



## インターネットセミナー

**SciFinder 合成化学者必見！**  
**反応検索**  
**～番外編～**

**JAICI**  
化学情報協会

**2013年11月**

1

## SciFinder の反応検索

- ・合成化学者必見！反応検索 (1)  
～ 基礎編 ～
- ・合成化学者必見！反応検索 (2)  
～ 検索精度 UP 編 ～
- ・合成化学者必見！反応検索 (3)  
～ さらなる情報 編 ～

**JAICI**  
化学情報協会

2

# SciFinder の反応検索

JAICI 化学情報協会 HOME  
SciFinder 科学関連情報を必要とする企業や政府機関、教育機関の研究者向けオンライン検索サービスです。

SciFinder  
お申込方法  
必要なシステム環境  
e-ラーニング  
技術資料  
機能紹介  
ユーザーインデュー

e-ラーニング (自習用教材)  
SciFinder (Web 版) の操作方法を学ぶことができます  
・ 使い方全般を知りたい方 → ビデオ形式教材「基本操作」をご覧ください。  
・ 特定の機能をピックアップを知りたい方 → ビデオ形式教材「ピックアップ」をご覧ください。  
・ 実際の操作方法を知りたい方 → ブラウザ型教材をご利用ください。  
日本語版 e-ラーニング

SciFinder ラーニング

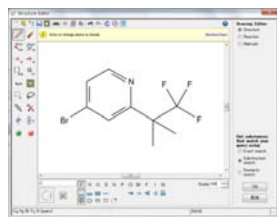
検索

<a href="#">合成化学者必見！反応検索(1) 基礎編</a>	★	約 19 分 (6.21 MB)
<a href="#">合成化学者必見！反応検索(2) 検索精度 UP 編</a>	★★	約 26 分 (11.5 MB)
<a href="#">合成化学者必見！反応検索(3) さらなる情報 編</a>	★★★	約 30 分 (10.6 MB)

過去の反応検索の内容もご覧いただけます

# SciFinder の反応検索

作図



文献情報



物質情報



反応  
情報

Refine/  
Analyze  
etc.

---

## 本日の流れ

1. 類似反応検索
2. 文献レコードから反応へのリンク
3. 物質レコードから反応へのリンク

---

## 本日の流れ

1. 類似反応検索
2. 文献レコードから反応へのリンク
3. 物質レコードから反応へのリンク

# 類似反応検索



## その反応と類似した反応を探す

1. View Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step Hover over any structure for more options.

**Steps/Stages**

1.1 C: Pd(OAc)<sub>2</sub>, C: 564483-18-7, S: BuOH, 15 min, 25°C  
1.2 R: CsOH, S: H<sub>2</sub>O, 1 h, 25°C

**Notes**

alternative preparation shown, in-situ generated Miyaura cross-coupling reaction, Reactants: 2, R: 2, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2, Most stages

# 類似度のレベルを選択

Get Similar Reactions [?](#)

Retrieve similar reactions from:

All reactions  
 Current answer set

Include this level of similarity:

Broad - Reaction centers only (191095)

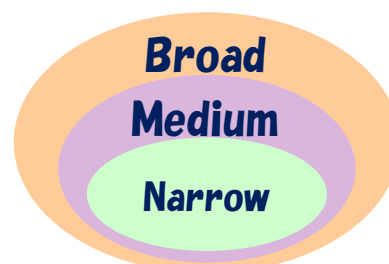
Medium - Reaction centers plus adjacent atoms and bonds (6050)

Narrow - Reaction centers plus extended atoms and bonds (66)

[Get Reactions](#) [Cancel](#)

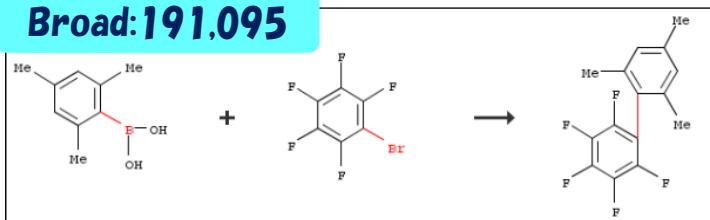
データベース全体 or  
現在の回答集合の中

● Broad  
● Medium  
● Narrow  
から類似度レベルを選択



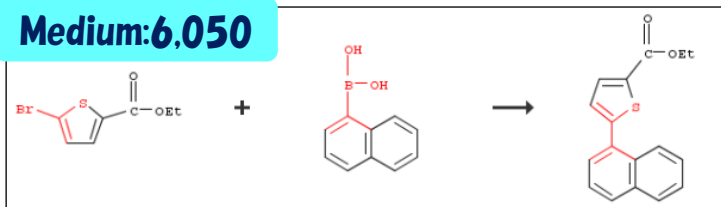
# レベルごとの回答

Broad:191,095



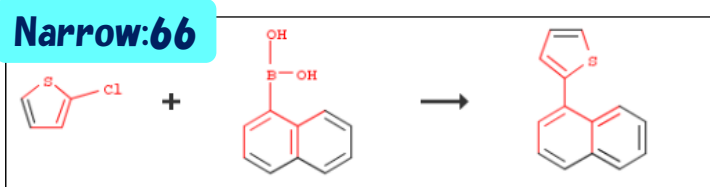
反応中心のみ

Medium:6,050



隣接する原子・結合まで

Narrow:66



$\alpha$  位および  $\beta$  位の原子・結合まで

## 本日の流れ

1. 類似反応検索
2. 文献レコードから反応へのリンク
3. 物質レコードから反応へのリンク

# 文献から反応を抽出

全文献の反応を抽出

一文献の反応を抽出

Get Substances **Get Reactions** Get Related Citations Get Full Text

Sort by: Accession Number

0 of 1491 References Selected

1. Fluorinated 1-Phenyl-1H-tetrazol-5-yl Sulfone Derivatives as General Reagents for Fluoroalkylidene Synthesis

By Ghosh, Arun K.; Zajc, Barbara  
From Journal of Organic Chemistry (2009), 74(22), 8531-8540. | Language: English, Database: CAPLUS

Julia-Kocienski olefination reagents 1-fluoropropyl, (cyclopropyl) fluoromethyl, 1-fluoro-2-methyl-2-propenyl, and 1-fluoro-5-hexenyl 1-phenyl-1H-tetrazol-5-yl (PT) sulfones were prepd. by metalation followed by electrophilic fluorination. Although metalation-fluorination of Pr, 5-hexenyl, and (cyclopropyl)methyl PT-sulfones proceeded under homogeneous conditions, fluorination of 2-methyl-2-propenyl PT-sulfone required heterogeneous fluorination conditions. Condensation reactions of fluoro PT-sulfones with aldehydes resulted in vinyl fluorides in high yields. Screening of olefination conditions showed that stereoselectivity depended on reagent and carbonyl structure and can in many cases be tuned either toward E- or Z-selectivity. For example, LiHMDS-mediated condensations of 1-fluoropropyl PT-sulfone in the presence of MgBr<sub>2</sub>·OEt<sub>2</sub> were Z-selective with electron-rich arom. aldehydes, a hindered arom. aldehyde, and cinnamaldehyde. Low-temp. KHMDS-mediated condensations were E-selective with electron-rich and electron-deficient arom. aldehydes and Z-selective with n-octanal. Dialkyl, aryl alkyl, and diaryl ketones reacted as well to give fluoroolefin products in 71-99% yields.

2. Rearrangement of 2,5-Bis(silylated)-N-Boc Pyrroles into the Corresponding 2,4-Species

By Mirebeau, Jean-Hugues; Haddad, Mansour; Henry-Ellinger, Martin; Jauouen, Gerard; Louvel, Julien; Le Bideau, Franck  
From Journal of Organic Chemistry (2009), 74(22), 8890-8892. | Language: English, Database: CAPLUS

# 文献から反応を抽出

193反応を抽出

SciFinder®

Explore Saved Searches SciPlanner Save Print Export

Opened saved answer set "JOC2009" (1491) > get reactions (193)

REACTIONS

Analyze Refine

Group by: No Grouping Sort by: Accession Number

0 of 193 Reactions Selected

1. View Reaction Detail Link

4 Steps Hover over any structure for more options.

Reagent (New)

LIN(Pr- <i>i</i> ) <sub>2</sub>	141
NFSI	141
(Me <sub>3</sub> Si) <sub>2</sub> NH·Li	138
MgBr <sub>2</sub> ·Et <sub>2</sub> O	94
mCPBA	76
NaOH	76
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	30
H <sub>2</sub> O	18
K [N(SiMe <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	16
NH <sub>4</sub> Cl	16

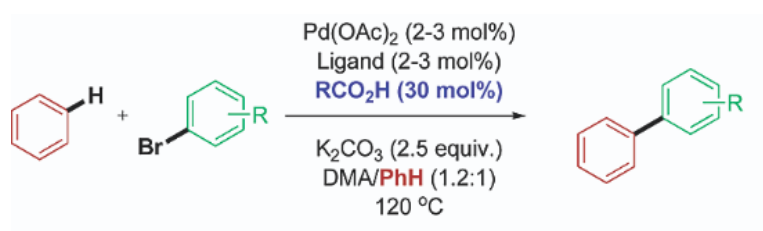
Reaction scheme showing the synthesis of a fluoroolefin derivative from a PT-sulfone reagent, an aldehyde, and a fluorinated olefin.

# 検索例

2009年の JOC 掲載論文のうち、最も被引用件数が多いものを検索

その論文中から**反応を抽出**

**主題と関係する反応のみを表示させる**



# まとめ

・**文献からの反応抽出機能**を使えば、化学反応の詳細を統一フォーマットで確認できる

・**Similar Reaction** を使って、特定の反応に限定できる

・**どう作図すればよいか分からない**ときは、**著名文献を探して Similar Reaction!**

# 本日の流れ

1. 類似反応検索
2. 文献レコードから反応へのリンク
3. 物質レコードから反応へのリンク

## 物質から反応へのリンク

全物質まとめて  
反応へリンク

一物質から  
反応へリンク

メリットは？

0 of 12022 Substances Selected

1. Substance Detail  
33069-62-4  
~27868

2. Substan  
114977-28-5  
~11118

Absolute stereochemistry.,Rotation (-).  
C<sub>47</sub>H<sub>51</sub>N O<sub>14</sub>

Absolute stereochemistry.,Rotation (-).  
C<sub>43</sub>H<sub>53</sub>N O<sub>14</sub>



# 「触媒」を指定できます

Get Reactions

Limit results by reaction role

- Product
- Reactant
- Reagent
- Reactant or reagent
- Catalyst
- Solvent
- Any role

Get Cancel

反応検索では指定できない!

# 反応検索では Analyze は可能

REACTIONS

Analyze by: Catalyst

Catalyst	Count
Pd(PPh <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	159
PdCl <sub>2</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	92
Pd(OAc) <sub>2</sub>	58
95464-05-4	37
4-DMAP	28
CuI	27
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub>	27
PPh <sub>3</sub>	26
657408-07-6	18

触媒で解析はできる

触媒で解析はできる

Single Step Hover over any structure for more options.

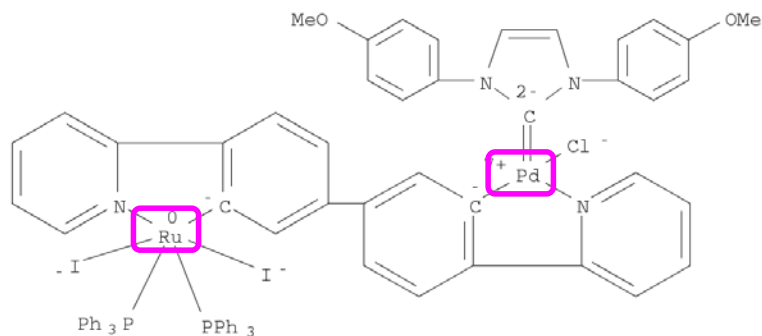
99%

Overview

Steps/Stages	Notes
1.1 C: Pd(OAc) <sub>2</sub> , C: 564483-18-7, S: BuOH, 15 min, 25°C	alternative preparation shown, in-situ generated

# 検索例

パラジウムとルテニウムを含む物質(塩・配位化合物など)を**触媒とする反応**をまとめて検索する



# まとめ

- ・反応情報を得るには、作図を使う方法のほか、**文献・物質**からリンクを使う方法がある
- ・物質からのリンクでは、反応中での役割として**触媒**を指定できる
- ・作図による反応検索だけでなく、**多様なリンク**の活用を