

STN INTERNATIONAL

リフレッシュセミナー

物性情報 2009

* GMELIN97 ファイルは ReaxysFile ファイルに統合されました,
DETERM ファイルは, サービスを中止しました.

目次

A REGISTRY ファイル

STN における物性情報	1
基本的な検索の流れ	2
参考: サマリーシート中の物性情報の探し方 (STNGUIDE ファイル)	3
概要	4
レコード例	6
表示形式	12
検索方法	13
検索可能な物性値	14
検索可能な物性値 (ETAG)	17
検索例 1	23
検索例 2	26
検索例 3	29

B ReaxysFile ファイル

概要	33
レコード例	34
表示形式	40
検索方法	42
参考: 複数の物質がヒットした場合	43
検索可能な物性値 (サマリーシート)	44
検索可能な物性値 (キーワード)	54
検索例 1	66
検索例 2	68
参考: 検索と回答表示時の単位	71

A REGISTRY ファイル

A REGISTRY ファイル

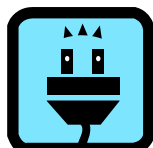
STN における物性情報

■ STN における物性情報

- STN では、無機化合物、有機化合物、ポリマーの化学的、物理的、電気的、力学的物性等に関する情報を収録したデータベースを搭載している。



引火点
爆発上限など



誘電率
絶縁耐力など



沸点、融点
溶解度など



剛性率
体積弾性率など



キュリー温度
磁化率

- STN では、これらの物性の数値情報、あるいは物性が収録された文献情報を入手することができる。
- 特定の物性を持つ化合物を検索することができる。

■ STN に収録されている代表的な物性データベース

(2011 年 1 月現在)

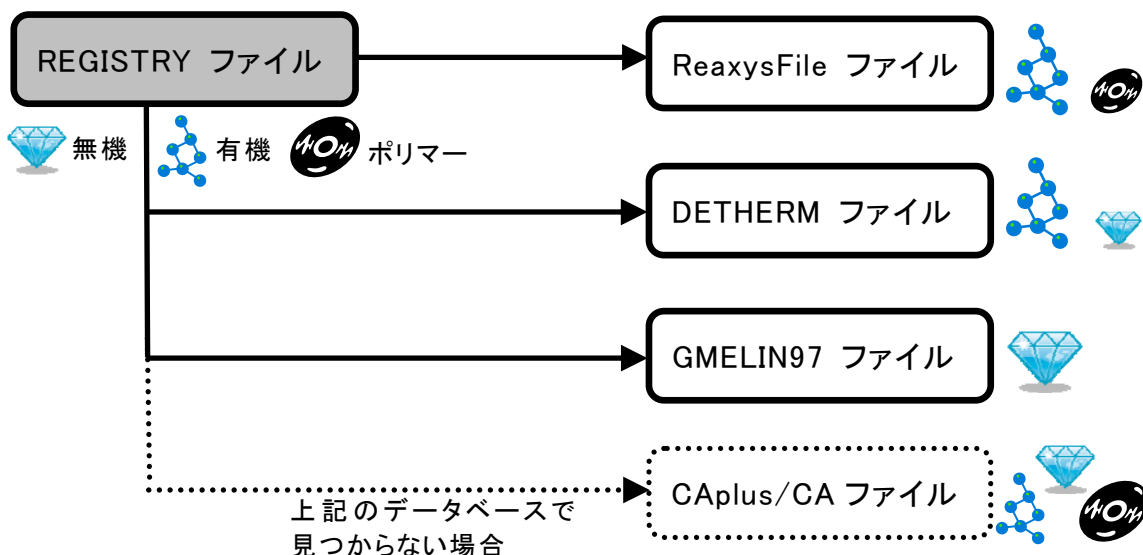
ファイル名	概要	収録単位
REGISTRY	CAplus/CA ファイルに索引された化学物質および米国、EC、カナダの既存化学物質台帳に収録された化学物質、タンパク質、核酸に関する実測物性値、スペクトル ($^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$, $^{19}\text{F-NMR}$, $^{29}\text{Si-NMR}$, $^{31}\text{P-NMR}$, IR, マス, ラマン), 参照文献タグ, 予想物性値	物質単位
ReaxysFile	有機化合物および有機金属化合物の物性データ, 合成・反応情報, 参考文献情報	物質単位 反応単位
GMELIN97	無機化合物および有機金属化合物の物性データ, 合成・反応情報, 参考文献情報	物質単位
DETERM	純物質および組成既知の混合物に関する化学プラント設計用の熱物性データ, 文献情報	文献単位 データ単位
ICSD	無機化合物の結晶構造データ (結晶対称群, 単位格子, パラメータ, 原子座標, 温度因子等), 書誌情報	物質単位
MRCK	化学物質, 医薬品, 生体物質, 農薬, 天然物の化学的, 物理的, 毒性データ. 冊子体 Merck Index 13 版に対応.	物質単位
SpecInfo	有機化合物および有機金属化合物のスペクトルデータ (NMR, IR, MS)	物質単位
CHEMSAFE	可燃性物質およびその混合物の評価済み安全性関連物性データ, 文献情報 【リフレッシュセミナー安全性情報 (2008)】	物質単位 文献単位
INSPEC	物理学, 電気工学, エレクトロニクス, 制御理論, 制御技術, コンピュータ, 計算機利用に関する文献情報	文献単位

A REGISTRY ファイル

基本的な検索の流れ

■ 物質の物性情報を検索する方法

- データベースによって収録されている物性データは異なるので、複数のデータベースを用いて検索を行うと目的の物性を見つけ出す確率が上がる。



ある物質の物性データ検索では、原則として REGISTRY ファイルから始めるとよい。

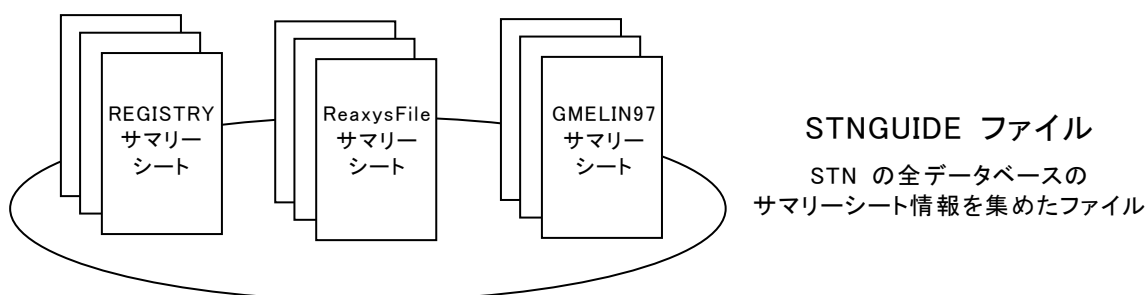
- REGISTRY ファイルは、無料で物性データの存在を確認できる上に、ほかのデータベースと比較しても、表示料金が安い。
- REGISTRY ファイルから、クロスオーバー検索で目的の物質の物性を検索することができる
 - ただし、ReaxysFile ファイルと GMELIN97 ファイルは CAS 登録番号付与率が低いので、ヒットしなかった場合は、それぞれのファイルで検索する必要がある。
- REGISTRY, ReaxysFile, GMELIN97, DETHERM ファイルで物性データが見つからない場合、CAplus/CA ファイルを用いて文献情報から探し出す方法もある。
 - REGISTRY ファイルには実測物性値（実際に測定された値）の他に、予想物性値（ソフトウェアによって算出された値）も含まれている。

A REGISTRY ファイル

基本的な検索の流れ

参考： サマリーシート中の物性情報の探し方 (STNGUIDE ファイル)

- 各データベースのサマリーシートで、目的の物性に関する検索フィールドが存在するかを確認してから検索する。
 - ・ STNGUIDE ファイルを用いると、各データベースのサマリーシート内の情報を横断的に検索できて便利。



```
=> FILE STNGUIDE                ← STNGUIDE ファイルに入る

=> E SUBLIMATION/SFIELD, DFIELD ← 検索フィールドと表示フィールドを調査する
E1      1      SUBJECT HEADING ADHESIVES ABSTRACTS (9)/SFIELD
E2      1      SUBJECT HEADING RAPRA (9)/SFIELD
E3      0 -->  SUBLIMATION/SFIELD
E4      2      SUBLIMATION/DFIELD
E5      9      SUBSECTION/SFIELD
:

=> S E4                          ← E 番号で検索する (無料)
L1      2      SUBLIMATION/DFIELD

=> D 1-2 DBN HIT                  ← ファイルの名前とヒットした部分を表示する (無料)

L1 ANSWER 1 OF 2 STNGUIDE COPYRIGHT 2011 ACS on STN
DBN REAXYSFILE - REAXYSFILE of Organic Compounds
DFIELD =====
DISPLAY and PRINT Formats
:
FORMAT |          CONTENT
=====+=====
ADSM   |Adsorption (MCS)          |D ADSM
:
SP     |Sublimation Point         |D SP
:
L1 ANSWER 2 OF 2 STNGUIDE COPYRIGHT 2011 ACS on STN
DBN GMELIN97 - Gmelin Handbook of Inorganic Chemistry
DFIELD =====
:
:
```

ReaxysFile と GMELIN97 ファイルがヒット
* 実際は REGISTRY に参照文献タグ情報が、
DETERM ファイルにも収録されている



ただし、サマリーシートにない物性はこの方法で確認できないので注意。
(例：REGISTRY ファイルの参照文献タグや、DETERM ファイルの多くの物性データ)

A REGISTRY ファイル

概要

- REGISTRY ファイルは、有機化合物、無機化合物、ポリマー、核酸配列、タンパク質配列情報などを収録する世界最大級の化学物質のデータベースである。各物質について、CAS 登録番号、構造、名称、物性情報等を収録している。

(2009 年 1 月現在)

レコード単位	化学物質単位
物質数	102,500,000 物質
収録源	<ul style="list-style-type: none"> Chemical Abstracts (CAplus ファイル) に索引されているすべての特定化学物質 CASREACT ファイルに収録されている反応中の反応関与物質 米国 (TSCA), カナダ (DSL, NDSL), EC (EINECS) の化学物質規制法に基づく既存化学物質台帳に収録された物質 公的機関や企業からの依頼により CAS 登録番号を付与した物質 (CAS 登録番号サービス) 登録システムの開始時に各種ハンドブック類から収録された化学物質 化合物ライブラリー (CHEMCATS ファイル) から登録された化学物質 他のデータベースからの化学物質情報 <p style="text-align: right;">など</p>
更新頻度	毎日更新, アラートは隔週実行
物性の種類	<p>生態学データ (生物濃縮係数など)</p> <p>薬理学データ (LD₅₀, 最小発育濃度 など)</p> <p>電氣的性質 (コンダクタンス, 比電気抵抗など)</p> <p>磁氣的性質 (磁化率, 磁気モーメントなど)</p> <p>光学的性質 (変旋光, 旋光度, 屈折率, コットン効果など)</p> <p>スペクトルデータ (NMR スペクトル, ESR スペクトル, ラマンスペクトルなど)</p> <p>相変化 (融点, 沸点, 昇華点など)</p> <p>放射性物性データ (ベータ崩壊エネルギー, 半減期など)</p> <p>熱力学的物性 (生成エンタルピー, ギブス自由エネルギー, デバイ温度など)</p> <p>材料物性 (接着強度, 延性, クリープ率, ヤング率, 引火点など)</p> <p>原子・分子構造 (バンドギャップ, 結合角, 結晶格子パラメータなど)</p> <p>溶液化学 (臨界ミセル濃度, 溶解度, 曇点など)</p> <p style="text-align: right;">など</p>
物性の数	<p>13 種類 (実測物性値), 8 種類 (オンラインで表示できるスペクトルデータ)</p> <p>約 180 種類 (参照文献タグ: 参照文献情報のみ収録)</p> <p>14 種類 (予想物性値: ソフトウエアで計算された物性値)</p>

REGISTRY ファイルの物性データの特徴

- 有機物質, 無機物質, ポリマーと様々な物質に関する物性データが収録されている。
- スペクトルデータがオンラインで表示できる。
- 他の物性データベースと比較してデータの速報性に優れ, また表示料金が安い。



経済的に物性情報を表示できるデータベース

A REGISTRY ファイル

概要

■ REGISTRY ファイルで収録している物性データのタイプ

(2009 年 1 月現在)

	実測物性値	参照文献タグ (実測物性)	スペクトル データ	予想物性値 (計算物性値)
分類	実際に測定されたデータ			ソフトウェアに基づく データ
表示 フィールド	EPROP	ETAG	SPEC	PPROP (CALC)
収録 物質数	220 万件	250 万件	48 万件	3160 万件
収録 物性数	320 万件	740 万件	71.3 万件	20 億件
物性の 種類	相変化に関する 物性 (沸点, 比重など) 電気物性 (コンダクダンス, 電気伝導率など) 材料物性 (ガラス転移点, 引張強度) 薬理学物性 (LD ₅₀)	スペクトルデータ 材料物性 原子・分子構造 界面物性 相変化に関する 物性 熱力学的物性 音・音波に関する 物性 電氣的物性 磁性的物性 生物・毒性的物性 放射化学的物性 光学的物性 など	各種 NMR (¹³ C, ¹ H, ¹⁹ F, ³¹ P, ²⁹ Si) IR スペクトル ラマンスペクトル マスマスペクトル	相変化に関する 物性 (沸点, 蒸気圧 など) 分子構造に関する 物性 (水素受容基数 など) 生物・毒性的物性 (LOG D, LOG P など)
物性の数	13 種類	約 180 種類	8 種類	20 種類
対象化学 物質	単成分および 多成分物質	単成分および 多成分物質	単成分および 多成分物質	主に単成分物質
数値検索 機能	○	× (数値データは未収録)	× (数値データは未収録)	○

有機化合物だけでなく、無機物質やポリマーの物性情報も収録している

■ REGISTRY ファイルの実測物性データの特徴 (EPROP, ETAG)

- ・ CAplus/GA ファイルで索引された物質に関する物性情報を REGISTRY ファイルに収録。
- ・ CAplus/GA ファイルで文献を収録するのとほぼ同時期に REGISTRY ファイルに収録されるので、ハンドブックや他の情報源と比べて速報性に優れる。
 - スペクトルデータについては、不定期に別途情報を入力している
 - CA 収録雑誌以外からも不定期に物性データを追加している
- ・ 実測物性値を収録できる場合は、EPROP に数値を収録する。同一文献から、実測物性値と参照文献タグ (ETAG) の両方のフィールドに重複して収録されることはない。
- ・ 実測物性値を収録できない場合は、参照文献タグ (ETAG) を収録する。

A REGISTRY ファイル

レコード例

レコード構成

■ レコード表示例 (FIDE 表示形式)

```

RN 67-56-1 REGISTRY          ← CAS 登録番号
ED Entered STN: 16 Nov 1984  ← 入力日
CN Methanol (CA INDEX NAME)  ← 化合物名 (CA 索引名)
OTHER NAMES:                 ← その他の化合物名
CN Bieleski's solution
CN Carbinol
CN Methanol cluster
CN Methyl alcohol
CN Methyl hydroxide
CN Methylol
CN Monohydroxymethane
CN NSC 85232
CN Solutions, Bieleski's
CN Wood alcohol
DR 1173023-83-0, 54841-71-3  ← 削除した CAS 登録番号
MF C H4 O                    ← 分子式
CI COM                        ← クラス識別子
LC STN Files: ANABSTR, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CAPLUS, CASREAC
  CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CHEMSAFE, CIN, CSNB, DDFU, DET
  DRUGU, EMBASE, ENCOMPLIT, ENCOMPLIT2, ENCOMPAT, ENCOMPAT2, GME
  IFICDB, IFIPAT, IFIUBD, IPA, MEDLINE, MRCK*, MSDS-OHS, PS, REAXY
  SPECINFO, TOXCENTER, TULSA, ULIDAT, USAN, USPAT2, USPATFULL, VET
  ↑ CAS 登録番号所在
  (*File contains numerically searchable property data)
Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**
  (**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)
  
```

H₃C-OH

← 構造図

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

← 物性データの存在

161679 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE) ← CA 文献数
 2274 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE ← 同上 (非特定誘導体)
 162170 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE) ← CAplus ファイルの文献数

化学物質同定情報

CAS 登録番号
 分子式等
 名称
 構造図
 など

EPROP (実測物性値)

物性 A
 物性 B
 :
 参考文献

SPEC (スペクトル)

スペクトル A
 参考文献
 スペクトル B
 参考文献
 :

ETAG (参照文献タグ)

物性 A
 物性 B
 :
 参考文献

PPROP (予想物性値)

物性 A
 物性 B
 :
 ソフトウェアのバージョン

Experimental Properties (EPROP)

実測物性値 (EPROP) (165 円)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	93 deg C	Press: 14 Torr	(1) CAS
Boiling Point (BP)	78 deg C		(2) CAS
Boiling Point (BP)	65 deg C		(3) CAS
Boiling Point (BP)	65 deg C		(4) CAS
Boiling Point (BP)	65 deg C		(5) CAS
Boiling Point (BP)	64.8 deg C		(6) CAS
Boiling Point (BP)	64.7-65.2 deg C	Press: 760 Torr	(7) CAS
Boiling Point (BP)	64.7 deg C		(8) CAS
		:	
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(33) WSS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(34) AIST
Density (DEN)	1 g/cm**3	Temp: 25 deg C	(35) CAS
Density (DEN)	0.81009 g/cm**3	Temp: 0 deg C	(36) CAS
		:	

注記 (NOTE) の番号は
 表下の文献番号に対応

A REGISTRY ファイル

レコード例

		実測物性値 (EPROP) (続き)	
Electric Conductance (ECON)	2.0e-7 Siemens	Temp: 25 deg C	()
Glass Transition Temperature (TG)	91 deg C		(54) CAS
Glass Transition Temperature (TG)	-155 deg C		(55) CAS
Glass Transition Temperature (TG)	-163 deg C		(56) CAS
Glass Transition Temperature (TG)	-170.7--165.7 deg C		(57) CAS
Glass Transition Temperature (TG)	-173 deg C		(58) CAS
IR Absorption Spectra	Spectrum		(34) AIST
IR Absorption Spectra	Spectrum		(59) BIORAD
IR Absorption Spectra	Spectrum		(33) WSS
Mass Spectra	Spectrum		(33) WSS
Mass Spectra	Spectrum		(34) AIST
Median Lethal Dose (LD50)	11700 mg/kg	Orgn: rat Rte: intragastric	(60) CAS
Median Lethal Dose (LD50)	8700 mg/kg	Orgn: rat Rte: intragastric	(60) CAS
Median Lethal Dose (LD50)	5628 mg/kg	Orgn: rat Rte: oral	(61) CAS
Melting Point (MP)	356 deg C (decomp)		(62) CAS
Melting Point (MP)	186 deg C		(63) CAS
Melting Point (MP)	179 deg C	Solv: ethanol (64-17-5)	(64) CAS
Melting Point (MP)	115 deg C		(65) CAS
:			
Optical Rotatory Power (ORP)	+1.3286 deg	Temp: 20 deg C Wavlen: 589.3 nm	(23) CAS
Optical Rotatory Power (ORP)	-9 deg	Solv: ethanol (64-17-5) Temp: 22 deg C Wavlen: 589.3 nm	(67) CAS
:			
Proton NMR Spectra	Spectrum		(34) AIST
Raman Spectra	Spectrum		(34) AIST
Refractive Index (RI)	1.40		(74) CAS
Refractive Index (RI)	1.3614	Temp: 20 deg C Wavlen: 589.3 nm	(7) CAS
Refractive Index (RI)	1.33303	Temp: 25 deg C Wavlen: 4358 nm	(36) CAS
:			

* To search for this CAS RN in other CAS databases, use the CAS RN plus other names from its Registry record.

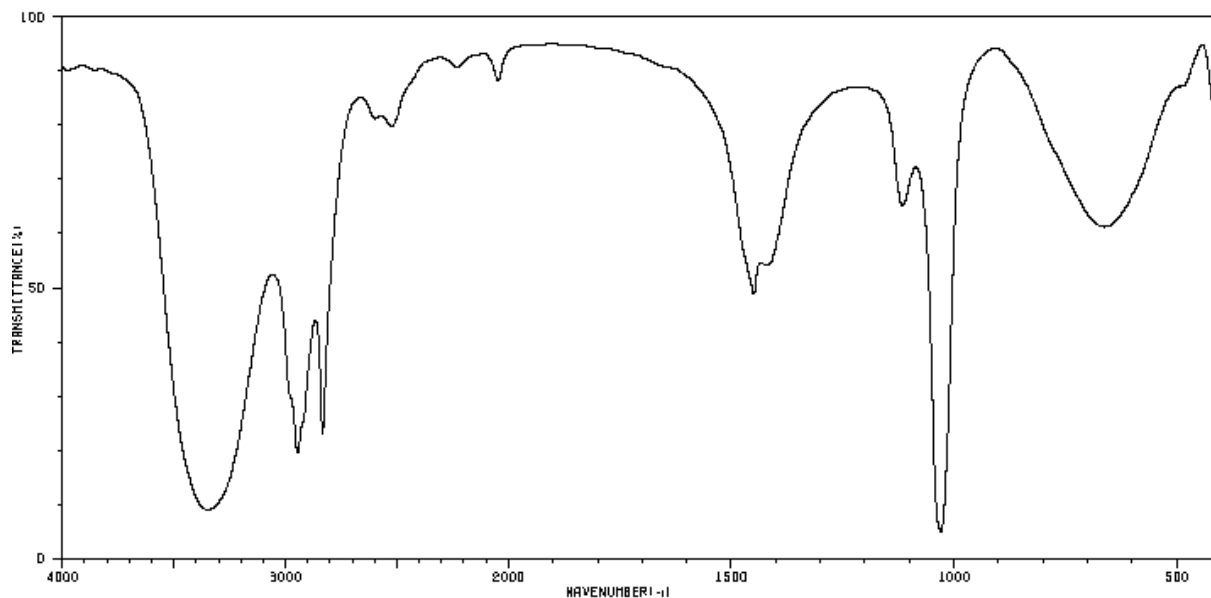
- | | |
|---|-----------------|
| (1) Eliel, Ernest L.; Journal of the American Chemical Society 1939 61, 173-174 <u>CAPLUS</u> | 物性の出典も合わせて表示される |
| (2) Bratulescu, George; Analele Universitatii din Craiova, Seria Chimie 2001 V30, P36-38 <u>CAPLUS</u> | |
| (3) Toda, Fumio; CrystEngComm 2002 V4, P171-173 <u>CAPLUS</u> | |
| (4) Pino, Piero; Gazzetta Chimica Italiana 1951 V81, P635-45 <u>CAPLUS</u> | |
| (5) "International Chemical Safety Cards" data were obtained from the National Institute for Occupational Safety and Health.: | |

A REGISTRY ファイル

レコード例

IR Absorption Spectra ← IR 吸収スペクトル

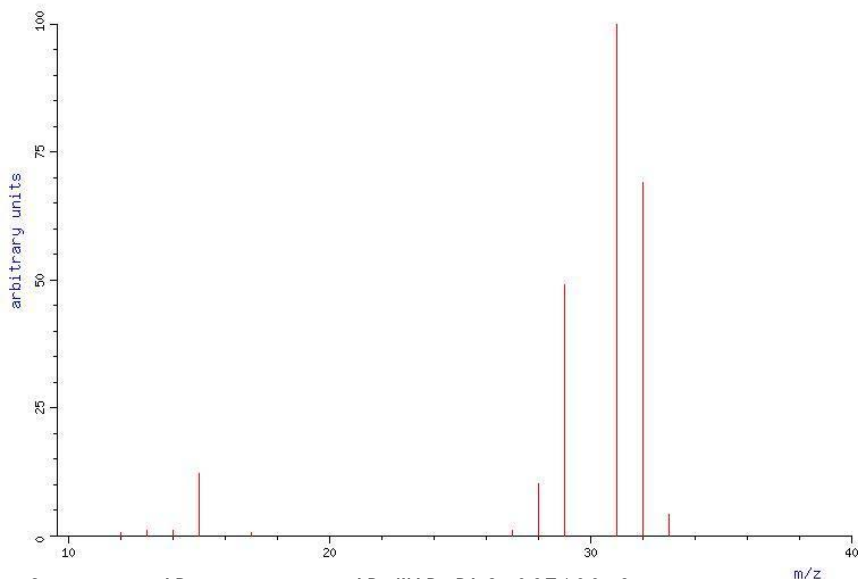
スペクトル (SPEC) (165 円)



Spectrum ID: NIDA63354
Spectrometer: Nicolet 170SX or JASCO FT/IR-410
Source: "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)

COPYRIGHT 2009 ACS on STN

Mass Spectra ← マススペクトル



Spectrum ID: ID_WID-DL0-067199-8
Number Of Peaks: 11
Nominal Mass: 32
Source: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)

COPYRIGHT 2009 ACS on STN

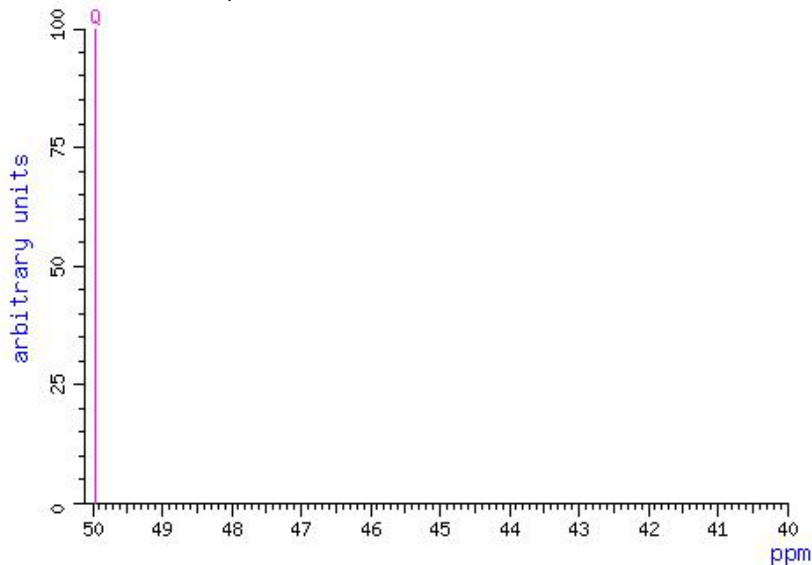
A REGISTRY ファイル

レコード例

Carbon-13 NMR Spectra

← ^{13}C -NMR スペクトル

スペクトル (SPEC) (続き)

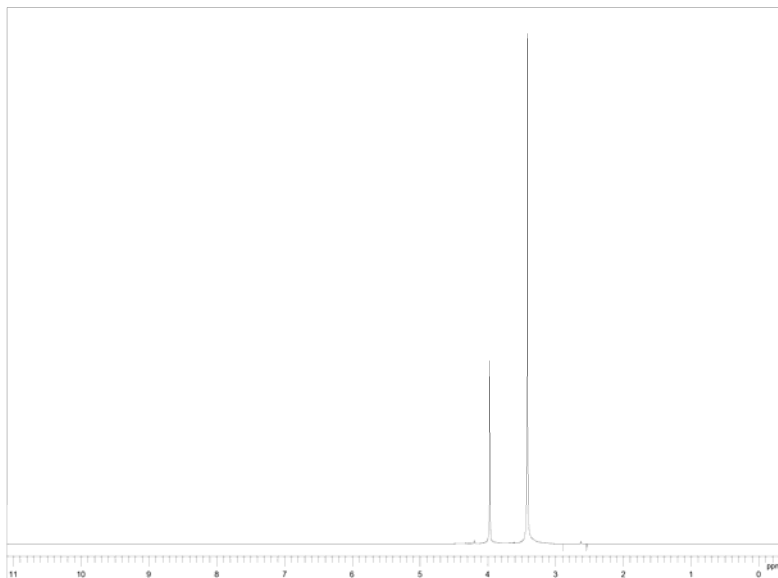


Spectrum ID: CNCC-32585-843C
Solvent: chloroform-d (865-49-6)
Standard: tetramethylsilane
Spectrometer: BRUKER WH-90
Source: Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)

COPYRIGHT 2009 ACS on STN

Proton NMR Spectra

← ^1H -NMR スペクトル



Source: National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)
Copyright © 2009 American Chemical Society (ACS). All rights reserved
Scroll down and right to view peaks -

Spectrum ID: WHSP05014
high-resolution image
Solvent: chloroform-d (865-49-6)

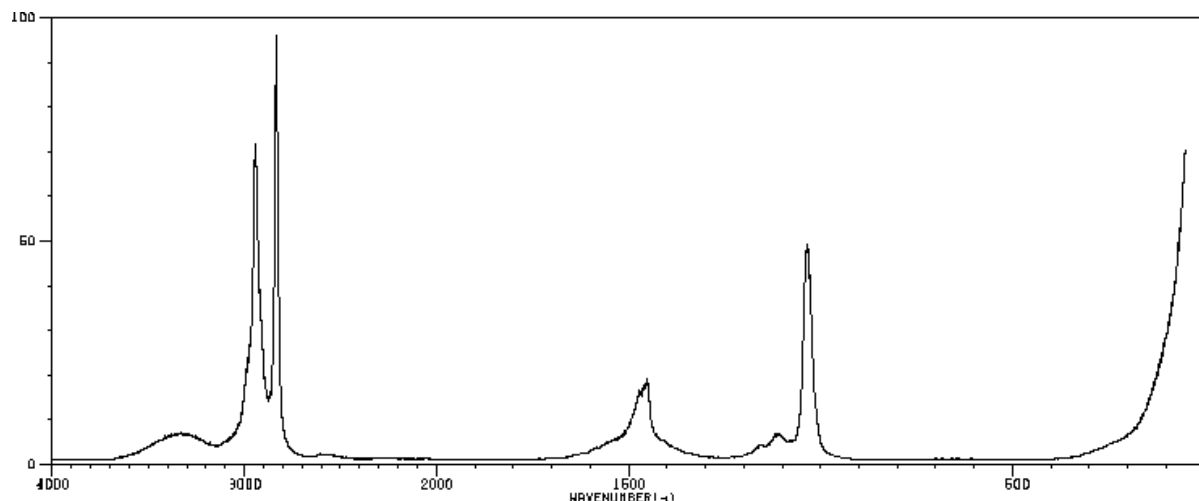
A REGISTRY ファイル

レコード例

スペクトル (SPEC) (続き)

Raman Spectra

← ラマンスペクトル



Spectrum ID: RM15
 Source: "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)

COPYRIGHT 2009 ACS on STN

Experimental Property Tags (ETAG)

参照文献タグ (ETAG) (無料)

物性の種類 ↓ PROPERTY	注記 ↓ NOTE
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb) 9 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(1) CAS
Band Gap 1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	(2) CAS
Boiling Point 6 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(3) CAS
Bond Angle	(4) CAS
Bond Length 7 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(5) CAS
Carbon-13 NMR Spectra 10 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(6) CAS
Compressibility 6 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	(7) CAS
Contact Angle	(8) CAS
Crystal Lattice Parameters	(9) CAS
Crystal Structure 1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	(9) CAS
Crystallization Temperature	(10) CAS

- (1) Babkin, V. A.; Oxidation Communications 2002 V25(3) P360-365 [CAPLUS](#)
 (2) Zhao, Dong-Xia; Journal of Physical Chemistry A 2005 V109(44) P10121-10128 [CAPLUS](#)
 (3) Huang, Kejin; Industrial & Engineering Chemistry Research 2007 V46(8) P2508-2519 [CAPLUS](#)

A REGISTRY ファイル

レコード例

Predicted Properties (PPROP)			予想物性値 (PPROP) (165 円)
物性の種類 ↓ PROPERTY (CODE)	予想物性値 ↓ VALUE	測定条件 ↓ CONDITION	注記 ↓ NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 5 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 6 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 7 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 8 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 9 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 10 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	48.1+/-3.0 deg C	760 Torr	(1)
Enthalpy of Vap. (HVAP)	35.21+/-0.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	11.1+/-0.0 deg C		(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	0		(1)
H acceptors (HAC)	1		(1)
H donors (HD)	1		(1)
Hydrogen Donors/Acceptors Sum (HDAS)	2		(1)
Koc (KOC)	9.68	pH 1 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	9.68	pH 2 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	9.68	pH 3 25 deg C	(1)
Koc (KOC)	9.68	pH 4 25 deg C	(1)
:	:	:	:
LOGD (LOGD)	-0.72	pH 1 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	-0.72	pH 2 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	-0.72	pH 3 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	-0.72	pH 4 25 deg C	(1)
:	:	:	:
LOGP (LOGP)	-0.719+/-0.176	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB.MASS)	241 g/L	25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	240 g/L	pH 1 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	240 g/L	pH 2 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	240 g/L	pH 3 25 deg C	(1)
:	:	:	:
Molar Intrinsic Solubility (ISLB.MOL)	7.51 mol/L	25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	7.50 mol/L	pH 1 25 d	HAC, HD, LOGP, MW の値から Lipinski's Rules (経口医薬品 候補物質の識別則) に合致 する化合物に限定可能
Molar Solubility (SLB.MOL)	7.50 mol/L	pH 2 25 d	
Molar Solubility (SLB.MOL)	7.50 mol/L	pH 3 25 d	
:	:	:	:
Molar Volume (MVOL)	42.5+/-3.0 cm**3/mol	20 deg C 760 Torr	
Molecular Weight (MW)	32.04		(1)
PKA (PKA)	15.17+/-0.10	Most Acidic 25 deg C	(1)
Polar Surface Area (PSA)	20.23 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	2.65E+02 Torr	25 deg C	(1)

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V8.14
(C) 1994-2009 ACD/Labs)

A REGISTRY ファイル

表示形式

■ 物性検索で使用する主な表示形式

	回答 番号	物性データ				物質同定情報							
		実測 値	予想 値	参考文献 タグ*2	スペク トル	RN	CN	MF	CI	構造	LC	REF	文献
FA (PRFA) (無料)	○	物性データの存在				-	-	-	-	-	-	-	-
PROP	○	○	○	各 1	○	-	-	-	-	-	-	-	
EPROP	○	○	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
EPROPS	○	○	-	各 1	-	-	-	-	-	-	-	-	
PPROP	○	-	○	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
ETAG (無料)	○	-	-	各 1	-	-	-	-	-	-	-	-	
ETAGFULL (無料)	○	-	-	全件	-	-	-	-	-	-	-	-	
SPEC	○	-	-	-	○	-	-	-	-	-	-	-	
SCAN (無料)	-	-	-	-	-	-	-	○	○	○	-	-	
SAM	○	-	-	-	-	-	-	○	○	○	-	-	
IDE (デフォルト)	○	-	-	-	-	○	○	○	○	○	○	-	
FIDE	○	○	○	各 1	○	○	○	○	○	○	○	-	
ALL *1	○	○	○	各 1	○	○	○	○	○	○	○	○	
MAX *1	○	○	○	全件	○	○	○	○	○	○	○	○	

*1: ALL, MAX 表示形式を指示すると, CA ファイルのデータ (最新 10 件分) も表示される.

*2: 「各 1」は, 各物性に付き 1 つずつの参考文献を表示. 「全件」は, すべての参考文献タグを表示.



無料の表示形式 PRFA や ETAGFULL で物性の存在を確認してから, 有料の表示形式を用いるとさらに経済的

■ REGISTRY ファイルでは, 物性に関する情報だけを表示することが可能

(2009 年 1 月現在)

物性情報専門 の表示形式	EPROP (実測物性値)	PPROP (予想物性値)	ETAG/ ETAGFULL (参考文献タグ)	SPEC (スペクトル)	PROP (全ての物性値)
料金	165 円	165 円	無料	165 円	330 円



REGISTRY ファイルでは, 他のデータベースと比較して 安価に 物性情報が表示できる. 参考文献タグ (参考文献のみの物性) は無料で表示できる

- ・ 個別の物性 (例: 融点 (MP)) のみも表示可能だが, 一つの物性データでも, 上記の定型表示形式の料金が課金されるので, 定型表示形式を利用すると経済的.

A REGISTRY ファイル

検索方法

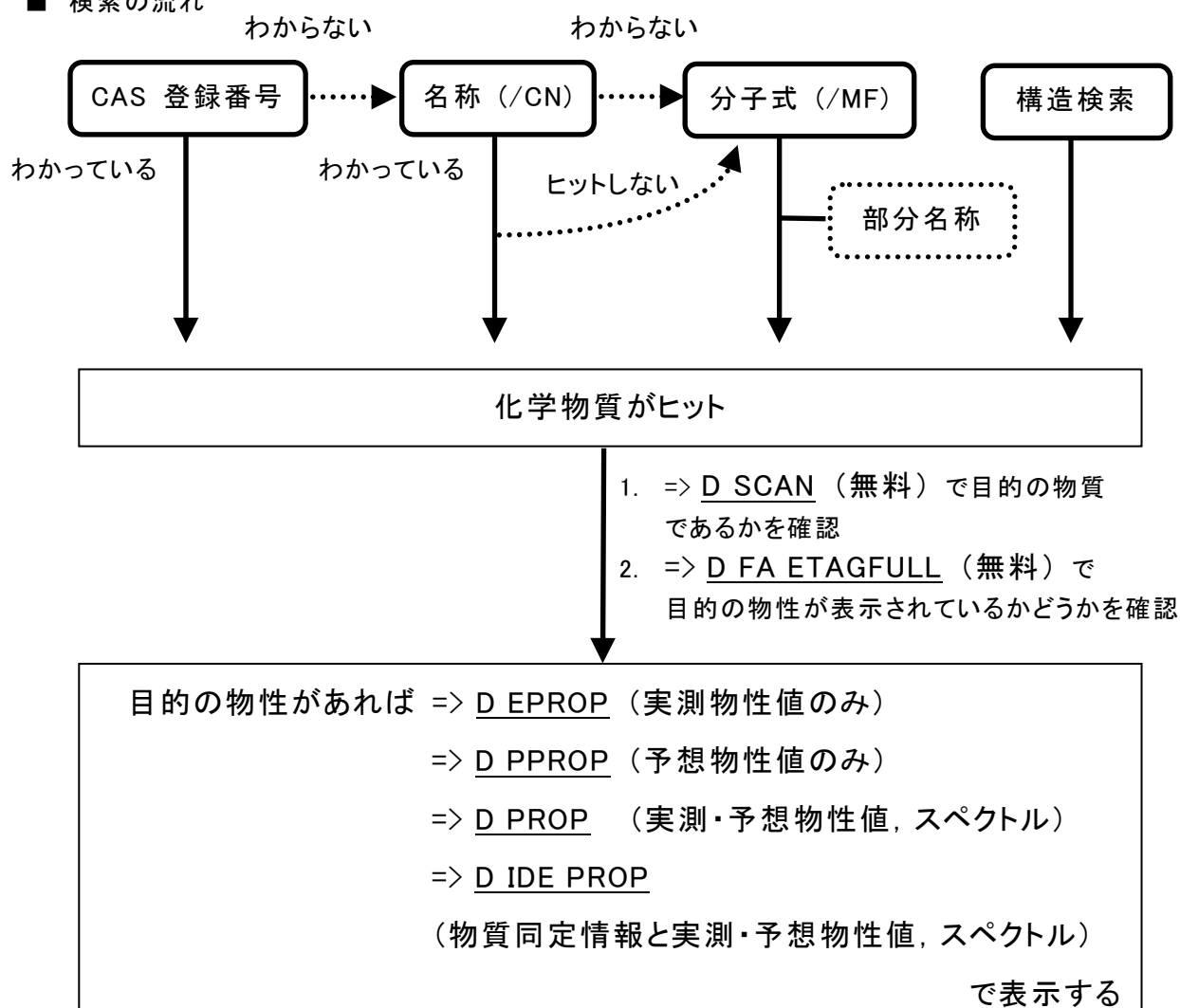
- REGISTRY ファイルでは、さまざまな検索方法で物性データを入手することができる。

(2009 年 1 月現在)

検索機能	網羅性	ポイント	検索料金*1
CAS 登録番号	○	CAS 登録番号検索は無料なので、CAS 登録番号がわかっている場合は経済的。	無料
名称 (/CN)	△	ヒットしない場合は別名を検討したり、他の検索方法を用いる	680 円
分子式 (/MF)	○	巨大な分子、珍しい原子が入っている場合に特に有効 名称が不明な場合も、この方法を用いる 無機物質の場合は分子式関連フィールド (/ELS など)を用いる	680 円
構造	○	主に誘導体の物性も必要な場合に行うとよい。	7,960 円 23,600 円
ファクトデータ	—	サマリーシート中の検索フィールドのみ検索可能。	680 円

*1 料金は、一語あるいは一構造質問式あたりの料金。(2009 年 1 月現在)

- 検索の流れ



A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値

■ REGISTRYファイルで検索可能な物性値 (=> S 物性コード/FA で物性を持つものに限定可能)

- ・ 各種測定条件に関する情報は必ず収録されているわけではないので、/コード.P などの . (ピリオド) つきの検索フィールドを使用する場合は注意する.

(2009 年 1 月現在)

物性コード	物性名	検索 フィールド	単位	入力例
実測物性値 (EPROP, PROP 表示形式で表示)				
BP ¹⁾	沸点	/BP	deg C	S 150-155/BP
	沸点測定時の圧力	/BP.P	Torr	S 166/BP (P) 3/BP.P
DEN ¹⁾	密度	/DEN	g/cm ³	S DEN>=1.002
	密度測定時の温度	/DEN.T	deg C	S 1.0021-1.02/DEN (P) 20/DEN.T
	密度測定時の圧力	/DEN.P	Torr	S 800/DEN.P
ECON	コンダクタンス	/ECON	Siemence	S 300<=ECON
	コンダクタンス測定時の温度	/ECON.T	deg C	S 280-300/ECON (P) 25/ECON.T
ECND	電気伝導率	/ECND	S/cm	S 1400-1500/ECND
	電気伝導率測定時の温度	/ECND.T	deg C	S 1400-1500/ECND (P) 1000/ECND.T
ERES	電気抵抗	/ERES	ohm	S 30-70/ERES
	電気抵抗測定時の温度	/ERES.T	deg C	S 900-960/ERES (P) 235/ERES.T
EREST	比電気抵抗	/EREST	ohm*cm	S EREST>=6600
	比電気抵抗測定時の温度	/EREST.T	deg C	S EREST>=6600 (P) 25/EREST.T
LD50	50%致死量	/LD50	mg/kg	S 741-745/LD50
	50%致死量 (生物体)	/LD50.ORGN	none	S 741-745/LD50 (P) MOUSE/LD50.ORGN
	50%致死量 (投与経路)	/LD50.RTE	none	S 450-520/LD50 (P) ORAL/LD50.RTE
MM	磁気モーメント	/MM	muB	S MM<=0.98
	磁気モーメント測定時の温度	/MM.T	K	S 0.021/MM (P) 10/MM.T
MP	融点	/MP	deg C	S MP<=30
	融点測定時の圧力	/MP.P	Torr	S 70/MP(P)2/MP.P
	融点測定時の溶媒	/MP.SOL	none	S ACETIC ACID/MP.SOL
ORP	旋光度	/ORP	deg	S 70-80/ORP
	旋光度測定時の濃度	/ORP.C	g/100mL	S 0.12/ORP.C
	旋光度測定時の光路長	/ORP.LEN	dm	S 1/ORP.LEN
	旋光度測定時の溶媒	/ORP.SOL	none	S METHANOL/ORP.SOL
	旋光度測定時の温度	/ORP.T	deg C	S 70-80/ORP (P) 20/ORP.T

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値

物性コード	物性名	検索 フィールド	単位	入力例
実測物性値 (続き)				
ORP	旋光度測定時の波長	/ORP.W	nm	S 546/ORP.W
RI	屈折率	/RI	none	S 1.427/RI
	屈折率測定時の温度	/RI.T	deg C	S 1.427/RI(P)25/RI.T
	屈折率測定時の波長	/RI.W	nm	S 500-589.3/RI.W
TG	ガラス転移温度	/TG	deg C	S 7-8/TG
TS	引張強度	/TS	MPa	S 42/TS
	引張強度測定時の温度	/TS.T	deg C	S 200-315/TS (P) 190/TS.T
予想物性値 (PPROP, PROP 表示形式で表示)				
BCF	生物濃縮係数	/BCF	none	S 4000-5000/BCF
	BCF のpH	/BCF.PH	none	S 4000-5000/PCF (P) 7/BCF.PH
	BCF の温度	/BCF.T	deg C	S 25/BCF.T
BP ¹⁾	沸点	/BP	deg C	S 150-155/BP
	沸点の圧力	/BP.P	Torr	S 166/BP (P) 3/BP.P
DEN ¹⁾	密度	/DEN	g/cm ³	S DEN>=1.002
	密度測定時の温度	/DEN.T	deg C	S 1.0021-1.02/DEN (P) 20/DEN.T
	密度測定時の圧力	/DEN.P	Torr	S 800/DEN.P
FP	引火点	/FP	deg C	S FP<250
FRB	回転可能な結合数	/FRB	none	S 2-5/FRB
HAC	水素受容基数 ²⁾	/HAC	none	S 1-3/HAC
HD	水素供与基数 ²⁾	/HD	none	S HD<=5
HDAS	水素受容基/供与基数 ²⁾	/HDAS	none	S HDAS<=5
HVAP	蒸発エンタルピー	/HVAP	kJ/mol	S 100-110/HVAP
	蒸発エンタルピーの圧力	/HVAP.P	Torr	S 760/HVAP.P
ISLB.MASS	固有質量溶解度	/ISLB.MASS	g/L	S 1.3/ISLB.MASS
ISLB.MOL	固有モル溶解度	/ISLB.MOL	mol/L	S SLB.MOL>=1
KOC	有機炭素吸着係数 (K _{oc})	/KOC	none	S 100-200/KOC
	K _{oc} のpH	/KOC.PH	none	S 100-200/KOC (P) 7/KOC.PH
	K _{oc} の温度	/KOC .T	deg C	S 25/KOC.T
LOGD	pHを考慮したオクタノール- 水分配 係数の対数値	/LOGD	none	S 2.21/LOGD
	LogDのpH	/LOGD.PH	none	S 2.21/LOGD (P) 10/LOGD.PH
	LogDの温度	/LOGD.T	deg C	S 25/LOGD.T

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値

物性コード	物性名	検索フィールド	単位	入力例
予想物性値 (続き)				
LOGP	オクタノール-水分配係数の対数值 ²⁾	/LOGP	none	S LOGP<=3
	LogPの温度	/LOGP.T	deg C	S 25/LOGP.T
MW	分子量 ²⁾	/MW	none	S MW<200
MVOL	モル体積	/MVOL	cm ³ /mol	S 31.1/MVOL
	モル体積の温度	/MVOL.T	deg C	S 20/MVOL.T
	モル体積の圧力	/MVOL.P	Torr	S 760/MVOL.P
PKA	酸塩基解離定数 (pKa)	/PKA	none	S PKA<=-0.62
	pKaの温度	/PKA.T	deg C	S 25/PKA.T
	pKaタイプ	/PKA.TYP	none	S PKA<=0.52 (P) MOST ACIDIC/PKA.TYP
PSA	極性表面積	/PSA	Å ²	S 3.24/PSA
SLB.MASS	質量溶解度	/SLB.MASS	g/L	S 1.4/SLB.MASS
	質量溶解度の pH	/SLB.PH	none	S 0.17/SLB.PH
SLB.MOL	モル溶解度	/SLB.MOL	mol/L	S SLB.MOL>=1
	モル溶解度の pH	/SLB.PH	none	S SLB.MOL>=1 (P) 7-10/SLB.PH
VP	蒸気圧	/VP	Torr	S .0001-.0002/VP
	蒸気圧測定時の温度	/VP.T	deg C	S .0001-.0002/VP (P) 25/VP.T

- 1) 沸点や密度を検索すると、実測物性値と予想物性値両方を検索する。(区別する場合、=> S BP/FA (L) EXPERIMENTAL/PTYP で実測物性値に、=> S BP/FA (L) PREDICTED/PTYP で予想物性値に限定できる。)
- 2) 当物性データは 経口医薬品の候補物質を識別するために C.A.Lipinski 氏が提唱したもので Lipinski's Rules (または rule of five) と呼ばれている。特定の物性データの検索に加え (=> S L1 AND LIPINSKI /CALC あるいは LIP/CALC) のように入力すれば回答集合を Lipinski's Rules に合致した値を持つものに限定できる。LIP/CALC は 実際には次の検索が実行される。(=> S 0-5/HD AND 0-10/HAC AND LOGP<=5 AND 0-500/MW)

■ REGISTRY ファイルでグラフィック表示可能なスペクトル

(2009 年 1 月現在)

スペクトル情報 (SPEC, PROP 表示形式で表示)		
¹ H - NMR スペクトル	¹³ C - NMR スペクトル	¹⁹ F - NMR スペクトル
²⁹ Si - NMR スペクトル	³¹ P - NMR スペクトル	IR 吸収スペクトル
マスマスペクトル	ラマンスペクトル	

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

■ 参照文献情報のみ収録されている物性情報 (ETAGFUL 表示形式で表示)

(2009 年 1 月現在)

参照文献タグ名 (= > S タグ名/ETAG で検索可能)	内容
スペクトル (NMR)	
NMR SOLUTION STRUCTURE (COMPLETE)	NMR 構造解析 (完全な)
NMR SPECTRA	NMR スペクトル
TWO-DIMENSIONAL NMR SPECTRA	二次元 NMR スペクトル
BORON-11 NMR SPECTRA	¹¹ B - NMR スペクトル
CARBON-13 NMR SPECTRA	¹³ C - NMR スペクトル
FLUORINE-19 NMR SPECTRA	¹⁹ F - NMR スペクトル
METAL NMR SPECTRA	金属 NMR スペクトル
NITROGEN-15 NMR SPECTRA	¹⁵ N - NMR スペクトル
PHOSPHORUS-31 NMR SPECTRA	³¹ P - NMR スペクトル
PROTON NMR SPECTRA	¹ H - NMR スペクトル
SILICON-29 NMR SPECTRA	²⁹ Si - NMR スペクトル
スペクトル (IR)	
IR ABSORPTION SPECTRA	IR 吸収スペクトル
IR EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	IR 発光スペクトル
IR REFLECTANCE SPECTRA	IR 反射スペクトル
IR SPECTRA	IR スペクトル
スペクトル (UV/Vis)	
UV AND VISIBLE SPECTRA	紫外/可視スペクトル
UV AND VISIBLE ABSORPTION SPECTRA	紫外/可視吸収スペクトル
UV AND VISIBLE EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	紫外/可視発光スペクトル
UV AND VISIBLE REFLECTANCE SPECTRA	紫外/可視反射スペクトル
スペクトル (X 線)	
X-RAY SPECTRA	X 線スペクトル
X-RAY ABSORPTION SPECTRA	X 線吸収スペクトル
X-RAY EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	X 線発光スペクトル
X-RAY REFLECTANCE SPECTRA	X 線反射スペクトル
スペクトル (その他)	
CIRCULAR DICHROISM SPECTRA	円偏光二色性スペクトル
ELECTRON SPECTRA	電子スペクトル
EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	発光スペクトル
ESR SPECTRA	電子スピン共鳴スペクトル (ESR)
GAMMA RAY SPECTRA	γ線スペクトル
MASS SPECTRA	マススペクトル
MICROWAVE SPECTRA	マイクロ波スペクトル
MOSSBAUER SPECTRA	メスバウアースペクトル
PHOTOELECTRON SPECTRA	光電子スペクトル

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

RAMAN SPECTRA	ラマンスペクトル
回折・散乱	
NEUTRON DIFFRACTION PATTERN	中性子回折パターン
NEUTRON SCATTERING	中性子散乱
X-RAY DIFFRACTION PATTERN	X線回折パターン
X-RAY SCATTERING	X線散乱
材料 (力学)	
HYDRODYNAMIC RADIUS	流体半径
ADHESIVE STRENGTH	接着強度
BENDING STRENGTH	曲げ強度
DUCTILITY	延性
COMPRESSIBILITY	圧縮率
COMPRESSIVE STRENGTH	圧縮強度
COMPLEX MODULUS	複素弾性率
CONTACT ANGLE	接触角
CREEP RATE	クリープ率
CREEP STRENGTH	クリープ強度
ELONGATION AT BREAK	破断点
ELONGATION AT YIELD	降伏点
FATIGUE STRENGTH	疲労強度
FLEXURAL MODULUS	曲げ弾性率
FRACTURE STRENGTH	破壊応力
FRACTURE TOUGHNESS	破壊靱性
FRICTION COEFFICIENT	摩擦係数
HYDRODYNAMIC RADIUS	流体力学半径
IMPACT STRENGTH	衝撃強度
INTERFACIAL TENSION	界面張力
LOSS MODULUS	損失係数
POISSON RATIO	ポアソン比
P-WAVE VELOCITY	P波速度
RESIDUAL STRESS	残留応力
SHEAR MODULUS	剛性率
SHEAR STRENGTH	せん断強度
STORAGE MODULUS	貯留係数
SURFACE TENSION	表面張力
S-WAVE VELOCITY	S波速度
TEAR STRENGTH	引裂強度
TENSILE STRENGTH	引張強度
THERMAL ANALYSIS	熱分析
THERMAL CONDUCTIVITY	熱伝導性

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

THERMAL EXPANSION COEFFICIENT	熱膨張係数
THERMAL FATIGUE	熱疲労
WEAR RATE	摩耗率
材料 (電気)	
BREAKDOWN VOLTAGE	破壊電圧
DIELECTRIC CONSTANT	誘電率
DIELECTRIC LOSS	誘電損失
DIELECTRIC STRENGTH	絶縁耐力
PIEZOELECTRIC COEFFICIENT	圧電係数
材料 (温度・硬度)	
BRITTLE TEMPERATURE	脆化温度
GLASS WORKING TEMPERATURE	ガラス作業温度
HARDNESS	硬度
MELT FLOW INDEX	メルトフローインデックス
MICROHARDNESS	微小硬度
SOFTENING POINT	軟化点
VISCOSITY	粘性率
YOUNG'S MODULUS	ヤング率
材料 (取扱温度)	
FLASH POINT	引火点
IGNITION POINT	発火点
材料 (形状・透過性)	
PERMEABILITY	透過性
PORE SIZE	孔径
POROSITY	多孔性 (ポロシティー)
PARTICLE SIZE	粒子径
SPECIFIC SURFACE AREA	比表面積
材料 (ポリマー)	
MOLECULAR WEIGHT (POLYMERS)	分子量 (ポリマー)
MOLECULAR WEIGHT DISTRIBUTION	分子量分布
REACTIVITY RATIO IN POLYMERIZATION	重合反応率
原子/分子構造	
BAND GAP	バンドギャップ
BOND ANGLE	結合角
BOND LENGTH	結合長
CRYSTAL LATTICE PARAMETERS	結晶格子パラメータ
CRYSTAL STRUCTURE	結晶構造
CRYSTALLIZATION TEMPERATURE	結晶化温度
ELECTRON AFFINITY	電子親和力
ELEMENTARY PARTICLE LIFETIME	素粒子寿命

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

ELEMENTARY PARTICLE MASS	素粒子質量
IONIZATION POTENTIAL	イオン化ポテンシャル
MOLECULAR STRUCTURE	分子構造
MOLECULAR ELECTRIC DIPOLE MOMENT	分子電気双極子モーメント
NUCLEAR BINDING ENERGY	核結合エネルギー
NUCLEAR ENERGY LEVEL	核エネルギーレベル
NUCLEAR TRANSITION PROBABILITY	核遷移確率
RADIUS OF GYRATION	回転半径
液体・溶液・化学反応	
ACID NUMBER	酸価
ACID/BASE DISSOCIATION CONSTANT (KA/KB)	酸・塩基解離定数
CRITICAL MICELLE CONCENTRATION	臨界ミセル濃度
CLOUD POINT	曇点
DISSOCIATION CONSTANT	解離定数
LOGD	pH を考慮したオクタノール-水分配係数の対数値
LOGP	オクタノール-水分配係数の対数値
PARTITION COEFFICIENT	分配係数
POTENTIAL OF ELECTRODE REACTION	電極反応の電位
SAPONIFICATION NUMBER	鹸化価
SOLUBILITY	溶解度
VAPOR PRESSURE/VOLATILITY	蒸気圧/揮発性
WATER SORPTION CAPACITY	水収着容量
相変化	
BOILING POINT	沸点
DENSITY	密度
DIFFUSION COEFFICIENT	拡散係数
FREEZING POINT	凝固点
GLASS TRANSITION TEMPERATURE	ガラス転移温度
HEAT CAPACITY	熱容量
LIQUID CRYSTAL TRANSITION TEMPERATURE	液晶転移温度
MELTING POINT	融点
PHASE DIAGRAM	相図
SUBLIMATION TEMPERATURE	昇華点
TRIPLE POINT	三重点
熱力学	
DEBYE TEMPERATURE	デバイ温度
ENTHALPY	エンタルピー
ENTROPY	エントロピー
FORMATION ENTHALPY	生成エンタルピー

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

FORMATION ENTROPY	生成エントロピー
FUSION ENTHALPY	融解エンタルピー
FUSION ENTROPY	融解エントロピー
GIBBS FREE ENERGY	ギブス自由エネルギー
HELMHOLTZ FREE ENERGY	ヘルムホルツ自由エネルギー
音・音波	
ACOUSTIC IMPEDANCE	音響インピーダンス
SOUND ATTENUATION COEFFICIENT	音減衰係数
SOUND VELOCITY	音速
電気	
ELECTRIC CONDUCTANCE AND ELECTRIC RESISTANCE	電気伝導性および電気抵抗
ELECTRIC CURRENT-POTENTIAL CURVE	電流電位曲線
SUPERCONDUCTIVITY	超伝導性
磁性	
CURIE TEMPERATURE	キュリー温度
HALL EFFECT COEFFICIENT	ホール効果係数
MAGNETIC ANISOTROPY	磁気異方性
MAGNETIC COERCIVITY	磁気保磁力
MAGNETIC DOMAIN (WALL LENGTH ENERGY ETC.)	磁区 (壁長 エネルギー など)
MAGNETIC MOMENT	磁気モーメント
MAGNETIC SUSCEPTIBILITY	磁化率
MAGNETIZATION	磁化
MAGNETOELASTIC COUPLING COEFFICIENT	磁気弾性結合係数
MAGNETORESISTANCE	磁気抵抗
MAGNETOSTRICTIVE CONSTANT	磁気ひずみ定数
MARTENSITIC TRANSITION TEMPERATURE	マルテンサイト転移温度
REMANENCE	残留磁気
光学	
FARADAY EFFECT	ファラデー効果
HAZE	曇価 (ヘイズ)
KERR EFFECT (MAGNETOOPTICAL)	カー効果 (光磁気)
LIGHT SCATTERING	光散乱
OPTICAL ROTATION	旋光度
OPTICAL ROTATORY POWER	旋光性
REFRACTIVE INDEX	屈折率
BIREFRINGENCE	複屈折
NONLINEAR OPTICAL SUSCEPTIBILITY	非線形光感受性
放射線	
BETA DECAY REACTION ENERGY	ベータ崩壊反応エネルギー
DECAY ENERGY (Q-VALUE)	崩壊エネルギー (Q 値)

A REGISTRY ファイル

検索可能な物性値 (ETAG)

HALF-LIFE (RADIONUCLIDES)	半減期 (放射性)
RADIATION ATTENUATION/TRANSMISSION COEFFICIENT	放射線減衰/伝達係数
生物・毒性	
ADME (ABSORPTION DISTRIBUTION METABOLISM EXCRETION)	ADME (吸収・分布・代謝・排泄)
ALLELE FREQUENCY AND HETEROZYGOSITY	対立遺伝子頻度とヘテロ接合性
BIOCONCENTRATION FACTOR	生物濃縮係数 (BCF)
DISEASE-RELATED MUTATIONS	病気に関連する変異
DRUG TARGETS	医薬品ターゲット
FUNCTIONAL SITES	機能部位
GENETIC MAPPING	遺伝子マップ
GENETIC POLYMORPHISM	遺伝子型多型
HALF-LIFE (BIOLOGICAL)	半減期 (生物的)
HUMAN DISEASE-RELATED MUTATIONS	人の病気に関連した変異
LC50	50% 致死濃度 (LC ₅₀)
LD50	50% 致死量 (LD ₅₀)
MINIMUM INHIBITORY CONCENTRATION	最小発育阻止濃度
NOAEL/LOAEL	NOAEL/LOAEL 値
NON-HUMAN ANIMAL DISEASE-RELATED MUTATIONS	非人間(動物)の病気に関連した変異
PLANT DISEASE-RELATED MUTATIONS	植物の病気に関する変異
POST-TRANSLATIONAL PROTEIN MODIFICATIONS	翻訳後のたんぱく質の修飾
SUBCELLULAR LOCALIZATIONS	細胞内局在性
TOXIC EQUIVALENCE FACTORS	毒性等価係数 (TEF)

詳細は 右記 URL を参照 : <http://www.cas.org/support/stngen/stndoc/properties.html>
(Tagged Experimental Properties in REGISTRY (PDF))

A REGISTRY ファイル

検索例 1

■ 検索例 1: イソブチルビニルエーテルの物性値（融点, 沸点, 密度）を調査する。



- ・ 無料の表示形式 FA や ETAGFULL で物性の存在を確認してから、有料の表示形式を用いる
- ・ 個別の物性コードで表示するより、目的の物性を含む EPROP, PPROP などの定型表示形式で表示するとよい。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E ISOBUTYL VINYL ETHER/CN ← 名称を EXPAND する

```
E1      1      ISOBUTYL VANADATE(V)/CN
E2      1      ISOBUTYL VANILLATE/CN
E3      1 --> ISOBUTYL VINYL ETHER/CN
E4      1      ISOBUTYL VINYL ETHER HOMOPOLYMER/CN
E5      1      ISOBUTYL VINYL ETHER HYDROCHLORIDE/CN
:
```

=> S E3 ← E 番号を検索する (680 円)

```
L1      1 "ISOBUTYL VINYL ETHER"/CN
```

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

```
L1  1 ANSWERS  REGISTRY  COPYRIGHT 2009 ACS on STN
IN  Propane, 1-(ethenyloxy)-2-methyl-
MF  C6 H12 O
CI  COM
```

i-BuO-CH=CH₂

PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> D FA ETAGFULL ← この物質についてどんな物性情報があるか確認する(無料)

```
L1  ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2009 ACS on STN
```

Available Properties (PRFA)

CODE	PROPERTY
=====+	=====

Experimental Data

BP	Boiling Point
DEN	Density
MP	Melting Point
RI	Refractive Index
SPEC	Carbon-13 NMR Spectra
SPEC	IR Absorption Spectra
SPEC	Mass Spectra
SPEC	Proton NMR Spectra
SPEC	Raman Spectra
ETAG	Experimental Tags

FA 表示形式

目的の物性があることがわかった
Experimental Data 中の SPEC, ETAG 以外の
物性コードは、EPROP 表示形式で、
まとめて表示することができる。

SPEC は SPEC 表示形式で表示 (165 円)

ETAG は ETAGFULL 表示形式で表示 (無料)

A REGISTRY ファイル

検索例 1

Predicted Data

```
BCF      Bioconcentration Factor
BP       Boiling Point
DEN      Density
FP       Flash Point
FRB      Freely Rotatable Bonds
HAC      H acceptors
HD       H donors
HDAS     Hydrogen Donors/Acceptors Sum
HVAP     Enthalpy of Vaporization
ISLB.MASS Mass Intrinsic Solubility
ISLB.MOL Molar Intrinsic Solubility
KOC      Koc
LOGD     logD
LOGP     logP
MVOL     Molar Volume
MW       Molecular Weight
PSA      Polar Surface Area
SLB.MASS Mass Solubility
SLB.MOL  Molar Solubility
VP       Vapor Pressure
```

Predicted Data は PPROP 表示形式
で表示 (165 円)

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Boiling Point	(1) CAS
Enthalpy	(2) CAS
IR Spectra	(1) CAS
Mass Spectra	(3) CAS
NMR Spectra	(4) IC
Potential of Electrode Reaction	(5) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS
Proton NMR Spectra	(4) IC
Reactivity Ratio In Polymerization	(6) CAS
Refractive Index	(1) CAS

ETAGFULL
表示形式

ETAGFULL 表示形式は、物性データは
表示できないが、その物性が収録されて
いる文献がわかる

- (1) Oparina, L. A.; Russian Journal of Organic Chemistry 2005 V41(5) P656-660 CAPLUS
- (2) Pre, P.; Fuel Processing Technology 2002 V77-78, P345-351 CAPLUS
- (3) Meurer, E. C.; International Journal of Mass Spectrometry 2001 V210/211(1-3) P469-482 CAPLUS
- (4) Afonin, A. V.; Zhurnal Organicheskoi Khimii 1991 V27(1) P161-70 CAPLUS
- (5) Yamashita, Toshiaki; Tetrahedron 2006 V63(2) P374-380 CAPLUS
- (6) Sugihara, Shinji; Macromolecules 2004 V37(5) P1711-1719 CAPLUS

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

=> D EPROP

← EPROP 表示形式で表示 (165 円)

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2009 ACS on STM

Experimental Properties (EPROP)

沸点, 融点, 密度だけ表示しても, EPROP で
その他の実測物性値を表示しても料金は同じ

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Boiling Point (BP)	83 deg C		(1) CAS

A REGISTRY ファイル

検索例 1

Boiling Point (BP)	83 deg C		(2)	SRC
Boiling Point (BP)	82.98 deg C	Press: 760 Torr	(3)	CAS
Boiling Point (BP)	82.9-83.2 deg C		(4)	CAS
Boiling Point (BP)	82.0-82.5 deg C		(5)	CAS
Boiling Point (BP)	81-82 deg C		(6)	CAS
Boiling Point (BP)	81-82 deg C		(7)	CAS
Boiling Point (BP)	78-83 deg C		(8)	CAS
Boiling Point (BP)	30-32 deg C	Press: 12 Torr	(7)	CAS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(9)	WSS
Carbon-13 NMR Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Density (DEN)	0.7693 g/cm**3	Temp: 20 deg C	(5)	CAS
Density (DEN)	0.7683 g/cm**3	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
Density (DEN)	0.7644 g/cm**3	Temp: 25 deg C	(4)	CAS
IR Absorption Spectra	Spectrum		(10)	AIST
IR Absorption Spectra	Spectrum		(11)	BIORAD
IR Absorption Spectra	Spectrum		(12)	WSS
Mass Spectra	Spectrum		(12)	WSS
Mass Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Melting Point (MP)	-112 deg C		(4)	CAS
Melting Point (MP)	-112 deg C		(2)	SRC
Proton NMR Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Raman Spectra	Spectrum		(10)	AIST
Refractive Index (RI)	1.40263	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
Refractive Index (RI)	1.39656	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		
Refractive Index (RI)	1.3960	Temp: 20 deg C	(5)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		
Refractive Index (RI)	1.3941	Temp: 25 deg C	(13)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		
Refractive Index (RI)	1.39398	Temp: 20 deg C	(3)	CAS
Refractive Index (RI)	1.3938	Temp: 25 deg C	(4)	CAS
		Wavlen: 589.3 nm		

- (1) Nakano, Senji; JP 38001490 1963 CAPLUS
- (2) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
- (3) Voronkov, M. G.; Zhurnal Obshchei Khimii 1950 V20, P2060-3 CAPLUS
- (4) Schildknecht, C. E.; Journal of Industrial and Engineering Chemistry (Washington, D. C.) 1947 V39, P180-6 CAPLUS
- (5) Shostakovskii, M. F.; Zhurnal Obshchei Khimii 1943 V13, P428-35 CAPLUS
- (6) Favorskii, A. E.; Zhurnal Obshchei Khimii 1943 V13, P1-20; English summary, 19 CAPLUS
- (7) Wittig, Georg; Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft [Abteilung] B: Abhandlungen 1944 V77B, P306-14 CAPLUS
- (8) Smith, Curtis W.; Journal of the American Chemical Society 1951 V73, P5267-70 CAPLUS
- (9) Kalabin, G. A.; Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya 1975(3) P576-81 CAPLUS
- (10) "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)
- (11) Infrared spectral data from the Bio-Rad/Sadtler IR Data Collection was obtained from Bio-Rad Laboratories, Philadelphia, PA (US). Copyright (C) Bio-Rad Laboratories. All Rights Reserved.
- (12) Spectral data were obtained from Wiley Subscription Services, Inc. (US)
- (13) Pino, P.; IT 665055 1964 CAPLUS

A REGISTRY ファイル

検索例 2

■ 検索例 2: 三臭素ホウ素 (BBr₃) の物性データを調査する.



- REGISTRY ファイルでは, PROP 表示形式で全物性データを表示しても 330 円と低料金
- CAplus/CA ファイルに索引された物質に関するデータも収録されているので, GMELIN97 ファイルと比較して, 出典が新しいものもある
- ETAG も含めると, さまざまな無機物質の物性を表示できる

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E TRIBROMOBORANE/CN ← 名称で EXPAND する

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

=> S E3 ← E 番号で検索する (680 円)

```
L1      1      TRIBROMOBORANE/CN
```

=> D FA ETAGFULL ← FA, ETAGFULL 表示形式で物性情報を確認する (無料)

```
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2009 ACS on STN
Available Properties (PRFA)
```

```
CODE   | PROPERTY
=====+=====
```

Experimental Data

```
BP      Boiling Point
DEN     Density
MP      Melting Point
RI      Refractive Index
ETAG    Experimental Tags
```

Predicted Data

```
BCF     Bioconcentration Factor
BP      Boiling Point
DEN     Density
FRB     Freely Rotatable Bonds
HAC     H acceptors
HD      H donors
HDAS    Hydrogen Donors/Acceptors Sum
HVAP    Enthalpy of Vaporization
ISLB.MASS Mass Intrinsic Solubility
ISLB.MOL Molar Intrinsic Solubility
LOGD    logD
LOGP    logP
MVOL    Molar Volume
```


A REGISTRY ファイル

検索例 2

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Bond Angle	(1) CAS
Bond Length	(1) CAS
Boron-11 NMR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(3) CAS
Photoelectron Spectra	(4) CAS
Raman Spectra	(2) CAS
Raman Spectra	(5) CAS
UV and Visible Emission/Luminescence Spectra	(6) CAS

} 参考文献情報

- (1) Mercier, Helene P. A.; Journal of Fluorine Chemistry **2004** V125(11) P1563-1578 CAPLUS
- (2) Mercier, Helene P. A.; Journal of Chemical Society **2004** V126(17) P5533-5548 CAPLUS 最近の物性データが収録されている
- (3) Hales, David A.; Journal of Physical Chemistry A **2007** V111(12) P2266-2275 CAPLUS
- (4) Mackie, R. A.; Chemical Physics **2003** V288(2-3) P211-240 CAPLUS
- (5) Anderson, A.; Journal of Raman Spectroscopy **2003** V34(9) P684-687 CAPLUS
- (6) Olander, Jenny; Chemical Vapor Deposition **2005** V11(6-7) P330-337 CAPLUS

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

=> D PROP ← すべての物性データ (EPROP, ETAG, PPROP, SPEC) を表示 (330 円)

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2009 ACS on STM

Experimental Properties (EPROP)



データベース中のすべての物性データを表示しても 330 円！

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

- (1) Coleman, Ralph A.; Journal of the American Chemical Society 1954 V76, P4534-8 CAPLUS
- (2) Cueilleron, Jean; Annali di Chimica Applicata 1944 V19, P459-86 CAPLUS
- (3) "International Chemical Safety Cards" data were obtained from the

A REGISTRY ファイル

検索例 2

Experimental Property Tags (ETAG)

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

(1) Mercier, Helene P. A.; Journal of Fluorine Chemistry 2004 V125(11)
P1563-1578 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	328.81	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	328.81	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	328.81	pH 3 25 deg C	(1)
:			
Boiling Point (BP)	91.3+/-9.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	2.782+/-0.06 g/cm**3	20 deg C	(1)
		760 Torr	
Enthalpy of Vap. (HVAP)	30.50+/-0.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	0		(1)
H acceptors (HAC)	0		(1)
H donors (HD)	0		(1)
Hydrogen Donors/Acceptors Sum	0		(1)
LOGD (LOGD)	3.61	pH 1 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	3.61	pH 2 25 deg C	(1)
LOGD (LOGD)	3.61	pH 3 25 deg C	(1)
:			
LOGP (LOGP)	3.614+/-0.839	25 deg C	(1)
Mass Intrinsic Solubility (ISLB.MASS)	0.33 g/L	25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	0.33 g/L	pH 1 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	0.33 g/L	pH 2 25 deg C	(1)
Mass Solubility (SLB.MASS)	0.33 g/L	pH 3 25 deg C	(1)
:			
Molar Intrinsic Solubility (ISLB.MOL)	0.0013 mol/L	25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.0013 mol/L	pH 1 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.0013 mol/L	pH 2 25 deg C	(1)
Molar Solubility (SLB.MOL)	0.0013 mol/L	pH 3 25 deg C	(1)
:			
Molar Volume (MVOL)	90.0+/-3.0 cm**3/mol	20 deg C	(1)
		760 Torr	
Molecular Weight (MW)	250.52		(1)
Polar Surface Area (PSA)	0.00 A**2		(1)
Vapor Pressure (VP)	6.13E+01 Torr	25 deg C	(1)

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V9.04

A REGISTRY ファイル

検索例 3

■ 検索例 3: ガラス転移温度が 150-200 °C のポリイミドを探す。



- ・ 物性の数値データを使って検索できるかどうかは、サマリーシートに記載されている。検索フィールド (SEARCH コード) があれば検索可能。(P. 14-16 参照)
- ・ 数値検索は、不等号記号 (<, >, =, <=, >=) やハイフンを使って、範囲指定検索が可能

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 150-200/TG ← ガラス転移温度で検索する (680 円)
 L1 2121 150 DEGC - 200 DEGC /TG * 単位はデフォルトの単位. 変更する場合は p. 71 参照

=> E POLYIMIDE/PCT ← ポリイミドのポリマー分類用語を確認
 E1 3872 POLYHYDRAZIDE/PCT
 E2 3014 POLYHYDRAZIDE FORMED/PCT
 E3 61789 --> POLYIMIDE/PCT
 :

=> S E3 ← E 番号を検索する (972 円)
 L2 61789 POLYIMIDE/PCT

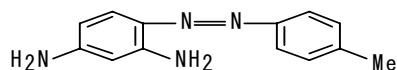
=> S L1 AND L2 ← ガラス転移温度が 150-200 °C のポリイミドを検索
 L3 196 L1 AND L2

=> D 1 102 IDE EPROP ETAGFULL ← IDE EPROP ETAGFULL 表示形式で表示する
 (426 円 × 2 = 852 円)

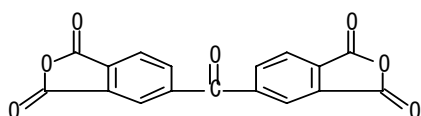
L3 ANSWER 1 OF 196 REGISTRY COPYRIGHT 2009 ACS on STN
 RN 1021301-43-8 REGISTRY
 ED Entered STN: 16 May 2008
 CN 1,3-Isobenzofurandione, 5,5'-carbonylbis-, polymer with
 4-[2-(4-methylphenyl)diazenyl]-1,3-benzenediamine (CA INDEX NAME)
 MF (C17 H6 O7 . C13 H14 N4)x
 CI PMS
 PCT Polyamic acid, Polyamic acid formed, **Polyimide**, Polyimide formed, Polyketone
 :

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK

CM 1
 CRN 18371-08-9
 CMF C13 H14 N4



CM 2
 CRN 2421-28-5
 CMF C17 H6 O7



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT



同じ料金で出力可能な物性をすべて表示させるために、TG が含まれている定型表示形式 EPROP と無料の表示形式の ETAGFULL 表示形式を用いる

A REGISTRY ファイル

検索例 3

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	NOTE
Glass Transition Temperature (TG)	185 deg C	(1) CAS ← ガラス転移温度

(1) Sava, Ion; Polymer 2008 V49(6) P1475-1482 CAPLUS ← クリックすると対応する *CAPLUS* ファイルのレコードが表示される*

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Molecular Weight (Polymers)	(1) CAS
Thermal Analysis	(1) CAS
UV and Visible Absorption Spectra	(1) CAS

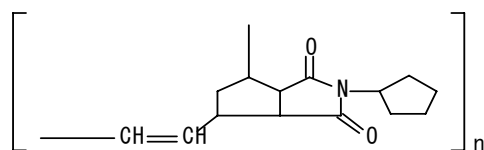
ETAGFULL (無料)
物性データは出ないが、データが記載されている参照文献が確認できる

(1) Sava, Ion; Polymer 2008 V49(6) P1475-1482 CAPLUS

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

L3 ANSWER 102 OF 196 REGISTRY COPYRIGHT 2009 ACS on STN
 RN 874270-02-7 REGISTRY
 ED Entered STN: 14 Feb 2006
 CN Poly[[(3aR, 4R, 6S, 6aS)-2-cyclopentyl-octahydro-1,3-dioxocyclopenta[c]pyrrole-4,6-diyl]-1,2-ethenediyl], rel- (9CI) (CA INDEX NAME)
 MF (C14 H17 N O2)n
 CI PMS
 PCT **Polyimide**
 SR CA
 LC STN Files: CA, CAPLUS

RELATED POLYMERS AVAILABLE WITH POLYLINK



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

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

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Density (DEN)	1.180 g/cm**3	Temp: 23 deg C	(1) CAS
Glass Transition Temperature (TG)	174 deg C		(1) CAS ← ガラス転移温度

EPROP 表示形式を使ったので、同じ EPROP に含まれる物性データが表示できた。(TG のみと EPROP は同料金)

(1) Diaz, Kenya; Macromolecular Chemistry and Physics 2005 V206(22) P2316-2322 CAPLUS

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

A REGISTRY ファイル

検索例 3

Experimental Property Tags (ETAG)

ETAGFULL (無料)

物性データは出ないが、データが記載されている参考文献が確認できる

PROPERTY	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	(1) CAS
Diffusion Coefficient	(1) CAS
IR Absorption Spectra	(1) CAS
Molecular Weight (Polymers)	(1) CAS
Molecular Weight Distribution	(1) CAS
Permeability	(1) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS
Thermal Analysis	(1) CAS

(1) Diaz, Kenya; Macromolecular Chemistry and Physics 2005 V206(22) P2316-2322 [CAPLUS](#)

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

* リンクをクリックすると、下記のように対応する CAPLUS ファイルのレコードを表示することができる

ANSWER 1 CAPLUS COPYRIGHT 2009 ACS on STN
 ACCESSION NUMBER: 2008:324825 CAPLUS [Full-text](#)
 DOCUMENT NUMBER: 148:496500
 TITLE: Synthesis and photochromic behavior of new polyimides containing azobenzene side groups
 TITLE (JAPANESE): アゾベンゼン側鎖基を含む新しいポリイミド類の合成とフォトクロミズム特性 [機械翻訳]
 AUTHOR(S): Sava, Ion; Resmerita, Ana-Maria; Lisa, Gabriela; Damian, Victor; Hurduc, Nicolae
 CORPORATE SOURCE: "Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry, Iasi, 700487, Rom.
 SOURCE: Polymer (2008), 49(6), 1475-1482
 CODEN: POLMAG; ISSN: 0032-3861
 PUBLISHER: Elsevier Ltd.
 DOCUMENT TYPE: Journal
 LANGUAGE: English
 ABSTRACT: Arom. polyimides contg. side azobenzene groups were synthesized by low-temp. soln. polycondensation of certain arom. dianhydrides with arom. diamines contg. preformed side azobenzene groups followed by chem. imidization at 100.degree. in the presence of pyridine and acetic anhydride. The wt. av. mol. wt. of these polymers is in the range of 16,000-129,000. The glass transition temp. of these polyimides is in the range of 185-230.degree.. The polymer architecture presents a special characteristic, one of the azobenzene arom. units being in the main chain of the polymer. This situation is intermediary between main-chain and side-chain azobenzene-contg. polymers. The photochromic behavior, detd. by the trans-cis isomerization process of azo-groups, in soln. and in solid state, was evaluated. The synthesis of polyimides was studied by spectral methods (UV, IR), thermal anal. and microscopy. The photochromic study concerning the surface structuration capabilities of the polymers was accomplished. Good results were obtained using an incident fluence of 35 mJ/cm2 (situated below threshold for photochemical reaction).
 STN Express ではダイアログボックスが起動し、表示形式を指定できる。
 STN on the Web では、自動的に BIB ABS 表示形式が選択される

REFERENCE COUNT: 34 THERE ARE 34 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD. ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

B ReaxysFile ファイル

B ReaxysFile ファイル

概要

- ReaxysFile ファイルは、有機化合物の実測物性値と参照文献情報を収録するデータベースである。

(2011 年 1 月現在)

レコード単位	化学物質単位 / 反応単位
物質数	約 10,864,000 物質
収録源	<p>1771 年から 1959 年までは、ハンドブック記載の評価済みデータ 1960 年以降は一次文献からの未評価データを収録</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 1960-1979 年は融点, 沸点, 密度, 屈折率, 旋光度, 天然物からの単離, 化学的誘導体の情報を収録, その他の物理的, 化学的性質は原文献への参照情報を収録 ・ 1980 年以降はすべての物理的, 化学的性質について, 物性データと参照文献情報を収録 <p>薬理的, 環境学的物性データもあわせて収録を開始</p>
収録開始年	1771 年以降
物性の種類	<p>生態学データ (生物濃縮係数, 酸素要求量など) 薬理学データ (LD₅₀, EC₅₀ など) 電気的性質 (比誘電率, 圧電性など) 磁氣的性質 (磁化率, 磁気モーメントなど) 電気化学的作用 (安定度定数, プロトン親和力, 酸化電位など) 多成分系データ (共沸点, ヘンリー定数, オクタノール-水分係数など) 光学的性質 (変旋光, 旋光度, 屈折率, コットン効果など) 安全性データ (引火点) 物理的および機械的性質 (圧縮率, 超音波吸収ど) スペクトルデータ (NMR スペクトル, NQR スペクトル, ラマンスペクトルなど) 凝集状態 (融点, 沸点, 臨界圧力, 昇華点など) 構造およびエネルギーパラメータ (双極子モーメント, 光学異方性など) 熱力学的物性 (蒸発エンタルピー, ギブス自由エネルギーなど) 輸送現象 (粘性率, 自己拡散係数, 熱伝導性など) など</p>
物性の数	<p>約 60 種類 (物性データが原則表示可能なもの) 約 470 種類 (参照文献情報のみが収録されている物性関連情報)</p>

- ReaxysFile ファイルの物性データの特徴

- ・ 有機物質に関する多くの物性データと参照文献情報が収録されている



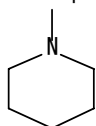
STN のデータベース中で、最も有機物質の物性情報が収録されている

B ReaxysFile ファイル

レコード例

■ 化学物質単位のレコード例 (ALL 表示形式: 一部の物性は省略)

Accession Number (AN): 1073
 Basic Pref. RN (BPR): 626-67-5
 CAS Reg. No. (RN): 626-67-5
 Chemical Name (CN): N-methylcyclohexylamine,
 1-Methylpiperidine, N-Methylpiper
 1-methyl-piperidine, 1-Methyl-pipe
 N-Methyl-piperidin, NMP
 1-Methyl-piperidine
 Autonom Name (AUN): 1-Methyl-piperidine
 Lin. Struct. Formula (LSF): (CH₂)₅NCH₃
 Molec. Formula (MF): C₆ H₁₃ N
 Molecular Weight (MW): 99.1759
 Compound Type (CTYPE): heterocyclic
 Handbook Citation (HSO): 4-20-00-00305, 0-20-00-00016,
 1-20-00-00007, 2-20-00-00012,
 5-20-02-00021, 6-20
 Entry Date (DED): 1988/06/27
 Update Date (DUPD): 2009/10/26



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
:		
ADSM	Adsorption (MCS)	5
ASSM	Association (MCS)	39
AZE	Azeotrope (MCS)	1
BP	Boiling Point	22
CDER	Chemical Derivative	44
CNF	Conformation	3
CP	Heat Capacity Cp	1
DE	Dissociation Exponent	29
DEN	Density (Liquid)	15
DFM	Molecular Deformation	1
DIC	Dielectric Constant	1
DICS	Dielectric Static Constant	3
DM	Dipole Moment	9
DV	Dynamic Viscosity	1
EBC	Energy Barrier of Conformation	1
ELCB	Electrochemical Behaviour	7
ENEM	Energy Data (MCS)	3
FINFO	Further Information	1
FLU	Fluorescence	6
HCOM	Enthalpy of Combustion	1
HFOR	Enthalpy of Formation	2
HVAP	Enthalpy of Vaporization	3
INP	Isolation from Natural Product	1
IP	Ionization Potential	5
IR	Infrared Spectrum	11
LIQPH	Liquid Phase	2
LLSM	Liquid/Liquid System (MCS)	7
LUM	Luminescence	4

レコード構成

化学物質同定情報 レコード番号 分子式等 名称 構造図 フィールドの存在 など
物性データ 1 参考文献 :
物性データ X 参考文献

B ReaxysFile ファイル

レコード例

MEC	Mechanical Property	2
MS	Mass Spectrum	3
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	21
NQR	Nuclear Quadrupole Resonance	1
OSM	Other Spectroscopic Methods	1
OTHE	Other Thermochemical Data	3
PHARM	Pharmacological Data	7
POL	Electrical Polarizability	1
POT	Electrochemical Characteristics	3
RAS	Raman Spectrum	4
RI	Refractive Index	22
SOLM	Solution Behaviour (MCS)	2
SOUND	Acoustic Property	1
TRAM	Transport Phenomena (MCS)	5
USC	Use of Compound	1
UVS	UV and Visible Spectrum	6
VP	Vapour Pressure	2
XREF	Crossfile Reference	20

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	320
RXREA	Substance is Reaction Reactant	210
RXPRO	Substance is Reaction Product	110

Ionization Potential:

Value (IP) (eV)	Method (.MET)	Ref.	Note
8.37	Photoionization	4	
8.35	PE	5	1
6.8	spectrographical	6	
8.3	Photoionization	7	1

イオン化ポテンシャル (IP) (780 円)

場合によっては、数値データがなく参照文献のみの場合もある。

Reference(s):

- Morishima et al., J. Amer. Chem. Soc., CODEN: JACSAT, 97, <1975>, 4283, 4284
- Pesterev et al., Russ. J. Phys. Chem. (Engl. Transl.), CODEN: RJPCAR, 53, <1979>, 845, 1499
- Aue, D. H. et al., J. Amer. Chem. Soc., CODEN: JACSAT, 98, <1976>, 311-317
- Rozeboom, Melvin D.; Houk, K. N., J. Amer. Chem. Soc., CODEN: JACSAT, 104(5), <1982>, 1189-1191; BABS-5692859
- Spanka, Gerhard; Rademacher, Paul, J. Org. Chem., CODEN: JOCEAH, 51(5), <1986>, 592-596; BABS-5697367
- Muralikrishna, U; Krishnamurthy, Mannam, Indian J. Chem. Sect. A, CODEN: IJCADU, 21(11), <1982>, 1018-1020; BABS-5950956
- Cauletti, Carla; Di Vona, Maria Luisa; Gargano, Patrizia; Grandinetti, Felice; Galli, Carlo; Lillocci, Claudio, J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, CODEN: JCPKBH, <1986>, 667-670; BABS-5727128

Notes(s):

- Type: vertical

B ReaxysFile ファイル

レコード例

Boiling Point:				沸点 (BP) (780 円)
Value (BP) (Cel)	Press. (. P) (Torr)	Ref.	Note	
105.9	760	1		
105 - 105.3	745.2	2		
106 - 107	757.6	3		
Reference(s):				
1. Magnusson; Schierz, Univ.Wyoming Publ., 7, <1940>, 1,5				
2. Lukes; Grossmann, Collect.Czech.Chem.Comm., CODEN: CCCCAK, 7, <1935>, 344, 351				
3. Bruehl, Z.Phys.Chem.Stoechiom.Verwandtschaftsl., CODEN: ZEPCAC, 16, <1895>, 214, Chem.Ber., CODEN: CHBEAM, 26, <1893>, 2515				
Notes(s):				
1. Only first 20 entries are displayed. Total number of entries = 22. Use "DIS F<prop>" for full format, e.g. FCPD instead of CPD.				
Vapour Pressure:				蒸気圧 (VP) (780 円)
Value (VP) (Torr)	Ref.	Note		
400 - 800	1	1		
	2			
Reference(s):				
1. Magnusson; Schierz, Univ.Wyoming Publ., 7, <1940>, 1,4				
2. Cabani; Ceccanti, J.Chem.Thermodynamics, CODEN: JCTDAF, 5, <1973>, 9,16				
Liquid Density:				液体密度 (DEN) (780 円)
Value (DEN) (g/cm**3)	Temp. (. T) (Cel)	Ref. Temp. (. RT) (Cel)	Ref.	
0.8245	9.5	4	1	
0.8133	21.7	4	1	
0.8207	20	4	2	
Reference(s):				
1. Lukes; Grossmann, Collect.Czech.Chem.Comm., CODEN: CCCCAK, 7, <1935>, 344, 351				
2. Magnusson; Schierz, Univ.Wyoming Publ., 7, <1940>, 1,4				
Dynamic Viscosity:				動粘度 (DV) (780 円)
Value (DV) (g/cm*s)	Temp. (. T) (Cel)	Ref.		
1.2167	303.2	1		
Reference(s):				
1. Prabhavathi, C. L.; Rambabu, K.; Venkateswarlu, P.; Raman, C. K., J.Indian Chem.Soc., CODEN: JICSAH, 69(12), <1992>, 810-812; BABS-5848373				



21 以上, 同一物性値が存在する際
各物性コードの前に, F をつけると
すべての物性データが表示できる.

B ReaxysFile ファイル

レコード例

Enthalpy of Combustion:

Value (HCOM) (J/mol)	Temp. (.T) (Cel)	Press. (.P) (Torr)	Ref.
-4.123e+06	25	750.06	1

燃焼エンタルピー (HCON)
定圧熱容量 (CP)
その他の熱力学的データ (OTHE)
(780 円)

Reference(s):

- Silva, Manuel A. V. Ribeiro da; Cabral, Joana I. Jose R. B., J. Org. Chem., CODEN: JOCEAH, SIR71(10),

原則、物性コードにつき 780 円課金
されるが、関連物性同士*であれば
一表示料金で表示可能
* ReaxysFile が独自に設定

Heat Capacity (CP):

Value (CP) (J/mol*K)	Ref.
	1, 2, 3

Reference(s):

- Cabani et al., Gazz.Chim.Ital., CODEN: GCITA9, 106, <1976>, 541,543, 544
- Lepori; Mengheri, Chim.Ind.(Milan), CODEN: CINMAB, 59, <1977>, 594
- Cabani et al., J.Chem.Soc.Faraday Trans.1, CODEN: JCFTAR, 69, <1973>, 2112

Other Thermochemical Data:

OTHE

Description (.KW): Thermodynamic properties

Reference(s):

- Crowley et al., Tetrahedron, CODEN: TETRAB, 33, <1977>, 915,916, 917,918,923,924

OTHE

Description (.KW): Heat capacity

Reference(s):

- Cabani et al., J.Solution Chem., CODEN: JSLCAG, 5, <1976>, 125,128, 129

OTHE

Description (.KW): Heat of combustion at constant volume

Reference(s):

- Silva, Manuel A. V. Ribeiro da; Cabral, Joana I. T. A.; Gomes, Paula; Gomes, Jose R. B., J. Org. Chem., CODEN: JOCEAH, SIR71(10), <2006>, 3677 - 3685; BABS-6559023

Refractive Index:

Value (RI) (--)	Temp. (.T) (Cel)	Wavelen. (.W) (nm)	Ref.	Note
1.4378	20	589	1	
1.4336	21.7	656.3	2	
1.4362	21.7	589	2	
1.4427	21.7	486.1	2	

屈折率 (RI) (780 円)

Reference(s):

- Magnusson; Schierz, Univ.Wyoming Publ., 7, <1940>, 1,4
- Lukes; Grossmann, Collect.Czech.Chem.Comm., CODEN: CCCCAK, 7, <1935>, 344, 351
- Eijkman, Chem.Ber., CODEN: CHBEAM, 25, <1892>, 3071
- Bruehl, Z.Phys.Chem.Stoichiom.Verwandtschaftsl., CODEN: ZEPCAC, 16, <1895>, 214, Chem.Ber., CODEN: CHBEAM, 26, <1893>, 2515

B ReaxysFile ファイル

レコード例

Nuclear Magnetic Resonance:					NMR (NMR) (780 円)
NMR					
Description (. KW) :		Spectrum			
Reference(s) :					
1. Weitkamp; Korte, Chem. Ber., CODEN: CHBEAM, 95, <1962>, 2896, 2898					
NMR					
Description (. KW) :		Chemical shifts			
Note(s) (. COM) :		NMR-Abs.			
Reference(s) :					
1. Maciel; Beatty, J. Phys. Chem., CODEN: JPCHAX, 69, <1965>, 3925					
NMR					
Description (. KW) :		Chemical shifts			
Note(s) (. COM) :		Chem. Versch. (2H), (gasf., Deuteriochloroform)			
Reference(s) :					
1. Pretsch; Simon, Helv. Chim. Acta, CODEN: HCACAV, 52, <1969>, 2133, 2134					
:					
Infrared Spectrum:					IR スペクトル (IR) (780 円)
Description (. KW)	Solvent (. SOL)	Temp. (. T) (Cel)	Ref.		

Spectrum			1	1	
Bands	CCl4		2	2	
IR			3, 4, 5		
Spectrum	gas		6	3	
Spectrum	CDC13		7	4	
:					
Reference(s) :					
1. Voetter; Tschamler, Monatsh. Chem., CODEN: MOCMB7, 84, <1953>, 134, 135					
2. Hill; Meakins, J. Chem. Soc., CODEN: JCSOA9, <1958>, 760, 763					
3. Cook, Can. J. Chem., CODEN: CJCHAG, 42, <1964>, 2292, 2293					
:					
Raman Spectrum:					ラマンスペクトル (RAS) (780 円)
RAS					
Description (. KW) :		Bands			
Reference(s) :					
1. Voetter; Tschamler, Monatsh. Chem., CODEN: MOCMB7, 84, <1953>, 134, 135					
RAS					
Description (. KW) :		Raman			
Reference(s) :					
1. Ernstbrunner; Hudec, J. Mol. Struct., CODEN: JMOSB4, 17, <1973>, 249, 250 - 256					
:					
Mass Spectrum:					マスマスペクトル (MS) (780 円)
MS					
Reference(s) :					
1. Lyuts, High Energy Chem. (Engl. Transl.), CODEN: HIECAP, 10, <1976>, 253					
□	2. Maquestiau et al., Bull. Soc. Chim. Belg., CODEN: BSCBAG, 88, <1979>, 53				
□	3. Holmes; Terlouw, Can. J. Chem., CODEN: CJCHAG, 54, <1976>, 1007, 1009				
□	4. Khmel'nitskii et al., J. Org. Chem. USSR (Engl. Transl.), CODEN: JOCYA9, 7, <1971>, 389, 390, Zh. Org. Khim., CODEN: ZORKAE, 7, <1971>, 391				
MS					
Description (. KW) :		spectrum			
Reference(s) :					
1. Katritzky, Alan R.; Parris, Roslyn L.; Ignatchenko, Elena S. ;					
:					

B ReaxysFile ファイル

レコード例

Transport Phenomena (MCS): TRAM	粘度 (TRAM) (780 円)
Description (.KW): Viscosity Partner AN (.PAAN): 969212 Partner (.PA): benzene Temperature (.T): 30 Cel Reference(s): 1. Prabhavathi, C. L.; Rambabu, K.; Venkateswarlu, P.; Raman, C. K., J. Indian Chem. Soc., CODEN: JICSAH, 69(12), <1992>, 810-812; BABS-5848373	
Pharmacological Data: PHARM	薬理学的データ (PHARM) (780 円)
Note(s) (.COM): effect on binding (+/-)<3H>nicotine to rat brain P2 fraction (in vitro) Reference(s): 1. Sloan, Jewell W.; Martin, William R.; Hook, Robert; Hernandez, Jorge, J. Med. Chem., CODEN: JMCMAR, 28(9), <1985>, 1245-1251; BABS-5701750	
PHARM	Effect (.E): protein binding Species or Test-System (.SP): Til-1 monoclonal antibody Concentration (.C): <= 126.0 nmol/ml Method, Remarks (.MR): competitive ELISA; splenocytes from BALB/c
Use of Compound: USC	物質の用途 (USC) (780 円)
Laboratory Use and Handling (.LH): catalyst in reaction of diphenylphosphinic hydrazide with phenyl isothiocyanate Reference(s): 1. Yanchuk, N. I., Russ. J. Gen. Chem., CODEN: RJGCEK, 66(8), <1996>, 1248-1251, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, 66(8), <1996>, 1287-1290; BABS-6069503	
Reaction: RX	反応情報 (RX) (780 円)
Reaction ID (.ID): 11050405 Reactant AN (.RAN): 123259 Reactant (.RCT): ethyl 1-methyl-piperidine-3-carboxylate Product AN (.PAN): 1073, 1730731, 1900390 Product (.PRO): N-methylcyclohexylamine, ethylene, carbon dioxide No. of React. Details (.NVAR): 1	
Reaction Details: RX	Reaction RID (.RID): 11050405.1 Reaction Classification (.CL): Chemical behaviour Temperature (.T): 430.2 Cel Pressure (.P): 29 Torr Subject Studied (.SUBJ): Kinetics Prototype Reaction (.PRT): Further Variations:, Pressures, Temperatures
Reference(s): 1. Monsalve, Angiebelk; Rosas, Felix; Tosta, Maria; Herize, Armando; Dominguez, Rosa M.; Brusco, Doris; Chuchani, Gabriel, International Journal of Chemical Kinetics, CODEN: IJCKBO, 38(2), <2006>, 106 - 114; BABS-7032693	

B ReaxysFile ファイル

表示形式

■ 物性検索で使用する主な表示形式

(2011 年 1 月現在)

	回答 番号	物性情報 物性	物質同定情報						料金 (円)
			AN	RN	CN	MF	FA	構造	
物性のコード	○	○ 20 データまで	-	-	-	-	-	-	780
F 物性のコード	○	○ 全データ	-	-	-	-	-	-	780
IDE	○	-	○	○	○	○	○	○	780
物性に関する 各定型表示形式	○	○ 各 20 データまで	-	-	-	-	-	-	*
ALL	○	○ 各 20 データまで	○	○	○	○	○	○	*

* 表示する物性の種類によって料金が変わる



ReaxysFile ファイルには無料の表示形式がないので注意
全データ表示しても、20 データまでと料金が同じ

■ ReaxysFile ファイルでの経済的な表示のコツ

- ・ 右ページのスーパーフィールドについては、複数の物性コードが入っていても、一フィールド料金 (780 円) で表示可能。
 - 一フィールド料金が適応できないスーパーフィールド: MCS, PHY, SAG, SPE
 - スーパーフィールドに含まれない物性は、各物性コードにつき 780 円課金される。
- ・ スーパーフィールドを指定して表示する場合、各物性について最大 20 データまで表示。
 - 全データ表示する場合は定型表示形式を利用せず、定型表示形式に含まれる各物性コードに F をつけて表示すると、一フィールド料金で表示可能。
- ・ 入力例
 - => D GAS ← 各フィールド (CRT, CRP, CRD, CRV, VP, GP) 20 データまで
 - => D FCRT, FCRP, FCRD, FCRV, FVP, FGP ← 21 データ以上ある場合もすべて表示



調査する物性値が右ページのスーパーフィールドに含まれる場合、関連物性情報も同一料金で表示できるので経済的

B ReaxysFile ファイル

表示形式

■ 一表示料金で表示できる物性値スーパーフィールド

(2011年1月現在)

スーパーフィールドコード	内容	含まれる表示フィールド
CHE	化学的データ	RSTR (関連構造), INP (天然物からの単離), CDER (誘導体), PUR (精製), XREF (クロスリファレンス)
LVS	気-液系データ	LVSM (気-液系), AZE (共沸混合物), CPEM (複雑な相平衡)
SOL	溶液作用	SLB (溶解度), SLBP (溶解度積), SOLM (溶解作用), CMC (臨界ミセル濃度), HNC (Henry 定数), POW (オクタノール水分配係数)
ECB	電気化学的作用	ELCB (電気化学的作用の詳細), DE (解離指数), IEP (等電点), POT (電気化学的特性), XS (クロスセクション)
ELEP	電気的特性	DICS (静電誘電率), DIC (比誘電率), ELE (電気的データ)
MAGP	磁気的特性	MSUS (磁化率), MAG (磁気的データ)
MECP	物理的および機械的特性	DEN (液体密度), MEC (機械的特性), CMP (圧縮率), SOUND (音響特性), ST (表面張力)
OPTP	光学特性	RI (屈折率), OPT (光学), ORP (旋光度), MUT (変旋光), ORD (旋光分散), CDIC (円偏光二色性)
CRY	結晶	CPD (結晶性状の記述), MP (融点), CRYPH (結晶相), DP (分解点), SP (昇華点), TP (三重点), CTP (結晶の転移点), CSYS (結晶系), CSG (結晶空間群), CDEN (結晶の密度)
GAS	気体	CRT (臨界温度), CRP (臨界圧力), CRD (臨界密度), CRV (臨界体積), VP (蒸気圧), GP (気相)
LIQ	液体	BP (沸点), LIQPH (液相の詳細), LPTP (液相の転移点)
SEP	構造およびエネルギーパラメータ	CNF (立体配座), GEO (原子間距離と角度), DM (双極子モーメント), POL (電気的分極), DFM (分子の変形), EBC (立体配座のエネルギー障壁), EDIS (解離エネルギー), IP (イオン化ポテンシャル), CIP (電子の結合)
SF	安全性データ	AIT (自然発火点), FP (引火点)
THE	熱力学的特性	HCOM (燃焼エンタルピー), HFOR (生成エンタルピー), HHDG (水素化エンタルピー), HFUS (融解エンタルピー), HVAP (蒸発エンタルピー), HSUB (昇華エンタルピー), HPT (相転移エンタルピー), CP (定圧熱容量), CP0 (定圧熱容量), CV (定容熱容量), OTHE (その他の熱力学的データ)
TRA	輸送現象	DV (粘性率), KV (動的粘性率), BV (体積粘性率), SDIF (自己拡散係数), TRAN (輸送データ)
PED	薬理学/生態学的データ	PHARM (薬理学データ), ECO (下段参照)
ECO	生態学的データ	ECTO (生態毒性), EXCA (汚染評価), COEV (環境への濃縮), ECTD (生態学的移動), BIO (生物学的性質), BIOD (生分解), ECDP (非生物学的分解), ECS (土壌中での安全性), EOD (酸素要求量), USC (物質用途)

B ReaxysFile ファイル

検索方法

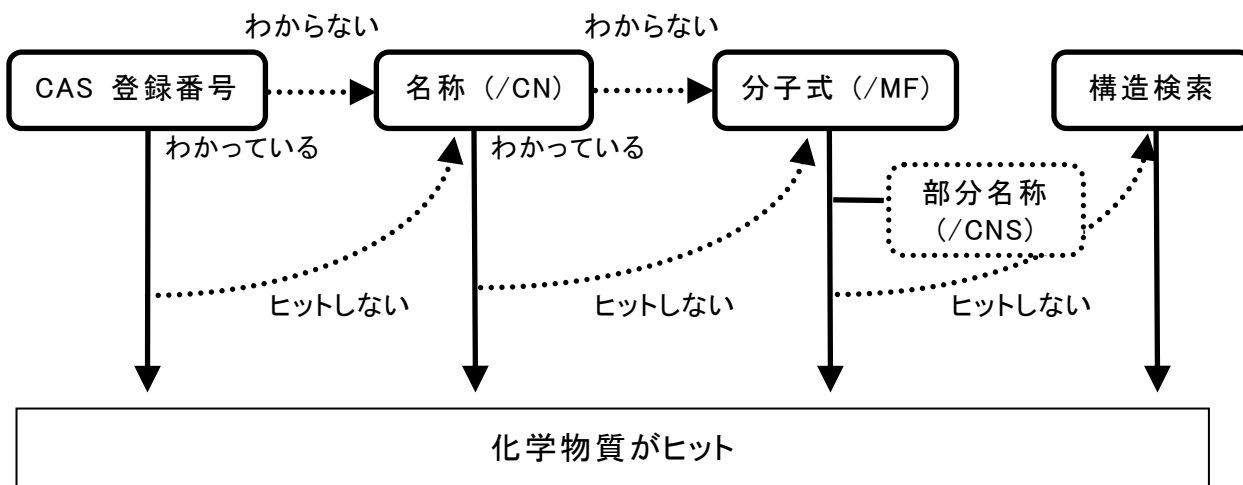
- ReaxysFile ファイルでは、主に分子式検索を用いて検索する。

(2011 年 1 月現在)

検索機能	網羅性	ポイント	料金
CAS 登録番号	△	CAS 登録番号付与率が約 45% であるため、CAS 登録番号検索では検索もれが起こる	無料
名称 (/CN)	△	化合物名称の収録はあまり網羅的ではなく、同義名の収録も少ない。 (/CN は 90 %, /AUN* は 76 %)	無料
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も利用可能 (/ELS, /MAC など)	無料
構造	○	構造検索はもれなく検索可能 (ただし、ポリマーや生体分子は除く)	3,700 円 9,700 円
ファクトデータ	—	サマリーシート中の検索フィールドのみ検索可能。	無料

* IUPAC 命名ソフトウェア AutoNom (/AUN) に基づく名称

- 検索の流れ



無料の表示形式がないので検索して確認!

=> S L# AND 物性コード/FA
=> S L# AND 物性名/物性コード.KW
を用いて、目的の物性が存在するか確認

目的の物性があれば => D 定型表示形式*1 (20 データまで表示)
=> D F 物性コード*2 (指定した物性の全データ)
=> D IDE F 物性コード*2 (物質同定情報と物性データ)
で表示

*1 調査した物性値が前ページのスーパーフィールドに含まれる場合、関連物性情報も同一料金で表示できる。

*2 スーパーフィールド中の物性値を全データ表示する場合は、各物性コードに F をつけて表示する

B ReaxysFile ファイル

検索方法

参考: 複数の物質がヒットした場合

■ ReaxysFile ファイルで、化学物質名称や CAS 登録番号などで検索した場合、目的の物質が一つであっても複数ヒットする場合があります。

- ・ 化学物質名称検索の場合：同一の慣用名が付与されている場合など
- ・ CAS 登録番号の場合：標識化合物なども合わせてヒットする。
 - 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 登録番号が収録されている。同じ構造情報を持つ立体異性体、ラジカル、イオン、同位体ラベル化合物には、複数の CAS 登録番号が付与される。



ReaxysFile ファイルは無料の表示形式がない、そして表示料金も 780 円と高額なため SELECT コマンドを用いて名称などを抽出し、ノイズを除くとよい。

```
=> FILE REAXYSFILE          ← ReaxysFile ファイルに入る
=> S 108-94-1                ← CAS 登録番号で検索する
L1                          3 108-94-1

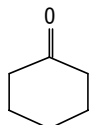
=> SEL CN MF LSF            ← 名称 (CN), 分子式 (MF), 示性式 (LSF) を抽出する (無料)
E1 THROUGH E10 ASSIGNED

=> D SEL                      ← 抽出したタームを表示する (無料)
E1          3      CYCLOHEXANONE/CN
E2          3      C6 H10 O /MF
E3          2      CYCLOHEXANON/CN
E4          1      COC5H10/LSF
E5          1      CYCLO-HEXANONE/CN
E6          1      CYCLOHEXANONE RADICAL CATION/CN
E7          1      CYCLOHEXANONRADIKAL/CN
:

=> S L1 NOT E6-E7           ← 不要な名称, 示性式等を除く
L2          1 L1 NOT ("CYCLOHEXANONE RADICAL CATION"/CN OR CYCLOHEXANONRADIKAL/CN)

=> D IDE                      ← IDE 表示形式で表示する (780 円)
L2  ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN):      385735
Basic Pref. RN (BPR):      108-94-1
CAS Reg. No. (RN):         108-94-1
Chemical Name (CN):         cyclo-hexanone, Cyclohexanone,
:
Autonom Name (AUN):         Cyclohexanone
Lin. Struct. Formula (LSF): COC5H10
Molec. Formula (MF):        C6 H10 O
```



B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

■ ReaxysFile ファイルで検索可能な物性値 (2011 年 1 月現在)

- レコードによっては、数値データがなく参照文献のみ収録されている場合もある。
- 各種測定条件に関する情報は必ず収録されているわけではないので、/コード.P などの (ピリオド) つきの検索フィールドを使用する場合は注意する。

ReaxysFile-12

Property Search および Display フィールドコード

電気的および磁気的性質

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
比誘電率 ¹⁾	なし	/DIC	S 2-2.2/DIC	DIC
コメント ²⁾	-			DIC
周波数 ¹⁾	Hz			DIC
温度 ¹⁾	セ氏			DIC
静電誘電率 ¹⁾	なし			DICS
コメント ²⁾	-			DICS
温度 ¹⁾	セ氏	/DICS.T	S DICS.T>20	DICS
電気的データ	-	/FA	S ELE/FA	ELE
コメント ²⁾	-	/ELE.COM	S PHENOL/ELE.COM	ELE
キーワード	-	/ELE.KW	S PIEZOELECTRICITY/ELE.KW	ELE
磁気的データ	-	/FA	S MAG/FA	MAG
コメント ²⁾	-	/MAG.COM	S HANDBOOK/MAG.COM	MAG
キーワード	-	/MAG.KW	S MAGNETIC MOMENT/MAG.KW	MAG
磁化率 ¹⁾	cm ³ /mol*E6	/MSUS	S 0-410/MSUS	MSUS
コメント ²⁾	-	/MSUS.COM	S RANGE/MSUS.COM	MSUS
温度 ¹⁾	セ氏	/MSUS.T	S 20-25/MSUS.T	MSUS

表示と物性の存在確認で用いるコード
 ・ => S コード/FA で物性の存在を確認
 ・ 表示の際は、各コードの頭に F をつけるると全データが表示できる

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

点線で囲っている部分は
一表示料金で表示可能な
関連物性同士

電気化学的作用

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
クロスセクション	-	/FA	S XS/FA	XS
コメント ¹⁾	-	/XS.COM	S ELEKTRONEN/XS.COM	XS
キーワード	-	/XS.KW	S COLLISION CROSS-SECTION/XS.KW	XS
解離指数 (pk) ²⁾	なし	/DE	S 1.5-1.55/DE	DE
コメント ¹⁾	-	/DE.COM	S HANDBOOK/DE.COM	DE
測定法	-	/DE.MET	S CONDUCTOMETRIC/DE.MET	DE
溶媒	-	/DE.SOL	S D20/DE.SOL	DE
温度 ²⁾	セ氏	/DE.T	S DE.T>180	DE
タイプ	-	/DE.TYP	S THERMODYNAMIC/DE.TYP	DE
電気化学的作用	-	/FA	S ELCB/FA	ELCB
コメント ¹⁾	-	/ELCB.COM	S GAS/ELCB.COM	ELCB
キーワード	-	/ELCB.KW	S PROTON AFFINITY/ELCB.KW	ELCB
電気化学的特性	-	/FA	S POT/FA	POT
コメント ¹⁾	-	/POT.COM	S CYCLOVOLTAMMETRY/POT.COM	POT
キーワード	-	/POT.KW	S OXIDATION POTENTIAL/POT.KW	POT
pH値 ²⁾	なし	/POT.PH	S 1-7/POT.PH	POT
生成物	-	/POT.PRO	S PHENYLENEDIAMINE/POT.PRO	POT
生成物 AN ²⁾	なし	/POT.PAN	S 2827/POT.PAN	POT
溶媒	-	/POT.SOL	S METHANOL/POT.SOL	POT
温度 ²⁾	セ氏	/POT.T	S POT.T<-10	POT
等電点 pH ²⁾	-	/IEP	S IEP>5.5	IEP
コメント ¹⁾	-	/IEP.COM	S HANDBOOK/IEP.COM	IEP
溶媒	-	/IEP.SOL	S H20/IEP.SOL	IEP

キーワードは参照文献のみ収録している物性データ
詳細は P.54 参照

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-13

多成分系データ (MCS)

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
吸着 (MCS)	-	/FA	S AD5M/FA	AD5M
コメント ¹⁾	-	/AD5M.COM	S HANDBOOK/AD5M.COM	AD5M
キーワード	-	/AD5M.KW	S ENTHALPY OF ADSORPTION /AD5M.KW	AD5M
対象物 ¹⁾	-	/AD5M.PA	S TRITON X-100/AD5M.PA	AD5M
対象物 AN ²⁾	なし	/AD5M.PAAN	S 2343266/AD5M.PAAN	AD5M
圧力 ²⁾	Torr	/AD5M.P	S 0.5-20/AD5M.P	AD5M
溶媒	-	/AD5M.SOL	S H2SO4/AD5M.SOL	AD5M
温度 ²⁾	セ氏	/AD5M.T	S 100/AD5M.T	AD5M
会合 (MCS)	-	/FA	S ASSM/FA	ASSM
コメント ¹⁾	-	/ASSM.COM	S ACIDIC SOLUTION/ASSM.COM	ASSM
キーワード	-	/ASSM.KW	S ASSOCIATION WITH COMPOUND /ASSM.KW	ASSM
対象物 ¹⁾	-	/ASSM.PA	S IMIDAZOLE PERCHLORATE /ASSM.PA	ASSM
対象物 AN ²⁾	なし	/ASSM.PAAN	S 54438/ASSM.PAAN	ASSM
圧力 ²⁾	Torr	/ASSM.P	S 0.5-1.5/ASSM.P	ASSM
溶媒	-	/ASSM.SOL	S CDCL3/ASSM.SOL	ASSM
温度 ²⁾	セ氏	/ASSM.T	S ASSM.T>100	ASSM
共沸混合物 (MCS)	-	/FA	S AZE/FA	AZE
コメント ¹⁾	-	/AZE.COM	S HANDBOOK/AZE.COM	AZE
濃度	-	/AZE.C	S 60.11 MOL-PERCENT/AZE.C	AZE
対象物 ¹⁾	-	/AZE.PA	S DODECANE/AZE.PA	AZE
対象物 AN ²⁾	なし	/AZE.PAAN	S 1697175/AZE.PAAN	AZE
圧力 ²⁾	Torr	/AZE.P	S 199.8/AZE.P	AZE
温度 ²⁾	セ氏	/AZE.T	S 20-25/AZE.T	AZE
界面現象	-	/FA	S BSPM/FA	BSPM
コメント ¹⁾	-	/BSPM.COM	S HANDBOOK/BSPM.COM	BSPM
キーワード	-	/BSPM.KW	S SURFACE TENSION/BSPM.KW	BSPM
対象物 ¹⁾	-	/BSPM.PA	S METHANOL/BSPM.PA	BSPM
対象物 AN ²⁾	なし	/BSPM.PAAN	S 1098229/BSPM.PAAN	BSPM
圧力 ²⁾	Torr	/BSPM.P	S 0-750060/BSPM.P	BSPM
溶媒	-	/BSPM.SOL	S H2O/BSPM.SOL	BSPM
温度 ²⁾	セ氏	/BSPM.T	S 100/BSPM.T	BSPM
複雑な相平衡	-	/FA	S CPEM/FA	CPEM
コメント ¹⁾	-	/CPEM.COM	S DEPENDENCE/CPEM.COM	CPEM
キーワード	-	/CPEM.KW	S PHASE EQUILIBRIUM/CPEM.KW	CPEM
対象物 ¹⁾	-	/CPEM.PA	S (NAPHTHALENE AND WATER) /CPEM.PA	CPEM
対象物 AN ²⁾	なし	/CPEM.PAAN	S 1421310/CPEM.PAAN	CPEM
圧力 ²⁾	Torr	/CPEM.P	S 30000-40000/CPEM.P	CPEM
溶媒	-	/CPEM.SOL	S H2O/CPEM.SOL	CPEM
温度 ²⁾	セ氏	/CPEM.T	S 20/CPEM.T	CPEM
臨界ミセル濃度 ²⁾	g/L	/CMC	S 0.025/CMC	CMC
コメント ¹⁾	-	/CMC.COM	S HANDBOOK/CMC.COM	CMC
溶媒	-	/CMC.SOL	S H2O/CMC.SOL	CMC
温度 ²⁾	セ氏	/CMC.T	S 0.025/CMC AND 40/CMC.T	CMC
電気的データ	-	/FA	S EDM/FA	EDM
コメント ¹⁾	-	/EDM.COM	S CONCENTRATION/EDM.COM	EDM
キーワード	-	/EDM.KW	S DIELECTRIC CONSTANT/EDM.KW	EDM
対象物 ¹⁾	-	/EDM.PA	S TETRATRIACONTAN-1-OL/EDM.PA	EDM
対象物 AN ²⁾	なし	/EDM.PAAN	S 1798829/EDM.PAAN	EDM
温度 ²⁾	セ氏	/EDM.T	S 20-30/EDM.T	EDM

(続)

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-14

多成分系データ (MCS)

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
エネルギーデータ (MCS)	-	/FA	S ENEM/FA	ENEM
コメント ¹⁾	-	/ENEM.COM	S CYCLOHEXANON/ENEM.COM	ENEM
キーワード	-	/ENEM.KW	S ENTHALPY OF SOLUTION /ENEM.KW	ENEM
対象物 ¹⁾	-	/ENEM.PA	S 1,4-DIOXANE/ENEM.PA	ENEM
対象物 AN ²⁾	なし	/ENEM.PAAN	S 969148/ENEM.PAAN	ENEM
圧力 ²⁾	Torr	/ENEM.P	S 2-20/ENEM.P	ENEM
溶媒	-	/ENEM.SOL	S TOLUENE/ENEM.SOL	ENEM
温度 ²⁾	セ氏	/ENEM.T	S 25-30/ENEM.T	ENEM
Henry定数 (MCS)	Pa*m**3/mol	/HNC	S 20-30/HNC	HNC
コメント ¹⁾	-	/HNC.COM	S CONSTANT/HNC.COM	HNC
Henry定数の対象 ²⁾	なし	/HNC.LOG	S -5.72/HNC.LOG	HNC
溶媒	-	/HNC.SOL	S H2O/HNC.SOL	HNC
温度 ²⁾	セ氏	/HNC.T	S 25/HNC.T	HNC
液-液系 (MCS)	-	/FA	S LLSM/FA	LLSM
コメント ¹⁾	-	/LLSM.COM	S HANDBOOK/LLSM.COM	LLSM
キーワード	-	/LLSM.KW	S LIQUID/LIQUID PHASE DIAGRAM/LLSM.KW	LLSM
対象物 ¹⁾	-	/LLSM.PA	S TETRACHLOROMETHANE/LLSM.PA	LLSM
対象物 AN ²⁾	なし	/LLSM.PAAN	S 1098295/LLSM.PAAN	LLSM
圧力 ²⁾	Torr	/LLSM.P	S 0-10000/LLSM.P	LLSM
溶媒	-	/LLSM.SOL	S DIMETHYLSULFOXIDE/LLSM.SOL	LLSM
温度 ²⁾	セ氏	/LLSM.T	S 5-10/LLSM.T	LLSM
固-液系 (MCS)	-	/FA	S LSSM/FA	LSSM
コメント ¹⁾	-	/LSSM.COM	S HANDBOOK/LSSM.COM	LSSM
キーワード	-	/LSSM.KW	S PHASE TRANSITION TEMPERATURE?/LSSM.KW	LSSM
対象物 ¹⁾	-	/LSSM.PA	S STRYCHNIDIN-10-ONE/LSSM.PA	LSSM
対象物 AN ²⁾	なし	/LSSM.PAAN	S 52979/LSSM.PAAN	LSSM
圧力 ²⁾	Torr	/LSSM.P	S 0-20000/LSSM.P	LSSM
溶媒	-	/LSSM.SOL	S NAPHTHALENE/LSSM.SOL	LSSM
温度 ²⁾	セ氏	/LSSM.T	S LSSM.T>200	LSSM
気-液系 (MCS)	-	/FA	S LVSM/FA	LVSM
コメント ¹⁾	-	/LVSM.COM	S HANDBOOK/LVSM.COM	LVSM
キーワード	-	/LVSM.KW	S CRITICAL VOLUME/LVSM.KW	LVSM
対象物 ¹⁾	-	/LVSM.PA	S ACETALDEHYDE/LVSM.PA	LVSM
対象物 AN ²⁾	なし	/LVSM.PAAN	S 506007/LVSM.PAAN	LVSM
圧力 ²⁾	Torr	/LVSM.P	S 19000-90000/LVSM.P	LVSM
溶媒	-	/LVSM.SOL	S PROPAN-1-OL/LVSM.SOL	LVSM
温度 ²⁾	セ氏	/LVSM.T	S 120/LVSM.T	LVSM
機械的および物理的特性 (MCS)	-	/FA	S MECM/FA	MECM
コメント ¹⁾	-	/MECM.COM	S DIAGRAM/MECM.COM	MECM
キーワード	-	/MECM.KW	S ISOTHERMAL COMPRESS? /MECM.KW	MECM
対象物 ¹⁾	-	/MECM.PA	S OCTAN-1-OL/MECM.PA	MECM
対象物 AN ²⁾	なし	/MECM.PAAN	S 1697461/MECM.PAAN	MECM
圧力 ²⁾	Torr	/MECM.P	S 1-10/MECM.P	MECM
溶媒	-	/MECM.SOL	S HCL/MECM.SOL	MECM
温度 ²⁾	セ氏	/MECM.T	S 25-65/MECM.T	MECM

(続く)

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-15

多成分系データ (MCS)

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
光学データ (MCS)	-	/FA	S ODM/FA	ODM
キーワード	-	/ODM.KW	S KERR CONSTANT/ODM.KW	ODM
対象物 ¹⁾	-	/ODM.PA	S PHENOL/ODM.PA	ODM
対象物 AN ²⁾	なし	/ODM.PAAN	S 969616/ODM.PAAN	ODM
オクタノール/水分配率 (POW) (MCS) ²⁾	なし	/POW	S 1.5-2/POW	POW
POWの対数 ²⁾	なし	/POW.LOG	S -0.9- -0.7/POW.LOG	POW
温度 ²⁾	セ氏	/POW.T	S 20/POW.T	POW
溶解度 (MCS) ²⁾	g/L	/SLB	S SLB<0.0001	SLB
コメント ¹⁾	-	/SLB.COM	S PH/SLB.COM	SLB
溶媒の比率	-	/SLB.RAT	S (6(P)1)/SLB.RAT	SLB
飽和	-	/SLB.SAT	S (PURE AND SOLVENT)/SLB.SAT	SLB
溶媒	-	/SLB.SOL	S DIETHYL ETHER/SLB.SOL	SLB
温度 ²⁾	セ氏	/SLB.T	S 10/SLB.T	SLB
溶解度積 (MCS) ²⁾	なし	/SLBP	S SLBP<0.00002	SLBP
コメント ¹⁾	-	/SLBP.COM	S HANDBOOK/SLBP.COM	SLBP
溶媒の比率	-	/SLBP.RAT	S (30(P)PERCENT)/SLBP.RAT	SLBP
溶媒	-	/SLBP.SOL	S H2O/SLBP.SOL	SLBP
温度 ²⁾	セ氏	/SLBP.T	S 25/SLBP.T	SLBP
溶液作用 (MCS)	-	/FA	S SOLM/FA	SOLM
コメント ¹⁾	-	/SOLM.COM	S PRESSURE/SOLM.COM	SOLM
キーワード	-	/SOLM.KW	S MISCIBILITY/SOLM.KW	SOLM
対象物 ¹⁾	-	/SOLM.PA	S XYLITOL/SOLM.PA	SOLM
対象物 AN ²⁾	なし	/SOLM.PAAN	S 2049719/SOLM.PAAN	SOLM
圧力 ²⁾	Torr	/SOLM.P	S 780-850/SOLM.P	SOLM
溶媒	-	/SOLM.SOL	S TETRAHYDROFURAN/SOLM.SOL	SOLM
温度 ²⁾	セ氏	/SOLM.T	S 20/SOLM.T	SOLM
輸送現象 (MCS)	-	/FA	S TRAM/FA	TRAM
コメント ¹⁾	-	/TRAM.COM	S HANDBOOK/TRAM.COM	TRAM
キーワード	-	/TRAM.KW	S DYNAMIC VISCOSITY/TRAM.KW	TRAM
対象物 ¹⁾	-	/TRAM.PA	S ETHANOL/TRAM.PA	TRAM
対象物 AN ²⁾	なし	/TRAM.PAAN	S 1718799/TRAM.PAAN	TRAM
圧力 ²⁾	Torr	/TRAM.P	S 0-800000/TRAM.P	TRAM
溶媒	-	/TRAM.SOL	S PYRIDINE/TRAM.SOL	TRAM
温度 ²⁾	セ氏	/TRAM.T	S 9.9/TRAM.T	TRAM

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

SOL

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-16

光学的性質

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
円偏光二色性	-	/FA	S CDIC/FA	CDIC ...
コメント ¹⁾	-	/CDIC.COM	S HANDBOOK/CDIC.COM	CDIC
溶媒	-	/CDIC.SOL	S CHCL3/CDIC.SOL	CDIC
変旋光 ²⁾	deg	/MUT	S 10-20/MUT	MUT
コメント ¹⁾	-	/MUT.COM	S HANDBOOK/MUT.COM	MUT
濃度	-	/MUT.C	S 0.7 G/100ML/MUT.C	MUT
光路長 ²⁾	cm	/MUT.LEN	S MUT.LEN>10	MUT
溶媒	セ氏	/MUT.SOL	S H2O/MUT.SOL	MUT
温度 ²⁾	-	/MUT.T	S 21/MUT.T	MUT
時間	-	/MUT.TIM	S 1 DAY?/MUT.TIM	MUT
タイプ	nm	/MUT.TYP	S M/MUT.TYP	MUT
波長 ²⁾	-	/MUT.W	S 589/MUT.W	MUT
旋光分散	-	/FA	S ORD/FA	ORD
コメント ¹⁾	-	/ORD.COM	S CYCLOHEXANOL/ORD.COM	ORD
溶媒	deg	/ORD.SOL	S ETHANOL/ORD.SOL	ORD
旋光度 ²⁾	-	/ORP	S 39.65-40/ORP	ORP
コメント ¹⁾	-	/ORP.COM	S ACETAMIDE/ORP.COM	ORP
濃度	cm	/ORP.C	S 1 MOL/L/ORP.C	ORP
光路長 ²⁾	-	/ORP.LEN	S 10/ORP.LEN	ORP
溶媒	セ氏	/ORP.SOL	S BENZENE/ORP.SOL	ORP
温度 ²⁾	-	/ORP.T	S 20/ORP.T	ORP
タイプ	nm	/ORP.TYP	S ALPHA/ORP.TYP	ORP
波長 ²⁾	-	/ORP.W	S 578/ORP.W	ORP
光学	-	/FA	S OPT/FA	OPT
コメント ¹⁾	-	/OPT.COM	S ACETON/OPT.COM	OPT
キーワード	なし	/OPT.KW	S LINEAR DICHOISM/OPT.KW	OPT
屈折率 ²⁾	-	/RI	S 1.00056/RI	RI
コメント ¹⁾	セ氏	/RI.COM	S HANDBOOK/RI.COM	RI
温度 ²⁾	nm	/RI.T	S 0/RI.T	RI
波長 ²⁾	-	/RI.W	S 586/RI.W	RI ...

OPTP

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

安全性データ

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
引火点	-	/FA	S FP/FA	FP
温度 ¹⁾	セ氏	/FP.T	S 105/FP.T	FP
テストのタイプ	-	/FP.TYP	S DIN/FP.TYP	FP

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-17

物理的および機械的性質

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
音響特性	-	/FA	S SOUND/FA	SOUND ...
コメント ¹⁾	-	/SOUND.CO	S HANDBOOK/SOUND.COM	SOUND
キーワード	-	M	S VELOCITY OF SOUND/SOUND.KW	SOUND
圧縮率	-	/SOUND.KW	S CMP/FA	CMP
コメント ¹⁾	-	/FA	S HANDBOOK/CMP.COM	CMP
キーワード	-	/CMP.COM	S ADIABATIC COMPRESSIBILITY	CMP
		/CMP.KW	/CMP.KW	
その他の情報 ²⁾ (物理的および化学的性質)	-	/FA	S FINFO/FA	FINFO
液体密度 ³⁾	g/cm ³	/FA	S 1/DEN	DEN
コメント ¹⁾	-	/DEN	S ALCOHOL/DEN.COM	DEN
測定温度 ³⁾	セ氏	/DEN.COM	S 20/DEN.T	DEN
基準温度 ³⁾	セ氏	/DEN.T	S 10/DEN.ET	DEN
機械的性質	-	/DEN.ET	S MEC/FA	MEC
コメント ¹⁾	-	/FA	S HANDBOOK/MEC.COM	MEC
キーワード	-	/MEC.COM	S VISCOSITY/MEC.KW	MEC
表面張力 ³⁾	g/s ²	/MEC.KW	S 1.9-2/ST	ST
コメント ¹⁾	-	/ST	S HANDBOOK/ST.COM	ST
温度 ³⁾	セ氏	/ST.COM	S 20-22/ST.T	ST
		/ST.T		...

1) ドイツ語で記述されている場合があります。

2) ReaxysFile では詳細をカバーしていない物理的、化学的特性に関する引用を含んでいます。

3) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

スペクトルデータ

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
ESR(電子スピン共鳴)スペクトル	-	/FA	S ESR/FA	ESR
コメント ¹⁾	-	/ESR.COM	S (INORGANIC AND COMPOUNDS)	ESR
			/ESR.COM	
キーワード	-	/ESR.KW	S SPECTRUM/ESR.KW	ESR
カップリング核	-	/ESR.NUI	S 2D/ESR.NUI	ESR
溶媒	-	/ESR.SOL	S CH2CL2/ESR.SOL	ESR
温度 ²⁾	セ氏	/ESR.T	S 19-20/ESR.T	ESR
蛍光スペクトル	-	/FA	S FLU/FA	FLU
コメント ¹⁾	-	/FLU.COM	S HANDBOOK/FLU.COM	FLU
キーワード	-	/FLU.KW	S MAXIMA/FLU.KW	FLU
溶媒	-	/FLU.SOL	S ACETONITRILE/FLU.SOL	FLU
温度 ²⁾	セ氏	/FLU.T	S 25/FLU.T	FLU
IR(赤外)スペクトル	-	/FA	S IR/FA	IR
コメント ¹⁾	-	/IR.COM	S PH/IR.COM	IR
キーワード	-	/IR.KW	S FINE STRUCTURE OF IR BANDS	IR
			/IR.KW	
溶媒	-	/IR.SOL	S CHCL3/IR.SOL	IR
温度 ²⁾	セ氏	/IR.T	S IR.T>50	IR
発光スペクトル	-	/FA	S LUM/FA	LUM
コメント ¹⁾	-	/LUM.COM	S (TEMPERATURE AND DEPENDE?)	LUM
			/LUM.COM	
キーワード	-	/LUM.KW	S LUMINESCENCE QUENCHING	LUM
			/LUM.KW	

(続く)

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-18

スペクトルデータ

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
MASS(質量)スペクトル	-	/FA	S MS/FA	MS
コメント ¹⁾	-	/MS.COM	S METASTABLE/MS.COM	MS
キーワード	-	/MS.KW	S FRAGMENTATION PATTERN/MS.KW	MS
NMR(核磁気共鳴)スペクトル	-	/FA	S NMR/FA	NMR
コメント ¹⁾	-	/NMR.COM	S (AMBIENT AND TEMPERATURE) /NMR.COM	NMR
カップリング核	-	/NMR.NUI	S (1H and 13C)/NMR.NUI	NMR
キーワード	-	/NMR.KW	S 2D-NMR/NMR.KW	NMR
周波数 ²⁾	MHz	/NMR.F	S 50/NMR.F	NMR
核種	-	/NMR.NUC	S 31P/NMR.NUC	NMR
溶媒	-	/NMR.SOL	S CDCl3/NMR.SOL	NMR
温度 ²⁾	セ氏	/NMR.T	S 20-22/NMR.T	NMR
NQR(核四重極共鳴)スペクトル	-	/FA	S NQR/FA	NQR
コメント ¹⁾	-	/NQR.COM	S (NQR AND ABSORPTION)/NQR.COM	NQR
キーワード	-	/NQR.KW	S NUCLEAR QUADRUPOLE RESONANCE /NQR.KW	NQR
核種	-	/NQR.NUC	S 35Cl/NQR.NUC	NQR
その他の分光法	-	/FA	S OSM/FA	OSM
コメント ¹⁾	-	/OSM.COM	S SHIFTS/OSM.COM	OSM
キーワード	-	/OSM.KW	S PHOTOELECTRON SPECTRUM/OSM.KW	OSM
りん光スペクトル	-	/FA	S PHO/FA	PHO
コメント ¹⁾	-	/PHO.COM	S HANDBOOK/PHO.COM	PHO
キーワード	-	/PHO.KW	S TRIPLET STATE LIFETIME/PHO.KW	PHO
溶媒	-	/PHO.SOL	S ETHANOL/PHO.SOL	PHO
温度 ²⁾	セ氏	/PHO.T	S 25/PHO.T	PHO
ラマンスペクトル	-	/FA	S RAS/FA	RAS
コメント ¹⁾	-	/RAS.COM	S (GASEOUS AND MATRIX)/RAS.COM	RAS
キーワード	-	/RAS.KW	S RAMAN INTENSITIES/RAS.KW	RAS
溶媒	-	/RAS.SOL	S KBr/RAS.SOL	RAS
回転スペクトル	-	/FA	S ROT/FA	ROT
コメント ¹⁾	-	/ROT.COM	S ROTATIONS DISPERSION/ROT.COM	ROT
キーワード	-	/ROT.KW	S ROTATIONAL SPECTRUM/ROT.KW	ROT
紫外・可視スペクトル	-	/FA	S UVS/FA	UVS
吸収極大 ²⁾	nm	/UVS.AM	S 199-199.1/UVS.AM	UVS
コメント ¹⁾	-	/UVS.COM	S (ACIDIC AND SOLUTION)/UVS.COM	UVS
キーワード	-	/UVS.KW	S ABSORPTION MAXIMA/UVS.KW	UVS
吸光/吸収係数 ²⁾	1/mol*cm	/UVS.EAC	S 4.4/UVS.EAC	UVS
溶媒	-	/UVS.SOL	S CYCLOHEXANE/UVS.SOL	UVS

1)ドイツ語で記述されている場合があります。

2)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-19

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
凝集状態				
結晶				
結晶密度 ¹⁾	g/cm ³	/CDEN	S 5-5.1/CDEN	CDEN
コメント ²⁾	-	/CDEN.COM	S ORTHORHOMBISCH?/CDEN.COM	CDEN
温度 ¹⁾	セ氏	/CDEN.T	S 298 K/CDEN.T	CDEN
結晶相	-	/FA	S CRYPH/FA	CRYPH
コメント ²⁾	-	/CRYPH.COM	S ANISOTROPIC/CRYPH.COM	CRYPH
キーワード	-	/CRYPH.KW	S CRYSTAL STRUCTURE?/CRYPH.KW	CRYPH
温度 ¹⁾	セ氏	/CRYPH.T	S 14.85/CRYPH.T	CRYPH
結晶性状	-	/CPD	S GLAS?/CPD	CPD
色およびその他の性質の記述	-	/CPD.COM	S HANDBOOK/CPD.COM	CPD
コメント ²⁾	-	/CSG	S P212121/CSG	CSG
結晶空間群	-	/CSG.COM	S HANDBOOK/CSG.COM	CSG
コメント ²⁾	-	/CSYS	S MONOCLINIC/CSYS	CSYS
結晶系	-	/CSYS.COM	S (LABILE(P)FORM)/CSYS.COM	CSYS
コメント ²⁾	-	/CTP	S 100.05-100.1/CTP	CTP
結晶の転移点 ¹⁾	セ氏	/CTP	S 100.05-100.1/CTP	CTP
相状態の変化	-	/CTP.COM	S GLASS/CTP.COM	CTP
コメント ²⁾	-	/CTP.COM	S HANDBOOK/CTP.COM	CTP
分解点 ¹⁾	セ氏	/DP	S 0-10/DP	DP
コメント ²⁾	-	/DP.COM	S CRYSTALLIZATION/DP.COM	DP
溶媒	-	/DP.SOL	S PROPAN-2-OL/DP.SOL	DP
融点 ¹⁾	セ氏	/MP	S 250-260/MP	MP
コメント ²⁾	-	/MP.COM	S DECOMPOSITION/MP.COM	MP
溶媒	-	/MP.SOL	S XYLENE/MP.SOL	MP
昇華点 ¹⁾	セ氏	/SP	S SP>=500	SP
コメント ²⁾	-	/SP.COM	S (MELTING(P)FORM)/SP.COM	SP
圧力 ¹⁾	Torr	/SP.P	S 1/SP.P	SP
三重点 ¹⁾	セ氏	/TP	S 218.85/TP	TP
コメント ²⁾	-	/TP.COM	S BAR/TP.COM	TP
液体				
沸点 ¹⁾	セ氏	/BP	S BP>200	BP
コメント ²⁾	-	/BP.COM	S BADTEMPERATUR/BP.COM	BP
圧力 ¹⁾	Torr	/BP.P	S 1/BP.P	BP
液相	-	/FA	S LIQPH/FA	LIQPH
コメント ²⁾	-	/LIQPH.COM	S AETHANOL/LIQPH.COM	LIQPH
キーワード	-	/LIQPH.KW	S SELF-ASSOCIATION IN SOLUTION/LIQPH.KW	LIQPH
液相の転移点 ¹⁾	セ氏	/LPTP	S 20/LPTP	LPTP
相状態の変化	-	/LPTP.COM	S (NEMATIC(P)ISOTROPIC)/LPTP.COM	LPTP
コメント ²⁾	-	/LPTP.COM	S HANDBOOK/LPTP.COM	LPTP
気体				
臨界密度 ¹⁾	g/cm ³	/CRD	S 0.2-0.2022/CRD	CRD
コメント ²⁾	-	/CRD.COM	S HANDBOOK/CRD.COM	CRD
臨界圧力 ¹⁾	Torr	/CRP	S CRP>760 MBAR	CRP
コメント ²⁾	-	/CRP.COM	S HANDBOOK/CRP.COM	CRP
臨界温度 ¹⁾	セ氏	/CRT	S 500-600/CRT	CRT
コメント ²⁾	-	/CRT.COM	S HANDBOOK/CRT.COM	CRT
臨界体積 ¹⁾	cm ³ /mol	/CRV	S 210/CRV	CRV
コメント ²⁾	-	/CRV.COM	S HANDBOOK/CRV.COM	CRV
気相	-	/FA	S GP/FA	GP
コメント ²⁾	-	/GP.COM	S (SATURATED(P)LIQ?)/GP.COM	GP
キーワード	-	/GP.KW	S FUGACITY/GP.KW	GP
蒸気圧 ¹⁾	Torr	/VP	S 4-5/VP	VP
コメント ²⁾	-	/VP.COM	S EQUATION/VP.COM	VP
温度 ¹⁾	セ氏	/VP.T	S VP>80 and VP.T<5	VP

1)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2)ドイツ語で記述されている場合があります。

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-20

構造およびエネルギーパラメータ

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
立体配座	-	/FA	S CNF/FA	CNF
研究の目的	-	/CNF.OBJ	S CONFORMER EQUILIBRIUM/CNF.OBJ	CNF
双極子モーメント ¹⁾	D	/DM	S 1-1.22/DM	DM
コメント ²⁾	-	/DM.COM	S CONCENTRATION/DM.COM	DM
キーワード	-	/DM.KW	S QUADRUPOLE MOMENT/DM.KW	DM
測定法	-	/DM.MET	S DIELECTRIC/DM.MET	DM
溶媒	-	/DM.SOL	S CCL4/DM.SOL	DM
温度 ¹⁾	セ氏	/DM.T	S 20>DM.T	DM
電気的分極	-	/FA	S POL/FA	POL
コメント ²⁾	-	/POL.COM	S (TIME(P)DEPENDENCE)/POL.COM	POL
キーワード	-	/POL.KW	S ELECTRON POLARIZATION/POL.KW	POL
電子の結合	-	/FA	S CIP/FA	CIP
コメント ²⁾	-	/CIP.COM	S (EXCITED(P)STATE)/CIP.COM	CIP
キーワード	-	/CIP.KW	S ELECTRON AFFINITY/CIP.KW	CIP
立体配座のエネルギー障壁 ¹⁾	J/mol	/EBC	S 1000<=EBC	EBC
障壁タイプ	-	/EBC.TYP	S CF3/EBC.TYP	EBC
コメント ²⁾	-	/EBC.COM	S ROTATION/EBC.COM	EBC
溶媒	-	/EBC.SOL	S TOLUENE/EBC.SOL	EBC
解離エネルギー ¹⁾	J/mol	/EDIS	S 12000-14000/EDIS	EDIS
結合タイプ	-	/EDIS.TYP	S (P(P)H)/EDIS.TYP	EDIS
コメント ²⁾	-	/EDIS.COM	S DISSOZIATIONSENERGIE/EDIS.COM	EDIS
原子間距離と角度	-	/FA	S GEO/FA	GEO
コメント ²⁾	-	/GEO.COM	S METHOD/GEO.COM	GEO
キーワード	-	/GEO.KW	S "INTERATOMIC DISTANCES(P) ANGLES"/GEO.KW	GEO
イオン化ポテンシャル ¹⁾	eV	/IP	S 7-8/IP	IP
コメント ²⁾	-	/IP.COM	S VERTICAL/IP.COM	IP
測定法	-	/IP.MET	S PHOTOIONIZATION/IP.MET	IP
分子の変形	-	/FA	S DFM/FA	DFM
コメント ²⁾	-	/DFM.COM	S ACETONITRIL?/DFM.COM	DFM
キーワード	-	/DFM.KW	S FORCE CONSTANTS/DFM.KW	DFM

1) 数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2) ドイツ語で記述されている場合があります。

熱力学的物性

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
燃焼エンタルピー ¹⁾	J/mol	/HCOM	S HCOM>-100000	HCOM
コメント ²⁾	-	/HCOM.COM	S HANDBOOK/HCOM.COM	HCOM
圧力 ¹⁾	Torr	/HCOM.P	S 760/HCOM.P	HCOM
温度 ¹⁾	セ氏	/HCOM.T	S 25/HCOM.T	HCOM
生成エンタルピー ¹⁾	J/mol	/HFOR	S 808052/HFOR	HFOR
コメント ²⁾	-	/HFOR.COM	S HANDBOOK/HFOR.COM	HFOR
圧力 ¹⁾	Torr	/HFOR.P	S 759-761/HFOR.P	HFOR
温度 ¹⁾	セ氏	/HFOR.T	S HFOR.T<10	HFOR
融解エンタルピー ¹⁾	J/mol	/HFUS	S 1000-2000/HFUS	HFUS
コメント ²⁾	-	/HFUS.COM	S HANDBOOK/HFUS.COM	HFUS
水素化エンタルピー ¹⁾	J/mol	/HHDG	S 153362/HHDG	HHDG
コメント ²⁾	-	/HHDG.COM	S HANDBOOK/HHDG.COM	HHDG
生成物 AN ¹⁾	なし	/HHDG.AN	S 1862856/HHDG.AN	HHDG
生成物名称 ²⁾	-	/HHDG.CN	S PHENYL-CYCLOOCTANE/HHDG.CN	HHDG
温度 ¹⁾	セ氏	/HHDG.T	S 24.9/HHDG.T	HHDG

(続く)

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (サマリーシート)

ReaxysFile-21

熱力学的物性

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
相転移エンタルピー ¹⁾	J/mol	/HPT	\$ 650-700/HPT	HPT
コメント ²⁾	-	/HPT.COM	\$ (HEXAGONAL(P)CUBIC)/HPT.COM	HPT
昇華エンタルピー ¹⁾	J/mol	HSUB	\$ HSUB<40000	HSUB
コメント ²⁾	-	/HSUB.COM	\$ HANDBOOK/HSUB.COM	HSUB
温度 ¹⁾	セ氏	/HSUB.T	\$ 25/HSUB.T	HSUB
蒸発エンタルピー ¹⁾	J/mol	/HVAP	\$ 90000>HVAP	HVAP
コメント ²⁾	-	/HVAP.COM	\$ HANDBOOK/HVAP.COM	HVAP
圧力 ¹⁾	Torr	/HVAP.P	\$ 250>HVAP.P	HVAP
温度 ¹⁾	セ氏	/HVAP.T	\$ 20-25/HVAP.T	HVAP
定圧熱容量 (CP) ¹⁾	J/mol*K	/CP	\$ 500-501/CP	CP
コメント ²⁾	-	/CP.COM	\$ HANDBOOK/CP.COM	CP
温度 ¹⁾	F	/CP.T	\$ CP.T>500	CP
定圧熱容量 (CP0) ¹⁾	J/mol*K	/CP0	\$ 200>CP0	CP0
コメント ²⁾	-	/CP0.COM	\$ DETERMIN?/CP0.COM	CP0
温度 ¹⁾	セ氏	/CP0.T	\$ 200-220/CP0.T	CP0
定容熱容量 (CV) ¹⁾	J/mol*K	/CV	\$ 113/CV	CV
コメント ²⁾	-	/CV.COM	\$ HANDBOOK/CV.COM	CV
温度 ¹⁾	セ氏	/CV.T	\$ 113/CV.T AND 25/CP	CV
その他の熱力学データ	-	/FA	\$ OTHE/FA	OTHE
コメント ²⁾	-	/OTHE.COM	\$ HANDBOOK/OTHE.COM	OTHE
キーワード	-	/OTHE.KW	\$ HEAT OF COMBUSTION AT CONSTANT VOLUME/OTHE.KW	OTHE

1)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2)ドイツ語で記述されている場合があります。

輸送現象

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
体積粘性率 ¹⁾	g/cm*s	/BV	\$ 52-54/BV	BV
コメント ²⁾	-	/BV.COM	\$ CONCENTRATION/BV.COM	BV
温度 ¹⁾	セ氏	/BV.T	\$ 40-60/BV.T	BV
粘性率 ¹⁾	g/cm*s	/DV	\$ 1.58-1.59/DV	DV
コメント ²⁾	-	/DV.COM	\$ RANGE/DV.COM	DV
温度 ¹⁾	セ氏	/DV.T	\$ 20/DV.T	DV
動粘性率 ¹⁾	cm**2/s	/KV	\$ 1.9988-1.9999/KV	KV
コメント ²⁾	-	/KV.COM	\$ HANDBOOK/KV.COM	KV
温度 ¹⁾	セ氏	/KV.T	\$ 10/KV.T	KV
自己拡散係数 ¹⁾	cm**2/s	/SDIF	\$ SDIF>=25	SDIF
コメント ²⁾	-	/SDIF.COM	\$ HANDBOOK/SDIF.COM	SDIF
温度 ¹⁾	セ氏	/SDIF.T	\$ 100/SDIF.T	SDIF
輸送データ	-	/FA	\$ TRAN/FA	TRAN
コメント ²⁾	-	/TRAN.COM	\$ PRESSURE/TRAN.COM	TRAN
キーワード	-	/TRAN.KW	\$ THERMAL CONDUCTIVITY/TRAN.KW	TRAN

1)数値演算子または範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

2)ドイツ語で記述されている場合があります。

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

■ キーワード中に収録されている物性 (参照文献情報のみ)

- ・ /物性コード.KW あるいは, /PH フィールドで検索可能. 表示形式はカッコ内 () のコード

(2011 年 1 月現在)

電気的および磁氣的性質		
/ELE.KW (ELE)	ANGLE OF DIELECTRIC LOSS	誘電体損失角
	COLE-COLE DIAGRAM	コールコールプロット
	CRITICAL FREQUENCY (OR WAVELENGTH)	臨界周波数
	DIELECTRIC ANISOTROPY	誘電異方性
	DIELECTRIC INCREMENT	誘電増大
	DIELECTRIC LOSS	誘電損失
	DIELECTRIC RELAXATION TIME	誘電緩和
	DIELECTRIC SATURATION	誘電飽和
	DIELECTRIC STRENGTH	誘電強度, 絶縁耐力
	ELECTRICAL CONDUCTIVITY	電気伝導率, 導電率
	ELECTRICAL PROPERTIES	電気的性質
	PHOTOCONDUCTIVITY	光伝導性
	PHOTOELECTRICITY (BECQUEREL EFFECT)	光電気学 (ベクレル効果)
	PHOTOVOLTAIC EFFECT	光起電力効果
	PIEZOELECTRICITY	圧電性
RELAXATION FREQUENCY	緩和周波数	
THERMOELECTRICITY	熱電気	
/MAG.KW (MAG)	ANISOTROPY OF MAGNETIC SUSCEPTIBILITY	磁化率異方性
	MAGNETIC MOMENT	磁気モーメント
	MAGNETIC PROPERTIES	磁氣的性質
	PARAMAGNETIC	常磁性
	VOLUME SUSCEPTIBILITY	体積磁化率
電気化学的作用		
/XS.KW (XS)	COLLISION CROSS-SECTION	衝突断面積
	ELECTRON IONIZATION CROSS-SECTION	電子イオン化断面積
	IONIZATION CROSS-SECTION	イオン化断面積
	PHOTOIONIZATION CROSS-SECTION	光イオン化断面積
/ELCB.KW (ELCB)	ACIDITY	酸性度
	AUTOPROTOLYSIS	自己プロトン解離
	BASICITY	塩基性度
	DEGREE OF DISSOCIATION	解離度
	DEPROTONATION	脱プロトン化
	ELECTROCHEMICAL PROPERTIES	電気化学的性質
	ELECTROLYTIC DISSOCIATION / PROTONATION EQUILIBRIUM	電離/プロトン平衡
	ENTHALPY OF DEPROTONATION	脱プロトン化エンタルピー
	ENTHALPY OF DISSOCIATION (ELECTROLYTIC) / PROTONATION	電離エンタルピー/プロトン化

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/ELCB.KW (ELCB)	ENTHALPY OF NEUTRALIZATION	中和エンタルピー
	KINETICS OF DISSOCIATION (ELECTROLYTIC) / PROTONATION	解離速度 (電気化学的) / プロトン化
	PH OF AQUEOUS SOLUTIONS	水溶液の pH
	PK(R+)	PK(R+)
	POLAROGRAPHY	ポーラログラフィー
	PROTON AFFINITY	プロトン親和性
	PROTONATION	プロトン化
	STABILITY CONSTANT	安定度定数
	THERMODYNAMIC PARAMETERS FOR AUTOPROTOLYSIS	自己プロトン解離の熱力学的 パラメータ
	THERMODYNAMIC PARAMETERS FOR DISSOCIATION	解離の熱力学的パラメータ
	VOLUME CHANGE ON DISSOCIATION	解離の体積変化
/POT.KW (POT)	CYCLIC VOLTAMMETRY	サイクリックボルタンメトリー
	OXIDATION POTENTIAL	酸化電位
	PHOTO-ELECTROCHEMICAL HALF-WAVE POTENTIAL	光化学的半波電位
	POLAROGRAPHIC CURRENT /VOLTAGE CURVE	ポーラログラフィック電流/電位 曲線
	POLAROGRAPHIC HALF-WAVE POTENTIAL	ポーラログラフィック半波電位
	REDOX POTENTIAL	酸化還元電位
	REDUCTION POTENTIAL	還元電位
VOLTAMMETRY	ボルタンメトリー	
多成分系データ		
/ADSM.KW (ADSM)	ADSORPTION	吸着
	ADSORPTION AND DESORPTION ISOTHERMS	吸脱着等温線
	ADSORPTION ISOTHERM	吸着等温線
	CHEMISORPTION	化学吸着
	DESORPTION	脱着
	DESORPTION ISOTHERM(S)	脱着等温線
	ENTHALPY OF ADSORPTION	吸着エンタルピー
	FURTHER PHYSICAL PROPERTIES OF THE ADSORBED MOLECULE	吸着分子のその他の物理的性質
	RATE OF ADSORPTION	吸着速度
	RATE OF DESORPTION	脱着速度
/ASSM.KW (ASSM)	ASSOCIATION WITH COMPOUND	化合物との会合
	DIPOLE MOMENT OF THE COMPLEX	複合体の双極子モーメント
	ENTHALPY OF ASSOCIATION	会合エンタルピー
	EXCIPLEX FORMATION	エキシプレックス生成
	FURTHER PHYSICAL PROPERTIES OF THE COMPLEX	複合体のその他の物理的性質
	IR SPECTRUM OF THE COMPLEX	複合体の IR スペクトル
	NMR SPECTRUM OF THE COMPLEX	複合体の NMR スペクトル
	SPECTRUM OF THE COMPLEX	複合体のスペクトル
	STABILITY CONSTANT OF THE COMPLEX WITHの複合体との安定度定数
UV /VIS SPECTRUM OF THE COMPLEX	複合体の紫外/可視スペクトル	

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/BSPM.KW (BSPM)	BOUNDARY SURFACE PHENOMENA	境界面現象
	CONTACT ANGLE WITH COMPOUND	化合物との接触角
	FURTHER SURFACE PROPERTIES	その他の表面物性
	INTERFACIAL TENSION	界面張力
	MICELLAR WEIGHT	ミセル量
	PRESSURE-SURFACE ISOTHERM	圧力-表面等温線
	SPREADING PRESSURE	拡張圧
	SURFACE MOMENT	表面モーメント
	SURFACE POTENTIAL	表面ポテンシャル
	SURFACE TENSION	表面張力
/CPEM.KW (CPEM)	LIQUID-SOLID-VAPOUR PHASE DIAGRAM	液-固-気 相図
	LIQUID-SOLID-VAPOUR PHASE EQUILIBRIUM	液-固-気 相平衡
	PHASE EQUILIBRIUM	相平衡
	SOLID-VAPOUR PHASE EQUILIBRIUM	固-気 相図
	TRIPLE POINT	三重点
/EDM.KW (EDM)	ANGLE OF DIELECTRIC LOSS	誘電体損失角
	DIELECTRIC CONSTANT	誘電率, 絶縁定数
	DIELECTRIC LOSS	誘電損失
/ENEM.KW (ENEM)	ENTHALPY OF DILUTION	希釈エンタルピー
	ENTHALPY OF EVAPORATION	蒸発エンタルピー
	ENTHALPY OF MIXING	混合エンタルピー
	ENTHALPY OF MIXTURES	混合物エンタルピー
	ENTHALPY OF SOLUTION	溶液エンタルピー
	ENTROPY OF MIXTURES	混合物エントロピー
	EXCESS HEAT CAPACITY CP	過剰熱容量 (Cp)
	EXCESS THERMOCHEMICAL PARAMETER	過剰熱化学パラメータ
	HEAT CAPACITY CP	定圧熱容量 Cp
	HEAT CAPACITY CV	定積熱容量 Cv
	HEAT CAPACITY OF MIXTURES	混合物熱容量
	MOLAR EXCESS GIBBS FREE ENERGY	モル過剰ギブス自由エネルギー
	PARTIAL MOLAR ENTHALPY OF MIXING	混合部分モルエンタルピー
	THERMODYNAMIC PROPERTIES OF SYSTEM WITH	系の熱力学的性質
/LLSM.KW (LLSM)	CRITICAL DEMIXING TEMPERATURE(S)	臨界分離温度
	CRITICAL SOLUTION TEMPERATURE	臨界溶液温度
	DISTRIBUTION BETWEEN SOLVENT 1 + 2	溶媒 1 + 2 の間の分配
	EQUILIBRIUM OF LIQUID PHASES	液相平衡
	LIQUID /LIQUID PHASE DIAGRAM	液-液 相図
	SOLUBILITY DIAGRAM	溶解度図
	SOLUTION EQUILIBRIUM	溶解平衡
	TEMPERATURE OF SEPARATION	分離温度

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/LVSM.KW (LVSM)	ACTIVITY COEFFICIENTS OF THE COMPONENTS IN THE MIXTUR	混合物中の成分活量係数
	BOILING POINT DIAGRAM	沸点図
	BOILING POINTS OF MIXTURES	混合物の沸点
	CRITICAL DATA FOR MIXTURES	混合物の臨界データ
	CRITICAL DENSITY	臨界密度
	CRITICAL PRESSURE	臨界圧力
	CRITICAL TEMPERATURE	臨界温度
	CRITICAL VOLUME	臨界体積
	FUGACITIES	フガシティー
	LIQUID/VAPOUR EQUILIBRIUM	液-気 平衡
	LIQUID/VAPOUR PHASE DIAGRAM	液-気 相図
	PARTIAL PRESSURES OF THE COMPONENTS	成分の分圧
	TRICRITICAL POINT	三重点
	VAPOUR PRESSURE	蒸気圧
	VAPOUR PRESSURE DIAGRAM FOR THE MIXTURE	混合物の蒸気圧図
/MECM.KW (MECM)	ACOUSTIC RELAXATION TIME	音響緩和時間
	ADIABATIC COMPRESSIBILITY	断熱圧縮率
	APPARENT MOLAL VOLUME	見かけモル体積
	APPARENT SPECIFIC VOLUME	見かけモル比体積
	EXCESS PARTIAL MOLAL VOLUME	過剰モル体積
	HYPERSONIC ABSORPTION	極超音速吸収
	HYPERSONIC VELOCITY	極超音速速度
	ISOTHERMAL COMPRESSIBILITY	等温圧縮率
	PARTIAL MOLAL VOLUME	部分モル体積
	PVT RELATIONSHIP	PVT (圧力, 体積, 温度) の相関
	SECOND VIRIAL COEFFICIENT(S) OF THE EQUATION OF STATE	状態方程式の第二ビリアル係数
	THIRD VIRIAL COEFFICIENT(S) OF THE EQUATION OF STATE	状態方程式の第三ビリアル係数
	ULTRASONIC ABSORPTION	超音波吸収
	ULTRASONIC VELOCITY	超音波速度
	VIRIAL COEFFICIENTS	ビリアル係数
VOLUME CHANGE ON MIXING	混合の体積変化	
/ODM.KW (ODM)	KERR CONSTANT	カー定数
/SOLM.KW (SOLM)	DISSOLVING CAPACITY	溶解能力
	MISCIBILITY	混和性
	MUTUAL SOLUBILITY	相互溶解度
	RATE OF DISSOLUTION	溶解速度
	SOLUBILITY (BUNSEN ABSORPTION COEFFICIENT)	溶解度 (ブンゼン吸収定数)
	SOLUBILITY (HENRY CONSTANT)	溶解度 (ヘンリー定数)
	SOLUBILITY (OSTWALD ABSORPTION COEFFICIENT)	溶解度 (オストワルド吸収定数)
SOLUBILIZING	可溶化能	

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/TRAM.KW (TRAM)	BULK VISCOSITY	体積粘性率
	DIFFUSION	拡散
	DIFFUSION COEFFICIENT	拡散定数
	DYNAMIC VISCOSITY	動的粘度, 動粘性定数
	KINEMATIC VISCOSITY	動粘性率
	THERMAL CONDUCTIVITY	熱伝導率
	THERMAL DIFFUSION	熱拡散
	THERMAL DIFFUSION (SORET COEFFICIENT)	熱拡散 (Soret 係数)
	THERMAL DIFFUSION FACTOR	熱拡散因子
	VISCOSITY	粘度
光学的性質		
/OPT.KW (TRAM)	COTTON EFFECT (ABNORMAL CURVE)	コットン効果 (異常曲線)
	CRYSTAL REFRACTIVE INDICES	結晶屈折率
	DEGREE OF DEPOLARIZATION OF RAYLEIGH SCATTERING	レイリー散乱の偏向解消度
	DIFFRACTION	回折
	ELECTRIC BIREFRINGENCE (KERR EFFECT)	電気複屈折
	FLOW BIREFRINGENCE	流動複屈折率
	ISO-& ANISOTROPIC COMPONENTS OF RAYLEIGH SCATTERING	レイリー散乱の等方性・異方性成分
	LINEAR DICHROISM	線二色性
	MAGNETIC BIREFRINGENCE (COTTON-MOUTON EFFECT)	磁気複屈折 (コットン-ムートン効果)
	MAGNETIC CIRCULAR DICHROISM	磁気円二色性
	MAGNETOROTATION	磁気旋光
	MECHANICAL BIREFRINGENCE	機械複屈折
	MUTAROTATION COEFFICIENT	変旋光定数
	NATURAL BIREFRINGENCE	固有複屈折
	OPTICAL PROPERTIES	光学的性質
	PHOTOCHROMISM	フォトクロミズム
	RAYLEIGH SCATTERING	レイリー散乱
	RAYLEIGH-BRILLOUIN SCATTERING	レイリー-ブリルアン散乱
	REFLECTION	反射
	THERMOCHROMISM	サーモクロミズム
物理的および機械的性質		
/SOUND.KW (SOUND)	ACOUSTIC RELAXATION	音響緩和
	HYPERSONIC ABSORPTION	極超音波吸収
	HYPERSONIC VELOCITY	極超音波速度
	SOUND ABSORPTION	吸音
	ULTRASONIC ABSORPTION	超音波吸収
	ULTRASONIC PROPERTIES	超音波の性質
	ULTRASONIC VELOCITY	超音波吸収
	VELOCITY OF SOUND	音速

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/CMP.KW (CMP)	ADIABATIC COMPRESSIBILITY	断熱圧縮率
	ISOTHERMAL COMPRESSIBILITY	等温圧縮率
/MEC.KW (MEC)	COMPRESSIBILITY	圧縮率
	ELASTICITY CONSTANTS	弾力定数
	INTERNAL PRESSURE	内圧
	MOLAR VOLUME	モル体積
	PVT RELATIONSHIP	PVT (圧力, 体積, 温度) 相関
	SECOND VIRIAL COEFFICIENT OF THE EQUATION OF STATE	状態方程式の第二ビリアル係数
	SPECIFIC VOLUME	比容
	THIRD VIRIAL COEFFICIENT OF THE EQUATION OF STATE	状態方程式の第三ビリアル係数
	VIRIAL COEFFICIENTS OF THE EQUATION OF STATE	状態方程式のビリアル係数
	VISCOSITY	粘度
	VOLUME CHANGE ON MELTING	融解による体積の変化
スペクトルデータ		
/ESR.KW (ESR)	1H-ELECTRON OVERHAUSER EFFECT	¹ H-電子オーバーハウザー効果
	CIDEP (CHEMICALLY INDUCED DYNAMIC ELECTRON POLARIZATION)	CIDEP
	ELDOR (ELECTRON-ELECTRON DOUBLE RESONANCE)	ELDOR
	ELECTRON SPIN-LATTICE RELAXATION TIME	電子スピン-格子緩和時間
	ELECTRON SPIN-SPIN RELAXATION TIME	電子スピン-スピン緩和時間
	ENDOR (ELECTRON-NUCLEAR DOUBLE RESONANCE)	ENDOR
	ESR	ESR
	ESR LINEWIDTH	ESR 線幅
	ESR-HYPERFINE COUPLING CONSTANTS	ESR 超微細結合定数
	G-FACTOR	g 因子
	SIGNALS	シグナル
	SPECTRUM	スペクトル
	TRIPLET STATE ESR	三重項状態の ESR
	TRIPLET STATE ESR G-FACTOR	三重項状態の ESR g 因子
	TRIPLET STATE ESR HYPERFINE COUPLING CONSTANT(S)	三重項状態の ESR超微細結合定数
	TRIPLET STATE ESR SPECTRUM	三重項状態の ESR スペクトル
TRIPLET STATE ESR ZERO-FIELD SPLITTING PARAMETER(S)	三重項状態の ESR ゼロ磁場分裂パラメータ	
/FLU.KW (FLU)	DEGREE OF POLARIZATION OF FLUORESCENCE	蛍光偏向の程度
	DELAYED FLUORESCENCE	遅延蛍光
	ENERGY TRANSFER FROM SINGLET STATE	一重項状態からのエネルギー移動
	EXCIMER FLUORESCENCE	エキシマー蛍光
	FLUORESCENCE	蛍光
	FLUORESCENCE CONCENTRATION QUENCHING	蛍光の濃度消光
	FLUORESCENCE DECAY KINETICS	蛍光の消失速度論
FLUORESCENCE EMISSION CROSS-SECTION	蛍光放出断面積	

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/FLU.KW (FLU)	FLUORESCENCE EXCITATION SPECTRUM	蛍光励起スペクトル
	FLUORESCENCE INTENSITY	蛍光強度
	FLUORESCENCE LIFETIME	蛍光寿命
	FLUORESCENCE QUANTUM YIELD	蛍光量子収率
	FLUORESCENCE QUENCHING	蛍光消光
	FLUORESCENCE SELF-QUENCHING	蛍光自己消光
	INTERSYSTEM CROSSING (SINGLET->TRIPLET)	項間交差 (一重項→三重項)
	MAXIMA	最大値
	SPECTRUM ●	スペクトル
/IR.KW (IR)	ANISOTROPY OF IR BANDS	赤外線バンドの異方性
	BANDS	バンド
	FAR IR BANDS	遠赤外線バンド
	FAR IR SPECTRUM	遠赤外線スペクトル
	FERMI RESONANCE	フェルミ共鳴
	FINE STRUCTURE OF IR BANDS	赤外線バンドの微細構造
	INTENSITY OF FAR IR BANDS	遠赤外線バンドの強度
	INTENSITY OF IR BANDS	赤外線バンドの強度
	INTENSITY OF NEAR IR BANDS	近赤外線バンドの強度
	INTENSITY OF ROTATIONAL LINES OF IR BANDS	赤外線バンドの回転線強度
	IR	IR
	IR SECOND MOMENT	IR 二次モーメント
	IR-MICROWAVE DOUBLE RESONANCE	IR-マイクロ波二重共鳴
	LINEWIDTH OF IR BANDS	IRバンドの線幅
	LINEWIDTH OF ROTATIONAL LINES OF IR BANDS	IRバンドの回転線線幅
	NEAR IR BANDS	近赤外線域
	NEAR IR SPECTRUM	近赤外線スペクトル
	OVERTONE SPECTRUM	倍音スペクトル
	POLARIZATION OF IR BANDS	IRバンドの局在化
	REFLECTION SPECTRUM	反射スペクトル
	SPECTRUM ●	スペクトル
	VIBRATIONAL ENERGY TRANSFER	振動エネルギー移動
	VIBRATIONAL RELAXATION	振動緩和
/LUM.KW (LUM)	DEGREE OF DEPOLARIZATION OF LUMINESCENCE	発光の偏向解消度
	ELECTROLUMINESCENCE	エレクトロルミネッセンス
	EMISSION SPECTRUM IN THE INFRARED REGION	赤外領域の放出スペクトル
	LASING PROPERTIES	レーザー発振特性
	LUMINESCENCE	発光
	LUMINESCENCE LIFETIME	発光寿命
	LUMINESCENCE MAXIMUM(A)	最大発光
	LUMINESCENCE QUANTUM YIELD	発光量子収率
	LUMINESCENCE QUENCHING	発光消光
	LUMINESCENCE SPECTRUM	発光スペクトル
	RADIOLUMINESCENCE	放射線ルミネッセンス
	SONOLUMINESCENCE	音ルミネッセンス

同じ用語がまれにあるので、/PH より /xx.KWの方がよい

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/LUM.KW (LUM)	THERMOLUMINESCENCE	熱ルミネッセンス
	TRIBOLUMINESCENCE	トリボルミネッセンス
	UV/VIS EMISSION	紫外/可視放出
	UV/VIS EMISSION SPECTRUM	紫外/可視放出スペクトル
	X-RAY EMISSION SPECTRUM	X 線放出スペクトル
/MS.KW (MS)	APPEARANCE POTENTIALS	出現電圧
	CHARGE EXCHANGE WITH NEGATIVE IONS	負イオンの電荷移動
	CHARGE EXCHANGE WITH POSITIVE IONS	陽イオンの電荷移動
	CHARGE EXCHANGE WITH RARE GAS IONS	希ガスイオンの電荷移動
	CHEMICAL IONIZATION (CI)	化学的イオン化
	COLLISION-INDUCED DISSOCIATION	衝突誘起解離
	COLLISIONAL ACTIVATION	衝突活性化
	COLLISIONALLY ACTIVATED DISSOCIATION (CAD)	衝突活性解離
	DESORPTION CHEMICAL IONIZATION (DCI)	脱離化学イオン化
	DIRECT ELECTRON IONIZATION (DEI)	脱離電子イオン化
	DOUBLY CHARGED IONS	二重荷電イオン
	ELECTROHYDRODYNAMIC IONIZATION	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
	ELECTRON IMPACT (EI)	電子 (衝撃) イオン化
	FAST ATOM BOMBARDMENT (FAB)	高速電子衝撃
	FIELD DESORPTION	FD, 電解脱離
	FIELD IONIZATION	FI, 電界イオン化
	FRAGMENTATION PATTERN	フラグメンテーションパターン
	HIGH FREQUENCY SPARK	高周波スパーク
	ION CURRENT PROFILES	イオン電流データ
	ION IMPACT	イオン衝撃
	ION KINETIC ENERGY (SPECTRUM) (IKE(S))	イオン運動エネルギースペクトル
	ION-CYCLOTRON RESONANCE	イオン-サイクロロン共鳴
	LASER DESORPTION	レーザー脱離
	LIQUID SECONDARY ION MASS SPECTROMETRY (LSIMS)	液体二次イオン質量分析
	MASS ION KINETIC ENERGY (MIKE)	質量イオン運動エネルギー
	METASTABLE IONS	準安定イオン
	MULTIPHOTON IONIZATION (MPI)	多光子イオン化
	NEGATIVE CHEMICAL IONIZATION	負イオン化学イオン化
	NEGATIVE ION SPECTROSCOPY	負イオン分光法
	NEGATIVE SECONDARY IONS	負二次イオン
	NEUTRAL FRAGMENTS	中性フラグメント
	NEUTRAL IMPACT	ニュートラルインパクト
	NEUTRALIZATION-REIONIZATION MASS SPECTROMETRY (NRMS)	中性化再イオン化質量分析
PENNING IONIZATION	ペンニングイオン化	
PHOTOELECTRON-PHOTOION COINCIDENCE	光電子-光イオン同時発生	
PHOTOIONIZATION	光イオン化	
POSITIVE SECONDARY IONS	二次陽イオン	

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/MS.KW (MS)	RESONANCE ENHANCED MULTIPHOTON IONIZATION (REMPI)	共鳴多光子イオン化法
	SECONDARY IONS	二次イオン
	SINGLE ION MONITORING (SIMS)	選択イオンモニタリング
	SPECTRUM	スペクトル
	SURFACE IONIZATION	表面イオン化
	TANDEM MASS SPECTROMETRY	タンデム質量解析
	TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTRA (TOFMS)	飛行時間質量分析
/NMR.KW (NMR)	2D-NMR	二次元 NMR
	3D-NMR	三次元 NMR
	AROMATIC SOLVENT INDUCED SHIFTS	芳香族溶媒によるケミカルシフト
	CHEMICAL SHIFTS	ケミカルシフト
	CIDNP	化学誘起動的核分極
	DOUBLE RESONANCE	二重共鳴
	DYNAMIC NMR	ダイナミック NMR
	INDOR	INDOR (核間二重共鳴)
	LINEWIDTH OF NMR ABSORPTION	NMR 吸収の線幅
	NMR	NMR
	NMR IN LIQUID-CRYSTAL PHASE	液晶相のNMR
	NMR WITH SHIFT REAGENTS	シフト試薬とNMR
	NOE	NOE
	RADICAL CONTACT SHIFTS	ラジカルコンタクトシフト
	SECOND MOMENT OF NMR ABSORPTION	NMR 吸収の二次モーメント
	SPECTRUM	スペクトル
	SPIN-LATTICE RELAXATION TIME (T1)	スピン-格子緩和時間 (T1)
SPIN-ROTATION CONSTANT	スピン-回転定数	
SPIN-SPIN COUPLING CONSTANTS	スピン-スピнкаップリング定数	
SPIN-SPIN RELAXATION TIME (T2)	スピン-スピン緩和時間 (T2)	
/NQR.KW (NQR)	NUCLEAR QUADRUPOLE COUPLING CONSTANTS	核四重極カップリング定数
	NUCLEAR QUADRUPOLE RESONANCE	核四重極共鳴
	PURE NQR	核四極共鳴
/OSM.KW (OSM)	AUGER ELECTRON SPECTRUM	オーージェ電子スペクトル
	ELECTRON IMPACT SPECTRUM	電子衝撃スペクトル
	ELECTRONIC STATE STUDIES	電子状態研究
	ESCA	X線電子分光法
	MOESSBAUER EFFECT	メスbauer効果
	MULTIPLE RESONANCE STUDIES	多重共鳴研究
	PHOTOELECTRON SPECTRUM	光電子スペクトル
/PHO.KW (PHO)	DEGREE OF POLARIZATION OF PHOSPHORESCENCE	りん光変更の程度
	DELAYED PHOSPHORESCENCE	りん光遅延
	ENERGY TRANSFER FROM TRIPLET STATE	三重状態からのエネルギー移動
	MAXIMA	最大値
	PHOSPHORESCENCE	りん光
	PHOSPHORESCENCE DECAY KINETICS	りん光消失速度論

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/PHO.KW (PHO)	PHOSPHORESCENCE EXCITATION SPECTRUM	りん光励起スペクトル
	PHOSPHORESCENCE LIFETIME	りん光寿命
	PHOSPHORESCENCE QUANTUM YIELD	りん光量子収率
	PHOSPHORESCENCE QUENCHING	りん光消光
	SPECTRUM	スペクトル
	TRIPLET STATE DECAY KINETICS	三重項状態の消失速度論
	TRIPLET STATE ENERGY	三重項状態エネルギー
	TRIPLET STATE LIFETIME	三重項状態の寿命
	TRIPLET STATE QUANTUM YIELD	三重項状態の量子収率
	TRIPLET STATE QUENCHING	三重項状態の消光
	TRIPLET STATE SUBLEVEL STUDIES	三重項状態の副準位研究
/RAS.KW (RAS)	BANDS	バンド
	DEGREE OF DEPOLARIZATION OF RAMAN BANDS	ラマンバンドの偏向解消度
	HYPER-RAMAN SPECTRUM	ハイパーラマンスペクトル
	LINEWIDTH OF RAMAN BANDS	ラマンバンドの線幅
	LOW FREQUENCY RAMAN BANDS	低周波ラマンバンド
	LOW FREQUENCY RAMAN SPECTRUM	低周波ラマンスペクトル
	PRERESONANCE RAMAN SPECTRUM	前共鳴ラマンスペクトル
	RAMAN	ラマン
	RAMAN INTENSITIES	ラマン強度
	RAMAN RESONANCE EFFECT	ラマン共鳴効果
	RAMAN SECOND MOMENT	ラマン二次モーメント
	ROTATIONAL FINE STRUCTURE OF RAMAN BANDS	ラマンバンドの回転微細構造
	SPECTRUM	スペクトル
/ROT.KW (ROT)	INTENSITY OF MICROWAVE BANDS	マイクロ波バンドの強度
	INTENSITY OF ROTATIONAL BANDS	回転バンドの強度
	LINEWIDTH OF MICROWAVE BANDS	マイクロ波バンドの線幅
	LINEWIDTH OF ROTATIONAL BANDS	回転バンドの線幅
	MICROWAVE SPECTRUM	マイクロ波スペクトル
	ROTATIONAL SPECTRUM	回転スペクトル
	ROTATIONAL-RAMAN SPECTRUM	回転-ラマンスペクトル
	STARK EFFECT	シュタルク効果
/UVS.KW (UVS)	ABSORPTION CROSS-SECTION	吸収断面積
	ABSORPTION MAXIMA	最大吸収
	ABSORPTION SPECTRUM	吸収スペクトル
	BAND ANISOTROPY	バンド異方性
	OPTO-ACOUSTIC UV SPECTRUM	光-音UVスペクトル
	OSCILLATOR STRENGTH	振動子強度
	REFLECTION SPECTRUM	反射スペクトル
	SINGLET-TRIPLET BAND	一重項-三重項バンド
	SOLVATOCHROMISM	ソルバトクロミズム
	SPECTRUM	スペクトル
	TRIPLET-SINGLET ABSORPTION SPECTRUM	三重項-一重項吸収スペクトル
	TRIPLET-TRIPLET BAND	三重項-三重項バンド
UV EXCITED STATE ABSORPTION	UV励起状態吸収	

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

/UVS.KW (UVS)	UV TWO-PHOTON ABSORPTION	紫外二光子吸収
	UV/VIS	紫外/可視
	UV/VIS REFLECTION MAXIMUM(A)	紫外/可視反射最大値
	VACUUM-UV SPECTRUM	真空-紫外スペクトル
	X-RAY ABSORPTION CROSS-SECTION	X 線吸収断面積
	X-RAY ABSORPTION SPECTRUM	X 線吸収スペクトル
凝集状態		
/CRYPH.KW (CRYPH)	ASSOCIATION IN THE SOLID STATE	固体状態の会合
	CRYSTAL GROWTH	結晶成長
	CRYSTAL HABIT	晶癖
	CRYSTAL MORPHOLOGY	結晶形態学
	CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION	結晶構造の決定
	FREEZING POINT	凝固点
	GLASS TRANSITION TEMPERATURE	ガラス転位点
	INTERPLANAR SPACING	格子面間隔
	LONG SPACING	ロングスペイシング
	MELTING PRESSURE	融解圧力
	NUCLEAR SPIN CONVERSION	核スピン変換
	PHASE DIAGRAM	相図
	POLYMORPHISM	多型
	RATE OF CRYSTALLIZATION	結晶速度
	RATE OF TRANSITION	遷移速度
	REORIENTATION IN THE SOLID STATE	結晶状態の再配向
	SOLID STATE STRUCTURE PROPERTIES	固体状態の構造的性質
	SPIN POLARIZATION	スピン偏極
STRUCTURE OF THE SOLID	固体の構造	
/LIQPH.KW (LIQPH)	ASSOCIATION IN THE LIQUID STATE	液体状態における会合
	CORRELATION FUNCTION OF THE LIQUID	液体の相関関数
	LIQUID-CRYSTALLINE PROPERTIES	液晶の性質
	LIQUID-CRYSTALLINE TRANSITION TEMPERATURES	液晶の遷移温度
	ORDER PARAMETER	秩序パラメータ
	RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION	動径分布関数
	RATE OF EVAPORATION	蒸発速度
	ROTATIONAL CORRELATION TIME	回転相関時間
	SELF-ASSOCIATION IN SOLUTION	溶液中の自己解離
	STRUCTURE OF THE LIQUID	液体の構造
	SUPERCOOLABILITY	超冷却性
	/GP.KW (GP)	ASSOCIATION IN THE GAS PHASE
FUGACITY		フガシティー
NEUTRON SCATTERING OF THE GAS		気体の中性子散乱
ROTATIONAL CORRELATION FUNCTION OF THE GAS		気体の回転相関関数

B ReaxysFile ファイル

検索可能な物性値 (キーワード)

構造およびエネルギーパラメータ		
/DM.KW (DM)	BOND MOMENT	結合モーメント
	DIPOLE MOMENT	双極子モーメント
	HEXADECAPOLE MOMENT	十六極子モーメント
	QUADRUPOLE MOMENT	四極子モーメント
/POL.KW (POL)	ATOM POLARIZATION	原子分極
	ELECTRON POLARIZATION	電子分極
	HYPERPOLARIZABILITY	超分極率
	MOLAR POLARIZATION	分子分極
	OPTICAL ANISOTROPY	光学異方性
	POLARIZABILITY	分極率
/CIP.KW (CIP)	ELECTRON AFFINITY	電子親和性
/GEO.KW (GEO)	ELECTRON DISTRIBUTION	電子分布
	INTERATOMIC DISTANCES AND ANGLES	原子間距離と角度
/DFM.KW (DFM)	CENTRIFUGAL DISTORTION CONSTANT(S)	遠心力歪定数
	CORIOLIS COUPLING CONSTANT(S)	コリオリカップリング定数
	FORCE CONSTANTS	力学定数
	FUNDAMENTAL VIBRATIONS	基本振動
	ROTATIONAL CONSTANTS	回転定数
輸送現象		
/TRAN.KW (TRAN)	ROTATIONAL DIFFUSION CONSTANT(S)	回転拡散係数
	THERMAL CONDUCTIVITY	熱伝導率
	THERMAL DIFFUSION	熱拡散
熱力学的物性		
/OTHE.KW (OTHE)	CRYOSCOPIIC CONSTANT	凝固点降下定数
	EBULLIOSCOPIIC CONSTANT	沸点上昇定数
	ENTHALPY	エンタルピー
	ENTHALPY OF SELF-ASSOCIATION	自己解離エンタルピー
	ENTROPY	エントロピー
	GIBBS FREE ENERGY	ギブス自由エネルギー
	HEAT CAPACITY	熱容量
	HEAT CAPACITY RATIO CP/CV	比熱比 (Cp/Cv)
	HEAT OF COMBUSTION AT CONSTANT VOLUME	定積燃焼熱
	THERMODYNAMIC PROPERTIES	熱力学的性質

B ReaxysFile ファイル

検索例 1

■ 検索例 1: イソブチルビニルエーテルの物性値（融点, 沸点, 密度）を調査する.



- ReaxysFile ファイルには無料の表示形式がないので、物性データの有無は検索して確認する。（検索語料は無料）
 - サマリーシート中の物性は => S コード/FA
 - キーワード中の物性は => S 物性名/物性コード.KW
- 関連物性以外は、物性の種類ごとに 780 円課金されるので、必要な物性のみを表示するようにしたほうがよい.
- 表示する際、物性コードの頭に F をつけると 21 データ以上表示できる.
- 参考文献のみで物性データがない場合もある.

=> FILE REAXYSFILE

← *ReaxysFile* ファイルに入る

=> E ISOBUTYL VINYL ETHER/CN

← 名称で *EXPAND* する

```
E1      1      ISOBUTYL VALERATE/CN
E2      1      ISOBUTYL VALPROATE/CN
E3      1 --> ISOBUTYL VINYL ETHER/CN
E4      1      ISOBUTYL VINYLACETATE/CN
E5      1      ISOBUTYL XANTHATE SODIUM SALT/CN
```

=> S E3

← E 番号で検索する

```
L1      1 "ISOBUTYL VINYL ETHER"/CN
```

=> S L1 AND MP/FA

← 融点の情報が存在するかを確認

```
L2      1 L1 AND MP/FA
```

=> S L1 AND BP/FA

← 沸点の情報が存在するかを確認

```
L3      1 L1 AND BP/FA
```

=> S L1 AND DEN/FA

← 密度の情報が存在するかを確認

```
L4      1 L1 AND DEN/FA
```

=> D FMP FBP FDEN: FST

← 融点, 沸点, 密度, 表面張力の全データを表示
(780 × 3 = 2,340 円)

```
L4 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN
```

Boiling Point:

Value (BP) (Cel)	Press. (.P) (Torr)	Ref.
83.21	771.2	1, 2
82.98	760	1, 2
83 - 83.1	760	3
82	752	4
82.4	746	5
83.1	760	6
83.05	759.8	7, 8
82.5 - 83		9
82 - 83		10

表面張力 (ST) は DEN と表示すると一表示料金を表示できるフィールド。もし数値データがあれば参考情報として欲しいので指定

B ReaxysFile ファイル

検索例 1

Reference(s):

1. Woronkow, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, 19, <1949>, 296, Chem. Abstr., <1949>, 6576
2. Woronkow, Zh. Fiz. Khim., CODEN: ZFKHA9, 22, <1948>, 975, Chem. Abstr., <1949>, 456
3. Batujew; Prileshajewa; Schostakowski, Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Khim., CODEN: IASKA6, <1947>, 123, Chem. Abstr., <1948>, 4464

Melting Point:

Value (MP) (Cel)	Ref.
-112	1
-112.1	2
84 - 85	3

Reference(s):

1. Schildknecht; Zoss; McKinley, Ind. Eng. Chem., CODEN: IECHAD, 39, <1947>, 181
2. Rowlands et al., J. Org. Chem., CODEN: JOCEAH, 17, <1952>, 807, 808
3. Berti, G.; Catelani, G.; Colonna, F.; Monti, L., Tetrahedron, CODEN: TETRAB, 38(20), <1982>, 3067-3072; BABS-5617214

Liquid Density:

Value (DEN) (g/cm**3)	Temp. (. T) (Cel)	Ref. Temp. (. RT) (Cel)	Ref.
0.7681 - 0.7683	20	4	1, 2
0.7682	20	4	3
0.7645	2	4	4
0.7684	20	4	5

Reference(s):

1. Woronkow, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, 19, <1949>, 296, Chem. Abstr., <1949>, 6576
2. Woronkow, Zh. Fiz. Khim., CODEN: ZFKHA9, 22, <1948>, 975, Chem. Abstr., <1949>, 456
3. Batujew; Prileshajewa; Schostakowski, Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Khim., CODEN: IASKA6, <1947>, 123, Chem. Abstr., <1948>, 4464
4. Rogers, J. Amer. Chem. Soc., CODEN: JOCEAH, 17, <1952>, 807, 808
5. Sspasski; Tarassow, J. Gen. Chem. U.S.S.R., CODEN: JGCH, <1960>, 275, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, <1960>, 275, Chem. Abstr. (22346), <1960>

Surface Tension:

Value (ST) (g/s**2)	Temp. (. T) (Cel)	Ref.
20.54	20	1, 2

Reference(s):

1. Woronkow, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, 19, <1949>, 296, Chem. Abstr., <1949>, 6576
2. Woronkow, Zh. Fiz. Khim., CODEN: ZFKHA9, 22, <1948>, 975, Chem. Abstr., <1949>, 456

数値データが存在するレコードに限定する方法

- すべての物性に使えるわけではないが、下記の方法で数値データがあるものに限定できる場合がある

=> FILE REAXYSFILE

=> S BP/FA
L1 689812 BP/FA

=> E 99999/BP ← 収録されてる沸点の最大値を調査
E1 1 660 CEL/BP
E2 1 663 CEL/BP
E3 0 --> 99999 CEL/BP
**** END OF FIELD ****

=> S L1 AND 663>=BP ← 最大値以下の沸点に限定
L2 687859 L1 AND 663 CEL >=BP

B ReaxysFile ファイル

検索例 2

■ 検索例 2: 760 Torr で沸点が 205-215 °C である化合物の検索.



- 数値データとその測定条件を組み合わせて検索するときは、(P) 演算子を利用

Solubility (MCS):

Value (SLB) (g/L)	Saturation (. SAT)	Temp. (. T) (Cel)	Solvent (. SOL)	Ref.	Note
18.2	in solution	20	ethanol	1	1
20.6	in solution	30	ethanol	1	1
72.2	in solution	20	diethyl ether	1	1

(P)

- 測定条件のフィールドは、/各物性コード. 測定条件の接尾辞で検索する
(接尾辞例: xx.C (濃度), xx.T (温度) など. 詳細はサマリーシート参照)
- 測定条件は収録されていない場合も多いので、利用する際はその点を注意する

=> FILE REAXYSFILE

← ReaxysFile ファイルに入る

=> S 205-215/BP (P) 760/BP.P

← 沸点と圧力条件を (P) 演算子で結ぶ

20508 205 CEL - 215 CEL /BP

19221 760 TORR /BP.P

L1

879 205 CEL - 215 CEL /BP (P) 760 TORR /BP.P

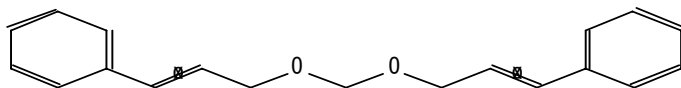
サマリーシートに記載されている
デフォルトの単位で検索

=> D 3 879 IDE FBP FLIQPH FLTPP

← 1 番目と 855 番目の回答を IDE FBP FLIGH FLTPP
表示形式で表示する (780 × 2 = 1,560 円)

L1 ANSWER 3 OF 879 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 9399168
 Chemical Name (CN): bis((E)-3-phenylallyloxy)methane
 Molec. Formula (MF): C19 H20 O2
 Molecular Weight (MW): 280.37



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formular Weight	1
LN	Lawson Number	2



BP だけ表示しても、LIQPH, LPTP と
同時に表示しても表示料金は変わらない

B ReaxysFile ファイル

検索例 2

Boiling Point:

Value (BP) (Cel)	Press. (.P) (Torr)	Ref.
212 - 214	760	1

Reference(s):

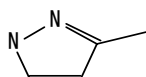
- Kulkarni, Mukund G.; Davawala, Saryu I.; Doke, Aniruddha K.; Doke, Ajit V., Indian J.Chem.Sect.B, CODEN: IJSBDB, 42(9), <2003>, 2121 - 2123; BABS-6422450

Transition Point of Liquid Modification:

Value	Ref.

L1 ANSWER 879 OF 879 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 1454
 Basic Pref. RN (BPR): 1453-58-3
 CAS Reg. No. (RN): 1453-58-3
 Chemical Name (CN): 3-(5)-methylpyrazole,
 3-methyl-1H-pyrazole, 3(5)-methylpyrazole,
 3<5>-methylpyrazole, 3-methyl-pyrazole,
 3-methylpyrazole, 4-methylpyrazole
 Autonom Name (AUN): 3-Methyl-1H-pyrazole
 Lin. Struct. Formula (LSF): C4H6N2
 Molec. Formula (MF): C4 H6 N2
 Molecular Weight (MW): 82.105



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BRP	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
AUN	Autonomname	1

Boiling Point:

Value (BP) (Cel)	Press. (.P) (Torr)	Ref.	Note
205 - 206	756	1	
202 - 203	747.5	2	
104 - 106	18	3	
98 - 99	18	4	
90	10	5	

B ReaxysFile ファイル

検索例 2

200	748	6	
204	752	7	1
204 - 206	755	8	
202 - 204	755	8	
121 - 122	20	8	
58	1	9	
93 - 94	10	10	
204 - 205	760	11	
202	680	12	
82.5	7	13	
59	1	14	
200 - 202	760	15	
98 - 100	10	16	
164	12	17	
99	20	18	
109 - 110	8	19	

Reference(s) :

1. Nesmejanow; Rybinskaja, Dokl. Akad. Nauk SSSR, CODEN: DANKAS, 120, <1958>, 793, 796, Dokl. Chem. (Engl. Transl.), CODEN: DKCHAY, 118-123 <1958> 417, 420
2. Grandberg; Kost, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, 28, <1958>, 3071, 3074; engl. Ausg. S. 3102, 3104
3. Franke; Kraft, Angew. Chem., CODEN: ANCEAD, 67, <1955>, 395, 398
4. Reimlinger, Chem. Ber., CODEN: CHBEAM, 92, <1959>, 970, 975
5. Djakonow, Zh. Obshch. Khim., CODEN: ZOKHA4, 15, <1945>, 484, Chem. Abstr., <1946>, 4718
6. Marchetti, Atti Accad. Naz. Lincei Cl. Sci. Fis. Mat. Nat. Rend., CODEN: AANLAW, <5>1 I, <1892>, 357, 359, Gazz. Chim. Ital., CODEN: GCITA9, 22 II, <1892>, 360, 363

Liquid Phase:

LIQPH

Description (.KW): Association in the liquid state

Reference(s):

1. Bystrov et al., Opt. Spectros. (Engl. Transl.), CODEN: OPSUA3, 17, <1964>, 31, Opt. Spektrosk., CODEN: OPSPAM, 63
2. Golovnya, R. V.; Kuz'menko, T. E.; Krikunova, N. I., Russ. Chem. Bl., CODEN: RGBUEY, 49(2), <2000>, 321 - 324, Izv. Akad. Nauk Ser. Khim., CODEN: IASKEA, 49(2), <2000>, 319 - 322; BABS-6238131

Transition Point of Liquid Modification:

Value | Ref.
 =====+=====

検索例 2

参考： 検索時と回答表示時の単位

■ 単位を指定せずに検索すると、自動的にデフォルトの単位で検索される。

- ・ 単位を変更するには、二通りの方法がある。

REGISTRY,GMELIN97
DETERM でも可能

① 検索時に自分で単位を指定して検索する

=> FILE REAXYSFILE

=> S 253.15 K/MP

L1 557 253.15 K/MP

=> D FMP

L1 ANSWER 1 OF 557 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

```

Melting Point:
Value      |Ref.
(MP)       |
(Gel)      |
=====+=====
-41 - -38 |1, 2
:
    
```

検索の単位は変更されるが、
表示の単位は変更されない



注: -20 °C は -20 + 273.15 K = 253.15 K

② SET UNIT コマンドで変更する

REGISTRY,
GMELIN97 でも可能

=> FILE REAXYSFILE

=> SET UNIT MP=K
SET COMMAND COMPLETED

← SET UNIT 物性コード=単位 で設定する

=> S 253.15/MP

← 融点を検索する

L1 557 253.15 K /MP

=> D FMP

L3 ANSWER 1 OF 557 REAXYSFILE COPYRIGHT 2011 Elsevier Properties SA. on STN

```

Melting Point:
Value      |Ref
(K)        |
=====+=====
232.15 - 235.15 |1, 2
:
    
```

検索の単位も表示の単位も変更される

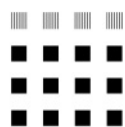


* 変更されたかどうかは、 => D UNIT 物性コード
あるいは => D UNIT ALL で確認できる

* その他の使用例

=> SET UNIT BP=K DEN=LB/FT**3 ← 沸点と密度の単位を変更する

=> SET UNIT ALL=SI ← すべての単位を国際単位系 (SI) にする



JAICI 社団法人 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

サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp

FAX: 03-5978-3600 URL: www.jaici.or.jp