

Reaxys



Reaxys基本検索ガイド

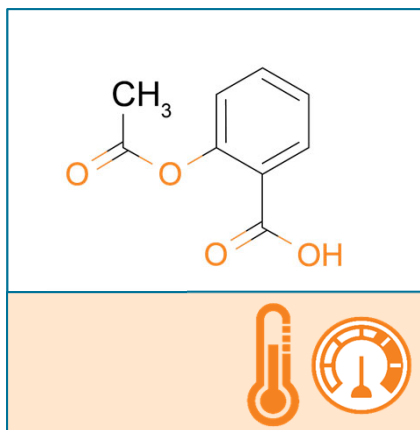
2021.09

目次

1. 概要
2. Reaxys検索方法
 - Reaxysへのアクセス
3. Quick Search: 反応検索
4. Synthesis Planner
5. Quick Search : 物質・物性値検索
6. 検索結果のExport / Save / Alertの利用
7. Quick Search: テキストサーチ
8. Query Builder
9. Query Builder検索事例
 - 条件の掛け合わせ(天然物、抗菌活性、分子式)
 - ノイズの除去
 - 条件の掛け合わせ(用途)
10. Appendix
 - 無機化合物の検索
 - 化合物の表記方法
 - 動作環境

Reaxysとは？

- 化学研究で実際に必要な「**データ**」を集めたデータベース
- 化学関連論文や特許から必要な「**情報そのもの**」を的確に抽出して提供



3,516万以上の化合物とその物性(物性値、スペクトル、生物活性データなど)**5億5千万**件を収録



5,660万件以上の反応情報(反応条件、溶媒、触媒、収率など)を収録



7,903万件以上のライフサイエンス、マテリアル、エンジニアリング、薬理学、環境科学などに関連する文献を**16,000誌**のジャーナルや特許から収録

Chemistry fundamentals

Uses across
disciplines

コンテンツ概要

- ✓ 収録ジャーナル： 合成化学関連450誌
 - **+** 幅広い分野の約16,000誌を追加
- ✓ 化合物に関わる必須の特許情報
- ✓ **5億5千万件以上の実測物性値・同定情報**
- ✓ 約5,660万の反応情報（すべて異なる反応）
- ✓ 論文ガイドにとどまらず、原著参照する前に必要な反応条件や実測物性値を得られるファクトデータベース
- ✓ PubChemやeMoleculesに収録されている化合物データも同時検索可能
- ✓ Gmelin Handbook, Belstein Handbookを収載

2021年9月現在のコンテンツ

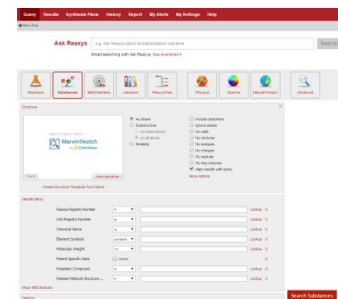
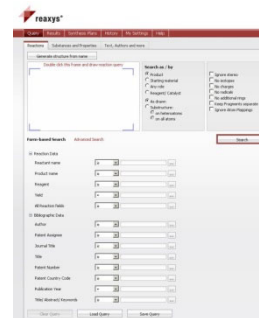
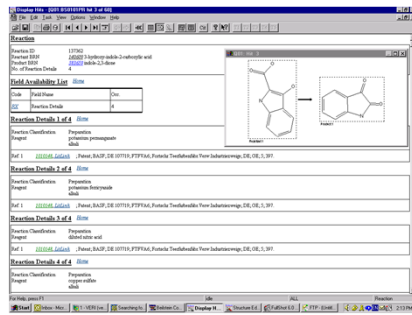
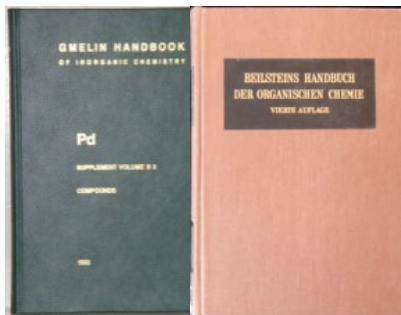
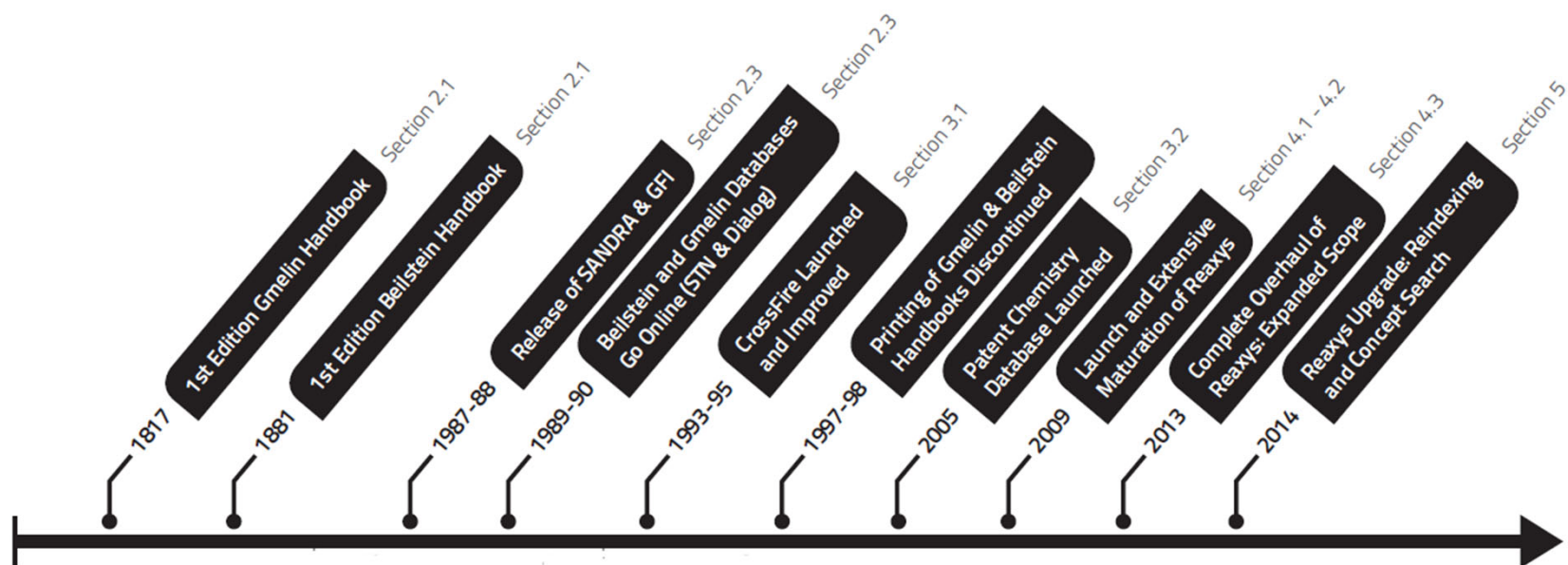
- 収録反応数： 約5,660万
- 収録化合物： 約3,516万
- **実測物性値： 5億5千万件以上**

収録対象の大幅な拡大

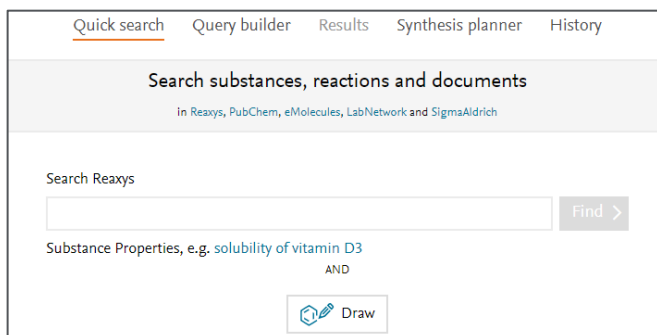
ライフサイエンス、エンジニアリング、薬理学、環境科学などの多岐にわたる分野の書籍、学会抄録などを含む約16,000誌の定期刊行物における構造情報や化学関連情報



Reaxys – 開発の歴史 (基礎となった情報源)



ユーザーニーズを満たすインターフェースやデータ構造



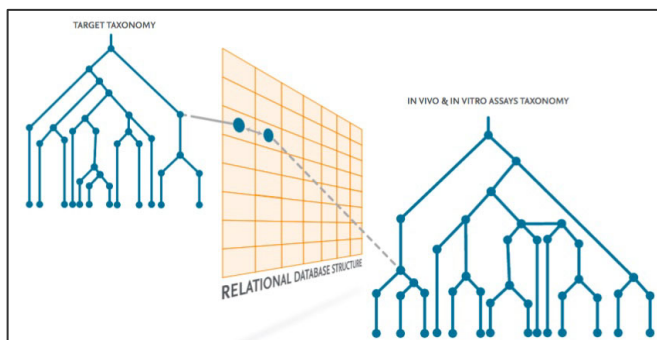
① ユーザーフレンドリーなインターフェース

- 構造検索、キーワード検索などユーザーが使いやすい方法に対応。
- 構造＋キーワードなどの検索にもドラッグアンドドロップで対応、直観的に利用可能



② 詳細なインデキシングにより整理されたデータ

- 細部まで行き届いた詳細なインデキシングによるデータ構成で迅速な情報の入手を実現
- 関連する情報を俯瞰的にとらえることが可能



③ Reaxys独自のタキソノミーとデータ構成

- 化学に関連したReaxys独自のタキソノミーを構築しデータの階層化により効率的な検索を実現
- ニーズに応じた使いやすいフィルタリングの機能を搭載し必要な情報に短時間で到達

コンテンツ 学術論文①

約450誌強の雑誌タイトルから専門家が**人手で**注意深く、実用的な価値を持つ実験データを抽出

- 有機化学 1771年～
- 無機化学・有機金属錯体 1772年～

1

Conditions [Find Similar](#) > Reaction ID: 22871426 [+i](#)

Conditions

With sodium hydrogencarbonate in water; isopropyl alcohol at 20 °C; for 3h;

Experimental Procedure [^](#)

Na[aspCO₂]₂.

The preparation of the title compound was adapted from the literature [1]. In a 10 mL round-bottom flask, a H₂O:iPrOH 85:15 v/v solution (1.0 mL) was added dropwise, with stirring, to a mixture of aspCO₂H (542 mg, 3.00 mmol) and NaHCO₃ (271 mg, 3.23 mmol). The bubbling suspension was stirred at room temperature for 3 hours in an open system. The resulting colorless solution (pH = 7-8) was diluted with iPrOH (8 mL), stirred for further 30' then filtered over celite. The filtrate solution was concentrated under vacuum (V ≈ 1-2 mL, opalescent mixture) then settled aside at -20 °C overnight. The colorless crystals (Na[aspCO₂]₂·2H₂O [1]) were collected by filtration, washed with iPrOH (2 mL, -20 °C), Et₂O then dried. The resulting colorless solid was stored under vacuum. The solid was possibly associated to the removal of water of crystallization [1]. The resulting colorless solid was stored under vacuum. The solid was possibly associated to the removal of water of crystallization [1]. The resulting colorless solid was stored under vacuum. The solid was possibly associated to the removal of water of crystallization [1].

With sodium hydride in N,N-dimethyl-formamide for 0.5h;

Yield	Reference
88%	Blancalana, Lorenzo; Pampaloni, Guido; Zacchini, Stefano; Marchetti, Fabio [Journal of Organometallic Chemistry, 2018, vol. 869, p. 201 - 211] Full Text Cited 1 times Details Abstract >

化合物の
実測物性値情報

化学反応情報

Physical Data - 565				Show/Hide columns v
Melting Point - 63				
Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location	Reference	
141			Lun, Huilin; Ouyang, Jing; Yang, Huaming [RSC Advances, 2014, vol. 4, # 83, p. 44197 - 44202] Full Text Cited 39 times Details Abstract >	
			Darwish, Shaza; Zeglinski, Jacek; Krishna, Gamidi Rama; Shaikh, Rahamatullah; Khraisheh, Majeda; Walker, Gavin M.; Croker, Denise M. [Crystal Growth and Design, 2018, vol. 18, # 12, p. 7526 - 7532] Full Text Details Abstract >	
130.5			Dichi, Emma; Sghaier, Mehrez; Guiblin, Nicolas [Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2018, vol. 131, # 3, p. 2141 - 2155] Full Text Cited 1 times Details Abstract >	
133 - 134			Sarief, Abdulla; Haque, SK Manirul; Feroze, Syed Mudabbir; Arifuddin, Mohammed [Journal of the Chinese Chemical Society, 2018, vol. 65, # 9, p. 1104 - 1109] Full Text Details Abstract >	
150	ethanol		Singh, Navneet; Garg, Geetika [Asian Journal of Chemistry, 2018, vol. 30, # 11, p. 2377 - 2382] Full Text Details Abstract >	

コンテンツ 学術論文②

16,000誌のジャーナルのフルテキストから構造情報やキーワード、化学関連のコンセプトを収録

- 自然言語処理技術を用いて情報を抽出 2015年～
 - 化合物名
 - 反応分類(酸化、還元、重合、縮合など)
 - 人名反応、物性値名など

ジャーナルの全文情報を最先端の技術により処理し収録



- **Compendex:** Technology & Engineering
- **EMBASE:** Biomedicine & Pharmacology
- **GeoBase:** Geosciences & Environment
- **MedLine:** Life Sciences & Medicine

* インデキシングに使用

① Reaxys独自の**タキソミー**を使用、情報を整理し収録

実際に探している情報を
簡単に効率よく収集

② 検索から導かれ得る複数の網羅的な選択肢を提示

分野を超えた新たな
化学的見識の発見

③ 年間約**30万化合物**の継続的な情報拡充

加速的に増加し続ける
情報量に迅速に対応

コンテンツ 特許



特許公報からのデータ収録

- WO/US/EPに出願された英文特許から抽出
- アジアの特許公報に基づく化合物の収録を開始、収録化合物情報の大幅な拡大

* 国際特許分類が以下の4種に該当する特許を収録

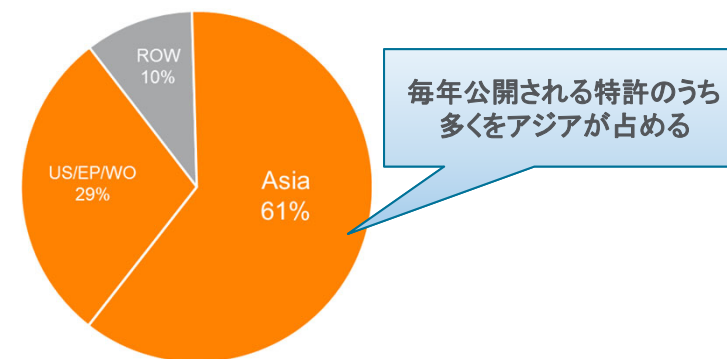
C07 (有機化学)、A01N (殺菌剤、殺虫剤、除草剤)、A61K (医薬品、歯科用又は化粧品用製剤)、C09B (染料)

- テキストデータに関しては105か国、170 IPCまで収録を拡大(2000年まで遡及)
- 構造式データも収録拡大予定

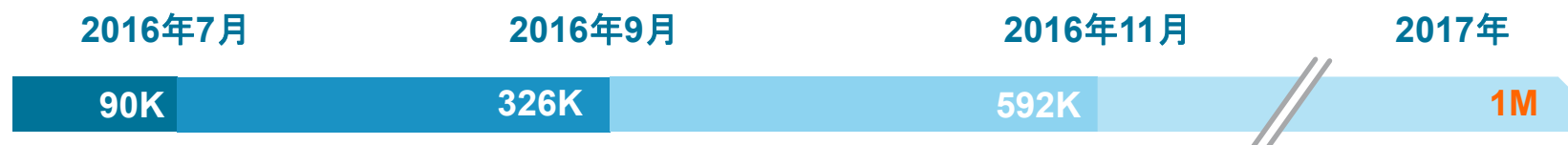
	World	US	Europe	Japan	S. Korea	China	Taiwan
≤2014	✓	✓	✓				
2015	✓	✓	✓	✓	✓		
2016	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
2017	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

US: 1976年以降
WO/EP: 1978年以降

Patent Publications Per Year (rel.%)



アジアの特許公報由来の化合物数の増加



収録対象IPC一覧(構造情報)

Main *IPC* C07 (without C07H21 and C07K)

Main *IPC* A61K31 with secondary *IPC* C07

Main *IPC* A61K without A61K31 and without secondary *IPC* C07

Main *IPC* C09B

Main *IPC* A01N

There are other more specific *IPCs* that are covered in Reaxys too:

A01N - preservation of bodies of humans, animals, plants or parts thereof, and biocides.

A61K - preparations for medical, dental, or cosmetics.

C07B - general methods of organic chemistry, apparatus thereof.

C07C - acyclic or carbocyclic compounds.

C07D - heterocyclic compounds.

C07F - acyclic or carbocyclic compounds or heterocyclic compounds containing elements other than carbon, hydrogen, halogen, oxygen, nitrogen, sulfur, selenium, or tellurium.

C07G - compounds of unknown constitution.

C07H - sugars, derivatives thereof, nucleosides, nucleotides, nucleic acids (without C07H21 nucleic acids).

C07J - steroids.

C07M - indexing scheme associated with subclasses C07B to C07K, relating to specific properties of organic compounds.

C09B - organic dyes or closely-related compounds for producing dyes, mordants, lakes.

https://service.elsevier.com/app/answers/detail/a_id/11579/kw/ipc/supporthub/reaxys/

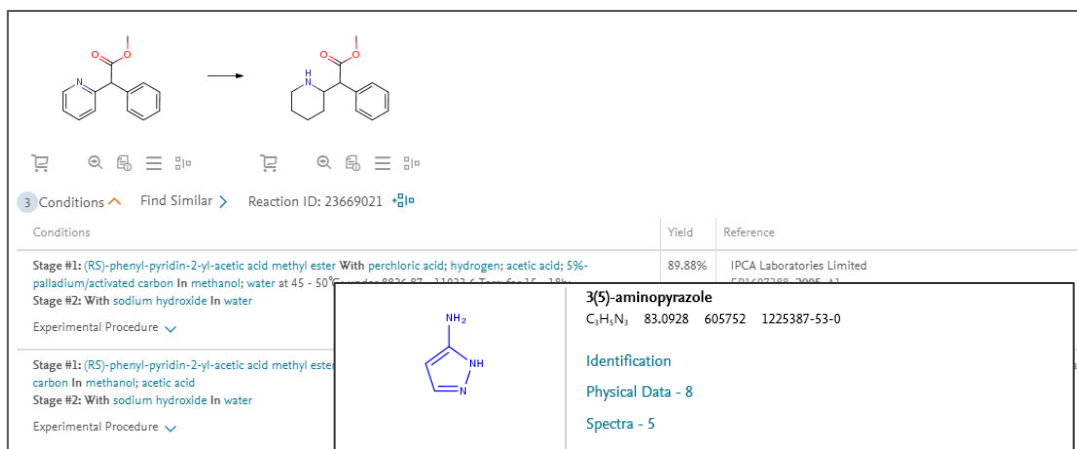
コンテンツ 収録項目

特許および約450誌のジャーナル

- 専門家が人手で実用的な価値を持つ実験データを抽出

<反応情報>

- 反応式、収率、反応条件、実施例



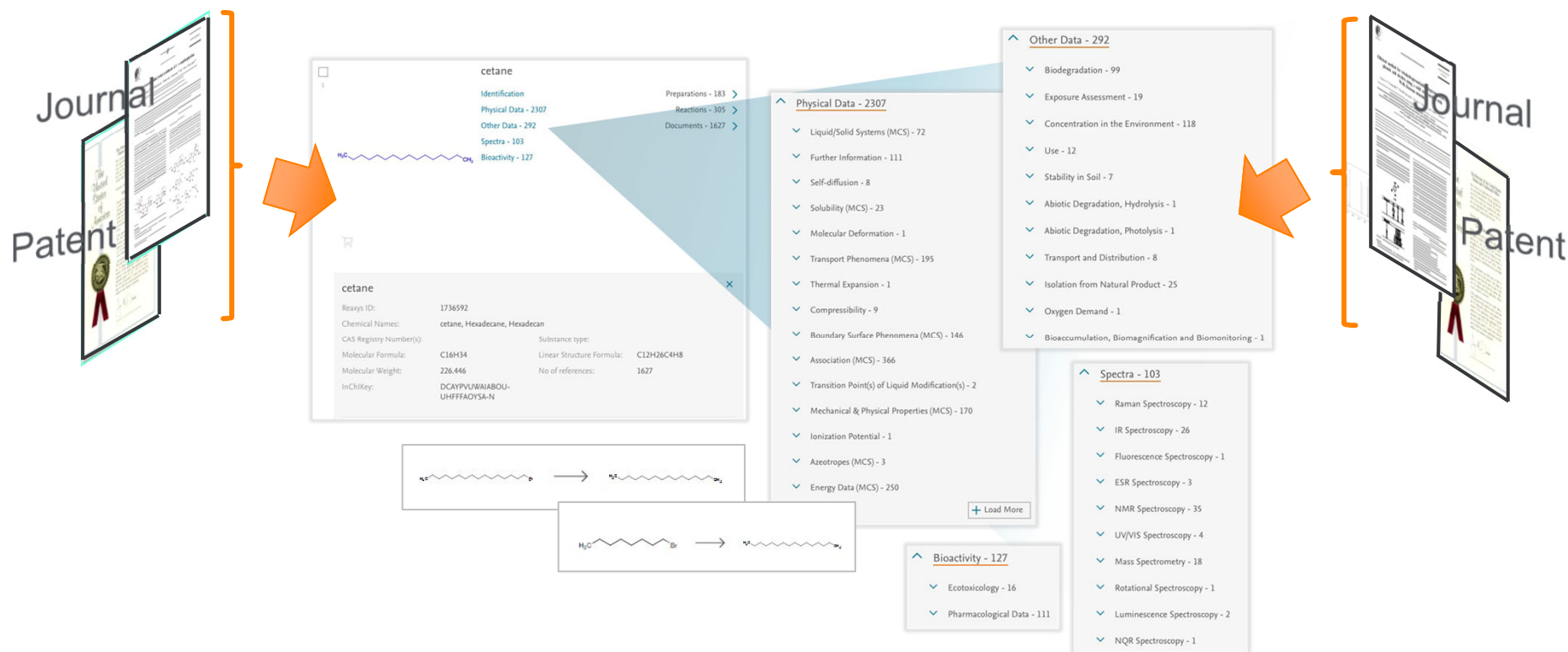
<化合物情報>

- 物性値
 - ✓ 融点、沸点、溶解度、分配係数
 - スペクトルデータ
 - ✓ NMR、UVスペクトル、マスマスペクトル
 - 市販情報
- * 約500項目、5億5000万件以上のデータ

3(5)-aminopyrazole	
Identification	
Physical Data - 8	
Melting Point - 2	
Melting Point, °C	Reference
36	Ege; Arnold - [Angewandte Chemie, 1974, vol. 86, p. 237] Full Text Details
	BASF - CH599162, 1974, DE2400415 [Chem.Abstr., vol. 83, # 179101] Full Text Details
36 - 38	Dorn et al. - [Angewandte Chemie, 1964, vol. 76, p. 920]

Reaxysのデータ構造

- 複数ある情報源から化合物、反応に関するすべての情報を1レコードとして集約
- それぞれの情報源へのスムーズなアクセス



ユーザーの検索に合わせ最適化されたインターフェース

Quick Search

Reaxys®

[Quick search](#) [Query builder](#) [Results](#) [Synthesis planner](#) [History](#)

Search for

テキスト検索はキーワードだけではなく
文中の言葉の前後関係を考慮した
自然言語処理に対応

Search Reaxys

Find >

Substance Molecular Formula, e.g. Pt(PPh3)3

AND

多くの研究者が利用する
構造検索とキーワード検索に対応したシ
ンプルかつ直観的なインターフェース

As drawn

ユーザーが必要とする情報を優先的に表示

検索例: esterification of benzoic acid

Search Reaxys

esterification of benzoic acid × Find >

Substance Molecular Formula, e.g. Pt(PPh₃)₃

AND

 Draw

① 自然言語を認識

目的の検索結果に加え
関連ある選択肢を追加で提案

② 自然言語処理により
「Benzoic acidの
エステル化の検索」
であることを認識

③ 上記の検索関連のある
選択肢提示

Results for esterification of benzoic acid

	86	Reactions	Reaction Query :  as drawn AND Condition : esterification Edit in Query Builder Create Alert 	Preview Results  View Results 
	1,294	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : esterification, benzoic acid Edit in Query Builder Create Alert 	Preview Results  View Results 
	76,021	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : esterification Edit in Query Builder Create Alert 	Preview Results  View Results 
	70,738	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : benzoic acid Edit in Query Builder Create Alert 	Preview Results  View Results 

複雑な掛け合わせの検索にもドラッグ & ドロップで対応

Query Builder

④ 検索条件を設定して検索

複数物性、構造やキーワードの組み合わせ、検索履歴との掛け合わせなどが容易に

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The user 'Takashi Isobe' is logged in. The main search area has tabs for 'Reactions', 'Substances', and 'Documents'. Below these are icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete all'. The search criteria are defined in a list:

- Structure**: A box with a pencil icon and the text 'Create Structure / Reaction Drawing'.
- Melting Point**: A row with a dropdown menu, a 'Find any' checkbox, and a 'Show fields' dropdown. The fields listed are '(Melting Point, °C, Solvent)'.
- Boiling Point**: A row with a dropdown menu, a 'Find any' checkbox, and a 'Hide fields' dropdown. The fields listed are 'Boiling Point, °C' and 'Pressure (Boiling Point), Torr'.

On the right side, there is a 'Fields' panel titled 'Find search fields and forms'. It lists various categories and their sub-fields:

- Basic Indexes**: (dropdown arrow)
- Identification**: (dropdown arrow)
- Physical Properties**: (dropdown arrow)
- Melting Point**: (checkbox)
- Boiling Point**: (checkbox)
- Sublimation**: (checkbox)
- Refractive Index**: (checkbox)

Annotations with arrows point to specific features:

- ① 検索条件リスト**: Points to the 'Fields' panel on the right.
- ② クリックで検索画面に追加**: Points to the 'Boiling Point' row in the search criteria list.
- ③ 演算子を使用して掛け合わせ**: Points to the 'AND' button between the 'Melting Point' and 'Boiling Point' rows.
- ④ 検索条件を設定して検索**: Points to the 'Structure' row in the search criteria list.

A blue callout box at the top right states: '複数物性、構造やキーワードの組み合わせ、検索履歴との掛け合わせなどが容易に'.

1レコードで多くの情報を提供

文献・特許情報

インデックスされた用語を表示

Synthesis, single crystal X-ray structure and thermal analysis of a novel polycatenar liquid crystal: Theoretical and experimental approaches

Bais, Abdul; Ashraf, Zameer; Tahir, Muhammad Nawaz; Perveen, Fouziq; Abbas, Mujahid; Ahmed, Imtiaz - Journal of Molecular Structure, 2019, vol. 1177, p. 1 - 8

Abstract hit: (...The 3,5-dihydroxy benzoic acid (1) was first converted into corresponding methyl ester (2)...)

Index Terms

Author keywords: Polycatenar liquid crystal, Single-crystal X-ray, Structural characterization, Thermogravimetry (TG) and differential scanning calorimetry (DSC)

Engineering uncontrolled terms: Computational investigation, Experimental approaches, Molecular electrostatic potentials, Polycatenar, Single crystal x-ray structures, Steglich esterifications, Structural characterization, Thermogravimetry analysis

Engineering controlled terms: Benzoic acid, Calorimeters, Computation theory, Coupling agents, Crystal structure, Differential scanning calorimetry, Energy gap, Esters, Liquid crystals, Molecular oxygen, Nuclear magnetic resonance spectroscopy, Thermoanalysis, Thermogravimetric analysis, X ray powder diffraction

Reaxys Index Terms: 13C NMR spectrum, 1H NMR spectrum, Chemical formula, DFT-B3LYP calculation, Electrostatic potential, Fourier transform infrared spectroscopy, Gibbs free energy, Hydrogen bond, Mesophase, Steglich esterification, Vibrational frequency, X-ray diffraction, Zero-point vibrational energy, alkylation, attenuated total reflection, band gap, basis set, bond angle, charge distribution, correlation function, crystal system, crystalline texture, crystallization, density functional theory, differential scanning calorimetry, enthalpy, entropy, frontier orbital, heat capacity, highest occupied molecular orbital, hydrolysis, intermolecular force, lowest unoccupied molecular orbital, molecular orbital, pi electron, quantum chemical calculation method, reflection, space group, thermal analysis, thermal property, thermodynamic property, thermogravimetry, vibrational spectrum

化合物情報のリンク

Reaction ID: 23669021

Conditions	Yield	Reference
Stage #1: (R5)-phenyl-pyridin-2-yl-acetic acid methyl ester With perchloric acid; hydrogen; acetic acid; 5%-palladium/activated carbon In methanol; water at 45 - 50°C; under 8826.87 - 11033.6 Torr; for 15 - 18h; Stage #2: With sodium hydroxide In water	89.88%	IPCA Laboratories Limited EP1607388, 2005, A1 Location in patent: Page/Page column 4 Full Text Details Abstract
Stage #1: (R5)-phenyl-pyridin-2-yl-acetic acid methyl ester With perchloric acid; hydrogen; 5%-palladium/activated carbon In methanol; acetic acid Stage #2: With sodium hydroxide In water	89.88%	Kumar, Ashok; Singh, Dharmendra; Patil, Swapnali Hemant; Mahale, Ganesh Devidas; Sawant, Uttamrao Arjunrao US2005/277667, 2005, A1 Location in patent: Page/Page column 3 Full Text Details Abstract

化合物情報

反応情報

反応条件の確認

METHYLPHENIDATE
C₁₄H₁₉NO₂ 233.31 200061 113-45-1

Identification
Physical Data - 20
Spectra - 12

Bioactivity - 407
Other Data - 228

Preparations - 13
Reactions - 28
Documents - 2,875

市販情報

関連する反応情報

Reference一覧

物性情報一覧

Melting Point - 2

Melting Point, °C	Reference
75	Schleuder; Duerrbeck; Jira - [Pharmazie, 1998, vol. 53, # 6, p. 381 - 386] Full Text Cited 3 times Details Abstract
214 - 215	Richter et al. - HU148659, 1959 [Chem.Abstr., 1963, vol. 58, # 10180b] Full Text Details

2 Example 2:

Example 2:
α-Phenyl-α-pyridyl-2-methyl acetate
In a reaction vessel, a mixture of 100 gm α-phenyl-α-pyridyl-2-methyl acetate, 100 ml of 0.1 N perchloric acid in acetic acid in presence of 10 gm 5percent Pd/C (50percent wet) and 1000 ml methanol were heated to 45-50°C under 12-15 Kg/cm² hydrogen pressure for 15 to 18 hrs.
The catalyst was removed by filtration.
Filtrate was concentrated under reduced pressure and the concentrated mass was diluted with water and basified with aqueous sodium hydroxide solution to get the product α-phenyl-α-pyridyl-2-methyl acetate.
Yield of product = 92 gm (89.88percent).

フィルターによる情報への迅速なアクセス

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Takashi Isobe

3.14 K Filters 3,135 Reactions out of 550 Documents containing 2,754 Substances

Limit to > Exclude >

By Structure Yield Reagent/Catalyst Solvent Catalyst Classes

☐ active center 297
☐ heterogeneous 17
☐ organism / enzymes 4

Solvent Classes Product Availability Reactant Availability

[View more](#)

Catalyst Classes 15

- Catalyst Classes 3,135
 - active center
 - Ti 183
 - Fe 51
 - W 18
 - V 17
 - Pd 16
 - ☒ palladium on activated charcoal 15
 - ☐ tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0) 1
 - Zr 8
 - Ni 7

Selected search items:
palladium on ... charcoal X

Clear selected X Limit To > Exclude >

Chemical reaction scheme showing a Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction:

COc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)SC3=CC=CC=C3.[O-]C1=CC=C(C=C1)N=C2C=CC(=C2)C=C1>>COc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)SC3=CC=CC=C3.[O-]C1=CC=C(C=C1)N=C2C=CC(=C2)C=C1>>COc1ccc2c(c1)c(c[nH]2)SC3=CC=CC=C3.[O-]C1=CC=C(C=C1)N=C2C=CC(=C2)C=C1

階層化されたフィルター項目



Reaxys検索方法

Reaxysへのアクセス

URL: <https://www.reaxys.com>

The screenshot shows the Reaxys homepage. At the top, there are navigation links: [Quick search](#), [Query builder](#), [Results](#), [Synthesis planner](#), and [History](#). Below these is a header section with the text "Search substances, reactions and documents" and "in Reaxys, PubChem, eMolecules, LabNetwork and SigmaAldrich". The main search area has a "Search Reaxys" label above a text input field. Below the input field, it says "Substance Molecular Formula, e.g. Pt(PPh3)3" and "AND". There is a "Find >" button to the right of the input field. At the bottom of the search area, there is a "Draw" button with a chemical structure icon.

ログインする場合

URL: <https://www.reaxys.com/#/login>

The screenshot shows the Reaxys login page. At the top, there are navigation links: [Sign in](#), [Institution sign in](#), and [Register](#). Below these is a header section with the text "Sign in" and "With your Reaxys Account". The main login area has a "Username" label above a text input field containing "t.isobe@elsevier.com". Below the username field, there is a "Password" label above a password input field. There is a "Remember me on this computer" checkbox with the text "(Do not use on a shared computer!)" below it. To the right of the password field, there is a "Not Registered?" link. Below the login fields, there is a large blue "Sign in >" button. Below the button, there are links for "Sign in via your institution" and "Forgot your password?". At the bottom of the page, there is a black bar with the text "Don't have access yet?" and links for "Learn more >" and "Contact sales >" on the right.

Reaxysの画面

① Quick search ② Query builder ③ Results ④ Synthesis planner ⑤ History ⑥ Alerts

Search substances, reactions and documents
in Reaxys, PubChem, eMolecules, LabNetwork and SigmaAldrich

Search Reaxys

テキスト入力 →

Substance Properties, e.g. solubility of vitamin D3
AND

構造式・反応式入力 → Draw

- ① **Quick search**: 構造検索、キーワード検索
- ② **Query builder**: 構造式、数値などの掛け合わせの検索。検索履歴の掛け合わせ検索
- ③ **Results**: 検索結果。ユーザーが必要とする情報を優先的に表示
- ④ **Synthesis planner**: 逆合成的にルートを検索
- ⑤ **History**: 検索履歴の閲覧
- ⑥ **Alerts**: 登録済み検索アラートの閲覧・編集

Reaxysの演算子

演算子	例	
OR	A OR B	A、B どちらかを含むもの
AND	A AND B	A、B 両者を含むもの
NOT	A NOT B	A から B を除く
PROXIMITY	A PROXIMITY B	A と B が対応するデータであるもの (Query Builderで使用)
NEXT	A NEXT B	A と B がこの順番で隣接しているもの
NEAR	A NEAR B	A と B が順序を問わず近接しているもの

* 一部、対応するフィールドが限定されている演算子もあります



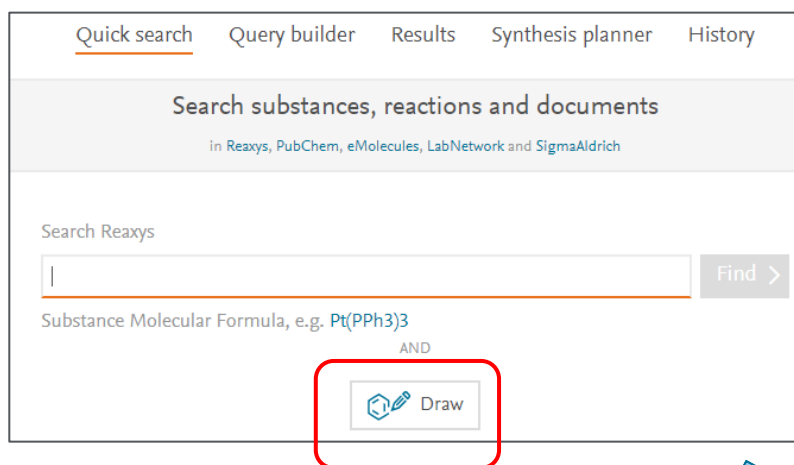
Quick Search: 反応検索

反応条件の設定①

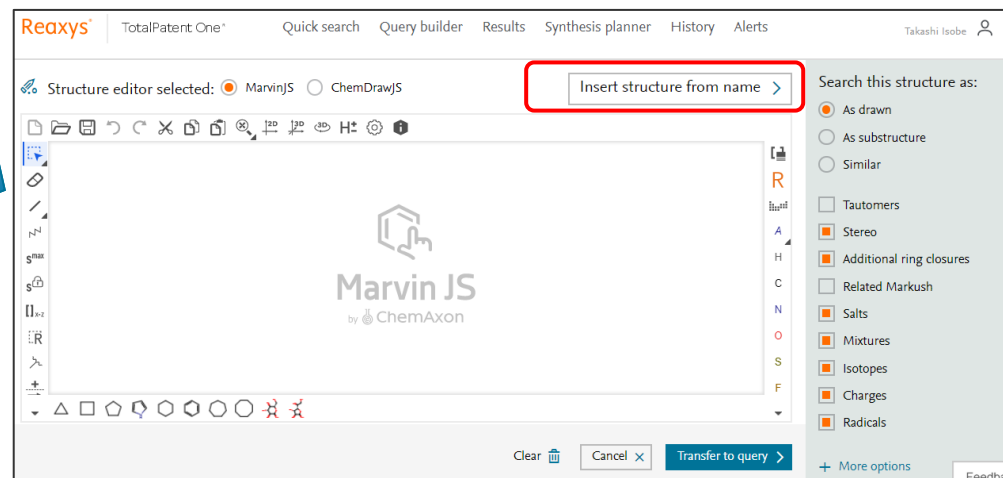
反応式、出発物質、生成物いずれからも反応が検索できます。
名称をから構造式を自動的に作画することも可能です。

検索例: エソメプラゾール(Esomeprazole)とその類縁体の合成方法を探す

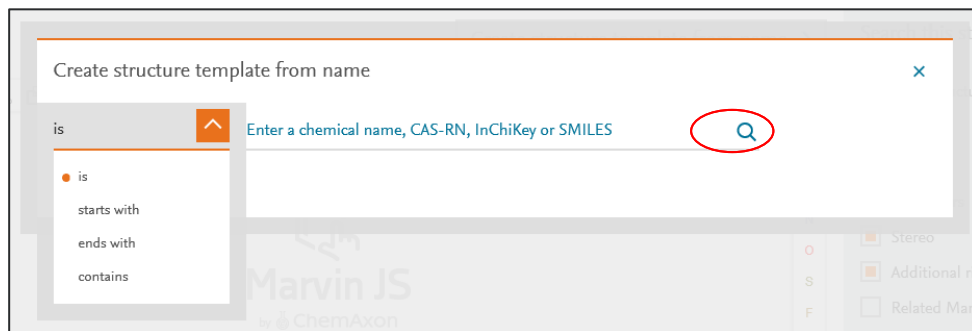
① 「Draw」をクリックして、構造式作画画面に移動します



② 「Insert structure from name」をクリックします



反応条件の設定②

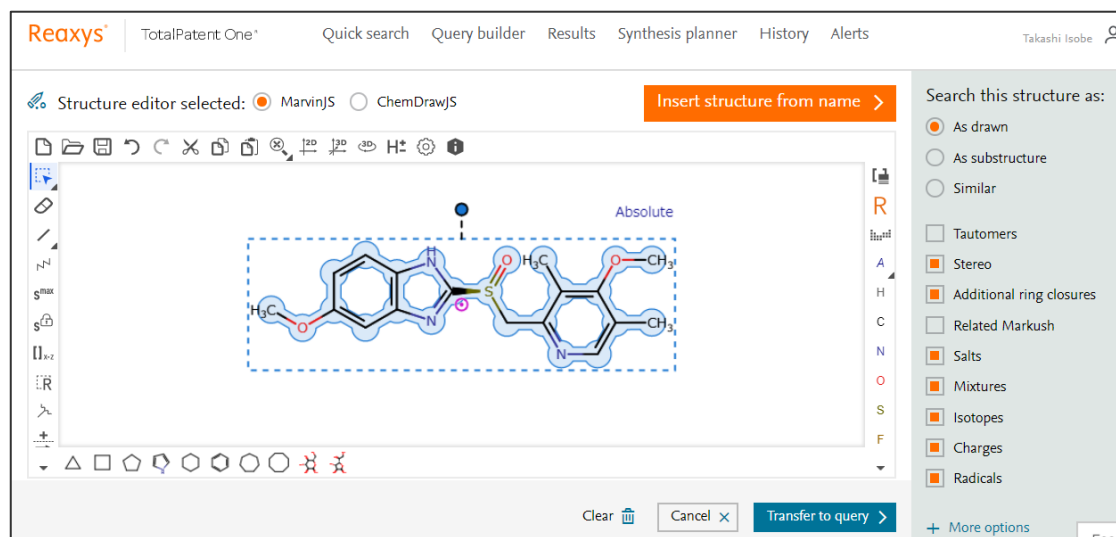


名称の入力画面:

“esomeprazole”と入力し、虫メガネアイコンをクリックします。

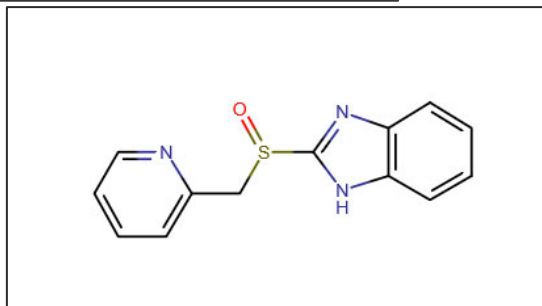
- 化合物名称は下記から選択可能
 - 完全一致(is)
 - 前方一致(starts with)
 - 後方一致(ends with)
 - 部分一致(contains)

- 複数候補化合物が表示される場合は必要なものを選択



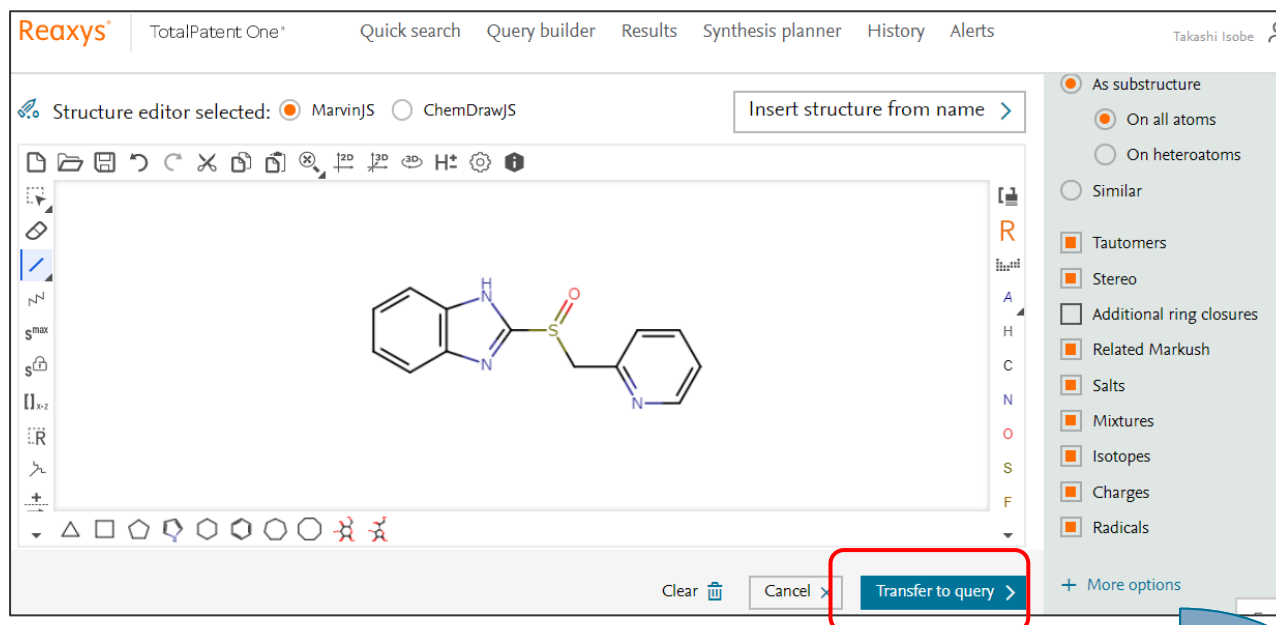
構造式の編集:

自動的に名称から構造式が生成されます。ここではesomeprazoleの骨格を含むものを検索したいので、作画ソフトで編集を行います。環上の置換基を全て削除し、骨格部分を検索に利用します。



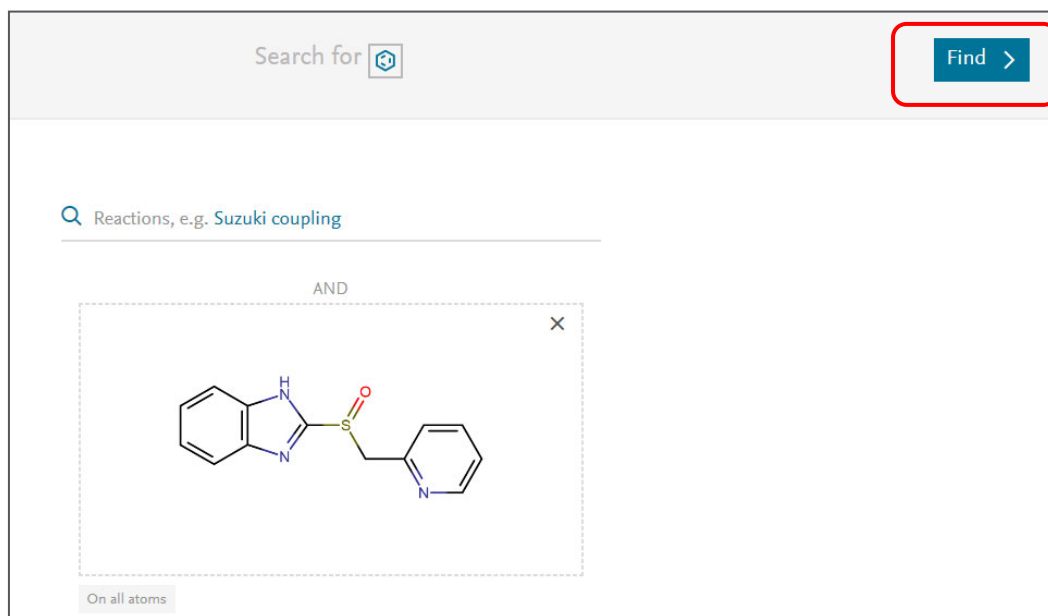
*Marvin JS操作方法の詳細は、別添のテクニック集をご参照ください。

反応条件の設定③



検索オプションを設定し、「Transfer to query」ボタンをクリックします。

* 検索オプションの説明は次ページをご参照ください。



検索を行います。

構造式が検索画面に反映されます。「Find」ボタンをクリックして検索を行います。

検索オプション

①

Search this structure as:

- ☒ As drawn
- ☐ As substructure
- ☐ Similar

②

Include

- ☐ Tautomers
- ☐ Stereo
- ☐ Additional ring closures
- ☐ Related Markush
- ☐ Salts
- ☐ Mixtures
- ☐ Isotopes
- ☐ Charges
- ☐ Radicals

① 構造検索オプション

- As Drawn: 描画通りの構造
- Substructure: 部分構造検索
- on heteroatoms: ヘテロアトム上に
- on all atoms: 全てのアトム上に
- Similarity: 類似反応検索

② その他の検索オプション

- Tautomers: 互変異性体を含む
- Stereo: 立体を含む
- Additional ring closure: 追加の縮環を含む
- Related Markush: 関連するMarkushを含む
- Salts: 塩を含む
- Mixtures: 混合物を含む
- Isotopes: アイソトープを含む
- Charges: 荷電分子を含む
- Radicals: ラジカルを含む

検索結果の表示

Reaxysがqueryから判断した検索結果を表示します。

例えば、構造式で検索した場合、化合物の検索結果と反応の検索結果の両方を表示します。

ここではエソメプラゾール(Esomeprazole)とその類縁体の合成方法を探そうとしているので、ReactionのView Resultsボタンをクリックします。

化合物の検索結果と反応および
試薬DB掲載化合物の検索結果が表示されている

Preview Resultsを展開すると、
top 3の結果が表示される

	3,861	Substances	Structure :  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals Edit in Query Builder  Create Alert 	Preview Results 	View Results 
	3,193	Reactions	Reaction Query :  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals Edit in Query Builder  Create Alert 	Preview Results 	View Results 
	276	Commercial Substances	Structure :  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals Edit in Query Builder  Create Alert 	Preview Results 	View Results 



検索結果画面

エソメプラゾール(Esomeprazole)とその類縁体の合成方法の検索結果がレコードごとに表示されます。

検索結果の絞り込みなどの軌跡をナビゲーションする機能や、各種フィールドを活用したフィルター機能も用意されています。検索結果からフルテキスト、引用情報などにアクセス可能なリンクも付与されています。

項目

- ① レコードごとに表示された検索結果
- ② 物質が購入可能なことを示すカートマーク
- ③ 実験手順の記載。
- ④ 検索結果の軌跡をナビゲート
- ⑤ フィルター機能：
 - 各種反応情報、書籍情報などでの絞り込みが可能
- ⑥ エクスポートボタン
- ⑦ 検索結果の並べ替え
 - デフォルトはReaxys Rankingによる並び
 - 昇順、降順を選択可能
- ⑧ プレビュー画面に戻る

検索結果の閲覧①

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Takashi Isobe

3,135 Reactions out of 550 Documents containing 2,754 Substances

⑦ 検索結果の並べ替え

Sort search results

- ✓ Reaxys Ranking
- No of References
- Reactant Availability
- Product Availability
- MW of product
- Yield
- Publication Year

1

Chemical reaction scheme showing the conversion of a sulfide to a sulfoxide.

5 Conditions Find Similar > Reaction ID: 28096702

Conditions	Yield	Reference
With $C_{68}H_{72}N_4O_{10}Ti_2$; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction;	93.5%	Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, [Catalysis Today, 2017, vol. Full Text Cited 5 times

Experimental Procedure

2.2. Standard procedure for small-scale catalytic sulfoxidation

General procedure: Sulfide (OMS or LPS, 100 mol) and the Ti-salalen catalyst(1.1 mol) were dissolved in the solvent (typically: EtOAc, 6.0 mL),the mixture was thermostatted at desired temperature (typically 0 °C, or -20 to +20 °C for variable-temperature measurements),and 30percent aqueous hydrogen peroxide (0.105 mmol of H_2O_2) was then introduced in one portion. Stirring (500 rpm) was continued at that temperature (typically 24 h). For low-temperature experiments, the reaction times were about 30 h at -10 °C and up to 10 days at -20 °C. To analyze the reaction outcome, 20 L aliquots of the reaction mixture were taken to a vial and immediately carefully evaporated to dryness with a stream of compressed air during ca. 15-20 s. The remaining solid was dissolved in 0.20 mL of 1percent Et_3N solution in isopropyl alcohol, and the contents of residual sulfide, (R)- and(S)-sulfoxide, and sulfone, were analyzed by chiral HPLC as noted above.

③Experimental Procedureの表示

Reaxys Rankingについて

収率、副生成物の有無、実験条件の情報量等のパラメータから、有用と思われるレコード順に表示されます。

3,095 Reactions out of 544 Documents containing 2,739 Substances

Limit To Exclude Export Syn-Plan

Reaxys Ranking

Sort search results

- ✓ Reaxys Ranking
- No of References
- Reactant Availability
- Product Availability
- MW of product
- Yield
- Publication Year

1

2

Conditions Find Similar Reaction ID: 28096702

検索結果の閲覧②

フィルターとして利用可能なフィールド・反応検索の場合

⑤フィルター機能

2,889	Filters and Analysis	
	By Structure	← 構造
	Yield	← 収率
	Reagent/Catalyst	← 試薬・触媒
	Solvent	← 溶媒
	Catalyst Classes	← 触媒クラス
	Solvent Classes	← 溶媒クラス
	Product Availability	← 生成物の使用可能
	Reactant Availability	← 反応物の使用可能
	Reaction Classes	← 反応クラス
	Document Type	← ソースの種類(文献・特許)
	Publication Year	← 発行年
	☐ Single step reactions only	← 1ステップ反応のみの絞り込み

* フィルター機能では、検索結果で多くヒットした条件が降順で表示されています。絞り込み機能以外に、傾向を知る簡易ツールとしても利用可能です。 31

検索結果の閲覧③

結果の閲覧①の続き:

レコード1の詳細を確認しています。

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Takashi Isobe

3,135 Reactions out of 550 Documents containing 2,754 Substances

0 Limit To Exclude Export Syn-Plan Reaxys Ranking ↓

1



5 Conditions Find Similar Reaction ID: 28096702

Conditions	Yield	Reference
With $C_{68}H_{72}N_4O_{10}Ti_2$; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction; Experimental Procedure	93.5%	Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. [Catalysis Today, 2017, vol. 279, p. 84 - 89] Full Text Cited 5 times Details Abstract
With N-methyl-6-aza-5β,6β-epoxy-cholestane-3β-tert-butylphenylsilyloxy tetrafluoroborate In dichloromethane at -70 - 20°C; for 3h; Inert atmosphere; enantioselective reaction;	86%	Zhou, Guobin; Guan, Yueqing [Heterocyclic Communications, 2016, vol. 22, # 1, p. 17 - 19] Full Text Cited 1 times Details Abstract

Full Text:フルテキストリンク(次ページ)

Cited 5 times:被引用数、クリックすることで引用文献が表示されます

Details: 論文のAbstract、Index Term、Indexされた化合物や反応(36ページ)

Abstract:Abstract

検索結果の閲覧④



Full Textをクリックすると論文本文へのリンクが表示されます。



ScienceDirect Journals Books Register Sign in 

 **Download PDF**  **Export**  **Advanced search**



Catalysis Today
Volume 279, Part 1, 1 January 2017, Pages 84–89

Ti-Salan catalyzed asymmetric sulfoxidation of pyridylmethylthiobenzimidazoles to optically pure proton pump inhibitors

Evgenii P. Talsi^{a, b}, Konstantin P. Bryliakov^{a, b}  

 **Show more**

<http://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.03.006> [Get rights and content](#)

▼ This article belongs to a special issue

EuropaCat XII: Catalysis for Chemical Synthesis
Edited By Konstantin P. Bryliakov and Ekaterina S. Lokteva

Other articles from this special issue

EuropaCat XII: Catalysis for chemical synthesis
Konstantin P. Bryliakov, Ekaterina S. Lokteva, [more](#)

Liquid-phase hydrogenation of benzaldehyde ove...
Roman M. Mironenko, Olga B. Belskaya, Tatyana... [more](#)

Supported Pt-Re catalysts for the selective hydro...
James Pritchard, Aysegul Ciftci, M.W.G.M. (Tiny)... [more](#)

[View more articles »](#)

検索結果の閲覧⑤

Detailsをクリックすると論文のAbstract、Index Termの詳細、論文に含まれる物質・反応、フルテキストへのリンクが表示されます。

Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. - Catalysis Today, 2017, vol. 279, p. 84 - 89
Full Text [↗](#) Cited 1 times [↗](#) Details [>](#) Abstract [>](#)

文献タイトル	著者名	出版年	出版物名	被引用数
☐ 1 Chiral Titanium(IV) Complexes Containing Polydentate Ligands Based on α-Pinene. Catalytic Activity in Sulfoxidation with Hydrogen Peroxide	Revejo, I., Tabernero, V., Mosquera, M.E.G., (...), Cuenca, T., Jiménez, G.	2018	Organometallics 37(20), pp. 3437-3449	0
抄録を表示 Full Text フルテキスト 関連文献				
☐ 2 Chiral sulfoxides: Advances in asymmetric synthesis and problems with the accurate determination of the stereochemical outcome	Han, J., Soloshonok, V.A., Klika, K.D., Drabowicz, J., Wzorek, A.	2018	Chemical Society Reviews 47(4), pp. 1307-1350	16
抄録を表示 Full Text フルテキスト 関連文献				
☐ 3 Catalytic Asymmetric Oxygenations with the Environmentally Benign Oxidants H ₂ O ₂ and O ₂ Open Access	Bryliakov, K.P.	2017	Chemical Reviews 117(17), pp. 11406-11459	39

☐ Ti-Salan catalyzed asymmetric sulfoxidation of pyridylmethylthiobenzimidazoles to optically pure proton pump inhibitors

1

Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. - [Catalysis Today, 2017, vol. 279, p. 84 - 89]

Abstract [↕](#) Index Terms [↕](#) Substances 35 [↕](#) Reactions 19 [↕](#) Full Text [↗](#)

Cited 3 times

Abstract
The asymmetric sulfoxidation of two pyridylmethylthiobenzimidazoles to anti-ulcer drugs of the PPI family (S)-omeprazole and (R)-lansoprazole with a series of chiral titanium(IV) salan complexes is reported. >95 percent and enantioselectivities (up to 94 percent) by introduction of electron-withdrawing substituents leads to enantiomerically pure products.

Index terms

Author keyword: Asymmetric oxidation, Esomeprazole, Mechanism, Salan, Titanium

Compendex Terms: Asymmetric oxidation, Electron-Enantioselective catalysts, Esomeprazole, Isoinversion, Temperature dependence

Compendex Terms: Catalysis, Enantioselectivity, Hydroperoxides, Temperature distribution, Titanium

Reaxys Index Terms: Kagan-Modena oxidation, Oxidation catalyst, electron acceptor, enantiomer excess, enantiomerically pure product, proton pump inhibitor, reaction kinetics, reaction separation method

Substances

+ Load More

Reactions

Find Similar Reactions >

Yield: 95.6% Conditions: With C₁₀H₁₄NO₂·2H₂O·O₂ (P₂W₁)¹ hydrogen peroxide; sodium hydrogen carbonate; (1S,2S)-cyclohexane-1,2-diammonium 2,3-dihydroxyisuccinate in water; acetone at 20°C for 15h; Temperature

Experimental Procedure [↕](#)

Find Similar Reactions >

Yield: 67.3% Conditions: Stage #1: lansoprazole sulfide With D-tartaric acid monophenyl ester benzylamine in water; toluene at 60°C for 0.5h; Stage #2: With Titanium(IV) isopropoxide in water; toluene for 1h; Reagent/catalyst

検索結果の閲覧⑥

☐ Ti-Salan catalyzed asymmetric sulfoxidation of
1 pyridylmethylthiobenzimidazoles to optically pure proton pump
inhibitors
Talsi, Evgenii P., Bryliakov, Konstantin P. - Catalysis Today, 2017, vol. 279
Abstract ✓ Index Terms ✓ Substances ✓ Reactions ✓ Full Text ↗

Scopus 検索 収録誌 アラート リスト ヘルプ SciVal ユーザー登録 ログイン

著者詳細

Scopus著者識別機能について

Scopus著者識別機能は、文献中の各種情報を元にしたアルゴリズムを使用して同一著者による論文をグループ化し、ユニークな著者IDを付与します。文献中の情報が不十分な場合は、同じ著者の論文が複数の著者IDに分かれて表示される可能性があります。

Talsi, Evgenii P.
Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation
著者ID: 36992516200
他の表記: Talsi, Evgenii P., Talsi, Evgenii P., Talsi, Evgenii P., Talsi, E. P., Talsi, Evgeniy P.

分野: Chemistry Chemical Engineering Materials Science Biochemistry, Genetics and Molecular Biology Physics and Astronomy
Computer Science Mathematics Environmental Science

文献数と被引用数のトレンド:

2015 被引用数: 461

h-index: 39 h-graph

文献数: 141 著者分析

被引用数の合計: 4609回 (2897 件の文献による) 引用分析

引用アラートを設定 + ORCIDに追加 著者プロフィールの修正を依頼 プロファイルをSciValにエクスポート

141 件の文献 2897 件の文献による被引用 142 人の共著者 著者履歴

検索結果の形式ですべてを表示 並び替え: 出版日 (新しい順)

すべてエクスポート すべてのリストに追加 文献アラートを設定 文献RSSを設定

文献タイトル	著者名	出版年	出版物名	被引用数
Direct reactivity studies of non-heme iron-oxo intermediates toward alkane oxidation	Zima, A.M., Lyakin, O.Y., Bryliakov, K.P., Talsi, E.P.	2018	Catalysis Communications 108, pp. 77-81	1
Highly efficient asymmetric aerobic oxidative coupling of 2-naphthols in the presence of bioinspired iron aminopyridine complexes	Tkachenko, N.V., Lyakin, O.Y., Samsonenko, D.G., Talsi, E.P., Bryliakov, K.P.	2018	Catalysis Communications 104, pp. 112-117	0

抄録を表示 Full Text フルテキスト 関連文献

著者のリンクをクリックすると
Scopusの著者詳細結果が
表示されます。

* Scopusの契約がない場合は
プレビューのみ表示

Scopusとは

Scopus はエルゼビアが提供
する世界最大級の書誌・引用
情報データベース。
Reaxys で見つけた文献を引用
して書かれた文献を調べることが
可能。



Synthesis Planner

合成ルートの作成①

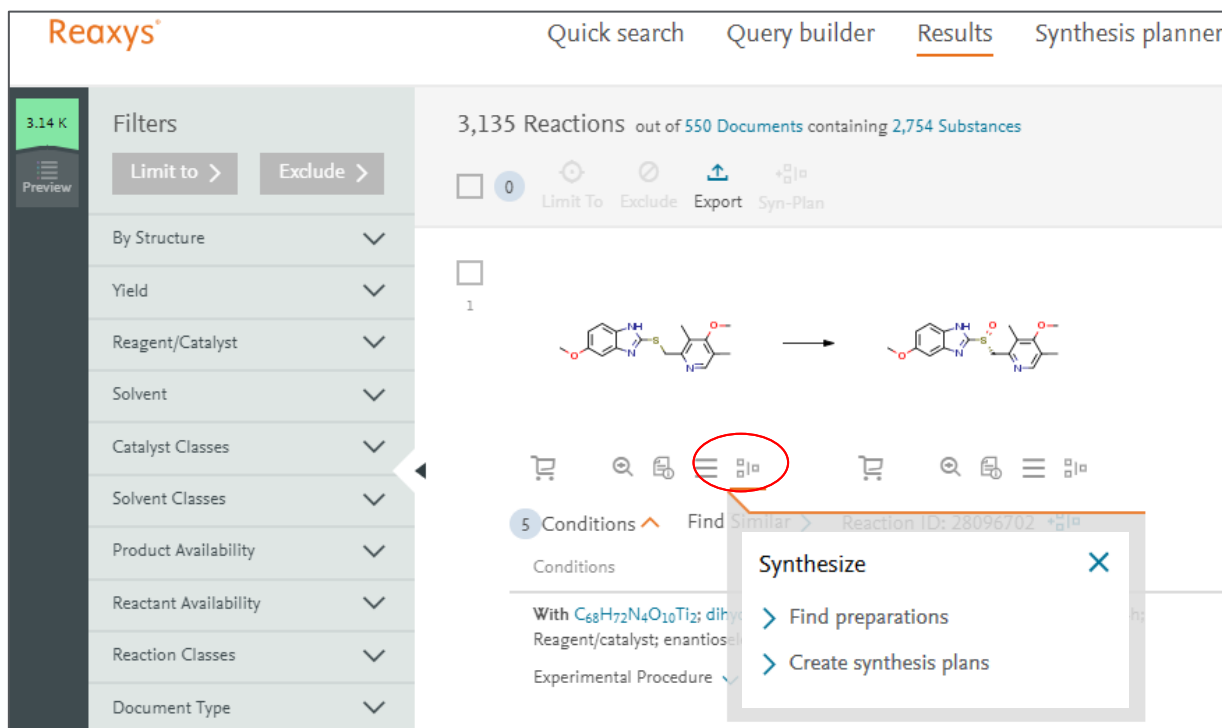
合成計画ツール (Synthesis Planner) :

ある物質を最終生成物として合成ルートを逆合成的に計画することができます。

- 複数の合成ルート候補を一画面で表示できるので、比較検討に便利
- 化合物検索の結果からも合成計画ツールを利用することが可能

検索例: エソメプラゾール (Esomeprazole) の合成法を探す

反応検索結果から
合成ルートの作成を行います。
 をクリックし、
「Find Preparations」または
「Create synthesis plans」を選択



Reaxys[®] Quick search Query builder Results Synthesis planner

3,135 Reactions out of 550 Documents containing 2,754 Substances

Limit To Exclude Export Syn-Plan

1

5 Conditions Find Similar Reaction ID: 28096702

Conditions

With $C_{68}H_{72}N_4O_{10}Ti_2$; dihy...
Reagent/catalyst; enantiosele...
Experimental Procedure

Synthesize

> Find preparations
> Create synthesis plans

合成ルートの作成②

Create synthesis plans

「Create synthesis plans」を選択するとオプション設定画面が表示されます。

- ① Numbers of plans to create
 - 設定範囲: 1～10まで
- ② Max. alternative branches
 - 設定範囲: 1～10まで
- ③ Max. number of steps
 - 設定範囲: 1～10まで
- ④ Stop searching if starting material is commercially available
 - はい、いいえで選択可能
- ⑤ Default yield for reactions without a given yield
 - カーソルでパーセンテージを変更

「Create Plans」をクリックすると合成ルートが表示されます。

Create plans by autoplan

Number of plans to create: 5

Max. alternative branches: 5

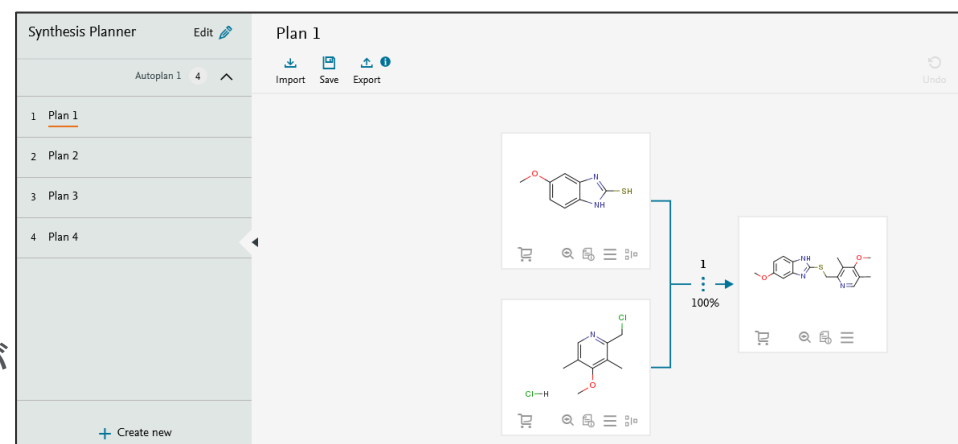
Max. number of steps: 5

Stop searching if starting material is commercially available: ☒ Yes ☐ No

Default yield for reactions without a given yield: [Slider]

☐ Always show screen before creating autoplan

Create Plans >



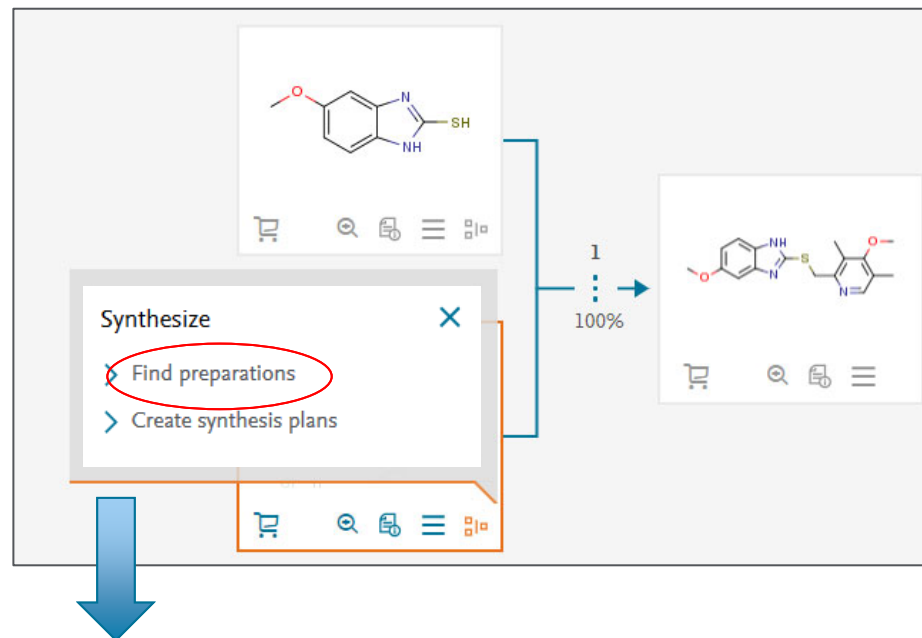
合成ルート作成③

Find preparations

(合成手法の手動選択)

「Find preparations」を選択すると、
合成法の候補一覧が表示されます。

- 反応条件を比較した後に、採用したい
反応式のチェックボックスを選択
(複数選択可)
- 必要な反応を選択し、「Syn-Plan」をク
リックすると選択した合成ルートが表
示されます。



Conditions	Yield	Reference
With thionyl chloride in dichloromethane at 20°C; for 1h; Experimental Procedure	100%	GARST, Michael, E.; SACHS, George; SHIN, Jai, Moo; WO2004/9583, 2004, A2; Location in patent: Page 156; Full Text; Details; Abstract

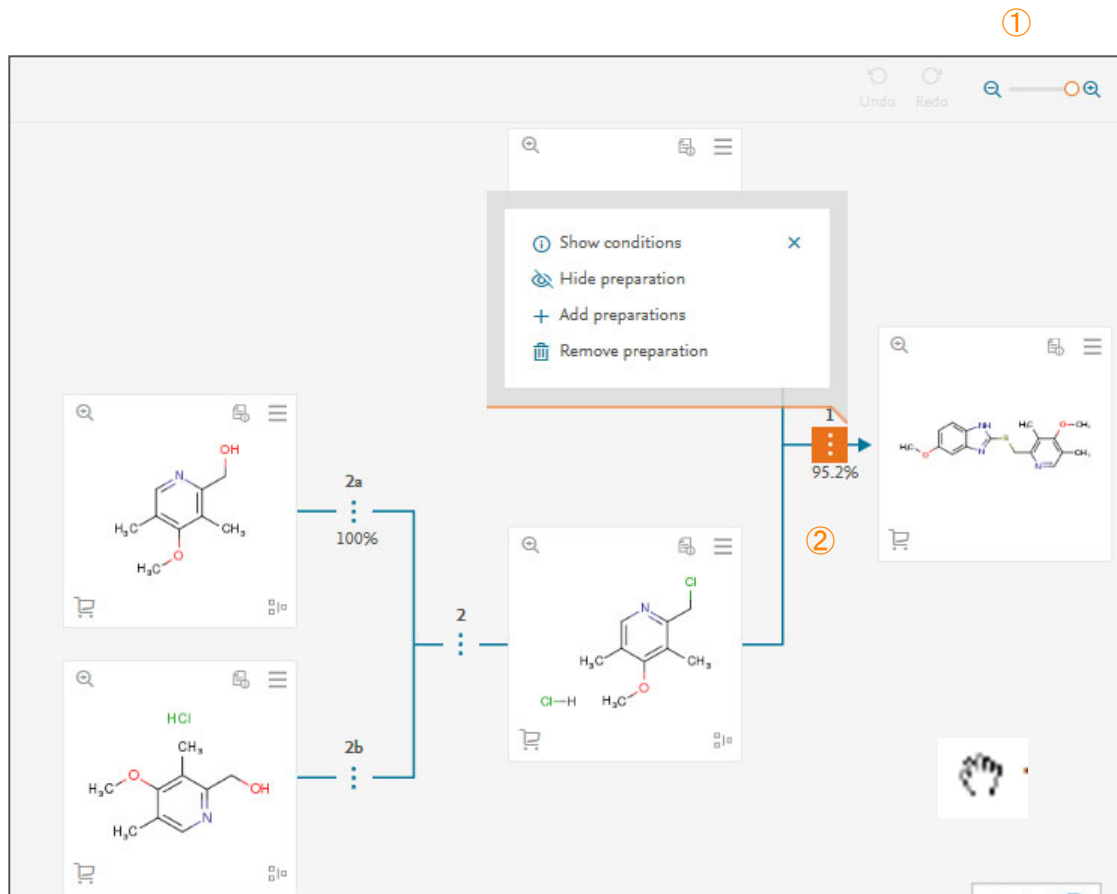
合成ルートの作成④

合成計画画面の続き：
前画面で追加した合成ルートが表示されています。

① 合成ルートの拡大・縮小表示

② 矢印にカーソルを当ててクリックすると、メニューが開く

- Show conditions
 - 実験条件詳細
- Hide preparation
 - 調製方法を隠す
- Show preparation
 - 再表示
- Add preparation
 - 調製方法を追加
- Remove preparation:
 - 調製方法を削除

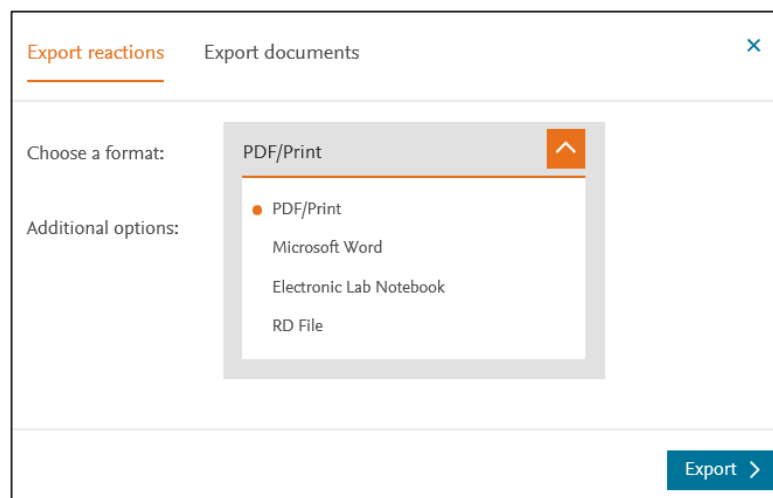
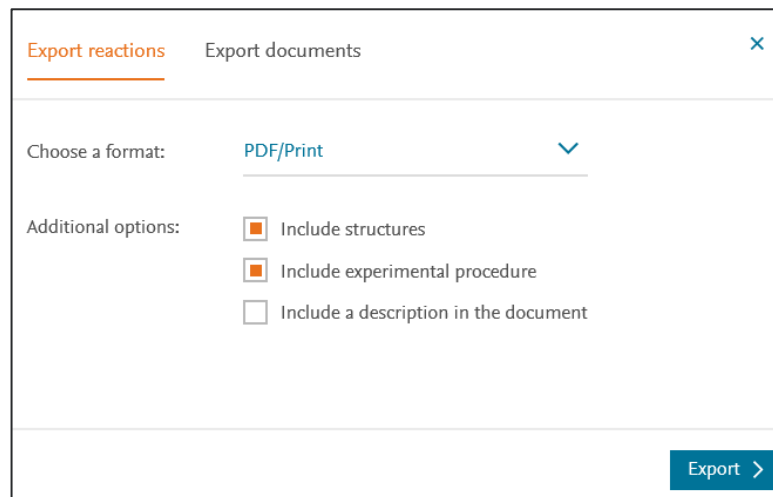


③ 合成ルートは でドラッグすることにより移動できます。

合成ルートの作成⑤

その他の機能:

- ① 合成計画をImport
- ② 合成計画をSave
 - Saveしたファイルを、Reaxysユーザー間で共有可能
- ③ 合成計画をExport
 - 出力形式は、選択可能
 - PDF/Print
 - Microsoft Word
 - Electronic Lab Notebook
 - RD File



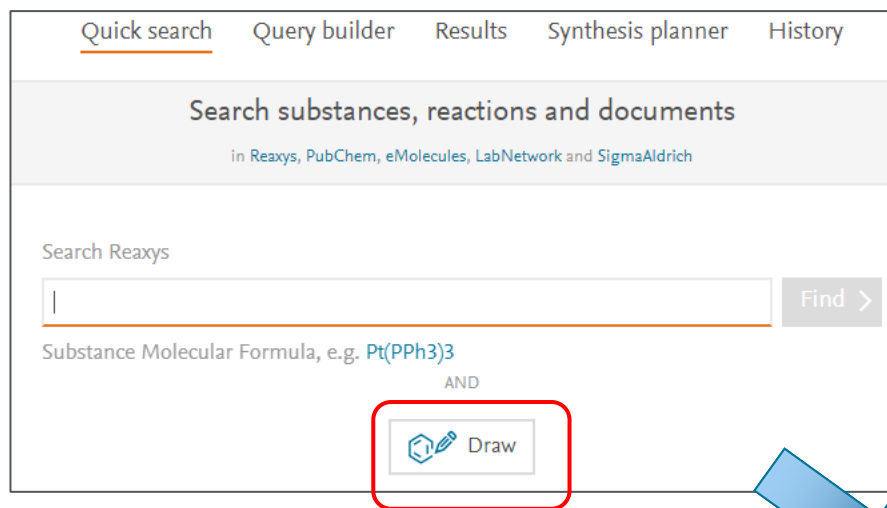


Quick Search: 物質・物性値検索

検索条件の設定①

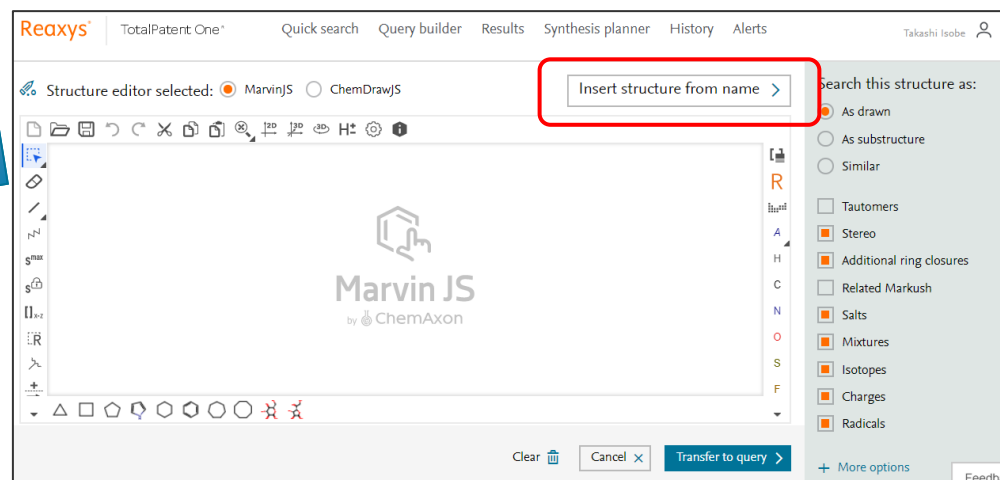
Reaxys では化学構造式、物質名、物性値、書誌情報などから物質・物性値の検索を行うことができます。

検索例: メバスタチン(*Mevastatin*)の類似化合物を検索する

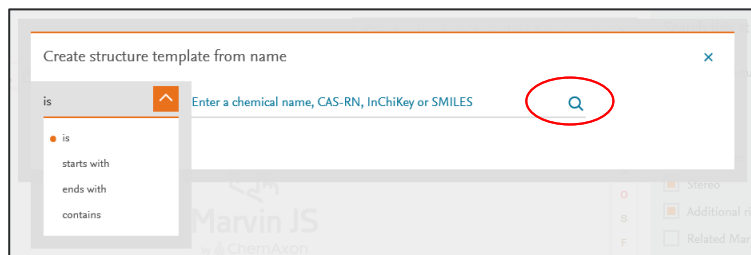


① 「Draw」をクリック

② 「Insert structure from name」のアイコンをクリック

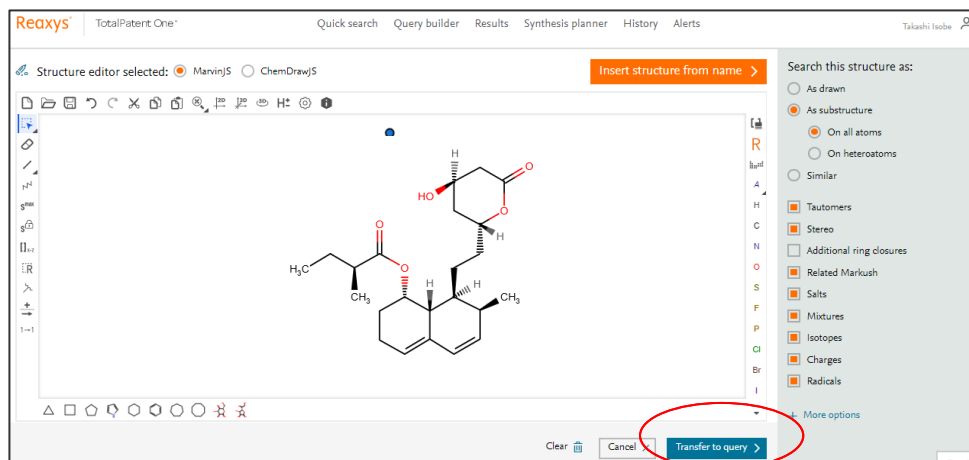


検索条件の設定②



名称の入力画面:

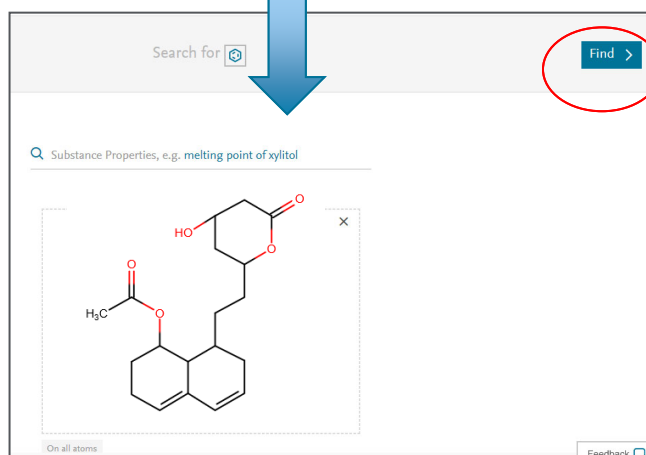
“Mevastatin”と入力し、 虫メガネアイコンをクリックします。



構造式の編集:

自動的に名称から構造式が生成されます。ここでは、mevastatin の骨格を含むものを検索したいので、作画ソフトで編集を行います。

検索オプションを設定し、編集後「Transfer query」ボタンをクリックすると、Reaxys の検索画面に転記されます。



「Find」ボタンをクリックして検索を行います。

* Marvin JS操作方法の詳細については別資料のテクニック集をご参照ください。

検索結果の表示

Reaxysがqueryから判断した検索結果を表示します。

ここではメバスタチン(mevastatin)とその類縁体の物質・物性値を探そうとしているので、Substanceの「View Results」ボタンをクリックします。

Results for  New  Edit 

Icon	Count	Category	Query	Buttons
	1,234	Substances	Structure :  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results View Results
	966	Reactions	Reaction Query :  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results View Results
	129	Commercial Substances	Structure :  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results View Results

化合物の検索結果と反応および試薬DB掲載化合物の検索結果が表示されている

Preview Resultsを展開すると、top 3の結果が表示される

957 Substances  substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals

Top 3 results

Chemical Structure	simvastatin	lovastatin	mevastatin
			
<chem>C₂₅H₄₂O₅</chem>	<chem>C₂₄H₃₈O₅</chem>	<chem>C₂₄H₃₈O₅</chem>	
418,574 4768037 79902-63-9	404,547 4720754 75330-75-5	390,52 3630717 73573-88-3	
Identification	Identification	Identification	
Bioactivity - 1,533	Bioactivity - 1,039	Bioactivity - 140	
Physical Data - 68	Physical Data - 228	Physical Data - 17	
Other Data - 2,629	Other Data - 2,568	Other Data - 1,000	
Spectra - 86	Spectra - 32	Spectra - 19	
Preparations - 49	Preparations - 27	Preparations - 115	
Reactions - 148	Reactions - 254	Reactions - 154	
Documents - 5,155	Documents - 2,390	Documents - 471	

<Preview Results>

検索結果画面①

メバスタチン(Mevastatin)とその類縁体の物質・物性値の検索結果がレコードごとに表示されます。

- 検索結果は表形式で表示される
- 構造式、化学名、収録されているデータ項目などの他、各化合物の合成法、誘導体の合成方法もワンクリックでチェック可能
- ブレッドクラムと呼ばれる検索結果の絞り込みなどの軌跡をナビゲーションする機能や、各種フィールドを活用したフィルター機能も用意
- 検索結果からフルテキスト、引用情報などにアクセス可能なリンクも付与されている

検索結果画面:

① 検索結果の軌跡をナビゲート

② フィルター機能

- 各種化合物情報、書誌情報での絞り込みが可能

③ 表示サイズ切替え

④ 検索結果ソート機能

- 参考文献数、フラグメント数、分子量、分子式、発行年、商業的入手可能性

⑤ Database変更機能

⑥ 各化合物の合成法、物性値などの情報へのリンク

⑦ Grid表示への切り替え

⑧ プレビュー画面に戻る

The screenshot displays the Reaxys search results interface. At the top, a navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', 'History', and 'Alerts'. The main content area shows '1,456 Substances out of 17,718 Documents, containing 1,454 Reactions'. A sidebar on the left contains a 'Filters' section with various criteria like 'By Structure', 'Substances Classes', 'Molecular Weight', etc. The main table lists compounds such as 'simvastatin', 'lovastatin', and 'mevastatin', each with a chemical structure and a table of associated data (Identification, Physical Data, Bioactivity, etc.). Numbered callouts (1-8) point to specific UI elements: 1. Breadcrumbs; 2. Filter sidebar; 3. Search and sort controls; 4. Sort dropdown; 5. Database selection; 6. Main results table; 7. Grid view toggle; 8. Back to preview button.

検索結果画面②

②フィルター機能:

Filters and Analysis	
By Structure	▼
Substances Classes	▼
Molecular Weight	▼
Number of Fragments	▼
Availability	▼
Availability in other databases	▼
Available Data	▼
Document Type	▼
Publication Year	▼

- ← 構造
- ← 物質分類
- ← 分子量
- ← フラグメント数
- ← 入手可能性
- ← supplier Dbへの登録有無
- ← 反応・物性等のデータ
- ← 資料の種類(文献・特許)
- ← 発行年

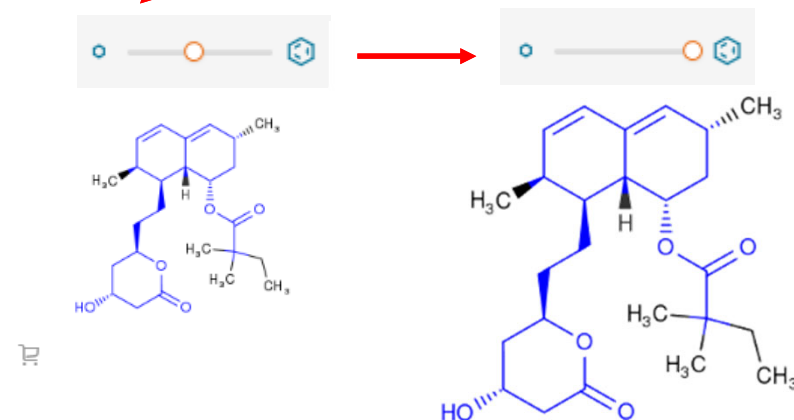
③表示サイズの切り替え:

1,456 Substances out of 17,718 Documents, containing 1,454 Reactions

selected Limit To Exclude Export Preparations

simvastatin
C₂₅H₄₂O₅ 418.574 4768037 123049-81-0, 79902-63-9

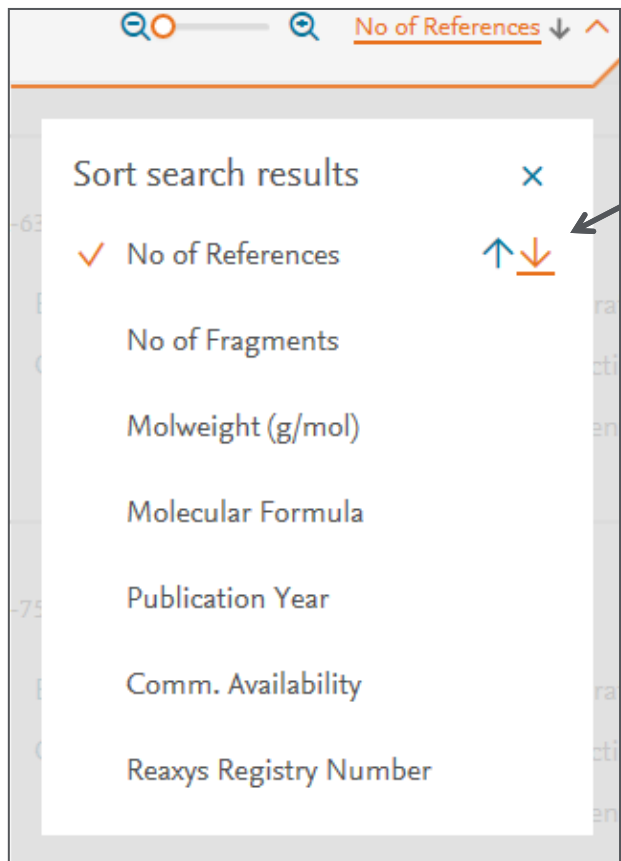
Identification Physical Data - 94 Bioactivity - 2,219 Preparations - 49
Druglikeness Spectra - 96 Other Data - 3,152 Reactions - 173 Documents - 13,098



* 3段階でサイズ変更が可能

検索結果画面③

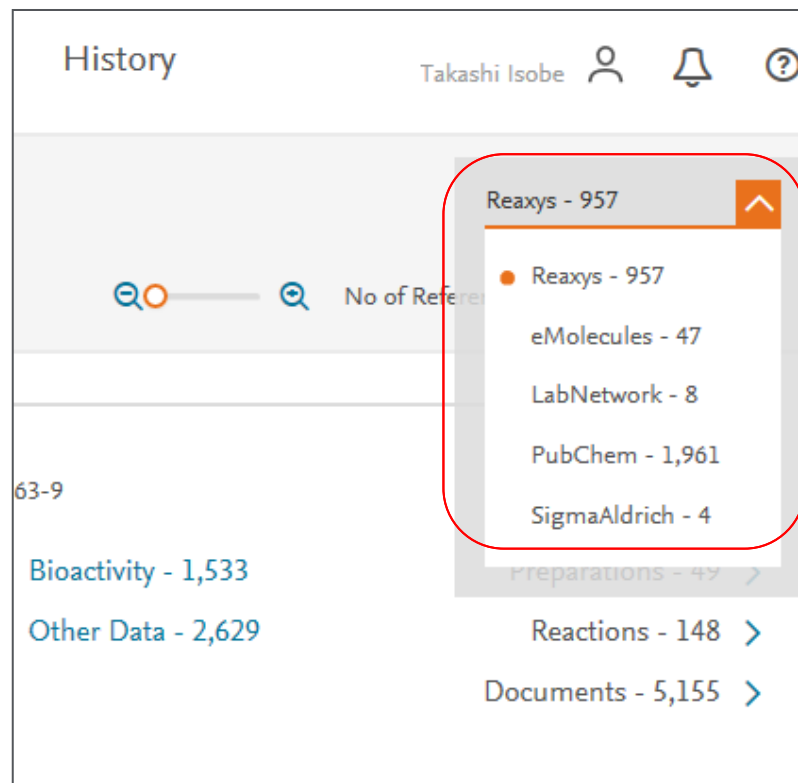
④検索結果のソート機能:



The screenshot shows a 'Sort search results' dropdown menu. The menu is currently set to 'No of References' (indicated by a checkmark). Below this, there are several other sorting options: 'No of Fragments', 'Molweight (g/mol)', 'Molecular Formula', 'Publication Year', 'Comm. Availability', and 'Reaxys Registry Number'. To the right of the menu, there is a label '降順昇順切替え' (Toggle between descending and ascending order) with an arrow pointing to the 'No of References' option, which has a small '↑↓' icon next to it.

ソート項目	説明
✓ No of References	← 参考文献数
No of Fragments	← フラグメント数
Molweight (g/mol)	← 分子量
Molecular Formula	← 分子式
Publication Year	← 発行年
Comm. Availability	← 商業的入手可能性
Reaxys Registry Number	← Reaxys登録番号

⑤表示Database変更機能:



The screenshot shows a 'History' page with a user profile 'Takashi Isobe'. A dropdown menu is open, showing a list of databases and their associated counts. The menu is currently set to 'Reaxys - 957'. The list includes: 'Reaxys - 957', 'eMolecules - 47', 'LabNetwork - 8', 'PubChem - 1,961', and 'SigmaAldrich - 4'. Below the list, there are links for 'Bioactivity - 1,533', 'Other Data - 2,629', 'Reactions - 148', and 'Documents - 5,155'.

データベース	数
Reaxys	957
eMolecules	47
LabNetwork	8
PubChem	1,961
SigmaAldrich	4

* デフォルトではReaxysになっています。

検索結果の閲覧①

1,456 Substances out of 17,718 Documents, containing 1,454 Reactions

Reaxys - 1,456

0 selected Limit To Exclude Export Preparations

Sort by No of References

Grid

①

simvastatin ②

C₂₅H₃₈O₅ 418.574 4768037 123049-81-0, 79902-63-9

Identification Physical Data - 94 Bioactivity - 2,219

Druglikeness Spectra - 96 Other Data - 3,152

④ Preparations - 49

⑤ Reactions - 173

⑥ Documents - 13,098

検索結果画面:

1件目のレコードを詳細表示させました。

- ① 構造式
- ② 名称
- ③ 収録されているデータ
- ④ この化合物が生成物となる反応
- ⑤ この化合物を含む反応
- ⑥ 参考文献数

ここでは、「Physical Data」をクリックして物性値を確認します。

さらに融点のデータを確認するために「Melting Point」をクリックします。

simvastatin

Identification

Physical Data - 87

Melting Point - 10

Density - 5

Association (MCS) - 10

Chromatographic Data - 7

Circular Dichroism - 1

検索結果の閲覧②

融点のデータ:

様々な論文・特許から実測値が収録されています。

- 異なる情報源からの値を一覧で表示できるので、比較・検討が容易

「Cited」のリンクをクリックするとScopusの被引用文献情報を閲覧することができます。

様々な論文・特許から実測値を収録。
異なる情報源からの値を一覧で表示、
比較・検討が容易

Physical Data - 87

Melting Point - 10

Show/Hide columns ▾

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Reference
136		Martínez-Jiménez, Cecilia; Cruz-Angel, Jorge; Vide, Marcelo; Martínez, Luz María - [Molecules, 2018, vol. 23, # 9] Full Text Details Abstract
137.87		Nicolás Vázquez, Inés; Rodríguez-Núñez, Jesús Rubén; Peña-Caballero, Vicente; Ruvalcaba, Rene Miranda; Aceves-Hernandez, Juan Manuel - [Journal of Molecular Structure, 2017, vol. 1149, p. 683 - 693] Full Text Cited 1 times Details Abstract
140.65		Basak, Souvik; Mondal, Sandip; Dey, Suddhasattya; Bhattacharya, Plaban; Saha, Achintya; Deep Punetha, Vinay; Abbas, Ali; Gopal Sahoo, Nanda - [Journal of Pharmacy and Pharmacology, 2017, vol. 69, # 10, p. 1304 - 1317] Full Text Cited 1 times Details Abstract
133 - 135		PFICKER PHARMACEUTICALS LTD. - US2009/43115, 2009, A1 Full Text Details Abstract
135 - 138		Oh, Dong-joon; Lee, Byung-Chul; Hwang, Sung-joo - [Journal of Chemical and Engineering Data, 2007, vol. 52, # 4, p. 1273 - 1279] Full Text Cited 16 times Details Abstract
139.5		Askin, D.; Verhoeven, T. R.; Liu, T. M.-H.; Shinkai, I. - [Journal of Organic Chemistry, 1991, vol. 56, # 16, p. 4929 - 4932] Full Text Details Abstract

Scopus

検索 収録誌 アラート リスト ヘルプ ▾ SciVal ユーザー登録 ログイン ▾

15 件の文献が次を引用しています:

戻る

Solubility of simvastatin and lovastatin in mixtures of dichloromethane and supercritical carbon dioxide
Oh D.-J., Lee B.-C., Hwang S.-J.
(2007) Journal of Chemical and Engineering Data, 52 (4), pp. 1273-1279.

RSS設定

検索語を追加して絞り込み

項目を選択して絞り込み
絞り込む 除外する

アクセスタイプ ⓘ
☐ Other (15) >

検索結果の分析 すべての抄録を表示 並び替え: 出版日(新しい順)

☐ すべて ☐ エクスポート ☐ ダウンロード ☐ 引用分析 ☐ 引用している文献 ☐ リストに追加

文庫タイトル	著者名	出版年	出版物名	被引用数
1 Solubility of Vitamin e Acetate in Supercritical Carbon Dioxide: Measurement and Correlation	Han, S., Wang, W., Jiao, Z., Wei, X.	2017	Journal of Chemical and Engineering Data 62(11), pp. 3854-3860	0

抄録を表示 ▾ [Full Text](#) [フルテキスト](#) [関連文献](#)

検索結果の閲覧③

NMR スペクトル情報:

Spectra のリンクからはNMR スペクトルなどのスペクトル情報を表示させることができます。

Spectra - 86								
NMR Spectroscopy - 35								
Description (NMR Spectroscopy)	Nucleus (NMR Spectroscopy)	Coupling Nuclei	Solvents (NMR Spectroscopy)	Temperature (NMR Spectroscopy), °C	Frequency (NMR Spectroscopy), MHz	Original Text (NMR Spectroscopy)	4...	Reference
NOE (Nuclear Overhauser Effect)	1H							Rakhmatullin; Galiullina; Klochkova; Latfullin; Aganov; Klochkov - Journal of Molecular Structure, 2016, vol. 1105, p. 25 - 29 Full Text ↗ Cited 5 times ↗ Details > Abstract >
Chemical shifts, Spectrum	1H			29.84				Rakhmatullin; Galiullina; Klochkova; Latfullin; Aganov; Klochkov - Journal of Molecular Structure, 2016, vol. 1105, p. 25 - 29 Full Text ↗ Cited 5 times ↗ Details > Abstract >
NOESY (Nuclear Overhauser Enhanced Spectroscopy), Spectrum	1H, 1H			29.84				
HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation), Spectrum	1H		chloroform-d1		600			
	1H		chloroform-d1			¹ H-NMR (δ, CDCl ₃): 6.01 (d, 1H), 5.78 (dd, 1H), 5.51 (br, 1H), 5.37 (m, 1H), 4.62 (m, 1H), 4.39 (br, 1H), 2.73-2.63 (m, 2H), 2.22-2.48 (m, 4H), 1.32-1.98 (m, 11H), 1.14 (s, 3H), 1.13 (s, 3H), 1.09 (d, 3H), 0.89 (d, 3H), 0.82 (t, 3H)		PFICKER PHARMACEUTICALS LTD. - US2009/43115, 2009, A1 Full Text ↗ Details > Abstract >
	1H		chloroform-d1		300	¹ H NMR (CDCl ₃) 300 MHz: δ6.00(d, J=9.3, 1H) δ5.78 (dd, J=6, 1H) δ5.5 (br t, 1H) δ5.37(q, 1H) δ4.6(m, 1H) δ4.38 (m, 1H) δ2.78-1.33(m, 16H) δ1.13(m, 9H) 0.85(m, 6H) δ0.87(m, 6H).		Glenmark Pharmaceuticals Limited - US2005/239885, 2005, A1 Full Text ↗ Details > Abstract >
Chemical shifts	1H		CDCl ₃		300			Dabak, Kadir; Adiyaman, Mustafa - Helvetica Chimica Acta, 2003, vol. 86, # 3, p. 673 - 677 Text ↗ Details > Abstract >

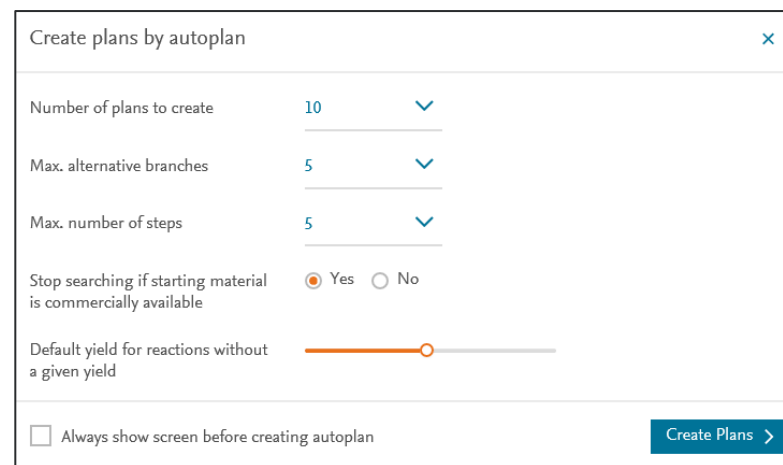
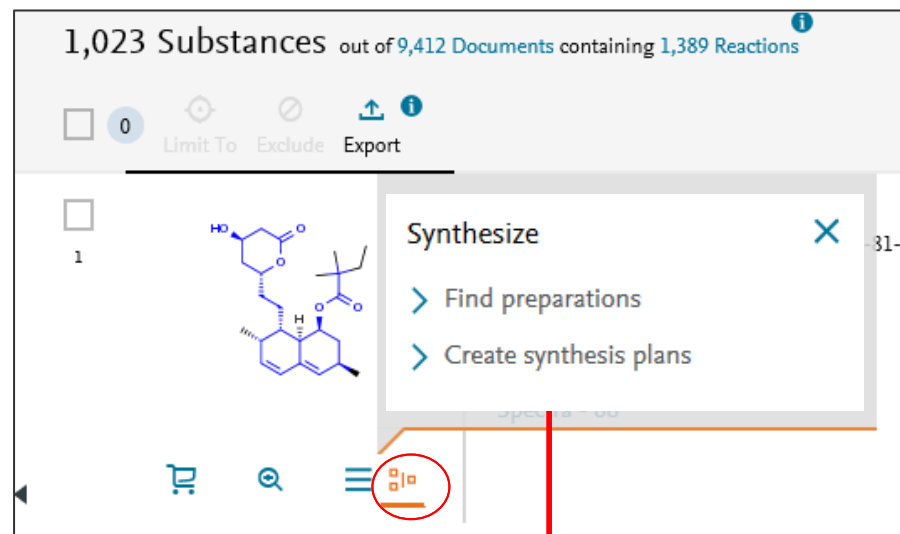
NMR スペクトルデータでは、核種・溶媒などの測定条件に加えて、ケミカルシフト値も収録されているため(特許由来レコードのみ)、原著を参照することなく詳細情報を入手可能

検索結果の閲覧④

 をクリックすることで、「Synthesize」のメニューを選択できます。

「Find preparations」もしくは「Create synthesis plans」を選択し、Synthesis Plannerで逆合成的にルートを検討することができます。

また、「Preparations」、「Reactions」をクリックすることで、この物質を合成する反応、この物質を含む反応もワンクリックで表示可能です。



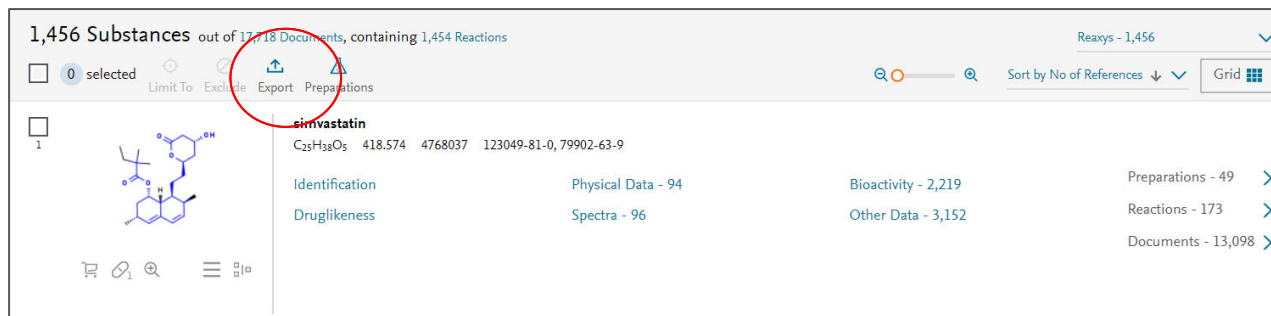


検索結果のExport / Save / Alertの利用

検索結果のExport①

検索結果をPDF 形式や、XML、Word、Excel などのファイル形式でエクスポートできます。

Exportにはログインが必要です。

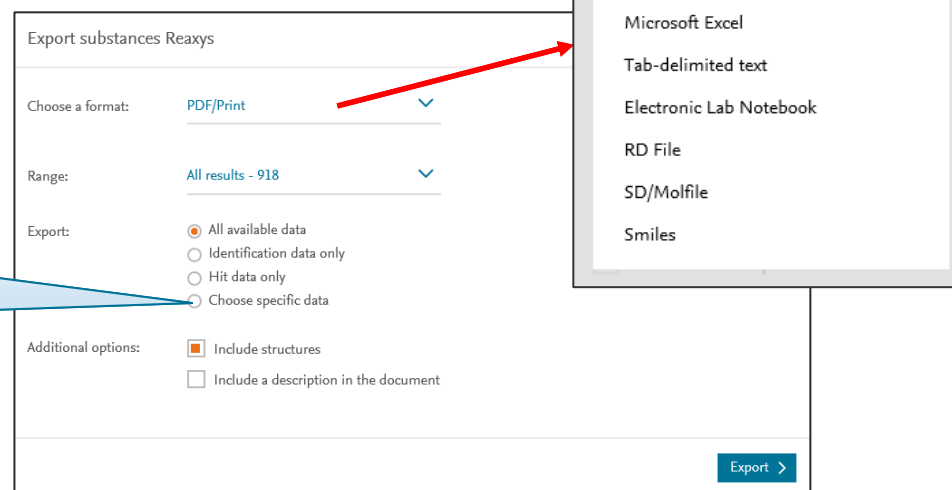


検索結果画面で、「Export」をクリックします。

エクスポートの設定画面:

出力形式、出力範囲、出力内容オプションを選択し、Exportボタンをクリックします。

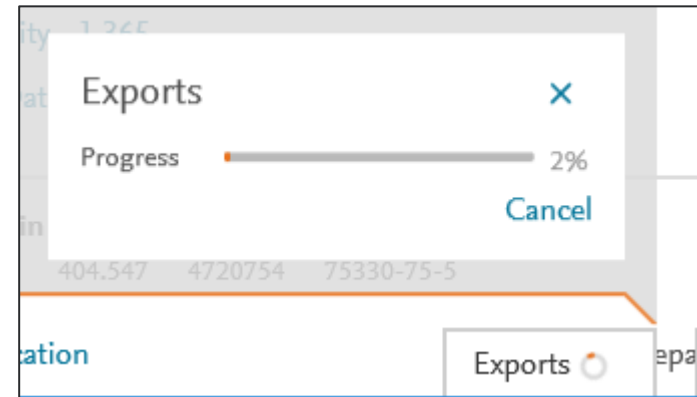
検索結果から任意のレコードやフィールドを選択して、エクスポートすることも可能



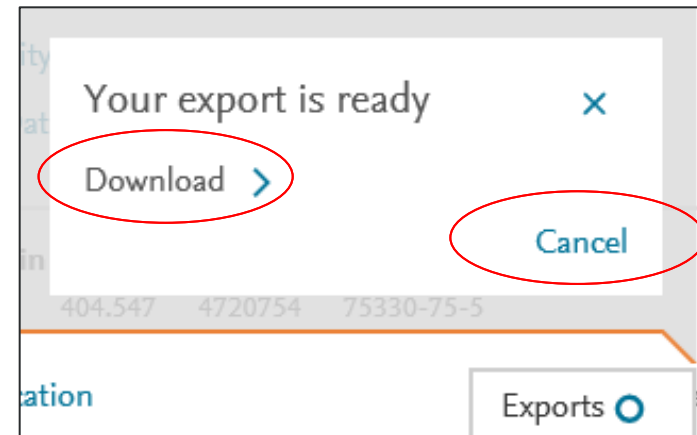
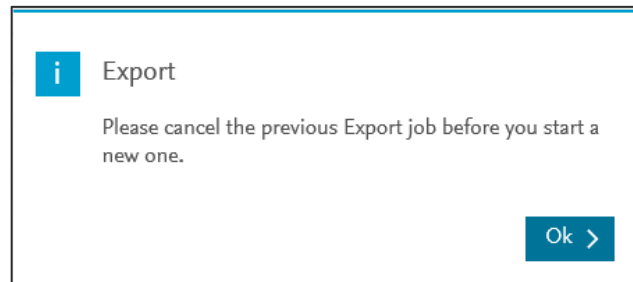
検索結果のExport②

Exportの進捗状況が表示されます。

- 準備が整うとDownloadリンクが表示されるので、クリックしてローカルに保存する



Downloadが終了したら、Cancelをクリックします。



* 続けて別の結果をExportする場合、CancelされていないとExportができません。

検索結果のExport③

エクスポート形式の設定詳細:

Choose a format: エクスポート先のファイル形式

- PDF/Print
- XML
- Microsoft Word
- Microsoft Excel (.xlsx形式)
- Tab-delimited Text(.xls形式)
- Electronic Lab Netbook
- RD File

Range: 出力する範囲を選択

Export: 出力するデータの種類を選択

- All available data
- Hit data only:
フィルターなどで絞り込んだデータ

Export documents

Choose a format:

PDF/Print

Range:

All results - 411

Export:

☒ All available data

☐ Hit data only

Additional options:

☒ Include structures

☒ Include abstracts

☒ Include reactions

☒ Include Front page information

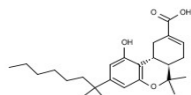
☒ Include a description in the document

Description

Export >

Additional option :

- エクスポート対象に含める項目を選択
 - Include structure
 - Include abstract
 - Include reaction
 - Include front page information
 - Include a description in the document

Structure: Image	SMILES	Substance	Links to R Data Cour
	CCCCCCC5856310	https://w1(1 of 1)	

Microsoft Excel形式でexportした場合、構造式が画像データとして出力されます。

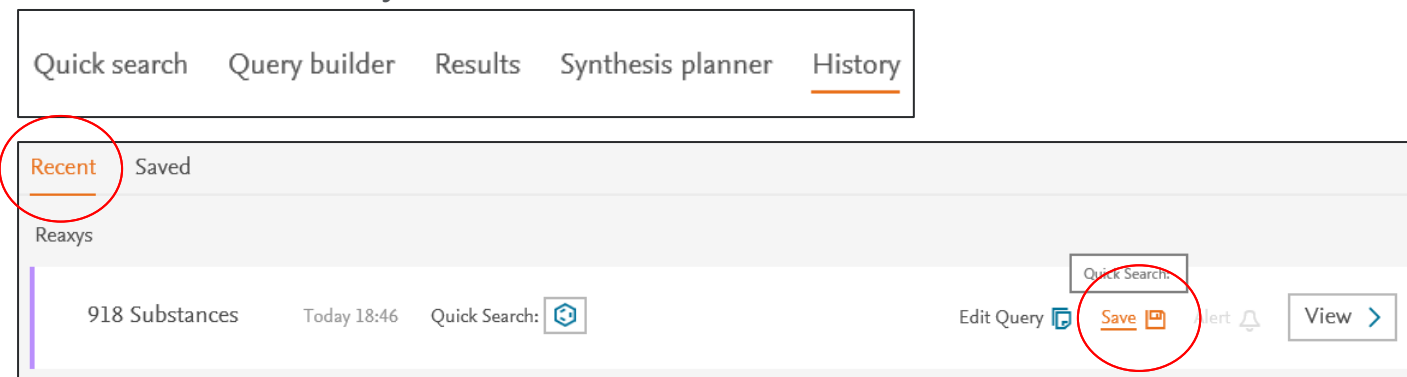
Tab-delimited Text形式の場合、構造データはSmiles形式のみとなります。

検索履歴の保存

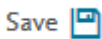
検索結果における任意のレコードを保存することができます。

- 保存したレコードはHistory 画面で閲覧することが可能(ログインして利用している場合、セッション終了後も削除されない)

画面最上部のHistoryのタブを開きます。



保存したいレコードの列にマウスを近づけると、メニューが表示されます。

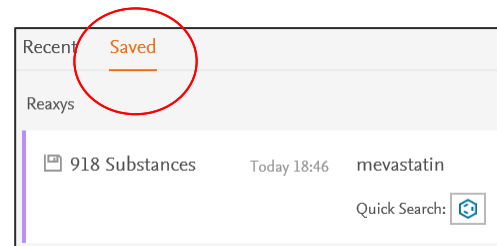
「Save」のアイコン  をクリックします。

Result setの名前を入力し「Save」をクリックします。

* 名前は日本語でも入力することも可能

「Saved」タブをクリックすると保存データの管理画面が表示されます。

登録したデータが一覧表示されます。



Alert機能

Alertは、検索条件を登録しておく、データベースの更新タイミングに合わせて条件に一致した検索結果が自動的に配信されるサービスです。

- 同じ条件で反応や物質・物性に関する情報をモニタリングしたい場合に便利です。
- Alert結果は登録されたEmailアドレスに配信されます。他の利用者にも同じAlert結果を配信して共有することもできます。

* Alertのご利用にはログインが必要となります(ログイン方法については別紙参照ください)。

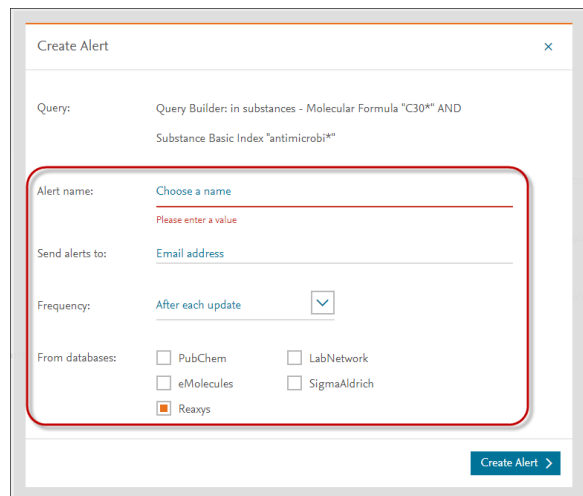
Alertの設定:

- ① Alertを設定したい検索を実行したのちにHistoryを開きます。
- ② History画面で、Alertを設定したい検索履歴を選択します。検索履歴にマウスオーバーすると、各種オプションが表示されますので、Alertをクリックします。

The screenshot displays the Reaxys web application interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The 'History' tab is selected and circled in red. A blue arrow points from this tab to the History panel on the right. The History panel shows a list of search results. The first entry, '876 Substances', is highlighted. An 'Alert' button with a bell icon is circled in red next to this entry. The main content area on the left shows search results for 'Oleanolic acid' and 'ursolic acid'.

Alertの設定・管理

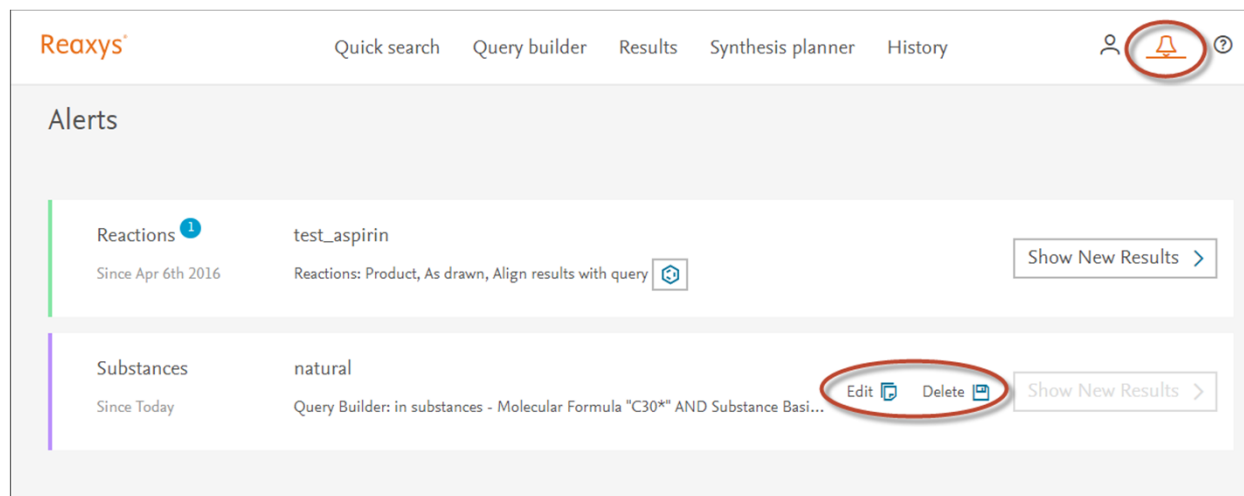
Alertの設定:



- Alert name: Alert名称
- Send alerts to: 配信先メールアドレス(複数入力可)
- Frequency: 配信頻度
 - After each update
 - Monthly
 - Deactivate
- From databases: 情報源のデータベースを選択

上記を設定しCreate Alertをクリックします。

Alertの管理:



画面右上部の  をクリックするとAlertの管理画面が表示されます。

登録しているAlertが一覧で確認できます。

Alert名をマウスオーバーすると、Edit、Deleteの機能が選択可能になります。

Quick Search: テキストサーチ

テキストサーチ①

Reaxys では構造式だけではなく、テキストサーチでも反応、物性や文献を検索できます。

検索例: キシリトールの融点情報を調べる

Quick search Query builder ^{New} Results Synthesis planner History

Search for melting point of xylitol

Search Reaxys
Q melting point of xylitol X ^{New}

AND

Create Structure or Reaction Drawing

① Quick Searchで「Search Reaxys」に
“melting point of xylitol”と入力し、
「Find」で検索

② 検索したいのは融点情報なので、
Substanceの「View Results」を
クリックし検索結果を表示する

Reaxys Quick search Query builder ^{New} Results Synthesis planner History Takashi Isoe

Results for melting point of xylitol

4	Substances	Structure : as drawn AND Property : melting point Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results	View Results
154	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : melting point, xylitol Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results	View Results
685,618	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : melting point Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results	View Results
7,058	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : xylitol Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results	View Results

4 Substances out of 2,941 Documents containing 497 Reactions Reaxys - 4

XYLITOL
HOCH2(CH(OH))3CH2OH

Hit Data - 24
Identification
Physical Data - 319

Hit Data - 24
Melting Point - 24 hits out of 24

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location	Comment (Melting Point)	Reference
272 - 274	ethyl acetate			Punla, Jyoti; Singh, Rajvir; Suman - [Asian Journal of Chemistry, 2018, vol. 30, # 9, p. 1966 - 1970] Full Text Details Abstract
92 - 96		Paragraph 0126		Yonsei University Industry-Academic Cooperation Foundation; wooshin medics co. ltd; Hwang, Sung Joo; Kang, Han; Song, In Ho; Kwon, Min Jun; Seon, Bo Kyung - KR2016/79954, 2016, A Full Text Details Abstract
107.2				Fujii, Kahor; Izutsu, Ken-ichi; Kume, Migiwa; Yoshino, Takeshi; Yoshihashi, Yasuo; Sugano, Kiyohiko; Terada, Katsuhiko - [Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 2015, vol. 63, # 5, p. 311 - 317] Full Text Details Abstract

Hit DataとしてMelting Pointが
表示される

テキストサーチ②

検索例: 安息香酸 (Benzoic acid) エステル化の検索

Quick search Query builder ^{New} Results Synthesis planner History

Search for esterification of benzoic acid

Search Reaxys
Q esterification of benzoic acid X ^{New}

- ① Quick Searchで「Search Reaxys」に“esterification of benzoic acid”と入力し、「Find」で検索
- ② 検索したい対象によってReactionまたはDocumentsの「View Results」を選択

86	Reactions	Reaction Query : as drawn AND esterification Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results View Results
1,294	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : esterification, benzoic acid Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results View Results
76,021	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : esterification Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results View Results
70,738	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : benzoic acid Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results View Results

86 Reactions out of 491 Documents containing 175 Substances

1

O=C(O)c1ccccc1 + CCCCCO → CCCCCOC(=O)c1ccccc1

2

CCOC(=O)C1CCOC1 + O=C(O)c1ccccc1 → CCOC(=O)C1CCOC1C(=O)c1ccccc1

Conditions: With pyrographites; toluene-4-sulfonic acid for 0.0097222h; Esterification; Microwave irradiation (500 W)

Yield: 95%

Reference: Fan, Xingjun; Yuan, Keguo; Hao, Caili; Li, Nanyang; Tan, Gangou; Yu, Xianli; Organic Preparations and Procedures International, 2000, vol. 32, # 1, p. 287 - 290

Full Text Details Abstract

1 hit out of 1

* 今回の検索ではDocumentの検索結果は下記に分類されている。
Title, Abstracts, Keywordsがそれぞれ

- ① esterification, benzoic acid
- ② esterification
- ③ benzoic acid

2,889 Reactions

1

Design of acyl chloride environmentally benign acylation of cellulose using an ionic liquid
Takeshita, Tokio; ...; Yokosui, Fumiyo; Matsumoto, Ryo; Nokami, Toshiki; Itoh, Toshiyuki [Australian Journal of Chemistry, 2019, vol. 72, # 2, p. 61 - 69]

Abstract hit: {...Esterification is the most important derivatization to utilise cellulose as a...}

Index Terms hit: {...Environmentally benign, Homogeneous esterifications, Materials industry...}

2

Remarkable stability of Candida antarctica lipase B immobilized via cross-linking aggregates (CLEA) in deep eutectic solvents
Gujardo, Nadia; Ahumada, Katherine; Dominguez de Maria, Pablo; Schreiber, Rodrigo A. [Biocatalysis and Biotransformation, 2019, vol. 37, # 2, p. 106 - 114]

Abstract hit: {...reactions (e.g. esterification) catalyzed by hydrolases. Substrates with different polarity may be employed....}

Index Terms hit: {...Deep eutectic solvents, esterification, lipases...}

テキストサーチ③

検索例: HPLCで分析した結果をもつ化合物を検索

Quick search Query builder **New** Results Synthesis planner History

Search for hplc glutamine

Search Reaxys
hplc glutamine

X New

- ① Quick Searchで「Search Reaxys」に“hplc glutamine”と入力し、「Find」で検索
- ② 今回は化合物を探しているので Substancesの「View Results」で検索結果を表示

Reaxys Quick search Query builder **New** Results Synthesis planner History

4 Substances Structure: as drawn AND Property: Preview Results View Results >

hplc
Edit in Query Builder Create Alert

2,194 Documents Titles, Abstracts, Keywords: hplc, glutamine Preview Results View Results >

535,907 Substances Property: hplc Preview Results View Results >

417,560 Documents Titles, Abstracts, Keywords: hplc Preview Results View Results >

71,134 Documents Titles, Abstracts, Keywords: glutamine Preview Results View Results >

Glutamineとhplcの掛け合わせの結果だけではなく、property「hplc」のみも提示

4 Substances out of 3,949 Documents containing 861 Reactions

GLUTAMINE
NC(CCC(=O)O)C(=O)O 146.146 1723795 56-85-9, 585-21-7, 5959-95-5, 6899-04-3

Hit Data - 2
Chromatographic Data - 2 hits out of 3

Chromatographic data	Location	Reference
HPPLC (High performance liquid chromatography)	supporting information	Taglang, Céline; Martínez-Prieto, Luis Miguel; Del Rosal, Iker; Maron, Laurent; Potesu, Romuald; Philippot, Karine; Chaudret, Bruno; Rousseau, Bernard; Pieters, Grégory - [Angewandte Chemie - International Edition, 2015, vol. 54, # 36, p. 10474 - 10477, Angew. Chem., 2015, vol. 127, # 36, p. 10620 - 10623, 4] Full Text Cited 29 times Details Abstract >
		Jeon, Jini; Lim, Chan Ju; Kim, Jae Kwang; Park, Sang Un - [Molecules, 2018, vol. 23, # 7] Full Text Details Abstract >
HPPLC (High performance liquid chromatography)		Han, Ningning; Li, Longlong; Peng, Mengling; Ma, Haitian - [Phytotherapy Research, 2016, p. 1316 - 1329] Full Text Cited 3 times Details Abstract >

Query Builder

Query Builder①

構造式、物性値などの掛け合わせ検索に対応できます。

複雑な掛け合わせの検索にもドラッグ & ドロップに対応できます。

Reaxys® Quick search Query builder ^{New} Results Synthesis planner History

Search in: Reactions > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all

② Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

① Drag & Drop to build a new query

Find search fields and forms

Fields Forms History

Reaxys ^

Basic Indexes ③ v

Identification v

Physical Properties v

Spectra v

Pharmacological Data v

Ecotoxicology v

Other v

Reactions v

- ① 検索フィールド
- ② 検索条件(構造、分子構成、CAS registry number、Document Basic Index)
- ③ 検索条件(キーワード、数値が入力可能)

Query Builder②

Query Builderには検索用項目が用意されています。

「Find search fields and forms」にキーワードを入力することで探すこともできます。

The screenshot displays the Reaxys Query Builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The user 'Takashi Isobe' is logged in. The 'Search in:' section shows 'Reactions', 'Substances', and 'Documents'. A red box highlights the 'Find search fields and forms' button with the keyword 'spec'. Below this, a sidebar lists various search categories: Catalyst Investigation, Patent Specific Data exists/any, NMR Spectroscopy, and IR Spectroscopy. A red box highlights the 'History' tab in the sidebar. The main area shows a list of search results, including '950 Substances' and '158 Substances', with a red box highlighting the 'Physical Data' category. A blue callout box points to the 'Physical Data' category, stating: 'Physical Dataや Natural Productなどのプリセットのフォームも用意' (Physical Data or Natural Product etc. preset forms are also available). Another blue callout box points to the 'History' tab, stating: '検索履歴との掛け合わせも可能' (Combination with search history is also possible).

Reaxys

Quick search Query builder ^{New} Results Synthesis planner History

Search in: Reactions Substances Documents

Find search fields and forms
Q spec

Drag & Drop to build a new query

Physical Data

		Find any	Show fields	
AND	Melting Point	☐	▼ (Melting Point, °C, Solvent)	X
AND	Boiling Point	☐	▼ (Boiling Point, °C, Pressure, Torr)	X
AND	Density	☐	▼ (Density, g·cm ⁻³ ...Type)	X
AND	Dissociation Exponent	☐	▼ (Dissociation Exponent...Type)	X
AND	Dynamic Viscosity	☐	▼ (Dynamic Viscosity, P, Temperature, °C)	X
AND	Optical Rotatory Power	☐	▼ (Type...Temperature, °C)	X

Find search fields and forms

Fields Forms History

My Forms

Reaxys Forms

Bibliography

Natural Products

Physical Data

Reactions

Spectra

Substances

Patents

検索履歴との掛け合わせも可能

Physical Dataや Natural Productなどのプリセットのフォームも用意

Query Builder: 検索事例

- ① 条件の掛け合わせ(天然物、抗菌活性、分子式)
- ② ノイズの除去
- ③ 条件の掛け合わせ(用途)

Query Builderでの検索1-①

条件の掛け合わせ:

天然物から抽出された化合物で、実験結果から炭素が30の化合物であることがわかっている。
この化合物が抗菌活性を測定されたことがあるかを検索。

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The user 'Takashi Isobe' is logged in. The search criteria are defined in the main area, with 'Molecular Formula' selected. A dropdown menu for the relationship shows 'is' as the selected option. The search criteria list on the right includes 'Basic Indexes', 'Identification', 'Chemical Name', 'Element Symbols', 'Molecular Formula', 'Molecular Weight', 'Preferred CAS Registry Number', and 'CAS Registry Number'. The 'Molecular Formula' field in the search criteria list is highlighted with a red circle.

- ① Molecular Formulaをクリックして、検索ボックスを呼び出します（または検索条件リストからMolecular Formulaを選択しクリックします）
- ② Molecular Formulaが炭素30の化合物を検索したいので、"is"を選択します。その他の構造は未知なので、「C30*」と入力します。

Query Builderでの検索1-②

The screenshot displays the Reaxys Query Builder interface. At the top, navigation tabs include 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The user 'Takashi Isobe' is logged in. Below the navigation bar, there are buttons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete all'. A 'Search in:' section contains 'Reactions', 'Substances', and 'Documents' buttons. A search bar on the right contains the text 'natural'. The main query area shows two criteria: 'Molecular Formula is C30*' and 'Isolation from Natural Product'. The 'Find any' checkbox is checked. On the right sidebar, the 'Isolation from Natural Product' item is highlighted in the search results list.

* キーワードで項目を探すことも可能。

- ③ 「Isolation from Natural Product」の項目を検索します。“Natural”と入力すると、「Isolation from Natural Product」の項目が表示されます。
- ④ 項目をクリックすると、検索フィールドに追加されます。Find anyにチェックを入れます。

Query Builderでの検索1-③

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. At the top, the 'Query builder' tab is selected. Below it, the 'Search in:' section has 'Substances' highlighted. The main search area contains three criteria: 'Molecular Formula is C30*', 'Isolation from Natural Product' (with 'Find any' selected), and 'Substance Basic Index is antimicrobi*'. The 'Substance Basic Index' criterion is circled in red. On the right sidebar, the 'Substance Basic Index' option is also circled in red. The top right corner shows the user 'Takashi Isobe' and a search bar with 'sub' entered.

- ⑤ Basic Indexesから「Substance Basic Index」をクリックし、検索フィールドに表示します。
* Basic Index: 検索結果の画面内をキーワード検索する機能(検索対象ではないフィールドでも検索が可能)
- ⑥ “antimicrobi*” (抗菌活性)と入力します。
- ⑦ Substancesをクリックし化合物を検索します。

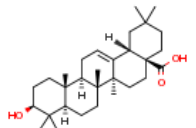
Query Builderでの検索1-④

Reaxys[®] Quick search Query builder^{New} Results Synthesis planner History Takashi Isobe

109 Substances out of 11,854 Documents containing 8,084 Reactions

0 Limit To Exclude Export No of References ↓ Grid

1



Oleanolic acid
C₃₀H₄₈O₃ 456.709 2228570 508-02-1

Hit Data - 799
Identification
Physical Data - 335
Spectra - 277
Bioactivity - 1,359
Other Data - 981
Preparations - 172 >
Reactions - 1,819 >
Documents - 3,435 >

Hit Data - 799

- ✓ Pharmacological Data - 27 hits out of 1349
- ✓ Isolation from Natural Product - 772 hits out of 772

2



ursolic acid
C₃₀H₄₈O₃ 456.709 2228563 77-52-1

検索結果画面:

構造式、化学名、収録されているデータ項目などの他に、合成方法、誘導体の合成方法も確認できます。検索結果の絞り込みの軌跡をナビゲーションする機能や、各種フィールドを活用したフィルター機能もついています。

Query Builderでの検索2-①

検索結果からノイズを除去する検索方法:

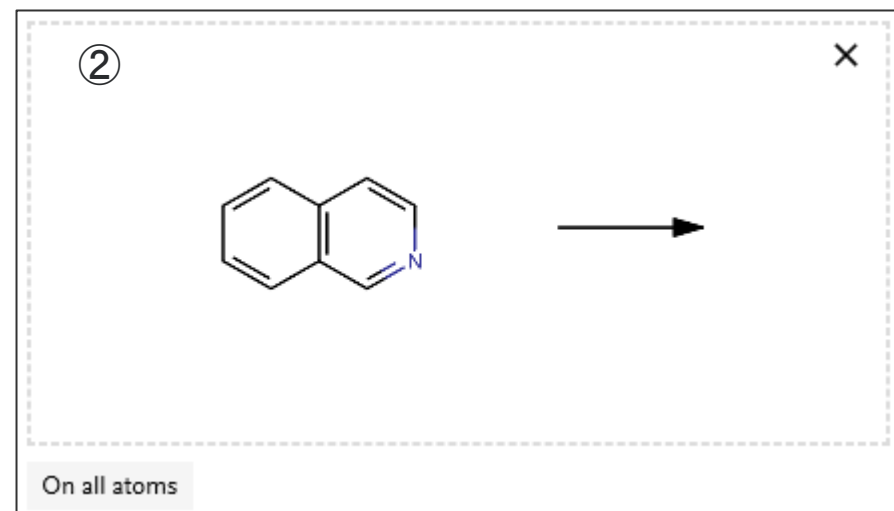
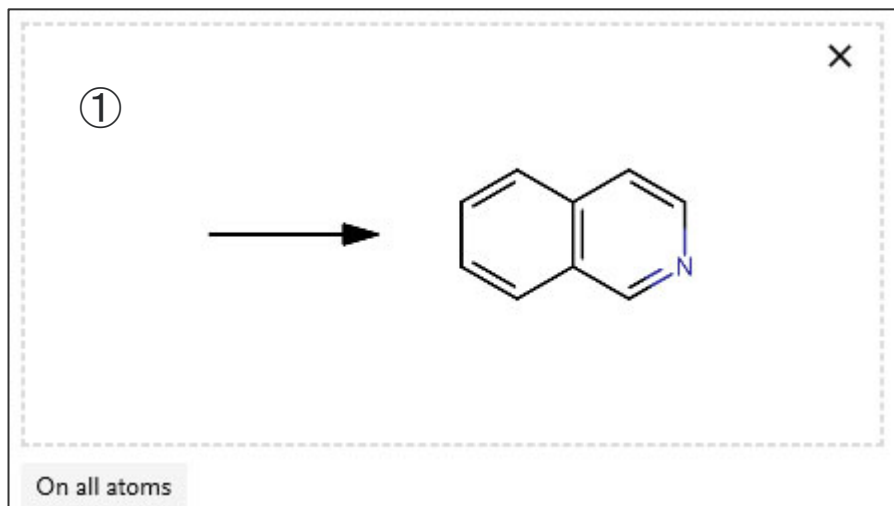
イソキノリンの骨格を作る反応を検索する。
ただし出発物質に既に目的骨格が含まれている反応
(ノイズ)を除去したい。

* ノイズに相当する検索を行い、Query Builderを
利用して全体の検索結果から除くことができます。

Quick searchで以下の検索を行います。

- ① イソキノリン骨格を作る反応を検索
- ② イソキノリン骨格を出発物質とする反応を検索
* Searchメニューでは、As substructureを選択

反応の検索結果が得られるので、View Result
で結果を閲覧します。



Query Builderでの検索2-②

2つの検索を実施後、Query Builderのタブを開き、「History」を選択します。
Historyタブで表示されていた二つの検索結果の履歴が、Query Builderタブでも表示されます。

- ①イソキノリン骨格を作る反応を検索した履歴です。
- ②イソキノリン骨格を出発物質とする反応を検索した履歴です。

Reaxys

Quick search Query builder^{New} Results Synthesis planner History

Takashi Isobe

Search in: Reactions Substances Documents

Import Save Reset form Delete all

Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

Find search fields and forms

Fields Forms History

Recent

69,637 Reactions

Reagent (substructure search)

129,145 Reactions

Product (substructure search)

Saved

Drag & Drop to build a new query

* イソキノリンの骨格を作る反応を検索したいと思いますが、イソキノリン骨格を持つものを出発物質とする反応には、単なる置換反応が多く含まれてしまいます。ノイズに共通項はないか探し、その共通項の検索を行い、もとの検索結果から差し引くことでノイズを除くことができます。

Query Builderでの検索2-③

- ① イソキノリン骨格を作る反応を検索した履歴を、クリックして検索フィールドに入れます。
- ② 同様にイソキノリン骨格を出発物質とする反応を検索した履歴を検索フィールドに入れます。
- ③ イソキノリン骨格を作る反応を検索した結果から、ノイズであるイソキノリン骨格を出発物質とする反応を検索した結果を除きたいので、「NOT」を選択します。
- ④ SearchでReactionを選択します。イソキノリン骨格をもたないものから、イソキノリン骨格を持つものを生成する反応結果が得られます。

Reaxys

Quick search Query builder ^{New} Results Synthesis planner History

Takashi Isobe

Search in: Reactions Substances Documents

Import Save Reset form Delete all

Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

129,145 Reactions Product (substructure search)

NOT 69,637 Reactions Reagent (substructure search)

OR AND NOT NEAR NEXT PROXIMITY

Find search fields and forms

Fields Forms History

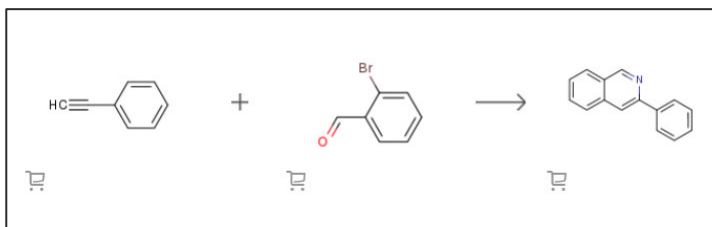
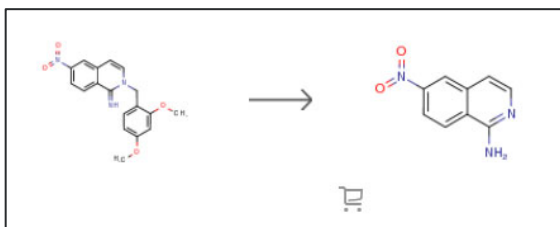
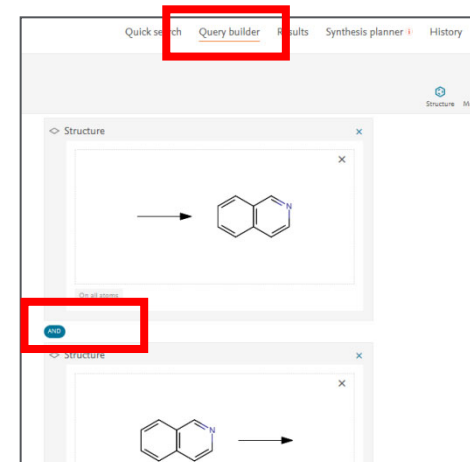
Recent

69,637 Reactions Reagent (substructure search)

129,145 Reactions Product (substructure search)

Saved

※Historyを用いず、
Query Builder上で反
応式同士を演算する
方法も考えられる



Query Builderでの検索3

食物(Food)とサプリメント(Supplement)を用途に含む化合物を探す

“Use”を選択し、条件を入力して
「Search Substances」で検索をする

The screenshot displays the Reaxys Query Builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The user 'Takashi Isobe' is logged in. The 'Search in:' section has buttons for 'Reactions', 'Substances', and 'Documents'. Below this, there are icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete all'. The main query builder area shows two conditions under the 'Use' field: 'is Laboratory Use and Handling' and 'is food'. A second condition is added with 'is supplement'. The 'Find any' button is visible. The 'Results' tab is active, showing the chemical structure of tannic acid (C₂₆H₁₂O₁₆, 1701.22, 8186396, 5424-20-4). The 'Hit Data - 6' section shows 6 hits out of 343. The table below lists the hits with their use patterns and references.

Use Pattern	Reference
Food composition comprising licorice polyphenol	Kaneka Corporation - US2008/286254, 2008, A1 Full Text Details Abstract
functional food	Kaneka Corporation - US2008/286254, 2008, A1 Full Text Details Abstract
nutritional supplement	Kaneka Corporation - US2008/286254, 2008, A1 Full Text Details Abstract
pet food	Kaneka Corporation - US2008/286254, 2008, A1 Full Text Details Abstract

用途としてFoodと
Supplementの記載のある
化合物がヒット

Appendix

- 無機化合物の検索
- 化合物の表記方法
- 動作環境

無機化合物の検索

無機化合物の場合、構造式ではなく、Molecular Formula Field に分子式を入力して検索する方法を推奨しています。

Query builderで、Molecular Formulaを選択し、分子式を入力して検索を行います。

The screenshot displays the Reaxys Query builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (highlighted with a red circle and a 'New' badge), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The user 'Takashi Isobe' is logged in. Below the navigation bar, the 'Search in:' section has three tabs: 'Reactions', 'Substances' (highlighted with a red circle), and 'Documents'. The 'Substances' tab is active, showing a search field with 'Pb????' entered. The 'Molecular Formula' field is selected (highlighted with a red circle), and the 'is' operator is visible. The right sidebar shows 'Find search fields and forms' with tabs for 'Fields', 'Forms', and 'History'. The 'Fields' tab is active, showing a list of search fields: 'Basic Indexes' and 'Identification', both with expandable arrows.

化合物の表記方法①

検索対象	表記方法	検索式例	検索結果
元素		Fe	Fe
簡単な分子		HCl	HCl
無機塩		NaCl	NaCl
付加化合物	付加する分子を *でつなぐ	CoCl ₂ *4NH ₃	
配位化合物		Fe(C ₅ H ₅) ₂	
固溶体	混合する分子を #でつなぐ	Na ₂ SO ₄ #Cs ₂ SO ₄ CaCO ₃ #CaMg(CO ₃) ₂	Mixture Solid Solution
すべての金属元素	M	MX	NaCl, KI, KBr
ハロゲン	X または(hal)		
複数の原子団を許容 例) (CH ₃) ₂ O (C ₂ H ₅) ₂ O	許容する原子団を (XX, YY)と列挙して 表記	(ch ₃ , c ₂ h ₅) ₂ O	
周期表番号や グループ名で表記	(1b), (alk), (act)	(1b)Cl (alk)Cl	AgCl, CuCl など KCl, LiCl, NaCl など
遷移元素	(trm)		
不特定の元素を含む 物質	??で1 種類、????で 2 種類の元素を表記	Pb???? Pb 以外に2 種類の元素を含む化合物	PbSO ₄ , Pb(NO ₃) ₂ , PbTiO ₃ など

化合物の表記方法②

検索対象	表記方法	検索式例	検索結果
特定の元素を含む物質	*で表	Tm*	Tm, TmCl ₃ など
特定の元素のみで構成される物質	?で表記 (数の制限はなし)	S?	S, S ₂ , S ₈ など
電荷をもつ物質	正電荷: (?+)または(*+) 負電荷: (?-)または(*-)	(?+)Na または(*+)Na	Na ³⁺ , Na ²⁺ など
ゼロ電荷でないもの	(?)または(*)		
電荷をもたないもの	(0+)	(0+)Na	Na
原子の数をレンジで指定	(x-y)	FeCl(2-3)	FeCl ₂ , FeCl ₃ , FeCl ₄
原子の数を指定	(x,y)	FeCl(2,4)	FeCl ₂ , FeCl ₄
複数の元素についてそれぞれの原子数を指定	A _x B _y , x=2,3 y=2-4	Fe _x O _y x=2,3 y=2-4	Fe ₂ O ₂ , Fe ₂ O ₃ , Fe ₃ O ₂ , Fe ₃ O ₄ など
複数の元素についてそれぞれの原子数を指定	AnB _{1-n} n=0-1 数式での表記	Fe _n Pd _{1-n} n=0-1	FePd, Fe _{0.2} Pd _{0.8} , Fe _{0.5} Pd _{0.5} など
Fe を含む合金、ドーピング物質など	Fe#	Fe#	
Fe とNi を含む合金	混合する元素を #でつなぐ	Fe#Ni	

化合物の表記方法③

物質の種類	検索式	結果例
多成分系	ZnO#TiO ₂	mixture (composition partially given): Titanium(IV) oxide zinc oxide
	PbSO ₄ #PbO#SiO ₂	mixture (composition partially given): lead (II) oxide silica gel lead (II) sulfate
溶液	NaCl#H ₂ O	mixture (composition partially given): water sodium chloride
水和物	CoCl ₂ ·(H ₂ O)?	cobaltous chloride hexahydrate cobalt(II) chloride hexahydrate CoCl ₂ ·6H ₂ O
ガラス、セラミック物資 (10-15% のB ₂ O ₃ および、 10-15%のAl ₂ O ₃ を含むSilica spheres)	B ₂ O ₃ (10-15W%)#Al ₂ O ₃ (10-15W%)#SiO ₂ #	mixture (composition partially given): lithium oxide aluminum oxide diboron trioxide silica gel Titanium(IV) oxide
合金 (96%Feおよび4%Crを含む鉄合 金)	Fe(96W%)#Cr(4W%)	mixture (composition partially given): iron chromium

動作環境

- ReaxysはJava-Free環境でご利用いただけます。
- Windows、Macintoshの以下のブラウザでご利用可能です。
 - Firefox (version 49以上)
 - Chrome (version 53以上)
 - Edge (version 14以上)
 - Safari (version 9)
 - Internet Explorer (version 11)

お問い合わせ先

Reaxysのご利用に関するご質問は、エルゼビア・ジャパン株式会社ヘルプデスクまでお問い合わせください。

- ◆ お問い合わせフォーム: <https://jp.service.elsevier.com/app/contact/supporthub/reaxys/>
- ◆ 電話番号: 03-5561-5035

Reaxysに関する情報は、以下のサポートページ上に随時掲載されています。

- ◆ <http://jp.elsevier.com/online-tools/reaxys/users>

Reaxys Rankingスコア算出方法

以下のパラメータを勘案したスコアを反応毎に算出し、スコア順に反応を表示します。

	Algorithm	スコア加算/減算
Counts for ID		
Fullreaction	Minimal 1 structured product and one structured reactant	Add
# of Reactants	2 - # of reactants	Sub
# of products	1 - # of products	Sub
Mapping available? Achilles class?	Depending on Achilles class: good mapping +20, else +10	Add
# of details	= # of details	Add
# of references	= # of references	Add
Chemical behaviour		Sub
Counts for details		
High yield	0 -10% =1 10 -20% =2...	Add
Reagent	Exists	Add
Solvent	Exists	Add
Catalyst	Exists	Add
Temperature	Exists	Add
Pressure	Exists	Add
# of stages	= +1 - # of stages	Sub
# of steps	= +1 - # of steps	Sub
Impact factor of journal	Impact factor normalized to 10	Add
Experimental text	Exists	Add