

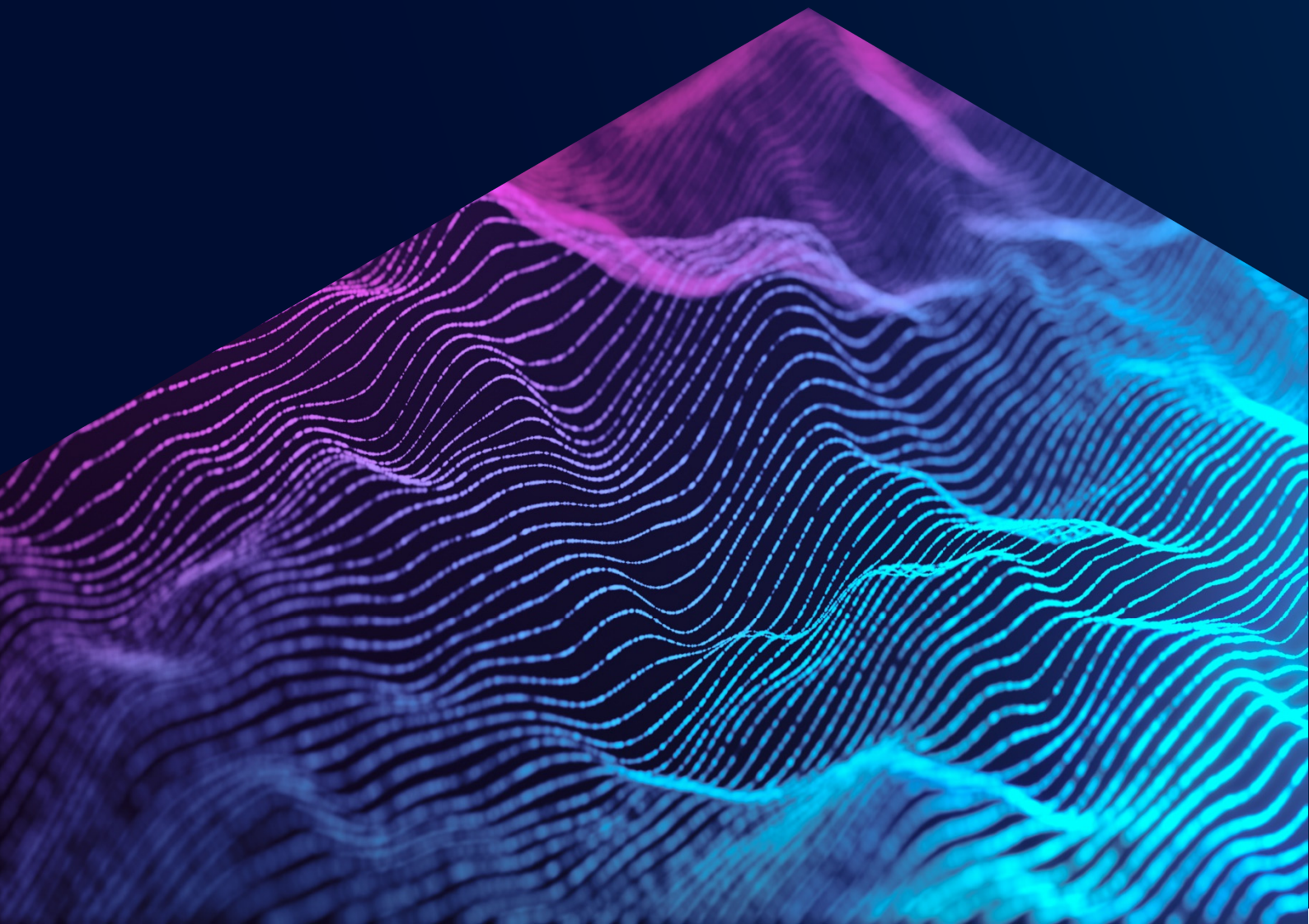
CAS IP Finder, powered by STN™

反応情報検索

202609

JAICI 化学情報協会

CAS
A division of the American Chemical Society



目次

A 概要
CAS IP Finder 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
主な検索フィールド 52

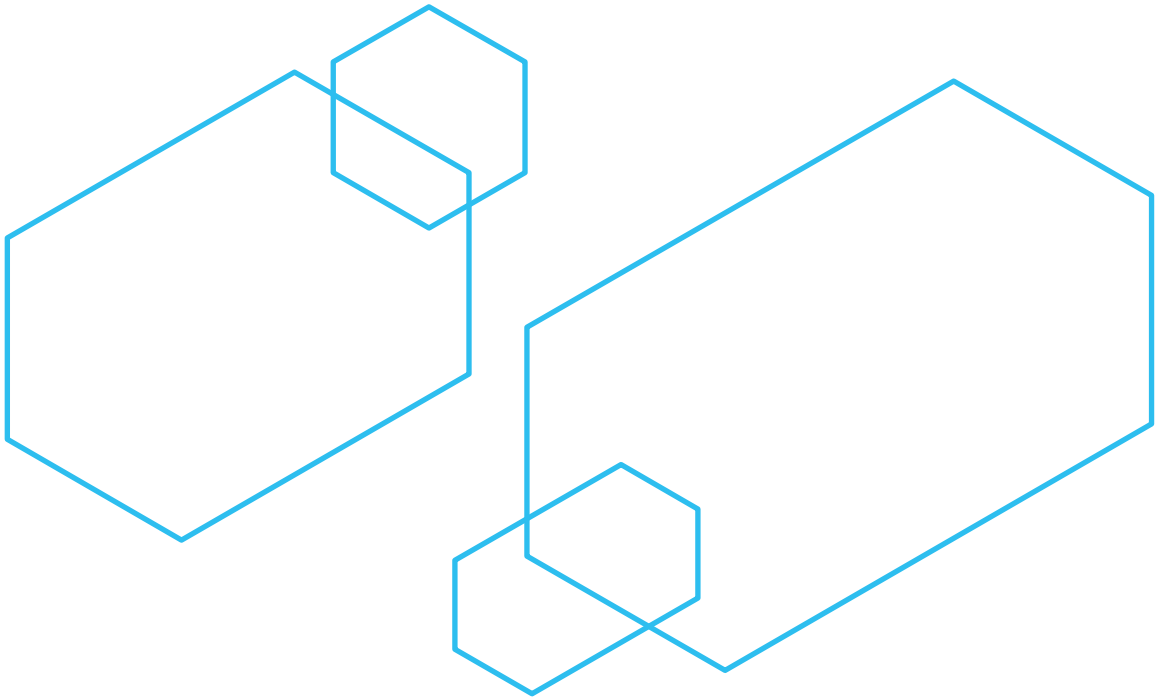
C CAS FILES の反応情報検索
CAS FILES を使った網羅的な反応情報検索 57

練習問題 73

APPENDIX
CASREACT ファイル - 構造検索時の注意 83
CASREACT ファイル – CA 由来のレコードの収録基準 85
CASREACT ファイル – 1990 年以前の収録雑誌 87

A　概要

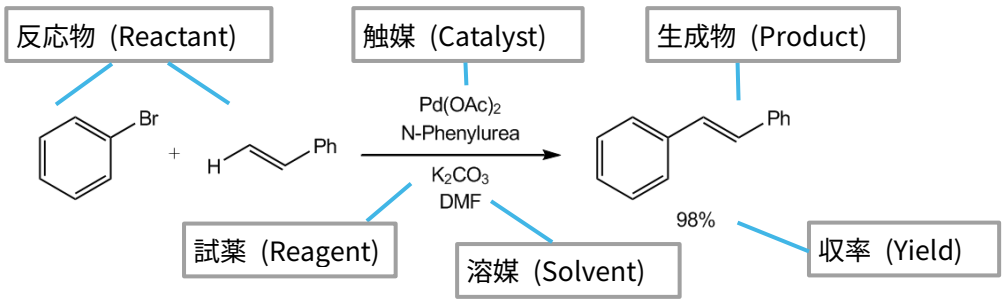
CAS IP Finder の反応データベースの概要と CAS FILES の反応情報についてご紹介します。



CAS IP Finder の反応情報

CAS IP Finder 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

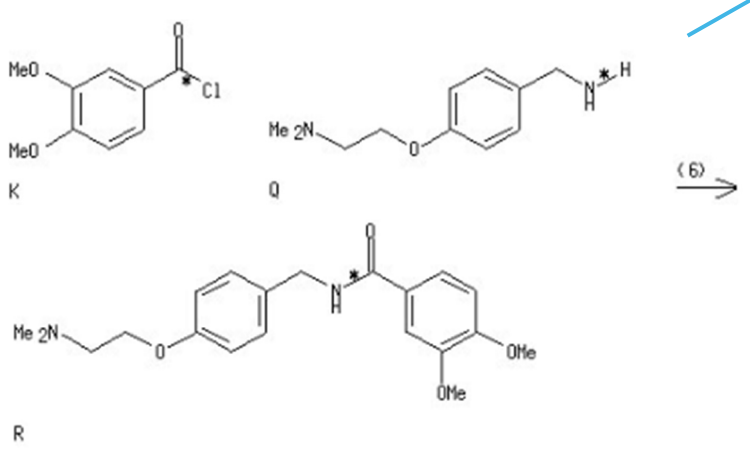
(2026 年 9 月現在)

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> 265 万件以上 <反応> 1 億 6,500 万件以上 (1840-、毎日)
REAXYSFILESUB	化学物質のデータベース 物質、物性、反応情報を収録	<物質> 6,330 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> 2,980 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> 7,080 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 979 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)

反応物の物質レコード番号と名称 (構造図はなし)

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

生成物の物質レコード番号と名称 (構造図はなし)

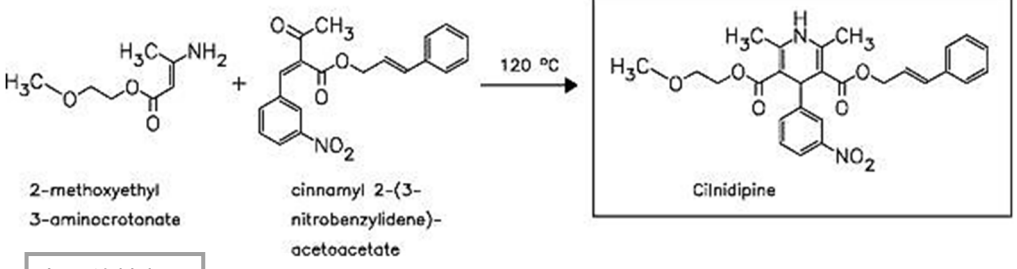
反応条件

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

出典情報

– PS ファイル (ALL 表示形式)

```
AN      30157   PS
ED      Entered STN: 24 Aug 2022
        Last updated on STN: 15 Jun 2026
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
INCH    InChI=1S/C27H28N2O7/c1-X200B18-X200B23(26(30)X200B35-X200B14-X200B8-
:
INKY    KJEBULYHNRNJTE-DHZHZOJOSA-N
MW      492.53
LD50    >5 g/kg (M, p.o.); 4412 mg/kg (R, p.o.); >2 g/kg (dog, p.o.)
FRM     tabl. 5 mg, 10 mg
DEF     Ethylene glycol ether esters; Pyridinecarboxylic acids, esters
DRV     CN.DRV    unspecified stereochemistry
        LSF.DRV   C27H28N2O7
        MW.DRV    492.53
        RN.DRV    102106-21-8
          :
TRD
Trade Data
Launch |Trade Name|Company Name (Manufacturer)
Country|          |
=======+==========+============================
J       |Aterec    |Ajinomoto Pharma; Mochida
          :
GI
```




```
INT
Intermediate(s) in Substance Preparation
CAS RN       |Molecular Formula|Chemical Name
=============+=================+================================================
102106-88-7  |C20H17NO5        |cinnamyl 2-(3-nitrobenzylidene)acetoacetate; But
             |                 |anoic 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)
             |                 |
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).
```

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

中間体情報

出典情報

検索機能の比較

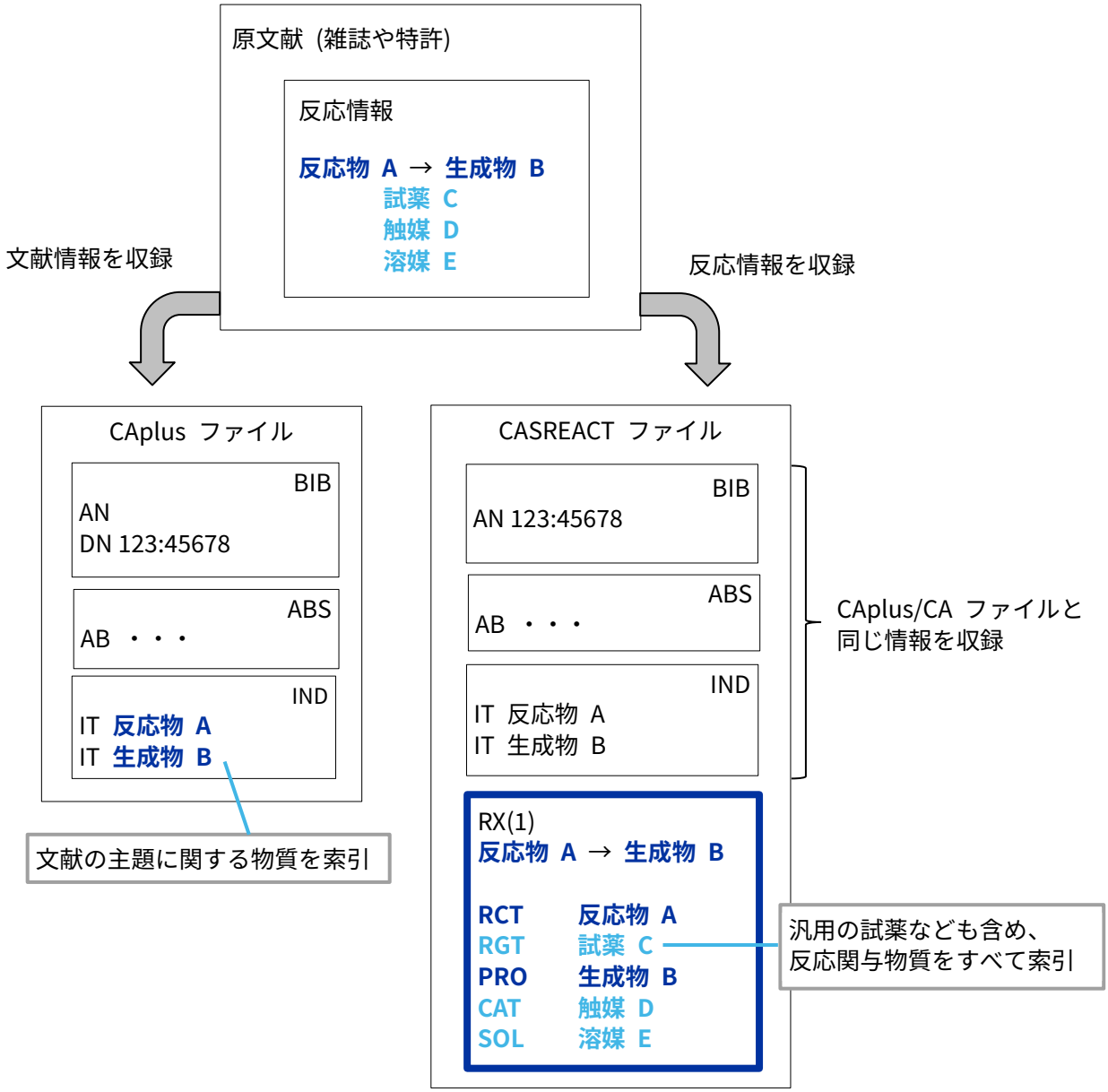
ファイルによって収録源や収録内容、検索機能などが異なるため、目的に合わせて適切なファイルを選択する。

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		○		

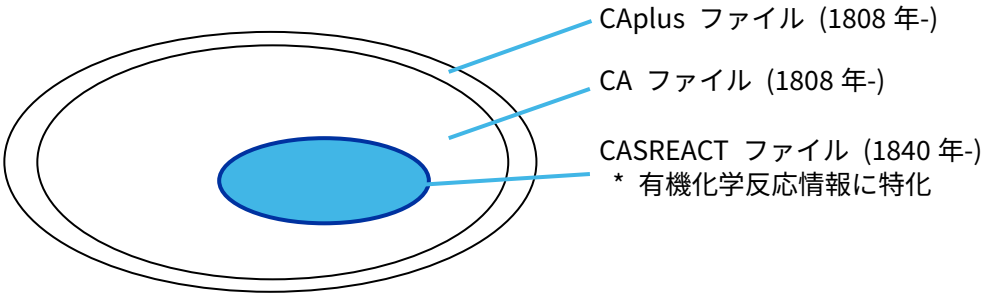
*1 △ の項目は CAS 登録番号 (CAS RN®) の付与が完全ではない。
*2 構造検索の回答より物質のレコード番号を抽出して、反応情報を検索する。
例 : ヒットした物質 (L1) が生成物である反応情報は => TRA L1 1- AN /RX.PAN で検索。
*3 CAS RN® の収録率は 16 %。
*4 CAS REGISTRY ファイルで構造検索した結果をクロスオーバーする。

CAS FILES の反応情報

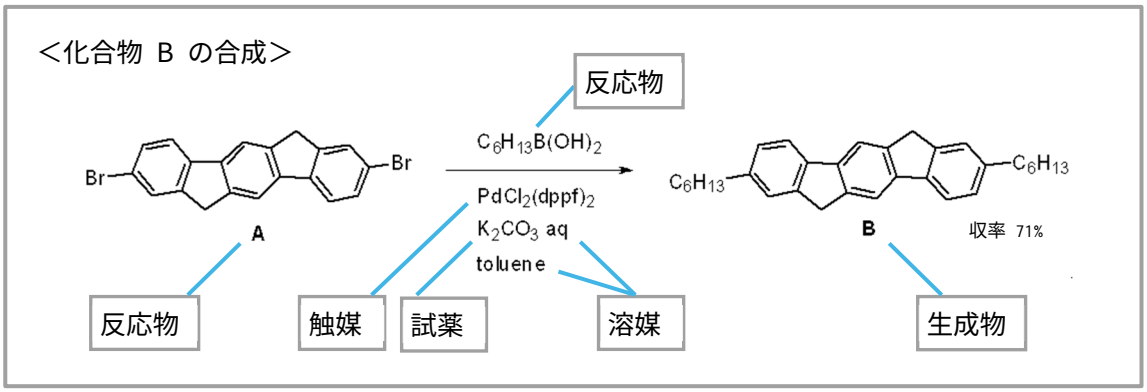
文献中の反応情報の収録方針



収録レコード数の相関性



収録例



BIB
ABS
IND

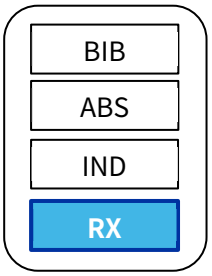
– CAplus ファイルの索引 (AN 2010:1279237，DN 153:543934)

```
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)
```

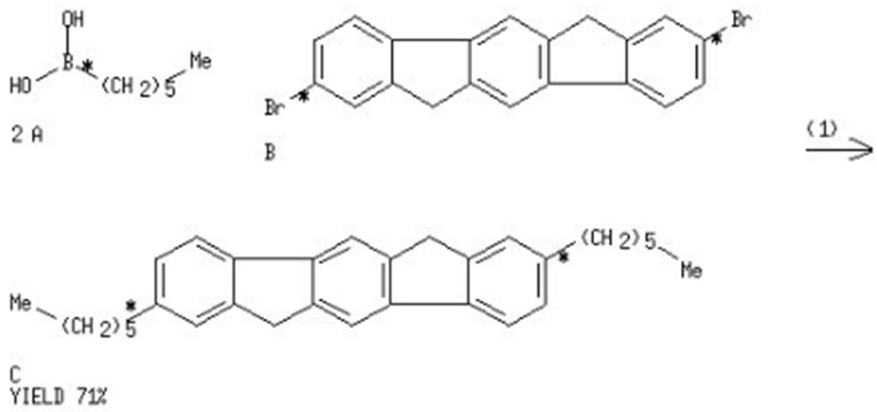
文献の主題に関与しない物質（汎用の試薬・溶媒・触媒など）は索引されない。

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




```
RX(1)     RCT  A 16343-08-1, B 848982-57-0
          RGT  D 584-08-7 K2CO3
          PRO  C 1247953-36-1
          CAT  72287-26-4 Palladium,
               [1,1'-bis(diphenylphosphino-κP)ferrocene]dichloro-,
               (SP-4-2)-
          SOL  7732-18-5 Water, 108-88-3 PhMe
          CON  8 hours, reflux
          NTE  Suzuki coupling
```

← **反応物**
← 試薬
← **生成物**
← 触媒
← 溶媒
← 反応条件
← 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。

CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較

(2026 年 9 月現在)

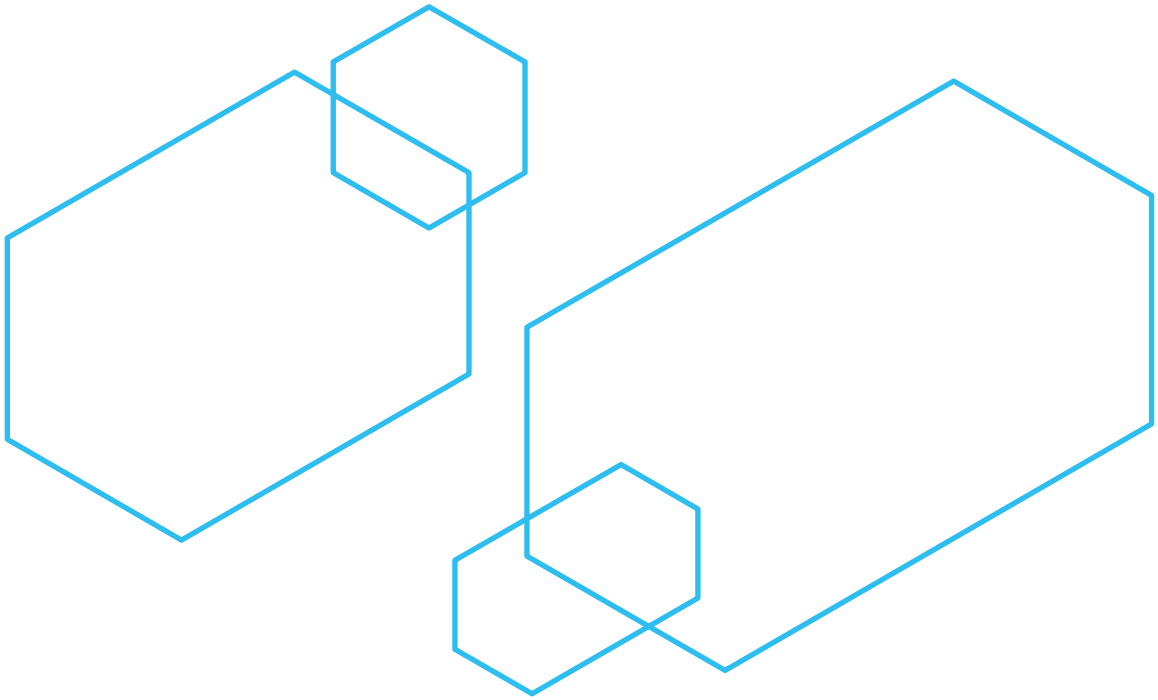
項目	CASREACT	CAplus
収録年	1840 年以降	1808 年以降 (PREP (製造) の CAS ロールが付与されているのは 1907 年以降)
収録数	<文献> 265 万件以上 <反応> 1 億 6,500 万件以上	<文献> 7,080 万件以上 (PREP (製造) の CAS ロールが付与されている文献数は 979 万件以上)
収録文献	CA に収録されているレコードの一部	CA 収録対象の化学および化学周辺分野
索引方針	合成的に意義のある反応を選択 (単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない)	文献の主題や発明の新規性/進歩性に関連する物質
特徴	– すべ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	– 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 IP Finder 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。
- CAplus 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

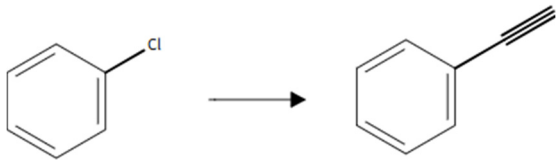
CASREACT ファイルは、CAS 作成のデータベースである。化学反応情報をさまざまな手法で検索できる。ただし、化学物質名称からは検索できない。

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。

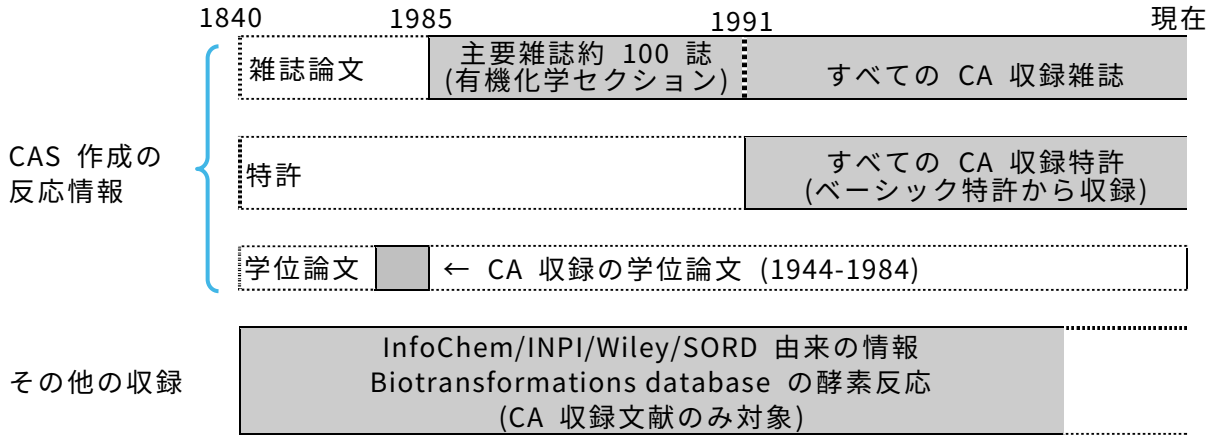
CAS 作成の反応情報 (1985 年以降) に加えて、他の収録源からも反応情報を収録している。

- 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

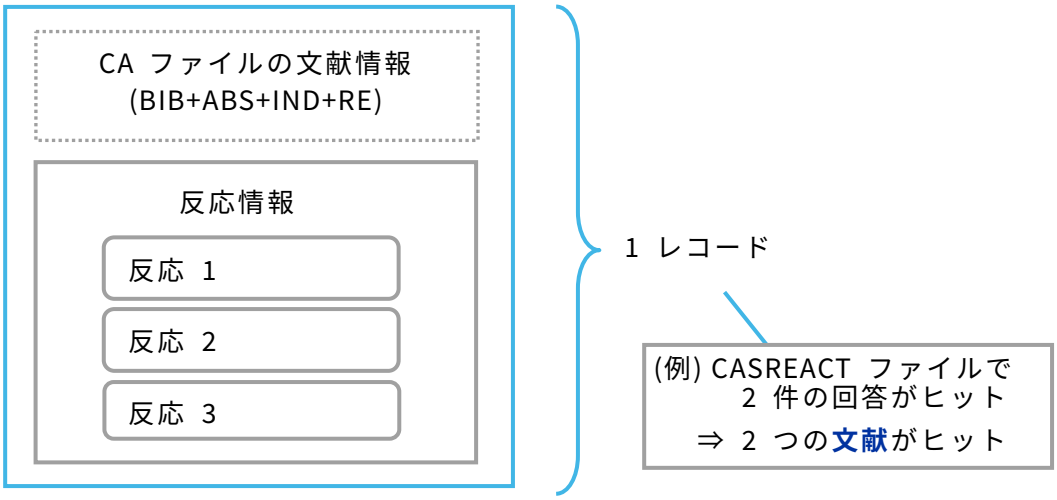


- Wiley 社由来の反応情報の出典
  - Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (EROS) ： e-EROS 2001～2015 年版
  - Organic Syntheses ： 1921 - 2015 年
  - Organic Reactions ： 1946 - 2008 年

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
        :

PRAI FR 1998-11734             19980921
```

ABS

CAplus/CA ファイルの抄録

```
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]
```

IND

CAplus/CA ファイルの索引情報

```
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)
```

一段階反応 RX(1)
A → B → H

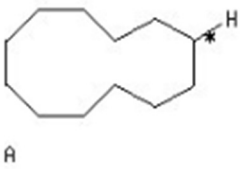
"..." 前後の反応の存在を表す

RX(1)

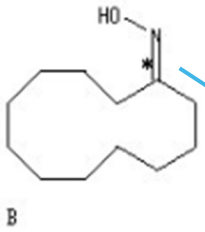
1 番目の
反応情報
(CASREACT
ファイル特有)

反応マップ RX(1) OF 3　　A ===> B...

反応図



(1)



* は反応部位

反応要約 RX(1)

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

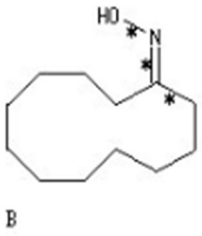
反応関与物質は CAS 登録番号 (CAS RN®) で索引されている

一段階反応 RX(2)
A → **B** → **H**

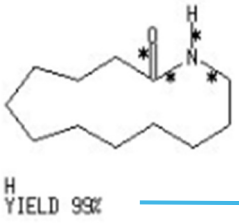
RX(2)

2 番目の
反応情報
(CASREACT
ファイル特有)

RX(2) OF 3　　...B　===>　H



(2)



収率

RX(2)

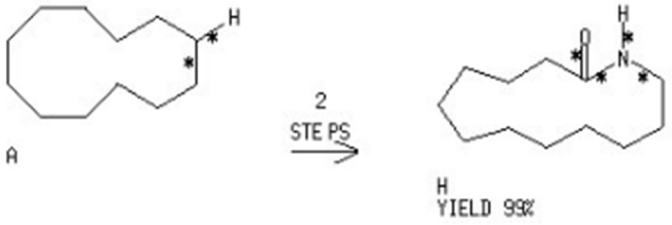
RCT	B 946-89-4
RGT	C 75-75-2 MeSO3H
PRO	H 947-04-6
CON	1 hour, 135 - 140 deg C
NTE	Beckmann rearrangement

RX(3)

3 番目の
反応情報
(CASREACT
ファイル特有)

多段階反応 RX(3)
A → B → H

RX(3) OF 3 COMPOSED OF RX(1), RX(2)
RX(3) A ===> 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          114 137-58-6 /RRT

=> S 137-58-6/PRO               ← リドカインを生成物とする反応
L2           54 137-58-6 /PRO
```

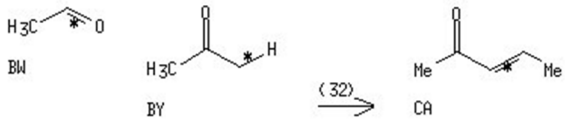
- 【方法 2】 REGISTRY ファイルの回答セット（L 番号）にロールを指定

```
=> 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           54 L3/PRO            (リドカインを生成物とする反応)
```

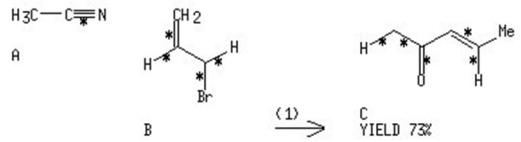
- 使い分けの目安
  - 3 物質以下の場合 → 【方法 1】
  - 4 物質以上の場合 → 【方法 2】

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 2026 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 2026 ACS on STN

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




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

             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
```

(L)
同一反応中に限定

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 ---> C ---> D ---> E の合成法に関する文献

⇨ 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

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 ---> 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
```

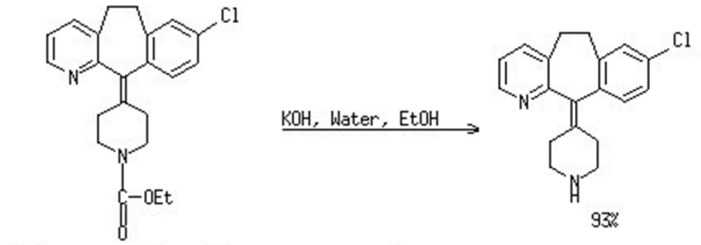
反応要約 ：

```
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          63 100643-71-8/PRO

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

L1   63 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 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

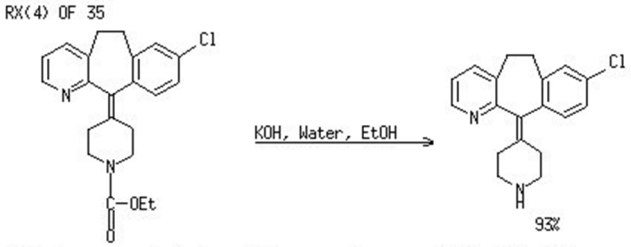



```
NOTE: optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization
      study

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 33                 ← FCRDREF 表示形式で表示

L1   ANSWER 33 OF 63  CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN
```

RX(4) OF 35



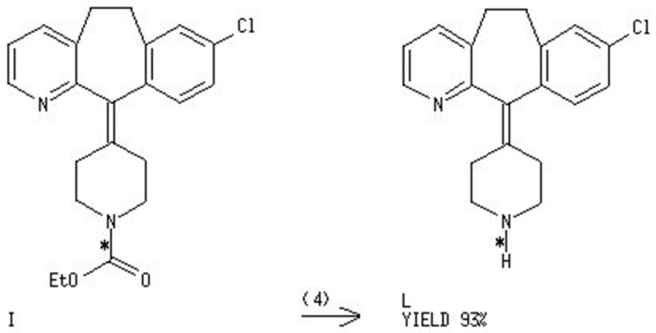

```
REF:  Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 22(8), 2701-2704;
      2012
NOTE: optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization
      study
CON:  6 hours, reflux
```

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 33 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 33 OF 63　CASREACT　COPYRIGHT 2026 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 compds. 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.

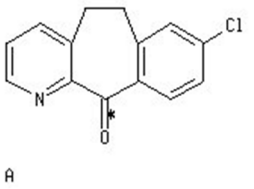
RX(4) OF 35　...I　===>　L...　　← 反応マップ



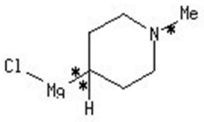
RX(4)　RCT　I 79794-75-5
RGT　M 1310-58-3 KOH
PRO　L 100643-71-8　　← 反応要約
SOL　7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH
CON　6 hours, reflux
NTE　optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study
RE.CNT　29　THERE ARE 29 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

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

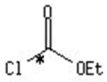
```
=> D FPATH 33                                          ← FPATH 表示形式で表示

L1   ANSWER 33 OF 63  CASREACT  COPYRIGHT 2026 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
```



A



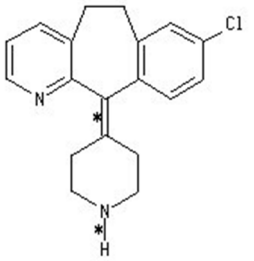
B



H

← 構造図

4
STE PS



L
YIELD 93%

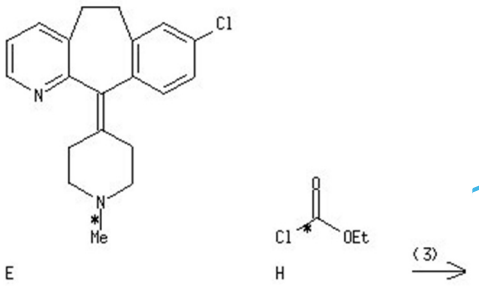
FPATH 表示形式の表示内容
- ヒットした反応のうち、最もステップ数の多い反応の反応マップと構造図
  (検索式によって表示される反応経路は異なる)

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

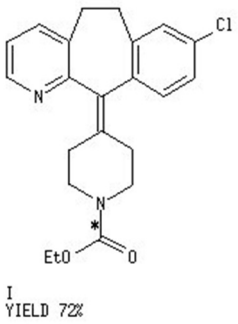
FPATH 表示形式では
① 生成物のみを指定して検索した場合、出発物質がすぐわかる
② 反応物のみを指定して検索した場合、最終化合物がすぐわかる

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

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 33 RX(3) RX(4)                                    ← RX(n) 表示形式で表示

L1   ANSWER 33 OF 63  CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

RX(3) OF 35     ...E  +  H  ===>  I...                 ← RX(3) の反応マップ
```

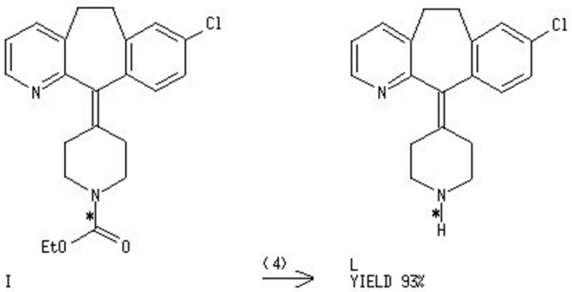


RX(n) 表示形式の表示内容
- 指定した反応番号の反応マップ、構造図、反応要約
  - 各ステップの詳細を表示できる
  - ヒットした反応以外も表示できる



← RX(3) の構造図

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

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                         ← RX(4) の反応要約
          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
```

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。

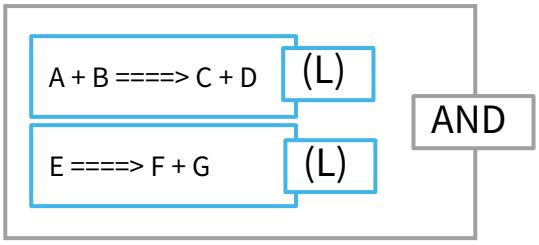
CASREACT ファイルで用いる演算子

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。

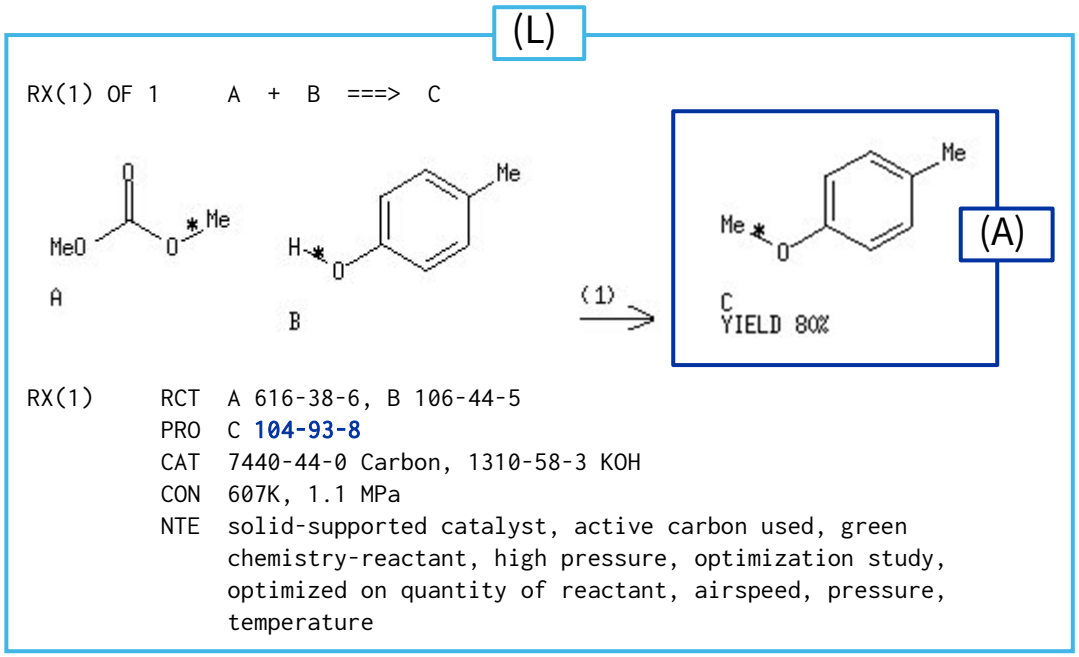
```
=> S 616-38-6/RCT (L) 104-93-8/PRO (L) 7440-44-0/CAT
=> S 616-38-6/RCT (L) ANY/CAT (L) 1/NS
```

- 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
```



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

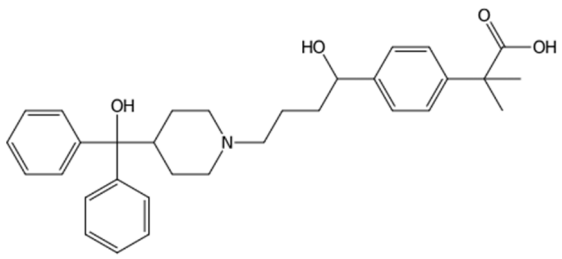
```
=> S 104-93-8/PRO AND P/DT                ← 特許中の反応に限定
```

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

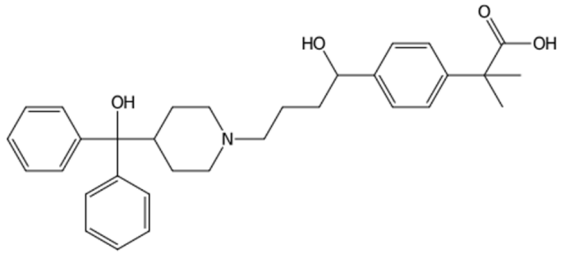
```
=> FILE REGISTRY          ← REGISTRY ファイルに入る

=> 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 2026 ACS on STN
RN   83799-24-0  REGISTRY
       :
CN   Fexofenadine
       :
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 RWTNPBWLLIMQHL-UHFFFAOYSA-N
CI   COM
SR   CA
LC   STN Files:   ADISINSIGHT, ADISNEWS, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASFORMULTNS,
       CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, EMBASE, IMSRESEARCH, IPA,
       MEDLINE, RTECS*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
         (*File contains numerically searchable property data)
```

フェキソフェナジンの CAS 登録番号（CAS RN®）




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

            2664 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
              49 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
            2771 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
```

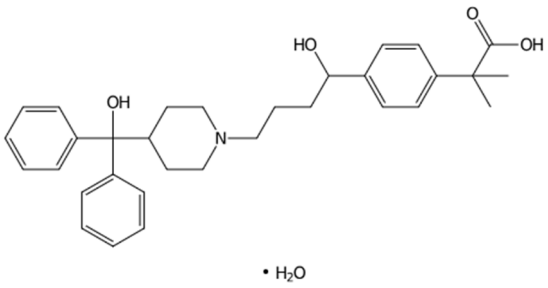
```
=> D SCAN                    ← SCAN 表示形式で表示

L2    64 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2026 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
```

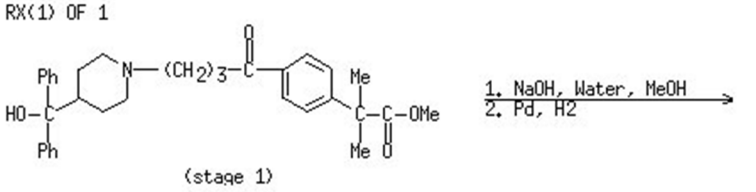


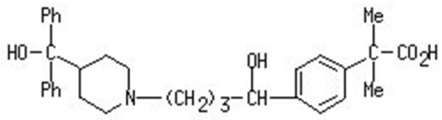

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2    64 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2026 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
```




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

=> S 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
L3          65 L1 OR L2

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

=> S 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
L4          63 L3/PRO
```

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

L4   63 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

TI   Process for preparing fexofenadine
RX
     RX(1) OF 1
```





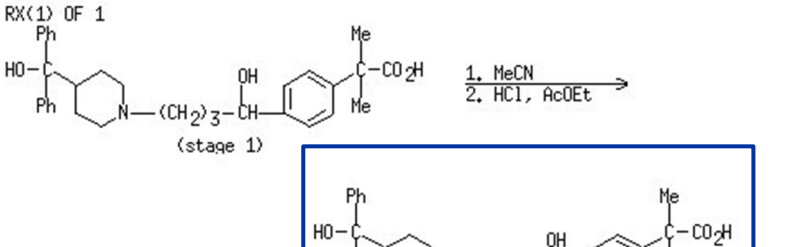

```
     NOTE: alternative preparation shown

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

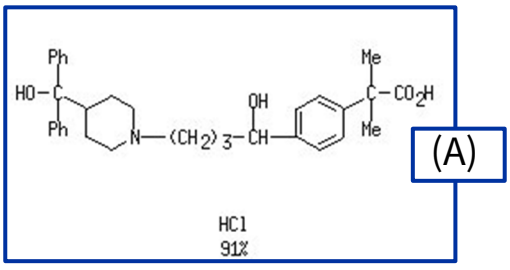
生成物の収率が 80% 以上の反応に限定

```
=> S L4 (A) 80<=YD           ← 生成物と収率を (A) 演算子で掛け合わせる
 L5          26 L4 (A) 80<=YD
```

収率情報のない反応も含めたい場合は
(A) (80<=YD OR NONE/YDT) と演算

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

L5   26 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

TI   Method for producing nonhydrated antiallergic fexofenadine hydrochloride
     in a novel crystalline form
RX
     RX(1) OF 1
```



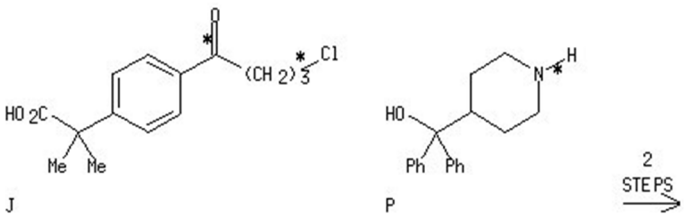



```
     NOTE: crystal polymorphism
 HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END
```

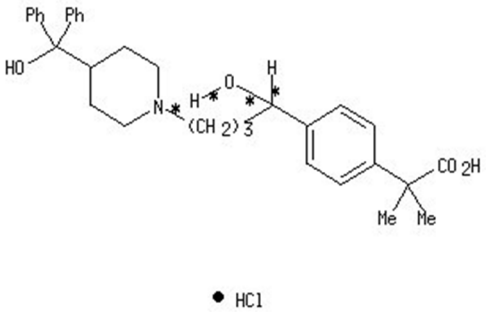
相間移動触媒 TEBAC を用いる反応に限定

- 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 2026 ACS on STN

RX(8) OF 15 COMPOSED OF RX(4), RX(1)
RX(8)     J  +  P  ===>  B
```



J　　P



● HCl

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。

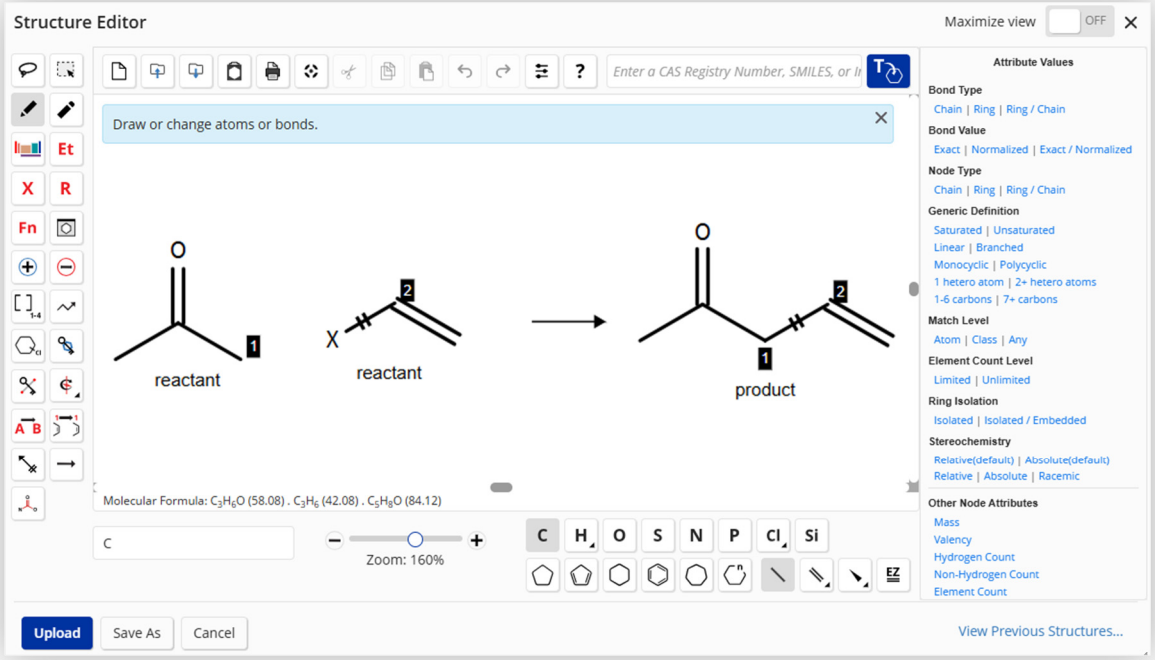
CAS IP Finder での作図

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。



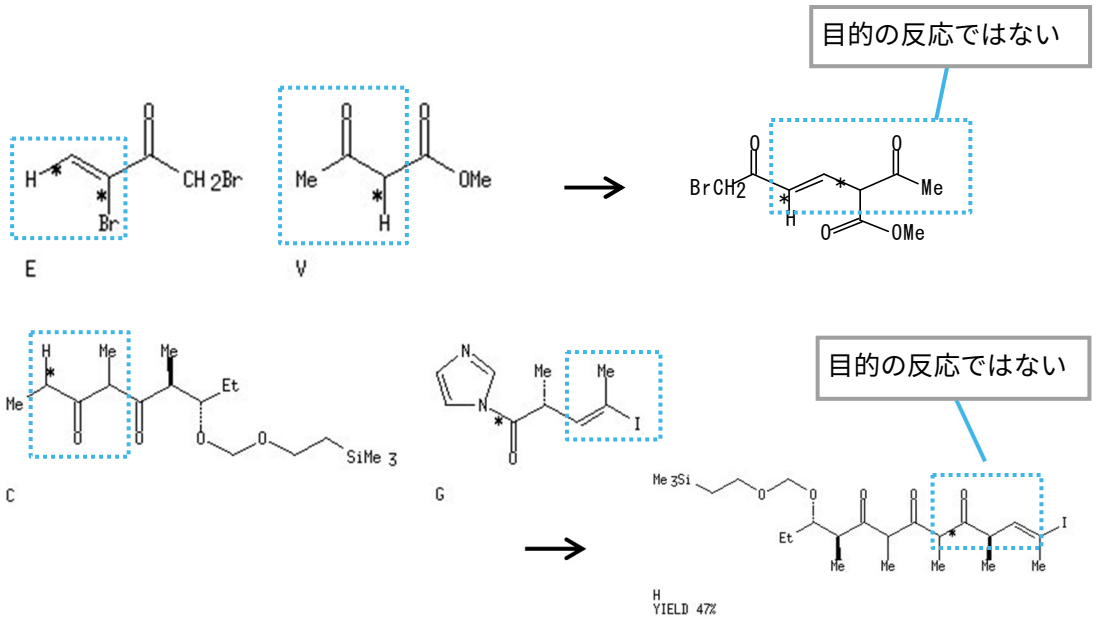
反応作図用のツール

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 IP Finder ユーザーガイド : コマンドライン」 参照 https://seminar.jaici.or.jp/doc/ip_finder_guide_command.pdf

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。



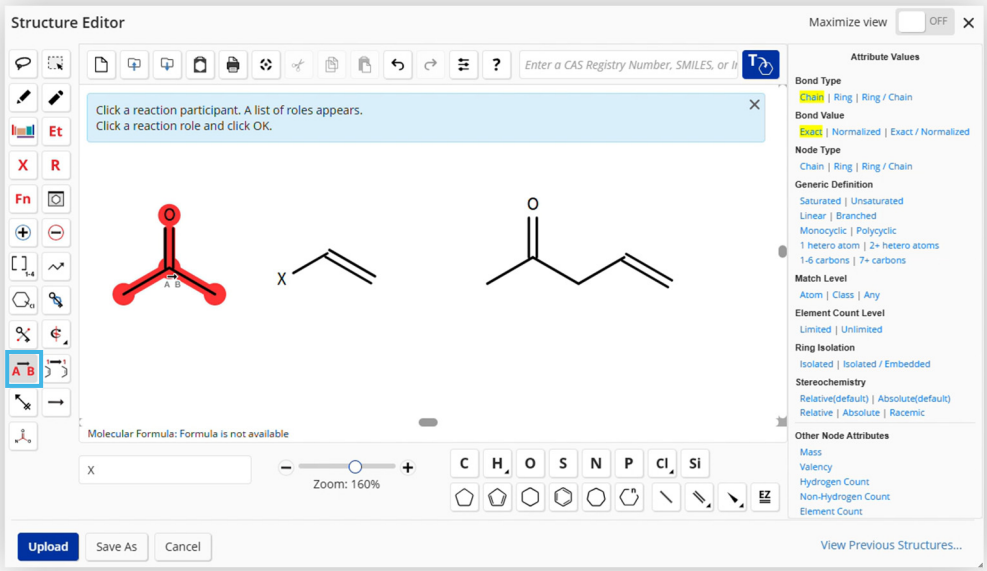
- 立体構造検索や同一成分内に限定した検索はできない。

反応質問式の作成 – 反応ロール

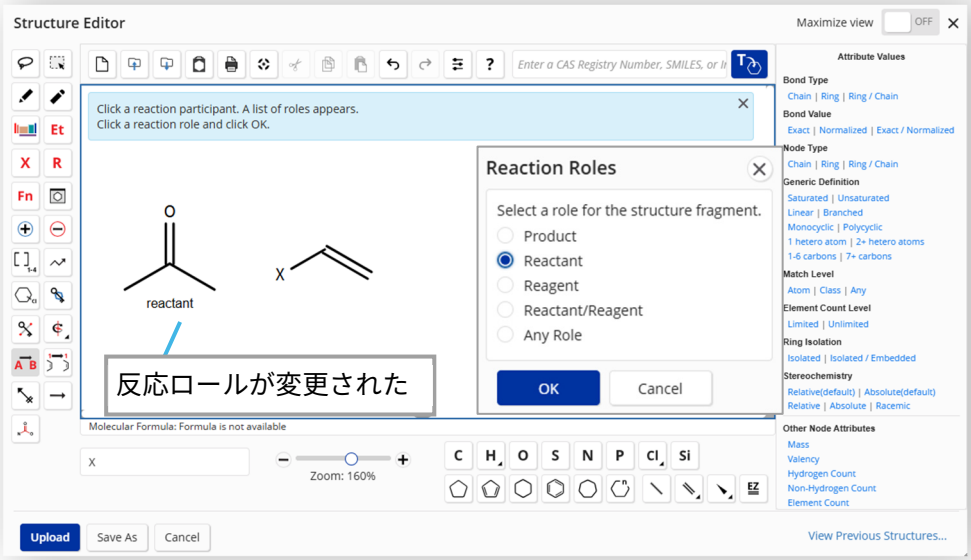
反応ロールの指定には反応ロールツール  を用いる。

- 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。

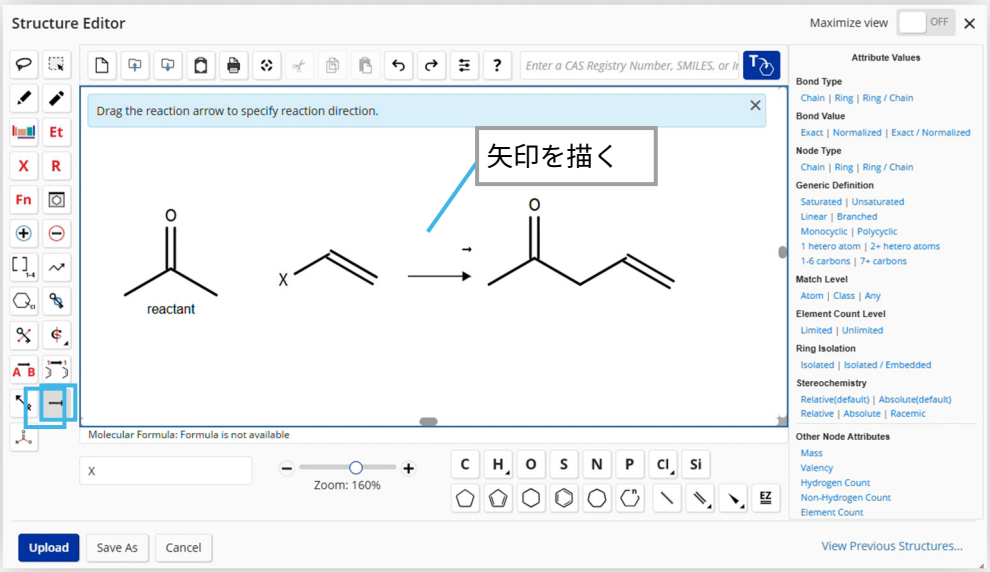


反応質問式の作成 – 反応矢印

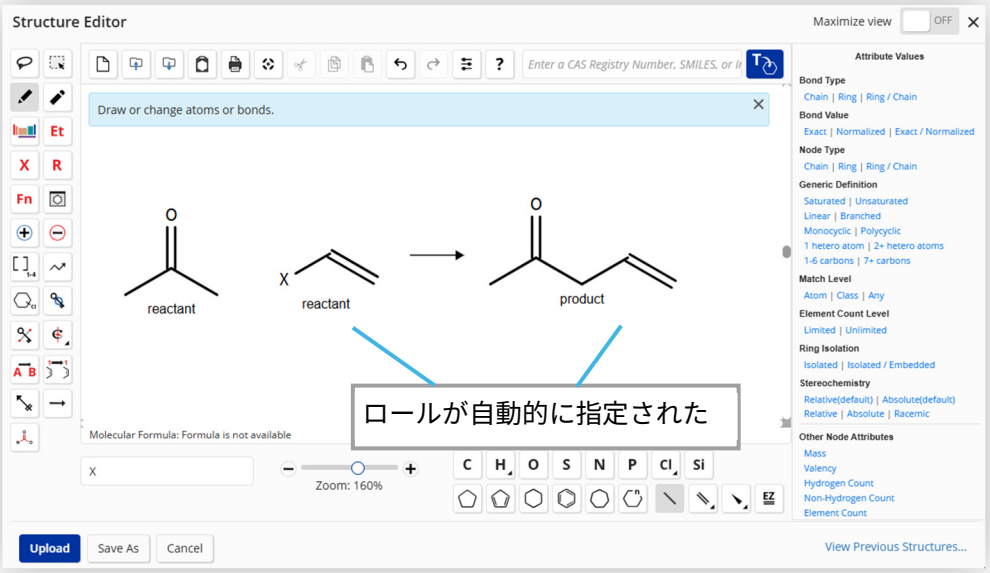
反応ロールツールの代わりに反応矢印ツールで反応ロールを自動的に付与することができる。

– 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。



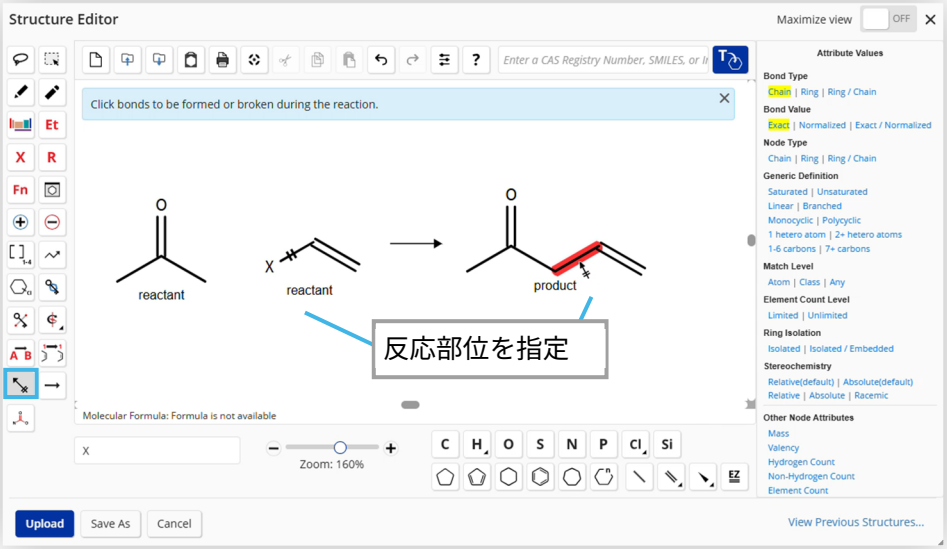
反応質問式の作成 – 反応部位

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。



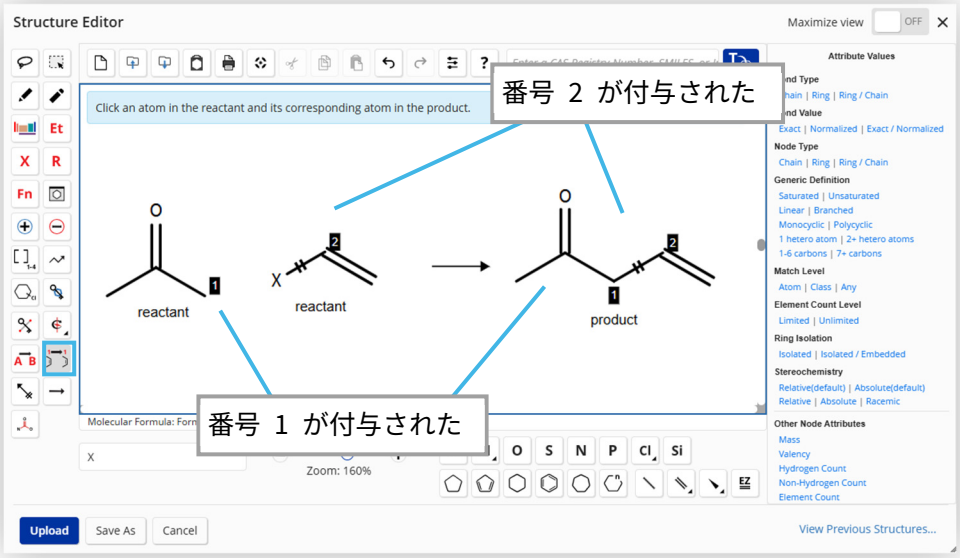
反応質問式の作成 – マッピング

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

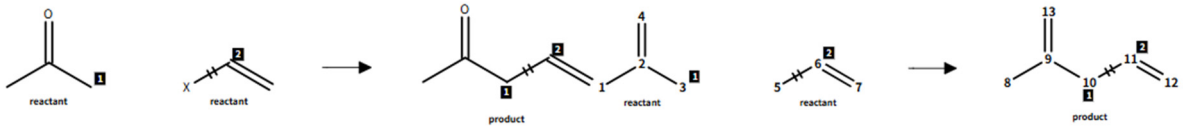
CASREACT ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	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	400,000,000	400,000,000	400,000,000	40,000,000
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
```

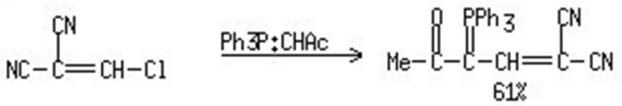
② サンプル検索を実行する。

```
=> S L1                                                    ← サンプル検索

SAMPLE SEARCH INITIATED 01:21:24 FILE 'CASREACT'
SCREENING COMPLETE -      29,546 REACTIONS TO VERIFY FROM         346 DOCUMENTS

100.0% DONE      29,546 VERIFIED           3 HIT RXNS                      1 DOCS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01

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:      580,625 TO     601,215      ← 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
```

ONLINE COMPLETE であることを確認

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 2026 ACS on STN

TI   Study of diazo compounds and azides; XLI.  Dicyanovinylation of
     acylmethylene triphenylphosphoranes
RX    RX(8) OF 30
```



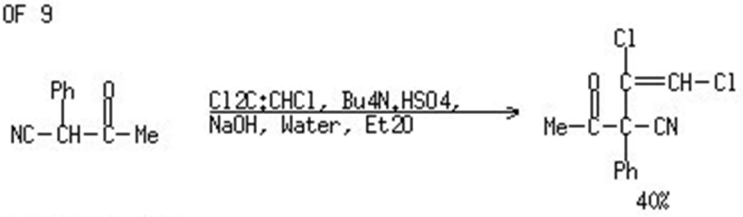

```
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
```

④ フルファイル検索を実行する。

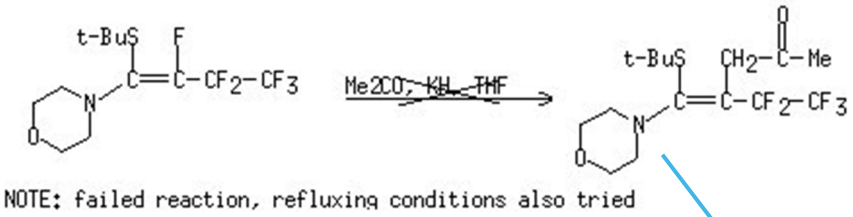
```
=> S L1 FUL                                          ← フルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 01:21:27 FILE 'CASREACT'
SCREENING COMPLETE -     612,301 REACTIONS TO VERIFY FROM       7,039 DOCUMENTS

100.0% DONE     612,301 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 2026 ACS on STN

TI   Direct Dichlorovinylation 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 2026 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
```

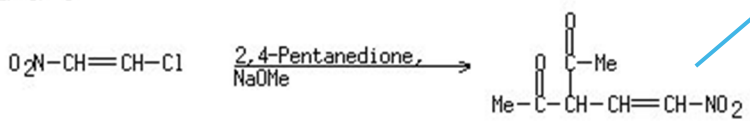
参考 ： 応用テクニック

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)
L4          24 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)
```

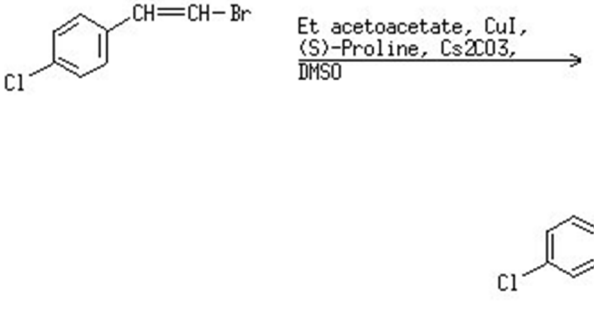
← L3 (生成物を作図した反応検索結果) に収率を演算する場合は (A) 演算子を使用

```
=> D SCAN

L4   24 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 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 2026 ACS on STN

TI   CuI/L-proline-catalyzed coupling reactions of vinyl bromides with
     activated methylene compounds
     RX(5) OF 11
```

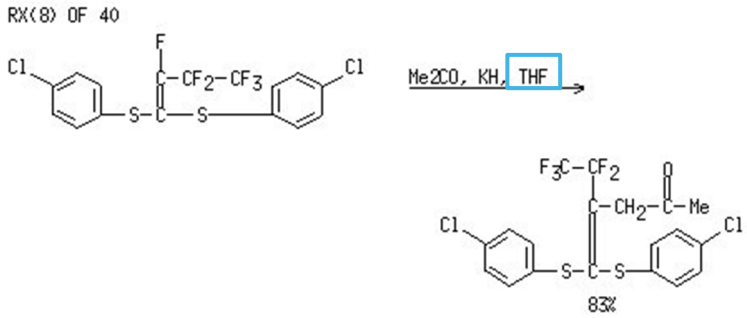


収率情報のある反応

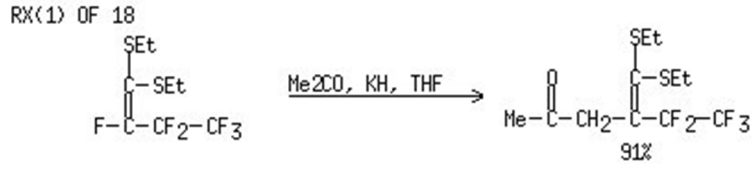
```
     NOTE: Ullmann-type coupling reaction

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

=> S L4 (L) 109-99-9/SOL
L5          12 L4 (L) 109-99-9/SOL
```

← 溶媒を THF (109-99-9) に限定

```
=> D SCAN

L5   12 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

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

RX
```



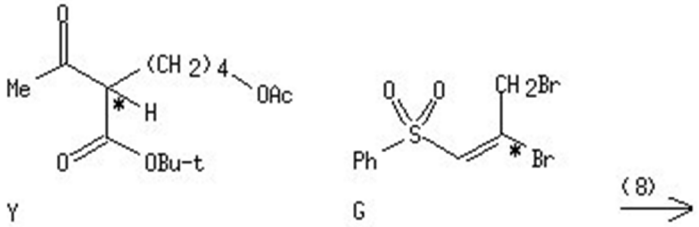

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> 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 2026 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
```



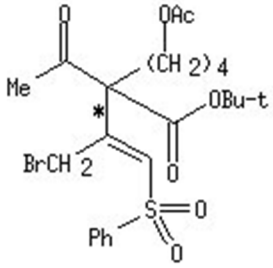

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D BIB ABS FHIT                                   ← BIB ABS FHIT 表示形式で表示

L6   ANSWER 1 OF 9  CASREACT  COPYRIGHT 2026 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...



Y G



Z
YIELD 92%

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

100.0% DONE   10139 VERIFIED      16 HIT RXNS  (      2 INCOMP)       8 DOCS
SEARCH TIME: 00.00.02

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

10,139 反応 (2,331 文献) を照合確認

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

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

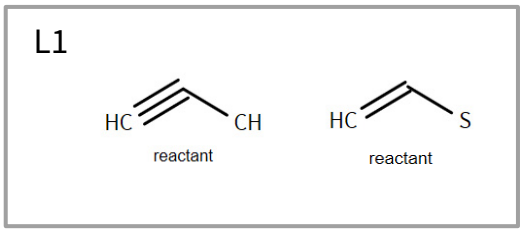
- Verification が完全な回答に限定したい場合は、=> S L#/COM または => S L#/COMPLETE (L# は構造検索結果) を実行する。

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

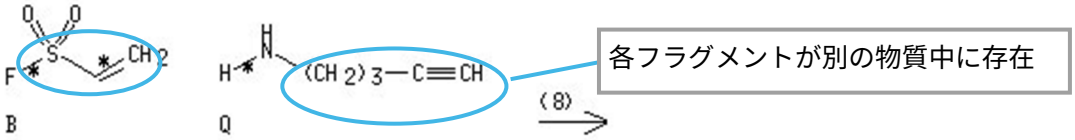
構造検索時の注意

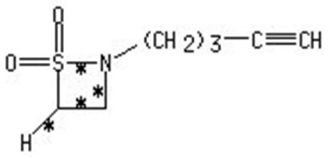
CASREACT ファイルの構造検索では、複数のフラグメントに同じロールを指定して検索できるが、同一物質中や異なる物質中という指定はできない。したがって、期待していない回答 (ノイズ) が得られる場合がある。

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          431 SEA SSS FUL L1 (     7359 REACTIONS)

=> D FHIT 16 31           ← 16、31 番目の回答を FHIT 表示形式で表示

L3   ANSWER 16 OF 431  CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

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

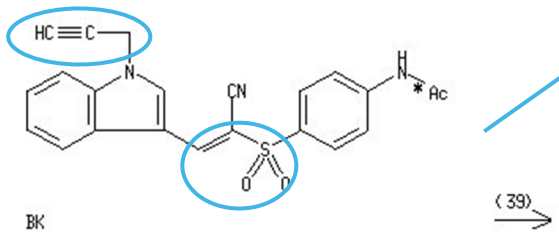




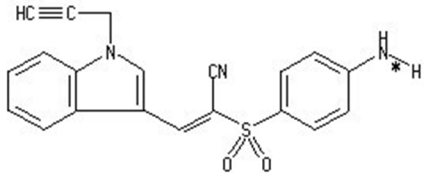
R
YIELD 74%

```
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
```

```
L3   ANSWER 31 OF 431  CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

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



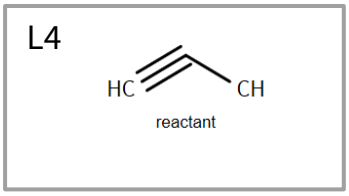
各フラグメントが同じ物質中に存在

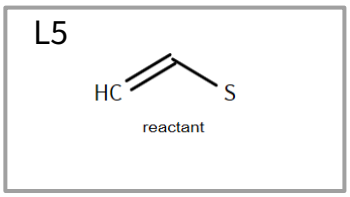



```
RX(39)    RCT  BK 2966800-62-2
          PRO  BN 2966800-63-3
          CAT  7647-01-0 HCl
          SOL  64-17-5 EtOH
          CON  8 hours, 90 deg C
```

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。



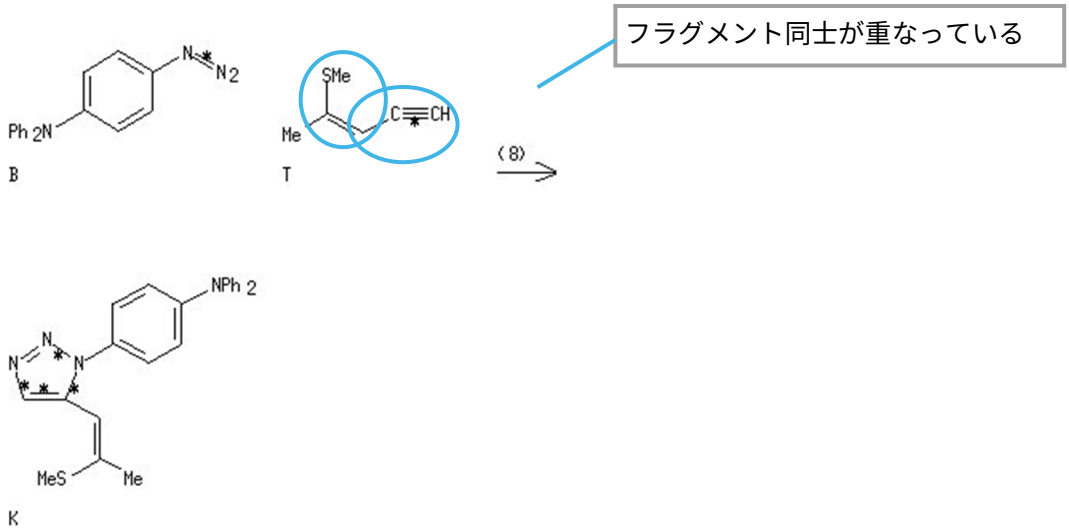



```
=>
L4       STRUCTURE UPLOADED

=>
L5       STRUCTURE UPLOADED

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

=> S L4 AND L5 FUL
L7           456 SEA SSS FUL L4 AND L5 (     7408 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 2026 ACS on STN

RX(8) OF 15　　B + T ===> K...



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
```

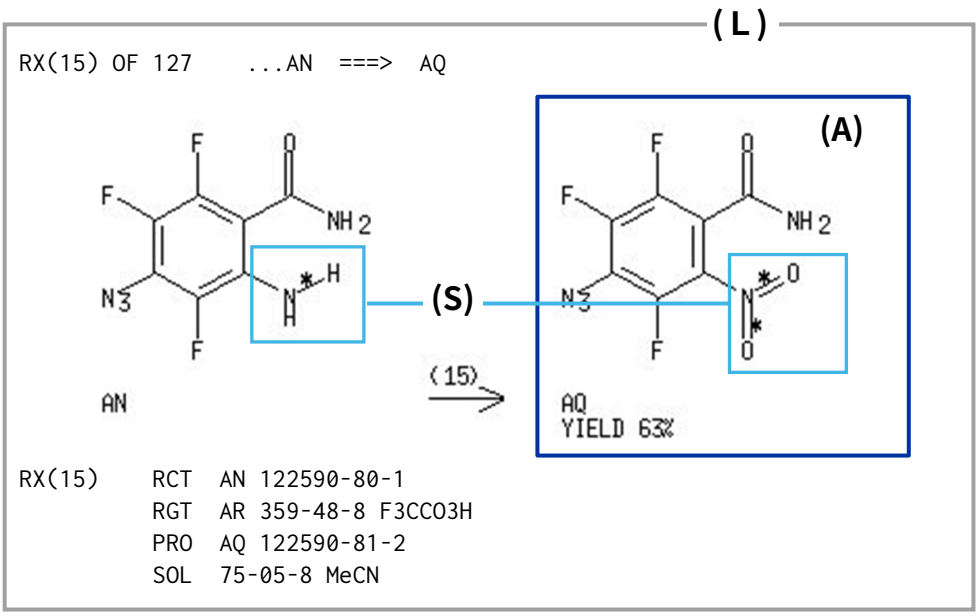
- ペルオキシ酸基を持つ試薬を用いる反応。ただし、反応物中のアジド基は変化しない反応

```
=> 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。

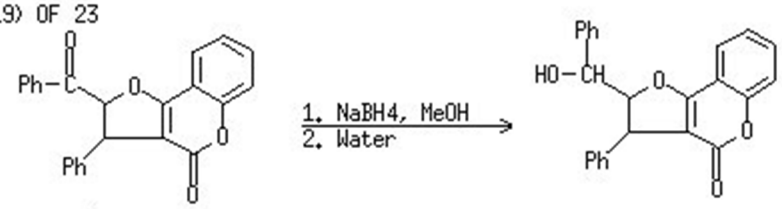
AND 演算子

- 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。

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

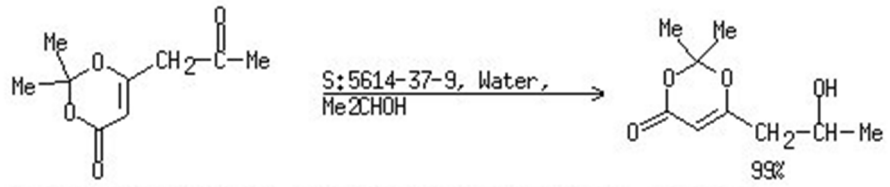
```
=> FILE CASREACT                                          ← CASREACT に入る

=> S LACTONE/FG.NON (L) (SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM (S) KETONES/FG.RXN)
L1        2761 LACTONE/FG.NON (L) (SECONDARY ALCOHOL/FG.FORM (S) KETONES/FG.RXN)

=> S L1 (L) 1/NS                                          ← 一段階反応に限定する
L2        2482 L1 (L) 1/NS

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

L2   2482 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 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
```

RX(19) OF 23




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

L2   2482 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

TI   Targeted covalent inhibition of telomerase
RX
```

RX(2) OF 28



NOTE: biotransformation, enzymic (KRED-P01-C01 used), phosphate buffered solution used, stereoselective

```
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         1207 L2 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE

=> D SCAN

L3   1207 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

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

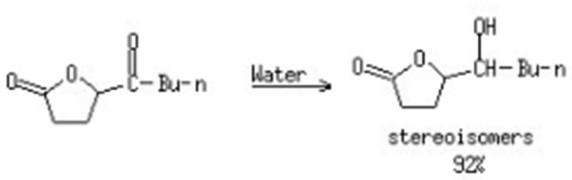
RX(7) OF 21



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           57 L3 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE

=> D SCAN

L4   57 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 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

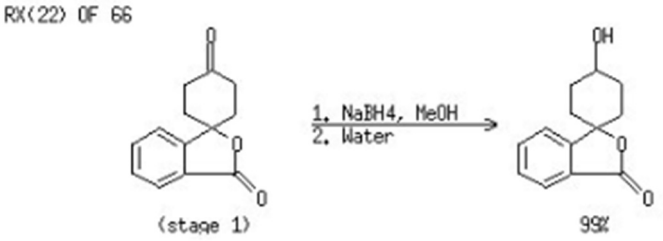
- NOTE フィールド中の用語は、著者の記述に基づき収録されているため、網羅性はない。また、用語が統制されていないため、使用する場合はトランケーションや同義語を利用して、広く検索する。必要に応じて、基本索引も併用するとよい。

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      1559 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  1559 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

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

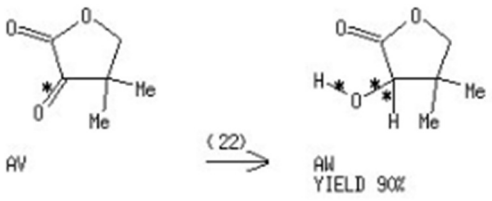



```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L5 AND P/DT
L6          460 L5 AND P/DT
```

← CAplus 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 22

L15  ANSWER 22 OF 460  CASREACT  COPYRIGHT 2026 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, Xinhu
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

主な検索フィールド

反応情報

検索フィールドなど		内容
	/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
CAS RN® 検索	/RCT	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）
	/CAT	触媒
	/SOL	溶媒
構造検索	ロール	反応物 試薬 生成物 反応物/試薬 任意のロール（ロール指定せず）
	反応部位	結合が完全に変化 結合が部分的に変化 結合が完全または部分的に変化 結合は変化しない 反応部位は特に指定しない
	マッピング	反応物と生成物中の対応する原子の指定
官能基検索	/FG.RXN	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	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。

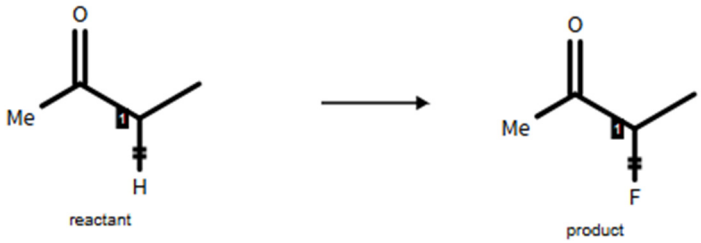
練習問題

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.75

2. 下記のフッ素化の反応を検索する。

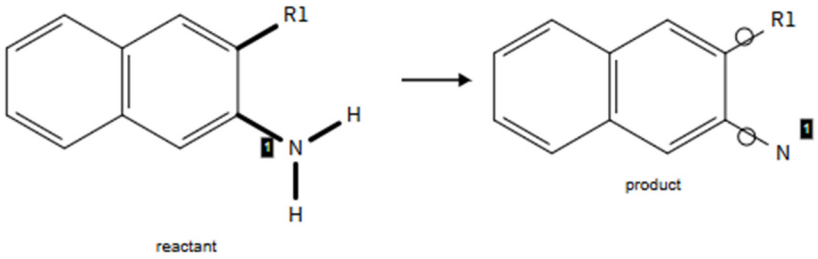


(作図のヒント)
- 反応ロール、反応サイト、反応部位を指定する。
- さらに、下記の条件で絞り込む。
  - ① 収率 80 % 以上もしくは収率情報のない反応に限定
  - ② 特許に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する。

(ヒント)
① 、② の限定の際、演算子に注意する。

回答は p.76

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. 78

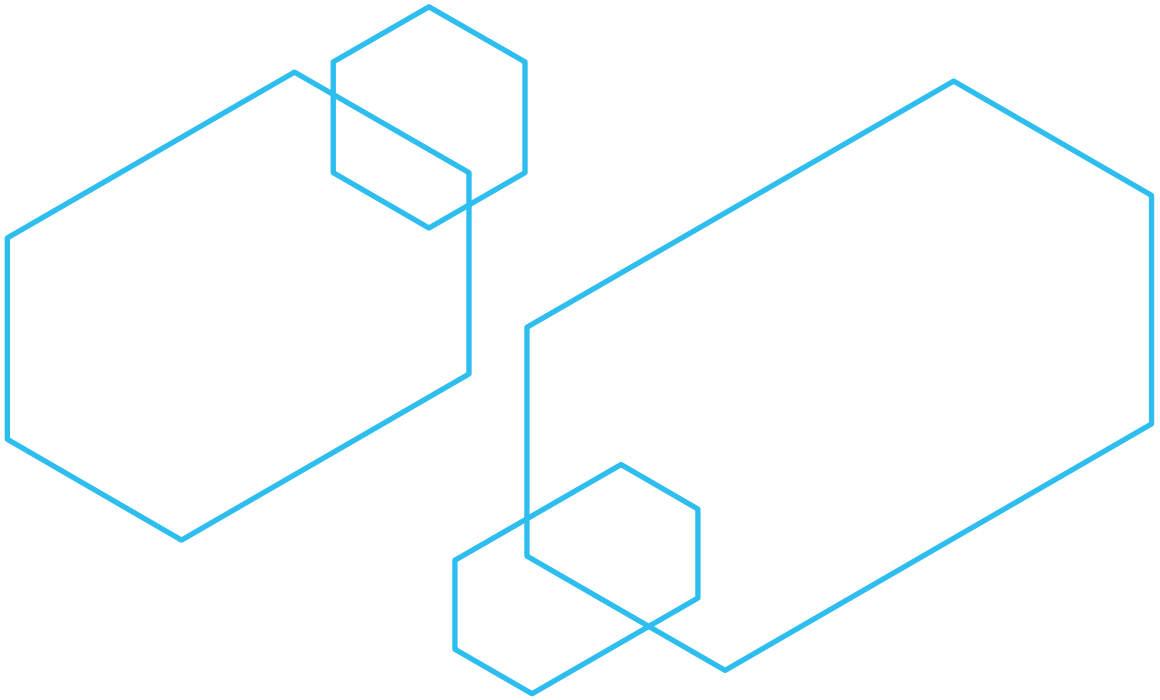
4. 二トリルオキシド (NITRILE OXIDE) から 1,2-C_3NO 環を合成する反応を検索する。さらに、下記の条件で絞り込む。
   ① 収率 80 % 以上の反応に限定
   ② 1 段階反応に限定

(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.80

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 REGISTRY/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

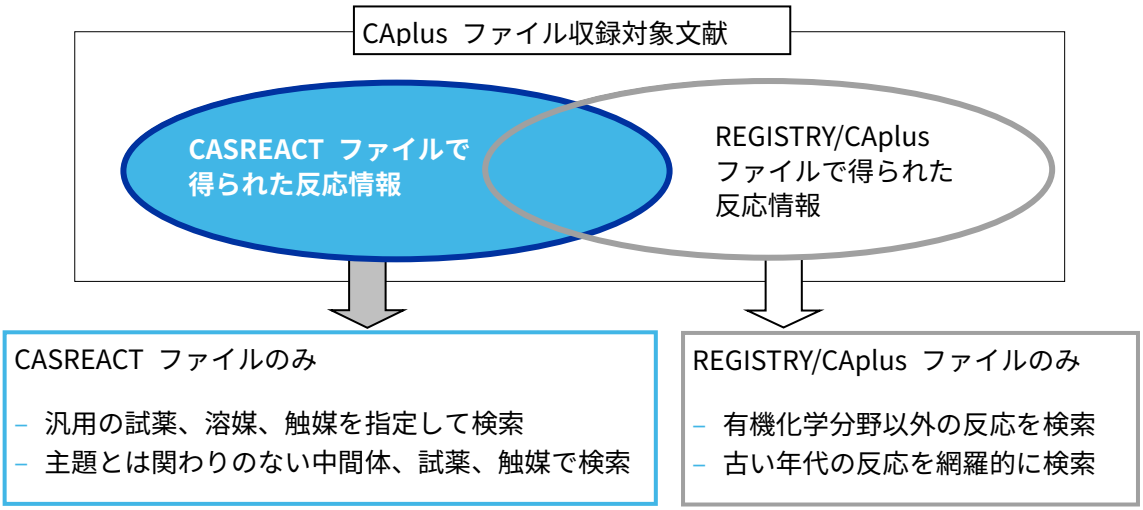
(2026 年 9 月現在)

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 : 265 万件以上 反応 : 1 億 6,500 万件以上	文献 : 7,080 万件以上 (PREP (製造) の CAS ロールが付与されている文献数は 979 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	– 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	– 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 REGISTRY/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の分野の反応情報や 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。

CAplus 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

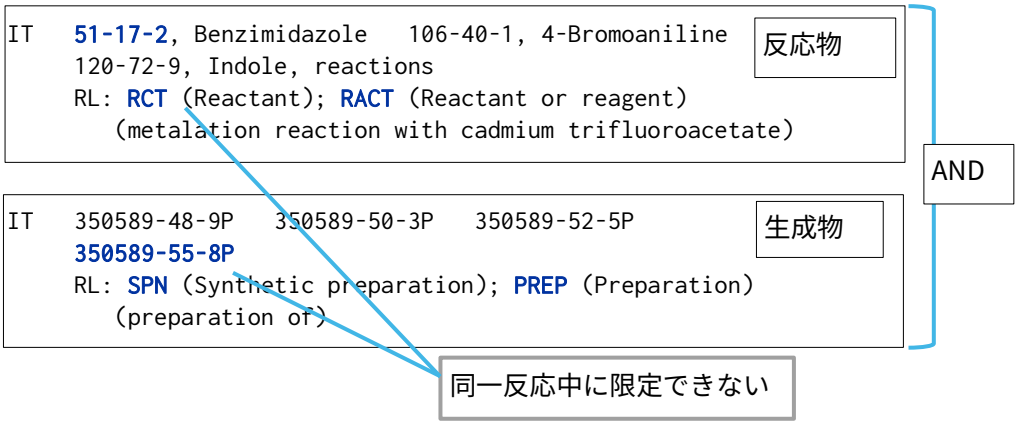
- 反応情報検索に用いる主な CAS ロール

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)	

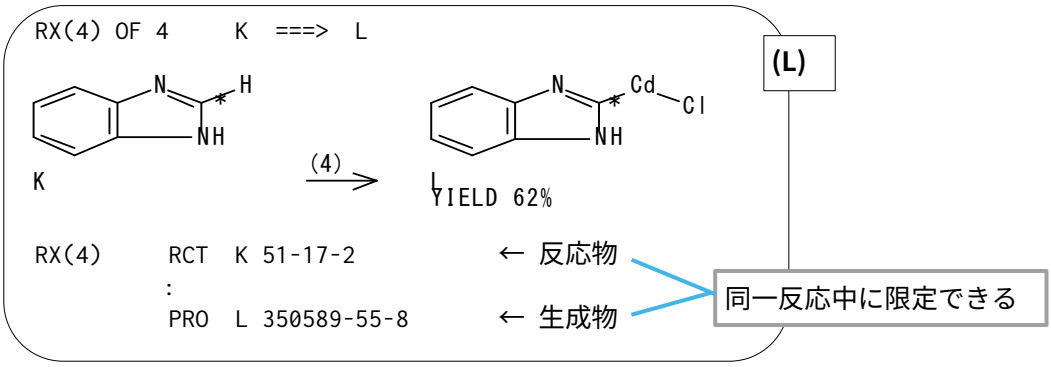
- CAS ロールで限定すると、自動的に付与年代以降に限定される。

- 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



- CASREACT ファイル



REGISTRY/CAplus ファイル、CASREACT ファイルの回答表示

- REGISTRY/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。

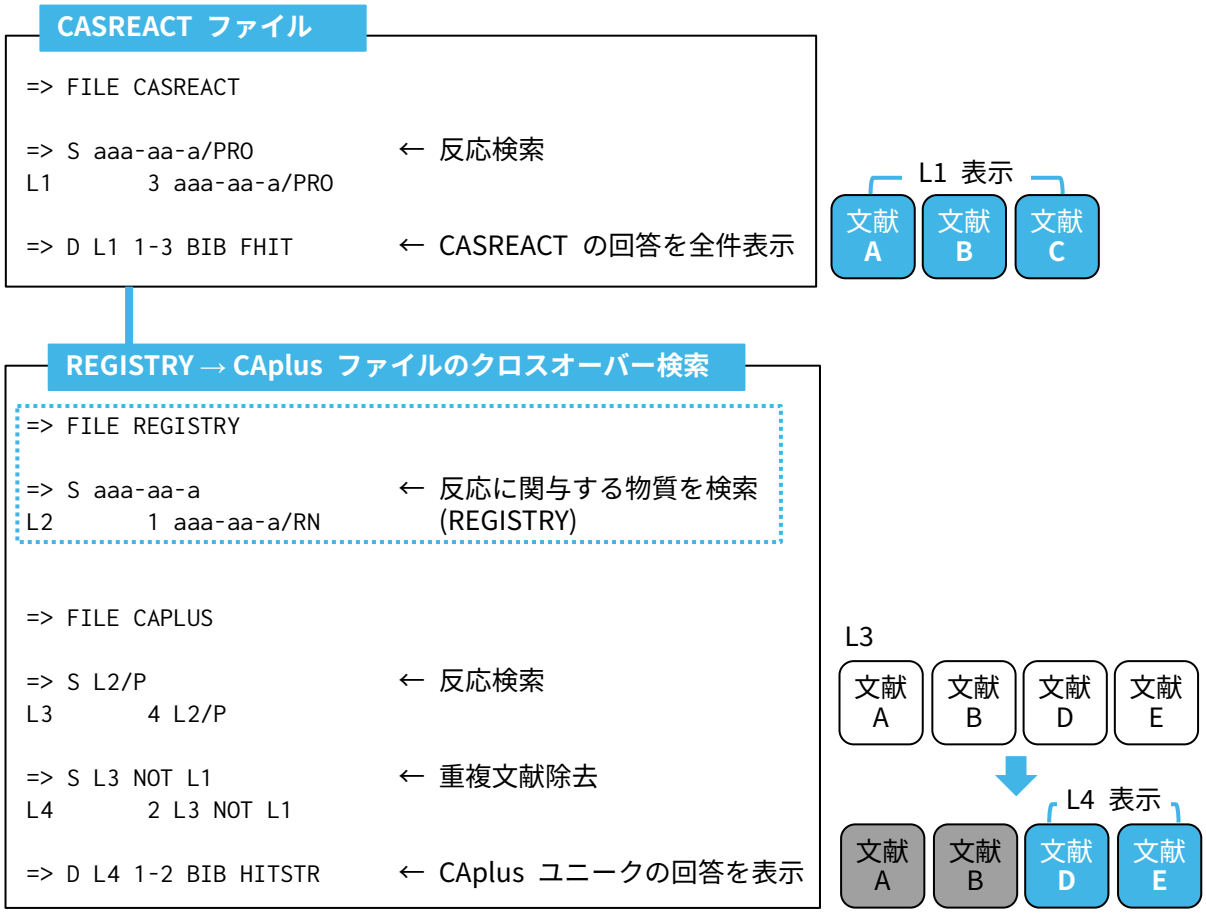
- L 番号を用いたクロスオーバー検索

  - 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



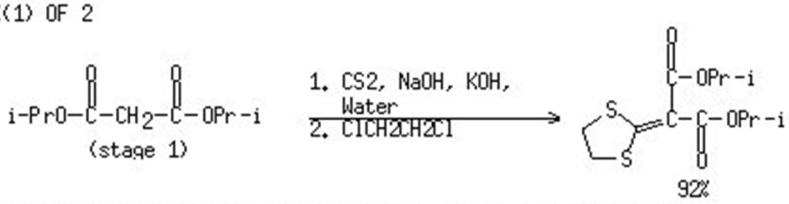
検索例 ： イソプロチオラン（CAS RN® 50512-35-1）の合成反応を検索する。

> 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 2026 ACS on STN

TI    New technologies for production process of isoprothiolane
RX
```

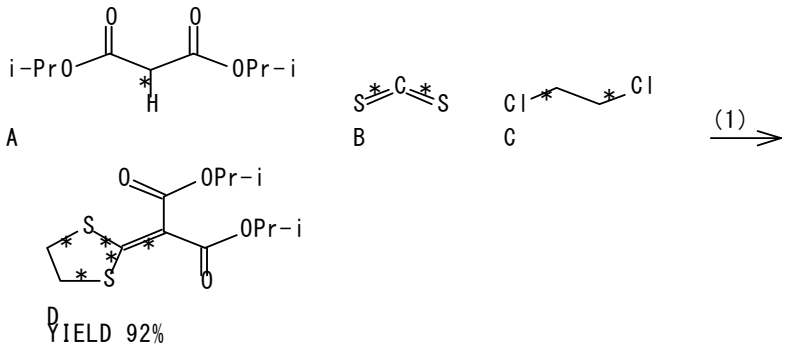
RX(1) OF 2



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 2026 ACS on STN
AN    155:300945  CASREACT Full-text
TI    Process for preparation of isoprothiolane
IN    Li, Jirui; Jiao, Xingzhong; Yu, Lianying; 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
```



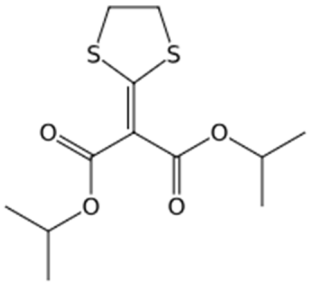

```
RX(1)     RCT  A 13195-64-7, B 75-15-0

            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
                 :
```

– 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 50512-35-1                           ← CAS RN® で検索
L2           1 50512-35-1
               (50512-35-1/RN)
```

表示は任意

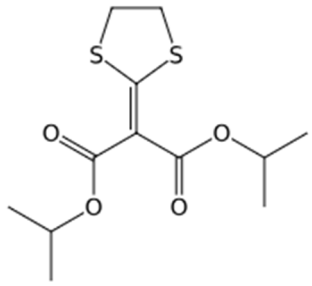
```
=> D

L2   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2026 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

2181 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
424 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
2263 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

```
=> FILE CAPLUS                ← CAplus 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          37 L2/P

=> S L3 NOT L1                ← CASREACT ファイルで得られた回答 (L1) を除く
L4          34 L3 NOT L1

=> D BIB HITSTR 1-34          ← 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 2 OF 34  CAPLUS  COPYRIGHT 2026 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 4 OF 34 CAPLUS COPYRIGHT 2026 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

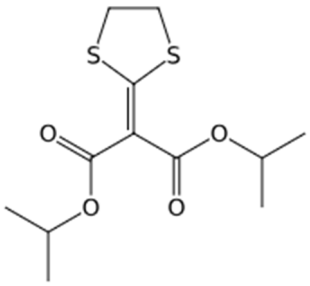
PI

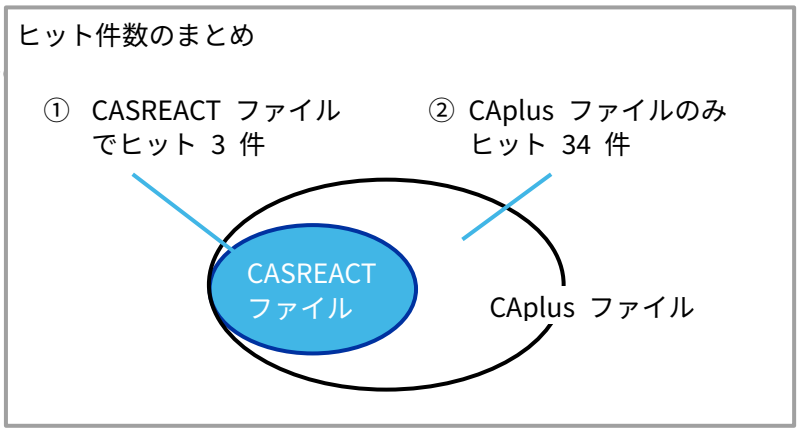
PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
IN 202221023880	A	20220819	IN 2022-21023880	20220422
IN 505130	B	20240202		

PRAI IN 2022-21023880 20220422
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 prepg. activated carbon nanoparticle and its application thereof)
RN 50512-35-1 CAPLUS
CN Propanedioic acid, 2-(1,3-
ester (CA INDEX NAME)





<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, Damien
PA    Elf Atochem S.A., Fr.
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[illegible]74
FAN.CNT 1
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
```

最終権利者

対応特許の IPC (/IPC) は表示できず検索もできない

関連特許ファミリー数

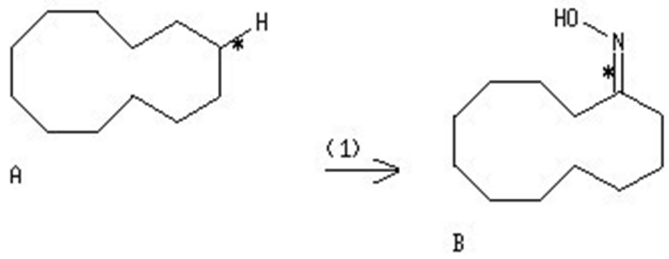
対応特許
(ベーシック特許以外の /PD, /PY, /PN, /AD, /AY, /AP など)

CAS 登録番号 (CAS RN®) とロール

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。

```
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

CASREACT ファイル

```
=> FILE CASREACT

=> S aaa-aa-a/PRO          ← 反応検索
L1        3 aaa-aa-a/PRO
```

L1: 文献 A / 文献 B / 文献 C

REGISTRY → CAplus ファイルのクロスオーバー検索

```
=> FILE REGISTRY

=> S aaa-aa-a              ← 反応に関与する物質を検索
L2        1 aaa-aa-a/RN       (REGISTRY)


=> FILE CAPLUS

=> S L2/P                  ← 反応検索
L3        4 L2/P

=> S L3 OR L1              ← 2 ファイルの回答をまとめる
L4        5 L3 OR L1

=> D L4 1-5 BIB HITSTR     ← 回答を表示
                              * 書誌情報などで絞り込み可能
```

L3: 文献 A / 文献 B / 文献 D / 文献 E

L4 表示

L4: 文献 A / 文献 B / 文献 C / 文献 D / 文献 E

CASREACT ファイルでのみヒットしたレコードだが、CAplus ファイルで表示

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          1409 121-73-3/RCT

=> S 108-42-9/PRO                   ← 生成物を検索
L2           829 108-42-9/PRO

=> S L1 (L) L2                      ← 同一反応中に限定
L3           707 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          2014 L4/RCT

=> S L5/P                           ← 生成物に関する文献を検索
L7          1265 L5/P

=> S L6 AND L7                      ← 同一反応中に限定できないため AND 演算
L8           889 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           707 L3

=> S L8 OR L9                       ← CASREACT ファイルの反応情報を合わせる
L10          906 L8 OR L9

=> S L10 AND B01J/IPC               ← IPC で検索する
L11          100 L10 AND B01J/IPC
```

```
=> D BIB HITIND 1-100                ← BIB HITIND 表示形式で表示する
        :
L11  ANSWER 11 OF 100  CAPLUS  COPYRIGHT 2026 ACS on ST
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
     CN 119746913         B    20260407  Chinese    PDF
PI
     PATENT NO.          KIND  DATE        APPLICATION NO.         DATE
     --------------      ----  --------    ---------------------   --------
     CN 119746913         A    20250404    CN 2024-11969069        20241230
     CN 119746913         B    20260407
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 13 OF 100  CAPLUS  COPYRIGHT 2026 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
```

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

PA Xiangtan University, Peop. Rep. China
UO XIANGTAN UNIVERSITY
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 82 OF 100 CAPLUS COPYRIGHT 2026 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

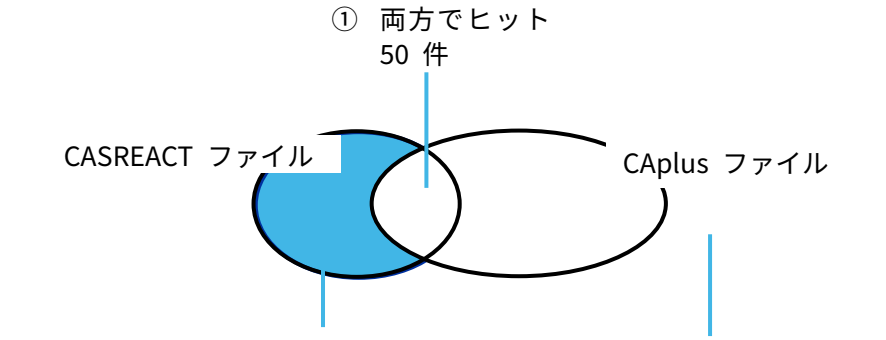
PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
CN 101735073	A	20100616	Chinese	PDF

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。

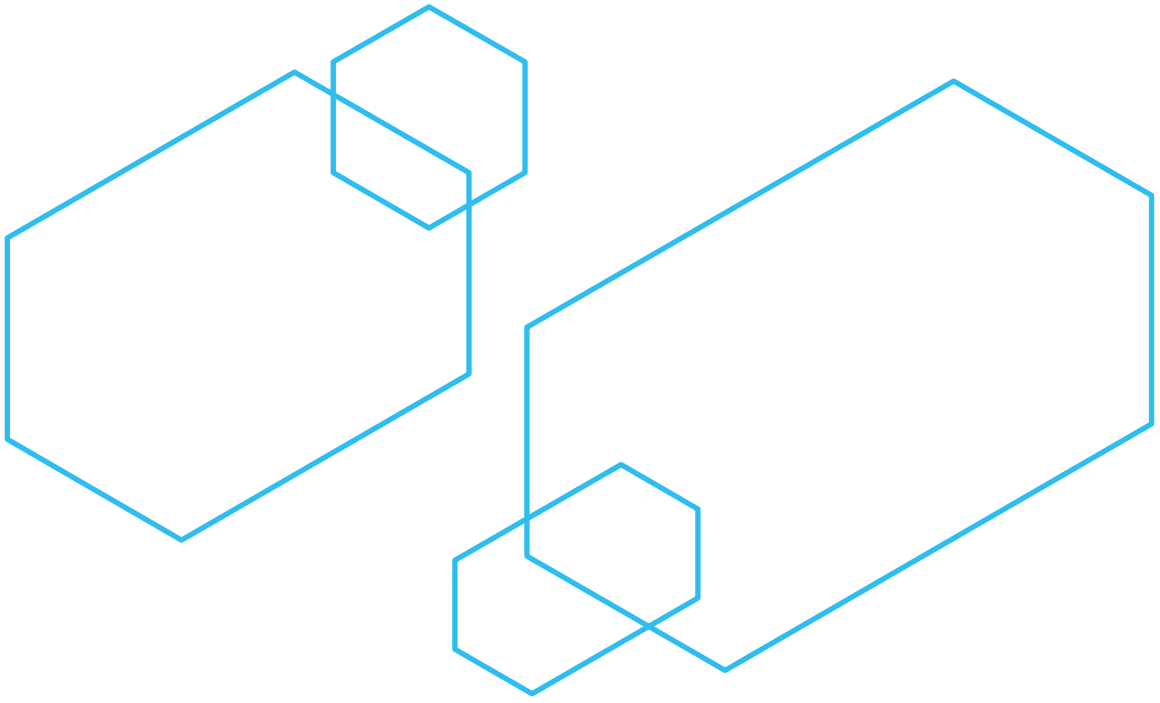
練習問題

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. 81

練習問題

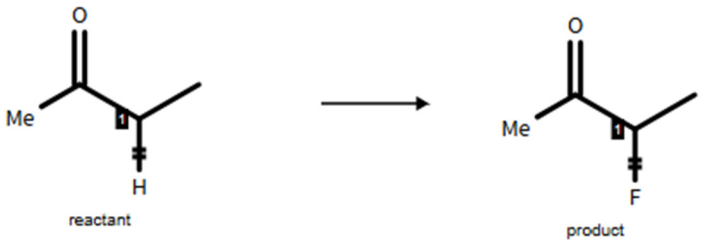


練習問題

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)

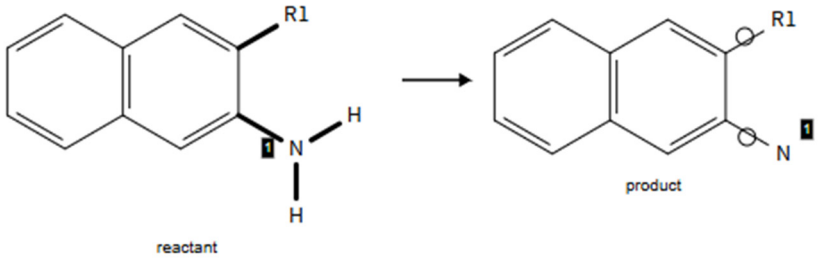
練習問題 2 ： 下記のフッ素化の反応を検索する。



(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-C_3NO 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。

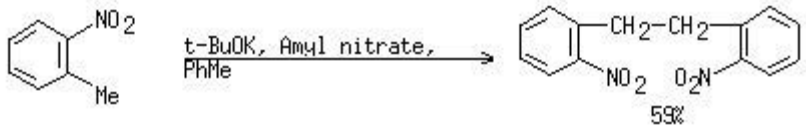
練習問題 5 ： CASREACT ファイルと CAplus ファイルで、6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索する。

(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。

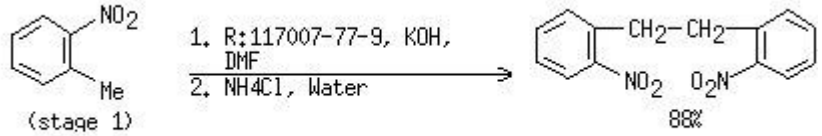
練習問題 1

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

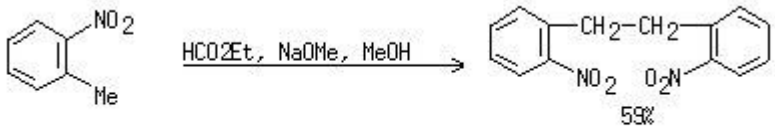
```
=> FILE CASREACT

=> 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          22 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   22 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 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   22 ANSWERS   CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN

TI   Synthesis of biologically active seven-membered-ring heterocycles
RX
     RX(18) OF 67
```



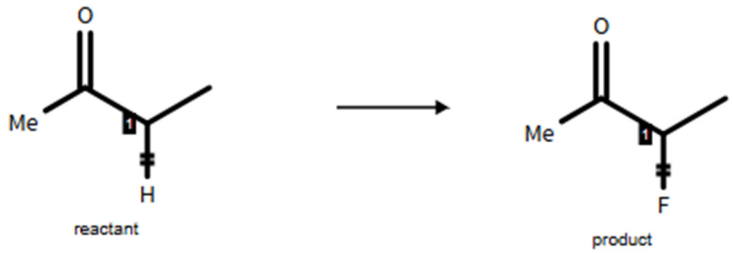

```
     (stage 1)
     NOTE: 92% reactant (pyrazole derivative) also recovered, product
           depends on reaction conditions

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

=> D                                     ← デフォールトの表示形式で表示

L1   ANSWER 1 OF 22  CASREACT  COPYRIGHT 2026 ACS on STN
RX
     RX(1) OF 6
```




```
     REF:  Faming Zhuanli Shenqing, 122167350, 09 Jun 2026
     NOTE: petroleum ether used, optimized on time, temperature,
           stoichiometry of agent, catalyst and solvent, optimization study
     CON:  STAGE(1) 2 hours, 5 - 7 deg C; 8 hours, 5 - 7 deg C
```

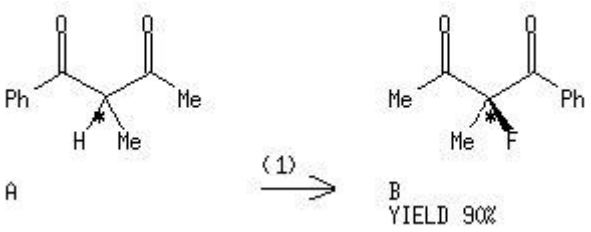
練習問題 2

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:      105,611 TO     114,509
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          147 SEA SSS FUL L1 (      778 REACTIONS)

=> S L3(A)(80<=YD OR NONE/YDT)                      ← 収率で限定
L4          94 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 2026 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
     JP 7783595           B2   20251210
PRAI JP 2021-196820             20211203
```

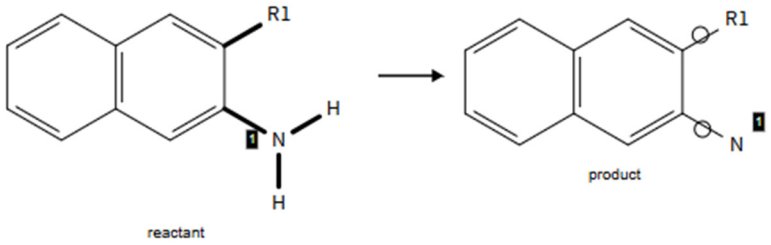
RX(1) OF 27 A ===> **B**...



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

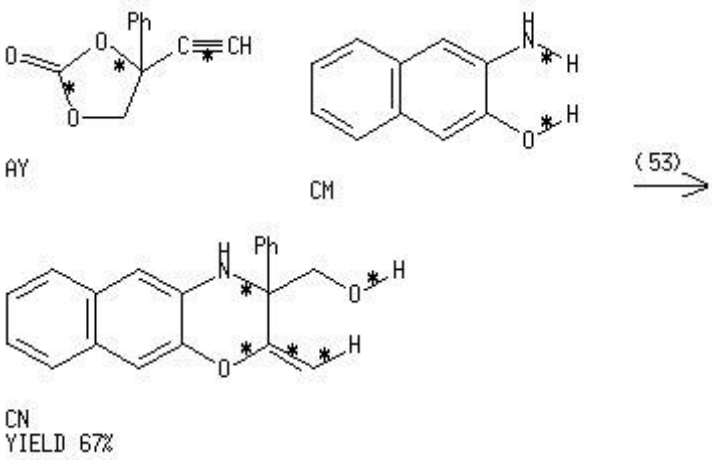
練習問題 3

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            9 SEA SSS SAM L1 (       18 REACTIONS)

=> S L1 FUL                               ← フルファイル検索
          :
100.0% DONE      41,008 VERIFIED     951 HIT RXNS (        31 INCOMP)         194 DOCS
                                                ↑
                                          Verification が不完全な回答が含まれていた
L3          194 SEA SSS FUL L1 (      951 REACTIONS)

=> S L3/COM                               ← Verification が完全な回答に限定
L4          188 L3/COM

=> S L4(L)ANY/CAT                         ← 触媒反応に限定
L5           77 L3(L)ANY/CAT

=> S L5(L)1/NS                            ← 一段階反応に限定
L6           42 L4 (L) 1/NS

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

L6   ANSWER 2 OF 42  CASREACT  COPYRIGHT 2026 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**

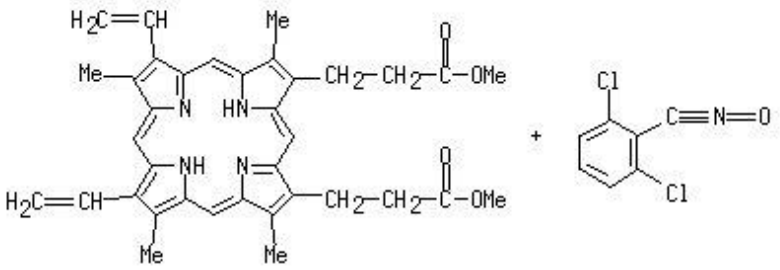
RE.CNT 36 THERE ARE 36 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

練習問題 4

ニトリルオキシド（NITRILE OXIDE）から、1,2-C_3NO 環を合成する反応を検索

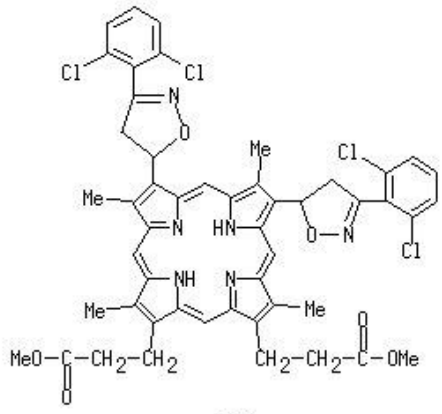
```
=> FILE CASREACT

=> S (NITRILE OXIDE/FG.RXN(S)1,2-C3NO/FG.FORM)            ← 官能基検索を実行する
L1          800 (NITRILE OXIDE/FG.RXN(S)1,2-C3NO/FG.FORM)

=> S L1(L)80<=FG.YD                                       ← 収率で限定
L2          362 L1(L)80<=FG.YD

=> S L2(L)1/NS                                            ← 反応ステップ数で限定
L3          294 L2(L)1/NS

=> D BIB FCRD 4                                           ← BIB FCRD 表示形式で表示

L3   ANSWER 4 OF 294  CASREACT  COPYRIGHT 2026 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



RX

RX(3) OF 6



82%

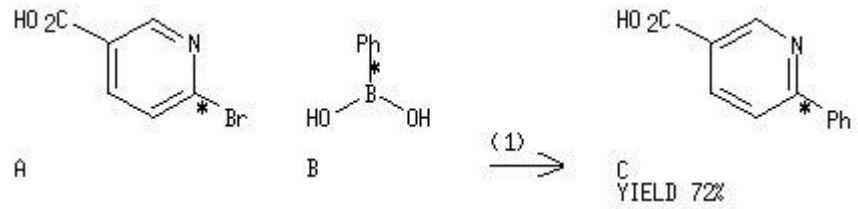
NOTE: optimization study, optimized on stoichiometry of agent and solvent
CON: 8 hours, 40 deg C

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          24 29051-44-3/PRO

=> D BIB FHIT 1-24                 ← 全件を BIB FHIT 表示形式で表示
:
L1   ANSWER 2 OF 24  CASREACT  COPYRIGHT 2026 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...
```

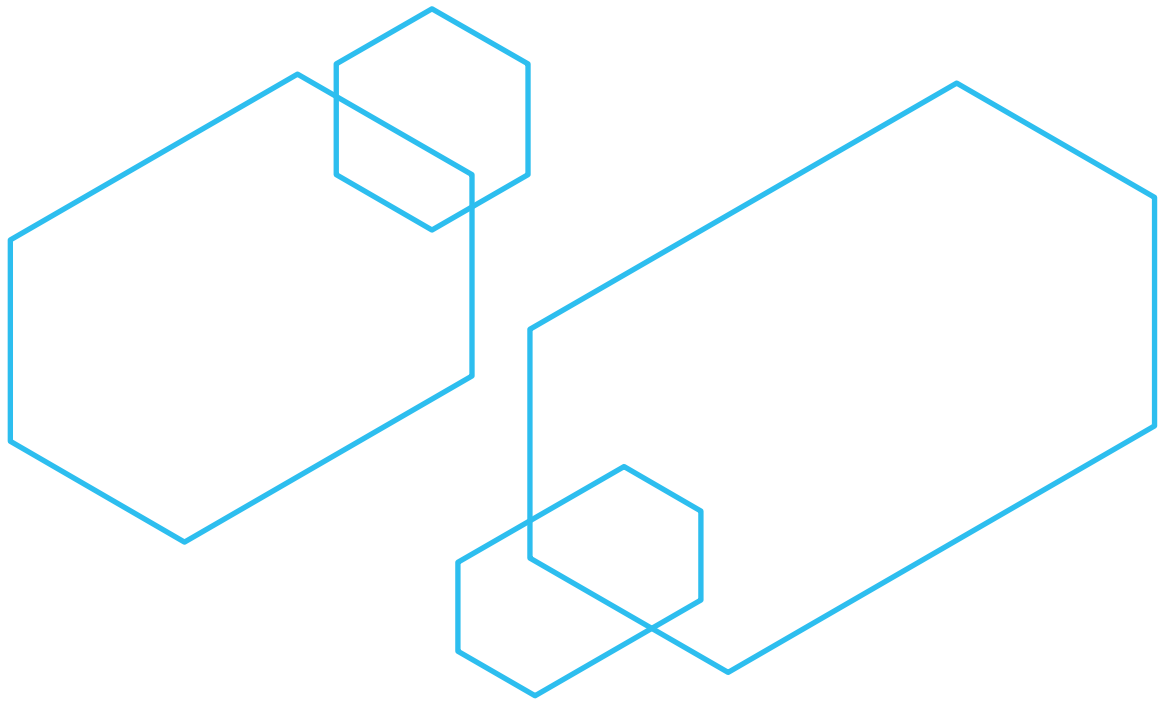



```
RX(1)      RCT  A 6311-35-9, B 98-80-6
           RGT  D 584-08-7 K2CO3
           PRO  C 29051-44-3
           CAT  14221-01-3 Pd(PPh3)4
           SOL  7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH, 108-88-3 PhMe
           CON  overnight, reflux
RE.CNT  26    THERE ARE 26 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD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

:
```

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
             24 L1
L4           16 L3 NOT L1

=> D BIB HITRN 1-16                ← BIB HITRN 表示形式で全件を表示

L4   ANSWER 1 OF 16  CAPLUS  COPYRIGHT 2026 ACS on STN
AN   2026:1613042  CAPLUS Full-text
TI   Decarboxylative arylation and alkoxylation of pyridine-2-carboxylic acid
     N-oxide derivatives via electrophilic carbene: access to lucidimine E and
     australine
AU   N., Pradeep; Mhaske, Santosh B.
CS   Division of Organic Chemistry, CSIR-National Chemical Laboratory
     (CSIR-NCL), Pune, 411008, India
SO   Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom) (2026) Ahead of Print
     CODEN: CHCOFS; ISSN: 1359-7345
DOI  10.1039/d6cc01865c
PB   Royal Society of Chemistry
DT   Journal
LA   English
IT   29051-44-3P
     RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
        (prepn. of (aryl/alkoxy)azaarenes via decarboxylative
        arylation/alkoxylation of pyridine carboxylic acid oxides with
        arenes/cyclic ethers)
RE.CNT  48    THERE ARE 48 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
              ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT


L4   ANSWER 2 OF 16  CAPLUS  COPYRIGHT 2026 ACS on STN
        :
```

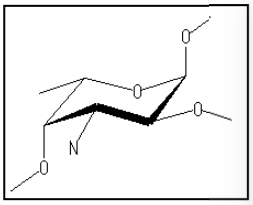
APPENDIX

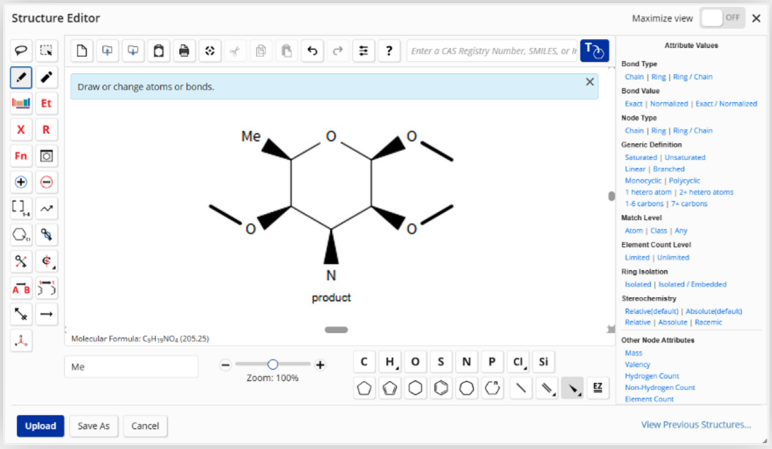


CASREACT ファイル - 構造検索時の注意

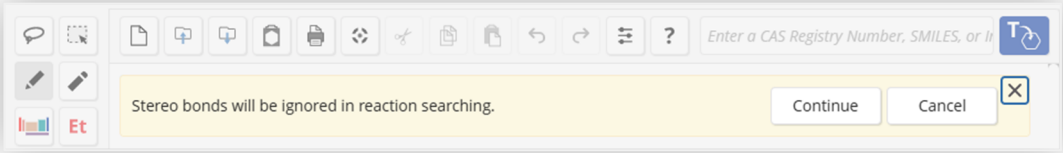
CASREACT ファイルでは、立体構造検索はできない。

- 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





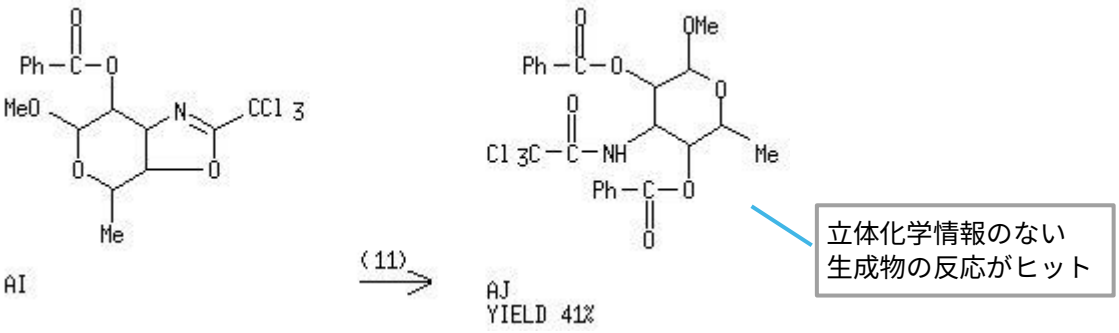
  - Upload ボタンをクリックすると、Stereo bonds will be ignored in reaction searching のメッセージが表示される。そして、Continue をクリックすると立体情報を考慮しない構造検索が実行される。



- 上記構造質問式でヒットする反応の例 (FHIT 表示形式)

例 1:

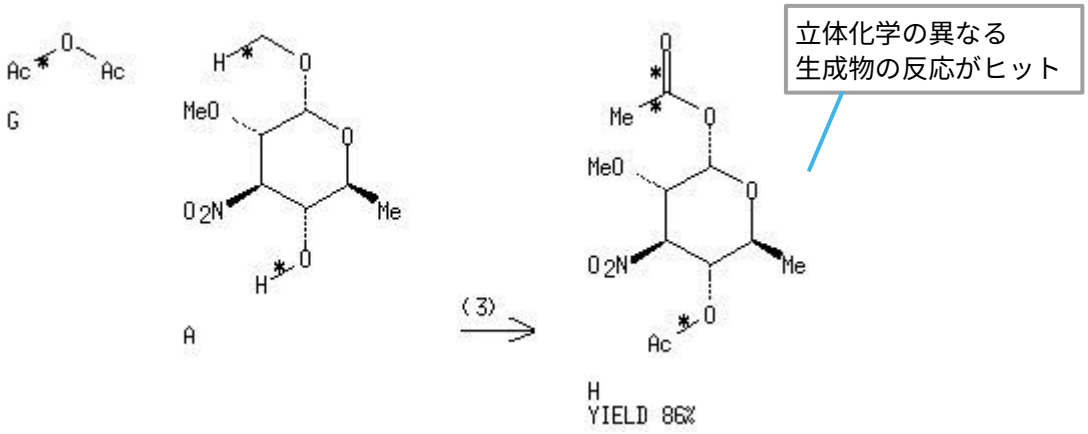
```
RX(11) OF 23     ...AI   ===>  AJ
```




```
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 Prirodnykh 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 Kogaku 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 IP Finder, powered by STN™ 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**

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.

JAICI 化学情報協会 | CAS A division of the American Chemical Society