



SciFinder ユーザーミーティング

2012年7月



SciFinder ユーザーミーティング

2012年7月



JAICI
化学情報協会

Japan User Meetings SciFinder Update



SciFinder®

Jonathan Taylor: Manager, SciFinder Product Marketing, CAS
2012年 7月



CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS はオハイオ州コロンバスに拠点をしています



CAS は、物質科学分野に関する全ての公開された情報を収集し、検索できる形に情報を体系化する世界で唯一の機関です。



CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS はオハイオ州立大学の近くにあります



CAS はアメリカ化学会 (ACS) の一部門です

ACS のビジョン

化学の力を通じて、世界の
人々の生活を向上させる



ACS 本社 (ワシントンDC)

CAS は ACS のミッションをサポートしています

ACS のミッション

地球および人類の利益のため、化学関連企業やその従事者に貢献する

CAS のミッション

優れた科学情報および検索・解析ツールの提供を通して、研究環境の向上に貢献する



CAS および協力機関のスタッフは、科学の進歩に貢献する科学者です



CAS 独自の索引情報によって、文献の検索が容易になり、
原報の理解の手助けとなります



arXiv.org

Aldrichimica ACTA

chemical
biologyBeilstein Journal of
Organic Chemistrydivision of polymer chemistry, inc.
American Chemical SocietyJACS
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETYACS Chemical
NeuroscienceTHE JOURNAL OF
PHYSICAL CHEMISTRY
LettersCornell University
Library

U.S. Patent Office

CAS | SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

世界随一の化学情報を提供します

化学物質

6,700万件以上の有機・無機
6,300万件以上の配列情報
毎日更新(平均12,000件追加)
最古で1802年発行の文献由来の物質も収録
36億件の物性データ(計算値および実測値)

化学反応

4,300万件の反応情報(1段階および多段階反応)
1,400万件の合成情報
毎週更新(平均3,000~5,000件追加)
1840年以降の反応を収録
反応条件も追加

文献

3,500万件以上の文献情報
収録対象雑誌10,000誌以上
収録対象特許63発行機関
100誌以上の雑誌は、印刷前に情報追加
毎日更新(平均4,500件追加)
1994年以降の3億1,900万件以上の引用情報
1800年代初頭まで文献も遡及収録

CAS のコンテンツ

マルクーシュ構造

92万件のマルクーシュ構造による特許中の有機化合物・有機金属化合物情報
1961年以降の情報収録
毎日更新(平均60~75特許公報から150~200のマルクーシュ構造情報を追加)

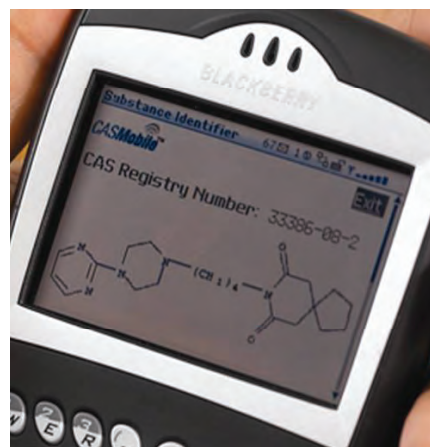
CAS | SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS は1907年から研究者に化学情報を提供：
冊子体にはじまり、いまやモバイル版も登場しました



CAS が提供する製品やサービスを利用すれば、CAS のコンテンツ
を効率よく利用でき、研究のスピードアップに役立ちます

 SciFinder®
Essential content. Proven results.™

STN
The choice of patent experts

 SCIENCE IP®
The CAS Search Service



SciFinder が化学および関連分野において最優先で使うツールとなったのには、理由があります

- ・ 収録するコンテンツ
 - コンテンツの違いを見極めてください。網羅的があり、速報性があり、質の高いデータベースを使うことが大切です。
- ・ SciFinder の利用価値の高さ
 - 物質の新規性の確認，合成ルートの探索，最新の特許情報の探索など SciFinder という1つのツールでさまざまな利用シーンが挙げられます。
- ・ SciFinder は幅広い科学分野で利用可能
 - SciFinder のコンテンツは化学分野に重きを置いていますが，他分野の研究者も活用できる幅広い分野の情報が収録されています。

SciFinder の付加価値が高くなった一例として、昨年からは提供を開始した生物活性情報が挙げられます

CAS Registry Number: 28911-01-5
C₁₇ H₁₂ Cl₂ N₄
4H-[1,2,4]Triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-chlorophenyl)-1-methyl-

4H-s-Triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-chlorophenyl)-1-methyl- (8Cl); 8-Chloro-1-methyl-6-(2-chlorophenyl)-4H-s-triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine; D II-18-2; Halcion; Novodorm; Songar; Triazolam; U 33030

~1,772 References

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative	✓	✓	✓	✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓	✓	✓	✓
Reactant or Reagent	✓	✓	✓	✓
Uses	✓	✓	✓	✓

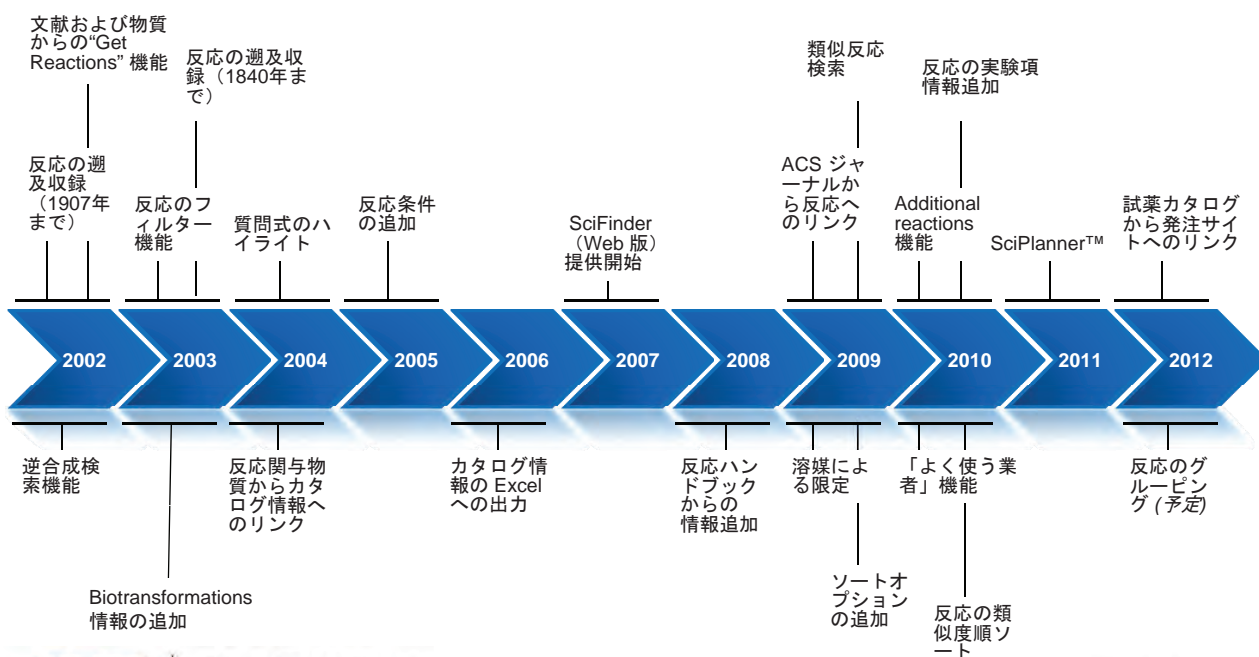
Bioactivity Indicators <small>NEW</small>		Target Indicators <small>NEW</small>	
	References		References
Nervous system agents (all) >>>	48	Enzymes (all) >>> Monoamine oxidase	13
Antidepressants		Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450	27
Nervous system agents (all) >>>>	28	Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450 1A2	10
Antipsychotics		Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450 3A4	42
Nervous system agents (all) >>>	28	Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450 2C9	10
Antipsychotics		Hemoproteins (all) >>> Cytochrome P 450 2D6	11
Nervous system agents (all) >>> Anxiolytics	67		

SciFinder の存在価値は、御社に役立つことにあります

“SciFinder がなければ、我々は目隠しを
 されているようなものだ。
 我々のビジネスはもはや存続しえない。”

Jiang Shengli, Head of Domestic Development, PharmaResources Co., Ltd.

CAS は SciFinder が合成研究において世界一のツールとなるよう進化させてきました



SciFinder の新機能は随時提供されています

2011年 12月

関連性の判断

2012年 2月

ワークフロー
の改善

2012年 4月

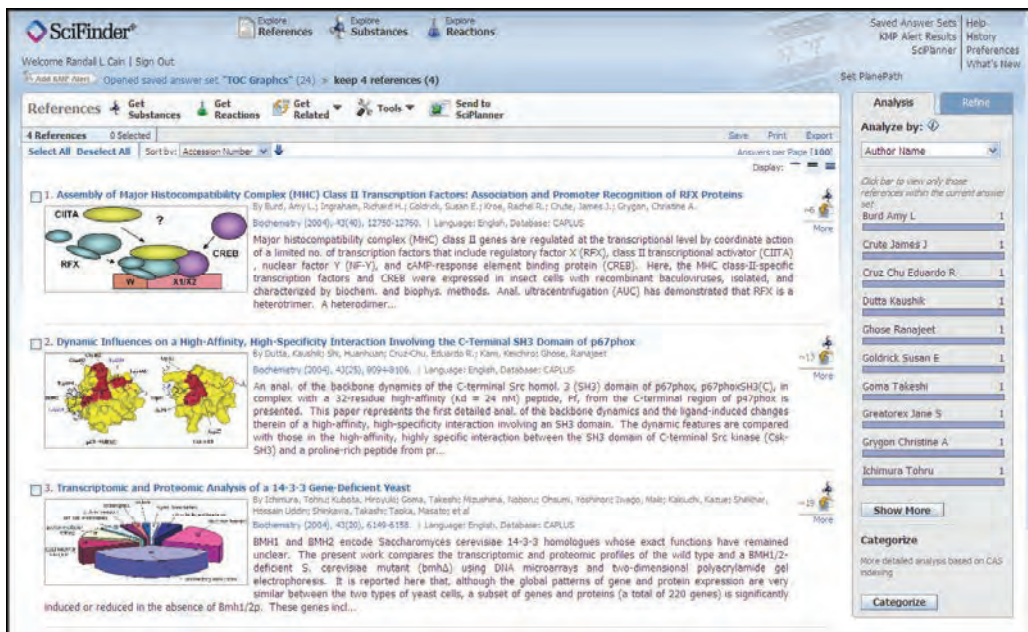
利便性の向上

物質の関連性によるソート機能により、構造検索後の大きな回答集合の俯瞰が手早く行えるようになりました

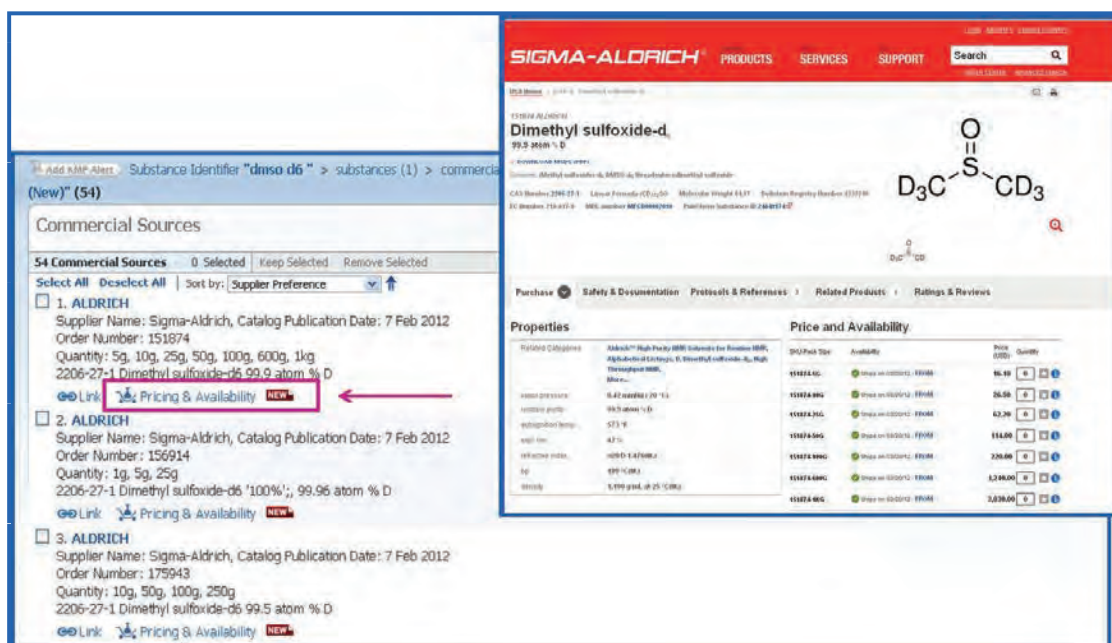
The screenshot displays the SciFinder search results interface. At the top, there are tabs for 'Substances', 'References', 'Reactions', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below the tabs, it shows '1346 Substances' and a 'Sort by: Relevance (New)' dropdown menu. The main area contains six substance detail cards, each with a chemical structure and its name. A large chemical structure is highlighted in a blue box on the right side of the interface.

Substance ID	Chemical Name	Stereochemistry
384336-73-6	7H-Pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-amine, N-methyl-N-(4-methyl-3-piperidinyl)-	Absolute stereochemistry
477600-74-1	7H-Pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-amine, N-methyl-N-(2R,4S)-4-methyl-2-piperidinyl]	Absolute stereochemistry
1206825-36-6	7H-Pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-amine, N-methyl-N-(3R,4R)-4-methyl-3-piperidinyl]-, ne#	Relative stereochemistry
1252974-20-1	INDEX NAME NOT YET ASSIGNED	Absolute stereochemistry
1252974-22-3	INDEX NAME NOT YET ASSIGNED	Absolute stereochemistry
1252974-23-4	INDEX NAME NOT YET ASSIGNED	Absolute stereochemistry

ACS 目次由来の図面情報により, 文献の概要把握が容易になりました

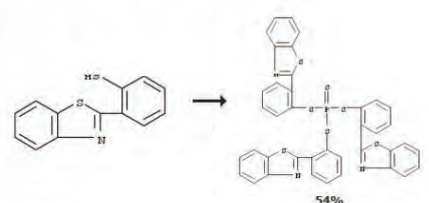


試薬カタログ情報から, メーカーの発注サイトに直接アクセスできるようになりました



反応の実験項情報の収録がさらに拡大し、反応経路の探索や有用性の評価にますます活用いただけます

1. View Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#)
Single Step Hover over any structure for more options.



54%

Overview

Steps/Stages

1.1 R: PSCl₃, R: Et₃N, S: THF, 0°C; 20-22 h, rt

Notes

product depends on stoichiometry, Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Synthesis and biocidal activity of organophosphates derived from benzothiazole [Full Text](#)
By Jhaghana, Priyanka et al
From Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements, 184(2), 315-321; 2009

Experimental Procedure

General/Typical Procedure: Synthesis of (C₁₃H₈NS₂)P(O)Cl₂/(C₁₃H₈NS₂)P(S)Cl₂ in the fast stirring solution of 2-(2-mercaptophenyl)benzothiazole (0.001 mol) in dry THF (30 mL) and Et₃N (0.001 mol) in dry THF (20 mL), a solution of POCl₃/PSCl₃ (0.001 mol) in dry THF was added dropwise at 0°C. The reaction was brought to room temperature, and stirring was continued for 20-22 hours. Then it was cooled, and the adduct (Et₃N.HCl) that formed during the reaction was filtered through a closed sintered funnel. The filtrate was then concentrated and recrystallized. Synthesis of (C₁₃H₈NS₂)₂P(O)/(C₁₃H₈NS₂)₂P(S) in the fast stirring solution of 2-(2-mercaptophenyl)benzothiazole (0.003 mol) in dry THF (30 mL) and Et₃N (0.003 mol) in dry THF (20 mL), a solution of POCl₃/PSCl₃ (0.001 mol) in dry THF (30 mL) was added dropwise at 0°C. Then a reaction was carried out in a manner similar as described above. (C₁₃H₈NS₂)₂P(S), yield 54%. Analysis (%) Found (Calcd.): C 59.01 (59.29), H 2.96 (3.06), N 5.21 (5.32), P 3.84 (3.92), S 28.29 (28.41), Mol. wt. Found (Calcd.): 787.89 (790.03), ¹H NMR (δ ppm): 6.8-7.2 (m, 2H, Ar-H).



SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

クイックビュー機能により、関連情報の閲覧が容易になりました

File Edit View Favorites Tools Help

SoFinder - Enantioselectiv...

Citations

Comini, L; J Photochem Photobiol, A 2007, 186, 185 [Quick View](#)

Nunez Montoya, S; J Nat Prod 2006, 69, 801 [Quick View](#)

Nunez Montoya, S; Toxicon 2008, 51, 1409 [Quick View](#)

Aguirre, D; Med Vet 2001, 18, 487

2012:262390
CAPLUS

Publisher

Quick View

Perylenequinone Natural Products: Total Synthesis of Hypocrellin A

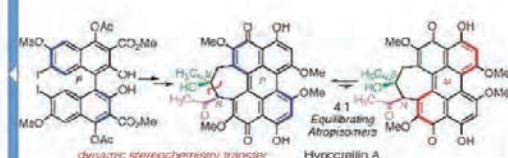
Full Text

By O'Brien, Erin M.; Morgan, Barbara L.; Mulrooney, Carol A.; Carroll, Patrick J.; Kozlovski, Maria C.
From Journal of Organic Chemistry (2010), 75(1), 57-66. | Language: English. Database: CAS

[Reference Images](#) [Substance Images](#)

1 2 of 2

An efficient and stereoselective total synthesis of the perylenequinone natural product hypocrellin A (1) was described. The key features included a potentially biomimetic 1,8-diketone aldol cyclization to set the centrochiral C7,C7'-stereochem., bis (trifluoroacetoxy)iodobenzene mediated oxygenation, a palladium-catalyzed decarboxylation, and an enantioselective catalytic oxidative 2-naphthol coupling to establish the biaryl axial chirality. The helical stereochem. was formed from an axial chiral intermediate and was then utilized in a dynamic stereochem. transfer to dictate the stereochem. of the C7,C7'-seven membered ring formed during the aldol cyclization.



synthetic stereochemistry transfer

Equilibrating Atropisomers

Hypocrellin A



SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

物性値検索機能により, 条件に合致する物質を見つけ出せます



SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS 登録番号から手早く構造を呼び出せます



SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

Copyright 2012 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS は大学の研究者にも、いつでも SciFinder をご利用いただきたいと考えています

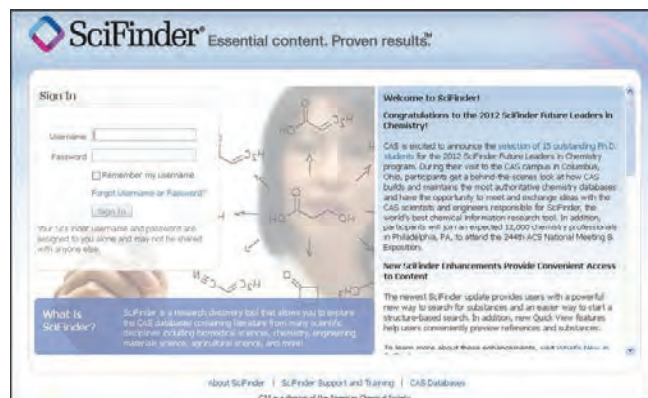
- ・ **大学向け SciFinder 無制限アクセスプラン**
 - CAS が大学ごとに個別にご提案します
 - 教員、学生がいつでもご利用いただける環境を提供します
- ・ **無制限アクセスプランは高い評価を受けています**
 - 日本国内では、すでに半数以上の大学が移行済みです
 - 全世界では、多くの大学が無制限アクセスプランにて SciFinder を利用しています
 - ・ お客様の声
「新たなプランにより、すべての機関で SciFinder が利用できるようになったのは本当に嬉しいことです」
(Andrew Wells, Council of Australian University Librarians)

企業向けエンタープライズ契約はユーザにメリットをもたらします

- ・ **エンタープライズ契約は、急速に普及しています。世界の多くのお客様が本契約下で SciFinder を活用していただいています**
- ・ **日本でも多くの研究機関が、エンタープライズ契約に移行済みです**
 - 昨年かなり多くの企業が契約いただきました。
- ・ **研究者がタスクを気にすることで、研究活動に支障があってはならないと考えています**
 - 化学情報協会にご相談ください。御社にあったプランをご提案します。

多くの日本の皆様が SciFinder (Web 版) のメリットを 実感いただいています

- ・ 大学ではクライアント版から100% 移行済みです
- ・ 企業でも2013年に移行完了の予定です
 - すでに多くの企業が移行済みです
 - CAS および化学情報協会は、移行のお手伝いを致します



ご講演者のご意向により
一部スライドを省いております
ご了承ください

SciFinder ユーザーミーティング
2012.7.26

SciFinder の活用事例について

- ・ 微生物を利用する物質生産
- ・ 大学院教育への活用

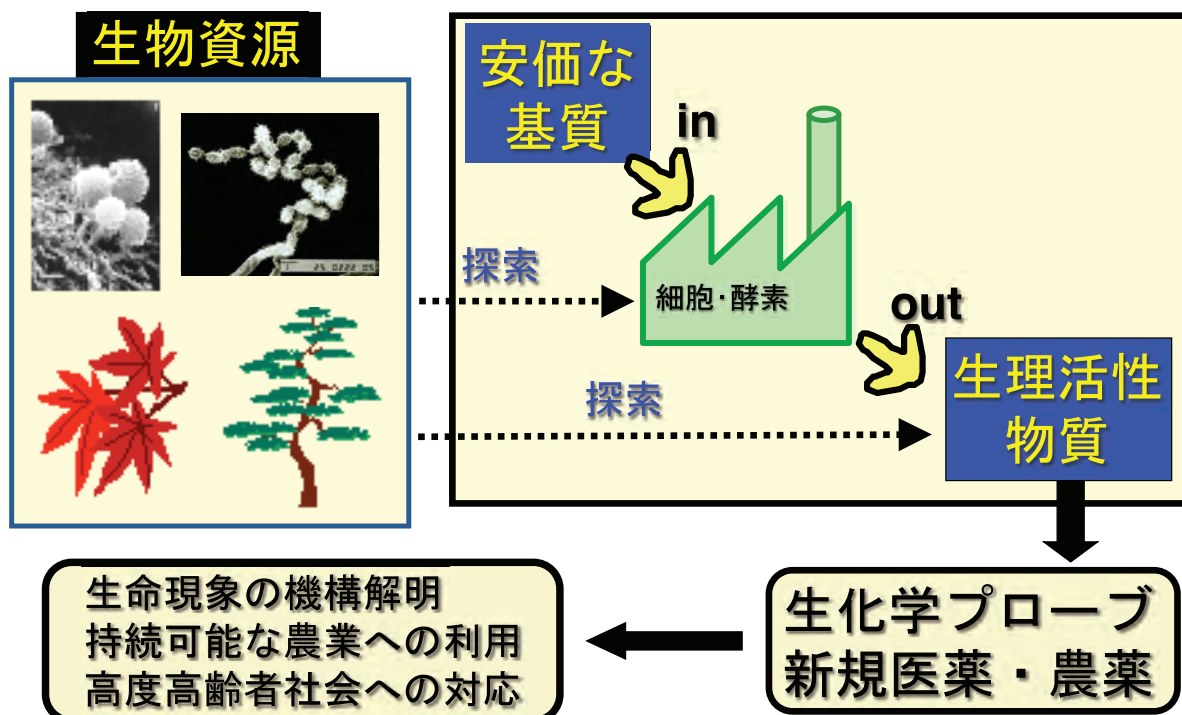
神崎 浩

岡山大学大学院

環境生命科学研究科 (農学部)



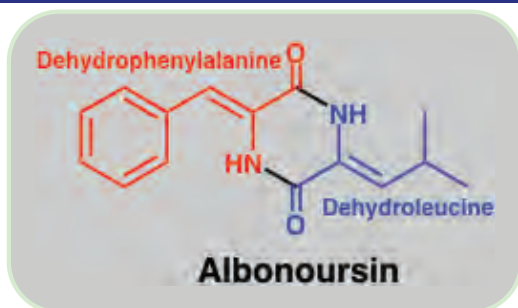
生物資源からの高機能物質の探索と 低機能物質からの効率的変換法の確立



微生物を利用する物質生産

- 新規の微生物酵素の多機能性を利用し、
- 構造活性相関研究で得られた情報を基に
- 基質をSciFinderで検索し、
- 見出した基質を使って高活性化合物を創製した。

Albonoursin



Streptomyces albulus



10min after fertilization

40min after fertilization

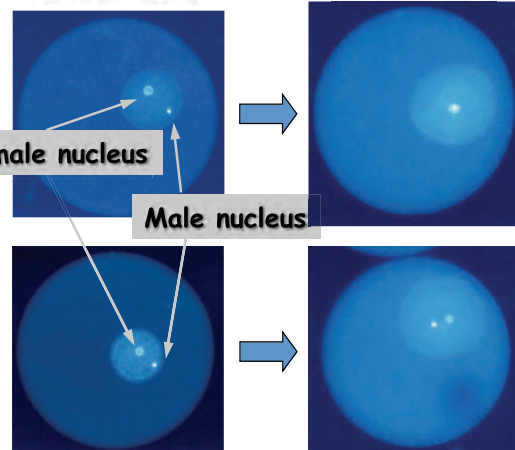
Control

Female nucleus

Male nucleus

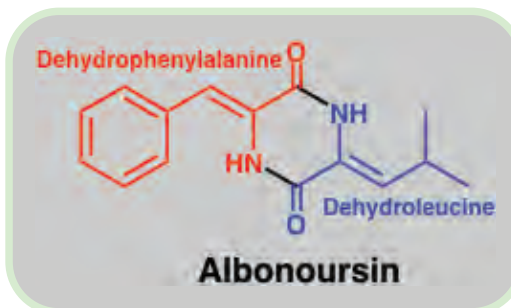
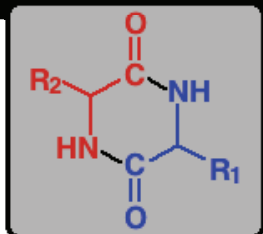
Inhibitory activity
against
pronuclear fusion
of sea urchin eggs

+ Albonoursin



Strategy for Research

Diketopiperazine (Cyclic dipeptide)

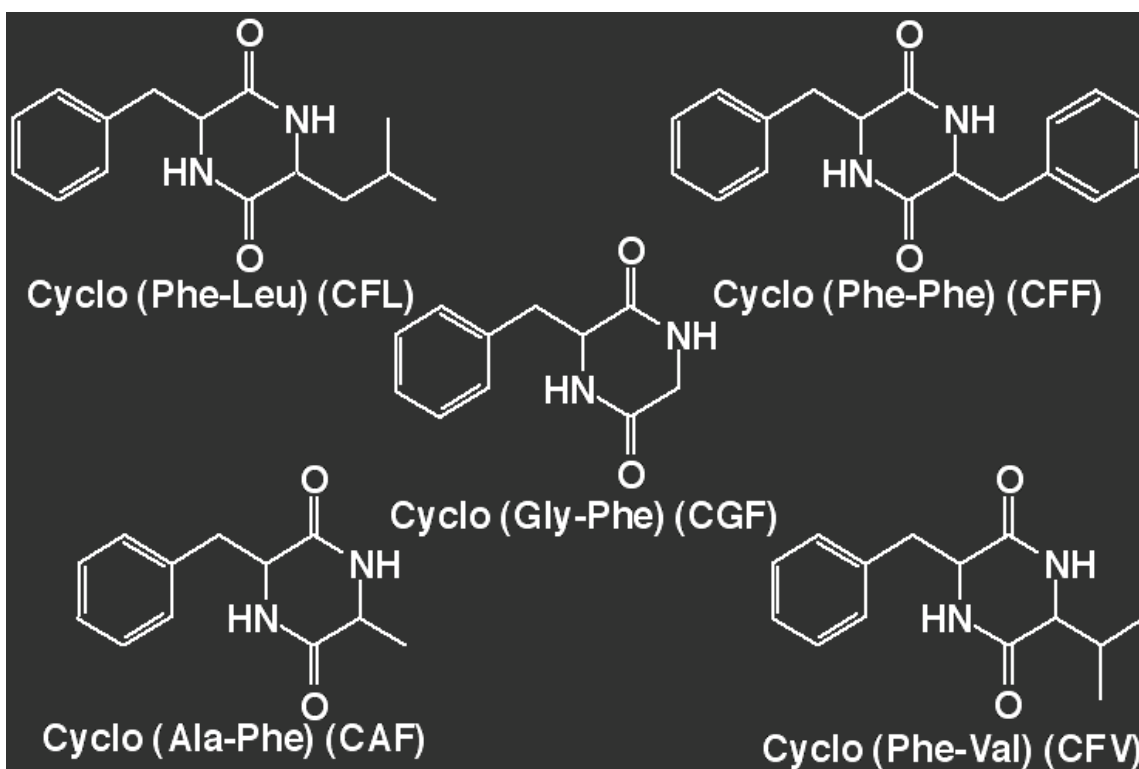


- 1 Dehydrocyclic dipeptides like albonoursin might exhibit interesting bioactivities
- 2 Albonoursin might be biosynthesized from cyclo(Leu-Phe)
- 3 Dehydrocyclic dipeptides other than albonoursin might be synthesized by albonoursin biosynthetic enzyme

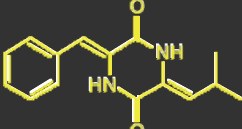
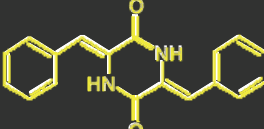
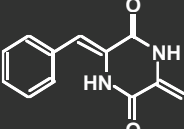
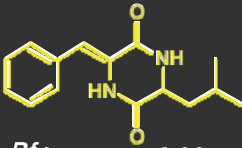
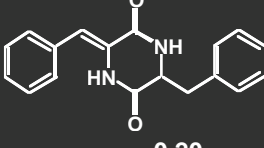
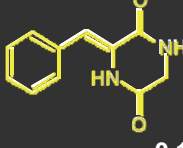
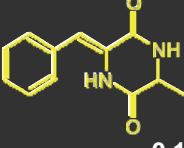
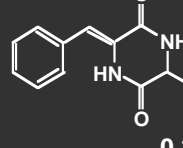
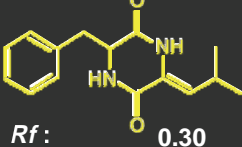
スライド省略

スライド省略

Substrates for Enzymatic Reaction



Dehydro CDPs Produced by Bioconversion

CFL	CFF	CGF	CAF	CFV
 <p><i>R_f</i>: 0.67 λ_{max} (nm): 235, 317</p>	 <p><i>R_f</i>: 0.75 λ_{max} (nm): 338</p>		 <p><i>R_f</i>: 0.42 λ_{max} (nm): 225, 295</p>	
 <p><i>R_f</i>: 0.30 λ_{max} (nm): 295</p>	 <p><i>R_f</i>: 0.20 λ_{max} (nm): 300</p>	 <p><i>R_f</i>: 0.12 λ_{max} (nm): 293</p>	 <p><i>R_f</i>: 0.19 λ_{max} (nm): 295</p>	 <p><i>R_f</i>: 0.22 λ_{max} (nm): 297</p>
 <p><i>R_f</i>: 0.30 λ_{max} (nm): 295</p>				

スライド省略

スライド省略

Possibility of Bioactive CDP Creation

- (a) Dehydro CDPs other than albonoursin can be synthesized by this enzyme**
- (b) Tetradehydro CDPs are active, while didehydro CDPs are not.**
- (c) Activity of tetradehydro CDPs varies with their amino acid-resiudes**



**Using this enzyme system,
more active compounds
could be prepared.**

Preparation of Highly Active Compounds

(1) ランダム合成？

(2) 基質デザイン？



高活性生成物を与える基質の選抜？



既知化合物の検索とその生理活性

SciFinderの有効利用(部分構造検索)

The screenshot displays the CAS website interface. On the left, a blue box shows a counter for 'ORGANIC AND INORGANIC SUBSTANCES TO DATE' with the number 67310412. Below this, text reads 'CAS is the lead and bioseq' and 'The Latest CAS Re'. A table shows the following data:

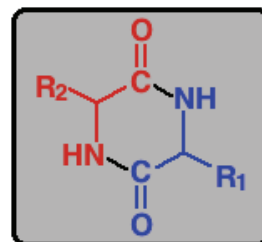
Date	Sat Oct 6 02:42
Count	18,765,628 org
	14,551,304 :
Total	33,316,932 chr
CAS RN	360758-37-8 is

The main content area features a 'Database Counter' section with the following information:

- In addition to organic and inorganic substances, REGISTRY has:
 - 63,866,608 sequences
 - CAS RN 1381492-05-2 is the most recent CAS Registry Number
- CAS also provides specialized databases of chemical reactions, regulated chemicals, commercially available chemicals and Markush substance information.
- Specialized Substance Collections Count:
 - CASREACT® 57,073,372 Single and multi-step reactions, and synthetic preparations
 - CHEMLIST® 295,096 Inventoried/regulating substances
 - CHEMCATS® 69,573,987 Commercially available chemicals
 - MARPAT® 935,179 Searchable Markush structures

At the bottom, there is a navigation bar with links for Home, About CAS, Our Expertise, Solutions, Products & Services, Support, and News & Events. The footer includes the copyright notice: © Copyright 2011 American Chemical Society.

Search for Known CDPs (REGISTRY & CA)



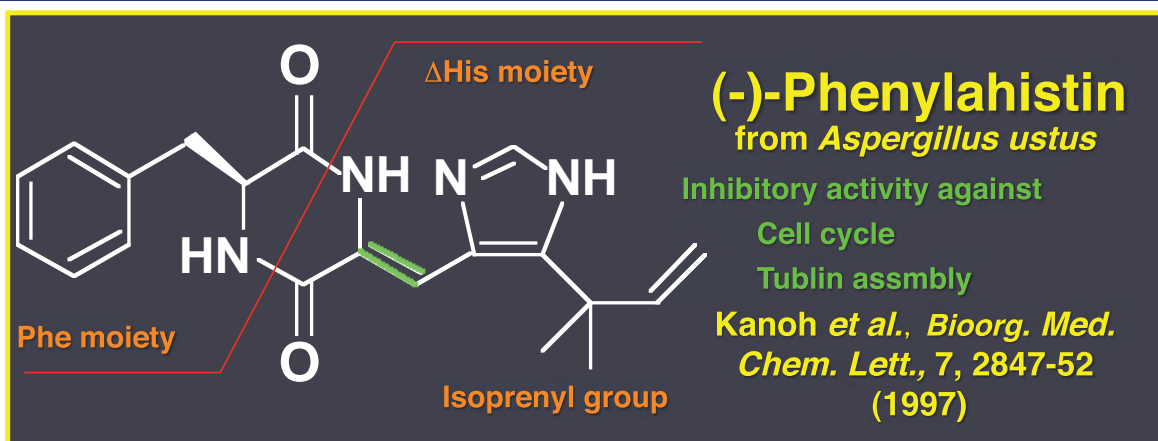
R1, R2 の置換体に限定

- | | |
|-------------|--------|
| ① R1, R2置換体 | 3304 種 |
| ② 片側2重結合有り | 1046 種 |
| ③ 両側脱水素体 | 830 種 |

酵素の基質となりうるCDP
多重結合無し 2258 種
片側脱水素体 216 種

② の化合物を含む文献 234 種

Substrate Candidate for CFLoxidase•



PLH is a didehydro CDP, but active.

Dehydro PLH (Δ PLH), if prepared,
could show the highest activity

大学院教育への活用

- 学生はインターネットをよく使っている
- が、必要な情報の探し方を知っているわけではない
- 文献検索はPubMedかGoogleScholarに頼っている（無料だから、先輩に教えてもらったから。。。）
- 化合物を扱う研究でいかにSciFinder検索が有用かを判らせるには？

今年の試験問題

生体物質化学 試験問題 120529

問題1 藍染めは Indigo(化合物1)という色素を使って行われるが、もともと植物中に含まれる Indican(化合物2,配糖体)が加水分解されて Indoxyl(化合物3)が生成し、それが酸化されて化合物1となる。これらの化合物についてインターネットを駆使して次の問に答えなさい。(検索の途中経過も記載すること)

問1 これら3種の化合物の構造式、Registry NoをSciFinderで調べなさい。またこれらの水(pH7.0)に対する溶解度、および、化合物1の構造異性体数を調べなさい

問2 生体内における外来遺伝子の発現確認のためにこの原理を利用した組織化学手法が使われている。その手法における酵素基質試薬の一つとしてX-gal(化合物4)がよく知られている。この化合物4の構造式、Registry Noを調べて答えなさい。

みなさんならどのように検索されますか？
どのような解答を予測されますか？

SciFinderに“ない” 新しい分子骨格構築法の開発

-drugmacidin Dの合成を例に-

名古屋大学大学院理学研究科 山口 潤一郎

Nagoya Univ. Junichiro Yamaguchi, Ph.D

自己紹介

2

山口潤一郎 (33歳、既婚)

Education

1997-2002 東京理科大学工学部工業化学科卒業

2002-2004 東京理科大学大学院工学研究科工業化学専攻修士課程修了

2004-2007 東京理科大学大学院工学研究科工業化学専攻博士課程修了 (林雄二郎教授)

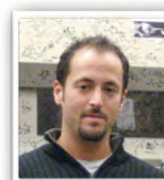


Academic Careers

2007-2008 米国スクリプス研究所博士研究員 (Phil S. Baran教授)

2008-2012 名古屋大学大学院理学研究科助教 (伊丹健一郎教授)

2012-現在 名古屋大学大学院理学研究科准教授



Hobby

学生と遊ぶ事、学生と化学を楽しむ事 → 徹夜の日々

ウェブ作成



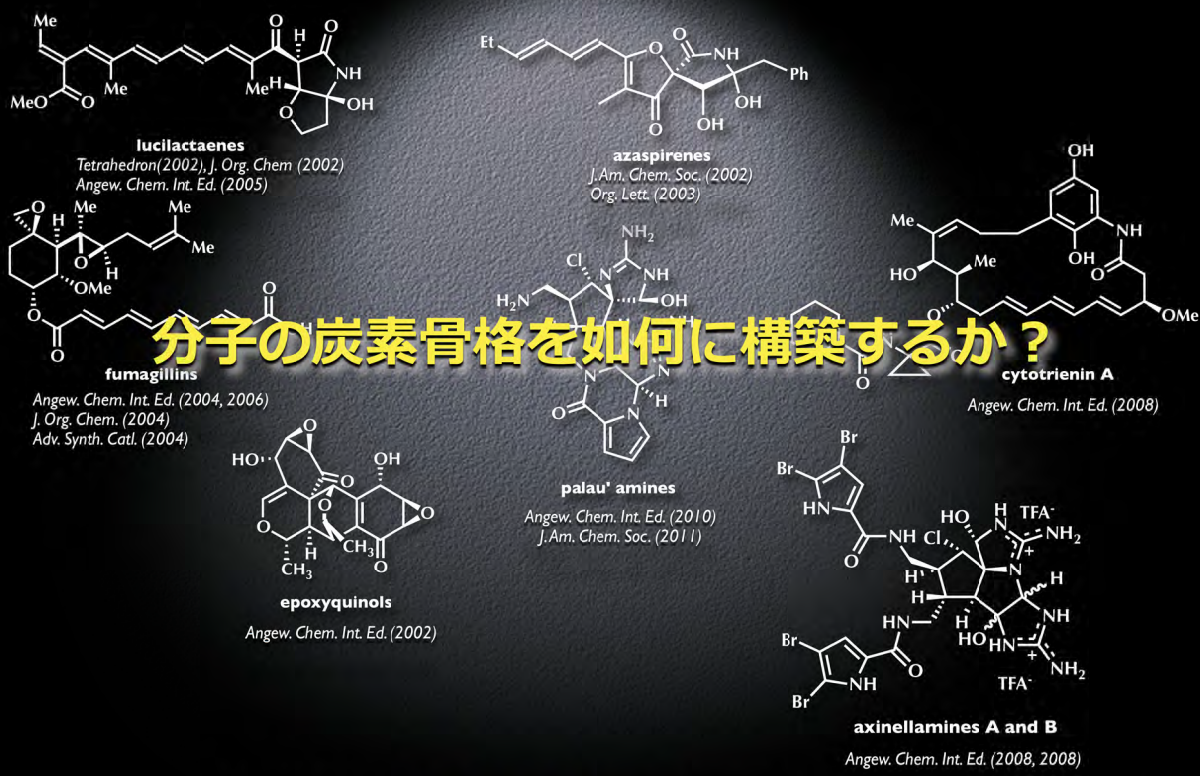


ウェブサイト名：Chem-Station
 (ケムステーション、略称ケムステ)
 URL:<http://www.chem-station.com/>
 アクセス：200万PV/月以上
 設立：2000.5.1 (大学3年時より)
 代表：山口潤一郎
 スタッフ：50名以上
 大学教員 博士研究員 企業研究者,大学院生
 (外国人2名含む)
 70%以上が修士取得者(30%が博士)
 スポンサー：10社以上

多彩な化学研究に重宝するコンテンツを提供
化学者のつばやき
 WORLD CHEMIST DB
 ノーベル化学賞への道
 THE DAILY MOLECULES
 研究者へのインタビュー
 ケムステニュース



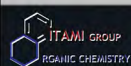
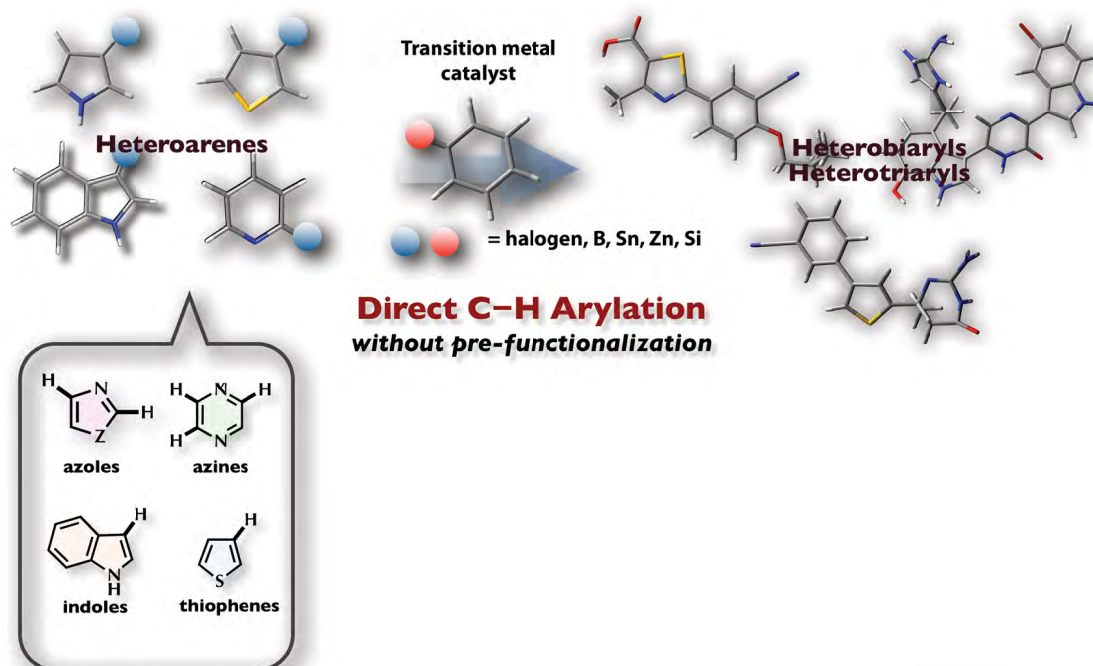
はじめに



炭素骨格を統一的な有機合成手法で生物活性物質群をつくりたい

芳香環直接連結反応 (C-H Arylation)

5

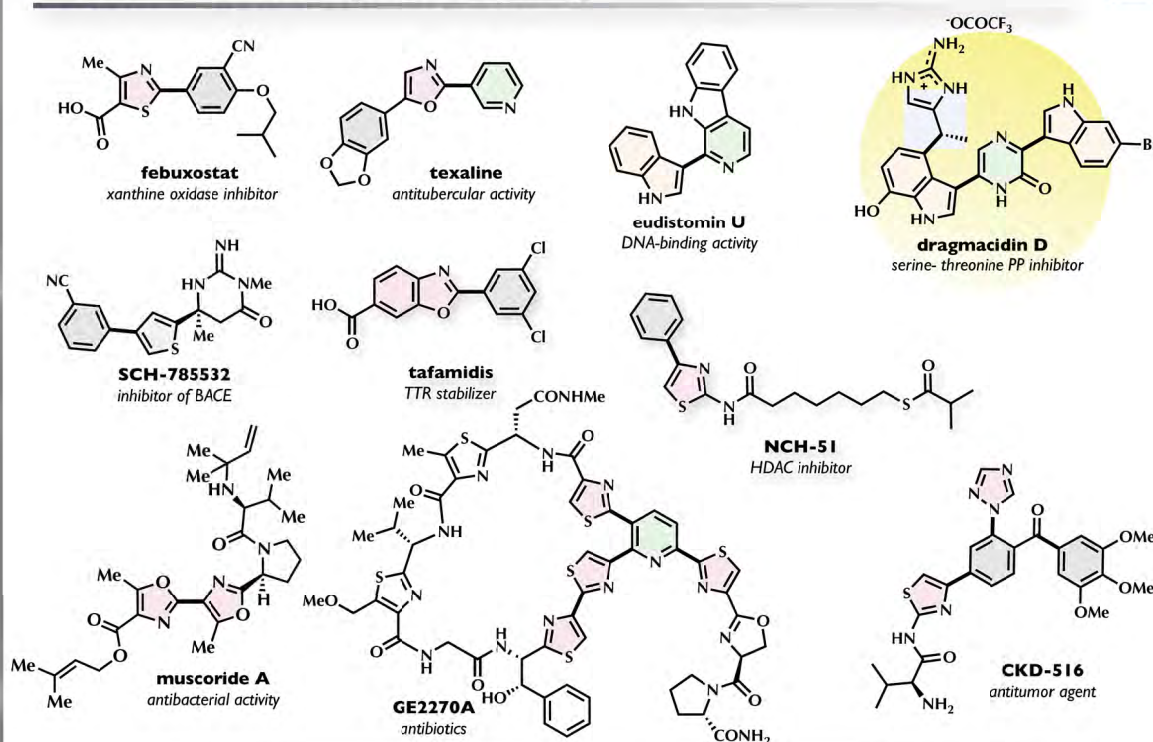


Itami Laboratory
Organic Chemistry

自在な芳香環連結反応を開発・駆使すれば新しい合成・展開が描ける

合成ターゲット (2009年より)

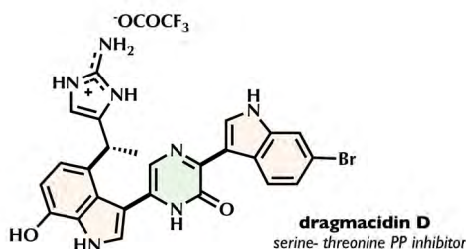
6



Itami Laboratory
Organic Chemistry

対象となるヘテロビアリアル化合物は無尽蔵

● SciFinder活用事例1ー dragmacidin Dの合成研究を例にー

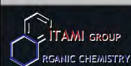


SciFinderにない反応（新反応）を駆使する

● SciFinder活用事例2ー総説執筆のサポートー



トピックのキーワードで分野の引用数を知る



Itami Laboratory
Organic Chemistry

主に活用事例1について話します

僕とSciFinder

● SciFinder歴と使い方

12年ほど

- 学部生 : どうやってつくるとい興味を解消してくれる存在。
楽しくて闇雲に検索をかける
- 修士、博士課程時 : 合成しようと思っている化合物の文献を2クリックで調べる事ができる
→ Chemistry reference resolver <http://chemsearch.kovsky.net/>
物質検索で売っているものを検索する（売っているなら合成）
→ e-nakaraiなど <https://www.nacalai.co.jp/ss/ecl/>

現在 : 新反応であることを確認する、合成のヒントを得る

● SciFinder利用頻度

通常：月に1回程度（ブアーユーザー）
テーマ作成時：ほぼ毎日（具体的な合成計画、反応開発のテーマを立てる際）
論文執筆時：ほぼ毎日（引用文献を探す）

● SciFinderの検索テクニックは？

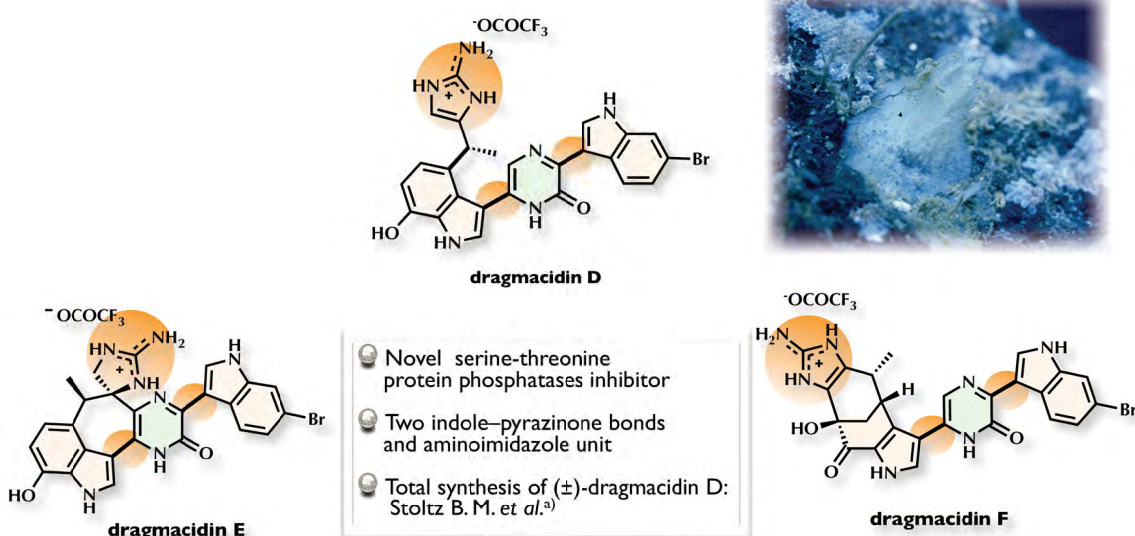
全くなし(大学教員としては普通?)

合成化学者のSciFinderの利用方法を実際の化合物の合成計画を通してみたいよう

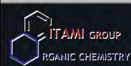


Itami Laboratory
Organic Chemistry

SciFinderは僕に新反応であることを確認するツール



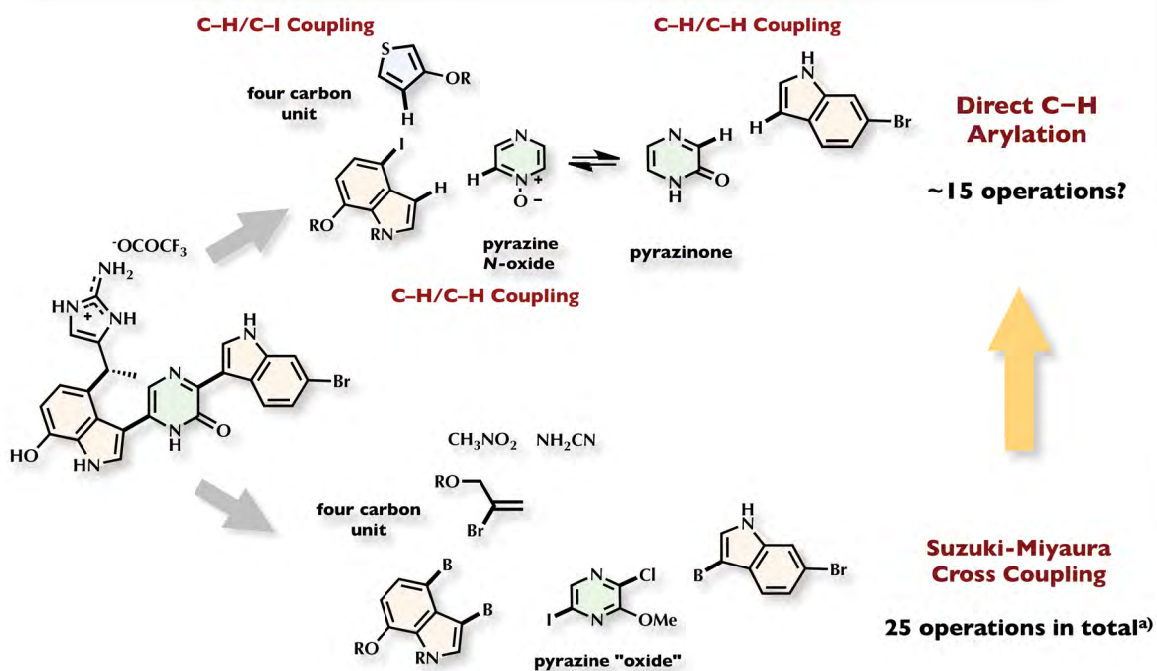
a) Stoltz, B. M. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 13179.



Itami Laboratory
Organic Chemistry

いかに“簡単に”これらを合成するか？

合成戦略の比較



a) Stoltz, B. M. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 13179.

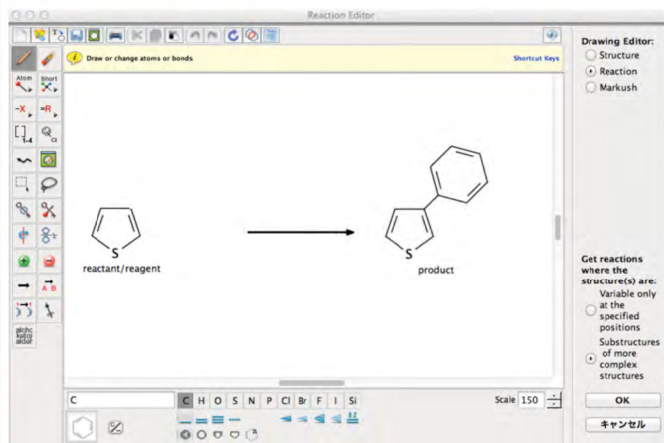
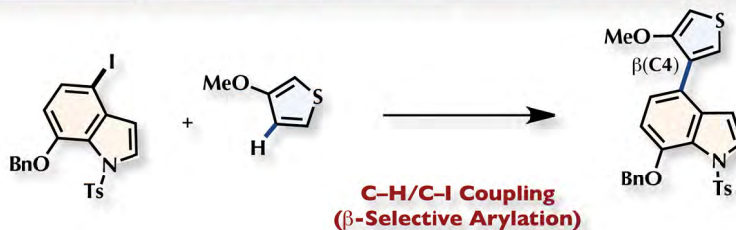


Itami Laboratory
Organic Chemistry

それぞれのユニット連結反応を開発しよう (既存の方法を学ぶ)

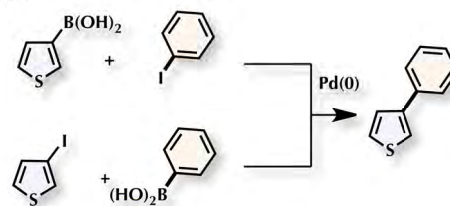
チオフェンのβ位選択的C-Hアリール化反応

11



検索内容：チオフェンのβ位のアリール化
 検索結果：4万件以上
 内容：クロスカップリング反応ばかり

例：



調製に多段階を要する

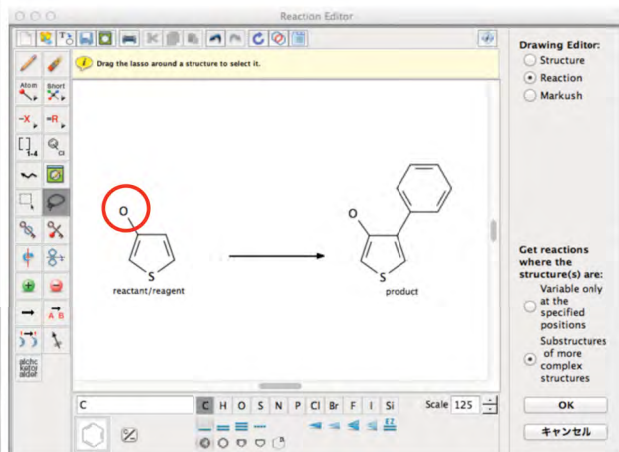
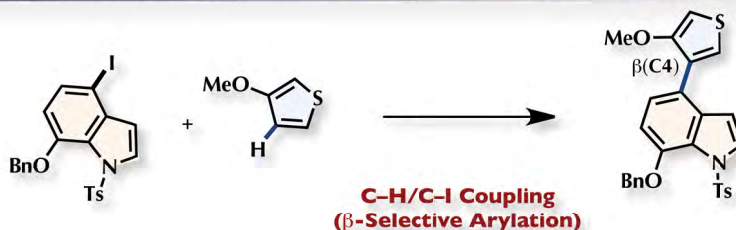


Itami Laboratory
Organic Chemistry

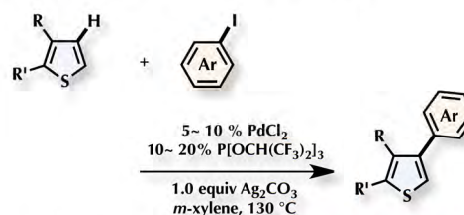
もう少し、実際の化合物に近づけて検索

チオフェンのβ位選択的C-Hアリール化反応

12



検索内容：3-オチオフェンのβ位のアリール化
 検索結果：0件
 内容：クロスカップリング反応でも難しい
 (原料の調製) or 誰もやっていない。



J. Am. Chem. Soc. **2009**, 131, 14622. **Highlighted in SYNFACTS**
 Angew. Chem. Int. Ed. **2010**, 49, 8946. **Highlighted in SYNFACTS**

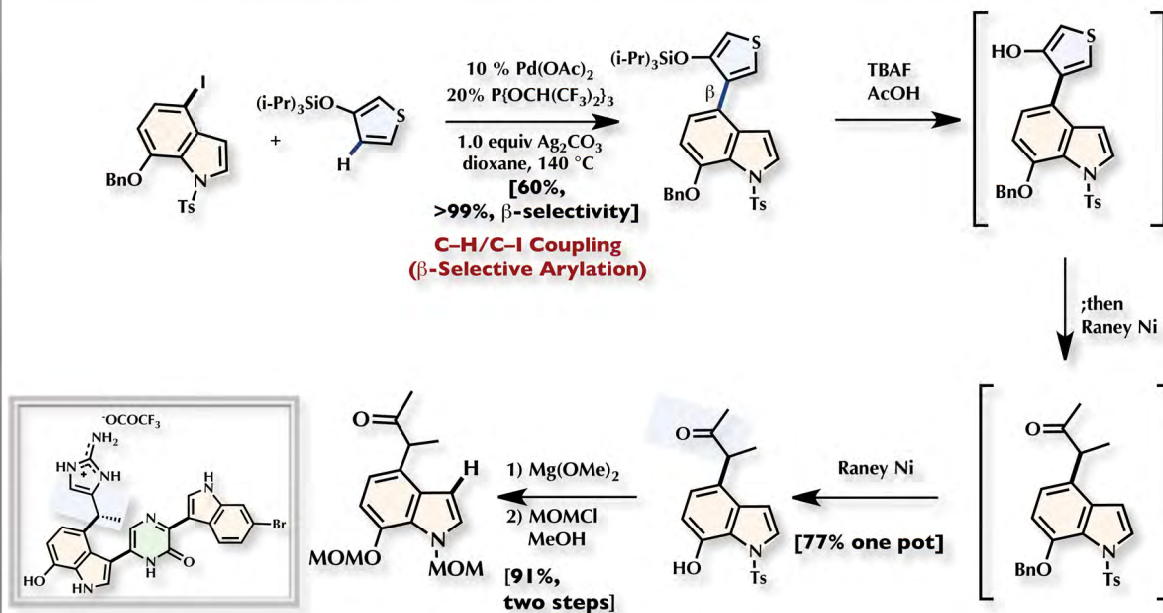


Itami Laboratory
Organic Chemistry

困難な位置でのチオフェンのアリール化反応の開発に成功

チオフェンを”壊して”4炭素ユニットとして使う

13

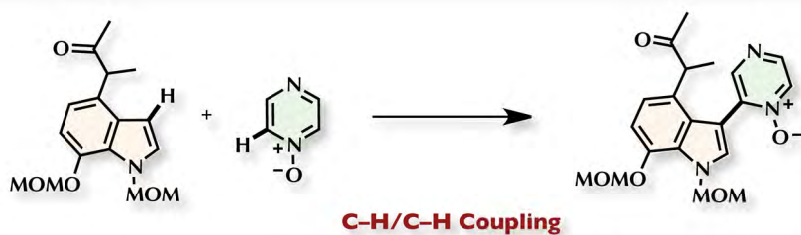


Itami Laboratory
Organic Chemistry

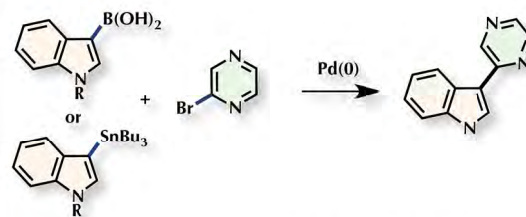
脱芳香族化反応で容易に側鎖（4炭素部位）を合成

インドールとアジン類のC-H/C-Hカップリング

14



検索内容：インドール3位のアリール化（アジン）
 検索結果：1000件以上
 内容：やはりクロスカップリング反応が主流。



調製に多段階を要する

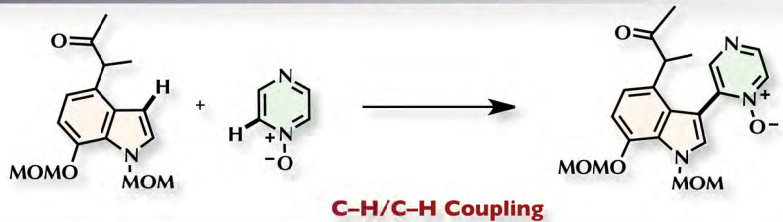


Itami Laboratory
Organic Chemistry

有機金属化合物を調製するのは面倒&時に困難

インドールとアジン類のC-H/C-Hカップリング

15



インドールとアリアル基の直接カップリング反応

Fagnou 2007^{a)}

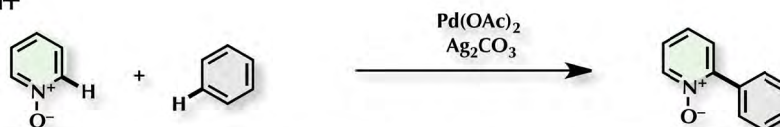
検索結果：数件



アジン類とアリアル基の直接カップリング反応

Chang 2008^{b)}

検索結果：1件



a) Fagnou, K. et al. *Science* **2007**, 316, 1172. Fagnou, K. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 12072; b) Chang, S. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 9254.

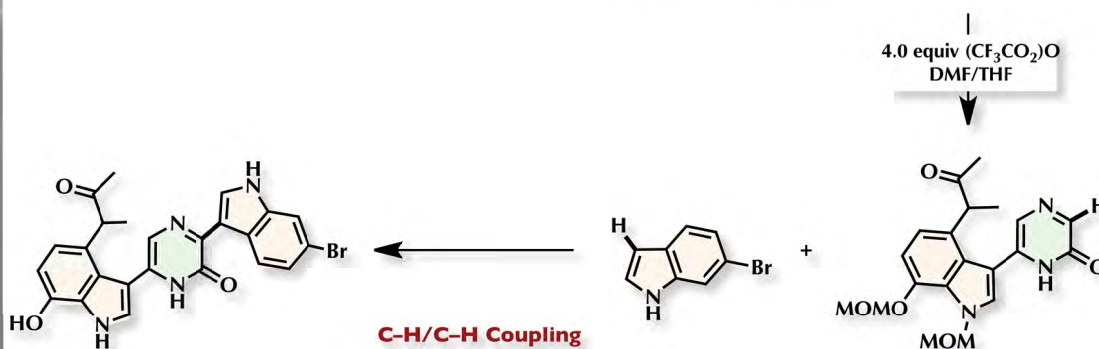
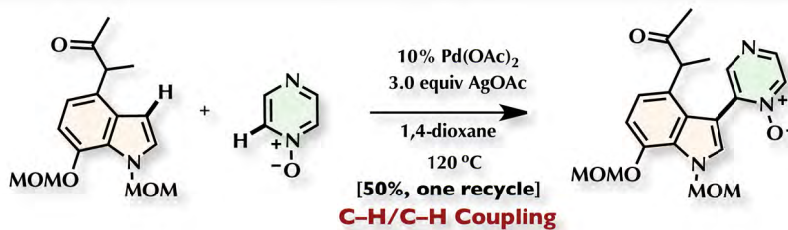


Itami Laboratory
Organic Chemistry

2つの求核剤をインドールとアジン類では進行しないか？

インドールとアジン類のC-H/C-Hカップリング

16

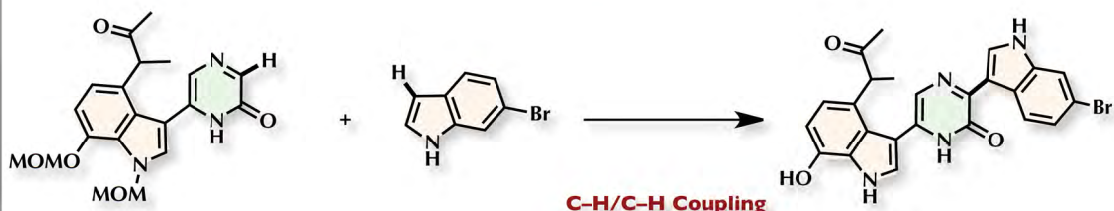


Itami Laboratory
Organic Chemistry

新規C-H/C-Hカップリングで左側の骨格を合成

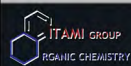
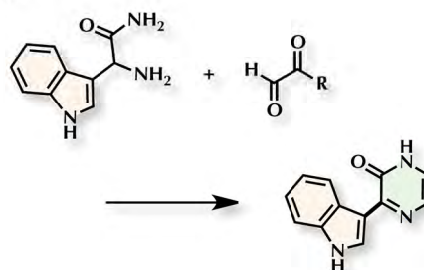
インドールとピラジノンの直接カップリング

17



Reaction Editor interface showing a search for reactions involving indole and pyridine derivatives. The search criteria include 'Structure', 'Reaction', and 'Markush'. The results show a reaction between indole and a pyridine derivative.

検索内容：インドールと
ピラジノンのカップリング
検索結果：350件以上
内容：ほとんど古典的なヘテロ環合成法
例：

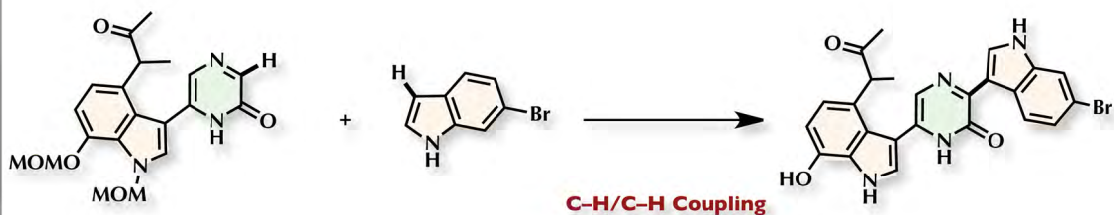


Itami Laboratory
Organic Chemistry

精査して調べたところ興味深い反応が見つかった

インドールとピラジノンの直接カップリング

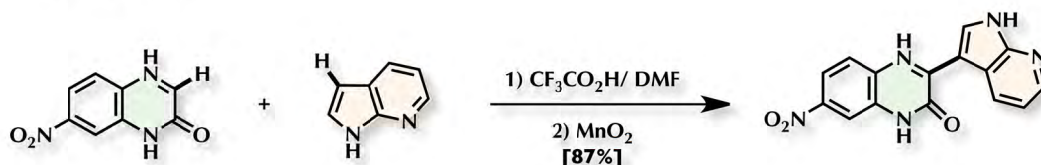
18



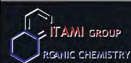
🔍 インドールとキノキサリノンのカップリング反応

Aoki^{a)}

検索結果：1件



Aoki, K. Chem. Pharm. Bull. 2007, 55, 922.

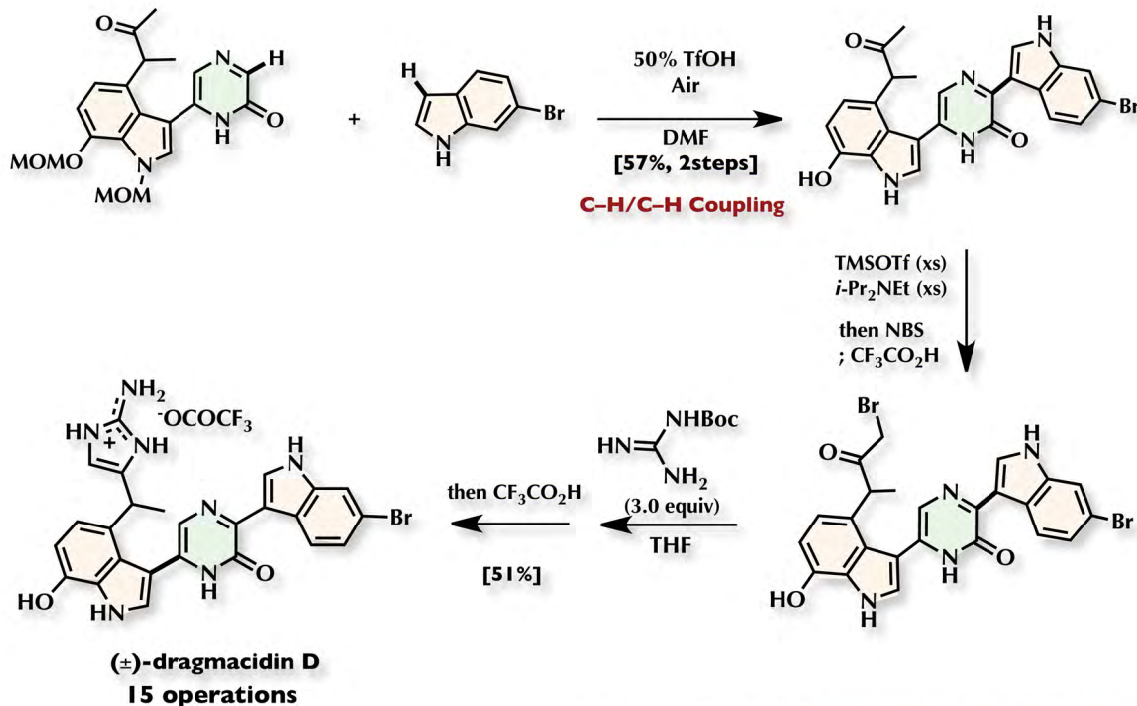


Itami Laboratory
Organic Chemistry

埋もれていた文献から反応開発のヒントを得る

ドラグマサイジンDの全合成

19



J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133, 19660. *Most Read Articles (November 2011)*



Itami Laboratory
Organic Chemistry

10工程以上既存の合成よりも短縮する事ができた

まとめ

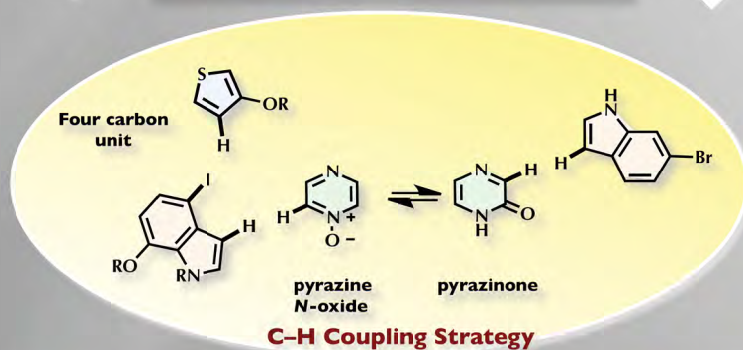
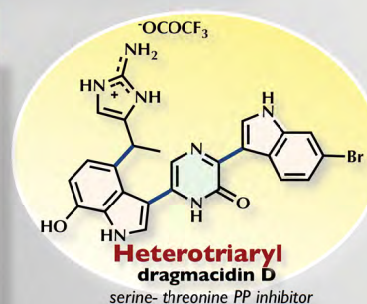
20



Indole/Azine C-H/C-H Coupling

- Development of target-oriented catalyst
- Connecting four key units by C-H couplings.
- Concise synthesis of dragmacidin D (15 operations)

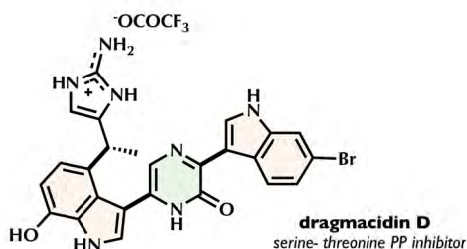
J. Am. Chem. Soc. **2009**, 131, 14622.
Angew. Chem. Int. Ed. **2010**, 49, 8946.
Chem. Lett. **2011**, 40, 555.
J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133, 19660.



Itami Laboratory
Organic Chemistry

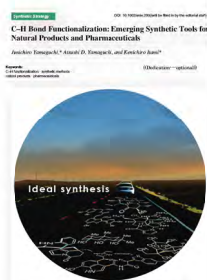
自在芳香環直接連結反応による複雑天然物の全合成

● SciFinder活用事例1ー dragmacidin Dの合成研究を例にー

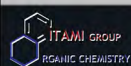


SciFinderにない反応（新反応）を駆使する

● SciFinder活用事例2ー総説執筆のサポートー



トピックのキーワードで分野の引用数を知る



Itami Laboratory
Organic Chemistry

残った時間は活用事例2を説明



総説執筆のサポート

● C-H官能基化反応を用いた生物活性化合物の合成



検索したい事

- 1.年代別C-H官能基化反応をつかった合成の文献数
→ 手動でカウント
- 2.年代別C-H官能基化反応に関する文献数
→ SciFinderで検索

検索方法

わからない → ヘルプデスクへ電話

0120-003-462

C-H functionalization

C-H activation

carbon-hydrogen activation

をそれぞれ *as entered* で検索し、 *combine* で結果をまとめる。

その結果について、 *Publication year* で *Analyze* した結果を送ってもらった。

by 化学情報協会 塩永 さん

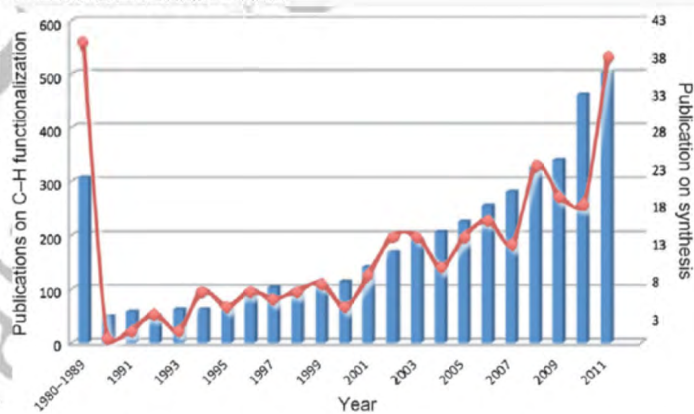


Itami Laboratory
Organic Chemistry

ヘルプデスクはとっても役に立つ



C-H官能基化反応を用いた生物活性化合物の合成



Scheme 1. The number of publications on the topic of C-H functionalization (blue bars) and on the synthesis of natural products and pharmaceuticals by C-H functionalization (red dots and line) between 1980 and 2011. Data for the bar chart were obtained by a SciFinder search in February 2012 using keywords "C-H functionalization", "C-H activation", and "carbon-hydrogen activation". Data for the line chart were obtained by a manual count of relevant articles after an exhaustive search of the literature.



Team **Dragmacidin**



Debashis Mandal (D3)

Total synthesis of Dragmacidin D

Chem. Lett. **2011**, 40, 555.
J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133, 19660.

Asymmetric total synthesis of Dragmacidin D

on going



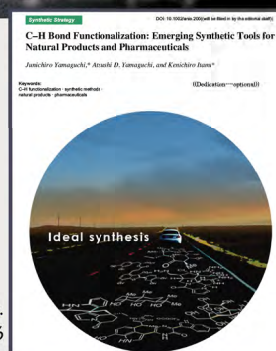
A Winner of Reaxys Prize 2012!



Atsushi D. Yamaguchi (D1)

**Over 50 pages
"Mega-review"**

Angew. Chem., Int. Ed., **2012**, in press.
DOI:10.1002/anie.201201666



●合成化学者にとってSciFinderとは

合成計画が新規かどうか網羅的に確かめる事のできる信頼できる唯一のデータベースツール

思いもかけない埋もれた反応をふとしたタイミングで見つける事ができる合成ヒント探索ツール

“すべて”のデータが収録されているためキーワード検索で分野の広がり確かめる事ができる
論文・総説執筆のお役立ちツール

●学生さんをお願いしていること

「使ってほしいが、SciFinderにないからといってつukれない訳ではない」

「SciFinderに”ない”反応を開発しよう」

「“ない”ことを確実に確認できる検索テクニックを身につけよう」

→千葉さんのSciFinder講習会には必ずでましよう。

「わからないときはヘルプデスクにすぐに電話しよう」

●SciFinderへの要望

価格の安定化

収録時期の高速化

検索の高速化



石原産業における SciFinderの活用とこれから

2012年7月26日

石原産業株式会社
中央研究所 研究管理部
小林伸行

SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

1

本日の内容

- 当社の紹介
- SciFinder導入経緯
- SciFinderの利用状況
- ユーザー教育と悩み
- 要望

SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

2

1) 当社の紹介

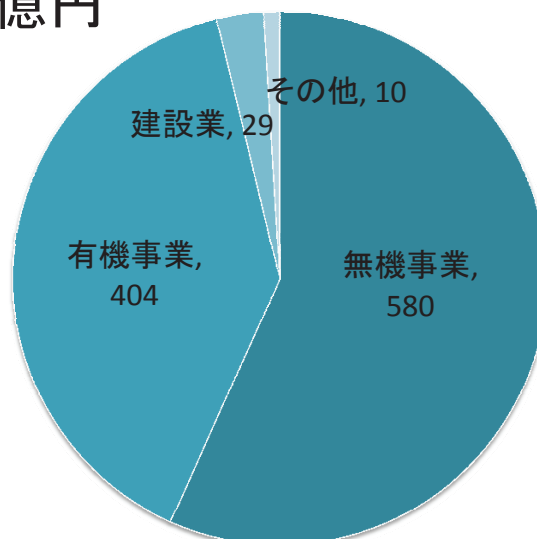


SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

3

1-1) 石原産業の概略

- 社員： 約1,900名
- 売上高： 1,023億円
- 売上構成



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

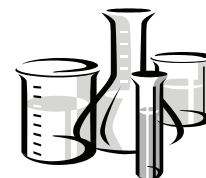
4

1-2)研究開発体制

—無機化学部門—

- 酸化チタン製品
- 機能材料
- 電池材料

三重県四日市市
四日市事業所



—有機化学部門—

- 自社創製農薬
- 医療材料
- バイオ試薬

滋賀県草津市
中央研究所



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

5

1-3)中央研究所（滋賀県草津市）

- 合成研究室
- 基盤技術研究室
- 工業化研究室
- 生物科学研究室
- 製剤研究室
- 安全科学研究室
- 生命科学研究室
- **研究管理部**



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

6

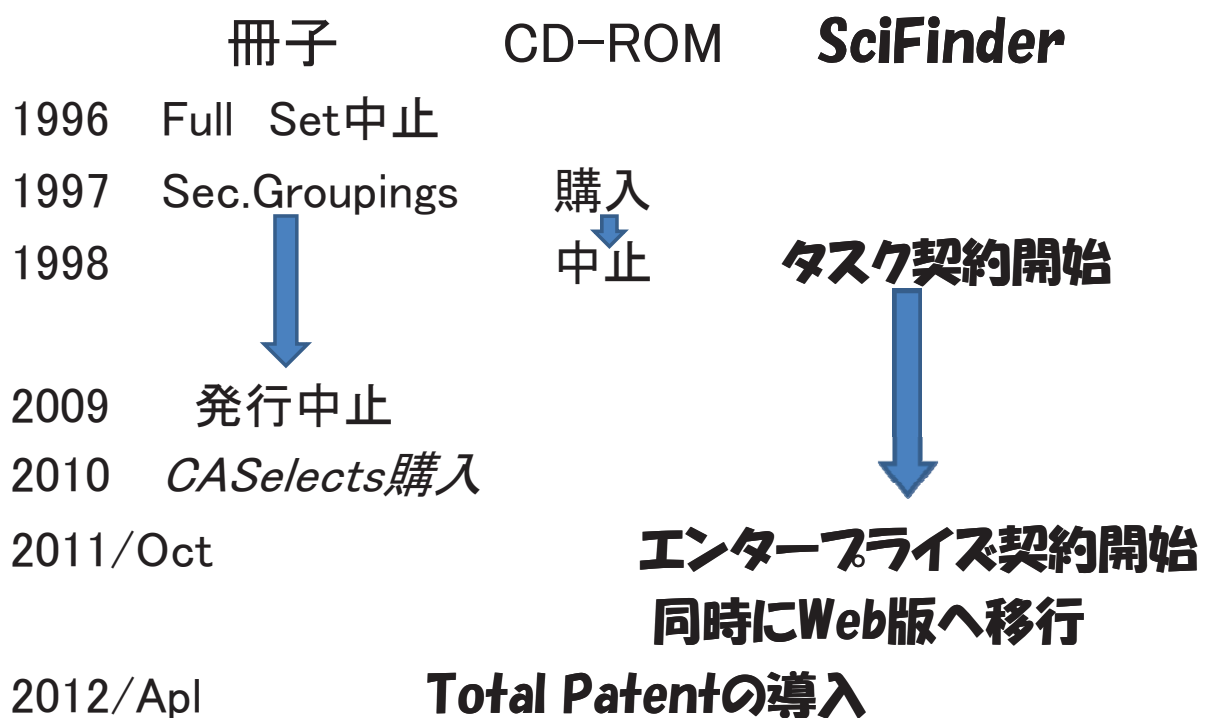
2) SciFinder導入経緯



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

7

2-1) SciFinder導入経緯



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

8

2-2)情報担当者検索とユーザー検索 の使い分け

<情報担当者検索の問題・課題>

- 「検索依頼書」の作成、上司の承認
- 情報担当者の知識のない分野の検索
- 情報担当者不足による依頼検索の滞り



エンドユーザー検索を推奨！
しかし、自信のない研究者は
情報担当者へ検索依頼を！

SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

9

3) SciFinderの利用状況



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

10

3-1)現在の状況

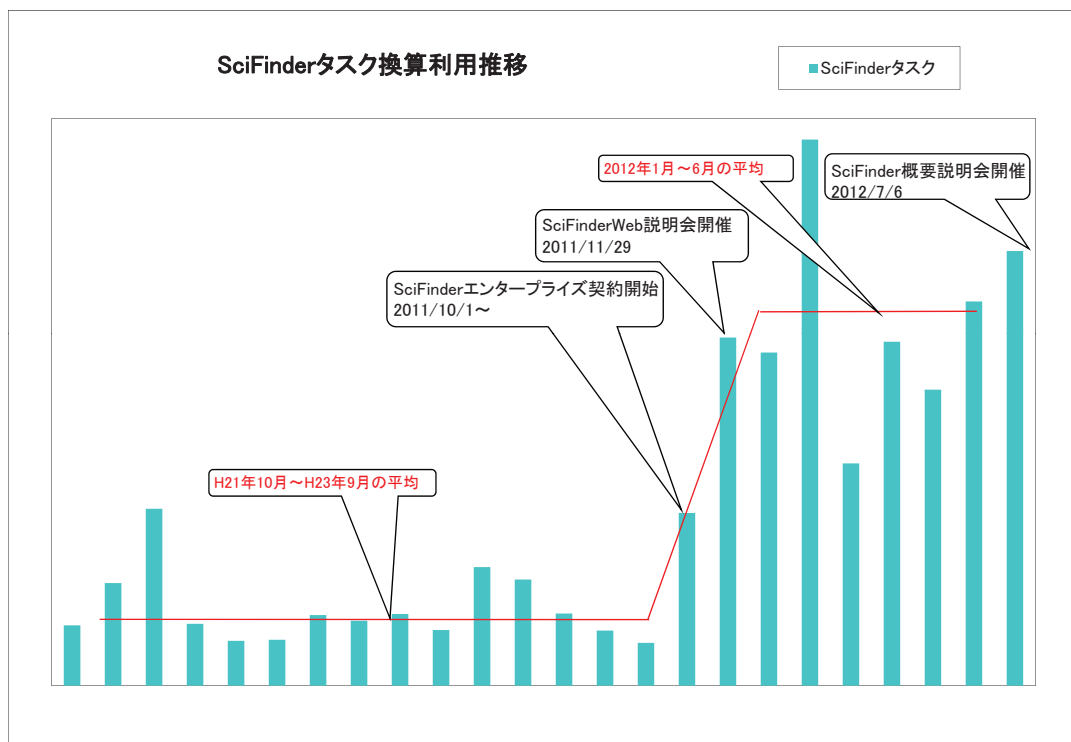
- 現在のユーザー数:約130名
- エンタープライズ契約料は、事業所単位で前年度利用実績に応じて按分
- 中央研究所内は研究管理部で一括予算計上

3-2)契約の移行メリット

2011年10月～ 開始

- タスク制からの逃避
 - ⇒ 予算管理
- クライアント版からWeb版へ
 - ⇒ 新入社員はWeb版経験者
 - ⇒ 新しい構造作図機能

3-3) 契約移行に伴う利用推移



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

13

4) ユーザー教育と悩み



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

14

4-1)インターネットセミナーの試み

- 従来のセミナー 化学情報協会スタッフ
 - ①新ユーザーへの概要セミナー(年一回)
 - ②ver.up時のUpdateセミナー(不定期)

自社で講師をするのは、資料作成から
説明まで大変



インターネットセミナー活用の取り組み

- 化学情報協会 インターネットセミナー
(SciFinder、STN)を担当で毎回視聴
- 今後、希望者を少人数募り、録画で実習
付セミナーを開催予定

< 実行例 >

対象：新ユーザー2名

資料：「SciFinder 基本的な検索」の関係分
ビデオ形式

時間：2時間

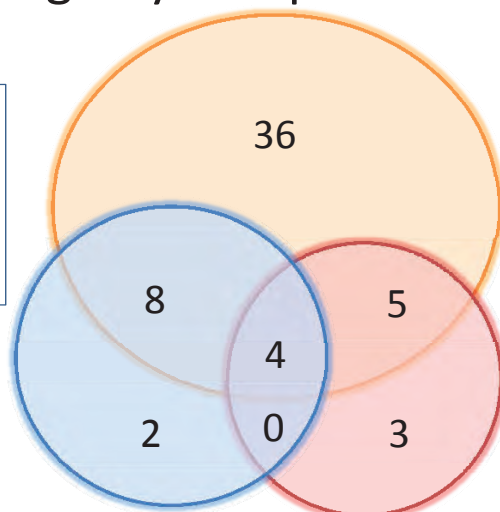
内容：視聴しながら画面と同じ操作を実際に
実行

終了後、興味あるテーマを実際に検索

4-2) 具体的比較での説明

Registry → CAplus : 53件

中間体Aの
合成方法(反応)
のDB間の比較



CASREACT : 14件 他社DB : 12件

4-3)コストをユーザーへ意識させるか・・・

- エンタープライズ契約の翌年価格が心配
 - 通常1～2%の値上げが設定されるというが・・・
 - 今更、タスクで管理するのも・・・
 - Web版ではカウント対象ボタンが多すぎる

当社では

- ・利用カウムの説明はしていない
- ・利用料をタスクに変換して毎月ユーザーへ報告

皆さんの会社ではどうされていますか？

SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

19

5)要 望



SciFinderユーザーミーティング2012大阪
Ishihara Sangyo Kaisha Ltd

21

5-1)要望

- SciFinder⇔STN間の自由なデータ移行
 - 目的： -STNとSciFinderの結果の比較
 - 各システムの独自機能の利用
 - STNの他DBへクロスファイル
- Research Topicsの文章入力は使いやすい？
- MyCASからユーザー情報の直接操作
- 配列検索のWeb版での利用
- Web版の動作の遅さの改善

5-2)要望

- CAplus でCSV形式へ出力すると①対応特許情報
②FullTextへのリンクボタン が表示されない
- 柔軟な出力形式 例:STNのHITSTR出力
- 特許の場合、発明者よりも出願人名の表示
- 検索結果からオリジナル特許の一括入手
- CASREACTの結果を文献単位で折り畳む出力機能
- Registryの部分構造検索のサンプルボタンの復活
- インターネットセミナーの検索事例の増加

5-3) 要望

- ダブルベータシット
- 同一特許の複数レコードへの分割



データ収録方法の改善に期待

ありがとうございました!!



以上

JAICI

化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
サービス全般 TEL: 0120-151-462
E-mail: customer@jaici.or.jp
ヘルプデスク TEL: 0120-003-462
E-mail: support@jaici.or.jp