Reaxysの概要と特徴

The Shortest Path from Chemistry Question to Insight Reaxys

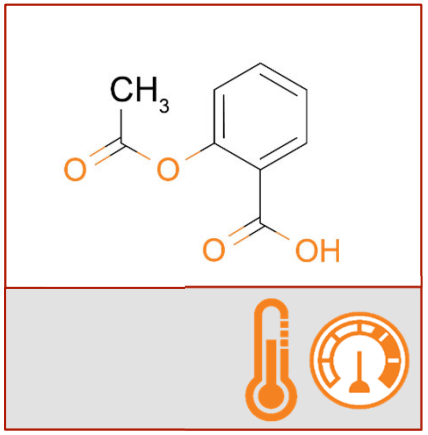
2021年7月7日
エルゼビア・ジャパン
礒辺　隆

目次

1. Reaxysとは
2. 導入実績
3. コンテンツ概要
4. 効率的なデータ取得のためのインターフェース例
   - ✓ Reaxys Ranking
   - ✓ 同一反応に紐づく複数の実験条件を並べて表示
   - ✓ 天然物に限定した検索
   - ✓ 同位体や異性体を考慮した検索
   - ✓ 特定条件レコードの除外機能による検索結果refine
5. 5.5億件以上の実測物性値・スペクトル情報
6. コンテンツ間の網羅性

Reaxysとは

- 反応、化合物データベース
- 化学関連論文や特許から反応、物性、スペクトルデータなどをサイエンティストが手順書に従って抽出
- コンテンツ：一定の網羅性を保ちつつ、ノイズを排除し、研究者にとって有用なデータを収録
- インターフェース：効率的かつノイズの少ない検索機能を搭載



3,368万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

5,454万件以上の反応情報（反応条件、溶媒、触媒、収率など）を収録

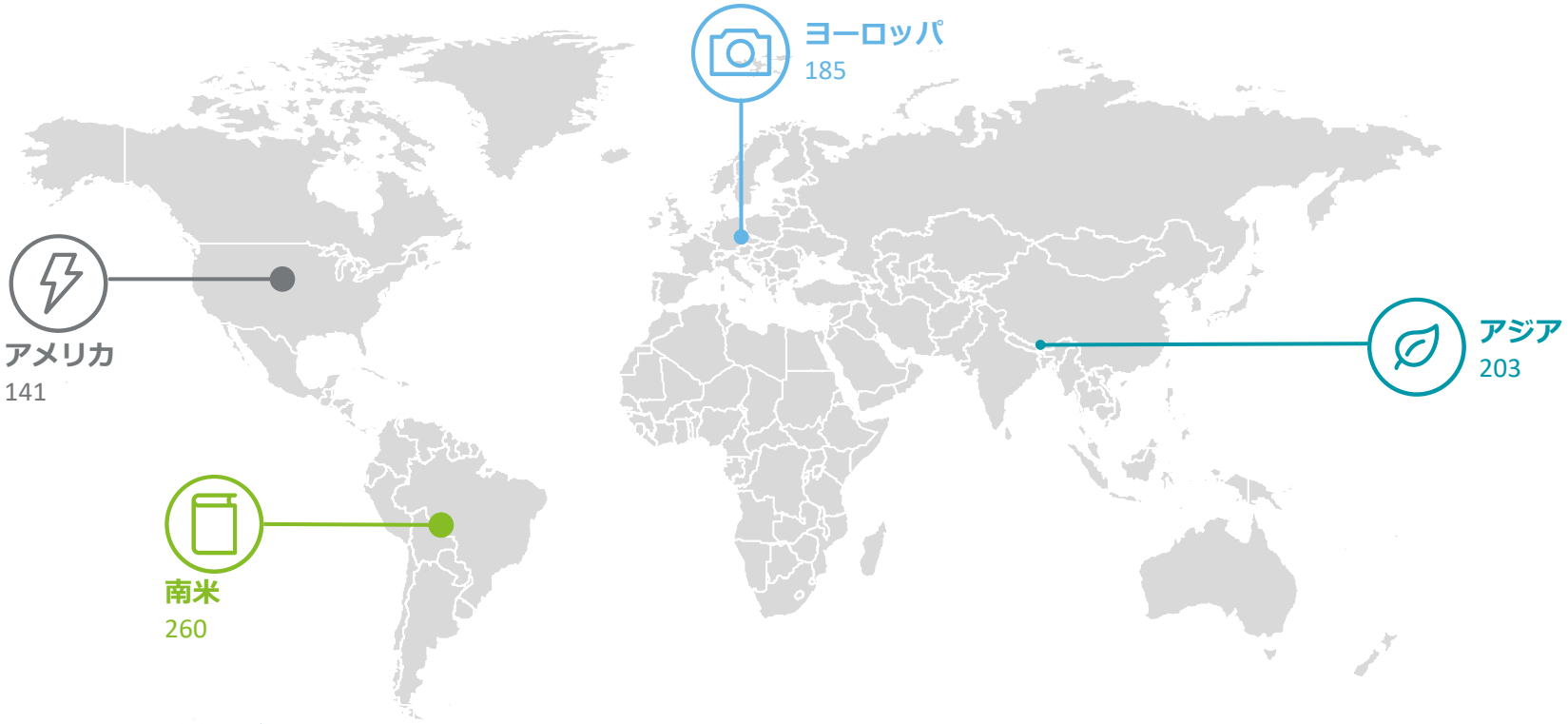
収録データ

6,153万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15,000誌のジャーナルや特許から収録

情報源

導入実績

789の大学・公的機関に導入されています。
(2019年1月現在、企業を除く)



***The Times Higher Education*上位50校のうち42校が*Reaxys*を導入しています。**

コンテンツ概要

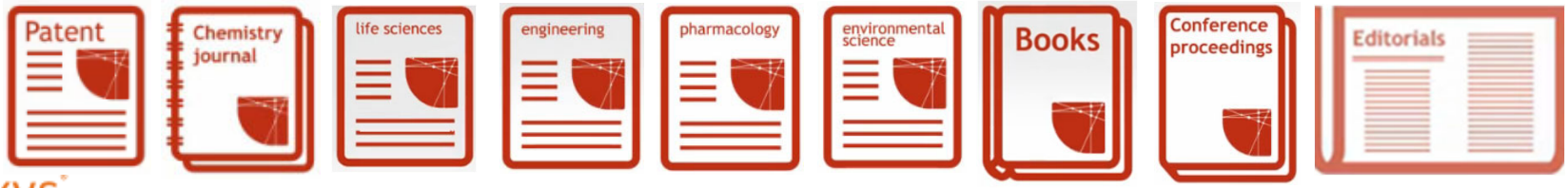
- ✓ **収録ジャーナル： 合成化学関連450誌**
  - ✚ **幅広い分野の約16,000誌を追加**
- ✓ **化合物に関わる必須の特許情報**
- ✓ **5億5千万件以上の実測物性値・同定情報**
- ✓ **約5,601万の反応情報（すべて異なる反応）**
- ✓ **論文ガイドにとどまらず、原著参照する前に必要な反応条件や実測物性値を得られるファクトデータベース**
- ✓ **PubChemやeMoleculesに収録されている化合物データも同時検索可能**
- ✓ **Gmelin Handbook, Belistein Handbookを収載**

2021年7月現在のコンテンツ

- 収録反応数： 約5,601万
- 収録化合物： 約3,440万
- **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



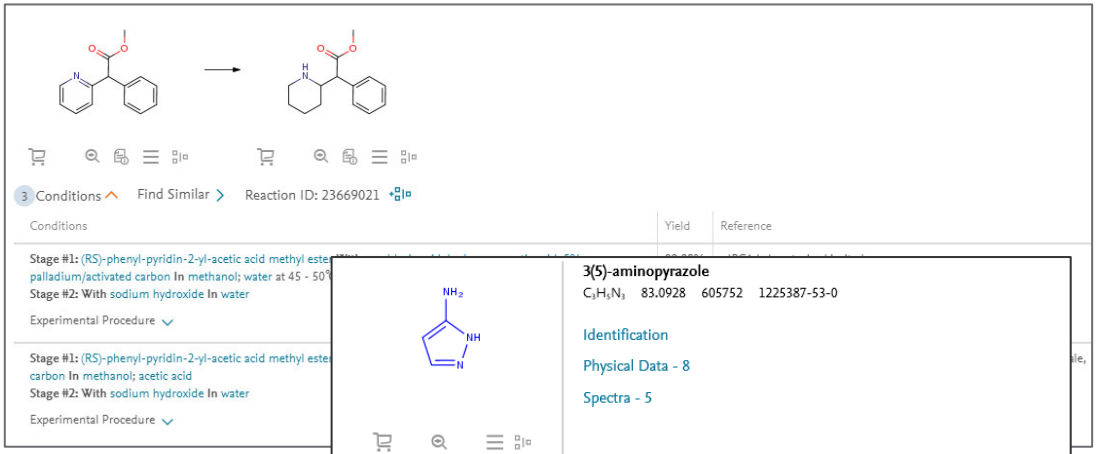
Reaxys

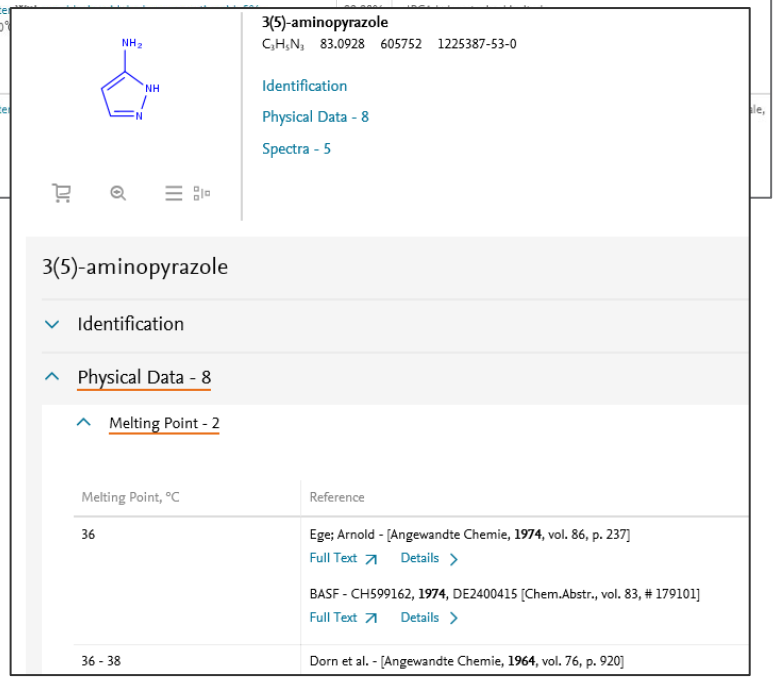
コンテンツ概要

特許および約450誌のジャーナル

- サイエンティストが人手で実用的な価値を持つ実験データを抽出
- **一定の網羅性を担保しつつ、ノイズを低減させ、研究者によって有用と思われるデータを収録**

（例）化合物は、物性、スペクトルあるいは反応情報といった化合物に紐づくデータが記載されている場合に収録する。化合物名や構造のみが文献・特許中に記載されているような場合は収録対象外





＜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

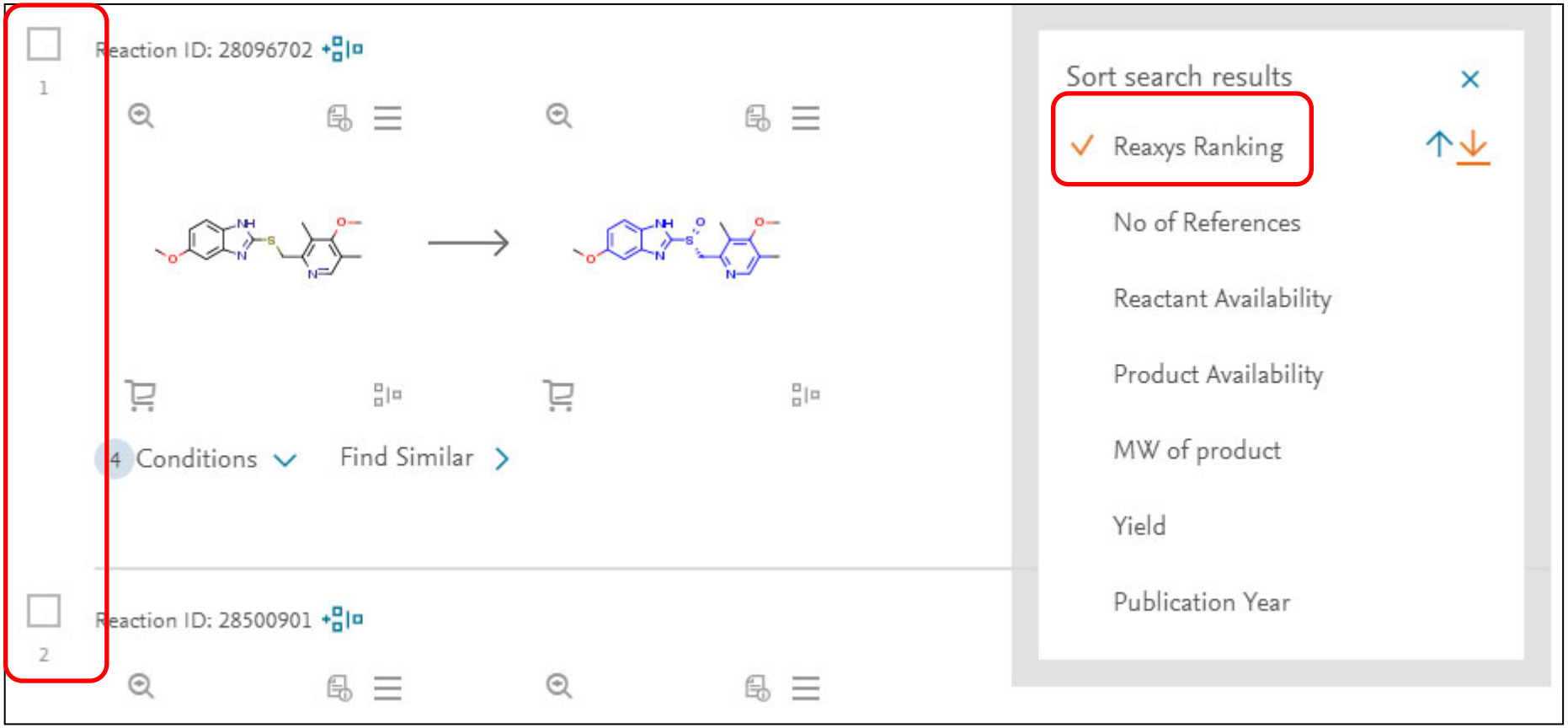
    400種類以上
- スペクトルデータ
  - ✓ NMR、UVスペクトル、マススペクトル

    ＊約500項目、5億5000万件以上のデータ
- 市販情報

Reaxys

効率的なデータ取得のためのインターフェース例：Reaxys Ranking

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、有用と思わるレコード順に表示されます。



効率的なデータ取得のためのインターフェース例：同一反応に紐づく複数の実験条件を並べて表示

年代順ではなく、ユーザーが必要とする順に検索結果を表示することで迅速に必要なデータにアクセス。収率、副生成物の有無、反応条件における情報量等で重み付け

条件違いの同一反応を並べて表示⇒容易に比較

原著にあたる前に、検索結果の画面上で基本情報が得られる

反応の実験項・実施例をワンクリックで表示
⇒ 複数の実施例の比較も容易

Reaxys Ranking

Hide All Details | Find Similar Reactions

Yield	Conditions	Reference
3.5%	With $C_{68}H_{72}N_4O_{10}Ti_2$; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C for 24h Reagent/catalyst Experimental part Experimental Procedure	Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. - Catalysis Today, 2017, vol. 279 Full Text | Show details

All Details

Yield	Conditions	Reference
86%	With N-methyl-6-aza-5β,6β-epoxy-cholestane-3β-tert-butyldiphenylsilyloxy tetrafluoroborate In dichloromethane at -70 - 20°C for 3h Inert atmosphere Experimental part	Zhou, Guobin; Guan, Yueqing - Heterocyclic Communications, 2016, vol. 22, # 1, p. 17 - 19 Full Text | Show details
	With tert.-butylhydroperoxide In water; toluene at -20°C for 12h	RATIOPHARM GMBH - US2008/319195, 2008, A1 Location in patent: Page/Page column 5 Full Text | Show details

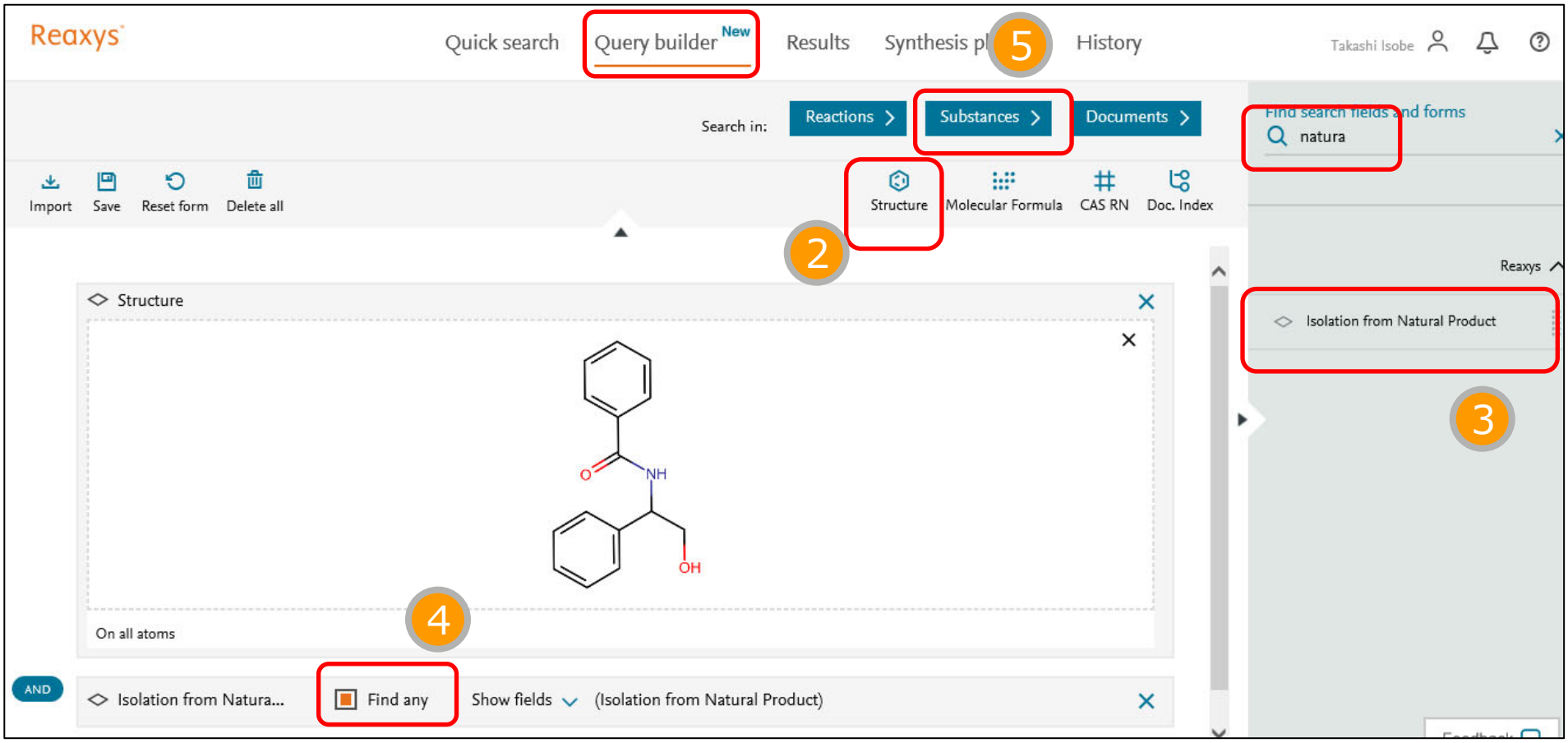
Experimental Procedure

Experimental Procedure

Titanium tetraisopropoxide (4.5 mg, 0.016 mmol) was added to a solution of (S,S)-1,2-bis-(2-bromophenyl)ethane-1,2-diol (12 mg, 0.032 mmol) in toluene (2 ml) at 25° C. The solution was stirred for 10 minutes, water (5.7 mg, 0.32 mmol) was added, and the solution was stirred for another 10 minutes. 5-methoxy-2-[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)-methyl]thio]-1H-benzimidazole (105 mg, 0.32 mol) was then added to the solution, and the temperature was adjusted to -20° C. Thereafter, t-butyl hydroperoxide (70percent, 96 µl, 0.064 mmol) was slowly added. After 12 hours at -20° C., the solution was extracted three times with aqueous ammonium hydroxide (12.5per-cent NH3, 3.x.5 ml). Thereafter, the methyl isobutyl ketone (5 ml) was added to the combined aqueous extracts. After this, the pH of the aqueous phase was adjusted using acetic acid, the aqueous phase was separated and extracted with an additional amount of methyl isobutyl ketone (5 ml). The organic solution was cooled to -10° C. over night, and the neutral form of R-omeprazole was precipitated as a solid to obtain the title compound. The enantiomeric excess of R-omeprazole was 93percent.

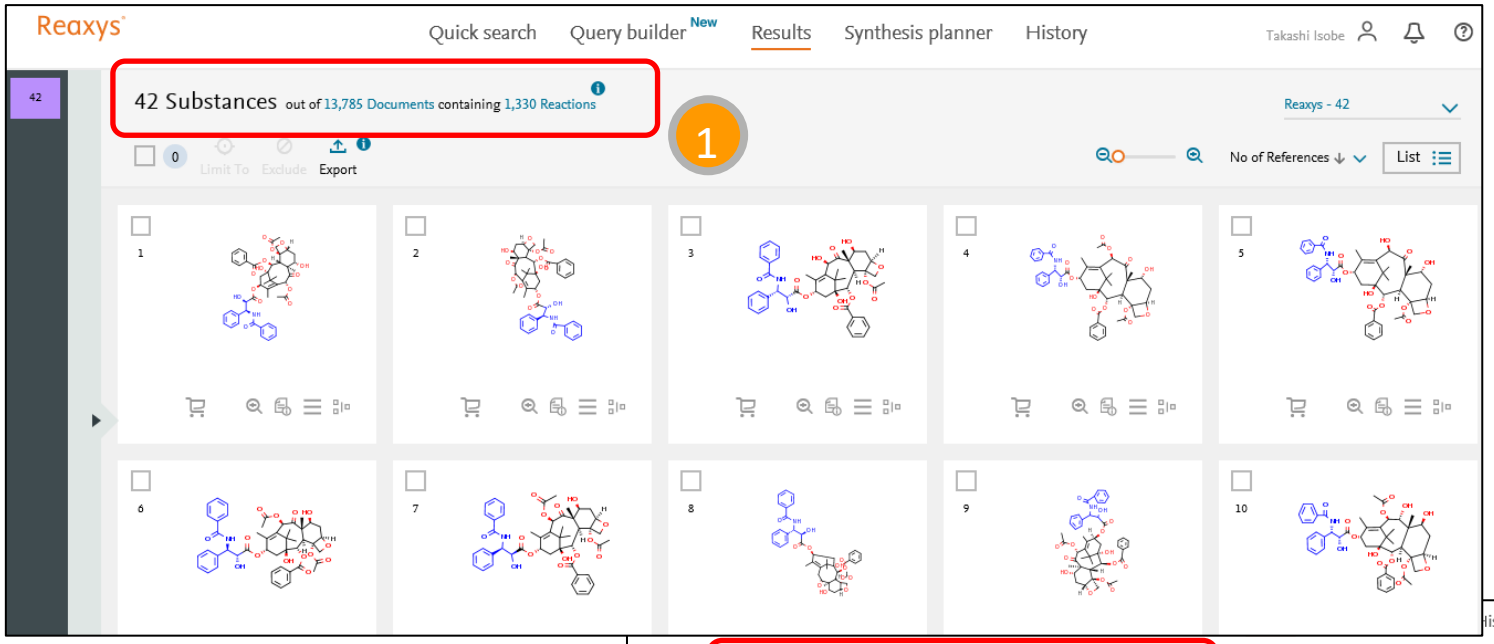
Reaxys®

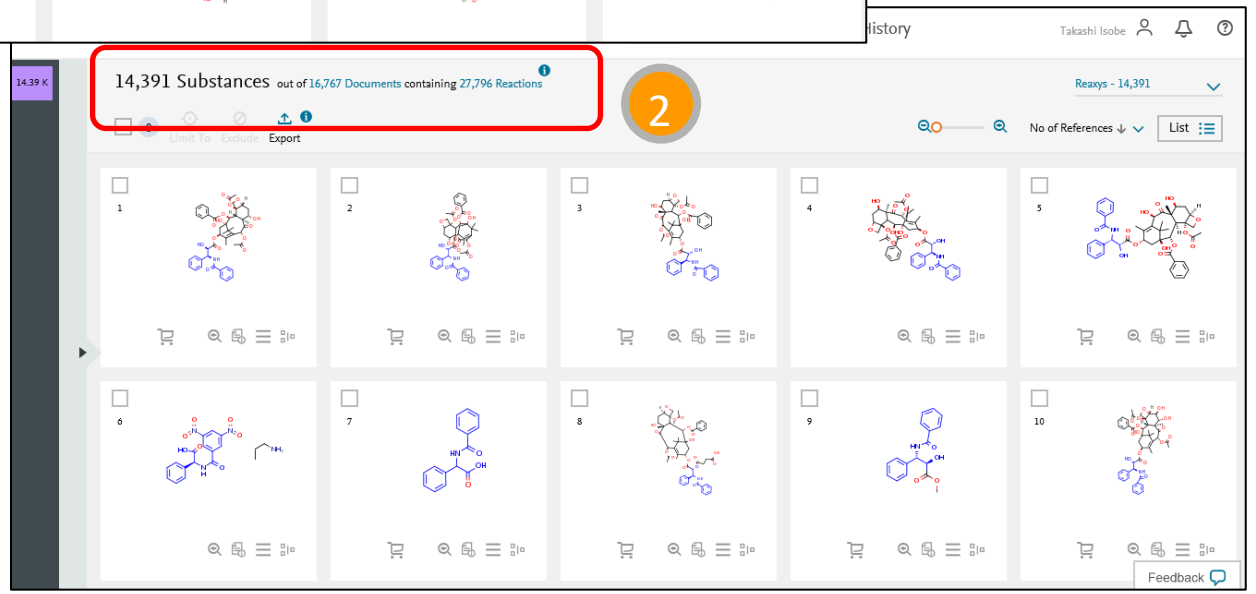
効率的なデータ取得のためのインターフェース例：天然物に限定した検索



天然物に限定した化合物・反応あるいは文献・特許検索を行うことができます。

効率的なデータ取得のためのインターフェース例：天然物に限定した検索





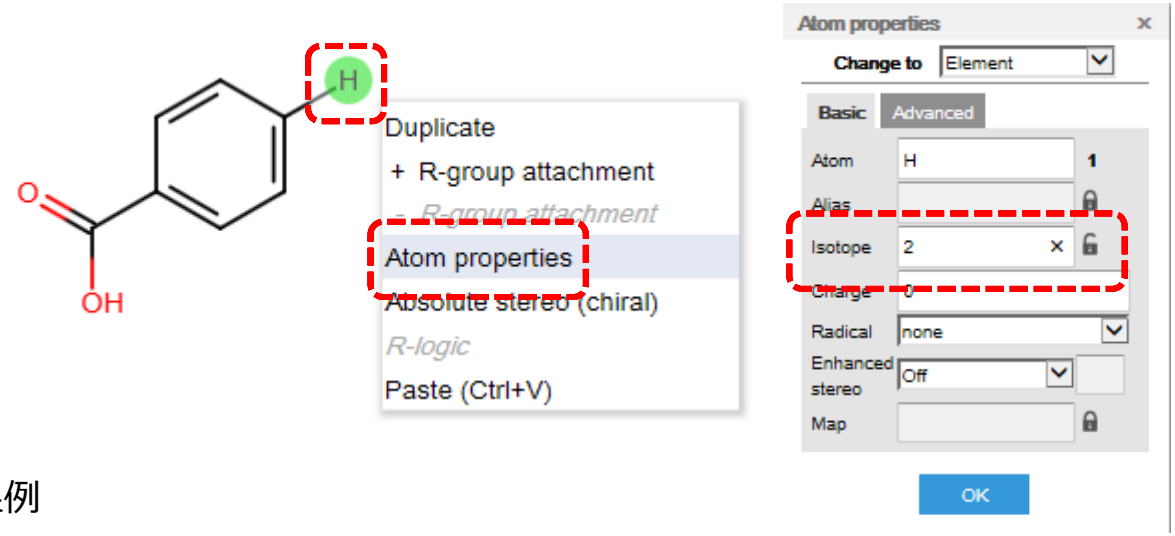
1 天然物に限定した化合物検索結果

2 限定しない場合の化合物検索結果

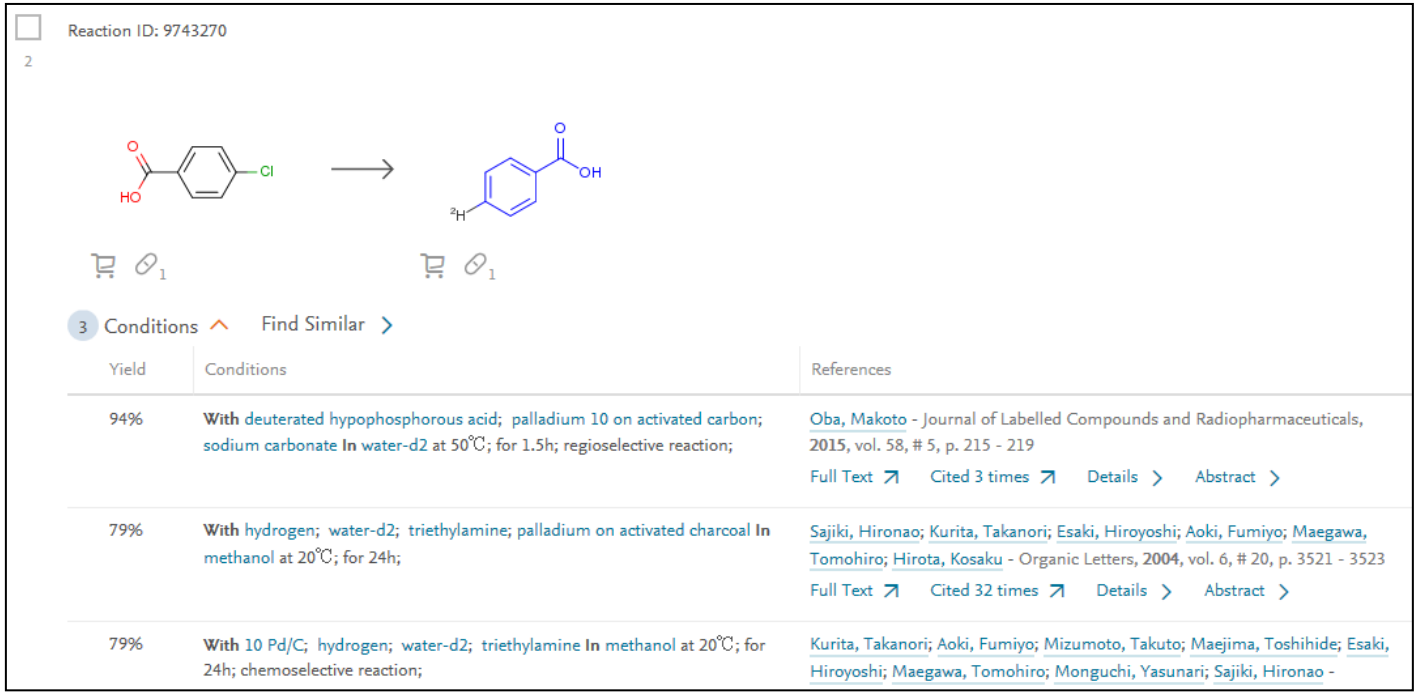
効率的なデータ取得のためのインターフェース例：同位体や電荷を考慮した検索

■検索例：アレーンの重水素化反応

立体異性体、電荷、原子価、ラジカル、同位体等、様々な観点から化合物や反応の検索を行うことができます。



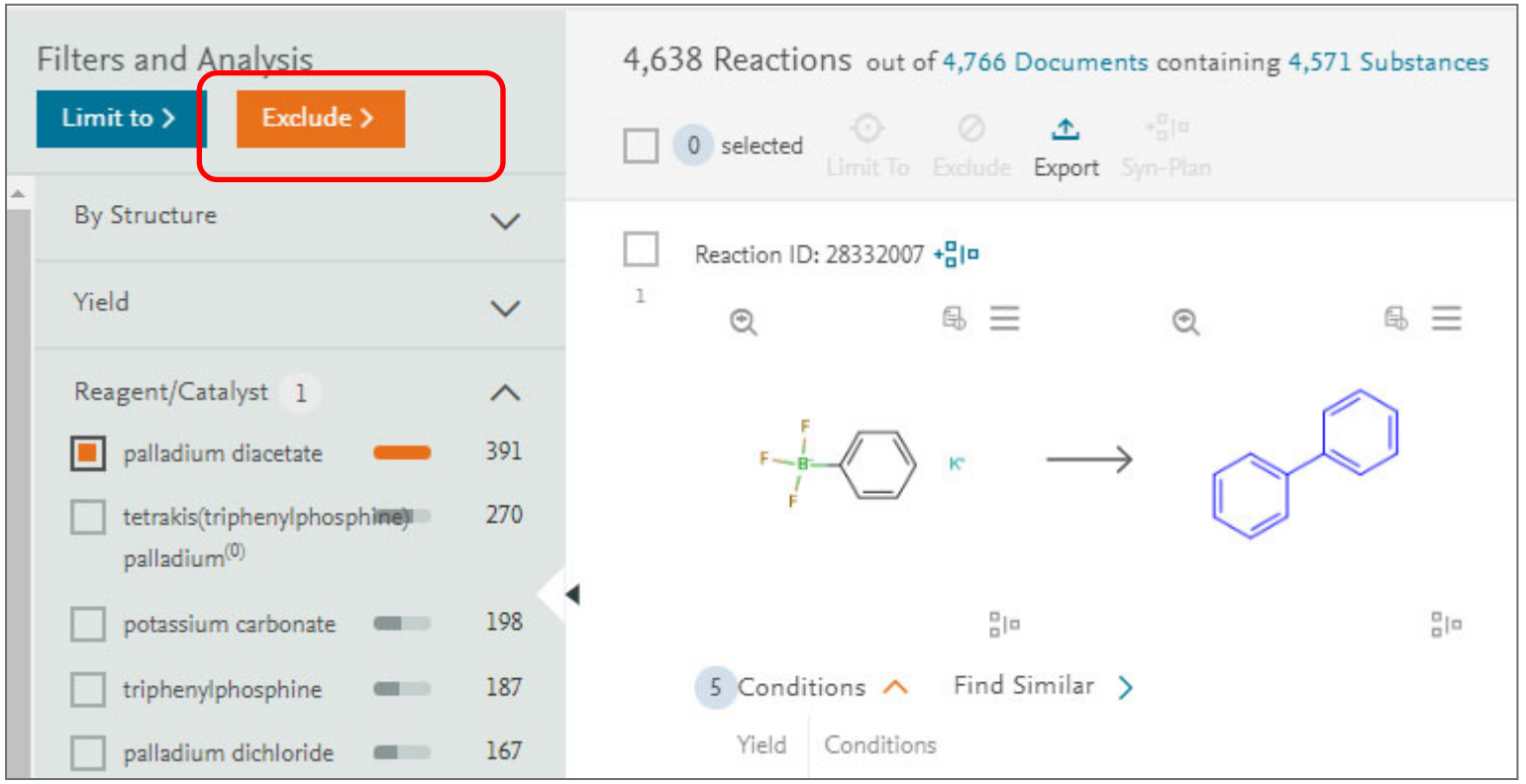
■検索結果例



Reaxys

特定条件レコードの除外機能による検索結果*refine*

必要なレコードに絞り込むだけではなく、不要なレコードのみ除外する機能を実装しています。



5.5億件以上の実測物性値・スペクトル情報

収録物性値抜粋

Melting Point
Boiling Point
Sublimation
Refractive Index
Density
Conformation
Interatomic Distances and Angles
Electrical Moment
Electrical Polarizability
Molecular Deformation
Energy Barriers
Dissociation Energy
Ionization Potential
Electron Binding
Crystal Property Description

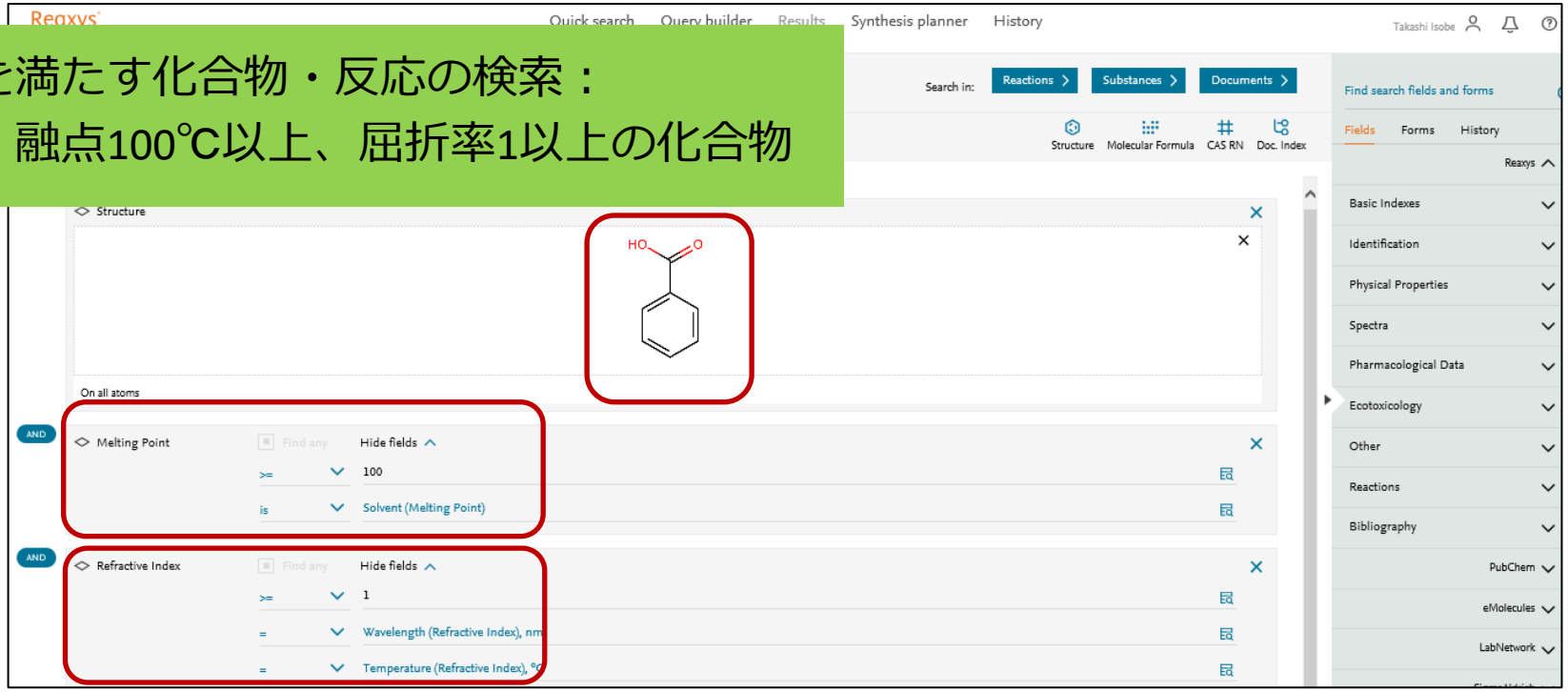
Crystal Phase
Crystal System
Decomposition
Triple Point
Transition Point(s) of Crystalline Modification(s)
Crystal System
Space Group
Density of the Crystal
Liquid Phase
Transition Point(s) of Liquid Modification(s)
Critical Temperature
Critical Pressure
Critical Density
Critical Volume
Vapour Pressure

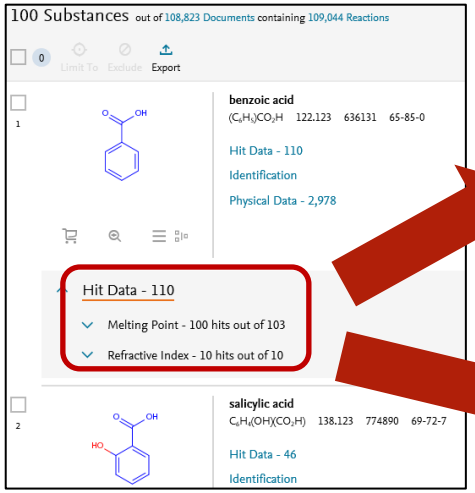
Reaxys®

約400種類、5億データポイント以上の実測物性値を収録

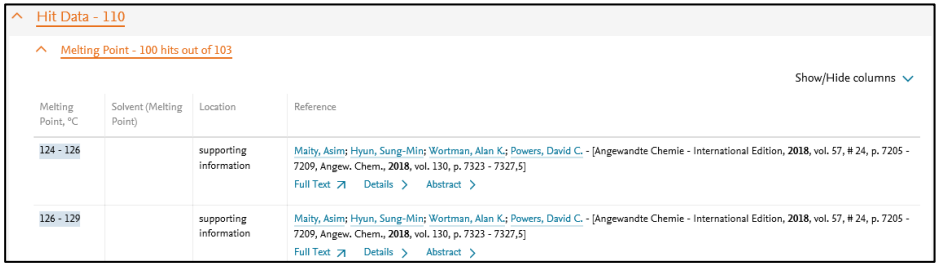
5.5億件以上の実測物性値・スペクトル情報

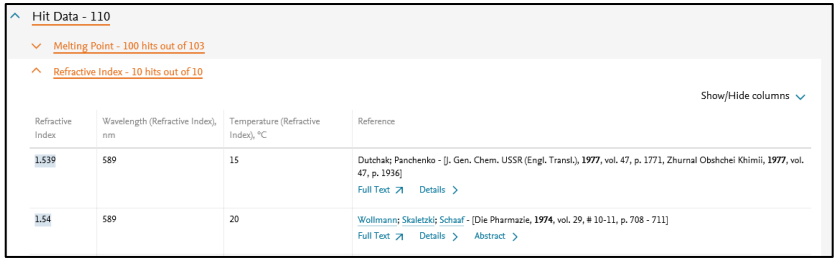
複数条件を満たす化合物・反応の検索：
部分構造、融点100℃以上、屈折率1以上の化合物





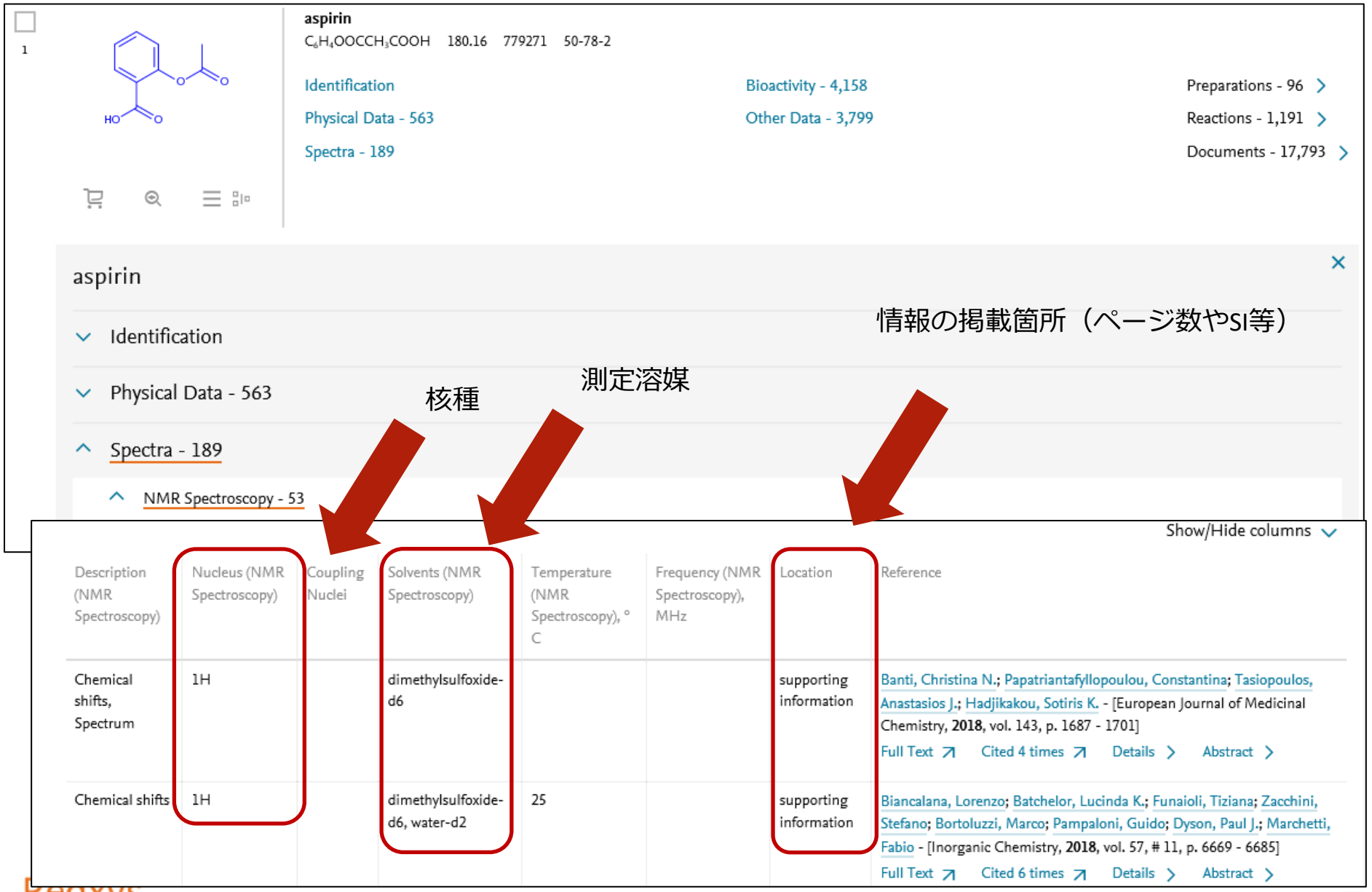
ヒットした物性値





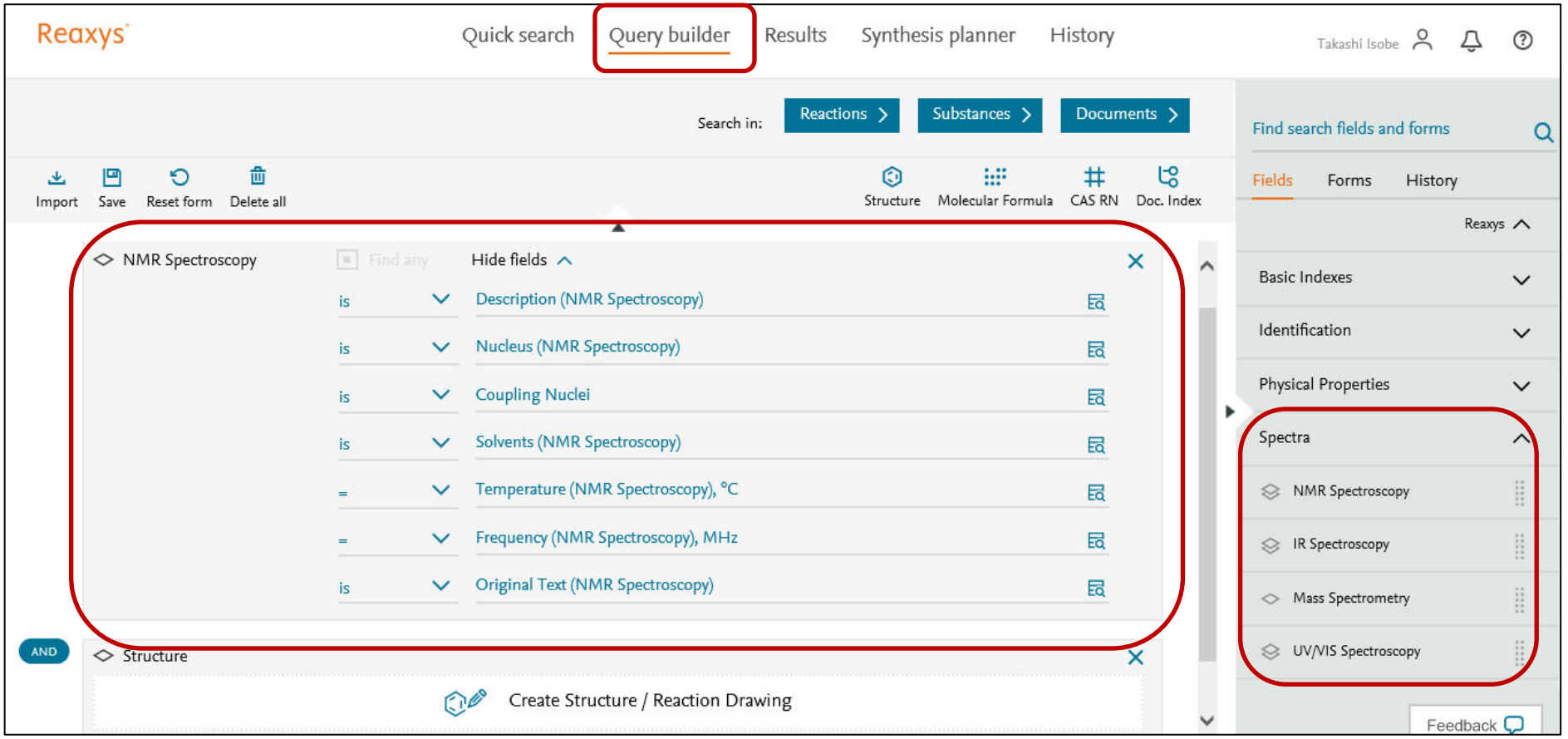
Reaxys

5.5億件以上の実測物性値・スペクトル情報

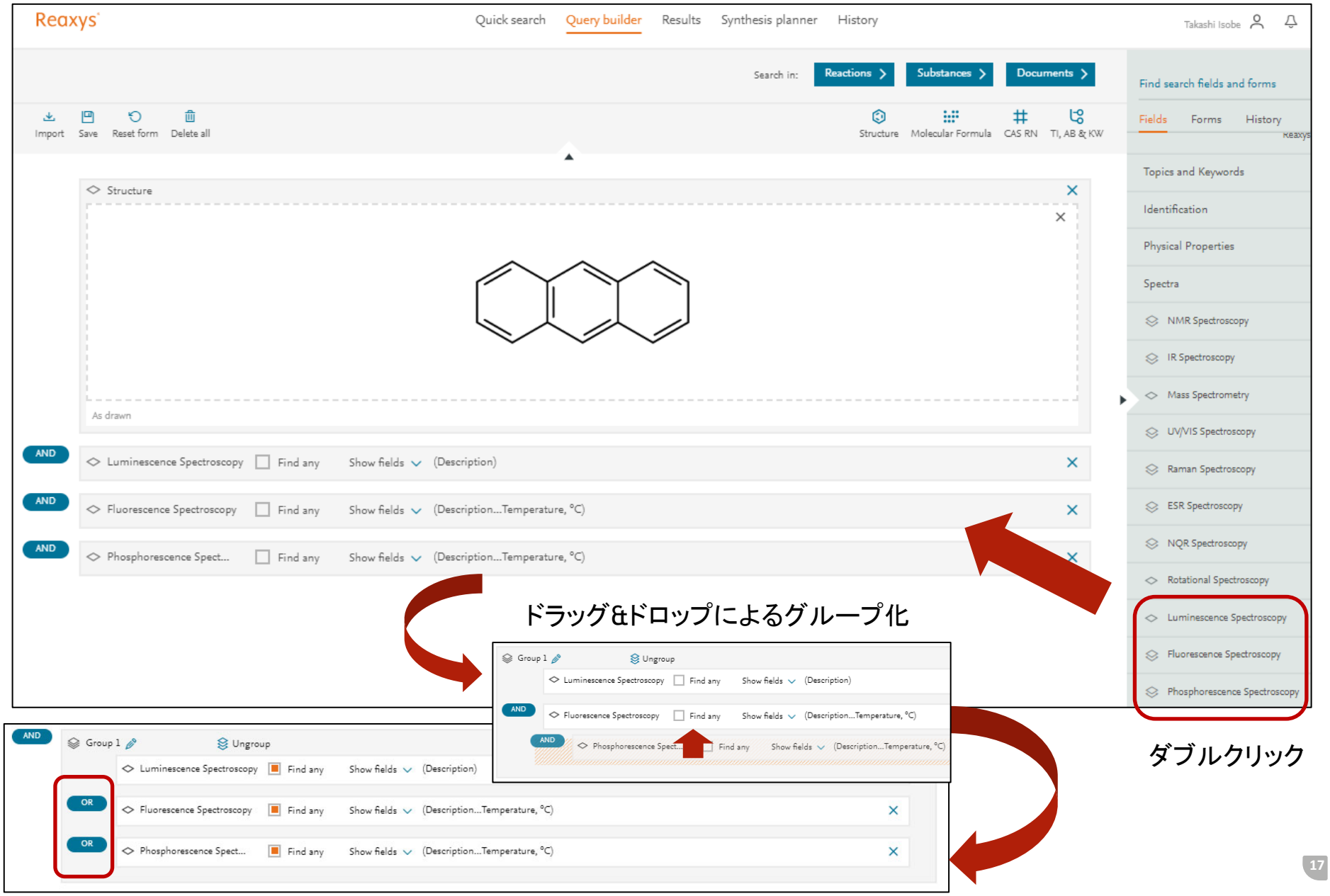


5.5億件以上の実測物性値・スペクトル情報

核種等スペクトルデータを指定した検索インターフェース

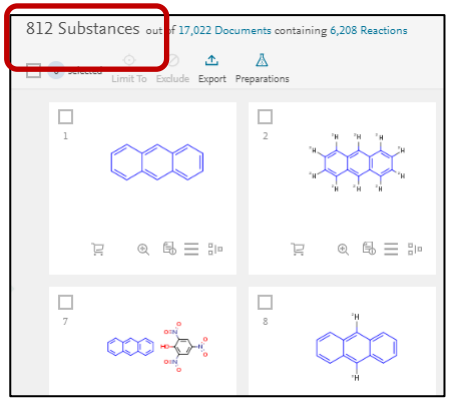


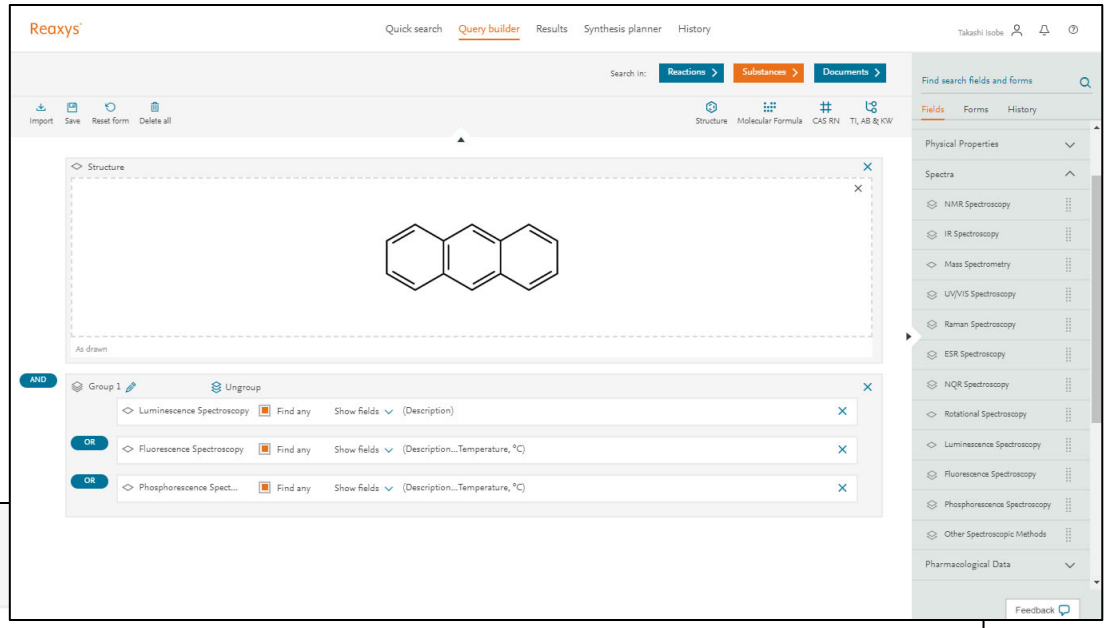
スペクトル情報の迅速な入手:
Luminescence, Fluorescence, Phosphorescenceいずれかを持つレコードの検索(1/2)

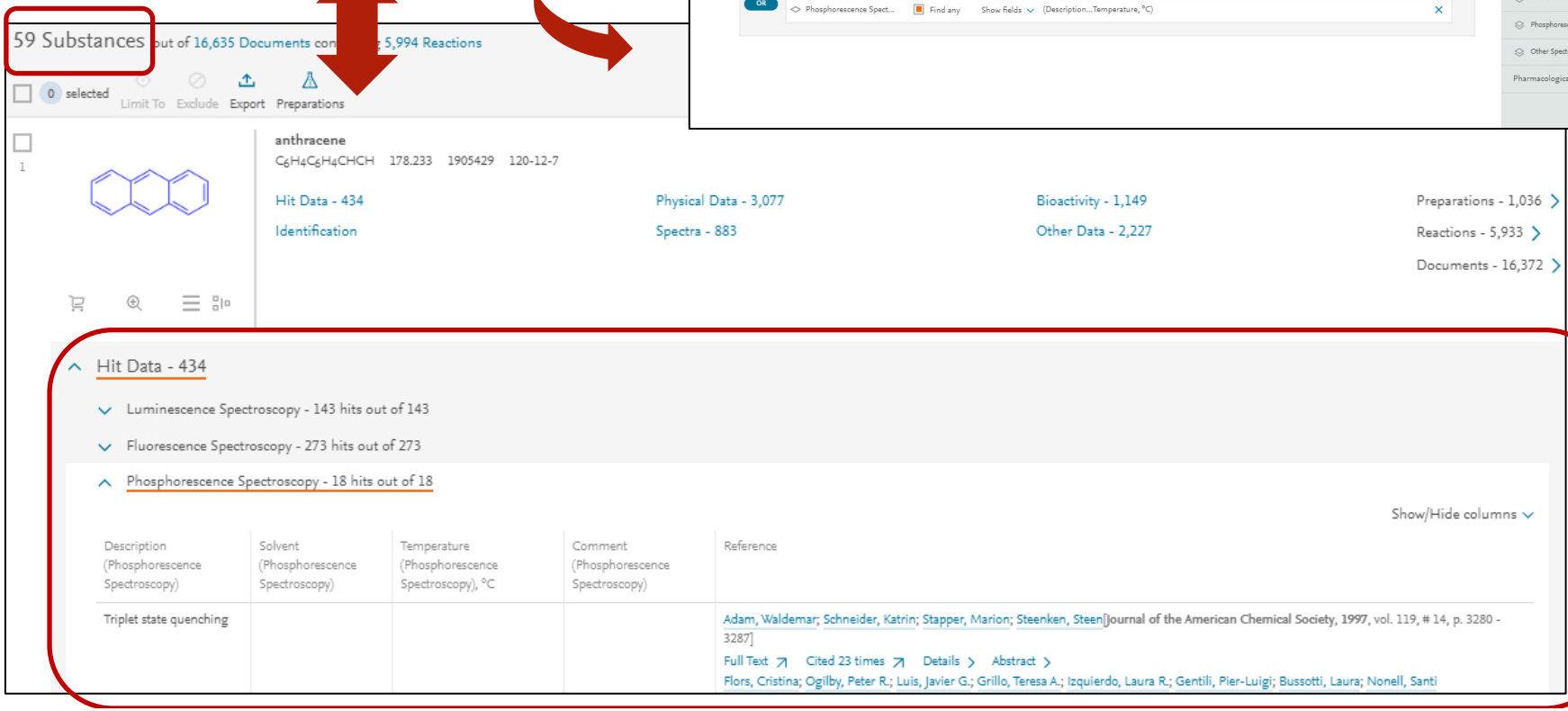


スペクトル情報の迅速な入手:
Luminescence, Fluorescence, Phosphorescenceいずれかを持つレコードの検索(2/2)

スペクトルの絞り込みを行わない場合

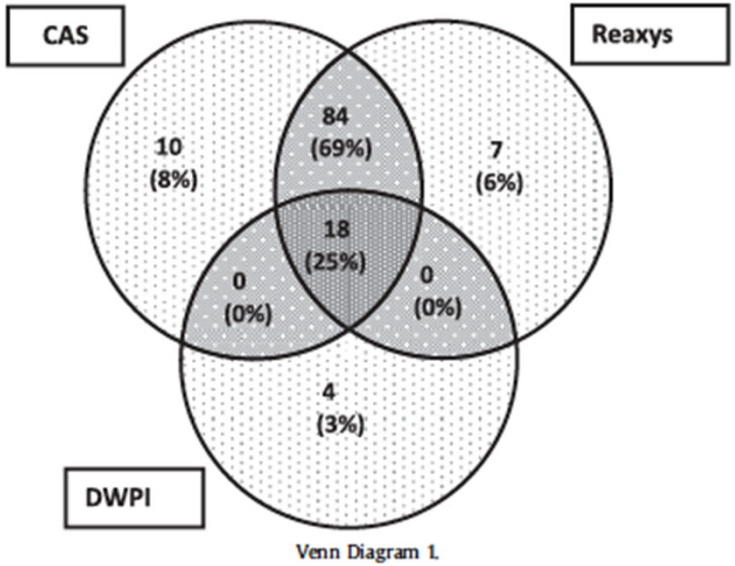






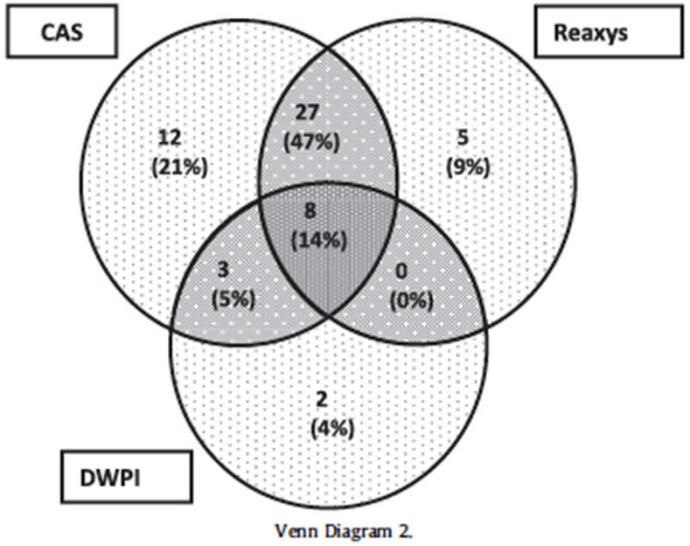
網羅性：データベース間収録コンテンツの差異

4. Case study- WO2010026122 (Novartis – Heterocydic PIM-Kinase Inhibitors)



Venn Diagram 1.

5. Case study – WO20100106249 (Servier Laboratoires - Benzothiadiazepine Derivatives Used as AMPA and NMDA Receptor Modulators)



Venn Diagram 2.

Mark Ede, John Endacott, Mark Harper, David Rees

Indexing chemical structures: Exemplified compound indexing in patents by the vendors Thomson Reuters, Chemical Abstracts and Elsevier – A comparative study by the Patent Documentation Group (PDG)

World Patent Information, Volume 44, 2016, 48–52

https://doi.org/10.1016/j.wpi.2015.12.003

ある２つの特許に含まれる化合物がReaxys、CAS、DWPIで網羅されているかどうかを調査し、ベン図に示したもの。それぞれユニークな化合物収録があり、網羅的に検索する場合は、これらすべてを検索することが理想的。

Reaxys