

ChemInformRX

ChemInformRX ファイルは、化学反応データベースであり、Cheminform に収録された雑誌から得られた反応情報を収録しています。レコードは文献単位で、Cheminform 資料番号が ChemInformRX のレコード番号です。一段階反応および多段階反応を収録しています。

レコードには、反応物と生成物の構造図、すべての反応物、生成物、試薬、溶媒、触媒の Cheminform (CI) 番号および CAS 登録番号、多くの生成物の収率、反応に関するテキスト情報が含まれます。反応物、試薬、生成物は一つの反応式によって構造検索ができます。また、物資の役割 (ロール)、反応部位、反応物と生成物の間の原子マッピングも構造検索で利用できます。反応に関与するすべての物質の Cheminform 番号、CAS 登録番号、ロール、テキスト情報、収率が検索できます。各レコードには書誌情報、物質および主題に関する詳細な索引と抄録も収録しています。

収録内容

Cheminform に収録された雑誌からの一段階反応および多段階反応

収録源

1991 年 1 月以降に Cheminform に収録された雑誌

ファイル内容

1991 年から現在
184,000 件以上のレコード (2011 年 7 月現在)
約 872,000 件の一段階反応と約 451,000 件の多段階反応
四半期ごとに更新、更新ごとに約 5000 のレコードを追加
アラート (自動 SDI 検索) は年 4 回実施

検索補助資料

STN Express User Guide, Chapter 6: Structure Queries
STN Express User Guide, Chapter 7: Reaction Queries
オンラインヘルプ (HELP DIRECTORY で利用できるすべてのヘルプメッセージが表示されます)
STNGUIDE

データベース製作者/提供者

FIZ CHEMIE GmbH
P. O. Box 120337
D-10593 Berlin
Germany
STNmail: HLPFCHK
Phone: (+49) (30) /399 77-111
Fax: (+49) (30) /399 77-134
E-mail: info@fiz-chemie.de
著作権保有者

ヨーロッパ

STN カールスルーエ

FIZ Karlsruhe
P.O. Box 2465
76012 Karlsruhe
Germany
Phone: +49-7247-808-555
Fax: +49-7247-808-259
E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de
Internet: www.stn-international.de

日本

STN 東京

一般社団法人 化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
: 0120-151-462 (上記以外)
Fax: 03-5978-4090
E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)
customer@jaici.or.jp (上記以外)
Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ

STN コロンバス

CAS
P.O. Box 3012
Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A
CAS Customer Care:
Phone: 800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (worldwide)
Fax: 614-447-3751
E-mail: help@cas.org
Internet: www.cas.org

SEARCHおよびDISPLAYフィールド

中間一致、後方一致検索を利用できるフィールドはありません。

フィールド	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
基本索引 すべての反応物, 生成物, 試薬 溶媒, 触媒のCheminform (CI) 登 録番号およびCAS登録番号 反応情報 (/RX) 標題 (/TI) 抄録 (AB) すべての. CN, .KWフィールド (以上の切出し語)	なし または/BI	S 50-00-0 S 207700 S HYDROGENATION? S 13129-38-9 (L) 16003-05-7 S NEW SYNTHESIS	AB, RX形式 TI
レコード番号 著者名 触媒 ¹⁾ (CI登録番号, CAS登録番号, CAT. CNと CAT. KWフィールドから の切出し語を含む) 触媒-CAS登録番号 触媒-化学物質名 触媒-キーワード 分類コード (コードおよびテキスト) 所属機関名 ²⁾ データ入力日 ³⁾ 入力日 ³⁾ 国際標準(資料)番号 (CODENおよびISSNを含む) 号数 ³⁾ 雑誌名 キーワード 言語(コードおよび言語名) 生成物以外 ¹⁾ (反応物, 試薬, 溶媒, 触媒のCI 登録番号, CAS登録番号および 化学物質名を含む) 注記 反応ステップ数 ³⁾ 反応段階数 ³⁾ ページ番号 ³⁾ 生成物 ¹⁾ (CI登録番号, CAS登録番号, 化学 物質名およびPRO. KWフィールド からの切出し語を含む) 生成物-CAS登録番号 生成物-キーワード 発行年 ³⁾	/AN /AU /CAT /CAT. RN あるいは/CAT /CAT. CN /CAT. KW /CC /CS /DED /ED あるいは/UP /ISN /IS /JT /KW /LA /NPRO /NTE /NS /NSS /PGNO /PRO /PRO. RN あるいは/PRO PRO. KW /PY	S 199726273/AN S VOSS?/AU;S BIRK, C?/AU S 498/CAT S 50-21-5/PRO (L) ANY/CAT S 1314-15-4/CAT;S PLATINUM/CAT S (PLATINUM (L) OXIDE)/CAT S 1314-15-4/CAT. RN S PLATINUM/CAT. CN S "PLATINUM(II) OXIDE"/CAT. CN S PTO/CAT. CN S ACID BROMIDE/CAT. KW S K2570/CC S AMINO ALCOHOLS/CC S ALKYLATION?/CC S BASF/CS S 19970711/DED S L5 AND ED>=19980100 S 0040-4039/ISN S TELEAY/ISN S TETRAHEDRON/SO AND 10-12/IS S TETRAHEDRON/JT S Z NATURFORSCH/JT S O-ALKYLATION/KW S EN/LA S 10024-97-2/NPRO S 144/NPRO S NITROGEN DIOXIDE/NPRO S NO2/NPRO S SEALED TUBE/NTE S 1/NS S 109-99-9(L)71-43-2(L)1/NS S 2/NSS S 10/PGNO S 96/PRO S 64-18-6/PRO S (FORMIC (L) ACID)/PRO S (ACYL (L) HALIDE)/PRO S 50-00-0/PRO. RN S ALCOHOL/PRO. KW S ACYL HALIDE/PRO. KW S 1997/PY	AN AU RX形式 RX形式 表示されない 表示されない CC CS DED 表示されない ISN, SO SO JT, SO RX形式 LA RX形式 RX形式 表示されない SO RX形式 RX形式 表示されない PY, SO

(続く)

SEARCHおよびDISPLAYフィールド

フィールド	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
反応物 ¹⁾ (CI登録番号, CAS登録番号, RCT.KWフィールドからの切出し 語を含む)	/RCT	S 95/RCT S 27437/RCT(L)293006/PRO S 139-13-9/RCT(L)24553-06-8/PRO S (ACETIC (L) ACID)/RCT S ACID/RCT	RX形式
反応物-CAS登録番号	/RCT.RN あるいは/RCT	S 75-09-2/RCT.RN	RX形式
反応物-キーワード	/RCT.KW	S HETEROCYCLE/RCT.KW S HYDROXAMIC ACID/RCT.KW	表示されない
試薬 ¹⁾ (CI登録番号, CAS登録番号, RGT.CNとRGT.KWフィールドから の切出し語を含む)	/RGT	S 18/RGT S 80-15-9/RGT S (BROMINE (L) CYANIDE)/RGT	RX形式
試薬-CAS登録番号	/RGT.RN あるいは/RGT	S 80-15-9/RGT.RN	RX形式
試薬-化学物質名	/RGT.CN	S BR2/RGT.CN S BROMINE CYANIDE/RGT.CN	RX形式
試薬-キーワード	/RGT.KW	S AMINE OXIDE/RGT.KW	表示されない
反応物または試薬 ¹⁾ (CI登録番号, CAS登録番号および 化学物質名を含む)	/RRT	S 45799/RRT S 109-99-9/RRT S THIOBENZOIC ACID/RRT	RX形式
収録源 (雑誌名, CODEN, ISSN, 巻, 号, ページを含む)	/SO	S (TETRAB AND 53 AND 7)/SO S 0040-4020/SO	SO
溶媒 ¹⁾ (CI登録番号, CAS登録番号, SOL.CNと SOL.KWフィールドから の切出し語を含む)	/SOL	S 123/SOL S 67-56-1/SOL S (METHYL(L)ACETATE)/SOL	RX形式
溶媒-CAS登録番号	/SOL.RN あるいは/SOL	S 60-29-7/SOL.RN	RX形式
溶媒-化学物質名	/SOL.CN	S MEOH/SOL.CN S METHYL ACETATE/SOL.CN	RX形式
溶媒-キーワード	/SOL.KW	S ALCOHOL/SOL.KW	表示されない
温度: キーワード	/T.KW	S REFLUX/T.KW	RX形式
標題	/TI	S CATALY?/TI S BECKMANN REARRANG?/TI	TI
巻数 ³⁾	/VL	S ANGEW CHEM/JT AND 109-110/VL	SO
生成物収率 ³⁾	/YDP	S 90-100/YDP S 502-49-8/PRO(A)94-100/YDP	RX形式
生成物収率テキスト	/YDPT	S NONE/YDPT S 502-49-8/PRO(A)(95-100/YDP OR NONE/YDPT	表示されない
段階収率 ³⁾	/YDS	S 90<YDS S 502-49-8/PRO(L)94- 100/YDS(L)1/NS	RX形式
段階収率テキスト	/YDST	S NONE/YDST S 502-49-8/PRO(L)(95-100/YDS OR NONE/YDST)(L)1/NS	表示されない

1) すべての物質のChemInformRX 番号は1993年 8月に再付与されました。

2) このフィールドでは, (S) 演算子はスペースで代用できます。

3) 数値演算子あるいは範囲指定検索による検索が可能な数値検索フィールドです。

物性値フィールド

フィールド	デフォルト 単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
圧力 ¹⁾	atm	/P	S P>1	RX形式
温度 ¹⁾	Cel	/T	S 100/T	RX形式

1) 数値演算子あるいは範囲指定検索による検索が可能な数値検索フィールドです。

構造検索の質問式

質 問 式 ¹⁾	検 索 例
STRUCTUREコマンドまたはSTN Express/STN on the Webのアップロード機能を用いて作成された構造質問式のL番号 (L番号間のブール演算も可能)	SEARCH L1 CSS FUL S L1 NOT L2
SCREENコマンドにより作成されたスクリーンセットのL番号 (L番号間のブール演算も可能)	S L3 OR L4
STRUCTUREコマンドまたはSTN Express/STN on the Webのアップロード機能を用いて作成された構造質問式のL番号とSCREENコマンドにより作成されたスクリーンセットのL番号の組み合わせ (L番号間のブール演算も可能)	S L1 NOT L3

1) 構造検索の回答セットのL番号は、辞書検索と組み合わせることができます (例:=>S L6 (L) ANY/CAT)。

構造検索の種類

種 類 ¹⁾	内 容	SEARCH コード	SEARCH 例
Substructure 部分構造検索 (デフォルト)	構造質問式を満足する物質を検索。 置換可能なすべての位置に追加の置換基が結合してもよい。 他の成分が含まれてもよい。	SSS	SEARCH L1 SSS FUL S L2
Closed Substructure 閉構造部分構造検索	構造質問式に完全に一致する物質を検索。 置換を許容した位置に置換基が結合してもよい。 他の成分が含まれてもよい。	CSS	SEARCH L1 CSS FUL SEA L4 CSS

構造検索の範囲

構造検索の際にスクリーンを通過した候補化合物の集合にL番号を付けるには、検索実行の前に=> SET EXTEND ONあるいは=> SET EXTEND ON PERMと設定します。あるいは、SEARCHコマンドと同じ行にEXTENDと入力しても同様の機能が働きます。本機能の詳細は、=> HELP SET EXTENDでご覧いただけます。

種 類	内 容	SEARCH コード	SEARCH 例
Sample ¹⁾ サンプル検索 (デフォルト)	ファイルの固定された一部 (5%)を検索	SAM	SEARCH L1 SAM SSS
Full フルファイル検索	ファイル全体(100%)を検索	FUL	S L5 SSS FUL
Range 範囲指定検索	ユーザーが指定した範囲内で 検索	RAN	S L4 RAN=(V112) S L1 RAN=(RCR)
Subset Sample ¹⁾ サブセットサンプル検索	ChemInformRXの検索で得られ た回答セットをさらに サンプル検索	SUB SAM	S L9 SUB=L8 SAM
Subset Range サブセット範囲指定 検索	ChemInformRXの検索で得られ た回答セットをさらに 範囲指定検索	SUB RAN	S L12 SUB=L11 RAN=(9101000, 9107000) S L3 SUB=L2 RAN=(910100, 920100)
Subset Full サブセットフルファイル 検索	ChemInformRXの検索で得られ た回答セットをさらに フルファイル検索	SUB FUL	S L2 CSS SUB=L1 FUL

1) SET EXTEND機能は、サンプル検索では機能しません。

DISPLAYおよびPRINT形式

回答のディスプレイとオフラインプリントには下記の表示形式を自由に組み合わせることができます。複数のコードは、“D TI FHIT”のようにスペースやカンマで区切ってください。フィールドは指定された順序で表示されます。

CC, NTEを除くすべての検索フィールドでハイライト機能が使えます。RXフィールド中のハイライトは、反応マップおよび反応要約に付与されます。HIT, FHIT, OCC, PATH, FPATH, SPATH, およびFSPATH形式を使うためには、検索時にハイライト機能がONになっていることが必要です。デフォルトの表示形式は二つの表示形式を結合したFHIT CBIBです。

反応情報の表示形式

形 式	英 語 名	内 容	入 力 例
RX	Reactions (Map, Diagram, Summary for all single-step reactions)	反応 (すべての一段階反応マ ップ, 構造図, 反応要約)	D TI RX
RX(n) ¹⁾	Reaction n (Map, Diagram, Summary for reaction n)	反応n (反応nのマップ, 構造 図, 反応要約)	D RX(3), RX(5)
RXF ¹⁾	Reactions Full (Map, Diagram, Summary for all single-step reactions plus all substance keywords and chemical names in the reaction summary)	反応 (すべての一段階反応マ ップ, 構造図, 要約, すべ ての物質のキーワード, 反 応要約中のすべての化学物 質名)	D RXF
RXF(n) ¹⁾	Reaction Full n (Map, Diagram, Summary for reaction n plus all substance keywords and chemical names in the reaction summary)	反応n (反応nのマップ, 構造 図, 要約, すべての物質の キーワード, 反応要約中の すべての化学物質名)	D BIB, RXF(1)

(続く)

反応情報の表示形式

形式	英語名	内容	入力例
RXG ¹⁾	Reaction Graphics (Map and Diagram for all single-step reactions)	反応図 (すべての一段階反応マップ, 構造図)	D RXG CBIB
RXG(n) ¹⁾	Reaction n Graphics (Map and Diagram for reaction n)	反応図 (反応nのマップ, 構造図)	D RXG(5)
RXL ¹⁾	Reaction Long (Map, Diagram, Summary for all single-step reactions)	反応nの詳細 (すべての一段階反応の詳細なマップ, 構造図, 反応要約)	D RXL
RXL(n) ¹⁾	Reaction n Long (Map, Diagram, Summary for all steps of reaction n)	反応nの詳細 (反応nの詳細なマップ, 構造図, 反応要約)	D RXL(8) RXL(13)
RXS ¹⁾	Reaction Summary (Map and Summary for all single-step reactions)	反応要約 (すべての一段階反応マップ, 反応要約)	D TI AU RXS
RXS(n) ¹⁾	Reaction n Summary (Map and Summary for reaction n)	反応nの反応要約 (反応nのマップ, 構造図, 反応要約)	D RXS(13)
ALL SCAN ^{2), 3)} FHIT FHITCBIB FPATH FSPATH	AN, TI, AU, CS, SO, LA, CC, AB, RX TI, FHIT (回答番号なしのランダム表示) ヒットした最初の反応の反応マップ, 構造図, および反応要約 CBIB FHIT (デフォルト) Full PATH-PATHと反応要約 Full SPATH-SPATHと反応要約		D L2 1-7 ALL D SCAN D FHIT D L4 2,4 FHITCBIB D BIB FPATH D FSPATH
HIT OCC ²⁾ PATH SPATH	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約 ヒットしたすべてのフィールドおよび各フィールド中でのヒットタームの頻度数 HIT, PATH, SPATHの中の反応数, イタレーションが不完全な反応を表示 最長経路 (PATH) の反応マップと構造図, そのステップが他のヒットした反応に完全に含まれるものを除いて, すべてのヒットした反応を表示 短い経路 (PATH) の反応マップと構造図, そのステップが他のSPATHに完全に含まれるものを除いて, ヒットした物質が最初と最後のステップにある反応を表示		D CBIB HIT DIS 1-10 OCC D PATH D SPATH

1) カスタム形式のみの表示です.

2) この表示形式のオンライン・ディスプレイ料金は無料です.

3) SCANは, コマンドに続けて入力します. 例: D SCANまたはDISPLAY SCAN

文献情報の表示形式

形式	英語名	内容	入力例
AB	Abstract	抄録	D AB
AN ¹⁾	Accession Number	レコード番号	DISPLAY L2 1-10 AN
AU	Author	著者名	D AU TI
CC ¹⁾	Classification Code	分類コード	D CC TI
CS	Corporate Source	所属機関名	D AU CS
DED ¹⁾	Data Entry Date	データ入力日	D DED
ISN ²⁾	International Standard (Document) Number	国際標準(資料)番号	D ISN
JT ²⁾	Journal Title	雑誌名	D JT
LA ¹⁾	Language	言語	D LA
PY ^{1), 2)}	Publication Year	発行年	D PY
SO	Source	収録源	D TI AU SO
TI ¹⁾	Title	標題	D TI RX

(続く)

文献情報の表示形式

形 式	内 容	入 力 例
ABS	AN, AB	DIS 2, 4, 6 CBIB ABS
ALL	AN, TI, AU, CS, SO, LA, AB, CC, DED, RX	D L2 1-7 ALL
BIB	AN, TI, AU, CS, SO, LA	D 1-3 BIB
CBIB	AN, 圧縮形式書誌情報	DISPLAY L1 1 CBIB
SCAN ^{1), 3)}	TI, FHIT (回答番号なしのランダム表示)	D SCAN
FHITCBIB	CBIB FHIT (デフォルト)	D L4 2, 4 FHITCBIB
HIT	ヒットしたすべての反応の反応マップ, 構造図, 反応要約, およびヒットタームを含むフィールド	D CBIB HIT
OCC ¹⁾	ヒットしたすべてのフィールドおよび各フィールド中での ヒットタームの頻度数 HIT, PATH, SPATHの中の反応数, イタレーションが不完全な 反応を表示	DIS 1-10 OCC

1) この表示形式のオンライン・ディスプレイ料金は無料です。

2) カスタム形式のみの表示です。

3) SCANは, コマンドに続けて入力します。例: D SCANまたはDISPLAY SCAN

SELECT, ANALYZEおよびSORTフィールド

SELECTコマンドは, 回答セットの指定したフィールドから抽出したタームにE番号を付与します。

ANALYZEコマンドは, 回答セットの指定したフィールドから抽出したタームにL番号を付与します。

SORTコマンドは, 検索結果を指定したフィールドのアルファベット順または数値順に並べ替えます。

(該当項目はY, 該当しないものはNで表示されています)

フィールド	フィールドコード	ANALYZE/SELECT ¹⁾	SORT
抄録	AB	Y	N
レコード番号	AN	Y	N
著者名	AU	Y (デフォルト)	Y
触媒-CAS登録番号	CAT. RN	Y ²⁾	N
触媒-化学物質名	CAT. CN	Y ²⁾	N
触媒-キーワード	CAT. KW	Y ²⁾	N
触媒-CI登録番号	CAT	Y ²⁾	N
分類コード	CC	Y ²⁾	Y
CODEN	CODEN	N	Y
所属機関名	CS	Y	Y
データ入力日	DED	Y	Y
国際標準(資料)番号	ISN	Y ³⁾	N
ISSN	ISSN	N	Y
雑誌名	JT	Y	Y
キーワード	KW	Y ²⁾	N
言語	LA	Y	Y
生成物以外のCI登録番号	NPRO	Y ²⁾	N
生成物-CAS登録番号	PRO. RN	Y ²⁾	N
生成物-キーワード	PRO. KW	Y ²⁾	N
生成物-CI登録番号	PRO	Y ²⁾	N
発行年	PY	Y	Y
反応物-CAS登録番号	RCT. RN	Y ²⁾	N
反応物-キーワード	RCT. KW	Y ²⁾	N
反応物-CI登録番号	RCT	Y ²⁾	N
反応物/試薬-CI登録番号	RRT	Y ²⁾	N
反応注記	NTE	Y ²⁾	N
反応 _n	RX (n)	Y ^{2), 4), 5)}	N
反応	RX	Y ^{2), 4)}	N

(続く)

SELECT, ANALYZEおよびSORTフィールド

フィールド	フィールドコード	ANALYZE/SELECT ¹⁾	SORT
試薬-CAS登録番号	RGT. RN	Y ²⁾	N
試薬-化学物質名	RGT. CN	Y ²⁾	N
試薬-キーワード	RGT. KW	Y ²⁾	N
試薬-CI登録番号	RGT	Y ²⁾	N
溶媒-CAS登録番号	SOL. RN	Y ²⁾	N
溶媒-化学物質名	SOL. CN	Y ²⁾	N
溶媒-キーワード	SOL. KW	Y ²⁾	N
溶媒-CI登録番号	SOL	Y ²⁾	N
収録源	SO	Y ⁶⁾	N
標題	TI	Y	Y

- 1) ヒットタームだけを抽出するには、HITを使います。例: SEL HIT AU
- 2) SELECT HITまたはANALYZE HITはこのフィールドでは使えません。
- 3) CODEN, ISSNがSELECTまたはANALYZEされ、SELECTで抽出されたタームに/ISNが付与されます。
- 4) ChemInformRX 番号がSELECTまたはANALYZEされます。すべての物質のCI登録番号は1993年 8月に再付与されました。
- 5) SELECTで抽出されたタームに/RXが付与されます。
- 6) CODENおよびISSNがSELECTまたはANALYZEされ、SELECTで抽出されたタームに/SOが付与されます。

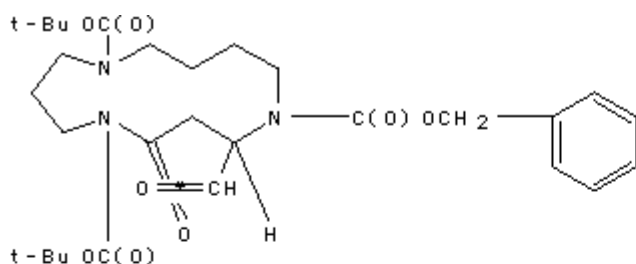
サンプルレコード

ALL形式での表示

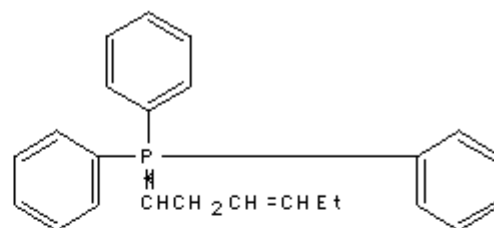
```

AN  199813201  CHEMINFORMRX
TI  Total Syntheses of Natural Occurring Spermidine Alkaloids:
    (+)-(2S)-Dihydromyricoidine and (+)-(2S)-Myricoidine.
AU  HAEUSERMANN, U. A.; HESSE, M.
CS  Org.-Chem. Inst., Univ. Zuerich, CH-8057 Zuerich, Switz.
SO  Tetrahedron Lett., 39(3), 257-260 (1998)
    CODEN: TELEAY  ISSN: 0040-4039
LA  English
AB  The synthesis of the title compounds such as (2S)-myricoidine (IV)
    unambiguously corrects their absolute stereochemistry at C-2 to the
    (S)-configuration.
CC  U0600 alkaloids
DED 19980422

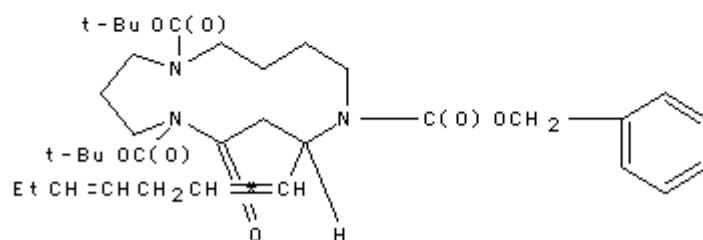
RX(1) OF 3      I  +  II  ==>  III...
```



I



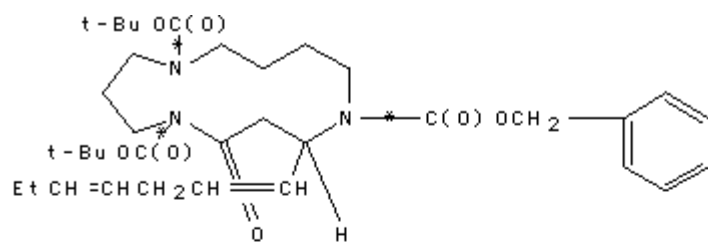
II

(1) \longrightarrow 

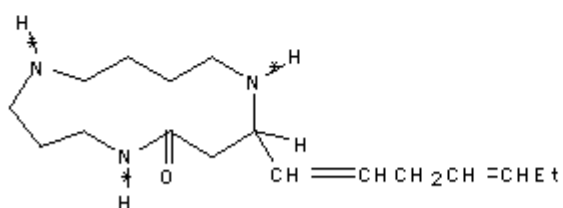
III

YIELD 12.0%

RX(1) RCT I, 587806, CHIRAL
 II, 587807
 SOL 214 (108-88-3), toluene
 PRO III, 587808, CHIRAL
 YDS 12.0 %
 T -80.0 Cel
 KW olefination
 NTE reaction: I* (II) \rightarrow III*

RX(2) OF 3 ...III \Rightarrow IV

III

(2) \longrightarrow 

IV

YIELD 37.0%

RX(2) RCT III, 587808, CHIRAL
STAGE(1)
RGT 322 (75-77-4), Tms-Cl
SOL 60 (75-09-2), CH₂Cl₂
STAGE(2)
RGT 219 (76-05-1), TFA
PRO IV, 587809, (S)-isomer
YDS 37.0 %
NTE reaction:III* -> (S)-IV