

CAS STNext®

物質・物性・反応検索に！ REAXYSFILESUB/REAXYSFILEBIB ファイルセミナー

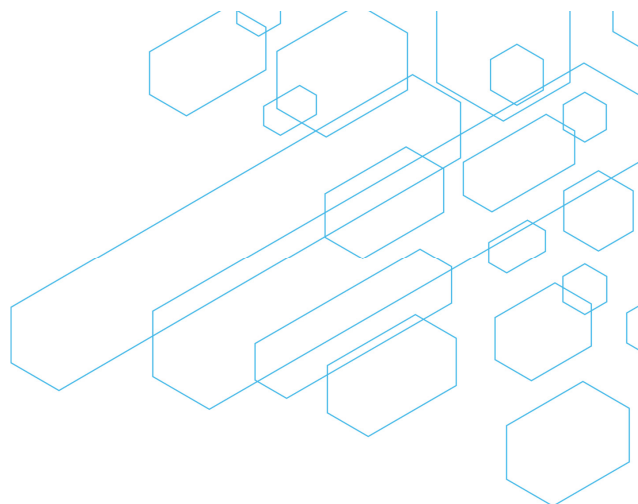
化学情報協会 情報事業部

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- はじめに
- REAXYSFILESUB ファイルの概要
 - 物質同定情報
 - 物性情報
 - 反応情報
- REAXYSFILEBIB ファイルの概要



© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.





はじめに

3 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



REAXYFILESUB ファイルと REAXYFILEBIB ファイル

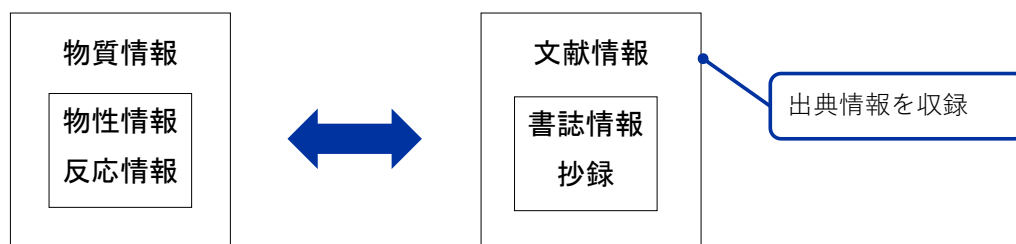
REAXYFILESUB ファイルは、物質、物性、反応情報を収録する化学物質情報データベースである

REAXYFILEBIB ファイルは、書誌情報、文献情報を収録する文献データベースである

– REAXYFILESUB ファイルの出典情報は、REAXYFILEBIB ファイルで確認できる

REAXYFILESUBファイル

REAXYFILEBIBファイル



4 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.





REAXYSFILESUB ファイルの概要

REAXYSFILESUB ファイル

概要

REAXYSFILESUB ファイルは、様々な化学物質の物質同定情報、物性情報、反応情報を収録する化学物質情報データベースである

- 製作者：Elsevier Information Systems GmbH
- レコード構成：化学物質単位
- 収録情報：化学物質同定情報、物性情報、反応情報、出典情報
- 収録期間：1771 年～
- 収録件数：5,420 万件
- 更新頻度：週 2 回
- 特長：特許、雑誌などから物質同定情報、物性情報、反応情報を収録している
出典情報は REAXYSFILEBIB ファイルに収録され、書誌情報・抄録を確認できる

レコード構成

物質に関連する、複数の物性情報、反応情報が収録されている



- レコード番号、化学物質名、分子式、構造図
- 収録物性リストとデータ数、収録反応の有無とデータ数
- 約 110 以上の物性情報と出典情報
 - 物理的特性
 - 凝集状態
 - その他のデータ
 - 多成分系データ
 - 分光学的データ
- 反応情報と出典情報
 - この物質が反応物/生成物である反応、反応の詳細

レコード例

AN 26969215 REAXYSFILESU
RN 1421341-46-9
CN cajanolactone A
MF C21 H20 O4
CMF C21 H20 O4
LSF C21H2004
INCHI JCWMYWSAQHRMAA-UHFFFAOYSA-N
MW 336.387
MARKREF.CNT 0
REC 12
ED Entered STN: 14 Jul 2020
Last updated on STN: 28 Feb 2024

物質同定情報

物質のレコード番号

物質名や分子式、
構造図を収録

収録物性・反応概要

PROPERTIES

- MP Melting Point (5) (PHYS)
- IR IR spectroscopy (3) (SPEC)
- MS Mass Spectrometry (7) (SPEC)
- NMR NMR spectroscopy (16) (SPEC)
- UVS UV/VIS spectroscopy (3) (SPEC)
- CPD Crystal Property Description (2) (STATE)
- FINFO1 Further Information (1) (FURTHER)
- FINFO2 Further Information (15) (FURTHER)
- INP Isolation from Natural Product (8) (FURTHER)
- LB Substance Label (3) (FURTHER)
- FA.RX RX.ID; RX.PAN; RX.RAN (7)

収録物性の概要。
() はデータ数と
物性カテゴリー

収録反応の概要。
() はデータ数

レコード例

Melting Point (5)

Value	Solvent	Location	Ref(s)
(MP)	(.SOL)	(.LO)	(REF)
(Cel)			

Physical Properties (物理的特性)
- Melting Point (融点)

物性情報

Value	Solvent	Location	Ref(s)
154	methanol	supporting informati	1
154		on	
127 - 129			
125 - 127			
127 - 129			

Spectroscopy (分光学的データ)
- IR Spectroscopy (赤外分光法)

IR spectroscopy (3)

Keyword	Original Text	Solvent	Location	Ref(s)
(.KW)	(.TX)	(.SOL)	(.LO)	(REF)

Bands; Spectrum | IR (KBr, cm^{sup}>-1</sup> | potassium bromide | supporting informati | 1; 2
| sup>): 3423, 2975, 1 | on |
| 688, 1631, 1612, 157 | | |

Bands | | 5, 1499, 1380 | | |
Bands | | potassium bromide | | 3
Bands | | potassium bromide | | 4

1. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vol. 24, No.2 arn.271
2. AN 73103391: Journal: He, Qi-Fang et al., Org. Lett. (2018) Vol. 20, No.3, pp. 876 - 879
3. AN 66232552: Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J. Org. Chem. (2015) Vol. 2015, No.8, pp. 1797 - 1803
4. AN 63563249: Journal: Chen, Wen-Zhong et al., Org. Lett. (2014) Vol. 25, No.5, pp. 749 - 751

1. AN 73103391: Journal: He, Qi-Fang et al., Org. Lett. (2018) Vol. 20, No.3, pp. 876 - 879
2. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vol. 24, No.2 arn.271
3. AN 66232552: Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J. Org. Chem. (2015) Vol. 2015, No.8, pp. 1797 - 1803
4. AN 63563249: Journal: Chen, Wen-Zhong et al., Org. Lett. (2014) Vol. 25, No.5, pp. 749 - 751

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイル
のレコード番号

レコード例

Crystal Property Description (2)

Value	Location	Ref(s)
(CPD)	(.LO)	(REF)
(--)		

colourless | supporting informati | 1; 2
| on |

colourless | | 3

1. AN 66232552: Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J. Org. Chem. (2015) Vol. 2015, No.8, pp. 1797 - 1803
2. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vol. 24, No.2 arn.271
3. AN 73103391: Journal: He, Qi-Fang et al., Org. Lett. (2018) Vol. 20, No.3, pp. 876 - 879

Aggregation State (凝集状態)
- Crystal Property Description (結晶性状)

Isolation from Natural Product (8)

Value	Location	Ref(s)
(INP)	(.LO)	(REF)
(--)		

Cajanus cajan (Linn. | supporting informati | 1
) Millsp. (Fabaceae) | on

, leaves; collected from Lingao County, Hainan Province, People's Republic of China; October, 2014

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

leaves of Cajanus cajan; collected from Wenshan County, Yunnan Province, China

Further Properties (その他の物性)
- Isolation from Natural Product (天然物からの単離)

出典情報

1. AN 117864262: Journal: Tan, Ling-Xuan et al., Fitoterapia (2022) Vol. 160 arn.105229
2. AN 75806475: Journal: Liu, Shan et al., Molecules (2019) Vol. 24, No.2 arn.271

レコード例

Reaction:

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

Reaction Details:

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

反応情報

該当物質が反応物である反応

反応の詳細

出典情報

レコード例

Reaction:

Reaction ID:	40217603
Reactant AN (.RAN):	26969214
Reactant (.RCT):	6-methoxy-8-(3-methylbut-2-enyloxy)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one
Product AN (.PAN):	26969215; 28245859; 28245874
Product (.PRO):	8-hydroxy-6-methoxy-5-(3-methylbut-2-en-1-yl)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; 8-hydroxy-6-methoxy-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; C21H20O4
Reference Count:	1

Reaction Details:

Reaction RID:	40217603.1
Reaction Classification (.CL):	Preparation
Product AN (.PRAN):	26969215; 28245859; 28245874
Solvent AN (.SOLAN):	1730800
Product:	8-hydroxy-6-methoxy-5-(3-methylbut-2-en-1-yl)-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; 8-hydroxy-6-methoxy-3-phenyl-1H-isochromen-1-one; C21H20O4
Reagent:	montmorillonite K10
Solvent:	dichloromethane
Temperature:	0 - 20 Cel
Time:	1.5 s
Yield:	30 percent; 20 percent; 18 percent
Yield Numerical:	30; 20; 18
Reference(s):	66232552; Journal: Sudarshan, Kasireddy et al., Eur. J. Org. Chem. (2015) Vol. 2015, No.8, pp. 1797 - 1803

反応情報

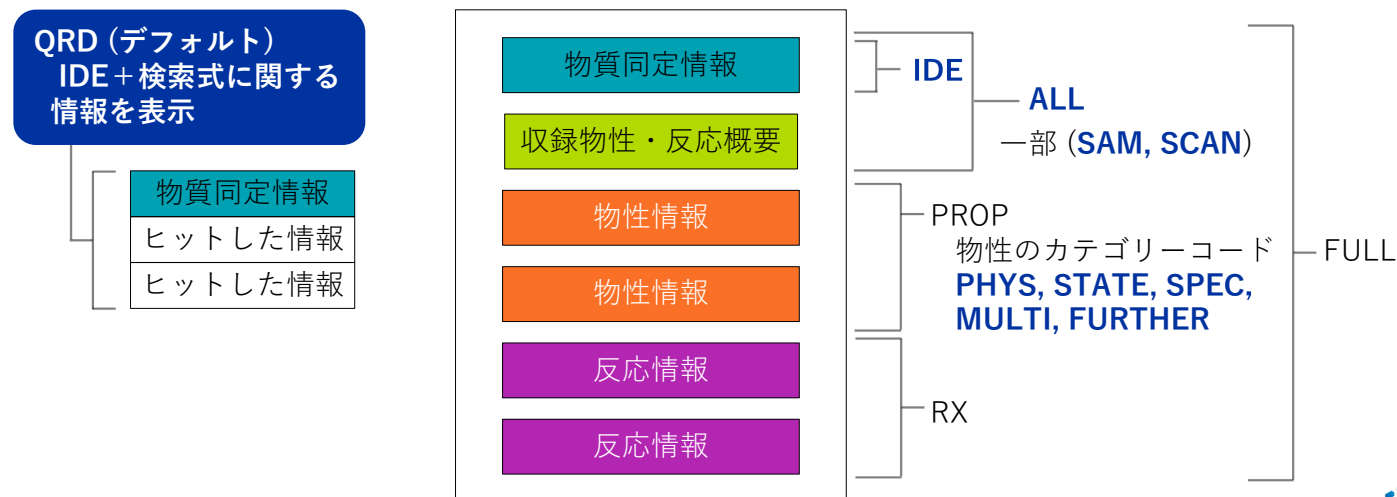
該当物質が生成物である反応

反応の詳細

出典情報

表示形式

情報量が非常に多くなる可能性があるため、QRD 表示形式を推奨する。あるいは、ALL 表示形式で収録物性・反応概要のデータ件数を事前に確認し、必要な情報を表示する。



REAXYSFILESUB ファイルの物質同定情報

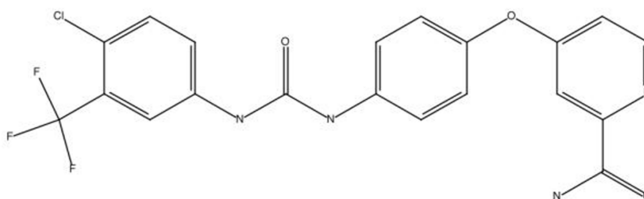
REAXYSFILESUB ファイルの物質同定情報

REAXYSFILESUB ファイルには、約 5,420 万件の化学物質のレコードが収録されている

レコード番号 AN 10488171 REAXYSFILESUB
CAS RN® RN 284461-74-1
化学物質名称 CN N-(4-chloro-3-(trifluoromethyl)phenyl)-N'-(4-(2-carbamoyl-4-pyridyloxy)phenyl)urea; 4-{4-[[[4-chloro-3-(trifluoromethyl)phenyl]amino]carbonyl]amino]phenoxy}-2-pyridine carboxamide; BAY 43-9007; 4-{4-[3-(4-Chloro-3-trifluoromethyl-phenyl)-ureido]-phenoxy}-pyridine-2-carboxylic acid amide

物質タイプ SD heterocyclic
分子式 MF C20 H14 Cl F3 N4 O3
成分分子式 CMF C20 H14 Cl F3 N4 O3
示性式 LSF C20H14ClF3N4O3
標準 InChi Key INCHI UAEBWZYTkimyrq-UHFFFAOYSA-N
InChi Key AINCHI UAEBWZYTkimyrq-PAIUyCELcz
分子量 MW 450.804
関連マルクージュ構造の数 MARKREF.CNT 5
文献数 REC 165
データ入力日 ED Entered STN: 14 Jul 2020
データ更新日 Last updated on STN: 24 Jun 2024

構造図



辞書検索の主な検索フィールド

辞書検索により化学物質を検索できる

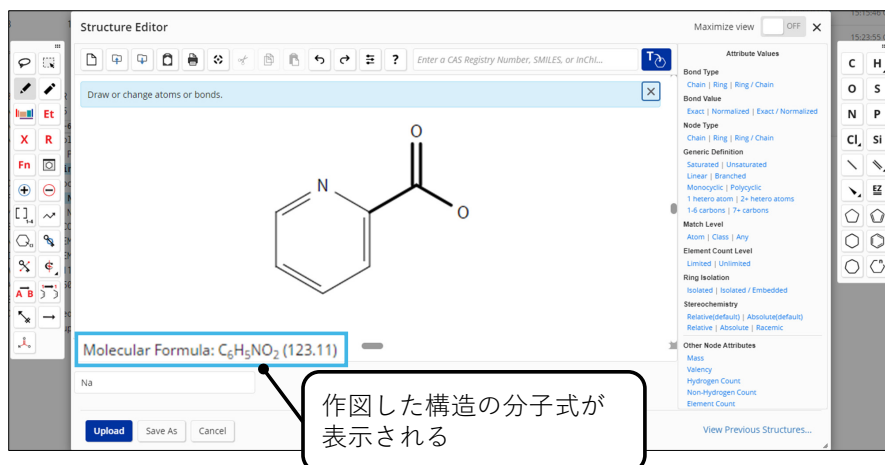
検索フィールド	内容	入力例	備考・収録率
/BI (またはなし)	基本索引 (CN, CNS から切り出された語)	S ?URIDIN? AND HYDROXY?	前方、後方、中間一致検索が 利用可能
/CN	化学物質名	S CHOLESTEROL?/CN	前方一致検索のみ利用可能 59%
/CNS	化学物質名セグメント	S ?CHOLESTERYL/CNS	前方、後方、中間一致検索が 利用可能
/RN	CAS RN® (CAS 登録番号)	S 100-03-8/RN	19%
/MF	分子式	S C4H9N5/MF	96%
/ELS	元素種	S L1 AND NA/ELS	
/SD	物質のタイプ	S HETEROCYCLIC/SD	24%
/REC	文献数	S L1 AND 100<=REC	

REAXYSFILESUB サマリーシート: <https://web.cas.org/marketing/solutions/stn-ip/stn-database/reaxysfilesub.pdf>

化学物質名称の注意点

化学物質検索 (/CN) を行うと複数の物質レコードがヒットすることがあるため、ノイズを防ぐには分子式 (/MF) などで限定するか、構造検索を行う

- 構造作図画面で化学物質を作図すると、分子式が表示されるので参考になる



検索例 1

ピリジン-2-カルボン酸の検索

```
>> FILE REAXYSFILESUB                                ← REAXYSFILESUB ファイルに入る
>> E PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN                    ← 化学物質名を/CN で EXPAND する
E1          1    PYRIDINE-2-CARBOXYLATEHEXADECYL-TRIMETHYL-AMMONIUM/CN
E2          1    PYRIDINE-2-CARBOXYLATETRIMETHYL-TETRADECYL-AMMONIUM/CN
E3         28 --> PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN
E4         21    PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID /CN
:
>> S E3
L1         28 "PYRIDINE-2-CARBOXYLIC ACID"/CN          ← E 番号で検索する

>> E C6H5NO2/MF                                       ← 分子式を確認する
E1          1    C6H5NO11U.2H2O.2NA/MF
E2          1    C6H5NO12V2.H2O.2K/MF
E3         291 → C6H5NO2/MF
E4          1    C6H5NO2.0C26H36AU6N10S6/MF
:

>> S E3
L2         291 C6H5NO2/MF                              ← E 番号で検索する

>> S L1 AND L2
L3          1 L1 AND L2                                ← L1 と L2 を AND 演算する
```

複数の回答がヒットした

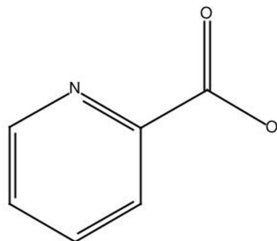
検索例 1

=> D ALL ← ALL 表示形式で表示する

物質同定情報

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN 109595 REAXYSFILESU
RN 98-98-6
CN 2-Picolinic acid; **pyridine-2-carboxylic acid**; 2-pyridinecarboxylic acid; Picolinic acid; **pyridine-2-carboxylic acid**; 2-pyridinic acid; **Pyridine-2-carboxylic acid**
SD heterocyclic
MF **C6 H5 N O2**
CMF C6 H5 N O2
LSF C5NH4CO2H
INCHI SIOXPEMLGUPBBT-UHFFFAOYSA-N
AINCHI SIOXPEMLGUPBBT-QDQILVOLCU
MW 123.111
MARKREF.CNT 50
REC 10552
ED Entered STN: 14 Jul 2020
Last updated on STN: 27 Jun 2024

検索例 1



PROPERTIES

- DEN Density of the Liquid (9) (PHYS)
- DE Dissociation Exponent (94) (PHYS)
- ELE Electrical Data (3) (PHYS)
- EM Electrical Moment (1) (PHYS)
- HCOM Enthalpy of Combustion (1) (PHYS)
- HFOR Enthalpy of Formation (3) (PHYS)
- HFUS Enthalpy of Fusion (1) (PHYS)
- HSB Enthalpy of Sublimation (3) (PHYS)
- IEP Isoelectric Point (2) (PHYS)
- LVSM Liquid/Vapor Systems (MCS) (1) (PHYS)
- :

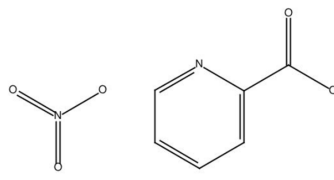
収録物性・反応概要

収録物性・反応概要は QRD 表示形式には含まれない。
ALL 表示形式には含まれる

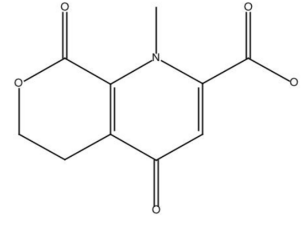
検索例 1 (参考)

<pre> => S L1 NOT L3 ← /CN でヒットした他の回答を確認する L4 27 L1 NOT L3 => D SCAN L4 27 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. CN pyridine-2-carboxylic acid; nitrate; Pyridin-2-carbonsaeure; Nitrat; Pyridine-2-carboxylic acid; compound with nitric acid MF C6 H5 N O2 . H N O3 SD heterocyclic </pre>	<pre> L4 27 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. CN 1-Methyl-1.4.5.6-tetrahydro-4.8-dioxo-8H-pyrano03C; 3.4-b03E; pyridine-2-carboxylic acid; 1-methyl-4,8-dioxo-4,5,6,8-tetrahydro- 1(i)H-pyrano[3,4-(i)b]pyridine-2-carboxylic acid; 1-Methyl-4,8-dioxo-4,5,6,8-tetrahydro-1H-pyrano[3,4-b]pyridine-2- carboxylic acid MF C10 H9 N O5 SD heterocyclic </pre>
--	---

各成分や部分構造の名称が ; (セミコロン) で区切られ収録されており、これが /CN の検索でヒットするためノイズが含まれる



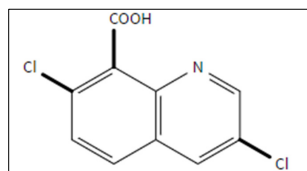
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):10
:



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

検索例 2

右の構造の物質を分子式を用いて検索する



<pre> => FILE REAXYSFILESUB => E C10H5CL2NO2/MF E1 4 C10H5CL2NO.CLH/MF E2 1 C10H5CL2NO.H/MF E3 156 --> C10H5CL2NO2/MF E4 60 C10H5CL2NO2S/MF E5 8 C10H5CL2NO2S2/MF : => S E3 L1 156 C10H5CL2NO2/MF => S L1 AND (DICHLORO AND ?CARBOXY?)/CNS L2 17 L1 AND (DICHLORO AND ?CARBOXY?)/CNS => SEL L2 CN E1 THROUGH E32 ASSIGNED </pre>	<pre> ← REAXYSFILESUB ファイルに入る ← 分子式を /MF で EXPAND する ← E 番号で検索する ← 化学物質名セグメント (/CNS) で部分名称を検索する ← SELECT コマンドで名称を抽出する </pre>
--	---

検索例 2

```
=> D SEL
E1      2      2,7-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN
E2      2      3,7-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID/CN
E3      2      4,7-DICHLORO-QUINOLINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN
E4      2      5,6-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID/CN
E5      2      5,7-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN
E6      2      6,8-DICHLORO-QUINOLINE-2-CARBOXYLIC ACID/CN
E7      2      6,8-DICHLORO-QUINOLINE-3-CARBOXYLIC ACID/CN
E8      2      6,8-DICHLORO-QUINOLINE-5-CARBOXYLIC ACID/CN
E9      2      7,8-DICHLORO-QUINOLINE-4-CARBOXYLIC ACID/CN
E10     1      DICHLORO-QUINOLIN-8-CARBOXYLIC ACID/CN
E11     1      DICHLORO-8-QUINOLINECARBOXYLIC ACID/CN
:
=> S L2 AND E2
L3      1 L2 AND "3,7-DICHLORO-QUINOLINE-8-CARBOXYLIC ACID"/CN

=> D
L3      ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      7761858 REAXYSFILESU
RN      84087-01-4
CN      3,7-dichloro-quinoline-8-carboxylic acid; quinclorac;
        3,7-dichloro-8-quinolinecarboxylic acid; quinchlorac;
        3,7-Dichloro-quinoline-8-carboxylic acid
```

← 抽出した化学物質名を表示する

← 構造と一致する化学物質名

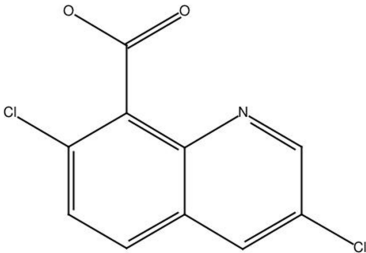
← L3 を E2 で限定する

← QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する

物性や反応情報を検索していないので IDE 表示形式と同じ情報が表示される

検索例 2

```
SD      heterocyclic
MF      C10 H5 Cl2 N O2
CMF     C10 H5 Cl2 N O2
LSF     C10H5Cl2NO2
INCHI   FFSSWMQPCJRRCRV-UHFFFAOYSA-N
AINCHI  FFSSWMQPCJRRCRV-YHMJCDSCB
MW      242.061
MARKREF.CNT 3
REC     1408
ED      Entered STN: 15 Jul 2020
        Last updated on STN: 27 Jun 2024
```



参考：物質のタイプ

約 1,313 万件 (全体の 24%) のレコードの SD フィールドに、物質のタイプが収録されている

– /SD : 物質のタイプ

物質のタイプ	物質のタイプ
ACYCLIC	MARKUSH STRUCTURE
ALLOY	MINERAL
BIOMOLECULE	MIXTURE (COMPOSITION COMPLETELY GIVEN)
COMPOUND	MIXTURE (COMPOSITION NOT GIVEN)
COORDINATION COMPOUND	MIXTURE (COMPOSITION PARTIALLY GIVEN)
GLASS OR CERAMIC MATERIAL	POLYMER (MONOMERS GIVEN)
HETEROCYCLIC	POLYMER (MONOMERS NOT GIVEN)
ISOCYCLIC	SOLID SOLUTION
ISOTOPE OR ISOTOPE CONTAINING COMPOUND	

25



参考：物質のタイプの例

2000 年以降、生体分子、混合物、ポリマーも収録対象である

```
AN 9476670 REAXYSFILESU
CN p-nonylphenol; o-nonylphenol; 2,4-dinonylphenol; mixture of
SD mixture (composition completely given)
COMPAN 2047450; 2259809; 2384242
COMPN 4-Nonylphenol; nonylphenol; 2,4-dinonylphenol
COMPC 95.5 weight percent; 4.34 weight percent; 0.05 weight percent
MARKREF.CNT 0
REC 1
ED Entered STN: 14 Jul 2020
Last updated on STN: 19 Jan 2024

Substance image not available

PROPERTIES
LB Substance Label (1) (FURTHER)
```

混合物

構造はほぼ収録されていない

```
AN 11381722 REAXYSFILESU
CN polybutylene terephthalate
SD polymer (monomers given)
COMPAN 1633445; 1909333
COMPN Butane-1,4-diol; terephthalic acid
MARKREF.CNT 0
REC 1
ED Entered STN: 14 Jul 2020
Last updated on STN: 19 Jan 2024

Substance image not available

FA.RX RX.ID; RX.PAN; RX.RAN (1)
```

ポリマー

構造はほぼ収録されていない

26

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



構造検索

構造検索により化学物質を検索できる

– 構造検索コマンド： => S L# 検索タイプ 検索範囲

– 検索タイプ

検索タイプ	内容
EXA (完全一致検索)	構造質問式に完全に一致する物質を検索
FAM (ファミリー検索)	EXA に加えて他の成分が含まれていてもよい
CSS (閉構造部分構造検索)	FAM に加えて可変構造質問式を使用できる特定の位置に置換基を含めることができる
SSS (部分構造検索 (デフォルト))	CSS に加えて追加の置換基が存在してもよい

– 検索範囲

検索範囲	内容
SAM (サンプル検索 (デフォルト))	フルファイルの一部 (10 %) をテスト的に検索
FUL (フルファイル検索)	ファイルのすべて (100 %) を検索

構造検索

– システム制限

– REAXYSFILESUB ファイルの構造検索は、REGISTRY ファイルの構造検索と仕組みが異なり、イタレーション検索を行わない

検索範囲	回答
SAM (サンプル検索)	50
FUL (フルファイル検索)	150 万

```
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:46:25
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -      0 TO ITERATE

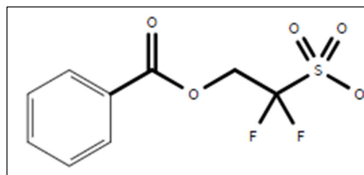
0.0% PROCESSED  5174921 ITERATIONS      14 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.06

L2      14 SEA SSS SAM L1
```

サンプル検索の際、REGISTRY ファイルで表示される FULL FILE PROJECTIONS (フルファイル検索の予想) の表示はない

検索例 3

右の構造の物質を誘導体も含め構造検索する



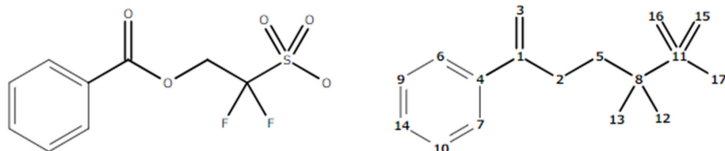
=> FILE REAXYSFILESUB

← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=>

Uploading structure file: 2024_0012_Structure

← 構造質問式をアップロードする



Node Attributes

Ring Nodes : 4 6 7 9 10 14

Chain Nodes : 1 2 3 5 8 11 12 13 15 16 17

Bond Attributes

:

L1 STRUCTURE UPLOADED

検索例 3

=> S L1

SAMPLE SEARCH INITIATED 11:41:14 FILE 'REAXYSFILESUB'
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

← 部分構造検索のサンプル検索を行う

0.0% PROCESSED 1256709 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

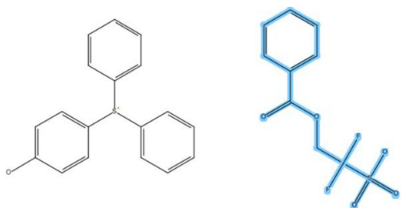
50 ANSWERS

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示する

L2 50 ANSWERS REAXYSFILESUB COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
CN Benzoic acid-2,2-difluoro-2-sulfo-ethyl ester
diphenyl-4-hydroxyphenylsulfonium salt
MF C9 H7 F2 O5 S . C18 H15 O S



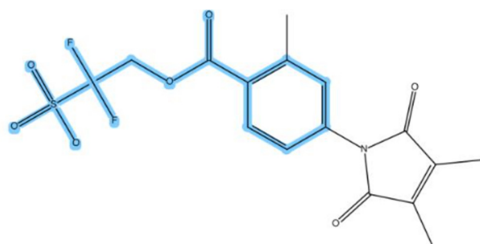
SCAN 表示形式には、化学物質名 (CN)、分子式 (MF)、物質のタイプ (SD)、構造図が含まれる。回答番号の指定はできず、ランダムに回答が表示される

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):10

← SCAN で表示したい件数を入力

検索例 3

L2 50 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
MF C16 H15 F2 N O7 S



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

← END と入力して終了する

=> S L1 FUL

← 部分構造検索のフルファイル検索を行う

FULL SEARCH INITIATED 11:41:48 FILE 'REAXYSFILESU'
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 51776416 ITERATIONS
SEARCH TIME: 00.00.01

1895 ANSWERS

L3 1895 SEA SSS FUL L1

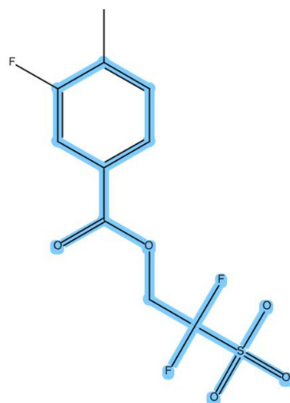
検索例 3

=> D

← QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する

L3 ANSWER 1 OF 1895 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN 60144114 REAXYSFILESU
MF C10 H9 F3 O5 S
CMF C10 H9 F3 O5 S
LSF C10H9F3O5S
INCHI KHTXYNUVXSSMGI-UHFFFAOYSA-N
MW 298.24
MARKREF.CNT 0
REC 1
ED Entered STN: 3 Jul 2024
Last updated on STN: 3 Jul 2024

物性や反応情報を検索していないので
IDE 表示形式と同じ情報が表示される



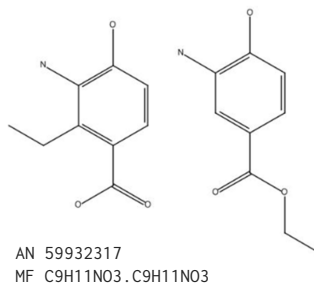
参考：REGISTRY ファイルとの違い

作図画面に複数のフラグメントを描いた時の違い

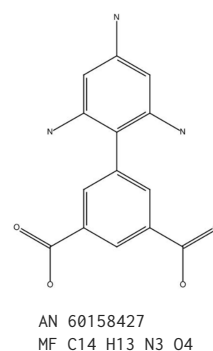
	別々に作図して AND 演算	同一画面に作図
REGISTRY	①②③ がヒット	② がヒット
REAXYSFILE SUB	①②③ がヒット	①② がヒット

異なる点

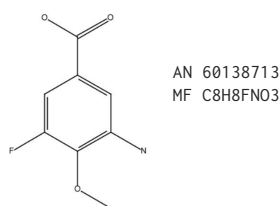
① A, B が別成分



② A, B が同一成分中



③ A, B が重複して存在



参考：REGISTRY ファイルとの違い

以下の検索機能は利用できない

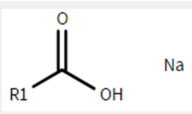
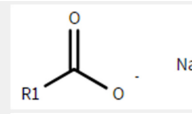
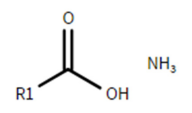
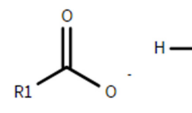
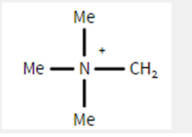
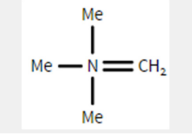
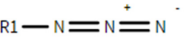
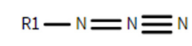
- 環に繰り返しグループを 2 つ以上使った作図
- 可変置換位置を 2 つ以上使った作図
- 可変置換位置の置換基として一般式を利用した作図
- 立体構造を含む作図
- 繰り返しを指定した R グループの作図

Overview on current errors in ReaxysfileSub Database June 2024

https://www.stn-international.com/sites/default/files/X/Reaxysfile_Current_Issues.pdf

参考：REGISTRY ファイルとの違い

一部の物質は登録形式が異なるため、分子式や構造で検索する際は違いを考慮する

物質の種類	REGISTRY	REAXYSFILESUB
カルボン酸塩		
カルボン酸アンモニウム		
窒素イリド		
アジド		

作図の際には、電荷は特に指定しなくてよい

REAXYSFILESUB ファイルの物性情報

物性情報の概要

5 カテゴリーに分類される 110 以上の物性情報が収録されている

– Physical Properties (PHYS) - 物理的特性

- 例：沸点 (BP)、融点 (MP)、昇華点 (SP)、他 39 物性

– Spectroscopy (SPEC) - 分光学的データ

- 例：電子スピン共鳴スペクトル (ESR)、赤外スペクトル (IR)、核磁気共鳴スペクトル (NMR)、他 9 物性

– Aggregation State (STATE) - 凝集状態

- 例：結晶系データ (CSYS)、気相 (GP)、液相 (LQPH)、他 9 物性

– Multi-Component Systems (MULTI) - 多成分系データ

- 例：電気的データ (EDM)、液-液系データ (LLSM)、光学データ (ODM)、他 12 物性

– Further Properties (FURTHER) - その他の物性

- 例：立体配座 (CNF)、爆発限界 (EL)、磁気的データ (MAG)、他 28 物性

全物性の確認

REAXYSFILESUB ファイルで調べられる物性は、=> **HELP PROP** で確認できる

```
=> FILE REAXYSFILESUB
=> HELP PROP

Properties may be searched in Field Availability, Properties
(/FA.P) by using name or code  see table below.

Search Examples:
= > S BP/FA.P
= > S Boiling Point/FA.P

Physical Properties:
Name                                     Code
-----
Boiling Point                            BP
Bulk Viscosity                           BV
Critical Micelle Concentration            CMC
Density of the Liquid                     DEN
Dielectric Constant                       DIC
:
```

```
Further Properties:
Name                                     Code
-----
Acoustic Properties                       SOUND
Autoignition                              AIT
Chemical Derivative                       CDER
Circular Dichroism                        CDIC
Compressibility                           CMP
:
Multi-Component Systems:
Name                                     Code
-----
Adsorption                                ADSM
Association                                ASSM
Azeotropes                                AZE
Boundary Surface Phenomena                BSPM
:
```

物性名

物性コード

物性情報の検索フィールド

物性情報の検索では、以下の検索フィールドを利用する

- /FA.P フィールド：利用可能な物性
 - => HELP PROP 一覧の物性名や物性コードを確認・検索する時に利用
- /KW フィールド：キーワード
 - 物性情報に含まれる物性に関するキーワードを確認・検索する時に利用

Callout 1: => S BOILING POINT/FA.P
または => S BP/FA.P

Boiling Point (1)		
Value	Pressure	Ref(s)
(BP)	(.P)	(REF)
(Cel)	(Torr)	
=====		
86	5	1; 2

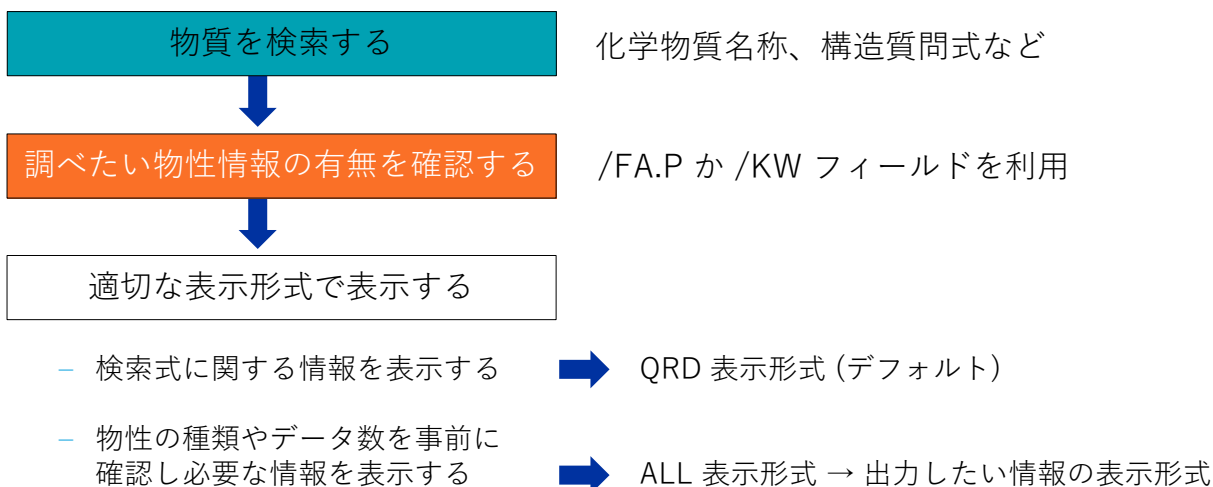
Callout 2: => S ELECTRICAL DATA/FA.P
または => S ELE/FA.P

Electrical Data (2)		
Keyword	Crit. Temp.	Ref(s)
(.KW)	(.CRIT)	(REF)
	(Cel)	

Superconductivity	-269.96	1
Superconductive transition temperature		1

Callout 3: => S
SUPERCONDUCTIVITY/KW

物性情報の検索の流れ

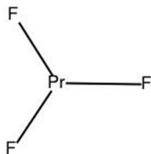


検索例 4

三フッ化プラセオジウム (13709-46-1) の溶解度 (SLB) を調べる

```
=> FILE REAXYSFILESUB          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る
=> S 13709-46-1/RN             ← CAS RN® を /RN で検索する
L1      5 13709-46-1/RN
=> S L1 AND SLB/FA.P          溶解度 (SLB) が存在する物質を利用可能な
    376408 SLB/FA.P          物性 (/FA.P) で限定する
L2      1 L1 AND SLB/FA.P
=> D ALL                       ← ALL 表示形式で表示する
L2      ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      16052791 REAXYSFILESU
RN      13709-46-1
CN      praseodymium(III) fluoride; praseodymium trifluoride; praseodymium fluoride
SD      coordination compound
MF      F3 Pr
CMF     F3 Pr
LSF     F3Pr
INCHI   BOTHRRRVFIZTGG-UHFFFAOYSA-K
AINCHI  BOTHRRRVFIZTGG-YVIXVVEYCF
```

検索例 4

<p>MW 197.903 MARKREF.CNT 0 REC 388 ED Entered STN: 14 Jul 2020 Last updated on STN: 13 May 2024</p>  <p>PROPERTIES</p> <ul style="list-style-type: none">BP Boiling Point (2) (PHYS)DEN Density of the Liquid (4) (PHYS)DIC Dielectric Constant (5) (PHYS)EDIS Dissociation Energy (1) (PHYS)ELE Electrical Data (5) (PHYS)HFOR Enthalpy of Formation (15) (PHYS)HFUS Enthalpy of Fusion (2) (PHYS)HSB Enthalpy of Sublimation (3) (PHYS)HVAP Enthalpy of Vaporization (2) (PHYS)	<ul style="list-style-type: none">CP Heat Capacity Cp (90) (PHYS)IP Ionization Potential (1) (PHYS)MSUS Magnetic Susceptibility (2) (PHYS)MP Melting Point (6) (PHYS)<u>RI Refractive Index (2) (PHYS)</u><u>SLB Solubility (8) (PHYS)</u> → 溶解度SLBP Solubility Product (5) (PHYS)TEC Thermal Expansion (6) (PHYS)VP Vapor Pressure (2) (PHYS)ADSM Adsorption (MCS) (5) (MULTI)FLUS Fluorescence spectroscopy (1) (SPEC)IR IR spectroscopy (3) (SPEC)LUM Luminescence spectroscopy (2) (SPEC)NMR NMR spectroscopy (6) (SPEC)OSM Other Spectroscopic Methods (4) (SPEC)RAS Raman spectroscopy (1) (SPEC)UVS UV/VIS spectroscopy (3) (SPEC)CRYPH Crystal Phase (9) (STATE)CPTP Crystal Phase Transition Point (1) (STATE)CPD Crystal Property Description (7) (STATE)CSG Crystal Space Group (8) (STATE)CSYS Crystal System (3) (STATE)CNF Conformation (1) (FURTHER)
---	---

検索例 4

=> SET LINE 200
SET COMMAND COMPLETED

物性の表が横長な場合を考慮し、
一行あたりの文字数を 200 字に指定する

=> D L2 SLB

溶解度 (SLB)

← L2 の回答を SLB 表示形式 (溶解度のコード) で表示する

Solubility (8)

Value (SLB) (g*1-1)	Solvent (.SOL)	Temp. (.T) (Cel)	Comment (.CMT)	Ref(s) (REF)
0.00023	water	19 - 21	sol. in liq. UF6	1
0.00379974 - 0.00447 261	H2O	25	Solubility: 6.5E-2 g /100g solvent - 7.5E -2 g/100g solvent	2
0.00534338 - 0.00657 038	H2O	25	solubility in hot 1 n H2SO4 given;	2
	liquid HF	-0.1 - 0.1	sparingly sol. in aq . HF at ambient temp .;	3; 4
			sol. in molten KHF2;	5; 6
				7; 8
				7; 9
				10; 11

検索例 4

1. AN 8613646: Journal: Lokshin et al., Russ. J. Inorg. Chem. (2007) Vol. 52, No.12, pp. 1830 - 1834
2. AN 5730537: Journal: Menon, Manchery P. et al., J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1 (1989) Vol. 85, No.9, pp. 2683 - 2694
3. AN 7783763: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. U: SVol.C8, 5.1.5.3, page 139 - 163
4. AN 7747647: Journal: Nikolaev, N. S., Atomnaya Energ. (1975) Vol. 39, pp. 982 - 987
5. AN 7781432: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. Sc: MVol.C3, 6.2.2.9.4.3, page 114 - 115
6. AN 7727177: Journal: Ikrami, D. D. et al., Zh. Neorg. Khim. (1972) Vol. 17, pp. 591 - 593
7. AN 7781433: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. Sc: MVol.C3, 6.2.2.9.4.4, page 115 - 116
8. AN 7731512: Journal: Kharakoz, A. E. et al., Khim. Redk. Rassayan. Elem. (1969), pp. 46 - 55
9. AN 7501271: Journal: Bock, R. et al., Z. Anorg. Allg. Chem.
10. AN 7781553: Journal: , Gmelin Handbuch Vol. Sc: MVol.C3, 6.2.5.5.1.2, page 187 - 188
11. AN 7751226: Journal: Perros, T. P. et al., J. Am. Chem. Soc. (1949) Vol. 71, pp. 3847 - 3848

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号
文献を確認したい場合は、REAXYSFILEBIB ファイルに入り、
=> S レコード番号/AN で検索する

検索例 5

ユーロピウムと鉄を含み、電気的データの中でも特に超電導に関するデータが含まれる物質を検索する

```
=> FILE REAXYSFILESUB          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る
=> S EU/ELS AND FE/ELS        ← ユーロピウムと鉄を含む物質を元素種 (/ELS) で検索する
    44607 EU/ELS
    357989 FE/ELS
L1      703 EU/ELS AND FE/ELS
=> S L1 AND ELE/FA.P          ← 電気的データ (ELE) が存在する物質を
    197482 ELE/FA.P          ← 利用可能な物性 (/FA.P) で限定する
L2      104 L1 AND ELE/FA.P
=> E SUPERCONDUCT/KW         ← 超電導関連のキーワードがあるか /KW で EXPAND し確認する
E1      2 SUPERC18/KW
E2      5 SUPERCHIRAL/KW
E3      0 --> SUPERCONDUCT/KW
E4      20058 SUPERCONDUCTIVE/KW
E5      2 SUPERCONDUCTIVE TRANSITION /KW
E6      20058 SUPERCONDUCTIVE TRANSITION TEMPERATURE/KW
E7      21048 SUPERCONDUCTIVITY/KW
E8      132 SUPERCOOLABILITY/KW
:
```

電気的データ (ELE) が存在する物質を利用可能な物性 (/FA.P) で限定する

超電導に関するキーワードがある

検索例 5

```
=> S L2 AND SUPERCONDUCT?/KW ← 超電導に関するキーワード (/KW) で限定する
    29314 SUPERCONDUCT?/KW
L3      26 L2 AND SUPERCONDUCT?/KW
=> SET LINE 200              ← 物性の表が横長な場合を考慮し、
SET COMMAND COMPLETED      ← 一行あたりの文字数を 200 字に指定する
=> D L3 7                    ← L3 の 7 番目の回答を QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する
L3      ANSWER 7 OF 26 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      29585581 REAXYSFILESU
MF      As4 Eu Fe4 Rb
CMF     As4 Eu Fe4 Rb
LSF     EuRbFe4As4
INCHI   SAIUVDLWLJPHMM-UHFFFAOYSA-N
MW      760.502
MARKREF.CNT 0
REC     3
ED      Entered STN: 14 Jul 2020
        Last updated on STN: 19 Jan 2024
Substance image not available
PROPERTIES
DEN Density of the Liquid (1) (PHYS)
ELE Electrical Data (4) (PHYS)
CP Heat Capacity Cp (1) (PHYS)
CRYPH Crystal Phase (1) (STATE)
:
```

物質同定情報

収録物性・反応概要は QRD 表示形式には含まれない。ALL 表示形式には含まれる。

検索例 5

Electrical Data (4)	Electric Cond. (ELE)	Crit. Temp. (.CRIT)	Temp. Elec. Cond. (.T)	Ref(s) (REF)
Keyword (.KW)	(S/cm)	(Cel)	(Cel)	
Superconductivity	2857.14	-236.36	26.84	1
Conductivity diagram				2; 3
Electrical conductivity				3
Superconductive transition temperature				3

1. AN 130126585: Journal: Usman, Mohammad et al., Chem. Mater. (2023) Vol. 35, No.20, pp. 8494 - 8501
2. AN 68976780: Journal: Kawashima, Kenji et al., J. Phys. Soc. Jpn. (2016) Vol. 85, No.6 pp. 064710
3. AN 73769915: Journal: Bao, Jin-Ke et al., Cryst. Growth Des. (2018) Vol. 18, No.6, pp. 3517 - 3523

電気的データ (ELE)

ヒットした物性情報

超電導のキーワードでヒット

出典情報

REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号

電気的データは PHYS (物理的特性) に分類されている。物理的特性に含まれる他のデータも一括で表示する場合は => D PHYS と入力する。

REAXYSFILESUB ファイルの反応情報

反応情報の概要

2,890 万件以上 (全体の 54%) のレコードに反応情報が追加された。反応情報は以下のデータが収録されている。

反応識別データ

- 同じ反応物と生成物を持つ反応は、一つの反応 ID (RX.ID) が付与されまとめられている
- 生成物および反応物のレコード番号や名称などの概要を確認できる
- 構造で示された反応スキームは収録されていない

```
Reaction:
  Reaction ID: 31774999
  Reactant AN (.RAN): 1813600; 21888537
  Reactant (.RCT): trifluoromethylsulfonic anhydride;
  9-bromo-8-hydroxy-6,6-dimethyl-11-oxo-6,11-dihydro-5H-benzo[b]carbazole-3-carbonit
  rile
  Product AN (.PAN): 21888540
  Product (.PRO): trifluoro-methane sulfonic acid
  9-bromo-3-cyano-6,6-dimethyl-11-oxo-6,11-
  dihydro-5H-benzo[b]carbazol-8-yl ester
  Reference Count: 2
```

反応 ID

反応物の物質レコード番号

生成物の物質レコード番号

反応情報の追加

反応詳細データ

- 反応詳細 ID が付与され (反応 ID の後ろに小数点)、出典や反応分類ごとに反応の詳細がまとめられている
- 反応に関する様々な条件と出典が収録される (文献に記載されている試薬、触媒、溶媒、時間、温度、収率、反応タイプなど)

```
Reaction Details:
  Reaction RID: 31774999.1
  Reaction Classification (.CL): Preparation
  Product AN (.PRAN): 21888540
  Reactant AN (.RCAN): 103233
  Product: trifluoro-methane sulfonic
  9-bromo-3-cyano-6,6-dimeth
  dihydro-5H-benzo[b]carbazol
  e
  Reagent: pyridine
  Temperature: 0 - 20 Cel
  Time: 1.5 s
  Yield: 64 percent
  Yield Numerical: 64
  Reference(s): 20026960: Journal: Kinoshi
  al., J. Med. Chem. (2011)
  pp. 6286 - 6294
```

```
Reaction Details:
  Reaction RID: 31774999.3
  Reaction Classification (.CL): Preparation
  Product AN (.PRAN): 21888540
  Reactant AN (.RCAN): 103233
  Solvent AN (.SOLAN): 1730800
  Product: trifluoro-methane sulfonic acid
  9-bromo-3-cyano-6,6-dimethyl-11-oxo-6,11-
  dihydro-5H-benzo[b]carbazol-8-yl ester
  Reagent: pyridine
  Solvent: dichloromethane
  Temperature: 0 - 5 Cel
  Yield: 100 percent
  Yield Numerical: 100
  Reference(s): 75800658: Patent, WO 2019008520 A1
```

反応詳細 ID

反応詳細 ID

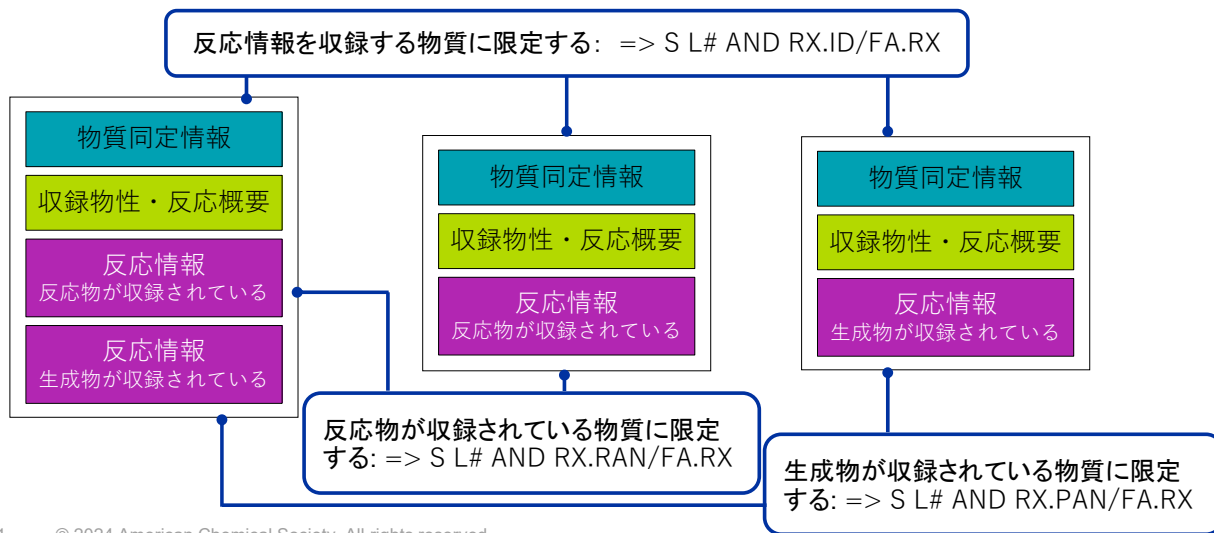
反応に関する条件

出典

反応情報の主な検索フィールド

反応情報の検索では、以下の検索フィールドを利用できる

- /FA.RX フィールド：反応情報の収録有無を確認する



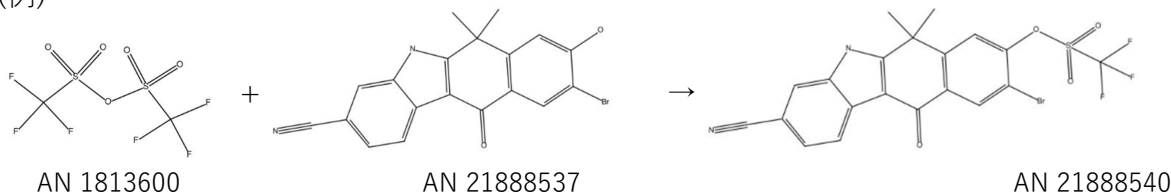
51 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



反応情報の主な検索フィールド

- /RX.AAN、/RX.PAN、/RX.RAN：物質のレコード番号を指定し反応情報を検索する

(例)



- ある物質を反応物または生成物に指定し検索する: => S 1813600/RX.AAN
- ある物質を反応物に指定し検索する: => S 21888537/RX.RAN
- ある物質を生成物に指定し検索する: => S 21888540/RX.PAN
- 同一反応中に限定する: => S 21888537/RX.RAN (P) 21888540/RX.PAN

52 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



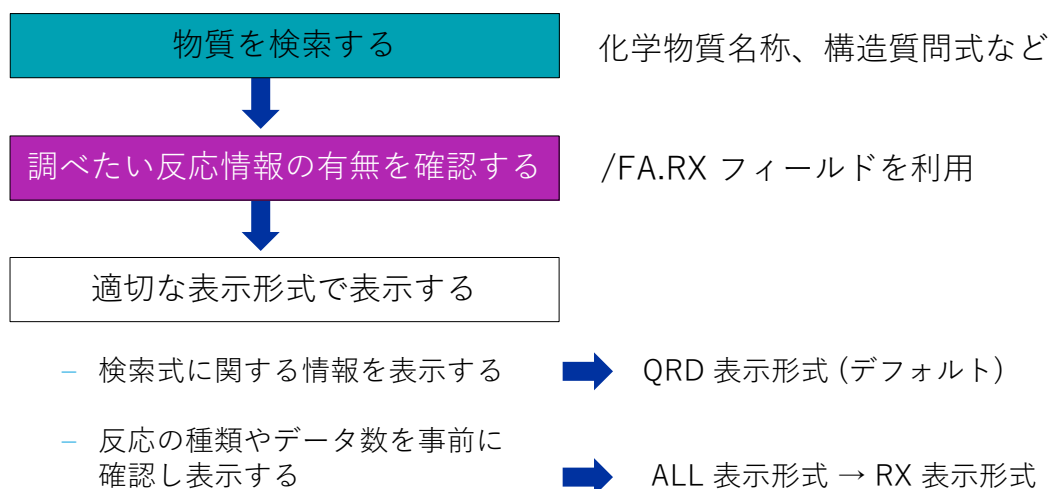
反応分類による回答の絞り込み

REAXYSFILESUB ファイルには、物質の合成方法が収録されているが、より細かな反応の種類で絞り込むことができる

– /RX.CL フィールド：反応分類の種類

反応分類	内容
CHEMICAL BEHAVIOUR	化学的挙動（反応速度、反応機構、予期しなかった反応）が主題の反応
MARKUSH REACTION	マルクーシュ構造の物質が関与する反応。反応の詳細な条件は収録されないことが多い
MULTI-STEP REACTION	いくつかの反応ステップの詳細が収録されている反応であり、反応データが収録されている
PREPARATION	物質の生成を目的とする反応
PREPARATION (HALF REACTION)	物質の生成を目的とする反応であるが、反応物が特定されていない反応（反応物のレコード番号が存在しない反応）

反応情報の検索の流れ



検索例 6

Condyfolan の部分構造を有し、合成反応情報をもつ物質を検索する

テンプレート

検索したい構造がテンプレートにあれば簡単に作図できる

Molecular Formula: C₁₆H₂₀N₂ (240.35)

55 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例 6

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

=>
Uploading structure file: 2024_0149_Structure
<- 構造質問式をアップロードする
```

Node Attributes
Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18
Bond Attributes
:

L1 STRUCTURE UPLOADED

56 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例 6

```
=> S L1                                ← 部分構造検索のサンプル検索を行う

SAMPLE SEARCH INITIATED 17:36:42
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -      0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED    755623 ITERATIONS          50 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.09

L2          50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                              ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う

FULL SEARCH INITIATED 17:37:04
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -        0 TO ITERATE

  0.0% PROCESSED   51533504 ITERATIONS        3688 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3          3688 SEA SSS FUL L1

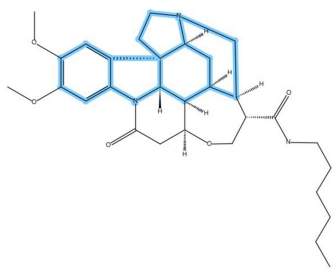
=> S L3 AND RX.PAN/FA.RX                 ← 反応情報に生成物 (RX.PAN) が収録されている物質を検索する
  28861453 RX.PAN/FA.RX
L4          1900 L3 AND RX.PAN/FA.RX
```

検索例 6

```
=> D L4 2                                ← L4 の 2 番目の回答を QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する

L4    ANSWER 2 OF 1900 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN    59053855 REAXYSFILESU
MF    C30 H41 N3 O5
CMF   C30 H41 N3 O5
LSF   C30H41N3O5
INCHI HQDIWXVVAVBJSU-LGPQYWKVSA-N
MW    523.673
MARKREF.CNT 0
REC   1
ED    Entered STN: 8 Apr 2024
      Last updated on STN: 8 Apr 2024
```

物質同定情報



検索例 6

Reaction:

Reaction ID: 66494617
Reactant AN (.RAN): 1731298; 1900508; 63046 ← 反応物
Reactant (.RCT): hexan-1-amine; carbon monoxide; brucine
Product AN (.PAN): **59053855**
Product (.PRO): C30H41N3O5
Reference Count: 1

Reaction Details:

Reaction RID: 66494617.1
Reaction Classification (.CL): Preparation
Product AN (.PRAN): 59053855 ← 生成物
Reactant AN (.RCAN): 13204136 ← 反応物または試薬
Solvent AN (.SOLAN): 1730942 ← 溶媒
Pressure: 1520.1 Torr
Product: C30H41N3O5
Reagent: dicobalt octacarbonyl
Solvent: tert-butyl methyl ether
Temperature: 90 Cel
Yield: 60 percent
Yield Optical: > 92.308 percent de
Reference(s): **132011681** Journal: Faculak, Mason S. et al., Science (2024) Vol. 383, No.6678, pp. 77 - 81

REAXYSFILEBIB ファイルの
レコード番号

ヒットした反応情報

ヒットした物質のレコード番号が
生成物として収録されている

反応に関する条件

出典情報

59 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例 6

参考：反応の出典情報を REAXYSFILEBIB ファイルで確認する

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

=> S 132011681/AN ← 反応の出典に記載のレコード番号を /AN で検索する
L5 1 132011681/AN

=> D L5 ALL ← L5 の 1 番目の回答を ALL 表示形式で表示する

L5 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILEBIB COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN **132011681** REAXYSFILEBIB [Full-text](#)
TI Cobalt-catalyzed synthesis of amides from alkenes and amines promoted by light
AU Faculak, Mason S.; Veatch, Alexander M.; Alexanian, Erik J.
SO Science (2024), Volume 383, Number 6678, pp. 77-81
CODEN: SCIEAS ISSN: 0036-8075
DOI: <https://doi.org/10.1126/science.adk2312>
Published by: American Association for the Advancement of Science, United States
DT Journal
LA English
SL English
ED Entered STN: 28 Feb 2024
Last updated on STN: 14 Jun 2024

タイトルや著者名などの
詳しい書誌情報

60 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例 6

AB Catalytic methods to couple alkene and amine feedstocks are valuable in synthetic chemistry. The direct carbonylative coupling of alkenes and amines holds promise as a perfectly atom-economical approach to amide synthesis, but general methods remain underdeveloped. Herein, we report an alkene hydroaminocarbonylation catalyzed by unmodified, inexpensive cobalt carbonyl under mild conditions and low pressure promoted by light. Silane addition after the reaction enables sequential cobalt-catalyzed amide reduction, constituting a formal alkene hydroaminomethylation. These methods exhibit exceptional scope across both alkene and amine components with high chemo- and regioselectivity and proceed efficiently even in the absence of solvent. The formation of a hydridocobalt through photodissociation of a carbonyl ligand is proposed to enable catalytic activity under mild conditions, which addresses a long-standing challenge in catalysis.

抄録

検索例 7

下記の環化反応を検索

R1 (O または S) と N で環を形成する



- R1 は構造作図ツールの R グループ **R** を利用し、O と S を含める
- 生成物の C-R1, C-N の結合属性を Ring に指定する

Bond Attributes

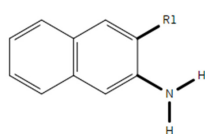
Bond Type	<input type="radio"/> Ring/Chain
Bond Value	<input checked="" type="radio"/> Ring
	<input type="radio"/> Chain

検索例 7 の検索方法 (1/2)

反応物 AN/RX.RAN (P) 生成物 AN/RX.PAN の検索式で同一反応中に限定する

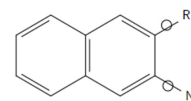
1. 構造検索

反応物



L#

生成物



L*

2. レコード番号を抽出し、 反応物または生成物に 限定

=> TRA L# 1- AN /RX.RAN

L##

=> TRA L* 1- AN /RX.PAN

L* *

3. 同一反応中に限定

=> S L## (P) L* *

L@

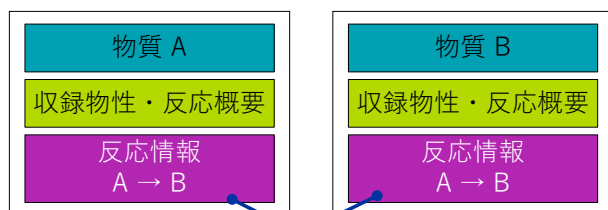
検索例 7 の検索方法 (2/2)

4. 反応情報の重複を除去するために、3 の結果と生成物の集合を組み合わせる

=> S L@ AND L*

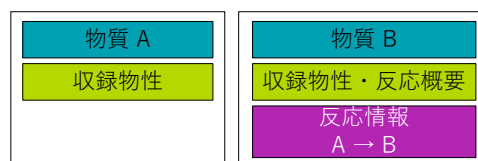
L@@

— 反応情報が重複している理由



反応物 AN/RX.RAN (P) 生成物 AN/RX.PAN の検索
で両レコードがヒット

— ただし反応物、生成物のどちらかのレコード のみに反応情報が収録されている場合もある



検索例 7

```
FILE REAXYSFILESUB          ← REAXYSFILESUB ファイルに入る

=>
Uploading structure file: 2024_0010_REACTANT ← 反応物の構造質問式をアップロードする
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> S L1                      ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
L2      50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL                  ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
L3      984 SEA SSS FUL L1

=> TRA L3 1- AN /RX.RAN     ← レコード番号を抽出し、ヒットした物質が反応物である反応に限定する

L4      TRANSFER L3 1- AN :   983 TERMS
L5      2092 L4/RX.RAN
L6      QUE TERMS FROM L4/RX.RAN WITH NO HITS:  804 TERMS ← CAS STNext の Settings で Audit を ON に設定した場合は
                                                    TRANSFER でヒットしなかったタームの集合を作成する
```

検索例 7

```
=>
Uploading structure file: 2024_0011_Product ← 生成物の構造質問式をアップロード
L7      STRUCTURE UPLOADED

=> S L7                      ← 部分構造検索のサンプル検索を行う
L8      50 SEA SSS SAM L7

=> S L7 FUL                  ← 部分構造検索のフルファイル検索を行う
L9      13387 SEA SSS FUL L7

=> TRA L9 AN 1- /RX.PAN     ← レコード番号を抽出し、ヒットした物質が生成物である反応に限定する

L10     TRANSFER L9 1- AN :   13387 TERMS
L11     4496 L10/RX.PAN
L12     QUE TERMS FROM L10/RX.PAN WITH NO HITS: 10486 TERMS

=> S L5(P)L11               ← 同一反応中に限定する
L13     443 L5(P)L11

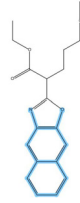
=> S L9 AND L13            ← 重複を除くために、L13 と生成物の集合 (L9) を組み合わせる
L14     294 L9 AND L13
```

検索例 7

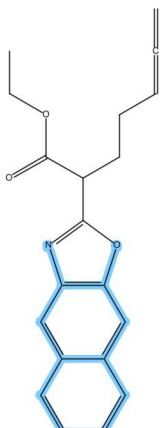
=> D 1 ← L14 の 1 番目の回答を QRD 表示形式 (デフォルト) で表示する

```
L14 ANSWER 1 OF 294 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC.
AN 60070918 REAXYSFILESU
CN ethyl 2-(naphtho[2,3-d]oxazol-2-yl)hepta-5,6-dienoate
MF C20 H19 N O3
CMF C20 H19 N O3
LSF C20H19NO3
INCHI BXRWOVALQRNEOC-UHFFFAOYSA-N
MW 321.376
MARKREF.CNT 0
REC 1
ED Entered STN: 24 Jun 2024
   Last updated on STN: 24 Jun 2024
```

ヒットした生成物のレコード番号



作図の拡大



検索例 7

Reaction:

```
Reaction ID: 67417056
Reactant AN (.RAN): 636903
Reactant (.RCT): 3-Amino-2-naphthol
Product AN (.PAN): 60070918
Product (.PRO): ethyl
                2-(naphtho[2,3-d]oxazol-2-yl)hepta-5,6-dienoate
Reference Count: 1
```

ヒットした反応物

ヒットした生成物

参考：ヒットした反応物

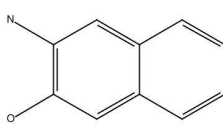
=> S 636903/AN
L1 1 636903/AN

=> D SCAN

L1 1 ANSWERS REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024
ELSEVIER INC. on STN.
CN 3-Amino-2-naphthol; 3-aminonaphthalen-2-ol
MF C10 H9 N O
SD isocyclic

Reaction Details:

```
Reaction RID: 67417056.1
Reaction Classification (.CL): Multi-step reaction
Reactant AN (.RCAN): 4122952
Solvent AN (.SOLAN): 1718733; 605365
Reagent: sodium hydride
Solvent: ethanol; N,N-dimethyl-formamide
Reference(s): 133148975: Journal: Becker, Antonia et al., Org. Lett. (2024) Vol. 26, No.12, pp. 2451 - 2455
```





REAXYSFILEBIB ファイルの概要

REAXYSFILEBIB ファイル

概要

REAXYSFILEBIB ファイルは、REAXYSFILESUB ファイルの出典情報データベースである

- 製作者：Elsevier Information Systems GmbH
- レコード構成：文献単位 (特許は特許ファミリー単位)
- 収録情報：書誌情報、抄録
- 収録期間：1771 年～
- 収録件数：6,120 万件
- 更新頻度：週 2 回
- 特長：105 特許発行機関の特許を収録、約 450 の化学系コア雑誌、16,000 以上の定期刊行物
特許は 1803 年から収録。以下の国と年代は特に物質・物性・反応情報の抜粋がより詳細に行われている
 - PCT 出願 (WO)、米国 (US)、欧州 (EP) 特許で言語が英語：2001 年～
 - 日本 (JP)、韓国 (KR)：2015 年～
 - 中国 (CN)、台湾 (TW)：2016 年～

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

特許のレコード例 (ALL 表示形式)

レコード番号	AN	132080060	REAXYSFILEBIB Full-text
標題	TI	Pharmaceutical composition of sorafenib having high bioavailability, oral solid dosage of sorafenib, and use thereof	
特許出願人	PA	Beijing Creatron Institute of Pharmaceutical Research Co., Ltd.	
特許情報	PI	PATENT NO. KIND DATE APPLICATION NO. DATE	
		-----	-----
		CA 3155855	A1 20220607
		CN 114916221	A 20220816
		CN 114916221	B 20240130
		EP 4032529	A1 20220727
		EP 4032529	A4
		JP 2023509560	A
		JP 7428356 B *	B2 20240206 JP 2022-516367 20201207
		US 20230310393	A1 20231005
		WO 2022120512	A1 20220616
		* = indexed patent	
		* の付与された特許から索引している	

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

資料種類	DT	Patent
言語	LA	Japanese
要約言語	SL	English
入力日	ED	Entered STN: 9 Mar 2024 Last updated on STN: 27 Jun 2024
抄録	AB	The present disclosure provides a sorafenib pharmaceutical composition with high bioavailability and use thereof, and specifically provides a low-dose sorafenib oral solid preparation, comprising: a) a sorafenib solid dispersion; b) a crystallization inhibitor; and c) additional pharmaceutically acceptable adjuvant. The aforementioned low-dose sorafenib oral solid preparation provided by the present disclosure has high bioavailability and reduces the dosage of sorafenib that the same therapeutic effect as that of Nexavar tablet can be achieved when a patient takes orally 35% to 70% of the administered dose of Nexavar tablet; it has higher stability, better safety, and less incidence of
国際特許分類	IPC	A61K0009-14; A61K0047-20; A61K0047-26; A61K0047-28; A61K0047-32; A61K0047-36; A61K0047-38; A61P0035-00; A61K0031-44; A61K0009-20; A61K0009-48; A61K0009-70; A61K0047-02; A61K0047-04; A61K0047-10; A61K0047-12

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

雑誌のレコード例 (ALL 表示形式)

レコード番号	AN	82103379	REAXYSFILEBIB Full-text
標題	TI	Immune response on outcomes in hepatocellular carcinoma	
著者名	AU	Iseda, Norifumi; Itoh, Shinji; Tomiyama, Takahiro; Morinaga, Akinari; Wang, Huanlin; Shimagaki, Tomonari; Kurihara, Takeshi; Nagao, Yoshihiro; Toshima, Takeo; Harada, Noboru; Iguchi, Tomohiro; Yoshizumi, Tomoharu; Mori, Masaki	
収録源	SO	Gan to kagaku ryoho/Cancer and chemotherapy (2020), Volume 47, Number 9, pp. 1303-1306 CODEN: GTKRDX ISSN: 0385-0684 Published by: Japanese Journal of Cancer and Chemotherapy Publishers Inc., Japan	
資料種類	DT	Journal	
言語	LA	Japanese	
抄録言語	SL	English	
入力日	ED	Entered STN: 19 Jan 2021 Last updated on STN: 3 Jul 2024	

REAXYSFILEBIB ファイルの文献情報

抄録	AB	Recently, immune checkpoint inhibitors (ICI) has been developed considerably. ICI has already been approved for malignant melanoma, lung cancer and renal cancer. We expected ICI to be taken for many cancers in the future. Therefore, the development of biomarker for them are needed. The recent large phase EI study IMbrave 150 evaluated atezolizumab plus bevacizumab vs sorafenib as the first treatment for patients with unresectable hepatocellular carcinoma (HCC). IMbrave 150 demonstrated statistically significant and clinically meaningful improvements in both OS and RFS for atezolizumab plus bevacizumab compared with sorafenib in HCC patients. A paradigm shift in the treatment of unresectable HCC is about to occur. In this article, we discussed the significance and biomarkers of tumor immunity in HCC microenvironment.
キーワード	KW	Author Keyword: Hepatocellular carcinoma; Immune checkpoint inhibitors; Programmed death-ligand 1

REAXYSFILEBIB の主な検索フィールド

適切な検索フィールドを利用して文献を検索できる

検索フィールド	内容	入力例	備考
/BI (またはなし)	基本索引 (TI, AB から切り出された語)	S LIQUID CHROMATOGRAPH	前方、後方、中間一致検索が 利用可能
/AB	抄録	S ?AMINOETHYL/AB	
/TI	標題	S TRIAZOLOPYRAZINONE/TI	
/AN	レコード番号	S 131685370/AN	
/AU	著者名	S YAMADA TARO/AU S YAMADA T?/AU	
/DT	資料種類	S J/DT S JOURNAL/DT	
/SO	収録源	S ANALYTICAL CHEMISTRY/SO	SO に収録されている雑誌名 は /JT でフレーズ検索が可能

REAXYSFILEBIB サマリーシート: <https://web.cas.org/marketing/solutions/stn-ip/stn-database/reaxysfilebib.pdf>

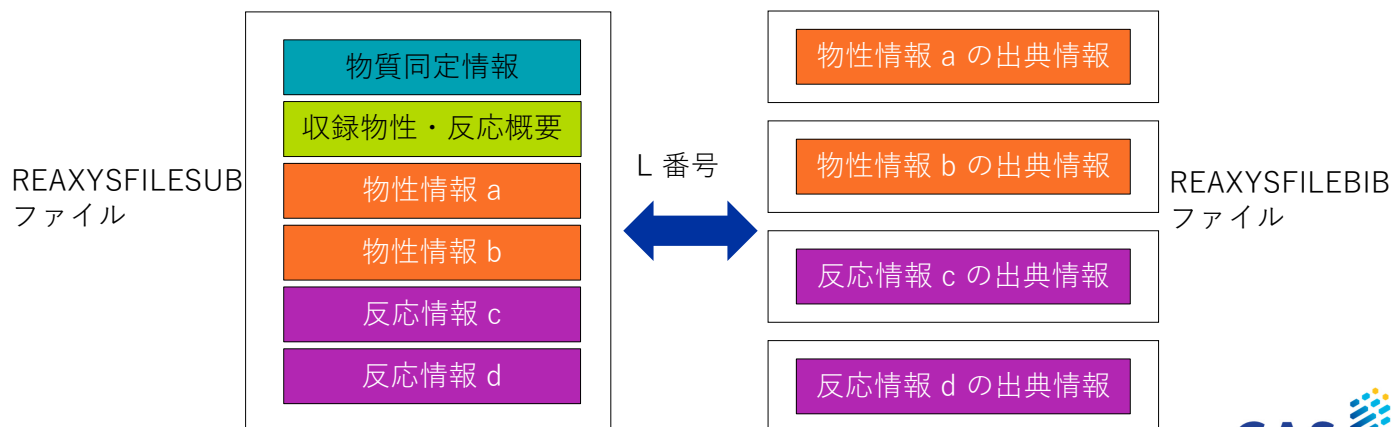
REAXYSFILEBIB の主な検索フィールド

検索フィールド	内容	入力例	備考
/PN /AP /PRN	特許番号 出願番号 優先権出願番号	S WO2018039051/PN S US1964-363680/AP S US 1997-68200P/PRN	
/PK /PNK	特許種別 種別付き特許番号	S EPA1/PK S WO2018039051A1/PNK	
/PY /AY /PRY	発行年 特許出願年 優先権主張年	S L1 AND 2010-2011/PY S L1 AND 1995>=AY S L1 AND 1995>=PRY	PY は特許以外の資料種類 の発行年も対象
/PD /AD /PRD	特許発行日 特許出願日 優先権主張日	S L1 AND 20100101/PD S L1 AND 20050601-20060531/AD S L1 AND 20100101>=PRD	
/PA (/CS)	特許出願人	S LILLY COMPANY/PA	/CS は雑誌を含まない
/IPC	国際特許分類	S C07C0231/IPC S C07C0231-02/IPC	

REAXYSFILEBIB サマリーシート: <https://web.cas.org/marketing/solutions/stn-ip/stn-database/reaxysfilebib.pdf>

ファイル間の連携

- REAXYSFILESUB から REAXYSFILEBIB ファイルに L 番号をクロスオーバーすると、物質に関する文献情報を一括で検索できる
- REAXYSFILEBIB から REAXYSFILESUB ファイルに L 番号をクロスオーバーすると、文献に関する物質情報を一括で検索できる



注意点：REAXYSFILESUB からのクロスオーバー検索

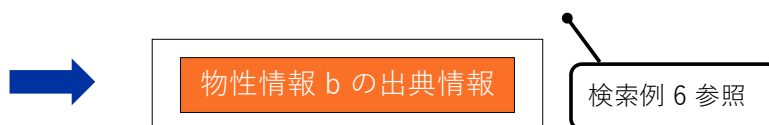
特定の情報の出典を REAXYSFILEBIB ファイルで確認する場合は、該当の AN を検索する

REAXYSFILESUB ファイル
(化学物質単位)



REAXYSFILEBIB ファイル
(文献単位)

=> S REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号/AN



注意点：重複レコード

特許ファミリー中の複数の特許から索引が作られている場合、同じ特許ファミリー由来の重複レコードが存在する

– 事前に確認したい場合は FSORT コマンドを用いてまとめるとよい

```
=> FILE REAXYSFILEBIB                                ← REAXYSFILEBIB ファイルに入る
=> S JP2023044300/PN                                  ← 特許番号を /PN で検索する
L1          3 JP2023044300/PN

=> FSORT L1
:
SEL L1 1- PN,APPS
L2          SEL L1 1- PN APPS :          6 TERMS

'L2' DELETED
L2          3 FS0 L1

          1 Multi-record Family      Answers 1-3      ← 関連特許ファミリーにまとまる
          0 Individual Records
          0 Non-patent Records
          :
```



注意点：重複レコード

```
=> D TI 1-3

L2 ANSWER 1 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
TI Humidification device or atmospheric water generator

L2 ANSWER 2 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
TI Humidity control device or atmospheric water generator

L2 ANSWER 3 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
TI HUMIDITY CONTROL DEVICE OR ATMOSPHERIC WATER GENERATOR

=> D L2 1 ALL

L2 ANSWER 1 OF 3 REAXYSFILEBI COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN. FAMILY1
AN 133733991 REAXYSFILEBI Full-text
TI Humidification device or atmospheric water generator
PA DAIKIN IND LTD

PI PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.      DATE
-----
CN 117940203 *    A    20240426  CN 2022-80062633    20220912
JP 2023044300    A    20230330
WO 2023042781    A1   20230323

* = indexed patent
```

1 番目の回答は CN が索引特許のレコード。
2 番目は JP、3 番目は WO が索引特許のレコードだった

PI PATENT NO.	PI PATENT NO.
JP 2023044300 *	WO 2023042781 *
WO 2023042781	JP 2023044300
CN 117940203	CN 117940203

索引特許



注意点：重複レコード

DT Patent
LA Chinese
SL English
ED Entered STN: 13 May 2024
Last updated on STN: 24 May 2024
AB Provided is a humidity control device or an atmospheric water generator with which damage to an adsorption material, which adsorbs moisture, due to heating during regeneration is suppressed. A humidity control device (100) comprises an absorbent material (11a) and a heater (12). The absorbent material (11a) adsorbs moisture. The heater (12) heats the absorbent material (11a), causing moisture adsorbed by the absorbent material (11a) to undergo desorption from the absorbent material (11a). The absorbent material (11a) comprises a base material and metal-organic frameworks. The metal-organic frameworks include metal ions and organic ligands. The heat resistance temperature of the base material is at least 150°C.
IPC B01D0053-26; B01D0053-06; B01J0020-26; B01J0020-34; F24F0003-14; F24F0006-08

まとめ

REAXYSFILESUB ファイルは、物性情報と反応情報が新たに追加された

- 110 以上の物性情報を収録している
 - 物理的特性
 - 凝集状態
 - 多成分系データ
 - 分光学的データ
 - その他の物性
- 2,890 万件以上の物質レコードに反応情報を収録している
- シンプルな操作で物性情報あるいは反応情報を検索できる
- 出典情報には REAXYSFILEBIB ファイルのレコード番号が記載されており、書誌情報、抄録をすぐに確認できる