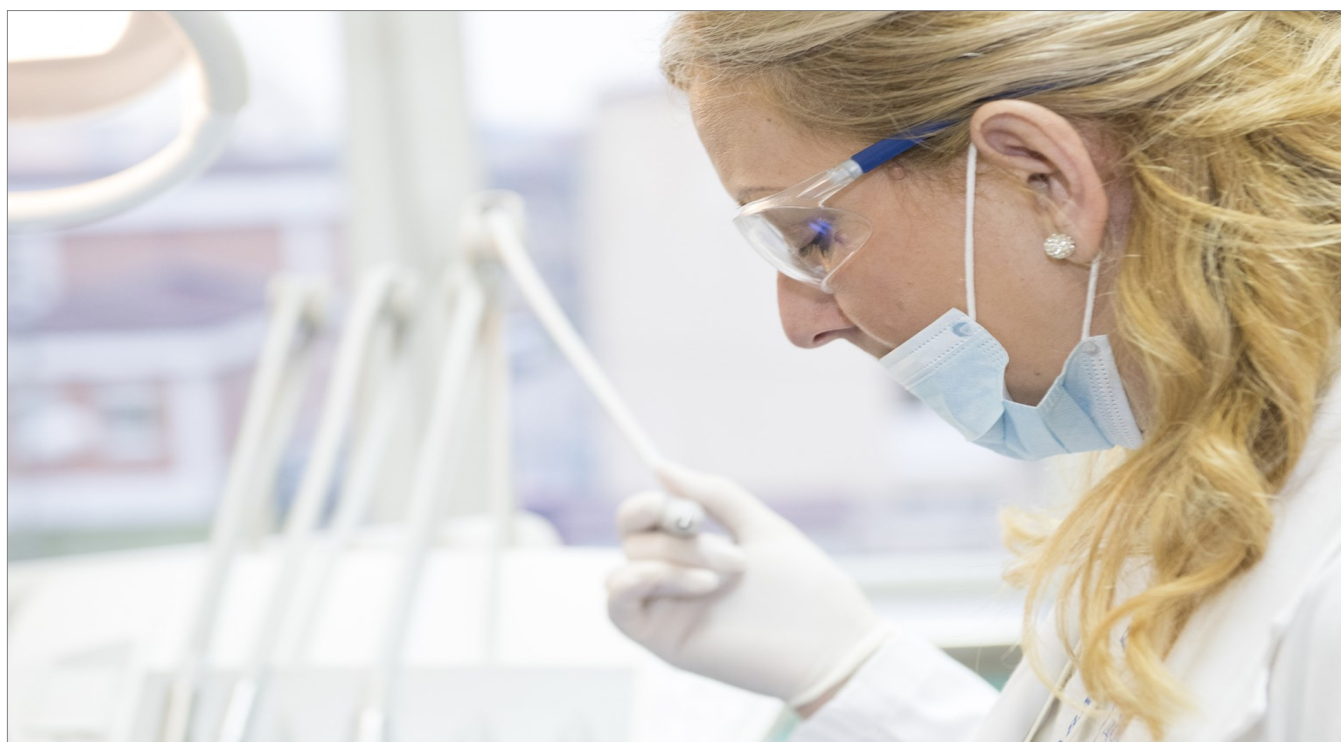


CAS STNNext®

# 反応情報検索





## \* 目次 \*

### A 概要

STN の反応情報 .....	1
CAS FILES の反応情報 .....	5

### B CASREACT ファイル

概要 .....	9
収録範囲 .....	10
レコード構成 .....	11
CAS 登録番号 (CAS RN <sup>®</sup> ) 検索 .....	14
回答表示 .....	16
反応条件, 書誌情報の検索 .....	22
CASREACT ファイルで用いる演算子 .....	23
反応質問式による構造検索 - 概要 .....	28
反応質問式の作成 - 反応ロール .....	30
反応質問式の作成 - 反応矢印 .....	31
反応質問式の作成 - 反応部位 .....	32
反応質問式の作成 - マッピング .....	33
構造検索のコマンド .....	34
構造検索の流れ .....	35
参考 : 応用テクニック .....	37
Verification が不完全な回答 .....	39
構造検索時の注意 .....	40
官能基検索 .....	42
参考 : 応用テクニック .....	45
参考 : サブセット検索 .....	47
主要な検索フィールド一覧 .....	49

### C CAS FILES の反応情報検索

CAS FILES を使った網羅的な反応情報検索 .....	53
--------------------------------	----

### D ReaxysFile ファイル

概要 .....	67
レコード構成 .....	68
レコード例 .....	69
物質レコードの検索方法 .....	71
物質レコードからの反応情報の表示 .....	72
参考 : 複数のレコードが得られる場合の検索方法 .....	74
参考 : 反応レコードの検索 .....	75

練習問題 .....	79
------------	----

### APPENDIX

CASREACT ファイル - 構造検索時の注意 .....	89
CASREACT ファイル - CA 由来のレコードの収録基準 .....	90
CASREACT ファイル - 1990 年以前の収録雑誌 .....	92



## A 概要

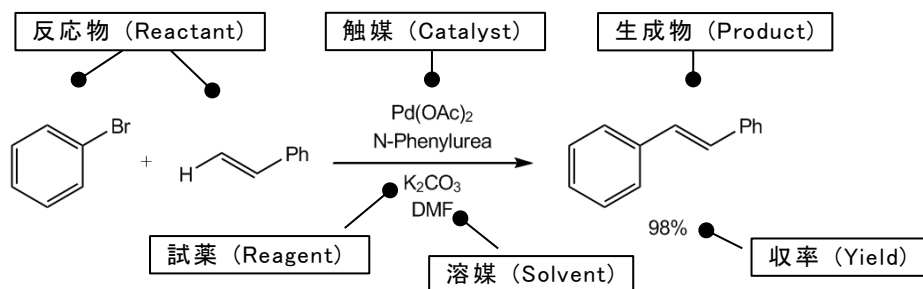
STN の反応データベースの概要と, CAS FILES の反応情報について  
ご紹介します.



## STN の反応情報

■ STN には、反応情報に関するデータベースが複数搭載されている。

・ 反応情報の例



- ・ 様々な情報から反応を検索できる。
  - 構造検索
  - CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) からの検索
  - 官能基の名称からの検索
  - 溶媒や収率などの反応条件からの検索

■ 反応情報のデータベース一覧

(2018 年 8 月現在)

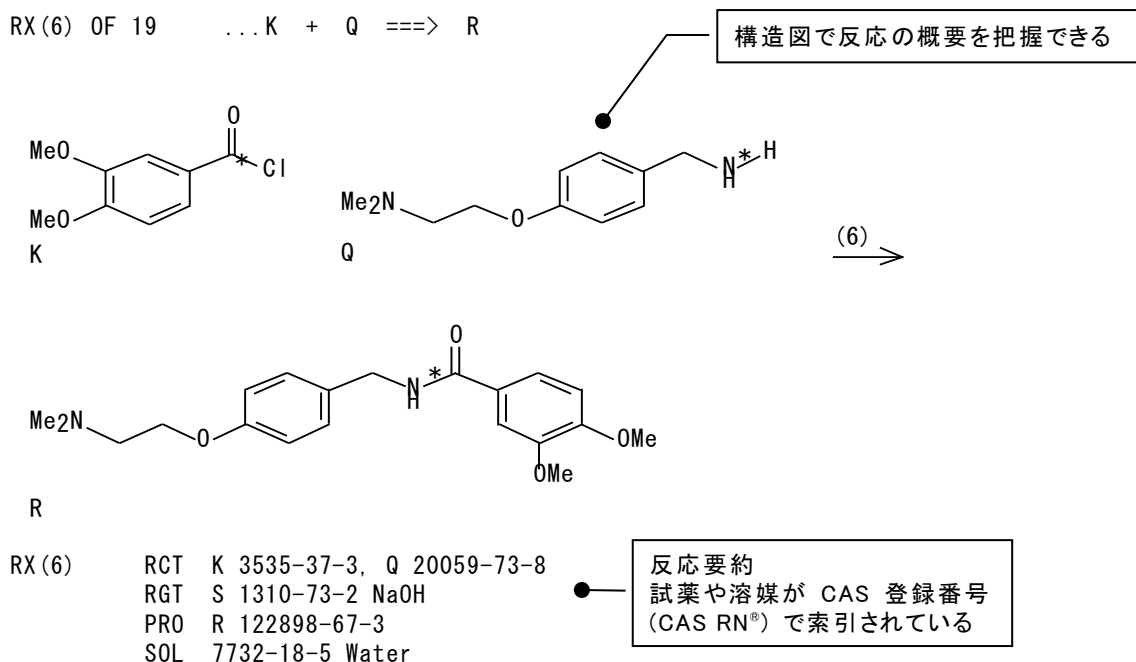
ファイル名	内容	収録件数 (収録年代, 更新頻度)
CASREACT 【B 章, C 章】	有機化学反応情報を含む文献データベース CA 収録対象文献から選択した反応情報を収録	<文献> 162 万件以上 <反応> 9,410 万件以上 (1840-, 毎日)
ReaxysFile 【D 章】	化学物質および反応情報のデータベース 有機・無機化合物の物質情報と反応情報を収録	<物質> 1,940 万件以上 <一段階反応> 約 3,100 万件 (1771-, 不定期*1)
DJSMONLINE DJSMDS	反応情報データベース Derwent Journal of Synthetic Methods の有機 化学反応情報を収録	10.9 万件以上 (1975-2009, 更新なし)
PS	医薬品データベース 世界中に上市された重要な医薬品の合成法, 薬理作用, 特許情報を収録	<物質> 2,400 件以上 <反応> 8,200 件以上 (1957-2009, 更新なし)
CAplus/CA	化学および周辺分野の文献データベース PERP (製造) ロール付与は 1907 年- 【A 章, C 章】	<文献*2> 707 万件以上 (1808-, 毎日)

\*1 2018 年 8 月現在, classic STN の ReaxysFile ファイルの収録期間は 1771-2011 年.  
更新再開は未定

\*2 PREP (製造) のロールが付与されている文献数

■ 代表的な反応情報レコード例

・ CASREACT ファイル (FHIT 表示形式)



・ ReaxysFile ファイル (反応レコード RX 表示形式)

Reaction:  
 RX

Reaction ID:	3810523
Reactant AN (.RAN):	2210230, 783596
Reactant (.RGT):	4-<2-(dimethylamino)ethoxy>benzylamine, 3,4-dimethoxybenzoic acid chloride
Product AN (.PAN):	5384115
Product (.PRO):	N-<4-<2-(dimethylamino)ethoxy>benzyl>-3,4-dimethoxybenzamide
React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction
Record type (.RTYP):	full reaction, ha
Number of Bond Changes (.NBC):	6
No. of React. Details (.NVAR):	1
Preparation reactants (.BLB):	2210230, 783596, 5384115
Det. React. reactants (.BLC):	2210230, 783596, 5384115
No. of References (.NUMREF):	1

反応物の物質レコード番号と名称  
 (構造図はなし)

生成物の物質レコード番号と名称  
 (構造図はなし)

Reaction Details:  
 RX

Reaction RID (.RID):	3810523.1
Reaction Classification (.CL):	Preparation
Reagent (.RGT):	triethylamine
Solvent (.SOL):	chloroform
Time (.TIM):	2
Other Conditions (.COND):	Ambient temperature
Reactant AN (.RCAN):	605283
Solvent AN (.SOLAN):	1731042
Number of R. steps (.STP):	1

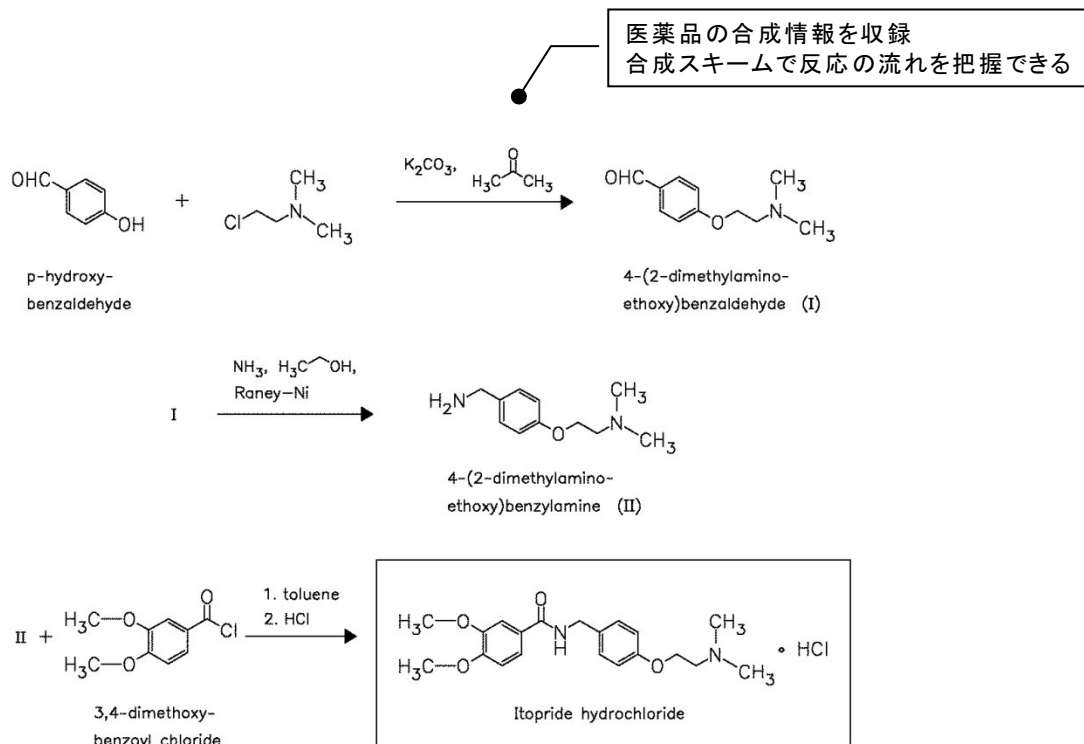
反応条件

Reference(s):  
 1. Sakaguchi, Jun; Nishino, Hiroyuki; Ogawa, Nobuo; Iwanaga, Yuji; Yasuda, Shingo; et al., Chemical & Pharmaceutical Bulletin, CODEN: CPBTAL, 40(1), <1992>, 202 - 211

出典情報



・ PS ファイル (PRED 表示形式)



中間体情報

INT

RN. INT	MF. INT	CN. INT
3535-37-3	C9H9ClO3	3,4-dimethoxybenzoyl chloride; Benzoyl chloride, 3,4-dimethoxy-
15182-92-0	C11H15NO2	4-[2-(dimethylamino)ethoxy]benzaldehyde; Benzaldehyde, 4-[2-
20059-73-8	C11H18N2O	(dimethylamino)ethoxy]-4-(2-dimethylaminoethoxy)benzylamine; Benzenemethanamine, 4-[2-
107-99-3	C4H10ClN	(dimethylamino)ethoxy]-2-(dimethylamino)ethyl chloride; Ethanamine, 2-chloro-N,N-dimethyl-
123-08-0	C7H6O2	p-salicylaldehyde; Benzaldehyde, 4-hydroxy-

出典情報

RE

preparation and formulation:

synthesis of intermediate II:

- (1) EP 306 827 (Hokuriku Pharmaceutical Co.; appl. 15.3.1989; J-prior. 1.9.1988, 5.9.1987, 22.9.1987, 29.9.1987, 5.10.1987).
- (2) US 2 879 293 (Hoffmann-La Roche; 1957).

## ■ 検索機能の比較

ファイル名	検索対象	構造検索	反応式検索	CAS 登録番号 (CAS RN <sup>®</sup> ) 検索	ファイル固有の番号検索	官能基検索	
CASREACT	反応物	○	○	○	○ CAS RN <sup>®</sup> 検索	○	
	生成物	○		○		○	
	試薬	○		○		○	
	触媒	×	×	△ <sup>*1</sup>		×	
	溶媒	×		△ <sup>*1</sup>		×	
ReaxysFile	反応物	○	×	△ <sup>*1</sup>	○	×	
	生成物	○		△ <sup>*1</sup>	○		
	試薬	×		×	○		
	触媒	×		×	○		
	溶媒	×		×	○		
DJSMONLINE DJSMDS	反応物	○ <sup>*3</sup>	○ <sup>*3</sup>	×	○	*4	
	生成物	○ <sup>*3</sup>			○		
	試薬	×	×		×		○
	触媒	×			○		
	溶媒	×			○		
PS	中間体	○ <sup>*3</sup>	○ <sup>*3</sup>	○	-	×	
	最終生成物	○ <sup>*3</sup>					
CAplus/CA	反応物	△ <sup>*2</sup>	×	○	○ CAS RN <sup>®</sup> 検索	×	
	生成物	△ <sup>*2</sup>		○			
	試薬	△ <sup>*2</sup>		○			

\*1 △ の項目は CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) の付与が完全ではない。

\*2 REGISTRY ファイルで構造検索した結果をクロスオーバーする。

\*3 サンプル検索は利用できない。

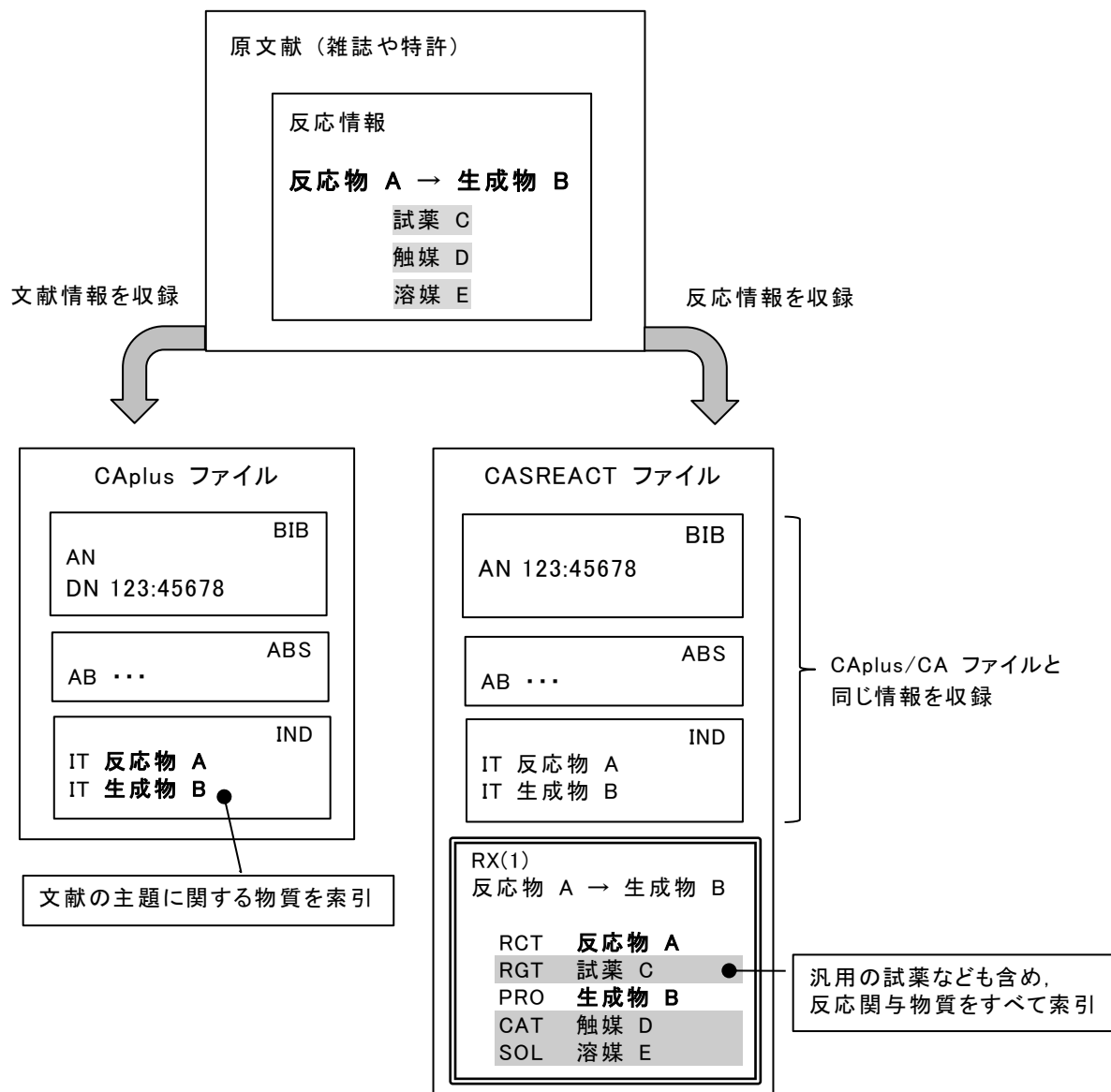
\*4 反応に関する索引情報のキーワード検索を利用する。



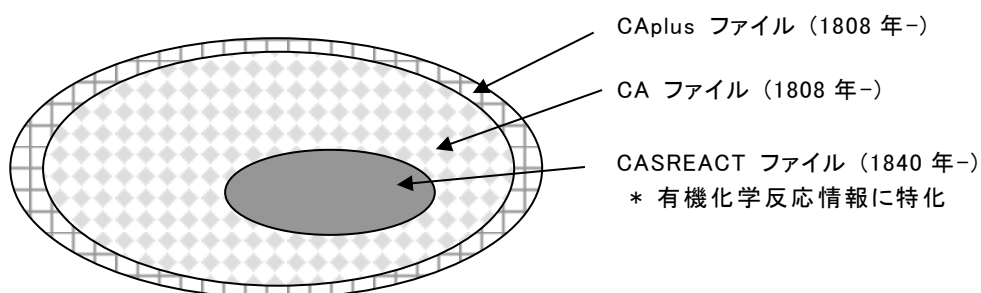
ファイルによって収録源や収録内容、検索機能などが異なるため、目的に合わせて適切なファイルを選択する。

## CAS FILES の反応情報

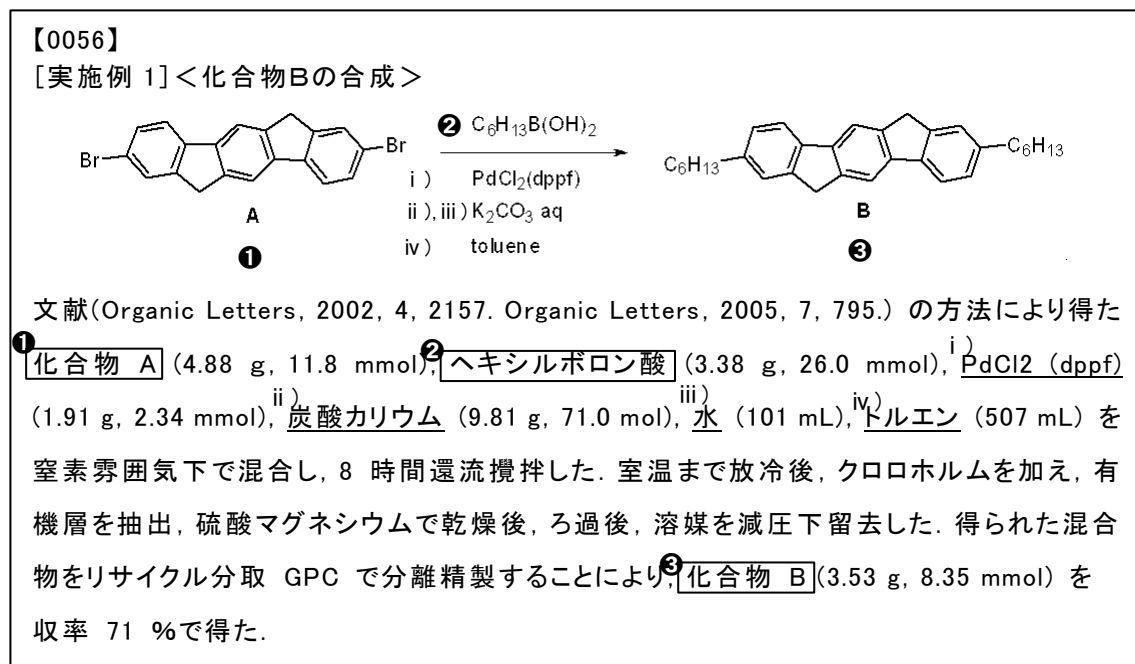
### ■ 文献中の反応情報の収録方針



### ■ 収録レコード数の相関性



## ■ 収録例：原特許文献（特開 2010-229048）



## ・ CAplus ファイルの索引 (AN 2010:1279237, DN 153:543934)

BIB
ABS
IND

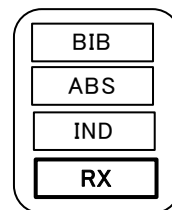
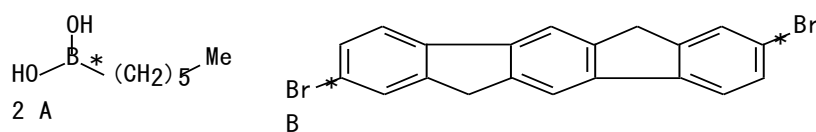
ST org semiconductor device indenofluorene deriv solvent soly proces  
IT Semiconductor materials  
Transistors  
(organic; indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)  
IT Semiconductor devices  
(organic; indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)  
IT ③ 1247953-36-1P ← 生成物  
RL: IMF (Industrial manufacture); PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
(indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)  
IT ② 16343-08-1, Hexylboronic acid ① 848982-57-0 ← 反応物  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(indenofluorene-based semiconductor materials with high solvent solubility for organic semiconductor devices)

文献の主題に関与しない物質（汎用の試薬・溶媒・触媒など）は索引されない。

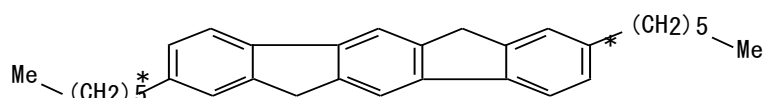
生成物, 反応物など反応関与物質は IT フィールドに別々に索引される. 同一反応中を示す指標はない。

## CASREACT ファイルの反応情報 (AN 153:543934)

RX (1) OF 1     2 A + B ==&gt; C



(1) →



YIELD 71%

RX (1)	RCT	<sup>2</sup> A 16343-08-1, <sup>1</sup> B 848982-57-0	← 反応物
	RGT	D 584-08-7 K2C03 ii)	← 試薬
	PRO	<sup>3</sup> C 1247953-36-1	← 生成物
	CAT	72287-26-4 Palladium, i) [1, 1'-bis(diphenylphosphino-κP) ferrocene]dichloro-, (SP-4-2)-	← 触媒
	SOL	7732-18-5 Water, 108-88-3 PhMe <sub>iv</sub> )	← 溶媒
	CON	8 hours, reflux <sup>ii</sup> )	← 反応条件
	NTE	Suzuki coupling	← 注記

すべての反応関与物質が反応ごとに索引される。  
収率や反応条件も収録される。

## ■ CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較

(2018 年 8 月現在)

項目	CASREACT	CAplus
収録年	1840 年以降	1808 年以降 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているのは 1907 年以降)
収録数	162 万件 (レコード数) 9,410 万件 (反応数)	707 万件 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているレコード数)
収録文献	CA に収録されているレコードの一部	CA 収録対象の化学および化学周辺分野
索引方針	合成的に意義のある反応を選択 (単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない)	文献の主題や発明の新規性/進歩性に関連する物質
特徴	<ul style="list-style-type: none"> <li>すべての反応関与物質を収録する.</li> <li>収率情報も収録する.</li> <li>反応関与物質や収率情報をリンクして精密な反応検索ができる.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>無機化合物やポリマーを含めて幅広く合成文献を検索できる.</li> <li>古い年代の反応情報も検索できる.</li> <li>同一反応中に限定した検索はできない.</li> <li>汎用の試薬, 溶媒, 触媒は索引されない.</li> <li>収率情報は収録されない.</li> </ul>



## まとめ

- STN には, 反応情報に関するデータベースが複数搭載されている. 収録源や収録内容, 検索機能などが異なるため, 目的に合わせて適切なファイルを選択する.
- CAplus ファイルと CASREACT ファイルは, 反応関与物質の索引方針に違いがある. CASREACT ファイルは反応情報検索に特化したデータベースである.

## *B CASREACT ファイル*

CASREACT ファイルの収録内容や検索方法についてご紹介します。





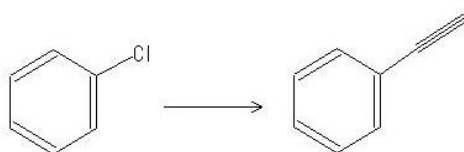
## 概要

■ CASREACT ファイルは、Chemical Abstracts Service (CAS) 作成のデータベースである。化学反応情報をさまざまな手法で検索できる。

- ・ CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) を使った検索
  - 例 : トルエン (108-88-3) からフェノール (108-95-2) の合成
  - 注意 : 化学物質名称からは検索できない

- ・ 反応質問式を使った構造検索

- 例 : 以下の反応を検索



- ・ 官能基用語を使った検索
  - 例 : ケトンからアルコールへの還元反応

■ 反応物や生成物の指定だけでなく、さまざまな条件を組み合わせで検索できる。

項目	検索フィールドなど	
溶媒	/SOL	
触媒	/CAT * ANY/CAT : 触媒を使っている反応すべてに限定	
収率	/YD NONE/YDT (収率の記載なし)	CAS 登録番号 (CAS RN <sup>®</sup> ) 検索, 構造検索用
	/FG.YD NONE/FG.YDT (収率の記載なし)	官能基検索用
反応情報のキーワード	/NTE	
CA の一部の書誌情報 (代表的なフィールド)	/JT	(雑誌名)
	/PY	(発行年)
	/DT	(資料種類)

## 収録範囲

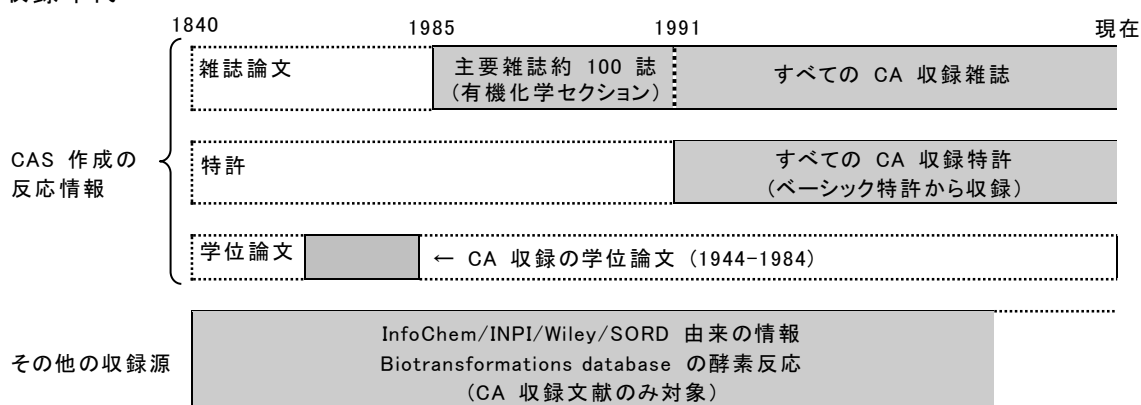
■ CASREACT ファイルには CAS の収録基準 (APPENDIX 参照) に合致した反応が収録されている。

- ・ 一段階反応および多段階反応が収録されている。
- ・ 反応に関与するすべての化合物が索引されている。
- ・ 原文献に記載されていれば、収率や反応条件、安全性に関する情報 (キーワード) も収録されている。

■ CAS 作成の反応情報 (1985 年以降) に加えて、他の収録源からも反応情報を収録している。

- ・ 他の収録源 (=> S NONCAS/FS で限定できる)
  - InfoChem (1974-1999 年)
  - INPI (1840-1985 年)
  - SORD (1961-2011 年)
  - Wiley\* (1921-2015 年)
  - Biotransformation (1971-1997 年)
- ・ CAS 以外の収録源のデータについても以下の機能を利用できる。
  - すべての反応関与物質に CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) が付与されている。  
(INPI, Wiley 由来の反応情報は、触媒と溶媒の CAS RN<sup>®</sup> の収録が不完全な場合がある)
  - ロール、反応部位、マッピングを指定した検索や、官能基検索が利用できる。

・ 収録年代



\* Wiley 社由来の反応情報の出典

Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (EROS) : e-EROS 2001~2015 年版  
 Organic Syntheses : 1921 - 2015 年  
 Organic Reactions : 1946 - 2008 年



■ レコード例 (BIB ABS IND RX(1) RX(2) RX(3) 表示形式)

**BIB**  
 CAplus/CA  
 ファイルの  
 書誌情報

AN 132:222457 CASREACT Full-text  
 TI Photochemical process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane  
 IN Ollivier, Jean; Drutel, Damien  
 PA Elf Atochem S.A., Fr.  
 SO Eur. Pat. Appl., 7 pp.  
 CODEN: EPXXDW  
 DT Patent  
 LA French  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	EP 989118	A1	20000329	EP 1999-402108	19990824
	EP 989118	B1	20011024		
	R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT, IE, SI, LT, LV, FI, RO				
	US 6194570	B1	20010227	US 1999-400996	19990921
PRAI	FR 1998-11734		19980921		

**ABS**  
 CAplus/CA  
 ファイルの  
 抄録

AB Lauryl lactam, useful as a monomer (no data), is prepared in high yield and selectivity by the photochem. nitrosation of cyclododecane with a nitrosation agent (e.g., nitrosyl chloride) and hydrogen chloride in an organic solvent (e.g., chloroform) to produce the oxime of cyclododecanone which is then subjected to a Beckmann rearrangement in the presence of methanesulfonic acid.

IPCI C07D0201-04 [ICM, 6]  
 IPCR C07D0227-02 [I]; C07D0201-04 [I]  
 CC 27-21 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))  
 Section cross-reference(s): 35, 74  
 ST lauryl lactam prepn cyclododecane reaction; photochem nitrosation cyclododecane prepn cyclododecanone oxime; Beckmann rearrangement cyclododecanone oxime prepn lauryl lactam  
 IT Beckmann rearrangement  
 (of cyclododecanone oxime in the presence of methanesulfonic acid for the preparation of lauryl lactam)  
 IT Nitrosation  
 (photochem.; of cyclododecane with nitrosyl chloride in the prepn of cyclododecanone oxime)  
 IT 75-75-2, Methanesulfonic acid  
 RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 67-66-3, Chloroform, uses 108-90-7, Chlorobenzene, uses  
 RL: NUU (Other use, unclassified); USES (Uses)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 294-62-2, Cyclododecane 2696-92-6, Nitrosyl chloride 7647-01-0,  
 Hydrogen chloride, reactions  
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 946-89-4P, Cyclododecanone oxime  
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 IT 947-04-6P, Lauryl lactam  
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)

RE. CNT 2 THERE ARE 2 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD

RE  
 (1) Ato Chim  
 (2) Montecat

**IND**  
 CAplus/CA  
 ファイルの  
 索引情報

CASREACT ファイルでは、下記のフィールドは検索できない。

- ・対応特許情報 (ベーシック特許以外の /PD, /PY, /PN, /AD, /AY, /AP など)
- ・IT フィールド中の CAS 登録番号 (CAS RN®) と CAS ロール (/IT)
- ・特許分類 (/IPC, /CPC, /ECLA, /USC など)
- ・引用情報・被引用情報 (/REN, /OSC.G など)

**RX(1)**  
1 番目の  
反応情報  
(CASREACT  
ファイル特有)

反応マップ RX(1) OF 3 ... A ==> B

一段階反応 RX(1)  
G → A → B  
"..." 前後の反応の存在を表す

反応図

\* は反応部位

収率

反応要約

反応物  
試薬  
生成物  
触媒  
溶媒  
注記

RX(1) RCT A 946-89-4  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO B 947-04-6  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3  
NTE photochem.

反応関与物質は CAS 登録番号 (CAS RN®) で索引されている。

**RX(2)**  
2 番目の  
反応情報  
(CASREACT  
ファイル特有)

RX(2) OF 3 G ==> A...

一段階反応 RX(2)  
G → A → B

反応図

RX(2) RCT G 294-62-2  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO A 946-89-4  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3, 7732-18-5 Water

**RX(3)**  
3 番目の  
反応情報  
(CASREACT  
ファイル特有)

RX(3) OF 3 COMPOSED OF RX(2), RX(1)  
RX(3) G ==> B

多段階反応 RX(3)  
G → ... → B

反応図

2 STEPS

YIELD 99%

RX(2) RCT G 294-62-2  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO A 946-89-4  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3, 7732-18-5 Water

RX(1) RCT A 946-89-4  
RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
PRO B 947-04-6  
CAT 75-75-2 MeSO3H  
SOL 67-66-3 CHCl3  
NTE photochem.

## CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) 検索

- CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) に役割 (ロール) を指定して検索できる。

■ 使用頻度の高いロール

/RCT	反応物 (Reactant)	/RRT	反応物または試薬 (Reactant or Reagent) (/RCT, RGT)
/RGT	試薬 (Reagent)		
/PRO	生成物 (Product)		
/NPRO	生成物以外の物質 (NonProducts) (/RCT, RGT, SOL, CAT)		
/SOL	溶媒 (Solvent)		
/CAT	触媒 (Catalyst) *ANY/CAT : 触媒反応に限定		

\* ロールを指定しない場合は、すべてのロールが検索対象

- ・ 化学物質名称からは検索できない (反応データには名称が入っていない)。
- ・ 溶媒と触媒は CAS RN<sup>®</sup> 検索のみ可能 (構造検索, 官能基検索は不可)。
- ・ 同一反応中に限定する場合, (L) 演算子を使う。

### ■ ロールを指定した検索

- ・ 【方法 1】 CASREACT ファイルで CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) に直接ロールを指定

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

=> S 103-90-2/RRT ← アセトアミノフェンを反応物または試薬とする反応  
L1 982 103-90-2/RRT

=> S 103-90-2/PRO ← アセトアミノフェンを生成物とする反応  
L2 278 103-90-2/PRO

- ・ 【方法 2】 REGISTRY ファイルの回答セット (L 番号) にロールを指定

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S ACETAMINOPHEN/CN ← アセトアミノフェンの名称で検索  
L3 1 ACETAMINOPHEN/CN

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

=> S L3/PRO ← REGISTRY ファイルの回答集合の L 番号を指定して検索  
L4 278 L3/PRO (アセトアミノフェンを生成物とする反応)

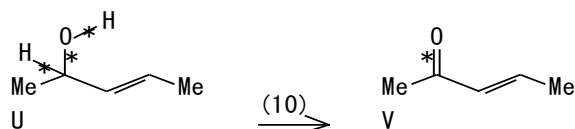
- ・ 使い分けの目安

- 3 物質以下の場合 → 【方法 1】
- 4 物質以上の場合 → 【方法 2】

- 検索例 : (*E*)-3-Penten-2-one (CAS RN<sup>®</sup> 3102-33-8) の合成法を検索する. さらに, アセトニトリル (CAS RN<sup>®</sup> 75-05-8) を反応物/試薬に用いている反応に限定する.

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る  
=> S 3102-33-8/PRO ← 3102-33-8 が生成物の反応を検索  
L1 30 3102-33-8/PRO  
=> D FHIT 4 ← 4 番目の回答を FHIT 表示形式で表示  
L1 ANSWER 4 OF 30 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(10) OF 10 U ==> **V**



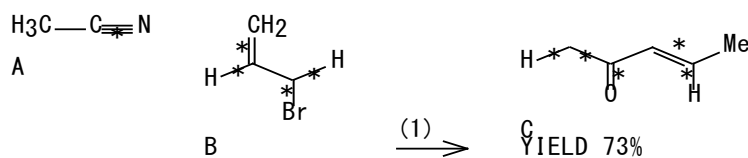
RX(10) RCT U 1569-50-2  
RGT C 7782-44-7 02  
PRO V **3102-33-8**  
CAT 13820-41-2 Platinate(2-), tetrachloro-, ammonium (1:2), (SP-4-1)-  
SOL 108-88-3 PhMe  
CON 7 hours, 90 deg C, 1 bar  
NTE solid-supported catalyst, modified silica (SBA-15) support used, conversion 7%, selectivity 72%, 10 mmol scale, selective oxidation

=> S L1 (L) 75-05-8/RRT ← 75-05-8 が反応物/試薬の反応に限定  
L2 1 L1 (L) 75-05-8/RRT

=> D FHIT ← FHIT 表示形式で表示

L2 ANSWER 1 OF 1 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(1) OF 1 **A** + B ==> **C**



RX(1) RCT A **75-05-8**  
STAGE(1)  
RGT D 37350-66-6 Ag Zn alloy  
SOL 60-29-7 Et2O, 109-99-9 THF  
STAGE(2)  
RCT B 106-95-6  
STAGE(3)  
RGT E 7647-01-0 HCl  
SOL 7732-18-5 Water, 60-29-7 Et2O  
STAGE(4)  
RGT F 6674-22-2 DBU  
SOL 60-29-7 Et2O  
PRO C **3102-33-8**

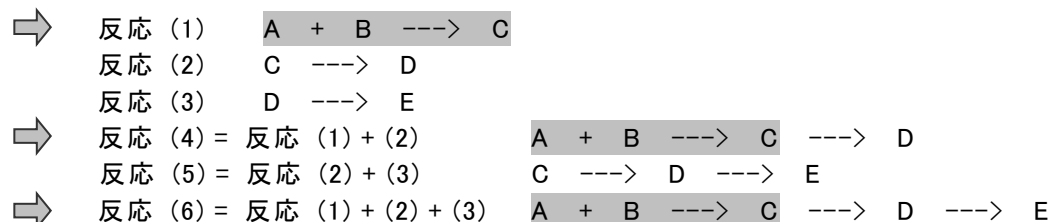
(L)

同一反応中に限定

## 回答表示

- CASREACT ファイルは 1 レコード = 1 文献で構成されている。  
そのため、1 レコードに複数の反応情報が収録されている場合がある。

例 : A + B ----> C ----> D ----> E の合成法に関する文献



### ・ 反応情報の表示

- 基本的には、検索してヒットした部分 (= 目的の反応) を表示する。①, ② を選択できる。

- ① FHIT 表示形式 : 最初にヒットした反応のみを表示
- ② HIT 表示形式 : ヒットした反応すべてを表示  
(同じ反応が何度も表示される場合がある)

- 例えば、ヒットした反応が A + B ----> C の場合

- ① FHIT 表示形式 : 反応 (1)
- ② HIT 表示形式 : 反応 (1), 反応 (4), 反応 (6)

- ヒットしていない部分も含めてすべての反応情報を表示した場合、表示が非常に長くなる場合がある。(全合成研究の文献など)

- CASREACT ファイルには、反応情報に加えて、CAplus/CA ファイルと同じ文献情報 (書誌情報, 抄録, 索引など) が収録されている。

- ・ 反応情報を表示する際、文献の書誌情報と合わせて表示することができる。

例 : => D L1 BIB FHIT                      => D L1 STD FPATH

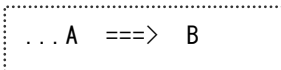
- CAplus/CA ファイルと同じ表示形式を利用できる。(ALL, FBIB, FAM 表示形式以外)
- ALL 表示形式では、文献情報に加えてすべての一段階反応が表示される。  
情報量が非常に多い場合があるので、通常は利用しない。

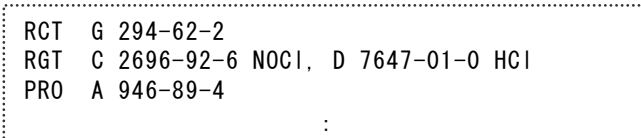


## ■ 主な表示形式（反応情報）

形式	表示内容
FGRD	ヒットした最初の反応の構造図のコンパクト表示
FGRDREF	<デフォルト> FGRD と原資料 (SO, PY)
SCAN	<回答チェック用> FGRD と標題 (回答番号の指定不可)
FHIT	ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, 反応要約 (First HIT)
HIT	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約, ヒットタームを含むフィールド
OCC	ヒットタームを含むフィールド名 (反応番号) と各フィールドにおけるヒットタームの頻度数 (OCCurrence)
RX	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
RXG	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図
RXS	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 反応要約
RX(n)	反応 n の反応マップ, 構造図, 反応要約
RXG(n)	反応 n の反応マップ, 構造図
RXS(n)	反応 n の反応マップ, 反応要約
SSRX	すべての一段階反応の反応マップ, 構造図, 反応要約
SSRX(n)	一段階反応 n の反応マップ, 構造図, 反応要約
CRD	ヒットしたすべての反応のコンパクト表示
CRD(n)	反応 n のコンパクト表示
CRDREF	CRD と原資料 (SO, PY)
CRDREF(n)	反応 n のコンパクト表示と原資料 (SO, PY)
PATH	ヒットした反応のうち, 最もステップ数の多い反応の反応マップと構造図 (検索式によって表示される反応経路は異なる)
SPATH	ヒットした反応のうち, 最もステップ数の少ない反応の反応マップと構造図 (検索式によって表示される反応経路は異なる)
FPATH	PATH に反応要約が追加 (Full PATH)
FSPATH	SPATH に反応要約が追加 (Full SPATH)

コンパクト表示 : 反応部位 (\*) 等が表示されないコンパクトな反応式の表示

反応マップ : 

反応要約 : 

■ 表示例 : Clarinex (CAS RN® 100643-71-8) の合成法を調べる.

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

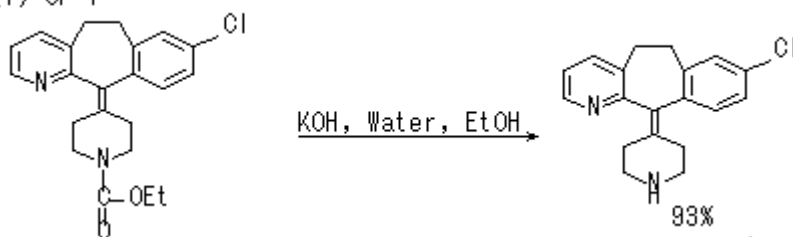
=> S 100643-71-8/PRO ← 生成物の反応に限定する  
L1 36 100643-71-8/PRO

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示

L1 36 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Synthesis study of descarboethoxyloratadine

RX(1) OF 1



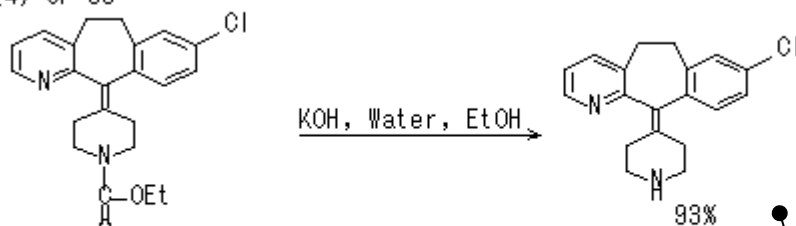
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

SCAN 表示形式 (回答チェック用) の表示内容  
- 標題  
- FCRD (ヒットした最初の反応の構造図のコンパクト表示)

=> D FCRDREF 9 ← FCRDREF 表示形式で表示

L1 ANSWER 9 OF 36 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(4) OF 35



REF: Biorganic & Medicinal Chemistry Letters, 22(8), 2701-2704;  
NOTE: 2012 optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization  
study  
CON: 6 hours, reflux

FCRDREF 表示形式 (デフォルト) の表示内容  
- FCRD (ヒットした最初の反応の構造図のコンパクト表示)  
- 原資料 (SO, PY)

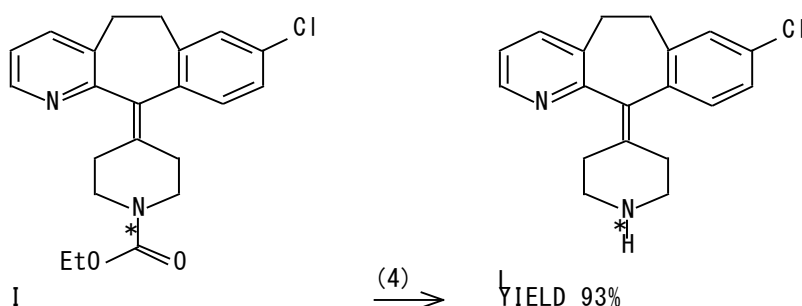
=> D 9 BIB ABS FHIT

← 書誌情報, 抄録と反応情報 (FHIT) を組み合わせて表示

L1 ANSWER 9 OF 36 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 AN 156:560388 CASREACT Full-text  
 TI Design and synthesis of thiourea derivatives containing a benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine moiety as potential antitumor and anti-inflammatory agents  
 AU Liu, Wukun; Zhou, Jinpei; Zhang, Tong; Zhu, Haiyang; Qian, Hai; Zhang, Huibin; Huang, Wenlong; Gust, Ronald  
 CS Department of Medicinal Chemistry, China Pharmaceutical University, Nanjing, 210009, Peop. Rep. China  
 SO Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters (2012), 22(8), 2701-2704  
 CODEN: BMCLE8; ISSN: 0960-894X  
 PB Elsevier B.V.  
 DT Journal; (online computer file)  
 LA English  
 AB Benzo[5,6]cyclohepta[1,2-b]pyridine thiourea derivs. were developed and screened for antitumor and anti-inflammatory activity. Most of the compds. exhibited growth inhibitory effects comparable to 5-fluorouracil in vitro against mammary (MCF-7 and MDA-MB 231) as well as colon (HT-29) carcinoma cells. They also showed stronger anti-inflammatory activity than ibuprofen in vivo in the xylene-induced ear swelling assay in mice.

RX(4) OF 35 ... I ==&gt; L...

← 反応マップ



RX(4) RCT I 79794-75-5  
 RGT M 1310-58-3 KOH  
 PRO L **100643-71-8**  
 SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH  
 CON 6 hours, reflux  
 NTE optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study  
 RE. CNT 29 THERE ARE 29 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

← 反応要約

FHIT 表示形式の表示内容  
 - ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, 反応要約

=> D FPATH 9

← FPATH 表示形式で表示

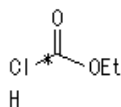
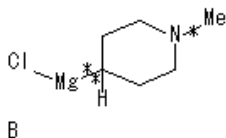
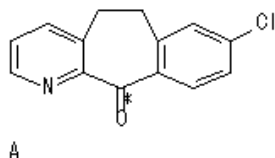
FPATH 表示形式の表示内容

- ヒットした反応のうち、最もステップ数の多い反応の反応マップと構造図  
(検索式によって表示される反応経路は異なる)

L1 ANSWER 9 OF 36 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(20) OF 35 COMPOSED OF RX(1), RX(2), RX(3), RX(4)

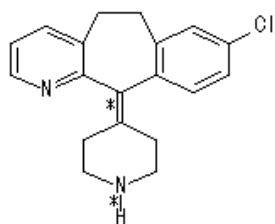
RX(20) A + B + H ==> L



← 反応マップ

← 構造図

4  
STEPS  
→



YIELD 93%

FPATH 表示形式では、RX(1)~(4) の反応要約が表示されるので、  
中間体や試薬も確認できる。

[比較] FHIT 表示形式では RX(4) の反応要約のみが表示される。

FPATH 表示形式では、

- ① 生成物のみを指定して検索した場合、出発物質がすぐわかる。
- ② 反応物のみを指定して検索した場合、最終化合物がすぐわかる。

RX(1) RCT A 31251-41-9, B 63463-36-5  
PRO C 38089-93-9  
SOL 109-99-9 THF  
CON 3 hours, reflux  
NTE in-situ generated reactant

← 反応要約

RX(2) RCT C 38089-93-9  
RGT F 7664-93-9 H2SO4  
PRO E 38092-89-6  
SOL 7732-18-5 Water  
CON 4.5 hours, room temperature

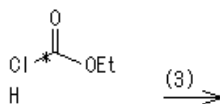
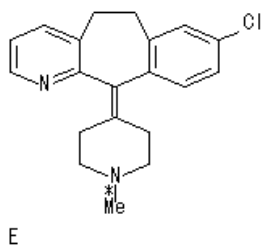
RX(3) RCT E 38092-89-6, H 541-41-3  
RGT J 121-44-8 Et3N  
PRO I 79794-75-5  
SOL 108-88-3 PhMe  
CON 3 hours, reflux

RX(4) RCT I 79794-75-5  
RGT M 1310-58-3 KOH  
PRO L **100643-71-8**  
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH  
CON 6 hours, reflux  
NTE optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study

=> D 9 RX(3) RX(4) ← RX(n) 表示形式で表示

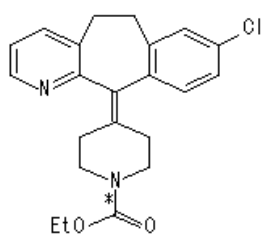
L1 ANSWER 9 OF 36 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(3) OF 35 ... E + H ==> I... ← RX(3) の反応マップ



(3) →

RX(n) 表示形式の表示内容  
 - 指定した反応番号の反応マップ, 構造図, 反応要約  
 \* 各ステップの詳細を表示できる  
 \* ヒットした反応以外も表示できる



YIELD 72%

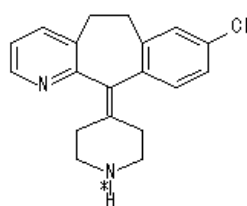
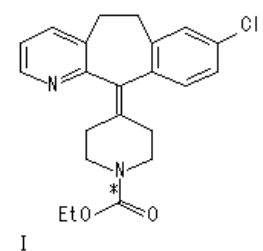
RX(3) RCT E 38092-89-6, H 541-41-3  
 RGT J 121-44-8 Et3N  
 PRO I 79794-75-5  
 SOL 108-88-3 PhMe  
 CON 3 hours, reflux

← RX(3) の構造図

← RX(3) の反応要約

RX(4) OF 35 ... I ==> L...

← RX(4) の反応マップ



(4) → YIELD 93%

← RX(4) の構造図

RX(4) RCT I 79794-75-5  
 RGT M 1310-58-3 KOH  
 PRO L **100643-71-8**  
 SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH  
 CON 6 hours, reflux  
 NTE optimized on solvent, reagent and reaction time, optimization study

← RX(4) の反応要約

## 反応条件, 書誌情報の検索

- 下記の項目から検索が可能である.

項目	検索フィールドなど	
収率	/YD NONE/YDT (収率の記載なし)	CAS 登録番号 (CAS RN <sup>®</sup> ) 検索, 構造検索用
	/FG.YD NONE/FG.YDT (収率の記載なし)	官能基検索用
反応ステップ数	/NS	
反応情報のキーワード	/NTE	
CA の一部の書誌情報 (代表的なフィールド)	/JT	(雑誌名)
	/PY	(発行年)
	/DT	(資料種類)

- ・ 収率や反応ステップ数は数値検索フィールドである. 範囲を指定した数値検索ができる.
  - 入力例
 

=> <u>S 90&lt;=YD</u>	← 収率 90% 以上
=> <u>S 1-3/NS</u>	← 反応ステップ数 1-3
=> <u>S 1&lt;=NS&lt;=2</u>	← 反応ステップ数 1 以上 2 以下
- ・ 生成物や反応物と, 収率や反応ステップ数をリンクして検索する場合は, 適切な近接演算子を使用する.
- ・ 反応に関するキーワードが NTE フィールドに収録されている場合がある.
  - キーワードは統制されていないため, 様々な表現を考慮した上で検索するとよい.
- ・ CAplus/CA ファイルと同じ検索フィールドを利用できるが, 下記は検索できない.
  - 対応特許情報
  - 特許分類 (IPC, CPC など)
  - IT フィールド中の CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) と CAS ロール
  - 引用情報・被引用情報

## CASREACT ファイルで用いる演算子

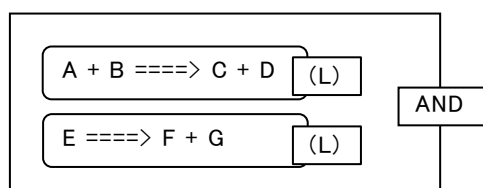
■ CASREACT ファイルにおける演算子は下記の通りである。

- ・ 同一反応中に限定したい場合は (L) 演算子を使う。

=> S 616-38-6/RCT (L) 104-93-8/PRO (L) 7440-44-0/CAT

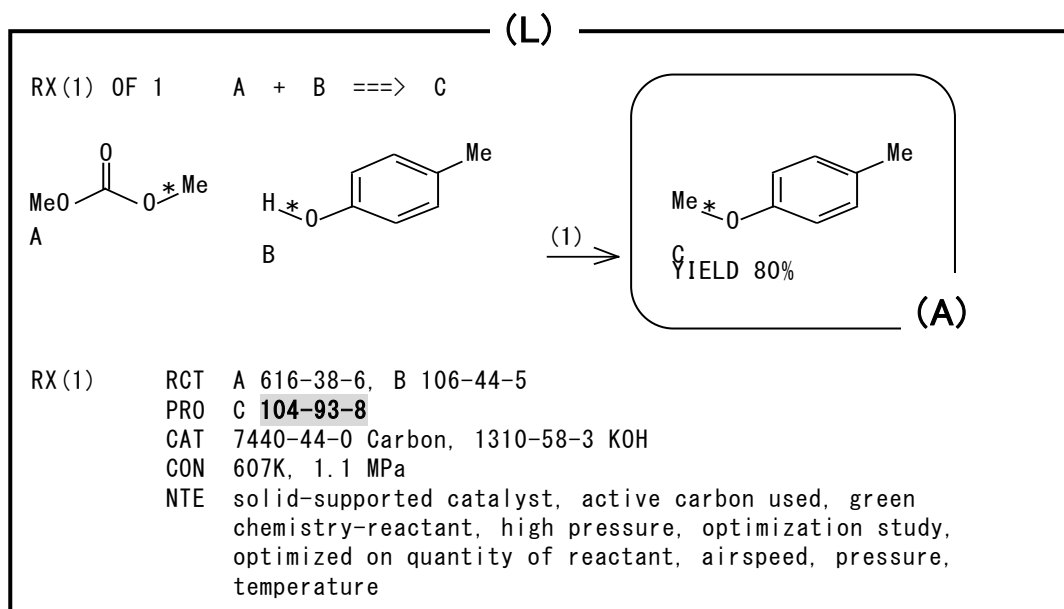
=> S 616-38-6/RCT (L) ANY/CAT (L) 1/NS

- AND 演算子は、レコード（文献）中のすべての情報が対象であるため、目的でない反応がヒットする場合がある。



- ・ 収率 (/YD) と生成物をリンクする場合のみ (A) 演算子を用いる。

=> S 104-93-8/PRO (A) 80<=YD



■ CPlus/CA ファイルの書誌情報とかけ合せたい場合は AND 演算子を用いる。

=> S 104-93-8/PRO AND P/DT

← 特許中の反応に限定

- 検索例 : フェキソフェナジン (Fexofenadine) およびフェキソフェナジンを含む多成分物質の合成反応を検索する. さらに下記の条件に限定する.

- 収率が 80% 以上の反応
- 相間移動触媒 TEBAC (Triethylbenzylammonium chloride) を用いる反応

=> FILE REGISTRY

=> E FEXOFENADINE/CN ← フェキソフェナジンの名称を /CN で EXPAND

```
E1      1      FEXODINE/CN
E2      1      FEXOFEN/CN
E3      1 --> FEXOFENADINE/CN
E4      1      FEXOFENADINE HYDROCHLORIDE/CN
E5      1      FEXOFENADINE METHYL ESTER/CN
```

:

=> S E3

L1 1 FEXOFENADINE/CN

=> D ← IDE 表示形式 (デフォルト) で表示

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2018 AGS on STN

RN 83799-24-0 REGISTRY

:

CN **Fexofenadine**

:

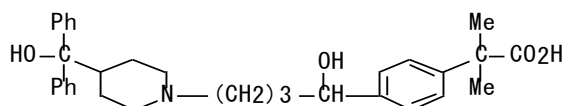
MF C32 H39 N O4

C1 COM

SR CA

LC STN Files: ADISINSIGHT, ADISNEWS, ANABSTR, BIOSIS, CA, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN, DDFU, DRUGU, EMBASE, IMSRESEARCH, IPA, MEDLINE, PS, RTECS\*, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL  
(\*File contains numerically searchable property data)

フェキソフェナジンの CAS 登録番号 (CAS RN®)



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

1641 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
47 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
1675 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> S 83799-24-0/CRN ← /CRN で, フェキソフェナジンを含む多成分物質を検索

L2 61 83799-24-0/CRN

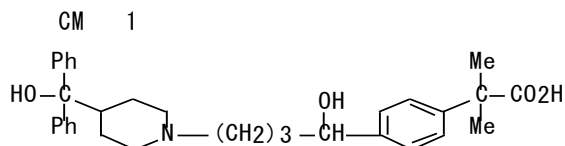
=> S L1 OR L2 ← フェキソフェナジンとその多成分物質の検索結果をまとめる

L3 62 L1 OR L2

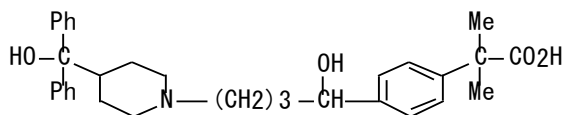


=> D\_SCAN ← SCAN 表示形式で表示

L3 62 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 IN Benzeneacetic acid, 4-[1-hydroxy-4-[4-(hydroxydiphenylmethyl)-1-piperidinyl]butyl]- $\alpha$ ,  $\alpha$ -dimethyl-, compd. with methanol (1:2)  
 MF C32 H39 N 04 . 2 C H4 O

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

L3 62 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 IN Benzeneacetic acid, 4-[1-hydroxy-4-[4-(hydroxydiphenylmethyl)-1-piperidinyl]butyl]- $\alpha$ ,  $\alpha$ -dimethyl-, hydrate (1:1)  
 MF C32 H39 N 04 . H2 O

● H<sub>2</sub>OHOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

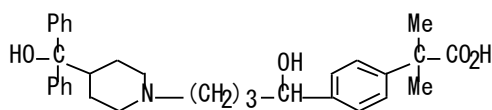
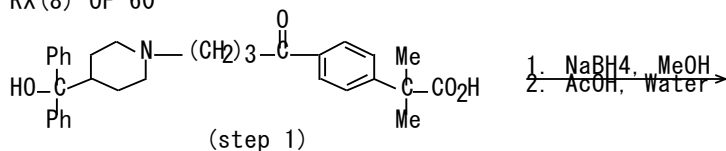
=> S L3/PRO ← フェキソフェナジンとその多成分物質の合成反応を検索  
 L4 50 L3/PRO \* L3 (REGISTRY ファイルの L 番号) をクロスオーバー

=> D\_SCAN ← SCAN 表示形式で表示

L4 50 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

T1 Preparation of fexofenadine polymorphs and processes of preparing the same

RX(8) OF 60

H<sub>2</sub>O

● 収率情報なし

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

生成物の収率が 80% 以上の反応に限定

=> S L4 (A) 80<=YD  
L5 19 L4 (A) 80<=YD

← 生成物と収率を (A) 演算子で掛け合わせる

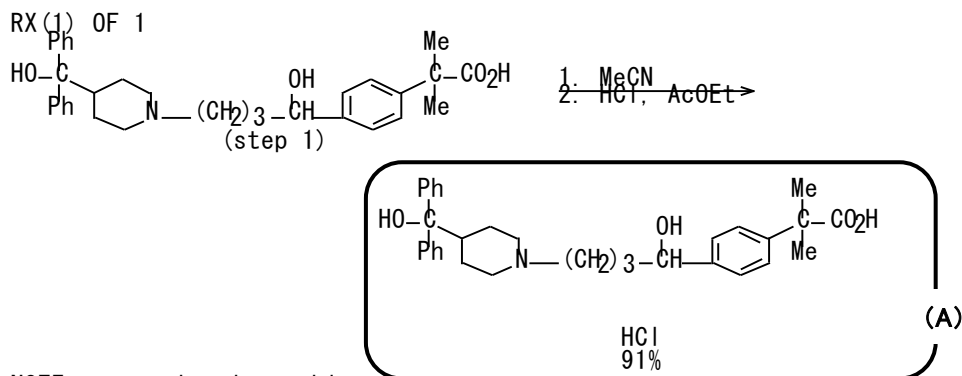
収率情報のない反応も含めたい場合は (A) (80<=YD OR NONE/YDT) と演算

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で表示

L5 19 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Method for producing nonhydrated antiallergic fexofenadine hydrochloride in a novel crystalline form



NOTE: crystal polymorphism

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

相間移動触媒 *TEBAC* を用いる反応に限定

=> FILE REGISTRY

=> E TEBAC/CN ← *TEBAC* の名称を /CN で EXPAND

E1 1 TEB4 PROTEIN (HUMAN CLONE TEB4)/CN  
E2 1 TEB4/CN  
E3 1 --> TEBAC/CN  
E4 1 TEBACON/CN  
E5 1 TEBACYL/CN  
:

CASREACT ファイルでは触媒や溶媒は CAS RN® で検索する

CAS RN® がわからない場合は REGISTRY ファイルで調べる

=> S E3

L6 1 TEBAC/CN

=> SEL RN

E1 THROUGH E1 ASSIGNED

← L6 から CAS RN® を抽出

← E 番号が付与される

=> D SEL

E1 1 56-37-1/BI

← E 番号を表示して確認

=> FILE CASREACT

=> S L5 (L) E1/CAT

L7 1 L5 (L) 56-37-1/CAT

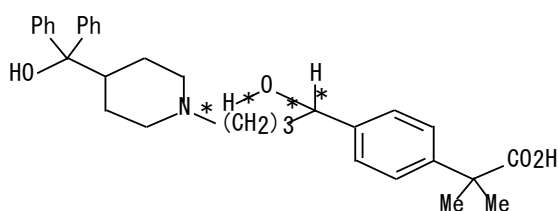
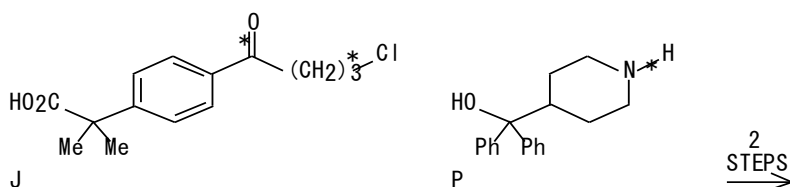
← *TEBAC* が触媒である反応に限定

=> D FHIT

← FHIT 表示形式で表示

L7 ANSWER 1 OF 1 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(8) OF 15 COMPOSED OF RX(4), RX(1)

RX(8) J + P ==> **B**

● HCl

**B**  
YIELD 81%

RX(4) RCT J 169280-21-1, P 115-46-8  
 STAGE(1)  
 RGT Q 144-55-8 NaHCO<sub>3</sub>  
 CAT **56-37-1** PhCH<sub>2</sub>NEt<sub>3</sub> Cl  
 SOL 7732-18-5 Water  
 CON overnight, 35 - 40 deg C

STAGE(2)  
 RGT E 7647-01-0 HCl  
 SOL 7732-18-5 Water  
 CON pH 5

PRO A 76811-98-8

RX(1) RCT A 76811-98-8  
 STAGE(1)  
 RGT C 16940-66-2 NaBH<sub>4</sub>, D 1310-73-2 NaOH  
 SOL 64-17-5 EtOH, 7732-18-5 Water  
 CON SUBSTAGE(1) cooled  
 SUBSTAGE(2) 3 hours, room temperature

STAGE(2)  
 RGT E 7647-01-0 HCl  
 SOL 7732-18-5 Water  
 CON pH 5

STAGE(3)  
 RGT E 7647-01-0 HCl  
 SOL 64-17-5 EtOH  
 CON pH 2.5 - 3

PRO B **153439-40-8**

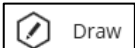
NTE green chemistry, green chemistry-waste reduction, overall yield was 42% from benzene over five steps

## 反応質問式による構造検索 – 概要

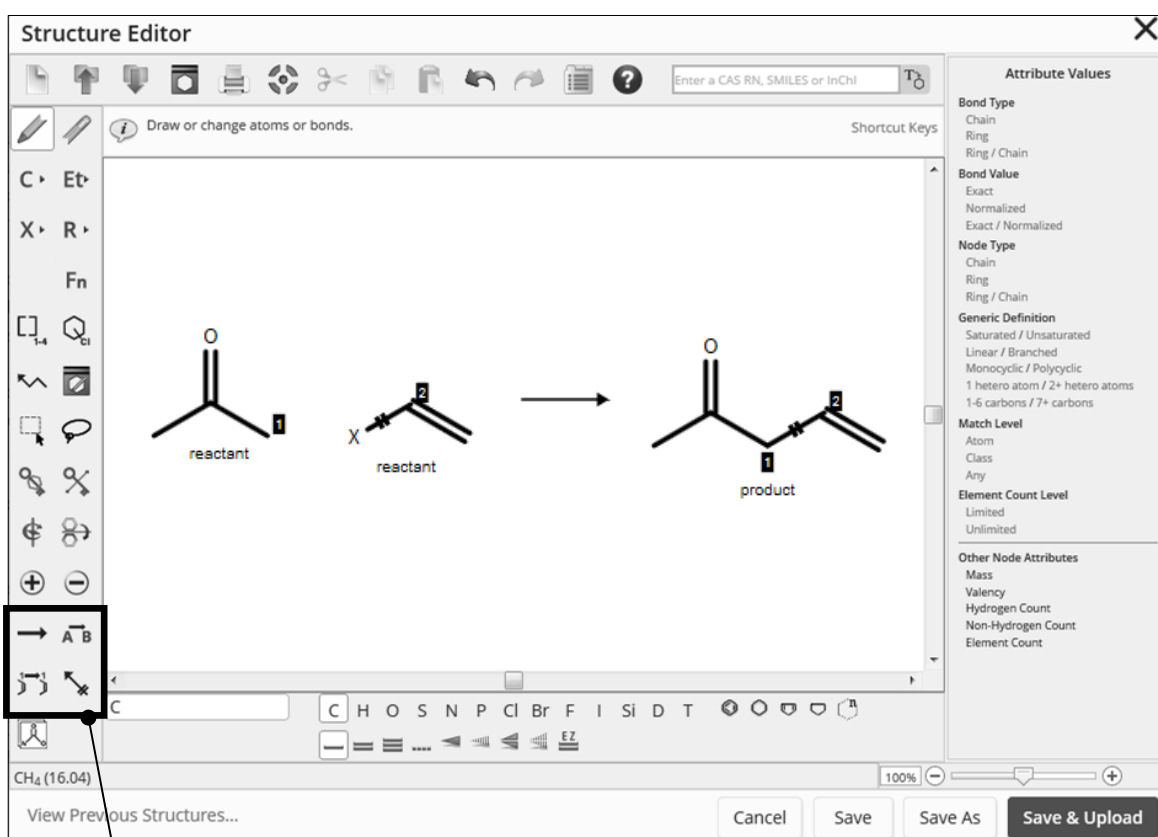
■ CASREACT ファイルでは、反応質問式を作図して構造検索を行うことができる。

■ STNext での作図


① CASREACT ファイルに入る


②  Draw ボタンをクリックすると、構造作図画面が起動する。


③ 反応質問式を作成し、反応ロールや反応部位、マッピングを指定する。




反応作図用のツール


反応矢印ツール 

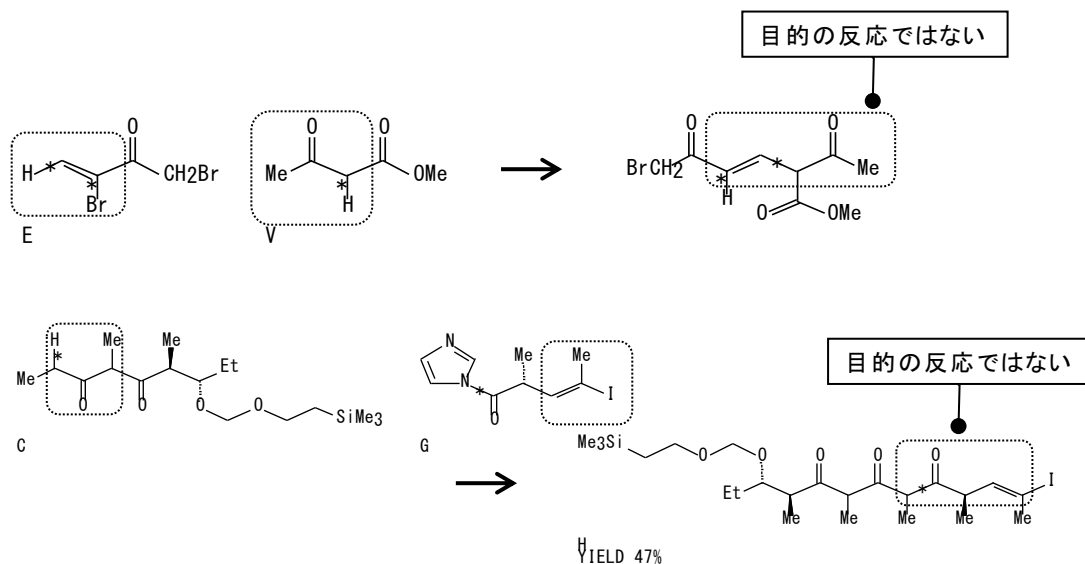
反応ロールツール 

マッピングツール 

反応部位ツール 


## ■ 反応質問式の作図のポイント

- ・ 反応物, 生成物, 試薬を独立した構造として作図する.
  - 反応物のみ, 生成物のみ, 試薬のみの作図でもよい.
  - 溶媒や触媒は構造検索できないので, 作図しない.
- ・ 反応ロールは, 反応ロールツール  で指定する.
  - 「試薬」ロールを指定すると, マッピングや反応サイトの指定をしても無視される.
  - 「反応物または試薬」ロールを指定すると, マッピングや反応サイトの指定は反応物だけについて行われ, 試薬については無視されるため, 検索結果にノイズが含まれることがある.
- ・ 必要に応じて, マッピングや反応部位を指定する.
  - 例えば, 前ページの反応質問式でマッピングや反応部位を指定しなかった場合, 下記の反応 (ノイズ) がヒットする.




- ・ 立体構造検索や同一成分内に限定した検索はできない.

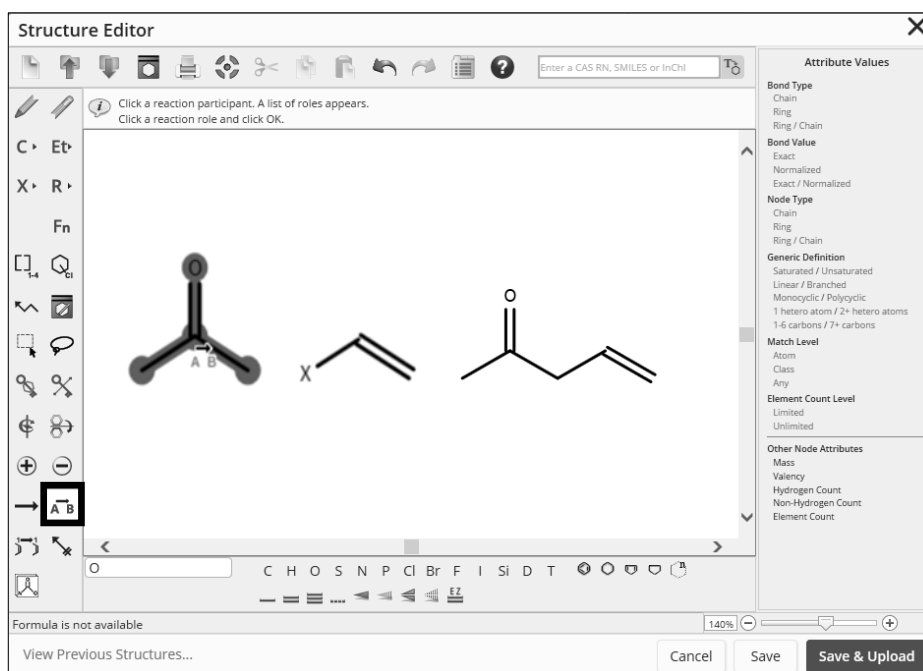
## 反応質問式の作成 – 反応ロール

■ 反応ロールの指定には反応ロールツール  を用いる。

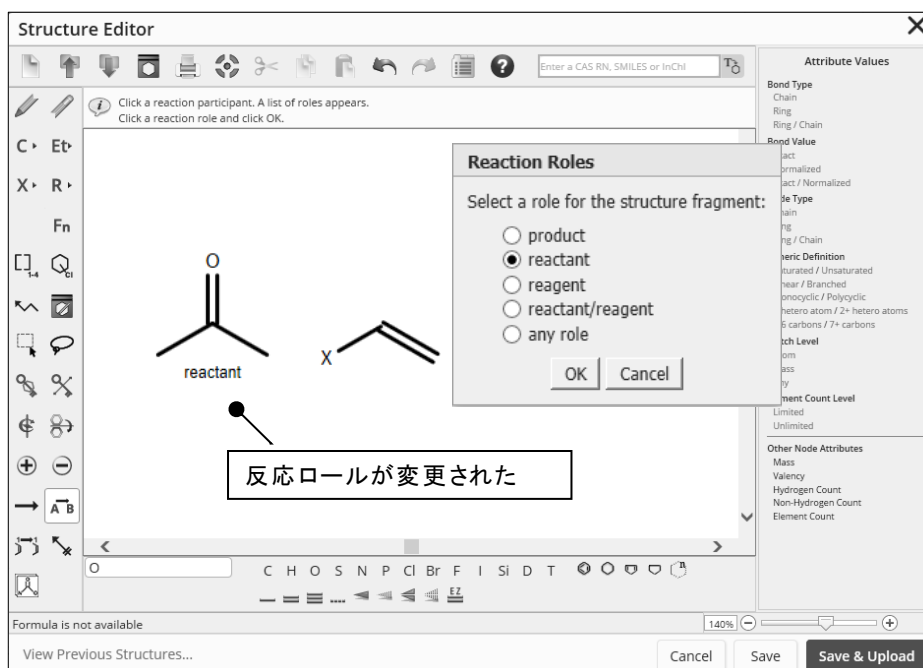
- ・ 反応サイトとマッピングは、反応ロールとして reactant または product を指定した場合のみ有効。

- reactant/reagent を指定すると、反応サイトやマッピングの指定は reactant だけについて行われ reagent については無視されるため、検索結果にノイズが含まれることがある。

① 反応ロールツール  をクリックし、ロールを指定したい構造をクリックする。




② 反応ロールの選択画面で、指定したいロールを選んで OK をクリックする。

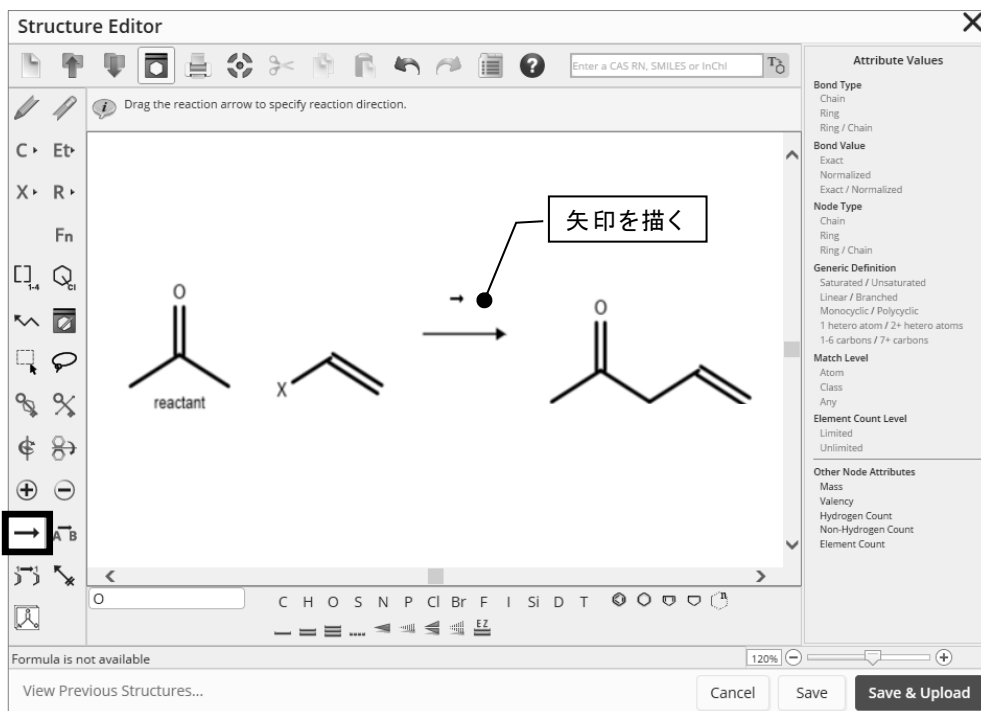


## 反応質問式の作成 – 反応矢印

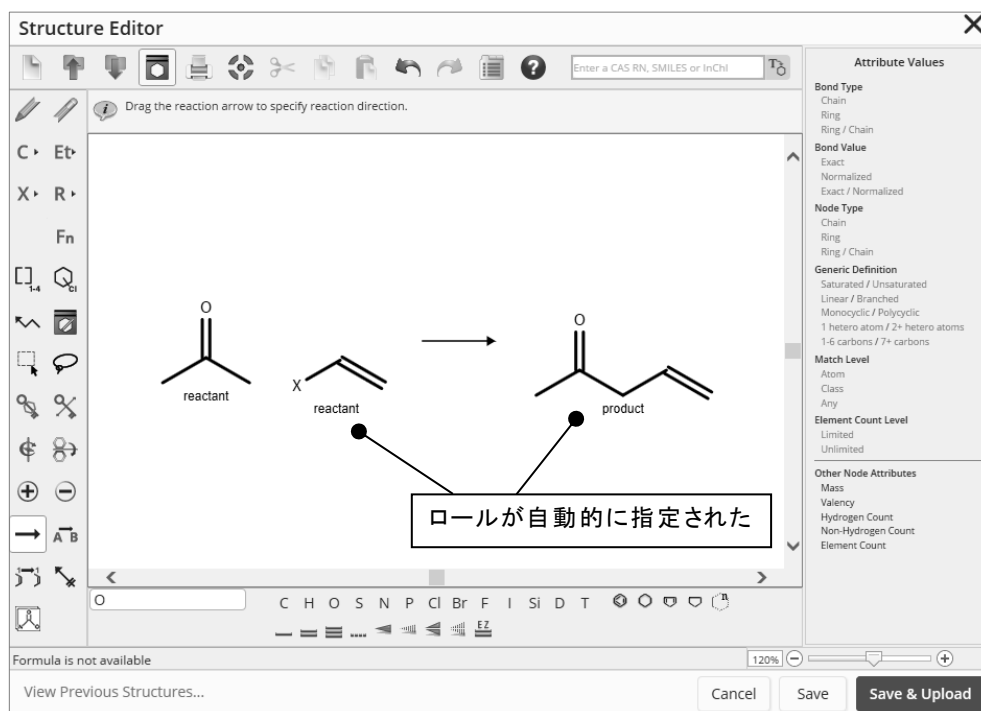
■ 反応ロールツールの代わりに反応矢印ツールで反応ロールを自動的に付与することができる。

- ・ 反応矢印ツールでは、自動的に reactant または product のどちらかが付与される。

① 反応矢印ツール  をクリックし、マウスをドラッグして矢印を描く。




② 反応ロールが付与される。

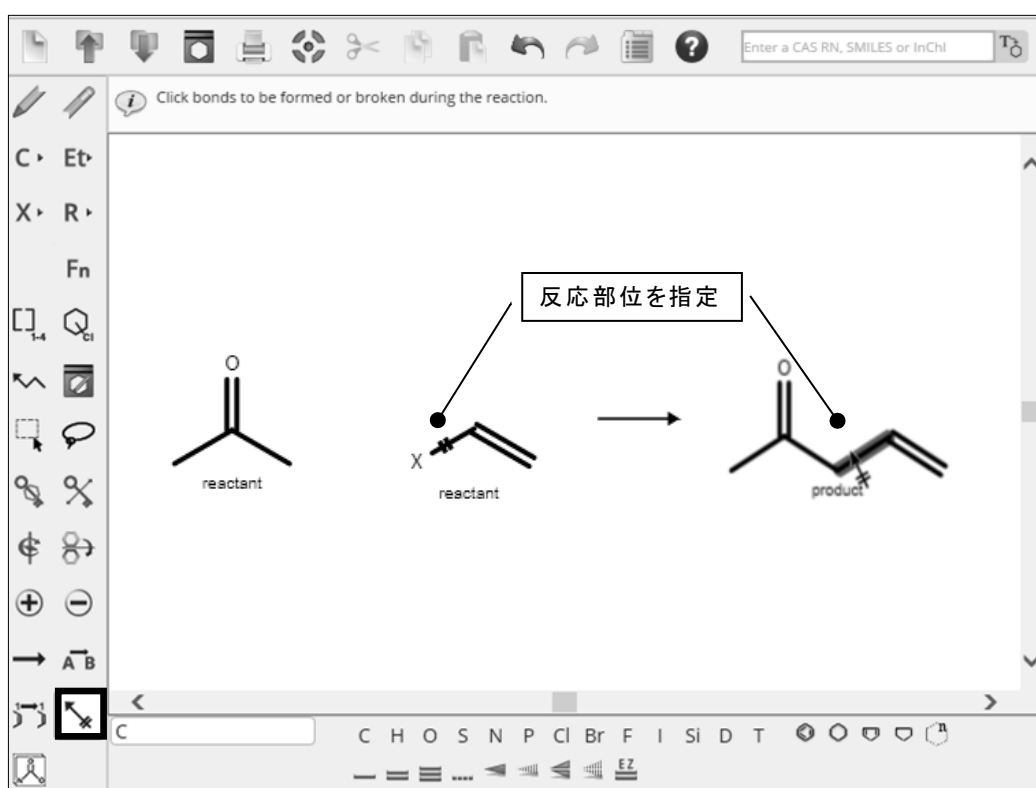


## 反応質問式の作成 – 反応部位

- 反応部位ツールを用いると、反応によって変化する結合を指定することができる。
  - ・「反応物」または「生成物」の構造フラグメント中にすでに存在する結合に対して指定する。
  - ・「試薬」や「反応物または試薬」の結合に指定すると、反応部位情報との照合は反応物だけについて行われ、試薬については無視される。

### ■ 反応部位の指定方法

- ・ 反応部位ツール  をクリックし、反応によって変化する結合をクリックする。




\* 反応に関与する結合が複数ある場合は、主な結合に付与する。

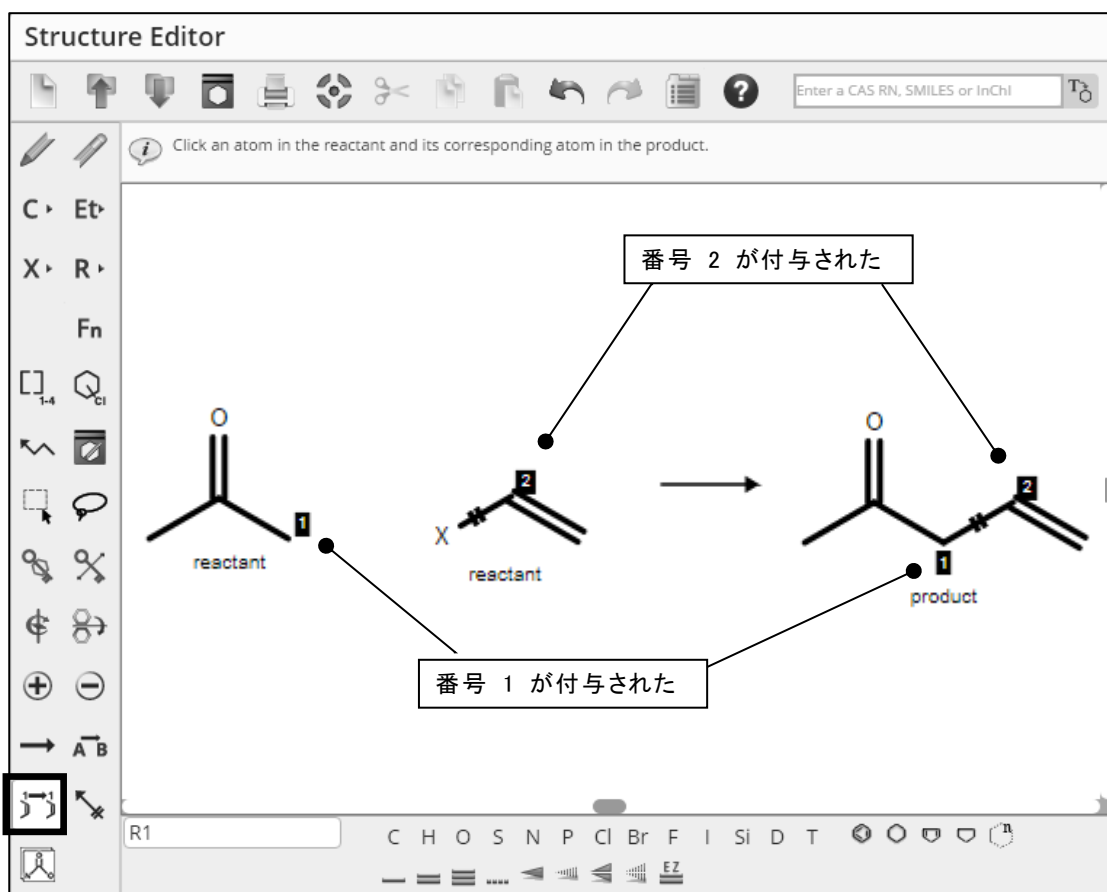


## 反応質問式の作成 – マッピング

- マッピングツールを用いると、反応物と生成物中の対応する原子を指定することができる。
  - ・ 異なる構造フラグメント内の同じ元素記号に対して指定できる。
  - ・ ショートカット、R グループ、一般式グループ (Ak, Hy など)、繰り返しグループ中のノードにはマッピングを指定できない。
  - ・ 試薬の場合は、マッピングを無視した検索が実行される。

### ■ マッピングの指定方法

- ・ マッピングツール  をクリックし、反応物と生成物中の対応する原子をクリックする。(対応する原子に同じ番号が付与される)。



- \* 構造中のすべての原子にマッピング情報が存在するわけではない。  
すべてのノードに指定するのではなく、反応部位の周辺に数点付与する。

## 構造検索のコマンド

- 反応質問式を使った構造検索 (L# は構造質問式)

=> **S L# 検索タイプ 検索範囲**

\* 一部スクリーンも利用可能

- 構造検索のタイプ

検索タイプ	内容
部分構造検索 SSS (デフォルト)	反応質問式を部分構造とする物質の反応を検索する。 追加の置換基がついてもよい。
閉構造部分構造検索 CSS	反応質問式に完全に一致する物質 (作図していないところはすべて水素) の反応を検索する。

- 構造検索の範囲

検索範囲	内容
SAMPLE (デフォルト)	データベース中の一部 (5%) を検索
FULL	データベースすべて (100%) を検索
RANGE	指定した範囲に限定して検索

- CASREACT ファイルの構造検索におけるシステム制限値

	オンライン検索・サブセット検索			バッチ検索	
	サンプル	フルファイル	範囲指定	フルファイル	範囲指定
Verification 数 (反応の確認)	5,000	12,000,000	12,000,000	20,000,000	20,000,000
回答数 (文献数)	50	12,000,000	12,000,000	20,000,000	20,000,000

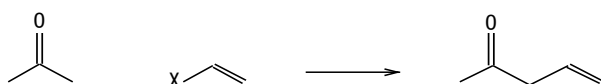
## 構造検索の流れ

### ■ 構造検索の流れ

① 作図が完了したら、構造作図画面右下の **Save & Upload** をクリックして、アップロードする。

② アップロードした反応質問式を => D QUE で表示して確認する。

=> D QUE L1 ← アップロードした反応質問式を表示して確認  
L1 STR



Structure attributes must be viewed using the Structure Drawing program.

③ サンプル検索を実行する。

=> S L1 ← サンプル検索  
SAMPLE SEARCH INITIATED 11:39:24 FILE 'CASREACT'  
SCREENING COMPLETE - 18019 REACTIONS TO VERIFY FROM 247 DOCUMENTS

28.5% DONE 5144 VERIFIED 0 HIT RXNS 0 DOCS  
SEARCH TIME: 00.00.01

ONLINE COMPLETE であることを確認

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\* ← フルファイル検索の予想  
BATCH \*\*COMPLETE\*\* ← BATCH 検索の予想

PROJECTED VERIFICATIONS: 352342 TO 368418 ← 予想 Verification 数 (反応の確認)  
PROJECTED ANSWERS: 1 TO 222 ← 予想回答数

L2 0 SEA SSS SAM L1 ( 0 REACTIONS)  
↑ ヒットした文献数 ↑ ヒットした反応数

サンプル検索の回答が得られた場合は  
回答を確認する

④ フルファイル検索を実行する。

=> S L1 FUL ← フルファイル検索  
FULL SEARCH INITIATED 11:20:31 FILE 'CASREACT'  
SCREENING COMPLETE - 402685 REACTIONS TO VERIFY FROM 5073 DOCUMENTS

100.0% DONE 402685 VERIFIED 120 HIT RXNS 40 DOCS  
SEARCH TIME: 00.00.05

L3 40 SEA SSS FUL L1 ( 120 REACTIONS)  
↑ ヒットした文献数 ↑ ヒットした反応数

⑤ 回答を表示する.

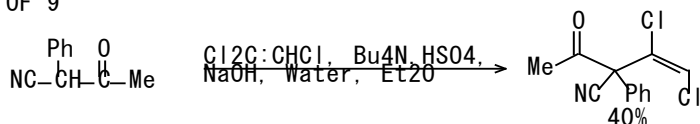
=> D SCAN

← SCAN 表示形式でヒットした回答を確認する

L3 40 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Direct Dichlorovinylolation of Some Carbonyl Compounds by Trichloroethylene Under Conditions of Phase-Transfer Catalysis

RX(9) OF 9



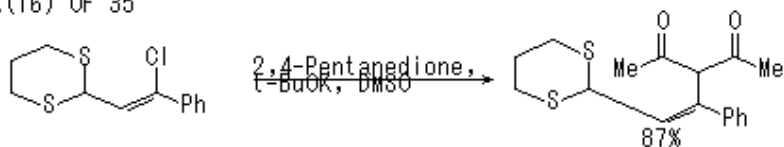
NOTE: stereoselective

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

L3 40 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Di-tert-Butyl Peroxide-Mediated Atom-Transfer Radical Addition of 2-Chlorodithiane to Aryl Alkynes under Mild Conditions

RX(16) OF 35

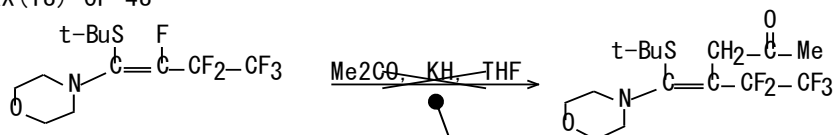


NOTE: regioselective, stereoselective

L3 40 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Oxidation and chlorination reactions of perfluoroketene-N,S-acetals

RX(18) OF 48



NOTE: failed reaction, refluxing conditions also tried

進行しない反応も回答に含まれている

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

## 参考：応用テクニック

- 反応検索の結果に対して絞り込み検索を行う際は、適切な近接演算子を使用する。

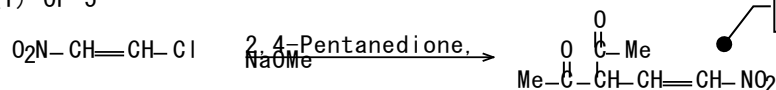
=> S L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) ← L3 (生成物を作図した反応検索結果) に  
L4 22 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) 収率を演算する場合は (A) 演算子を使用

=> D SCAN

L4 22 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Synthesis, structure, and stereospecific reactions of 1-halo-2-nitroethenes

RX(1) OF 5



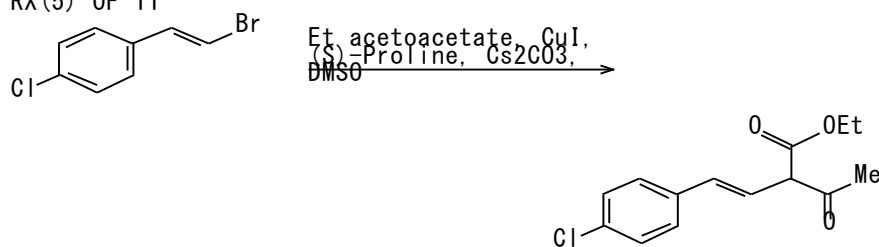
収率情報のない反応

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

L4 22 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI CuI/L-proline-catalyzed coupling reactions of vinyl bromides with activated methylene compounds

RX(5) OF 11



81%

収率情報のある反応

NOTE: Ullmann-type coupling reaction

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

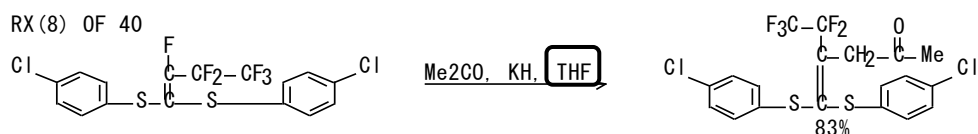
=> S L4 (L) 109-99-9/SOL ← 溶媒を THF (109-99-9) に限定

L5 12 L4 (L) 109-99-9/SOL

=> D SCAN

L5 12 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Synthesis of new trifluoromethylated furans, dihydrofurans and butenolides starting from  $\gamma$ -ketothioesters and diisopropylamine



83%

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

=&gt; S L5 (L) 1/NS

← 一段階反応に限定

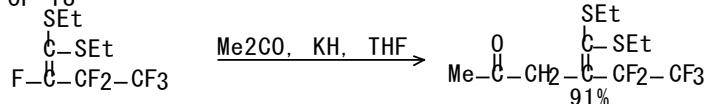
L6 9 L5 (L) 1/NS

=&gt; D SCAN

L6 9 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Fluorinated ketene dithioacetals. 8.1,1-Bis(ethylsulfanyl)perfluorobut-1-ene as starting material for the synthesis of substituted 2-(trifluoromethyl)furans and -pyrroles

RX(1) OF 18



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

=&gt; D BIB ABS FHIT 1-9

← 回答全件を BIB ABS FHIT 表示形式で表示

L6 ANSWER 1 OF 9 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 164:507213 CASREACT Full-text

TI 2,3-Dibromo-1-(phenylsulfonyl)-1-propene

AU Murphree, S. Shaun

CS Allegheny College, Meadville, PA, USA

SO e-EROS Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (2008), 1-4 Publisher: John Wiley &amp; Sons, Ltd., Chichester, UK.

CODEN: 69KUHI

URL: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/047084289X.rn00829/pdf>; ISBN:

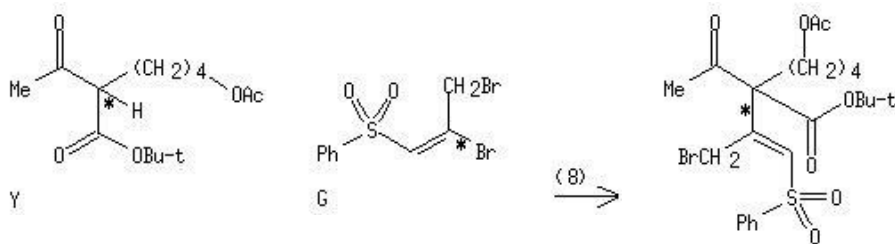
978-0-470-84289-8

DT Conference: General Review; (online computer file)

LA English

AB A review. Synthesis, handling, properties and reactivity of 3-dibromo-1-(phenylsulfonyl)-1-propene in Michael addns. and cyclization reactions are briefly reviewed.

RX(8) OF 533 ... Y + G ==&gt; Z...



RX(8) RCT Y 22281-73-8

Z  
YIELD 92%

STAGE(1)

RGT W 7646-69-7 NaH

SOL 109-99-9 THF

STAGE(2)

RCT G 128496-94-6

PRO Z 213205-45-9

NTE Michael addition

RE.CNT 14 THERE ARE 14 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## Verification が不完全な回答

- CASREACT ファイルで構造検索を行った際、Verification (照合確認) が不完全な回答が含まれることがある。

=> FILE CASREACT

:

=> S L1 FUL

FULL SEARCH INITIATED 15:26:34

SCREENING COMPLETE - 10139 REACTIONS TO VERIFY FROM 2331 DOCUMENTS

100.0% DONE 10139 VERIFIED 16 HIT RXNS ( 2 INCOMP) 8 DOCS  
SEARCH TIME: 00.00.02

10,139 反応 (2,331 文献) を照合確認

16 反応 (8 文献) がヒット  
\* Verification が不完全な 2 反応を含む

L3 8 SEA SSS FUL L1 ( 16 REACTIONS)  
↑ 文献数 ↑ 反応数

- Verification が不完全な反応とは、作図した反応式と一致するかどうかをシステムが判断できなかった反応で、大きく分けて下記の二種類がある。

### 1) 反応マッピングや反応部位の情報が不完全なレコードの場合

- 回答を表示した際、次のメッセージが表示される。

表示	内容
VERIFICATION INCOMPLETE - REACTION SITE DATA UNAVAILABLE	反応部位の照合不可
VERIFICATION INCOMPLETE - REACTION MAP DATA UNAVAILABLE	マッピングの照合不可
VERIFICATION INCOMPLETE - REACTION MAP AND SITE DATA UNAVAILABLE	反応部位およびマッピングの照合不可

### 2) Verification が制限時間内に終わらなかった場合

- Verification が完全な回答に限定したい場合は、=> S L#/COM または => S L#/COMPLETE (L# は構造検索結果) を実行する。

=> S L3/COM

L4 7 L3/COM

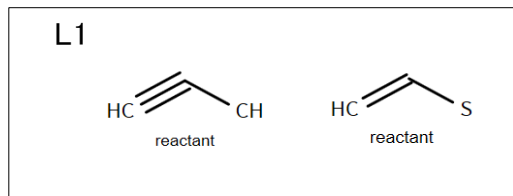
← Verification が完全 (COMPLETE) な回答に限定

← Verification が完全な回答 (7 文献)

## 構造検索時の注意

- CASREACT ファイルの構造検索では、複数のフラグメントに同じロールを指定して検索できるが、同一物質中や異なる物質中という指定はできない。したがって、期待していない回答（ノイズ）が得られる場合がある。

- 検索例 1 : 下記の反応質問式 (L1) を検索する。



=> FILE CASREACT

L1 STRUCTURE UPLOADED

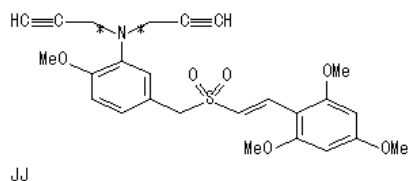
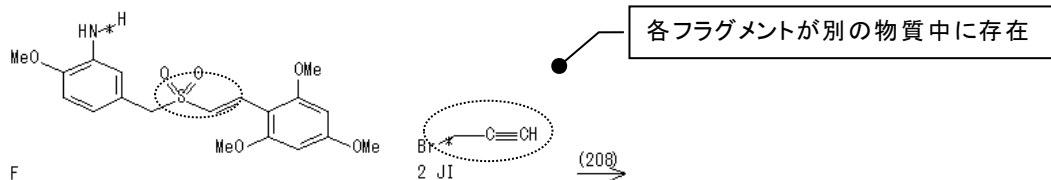
=> S L1 ← サンプル検索  
L2 2 SEA SSS SAM L1 ( 38 REACTIONS)

=> S L1 FUL ← フルファイル検索  
L3 262 SEA SSS FUL L1 ( 5185 REACTIONS)

=> D FHIT 1 3 ← 1, 3 番目の回答を FHIT 表示形式で表示

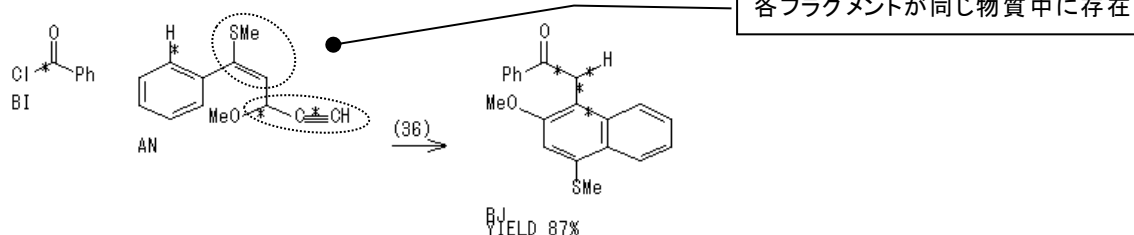
L3 ANSWER 1 OF 262 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX(208) OF 1389 ... **F** + 2 **JI** ==> JJ



L3 ANSWER 3 OF 262 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

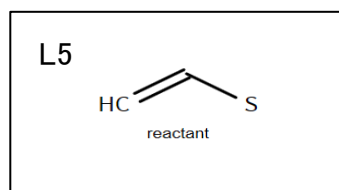
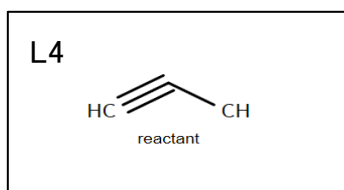
RX(36) OF 247 ... **BI** + **AN** ==> BJ...





■ 検索例 2 : 下記の反応質問式 (L4, L5) を AND 演算する.

- ・ 検索例 1 の回答に加え, 両フラグメントの構造が重なった反応物の回答も得られる.



=>

L4 STRUCTURE UPLOADED

=>

L5 STRUCTURE UPLOADED

=> S L4 AND L5 SAM

L6 2 SEA SSS SAM L4 AND L5 ( 38 REACTIONS)

=> S L4 AND L5 FUL

L7 285 SEA SSS FUL L4 AND L5 ( 5230 REACTIONS)

=> S L7 NOT L3

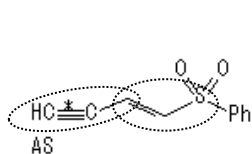
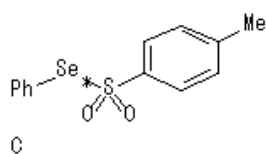
L8 23 L7 NOT L3

=> D FHIT

← 1 番目の回答を FHIT 表示形式で表示

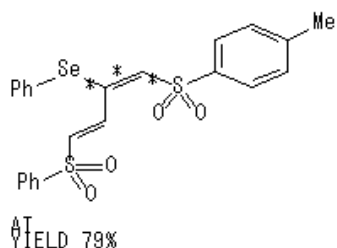
L8 ANSWER 1 OF 23 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX (22) OF 100 ... C + AS ==> AT



フラグメント同士が重なっている

(22)



RX (22) RCT C 68819-94-3, AS **180194-52-9**  
 PRO AT 180194-65-4  
 CAT 78-67-1 AIBN  
 CON heated  
 NTE regioselective, stereoselective

## 官能基検索

■ CASREACT ファイルでは、反応物、試薬、生成物中の官能基の名称から反応情報を検索できる。  
(例：アミノ基からニトロ基への反応)。

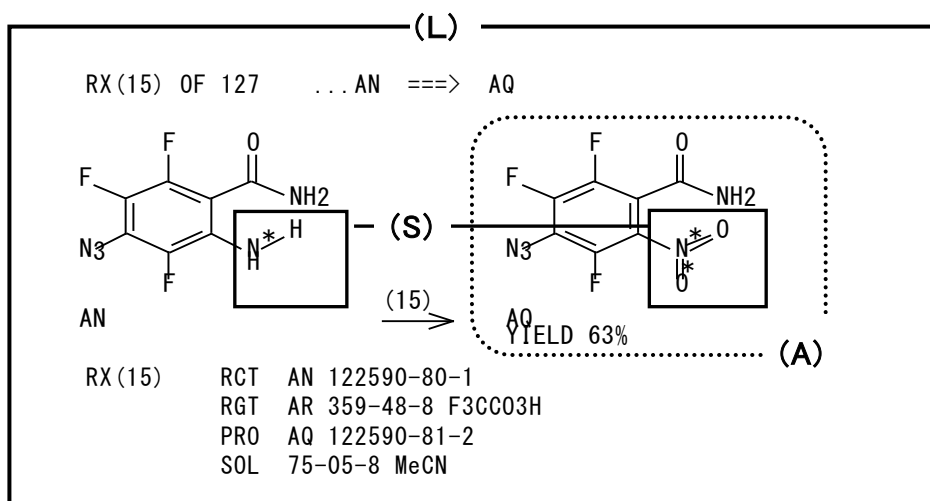
- ・ 官能基用語は約 200 種あり、反応関与化合物の構造を解析して付与されている。
  - 通常の官能基用語 (NITRO, PRIMARY AMINE など)
  - 一般的なヘテロ環を表す官能基用語 (1,2-C3N2 など)
  - 複数の官能基を組み合わせた官能基クラス用語 (ALCOHOLS など)
- ・ 官能基用語の一覧は => [HELP FGA](#) で、官能基クラス用語の一覧と定義は => [HELP FGC](#) で確認できる。

### ■ 官能基検索フィールド

検索フィールド	内容
/FG.RXN (Functional Group Reactant)	反応した官能基
/FG.FORM (Functional Group Formed)	生成した官能基
/FG.NON (Nonreacting Functional Group)	反応しない官能基
/FG.RCT (Reactant Functional Group)	反応物中の官能基
/FG.PRO (Product Functional Group)	生成物中の官能基
/FG.RGT (Reagent Functional Group)	試薬中の官能基
/FG (/FG.PRO, /FG.RGT, /FG.RCT)	官能基一般
/FG.YD (Yield Functional Group)	官能基-収率
NONE/FG.YDT	官能基-収率情報なし

- ・ 入力例
  - 第一級アミンが反応して、ニトロ基に変化する反応  
=> [S PRIMARY AMINE/FG.RXN \(S\) NITRO/FG.FORM](#)
  - ハロゲン基が反応して、第三級アルコールが生成する反応  
=> [S HALIDES/FG.RXN \(S\) TERTIARY ALCOHOL/FG.FORM](#)
  - ペルオキシ酸基を持つ試薬を用いる反応。ただし、反応物中のアジド基は変化しない反応。  
=> [S AZIDE/FG.NON \(L\) PEROXY ACID/FG.RGT](#)
  - ニトロ基が生成する反応で 80 % 以上の収率または収率情報のない反応  
=> [S NITRO/FG.FORM \(A\) \(80=<FG.YD OR NONE/FG.YDT\)](#)

## ■ 官能基検索の演算子



- ・ 複数の官能基を指定する場合は、近接演算子を用いてなるべく一つの質問式で検索する。
- ・ (S) 演算子
  - 同一反応（一段階および多段階）中の反応物と生成物の指定した官能基が何らかの形で反応しており、少なくとも一つの原子が共通に存在すること（マッピング）を条件として検索する場合、(S) 演算子を利用する。
- ・ (L) 演算子
  - 同一反応中に限定する場合、(L) 演算子を利用する。
  - 例： 共通の原子が存在しない官能基変換の場合  
 反応しない官能基の存在を指定する場合  
 試薬中の官能基と反応物や生成物を組み合わせて検索する場合  
 反応ステップ数 (/NS), CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) 検索と組み合わせる場合
- ・ (A) 演算子
  - 収率 (/FG.YD) と生成物中の官能基 (/FG.FORM または /FG.PRO) をリンクする場合、(A) 演算子を利用する。
- ・ AND 演算子
  - 書誌情報、抄録の情報と組み合わせて検索する場合、AND 演算子を利用する。

- 検索例:ラクトン存在下で、ケトンを第二級アルコールに還元する反応を検索する。

=> FILE CASREACT

=> S LACTONE/FG. NON (L) (SECONDARY ALCOHOL/FG. FORM (S) KETONES/FG. RXN)  
 L1 2120 LACTONE/FG. NON (L) (SECONDARY ALCOHOL/FG. FORM (S) KETONES/FG. RXN)

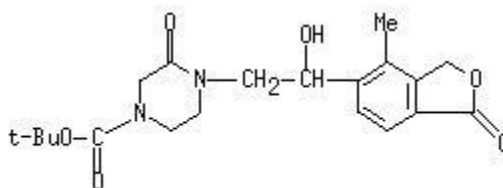
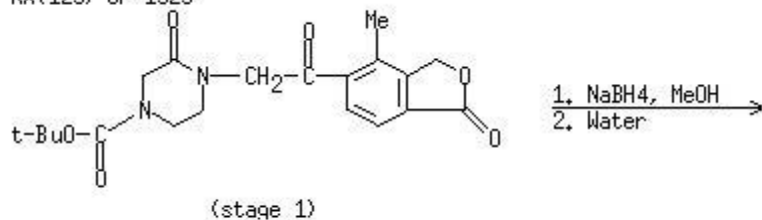
=> S L1 (L) 1/NS ← 一段階反応に限定する  
 L2 1922 L1 (L) 1/NS

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で表示する

L2 1922 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Preparation of 2-oxopiperazines as inhibitors of the renal outer medullary potassium channel

RX(129) OF 1323

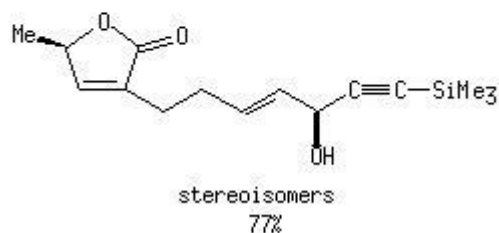
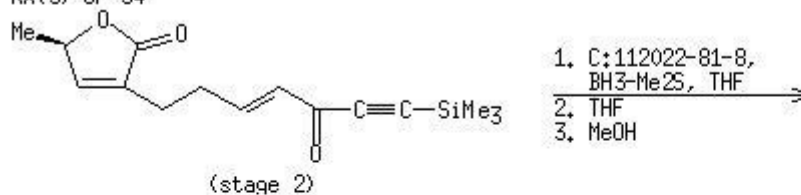


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2 1922 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Asymmetric Catalytic Synthesis of the Proposed Structure of Trocheliophorolide B  
 RX

RX(9) OF 34



NOTE: stereoselective

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

## 参考 : 応用テクニック

## ■ 反応情報のキーワード (/NTE) による絞り込み

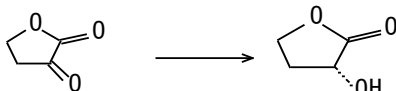
=> S L2 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE ← 立体選択性に関する記述がある反応に限定  
L3 909 L2 (L) (STEREO? OR ENANTIO?)/NTE

=> D SCAN

L3 909 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Synthesis of chiral  $\alpha$ -hydroxy amides by two sequential enzymatic catalyzed reactions

RX(7) OF 21



NOTE: **stereoselective** no solvent, enzymic, biotransformation, whole cells of *Saccharomyces cerevisiae* used, ee 82% at 100% conversion

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

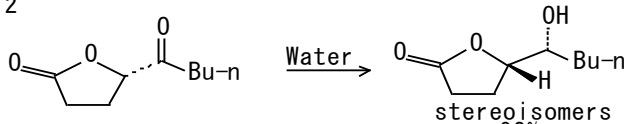
=> S L3 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE ← 酵素反応に限定  
L4 40 L3 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE

=> D SCAN

L4 40 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Preparation of enantiomerically pure syn-4,5-dihydroxy carboxylic acid lactones by microbial reduction

RX(1) OF 2



NOTE: **stereoselective**; *Aspergillus niger* agent; **enzymic**

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

## ■ NOTE (/NTE) フィールドに, 反応情報のキーワードが収録されている場合がある.

種類	NOTE フィールドの記載例
反応タイプ	photochem. biotransformation
安全性	safety - danger of explosion health hazard
反応条件*	Temp. -35.degree high pressure

\* 2003 年以降, 反応条件は CON フィールドに収録されるようになったため, 検索できない.

- NOTE フィールド中の用語は, 著者の記述に基づき収録されているため, 網羅性はない. また, 用語が統制されていないため, 使用する場合はトランケーションや同義語を利用して, 広く検索する. 必要に応じて, 基本索引も併用するとよい.

■ 収率や書誌情報などによる絞り込み

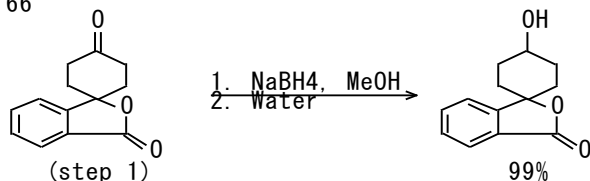
=> S L2 (L) 90<=FG. YD (A) SECONDARY ALCOHOL /FG. FORM ← 収率と /FG. FORM をリンクする際は (A),  
L5 540 L2 (L) (90<=FG. YD OR NONE /FG. YDT) それ以外の場合は (L) 演算子を使用

=> D SCAN

L5 540 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Preparation of N-aryl(sulfonyl)piperidine-3-carboxamides as 11β-hydroxysteroid dehydrogenase type 1 inhibitors and mineralocorticoid receptor antagonists.

RX (22) OF 66



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

=> S L5 AND P/DI ← CAplus の書誌情報をかけ合せる場合は AND 演算子を使用  
L6 90 L5 AND P/DI

=> D BIB FHIT

L6 ANSWER 1 OF 90 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 167:305477 CASREACT [Full-text](#)

TI Method for synthesizing ezetimibe intermediate(4S)-3-(5-(4-fluorophenyl)-5-hydroxypentanoyl)-4-phenyloxazolidin-2-one by enzymatic catalysis

IN He, Qinting; Wang, Bin; Liang, Guobin; Shu, Li; Cheng, Jiehong; Cheng, Qinglin; Tong, Fei

PA Jiangsu University of Technology, Peop. Rep. China

SO Faming Zhuanli Shenqing, 7pp.

CODEN: CNXXEV

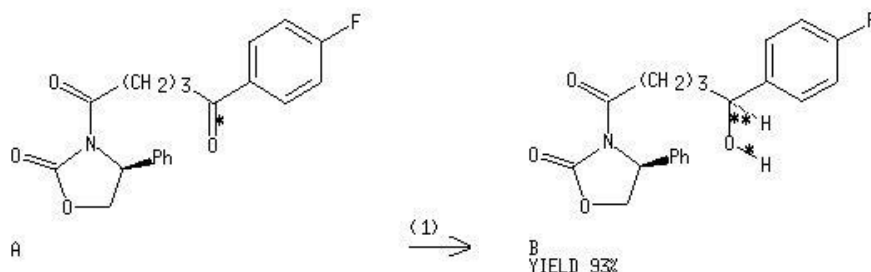
DT **Patent**

LA Chinese

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 107022587	A	20170808	CN 2017-10285381	20170427
PRAI	CN 2017-10285381		20170427		

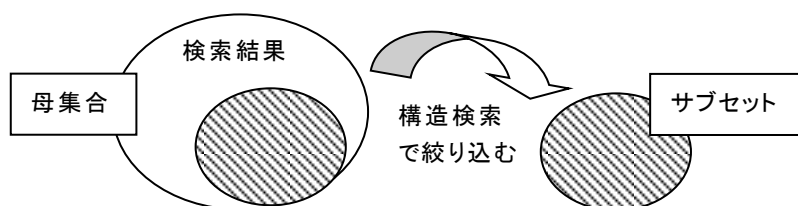
RX (1) OF 1 **A** ==> **B**



RX (1) RCT A **189028-93-1**  
RGT C 7786-30-3 MgCl2  
PRO B **189028-95-3**  
CAT 77106-95-7 Carbonyl reductase, 53-59-8 Coenzyme II  
SOL 67-63-0 Me2CHOH, 7732-18-5 Water  
CON 25 deg C, pH 8  
NTE biotransformation, enzymic, catalyst prepared and used, optimization study, optimized on reaction conditions, buffered solution used (phosphate)

### 参考 : サブセット検索

- サブセット検索は、回答集合の L 番号の中をさらに構造検索する手法である。



- ・ 効果的な利用法
  - 構造検索で得られた回答が多く、さらに反応質問式で限定して検索する場合。
  - 構造検索の結果、INCOMPLETE が表示された場合。
  - 官能基検索の結果を、特定の構造を含む反応に限定する場合。

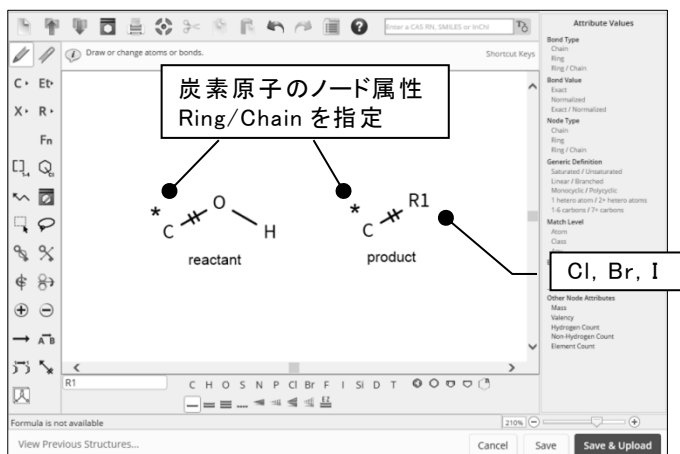
### ■ 入力方法

=> S L# 検索タイプ SUB=L@ 検索範囲

検索対象範囲（母集合）を SUB=L@ で指定する  
これを入力しないと、全ファイル対象の検索になる

- ・ サブセット検索では、サンプル検索の場合も検索の範囲（SAM）の入力が必須。
- ・ 構造検索の結果をサブセット検索する場合は、必ずフルファイル検索の結果の L 番号を母集合に指定する。

- 検索例：下記のアルコールからハロゲン化物（塩素，臭素，ヨウ素）に変換する反応を検索（INCOMPLETE の回避方法として利用）



=> FILE CASREACT

:  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

:  
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE **\*\*INCOMPLETE\*\*** ← INCOMPLETE になった  
BATCH **\*\*COMPLETE\*\***

PROJECTED VERIFICATIONS: 16288093 TO 16386347  
PROJECTED ANSWERS: 86988 TO 94842

L2 38 SEA SSS SAM L1 ( 563 REACTIONS)

=> S ALCOHOLS/FG.RXN (S) HALIDES/FG.FORM ← 母集合を作成（ここでは官能基検索を実行）  
L3 65788 ALCOHOLS/FG.RXN (S) HALIDES/FG.FORM

=> S L1 SUB=L3 SAM ← L3 を母集合としたサブセット検索（サンプル検索）

PROJECTIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): ONLINE **\*\*COMPLETE\*\***  
PROJECTED VERIFICATIONS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 406179 TO 423421  
PROJECTED ANSWERS (WITHIN SPECIFIED SUBSET): 46362 TO 52226

L4 50 SEA SUB=L3 SSS SAM L1 ( 228 REACTIONS)

=> S L1 SUB=L3 FUL ← サブセット検索のフルファイル検索

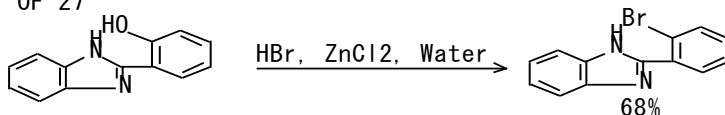
:  
L5 48936 SEA SUB=L3 SSS FUL L1 (269450 REACTIONS)

=> D SCAN

L5 48936 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

T1 Synthesis, characterization and biological evaluation of  
N-(2-(1-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)-substituted benzamines

RX(2) OF 27



NOTE: product formed after overnight in the refrigerator

:



## 主な検索フィールド

### ■ CASREACT ファイルの主な検索フィールド一覧

		検索フィールドなど	内容
文献情報	CAplus/CA ファイルの全フィールド (引用・被引用情報, CAS RN®, CAS ロール, 特許分類, 対応特許情報除く)		
		/BI (デフォルト)	基本索引 (反応要約中の CAS RN®, 標題, 抄録, 補遺語, 索引語, 反応情報中の単語)
反応情報		/NS /NTE /YD NONE/YDT	反応のステップ数 反応注記 収率 収率データなし
	CASRN検索	/RCT /RGT /RRT /PRO /NPRO /CAT /SOL	反応物 試薬 反応物または試薬 (/RCT, RGT) 生成物 生成物以外の物質 (/RCT, /RGT, /SOL, /CAT) 触媒 溶媒
	構造検索	ロール	反応物 試薬 生成物 反応物/試薬 任意のロール (ロール指定せず)
		反応部位	結合が完全に変化 結合が部分的に変化 結合が完全または部分的に変化 結合は変化しない 反応部位は特に指定しない
		マッピング	反応物と生成物中の対応する原子の指定
官能基検索	/FG.RXN /FG.FORM /FG.NON /FG.RCT /FG.PRO /FG.RGT /FG /FG.YD NONE/FG.YDT	反応した官能基 生成した官能基 反応しない官能基 反応物中の官能基 生成物中の官能基 試薬中の官能基 官能基一般 (/FG.PRO, /FG.RGT, /FG.RCT) 官能基-収率 官能基-収率データなし	

	構造検索	CAS RN®	REGISTRY からの クロスオーバー検索	官能基検索
反応物	○	○	○	○
生成物	○	○	○	○
試薬	○	○	○	○
触媒	×	△*	△*	×
溶媒	×	△*	△*	×

\* 遡及追加されたレコードの一部は、触媒と溶媒の CAS RN® の収録が不完全



## まとめ

- ・ CASREACT ファイルでは, CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) 検索, 反応質問式による構造検索, 官能基検索を行って, 反応を情報検索できる.
- CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) 検索では, 反応物・生成物に加え, 試薬, 触媒, 溶媒を指定した検索ができる.
- 複数の条件を掛け合わせる際は, 適切な近接演算子を使用する.



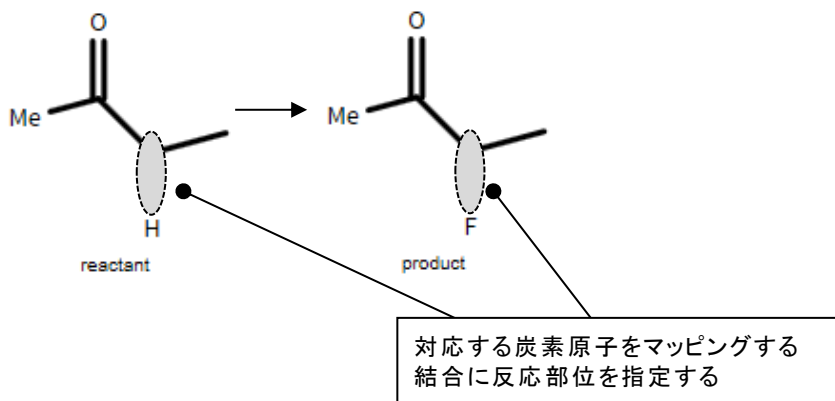
## 練習問題

1. 2-ニトロトルエン (CAS RN<sup>®</sup> 88-72-2) から 2,2'-ジニトロジベンジル (16968-19-7) を合成する反応を検索する.

【ヒント】 CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) にロールを指定して検索  
(反応物/試薬は /RRT, 生成物は /PRO).

回答は P. 81

2. 下図のフッ素化の反応を検索し, 下記①②の条件で絞り込む.



【作図のヒント】 反応ロール, 反応サイト, 反応部位を指定する.

- ① 収率 80 % 以上もしくは収率情報のない反応に限定
  - ② 特許に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する.

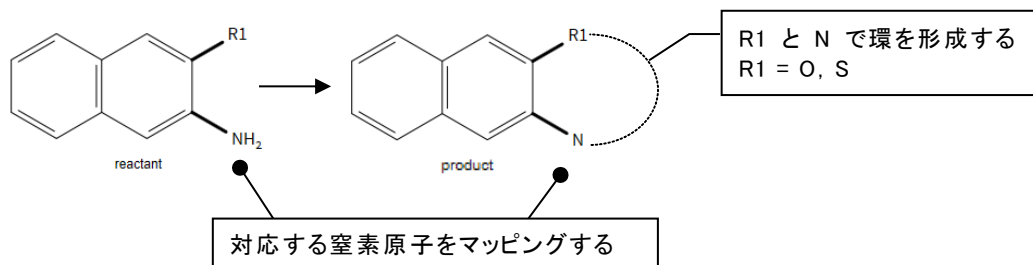
【ヒント】 ①, ② の限定の際, 演算子に注意する.

回答は P. 82

3. 下記の環化反応を検索し、下記の条件で絞り込む。

【作図のヒント】 環を形成する結合の属性を、「Ring」に変更する。  
マッピングは、R グループや可変原子には指定できない。

- ① Verification が不完全な回答を含む場合、それを除く (L 番号/COM)。
  - ② 触媒反応に限定
  - ③ 1 段階反応に限定
- 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する。



【ヒント】 ②, ③ の限定の際、演算子に注意する。

回答は P. 83

4. ニトリルオキシドから 1,2-C<sub>3</sub>NO 環を合成する反応を検索し、下記の条件で絞り込む。

- ① 収率 80 % 以上の反応に限定
- ② 1 段階反応に限定

【ヒント】 官能基検索を収率とかけ合わせる際は (L) 演算子を用いる。  
反応ステップ数とかけ合わせる際は (L) 演算子を用いる。

回答は P. 84



## *C CAS FILES* の反応情報検索

反応情報を網羅的に検索したい場合は, CASREACT ファイルに加えて CAplus ファイルでも検索を行います.



## CAS FILES を使った網羅的な反応情報検索

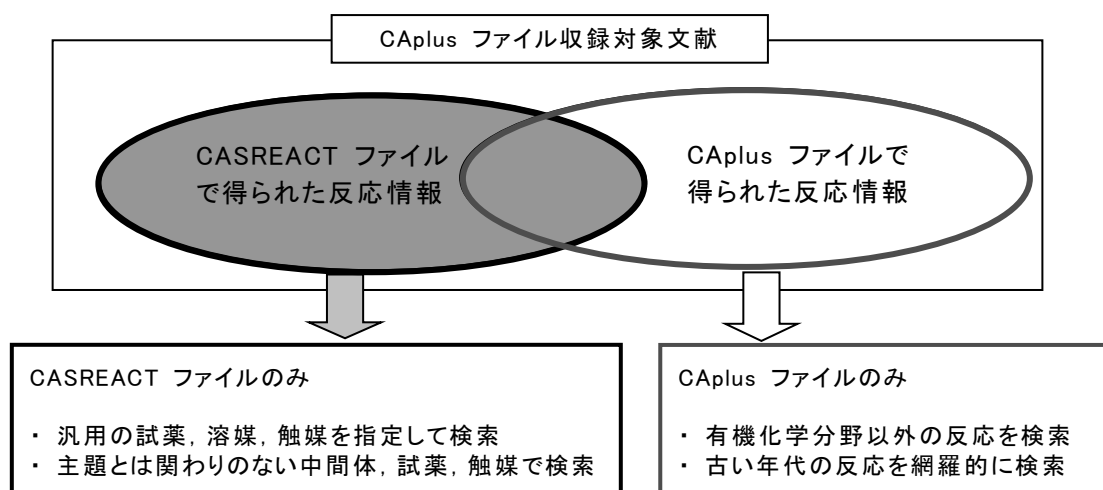
## ■ CAplus ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較

(2018 年 8 月現在)

項目	CASREACT	CAplus
収録年	1840 年以降	1808 年以降 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているのは 1907 年以降)
収録数	162 万件 (レコード数) 9,410 万件 (反応数)	707 万件 (合成の CAS ロール (PREP) が付与されているレコード数)
収録文献	CA に収録されているレコードの一部	CA 収録対象の化学および化学周辺分野
索引方針	合成的に意義のある反応を選択 (単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない)	文献の主題や発明の新規性/進歩性に 関連する物質
特徴	<ul style="list-style-type: none"> <li>すべての反応関与物質を収録する。</li> <li>収率情報も収録する。</li> <li>反応関与物質や収率情報をリンクして精密な反応検索ができる。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>無機化合物やポリマーを含めて幅広く合成文献を検索できる。</li> <li>古い年代の反応情報も検索できる。</li> <li>同一反応中に限定した検索はできない。</li> <li>汎用の試薬, 溶媒, 触媒は索引されない。</li> <li>収率情報は収録されない。</li> </ul>

## ■ CAplus ファイルと CASREACT ファイルの検索で得られる情報の違い

- ・ CASREACT ファイルの収録文献はすべて CAplus ファイルの収録文献に含まれている。
- ・ 化学物質の索引方針や検索機能が違うため、各ファイルで得られる情報は異なる。



- 反応情報を網羅的に検索したい場合は、CASREACT ファイルに加えて CAplus ファイルも検索する。

- ・ CASREACT ファイルは CAplus ファイルに比べて収録対象である文献は少ないが、索引方針が異なるので、CASREACT ファイルにのみ収録されている反応情報がある。
- ・ CAplus ファイルでは、CASREACT ファイルの収録対象外の分野の反応情報や CAS 由来の古い年代の文献情報も含めて幅広く検索できる。

- CAplus ファイルの反応情報検索

=> S L#/P                      生成物に限定

=> S L#/CAS ロール              生成物以外の役割で限定

\* L# : REGISTRY ファイルの回答セット

- ・ 反応情報検索に用いる主な CAS ロール

ロール	内容	備考
/RACT	反応物または試薬	/RCT, /RGT を含む上位のスーパーロール
	/RCT	反応物 (Reactant)
	/RGT	試薬 (Reagent)
/PREP (/P)	製造	スーパーロール (以下の /BMF ~ /SPN を含む) 1907 年以降のレコードに付与
	/BMF	生化学的工業生産
	/BPN	生化学的合成
	/BYP	副生成物 (By-product)
	/IMF	化学的工業生産
	/PUR	精製
	/SPN	化学合成
/CAT	触媒 (Catalyst)	1967 年以降のレコードに付与

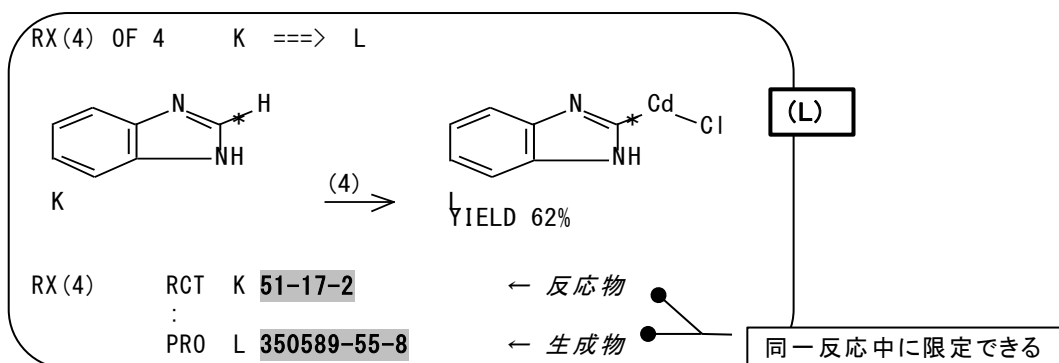
- CAS ロールで限定すると、自動的に付与年代以降に限定される。



- ・ 反応物と生成物は AND 演算子で組み合わせる。
  - CAplus ファイルでは、同一反応中という限定ができないため、回答にノイズが含まれる場合がある。
  - 例 : CAplus ファイル AN 2001:361761 (DN 135:122572) および  
CASREACT ファイル AN 135:122572 の索引 (抜粋)

IT <b>51-17-2</b> , Benzimidazole 106-40-1, 4-Bromoaniline <span style="float: right; border: 1px solid black; padding: 2px;">反応物</span> 120-72-9, Indole, reactions RL: <b>RCT</b> (Reactant); <b>RACT</b> (Reactant or reagent) (metalation reaction with cadmium trifluoroacetate)	} <span style="border: 1px solid black; padding: 2px;">AND</span>
IT 350589-48-9P 350589-50-3P 350589-52-5P <span style="float: right; border: 1px solid black; padding: 2px;">生成物</span> <b>350589-55-8P</b> RL: <b>SPN</b> (Synthetic preparation); <b>PREP</b> (Preparation) (preparation of)	

同一反応中に限定できない



■ CAplus ファイル, CASREACT ファイルの回答表示

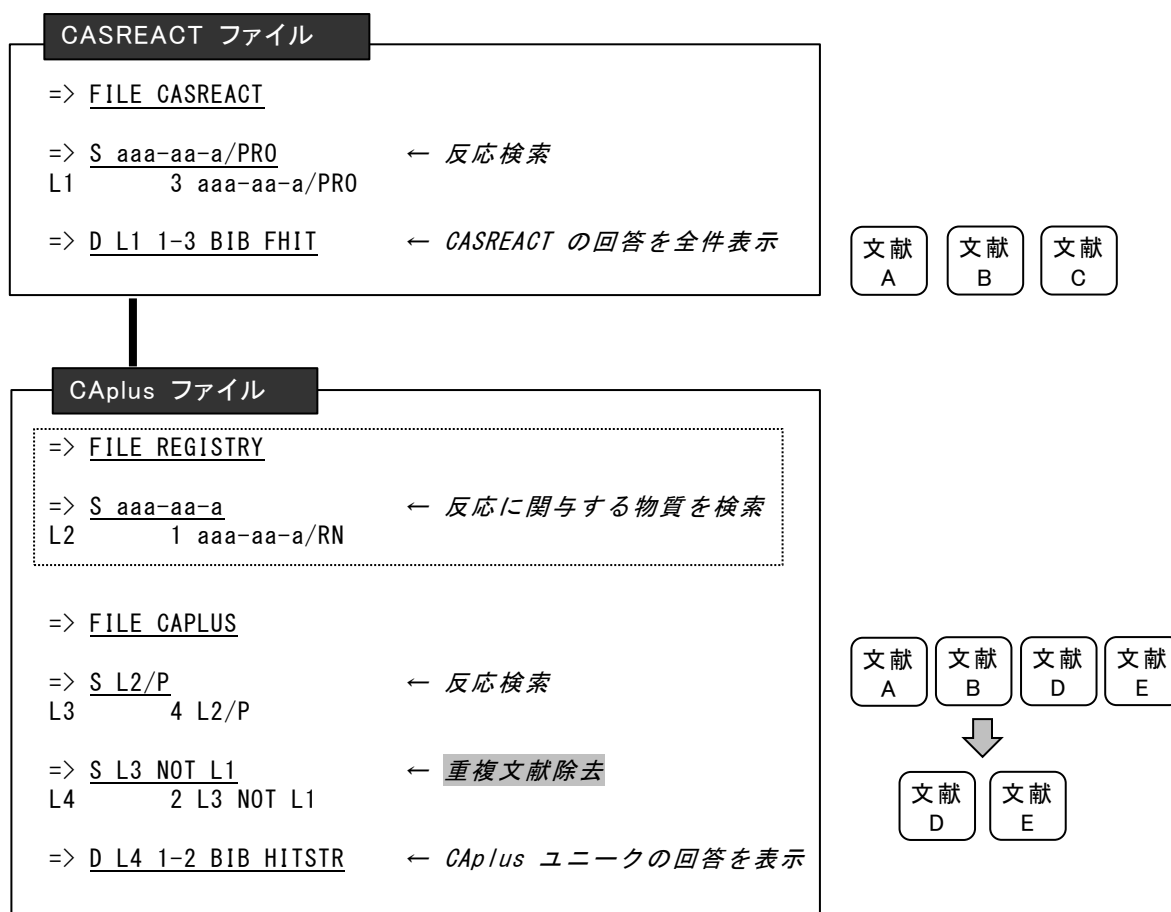
- ・ CAplus ファイルの回答と CASREACT ファイルの回答に同じ文献が含まれることもある。
  - <方法 1> CASREACT ファイルで全件表示した後, CAplus ファイルで重複を除いて表示
  - <方法 2> CAplus ファイルにすべての回答をまとめてから表示

■ <方法 1> CASREACT ファイルで全件表示した後, CAplus ファイルで重複を除いて表示

- ・ L 番号同士を NOT 演算することにより, CAplus ファイルの回答から CASREACT ファイルの回答を除くことができる.
- ・ CASREACT ファイルを優先して表示すると, 反応の詳細情報を手早く確認できる.  
また, CASREACT ファイルでは同一反応内に限定した検索が可能.
- ・ L 番号を用いたクロスオーバー検索
  - CASREACT, CAplus/CA ファイル間では CA 抄録番号 (DN) をキーにしたクロスオーバー検索が自動的に実行されるため, 互いの回答集合を簡単に再現できる.
  - ただし, CAplus ファイルから CASREACT ファイルへの L 番号を用いたクロスオーバー検索はできない.



・ 検索の流れ



■ 検索例 : イソプロチオラン (CAS RN® 50512-35-1) の合成反応を検索する.

- ・ CASREACT ファイルで検索し, 全件表示する.
- ・ CPlus ファイルで検索し, CASREACT ファイルで得られた回答を除いて表示する

CASREACT ファイルの反応検索

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

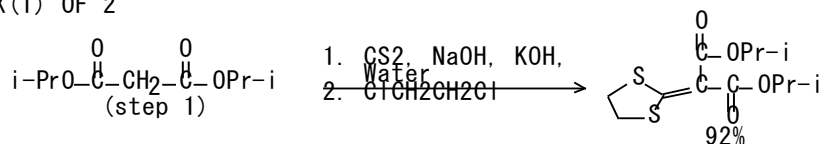
=> S 50512-35-1/PRO ← 生成物の CAS RN® で検索  
L1 3 50512-35-1/PRO

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

L1 3 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI New technologies for production process of isoprothiolane

RX(1) OF 2



NOTE: optimization study, optimized on catalyst, stoichiometry, temperature and reaction time, chloro compound used as catalyst in stage 2, phase transfer catalysis in stage 2

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

=> D BIB FHIT 1-3 ← BIB FHIT 表示形式で書誌情報と反応情報を表示

L1 ANSWER 1 OF 3 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 155:300945 CASREACT Full-text

TI Process for preparation of isoprothiolane

IN Li, Jirui; Jiao, Xingzhong; Yu, Lianying; Yan, Xunlong; He, Shaoping; Shi, Shaojun

PA Hunan Chemical Vocational Technology College, Peop. Rep. China

SO Faming Zhuanli Shenqing, 6pp.

CODEN: CNXXEV

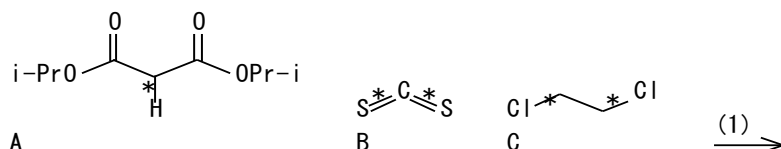
DT Patent

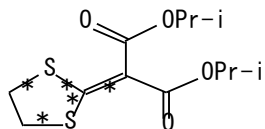
LA Chinese

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 102146072	A	20110810	CN 2011-10056903	20110310
	CN 102146072	B	20130605		
PRAI	CN 2011-10056903		20110310		
OS	MARPAT 155:300945				

RX(1) OF 1 A + B + C ==> **D**





D  
YIELD 92%

RX(1) RCT A 13195-64-7, B 75-15-0

STAGE(1)

RGT E 1310-58-3 KOH  
SOL 7732-18-5 Water  
CON SUBSTAGE(1) 35 deg C  
SUBSTAGE(2) 35 minutes, 35 deg C

STAGE(2)

RGT C 107-06-2  
CAT 1124-64-7 Pyridinium, 1-butyl-, chloride (1:1)  
CON 1.5 hours, 75 deg C

PRO D **50512-35-1**

← 反応物

NTE optimization study, optimized on reaction time, temperature, catalyst, reagent

:

CAplus ファイルの反応検索 (REGISTRY → CAplus ファイルのクロスオーバー検索)

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=> S 50512-35-1

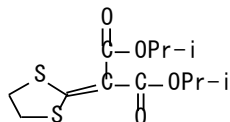
← CAS RN® で検索

L2 1 50512-35-1  
(50512-35-1/RN)

<表示は任意>

=> D

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
RN **50512-35-1** REGISTRY  
ED Entered STN: 16 Nov 1984  
CN Propanedioic acid, 2-(1,3-dithiolan-2-ylidene)-, 1,3-bis(1-methylethyl) ester (CA INDEX NAME)  
OTHER CA INDEX NAMES:  
CN Propanedioic acid, 1,3-dithiolan-2-ylidene-, bis(1-methylethyl) ester (9CI)  
OTHER NAMES:  
:  
CN Isoprothiolane  
:  
MF C12 H18 O4 S2  
:



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

1558 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
339 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA  
1578 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

- => FILE CAPLUS ← *CAplus* ファイルに入る
- => S L2/P ← *REGISTRY* ファイルの *L* 番号/*P* で製造に関する文献を検索  
L3 28 L2/P
- => S L3 NOT L1 ← *CASREACT* ファイルで得られた回答 (*L1*) を除く  
L4 25 L3 NOT L1
- => D BIB HITSTR 1-25 ← *BIB HITSTR* 表示形式で書誌情報とヒットした化合物を確認

L4 ANSWER 1 OF 25 CAPLUS COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 PatentPak PDF | PatentPak PDF+ | PatentPak Interactive  
 AN 2017:1243683 CAPLUS Full-text  
 DN 167:368349  
 TI Thiadiazolyl oxime ether methoxy acrylate derivative, synthesis method and application thereof  
 TIJP チアジアゾリルオキシムエーテルメトキシアクリレート誘導体, 合成法. その応用 [機械翻訳]  
 IN Fan, Zhijin; Chen, Lai; Zhang, Zhiming; Zhang, Nailou; Guo, Xiaofeng; Zhu, Yujie; Qian, Xiaolin; Ma, Liuyong; Wang, Haixia; Xu, Jinghua; Song, Yinqi; Liang, Fuqi; Tian, Haifeng; Yu, Maoxiang  
 PA Nankai University, Peop. Rep. China  
 SO Faming Zhuanli Shenqing, 21pp.  
 CODEN: CNXXEV  
 DT Patent  
 LA Chinese  
 FAN. CNT 1  
 PPPI

PATENT NO.	KIND	DATE	LANGUAGE	PatentPak
CN 106995420	A	20170801	Chinese	PDF   PDF+   Interactive
WO 2017129121	A1	20170803	Chinese	PDF

PI

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
CN 106995420	A	20170801	CN 2016-10185961	20160325
WO 2017129121	A1	20170803	WO 2017-CN72554	20170125

W: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY,  
 :

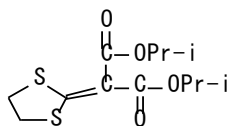
PRAI CN 2016-10058307 A 20160126  
 CN 2016-10185961 A 20160325

OS MARPAT 167:368349

IT **50512-35-1P**  
 RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (preparation of thiadiazolyl oxime ether methoxy acrylate derivs and their application as insecticide, acaricide, antimicrobial agent and anti-plant virus agent)

RN 50512-35-1 CAPLUS

CN Propanedioic acid, 2-(1,3-dithiolan-2-ylidene)-, 1,3-bis(1-methylethyl) ester (CA INDEX NAME)



:

L4 ANSWER 25 OF 25 CAPLUS COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 AN 1974:14935 CAPLUS Full-text  
 DN 80:14935  
 OREF 80:2509a,2512a  
 TI Fungicidal cyclic sulfides  
 IN Taninaka, Kuniaki; Kurono, Hitoshi; Mine, Seizo; Hirano, Akira; Tanaka, Hiroshi  
 PA Nihon Nohyaku Co., Ltd.  
 SO Ger. Offen., 41 pp.  
 CODEN: GWXXBX  
 DT Patent  
 LA German  
 FAN. CNT 2  
 PI

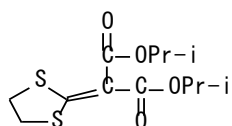
PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
DE 2316921	A1	19731025	DE 1973-2316921	19730404
DE 2316921	B2	19751120		
DE 2316921	C3	19760701		
JP 48099110	A	19731215	JP 1972-33702	19720404
JP 51017536	B	19760603		
US 3876663	A	19750408	US 1973-345319	19730327
GB 1425532	A	19760218	GB 1973-15995	19730403
GB 1425533	A	19760218	GB 1974-44891	19730403
CH 581649	A5	19761115	CH 1973-4732	19730403
CH 585509	A5	19770315	CH 1976-7934	19730403
NL 7304673	A	19731008	NL 1973-4673	19730404
NL 159383	B	19790215		
FR 2179097	A1	19731116	FR 1973-12108	19730404
FR 2213285	A1	19740802	FR 1973-40480	19731114
PRAI JP 1972-33702	A	19720404		

IT **50512-35-1P**

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (preparation of)

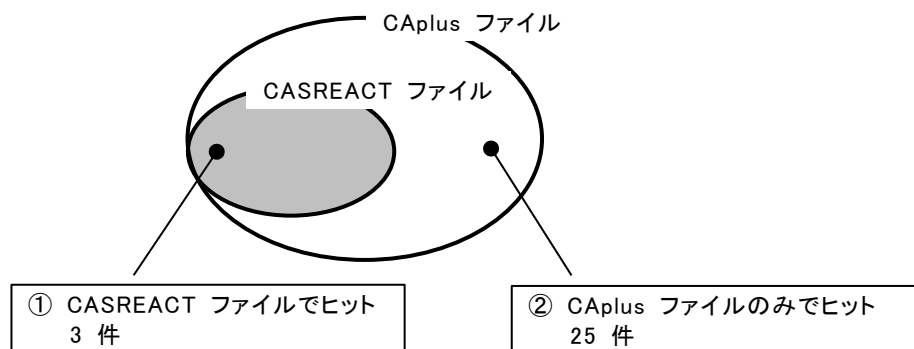
RN 50512-35-1 CAPLUS

CN Propanedioic acid, 2-(1,3-dithiolan-2-ylidene)-, 1,3-bis(1-methylethyl) ester (CA INDEX NAME)



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

ヒット件数のまとめ



■ <方法 2> CPlus ファイルにすべての回答をまとめてから表示

- ・ CASREACT ファイルでは、下記のフィールドは検索できない。これらの情報から絞り込みを行う場合は、CPlus ファイルにクロスオーバーしてから検索する。

- 対応特許情報（ベーシック特許以外の /PD, /PY, /PN, /AD, /AY, /AP など）
- IT フィールド中の CAS 登録番号（CAS RN<sup>®</sup>）と CAS ロール（/IT）
- 特許分類（/IPC, /CPC, /ECLA, /USC など）
- 引用情報・被引用情報（/REN, /OSC.G など）

- ・ CASREACT ファイルでは検索できないフィールド

AN 132:222457 CASREACT Full-text  
 TI Photochemical process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane  
 IN Ollivier, Jean; Drutel, Damien  
 PA Elf Atochem S.A., Fr.  
 :

FAN.CNT 1

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE	対応特許
EP 989118	A1	20000329	EP 1999-402108	19990824	
EP 989118	B1	20011024			
R: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IT, LI, LU, NL, SE, MC, PT, IE, SI, LT, LV, FI, RO					
US 6194570	B1	20010227	US 1999-400996	19990921	

PRAI FR 1998-11734 19980921  
 AB Lauryl lactam, useful as a monomer (no data), is prepared in high yield and selectivity by the photochem. nitrosation of cyclododecane with a nitrosation agent  
 :

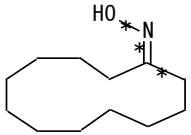
IPC1 C07D0201-04 [ICM,6]  
 IPCR C07D0227-02 [I]; C07D0201-04 [I] 特許分類  
 CC 27-21 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))  
 Section cross-reference(s): 35, 74  
 ST lauryl lactam prepn cyclododecane reaction; photochem nitrosation  
 :

IT Beckmann rearrangement  
 (of cyclododecanone oxime in the presence of methanesulfonic acid for the preparation of lauryl lactam)  
 :

IT 75-75-2, Methanesulfonic acid CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) とロール  
 RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)  
 (photochem. process for the preparation of lauryl lactam from cyclododecane)  
 :

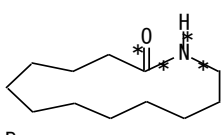
RE.CNT 2 THERE ARE 2 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 RE  
 (1) Ato Chimie Sa; FR 2417501 A 1979 CAPLUS  
 (2) Montecatini, S; FR 1335822 A 1963 CAPLUS

RX(1) OF 3 ... A ==> B 引用日期



A

(1) →

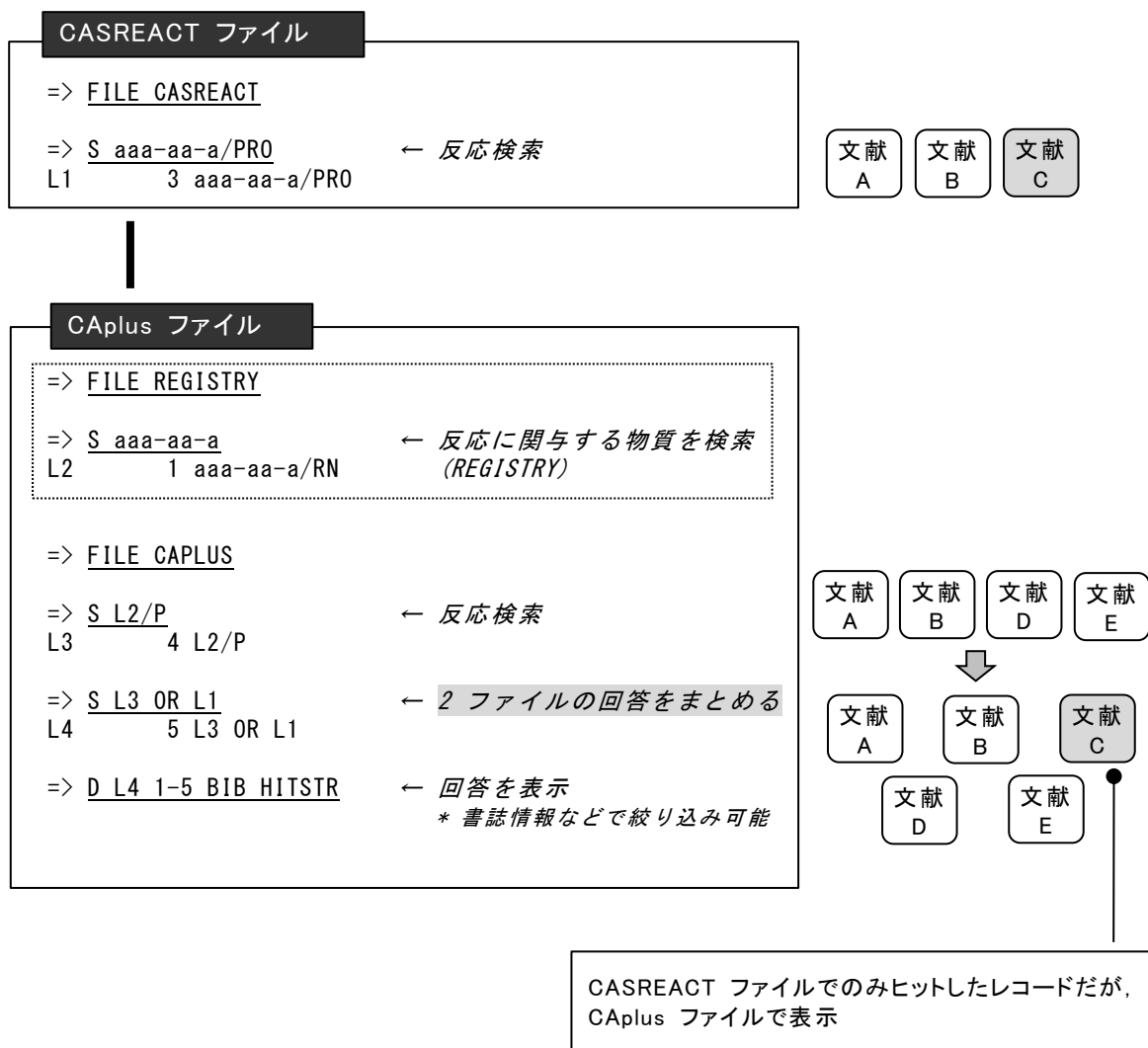


B

YIELD 99%

RX(1) RCT A 946-89-4  
 RGT C 2696-92-6 NOCl, D 7647-01-0 HCl  
 PRO B 947-04-6  
 :

・ 検索の流れ





- 検索例 : 3-クロロニトロベンゼン (121-73-3) から 3-クロロアニリン (108-42-9) を合成する反応のうち, IPC (国際特許分類) B01J (物理的または化学的方法または装置一般; 化学的または物理的方法) が付与されている特許を検索する.

- ・ CASREACT ファイル, CAplus ファイルで合成情報を検索する.
- ・ CASREACT ファイルでは特許分類の検索ができないため, CAplus ファイルに回答集合をクロスオーバーし, CAplus ファイルで得られた回答とまとめた後, 特許分類で限定する.

#### CASREACT ファイルの反応検索

- => FILE CASREACT
- => S 121-73-3/RCT ← 反応物を検索  
L1 689 121-73-3/RCT
- => S 108-42-9/PRO ← 生成物を検索  
L2 373 108-42-9/PRO
- => S L1 (L) L2 ← 同一反応中に限定  
L3 293 L1 (L) L2

#### CAplus ファイルの反応検索 (REGISTRY → CAplus ファイルのクロスオーバー検索)

- => FILE REGISTRY
- => S 121-73-3 ← 反応物の CAS 登録番号 (CAS RN®) で検索  
L4 1 121-73-3
- => S 108-42-9 ← 生成物の CAS 登録番号 (CAS RN®) で検索  
L5 1 108-42-9
- => FILE CAPLUS
- => S L4/RCT ← 反応物に関する文献を検索  
L6 1104 L4/RCT
- => S L5/P ← 生成物に関する文献を検索  
L7 649 L5/P
- => S L6 AND L7 ← 同一反応中に限定できないため AND 演算  
L8 380 L6 AND L7

#### 反応検索結果の表示 (CAplus + CASREACT)

- => S L3 ← CASREACT ファイルの検索結果をクロスオーバー検索する  
L9 293 L3
- => S L8 OR L9 ← CASREACT ファイルの反応情報を合わせる  
L10 394 L8 OR L9
- => S L10 AND B01J/IPC ← IPC で検索する  
L11 39 L10 AND B01J/IPC

=> D BIB HITIND 1-39

← BIB HITIND 表示形式で表示する

L11 ANSWER 11 OF 39 CAPLUS COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
PatentPak PDF

① 両方でヒットしたレコード

AN 2014:713508 CAPLUS Full-textDN **160:636470**TI Solid hydrogenation catalysts, their in-situ preparation, and preparation  
of hydrogenated products of aromatic nitro compounds, aromatic nitriles,  
or phenols with them in supercritical carbon dioxide

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 2014076416	A	20140501	JP 2012-224617	20121009 <--
PRAI	JP 2012-224617		20121009		

OS CASREACT 160:636470

IPCI	B01J0029-74 [I]; C07C0209-36 [I]; C07C0211-46 [I]; C01B0039-48 [I]; C07B0061-00 [N]				<--
------	--	--	--	--	-----

IPCR	B01J0029-74 [I]; C01B0039-48 [I]; C07B0061-00 [N]; C07C0209-36 [I]; C07C0211-46 [I]				<--
------	--	--	--	--	-----

CC 25-4 (Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds)

Section cross-reference(s): 21, 45, 49, 67

IT 88-73-3, o-Chloronitrobenzene 91-23-6, o-Nitroanisole 98-95-3,  
Nitrobenzene, reactions 100-00-5, p-Chloronitrobenzene 100-17-4,  
p-Nitroanisole **121-73-3**, m-Chloronitrobenzene 555-03-3,  
m-NitroanisoleRL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)(hydrogenation of aromatic nitro compds. with palladium or palladium oxide  
nanoparticle-supported boron-substituted mesoporous silica solid  
hydrogenation catalysts in supercrit. carbon dioxide)IT 62-53-3P, Aniline, preparation 90-04-0P, o-Aminoanisole 95-51-2P,  
o-Chloroaniline 104-94-9P, p-Aminoanisole 106-47-8P, p-Chloroaniline,  
preparation **108-42-9P**, m-Chloroaniline 536-90-3P,  
m-Aminoanisole

RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(hydrogenation of aromatic nitro compds. with palladium or palladium oxide  
nanoparticle-supported boron-substituted mesoporous silica solid  
hydrogenation catalysts in supercrit. carbon dioxide)

L11 ANSWER 21 OF 39 CAPLUS COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 2010:763769 CAPLUS Full-textDN **153:148675**

TI Method for preparing chloroaniline via catalytic hydrogenation

TIJIP 接触水素化を経由したクロロアニリンを調製するための方法 [機械翻訳]

IN Li, Bindong; Lv, Chunxu; Sun, Yu

PA Nanjing University of Science and Technology, Peop. Rep. China

SO Faming Zhuanli Shenqing, 5pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

LA Chinese

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 101735073	A	20100616	CN 2008-10236175	20081125 <--
PRAI	CN 2008-10236175		20081125		

OS CASREACT 153:148675

IPCI	C07C0211-52 [I]; C07C0209-36 [I]; B01J0023-755 [I]				<--
------	--	--	--	--	-----

IPCR	C07C0211-52 [I]; B01J0023-755 [I]; C07C0209-36 [I]				<--
------	--	--	--	--	-----

CC 45-4 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)

Section cross-reference(s): 25

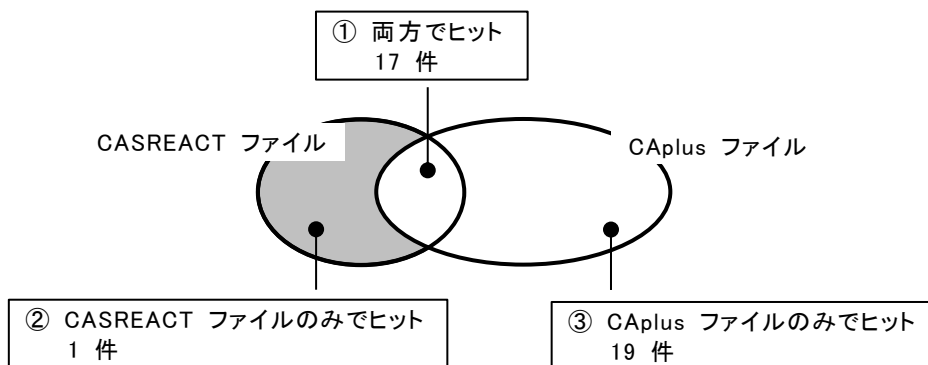
CASREACT ファイルからのクロスオーバー検索の回答は  
ヒットタームは DN であり, CAS 登録番号ではない  
そのため HITIND (IT フィールド) は表示されない

L11 ANSWER 37 OF 39 CAPLUS COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 AN 1976:523554 CAPLUS Full-text  
 DN 85:123554  
 OREF 85:19825a,19828a  
 TI Hydrogenation of aromatic nitro compounds and catalysts  
 PA Institute of Chemical Physics, Chernogolovka, USSR  
 SO Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 6 pp.  
 CODEN: JKXXAF  
 DT Patent  
 LA Japanese  
 FAN. CNT 1

③ CAplus ファイルのみで  
ヒットしたレコード

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	JP 50084537	A	19750708	JP 1973-132227	19731127 <--
	JP 55016412	B	19800501		
PRAI	JP 1973-132227	A	19731127		
IPCI	C07C0085-11; C07C0087-50; C07C0089-00; C07C0091-42; B01J0023-46				<--
IPCR	C07B0043-04 [I]; B01J0023-00 [I]; B01J0023-46 [I]; C07B0031-00 [I]; C07B0061-00 [I]; C07C0067-00 [I]; C07C0209-00 [I]; C07C0209-36 [I]; C07C0213-00 [I]; C07C0213-02 [I]; C07C0215-76 [I]; C07C0301-00 [I]; C07C0303-32 [I]; C07C0309-46 [I]				<--
CC	25-4 (Noncondensed Aromatic Compounds)				
IT	62-53-3P, preparation	95-51-2P	95-55-6P	95-76-1P	98-16-8P
	102-51-2P	104-94-9P	106-47-8P	106-49-0P	<b>108-42-9P</b>
	108-45-2P, preparation	123-30-8P	156-43-4P	527-20-8P	636-25-9P
	636-30-6P	2834-92-6P	7336-20-1P		
	RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation) (preparation of)				
IT	82-68-8	88-73-3	88-75-5	89-69-0	96-96-8
	reactions	99-54-7	99-65-0	99-99-0	100-00-5
	100-29-8	<b>121-73-3</b>	329-71-5	550-60-7	3709-43-1
	RL: <b>RCT (Reactant)</b> ; RACT (Reactant or reagent) (reduction of, catalysts for)				

### ヒット件数のまとめ





## まとめ

- ・ CASREACT ファイルと CAplus ファイルでは、収録年代や収録分野、索引方針の違いがある。反応情報を網羅的に検索したい場合は、両ファイルで検索するとよい。
- ・ 両ファイルで検索した場合は、重複文献を除いて表示する。



## 練習問題

5. CASREACT ファイルと CAplus ファイルで、6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索する。

### 【ヒント】

CASREACT ファイルで生成物 (/PRO) を指定して検索し、全件を BIB FHIT 表示形式で表示する。

REGISTRY ファイルで CAS 登録番号 (CAS RN®) から検索を行う。  
CAplus ファイルにクロスオーバーする際、合成文献に限定 (/P) する。  
CASREACT ファイルの回答との重複を除いた後、全件を BIB HITRN 表示形式で表示する。

回答は P. 85

## *D ReaxysFile* ファイル

ReaxysFile ファイルの反応情報検索についてご紹介します。



## 概要

- ReaxysFile ファイルは、化学物質同定情報、物性情報、反応情報を収録するデータベースである。

(2018 年 8 月現在)

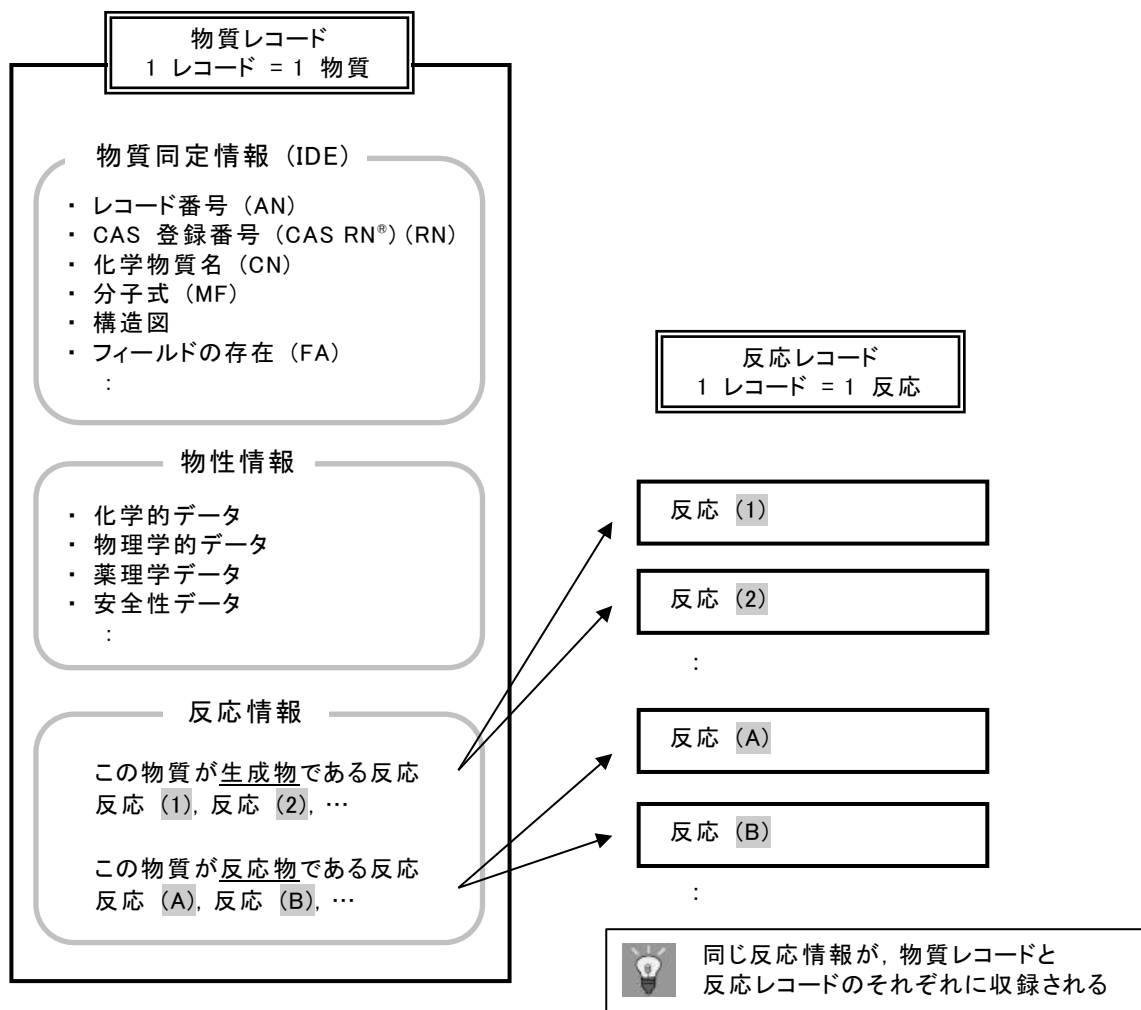
製作者	Elsevier Information Systems GmbH
収録物質	有機化合物, 無機化合物, 有機金属化合物 (ポリマーの収録は 2000 年以降)
収録内容	化学物質同定情報, 物性情報, 薬理学・生態学的情報, 反応情報 (一部, 実験項を含む), 出典情報
収録源	<ul style="list-style-type: none"> <li>・Friedrich Beilstein 発行の Handbook of Organic Chemistry (1771~1959 年)</li> <li>・Gmelin Handbook of Inorganic Chemistry (1817~1995 年)</li> <li>・1771 年以降の有機化学および無機化学分野の主要雑誌論文</li> <li>・1771-1960, 1976 年以降の特許 (言語, 発行機関, IPC により選択)</li> </ul>
レコード構成	物質単位, 反応単位 (物質レコード中の個々の反応情報を独立させた情報)
収録件数	物質 : 1,940 万件以上 反応 : 約 3,100 万件の一段階反応 (反応の出典 : 約 1580 万件の文献)
収録期間*	1771 年 ~
更新頻度*	不定期 (アラート不可)

\* 2018 年 8 月現在, Classic STN の ReaxysFile ファイルの収録期間は 1771 ~ 2011 年.  
更新再開は未定.

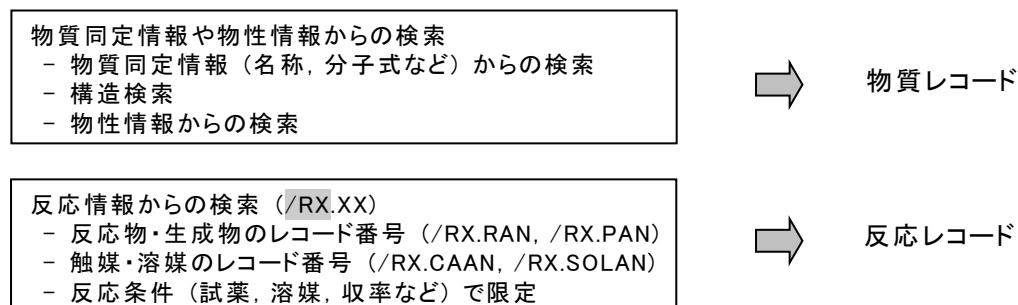
## レコード構成

### ■ レコード構成

- ReaxysFile ファイルには、物質レコード（物質単位）と反応レコード（反応単位）の 2 種類が収録されている。



- どちらのレコードが得られるかは、検索フィールドにより決まる。



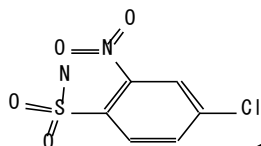


## レコード例

## ■ レコード例 (物質レコード, IDE 表示形式)

レコード番号	Accession Number (AN):	2124520
ベーシック優先 CAS RN®	Basic Pref. RN (BPR):	13852-81-8
CAS RN®	CAS Reg. No. (RN):	13852-81-8
化学物質名	Chemical Name (CN):	4-chloro-2-nitrobenzenesulfonamide, 4-chloro-2-nitro-benzenesulfonic acid amide, 4-Chlor-2-nitro-benzolsulfonsaeure-amid, 5-Chlor-2-sulfamoyl-1-nitrobenzol, 2-Nitro-4-chlor-benzolsulfonamid 4-Chloro-2-nitro-benzenesulfonamide
Autonom 名	Autonom Name (AUN):	4-Chloro-2-nitro-benzenesulfonamide
示性式	Lin. Struct. Formula (LSF):	C6H5ClN2O4S
分子式	Molec. Formula (MF):	C6 H5 Cl N2 O4 S
分子量	Formula Weight (FW):	236.636
化学物質タイプ	Compound Type (CTYPE):	isocyclic
標準 InChi Key	InChi Key: (INCHI):	QOQUXGKXVOXTH-UHFFFAOYSA-N
InChi Key	Alternate InChi Key: (AINCHI):	QOQUXGKXVOXTH-FSHFIPFOCC
関連マークシ構造番号の数	Markush Ref. Count (MARKREF):	0
データ入力日	Entry Date (DED):	1989/06/29
データ更新日	Update Date (DUPD):	2008/05/25

構造図



フィールドの存在 Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	5
AUN	Autonomname *1	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
CPD	Crystal Property Description	1
LB	Substance Label	5
MP	Melting Point	4
XREF	Crossfile Reference	1

物質  
同定  
情報・  
物性  
情報

反応情報の存在 This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	25
RX.RAN	Reactant AN	22
RX.PAN	Product AN	3

反  
応  
情  
報

\*1 Autonom (AUTomatic NOMenclature) 名はソフトウェアによって発生させた名称

## ■ レコード例 (物質レコード, FRX 表示形式)

Reaction:		反応 1
RX		
Reaction ID (.ID):	7305923	← 反応 ID
Reactant AN (.RAN):	1978605	← 反応物のレコード番号
Reactant (.RCT):	3-nitro-4-chlorobenzenesulphonyl chloride, ammonium carbonate ← 反応物	
Product AN (.PAN):	2124520	← 生成物のレコード番号
Product (.PRO):	4-chloro-2-nitrobenzenesulfonamide ← 生成物	
React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction ← 反応構造キーワード	
Record type (.RTYP):	full reaction, has preparation ← 反応タイプ	
No. of React. Details (.NVAR):	1 ← 反応詳細の数	
Preparation reactants (.BLB):	1978605, 2124520 ← 反応物・生成物レコード番号	
No. of References (.NUMREF):	1 ← 文献数	
Reaction Details:		
RX		
反応 1 の反応詳細		
Reaction RID (.RID):	7305923.1	← 反応詳細 ID
Reaction Classification (.CL):	Preparation ← 反応分類	
Number of R. steps (.STP):	1 ← 反応数	
Reference(s):	← 出典	
1. Riess, Monatshefte fuer Chemie, CODEN: MOCMB7, 50, <1928>, 266		
:		
Reaction:		反応 2
RX		
Reaction ID (.ID):	325259	← 反応 ID
Reactant AN (.RAN):	2124520	← 反応物のレコード番号
Reactant (.RCT):	4-chloro-2-nitrobenzenesulfonamide	
Product AN (.PAN):	611058	
Product (.PRO):	2-Amino-4-chlorobenzenesulfonamide	
React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction	
Record type (.RTYP):	full reaction, has preparation	
No. of React. Details (.NVAR):	5	
Preparation reactants (.BLB):	2124520, 61	この反応物と生成物の組み合わせの反応が 5 件収録されている
Det. React. reactants (.BLC):	2124520, 61	
No. of References (.NUMREF):	5	
Reaction Details:		
RX		
反応 2 の反応詳細 - 1		
Reaction RID (.RID):	325259.1	
Reaction Classification (.CL):	Preparation	
Yield (.YDT):	95 percent	
Reagent (.RGT):	hydrogen iodide	← 試薬
Time (.TIM):	2 ← 時間	
Temperature (.T):	90 Cel ← 温度	
Product AN (.PRAN):	611058 ← 生成物のレコード番号	
Reactant AN (.RCAN):	3587159 ← 試薬のレコード番号	
Number of R. steps (.STP):	1	
Yield numerical (.YDN):	95	
Product (.YPRO):	2-Amino-4-chlorobenzenesulfonamide	
Reference(s):	← 出典	
1. Kumar, J. S. Dileep; Ho, ManKit M.; Toyokuni, Tatsushi, Tetrahedron Letters, CODEN: TELEAY, 42(33), <2001>, 5601 - 5604		
:		
Reaction:		反応 2 の反応詳細 - 2
RX		
Reaction RID (.RID):	325259.2	
Reaction Classification (.CL):	Preparation	
Reagent (.RGT):	tin(II) chloride	
Reactant AN (.RCAN):	8127944	
Number of R. steps (.STP):	1	
Reference(s):	← 出典	
1. Logemann et al., Justus Liebigs Annalen der Chemie, CODEN: JLACBF, 623, <1959>, 157, 162		

該当物質が生成物である反応

該当物質が反応物である反応

## 物質レコードの検索方法

- ReaxysFile ファイルでは、以下の方法で物質レコードを検索できる。

(2018 年 8 月現在)

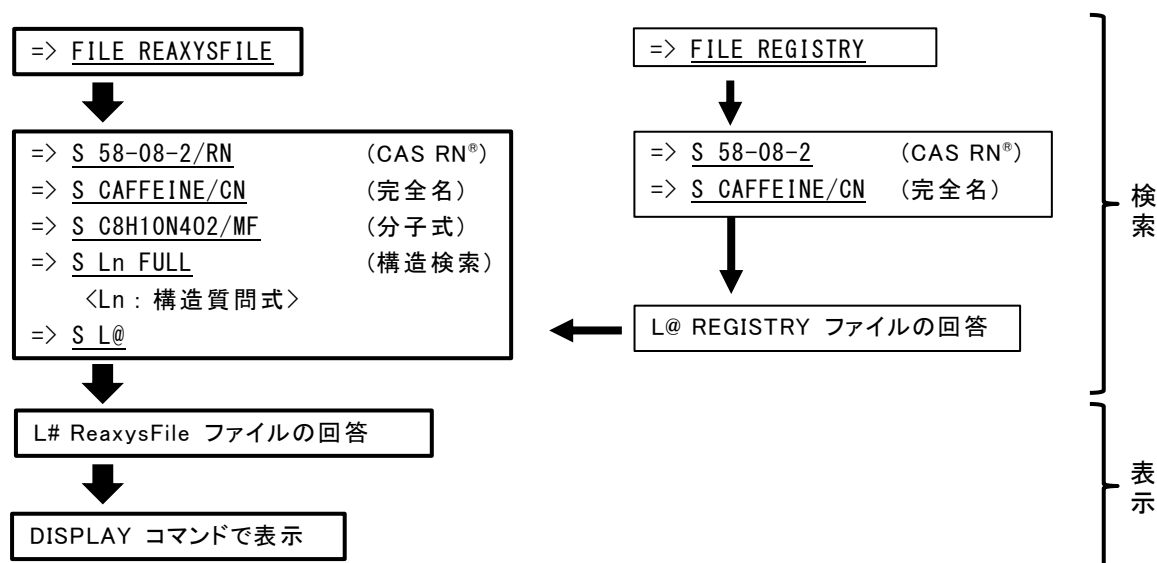
検索機能 (/検索フィールド)	ポイント
CAS RN® (/RN)	CAS 登録番号 (CAS RN®) の収録率は 35% であり、網羅的ではない*。
完全名称 (/CN) 部分名称 (/CNS)	化学物質名の収録はあまり網羅的ではなく、同義名の収録も少ない。 (化学物質名の収録率は 63%)
分子式 (/MF)	全レコードに分子式情報を収録 (Hill 方式)。 分子式関連フィールド (/ELS など) も利用可能。
構造	構造情報が収録されているレコードを検索できる (ポリマーや生体分子は構造情報が収録されていない)。また、部分構造検索も可能。

\* 1996 年以降、新規登録物質について CAS RN® の付与が中止された。

- ・ 上記の /RN, /CN, /CNS, /MF フィールドは基本索引 (/BI または なし) でも検索できるが、ReaxysFile ファイルの基本索引は多数のフィールドからの切り出し語で作成されているため、ノイズが多く含まれる可能性がある。そのため、個別のフィールドを指定した方がよい。

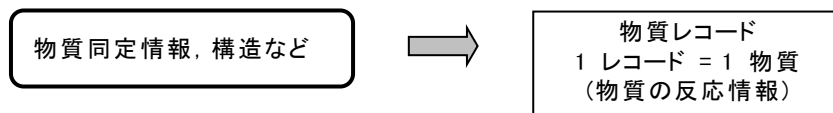
### ■ 物質レコードの検索・表示

- ・ ReaxysFile ファイルで名称や分子式などの辞書検索、構造検索などで特定の物質を検索する。
- ・ REGISTRY ファイルで得られた結果をクロスオーバー検索することもできる。
  - ReaxysFile ファイルでは CAS 登録番号 (CAS RN®) の収録率は低いため、L 番号を使った CAS 登録番号 (CAS RN®) によるクロスオーバー検索は網羅的ではない。



## 物質レコードからの反応情報の表示

### ■ ReaxysFile ファイルの物質レコードにおける反応情報の表示



- ・ 全データ表示と 50 データ表示が選択できる。
  - レコードによっては多数の反応が収録されており、全データ表示は長大になる場合がある。
- ・ 表示する前に反応情報の存在を確認したい場合は、検索して確認する。

種類	反応情報の存在の確認	表示形式 (全データ表示)	表示形式 (50 データまで)
全反応情報	=> <u>S RX/FA</u>	=> <u>D FRX</u>	=> <u>D RX</u>
該当物質が <b>反応物</b> である反応	=> <u>S RXREA/FA</u> (または <u>S REA/FA</u> )	=> <u>D FRXREA</u>	=> <u>D RXREA</u>
該当物質が <b>生成物</b> である反応	=> <u>S RXPRO/FA</u> (または <u>S PRE/FA</u> )	=> <u>D FRXPRO</u>	=> <u>D RXPRO</u>

### ■ 検索例 : ReaxysFile ファイルに 7-methoxyacetyl-5-hydroxy-1,3-benzoxathiol-2-one (CAS 登録番号 (CAS RN®) : 112450-16-5) の反応情報を表示する。

```

=> FILE REAXYSFILE          ← ReaxysFile ファイルに入る
=> S 112450-16-5/RN         ← CAS 登録番号 (CAS RN®) で検索
L1      1 112450-16-5/RN
=> D FRX                    ← すべての反応を表示
  
```

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2018 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:	
RX	反応 1
Reaction ID (.ID):	19464763
Reactant AN (.RAN):	5930746
Reactant (.RCT):	(3,6-Dioxo-cyclohexa-1,4-dienyl)-acetic acid methyl ester
Product AN (.PAN):	5953831
Product (.PRO):	7-methoxyacetyl-5-hydroxy-1,3-benzoxathiol-2-one
React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction
Record type (.RTYP):	full reaction, has multi-step
No. of React. Details (.NVAR):	1
Det. React. reactants (.BLC):	5930746, 5953831
No. of References (.NUMREF):	1

Reaction Details:	
RX	
Reaction RID (.RID):	19464763.1
Reaction Classification (.CL):	Multi-step reaction
Reagent (.RGT):	hydrogenchloride
Reactant AN (.RGAN):	1098214
Number of R. steps (.STP):	2
Multistep details (.MTEXT):	1: HCl, 2: Heating
Reference(s):	
	1. Al-Hamdany, R.; Al-Rawi, J. M.; Ahmed, B. A.; Al-Shahiry, K. F., Journal fuer Praktische Chemie (Leipzig), CODEN: JPCEAO, 329(2), <1987>, 337 - 342

Reaction:		反応 2
RX		
Reaction ID (.ID):	19453897	
Reactant AN (.RAN):	3267989	
Reactant (.RCT):	methyl 2,5-dihydroxyphenylacetate	
Product AN (.PAN):	5953831	
Product (.PRO):	7-methoxyacetyl-5-hydroxy-1,3-benzoxathiol-2-one	
React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction	
Record type (.RTYP):	full reaction, has multi-step	
No. of React. Details (.NVAR):	1	
Det. React. reactants (.BLC):	3267989, 5953831	
No. of References (.NUMREF):	1	
Reaction Details:		
RX		
Reaction RID (.RID):	19453897.1	
Reaction Classification (.CL):	Multi-step reaction	
Reagent (.RGT):	hydrogenchloride, sodium sulfate, silver(I) oxide	
Solvent (.SOL):	diethyl ether	
Reactant AN (.RGAN):	1098214, 5136723, 8129999	
Solvent AN (.SOLAN):	1696894	
Number of R. steps (.STP):	3	
Multistep details (.MTEXT):	1: 85 percent / Ag2O, Na2SO4 / diethyl ether / 3 h / Ambient temperature, 2: HCl, 3: Heating	
Reference(s):		
	1. Al-Hamdany, R.; Al-Rawi, J. M.; Ahmed, B. A.; Al-Shahiry, K. F., Journal fuer Praktische Chemie (Leipzig), CODEN: JPCEAO, 329(2), <1987>, 337 - 342	
	:	

- 表示する前に反応情報の存在を確認する場合は、/FA で検索して確認する。

=> S 112450-16-5/RN  
L1 1 112450-16-5/RN

=> S L1 AND RX/FA  
L2 1 L1 AND RX/FA

← 反応情報の存在を確認

=> S L1 AND RXREA/FA  
L3 0 L1 AND RXREA/FA

← 反応物である反応の存在を確認  
\* 収録なし

=> S L1 AND RXPRO/FA  
L4 1 L1 AND RXPRO/FA

← 生成物である反応の存在を確認  
\* 収録あり

## 参考：複数のレコードが得られる場合の検索方法

■ ReaxysFile ファイルで、化学物質名称や、CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>)、構造などで検索をした際、目的の化学物質がひとつであっても、複数の回答が得られる場合がある。

- ・ ReaxysFile ファイルでは、化学物質の構造情報 (結合表) によって照合した CAS RN<sup>®</sup> が収録されている。同じ構造情報を持つ立体異性体、ラジカル、イオン、同位体化合物には、同じ CAS RN<sup>®</sup> が付与され、CAS RN<sup>®</sup> 検索で複数の回答が得られる場合がある。
  - 結合表による CAS RN<sup>®</sup> の照合は、1996 年以降中止されたが、文献や特許に CAS RN<sup>®</sup> の記載がある場合には収録される。

■ SELECT コマンドでヒットした物質の化学物質名や分子式、レコード番号を抽出して確認できる。

## =&gt; SEL L 番号 回答番号 抽出フィールド

- ・ SELECT コマンドは、回答集合から特定の情報を抽出するのに用いる。
- ・ L 番号、回答番号を省略した場合は、直前の L 番号の全回答から抽出される。

■ 検索例：CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) 100-17-4 の物質の合成反応を検索する。

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

=> S 100-17-4/RN ← CAS RN<sup>®</sup> で検索  
L1 2 100-17-4/RN

=> S L1 AND RXPRO/FA ← 物質が生成物である反応情報の存在を確認  
L2 2 L1 AND RXPRO/FA

2 件ヒット

=> SEL CN MF LSF ← 化学物質名、分子式、示性式 (LSF) を抽出  
E1 THROUGH E12 ASSIGNED

=> D SEL ← 抽出したタームを表示

E1	2	C7 H7 N O3 /MF
E2	2	1-METHOXY-4-NITRO-BENZENE/CN
E3	2	1-METHOXY-4-NITROBENZENE/CN
E4	1	CH3OC6H4NO2/LSF
E5	1	C7H7NO3 (1-)/LSF
E6	1	P-METHOXYNITROBENZENE/CN
E7	1	P-NITROANISOLE ANION RADICAL/CN
E8	1	P-NITROANISOLE/CN
E9	1	PNAS/CN
E10	1	4-METHOXYNITROBENZENE ANION RADICAL/CN
E11	1	4-NITRO-ANISOLE/CN
E12	1	4-NITROANISOLE/CN

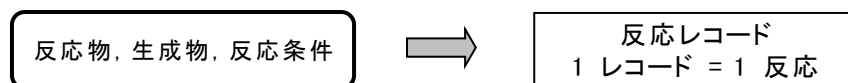
抽出されたタームのうち、目的の化合物ではないものを探す

=> S L2 NOT E5, E7, E10 ← 目的の化合物ではない情報を除く  
L3 1 L2 NOT ...

1 件に限定

## 参考：反応レコードの検索

- 反応物と生成物の両方を指定した検索や、試薬、触媒、反応条件などで限定したい場合には、反応レコードを検索する。



- ・ 名称の収録率が低いため、反応物、生成物を指定して検索する場合には、各物質のレコード番号 (AN) で検索する。

=> S 反応物のレコード番号/RX.RAN AND 生成物のレコード番号/RX.PAN

- ・ 反応検索フィールドを使って検索すると、自動的に反応レコードが検索される。
- ・ 反応レコードを表示する場合には、RX 表示形式を用いる。

## ■ 主な反応検索フィールド

種類	検索フィールド	内容	入力例	演算子
反応情報	/RX.RAN	反応物 (AN)	=> S 5026/RX.RAN	AND
	/RX.RCT	反応物 (名称)	=> S L-PROLINE/RX.RCT	
	/RX.PAN	生成物 (AN)	=> S 4885620/RX.PAN	
	/RX.PRO	生成物 (名称)	=> S GLYCINE/RX.PRO	
反応の詳細	/RX.RGT	試薬 (名称, 分子式)	=> S ACETONE/RX.RGT	(P)
	/RX.CAAN	触媒 (AN)	=> S 1073/RX.CAAN	
	/RX.CAT	触媒 (名称, 分子式)	=> S SNBR2/RX.CAT	
	/RX.SOLAN	溶媒 (AN)	=> S 1191/RX.SOLAN	
	/RX.SOL	溶媒 (名称, 分子式)	=> S CH2CL2/RX.SOL	
	/RX.YDN	収率*2	=> S 90<=RX.YDN	
	/RX.T	反応温度*2	=> S -100--10/RX.T	
	/RX.TIM	反応時間*2	=> S 2/RX.TIM	
	/RX.PH	pH値*2	=> S RX.PH<1	
	/RX.P	圧力*2	=> S 1-25/RX.P	
	/RX.CL	反応分類	=> S MULTI/RX.CL	
	/RX.TXT	反応テキスト	=> S CONTROLLED/RX.TXT	
	出典情報	/AU.RX	著者名	
/JT.RX		資料名	=> S SYNTHESIS/JT.RX	
/ISN.RX		CODEN	=> S JACSAT/ISN.RX	
/PA.RX		特許出願人	=> S AJINOMOTO/PA.RX	
/PN.RX		特許番号	=> S US 2986578/PN.RX	

\*1 同一反応条件に限定する場合は、(P) 演算子を利用する。

反応条件の収録は不完全であるため、網羅的な検索をしたい場合には利用しない方がよい。

\*2 数値演算子による検索が可能な数値検索フィールド。

- 検索例 : シクロヘキサノール (レコード番号 906744) からシクロヘキサノン (レコード番号 385735) への酸化反応を調べる. 回答件数が多い場合には, 収率 80% 以上の反応に限定する.

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

=> S 385735/RX.PAN AND 906744/RX.RAN ← 生成物と反応物のレコード番号を指定して検索  
L1 111 385735/RX.PAN AND 906744/RX.RAN

=> S L1 AND 80<=RX.YDN ← 収率で検索  
L2 4 L1 AND 80<=RX.YDN

=> D 1-4 RX ← RX 表示形式で表示

反応レコードがヒット

L2 ANSWER 1 OF 4 REAXYSFILE COPYRIGHT 2018 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

反応 1

RX

Reaction ID:	3856140	← 反応 ID
Reactant AN (.RAN):	906744	← 反応物のレコード番号
Reactant (.RCT):	cyclohexanol	
Product AN (.PAN):	385735, 774100	← 生成物のレコード番号
Product (.PRO):	cyclohexanone, 2-chlorocyclohexan-1-one	
React. Struct. Keywords (.SKW):	mapped reaction	← 反応構造キーワード
Record type (.RTYP):	full reaction, has preparation	
Number of Bond Changes (.NBC):	6	
No. of React. Details (.NVAR):	2	← 反応詳細の数
Chem. Behav. reactants (.BLA):	906744, 385735, 774100	
Preparation reactants (.BLB):	906744, 385735, 774100	
Det. React. reactants (.BLC):	906744, 385735, 774100	
No. of References (.NUMREF):	1	← 文献数

Reaction Details:

反応 1 の反応詳細 - 1

RX

Reaction RID (.RID):	3856140.1	← 反応詳細 ID
Reaction Classification (.CL):	Preparation	← 反応分類
Yield (.YDT):	2 percent, 85 percent	← 収率 (テキスト)
Reagent (.RGT):	2, 2, 6, 6-tetramethyl radical, chlorine,	収率は, 収率データ (RX.YDT) および収率 (RX.YDN) フィールド に収録される. 数値検索は /RX.YDN フィールドで行う
Solvent (.SOL):	dichloromethane	
Other Conditions (.COND):	Ambient temperature	
Product AN (.PRAN):	774100, 385735	
Reactant AN (.RCAN):	1422418, 3902968, 4154566	← 試薬のレコード番号
Solvent AN (.SOLAN):	1730800	← 溶媒のレコード番号
Number of R. steps (.STP):	1	
Yield numerical (.YDN):	2, 85	← 収率 (数値検索性)
Product (.YPRO):	2-chlorocyclohexan-1-one, cyclohexanone	
Reference(s):		← 出典
	1. Yamaguchi, Masao; Takata, Toshikazu; Endo, Takeshi, Bulletin of the Chemical Society of Japan, CODEN: BCSJA8, 63(3), <1990>, 947 - 949	



RX

Reaction RID (.RID):	3856140.2	反応 1 の反応詳細 - 2
Reaction Classification (.CL):	Chemical behaviour	
Yield (.YDT):	85 percent, 2 percent	
Reagent (.RGT):	2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidinyloxy, free radical, chlorine, sodium carbonate	
Solvent (.SOL):	dichloromethane	
Other Conditions (.COND):	Ambient temperature, reaction of other cyclic alcohols, other reaction conditions	
Subject Studied (.SUBJ):	Product distribution	
Product AN (.PRAN):	385735, 774100	
Reactant AN (.RCAN):	1422418, 3902968, 4154566	
Solvent AN (.SOLAN):	1730800	
Number of R. steps (.STP):	1	
Yield numerical (.YDN):	85, 2	
Product (.YPRO):	cyclohexanone, 2-chlorocyclohexan-1-one	
Reference(s):	1. Yamaguchi, Masao; Takata, Toshikazu; Endo, Takeshi, Bulletin of the Chemical Society of Japan, CODEN: BCSJA8, 63(3), <1990>, 947 - 949	
	:	

- ・レコード番号が分からない場合は、名称などから物質を検索し、SELECT コマンドでレコード番号 (AN) を抽出する。

```

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

=> E CYCLOHEXANOL/CN 5            ← 名称で EXPAND する (例 : シクロヘキサノール)
E1      1      CYCLOHEXANOIC CARBOXYLIC ACID/CN
E2      1      CYCLOHEXANOISOXAZOLE/CN
E3      1  --> CYCLOHEXANOL/CN
E4      1      CYCLOHEXANOL 2,7-OCTADIENYL ETHER/CN
E5      1      CYCLOHEXANOL ANION/CN

=> S E3                          ← 名称で検索する (物質レコードの検索)
L1      1      CYCLOHEXANOL/CN

=> SEL L1 AN                      ← レコード番号 (AN) を抽出する
E1 THROUGH E1 ASSIGNED

=> D SEL                          ← 抽出したタームを表示する
E1      1      906744/AN

=> S 385735/RX.PAN AND E1/RX.RAN  ← 抽出したタームを利用して検索
L2      111 385735/RX.PAN AND 906744/RX.RAN

```



## まとめ

- ReaxysFile ファイルには、物質レコードと反応レコードがあり、いずれにも反応情報が収録されている。
  - 物質レコードの反応情報を表示すると、その物質が関与する反応をまとめて表示できる。
  - 反応物と生成物を指定する場合や反応条件で限定する場合は反応レコードを検索する。

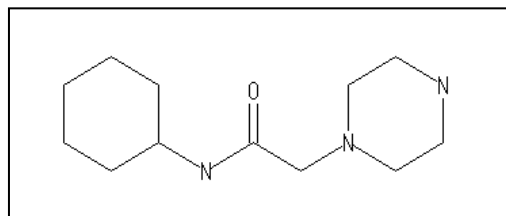


## 練習問題

6. ReaxysFile ファイルで Esaprazole の反応情報を検索する。

6-1 : CAS 登録番号 (CAS RN®) : 64204-55-3 から検索する。

6-2 : 化学物質名称から検索する。



【ヒント】 FRX 表示形式で、物質レコード中のすべての反応情報を表示できる。

回答は P. 87

## 練習問題



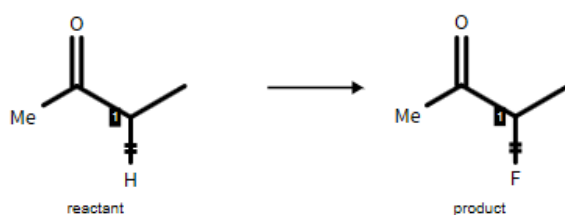
## 練習問題

- 練習問題 1 : CASREACT ファイルで 2-ニトロトルエン (88-72-2) から, 2,2'-ジニトロジベンジル (16968-19-7) を合成する反応を検索する.

## 【ヒント】

CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) にロールを指定して検索する (反応物/試薬は /RRT, 生成物は /PRO).

- 練習問題 2 : 下記のフッ素化の反応を検索する.



## 【作図のヒント】

反応ロール, 反応サイト, 反応部位を指定する.

さらに, 下記の条件で絞り込む.

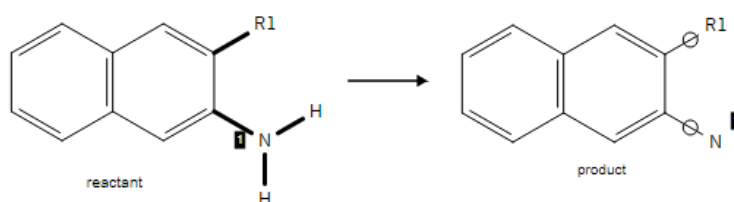
- ① 収率 80 % 以上もしくは収率情報のない反応に限定
- ② 特許に限定

最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する.

## 【ヒント】

①, ② の限定の際, 演算子に注意する.

- 練習問題 3 : 下記の環化反応 (R1 と N で環を形成) を検索する. (R1= O, S)



## 【作図のヒント】

環を形成する部分の結合の属性を Ring (環) に変更する.  
マッピングは R グループや可変原子には指定できない.

さらに, 下記の条件で絞り込む.

- ① Verification が不完全な回答を含む場合, それを除く (L 番号/COM).
- ② 触媒反応に限定
- ③ 1 段階反応に限定

最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する.

## 【ヒント】

②, ③ の限定の際, 演算子に注意する.

- 練習問題 4 : ニトリルオキシドから 1,2-C<sub>3</sub>NO 環を合成する反応を検索する。  
さらに, 下記の条件で絞り込む。  
① 収率 80 % 以上の反応に限定  
② 1 段階反応に限定

【ヒント】

官能基検索を行う。

①, ② の限定の際, 演算子に注意する。

- 練習問題 5 : CASREACT ファイルと CAplus ファイルで, 6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索する。

【ヒント】

CASREACT ファイルで生成物 (/PRO) を指定して検索し, 全件を BIB FHIT 表示形式で表示する。

REGISTRY ファイルで CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) から検索を行う。  
CAplus ファイルにクロスオーバーする際, 合成文献に限定 (/P) する。  
CASREACT ファイルの回答との重複を除いた後, 全件を BIB HITRN 表示形式で表示する。

- 練習問題 6 : ReaxysFile ファイルで Esaprazole の反応情報を検索する。

6-1 : CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) (64204-55-3) から検索する。

6-2 : 化学物質名称から検索する。

【ヒント】

FRX 表示形式で, 物質レコード中のすべての反応情報を表示できる。

## 練習問題 1

- 2-ニトロトルエン (88-72-2) から 2,2'-ジニトロジベンジル (16968-19-7) を合成する反応を検索

=> FILE CASREACT

=> S 88-72-2/RRT (L) 16968-19-7/PRO ← CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) にロールを指定して検索  
L1 12 88-72-2/RRT (L) 16968-19-7/PRO

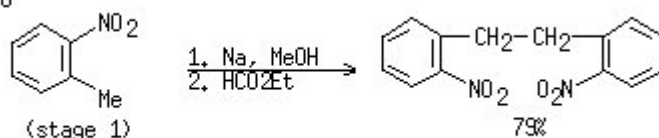
=> D SCAN

← 回答チェック用の SCAN 表示形式で確認

L1 12 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Improved synthesis of 10,11-dihydro-5H-dibenzo[b,f]azepine  
RX

RX(3) OF 6



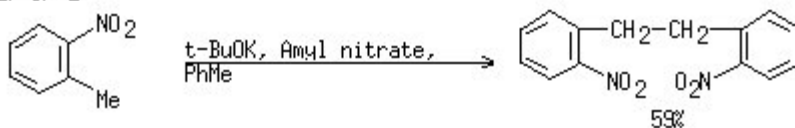
NOTE: 10.degree.

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

L1 12 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

TI Dimerization reaction of nitrotoluene  
RX

RX(1) OF 1



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

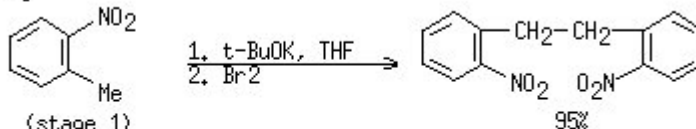
=> D

← デフォルトの表示形式で表示

L1 ANSWER 1 OF 12 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

RX

RX(1) OF 8



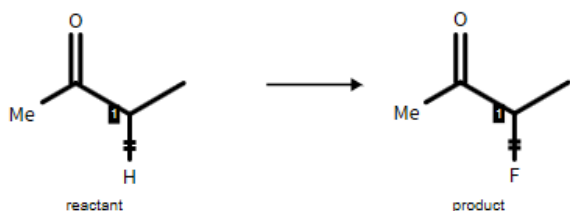
REF: Synthesis, 49(15), 3471-3475; 2017

CON: STAGE(1) 2 minutes, 0 deg C

STAGE(2) 5 minutes, 0 deg C

## 練習問題 2

■ 下記のフッ素化の反応を検索



=> FILE CASREACT

=>

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← サンプル検索

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
 BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED VERIFICATIONS: 52477 TO 58803

PROJECTED ANSWERS: 7 TO 298

L2 7 SEA SSS SAM L1 ( 15 REACTIONS)

=> S L1 FUL

← フルファイル検索

L3 107 SEA SSS FUL L1 ( 520 REACTIONS)

=> S L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)

← 収率で限定

L4 66 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)

=> S L4 AND P/DT

← 特許に限定

L5 8 L4 AND P/DT

=> D BIB FHIT

← BIB FHIT 表示形式で表示

L5 ANSWER 1 OF 8 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 157:605698 CASREACT Full-text

:

DT **Patent**

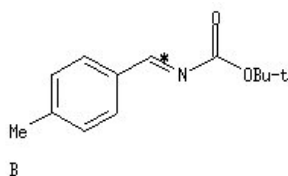
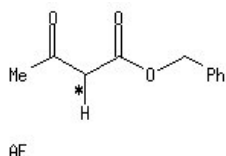
LA Korean

FAN. CNT 1

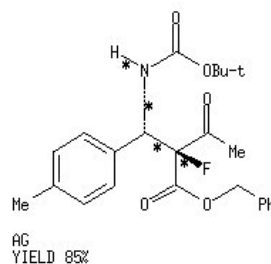
	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	KR 2012110683	A	20121010	KR 2011-28702	20110330

:

RX (15) OF 15 AF + B ==> **AG**



(15) →



RX (15) RCT AF 5396-89-4

:

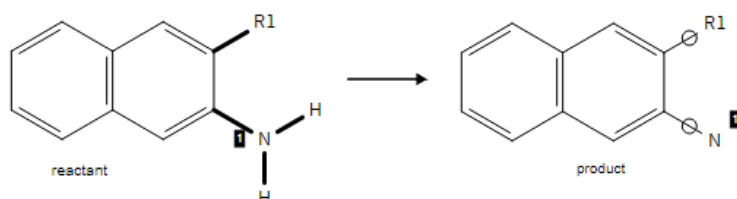
PRO AG **1192024-61-5**

NTE stereoselective (72:28 ratio of isomers, 87% ee)



## 練習問題 3

- 下記の環化反応 (R1 と N で環を形成) を検索 (R1= O, S)



=> FILE CASREACT

=>

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← サンプル検索

L2 3 SEA SSS SAM L1 ( 7 REACTIONS)

=> S L1 FUL

← フルファイル検索

100.0% DONE 19209 VERIFIED 481 HIT RXNS ( 16 INCOMP) 100 DOCS

L3 100 SEA SSS FUL L1 ( 481 REACTIONS) ↑ Verification が不完全な回答が含まれていた

=> S L3/COM

← Verification が完全な回答に限定

L4 96 L3/COM

=> S L4 (L) ANY/CAT

← 触媒反応に限定

L5 31 L3 (L) ANY/CAT

=> S L5 (L) 1/NS

← 一段階反応に限定

L6 20 L4 (L) 1/NS

=> D BIB FHIT

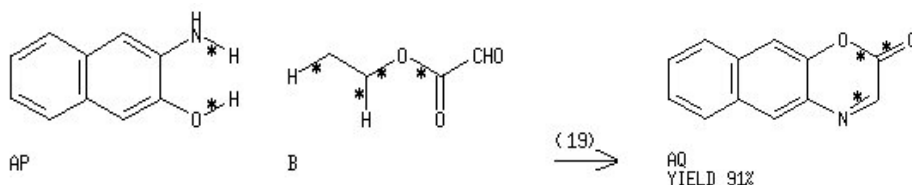
← 最初の回答を BIB FHIT 表示形式で表示

L6 ANSWER 1 OF 20 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 167:393911 CASREACT Full-text

TI Rationalization of Benzazole-2-carboxylate versus Benzazine-3-one/Benzazine-2,3-dione Selectivity Switch during Cyclocondensation of 2-Aminothiophenols/Phenols/Anilines with 1,2-Biselectrophiles in Aqueous Medium

RX(19) OF 39 **AP** + B ==> **AQ**



RX(19) RCT AP **5417-63-0**, B 924-44-7

PRO AQ **2128302-11-2**

CAT **577-11-7** Aerosol OT

SOL 7732-18-5 Water

CON 1 hour, room temperature

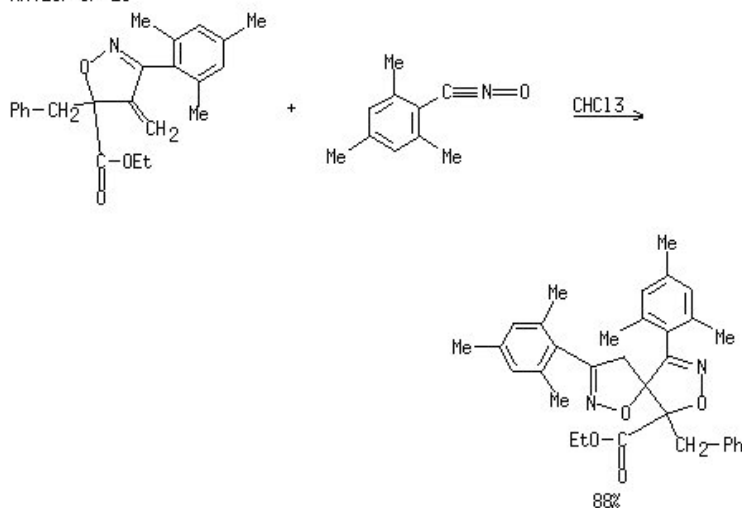
RE.CNT 60 THERE ARE 60 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## 練習問題 4

■ ニトリルオキシド (NITRILE OXIDE) から, 1,2-C<sub>3</sub>NO 環を合成する反応を検索=> FILE CASREACT=> S (NITRILE OXIDE/FG.RXN (S) 1,2-C3NO/FG.FORM) ← 官能基検索を実行する  
L1 689 (NITRILE OXIDE/FG.RXN (S) 1,2-C3NO/FG.FORM)=> S L1 (L) 80<=FG.YD ← 収率で限定  
L2 308 L2 (L) 80<=FG.YD=> S L2 (L) 1/NS ← 反応ステップ数で限定  
L3 259 L3 (L) 1/NS=> D BIB FCRD 1 ← BIB FCRD 表示形式で表示

L3 ANSWER 1 OF 259 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
 AN 167:164228 CASREACT Full-text  
 TI Direct access to spirobiisoxazoline via the double 1,3-dipolar  
 cycloaddition of nitrile oxide with allenolate  
 AU Shang, Xinye; Liu, Kun; Zhang, Zhongyin; Xu, Xianhong; Li, Pengfei; Li,  
 Wenjun  
 CS Department of Medicinal Chemistry, School of Pharmacy, Qingdao University,  
 Shandong, 266021, Peop. Rep. China  
 SO Organic & Biomolecular Chemistry (2018), 16(6), 895-898  
 CODEN: OBCRAK; ISSN: 1477-0520  
 PB Royal Society of Chemistry  
 DT Journal; (online computer file)  
 LA English  
 RX

RX(23) OF 28



RX

CON: 24 hours, 50 deg C

RE.CNT 51 THERE ARE 51 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## 練習問題 5

- CASREACT ファイルと CAplus ファイルで、6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid (29051-44-3) の合成反応に関する文献を検索

## CASREACT ファイルの検索

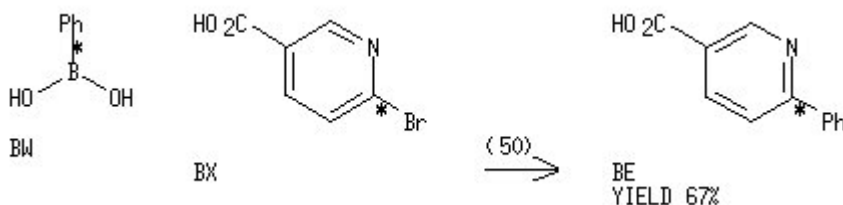
=> FILE CASREACT

=> S 29051-44-3/PRO ← 6-Phenyl-3-pyridinecarboxylic acid の合成反応を検索  
L1 14 29051-44-3/PRO

=> D BIB FHIT 1-14 ← 全件を BIB FHIT 表示形式で表示

L1 ANSWER 1 OF 14 CASREACT COPYRIGHT 2018 ACS on STN  
AN 167:80597 CASREACT Full-text  
TI Design, synthesis and evaluation of aromatic heterocyclic derivatives as potent antifungal agents  
AU Zhao, Shizhen; Zhang, Xiangqian; Wei, Peng; Su, Xin; Zhao, Liyu; Wu, Mengya; Hao, Chenzhou; Liu, Chunchi; Zhao, Dongmei; Cheng, Maosheng  
CS Key Laboratory of Structure-Based Drug Design and Discovery, Ministry of Education, School of Pharmaceutical Engineering, Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang, 110016, Peop. Rep. China  
SO European Journal of Medicinal Chemistry (2017), 137, 96-107  
CODEN: EJMCA5; ISSN: 0223-5234  
PB Elsevier Masson SAS  
DT Journal; (online computer file)  
LA English

RX (50) OF 324 BW + BX ==> **BE...**



RX (50) RCT BW 98-80-6, BX 6311-35-9

## STAGE (1)

RGT BY 584-08-7 K2CO3  
CAT 14221-01-3 Pd(PPh3)4  
SOL 7732-18-5 Water, 123-91-1 Dioxane  
CON SUBSTAGE (1) 6 hours, reflux  
SUBSTAGE (2) reflux -> room temperature

## STAGE (2)

RGT BL 7647-01-0 HCl  
SOL 7732-18-5 Water  
CON room temperature, pH 1 - 3

PRO BE **29051-44-3**

NTE Suzuki coupling, key intermediate

RE. CNT 25 THERE ARE 25 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## CAplus ファイルの検索 (REGISTRY ファイルから CAplus ファイルへのクロスオーバー検索)

=> FILE REGISTRY=> S 29051-44-3

L2 1 29051-44-3

=> FILE CAPLUS=> S L2/P

L3 24 L2/P

← 合成文献に限定

=> S L3 NOT L1L4 14 L1  
12 L3 NOT L1

← CASREACT ファイルで得られた回答 (L1) を除く

=> D BIB HITRN 1-12

← BIB HITRN 表示形式で全件を表示

L4 ANSWER 1 OF 12 CAPLUS COPYRIGHT 2018 ACS on STN

AN 2010:1304774 CAPLUS Full-text

DN 153:618846

TI Falcipain Inhibitors: Optimization Studies of the 2-Pyrimidinecarbonitrile  
Lead Series. [Erratum to document cited in CA153:382905]TIJP ファルシpain阻害剤. 2-ピリミジンカルボニトリル鉛シリーズの最適化研究.  
[機械翻訳]AU Coteron, Jose M.; Catterick, David; Castro, Julia; Chaparro, Maria J.;  
Diaz, Beatriz; Fernandez, Esther; Ferrer, Santiago; Gamo, Francisco J.;  
Gordo, Mariola; Gut, Jiri; de las Heras, Laura; Legac, Jennifer; Marco,  
Maria; Miguel, Juan; Munoz, Vicente; Porras, Esther; de la Rosa, Juan C.;  
Ruiz, Jose R.; Sandoval, Elena; Ventosa, Pilar; Rosenthal, Philip J.;  
Fiandor, Jose M.CS Department of Drug Discovery Chemistry, GlaxoSmithKline, Madrid, 28760,  
Spain

SO Journal of Medicinal Chemistry (2010), 53(21), 7885-7886

CODEN: JMCMAR; ISSN: 0022-2623

DOI 10.1021/jm101228f

PB American Chemical Society

DT Journal

LA English

IT **29051-44-3P**RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
(Reactant or reagent)(preparation, falcipain inhibition activity structure-activity relationship,  
and antimalarial activity of hydrazinopyrimidine carbonitrile derivs.

(Erratum))

:

## 練習問題 6

## ■ ReaxysFile ファイルで Esaprazole (CAS RN® : 64204-55-3) の反応情報を検索

6-1 : CAS 登録番号 (CAS RN®) : 64204-55-3 から検索する

=&gt; FILE REAXYSFILE

=&gt; S 64204-55-3/RN

L1 1 64204-55-3/RN

=&gt; D IDE FRX

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2018 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 785765  
 Basic Pref. RN (BPR): 64204-55-3  
 CAS Reg. No. (RN): **64204-55-3**  
 Chemical Name (CN): N-cyclohexyl-piperazino-acetamide,  
 esaprazole,  
 :

Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	5
:		

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	4
RX.PAN	Product AN	4

Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 17803699  
 Reactant AN (.RAN): 471175  
 Reactant (.RCT): cyclohexylamine, sodium-salt of  
 sulfomercapto-acetic acid cyclohexylamide  
 Product AN (.PAN): 785765  
 Product (.PRO): N-cyclohexyl-piperazino-acetamide  
 React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction  
 :

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 17803699.1  
 Reaction Classification (.CL): Multi-step reaction  
 Reagent (.RGT): 4-(N,N-dimethylamino)pyridine, aluminium  
 trichloride, Wang resin,  
 diisopropyl-carbodiimide  
 Solvent (.SOL): dichloromethane, trifluoroacetic acid  
 Reactant AN (.RCAN): 110354, 1209238, 8189822, 878281  
 Solvent AN (.SOLAN): 1730800, 742035  
 Number of R. steps (.STP): 2  
 :

## 6-2: 化学物質名称から検索する

=&gt; FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=&gt; E ESAPRAZOLE/CN ← 化学物質名称を EXPAND で確認

E1 1 ESAIDROBENZILIDEN-DI-N-(2-AMINOTIAZOLO)/CN  
 E2 1 ESAPENT. (R) ./CN  
 E3 1 --> ESAPRAZOLE/CN  
 E4 1 ESAT/CN

:

=&gt; S E3

L1 1 ESAPRAZOLE/CN

=&gt; D IDE FRX ← IDE FRX 表示形式で表示

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2018 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 785765  
 Basic Pref. RN (BPR): 64204-55-3  
 CAS Reg. No. (RN): 64204-55-3  
 Chemical Name (CN): N-cyclohexyl-piperazino-acetamide,  
**esaprazole,**

:

## Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1

:

## This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	4
RX.PAN	Product AN	4

## Reaction:

RX

Reaction ID (.ID): 17803699  
 Reactant AN (.RAN): 471175  
 Reactant (.RCT): cyclohexylamine, sodium-salt of  
 sulfomercapto-acetic acid cyclohexylamide  
 Product AN (.PAN): 785765  
 Product (.PRO): N-cyclohexyl-piperazino-acetamide  
 React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction

:

## Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 17803699.1  
 Reaction Classification (.CL): Multi-step reaction  
 Reagent (.RGT): 4-(N,N-dimethylamino)pyridine, aluminium  
 trichloride, Wang resin,  
 diisopropyl-carbodiimide  
 Solvent (.SOL): dichloromethane, trifluoroacetic acid  
 Reactant AN (.RCAN): 110354, 1209238, 8189822, 878281  
 Solvent AN (.SOLAN): 1730800, 742035  
 Number of R. steps (.STP): 2

:

# *APPENDIX*

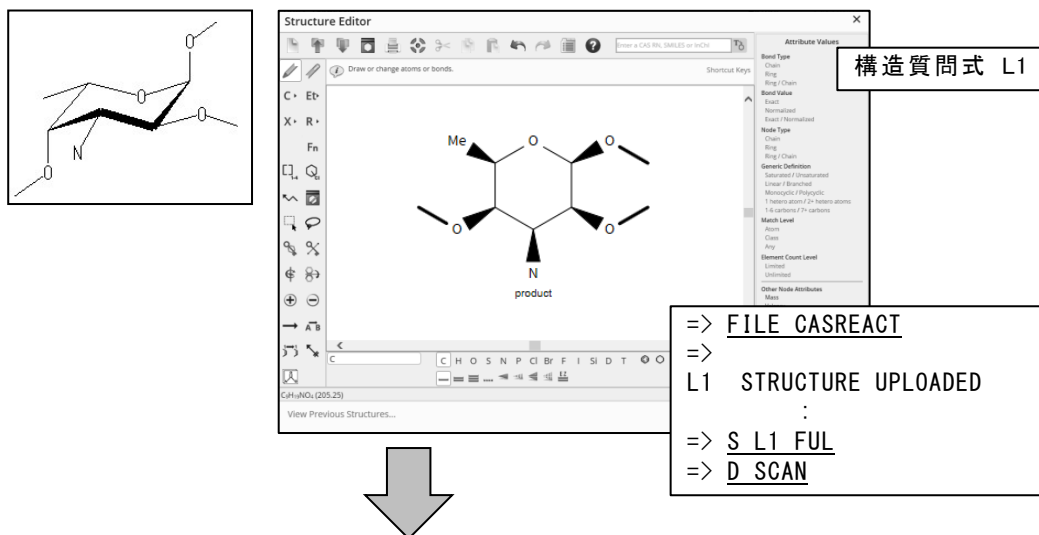




## CASREACT ファイル – 構造検索時の注意

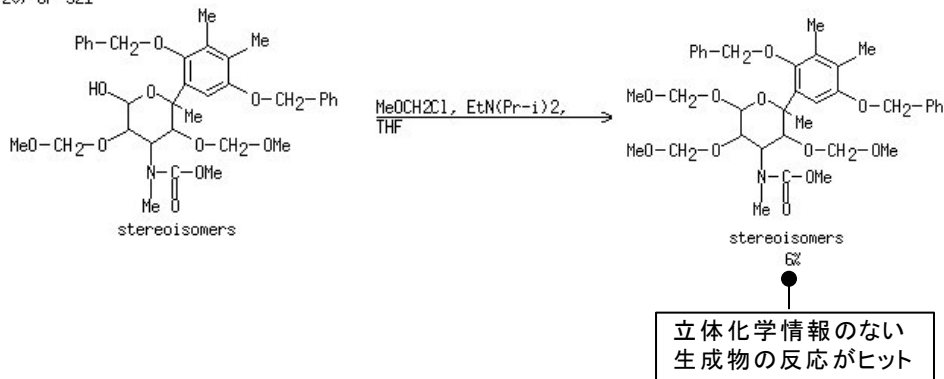
### ■ CASREACT ファイルでは、立体構造検索はできない。

- ・ 立体情報は検索結果には反映されず、目的以外のさまざまな異性体もヒットする。
- ・ 例：下記の立体情報を有する物質が生成物である反応を検索したい場合

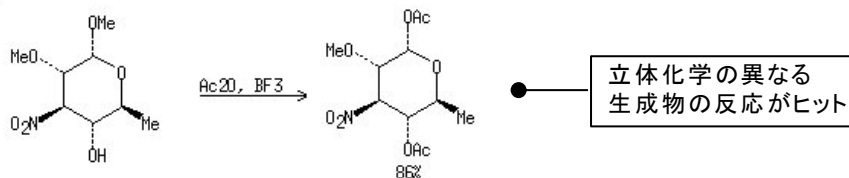


### － ヒットする反応の例

RX(20) OF 921



RX(3) OF 4



NOTE: Classification: O-Acylation; Substitution; Diastereoselective; Acetoxylation; # Conditions: Ac2O BF3; 0 deq 1h

- ・ CASREACT ファイルで、目的の立体情報を有する物質の反応のみを検索したい場合は、REGISTRY ファイルで目的の物質を検索し、その結果を CASREACT ファイルにクロスオーバーする。

## CASREACT ファイル – CA 由来のレコードの収録基準

### ■ 収録される反応の選択基準は、年代によって異なる。

- ・ 1985 ~ 1990 年 - 主要雑誌約 100 誌から、CA ファイルの有機化学セクション (セクション 21~34) に分類された文献中のすべての反応を収録。
- ・ 1991 年以降 - CA ファイルに収録されるすべての雑誌論文から選択された、合成的に意義のある反応を収録。
  - 1991 年 1 月 1 日以降に発行された、CA ファイル収録対象の特許から選択された、合成的に意義のある反応を収録。

### ■ 1991 年以降の収録規準

- ・ 以下の条件に合致する反応を報告する雑誌論文と特許を収録する。
  - 新規な、便利な、容易な、穏やかな、簡略化された、修正された、改善された、強化された簡単な、簡潔な、迅速な、有効な、等の反応 (単に新規化学物質の合成法のみを収録するわけではない。)
  - 立体選択性 (エナンチオ選択性, ジアステレオ選択性), 立体特異性, 位置選択性, 化学選択性 (他の官能基に影響を与えない特定官能基の変換) のある反応
  - 改善された高収率の反応; 低収率の反応を避けた反応スキーム
  - 種々の触媒, 溶媒, 試薬などを使った前進的反応研究
  - 代替法, ユニークな変換反応, 珍しい合成方法
  - 意図した生成物が報告されているが, 実際には成功しなかった反応
  - 新規または合成上有益であるという条件に合致した全合成
- ・ 以下のような反応を報告する文献は収録されない。
  - 動力学, スペクトル, またはその他のあらゆる物理化学的研究のための化合物の合成
  - 方法についてまったくコメントのない既知反応による化合物の合成
  - 標準的な標識化合物の合成法や, 標準的なアミノ酸や炭水化物のカップリング反応
  - 単純な塩, 水和物, 溶媒和物, および電荷移動錯体のような反応物と生成物の結合表に変化のないすべての反応
  - 生成物が構造で表現できない反応

- CASREACT ファイルに収録されないか、または収録が不完全な有機化学反応
  - ・ ポリマーの重合反応
  - ・ 工業的反応, スケールアップ等の化学工業的な文献
  - ・ モノマーの合成反応
  
- 多段階反応を収録する場合, 以下の条件に合致するありふれた反応は省略される.
  - ・ 保護基の付加と除去に関する反応
  - ・ 光学活性体の分離
  - ・ 新しい C-C 結合生成の段階は収録することを原則とするが, 例外的に省略される反応
    - ハロゲン化アルキル (C1-3) による簡単なアルキル化反応
    - カルボニル化合物からアルキル化されたアルコールを合成するグリニャール反応
  - ・ 多段階反応スキームの記述において, 著者が省略した反応
  - ・ 省略するか否かは, 著者の記述に基づき文献中での重要性から判断される.
  
- 例示されたすべての反応が収録されるとは限らないので, 一般的に反応物と生成物は部分構造検索することが好ましい.

## CASREACT ファイル – 1990 年以前の収録雑誌

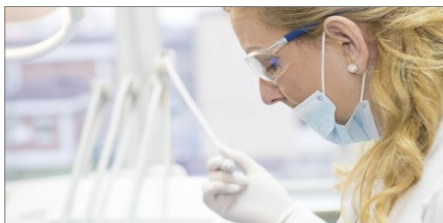
## ■ 1990 年以前の収録雑誌

Accounts of Chemical Research  
 Acta Chemica Scandinavica, Series B. Organic Chemistry and Biochemistry  
 Acta Chimica Hungarica  
 Anales de Quimica, Serie C: Quimica Organica y Bioquimica  
 Angewandte Chemie  
 Archiv der Pharmazie  
 Armyanskii Khimicheskii Zhurnal  
 Australian Journal of Chemistry  
 Bulletin de La Societe Chimique de France  
 Bulletin des Societes Chimiques Belges  
 Bulletin of the Chemical Society of Japan  
 Canadian Journal of Chemistry  
 Carbohydrate Research  
 Chemica Scripta  
 Chemical Reviews  
 Chemical and Pharmaceutical Bulletin  
 Chemiker-Zeitung  
 Chemische Berichte  
 Chemistry Letters  
 Collection of Czechoslovak Chemical Communications  
 Doklady Akademii Nauk SSSR  
 Electrochimica Acta  
 European Journal of Medicinal Chemistry -- Chimie Therapeutique  
 Gazzetta Chimica Italiana  
 Helvetica Chimica Acta  
 Heterocycles  
 Huaxue Xuebao  
 Indian Journal of Chemistry, Section A: Inorganic, Physical, Theoretical & Analytical  
 Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry, Including Medicinal Chemistry  
 Inorganic Chemistry  
 Inorganic Synthesis  
 Inorganica Chimica Acta  
 International Journal of Chemical Kinetics  
 International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes  
 International Journal of Peptide and Protein Research  
 Israel Journal of Chemistry  
 Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya  
 Izvestiya Vysshykh Uchebnykh Zavedenii, Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya  
 Journal fuer Praktische Chemie  
 Journal of Antibiotics  
 Journal of Carbohydrate Chemistry  
 Journal of Catalysis  
 Journal of Chemical Physics  
 Journal of Chemical Research, Synopses  
 Journal of Fluorine Chemistry  
 Journal of Heterocyclic Chemistry  
 Journal of Labelled Compounds and Radiopharmaceuticals  
 Journal of Medicinal Chemistry  
 Journal of Molecular Catalysis  
 Journal of Molecular Structure  
 Journal of Organic Chemistry  
 Journal of Organometallic Chemistry  
 Journal of Pharmaceutical Sciences  
 Journal of Physical Chemistry  
 Journal of the American Chemical Society

Journal of the Chemical Society of Pakistan  
Journal of the Chemical Society, Chemical Communications  
Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, Inorganic Chemistry  
Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1  
Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1: Organic and Bio-Organic Chemistry  
Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2: Physical Organic Chemistry  
Journal of the Indian Chemical Society  
Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii  
Khimiya Prirodnykh Soedinenii  
Khimiko-Farmatsevticheskii Zhurnal  
Kinetika i Kataliz  
Langmuir  
Liebig's Annalen der Chemie  
Magnetic Resonance in Chemistry  
Monatshefte fuer Chemie  
Neftekhimiya  
New Journal of Chemistry (1987-)  
Nippon Kagaku Kaishi  
Nouveau Journal de Chimie (1985-1986)  
Nucleic Acids Symposium Series  
Nucleosides Nucleotides  
Organic Mass Spectrometry  
Organic Preparations and Procedures International  
Organic Syntheses  
Organometallics  
Pharmazie  
Phosphorus and Sulfur and the Related Elements  
Polish Journal of Chemistry  
Polyhedron  
Pure and Applied Chemistry  
Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas  
Revue Roumaine de Chimie  
Spectrochimica Acta, Part A. Molecular Spectroscopy  
Steroids  
Sulfur Letters  
Synthesis  
Synthesis and Reactivity in Inorganic and Metal-organic Chemistry  
Synthetic Communications  
THEOCHEM  
Teoreticheskaya i Eksperimental'naya Khimiya. Kiev  
Tetrahedron  
Tetrahedron Letters  
Ukrainskii Khimicheskii Zhurnal (Russian Edition)  
Uspekhi Khimii  
Yakugaku Zasshi  
Youji Huaxue  
Yukagaku  
Yuki Gosei Kagaku Kyokaishi  
Zeitschrift fuer Anorganische Allgemeine Chemie  
Zeitschrift fuer Chemie  
Zeitschrift fuer Naturforschung, Teil B. Anorganische Chemie, Organische Chemie  
Zhurnal Obshchei Khimii  
Zhurnal Organicheskoi Khimii  
Zhurnal Prikladnoi Khimii (Leningrad)







# JAICI

化学情報協会

情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-151-462 FAX: 03-5978-4090

URL: [www.jaici.or.jp](http://www.jaici.or.jp)