



■ 化学物質の検索と物性情報の表示 (検索例 : 4-Ethylaniline の物質同定情報, 沸点, 薬理学データ)

=> FILE REAXYSFILE

=> SET NOT DIS 3000

NOTICE SET TO 3000 JAPANESE YEN FOR DISPLAY COMMAND  
SET COMMAND COMPLETED

【おすすめ】 SET NOTICE DISPLAY (金額)

設定した金額を超える表示料が課金される場合に、警告を表示する設定。  
\* ReaxysFile ファイルのデータを表示する際、フィールド毎に表示料が課金され、表示が高額になる可能性があるため、警告の設定をする。

=> S 4-ETHYLANILINE/CN

L1 1 4-ETHYLANILINE/CN

=> D IDE FBP FPHARM

物質同定情報の表示形式  
IDE : 同定情報

物性情報の表示形式

F<物性の表示フィールドコード> : 物性情報の表示 (全データ)

(例) FMP : 融点 (全データ)

FVP : 蒸気圧 (全データ)

\* F を省略すると 50 データまで表示

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2013 Elsevier Properties SA. on STN

レコード番号  
ヘリック優先 CAS 登録番号  
CAS 登録番号  
化学物質名

Accession Number (AN): 774319 4-Ethylaniline を示す番号  
Basic Pref. RN (BPR): 589-16-2  
CAS Reg. No. (RN): 589-16-2  
Chemical Name (CN): 4-ethyl-aniline, p-ethyl aniline,  
4-ethylaniline, 4-aminoethylbenzene,  
4-ethylbenzeneamine, 4-ethylphenylamine,  
(4-ethyl)aniline

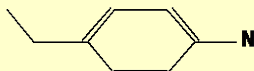
Autonom 名  
示性式  
分子量  
分子量  
化学物質タイプ  
標準 InChIKey  
InChIKey

Autonom Name (AUN): 4-Ethyl-phenylamine IDE 表示形式  
Lin. Struct. Formula (LSF): NH2C6H4CH2CH3  
Molec. Formula (MF): C8 H11 N  
Formula Weight (FW): 121.182  
Compound Type (CTYPE): isocyclic  
InChI Key: (INCHI): HRXZRAXKKNUKRF-UHFFFAOYSA-N  
Alternate InChI Key: (AINCHI): HRXZRAXKKNUKRF-UHFFFAOYAA

関連マルケシ構造番号の数  
データ入力日  
データ更新日

Markush Ref. Count (MARKREF): 6  
Entry Date (DED): 1989/06/29  
Update Date (DUPD): 2011/03/18

構造



フィールドの存在

Field Availability:

コード ↓ Code	フィールド名 ↓ Name	データ数 ↓ Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7

物性の  
表示フィールドコード

ASSM	Association (MCS)	4
BP	Boiling Point	26
CDER	Chemical Derivative	6
CIP	Electron Binding	1
OTHE	Other Thermochemical Data	1
PHARM	Pharmacological Data	4
POT	Electrochemical Characteristics	1
POW	Partition octan-1-ol/water (MCS)	3
PSD	Patent Specific Data	7

【物質同定情報の主な検索】

CAS 登録番号 (なし, または /RN)  
=> S 589-16-2

名称 (/CN)  
=> S P-ETHYL ANILINE/CN

分子式 (/MF)  
=> S C8H11N/MF

部分名称 (/CNS)  
=> S ETHYLPHENYL?/CNS

反応情報のデータ数

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	818
RX.RAN	Reactant AN	755
RX.PAN	Product AN	63

沸点

Boiling Point:

沸点 ↓ Value (BP) (Cel)	圧力 ↓ Press. (.P) (Torr)	参考文献番号 ↓ Ref.
214		1
134 - 135	60	2
92	10	3
:		
216 - 216.5	769	24
212		25

FBP 表示形式

表中の数値も検索可能  
(例) => S 214/BP

表の同一行中の数値は (P) 演算子でリンクできる  
(例) => S 215-220/BP (P) 760<=BP.P

参考文献

Reference(s):

- Selvakumar, S.; Easwaramurthy, M.; Raju, G. J., Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry, CODEN: IJSBDB, 46(4), <2007>, 713 - 715
- Ono, Aoi; Suzuki, Nobuko; Kamimura, Junko, Synthesis, CODEN: SYNTBF(8), <1987>, 736 - 738
- Benattar et al., Journal de Physique (Paris), CODEN: JOPQAG, 39, <1978>, 1233
- :
- Behal; Choay, Bulletin de la Societe Chimique de France, CODEN: BSCFAS, <3> 11, <1894>, 210, Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences, CODEN: COREAF, 118, <1894>, 424
- Hofmann, A. W., Chemische Berichte, CODEN: CHBEAM, 7, <1874>, 527

薬理学データ

効果  
生物種, 試験系  
投与種類  
方法, 注釈

Pharmacological Data:

PHARM

FPHARM 表示形式

Effect (.E): antifungal

Species or Test-System (.SP): Saccharomyces cerevisiae

Kind of Dosing (.KD): title comp. dissolved in EtOH

Method, Remarks (.MR): recombinant yeast assay; strain contains cDNA of hER- $\alpha$ ; incubated with title comp. for 3, 5 and 7 days at 30 deg C; measured spectrophotometrically at 610 nm; five-day LC50

Further Details (.FD): hER- $\alpha$ : human  $\alpha$ -estrogen receptor; LC50: concentration eliciting 50 percent reduction in turbidity at 610 nm; 3 replicates; diluted to total of 12 concentrations

Type (.TYP): LC50

Value of Type (.V): 4.95E-3 mol/l

Results (.RE): LC50 identical on day 3, 5 and 7

Reference(s):

- Hamblen, Elizabeth L.; Cronin, Mark T. D.; Schultz, T. Wayne, Chemosphere, CODEN: CMSHAF, 52(7), <2003>, 1173 - 1182
- :

詳細

タイプ  
タイプの値  
結果  
参考文献

■ 主な物性の表示フィールドコード

コード	内容	コード	内容
BP	沸点	HFOR	生成エンタルピー
COEV	環境への濃縮	MP	融点
CP	定圧熱容量	MSUS	磁化率
CRD	臨界密度	ORP	旋光度
DE	解離指数 (pK)	PHARM	薬理学データ
DEN	液体密度	POW	オクタノール/水分配率
DIC	比誘電率	RI	屈折率
DM	双極子モーメント	SLB	溶解度
DV	粘性率	UVS	紫外・可視スペクトル
ECTOX	生態毒性	VP	蒸気圧

\* すべての表示フィールドコードは, ReaxysFile ファイルサマリーシートを参照  
<http://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/db.html#r>

■ 反応情報の表示 (検索例 : 4-Ethylaniline の反応情報)

=> FILE REAXYSFILE  
 => S 4-ETHYLANILINE/CN  
 L1 1 4-ETHYLANILINE/CN  
 => D FRX

反応情報の表示形式

FRX : FRXPRO と FRXREA の両方の反応  
 FRXPRO : 目的物が生成物となる反応  
 FRXREA : 目的物が反応物となる反応

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2013 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

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  
 レコードタイプ  
 反応詳細の数  
 文献数

Reaction ID (.ID): 29649508  
 Reactant AN (.RAN): 607777  
 Reactant (.RCT): 4-nitrophenylacetaldehyde  
 Product AN (.PAN): 774319  
 Product (.PRO): 4-ethyl-aniline  
 React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction  
 Record type (.RTYP): full reaction, has preparation  
 No. of React. Details (.NVAR): 1  
 Preparation reactants (.BLB): 607777, 774319  
 Det. React. reactants (.BLC): 607777, 774319  
 No. of References (.NUMREF): 1

FRXPRO :  
 目的物が生成物となる反応

Reaction Details:

RX

反応の詳細情報

反応詳細 ID  
 反応分類  
 収率  
 試薬  
 溶媒  
 時間  
 その他の条件  
 記載位置  
 生成物レコード番号  
 試薬レコード番号  
 溶媒レコード番号  
 反応ステップ数  
 収率  
 生成物  
 出典

Reaction RID (.RID): 29649508.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 94 percent  
 Reagent (.RGT): triethylsilane, palladium dichloride  
 Solvent (.SOL): ethanol  
 Time (.TIM): 1  
 Other Conditions (.COND): Inert atmosphere, Reflux  
 Location (.LCN): experimental part  
 Product AN (.PRAN): 774319  
 Reactant AN (.RCAN): 1098278, 8128173  
 Solvent AN (.SOLAN): 1718733  
 Number of R. steps (.STP): 1  
 Yield numerical (.YDN): 94  
 Product (.YPRO): 4-ethyl-aniline  
 Reference(s):  
 1. Mirza-Aghayan, Maryam; Rahimifard, Mahshid; Bolourtchian, Mohammad; Boukherroub, Rabah, Applied Organometallic Chemistry, CODEN: AOCHEX, 24(6), <2010>, 477 - 480

Reaction:

RX

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  
 レコードタイプ

Reaction ID (.ID): 24344870  
 Reactant AN (.RAN): 385653, 774319  
 Reactant (.RCT): chloroformic acid ethyl ester, 4-ethyl-aniline  
 Product AN (.PAN): 2715866  
 Product (.PRO): N-Methyl-4-ethylaniline  
 React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction  
 Record type (.RTYP): full reaction, has preparation

FRXREA :  
 目的物が反応物となる反応

Reaction Details:

RX

反応の詳細情報

反応詳細 ID  
 反応分類  
 試薬  
 溶媒  
 反応の見出し  
 実験項  
 反応記載位置  
 試薬のレコード番号  
 溶媒のレコード番号  
 反応ステップ数  
 出典

Reaction RID (.RID): 24344870.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Reagent (.RGT): sodium hydroxide, sodium hydrogencarbonate, triethylamine  
 Solvent (.SOL): tetrahydrofuran, diethyl ether, dichloromethane, water, ethyl acetate  
 Example title (.TI): N-Methyl-4-ethylaniline:  
 Fulltext of reaction (.TXT): Preparation Example 15  
 N-Methyl-4-ethylaniline:  
 4-Ethylaniline (2.4 g, 20 mmol) was dissolved in dichloromethane (150 ml), and  
 Example label (.LB): P.15  
 Reactant AN (.RCAN): 11342940, 4153970, 605283  
 Solvent AN (.SOLAN): 102391, 1696894, 1730800, 3587155, 506104  
 Number of R. steps (.STP): 1  
 Reference(s):  
 1. Patent: Epoxysuccinamide derivative or salt thereof; for details see display format ALLPAT

実験項の情報を確認できる  
 場合がある