

Reaxysによるこそ

www.info.reaxys.com

合成化学者のための反応データベース



エルゼビア・ジャパン株式会社

Reaxysとは?

- 合成化学者のための **新規ワークフローツール**
 - CrossFire Beilstein
 - CrossFire Gmelin
 - Patent Chemistry Database
- } 3つの実績のあるデータベースを統合

世界最大の有機化学、無機化学、有機金属・錯体の
ファクトデータベース

- **有効で高質なコンテンツ**の利点を生かしたまま使いやすく
- **トレーニングなし**でも操作できる シンプルなインターフェース
- **ウェブベース**でのサービス。社内のどのPCからもご使用いただけます、化合物研究と発見を効率化



3つのデータベースを統合化した、使いやすいプランニングツール

◆CrossFire Beilstein Database

世界最大の有機化合物のファクトデータベース
冊子体のBeilstein Handbook of Organic Chemistryの後継

◆CrossFire Gmelin Database

世界最大の無機化合物と有機金属・錯体のファクトデータベース。
冊子体のGmelin Handbook of Inorganic and Organometallic
Chemistryの後継
(STNのGmelin97ファイルは、1995年までのデータのみ)

◆Patent Chemistry Database

WO/US/EPIに出願された英文特許から抽出・統合したファクトデータベース
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(消毒薬、殺虫剤、除草剤)、
A61K(医薬品、歯科用又は化粧品用製剤)、C09B(染料)



質の高い論文、特許などから専門家が**人手で**注意深く、
実用的な価値を持つ**実験データ**を抽出し、データベース化

有機化学

- ◆有機化合物の**構造、実測物性値、反応、引用文献**
- ◆合成ルート同定
- ◆環境毒性データ
- ◆毒性データ
- ◆バイオアッセイデータ
- ◆logP
- ◆毒性値 など

⇒
・化合物合成設計
・合成展開から
プロセス研究まで
強力に推進

無機化学、有機金属化学

- ◆無機化合物、有機金属化合物、錯体などの**構造、実測物性値、反応、引用文献**
 - 触媒(無機、有機金属、錯体)、蛍光物質
 - 電気、磁性、光学、ナノ科学に関連した物質
 - 無機化合物(ナノマテリアル、ジオライト、レーザー物質、配位化合物、
固体化合物、ガラス、セラミック、合金、ドーピング物質、ミネラル)

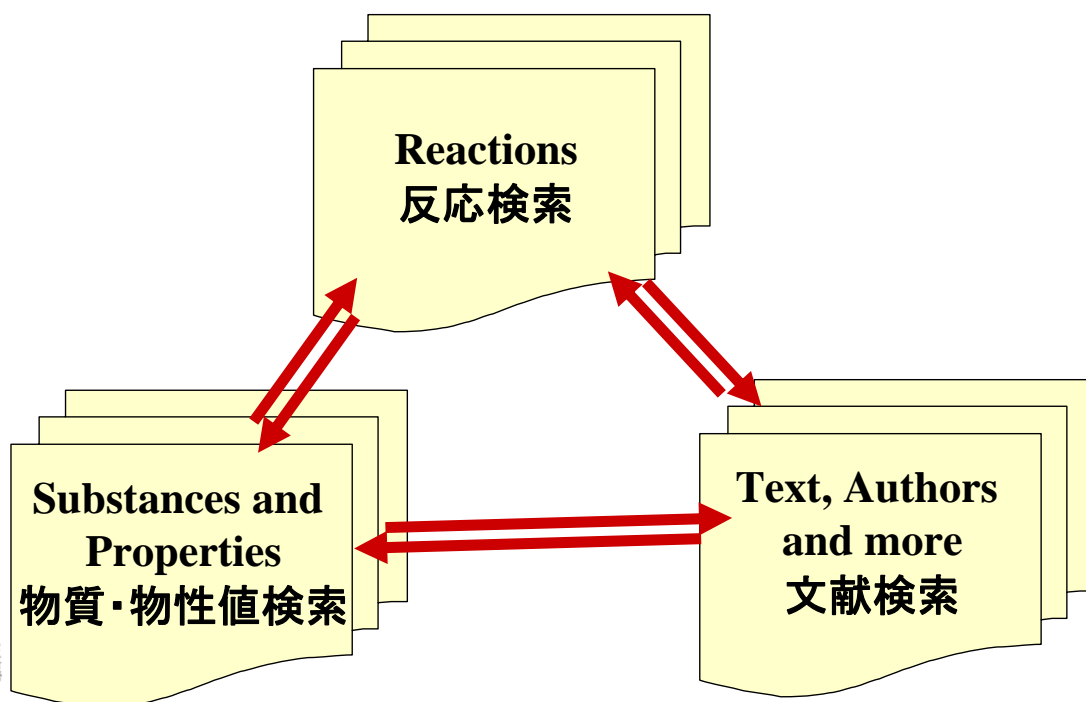


Reaxys での改良点

	Reaxys	CrossFire
ソフトウェア	Web アプリケーション	クライアントサーバーアプリケーション
インストール	なし(ご使用のPCへのインストールなし)	ご使用のPCにインストール(Commander)
使いやすさ	簡単操作:タスク中心(フィルター、分析、ランク)	ユーザートレーニングが必要; 機能中心(グルーピング、ソートなど)
コンテンツ	3つのCrossFire databaseを統合	Beilstein, Gmelin, Patent Chemistry Database に分かれたデータベース
データ	標準化・規格化されたデータフィールド (同一フィールド名・単位・フォーマット)	同じ物質特性でもそれぞれのデータベースに異なるデータフィールド名やフォーマットが存在
サーチメニュー	ユーザー中心に設計された検索フィールド (反応・化合物・引用文献)	すべてのデータフィールドを提示、入り組んだ何百種類のデータフィールド
結果表示	表形式表示:重要なフィールドのほとんどを表で表示;必要に応じてフィールド付与可能	デフォルトの表示:すべてのフィールドのリスト形式;エクスポートのためだけの表形式、新しいエクスポート作成が難しい
合成計画	合成計画ツール	—
操作システム	Mac サポートあり	Mac サポートなし
アクセス	In-houseバージョンはなし	CrossFire DirectとCrossFire in-house



パワフルな機能 Reaxys—3方面からの検索機能

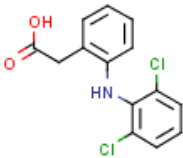


Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name

diclofenac

Double click here to draw a structure or reaction



Search as / by

- Product
- Starting material
- Any role
- Reagent/ Catalyst
- As drawn
- Substructure:
 - on heteroatoms
 - on all atoms

- Ignore stereo
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Keep Fragments separate
- Ignore Atom Mappings

Add further search conditions

Search

Clear Query Load Query Save Query



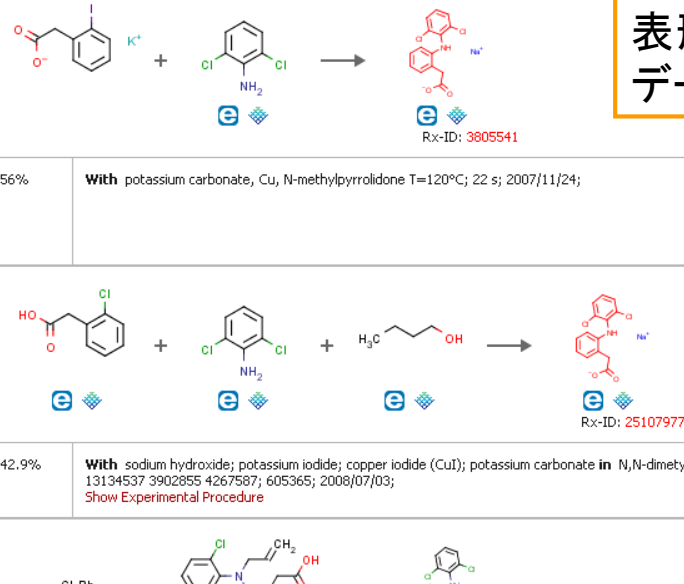
Reactions Citations

3 reactions out of 3 citations go to No. [] Page 1

Limit to Selection Output Sort by Reaxys-Ranking [] [] [] Hide Details

Yield	Conditions	References
56%	With potassium carbonate, Cu, N-methylpyrrolidone T=120°C; 22 s; 2007/11/24;	Moser, Peter; Sallmann, Alfred; Wiesenberg, Irmgard Journal of Medicinal Chemistry, 1990, vol. 33, # 9 p. 2358 - 2368 Abstract Full Text Scopus
42.9%	With sodium hydroxide; potassium iodide; copper iodide (CuI); potassium carbonate in N,N-dimethyl-formamide 11342940 Show Experimental Procedure	Zenyaku Kogyo Kabushiki Kaisha Patent: US4410724, 1983 Abstract Full Text

Cl,Rh




引用文献、Scopusへのリンク

要旨表示

被引用件数とリストを表示

SCOPUSへのリンク

テキスト情報へ

ELSEVIER

特許情報由来—実験項の表示

reaxys
Innovation from CrossFire Beilstein

特許情報由来—実験項の表示

Example 1
A stirred mixture of 5.11 g of o-chlorophenylacetic acid, 24.30 g of 2,6-dichloroaniline, 8.28 g of potassium carbonate, 4.98 g of potassium iodide, 4.50 g of cuprous iodide and 60 ml of N,N-dimethylformamide was refluxed under a nitrogen atmosphere for 7 hours. The reaction mixture was filtered and the filtration residue was thoroughly washed with warm water. The washing solution was combined with the filtrate and n-butanol was added thereto. The mixture was concentrated under a reduced pressure. The concentration residue was thoroughly washed with chloroform and then diluted with icewater. It was then acidified with 2 N hydrochloric acid and extracted with chloroform. A 2 N aqueous sodium hydroxide solution was added to the chloroform layer and the whole was stirred at room temperature for 30 minutes and then cooled to precipitate crystals. Thus, 4.09 g (yield: 42.9percent) of sodium o-(2,6-dichloroanilino)phenylacetate was obtained. 22percent of unreacted o-chlorophenylacetic acid was recovered. m.p. 283.deg.-285.deg. C. (decomp.)

特許由来の情報では、実験項が表示

ELSEVIER

項目別のフィルタリング機能



Query Results Synthesis Plans My Settings Help

Query 69 reactions 3 reactions Limited by hits

結果の絞り込みも簡単

Filter by: Yield Record Type Reagent/Catalyst Solvent Reaction Type No. of Steps Document Type Authors Patent Assignee Journal Title Publication Year

Yield: >95 - 100 (4), >90 - 95 (4), >85 - 90 (2), >80 - 85 (2)

Record Type: patent (33), journal (18)

Document Type: patent (33), journal (18)

Reactions Citations

Limit to Selection Output Sort by Reaxys-Ranking

69 reactions out of 51 citations go to No. [] [] [] []

Yield Conditions References

21 Clc1ccc(cc1)C(=O)O + Clc1ccc(cc1)N + H3C-CH2-CH2-OH → Clc1ccc(cc1)C(=O)O Rx-ID: 25107977

42.9% With sodium hydroxide; potassium iodide; copper iodide (CuI); potassium carbonate in N,N-dimethyl-Formamide 11342940 13134537 3902855 4267587; 605365; 2008/07/03; Show Experimental Procedure

22 Clc1ccc(cc1)C(=O)O + H-O-H + Clc1ccc(cc1)N → Clc1ccc(cc1)C(=O)O Rx-ID: 25332573

91.2% in tetrahydrofuran; hexane; toluene 102391 1730733 635760; 2008/07/04; Show Experimental Procedure

Nissan Chemical Industries, Ltd.; Sagami Ch Center Patent: U54189595, 1980 Abstract Full Text

23

絞込みの項目
 ✓収率
 ✓レコードタイプ
 ✓溶媒/触媒
 ✓反応タイプ(ex.加水分解)
 ✓反応のステップ数

文献情報での絞り込みも可能

11

合成化学者に必要で有効な情報



Innovation from CrossFire Beilstein

適切な合成経路の設計を助ける synthesis plan(合成計画)機能

Query Results Synthesis Plans My Settings Help Logout

Synthesis 1

Undo Open Save Copy plan to new page

93% Modify Synthesize

Hide selected details Hide all details Show all details

Step	Yield	Conditions	References
1	93%	With 2 N NaOH in ethanol; H ₂ O 4 h; Heating;	Moser, Peter; Sallmann, Alfred; Wiesenberg, Irmgard Journal of Medicinal Chemistry, 1990, vol. 33, # 9 p. 2358 - 2368 Abstract Full Text Scopus
	85%	With 20percent NaOH in ethanol 3 h; Heating;	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Choi, Hong Dae; Haruta, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 1984, vol. 32, # 5 p. 1995 - 1997 Abstract Full Text Scopus

21 reactions out of 11 citations go to No. [] [] [] [] Page 1 [] [] []

Sort by Reaxys-Ranking

Filter by: Yield Record Type Reagent/Catalyst Solvent Reaction Type No. of Steps

Yield Conditions References

81.3% With AlCl₃ (1.) 145-150 deg C, 2.) 162-168 deg C, 2

Predvoditeleva, G. S.; Kartseva, T. V.; Oleshko, O. N.; Shvedov, V. I.; Syubaev, R. D.; et al.
Pharmaceutical Chemistry Journal, 1987, vol. 21, # 4.4 p. 376 - 378

ELSEVIER

目的とする化合物を出発点に逆合成的な合成ルートが簡単にわかりやすく

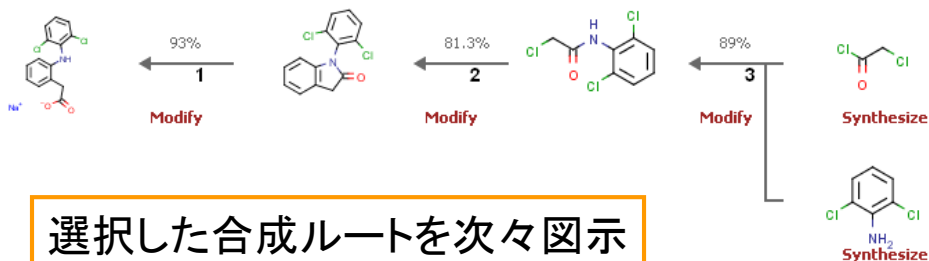
12

合成計画ツール

Query Results Synthesis Plans My Settings Help

Synthesis 1

Undo Open Save Copy plan to new page Synthesis representation Horizontal tree Show



選択した合成ルートを次々図示

Hide selected details Hide all details Show all details

Step	Yield	Conditions	References
1	93%	With 2 N NaOH in ethanol; H ₂ O 4 h; Heating;	Moser, Peter; Sallmann, Alfred; Wiesenberg, Irmgard Journal of Medicinal Chemistry, 1990, vol. 33, # 9 p. 2358 - 2368 Abstract Full Text Scopus
	85%	With 20percent NaOH in ethanol	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Choi, Hong Dae; Haruta, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki

反応条件は下に表で表示



物質・物性値からの検索

Query Results Synthesis Plans My Settings Help

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name

Double click here and draw structure

As drawn
Substructure:
on heteroatoms
on all atoms

Ignore stereo
No salts
No mixtures
No isotopes
No additional rings

Further options

Hide further search conditions

- Substance Data
- Identification Data
- Physical Data
- Spectroscopic Data
- Bioactivity Data
- Ecotoxicological Data
- Bibliographic Data

物質名
ID番号
化学構造式
物性値 など } から検索可能

Search

Clear Query Load Query Save Query



物質検索結果

Substances (Grid) Substances (Table) Citations 36 substances out of 40 citations go to No.

Limit to Selection Output Sort by Molweight

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.
 Show Details	1-(indol-3-yl)indole 3-(2-indolyl)indole 2,3'-Bi-indolyl 2,3'-biindolyl 2,3'-biindole 2,3-biindolyl 1,1',1''-[2,3']biindolyl	Identification (13) Physical Data (9) Spectra (16) Natural Product (1)	24	16 prep out of 36 reactions.
 Show Details	3-cyano-2,3'-biindolyl	Identification (3) Physical Data (1) Spectra (4)	1	3 prep out of 3 reactions.
 Show Details	2,3'-biindolyl-3-carboxaldehyde 3-Formyl-2,3'-biindolyl	Identification (3) Physical Data (1) Spectra (1)	2	3 prep out of 7 reactions.
 Show Details	7,7'-Dimethyl-1,1',1''-[2,3']biindolyl	Identification (2) Physical Data (1)	1	1 prep out of 1 reactions.

ELSEVIER 15

表形式でわかりやすい表示

豊富な物性値情報

 Hide Details	3-Formyl-5,6-dihydroindolo<2,3-a>indolizine	Identification (4) Physical Data (2) Spectra (7)	2	4 prep out of 4 reactions.		
<p>Structure/Compound Data</p> <p>Reaxys Registry Number: 7376735 CAS Registry Number: Chemical Name: 3-Formyl-5,6-dihydroindolo<2,3-a>indolizine Type of Substance: heterocyclic</p> <p>Molecular Formula: C₁₅H₁₂N₂O Linear Structure Formula: C₁₅H₁₂N₂O Molecular Weight: 236.273 InChi Key: ROVCATXBRMEDBY-UHFFFAOYAT</p> <p>▼ Identification ▼ Physical Data ▲ Spectra ▲ NMR Spectroscopy (3)</p>						
<p>表形式表示 必要な情報だけプルダウンで表示</p>						
Description	Nucleus	Solvents	Original Text	Entry Date	Comment	Reference
Chemical shifts	1H	CDCl ₃	<p>特許由来のデータは ケミカルシフトも掲載</p>	2007/10/26		Manna, Ranjan K.; Jaisankar, Parasuraman; Giri, Venkatchalam S. Synth. Commun., 1995, vol. 25, # 19 p. 3027 - 3034 Abstract Full Text Scopus
Spin-spin coupling constants		CDCl ₃		2007/10/26	1H-1H	Manna, Ranjan K.; Jaisankar, Parasuraman; Giri, Venkatchalam S. Synth. Commun., 1995, vol. 25, # 19 p. 3027 - 3034 Abstract Full Text Scopus
	1H	chloroform-d1	1H NMR (CDCl ₃): δ 3.4 (t, J=8 Hz, 2H, H-6), 4.8 (t, J=8 Hz, 2H, H-5), 6.38 (d, J=6 Hz, 1H, H-1), 7.02 (d, J=6 Hz, 1H, H-2), 7.08 - 7.68 (m, 4H, ArH), 8.34 (brs, 1H, NH), 9.58 (s, -CHO).	2008/06/23		DABUR RESEARCH FOUNDATION Patent: WO2005/121143, 2005 Abstract Full Text

ELSEVIER

基本データ

Molecular weight (分子量)

Melting point (沸点)

Sublimation (昇華)

Liquid phase (液相)

スペクトルデータ

NMR spectrum (NMR スペクトル)

IR spectrum (IRスペクトル)

Mass spectrometry (マスマスペクトル)

UV/VIS spectroscopy (UV/VISスペクトル)

Fluorescence Spectroscopy (蛍光スペクトル)

Raman Spectroscopy (ラマン分光)

Luminescence Spectroscopy (ルミネッセンス分光)

生物活性

Pharmacological Data (薬理データ)

Concentration in the Environment (環境濃度)

物理学的情報

Ionization Potential(電離ポテンシャル)

Electron Binding(電子結合)

Enthalpy of Formation (標準生成エンタルピー)

Interatomic Distance (原子間距離)

など

文献情報からの検索

Query Results Synthesis Plans My Settings Help

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

2005年ノーベル化学賞受賞者

Author: grubbs, r. h.
e.g. Snyder, e.g. Peter, e.g. Sny*

Publication: e.g. Journal of Organic Chemistry

Patent Number: e.g. U512345678

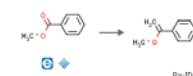
Patent Country: e.g. EP

Limit to Selection Output Sort by Publication Year Hide Details

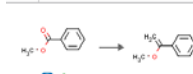
Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
Titanium-Mediated Methylene-Transfer Reactions. Direct Conversion of Esters into Vinyl Ethers	Pine, S. H.; Zahler, R.; Evans, D. A.; Grubbs, R. H.	1990	Journal of the American Chemical Society, 112 , vol. 102, # 9 p. 3270 - 3272 Full Text Scopus	
REACTIONS OF NICKEL-CARBENE COMPLEXES GENERATED FROM NICKELACETYLENE COMPLEXES.	Miyashita, Akira; Grubbs, R. H.	1981	Tetrahedron Letters, 1981 , vol. 22, # 13 p. 1255 - 1256 Full Text	

文献中の反応式が展開

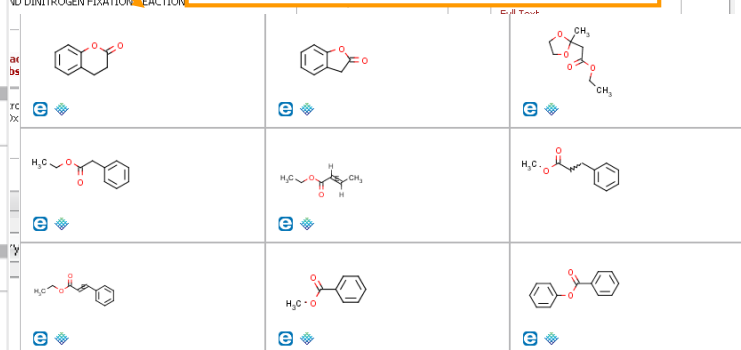
文献中の化合物が展開



Yield: 81%
Conditions: With $\text{Cp}_2\text{Ti}(\text{CH}_3)_2\text{-ClAlPh}_2$, pyridine in toluene; tetrahydrofuran $\text{T} = 25^\circ\text{C}$; 1 s; analogous reaction in the absence of pyridine (25 deg C, 24 h); methylation reactions with other esters (including α,β -unsaturated esters); Product distribution; 2007(11)214;



Yield: 81%
Conditions: With pyridine in toluene; tetrahydrofuran 1.) -40°C , 0.5 h, 2.) -40°C \rightarrow room temperature, 90 min; 2007(12)205;



My Settings Help

95

ances (Grid) Substances (Table) Citations

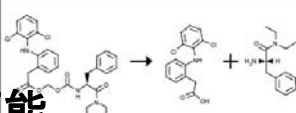
Limit to Selection Output

Sort by Molweight

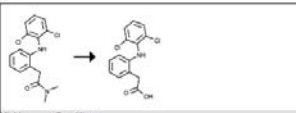
Structure Chemical Name

いろいろな形式でのエクスポートが可能

reaxys diclofenac synthesis



Yield	Conditions	References
100 %	With human plasma in aq. phosphate buffer, T = 37 °C, pH = 7.4	Ribeiro, Lina; Silva, Nuno; Iley, Jim; Raabio, Jarkko; Jaervinen, Tomi; Mota-Filipe, Heider; Moreira, Rui; Mendes, Eduarda, Archiv der Pharmazie (Weinheim, Germany), vol. 340, no. 1, (2007), p. 32 - 40



Yield	Conditions	References
92.2%	Example Name 19: Example Title (I) Preparation of o-(2,6-dichloroantino)phenylacetic acid To 40 ml of a 15percent ethanol solution of potassium hydroxide was added 1.7 g of N,N-dimethyl-o-(2,6-dichloroantino)phenylacetamide, and the mixture was made acidic by hydrochloric acid at a temperature lower than 5 deg. C. After completion of the reaction, the solvent was removed by distillation under reduced pressure, and 30 ml of water was added to the residue and the mixture was made acidic by hydrochloric acid at a temperature lower than 5 deg. C. The precipitated crystal was recovered by filtration under suction, washed with water and dried. Recrystallization from a mixed solvent of ether and petroleum ether gave 1.45 g of a colorless crystal having a melting point of 156 deg. to 160 deg. C. The yield was 92.2percent. With potassium hydroxide in ethanol, water	Patent, Ikeda Mohando Co., Ltd., US4263532; (1981); (A1) English

reaxys

Output Substance Results

Output

Substance Grid Substance Details Table Sub

to PDF/Print XML Liter (e.g

Microsoft Word Microsoft Excel Smiles

Include the following headline

Output range All Hits Selected hits Range:

e.g. 1, 2-5, 10

OK Cancel

19



最適化されたインターフェース

- シンプルなインターフェースにより、データの発見、絞り込み、分析が簡単
- ワークフローにしたがって、直観的にご利用いただけるので、研究開発のスピードアップに貢献いたします
- Reaxys は、ウェブベースの製品であり、インストールや特定ポートの開放などの労力も必要ありません
製品へは www.reaxys.com から簡単アクセス
(Internet Explorer 6以上、Firefox 1.5以上、Safari 2以上をサポート)
- 社内のどのPCからでもご自由にご利用でき、検索・分析が可能です



20



開発パートナー – 専門家から専門家のために

Reaxys は、リーディングカンパニーと大学を開発パートナーとして迎え、開発されました

富士通,
Chemistry Biology Pharmacy Information Center
Merchachem
ノヴァセップ
バース大学
ウィーン技術大学 など

上記を含む世界中の製薬企業、化学関連企業、大学、国立研究所の化学者や情報マネジャーの見解や要望をもとにReaxysの継続的な価値の向上を行っています



諮問機関 – 世界クラスの科学的専門知識

著名な科学者にReaxysの領域、対象、質、および、開発の継続的な価値向上のための助言をいただいています

Dr. James E. Audia, Eli Lilly, Indianapolis, IN, USA

Prof. A.G.M. Barrett, Imperial College, London, UK

Prof. Dr. Erick M. Carreira, ETH Zürich, Switzerland

Prof. Robert H. Grubbs, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA (Nobel Laureate)

Dr. Torsten Hoffmann, F. Hoffmann-La Roche Ltd., Basel, Switzerland

Prof. Dr. Horst Kunz, University of Mainz, Germany

Dr. Ge Li, WuXi PharmaTech, Shanghai, China

Dr. Graeme Robertson, Siena Biotech, Siena, Italy

Dr. K. Barry Sharpless, Scripps Research Institute, La Jolla, CA, USA (Nobel Laureate)

Prof. Barry M. Trost, University of Stanford, CA, USA

Prof. Henry N. C. Wong, Chinese University Hong Kong, China



- **Reaxys**は 合成研究の**生産性**を高めるための**情報とツール**をご提供します
- Beilstein Databaseなど信頼できる情報源からの**正確で有効性**の実証された**実験データ**をもとにしています
- ウェブベース製品なため、いつでも社内のどのPCからも簡単アクセス



時間とコストの効率が向上し、**研究開発の成功**に貢献



お問い合わせ

エルゼビア・ジャパン株式会社

TEL:03-5561-5034 担当:鈴木、海附(コーポレートチーム)

FAX:03-5561-5047

E mail: jp.corporate@elsevier.com

<http://www.info.reaxys.com>

