

CAS STN[®]next

反応情報検索

202511



目次

A 概要

CAS STNext の反応情報	1
CAS FILES の反応情報	5

B CASREACT ファイル

概要	9
収録範囲	10
レコード構成	11
CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索	15
回答表示	17
反応条件、書誌情報の検索	23
CASREACT ファイルで用いる演算子	24
反応質問式による構造検索 - 概要	30
反応質問式の作成 - 反応ロール	32
反応質問式の作成 - 反応矢印	33
反応質問式の作成 - 反応部位	34
反応質問式の作成 - マッピング	35
構造検索のコマンド	36
構造検索の流れ	37
参考 : 応用テクニック	39
Verification が不完全な回答	42
構造検索時の注意	43
官能基検索	46
参考 : 応用テクニック	49
参考 : サブセット検索	52
主な検索フィールド	54

C CAS FILES の反応情報検索

CAS FILES を使った網羅的な反応情報検索	59
--------------------------------	----

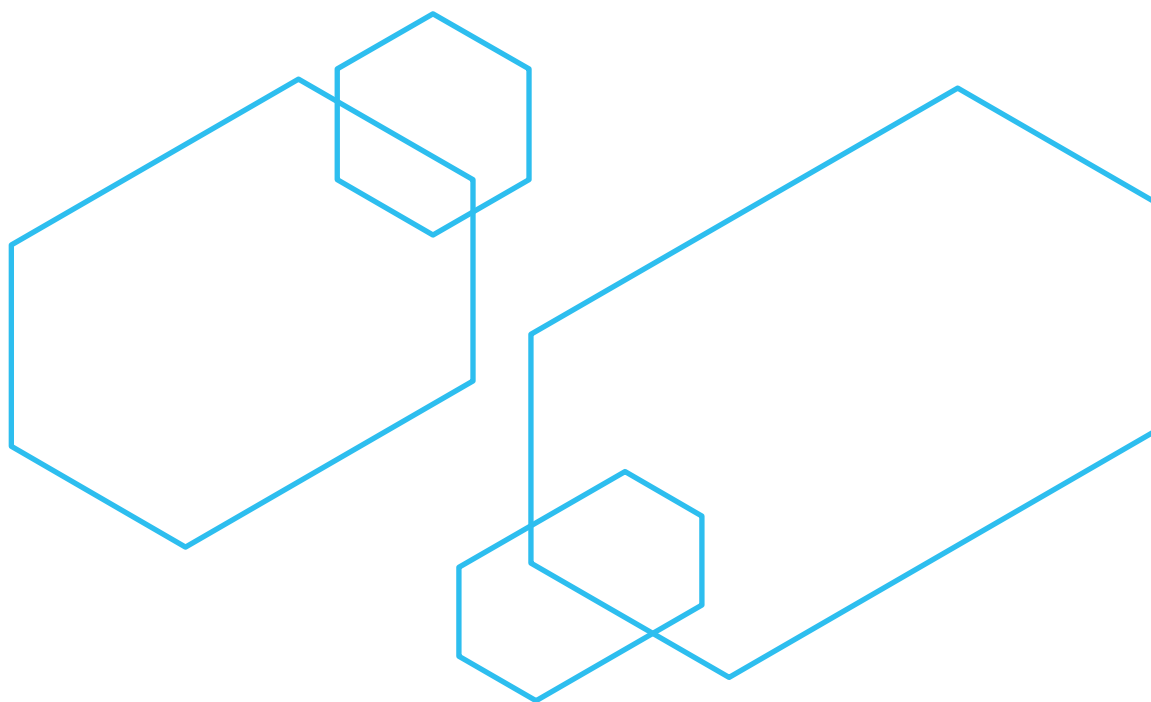
練習問題	75
------------	----

APPENDIX

CASREACT ファイル - 構造検索時の注意	85
CASREACT ファイル - CA 由来のレコードの収録基準	87
CASREACT ファイル - 1990 年以前の収録雑誌	89

A 概要

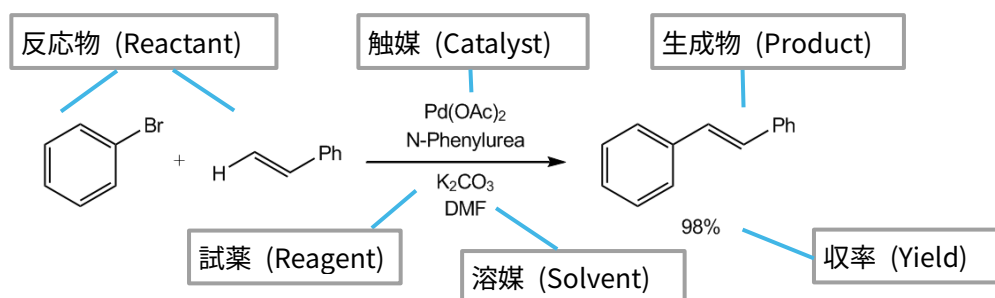
CAS STNext の反応データベースの概要と CAS FILES の反応情報についてご紹介します。



CAS STNext の反応情報

CAS STNext には、反応情報に関するデータベースが複数搭載されている。

– 反応情報の例



– 様々な情報から反応を検索できる。

- 構造検索
- CAS 登録番号 (CAS RN®) からの検索
- 官能基の名称からの検索
- 溶媒や収率などの反応条件からの検索

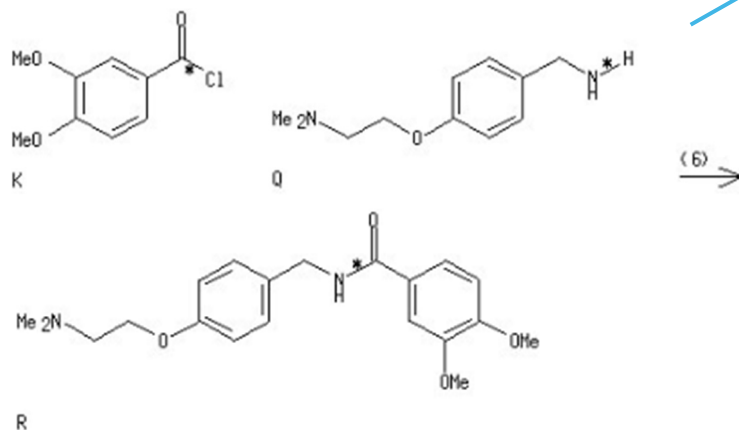
反応情報のデータベース一覧

(2025 年 11 月現在)		
ファイル名	内容	収録件数 (収録年代、更新頻度)
CASREACT 【B 章、C 章】	有機化学反応情報を含む文献データベース CA 収録対象文献から選択した反応情報を収録	<文献> 250 万件以上 <反応> 1 億 5,600 万件以上 (1840-、毎日)
REAXYFILESUB	化学物質のデータベース 物質、物性、反応情報を収録	<物質> 5,810 万件以上 (1771-、週 2 回)
PS	医薬品データベース 世界中に上市された重要な医薬品の合成法、 薬理作用、特許情報を収録	<物質> 2,930 件 (1957-、不定期)
CAplus/CA	化学および周辺分野の文献データベース PERP (製造) ロール付与は 1907 年- 【A 章、C 章】	<文献> 6,790 万件以上 (1808-、毎日) PREP (製造) の CAS ロールが 付与されている文献数は 935 万件以上

代表的な反応情報レコード例

- CASREACT ファイル (FHIT 表示形式)

RX(6) OF 19 ...K + Q ==> R



構造図で反応の概要を把握できる

RX(6) RCT K 3535-37-3, Q 20059-73-8
RGT S 1310-73-2 NaOH
PRO R 122898-67-3
SOL 7732-18-5 Water

反応要約
試薬や溶媒が CAS 登録番号
(CAS RN®) で索引されている

- REAXYSFILESUB ファイル (反応レコード RX 表示形式)

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)benzoic acid
Reference Count:	1

反応物の物質レコード番号と名称
(構造図はなし)

生成物の物質レコード番号と名称
(構造図はなし)

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

反応条件

出典情報

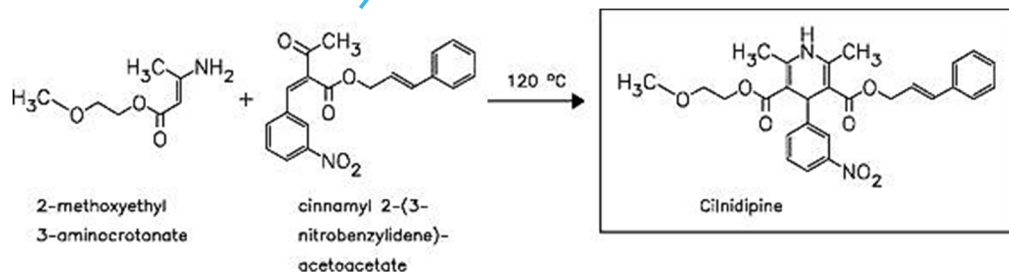
- PS ファイル (ALL 表示形式)

AN 30157 PS
 ED Entered STN: 24 Aug 2022
 Last updated on STN: 11 Jun 2025
 CN GENERIC: Cilnidipine
 SYNONYM: FRC-8653
 SYSTEMATIC: (E)-(+)-1,4-dihydro-2,6-dimethyl-4-(3-nitrophenyl)-3,5-pyridinedicarboxylic acid 2-methoxyethyl 3-phenyl-2-propenyl ester
 CC C08CA14
 THER antihypertensive; calcium channel blocker (calcium antagonist)
 RN 132203-70-4
 MF C27H28N2O7
 INCHI KJEBULYHNRNJTE-DHZHZOJOSA-N
 :
 DRV CN.DRV unspecified stereochemistry
 LSF.DRV C27H28N2O7
 MW.DRV 492.53
 RN.DRV 102106-21-8
 CN.DRV (+)-enantiomer
 LSF.DRV C27H28N2O7
 MW.DRV 492.53
 RN.DRV 132338-87-5
 CN.DRV (-)-enantiomer
 LSF.DRV C27H28N2O7
 MW.DRV 492.53
 RN.DRV 132295-21-7
 :

化学物質名称

医薬品の合成情報を収録
 合成スキームで反応の流れを把握できる

GI



中間体情報

INT

Intermediate(s) in Substance Preparation

CAS RN	Molecular Formula	Chemical Name
102106-88-7	C20H17NO5	cinnamyl 2-(3-nitrobenzylidene)acetoacetate; Butanoic acid, 2-((3-nitrophenyl)methylene)-3-oxo-, 3-phenyl-2-propenyl ester (CA Index Name)
50899-10-0	C7H13NO3	2-methoxyethyl 3-aminocrotonate; 2-Butenoic acid, 3-amino-, 2-methoxyethyl ester (CA Index Name)

出典情報

RE

EP 161 877 (Fujirebio; appl. 2.5.1985; J-prior. 4.5.1984, 20.6.1984).
 US 4 672 068 (Fujirebio; 9.6.1987; J-prior. 4.5.1984, 20.6.1984).
 Drugs Future (DRFUD4) 21(3), 249-253 (1996).

検索機能の比較

ファイルによって収録源や収録内容、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。

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

*1 △ の項目は CAS 登録番号 (CAS RN®) の付与が完全ではない。

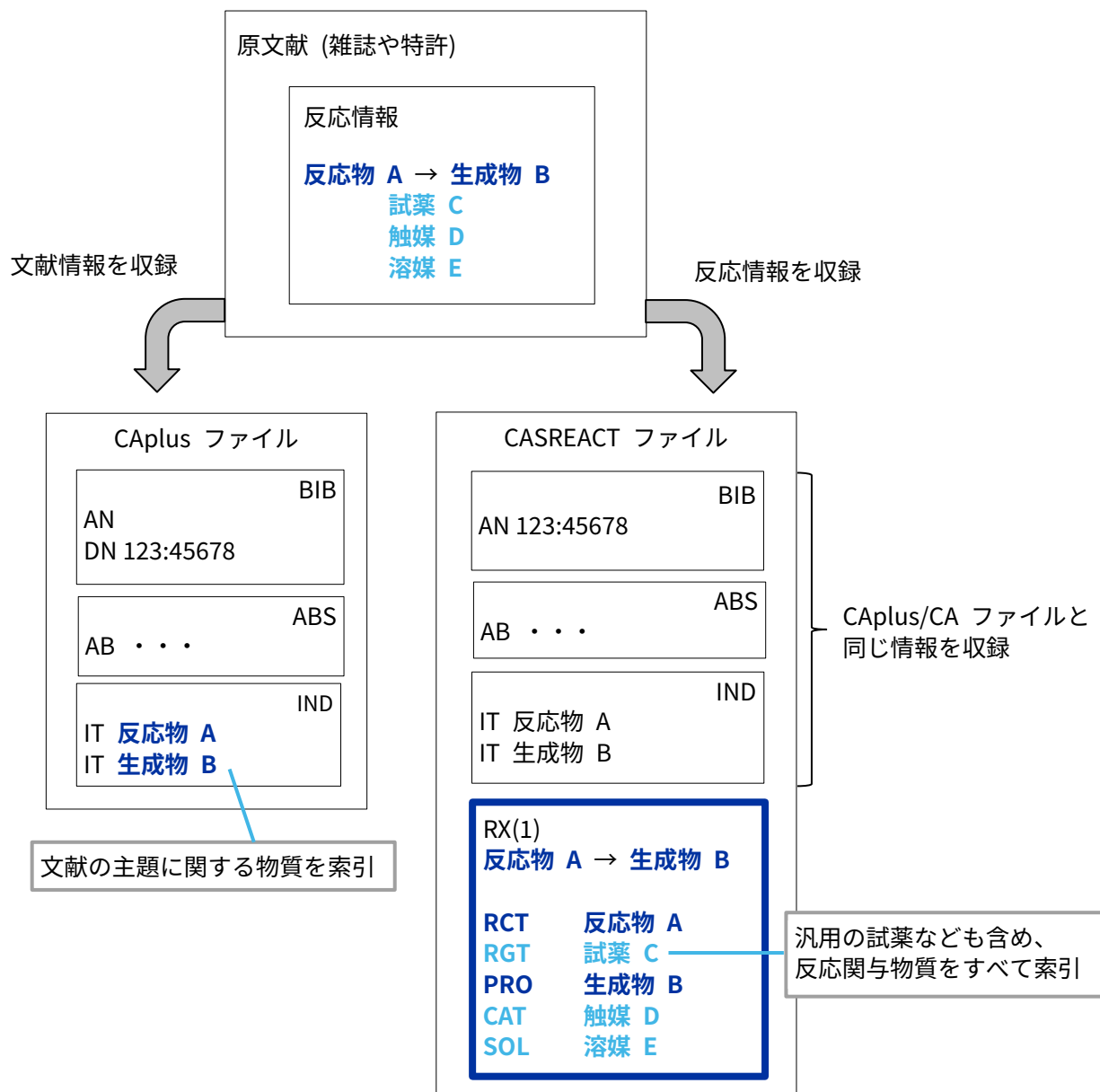
*2 構造検索の回答より物質のレコード番号を抽出して、反応情報を検索する。
例：ヒットした物質 (L1) が生成物である反応情報は => TRA L1 1- AN /RX.PAN で検索。

*3 CAS RN® の収録率は 18 %。

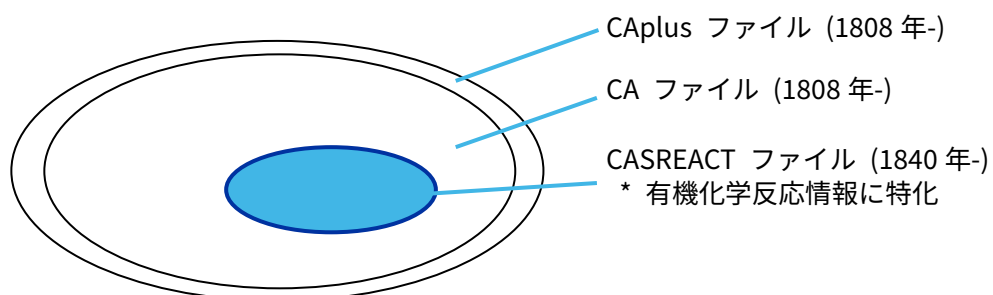
*4 CAS REGISTRY ファイルで構造検索した結果をクロスオーバーする。

CAS FILES の反応情報

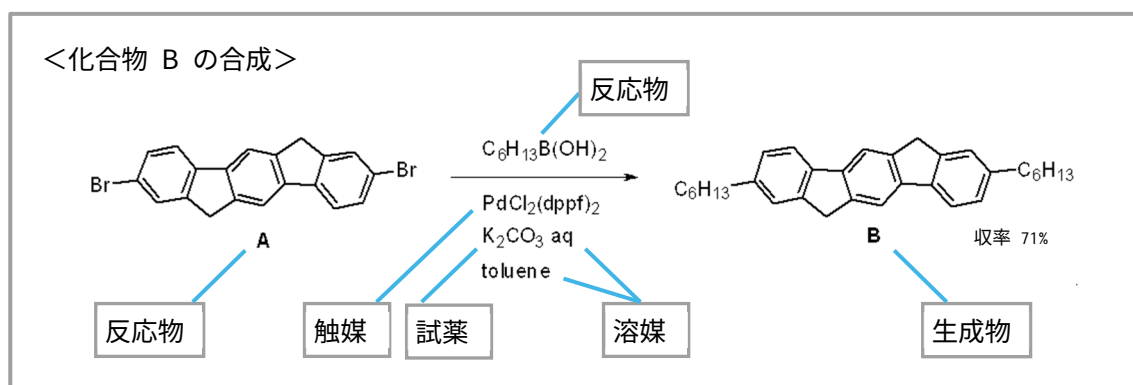
文献中の反応情報の収録方針



収録レコード数の相関性

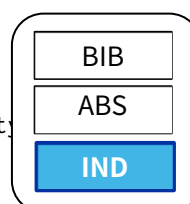


収録例



- CPlus ファイルの索引 (AN 2010:1279237, DN 153:543934)

ST org semiconductor device indenofluorene deriv solvent soly processability
 IT Semiconductor materials
 Transistors
 (organic; indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)
 IT Semiconductor devices
 (organic; indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)
 IT 1247953-36-1P ← 生成物
 RL: IMF (Industrial manufacture); PRP (Properties); **SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)**
 (indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)
 IT 16343-08-1, Hexylboronic acid 848982-57-0 ← 反応物
 RL: **RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)**
 (indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)

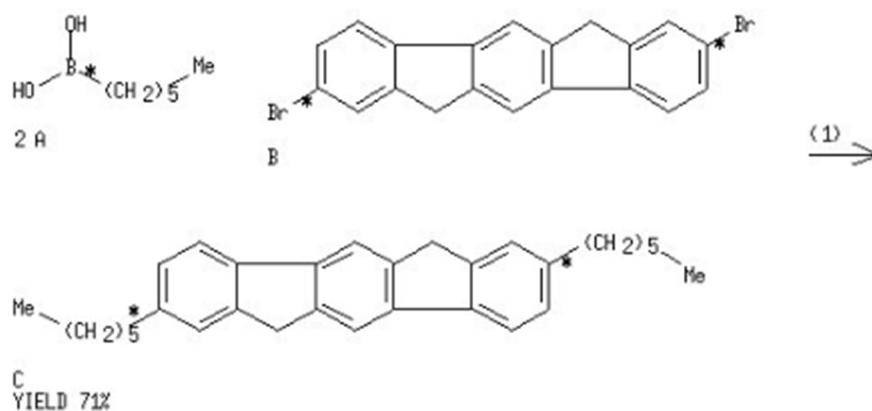


文献の主題に関与しない物質（汎用の試薬・溶媒・触媒など）は索引されない。

生成物、反応物など反応関与物質は IT フィールドに別々に索引される。同一反応中を示す指標はない。

- CASREACT ファイルの反応情報 (AN 153:543934)

RX(1) OF 1 2 A + B ==> C



BIB
ABS
IND
RX

RX(1)	RCT	A 16343-08-1, B 848982-57-0	← 反応物
	RGT	D 584-08-7 K ₂ CO ₃	← 試薬
	PRO	C 1247953-36-1	← 生成物
	CAT	72287-26-4 Palladium, [1,1'-bis(diphenylphosphino-κP)ferrocene]dichloro-, (SP-4-2)-	← 触媒
	SOL	7732-18-5 Water, 108-88-3 PhMe	← 溶媒
	CON	8 hours, reflux	← 反応条件
	NTE	Suzuki coupling	← 注記

すべての反応関与物質が反応ごとに索引される。
収率や反応条件も収録される。

CPlus/CA ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較

(2025 年 11 月現在)

項目	CASREACT	CPlus
収録年	1840 年以降	1808 年以降 (PREP (製造) の CAS ロールが付与されているのは 1907 年以降)
収録数	<文献> 250 万件以上 <反応> 1 億 5,600 万件以上	<文献> 6,790 万件以上 (PREP (製造) の CAS ロールが付与されている文献数は 935 万件以上)
収録文献 索引方針	CA に収録されているレコードの一部 合成的に意義のある反応を選択 (単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない)	CA 収録対象の化学および化学周辺分野 文献の主題や発明の新規性/進歩性に関連する物質
特徴	<ul style="list-style-type: none"> すべての反応関与物質を収録する 収率情報も収録する 反応関与物質や収率情報をリンクして精密な反応検索ができる 	<ul style="list-style-type: none"> 無機化合物やポリマーを含めて幅広く合成文献を検索できる 古い年代の反応情報も検索できる 同一反応中に限定した検索はできない 汎用の試薬、溶媒、触媒は索引されない 収率情報は収録されない

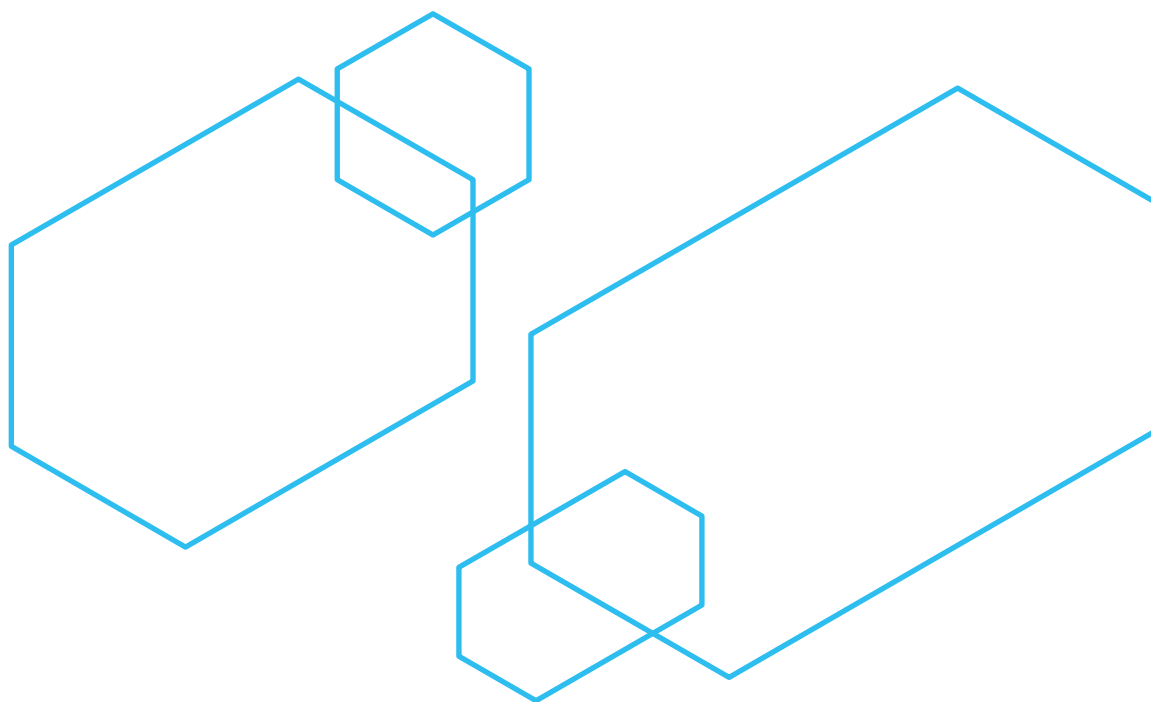


まとめ

- CAS STNext には、反応情報に関するデータベースが複数搭載されている。収録源や収録内容、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。
- CPlus ファイルと CASREACT ファイルは、反応関与物質の索引方針に違いがある。CASREACT ファイルは反応情報検索に特化したデータベースである。

B CASREACT ファイル

CASREACT ファイルの収録内容や検索方法についてご紹介します。



概要

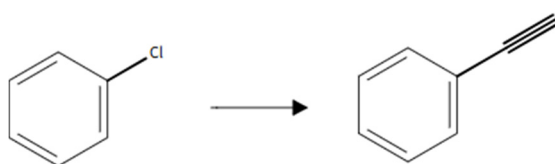
CASREACT ファイルは、CAS 作成のデータベースである。化学反応情報をさまざまな手法で検索できる。ただし、化学物質名称からは検索できない。

CAS 登録番号 (CAS RN®) を使った検索

- 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

反応物や生成物の指定だけでなく、さまざまな条件を組み合わせて検索できる。

項目		検索フィールド
溶媒		/SOL
触媒		/CAT ANY/CAT : 触媒を使っている反応すべてに限定
収率	CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索、構造検索用	/YD NONE/YDT (収率の記載なし)
	官能基検索用	/FG.YD NONE/FG.YDT (収率の記載なし)
反応情報のキーワード		/NTE
雑誌名		/JT
発行年*		/PY
資料種類		/DT

* ベーシック特許のみ

収録範囲

CASREACT ファイルには CAS の収録基準 (APPENDIX 参照) に合致した反応が収録されている。

- 一段階反応および多段階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。
- 原文献に記載されていれば、収率や反応条件、安全性に関する情報 (キーワード) も収録されている。

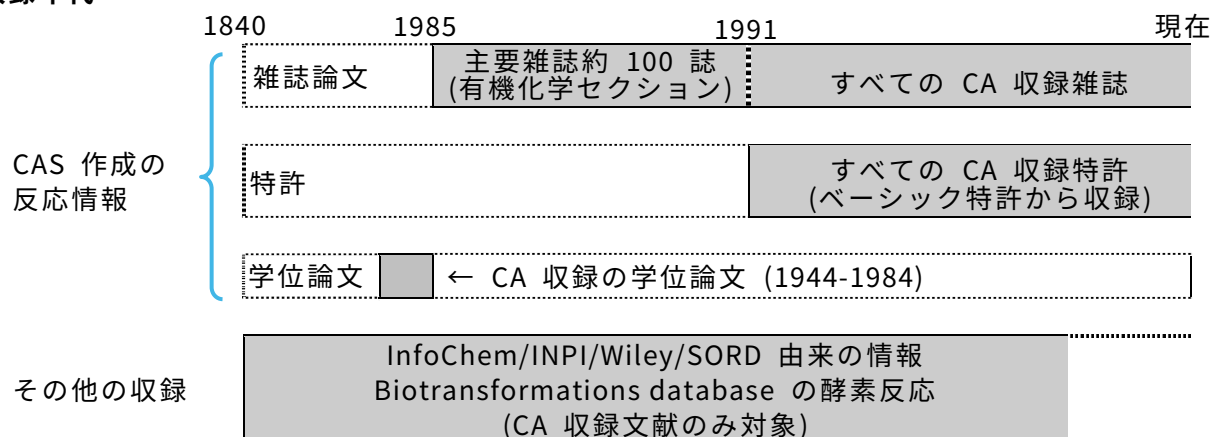
CAS 作成の反応情報 (1985 年以降) に加えて、他の収録源からも反応情報を収録している。

- 他の収録源 (=> S NONCAS/FS で限定できる)
 - InfoChem (1974-1999 年)
 - INPI (1840-1985 年)
 - SORD (1961-2011 年)
 - Wiley (1921-2015 年)
 - Biotransformation (1971-1997 年)

CAS 以外の収録源のデータについても以下の機能を利用できる。

- すべての反応関与物質に CAS 登録番号 (CAS RN®) が付与されている。
(INPI, Wiley 由来の反応情報は、触媒と溶媒の CAS RN® の収録が不完全な場合がある)
- ロール、反応部位、マッピングを指定した検索や、官能基検索が利用できる。

収録年代

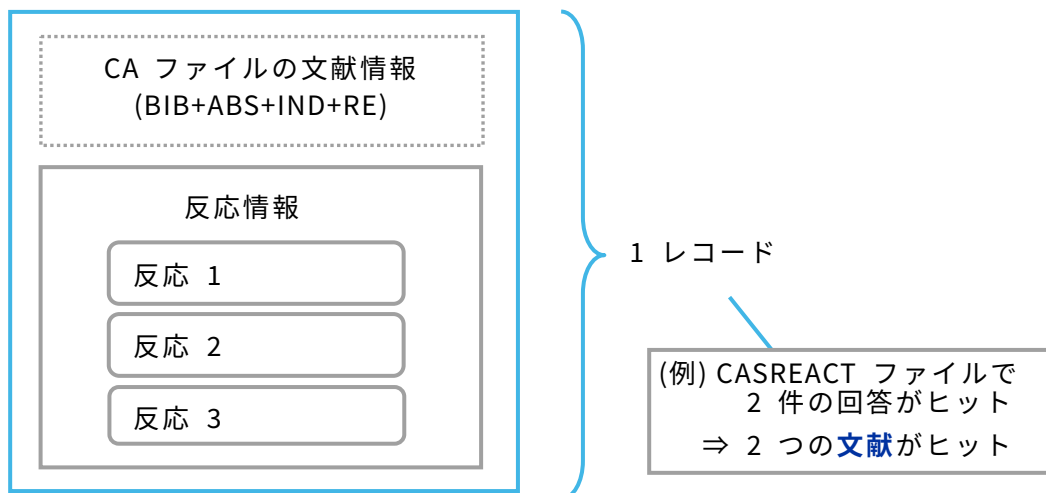


- Wiley 社由来の反応情報の出典
 - Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (EROS) : e-EROS 2001~2015 年版
 - Organic Syntheses : 1921 - 2015 年
 - Organic Reactions : 1946 - 2008 年

レコード構成

レコードは文献単位であり、1 レコード = 1 文献である。

- CAplus/CA ファイルの文献情報と CASREACT ファイル独自の反応情報が収録されている。



反応情報の収録

- 一段階反応 (例：新規反応を開発した論文)

反応 (1)	A	---	B
反応 (2)	C	---	D
反応 (3)	E	---	F

- 多段階反応 A + B ---> C ---> D ---> E (例：全合成)

反応 (1)	A + B	---	C
反応 (2)	C	---	D
反応 (3)	D	---	E
反応 (4) = 反応 (1) + (2)	A + B	---	C ---> D
反応 (5) = 反応 (2) + (3)	C	---	D ---> E
反応 (6) = 反応 (1) + (2) + (3)	A + B	---	C ---> D ---> E

- 分岐多段階反応 A + B ---> C -----> D (例：誘導体合成)

|
---> E ---> F

反応 (1)	A + B	---	C
反応 (2)	C	---	D
反応 (3)	C	---	E
反応 (4)	E	---	F
反応 (5) = 反応 (1) + (2)	A + B	---	C ---> D
反応 (6) = 反応 (1) + (3)	A + B	---	C ---> E
反応 (7) = 反応 (3) + (4)	C	---	E ---> F
反応 (8) = 反応 (1) + (3) + (4)	A + B	---	C ---> E ---> F

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。

レコード例 (BIB ABS IND RX(1) RX(2) RX(3) 表示形式)

BIB

CAplus/CA
ファイルの
書誌情報

AN 132:222457 CASREACT [Full-text](#)
 TI Photochemical process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane
 IN Ollivier, Jean; Drutel, Damien
 PA Elf Atochem S.A., Fr.
 UO ARKEMA
 UOS Arkema
 SO Eur. Pat. Appl., 7 pp.
 CODEN: EPXXDW
 DT Patent
 LA French
 FAN.CNT 1
 PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----	----	-----	-----	-----
EP 989118	A1	20000329	EP 1999-402108	19990824
EP 989118	B1	20011024		
:				

ABS

CAplus/CA
ファイルの
抄録

PRAI FR 1998-11734 19980921
 AB Lauryl lactam, useful as a monomer (no data), is prepd. in high yield and selectivity by the photochem. nitrosation of cyclododecane with a nitrosation agent (e.g., nitrosyl chloride) and hydrogen chloride in an org. solvent (e.g., chloroform) to produce the oxime of cyclododecanone which is then subjected to a Beckmann rearrangement in the presence of methanesulfonic acid. IPCI C07D0201-04 [ICM,6]

IPCI C07D0201-04 [ICM,6]

IPCR C07D0201-04 [I]; C07D0227-02 [I]

CC 27-21 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))
 Section cross-reference(s): 35, 74

ST lauryl lactam prepn cyclododecane reaction; photochem nitrosation
 cyclododecane prepn cyclododecanone oxime; Beckmann rearrangement
 cyclododecanone oxime prepn lauryl lactam

IT Beckmann rearrangement
 (of cyclododecanone oxime in the presence of methanesulfonic acid for the prepn. 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 prepn. of lauryl lactam from cyclododecane)

IT 67-66-3, Chloroform, uses 108-90-7, Chlorobenzene, uses
 RL: NUU (Other use, unclassified); USES (Uses)

(photochem. process for the prepn. 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 prepn. 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 prepn. of lauryl lactam from cyclododecane)

IT 947-04-6P, Lauryl lactam

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(photochem. process for the prepn. of lauryl lactam from cyclododecane)

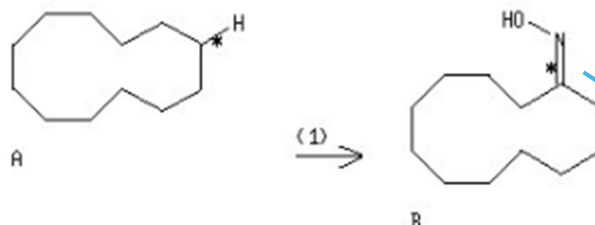
IND

CAplus/CA
ファイルの
索引情報

RX(1)
1 番目の
反応情報
(CASREACT
ファイル特有)

反応マップ RX(1) OF 3 A ==> B...

反応図



一段階反応 RX(1)

A → B → H

"..." 前後の反応の存在を表す

* は反応部位

反応要約 RX(1)

反応物
試薬
生成物
溶媒
注記

RCT A 294-62-2
RGT C 75-75-2 MeSO₃H, D 2696-92-6 NOCl, E 7647-01-0 HCl
PRO B 946-89-4
SOL 67-66-3 CHCl₃, 7732-18-5 Water
NTE gaseous HCl and NOCl used, sodium vapor lamp (400 W) used, photochemical

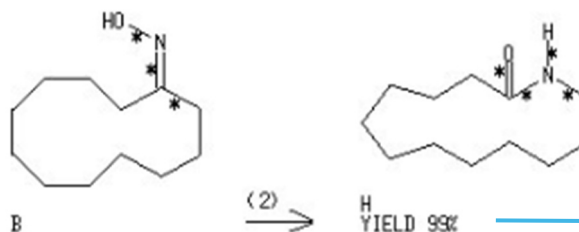
反応関与物質は CAS 登録番号 (CAS RN®) で索引されている

RX(2)
2 番目の
反応情報
(CASREACT
ファイル特有)

RX(2) OF 3 ...B ==> H

一段階反応 RX(2)

A → B → H



収率

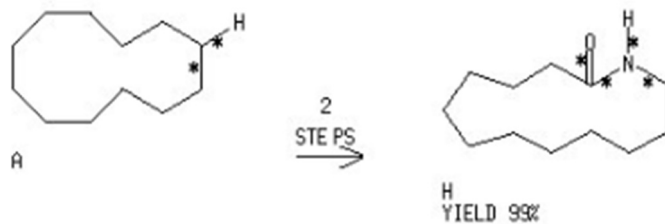
RX(2)

RCT B 946-89-4
RGT C 75-75-2 MeSO₃H
PRO H 947-04-6
CON 1 hour, 135 - 140 deg C
NTE Beckmann rearrangement

RX(3)
3 番目の
反応情報
(CASREACT
ファイル特有)

RX(3) OF 3 COMPOSED OF RX(1), RX(2)
RX(3) A ==> H

多段階反応 RX(3)
A → B → H



RX(1) RCT A 294-62-2
RGT C 75-75-2 MeSO₃H, D 2696-92-6 NOCl, E 7647-01-0 HCl
PRO B 946-89-4
SOL 67-66-3 CHCl₃, 7732-18-5 Water
NTE gaseous HCl and NOCl used, sodium vapor lamp (400 W) used, photochemical

RX(2) RCT B 946-89-4
RGT C 75-75-2 MeSO₃H
PRO H 947-04-6
CON 1 hour, 135 - 140 deg C
NTE Beckmann rearrangement

RE.CNT 2 THERE ARE 2 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索

CAS 登録番号 (CAS RN®) に役割 (ロール) を指定して検索できる。

青字 : 使用頻度の高いロール

フィールド	ロール	フィールド	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 : 触媒反応に限定		

ロールを指定しない場合は、すべてのロールが検索対象

- 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)。
- 溶媒と触媒は CAS RN® 検索のみ可能 (構造検索、官能基検索は不可)。
- 同一反応中に限定する場合、(L) 演算子を使う。

ロールを指定した検索

- 【方法 1】 CASREACT ファイルで CAS 登録番号 (CAS RN®) に直接ロールを指定

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

=> S 137-58-6/RRT          ← リドカインを反応物または試薬とする反応
L1      102 137-58-6 /RRT

=> S 137-58-6/PRO          ← リドカインを生成物とする反応
L2      53 137-58-6 /PRO
```

- 【方法 2】 REGISTRY ファイルの回答セット (L 番号) にロールを指定

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

=> S LIDOCAINE/CN          ← リドカインの名称で検索
L3      1 LIDOCAINE/CN

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

=> S L3/PRO                ← REGISTRY ファイルの回答集合の L 番号を指定して検索
L4      53 L3/PRO          (リドカインを生成物とする反応)
```

- 使い分けの目安

- 3 物質以下の場合 → 【方法 1】
- 4 物質以上の場合 → 【方法 2】

検索例： (*E*)-3-Penten-2-one (CAS RN® 3102-33-8) の合成法を検索する。さらに、アセトニトリル (CAS RN® 75-05-8) を反応物/試薬に用いている反応に限定する。

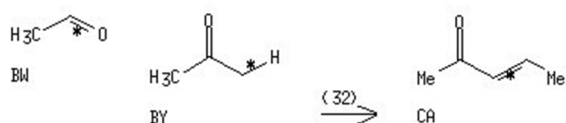
```
=> FILE CASREACT          ← CASREACT ファイルに入る

=> S 3102-33-8/PRO          ← 3102-33-8 が生成物の反応を検索
L1      40 3102-33-8/PRO

=> D FHIT                  ← 1 番目の回答を FHIT 表示形式で表示

L1  ANSWER 1 OF 40  CASREACT  COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX(32) OF 1191    BW  +  BY  ==>  CA...
```



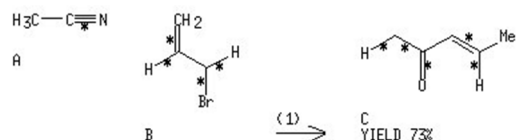
```
RX(32)  RCT  BW 75-07-0, BY 67-64-1
        RGT  AC 1310-73-2 NaOH
        PRO  CA 3102-33-8
        SOL  64-17-5 EtOH
        CON  SUBSTAGE(1) 0 deg C -> room temperature
              SUBSTAGE(2) 4 hours, room temperature
        NTE  stereoselective
```

```
=> S L1 (L) 75-05-8/RRT    ← 75-05-8 が反応物/試薬の反応に限定
L2      1 L1 (L) 75-05-8/RRT
```

```
=> D FHIT                  ← FHIT 表示形式で表示
```

```
L2  ANSWER 1 OF 1  CASREACT  COPYRIGHT 2025 ACS on STN
```

```
RX(1) OF 1    A  +  B  ==>  C
```



```
RX(1)  RCT  A 75-05-8
```

(L)
同一反応中に限定

```
STAGE(1)
```

```
RGT  D 37350-66-6 Ag Zn alloy
SOL  60-29-7 Et2O, 109-99-9 THF
```

```
STAGE(2)
```

```
RCT  B 106-95-6
```

```
STAGE(3)
```

```
RGT  E 7647-01-0 HCl
SOL  7732-18-5 Water, 60-29-7 Et2O
```

```
STAGE(4)
```

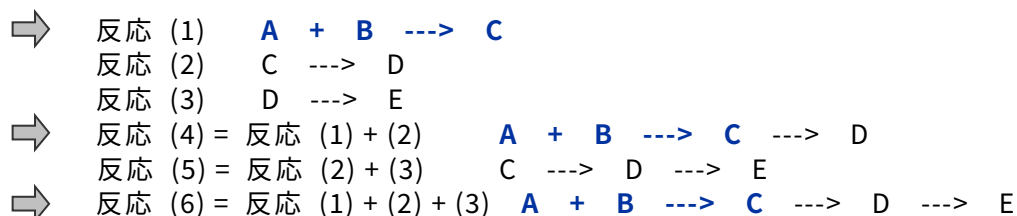
```
RGT  F 6674-22-2 DBU
SOL  60-29-7 Et2O
```

```
PRO  C 3102-33-8
```

回答表示

CASREACT ファイルは 1 レコード = 1 文献で構成されている。そのため、1 レコードに複数の反応情報が収録されている場合がある。

例 : A + B \longrightarrow C \longrightarrow D \longrightarrow E の合成法に関する文献



反応情報の表示

- 基本的には、検索してヒットした部分 (= 目的の反応) を表示する。①、② を選択できる。

- ① FHIT 表示形式 : 最初にヒットした反応のみを表示
- ② HIT 表示形式 : ヒットした反応すべてを表示
 (同じ反応が何度も表示される場合がある)

- 例えば、ヒットした反応が A + B \longrightarrow C の場合、以下の反応が表示される

- ① FHIT 表示形式 : 反応 (1)
- ② HIT 表示形式 : 反応 (1)、反応 (4)、反応 (6)

- ヒットしていない部分も含めてすべての反応情報を表示した場合、表示が非常に長くなる場合がある (全合成研究の文献など)。

CASREACT ファイルには、反応情報に加えて、CAplus/CA ファイルと同じ文献情報 (書誌情報、抄録、索引など) が収録されている。

- 反応情報を表示する際、文献の書誌情報と合わせて表示することができる。

例 : => D L1 BIB FHIT
 => D L1 STD FPATH

- CAplus/CA ファイルと同じ表示形式を利用できる (ALL、FBIB、FAM 表示形式以外)。

- ALL 表示形式では、文献情報に加えて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。

主な表示形式 (反応情報)

青字 : 使用頻度の高い表示形式

形 式	表 示 内 容
FCRD	ヒットした最初の反応の構造図のコンパクト表示
FCRDREF	<デフォルト> FCRD と原資料 (SO、PY)
SCAN	<回答チェック用> FCRD と標題 (回答番号の指定不可)
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)

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

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
 :

表示例 : Clarinex (CAS RN® 100643-71-8) の合成法を調べる。

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

=> S 100643-71-8/PRO ← 生成物の反応に限定する
L1 61 100643-71-8/PRO

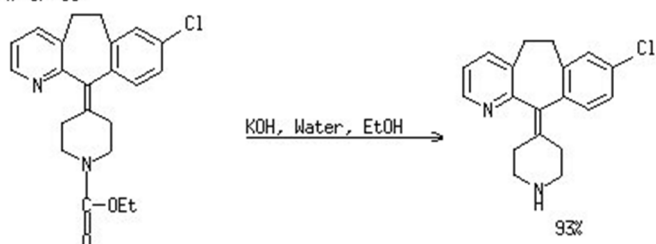
=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示

L1 61 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Design and synthesis of thiourea derivatives containing a
benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine moiety as potential antitumor and
anti-inflammatory agents

RX

RX(4) OF 35



NOTE: optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study

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

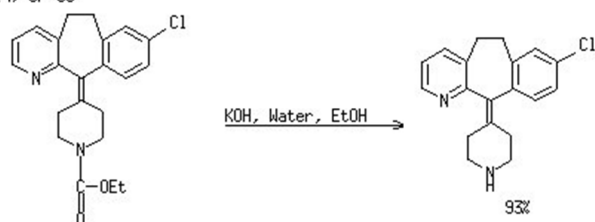
SCAN 表示形式 (回答チェック用) の表示内容

- 標題
- FCRD (ヒットした最初の反応の構造図のコンパクト表示)

=> D FCRDREF 31 ← FCRDREF 表示形式で表示

L1 ANSWER 31 OF 61 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX(4) OF 35



REF: Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 22(8), 2701-2704;

2012

NOTE: optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study

CON: 6 hours, reflux

FCRDREF 表示形式 (デフォルト) の表示内容

- FCRD (ヒットした最初の反応の構造図のコンパクト表示)
- 原資料 (SO、PY)

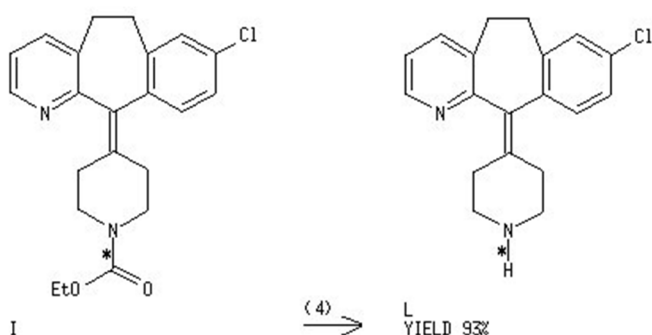
=> D 31 BIB ABS FHIT

← 書誌情報、抄録と反応情報 (FHIT) を組み合わせて表示

L1 ANSWER 31 OF 61 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN
AN 156:560388 CASREACT [Full-text](#)
TI Design and synthesis of thiourea derivatives containing a
benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine moiety as potential antitumor and
anti-inflammatory agents
AU Liu, Wukun; Zhou, Jinpei; Zhang, Tong; Zhu, Haiyang; Qian, Hai; Zhang,
Huibin; Huang, Wenlong; Gust, Ronald
CS Department of Medicinal Chemistry, China Pharmaceutical University,
Nanjing, 210009, Peop. Rep. China
SO Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters (2012), 22(8), 2701-2704
CODEN: BMCLE8; ISSN: 0960-894X
PB Elsevier B.V.
DT Journal; (online computer file)
LA English
AB Benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine thiourea derivs. were developed and
screened for antitumor and anti-inflammatory activity. Most of the
comps. exhibited growth inhibitory effects comparable to 5-fluorouracil
in vitro against mammary (MCF-7 and MDA-MB 231) as well as colon (HT-29)
carcinoma cells. They also showed stronger anti-inflammatory activity
than ibuprofen in vivo in the xylene-induced ear swelling assay in mice.

RX(4) OF 35 ...I ==> L...

← 反応マップ



RX(4) RCT I 79794-75-5
RGT M 1310-58-3 KOH
PRO L [100643-71-8](#)
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH
CON 6 hours, reflux
NTE optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization
study
RE.CNT 29 THERE ARE 29 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

← 反応要約

FHIT 表示形式の表示内容

– ヒットした最初の反応の反応マップ、構造図、反応要約

=> D FPATH 31

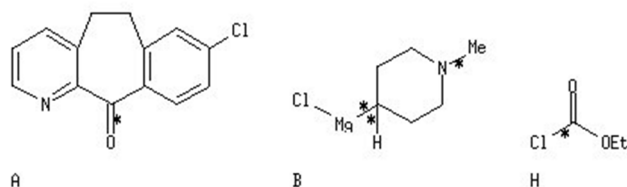
← FPATH 表示形式で表示

L1 ANSWER 31 OF 61 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX(20) OF 35 COMPOSED OF RX(1), RX(2), RX(3), RX(4)

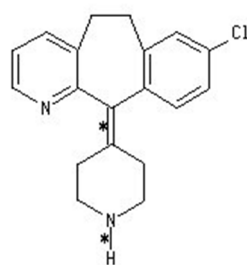
RX(20) A + B + H ==> L

← 反応マップ



← 構造図

4
STEPS
→



L
YIELD 93%

FPATH 表示形式の表示内容

- 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)

FPATH 表示形式では、RX(1)~(4) の反応要約が表示されるので、
中間体や試薬も確認できる

【比較】 FHIT 表示形式では RX(4) の反応要約のみが表示される

FPATH 表示形式では

- ① 生成物のみを指定して検索した場合、出発物質がすぐわかる
- ② 反応物のみを指定して検索した場合、最終化合物がすぐわかる

RX(1) RCT A 31251-41-9, B 63463-36-5
PRO C 38089-93-9
SOL 109-99-9 THF
CON 3 hours, reflux
NTE in-situ generated reactant

← 反応要約

RX(2) RCT C 38089-93-9
RGT F 7664-93-9 H2SO4
PRO E 38092-89-6
SOL 7732-18-5 Water
CON 4.5 hours, room temperature

RX(3) RCT E 38092-89-6, H 541-41-3
RGT J 121-44-8 Et3N
PRO I 79794-75-5
SOL 108-88-3 PhMe
CON 3 hours, reflux

RX(4) RCT I 79794-75-5
RGT M 1310-58-3 KOH
PRO L **100643-71-8**
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH
CON 6 hours, reflux
NTE optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study

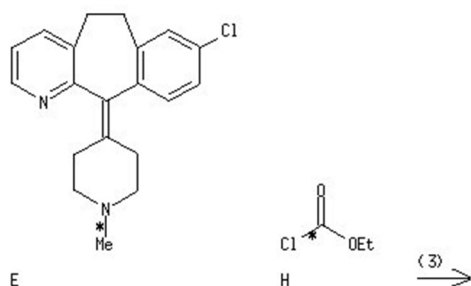
=> D 31 RX(3) RX(4)

← RX(n) 表示形式で表示

L1 ANSWER 31 OF 61 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX(3) OF 35 ...E + H ==> I...

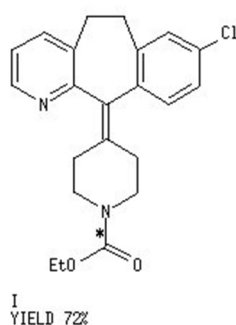
← RX(3) の反応マップ



RX(n) 表示形式の表示内容

– 指定した反応番号の反応マップ、構造図、反応要約

- 各ステップの詳細を表示できる
- ヒットした反応以外も表示できる



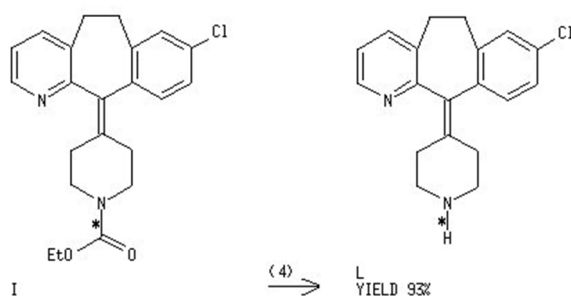
← RX(3) の構造図

RX(3) RCT E 38092-89-6, H 541-41-3
RGT J 121-44-8 Et3N
PRO I 79794-75-5
SOL 108-88-3 PhMe
CON 3 hours, reflux

← RX(3) の反応要約

RX(4) OF 35 ...I ==> L...

← RX(4) の反応マップ



← RX(4) の構造図

RX(4) RCT I 79794-75-5
RGT M 1310-58-3 KOH
PRO L 100643-71-8
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH
CON 6 hours, reflux
NTE optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study

← RX(4) の反応要約

反応条件、書誌情報の検索

下記の項目から検索が可能である。

項目		検索フィールド
収率	CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索、構造検作用	/YD NONE/YDT (収率の記載なし)
	官能基検作用	/FG.YD NONE/FG.YDT (収率の記載なし)
反応ステップ数		/NS
反応情報のキーワード		/NTE
雑誌名		/JT
発行年*		/PY
資料種類		/DT

* ベーシック特許のみ

- 収率や反応ステップ数は数値検索フィールドである。範囲を指定した数値検索ができる。

=> S 90<=YD ← 収率 90% 以上
 => S 1-3/NS ← 反応ステップ数 1-3
 => S 1<=NS<=2 ← 反応ステップ数 1 以上 2 以下

- 生成物や反応物と、収率や反応ステップ数をリンクして検索する場合は、適切な近接演算子を使用する。
- 反応に関するキーワードが NTE フィールドに収録されている場合がある。
 - キーワードは統制されていないため、様々な表現を考慮した上で検索するとよい。
- CAplus/CA ファイルと同じ検索フィールドを利用できるが、下記は検索できない。
 - 対応特許情報 (ベーシック特許以外の /PD, /PY, /PN, /AD, /AY, /AP など)
 - 対応特許の IPC (/IPC)
 - 最終権利者情報 (/UO, /UOS)
 - 関連特許ファミリー数 (/FAN.CNT)
 - IT フィールド中の CAS 登録番号 (CAS RN®) と CAS ロール (/IT)
 - 引用情報・被引用情報 (/RE.CNT, /OSC.G など)
 - クレーム (/CLM)、特許ステータス (/STI)、IPC 以外の特許分類 (/CPC など) は CASREACT ファイルでは表示できず、検索もできない。

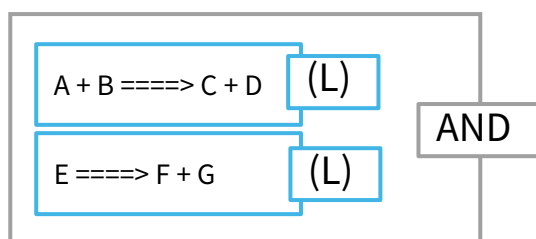
CASREACT ファイルで用いる演算子

CASREACT ファイルにおける演算子は下記の通りである。

- 同一反応中に限定したい場合は (L) 演算子を使う。

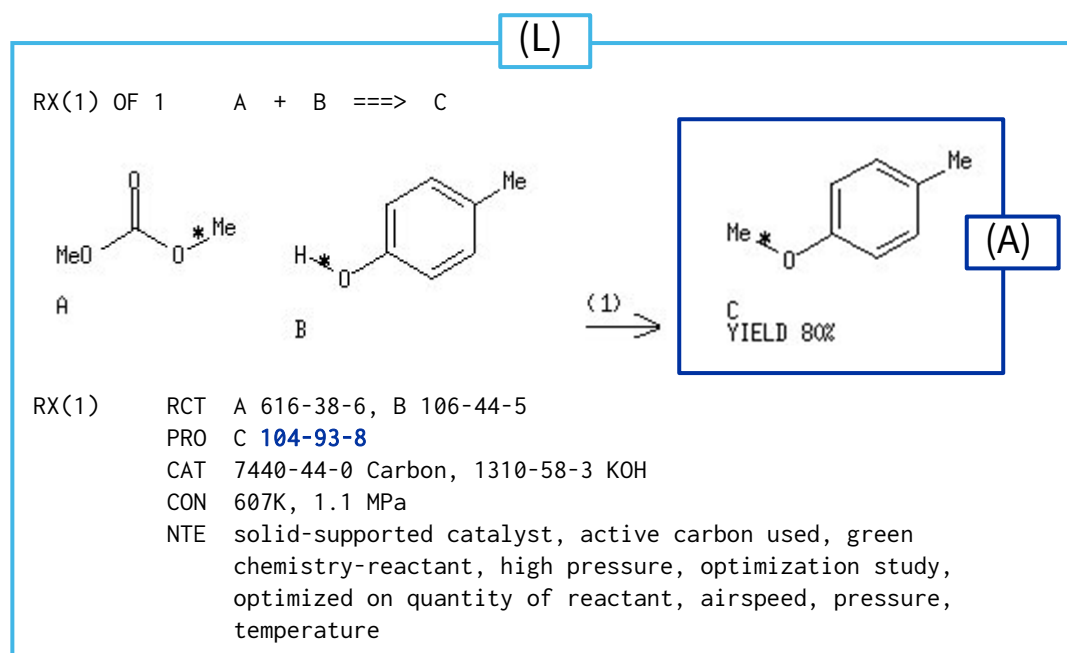
```
=> S 616-38-6/RCT (L) 104-93-8/PRO (L) 7440-44-0/CAT
=> S 616-38-6/RCT (L) ANY/CAT (L) 1/NS
```

- AND 演算子は、レコード (文献) 中のすべての情報が対象であるため、目的でない反応がヒットする場合がある。



- 収率 (YD) と生成物をリンクする場合のみ (A) 演算子を用いる。

```
=> S 104-93-8/PRO (A) 80<=YD
```



- CAlplus/CA ファイルの書誌情報とかけ合わせたい場合は AND 演算子を用いる。

```
=> S 104-93-8/PRO AND P/DT
```

← 特許中の反応に限定

検索例：フェキソフェナジン (Fexofenadine) およびフェキソフェナジンを含む多成分物質の合成反応を検索する。さらに下記の条件に限定する。

- 収率が 80% 以上の反応
- 相間移動触媒 TEBAC (Triethylbenzylammonium chloride) を用いる反応

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E FEXOFENADINE/CN ← フェキソフェナジンの名称を /CN で EXPAND

```
E1      1      FEXODINE/CN
E2      1      FEXOFEN/CN
E3      1  --> FEXOFENADINE/CN
E4      1      FEXOFENADINE HYDROCHLORIDE/CN
E5      1      FEXOFENADINE METHYL ESTER/CN
```

=> S E3

L1 1 FEXOFENADINE/CN

=> D ← IDE 表示形式 (デフォルト) で表示

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RN 83799-24-0 REGISTRY

CN **Fexofenadine**

フェキソフェナジンの CAS 登録番号 (CAS RN®)

MF C32 H39 N O4

INCH InChI=1S/C32H39NO4/c1-31(2,30(35)36)25-17-15-24(16-18-25)29(34)14-9-21-33-22-19-28(20-23-33)32(37,26-10-5-3-6-11-26)27-12-7-4-8-13-27/h3-8,10-13,15-18,28-29,34,37H,9,14,19-23H2,1-2H3,(H,35,36)

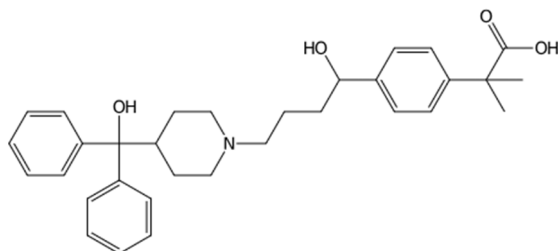
INKY RWTNPBWLIMQHL-UHFFFAOYSA-N

CI COM

SR CA

LC STN Files: ADISINSIGHT, ADISNEWS, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASBIOACTIVI, CASFORMULTNS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, EMBASE, IMSRESEARCH, IPA, MEDLINE, REAXYSFILESU*, RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL

(*File contains numerically searchable property data)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

2522 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

49 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

2604 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> S 83799-24-0/CRN ← /CRN で、フェキソフェナジンを含む多成分物質を検索

L2 64 83799-24-0/CRN

=> D SCAN

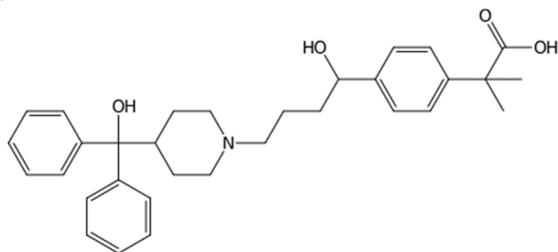
← SCAN 表示形式で表示

L2 64 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Benzeneacetic acid, 4-[1-hydroxy-4-[4-(hydroxydiphenylmethyl)-1-piperidinyl]butyl]- α,α -dimethyl-, compd. with methanol (1:2)

MF C32 H39 N O4 . 2 C H4 O

CM 1



CM 2

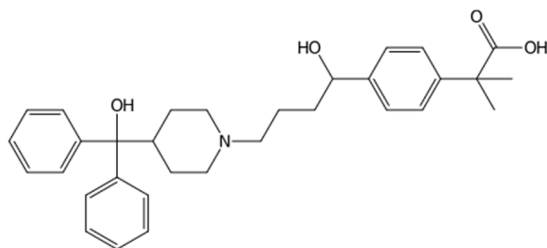
—OH

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

L2 64 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

IN Benzeneacetic acid, 4-[1-hydroxy-4-[4-(hydroxydiphenylmethyl)-1-piperidinyl]butyl]- α,α -dimethyl-, hydrate (1:1)

MF C32 H39 N O4 . H2 O



• H₂O

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

=> S L1 OR L2

L3 65 L1 OR L2

← フェキソフェナジンとその多成分物質の検索結果をまとめる

=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

=> S L3/PRO

L4 63 L3/PRO

← フェキソフェナジンとその多成分物質の合成反応を検索

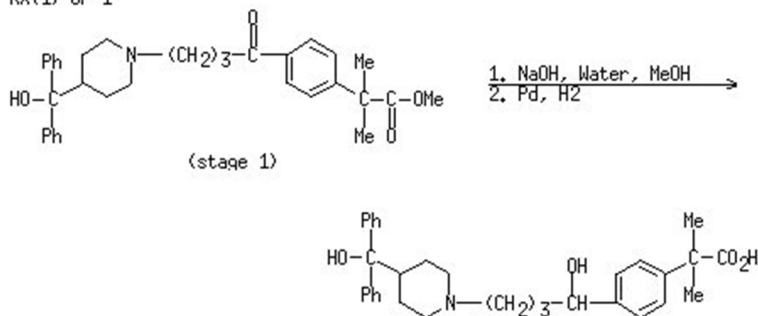
← SCAN 表示形式で表示

L4 63 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Process for preparing fexofenadine

RX

RX(1) OF 1



NOTE: alternative preparation shown

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

生成物の収率が 80% 以上の反応に限定

$$\Rightarrow S_{L4}(A) 80 \leq YD$$

L5

26 L4 (A) $80 \leq YD$

← 生成物と収率を (A) 演算子で掛け合わせる

収率情報のない反応も含めたい場合は
(A) $(80 \leq YD \text{ OR } NONE/YDT)$ と演算

=> D SCAN

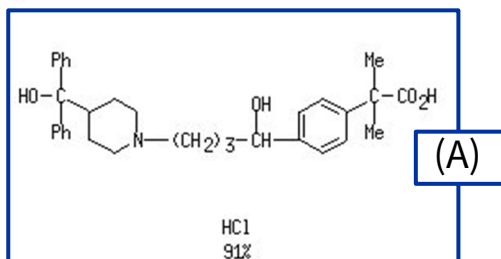
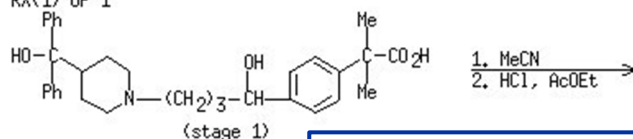
← SCAN 表示形式で表示

L5 26 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Method for producing nonhydrated antiallergic fexofenadine hydrochloride in a novel crystalline form

RX

RX(1) OF 1



NOTE: crystal polymorphism

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

相間移動触媒 TEBAC を用いる反応に限定

- CASREACT ファイルでは触媒や溶媒は CAS RN® で検索する。
- CAS RN® がわからない場合は REGISTRY ファイルで調べる。

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> E TEBAC/CN

← TEBAC の名称を /CN で EXPAND

```
E1      1      TEB4 PROTEIN (HUMAN CLONE TEB4)/CN
E2      1      TEBA/CN
E3      1  --> TEBAC/CN
E4      1      TEBACON/CN
E5      1      TEBACYL/CN
```

:

=> S E3

L6 1 TEBAC/CN

=> SEL RN

← L6 から CAS RN® を抽出

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

← E 番号が付与される

=> D SEL

← E 番号を表示して確認

E1 1 56-37-1/BI

=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

=> S L5 (L) E1/CAT

← TEBAC が触媒である反応に限定

L7 1 L5 (L) 56-37-1/CAT

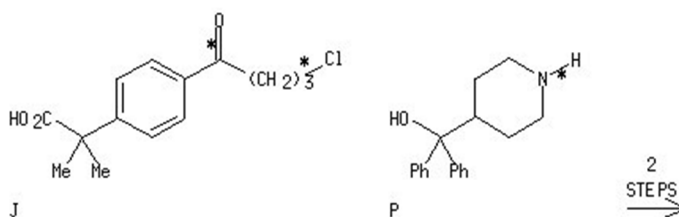
=> D FHIT

← FHIT 表示形式で表示

L7 ANSWER 1 OF 1 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX(8) OF 15 COMPOSED OF RX(4), RX(1)

RX(8) J + P ==> B



B
YIELD 81%

RX(4) RCT J 169280-21-1, P 115-46-8

STAGE(1)

RGT Q 144-55-8 NaHCO₃
CAT [56-37-1](#) PhCH₂NEt₃ Cl
SOL 7732-18-5 Water
CON overnight, 35 - 40 deg C

STAGE(2)

RGT E 7647-01-0 HCl
SOL 7732-18-5 Water
CON pH 5

PRO A 76811-98-8

RX(1) RCT A 76811-98-8

STAGE(1)

RGT C 16940-66-2 NaBH₄, D 1310-73-2 NaOH
SOL 64-17-5 EtOH, 7732-18-5 Water
CON SUBSTAGE(1) cooled
SUBSTAGE(2) 3 hours, room temperature

STAGE(2)

RGT E 7647-01-0 HCl
SOL 7732-18-5 Water
CON pH 5

STAGE(3)

RGT E 7647-01-0 HCl
SOL 64-17-5 EtOH
CON pH 2.5 - 3


PRO B [153439-40-8](#)

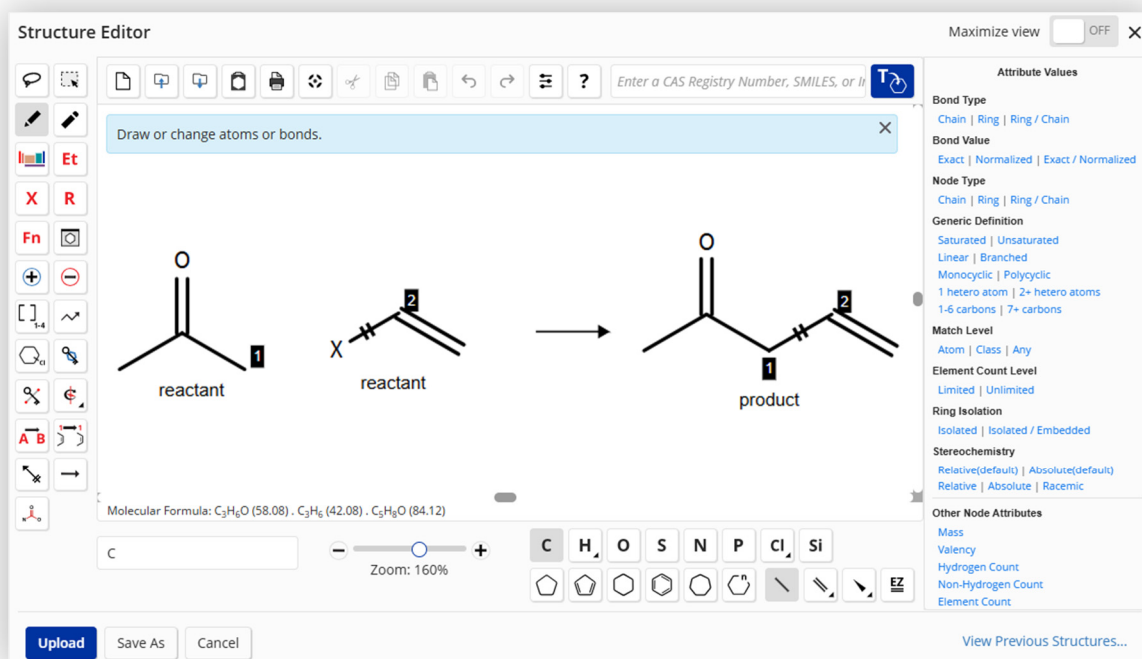
NTE green chemistry, green chemistry-waste reduction, overall yield was 42% from benzene over five steps

反応質問式による構造検索 - 概要

CASREACT ファイルでは、反応質問式を作図して構造検索を行うことができる。

STNext での作図

- ① CASREACT ファイルに入る
- ②  ボタンをクリックすると、構造作図画面が起動する。
- ③ 反応質問式を作成し、反応ロールや反応部位、マッピングを指定する。



反応作図用のツール

反応矢印ツール



反応ロールツール



マッピングツール




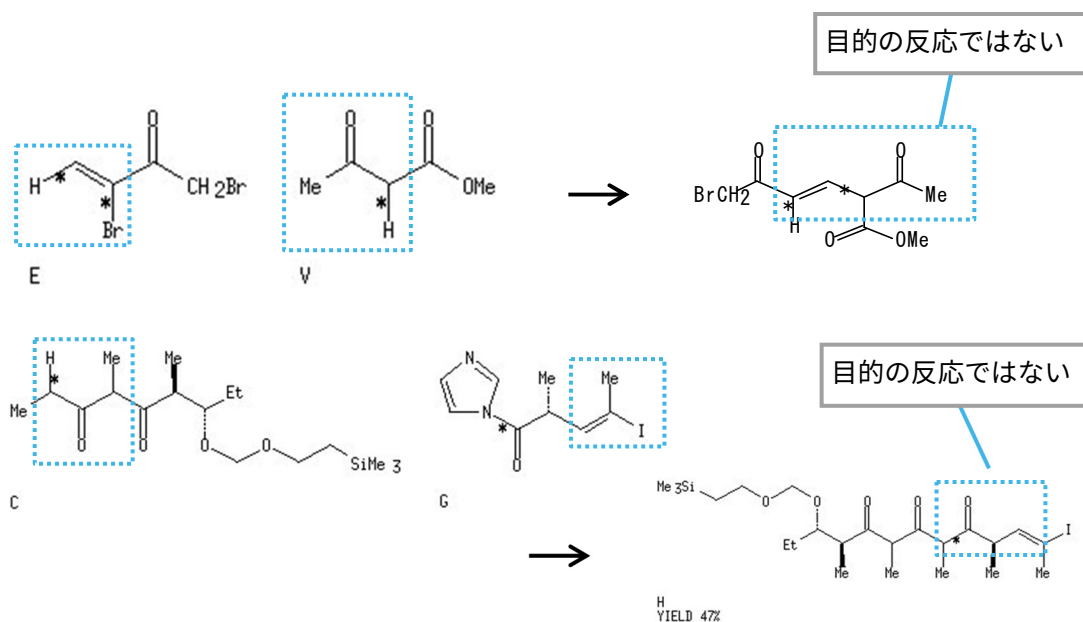
反応部位ツール



- 構造作図画面は Settings で 構造作図のツールバーの配置をメイン画面に組み込まれた配置 (Attached) と独立して移動できる配置 (Floating) の変更が可能。本テキストでは Attached を使用する。詳細は CAS STNext 利用ガイド <https://seminar.jaici.or.jp/doc/stnextguide.pdf> 参照。


反応質問式の作図のポイント

- 反応物、生成物、試薬を独立した構造として作図する。
 - 反応物のみ、生成物のみ、試薬のみの作図でもよい。
 - 溶媒や触媒は構造検索できないので、作図しない。
- 反応ロールは、反応ロールツール  で指定する。
 - 「試薬」 ロールを指定すると、マッピングや反応サイトの指定をしても無視される。
 - 「反応物または試薬」 ロールを指定すると、マッピングや反応サイトの指定は反応物だけについて行われ、試薬については無視されるため、検索結果にノイズが含まれることがある。
- 必要に応じて、マッピングや反応部位を指定する。
 - 例えば、前ページの反応質問式でマッピングや反応部位を指定しなかった場合、下記の反応(ノイズ) がヒットする。




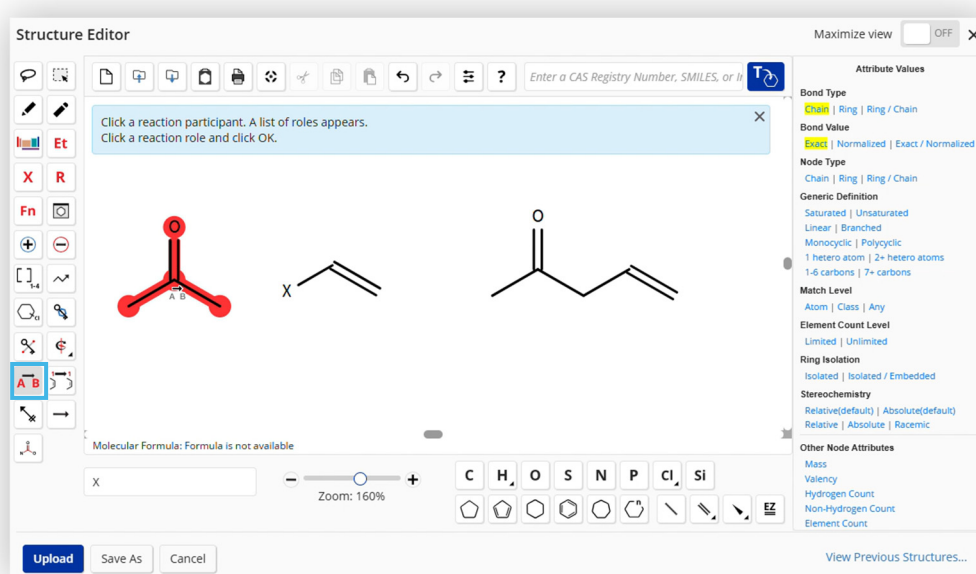
- 立体構造検索や同一成分内に限定した検索はできない。

反応質問式の作成 - 反応ロール

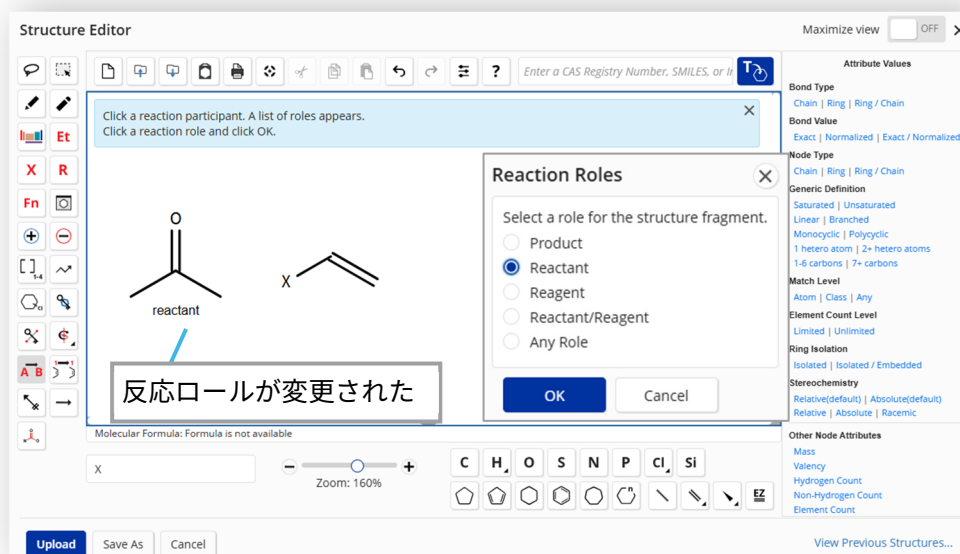
反応ロールの指定には反応ロールツール  を用いる。

- 反応サイトとマッピングは、反応ロールとして reactant または product を指定した場合のみ有効。
- reactant/reagent を指定すると、反応サイトやマッピングの指定は reactant だけについて行われ reagent については無視されるため、検索結果にノイズが含まれることがある。

① 反応ロールツール  をクリックし、ロールを指定したい構造をクリックする。




② 反応ロールの選択画面で、指定したいロールを選んで OK をクリックする。

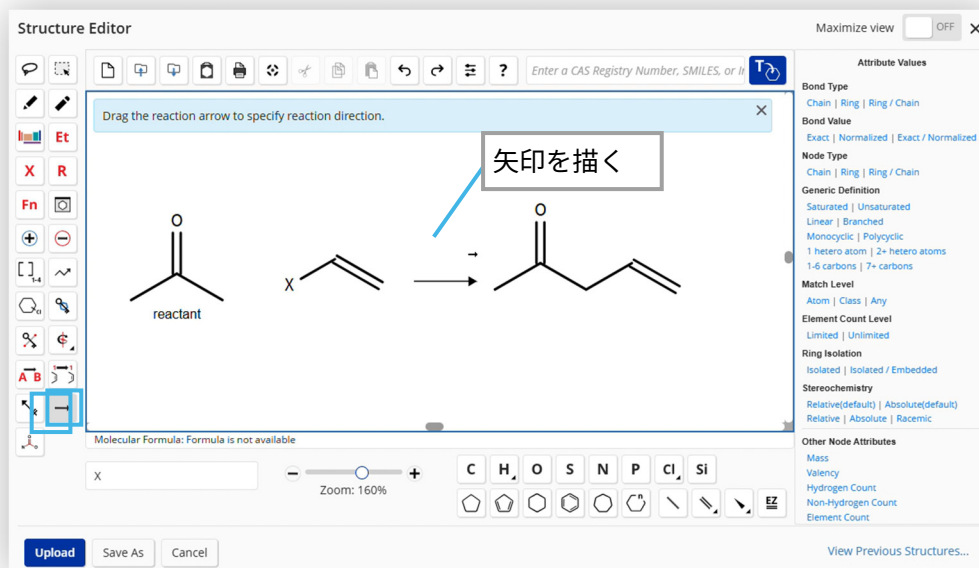


反応質問式の作成 – 反応矢印

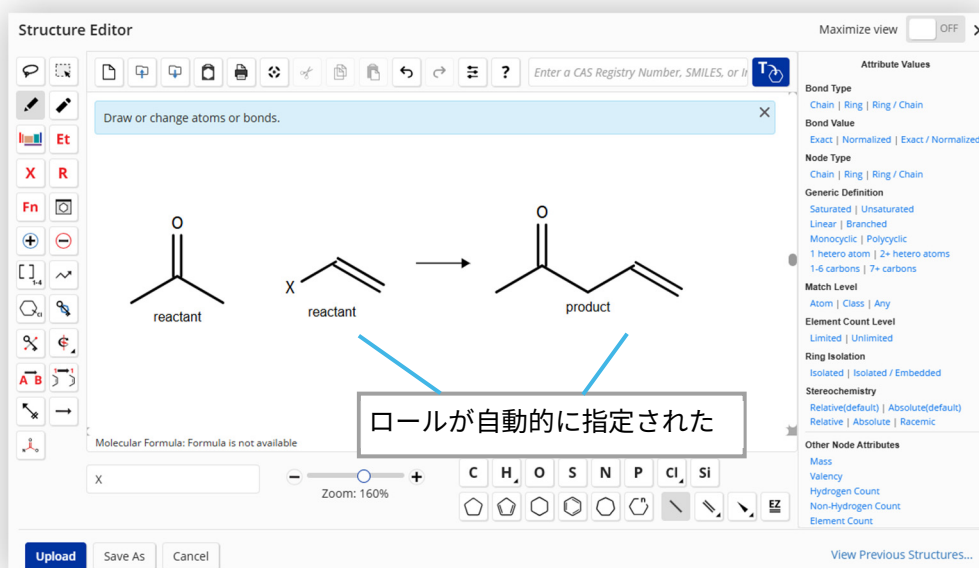
反応ロールツールの代わりに反応矢印ツールで反応ロールを自動的に付与することができる。

- 反応矢印ツールでは、自動的に reactant または product のどちらかが付与される。

① 反応矢印ツール  をクリックし、マウスをドラッグして矢印を描く。



② 反応ロールが付与される。




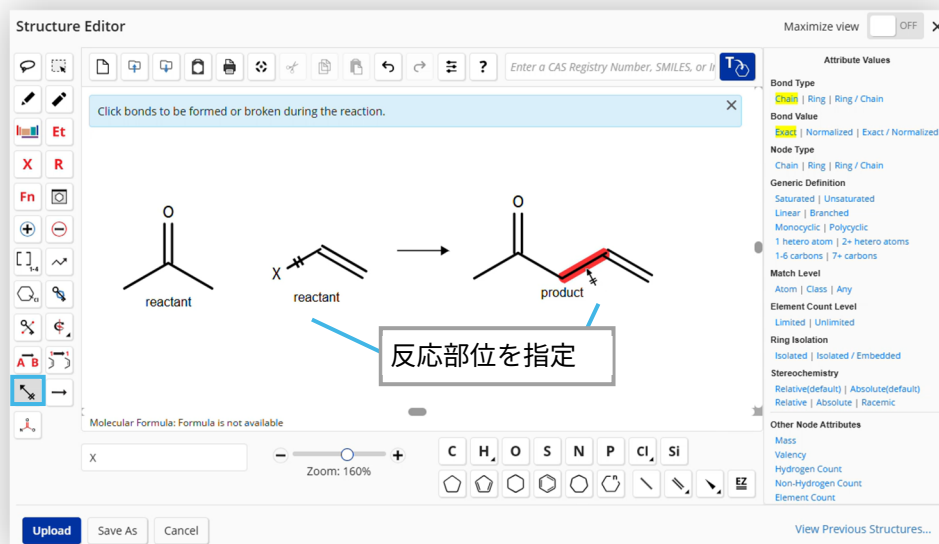
反応質問式の作成 – 反応部位

反応部位ツールを用いると、反応によって変化する結合を指定することができる。

- 「反応物」 または 「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。
- 「試薬」 や「反応物または試薬」 の結合に指定すると、反応部位情報との照合は反応物だけについて行われ、試薬については無視される。

反応部位の指定方法

- 反応部位ツール  をクリックし、反応によって変化する結合をクリックする。
- 反応に関与する結合が複数ある場合は、主な結合に付与する。




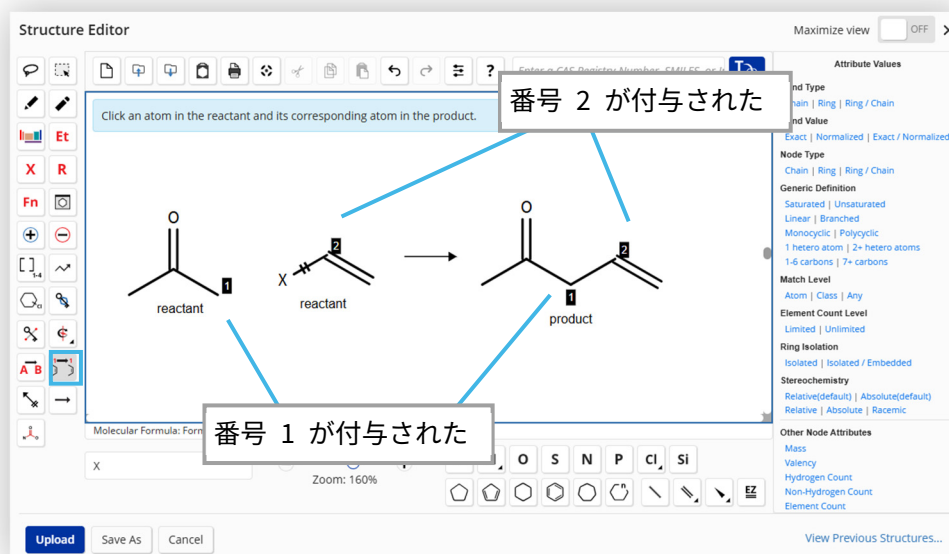
反応質問式の作成 - マッピング

マッピングツールを用いると、反応物と生成物中の対応する原子を指定することができる。

- 異なる構造フラグメント内の同じ元素記号に対して指定できる。
- ショートカット、R グループ、一般式グループ (Ak, Hy など)、繰り返しグループ中のノードにはマッピングを指定できない。
- 試薬の場合は、マッピングを無視した検索が実行される。

マッピングの指定方法

- マッピングツール  をクリックし、反応物と生成物中の対応する原子をクリックする。(対応する原子に同じ番号が付与される)。
- 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。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。



構造検索のコマンド

反応質問式を使った構造検索 (L# は構造質問式)

=> S L# 検索タイプ 検索範囲

一部スクリーンも利用可能

構造検索のタイプ

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。 追加の置換基がついてもよい。
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 (作図していないところはすべて水素) の反応を検索する。

構造検索の範囲

検索範囲	内容
SAMPLE (デフォルト)	データベース中の一部 (5%) を検索
FULL	データベースすべて (100%) を検索
RANGE	指定した範囲に限定して検索

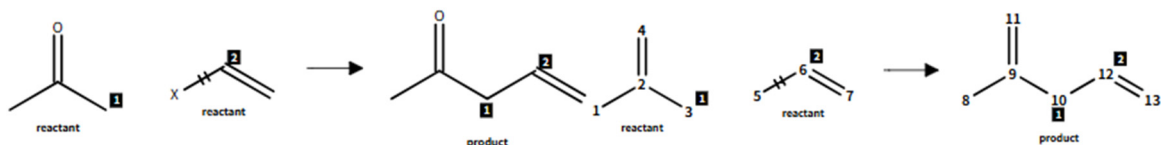
CASREACT ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	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	100,000,000	100,000,000	100,000,000	100,000,000
回答数 (文献数)	50	100,000,000	100,000,000	100,000,000	100,000,000

構造検索の流れ

構造検索の流れ

- ① 作図が完了したら、構造作図画面の **Upload** をクリックして、アップロードする。



L1 STRUCTURE UPLOADED

- ② サンプル検索を実行する。

=> S L1

← サンプル検索

SAMPLE SEARCH INITIATED 02:24:56

SCREENING COMPLETE - 28925 REACTIONS TO VERIFY FROM 337 DOCUMENTS

100.0% DONE 28925 VERIFIED 3 HIT RXNS

1 DOCS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

ONLINE COMPLETE であることを確認

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE

COMPLETE

← フルファイル検索の予想

BATCH

COMPLETE

← BATCH 検索の予想

PROJECTED VERIFICATIONS: 568315 TO 588685

← 予想 Verification 数

PROJECTED ANSWERS:

1 TO 79

← 予想回答数

L2 1 SEA SSS SAM L1 (

3 REACTIONS)

↑ ヒットした文献数

↑ ヒットした反応数

- ③ サンプル検索の回答を確認する。

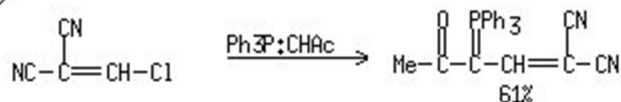
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で回答を確認

L2 1 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Study of diazo compounds and azides; XLI. Dicyanovinylolation of acylmethylene triphenylphosphoranes

RX RX(8) OF 30



ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

④ フルファイル検索を実行する。

=> S L1 FUL

← フルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 02:12:15

SCREENING COMPLETE - 593047 REACTIONS TO VERIFY FROM 6819 DOCUMENTS

100.0% DONE 593047 VERIFIED 128 HIT RXNS

44 DOCS

SEARCH TIME: 00.00.02

L3 44 SEA SSS FUL L1 (128 REACTIONS)
 ↑ ヒットした文献数 ↑ ヒットした反応数

⑤ 回答を表示する。

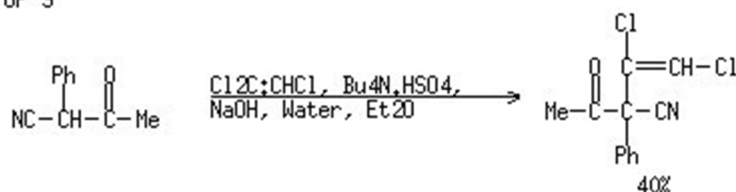
=> D SCAN

← SCAN 表示形式でヒットした回答を確認

L3 44 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Direct Dichlorovinylolation of Some Carbonyl Compounds by Trichloroethylene Under Conditions of Phase-Transfer Catalysis

RX(9) OF 9



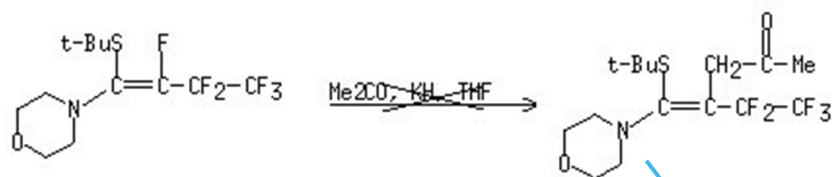
NOTE: stereoselective

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

L3 44 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Oxidation and chlorination reactions of perfluoroketene-N,S-acetals

RX(18) OF 48



NOTE: failed reaction, refluxing conditions also tried

進行しない反応も回答に含まれている

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

参考：応用テクニック

反応検索の結果に対して絞り込み検索を行う際は、適切な近接演算子を使用する。

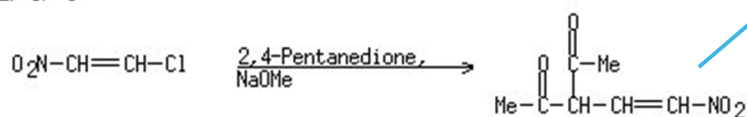
=> S L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) ← L3 (生成物を作図した反応検索結果) に
L4 24 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) 収率を演算する場合は (A) 演算子を使用

=> D SCAN

L4 24 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Synthesis, structure, and stereospecific reactions of
1-halo-2-nitroethenes

RX(1) OF 5



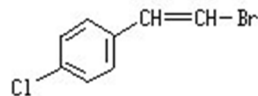
収率情報のない反応

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

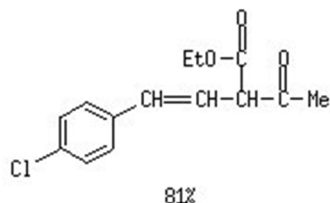
L4 24 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI CuI/L-proline-catalyzed coupling reactions of vinyl bromides with
activated methylene compounds

RX(5) OF 11



Et acetoacetate, CuI,
(S)-Proline, Cs2CO3,
DMSO



収率情報のある反応

NOTE: Ullmann-type coupling reaction

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

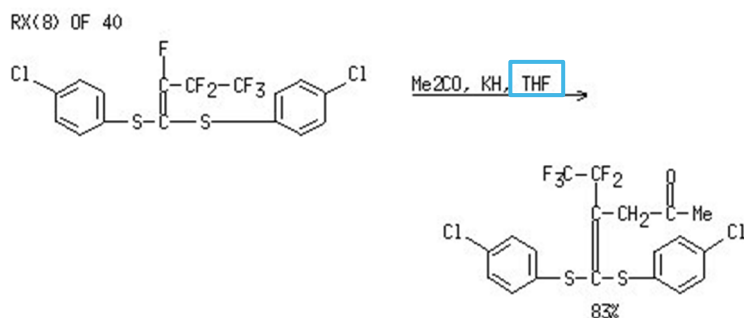
=> S L4 (L) 109-99-9/SOL ← 溶媒を THF (109-99-9) に限定
L5 12 L4 (L) 109-99-9/SOL

=> D SCAN

L5 12 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Synthesis of new trifluoromethylated furans, dihydrofurans and butenolides starting from γ -ketothioesters and diisopropylamine

RX



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

=> S L5 (L) 1/NS

← 一段階反応に限定

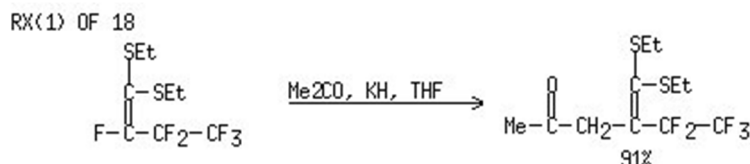
L6 9 L5 (L) 1/NS

=> D SCAN

L6 9 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Fluorinated ketene dithioacetals. 8.
1,1-Bis(ethylsulfanyl)perfluorobut-1-ene as starting material for the synthesis of substituted 2-(trifluoromethyl)furans and -pyrroles

RX



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

=> D BIB ABS FHIT

← BIB ABS FHIT 表示形式で表示

L6 ANSWER 1 OF 9 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 164:507213 CASREACT [Full-text](#)

TI 2,3-Dibromo-1-(phenylsulfonyl)-1-propene

AU Murphree, S. Shaun

CS Allegheny College, Meadville, PA, USA

SO e-EROS Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (2008), 1-4

Publisher: John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, UK.

CODEN: 69KUHI

URL: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/047084289X.rn00829/pdf;>

ISBN: 978-0-470-84289-8

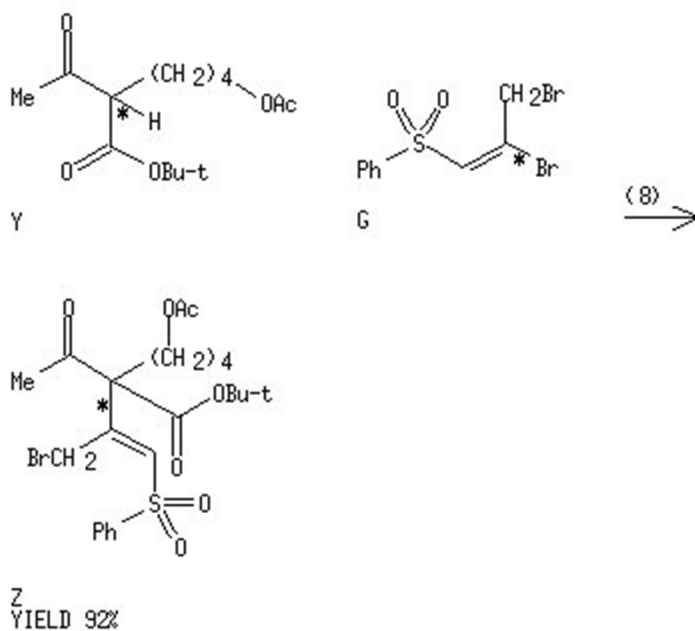
DT Conference; General Review; (online computer file)

LA English

AB A review. Synthesis, handling, properties and reactivity of 3-dibromo-1-(phenylsulfonyl)-1-propene in Michael addns. and cyclization

reactions are briefly reviewed.

RX(8) OF 533 ...Y + G ==> Z...



RX(8) RCT Y 22281-73-8

STAGE(1)

RGT W 7646-69-7 NaH

SOL **109-99-9** THF

STAGE(2)

RCT G 128496-94-6

PRO Z **213205-45-9**

NTE Michael addition

RE.CNT 14 THERE ARE 14 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMATT

Verification が不完全な回答

CASREACT ファイルで構造検索を行った際、Verification (照合確認) が不完全な回答が含まれることがある。

=> FILE CASREACT
:

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 15:26:34

SCREENING COMPLETE - 10139 REACTIONS TO VERIFY FROM 2331 DOCUMENTS

10,139 反応 (2,331 文献) を照合確認

100.0% DONE 10139 VERIFIED 16 HIT RXNS (2 INCOMP) 8 DOCS

SEARCH TIME: 00.00.02

16 反応 (8 文献) がヒット
* Verification が不完全な 2 反応を含む

L3 8 SEA SSS FUL L1 (16 REACTIONS)
↑文献数 ↑反応数

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、大きく分けて下記の二種類がある。

1) 反応マッピングや反応部位の情報が不完全なレコードの場合

- 回答を表示した際、次のメッセージが表示される。

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

2) Verification が制限時間内に終わらなかった場合

- Verification が完全な回答に限定したい場合は、=> S L#/COM または => S L#/COMPLETE (L# は構造検索結果) を実行する。

=> S L3/COM

L4 7 L3/COM

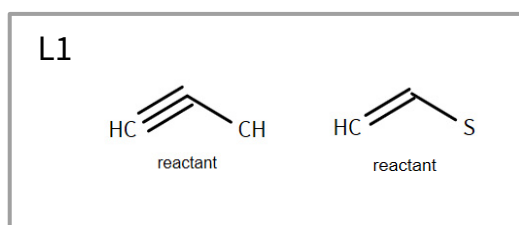
← Verification が完全 (COMPLETE) な回答に限定

← Verification が完全な回答 (7 文献)

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できるが、同一物質中や異なる物質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）が得られる場合がある。

検索例 1：下記の反応質問式 (L1) を検索する。



```
=> FILE CASREACT          ← CASREACT に入る
:
L1      STRUCTURE UPLOADED

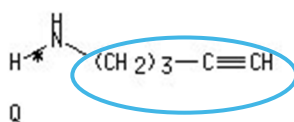
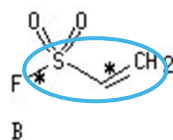
=> S L1                    ← サンプル検索
L2      22 SEA SSS SAM L1 ( 730 REACTIONS)

=> S L1 FUL                ← フルファイル検索
L3      414 SEA SSS FUL L1 ( 7084 REACTIONS)

=> D FHIT 1 14            ← 1、14 番目の回答を FHIT 表示形式で表示

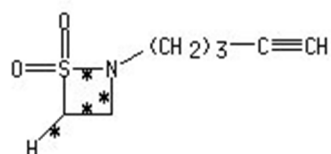
L3      ANSWER 1 OF 414 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN
```

RX(8) OF 26 B + Q ==> R



各フラグメントが別の物質中に存在

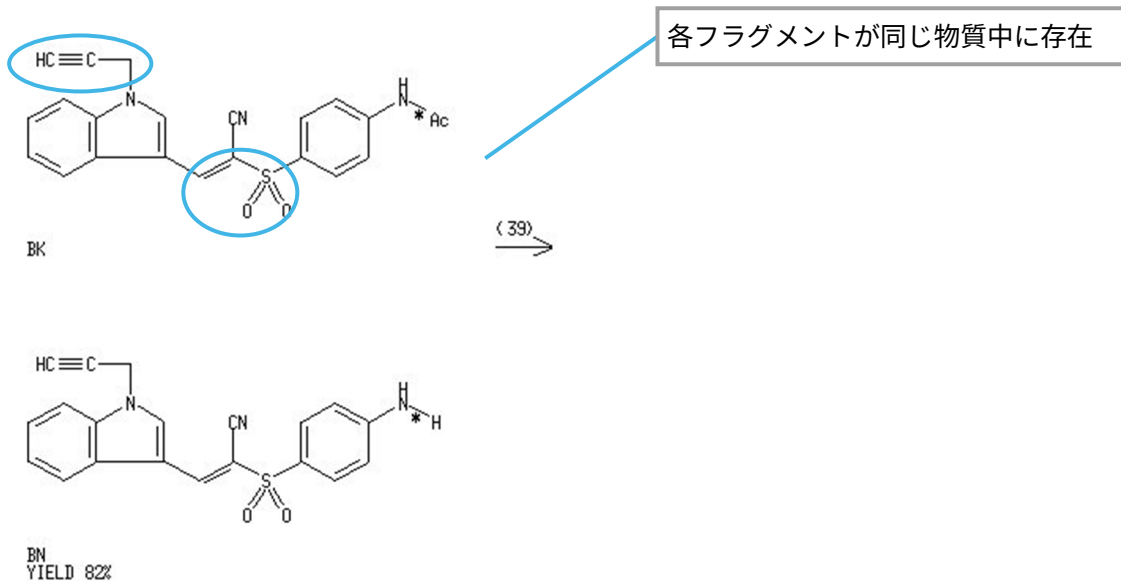
(8)



YIELD 74%

```
RX(8)      RCT  B 677-25-8, Q 15252-44-5
           PRO  R 1857994-53-6
           SOL  75-09-2 CH2Cl2
           CON  16 hours, room temperature
           NTE  silica gel used
```

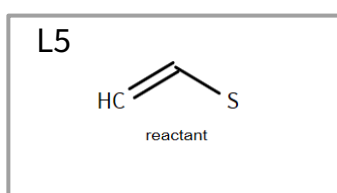
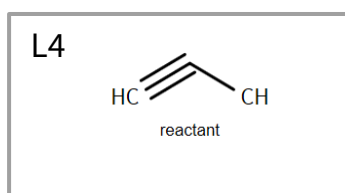
RX(39) OF 546 ...BK ==> BN



RX(39) RCT BK 2966800-62-2
 PRO BN 2966800-63-3
 CAT 7647-01-0 HCl
 SOL 64-17-5 EtOH
 CON 8 hours, 90 deg C

検索例 2 : 下記の反応質問式 (L4、L5) を AND 演算する。

検索例 1 の回答に加え、両フラグメントの構造が重なった反応物の回答も得られる。



=>

L4 STRUCTURE UPLOADED

=>

L5 STRUCTURE UPLOADED

=> S L4 AND L5

L6 24 SEA SSS SAM L4 AND L5 (732 REACTIONS)

=> S L4 AND L5 FUL

L7 439 SEA SSS FUL L4 AND L5 (7133 REACTIONS)

=> S L7 NOT L3

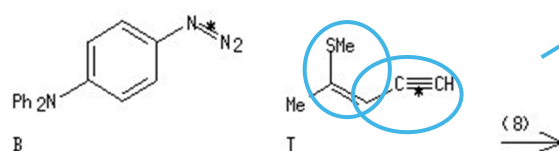
L8 25 L7 NOT L3

=> D FHIT

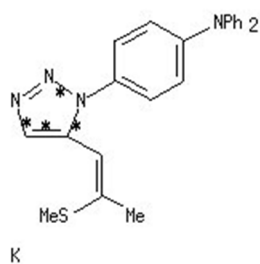
← 1 番目の回答を FHIT 表示形式で表示

L8 ANSWER 1 OF 25 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX(8) OF 15 B + T ==> K...



フラグメント同士が重なっている



RX(8) RCT B 1186212-40-7, T **2258-44-8**
PRO K 2152619-77-5
CAT 1427319-59-2 Ruthenium, tetra-μ₃-chlorotetrakis(η⁵-2,4-cyclopentadien-1-yl)tetra-
SOL 68-12-2 DMF
CON 110 deg C
NTE alternative preparation shown

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から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)。

- 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。
 - 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)
- 官能基用語の一覧は => HELP FGA で、官能基クラス用語の一覧と定義は => HELP FGC で確認できる。

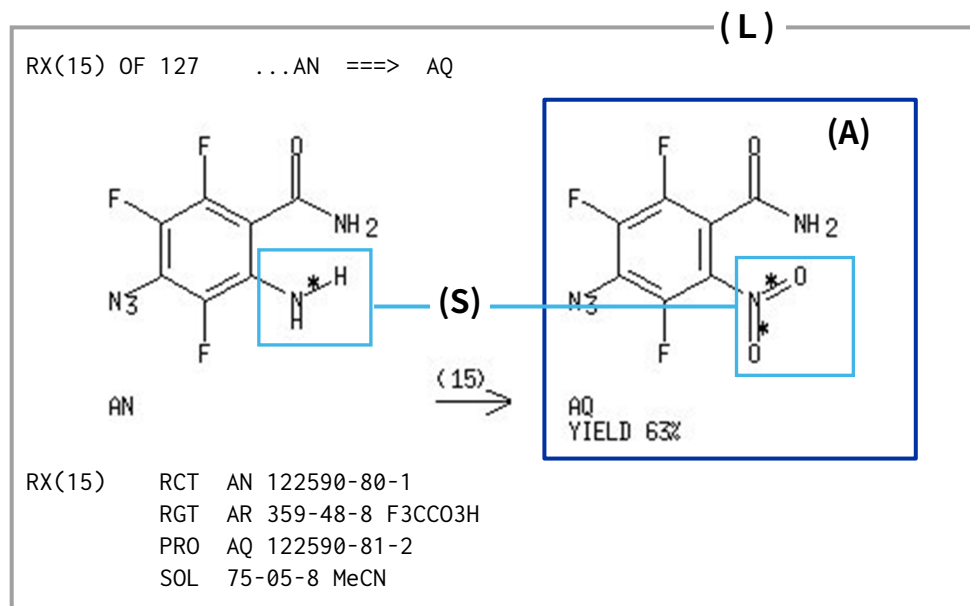
官能基検索フィールド

検索フィールド	内容
/FG.RXN	反応した官能基 (Functional Group Reactant)
/FG.FORM	生成した官能基 (Functional Group Formed)
/FG.NON	反応しない官能基 (Nonreacting Functional Group)
/FG.RCT	反応物中の官能基 (Reactant Functional Group)
/FG.PRO	生成物中の官能基 (Product Functional Group)
/FG.RGT	試薬中の官能基 (Reagent Functional Group)
/FG	官能基一般 (/FG.PRO, /FG.RGT, /FG.RCT)
/FG.YD	官能基—収率 Yield Functional Group)
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 (S) 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



複数の官能基を指定する場合は、近接演算子を用いてなるべく一つの質問式で検索する。

(S) 演算子

- 同一反応（一段階および多段階）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、(S) 演算子を利用する。

(L) 演算子

- 同一反応中に限定する場合、(L) 演算子を利用する。
 - 例：共通の原子が存在しない官能基変換の場合
 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 (CAS RN[®]) 検索と組み合わせる場合

(A) 演算子

- 収率 (/FG.YD) と生成物中の官能基 (/FG.FORM または /FG.PRO) をリンクする場合、(A) 演算子を利用する。

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、AND 演算子を利用する。

← CASREACT に入る

```

=> S LACTONE/FG.NON (L) (SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM (S) KETONES/FG.RXN)
L1      2680 LACTONE/FG.NON (L) (SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM (S) KETONES/FG.RXN)

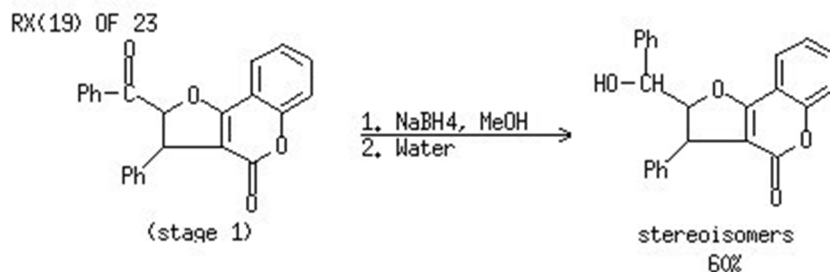
```

$$\begin{array}{l} \Rightarrow S \quad L1 \quad (L) \quad 1/NS \\ L2 \quad \quad \quad 2406 \quad L1 \quad (L) \quad 1/NS \end{array} \quad \leftarrow \text{一段階反応に限定する}$$

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

L2 2406 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

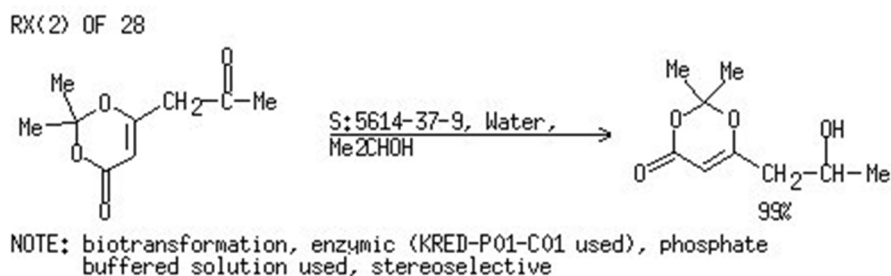
TI Erythrosine B Catalyzed Synthesis of
trans-Dihydro-4H-furo[3,2-c]chromen-4-ones through Photocatalytic
Dehydrogenative sp³ C-O Bond Formation



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

L2 2406 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Targeted covalent inhibition of telomerase
RX



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

参考：応用テクニック

反応情報のキーワード (/NTE) による絞り込み

=> S L2 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE ← 立体選択性に関する記述がある反応に限定
L3 1175 L2 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE

=> D SCAN

L3 1175 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Synthesis of chiral α -hydroxy amides by two sequential enzymatic catalyzed reactions

RX(7) OF 21



NOTE: stereoselective, no solvent, enzymic, biotransformation, whole cells of *Saccharomyces cerevisiae* used, ee 82% at 100% conversion

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

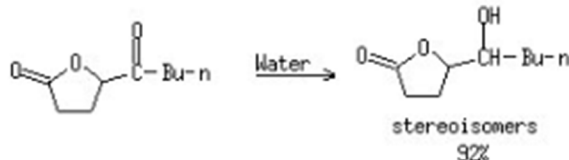
=> S L3 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE ← 酵素反応に限定
L4 55 L3 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE

=> D SCAN

L4 55 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Preparation of enantiomerically pure syn-4,5-dihydroxy carboxylic acid lactones by microbial reduction

RX(1) OF 2



NOTE: stereoselective; *Aspergillus niger* agent; enzymic

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

NOTE (/NTE) フィールドに、反応情報のキーワードが収録されている場合がある。

種類	NOTE フィールドの記載例
反応タイプ	Photochem、biotransformation
安全性	safety - danger of explosion、health hazard
反応条件*	Temp. -35.degree、high pressure

* CON フィールドに収録されている反応条件は検索不可

- NOTE 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、広く検索する。必要に応じて、基本索引も併用するとよい。

収率や書誌情報などによる絞り込み

=> S L2 (L) (90<=FG.YD OR NONE/FG.YDT)

L5 1526 L2 (L) (90<=FG.YD OR NONE/FG.YDT)

← 同一反応中に限定する場合は (L) 演算子を使用

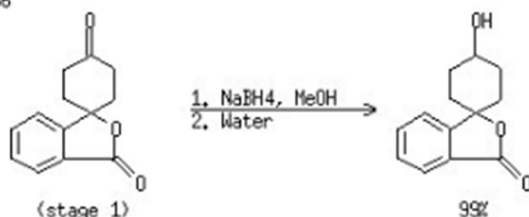
=> D SCAN

L5 1526 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Preparation of N-aryl(sulfonyl)piperidine-3-carboxamides as 11 β -hydroxysteroid dehydrogenase type 1 inhibitors and mineralocorticoid receptor antagonists.

RX

RX(22) OF 66



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

=> S L5 AND P/DT

L6 446 L5 AND P/DT

← CPlus ファイルの書誌情報をかけ合せる場合は AND 演算子を使用

=> D BIB FHIT 8

L15 ANSWER 8 OF 446 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 183:33000 CASREACT [Full-text](#)

TI Preparation of chiral α -hydroxy acid esters from α -carbonyl esters by iridium-catalyzed asymmetric hydrogenation

IN Hu, Xiangping; Hu, Xinhua

PA Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Peop. Rep. China

UO Dalian Institute of Chemical Physics (in: CAS); CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

UOS Dalian Institute of Chemical Physics (in: CAS); Chinese Academy of Sciences

SO Faming Zhuanli Shenqing, 14pp.
CODEN: CNXXEV

DT [Patent](#)

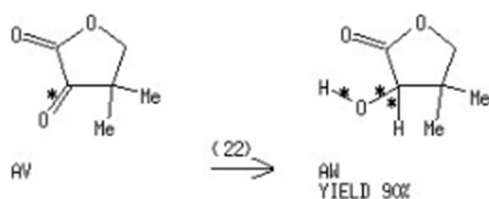
LA Chinese

FAN.CNT 1

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
CN 116135834	A	20230519	CN 2021-11361740	20211117
PRAI CN 2021-11361740		20211117		
OS MARPAT 183:33000				

RX(22) OF 22 AV ==> AW



RX(22)

STAGE(1)

CAT 2035484-52-5 Ferrocene,
1-(diphenylphosphino)-2-[(1S)-1-[[R)-(2-methylphenyl)-2-
pyridinylmethyl]amino]ethyl]-, (1S)-, 12112-67-3 Iridium,
di-μ-chlorobis[(1,2,5,6-η)-1,5-cyclooctadiene]di-
SOL 64-17-5 EtOH
CON 1 hour, room temperature

STAGE(2)

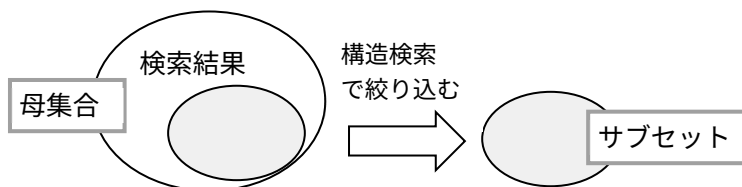
RCT AV 13031-04-4
RGT C 865-47-4 t-BuOK, D 1333-74-0 H2
CON 24 hours, room temperature, 20 atm

PRO AW 79-50-5

NTE 85% ee, glove box used in stage 1, autoclave used in stage 2,
high pressure in stage 2

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手法である。



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。

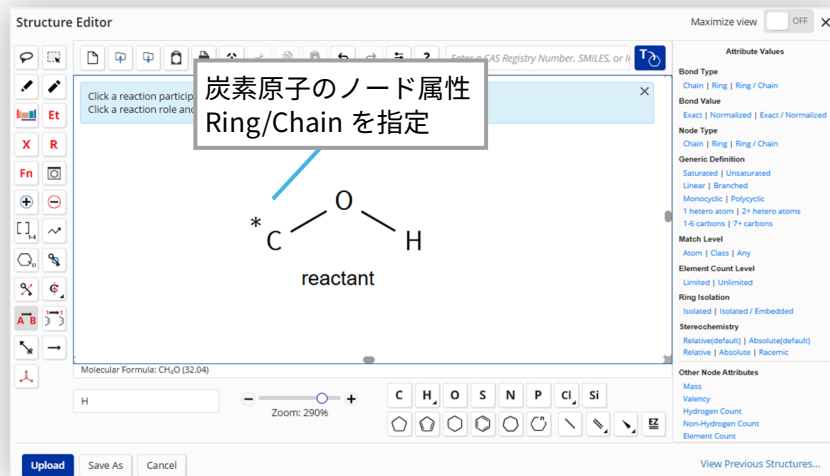
入力方法

=> S L# 検索タイプ SUB=Ln 検索範囲

検索対象範囲 (母集合) を SUB=Ln 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

- サブセット検索では、サンプル検索の場合も検索の範囲 (SAM) の入力が必要。
- 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結果の L 番号を母集合に指定する。

検索例：アルコールの反応検索 (INCOMPLETE の回避方法として利用)



=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルに入る

:
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← サンプル検索

:
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE ****INCOMPLETE****
BATCH ****INCOMPLETE****

PROJECTED VERIFICATIONS: EXCEEDS 100000000
PROJECTED ANSWERS: EXCEEDS 809019

IMCOMPLETE になった

L2 50 SEA SSS SAM L1 (467 REACTIONS)

=> S ALCOHOLS/FG.RXN

← 母集合を作成 (ここでは官能基検索を実行)

L3 849064 ALCOHOLS/FG.RXN

=> S L1 SUB=L3 SAM

← L3 を母集合としたサブセット検索 (サンプル検索)

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): ONLINE ****COMPLETE****
PROJECTED VERIFICATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 58344752 TO 58506912
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 738760 TO 758200

サブセット検索で
COMPLETE になった

L4 50 SEA SUB=L21 SSS SAM L19 (647 REACTIONS)

=> S L1 SUB=L3 FUL

← サブセット検索のフルファイル検索

:
L5 843510 SEA SUB=L21 SSS FUL L19 (51206570 REACTIONS)

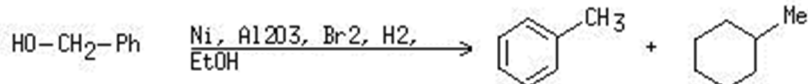
=> D SCAN

L5 843510 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Synergy of electronic and steric effects of Br-Ni catalysts for selective
hydrogenolysis of diphenyl ether to phenol

RX

RX(4) OF 9



NOTE: autoclave used, alumina supported bromine-functionalized nickel
catalyst prepared and used, high pressure, solid-supported
catalyst, thermal

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

主な検索フィールド

反応情報

検索フィールドなど	内容
CAS RN® 検索	/NS
	反応のステップ数
	/NTE
	反応注記
	/YD
	収率
	NONE/YDT
	収率データなし
	/RCT
CAS RN® 検索	反応物
	/RGT
	試薬
	/RRT
	反応物または試薬 (/RCT、/RGT)
	/PRO
	生成物
	/NPRO
	生成物以外の物質 (/RCT、/RGT、/SOL、/CAT)
CAS RN® 検索	/CAT
	触媒
	/SOL
	溶媒
構造検索	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)
構造検索	反応部位
	結合が完全に变化
	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
構造検索	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
	反応した官能基
	/FG.FORM
	生成した官能基
	/FG.NON
	反応しない官能基
	/FG.RCT
	反応物中の官能基
	/FG.PRO
官能基検索	生成物中の官能基
	/FG.RGT
	試薬中の官能基
	/FG
	官能基一般 (/FG.PRO、/FG.RGT、/FG.RCT)
	/FG.YD
	官能基-収率
	NONE/FG.YDT
	官能基-収率データなし

文献情報

検索フィールドなど	内容
/BI (デフォルト)	基本索引 (反応要約中の CAS RN [®] 、標題、抄録、 補遺語、索引語、反応情報中の単語)

Caplus/CA ファイルの全フィールド*

*ただし下記のフィールドを除く

- 対応特許情報 (ベーシック特許以外の /PD, /PY, /PN, /AD, /AY, /AP など)
- 対応特許の IPC (/IPC)
- 最終権利者情報 (/UO, /UOS)
- 関連特許ファミリー数 (/FAN.CNT)
- IT フィールド中の CAS 登録番号 (CAS RN[®]) と CAS ロール (/IT)
- 引用情報・被引用情報 (/RE.CNT, /OSC.G など)
- クレーム (/CLM)、特許ステータス (/STI)、IPC 以外の特許分類 (/CPC など)

検索機能の比較

	構造検索	CAS RN [®]	REGISTRY からの クロスオーバー検索	官能基検索
反応物	○	○	○	○
生成物	○	○	○	○
試薬	○	○	○	○
触媒	×	△*	△*	×
溶媒	×	△*	△*	×

* 遡及追加されたレコードの一部は、触媒と溶媒の CAS RN[®] の収録が不完全



まとめ

- CASREACT ファイルでは、CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索、反応質問式による構造検索、官能基検索を行って、反応を情報検索できる。
- CAS 登録番号 (CAS RN®) 検索では、反応物・生成物に加え、試薬、触媒、溶媒を指定した検索ができる。
- 複数の条件を掛け合わせる際は、適切な近接演算子を使用する。



練習問題

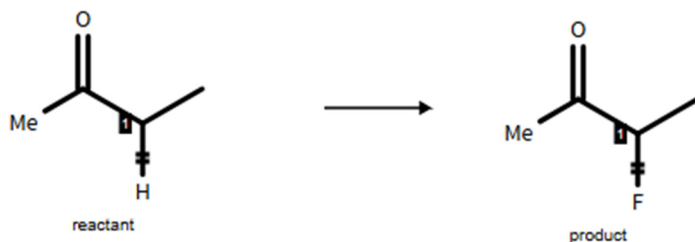
1. 2-ニトロトルエン (88-72-2) から 2,2'-ジニトロジベンジル (16968-19-7) を合成する反応を検索する。

(ヒント)

CAS 登録番号 (CAS RN®) 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)

回答は p.77

2. 下記のフッ素化の反応を検索する。



(作図のヒント)

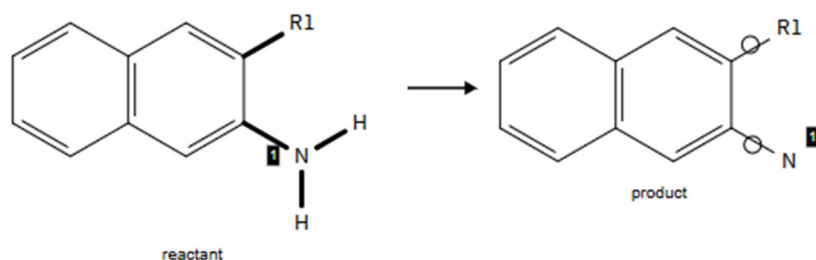
- 反応ロール、反応サイト、反応部位を指定する。
- さらに、下記の条件で絞り込む。
 - ① 収率 80 % 以上もしくは収率情報のない反応に限定
 - ② 特許に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する。

(ヒント)

- ①、② の限定の際、演算子に注意する。

回答は p.78

3. 下記の環化反応 (R1 と N で環を形成) を検索する。(R1= O、S)



(作図のヒント)

- 環を形成する部分の結合の属性を Ring (環) に変更する。
- マッピングは R グループや可変原子には指定できない。
- さらに、下記の条件で絞り込む。
 - ① Verification が不完全な回答を含む場合、それを除く (L 番号/COM)。
 - ② 触媒反応に限定
 - ③ 1 段階反応に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する。

(ヒント)

- ②、③ の限定の際、演算子に注意する。

回答は p. 80

4. ニトリルオキシド (NITRILE OXIDE) から 1,2-C₃NO 環を合成する反応を検索する。さらに、下記の条件で絞り込む。

- ① 収率 80 % 以上の反応に限定
- ② 1 段階反応に限定

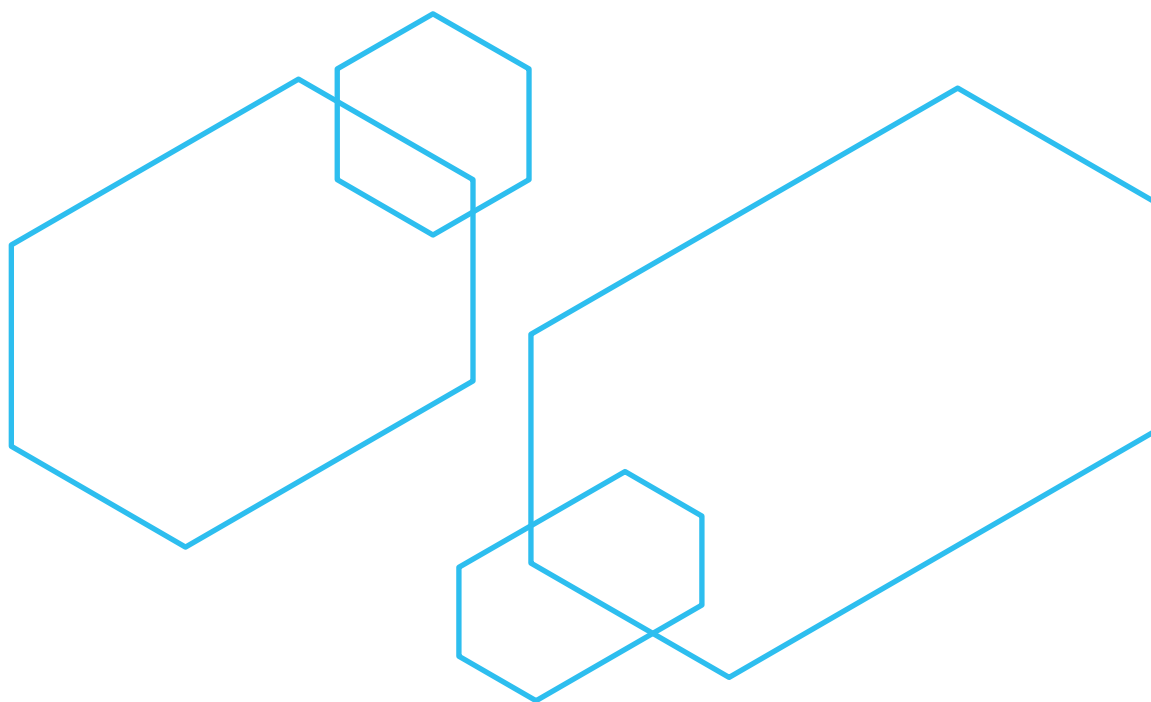
(ヒント)

- 官能基検索を行う。
- ①、② の限定の際、演算子に注意する。

回答は p.82

C CAS FILES の反応情報検索

反応情報を網羅的に検索したい場合は、CASREACT ファイルに加えて CAplus ファイルでも検索を行います。



CAS FILES を使った網羅的な反応情報検索

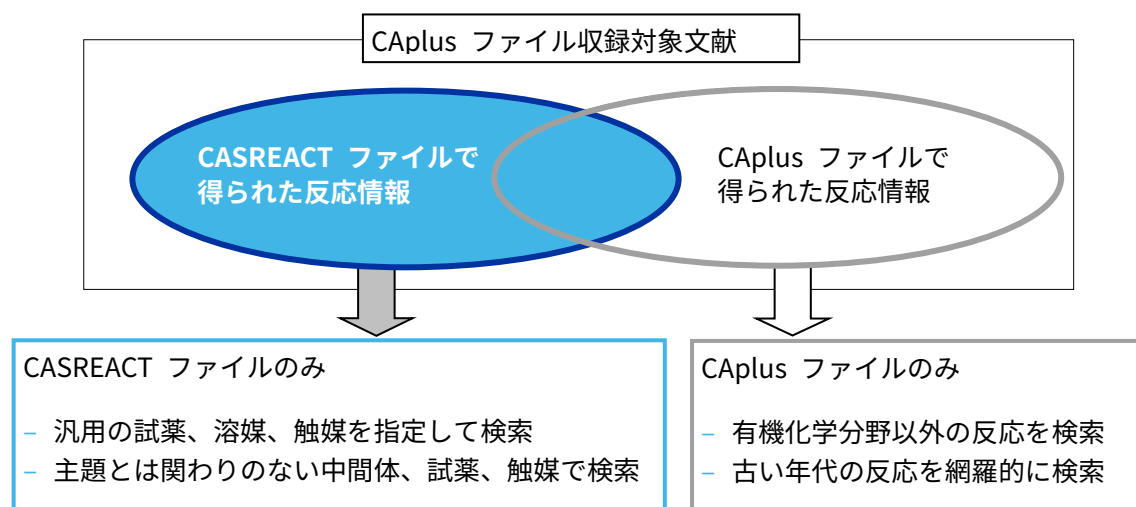
CAplus ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較

(2025 年 11 月現在)

項目	CASREACT	CAplus
収録年	1840 年以降	1808 年以降 PREP (製造) の CAS ロールが付与されているのは 1907 年以降
収録数	文献 : 250 万件以上 反応 : 1 億 5,600 万件以上	文献 : 6,790 万件以上 (PREP (製造) の CAS ロールが付与されている文献数は 935 万件以上)
収録文献	CA に収録されているレコードの一部	CA 収録対象の化学および化学周辺分野
索引方針	合成的に意義のある反応を選択 (単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない)	文献の主題や発明の新規性/進歩性に関連する物質
特徴	<ul style="list-style-type: none"> すべての反応関与物質を収録する 収率情報も収録する 反応関与物質や収率情報をリンクして精密な反応検索ができる 	<ul style="list-style-type: none"> 無機化合物やポリマーを含めて幅広く合成文献を検索できる 古い年代の反応情報も検索できる 同一反応中に限定した検索はできない 汎用の試薬、溶媒、触媒は索引されない 収率情報は収録されない

CAplus ファイルと CASREACT ファイルの検索で得られる情報の違い

- CASREACT ファイルの収録文献はすべて CAplus ファイルの収録文献に含まれている。
- 化学物質の索引方針や検索機能が違うため、各ファイルで得られる情報は異なる。



反応情報を網羅的に検索したい場合は、CASREACT ファイルに加えて CAplus ファイルも検索する。

- CASREACT ファイルは CAplus ファイルに比べて収録対象である文献は少ないが、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 ファイルでは、CASREACT ファイルの収録対象外分野の反応情報や CAS 由来の古い年代の文献情報も含めて幅広く検索できる。

CPlus ファイルの反応情報検索

=> S L#/P	生成物に限定
=> S L#/CAS ロール	生成物以外の役割で限定

* L# : REGISTRY ファイルの回答セット

- 反応情報検索に用いる主な 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 (/P)		製造	スーパーロール (以下の /BMF ~ /SPN 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)	
	/IMF	化学的工業生産	
	/PUR	精製	
	/SPN	化学合成	
/CAT		触媒 (Catalyst)	

- CAS ロールで限定すると、自動的に付与年代以降に限定される。

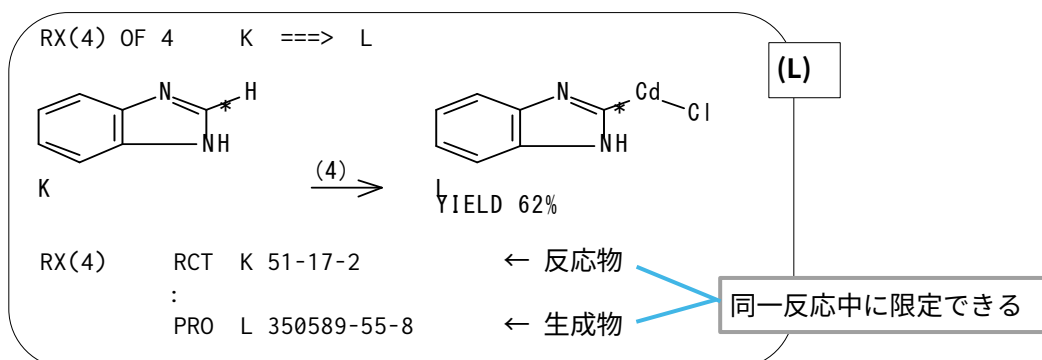
- 反応物と生成物は AND 演算子で組み合わせる。
- CAplus ファイルでは、同一反応中という限定ができないため、回答にノイズが含まれる場合がある。
- 例 : CAplus ファイル AN 2001:361761 (DN 135:122572) および CASREACT ファイル AN 135:122572 の索引 (抜粋)
- CAplus ファイル

IT	51-17-2, Benzimidazole 106-40-1, 4-Bromoaniline 120-72-9, Indole, reactions RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent) (metalation reaction with cadmium trifluoroacetate)	反応物
IT	350589-48-9P 350589-50-3P 350589-52-5P 350589-55-8P RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (preparation of)	生成物

AND

同一反応中に限定できない

- CASREACT ファイル



CPlus ファイル、CASREACT ファイルの回答表示

- CAplus ファイルの回答と CASREACT ファイルの回答に同じ文献が含まれることもある。
- <方法 1> CASREACT ファイルで全件表示した後、CAplus ファイルで重複を除いて表示
- <方法 2> CAplus ファイルにすべての回答をまとめてから表示

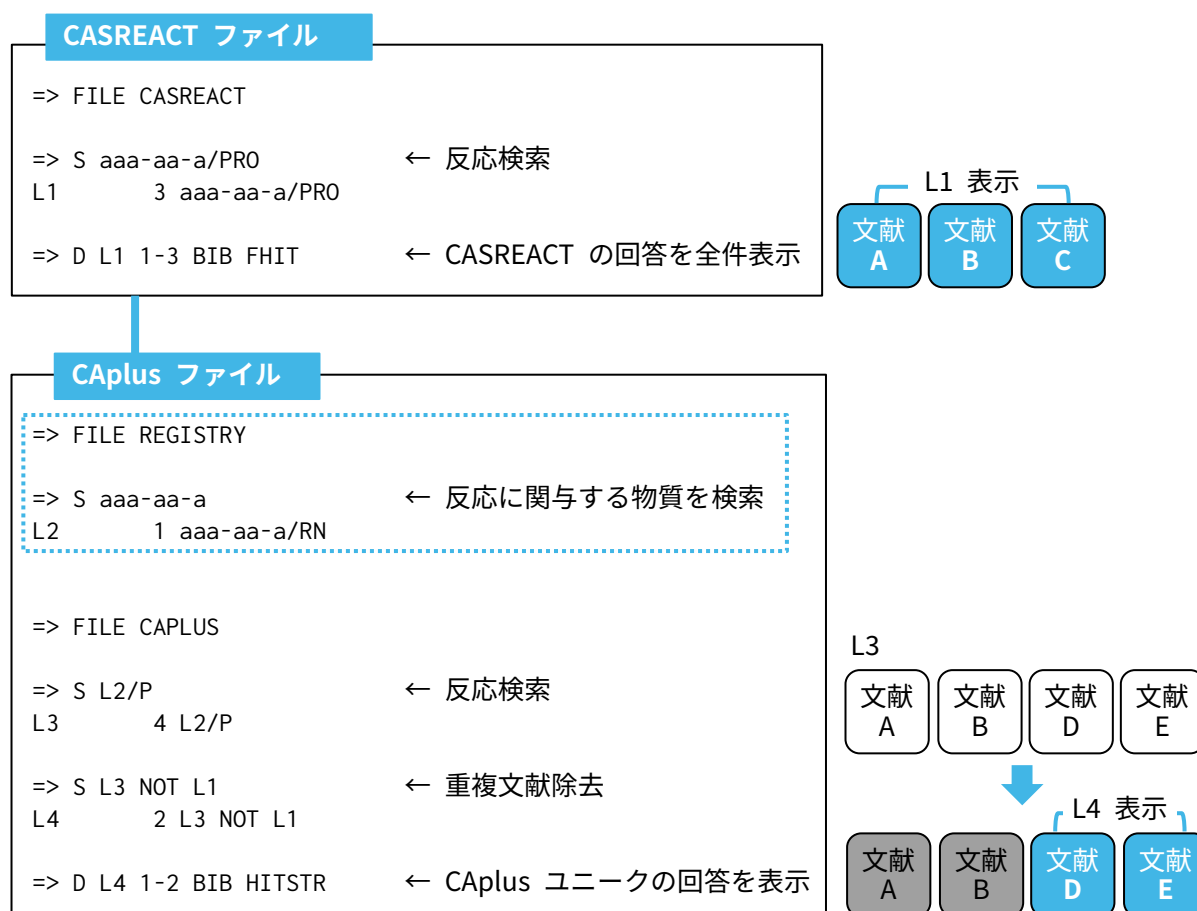
<方法 1> CASREACT ファイルで全件表示した後、CAplus ファイルで重複を除いて表示

L 番号同士を NOT 演算することにより、CAplus ファイルの回答から CASREACT ファイルの回答を除くことができる。

- CASREACT ファイルを優先して表示すると、反応の詳細情報を手早く確認できる。
また、CASREACT ファイルでは同一反応内に限定した検索が可能。
- L 番号を用いたクロスオーバー検索
 - CASREACT、CAplus/CA ファイル間では CA 抄録番号 (DN) をキーにしたクロスオーバー検索が自動的に実行されるため、互いの回答集合を簡単に再現できる。
 - ただし、CAplus ファイルから CASREACT ファイルへの L 番号を用いたクロスオーバー検索はできない。CAplus ファイルの回答集合を CASREACT ファイルで再現したい場合は、CASREACT ファイルに入った後に => TRA L# DN/AN と入力する (L# は CAplus ファイルの L 番号)。



- 検索の流れ



検索例：イソプロチオラン (CAS RN® 50512-35-1) の合成反応を検索する。

CASREACT ファイルで検索し、全件表示する。

CAPLUS ファイルで検索し、CASREACT ファイルで得られた回答を除いて表示する。

– CASREACT ファイルの反応検索

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

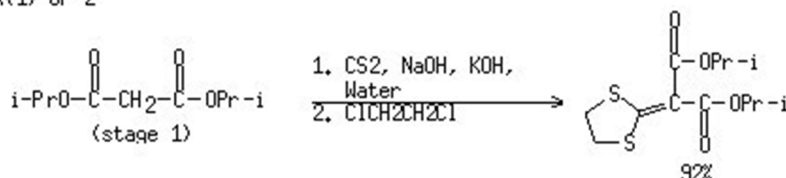
=> S 50512-35-1/PRO ← 生成物の CAS RN® で検索
L1 3 50512-35-1/PRO

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

L1 3 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI New technologies for production process of isoprothiolane
RX

RX(1) OF 2



NOTE: optimization study, optimized on catalyst, stoichiometry, temperature and reaction time, chloro compound used as catalyst in stage 2, phase transfer catalysis in stage 2

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

=> D BIB FHIT 1-3 ← BIB FHIT 表示形式で書誌情報と反応情報を表示

L1 ANSWER 1 OF 3 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 155:300945 CASREACT [Full-text](#)

TI Process for preparation of isoprothiolane

IN Li, Jirui; Jiao, Xingzhong; Yu, Lianning; Yan, Xunlong; He, Shaoping; Shi, Shaojun

PA Hunan Chemical Vocational Technology College, Peop. Rep. China

UO HUNAN CHEMICAL VOCATIONAL TECHNOLOGY COLLEGE

UOS HUNAN CHEMICAL VOCATIONAL TECHNOLOGY COLLEGE

SO Faming Zhuanli Shenqing, 6pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

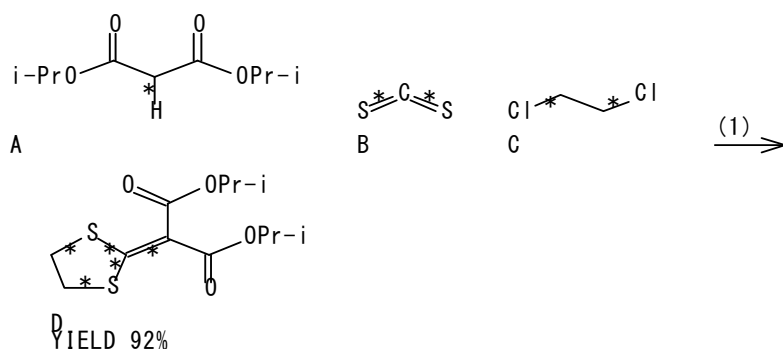
LA Chinese

FAN.CNT 1

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----	----	-----	-----	-----
CN 102146072	A	20110810	CN 2011-10056903	20110310
CN 102146072	B	20130605		
PRAI CN 2011-10056903		20110310		
OS MARPAT 155:300945				

RX(1) OF 1 A + B + C ==> D



RX(1) RCT A 13195-64-7, B 75-15-0

STAGE(1)

RGT E 1310-58-3 KOH

SOL 7732-18-5 Water

CON SUBSTAGE(1) 35 deg C

 SUBSTAGE(2) 35 minutes, 35 deg C

STAGE(2)

RCT C 107-06-2

CAT 1124-64-7 Pyridinium, 1-butyl-, chloride (1:1)

CON 1.5 hours, 75 deg C

PRO D **50512-35-1** ← 生成物

NTE optimization study, optimized on reaction time, temperature,
catalyst, reagent

:

– CPlus ファイルの反応検索 (REGISTRY → CPlus ファイルのクロスオーバー検索)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 50512-35-1

← CAS RN® で検索

L2 1 50512-35-1
 (50512-35-1/RN)

表示は任意

=> D

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RN **50512-35-1** REGISTRY

ED Entered STN: 16 Nov 1984

CN Propanedioic acid, 2-(1,3-dithiolan-2-ylidene)-, 1,3-bis(1-methylethyl)
 ester (CA INDEX NAME)

OTHER CA INDEX NAMES:

CN Propanedioic acid, 1,3-dithiolan-2-ylidene-, bis(1-methylethyl) ester
 (9CI)

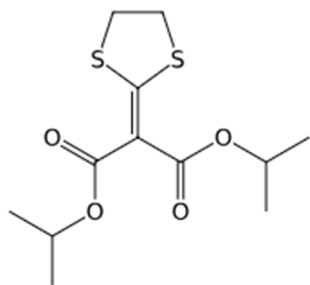
OTHER NAMES:

:

CN Isoprothiolane

:

MF C12 H18 O4 S2



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

2099 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)

411 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA

2174 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```
=> FILE CAPLUS           <- CPlus ファイルに入る

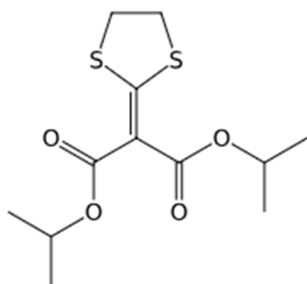
=> S L2/P                 <- REGISTRY ファイルの L 番号/P で製造に関する文献を検索
L3                        36 L2/P

=> S L3 NOT L1            <- CASREACT ファイルで得られた回答 (L1) を除く
L4                        33 L3 NOT L1

=> D BIB HITSTR 1-33      <- BIB HITSTR 表示形式で書誌情報とヒットした化合物を確認

L4  ANSWER 1 OF 33  CAPLUS  COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN  2025:1552102  CAPLUS Full-text
TI  Multiresidue Analysis Method for the Determination of 477 Pesticides in
    Soil Based on Thorough Method Validation
AU  Wang, Jishi; Zhang, Yi; Zhang, Yanwei; Geng, Yue; Liu, Wenjing; Wei, Jing;
    He, Zeying
CS  Key Laboratory for Environmental Factors Control of Agro-product Quality
    Safety, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Agro-Environmental
    Protection Institute, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Tianjin,
    300191, Peop. Rep. China
SO  Journal of Agricultural and Food Chemistry (2025), 73(27), 17269-17286
    CODEN: JAFCAU; ISSN: 0021-8561
DOI  10.1021/acs.jafc.5c04519
PB  American Chemical Society
DT  Journal; (online computer file)
LA  English
IT  INDEXING IN PROGRESS
IT  50512-35-1P
    RL: AGR (Agricultural use); ANT (Analyte); PUR (Purification or recovery);
    ANST (Analytical study); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES
    (Uses)
        (multiresidue anal. method for detn. of 477 pesticides in soil based on
        thorough method validation)
RN  50512-35-1  CAPLUS
CN  Propanedioic acid, 2-(1,3-dithiolan-2-ylidene)-, 1,3-bis(1-methylethyl)
    ester (CA INDEX NAME)
```



L4 ANSWER 3 OF 33 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
[PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)

AN 2022:2233257 CAPLUS [Full-text](#)

DN 181:393115

TI A process for preparing activated carbon nanoparticle and its application thereof

IN T. P., Ahammed Shabeer; Bharate, Bapurao Gangaram

PA ICAR-National Research Centre for Grapes, India

SO Indian Pat. Appl., 33pp.

CODEN: INXXBQ

DT Patent

LA English

FAN.CNT 1

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
IN 202221023880	A	20220819	English	PDF PDF+ Interactive

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
IN 202221023880	A	20220819	IN 2022-21023880	20220422
IN 505130	B	20240202		

PRAI IN 2022-21023880

PSPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
IN 202221023880	A	Alive	20250402
IN 505130	B	Alive	20250402

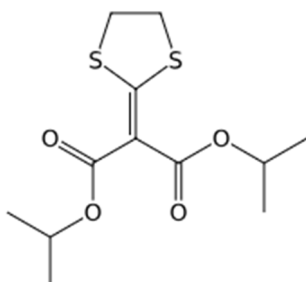
IT **50512-35-1P**

RL: PUR (Purification or recovery); PREP (Preparation)

(process for prep. activated carbon nanoparticle and its application thereof)

RN 50512-35-1 CAPLUS

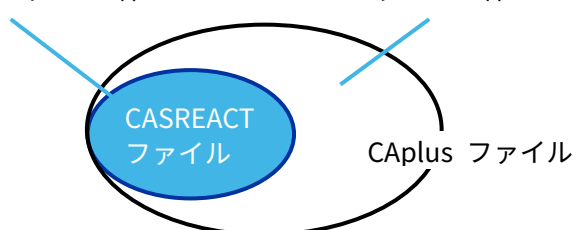
CN Propanedioic acid, 2-(1,3-
 ester (CA INDEX NAME)



ヒット件数のまとめ

① CASREACT ファイル
 でヒット 3 件

② CAplus ファイルのみ
 ヒット 33 件



<方法 2> CAplus ファイルにすべての回答をまとめてから表示

CASREACT ファイルでは、下記のフィールドは検索できない。これらの情報から絞り込みを行う場合は、CAplus ファイルにクロスオーバーしてから検索する。

CASREACT ファイルでは検索できないフィールド

AN 132:222457 CASREACT [Full-text](#)

TI Photochemical process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane

IN Ollivier, Jean; Drutel, Bernard

PA Elf Atochem S.A., Fr. 最終権利者

UO ARKEMA

UOS Arkema

SO Eur. Pat. Appl., 7 pp.

CODEN: EPXXDW

DT Patent

LA French

IPCI C07D0201-04 [ICM,6]

IPCR C07D0201-04 [I]; C07D0227-02 [I]

CC 27-21 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))

Section c 74

FAN.CNT 1 関連特許ファミリー数

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
EP 989118	A1	20000329	EP 1999-402108	19990824
EP 989118	B1	20011024		
FR 2784103	A1	20000407	FR 1998-11734	19980921
FR 2784103	B1	20001208		
AT 207464	T	20011115	AT 1999-402108	19990824
:				

PRAI FR 1998-11734 19980921

AB Lauryl lactam, useful as a monomer (no data), is prepd. in high yield and selectivity by the photochem. nitrosation of cyclododecane with a

ST lauryl lactam prepn cyclododecane reaction; photochem nitrosation

IT Beckmann rearrangement

(of cyclododecanone oxime in the presence of methanesulfonic acid for the prepn. of lauryl lactam)

IT 75-75-2, Methanesulfonic acid

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)

(photochem. process for the prepn. of lauryl lactam)

RE.CNT 2 THERE ARE 2 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD

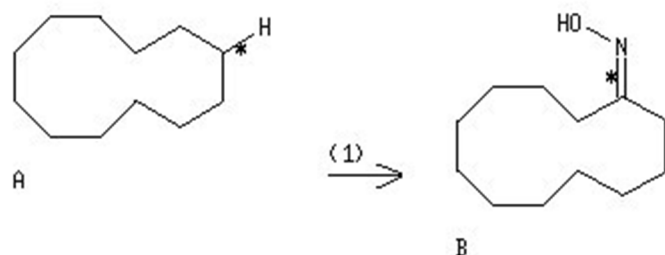
RE

(1) Ato Chimie Sa; FR 2417501 A 1979 CAPLUS

(2) Montecatini, S; FR 1335822 A 1963 CAPLUS

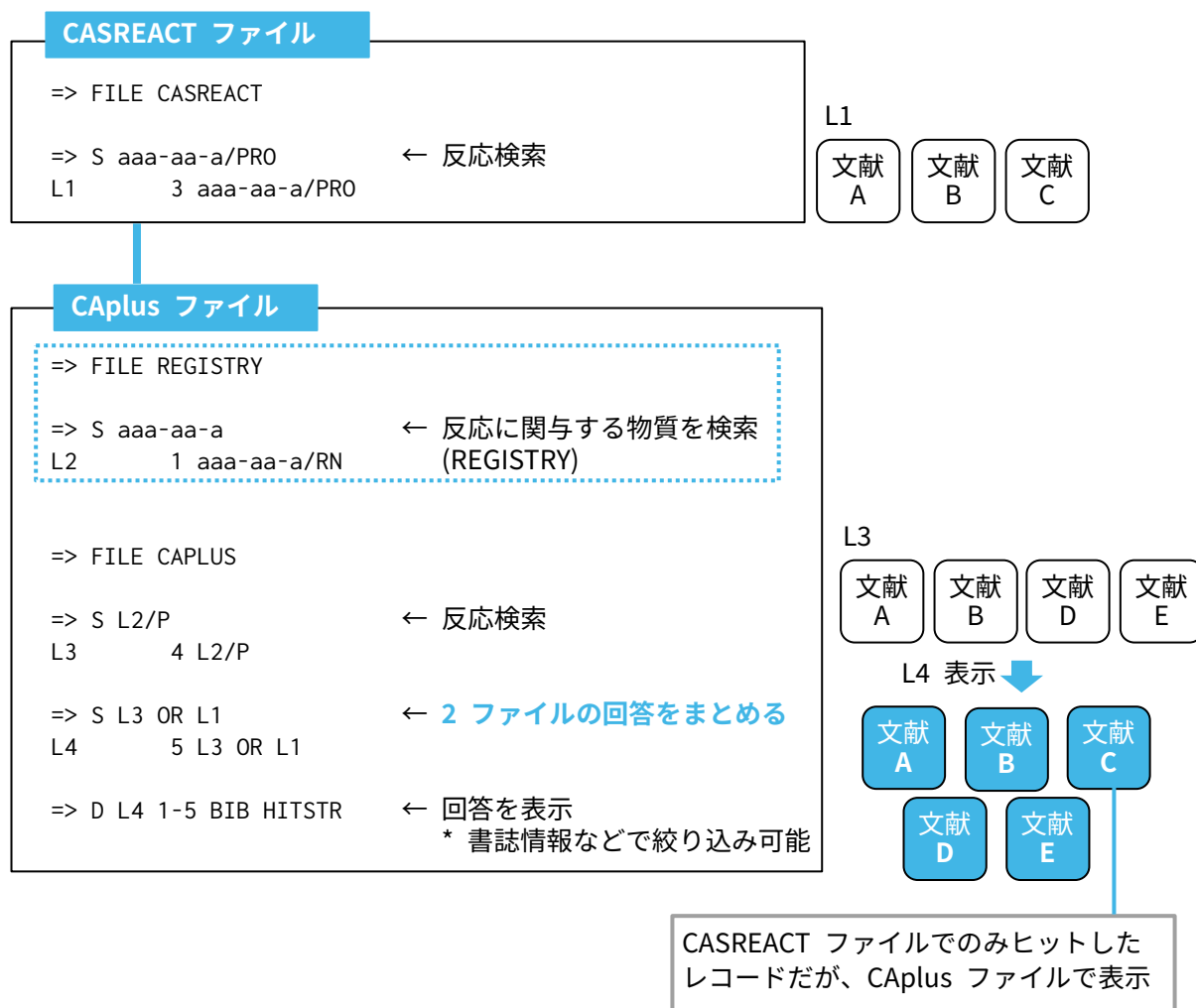
クレーム (/CLM)、特許ステータス (/STI)、IPC 以外の特許分類 (/CPC など) は CASREACT ファイルでは表示できず、検索もできない。

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



RX(1) RCT A 294-62-2
 RGT C 75-75-2 MeSO₃H, D 2696-92-6 NOCl, E 7647-01-0 HCl
 PRO B 946-89-4
 :

– 検索の流れ



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) を合成する反応のうち、IPC (国際特許分類) B01J (物理的または化学的方法または装置一般；化学的または物理的方法) が付与されている特許を検索する。

CASREACT ファイル、CAplus ファイルで合成情報を検索する。

CASREACT ファイルでは特許分類の検索ができないため、CAplus ファイルに回答集合をクロスオーバーし、CAplus ファイルで得られた回答とまとめた後、特許分類で限定する。

– CASREACT ファイルの反応検索

=> FILE CASREACT	← CASREACT ファイルに入る
=> S 121-73-3/RCT	← 反応物を検索
L1 1303 121-73-3/RCT	
=> S 108-42-9/PRO	← 生成物を検索
L2 763 108-42-9/PRO	
=> S L1 (L) L2	← 同一反応中に限定
L3 645 L1 (L) L2	

– CAplus ファイルの反応検索 (REGISTRY → CAplus ファイルのクロスオーバー検索)

=> FILE REGISTRY	← REGISTRY ファイルに入る
=> S 121-73-3	← 反応物の CAS 登録番号 (CAS RN®) で検索
L4 1 121-73-3	
=> S 108-42-9	← 生成物の CAS 登録番号 (CAS RN®) で検索
L5 1 108-42-9	
=> FILE CAPLUS	← CAPLUS ファイルに入る
=> S L4/RCT	← 反応物に関する文献を検索
L6 1883 L4/RCT	
=> S L5/P	← 生成物に関する文献を検索
L7 1175 L5/P	
=> S L6 AND L7	← 同一反応中に限定できないため AND 演算
L8 811 L6 AND L7	

– CAplus ファイルで反応検索結果を表示 (CAplus + CASREACT)

=> S L3	← CASREACT ファイルの検索結果をクロスオーバー検索する
L9 645 L3	
=> S L8 OR L9	← CASREACT ファイルの反応情報を合わせる
L10 828 L8 OR L9	
=> S L10 AND B01J/IPC	← IPC で検索する
L11 91 L10 AND B01J/IPC	

=> D BIB HITIND 1-91

← BIB HITIND 表示形式で表示する

L11 ANSWER 2 OF 91 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
[PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)

AN 2025:783800 CAPLUS [Full-text](#)

DN 190:289861

TI A catalyst having a phthalocyanine-metal atom structure and its
preparation method and application

IN Xi, Jiangbo; Xiong, Miao; Bi, Zhuoyuan

PA Wuhan Institute of Technology, Peop. Rep. China

UO WUHAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY

UOS Wuhan Institute of Technology

SO Faming Zhuanli Shenqing, 14pp.
CODEN: CNXXEV

DT Patent

LA Chinese

FAN.CNT 1

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
-----	----	-----	-----	-----
CN 119746913	A	20250404	Chinese	PDF PDF+ Interactive

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----	----	-----	-----	-----
CN 119746913	A	20250404	CN 2024-11969069	20241230

PRAI CN 2024-11969069

20241230

PSPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
-----	----	-----	-----
CN 119746913	A	Alive	20250410

OS CASREACT 190:289861

IPCI [B01J0027-24](#); [B01J0023-745](#); [B01J0023-75](#); [B01J0023-755](#); [B01J0037-10](#);
C07C0213-02; C07C0215-76

IPCR [B01J0027-24 \[I\]](#); [B01J0023-745 \[I\]](#); [B01J0023-75 \[I\]](#); [B01J0023-755 \[I\]](#);
[B01J0037-10 \[I\]](#); C07C0213-02 [I]; C07C0215-76 [I]

CC 67-2 (Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms)

IT 62-53-3P, Benzenamine, preparation 100-01-6P, preparation 104-94-9P
106-40-1P 106-47-8P, preparation 106-49-0P, preparation
[108-42-9P](#) 123-30-8P 150-13-0P 591-19-5P 2237-30-1P

RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)

(catalyst having phthalocyanine-metal atom structure and its prepn.
method and application)

IT 62-23-7 98-95-3, reactions 99-99-0 100-00-5 100-02-7, reactions
100-17-4 100-25-4 [121-73-3](#) 585-79-5 586-78-7 619-24-9

RL: [RCT \(Reactant\)](#); RACT (Reactant or reagent)

(catalyst having phthalocyanine-metal atom structure and its prepn.
method and application)

:

L11 ANSWER 4 OF 91 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
[PatentPak PDF](#) | [PatentPak PDF+](#) | [PatentPak Interactive](#)

AN 2025:179934 CAPLUS [Full-text](#)

DN 190:161839

TI Preparation method and application of nitrogen-doped carbon-coated
non-precious bimetallic honeycomb core-shell catalyst

IN Cai, Jinjun; Zeng, Zhengkai; Li, Xintong; Zhu, Laiying; Liu, Xiao

PA Xiangtan University, Peop. Rep. China

UO XIANGTAN UNIVERSITY

HITIND 表示形式では、CAplus
ファイルの索引でヒットした情報が
表示される

① 両方でヒットしたレコード

② CAplus ファイルのみで
ヒットしたレコード

UOS Xiangtan University
SO Faming Zhuanli Shenqing, 10pp.
CODEN: CNXXEV
DT Patent
LA Chinese
FAN.CNT 1
PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
-----	----	-----	-----	-----
CN 119327499	A	20250121	Chinese	PDF PDF+ Interactive

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----	----	-----	-----	-----
CN 119327499	A	20250121	CN 2024-11444071	20241016

PRAI CN 2024-11002171 A 20240725

PSPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
-----	----	-----	-----
CN 119327499	A	Alive	20250130

IPCI **B01J0027-24; B01J0037-08; B01J0037-10; B01J0035-57**; C07C0209-36;
C07C0211-46

IPCR **B01J0027-24 [I]; B01J0035-57 [I]; B01J0037-08 [I]; B01J0037-10 [I];**
C07C0209-36 [I]; C07C0211-46 [I]

CC 67-1 (Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms)

IT 99-08-1 99-99-0 100-00-5 100-02-7, reactions **121-73-3**
350-46-9 586-78-7

RL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)

(prepn. method and application of nitrogen-doped carbon-coated
non-precious bimetallic honeycomb core-shell catalyst)

IT 95-53-4P, preparation 95-55-6P 106-40-1P 106-47-8P, preparation
106-49-0P, preparation **108-42-9P** 108-44-1P, preparation
123-30-8P 371-40-4P

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. method and application of nitrogen-doped carbon-coated
non-precious bimetallic honeycomb core-shell catalyst)

:

L11 ANSWER 73 OF 91 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN
[PatentPak PDF](#)

AN 2010:763769 CAPLUS [Full-text](#)

DN **153:148675**

TI Method for preparing chloroaniline via catalytic hydrogenation

IN Li, Bindong; Lv, Chunxu; Sun, Yu

PA Nanjing University of Science and Technology, Peop. Rep. China

UO NANJING UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

UOS Nanjing University of Science and Technology

SO Faming Zhuanli Shenqing, 5pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

LA Chinese

FAN.CNT 1

PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
-----	----	-----	-----	-----
CN 101735073	A	20100616	Chinese	PDF

③ CASREACT ファイルのみで
ヒットしたレコード

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
CN 101735073	A	20100616	CN 2008-10236175	20081125
PRAI CN 2008-10236175		20081125		

PSPI

PATENT NO.	KIND	STATUS	STATUS DATE
CN 101735073	A	Dead	20201121

OS CASREACT 153:148675

IPCI C07C0211-52 [I]; C07C0209-36 [I]; B01J0023-755 [I]

IPCR C07C0211-52 [I]; B01J0023-755 [I]; C07C0209-36 [I]

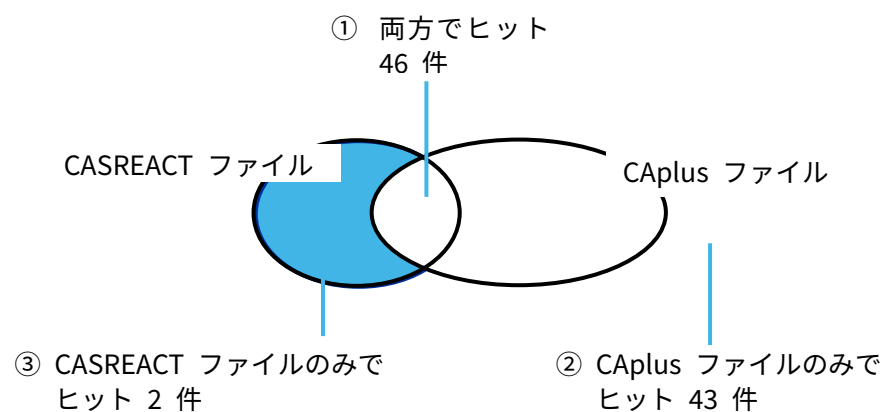
CC 45-4 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)

Section cross-reference(s): 25

:

CASREACT ファイルからのクロスオーバー検索の回答のはヒットタームは DN であり、CAS 登録番号ではない。そのため HITIND (IT フィールド) は表示されない

ヒット件数のまとめ





まとめ

- CASREACT ファイルと CAplus ファイルでは、収録年代や収録分野、索引方針の違いがある。反応情報を網羅的に検索したい場合は、両ファイルで検索するとよい。
- 両ファイルで検索した場合は、重複文献を除いて表示する。



練習問題

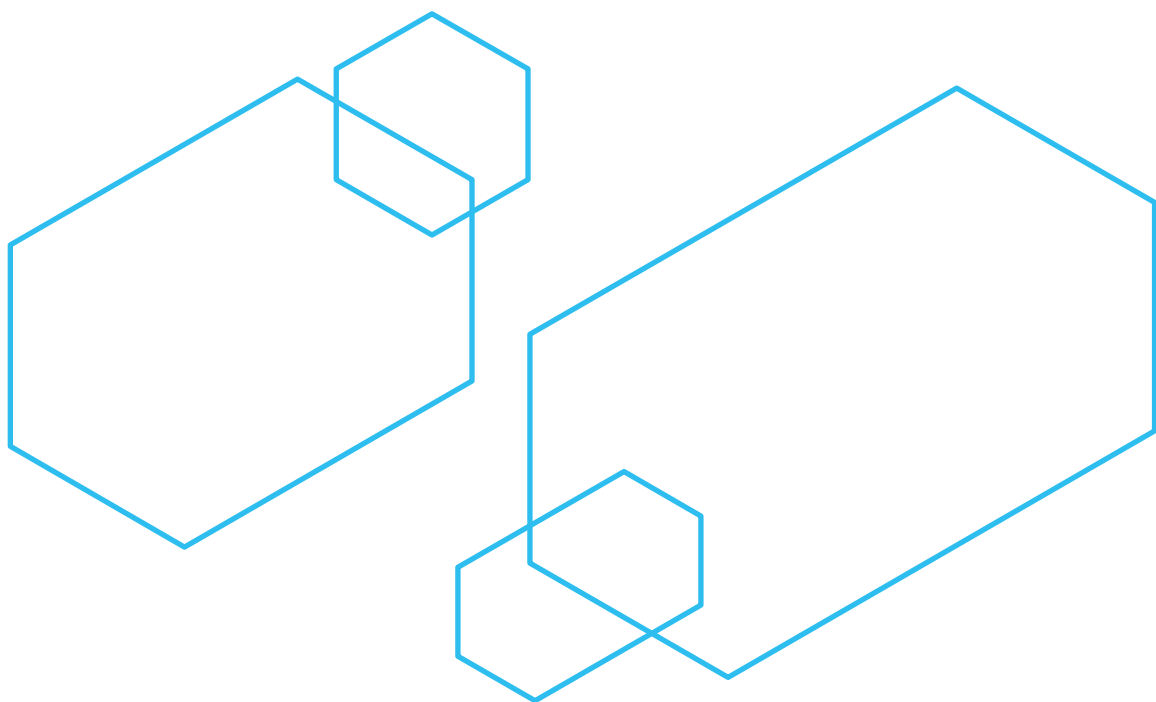
5. CASREACT ファイルと CAplus ファイルで、6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索する。

(ヒント)

- CASREACT ファイルで生成物 (/PRO) を指定して検索し、全件を BIB FHIT 表示形式で表示する。
- REGISTRY ファイルで CAS 登録番号 (CAS RN[®]) から検索を行う。
- CAplus ファイルにクロスオーバーする際、合成文献に限定 (/P) する。
- CASREACT ファイルの回答との重複を除いた後、全件を BIB HITRN 表示形式で表示する。

回答は P. 83

練習問題



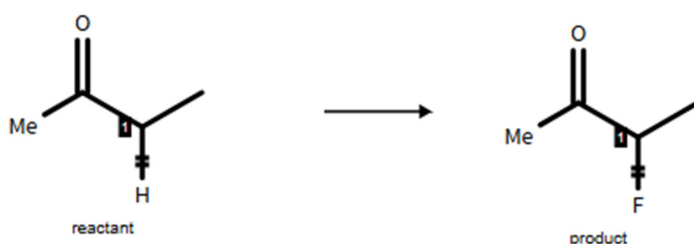
練習問題

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。

(ヒント)

CAS 登録番号 (CAS RN®) 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。



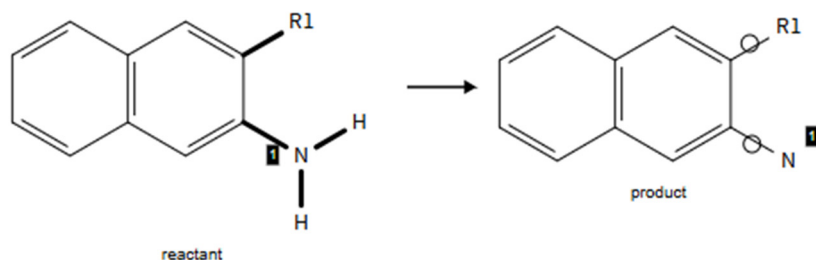
(作図のヒント)

- 反応ロール、反応サイト、反応部位を指定する。
- さらに、下記の条件で絞り込む。
 - ① 収率 80 % 以上もしくは収率情報のない反応に限定
 - ② 特許に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する。

(ヒント)

①、② の限定の際、演算子に注意する。

練習問題 3 : 下記の環化反応 (R1 と N で環を形成) を検索する。(R1= O、S)



(作図のヒント)

- 環を形成する部分の結合の属性を Ring (環) に変更する。
- マッピングは R グループや可変原子には指定できない。
- さらに、下記の条件で絞り込む。
 - ① Verification が不完全な回答を含む場合、それを除く (L 番号/COM)。
 - ② 触媒反応に限定
 - ③ 1 段階反応に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する。

(ヒント)

②、③ の限定の際、演算子に注意する。

**練習問題 4 : ニトリルオキシド (NITRILE OXIDE) から 1,2-C₃NO 環を合成する反応を検索する。
さらに、下記の条件で絞り込む。**

- ① 収率 80 % 以上の反応に限定
- ② 1 段階反応に限定

(ヒント)

- 官能基検索を行う。
- ①、② の限定の際、演算子に注意する。

練習問題 5 : CASREACT ファイルと CAplus ファイルで、6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索する。

(ヒント)

- CASREACT ファイルで生成物 (/PRO) を指定して検索し、全件を BIB FHIT 表示形式で表示する。
- REGISTRY ファイルで CAS 登録番号 (CAS RN®) から検索を行う。
- CAplus ファイルにクロスオーバーする際、合成文献に限定 (/P) する。
- CASREACT ファイルの回答との重複を除いた後、全件を BIB HITRN 表示形式で表示する。

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

=> FILE CASREACT

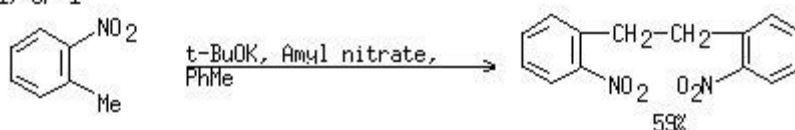
=> S 88-72-2/RRT (L) 16968-19-7/PRO ← CAS 登録番号 (CAS RN®) にロールを指定して検索
L1 21 88-72-2/RRT (L) 16968-19-7/PRO

=> D SCAN ← 回答チェック用の SCAN 表示形式で確認

L1 21 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Dimerization reaction of nitrotoluene
RX

RX(1) OF 1

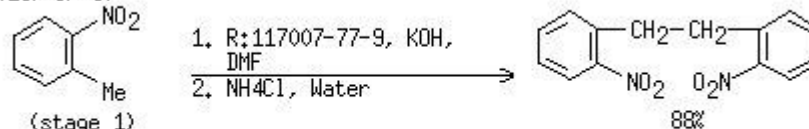


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L1 21 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

TI Synthesis of biologically active seven-membered-ring heterocycles
RX

RX(18) OF 67



NOTE: 92% reactant (pyrazole derivative) also recovered, product depends on reaction conditions

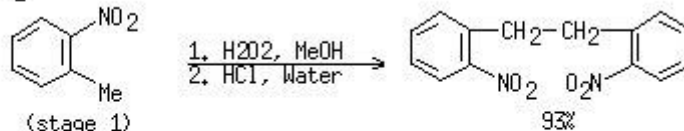
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D ← デフォルトの表示形式で表示

L1 ANSWER 1 OF 21 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

RX

RX(1) OF 1



REF: Faming Zhuanli Shenqing, 119191987, 27 Dec 2024

NOTE: Petroleum ether used, optimization study, optimized on agent

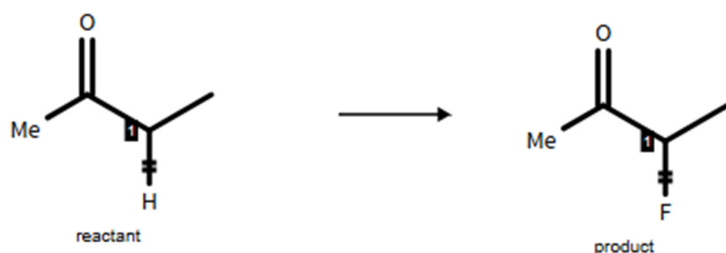
CON: STAGE(1) 4 hours, 5 deg C; 4 hours, 15 deg C;

15 deg C -> 10 deg C

STAGE(2) pH 5.8

練習問題 2

下記のフッ素化の反応を検索



=> FILE CASREACT

=>

L1 STRUCTURE UPLOADED

← 反応質問式をアップロード

=> S L1

← サンプル検索

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**
BATCH **COMPLETE**

PROJECTED VERIFICATIONS: 102966 TO 111754

PROJECTED ANSWERS: 11 TO 389

L2 10 SEA SSS SAM L1 (18 REACTIONS)

=> S L1 FUL

← フルファイル検索

L3 142 SEA SSS FUL L1 (734 REACTIONS)

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

← 収率で限定

L4 92 L3(A)(80<=YD OR NONE/YDT)

=> S L4 AND P/DT

← 特許に限定

L5 11 L4 AND P/DT

=> D BIB FHIT

← BIB FHIT 表示形式で表示

L5 ANSWER 1 OF 11 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 183:120838 CASREACT [Full-text](#)

TI Method for the production of compounds in which the α -position of α -substituted β -diketones is fluorinated

IN Yoneyama, Shin; Xu, Pengyu; Arimitsu, Akira

PA SynCrest Inc., Japan; University of Ryukyus

UO SYNCREST INC; UNIVERSITY OF THE RYUKYUS

UOS SYNCREST INC; University of the Ryukyus

SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 13pp.

CODEN: JKXXAF

DT [Patent](#)

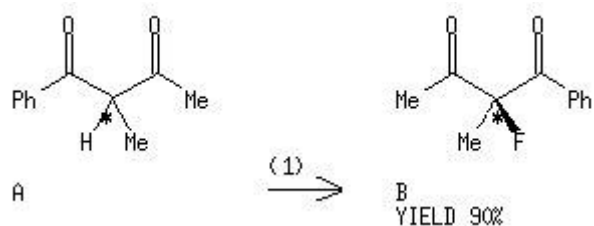
LA Japanese

FAN.CNT 1

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
-----	----	-----	-----	-----
JP 2023082847	A	20230615	JP 2021-196820	20211203
PRAI JP 2021-196820		20211203		

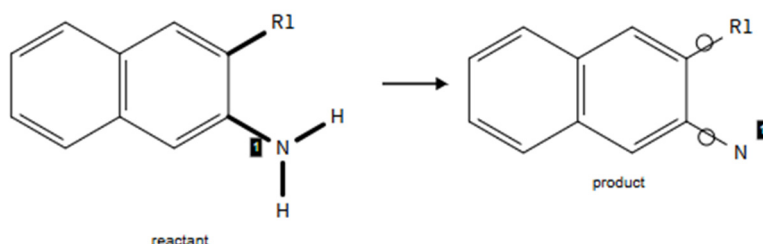
RX(1) OF 27 A ==> B...



RX(1) RCT A 6668-24-2
RGT C 140681-55-6 Selectfluor
PRO B [2010177-37-2](#)
CAT 2409928-73-8 D-Tyrosine,
 β -[3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methoxyphenyl]-3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-
 β -hydroxy-O-methyl-
SOL 109-99-9 THF
CON 48 hours, room temperature
NTE 94% ee, 86% isolated yield, optimized on catalyst, solvent and
 fluorinating agent, optimization study, stereoselective

練習問題 3

下記の環化反応 (R1 と N で環を形成) を検索 (R1= O, S)



=> FILE CASREACT

=>

L1 STRUCTURE UPLOADED

← 反応質問式をアップロード

=> S L1

← サンプル検索

L2 8 SEA SSS SAM L1 (

17 REACTIONS)

=> S L1 FUL

← フルファイル検索

100.0% DONE

39284 VERIFIED

942 HIT RXNS (31 INCOMP)

189 DOCS

↑
Verification が不完全な回答が含まれていた

L3 189 SEA SSS FUL L1 (

942 REACTIONS)

=> S L3/COM

← Verification が完全な回答に限定

L4 183 L3/COM

=> S L4(L)ANY/CAT

← 触媒反応に限定

L5 73 L3(L)ANY/CAT

=> S L5(L)1/NS

← 一段階反応に限定

L6 41 L4 (L) 1/NS

=> D BIB FHIT

← 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示

L6 ANSWER 1 OF 41 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 187:190975 CASREACT [Full-text](#)

TI Copper-Catalyzed Formal [4+2] Cycloaddition of Ethynylethylene Carbonates for the Construction of 3,4-Dihydro-2H-benzo[b][1,4]oxazines

AU Hu, Xinzhe; Zhu, Haihui; Li, Xiang; Han, Zhengyu; Sun, Jianwei; Jin, Xiaodong; Huang, Hai

CS Jiangsu Key Laboratory of Advanced Catalytic Materials & Technology, School of Petrochemical Engineering, Changzhou University, No.21 Gehu Road, Changzhou, 213164, Peop. Rep. China

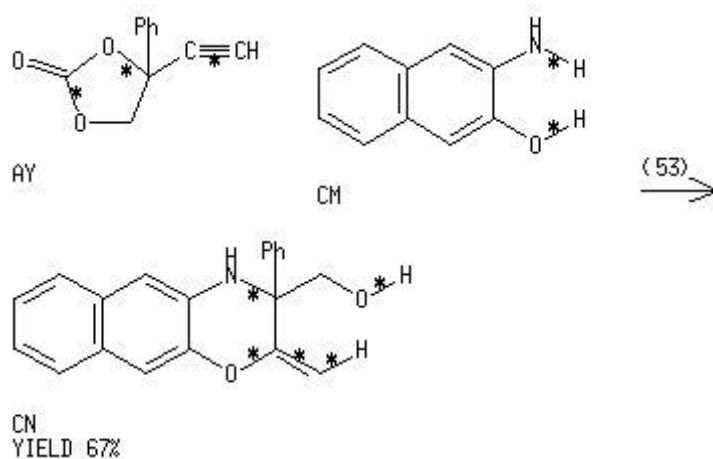
SO European Journal of Organic Chemistry (2024), 27(25), e202400306
CODEN: EJOCFK; ISSN: 1099-0690

PB Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

DT Journal; (online computer file)

LA English

RX(53) OF 224 ...AY + CM ==> CN



RX(53)

STAGE(1)

CAT [34946-82-2](#) Cu(CF₃SO₃)₂, [1071441-23-0](#)
 Ferrocene, 1-[(dimethylamino)[2-(diphenylphosphino)phenyl]methyl]-2-(diphenylphosphino)-
 SOL 107-06-2 ClCH₂CH₂Cl
 CON 30 minutes, room temperature

STAGE(2)

RCT AY 2222467-84-5, CM [5417-63-0](#)
 RGT AZ 121-44-8 Et₃N
 SOL 107-06-2 ClCH₂CH₂Cl
 CON 12 hours, 50 deg C

PRO CN [3049301-64-3](#)

RE.CNT 36 THERE ARE 36 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

練習問題 4

ニトリルオキシド (NITRILE OXIDE) から、1,2-C₃NO 環を合成する反応を検索

=> FILE CASREACT

=> S (NITRILE OXIDE/FG.RXN(S)1,2-C₃NO/FG.FORM) ← 官能基検索を実行する
L1 789 (NITRILE OXIDE/FG.RXN(S)1,2-C₃NO/FG.FORM)

=> S L1(L)80<=FG.YD ← 収率で限定
L2 359 L1(L)80<=FG.YD

=> S L2(L)1/NS ← 反応ステップ数で限定
L3 291 L2(L)1/NS

=> D BIB FCRD 1 ← BIB FCRD 表示形式で表示

L3 ANSWER 1 OF 291 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 191:157943 CASREACT [Full-text](#)

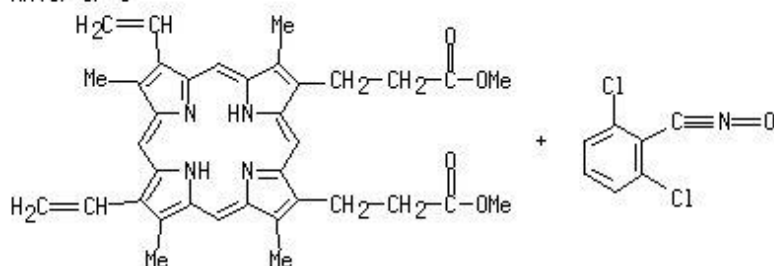
TI Preparation of macromolecular heterocyclic compound

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
CN 119462673	A	20250218	CN 2024-11580755	20241107
PRAI CN 2024-11580755		20241107		

RX

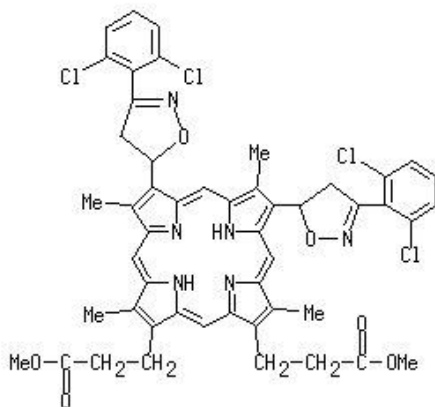
RX(3) OF 6



CH2C12 →

RX

RX(3) OF 6



82%

NOTE: optimization study, optimized on stoichiometry of agent and solvent
CON: 8 hours, 40 deg C

練習問題 5

CASREACT ファイルと CAplus ファイルで、6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索

CASREACT ファイルの検索

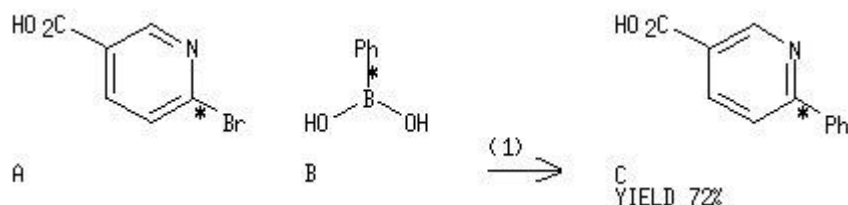
=> FILE CASREACT

=> S 29051-44-3/PRO ← 6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid の合成反応を検索
L1 23 29051-44-3/PRO

=> D BIB FHIT 1-23 ← 全件を BIB FHIT 表示形式で表示

L1 ANSWER 1 OF 23 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN
AN 186:78701 CASREACT [Full-text](#)
TI Robust Packing of a Self-Assembling Iridium Complex via Endocytic Trafficking for Long-Term Lysosome Tracking
AU Jin, Chengzhi; Li, Guanying; Wu, Xia; Liu, Jiangping; Wu, Weijun; Chen, Yazhou; Sasaki, Toshio; Chao, Hui; Zhang, Ye
CS Bioinspired Soft Matter Unit, Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University, 1919-1 Tancha, Onna-son, 904-0495, Japan
SO Angewandte Chemie, International Edition (2021), 60(14), 7597-7601
CODEN: ACIEF5; ISSN: 1433-7851
PB Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
DT Journal; (online computer file)
LA English

RX(1) OF 11 A + B ==> C...



RX(1) RCT A 6311-35-9, B 98-80-6
RGT D 584-08-7 K₂CO₃
PRO C [29051-44-3](#)
CAT 14221-01-3 Pd(PPh₃)₄
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH, 108-88-3 PhMe
CON overnight, reflux
RE.CNT 26 THERE ARE 26 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

L1 ANSWER 2 OF 23 CASREACT COPYRIGHT 2025 ACS on STN
:

CAplus ファイルの検索 (REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索)

=> FILE REGISTRY

=> S 29051-44-3

L2 1 29051-44-3

=> FILE CAPLUS

=> S L2/P

← 合成文献に限定

L3 36 L2/P

=> S L3 NOT L1

← CASREACT ファイルで得られた回答 (L1) を除く

23 L1

L4 15 L3 NOT L1

=> D BIB HITRN 1-15

← BIB HITRN 表示形式で全件を表示

L4 ANSWER 1 OF 15 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN

AN 2025:1896805 CAPLUS [Full-text](#)

TI Design, Synthesis, Herbicidal Evaluation, and Molecular Simulation of
2-(6-Phenylnicotinoyl)cyclohexane-1,3-dione Derivatives as Novel
4-Hydroxyphenylpyruvate Dioxygenase Inhibitors

AU Li, Yue; Zhao, Li-Xia; Zhang, Pan-Xiu; Jiang, Zi-Bin; Lakhvich, Fedor A.;
Khlebnicova, Tatyana S.; Fu, Ying; Ye, Fei

CS Department of Chemistry, College of Arts and Sciences, Northeast
Agricultural University, Harbin, 150030, Peop. Rep. China

SO Journal of Agricultural and Food Chemistry (2025), 73(32), 19935-19943
CODEN: JAFCAU; ISSN: 0021-8561

DOI 10.1021/acs.jafc.5c02089

PB American Chemical Society

DT Journal; (online computer file)

LA English

IT INDEXING IN PROGRESS

IT [29051-44-3P](#)

RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT
(Reactant or reagent)

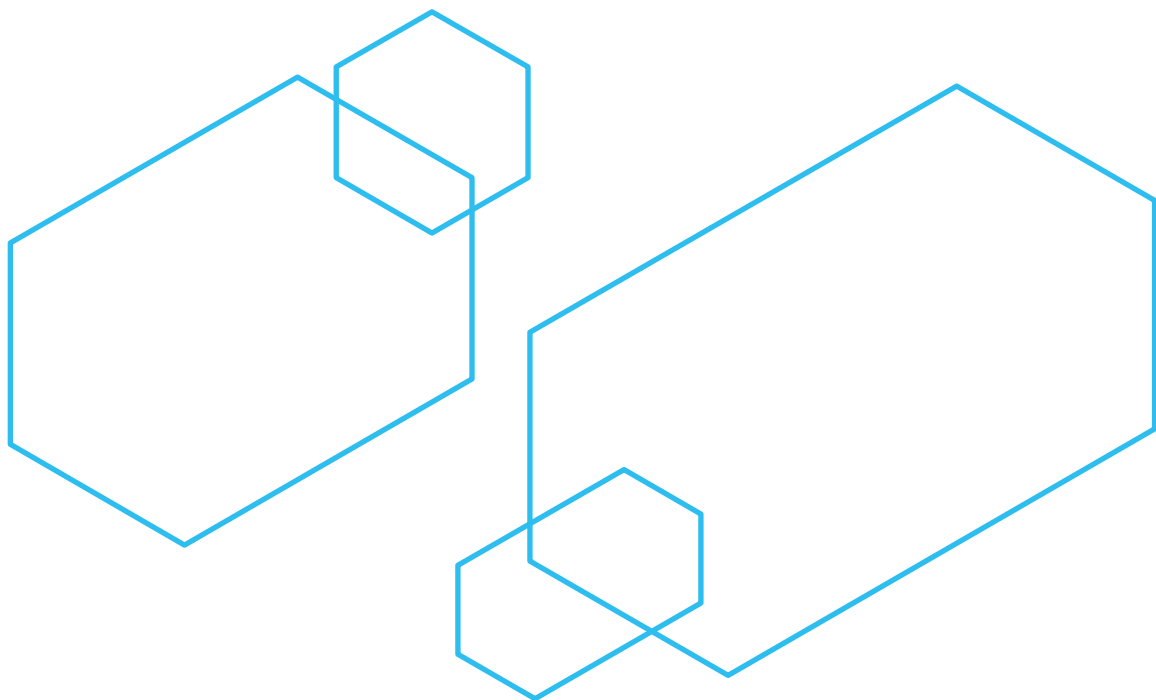
(design, synthesis, herbicidal evaluation, and mol. simulation of
2-(6-phenylnicotinoyl)cyclohexane-1,3-dione derivs. as novel
4-hydroxyphenylpyruvate dioxygenase inhibitors)

RE.CNT 46 THERE ARE 46 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

L4 ANSWER 2 OF 15 CAPLUS COPYRIGHT 2025 ACS on STN

:

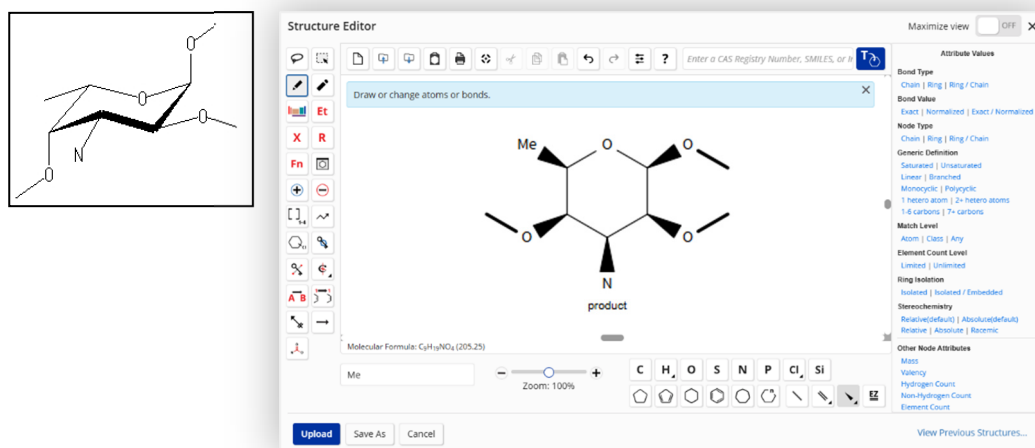
APPENDIX



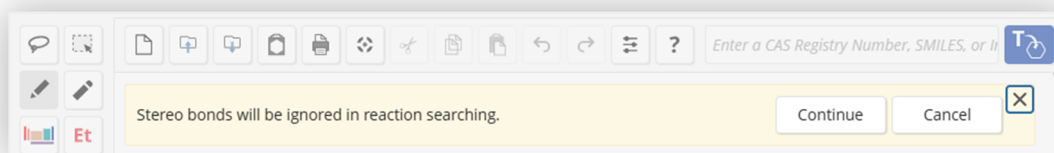
CASREACT ファイル - 構造検索時の注意

CASREACT ファイルでは、立体構造検索はできない。

- 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。
- 例：下記の立体情報を有する物質が生成物である反応を検索したい場合



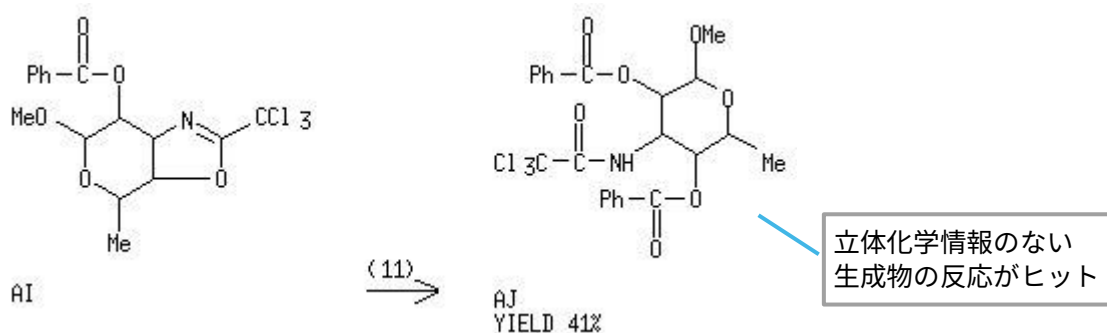
- Upload ボタンをクリックすると、Stereo bonds will be ignored in reaction searching のメッセージが表示される。そして、Continue をクリックすると立体情報を考慮しない構造検索が実行される。



- 上記構造質問式でヒットする反応の例 (FHIT 表示形式)

例 1:

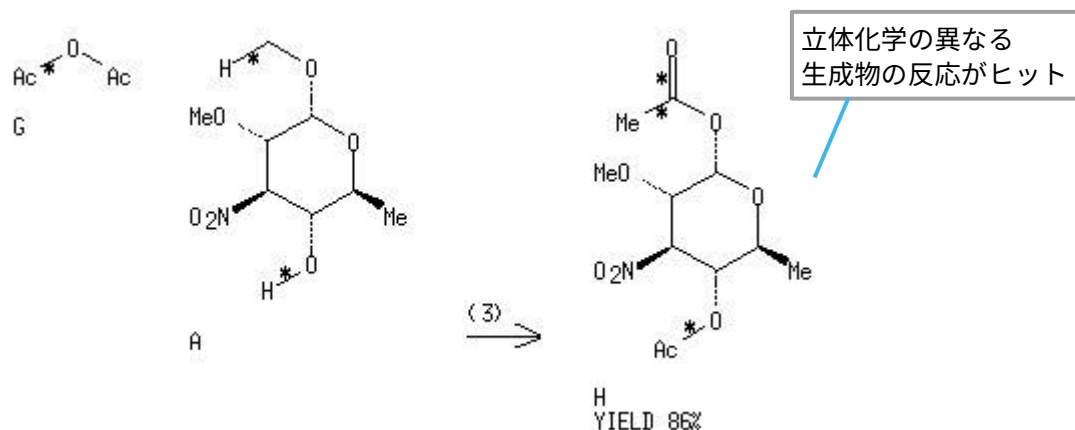
RX(11) OF 23 ...AI ==> AJ



RX(11) RCT AI 108782-78-1
:
PRO AJ 108782-79-2

例 2:

RX(3) OF 4 G + A ==> H



RX(3) RCT G 108-24-7, A 51295-93-3
 RGT I 7637-07-2 BF3
 PRO H [51295-98-8](#)
 NTE Classification: O-Acylation; Substitution; Diastereoselective;
 Acetoxylation; # Conditions: Ac2O BF3; 0 deg 1h

- CASREACT ファイルで、目的の立体情報を有する物質の反応のみを検索したい場合は、REGISTRY ファイルで目的の物質を検索し、その結果を CASREACT ファイルにクロスオーバーする。

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、溶媒和物、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)

JAICI について

一般社団法人化学情報協会 (JAICI) は、化学技術情報の流通を図るため 1971 年に設立されました。米国 CAS をはじめ世界各国の情報機関などと協力関係を築き、日本の研究者をサポートする情報センターとして、大学・企業などの情報取得・分析から研究・開発までを支援しています。

CAS STNext に関するお問い合わせ先
<https://www.jaici.or.jp/inquiry/>

About CAS

CAS connects the world's scientific knowledge to accelerate breakthroughs that improve lives. We empower global innovators to efficiently navigate today's complex data landscape and make confident decisions in each phase of the innovation journey. As a specialist in scientific knowledge management, our team builds the largest authoritative collection of human-curated scientific data in the world and provides essential information solutions, services, and expertise. Scientists, patent professionals, and business leaders across industries rely on CAS to help them uncover opportunities, mitigate risks, and unlock shared knowledge so they can get from inspiration to innovation faster. CAS is a division of the American Chemical Society. Connect with us at **cas.org**