

## Reaxys基本検索ガイド

2018.4

エルゼビア・ジャパン株式会社

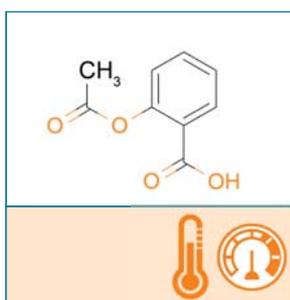
## 目次

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

## 概要：新しくなったReaxys

### 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



**9,000万**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

Chemistry fundamentals



**4,100万**件以上の反応情報(反応条件、溶媒、触媒、収率など)を収録



**5200万**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

Uses across disciplines

# Reaxysの特徴

Reaxys

書誌データベース

情報の収集より  
活用にフォーカスし  
必要な時間を短縮

Find Similar Reactions >

Yield	Conditions	Reaction Time (min)	Reaction Temp (°C)	Reaction Pressure (atm)	Reaction Solvent	Reaction Catalyst	Reaction Reagent
90.8%	Stage #1: 3-(phenylamino)ethanol (1.0 g, 5.0 mmol) + 3-(phenylamino)-1-propanol (1.0 g, 5.0 mmol) + titanium tetrachloride (0.5 g, 2.5 mmol) in CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> at 20°C for 3h	3.48	25	1	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		
	Stage #2: acetic acid (1.0 g, 10.0 mmol) in CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> at 20°C for 3h	3.47	25	1	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		
	Stage #3: acetic acid (1.0 g, 10.0 mmol) in CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> at 20°C for 3h	3.45	25	1	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		
	Experimental Procedure	3.6	25	1	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>		

Physical Data - 532

Discussion Equipment - 27

Lyophilized aspirin with trehalose may decrease the incidence of gastric injuries in healthy dogs Cited 1 times  
Lin, Lee-Shuan; Koyanagi, Yuko; Shimohata, Nobuyuki; +8 others - Journal of Veterinary Medical Science, 2012, vol. 74, # 11, p. 1511 - 1516  
Abstract Index Terms Full Text

Incidence of aspirin resistance in the patient group of a university hospital in Korea Cited 6 times  
Lee, Young Kyung; Kim, Han-Sung; Park, Ji-Young; +1 other - Korean Journal of Laboratory Medicine, 2008, vol. 28, # 4, p. 251 - 257  
Abstract Index Terms Full Text

Increased platelet expression of glycoprotein IIIa following aspirin treatment in aspirin-resistant but not aspirin-sensitive subjects Cited 3 times  
Floyd, Christopher N.; Goodman, Timothy; Becker, Silke; +7 others - British Journal of Clinical Pharmacology, 2014, vol. 78, # 2, p. 320 - 328  
Abstract Index Terms Full Text

検索に対応した書誌情報リストを提示

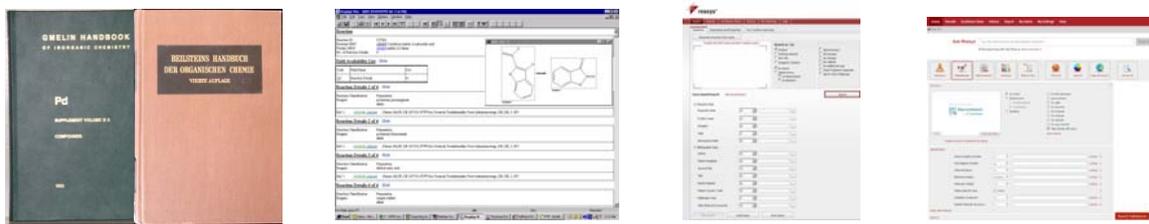
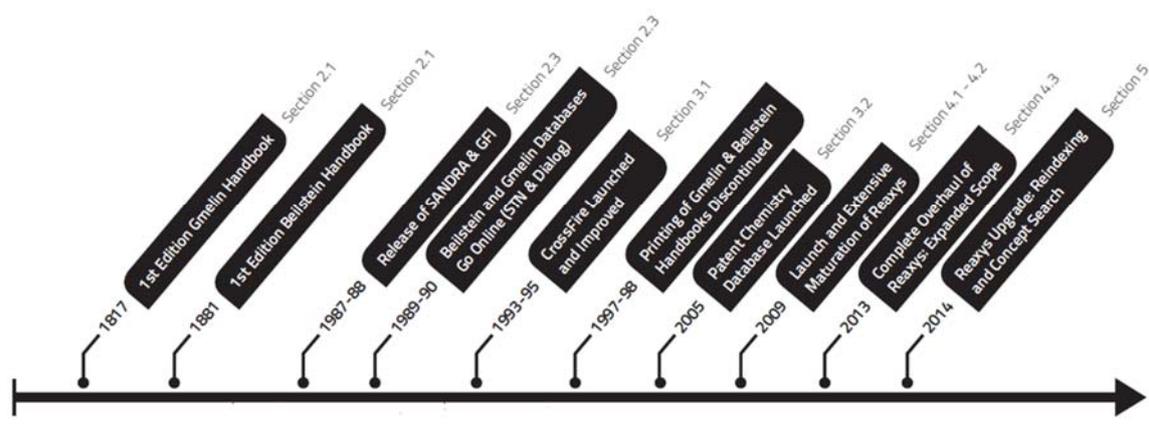
- リストの中から文献を選定
- 内容を精査する作業が発生

→ 膨大な時間を要する

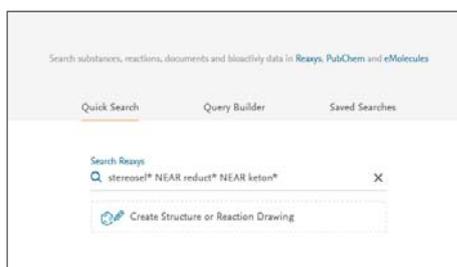
Reaxysは研究者が必要とする適切な情報をあらかじめ抽出

- 関連性の高いデータから提示
- 詳細な実験条件を含む反応情報
- 化合物の詳細な実測物性値データ

# 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



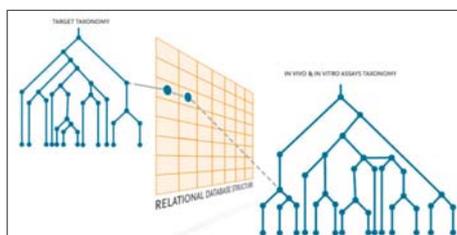
### ① ユーザーフレンドリーなインターフェース

- 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独自のタクソミーとデータ構成

- 化学に関連したReaxys独自のタクソ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

7

## 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～

Find Similar Reactions >

Yield	Conditions	Reference
90.8%	Stage #1: 3-(diethylamino)propanamine; Aspirin With O-(benzotriazol-1-yl)-N,N,N',N'-tetramethyluronium tetrafluoroborate; triethylamine In acetonitrile at 20°C for 3h Stage #2: acetic acid in acetonitrile Stage #3: acetic acid in dichloromethane Experimental Procedure	TECHFIELDS BIOCHEM CO. LTD; YU, Cheng WO2008/7171, 2008, A1 Location in patent: Page/Page column 14-15 Full Text <a href="#">↗</a> Show details >

化学反応情報

化合物の実測物性値情報

Physical Data - 532						
Dissociation Exponent - 27						
Dissociation Exponent (pK)	Dissociation Group	Temperature (Dissociation Exponent), °C	Solvent (Dissociation Exponent)	Method (Dissociation Exponent)	Type (Dissociation Exponent)	Reference
3.48	RCOO-H	25	dimethylsulfoxide, H2O	spectrophotometric	a1/apparent	Article, 2003 Citation Journals: Analytical Chemistry, 4, 75, 2003, 883 - 892
3.47		25	dimethylsulfoxide, H2O		a1/thermodynamic	Article, 2002 Citation Journals: Journal of Pharmaceutical Sciences, 4, 91, 2002, 933 - 942
3.55	COOH	37	H2O		a1/apparent	Article, 1995 Citation Journals: Biological and Pharmaceutical Bulletin, 2, 18, 1995, 310 - 314
3.6	COOH	25			a1/apparent	Article, 1993 Citation Journals: Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 4, 41, 1993, 1137 - 1143

8

## コンテンツ 学術論文②

15,000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**タクソミー**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

加率的に増加し続ける  
情報量に迅速に対応

9

## 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**

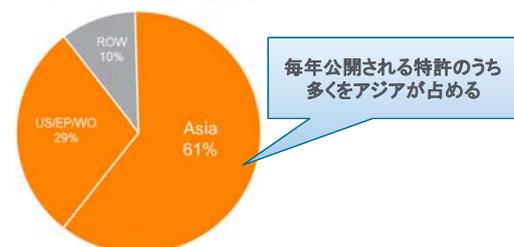
\* 国際特許分類が以下の4種に該当する特許を収録

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)

	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予定



10

## 収録対象IPC一覧

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

11

## 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>

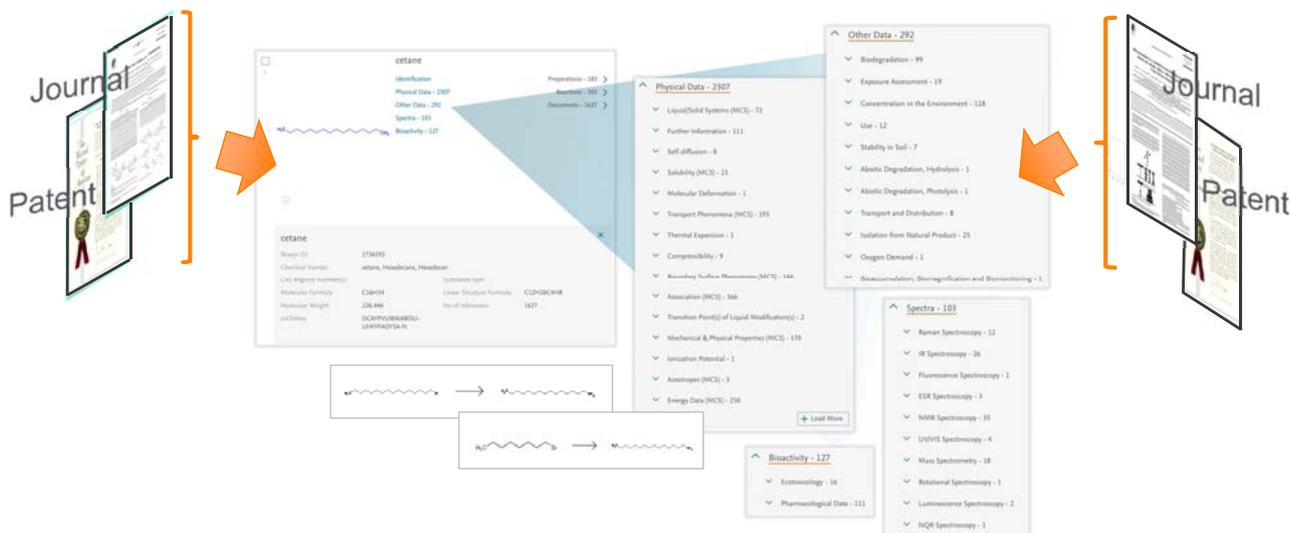
- 物性値
  - ✓ 融点、沸点、溶解度、分配係数400種類以上
- スペクトルデータ
  - ✓ NMR、UVスペクトル、マスペクトル
- 生物活性データ
  - ✓ 毒性、PKデータ、環境毒性\* 約500項目、5億5000万件以上のデータ
- 市販情報

The screenshot displays a chemical reaction in the Reaxys interface. The reaction involves the conversion of a pyridine derivative to a pyrazole derivative. Below the reaction, the conditions are listed: Stage #1: (R)-phenyl-pyridin-4-ylidene, hydrogen, acetic acid, water at 45 - 50°C; under 8826; Stage #2: With sodium hydride. The yield is 89.88%. To the right, a data card for 3(5)-aminopyrazole is shown, including its chemical formula (C<sub>4</sub>H<sub>5</sub>N<sub>3</sub>), molecular weight (83.0928), and various data points such as melting point, boiling point, and spectra.

12

# 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



13

## 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 substances, reactions and documents

Q Substance CAS Registry Number, e.g. 102625-70-7 Search >

AND

On all atoms

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

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

14

## 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

① 自然言語を認識

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他の3つの選択肢提示

目的の検索結果に加え関連ある選択肢を追加で提案

82 Reactions  
benzoic acid starting (exact search) AND Reaction Type : esterification; esterifications OR Other Conditions : esterification; esterifications

399 Documents  
Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : "esterification"; "esterifications" AND Document Basic Index : benzoic acid

21316 Documents  
Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : benzoic acid

48655 Documents  
Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : "esterification"; "esterifications"

15

## 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

① 検索条件リスト

③ 演算子を使用して掛け合わせ

② ドラッグ & ドロップで検索画面に追加

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

必要な条件だけを選んで掛け合わせ

Reaxys<sup>®</sup>

Untitled

Structure Formula Number CI.index Favourites Save to file Save form Reset form Delete

Structure

Create Structure / Reaction Drawing

AND

Melting Point Exist

AND

Boiling Point Exist

Search properties

Fields Form Saved searches

Autoignition

Azeotropes (MCS)

Boiling Point

Boundary Surface Phenomena (MCS)

Bulk Viscosity

Chromatographic Data

Circular Dichroism

Complex Phase Equilibria (MCS)

Compressibility

Conformation

Critical Density

Critical Micelle Concentration (MCS)

Critical Pressure

Critical Temperature

Critical Volume

16

# 1レコードで多くの情報を提供

インデックスされた用語を表示

被引用情報一覧(Scopus由来)

化合物情報のリンク

反応情報

化合物情報

関連する反応情報

Reference一覧

市販情報

物性情報一覧

Experimental Procedure

反応条件の確認

# フィルターと分析機能による情報への迅速なアクセス

詳細な項目の絞り込みフィルター

絞り込む前に検索結果の傾向分析が可能

# フィルターと分析機能による情報への迅速なアクセス

Reaxys® Quick search Query builder **Results** Synthesis planner (i)

2,892 Filters and Analysis 2,892 Reactions out of 505 Documents containing 2,608 Substances

By Structure Yield Reagent/Catalyst Solvent Catalyst Classes

active center  heterogeneous  organism / enzymes [+ More](#)

Reaction ID: 28096702

Catalyst Classes

Catalyst Class	Count
Catalyst Classes	2,892
active center	210
Ti	135
V	16
Pd	16
palladium on activated charcoal	15
tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)	1
W	13
Zr	8
Ni	7
Ru	7

Clear selected × Limit To > Exclude >

階層化されたフィルター項目

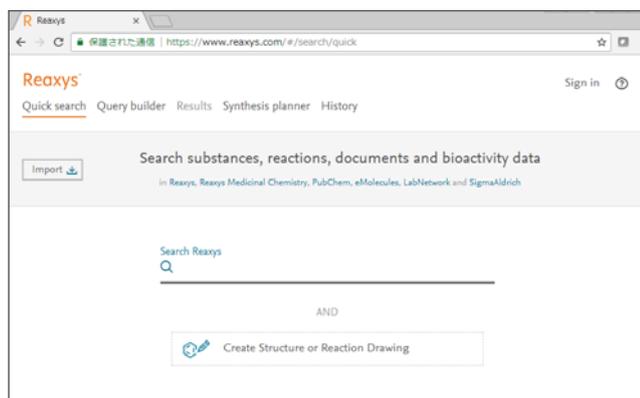
19



## Reaxys検索方法

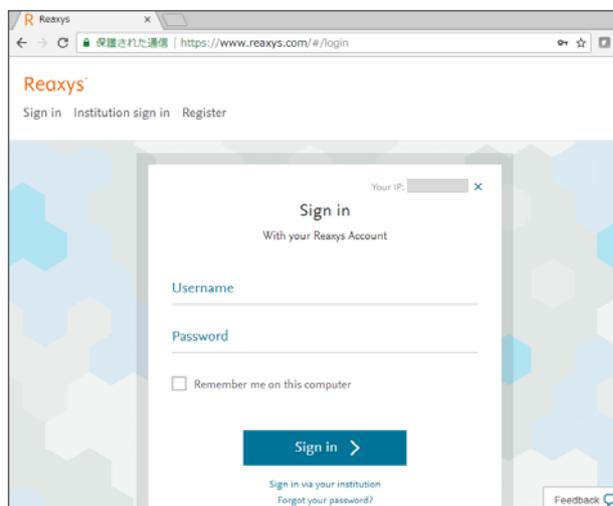
# Reaxysへのアクセス

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



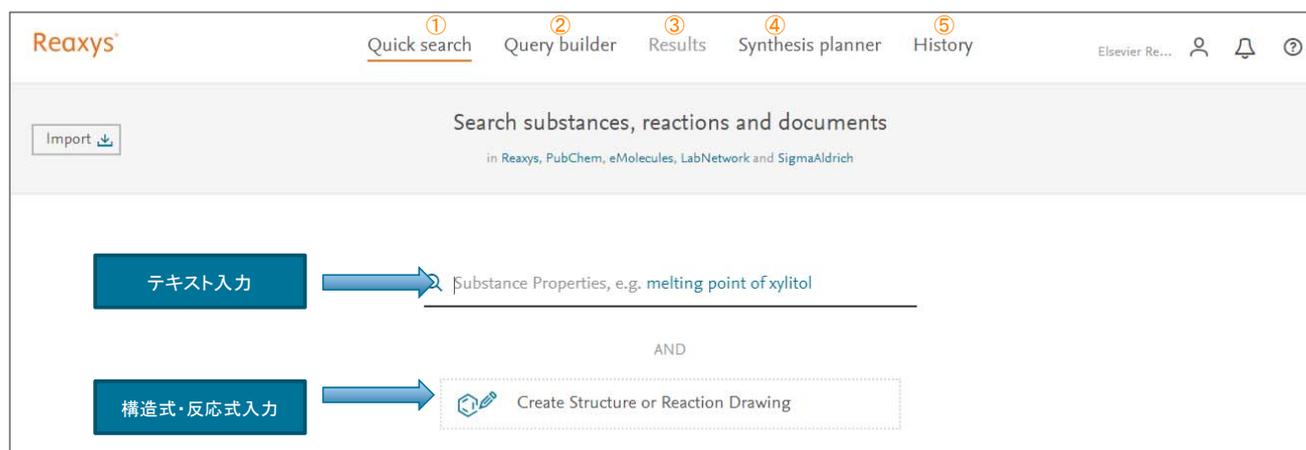
ログインする場合

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



21

# Reaxysの画面



- ① **Quick search**: 構造検索、キーワード検索
- ② **Query builder**: 構造型、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

22

## 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
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



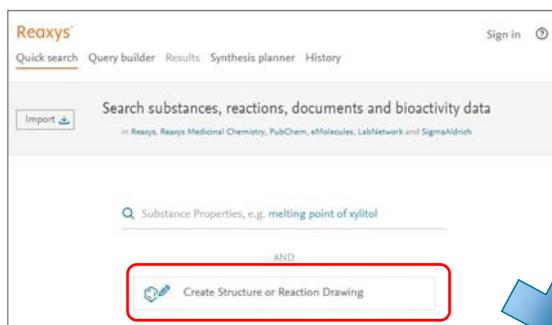
# Quick Search : 反応検索

## 反応条件の設定①

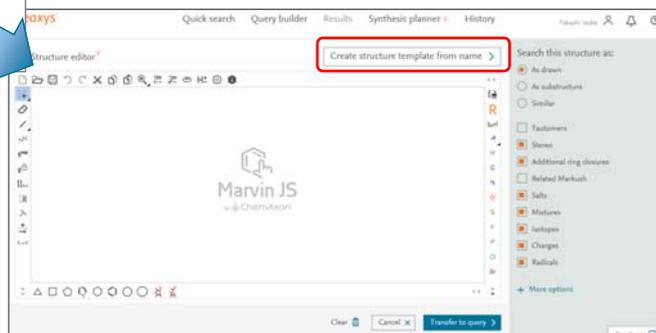
Reaxysでは全反応、半反応、出発物質、生成物のいずれからでも反応が検索できます。名称をから構造式を自動的に作画することも可能です。

### 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 「Create Structure or Reaction Drawing」をクリックして、構造式作画画面に移動します



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



25

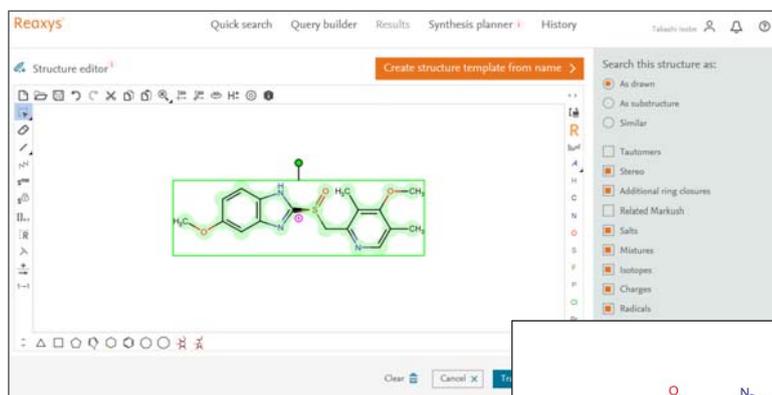
## 反応条件の設定②



### 名称の入力画面:

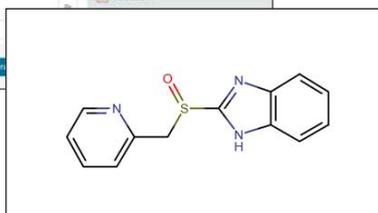
“esomeprazole”と入力し、 虫メガネアイコンをクリックします。

- 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:

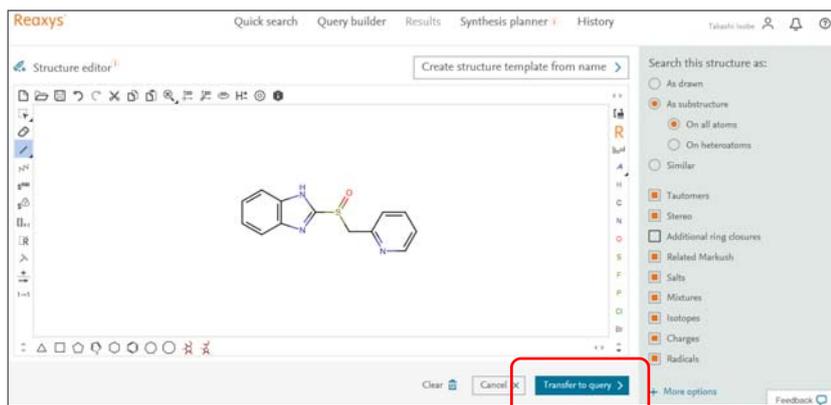
自動的に名称から構造式が生成されます。ここではesomeprazoleの骨格を含むものを検索したいので、作画ソフトで編集を行います。環上の置換基を全て削除し、骨格部分を検索に利用します。



\*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。

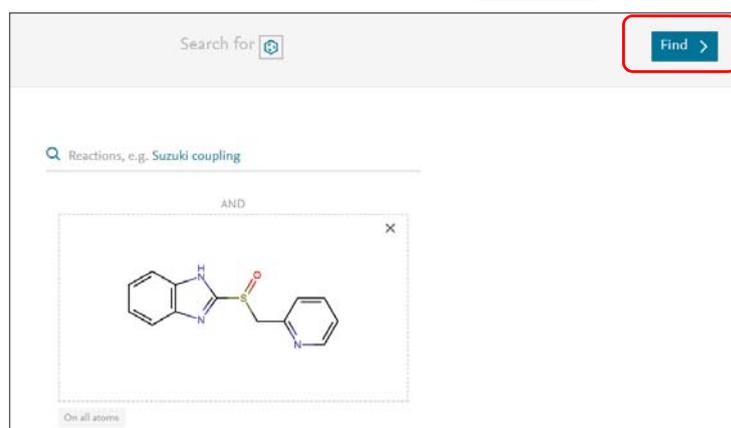
26

## 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。

27

## 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

28

## 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。

この場合、化合物の検索結果と反応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

29

## 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

①

②

③

④

⑤

⑥

⑦

30

## 検索結果の閲覧①

### 並び替えメニュー

- Reaxys Ranking
- Referenceの数
- 反応物の利用可能
- 生成物の利用可能
- 生成物の分子量
- 収率
- 出版年度

### ⑦検索結果の並び替え

### ③Experimental Procedureの表示

31

## 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
	<input type="checkbox"/> 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。 32

## 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<sup>®</sup> Quick search Query builder Results Synthesis planner History Takashi Isobe

2,889 Filters and Analysis 2,889 Reactions out of 504 Documents containing 2,601 Substances

By Structure Yield Reagent/Catalyst Solvent Catalyst Classes Solvent Classes Product Availability Reactant Availability Reaction Classes Document Type

Reaction ID: 28096702

Conditions Find Similar

Yield Conditions References

93.5% With C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>H<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub> dihydrogen peroxide in water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction; Experimental Procedure

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

Full Text Cited 1 times Details Abstract

Full Text: フルテキストリンク(次ページ)

Cited 1 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(35ページ)

Abstract: Abstract

33

## 検索結果の閲覧④

REAXYS<sup>®</sup> Research Literature Service

The document:

Author	Talsi
Journal	Catalysis Today
Volume	279
Publication Year	2017
Issue	
Pages	
COHEN	CATTI
DOI	10.1016/j.cattod.2016.03.006
DOI	10.1016/j.cattod.2016.03.006

See the following DOI: 10.1016/j.cattod.2016.03.006. You will be redirected automatically. If not, then please click the hyperlink.

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 Search ScienceDirect 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<sup>a, b</sup>, Konstantin P. Bryliakov<sup>a, b</sup>

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 over... Roman M. Mironenko, Olga B. Belskaya, Tatyana... more

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

View more articles >

34

## 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。

1 Ti-Salan catalyzed asymmetric sulfoxidation of 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](#)

**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(V) salen complexes is reported. >95percent and enantioselectivities (up to 96percent ee) h introduction of electron-withdrawing substituents leads to en...

**Index terms**  
 Author keywords: 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, Oxid catalyst, electron acceptor, enantiomer excess, enanti reaction, proton pump inhibitor, reaction kinetics, re separation method

**Substances**  
 Chemical structures of the reactants and products are shown.

**Reactions**  
 Reaction schemes showing the conversion of the starting materials to the products.

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

35

## 検索結果の閲覧⑥

1 Ti-Salan catalyzed asymmetric sulfoxidation of 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](#)

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

著者詳細 Scopus 著者詳細結果にアクセス

Talsi, Evgenii P.  
 Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation  
 著者の Scopus ID: 34992516200  
 物の表記: Talsi, Evgenii P.; Talsi, Evgenii P.; Talsi, Evgenii P.; Talsi, E.P.; Talsi, Evgenii P.

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

立派な引用 (H-index) のトレンド:  
 2008 2009 2010 2011 2012 2013 2014 2015 2016 2017 2018 2019  
 H-index: 39  
 2015: 引用回数: 461

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

検索結果の形式ですべてを表示  
 すべてをエクスポート すべてのリストに追加 交差アラートを設定 交差RSSを設定

文献タイトル	著者名	出版年	出版物名	引用回数
Direct reactivity studies of non-heme iron-oxo intermediates toward alkane oxidation	Zina, A.M., Ipatin, O.Y., Bryliakov, K.P., Talsi, E.P.	2018	Catalysis Communications	1
Highly efficient asymmetric aerobic oxidative coupling of 2-naphthols in the presence of bisoxazolone iron aminopyridine complexes	Thaibonk, N.V., Ipatin, O.Y., Samsonenko, D.G., Talsi, E.P., Bryliakov, K.P.	2018	Catalysis Communications	0

### 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。

36

# Synthesis Planner

## 合成ルートの作成①

### 合成計画ツール (Synthesis Planner) :

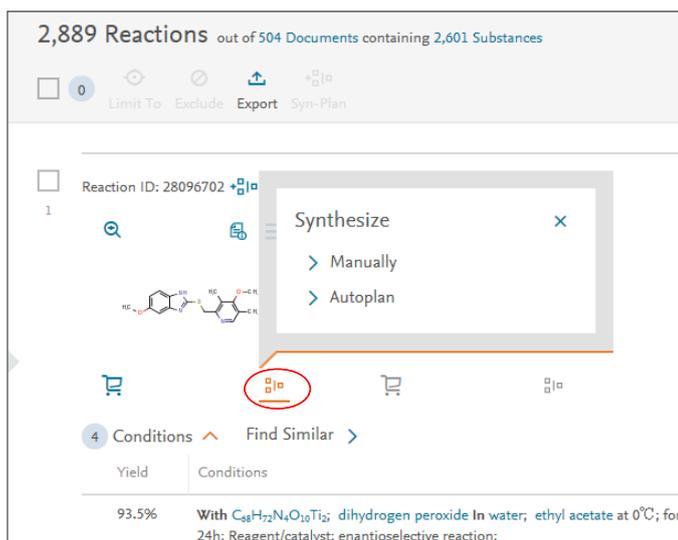
ある物質を最終生成物として合成ルートを逆合成的に計画することができます。

- 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、「Manually」または「Autoplan」を選択



2,889 Reactions out of 504 Documents containing 2,601 Substances

Reaction ID: 28096702

1

4 Conditions Find Similar >

Yield Conditions

93.5% With  $C_{28}H_{22}N_4O_{10}Ti_2$ ; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction;

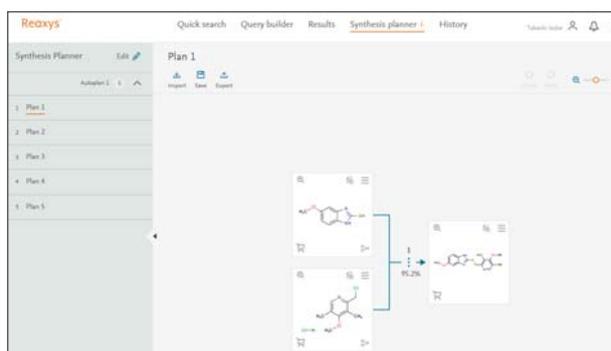
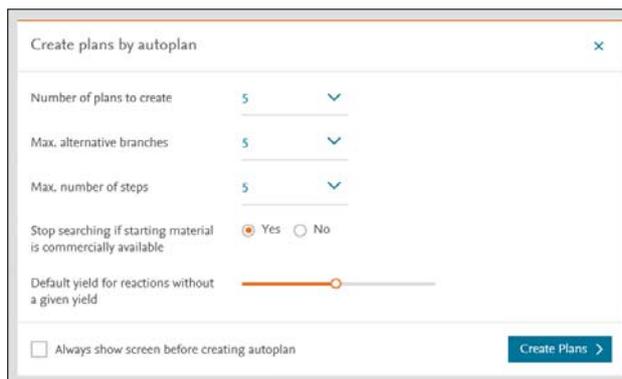
## 合成ルートの作成②

### Autoplan

「Autoplan」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。



39

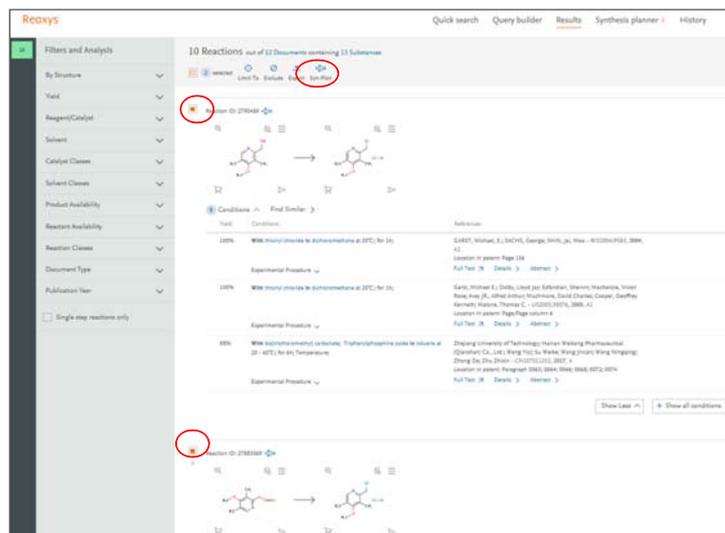
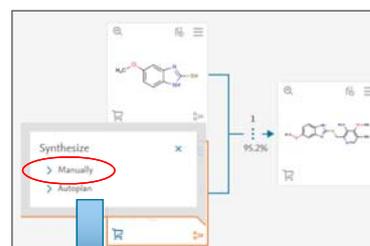
## 合成ルートの作成③

### Manually

(合成手法の手動選択)

「Manually」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、「SynPlan」をクリックすると選択した合成ルートが表示されます。



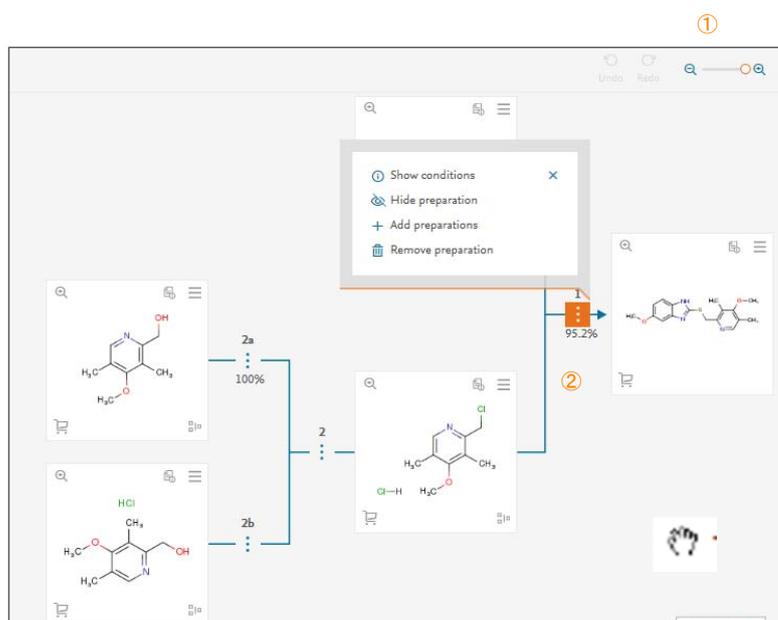
40

## 合成ルート④の作成

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



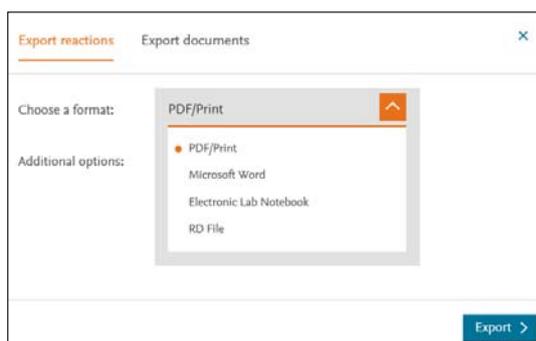
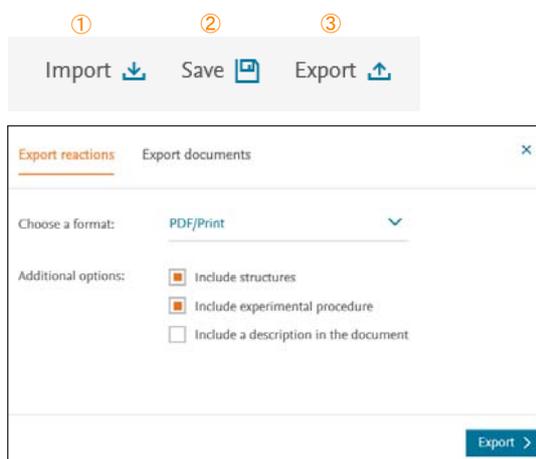
- ③ 合成ルートは でドラッグすることにより移動できます

41

## 合成ルート⑤の作成

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



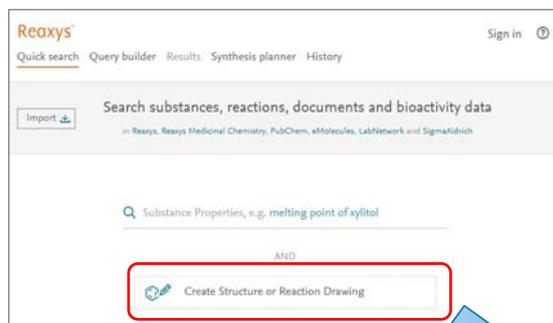
42

# Quick Search: 物質・物性値検索

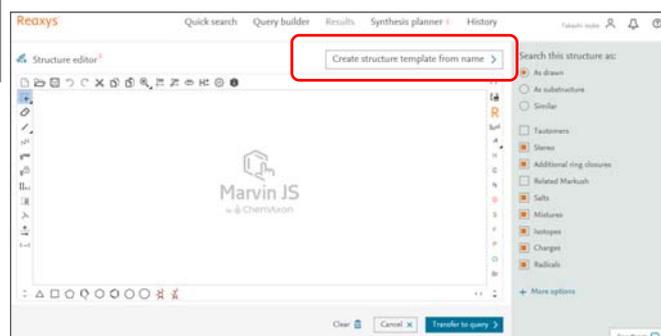
## 検索条件の設定①

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 「Create structure or Reaction Drawing」をクリック
- ② 「Generate structure template from name」のアイコンをクリック



## 検索条件の設定②

The image shows two screenshots of the Reaxys software interface. The top screenshot shows the 'Create structure template from name' dialog box with a search icon circled in red. The middle screenshot shows the 'Structure editor' with a chemical structure of mevastatin and a 'Transfer to query' button circled in red. The bottom screenshot shows the search results page with a 'Find' button circled in red. A blue arrow points from the 'Transfer to query' button in the middle screenshot to the search bar in the bottom screenshot.

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添のテクニック集をご参照ください。

45

## 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。

The image shows two screenshots of the Reaxys search results page. The top screenshot shows the search results for 'mevastatin' with two entries: 'Substances' (957) and 'Reactions' (924). The 'View Results' button for the 'Substances' entry is circled in red. A blue callout box points to this button with the text: 'この場合、化合物の検索結果と反応の検索結果が表示されている'. The bottom screenshot shows a detailed view of the 'Substances' results, displaying the top 3 results for mevastatin. A blue callout box points to the top 3 results with the text: 'Preview Resultsを展開すると、top 3の結果が表示される'.

Substance	Identification	Bioreactivity	Preparations
mevastatin	C <sub>27</sub> H <sub>42</sub> O <sub>5</sub> 438374 4748857 73962-63-9	1.533	49
mevastatin	C <sub>27</sub> H <sub>42</sub> O <sub>5</sub> 494347 4720754 73308-75-3	1.039	27
mevastatin	C <sub>27</sub> H <sub>42</sub> O <sub>5</sub> 396332 3630717 73371-88-3	1.40	115

46

## 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

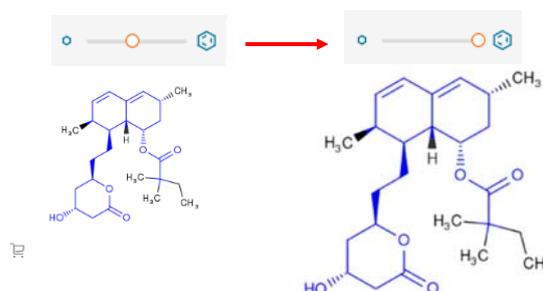
47

## 検索結果画面②

### ②フィルター機能:

Filters and Analysis	
By Structure	← 構造
Substances Classes	← 物質分類
Molecular Weight	← 分子量
Number of Fragments	← フラグメント数
Availability	← 入手可能性
Availability in other databases	← supplier Dbへの登録有無
Available Data	← 反応・物性等のデータ
Document Type	← 資料の種類(文献・特許)
Publication Year	← 発行年

### ③表示サイズの切り替え:



\* 3段階でサイズ変更が可能

48

## 検索結果画面③

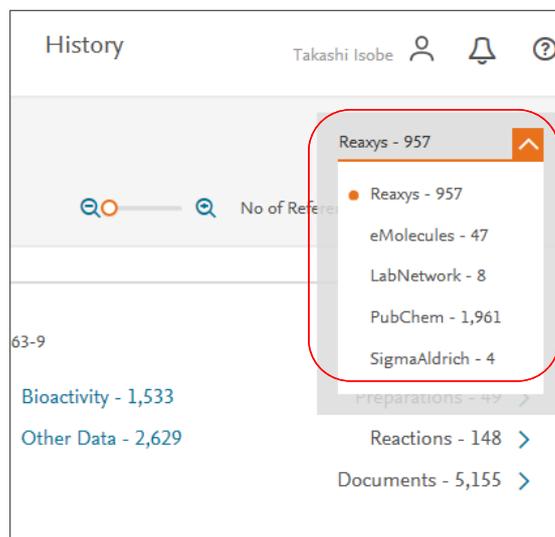
### ④ 検索結果のソート機能:



降順昇順切替

- ← 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
- ← Reaxys登録番号

### ⑤ 表示Database変更機能:



\* デフォルトではReaxysになっています。

49

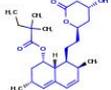
## 検索結果の閲覧①



957 Substances out of 7,043 Documents containing 1,372 Reactions

Reaxys - 957

Limit To Exclude Export

1  ①

simvastatin ②

C<sub>25</sub>H<sub>38</sub>O<sub>5</sub> 418.574 4768037 79902-63-9

Identification ③

Physical Data - 68

Spectra - 86

Bioactivity - 1,533 ④

Other Data - 2,629

Preparations - 49 > ⑤

Reactions - 148 > ⑥

Documents - 5,155 > ⑦

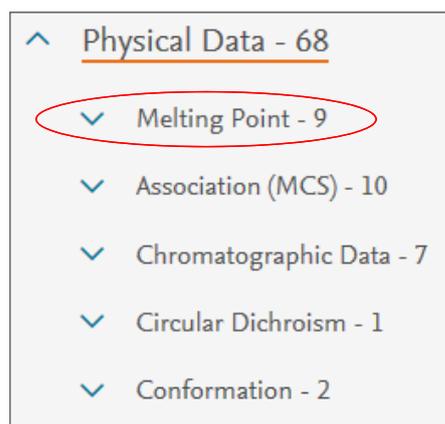
検索結果画面:

1件目のレコードを詳細表示させました。

- ① 構造式
- ② 化学名
- 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 参照文献数

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。



Physical Data - 68

- ✓ Melting Point - 9
- ✓ Association (MCS) - 10
- ✓ Chromatographic Data - 7
- ✓ Circular Dichroism - 1
- ✓ Conformation - 2

50

## 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。

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Reference
137.87		Nicolás Vázquez, Inés Rodríguez-Núñez, Jesús Rubén Peña-Caballero, Vicente Ruvalcaba, Rene Miranda, Azeves-Hernandez, Juan Manuel - Journal of Molecular Structure, 2017, vol. 1149, p. 683 - 693 Full Text > Details > Abstract >
140.65		Basak, Souvik; Mondal, Sandip; Oey, Suddhasattya; Bhattacharya, Prabon; Saha, Achintya; Deep Punetha, Vinay; Abbas, Ali; Gopal Sehoo, Nanda - Journal of Pharmacy and Pharmacology, 2017, vol. 69, # 10, p. 1304 - 1317 Full Text > 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 15 times > Details > Abstract >
139.5		Askin, Du; Verhoeven, T. R.; Liu, T. M.-H.; Shinkai, I. - Journal of Organic Chemistry, 1993, vol. 56, # 16, p. 4929 - 4932 Full Text > Details > Abstract >
132 - 134	toluene, hexane	Dabak, Kadir; Adiyaman, Mustafa - Helvetica Chimica Acta, 2003, vol. 86, # 3, p. 673 - 677 Full Text > Details > Abstract >
		Dabak, Kadir; Keskin, Mulya - Heterocyclic Communications, 2004, vol. 10, # 1, p. 29 - 34 Full Text > Details > Abstract >
124 - 127		BIOCON LIMITED - WO2004/69819, 2004, A1 Full Text > Details > Abstract >

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

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 losartan 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.

検索結果の分析

項目を選択して絞り込み

アクセスタイプ

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	6

51

## 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。

Description (NMR Spectroscopy)	Nucleus (NMR Spectroscopy)	Coupling Nuclei	Solvents (NMR Spectroscopy)	Temperature (NMR Spectroscopy), °C	Frequency (NMR Spectroscopy), MHz	Original Text (NMR Spectroscopy)	Reference
NOE (Nuclear Overhauser Effect)	<sup>1</sup> H						Rakhtmatullina; Gallullina; Kochkova; Latfullin; Aganov; Kochkov - Journal of Molecular Structure, 2016, vol. 1105, p. 25 - 29 Full Text > Cited 5 times > Details > Abstract >
Chemical shifts, Spectrum	<sup>1</sup> H			29.84			Rakhtmatullina; Gallullina; Kochkova; Latfullin; Aganov; Kochkov - Journal of Molecular Structure, 2016, vol. 1105, p. 25 - 29 Full Text > Cited 5 times > Details > Abstract >
NOESY (Nuclear Overhauser Enhanced Spectroscopy), Spectrum	<sup>1</sup> H, <sup>1</sup> H			29.84			
HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation), Spectrum	<sup>1</sup> H		chloroform-d1		600		
Chemical shifts	<sup>1</sup> H		chloroform-d1			<sup>1</sup> H-NMR (δ, CDCl <sub>3</sub> ): 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), 1.32-1.08 (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 >
Chemical shifts	<sup>1</sup> H		chloroform-d1		300	<sup>1</sup> H-NMR (CDCl <sub>3</sub> ) 300 MHz: 64.00(s, J=9.3, 1H), 65.78 (dd, J=6, 1H), 65.50(br t, 1H), 65.37(s, 1H), 64.64(m, 1H), 64.38 (m, 1H), 62.78-1.33(m, 16H), 0.11-1.13(m, 9H), 0.85(m, 6H), 0.87(m, 6H)	Glenmark Pharmaceuticals Limited - US2005/239885, 2005, A1 Full Text > Details > Abstract >
Chemical shifts	<sup>1</sup> H		CDCl <sub>3</sub>		300		Dabak, Kadir; Adiyaman, Mustafa - Helvetica Chimica Acta, 2003, vol. 86, # 3, p. 673 - 677 Full 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

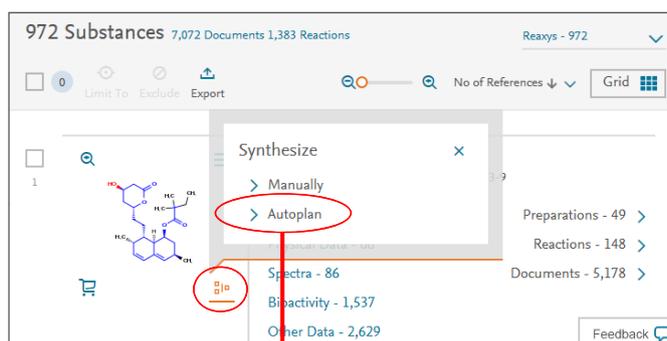
52

## 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。

「Manually」もしくは「Autoplan」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。



972 Substances 7,072 Documents 1,383 Reactions Reaxys - 972

Limit To Exclude Export No of References Grid

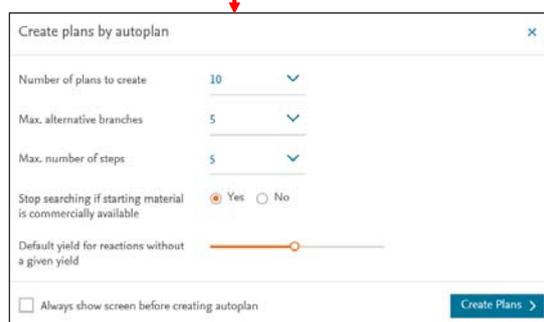
Synthesize

- > Manually
- > Autoplan

Spectra - 86  
Biactivity - 1,537  
Other Data - 2,629

Preparations - 49 >  
Reactions - 148 >  
Documents - 5,178 >

Feedback



Create plans by autoplan

Number of plans to create 10

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

Always show screen before creating autoplan

Create Plans >

53

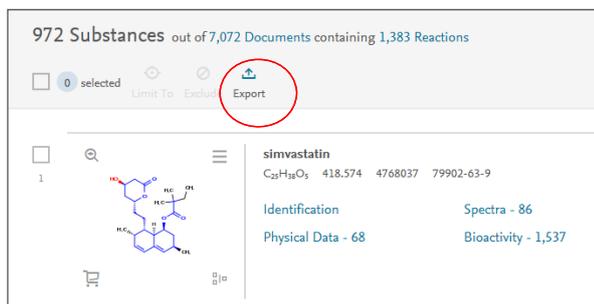


## 検索結果のExport / Save / Alertの利用

## 検索結果のExport①

検索結果を見やすいPDF形式や、XML、Word、Excelなどのファイル形式でエクスポートすることができます。

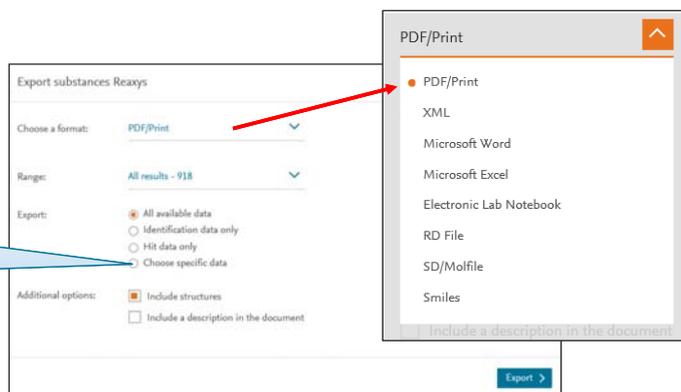
検索結果画面で、「Export」をクリックします。



### 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

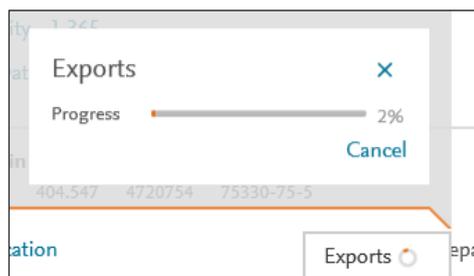


55

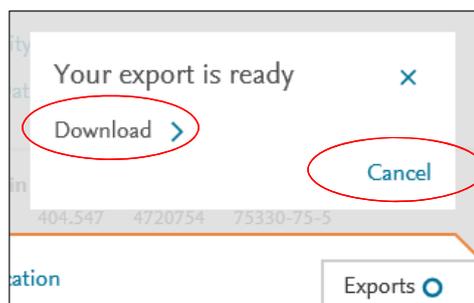
## 検索結果のExport②

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。

56

## 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
- Literature Management System
- Electronic Lab Netbook
- RD File

Range: 出力する範囲を選択

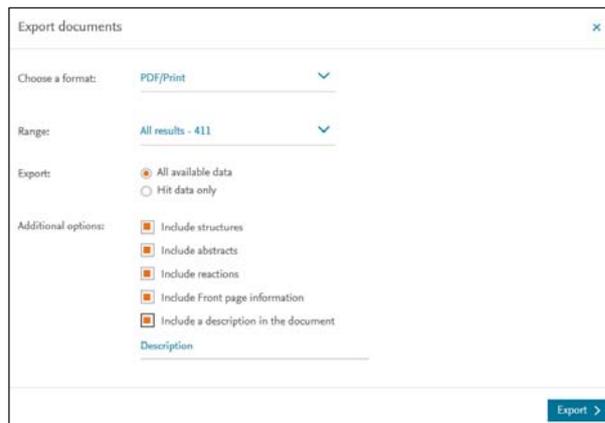
- 上限は5,000データまで

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

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



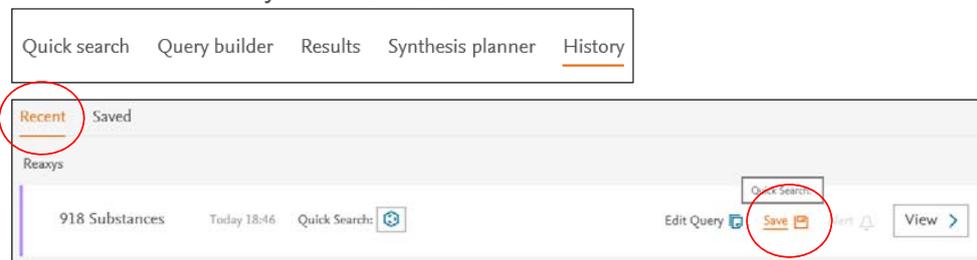
57

## 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。

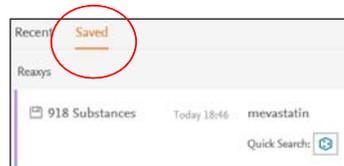
「Save」のアイコン  をクリックします。

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。



58

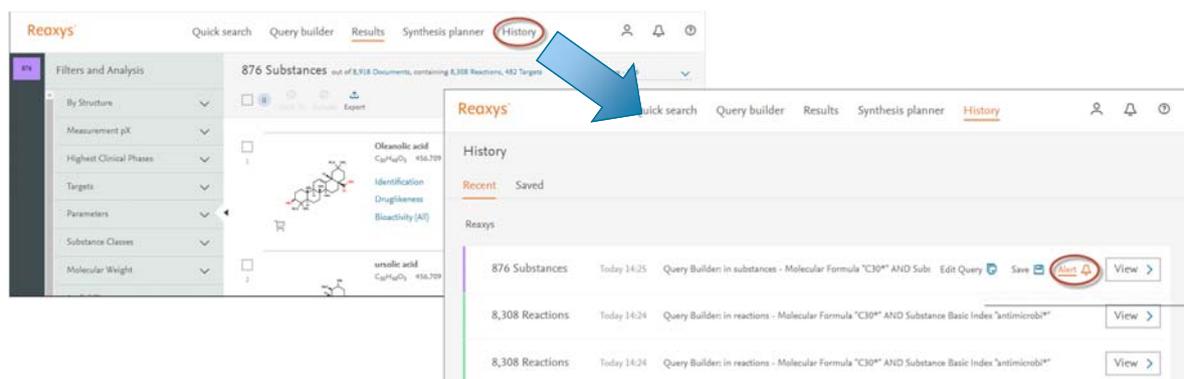
# Alert機能

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。



59

# Alertの設定・管理

## Alertの設定:

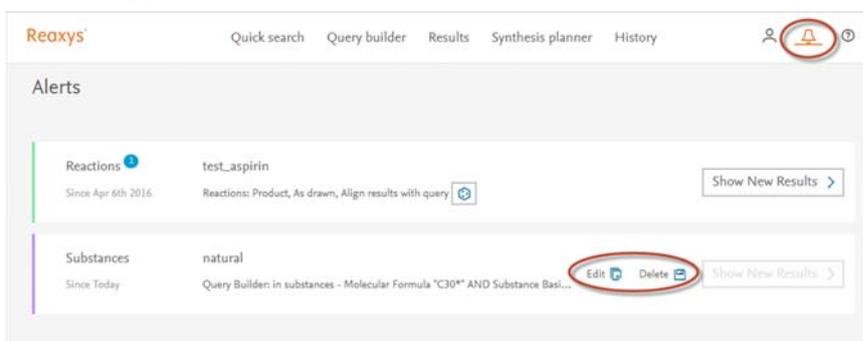
The 'Create Alert' dialog box contains the following fields and options:

- Alert name: Choose a name (with a red box around the input field and a red error message 'Please enter a value')
- Send alerts to: Email address
- Frequency: After each update (dropdown menu)
- From databases:  PubChem,  LabNetwork,  sMolecules,  SigmaAldrich,  Reaxys

- 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。

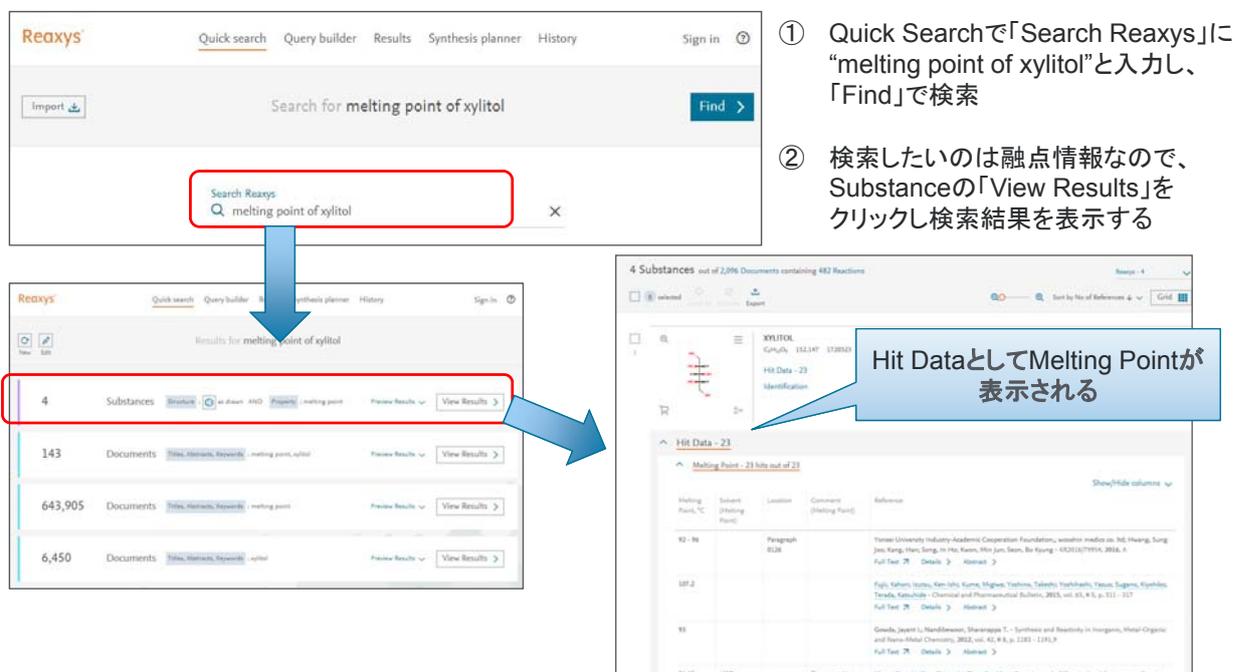
60

# 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



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

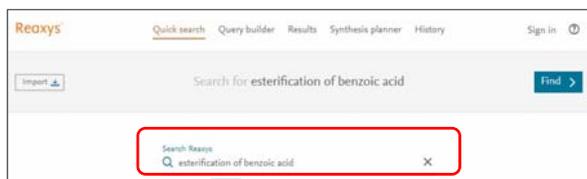
② 検索したいのは融点情報なので、  
Substanceの「View Results」を  
クリックし検索結果を表示する

Hit DataとしてMelting Pointが  
表示される

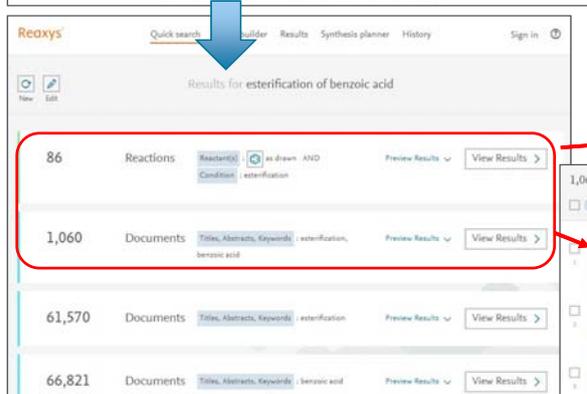
Hit Data - 23	Melting Point - 23 hits out of 23				
Hit No.	Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location	Comment (Melting Point)	Reference
92-94			Paragraph 929		Yonsei University Industry-Academic Cooperation Foundation, sensitive medicine on 16, Hwang, Sung-jun, Kang, Min, Song, in Hwi, Kwon, Hwi Jun, Seon, Bo Young - KSC20170904, 2016, 9 Full Text <a href="#">View</a> Details <a href="#">View</a> Abstract <a href="#">View</a>
107.2					Fujii, Mitsuo; Itozumi, Ken-ichi; Kurita, Naohiko; Yoshizawa, Tetsuo; Sugawara, Kenjiro; Tanaka, Kenichiro - Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 2005, vol. 53, Pt. 4, p. 111 - 117 Full Text <a href="#">View</a> Details <a href="#">View</a> Abstract <a href="#">View</a>
95					Gouda, Jaewon L.; Handbergman, Shanarappa T. - Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry, 2002, vol. 42, Pt. 8, p. 1181 - 1183, 9 Full Text <a href="#">View</a> Details <a href="#">View</a> Abstract <a href="#">View</a>
94.49	H2O		Decomposition		Wang, Shui, Li, Qun-Sheng, Li, Zhao, Su, Ming-Guo - Journal of Chemical and Engineering Data,

## テキストサーチ②

### 検索例:安息香酸(Benzenic acid)エステル化の検索



- 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



Index terms

Author keyword: Esterification, Eugenol, Eugenyl benzoate, Kinetics of inhibition, Rhizomucor miehei lipase, Run

Compound Terms: Biochemical design (BDC), Enzymatic esterification, Esterification reaction(s), Eugenol, Eugenyl benzoate, Inhibition constants, Reaction parameters, Rhizomucor miehei lipase

Compound Terms: Catalytic, Chitin, Chitosan, Esterification, Esters, Isomers, Kinetics, Nanomaterials, Optimization

ENTREE drug terms: benzoic acid, chitin, chitin nanomaterial, chitosan, eugenol, eugenyl benzoate, immobilized protein,

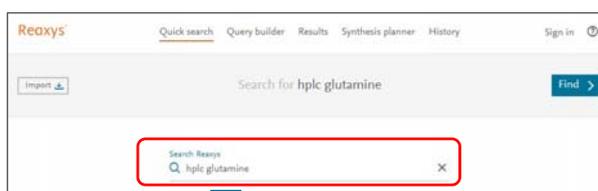
\* 今回の検索ではDocumentの検索結果は下記に分類されている。  
Title, Abstracts, Keywordsがそれぞれ

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

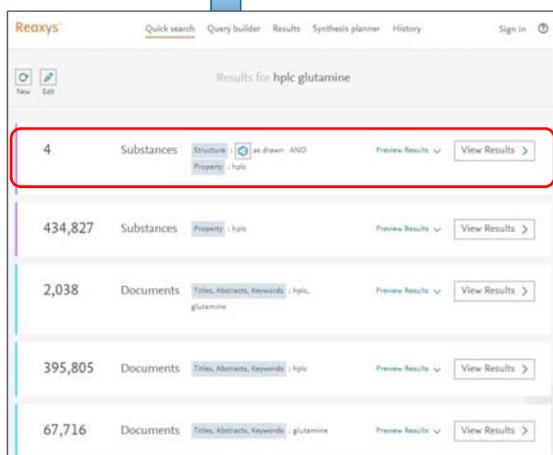
63

## 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



- 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ため Substancesの「View Results」で検索結果を表示



Chromatographic data	Location	Reference
HPLC (High performance liquid chromatography)		Han, Ningning; Li, Longlong; Peng, Mengling; Ma, Haitan - Phytotherapy Research, 2016, p. 1310 - 1329 Full Text <a href="#">Full Text</a> Cited 1 times <a href="#">Details</a> <a href="#">Abstract</a>
HPLC (High performance liquid chromatography)	supporting information	Taglang, Céline; Martínez-Prieto, Luis Miguel; Del Rosal, Iker; Maron, Laurent; Poteau, 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 <a href="#">Full Text</a> <a href="#">Details</a> <a href="#">Abstract</a>

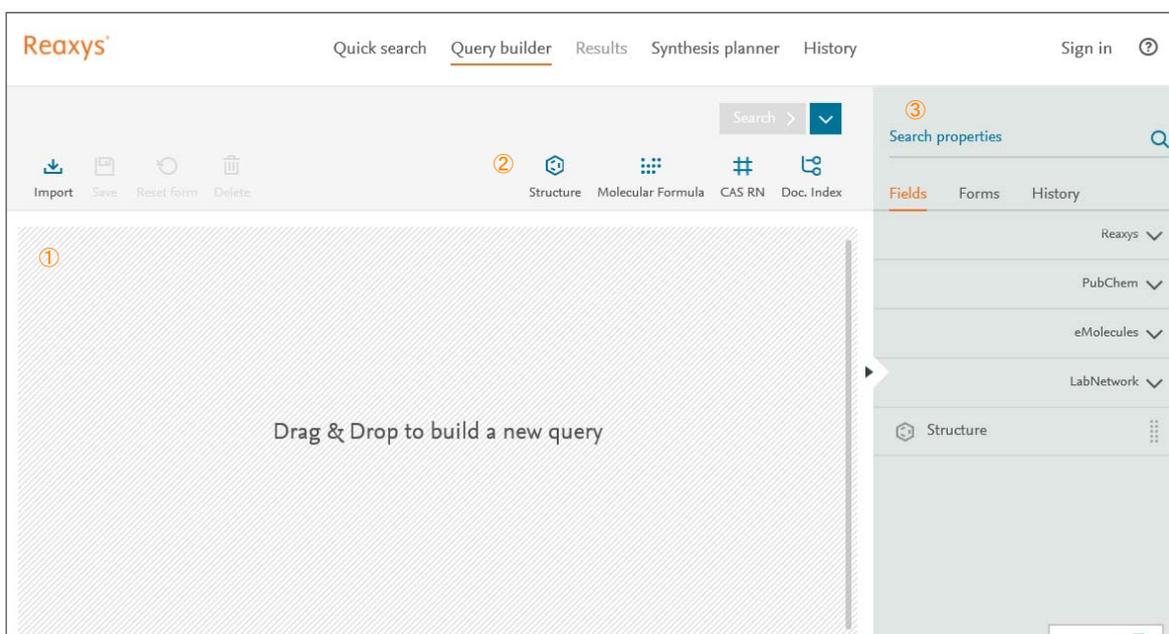
Glutamineとhplcの掛け合わせの結果だけではなく、property「hplc」のみも提示

64

# 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。



- 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. At the top, there are navigation tabs: Quick search, Query builder (selected), Results, Synthesis planner, and History. A search bar is present with a dropdown menu. Below the search bar, there are icons for Import, Save, Reset form, and Delete all. The main area is divided into sections for Structure, Molecular Formula, CAS RN, and Doc. Index. A search bar is also present in the top right corner. A dropdown menu is open, showing search results for 'Find search fields and forms'. The dropdown menu has tabs for Fields, Forms, and History. The History tab is selected, showing a list of search results including Catalyst Investigation, Patent Specific Data exists/any, NMR Spectroscopy, IR Spectroscopy, Mass Spectrometry, UV/VIS Spectroscopy, Raman Spectroscopy, and ESR Spectroscopy. A callout box points to the 'History' tab with the text: 「検索履歴との掛け合わせも可能」. Another callout box points to the 'Forms' tab with the text: 「Physical Dataや Natural Productなどのプリセットのフォームも用意」. The main interface shows a list of search fields and forms, including Physical Data, Melting Point, Boiling Point, Density, Dissociation Exponent, and Dynamic Viscosity.

67



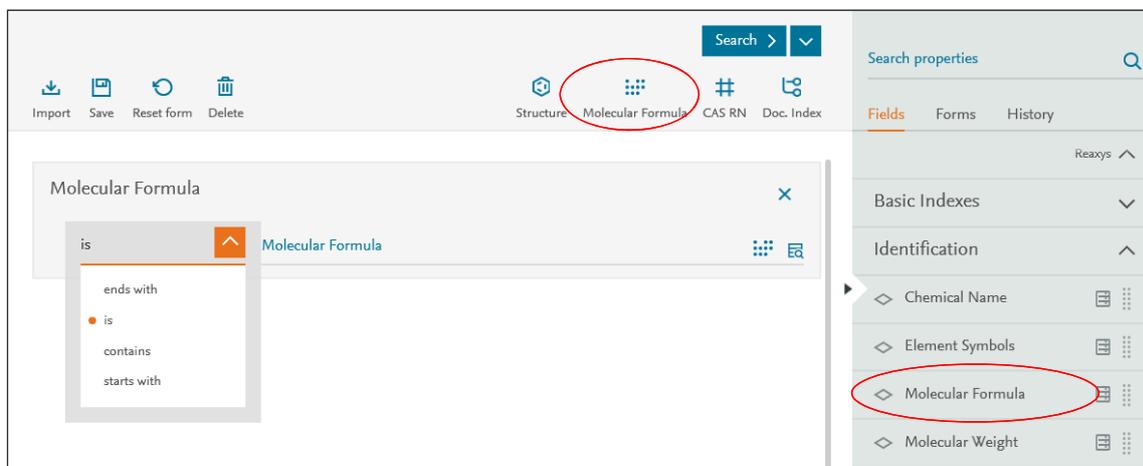
## Query Builder: 検索事例

- 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:

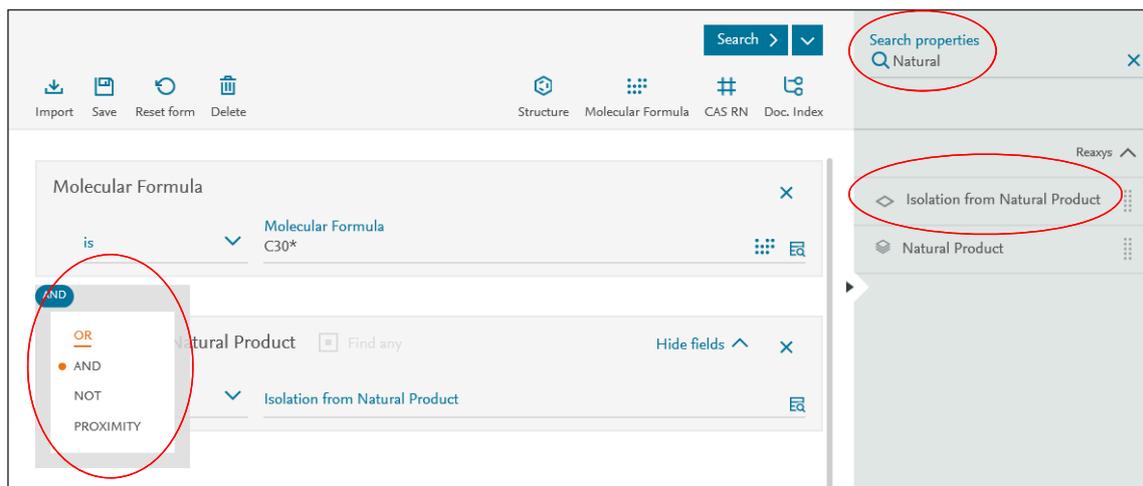
天然物から抽出された化合物で、実験結果から炭素が30の化合物であることがわかっている。  
この化合物が抗菌活性を測定されたことがあるかを検索。



- 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。

69

## Query Builderでの検索1-②



\* 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、先にあったボックスとの間に演算子が表示されます。

70

## Query Builderでの検索1-③

The screenshot shows the Query Builder interface. The search criteria are: Molecular Formula is C30\*, Isolation from Natural Product is Isolation from Natural Product, and Substance Basic Index is Substance Basic Index antimicrobi\*. The search properties panel on the right shows the 'Substance Basic Index' field selected. The 'Search' button is highlighted with a red circle, and the 'Substance Basic Index' field is also highlighted with a red circle.

- 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 反応、化合物、文献の中から該当するものを選択し、Searchをクリックします。ここではSubstanceを選択します。

71

## Query Builderでの検索1-④

The screenshot shows the Reaxys search results page. The search criteria are: Molecular Formula is C30\*, Isolation from Natural Product is Isolation from Natural Product, and Substance Basic Index is Substance Basic Index antimicrobi\*. The search results show 876 Substances out of 8,094 Documents containing 7,885 Reactions. The first result is Oleanolic acid, with the chemical structure C30H48O3 and the following data: 456,709, 2228570, 508-02-1. The Hit Data - 27 is expanded, showing the following data: Preparations - 171, Reactions - 1,451, Documents - 2,065, Identification, Physical Data - 319, Spectra - 234, Bioactivity - 1,148, Other Data - 869.

### 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。

72

## 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:

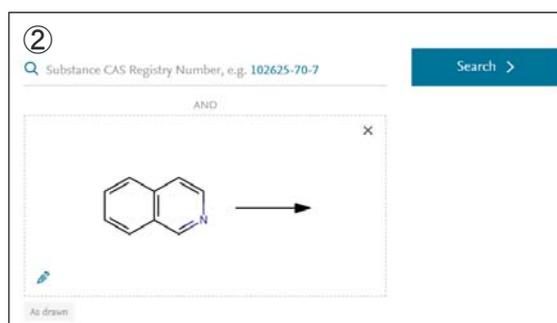
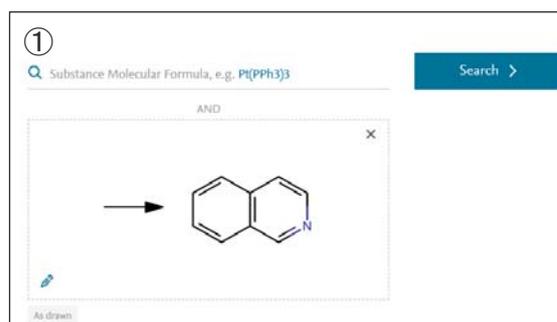
イソキノリンの骨格を作る反応を検索する。  
ただし出発物質に既に目的骨格が含まれている反応  
(ノイズ)を除去したい。

\*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。



73

## 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。

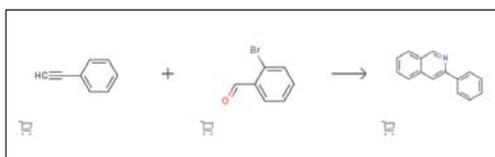
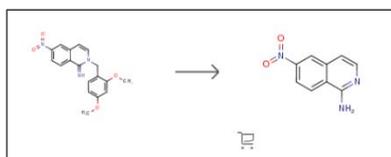
\* イソキノリンの骨格を作る反応を検索したいと思っておりますが、イソキノリン骨格を持つものを出発物質とする反応には、単なる置換反応が多く含まれてしまいます。ノイズに共通項はないか探し、その共通項の検索を行い、もとの検索結果から差し引くことでノイズを除くことができます。

74

## 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。

※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



結果例

## 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

用途としてFoodとSupplementの記載のある化合物がヒット

Use Pattern	Location	Reference
Food/food additives	Paragraph 2	Xie, Lingjun; Wang, Nuan - CN106474454, 2017, A Full Text > Details > Abstract >
Food product	Paragraph 2	Xie, Lingjun; Wang, Nuan - CN106474454, 2017, A Full Text > Details > Abstract >
new natural resource food product	Paragraph 2	Xie, Lingjun; Wang, Nuan - CN106474454, 2017, A Full Text > Details > Abstract >
Food/food additives	Page/Page column title page 17-20	MYCOTOX SOLUTIONS INC.; MARQUARDT, Ronald R.; MADH-YASTHA, Srinivasa - WO2017/03964, 2017, A1 Full Text > Details > Abstract >
Food allergies	Page/Page column 8	NEXORA INTERNATIONAL; DAGUET, David - US2015/106162, 2015, A1 Full Text > Details > Abstract >
Dietary supplement		Usell, Ronald G. - US2005/249801, 2005, A1 Full Text > Details > Abstract >

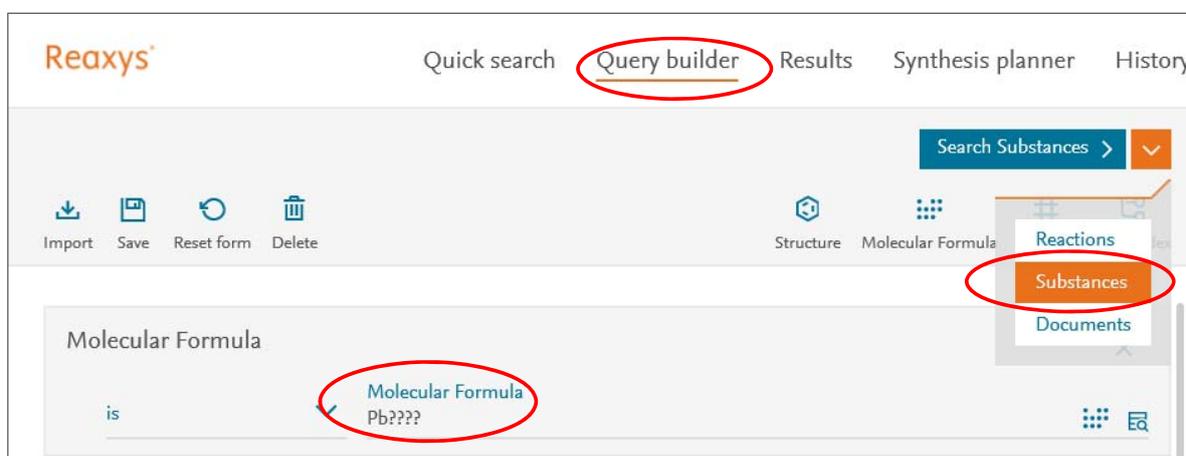
# Appendix

- 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 shows the Reaxys interface. At the top, the 'Query builder' tab is circled in red. Below it, the search dropdown menu is open, and the 'Substances' option is circled in red. In the search input field, the text 'Molecular Formula' is circled in red, and 'Pb????' is entered below it.

## 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 <sub>2</sub> *4NH <sub>3</sub>	
配位化合物		Fe(C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	
固溶体	混合する分子を#でつなぐ	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> #Cs <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> CaCO <sub>3</sub> #CaMg(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	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 <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> O	許容する原子団を(XX, YY)と列挙して表記	(ch <sub>3</sub> , c <sub>2</sub> h <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> 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	(tm)		
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 <sub>4</sub> , Pb(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> , PbTiO <sub>3</sub> など

79

## 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 <sub>3</sub> 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 <sub>2</sub> , S <sub>8</sub> 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 <sup>3+</sup> , Na <sup>2+</sup> 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 <sub>2</sub> , FeCl <sub>3</sub> , FeCl <sub>4</sub>
原子の数を指定	(x,y)	FeCl(2,4)	FeCl <sub>2</sub> , FeCl <sub>4</sub>
複数の元素についてそれぞれの原子数を指定	A <sub>x</sub> B <sub>y</sub> , x=2,3 y=2-4	Fe <sub>x</sub> O <sub>y</sub> x=2,3 y=2-4	Fe <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , Fe <sub>3</sub> O <sub>2</sub> , Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> など
複数の元素についてそれぞれの原子数を指定	AnB <sub>1-n</sub> n=0-1 数式での表記	Fe <sub>n</sub> Pd <sub>1-n</sub> n=0-1	FePd, Fe <sub>0.2</sub> Pd <sub>0.8</sub> , Fe <sub>0.5</sub> Pd <sub>0.5</sub> など
Feを含む合金、ドーブ物質など	Fe#	Fe#	
FeとNiを含む合金	混合する元素を#でつなぐ	Fe#Ni	

80

## 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#TiO2	mixture (composition partially given): Titanium(IV) oxide zinc oxide
	PbSO4#PbO#SiO2	mixture (composition partially given): lead (II) oxide silica gel lead (II) sulfate
溶液	NaCl#H2O	mixture (composition partially given): water sodium chloride
水和物	CoCl2.(H2O)?	cobaltous chloride hexahydrate cobalt(II) chloride hexahydrate CoCl2, 6H2O
ガラス、セラミック物資 (10-15%のB2O3および、 10-15%のAlO3を含むSilica spheres)	B2O3(10-15W%)#Al2O3(10-15W%)#SiO2#	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

81

## 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)

82

## 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>