




ChemInform®
RxnFinder

化学ジャーナルトップ100誌から
重要な反応を、専門家の目で選んで集めた
コストパフォーマンスの高い有機合成反応データベース

WILEY-VCH WILEY



ChemInform®
RxnFinder

RxnFinder (リアクションファインダー) は
このような化学反応データベースです

- 対象分野 有機合成化学
- 収録反応数 170万件以上 (毎年7万件を追加)
- 収録された化合物数 150万以上
- データ更新 3か月ごと
(近く毎月更新に移行を予定)
- 収録対象のジャーナル Angewandte Chemie, JACSなど
有機合成化学で特に重要な100誌
- 収録年度 1991年以降

WILEY-VCH WILEY

RxnFinder にできること



RxnFinder は、化学反応についてのさまざまな疑問に答えます。



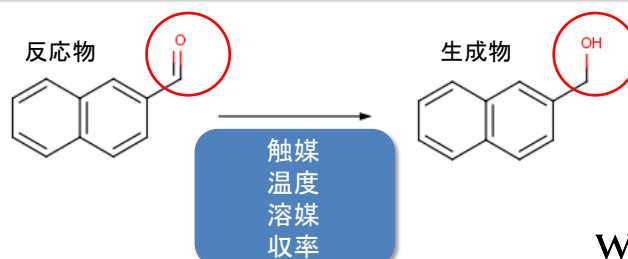
- ある薬剤の候補化合物を合成する方法は？
- どのような反応条件の下で、最も高い収率が得られる？
- この官能基変換に使われてきた触媒は？
- この試薬の合成法は？
- この反応の不成功例はある？

WILEY-VCH

WILEY

化合物のすぐれた合成法を見つけられるかどうかは、医薬品・材料・農薬などの創出の成功を大きく左右します。

- 合成法を効率的に探索するためには、重要度の高い反応を専門家の目で注意深く選んで収録したデータベースが欠かせません。
- 反応式だけでなく、反応条件や収率についての情報も必要です。



WILEY-VCH

WILEY



RxnFinderの3つの特長

- 「量より質」の方針により、新規性・重要性の高い反応を精選して収録。ノイズの少ない、効率的な反応探索が可能
- 反応スキーム、不成功の反応(Failed Reactions)、反応条件など研究者に役立つ情報を収録
- 収録反応数を絞り込むことによって、質の高さに対してリーズナブルな価格を実現

WILEY-VCH

WILEY




さらに詳しく・・・ (1)

- 有機化学の専門家が主要な化学誌の論文を内容的に吟味、新規性・重要性の高い反応を選んで収録することで、検索結果からノイズを排除 ⇒ 求める反応が効率よく見付き、時間とコストを削減
- **逆合成検索(Retrosynthetic analysis)**で、合成戦略の最適化が可能に
- 収率0%で不成功に終わった反応 '**Failed reactions**' 約4万件を収録 ⇒ 反応が行き詰る「デッドエンド」を事前に回避し、無駄な実験に要する時間と費用を節約

WILEY-VCH

WILEY



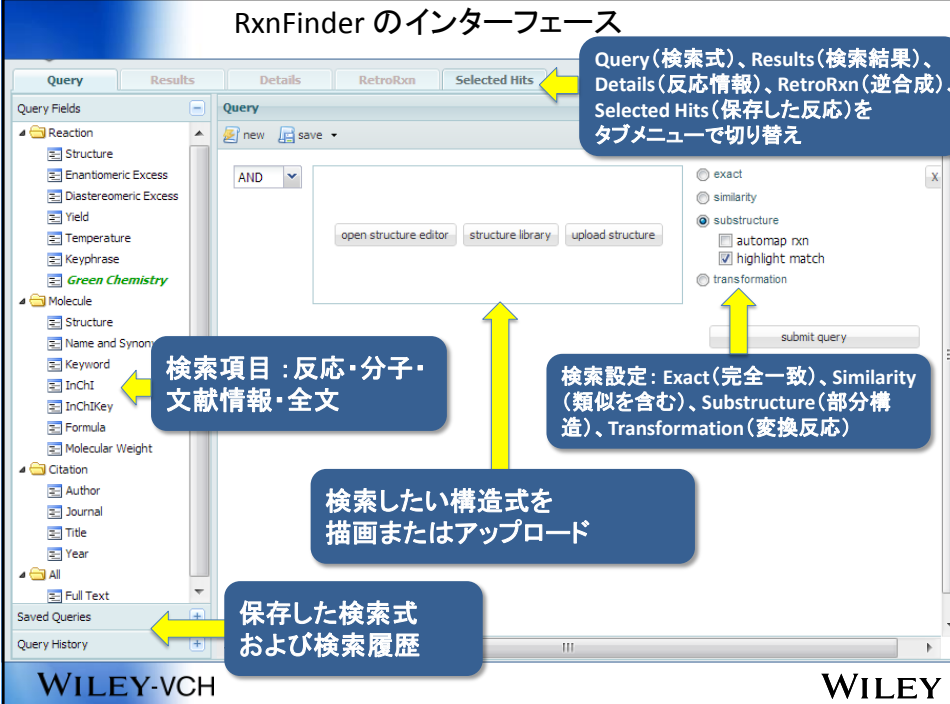
さらに詳しく・・・ (2)

- 使いやすい検索機能で、構造・部分構造・反応条件（試薬・溶媒・収率など）・文献情報（著者・誌名・出版年など）から検索可能
- 反応スキームを収録することにより、反応を合成戦略全体の中で理解できる

次のスライドで具体的にお見せします ➡

WILEY-VCH
WILEY

RxnFinder のインターフェース



Query (検索式)、Results (検索結果)、Details (反応情報)、RetroRxn (逆合成)、Selected Hits (保存した反応) をタブメニューで切り替え

検索項目：反応・分子・文献情報・全文

検索設定：Exact (完全一致)、Similarity (類似を含む)、Substructure (部分構造)、Transformation (変換反応)

検索したい構造式を描画またはアップロード

保存した検索式および検索履歴

WILEY-VCH
WILEY

基本的な検索の流れ

RxnFinderで最もよく使われる検索方法が **transformational search (変換検索)** です。これによって、似通った反応部位を持つ反応を見つけることができます。

次のスライドでは、トリフルオロメチル基からカルボキシル基への官能基変換を例に見てみましょう。

WILEY-VCH

WILEY

The screenshot shows the RxnFinder software interface. On the left is a 'Query Fields' sidebar with categories like Reaction, Molecule, and Citation. The main area is titled 'Query' and shows a reaction scheme: a trifluoromethyl group (CF₃) on a carbon chain reacting to form a carboxylic acid group (COOH) on the same carbon chain. A blue box with the text 'Transformationを選択' (Select Transformation) has a yellow arrow pointing to the 'transformation' option in a dropdown menu. Another blue box with the text '描画ツールで反応を描くか、またはファイルをアップロード' (Draw the reaction with the drawing tool or upload a file) has a yellow arrow pointing to the reaction drawing area. A third blue box with the text '検索を実行' (Execute Search) has a yellow arrow pointing to the 'submit query' button.

WILEY-VCH

WILEY

13件の反応がヒット

Cluster Analysis Results Details Retroforn Selected Hits

Author Catalyst Catalyst n none 13

Reagent Solvent Temperature (min.) Temperature (max.) Year Yield Classification: broad Classification: medium Classification: narrow

Resultset

Yield Condition Reference

90 fuming H₂SO₄ WANG, K.; LI, H.; WEN, J.; J Fluorine Chem [JFLCAR] 2001, 109 (2), 205-208. [open scheme] [open article] [save pdf] [show details]

90 0.5M aq. NaOH dioxane KING, J. F.; GILL, M. S.; J Org Chem [JOCEAH] 1996, 61 (21), 7250-7255. [open scheme] [open article] [save pdf] [show details]

Clipboard

Reference

no reactions on clipboard

Page 1 of 1

Displaying Reactions 1 - 13 of 13

WILEY-VCH WILEY

Organic Sulfur Mechanism. Part Bimolecular Nucleophilic Substitution

The reactions of alkyl trifluoroethane studied and compared with those of

Reaction-Addition vs

as or thols are

反応スキーム (scheme)は、論文で報告された複数の反応から最も重要な部分を抜き出した要約です

化学者が一目で反応のエッセンスを把握できるように記述

利用者が探していた変換反応

それに関連する興味深い変換反応

Neo-O-SO₂-CH₂-CF₃ (I) $\xrightarrow[\text{dioxane}]{0.5\text{M aq. NaOH}}$ Neo-O-SO₂-CH₂-COOH (II) 90% Neo: CC(C)C

I $\xrightarrow[\text{dioxane}]{\text{R}^1\text{NH}(\text{R}^2) \text{ (III)}, 0.5\text{M aq. NaOH}}$ Neo-O-SO₂-CH₂-CO-N(R¹)(R²) (IV) a R¹: -Bu; R²: -H 30% b R¹, R²: -Et 80%

I $\xrightarrow[\text{0.5M aq. NaOH, dioxane}]{3 \text{ equiv. Bn-SH (V)}}$ Neo-O-SO₂-CH₂-S-Bn (V)

WILEY-VCH WILEY

The screenshot displays a search interface with tabs for Query, Results, Details, Retroforn, and Selected Hits. The Results tab is active, showing a list of reactions. A callout box with a yellow arrow points to the 'show details' link for the second reaction.

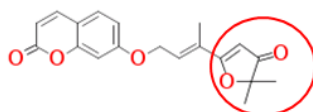
Yield	Condition	Reference
90	fuming H ₂ SO ₄	WANG, K.; LI, H.; WEN, J.; J Fluorine Chem [JFLCAR] 2001, 109 (2), 205-208. [open scheme] [open article] [save pdf] [show details]
90	0.5M aq. NaOH dioxane	KING, J. F.; GILL, M. S.; J Org Chem [JOCEAH] 1996, 61 (21), 7250-7255. [open scheme] [open article] [save pdf] [show details]

反応の詳細を見たい場合は Show Detailsをクリック

WILEY-VCH WILEY

部分構造検索・フィルタリング・ クラスター分析

例：天然物ゲイパルバリン(Geipavarin)は、
抗がん剤の候補化合物として知られています。



この化合物に生理活性を与える部位として
五員環に注目し、同じ五員環を生成する
反応を検索してみましょう。

Section 3

The screenshot shows the Wiley-VCH software interface. On the left, a tree view under 'Query Fields' shows 'Reaction' and 'Molecule' categories. A yellow arrow points from the 'Reaction' category to a chemical structure of a reaction product. A blue callout box contains the text: 'ゲイパルバリンの構造式をアップロード' (Upload the chemical structure of Gaypallarin). Another yellow arrow points from this structure to the 'edit' button. A second blue callout box says: 'アップロードした構造を作図エディタに送る' (Send the uploaded structure to the drawing editor). Below this, a drawing editor window shows the same structure with a blue lasso tool around a portion of it. A third blue callout box says: '作図エディタのlasso/delete機能を使って、構造から不要な部分を削除する' (Use the lasso/delete function of the drawing editor to delete unnecessary parts from the structure). The interface includes a 'submit query' button and a 'Query History' section at the bottom.

アップロードした構造を作図エディタに送る

ゲイパルバリンの構造式をアップロード

作図エディタのlasso/delete機能を使って、構造から不要な部分を削除する

WILEY-VCH WILEY

Section 3

The screenshot shows the Wiley-VCH software interface for a substructure search. A yellow arrow points from a chemical structure to the 'edit' button. A blue callout box says: '残った部分の右に矢印を加えると、生成物がこの部分構造を含む反応を検索' (Adding an arrow to the right of the remaining part allows searching for reactions containing this substructure as a product). Another yellow arrow points from the 'edit' button to the 'Reaction Substructure Search' option in the search criteria. A blue callout box says: 'Reaction Substructure Search (部分構造検索)を選ぶ' (Select Reaction Substructure Search (substructure search)). Below this, a search criteria field shows 'AND Year >= 2011'. A blue callout box says: '検索対象を2011年以降の新しい論文に絞り込む' (Narrow down the search target to new papers from 2011 onwards). A yellow arrow points from this field to the 'submit query' button. A final blue callout box says: 'Submit query ボタンをクリックして検索実行' (Click the Submit query button to execute the search). The interface includes a 'submit query' button and a 'Query History' section at the bottom.

残った部分の右に矢印を加えると、生成物がこの部分構造を含む反応を検索

Reaction Substructure Search (部分構造検索)を選ぶ

検索対象を2011年以降の新しい論文に絞り込む

Submit query ボタンをクリックして検索実行

WILEY-VCH WILEY

Section 3

Cluster Analysis (クラスター分析) ツールを使うと、検索結果をさまざまな角度から絞り込み可能

特定の試薬を用いる反応を探す

56件ヒット

WILEY-VCH WILEY

Section 3

置換基Rが脂肪族のときはOH基の保護不要

置換基Rが芳香族のときはOH基の保護が必要

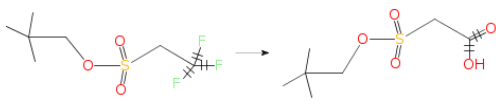
1件がヒット、反応スキームで詳細を表示

WILEY-VCH WILEY

Query Results Details RetroRxn Selected Hits

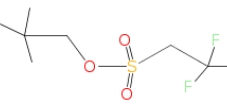
Source Information KING, J. F.; GILL, M. S.; J Org Chem 61 (1996) 21, 7250-

Reaction RXCI90428854



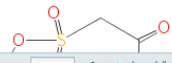
max. overall yield: 90%; Keyphrases: alkylation, O-alkylation

Reactant



$C_7H_{13}F_2O_3S$ (mw: 234.23652)
Keywords: halide, halide (F), sulfonate ester, sulfur
InChI: InChI=1S/C7H13F2O3S/c1-6(2,3)4-13-14(11,12)5-7(8,9)10/h4-5H2,1-3H3
InChIKey: WQWGDQFECKBTJN-UHFFFAOYSA-N

Product



Reaction 3 of 13 Yield: 90.8%

WILEY-VCH WILEY

Reaction details
のページに含ま
れる情報

- 反応物
- 生成物
- 触媒
- 溶媒

さらに

- キーワード
- 化合物の構造と物性
- 収率
- 反応温度

ご契約について

- 年間契約
- 何月からでもスタート可能
- 年間料金は、機関の所属人数(FTE)によって決定
大学・企業それぞれ5段階の料金設定
- 契約機関のネットワーク内から無制限に利用可能
- ご契約終了後はご利用いただけません

WILEY-VCH

WILEY



4週間の無料トライアルも
ご利用いただけます！

お見積りほか各種お問い合わせは
ワイリー・ジャパンまで
marketing@wiley.co.jp

2014.02

WILEY-VCH

WILEY