



SciFinder®

インターネットセミナー

SciFinder 合成化学者必見！

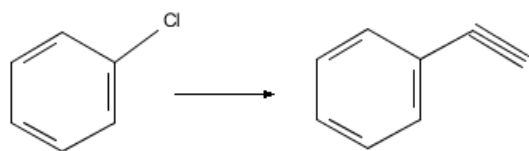
反応検索 ②

～検索精度 UP 編～

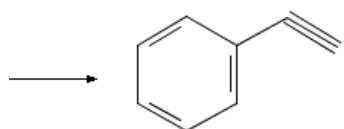
JAICI
化学情報協会

1

SciFinder の反応検索



試薬, 触媒は?
反応条件は?



原料は? 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

反応検索の基本的な内容は下記をご参照ください

[合成化学者必見！反応検索\(1\)基礎編](#)



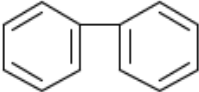
JAICI
化学情報協会

2

収録反応数は 5700 万件以上！


(2014 年 1 月時点)

(部分構造検索) **検索式**



→  product

Substructure : **reactions (3515588)**

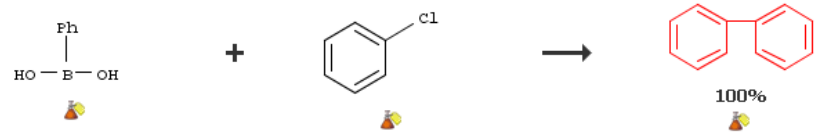
Send to SciPlanner

Answers per Page [25] Display: 

0 of 3209999 Reactions Selected Page: 1 of 128400

1. View Reaction Detail   Similar Reactions

Single Step Hover over any structure for more options.

 100%

どの反応から見ればいいのだろうか？



本セッションの流れ

1. 検索精度を上げるための方法

2. 検索例

3. まとめ

① 検索結果の絞り込みなど

得られた結果の中から

高収率の反応,
反応ステップ数の少ない反応 など

を探したい場合にはどうすればよいのだろうか？



① 検索結果の絞り込みなど

以下の操作により、検索結果を精査することができる

- ・ 解析
- ・ 絞り込み
- ・ グループピング (反応タイプ, 文献単位)
- ・ 並び替え (収率, 反応ステップ数, 発行年など)

※グレーの項目は、「反応検索①基礎編」参照

① 検索結果の絞り込みなど

解析

絞り込み

グルーピング

反応タイプごとに分類

① 検索結果の絞り込みなど

解析

Analyze Refine

Analyze by: Catalyst

Pd(PPh ₃) ₄	680
PdCl ₂ (PPh ₃) ₂	177
Pd(OAc) ₂	108
Pd ₂ (dba) ₃	99
CuI	86
131274-22-1	60
PPh ₃	48
95464-05-4	37
53199-31-8	31
4-DMAP	27

Show More

Reagent

- Author Name
- Catalyst
- Company-Organization
- Complete Iterations
- Document Type
- Experimental Procedure
- Journal Name
- Language
- Number of Steps
- Product Yield
- Publication Year
- Reagent
- Solvent

絞り込み

Analyze Refine

Refine by:

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Reaction Structure:

Click image to change structure or view detail

Search type: Substructure

Refine

解析の観点

Author Name	著者名
Catalyst	触媒
Company Organization	会社名(大学名)
Document Type	資料種類
Experimental Procedures	実験情報の有無
Journal Name	雑誌名
Language	原文献の使用言語
Number of Steps	反応のステップ数
Product Yield	収率
Publication Year	発行年
Reagent	試薬
Solvent	溶媒

絞り込みの観点

Reaction Structure	化学構造
Product Yield	収率
Number of Steps	反応ステップ数
Reaction Classification	反応分類
Excluding Reaction Classification	特定の反応分類を除く
Non-participating functional groups	反応に関与しない官能基

②反応作図ツール

反応式を作図する際、

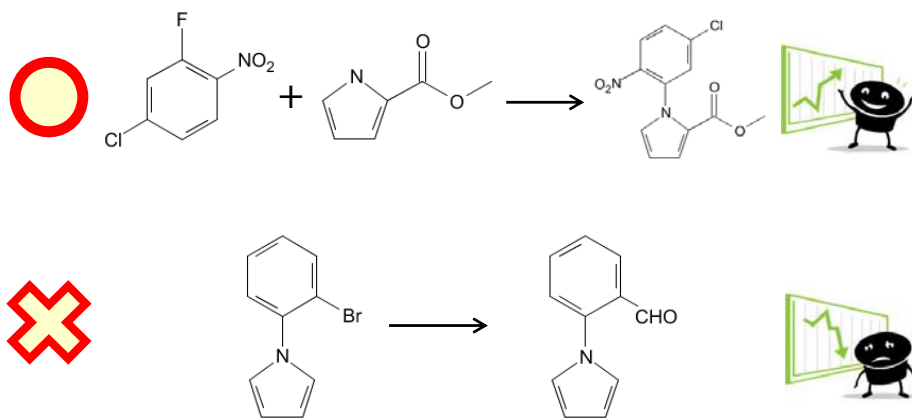
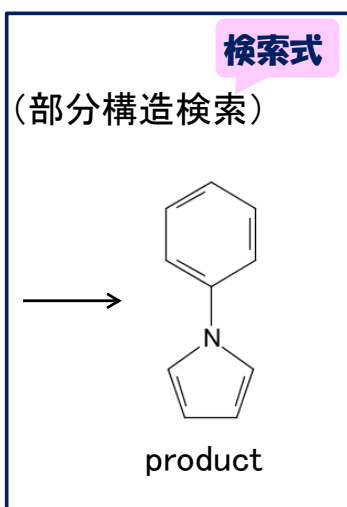
意図しない結果を除く方法

はないのだろうか？



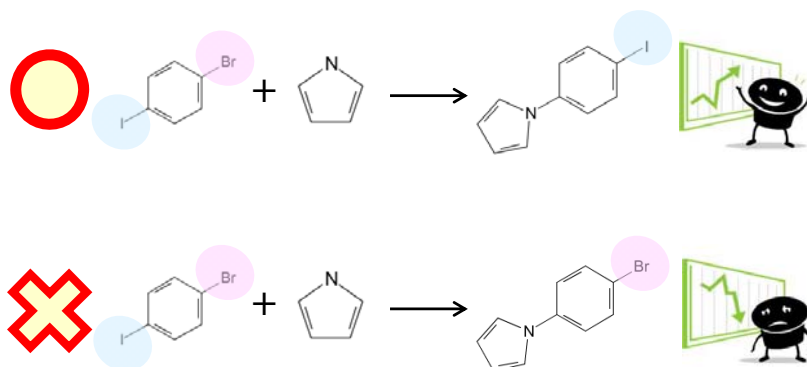
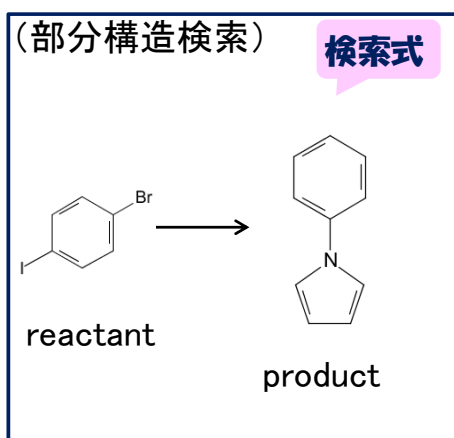
②反応作図ツール

ベンゼン環とピロール環のカップリング反応を調べる場合…

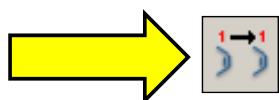


②反応作図ツール

ベンゼン環の臭素がピロール環と反応する回答が知りたい場合…



JAICI
化学情報協会



原子マッピングツール

②反応作図ツール

作図ツールの利用で、検索精度を向上させることができる



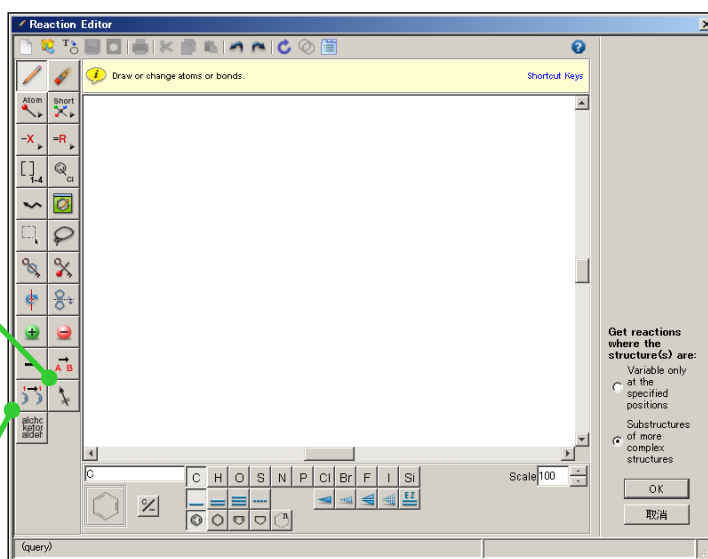
反応サイトツール

反応によって変化する
結合部位の指定



原子マッピングツール

反応物・生成物間の対応する
原子の指定



JAICI
化学情報協会

③フィルターの活用

検索初期の段階で

反応に用いる溶媒 など

回答を限定できないのだろうか？



③フィルターの活用

初期検索の段階で、以下の限定が可能

- ・ 反応しない官能基
- ・ 反応ステップ数
- ・ 反応分類
- ・ 溶媒
- ・ 収録源
- ・ 年代

③フィルター

REACTIONS: REACTION STRUCTURE

Structure Editor:
Java Non-Java
Click to Edit

Search Type:
 Allow variability only as specified
 Substructure

Import CXF

Search

Advanced Search Always Show

③フィルター

REACTIONS: REACTION STRUCTURE

Structure Editor:
Java Non-Java
Click to Edit

Search Type:
 Allow variability only as specified
 Substructure

Import CXF

Search

Advanced Search Always Show

Solvents Select Solvents

Non-participating Functional Groups Select Groups

Number of Steps
Examples: 1, 1-3, 1-, -3

Classifications
 Electrochemical Stereoselective
 Gas-phase

Sources
 Any source
 Patents only
 Sources other than patents

Publication Years
Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Solvent Hierarchy
[View Solvent List]

0 Selected Select All Deselect All

- Inorganic solvents
- Ionic liquids
- Nonpolar solvents
 - Aliphatic compounds
 - Aromatic compounds
 - Slanes
- Polar solvents
 - Polar solvents, aprotic
 - Acetals
 - (Dimethoxymethyl)benzene
 - 1,1-Diethoxypropane
 - 1-Methoxyethanol
 - 2,2-Diethoxypropane

Find: Next Previous

View: All 217

0 Selected Clear Selections

- Acetal
- Acetyl
- Acid Halide
- Acyclic Alkene
- Acyclic Ketone
- Acylmetal
- ALCOHOLS
- Aldehyde
- pi-Alkene
- ALKENES
- Alkyl Halide
- pi-Alkyne
- Alkyne

Reactions must have all selections
 any selection

本セッションの流れ

1. 検索精度を上げるための方法

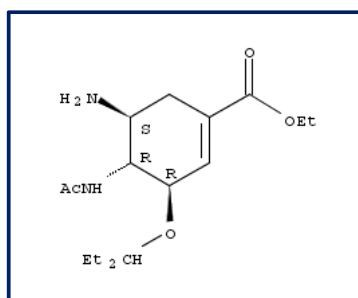
2. 検索例

3. まとめ

①解析 / 絞り込み / グループینگ

例1: 下記骨格をもつ物質の合成法を検索し、
得られた結果の中から効率よく欲しい反応を探す

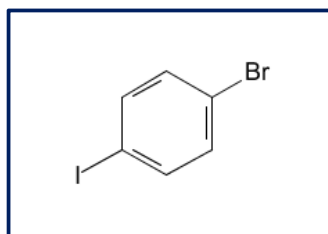
- ・アジドを還元してアミンを生成する反応
- ・実験項情報のある反応
- ・高収率の反応 など



②反応作図ツール

例2: ベンゼン環を骨格に持つ物質と, ピロール環を骨格に持つ物質のカップリング反応について検索する

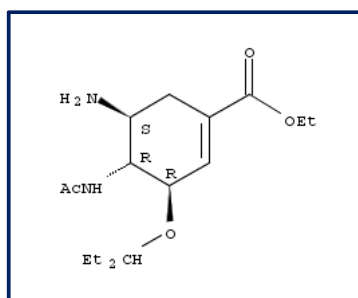
また, その中から原料が下記骨格をもち, 臭素の部分がピロール環と反応している回答を探す



③フィルター

例3: 下記骨格をもつ物質の, アルコール溶媒を用いた合成法を検索する

また, “アミンは反応しない”反応が好ましい



まとめ

★検索精度を向上させる主な方法

- **解析 / 絞り込み** の利用
- **検索結果のグルーピング**
- **反応作図ツールの利用**
- **溶媒, 反応しない官能基の指定**