

CAS STNext[®]

REAXYSFILESUB USER GUIDE

Properties & Reactions

CAS



A division of the
American Chemical Society

REAXYSFILESUB の物性および反応情報の検索

Content

- 検索の前に - 重要なポイント
- 物性情報の概要 - コンテンツなど
- 物性情報の検索で役立つ検索フィールド
- 反応情報の概要 - コンテンツなど
- 反応情報の検索で知っておくとよい項目
- 物性用語集

Summary

物性および反応情報を得る簡単なステップ：

- 辞書あるいは構造検索の結果に対し、調べたい物性や反応情報が収録されているか検索します
物性情報の場合は /FA.P を、反応情報の場合は /FA.RX を利用します
- QRD 表示形式 (default) は物質同定情報、ヒットした物性および反応情報を表示します
- ALL/IALL 表示形式は物質同定情報、収録されている物性および反応情報のリストを表示します



検索の前に - 重要なポイント

REAXYSFILESUB ファイルには、多くの物性あるいは反応情報が収録されているため、情報を表示する際は以下のポイントを考慮してください。

以下のいずれかの表示形式の利用を検討します。

- QRD 表示形式
- ALL/IALL 表示形式

通常 FULL 表示形式の利用はお勧めしません。

物性は5つのカテゴリーに分類されており、そのカテゴリーコードを指定すれば分類された物性を一括表示できます。

特定の物性あるいは反応情報について、REAXYSFILESUB から REAXYSFILEBIB へクロスオーバーすることはできません。

1. おすすめの表示形式は QRD 表示形式 (デフォルト)

デフォルトの QRD 表示形式を利用すると、表示形式を指定することなく、物質同定情報と検索に関連した物性および反応情報を表示できます。QRD 表示形式を強くお勧めします。

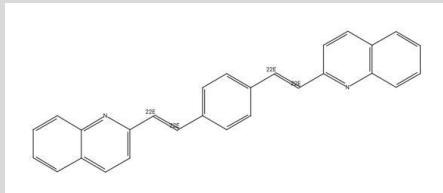


2. 収録情報の確認には ALL/IALL 表示形式を使う

物質同定情報および収録されている物性と反応のリストを表示できます。以下のレコードは、フィールド付きインデント型の IALL 表示形式で表示した例です。

- 検索や表示のための物性コード (例: DEN)
- 物性の名称 (例: Density of the Liquid)
- データ数 (例: 1)
- 物性のカテゴリ (例: PHYS)
- 反応情報の有無、データ数 (生成物と反応物を分けて表示することはできません)。

```
ACCESSION NUMBER:      38153   REAXYSFILESU
REGISTRY NUMBER:       29820-79-9
CHEMICAL NAME:         1,4-Bis03C; 3B2; -(2-quinoly1)vinyl03E; benzene;
                        1,4-di-03C; 3B2; -(2-quinoly1)vinyl03E; benzene;
                        2,2'-(1,4-phenylenedivinylene)bisquinoline;
                        1,4-bis-((i)trans-2-[2]quinoly1-vinyl)-benzene
SUBSTANCE DESCRIPTOR:  heterocyclic
COMP. MOL. FORMULA:    C28 H20 N2
LIN. STRUCTURE FORMULA: C28H20N2
INCHI KEY:             DJDHBLKJOAHWQU-HBKJEHTGSA-N
ALTERNATE INCHI KEY:   DJDHBLKJOAHWQU-HBKJEHTGGBR
MOLECULAR WEIGHT:      384.48
MARKUSH REF. COUNT:    1
REFERENCE COUNT:       12
ENTRY DATE:           Entered STN: 14 Jul 2020
                        Last updated on STN: 1 Feb 2024
```



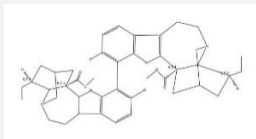
```
PROPERTIES:           DEN Density of the Liquid (1) (PHYS)
                        MP Melting Point (3) (PHYS)
                        FLUS Fluorescence spectroscopy (14) (SPEC)
                        LUM Luminescence spectroscopy (1) (SPEC)
                        NMR NMR spectroscopy (4) (SPEC)
                        UVS UV/VIS spectroscopy (18) (SPEC)
                        CRYPH Crystal Phase (1) (STATE)
                        CPD Crystal Property Description (5) (STATE)
                        CSG Crystal Space Group (1) (STATE)
                        CSYS Crystal System (1) (STATE)
                        POT Electrochemical Characteristics (2) (FURTHER)
                        FINFO2 Further Information (8) (FURTHER)
                        IDA Interatomic Distances and Angles (1) (FURTHER)
                        PSD Patent Specific Data (3) (FURTHER)
                        LB Substance Label (3) (FURTHER)
REACTIONS:           RX.ID; RX.PAN; RX.RAN (2)
```

3. 通常利用を推奨していない表示形式：DISPLAY FULL (全情報を表示)

(IFULL 表示形式は現在利用できません)

重要： D FULL で表示すると、非常に長くなり (一般的に 10,000 以上データが含まれます)、システムエラーを引き起こす可能性があります。FULL 表示形式を利用する場合は、事前に D ALL で表示して、収録されている物性と反応のデータ数を確認してください。

```
AN      1205685   REAXYSFILESU
CN      13,13'-dihydroxy-[14,14']biibogaminy-18,18'-dicarboxylic acid dimethyl
        ester
SD      heterocyclic
MF      C42 H52 N4 O6
CMF     C42 H52 N4 O6
LSF     C42H52N4O6
INCHI   KHWRBQXEKRQJSZ-FPDPKCOBSA-N
AINCHI  KHWRBQXEKRQJSZ-FPDPKCOBBI
MW      708.898
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 13 Jul 2020
        Last updated on STN: 19 Jan 2024
```



PROPERTIES

```
ORP Optical Rotatory Power (1) (PHYS)
IR IR spectroscopy (1) (SPEC)
MS Mass Spectrometry (1) (SPEC)
NMR NMR spectroscopy (2) (SPEC)
UVS UV/VIS spectroscopy (1) (SPEC)
LB Substance Label (1) (FURTHER)
```

Optical Rotatory Power (1)

Value	Type	Wavelength	Ref(s)
(ORP)	(.TYP)	(.W)	(REF)
(deg)		(nm)	

```
=====+=====+=====+=====
-43      | [alpha]   | 589      | 1
```

1. AN 3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

IR spectroscopy (1)

Keyword	Ref(s)
(.KW)	(REF)

```
=====+=====
IR      | 1
```

1. AN 3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

Mass Spectrometry (1)

Ref(s)
(REF)

```
=====
1
```

1. AN 3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

NMR spectroscopy (2)

Keyword (.KW)	Comment (.CMT)	Ref(s) (REF)
------------------	-------------------	-----------------

NMR	13C-NMR	1
NMR		1

1. AN 3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

UV/VIS spectroscopy (1)

Keyword (.KW)	Ref(s) (REF)
------------------	-----------------

UV/VIS	1
--------	---

1. AN 3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

Substance Label (1)

Label (.LB)	Ref(s) (REF)
----------------	-----------------

1	1
---	---

1. AN 3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

Reaction:

Reaction ID:	6393128
Product AN (.PAN):	1205685
Product (.PRO):	13,13'-dihydroxy-[14,14']biibogaminyll-18,18'-dicarboxylic acid dimethyl ester
Reference Count:	1

Reaction Details:

Reaction RID:	6393128.1
Reaction Classification (.CL):	Preparation (half reaction)
Reference(s):	3007390: Journal: Damak et al., Tetrahedron Lett. (1974), 2141p.

4. カテゴリーに含まれる物性の一括表示

カテゴリーに含まれる物性は下記のカテゴリーコードを使って一括表示できます。

物性のカテゴリーコード	内容	入力例
PHYS	物理的特性 (All physical properties)	D PHYS
STATE	凝集状態 (All state of aggregation properties)	D STATE
FURTHER	その他の物性 (All further properties)	D FURTHER
MULTI	多成分系データ (All multicomponent properties)	D MULTI
SPEC	分光学的データ (All spectroscopy properties)	D SPEC



物性情報の概要

Content

データベースに収録する関連データの選択は非常に多岐にわたります。単成分および多成分系のデータの収録が考慮されます。110の物性データが5つのカテゴリーに分類されています：

- 物理的特性 (Physical properties (例：融点、沸点))
- 凝集状態 (State of aggregation (例：結晶データ))
- 分光学的データ (Spectroscopy (例：NMR, IR))
- 多成分系データ (Multicomponent Systems (例：電気データ、液-液系データ))
- その他の物性 (Further properties (例：天然物からの単離、化学的誘導体))

注意：FURTHER INFORMATION、FINFO、FINFO1-3は、あまり調査されない物性のコレクションです。カテゴリーの1つであるFURTHER PROPERTIESと混同しないでください。名称中に数字が含まれていますが、技術的な理由によるものです。

物性情報の検索で役立つ検索フィールド

Summary

利用可能な特定の物性情報を検索する

/FA.P フィールド (検索例 1、3)

キーワードで物性情報を検索する

/KW フィールド (検索例 2)

物性情報の検索の操作性を向上させるため、いくつかの検索および表示フィールドが導入されました。

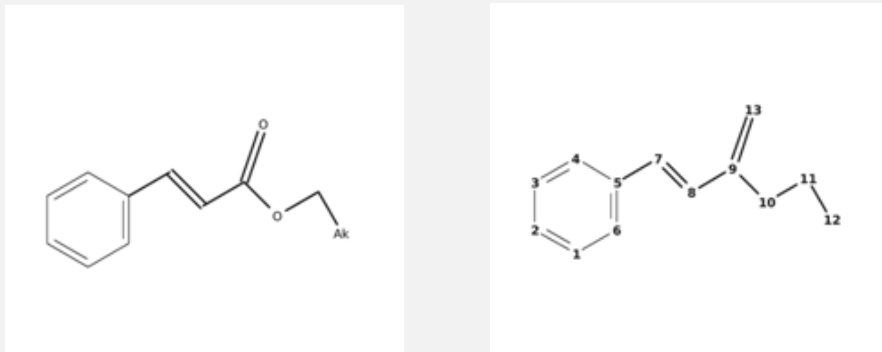
1. 利用可能な物性情報 (/FA.P)

/FA.P フィールドを利用すると、物性名や物性コードで検索/表示できます。調べたい物性が含まれるレコードに限定するには、/FA.P フィールドを利用するとよいです。=> HELP PROP で /FA.P で検索/表示できる物性を確認できます。

検索例 1:

融点のデータが含まれる桂皮酸アルキルエステルの検索 (閉構造部分構造検索)。

Uploading structure file: cinnamic ester



Node Attributes
Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6

```

Chain Nodes : 7 8 9 10 11 13
Bond Attributes
Ring Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1
Chain Bonds : 5-7 7-8 8-9 9-10 10-11 11-12 13-9
Exact Bonds : 5-7 7-8 8-9
Normalized Bonds : 1-2 2-3 3-4 4-5 5-6 6-1
Exact/Normalized Bonds : 9-10 10-11 11-12 13-9
Markush Attributes
Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5 6
Match Level (CLASS) : 7 8 9 10 11 12 13
Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13

```

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> s 11 css ful

FULL SEARCH INITIATED 05:33:10 FILE 'REAXYSFILESU'
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 49510784 ITERATIONS 187 ANSWERS
 SEARCH TIME: 00.01.44

L2 187 SEA CSS FUL L1

=> s 12 and mp/fa.p

7695407 MP/FA.P

L3 18 L2 AND MP/FA.P

=> d

L3 ANSWER 1 OF 18 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
 AN 49531772 REAXYSFILESU
 MF C37 H64 O2
 CMF C37 H64 O2
 LSF C37H64O2
 INCHI WXOZRCXXCCYWOK-UHFFFAOYSA-N
 MW 540.914
 MARKREF.CNT 0
 REC 1
 ED Entered STN: 20 Mar 2023
 Last updated on STN: 19 Jan 2024



Melting Point (1)

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

```

=====+=====
69 - 71 | supporting informati | 1
        | on                  |

```

1. AN 123575571: Journal: Dawurung, Christiana J. et al., Molecules (2023)
 Vol. 28, No.2 arn.673

2. キーワード (/KW)

/KW フィールドを利用すると、KW フィールドがある物性のキーワードを検索できます。特定の物性フィールドがわからなくても、調べたい物性を検索できる利点があります。

検索例 2:

超電導に関するデータが含まれるユウロピウムと鉄を含む化合物の検索

```
=> s (eu and fe)/els and superconductivity/kw

      43809 EU/ELS
      353411 FE/ELS
      21029 SUPERCONDUCTIVITY/KW
L1      21 (EU AND FE)/ELS AND SUPERCONDUCTIVITY/KW

=> d

L1      ANSWER 1 OF 21 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      57000469 REAXYSFILESU
MF      As3 Eu Fe4 P Rb
CMF     As3 Eu Fe4 P Rb
LSF     RbEuFe4As3.25P0.75
INCHI   RYUPIUPCLBCDSR-UHFFFAOYSA-N
MW      727.541
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 14 Dec 2023
        Last updated on STN: 19 Jan 2024

                Substance image not available

Electrical Data (2)
Keyword          | Crit. Temp. | Ref(s)
(.KW)           | (.CRIT)    | (REF)
                | (Cel)      |
=====+=====+=====
Superconductivity | -238.78    | 1
Superconductive tran |           | 1
sition temperature |           |

1. AN 130126585: Journal: Usman, Mohammad et al., Chem. Mater. (2023) Vol.
35, No.20, pp. 8494 - 8501
```



3. 利用可能な物性情報 (/FA.P)

検索例 3:

分光学的データが含まれる自然素材の検索

すべてのブール演算子を利用できます。物性のカテゴリーコードを利用すると、カテゴリーに含まれる物性を一括表示できます。D SPEC で表示すると、分光学的データを一括表示できます。

注意：物性情報は表形式で収録されており、表が崩れないように、表示する前に SET LINE コマンドで 1 行あたりの文字数を増やすことをおすすめします。（デフォルトは 1 行あたり 80 文字です）

例：1 行あたりの文字数を 200 文字に変更する => SET LINE 200

```
=> SET LINE 200

=> s inp/fa.p and (ms and nmr and ir and uvs)/fa.p

      316789 INP/FA.P
      12305613 MS/FA.P
      14956017 NMR/FA.P
      6564641 IR/FA.P
      1815392 UVS/FA.P
L3      88871 INP/FA.P AND (MS AND NMR AND IR AND UVS)/FA.P

=> d

L3      ANSWER 1 OF 88871 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN      57424697 REAXYSFILESU
CN      euphyllonane G
MF      C35 H44 O9
CMF     C35 H44 O9
LSF     C35H44O9
INCHI   UMEABDUVKKGNCILXSNTAKSA-N
MW      608.729
MARKREF.CNT 0
REC     1
ED      Entered STN: 1 Feb 2024
        Last updated on STN: 1 Feb 2024

        Substance image not available

IR spectroscopy (1)
Keyword | Solvent | Location | Ref(s)
(.KW) | (.SOL) | (.LO) | (REF)
=====+=====+=====+=====
Bands; Spectrum | neat (no solvent) | supporting informati | 1
| | | on |
1. AN 130962458: Journal: Wu, Shu-Qi et al., J. Nat. Prod. (2023)

Mass Spectrometry (1)
Keyword | Location | Ref(s)
(.KW) | (.LO) | (REF)
=====+=====+=====
high resolution mass | supporting informati | 1
spectrometry (HRMS) | on |
; electrospray ionis | |
ation (ESI); time-of | |
-flight mass spectra | |
```



(TOFMS); spectrum

1. AN 130962458: Journal: Wu, Shu-Qi et al., J. Nat. Prod. (2023)

NMR spectroscopy (7)

Keyword (.KW)	Nucleus (.NUC)	Solvent (.SOL)	Location (.LO)	Ref(s) (REF)
Chemical shifts; Spectrum	1H	chloroform-d1	supporting information	1
COSY (Correlation Spectroscopy); Spectrum	1H; 1H	chloroform-d1	supporting information	1
NOESY (Nuclear Overhauser Enhanced Spectroscopy); Spectrum	1H; 1H	chloroform-d1	supporting information	1
HSQC (Heteronuclear Single Quantum Coherence); Spectrum	1H; 13C	chloroform-d1	supporting information	1
HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Coherence); Spectrum	1H; 13C	chloroform-d1	supporting information	1
Chemical shifts; Spectrum	13C	chloroform-d1	supporting information	1
DEPT (Distorsionless Enhancement by Polarisation Transfer); Spectrum	13C	chloroform-d1	supporting information	1

1. AN 130962458: Journal: Wu, Shu-Qi et al., J. Nat. Prod. (2023)

UV/VIS spectroscopy (1)

Solvent (.SOL)	Ref(s) (REF)
acetonitrile	1

1. AN 130962458: Journal: Wu, Shu-Qi et al., J. Nat. Prod. (2023)

Isolation from Natural Product (1)

Value (INP) (--)	Ref(s) (REF)
whole plants of Euphorbia hylonoma	1

1. AN 130962458: Journal: Wu, Shu-Qi et al., J. Nat. Prod. (2023)



反応情報の概要

Summary

物質の反応情報は演算して検索します。例えば、構造検索結果に利用可能な反応情報フィールド (/FA.RX) を演算し、QRD 表示形式で表示します (検索例 7) => **S L# and RX.ID/FA.RX**

物質を合成する反応情報を検索できます (検索例 5) => **S L# AND PREPARATION/RX.CL**

2つの物質を同一反応中に限定する場合は (P) 演算子を利用します (検索例 4)

反応情報は明確に2つのパートに分かれています。反応識別データと反応詳細データ (同じ反応 ID ですが、追加の数字が. の後に付与されます) です。以下が反応情報の例です (化学物質名は短縮しています)。

Reaction:

Reaction ID: 30015584
Reactant AN (.RAN): 14292834; 7703552
Reactant (.RCT): 4-bromo-2-chloro-1-[(1-methylethyl)oxy]benzene;
bis(pinacol)diborane
Product AN (.PAN): 21007747
Product (.PRO): 2-{3-chloro-4-[(1-methylethyl)oxy]phenyl}-
4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
Reference Count: 7

Reaction Details:

Reaction RID: 30015584.1
Reaction Classification (.CL): Preparation
Product AN (.PRAN): 21007747
Reactant AN (.RCAN): 13182466; 4267587
Solvent AN (.SOLAN): 605365
Product: 2-{3-chloro-4-[(1-methylethyl)oxy]phenyl}-
4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
Reagent: dichloro(1,1'-
bis(diphenylphosphanyl)ferrocene)palladiu
m(II)*CH₂Cl₂; potassium carbonate
Solvent: N,N-dimethyl-formamide
Temperature: 80 Cel
Yield: 11.8 g
Reference(s): 35460124: Patent, US 20130012491 A1

Reaction RID: 30015584.2
Reaction Classification (.CL): Preparation
Reactant AN (.RCAN): 3595449
Solvent AN (.SOLAN): 605365
Catalyst AN (.CAAN): 13182466
Catalyst: dichloro(1,1'-
bis(diphenylphosphanyl)ferrocene)palladiu
m(II)*CH₂Cl₂
Reagent: potassium acetate
Solvent: N,N-dimethyl-formamide
Temperature: 20 - 80 Cel
Reference(s): 20010910: Patent, WO 2011113309 A1

同じ反応識別データを持つ反応、つまり同じ反応物と生成物を持つ反応はすべて一つの反応 ID にまとめられます。ある反応を実施するための方法に関する詳細は、反応詳細データに収録されています。反応詳細データには、反応条件に関する情報が含まれます。文献に、収率、試薬、触媒、溶媒、時間、温度、反応タイプなどのさらなる情報があれば、反応詳細データに収録されます。



調査の目的に応じて、反応の詳細が反応分類フィールド (/RX.CL) に分類されます。例えば、PREPARATION や CHEMICAL BEHAVIOUR です。物質の合成方法に重点を置いた調査は、PREPARATION に分類されます。反応の熱力学や速度といった化学的挙動が主題の場合は、CHEMICAL BEHAVIOUR に分類されます。多段階反応 (MULTI-STEP REACTION) は、反応の中間体の構造が不明な特別なタイプの反応です。

```
=> e a/rx.cl
**** START OF FIELD ****
E3      0 --> A/RX.CL
E4      1171799      CHEMICAL BEHAVIOUR/RX.CL
E5      172025      MARKUSH REACTION/RX.CL
E6      10709632     MULTI-STEP REACTION/RX.CL
E7      23762931     PREPARATION/RX.CL
E8      5172426     PREPARATION (HALF REACTION)/RX.CL
**** END OF FIELD ****
```

反応情報の検索で知っておくとよい項目

注意: 2つの用語が同じ情報単位、反応検索では同一反応識別データに限定する場合には (P) 演算子を利用します。

検索例 4:

反応物と生成物の組み合わせ

```
S 1000/RX.PAN (P) 6831972/RX.RAN
```

例えば、反応分類の“preparation”を同一反応中で限定したい場合は (P) 演算子を利用します。

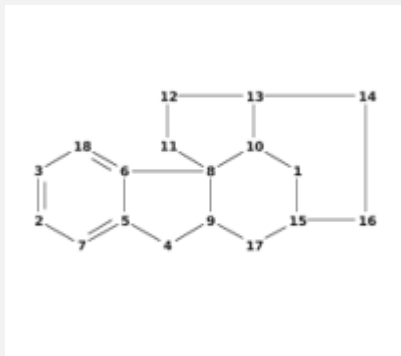
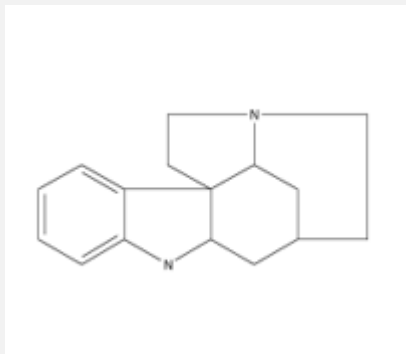
利用可能な検索フィールド:

検索フィールドコード	内容	入力例
RX.ID	反応 ID	RX.ID/FA.RX
PAN	生成物レコード番号	/RX.PAN
RAN	反応物レコード番号	/RX.RAN
CL	反応分類	/RX.CL
AAN	反応におけるすべてのレコード番号	/RX.AAN
PRO, RCT	生成物、反応物の化学物質名や分子式	EXPAND を利用

検索例 5:

Condyfolan 骨格を有する物質の合成検索

Uploading structure file: condyfolan



Node Attributes

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

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-15 2-3 3-18 4-5 4-9 5-6 5-7 6-8 6-18 7-2 8-9 8-10
9-17 10-1 10-13 11-8 11-12 12-13 13-14 14-16 15-16 15-17

Normalized Bonds : 2-3 3-18 5-6 5-7 6-18 7-2

Exact/Normalized Bonds : 1-15 4-5 4-9 6-8 8-9 8-10 9-17 10-1 10-13
11-8 11-12 12-13 13-14 14-16 15-16 15-17

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> s l1 ful

FULL SEARCH INITIATED 02:29:09 FILE 'REAXYSFILESU'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 49605936 ITERATIONS

3664 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.01.27

L2 3664 SEA SSS FUL L1

=> s l2 and preparation/rx.cl

23789332 PREPARATION/RX.CL

L3 1413 L2 AND PREPARATION/RX.CL

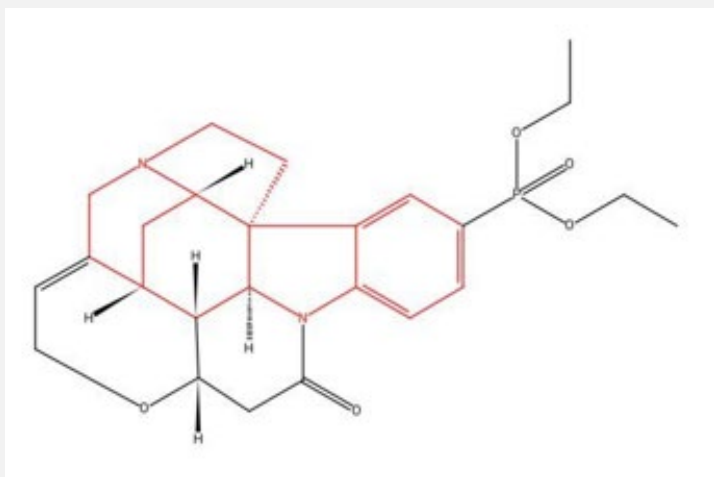
=> d

L3 ANSWER 1 OF 1413 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.

AN 57408373 REAXYSFILESU

MF C25 H31 N2 O5 P

CMF C25 H31 N2 O5 P
LSF C25H31N2O5P
INCHI IPEGNYNLMRQRS-XPJHAGJWSA-N
MW 470.505
MARKREF.CNT 0
REC 1
ED Entered STN: 1 Feb 2024
Last updated on STN: 1 Feb 2024



Reaction:

Reaction ID: 65760958
Reactant AN (.RAN): 5412178; 605759
Reactant (.RCT): 2-iodostrychnine; phosphonic acid diethyl ester
Product AN (.PAN): 57408373
Product (.PRO): C25H31N2O5P
Reference Count: 1

Reaction Details:

Reaction RID: 65760958.1
Reaction Classification (.CL): Preparation
Product AN (.PRAN) 57408373
Reactant AN (.RCAN): 105690; 16475472; 23015538; 3602276;
57408372; 7085968; 8128145
Solvent AN (.SOLAN): 3587155; 506104
Product: C25H31N2O5P
Reagent: 2,6-dimethylpyridine;...
Solvent: water; ethyl acetate
Temperature: 45 Cel
Yield: 65 percent
Reference(s): 130002965: Journal: Navratil, Rafael et al.,
Green Chem. (2023) Vol. 25, No.23, pp. 9779
- 9794

検索例 6:

物質のレコード番号(AN) 55280523 (anhydropereirine) を用いた反応検索

```
=> s 55280523/rx.aan
```

```
L5          14 55280523/RX.AAN
```

Required Accession Number is found in different fields of the reaction document
(two selected examples):

Reaction:

```
Reaction ID:          64122497
Reactant AN (.RAN):   55280574
Reactant (.RCT):      C24H19N3O6S
Product AN (.PAN):    55280523
Product (.PRO):       (-)-anhydropereirine
Reference Count:      1
```

...

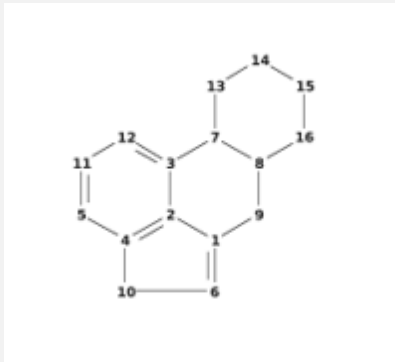
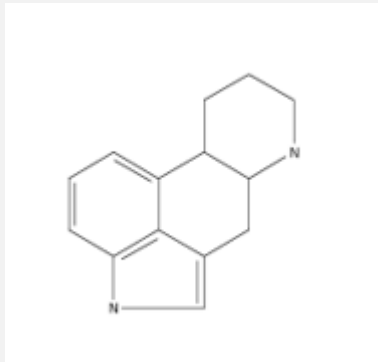
Reaction:

```
Reaction ID:          64122148
Reactant AN (.RAN):   55280523
Reactant (.RCT):      (-)-anhydropereirine
Product AN (.PAN):    27897521
Product (.PRO):       (-)-19,20-dihydrovalparicine
Reference Count:      1
```

検索例 7:

ergoline 誘導体の反応検索 (閉構造部分構造検索 (CSS))

Uploading structure file: ergoline



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-2 1-6 1-9 2-3 2-4 3-7 3-12 4-5 4-10 5-11 6-10 7-8 7-13 8-9
8-16 11-12 13-14 14-15 15-16

Normalized Bonds : 2-3 2-4 3-12 4-5 5-11 11-12

Exact/Normalized Bonds : 1-2 1-6 1-9 3-7 4-10 6-10 7-8 7-13 8-9 8-16 13-14
14-15 15-16

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16

L8 STRUCTURE UPLOADED

=> s 18 css ful

FULL SEARCH INITIATED 02:57:06 FILE 'REAXYSFILESU'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 49605936 ITERATIONS 10 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.46

L9 10 SEA CSS FUL L8

=> s 19 and rx.id/fa.rx

28414331 RX.ID/FA.RX

L10 2 L9 AND RX.ID/FA.RX

=> d 1-2

L10 ANSWER 1 OF 2 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.

AN 13328795 REAXYSFILESU

CN ergoline maleate

MF C4 H4 O4 . C14 H16 N2

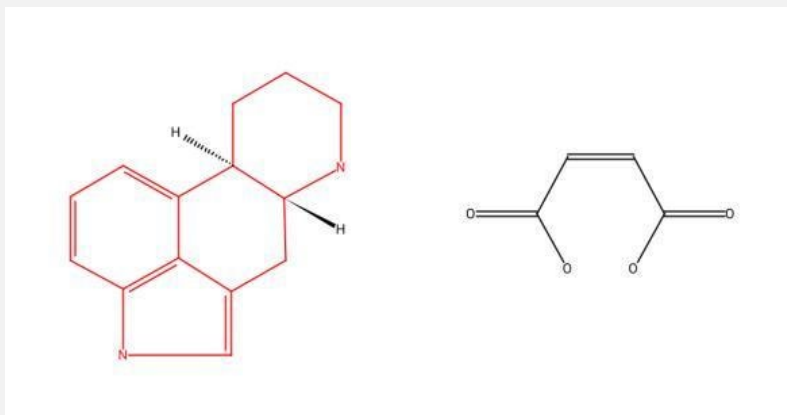
CMF C4 H4 O4; C14 H16 N2

LSF C4H4O4*C14H16N2

INCHI UHLMNQPSHNOIPZ-DNOYJIHNSA-N

AINCHI UHLMNQPSHNOIPZ-DOLCASHREDO

MW 328.368
MARKREF.CNT 0
REC 2
ED Entered STN: 15 Jul 2020
Last updated on STN: 19 Jan 2024



Reaction:

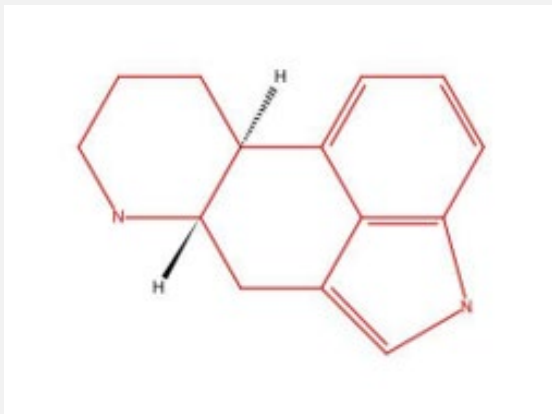
Reaction ID: 25325835
Product AN (.PAN): 13328795
Product (.PRO): ergoline maleate
Reference Count: 2

Reaction Details:

Reaction RID: 25325835.1
Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)
Reference(s): 32797: Patent, US 4197299 A

Reaction RID: 25325835.2
Reaction Classification (.CL): Preparation (half reaction)
Reference(s): 35474: Patent, US 4229450 A

L10 ANSWER 2 OF 2 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN 17738 REAXYSFILESU
CN (i)rac-ergoline; (i)rac-Ergolin;
(6aS,10aS)-4,6,6a,7,8,9,10,10a-Octahydro-indolo[4,3-fg]quinoline
SD heterocyclic
MF C14 H16 N2
CMF C14 H16 N2
LSF C14H16N2
INCHI RHGUXDUPXYFCTE-GWCFXTLKSA-N
AINCHI RHGUXDUPXYFCTE-GWCFXTLKBK
MW 212.294
MARKREF.CNT 0
REC 2
ED Entered STN: 14 Jul 2020
Last updated on STN: 19 Jan 2024



Reaction:

Reaction ID: 22298256
 Reactant AN (.RAN): 254518
 Reactant (.RCT): 7-nitro-benzo[*f*]quinoline...
 Product AN (.PAN): 17738
 Product (.PRO): *rac*-ergoline
 Reference Count: 1

Reaction Details:

Reaction RID: 22298256.1
 Reaction Classification (.CL): Multi-step reaction
 Reactant AN (.RCAN): 11342940; 3647881; 4933679
 Reagent: sodium hydroxide; sodium; iron(II) sulfate
 Reference(s): 705489: Journal: Jacobs et al., J. Biol.Chem. (1937) Vol. 120, 141,150p.

Reaction:

Reaction ID: 263473
 Reactant AN (.RAN): 183432; 969148
 Reactant (.RCT): 4*H*-indolo[4,3-*fg*]quinolin-5-one; butan-1-ol
 Product AN (.PAN): 17738; 20981
 Product (.PRO): *rac*-ergoline;
 (7-amino-1,2,3,4,4a,5,6,10b-octahydro-benzo[*f*]quinolin-6-yl)-methanol
 Reference Count: 1

Reaction Details:

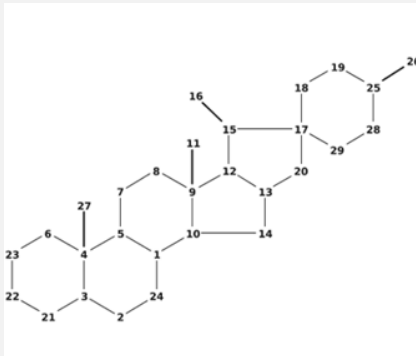
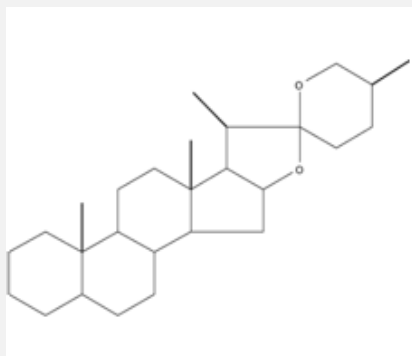
Reaction RID: 263473.1
 Reaction Classification (.CL): Preparation
 Reactant AN (.RCAN): 3647881
 Reagent: sodium
 Reference(s): 705489: Journal: Jacobs et al., J. Biol. Chem. (1937) Vol. 120, 141,150p.

検索例 8:

pirostate が生成物である反応を検索 (部分構造検索)

ANALYZE (最大 50,000 件のレコード番号)を使用し、/RX.PAN と組み合わせることで生成物に限定します。

Uploading structure file: spirostate



Node Attributes

Ring Nodes : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 12 13 14 15 17 18 19 20 21 22 23 24
25 28 29

Chain Nodes : 11 16 26 27

Bond Attributes

Ring Bonds : 1-10 1-24 2-3 2-24 3-4 3-21 4-5 4-6 5-1 5-7 7-8 8-9 9-10 9-12
10-14 12-13 12-15 13-14 13-20 15-17 17-18 17-20 17-29 18-19 19-25 21-22 22-23
23-6 25-28 28-29

Chain Bonds : 4-27 9-11 15-16 25-26

Exact Bonds : 4-27 9-11 15-16 25-26

Exact/Normalized Bonds : 1-10 1-24 2-3 2-24 3-4 3-21 4-5 4-6 5-1 5-7 7-8 8-9
9-10 9-12 10-14 12-13 12-15 13-14 13-20 15-17 17-18 17-20 17-29 18-19 19-25
21-22 22-23 23-6 25-28 28-29

Markush Attributes

Match Level (ATOM) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 12 13 14 15 17 18 19 20 21 22
23 24 25 28 29

Match Level (CLASS) : 11 16 26 27

Element Count Level (LIMITED) : 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17
18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29

L1 STRUCTURE UPLOADED

=> s 11 ful

FULL SEARCH INITIATED 04:34:39 FILE 'REAXYSFILESU'

FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 0 TO ITERATE

0.0% PROCESSED 49918784 ITERATIONS

5765 ANSWERS

SEARCH TIME: 00.00.31

L2 5765 SEA SSS FUL L1

=> ana 12 1-

L3 ANALYZE L2 1- AN : 5765 TERMS



=> s 13/rx.pan

L5 4329 L3/RX.PAN

=> d 4302

L5 ANSWER 4302 OF 4329 REAXYSFILESU COPYRIGHT 2024 ELSEVIER INC. on STN.
AN 45102 REAXYSFILESU
RN 547-01-3
CN tokorogenin
SD heterocyclic
MF C27 H44 O5
CMF C27 H44 O5
LSF C27H44O5
INCHI SRTGQBIWSBCVSM-RXWDRLOESA-N
AINCHI SRTGQBIWSBCVSM-RXWDRLOEBC
MW 448.643
MARKREF.CNT 0
REC 12
ED Entered STN: 15 Jul 2020
Last updated on STN: 19 Jan 2024

Structure image

Reaction:

Reaction ID:	5180294
Reactant AN (.RAN):	8307197
Reactant (.RCT):	arundinoside A
Product AN (.PAN):	45102
Product (.PRO):	tokorogenin
Reference Count:	1

Reaction Details:

Reaction RID:	5180294.1
Reaction Classification (.CL):	Preparation
Reactant AN (.RCAN):	1098214
Reagent:	hydrogenchloride
Time:	6 s
Reference(s):	6172139: Journal: Tandon, Mamta et al., J.

Indian

Chem. Soc. (1997) Vol. 74,
No.1, pp. 56 - 58



物性用語集

(アルファベット順)

音響特性 (Acoustic Properties (SOUND))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 音速 (Velocity of sound)
- 吸音 (Sound absorption)
- 音響緩和 (Acoustic relaxation)
- 超音波の性質 (Ultrasonic properties)
- 超音波速度 (Ultrasonic velocity)
- 極超音速度 (Hypersonic velocity)
- 超音波吸収 (Ultrasonic absorption)
- 極超音吸収 (Hypersonic absorption)

吸着 (Adsorption (ADSM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 吸着 (Adsorption)
- 吸着等温線 (Adsorption isotherm)
- 化学吸着 (Chemisorption)
- 吸着エンタルピー (Enthalpy of adsorption)
- 吸着分子のその他の物理的性質 (Further physical properties of the adsorbed molecule)
- 脱着 (Desorption)
- 吸脱着等温線 (Adsorption and desorption isotherms)
- 吸着速度 (Rate of adsorption)
- 脱着等温線 (Desorption isotherm(s))
- 脱着速度 (Rate of desorption)

会合 (Association (ASSM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 化合物との会合 (Association with compound)
- 安定度定数 (Stability constant)
- 会合エンタルピー (Enthalpy of association)
- 複合体の双極子モーメント (Dipole moment of the complex)
- 複合体のスペクトル (Spectrum of the complex)
- 複合体のその他の物理的性質 (Further physical properties of the complex)
- エクシプレックス生成 (Exciplex formation)
- 複合体の IR スペクトル (IR spectrum of the complex)
- 複合体の NMR スペクトル (NMR spectrum of the complex)
- 複合体の紫外/可視スペクトル (UV/VIS spectrum of the complex)

自然発火点 (Autoignition (AIT))

ある物質の自己着火温度または自己発火温度とは、炎や火花のような外部着火源なしに、その物質が通常の雰囲気下で自然発火する最低温度のことです。これは燃焼に必要な活性化エネルギーを供給するのに必要な温度です。自然発火温度、最低発火温度、着火温度、着火点とも呼ばれます。



共沸混合物 (Azeotropes (AZE))

このフィールドは多成分系データです。

共沸混合物とは、液相と気相の組成が等しい多成分溶液のことで、沸騰しても組成に変化はありません。

このフィールドは、他の物質との共沸混合物の情報が含まれます。

沸点 (Boiling Point (BP))

沸点とは、液体の蒸気圧が外圧に等しくなる温度です。通常の沸点は、蒸気圧が通常の大気圧に等しくなる温度です。

境界面現象 (Boundary Surface Phenomena (BSPM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 表面張力 (Surface tension)
- 表面ポテンシャル (Surface potential)
- 表面モーメント (Surface moment)
- 圧力-表面等温線 (Pressure-surface isotherm)
- 拡張圧 (Spreading pressure)
- 界面張力 (Interfacial tension)
- 化合物との接触角 (Contact angle with compound)
- 境界面現象 (Boundary surface phenomena)
- ミセル量 (Micellar weight)
- その他の表面物性 (Further surface properties)

体積粘性率 (Bulk Viscosity (BV))

体積粘性率は、1cm離れた2つの層間の単位速度差を維持するのに必要な単位面積当たりの力です。測定温度は BV.T フィールドで確認できます。

円偏光二色性 (Circular Dichroism (CDIC))

光学活性化合物は左右の偏光を不均等に吸収します。物質を透過した直線偏光の入射光が楕円偏光になる現象は円偏光二色性と呼ばれます。

複雑な相平衡 (Complex Phase Equilibria (CPEM))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 固-気 相平衡 (Solid-vapour phase equilibrium)
- 液-固-気 相図 (Liquid-solid-vapour phase diagram)
- 液-固-気 相平衡 (Liquid-solid-vapour phase equilibrium)
- 三重点 (Triple point)
- 四重点 (Quadruple point)
- 相平衡 (Phase equilibrium)

圧縮率 (Compressibility (CMP))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 断熱圧縮率 (Adiabatic compressibility)
- 等温圧縮率 (Isothermal compressibility)

立体配座 (Conformation (CNF))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。

- エネルギー障壁 (Energy barrier)
- 配座異性体間のエネルギー差 (Energy difference between conformers)
- 平衡定数 (Equilibrium constant)
- 平衡データ (Equilibrium data)



- 反応速度論 (Kinetics)

臨界密度 (Critical Density (CRD))

このフィールドには、臨界温度と臨界圧力で測定された物質の密度の数値が含まれます。

臨界ミセル濃度 (Critical Micelle Concentration (CMC))

このフィールドは多成分系データです。

臨界ミセル濃度とは、溶媒、界面活性剤、場合によっては他の溶質からなる系および定義された物理的環境において、ミセルが形成され始める濃度のことです。温度および溶媒の情報は CMC.T および CMC.SOL フィールドに収録されます。

結晶相転移点 (Crystal Phase Transition Point (CPTP))

結晶相転移点は、2つの結晶相（三斜晶、単斜晶、直方晶、立方晶、正方晶、六方晶）が平衡状態にある温度です。結晶相転移点フィールドには、物質の2つの結晶相が平衡状態にある温度が含まれます。

臨界圧力 (Critical Pressure (CRP))

臨界圧力とは、気体が臨界温度で液化するのに必要な最小圧力です。臨界圧力フィールドには、その物質の臨界圧力の値が含まれます。

臨界温度 (Critical Temperature (CRT))

臨界温度は、それを超える温度では気体が圧力によって液化できない温度です。臨界温度フィールドは物質の臨界温度の値が含まれます。

臨界体積 (Critical Volume (CRV))

臨界体積フィールドには、臨界圧力と臨界温度で測定された物質のモル体積の値が含まれます。

断面積 (Cross-Section (XS))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 光イオン化断面積 (Photoionization cross-section)
- 電子イオン化断面積 (Electron ionization cross-section)
- プロトンイオン化断面積 (Proton ionization cross-section)
- イオン化断面積 (Ionization cross-section)
- 衝突断面積 (Collision cross-section)

結晶相 (Crystal Phase (CRYPH))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 結晶化速度 (Rate of crystallization)
- 結晶多形 (Polymorphism)
- 遷移速度 (Rate of transition)
- 晶癖 (Crystal habit)
- 結晶成長 (Crystal growth)
- 結晶形態学 (Crystal morphology)
- 結晶構造決定 (Crystal structure determination (crystal lattice parameters))
- 格子面間隔 (Interplanar spacing)
- 固体状態の会合 (Association in the solid state)
- 固体状態の構造的性質 (Solid state structure properties)
- 融解圧力 (Melting pressure)
- 凝固点 (Freezing point)
- ガラス転移温度 (Glass transition temperature)
- 相図 (Phase diagram)
- 長面間隔 (Long spacing)



- 固体状態の再配向 (Reorientation in the solid state)
- スピン偏極 (Spin polarization)
- 核スピン変換 (Nuclear spin conversion)
- 固体の構造 (Structure of the solid)
- 単位格子の寸法 (Dimensions of the unit cell)

結晶性状の記述 (Crystal Property Description (CPD))

このフィールドには、結晶の色や形状など、結晶材料の外見に関する定性的な説明を与える用語が含まれます。

結晶空間群 (Crystal Space Group (CSG))

このフィールドには、関連用語を使用したさまざまな結晶空間群に関する情報が含まれます。

結晶系 (Crystal System (CSYS))

このフィールドには、立方晶、六方晶、三方晶、正方晶、単斜晶、三斜晶、直方晶の7つの結晶クラスに関する情報が含まれます。

分解点 (Decomposition Point (DP))

分解点は、物質が大気圧下で熱分解を起こす温度です。

液体密度 (Density of the Liquid (DEN))

密度は、特定の温度と圧力における単位体積あたりの質量として定義されます。このフィールドには、1気圧以下での結晶密度、1気圧で通常の沸点以下、飽和圧力で通常の沸点以上での液体密度の値が含まれます。測定温度や基準温度の情報は DEN.T および DEN.RT フィールドに収録されます。

化学的誘導体 (Chemical Derivative (CDER))

誘導体および付加化合物（塩、錯体、付加体、会合体、包接体）の特性が、個々の化合物としてすべてのデータとともに記録されます。別のケースでは、誘導体の名称や追加情報（塩の名称、塩の分子式、誘導体の融点など）が含まれます。誘導体のレコード番号は CDER.AN フィールドに収録されます。

特性評価に使われる物質の例：

- ピクリン酸塩 (Picrates)
- フェニルヒドラゾン (Phenylhydrazones)
- セミカルバゾン (Semicarbazones)
- アセチル誘導体 (Acetyl derivatives)
- ベンゾイル誘導体 (Benzoyl derivatives)
- オキシム (Oximes)

誘電率 (Dielectric Constant (DIC))

誘電率は、その物質を誘電媒体とするコンデンサーの容量と、真空中の同じコンデンサーの容量の比です。誘電率の値は、特定の温度と周波数で与えられます。温度や周波数の情報は DIC.T および DIC.F フィールドに収録されます。

静的誘電率 (Static Dielectric Constant (SDIC))

静的誘電率は、電界が変化しても平衡が保たれるような低い周波数における誘電率です。定数の値は、特定の温度で与えられます。温度の情報は SDIC.T に収録されます。

電気モーメント (Electrical Moment (EM))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 結合モーメント (Bond moment)
- 双極子モーメント (Dipole moment)
- 四極子モーメント (Quadrupole moment)



- 十六極子モーメント (Hexadecapole moment)
- 八極子モーメント (Octupole moment)

解離指数 (Dissociation Exponent (DE))

解離指数は平衡定数の逆数の対数（底10）として定義されます。このフィールドには解離指数の値（酸のpKa、塩基のpKb）が含まれます。解離基、温度、溶媒、測定方法、タイプに関する関連情報は、DE.GRP、DE.T、DE.SOL、DE.MET、DE.TYP フィールドに収録されます。

動的粘度 (Dynamic Viscosity (DV))

動的粘度は、せん断応力とせん断速度の比です。このフィールドには、特定の温度での物質の動的粘度の値が含まれます。温度の情報は DV.T フィールドに収録されます。

電気的データ (Electrical data (ELE))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 誘電体損失角 (Angle of dielectric loss)
- 臨界周波数 (Critical frequency (or wavelength))
- 誘電異方性 (Dielectric anisotropy)
- 誘電増大 (Dielectric increment)
- 誘電損失 (Dielectric loss)
- 誘電緩和時間 (Dielectric relaxation time)
- 誘電飽和 (Dielectric saturation)
- 緩和周波数 (Relaxation frequency)
- コールコールプロット (Cole-Cole diagram)
- 圧電性 (Piezoelectricity)
- 熱電気 (Thermoelectricity)
- 光電気学 (ペクレル効果) (Photoelectricity (Becquerel effect))
- 導電率 (Electrical conductivity)
- 光伝導性 (Photoconductivity)
- 誘電強度 (Dielectric strength)
- 電気的性質 (Electrical properties)
- 光起電力効果 (Photovoltaic effect)

電気的データ (Electrical Data (EDM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドに収録されている情報は ELE フィールドに収録されている情報に対応します。

電気的分極 (Electrical Polarizability (ELP))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 原子分極 (Atom polarization)
- 電子分極 (Electron polarization)
- 超分極率 (Hyperpolarizability)
- モル分極 (Molar polarization)
- 光学異方性 (Optical anisotropy)
- 分極率 (Polarizability)

電気化学的作用 (Electrochemical Behavior (ELCB))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 自己プロトン解離 (Autoprotolysis)
- 電離エンタルピー/プロトン化 (Enthalpy of dissociation (electrolytic) / protonation)
- 解離速度 (電気化学的)/プロトン化 (Kinetics of dissociation (electrolytic) / protonation)



- 中和エンタルピー (Enthalpy of neutralization)
- プロトン親和性 (Proton affinity)
- 電離/プロトン平衡 (Electrolytic dissociation / protonation equilibrium)
- 自己プロトン解離の熱力学的パラメータ (Thermodynamic parameters for autoprotolysis)
- 解離の熱力学的パラメータ (Thermodynamic parameters for dissociation / protonation)
- 解離の体積変化 (Volume change on dissociation)
- 脱プロトン化エンタルピー (Enthalpy of deprotonation)
- 酸性度 (Acidity)
- 塩基性度 (Basicity)
- プロトン化 (Protonation)
- 脱プロトン化 (Deprotonation)
- pK(R+) (pK(R+))
- 水溶液の pH (pH of aqueous solutions)
- 安定度定数 (Stability constant)
- 電気化学定性質 (Electrochemical properties)
- ポーラログラフィー (Polarography)
- 解離度 (Degree of dissociation)

電気化学セル材料 (Electrochemical Data (ELCH))

このフィールドには、その物質が電極材料、電解質材料として使用されたセル電位の値が含まれます。電気化学セルの電位場は関連した温度にリンクしています。電解質 (液体、固体または気体) と呼ばれるイオン性の媒体に浸漬し、外部導電体で接続された一対の電極は、電気化学セルを構成します。

電気化学的特性 (Electrochemical Characteristics (POT))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- サイクリックボルタンメトリー (Cyclic voltammetry)
- 酸化電位 (Oxidation potential)
- ポーラログラフィック電流/電位曲線 (Polarographic current/voltage curve)
- ポーラログラフィック半波電位 (Polarographic half-wave potential)
- 酸化還元電位 (Redox potential)
- 還元電位 (Reduction potential)
- ボルタンメトリー (Voltammetry)
- 光化学的半波電位 (Photo-electrochemical half-wave potential)

電気伝導率 (Electrolytic Conductivity (ELYC))

モル (または比) 電気伝導率は、溶液の単位体積あたりのモル (比の場合はグラム) あたりの抵抗率の逆数です。等価電気伝導率は、等量数あたりのモル電気伝導率です。

電子の結合 (Electron Binding (CIP))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 電子親和性 (Electron affinity)
- Core IP

立体配座のエネルギー障壁 (Energy Barriers (EBC))

このフィールドには、分子のある立体配座を別の立体配座に変換するために必要なエネルギー量の値が含まれます。立体配座は分子内の原子の空間的な配置として定義され、1つの結合を中心に回転することで相互交換することができます。結合タイプの情報は EBC.TYP フィールドに収録されます。

エネルギーデータ (Energy Data (ENEM))

このフィールドは多成分系データです。



このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 溶液エンタルピー (Enthalpy of solution)
- 混合エンタルピー (Enthalpy of mixing)
- 希釈エンタルピー (Enthalpy of dilution)
- 蒸発エンタルピー (Enthalpy of evaporation)
- 混合物熱容量 (Heat capacity of mixtures)
- 混合物エンタルピー (Enthalpy of mixtures)
- 混合物エントロピー (Entropy of mixtures)
- 過剰熱化学パラメータ (Excess thermochemical parameter)
- 混合部分モルエンタルピー (Partial molar enthalpy of mixing)
- 定圧熱容量 (Cp) (Heat capacity Cp)
- 定積熱容量 (Cv) (Heat capacity Cv)
- 過剰熱容量 (Cp) (Excess heat capacity Cp)
- モル過剰ギブス自由エネルギー (Molar excess Gibbs free energy)

解離エネルギー (Dissociation Energy (EDIS))

解離エネルギーとは、化合物 1 モル中の特定の結合を切断し、2 つのフラグメントを生成するのに必要なエネルギーとして定義されます。結合タイプの情報は DEIS.TYP フィールドに収録されます。

燃焼エンタルピー (Enthalpy of Combustion (HCOM))

燃焼エンタルピーとは、ある化合物 1 モルが大気圧、室温で過剰の酸素と完全に反応したときに生じるエンタルピーの変化のことで、生成物はこれらの条件下で自然な物理的状態にあるものとします。燃焼エンタルピーの値は、特定の温度と圧力で与えられます。温度および圧力の情報は HCOM.T および HCOM.P フィールドに収録されます。

生成エンタルピー (Enthalpy of Formation (HFOR))

生成エンタルピーは、通常の温度と圧力でそれぞれの元素から 1 モルの化合物が生成されるときエンタルピーの変化です。生成エンタルピーの値は、特定の温度と圧力で与えられます。温度および圧力の情報は HFOR.T および HFOR.P フィールドに収録されます。

融解エンタルピー (Enthalpy of Fusion (HFUS))

融解エンタルピーとは、一定の圧力で 1 モルの固体が液体に変化するときに生じるエンタルピーの変化です。

相転移エンタルピー (Enthalpies of Other Phase Transitions (HPT))

相転移エンタルピーとは、化合物をある相から別の相に変換するのに必要なエネルギーです。

水素化エンタルピー (Enthalpy of Hydrogenation (HHDG))

水素化エンタルピーとは、不飽和化合物 1 モルが大気圧、室温で過剰の水素と反応して完全に飽和したときに生じるエンタルピーの変化と定義されます。水素化エンタルピーの値は、特定の温度で与えられます。このフィールドには、関連する飽和化合物の AN (アクセッション番号) や化学物質名が収録されている場合があります。AN (アクセッション番号) および化学物質名は HHDG.AN および HHDG.CN フィールドに収録されます。

昇華エンタルピー (Enthalpy of Sublimation (HSB))

昇華の定義は一定の温度と圧力で固体が気体に直接相転移です。昇華エンタルピーは、特定の温度と圧力で 1 モルの物質が昇華する際に生じるエンタルピーの変化です。昇華エンタルピーの値は、昇華温度で与えられます。

蒸発エンタルピー (Enthalpy of Vaporization (HVAP))

蒸発エンタルピーは、一定の圧力で 1 モルの液体が気体に変化するときに生じるエンタルピーの変化です。蒸発エンタルピーの値は特定の温度と圧力で引用されています。温度または圧力の情報は HVP.T および HVP.P フィールドに収録されています。



ESR (電子スピン共鳴) スペクトル (ESR Spectroscopy (ESR))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- シグナル (Signals)
- ENDOR ENDOR (electron-nuclear double resonance)
- g 因子 (g-factor)
- ESR 線幅 (ESR linewidth)
- ESR 二次モーメント (ESR second moment)
- 電子スピン - 格子緩和時間 (Electron spin-lattice relaxation time)
- 電子スピン - スピン緩和時間 (Electron spin-spin relaxation time)
- 1H- 電子オーバーハウザー効果 (1H-electron Overhauser effect)
- CIDEP (CIDEP (chemically induced dynamic electron polarization))
- ELDOR (ELDOR (electron-electron double resonance))
- ESR (ESR)
- ESR - 超微細結合定数 (ESR-hyperfine coupling constants)
- 三重項状態の ESR (Triplet state ESR spectrum)
- 三重項状態の ESR スペクトル (Triplet state ESR)
- 三重項状態の ESR g 因子 (Triplet state ESR g-factor)
- 三重項状態の ESR 超微細結合定数 (Triplet state ESR hyperfine coupling constant(s))
- 三重項状態の ESR ゼロ磁場分裂パラメータ (Triplet state ESR zero-field splitting parameter(s))

爆発限界 (Explosion Limits (EL))

爆発限界は、爆発下限界 (LEL) から爆発上限界 (UEL) までの範囲です。

- 爆発下限界 (LEL) は、着火源に接触すると燃焼または爆発するときの空気中の蒸気の最低濃度です。LEL よりも低い濃度では、混合物の濃度が薄すぎる (燃料が不足している) 状態です。
- 爆発上限界 (UEL) は、着火源に接触すると燃焼または爆発するときの空気中の蒸気の最高濃度です。UEL を超える濃度では、混合物の濃度が濃い (すなわち酸素が不十分な) 状態です。

LEL と UEL は、通常空気中の蒸気の体積パーセントで表されます。

引火点 (Flash Point (FP))

引火点とは、液体が十分な量の蒸気を放出して液体表面上で着火可能な蒸気と空気の混合物を形成できる最低温度です。液体は引火点によって可燃性または引火性に分類されます。可燃性液体の引火点は 37.8 °C 未満であり、引火性液体では 37.8 °C 以上です。

りん光スペクトル (Phosphorescence Spectroscopy (PHOS))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- 最大値 (Maxima)
- りん光寿命 (Phosphorescence lifetime)
- りん光消失速度論 (Phosphorescence decay kinetics)
- りん光消失 (Phosphorescence quenching)
- りん光変更の程度 (Degree of polarization of phosphorescence)
- (Excimer phosphorescence)
- りん光遅延 (Delayed phosphorescence)
- 三重項状態のエネルギー (Triplet state energy)
- 三重項状態の漁師収率 (Triplet state quantum yield)
- 三重項状態の寿命 (Triplet state lifetime)
- 三重項状態の消失速度論 (Triplet state decay kinetics)
- 三重項状態の消失 (Triplet state quenching)
- 三重項状態の副準位研究 (Triplet state sublevel studies)



- 三重項状態からのエネルギー移動 (Energy transfer from triplet state)
- りん光励起スペクトル (Phosphorescence excitation spectrum)
- りん光量子収率 (Phosphorescence quantum yield)
- りん光 (Phosphorescence)

その他の情報 (物理的および化学的性質) (Further Information (FINFO))

このフィールドには、報告数が少ない物理的および化学的性質に関する文献情報が含まれます。

例:

- 触媒としての挙動 (Behavior as catalyst)
- 阻害剤としての挙動 (Behavior as inhibitor)
- コロイドの化学的挙動 (Colloid chemical behavior)
- 生態データ (Ecological data)
- 健康の保護 (Health protection)
- 自然界での発生 (Occurrence in nature)
- 重合 (Polymerization)
- 化合物表面の反応 (Reaction of compound surface)
- 物質クラスとの反応 (Reaction with substance classes)
- 溶媒和/水和 (Solvation / hydration)

FINFO、FINFO1-3 はあまり調査されない物性のコレクションです。名称中に数字が含まれていますが、技術的な理由によるものです (カテゴリーの1つである FURTHER PROPERTIES と混同しないでください)。

気相 (Gas Phase (GP))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- フガシティー (Fugacity)
- 気体の回転相関関数 (Rotational correlation function of the gas)
- 気体の中性子散乱 (Neutron scattering of the gas)
- 気体状態の会合 (Association in the gas phase)

定圧熱容量 Cp (Heat Capacity Cp (CP))

定圧熱容量とは、一定の圧力下で 1 モルの物質の温度を 1 °C 上げるの必要な熱量として定義されます。定圧熱容量の値は特定の温度で与えられます。定圧熱容量の値は CP フィールドには収録されます (Cp0 もご覧ください)。温度の情報は CP.T フィールドに収録されています。

定圧熱容量 Cp0 (Heat Capacity Cp0 (CP0))

標準定圧熱容量 (Cp0) とは、理想気体 1 モルを一定圧力で 1 °C 上昇させるのに必要な熱量として定義されます。定圧熱容量 Cp0 フィールドには、統計熱力学の計算から得られた理想気体の値を含みます (CP もご覧ください)。温度の情報は CP0.T フィールドに収録されます。

定容熱容量 Cv (Heat Capacity Cv (CV))

定容熱容量 Cv は、一定体積の 1 モルの物質の温度を 1 °C 上昇させるために必要な熱量と定義されます。温度の情報は CV.T フィールドに収録されます。

Henry 定数 (Henry Constant (HNC))

このフィールドは多成分系データです。

ヘンリー定数は、平衡状態のときの大気中の化学物質の濃度と水溶液中の濃度の比を表します。物質の揮発性や自然界での所在についての定性的な尺度として利用することができます。温度および溶媒の情報は HNC.T および HNC.SOL フィールドに収録されます。

IR (赤外) スペクトル (IR Spectroscopy (IR))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。



- スペクトル (Spectrum)
- バンド (Bands)
- 赤外線バンドの微細構造 (Fine structure of IR bands)
- 赤外線バンドの強度 (Intensity of IR bands)
- IRバンドの局在化 (Polarization of IR bands)
- 反射スペクトル (Reflection spectrum)
- 遠赤外線スペクトル (Far IR spectrum)
- 近赤外線スペクトル (Near IR spectrum)
- 遠赤外線バンド (Far IR bands)
- 近赤外線バンド (Near IR bands)
- 遠赤外線バンドの強度 (Intensity of far IR bands)
- 近赤外線バンドの強度 (Intensity of near IR bands)
- 赤外線バンドの回転線強度 (Intensity of rotational lines of IR bands)
- IRバンドの線幅 (Linewidth of IR bands)
- IRバンドの回転線線幅 (Linewidth of rotational lines of IR bands)
- IR二次モーメント (IR second moment)
- IR - ラジオ波二重共鳴 (IR-radiofrequency double resonance)
- IR - マイクロ波二重共鳴 (IR-microwave double resonance)
- 振動緩和 (Vibrational relaxation)
- 振動エネルギー移動 (Vibrational energy transfer)
- 倍音スペクトル (Overtone spectrum)
- 赤外線バンドの異方性 (Anisotropy of IR bands)
- フェルミ共鳴 (Fermi resonance)
- IR (IR)

原子間距離と角度 (Interatomic Distances and Angles (IDA))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 電子分布 (Electron distribution)
- 原子間距離と角度 (Interatomic distances and angles)

イオン化ポテンシャル (Ionization Potential (IP))

イオン化ポテンシャルとは、原子または分子から電子を無限距離まで完全に取り除くのに必要なエネルギーとして定義されます。イオン化ポテンシャルのフィールドには、エネルギー値と測定方法が含まれます。測定方法は IP.MET フィールドに収録されます。

等電点 pH (Isoelectric Point (IEP))

等電点とは、溶液中の物質が電氣的に中性になるときの pH 値として定義されています。

天然物からの単離 (Isolation from Natural Product (INP))

天然物からの単離フィールドには、化合物が単離された天然物 (植物、菌類、動物など) の名前や工業的に製造された天然物の名前が含まれます。収録源は化合物が単離できた時のみ収録されます。天然物や合成分の成分として機器分析 (例: GLC、TLC) によってよく知られている化合物の同定情報は含まれません。 (例: たばこの煙に含まれる pentan-2-one、希少植物のエーテル油に含まれるリモネン、樹皮からの抽出物の成分であるスクロース)。用語は統制されていないため、具体的な名称 (植物や動物の系統名など) がある場合にはそれを使用します。

動粘性率 (Kinematic Viscosity (KV))

動粘性率とは、流体の密度に対する粘性率の比として定義される係数です。動粘性率の値は特定の温度で与えられます。温度の情報は KV.T フィールドに収録されます。



液相の詳細 (Liquid Phase (LQPH))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 蒸発速度 (Rate of evaporation)
- 超冷却性 (Supercoolability)
- 液体の構造 (Structure of the liquid)
- 動径分布関数 (Radial distribution function)
- 液体状態における会合 (Association in the liquid state)
- 溶液中の事故解離 (Self-association in solution)
- 再配向の緩和時間 (Relaxation time for reorientation)
- 回転相関時間 (Rotational correlation time)
- 液晶の性質 (Liquid-crystalline properties)
- 液体の回転相関関数 (Rotational correlation function of the liquid)
- 液体の相関関数 (Correlation function of the liquid)
- 秩序パラメータ (Order parameter)
- 液晶の遷移温度 (Liquid-crystalline transition temperatures)

液-液系 (Liquid/Liquid Systems (LLSM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 液-液相図 (Liquid/liquid phase diagram)
- 溶解平衡 (Solution equilibrium)
- 臨界溶液温度 (Critical solution temperature)
- 分離温度 (Temperature of separation)
- 液相平衡 (Equilibrium of liquid phases)
- 溶媒 1 + 2 の間の分配 (Distribution between solvent 1 + 2)
- 溶解度図 (Solubility diagram)
- 臨界混合温度 (Critical mixing temperature(s))
- 臨界分離温度 (Critical demixing temperature(s))

固-液系 (Liquid/Solid Systems (LSSM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 液/固相図 (Liquid/solid phase diagram)
- 溶融相図 (Melting diagram)
- 凝固図 (Solidification diagram)
- 混合物の凝固点 (Solidification points of mixtures)
- 共晶融点 (Eutectic)
- 液相-固相平衡 (Liquid-solid phase equilibrium)
- 溶融点 (Melting points)
- ガラス転移温度 (Glass transition temperature(s))
- 相転移温度 (Phase transition temperature(s))

気-液系 (Liquid/Vapor Systems (LVSM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 液-気相図 (Liquid/vapor phase diagram)
- 液-気平衡 (Liquid/vapor equilibrium)
- 沸点図 (Boiling point diagram)
- 混合物の沸点 (Boiling points of mixtures)
- 混合物の蒸気圧図 (Vapor pressure diagram for the mixture)



- 成分の分圧 (Partial pressures of the components)
- 混合物の臨界データ (Critical data for mixtures)
- 混合物中の成分活量係数 (Activity coefficients of the components in the mixture)
- 蒸気圧 (Vapor pressure)
- 三重点 (Tricritical point)
- 臨界温度 (Critical temperature)
- 臨界圧力 (Critical pressure)
- 臨界密度 (Critical density)
- 臨界体積 (Critical volume)
- フガシティー (Fugacities)

発光分光法 (Luminescence Spectroscopy (LUM))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は/KW で検索できます。

- 赤外領域の放出スペクトル (Emission spectrum in the infrared region)
- 放射線ルミネッセンス (Radioluminescence)
- 音ルミネッセンス (Sonoluminescence)
- トリボルミネッセンス (Triboluminescence)
- 熱ルミネッセンス (Thermoluminescence)
- エレクトロルミネッセンス (Electroluminescence)
- レーザー発振特性 (Lasing properties)
- 発光寿命 (Luminescence lifetime)
- 発光消光 (Luminescence quenching)
- 発光の偏向解消度 (Degree of depolarization of luminescence)
- 発光量子収率 (Luminescence quantum yield)
- 発光 (Luminescence)
- 紫外/可視放出スペクトル (UV/VIS emission spectrum)
- 紫外/可視放出 (UV/VIS emission)
- X線放出スペクトル (X-ray emission spectrum)
- X線放出断面積 (X-ray emission cross-section)
- X線放出量子収率 (X-ray emission quantum yield)
- 発光スペクトル (Luminescence spectrum)

磁気的データ (Magnetic Data (MAG))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は/KW で検索できます。

- 磁化率異方性 (Anisotropy of magnetic susceptibility)
- 磁気モーメント (Magnetic moment)
- 磁気的性質 (Magnetic properties)
- 常磁性 (Paramagnetism)
- 体積磁化率 (Volume susceptibility)
- 回転磁気モーメント (Rotational magnetic moment)

磁化率 (Magnetic Susceptibility (MSUS))

磁化率は磁化と磁場の強さの比である。

質量分析法 (Mass Spectrometry (MS))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は/KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- 化学的イオン化 (Chemical ionization (CI))
- 衝突活性化 (Collisional activation)
- 電子 (衝撃) イオン化 (Electron impact (EI))



- EHI, EDHI, エレクトロハイドロダイナミックイオナイゼーション (Electrohydrodynamic ionization)
- 高速原子衝撃 (FAB) (Fast atom bombardment (FAB))
- FD, 電解脱離 (Field desorption)
- FI, 電界イオン化 (Field ionization)
- フラグメンテーションパターン (Fragmentation pattern)
- 高周波スパーク (High frequency spark)
- 炭素, 水素スクランブリング (Hydrogen and carbon scrambling)
- イオン運動エネルギースペクトル (Ion kinetic energy (spectrum) (IKE(S)))
- イオン電流データ (Ion current profiles)
- レーザー脱離 (Laser desorption)
- 準安定イオン (Metastable ions)
- 質量イオン運動エネルギー (Mass ion kinetic energy (MIKE))
- 負イオン分光法 (Negative ion spectroscopy)
- 負二次イオン (Negative secondary ions)
- 二次陽イオン (Positive secondary ions)
- 希ガスイオンの電荷移動 (Charge exchange with rare gas ions)
- 衝突誘起解離 (Collision-induced dissociation)
- 二重荷電イオン (Doubly charged ions)
- イオン-サイクロトロン共鳴 (Ion-cyclotron resonance)
- イオン衝撃 (Ion impact)
- 負イオン化学イオン化 (Negative chemical ionization)
- ニュートラルインパクト (Neutral impact)
- ペンニングイオン化 (Penning ionization)
- 光電子-光イオン同時発生 (Photoelectron-photoion coincidence)
- 光イオン化 (Photoionization)
- 二次イオン (Secondary ions)
- 負イオンの電荷移動 (Charge exchange with negative ions)
- 中性フラグメント (Neutral fragments)
- 表面イオン化 (Surface ionization)
- 選択イオンモニタリング (Single ion monitoring (SIMS))
- 液体二次イオン質量分析 (Liquid secondary ion mass spectrometry (LSIMS))
- 中性化再イオン化質量分析 (Neutralization-reionization mass spectrometry (NRMS))
- 脱離化学イオン化 (Desorption chemical ionization (DCI))
- 飛行時間質量分析 (Time-of-flight mass spectra (TOFMS))
- 多光子イオン化 (Multiphoton ionization (MPI))
- 共鳴多光子イオン化法 (REMPI) (Resonance enhanced multiphoton ionization (REMPI))
- 脱離電子イオン化 (Direct electron ionization (DEI))
- タンデム質量解析 (Tandem mass spectrometry)
- 衝突活性解離 (Collisionally activated dissociation (CAD))
- 出現電圧 (Appearance potentials)
- 陽イオンの電荷移動 (Charge exchange with positive ions)

機械的および物理的特性 (Mechanical and Physical Property (MECM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は/KW で検索できます。

- 混合の体積変化 (Volume change on mixing)
- 部分モル体積 (Partial molal volume)
- PVT (圧力, 体積, 温度) の相関 (PVT Relationship)
- ビリアル係数 (Virial coefficients)
- 断熱圧縮率 (Adiabatic compressibility)



- 等温圧縮率 (Isothermal compressibility)
- 過剰モル体積 (Excess partial molal volume)
- 見かけモル体積 (Apparent molal volume)
- 見かけモル比体積 (Apparent specific volume)
- 状態方程式の第二ビリアル係数 (Second virial coefficient(s) of the equation of state)
- 状態方程式の第三ビリアル係数 (Third virial coefficient(s) of the equation of state)
- 状態方程式の第四ビリアル係数 (Fourth virial coefficient(s) of the equation of state)
- 超音波速度 (Ultrasonic velocity)
- 極超音速速度 (Hypersonic velocity)
- 超音波吸収 (Ultrasonic absorption)
- 極超音速吸収 (Hypersonic absorption)
- 音響緩和時間 (Acoustic relaxation time)

機械的性質 (Mechanical Properties (MEC))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は/KW で検索できます。

- 比容 (Specific volume)
- 融解による体積の変化 (Volume change on melting)
- PVT (圧力, 体積, 温度) 相関 (PVT relationship)
- 状態方程式のビリアル係数 (Virial coefficients of the equation of state)
- 内圧 (Internal pressure)
- 弾力定数 (Elasticity constants)
- 圧縮率 (Compressibility)
- 粘度 (Viscosity)
- モル体積 (Molar volume)
- 状態方程式の第二ビリアル係数 (Second virial coefficient of the equation of state)
- 状態方程式の第三ビリアル係数 (Third virial coefficient of the equation of state)
- 状態方程式の第四ビリアル係数 (Fourth virial coefficient of the equation of state)

融点 (Melting Point (MP))

純物質の融点または凝固点は、その結晶が大気温度で液相と平衡状態にある温度です。融点が記載されている物質が結晶化した溶媒などの関連情報はMP.SOL フィールドに収録されています。

分子の変形 (Molecular Deformation (DFM))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は/KW で検索できます。

- 基本振動 (Fundamental vibrations)
- 力学定数 (Force constants)
- 回転定数 (Rotational constants)
- 遠心ひずみ定数 (Centrifugal distortion constant(s))
- コリオリカップリング定数 (Coriolis coupling constant(s))

変旋光 (Mutarotation (MUT))

変旋光は、光学活性物質から新たに調製された溶液中で、ある異性体から別の異性体への可逆的変換の結果として時間の経過とともに起こる旋光度の変化です。値は特定の波長で与えられます。

NMR (核磁気共鳴) スペクトル (NMR Spectroscopy (NMR))

NMR スペクトルのフィールドは、文献中に各物質のNMR スペクトルのケミカルシフトが記載されている場合に収録されます。このNMR フィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- ケミカルシフト (Chemical shifts)
- ダイナミック NMR (Dynamic NMR)



- INDOR (核間二重共鳴) (INDOR)
- シフト試薬とNMR (NMR with shift reagents)
- NMR 吸収の線幅 (Linewidth of NMR absorption)
- 液晶相のNMR (NMR in liquid-crystal phase)
- NOE (NOE)
- NMR 吸収の二次モーメント (Second moment of NMR absorption)
- スピン-格子緩和時間 (T1) (Spin-lattice relaxation time (T1))
- スピン-スピン緩和時間 (T2) (Spin-spin relaxation time (T2))
- 二次元 NMR (2D-NMR)
- 三次元 NMR (3D-NMR)
- 芳香族溶媒によるケミカルシフト (Aromatic solvent induced shifts)
- ラジカルコンタクトシフト (Radical contact shifts)
- 二重共鳴 (Double resonance)
- スピン-回転定数 (Spin-rotation constant)
- 1H-電子二重共鳴 (1H-electron double resonance)
- CIDNP (化学誘起動的核分極) (CIDNP)
- NMR (NMR)
- スピン-スピнкаップリング定数 (Spin-spin coupling constants)

NQR (核四重極共鳴) スペクトル (NQR Spectroscopy (NQR))

この NQR フィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 核四重極共鳴 (Nuclear quadrupole resonance)
- 核四重極カップリング定数 (Nuclear quadrupole coupling constants)
- 核四極共鳴 (Pure NQR)

光学データ (Optical Data (ODM))

このフィールドは多成分系データです。カー定数やその他の光学データなどの情報が含まれています。

旋光分散 (Optical Rotatory Dispersion (ORD))

旋光分散は、光の波長に伴う旋光度の変化として定義されます。この現象が測定された波長範囲は、ORD フィールドに収録されます。

旋光度 (Optical Rotatory Power (ORP))

旋光度とは、光学活性物質が偏光を屈折および吸収する能力のことです。これにより、偏光面が連続的に回転します。

光学 (Optics (OPT))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 結晶屈折率 (Crystal refractive indices)
- 固有複屈折 (Natural birefringence)
- 機械複屈折 (Mechanical birefringence)
- 磁気複屈折 (コットン-ムートン効果) (Magnetic birefringence (Cotton-Mouton effect))
- 電気複屈折 (Electric birefringence (Kerr effect))
- 回折 (Diffraction)
- 反射 (Reflection)
- レイリー散乱 (Rayleigh scattering)
- レイリー散乱の偏光解消度 (Degree of depolarization of Rayleigh scattering)
- レイリー散乱の等方性・異方性成分 (Iso- & anisotropic components of Rayleigh scattering)
- 平面曲線 (Plain curve)
- コットン効果 (異常曲線) (Cotton Effect (abnormal curve))
- 磁気旋光 (Magnetorotation)



- 磁気円二色性 (Magnetic circular dichroism)
- サーモクロミズム (Thermochromism)
- フォトクロミズム (Photochromism)
- 線二色性 (Linear dichroism)
- 変旋光定数 (Mutarotation coefficient)
- 光学的性質 (Optical properties)
- レイリー-ブリルアン散乱 (Rayleigh-Brillouin scattering)
- ベルデ定数 (Verdet constant)
- 流動複屈折率 (Flow birefringence)

その他の分光法 (Other Spectroscopic Methods (OSM))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 光電子スペクトル (Photoelectron spectrum)
- X線電子分光法 (ESCA)
- メスバウワー効果 (Mössbauer effect)
- 電子状態研究 (Electronic state studies)
- 電子衝撃スペクトル (Electron impact spectrum)
- オージェ電子スペクトル (Auger electron spectrum)
- 多重共鳴研究 (Multiple resonance studies)

その他の熱力学的データ (Other Thermochemical Data (OTHE))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 凝固点降下定数 (Cryoscopic constant)
- 沸点上昇定数 (Ebullioscopic constant)
- エンタルピー (Enthalpy)
- 定積燃焼熱 (Heat of combustion at constant volume)
- 自己解離エンタルピー (Enthalpy of self-association)
- 熱力学的性質 (Thermodynamic properties)
- 熱容量 (Heat capacity)
- エントロピー (Entropy)
- 比熱比 (Cp/Cv) (Heat capacity ratio Cp/Cv)
- ギブス自由エネルギー (Gibbs free energy)

オクタノール水分分配係数 (Partition octan-1-ol/water (POW))

このフィールドは多成分系データです。

分配係数定数 POW は、n-オクタノール相と水相の間の物質の平衡分配のことです。分配係数は2つの濃度の比であり、一般的に対数値 (log POW) で記述されます。POW および POW の対数 (log POW) の両方の値が収録され、また温度に関連する情報は POW.T フィールドに収録されます。

特許情報 (Patent Specific Data (PSD))

このフィールドには Prophetic 物質、関連マルクーシュ構造、特許記載位置の情報が含まれます。

蛍光分光法 (Fluorescence Spectroscopy (FLUS))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- 最大値 (Maxima)
- 蛍光放出断面積 (Fluorescence emission cross-section)
- 蛍光量子収率 (Fluorescence quantum yield)
- 蛍光寿命 (Fluorescence lifetime)
- 蛍光の消失速度論 (Fluorescence decay kinetics)



- 蛍光自己消光 (Fluorescence self-quenching)
- 蛍光の濃度消光 (Fluorescence concentration quenching)
- 蛍光消光 (Fluorescence quenching)
- 蛍光偏向の程度 (Degree of polarization of fluorescence)
- エキシマー蛍光 (Excimer fluorescence)
- 遅延蛍光 (Delayed fluorescence)
- 項間交差 [一重項→三重項] (Intersystem crossing [singlet->triplet])
- 一重項状態からのエネルギー移動 (Energy transfer from singlet state)
- 蛍光励起スペクトル (Fluorescence excitation spectrum)
- 蛍光強度 (Fluorescence intensity)
- 蛍光 (Fluorescence)

精製 (Purification (PUR))

精製のフィールドには物質の精製方法を表す単語やフレーズが含まれます。

化合物の精製に関するコメントは、その作業または大部分が該当する化合物に対する稀な精製方法が含まれている場合のみ収録されます。自然発生および天然物からの単離は Isolation from Natural Products (INP) のフィールドに収録されます。ラセミ体の分割は独立した合成としてはカウントされません。(ラセミ体を経由した) 対掌体の調整の説明の下に、精製の方法として記載されます。

量子化学計算 (Quantum Chemical Calculations (QCC))

量子化学計算のフィールドは物質に実行された量子化学計算を参照しています。このフィールドには、計算物性値が対応する量子化学計算方法 (QCC.MET) とともに収録されています。

ラマン分光法 (Raman Spectroscopy (RAS))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- バンド (Bands)
- ラマンバンドの偏向解消度 (Degree of depolarization of Raman bands)
- ハイパーラマンスペクトル (Hyper-Raman spectrum)
- ラマンバンドの線幅 (Linewidth of Raman bands)
- 低周波ラマンバンド (Low frequency Raman bands)
- 低周波ラマンスペクトル (Low frequency Raman spectrum)
- 前共鳴ラマンスペクトル (Preresonance Raman spectrum)
- ラマン強度 (Raman intensities)
- ラマン共鳴効果 (Raman resonance effect)
- ラマン二次モーメント (Raman second moment)
- ラマンバンドの回転微細構造 (Rotational fine structure of Raman bands)
- ラマン (Raman)

屈折率 (Refractive Index (RI))

屈折率とは真空中の光の速度と物質中の光の速度の比です。入射角の正弦と屈折角の正弦の比が、第二の媒質の屈折率です。屈折率は入射光の波長、温度、圧力によって変化します。特定の温度と波長における値を示します。

関連構造 (Related Structure (RSTR))

関連構造フィールドには引用された化合物の新しい調査によって異なる結果が得られた場合に物質に割り当てられたレコード番号 (AN) が含まれます。例えば立体化学に関するものです。以前の文献参照に関する情報と表題化合物に割り当てられた構成や立体配置が誤っているか、疑わしいかどうかについての注記も収録されています。

回転分光法 (Rotational Spectroscopy (ROT))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。



- マイクロ波スペクトル (Microwave spectrum)
- 回転スペクトル (Rotational spectrum)
- マイクロ波バンドの強度 (Intensity of microwave bands)
- シュタルク効果 (Stark effect)
- 回転-ラマンスペクトル (Rotational-Raman spectrum)
- マイクロ波バンドの線幅 (Linewidth of microwave bands)
- 回転バンドの強度 (Intensity of rotational bands)
- 回転バンドの線幅 (Linewidth of rotational bands)

反応物の反応情報 (RX.RAN)

この検索フィールドには反応物レコード番号 (RAN) が含まれます。

生成物の反応情報 (RX.PAN)

この検索フィールドには生成物レコード番号 (PAN) が含まれます。

自己拡散係数 (Self-Diffusion Coefficient (SDIF))

自己拡散は濃度勾配によって引き起こされる相互拡散 (自動拡散) と定義されます。この値は指定された温度で与えられます。自己拡散係数の温度に関連する情報は SDIF.T のフィールドに収録されます。

溶解度 (Solubility (SLB))

このフィールドは多成分系データです。

溶解度とは特定の温度で、ある溶質が一定量の溶媒に溶ける限界量をいいます。溶解度に関連する飽和、温度、溶媒、溶媒の比率の情報はそれぞれ SLB.SAT、SLB.T、SLB.SOL、SLB.RAT のフィールドに収録されます。

溶解度積 (Solubility Product (SLBP))

このフィールドは多成分系データです。

溶解度積とは指定された温度での物質の飽和溶液中における物質のイオンの濃度の積です。溶解度積に関連する温度、溶媒、溶媒の比率の情報はそれぞれ SLBP.T、SLBP.SOL、SLBP.RAT のフィールドに収録されます。

溶解作用 (Solution Behavior (SOLM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 溶解能力 (Dissolving capacity)
- 混和性 (Miscibility)
- 可溶化能 (Solubilizing)
- 相互溶解度 (Mutual solubility)
- 溶解速度 (Rate of dissolution)
- 溶解度 [ブンゼン吸収定数] (Solubility [Bunsen absorption coefficient])
- 溶解度 [ヘンリー定数] (Solubility [Henry constant])
- 溶解度 [オストワルド吸収定数] (Solubility [Ostwald absorption coefficient])

昇華点 (Sublimation (SP))

昇華点は固体上の蒸気圧が所定の圧力に等しくなる温度として定義されます。

物質ラベル (Substance Label (LB))

物質ラベルのフィールドには、検索対象の物質の特許記載位置が掲載されます。

表面張力 (Surface Tension (ST))

表面張力とは気体と液体の境界において新たな単位領域をつくるのに必要な単位長さ当たりの力のことです。表面張力の温度に関連する情報は ST.T フィールドに収録されます。



熱膨張 (Thermal Expansion (TEC))

熱膨張係数は、温度変化に対する単位長さあたりの長さの変化、または単位体積あたりの体積の変化の比率です。このフィールドには熱膨張係数は、温度と膨張の種類とともに収録されています。

液相転移点 (Transition Point(s) of Liquid Modification (LPTP))

液相転移点とは化合物が液相で相転移する温度のことです。

輸送データ (Transport Data (TRAN))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。

- 熱伝導率 (Thermal conductivity)
- 回転拡散係数 (Rotational diffusion constant(s))
- 熱拡散 (Thermal diffusion)

輸送現象 (Transport Phenomena (TRAM))

このフィールドは多成分系データです。

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- 粘度 (Viscosity)
- 拡散 (Diffusion)
- 熱拡散 (Thermal diffusion)
- 動的粘度、動粘性定数 (Dynamic viscosity)
- 動粘性率 (Kinematic viscosity)
- 体積粘性率 (Bulk viscosity)
- 拡散定数 (Diffusion coefficient)
- 二元拡散係数 (Binary diffusion coefficient)
- 相互拡散 (Interdiffusion)
- 熱拡散因子 (Thermal diffusion factor)
- 熱拡散 (Soret 係数) (Thermal diffusion (Soret coefficient))
- 拡散熱効果 (デュフォー効果) (Diffusion thermo effect (Dufour effect))
- 熱伝導率 (Thermal conductivity)

三重点 (Triple Point (TP))

三重点はその物質の三つの相が平衡状態で存在する状態図の点であり、その点の温度と圧力によって定義されます。このフィールドには物質の温度が収録されています。

紫外/可視分光法 (UV/VIS Spectroscopy (UVS))

このフィールドには下記の物性情報が含まれます。物性名は /KW で検索できます。

- スペクトル (Spectrum)
- 最大吸収 (Absorption maxima)
- 反射スペクトル (Reflection spectrum)
- 一重項-三重項バンド (Singlet-triplet band)
- ソルバトクロミズム (Solvatochromism)
- 三重項-三重項バンド (Triplet-triplet band)
- 真空-紫外スペクトル (Vacuum-UV spectrum)
- 吸収スペクトル (Absorption spectrum)
- 吸収断面積 (Absorption cross-section)
- UV 励起状態吸収 (UV excited state absorption)
- 紫外二光子吸収 (UV two-photon absorption)
- 三重項-一重項吸収スペクトル (Triplet-singlet absorption spectrum)
- 光-音 UV スペクトル (Opto-acoustic UV spectrum)
- 紫外/可視反射最大値 (UV/VIS reflection maximum(a))



- X線吸収スペクトル (X-ray absorption spectrum)
- X線吸収断面積(X-ray absorption cross-section)
- バンド異方性 (Band anisotropy)
- 振動子強度 (Oscillator strength)
- 紫外/可視 (UV/VIS)

蒸気圧 (Vapor Pressure (VP))

純粋な液体または固体の蒸気圧は、ある温度で平衡状態になったときの蒸気の圧力です。蒸気圧に関連する温度はVP.Tフィールドに収録されます。

CAS is a leader in scientific information solutions, partnering with innovators around the world to accelerate scientific breakthroughs. CAS employs over 1,400 experts who curate, connect, and analyze scientific knowledge to reveal unseen connections. For over 100 years, scientists, patent professionals, and business leaders have relied on CAS solutions and expertise to provide the hindsight, insight, and foresight they need so they can build upon the learnings of the past to discover a better future.

CAS is a division of the American Chemical Society.

Connect with us at cas.org

