CAS STNext®

物質・物性・反応検索に！REAXYSFILESUB/REAXYSFILEBIB ファイルセミナー

化学情報協会　情報事業部

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

目次

- はじめに
- REAXYSFILESUB ファイルの概要
  - 物質同定情報
  - 物性情報
  - 反応情報
- REAXYSFILEBIB ファイルの概要

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS
A division of the American Chemical Society

はじめに

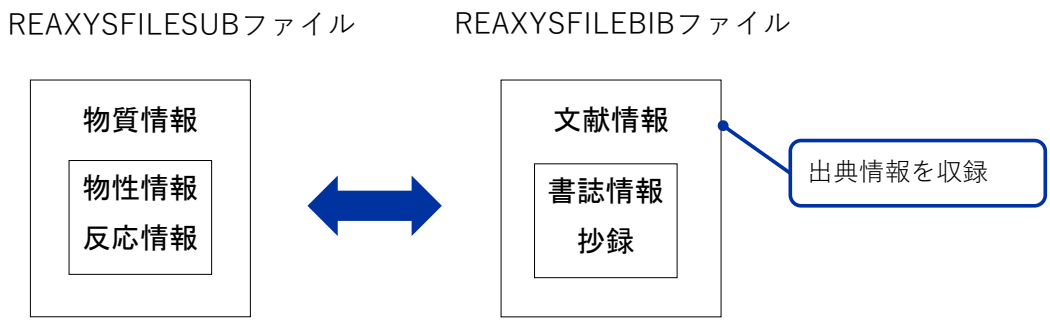
© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイルと REAXYSFILEBIB ファイル

REAXYSFILESUB ファイルは、物質、物性、反応情報を収録する化学物質情報データベースである

REAXYSFILEBIB ファイルは、書誌情報、文献情報を収録する文献データベースである

- REAXYSFILESUB ファイルの出典情報は、REAXYSFILEBIB ファイルで確認できる



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイルの概要

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイル

概要

REAXYSFILESUB ファイルは、様々な化学物質の物質同定情報、物性情報、反応情報を収録する化学物質情報データベースである

- 製作者：Elsevier Information Systems GmbH
- レコード構成：化学物質単位
- 収録情報：化学物質同定情報、物性情報、反応情報、出典情報
- 収録期間：1771 年～
- 収録件数：5,420 万件
- 更新頻度：週 2 回
- 特長：特許、雑誌などから物質同定情報、物性情報、反応情報を収録している
  出典情報は REAXYSFILEBIB ファイルに収録され、書誌情報・抄録を確認できる

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

レコード構成

物質に関連する、複数の物性情報、反応情報が収録されている

- 物質同定情報
- 収録物性・反応概要
- 物性情報
- 物性情報
- 反応情報
- 反応情報

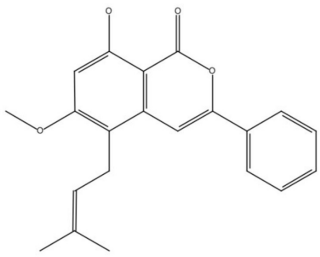
- レコード番号、 化学物質名、分子式、構造図
- 収録物性リストとデータ数、収録反応の有無とデータ数
- 約 110 以上の物性情報と出典情報
  - 物理的特性
  - 凝集状態
  - その他のデータ
  - 多成分系データ
  - 分光学的データ
- 反応情報と出典情報
  - この物質が反応物/生成物である反応、反応の詳細

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

レコード例

物質同定情報

```
AN      26969215 REAXYSFILESU
RN      1421341-46-9
CN      cajanolactone A
MF      C21 H20 O4
CMF     C21 H20 O4
LSF     C21H2004
INCHI   JCWMYWSAQHRMAA-UHFFFAOYSA-N
MW      336.387
MARKREF.CNT 0
REC     12
ED      Entered STN: 14 Jul 2020
        Last updated on STN: 28 Feb 2024
```



物質のレコード番号

物質名や分子式、構造図を収録

収録物性・反応概要

```
PROPERTIES
        MP Melting Point (5) (PHYS)
        IR IR spectroscopy (3) (SPEC)
        MS Mass Spectrometry (7) (SPEC)
        NMR NMR spectroscopy (16) (SPEC)
        UVS UV/VIS spectroscopy (3) (SPEC)
        CPD Crystal Property Description (2) (STATE)
        FINFO1 Further Information (1) (FURTHER)
        FINFO2 Further Information (15) (FURTHER)
        INP Isolation from Natural Product (8) (FURTHER)
        LB Substance Label (3) (FURTHER)
FA.RX   RX.ID; RX.PAN; RX.RAN   (7)
```

収録物性の概要。( ) はデータ数と物性カテゴリー

収録反応の概要。( ) はデータ数

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

レコード例

物性情報

Physical Properties (物理的特性)
– Melting Point (融点)

Spectroscopy (分光学的データ)
– IR Spectroscopy (赤外分光法)

```
Melting Point (5)
 Value      | Solvent    | Location            | Ref(s)
 (MP)       | (.SOL)     | (.LO)               | (REF)
 (Cel)      |            |                     |
============+============+===================+============
 154        | methanol   | supporting informati | 1
            |            | on
 154        |            |
 127 - 129  |            |
 125 - 127  |            |
 127 - 129  |            |

1. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et
2. AN 73103391: Journal: He, Qi-Fang
3. AN 66232552: Journal: Sudarshan, K
4. AN 63563249: Journal: Chen, Wen-Zh
```

```
IR spectroscopy (3)
 Keyword          | Original Text          | Solvent            | Location              | Ref(s)
 (.KW)            | (.TX)                  | (.SOL)             | (.LO)                 | (REF)
================+======================+===================+======================+============
 Bands; Spectrum | IR (KBr, cm<sup>-1</ | potassium bromide | supporting informati | 1; 2
                 | sup>): 3423, 2975, 1 |                   | on                   |
                 | 688, 1631, 1612, 157 |                   |                      |
                 | 5, 1499, 1380        |                   |                      |
 Bands           |                      | potassium bromide |                      | 3
 Bands           |                      | potassium bromide |                      | 4

1. AN 73103391: Journal: He, Qi-Fang et al., Org. Lett. (2018) Vol. 20, No.3, pp. 876 - 879
2. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vol. 24, No.2 arn.271
3. AN 66232552: Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J. Org. Chem. (2015) Vol. 2015, No.8, pp. 1797 - 1803
4. AN 63563249: m. Lett. (2014) Vol. 25, No.5, pp. 749 - 751
```

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

レコード例

物性情報

```
Crystal Property Description (2)
 Value      | Location            | Ref(s)
 (CPD)      | (.LO)               | (REF)
 (--)       |                     |
============+=====================+============
 colourless | supporting informati | 1; 2
            | on                  |
 colourless |                     | 3

1. AN 66232552: Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J.
2. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vo
3. AN 73103391: Journal: He, Qi-Fang et al., Org. Lett. (2018)
```

```
Isolation from Natural Product (8)
 Value                | Location            | Ref(s)
 (INP)                | (.LO)               | (REF)
 (--)                 |                     |
====================+=====================+============
 Cajanus cajan (Linn. | supporting informati | 1
 ) Millsp. (Fabaceae) | on                  |
 , leaves; collected  |                     |
 from Lingao County,
 Hainan Province, Pe
 ple's Republic of C
 ina; October, 2014
        :
leaves of Cajanus ca |                     | 2
jan; collected from  |                     |
Wenshan County, Yunn |                     |
an Province, China   |                     |
        :

1. AN 117864262: Journal: Tan, Ling-Xuan et al., Fitoterapia (2022) Vol. 160 arn.105229
2. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vol. 24, No.2 arn.271
        :
```

Further Properties (その他の物性)
– Isolation from Natural Product (天然物からの単離)

Aggregation State (凝集状態)
– Crystal Property Description (結晶性状)

出典情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

レコード例

反応情報

該当物質が反応物である反応

```
Reaction:
        Reaction ID:                    38015357
        Reactant AN (.RAN):             26969215
        Reactant (.RCT):                8-hydroxy-6-methoxy-5-(3-methylbut-2-en-1-yl)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one
        Product AN (.PAN):              26969216
        Product (.PRO):                 6-hydroxy-4-methoxy-3-(3-methylbut-2-enyl)x2011;2-(2-oxo-2-phenylethyl)benzoi
        Reference Count:                1
```

反応の詳細

```
Reaction Details:
        Reaction RID:                   38015357.1
        Reaction Classification (.CL): Preparation
        Product AN (.PRAN)              26969216
        Reactant AN (.RCAN):            3587155; 8128138
        Solvent AN (.SOLAN):            1718733
        Product:                        6-hydroxy-4-methoxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-2-(2-oxo-2-phenylethyl)benzoic acid
        Reagent:                        water; potassium hydroxide
        Solvent:                        ethanol
        Time:                           8 s
        Yield:                          82 percent
        Yield Numerical:                82
        Reference(s):                   63563249: Journal: Chen, Wen-Zhang et al., Chin. Chem. Lett. (2014) Vol. 25, No.5, pp. 749 - 751
```

出典情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

レコード例

反応情報

該当物質が生成物である反応

```
Reaction:
        Reaction ID:                    40217603
        Reactant AN (.RAN):             26969214
        Reactant (.RCT):                6-methoxy-8-(3-methylbut-2-enyloxy)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one
        Product AN (.PAN):              26969215; 28245859; 28245874
        Product (.PRO):                 8-hydroxy-6-methoxy-5-(3-methylbut-2-en-1-yl)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; 8-hydroxy-6-methoxy-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; C21H20O4
        Reference Count:                1
```

反応の詳細

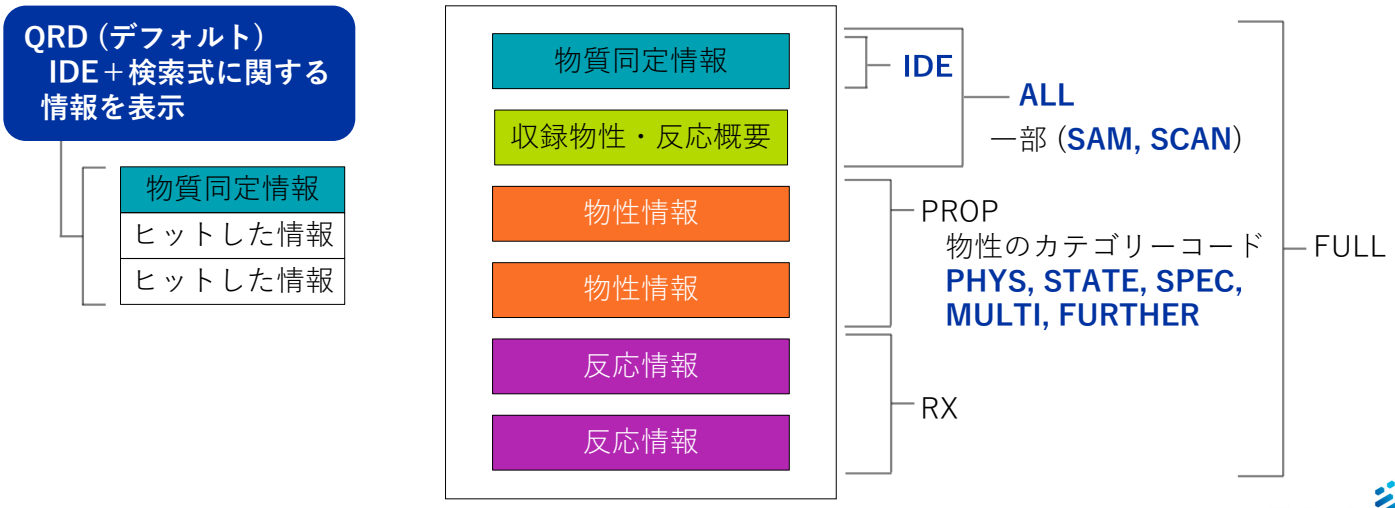
```
Reaction Details:
        Reaction RID:                   40217603.1
        Reaction Classification (.CL): Preparation
        Product AN (.PRAN)              26969215; 28245859; 28245874
        Solvent AN (.SOLAN):            1730800
        Product:                        8-hydroxy-6-methoxy-5-(3-methylbut-2-en-1-yl)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; 8-hydroxy-6-methoxy-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; C21H20O4
        Reagent:                        montmorillonite K10
        Solvent:                        dichloromethane
        Temperature:                    0 - 20 Cel
        Time:                           1.5 s
        Yield:                          30 percent; 20 percent; 18 percent
        Yield Numerical:                30; 20; 18
        Reference(s):                   66232552: Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J. Org. Chem. (2015) Vol. 2015, No.8, pp. 1797 - 1803
```

出典情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

表示形式

情報量が非常に多くなる可能性があるため、QRD 表示形式を推奨する。あるいは、
ALL 表示形式で収録物性・反応概要のデータ件数を事前に確認し、必要な情報を表示する。



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイルの物質同定情報

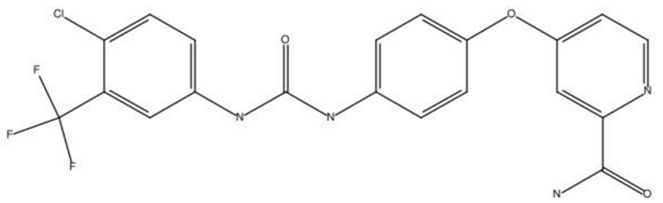
© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイルの物質同定情報

REAXYSFILESUB ファイルには、約 5,420 万件の化学物質のレコードが収録されている

レコード番号	AN	10488171 REAXYSFILESU
CAS RN®	RN	284461-74-1
化学物質名称	CN	N-(4-chloro-3-(trifluoromethyl)phenyl)-N'-(4-(2-carbamoyl-4-pyridyloxy)phenyl)urea; 4-{4-[({[4-chloro-3-(trifluoromethyl)phenyl]amino}carbonyl)amino]phenoxy}-2-pyridine carboxamide; BAY 43-9007; 4-{4-[3-(4-Chloro-3-trifluoromethyl-phenyl)-ureido]-phenoxy}-pyridine-2-carboxylic acid amide
物質タイプ	SD	heterocyclic
分子式	MF	C20 H14 Cl F3 N4 O3
成分分子式	CMF	C20 H14 Cl F3 N4 O3
示性式	LSF	C20H14ClF3N4O3
標準 InChi Key	INCHI	UAEWBZYTKIMYRQ-UHFFFAOYSA-N
InChi Key	AINCHI	UAEWBZYTKIMYRQ-PAIUYCELCZ
分子量	MW	450.804
関連マルクーシュ構造の数	MARKREF.CNT	5
文献数	REC	165
データ入力日	ED	Entered STN: 14 Jul 2020
データ更新日		Last updated on STN: 24 Jun 2024

構造図



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

辞書検索の主な検索フィールド

辞書検索により化学物質を検索できる

検索フィールド	内容	入力例	備考・収録率
/BI (またはなし)	基本索引 (CN, CNS から切り出された語)	S ?URIDIN? AND HYDROXY?	前方、後方、中間一致検索が利用可能
/CN	化学物質名	S CHOLESTEROL?/CN	前方一致検索のみ利用可能 59%
/CNS	化学物質名セグメント	S ?CHOLESTERYL/CNS	前方、後方、中間一致検索が利用可能
/RN	CAS RN® (CAS 登録番号)	S 100-03-8/RN	19%
/MF	分子式	S C4H9N5/MF	96%
/ELS	元素種	S L1 AND NA/ELS	
/SD	物質のタイプ	S HETEROCYCLIC/SD	24%
/REC	文献数	S L1 AND 100<=REC	

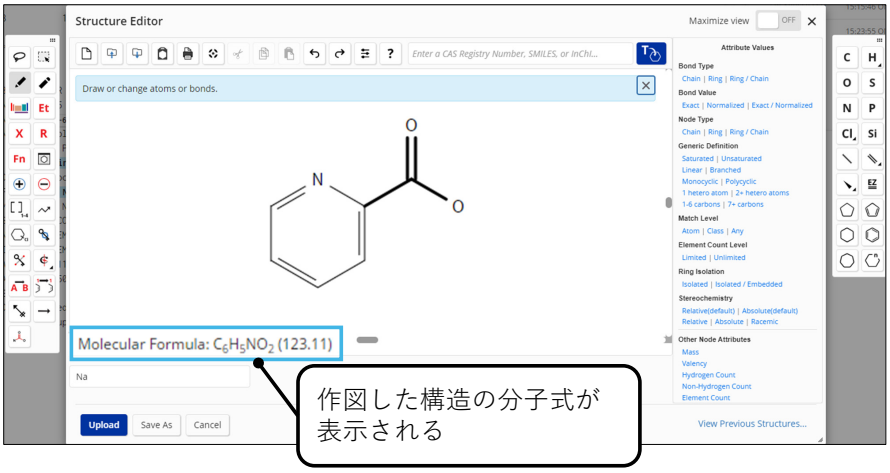
REAXYSFILESUB サマリーシート： https://web.cas.org/marketing/solutions/stn-ip/stn-database/reaxysfilesub.pdf

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

化学物質名称の注意点

化学物質検索 (/CN) を行うと複数の物質レコードがヒットすることがあるため、ノイズを防ぐには分子式 (/MF) などで限定するか、構造検索を行う

– 構造作図画面で化学物質を作図すると、分子式が表示されるので参考になる



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 1

ピリジン-2-カルボン酸の検索

```
=> FILE REAXYSFILESUB                                  ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=> E PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN                     ← 化学物質名を/CN で EXPAND する
E1          1     PYRIDINE-2-CARBOXYLATEHEXADECYL-TRIMETHYL-AMMONIUM/CN
E2          1     PYRIDINE-2-CARBOXYLATETRIMETHYL-TETRADECYL-AMMONIUM/CN
E3         28 --> PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN
E4         21     PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID /CN
:

=> S E3                                                ← E 番号で検索する
L1         28 "PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID"/CN

=> E C6H5NO2/MF                                        ← 分子式を確認する
E1          1     C6H5NO11U.2H2O.2NA/MF
E2          1     C6H5NO12V2.H2O.2K/MF
E3        291 → C6H5NO2/MF
E4          1     C6H5NO2.0C26H36AU6N10S6/MF
:

=> S E3                                                ← E 番号で検索する
L2        291 C6H5NO2/MF

=> S L1 AND L2                                         ← L1 と L2 を AND 演算する
L3          1 L1 AND L2
```

複数の回答がヒットした

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

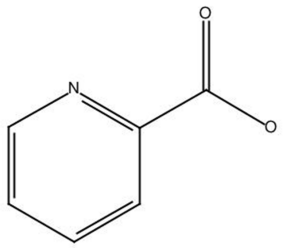
検索例 1

```
=> D ALL                                        ← ALL 表示形式で表示する

L3      ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      109595   REAXYSFILESU
RN      98-98-6
CN      2-Picolinic acid; pyridine-2-carboxylic acid; 2-pyridinecarboxylic
        acid; Picolinic acid; pyridine-2-carboxylic acid; 2-pyridinic acid;
        Pyridine-2-carboxylic acid
SD      heterocyclic
MF      C6 H5 N O2
CMF     C6 H5 N O2
LSF     C5NH4CO2H
INCHI   SIOXPEMLGUPBBT-UHFFFAOYSA-N
AINCHI  SIOXPEMLGUPBBT-QDQILVOLCU
MW      123.111
MARKREF.CNT 50
REC     10552
ED      Entered STN: 14 Jul 2020
        Last updated on STN: 27 Jun 2024
```

物質同定情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 1




```
PROPERTIES
        DEN Density of the Liquid (9) (PHYS)
        DE Dissociation Exponent  (94) (PHYS)
        ELE Electrical Data (3) (PHYS)
        EM Electrical Moment (1) (PHYS)
        HCOM Enthalpy of Combustion (1) (PHYS)
        HFOR Enthalpy of Formation (3) (PHYS)
        HFUS Enthalpy of Fusion (1) (PHYS)
        HSB Enthalpy of Sublimation (3) (PHYS)
        IEP Isoelectric Point  (2) (PHYS)
        LVSM Liquid/Vapor Systems (MCS) (1) (PHYS)
             :
```

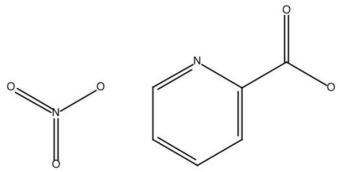
収録物性・反応概要

収録物性・反応概要は QRD 表示形式には含まれない。
ALL 表示形式には含まれる

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 1（参考）

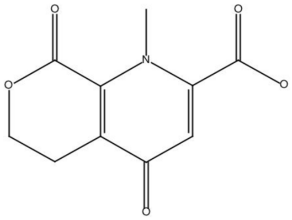
```
=> S L1 NOT L3            ← /CN でヒットした他の回答を確認する
L4          27 L1 NOT L3

=> D SCAN

L4    27 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
CN    pyridine-2-carboxylic acid; nitrate; Pyridin-2-carbonsaeure;
      Nitrat; Pyridine-2-carboxylic acid, compound with nitric acid
MF    C6 H5 N O2 . H N O3
SD    heterocyclic
```



```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):10
            :
```

各成分や部分構造の名称が ;(セミコロン) で区切られ収録されており、これが /CN の検索でヒットするためノイズが含まれる

```
L4    27 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
CN    1-Methyl-1.4.5.6-tetrahydro-4.8-dioxo-8H-pyrano03C; 3.4-b03E;
      pyridine-2-carboxylic acid; 1-methyl-4,8-dioxo-4,5,6,8-tetrahydro-
      1(i)H-pyrano[3,4-(i)b]pyridine-2-carboxylic acid;
      1-Methyl-4,8-dioxo-4,5,6,8-tetrahydro-1H-pyrano[3,4-b]pyridine-2-
      carboxylic acid
MF    C10 H9 N O5
SD    heterocyclic
```

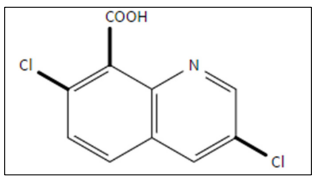


```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 2

右の構造の物質を分子式を用いて検索する




```
=> FILE REAXYSFILESUB                          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=> E C10H5CL2NO2/MF                            ← 分子式を /MF で EXPAND する
E1          4     C10H5CL2NO.CLH/MF
E2          1     C10H5CL2NO.H/MF
E3        156 --> C10H5CL2NO2/MF
E4         60     C10H5CL2NO2S/MF
E5          8     C10H5CL2NO2S2/MF
:

=> S E3                                        ← E 番号で検索する
L1        156 C10H5CL2NO2/MF

=> S L1 AND (DICHLORO AND ?CARBOXY?)/CNS       ← 化学物質名セグメント (/CNS) で部分名称を検索する
L2         17 L1 AND (DICHLORO AND ?CARBOXY?)/CNS

=> SEL L2 CN                                   ← SELECT コマンドで名称を抽出する
E1 THROUGH E32 ASSIGNED
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 2

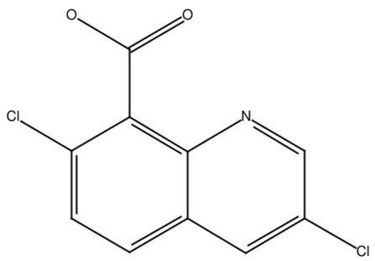
```
=> D SEL                                                    ← 抽出した化学物質名を表示する
E1          2     2,7-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN
E2          2     3,7-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID/CN   ← 構造と一致する化学物質名
E3          2     4,7-DICHLORO-QUINOLINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN
E4          2     5,6-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID/CN
E5          2     5,7-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN
E6          2     6,8-DICHLORO-QUINOLINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN
E7          2     6,8-DICHLORO-QUINOLINE-3-CARBOXYLIC ACID/CN
E8          2     6,8-DICHLORO-QUINOLINE-5-CARBOXYLIC ACID/CN
E9          2     7,8-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN
E10         1     DICHLORO-QUINOLIN-8-CARBOXYLIC ACID/CN
E11         1     DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN
:
=> S L2 AND E2                                              ← L3 を E2 で限定する
L3          1 L2 AND "3,7-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID"/CN

=> D                                                        ← QRD 表示形式（デフォルト）で表示する

L3     ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN     7761858   REAXYSFILESU
RN     84087-01-4
CN     3,7-dichloro-quinoline-8-carboxylic acid; quinclorac;
       3,7-dichloro-8-quinolinecarboxylic acid; quinchlorac;
       3,7-Dichloro-quinoline-8-carboxylic acid
```

物性や反応情報を検索していないので
IDE 表示形式と同じ情報が表示される

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 2

```
SD     heterocyclic
MF     C10 H5 Cl2 N O2
CMF    C10 H5 Cl2 N O2
LSF    C10H5Cl2NO2
INCHI  FFSSWMQPCJRCRV-UHFFFAOYSA-N
AINCHI FFSSWMQPCJRCRV-YHMJCDSICB
MW     242.061
MARKREF.CNT 3
REC    1408
ED     Entered STN: 15 Jul 2020
       Last updated on STN: 27 Jun 2024
```



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

参考：物質のタイプ

約 1,313 万件 (全体の 24%) のレコードの SD フィールドに、物質のタイプが収録されている

– /SD : 物質のタイプ

物質のタイプ	物質のタイプ
ACYCLIC	MARKUSH STRUCTURE
ALLOY	MINERAL
BIOMOLECULE	MIXTURE (COMPOSITION COMPLETELY GIVEN)
COMPOUND	MIXTURE (COMPOSITION NOT GIVEN)
COORDINATION COMPOUND	MIXTURE (COMPOSITION PARTIALLY GIVEN)
GLASS OR CERAMIC MATERIAL	POLYMER (MONOMERS GIVEN)
HETEROCYCLIC	POLYMER (MONOMERS NOT GIVEN)
ISOCYCLIC	SOLID SOLUTION
ISOTOPE OR ISOTOPE CONTAINING COMPOUND	

参考：物質のタイプの例

2000 年以降、生体分子、混合物、ポリマーも収録対象である

```
AN      9476670    REAXYSFILESU
CN      p-nonylphenol; o-nonylphenol; 2,4-dinonylphenol; mixture of
SD      mixture (composition completely given)
COMPAN 2047450; 2259809; 2384242
COMPN   4-Nonylphenol; nonylphenol; 2,4-dinonylphenol
COMPC   95.5 weight percent; 4.34 weight percent; 0.05 weight percent
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 14 Jul 2020
        Last updated on STN: 19 Jan 2024

        Substance image not available

PROPERTIES
        LB Substance Label (1) (FURTHER)
```

混合物

構造はほぼ収録されていない

```
AN      11381722    REAXYSFILESU
CN      polybutylene terephthalate
SD      polymer (monomers given)
COMPAN 1633445; 1909333
COMPN   Butane-1,4-diol; terephthalic acid
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 14 Jul 2020
        Last updated on STN: 19 Jan 2024

        Substance image not available

FA.RX   RX.ID; RX.PAN; RX.RAN    (1)
```

ポリマー

構造はほぼ収録されていない

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

構造検索

構造検索により化学物質を検索できる

- 構造検索コマンド： => S L# 検索タイプ 検索範囲
  - 検索タイプ

検索タイプ	内容
EXA (完全一致検索)	構造質問式に完全に一致する物質を検索
FAM (ファミリー検索)	EXA に加えて他の成分が含まれていてもよい
CSS (閉構造部分構造検索)	FAM に加えて可変構造質問式を使用できる 特定の位置に置換基を含めることができる
SSS（部分構造検索 (デフォルト))	CSS に加えて追加の置換基が存在してもよい

  - 検索範囲

検索範囲	内容
SAM (サンプル検索 (デフォルト))	フルファイルの一部 (10 %) をテスト的に検索
FUL (フルファイル検索)	ファイルのすべて (100 %) を検索

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

構造検索

- システム制限
  - REAXYSFILESUB ファイルの構造検索は、REGISTRY ファイルの構造検索と仕組みが異なり、イタレーション検索を行わない

検索範囲	回答
SAM (サンプル検索)	50
FUL (フルファイル検索)	150 万

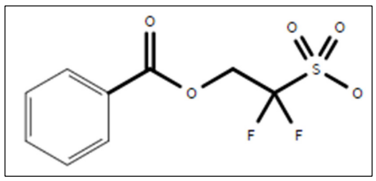
```
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:46:25
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -       0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED    5174921 ITERATIONS                          14 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.06

L2          14 SEA SSS SAM L1
```

サンプル検索の際、REGISTRY ファイルで表示される FULL FILE PROJECTIONS (フルファイル検索の予想) の表示はない

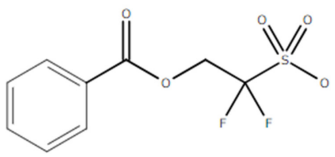
© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

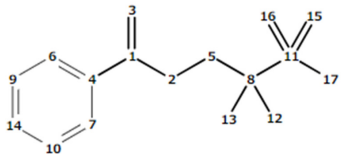
検索例 3

右の構造の物質を誘導体も含め構造検索する



```
=> FILE REAXYSFILESUB                                  ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=>
Uploading structure file: 2024_0012_Structure          ← 構造質問式をアップロードする
```



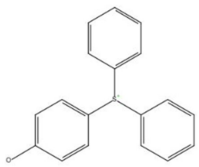


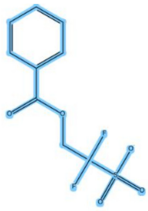
```
Node Attributes
Ring Nodes : 4  6  7  9  10  14
Chain Nodes : 1  2  3  5  8  11  12  13  15  16  17
Bond Attributes
 :

L1      STRUCTURE UPLOADED
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 3

```
=> S L1                                                ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
SAMPLE SEARCH INITIATED 11:41:14 FILE 'REAXYSFILESU'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -        0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED    1256709 ITERATIONS                          50 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L2           50 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN                                              ← SCAN 表示形式で表示する

L2      50 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
CN      Benzoic acid-2,2-difluoro-2-sulfo-ethyl ester
        diphenyl-4-hydroxyphenylsulfonium salt
MF      C9 H7 F2 O5 S . C18 H15 O S
```





```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):10      ← SCAN で表示したい件数を入力
```

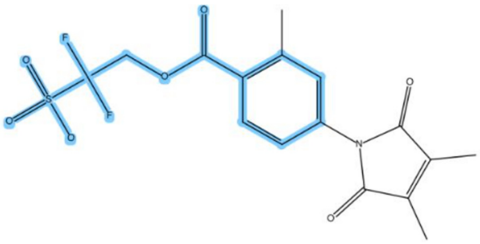
サンプル検索を行うと、最大 50 件回答が得られる。意図した回答が得られているかフルファイル検索前に確認できる

SCAN 表示形式には、化学物質名 (CN)、 分子式 (MF)、物質のタイプ (SD)、 構造図が含まれる。回答番号の指定はできず、ランダムに回答が表示される

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 3

```
L2      50 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
MF      C16 H15 F2 N O7 S
```



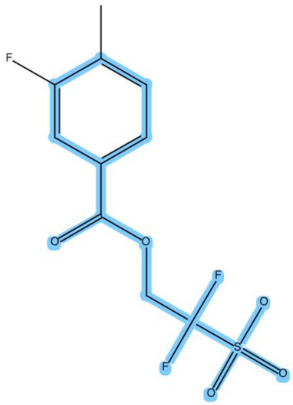
```
                        :
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END          ← END と入力して終了する

=> S L1 FUL                                                 ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う

FULL SEARCH INITIATED 11:41:48 FILE 'REAXYSFILESU'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -        0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED   51776416 ITERATIONS                          1895 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3          1895 SEA SSS FUL L1
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 3

```
=> D                                                        ← QRD 表示形式（デフォルト）で表示する

L3      ANSWER 1 OF 1895 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      60144114   REAXYSFILESU
MF      C10 H9 F3 O5 S
CMF     C10 H9 F3 O5 S
LSF     C10H9F3O5S
INCHI   KHTXYNUVXSSMGI-UHFFFAOYSA-N
MW      298.24
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 3 Jul 2024
        Last updated on STN: 3 Jul 2024
```

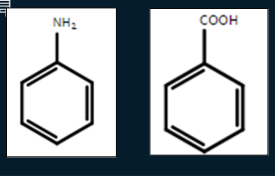
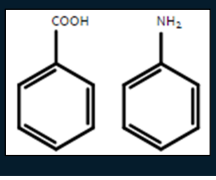
物性や反応情報を検索していないので
IDE 表示形式と同じ情報が表示される



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

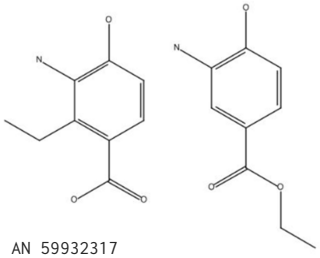
参考：REGISTRY ファイルとの違い

作図画面に複数のフラグメントを描いた時の違い

	別々に作図して AND 演算	同一画面に作図
		
REGISTRY	①②③ がヒット	② がヒット
REAXYSFILE SUB	①②③ がヒット	**①② がヒット**

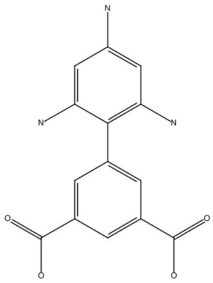
異なる点

① A, B が別成分



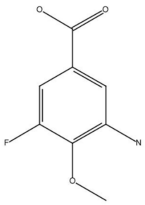
AN 59932317
MF C9H11NO3.C9H11NO3

② A, B が同一成分中



AN 60158427
MF C14 H13 N3 O4

③ A, B が重複して存在



AN 60138713
MF C8H8FNO3

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

参考：REGISTRY ファイルとの違い

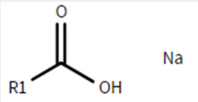
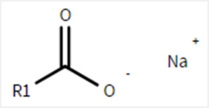
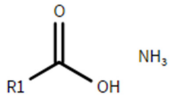
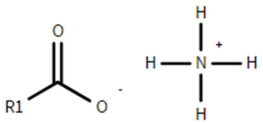
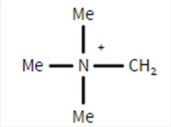
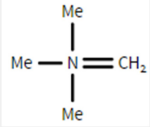
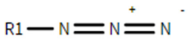
以下の検索機能は利用できない

- 環に繰り返しグループを 2 つ以上使った作図
- 可変置換位置を 2 つ以上使った作図
- 可変置換位置の置換基として一般式を利用した作図
- 立体構造を含む作図
- 繰り返しを指定した R グループの作図

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

参考：REGISTRY ファイルとの違い

一部の物質は登録形式が異なるため、分子式や構造で検索する際は違いを考慮する

物質の種類	REGISTRY	REAXYSFILESUB
カルボン酸塩		
カルボン酸アンモニウム		
窒素イリド		
アジド		

作図の際には、電荷は特に指定しなくてよい

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイルの物性情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

物性情報の概要

5 カテゴリーに分類される 110 以上の物性情報が収録されている

- **Physical Properties (PHYS) - 物理的特性**
  - 例：沸点 (BP)、融点 (MP)、昇華点 (SP)、他 39 物性
- **Spectroscopy (SPEC) - 分光学的データ**
  - 例：電子スピン共鳴スペクトル (ESR)、赤外スペクトル (IR)、核磁気共鳴スペクトル (NMR)、他 9 物性
- **Aggregation State (STATE) - 凝集状態**
  - 例：結晶系データ (CSYS)、気相 (GP)、液相 (LQPH)、他 9 物性
- **Multi-Component Systems (MULTI) - 多成分系データ**
  - 例：電気的データ (EDM)、液-液系データ (LLSM)、光学データ (ODM)、他 12 物性
- **Further Properties (FURTHER) - その他の物性**
  - 例：立体配座 (CNF)、爆発限界 (EL)、磁気的データ (MAG)、他 28 物性

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

全物性の確認

REAXYSFILESUB ファイルで調べられる物性は、=> **HELP PROP** で確認できる

```
=> FILE REAXYSFILESUB
=> HELP PROP

Properties may be searched in Field Availability, Properties
(/FA.P) by using name or code □□□ see table below.

Search Examples:
= > S BP/FA.P
= > S Boiling Point/FA.P

Physical Properties:
Name                                    Code
----------------------------------------  -----
Boiling Point                           BP
Bulk Viscosity                          BV
Critical Micelle Concentration          CMC
Density of the Liquid                   DEN
Dielectric Constant                     DIC
        :
```

```
Further Properties:
Name                                    Code
----------------------------------------  -----
Acoustic Properties                     SOUND
Autoignition                            AIT
Chemical Derivative                     CDER
Circular Dichroism                      CDIC
Compressibility                         CMP
        :

Multi-Component Systems:
Name                                    Code
----------------------------------------  -----
Adsorption                              ADSM
Association                             ASSM
Azeotropes                              AZE
Boundary Surface Phenomena              BSPM
        :
```

物性名

物性コード

REAXYSFILESUB ユーザーガイド - 物性・反応情報　物性用語集：　https://www.jaici.or.jp/stn-ip-protection-suite/cas-stnext/documents/

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

物性情報の検索フィールド

物性情報の検索では、以下の検索フィールドを利用する

- /FA.P フィールド：利用可能な物性
  - => HELP PROP 一覧の物性名や物性コードを確認・検索する時に利用
- /KW フィールド：キーワード
  - 物性情報に含まれる物性に関するキーワードを確認・検索する時に利用

=> S BOILING POINT/FA.P
または => S BP/FA.P

```
Boiling Point (1)
 Value      | Pressure   | Ref(s)
 (BP)       | (.P)       | (REF)
 (Cel)      | (Torr)     |
============+============+============
 86         | 5          | 1; 2
```

=> S ELECTRICAL DATA/FA.P
または => S ELE/FA.P

```
Electrical Data (2)
 Keyword                | Crit. Temp.  | Ref(s)
 (.KW)                  | (.CRIT)      | (REF)
                        | (Cel)        |
=======================+==============+
 Superconductivity      | -269.96      | 1
 Superconductive tran   |              | 1
 sition temperature     |              |
```

=> S SUPERCONDUCTIVITY/KW

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

物性情報の検索の流れ

物質を検索する — 化学物質名称、構造質問式など

↓

調べたい物性情報の有無を確認する — /FA.P か /KW フィールドを利用

↓

適切な表示形式で表示する

- 検索式に関する情報を表示する → QRD 表示形式（デフォルト）
- 物性の種類やデータ数を事前に確認し必要な情報を表示する → ALL 表示形式 → 出力したい情報の表示形式

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 4

三フッ化プラセオジム (13709-46-1) の溶解度 (SLB) を調べる

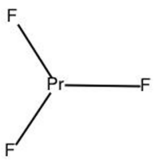
```
=> FILE REAXYSFILESUB                          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=> S 13709-46-1/RN                             ← CAS RN® を /RN で検索する
L1           5 13709-46-1/RN

=> S L1 AND SLB/FA.P
        376408 SLB/FA.P
L2           1 L1 AND SLB/FA.P


=> D ALL                                       ← ALL 表示形式で表示する

L2     ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN     16052791   REAXYSFILESU
RN     13709-46-1
CN     praseodymium(III) fluoride; praseodymium trifluoride; praseodymium fluoride
SD     coordination compound
MF     F3 Pr
CMF    F3 Pr
LSF    F3Pr
INCHI  BOTHRHRVFIZTGG-UHFFFAOYSA-K
AINCHI BOTHRHRVFIZTGG-YVIXVVEYCF
```

溶解度 (SLB) が存在する物質を利用可能な物性 (/FA.P) で限定する

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 4

```
MW     197.903
MARKREF.CNT 0
REC    388
ED     Entered STN: 14 Jul 2020
       Last updated on STN: 13 May 2024
```




```
PROPERTIES
       BP Boiling Point (2) (PHYS)
       DEN Density of the Liquid (4) (PHYS)
       DIC Dielectric Constant (5) (PHYS)
       EDIS Dissociation Energy (1) (PHYS)
       ELE Electrical Data (5) (PHYS)
       HFOR Enthalpy of Formation (15) (PHYS)
       HFUS Enthalpy of Fusion (2) (PHYS)
       HSB Enthalpy of Sublimation (3) (PHYS)
       HVAP Enthalpy of Vaporization (2) (PHYS)
       CP Heat Capacity Cp (90) (PHYS)
       IP Ionization Potential (1) (PHYS)
       MSUS Magnetic Susceptibility (2) (PHYS)
       MP Melting Point (6) (PHYS)
       RI Refractive Index (2) (PHYS)
       SLB Solubility (8) (PHYS)
       SLBP Solubility Product (5) (PHYS)
       TEC Thermal Expansion (6) (PHYS)
       VP Vapor Pressure (2) (PHYS)
       ADSM Adsorption (MCS) (5) (MULTI)
       FLUS Fluorescence spectroscopy (1) (SPEC)
       IR IR spectroscopy (3) (SPEC)
       LUM Luminescence spectroscopy (2) (SPEC)
       NMR NMR spectroscopy (6) (SPEC)
       OSM Other Spectroscopic Methods (4) (SPEC)
       RAS Raman spectroscopy (1) (SPEC)
       UVS UV/VIS spectroscopy (3) (SPEC)
       CRYPH Crystal Phase (9) (STATE)
       CPTP Crystal Phase Transition Point (1) (STATE)
       CPD Crystal Property Description (7) (STATE)
       CSG Crystal Space Group (8) (STATE)
       CSYS Crystal System (3) (STATE)
       CNF Conformation (1) (FURTHER)
            :
```

溶解度

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 4

```
=> SET LINE 200
SET COMMAND COMPLETED

=> D L2 SLB

Solubility (8)
 Value                | Solvent    | Temp.      | Comment              | Ref(s)
 (SLB)                | (.SOL)     | (.T)       | (.CMT)               | (REF)
 (g*l-1)              |            | (Cel)      |                      |
======================+============+============+======================+============
 0.00023              | water      | 19 - 21    | sol. in liq. UF6     | 1
 0.00379974 - 0.00447 | H2O        | 25         | Solubility: 6.5E-2 g | 2
 261                  |            |            | /100g solvent - 7.5E |
                      |            |            | -2 g/100g solvent    |
 0.00534338 - 0.00657 | H2O        | 25         | solubility in hot 1  | 2
 038                  |            |            | n H2SO4 given;       |
                      | liquid HF  | -0.1 - 0.1 | sparingly sol. in aq | 3; 4
                      |            |            | . HF at ambient temp |
                      |            |            | .;                   |
                      |            |            | sol. in molten KHF2; | 5; 6
                      |            |            |                      | 7; 8
                      |            |            |                      | 7; 9
                      |            |            |                      | 10; 11
```

物性の表が横長な場合を考慮し、
一行あたりの文字数を 200 字に指定する

溶解度 (SLB)

← L2 の回答を SLB 表示形式 (溶解度のコード) で表示する

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 4

```
1. AN 8613646: Journal: Lokshin et al., Russ. J. Inorg. Chem. (2007) Vol. 52, No.12, pp. 1830 - 1834
2. AN 5730537: Journal: Menon, Manchery P. et al., J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1 (1989) Vol. 85, No.9, pp. 2683 - 2694
3. AN 7783763: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. U: SVol.C8, 5.1.5.3, page 139 - 163
4. AN 7747647: Journal: Nikolaev, N. S., Atomnaya Energ. (1975) Vol. 39, pp. 982 - 987
5. AN 7781432: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. Sc: MVol.C3, 6.2.2.9.4.3, page 114 - 115
6. AN 7727177: Journal: Ikrami, D. D. et al., Zh. Neorg. Khim. (1972) Vol. 17, pp. 591 - 593
7. AN 7781433: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. Sc: MVol.C3, 6.2.2.9.4.4, page 115 - 116
8. AN 7731512: Journal: Kharakoz, A. E. et al., Khim. Redk. Rassayan. Elem. (1969), pp. 46 - 55
9. AN 7501271: Journal: Bock, R. et al., Z. Anorg. Allg. Chem.
10. AN 7781553: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. Sc: MVol.C3, 6.2.5.5.1.2, page 187 - 188
11. AN 7751226: Journal: Perros, T. P. et al., J. Am. Chem. Soc. (1949) Vol. 71, pp. 3847 - 3848
```

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号
文献を確認したい場合は、REAXYSFILEBIB ファイルに入り、
=> S レコード番号/AN で検索する

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 5

ユーロピウムと鉄を含み、電気的データの中でも特に超電導に関するデータが含まれる物質を検索する

```
=> FILE REAXYSFILESUB                          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=> S EU/ELS AND FE/ELS                         ← ユーロピウムと鉄を含む物質を元素種 (/ELS) で検索する
         44607 EU/ELS
        357989 FE/ELS
L1         703 EU/ELS AND FE/ELS

=> S L1 AND ELE/FA.P
        197482 ELE/FA.P
L2         104 L1 AND ELE/FA.P

=> E SUPERCONDUCT/KW                           ← 超電導関連のキーワードがあるか /KW で EXPAND し確認する
E1           2     SUPERC18/KW
E2           5     SUPERCHIRAL/KW
E3           0 --> SUPERCONDUCT/KW
E4       20058     SUPERCONDUCTIVE/KW
E5           2     SUPERCONDUCTIVE TRANSITION /KW
E6       20058     SUPERCONDUCTIVE TRANSITION TEMPERATURE/KW
E7       21048     SUPERCONDUCTIVITY/KW
E8         132     SUPERCOOLABILITY/KW
:
```

電気的データ (ELE) が存在する物質を利用可能な物性 (/FA.P) で限定する

超電導に関するキーワードがある

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 5

```
=> S L2 AND SUPERCONDUCT?/KW                   ← 超電導に関するキーワード (/KW) で限定する
         29314 SUPERCONDUCT?/KW
L3          26 L2 AND SUPERCONDUCT?/KW

=> SET LINE 200
SET COMMAND COMPLETED

=> D L3 7                                      ← L3 の 7 番目の回答を QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する

L3      ANSWER 7 OF 26 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      29585581   REAXYSFILESU
MF      As4 Eu Fe4 Rb
CMF     As4 Eu Fe4 Rb
LSF     EuRbFe4As4
INCHI   SAIUVDLWLJPHMM-UHFFFAOYSA-N
MW      760.502
MARKREF.CNT 0
REC     3
ED      Entered STN: 14 Jul 2020
        Last updated on STN: 19 Jan 2024

            Substance image not available
```

物性の表が横長な場合を考慮し、一行あたりの文字数を 200 字に指定する

物質同定情報

収録物性・反応概要は QRD 表示形式には含まれない。ALL 表示形式には含まれる。

```
PROPERTIES
        DEN Density of the Liquid (1) (PHYS)
        ELE Electrical Data (4) (PHYS)
        CP Heat Capacity Cp (1) (PHYS)
        CRYPH Crystal Phase (1) (STATE)
            :
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 5

電気的データ (ELE)

ヒットした物性情報

```
Electrical Data (4)
 Keyword              | Electric Cond. | Crit. Temp. | Temp. Elec. Cond. | Ref(s)
 (.KW)                | (ELE)          | (.CRIT)     | (.T)              | (REF)
                      | (S/cm)         | (Cel)       | (Cel)             |
=====================+================+=============+===================+============
 Superconductivity    | 2857.14        | -236.36     | 26.84             | 1
 Conductivity diagram |                |             |                   | 2; 3
 Electrical conductiv |                |             |                   | 3
 ity                  |                |             |                   |
 Superconductive tran |                |             |                   | 3
 sition temperature   |                |             |                   |

1. AN 130126585: Journal: Usman, Mohammad et al., Chem. Mater. (2023) Vol. 35, No.20, pp. 8494 - 8501
2. AN 68976780: Journal: Kawashima, Kenji et al., J. Phys. Soc. Jpn. (2016) Vol. 85, No.6 arn.064710
3. AN 73769915: Journal: Bao, Jin-Ke et al., Cryst. Growth Des. (2018) Vol. 18, No.6, pp. 3517 - 3523
```

超電導のキーワードでヒット

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号

電気的データは PHYS (物理的特性) に分類されている。
物理的特性に含まれる他のデータも一括で表示する場合は
=> D PHYS と入力する。

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILESUB ファイルの反応情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

反応情報の概要

2,890 万件以上 (全体の 54%) のレコードに反応情報が追加された。反応情報は以下のデータが収録されている。

- **反応識別データ**
  - 同じ反応物と生成物を持つ反応は、一つの反応 ID (RX.ID) が付与されまとめられている
  - 生成物および反応物のレコード番号や名称などの概要を確認できる
  - 構造で示された反応スキームは収録されていない

```
Reaction:
        Reaction ID:                31774999
        Reactant AN (.RAN):         1813600; 21888537
        Reactant (.RCT):            trifluoromethylsulfonic anhydride;
                                    9-bromo-8-hydroxy-6,6-dimethyl-11-oxo-6,1
                                    1-dihydro-5H-benzo[b]carbazole-3-carbonit
                                    rile
        Product AN (.PAN):          21888540
        Product (.PRO):             trifluoro-methane sulfonic acid
                                    9-bromo-3-cyano-6,6-dimethyl-11-oxo-6,11-
                                    dihydro-5H-benzo[b]carbazol-8-yl ester
        Reference Count:            2
```

反応 ID

反応物の物質レコード番号

生成物の物質レコード番号

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

反応情報の追加

- **反応詳細データ**
  - 反応詳細 ID が付与され (反応 ID の後ろに小数点) 、出典や反応分類ごとに反応の詳細がまとめられている
  - 反応に関する様々な条件と出典が収録される
    (文献に記載されている試薬、触媒、溶媒、時間、温度、収率、反応タイプなど)

```
Reaction Details:
        Reaction RID:                   31774999.1
        Reaction Classification (.CL):  Preparation
        Product AN (.PRAN)              21888540
        Reactant AN (.RCAN):            103233
        Product:                        trifluoro-methane sulfonic
                                        9-bromo-3-cyano-6,6-dimeth
                                        dihydro-5H-benzo[b]carbazo
        Reagent:                        pyridine
        Temperature:                    0 - 20 Cel
        Time:                           1.5 s
        Yield:                          64 percent
        Yield Numerical:                64
        Reference(s):                   20026960: Journal: Kinoshi
                                        al., J. Med. Chem. (2011)
                                        pp. 6286 - 6294
```

反応詳細 ID

```
        Reaction RID:                   31774999.3
        Reaction Classification (.CL):  Preparation
        Product AN (.PRAN)              21888540
        Reactant AN (.RCAN):            103233
        Solvent AN (.SOLAN):            1730800
        Product:                        trifluoro-methane sulfonic acid
                                        9-bromo-3-cyano-6,6-dimethyl-11-oxo-6,11-
                                        dihydro-5H-benzo[b]carbazol-8-yl ester
        Reagent:                        pyridine
        Solvent:                        dichloromethane
        Temperature:                    0 - 5 Cel
        Yield:                          100 percent
        Yield Numerical:                100
        Reference(s):                   75800658: Patent, WO 2019008520 A1
```

反応詳細 ID

反応に関する条件

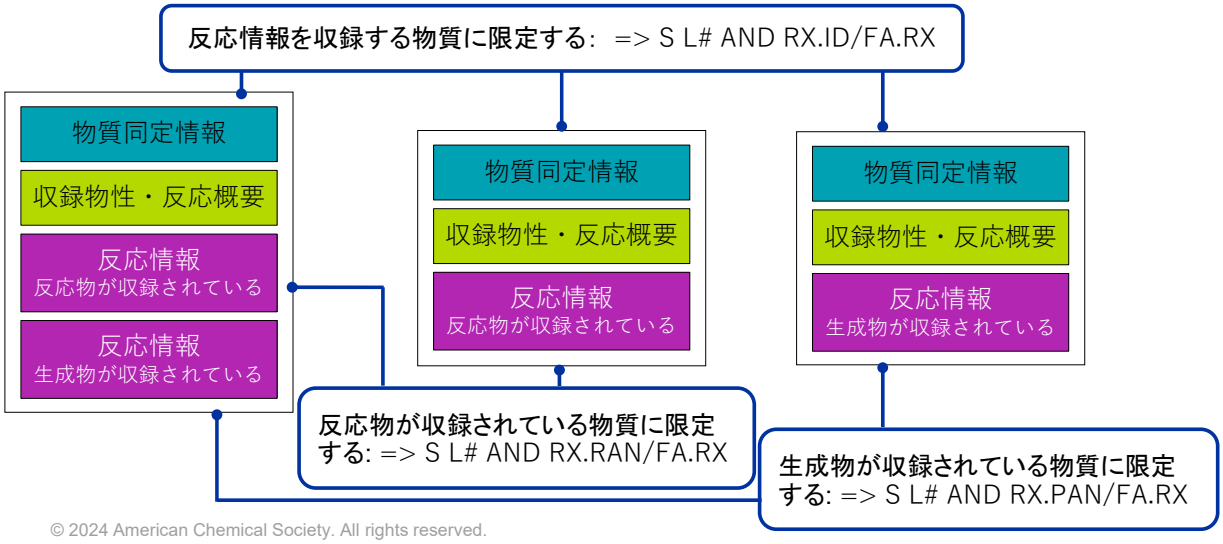
出典

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

反応情報の主な検索フィールド

反応情報の検索では、以下の検索フィールドを利用できる

– /FA.RX フィールド：反応情報の収録有無を確認する

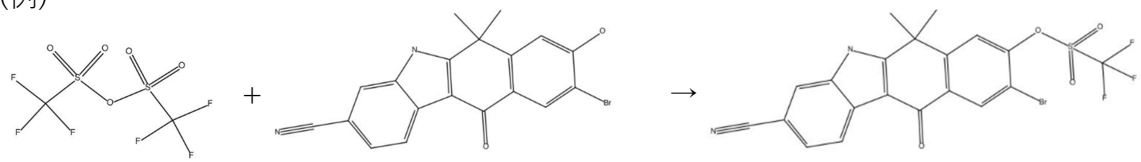


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

反応情報の主な検索フィールド

– /RX.AAN、/RX.PAN、/RX.RAN：物質のレコード番号を指定し反応情報を検索する

（例）



AN 1813600　　AN 21888537　　AN 21888540

– ある物質を反応物または生成物に指定し検索する：=> S 1813600/RX.AAN
– ある物質を反応物に指定し検索する：=> S 21888537/RX.RAN
– ある物質を生成物に指定し検索する：=> S 21888540/RX.PAN
– 同一反応中に限定する：=> S 21888537/RX.RAN (P) 21888540/RX.PAN

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

反応分類による回答の絞り込み

REAXYSFILESUB ファイルには、物質の合成方法が収録されているが、より細かな反応の種類で絞り込むことができる

– /RX.CL フィールド：反応分類の種類

反応分類	内容
CHEMICAL BEHAVIOUR	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
MARKUSH REACTION	マルクーシュ構造の物質が関与する反応。反応の詳細な条件は収録されないことが多い
MULTI-STEP 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り、反応データが収録されている
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（反応物のレコード番号が存在しない反応）

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

反応情報の検索の流れ

物質を検索する → 化学物質名称、構造質問式など

↓

調べたい反応情報の有無を確認する → /FA.RX フィールドを利用

↓

適切な表示形式で表示する

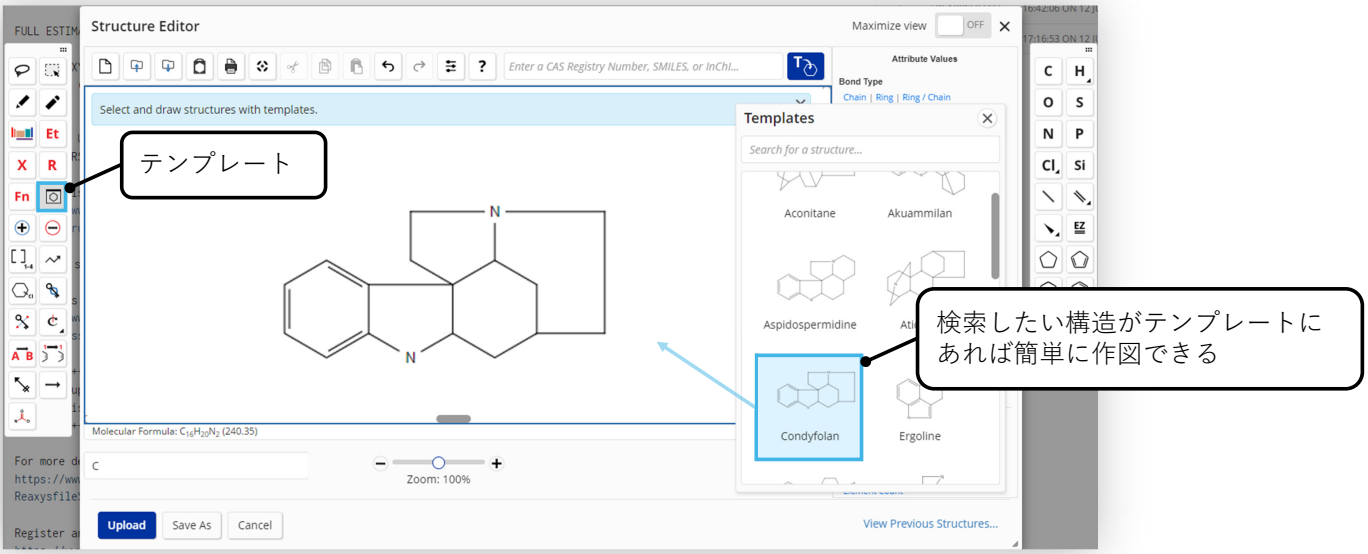
– 検索式に関する情報を表示する → QRD 表示形式（デフォルト）

– 反応の種類やデータ数を事前に確認し表示する → ALL 表示形式 → RX 表示形式

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

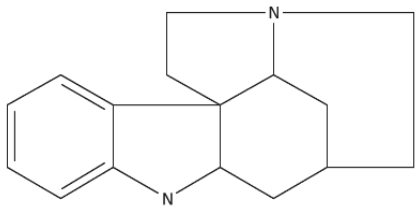
Condyfolan の部分構造を有し、合成反応情報をもつ物質を検索する

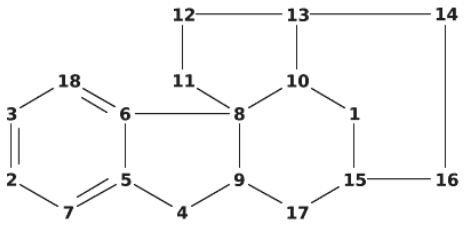


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

```
=> FILE REAXYSFILESUB                          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=>
Uploading structure file: 2024_0149_Structure  ← 構造質問式をアップロードする
```






```
Node Attributes
Ring Nodes : 1  2  3  4  5  6  7  8  9  10  11  12  13  14  15  16  17  18
Bond Attributes
            :

L1      STRUCTURE UPLOADED
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

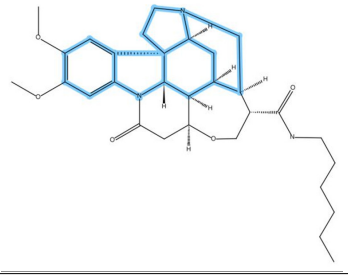
```
=> S L1                          ← 部分構造検索のサンプル検索を行う

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:36:42
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -        0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED     755623 ITERATIONS                              50 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.09

L2           50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                      ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う

FULL SEARCH INITIATED 17:37:04
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -        0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED   51533504 ITERATIONS                           3688 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3         3688 SEA SSS FUL L1

=> S L3 AND RX.PAN/FA.RX         ← 反応情報に生成物 (RX.PAN) が収録されている物質を検索する
      28861453 RX.PAN/FA.RX
L4        1900 L3 AND RX.PAN/FA.RX
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

```
=> D L4 2                        ← L4 の 2 番目の回答を QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する

L4     ANSWER 2 OF 1900 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN     59053855   REAXYSFILESU
MF     C30 H41 N3 O5
CMF    C30 H41 N3 O5
LSF    C30H41N3O5
INCHI  HQDIWXVVAVBJSU-LGPQYWKVSA-N
MW     523.673
MARKREF.CNT 0
REC    1
ED     Entered STN: 8 Apr 2024
       Last updated on STN: 8 Apr 2024
```

物質同定情報



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

ヒットした反応情報

```
Reaction:
        Reaction ID:                    66494617
        Reactant AN (.RAN):             1731298; 1900508; 63046                ← 反応物
        Reactant (.RCT):                hexan-1-amine; carbon monoxide; brucine
        Product AN (.PAN):              59053855
        Product (.PRO):                 C30H41N3O5
        Reference Count:                1

Reaction Details:
        Reaction RID:                   66494617.1
        Reaction Classification (.CL): Preparation
        Product AN (.PRAN)              59053855                               ← 生成物
        Reactant AN (.RCAN):            13204136                               ← 反応物または試薬
        Solvent AN (.SOLAN):            1730942                                ← 溶媒
        Pressure:                       1520.1 Torr
        Product:                        C30H41N3O5
        Reagent:                        dicobalt octacarbonyl
        Solvent:                        tert-butyl methyl ether
        Temperature:                    90 Cel
        Yield:                          60 percent
        Yield Optical:                  > 92.308 percent de
        Reference(s):                   132011681  Journal: Faculak, Mason S. et
                                        al., Science (2024) Vol. 383, No.6678,
                                        pp. 77 - 81
```

ヒットした物質のレコード番号が生成物として収録されている

反応に関する条件

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

参考：反応の出典情報を REAXYSFILEBIB ファイルで確認する

```
=> FILE REAXYSFILEBIB                          ← REAXYSFILEBIB ファイルに入る

=> S 132011681/AN                              ← 反応の出典に記載のレコード番号を /AN で検索する
L5          1 132011681/AN

=> D L5 ALL                                    ← L5 の 1 番目の回答を ALL 表示形式で表示する

L5      ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      132011681   REAXYSFILEBI Full-text
TI      Cobalt-catalyzed synthesis of amides from alkenes and amines promoted by
        light
AU      Faculak, Mason S.; Veatch, Alexander M.; Alexanian, Erik J.
SO      Science (2024), Volume 383, Number 6678, pp. 77-81
        CODEN: SCIEAS  ISSN: 0036-8075
        DOI: https://doi.org/10.1126/science.adk2312
        Published by: American Association for the Advancement of Science,
        United States
DT      Journal
LA      English
SL      English
ED      Entered STN: 28 Feb 2024
        Last updated on STN: 14 Jun 2024
```

標題や著者名などの詳しい書誌情報

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 6

AB Catalytic methods to couple alkene and amine feedstocks are valuable in synthetic chemistry. The direct carbonylative coupling of alkenes and amines holds promise as a perfectly atom-economical approach to amide synthesis, but general methods remain underdeveloped. Herein, we report an alkene hydroaminocarbonylation catalyzed by unmodified, inexpensive cobalt carbonyl under mild conditions and low pressure promoted by light. Silane addition after the reaction enables sequential cobalt-catalyzed amide reduction, constituting a formal alkene hydroaminomethylation. These methods exhibit exceptional scope across both alkene and amine components with high chemo- and regioselectivity and proceed efficiently even in the absence of solvent. The formation of a hydridocobalt through photodissociation of a carbonyl ligand is proposed to enable catalytic activity under mild conditions, which addresses a long-standing challenge in catalysis.

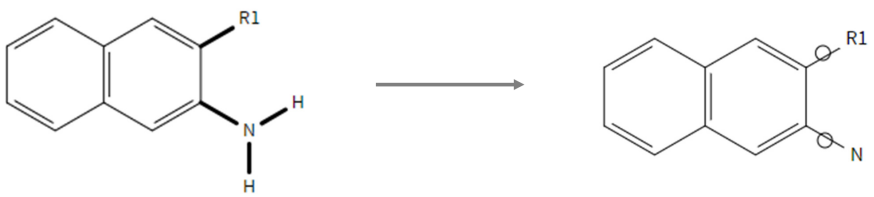
抄録

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

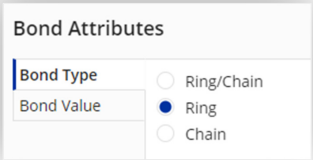
検索例 7

下記の環化反応を検索

R1 (O または S) と N で環を形成する



- R1 は構造作図ツールの R グループ R を利用し、O と S を含める
- 生成物の C-R1, C-N の結合属性を Ring に指定する



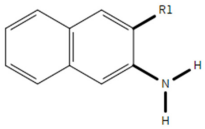
© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 7 の検索方法 (1/2)

反応物 AN/RX.RAN (P) 生成物 AN/RX.PAN の検索式で同一反応中に限定する

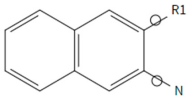
1. 構造検索

反応物



L#

生成物



L＊

2. レコード番号を抽出し、反応物または生成物に限定

=> TRA L# 1- AN /RX.RAN

L##

=> TRA L＊ 1- AN /RX.PAN

L＊＊

3. 同一反応中に限定

=> S L## (P) L＊＊

L@

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

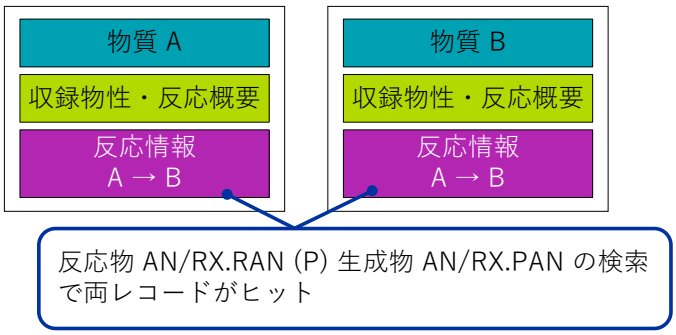
検索例 7 の検索方法 (2/2)

4. 反応情報の重複を除去するために、3 の結果と生成物の集合を組み合わせる

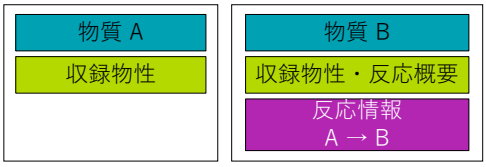
=> S L@ AND L＊

L@@

– 反応情報が重複している理由



– ただし反応物、生成物のどちらかのレコードのみに反応情報が収録されている場合もある



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 7

```
FILE REAXYSFILESUB                                  ←  REAXYSFILESUB ファイルに入る

=>
Uploading structure file: 2024_0010_REACTANT        ← 反応物の構造質問式をアプロードする
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> S L1                                             ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
L2           50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                                         ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
L3          984 SEA SSS FUL L1

=> TRA L3 1- AN /RX.RAN                             ← レコード番号を抽出し、ヒットした物質が反応物である反応に限定する

L4          TRANSFER L3 1- AN :     983 TERMS
L5        2092 L4/RX.RAN
L6            QUE  TERMS FROM L4/RX.RAN WITH NO HITS:   804 TERMS ← CAS STNext の Settings で Audit を ON に設定した場合は
                                                                      TRANSFER でヒットしかなったタームの集合を作成する
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 7

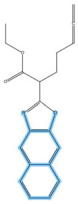
```
=>
Uploading structure file: 2024_0011_Product                 ← 生成物の構造質問式をアプロード
L7      STRUCTURE UPLOADED

=> S L7                                                     ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
L8           50 SEA SSS SAM L7

=> S L7 FUL                                                 ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
L9        13387 SEA SSS FUL L7

=> TRA L9 AN 1- /RX.PAN                                     ← レコード番号を抽出し、ヒットした物質が生成物である反応に限定する

L10         TRANSFER L9 1- AN :   13387 TERMS
L11       4496 L10/RX.PAN
L12           QUE  TERMS FROM L10/RX.PAN WITH NO HITS: 10486 TERMS

=> S L5(P)L11                                               ← 同一反応中に限定する
L13        443 L5(P)L11

=> S L9 AND L13                                             ← 重複を除くために、L13 と生成物の集合 (L9) を組み合わせる
L14        294 L9 AND L13
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

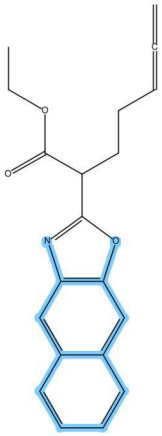
検索例 7

```
=> D 1                                  ← L14 の 1 番目の回答を QRD 表示形式（デフォルト）で表示する

L14     ANSWER 1 OF 294 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER IN
AN      60070918   REAXYSFILESU
CN      ethyl 2-(naphtho[2,3-d]oxazol-2-yl)hepta-5,6-dienoate
MF      C20 H19 N O3
CMF     C20 H19 N O3
LSF     C20H19NO3
INCHI   BXRWOVALQRNEOC-UHFFFAOYSA-N
MW      321.376
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 24 Jun 2024
        Last updated on STN: 24 Jun 2024
```

ヒットした生成物のレコード番号



作図の拡大



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

検索例 7

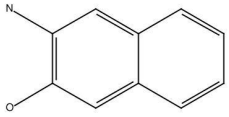
```
Reaction:
        Reaction ID:                    67417056
        Reactant AN (.RAN):             636903
        Reactant (.RCT):                3-Amino-2-naphthol
        Product AN (.PAN):              60070918
        Product (.PRO):                 ethyl
                                        2-(naphtho[2,3-d]oxazol-2-yl)hepta-5,6-dienoate
        Reference Count:                1


Reaction Details:
        Reaction RID:                   67417056.1
        Reaction Classification (.CL): Multi-step reaction
        Reactant AN (.RCAN):            4122952
        Solvent AN (.SOLAN):            1718733; 605365
        Reagent:                        sodium hydride
        Solvent:                        ethanol; N,N-dimethyl-formamide
        Reference(s):                   133148975: Journal: Becker, Antonia et
                                        al., Org. Lett. (2024) Vol. 26, No.12,
                                        pp. 2451 - 2455
```

ヒットした反応物

ヒットした生成物

– 参考：ヒットした反応物

```
=> S 636903/AN
L1            1 636903/AN

=> D SCAN

L1      1 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024
ELSEVIER INC. on STN.
CN      3-Amino-2-naphthol; 3-aminonaphthalen-2-ol
MF      C10 H9 N O
SD      isocyclic
```



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB ファイルの概要

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB ファイル

概要

REAXYSFILEBIB ファイルは、REAXYSFILESUB ファイルの出典情報データベースである

- 製作者：Elsevier Information Systems GmbH
- レコード構成：文献単位 (特許は特許ファミリー単位)
- 収録情報：書誌情報、抄録
- 収録期間：1771 年～
- 収録件数：6,120 万件
- 更新頻度：週 2 回
- 特長：105 特許発行機関の特許を収録、約 450 の化学系コア雑誌、16,000 以上の定期刊行物
  特許は 1803 年から収録。以下の国と年代は特に物質・物性・反応情報の抜粋がより詳細に行われている
  - PCT 出願 (WO)、米国 (US)、欧州 (EP) 特許で言語が英語： 2001 年～
  - 日本 (JP)、韓国 (KR)： 2015 年～
  - 中国 (CN)、台湾 (TW)： 2016 年～

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

特許のレコード例 (ALL 表示形式)

レコード番号
標題
特許出願人
特許情報

```
AN      132080060   REAXYSFILEBI Full-text
TI      Pharmaceutical composition of sorafenib having high bioavailability,
        oral solid dosage of sorafenib, and use thereof
PA      Beijing  Creatron  Institute  of  Pharmaceutical  Research  Co.,  Ltd.

PI      PATENT NO.          KIND  DATE      APPLICATION NO.         DATE
        -------------------  ----  --------  ----------------------  --------
        CA 3155855           A1    20220607
        CN 114916221         A     20220816
        CN 114916221         B     20240130
        EP 4032529           A1    20220727
        EP 4032529           A4
        JP 2023509560        A
        JP 7428356 B *       B2    20240206  JP 2022-516367          20201207
        US 20230310393       A1    20231005
        WO 2022120512        A1    20220616

        * = indexed patent
```

索引特許

* の付与された特許から索引している

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

資料種類
言語
要約言語
入力日
抄録
国際特許分類

```
DT      Patent
LA      Japanese
SL      English
ED      Entered STN: 9 Mar 2024
        Last updated on STN: 27 Jun 2024

AB      The present disclosure provides a sorafenib pharmaceutical composition
        with high bioavailability and use thereof, and specifically provides a
        low-dose sorafenib oral solid preparation, comprising: a) a sorafenib
        solid dispersion; b) a crystallization inhibitor; and c) additional
        pharmaceutically acceptable adjuvant. The aforementioned low-dose
        sorafenib oral solid preparation provided by the present disclosure has
        high bioavailability and reduces the dosage of sorafenib that the same
        therapeutic effect as that of Nexavar tablet can be achieved when a
        patient takes orally 35% to 70% of the administered dose of Nexavar
        tablet; it has higher stability, better safety, and less incidence of
                :
IPC     A61K0009-14; A61K0047-20; A61K0047-26; A61K0047-28; A61K0047-32;
        A61K0047-36; A61K0047-38; A61P0035-00; A61K0031-44; A61K0009-20;
        A61K0009-48; A61K0009-70; A61K0047-02; A61K0047-04; A61K0047-10;
        A61K0047-12
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

雑誌のレコード例 (ALL 表示形式)

レコード番号	AN	82103379 REAXYSFILEBI Full-text
標題	TI	Immune response on outcomes in hepatocellular carcinoma
著者名	AU	Iseda, Norifumi; Itoh, Shinji; Tomiyama, Takahiro; Morinaga, Akinari; Wang, Huanlin; Shimagaki, Tomonari; Kurihara, Takeshi; Nagao, Yoshihiro; Toshima, Takeo; Harada, Noboru; Iguchi, Tomohiro; Yoshizumi, Tomoharu; Mori, Masaki
収録源	SO	Gan to kagaku ryoho/Cancer and chemotherapy (2020), Volume 47, Number 9, pp. 1303-1306 CODEN: GTKRDX ISSN: 0385-0684 Published by: Japanese Journal of Cancer and Chemotherapy Publishers Inc., Japan
資料種類	DT	Journal
言語	LA	Japanese
抄録言語	SL	English
入力日	ED	Entered STN: 19 Jan 2021 Last updated on STN: 3 Jul 2024

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

抄録	AB	Recently, immune checkpoint inhibitors (ICI) has been developed considerably. ICI has already been approved for malignant melanoma, lung cancer and renal cancer. We expected ICI to be taken for many cancers in the future. Therefore, the development of biomarker for them are needed. The recent large phase EI study IMbrave 150 evaluated atezolizumab plus bevacizumab vs sorafenib as the first treatment for patients with unresectable hepatocellular carcinoma (HCC). IMbrave 150 demonstrated statistically significant and clinically meaningful improvements in both OS and RFS for atezolizumab plus bevacizumab compared with sorafenib in HCC patients. A paradigm shift in the treatment of unresectable HCC is about to occur. In this article, we discussed the significance and biomarkers of tumor immunity in HCC microenvironment.
キーワード	KW	Author Keyword: Hepatocellular carcinoma; Immune checkpoint inhibitors; Programmed death-ligand 1

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB の主な検索フィールド

適切な検索フィールドを利用して文献を検索できる

検索フィールド	内容	入力例	備考
/BI (またはなし)	基本索引 (TI, AB から切り出された語)	S LIQUID CHROMATOGRAPH	前方、後方、中間一致検索が利用可能
/AB	抄録	S ?AMINOETHYL/AB	
/TI	標題	S TRIAZOLOPYRAZINONE/TI	
/AN	レコード番号	S 131685370/AN	
/AU	著者名	S YAMADA TARO/AU S YAMADA T?/AU	
/DT	資料種類	S J/DT S JOURNAL/DT	
/SO	収録源	S ANALYTICAL CHEMISTRY/SO	SO に収録されている雑誌名は /JT でフレーズ検索が可能

REAXYSFILEBIB サマリーシート： https://web.cas.org/marketing/solutions/stn-ip/stn-database/reaxysfilebib.pdf

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

REAXYSFILEBIB の主な検索フィールド

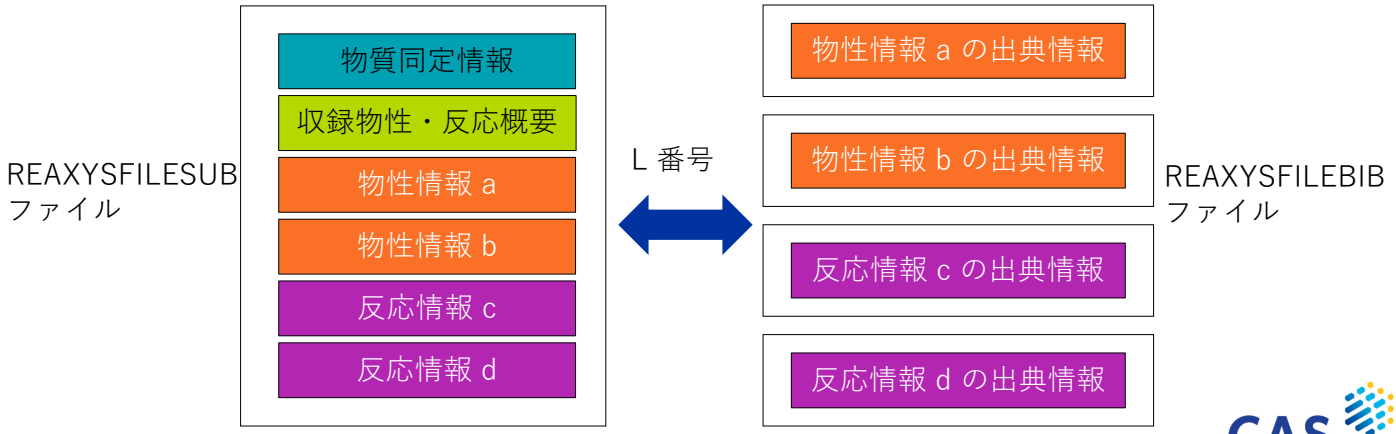
検索フィールド	内容	入力例	備考
/PN /AP /PRN	特許番号 出願番号 優先権出願番号	S WO2018039051/PN S US1964-363680/AP S US 1997-68200P/PRN	
/PK /PNK	特許種別 種別付き特許番号	S EPA1/PK S WO2018039051A1/PNK	
/PY /AY /PRY	発行年 特許出願年 優先権主張年	S L1 AND 2010-2011/PY S L1 AND 1995>=AY S L1 AND 1995>=PRY	PY は特許以外の資料種類の発行年も対象
/PD /AD /PRD	特許発行日 特許出願日 優先権主張日	S L1 AND 20100101/PD S L1 AND 20050601-20060531/AD S L1 AND 20100101>=PRD	
/PA (/CS)	特許出願人	S LILLY COMPANY/PA	/CS は雑誌を含まない
/IPC	国際特許分類	S C07C0231/IPC S C07C0231-02/IPC	

REAXYSFILEBIB サマリーシート： https://web.cas.org/marketing/solutions/stn-ip/stn-database/reaxysfilebib.pdf

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

ファイル間の連携

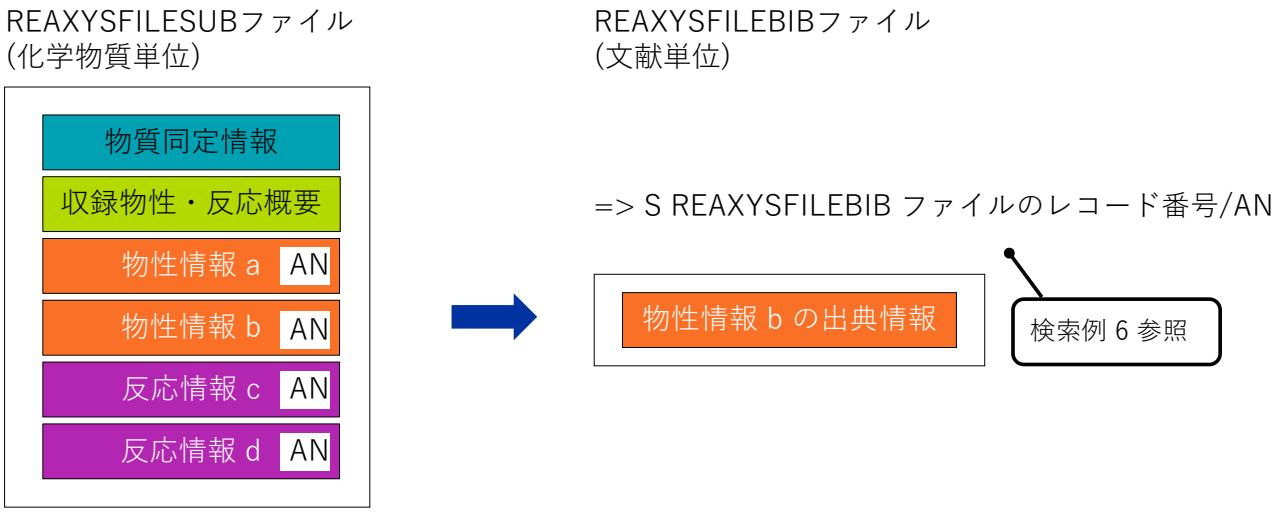
- REAXYSFILESUB から REAXYSFILEBIB ファイルに L 番号をクロスオーバーすると、物質に関する文献情報を一括で検索できる
- REAXYSFILEBIB から REAXYSFILESUB ファイルに L 番号をクロスオーバーすると、文献に関する物質情報を一括で検索できる



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

注意点：REAXYSFILESUB からのクロスオーバー検索

特定の情報の出典を REAXYSFILEBIB ファイルで確認する場合は、該当の AN を検索する



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

注意点：重複レコード

特許ファミリー中の複数の特許から索引が作られている場合、同じ特許ファミリー由来の重複レコードが存在する

- 事前に確認したい場合は FSORT コマンドを用いてまとめるとよい

```
=> FILE REAXYSFILEBIB                                   ← REAXYSFILEBIB ファイルに入る

=> S JP2023044300/PN                                    ← 特許番号を /PN で検索する
L1           3 JP2023044300/PN

=> FSORT L1
:
SEL L1 1- PN,APPS
L2          SEL L1 1- PN APPS :       6 TERMS

'L2' DELETED
L2            3 FSO L1

              1 Multi-record Family     Answers 1-3       ← 関連特許ファミリーにまとまる
              0 Individual Records
              0 Non-patent Records
                        :
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

注意点：重複レコード

```
=> D TI 1-3

L2     ANSWER 1 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
TI     Humidification device or atmospheric water generator

L2     ANSWER 2 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
TI     Humidity control device or atmospheric water generator

L2     ANSWER 3 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
TI     HUMIDITY CONTROL DEVICE OR ATMOSPHERIC WATER GENERATOR

=> D L2 1 ALL

L2     ANSWER 1 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
AN     133733991   REAXYSFILEBI Full-text
TI     Humidification device or atmospheric water generator
PA     DAIKIN IND LTD

PI     PATENT NO.           KIND  DATE       APPLICATION NO.          DATE
       -------------------  ----  --------   -----------------------  --------
       CN 117940203 *       A     20240426   CN 2022-80062633         20220912
       JP 2023044300        A     20230330
       WO 2023042781        A1    20230323

       * = indexed patent
```

索引特許

1 番目の回答は CN が索引特許のレコード。2 番目は JP、3 番目は WO が索引特許のレコードだった

```
PI PATENT NO.
   ---------------
   JP 2023044300 *
   WO 2023042781
   CN 117940203
```

```
PI PATENT NO.
   ---------------
   WO 2023042781 *
   JP 2023044300
   CN 117940203
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

注意点：重複レコード

```
DT     Patent
LA     Chinese
SL     English
ED     Entered STN: 13 May 2024
       Last updated on STN: 24 May 2024
AB     Provided is a humidity control device or an atmospheric water generator
       with which damage to an adsorption material, which adsorbs moisture, due
       to heating during regeneration is suppressed. A humidity control device
       (100) comprises an absorbent material (11a) and a heater (12). The
       absorbent material (11a) adsorbs moisture. The heater (12) heats the
       absorbent material (11a), causing moisture adsorbed by the absorbent
       material (11a) to undergo desorption from the absorbent material (11a).
       The absorbent material (11a) comprises a base material and metal-organic
       frameworks. The metal-organic frameworks include metal ions and organic
       ligands. The heat resistance temperature of the base material is at
       least 150°C.
IPC    B01D0053-26; B01D0053-06; B01J0020-26; B01J0020-34; F24F0003-14;
       F24F0006-08
```


© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.

まとめ

REAXYSFILESUB ファイルは、物性情報と反応情報が新たに追加された

- 110 以上の物性情報を収録している
  - 物理的特性
  - 凝集状態
  - 多成分系データ
  - 分光学的データ
  - その他の物性
- 2,890 万件以上の物質レコードに反応情報を収録している
- シンプルな操作で物性情報あるいは反応情報を検索できる
- 出典情報には REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号が記載されており、書誌情報、抄録をすぐに確認できる

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.