



インターネットセミナー

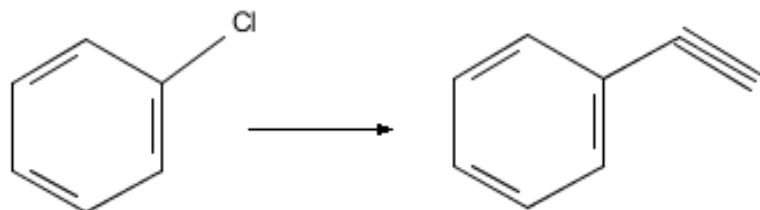


SciFinder 合成化学者必見！  
反応検索 ① ～基礎編～

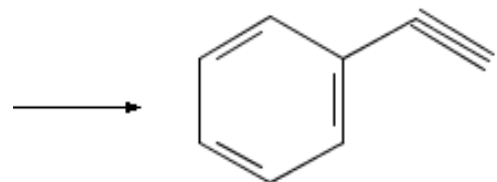
**JAICI**  
化学情報協会

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 detabase 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

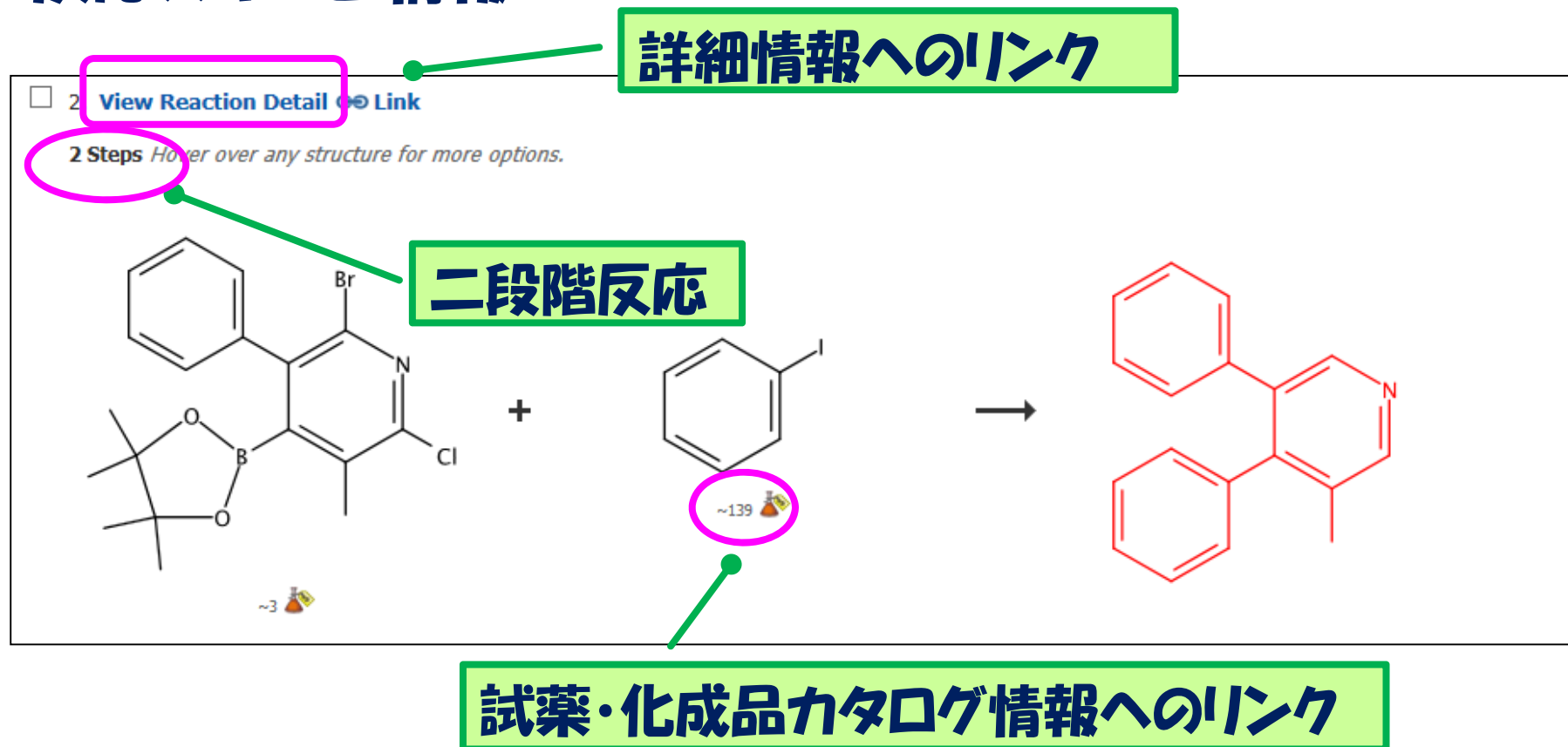
Steps/Stages	Notes
1.1 R:Cs <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> , C: PdCl <sub>2</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> , S: THF, 48 h, rt	1) Suzuki-Miyaura coupling, Reactants: 2, Reagents: 3, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 2, Stages: 4, Most stages in any one step: 2
1.2 R: H <sub>2</sub> O	
2.1 R: LiAlH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

**Step 1:**

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

[Experimental Procedure](#)

**Step 2:**

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

[Experimental Procedure](#)

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

**NUMBER OF STEPS**  
2

**Yield 79%**

**収率**

注) 全ての情報に収率情報が存在するわけではない

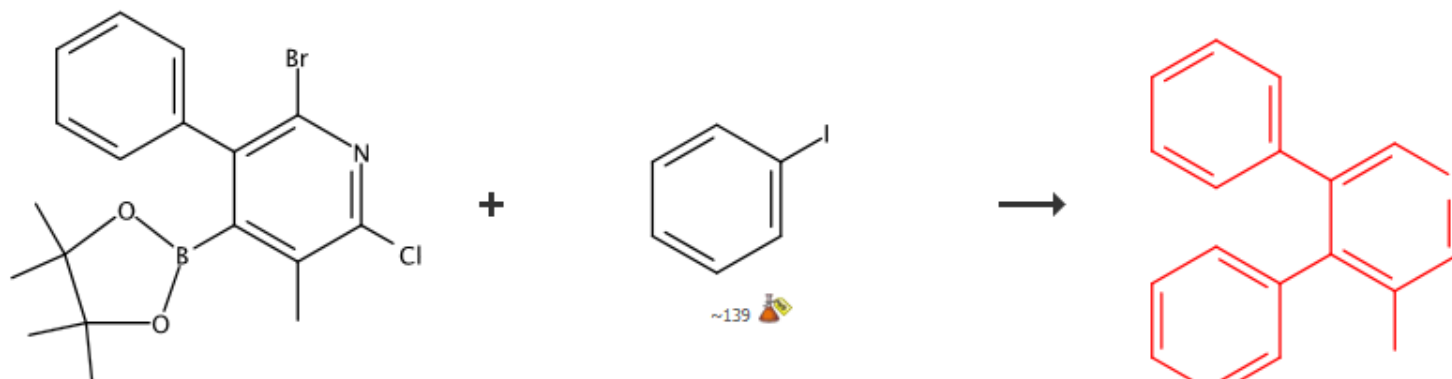
**Yield 73%**

**中間体を確認できる**

# 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: Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, C: PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S: THF, 48 h, rt
- 1.2 R: H<sub>2</sub>O
- 2.1 R: LiAlH<sub>4</sub>, S: THF, 3 h, rt
- 2.2 R: H<sub>2</sub>O

##### 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:Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, C:PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S:THF, 48 h, rt  
1.2 R:H<sub>2</sub>O  
2.1 R:LiAlH<sub>4</sub>, S:THF, 3 h, rt  
2.2 R:H<sub>2</sub>O

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 '~3' and '~139' indicating quantities. A red structure of a styrene derivative is shown on the right. The main content area is divided into sections: 'Overview', 'Steps/Stages', 'Notes', and 'References'. The 'Steps/Stages' section lists four steps: 1.1 R:Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, C: PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S: THF, 48 h, rt; 1.2 R: H<sub>2</sub>O; 2.1 R: LiAlH<sub>4</sub>, S: THF, 3 h, rt; 2.2 R: H<sub>2</sub>O. 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:Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, C: PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S: THF, 48 h, rt  
1.2 R:H<sub>2</sub>O  
2.1 R:LiAlH<sub>4</sub>, S:THF, 3 h, rt  
2.2 R:H<sub>2</sub>O

**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), PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (0.007 g, 5 mol %), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (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 N<sub>2</sub> 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 (MgSO<sub>4</sub>), 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) <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ; 2.15 (3H, s, CH<sub>3</sub>), 6.89-7.00 (4H, m, Ar-H), 7.16-7.21 (6H, m, Ar-H) (14) <sup>13</sup>C NMR (62.9 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 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 C<sub>18</sub>H<sub>13</sub>N<sub>3</sub>Cl<sub>2</sub>Br: 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 N<sub>2</sub> 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 (MgSO<sub>4</sub>), 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) <sup>1</sup>H NMR (250 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ; 2.19 (3H, s, CH<sub>3</sub>), 7.03-7.30 (10H, m, Ar-H), 8.51 (1H, s, HetAr-H), 8.53 (1H, s, HetAr-H). (16) <sup>13</sup>C NMR (62.9 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 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 C<sub>18</sub>H<sub>15</sub>N: 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

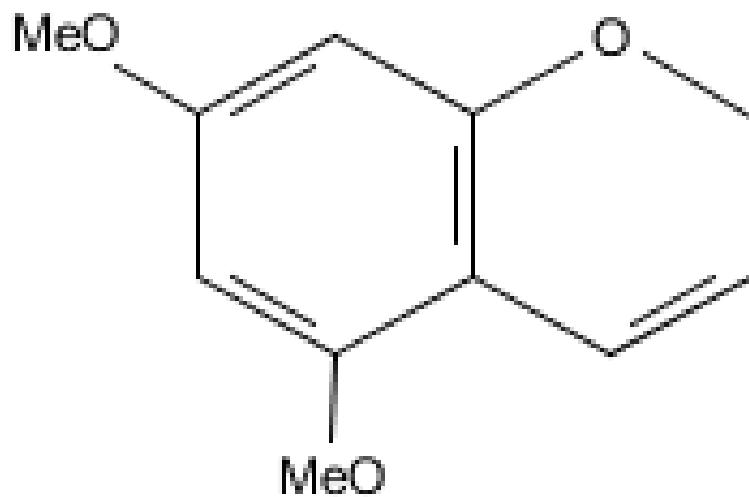
1. 収録情報

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), PdCl<sub>2</sub>(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 'Group by:' is open, showing 'No Grouping' and 'Document' (highlighted in pink). A dropdown menu for 'Sort by:' is open, showing 'Relevance' (highlighted in blue) and other options: 'Accession Number', 'Experimental Procedure', 'Number of Steps', 'Product Yield', and 'Publication Year'. A pink callout box says '1 文献 1 反応表示' (1 document, 1 reaction display). A green callout box explains that clicking on a reaction allows showing or hiding information other than reactants and products. Another green callout box explains that clicking on the sort dropdown allows sorting by various criteria. The main reaction list shows '0 of 64 Reactions Selected' and a list of reactions with details like '1.1 R:LiAlH<sub>4</sub>, S:THF, 3 h, rt' and '1.2 R:H<sub>2</sub>O'. A 'Show More' button is at the bottom left.

# 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**