

[補足資料]

【Reaxys(リアクシス)について】

Reaxys(<http://www.reaxys.com/>)は、これまでエルゼビアが提供してきた CrossFire Beilstein(クロスファイア・バイルシュタイン)、CrossFire Gmelin(クロスファイア・グメリン)、Patent Chemistry Database(パテント・ケミストリー・データベース)を統合し発展させた製品で、有機合成を中心とした化学研究開発の生産性向上のための新しいソリューションである。

具体的には、有機化合物、無機化合物、有機金属・錯体の反応、構造、実測物性値のデータベースである。様々な論文や特許で報告のあった化合物の性質や合成法を人手をかけて収録してまとめてあるため、一つ一つ原著をあたらなくても幅広くかつ迅速に情報収集が可能。さらに、収集している物性値は実験データのあるものを選択しているため、信頼性の高いデータ集となっている。

世界中の製薬企業、化学関連企業、国立研究所、大学の研究者や情報マネージャーに開発パートナーとして開発に参加いただいた。化学研究者が実験の合間に簡単に使用でき、日常の実験を効率的に検討できるデータベースを目指して、意見や要望を取り入れながら開発された。学術論文由来の実験データと特許由来のデータが同一画面および同一の表で閲覧できるため、比較や検討の効率が従来製品に比べて格段に向上している。

また、Reaxys の新機能として合成したい化合物を出発点として逆合成的に合成ルートを検索検討する合成計画ツールを搭載し、化合物の合成方法の検討がさらに容易となった。

web ベースでの提供により、専用ソフトウェアのインストール等が不要で、同時ユーザー数は無制限、24 時間利用が可能。

サービス提供の形態は、全社契約により中堅企業でもリーズナブルな料金で制限なく Reaxys を利用することが可能。製薬、化学関連業界を中心とした多数の CrossFire の既存顧客のスムーズな移行とより一層の浸透を狙う。製品情報英語版はこちらから(<http://www.info.reaxys.com/>)。

※次ページに代表的な画面を掲載

【CrossFire Beilstein、CrossFire Gmelin、Patent Chemistry Database について】

CrossFire Beilstein(クロスファイア・バイルシュタイン)

有機化合物の構造、反応、実測物性値のデータベースで、Beilstein Handbook の後継製品。1771 年から現在までの有機化合物の構造、反応、物性値を一流の化学学術論文から人手で抽出し、まとめたデータベース。特に反応検索に強く、化合物の生産物や前駆体が簡単に追えるようになっている。

CrossFire Gmelin(クロスファイア・グメリン)

無機化合物、有機金属・錯体の構造、反応、実測物性値のデータベースで、Gmelin Handbook の後継製品。1772 年から現在までの無機化合物、有機金属・錯体の構造、物性値、反応を人手で学術論文より抽出し、まとめたデータベース。

Patent Chemistry Database(パテント・ケミストリー・データベース)

米国特許商標庁(USPTO)、ヨーロッパ特許庁(EPO)、世界知的所有権機関(WIPO)のうち 4 つの国際特許分類(C07(有機化学)、A61K(医薬用、歯科又は化粧品用製剤)、A01N(消毒薬、殺虫剤、除草剤)、C09B(染料))から化合物の構造、反応、物性値を収集し、まとめたデータベースで、実験項(実施例)やスペクトルデータも収録しているため、個別に原文にあたらなくても情報収集が容易。

【Reaxys の主な画面】

Step	Yield	Conditions	References
1	89%	With 10percent HCl in tetrahydrofuran T=25°C; 4 h;	Carini, David J.; Duncia, John V.; Aldrich, Paul E.; Chiu, Andrew T.; Johnson, Alexander L.; et al. Journal of Medicinal Chemistry, 1991, vol. 34, # 8 p. 2525 - 2547 Title/Abstract Full Text Scopus
2		Yield given. Multistep reaction;	Carini, David J.; Duncia, John V.; Aldrich, Paul E.; Chiu, Andrew T.; Johnson, Alexander L.; et al. Journal of Medicinal Chemistry, 1991, vol. 34, # 8 p. 2525 - 2547 Title/Abstract Full Text Scopus

画面 1: 合成計画ツール画面

右端の物質を合成する経路を一段階ごとに追って計画するためのツール。合成ルートを図示するだけでなく、下段に合成時の反応条件と出典を表で表示する。多数の報告の中から合成目的に適った方法を選択し積み上げていくので、簡単に効率よく合成計画が立てられるユニークな機能である。

2-n-butyl-4-chloro-1-[[2'-(1H-tetrazol-5-yl)[1,1'-biphenyl]-4-yl]methyl]-1H-imidazole-5-methanol

Identification
Physical Data (9)
Spectra (20)
Bioactivity/Ecotox (561)
Use/Application (1311)

326 26 prep out of 45 reactions.

Melting Point(8)

Melting Point	Reference
183.5 - 184.5°C	Carini, David J.; Duncia, John V.; Aldrich, Paul E.; Chiu, Andrew T.; Johnson, Alexander L.; et al. J. Med. Chem., 1991, vol. 34, # 8 p. 2525 - 2547 Title/Abstract Full Text Scopus
186 - 188°C	ZENTIVA, a.s. Patent: WO2005/21535, 2005 Title/Abstract Full Text
102 - 105°C	Imperial Chemical Industries PLC Patent: US5294716, 1994 Title/Abstract Full Text

NMR Spectroscopy(13)

Description	Nucleus	Solvents	Frequency	Original Text	Comment	Reference
Chemical shifts	1H	dimethylsulfoxide-d6				Carini, David J.; Duncia, John V.; Aldrich, Paul E.; Chiu, Andrew T.; Johnson, Alexander L.; et al. J. Med. Chem., 1991, vol. 34, # 8 p. 2525 - 2547 Title/Abstract Full Text Scopus
Spin-spin coupling constants		dimethylsulfoxide-d6			1H-1H	Carini, David J.; Duncia, John V.; Aldrich, Paul E.; Chiu, Andrew T.; Johnson, Alexander L.; et al. J. Med. Chem., 1991, vol. 34, # 8 p. 2525 - 2547 Title/Abstract Full Text Scopus
	1H	DMSO-d6 (dimethylsulfoxide-d6)		H NMR spectra (DMSO): 0.81 T, J= 7.24,3H; 1.27 m, 2H; 1.47 m, 2H; 2.47 T, J= 7.57, 2H; 4.35 s, 2H; 5.26 s, 2H; 7.03-7.12 m, 4H; 7.49-7.73 m, 4H.		ZENTIVA, a.s. Patent: WO2005/21535, 2005 Title/Abstract Full Text

画面 2: 化合物の物性値情報画面

化合物の物性値の一覧表示画面。画面 2 は目的の化合物が合成できているか確認するために重要な融点と NMR (核磁気共鳴) のスペクトルデータを例示。融点も文献 (論文や特許) で報告のあるものを列挙するため、比較・検討が容易。