



インターネットセミナー

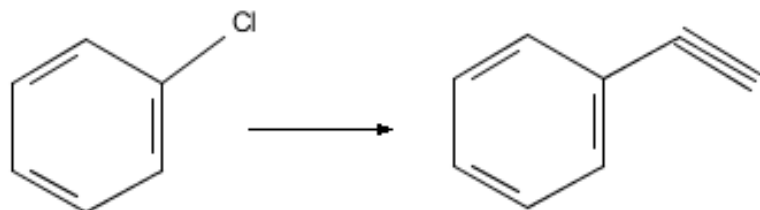


SciFinder 合成化学者必見！
反応検索 ① ～基礎編～

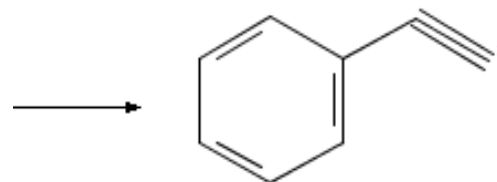
JAICI
化学情報協会

2013年5月

SciFinder の反応検索



試薬, 触媒は?
反応条件は?



反応物は? 収率は?

**SciFinder では化学構造や官能基グループから
反応のスキーム情報を得ることができます**

本日の流れ

1. 収録情報

2. レコード例(得られたデータの内容)

3. 検索例

本日の流れ

1. 収録情報

2. レコード例(得られたデータの内容)

3. 検索例

収録情報

- ✓ 収録年代: 1840 年以降
- ✓ 更新: 毎日
- ✓ 収録件数: 6,700 万件以上

収録情報

- ✓ **収録源：特許・雑誌論文などから収録**
 - **CAS 作成データ**
 - **Infochem 社, Wiley 社のデータ**
 - **INPI の反応データベース**
 - **SORD (Selected Organic Reactions Database)**

由来情報

- **Biotransformations database の酵素反応**

収録情報

- ✓ CAS の収録基準に合致した反応が収録されている
 - 有機化学反応情報を収録している
 - ポリマーの反応や工業的反応はあまり収録されていない
- ✓ 一段階、および多段階の合成反応が収録されている

収録情報

✓ 収録する反応情報の例

- 一段階反応のみを報告した文献



例えば, 新規反応を
開発した論文など

収録情報

- 多段階反応 $A + B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E$ を報告した論文



例えば, 全合成

本日の流れ

1. 収録情報

2. レコード例(得られたデータの内容)

3. 検索例

レコード例

2. View Reaction Detail [Link](#)

2 Steps *Hover over any structure for more options.*

反応スキーム

概要

▼ Overview

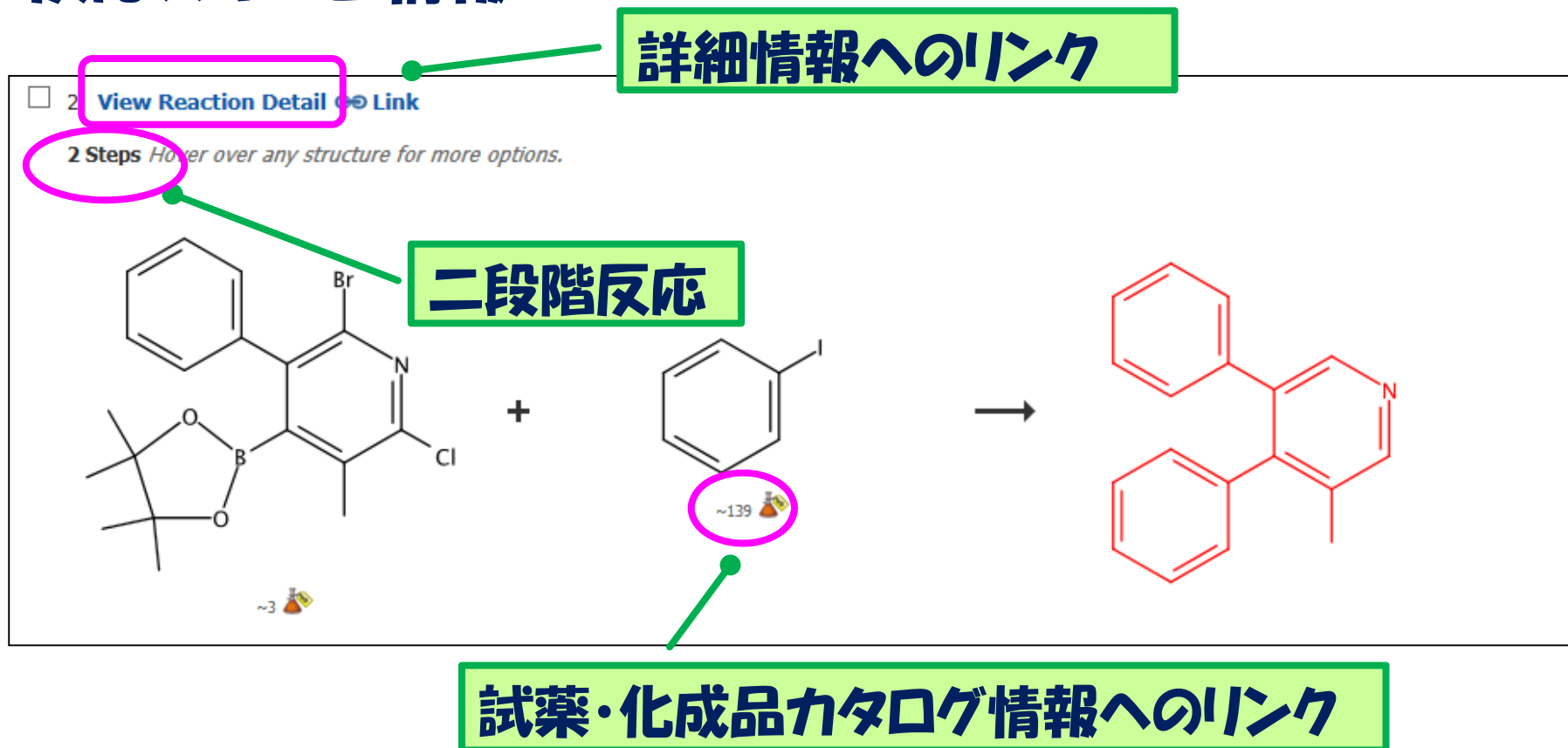
Steps/Stages	Notes
1.1 R:Cs ₂ CO ₃ , C: PdCl ₂ (PPh ₃) ₂ , S: THF, 48 h, rt	1) Suzuki-Miyaura coupling, Reactants: 2, Reagents: 3, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 2, Stages: 4, Most stages in any one step: 2
1.2 R: H ₂ O	
2.1 R: LiAlH ₄ , S: THF, 3 h, rt	References A [4 + 2] Cycloaddition Strategy to Pyridine Boronic Ester Derivatives Quick View Other Sources By Delaney, Patrick M. et al From Organic Letters, 10(5), 781-783; 2008
2.2 R: H ₂ O	

▶ Experimental Procedure

実験項

レコード例

反応スキーム情報



レコード例

中間ステップの表示 (View Reaction Detail)

2. 2 Steps *Hover over any structure for more options.*

2. 2 Steps

Steps	Stages	Notes	Yield
1	1.1 R: Cs ₂ CO ₃ , C: PdCl ₂ (PPh ₃) ₂ , S: THF, 48 h, rt 1.2 R: H ₂ O	Suzuki-Miyaura coupling, Reactants: 2, Reagents: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2	79%

Experimental Procedure

2

Steps	Stages	Notes	Yield
2	2.1 R: LiAlH ₄ , S: THF, 3 h, rt 2.2 R: H ₂ O	Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2	73%

Experimental Procedure

中間体を確認できる

収率
Yield 79%

注) 全ての情報に収率情報が存在するわけではない

Ester Derivatives
Delaney, Patrick M.; Huang, Jianhui; Macdonald, Simon J. F.; Harrity, Joseph P. A.
Organic Letters
Volume 10
Issue 5
Pages 781-783
Journal
2008

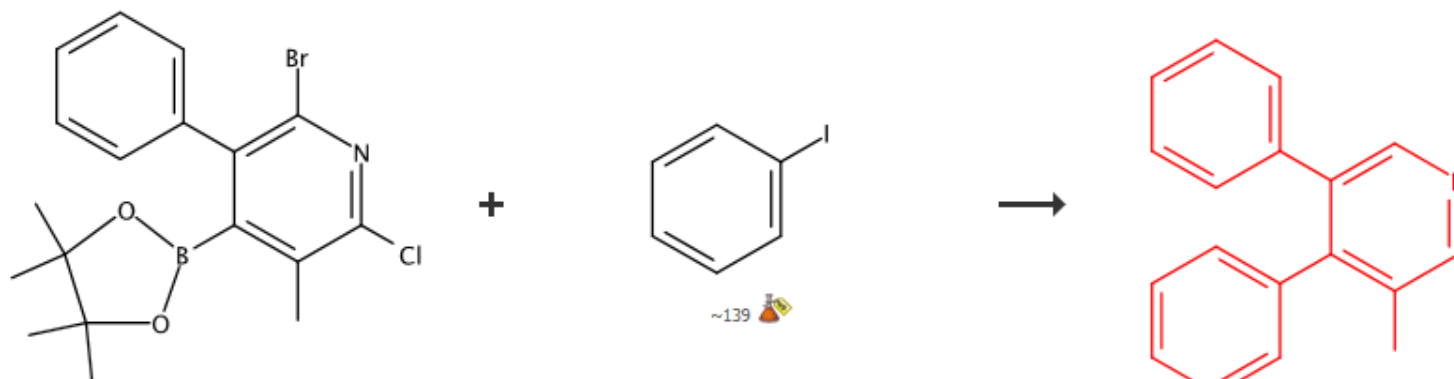
COMPANY/ORGANIZATION
Department of Chemistry
University of Sheffield
Sheffield, UK S3 7HF

NUMBER OF STEPS
2

レコード例

2. View Reaction Detail [Link](#)

2 Steps *Hover over any structure for more options.*



概要

Overview

Steps/Stages

- 1.1 R: Cs₂CO₃, C: PdCl₂(PPh₃)₂, S: THF, 48 h, rt
- 1.2 R: H₂O
- 2.1 R: LiAlH₄, S: THF, 3 h, rt
- 2.2 R: H₂O

Notes

1) Suzuki-Miyaura coupling, Reactants: 2, Reagents: 3, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 2, Stages: 4, Most stages in any one step: 2

References

A [4 + 2] Cycloaddition Strategy to Pyridine Boronic Ester Derivatives
[Quick View](#) [Other Sources](#)
By Delaney, Patrick M. et al
From Organic Letters, 10(5), 781-783; 2008

Experimental Procedure

レコード例

▼ Overview

Steps/Stages

1.1 R:Cs₂CO₃, C:PdCl₂(PPh₃)₂, S:THF, 48 h, rt
1.2 R:H₂O
2.1 R:LiAlH₄, S:THF, 3 h, rt
2.2 R:H₂O

1 段階 / 2 ステージ

2 段階 / 2 ステージ

R: Reactant (反応物)
C: Catalyst (触媒)
S: Solvent (溶媒)



Step と Stage の違い

Step: 生成し物質を単離する

Stage: 生成した物質を単離せず、
そのまま次の試薬・触媒を
加えて先の反応に進む

レコード例

Notes

1) Suzuki-Miyaura coupling, Reactants: 2, Reagents: 3, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 2, Stages: 4, Most stages in any one step: 2

References

A [4 + 2] Cycloaddition Strategy to Pyridine Boronic Ester Derivatives

[Quick View](#) [Other Sources](#)

By Delaney, Patrick M. et al

From Organic Letters, 10(5), 781-783; 2008

Notes(注記):

反応タイプや安全性に関する記載がある場合がある

References(出典):

クリックで抄録を確認することができる

[Other Sources](#)

原報へのリンク→原報で更に情報を得る

レコード例

The screenshot displays a chemical record interface. At the top, there are chemical structures: a boronic ester, a chlorine atom, and a vinyl group. Below these are icons for reagents and solvents, with labels like "~3" and "~139". On the right, a red structure of a styrene derivative is shown. The main content area is divided into sections: "Overview", "Steps/Stages", "Notes", and "References". The "Steps/Stages" section lists four steps: 1.1 R:Cs₂CO₃, C: PdCl₂(PPh₃)₂, S: THF, 48 h, rt; 1.2 R: H₂O; 2.1 R: LiAlH₄, S: THF, 3 h, rt; 2.2 R: H₂O. The "Notes" section contains a description of a Suzuki-Miyaura coupling. The "References" section cites a paper by Delaney, Patrick M. et al. from Organic Letters, 10(5), 781-783; 2008. A pink box highlights the "Experimental Procedure" link at the bottom left of the record.

▼ Overview

Steps/Stages

1.1 R:Cs₂CO₃, C: PdCl₂(PPh₃)₂, S: THF, 48 h, rt
1.2 R:H₂O
2.1 R:LiAlH₄, S:THF, 3 h, rt
2.2 R:H₂O

Notes

1) Suzuki-Miyaura coupling, Reactants: 2, Reagents: 3
Solvents: 1, Steps: 2, Stages: 4, Most stages in any of

References

A [4 + 2] Cycloaddition Strategy to Pyridine Boronic E
Quick View Other Sources
By Delaney, Patrick M. et al
From Organic Letters, 10(5), 781-783; 2008

▶ Experimental Procedure

Experimental Procedure: 実験項

レコード例

Experimental Procedure: 実験項

▼ Experimental Procedure

Organic
LETTERS

Step 1

4. Functionalisation of pyridine boronic esters 4.1. 2-bromo-6-chloro-5-methyl-3,4-diphenylpyridine (14) A round bottom flask was charged with (5a) (0.082 g, 0.2 mmol), PdCl₂(PPh₃)₂ (0.007 g, 5 mol %), Cs₂CO₃ (0.130 g, 0.4 mmol), THF (1.0 ml) and iodo benzene (0.093 g, 0.4 mmol). The reaction was stirred at room temperature under N₂ for 48 h the reaction was quenched by the addition of distilled water (10 ml), the product was extracted into dichloromethane (3 x 10 ml), dried (MgSO₄), filtered and conc. in vacuo. The product was purified by flash column chromatography (eluting solvent petroleum ether/ethylacetate 15:1 ratio) to give compound (14) as clear oil, 0.056 g 4.1. 2-bromo-6-chloro-5-methyl-3,4-diphenylpyridine (14), yield 79% (14) ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ; 2.15 (3H, s, CH₃), 6.89-7.00 (4H, m, Ar-H), 7.16-7.21 (6H, m, Ar-H) (14) ¹³C NMR (62.9 MHz, CDCl₃): δ; 153.7, 149.7, 138.8, 137.9, 137.5, 137.3, 130.3, 129.9, 128.6, 128.1, 127.8, 127.7, 127.6, 17.6. FTIR 2913(3080 (w), 1543 (s), 1350 (s), 1075 (s), 698 (s). HRMS (EI+) calculated for C₁₈H₁₃N₃Cl₂Br: 356.9919; Found: 356.9914.s

Step 2

3-Methyl-4,5-diphenylpyridine (16) To a round bottom flask with compound (14) phenyl pyridine (0.072 g, 0.2 mmol), in THF (2 ml) was added LAH (0.040 g, 1.0 mmol). The reaction was stirred at room temperature under N₂ for 3 h. The reaction was quenched by the addition of distilled water (10 ml), the product was extracted into dichloromethane (3 x 10 ml), dried (MgSO₄), filtered and conc. in vacuo. The product was purified by flash column chromatography (eluting solvent petroleum ether/ethyl acetate 4:1 ratio) to give compound (16) as a colourless solid, 0.036 g 3-Methyl-4,5-diphenylpyridine (16), yield 73% (16) ¹H NMR (250 MHz, CDCl₃): δ; 2.19 (3H, s, CH₃), 7.03-7.30 (10H, m, Ar-H), 8.51 (1H, s, HetAr-H), 8.53 (1H, s, HetAr-H). (16) ¹³C NMR (62.9 MHz, CDCl₃): δ; 149.8, 148.2, 147.8, 137.9, 137.5, 136.2, 131.2, 129.8, 129.4, 128.1, 127.9, 127.3, 126.9, 17.7 FTIR 3025 (s), 1582 (s), 1443 (s), 1407 (s), 1164 (m), 1073 (m), 890 (m) HRMS (EI+) calculated for C₁₈H₁₅N: 245.1204; Found: 245.1195.

実験の詳細を確認することができる

本日の流れ

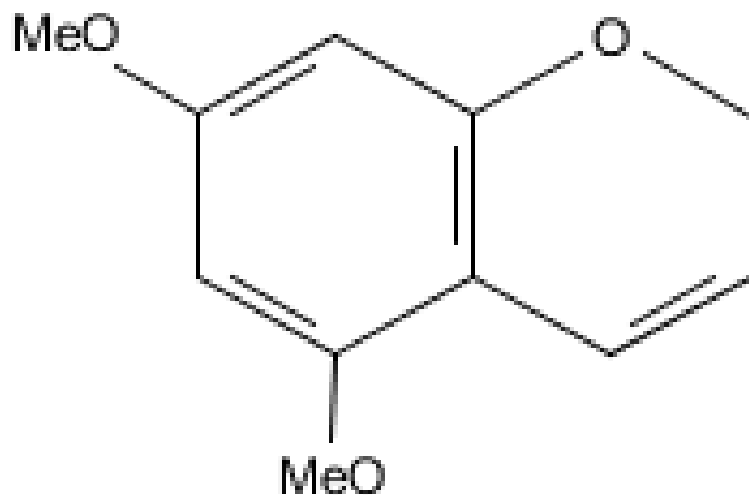
1. 収録情報

2. レコード例(得られたデータの内容)

3. 検索例

検索例

下記の骨格をもつ物質の合成方法を確認する.



まとめ

- ✓ SciFinder では広範な有機合成情報を得ることができる
- ✓ グループング, ソートなどの機能を使用して得られた回答を効率よく把握することができる
- ✓ 得られた回答はスキーム, 条件だけでなく, 実験項情報を確認することができる.

まとめ

グルーピング、ソートなどの機能を使用して得られた回答を効率よく把握することが可能

The screenshot shows a web interface for searching chemical reactions. The top navigation bar includes 'REACTIONS', 'Get References', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below this, there are tabs for 'Analyze' and 'Refine'. The 'Analyze' section has a dropdown for 'Analyze by:' set to 'Catalyst'. A list of catalysts is shown with counts: 12354-85-7 (9), 125357-42-8 (8), AcOH (6), PdCl₂(PP), 12307-1, Cu(OAc), 20442-7, 1603-40, CuI, and Pd(OAc). The 'Refine' section has 'Group by:' set to 'No Grouping' and 'Sort by:' set to 'Relevance'. A 'Display Options' button is highlighted. A dropdown menu for 'Display Options' is open, showing options: Relevance, Accession Number, Experimental Procedure, Number of Steps, Product Yield, and Publication Year. A 'Show More' button is at the bottom left. The main content area shows '0 of 64 Reactions Selected' and a list of reactions. The first reaction is highlighted with a red box. A 'View Reaction Detail' link and a 'Similar Reactions' link are visible. A 'Single Step' button is also present. The reaction details for the first reaction are: 1.1 R:LiAlH₄, S:THF, 3 h, rt; 1.2 R:H₂O. The reaction type is 'Transformation'. The reaction progress is shown as 'Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2, Most stages in any one step: 2'.

Clicking on the catalyst list allows grouping by document or reaction unit.

Clicking on the 'Sort by:' dropdown allows sorting by relevance, accession number, experimental procedure, number of steps, product yield, or publication year.

Clicking on the 'Display Options' button allows selecting or deselecting information to display, such as reaction details and similar reactions.

1 Document 1 Reaction Display

まとめ

Experimental Procedure: 実験項

◇ 雑誌論文

出版社	雑誌	収録年
ACS	全誌	2000年～
Taylor & Francis ※1	・Synthetic Communications	1998年～
	・Journal of Coordination Chemistry	
	・Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements	
Springer	化学系 165 誌	1985年～※2
上海有機化学研究所	Youji Huaxue, Huaxue Xuebao	1998年～
Thieme	SYNLETT	1989～2013年
	SYNTHESIS	1980～2013年

◇ 特許

公報言語	発行国	収録年
英語	US(アメリカ), EP(ヨーロッパ), PCT(世界知的所有権機関) CA(カナダ), GB(イギリス)	2000年～
日本語※	JP(日本), PCT(世界知的所有権機関)	2008年～
ドイツ語※	DE(ドイツ), EP(ヨーロッパ), PCT(世界知的所有権機関)	

◇ その他

JAICI
化学情報協会

Selected Organic Reactions Database (SORD) 由来の反応情報

* 学位論文由来の反応を収録したデータベース

1961年～2011年

今後も収録を拡大する予定