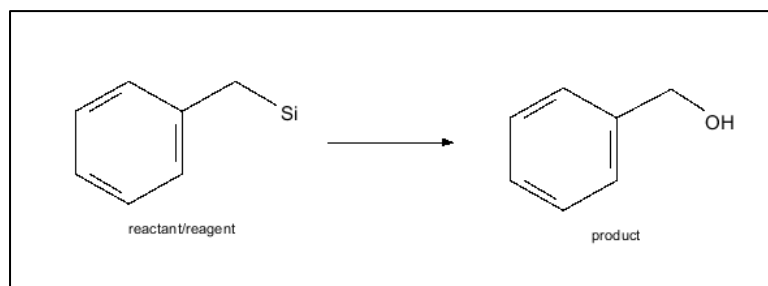



検索例: SciFinder 化学反応のキーワードによる絞り込み

SciFinder の反応検索で得られた回答集合は特定の構造や、立体選択的反応があるなどの条件で限定することが可能です。しかし、反応検索では「人名反応」などで回答を限定することはできません。この検索例では「人名反応」などで回答を限定する(絞り込む)方法を紹介します。


- 例：下記の反応において得られた反応情報から「玉尾反応」に関連する反応に限定する。

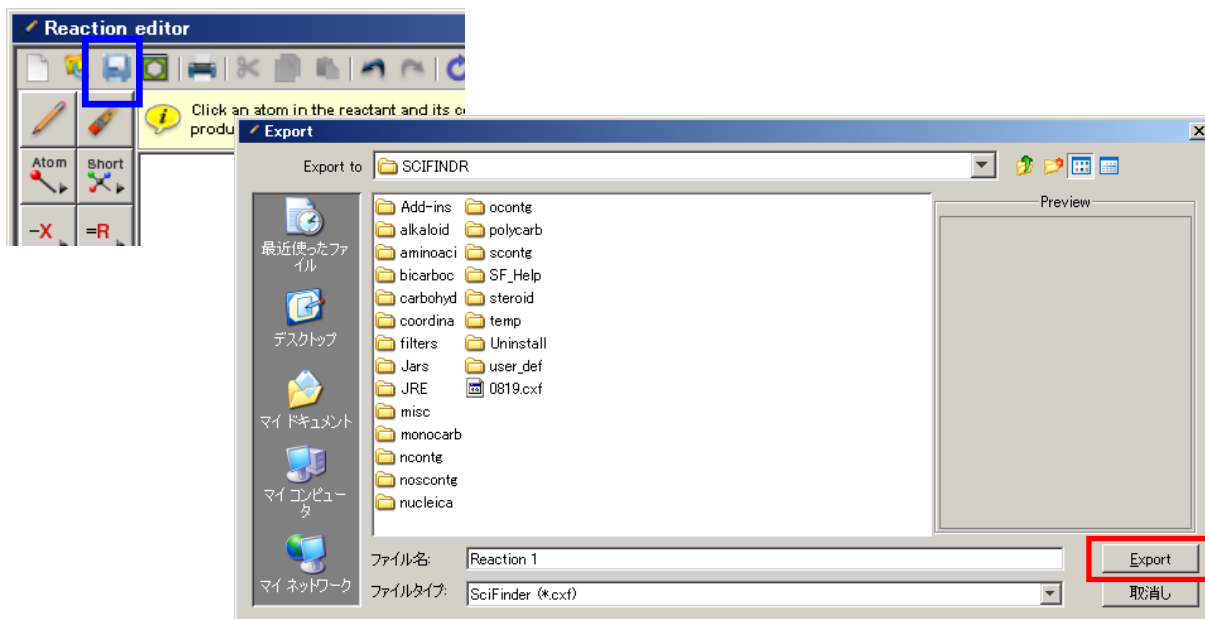


- (1) 反応検索画面  を選択し、反応作図画面を開き、質問式を作図します。目的の回答に限定するためにマッピングで反応物と生成物中の対応する原子を指定します。

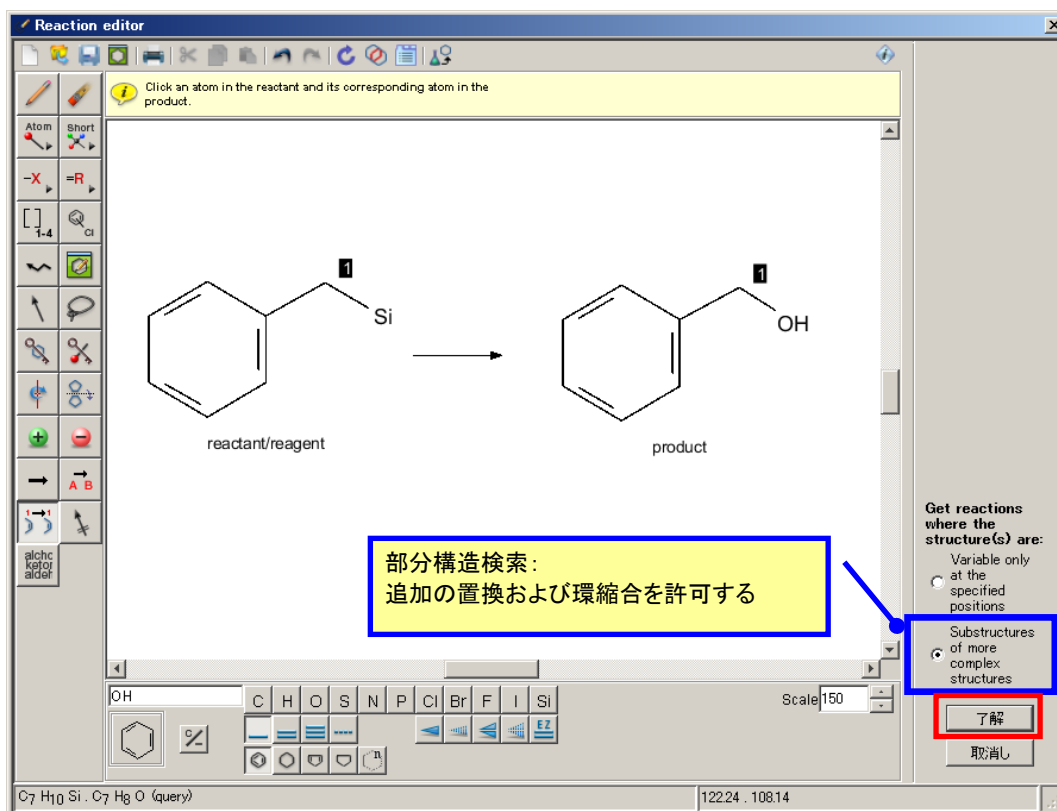
The screenshot shows the 'Reaction editor' window. The main area displays the reaction from the previous diagram. A yellow tooltip box says 'Click an atom in the reactant and its corresponding atom in the product.' A blue box highlights the 'mapping tool' icon in the left toolbar, with a label 'マッピングツール' pointing to it. Another tooltip box explains: 'マッピング: 反応物と生成物中の対応する原子を指定することでノイズを減らすことが可能'. On the right, there are options for 'Get reactions where the structure(s) are:' with radio buttons for 'Variable only at the specified positions' and 'Substructures of more complex structures'. At the bottom, there are buttons for '了解' and '取消し', and a status bar showing 'C7 H10 Si . C7 H8 O (query)' and '12224 . 108.14'.

- (2) 作図した構造を保存します。

作図画面の上部の  をクリックし、ファイル名と保存先を指定し、「Export」をクリックします。



(3) 検索のタイプから部分構造検索を指定し、「了解」をクリックします。



(4) 画面の作図と検索タイプを確認し「Search」をクリックします。

(6) 得られた文献をキーワードで絞り込みます。

画面右側の [Refine] タブを選択します。絞り込み項目から「Research Topic」を選び、キーワード「Tamao」を入力し、下部の [Refine] をクリックします。

玉尾反応で限定するために「Tamao」と入力

Analysis Refine

Refine by:

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Type
- Publication Year
- Language
- Database

Research Topic

Tamao

Examples:

The effect of antibiotic dairy products

Photocyanation of ar compounds

Refine

Reaction Structure substructure > reactions (778) > get references (167) > refine "Tamao" (7)

References

7 References 0 Selected Keep Selected Remove Selected Remove Duplicates Add Tags Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number Answers per Page [75]

1. Siloxacyclopentenes as Dienophile-Linked Directing Groups in Intramolecular Diels-Alder Reactions
By Halvorsen, Geoff T.; Roush, William R.
From Organic Letters (2008), 10(22), 5313-5316. Language: English, Database: CAPLUS
Substances Reactions Citing Full Text Link 0 Comments 0 Tags
2. Nickel-Catalyzed Reactions of Silacyclobutanes with Aldehydes: Ring Opening and Ring Expansion Reaction
By Hirano, Koji; Yorimitsu, Hideki; Oshima, Koichiro
From Organic Letters (2006), 8(3), 483-485. Language: English, Database: CAPLUS
Substances Reactions Citing Full Text Link 0 Comments 0 Tags
3. Asymmetric hydrosilylation of alkenes with alkoxyhydrosilanes catalyzed by chiral bis(oxazolonyl)phenyl-rhodium complex
By Tsuchiya, Yasunori; Uchimura, Hirofumi; Kobayashi, Kazuki; Nishiyama, Hisao
From Synlett (2004), (12), 2099-2102. Language: English, Database: CAPLUS
Substances Reactions Citing Full Text Link 0 Comments 0 Tags
4. Stereochemistry of the reaction of Si-phenyl silenes with butadienes: elaboration of the silacycloadducts to provide a novel route to substituted lactones
By Sanganee, Mahesh J.; Steel, Patrick G.; Wheligan, Daniel K.
From Organic & Biomolecular Chemistry (2004), 2(16), 2393-2402. Language: English, Database: CAPLUS
Substances Reactions Citing Full Text Link 0 Comments 0 Tags

Analysis Refine

Analyze by:

Author Name

Click bar to view only those references within the current answer set

Buck Richard T	1
Coe Diane M	1
Drysdale Martin J	1
Ferris Leigh	1
Fuchs P L	1
Haigh David	1
Halvorsen Geoff T	1
Hirano Koji	1

(7) 得られた文献集合から文献に関連する反応情報を抽出するために、画面上部の [Get Reactions] をクリックします。文献中の反応集合が作成されます(440 件)。

Reaction Structure substructure > reactions (778) > get references (167) > refine "Tamao" (7)

References

7 References 0 Selected Keep Selected Remove Selected Remove Duplicates Add Tags Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

Get Substances **Get Reactions** Get Cited Get Citing

1. Reaction Detail Link

Reaction scheme showing the Swern oxidation of an alcohol to an aldehyde, followed by a Diels-Alder reaction with a silacyclobutene derivative.

1.1 R:DMSO, R:Cl(=O)CC(=O)Cl, S:CH₂Cl₂, -78°C

1.2 S:CH₂Cl₂, 5 min, -78°C

1.3 R:Et₃N, -78°C; 10 min, -78°C; -78°C → rt

1.4 R:H₂O, S:Et₂O

1.5 R:BuLi, S:THF, S:Hexane, 15 min, 0°C; 1.5 h, 0°C → rt

1.6 R:NH₄Cl, S:H₂O, S:Et₂O

2.1 12 h, rt

2.2 R:t-BuOK, S:THF, 10 min, rt; 1 h, rt

2.3 R:NH₄Cl, S:H₂O, S:Et₂O

3.1 C:Me₃SiSO₃CP₃, S:CH₂Cl₂, 10 min, -78°C; -78°C → 0°C; 1.5 h, 0°C

3.2 R:Et₃N

3.3 R:Bu₄N⁺PF₆⁻, S:THF, rt → 60°C; 2 h, 60°C

3.4 R:NH₄Cl, S:H₂O, S:Et₂O

Relative stereochemistry.

NOTE: 1) Swern oxidation stage 1-3, 3) Diels-Alder reaction, stereoselective. Reactants: 3, Reagents: 8, Catalysts: 1, Solvents: 5, Steps: 3, Stages: 13, Most stages in any one step: 6

Analysis Refine

Analyze by:

Catalyst

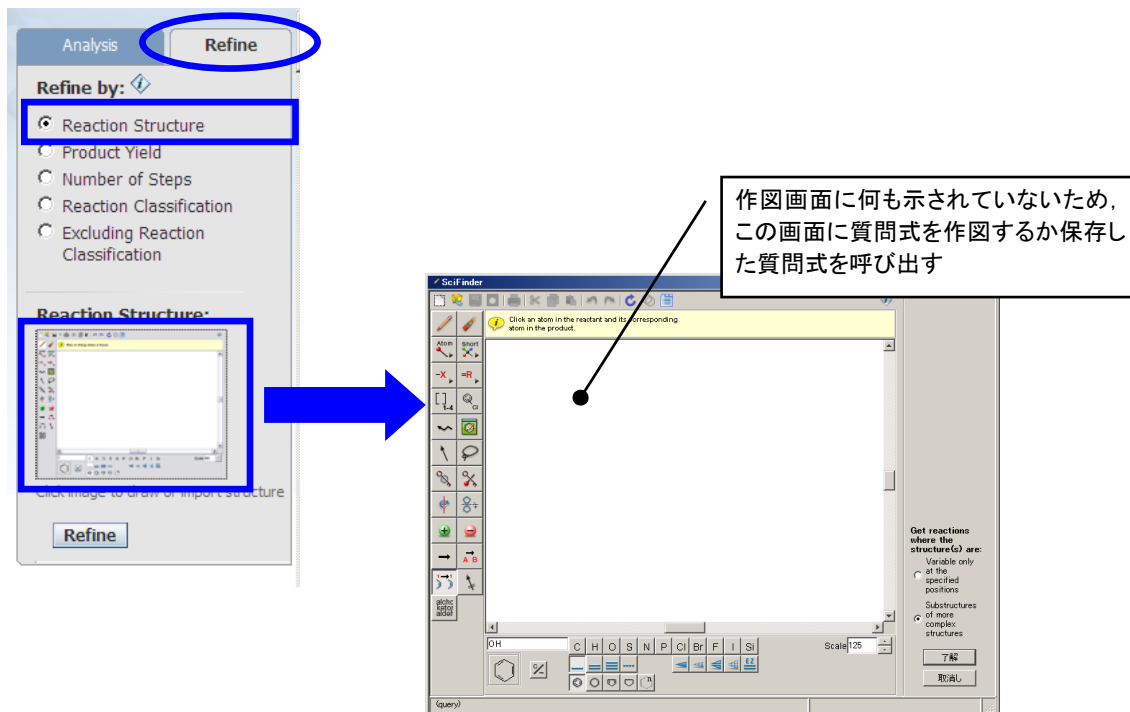
Click bar to view only those reactions within the current answer set

PtO ₂	74
Pd	32
12012-95-2	22
201732-49-2	20
Ni dicyclooctadiene	19
196407-85-9	15
2,6-Di-t-butylcresol	12
Rh ₂ (OAc) ₄	11
Pb ₂	10
MePF ₂	9

Show More

(8) 玉尾反応に限定するために反応質問式で絞り込みます。

画面右側の [Refine] タブを選択します。絞り込み項目から「Reaction Structure」を選び、下部の反応検索画面をクリックします。



(9) (2)で作図、保存した反応質問式を呼び出します。

作図画面の上部の  をクリックし、保存したファイルを選択し、「Import」をクリックします。



(10) 検索のタイプから部分構造検索を指定し、「了解」をクリックします。

SciFinder - Reaction 1.cxf

Click an atom in the reactant and its corresponding atom in the product.

reactant/reagent → product

部分構造検索:
追加の置換および環縮合を許可する

Get reactions where the structure(s) are:
Variable only at the specified positions
 Substructures of more complex structures

了解
取消し

OH C H O S N P Cl Br F I Si Scale 125

C₇ H₁₀ Si . C₇ H₈ O (query) 122.24 . 108.14

(11) 「Refine」をクリックすると回答集合から目的の質問式に該当する反応を限定することができます。

Analysis Refine

Refine by: Reaction Structure
 Product Yield
 Number of Steps
 Reaction Classification
 Excluding Reaction Classification

Reaction Structure:
Click image to change structure or view detail

Search type: Substructure

Refine

最初の検索で得られた 778 反応から「玉尾反応」に関連する 27 反応に限定することができた

Reactions

27 Reactions 0 Selected Keep Selected Remove Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number Answers per Page [15] Display: [Icons]

1. Reaction Detail Link Similar Reactions NEW

Me Me (CH₂)₃ CH=CH₂ →

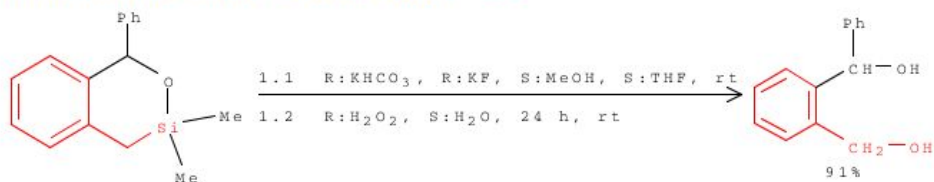
1.1 C:2,6-Di-t-butylcresol, S:PhMe, 5 d, 190 °C
1.2 R:KHCO₃, R:H₂O₂, R:KF, S:H₂O, S:MeOH, S:THF,
12 h, rt
1.3 R:Na₂SO₃, S:H₂O

Double bond geometry as shown.

Relative stereochemistry.
64%

NOTE: Diels-Alder reaction, sealed tube used, thermal, stereoselective, Fleming-Tamao oxidation.
Reactants: 1, Reagents: 4, Catalysts: 1, Solvents: 4,
Steps: 1, Stages: 3

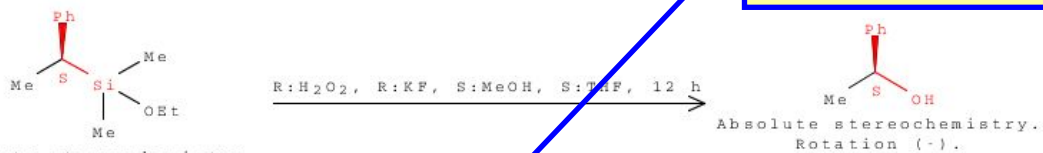
10. Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#) **NEW**



NOTE: Tamao-Fleming oxidation,
Reactants: 1, Reagents: 3, Solvents: 3,
Steps: 1, Stages: 2

Nickel-Catalyzed Reactions of Silacyclobutanes with Aldehydes: Ring Opening and Ring Expansion Reaction
By Hirano, Koji et al
From Organic Letters, 8(3), 483-485; 2006

11. Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#) **NEW**



NOTE: Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 2,
Steps: 1, Stages: 1

Asymmetric hydrosilylation of alkenes with alkoxyhydrosilanes catalyzed by chiral bis(oxazolonyl)phenyl-rhodium complex
By Tsuchiya, Yasunori et al
From Synlett, (12), 2099-2102; 2004

注記部分に人名反応であることが記載されている場合もあるが記載のないものもあり、反応情報のみから人名反応に関係があるか判断することは難しい場合がある