

DJSMDs/DJSMONLINE

The Derwent Journal of Synthetic Methods ファイルは、Theilheimer をもとに作成された構造検索可能な化学反応データベースで、世界中の特許および科学文献からの新しい合成方法の情報を提供しています。厳格な選別により、新規合成法および合成法として意義のある既知合成法の改良法が収録されています。加えて、関連のあるそれ以前の技術および他の類似の反応情報へのクロスリファレンスが収録されています。このデータベースおよび印刷体の Derwent Journal of Synthetic Methods は、Theilheimer's Synthetic Methods of Organic Chemistry を拡張したものです。

レコードに含まれる反応情報は、反応物と生成物の構造図、すべての反応物、生成物、溶媒および触媒の DJSM 登録番号、多くの生成物の収率、および反応のテキスト情報です。生成物と反応物は、一つの反応質問式を用いて構造検索可能です。構造検索では、ロール、反応サイト、および原子マッピングの指定ができます。反応に関する物質の DJSM 登録番号、名称、補遺語、および収率は検索可能です。また、レコードは書誌情報、分類コード、キーワード、および抄録も収録しています。

すべてのレコードに対する印刷体 Derwent Journal of Synthetic Methods のページイメージ情報が収録されています。STN on the Web では、イメージを直接画面に表示することができます。

収録内容

化学反応

- すべての新しいまたは改良された合成反応
- 新しい試薬を効果的に用いた既知反応
- 既知反応の興味ある応用および拡張
- 有機金属化合物および金属錯体の有機合成への応用

収録源

- 180 以上の雑誌
- 40 特許発行機関の特許

ファイル内容

- 1975 年から 2009 年まで
- 109,100 件以上のレコード (2011 年 7 月現在)
- 88,500 件以上の一段階反応 (2011 年 7 月現在)
- 5,700 件以上の多段階反応 (2011 年 7 月現在)
- (1975 ~ 1979 年の 15,000 件のレコードには構造情報は収録されていません)
- アラート (自動 SDI 検索) は利用できません

検索補助資料

- DJSM Technical Guide (データベース製作者から入手可能)
- DJSM Thesaurus (データベース製作者から入手可能)
- STN 構造検索ユーザーガイド (和訳版)
- 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

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

データベース製作者

Clarivate Analytics (UK) Limited

Friars House, 160 Blackfriars Rd.

London SE1 8EZ

United Kingdom

Copyright Holder: Clarivate Analytics

データベース代理店

クラリベイト・アナリティクス・

ジャパン株式会社 (日本法人)

〒107-6119 東京都港区赤坂 5-2-20

赤坂パークビル 19F

SEARCHおよびDISPLAYフィールド

このファイルには後方一致可能な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 すべての反応に関する物質の DJSM登録番号 抄録 (AB) 分類コード (/CC) キーワード (/KW) 注記 (/NTE) 標題 (/TI) (以上からの切出し語)	なし または/BI	S 1981 S STEREOSPECIFIC MICHAEL ADDITION S A(1W)B S "TEMP="	AB, CC, KW, NTE, TI, RX形式
レコード番号	/AN	S 75005D/AN S 88:75005/AN S 8875005/AN S 198875005/AN S 1988:75005D/AN	AN
反応環境 著者名	/ATM /AU	S 03/ATM S CINQUINI M/AU S CINQUINI, M./AU	RX形式 AU
触媒-化合物名 触媒-DJSM登録番号 ¹⁾	/CAT. CN /CAT	S TiCl ₃ /CAT. CN S 404/CAT S ANY/CAT	RX形式 RX形式
触媒-補遺語 分類コード 資料種類	/CAT. ST /CC /DT	S 68/CAT AND HYDRATE/CAT. ST S (A AND B)/CC S DIARYLSULFON?/TI AND P/DT	RX形式 CC DT
入力日 ²⁾ 国際標準(資料)番号 (CODENおよびISSNを含む)	または/TC /ED /ISN	S DIARYLSULFON?/TI AND J/TC S L1 AND ED=16961118 S TETRAB/ISN S 0040-4020/ISN	ED ISN, SO
雑誌名 キーワード 非生成物 非反応グループ-キーワード 注記 反応ステップ数 ²⁾ その他の収録源 特許出願人 ³⁾	/JT /KW /NPRO /NON. KW /NTE /NS /OS /PA または/CS	S TETRAHEDRON/JT S PROTECTION-NH/KW S FERROCENE/NPRO S O-SULFONYL/NON. KW S L6 AND VACUUM/NTE S L5 AND 1/NS S 85-160803/OS S BOEHRINGER/PA S DAIICHI KAGAKU/CS	JT, SO KW RX形式 NON. KW NTE NS OS PA
特許番号 圧力 ^{2), 4)}	/PN /P	S EP330058/PN S 2/P S 2-3 ATM/P	PI RX形式
生成物-DJSM登録番号 ⁵⁾ 生成物-キーワード 生成物-補遺語	/PRO /PRO. KW /PRO. ST	S 200/PRO S PURINE/PRO. KW S 51498/PRO AND CHIRAL/PRO. ST	RX形式 PRO. KW RX形式

(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
発行年 ²⁾	/PY	S 1990/PY S PY>1985 AND CZECH B P /AU	PY, SO
反応物-DJSM登録番号 ⁶⁾	/RCT	S 40/RCT	RX形式
反応物-キーワード	/RCT. KW	S STEROID/RCT. KW S "HYDROXYLAMINE+"/RCT. KW	RCT. KW
反応物-補遺語	/RCT. ST	S 41468/RCT AND CHIRAL/RCT. ST	RX形式
反応記号	/SYM	S CC-ELI-O/SYM	SYM
試薬-キーワード	/RGT. KW	S SILANE/RGT. KW S "ACID=7"/RGT. KW	RGT. KW
収録源 (雑誌名, 巻号ページ, ISSN, CODENを含む)	/SO	S TETRAB/SO S (TETRAHEDRON(L) 35)/SO S 0040-4020/SO	SO
溶媒-化合物名	/SOL. CN	S NH3/SOL. CN	RX形式
溶媒-DJSM登録番号 ⁷⁾	/SOL	S 12/SOL	RX形式
溶媒-キーワード	/SOL. KW	S ESTER/SOL. KW	SOL. KW
溶媒-補遺語	/SOL. ST	S 12/SOL AND GAS/SOL. ST	RX形式
温度 ^{2), 8)}	/T	S 200-220/T	RX形式
時間 ^{2), 9)}	/TIM	S L1 AND TIM<1	RX形式
標題	/TI	S CYCLOPROPYLKETONE?/TI	TI
更新日 ²⁾	/UP	S UP=2991200	UP
巻/号 (印刷体DJSM)	/VI	S 16-1/VI	VI
生成物収率 ²⁾	/YDP	S L1 AND YDP>95	RX形式
生成物収率テキスト	/YDPT	S NONE/YDPT	表示されない

1) /CATフィールドでの検索には、触媒-化合物名フィールド(/CAT. CN)および触媒-補遺語フィールド(/CAT. ST)が含まれます。

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。

3) 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。

4) このフィールドでは、ATMがデフォルトの単位です。

5) /PROフィールドでの検索には、生成物-補遺語フィールド(/PRO. ST)が含まれます。

6) /RCTフィールドでの検索には、反応物-補遺語フィールド(/RCT. ST)が含まれます。

7) /SOLフィールドでの検索には、溶媒-化合物名フィールド(/SOL. CN)および溶媒-補遺語フィールド(/SOL. ST)が含まれます。

8) このフィールドでは、Cがデフォルトの単位です。

9) このフィールドでは、HRがデフォルトの単位です。

構造検索項目

項 目 ¹⁾	SEARCH 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 組合せ (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

構造検索のタイプ

タイプ	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 すべての開かれた位置に追加の 置換基が結合してもよい	SSS	SEARCH L1 SSS FUL S L2
Closed Substructure 閉構造部分構造検索	質問式に完全に一致する物質を検索 CONNECTによって許された位置に 置換基が結合していてもよい	CSS	SEARCH L1 CSS FUL SEA L4 CSS

構造検索の範囲

範 囲	内 容	SEARCH コード	SEARCH 例
Full (デフォルト) フルファイル検索	ファイルの全体(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=(1990, 1993)
Subset Range サブセット範囲指定検索	当ファイルの検索で得られた 回答セットをさらに 範囲指定検索	SUB RAN	S L12 SUB=L11 RAN=(77000J, 77100J)
Subset Full サブセットフルファイル 検索	当ファイルの検索で得られた 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

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 L1 1-5 TI RX(1)”のようにスペースやカンマで区切ってください。フィールドは指定した順序に表示または出力されます。ヒットターム・ハイライトは、書誌情報のフィールド、およびRXフィールドで利用できます。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加されます。HIT, FHITおよびOCC形式を利用するためには、検索時にハイライトがONであることが必要です。デフォルト表示形式は、CBIB FHITです。

形 式	内 容	入 力 例
RX	反応 (すべての一段階反応の反応マップ, 構造図, 反応要約)	D TI RX
RX(n) ¹⁾	反応n (反応nの反応マップ, 構造図, 反応要約)	D RX(1)
RXG ¹⁾	反応図 (すべての一段階反応の反応マップ, 構造図)	D RXG, CBIB
RXG(n) ¹⁾	反応nの図 (反応nの反応マップ, 構造図)	D RXG(3)
RXS ¹⁾	反応要約 (すべての一段階反応の反応マップ, 反応要約)	D TI AU RXS
RXS(n) ¹⁾	反応nの要約 (反応nの反応マップ, 反応要約)	D RXS(3)
AB	Abstract	D AB
AN ²⁾	Accession Number	D L5 1-10 AN
AU	Author	D AU TI
CC ²⁾	Classification Code	D CC
DT (TC) ²⁾	Document Type	D DT
ED ^{1), 2)}	Entry Date	D ED
GI (PAGE) ^{1), 3)}	Graphic Image	D GI
ISN ¹⁾	International Standard (Document) Number	D ISN
	抄録	
	レコード番号	
	著者名	
	分類コード	
	資料種類	
	入力日	
	グラフィック情報	
	国際標準(資料)番号	

(続く)

DISPLAYおよびPRINT形式

形式	英語名	内容	入力例
JT ¹⁾ KW ²⁾	Journal Title Keyword (includes RCT.KW, RGT.KW, PRO.KW, SOL.KW, and NON.KW)	雑誌名 キーワード (RCT.KW, RGT.KW, PRO.KW, SOL.KW, NON.KWを 含む)	D JT D KW
NS ²⁾ NTE ²⁾	Number of Steps Note	反応ステップ数 注記	D NS D NTE
OS	Other Source	その他の収録源	D OS
PA (CS)	Patent Assignee	特許出願人	D PA
PI (PN) ⁴⁾	Patent Information (Patent Number)	特許情報 (特許番号)	D PI OS
PY ²⁾	Publication Year	発行年	D PY
SO	Source	収録源	D SO
SYM ²⁾	Reaction Symbol	反応記号	D SYM
TI ²⁾	Title	標題	D TI
UP ²⁾	Update Date	更新日	D UP
VI	Volume/Issue (printed DJSM)	巻/号 (印刷体DJSM)	D VI TI 1-10
ABS ALL ⁴⁾	AN, AB 雑誌: AN, TI, AU, SO, DT, VI, AB, CC, SYM, KW, RCT.KW, PRO.KW, RGT.KW, SOL.KW, NON.KW, NTE, NS, RX 特許: AN, TI, PA, PI, DT, VI, OS, AB, CC, SYM, KW, RCT.KW, PRO.KW, RGT.KW, SOL.KW, NON.KW, NTE, NS, RX		D ABS D ALL
BIB ⁴⁾	雑誌: AN, TI, AU, SO, DT, VI 特許: AN, TI, PA, PI, DT, VI, OS (デフォルト)		D 1-5 BIB
CBIB	圧縮形式書誌情報		D CBIB 1-5
IABS	フィールド名付きインデント型ABS形式		D IABS
IALL ⁴⁾	フィールド名付きインデント型ALL形式		D IALL
IBIB ⁴⁾	フィールド名付きインデント型BIB形式		D IBIB 1-5
IIND ²⁾	フィールド名付きインデント型IND形式		D IIND
IND ²⁾	CC, SYM, KW, RCT.KW, PRO.KW, RGT.KW, SOL.KW, NON.KW, NTE, NS		D IND
SCAN ^{2), 5)}	AN, TI (回答番号なしのランダム表示)		D SCAN
FHIT HIT	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 すべてのヒットした反応の反応マップ, 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 FHIT D CBIB HIT
OCC ²⁾	すべてのヒットしたフィールドおよびヒットした各反応中の ヒットタームの頻度数. Verification incompleteの反応は 明記される.		DIS 1-10 OCC

1) カスタム表示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) DISPLAYコマンド印刷体DJSMのページイメージを入手するときには, GI形式を利用します. G4 fax形式に圧縮されたTiff画像を扱えるプログラム, 例えばSTN Express, STN on the Webを使えばイメージ情報を取り込めます.

4) デフォルトでは, 特許番号はSTN形式で表示されます. ダウエント形式に変更するときには, 矢印プロンプト(=>)の後でSET PATENT DERWENTと入力します. STN形式に戻す場合は, SET PATENT STNと入力します.

5) 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語句にE番号またはL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語句に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 ²⁾	N
レコード番号	AN	Y	N
著者名	AU	Y	Y
触媒-化合物名	CAT. CN	Y ³⁾	N
触媒-DJSM登録番号	CAT	Y	N
触媒-補遺語	CAT. ST	Y ³⁾	N
分類コード	CC	Y	Y
CODEN	CODEN	N	Y
資料種類	DT	Y	Y
国際標準(資料)番号	ISN	Y ⁴⁾	N
国際標準逐次刊行物番号	ISSN	N	Y
雑誌名	JT	Y	Y
キーワード	KW	Y ⁵⁾	N
非反応グループ-キーワード	NON. KW	Y	N
注記	NTE	Y	N
その他の収録源	OS	Y	N
特許出願人	PA	Y	Y
特許情報	PI	Y ^{6), 7)}	Y
特許番号	PN	Y ⁷⁾	Y
生成物-DJSM登録番号	PRO	Y	N
生成物-キーワード	PRO. KW	Y	N
生成物-補遺語	PRO. ST	Y ³⁾	N
発行年	PY	Y	Y
反応物-DJSM登録番号	RCT	Y	N
反応物-キーワード	RCT. KW	Y	N
反応物-補遺語	RCT. ST	Y ³⁾	N
試薬-キーワード	RGT. KW	Y	N
反応 _n	RX (n)	Y ⁸⁾	N
反応記号	SYM	Y	Y
反応	RX	Y ⁹⁾	N
収録源	SO	Y ¹⁰⁾	N
溶媒-化合物名	SOL. CN	Y ³⁾	N
溶媒-DJSM登録番号	SOL	Y	N
溶媒-キーワード	SOL. KW	Y	N
溶媒-補遺語	SOL. ST	Y ³⁾	N
標題	TI	Y (デフォルト)	Y

1) ヒットタームだけを抽出させるには、HITを使います。例：SEL HIT KW

2) SELECTで抽出されたタームには/BIが付与されます。

3) SELECT HITまたはANALYZE HITはこのフィールドでは使えません。

4) CODENおよびISSNがSELECTまたはANALYZEされ、SELECTされたタームに/ISNが付与されます。

5) KW, RCT. KW, PRO. KW, RGT. KW, SOL. KWおよびNON. KWフィールドからタームがSELECTまたはANALYZEされ、SELECTしたタームに/KWが付与されます。

6) 特許番号がSELECTまたはANALYZEされ、SELECTしたタームに/PNが付与されます。

7) ダウエント形式で特許番号をSELECTするには、矢印プロンプト(=>)の後でSET PATENT DERWENTと入力します。

8) 反応_n中のRCT, SOL, CATおよびPROからDJSM登録番号がSELECTまたはANALYZEされ、SELECTしたタームに/RXが付与されます。

9) 各反応中のRCT, SOL, CATおよびPROからDJSM登録番号がSELECTまたはANALYZEされ、SELECTしたタームに/RXが付与されます。

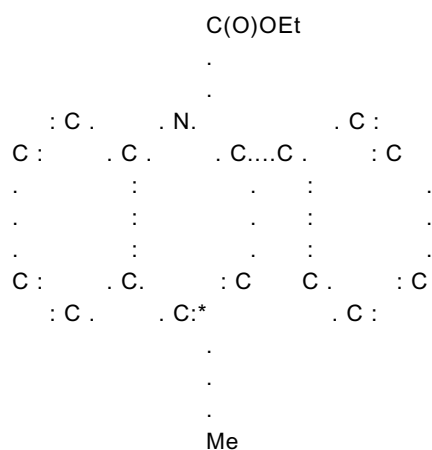
10) CODEN, ISSNがSELECTまたはANALYZEされ、SELECTされたタームに/SOが付与されます。

サンプルレコード

ALL形式での表示

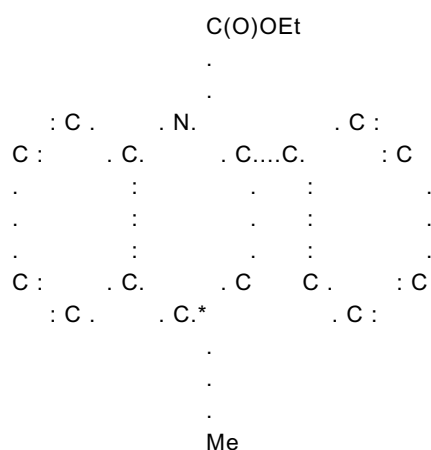
AN 1990:77763F DJSMONLINE
 TI TRANSFER-HYDROGENATION OF QUINOLINE RING . 1,2,3,4-
 TETRAHYDROQUINOLINES . ALSO 9,10-DIHYDROACRIDINES
 AU Baiczewski, P.; Joule, J. A.
 SO Synth Commun, 20(18), p.2815-9 (1990)
 CODEN: SYNCAV ISSN: 0039-7911
 DT J
 VI 16-12
 AB Chloro and nitro groups were also reduced. 2-Amino- and
 4-methyl-6-methoxy-quinoline were not reduced, and isoquinolines
 were reduced less efficiently (14%, 23%). For further examples,
 (two; 65%) from quinolines, also 9,10-dihydroacridines (72%),
 see litref(1).
 CC R Reduction
 Y Selective, preferential and partial reactions
 SYM HC-Add-CC
 KW ORG-REDN
 RCT.KW DIHYDRO; UNSATD; HETEROARENE-6
 PRO.KW TETRAHYDRO
 RGT.KW PD; PT-GROUP,ELEMENT; C-ACID-SALT; AMMONIUM,NH4; FORMIC;
 PALLADIUM-CARBON; AMMONIUM-FORMATE
 SOL.KW ALCOHOL
 NON.KW FUNCT; URETHAN; QUINOLINE; ACRIDINE
 NTE TEMP=5 (40-110 degC)
 NS 1

RX(1) OF 1 A ==> B



ALL形式での表示 (続き)

A



B

YIELD 95.0%

```

RX(1)  RCT  A, 59064; Suspension
        SOL  15, MeOH
        CAT  73, Pd(m); 10%, on Carbon
        952, NH4-Formate; 25 Eq.
        PRO  B, 59065
        TIM  2.5 hr
        ATM  Ar
        CMT  Reflux
  
```

IIND形式での表示

CLASSIFICATION CODE:

```

H Heterocyclic ring closure
X Stereochemistry
G Heterocyclic ring opening
  
```

REACTION SYMBOL: CC-Add-CC; CC-Eli-C

KEYWORD: CYCLOADDN,DIPOLAR; RING-LOSS

```

REACTANT KEYWORD: DIAZO; UNSATD; ISOTHIAZOLE; FUNCT; S-DIOXIDE,CYCLIC;
PYRAZOLE; COND-C; DIHYDRO; UNFUNCT; AMIDINE,CYCLIC
  
```

```

PRODUCT KEYWORD: PYRAZOLE; ISOL; HETEROARENE-5; UNSATD; C-FUNCT;
COND-C; DIHYDRO
  
```

SOLVENT KEYWORD: ETHER

NON-REACTING GROUPS KEYWORD:

```

C-ESTER; PYRAZOLE; ISOTHIAZOLE; S-DIOXIDE,CYCLIC;
AMIDINE,CYCLIC
  
```

NOTE TEMP=4 (10-40 degC); TEMP=5 (40-110 degC)

NUMBER OF STEPS: 2