

## \* 目次 \*

## 反応検索のテクニック

反応検索の種類 .....	2
反応情報データベースに収録されている反応情報の例 .....	3
反応情報データベースでの反応検索の流れ .....	4
反応検索ツール .....	11
表示された物質に関する反応検索 .....	12
Product Only Reaction .....	13
反応検索に関するよくある質問 .....	15

## 反応検索の種類

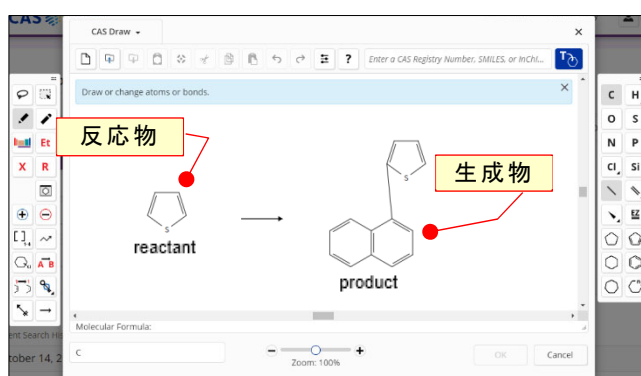


CAS SciFinder<sup>®</sup> の反応検索は、大きく分けて 2 種類ある。

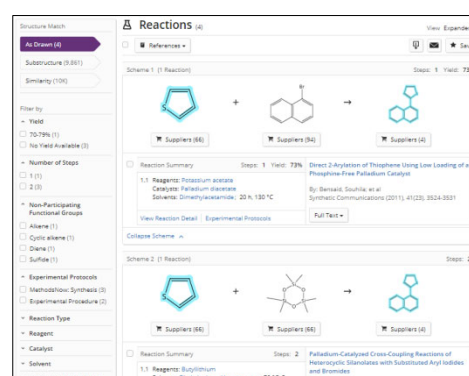
### 反応検索

- ・ 反応自体が新規、もしくは改良点等のある有機化学反応がスキーム表示される。
- ・ すべての反応関与物質（反応物、生成物、試薬、溶媒、触媒）や、収率情報などを確認できる。

### Reactions



### Reactions



※生成物のみ指定した検索では、追加で Production Only の結果も得られる (P13)。

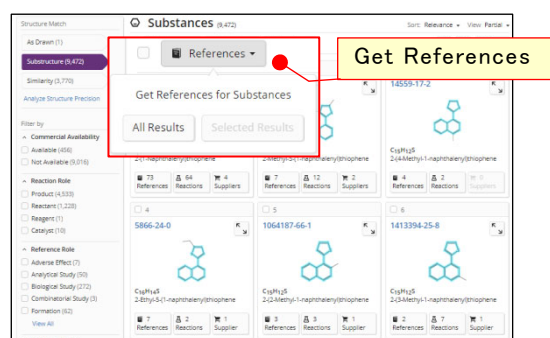
さらに幅広く反応情報を取得するには、物質情報データベースからの反応情報検索も行う。

※3 種の反応情報（反応情報データベース/Production Only/物質情報データベースからの反応情報）の違いは、p14 を参照。

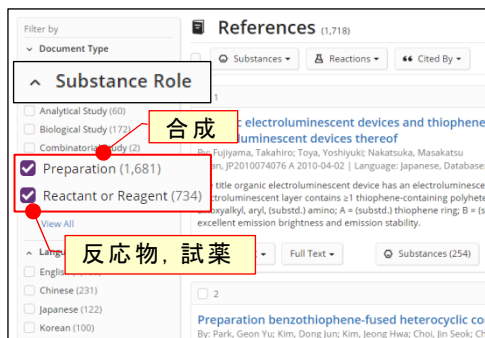
### 物質情報データベースからの反応情報検索

- ・ 反応検索では確認できなかった有機化学反応が、追加で得られることもある。
- ・ 無機化合物やポリマーなど有機化合物以外の反応情報も幅広く確認できる。
- ・ 生成物もしくは反応物のどちらか一方を指定した検索のみできる。

### Substances



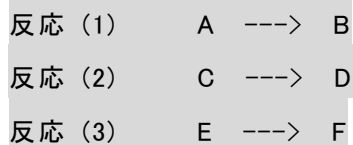
### References



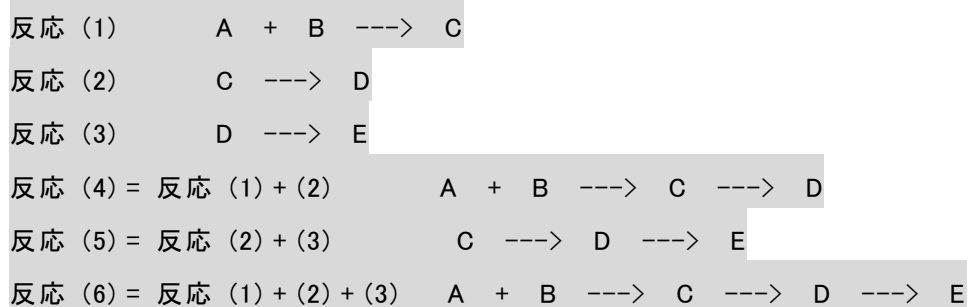
➡ CAS SciFinder<sup>®</sup> 検索ガイドを参照 (<https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn.pdf>)

## 反応情報データベースに収録されている反応情報の例

- 一段階反応（例：新規反応を開発した論文）
  - 反応（１）～ 反応（３）を反応情報として CAS SciFinder<sup>n</sup> で検索できる。



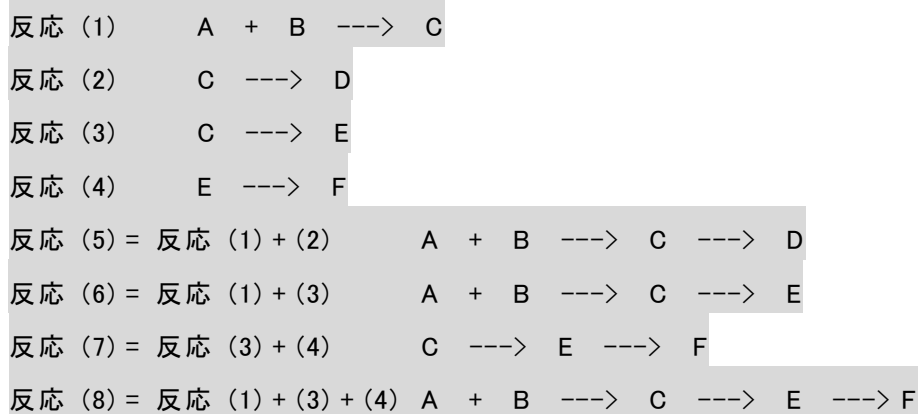
- 多段階反応 A + B ----> C ----> D ----> E（例：全合成）
  - 反応（１）～ 反応（６）を反応情報として CAS SciFinder<sup>n</sup> で検索できる。



- 分岐多段階反応 A + B ----> C -----> D（例：誘導体合成）
 

|  
 ----> E ----> F


  - 反応（１）～ 反応（８）を反応情報として CAS SciFinder<sup>n</sup> で検索できる。

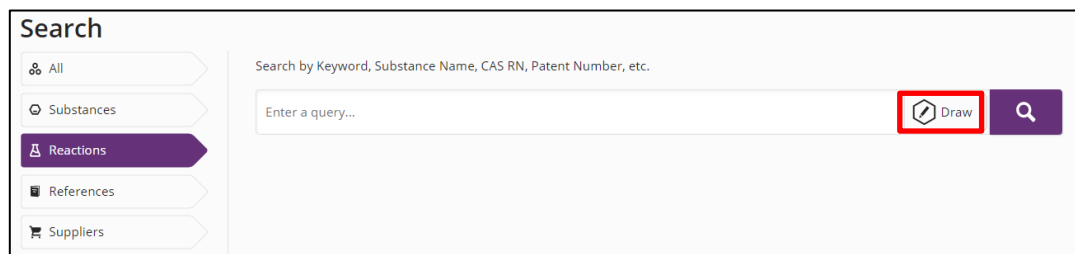


どの組み合わせでもヒットするように、分割したステップも収録されている

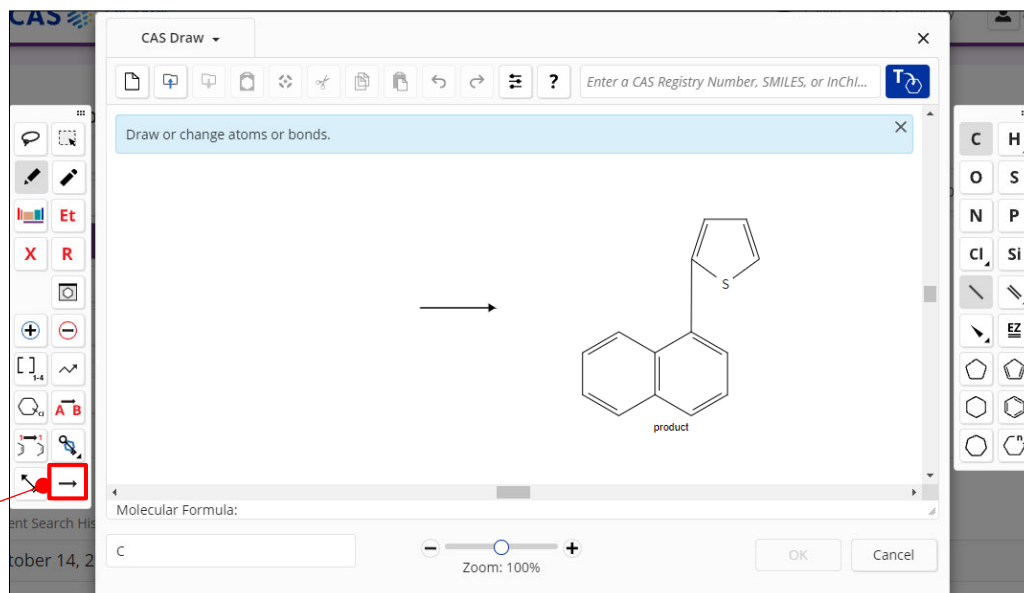
## 反応情報データベースでの反応検索の流れ

### ■ STEP1: 作図

Search で Reactions を選択,  をクリックし, 反応作図画面を起動する.



反応作図画面に構造を作図して, 反応物, 試薬, 生成物のロール (役割) を指定して (下図の例では生成物を作図) OK をクリックする.



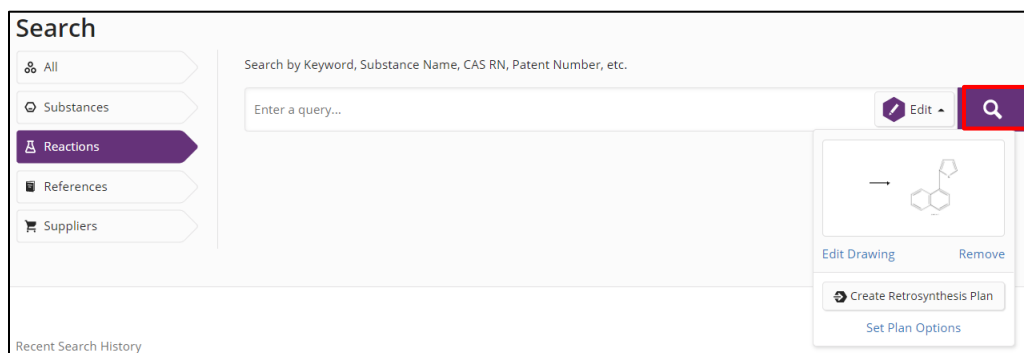
#### 反応作図ツール



: 矢印を左から右にドラッグすると, 位置関係からロールが自動的に割り当てられる

### ■ STEP2: 検索

反応質問式が読み込まれたら,  ボタンをクリックして検索する.



### ■ STEP3: 表示 (結果一覧画面)

- ・ 検索タイプは Structure Match から選択する。
- ・ 回答は関連度の高い順に反応スキームで表示される。
- ・ 反応物と生成物が同じ反応は、出典が異なる場合でも同一スキームにまとめて表示される。  
スキームの詳細情報を見るには、回答一覧で、Expand Scheme をクリックする。
- ・ 一段階反応の他にも、多段階反応も収録されている。
- ・ Experimental Procedure には、実験項情報として雑誌論文や特許明細書中にある実験手順を示す記載箇所が収録されている。

The screenshot displays the 'Reactions' database interface. The left sidebar contains filters for 'Structure Match' (As Drawn, Substructure), 'Filter Behavior' (Filter by, Exclude), and 'Filter Content Report'. The main area shows 'Scheme 1 (2 Reactions)' and 'Scheme 2 (2 Reactions)'. The right sidebar lists references with links to 'Full Text'. Annotations highlight various features: '一段階反応' (One-step reaction), '二段階反応' (Two-step reaction), '反応の概要' (Reaction summary), '反応詳細画面の表示(P6)' (Display of reaction detail screen (P6)), '実験項情報 (P6)' (Experimental procedure information (P6)), 'カタログ情報へのリンク' (Link to catalog information), '出典元の文献情報へのリンク' (Link to literature information from the source), '原文献へのリンク (PatentPak, Other Sources)' (Link to original literature (PatentPak, Other Sources)), and '多段階反応は Step. Stage ごとに記載' (Multi-step reactions are recorded by Step. Stage).

Step : 生成した物質を単離する

Stage : 生成した物質を単離せずに、試薬・触媒を加えて先の反応に進む

### ■ STEP3: 表示 (詳細情報)

**Reaction Detail** (Scheme 2, Reaction 1 of 2)

Steps: 2

**Step 1**

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	tert-Butyllithium	-	Diethyl ether	20 min, rt → -78 °C; 5 min, -78 °C; 2 h, -78 °C
2	Sulfur dioxide	-	-	-78 °C → 23 °C

CAS Reaction Number: 31-083-CAS-12492251

**Notes**  
128.84 mmol scale

**Reference**  
Efficient desulfinylative cross-coupling of thiophene and furan sulfinates with aryl bromides in aqueous media  
By: Sevigny, Stephane; et al  
New Journal of Chemistry (2013), 37(3), 589-592

**Company/Organization**  
Department of Chemistry and Biochemistry  
Concordia University  
Montreal, Quebec  
Canada

### ■ STEP3: 表示 (実験項情報)

- ・ 原報を見なくても、詳細な実験手順を確認できる。
- ・ 実験項情報には、Synthetic MethodsとExperimental Procedure の2種類がある。

#### 実験項情報の収録範囲

Synthetic Methods	
雑誌論文等	2000 年～
ACS	: Journal of Medicinal Chemistry, Journal of the American Chemical Society
Springer	: Catalysis Letters
Taylor & Francis	: Journal of Coordination Chemistry
Elsevier	: Tetrahedron
RSC	: Chemical Science
Wiley	: Angewandte Chemie
など約 180 誌由来の情報	
WO 特許 (英語)	2010 年～
Experimental Procedure	
雑誌論文等	主に 1998 年～
ACS	: 全誌
Taylor & Francis	: Synthetic Communications, Journal of Coordination Chemistry など
Springer	: 化学系 165 誌 (1985 年～)
上海有機化学研究所	: Youji Huaxue, Huaxue Xuebao
Thieme	: SYNLETT (1989 ～ 2013 年), SYNTHESIS (1980 ～ 2013 年)
SORD	: Selected Organic Reactions Database (学位論文由来, 1961～2011 年)
下記の言語の特許	2000 年～
英語	: アメリカ, ヨーロッパ, WIPO, カナダ, イギリス
日本語	: 日本, WIPO
ドイツ語	: ドイツ, ヨーロッパ, WIPO

Experimental Protocols	
Synthetic Methods	Experimental Procedure
Products	2-Methyl-5-(1-naphthalenyl)thiophene, Yield: 82%
Reactants	1-Iodonaphthalene 2-Methylthiophene
Reagents	Cesium carbonate Ammonium chloride
Catalysts	1,10-Phenanthroline Palladium diacetate
Solvents	Dimethylformamide Water
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Charge a flame-dried Schlenk tube with Pd (OAc)<sub>2</sub> ( 4.5 mg, 0.02 mmol ), 1, 10-phenanthroline ( 7.2 mg, 0.04 mmol ) and Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> ( 326 mg, 1.0 mmol ).</li> <li>2. Add dimethylformamide ( 1.0 mL, 1.0 M to iodobenzene ), and iodobenzene ( <b>1a</b> ) ( 112 μL, 1.0 mmol ) under nitrogen atmosphere to the tube.</li> <li>3. Stir the resulting solution at 100 °C for 30 minutes and add 2-methylthiophene ( 146 μL, 1.50 mmol ).</li> <li>4. Stir the mixture at 100 °C for 4 h and cool.</li> <li>5. Dilute the reaction with diethyl ether, quench by aqueous NH<sub>4</sub>Cl and extract with diethyl ether.</li> <li>6. Dry over Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> and evaporate the organic solvent.</li> <li>7. Purify the resulting crude mixture by flash column chromatography ( silica gel, eluent: hexane only ) to obtain the product.</li> </ol>
Transformation	Photochemical Arylation of Aromatic Compounds
Scale	milligram
Characterization Data	
$\wedge$ 2-Methyl-5-(1-naphthalenyl)thiophene	
Proton NMR Spectrum	( CDCl <sub>3</sub> ) : $\delta$ 8.33-8.30 ( m, 2H ) , 7.93-7.85 ( m, 4H ) , 7.07 ( d, $J$ = 3.2 1H ) , 7.87 ( d, $J$ = 3.2 Hz, 1H ) , 2.61 ( s, 3H )
Carbon-13 NMR	( CDCl <sub>3</sub> ) : $\delta$ 140.2, 133.8, 132.8, 131.8, 128.3, 128.0, 127.9, 127.2, 126.3, 125.9, 125.8, 125.5, 125.2, 12.3
Elemental Analysis	calcd. for C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> S: C 80.31, H 5.39; found: C 80.20, H 5.64
CAS Method Number 3-218-CAS-2049250	

Experimental Protocols	
Synthetic Methods	Experimental Procedure
<b>SYNLETT</b>	<p>General/Typical Procedure: 2. Representative Procedure for Direct Arylation of 2-Methylthiophene (<b>2a</b>) with Iodoarene (<b>1a</b>)Catalyzed by Pd(OAc)<sub>2</sub>/1,10-phenanthroline (entry 1, Table 2): A flame-dried Schlenk tube was charged with Pd(OAc)<sub>2</sub> (4.5 mg, 0.02 mmol), 1,10-phenanthroline (7.2 mg, 0.04 mmol), and Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (326 mg, 1.0 mmol). To the tube was added dimethylformamide (1.0 mL, 1.0 M to iodobenzene), and iodobenzene (<b>1a</b>) (112 μL, 1.0 mmol) under nitrogen atmosphere. The resulting solution was stirred at 100 °C for 30 minutes, and 2-methylthiophene (<b>2a</b>) (146 μL, 1.50 mmol) was added. The mixture was stirred at 100 °C for 4 h. After cooling, the reaction was diluted with diethyl ether, quenched by aqueous NH<sub>4</sub>Cl, extracted with diethyl ether, and dried over Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. The organic solvent was evaporated and resulting crude mixture was purified by flash column chromatography (silica gel, eluent: hexane only) to give <b>3aa</b>. 2-Methyl-5-(1-naphthyl)thiophene (<b>3ca</b>). Yield (82%) Registry Number: [58256-11-4] Representative Reference: <i>Khim. Farmats. Zh.</i> <b>1975</b>, 9, 20. <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): <math>\delta</math> 8.33-8.30 (m, 2H), 7.93-7.85 (m, 4H), 7.07 (d, <math>J</math> = 3.2 1H), 7.87 (d, <math>J</math> = 3.2 Hz, 1H), 2.61 (s, 3H) <sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>): <math>\delta</math> 140.2, 133.8, 132.8, 131.8, 128.3, 128.0, 127.9, 127.2, 126.3, 125.9, 125.8, 125.5, 125.2, 12.3 Elemental Analysis: calcd. for C<sub>15</sub>H<sub>12</sub>S: C 80.31, H 5.39; found: C 80.20, H 5.64</p>

- ・ フィルターを利用すると、収率や反応ステップ数などで回答を限定できる。
- ・ 指定した反応式で使用されている試薬、触媒、溶媒を解析できる。

役割 (p15 参照)

反応ステップ数

反応ステップ数

反応に関与しない

官能基

## 実験項の有無

## 反応タイプ

## 立体化学

試藥

触媒

溶媒

カタログ情報の有無

反応ノート

反応式

【文献情報】

資料種類

言語

発行年

雜誌名

Filter Behavior

Filter by

Exclude

Substance Role

Yield

Number of Steps

Non-Participating Functional Groups

Experimental Protocols

Reaction Type

Stereochemistry

Reagent

Catalyst

Solvent

Commercial Availability

Reaction Notes

Search Within Results

Potassium carbonate (11)

Tripotassium phosphate (9)

Ammonium chloride (4)

Hydrochloric acid (1)

Butyllithium (1)

View All

Draw

Search

Source Reference

Document Type

Language

Publication Year

Publication Name

Filter Content Report

Download filter data from this result set.

Reagent

Top Count

Alphanumeric

Search

0 Selected

☐ Potassium carbonate (3,101)
 ☐ Boron tribromide (220)
 ☐ Potassium tert-butoxide (138)

☐ Butyllithium (2,679)
 ☐ Tetrabutylammonium fluoride (220)
 ☐ Diisopropanolamine (128)

☐ N-Bromosuccinimide (2,484)
 ☐ Trimethyltin chloride (217)
 ☐ Sodium sulfite (115)

☐ Sodium carbonate (2,053)
 ☐ Sulfuric acid (211)
 ☐ Hydrazine (110)

☐ Hydrochloric acid (2,002)
 ☐ Oxalyl chloride (209)
 ☐ Manganese oxide (MnO<sub>2</sub>) (109)

☐ Sodium tert-butoxide (1,254)
 ☐ Amberlyst 15 (207)
 ☐ Hexanoic acid, mercury(2+) salt (2:1) (108)

☐ Potassium hydroxide (1,228)
 ☐ Dicyclohexylcarbodiimide (205)
 ☐ Hydrogen (107)

☐ Water (1,154)
 ☐ Oxygen (202)
 ☐ Silver oxide (Ag<sub>2</sub>O) (104)

☐ Triethylamine (1,042)
 ☐ Diisopropylethylamine (199)
 ☐ Diisopropylamine (99)

☐ Sodium hydroxide (936)
 ☐ Methanesulfonic acid (199)
 ☐ Piperidine (97)

☐ Potassium acetate (910)
 ☐ Phosphoric acid (196)
 ☐ 1,2-Dibromo-1,1,2,2-tetrachloroethane (96)

☐ Bromine (755)
 ☐ Sodium bisulfite (190)
 ☐ Trifluoroacetic anhydride (94)

☐ Ammonium chloride (748)
 ☐ Boron trifluoride etherate (186)
 ☐ Zinc (94)

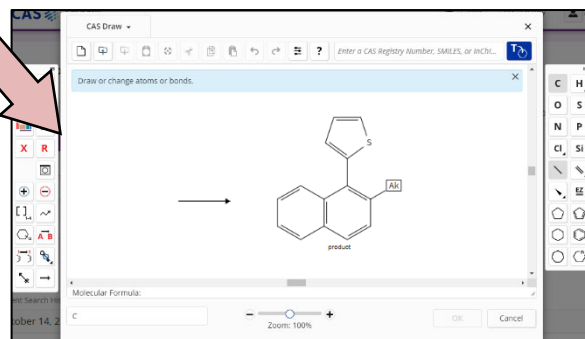
☐ Tripotassium phosphate (723)
 ☐ (±)-Propylene oxide (185)

☐ Iodine (710)

Apply

Cancel

さらに構造を利用した絞り込みを行う際に使用。  
(Ex. ナフタレンのオルト位がアルキル鎖であるものに限定)





## ■ 反応検索結果のグループ化

反応検索結果を表示する際、目的に応じてグループ化を用いると、効率的に反応情報を見ることができる。

Reactions (57) Group: By Scheme View: Expanded

References

Scheme 1 (2 Reactions)

Suppliers (116) Suppliers (89) Suppliers (5)

Group: By Scheme

By Scheme

By Document

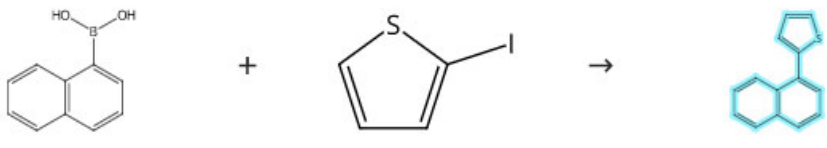
← 同じ反応物と生成物を持つ反応を表示

← 1 文献から 1 反応を表示

Group by :	反応結果の表示イメージ
<p>同じ反応物と生成物を持つ反応を表示</p> <p>Group: By Scheme</p> <p>(デフォルト)</p>	<p>＜文献 A に記載の反応＞</p> $\begin{matrix} a & \Rightarrow & b \\ a' & \Rightarrow & b' \end{matrix}$ <p>＜特許 X に記載の反応＞</p> $\begin{matrix} a & \Rightarrow & b \\ a' & \Rightarrow & b' \end{matrix}$ <p>＜反応検索結果の表示＞</p> $\begin{matrix} a & \Rightarrow & b \\ \text{文献 A の反応条件} \\ \text{特許 X の反応条件} \end{matrix}$ $\begin{matrix} a' & \Rightarrow & b' \\ \text{文献 A の反応条件} \\ \text{特許 X の反応条件} \end{matrix}$ <p>出典が異なる場合でも同スキームにまとめて表示</p>
<p>1 文献から 1 反応を表示</p> <p>Group: By Document</p>	<p>＜文献 A に記載の反応＞</p> $\begin{matrix} a & \Rightarrow & b \\ a' & \Rightarrow & b' \\ a'' & \Rightarrow & b'' \end{matrix}$ <p>＜特許 X に記載の反応＞</p> $\begin{matrix} x & \Rightarrow & y \\ x' & \Rightarrow & y' \\ x'' & \Rightarrow & y'' \end{matrix}$ <p>＜反応検索結果の表示＞</p> $a \Rightarrow b$ $x \Rightarrow y$ <p>各文献中の代表的な反応のみ表示でき、回答を確認しやすい</p>

- ・ 同じ反応物と生成物を持つ反応を表示 (Scheme)

Scheme 1 (2 Reactions) Steps: 1 Yield: 92-99%



🛒 Suppliers (115)

🛒 Suppliers (89)

🛒 Suppliers (5)

☐ Reaction Summary Steps: 1 Yield: 99%

1.1 Reagents: Potassium carbonate  
Catalysts: Palladium(1+), [1-(diphenylphosphino-κP)-N-[(diphenylphosphino-κP)methyl]methana... (ArgoGel bound)  
Solvents: Water

[View Reaction Detail](#) [Experimental Protocols](#)

**An Amphiphilic Resin-Supported Palladium Catalyst for High-Throughput Cross-Coupling in Water**

By: Uozumi, Yasuhiro; et al  
Organic Letters (2002), 4(17), 2997-3000

[Full Text ▾](#)

☐ Reaction Summary Steps: 1 Yield: 92%

1.1 Reagents: Potassium carbonate, Oxygen  
Catalysts: Palladium  
Solvents: Water; 3 h, 25 °C

[View Reaction Detail](#) [Experimental Protocols](#)

**A novel polymer containing phosphorus-nitrogen ligands for stabilization of palladium nanoparticles: an efficient and recyclable catalyst for Suzuki and Sonogashira reactions in neat water**

By: Gholinejad, M.; et al  
Dalton Transactions (2015), 44(32), 14293-14303

[Full Text ▾](#)

[Collapse Scheme ^](#)

- ・ 1 文献から 1 反応を表示 (Document)

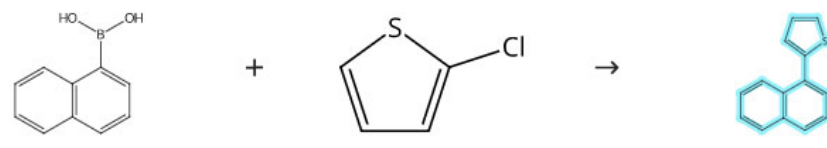
☐ 1

**Room-temperature Suzuki-Miyaura coupling of heteroaryl chlorides and tosylates**

By: Yang, Junfeng; Liu, Sijia; Zheng, Jian-Feng; Zhou, Jianrong  
European Journal of Organic Chemistry (2012), 2012(31), 6248-6259 | [View Full Text](#) | License: CC BY-NC-ND 4.0 | Base: CAplus

Full Text ▾

View All Related Reactions



🛒 Suppliers (115)

🛒 Suppliers (72)

🛒 Suppliers (5)

Reaction Summary Steps: 1 Yield: 99%

1.1 Catalysts: Palladium diacetate, X-Phos  
Solvents: 1-Butanol; 15 min, 25 °C

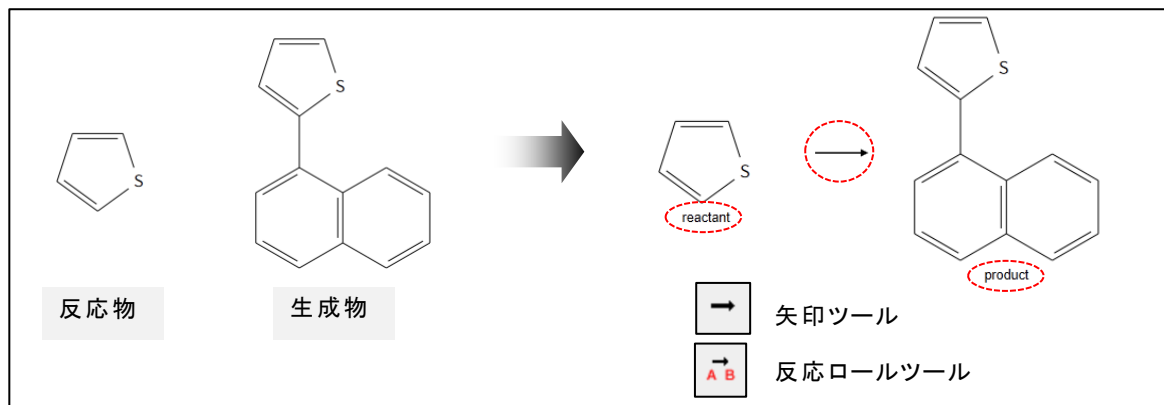
1.2 Reagents: Cesium hydroxide  
Solvents: Water; 1 h, 25 °C

[View Reaction Detail](#) [Experimental Protocols](#)

## 反応検索ツール

より精密に反応検索をしたいときは、反応作図ツールを利用して作図する。

### ケース 1 : ロール（役割）の指定



- ☛ ポイント : 矢印ツールを作図すると、自動的にロールが付与される。  
ロールを変更したい場合は、反応ロールツールで指定する。

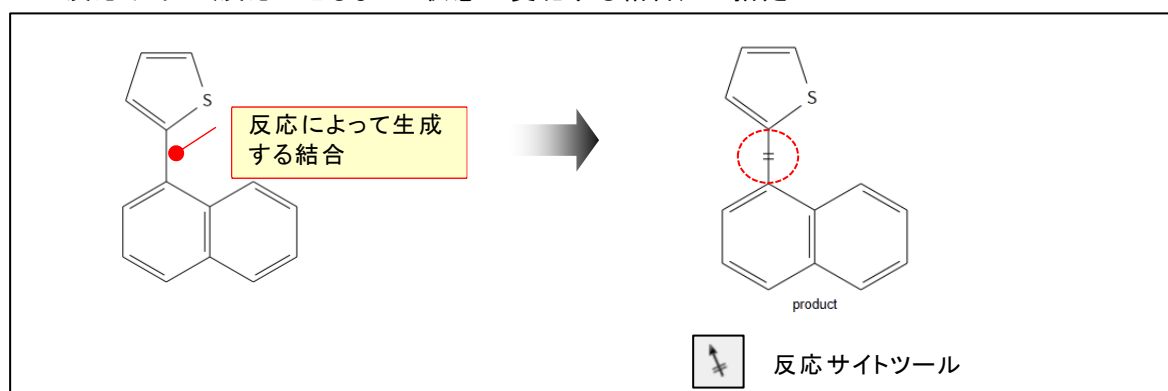
**Reaction Roles**

Select a role for the structure fragment:

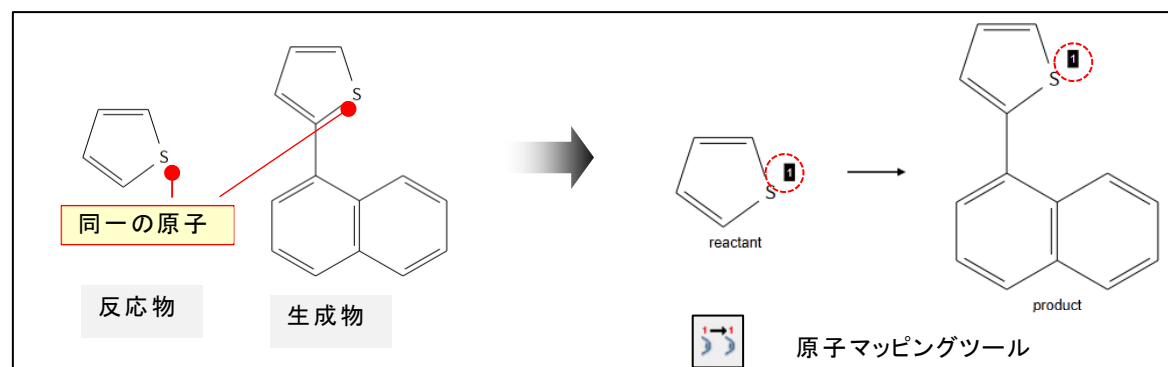
☒ product  
☐ reactant  
☐ reagent  
☐ reactant/reagent  
☐ any role

OK Cancel

### ケース 2 : 反応サイト（反応にともなって状態が変化する結合）の指定



### ケース 3 : 原子のマッピング（生成物と反応物の原子の対応関係）の指定



※ 詳細は CAS SciFinder<sup>®</sup> の構造作図 ([https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn\\_str.pdf](https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn_str.pdf)) 参照

## 表示された物質に関する反応検索

- 反応検索結果から、簡単な操作で追加の反応情報を調べることができる。  
(例: 原料の合成方法など)

反応情報を追加で検索物質をクリック

Suppliers (117)      Suppliers (1)      Suppliers (5)

【Reactions】  
目的の物質が関与する反応を検索する

【Synthesize】  
目的の物質の合成する反応を検索する

【Create Retrosynthesis Plan】  
化学物質の合成ルートを自動的に調べて提案する

CAS RN 3437-95-4  
CAS Name 2-Iodothiophene

Substance Detail  
Reactions (3,082)  
Synthesize (107)  
Create Retrosynthesis Plan  
References (2,709)  
Suppliers (92)

Edit Structure   -   Reset   +   ↕

原料の合成方法が得られた

Filter by

- Yield
  - 90-100% (6)
  - 80-89% (3)
  - 70-79% (11)
  - 50-69% (15)
  - 30-49% (8)
  - View All
- Number of Steps
  - 1 (75)
  - 2 (20)
- Non-Participating Functional Groups
  - Alkene (63)
  - Cyclic alkene (63)
  - Diene (63)
  - Sulfide (63)
  - Halide (8)
  - View All

Reactions (107)

View Expanded

References

Scheme 1 (1 Reaction)

2-bromothiophene → 2-iodothiophene

Suppliers (86)      Suppliers (92)

Reaction Summary      Steps: 1    Yield: 100%

1.1 Reagents: Potassium iodide  
Catalysts: Nickel bromide  
Solvents: *N*-Methyl-2-pyrrolidone

View Reaction Detail

Electrocatalytic nickel complexes in the synthesis of aromatic or vinylic iodides from the corresponding bromo derivatives

By: Meyer, Gilbert; et al  
Tetrahedron Letters (1986), 27(30), 3497-500

Full Text

Collapse Scheme

※ 合成ルートを自動で提案する Retrosynthesis Plan については、以下の資料を参照。

[https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn\\_retrosynthesis.pdf](https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn_retrosynthesis.pdf)

## Product Only Reaction

反応検索結果に生成物のみの情報が得られる場合がある。この情報は、反応情報データベースの収録対象ではないが、生成物に指定した物質の合成(実験室規模で製造を意図したもの)方法として、Product Only Reaction として表示される。

生成物のみ指定した検索を行うと、Production Only Reaction の結果も回答に含まれる。  
フィルターの Reaction Type から、回答を Product Only Reaction に限定することができる。

The screenshot shows a search interface with a left sidebar for filters and a main results area. The 'Reaction Type' filter is expanded, showing 'Full (48)' and 'Product Only (7)'. The 'Product Only (7)' option is selected. The main results area shows a chemical structure of a triene and a list of reactions. One reaction is highlighted with a red box around the 'DOI' link. A red arrow points from a text box to the 'DOI' link.

Structure Match  
As Drawn (55)  
Substructure (14K)

Filter by  
Reaction Type  
Full (48)  
Product Only (7)  
Commercial Availability  
Search Within Results  
Source Reference  
Document Type  
Language  
Publication Year  
Publication Name

Reactions (7)  
View: Expanded  
References  
Scheme 1 (7 Reactions)  
Product Only Reaction  
See full text  
Suppliers (5)

Reaction Summary  
No Data Available  
View Reaction Detail  
Reaction Summary  
No Data Available

Photocyclization reactions of aryl polyenes. VII. Photocyclization of 1-phenyl-4-thienyl- and 1,4-dithienyl-1,3-butadienes  
By: Leznoff, Clifford C.; et al  
Canadian Journal of Chemistry (1974), 52(1), 132-5  
Full Text  
KF\_set\_Journal\_Primary  
KF\_set\_Journal\_Secondary  
DOI  
View all Sources  
91-09-03

反応検索結果から文献由来の情報が簡単に得られる

反応の概要は記載されないため、原報を取得して確認する。

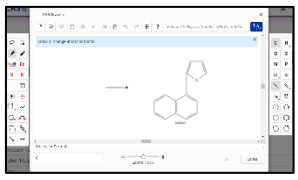
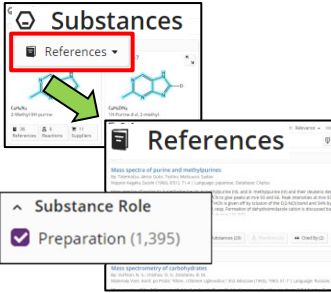
The screenshot shows the article page for 'Photocyclization Reactions of Aryl Polyenes. VII. The Photocyclization of 1-Phenyl-4-thienyl- and 1,4-Dithienyl-1,3-butadienes' by Clifford C. Leznoff, Wolfgang Lilie, and Carl Manning. The article is available as a PDF (251 K) or PDF-Plus (237 K). A red arrow points from the 'DOI' link in the previous screenshot to the article page.

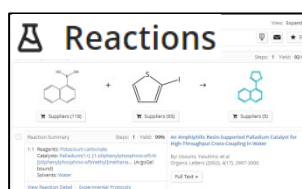
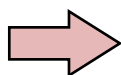
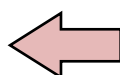
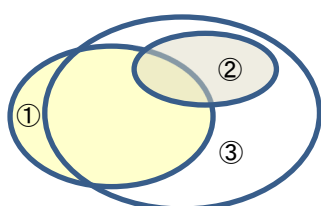
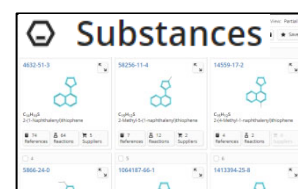
Canadian Journal of Chemistry  
Home About Us Journals Books Compilations Open Access Authors Librarians Societies  
Home > Journals > Canadian Journal of Chemistry > List of Issues > Volume 52, Number 1, January 1974 > Photocyclization Reactions of Aryl Polyenes. VII.  
Article  
Photocyclization Reactions of Aryl Polyenes. VII. The Photocyclization of 1-Phenyl-4-thienyl- and 1,4-Dithienyl-1,3-butadienes  
Clifford C. Leznoff, Wolfgang Lilie, and Carl Manning  
Canadian Journal of Chemistry, 1974, 52(1): 132-135, <https://doi.org/10.1139/v74-020>  
PDF (251 K)  
PDF-Plus (237 K)  
Citing articles

- \* 購読のあるジャーナル、もしくは無償のジャーナルの場合は、その場で PDF を取得できる。  
それ以外のものは、購入画面が表示される。(企業アカウントのみ)
- \* 特許の場合は、PatentPak もしくは Full Text から Espacenet にアクセスすると特許明細書を取得できる。

## (参考) 3つの反応文献の検索の比較

(2021 年 10 月)

項目	① 反応情報データベースから反応検索	② Product Only Reactions	③ 物質情報データベースからの反応情報検索
対象年代	1840 年～	1967 年～	1907 年～
検索対象の情報	反応情報（反応スキーム） 反応自体が新規、もしくは改良点等のある有機化学反応	文献情報 製造を意図して 実験室規模で 合成された物質	文献情報 製造の意図があり、合成された物質や、回収・精製・分離・その他の方法で生成された物質、また個々の反応中の反応物
収録数	<ul style="list-style-type: none"> <li>190 万件以上（論文・特許数）</li> <li>1 億 1,800 万件以上（一段階・多段階反応数）</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>437 万（論文・特許数）</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>806 万件（論文・特許数）（合成された物質）</li> <li>596 万件（論文・特許数）（反応中の反応物）</li> </ul>
検索対象の物質（生成物，反応物）	有機化学物質 （有機金属物質を含む）	有機化学物質 （有機金属物質を含む）	化学物質全般 有機化学物質，無機化学物質，ポリマーなど
検索方法	反応質問式を用いた反応検索 ⇒ Reaction Type で限定 		化学物質検索 ⇒ 文献検索 
同一反応中の生成物と反応物を指定	○	×	×
特長	<ul style="list-style-type: none"> <li>反応の詳細な条件を指定して検索できる</li> <li>反応に関与するすべての物質情報（反応物，生成物，試薬，触媒，溶媒）を収録する</li> <li>収率情報や反応条件も収録される</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>反応検索結果から文献由来の情報が簡単に得られる</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>反応情報データベースからの反応検索や，Product only Reactions では確認できなかった有機化学反応が，追加で得られることもある</li> <li>無機化合物，ポリマーを含め，幅広く合成文献を検索できる</li> </ul>

Get  
ReferencesGet  
ReferencesSubstance Role  
: Preparation

文献情報で比較した時のイメージ



## 反応検索に関するよくある質問

### ■ Q1. 触媒を指定した反応検索はできる？

A1-1. 触媒を物質名で指定する場合は、Reactions から検索し、結果画面のフィルターで Substance Role の Catalyst を選択すると、触媒を指定することができる。

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.

4-(Dimethylamino)pyridine

Filter by

- Substance Role
  - Product (144)
  - Reactant (2,766)
  - Reagent (154K)
  - Catalyst (420K)**
  - Solvent (706)
- Groups
  - Experimental Protocols
  - Reaction Type
  - Stereochemistry
  - Reagent
  - Catalyst

Reactions (420,655)

Scheme 1 (1 Reaction)

Steps: 1 Yield: 100%

Reaction Summary

1.1 Reagents: 1-Ethyl-3-(3'-dimethylaminopropyl)carbodiimide hydrochloride  
Catalysts: 4-(Dimethylamino)pyridine  
Solvents: Dichloromethane; 18 h, rt

Preparation of N-(3,4-disubstituted phenyl)salicylamide derivatives as inhibitors of STAT6 and NF-κB activation

By: Tokuyama, Ryukou; et al  
World Intellectual Property Organization, WO2007148711 A1  
2007-12-27

A1-2. 触媒を化学構造で指定する場合は、Substances から検索し、その結果に対して 反応情報へのリンク (Get Reactions) をクリックし、反応検索結果のフィルターで Substance Role の Catalyst を選択すると、触媒を指定することができる。

Substances (646)

Sort: Relevance View: Partial

1 Selected

References

**Reactions**

Suppliers

Get Reactions for Substances

All Results Selected Results

1122-58-3

C<sub>7</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>  
4-(Dimethylamino)pyridine

14K References 578K Reactions

Filter by

- Substance Role
  - Product (144)
  - Reactant (2,766)
  - Reagent (154K)
  - Catalyst (420K)**
  - Solvent (706)
- Groups
  - Experimental Protocols
  - Reaction Type
  - Stereochemistry
  - Reagent
  - Catalyst

Reactions (420,655)

Scheme 1 (1 Reaction)

Steps: 1 Yield: 100%

Reaction Summary

1.1 Reagents: 1-Ethyl-3-(3'-dimethylaminopropyl)carbodiimide hydrochloride  
Catalysts: 4-(Dimethylamino)pyridine  
Solvents: Dichloromethane; 18 h, rt

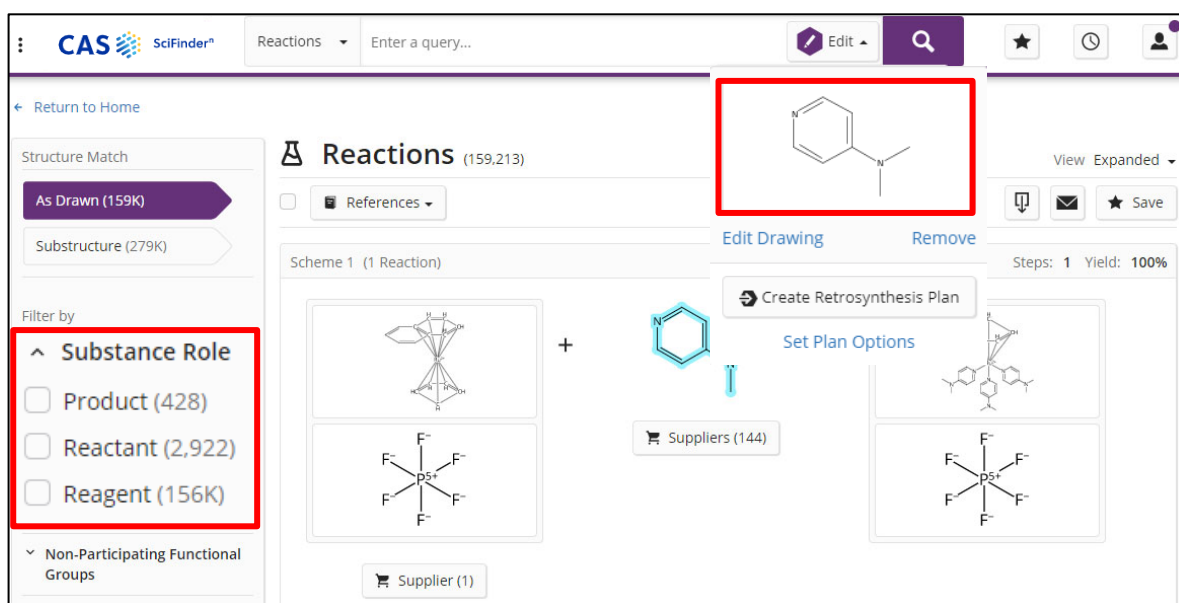
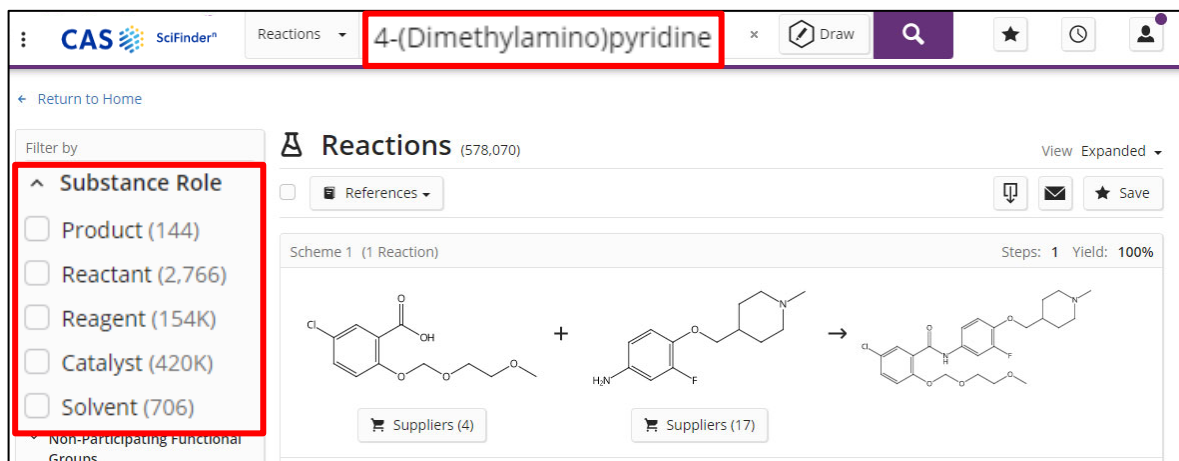
Preparation of N-(3,4-disubstituted phenyl)salicylamide derivatives as inhibitors of STAT6 and NF-κB activation

By: Tokuyama, Ryukou; et al  
World Intellectual Property Organization, WO2007148711 A1  
2007-12-27

この結果から、あさらに生成物などを指定して絞り込み検索を行う場合は P8 参照

- Q2. Reactions で物質名称から検索した場合と化学構造から検索した場合で、得られる回答は異なる？

A2. 化学構造から検索した場合、指定した化学物質の Substance Role が Product, Reactant, Reagent である回答に限定され、Catalyst または Solvent で報告された回答が含まれない。



\* 化学構造式を用いて、完全一致検索 (As Drawn) を行うと、作図した構造どおりの物質だけでなく、互変異性体なども検索対象に含まれる。化学構造検索の検索タイプ、構造検索のしくみについては以下の資料を参照。  
([https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn\\_strtype.pdf](https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn_strtype.pdf))



■ Q3. Reactions でロールを指定した場合と指定しない場合で、得られる回答は異なる？

A3. ロールを指定しない場合、得られる結果は一段階反応に限定される。

CAS SciFinder<sup>®</sup> Reactions Enter a query...

Structure Match  
As Drawn (55)  
Substructure (14K)

Number of Steps  
☐ 1 (3,913)  
☐ 2 (3,189)  
☐ 3 (2,310)  
☐ 4 (1,636)  
☐ 5 (991)  
[View All](#)

Reactions (14,415)  
References

Scheme 1 (2 Reactions)

Product structure highlighted by a red box.

Reaction Summary: Steps: 1 Yield: 99%  
 1.1 Reagents: Potassium carbonate  
 Catalysts: Palladium(1+), [1-(diphenylphosphino-κP)-N-  
 [1-(diphenylphosphino-κP)dimethylmethane-κC]ArgoGel  
 By: Uozumi, Yasuhiro; et al  
 Organic Letters (2002) 4(17) 2997-3000

CAS SciFinder<sup>®</sup> Reactions Enter a query...

Structure Match  
As Drawn (52)  
Substructure (4,018)

Filter by  
 Substance Role  
☐ Product (43)  
☐ Reactant (9)

Number of Steps  
☐ 1 (4,018)

Reactions (52)  
References

Scheme 1 (2 Reactions)

Product structure highlighted by a red box.

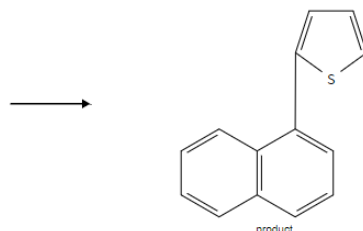
Reaction Summary: Steps: 1 Yield: 99%  
 1.1 Reagents: Potassium carbonate  
 Catalysts: Palladium(1+), [1-(diphenylphosphino-κP)-N-  
 [1-(diphenylphosphino-κP)dimethylmethane-κC]ArgoGel  
 By: Uozumi, Yasuhiro; et al  
 Organic Letters (2002) 4(17) 2997-3000

\* ALL 検索で物質名, CAS RN<sup>®</sup>, 化学構造から検索を行う場合, ロールを指定できないため, 得られる反応情報の回答は一段階の反応に限定される。

■ Q4. 反応検索の結果から、特定の条件を除くことができる？

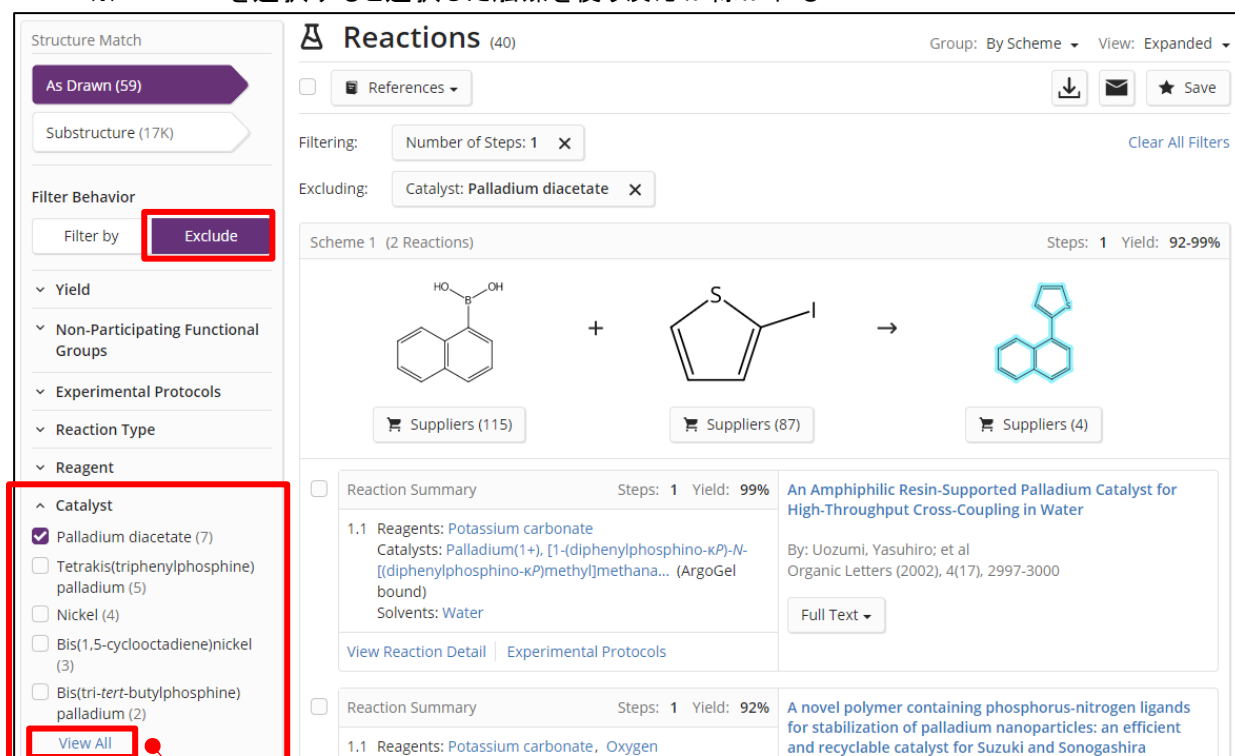
A4. Exclude フィルターを使えば特定の条件を除くことができる。

(例) 下記物質の合成法のうち、Palladium diacetate, Copper bromide 以外の触媒を用いているものに限定する。



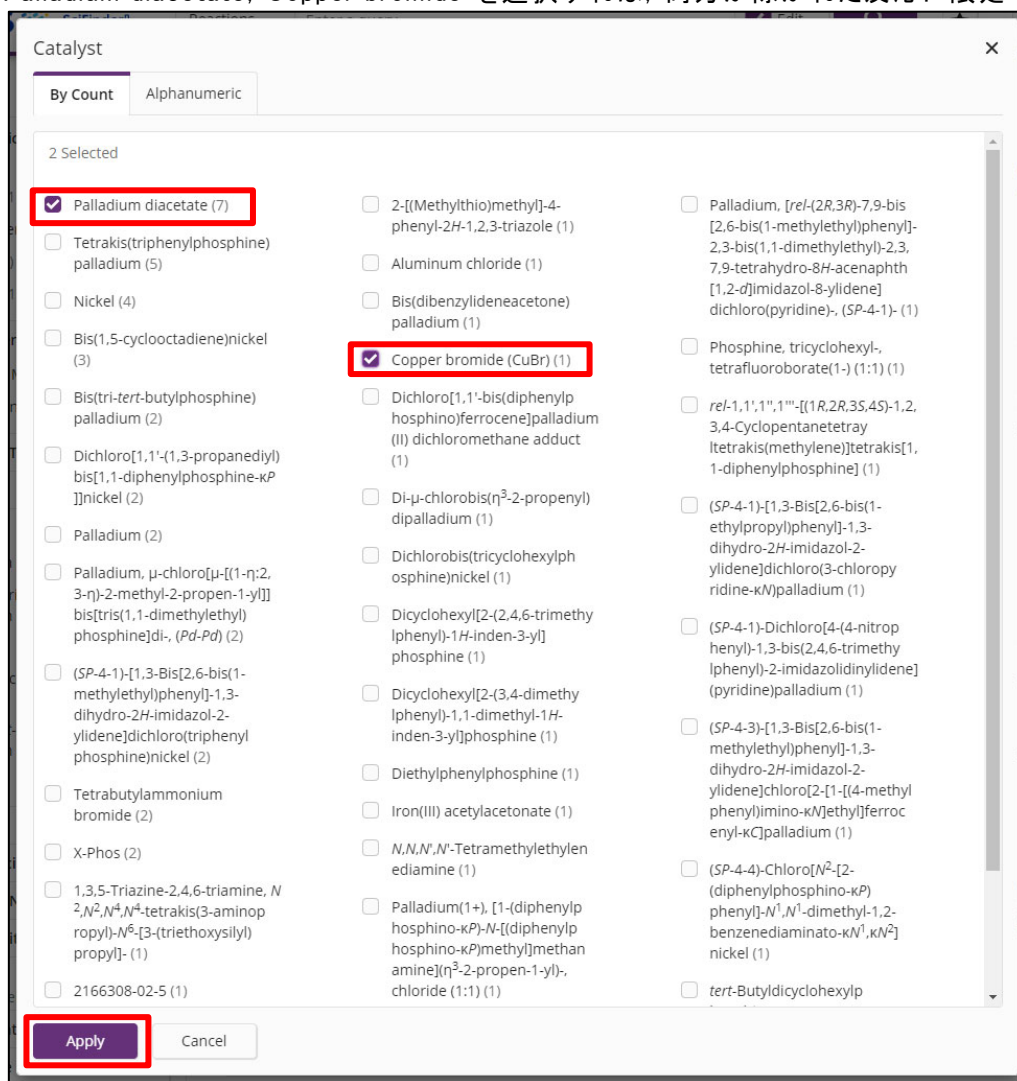
- 1) 上記反応式を検索する。結果に対し、フィルターで **Exclude** を選択し、Catalyst のリストから Palladium diacetate を選択する。

※Exclude を選択すると選択した触媒を使う反応が除かれる。



すべての触媒リストを  
表示

2) リストに触媒がない場合は Catalyst フィルターの下にある View All を選択する。  
Palladium diacetate, Copper bromide を選択すれば、両方が除かれた反応に限定できる。



Combine 機能を使えば、除外だけでなく、より柔軟な集合間演算 (AND・OR・NOT) が行える。Combine 機能の詳細は以下の資料を参照

[https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn\\_combine.pdf](https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn_combine.pdf)

■ Q5. ある文献中に記載されている反応を検索する方法は？

A5. 文献を検索した後に Get Reactions で反応を検索する。

(例) Fernandez, Estefania. et al. **Journal of the American Chemical Society**, 2019, 141 (5), 1928–1940 に記載されている反応を検索する。

1) 書誌情報による検索を実行する。

**Search**

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.

Enter a query...

Use **Advanced Search** for Author, Journal, or Organization

**Advanced Reference Search**

Journal

Journal Name  
Journal of the American Chemical Society

Volume  
141

Issue  
5

Starting Page  
1928

Title Word(s)

Ex: Antibiotic

Add Another Journal

2) Get Reactions で文献中の反応情報を検索する。

**References** (2)

Sort: Relevance View: Partial Abstract

Substances Reactions Cited By

1

Base-Controlled Heck, Suzuki, and Sonogashira Reactions Catalyzed by Ligand-Free Platinum or Palladium Single Atom and Sub-Nanometer Clusters

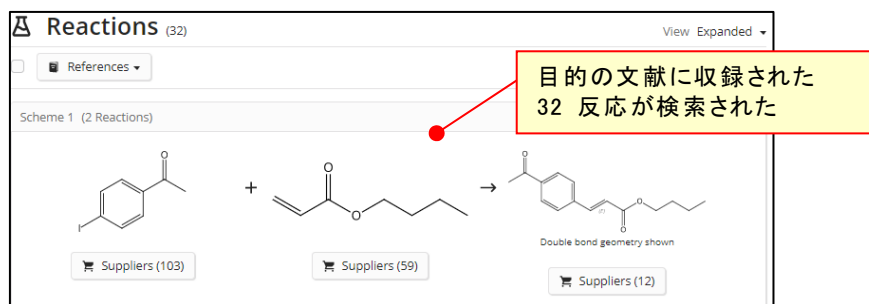
By: Fernandez, Estefania; Rivero-Crespo, Miguel A.; Dominguez, Irene; Rubio-Marques, Paula; Oliver-Meseguer, Judit; Liu, Lichen; Cabrero-Antonino, Maria; Gavara, Rafael; Hernandez-Garrido, Juan C.; Boronat, Mercedes; et al

Journal of the American Chemical Society (2019), 141 (5), 1928–1940 | Language: English, Database: CAlpus

The assumption that oxidative addition is the key step during the cross-coupling reaction of aryl halides has led to the development of a plethora of increasingly complex metal catalysts, thereby obviating in many cases the exact influence of the base, which is a simple, inexpensive, and necessary reagent for this paramount transformation. Here, a combined exptl. and computational study shows that the oxidative addition is not the single kinetically relevant step in different cross-coupling reactions catalyzed by sub-nanometer Pt or Pd species, since the reactivity control is shifted toward su...

View More

Full Text Substances (62) **Reactions (32)** Cited By (15) Citation Map

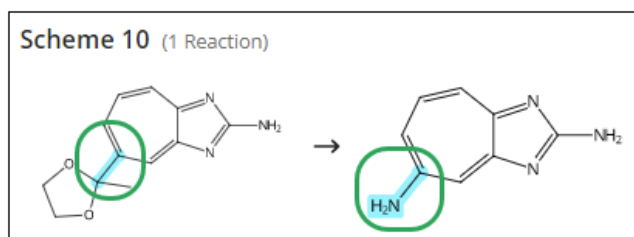
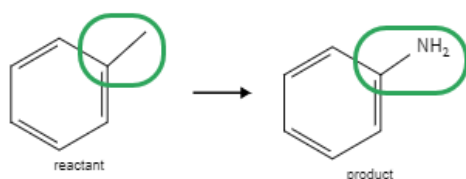


- \* 特許番号や Accession Number (AN) がわかっている場合は、ALL 検索で、文献中に記載されている反応を検索できる。ALL 検索については、CAS SciFinder<sup>n</sup> 検索ガイドを参照。( <https://www.jaici.or.jp/scifinder-n/ref/sfn.pdf> )

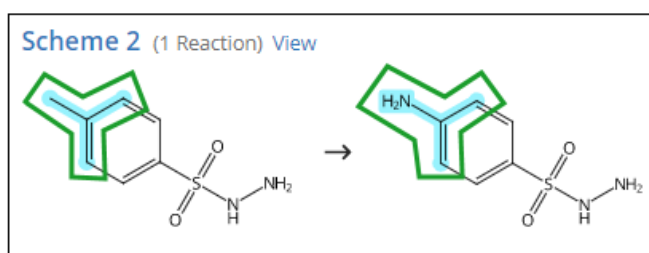
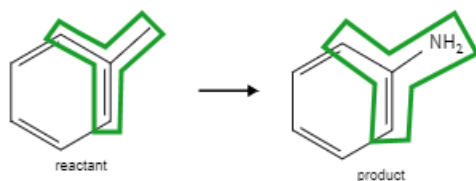
■ Q6. 類似反応検索 (Similarity) とは何？

A6. 検索した反応式と同様の反応中心をもつ反応を検索することができる。類似反応検索は反応物と生成物を作図すると得られる。回答は一段階反応に限られる。

- Broad (広い) : 反応中心のみが比較され、上記の例では 275 件の回答が得られる。



- Medium (中間) : 反応中心および隣接する原子・結合が比較され、上記の例では 9 件の回答が得られる。



- Narrow (狭い) : 反応中心および反応中心に対して  $\alpha$  位および  $\beta$  位の原子・結合が比較され、上記の例では 7 件の回答が得られる。

