

第8章 様々な検索フィールドの活用

I. Form Based Search

Reaxys では、構造式や反応式以外のフィールドのデータを検索することができるフォームが用意されています (Form Based Search)。構造式や反応式と組み合わせた検索も可能です。

フォームにはあらかじめ、普段良く使うグループ化されたフィールドが用意されています。反応検索画面では、反応式と反応物名、生成物名、試薬、収量、書誌事項などと組み合わせた検索ができます。物質・物性値検索画面では、分子量などの物質に関する基本情報、各種の物性、スペクトル、生物活性、環境毒性のデータや書誌事項との組み合わせが可能です。

複数のフィールドを選択することも可能です。その場合、各フィールド間は **AND 演算** されます。各フィールドではプルダウンメニューから、適切な演算子を選択することができます (詳細後述)。

1. 書誌事項との組み合わせ

物質・物性値検索画面です。

① 構造式を作画し、検索オプションを設定します。

② 画面下部の

“Properties (Form-based)” タブから、“Bibliographic Data” を開きます。以下のフィールドを指定して検索することができます。

Author : 著者名

Patent Assignee : 特許出願人

Journal Title : ジャーナルタイトル

Title : 文献タイトル

Patent Number : 特許番号

Patent Country Code :

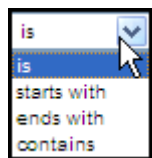
特許発行国

Publication Year : 発行年

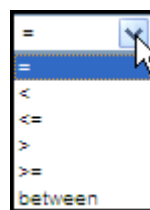
Title/Abstract/Keywords :

タイトル・抄録・キーワード

<プルダウンで選択可能な演算子>



- ← 完全一致
- ← 後方一致
- ← 前方一致
- ← 部分一致



- ← 完全一致
- ← 未満
- ← 以下
- ← より大きい
- ← 以上
- ← ~の間

2. 各種物性値との組み合わせ

物質・物性値検索画面です。

① 構造式を作画し、検索オプションを設定します。

② 画面下部の

“Properties(Form-based)”タブから、“Substance Data”を開きます。以下のフィールドを指定して検索することができます。

Search text in all facts :

すべての facts からテキスト検索

Identification Data :

分子量、名称、分子式などの
物質情報

Physical Data : 融点などの物性値

Spectroscopic Data :

NMR などのスペクトルデータ

Bioactivity Data : 生物活性値

Ecotoxicological Data :

環境毒性値

Natural Products : 天然物由来

3. 反応データとの組み合わせ

反応検索画面です。

① 反応式を作画し、検索オプションを設定します。

② 画面下部の

“Conditions(Form-based)”タブから、“Reaction Data”を開きます。以下のフィールドを指定して検索することができます。

Reactant Name : 反応物名

Product Name : 生成物名

Reagent/Catalyst : 試薬/触媒

Yield : 収率

Solvent : 溶媒

Time : 時間

Temperature : 温度

Pressure : 圧力

Reaction Type : 反応の種類

All Reaction Fields :

すべての反応情報からテキスト検索

II. Advanced Search

Form Based Search では良く使うグループ化されたフィールドが用意されていますが、それ以外の検索フィールドを用いる場合には Advanced Search を利用します。複雑な論理演算も可能です。Advanced Search に利用可能なフィールドを探すルックアップ機能も用意されています。

1. 検索フィールドを探す

例：特許での「用途」

物質・物性値検索画面です。画面下部の「Properties(Advanced)」タブを開きます。

検索フィールドは以下の 2 通りの方法で探すことができます。

- ① 検索フィールドを探すために、「use」と入力して、SEARCH FOR FIELD をクリックします。
- ② 階層表示された検索フィールドから \oplus をクリックして、必要なフィールドを探します。

2. 検索式の入力

検索式は以下のルールで入力します。

<フィールドコード><演算子><検索語・値>

複数のフィールドを組み合わせた検索も可能です。

各検索フィールドの説明は、画面上部の **Help** より確認可能です。

ワンポイント：演算子の種類

Reaxys で利用可能な演算子は以下の 6 種類です。

(一部、対応するフィールドが限定されている演算子もあります。)

AND	: A AND B	A,B の両者を含むもの
OR	: A OR B	A,B どちらかを含むもの
NOT	: A NOT B	A - B
NEXT	: A NEXT B	A と B がこの順番で隣接しているもの
NEAR	: A NEAR B	A と B が順序を問わず近接しているもの
PROXIMITY	: A PROXIMITY B	A と B が対応するデータであるもの