

STN おさらいセミナー 基礎からの 合成文献検索

2013 年 8 月

本日の内容

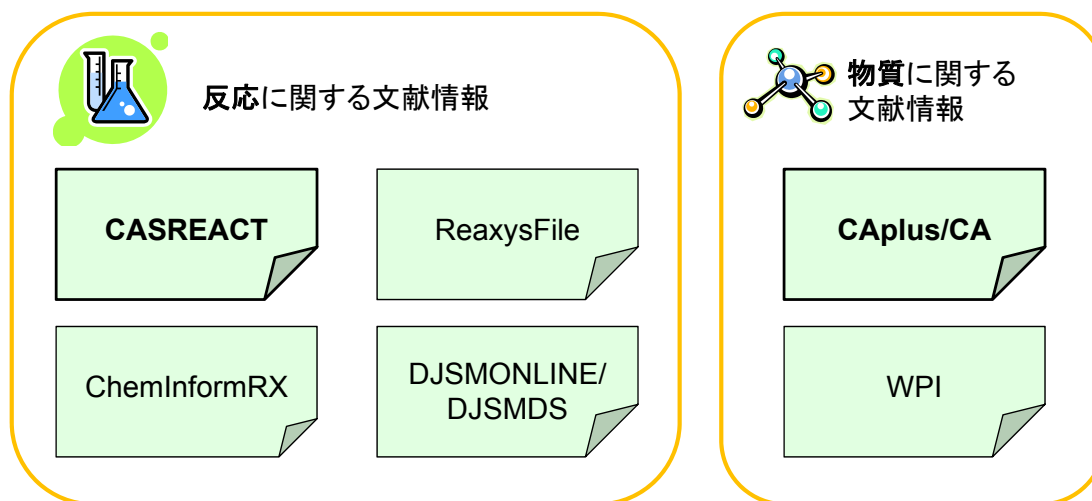
- ・ 合成文献検索に使うファイル
- ・ CASREACT ファイルと
CAplus ファイルを使った合成文献検索
- ・ ReaxysFile ファイルの合成文献検索

本日の内容

- ・ 合成文献検索に使うファイル
- ・ CASREACT ファイルと
CAplus ファイルを使った合成文献検索
- ・ ReaxysFile ファイルの合成文献検索

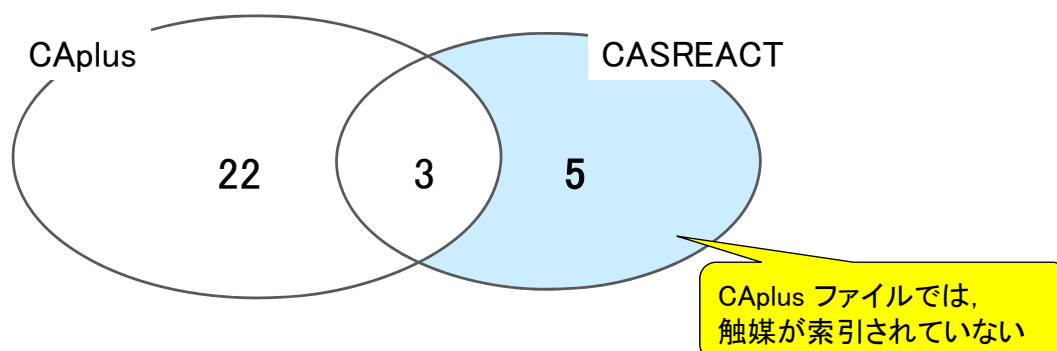
STN で合成文献検索可能なファイル

STN は合成文献検索できるファイルを多数搭載



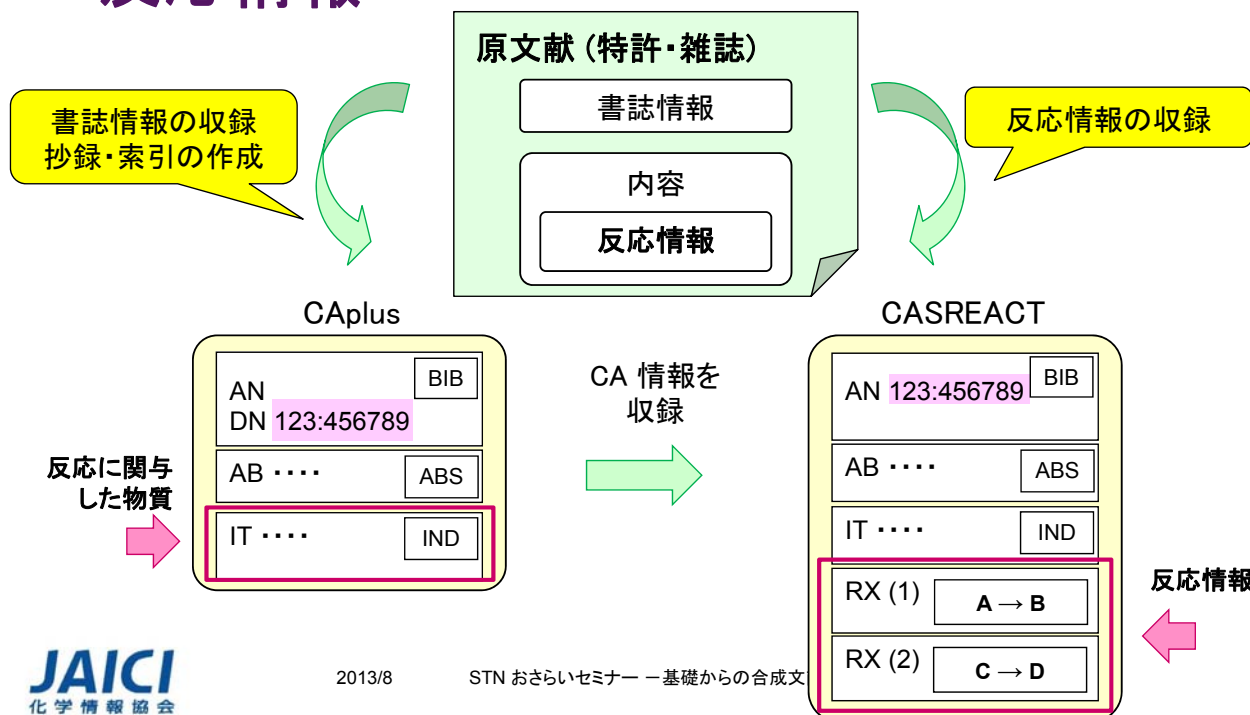
CASREACT ファイルのみに収録されている文献

(例) 硫酸を触媒として用いたトリオキサンの合成文献

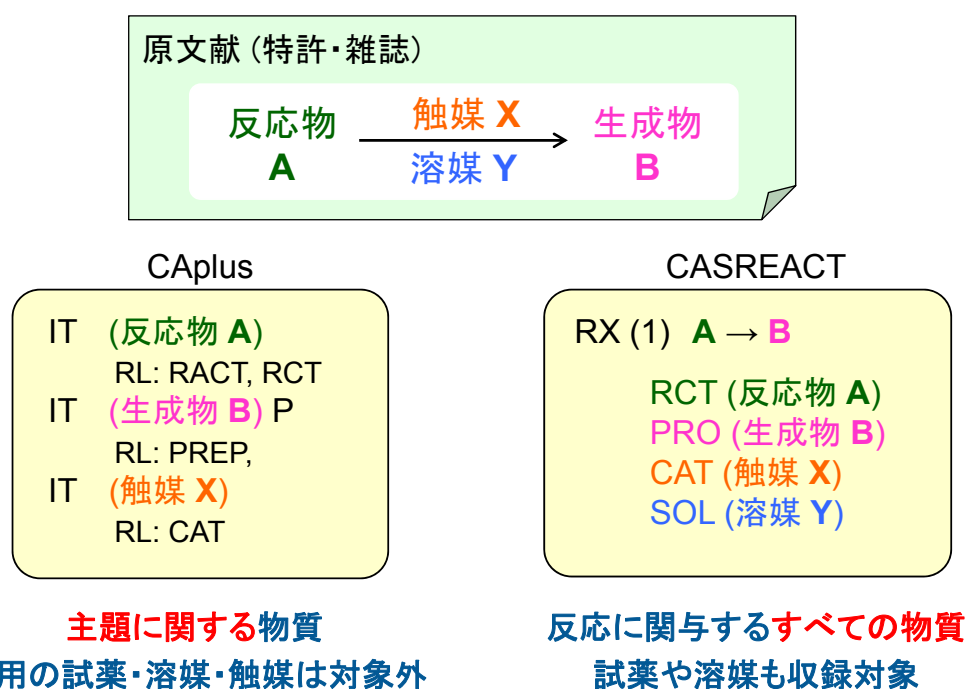


CAplus ファイルと CASREACT ファイルの
索引方針や収録年代などの違いによる

CAplus / CASREACT ファイルの 反応情報



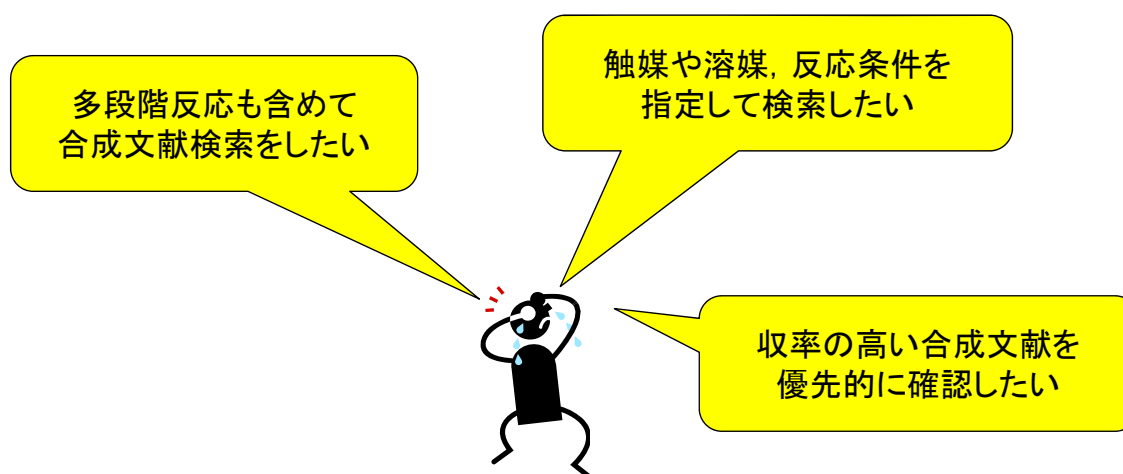
反応関与物質の収録



反応情報の収録

	CPlus	CASREACT
収録年代	1808 年以降	1840 年以降
収録件数	レコード数: 3,794 万件以上	レコード数: 104 万件以上 反応数 : 5,360 万件以上
レコード単位	文献単位	文献単位
収録対象	化学・化学関連分野の雑誌・特許	CA に収録された雑誌・特許の有機化学反応情報
索引の対象化合物	研究の主題に関する物質	反応に関与するすべての物質 (反応物, 生成物, 試薬, 触媒, 溶媒)
特長	<ul style="list-style-type: none"> 古い年代の文献検索 幅広い分野の文献検索 	<ul style="list-style-type: none"> 物質や反応条件を指定した検索 反応部位を指定した検索
備考	<ul style="list-style-type: none"> 汎用の試薬・溶媒・触媒等は索引されていない 同一反応中に限定した検索はできない 	<ul style="list-style-type: none"> 工業的反応やポリマーの重合反応は収録されていない

活用シーン



CASREACT ファイルで検索できます

本日の内容

- ・ 合成文献検索に使うファイル
- ・ CASREACT ファイルと CAplus ファイルを使った合成文献検索
 - CASREACT ファイル
 - CAplus ファイル
 - 両ファイルの併用と重複除去
- ・ ReaxysFile ファイルの合成文献検索

CASREACT ファイルの検索機能

- ◆ 特定の化合物に関する合成文献
 - ◆ REGISTRY ファイルで検索した化合物に関する合成文献
- ➡ CAS 登録番号検索
- ◆ ある部分構造を持つ化合物の合成文献
- ➡ 反応質問式による構造検索
- ◆ 化合物を指定しない検索
 - ◆ 官能基のみを指定した幅広い化合物の合成文献
- ➡ 官能基検索

CASREACT ファイルの検索機能

- ◆ 特定の化合物に関する合成文献
 - ◆ REGISTRY ファイルで検索した化合物に関する合成文献
- ⇒ CAS 登録番号検索
- ◆ ある部分構造を持つ化合物の合成文献
- ⇒ 反応質問式による構造検索
- ◆ 化合物を指定しない検索
 - ◆ 官能基のみを指定した幅広い化合物の合成文献
- ⇒ 官能基検索

CAS 登録番号検索

特定の化合物の合成文献を検索したい

⇒ S CAS 登録番号/ロール

⇒ S L#/ロール

(L#: REGISTRY ファイルの L 番号)

/RCT	反応物	/RRT	反応物または試薬 (/RCT,RGT)
/RGT	試薬		
/PRO	生成物		
/SOL	溶媒		
/CAT	触媒	* ANY/CAT で触媒反応に限定可能	

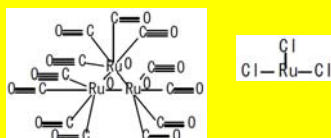
ロールを指定しないと、すべてのロールが検索対象となる

CASREACT ファイルでうまく検索できない場合

REGISTRY ファイルからクロスオーバー

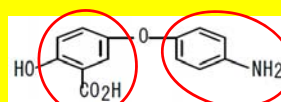
=> **S L#/ロール** (L#: REGISTRY ファイルの L 番号)

Ru を含む触媒を使った
合成文献を検索したい



CASREACT ファイルには
検索フィールドがない

2つの部分構造を同一化合物中に
含む化合物を合成したい



CASREACT ファイルでは
厳密に指定できない

【注意】

- REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索料：4,020 円/L 番号
- L 番号に含まれる化合物が 4 個以下の場合 CAS 登録番号で検索すると経済的 (968 円/ CAS 登録番号)

検索方法の使い分け

◆ CASREACT ファイルで直接 CAS 登録番号を検索

- CAS 登録番号が既知の化合物
- L 番号に含まれる化合物が 4 個以下の場合

◆ REGISTRY ファイルの L 番号を使ったクロスオーバー

- REGISTRY ファイルのみで条件を指定できる化合物
 - 存在する元素 (ELS など) を指定したい場合
 - 化合物に含まれる 2 つの構造の存在を厳密に指定したい場合
- L 番号に含まれる化合物が 5 個以上の場合

CASREACT ファイル - 近接演算子

AND

反応情報と文献情報

AN 149:104482 CASREACT Full-text
ED Entered STN: 17 Jun 2008
TI Method for synthesis of chloroaniline ...
IN Xu, Jie; Ning, Jianbo
:

RX (4) OF 13 K ==> L (L):同一反応中

反応のステップ数 (/NS)
触媒の存在 (ANY/CAT)

生成物と収率 (/YD)

RX (4) RCT K 121-73-3
RGT C 1333-74-0 H2
PRO L 108-42-9
CAT 7440-18-8 Ru, 7631-86-9 SiO2
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH
CON 25 minutes, 100 deg C
NTE autoclave used, chemoselective

JAICI
化学情報協会

【入力例】 => S 108-42-9/PRO (L) 7440-18-8/CAT
=> S 108-42-9/PRO AND P/DT

CASREACT ファイル - 近接演算子

【注意】 AND 演算子では同一反応中に限定できない

(例) Ni 触媒を用いた 3-クロロアニリンの合成文献検索

=> S 108-42-9/PRO AND 7440-02-0/CAT

AND 演算子を使うと
同一文献中に限定される

RX (9) OF 30 U ==> V

別の触媒による反応

RX (9) RCT U 121-73-3
RGT Q 6819-41-6 n-PrONa,
R 71-23-8 PrOH
PRO V 108-42-9
CAT 7440-05-3 Pd
CON 3 hours, 23K
NTE selective NO2 reduction,
GC yield

化学情報協会

RX (14) OF 30 AD ==> AE

Ni 触媒は別の
反応で使用

RX (14) RCT AD 109-74-0
RGT Q 6819-41-6 n-PrONa
PRO AE 109-73-9
CAT 7440-02-0 Ni
SOL 110-71-4 (CH2OMe)2
CON 3 hours, 243K
NTE Raney

検索例 1

CASREACT ファイルで
酢酸パラジウム (3375-31-3) を触媒として使った
p-ニトロベンゾフェノンの合成文献を検索する



検索の流れ

1. REGISTRY ファイルで p-ニトロベンゾフェノンの CAS 登録番号を確認する
2. CASREACT ファイルで p-ニトロベンゾフェノンと酢酸パラジウムの CAS 登録番号にロールをつけて検索する
3. (L) 演算子を使って, 触媒と生成物を同一反応中に限定する

【検索例 1】

CASREACT ファイルで酢酸パラジウム (3375-31-3) を触媒として使った p-ニトロベンゾフェノンの合成文献を検索する



生成物や触媒が決まっているので、CAS 登録番号検索を利用する

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルで p-ニトロベンゾフェノンの CAS 登録番号を調べる

=> E P-NITROBENZOPHENONE/CN

```
E1      1      P-NITROBENZONITRILE RADICAL ION(1+)/CN
E2      1      P-NITROBENZONITRILE(1-)/CN
E3      1  --> P-NITROBENZOPHENONE/CN
E4      1      P-NITROBENZOPHENONE OXIME/CN
E5      1      P-NITROBENZOTRIBROMIDE/CN
:
```

=> S E3

```
L1      1      P-NITROBENZOPHENONE/CN
```

=> SEL RN

← CAS 登録番号を抽出する (13 円/件)

```
E1 THROUGH E1 ASSIGNED
```

=> D SEL

← 抽出した CAS 登録番号を表示 (無料)

```
E1      1      1144-74-7/BI
```

=> FILE CASREACT

← CASREACT ファイルで合成文献を検索する

=> S E1/PRO (L) 3375-31-3/CAT

← CAS 登録番号で検索

```
L2      12 1144-74-7/PRO (L) 3375-31-3/CAT
```

【ポイント 1】 ロールの指定
生成物：/PRO
触媒：/CAT

【ポイント 2】 近接演算子
同一反応中：(L) 演算子

〈参考〉 CASREACT ファイルの主な定型表示形式

表示形式	表示内容
FCRDREF	ヒットした最初の反応の反応物、生成物の構造図と試薬、触媒、溶媒の一画面表示 (コンパクト表示) と原資料 (SO, PY) (デフォルト)
SCAN (無料)	ヒットした最初の反応の反応物、生成物の構造図と試薬、触媒、溶媒の一画面表示 (コンパクト表示)
FHIT	ヒットした最初の反応の反応マップ、構造図、反応要約
RX(n)	反応 n の反応マップ、構造図、反応要約

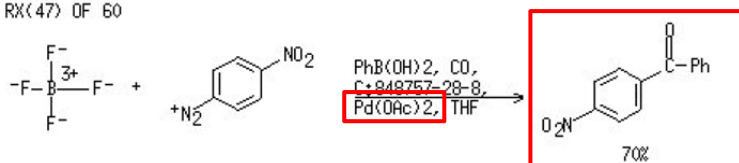
=> D SCAN

← SCAN 表示形式で反応情報を確認する (無料)

L2 12 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2013 ACS on STN

TI A novel thiourea ligand applied in the Pd-catalyzed Heck, Suzuki and Suzuki carbonylative reactions

RX(47) OF 60



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):3

:

=> D BIB FHIT

← BIB 表示形式 (書誌情報) と FHIT 表示形式でレコードを確認

* FHIT 表示形式: ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, 反応要約

L2 ANSWER 1 OF 12 CASREACT COPYRIGHT 2013 ACS on STN

AN 155:379976 CASREACT [Full-text](#)

TI by palladium-catalysed desulfitative reaction of arylsulfonic acids with nitriles

AU Miao, Tao; Wang, Guan-Wu

CS Hefei National Laboratory for Physical Sciences at Microscale, CAS Key Laboratory of Soft Matter Chemistry, Joint Laboratory of Green Synthetic Chemistry and Department of Chemistry, University of Science and Technology of China, Anhui, Hefei, 230026, Peop. Rep. China

SO Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom) (2011), 47(33), 9501-9503

CODEN: CHCOFS; ISSN: 1359-7345

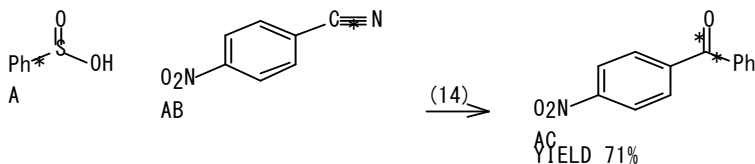
PB Royal Society of Chemistry

DT Journal; (online computer file)

LA English

BIB 表示形式

RX(14) OF 33



構造図

RX(14) RCT A 618-41-7, AB 619-72-7
RGT D 7732-18-5 Water, E 7664-93-9 H2SO4
PRO AC 1144-74-7
CAT 3375-31-3 Pd(OAc)2, 366-18-7 Bipyridine
SOL 78-83-1 i-BuOH
CON 6 hours, 100 deg C

反応要約
(ルールと CAS 登録番号)

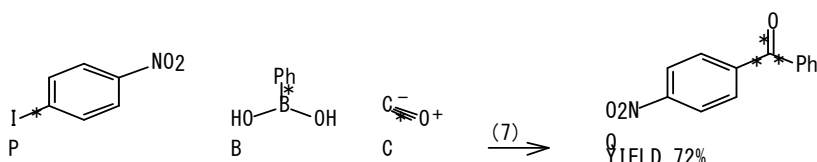
CASREACT ファイルで酢酸パラジウムを使った p-ニトロベンゾフェノンの合成文献が得られた

<注意> AND 演算子を使うと同一文献中での検索となる

=> S E1/PRO AND 3375-31-3/CAT ← AND 演算子を使って検索
L2 17 1144-74-7/PRO AND 3375-31-3/CAT

=> D HIT 4 ← HIT 表示形式で表示
* HIT 表示形式: 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

L2 ANSWER 4 OF 17 CASREACT COPYRIGHT 2013 ACS on STN
RX (7) OF 19 P + B + C ==> Q



RX (7) RCT P 636-98-6, B 98-80-6

STAGE (1)

RGT E 584-08-7 K2CO3

CAT 15214-66-1 Palladium, bis(2, 2, 6, 6-tetramethyl-3, 5-heptanedionato- κ 03, κ 05)-, (SP-4-1)-

SOL 100-66-3 PhOMe

CON 10 minutes, room temperature

STAGE (2)

RCT C 630-08-0

CON SUBSTAGE (1) 6 hours, 80 deg C, 100 psi

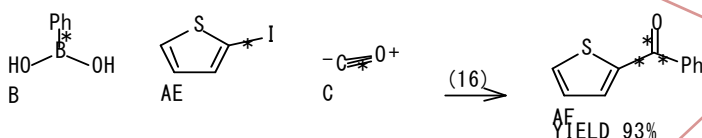
SUBSTAGE (2) 80 deg C -> room temperature

PRO Q 1144-74-7

NTE Suzuki coupling, autoclave used

p-ニトロベンゾフェノンの
合成で使われた触媒

RX (16) OF 19 B + AE + C ==> AF



RX (16) RCT B 98-80-6, AE 3437-95-4

STAGE (1)

RGT E 584-08-7 K2CO3

CAT 3375-31-3 Pd(OAc)2

SOL 108-88-3 PhMe

CON 10 minutes, room temperature

STAGE (2)

RCT C 630-08-0

CON SUBSTAGE (1) 10

SUBSTAGE (2) 10

酢酸パラジウムを触媒として
合成された化合物

PRO AF 135-00-2

NTE Suzuki coupling, autoclave used, high pressure, alternatively use of bis(2, 2, 6, 6-tetramethyl-3, 5-heptanedionate)palladium as catalyst gave similar yield

【ノイズ】
目的の生成物と触媒は
それぞれ別の反応で使われていた

CASREACT ファイルの検索機能

- ◆ 特定の化合物に関する合成文献
- ◆ REGISTRY ファイルで検索した化合物に関する合成文献



CAS 登録番号検索

- ◆ ある部分構造を持つ化合物の合成文献



反応質問式による
構造検索

- ◆ 化合物を指定しない検索
- ◆ 官能基のみを指定した幅広い化合物の合成文献



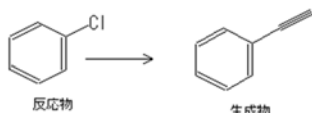
官能基検索

反応質問式の作図ポイント

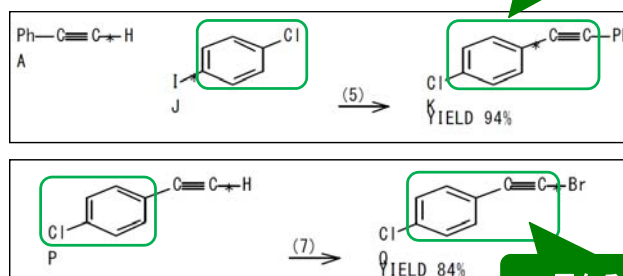


目的以外の反応が多くて困ります

反応質問式



例



反応部位・マッピングの指定で除くことができる

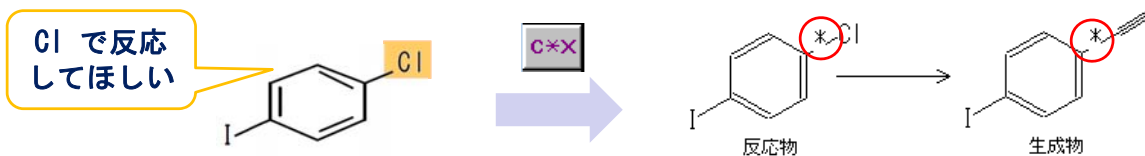
【注意】 試薬に指定できない

【ポイント】 重要なところに指定する

反応部位の指定

【ポイント】重要な部位のみ指定する
【注意】試薬に指定できない

複数の反応部位がある場合
反応サイトを特定したい場合

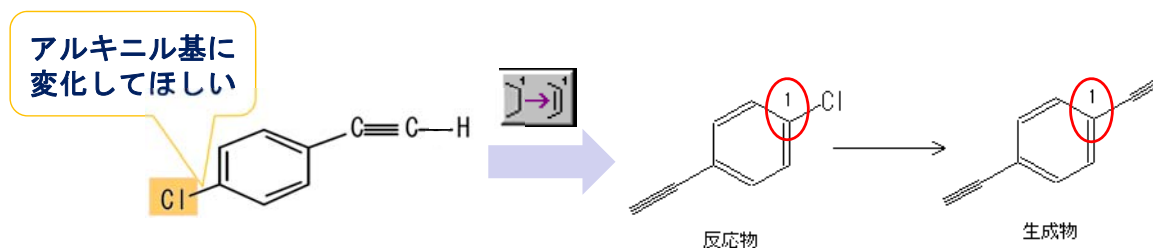


反応部位	定義	例
CC	結合は反応によって完全に変化	C=O → C=N
PC	結合は部分的に変化	C=O → C-O
XC	結合は完全または部分的に変化 (CC または PC)	C=O → C=N C=O → C-O
NC	結合は変化しない	C=O → C=O
NON	反応部位は特に指定しない	

マッピングの指定

異なる構造フラグメント内の
同じ元素に対して指定

同じ分子内に似た構造が複数ある場合
元素の対応を特に指定して検索したい場合



【ポイント】重要なノードにのみ指定する

【注意】指定できないノードがある

- ✓ 試薬
- ✓ ショートカット記号
- ✓ G グループ
- ✓ 一般式グループ (Ak, Hy など)
- ✓ 繰り返しグループ内のノード

構造検索

=> **S Ln 検索タイプ 検索の範囲**

Ln: 反応質問式

検索タイプ	コード	内容
部分構造検索 (デフォルト)	SSS	反応質問式を部分構造とする物質の反応を検索 → 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の反応を検索 → 作図していない部分は水素が置換

検索範囲	内容
SAMPLE (デフォルト)	ファイルの 5% をテスト的に検索 (無料)
FULL	ファイルのすべてを検索
RANGE	ユーザーが指定した範囲内で検索

検索例 2

**CASREACT ファイルで
クロロベンゼン誘導体からアルキニルベンゼン
誘導体を合成する文献を検索する**



反応質問式の作図

反応質問式作図ツール

反応矢印

反応ロール

反応部位

マッピング

結合に反応部位 CC (結合は完全に変化) を指定

「反応物」のロールを指定

炭素にマッピングを指定

JAICI
化学情報協会

反応質問式を使った構造検索

```

=> FILE CASREACT
=>
Uploading C:\Users\%xxxxx\example.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

【STN Express の場合】
「コマンドで修正可能な形式でアップロード」
にチェックを入れて属性を確認

=> D QUE ← 構造の確認 (無料)
L1      STR

```

RCT

3 C 5 C Cl 13
2 C 6 C

PRO

9 O 10 C 14 C 15
8 C 11 C 12 C

```

NODE ATTRIBUTES:
NSPEC  IS R      AT  1
:
NSPEC  IS C      AT 14

```

```

NSPEC  IS C      AT 15

DEFAULT MLEVEL IS ATOM
MLEVEL  IS CLASS AT 13 14 15
DEFAULT ELEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:
RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED
NUMBER OF NODES IS 15

STEREO ATTRIBUTES: NO

```

```

****MAPPINGS****
NOD SYM  ROL  NOD SYM  ROL
  5 C      RCT  11 C      PRO
 11 C      PRO   5 C      RCT

```

マッピングの設定を確認できる

JAICI
化学情報協会

反応質問式を使った構造検索

=> S_L1 ← サンプル検索 (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 14:30:25 FILE 'CASREACT'

SCREENING COMPLETE - 2916 REACTIONS TO VERIFY FROM 206 DOCUMENTS

100.0% DONE 2916 VERIFIED 49 HIT RXNS 14 DOCS

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **COMPLETE**

BATCH **COMPLETE**

PROJECTED VERIFICATIONS: 55082 TO 61558

PROJECTED ANSWERS: 56 TO 504

L2 14 SEA SSS SAM L4 (49 REACTIONS)

【チェック項目①】
COMPLETE になっているか

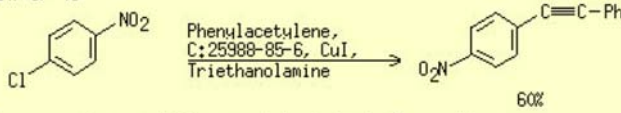
反応質問式を使った構造検索

=> D_SCAN

L2 14 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2013 ACS on STN

TI Triazine functionalized ordered mesoporous polymer: a novel solid support for Pd-mediated C-C cross-coupling reactions in water

RX(24) OF 46



NOTE: green chem., solid-supported catalyst, Sonogashira cross-coupling, palladium(II) acetate grafted mesoporous poly-2,4,6-triallyloxy-1,3,5-triazine catalyst used

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

【チェック項目②】
SCAN 表示形式で
回答の適合性をチェック

反応質問式を使った構造検索

⇒ S L1 FUL ← フルファイル検索

FULL SEARCH INITIATED 14:30:53 FILE 'CASREA
SCREENING COMPLETE - 109360 REACTIONS TO

100.0% DONE 109360 VERIFIED 3139 HIT RXNS (24 INCOMP) 283 DOCS
SEARCH TIME: 00.00.02

L3 283 SEA SSS FUL L4 (3139 REACTIONS)

⇒ S L3/COM ← Verification が不完全な回答を除く (無料)

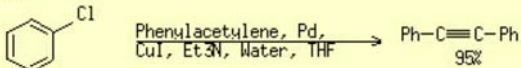
L4 283 L3/COM

⇒ D SCAN

L4 283 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2013 ACS ON STN

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

RX(18) OF 26



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

【チェック項目③】
Verification が不完全な反応 * の有無を確認
* 質問式と一致するかシステムが判断できなかった反応

同一文献中に Verification が完全な反応と不完全な回答が含まれていたため、回答数 (= 文献数) は変わらない

CASREACT ファイルの検索機能

- ◆ 特定の化合物に関する合成文献
- ◆ REGISTRY ファイルで検索した化合物に関する合成文献
- ◆ ある部分構造を持つ化合物の合成文献
- ◆ 化合物を指定しない検索
- ◆ 官能基のみを指定した幅広い化合物の合成文献



CAS 登録番号検索



反応質問式による
構造検索



官能基検索

官能基検索

官能基を使って合成文献を
幅広く検索したい

=> **S** 官能基用語/官能基検索フィールド

□ よく利用される官能基検索フィールド*

/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.YD	官能基 - 収率
NONE/FG.YDT	官能基 - 収率情報なし

溶媒・触媒の官能基は
指定できない

*その他の官能基検索フィールドは「反応情報検索」参照
http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_react.pdf

□ 官能基用語の調べ方

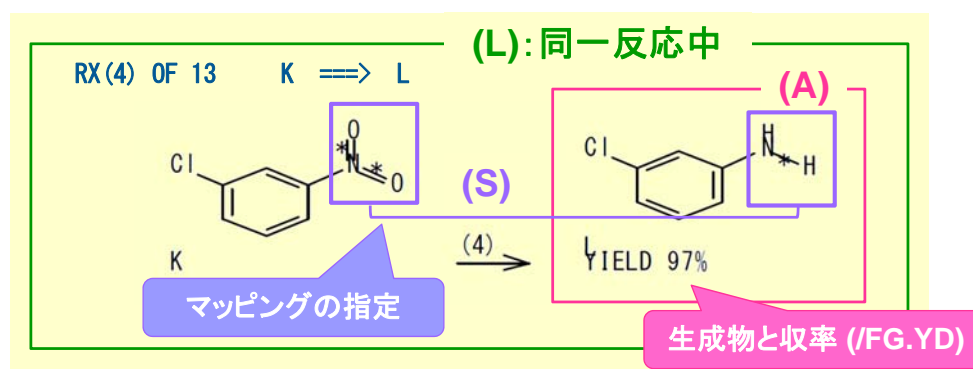
官能基用語の一覧

:=> [HELP FGA](#)

官能基クラス用語の一覧と定義

:=> [HELP FGC](#)

近接演算子



(S) 演算子: マッピングの指定 (官能基検索のみ)

【入力例】

=> **S** AMINES/FG.FORM (A) 80<=FG.YD

=> **S** HALIDES/FG.NON (L) AMINES/FG.FORM

=> **S** NITRO/FG.RXN (S) AMINES/FG.FORM

CASREACT ファイルのまとめ

- 反応に関する全物質を収録している
- 検索目的に応じて検索機能を使い分ける
 - 化合物を指定した検索 : CAS 登録番号検索
 - 誘導体を含めた検索 : 反応質問式による構造検索
 - 官能基からの検索 : 官能基検索
- 目的に応じて適切な近接演算子を使う
 - 同一反応中 : (L) 演算子
 - 生成物と収率 : (A) 演算子
 - 反応情報と文献情報 : AND 演算子

本日の内容

- ・ 合成文献検索に使うファイル
- ・ CASREACT ファイルと CAplus ファイルを使った合成文献検索
 - CASREACT ファイル
 - CAplus ファイル
 - 両ファイルの併用と重複除去
- ・ ReaxysFile ファイルの合成文献検索

CAplus ファイルの合成文献検索

- => **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 L 番号)

ロール	定義	ロール	定義	
/PREP (/P)	製造	/RACT	反応物または試薬	
PREP の下位	/BMF	生化学的工業生産	RACT /RCT	反応物
	/BPN	生化学的合成	の下位 /RGT	試薬
	/BYP	副生成物	/CAT	触媒
	/IMF	化学的工業生産	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	
	/PUR	精製		
	/SPN	化学合成		
	/PNU	上記以外の合成		
		> /PREP	:1907 年以降	
		> /RGT	:2002 年以降	
		> 上記以外	:1967 年以降	

CAplus ファイルの演算子

反応物・生成物などの化合物は **AND** 演算子で組み合わせる

AND

```

IT 7439-89-6, Iron, uses 7440-02-0, Nickel, uses 7440-18-8
Ruthenium, uses 7440-22-4, Silver, uses 7440-48-4, Cobalt, uses
7440-50-8, Copper, uses
RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(synthesis of chloroaniline by selective hydrogenation of
chloronitrobenzene in aqueous alc.)
IT 108-42-9P, m-Chloroaniline
RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation);
PREP (Preparation)
(synthesis of chloroaniline by selective hydrogenation of
chloronitrobenzene in aqueous alc.)
IT 100-00-5, p-Chloronitrobenzene 121-73-3, m-Chloronitrobenzene
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
(synthesis of chloroaniline by selective hydrogenation of
chloronitrobenzene in aqueous alc.)

```

触媒

生成物

反応物

同一反応中に限定できないので
ノイズが生じる可能性がある

検索例 3

CAplus ファイルで
酢酸パラジウム (3375-31-3) を触媒として使った
p-ニトロベンゾフェノンの合成文献を検索する



検索の流れ

1. REGISTRY ファイルで化合物を検索する
2. 生成物の L 番号に /P を付与し CAplus ファイルにクロスオーバー
3. 触媒の L 番号に /CAT (触媒の CAS ロール) を付与し CAplus ファイルにクロスオーバー
4. 生成物と触媒を AND 演算子で組み合わせる

【検索例 3】

CAplus ファイルで酢酸パラジウム (3375-31-3) を触媒として使った p-ニトロベンゾフェノンの合成文献を検索する



CAplus ファイルでは REGISTRY ファイルの L# をクロスオーバーする

=> FILE REGISTRY

:

=> S E3

L1 1 P-NITROBENZOPHENONE/CN

検索例 1 の検索

=> FILE CASREACT

=> S E1/PRO (L) 3375-31-3/CAT

L2 12 1144-74-7/PRO (L) 3375-31-3/CAT

:

=> FILE REGISTRY

=> S 3375-31-3 ← 酢酸パラジウムを検索する

L3 1 3375-31-3
(3375-31-3/RN)

【ポイント 1】 ロールの指定
製造 : /P (/PREP)
触媒 : /CAT

=> FILE CAPLUS

=> S L1/P

L4 215 L1/P

← p-ニトロベンゾフェノンを合成している文献検索

=> S L3/CAT

L5 10299 L3/CAT
(L3 (L) CAT/RL)

← 酢酸パラジウムが触媒として使われている文献を検索

=> S L4 AND L5

L6 18 L4 AND L5

← L4 と L5 を同一文献中に限定

【ポイント 2】 演算子
同一文献中 : AND

=> D SCAN TI HITRN

← SCAN 表示形式 (無料) で標題と該当する索引を確認する

L6 18 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN

TI Preparation of ketones from carboxylic acid anhydrides and boronic acids

IT 3375-31-3

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses) (preparation of ketones from carboxylic acid anhydrides and boronic acids)

IT 1144-74-7P

RL: IMF (Industrial manufacture) (preparation of ketones from carboxylic acid anhydrides and boronic acids); PREP (Preparation)

生成物と触媒は別の
IT フィールドに収録

CAplus ファイルのみで
得られるレコード

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):17

L6 18 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN
TI Synthesis of aryl ketones or ketimines by palladium-catalyzed arene C-H a
TIJP ニトリルへのパラジウム触媒アレーン C-H 付加によるアリアルケトンかケチミン

CASREACT ファイルと
重複するレコード

IT 1144-74-7P, 4-Nitro-Benzophenone

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of aryl ketones or ketimines via palladium-catalyzed C-H addition of (aryl)boronic acids to benzonitriles)

IT 3375-31-3

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(preparation of aryl ketones or ketimines via palladium-catalyzed C-H addition of arenes to benzonitriles)

L6 18 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN
TI Phosphane-Free Palladium-Catalyzed Carbonylative Suzuki Coupling Reaction
Heteroaryl Iodides
TIJP アリアルとヘテロアリアルヨージドの無ホスファンのパラジウム触媒カルボニル金
[機械翻訳]

CAplus ファイルのみで
得られるレコード
(ノイズ)

IT 3375-31-3

RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(preparation of biaryl ketones via phosphane-free palladium-catalyzed carbonylative Suzuki cross-coupling reaction of aryl/heteroaryl iodides with arylboronic acids in presence of carbon monoxide)

IT 1144-74-7P

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of biaryl ketones via phosphane-free palladium-catalyzed carbonylative Suzuki cross-coupling reaction of aryl/heteroaryl iodides with arylboronic acids in presence of carbon monoxide)

:

CAplus ファイルで酢酸パラジウムを使った p-ニトロベンゾフェノンの合成文献が得られた

CAplus ファイルのまとめ

- **主題に関する物質を収録している**
収録対象外: 汎用の試薬・溶媒・触媒
- **REGISTRY ファイルの L 番号をクロスオーバー検索する**
CAS ロールの指定で目的の文献に限定できる
- **AND 演算子**で同一文献中に限定する

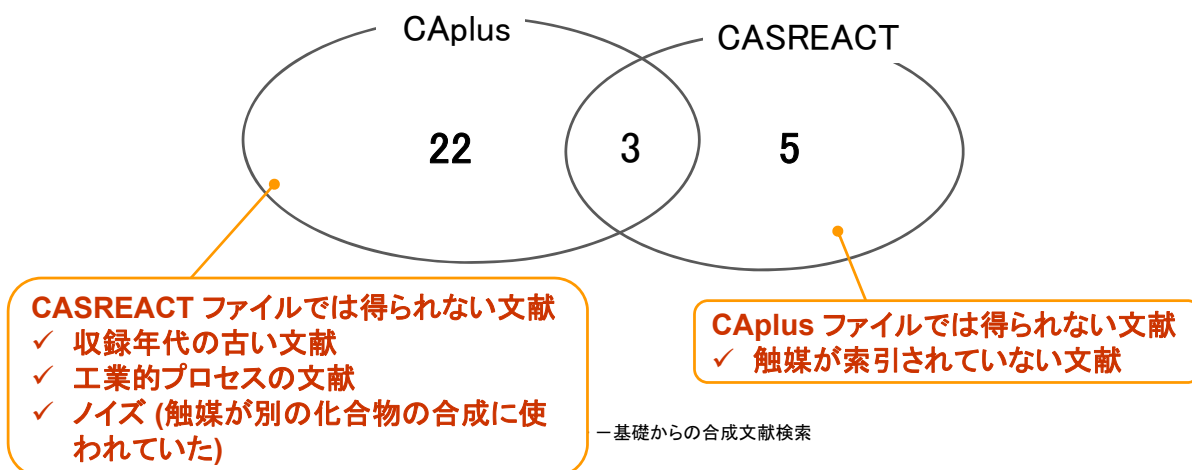
本日の内容

- ・ 合成文献検索に使うファイル
- ・ **CASREACT ファイルと CAplus ファイルを使った合成文献検索**
 - CASREACT ファイル
 - CAplus ファイル
 - **両ファイルの併用と重複除去**
- ・ ReaxysFile ファイルの合成文献検索

CASREACT / CAplus ファイルの併用

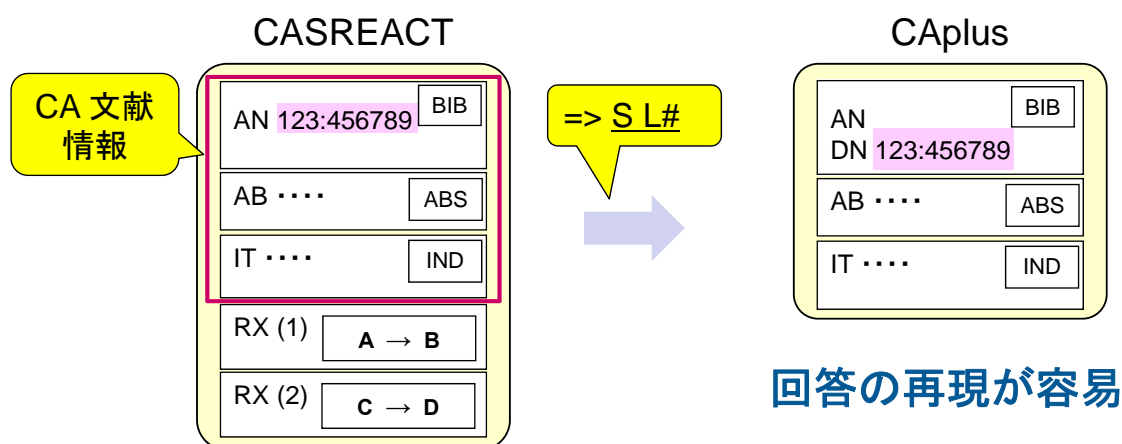
CASREACT / CAplus ファイルを併用することで
より多くの文献情報を得られる場合がある

(例) 硫酸を触媒として用いたトリオキサンの合成文献



CASREACT / CAplus ファイルの構成

CASREACT ファイルには CA ファイルの
文献情報が収録されている



* CAplus ファイルから CASREACT ファイルへは L 番号を使った
クロスオーバーはできない

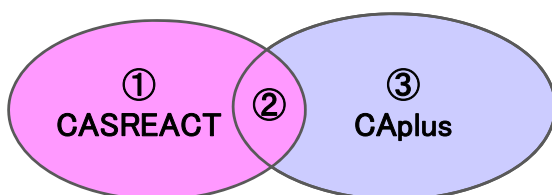
重複文献の処理



- 反応の詳細を手早く確認したい
- 同一反応に限定された文献を優先的に確認したい

CAplus ファイルで重複を除く

=> **S L# (CAplus) NOT L# (CASREACT)**



- ① CASREACT: 全件表示
- ② CAplus: 重複除去
- ③ CAplus: 残りを表示

文献情報を使った絞り込み



- 対応特許情報で限定したい
- 統制語で絞り込みたい

CASREACT ファイルで検索できない情報

- 対応特許情報
- IT フィールド
- 特許分類
- 引用・被引用情報



CAplus ファイルで絞り込む

=> **S L# (CAplus) OR L# (CASREACT)**

検索例 4

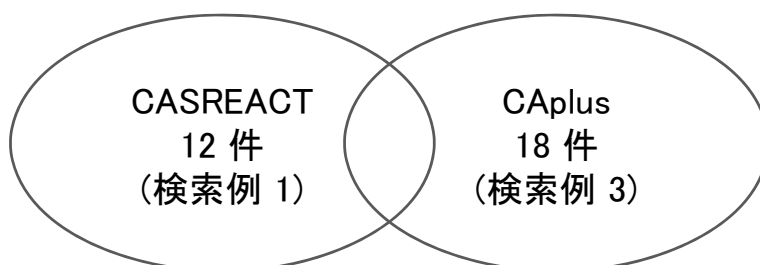
CASREACT ファイルと CAplus ファイルで
酢酸パラジウム (3375-31-3) を触媒として使った
p-ニトロベンゾフェノンの合成文献を検索する

反応の詳細を確認したいので, CASREACT ファイルで
得られなかった文献のみ CAplus ファイルで確認する



検索の流れ

1. CASREACT ファイルで検索 (検索例 1)
2. 得られた全文献を表示する
3. CAplus ファイルで検索 (検索例 3)
4. CASREACT ファイルとの重複分を除く
5. CAplus ファイルのみで得られた文献を表示する



【検索例 4】

酢酸パラジウム (3375-31-3) を触媒として使った p-ニトロベンゾフェノンの合成文献を検索する。CASREACT ファイルで全件の反応の詳細を確認し、CASREACT ファイルで得られなかった文献のみ CPlus ファイルで出力する。



CPlus ファイルで CASREACT ファイルの回答を NOT 演算する

```
=> FILE REGISTRY
:
=> S E3
L1 1 P-NITROBENZOPHENONE/CN
=> FILE CASREACT
=> S E3
L1 1 P-NITROBENZOPHENONE/CN
=> S E1/PRO (L) 3375-31-3/CAT
L2 12 1144-74-7/PRO (L) 3375-31-3/CAT
=> D BIB FHIT 1-12
:
← CASREACT ファイルの全回答を BIB 表示形式 (書誌情報) と FHIT 表示形式で表示
* FHIT 表示形式: ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
```

検索例 1 の検索

```
=> FILE REGISTRY
=> S 3375-31-3
L3 1 3375-31-3
=> FILE CAPLUS
=> S L1/P
L4 215 L1/P
=> S L3/CAT
L5 10299 L3/CAT
(L3 (L) CAT/RL)
=> S L4 AND L5
L6 18 L4 AND L5
=> S L6 NOT L2
L7 9 L6 NOT L2
← CASREACT ファイルの回答を NOT 演算して重複を除く
```

検索例 3 の検索

=> D BIB HITRN 1-9

← 全回答を BIB 表示形式 (書誌情報) と HITRN 表示形式で表示する

* HITRN 表示形式: ヒットした CAS 登録番号, そのロールとテキスト説明句

:
L7 ANSWER 2 OF 9 CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN
AN 2009:708522 CAPLUS [Full-text](#)
DN 151:220798
TI Phosphane-Free Palladium-Catalyzed Carbonylative Suzuki Coupling Reaction of Aryl and Heteroaryl Iodides
TIJP アリールとヘテロアリールヨードの無ホスファンのパラジウム触媒カルボニル鈴木カップリング反応 [機械翻訳]
AU Tambade, Pawan J.; Patil, Yogesh P.; Panda, Anil G.; Bhanage, Bhalchandra M.
CS Department of Chemistry, Institute of Chemical Technology (Autonomous), Mumbai, 400019, India
SO European Journal of Organic Chemistry (2009), (18), 3022-3025
CODEN: EJOCHF; ISSN: 1434-193X
PB Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
DT Journal
LA English
OS CASREACT 151:220798
IT **3375-31-3**
RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(preparation of biaryl ketones via phosphane-free palladium-catalyzed carbonylative Suzuki cross-coupling reaction of aryl/heteroaryl iodides with arylboronic acids in presence of carbon monoxide)
IT **1144-74-7P**
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of biaryl ketones via phosphane-free palladium-catalyzed carbonylative Suzuki cross-coupling reaction of aryl/heteroaryl iodides with arylboronic acids in presence of carbon monoxide)
OSC.G 15 THERE ARE 15 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (15 CITINGS)
RE.CNT 18 THERE ARE 18 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

ノイズのレコード

:
L7 ANSWER 7 OF 9 CAPLUS COPYRIGHT 2013 ACS on STN
AN 2002:888690 CAPLUS
DN 137:369827
TI Preparation of ketones from carboxylic acid anhydrides and boronic acids
IN Goossen, Lukas; Ghosh, Keya
PA Studiengesellschaft Kohle m. b. H., Germany
SO PCT Int. Appl., 32 pp.
CODEN: PIXXD2
DT Patent
LA German
FAN.CNT 1

目的の合成文献

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI WO 2002092547	A1	20021121	WO 2002-EP5067	20020508
W:	AE, AG, AL, AU, BA, BB, BG, BR, BZ, CA, CN, CO, CR, CU, CZ, DM, DZ, EC, EE, GD, GE, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KP, KR, LC, LK, LR, LT, LV, MA, MG, MK, MN, MX, NZ, OM, PH, PL, RO, SG, SI, SK, TT, UA, US, UZ, VN, YU, ZA, AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM			
RW:	GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW, AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, TR, BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG			
DE 10123909	A1	20021121	DE 2001-10123909	20010517
CA 2447232	A1	20021121	CA 2002-2447232	20020508
AU 2002308073	A1	20021125	AU 2002-308073	20020508
EP 1389176	A1	20040218	EP 2002-769473	20020508
R:	AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT, IE, SI, LT, LV, FI, RO, MK, CY, AL, TR			
JP 2004529954	T	20040930	JP 2002-589433	20020508
US 20040186321	A1	20040923	US 2004-477653	20040525
US 6864394	B2	20050308		
PRAI DE 2001-10123909	A	20010517		
WO 2002-EP5067	W	20020508		
OS CASREACT 137:369827				

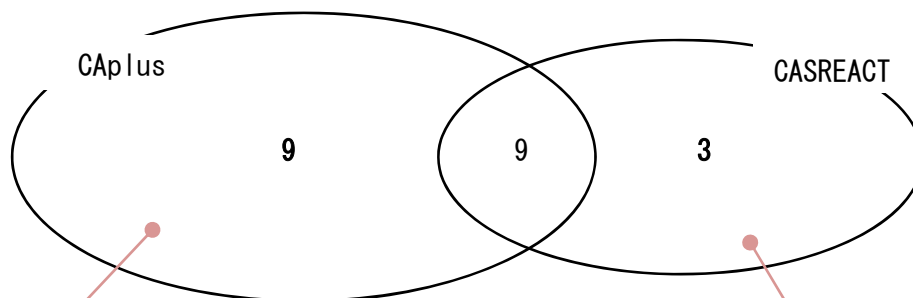
IT 3375-31-3
RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(prepn. of ketones from carboxylic acid anhydrides and boronic acids)

IT 1144-74-7P
RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(prepn. of ketones from carboxylic acid anhydrides and boronic acids)

OSC.G 1 THERE ARE 1 CAPLUS RECORDS THAT CITE THIS RECORD (1 CITINGS)

RE.CNT 3 THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

:



CAplus ファイルのみでヒット

- ・ CASREACT ファイルに収録されていない (収録基準の違いなど)
- ・ ノイズ (索引されていた Pd 触媒が他の物質の合成に使われている文献)

CASREACT ファイルのみでヒット

- ・ CAplus ファイルでは触媒が索引されていない

CASREACT ファイルと CAplus ファイルを併用することで CAplus ファイルでも目的の合成文献を得ることができた。また、両ファイルで重複することなく合成文献を出力することができた。

本日の内容

- ・ 合成文献検索に使うファイル
- ・ CASREACT ファイルと CAplus ファイルを使った合成文献検索
- ・ ReaxysFile ファイルの合成文献検索

他ファイルの併用



CASREACT ファイルと CAplus ファイルを調査したが、目的の合成文献が見つからなかった

〇〇の合成に関する文献をできるだけ入手したい

反応条件の異なる合成文献が欲しい

他ファイルの併用をおすすめします

STN で合成文献検索可能なファイル

各ファイルの特徴

(◎ 向いている, ○ 併用するとよい, × 向いていない)

	CAplus /CA	CASREACT	Reaxys File	Chem InformRX	DJSM	WPI
古い年代	◎	○	◎	×	×	×
合成特許	◎	◎	○	×	○	◎
有機物質	◎	◎	◎	◎	◎	◎
医薬品	◎	○	○	○	○	◎
無機物質	◎	×	◎	×	×	○
ポリマー	◎	×	△	×	◎	◎

ReaxysFile ファイルでは, **CAplus ファイル**に収録されていない合成文献を検索できます

ReaxysFile vs CASREACT

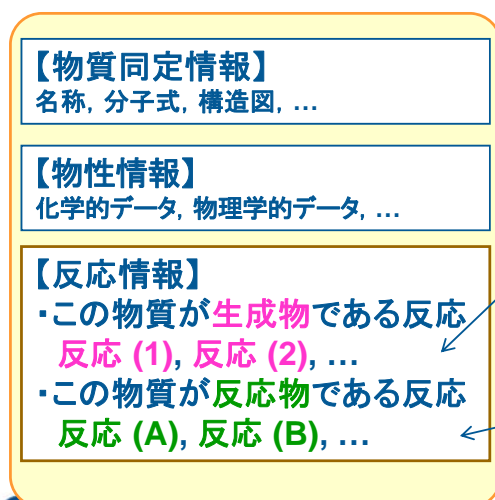
	ReaxysFile	CASREACT
収録対象	有機・有機金属化合物・無機化合物 (反応に関与するすべての物質)	有機・有機金属化合物 (反応に関与するすべての物質)
収録年代	1771 年以降	1840 年以降
収録源	雑誌・特許	雑誌・特許
反応数	約 3,100 万件 (一段階反応)	5,360 万件以上 (多段階反応を含む)
レコード単位	物質単位/反応単位	文献単位
特長	<ul style="list-style-type: none"> 古い年代の合成文献検索 構造検索以外の検索語料は無料 	<ul style="list-style-type: none"> 反応質問式による構造検索 反応スキームの表示
備考	<ul style="list-style-type: none"> 構造質問式による反応検索はできない 反応スキームが表示されない ポリマーの収録は 2000 年以降 	<ul style="list-style-type: none"> 工業的反応やポリマーの重合反応は収録されていない

ReaxysFile ファイルのレコード構成

レコード形態は 2 種類

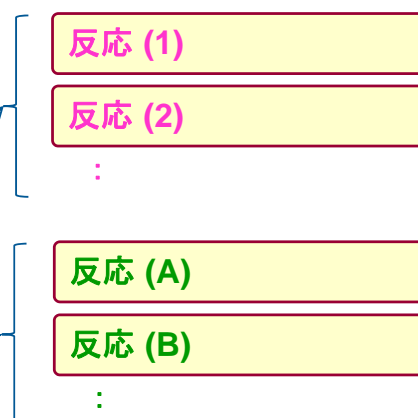
物質レコード

1 レコード = 1 物質



反応レコード

1 レコード = 1 反応



ReaxysFile ファイルの検索とレコード

- ◆ 反応物または生成物のみ指定した検索
- ◆ 目的物質の合成文献をすべて確認したい



物質レコード

- ◆ 反応物と生成物の両方を指定した検索
- ◆ 触媒や溶媒を限定した検索
- ◆ 高収率の反応情報に関する文献が欲しい



反応レコード

反応物/生成物を指定した検索方法

反応物または生成物を指定した検索

➡ 物質レコード

物質同定情報 (名称, 分子式など), 構造, 物性データで検索

【ポイント】

回答を表示する前に**反応情報をもつレコードに限定**する

=> **S L# AND RXREA/FA**

=> **D FRXREA**

該当物質が**反応物**である合成文献が欲しい
(1 表示料金)

=> **S L# AND RXPRO/FA**

=> **D FRXPRO**

該当物質が**生成物**である合成文献が欲しい
(1 表示料金)

検索例 5

ReaxysFile ファイルで p-ニトロベンゾフェノン
(1144-74-7) の合成文献を検索する



【検索例 5】

ReaxysFile ファイルで p-ニトロベンゾフェノン (1144-74-7) の合成文献を検索する



p-ニトロベンゾフェノンが生成物である反応情報の存在を検索で確認してから表示する

=> FILE REAXYSFILE

=> S 1144-74-7 ← CAS 登録番号で p-ニトロベンゾフェノンを検索
L1 2 1144-74-7

【ポイント】
CAS 登録番号の他にも、
名称や分子式、構造 (有料) で
検索できる

=> S L1 AND RXPRO/FA ← p-ニトロベンゾフェノンが生成物である反応情報を持つレコードに限定
L2 1 L1 AND RXPRO/FA

=> SEL CN ← 化学物質名を抽出 (無料)
E1 THROUGH E8 ASSIGNED

=> D SEL ← 抽出した名称を表示して、L1 の物質を確認 (無料)

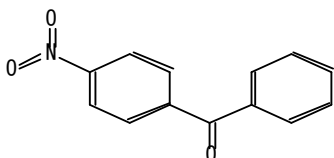
E1 1 (4-NITRO-PHENYL)-PHENYL-METHANONE/CN
E2 1 (4-NITROPHENYL) (PHENYL) METHANONE/CN
E3 1 P-NITROBENZOPHENONE/CN
E4 1 4-BENZOYLNITROBENZENE/CN
E5 1 4-NITRO-BENZOPHENON/CN
E6 1 4-NITRO-BENZOPHENONE/CN
E7 1 4-NITROBENZOPHENONE/CN
E8 1 4-NITROPHENYL (PHENYL) METHANONE/CN

=> D IDE ← IDE 表示形式で物質同定情報を表示 (任意: 780 円)

FRXPRO 表示形式で反応情報を表示する前に、何件の反応が含まれているか確認する

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2013 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 1912753
Basic Pref. RN (BPR): 1144-74-7
CAS Reg. No. (RN): 1144-74-7
Chemical Name (CN): 4-nitro-benzophenone, p-nitrobenzophenone,
:



Field Availability:

【フィールドの存在】
物質レコードに含まれるフィールド、物性値データ

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
:		

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	350
RX.RAN	Reactant AN	239
RX.PAN	Product AN	111

【反応情報の存在】
RX : 該当物質が生成物/反応物である反応
RX.RAN : 該当物質が反応物である反応
RX.PAN : 該当物質が生成物である反応

p-ニトロベンゾフェノンが
生成物である反応は 111 反応

=> **D FRXPRO**← FRXPRO 表示形式で p-ニトロベンゾフェノンが生成物である
全反応情報を表示 (780 円)

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2013 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:
RX

Reaction ID (.ID):	27951184	
Reactant AN (.RAN):	1900508, 3530497, 4928175	← 反応物のレコード番号
Reactant (.RCT):	carbon monoxide, 4-methoxyphenylboronic acid, triphenylantimony(v) diacetate	← 反応物の名称
Product AN (.PAN):	1912753	← 生成物のレコード番号
Product (.PRO):	4-nitro-benzophenone	← 生成物の名称
React. Struct. Keywords (.SKW):	nonmapped reaction	
Record type (.RTYP):	full reaction, has preparation	
No. of React. Details (.NVAR):	1	← Reaction Details の数
Preparation reactants (.BLB):	1900508, 3530497, 4928175, 1912753	
Det. React. reactants (.BLC):	1900508, 3530497, 4928175, 1912753	
No. of References (.NUMREF):	1	← 反応情報の出典の数

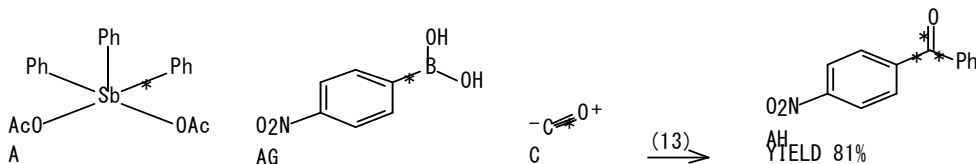
Reaction Details:
RX

Reaction RID (.RID):	27951184.1	
Reaction Classification (.CL):	Preparation	
Yield (.YDT):	81 percent	← 収率
Catalyst (.CAT):	tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)	← 触媒の名称
Solvent (.SOL):	1-methyl-pyrrolidin-2-one	← 溶媒の名称
Time (.TIM):	6	← 反応時間
Temperature (.T):	60 Cel	← 反応温度
Catalyst AN (.CAAN):	11604118	← 触媒のレコード番号
Product AN (.PRAN):	1912753	
Solvent AN (.SOLAN):	106420	← 溶媒のレコード番号
Number of R. steps (.STP):	1	← 反応ステップ数
Yield numerical (.YDN):	81	
Product (.YPRO):	4-nitro-benzophenone	
Reference(s):		← 反応情報の出典
1. Qin, Weiwei; Yasuike, Shuji; Kakusawa, Naoki; Kurita, Jyoji, Journal of Organometallic Chemistry, CODEN: JORCAI, 693(17), <2008>, 2949 - 2953		

〈参考〉 ReaxysFile ファイルでは化合物の構造図や反応スキームが表示されない

(例) AN 149:355485 (Journal of Organometallic Chemistry (2008), 693(17), 2949-2953)

RX(13) OF 14 A + AG + C ==> AH



RX(13) RCT A 1538-62-1, AG 24067-17-2, C 630-08-0
 PRO AH 1144-74-7
 CAT 14221-01-3 Pd(PPh3)4
 SOL 872-50-4 NMP
 CON 6 hours, 60 deg C, 1 atm
 NTE mechanism studied, Suzuki-type cross-coupling

Reaction:

反応 107 番目

RX

Reaction ID (.ID): 626703
 Reactant AN (.RAN): 473192, 969212 ← 反応物のレコード番号
 Reactant (.RCT): 4-nitro-benzoyl chloride, benzene ← 反応物の名称
 Product AN (.PAN): 1912753 ← 生成物のレコード番号
 Product (.PRO): 4-nitro-benzophenone ← 生成物の名称
 React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction
 Record type (.RTYP): full reaction, has preparation
 No. of React. Details (.NVAR): 8 ← Reaction Details の数
 Chem. Behav. reactants (.BLA): 473192, 969212, 1912753
 Preparation reactants (.BLB): 473192, 969212, 1912753
 Det. React. reactants (.BLC): 473192, 969212, 1912753
 No. of References (.NUMREF): 11 ← 反応情報の出典の数

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 626703.1 ← 1 個目の Reaction Details
 Reaction Classification (.CL): Preparation
 Yield (.YDT): 95.2 percent ← 収率
 Temperature (.T): 250 Cel ← 反応温度
 Product AN (.PRAN): 1912753
 Number of R. steps (.STP): 1 ← 反応ステップ数
 Yield numerical (.YDN): 95.2
 Product (.YPRO): 4-nitro-benzophenone
 Reference(s): ← 反応情報の出典
 1. Mil'to, V. I.; Mironov, G. S.; Kopeikin, V. V., Zhurnal Organicheskoi Khimii, CODEN:
 JOCY99, 25(11.2), <1989>, 2372 - 2374, 2139 - 2141

RX

Reaction RID (.RID): 626703.5 ← 5 個目の Reaction Details
 Reaction Classification (.CL): Chemical behaviour
 Yield (.YDT): 75 percent ← 収率
 Catalyst (.CAT): anhydrous iron chloride ← 触媒の名称
 Time (.TIM): 0.579167 ← 反応時間
 Temperature (.T): 109 Cel ← 反応温度
 Other Conditions (.COND): Irradiation
 Subject Studied (.SUBJ): Product distribution / selectivity
 Location (.LCN): Page column 17-18 ← 特許記載位置
 Catalyst AN (.CAAN): 11323458 ← 触媒のレコード番号
 Example title (.TI): Examples 32 to 35

反応フルテキスト
(実施例) 中のキーワード

In these examples, the activation, under a microwave field, of acylation reactions on a non-activated aromatic substrate such as benzene is demonstrated. A flask equipped with a cooling agent and a CaCl₂ tube is charged with: 40 mmol benzene, 10 mmol acylating agent, x mol percent, expressed with respect to the acylating agent, of a catalyst, the nature of which is stated in the following table VI. The reaction mixture is heated under a microwave field for a period shown in the table. After treatment according to example 1 (extraction solvent CH₂Cl₂) and removal of the benzene, the organic products are analysed by GC, GC/MS and NMR. The yields of aromatic ketone are expressed in product isolated and are shown in relation to the minority reactant (RCOCl). In the case of example 33, the molar ratio between the benzene and the benzoyl chloride is only 2:1.

Example label (.LB): 34
 Product AN (.PRAN): 1912753
 Number of R. steps (.STP): 1
 Yield numerical (.YDN): 75
 Product (.YPRO): 4-nitro-benzophenone
 Reference(s): ← 反応情報の出典
 1. Patent: Method for acylation or sulphonylation of an aromatic compound; for details see display format ALLPAT

ReaxysFile ファイルで p-ニトロベンゾフェノンの合成文献が得られた

詳細な条件を指定した検索方法

反応物と生成物を指定したい
触媒や溶媒を指定したい
収率で限定したい

➡ 反応レコード

化合物のレコード番号で検索

□ よく利用される反応検索フィールド*

検索フィールド	内容	種類
/RX.RAN	反応物のレコード番号	反応情報
/RX.PAN	生成物のレコード番号	
/RX.CAAN	触媒のレコード番号	反応の詳細 (反応条件)
/RX.SOLAN	溶媒のレコード番号	
/RX.YDN	収率	

JAICI
化学情報協会

*その他の反応検索フィールドは「ReaxysFile ファイル」参照
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-reaxys.pdf>

詳細な条件を指定した検索方法

(例) Ni 触媒を用いた 3-クロロアニリンの合成文献検索

=> FILE REAXYSFILE

=> S 605969/RX. PAN AND 4122946/RX. CAAN

L1 5 605969/RX. PAN AND 4122946/RX. CAAN

=> D RX 1-5 ← ヒットした反応を **RX 表示形式** で表示

化合物のレコード
番号で検索

反応レコードは 1 レコード = 1 反応
1 反応あたり 1 表示料金が課金される

反応レコードと近接演算子

反応情報

Reaction:
RX
Reaction ID: 18639468
Reactant AN (.RAN): 6767727 ← 反応物のレコード番号
Reactant (.RCT): m-Cl-phenyl thiocarbamide
Product AN (.PAN): 605969 ← 生成物のレコード番号
Product (.PRO): 3-chloro-aniline
React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction
Record type (.RTYP): full reaction, has multi-step
Number of Bond Changes (.NBC): 4
No. of React. Details (.NVAR): 1 ← 「反応の詳細」の数
Det. React. reactants (.BLC): 6767727, 605969
No. of References (.NUMREF): 1 ← 出典文献の数

AND

反応の詳細

Reaction Details:
RX (P): 同一反応条件
Reaction RID (.RID): 18639468.1
Reaction Classification (.CL): Multi-step reaction
Catalyst (.CAT): nickel
Solvent (.SOL): ethanol, benzene
Catalyst AN (.CAAN): 4122946 ← 触媒のレコード番号
Solvent AN (.SOLAN): 1718733, 969212 ← 溶媒のレコード番号
Number of R. steps (.STP): 2 ← 反応ステップ数
Multistep details (.MTEXT): 1: 3.8 g / Raney nickel / benzene / 2.5 h / Heating
2: Raney nickel / ethanol / この反応の出典情報

Reference(s):
1. Ali, M. Umar; Meshram, H. M.; Paranjpe, M. G., Journal of the Indian Chemical Society, CODEN: JICSAH, 62(9), <1985>, 666 - 669

ReaxysFile ファイルのまとめ

- 2つのレコード形態がある
物質レコードと反応レコード
- 利用する検索フィールドによって得られるレコードが異なる
物質同定情報・構造・物性値 : 物質レコード
反応関与物質・反応条件 : 反応レコード
- 目的に応じた検索フィールドを利用する
目的物質の合成文献を幅広く欲しい場合 : 物質レコード
反応関与物質や反応条件を指定したい場合 : 反応レコード

まとめ

- CASREACT ファイル
有機化合物 (ポリマーを除く) の合成文献の検索
物質や反応条件を指定した検索
- CAplus ファイル
すべての化合物を対象とした合成文献の検索
幅広い分野の文献を対象にしたい場合
- ReaxysFile ファイル
古い年代の合成文献の検索
より網羅的に検索したいとき



【ポイント】 網羅的な合成文献検索を行いたい場合は
複数のファイルを併用する

参考資料のお知らせ

- ◆ 反応情報検索
http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_react.pdf
- ◆ 合成文献検索
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-synth.pdf>
- ◆ ReaxysFile ファイル
<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-reaxys.pdf>



■ ヘルプデスク

・ 化学情報協会（JAICI）の問い合わせ先

- ヘルプデスク（STN の技術的な内容について）

TEL 0120-003-462

FAX 03-5978-4090

E-mail support@jaici.or.jp

- そのほかの内容について（契約、住所・担当者変更など）

TEL 0120-151-462

FAX 03-5978-4090

E-mail customer@jaici.or.jp

JAICI
化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp