

STN おさらいセミナー

物性・毒性情報の調べ方

2014 年 8 月

本日の内容

- ・ 概要
- ・ 物性検索
 - REGISTRY ファイル
 - ReaxysFile ファイル
- ・ 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY, ReaxysFile)

物性情報

- ・ 物性情報とは
 - 物質の示す物理的・化学的性質の情報



引火点
爆発上限
など



誘電率
絶縁耐力
など



沸点, 融点
溶解度
など



剛性率
体積弾性率
など

毒性情報

- ・ 毒性情報とは
 - 物質が生体または環境に与える影響に関する情報



刺激性
変異原性
など



生分解
土壌安定性
など

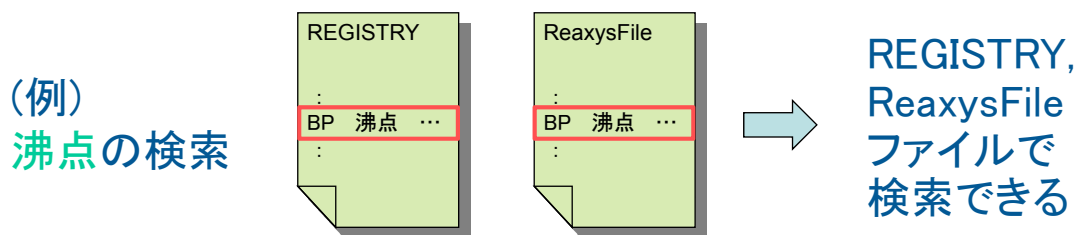
STN の物性・毒性情報

- ・ ファイル，物性・毒性の種類によって，収録の形式が異なる
 - 物性・毒性の**数値**（ファクトデータ）を収録
 - 物性値が記載されている**文献情報**を収録

- 特許全文などの**テキスト**中に記載された**数値データ**を検索できる機能

ファイルの選択 ①

- サマリーシートで目的の物性・毒性に関する検索フィールドが存在するかを確認する



日本語サマリーシート

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

サマリーシート (抜粋)

REGISTRY のサマリーシート

■ 物性検索フィールド

SEARCH コード	内容	デフォルト単位	入力例	DISPLAY コード
/BP	沸点 ⁵⁾	deg C	S 150-155/BP	BP
/BP. P	沸点測定時の圧力 ⁵⁾	Torr	S 166/BP (P) 3/BP. P	BP
/DEN	密度 ⁵⁾	g/cm**3	S DEN>=1.002	DEN
/DEN. T	密度測定時の温度 ⁵⁾	deg C	S 1.01-1.02/DEN (P) 20/DEN. T	DEN
/DEN. P	密度測定時の圧力 ⁵⁾	Torr	S 800/DEN. P	DEN

沸点のフィールドは /BP

デフォルト単位は °C

数値範囲で検索可能

ReaxysFile のサマリーシート

■ 電気的および磁氣的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト単位	入 力 例	DISPLAY コード
/DIC	比誘電率 ¹⁾	なし	S 2-2.2/DIC	DIC
/DIC.COM	コメント	-	S HEAT/DIC.COM	DIC
/DIC.F	周波数 ¹⁾	Hz	S 50000/DIC.F	DIC
/DIC.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 20.5/DIC.T	DIC
/DICS	静電誘電率 ¹⁾	なし	S 2.3-2.301/DICS	DICS
/DICS.COM	コメント	-	S POLARISATION/DICS.COM	DICS
/DICS.T	温度 ¹⁾	セ氏	S DICS.T>20	DICS

ファイルの選択 ②

- ・ サマリーシートに目的の物性・毒性に関する検索フィールドがないときは…
 - 参照文献情報を検索する (REGISTRY ファイル)
 - 物性情報に関するキーワードで検索する (ReaxysFile ファイル)

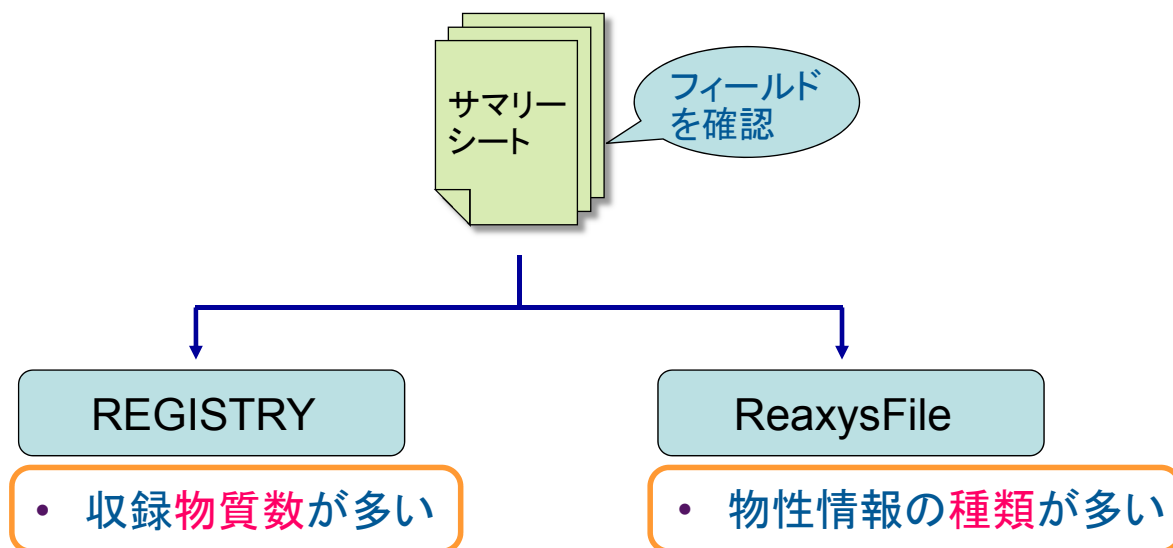
代表的なデータベース

- ・ データベースによって、収録対象物質や収録されている物性・毒性データが異なる

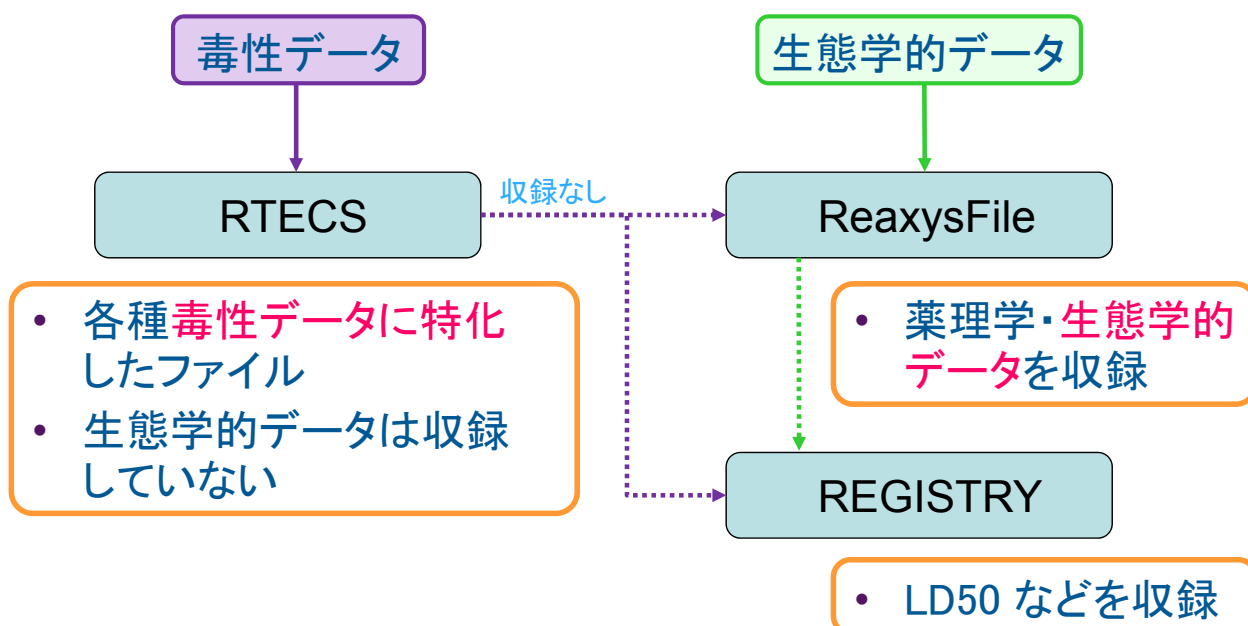
ファイル	収録物質	一般物性	毒性
REGISTRY	有機, 無機, ポリマー	○	△
ReaxysFile	有機, 無機, ポリマー	○	△
RTECS	有機, 無機 (医薬品, 農芸化学物質)	×	○
MSDS-OHS	工業化学製品	△	△

本セミナーでは赤枠内の 3 ファイルを紹介

物性検索



毒性検索



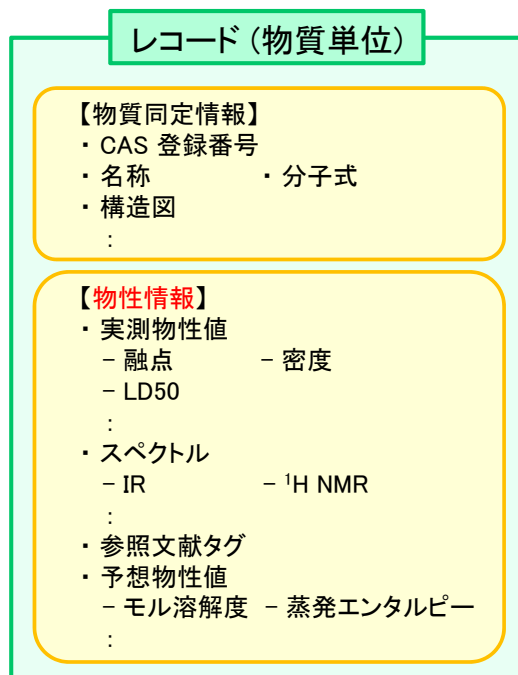
本日の内容

- ・ 概要
- ・ 物性検索
 - REGISTRY ファイル
 - ReaxysFile ファイル
- ・ 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY, ReaxysFile)

REGISTRY ファイル概要

- ・ 化学物質情報, **物性データ**を収録
 - 物性データ: 実測物性値, 予想物性値など
- ・ 有機・無機化合物, ポリマー, 配列などを収録した世界最大の物質データベース
 - 製作機関: CAS (Chemical Abstracts Service)
 - 収録件数: **1 億 5,500 万件**以上
 - 収録期間: 1800 年初頭~
 - 更新頻度: **毎日**

レコード構成



- 物質同定情報, **物性情報**を収録
- 実測物性値の他に, **スペクトルのグラフィック**, 予想物性値も収録
- LD50 や生物濃縮係数などの**毒性関連情報**も収録

REGISTRY ファイルの物性データ

	実際に測定されたデータ			ソフトウェアで計算したデータ
	実測物性値	参照文献タグ	スペクトルデータ	予想物性値
収録形態	数値	文献情報	グラフィック	数値
物性の数	13 種類	約 200 種類 *	11 種類	20 種類
収録物質数	3,000,000	3,740,000	930,000	75,300,000
表示形式	EPROP	ETAG	SPEC	PPROP
	PROP			
収録対象	単成分・多成分物質			単成分物質

* REGISTRY ファイルで EXPAND を実行して確認できる

実測物性値 (13 種類)

物性コード	内容	物性コード	内容
BP *	沸点	MM	磁気モーメント
DEN *	密度	MP	融点
ECON	コンダクタンス	ORP	旋光度
ECND	電気伝導率	RI	屈折率
ERES	電気抵抗	TG	ガラス転移温度
EREST	比電気抵抗	TS	引張強度
LD50	50% 致死量		

* 予想物性値にも収録されている

– CPlus ファイルで索引された物質に関する物性情報を収録

予想物性値 (20 種類)

物性コード	内容	物性コード	内容
BCF	生物濃縮係数	KOC	有機炭素吸着係数
BP *	沸点	LOGD	pH を考慮したオクタノール – 水分配係数の対数値
DEN *	密度	LOGP	オクタノール – 水分配係数の対数値
FP	引火点	MW	分子量
FRB	回転可能な結合数	MVOL	モル体積
HAC	水素受容基数	PKA	酸塩基解離定数 (pKa)
HD	水素供与基数	PSA	極性表面積
HVAP	蒸発エンタルピー	SLB.MASS	質量溶解度
ISLB.MASS	固有質量溶解度	SLB.MOL	モル溶解度
ISLB.MOL	固有モル溶解度	VP	蒸気圧

* 実測物性値にも収録されている

参照文献タグ (約 200 種類)

- 数値データではなく、該当の物性に関連する文献情報のみが表示される

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb) 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(1) CAS
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	(2) CAS
Carbon-13 NMR Spectra 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(3) CAS
Crystal Structure 2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(4) CAS

実測物性値, 予想物性値,
スペクトルの物性情報が
参照文献タグにも収録され
ている場合がある

- (1) Sharnin, Valentin A.; Inorganica Chimica Acta 2009 V362(2) P437-442 [CAPLUS](#)
 (2) Reiche, Ines; Nephrology, Dialysis, Transplantation 2011 V26(1) P276-282 [CAPLUS](#)
 (3) Angeles, Norma A.; Journal of the Brazilian Chemical Society 2010 V21(5) P905-908 [CAPLUS](#)

参照文献タグ (約 200 種類)

- 物性の種類は /ETAG で EXPAND して確認できる

=> FILE REGISTRY

=> E A/ETAG

**** START OF FIELD ****

E3	0	--> A/ETAG	
E4	890	ACID NUMBER/ETAG	← 酸価
E5	12253	ACID/BASE DISSOCIATION CONSTANT (KA/KB)/ETAG	← 酸・塩基解離定数
:	:	:	:
E16	15218	BOILING POINT/ETAG	← 沸点
:	:	:	:
E191	7112	THERMAL CONDUCTIVITY/ETAG	← 熱伝導率
E192	5959	THERMAL EXPANSION COEFFICIENT/ETAG	← 熱膨張係数
:	:	:	:
E194	212	TOXIC EQUIVALENCE FACTORS/ETAG	← 毒性等価係数 (TEF)
:	:	:	:

表示形式

表示形式	内容
IDE	物質同定情報 (デフォルト)
FIDE	物質同定情報と物性情報
PROP	すべての物性値 (スペクトルはリンクのみ)
EPROP	実測物性値
PPROP	予想物性値
ETAG	参照文献タグ
SPEC	スペクトル (グラフィック)
FA	フィールドの存在

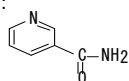
物性情報を含む
表示形式

表示のポイント

- ・ **FA** 表示形式でフィールドの存在をあらかじめ確認できる
 => D FA (フィールドの存在を表示)
- ・ すべての物性値をまとめて表示できる
 => D PROP (全物性値を表示)
- ・ 参照文献タグをすべて表示したい場合は **ETAGFULL** 表示形式を使用する
 => D ETAGFULL (参照文献タグをすべて表示)

表示例 (IDE FA 表示形式)

RN 98-92-0 REGISTRY
 :
 CN Nicotinamide (8CI)



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

Available Properties (PRFA)

CODE	PROPERTY
=====	
Experimental Data	●
BP	Boiling Point
DEN	Density
LD50	Median Lethal Dose
:	
TS	Tensile Strength
ETAG	Experimental Tags
Predicted Data	●
BCF	Bioconcentration Factor
BP	Boiling Point
:	

Experimental Data

実測物性値

BP Boiling Point
 DEN Density
 LD50 Median Lethal Dose
 :

TS Tensile Strength
 ETAG Experimental Tags

参照文献タグ

Predicted Data

予想物性値

BCF Bioconcentration Factor
 BP Boiling Point
 :

IDE
物質同定情報

FA
フィールドの存在

表示例 (PROP 表示形式)

Experimental Properties (EPROP) ●

実測物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	157 deg C		(1) SRC
Boiling Point (BP)	157 deg C	Press: 0.0005 Torr	(2) NLM
Boiling Point (BP)	150-160 deg C	Press: 0.0005 Torr	(3) APC
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(4) WSS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(5) AIST
:			
Median Lethal Dose (LD50)	200 mg/kg	Orgn: mouse Rte: intraperitoneal	(11) CAS
:			
Melting Point (MP)	131-132 deg C		(15) CAS
:			
Nitrogen-15 NMR Spectra	Spectrum		(42) WSR
:			

- (1) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
 (2) "Hazardous Substances Data Bank" data were obtained from the National Library of Medicine (US)
 (3) "Drugs - Synonyms and Properties" data were obtained from Ashgate Publishing Co. (US) CAPLUS
 (4) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)

EPROP

PROP

Experimental Property Tags (ETAG)

参照文献タグ

PROPERTY	NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb) 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(1) CAS
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	(2) CAS
Carbon-13 NMR Spectra 8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(3) CAS
Crystal Structure 2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(4) CAS
Dissociation Constant	(5) IC

ETAG

PROP

LC50
LD50
LOGD
LOGP
Solubility
Surface Tension
Thermal Analysis
Two-Dimensional NMR Spectra
(1) Sharnin, Valentin A.; Inorganica Chimica Acta 2008 V10(46)
(2) Reiche, Ines; Nephrology, Dialysis and Transplantation 2010 V66(9) Pm1135-m1136 CAPLUS
(3) Angeles, Norma A.; Journal of Pharmaceutical Sciences 2013 V102(1) P1-10 CAPLUS
(4) Borba, Ana; Physical Chemistry Reports Online 2010 V66(9) Pm1135-m1136 CAPLUS

PROP (または ETAG) 表示形式では、複数のデータがある場合は一つの収録源のみが表示される。すべて表示するには ETAGFULL 表示形式を利用する。

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb)	(1) CAS
Crystal Structure	(20) CAS
Crystal Structure	(21) CAS
Crystal Structure	(22) CAS
Dissociation Constant	(23) IC

(20) Borba, Ana; Physical Chemistry Reports Online 2010 V66(9) Pm1135-m1136 CAPLUS
(21) Hoekel, Tuncer; Acta Crystallographica, Section E: Structure Reports Online 2010 V66(9) Pm1135-m1136 CAPLUS
(22) Zhang, Si-Wei; Journal of the American Chemical Society 2013 V135(50) P18981-18989 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)

予想物性値

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 3 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	334.4+/-15.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	1.204+/-0.06 g/cm**3	20 deg C 760 Torr	(1)
Enthalpy of Vap. (HVAP)	57.74+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	156.0+/-20.4 deg C		(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	1		(1)
H acceptors (HAC)	3		(1)
H donors (HD)	2		(1)

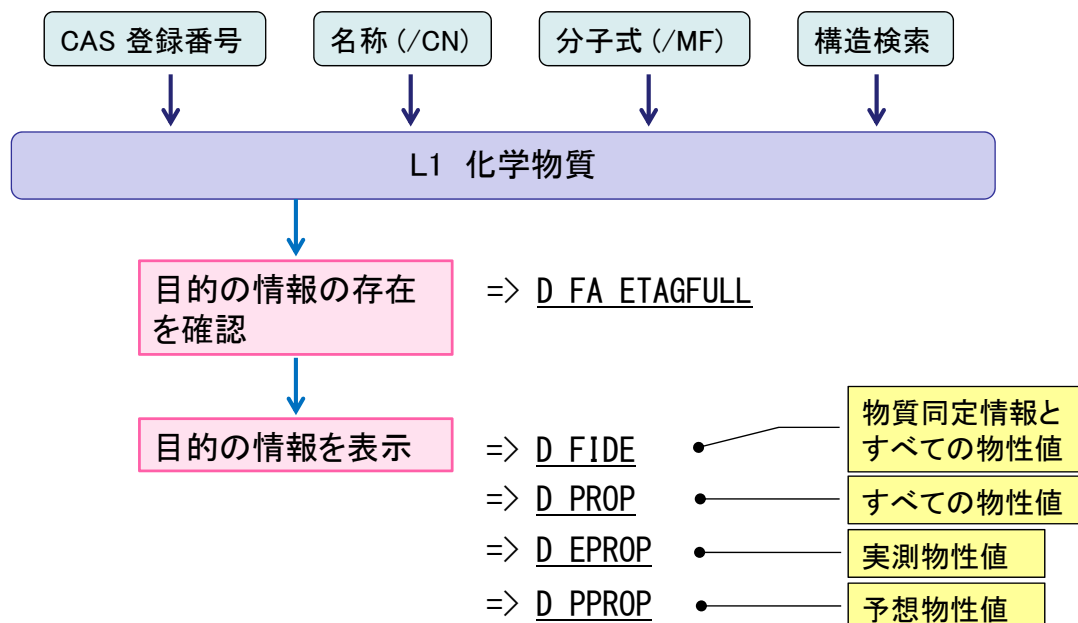
PPROP

PROP

This substance may exist in multiple tautomeric forms. The predicted property values in this table are calculated based upon the displayed form and may therefore differ from experimental values based on the actual tautomeric ratio at equilibrium.

- (1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 ((C) 1994-2014 ACD/Labs)

検索の流れ - 目的の物質の物性を調査



検索例 1

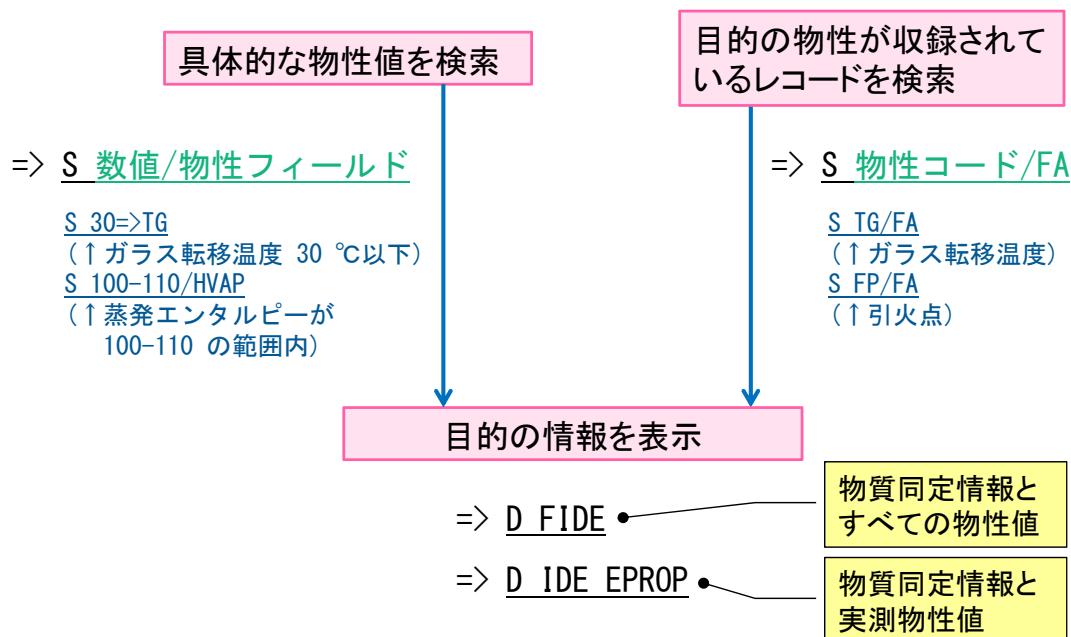
三臭化ホウ素 (BBr₃) の物性データを検索する



検索のポイント

- ・ 名称や分子式などで三臭化ホウ素を検索する
- ・ FA 表示形式でフィールドの存在を確認する
- ・ PROP 表示形式で実測物性値, 予想物性値, 参照文献タグをまとめて表示する

検索の流れ - 物性からの調査



検索例 2

屈折率が 1.6 以上で、主鎖中にエステルおよびチオエーテル構造を持つポリマーを検索する



検索のポイント

- ・ 屈折率は /RI で検索する (数値検索可能)
- ・ ポリマー主鎖中の官能基は、ポリマー分類用語 (/PCT) で検索する
 - POLYESTER/PCT (ポリエステル)
 - POLYTHIOETHER/PCT (ポリチオエーテル)

MEMO

本日の内容

- 概要
- **物性検索**
 - REGISTRY ファイル
 - **ReaxysFile ファイル**
- 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY, ReaxysFile)

ReaxysFile ファイル概要

- ・ 化学物質情報, **物性データ**, 反応情報を収録
 - 収録している**物性データの種類が多い**
- ・ 有機・無機化合物, 有機金属化合物を収録
 - 製作機関 : Elsevier Information Systems GmbH
 - 収録件数 : 1,940 万物質
 - 収録期間 : **1771 年**~
 - 更新頻度 : 不定期 (最新の更新は 2012 年 8 月)

レコード構成

物質単位のレコード

【物質同定情報】

- ・ レコード番号
- ・ CAS 登録番号
- ・ 名称
- ・ 分子式
- ・ 構造図
- ・ フィールドの存在
- ：

【物性情報】

- ・ 沸点
- ・ 融点
- ・ 液体密度
- ・ 溶解度
- ・ 定圧熱容量
- ・ 屈折率
- ・ NMR スペクトル
- ：

【反応情報】

- ・ この物質が生成物である反応
B → A
- ・ この物質が反応物である反応
A → C

- 物質レコードに, 物質同定情報, **物性情報**, 反応情報を収録
- 薬理学データ, 生態毒性データなどの**毒性関連データ**も収録
- 反応単位のレコードも収録している

物性情報 (1/2)

内容	物性情報 (表示フィールド)
化学的データ	CDER (誘導体), INP (天然物からの単離), PUR (精製), RSTR (関連構造)
結晶	CDEN (結晶の密度), CPD (結晶性状の記述), CRYPH (結晶相), CSG (結晶空間群), CSYS (結晶系), CTP (結晶の転移点), DP (分解点), MP (融点), SP (昇華点), TP (三重点)
電気化学的作用	DE (解離指数), ELCB (電気化学的作用の詳細), IEP (等電点), POT (電気化学的特性), XS (クロスセクション), ELCH (電気化学セル材料)
生態学的データ	BIO (生物学的性質), BIOD (生分解), COEV (環境への濃縮), ECDH (非生物学的分解, 加水分解), ECDP (非生物学的分解, 光分解), ECS (土壌中での安全性), ECTD (生態学的移動), ECTOX (生態毒性), EOD (酸素要求量), EXCA (汚染評価), USC (物質用途)
電気的特性	DIC (比誘電率), DICS (静電誘電率), ELE (電気的データ)
気体	CRD (臨界密度), CRP (臨界圧力), CRT (臨界温度), CRV (臨界体積), GP (気相), VP (蒸気圧)
液体	BP (沸点), LIQPH (液相), LPTP (液相の転移点)
気-液系データ	AZE (共沸混合物), CPEM (複雑な相平衡), LVSM (気-液系)
磁気的特性	MAG (磁気的データ), MSUS (磁化率)

物性情報 (2/2)

内容	物性情報 (表示フィールド)
物理的および機械的特性	CMP (圧縮率), DEN (液体密度), MEC (機械的特性), SOUND (音響特性), ST (表面張力), TEC (熱膨張)
光学特性	CDIC (円偏光二色性), MUT (変旋光), OPT (光学), ORD (旋光分散), ORP (旋光度), RI (屈折率)
薬理学/生態学的データ	ECO (生態学的データ), PHARM (薬理学データ)
構造およびエネルギーパラメータ	CIP (電子の結合), CNF (立体配座), DFM (分子の変形), DM (双極子モーメント), EBC (立体配座のエネルギー障壁), EDIS (解離エネルギー), GEO (原子間距離と角度), IP (イオン化ポテンシャル), POL (電気的分極)
安全性データ	AIT (自然発火点), FP (引火点)
溶液作用	CMC (臨界ミセル濃度), HNC (Henry 定数), POW (オクタノール水分分配係数), SLB (溶解度), SLBP (溶解度積), SOLM (溶解作用)
熱力学的特性	CP (定圧熱容量), CPO (標準定圧熱容量), CV (定容熱容量), HCOM (燃焼エンタルピー), HFOR (生成エンタルピー), HFUS (融解エンタルピー), HHDG (水素化エンタルピー), HPT (相転移エンタルピー), HSUB (昇華エンタルピー), HVAP (蒸発エンタルピー), OTHE (その他の熱力学的データ)
輸送現象	BV (体積粘性率), DV (粘性率), KV (動的粘性率), SDIF (自己拡散係数), TRAN (輸送データ)

表示形式

- 各物性を表示するには個別のフィールドを指定する
=> D DIC (比誘電率を表示)
- スーパーフィールド**を指定すると、類似した複数の物性情報をまとめて表示できる

サマリーシート

スーパーフィールドコード	内 容	含まれる表示フィールド
ELEP	電気的特性	DIC (比誘電率), DICS (静電誘電率), ELE (電気的データ)

=> D ELEP (DIC, DICS, ELE をまとめて表示)

表示のポイント

- 各物性のすべてのデータを表示するには、**F 付き**の物性フィールドコードを指定する
=> D DIC (比誘電率を最大 50 データ表示)
=> D FDIC (比誘電率をすべて表示)
- 同一のスーパーフィールド**に含まれるフィールドは、**同時に表示**すると一回分の表示料金で表示できる
=> D FDIC FDICS FELE

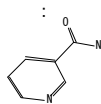


スーパーフィールドに F は付けられないので、個別のフィールドを指定する

スーパーフィールド	内容	含まれる表示フィールド
ELEP	電気的特性	DIC (比誘電率), DICS (静電誘電率), ELE (電気的データ)

表示例 (IDE 表示形式)

Accession Number (AN): 383619
 Basic Pref. RN (BPR): 98-92-0
 CAS Reg. No. (RN): 98-92-0
 Chemical Name (CN): pyridine-3-carboxamide,
 3-Pyridinecarboxamide, vitamin B3,
 3-carbamoylpyridine, nicotinic amide,



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CDEN	Density (Crystal)	6
CDER	Chemical Derivative	44
IR	Infrared Spectrum	29
MP	Melting Point	51
MS	Mass Spectrum	11
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	77
NQR	Nuclear Quadrupole Resonance	1

IDE 表示形式で表示すると、
収録されている物性情報と
データ数の一覧を確認できる

MP (融点) の情報が 51 データある

スペクトルデータ

表示例 (MP 表示形式)

Melting Point: ● MP (融点)

Value (MP) (Cel)	Solvent (. SOL)	Ref.
105.84		
129	methanol	
129 - 131	ethanol, hexane	
124		
129		
145 - 147		

物性情報 (表形式)

Reference(s):

Reference(s):

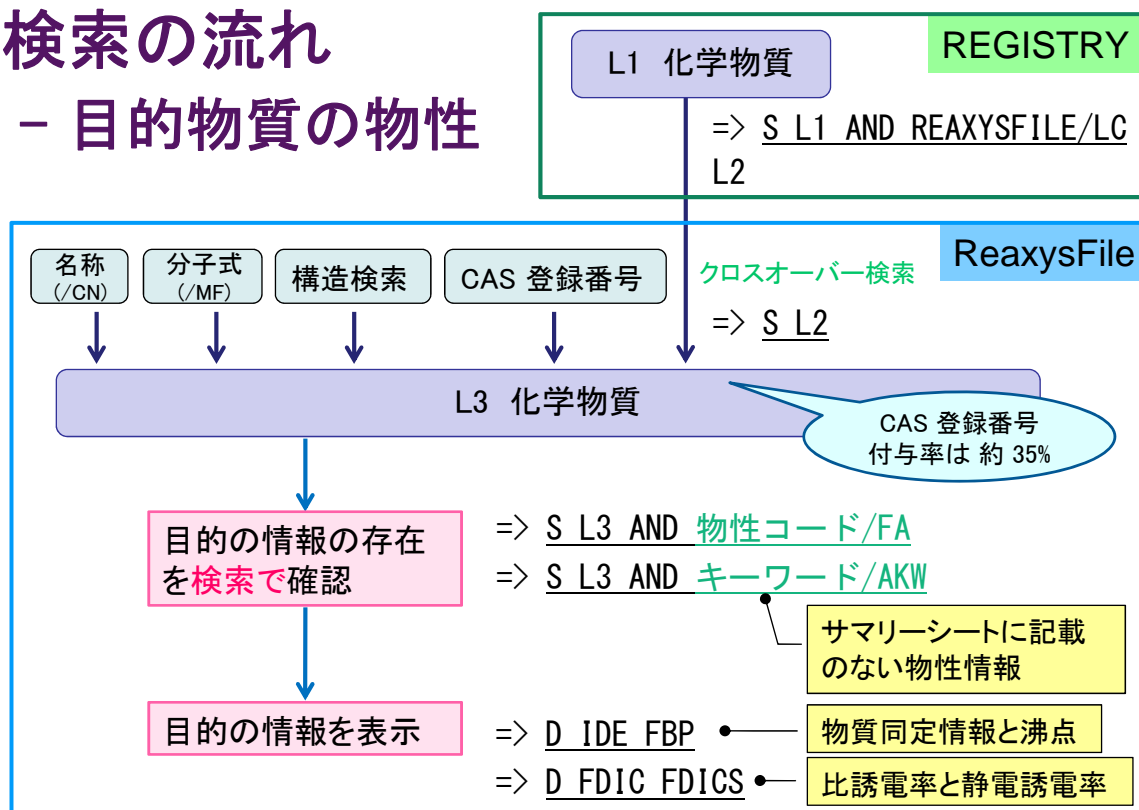
- Li, Jinjing; Bourne, Susan A.; Cairn, Mino R., Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom), CODEN: CHCOFS, 47(5), <2011>, 1530 - 1532
- Angeles, Norma A.; Villavicencio, Felipe; Guadarrama, Carlos; Corona, David; Cuevas-Yanez, Erick, Journal of the Brazilian Chemical Society, CODEN: JOCSET, 21(5), <2010>, 905 - 908
- Crisostomo, Carmela; Crestani, Marco G.; Garcia, Juventino J., Inorganica Chimica Acta, CODEN: ICHAA3, 363(6), <2010>, 1092 - 1096

Notes(s):

- Only first 50 entries are displayed. Total number of entries = 51.
Use "DIS F<prop>" for full format, e.g. FCPD instead of CPD.

MP 表示形式では、最初の 50 データ
が表示される。51 データをすべて表示
するには、FMP 表示形式を用いる

検索の流れ - 目的物質の物性



検索例 3

酢酸エチルの共沸混合物データを表示する



検索のポイント

- ・ 名称などで酢酸エチルを検索する
- ・ ⇒ S L# AND AZE/FA で共沸混合物データが収録されているか確認する
- ・ 共沸混合物データは F 付きの表示形式 (FAZE) で表示する

サマリーシートに記載がない物性情報

- 物性情報に関連するキーワード/AKW を EXPAND して確認する

=> E REDOX POTENTIAL/AKW

E1	4552	REACTION OF COMPOUND SURFACE/AKW
E2	1172	REACTION WITH SUBSTANCE CLASSES/AKW
E3	13097	→ REDOX POTENTIAL/AKW
E4	7492	REDUCTION POTENTIAL/AKW
E5	179	REFLECTION/AKW
:		

酸化還元電位はサマリーシートに記載がないが、キーワードは収録されている



Electrochemical Characteristics: ← 電気化学的特性に収録されている
POT

Description (. KW):	redox potential
Solvent (. SOL):	acetonitrile

検索例 4

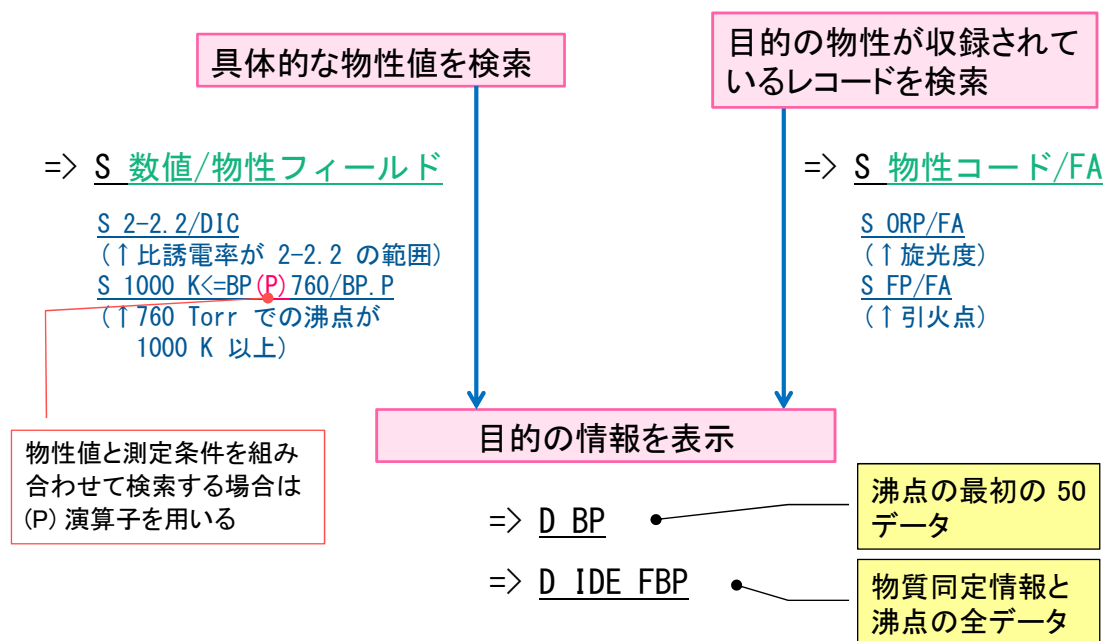
2,6-ジメチルベンゾキノン¹の酸化還元電位 (REDOX POTENTIAL) を調べる



検索のポイント

- サマリーシート中に目的の物性に対応するフィールドコードが見当たらない場合は、**物性情報に関するキーワード/AKW** で検索する

検索の流れ - 物性からの調査



検索例 5

超電導臨界温度が 液体窒素温度 ($-196\text{ }^{\circ}\text{C}$)
以上の銅酸化物を検索する



検索のポイント

- ・ 超電導臨界温度は /ELE.CRIT で数値を指定して検索する
- ・ 銅酸化物は分子式関連フィールドで検索する

MEMO

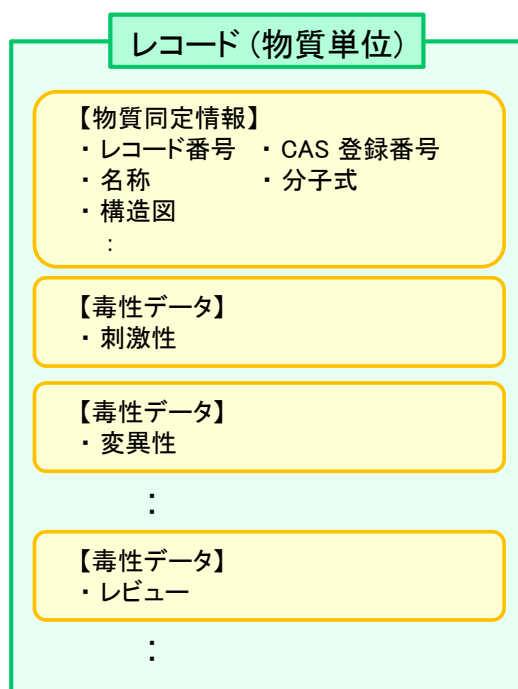
本日の内容

- ・ 概要
- ・ 物性検索
 - REGISTRY ファイル
 - ReaxysFile ファイル
- ・ 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY, ReaxysFile)

RTECS ファイルの概要

- ・ 化学物質情報, **毒性情報**を収録
- ・ 医薬品, 農芸化学物質など商業上重要な物質を収録
 - 製作機関 : 米国労働安全衛生研究所 (NIOSH)
Accelrys, Inc.
 - 収録件数 : **18 万件**以上
 - 収録期間 : 1971 年
 - 更新頻度 : **毎日**

レコード構成



- レコードは物質単位

毒性データ

- 各種毒性試験の数値データが**表形式**でまとめられている

フィールド	データ種類	内容
IRR	刺激性データ	ドレイズ法による肌や眼の刺激性試験結果
MUT	変異原性データ	20種類の試験法, 多種にわたる動物種細胞のデータ
REP	生殖試験データ	催奇形性, 両親・胎児・新生児の影響, 受精率, 奇形, 腫瘍原性などのデータをメスの生殖周期とともに収録
TUM	腫瘍原性データ	発がん性データ, 腫瘍性データなど
TOX	毒性データ (主に急性毒性)	主に単回投与の急性毒性データ, 致死データ
OMUL	その他の毒性データ (主に慢性毒性)	主に慢性毒性データ(致死データを除く)

毒性データ

- ・ 毒性試験データは, 毒性発現の**最小値**が記載されている
- ・ 刺激性や変異原性などの特殊毒性試験データは, **陽性データ**を収録している
- ・ 掲載データは第三者機関などによって評価されたものではない. 必要に応じて出典データの原文を参照する

表示例 (TOX 表示形式)

TOXICITY DATA (TOX):

作用 Effect EFF	経路 Route RTE	生物種 Organism ORGN	投与量 Dose DOSE	期間 Duration DUR	出典情報 Source SO
	intraperitoneal	rat	LD50 1100 ug/kg		APYPAY 12, 173, 1961
P30;U25	inhalation	man	TCLo 150 ppm	1Y-I	BLUTA9 28, 293, 1974

対象となる生物種や細胞

毒性データ

アルファベットと数字の組み合わせで症状を定義

S:秒 M:分 H:時
D:日 Y:年 W:週
C:連続的 I:断続的

LD (Lethal Dose): 致死量
TD (Toxic Dose): 毒性量
LC (Lethal Concentration): 致死濃度
TC (Toxic Concentration): 毒性濃度

50: 50%
Lo: 最低

出典情報 (OMULFULL 表示形式)

OTHER MULTIPLE DOSE DATA (OMUL):

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
U01;Z73	inhalation	rat	TDL0 3000 ppm	6H/5D-I	TXAPA9 77, 144, 1985
A30;F11;F19	inhalation	dog	TCL0 500 ppm	24H/3D-C	NTIS** OTS0534633
A11;P70	inhalation	rat	TCL0 240 mg/m**3	4H/24W-I	VCVGH* -, 313, 1990

出典情報

CODEN
雑誌名・機関
(簡略表記)

巻・号, ページ
出版年など

対応する情報

OTHER MULTIPLE DOSE REFERENCES:

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959-

NTIS** National Technical Information Service (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information.

VCVGH* "Vrednie chemicheskije veshstva, galogenproisvodnie uglevodorodov" (Hazardous substances: Galogenated hydrocarbons) Bandman A.L. et al., Chimia, 1990.

EFF コード

A	Brain and Coverings	M	Kidney, Ureter, and Bladder
B	Spinal Cord	N	Endocrine
C	Peripheral Nerve and Sensation	P	Blood
D	Sense Organs and Special Senses (Nose, Eye, Ear, and Taste)	Q	Musculoskeletal
E	Autonomic Nervous System	R	Skin and Appendages
F	Behavioral	S	Immunological including Allergic
G	Cardiac	T	Reproductive including Embryotoxic, Neonatal and Teratogenic
H	Vascular	U	Nutritional and Gross Metabolic
I	Aquatic Organism Effects	V	Tumorigenic
J	Lungs, Thorax, or Respiration	X	In Vitro Toxicity Studies
K	Gastrointestinal	Y	Biochemical
L	Liver	Z	Related to Chronic Data

作用を表すためのコード. さらにダメージコードが続く

EFF コード (ダメージコード)

F BEHAVIORAL	
01	GENERAL ANESTHETIC
02	ANTICONVULSANT
03	WAKEFULNESS
04	SLEEP
05	ALTERED SLEEP TIME
06	EUPHORIA
07	SOMNOLENCE
:	

アルファベットと
数字を組み合わせて
症状を定義している

(例)

F : 「行動」

F01 : 「麻痺」

F02 : 「けいれん」

:

EFF コードの定義 URL: <http://www.jaici.or.jp/stn/rtecs0201.htm>

(オンラインでも表示可能: => [HELP EFF](#) => [HELP アルファベット](#))

毒性関連データ

- 各種情報がテキスト形式でまとめられている

フィールド	データ種類	内容
CREV	がんレビュー	IARC (国際がん研究機関) による発がん性評価情報
TREV	毒性レビュー	文献中の毒性レビュー情報
TLV	限界値	ACGIH (米国産業衛生専門家会議) 勧告の暴露限界値
SREG	規制および基準	政府機関または法律による規制状況
NREC	NIOSH 勧告	NIOSH (米国労働安全衛生研究所) 勧告の暴露限界濃度
SURV	米国職業調査	NIOSH による米国産業界対象の暴露調査結果
ASTA	機関識別	各政府関連機関が実施した活動内容報告など

表示例 (TREVFULL 表示形式)

TOXICOLOGY REVIEW (TREV) : 毒性レビュー

TOXICOLOGY REVIEW TOLED5 127, 135, 2002

TOXICOLOGY REVIEW TOLED5 138, 9, 2003

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 543, 201, 2003

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 227, 2004

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 109, 2004

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 151, 2004

TOXICOLOGY REVIEW EMMUEG 39, 69, 2002

:

TOXICOLOGY REVIEW REFERENCES: 出典情報の詳細

TOLED5 Toxicology Letters (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE
Amsterdam, Netherlands) V.1- 1977-

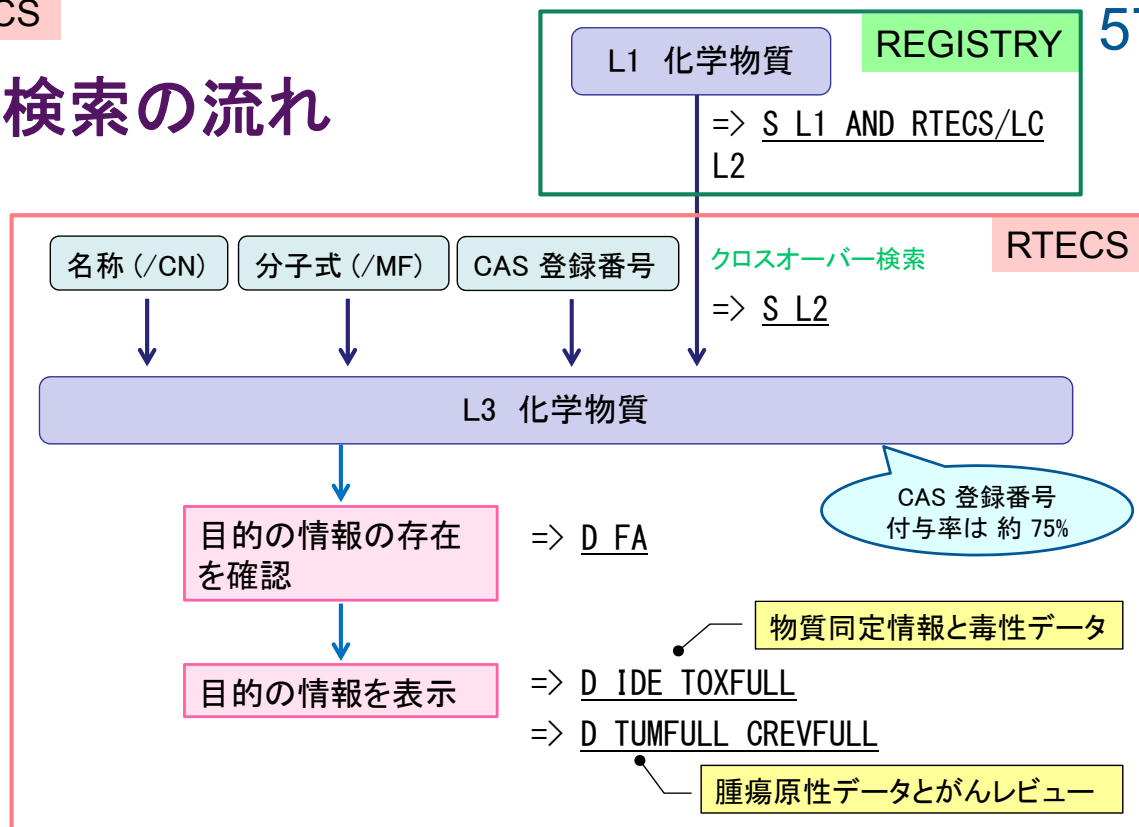
MUREAV Mutation Research (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE
Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964-

EMMUEG Environmental and Molecular Mutagenesis (Alan R. Liss, Inc., 41 E.
11th St., New York, NY 10003) V.10- 1987-

:

CODEN, 巻・号, ページ, 出版年

検索の流れ



定型表示形式

表示形式	内容
IDE	物質同定データ
ALL	物質同定データ, 毒性データ, 毒性関連データ
QRD	物質同定データ, ヒットタームを含むフィールド (デフォルト)
EFFECTS	毒性データ IRR (刺激性データ), MUT (変異原性データ), REP (生殖試験データ), TUM (腫瘍原性データ), TOX (毒性データ), OMUL (その他毒性データ)
BIB	毒性関連データ CREV (がんレビュー), TREV (毒性レビュー), TLV (限界値)
LEGAL	毒性関連データ SREG (規制および基準), NREC (NIOSH 勧告), SURV (米国職業調査), ASTA (機関識別)

表示のポイント

- ・ **FA** 表示形式で毒性データの有無を確認できる
⇒ D FA (フィールドの存在を表示)
- ・ 出典情報をわかりやすく表示するには **FULL 付き**の表示形式を使う
⇒ D TOX**FULL** (毒性データを表示)
- ・ 同じ定型表示形式内に含まれるデータは一行にまとめて入力する
⇒ D TOXFULL OMULFULL TUMFULL MUTFULL

検索例 6

RTECS ファイルで、四塩化炭素の毒性データ、腫瘍原性データ、毒性レビュー、がんレビューを検索する



検索のポイント

- ・ REGISTRY ファイルの回答は、RTECS/LC で限定した後クロスオーバーする
(件数が少ない場合は直接クロスオーバーする)
- ・ 毒性情報を表示する際に FULL を付けると詳細な出典情報を表示する

MEMO

本日の内容

- ・ 概要
- ・ 物性検索
 - REGISTRY ファイル
 - ReaxysFile ファイル
- ・ 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY, ReaxysFile)

REGISTRY ファイルの毒性関連情報

- ・ 実測物性値 (EPROP)
 - LD50
- ・ 予想物性値 (PPROP)
 - 生物濃縮係数
- ・ 参照文献タグ (ETAG)
 - ADME (吸収・分布・代謝・排泄)
 - NOAEL/LOAEL (最大無毒性量/最小毒性量) など

ReaxysFile ファイルの毒性情報

- ・ 薬理学データ (PHARM)
 - ヒトおよび哺乳類の薬理学データ, 毒物学データ
- ・ 生態学的データ
 - 化学物質が生態系などに及ぼす効果・影響
 - 生分解 (BIO), 環境への濃縮 (COEV), 生態毒性 (ECTOX), 土壌での安定性 (ECS) など

検索例 7

ウィルキンソン触媒 ($(\text{Ph}_3\text{P})_3\text{RhCl}$) の毒性情報を調査する



検索のポイント

- ・ 化学物質の名称から検索する場合は、名称の収録が多い REGISTRY ファイルで検索する
- ・ RTECS ファイルに毒性情報が収録されていない場合は、ReaxysFile ファイルなどを検索する

参考資料

◆物性情報 2009

<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-prop09.pdf>

◆ReaxysFile ファイル

<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-reaxys.pdf>

◆毒性情報 2011

<http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/ref-tox2011.pdf>



【検索例 1】 三臭化ホウ素 (BBr₃) の物性データを検索する

=> FILE REGISTRY

← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E TRIBROMOBORANE/CN 5

```
E1      1      TRIBROMOBISMUTHINE/CN
E2      1      TRIBROMOBISPHENOL A/CN
E3      1  --> TRIBROMOBORANE/CN
E4      1      TRIBROMOBORANE COMPD. WITH METHYLPHOSPHINE (1:1)/CN
E5      1      TRIBROMOBORANE COMPD. WITH PHOSPHINE (1:1)/CN
```

=> S E3

← 三臭化ホウ素を化学物質名で検索する

L1 1 TRIBROMOBORANE/CN

=> D FA

← フィールドの存在を表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN

Available Properties (PRFA)

CODE	PROPERTY

Experimental Data ●	
BP	Boiling Point
DEN	Density
MP	Melting Point
RI	Refractive Index
SPEC	Boron-11 NMR Spectra
ETAG	Experimental Tags ●
Predicted Data ●	
BCF	Bioconcentration Factor
BP	Boiling Point
DEN	Density
FRB	Freely Rotatable Bonds
HAC	H acceptors
HD	H donors
HDAS	Hydrogen Donors/Acceptors Sum
HVAP	Enthalpy of Vaporization
ISLB.MASS	Mass Intrinsic Solubility
ISLB.MOL	Molar Intrinsic Solubility
LOGD	logD
LOGP	logP
MVOL	Molar Volume
MW	Molecular Weight
PSA	Polar Surface Area
SLB.MASS	Mass Solubility
SLB.MOL	Molar Solubility
VP	Vapor Pressure

実測物性値

参考文献タグ

予想物性値

フィールドの存在

各レコードに収録されている物性を
あらかじめ確認できる

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	96-97 deg C		(1) CAS
Boiling Point (BP)	91.3 deg C		(2) CAS
Boiling Point (BP)	91 deg C		(3) NIOSH
Boiling Point (BP)	90.1 deg C	Press: 740 Torr	(4) CAS
Boiling Point (BP)	90 deg C		(5) NLM
Boiling Point (BP)	90 deg C		(6) SRC
Boiling Point (BP)	89.8 deg C	Press: 760 Torr	(7) IC
Boiling Point (BP)	12 deg C	Press: 760 Torr	(8) CAS
Boron-11 NMR Spectra	Spectrum		(9) WSS
Density (DEN)	2.7 g/cm**3		(3) NIOSH
Density (DEN)	2.691 g/cm**3		(10) CAS
Density (DEN)	2.6431 g/cm**3	Temp: 18.4 deg C	(5) NLM
Melting Point (MP)	2507 deg C		(11) CAS
Melting Point (MP)	-46.0 deg C		(5) NLM
Melting Point (MP)	-46 deg C		(3) NIOSH
Melting Point (MP)	-46 deg C		(6) SRC
Refractive Index (RI)	1.5312	Wavlen: 589.3 nm	(10) CAS
Refractive Index (RI)	1.5312	Temp: 16.3 deg C	(5) NLM
		Wavlen: 589.3 nm	

実測物性値

← 沸点

実測の数値が収録されている

← ¹¹B NMR スペクトル

← 密度

← 融点

← 屈折率

Spectra may be displayed by clicking the links in the property table, or in bulk using the SPEC or MAX formats.

- (1) Coleman, Ralph A.; Journal of the American Chemical Society 1954 V76, P4534-8 [CAPLUS](#)
- (2) Gueilleron, Jean; Annali di Chimica Applicata 1944 V19, P459-86 [CAPLUS](#)
- (3) "International Chemical Safety Cards" data were obtained from the National Institute for Occupational Safety and Health.
- (4) Anderson, Thomas F.; Journal of Chemical Physics 1936 V4, P703-7 [CAPLUS](#)
- (5) "Hazardous Substances Data Bank" data were obtained from the National Library of Medicine (US)
- (6) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
- (7) Var'gin, V. V.; Vysokochistye Veshchestva 1990(5) P167-71 [CAPLUS](#)
- (8) Druce, P. M.; Chemical Communications (London) 1967(10) P486-7 [CAPLUS](#)
- (9) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
- (10) Pohland, E.; Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie 1931 V201, P282-8 [CAPLUS](#)
- (11) Vasil'ev, A. M.; Trans. Kirov Inst. Chem. Tech. Kazan 1935(No. 4-5) P93-5 [CAPLUS](#)

Experimental Property Tags (ETAG)

← 参考文献タグ

PROPERTY	NOTE
Bond Angle	(1) CAS
Bond Length	(1) CAS
Boron-11 NMR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(3) CAS
Photoelectron Spectra	(4) CAS
Potential of Electrode Reaction	(5) CAS
Proton NMR Spectra	(6) CAS
Raman Spectra	(2) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
UV and Visible Absorption Spectra	(7) CAS
UV and Visible Emission/Luminescence Spectra	(8) CAS

参考文献タグ

参考文献タグは実測物性値が記載された文献の情報が収録されている

- (1) Mercier, Helene P. A.; Journal of Fluorine Chemistry 2004 V125(11) P1563-1578 [CAPLUS](#)
- (2) Mercier, Helene P. A.; Journal of the American Chemical Society 2004 V126(17) P5533-5548 [CAPLUS](#)
- (3) Hales, David A.; Journal of Physical Chemistry A 2007 V111(12) P2266-2275 [CAPLUS](#)
- (4) Mackie, R. A.; Chemical Physics 2003 V288(2-3) P211-240 [CAPLUS](#)
- (5) Celikkan, Hueseyin; Journal of Applied Electrochemistry 2009 V39(9) P1525-1533 [CAPLUS](#)
- (6) Lungwitz, Ralf; ChemPhysChem 2012 V13(7) P1910-1916 [CAPLUS](#)
- (7) Welch, Gregory C.; Journal of the American Chemical Society 2009 V131(31) P10802-10803 [CAPLUS](#)
- (8) Olander, Jenny; Chemical Vapor Deposition 2005 V11(6-7) P330-337 [CAPLUS](#)

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 5 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 6 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 7 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 8 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 9 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	50.53	pH 10 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	91.3+/-9.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	2.782+/-0.06 g/cm**3	20 deg C	(1)
		760 Torr	
Enthalpy of Vap. (HVAP)	30.50+/-0.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	0		(1)
H acceptors (HAC)	0		(1)
H donors (HD)	0		(1)
Hydrogen Donors/Acceptors Sum (HDAS)	0		(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 1 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 2 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 3 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 4 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 5 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 6 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 7 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 8 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 9 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	2.54	pH 10 25 deg C	(1)
LOGP (LOGP)	2.544+/-0.350	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB. MASS)	1.4 g/L	25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 1 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 2 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 3 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 4 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 5 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 6 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 7 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 8 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 9 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	pH 10 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB. MASS)	1.4 g/L	Unbuffered Water	(1)
		pH 7.00	
		25 deg C	
Molar Intrinsic Solubility (ISLB. MOL)	0.0055 mol/L	25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 1 25 deg C	(1)

予想物性値

← 生物濃縮係数
計算値が収録されている

← 生物濃縮係数

← 沸点
← 密度

← 蒸発エンタルピー
← 回転可能な結合数
← 水素受容基数
← 水素供与基数
← 水素受容/供与基数の合計

← pH を考慮したオクタノール - 水分配係数の対数値

← オクタノール - 水分配係数の対数値
← 固有質量溶解度

← 質量溶解度

← 固有モル溶解度

← モル溶解度

Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 2 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 3 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 4 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 5 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 6 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 7 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 8 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 9 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	pH 10 25 deg C	(1)	
Molar Solubility (SLB. MOL)	0.0055 mol/L	Unbuffered Water	(1)	
		pH 7.00		
		25 deg C		
Molar Volume (MVOL)	90.0+/-3.0 cm**3/mol	20 deg C	(1)	← モル体積
		760 Torr		
Molecular Weight (MW)	250.52		(1)	← 分子量
Polar Surface Area (PSA)	0.00 A**2		(1)	← 極性表面積
Vapor Pressure (VP)	6.13E+01 Torr	25 deg C	(1)	← 蒸気圧

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02
 ((C) 1994-2014 ACD/Labs)

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

【検索例 2】 屈折率が 1.6 以上で、主鎖中にエステルおよびチオエーテル構造を持つポリマーを検索する

REGISTRY ファイルのサマリーシート

■ 物性検索フィールド (続き)

SEARCH コード	内容	デフォルト 単位	入力例	DISPLAY コード
/RI	屈折率 ⁵⁾	none	S 1.427/RI	RI
/RI.T	屈折率測定時の温度 ⁵⁾	deg C	S 1.427/RI (P) 25/RI.T	RI
/RI.W	屈折率測定時の波長 ⁵⁾	nm	S 500-589.3/RI.W	RI

屈折率 (/RI) は数値検索できる

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 1.6<=RI
L1 7238 1.6<=RI

← 屈折率が 1.6 以上である物質を検索する

数値検索フィールドは範囲指定検索が可能

=> S POLYESTER/PCT AND POLYTHIOETHER/PCT
290361 POLYESTER/PCT
15823 POLYTHIOETHER/PCT
L2 4104 POLYESTER/PCT AND POLYTHIOETHER/PCT

← ポリエステルおよびポリチオエーテルのポリマー分類用語が付与されているポリマーを検索する

=> S L1 AND L2
L3 16 L1 AND L2

← L1 と L2 を AND 演算する

=> D 1 IDE EPROP

← 1 件目の物質同定情報、実測物性値を表示する

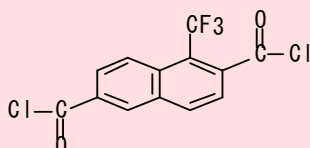
L3 ANSWER 1 OF 16 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
RN 612090-08-1 REGISTRY
ED Entered STN: 03 Nov 2003
CN 2,6-Naphthalenedicarbonyl dichloride, 1-(trifluoromethyl)-, polymer with 2-fluoro-1,3-benzenedicarbonyl dichloride and 4,4'-thiobis[2-aminophenol] (9CI) (CA INDEX NAME)
MF (C13 H5 C12 F3 O2 . C12 H12 N2 O2 S . C8 H3 C12 F O2)x
CI PMS
PCT Polyamide, Polyamide formed, Polybenzoxazole, Polybenzoxazole formed, Polyester, Polyester formed, Polythioether
SR CA
LC STN Files: CA, CAPLUS

CM 1

CRN 438202-09-6
CMF C13 H5 C12 F3 O2

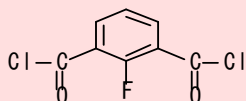
物質同定情報

ポリマー分類用語 (PCT) は、ポリマーの主鎖に存在する結合の種類に基づいて付与されるコード



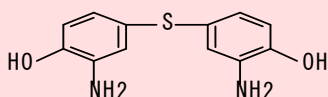
CM 2

CRN 91129-30-5
CMF C8 H3 Cl2 F O2



CM 3

CRN 22445-97-2
CMF C12 H12 N2 O2 S



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

1 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
1 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	NOTE
Refractive Index (RI)	1.626	(1) CAS

実測物性値

屈折率は 1.626

(1) Fujiwara, Makoto; JP 2003287634 A 2003 CAPLUS

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

【検索例 3】 酢酸エチルの共沸混合物データを表示する

=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> E ETHYL ACETATE/CN 5

E1 1 ETHYL ACETARE/CN
 E2 1 ETHYL ACETAT-ETHER/CN
 E3 1 --> ETHYL ACETATE/CN
 E4 1 ETHYL ACETATE (1 VOLUME)-ISOPROPYL OXIDE/CN
 E5 1 ETHYL ACETATE (10 ML)-METHANOL/CN

=> S E3 ← 酢酸エチルを検索する

L1 1 "ETHYL ACETATE"/CN

=> S L1 AND AZE/FA ← 共沸混合物の情報が存在するかを確認する

L2 1414 AZE/FA

L2 1 L1 AND AZE/FA

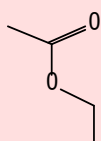
ReaxysFile ファイルでは、**検索**によりフィールドの存在を確認するとよい

=> D IDE ← 物質同定情報を表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 506104
 Basic Pref. RN (BPR): 141-78-6
 CAS Reg. No. (RN): 141-78-6
 Chemical Name (CN): ethyl acetate, acetic acid ethyl ester,
 CH3C(O)OEt, CH3COOC2H5, MeC(O)OEt, EA,
 ethyl ethanoate
 Autonom Name (AUN): Acetic acid ethyl ester
 Lin. Struct. Formula (LSF): C2H5COOCH3
 Molec. Formula (MF): C4 H8 O2
 Formula Weight (FW): 88.1063
 Compound Type (CTYPE): acyclic
 InChi Key: (INCHI): XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYSA-N
 Alternate InChi Key: (AINCHI): XEKOWRVHYACXOJ-UHFFFAOYAD
 Markush Ref. Count (MARKREF): 16
 Entry Date (DED): 1989/02/27
 Update Date (DUPD): 2011/03/23

物質同定情報



Field Availability: ● フィールドの存在

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
AUN	Autonomname	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formula Weight	1
INCHI	InChi Key	1
AINCHI	Alternate InChi Key	1
CTYPE	Compound Type	1
MARKREF	Markush Reference Count	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1

ADSM	Adsorption (MCS)	128	
ASSM	Association (MCS)	270	
AZE	Azeotrope (MCS)	55	← 共沸混合物
BIOD	Biodegradation	8	
BP	Boiling Point	56	
BSPM	Boundary Surface Phenomena (MCS)	49	
BV	Bulk Viscosity	1	
CDEN	Density (Crystal)	18	
:			

=> SET LIN 100
SET COMMAND COMPLETED

← 1行あたりの文字数を 100 に指定する

=> D FAZE

← 共沸混合物の情報を表示する

F 付きのフィールドコードを指定すると、すべてのデータを表示できる

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

Azeotrope (MCS):

Value (AZE. PA)	Temp. (. T) (Cel)	Press. (. P) (Torr)	Partner AN (. PAAN)	Ref.
ethanol	71.55	750.075	1718733	
2-ethoxy-2-methylpropane	59.85	519.042	1731469	
cyclohexane, isopropyl alcohol, butanone	68.53	759.811	1900225, 635639, 741880	
cyclohexane, isopropyl alcohol, butanone	103.67	2265.18	1900225, 635639, 741880	
cyclohexane, isopropyl alcohol	121.94	3765.3	1900225, 635639	
#tert!-butyl alcohol	76.44	759.961	906698	
HFE-449mec-f	79.93	759.811	1869158	
ethanol	71.7	760	1718733	
n-heptane	50	295.8	1730763	
n-heptane	70	614.6	1730763	
cyclohexane	55	434.5	1900225	
methanol				
propan-1-ol				
isopropyl alcohol				
ethanol				
cyclohexane		233		
cyclohexane, ethanol		203		
water, ethanol	70.3			
CCl4				
water	70.5	760		
methanol	62.3	760		
butyl chloride	75.5	760		
carbon disulfide	46	760		
ethyl iodide	70.9	760		
hexane	65	760		
isopropyl alcohol	75.3	760		
dichlorobromomethane	90.6	760		
methylethyl ketone	76.7	760		
water	70.5			
alcohol	71.8			
alcohol, water	70.3			
hexane	65.1	760		
heptane	76.9	760		
water	70.4	760		
ethanol	71.8	760		
cyclohexane	72.8	760		
cyclohexene	74.5	760		
acetonitrile	74.8	760		
butyl nitrite	76.3	760		
ethyl iodide	71	760		
butyl chloride	75.9	760		

共沸混合物

tetrachloromethane	74.8	760		
tetrachloromethane				
#tert!butyl alcohol	76	760		
methylethyl ketone	77	760		
methylcyclopentane	67.2	760		
#tert!-butyl bromide	73	760		
dichlorobromomethane	90.5	760		
#tert!-butyl alcohol	76	760		
2,3-dimethyl-butane	57.2	760		
cyclohexadiene-(1.3)	73.8	760		
carbon disulfide				
cyclohexane, isopropyl alcohol				
water, ethanol, #trans!-crotonaldehyde				

Reference(s) :

- Orchilles, A. Vicent; Miguel, Pablo J.; Vercher, Ernesto; Martinez-Andreu, Antoni, Journal of Chemical and Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 52(6), <2007>, 2325 - 2330
- Kim, Younghun; Keskinen, Kari I.; Aittamaa, Juhani, Journal of Chemical & Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 49(5), <2004>, 1273 - 1278
- Wang, Qi; Yan, Xin-Huan; Chen, Geng-Hua; Han, Shi-Jun, Journal of Chemical & Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 48(1), <2003>, 66 - 70
- Ortega, Juan; Espiau, Fernando; Postigo, Miguel, Journal of Chemical & Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 48(4), <2003>, 916 - 924
- Tochigi, Katsumi; Kikuchi, Chie; Kurihara, Kiyofumi; Ochi, Kenji; Murata, Jinji; Otake, Katuto, Journal of Chemical & Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 47(4), <2002>, 830 - 834
- Ortega, Juan; Pena, Juan A.; Alfonso, Casiano de, Journal of Chemical & Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 31(3), <1986>, 339 - 342
- Shealy, Glenn S.; Sandler, Stanley I., Journal of Chemical Thermodynamics, CODEN: JCTDAF, 17(2), <1985>, 143 - 150
- Ohta, Tatsuhiro; Nagata, Isamu, Journal of Chemical & Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 25(3), <1980>, 283 - 286
- Susarev et al., Russian Journal of Physical Chemistry, CODEN: RJPCAR, 37, <1963>, 1446, Zhurnal Fizicheskoi Khimii, CODEN: ZFKHA9, 2672
- Chistov; Ganshina, Gidroliznaya i Lesokhimicheskaya Promyshlennost, CODEN: GLKPA2, 13(1), <1960>, 20, Chem. Abstr. (14110), <1960>
- Aristovich; Stepanova, J. Appl. Chem. USSR (Engl. Transl.), CODEN: JAPUAW, 43, <1970>, 2192, 2217, 2219
- Pichler et al., Brennstoff-Chemie, CODEN: BRCHAR, 31, <1950>, 361, 362
- Murti; van Winkle, Journal of Chemical and Engineering Data, CODEN: JCEAAX, 3, <1958>, 65, 68
- Rabcewicz-Zubkowski, Roczniki Chemii, CODEN: ROCHAC, 13, <1933>, 16, Chem. Zentralbl., CODEN: CHZEA6, 105(I), <1934>, 2561
- Skljarenko; Baranajew, Zeitschrift fuer Physikalische Chemie, Abteilung A: Chemische Thermodynamik, Kinetik, Elektrochemie, Eigenschaftslehre, CODEN: ZPCAAI, 175, <1936>, 200, Acta physicoch. U. R. S. S., 4, <1936>, 873, Chem. Zentralbl., CODEN: CHZEA6, 108(I), <1937>, 296
- Skljarenko; Baranajew, Zhurnal Fizicheskoi Khimii, CODEN: ZFKHA9, 6, <1935>, 1180, 1187, 1204, 1207, Chem. Zentralbl., CODEN: CHZEA6, 107(II), <1936>, 1500, 1501
- Storonkin; Moratschewskii, Zhurnal Fizicheskoi Khimii, CODEN: ZFKHA9, 31, <1957>, 42, Chem. Abstr., <1957>, 15236
- Storonkin et al., Zhurnal Fizicheskoi Khimii, CODEN: ZFKHA9, 31, <1957>, 395, 399, Chem. Abstr., <1957>, 15200
- Patent
- Guinot; Clarke, Chem. Trade J., 103, <1938>, 413
- Griswold; Chu; Winsauer, Industrial and Engineering Chemistry, CODEN: IECHAD, 41, <1949>, 2354
- Schutz; Mallone, Journal of the American Chemical Society, CODEN: JACSAT, 62, <1940>, 1491
- Schutz, Journal of the American Chemical Society, CODEN: JACSAT, 61, <1939>, 2692
- Redlich; Schutz, Journal of the American Chemical Society, CODEN: JACSAT, 66, <1944>, 1007, 1010
- Dolique, Bulletin de la Societe Chimique de France, CODEN: BSCFAS, <5> 2, <1935>, 1832, 1842, 1843
- Quinot; Clarke, Chem. Trade J., 103, <1938>, 413
- Herz; Levi, Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie, CODEN: ZAACAB, 183, <1929>, 341
- Lecat, Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas, CODEN: RTCPA3, 45, <1926>, 624, Ann. Soc. scient. Bruxelles, 47 I, <1927>, 24
- Faillebin, Bulletin de la Societe Chimique de France, CODEN: BSCFAS, <4> 29, <1921>, 273
- Lecat, M., Tables azeotropiques, 2. Aufl. <Bruessel 1949> S. 57
- Lecat, Ann. Soc. scient. Bruxelles, 48 I, <1928>, 116, 117

【検索例 4】 2,6-ジメチルベンゾキノンの酸化還元電位 (REDOX POTENTIAL) を調べる

=> FILE REAXYSFILE

← ReaxysFile ファイルに入る

=> E 2,6-DIMETHYLBENZOQUINONE/CN

← 2,6-ジメチルベンゾキノンの名称を EXPAND する

```
E1      1      2,6-DIMETHYLBENZOPHENONHYDRAZON/CN
E2      1      2,6-DIMETHYLBENZOPHENONIMIN/CN
E3      1 --> 2,6-DIMETHYLBENZOQUINONE/CN
E4      1      2,6-DIMETHYLBENZOSEMICHINON-RADIKAL/CN
E5      1      2,6-DIMETHYLBENZOSULFONSAEURE/CN
E6      1      2,6-DIMETHYLBENZOTHIAZOL/CN
:
```

=> S E3

← 2,6-ジメチルベンゾキノンを検索する

L1 1 "2,6-DIMETHYLBENZOQUINONE"/CN

=> E REDOX POTENTIAL/AKW

← 酸化還元電位 (REDOX POTENTIAL) を /AKW フィールドで EXPAND する

```
E1      4552   REACTION OF COMPOUND SURFACE/AKW
E2      1172   REACTION WITH SUBSTANCE CLASSES/AKW
E3      13097 --> REDOX POTENTIAL/AKW
E4      7492   REDUCTION POTENTIAL/AKW
E5      179    REFLECTION/AKW
E6      17140  REFLECTION SPECTRUM/AKW
E7      234    RELAXATION FREQUENCY/AKW
:
```

酸化還元電位のキーワードが収録されている

=> S L1 AND E3

← REDOX POTENTIAL/AKW を AND 演算する

```
13097 "REDOX POTENTIAL"/AKW
L2      1 L1 AND "REDOX POTENTIAL"/AKW
```

=> D HIT

← ヒットした部分を表示する

HIT 表示形式を用いると、検索式に関連した部分のみが表示される

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

Chemical Name (CN): 2,6-dimethyl-1,4-benzoquinone,
2,6-dimethyl-p-benzoquinone,
2,6-dimethylbenzoquinone,
2,6-dimethyl-p-quinone,
2,6-dimethyl-1,4-BQ, 2,6-dimethylquinone,
m-xyloquinone

Autonom Name (AUN): 2,6-Dimethyl-<1,4>benzoquinone

化学物質名称

Electrochemical Characteristics:

POT

Description (.KW): redox potential
Solvent (.SOL): acetonitrile
Reference(s):
1. Goerner, Helmut, Photochemistry and Photobiology, CODEN: PHCBAP, 82(1), <2006>, 71 - 77

酸化還元電位

電気化学的特性

POT

Description (.KW): redox potential
Solvent (.SOL): H2O
Reference(s):
1. Goerner, Helmut, Photochemistry and Photobiology, CODEN: PHCBAP, 82(1), <2006>, 71 - 77

POT

Description (.KW): redox potential
pH-Value (.PH): 0
Reference(s):
1. Avdeenko, A. P.; Petrova, S. A.; Kolodyazhnyi, M. V.; Burmistrov, K. S., Russian Journal of Organic Chemistry, CODEN: RJOCEQ, 38(1), <2002>, 26 - 30, Zhurnal Organicheskoi Khimii, CODEN: ZORKAE, 38(1), <2002>, 36 - 40

サマリーシートには、POT (電気化学的特性) が記載されているが、キーワード (.KW) の内容は記載されていない

- POT
 Description (.KW): redox potential
 Solvent (.SOL): CH₂Cl₂
 Reference(s):
 1. Akine, Shigehisa; Goto, Kei; Kawashima, Takayuki, Tetrahedron Letters, CODEN: TELEAY, 41(6), <2000>, 897 - 902
- POT
 Description (.KW): redox potential
 Reference(s):
 1. Sandstede, Zeitschrift fuer Physikalische Chemie (Muenchen, Germany), CODEN: ZPCFAX, 98, <1975>, 389,392,400
 2. Musso et al., Chemische Berichte, CODEN: CHBEAM, 94, <1961>, 1107,1115
 3. Flaig, W. et al., Justus Liebigs Annalen der Chemie, CODEN: JLACBF, 719, <1968>, 96 - 111
 4. Tanner, Dennis D.; Deonarian, Natasha; Kharrat, Abdelmajid, Canadian Journal of Chemistry, CODEN: CJCHAG, 67, <1989>, 171 - 175
- POT
 Description (.KW): redox potential
 Solvent (.SOL): CH₂Cl₂
 Product AN (.PAN): 1877256
 Product (.PRO): 2,6-dimethyl-1,4-benzosemiquinone anion radical
 Note(s) (.COM): -0.5 V, Product: /BRN= 5007791/. No. of transm. electrons: 1. Method: not given. Description: Working electrode: Pt, reference electrode: Ag/AgCl/CH₃CN, supporting electrolyte: Bu₄NBF₄, method of determination: alternating current voltammetry
 Reference(s):
 1. Aumeller, Alexander; Huenig, Siegfried, Liebigs Annalen der Chemie, CODEN: LACHDL(1), <1986>, 165 - 176
- POT
 Description (.KW): redox potential
 Solvent (.SOL): acetonitrile
 Temperature (.T): 24.9 Cel
 Product AN (.PAN): 6019166
 Product (.PRO): C₈H₈O₂ (2-)*Mg(2+)
 Note(s) (.COM): 0.3 V, Product: /BRN= 6019166/. No. of transm. electrons: 2. Method: cyclic voltammetry. Description: potentiostat-galvanostat, platinum microelectrode, NaCl/calomel reference electrode, in presence of Mg(2+) ion
 Reference(s):
 1. Fukuzumi, Shunichi; Nishizawa, Nobuaki; Tanaka, Toshio, Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2: Physical Organic Chemistry (1972-1999), CODEN: JCPKBH, <1985>, 371 - 378
- POT
 Description (.KW): redox potential
 Solvent (.SOL): acetonitrile
 Temperature (.T): 24.9 Cel
 Product AN (.PAN): 6019166
 Product (.PRO): C₈H₈O₂ (2-)*Mg(2+)
 Note(s) (.COM): 0.28 V, Product: /BRN= 6019166/. No. of transm. electrons: 2. Method: cyclic voltammetry. Description: potentiostat-galvanostat, platinum microelectrode, NaCl/calomel reference electrode, in presence of Mg(2+) ion
 Reference(s):
 1. Fukuzumi, Shunichi; Nishizawa, Nobuaki; Tanaka, Toshio, Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2: Physical Organic Chemistry (1972-1999), CODEN: JCPKBH, <1985>, 371 - 378

【検索例 5】 超電導臨界温度が液体窒素温度 (-196 °C) 以上の銅酸化物を検索する

ReaxysFile ファイルのサマリーシート

電気的および磁氣的性質

SEARCH コード	内 容	デフォルト 単位	入 力 例	DISPLAY コード
/ELE.COM	電気的データ コメント	-	S PHENOL/ELE.COM	ELE
/ELE.CRIT	超電導臨界温度	セ氏	S -201.16/ELE.CRIT	ELE
/ELE.ECVAL	電導度	S/cm	S 4/ELE.ECVAL	ELE
/ELE.KW	キーワード	-	S PIEZOELECTRICITY/ELE.KW	ELE
/ELE.T	温度 ¹⁾	セ氏	S 216.84/ELE.T	ELE

デフォルトの
単位はセ氏

超電導臨界温度 (/ELE.CRIT)
は数値検索できる

=> FILE REAXYSFILE

← ReaxysFile ファイルに入る

=> S -196<=ELE.CRIT

← 超電導臨界温度が -196 °C以上の物質を検索する

L1 50 -196 CEL <=ELE.CRIT

デフォルトの単位はセ氏なので、単位は不要

=> S L1 AND CU/ELS AND O/ELS

← 銅と酸素を含む物質に限定する

188241 CU/ELS

15807460 O/ELS

L2 50 L1 AND CU/ELS AND O/ELS

=> D 1 28 IDE FELE

← 物質同定情報と電気的データを表示する

L2 ANSWER 1 OF 50 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 21150355
 Lin. Struct. Formula (LSF): Bi_{2.17}Sr_{1.52}Ca_{1.35}Cu_{1.8008}O₈
 Molec. Formula (MF): Bi₂ Ca Cu O₈ Sr
 Formula Weight (FW): 883.793
 InChi Key: (INCHI): FHXYGXYWJM-UHFFFAOYSA-N
 Alternate InChi Key: (AINCHI): FHXYGXYWJM-PSTPYLFAF
 Markush Ref. Count (MARKREF): 0
 Entry Date (DED): 2011/03/21
 Update Date (DUPD): 2011/03/21

物質同定情報

元素の正確な存在数は LSF フィールド
に表示される。

Bi_{2.17} Sr_{1.52} Ca_{1.35} Cu_{1.80} O_{8.04}

No structure diagram available for this Document

Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formula Weight	1
INCHI	InChi Key	1
AINCHI	Alternate InChi Key	1
MARKREF	Markush Reference Count	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
CRYPH	Crystal Phase	2
CSG	Crystal Space Group	1
ELE	Electrical Data (MCS)	2
MSUS	Magnetic Susceptibility	1

Electrical Data:

Crit. Temp. (. CRIT)	Keyword (. KW)	Ref.
-194.16 - -187.66	Superconductivity Superconductive transition temperature	

電気的データ

Reference(s):

- Golubkov, M. V.; Gorina, Yu. I.; Kalyuzhnaya, G. A.; Rodin, V. V.; Sentyurina, N. N.; et al., Inorganic Materials (Transl. of Neorg. Mater.), CODEN: INOMAF, 45, <2009>, 671 - 677, Neorganicheskie Materialy, CODEN: NMATEI, 45, <2009>, 731 - 737

L2 ANSWER 28 OF 50 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 17210898
 Lin. Struct. Formula (LSF): Hg00.9Ba2Ca2Cu30(x)
 Molec. Formula (MF): Ba2 Ca2 Cu3 Hg 0
 InChi Key: (INCHI): KH1ODMQQHSCMBK-UHFFFAOYSA-N
 Alternate InChi Key: (AINCHI): KH1ODMQQHSCMBK-LBPCCLRRAX
 Compound Type (CTYPE): Glass or Ceramic material
 Markush Ref. Count (MARKREF): 0
 Entry Date (DED): 2008/10/17
 Update Date (DUPD): 2011/02/16

物質同定情報

No structure diagram available for this Document

Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
INCHI	InChi Key	1
AINCHI	Alternate InChi Key	1
CTYPE	Compound Type	1
MARKREF	Markush Reference Count	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
CDEN	Density (Crystal)	6
CP	Heat Capacity Cp	2
CPD	Crystal Property Description	1
CRYPH	Crystal Phase	11
CSG	Crystal Space Group	86
CSYS	Crystal System	2
ELE	Electrical Data (MCS)	6
ESR	ESR Data	1
GEO	Interatomic Distanc and Angle	1

Electrical Data:

Crit. Temp. (. CRIT)	Keyword (. KW)	Ref.
-139.16	Superconductive transition temperature	

電気的データ

Reference(s):

- Hirata, Yasuyuki; Kojima, Kenji M.; Uchida, Shin-Ichi; Ishikado, Motoyuki; Iyo, Akira; et al., Physica C: Superconductivity and its Applications (Amsterdam), CODEN: PHYCE6, 470, <2010>, S44 - S46

【検索例 6】 RTECS ファイルで、四塩化炭素の毒性データ、腫瘍原性データ、毒性レビュー、がんレビューを表示する

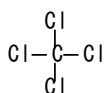
=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S CCL4/MF ← 分子式で検索する
L1 20 CCL4/MF

=> S L1 AND RTECS/LC ← RTECS ファイルに CAS 登録番号が収録されているレコードに限定する
134345 RTECS/LC (オプション: L1 の件数が多い場合に実行する)
L2 1 L1 AND RTECS/LC

=> D SAM ← SAM 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
IN Methane, tetrachloro-
MF C Cl4
CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> FILE RTECS ← RTECS ファイルに入る

=> S L2 ← クロスオーバー検索を行う
L3 1 L2

=> D FA ← フィールドの存在を表示する

L3 ANSWER 1 of 1 RTECS COPYRIGHT 2014 U. S. GOVERNMENT on STN

Code	Field Name	
CREV	Cancer Review	← がんレビュー
RN	CAS Registry Number	
CN	Chemical Name	
CI	Class Identifier	
ASTA	Federal Agency Status (EPA, NIOSH, NTP, OSHA)	
IRR	Irritation Data	
MF	Molecular Formula	
MUT	Mutation Data	
NREC	NIOSH Recommendations	
OMUL	Other Multiple Dose Data	← その他の毒性データ
SREG	Regulations and Standards	
REP	Reproductive Effect Data	
RTN	RTECS Number	
SO	Source	
SURV	National Occupational Survey (NOHS, NOES)	
TLV	Threshold Limit Value	
TOX	Toxicity Data	← 毒性データ
TREV	Toxicology Review	← 毒性学レビュー
TUM	Tumorigenic Data	← 腫瘍原性データ
WLN	Wiswesser Line Notation	

フィールドの存在

フィールドコードに FULL を付けると、文献情報の詳細を表示できる

=> D TOXFULL OMULFULL TUMFULL TREVFULL CREVFULL

← 毒性データ, その他の毒性データ, 腫瘍原性データ, 毒性学レビュー, がんレビューを表示

L3 ANSWER 1 of 1 RTECS COPYRIGHT 2014 U. S. GOVERNMENT on STN

TOXICITY DATA (TOX) :

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
K13	inhalation	human	TCLo 20 ppm		85CYAB 2, 136, 1959
D15;F24;F25	oral	woman	TDL0 1800 mg/kg		TXMDAX 69, 86, 1973
F11;J30;K30	oral	man	TDL0 1700 mg/kg		SAMJAF 49, 635, 197 5
G10;J24;M05	oral	man	LDLo 429 mg/kg		ZHYGAM 19, 781, 197 3
	inhalation	human	LCLo 1000 ppm		PCOC** -, 198, 1966
F07;F14;K13	inhalation	human	TCLo 45 ppm	3D	LANCAO 1, 360, 1960
K13	inhalation	human	TCLo 317 ppm	30M	JAMAAP 103, 962, 19 34
	inhalation	human	LCLo 5 pph	5M	TABIA2 3, 231, 1933
:					
X11	in vitro	Chicken neurons	IC50 8013 umol/L	21H	TIVIEQ 7, 653, 1993
:					

毒性データ

「吸入 (inhalation) によりヒトが嘔吐 (EFF コード : K13) する最低毒性濃度は 20 ppm」という情報が, "Chemistry of Industrial Toxicology" 2nd ed. の P.136 に記載されている

TOXICITY DATA REFERENCES:

85CYAB "Chemistry of Industrial Toxicology," 2nd ed., Elkins, H.B., New York, John Wiley & Sons, Inc., 1959
 TXMDAX Texas Medicine (Texas Medical Assoc., 1801 N. Lamar Blvd., Austin, TX 78701) V.60- 1964-
 SAMJAF South African Medical Journal (Medical Assoc. of South Africa, Secy., P.O. Box 643, Cape Town, S. Africa) V.6- 1932-
 ZHYGAM Zeitschrift fuer die Gesamte Hygiene und Ihre Grenzgebiete (VEB Verlag Volk und Gesundheit, Neue Gruenstr. 18, Berlin DDR-1020, Ger. Dem. Rep.) V.1-1955-
 PCOC** Pesticide Chemicals Official Compendium, Association of the American Pesticide Control Officials, Inc, 1966. (Topeka, KS)
 LANCAO Lancet (7 Adam St., London WC2N 6AD, UK) V.1- 1823-
 JAMAAP JAMA, Journal of the American Medical Association (AMA, 535 N. Dearborn St., Chicago, IL 60610) V.1- 1883-
 TABIA2 Tabulae Biologicae (The Hague, Netherlands) V.1-22, 1925-63.
 Discontinued.

OTHER MULTIPLE DOSE DATA (OMUL) :

その他の毒性データ

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
F15;L04;M03	oral	rat	TDLo 4800 µL/kg	8W-I	JTSCDR 25, 33, 2000
L70;Y07;Y15	oral	rat	TDLo 1200 mg/kg	12W-I	FAATDF 15, 558, 199 0
L30	oral	rat	TDLo 4197 ug/kg	28D-I	JPPMAB 3, 169, 1951
L70;U01;Y15	oral	rat	TDLo 400 mg/kg	10D-I	FAATDF 17, 186, 199 1
L03;L30	inhalation	rat	TCLo 61 mg/m**3	90D-C	TXAPA9 10, 270, 196 7

:

OTHER MULTIPLE DOSE REFERENCES:

JTSCDR Journal of Toxicological Sciences (Japanese Soc. of Toxicological Sciences, 4th Floor, Gakkai Center Bldg., 4-16, Yayoi 2-chome, Bunkyo-ku, Tokyo 113, Japan) V.1- 1976-

FAATDF Fundamental and Applied Toxicology (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1-40, 1981-97. For publisher information, see TOSCF2

JPPMAB Journal of Pharmacy and Pharmacology (Pharmaceutical Soc. of Great Britain, 1 Lambeth High St., London SE1 7JN, UK) V.1- 1949-

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology (Academic Press, Inc., 1 E. First

:

TUMORIGENIC DATA (TUM) :

腫瘍原性データ

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
V03;L60	subcutaneous	rat	TDLo 1.5600E+04 mg/kg	12W-I	JNCIAM 38, 891, 196 7
V02;L60;R60	oral	Mouse	TDLo 4400 mg/kg	19W-I	JNCIAM 20, 431, 195 8
V03;L60	parenteral	Mouse	TDLo 305 g/kg	30W-I	BEXBAN 89, 845, 198 0
V03;L04;L60	oral	hamster	TDLo 9250 mg/kg	30W-I	JNCIAM 26, 855, 196 1

:

TUMORIGENIC DATA REFERENCES:

JNCIAM Journal of the National Cancer Institute (Washington, DC) V.1-60, 1940-78. For publisher information, see JJIND8.

BEXBAN Bulletin of Experimental Biology and Medicine (English Translation) Translation of BEBMAE. (Plenum Pub. Corp., 233 Spring St., New York, NY 10013) V.41- 1956-

:

TOXICOLOGY REVIEW (TREV) :

TOXICOLOGY REVIEW TXCYAC 189, 113, 2003
TOXICOLOGY REVIEW 32XPAD -, 49, 1975
TOXICOLOGY REVIEW PAREAQ 4, 1, 1952
TOXICOLOGY REVIEW AJMEAZ 38, 409, 1965
TOXICOLOGY REVIEW BNYMAM 54, 413, 1978
TOXICOLOGY REVIEW CTOXAO 13, 231, 1978
TOXICOLOGY REVIEW 85CVA2 5, 250, 1970
TOXICOLOGY REVIEW CRTXB2 7, 177, 1980
TOXICOLOGY REVIEW JTEHD6 6, 1133, 1980
TOXICOLOGY REVIEW NTIS** PB256-732
TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 543, 201, 2003
TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 227, 2004
TOXICOLOGY REVIEW CRTXB2 33, 105, 2003
TOXICOLOGY REVIEW TXCYAC 196, 1, 2004
TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 613, 138, 2006

毒性レビュー

TOXICOLOGY REVIEW REFERENCES:

TXCYAC Toxicology (Elsevier Scientific Pub. Ireland, Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) V.1- 1973-
32XPAD "Teratology," Berry, C.L., and D.E. Poswillo, eds., New York, Springer, 1975
PAREAQ Pharmacological Reviews (Williams & Wilkins, 428 E. Preston St., Baltimore, MD 21202) V.1- 1949-
AJMEAZ American Journal of Medicine (Technical Pub., 875 Third Ave., New York, NY 10022) V.1- 1946-
BNYMAM Bulletin of the New York Academy of Medicine (New York Academy of Medicine, 2 E. 103rd St., New York, NY 10029) Ser 2: V.1- 1925-
CTOXAO Clinical Toxicology (New York, NY) V.1-18, 1968-81. For publisher information, see JTCTDW.
85CVA2 "Oncology 1970, Proceedings of the Tenth International Cancer Congress," Chicago, Year Book Medical Pub., 1971
CRTXB2 CRC Critical Reviews in Toxicology (CRC Press, Inc., 2000 Corporate Blvd., NW, Boca Raton, FL 33431) V.1- 1971-
JTEHD6 Journal of Toxicology and Environmental Health (Hemisphere Pub., 1025 Vermont Ave., NW, Washington, DC 20005) V.1- 1975/76-
NTIS** National Technical Information Service (Springfield, VA 22161)
Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information.
MUREAV Mutation Research (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964-

CANCER REVIEW (CREV) :

IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence IMEMDT 20, 371, 1979
IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence IMEMDT 71, 401, 1999
IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence IMEMDT 1, 53, 1972
IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence IMEMDT 1, 53, 1972
IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence IMEMDT 20, 371, 1979
IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence IMEMDT 71, 401, 1999
IARC Cancer Review:Group 2B IMEMDT 71, 401, 1999

がんレビュー

CANCER REVIEW REFERENCES:

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1- 1972-

【検索例 7】
ウィルキンソン触媒の毒性情報を調査する

REGISTRY ファイルの検索

=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> E WILKINSON/CN
 E1 1 WILIFORINE MONOACETATE/CN
 E2 1 WILKINITE/CN
 E3 1 --> WILKINSON/CN
 E4 1 WILKINSON'S CATALYST/CN
 E5 1 WILKINSON'S COMPLEX/CN
 E6 1 WILKINSONITE/CN
 :

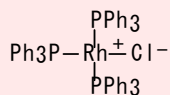
=> S E4 ← *WILKINSON'S CATALYST* を化学物質名称から検索する
 L1 1 "WILKINSON'S CATALYST"/CN

=> D IDE FA ETAGFULL ← 物質同定情報, フィールドの存在, 参考文献タグを表示する

```
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
RN 14694-95-2 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Rhodium, chlorotris(triphenylphosphine)-, (SP-4-2)- (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN Rhodium, chlorotris(triphenylphosphine)- (7CI, 8CI)
OTHER NAMES:
CN Chlorotris(triphenylphosphine) rhodium
CN Chlorotris(triphenylphosphine) rhodium(I)
CN NSC 124140
CN Rhodium tris(triphenylphosphine) chloride
CN Tris(triphenylphosphine)chlororhodium
CN Tris(triphenylphosphine)chlororhodium(I)
CN Tris(triphenylphosphine)rhodium chloride
CN Tris(triphenylphosphine)rhodium monochloride
CN Tris(triphenylphosphine)rhodium(I) chloride
CN Wilkinson's catalyst
CN Wilkinson's complex
DR 27813-17-8, 35933-45-0, 63478-44-4
MF C54 H45 Cl P3 Rh
CI CCS, COM
LC STN Files: BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, EMBASE,
  IFIALL, IPA, MEDLINE, MSDS-OHS, REAXYSFILE*, TOXCENTER, USPAT2,
  USPATFULL, USPATOLD
  (*File contains numerically searchable property data)
  Other Sources: EINECS**, NDSL**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
```

物質同定情報

この物質の CAS 登録番号は ReaxysFile ファイル
 には収録されているが RTECS ファイルには収録
 されていない



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

3329 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
 65 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
 3333 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

Available Properties (PRFA)

フィールドの存在

CODE | PROPERTY

Experimental Data

DEN	Density
MP	Melting Point
SPEC	Carbon-13 NMR Spectra
SPEC	IR Absorption Spectra
SPEC	Phosphorus-31 NMR Spectra
SPEC	Proton NMR Spectra
ETAG	Experimental Tags

Experimental Property Tags (ETAG)

参考文献タグ

PROPERTY	NOTE
Bond Angle	(1) CAS
Bond Length	(1) CAS
Carbon-13 NMR Spectra	(2) CAS
Fluorine-19 NMR Spectra	(2) CAS
IR Absorption Spectra	(3) CAS
IR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(4) CAS
Metal NMR Spectra	(5) CAS
Partition Coefficient	(6) CAS
Phosphorus-31 NMR Spectra	(7) CAS
Phosphorus-31 NMR Spectra	(8) CAS
Proton NMR Spectra	(9) CAS
Proton NMR Spectra	(2) CAS
UV and Visible Absorption Spectra	(6) CAS

REGISTRY ファイルには、この物質の
毒性情報は収録されていない

- (1) Chen, Austin C.; Canadian Journal of Chemistry 2005 V83(6-7) P943-957
CAPLUS
- (2) Sato, Kazuyuki; Tetrahedron Letters 2005 V46(45) P7679-7681 CAPLUS
- (3) Xiong, Jiacong; Gujinshu 2002 V23(3) P18-22 CAPLUS
- (4) Chisholm, Danielle M.; Dalton Transactions 2010 V39(2) P364-373 CAPLUS
- (5) Carlton, Laurence; Magnetic Resonance in Chemistry 2004 V42(9) P760-768
CAPLUS
- (6) Li, Min; Separation Science and Technology 2008 V43(4) P828-841 CAPLUS
- (7) Huang, Lin; Reaction Kinetics and Catalysis Letters 2004 V82(1) P65-71
CAPLUS
- (8) Sharma, Sumeet K.; Catalysis Communications 2005 V6(3) P205-209 CAPLUS
- (9) Jin, Xudong; Helvetica Chimica Acta 2010 V93(4) P729-745 CAPLUS

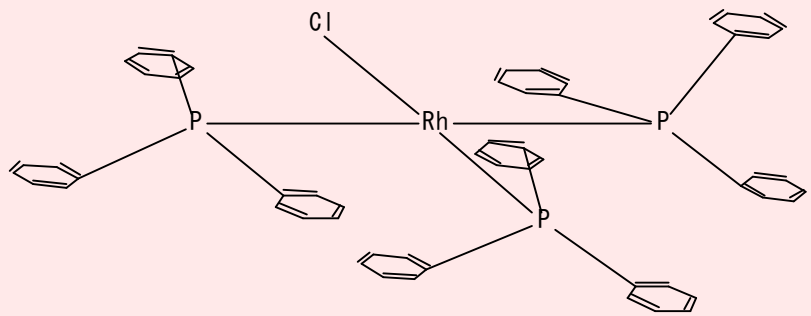
See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

- => FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る
- => S L1 ← クロスオーバー検索を行う
- L2 8 L1
- => S L2 AND PHARM/FA ← 薬理学データの存在を検索により確認する
- 1931895 PHARM/FA
- L3 1 L2 AND PHARM/FA
- => D IDE FPHARM ← 物質同定情報と薬理学データを表示する

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 11406361
 Basic Pref. RN (BPR): 14694-95-2
 CAS Reg. No. (RN): 14694-95-2
 Chemical Name (CN): Wilkinson's catalyst,
 chlorotris(triphenylphosphine) rhodium
 (I), tris(triphenylphosphine)rhodium(I)
 chloride,
 chlorotris(triphenylphosphinr) rhodium(I),
 chlorotris(triphenylphosphine),
 <Rh(Ph3P)3>Cl, (Ph3P)3RhCl
 Lin. Struct. Formula (LSF): <ClRh(P(C6H5)3)3>
 Molec. Formula (MF): C54 H45 Cl P3 Rh
 Formula Weight (FW): 925.231
 Compound Type (CTYPE): Coordination compound
 InChi Key: (INCHI): IXAYKDDZKIZSPV-UHFFFAOYSA-M
 Alternate InChi Key: (AINCHI): IXAYKDDZKIZSPV-PBCAPHJPCM
 Markush Ref. Count (MARKREF): 1
 Entry Date (DED): 2008/06/16
 Update Date (DUPD): 2011/03/22

物質同定情報



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formula Weight	1
INCHI	InChi Key	1
AINCHI	Alternate InChi Key	1
CTYPE	Compound Type	1

Pharmacological Data:

PHARM

薬理学データ

Effect (.E): cytotoxic

Species or Test-System (.SP): SK-N-SH

Method, Remarks (.MR): Determination of Compound
 Cytotoxicity<0198> Cells are plated at optimal cell density in a standard sterile tissue culture 96 well plate, and incubated at 37 OC 0/N in a 5percent CO2 incubator. 12 to 48 hours post-plating media is removed. The cells are washed 1 or 2 times with IX PBS and replaced with fresh media containing the test compound in 1percent DMSO. 24 to 72 hours after addition of compound, the media is removed, and the cells washed 1 to 2 times with IX PBS. Fresh media containing 1/10 volume of Alamar Blue is then added. Plates are incubated 4 hours at 37 oC in a 5percent CO2 incubator and read in a Victor V plate reader, 544 nm excitation, 590 nm emission.<0199> Compounds are diluted to 20 micromolar in 1percent DMSO and media and screened in duplicate to obtain single concentration cytotoxicity data. Eight concentration points from 0.78 micromolar to 100 micromolar, run in duplicate, are used to determine cytotoxicity CC50 values. Cells with 1percent DMSO and media are used as a negative control, compounds having a known CC50 against a particular cell type are used as positive controls.<0200> The change in fluorescence vs. concentration of test compound is plotted to determine the cytotoxicity of the compound.<0201> Sample media conditions, optimal plating densities, and positive control compounds for two cell types screened are presented in Table III.<0202> Preferred compounds disclosed in Example 1 and 2 exhibit CC50 values greater than 10 uM against each of the cell lines listed below. Other cell types that may be used include but are not limited to Balb/3TC, CEM-SS, HeLa, Hep2, HepG2, HT-29, MRC-5, SK-N-SH, U- 87 MG, 293T, and Huh-7. More preferred are compounds with a CC50 value greater than 50 uM. Most preferred are compounds with a CC50 value greater than 100 uM. Should the most preferred compounds have CC50 greater than 10 micromolar.

Type (.TYP): CC50

Value of Type (.V): > 10 .my.mol/l

Reference(s):

1. Patent: 9-(HETEROARYL)-ISOTHIAZOLO<5, 4-B>QUINOLINE-3, 4-DIONES AND RELATED COMPOUNDS AS ANTI-INFECTIVE AGENTS; for details see display format **ALLPAT**

特許は標題のみが表示される。ALLPAT 表示形式で特許情報の詳細を確認できる

L3 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2014 Elsevier Properties SA. on STN

All Patents:
ALLPAT

特許情報

Reference: Patent
Title: 9-(HETEROARYL)-ISOTHIAZOLO<5, 4-B>QUINOLINE-3, 4-DIONES AND RELATED COMPOUNDS AS ANTI-INFECTIVE AGENTS
Patent Number: WO2008/36420
Inventor: BRADBURY, Barton, James; WANG, Qiuping; WILES, Jason, Allan; HASHIMOTO, Akihiro; LUCIEN, Edlaine; PAIS, Godwin, Clarence, Gilroy; KIM, Ha, Young
Patent Assignee: ACHILLION PHARMACEUTICALS, INC.
Abstract: The invention provides compounds and salts of Formula (I) and Formula (II); which possess antimicrobial activity. The invention also provides novel synthetic intermediates useful in making compounds of Formula (I) and Formula (II). The variables R2, R3, R5, R6, R7, A8 and R9 are defined herein. Certain compounds of Formula (I) and Formula (II) disclosed herein are potent and/or selective inhibitors of bacterial DNA synthesis and bacterial replication. The invention also provides antimicrobial compositions, including pharmaceutical compositions, containing one or more compounds of Formula (I) or Formula (II) and one or more carriers, excipients, or diluents. Such compositions may contain a compound of Formula (I) or Formula (II) as the only active agent or may contain a combination of a compound of Formula (I) or Formula (II) and one or more other active agents. The invention also provides methods for treating microbial infections in animals.
Main IPC: C07D 513/04
Secondary IPC: A61K 31/428; A61P 31/04
Priority Number Priority Date
US2006-826408P 2006/09/21

Reference: Patent
Title: CLICKPHOSPHINES FOR TRANSITION METAL-CATALYZED REACTIONS
Patent Number: WO2006/130842
Inventor: ZHANG, Xumu
Patent Assignee: THE PENN STATE RESEARCH FOUNDATION
Abstract: Phosphine triazole ligand compounds, prepared through click chemistry, complex with transition metals to form transition metal-phosphine triazole ligand complexes. These complexes are useful catalysts in coupling reactions such as Suzuki-Miyaura coupling, Stille coupling, Negishi coupling, Sonagashira coupling, carbon-heteroatom bond-forming reactions (C-O and C-N), alpha alkylation of carbonyls, Heck coupling reactions, and hydrogenation reactions.
Main IPC: C07F 9/50
Priority Number Priority Date
US2005-686457P 2005/06/02

■ 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