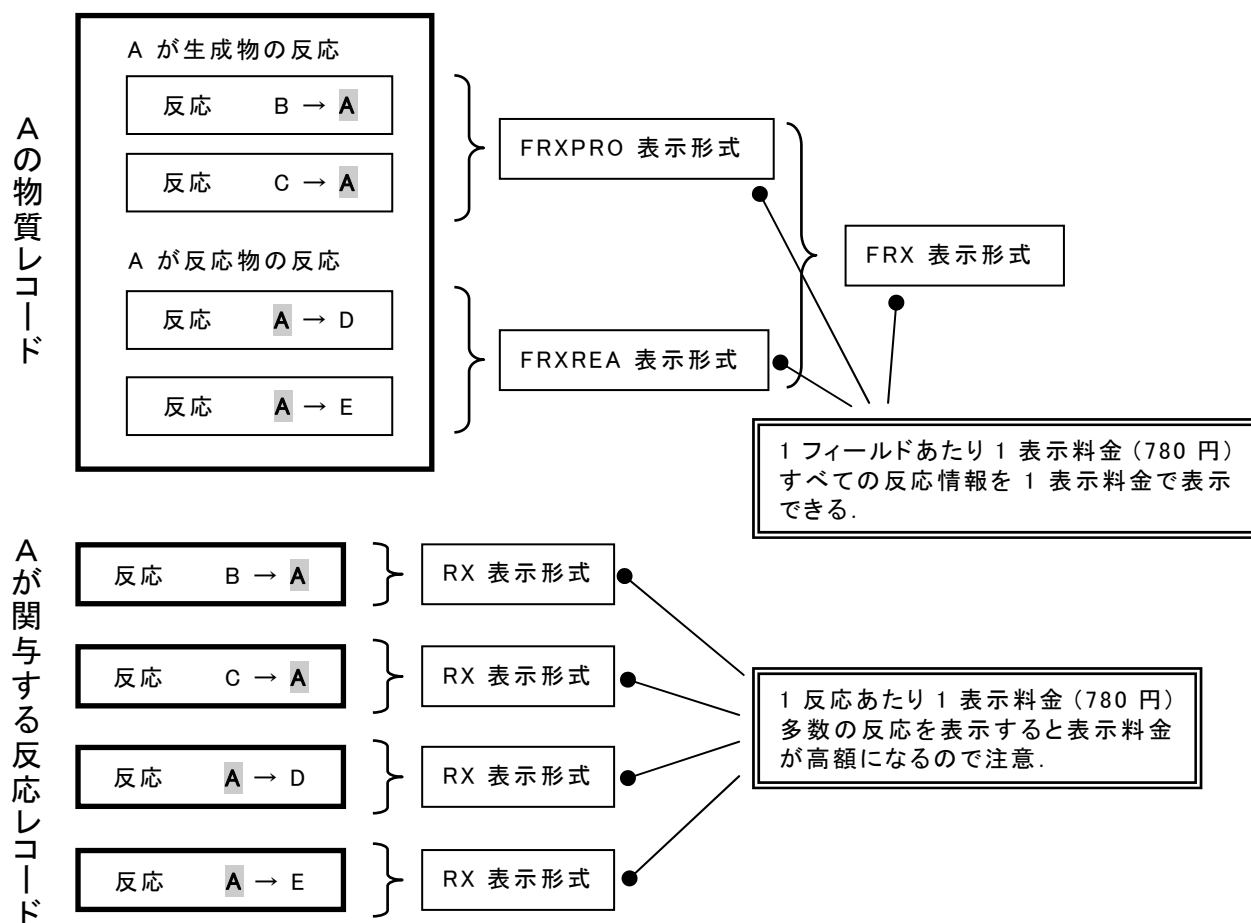


## 反応情報の検索と表示

- 物質レコード、反応レコードのどちらが検索されるかは、検索フィールドによって決まる。
  - ・ 物質同定情報検索フィールドや構造検索を利用すると、物質レコードが得られる。
  - ・ 反応検索フィールド (/RX.〇〇, /〇〇.RX) を利用すると、反応レコードが得られる。



- 物質レコードと反応レコードでは、同じ反応情報でも表示形式や料金が異なる。



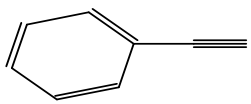
通常は、経済的に表示できる物質レコードからの検索、表示を行う。

反応物と生成物の両方を指定した検索や、試薬、溶媒、収率などを条件に限定する場合にのみ、反応レコードを検索する。

## レコード例

## ■ レコード例 (物質レコード, IDE 表示形式)

レコード番号 Accession Number (AN): 605461  
 ベーシック優先 CAS 登録番号 Basic Pref. RN (BPR): 536-74-3  
 CAS 登録番号 CAS Reg. No. (RN): 536-74-3  
 化学物質名称 Chemical Name (CN): phenyl acetylene, Phenylacetylene,  
 benzene, phenylacetilene,  
 Ethynylbenzene, phenylethine,  
 phenylethyne  
 AUTONOM 名\* Autonom Name (AUN): Ethynyl-benzene  
 示性式 Lin. Struct. Formula (LSF): C6H5CCH  
 分子式 Molec. Formula (MF): C8 H6  
 分子量 Molecular Weight (MW): 102.136  
 化学物質タイプ Compound Type (CTYPE): isocyclic  
 ハンドブック 記事 (収録源) Handbook Citation (HSO): 5-05, 0-05-00-00511, 1-05-00-00246,  
 2-05-00-00406, 3-05-00-01346,  
 4-05-00-01525, 6-05  
 入力日 Entry Date (DED): 1989/06/29  
 更新日 Update Date (DUPD): 2009/10/26

構造 

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	7
AUN	Autonomname	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formular Weight	1
CTYPE	Compound Type	1
HSO	Handbook Citation	7
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
ADSM	Adsorption (MCS)	7
ASSM	Association (MCS)	80
BP	Boiling Point	75
BSPM	Boundary Surface Phenomena (MCS)	2
CDEN	Density (Crystal)	8
CDER	Chemical Derivative	65
CIP	Electron Binding	1
:		

物質同定情報 (AN, BRP, RN, CN, AUN, LSF, MF, FW, CTYPE, HSO, DED, DUPD)

物性情報 (ADSM, ASSM, BP, BSPM, CDEN, CDER, CIP)

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	1338
RXREA	Substance is Reaction Reactant	1305
RXPRO	Substance is Reaction Product	331

反応情報 (RX, RXREA, RXPRO)

\* AUTONOM (AUTOMATIC NOMENCLATURE) 名はソフトウェアによって構造から発生させた名称。

## ■ レコード例 (化学物質レコード, FRX 表示形式)

Reaction:		<b>反応 1</b>
RX	Reaction ID (.ID):	10240984
	Reactant AN (.RAN):	878306, 605461 ← 反応物のレコード番号
	Reactant (.RCT):	cyclohexanecarbaldehyde, ethynylbenzene, pyrrolidine ← 反応物の名称
	Product AN (.PAN):	9712189 ← 生成物のレコード番号
	Product (.PRO):	1-(1-cyclohexyl-3-phenyl-prop-2-ynyl)-pyrrolidine ← 生成物の名称
	No. of React. Details (.NVAR):	1 ← この反応物, 生成物の組み合わせの反応が 1 件収録されている
Reaction Details:		
RX	Reaction RID (.RID):	10240984.1
	Reaction Classification (.CL):	Preparation ← 反応分類
	Yield (.YDT):	97 percent (AN=9712189) ← 収率
	Reagent (.RGT):	gold(III) salen complex ← 試薬
	Solvent (.SOL):	H2O ← 溶媒
	Time (.TIM):	24 hour(s) ← 反応時間
	Temperature (.T):	40 Cel ← 反応温度
	Reference(s):	↓ 出典情報
	1. Lo, Vanessa Kar-Yan; Liu, Yungen; Wong, Man-Kin; Che, Chi-Ming, Org. Lett., CODEN: ORLEF7, SIR8(8), <2006>, 1529 - 1532; BABS-6559929	
: .		
Reaction:		<b>反応 2</b>
RX	Reaction ID (.ID):	8666517
	Reactant AN (.RAN):	1072530 ← 反応物のレコード番号
	Reactant (.RCT):	4-phenyl-<1, 2, 3>selenadiazole ← 反応物の名称
	Product AN (.PAN):	605461 ← 生成物のレコード番号
	Product (.PRO):	ethynylbenzene ← 生成物の名称
	No. of React. Details (.NVAR):	2 ← この反応物, 生成物の組み合わせの反応が 2 件収録されている
Reaction Details:		
RX	Reaction RID (.RID):	8666517.1
	Reaction Classification (.CL):	Preparation
	Yield (.YDT):	32 percent (AN =605461)
	Reagent (.RGT):	ethyl acrylate, AIBN, hydroquinone
	Catalyst (.CAT):	tributylstannyl hydride
	Solvent (.SOL):	benzene
	Time (.TIM):	5 hour(s)
	Reference(s):	
	1. Nishiyama, Yutaka; Hada, Yasunobu; Anjiki, Masahiro; Miyake, Kazuya; Hanita, Sakiko; Sonoda, Noboru, J.Org.Chem., CODEN: JOCEAH, 67(5), <2002>, 1520 - 1525; BABS-6348565	
: .		
RX	Reaction RID (.RID):	8666517.2
	Reaction Classification (.CL):	Preparation
	Yield (.YDT):	80 percent (AN =605461)
	Reagent (.RGT):	ethyl acrylate
	Time (.TIM):	15 hour(s)
	Temperature (.T):	130 Cel
	Reference(s):	
	1. Nishiyama, Yutaka; Hada, Yasunobu; Iwase, Kuniko; Sonoda, Noboru, J.Organomet.Chem., CODEN: JORCAI, 611(1-2), <2000>, 488 - 493;	

該当物質が反応物となる反応

該当物質が生成物となる反応

詳細 -1 と詳細 -2 は, 反応物と生成物は共通しているが反応条件や出典が異なる

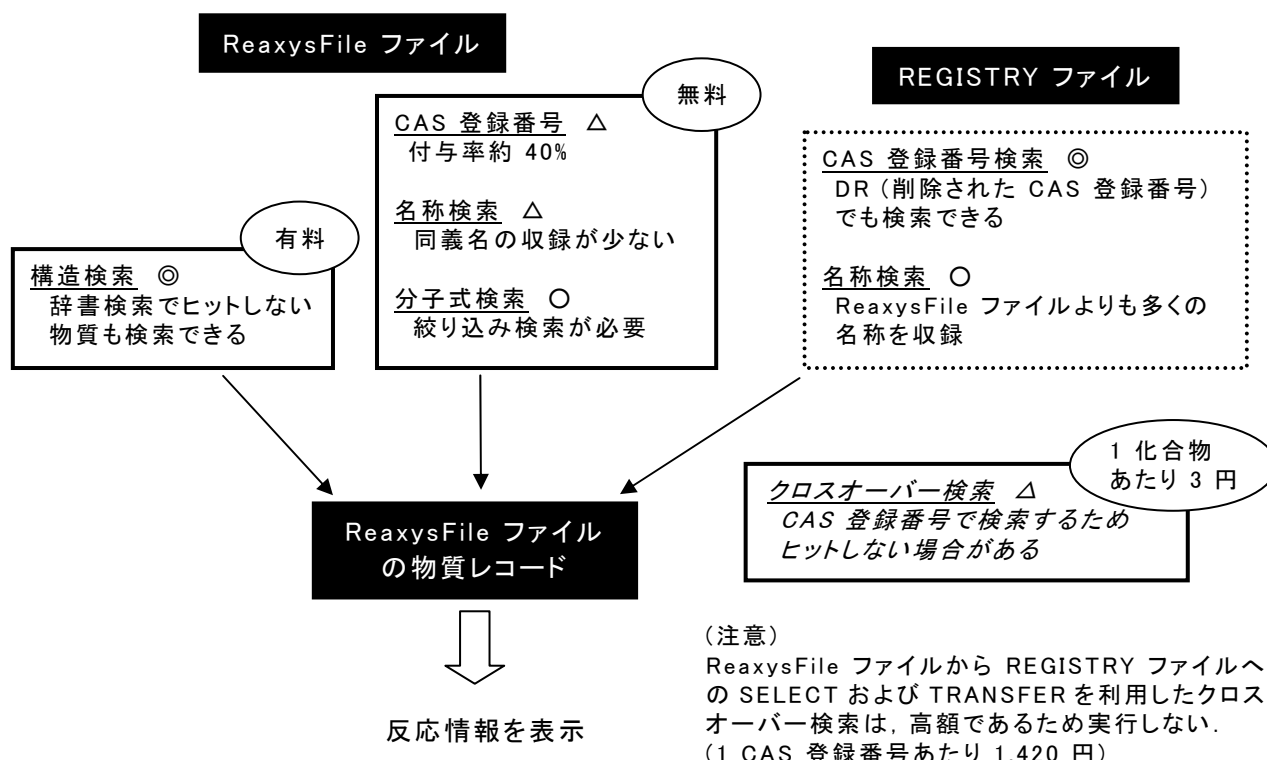
## 物質レコードの検索方法

■ ReaxysFile ファイルでは、以下の方法で物質レコードが検索できる。

- ・ CAS 登録番号による検索  
ただし 1996 年以降、新規登録物質については CAS 登録番号の付与が中止された。  
したがって、目的のレコードが存在しても CAS 登録番号検索ではヒットしないことがある。
  - CAS 登録番号付与率は約 40% (2011 年 3 月現在)
- ・ 辞書検索 (名称, 分子式などによる検索 = CAS 登録番号以外)
- ・ 構造検索 (辞書検索でヒットしない物質の検索に有効)

■ 物質レコード検索の流れ

- ① 特定の化合物を検索する場合は、まず ReaxysFile ファイルで、無料の CAS 登録番号検索や辞書検索 (名称や分子式など) を試す。
- ② ReaxysFile ファイルの辞書検索でヒットしない場合でも、REGISTRY ファイルで検索した結果をクロスオーバーすると、ヒットすることがある。
  - REGISTRY ファイルには、名称が豊富に収録されている。また REGISTRY ファイルでは、DR (削除された CAS 登録番号) で検索しても現行の CAS 登録番号のレコードがヒットする。
- ③ 辞書検索ではヒットしない場合や、共通の構造を含む一連の誘導体を検索する場合は、ReaxysFile ファイルで構造検索を行う。



## 物質レコードからの反応情報の表示

### ■ ReaxysFile ファイルの物質レコードにおける反応情報の表示形式と確認方法

- 物質が収録されていたとしても、反応情報が収録されているとは限らない。したがって、検索して存在を確認（検索料は無料）してから表示するとよい。
- 生成物となる反応の表示料金，反応物となる反応の表示料金，全反応の表示料金は同じ。
- 全データ表示と 20 データ表示，どちらも同じ料金なので，全データ表示のほうが経済的。

種類	反応情報の存在の確認	表示形式 全データ表示	表示形式 (20 データまで)
全反応情報	=> <u>S RX/FA</u>	=> <u>D FRX</u>	=> <u>D RX</u>
該当物質が生成物となる反応	=> <u>S RXREA/FA</u>	=> <u>D FRXREA</u>	=> <u>D RXREA</u>
該当物質が反応物となる反応	=> <u>S RXPRO/FA</u>	=> <u>D FRXPRO</u>	=> <u>D RXPRO</u>

### ■ 検索例：ReaxysFile ファイルに 6-phenylsulfanyl-7H-purine (5450-35-1) の反応情報が存在するかを確認して，表示する。

=> FILE REAXYSFILE

=> S 5450-35-1 ← CAS 登録番号で検索（無料）  
L1 1 5450-35-1

=> S L1 AND RX/FA ← 反応情報の存在を確認（無料）  
L2 1 L1 AND RX/FA

=> S L1 AND RXREA/FA ← 反応物となる反応の存在を確認  
L3 0 L1 AND RXREA/FA ← 収録なし

=> S L1 AND RXPRO/FA ← 生成物となる反応の存在を確認  
L4 1 L1 AND RXPRO/FA ← 収録あり

=> SET NOT DIS 1000 ← 表示料金が 1,000 円を越える際に警告が表示される設定  
NOTICE SET TO 1000 JAPANESE YEN FOR DISPLAY COMMAND  
SET COMMAND COMPLETED

=> D FRX ← すべての反応を表示（780 円）

L4 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 678335  
 Reactant AN (.RAN): 5774, 506523  
 Reactant (.RCT): 6-chloro-7(9)H-purine, benzenethiol  
 Product AN (.PAN): 13668  
 Product (.PRO): 6-phenylsulfanyl-7(9)H-purine  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 678335.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation

## 化学物質名称検索

■ 化学物質の完全名称は、化学物質名フィールド (/CN) で検索する。

- ・ EXPAND コマンドで確認する。
- ・ 句読点や特殊記号も含めて入力する。
- ・ 特殊記号は引用符 (") で囲む。
- ・ 化学物質名称中で使用しているカッコは、大小記号 < > と丸カッコ ( ) を区別して使用する (REGISTRY ファイルでは角カッコ [ ] は ( ) に変換する)。
- ・ 場合によっては複数の回答が得られる場合もある。複数の回答が得られたときの有効な絞りこみ方法については p.71。
- ・ 基本索引でも名称を検索できるが、/CN フィールド以外も検索するためノイズを含む。

■ 検索例 : 3-methyl-cinnoline の合成反応を検索する。

=> FILE REAXYSFILE

=> E 3-METHYL-CINNOLINE/CN 5 ← 名称を EXPAND で確認する

```
E1          1      3-METHYL-CINNOLIN-4-OL/CN
E2          1      3-METHYL-CINNOLIN-5-YLAMINE/CN
E3          1 --> 3-METHYL-CINNOLINE/CN
E4          1      3-METHYL-CINNOLINE-4,6-DIAMINE/CN
E5          1      3-METHYL-CINNOLINE-4,6-DIYLDIAMINE/CN
```

=> S E3 ← E 番号で検索する (無料)

```
L1          1 3-METHYL-CINNOLINE/CN
```

=> S L1 AND RXPRO/FA ← 生成物となる反応があるか確認する (無料)

```
8604168 RXPRO/FA
(RX.PAN/FA.RX)
L2          1 L1 AND RXPRO/FA
```

=> D FRXPRO ← すべての合成反応を表示する (780 円)

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

```
Reaction ID (.ID):          5415829
Reactant (.RCT):           toluene-4-sulfonic acid-<N'-(3-methyl-
                           cinnolin-4-yl)-hydrazide>
Product AN (.PAN):         113384
Product (.PRO):            3-methyl-cinnoline ← 生成物の名称
No. of React. Details (.NVAR): 1
```

Reaction Details:

RX

```
Reaction RID (.RID):        5415829.1
Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)
Reagent (.RGT):            aqueous Na2CO3
Note(s) (.COM):            Handbook
Reference(s):
1. Alford; Schofield, J.Chem.Soc., CODEN: JCS0A9, <1953>, 609, 611
```

## Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 5415828  
 Reactant (.RCT): (4a, 5, 6, 7, 8, 8a-η<sup>6</sup>-1,4-dihydro-3-methylcinnoline) iron(cyclopentadienyl) hexafluorophosphate  
 Product AN (.PAN): 113384  
 Product (.PRO): 3-methyl-cinnoline ← 生成物の名称  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

## Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 5415828.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)  
 Yield (.YDT): 78 percent (AN=113384)  
 Reagent (.RGT): NaNH<sub>2</sub>  
 Solvent (.SOL): CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>  
 Time (.TIM): 3 hour(s)  
 Reference(s):  
 1. Sutherland, Ronald G.; Abd-El-Aziz, Alaa S.; Piorko, Adam; Gill, Udai S.; Lee, Choi Chuck, J.Heterocycl.Chem., CODEN: JHTCAD, 25, <1988>, 1107-1110; BABS-5636017

## Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 5415827  
 Product AN (.PAN): 113384  
 Product (.PRO): 3-methyl-cinnoline ← 生成物の名称  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

## Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 5415827.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)  
 Reference(s):  
 1. Somei; Kurizuka, Chem.Lett., CODEN: CMLTAG, <1979>, 127  
 2. Somei; Ura, Chem.Lett., CODEN: CMLTAG, <1978>, 707  
 3. Lund, H.; Nilsson, N.H., Acta Chem.Scand.Ser.B, CODEN: ACBOCV, 30, <1976>, 5-11

参考 : ReaxysFile ファイルでの部分名称検索

■ ReaxysFile ファイルでは部分名称検索も可能。ただし、化学物質名称があまり収録されていないため、絞り込み等に使う際は検索モレに注意する。

- ・ 部分名称は、部分名称セグメントフィールド (/CNS: Chemical Name Segment) あるいは基本索引 (/BI またはなし) で検索する。
- ・ 前方一致検索のみ可能 (後方一致検索, 中間一致検索は不可)。
- ・ 名称セグメント間の隣接関係は近接演算子で指定できる ((W) は省略できる)。
- ・ 複数の名称セグメントを同一名称中に限定する場合は, (L) 演算子を利用する。

=> FILE REAXYSFILE

=> S (BENZENEDIAMINE (L) METHOXY)/CNS ← (L) 演算子で同一名称中に限定  
 L1 8 (BENZENEDIAMINE (L) METHOXY)/CNS

## 参考：REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索



ReaxysFile ファイルで既知の化学物質名称を検索して回答が得られなかった場合でも、REGISTRY ファイルを利用して化学物質名称を検索し、得られた L 番号をクロスオーバーすると回答が得られることがある。

```

=> FILE REAXYSFILE                               ← ReaxysFile ファイルに入る

=> E 2,4-DISULFOTOLUENE/CN 5                       ← 名称を EXPAND で確認する
E1          1          2,4-DISULFOBENZALDEHYDE-4'-NITROPHENYLHYDRAZONE DISODIUM SAL
T/CN
E2          1          2,4-DISULFOPHENOL-(6-AZO-1)-2-NAPHTHOL-3,6-DISULFONSAEURE/CN
E3          0 -->    2,4-DISULFOTOLUENE/CN
E4          1          2,4-DITERT-BUTYL-6-METHYLPHENYLMAGNESIUM BROMIDE/CN
E5          1          2,4-DITERT-BUTYL-N,N,N',N'-TETRAETHYL-1,3-DIPHOSPHABICYCLO<2
.2.0>HEXA-2,5-DIENE-5,6-DIAMINE/CN

=> FILE REGISTRY                                   ← REGISTRY ファイルに入る

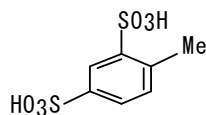
=> E 2,4-DISULFOTOLUENE/CN 5                       ← 名称を EXPAND で確認する
E1          1          2,4-DISULFOBENZOIC ACID/CN
E2          1          2,4-DISULFOPHENOL-(6-AZO-1)-2-NAPHTHOL-3,6-DISULFONIC ACID/C
N
E3          1 -->    2,4-DISULFOTOLUENE/CN
E4          1          2,4-DITELLURAHEXANE/CN
E5          1          2,4-DITERTBUTYLPHENOL/CN

=> S E3                                             ← E 番号で検索する (702 円)
L1          1 "2,4-DISULFOTOLUENE"/CN

=> D                                               ← デフォルトの表示形式 (IDE) で表示する (265 円)

L1  ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2011 ACS on STN
RN  121-04-0  REGISTRY
ED  Entered STN:  16 Nov 1984
CN  1,3-Benzenedisulfonic acid, 4-methyl- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN  Toluene-2,4-disulfonic acid (6Cl, 7Cl, 8Cl)
OTHER NAMES:
CN  2,4-Disulfotoluene
MF  C7 H8 O6 S2
CI  COM
LC  STN Files:  ANABSTR, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMLIST, GMELIN*, IFICDB,
IFIPAT, IFIUDB, REAXYSFILE*, TOXCENTER, USPATFULL, USPATOLD
(*File contains numerically searchable property data)
Other Sources:  EINECS**, NDSL**, TSCA**
(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
  
```

ReaxysFile ファイルで直接名称を EXPAND しても見つからなかったが、この物質は ReaxysFile ファイルに収録されていた



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

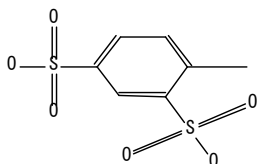
32 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
32 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=&gt; FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S L1 ● ————— REGISTRY ファイルの検索結果をクロスオーバー検索する  
L2 1 L1 (クロスオーバー料金: 3 円 / 1 CAS 登録番号)=> S L2 AND RXPRO/FA ← 生成物となる反応が収録されているかどうかを確認する (無料)  
L3 1 L2 AND RXPRO/FA=> D IDE FRXPRO ← 物質同定情報とすべての合成反応を表示する  
(780 円 X 2 = 1,560 円)

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 2699965  
 Basic Pref. RN (BPR): 121-04-0  
 CAS Reg. No. (RN): 121-04-0 ← ヒットタームは CAS 登録番号  
 Chemical Name (CN): toluene-2,4-disulfonic acid,  
 Toluol-disulfonsaeure-(2.4)  
 Autonom Name (AUN): 4-methyl-benzene-1,3-disulfonic acid  
 Molec. Formula (MF): C7 H8 O6 S2  
 Molecular Weight (MW): 252.26  
 Lawson Number (LN): 13854  
 Compound Type (CTYPE): isocyclic  
 Constitution ID (CONSID): 2377712  
 Handbook Citation (HSO): 0-11-00-00204, 2-11-00-00115, 5-11, 6-11  
 Entry Date (DED): 1989/07/05  
 Update Date (DUPD): 1994/04/18



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BRP	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	2

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	33
RXREA	Substance is Reaction Reactant	9
RXPRO	Substance is Reaction Product	24

Reaction:  
RX

Reaction ID (.ID): 8252952  
 Reactant AN (.RAN): 3596974, 3674757  
 Reactant (.RCT): dithiocarbonic acid O-ethyl ester;  
 potassium salt, 2-sulfo-toluene-4-  
 diazonium-betaine  
 Product AN (.PAN): 2699965  
 Product (.PRO): toluene-2,4-disulfonic acid,  
 4-ethanesulfonyl-toluene-sulfonic acid-(2)  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

## CAS 登録番号検索

■ CAS 登録番号は、基本索引 (Basic Index, /BI) または /RN フィールドで検索する。

- ・ CAS 登録番号付与率は約 40% (2011 年 3 月現在)  
該当物質が収録されていても、CAS 登録番号検索ではヒットしない場合がある。
- ・ ReaxysFile ファイルでは、化学物質の構造情報 (結合表) によって照合した CAS 登録番号が収録されている。同じ構造情報を持つ立体異性体、ラジカル、イオン、同位体化合物には、複数の CAS 登録番号が付与されることがある。その結果、CAS 登録番号で検索すると複数の回答が得られる場合がある。
- ・ 複数回答が得られたときの有効な絞りこみ方法については、p.71。

■ 検索例 : CAS 登録番号 121-04-0 の物質の反応情報を検索する。

=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S 121-04-0 ← CAS 登録番号を入力する (無料)

```

1 121-04-0/RN
1 121-04-0/BPR
L1 1 121-04-0
    (121-04-0/RN, BPR)

```

=> S L1 AND RX/FA ← 反応情報が存在するかどうかを確認する (無料)

```
L2 1 L4 AND RX/FA
```

=> D FRX ← すべての反応情報を表示する (780 円)

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

```

RX
  Reaction ID (.ID):          8252952
  Reactant AN (.RAN):        3596974, 3674757
  Reactant (.RCT):           dithiocarbonic acid 0-ethyl ester;
                              potassium salt, 2-sulfo-toluene-4-
                              diazonium-betaine
  Product AN (.PAN):         2699965
  Product (.PRO):            toluene-2,4-disulfonic acid,
                              4-ethanesulfonyl-toluene-sulfonic
                              acid-(2)
  No. of React. Details (.NVAR): 1

```

Reaction Details:

```

RX
  Reaction RID (.RID):        8252952.1
  Reaction Classification (.CL): Chemical behaviour
  Other Conditions (.COND):   Verseifen das Erhaltenen Kaliumsalz des
                              Aethylxanthogensaeureesters mit
                              alkoh.Kalilauge und darauffolgende
                              Oxydation mit Kaliumpermanganat
  Note(s) (.COM):            Handbook
  Reference(s):               1. Wynne; Bruce, J.Chem. Soc., CODEN: JCSOA9, 73, <1898>, 754

```

:

## 回答の確認・絞り込み方法

### ■ SELECT コマンドの利用

- ・ ReaxysFile ファイルは表示料金がすべて有料であるため、得られた回答を、無料の表示形式で確認することはできない。
- ・ ReaxysFile ファイルで、化学物質名称や、CAS 登録番号、構造などで検索をした場合、目的の化学物質がひとつであっても複数の回答が得られる場合がある（たとえば、CAS 登録番号で検索した場合、<sup>13</sup>C でラベルされた物質などもヒットする）。
- ・ ヒットした物質の確認や、目的の物質以外を除くには SELECT コマンドを利用するとよい。

### ■ 検索例：CAS 登録番号 100-17-4 の物質の合成反応を検索する。

```
=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S 100-17-4 ← CAS 登録番号で検索する (無料)
L1          2 100-17-4
              (100-17-4/RN, BPR)

=> S L1 AND RXPRO/FA ← 生成物となる反応情報を持つ化合物に限定する (無料)
L2          2 L1 AND RXPRO/FA

=> SEL CN MF LSF ← SELECT コマンドで、化学物質名 (CN)、分子式 (MF)
E1 THROUGH E12 ASSIGNED 示性式 (LSF) を抽出する (無料)

=> D SEL ← 抽出したタームを表示する (無料)
E1          2      C7 H7 N O3 /MF
E2          1      C6H4OCH3NO2/LSF
E3          1      C7H7NO3(1-)/LSF
:
E9          1      4-METHOXYNITROBENZENE ANION RADICAL/CN
:

=> S L2 NOT E3, E9 ← L1 より不要な名称、示性式を収録しているレコードを除く (無料)
L3          1 L2 NOT ("C7H7NO3(1-)/LSF OR "4-METHOXYNITROBENZENE ANION RADICAL"/CN)

=> D FRXPRO ← すべての合成反応を表示する (780 円)
```

```
L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN
```

Reaction:

RX

```
Reaction ID (.ID):          23291952
Reactant AN (.RAN):        2110529, 3592982
Reactant (.RCT):          4-Nitrophenyl phenyl selenide, sodium
                           methanolate
Product AN (.PAN):         1865361
Product (.PRO):            4-nitroanisole
No. of React. Details (.NVAR): 1
```

Reaction Details:

RX

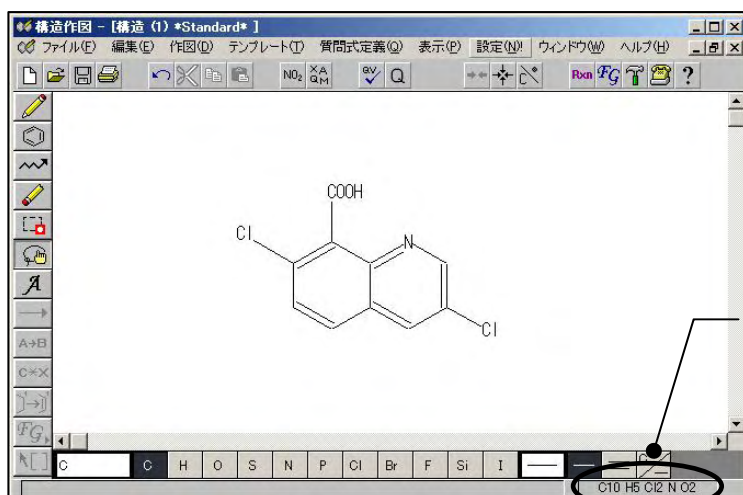
```
Reaction RID (.RID):        23291952.1
Reaction Classification (.CL): Preparation
Yield (.YDT):              100 percentSpectr.
```

## 分子式検索

■ 分子式は、基本索引 (Basic Index, /BI) または /MF フィールドで検索する。

- ・ 名称や CAS 登録番号が不明で、構造のみ既知の場合に有効。
- ・ 分子式の記述は Hill 方式に従う。
  - 炭素を含む物質 : 炭素, 水素, その他の元素 (アルファベット順) (例: C4H3N11O6)
  - 炭素を含まない物質 : すべての元素をアルファベット順に表示 (例: O2Ti)
- ・ 同じ分子式をもつ異性体が回答に含まれるため、部分名称などで絞り込み検索を行う。ある程度件数を絞り込んだら、SELECT コマンドを利用して目的物質を探す。
  - 部分名称検索で絞り込む場合、収録されていてもヒットしない場合があるので注意。

■ 検索例 : 下記の構造の物質を検索して、物質同定情報と反応情報を表示する。



=> FILE REAXYSFILE

=> S C10H5CL2NO2/MF

L1 83 C10H5CL2NO2/MF

← 分子式で検索

=> S L1 AND (DICHLORO (L) CARBOXY?)/CNS

L2 12 L1 AND (DICHLORO (L) CARBOXY?)/CNS (同一名称中は (L) 演算子を使用)

← 部分名称で絞り込み検索

=> SEL CN

E1 THROUGH E17 ASSIGNED

← 名称を抽出

=> D SEL

E1 2 2,6-DICHLORO-CYCLOHEPTA<B>PYRROLE-3-CARBOXYLIC ACID/CN

E2 2 2,6-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN

E3 2 2,7-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN

E4 2 4,7-DICHLORO-QUINOLINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN

:

E14 1 2,4-DICHLOROQUINOLINE-3-CARBOXYLIC ACID/CN

E15 1 3,7-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID/CN

E16 1 3,7-DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN

E17 1 3,7-DICHLOROQUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID/CN ← 構造と一致する名称

← 抽出した名称を表示

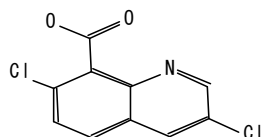
=> S E17 ← 該当した名称で検索  
 L3 1 "3,7-DICHLOROQUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID"/CN

=> S L3 AND RX/FA ← 反応情報の存在を確認  
 L4 1 L3 AND RX/FA

=> D IDE FRX ← 物質同定情報とすべての反応を表示 (780 円 × 2 = 1,560 円)

L4 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 7761858  
 Chemical Name (CN): Facet 75 DF,  
 3,7-dichloro-8-quinolinecarboxylic acid,  
**3,7-dichloroquinoline-8-carboxylic acid**,  
 Quinclorac  
 Autonom Name (AUN): 3,7-Dichloro-quinoline-8-carboxylic acid  
 Lin. Struct. Formula (LSF): C10H5Cl2O2N  
 Molec. Formula (MF): C10 H5 Cl2 N O2  
 Molecular Weight (MW): 242.061  
 Compound Type (CTYPE): heterocyclic  
 Handbook Citation (HSO): 6-22  
 Entry Date (DED): 1998/03/03  
 Update Date (DUPD): 2008/12/06



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	4
AUN	Autonomname	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1

:

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 8499187  
 Reactant AN (.RAN): 7761858  
 Reactant (.RCT): 3,7-dichloroquinoline-8-carboxylic acid  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 8499187.1  
 Reaction Classification (.CL): Chemical behaviour (half reaction)  
 Reagent (.RGT): N,N-dimethyl-4-nitrosoaniline, H2O2,  
 sodium tetraborate buffer, air  
 Temperature (.T): 25 Cel

## 構造検索

### ■ ReaxysFile ファイルでは化学構造検索が利用できる。

- ・ 基本的には、REGISTRY ファイルの構造検索と同じ。
- ・ 作図方法
  - STN Express/STN on the Web の構造作図プラグイン
  - コマンド作図
- ・ 検索タイプ (SSS, CSS, FAMILY, EXACT)
- ・ 検索範囲 (SAMPLE (全ファイルの 10 %), FULL, RANGE, SUBSET)
- ・ システム制限値

	検索タイプ	イタレーション検索対象数	回答数
オンライン検索	サンプル検索	1,000	50
	フルファイル検索	200,000	100,000
バッチ検索	フルファイル検索	300,000	250,000

### ■ 特定化学物質を検索する場合は、EXACT または FAMILY 検索、作図した構造の誘導体を含めた検索を行う場合は、SSS または CSS 検索を用いるとよい。



特定化学物質の検索は、構造検索のほうが辞書検索 (CAS 登録番号検索, 化学物質名称検索など) より有効である。辞書検索でヒットしない場合は、必ず構造検索を行う。

理由 1 : 知っている化学物質名称が必ず収録されているとは限らないため、名称で検索してもヒットしない場合がある。

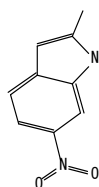
理由 2 : CAS 登録番号はすべての物質には付与されていない (CAS 登録番号の付与率は 40%)。したがって、REGISTRY ファイルからのクロスオーバーや CAS 登録番号検索ではヒットしない物質がある。

### ■ 構造検索料金

(2011 年 3 月現在)

サンプル検索		無料
フルファイル検索	完全一致検索 (EXA), ファミリー検索 (FAM)	3,700 円
	部分構造検索 (SSS), 閉構造部分構造検索 (CSS)	9,700 円
サブセット検索	構造検索結果のサブセット検索	フルファイル検索の半額
	辞書検索を含む検索結果のサブセット検索	フルファイル検索と同額





Reaction:  
RX

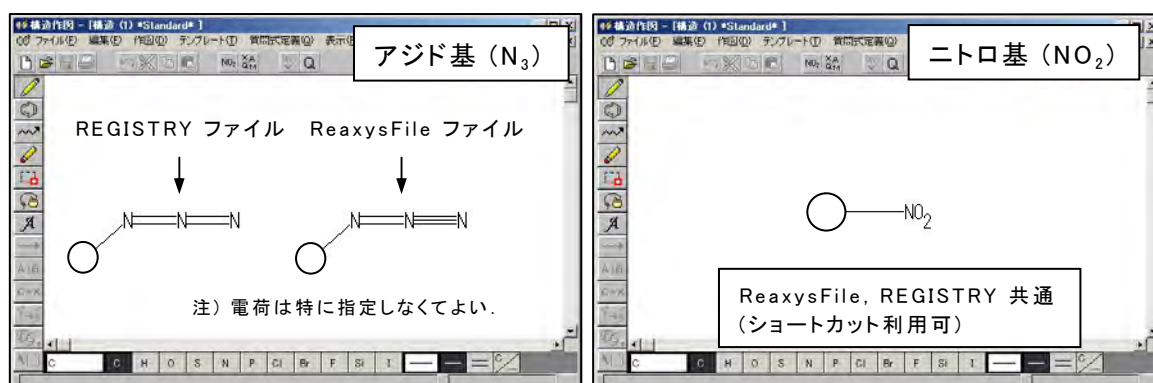
Reaction ID (.ID): 9542437  
 Reactant AN (.RAN): 636962, 635680  
 Reactant (.RCT): 3-nitro-aniline, propan-2-one  
 Product AN (.PAN): 1311041, 152737  
 Product (.PRO): 2-methyl-4-nitro-indole,  
 2-methyl-6-nitro-indole  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:  
RX

Reaction RID (.RID): 9542437.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 58 percent (AN=1311041), 7 percent  
 (AN=152737)  
 Reagent (.RGT): potassium tert-butoxide, air  
 Solvent (.SOL): dimethylsulfoxide  
 Time (.TIM): 2 hour(s)  
 Reference(s):  
 1. Moskalev, Nikolai; Barbasiewicz, Michal; Makosza, Mieczyslaw,  
 Tetrahedron, CODEN: TETRAB, 60(2), <2004>, 347 - 358; BABS-6433819  
 2. Moskalev, Nikolai; Barbasiewicz, Michal; Makosza, Mieczyslaw,  
 Tetrahedron, CODEN: TETRAB, 60(2), <2004>, 347 - 358; BABS-6681797

### 参考 : ReaxysFile ファイルと REGISTRY ファイルの構造作図の違い

- ReaxysFile ファイルと REGISTRY ファイルでは、基本的に同じ構造質問式を利用できる。しかし、何通りかで記載できる官能基などは、REGISTRY ファイルと ReaxysFile ファイルで作図する方法が異なる場合がある。



- ・ 官能基の作図について不明な点がある場合は、ヘルプデスクまでお問い合わせください。

参考 : REGISTRY ファイルの構造データを利用した構造検索

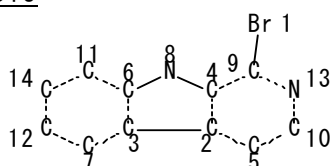
■ 検索例 : CAS 登録番号 159898-15-4 の物質の反応情報を検索する.

=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S 159898-15-4 ← CAS 登録番号検索で検索したが, 0 件 (無料)  
L1 0 159898-15-4

=> FILE ZREGISTRY ← ZREGISTRY ファイルに入る

=> STR 159898-15-4 ← STR コマンドの後 CAS 登録番号を入力し, : の後 DIS と入力する  
:DIS



:END ← END と入力する

L2 STRUCTURE CREATED ● 構造質問式が作成された (無料)

=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S L2 EXA ← 作成した L 番号でサンプル検索する (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 0 TO 0  
PROJECTED ANSWERS: 0 TO 0

L3 0 SEA EXA SAM L2

=> S L2 EXA FUL ← フルファイル検索 (3,700 円)

L4 1 SEA EXA FUL L2 ● 1 件ヒットした

=> S L4 AND RX/FA ← 反応情報が存在するかどうかを確認する (無料)

L5 1 L4 AND RX/FA

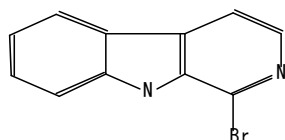
=> D IDE FRX ← 物質同定情報とすべての反応情報を表示

(780 円 X 2 = 1,560 円)

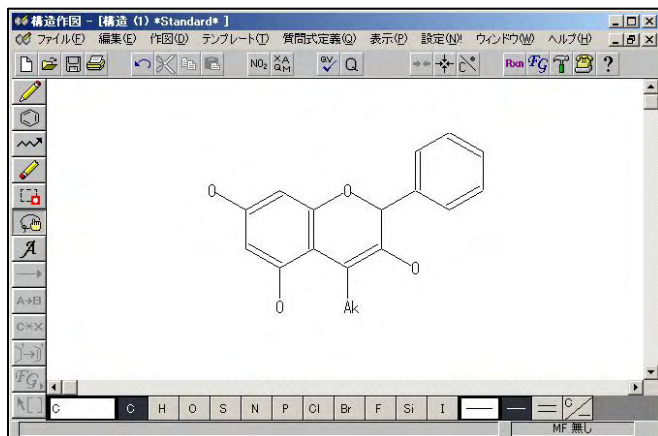
L5 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 7023461  
Chemical Name (CN): 1-bromo- $\beta$ -carboline  
Autonom Name (AUN): 1-bromo-9H- $\beta$ -carboline  
Molec. Formula (MF): C11 H7 Br N2  
Molecular Weight (MW): 247.09  
Lawson Number (LN): 28154  
Compound Type (CTYPE): heterocyclic  
Constitution ID (CONSID): 6032910  
Tautomer ID (TAUTID): 6667531  
Handbook Citation (HSO): 6-23  
Entry Date (DED): 1995/05/11  
Update Date (DUPD): 2007/02/05

● CAS 登録番号が  
収録されていなかった



■ 検索例：下記の構造を有する誘導体の合成反応を検索する（部分構造検索）。



=> FILE REAXYSFILE

← ReaxysFile ファイルに入る

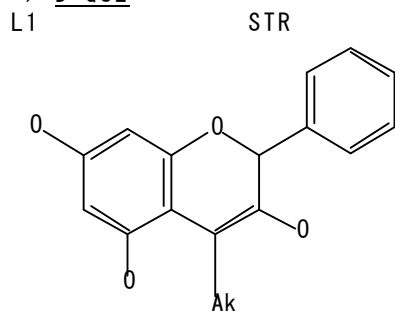
=>

Uploading C:\Documents and Settings\...¥STN Express 8.4¥Queries¥test.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE

← アップロードした構造を表示して確認（無料）



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1

← サンプル検索（無料）

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
 BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
 PROJECTED ITERATIONS: 13850 TO 17190  
 PROJECTED ANSWERS: 0 TO 0

L2 0 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL

← フルファイル検索（部分構造検索：9,700円）

L3 12 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND RXPRO/FA

← 合成反応情報が存在するかどうかを確認する（無料）

L4 7 L3 AND RXPRO/FA

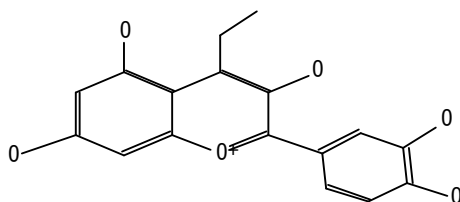
=> D 4 IDE FRXPRO

← 4番目の物質同定情報とすべての合成反応を表示する  
 (780円 X 2 = 1,560円)

L4 ANSWER 4 OF 7 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 3897763  
 Chemical Name (CN): 4-ethyl-2-(3,4-dihydroxy-phenyl)-3,5,7-tri  
 hydroxy-chromenylium; iodide  
 Lin. Struct. Formula (LSF): C17H15O6(1+)\*I(1-)  
 Fragm. Molec. Formula (FMF): C17 H15 O6 . I  
 Molecular Formula (MF): C17 H15 O6 . I  
 :

CM 1

FAN 3914750  
FMF C17 H15 O6

ReaxysFile ファイルの反応情報には反応スキームが表示されない。ヒットした物質の構造を確認したい場合は、IDE 表示形式で表示する

CM 2

FAN 3587184  
FMF 1

## Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
FMF	Fragment Molecular Formula	2
MF	Molecular Formula	1
FW	Formular Weight	2
FAN	Fragment AN	2
LN	Lawson Number	1
CTYPE	Compound Type	1
CONSID	Constitution ID	1
HSO	Handbook Citation	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1

## This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	1
RXPRO	Substance is Reaction Product	1

## Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 8239939  
 Reactant (.RCT): 3,5,7-triethoxy-4-ethyl-2-(3,4-diethoxy-phenyl)-benzopyrylium iodide  
 Product AN (.PAN): 3897763  
 Product (.PRO): 4-ethyl-2-(3,4-dihydroxy-phenyl)-3,5,7-trihydroxy-chromenylium; iodide  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

## Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 8239939.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)  
 Reagent (.RGT): hydriodic acid, acetic acid anhydride  
 Note(s) (.COM): Handbook  
 Reference(s):  
 1. Watson; Sen, J. Chem. Soc., CODEN: JCS0A9, 105, <1914>, 398

## 反応レコードの検索

- 反応物と生成物の両方を指定した検索や、試薬、触媒、反応条件などで限定したい場合には、反応レコードを検索する。

- ・ 反応検索フィールドを使って検索すると、自動的に反応レコードが検索される。
- ・ 物質レコードで表示すると反応数が多すぎる場合に、有用な反応だけを効率よく見られる。
- ・ 反応レコードで反応を表示する場合には、RX 表示形式を用いる。



回答は 1 件が 1 反応となり、1 反応ごとに 1 表示料金 (780 円) が課金される。

- 主な反応検索フィールド

種類		内容	入力例	演算子	
反応情報	反応物 生成物	反応物 (AN)	=> <u>S 50000/RX.RAN</u>	AND	
		反応物	=> <u>S L-PROLINE/RX.RCT</u>		
		生成物 (AN)	=> <u>S 1915876/RX.PAN</u>		
		生成物	=> <u>S GLYCINE/RX.PRO</u>		
反応の 詳細	反応条件*	試薬 (名称, 分子式)	=> <u>S ACETONE/RX.RGT</u>	(P)	AND
		触媒 (名称, 分子式)	=> <u>S SNBR2/RX.CAT</u>		
		溶媒 (名称, 分子式)	=> <u>S CH2CL2/RX.SOL</u>		
		収率	=> <u>S 99.99/RX.YD</u>		
		反応温度	=> <u>S -100--10/RX.T</u>		
		反応時間	=> <u>S "2 HOUR(S)"/RX.TIM</u>		
		pH 値	=> <u>S RX.PH&lt;1</u>		
		圧力	=> <u>S 1-25/RX.P</u>		
	反応分類	=> <u>S PREPARATION/RX.CL</u>			
	出典情報	著者名	=> <u>S COREY?/AU.RX</u>	AND	
		資料名	=> <u>S SYNTHESIS/JT.RX</u>		
		CODEN	=> <u>S JACSAT/ISN.RX</u>		
		特許出願人	=> <u>S AJINOMOTO/PA.RX</u>		
		特許番号	=> <u>S US 2986578/PN.RX</u>		

\* 反応条件の収録は不完全であるため、網羅的な検索をしたい場合には利用しない方がよい。

- ・ 同一反応条件に限定する場合は、(P) 演算子を利用する。

```

Reaction Details:
RX
(P) {
  Reaction RID (.RID):      10398133.1
  Reaction Classification (.CL): Preparation
  Yield (.YDT):            65 percent (AN=878307)
  Reagent (.RGT):         12
  Solvent (.SOL):         triethylene glycol
  Time (.TIM):            2 hour(s)

```

- 生成物, 反応物を指定して検索する場合には, レコード番号 (AN) で検索する.

=> S 反応物のレコード番号/RX.RAN AND 生成物のレコード番号/RX.PAN

- ・ 名称の収録率が低いため, レコード番号で指定する.

- 反応分類による回答の絞り込み

- ・ ReaxysFile ファイルには, 物質の合成法が収録されているが, 生成物が特定されていない反応や, 化学的挙動を調べるための反応, 多段階反応も一部含まれている. このような反応の種類は, 反応分類 (/RX.CL) によって絞り込むことができる.
- ・ 反応分類の種類 (/RX.CL)

① Preparation	
Preparation	物質の生成を目的とする反応
Preparation (half reaction)	物質の生成を目的とする反応であるが, 反応物が特定されていない (反応物レコード番号存在しない) 反応
② Chemical Behavior	
Chemical Behavior	化学的挙動 (反応速度, 反応機構, 予期しなかった反応) が主題の反応
Chemical Behavior (half reaction)	化学的挙動が主題である反応であるが, 生成物が特定されていない (生成物のレコード番号が存在しない) 反応
③ Multistage	
Multistage	いくつかの反応ステップの詳細が収録されている反応であり, 合成・反応データが収録されている
Multistage (half reaction)	いくつかの反応ステップの詳細が収録されている反応であるが, 生成物または反応物が特定されていない反応.

- ・ 入力例

- Preparation (Half reaction を含む) 情報のみを表示する場合

=> S L# AND PREPARATION/RX.CL

- 上記に加えて Multistage (Half reaction を含む) の反応も含める場合

=> S L# AND (PREPARATION OR MULTISTAGE)/RX.CL

- Preparation 情報の中で, Half reaction を除く場合

=> S L# AND (PREPARATION (NOTP) HALF)/RX.CL

- Chemical Behavior 情報 (Half reaction を含む) のみを表示する場合

=> S L# AND CHEMICAL/RX.CL

- 検索例 : シクロヘキサノールからシクロヘキサノンへの酸化反応を調べる。回答件数が多い場合には、収率の高い反応に限定する。

=> FILE REAXYSFILE

=> E CYCLOHEXANONE/CN 5

← 生成物の名称を確認

E1 1 CYCLOHEXANONCYANHYDRIN-TRIMETHYLSILYLETHER/CN  
 E2 1 CYCLOHEXANONDITOSYLHYDRAZON/CN  
 E3 3 --> CYCLOHEXANONE/CN  
 E4 1 CYCLOHEXANONE 1-ACETYL-5-INDOLINYLYDRAZONE/CN  
 E5 1 CYCLOHEXANONE 1-ACETYL-6-INDOLINYLYDRAZONE/CN

=> S E3

← 生成物を名称で検索

L1 3 CYCLOHEXANONE/CN

=> S L1 AND RXPRO/FA

← 生成物となる反応の収録を確認

8604168 RXPRO/FA

(RX. PAN/FA. RX)

L2 3 L1 AND RXPRO/FA

← 3件とも収録されていた

=> SEL CN

← 全回答から名称を抽出

E1 THROUGH E8 ASSIGNED

=> D SEL

← 抽出した名称を表示

E1 4 CYCLOHEXANONE/CN  
 E2 2 CYCLOHEX-1-ENOL/CN ← ノイズ  
 E3 2 CYCLOHEXANON/CN  
 E4 1 CYCLO-HEXANONE/CN  
 E5 1 CYCLOHEXEN-1-OL/CN ← ノイズ  
 E6 1 KETOHEXAMETHYLEN/CN  
 E7 1 PIMELINKETON/CN  
 E8 1 4-OXO-2,5-CYCLOHEXADIENYLIDENE/CN ← ノイズ

=> S L2 NOT E2, E5, E8

← 回答からノイズを除く

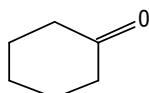
L3 1 L2 NOT (CYCLOHEX-1-ENOL/CN OR CYCLOHEXEN-1-OL/CN OR "4-OXO-2,5-CYCLOHEXADIENYLIDENE"/CN)

=> D IDE

← 物質同定情報と収録反応数を確認

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STM

Accession Number (AN): 385735  
 Basic Pref. RN (BPR): 108-94-1  
 CAS Reg. No. (RN): 108-94-1  
 Chemical Name (CN): cyclo-hexanone, **Cyclohexanone**,  
 cyclohexanon, **cyclohexanone**,  
 Cyclohexanon, Ketoexamethylen,  
 Pimelinketon  
 Autonom Name (AUN): **cyclohexanone**  
 Molec. Formula (MF): C6 H10 O  
 Molecular Weight (MW): 98.1448  
 Compound Type (CTYPE): isocyclic  
 Handbook Citation (HSO): 0-07-00-00008, 1-07-00-00006,  
 2-07-00-00005, 3-07-00-00014,  
 4-07-00-00015, 5-07, 6-07  
 Entry Date (DED): 1989/06/29  
 Update Date (DUPD): 2008/04/19



## Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BRP	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
AUN	Autonomname	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formular Weight	1
CTYPE	Compound Type	1
HSO	Handbook Citation	7
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
ADSM	Adsorption (MCS)	32

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	1431
RXREA	Substance is Reaction Reactant	1326
RXPRO	Substance is Reaction Product	1047

← シクロヘキサノンが生成物である反応

=> D FRXPRO ← 1047 反応すべてを表示 ●  
(物質レコード : 780 円)

物質レコードからの表示

- ・ 1 表示料金で全反応が表示される
- ・ あらゆる反応物からの合成反応が含まれている
- ・ 低収率の反応も含まれている
- ・ シクロヘキサノールが反応物である反応は収録されていない可能性もある

=> E CYCLOHEXANOL/CN 5 ← 反応物の名称を確認する

E1 1 CYCLOHEXANOHYDROXAMSAEURE/CN  
 E2 1 CYCLOHEXANOIC ACID/CN  
 E3 1 --> CYCLOHEXANOL/CN  
 E4 1 CYCLOHEXANOL ANION/CN  
 E5 1 CYCLOHEXANOL TETRAHYDROPYRANYL ETHER/CN

=> S E3 ← 反応物を名称から検索

L4 1 CYCLOHEXANOL/CN

=> SEL L3 AN ← 生成物 (シクロヘキサノン) のレコード番号を抽出

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> SEL L4 AN ← 反応物 (シクロヘキサノール) のレコード番号を抽出

E2 THROUGH E2 ASSIGNED

=> S E1/RX.PAN AND E2/RX.RAN ← 抽出したレコード番号にそれぞれ対応する  
 フィールドコードをつけて、反応レコードを検索

1015 385735/RX.PAN  
 2723 906744/RX.RAN

L5 106 385735/RX.PAN AND 906744/RX.RAN ← 106 反応が得られた

=> S L5 AND 80<=RX.YD ← 80% 以上の反応に限定

803848 80 % <=RX.YD  
 L6 3 L5 AND 80 % <=RX.YD ← 3 件に絞り込めた

=> SET NOT DIS 1000 ← 表示料金が 1,000 円を超える場合に警告を表示

NOTICE SET TO 1000 JAPANESE YEN FOR DISPLAY COMMAND  
 SET COMMAND COMPLETED

=> D 1-3 RX ← 全件を RX 表示形式で表示 (780 円 × 3 = 2,340 円)  
 THE ESTIMATED COST FOR THIS REQUEST IS 2340 JAPANESE YEN  
 DO YOU WANT TO CONTINUE WITH THIS REQUEST? (Y)/N:Y

L6 ANSWER 1 OF 3 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

Reaction ID:	3856140
Reactant AN (.RAN):	<b>906744</b>
Reactant (.RCT):	cyclohexanol
Product AN (.PAN):	774100, <b>385735</b>
Product (.PRO):	2-chloro-cyclohexanone, cyclohexanone
No. of React. Details (.NVAR):	2

レコードは  
反応単位

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID):	3856140.1
Reaction Classification (.CL):	Preparation
Yield (.YDT):	85 percent (AN=385735), 2 percent (AN=774100)
Reagent (.RGT):	2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidinyloxy, chlorine, Na2CO3
Solvent (.SOL):	CH2Cl2
Other Conditions (.COND):	Ambient temperature
Reference(s):	1. Yamaguchi, Masao; Takata, Toshikazu; Endo, Takeshi, Bull. Chem. Soc. Jpn., CODEN: BCSJA8, 63(3), <1990>, 947-949; BABS-5510842

RX

Reaction RID (.RID):	3856140.2
Reaction Classification (.CL):	Chemical behaviour
Yield (.YDT):	85 percent (AN=385735), 2 percent (AN=774100)
Reagent (.RGT):	2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidinyloxy, chlorine, Na2CO3
Solvent (.SOL):	CH2Cl2
Other Conditions (.COND):	Ambient temperature, reaction of other cyclic alcohols, other reaction conditions
Subject Studied (.SUBJ):	Product distribution
Reference(s):	1. Yamaguchi, Masao; Takata, Toshikazu; Endo, Takeshi, Bull. Chem. Soc. Jpn., CODEN: BCSJA8, 63(3), <1990>, 947-949; BABS-5510842

L6 ANSWER 2 OF 3 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

Reaction ID:	3856134
Reactant AN (.RAN):	<b>906744</b>



#### 物質レコード vs 反応レコードの選択のポイント

- なるべく安価に出力したい。
- 出発物質は問わず、目的物質の合成反応はすべて表示したい。 ⇒ 物質レコード
- 収録されている反応数が多くない。
- 収録されている反応数が多すぎる場合に、回答を絞り込んで効率的に見たい。
- 生成物と反応物の両方を指定する。 ⇒ 反応レコード
- 収率で限定する。

## 練習問題



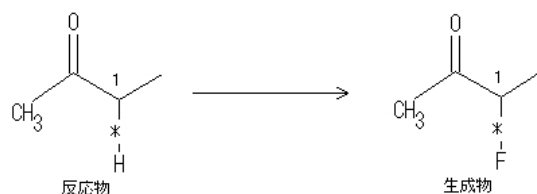
## 練習問題

- 練習問題 1 : 2-ニトロトルエン (88-72-2) から, 2,2'-ジニトロジベンジル (16968-19-7) を合成する反応を検索する.

- ① 無料の SCAN 表示形式で表示する.
- ② 最初の回答をデフォルトの表示形式で表示する.

【ヒント】 CAS 登録番号にロールを指定して検索する (反応物/試薬は /RRT, 生成物は /PRO).

- 練習問題 2 : 下記のフッ素化の反応を検索する.

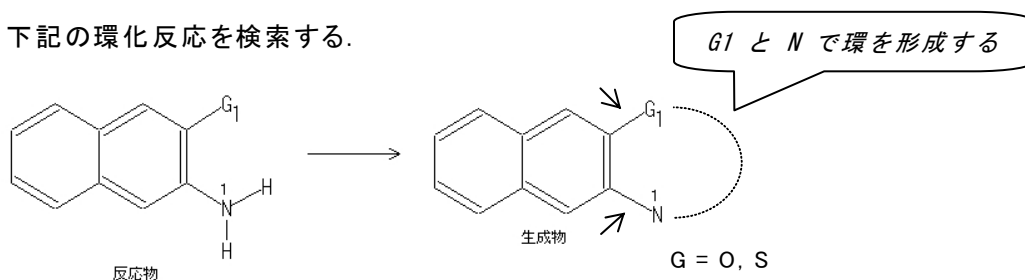


【作図のヒント】 ロール, 反応サイト, 反応部位の指定をする. 結合が完全に切断される反応 (反応した結合上の原子が変わる反応) では, 反応部位の指定は CC を選択する.

- ① 80 % 以上の収率 (80<=YD), あるいは収率情報のない反応 (NONE/YDT) に限定する.
- ② 特許に限定 (P/DT) する.
- ③ 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する.

【ヒント】 生成物を作図した反応検索結果の L 番号に収率情報を直接かけ合わせる場合は, (A) 演算子を用いる. CA の書誌情報をかけあわせる時には AND 演算子を用いる.

- 練習問題 3 : 下記の環化反応を検索する.

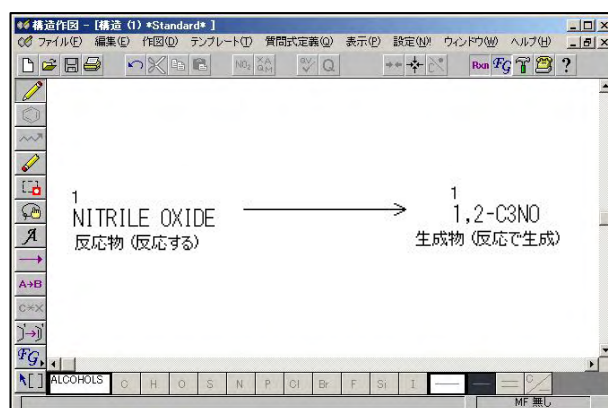


【作図のヒント】 環を形成する結合 (→) の属性を, デフォルトの「鎖」から「環」に変更する. G グループやショートカット, 可変原子にはマッピングは指定できない.

- ① 触媒反応に限定 (ANY/CAT) する.
- ② 1 段階反応に限定 (1/NS) する.
- ③ 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する.

【ヒント】 反応ステップ数や, 同一反応に限定する場合は (L) 演算子を用いる.

- 練習問題 4 : ニトリルオキシド (NITRILE OXIDE) から, 1,2-C<sub>3</sub>NO 環を合成する反応を検索する.



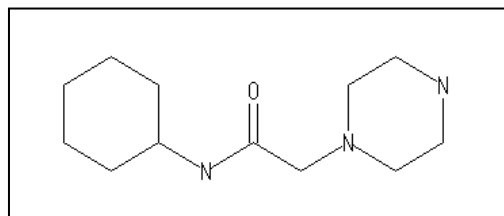
【作図のヒント】 作図画面の官能基グループ語を用いて検索する. 共通の原子を含む場合は, マッピングを指定する.

- ① 80 % 以上の収率 (80<=FG.YD) に限定する.
- ② 1 段階反応に限定 (1/NS) する.

【ヒント】 官能基検索ではマッピングと (A) 演算子を両方利用することはできないため, 収率を掛け合わせるときは (L) 演算子を用いる. 反応ステップ数は (L) 演算子で限定する.

- 練習問題 5 : Esaprazole (64204-55-3) の反応情報を ReaxysFile ファイルで検索する.

- 5-1 : CAS 登録番号 (64204-55-3) から検索する.
- 5-2 : 化学物質名称 (Esaprazole) から検索する.
- 5-3 : 化学構造から検索する.



【ヒント】 ReaxysFile ファイルには無料の表示形式はないため, 反応情報が収録されているかを事前に確認する (RX/FA).

物質レコードの場合, 反応情報の全データ表示には FRX を選択する.

名称検索でヒットしなかった場合, REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索でヒットする場合がある.

## 練習問題 1

- 2-ニトロトルエン (88-72-2) から, 2,2'-ジニトロジベンジル (16968-19-7) を合成する反応を検索する.

=&gt; FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

=&gt; S 88-72-2/RRT (L) 16968-19-7/PRO

← CAS 登録番号にロールを直接指定して検索する

L1 8 88-72-2/RRT (L) 16968-19-7/PRO

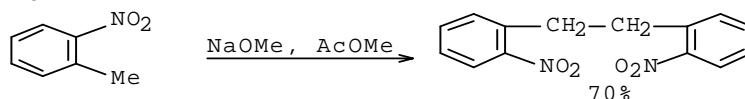
=&gt; D SCAN

← 無料の SCAN 表示形式で確認する

L1 8 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Preparation of carbamazepine

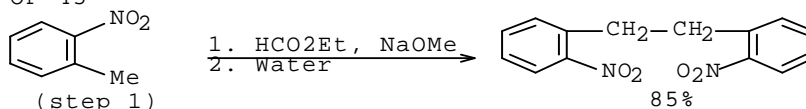
RX(1) OF 8

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L1 8 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

T1 Synthesis of oxcarbazepine

RX(2) OF 45



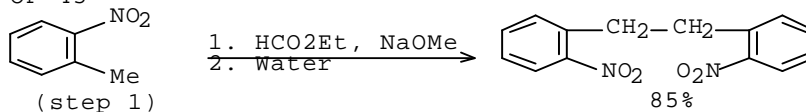
NOTE: petroleum ether used as solvent in stage 1

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END=> D

← デフォルトの表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 8 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

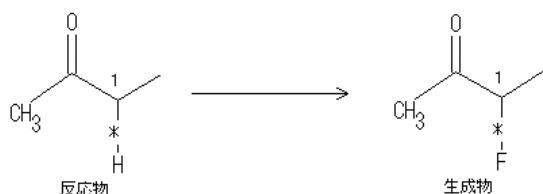
RX(2) OF 45



REF: Zhongguo Yiyao Gongye Zazhi, 37(7), 443-445; 2006  
 NOTE: petroleum ether used as solvent in stage 1  
 CON: STAGE(1) 5 - 10 deg C; 4 hours, 10 - 15 deg C  
 STAGE(2) cooled

## 練習問題 2

- 下記のフッ素化の反応を検索する.



=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

=>

Uploading C:\Documents and Settings\¥...¥STN Express 8.4¥Queries¥test.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← サンプル検索を行う (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED VERIFICATIONS: 14797 TO 18243

PROJECTED ANSWERS: 5 TO 234

L2 5 SEA SSS SAM L1 ( 11 REACTIONS)

=> S L1 FUL

← フルファイル検索する

L3 54 SEA SSS FUL L1 ( 154 REACTIONS)

=> S L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)

← 収率で限定する

L4 34 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)

=> S L4 AND P/DT

← 特許に限定する

L5 6 L4 AND P/DT

=> D BIB FHIT

← 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する

L5 ANSWER 1 OF 6 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

AN 135:344033 CASREACT [Full-text](#)

TI Catalytic halogenation of activated methylene and methine compound

:

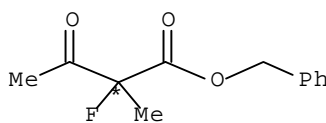
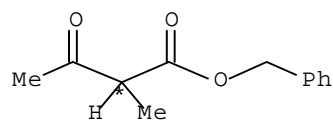
DT **Patent**

LA English

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	EP 1151980	A1	20011107	EP 2001-110667	20010502
	R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT, IE, SI, LT, LV, FI, RO				
	US 20020026067	A1	20020228	US 2001-846318	20010502

RX (2) OF 5 **I** ==> **J**



I

(2) →

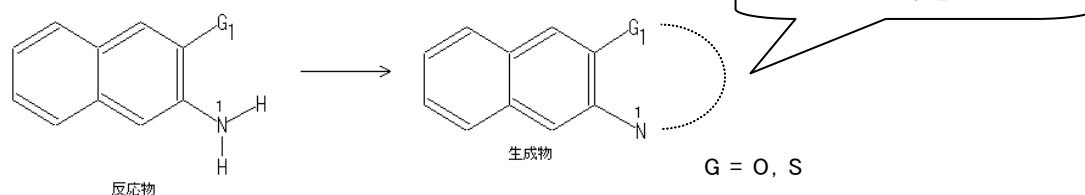
J  
YIELD 96%

RX (2) RCT I **37526-93-5**

:

## 練習問題 3

- 下記の環化反応を検索する。



=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

=>

Uploading C:\Documents and Settings¥...¥STN Express 8.4¥Queries¥test.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← サンプル検索を行う (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED VERIFICATIONS: 65246 TO 72274

PROJECTED ANSWERS: 7 TO 298

L2 7 SEA SSS SAM L1 ( 14 REACTIONS)

=> S L1 FUL

← フルファイル検索を行う

L3 120 SEA SSS FUL L1 ( 632 REACTIONS)

=> S L3 (L) ANY/CAT

← 触媒反応に限定する

L4 21 L3 (L) ANY/CAT

=> S L4 (L) 1/NS

← 一段階反応に限定する

L5 7 L4 (L) 1/NS

=> D BIB FHIT

← 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する

L5 ANSWER 1 OF 7 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN

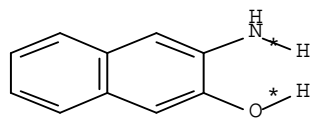
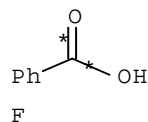
AN 151:33458 CASREACT [Full-text](#)

TI One-Pot Synthesis of 2-Substituted Benzoxazoles Directly from Carboxylic Acids

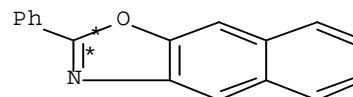
S0 Australian Journal of Chemistry (2008), 61(11), 881-887

CODEN: AJCHAS; ISSN: 0004-9425

RX(26) OF 27 F + AX ==> AY



(26) →



YIELD 87%

RX(26) RCT F 65-85-0

STAGE(1)

RGT G 7719-09-7 SOC12

CON 1 hour, 80 deg C

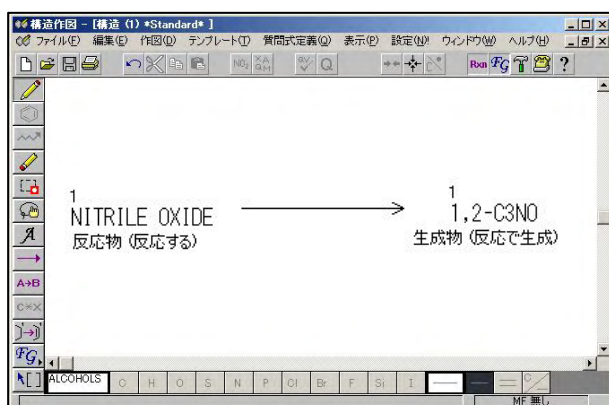
STAGE(2)

RCT AX **5417-63-0**

CAT **75-75-2** MeSO3H

## 練習問題 4

- ニトリルオキシド (NITRILE OXIDE) から, 1,2-C<sub>3</sub>NO 環を合成する反応を検索する.



- => FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る
- => que (NITRILE OXIDE/fg. rxn (S) 1,2-C3NO/fg. form) ← アップロードすると自動的に入力される質問式
- L1 QUE (NITRILE OXIDE/FG. RXN (S) 1,2-C3NO/FG. FORM)
- => S L1 ← L 番号を検索する
- L2 552 (NITRILE OXIDE/FG. RXN (S) 1,2-C3NO/FG. FORM)
- => S L2 (L) 80<=FG. YD ← 収率で限定する
- L3 241 L2 (L) 80<=FG. YD
- => S L3 (L) 1/NS ← 反応ステップ数で限定する
- L4 211 L3 (L) 1/NS
- => D BIB FCRD ← BIB FCRD 表示形式で表示する

L4 ANSWER 1 OF 211 CASREACT COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
 AN 154:64675 CASREACT [Full-text](#)  
 TI A novel synthesis of N-unsubstituted β-enamino thioesters from  
 3-arylisoaxazoles and 3-aryl-5-phenylthio-2-isoxazolines  
 AU Vitale, Paola; Di Nunno, Leonardo; Scilimati, Antonio  
 CS Dipartimento Farmaco-Chimico, Universita degli Studi di Bari 'A. Moro',  
 Bari, 70125, Italy  
 SO Synthesis (2010), (18), 3195-3203  
 CODEN: SYNTBF; ISSN: 0039-7  
 PB Georg Thieme Verlag  
 DT Journal  
 LA English

RX(1) OF 83



NOTE: dropwise addition of  
 CON: STAGE(1) room tempera

RE.CNT 29 THERE ARE 29 CITED  
 ALL CITATIONS AVAIL

あらかじめ件数を調べるときは, STNindex を利用する.

=> FILE CASREACT

=>

Uploading C:\Documents and Settings\...¥test.str  
 L1 STRUCTURE UPLOADED

=> IND CASREACT LCASREACT

STNindex で確認

=> S L1

552 FILE CASREACT

L2 QUE L1

=> FILE CASREACT

=> S L2

L3 552 (NITRILE OXIDE/FG. RXN (S) 1,2-C3NO/FG. FORM)

## 練習問題 5

- Esaprazole (64204-55-3) の反応情報を ReaxysFile ファイルで検索する。

5-1 : CAS 登録番号 (64204-55-3) から検索する。

=> FILE REAXYSFILE ← *ReaxysFile* ファイルに入る

=> S 64204-55-3 ← *CAS* 登録番号で検索する

L1 1 64204-55-3  
(64204-55-3/RN, BPR)

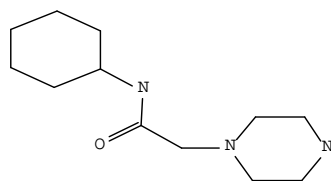
=> S L1 AND RX/FA ← *反応情報の有無を確認*

L2 1 L1 AND RX/FA

=> D IDE FRX ← *IDE FRX* 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 785765  
 Basic Pref. RN (BPR): **64204-55-3**  
 CAS Reg. No. (RN): **64204-55-3**  
 Chemical Name (CN): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 Autonom Name (AUN): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BRP	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	3
RXPRO	Substance is Reaction Product	3

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 6084857  
 Product AN (.PAN): 785765  
 Product (.PRO): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 6084857.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)  
 Reference(s):  
 1. Patent: Camillo Corvi CH 624944 1981 DE 2702537 1977, Chem. Abstr.,  
 87(152273)

5-2 : 化学物質名称 (Esaprazole) から検索する.

=> FILE REAXYSFILE ← *ReaxysFile* ファイルに入る

=> E ESAPRAZOLE/CN 5 ← 化学物質名称を *EXPAND* で確認する

```
E1      1      ESAACTIL-LAMIIDE/CN
E2      1      ESAIDROBENZILIDEN-DI-N-(2-AMINOTIAZOLO)/CN
E3      0 --> ESAPRAZOLE/CN
E4      1      ESBERICUMTM/CN
E5      1      ESCAMBIA BAY SEDIMENT; EXTRACT/CN
:
```

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E ESAPRAZOLE/CN 5 ← 化学物質名称を *EXPAND* で確認する

```
E1      1      ESAPON 1214/CN
E2      1      ESAPON 1850/CN
E3      1 --> ESAPRAZOLE/CN
E4      1      ESAQUA XD 401/CN
E5      1      ESAQUA XM 502/CN
:
```

=> S E3 ← *E* 番号で検索する

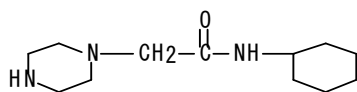
L1 1 ESAPRAZOLE/CN

=> D ← デフォルトの表示形式で表示する

```
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN
RN 64204-55-3 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN 1-Piperazineacetamide, N-cyclohexyl- (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN C 63
CN Esaprazole
CN Exaprazole
:
```

ReaxysFile ファイルに収録されている

```
LC STN Files: ADISINSIGHT, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAPLUS, CASREACT,
CHEMCATS, CIN, DDFU, DRUG, EMBASE, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IMSPATENTS, IMSRESEARCH,
IPA, MEDLINE, MRCK*, REAXYSFILE*, RTECS*, TOXCENTER, USAN, USPAT2, USPATFULL
(*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: WHO
```



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

21 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
21 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> FILE REAXYSFILE ← *ReaxysFile* ファイルに入る

=> S L1 ← *REGISTRY* ファイルの *L* 番号を使って検索

L2 1 L1

=> S L2 AND RX/FA ← 反応情報の有無を確認

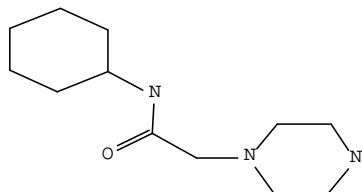
L3 1 L2 AND RX/FA

=> D IDE FRX

← IDE FRX 表示形式で表示する

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 785765  
 Basic Pref. RN (BPR): **64204-55-3**  
 CAS Reg. No. (RN): **64204-55-3**  
 Chemical Name (CN): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 Autonom Name (AUN): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 :



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BRP	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
:		

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	3
RXPRO	Substance is Reaction Product	3

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 6084857  
 Product AN (.PAN): 785765  
 Product (.PRO): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 6084857.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)  
 Reference(s):  
 1. Patent: Camillo Corvi CH 624944 1981 DE 2702537 1977, Chem. Abstr.,  
 87(152273)

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 4493589  
 Reactant AN (.RAN): 7489666  
 Reactant (.RCT): 4-cyclohexylcarbamoylmethyl-piperazine-1-carboxylic acid tert-butyl ester  
 Product AN (.PAN): 785765  
 Product (.PRO): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 4493589.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Solvent (.SOL): CH2Cl2, trifluoroacetic acid  
 Note(s) (.COM): Yield given  
 :

5-3 : 化学構造から検索する.

=> FILE REAXYSFILE ← *ReaxysFile* ファイルに入る

=&gt;

Uploading C:\Documents and Settings\...¥STN Express 8.4¥Queries¥test.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1 EXA ← サンプル検索を行う (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 2 TO 124

PROJECTED ANSWERS: 0 TO 0

L2 0 SEA EXA SAM L1

=> S L1 EXA FUL ← フルファイル検索を行う

L3 1 SEA EXA FUL L1

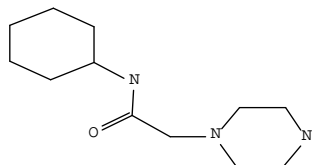
=> S L3 AND RX/FA ← 反応情報の有無を確認

L4 1 L3 AND RX/FA

=> D IDE FRX ← *IDE FRX* 表示形式で表示する

L4 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 785765  
 Basic Pref. RN (BPR): 64204-55-3  
 CAS Reg. No. (RN): 64204-55-3  
 Chemical Name (CN): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 Autonom Name (AUN): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	3
RXPRO	Substance is Reaction Product	3

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 6084857  
 Product AN (.PAN): 785765  
 Product (.PRO): N-cyclohexyl-2-piperazin-1-yl-acetamide  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 6084857.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)  
 Reference(s):  
 1. Patent: Camillo Corvi CH 624944 1981 DE 2702537 1977, Chem. Abstr., 87(152273)

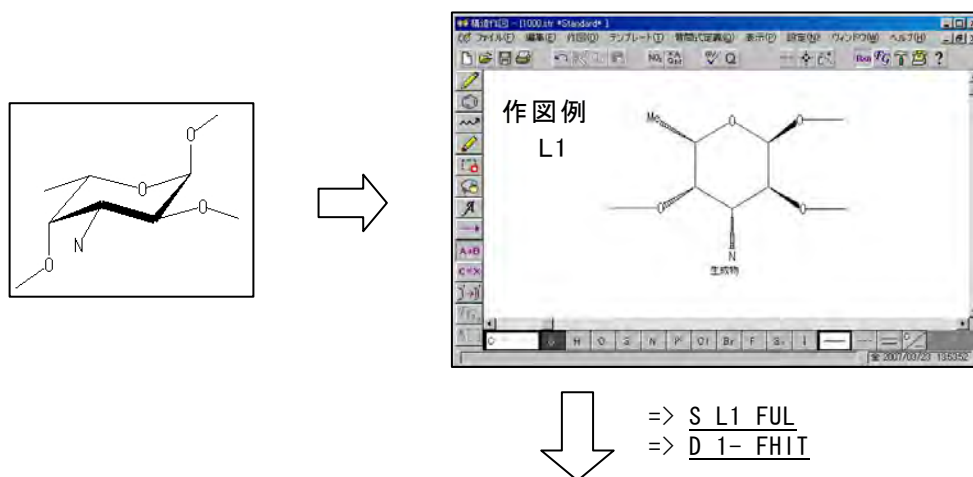
## *APPENDIX*



## CASREACT ファイル – 構造検索時の注意

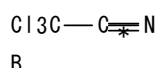
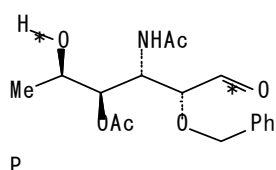
■ CASREACT ファイルでは、立体構造検索はできない。

- ・ 下図のような立体情報を含んだ作図を行っても、立体情報は検索結果には反映されず、目的以外のさまざまな異性体もヒットする。

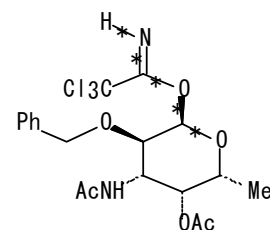


- ・ ヒットする反応の例

RX (7) OF 31 P + B ==> Q



(7) ⇒

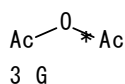
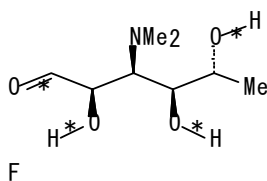


YIELD 53%

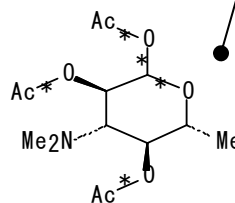
RX (7) RCT P 720694-50-8, B 545-06-2  
PRO Q **720694-51-9**  
CAT 6674-22-2 DBU  
SOL 75-09-2 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>  
CON SUBSTAGE (1) 0 deg C  
SUBSTAGE (2) room temperature  
NTE stereoselective

立体化学の異なる物質がヒット

RX (2) OF 21 ... F + 3 G ==> H...



(2) ⇒



YIELD 55%

RX (2) RCT F 519-21-1, G 108-24-7  
PRO H **869343-67-9**  
SOL 110-86-1 Pyridine  
CON overnight, room temperature  
NTE 37% yield over two steps from Josamycin propionate

## CASREACT ファイル – CA 由来のレコードの収録基準

### ■ 収録される反応の選択基準は、年代によって異なる。

- ・ 1985 ~ 1990 年 - 主要雑誌約 100 誌から、CA ファイルの有機化学セクション (セクション 21~34) に分類された文献中のすべての反応を収録。
- ・ 1991 年以降 - CA ファイルに収録されるすべての雑誌論文から選択された、合成的に意義のある反応を収録。
  - 1991 年 1 月 1 日以降に発行された、CA ファイル収録対象の特許から選択された、合成的に意義のある反応を収録。

### ■ 1991 年以降の収録規準

- ・ 以下の条件に合致する反応を報告する雑誌論文と特許を収録する。
  - 新規な、便利な、容易な、穏やかな、簡略化された、修正された、改善された、強化された簡単な、簡潔な、迅速な、有効な、等の反応 (単に新規化学物質の合成法のみを収録するわけではない。)
  - 立体選択性 (エナンチオ選択性, ジアステレオ選択性), 立体特異性, 位置選択性, 化学選択性 (他の官能基に影響を与えない特定官能基の変換) のある反応
  - 改善された高収率の反応; 低収率の反応を避けた反応スキーム
  - 種々の触媒, 溶媒, 試薬などを使った前進的反応研究
  - 代替法, ユニークな変換反応, 珍しい合成方法
  - 意図した生成物が報告されているが, 実際には成功しなかった反応
  - 新規または合成上有益であるという条件に合致した全合成
- ・ 以下のような反応を報告する文献は収録されない。
  - 動力学, スペクトル, またはその他のあらゆる物理化学的研究のための化合物の合成
  - 方法についてまったくコメントのない既知反応による化合物の合成
  - 標準的な標識化合物の合成法や, 標準的なアミノ酸や炭水化物のカップリング反応
  - 単純な塩, 水和物, 溶和物, および電荷移動錯体のような反応物と生成物の結合表に変化のないすべての反応
  - 生成物が構造で表現できない反応

- CASREACT ファイルに収録されないか、または収録が不完全な有機化学反応
  - ・ ポリマーの重合反応
  - ・ 工業的反応、スケールアップ等の化学工業的な文献
  - ・ モノマーの合成反応
  
- 多段階反応を収録する場合、以下の条件に合致するありふれた反応は省略される。
  - ・ 保護基の付加と除去に関する反応
  - ・ 光学活性体の分離
  - ・ 新しい C-C 結合生成の段階は収録することを原則とするが、例外的に省略される反応
    - ハロゲン化アルキル (C1-3) による簡単なアルキル化反応
    - カルボニル化合物からアルキル化されたアルコールを合成するグリニャール反応
  - ・ 多段階反応スキームの記述において、著者が省略した反応
  - ・ 省略するか否かは、著者の記述に基づき文献中での重要性から判断される。
  
- 例示されたすべての反応が収録されるとは限らないので、一般的に反応物と生成物は部分構造検索することが好ましい。

## CASREACT ファイル – 1990 年以前の収録雑誌

## ■ 1990 年以前の収録雑誌

Accounts of Chemical Research  
 Acta Chemica Scandinavica, Series B. Organic Chemistry and Biochemistry  
 Acta Chimica Hungarica  
 Anales de Quimica, Serie C: Quimica Organica y Bioquimica  
 Angewandte Chemie  
 Archiv der Pharmazie  
 Armyanskii Khimicheskii Zhurnal  
 Australian Journal of Chemistry  
 Bulletin de La Societe Chimique de France  
 Bulletin des Societes Chimiques Belges  
 Bulletin of the Chemical Society of Japan  
 Canadian Journal of Chemistry  
 Carbohydrate Research  
 Chemica Scripta  
 Chemical Reviews  
 Chemical and Pharmaceutical Bulletin  
 Chemiker-Zeitung  
 Chemische Berichte  
 Chemistry Letters  
 Collection of Czechoslovak Chemical Communications  
 Doklady Akademii Nauk SSSR  
 Electrochimica Acta  
 European Journal of Medicinal Chemistry -- Chimie Therapeutique  
 Gazzetta Chimica Italiana  
 Helvetica Chimica Acta  
 Heterocycles  
 Huaxue Xuebao  
 Indian Journal of Chemistry, Section A: Inorganic, Physical, Theoretical & Analytical  
 Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry, Including Medicinal Chemistry  
 Inorganic Chemistry  
 Inorganic Synthesis  
 Inorganica Chimica Acta  
 International Journal of Chemical Kinetics  
 International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes  
 International Journal of Peptide and Protein Research  
 Israel Journal of Chemistry  
 Izvestiya Akademii Nauk SSSR., Seriya Khimicheskaya  
 Izvestiya Vysshykh Uchebnykh Zavedenii, Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya  
 Journal fuer Praktische Chemie  
 Journal of Antibiotics  
 Journal of Carbohydrate Chemistry  
 Journal of Catalysis  
 Journal of Chemical Physics  
 Journal of Chemical Research, Synopses  
 Journal of Fluorine Chemistry  
 Journal of Heterocyclic Chemistry  
 Journal of Labelled Compounds and Radiopharmaceuticals  
 Journal of Medicinal Chemistry  
 Journal of Molecular Catalysis  
 Journal of Molecular Structure  
 Journal of Organic Chemistry  
 Journal of Organometallic Chemistry  
 Journal of Pharmaceutical Sciences  
 Journal of Physical Chemistry  
 Journal of the American Chemical Society

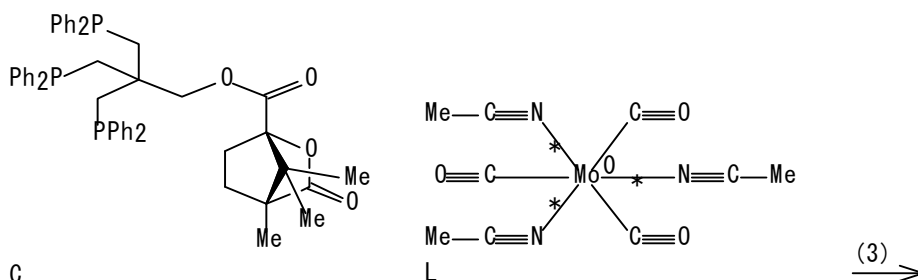
Journal of the Chemical Society of Pakistan  
 Journal of the Chemical Society, Chemical Communications  
 Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, Inorganic Chemistry  
 Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1  
 Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1: Organic and Bio-Organic Chemistry  
 Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2: Physical Organic Chemistry  
 Journal of the Indian Chemical Society  
 Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii  
 Khimiya Prirodnikh Soedinenii  
 Khimiko-Farmatsevticheskii Zhurnal  
 Kinetika i Kataliz  
 Langmuir  
 Liebigs Annalen der Chemie  
 Magnetic Resonance in Chemistry  
 Monatshefte fuer Chemie  
 Neftekhimiya  
 New Journal of Chemistry (1987-)  
 Nippon Kagaku Kaishi  
 Nouveau Journal de Chimie (1985-1986)  
 Nucleic Acids Symposium Series  
 Nucleosides Nucleotides  
 Organic Mass Spectrometry  
 Organic Preparations and Procedures International  
 Organic Syntheses  
 Organometallics  
 Pharmazie  
 Phosphorus and Sulfur and the Related Elements  
 Polish Journal of Chemistry  
 Polyhedron  
 Pure and Applied Chemistry  
 Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas  
 Revue Roumaine de Chimie  
 Spectrochimica Acta, Part A. Molecular Spectroscopy  
 Steroids  
 Sulfur Letters  
 Synthesis  
 Synthesis and Reactivity in Inorganic and Metal-organic Chemistry  
 Synthetic Communications  
 THEOCHEM  
 Teoreticheskaya i Eksperimental'naya Khimiya. Kiev  
 Tetrahedron  
 Tetrahedron Letters  
 Ukrainskii Khimicheskii Zhurnal (Russian Edition)  
 Uspekhi Khimii  
 Yakugaku Zasshi  
 Youji Huaxue  
 Yukagaku  
 Yuki Gosei Kagaku Kyokaishi  
 Zeitschrift fuer Anorganische Allgemeine Chemie  
 Zeitschrift fuer Chemie  
 Zeitschrift fuer Naturforschung, Teil B. Anorganische Chemie, Organische Chemie  
 Zhurnal Obshchei Khimii  
 Zhurnal Organicheskoi Khimii  
 Zhurnal Prikladnoi Khimii (Leningrad)

## CASREACT ファイル – 構造図が表示されない化合物

■ 構造図が大きすぎて表示されない場合もある。

- ・ “AVAILABLE VIA OFFLINE PRINT” のメッセージが表示される場合は、オフラインプリントで表示できる。

RX(3) OF 4 ... C + L ==> M



\* STRUCTURE DIAGRAM TOO LARGE FOR DISPLAY - AVAILABLE VIA OFFLINE PRINT \*

RX(3) RCT C 172685-31-3, L 15038-48-9  
 PRO M 172685-35-7  
 SOL 75-09-2 CH2C12

- ・ オフラインプリント以外に、REGISTRY/ZREGISTRY ファイルで確認できる場合もある。

=> FILE ZREGISTRY

← 接続時間料無料の ZREGISTRY ファイルに入る

=> S 172685-35-7

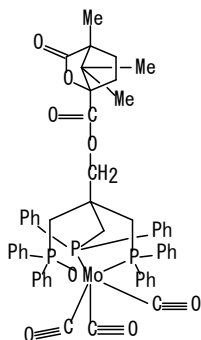
← CAS 登録番号で検索する (無料)

L1 1 172685-35-7  
 (172685-35-7/RN)

=> D SCAN

← 無料の表示形式で確認する

L1 1 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2011 ACS on STN  
 IN Molybdenum, tricarbonyl[3-(diphenylphosphino)-2,2-bis[(diphenylphosphino)methyl]propyl 4,6,6-trimethyl-3-oxo-2-oxabicyclo[2.2.1]heptane-1-carboxylate-P, P', P'']-, [OC-6-22-(1S)]- (9CI)  
 MF C54 H51 Mo O7 P3  
 CI CCS



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

# ReaxysFile ファイル – ハンドブックの構成

## ■ 主編および各増補編の全 27 巻の構成

官能基の種類	鎖状化合物	炭素環化合物	ヘテロ環化合物					
官能基のない化合物		5			20	23		
-OH 化合物	1	6	17					
=O 化合物		7			21	24		
=O + -OH 化合物		8						
-C(O)-OH 化合物	2	9						
-C(O)-OH + -OH 化合物 -C(O)-OH + =O 化合物	3	10						
-SO <sub>2</sub> H, -SO <sub>3</sub> H 化合物		11						
-NH <sub>2</sub> 化合物		12						
(-NH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> 化合物 -NH <sub>2</sub> + -OH 化合物		13		19			26	27
-NH <sub>2</sub> + =O 化合物 -NH <sub>2</sub> + -C(O)-OH 化合物		14	18		22	25		
-NH-OH, -NH-NH <sub>2</sub> 化合物		15						
-N=NH, -N=N+ 化合物	4							
-NH-NH-NH <sub>2</sub> , -N(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -N=N-NH <sub>2</sub> など								
-PH <sub>2</sub> , PH-OH, -P(OH) <sub>2</sub> , PH <sub>4</sub> , ..., -PO(OH) <sub>2</sub>		16						
-SiH <sub>3</sub> , -SiH <sub>2</sub> (OH), ...								
-BH <sub>2</sub> , -BH(OH), ..., -MG <sup>+</sup>			10 1S 1Se 1Te	20- 2S- 2Se- 2Te-				
-HGH, -HG <sup>+</sup> , ...					1N	2N	3N-	その他*

\* 1N と 10, 1N と 20, 2N と 10, 2N と 20, および O が S, Se, Te であるもの, ならびに B, Si, P など.

## ReaxysFile ファイル – 多成分物質

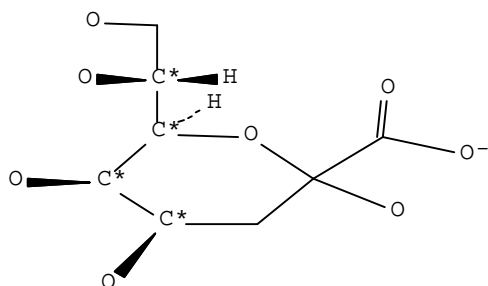
### ■ 塩の場合

Accession Number (AN): 4896708  
 CAS Reg. No. (RN): 81342-43-0, 90461-30-6, 92693-58-8,  
 101236-38-8, 111554-16-6, 128622-37-7,  
 146985-67-3  
 Chemical Name (CN): ammonium salt of  
 3-deoxy-D-manno-2-octulosonic acid  
 Lin. Struct. Formula (LSF): C8H13O8(1-)\*H4N(1+)  
 Fragm. Molec. Formula (FMF): C8 H13 O8 , H4 N ← フラグメント分子式  
 Molecular Formula (MF): C8 H13 O8 . H4 N  
 Molecular Weight (MW): 237.19, 18.04  
 Fragment AN (FAN): 4874757, 3587166 ← フラグメントレコード番号  
 Lawson Number (LN): 2702  
 File Segment (FS): Stereo compound  
 Compound Type (CTYPE): acyclic  
 Handbook Citation (HSO): 6-03  
 Entry Date (DED): 1992/08/28  
 Update Date (DUPD): 1994/02/18  
 Compound Disposition (CDISP): 4240140 Alternate BRN

CM 1

FAN 4874757  
 FMF C8 H13 O8

← フラグメントレコード番号 (/FAN)  
 ← フラグメント分子式 (/FMF)



CM 2

FAN 3587166  
 FMF H4 N

← フラグメントレコード番号 (/FAN)  
 ← フラグメント分子式 (/FMF)

## ■ 検索方法

### ・ フラグメント分子式で検索

- Fragm. Molec. Formula (FMF) : C8 H13 O8 , H4 N ← 各成分の分子式を収録

=> S C8H13O8/FMF AND H4N/FMF ← フラグメント分子式で検索する  
L1 3 C8H13O8/FMF AND H4N/FMF

=> D 1-3 IDE ← 回答全件を IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 3 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 10780690  
Lin. Struct. Formula (LSF): C8H13O8(1-)\*NH4(1+)  
Fragm. Molec. Formula (FMF): **C8 H13 O8 , H4 N**  
Molecular Formula (MF): C8 H13 O8 . H4 N  
Molecular Weight (MW): 255.225  
Fragment AN (FAN): 4195334, 3587166  
:

L4 ANSWER 2 OF 3 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 4896708  
CAS Reg. No. (RN): 81342-43-0, 90461-30-6, 92693-58-8,  
101236-38-8, 111554-16-6, 128622-37-7,  
146985-67-3  
Chemical Name (CN): ammonium salt of  
3-deoxy-D-manno-2-octulosonic acid  
Lin. Struct. Formula (LSF): C8H13O8(1-)\*H4N(1+)  
Fragm. Molec. Formula (FMF): **C8 H13 O8 , H4 N**  
Molecular Formula (MF): C8 H13 O8 . H4 N  
:

L4 ANSWER 3 OF 3 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 4731616  
CAS Reg. No. (RN): 81342-43-0, 90461-30-6, 92693-58-8,  
101236-38-8, 111554-16-6, 128622-37-7,  
146985-67-3  
Chemical Name (CN): ammonium  
3-deoxy- $\alpha$ -D-manno-2-octulopyranosonate  
Lin. Struct. Formula (LSF): C8H13O8(1-)\*H4N(1+)  
Fragm. Molec. Formula (FMF): **C8 H13 O8 , H4 N**  
:

### ・ フラグメントレコード番号で検索

=> S 4874757/FAN AND 3587166/FAN ← フラグメントレコード番号で検索する  
L1 1 4874757/FAN AND 3587166/FAN

=> D IDE ← IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 4896708  
:  
Fragment AN (FAN): **4874757, 3587166**  
:



回答が多い場合には、成分で絞り込むことができる。=> S L1 AND 2/NF

## ■ ポリマーの場合

Accession Number (AN): 8829009  
 Chemical Name (CN): polyethylene, Mv: 7.5E4  
 Compound Type (CTYPE): polymer (monomers given) ← 化学物質タイプ  
 Compos.: Comp. AN (COMPAN): 1730731 ← 成分レコード番号  
 Compos.: Comp. Name (COMPN): ethane ← 成分名称

### ・ 成分レコード番号と化学物質タイプで検索

=> S 1730731/COMPAN AND POLYMER?/CTYPE ← 成分レコード番号と化学物質タイプで検索  
 L1 3451 1730731/COMPAN AND POLYMER?/CTYPE

=> D IDE ← IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 3451 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 11533042  
 Chemical Name (CN): polyethylene, Mw = 987000, Mw/Mn = 4.1;  
 monomer(s): ethene  
 Compound Type (CTYPE): **polymer (monomers given)**  
 Compos.: Comp. AN (COMPAN): **1730731**  
 Compos.: Comp. Name (COMPN): ethylene  
 Entry Date (DED): 2008/11/14  
 Update Date (DUPD): 2008/11/14

No structure diagram available for this Document

:

## ■ 混合物の場合

Accession Number (AN): 8828919  
 Compound Type (CTYPE): mixture (composition completely given) ← 化学物質タイプ  
 Compos.: Comp. AN (COMPAN): 6407309, 8771734 ← 成分レコード番号  
 Compos.: Comp. Name (COMPN): trans-4'-tert-butyl-4-nitrostilbene, ← 成分名称  
 cis-4'-tert-butyl-4-nitrostilbene  
 Compos.: Comp. Conc. (COMPC): 95 mass percent (BRN=6407309), 5 mass ← 成分濃度  
 percent (BRN=8771734)

### ・ 成分レコード番号と化学物質タイプで検索

=> S 6407309/COMPAN AND 8771734/COMPAN AND MIXTURE?/CTYPE  
 L1 1 6407309/COMPAN AND 8771734/COMPAN AND MIXTURE?/CTYPE  
 ↑ 成分レコード番号と化学物質タイプで検索

=> D IDE ← IDE 表示形式で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 8828919  
 Compound Type (CTYPE): **mixture (composition completely given)**  
 Compos.: Comp. AN (COMPAN): **6407309, 8771734**  
 Compos.: Comp. Name (COMPN): trans-4'-tert-butyl-4-nitrostilbene,  
 cis-4'-tert-butyl-4-nitrostilbene  
 Compos.: Comp. Conc. (COMPC): 95 mass percent (BRN=6407309), 5 mass  
 percent (BRN=8771734)  
 Entry Date (DED): 2001/07/25  
 Update Date (DUPD): 2001/07/25

No structure diagram available for this Document

:

## ReaxysFile ファイル – 異性体

■ 立体異性体, 互変異性体は, それぞれ別レコードになっている.

・ 立体異性体に対しては, 同じ CONSID が付与されている.

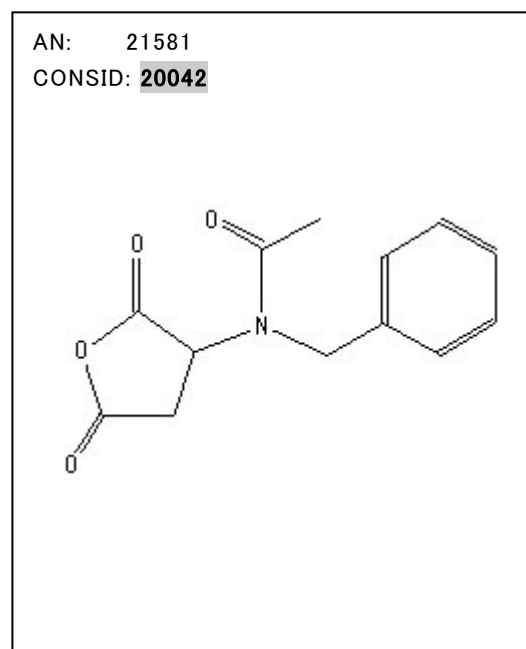
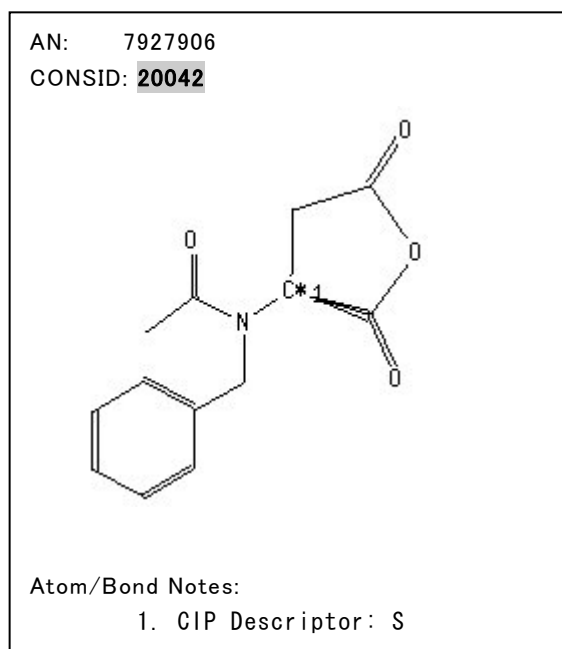
– CONSID で検索すると, 全立体異性体がヒットする.

■ 検索例 : CONSID 20042 を検索する.

=> FILE REAXYSFILE

=> S 20042/CONSID

L1 2 20042/CONSID



## ReaxysFile ファイル – 生体分子, 混合物, ポリマー

### ■ 2000 年以降, 生体分子, 混合物, ポリマーが収録された.

- ・ CTYPE フィールドに物質のタイプが収録されている.

```
=> E A/CTYPE 13
**** START OF FIELD ****
E3      0 --> A/CTYPE
E4      843114 ACYCLIC/CTYPE
E5      60316  BIOMOLECULE/CTYPE
E6      5556090 HETEROCYCLIC/CTYPE
E7      3581688 ISOCYCLIC/CTYPE
E8      2704   MIXTURE (COMPOSITION COMPLETELY GIVEN)/CTYPE
E9      22430   MIXTURE (COMPOSITION NOT GIVEN)/CTYPE
E10     22947   MIXTURE (COMPOSITION PARTIALLY GIVEN)/CTYPE
E11     44615   POLYMER (MONOMERS GIVEN)/CTYPE
E12     21368   POLYMER (MONOMERS NOT GIVEN)/CTYPE
**** END OF FIELD ****
```

### ■ 混合物

- ・ 成分が明確なもの, 不明なもの, 一部明確なものが収録されている.  
(薬理学データ, 生態学データが収録されている)

```
Accession Number (AN):      9476670
Chemical Name (CN):        p-nonylphenol; o-nonylphenol;
                           2,4-dinonylphenol; mixture of
Compound Type (CTYPE):    mixture (composition completely given)
Compos.: Comp. AN (COMPAN): 2047450, 2259809, 2384242
Compos.: Comp. Name (COMPN): 4-Hydroxy-1-nonyl-benzol,
                              2-Hydroxy-1-nonyl-benzol,
                              2,4-dinonylphenol
Compos.: Comp. Conc. (COMPC): 95.5 mass percent (BRN=2047450), 4.34 mass
                              percent (BRN=2259809), 0.05 mass percent
                              (BRN=2384242)
Entry Date (DED):         2003/10/23
Update Date (DUPD):       2003/10/23
```

No structure diagram available for this Document

Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	1
CTYPE	Compound Type	1
COMPAN	Composition: Comp. AN	3
COMPN	Composition: Comp. Name	3
COMPC	Composition: Comp. Conc.	3
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
ECTOX	Ecotoxicology	1

## ■ ポリマー

- 原料モノマーが明確なもの、不明なものが収録されている（主に合成情報を収録）。

Accession Number (AN): 8829009  
 Chemical Name (CN): polyethylene, Mv: 7.5E4  
 Compound Type (CTYPE): polymer (monomers given)  
 Compos.: Comp. AN (COMPAN): 1730731  
 Compos.: Comp. Name (COMPN): ethene  
 Entry Date (DED): 2001/07/25  
 Update Date (DUPD): 2001/07/25

No structure diagram available for this Document

Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	1
CTYPE	Compound Type	1
COMPAN	Composition: Comp. AN	1
COMPN	Composition: Comp. Name	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	1
RXPRO	Substance is Reaction Product	1

## ■ 生体分子

- 薬理学データ, 合成情報, スペクトル情報, 天然物からの単離などを収録。

Accession Number (AN): 9476505  
 Chemical Name (CN): phosphatidylcholine sodium salt  
 Compound Type (CTYPE): biomolecule  
 Entry Date (DED): 2003/10/23  
 Update Date (DUPD): 2003/10/23

No structure diagram available for this Document

Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	1
CTYPE	Compound Type	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
PHARM	Pharmacological Data	1

## PS ファイル – 概要

■ データベース作成機関 : Georg Thieme Verlag Thieme Chemistry

■ PS (Pharmaceutical Substances) ファイルは, 世界中の上市された重要な医薬品に関するデータベースで, 合成法も収録されている. PS ファイルに収録される物質は, 米国の FDA が承認した APIs (active pharmaceutical ingredients : 薬理活性成分) である. 反応物および生成物を構造で指定した反応検索ができる.

(2011 年 3 月現在)

項目	内容
収録源	冊子体「Pharmaceutical Substances – Synthesis, Patents, Applications」に対応. 雑誌および特許からの情報を収録.
収録年	1957 年以降
収録件数	2,460 件 (物質) / 8,200 件 (反応数)
更新頻度	年 2 回 (アラートはなし)

■ レコードは医薬品単位で, 以下の内容を収録している.

- ・ 物質同定情報 : 医薬品名, 国際一般名 (INN), 商品名, 分子式, 分子量, CAS 登録番号, EINECS 番号, ATC (WHO), 薬効/適応症, LD50, 化合物クラス, 誘導体
- ・ 上市情報および製剤情報 : 発売日, 上市国, 商品名, 会社名, 製剤情報
- ・ 反応情報
  - 合成法 (反応図) : TIFF 形式 (STN Express), JPEG 形式 (STN on the Web)
  - 生成物, 反応物, 中間体 (CAS 登録番号, 名称, 分子式, 構造)
- ・ 文献情報
  - 特許 (特許番号, 出願人名, 優先権主張日など)
  - 雑誌 (第一著者名, 雑誌略名, CODEN, 発行年, 巻, 号, ページ)

■ 特徴

- ・ 重要な医薬品に関する様々な情報 (薬効, 上市, 合成法など) を比較的安価に入手できる.
- ・ CAS 登録番号によるクロスオーバーが可能 (医薬品の CAS 登録番号付与率は 100 %).
- ・ 合成反応を構造検索することができる. 作図, 検索の方法は CASREACT ファイルと同じ.
  - ロールの指定のみ有効. 反応部位, マッピングは指定しても無視される.
  - 検索はフルファイル検索のみ可能.

## PS ファイル - レコード例

## ■ レコード例 (ALL 表示形式) (2,404 円 : 2011 年 3 月現在)

レコード番号 AN 266370  
 入力日 DED 20080731  
 国際一般名 (INN) CN GENERIC: Glipizide  
 CA 索引名 CN SYSTEMATIC: N-[2-[4-[[[(cyclohexylamino)carbonyl]amino]sulfonyl]phenyl]ethyl]-5-methylpyrazinecarboxamide  
 商品名 TN Glibenese; Glibenese; Munidiab; Ozidia; Glibenese; Minodiab; Minidiab; generic preparations  
 ATC (WHO) \*1 CC A10BB07  
 薬効/適応症 THER antidiabetic  
 CAS 登録番号 RN 29094-61-9  
 分子式 MF C21H27N5O4S  
 分子量 MW 445.54  
 EINECS 番号 EIN 249-427-6  
 LD 50 LD50 >3 g/kg (M, i.p.);1200 mg/kg (R, i.p.)  
 化合物クラス DEF Pyrazinecarboxamides  
 DEF Sulfonylurea compounds, derivatives

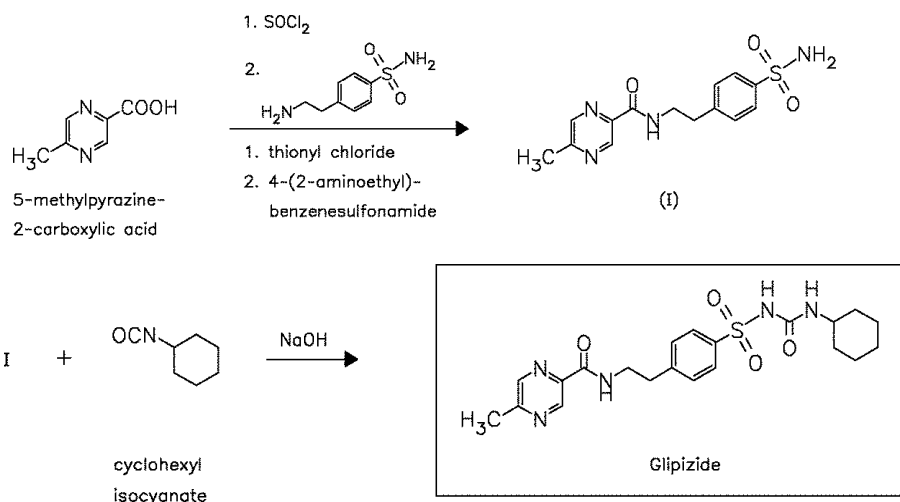
## 上市情報

TRD	LNY	LNC	TN	CO	STA	COM
1977	DE	Glibenese	Pfizer	wfm		
	FR	Glibenese	Pfizer			
	FR	Munidiab	Pfizer			
	FR	Ozidia	Pfizer			
	GB	Glibenese	Pfizer			
	GB	Minodiab	Pfizer			
	IT	Minidiab	Pfizer			
	US	generic preparations				

上市年 (LNY)	上市国 (LNC)	商品名 (TN)	会社名 (CO)	開発段階 (STA)*2	成分 (COM)
--------------	--------------	-------------	-------------	-----------------	-------------

薬剤情報 FRM tabl. 2.5 mg, 5 mg, 10 mg; tabl. 2.5 mg, 5 mg in comb. with metformine

## 合成スキーム PRE



## 反応関与物質情報 INT

RN. INT	MF. INT	CN. INT
35303-76-5	C8H12N2O2S	4-(2-aminoethyl)benzenesulfonamide;
33288-71-0	C14H16N4O3S	Benzenesulfonamide, 4-(2-aminoethyl)- N-[2-[4-(aminosulfonyl)phenyl]ethyl]-5- methylpyrazinecarboxamide;
3173-53-3	C7H11NO	Pyrazinecarboxamide, N-[2-[4- (aminosulfonyl)phenyl]ethyl]-5-methyl- cyclohexyl isocyanate; Cyclohexane, isocyanato-
5521-55-1	C6H6N2O2	5-methyl-2-pyrazinecarboxylic acid;
5521-55-1	C6H6N2O2	Pyrazinecarboxylic acid, 5-methyl- 5-methylpyrazine-2-carboxylic acid; Pyrazinecarboxylic acid, 5-methyl-

CAS 登録番号 (RN.INT)	分子式 (MF.INT)	化学物質名 (CN.INT)
----------------------	-----------------	-------------------

## 文献情報 RE

- (1) DAS 2 012 138 (Carlo Erba; appl. 14.3.1970; I-prior. 26.3.1969, 18.6.1969).
- (2) US 3 669 966 (Carlo Erba; 13.6.1972; I-prior. 26.3.1969, 18.6.1969).  
preparation of 5-methylpyrazine-2-carboxylic acid from 2,5-dimethylpyrazine  
via oxidation:
- (3) Ambrogli, V. et al.: *Arzneim.-Forsch. (ARZNAD)* 21, 200 (1971).
- (4) Stoehr: *J. Prakt. Chem. (JPCEAO)* (2), 51, 464 (1895).
- (5) Stoehr: *J. Prakt. Chem. (JPCEAO)* (2), 47, 480 (1893).
- (6) Kiener, A.: *Angew. Chem. (ANCEAD)* 104 (6), 748 (1992).  
electrochemical preparation of 5-methylpyrazine-2-carboxylic acid:
- (7) Goldberg, Yu.; Shymanska, M.: *Org. Prep. Proced. Int. (OPPIAK)* 23 (2),  
188 (1991).
- (8) Borsotti, G.P.; FoA, M.; Gatti, N.: *Synthesis (SYNTBF)* 1990 (3), 207.
- (9) Feldman, D. et al.: *Chem. Heterocycl. Compd. (N. Y.) (GHCCAL)* 31 (1),  
80 (1995).

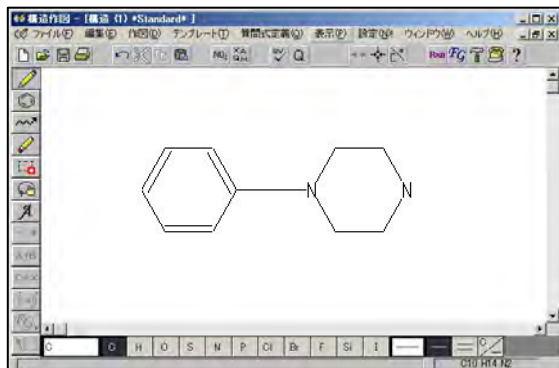
\*1 ATC (Anatomical, Therapeutic, Chemical) (WHO) のコードの内容は以下の URL で調べることができる。

[http://www.whocc.no/atc\\_ddd\\_index/](http://www.whocc.no/atc_ddd_index/)

\*2 STA フィールドに表示されるのは wfm (withdrawn from market: 市場から撤退) のみ。

## PS ファイル – 検索例

- 検索例：下記の構造（N-アрилピペラジン誘導体）を原料として用いた医薬品を検索する。  
（料金は 2011 年 3 月現在）



CASREACT ファイルや ReaxysFile ファイルでは、生成物を医薬品に限定することが難しい。  
PS ファイルは、医薬品のデータベースのため、効率的に探し出せる。



PS ファイルでは構造検索が可能。

料金も REGISTRY ファイルより安価なので、直接 PS ファイルで検索する。

=> FILE PS ← PS ファイルに入る

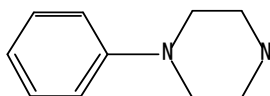
=>

Uploading C:\Documents and Settings\...\STN Express 8.4\Queries\APP-1.str

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE ← アップロードした構造を確認する（無料）

L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation

=> S L1 ← フルファイル検索 (4,725 円)

FULL SEARCH INITIATED 16:07:14

SCREENING COMPLETE - 102 REACTIONS TO VERIFY FROM 45 DOCUMENTS

100.0% DONE 102 VERIFIED 42 HIT RXNS 18 DOCS

SEARCH TIME: 00.00.02

L2 18 SEA SSS FUL L1 ( 42 REACTIONS)

サンプル検索はないため、FUL と入力しなくても、自動的にフルファイル検索になる。

=> D TRI 1-18 ← TRI 表示形式で、ヒットした医薬品名を確認する（無料）

L2 ANSWER 1 OF 18 PS COPYRIGHT 2011 THIEME on STN

AN 267438

CN GENERIC: Posaconazole

CN SYNONYM: Sch-56592

:

L2 ANSWER 2 OF 18 PS COPYRIGHT 2011 THIEME on STN

AN 267310

CN GENERIC: Aripiprazole

CN SYNONYM: OPC-14597

:

=&gt; D 2 ALL

← 興味ある回答の回答番号を指定し, ALL 表示形式で表示 (2,404 円)

L2 ANSWER 2 OF 18 PS COPYRIGHT 2011 THIEME on STN

AN 267310

DED 20080731

CN GENERIC: Aripiprazole

:

THER antipsychotic; Dopamin D2-antagonist

RN 129722-12-9

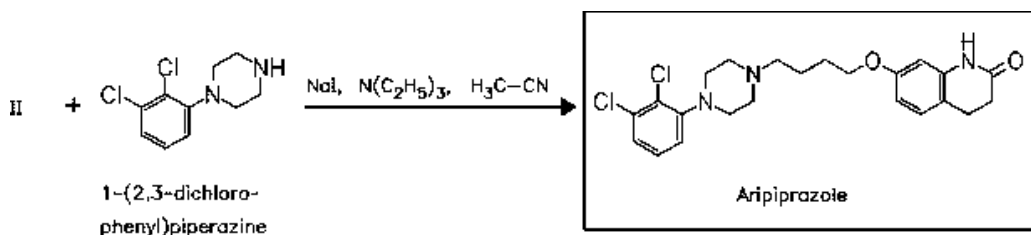
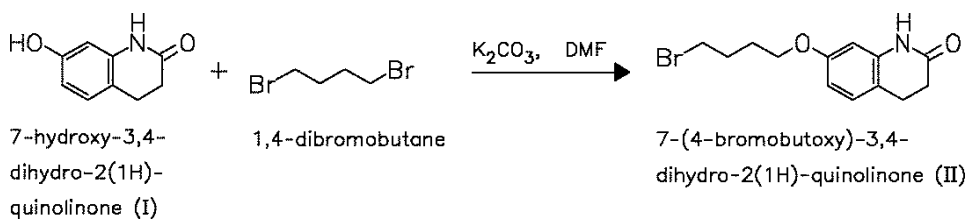
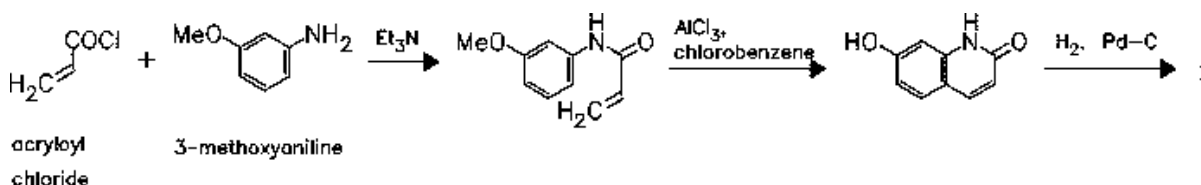
:

TRD

LNY	LNC	TN	CO	STA	COM
	DE	Abilify	Bristol-Myers Squibb		
	FR	Abilify	Bristol-Myers Squibb		
	GB	Abilify	Bristol-Myers Squibb		
	IT	Abilify	Bristol-Myers Squibb		
	JP	Abilify	Otsuka		
2002	US	Abilify	Otsuka		

FRM tabl 2 mg, 5 mg, 10 mg, 15 mg, 20 mg, 30 mg

PRE



RN. INT	MF. INT	CN. INT
814-68-6	C3H3ClO	acryloyl chloride; 2-Propenyl chloride
536-90-3	C7H9NO	m-anisidine; Benzenamine, 3-methoxy-
129722-34-5	C13H16BrNO2	7-(4-bromobutoxy)-3,4-dihydro-2(1H)-quinolinone; 2(1H)-Quinolinone, 7-(4-bromobutoxy)-3,4-dihydro-

RE

- (1) Oshiro, Y. et al.: J. Med. Chem. (JMCMAR) 41, 658-667 (1998).
- (2) US 5 006 528 (Otsuka; 9.4.1991; appl. 20.10.1989; J-prior. 31.10.1988).

improved process:

- (3) EP 367 141 (Otsuka; 10.1.1996; appl. 27.10.1989; J-prior. 31.10.1988).



**JAICI**

化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp