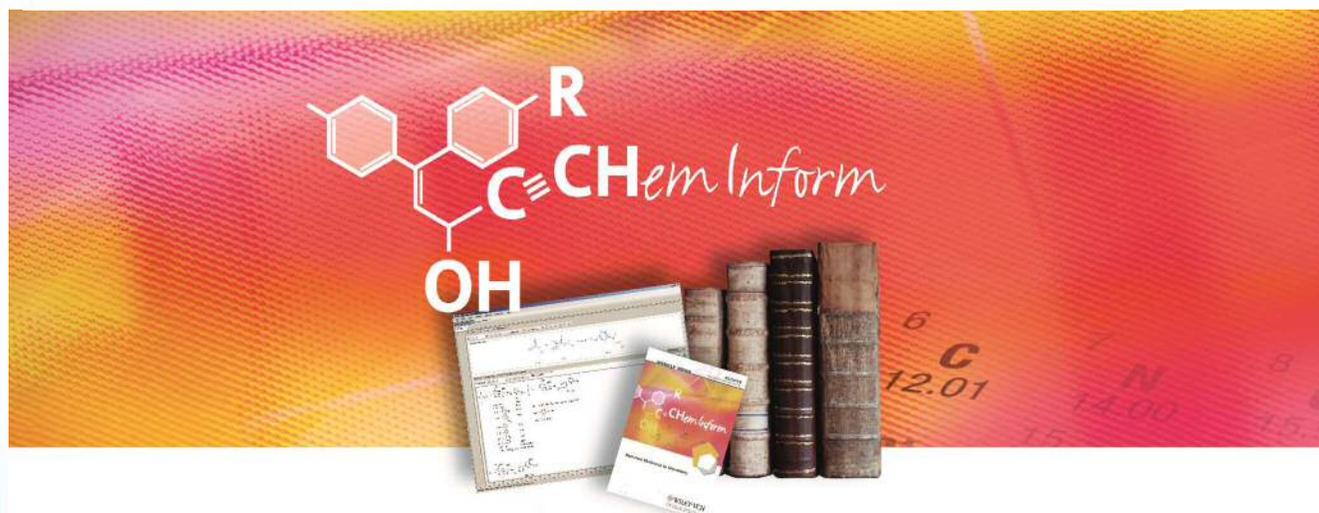




ChemInform[®]
RxnFinder

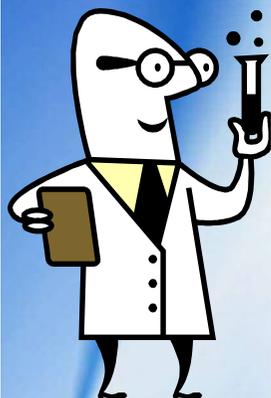


化学ジャーナルトップ100誌から
重要な反応を、専門家の目で選んで集めた
コストパフォーマンスの高い有機合成反応データベース

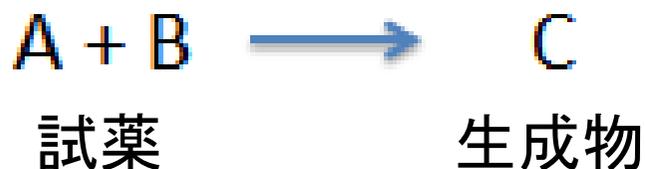
WILEY-VCH

WILEY

RxnFinder にできること



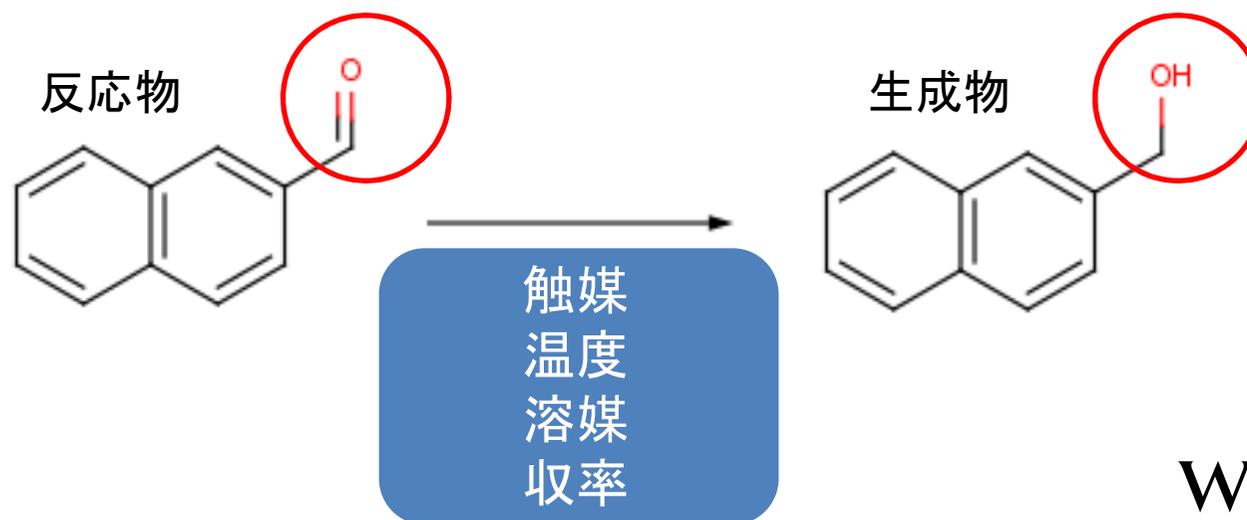
RxnFinder は、化学反応についてのさまざまな疑問に答えます。



- 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？

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。





ChemInform[®]
RxnFinder

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



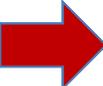
さらに詳しく・・・ (1)

- 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



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 

RxnFinder のインターフェース

The screenshot shows the RxnFinder software interface with several tabs: Query, Results, Details, RetroRxn, and Selected Hits. The Query tab is active, showing a search form with a dropdown menu set to 'AND'. Below the dropdown are three buttons: 'open structure editor', 'structure library', and 'upload structure'. To the right of the search form are radio buttons for search types: 'exact', 'similarity', 'substructure' (selected), and 'transformation'. There are also checkboxes for 'automap rxn' and 'highlight match', and a 'submit query' button. On the left side, there is a 'Query Fields' tree view with categories: Reaction (Structure, Enantiomeric Excess, Diastereomeric Excess, Yield, Temperature, Keyphrase, Green Chemistry), Molecule (Structure, Name and Synonym, Keyword, InChI, InChIKey, Formula, Molecular Weight), Citation (Author, Journal, Title, Year), and All (Full Text). At the bottom left, there are sections for 'Saved Queries' and 'Query History'. Yellow arrows point from blue callout boxes to these specific interface elements.

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

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。

The screenshot shows a chemical search software interface with several tabs: Query, Results, Details, RetroRxn, and Selected Hits. The Query tab is active, displaying a chemical reaction scheme where a trifluoromethyl group is converted to a methyl ester group. The interface includes a left sidebar with 'Query Fields' (Reaction, Molecule, Citation, All) and a right sidebar with search options (exact, similarity, substructure, transformation) and a 'submit query' button. Annotations include a blue box 'Transformationを選択' pointing to the 'transformation' radio button, a blue box '検索を実行' pointing to the 'submit query' button, and a blue box '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' pointing to the reaction scheme.

Transformationを選択

検索を実行

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

13件の反応がヒット

The screenshot displays a search results interface with the following components:

- Query Tab:** Shows search filters for Catalyst (none, 13 hits), Reagent, Solvent, Temperature, Year, Yield, and Classification.
- Resultset Table:**

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]
- Clipboard:** Shows "no reactions on clipboard".
- Navigation:** Includes "Page 1 of 1" and "Displaying Reactions 1 - 13 of 13".

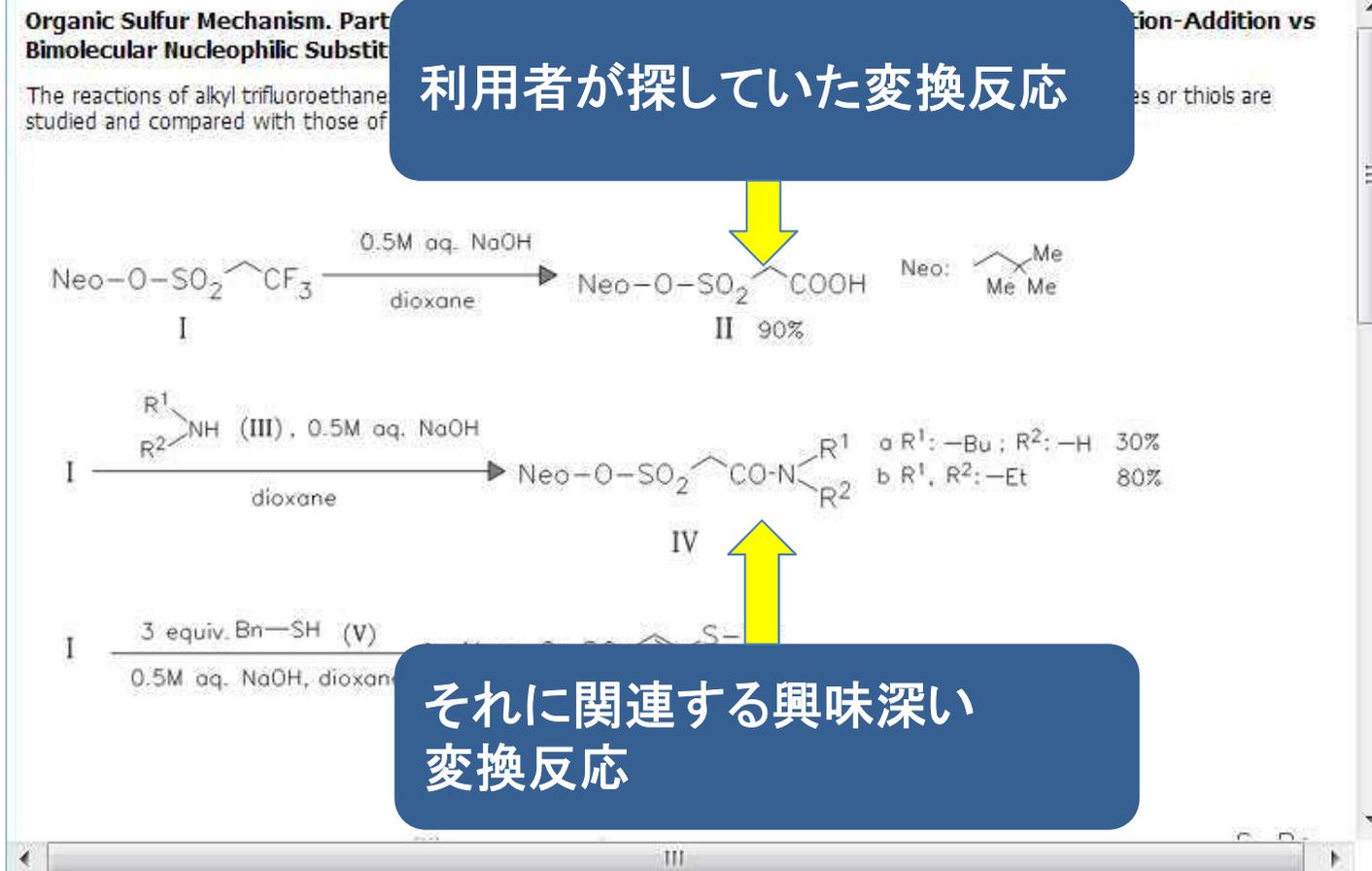
反応スキームを表示する

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



Query Results Details RetroBxn Selected Hits

Cluster Analysis << Author + Catalyst - Catalyst n none 13 Reagent + Solvent + Temperature (min.) + Temperature (max.) + Year + Yield + Classification: broad + Classification: medium + Classification: narrow +

Resultset 13 Hits

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]

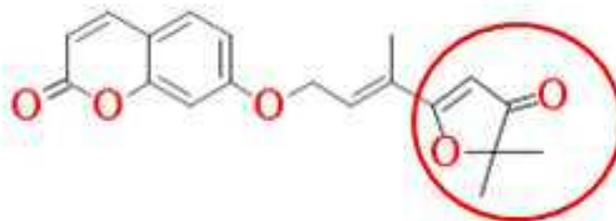
Clipboard Reference no reactions on clipboard

Page 1 of 1 Displaying Reactions 1 - 13 of 13

反応の詳細を見たい場合は
Show Detailsをクリック

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。

The screenshot displays a chemical database interface with several tabs: Query, Results, Details, RetroRxn, and Selected Hits. The left sidebar contains a tree view with categories like Reaction, Molecule, and Citation, each with sub-items such as Structure, Name and Synonyms, Keyword, InChI, InChIKey, Formula, Molecular Weight, Author, Journal, Title, Year, and Full Text. The main area shows a chemical structure of a complex molecule with a blue callout box pointing to it, stating 'ゲイパルバリンの構造式をアップロード' (Upload the chemical structure of Gelparalin). A yellow arrow points from this callout to the structure. Another yellow arrow points from the structure to an 'edit' button, with a callout box above it stating '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 the main view is a drawing editor window with a toolbar and a callout box stating '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). A yellow arrow points from this callout to the drawing editor window. The interface also includes a 'submit query' button and various search filters like 'exact', 'similarity', 'substructure', 'automap rxn', 'highlight match', and 'transformation'.

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

The screenshot shows a web-based search interface for chemical reactions. On the left is a sidebar with 'Query Fields' categorized into 'Reaction' (Structure, Enantiomerism, Diastereomerism, Yield, Temperature, Keyphrase, Green Chemistry) and 'Molecule' (Structure, Name and Synonyms, Keyword, InChI, InChIKey, Formula, Molecular Weight). Below this are 'Citation' fields (Author, Journal, Title, Year) and 'All' (Full Text). At the bottom are 'Saved Queries' and 'Query History'. The main area is titled 'RetroRxn' and 'Selected Hit'. It features a chemical structure of a cyclic ketone with a double bond. To the right of the structure are search options: 'exact', 'similarity', 'substructure' (selected), 'automap rxn', 'highlight match' (checked), and 'transformation'. Below these is a search criteria field set to 'AND Year >= 2011'. A 'submit query' button is at the bottom right. A footer note reads 'Structure/Reaction search powered by Accelrys'.

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

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

Reagent	n
CO ₂ / H ₂ O	9
[CuH(PPh ₃)] ₆	5
TFA	5
CO ₂ / O ₂ / H ₂ O	3
1. HCl, 2. NaHCO ₃	3
1. O ₂ / methylene blu...	1
1. HCl, 2. K ₂ CO ₃	1
(Tms) ₂ NNa	1

Clipboard
Reference
no reactions on clipboard

56 Hits

98
L. L.; MEDVEDEV, Y. Y.; MOROZ, P. N.;
V. A.; Russ J Org Chem [RJOCEQ] 2012, 48
04.
[open article] [save pdf] [show details]

95 TFA
RODINA, L. L.; MEDVEDEV, Y. Y.; MOROZ, P. N.;
NTKOI AFV. V. A.; Russ J Org Chem [RJOCEQ] 2012, 48

Page 1 of 3
Displaying Reactions 1 - 20 of 56

Query Results Details RetroSm Selected Hits

Cluster Analysis Resultset with filter [Reagent : (Tms)2NNa] Clipboard

Abstract 201125099

1件がヒット、反応スキームで詳細を表示

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

Substituent	Yield (%)
a R ¹ : -Me	69%
b R ¹ : -Bu	73%
-iPr	61%
-tBu	69%
-CH ₂ -CH=CH ₂	57%

Substituent	Yield (%)
a R ² : -Ph	64%
b R ² : -CH ₂ -Ph	57%

A): NaN(Tms)₂, THF, 0 → 25°C

III

Query

Results

Details

RetroRxn

Selected Hits

Source Information

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

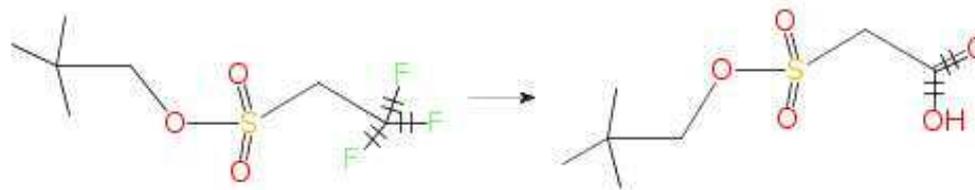
Reaction details
のページに含ま
れる情報

- 反応物
- 生成物
- 触媒
- 溶媒

さらに

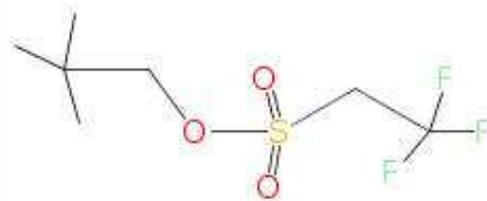
- キーワード
- 化合物の
構造と物性
- 収率
- 反応温度

Reaction RXCI90428854



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

Reactant



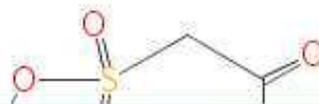
C₇H₁₃F₃O₃S (mw: 234.23652)

Keywords: halide, halide (F), sulfonate ester, sulfur

InChI: InChI=1S/C7H13F3O3S/c1-6(2,3)4-13-14(11,12)5-7(8,9)10/h4-5H2,1-3H3

InChIKey: WQWGDQFECKBTJN-UHFFFAOYSA-N

Product



CS: 100.0% Yield: 90.0%

Reaction 3 of 13



ChemInform[®]
RxnFinder

WILEY-VCH

WILEY