

収録範囲	有機化学および無機化学分野		
	<ul style="list-style-type: none"> ・ 化学的データ ・ 電気化学的作用 ・ 電気的および磁気的性質 ・ 物質同定情報 ・ 物質組成データ ・ 多成分系データ ・ 光学的性質 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 特許情報 ・ 薬理学および生態学的データ ・ 物理的および機械的性質 ・ 反応データ ・ 安全性データ ・ スペクトルデータ 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 凝集状態 ・ 構造およびエネルギーパラメータ ・ 熱力学的性質 ・ 輸送現象
ファイル種類	化学物質データベース (数値, 構造)		
特徴	アラート (自動 SDI 検索)	利用不可	
	CAS 登録番号	<input checked="" type="checkbox"/> ページイメージ	<input type="checkbox"/> STN AnaVist <input type="checkbox"/>
	Keep & Share	<input type="checkbox"/> 中間一致・ 後方一致検索	<input type="checkbox"/> STN Easy <input type="checkbox"/>
	練習用ファイル	<input type="checkbox"/> 構造図	<input checked="" type="checkbox"/> STN Viewer <input type="checkbox"/>
レコード内容	<ul style="list-style-type: none"> ・ 化学物質単位のレコードには、Handbook of Organic Chemistry by Friedrich Beilstein および 1771 年以降の有機および無機化学分野の主要雑誌から厳密に検討、評価された文献情報を収録。 ・ 特許収録範囲：国際特許分類 (IPC), 機関/国により選択, 1771~1960, 1976~. ・ 特定物質の構造と物理的, 化学的データ, 薬理学および生態学的データ。 ・ 特許情報 (特許発行日, 発明者, 特許記載位置など)。 ・ 注釈などがドイツ語で記述されている場合があります。 		
レコード数	19,400,000 物質レコード (2014 年 8 月)		
収録年代	1771 年以降		
更新頻度	年 4 回		
言語	英語		
データベース 製作者	Elsevier Information Systems GmbH Theodor-Heuss-Allee 108 60486 Frankfurt am Main Germany Phone: +49 69 5050 4252 Fax: +49 69 5050 4254	著作権保有者:	Elsevier Properties SA Espace de l'Europe 3 CH-2000, Neuchâtel Switzerland
データベース 提供者	FIZ Karlsruhe P.O. Box 2465 76012 Karlsruhe Germany Phone: +49-7247-808-555 Fax: +49-7247-808-259 E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de		

ヨーロッパ
STN カールスルーエ

FIZ Karlsruhe
P.O. Box 2465
76012 Karlsruhe
Germany
Phone: +49-7247-808-555
Fax: +49-7247-808-259
E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de
Internet: www.stn-international.de

日本
STN 東京

化学情報協会
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
: 0120-151-462 (上記以外)
Fax: 03-5978-4090
E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)
customer@jaici.or.jp (上記以外)
Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ
STN コロンバス

CAS
P.O. Box 3012
Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A.
CAS Customer Care:
Phone: 800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (worldwide)
Fax: 614-447-3751
E-mail: help@cas.org
Internet: www.cas.org

収録源	<ul style="list-style-type: none">• 化学分野の雑誌• Handbook of Organic Chemistry (by F. Beilstein)
検索補助 資料	<ul style="list-style-type: none">• 講習会テキスト https://www.jaici.or.jp/seminar/text.php• STN 技術資料 http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_01.html• オンラインヘルプ => HELP DIRECTORY ですべての利用可能なヘルプメッセージが表示されます• STNGUIDE ファイル STN の各ファイルの最新版サマリーシートの全情報をオンラインで参照できます
利用可能な クラスター	<ul style="list-style-type: none">• CASRNS• NUMERIC• STRUCTURE

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

<http://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/db.html>

検索フィールド

このファイルには後方一致検索可能なフィールドはありません。

物質同定情報

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
なし または/BI	基本索引 ・物質同定情報中 (レコード番号 (AN), Autonom 名 (AUN), ベーシック優先 CAS 登録番号 (BPR), 化学物質名 (CN), 組成物: 成分名称 (COMPN), 組成物: 成分レコード番号 (COMPAN), フラグメント分子式 (FMF), 分子式 (MF), CAS 登録番号 (RN)) ・物性データ中 (xx. KW フィールドからの切出し語, CDER, INP, CDER. COM, RSTR. PA, XREF. CN)	S ETHYL S C106H146036 S 8086664	各フィールド コード ¹⁾
/BIPED	薬理学および生態学的データの基本索引 (すべてのPEDフィールド: BIO, BIOD, COEV, ECDH, ECDP, ECTD, ECTOX, EOD, EXCA, PHARM, USCからの切出し語)	S (AQUA? TOX?)/BIPED	BIO, BIOD, COEV, ECDH, ECDP, ECTD, ECTOX, EOD, EXCA, PHARM, USC
/AINCHI	InChIKey	S WMZNGTSLFSJHMZ-KZFATGLACB /AINCHI	AINCHI
/AKW (/PH)	キーワード中に収録されている物性名	S CHEMICAL SHIFTS/AKW	xx. KW
/AN	レコード番号	S 1915876/AN	AN
/ATC	原子数 ²⁾	S 34-36/ATC	FMF, MF
/BPR	ベーシック優先 CAS 登録番号	S 106-24-1/BPR	BPR
/CHA	電荷 ²⁾	S L1 AND -1<CHA	LSF
/CN	化学物質名	S CHOLESTEROL/CN	AUN ³⁾ , CN
/CNS	化学物質名称セグメント	S CHOLESTERYL/CNS	CN
/COMPAN	組成物: 成分レコード番号 ²⁾	S 5811/COMPAN	COMPAN
/COMPC	組成物: 成分濃度	S 85?/COMPC	COMPC
/COMPN	組成物: 成分名称	S POLYVINYLPIRROLIDONE/COMPN	COMPN
/CTYPE	化学物質タイプ	S ETHYLENE/CNS AND POLYMER?/CTYPE	CTYPE
/DED	データ入力日	S 1990?/DED S 2001/07/25/DED	DED
/DUPD	データ更新日	S 2011/03/23/DUPD	DUPD
/ELC	元素数 (全体の) ²⁾	S 5/C AND 5/ELC	FMF, MF
/ELR. XX	元素比	S 2/ELR. CH AND 0.5/ELR. CO	MF
/ELS	元素記号	S 0/ELS AND SE/ELS	MF

(続く)

物質同定情報 (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/FA /FAN /FMF /FNA /INCHI	フィールドの存在 ⁴⁾ フラグメントレコード番号 ²⁾ フラグメント分子式 フィールドの非存在 標準 InChIKey	S ISOELECTRIC POINT/FA S 1073/FAN S C6H12/FMF S ALCOHOL/CNS AND BP/FNA S WMZNGTSLFSJHMZ-UHFFFAOYSA-N /INCHI	FA ⁵⁾ FAN FMF, MF 表示されない INCHI
/LB /LSF /MARKREF /MF /MW または/FW /NF /PG /RN /UP /元素記号	物質の記載位置 示性式 関連マルクレーシュ構造番号の数 分子式 分子量 ²⁾ (分子式量) フラグメントの数 ²⁾ 周期律グループ CAS 登録番号 STN データ更新日 元素数 (各元素の) ²⁾	S LINE16/LB S CH20AL2MG8023/LSF S 3/MARKREF S C4H9N5. H304P/MF S 3000/MW S 3/NF S (A3 AND A6)/PG S 100-03-8/RN S L1 AND 20120101/UP S 5/CL	LB LSF MARKREF MF MW MF 表示されない RN 表示されない MF

- 1) キーワード (KW) の付くすべてのフィールドコードを含みます。
- 2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。
- 3) CN フィールドは化学物質名 (CN) と Autonom 名 (AUN) を含みます。
- 4) 表示フィールドがレコードに存在するかを調べるために使用します。
- 5) Display FA はレコードのすべての表示可能フィールドコードを表示します。

書誌情報

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/AU /DT /ISN /JT /JTW	著者名 ¹⁾ 資料種類 ¹⁾ 国際標準(資料)番号 (CODEN) ¹⁾ 雑誌名 ¹⁾ CODEN のない雑誌名	S SHARPLESS?/AU S PATENT/DT S JACSAT/ISN S TETRAHEDRON/JT S "JOURNAL OF THE SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS"/JTW	表示されない
/LA /PA /PN /PY /URES	言語 (コードとテキスト) 特許出願人 ¹⁾ 特許番号 ¹⁾ 発行年 ^{1), 2)} 出典 (非標準形式)	S JAPANESE/LA S BASF/PA S DE1000154/PN S JACSAT/ISN AND 2000/PY S PERKIN?/URES	表示されない

- 1) 物質レコード中の書誌情報を限定したい場合は検索フィールドコードに “.SUB” を付加します。
(例:/JT.SUB). また反応データ中の書誌情報を検索したい場合には “.RX” を付加します (例:/AU.RX).
- 2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

■ スーパー検索フィールド

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

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

1) 出典情報は検索語を含むフィールド中に含まれます。

■ 反応データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/BIRX	反応の基本索引 (RX. CAT, RX. CL, RX. COND, RX. PRO, RX. RCT, RX. RGT, RX. SOL, RX. SRCT, RX. SUBJ, RX. TYP, およびすべての 反応関与物質のレコード番号からの 切出し語) ¹⁾	S CONDENSATION/BIRX	RX
/FA. RX	反応フィールドの存在	S REACTION DOCUMENTS/FA. RX	表示されない
/RX. AAN	すべての反応関与物質レコード番号 (RX. PAN, RX. RAN, RX. SRAN, RX. BLA, RX. BLB, RX. BLC, RX. RCAN, RX. CAAN, RX. SOLAN からのレコード番号を含む) ²⁾	S 50000/RX. AAN	RX

(続く)

反応データ (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/RX. BLA	反応物・生成物のレコード番号 (反応分類 Chemical behavior) ¹⁾	S 1073/RX. BLA	RX
/RX. BLB	反応物・生成物のレコード番号 (反応分類 Preparation) ¹⁾	S 1004/RX. BLB	RX
/RX. BLC	反応物・生成物のレコード番号 (反応詳細) ¹⁾	S 1033/RX. BLC	RX
/RX. CAAN	触媒のレコード番号 ^{1), 2)}	S 1073/RX. CAAN	RX
/RX. CAT	触媒 ²⁾	S THIAMINE DIPHOSPHATE/RX. CAT	RX
/RX. CL	反応分類 ²⁾	S MULTI/RX. CL	RX
/RX. COND	その他の条件 ²⁾	S ICEWATER/RX. COND	RX
/RX. ID	反応 ID ¹⁾	S 5418675/RX. ID	RX
/RX. LB	反応記載位置 ²⁾	S METHOD?/RX. LB	RX
/RX. LCN	特許記載位置 ²⁾	S COLUMN/RX. LCN	RX
/RX. MTEXT	多段階反応の詳細 ²⁾	S WATER/RX. MTEXT	RX
/RX. NUMREF	文献数	S 10/RX. NUMREF	RX
/RX. NVAR	反応詳細の数 ¹⁾	S 2/RX. NVAR	RX
/RX. P	圧力 ^{1), 2), 3)}	S 1-25/RX. P	RX
/RX. PAN	生成物のレコード番号 ¹⁾	S 4885620/RX. PAN	RX
/RX. PH	pH値 ^{1), 2)}	S RX. PH<1	RX
/RX. PRO	生成物	S "2-BENZYL-2-METHYL-CYCLOHEXANO NE"/RX. PRO	RX
/RX. PRT	プロトタイプの反応 ²⁾	S CATALYST?/RX. PRT	RX
/RX. RAN	反応物のレコード番号 ¹⁾	S 5026/RX. RAN	RX
/RX. RCAN	試薬のレコード番号 ^{1), 2)}	S 1073/RX. RCAN	RX
/RX. RCT	反応物	S L-PROLINE/RX. RCT	RX
/RX. RGT	試薬 ²⁾	S ACETONE/RX. RGT	RX
/RX. RID	反応詳細 ID ²⁾	S 1000. 2/RX. RID	RX
/RX. RTYP	レコードのタイプ	S FULL REACTION/RX. RTYP	RX
/RX. SKW	反応構造キーワード	S FAILED/RX. SKW	RX
/RX. SNR	ステージ数 ^{1), 2)}	S 2/RX. SNR	RX
/RX. SOL	溶媒 ²⁾	S CH2CL2/RX. SOL	RX
/RX. SOLAN	溶媒のレコード番号 ^{1), 2)}	S 1191/RX. SOLAN	RX
/RX. SRAN	ステージ反応物のレコード番号 ^{1), 2)}	S 742586/RX. SRAN	RX
/RX. SRCT	ステージ反応物 ²⁾	S MALONALDEHYDE/RX. SRCT	RX
/RX. STP	反応数 ^{1), 2)}	S 3/RX. STP	RX
/RX. SUBJ	研究主題 ²⁾	S KINETICS/RX. SUBJ	RX
/RX. T	温度 ^{1), 2), 4)}	S -100 - -10/RX. T	RX
/RX. TI	反応の見出し ²⁾	S ENANTIO?/RX. TI	RX
/RX. TIM	時間 ^{1), 2)}	S 2/RX. TIM	RX
/RX. TXT	反応フルテキスト中のキーワード ²⁾	S CONTROLLED/RX. TXT	RX
/RX. TYP	反応タイプ ²⁾	S POLYMERIZATION/RX. TYP	RX
/RX. YDN	収率 ^{1), 2), 5)}	S 99.99/RX. YDN	RX
/RX. YDO	収率 (光学) ²⁾	S 50 PERCENT EE/RX. YDO	RX
/RX. YDT	収率データ ^{2), 5)}	S "1 gm (38percent)"/RX. YDT	RX
/RX. YPRO	生成物 (反応詳細) ²⁾	S 45?/RX. YPRO	RX

1) 数値演算子による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) QRD 表示形式を用いると、ヒットした反応詳細のみを表示できます。

3) デフォルト単位は Torr です。

4) デフォルト単位はセ氏です。

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

構造検索語

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

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

構造検索のタイプ

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

構造検索の範囲

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

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

化学的データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/CDER /CDER. AN /CDER. COM /CDER. MP	化学的誘導体 誘導体のレコード番号 ¹⁾ コメント 融点 ¹⁾	S HYDRAZONE/CDER S 5845535/CDER. AN S BENZIMIDAZOLE/CDER. COM S 50/CDER. MP	CDER CDER CDER CDER
/INP /INP. COM	天然物からの単離 コメント	S LEAVES/INP S DEXTROROTATORY/INP. COM	INP INP
/PUR	精製 (法)	S ALCOHOL/CNS AND ACETYLATION/PUR	PUR
/RSTR /RSTR. PAAN /RSTR. PA	関連構造 参照のレコード番号 ¹⁾ 参照物質	S CONSTITUTION/RSTR S 1581/RSTR. PAAN S OESTRADIOLDIMETHYLETHER/RSTR. PA	RSTR RSTR RSTR
/XREF. CN /XREF. DTP /XREF. ID /XREF. SO または /OS	相互参照資料 化学物質名称 データタイプ 外部アクセス ID その他の収録源	S N-BENZOYL-4-PIPERIDONE/XREF. CN S 6279685/AN AND IR/XREF. DTP S ALDRICH/XREF. SO AND 250619/XREF. ID S MERCK INDEX/OS	XREF XREF XREF XREF

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

生態学的データ

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/BIO. A /BIO. AR /BIO. BC /BIO. C /BIO. ER /BIO. EX /BIO. H /BIO. LOG /BIO. MAG /BIO. ME /BIO. MON /BIO. MR	生物学的作用 蓄積半減期 蓄積速度定数 生物濃縮係数 (BCF) 濃度 排出速度定数 暴露時間 排出半減期 BCFの対数 生物学的濃縮 媒体 生態検査 方法, 注釈	S 5 /BIO. A S 0.882 PER HOUR/BIO. AR S 0.03/BIO. BC S 0.033 .MY. MOL/L/BIO. C S 1.1 PER DAY/BIO. ER S 5 D/BIO. EX S 28 /BIO. H S 3.1/BIO. LOG S 20/BIO. MAG S FOOD/BIO. ME S LEUKOCYTES/BIO. MON S (FISH(W) BRAIN(W) ACETYLCHOLINESTERASE)/BIO. MR	BIO BIO BIO BIO BIO BIO BIO BIO BIO BIO BIO
/BIO. SP /BIO. T	生物種 温度 ^{1), 2)}	S (SALMO(W) SOLAR)/BIO. SP S 10-15/BIO. T	BIO BIO
/BIOD. AN /BIOD. C /BIOD. COM /BIOD. D /BIOD. DP /BIOD. EX /BIOD. H /BIOD. IN /BIOD. MR /BIOD. T /BIOD. TYP	生分解 分解生成物のレコード番号 ¹⁾ 濃度 コメント 分解速度 分解生成物 暴露時間 半減期 接種物 方法, 注釈 温度 タイプ	S 8612787/BIOD. AN S 1 G/L/BIOD. C S (FURTHER(W) DEGRADATION(W) PRODUCT)/BIOD. COM S 29 PERCENT/BIOD. D S (CARBOXYLATED(W) ALIPHATIC(W) ALCOHOL)/BIOD. DP S 8 W/BIOD. EX S 40 D/BIOD. H S (ACTIVATED(W) SLUDGE)/BIOD. IN S (SEWAGE(W) TREATMENT)/BIOD. MR S 20/BIOD. T S AEROBIC/BIOD. TYP	BIOD BIOD BIOD BIOD BIOD BIOD BIOD BIOD BIOD BIOD

(続く)

生態学的データ (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/COEV. BC	環境への濃縮	S (FAT(W)BASIS)/COEV. BC	COEV
/COEV. CC	バックグラウンド濃度	S 0.0 - 0.48 NG/G DRY WT/COEV. CC	COEV
/COEV. LO	汚染濃度	S LAKE MICHIGAN/COEV. LO	COEV
/COEV. ME	場所	S TOLUENE/CN AND SOIL/COEV. ME	COEV
/COEV. MR	媒体	S (FISH?(S) CAPTURE?(S) APRIL(S) 1996)/COEV. MR	COEV
/COEV. SP	方法, 注釈	S FISH/COEV. SP	COEV
/ECDH. AN	生物種		
/ECDH. AN	非生物的分解, 加水分解	S 647116/ECDH. AN	ECDH
/ECDH. C	分解生成物のレコード番号 ¹⁾	S 0.21 PPM/ECDH. C	ECDH
/ECDH. COM	濃度	S (FURTHER(W) DEGRADATION(W) PRODUCT?)/ECDH. COM	ECDH
/ECDH. D	コメント	S 100/ECDH. D	ECDH
/ECDH. DP	分解速度	S OCTACHLORODIBENZOBENZOFURAN/ECDH. DP	ECDH
/ECDH. EX	分解生成物	S 24 H/ECDH. EX	ECDH
/ECDH. H	暴露時間	S 0.56/ECDH. H	ECDH
/ECDH. MR	半減期	S GC/ECDH. MR	ECDH
/ECDH. PH	方法, 注釈	S 1.01/ECDH. PH	ECDH
/ECDH. RC	pH値	S 1.15 PER HOUR/ECDH. RC	ECDH
/ECDH. T	速度定数	S 10/ECDH. T	ECDH
/ECDH. TYP	温度	S OXIDATION/ECDH. TYP	ECDH
/ECDH. TYP	タイプ		
/ECDP. AN	非生物的分解, 光分解	S 1446588/ECDP. AN	ECDP
/ECDP. C	分解生成物のレコード番号 ¹⁾	S 5.9 PPM/ECDP. C	ECDP
/ECDP. COM	濃度	S (DEGRADATION(W) PRODUCT?)/ECDP. COM	ECDP
/ECDP. D	コメント	S 80/ECDP. D	ECDP
/ECDP. DP	分解速度	S HEXACHLOROBIPHENYL/ECDP. DP	ECDP
/ECDP. EX	分解生成物	S 3 H/ECDP. EX	ECDP
/ECDP. H	暴露時間	S 1/ECDP. H	ECDP
/ECDP. MR	半減期	S H2O2/ECDP. MR	ECDP
/ECDP. PH	方法, 注釈	S PHOTOOXIDATION/ECDP. TYP (P) 2.8/ECDP. PH	ECDP
/ECDP. RC	pH値	S 0.0054 MIN-1/ECDP. RC	ECDP
/ECDP. T	速度定数	S 600/ECDP. T	ECDP
/ECDP. TYP	温度	S PHOTOLYSIS/ECDP. TYP	ECDP
/ECDP. TYP	タイプ		
/ECS. 5	土壤中での安定性	S 1332/ECS. 5	ECS
/ECS. 9	散逸時間50	S 25 D/ECS. 9	ECS
/ECS. C	散逸時間90	S 50 MG/KG/ECS. C	ECS
/ECS. CE	濃度	S 12.4 CMOL/KG/ECS. CE	ECS
/ECS. D	カチオン交換速度	S 33/ECS. D	ECS
/ECS. EX	散逸	S 64 D/ECS. EX	ECS
/ECS. HU	暴露時間	S 11.1 PERCENT/ECS. HU	ECS
/ECS. MB	湿度	S 9.8E7 CFU/G/ECS. MB	ECS
/ECS. MR	微生物量	S (SOIL(2W) HOLIDAY(W) BEACH)/ECS. MR	ECS
/ECS. OC	方法, 注釈	S (50(W) PERCENT)/ECS. OC	ECS
/ECS. PH	有機炭素量	S 2-5/ECS. PH	ECS
/ECS. T	pH値 ¹⁾	S 20>ECS. T	ECS
/ECS. TYP	温度 ^{1), 2)}	S (SANDY(W) LOAM)/ECS. TYP	ECS
/ECS. TYP	タイプ		

(続く)

生態学的データ (続き)

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/ECTD. ME	生態学的移動性:輸送および分布 媒体	S AIR/ECTD. ME	ECTD
/ECTD. MR	方法, 注釈	S (SOLID(W)PHASE(W)EXTRACTION) /ECTD. MR	ECTD
/ECTD. RE	結果	S (SORPTION(W)ISOTHERM)/ECTD. RE	ECTD
/ECTD. TYP	タイプ	S ADSORPTION/ECTD. TYP	ECTD
/ECTOX. AN	生態毒性 代謝産物 生態毒性 代謝産物のレコード 番号 ¹⁾	S 2242347/ECTOX. AN	ECTOX
/ECTOX. C	濃度	S 3.09 MG/G/ECTOX. C	ECTOX
/ECTOX. COM	コメント	S (FURTHER(W)METABOL?)/ECTOX. COM	ECTOX
/ECTOX. E	効果	S ABSORPTION/ECTOX. E	ECTOX
/ECTOX. EP	効果のエンドポイント	S (GROWTH(W)INHIBITION)/ECTOX. EP	ECTOX
/ECTOX. EX	暴露時間	S 10 D/ECTOX. EX	ECTOX
/ECTOX. FD	詳細	S TEQ/ECTOX. FD	ECTOX
/ECTOX. KD	投与種類	S SOIL/ECTOX. KD	ECTOX
/ECTOX. META	代謝産物	S TNT/CN AND 4-METHYL-3,5-DINITRO-PH ENYLAMINE/ECTOX. META	ECTOX
/ECTOX. MR	方法, 注釈	S (CHOICE(W)BIOASSAY)/ECTOX. MR	ECTOX
/ECTOX. RA	適用経路	S PERORAL/ECTOX. RA	ECTOX
/ECTOX. RE	結果	S (EFFECTS(2W)OVARIES)/ECTOX. RE	ECTOX
/ECTOX. S	性別	S FEMALE/ECTOX. S	ECTOX
/ECTOX. SP	生物種またはテスト系	S (EISENIA(W)FOETIDA)/ECTOX. SP	ECTOX
/ECTOX. TYP	タイプ	S LC50/ECTOX. TYP	ECTOX
/ECTOX. V	タイプの値	S CA. 0.2 NKAT/MG PROTEIN/ECTOX. V	ECTOX
/EXCA. HE	汚染評価 汚染対象	S (DISTRIBUTION(S)WATER)/EXCA. HE	EXCA
/EXCA. SO	汚染源	S OIL/EXCA. SO	EXCA
/EOD. C	酸素要求量 濃度	S 1.5 G/EOD. C	EOD
/EOD. D	酸素要求量	S 290/EOD. D	EOD
/EOD. MR	方法, 注釈	S (STANDARD(2W)METHOD?)/EOD. MR	EOD
/EOD. RAT	BOD5/COD比率	S 0.98/EOD. RAT	EOD
/EOD. RE	適応	S DOC/EOD. RE	EOD
/EOD. TYP	タイプ	S COD/EOD. TYP	EOD

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) デフォルト単位はセ氏です。

実験用途と操作

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

薬理学データ

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

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

特許情報

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/PSD. LCN	特許情報	S CLAIM/PSD. LCN	PSD
/PSD. PRC	特許記載位置 Prophetic 物質	S PROPHETIC PRODUCT/PSD. PRC	PSD

電気のおよび磁気的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/DIC /DIC.COM /DIC.F /DIC.T	比誘電率 ¹⁾ コメント 周波数 ¹⁾ 温度 ¹⁾	なし - Hz セ氏	S 2-2.2/DIC S HEAT/DIC.COM S 50000/DIC.F S 20.5/DIC.T	DIC DIC DIC DIC
/DICS /DICS.COM /DICS.T	静電誘電率 ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	なし - セ氏	S 2.3-2.301/DICS S POLARISATION/DICS.COM S DICS.T>20	DICS DICS DICS
/ELE.COM /ELE.CRIT /ELE.ECVL /ELE.KW /ELE.T	電気的データ コメント 超電導臨界温度 電導度 キーワード 温度 ¹⁾	- セ氏 S/cm - セ氏	S PHENOL/ELE.COM S -201.16/ELE.CRIT S 4/ELE.ECVL S PIEZOELECTRICITY/ELE.KW S 216.84/ELE.T	ELE ELE ELE ELE ELE
/MAG.COM /MAG.KW /MAG.MMOM /MAG.T	磁気的データ コメント キーワード モーメント 温度 ¹⁾	- - A*cm**2 セ氏	S OBJECT/MAG.COM S MAGNETIZATION/MAG.KW S 9.21/MAG.MMOM S 129/MAG.T	MAG MAG MAG MAG
/MSUS /MSUS.COM /MSUS.T	磁化率 ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	cm**3/mol*E6 - セ氏	S 0-410/MSUS S RANGE/MSUS.COM S 20-25/MSUS.T	MSUS MSUS MSUS

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

電気化学的作用

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/DE /DE.COM /DE.MET /DE.SOL /DE.T /DE.TYP	解離指数 (pk) ¹⁾ コメント 測定法 溶媒 温度 ¹⁾ タイプ	なし - - - セ氏 -	S 1.5-1.55/DE S HANDBOOK/DE.COM S CONDUCTOMETRIC/DE.MET S D20/DE.SOL S DE.T>180 S THERMODYNAMIC/DE.TYP	DE DE DE DE DE DE
/ELCB.COM /ELCB.KW	電気化学的作用 コメント キーワード	- -	S GAS/ELCB.COM S PROTON AFFINITY/ELCB.KW	ELCB ELCB
/ELCH.ECELL /ELCH.COM /ELCH.POT /ELCH.KW	電気化学セル材料 コメント 電池電位 ¹⁾ キーワード	- - c -	S ELECTROLYTE/ELCH.ECELL S AMOUNT/ELCH.COM S 1/ELCH.POT S ELECTROLYSIS/ELCH.KW	ELCH ELCH ELCH ELCH
/IEP /IEP.COM /IEP.SOL	等電点 pH ¹⁾ コメント 溶媒	- - -	S IEP>5.5 S BUTYRIC/IEP.COM S H20/IEP.SOL	IEP IEP IEP

電気化学的作用 (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/POT. COM	電気化学的特性 コメント	-	S CYCLOVOLTAMMETRY/POT. COM	POT
/POT. KW	キーワード	-	S OXIDATION POTENTIAL/POT. KW	POT
/POT. PAN	生成物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 2827/POT. PAN	POT
/POT. PH	pH値 ¹⁾	なし	S 1-7/POT. PH	POT
/POT. PRO	生成物	-	S PHENYLENEDIAMINE/POT. PRO	POT
/POT. SOL	溶媒	-	S METHANOL/POT. SOL	POT
/POT. T	温度 ¹⁾	セ氏	S POT. T<-10	POT
/XS. COM	クロスセクション コメント	-	S ELEKTRONEN/XS. COM	XS
/XS. KW	キーワード	-	S COLLISION CROSS-SECTION/XS. KW	XS

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

量子化学計算

SEARCH コード	内 容	入 力 例	DISPLAY コード
/QCC. TYP	量子化学計算 タイプ	S ANALYSIS/QCC. TYP	QCC
/QCC. MET	方法	S DIRAC/QCC. MET	QCC

輸送現象

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

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

多成分系データ (MCS)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ADSM.COM	吸着 (MCS)	-	S HIGH/ADSM.COM	ADSM
/ADSM.KW	コメント キーワード	-	S ENTHALPY OF ADSORPTION /ADSM.KW	ADSM
/ADSM.PA	対象物	-	S TRITON X-100/ADSM.PA	ADSM
/ADSM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 2343266/ADSM.PAAN	ADSM
/ADSM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 0.5-20/ADSM.P	ADSM
/ADSM.SOL	溶媒	-	S H2SO4/ADSM.SOL	ADSM
/ADSM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 100/ADSM.T	ADSM
/ASSM.COM	会合 (MCS)	-	S ACIDIC/ASSM.COM	ASSM
/ASSM.KW	コメント キーワード	-	S ASSOCIATION WITH COMPOUND /ASSM.KW	ASSM
/ASSM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 0.5-1.5/ASSM.P	ASSM
/ASSM.PA	対象物	-	S IMIDAZOLE/ASSM.PA	ASSM
/ASSM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 54438/ASSM.PAAN	ASSM
/ASSM.SOL	溶媒	-	S CDCL3/ASSM.SOL	ASSM
/ASSM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S ASSM.T>100	ASSM
/AZE.C	共沸混合物 (MCS)	-	S 54/AZE.C	AZE
/AZE.COM	濃度 コメント	-	S INACTIVE/AZE.COM	AZE
/AZE.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 199.8/AZE.P	AZE
/AZE.PA	対象物	-	S DODECANE/AZE.PA	AZE
/AZE.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1697175/AZE.PAAN	AZE
/AZE.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20-25/AZE.T	AZE
/BSPM.COM	界面現象	-	S HCL/BSPM.COM	BSPM
/BSPM.KW	コメント キーワード	-	S SURFACE TENSION/BSPM.KW	BSPM
/BSPM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 0-750060/BSPM.P	BSPM
/BSPM.PA	対象物	-	S METHANOL/BSPM.PA	BSPM
/BSPM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1098229/BSPM.PAAN	BSPM
/BSPM.SOL	溶媒	-	S H2O/BSPM.SOL	BSPM
/BSPM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 100/BSPM.T	BSPM
/CPEM.COM	複雑な相平衡	-	S DEPENDENCE/CPEM.COM	CPEM
/CPEM.KW	コメント キーワード	-	S PHASE EQUILIBRIUM/CPEM.KW	CPEM
/CPEM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 30000-40000/CPEM.P	CPEM
/CPEM.PA	対象物	-	S NAPHTHALENE/CPEM.PA	CPEM
/CPEM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1421310/CPEM.PAAN	CPEM
/CPEM.SOL	溶媒	-	S H2O/CPEM.SOL	CPEM
/CPEM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20/CPEM.T	CPEM
/CMC	臨界ミセル濃度 ¹⁾	g/L	S 0.025/CMC	CMC
/CMC.COM	コメント	-	S CMC/CMC.COM	CMC
/CMC.SOL	溶媒	-	S H2O/CMC.SOL	CMC
/CMC.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 0.025/CMC AND 40/CMC.T	CMC
/EDM.COM	電氣的データ	-	S CONCENTRATION/EDM.COM	EDM
/EDM.KW	コメント キーワード	-	S DIELECTRIC CONSTANT/EDM.KW	EDM
/EDM.PA	対象物	-	S TETRACHLOROMETHANE/EDM.PA	EDM
/EDM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1798829/EDM.PAAN	EDM
/EDM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20-30/EDM.T	EDM

(続く)

多成分系データ (MCS) (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ENEM.COM	エネルギーデータ (MCS) コメント	-	S CYCLOHEXANON/ENEM.COM	ENEM
/ENEM.KW	キーワード	-	S ENTHALPY OF SOLUTION/ENEM.KW	ENEM
/ENEM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 2-20/ENEM.P	ENEM
/ENEM.PA	対象物	-	S 1,4-DIOXANE/ENEM.PA	ENEM
/ENEM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 969148/ENEM.PAAN	ENEM
/ENEM.SOL	溶媒	-	S TOLUENE/ENEM.SOL	ENEM
/ENEM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 25-30/ENEM.T	ENEM
/HNC	Henry定数 (MCS)	Pa*m**3/mol	S 20-30/HNC	HNC
/HNC.COM	コメント	-	S CONSTANT/HNC.COM	HNC
/HNC.LOG	Henry定数の対数 ¹⁾	-	S -5.72/HNC.LOG	HNC
/HNC.SOL	溶媒	-	S H2O/HNC.SOL	HNC
/HNC.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 25/HNC.T	HNC
/LLSM.COM	液-液系 (MCS) コメント	-	S (INORGANIC (S) COMPOUND?) /LLSM.COM	LLSM
/LLSM.KW	キーワード	-	S LIQUID/LIQUID PHASE DIAGRAM /LLSM.KW	LLSM
/LLSM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 0-10000/LLSM.P	LLSM
/LLSM.PA	対象物	-	S TETRACHLOROMETHANE/LLSM.PA	LLSM
/LLSM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1098295/LLSM.PAAN	LLSM
/LLSM.SOL	溶媒	-	S DIMETHYLFORMAMIDE/LLSM.SOL	LLSM
/LLSM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 5-10/LLSM.T	LLSM
/LSSM.COM	固-液系 (MCS) コメント	-	S (NEUTRAL (W) SOLUTION) /LSSM.COM	LSSM
/LSSM.KW	キーワード	-	S PHASE TRANSITION TEMPERATURE?/LSSM.KW	LSSM
/LSSM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 0-20000/LSSM.P	LSSM
/LSSM.PA	対象物	-	S STRYCHNIDIN-10-ONE/LSSM.PA	LSSM
/LSSM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 52979/LSSM.PAAN	LSSM
/LSSM.SOL	溶媒	-	S NAPHTHALENE/LSSM.SOL	LSSM
/LSSM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S LSSM.T>200	LSSM
/LVSM.COM	気-液系 (MCS) コメント	-	S AZEOTROP?/LVSM.COM	LVSM
/LVSM.KW	キーワード	-	S CRITICAL VOLUME/LVSM.KW	LVSM
/LVSM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 19000-90000/LVSM.P	LVSM
/LVSM.PA	対象物	-	S ACETALDEHYDE/LVSM.PA	LVSM
/LVSM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 506007/LVSM.PAAN	LVSM
/LVSM.SOL	溶媒	-	S PROPAN-1-OL/LVSM.SOL	LVSM
/LVSM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 120/LVSM.T	LVSM
/MECM.COM	機械的および物理的特性 (MCS) コメント	-	S DIAGRAM/MECM.COM	MECM
/MECM.KW	キーワード	-	S ISOTHERMAL COMPRESS? /MECM.KW	MECM
/MECM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 1-10/MECM.P	MECM
/MECM.PA	対象物	-	S OCTANOL/MECM.PA	MECM
/MECM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1697461/MECM.PAAN	MECM
/MECM.SOL	溶媒	-	S HCL/MECM.SOL	MECM
/MECM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 25-65/MECM.T	MECM

(続く)

多成分系データ (MCS) (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ODM.COM	光学データ (MCS) コメント	-	S CONCENTRATION/ODM.COM	ODM
/ODM.KW	キーワード	-	S KERR CONSTANT/ODM.KW	ODM
/ODM.PA	対象物	-	S PHENOL/ODM.PA	ODM
/ODM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 969616/ODM.PAAN	ODM
/POW	オクタノール/水分配率 (POW) (MCS) ¹⁾	-	S 1.5-2/POW	POW
/POW.LOG	POWの対数 ¹⁾	-	S -0.9- -0.7/POW.LOG	POW
/POW.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20/POW.T	POW
/POW.COM	コメント	-	S BUFFER/POW.COM	POW
/SLB	溶解度 (MCS) ¹⁾	g/L	S 0.1/SLB	SLB
/SLB.COM	コメント	-	S PH/SLB.COM	SLB
/SLB.RAT	溶媒の比率	-	S (6(P)1)/SLB.RAT	SLB
/SLB.SAT	飽和	-	S IN PURE SOLVENT/SLB.SAT	SLB
/SLB.SOL	溶媒	-	S DIETHYL ETHER/SLB.SOL	SLB
/SLB.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 10/SLB.T	SLB
/SLBP	溶解度積 (MCS) ¹⁾	-	S SLBP<0.00002	SLBP
/SLBP.COM	コメント	-	S (ACETONE AND MEOH)/SLBP.COM	SLBP
/SLBP.RAT	溶媒の比率	-	S (30(P)PERCENT)/SLBP.RAT	SLBP
/SLBP.SOL	溶媒	-	S H2O/SLBP.SOL	SLBP
/SLBP.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 25/SLBP.T	SLBP
/SOLM.COM	溶液作用 (MCS) コメント	-	S PRESSURE/SOLM.COM	SOLM
/SOLM.KW	キーワード	-	S MISCIBILITY/SOLM.KW	SOLM
/SOLM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 780-850/SOLM.P	SOLM
/SOLM.PA	対象物	-	S XYLITOL/SOLM.PA	SOLM
/SOLM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 2049713/SOLM.PAAN	SOLM
/SOLM.SOL	溶媒	-	S TETRAHYDROFURAN/SOLM.SOL	SOLM
/SOLM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20/SOLM.T	SOLM
/TRAM.COM	輸送現象 (MCS) コメント	-	S MEMBRAN?/TRAM.COM	TRAM
/TRAM.KW	キーワード	-	S DYNAMIC VISCOSITY/TRAM.KW	TRAM
/TRAM.P	圧力 ¹⁾	Torr	S 0-800000/TRAM.P	TRAM
/TRAM.PA	対象物	-	S ETHANOL/TRAM.PA	TRAM
/TRAM.PAAN	対象物のレコード番号 ¹⁾	なし	S 1718733/TRAM.PAAN	TRAM
/TRAM.SOL	溶媒	-	S PYRIDINE/TRAM.SOL	TRAM
/TRAM.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 9.9/TRAM.T	TRAM

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

光学的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CDIC.COM	円偏光二色性 コメント	-	S (25? AND NM)/CDIC.COM	CDIC
/CDIC.SOL	溶媒	-	S CHCL3/CDIC.SOL	CDIC
/MUT	変旋光 ¹⁾	deg	S 10-20/MUT	MUT
/MUT.C	濃度	-	S 0.7 G/100ML/MUT.C	MUT
/MUT.COM	コメント	-	S CAMPHOR/MUT.COM	MUT
/MUT.LEN	光路長 ¹⁾	cm	S MUT.LEN>10	MUT
/MUT.SOL	溶媒	-	S H2O/MUT.SOL	MUT
/MUT.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 21/MUT.T	MUT
/MUT.TIM	時間	-	S 120 - 1020/MUT.TIM	MUT
/MUT.TYP	タイプ	-	S M/MUT.TYP	MUT
/MUT.W	波長 ¹⁾	nm	S 589/MUT.W	MUT
/OPT.COM	光学 コメント	-	S ACETON/OPT.COM	OPT
/OPT.KW	キーワード	-	S LINEAR DICHROISM/OPT.KW	OPT
/ORD.COM	旋光分散 コメント	-	S CYCLOHEXANOL/ORD.COM	ORD
/ORD.SOL	溶媒	-	S ETHANOL/ORD.SOL	ORD
/ORP	旋光度 ¹⁾	deg	S 39.65-40/ORP	ORP
/ORP.C	濃度	-	S 1 MOL/L/ORP.C	ORP
/ORP.COM	コメント	-	S ACETAMIDE/ORP.COM	ORP
/ORP.LEN	光路長 ¹⁾	cm	S 10/ORP.LEN	ORP
/ORP.SOL	溶媒	-	S BENZENE/ORP.SOL	ORP
/ORP.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20/ORP.T	ORP
/ORP.TYP	タイプ	-	S ALPHA/ORP.TYP	ORP
/ORP.W	波長 ¹⁾	nm	S 578/ORP.W	ORP
/RI	屈折率 ¹⁾	-	S 1.00056/RI	RI
/RI.COM	コメント	-	S (RED(W)LIGHT)/RI.COM	RI
/RI.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 0/RI.T	RI
/RI.W	波長 ¹⁾	nm	S 586/RI.W	RI

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

安全性データ

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

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

物理的および機械的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CMP. COM	圧縮率 コメント	-	S PRESSURE/CMP. COM	CMP
/CMP. KW	キーワード	-	S ADIABATIC COMPRESSIBILITY /CMP. KW	CMP
/DEN /DEN. COM /DEN. RT /DEN. T	液体密度 ¹⁾ コメント 基準温度 ¹⁾ 測定温度 ¹⁾	g*cm**3 - セ氏 セ氏	S 1/DEN S ALCOHOL/DEN. COM S 10/DEN. RT S 20/DEN. T	DEN DEN DEN DEN
/MEC. COM	機械的性質 コメント	-	S CONCENTRATION/MEC. COM	MEC
/MEC. KW	キーワード	-	S VISCOSITY/MEC. KW	MEC
/SOUND. COM	音響特性 コメント	-	S OBJECT/SOUND. COM	SOUND
/SOUND. KW	キーワード	-	S VELOCITY OF SOUND/SOUND. KW	SOUND
/ST /ST. COM /ST. T	表面張力 ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	g/s**2 - セ氏	S 1.9-2/ST S SURFACE/ST. COM S 20-22/ST. T	ST ST ST
/TEC. KW /TEC. T /TEC. VAL	熱膨張 キーワード 温度 ¹⁾ 係数 ¹⁾	- セ氏 -	S CUBIC/TEC. KW S -233/TEC. T S 0.99/TEC. VAL	TEC TEC 表示され ない
-	その他の情報 ²⁾ (物理的および化学的性質)	-	S FINFO/FA	FINFO

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

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

スペクトルデータ

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

(続く)

■ スペクトルデータ (続き)

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

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

凝集状態

	SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード	
結	/CDEN /CDEN.COM /CDEN.T	結晶密度 ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	g/cm**3 - セ氏	S 5-5.1/CDEN S ORTHORHOMBISCH?/CDEN.COM S 293 K/CDEN.T	CDEN CDEN CDEN	
	/CPD /CPD.COM /CPD.PGROUP	結晶性状 色およびその他の 性質の記述 コメント 点群	- - -	S GLAS?/CPD S CRYST?/CPD.COM S C2/CPD.PGROUP	CPD CPD CPD	
	/CRYPH.COM /CRYPH.KW /CRYPH.T	結晶相 コメント キーワード 温度 ¹⁾	- - セ氏	S ANISOTROPIC/CRYPH.COM S CRYSTAL STRUCTURE? /CRYPH.KW S 14.85/CRYPH.T	CRYPH CRYPH CRYPH	
	/CSG /CSG.COM	結晶空間群 コメント	- -	S BIPYRAMIDAL/CSG S CUBIC/CSG.COM	CSG CSG	
	/CSYS /CSYS.COM	結晶系 コメント	- -	S MONOCLINIC/CSYS S (LABILE (P) FORM)/CSYS.COM	CSYS CSYS	
	晶	/CTP /CTP.CM /CTP.COM	結晶の転移点 ¹⁾ 相状態の変化 コメント	セ氏 - -	S 100.05-100.1/CTP S GLASS/CTP.CM S TRANSITION/CTP.COM	CTP CTP CTP
		/DP /DP.COM /DP.CRSOL /DP.SOL /DP.SOLM	分解点 ¹⁾ コメント 溶媒 (結晶化用) 溶媒 量	セ氏 - - - -	S 0-10/DP S CRYSTALLIZATION/DP.COM S HEXANE/DP.CRSOL S PROPAN-2-OL/DP.SOL S 2/DP.SOLM	DP DP DP
		/MP /MP.COM /MP.SOL	融点 ¹⁾ コメント 溶媒	セ氏 - -	S 250-260/MP S DECOMPOSITION/MP.COM S XYLENE/MP.SOL	MP MP MP
		/SP /SP.COM /SP.P	昇華点 ¹⁾ コメント 圧力 ¹⁾	セ氏 - Torr	S SP>=500 S (MELTING (P) FORM)/SP.COM S 1/SP.P	SP SP SP
		/TP /TP.COM	三重点 ¹⁾ コメント	セ氏 -	S 218.85/TP S BAR/TP.COM	TP TP
液 体		/BP /BP.COM /BP.P	沸点 ¹⁾ コメント 圧力 ¹⁾	セ氏 - Torr	S BP>200 S BADTEMPERATUR/BP.COM S 1/BP.P	BP BP BP
		/LIQPH.COM /LIQPH.KW	液相 コメント キーワード	- -	S AETHANOL/LIQPH.COM S SELF-ASSOCIATION IN SOLUTION/LIQPH.KW	LIQPH LIQPH
		/LPTP /LPTP.CM /LPTP.COM	液相の転移点 ¹⁾ 相状態の変化 コメント	セ氏 - -	S 20/LPTP S (NEMATIC (P) ISOTROPIC) /LPTP.CM S TRANSITION/LPTP.COM	LPTP LPTP LPTP

凝集状態 (続き)

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード	
気	/CRD /CRD.COM	臨界密度 ¹⁾ コメント	g/cm**3 -	S 0.2-0.2022/CRD S DENSITY/CRD.COM	CRD CRD
	/CRP	臨界圧力 ¹⁾	Torr	S CRP>760 MBAR	CRP
	/CRT /CRT.COM	臨界温度 ¹⁾ コメント	セ氏 -	S 500-600/CRT S TEMPERATUR/CRT.COM	CRT CRT
	/CRV /CRV.COM	臨界体積 ¹⁾ コメント	cm**3/mol -	S 358.1/CRV S CRITICAL/CRV.COM	CRV CRV
体	/GP.COM	気相 コメント	-	S (SATURATED(P)LIQ?)/GP.COM	GP
	/GP.KW	キーワード	-	S FUGACITY/GP.KW	GP
	/VP /VP.COM /VP.T	蒸気圧 ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	Torr - セ氏	S 4-5/VP S EQUATION/VP.COM S VP>80 and VP.T<5	VP VP VP

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

構造およびエネルギーパラメータ

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

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

熱力学的物性

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/CP /CP.COM /CP.T	定圧熱容量 (CP) ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	J/mol*K - セ氏	S 500-501/CP S (HEAT(S)CAPACITY)/CP.COM S CP.T>500	CP CP CP
/CPO /CPO.COM /CPO.T	定圧熱容量 (CPO) ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	J/mol*K - セ氏	S 200>CPO S DETERMIN?/CPO.COM S 200-220/CPO.T	CPO CPO CPO
/CV /CV.COM /CV.T	定容熱容量 (CV) ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	J/mol*K - セ氏	S 113/CV S EQUATION/CV.COM S 113/CV.T AND 25/CP	CV CV CV
/HCOM /HCOM.COM /HCOM.P /HCOM.T	燃焼エンタルピー ¹⁾ コメント 圧力 ¹⁾ 温度 ¹⁾	J/mol - Torr セ氏	S HCOM>-100000 S ENTHALPY/HCOM.COM S 760/HCOM.P S 25/HCOM.T	HCOM HCOM HCOM HCOM
/HFOR /HFOR.COM /HFOR.P /HFOR.T	生成エンタルピー ¹⁾ コメント 圧力 ¹⁾ 温度 ¹⁾	J/mol - Torr セ氏	S 808052/HFOR S ENTHALPY/HFOR.COM S 759-761/HFOR.P S HFOR.T<10	HFOR HFOR HFOR HFOR
/HFUS /HFUS.COM	融解エンタルピー ¹⁾ コメント	J/mol -	S 1000-2000/HFUS S ENTHALPY/HFUS.COM	HFUS HFUS
/HHDG /HHDG.AN /HHDG.COM /HHDG.CN /HHDG.T	水素化エンタルピー ¹⁾ 生成物のレコード番号 ¹⁾ コメント 生成物名称 温度 ¹⁾	J/mol - - - セ氏	S 153362/HHDG S 1862856/HHDG.AN S ENTHALPY/HHDG.COM S PHENYLCYCLOBUTANE/HHDG.CN S 24.9/HHDG.T	HHDG HHDG HHDG HHDG HHDG
/HPT /HPT.COM	相転移エンタルピー ¹⁾ コメント	J/mol -	S 650-700/HPT S (HEXAGONAL(P)CUBIC)/HPT.COM	HPT HPT
/HSUB /HSUB.COM /HSUB.T	昇華エンタルピー ¹⁾ コメント 温度 ¹⁾	J/mol - セ氏	S HSUB<40000 S ENTHALPY/HSUB.COM S 25/HSUB.T	HSUB HSUB HSUB
/HVAP /HVAP.COM /HVAP.P /HVAP.T	蒸発エンタルピー ¹⁾ コメント 圧力 ¹⁾ 温度 ¹⁾	J/mol - Torr セ氏	S 90000>HVAP S ENTHALPY/HVAP.COM S 250>HVAP.P S 20-25/HVAP.T	HVAP HVAP HVAP HVAP
/OTHE.COM /OTHE.KW	その他の熱力学データ コメント キーワード	- -	S (TEMPERATURE AND DEPENDENCE) /OTHE.COM S HEAT OF COMBUSTION AT CONSTANT VOLUME/OTHE.KW	OTHE OTHE

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

表示形式

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

回答の表示をする際は、下記の表示形式を自由に組み合わせることができます。

複数のコードはスペースやカンマで区切ってください。フィールドは指定された順序で表示されます。

入力例； => D L1 1-5 BIB ABS

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

個別の表示フィールドコードおよびスーパーフィールドコードを用いて表示すると、最大 50 データが表示されます。フィールド中のすべてのデータを表示する際は、個別の表示フィールドコードに F を付けて表示します（表示料金は同じ）。

入力例； => D BP MP ECTOX 最大 50 データを表示

=> D FBP FMP FECTOX すべてのデータを表示（推奨）

カスタム表示形式

形式	内 容	入力例
ADSM	吸着 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D ADSM
AINCHI	InChIKey	D AINCHI
AN	レコード番号	D AN
ASSM	会合 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D ASSM
AUN	Autonom 名	D AUN
AZE	共沸混合物 (MCS) (値, 温度, 圧力, 濃度, 対象物のレコード番号, 出典, コメントを含む表)	D AZR
BIO	生物学的性質 (生物種, 媒体, 濃度, 暴露時間, 温度, BCF の対数, 生物濃縮係数 (BCF), 蓄積半減期, 蓄積速度定数, 排出半減期, 排出速度定数, 方法, 注釈, 生物学的濃縮, コメント, 出典)	D BIO
BIOD	生分解 (タイプ, 接種物, 濃度, 分解生成物レコード番号, 分解速度, 暴露時間, 温度, 半減期, 測定法, 注釈, コメント, 出典)	D 3 BIOD
BP	沸点 (圧力, 出典, コメントを含む表)	D L3 BP
BPR	ベーシック優先 CAS 登録番号	D BPR
BSPM	界面現象 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D BSPM
BV	体積粘性率 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D BV
CDEN	結晶の密度 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D CDEN
CDER	誘導体 (誘導体のレコード番号, 誘導体, コメント, 出典)	D CDER
CDIC	円偏光二色性 (溶媒, コメント, 出典)	D CDIC
CIP	電子の結合 (キーワード, コメント, 出典)	D CIP
CMC	臨界ミセル濃度 (MCS) (値, 溶媒, 温度, 出典, コメントを含む表)	D CMC
CMP	圧縮率 (キーワード, コメント, 出典)	D CMP
CN	化学物質名	D CN
CNF	立体配座 (研究の目的, 出典)	D CNF
COEV	環境への濃縮 (生物種, 場所, 汚染濃度, バックグラウンド, 濃度, 方法, 注釈, コメント, 出典)	D COEV
COMPAN	組成物:成分のレコード番号	D COMPAN
COMPC	組成物:成分濃度	D COMPC
COMPN	組成物:成分名称	D COMPN
CP	定圧熱容量 CP (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D L2 CP
CP0	定圧熱容量 CP0 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D CP0
CPD	結晶性状の記述 (色およびその他の性質, コメント, 出典)	D CPD

(続く)

カスタム表示形式 (続き)

形式	内 容	入力例
CPEM	複雑な相平衡 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D CPEM
CRD	臨界密度 (値, 出典, コメントを含む表)	D CRD
CRP	臨界圧力 (値, 出典, コメントを含む表)	D CRP
CRT	臨界温度 (値, 出典, コメントを含む表)	D CRT
CRV	臨界体積 (値, 出典, コメントを含む表)	D CRV
CRYPH	結晶相 (キーワード, 温度, コメント, 出典)	D CRYPH
CSG	結晶空間群 (CSG, コメント, 出典)	D CSG
CSYS	結晶系 (CSYS, コメント, 出典)	D CSYS
CTP	結晶の転移点 (値, 相状態の変化, 出典, コメントを含む表)	D L8 CTP
CTYPE	化学物質タイプ	D CTYPE
CV	定容熱容量 CV (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D CV
DE	解離指数 (値, 解離基, 温度, 溶媒, 測定法, タイプ, 出典, コメントを含む表)	D DE
DED	データ入力日	D DED
DEN	液体密度 (値, 温度, 基準温度, 出典, コメントを含む表)	D DEN
DFM	分子の変形 (キーワード, コメント, 出典)	D DFM
DIC	比誘電率 (値, 温度, 周波数, 出典, コメントを含む表)	D DIC
DICS	静電誘電率 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D DICS
DM	双極子モーメント (値, 温度, 測定法, 溶媒, キーワード, 出典, コメントを含む表)	D DM L5
DP	分解点 (値, 溶媒, 出典, コメントを含む表)	D DP
DUPD	データ更新日	D DUPD
DV	粘性率 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D DV
EBC	立体配座のエネルギー障壁 (値, 障壁タイプ, 溶媒, 出典, コメントを含む表)	D EBC
ECDH	非生物学的分解, 加水分解 (タイプ, 濃度, 分解速度, 暴露時間, 温度, pH 値, 分解生成物のレコード番号, 分解生成物, 速度定数, 半減期, 方法, 注釈, コメント, 出典)	D ECDH
ECDP	非生物学的分解, 光分解 (タイプ, 濃度, 分解速度, 暴露時間, 温度, 速度定数, 半減期, pH値, 分解生成物のレコード番号, 分解生成物, 方法, 注釈, コメント, 出典)	D ECDP
ECS	土壌中での安定性 (タイプ, 濃度, 散逸, 散逸時間50, 散逸時間90, 暴露時間, 温度, pH 値, 湿度, 有機炭素量, カチオン交換速度, 微生物量, 方法, 注釈, コメント, 出典)	D ECS
ECTD	生態学的移動性:輸送および分布 (タイプ, 媒体, 結果, 方法, 注釈, 出典)	D ECTD
ECTOX	生態毒性 (効果, 効果のエンドポイント, 生物種またはテスト系, 性別, 適用経路, 濃度, 投与種類, 暴露時間, 方法, 注釈, 詳細, タイプ, タイプの値, 結果, 代謝産物 のレコード番号, 代謝産物, コメント, 出典)	D ECTOX
EDIS	解離エネルギー (値, 結合タイプ, 出典, コメントを含む表)	D EDIS
EDM	電気的データ (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 温度, コメント, 出典)	D EDM
ELCB	電気化学的作用の詳細 (キーワード, コメント, 出典)	D ELCB 5
ELCH	電気化学セル材料 (電池電位, キーワード, 出典, コメントを含む表)	D ELCH
ELE	電気的データ (キーワード, 超電導臨界温度, 電導度, コメント, 出典)	D ELE
ENEM	エネルギーデータ (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D ENEM
EOD	酸素要求量 (タイプ, 適応, 酸素要求量, BOD5/COD比率, 濃度, 方法, 注釈, 出典)	D EOD
ESR	ESR (電子スピン共鳴) スペクトル (キーワード, カップリング核, 溶媒, 温度, コメント, 出典)	D ESR
EXCA	汚染評価 (汚染物質のレコード番号, 汚染源, 出典)	D EXCA
FA	フィールドの存在	D FA

(続く)

カスタム表示形式 (続き)

形式	内 容	入力例
FAN	フラグメントレコード番号	D FAN
FINFO	その他の情報 (出典)	D FINFO
FLU	蛍光スペクトル (キーワード, 溶媒, 温度, 出典, コメントを含む表)	D FLU
FMF ¹⁾	フラグメント分子式	D FMF
FP	引火点 (温度, テストのタイプ, 出典を含む表)	D FP
GEO	原子間距離と角度 (キーワード, コメント, 出典)	D GEO
GP	気相 (キーワード, コメント, 出典)	D L5 GP
HCOM	燃焼エンタルピー (値, 温度, 圧力, 出典, コメントを含む表)	D HCOM
HFOR	生成エンタルピー (値, 温度, 圧力, 出典, コメントを含む表)	D HFOR
HFUS	融解エンタルピー (値, 出典, コメントを含む表)	D HFUS
HHDG	水素化エンタルピー (値, 生成物のレコード番号, 生成物名称, 温度, 出典, コメントを含む表)	D HHDG
HNC	Henry定数 (MCS) (値, 対数, 温度, 溶媒, 出典, コメントを含む表)	D HNC
HPT	相転移エンタルピー (値, 出典, コメントを含む表)	D L8 HPT
HSUB	昇華エンタルピー (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D HSUB
HVAP	蒸発エンタルピー (値, 温度, 圧力, 出典, コメントを含む表)	D HVAP
IEP	等電点 (値, 溶媒, 出典, コメントを含む表)	D IEP
INCHI	標準 InChIKey	D INCHI
INP	天然物からの単離 (天然物からの単離, コメント, 出典)	D INP
IP	イオン化ポテンシャル (値, 測定法, 出典, コメントを含む表)	D IP
IR	IR (赤外) スペクトル (キーワード, 溶媒, 温度, テキスト, 出典, コメントを含む表)	D IR
KV	動粘性率 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D KV 17
LB	物質の記載位置	D LB
LIQPH	液相の詳細 (キーワード, コメント, 出典)	D LIQPH
LLSM	液-液系 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D LLSM
LPTP	液相の転移点 (値, 相状態の変化, 出典, コメントを含む表)	D LPTP
LSF	示性式	D LSF
LSSM	固-液系 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D 2 LSSM
LUM	発光スペクトル (キーワード, コメント, 出典)	D LUM
LVSM	気-液系 (MCS) (キーワード, 対象物レコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D 5 LVSM
MAG	磁気的データ (キーワード, コメント, 出典)	D MAG
MEC	機械的特性 (キーワード, コメント, 出典)	D MEC
MARKREF	関連マルクージュ構造番号の数	D MARKREF
MECM	機械的および物理的特性 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D MECM L3
MF	分子式	D MF
MP	融点 (値, 溶媒, 出典, コメントを含む表)	D MP
MS	マススペクトル (キーワード, コメント, 出典)	D MS
MSUS	磁化率 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D MSUS
MUT	変旋光 (値, タイプ, 濃度, 光路長, 溶媒, 波長, 温度, 時間, 出典, コメントを含む表)	D MUT
MW (FW)	分子量	D MW
NMR	NMR (核磁気共鳴) スペクトル (キーワード, 核種, カップリング核, 溶媒, 温度, 周波数, オリジナルテキスト, コメント, 出典)	D NMR
NQR	NQR (核四重極共鳴) スペクトル (キーワード, 核種, コメント, 出典)	D NQR

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

(続く)

カスタム表示形式 (続き)

形式	内 容	入力例
ODM	光学データ (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, コメント, 出典)	D ODM
OPT	光学 (核種, キーワード, コメント, 出典)	D OPT
ORD	旋光分散 (溶媒, コメント, 出典)	D ORD
ORP	旋光度 (値, タイプ, 濃度, 光路長, 溶媒, 波長, 温度, 出典, コメントを含む表)	D ORP
OSM	その他の分光法 (キーワード, コメント, 出典)	D OSM
OTHE	その他の熱力学データ (キーワード, コメント, 出典)	D OTHE
PHARM	薬理学データ (効果, 効果のエンドポイント, 生物種またはテスト系, 性別, タイプ, タイプの値, 適用経路, 濃度, 投与種類, 暴露時間, 方法, 注釈, 詳細, 結果, 代謝産物のレコード番号, 代謝産物, コメント, 出典)	D L3 PHARM
PHO	りん光スペクトル (キーワード, 溶媒, 温度, 出典, コメントを含む表)	D PHO
POL	電気的分極 (キーワード, コメント, 出典)	D POL
POT	電気化学的特性 (キーワード, 溶媒, pH 値, 温度, 生成物のレコード番号, 生成物, コメント, 出典)	D POT
POW	オクタノール水分配率 (MCS) (値, 対数, 温度, コメント, 出典を含む表)	D POW
PUR	精製 (法) (精製 (法), 出典)	D L4 PUR
QCC	量子化学計算 (タイプ, 方法, コメント, 出典)	D QCC
RAS	ラマンスペクトル (キーワード, 溶媒, コメント, 出典)	D RAS
RI	屈折率 (値, 温度, 波長, 出典, コメントを含む表)	D RI
RN	CAS 登録番号	D RN
ROT	回転スペクトル (キーワード, コメント, 出典)	D ROT
RSTR	関連構造 (関連構造, 参照物質のレコード番号, 参照物質, コメント, 出典)	D L2 RSTR
RXPRO ²⁾ (PRE)	検索物質が生成物である反応	D L4 RXPRO
RXREA ²⁾ (REA)	検索物質が反応物である反応	D RXREA 1-2
SDIF	自己拡散係数 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D SDIF
SLB	溶解度 (MCS) (値, 飽和, 温度, 溶媒, 溶媒の比率, 出典, コメントを含む表)	D SLB
SLBP	溶解度積 (MCS) (値, 温度, 溶媒, 溶媒の比率, 出典, コメントを含む表)	D SLBP
SOLM	溶液作用 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, コメント, 圧力, 出典)	D SOLM
SOUND	音響特性 (キーワード, コメント, 出典)	D SOUND
SP	昇華点 (値, 圧力, 出典, コメントを含む表)	D SP
ST	表面張力 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D ST
STR	構造図	D STR
TEC	熱膨張 (キーワード, 温度, 出典, コメントを含む表)	D TEC
TP	三重点 (値, 出典, コメントを含む表)	D TP
TRAM	輸送現象 (MCS) (キーワード, 対象物のレコード番号, 対象物, 溶媒, 温度, 圧力, コメント, 出典)	D TRAM
TRAN	輸送データ (キーワード, コメント, 出典)	D L1 TRAN
USC	物質用途 (実験用途と操作, 用途の形態, コメント, 出典)	D USC
UVS	紫外・可視スペクトル (キーワード, 溶媒, 吸収極大, 吸光/吸収係数, 出典, コメントを含む表)	D 1 UVS
VP	蒸気圧 (値, 温度, 出典, コメントを含む表)	D VP
XREF	相互参照資料 (データタイプ, その他の収録源, 化学物質名称, 外部アクセス ID, 出典)	D XREF
XS	クロスセクション (キーワード, コメント, 出典)	D XS

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

(続く)

定型表示形式

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

表示形式	内 容	入 力 例
ALL ¹⁾	すべての表示フィールド (CHE, IDE, MCS, PED, PHY, RX)	DISPLAY ALL
ALLREF	そのレコードの出典情報 (標題, 抄録, 出典)	D ALLREF
REACH ¹⁾	REACH 申請に関する物性情報 (BP, CP, CV, DE, DEN, ECO, FP, HFOR, HVAP, MP, MUT, ORP, PHARM, RI, SLB, SP, VP)	D REACH
PSD	特許情報 (特許記載位置, 標題, Prophetic 物質, 関連マルクシェン構造番号, 出典)	D PSD
ALLPAT	特許情報 (標題, 特許番号, 発明者名, 特許出願人, 抄録, IPC)	
IDE ²⁾	物質同定情報 (AN, BPR, RN, CN, AUN, LSF, FMF, MF (FW), MW, FAN, FS, CTYPE, COMPAN, COMPC, COMPN, DED, DUPD, STR, FA, LB, AINCHI, INCHI, MARKREF)	DISPLAY L1 IDE
RX ^{2), 3), 4)}	反応 (反応 ID, 反応物レコード番号, 反応物, 生成物レコード番号, 生成物, 反応構造キーワード, レコードのタイプ, 結合数の変更, 反応詳細の数, 反応物・生成物のレコード番号 (反応分類 Chemical Behavior, Preparation, 反応詳細), 文献数) 反応詳細 (反応詳細反応 ID, 反応分類, 収率, ステージ数, 試薬のレコード番号, 試薬, ステージ反応物のレコード番号, ステージ反応物, 反応数, 触媒のレコード番号, 触媒, 溶媒のレコード番号, 溶媒, 時間, 温度, 圧力, pH 値, 研究主題, プロトタイプ反応, その他の条件, 特許記載位置, 反応記載位置, 反応の見出し, 反応フルテキスト中のキーワード, 多段階反応の詳細, 反応タイプ, 出典) (RXPRO, RXREA)	D RX 1-3 D FRX
CHE ²⁾	化学的データ (RSTR, INP, CDER, PUR)	D CHE
MCS ¹⁾	多成分系 (SOL, LLSM, LSSM, LVSM, MECM, TRAM, ENEM, EDM, ODM, A DSM, ASSM, BSPM)	D MCS
LVS ²⁾	気-液系データ (MCS) (LVSM, AZE, CPEM)	D LVS
SOL ²⁾	溶液作用 (MCS) (SLB, SLBP, SOLM, CMC, HNC, POW)	D SOL
PED ²⁾	薬理学および生態学的データ (PHARM, ECO)	D PED
ECO ²⁾	生態学的データ (ECTOX, EXCA, COEV, ECTD, BIO, BIOD, ECDH, ECD P, ECS, EOD, USC)	D ECO
PHY ¹⁾	物理的特性 (ECB, ELEP, FINFO, MAGP, MECP, OPTP, SAG, SEP, SF, SPE, THE, TRA)	D PHY L6
ECB ^{2) 5)}	電気化学的作用 (ELCB, DE, IEP, POT, XS, ELCH)	D ECB
ELEP ²⁾	電気的特性 (DICS, DIC, ELE)	D ELEP
MAGP ²⁾	磁気的特性 (MSUS, MAG)	D L3 MAGP
MECP ^{2) 5)}	物理的および機械的特性 (DEN, MEC, CMP, SOUND, ST, TEC)	D L9 1-3 MECP
OPTP ²⁾	光学特性 (RI, OPT, ORP, MUT, ORD, CDIC)	D OPTP
SAG ¹⁾	凝集状態 (CRY, GAS, LIQ)	D SAG L3
CRY ²⁾	結晶 (CPD, MP, CRYPH, DP, SP, TP, CTP, CSYS, CSG, CDEN)	D CRY
GAS ²⁾	気体 (CRT, CRP, CRD, CRV, VP, GP)	D GAS
LIQ ²⁾	液体 (BP, LIQPH, LPTP)	D LIQ
SEP ²⁾	構造およびエネルギーパラメータ (CNF, GEO, DM, POL, DFM, EBC, EDIS, IP, CIP)	D SEP
SF ²⁾	安全性データ (AIT, FP)	D SF L8
SPE ¹⁾	スペクトルデータ (NMR, ESR, NQR, ROT, IR, RAS, UVS, LUM, FLU, PHO, OSM, MS)	D SPE
THE ²⁾	熱力学的特性 (HCOM, HFOR, HHDG, HFUS, HVAP, HSUB, HPT, CP, CPO, CV, OTHE)	D THE
TRA ²⁾	輸送現象 (DV, KV, BV, SDIF, TRAN)	D TRA

1) 存在するフィールドの合計が課金されます。

2) 1 フィールド分の表示料が課金されます。

3) 反応レコードの表示は、RX 表示形式のみ使用できます。

4) 物質レコードを表示する際に F 付きで指定すると、すべてのデータが表示されます (例: => D FRX)。

5) ELCH, TEC が含まれる場合は別途 1 フィールド分の表示量が課金されます。

網がけ はおすすめの定型表示形式です。

SELECT, ANALYZE および SORT フィールド

SELECT/ANALYZE コマンドは抽出・解析用のコマンドです。

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

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

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

http://www.jaici.or.jp/stn/stn_doc_03.html

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

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

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内 容	ANALYZE/ SELECT ¹⁾	SORT
ADSM. PAAN	吸着 (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
AN	レコード番号	○	×
ASSM. PAAN	会合 (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
AUN	Autonum 名	○	×
AZE. PAAN	共沸混合物 (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
BIOD. AN	生分解:分解生成物のレコード番号	○ ²⁾	×
BPR	ベーシック優先 CAS 登録番号	○	×
BSPM. PAAN	界面現象 (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
CDER. AN	化学的誘導体:誘導体のレコード番号	○ ²⁾	×
CN	化学物質名	○	×
COMPAN	組成物:成分のレコード番号	○	×
CPEM. PAAN	複雑な相平衡:対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
CTYPE	化合物タイプ	○	×
DED	データ入力日	○ ³⁾	×
ECDH. AN	非生成物分解, 加水分解:分解生成物のレコード番号	○ ²⁾	×
ECDP. AN	非生成物分解, 光分解:分解生成物のレコード番号	○ ²⁾	×
ECTOX. AN	生態毒性:代謝産物のレコード番号	○ ²⁾	×
EDM. PAAN	電気的データ:対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
ENEM. PAAN	エネルギーデータ (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
FAN	フラグメントのレコード番号	○	×
FMF	フラグメント分子式	○	×
HHDG. AN	水素化エンタルピー:生成物のレコード番号	○ ²⁾	×
LSF	示性式	○	×
LLSM. PAAN	液-液系:対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
LSSM. PAAN	固-液系:対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
LVSM. PAAN	気-液系:対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
MF	分子式	○ (デフォルト)	×
MECM. PAAN	機械的および物理的性質 (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
MW (FW)	分子量	○	×
ODM. PAAN	光学的データ (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
PHARM. AN	薬理学データ:代謝産物のレコード番号	○ ²⁾	×
PN	特許番号	○	×
POT. PAN	電気化学的性質:生成物のレコード番号	○ ²⁾	×
RN	CAS 登録番号	○	×
RSTR. PAAN	関連構造:参照のレコード番号	○ ²⁾	×
RX. PAN	反応:生成物のレコード番号	○ ²⁾	×
RX. RAN	反応:反応物のレコード番号	○ ²⁾	×
RX. SOL	反応:反応溶媒	○ ²⁾	×
RX. SRAN	反応:ステージ反応物のレコード番号	○ ²⁾	×

SELECT, ANALYZE および SORT フィールド (続き)

SELECT/ANALYZE/ SORT コード	内 容	ANALYZE/ SELECT ¹⁾	SORT
SOLM. PAAN	溶液作用:対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
TRAM. PAAN	輸送現象 (MCS):対象物のレコード番号	○ ²⁾	×
UP	STN 更新日	○ ²⁾	×
XREF. SO (OS)	その他の収録源	○	×

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

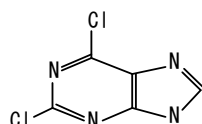
2) SELECT HIT および ANALYZE HIT は利用できません.

3) SELECT で抽出されたタームに /ED が付与されます.

サンプルレコード

IDE 表示形式 (物質レコード (化学物質単位))

レコード番号	Accession Number (AN):	610966
ベーシック優先 CAS 登録番号	Basic Pref. RN (BPR):	5451-40-1
CAS 登録番号	CAS Reg. No. (RN):	5451-40-1
化学物質名	Chemical Name (CN):	2,6-Dichloro-9H-purine, 2,6-dichloropurine, :
Autonom 名	Autonom Name (AUN):	2,6-Dichloro-9H-purine
示性式	Lin. Struct. Formula (LSF):	C2NHCHNCNC12
分子式	Molec. Formula (MF):	C5 H2 Cl2 N4
分子量	Formula Weight (FW):	189.004
化学物質タイプ	Compound Type (CTYPE):	heterocyclic
標準 InChIKey	InChi Key: (INCHI):	RMFWVOLULURGJI-UHFFFAOYSA-N
InChIKey	Alternate InChi Key: (AINCHI):	RMFWVOLULURGJI-BGGKNDAXCG
関連マーカーシュ構造番号の数	Markush Ref. Count (MARKREF):	4
入力日	Entry Date (DED):	1988/11/28
更新日	Update Date (DUPD):	2011/03/22



フィールドの存在 Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
AUN	Autonomname	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formula Weight	1
INCHI	InChi Key	1
AINCHI	Alternate InChi Key	1
CTYPE	Compound Type	1
MARKREF	Markush Reference Count	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
DE	Dissociation Exponent	2
ELCB	Electrochemical Behaviour	1
FINFO	Further Information	2
LB	Substance Label	33
MP	Melting Point	3
MS	Mass Spectrum	1
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	5
PHARM	Pharmacological Data	2
PSD	Patent Specific Data	4
UVS	UV and Visible Spectrum	2
XREF	Crossfile Reference	2

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	1527
RX.RAN	Reactant AN	1522
RX.PAN	Product AN	5

RX 表示形式 (反応レコード (反応単位))

Reaction:		
RX		
反応 ID	Reaction ID:	24801936
反応物のレコード番号	Reactant AN (.RAN):	1754008
反応物	Reactant (.RCT):	levulinic acid methyl ester
生成物のレコード番号	Product AN (.PAN):	1766336, 1768584
生成物	Product (.PRO):	5-bromo-4-oxo-pentanoic acid methyl ester, 3-bromo-4-oxopentanoic acid methyl ester
反応構造キーワード	React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction
反応のレコードタイプ	Record type (.RTYP):	full reaction, has preparation
結合数の変更	Number of Bond Changes (.NBC):	6
反応詳細の数	No. of React. Details (.NVAR):	1
反応物・生成物のレコード番号	Preparation reactants (.BLB):	1754008, 1766336, 1768584
(反応分類 Preparation)	Det. React. reactants (.BLC):	1754008, 1766336, 1768584
(反応詳細) 文献数	No. of References (.NUMREF):	1

Reaction Details:

RX		
反応詳細の ID	Reaction RID (.RID):	24801936.1
反応分類	Reaction Classification (.CL):	Preparation
試薬	Reagent (.RGT):	bromine
溶媒	Solvent (.SOL):	methanol
時間	Time (.TIM):	0.416667
その他の条件	Other Conditions (.COND):	Heating / reflux
特許記載位置	Location (.LCN):	Page/Page column 5-6
反応フルテキスト中の のキーワード	Fulltext of reaction (.TXT):	In one embodiment of the present invention, according to Fig. 1, 29.6 g levulinic acid (0.25 mole 98percent), dissolved EPO <DP n="7"/>in 600 ml methanol (analytical 99.8percent), was heated up to reflux. 40 g bromine (12.86 : substance) was dry enough to be used without further treatment in the step of synthesis, according to Fig. 1.
試薬のレコード番号	Reactant AN (.RCAN):	3587193
溶媒のレコード番号	Solvent AN (.SOLAN):	1098229
反応数	Number of R. steps (.STP):	1
出典	Reference(s):	1. Patent: PROCESS FOR THE PREPARATION OF ALKYL 5- (DICARBOXIMIDO) LEVULINATE AND ALKYL 4-OXO-PENTENOATE; for details see display format ALLPAT