



Reaxys使い方講習会(初級編)

December 2011
<エルゼビア・ジャパン株式会社>



本日の内容

- Reaxysとは？
- 反応検索 (Reactions)
- 合成計画ツール (Synthesis Plans)
- 物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)
- 無機化合物のデータ検索 (Inorganic)
- ヘルプデスクのご案内



Reaxys基本検索ガイドをご活用ください

リアクシス Reaxys 基本検索ガイド

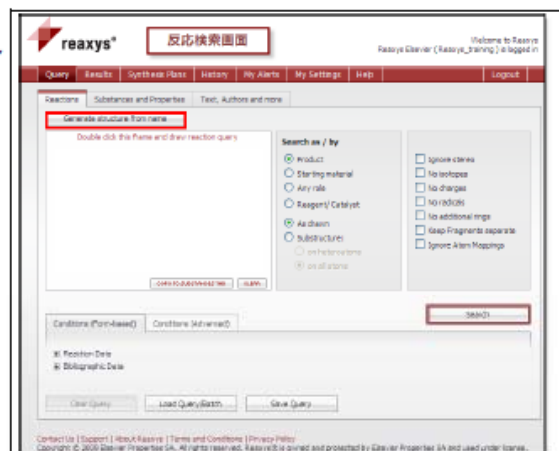


2010.12
エルゼビア・ジャパン株式会社

検索例：エソメプラゾール(Esomeprazole)の合成法を探す

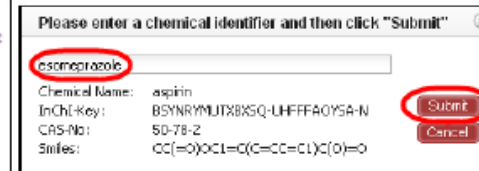
1. 反応検索画面です。

"Generate structure from name"
のアイコンをクリックします。



2. 名称の入力画面です。

"esomeprazole"と入力し、Submit
ボタンをクリックします。



3. 構造式の編集を行います。

自動的に名称から構造式が生成され
ます。ここでは、esomeprazole の
構造を含むものを探したいので、作
画ソフトを立ち上げて、編集を行いま
す。編集後、Transfer query ボタン
をクリックすると、Reaxys の検索画
面にコピー&ペーストされます。



<http://japan.elsevier.com/reaxysupport/>

• Reaxysとは？

- 反応検索 (Reactions)
- 合成計画ツール (Synthesis Plans)
- 物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)
- 無機化合物のデータ検索 (Inorganic)
- ヘルプデスクのご案内



Reaxysの情報源

有機化学

無機化学

有機金属
錯体

1) 有機化合物についての情報

Reaxys 諮問委員会にて厳選されたジャーナルから、1771 年以降の有機化合物と反応に関する情報を収録しています。著名な化学者である、フリードリヒ・バイルシュタイン氏が創刊した有機化合物に関するハンドブックを基礎としています。

2) 無機化合物・有機金属錯体についての情報

無機・有機金属分野の厳選された約 110 誌のジャーナルから、1772 年以降の無機化合物と金属錯体に関する情報を収録しています。ドイツの化学者、レオポルド・グメリン氏によって編纂された化学ハンドブックを継承しています。

3) 特許に由来する情報

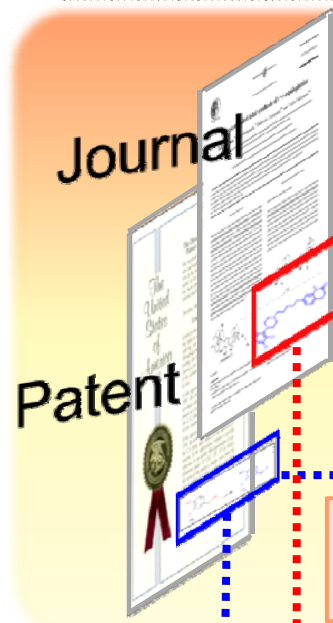
WIPO(世界知的所有権機関)/USPTO(米国特許商標庁)/EPO(ヨーロッパ特許庁)に出願されたWO/US/EP 特許(英文のみ)のうち、以下の4 種類の国際特許分類に該当する特許を収録対象としています(US は1976 年以降、WO/EP は1978 年以降)。

C07(有機化学)、A01N(消毒薬・殺虫剤・除草剤)、A61K(医薬品・歯科用または化粧品用製剤)、C09B(染料)

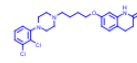
これらを統合してReaxysは生まれました



ファクトデータベース



Journal
Patent

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps All Reactions	Available Data
	7-[(4-{4-(2,3-dichlorophenyl)-1-piperazinyl}butoxy)-3,4-dihydrocyclopropyl]aniliprazole (TM), aniprazole OPC-14597	34 prep out of 75 reactions.	Identification Physical Data (43) Spectra (27) Bioactivity/EC50 (279) Use/Application (655)

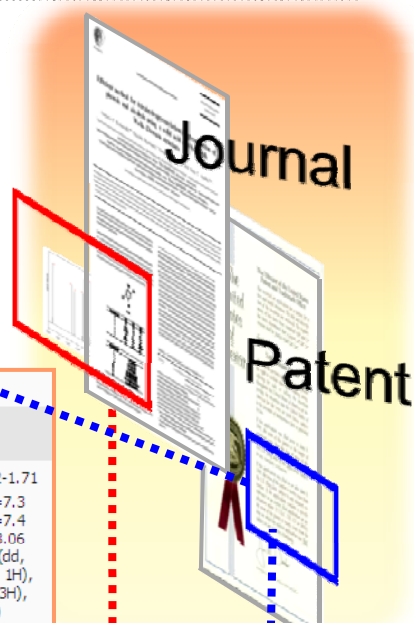
Melting Point

Melting Point
127 - 130 °C
139 - 140 °C
136.02 °C

NMR Spectroscopy (11)

Description	Nucleus	Coupling Nuclei	Solvents	Frequency	Original Text
	1H		pyridine-D5	400 MHz	¹ H NMR (400 MHz, pyridine-d ₅) δ 1.62-1.71 (m, 2H), 1.79-1.88 (m, 2H), 2.37 (t, J=7.3 Hz, 2H), 2.50-2.60 (m, 4H), 2.64 (t, J=7.4 Hz, 2H), 2.82 (t, J=7.4 Hz, 2H), 2.96-3.06 (m, 4H), 4.04 (t, J=6.5 Hz, 2H), 6.74 (dd, J=8.1, 2.5 Hz, 1H), 6.85 (d, J=2.5 Hz, 1H), 6.97 (d, J=8.0 Hz, 1H), 7.10-7.26 (m, 3H), 11.16 (br, exchangeable with D ₂ O, 1H)

Chinnappillai, Rajendiran; Arava, Veera Red Venkateswarlu
Patent: US2009/203907 A1, 2009;
Title/Abstract Full Text Show Details



Journal
Patent

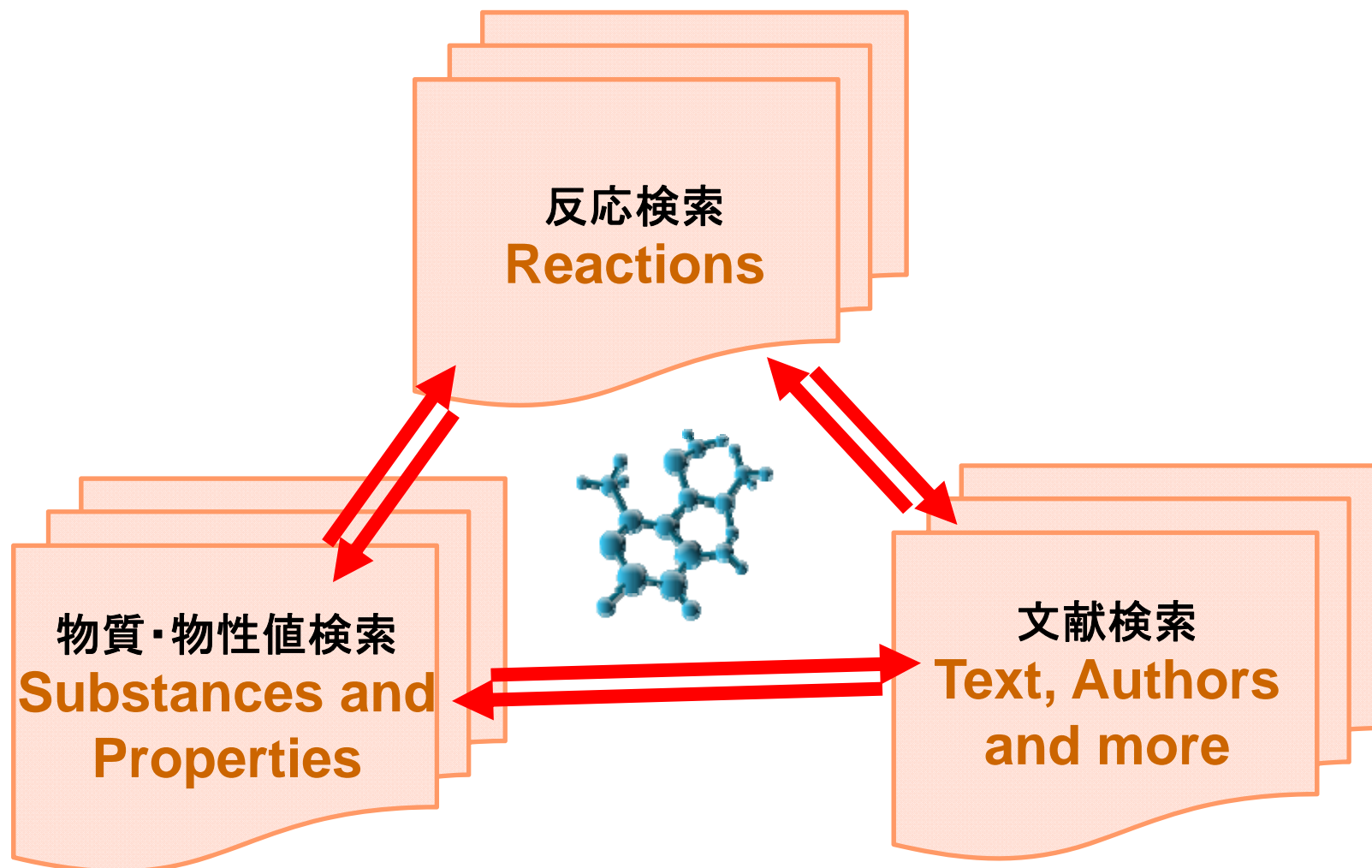
資料からデータを抜粋して収録しているので原著を参照しなくてもOK

Yield	Conditions	References
92.8%	With potassium carbonate in water T=90 - 95°C; 4 h; Show Experimental Procedure	OTSUKA PHARMACEUTICAL CO., LTD. Patent: WO2004/63162 A1, 2004; Location in patent: Page 11; Title/Abstract Full Text Show Details
65%	With potassium carbonate; tetrabutylammonium bromide in water; toluene 13 h; Heating / reflux; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	Naddaka, Vladimir; Brand, Michael; Davidi Gribun, Irina; Arad, Oded; Kaspi, Joseph Patent: US2006/79689 A1, 2006; Location in patent: Page/Page column 11; Title/Abstract Full Text Show Details
65%	With potassium carbonate; tetrabutylammonium bromide in water; T=65°C; 13 h; Heating / reflux; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	

条件違いの反応も見比べて検討可能



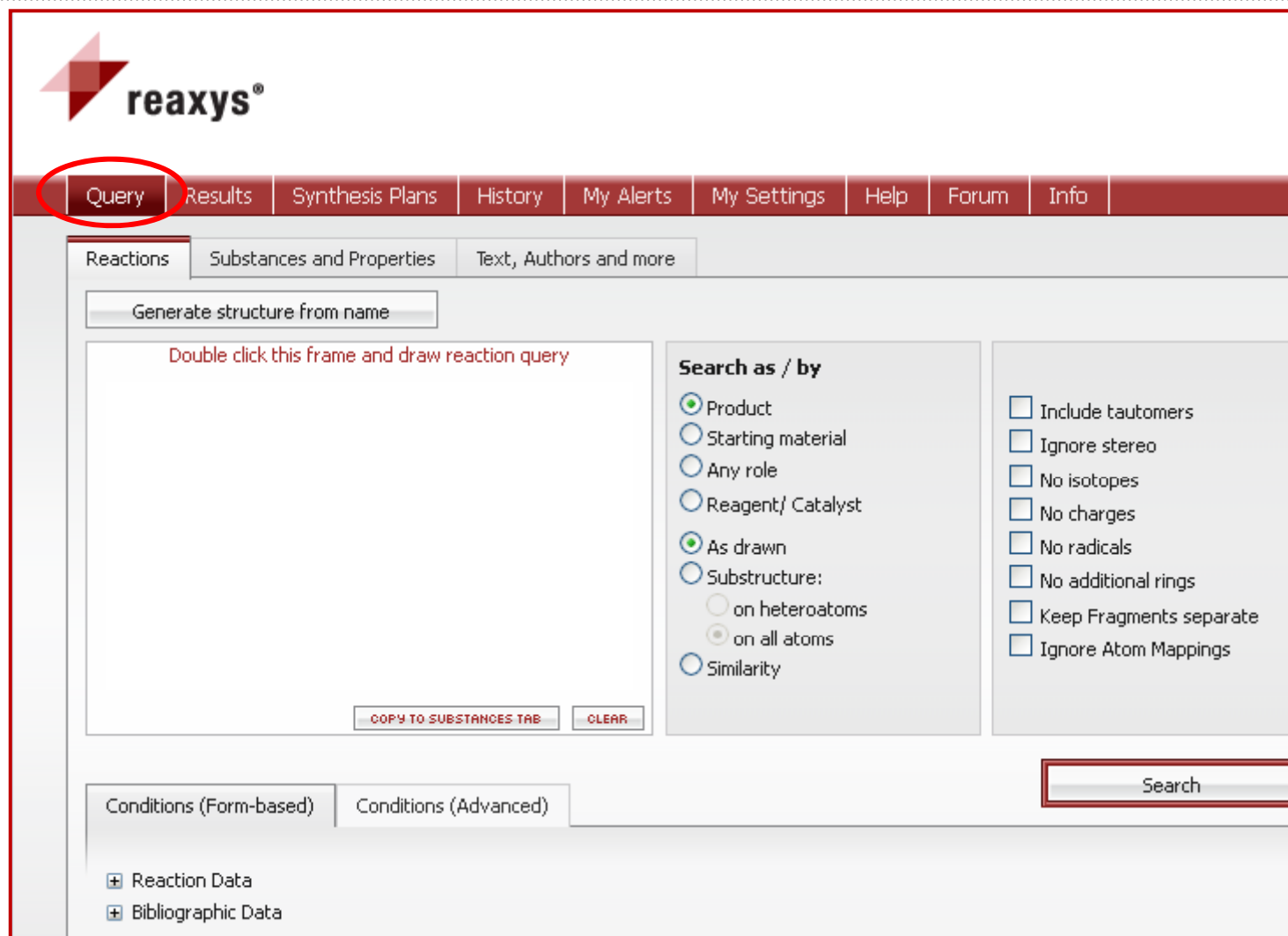
Reaxysの検索モード



-
- Reaxysとは？
 - **反応検索 (Reactions)**
 - 合成計画ツール (Synthesis Plans)
 - 物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)
 - 無機化合物のデータ検索 (Inorganic)
 - ヘルプデスクのご案内



Query (検索) 画面



The screenshot displays the Reaxys Query interface. At the top left is the Reaxys logo. A navigation bar contains the following tabs: Query (highlighted with a red circle), Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, Forum, and Info. Below the navigation bar are three sub-tabs: Reactions (selected), Substances and Properties, and Text, Authors and more. A text input field labeled "Generate structure from name" is positioned above a large drawing area. The drawing area contains the instruction "Double click this frame and draw reaction query". To the right of the drawing area is a "Search as / by" section with radio button options: Product (selected), Starting material, Any role, Reagent/ Catalyst, As drawn (selected), Substructure: (with sub-options "on heteroatoms" and "on all atoms"), and Similarity. Further right is a list of checkboxes: Include tautomers, Ignore stereo, No isotopes, No charges, No radicals, No additional rings, Keep Fragments separate, and Ignore Atom Mappings. At the bottom of the drawing area are "COPY TO SUBSTANCES TAB" and "CLEAR" buttons. Below the drawing area are two tabs: "Conditions (Form-based)" and "Conditions (Advanced)". A "Search" button is located at the bottom right of the main content area. At the bottom left, there are expandable sections for "Reaction Data" and "Bibliographic Data".

反応検索①: 作画ソフトで構造式を描画し検索

The image illustrates the workflow for searching a reaction using a drawing software. It is divided into two main parts: the Reaxys web interface and the MarvinSketch software.

Reaxys Interface (Left):

- 1:** The "Reactions" tab is selected in the top navigation bar.
- 2:** The "Generate structure from name" button is highlighted.
- 3:** A callout box points to the drawing area with the text: "描画パットをダブルクリックすると作画ソフトが立ち上がります。" (Double-clicking the drawing pattern will start the drawing software).
- 4:** The "Search as / by" section is highlighted, showing options like "Product", "Starting material", "Any role", "Reagent/ Catalyst", "As drawn", "Substructure:", and "Similarity".
- 5:** The "Search" button is highlighted.

MarvinSketch Software (Right):

- 1:** The MarvinSketch window is titled "MarvinSketch (ChemAxon) - Mozilla Firefox".
- 2:** The drawing area shows a chemical structure of a thiazole derivative.
- 3:** The "Transfer Query" button is highlighted at the bottom of the window.

反応検索②: 名前から構造式を呼び出し検索

反応検索画面

描画パットをダブルクリックすると作画ソフトが立ち上がります。

1 Generate structure from name

2 Please enter a chemical identifier and then click "Submit"

3

4

Search

is

Chemical Name: aspirin

InChI-Key: BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N

CAS-No: 50-78-2

Smiles: CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C(O)=O

Submit

Cancel

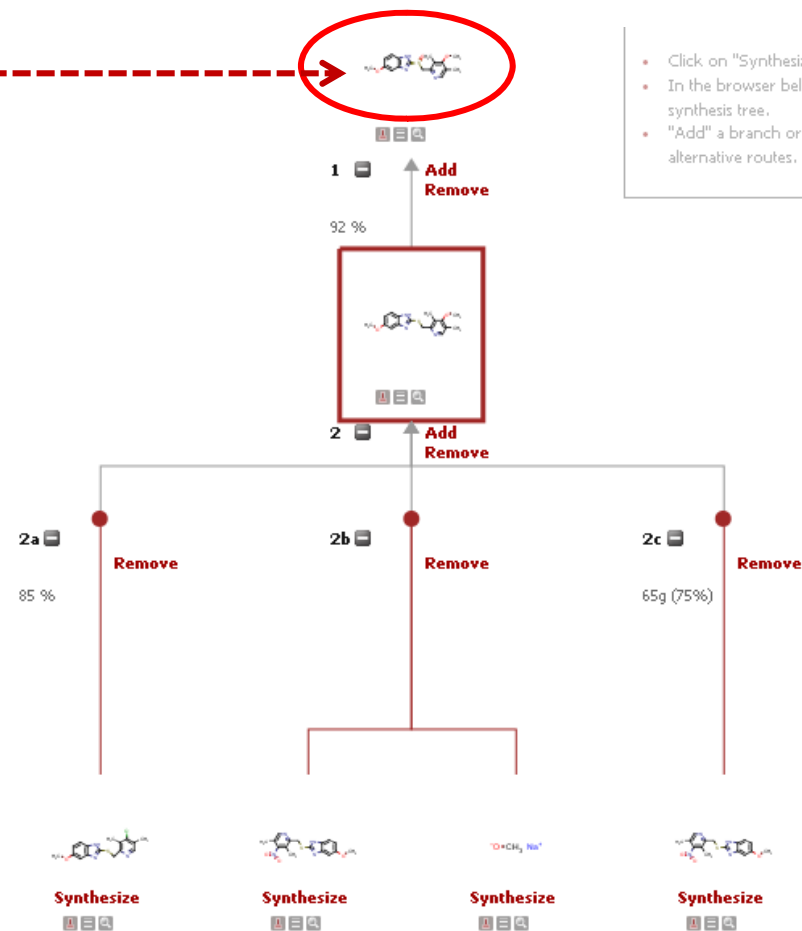
-
- Reaxysとは？
 - 反応検索 (Reactions)
 - **合成計画ツール (Synthesis Plans)**
 - 物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)
 - 無機化合物のデータ検索 (Inorganic)
 - ヘルプデスクのご案内

合成計画ツール

ある化合物を最終生成物として逆合成的に合成ルートを描く

それぞれの反応条件なども表示されます

Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 92%	With tert.-butylhydroperoxide in water; (-)-(R,R)-1,2-bis(2-bromophenyl)ethane-1,2-diol; titanium (IV) isopropoxide in toluene T=-20°C; 24 h; Inert atmosphere; optical yield given as percent ee enantioselective reaction;	Jiang, Biao; Zhao, Xiao-Lo European Journal of Organic Chemistry Title/Abstract Full Text
	<input type="checkbox"/> 92.7%	Stage #1: With D-tartaric acid di-n-propionamide in toluene T=70°C; 0.166667 h; Stage #2: With titanium(IV) isopropylate in toluene T=55 - 60°C; 1 h; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	CHENGDU LIKAI CHIRAL TECHNOLOGY ACADEMY OF SCIENCE Patent: WO2009/114981 A1 Location in patent: Page/Paragraph Title/Abstract Full Text
	<input type="checkbox"/> 90%	With tert.-butylhydroperoxide in water; toluene T=-20°C; 12 h; Show Experimental Procedure	RATIOPHARM GMBH Patent: US2008/319195 A1 Location in patent: Page/Paragraph Title/Abstract Full Text
Show All Remaining Details (7)			
2a	<input type="checkbox"/> 85%	With sodium methylate in methanol; ethyl acetate Show Experimental Procedure	Kuraray Co., Ltd. Patent: US6197962 B1, 20020101 Title/Abstract Full Text
2b	<input type="checkbox"/>	With N-benzyl-N,N,N-triethylammonium chloride in methanol T=20°C; 24 h; Heating / reflux; Show Experimental Procedure	Gant, Thomas G.; Sarshar Patent: US2007/82929 A1, 20060901 Location in patent: Page/Paragraph Title/Abstract Full Text
2c	<input type="checkbox"/> 65g (75%)	With sodium methylate; MgCl ₂ ; potassium carbonate in methanol; water; ethyl acetate Show Experimental Procedure	Cipla Limited Patent: EP1085019 A1, 20050901 Title/Abstract Full Text
	<input type="checkbox"/>	With hydrogenchloride; sodium methylate in methanol; water Show Experimental Procedure	Wockhardt Europe Limited Patent: US6245913 B1, 20010901 Title/Abstract Full Text



-
- Reaxysとは？
 - 反応検索 (Reactions)
 - 合成計画ツール (Synthesis Plans)
 - **物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)**
 - 無機化合物のデータ検索 (Inorganic)
 - ヘルプデスクのご案内

物質・物性値からの検索

物質名、物性値、書誌情報などからも検索可能。
反応検索同様に構造式を作画、もしくは名前から構造式を呼び出して検索。

The screenshot shows the reaxys website interface. The 'Substances and Properties' tab is selected and circled in red. Below it, there is a search area with a 'Generate structure from name' input field. A red dashed arrow points from this field to a pop-up window. To the right of the input field are radio buttons for 'As drawn', 'Substructure: on heteroatoms', 'on all atoms', and 'Similarity'. Further options include checkboxes for 'Include tautomers', 'Ignore stereo', 'No salts', 'No mixtures', 'No isotopes', and 'No additional rings'. A 'Search' button is highlighted with a red box. Below the search area are tabs for 'Properties (Form-based)' and 'Properties (Advanced)', with 'Substance Data' and 'Bibliographic Data' listed under the first tab.

A pop-up window titled 'Please enter a chemical identifier and then click "Submit"'. It contains a text input field with 'is' entered. Below the input field, the following information is displayed: Chemical Name: aspirin, InChI-Key: BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N, CAS-No: 50-78-2, and Smiles: CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C(O)=O. There are 'Submit' and 'Cancel' buttons on the right.

The screenshot shows the MarvinSketch software interface running in Mozilla Firefox. The URL in the address bar is https://www.reaxys.com/reaxys/js/sre_4_0_1_17/child_java.jsp. The main window displays a chemical structure of aspirin (acetylsalicylic acid). The interface includes a menu bar (File, Edit, View, Insert, Options, Object, Templates, Chemistry, Tools, Help) and a toolbar with various drawing tools. At the bottom, there are buttons for 'Transfer Query' and 'Cancel & Return', along with a note: 'Reaxys supports various structure editors. Please check "My Settings" for more.'

-
- Reaxysとは？
 - 反応検索 (Reactions)
 - 合成計画ツール (Synthesis Plans)
 - 物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)
 - **無機化合物のデータ検索 (Inorganic)**
 - ヘルプデスクのご案内

無機化合物のデータ検索

収録対象分野: 電気科学、磁気科学、光学、ナノ科学

収録対象物質: 一般的無機化合物他、配位化合物、半導体物質、ガラス、セラミック、合金、ドーピング物質、触媒、鉱物、ナノマテリアル、ゼオライト、レーザー物質など

The screenshot shows the Reaxys search interface. The 'Properties (Form-based)' section is expanded, and the 'Molecular Formula' field is circled in red. A callout bubble points to this field with the text '無機化合物は構造式よりも化学式で検索する' (For inorganic compounds, search by chemical formula rather than structural formula).

無機化合物は構造式よりも化学式で検索する

分子式から検索する
検索画面下部の
Properties (Form-based)をクリック
しIdentification Dataの中の
Molecular Formulaを用いる

分子式の表記例

以下の検索式をMolecular Formulaに入れて検索する

物質の種類	検索式例
元素	Fe
簡単な分子	HCl
無機塩	NaCl
付加化合物	CoCl ₂ *4NH ₃
配位化合物	Fe(C ₅ H ₅) ₂
固溶体	Na ₂ SO ₄ #Cs ₂ SO ₄
鉱物	CaMg(CO ₃) ₂
	Chemical nameにDolomiteと入れる
原子を列挙して表示	h2(s, se)o4
周期表番号やグループ名を入れた検索	(1b)Cl (alk)Cl
全ての金属元素とハロゲン	MX
遷移元素とハロゲン	(trm) (hal)
一般的な有機グループ	Me, Et, Phなど
	Pb???
一つ以上の元素と記号の組み合わせ	(??が1種類の元素に相当) Pb????
指定した元素を含む物質	Tm*

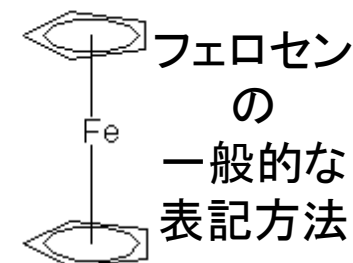
物質の種類	検索式例
元素を指定(数は制限なし)	S?
正電荷をもつ元素	(?+)Na or (*+)Na
ゼロ電荷でないもの	(?)Pb or(*)Pb
ゼロ電荷	(0+)Na
元素数のレンジを指定	FeCl(2-3)
元素数を指定	FeCl (2,4)
2つの元素のレンジを組み合わせる	FexOy x=2,3 y=2-4
数式表示	FenPd1-n n=0-1
Feを含む混合物(合金、ドープ物質など)	Fe#
FeとNiを含む混合物(合金など)	Fe#Ni
多成分系	ZnO#TiO ₂ PbSO ₄ #PbO#SiO ₂
溶液	NaCl#H ₂ O
水和物	CoCl ₂ ,(H ₂ O)?
ガラス、セラミック物資	B ₂ O ₃ (10-15W%)#Al ₂ O ₃ (10-15W%)#SiO ₂ #
(10-15%のB ₂ O ₃ および、10-15%のAl ₂ O ₃ を含むSilica spheres	
合金	Fe(96W%)#Cr(4W%)
(96%Feおよび4%Crを含む鉄合金)	



錯体表記方法

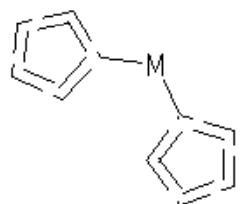
シクロペンタジエン環 (Cp環) を持つ π 錯体の表記例

金属との配位結合は**単結合**として表記
非局在化しているCp環のような個所は全て**Single or Double**として表記



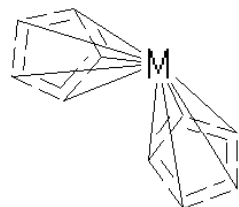
錯体を表現する場合、配位結合を表記する

eta-1
(η^1)



- Cp環と金属原子間の配位結合は、単結合を1本だけ表記する
- Cp環の全ての結合は、Query bond typeから「Single or Double」又は「Any」を指定する

eta-5
(η^5)



- Cp環と金属原子間の配位結合は、単結合を5本表記する
- Cp環の全ての結合は、Query bond typeから「Single or Double」又は「Any」を指定する

錯体検索①

Bis(diphenylphosphin)ferroceneを検索

構造式エディタで構造式を描画

The screenshot shows a chemistry software interface with a central workspace containing a ferrocene-like structure with an iron atom (Fe) coordinated to two cyclopentadienyl rings. The 'Object' menu is open, and the path 'Object > Bond > Type > Single or Double' is highlighted. A red arrow points from the 'Object' menu item in the top toolbar to the 'Object' menu in the workspace. The 'Bond' menu is open, showing 'Type' as a sub-menu. The 'Type' menu is open, showing 'Single or Double' as the selected option. The 'Single or Double' option is highlighted with a blue background.

5員環は、Single or doubleで表記する
Bondを選択し、Object>Bond>Type>Single or Double

錯体検索②

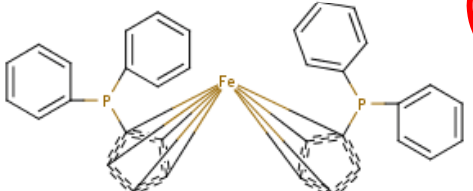
構造式をReaxysへ移し、部分構造検索

Query
Results
Synthesis Plans
History
My Alerts
My Settings
Help

Reactions
Substances and Properties
Text, Authors and more

Generate structure from name


Double click this frame and draw structure query



As drawn
 Substructure:
 on heteroatoms
 on all atoms

Ignore stereo
 No salts
 No mixtures
 No isotopes

Form-based Search
Advanced Search

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.
 Hide Details	1,1'-bis(diphenylphosphanyl)ferrocene 1,1'-bis(diphenylphosphino) ferrocene 1,1-diphenylphosphinoferrocene bis(diphenylphosphin)ferrocene (diphenylphosphino)ferrocene dppf bis(diphenylphosphano-η(5)-cyclopentadienyl)iron	Identification Physical Data (16) Spectra (33) Bioactivity/Ecotox (1) Use/Application (6)	392	10 prep out of 687 reactions.

Structure/Compound Data

Reaxys Registry Number: 11324583

Chemical Name: 1,1'-bis(diphenylphosphanyl)ferrocene, 1,1'-bis(diphenylphosphino) ferrocene, 1,1-diphenylphosphinoferrocene, bis(diphenylphosphin)ferrocene, (diphenylphosphino)ferrocene, dppf, bis(diphenylphosphano-η(5)-cyclopentadienyl)iron

Molecular Formula: C₃₄H₂₈FeP₂
Linear Structure Formula: C₅H₄(C₆H₅)₂PF₂C₅H₄(C₆H₅)₂P
Molecular Weight: 554.391

▼ **Identification**

⚡ **Physical Data**

⚡ **Melting Point (2)**

Melting Point	Solvent	Comment	Reference
184 - 185°C		from Gmelin	Adeleke, J. Adebajo; Chen, Yu-Wang; Liu, Ling-Kang Organometallics, 1992 , vol. 11, p. 2543 - 2550 Full Text
184 - 185°C	benzene hexane	from Gmelin	Seyferth, Dietmar; Withers, Howard P. Jr. Journal of Organometallic Chemistry, 1980 , vol. 185, p. C1 - C5 Full Text
			Seyferth, Dietmar; Withers, Howard P. Organometallics, 1982 , vol. 1, p. 1275 - 1282 Full Text

-
- Reaxysとは？
 - 反応検索 (Reactions)
 - 合成計画ツール (Synthesis Plans)
 - 物質・物性値からの検索 (Substances and Properties)
 - 無機化合物のデータ検索 (Inorganic)
 - **ヘルプデスクのご案内**

Reaxys関連ホームページとヘルプデスク

- 日本語ホームページ(製品情報):
<http://japan.elsevier.com/products/reaxys/>
- 日本語ホームページ(エンドユーザサポート):
<http://japan.elsevier.com/reaxysupport/>
- 英語ホームページ:
<http://www.info.reaxys.com/>
- ヘルプデスク(日本語、中国語、英語可):
email: jpinfo@reaxys.com
電話: 03-5561-5035

