

Reaxys



Reaxys基本検索ガイド

2026.04

エルゼビア・ジャパン株式会社
磯辺 隆

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. Retrosynthesis（逆合成ルート検索）
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

コンテンツ概要

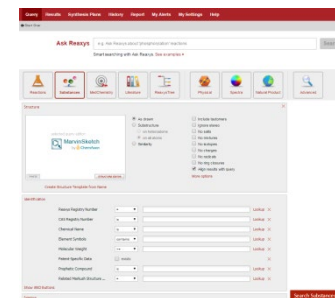
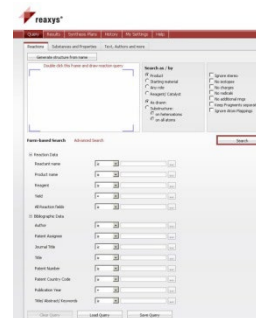
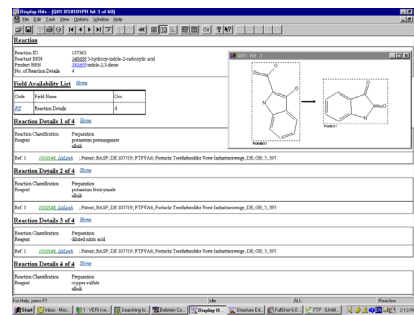
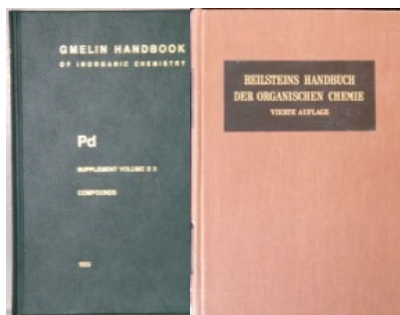
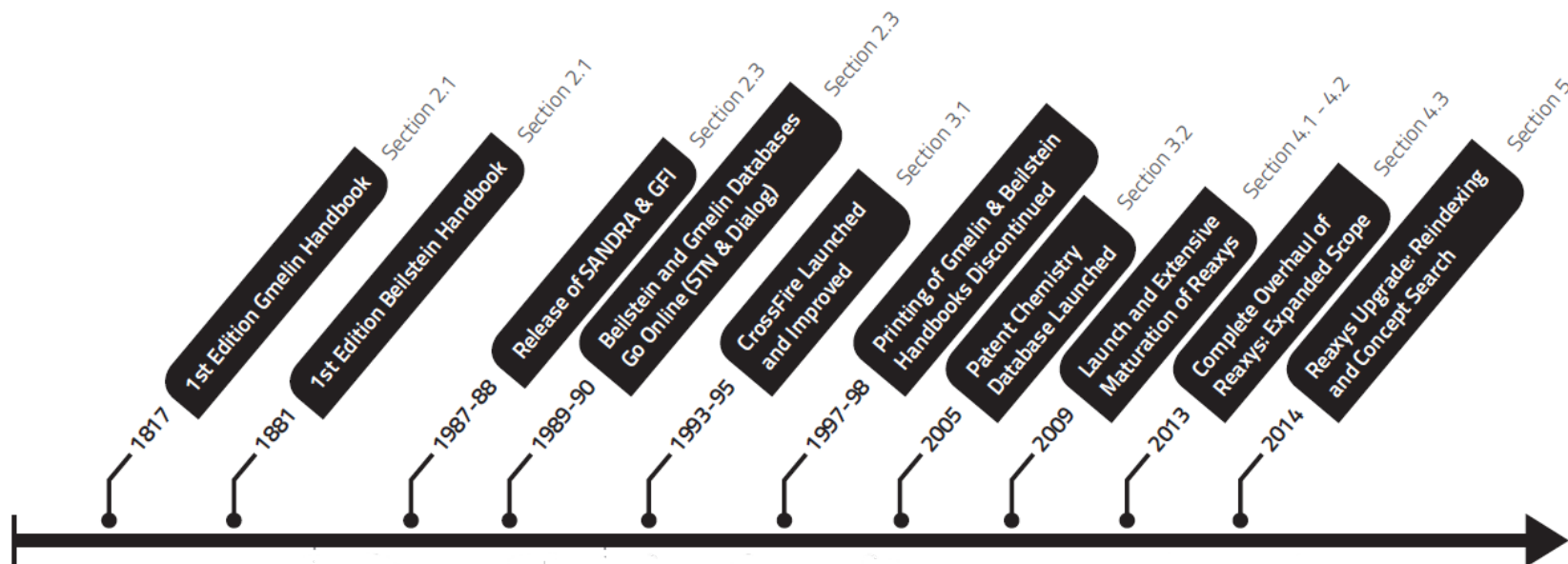
- ✓ 収録ジャーナル： 合成化学関連450誌
 - **+** 幅広い分野の約18,000誌を追加
- ✓ 化合物に関わる必須の特許情報
- ✓ **5億5千万件以上の実測物性値・同定情報**
- ✓ 約7,300万の反応情報（すべて異なる反応）
- ✓ 約3億5千300万の化合物
- ✓ 論文ガイドにとどまらず、原著参照する前に必要な反応条件や実測物性値を得られるファクトデータベース
- ✓ PubChemや試薬カタログに収録されている化合物データも同時検索可能
- ✓ Gmelin Handbook, Belistein Handbookを収載

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18,000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)



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～

3 Conditions Find Similar Reaction ID: 22871426

Conditions

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

Experimental Procedure

Yield 88%

Reference

Biancalana, Lorenzo; Pampaloni, Guido; Zacchini, Stefano; Marchetti, Fabio [Journal of Organometallic Chemistry, 2018, vol. 869, p. 201 - 211]

Full Text Cited 1 times Details Abstract

Na[aspCO₂].

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]·2H₂O [1]) were collected by filtration, washed with iPrOH (2 mL, -20 °C), Et₂O then dried in vacuum. The resulting colorless solid was stored under nitrogen. The procedure described is suitable for the removal of water of crystallization [1]. The resulting colorless solid was stored under nitrogen. The procedure described is suitable for the removal of water of crystallization [1]. The resulting colorless solid was stored under nitrogen. The procedure described is suitable for the removal of water of crystallization [1].

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

化合物の
実測物性値情報

化学反応情報

Physical Data - 565

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; Guilblin, 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

18,000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
 - 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

2015年～

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

* 上記データベースの辞書をインデキシングに使用

1 Reaxys独自の**タキソノミー**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

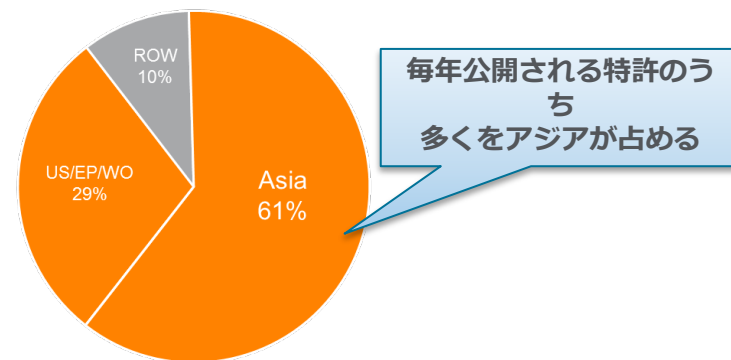
コンテンツ 特許



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
- アジアの特許(JP, CN, KR, TW)公報に基づく化合物・反応情報も収録
- 収録化合物情報の大幅な拡大
 - * IPC: C07 (有機化学)、A01N (殺菌剤、殺虫剤、除草剤)、A61K (医薬品、歯科用又は化粧用製剤)、C09B (染料) など
- テキストデータ、構造情報ともに105か国、170 IPCまで収録拡大(2000年まで遡及)

Patent Publications Per Year (rel.%)



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

3 Conditions Find Similar Reaction ID: 23669021

Conditions	Yield	Reference
Stage #1: (R)-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 Experimental Procedure	89.88%	No author EP1607388, 2005, A1 Location in patent: Page/Page column 4 Full Text Details Abstract

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 5% Pd/C (50% 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-

<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、マスマスペクトル
- * 約500項目、5億5000万件以上のデータ
- 市販情報
- 上記データを1ページに収録
- ブラウザのバックボタンの使用やページの行き来を可能な限り少なくした設計

(R)-phenyl-pyridin-2-yl-acetic acid methyl ester
C₁₄H₁₁NO₂ 227.263 177063 26483-64-7

Identification Physical Data - 6 Bioactivity - 1 Preparations - 10 >
Druglikeness Spectra - 6 Other Data - 2 Reactions - 20 >
Documents - 14 >

(R)-phenyl-pyridin-2-yl-acetic acid methyl ester

Identification

Druglikeness

Physical Data - 6

Melting Point - 3

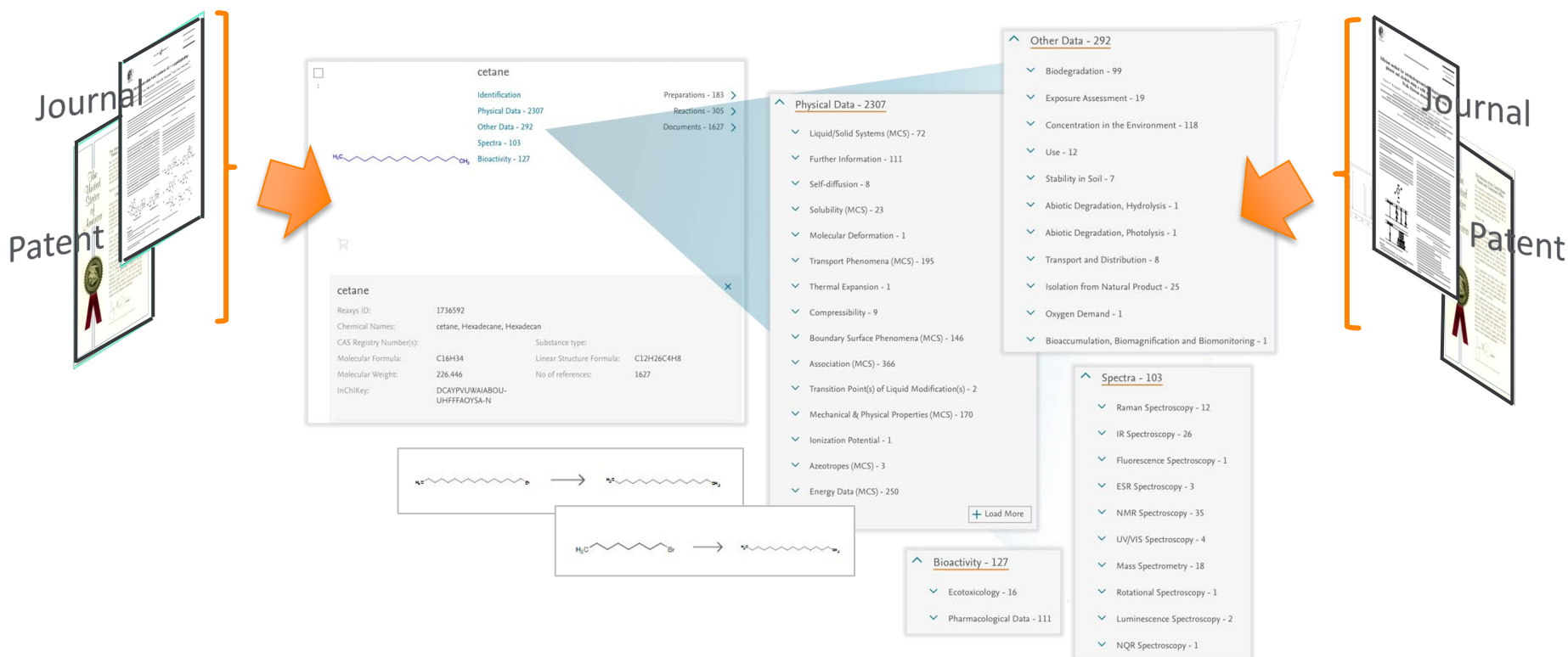
Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Reference
74 - 76	ethanol	Stengl, Milan; Chodkowski, Andrzej; Dawidowski, Maciej; El Harchi, Aziz; Hancock, Jules C.; Jarkovska, Dagmar; Konopelski, Piotr; (...) Wrobel, Martyna Zofia; Zhang, Yihong; <i>Bioorganic Chemistry</i> , 2020, vol. 98 Full Text Cited 1 times Details Abstract
76	aq. ethanol	Kloss; <i>Archiv der Pharmazie</i> , 1953, vol. 286, p. 433, 436 Full Text Details

Show/Hide columns

Feedback

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

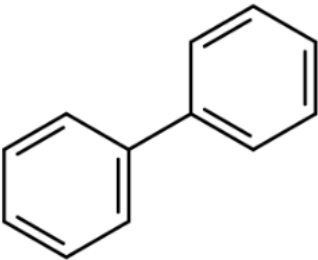
テキスト検索はキーワードだけではなく文中の言葉の前後関係を考慮した自然言語処理に対応

Search for ""melting point"" AND 

Search Reaxys [Learn how it works](#) [New](#) [Import](#)

"melting point" 

AND




On all atoms 

Search

4,4'-bis[N-(1-naphthyl)-N-phenylamino] bi
C₄₄H₃₂N₂ 588.751 8022378 [Retrie](#)

[Hit Data - 11](#) [Druglikenes](#)
[Identification](#) [Physical Data](#)

86     

Hit Data - 11

Melting Point - 11 hits out of 11

Melting Point, °C	Location	Reference
282	supporting information	Tsuchiya, Youichi; Nakamura, Nozomi; Kakumachi, Shunta; Kusuhashi, Keiko; Chan, Chin-Yiu; Adachi, Chihaya Chemical Communications , 2022, vol. 58, # 80, p. 11292 - 11295 Full Text Cited 20 times Details Abstract
279 - 283	Paragraph 0039	Current Patent Assignee: TOHOKU UNIVERSITY - JP2019/163243, 2019, A Full Text Details Abstract
278	Paragraph 0051	Current Patent Assignee: YAMAGATA UNIVERSITY - JP2018/127433, 2018, A Full Text Details Abstract

反応検索

Search Reaxys

① Learn how it works

New

 Import

esterification of benzoic acid

86

Reactions

Reaction Query :  as drawn

Condition : esterification

Create Alert Edit in Query Builder

19,366

Documents

Structure : as drawn

Titles, Abstracts, Keywords : "esterification",
"benzoic acid"

Create Alert Edit in Query Builder

477,139

Documents

Titles, Abstracts, Keywords : "esterification"

文献・特許検索：esterification

471,163

Documents

Structure :  as drawn

Titles, Abstracts, Keywords : "benzoic acid"

文献・特許検索：“benzoic acid”

[illegible]Preview Results [View Results](#)

Includes Summary AI ✨

Summary AI ↗

Esterification of Benzoic Acid: Summary

Overview

Key Methods & Catalysts

1. Acid Catalysts

- **Sulfuric Acid:** Commonly used for esterification with various alcohols (e.g., methanol, ethanol, octanol). The reaction is typically first-order with respect to benzoic acid and does not depend on alcohol concentration. Optimal conditions for methyl benzoate synthesis include a reaction temperature of 353.15 K, catalyst dosage of 15% (w/w) relative to benzoic acid, and a methanol:benzoic acid molar ratio of 3:1, achieving high conversion in 4 hours [1].
 - **Phosphotungstic Acid:** Used for esterification with n-octyl and isooctyl alcohols, also showing first-order kinetics with respect to benzoic acid [2].
 - **p-Toluenesulfonic Acid:** Catalyzes esterification with 1-butyl alcohol, with activation energy for the forward reaction at 58.40 kJ/mol. Under optimal conditions, conversion can reach 92% in 120 minutes [3].
- ### 2. Solid Acid Catalysts
- **Bis [sulfophenyl] phosphonate-formaldehyde resins:** Catalyzes esterification with primary alcohols [C1–C9] yielding 62–73% at 100°C; with secondary alcohols [C3–C9], yields are lower (11–47%) [4].
 - **SO4²⁻/Ti3AlC2 Ceramics:** Achieves 80.4% conversion and >99% selectivity for ethyl benzoate at 120°C in 34 hours [5].
 - **Titanium Dioxide/Graphene Oxide Nanocomposites:** Effective for esterification with dimethyl carbonate as a green methylating agent, outperforming parent catalysts [6].
- ### 3. Microwave-Assisted Esterification
- **Microwave Reactors:** Enable faster reactions and higher conversions at lower residence times. Both homogeneous [sulfuric acid, p-toluenesulfonic acid] and heterogeneous catalysts (e.g., Fe₂(SO₄)₃, sulfated ZrO₂) have been tested. Homogeneous catalysts are generally more effective [7], [8], [9].
- ### 4. Process Devices
- **Esterification Kettles:** Specialized reactors for producing methyl benzoate and benzyl benzoate, featuring efficient mixing and feeding mechanisms to optimize reaction conditions and prevent material accumulation [10], [11], [12], [13].
- ### 5. Enhancement by Base Addition
- **Imidazole Addition:** The rate of self-catalyzed esterification of benzoic acid and octan-1-ol can be enhanced by adding imidazole as a base [14].

Typical Reaction Conditions

Alcohol	Catalyst	Temp [°C/K]	Molar Ratio	Conversion/Yield	Notes	Reference
Methanol	Sulfuric acid	353.15 K	3:1	High (4 h)	Batch reactor	[1]
Ethanol	Sulfuric acid/Ion resin	High temp	-	High	Microwave tubular reactor	[8]

複雑な掛け合わせの検索にもドラッグ&ドロップで対応

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できる

Query Builder

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. At the top, there are tabs for 'Quick search', 'Query builder', 'Results', and 'Retrosynthesis'. Below these are buttons for 'Reactions', 'Targets', 'Substances', and 'Documents'. The 'Substances' button is highlighted with a dashed orange box. On the right side, there is a sidebar titled 'Search fields and forms' with a list of categories: 'Reaxys', 'Topics and Keywords', 'Identification', 'Physical Properties', and 'Spectra'. The 'Spectra' category is expanded, showing 'NMR Spectroscopy', 'IR Spectroscopy', 'Mass Spectrometry', and 'UV/VIS Spectroscopy'. The 'NMR Spectroscopy' item is highlighted with a dashed orange box. In the main area, there is a search bar with a dropdown menu showing 'AND' and a blue arrow. Below the search bar, there are several input fields for NMR Spectroscopy: 'Description (NMR Spectroscopy)', '13C', 'Coupling Nuclei', 'Solvents (NMR Spectroscopy)', 'Temperature (NMR Spectroscopy), °C', and 'Frequency (NMR Spectroscopy), MHz'. The 'AND' dropdown is highlighted with a dashed orange box. At the bottom, there are two callout boxes with orange arrows pointing to specific elements: one pointing to the 'AND' dropdown and another pointing to the 'NMR Spectroscopy' item in the sidebar.

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 クリックで検索画面に追加

ブラウザのバックボタンの使用や
ページの行き来を可能な限り
少なくした設計

Chemical reaction scheme showing the synthesis of a fluorinated pyridine derivative. The reaction involves a fluorinated pyridine-2-carboxylic acid derivative reacting with a fluorinated pyridine-2-amine derivative to form a fluorinated pyridine-2-amine derivative.

	Yield	Reference
minium hexafluoro-	56.4%	Yoshida, Yu; N Tanaka, Toshia Journal of Me Full Text ↗
ine With N-ethyl-N,N-	12.54 g	No author WO2013/1232 Location In Full Text ↗

[illegible][illegible]

関連する
反応情報

Reference一覽

文献・特許情報

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 Limit to > Exclude >

By Structure Yield Reagent/Catalyst Solvent Catalyst Classes active center 297 heterogeneous 17 organism / enzymes 4 View more

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

Limit To Exclude Export Syn-Plan

1

Chemical reaction scheme showing the conversion of a reactant to a product.

Catalyst Classes 15

Catalyst Classes	3,135
active center	297
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

Clear selected

Limit To > Exclude >

階層化されたフィルター項目

Reaxys検索方法

Reaxysへのアクセスとユーザー登録方法(1/2) :

初回ユーザー登録必須

1 Reaxysサイトにアクセス

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

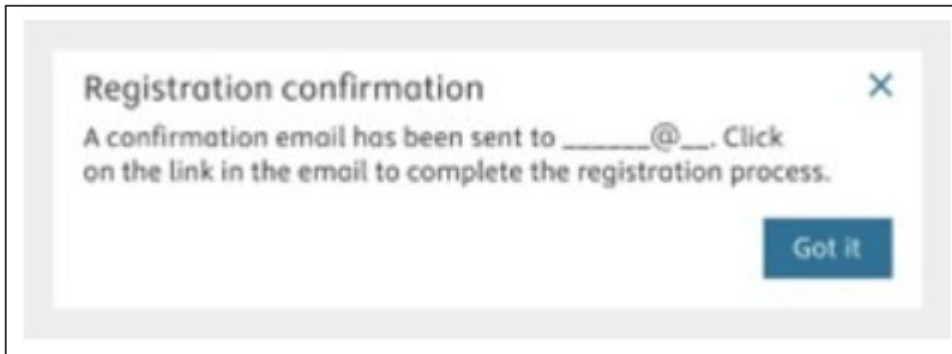
2 Not Registered?をクリック

3 名前、メールアドレス、パスワードを入力
メールアドレスがログインIDとなります。
予め伺っているお客様ご所属機関ドメインのメールアドレスのみ利用できます。
パスワードは8-200文字、大文字、小文字、数字か@#等の特殊文字をすべて含む必要があります

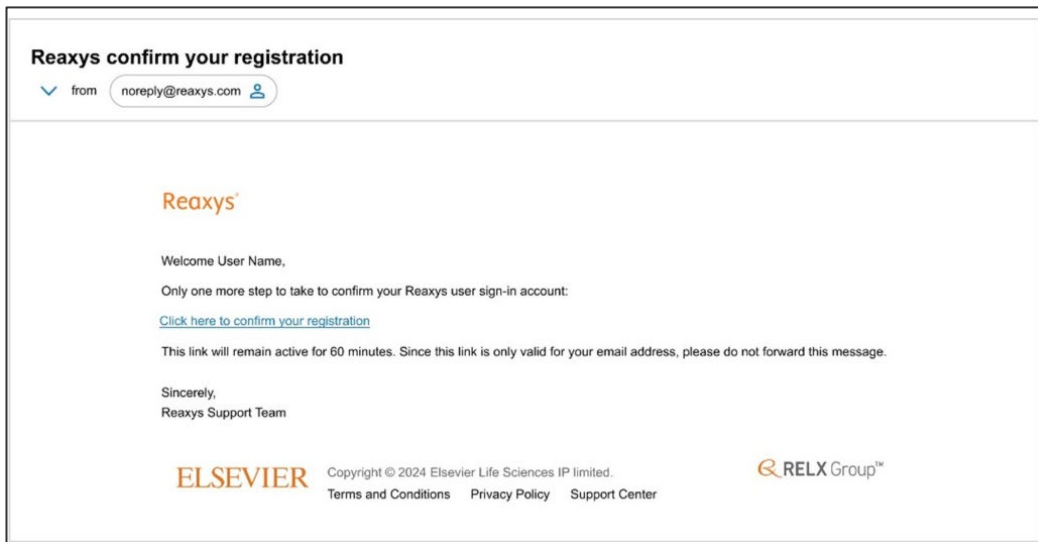
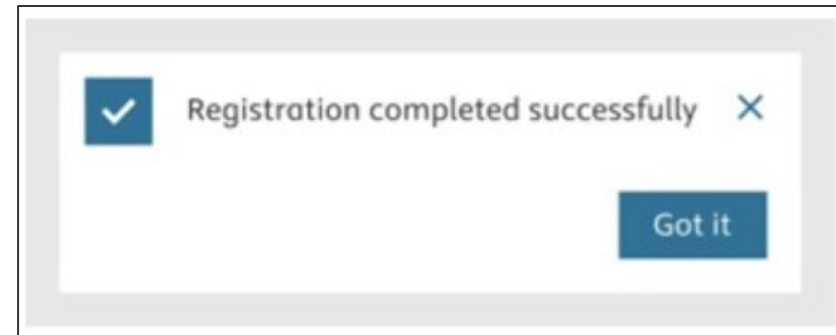
※Reaxysはユーザー登録必須となっています。

Reaxysへのアクセス

- ④ 入力したアドレス宛にconfirmationメールが届きますので、“Click here to confirm your registration”をクリックします。



- ⑤ クリック後に登録が完了します。



Reaxysの画面

Reaxys

Quick search Query builder Results Retrosynthesis

① ② ③ ④ ⑤ ⑥

Explore Chemistry with Reaxys

Discover substances, reactions, documents and bioactivity data with our powerful integrated databases ➔

Discover the *most relevant insights* with keywords, everyday language and AI summaries.

キーワード、フレーズ入力

Search Reaxys ① Learn how it works New Import

Documents, e.g. publications about quasicrystals

構造式・反応式入力 AND

Draw Structure / Reaction

キーワード、フレーズと構造式をともに入力し掛け合わせすることもできます。キーワード、フレーズ検索の場合は、単純なキーワード、フレーズ検索とともにAI検索が並行して実行されます。構造式によるAI検索は2026年中に実装予定です。

- 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 **Restisynthesis** : 逆合成的にルートを検索、予測（予測：オプション）
- 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

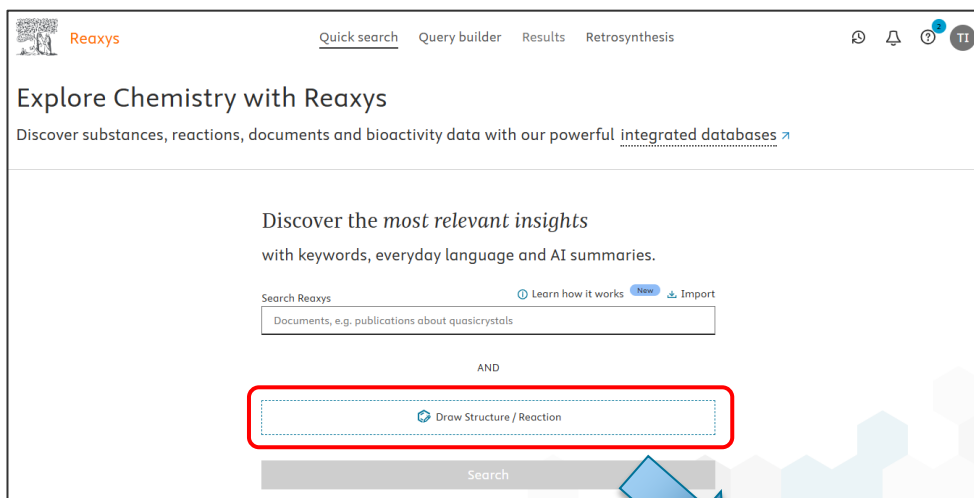
Quick Search : 反応検索

反応条件の設定①

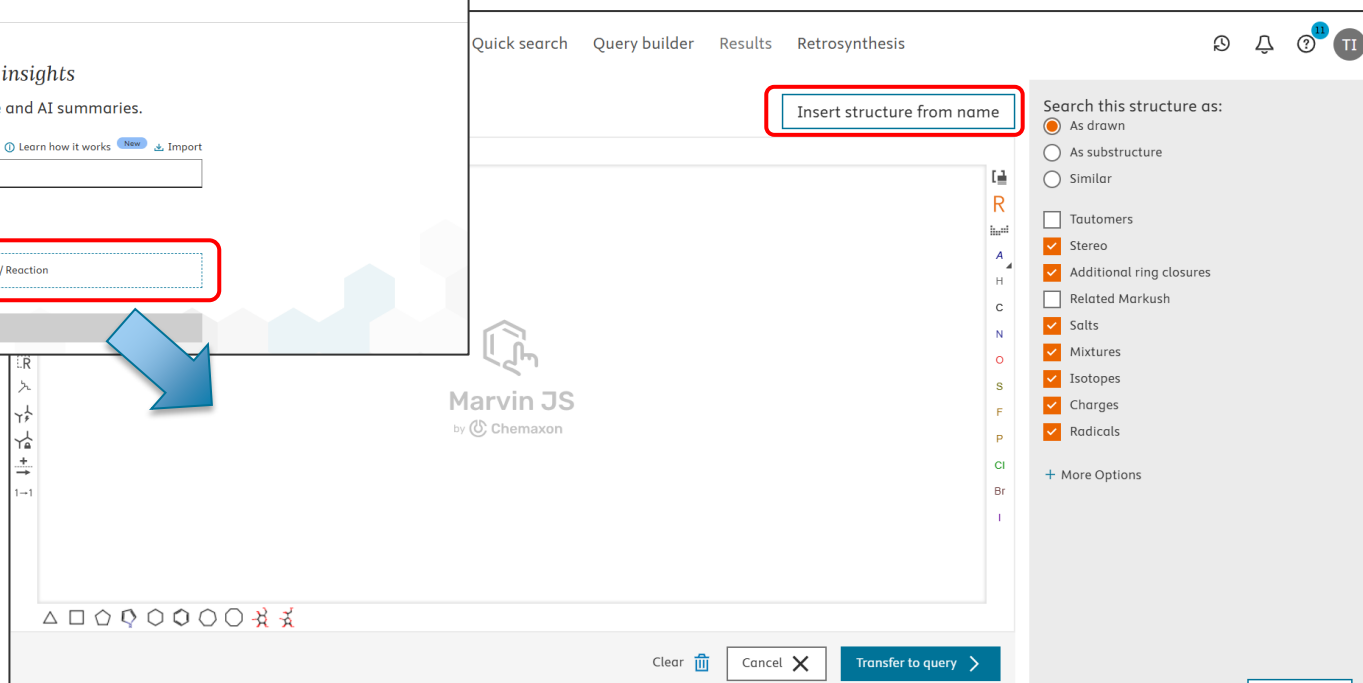
反応式、出発物質、生成物いずれからも反応が検索できます。
名称をから構造式を自動的に作画することも可能です。

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

Create structure template from name

is Enter a chemical name, CAS-RN, InChIKey or SMILES

is
starts with
ends with
contains

esomeprazole
16232 references
Load template >

esomeprazole
932 references
Load template >

Structure editor selected: ☒ MarvinJS ☐ ChemDrawJS

Quick search Query builder Results Ref

Chemical structure of esomeprazole is shown in the editor.

化合物が選択された状態でペーストされます。原子以外の部分をクリックすることで選択が解除され、編集できるようになります。

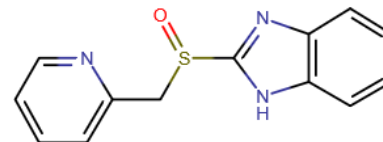
名称の入力画面：

“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。環上の置換基を下記のように全て削除し、骨格部分を検索に利用します。



反応条件の設定③

Reaxys

Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Structure editor selected: ☒ MarvinJS ☐ ChemDrawJS

Insert structure from name

Search this structure as:

- ☐ As drawn
- ☒ As substructure
 - ☒ On all atoms
 - ☐ On heteroatoms
- ☐ Similar

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

+ More Options

Clear

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。

Reaxys

Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Explore Chemistry with Reaxys

Discover substances, reactions, documents and bioactivity data with our powerful [integrated databases](#)

Search for

Search Reaxys [Learn how it works](#) [New](#) [Import](#)

Substance Names, e.g. Atenolol

AND

On all atoms

検索を行います。

構造式が検索画面に反映されます。「Search」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

The screenshot displays the Reaxys search results page for a query. It features a list of results categorized by type, each with a count, a category name, and a 'View Results' button. The 'Reactions' category is highlighted with a red box around its 'View Results' button.

Category	Count	Search Criteria	Buttons
Substances	5,071	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results, View Results
Targets	401	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results, View Results
Documents	27,096	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results, View Results
Reactions	3,384	Reaction Query : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results, View Results
Commercial Substances	912	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, related markush, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	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 試薬カタログへのリンク
- 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
- ⑥ エクスポート
- ⑦ 検索結果の並べ替え
デフォルトはReaxys Rankingによる並び
- ⑧ Top pageに戻る

The screenshot displays the Reaxys search results interface. At the top, the 'Reaxys' logo and navigation tabs (Query builder, Results, Retrosynthesis) are visible. A search bar at the top left shows 'Search > Preview results > 3,39 K Reactions'. The main header indicates '3,390 Reactions out of 675 Documents, containing 2,942 Substances, 377 Targets'. On the left, a 'Filters' sidebar is expanded, showing categories like 'By Structure', 'Yield', 'Reagent/Catalyst', 'Solvent', 'Catalyst Classes', 'Solvent Classes', 'Product Availability', 'Reactant Availability', 'Reaction Classes', 'Document Type', and 'Publication Year'. The main content area shows a chemical reaction scheme (1) and a table of results. The table has columns for 'Conditions', 'Yield', and 'Reference'. The first entry shows a reaction with sodium dihydrogenphosphate and a yield of 96%, with a reference to 'Angewandte Chemie - International Edition, 2016, vol. 55, # 25, p. 7101 - 7105'. The second entry shows a reaction with C₆H₅N₃O₃ and a yield of 96%, with a reference to 'Catalysis Today, 2017, vol. 279, p. 84 - 89'. Callouts 1 through 8 highlight specific features: 1 points to the reaction scheme, 2 points to the reagent list, 3 points to the experimental procedure link, 4 points to the search bar, 5 points to the filters sidebar, 6 points to the export button, 7 points to the sort dropdown menu, and 8 points to the top navigation bar.

検索結果の閲覧①

 **Reaxys**

Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis

Search > Preview results > 3.39 K Reactions

3,390 Reactions out of 675 Documents, containing 2,942 Substances, 377 Targets

Save search Create alert Edit in Query Builder

⑦ 検索結果の並べ替え

Sort by Reaxys Ranking

Reaxys Ranking

No of References

Reactant Availability

Product Availability

MW of product

Yield

Publication Year

Filters

0 selected Limit To Exclude Export

By Structure

Yield

Reagent/Catalyst

Solvent

Catalyst Classes

Solvent Classes

Product Availability

Reactant Availability

Reaction Classes

Document Type

Publication Year

Single step reactions only

Experimental procedure only

Limit to Exclude Clear



80 41

15 Conditions Find Similar Reaction ID: 28500901

Conditions	Yield	Reference
With sodium dihydrogenphosphate; 1,4-bis((4S,5S)-1,3-bis(3,5-di-tert-butylbenzyl)-4,5-diphenylimidazolidin-2-ylidene)piperazine-1,4-diium chloride; O ₄ W ^[2-] Ag ^[2+] ; dihydrogen peroxide at 5°C; for 48h; enantioselective reaction;	96%	Ye, Xinyi; Moeljadi, Adhitya Mangala Putra; Chin, Kek Foo; Hirao, Hajime; Zong, Lili; Tan, Choon-Hong Angewandte Chemie - International Edition , 2016, vol. 55, # 25, p. 7101 - 7105 Angew. Chem. , 2016, vol. 128, p. 7217 - 7221 Full Text Cited 63 times Details Abstract
With C ₆₄ H ₆₄ N ₄ O ₆ Ti ₂ ; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction;	96%	Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. Catalysis Today , 2017, vol. 279, p. 84 - 89 Full Text Cited 18 times Details Abstract

Experimental Procedure

2.2. Standard procedure for small-scale catalytic sulfoxidation

General procedure: Sulfide (OMS or LPS, 100 mol) and the Ti-salen 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 30% aqueous hydrogen peroxide (0.105 mmol of H₂O₂) 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

③ Experimental 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。

3,217 Reactions out of 603 Documents, containing 2,824 Substances

Limit To Exclude Export Show Conditions Reaxys Ranking

1

43 25

6 Conditions Find Similar Reaction ID: 28096702

2

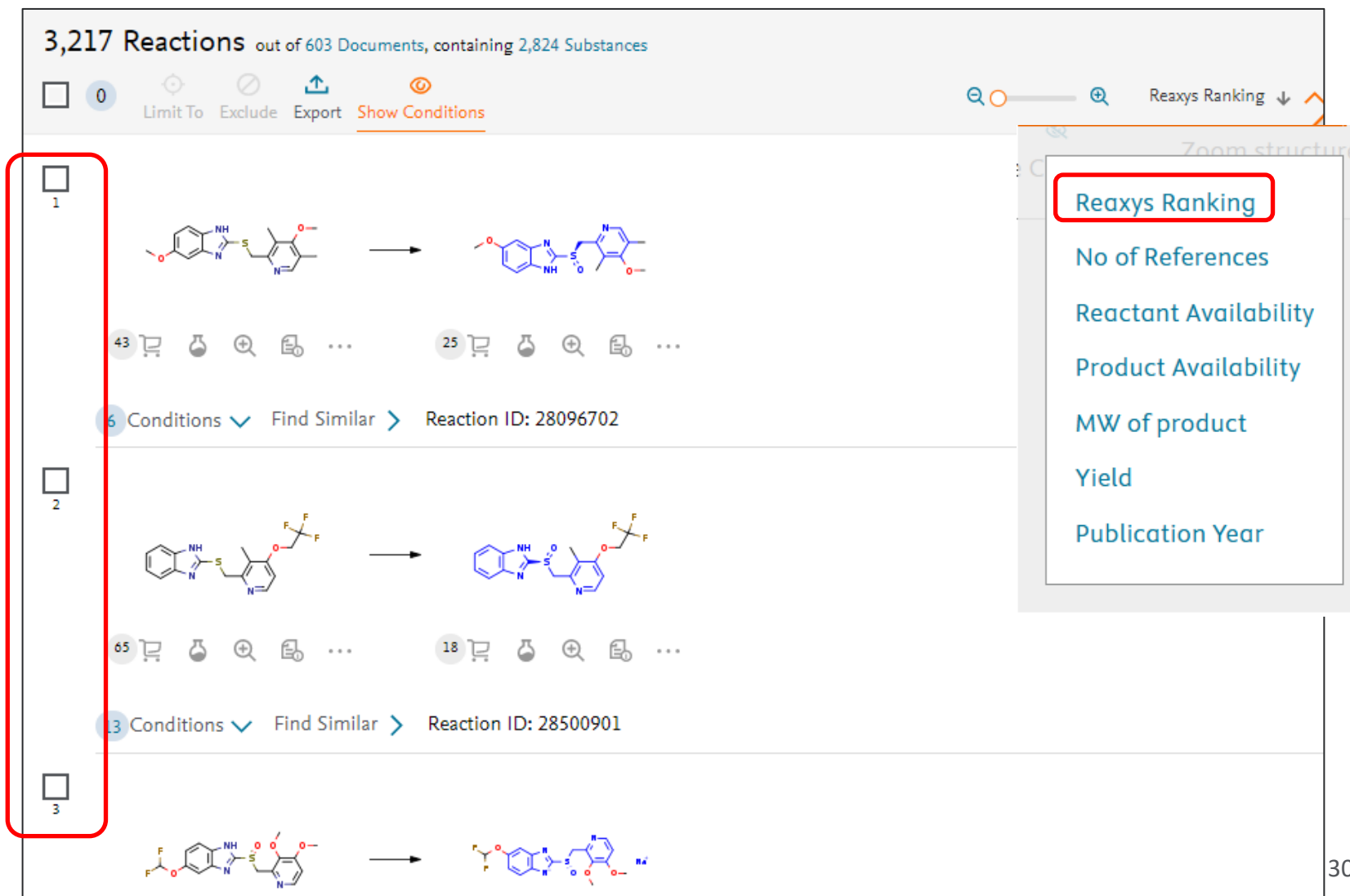
65 18

13 Conditions Find Similar Reaction ID: 28500901

3

Reaxys Ranking

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



検索結果の閲覧②

結果の閲覧①の続き：

レコード1の詳細を閲覧します。

Reaxys Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Search > Preview results > 3.39 K Reactions

3,390 Reactions out of 675 Documents, containing 2,942 Substances, 377 Targets

Save search Create alert Edit in Query Builder

Filters

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

0 selected Limit To Exclude Export

Sort by Reaxys Ranking

Hide Conditions Zoom structures

1

Chemical reaction scheme showing the synthesis of a complex molecule.

80 41

15 Conditions Find Similar Reaction ID: 28500901

Conditions	Yield	Reference
With sodium dihydrogenphosphate; 1,4-bis((4S,5S)-1,3-bis(3,5-di-tert-butylbenzyl)-4,5-diphenylimidazolidin-2-ylidene)piperazine-1,4-dilium chloride; O ₂ W ⁽²⁾ Ag ⁽²⁾ ; dihydrogen peroxide at 5°C; for 48h; enantioselective reaction;	96%	Ye, Xinyi; Moeljadi, Adhitya Mangala Putra; Chin, Kek Fao; Hirao, Hajime; Zong, Lili; Tan, Choon-Hong Angewandte Chemie - International Edition , 2016, vol. 55, # 25, p. 7101 - 7105 Angew. Chem. , 2016, vol. 128, p. 7217 - 7221

Limit to Exclude Clear

Full Text Cited 63 times Details Abstract

Full Text：フルテキストリンク（次ページ）

Cited 63 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

Abstract:Abstract

検索結果の閲覧③

REAXYS
Reaxys Literature Service

The document

Author	Talsi
Journal	Catalysis Today
Volume	279
Publication Year	2017
Issue	
Pages	
CODEN	CATTE
ISSN	0920-5861
DOI	10.1016/j.cattod.2016.03.006

has 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。
リンクリゾルバが設定されている場合、機関のロゴ等がFull Textリンクの代わりに表示されます。



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^{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④

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_2O_2 and O_2	Bryliakov, K.P.	2017	Chemical Reviews 117(17), pp. 11406-11459	39
Open Access				

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

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 enantioselective sulfoxidation.

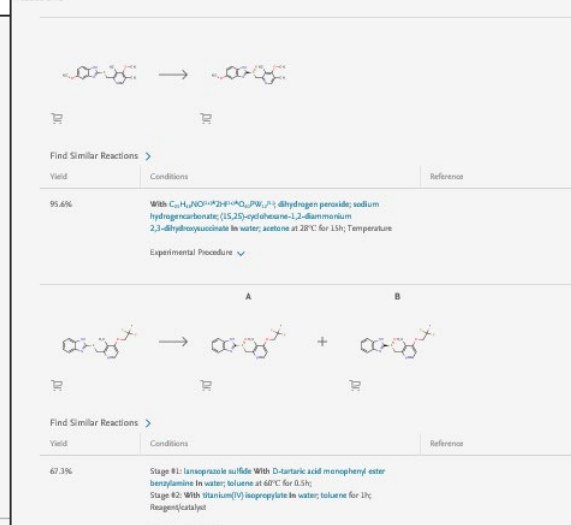
Index terms

Author keyword: Asymmetric oxidation, Esomeprazole, Mechanism, Salan, Titanium
Compendex Terms: Asymmetric oxidation, Electron-acceptor, Enantioselective catalysts, Esomeprazole, Isoinversion, Temperature dependence
Compendex Terms: Catalysis, Enantioselectivity, Hydrogen Peroxides, Temperature distribution, Titanium
Reaxys Index Terms: Kagan-Modena oxidation, Oxidation, catalyst, electron acceptor, enantiomer excess, enantioselective reaction, proton pump inhibitor, reaction kinetics, reaction separation method

Substances



Reactions



検索結果の閲覧⑤

☐ 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

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。

Retrosynthesis

合成ルート作成①

合成計画ツール (Retrosynthesis) :

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
- 既知の合成ルートの表示と予測それぞれ行うことができます。

検索例：エソメプラゾール(Esomeprazole)のReacant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

Find Preparations
1 stepのみ合成ルートを表示

Create synthesis plans
合成ルートの検索・予測

Reaxys interface showing a reaction scheme for the synthesis of Esomeprazole. The reaction involves the conversion of a precursor (a substituted benzimidazole) into Esomeprazole using sodium dihydrogenphosphate, 1,4-bis(4,5-dimethyl-3,5-di-tert-butylbenzyl)-4,5-diphenylimidazolidin-2-ylidene)piperazine-1,4-dium chloride, O₂W⁽²⁺⁾Ag⁽²⁺⁾, and dihydrogen peroxide at 5°C for 48h. The reaction is enantioselective.

Conditions: With sodium dihydrogenphosphate 1.4-bis(4,5-dimethyl-3,5-di-tert-butylbenzyl)-4,5-diphenylimidazolidin-2-ylidene)piperazine-1,4-dium chloride; O₂W⁽²⁺⁾Ag⁽²⁺⁾; dihydrogen peroxide at 5°C; for 48h; enantioselective reaction;

Yield: 96%

Reference: Ye, Xinyi; Moeljadi, Adhitya Mangala Putra; Chin, Kek Fao; Hiroo, Hajime; Zong, Lili; Tan, Choon-Hong. *Angewandte Chemie - International Edition*, 2016, vol. 55, # 25, p. 7101 - 7105. *Angew. Chem.*, 2016, vol. 128, p. 7217 - 7221. Full Text > Cited 63 times > Details > Abstract >

合成ルート作成②

Create synthesis plans

「Create plans」を選択するとオプション設定画面が表示されます。

Predicted :
予測合成ルート作成

Published:
既知情報からの合成ルート作成

Parameters

☐ Predicted ⓘ

20 full routes (up to)
3 identical reaction steps per project (up to)
3 identical building blocks per project (up to)
10 min processing time
STD SIAL LN EM U2 U5 T1 RSM3 RSM4 RSM5 building blocks

Edit

☐ Published ⓘ

5 full routes (up to)
5 branches per step (up to)
5 steps per route (up to)
Stop at commercial building blocks
50% yield per step (assumed, if not published)

Edit

Powered by Pending.AI

検索条件詳細設定(次ページ)

☐ Always show screen before creating plan

Create Plans >

Reaxys®

Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts

Takashi Isobe

0 selected Delete

No.	Date/Time	Project name	No. of routes
270597	16 Mar 2022 04:37	Project #270597	

Draw new structure

Predicted 1

Published 4

View >

Predicted In progress

Published 4

View >

Predicted in progressと表示され予測が開始されます。予測時間は初期設定では15分であり設定時間内で合成ルートを予測します。

合成ルートの作成②: Editをクリックしてパラメータを調整できます

Reaxysのデータセットを用いてneural networkにより合成ルートが予測されます。詳細は以下文献に記載されています。

Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI

Marwin H. S. Segler^{1,2}, Mike Preuss³ & Mark P. Waller⁴

doi:10.1038/nature25978

Parameters

☒ Predicted *i*

Length and depth of routes *i*

☒ Full routes: 20 *v*

☐ Last step only

Diversity of routes *i*

Allow

3 *v* identical reaction steps per project

3 *v* identical building blocks per project

Processing time *i*

☒ Standard ☐ Extended

Select Building Block Libraries *i*

☒ Standard Lab Chemicals (STD)

☒ Commercial Substances in 10 days (RCS10D)

☒ Commercial Substances >10 days (RCS>10D)

☐ Commercial Substances <\$10/g (RCS\$10)

☒ Published *i*

Length & depth of synthesis plans *i*

☒ Full routes: 5 *v*

☐ Last step only

Branches per step: 5 *v*

Max. number of steps: 5 *v*

Stop searching if building block is commercially available ☒ Yes ☐ No

Assumed yield for reactions without a given yield

0% 100%

Full routes:予測/表示ステップの指定
Last step only: 1 stepのみ予測

Branches per steps:ステップ毎許容building block数

Max. number of steps:最大表示ステップ数

Stop searching if building block is commercially available:市販されているbuilding blockまで逆合成検索した時点で検索・表示するか否か

Assumed yield for reactions without a given yield: 検索対応となる収率の閾値設定

Diversity of routes

identical reaction per project:予測スキーム全体中に採用できる同一反応数

identical building blocks per project:予測スキーム全体中に採用できる同一ビルディングブロック数

予測時間の設定: 時間内に予測できた反応が表示されます。

Standard: 15分

Extended: 30分、Standardで予測結果が出なかった際などに使用します。

Commercial Substances in 10 days 10日以内出荷のbuilding block

Commercial Substances > 10days 出荷まで10日以上building block

Commercial Substances <\$10/g gあたり10\$以下のbuilding block

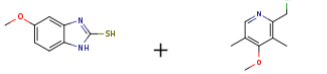
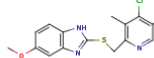
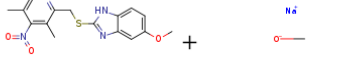
合成ルート作成③：既知 (Published)および予測 (Predicted) ルートの概要表示

Reaxys® Quick search Query builder Results **Retrosynthesis** History Alerts Takashi Isobe

Project #1164513 0 selected Limit to Delete

My Synthesis Projects Draw

Building blocks to target

	Building block (reactant)	No. of steps	Route topology	Score	Get to routes
☐ Published Route #1	 83 56	1 step	 スキームプレビュー Preview		Tree view >
☐ Published Route #2	 9	1 step	 Preview		Tree view >
☐ Published Route #3	 83 88	1 step	 Preview		Tree view >
☐ Published Route #4	 6 36	1 step	 Preview		Tree view >
☐ Predicted Route #5		1 step	 Preview	0.95	Tree view >

予測結果/既知情報

Published Route #1

Published Route #2

Published Route #3

Published Route #4

Predicted Route #5

スキームプレビュー

詳細表示

Tree view >

Tree view >

Tree view >

Tree view >

Tree view >

④ 詳細表示: Tree View

Reaxys® PDF, Word形式でExport

Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts

Takashi Isobe

Published Route #1

Export Legend

Rotate Fit view Copy route

他の合成ルートを表示

反応を追加

95.1 %

Published route #1

Step 1

Conditions	Yield	Reference
With potassium iodide; sodium hydroxide in ethanol at 15 - 55 °C; for 0.5h; Inert atmosphere; Large scale; Experimental Procedure	95.1%	Current Patent Assignee: ZHEJIANG KANGDE PHARMACEUTICAL; FENGSHI SHANGHAI BIO MEDICINE - CN109912569, 2019, A Location in patent: Paragraph 0072-0075 Full Text Details
In methanol for 4h; Heating;	2.1 g	Rane; Pathak; Kaushik; Prasad Rao; Kumar, Ashok [Synthetic Communications, 2002, vol. 32, # 8, p. 1211 - 1217] Full Text Cited 8 times Details

- > Show Conditions/Reaxys Examples
- > Add reaction step (one step only)
- > Delete prior step(s)

実験条件の表示（画面右上のHide Conditionや  により非表示の場合（予測反応の場合、予測の根拠となっている既知反応を表示します）

条件違いの反応を追加

反応を削除

⑤反応の追加

Reaxys® Quick search Query builder Results **Retrosynthesis** History Alerts

Takashi Isobe

Hide conditions

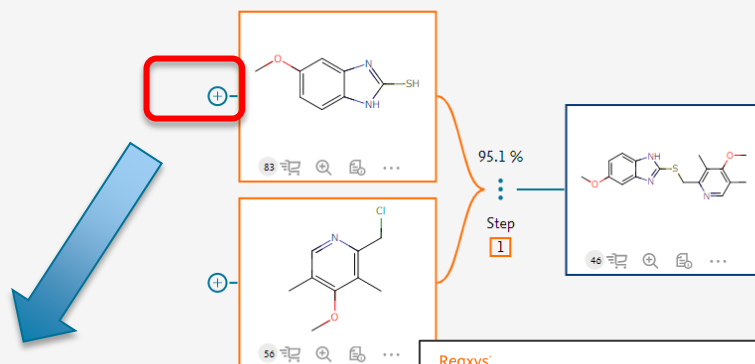
Export Legend

Rotate Fit view Copy route

Published route #1

Step 1

Conditions	Yield	Reference
With potassium iodide; sodium hydroxide In ethanol at 15 - 55°C; for 0.5h; Inert atmosphere; Large scale; Experimental Procedure	95.1%	Current Patent Assignee: ZHEJIANG KANGDE PHARMACEUTICAL; FENGSHI SHANGHAI BIO MEDICINE - CN109912569, 2019, A Location in patent: Paragraph 0072-0075 Full Text Details
In methanol for 4h; Heating;	2.1 g	Rane; Pathak; Kaushik; Prasad Rao; Kumar, Ashok [Synthetic Communications, 2002, vol. 32, # 8, p. 1211 - 1217] Full Text Cited 8 times Details



1 selected

Add >

Published (10) Predicted (10)

Reaxys® Quick search Query builder Results **Retrosynthesis** History Alerts

Takashi Isobe

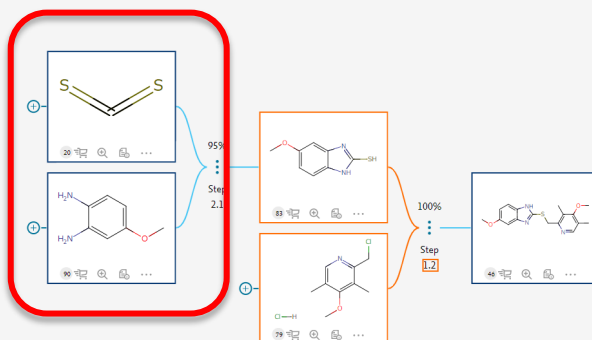
Hide conditions

Export Legend

Rotate Fit view Copy route

Customized route #9

Conditions	Yield	Reference
With tetrabutylammonium bromide; edate disodium; sodium hydroxide In dichloromethane; water pH=10; pH-value; Experimental Procedure	100%	Current Patent Assignee: CHENGDU TONGDE PHARMACEUTICAL - CN108409714, 2018, A Location in patent: Paragraph 0049-0054; 0063-0067; 0076-0080; 0089-0093 Full Text Details
With sodium hydroxide at 20°C; Experimental Procedure	98%	Current Patent Assignee: HUZHOU ANYIYUO BIOMEDICAL TECH - CN110407809, 2019, A Location in patent: Paragraph 0032-0034; 0036-0038; 0040-0042; 0044-0046 Full Text Details
With sodium hydroxide In methanol; water Reflux; Experimental Procedure	95.2%	Current Patent Assignee: HENAN NORMAL UNIVERSITY - CN106632256, 2017, A Location in patent: Paragraph 0008 Full Text Details
With sodium hydroxide In ethanol; acetone at 40 - 45°C; for 3h; Large scale; Experimental Procedure	94%	Current Patent Assignee: BRIGHTGENE BIO MEDICAL TECHNOLOGY CO LTD - CN107400117, 2017, A Location in patent: Paragraph 0058-0060 Full Text Details
With sodium hydroxide In ethanol; acetone at 20 - 45°C; for 3h; Large scale; Experimental Procedure	94%	Current Patent Assignee: BRIGHTGENE BIO MEDICAL TECHNOLOGY CO LTD - CN107400118, 2017, A Location in patent: Paragraph 0046; 0047; 0048 Full Text Details



[Indian Journal of Chemistry - Section B Organic and Medicinal Chemistry, 2006, vol. 45, # 7, p. 1756 - 1758] Full Text Cited 11 times Details Abstract

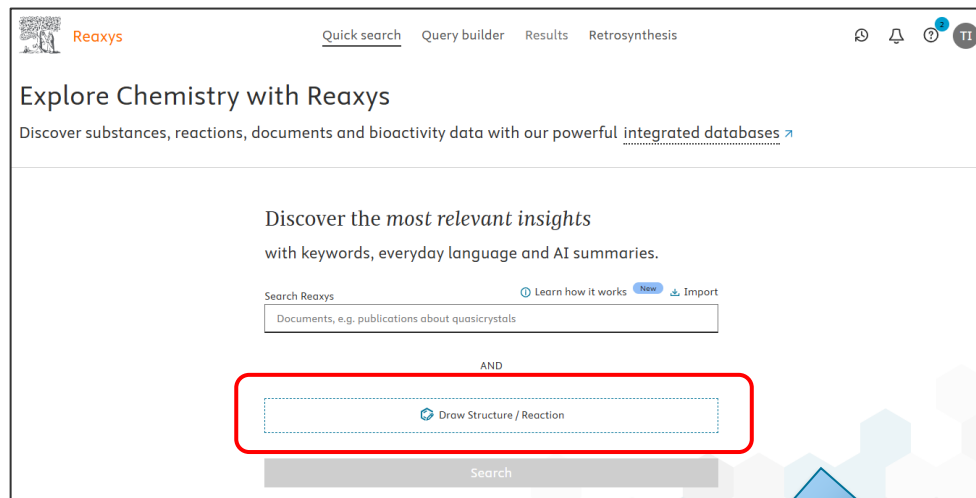
With potassium hydroxide In 63%

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



Reaxys

Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Explore Chemistry with Reaxys

Discover substances, reactions, documents and bioactivity data with our powerful integrated databases

Discover the *most relevant insights* with keywords, everyday language and AI summaries.

Search Reaxys [Learn how it works](#) [New](#) [Import](#)

Documents, e.g. publications about quasicrystals

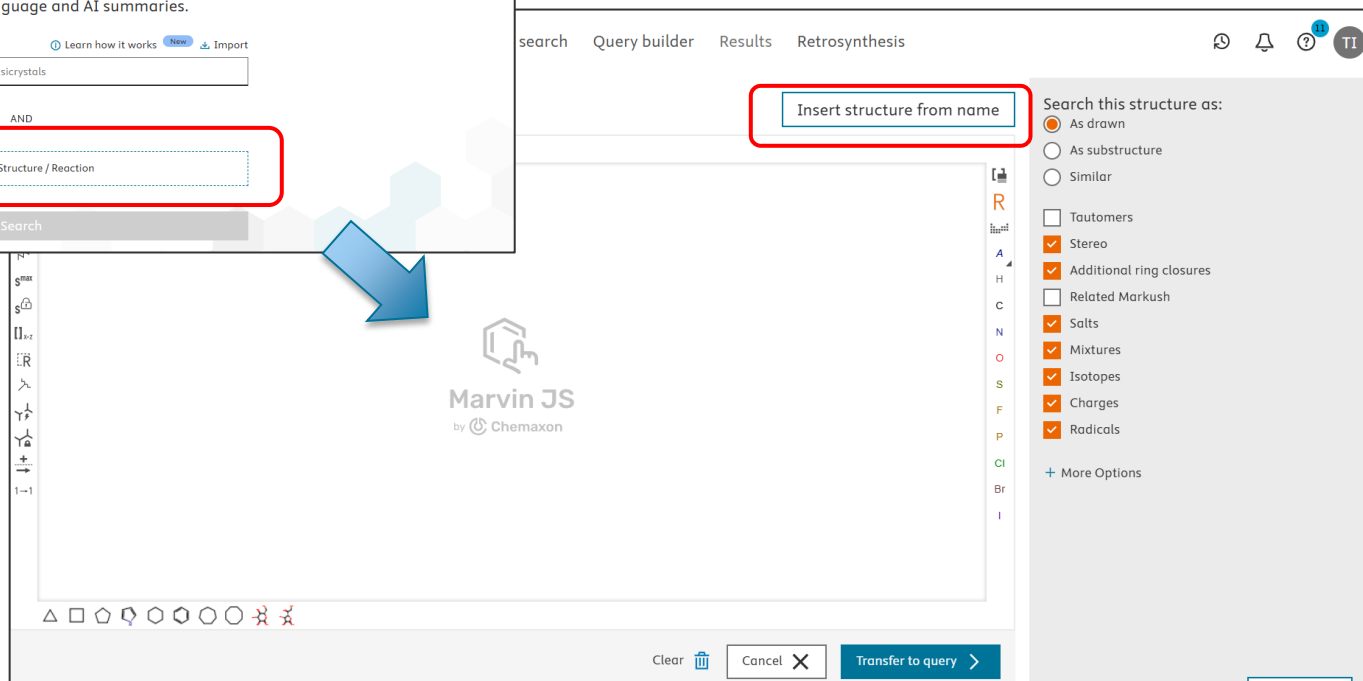
AND

Draw Structure / Reaction

Search

「Draw」をクリック

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



search Query builder Results Retrosynthesis

Insert structure from name

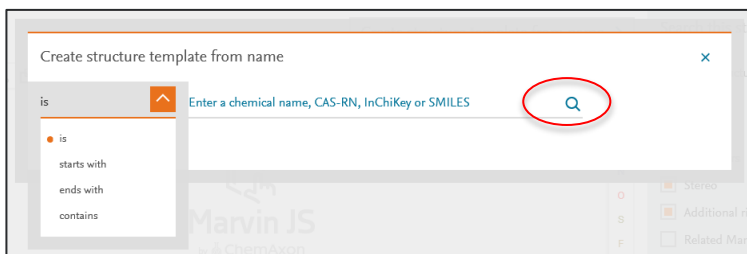
Search this structure as:

- ☒ As drawn
- ☐ As substructure
- ☐ Similar
- ☐ Tautomers
- ☒ Stereo
- ☒ Additional ring closures
- ☐ Related Markush
- ☒ Salts
- ☒ Mixtures
- ☒ Isotopes
- ☒ Charges
- ☒ Radicals
- [+ More Options](#)

Marvin JS
by Chemaxon

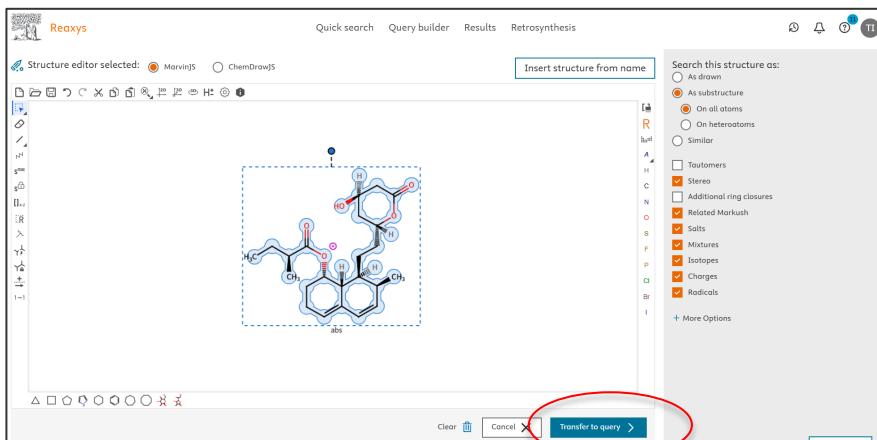
Clear [Cancel](#) [Transfer to query](#)

検索条件の設定②



名称の入力画面：

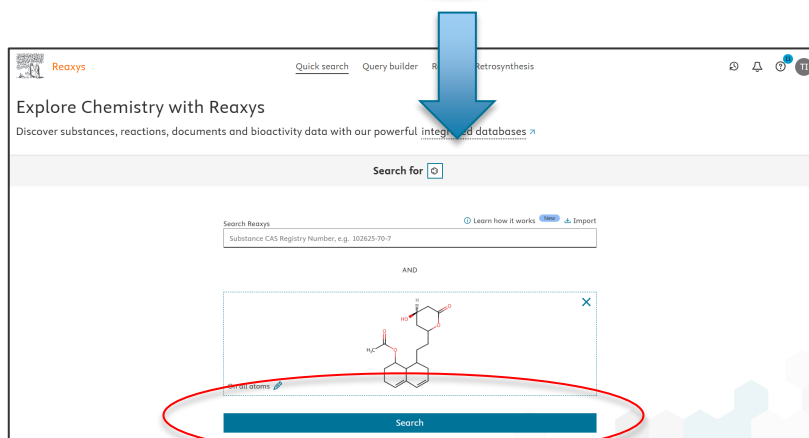
“Mevastatin”と入力し、 虫メガネアイコンをクリックします。



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。



「Search」ボタンをクリックして検索を行います。

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 screenshot shows a list of search results for 'Structure' with the following items:

- Substances**: 4,246 results. Includes buttons for 'Preview Results' and 'View Results' (circled in red).
- Targets**: 441 results. Includes buttons for 'Preview Results' and 'View Results'.
- Documents**: 26,035 results. Includes buttons for 'Preview Results' and 'View Results'.
- Reactions**: 1,111 results. Includes buttons for 'Preview Results' and 'View Results'.
- Commercial Substances**: 385 results. Includes buttons for 'Preview Results' (circled in red) and '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

The 'Preview Results' section shows the top 3 results for 'Structure':

- simvastatin**: C₂₅H₄₀O₅, 418,574, 4768037, 79902-63-9. Includes links for Identification, Bioactivity - 1,533, Physical Data - 68, Other Data - 2,629, Preparations - 49, Reactions - 148, and Documents - 5,155.
- lovastatin**: C₂₄H₃₆O₅, 404,547, 4720754, 75330-75-5. Includes links for Identification, Bioactivity - 1,039, Physical Data - 228, Other Data - 2,568, Preparations - 27, Reactions - 254, and Documents - 2,390.
- mevastatin**: C₂₄H₃₆O₅, 390,52, 3630717, 73573-88-3. Includes links for Identification, Bioactivity - 140, Physical Data - 17, Other Data - 1,000, Preparations - 115, Reactions - 154, and 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。

- 検索結果は表のような形式で表示される
- 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、別ページへの遷移を極力抑えている
- 検索結果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(検索範囲)変更

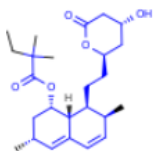
⑥ 各化合物の合成法、物性値などの情報へのリンク

⑦ Grid表示への切り替え

⑧ top page画面に戻る

The screenshot shows the Reaxys search results interface. At the top, the Reaxys logo (8) and navigation links are visible. Below the search bar (1), the database tabs (5) show 'Reaxys - 3,866', 'Commercial Substances - 243', and 'PubChem - 2,008'. The main results area displays '3,866 Substances out of 24,357 Documents, containing 1,486 Reactions, 435 Targets'. On the left, a filter sidebar (2) is expanded. The results are sorted by 'No of References' (4). A zoom structures icon (3) is present. The table lists compounds like 'simvastatin' and 'lovastatin' with various data points. A grid view icon (7) is also visible. The detailed data table (6) shows columns for Identification, Bioactivity, Spectra, and Preparations. The bottom of the page has a 'Limit to' and 'Exclude' section.

検索結果の閲覧①



①

simvastatin

②

C₂₅H₃₈O₅ 418.574 4768037  Retrieve CAS RN

Identification

Bioactivity (All)

Spectra - 135

Druglikeness

Physical Data - 106

Other Data - 3,552

③

④ Preparations - 52 >

⑤ Reactions - 217 >

⑦ Targets - 226 >

⑥ Documents - 17,383 >

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 CAS RN表示ボタン
- 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
- ⑦ 標的数

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。

Physical Data - 87		
Melting Point - 10		
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 Mirandas; 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

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 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 並べ替え: 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

	文献タイトル	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)	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		CDCl3		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

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、逆合成ルートを検討することができます。

また、「Preparations」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。

1,515 Substances out of 19,757 Documents, containing 1,557 Reactions

0 selected Limit To Exclude Export Preparations

1

simvastatin

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

Identification Physical Data - 93 Bioactivity - 2,351

Druglikeness Spectra - 95 Other Data - 3,252

Create synthesis Plan

2

20754 75330-75-5

Physical Data - 252 Bioactivity - 1,379

Spectra - 51 Other Data - 3,213

89

Parameters

Published ⓘ

Create upto 5 full routes.

Branches per step: 5

Max. number of steps: 5

Stop searching if building block is commercially available ☒ Yes ☐ No

Assumed yield for reactions without a given yield

0% 100%

☒ Always show screen before creating plan Create Plans >

検索結果の閲覧⑥

Bioactivity Visualizationをクリックすると化合物と標的との活性ヒートマップが表示されます。

Reaxys® Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis History Alerts

Takashi Isobe

4,152 Substances out of 24,717 Documents, containing 1,606 Reactions, 403 Targets

0 selected Limit To Exclude Export Preparations

Sort by No of References ↓

Grid **Bioactivity Visualization**

By Structure Measurement pX Targets Parameters Substance Classes Molecular Weight

simvastatin
C₂₅H₃₈O₅ 418.574 4768037 Retrieve CAS RN

Identification Bioactivity (All) Spectra - 130
Druglikeness Physical Data - 102 Other Data - 3,543

Preparations - 49
Reactions - 196
Targets - 200
Documents - 17,167



検索結果の閲覧⑥

pX値：標準化された活性値

独自指標「pX値」を用いたデータの標準化

様々な生物活性データを標準化することで、文献間での活性値の比較を可能にする独自の指標「pX」を採用しています。文献情報から得られる各種アッセイデータは、その濃度単位がまちまちであり、統合的に評価することは非常に難しいのが現状です。pX値を使用することにより、様々なアッセイデータを直観的に把握・相互比較することが可能となります。

1) 単位の統一

パラメーターの単位をモル濃度に統一（化合物の分子量や生体重、組織重、体積から換算）

2-a) 値の逆対数が親和性に比例するパラメーター

pIC_{50} , pEC_{50} , pED_{50} , pID_{50} , pLC_{50} , pLD_{50} , pKi , pKd , pKb , pD_2 , pD'_2 , pA_2

⇒ $pX = \text{parameter value}$

2-b) 値が親和性に比例するパラメーター

IC_{50} , EC_{50} , ED_{50} , ID_{50} , LC_{50} , LD_{50} , Ki , Kd , Kb , Ka , Ke

⇒ $pX = -\log_{10} (\text{parameter value})$

2-c) %inhibition

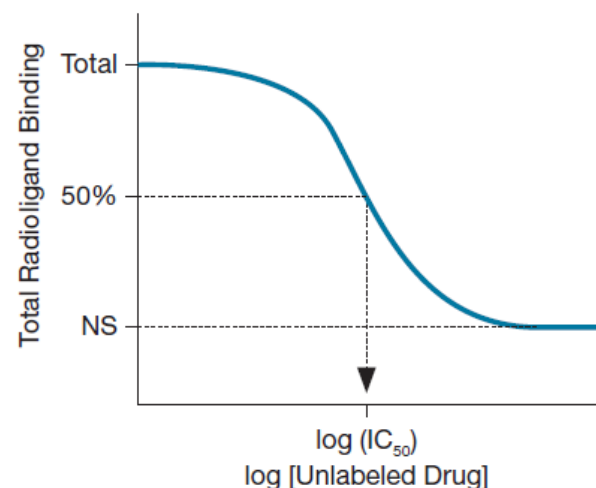
① 化合物の濃度 (C) がわからない場合（濃度が範囲として得られる場合も含む）

⇒ pXの算出なし

② 化合物の濃度 (C) がわかっている場合

⇒ %inhibition > 25 のとき $pX = -\log_{10} (IC_{50})$

⇒ %inhibition < 25 のとき $pX = 1$



※化合物の濃度を大きくすれば阻害率が100%に達すると仮定する

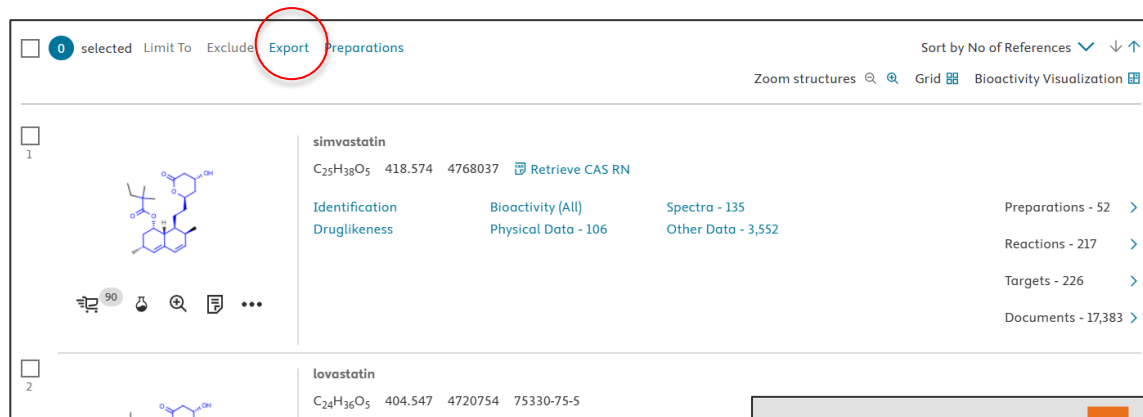
※濃度と阻害率の関係はヒル係数1の曲線に従うと仮定する

$$IC_{50} = \frac{100 \times [C]}{\% \text{ inhibition}} - [C]$$

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。

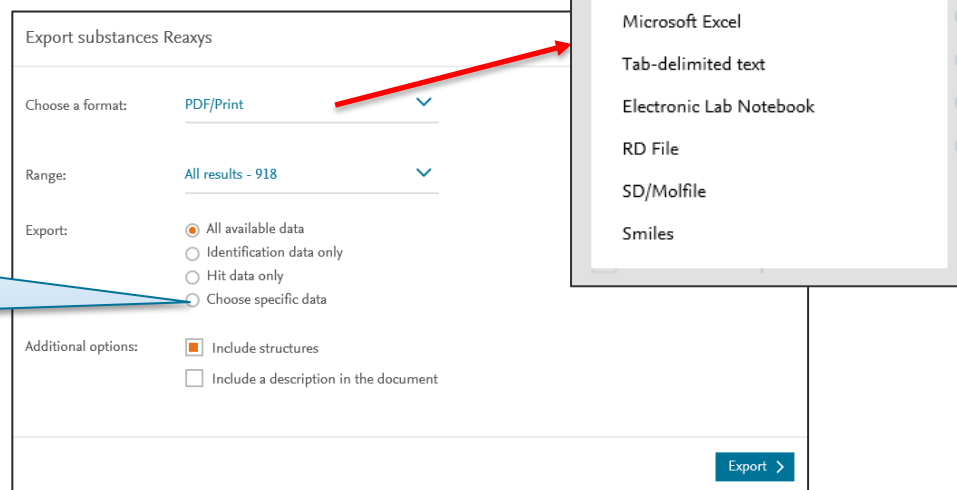


検索結果画面で、「Export」をクリックします。

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



Export substances Reaxys

Choose a format: PDF/Print

Range: All results - 918

Export:

- ☒ All available data
- ☐ Identification data only
- ☐ Hit data only
- ☐ Choose specific data

Additional options:

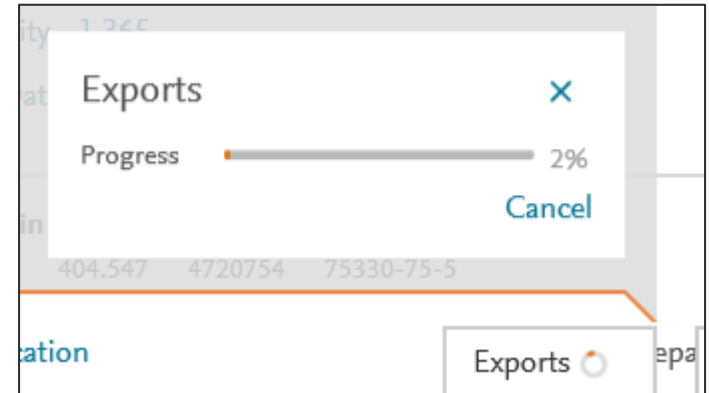
- ☒ Include structures
- ☐ Include a description in the document

Export >

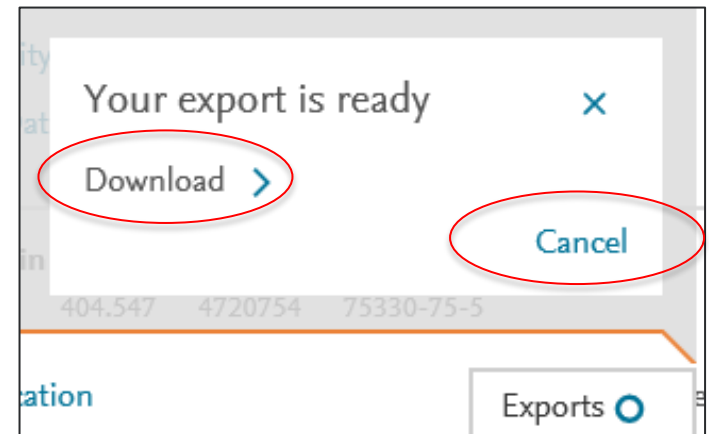
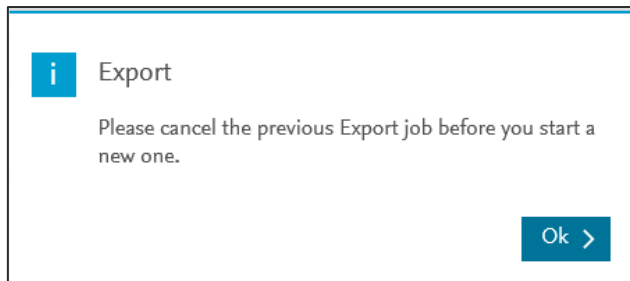
検索結果のExport②

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

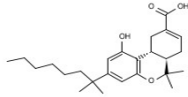
Additional options: ☐ Include structures ☐ Include abstracts ☐ Include reactions ☐ Include Front page information ☐ Include a description in the document

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 Court
	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。

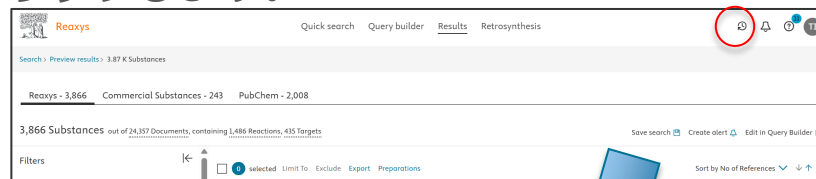
Tab-delimited Text形式の場合、構造データはSmiles形式のみとなります。

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）

画面最上部の時計アイコンをクリックします。



保存したいレコードの列「Save」アイコンを近づけると、メニューが表示されます。

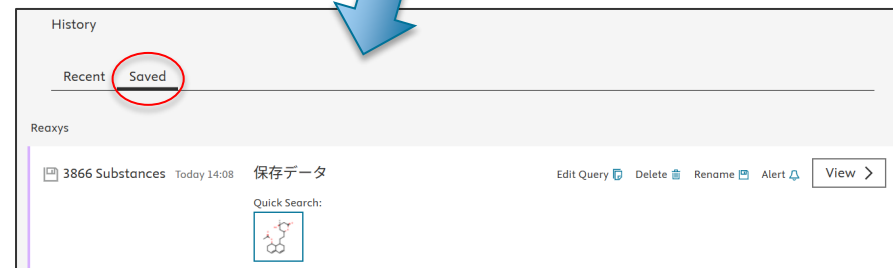
「Save」のアイコンをクリックします。

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におけるAlertボタンをクリックします。

The screenshot shows the Reaxys web interface. At the top, there is a navigation bar with the Reaxys logo and links for 'Quick search', 'Query builder', 'Results', and 'Retrosynthesis'. On the right side of the navigation bar, there are icons for a clock, a bell, a question mark, and a user profile. The main content area is titled 'History' and has two tabs: 'Recent' and 'Saved'. Under the 'Recent' tab, there are two search results listed. The first result is '3866 Substances' with a timestamp of 'Today 14:08'. It includes a chemical structure icon and a 'Quick Search:' label. To the right of this result are buttons for 'Edit Query', 'Save', 'Alert' (which is circled in red), and 'View >'. The second result is '3390 Reactions' with a timestamp of 'Today 12:50'. It also includes a chemical structure icon and a 'Quick Search:' label. To the right of this result are buttons for 'Edit Query', 'Save', 'Alert', and 'View >'.

Alertの設定・管理

Alertの設定：

Create Alert

Query: Quick Search:

Alert name: alerttest

Send alerts to: l.hobbs@elsevier.com
Add another email

Frequency: Every week on: Thursday

Send alert: Deactivate
Every month
Every two weeks
After each update

ADVANCED ALERT
From databases: ☒ Reaxys
Include in email: ☒ Title and bibliographic information
☒ Abstract
☐ Full abstract
☐ Partial abstract
☒ Hit details (keywords, substances, reactions or targets)

Email alerts will produce an email with a maximum of 99 records.

> Cancel > Create

- 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：

Reaxys

Quick search Query builder Results Retrosynthesis

History

Recent Saved

Reaxys

3866 Substances Today 14:08 Quick Search:

Edit Query Save Alert View >

3390 Reactions Today 12:50 Quick Search:

Edit Query Save Alert View >

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

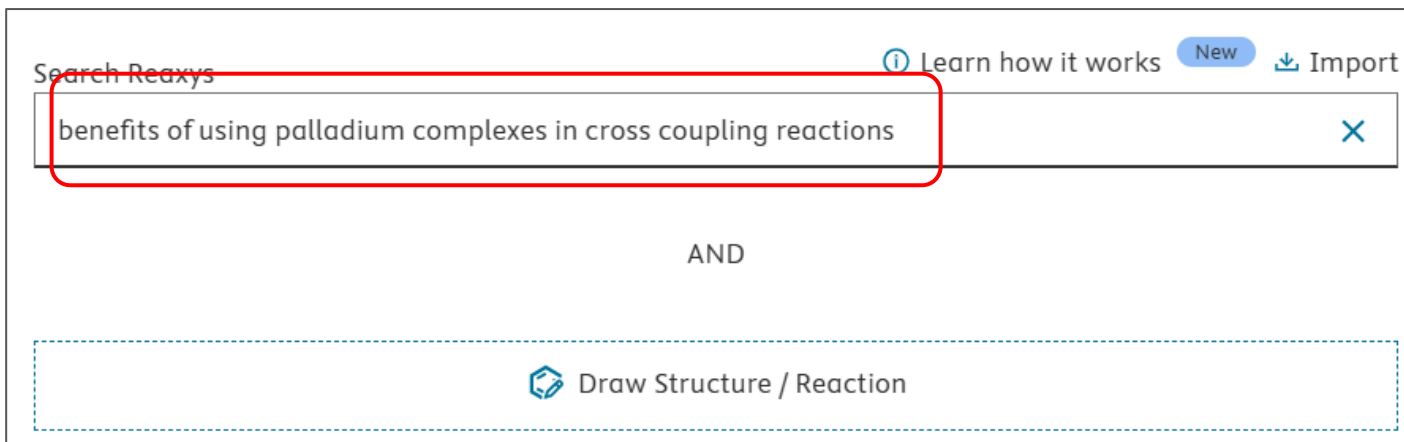
AIテキスト検索

Reaxysは文章、構造あるいは文章と構造のかけ合わせによる検索を行うことができます。

文章による検索の場合、AI機能により、検索文章を数値ベクトルに変換、Reaxysデータベース内の数値ベクトル化された文献、特許と比較し類似性の高い文章を抽出しています。文脈同士を比較するため、単語が一致しない文献・特許もヒットする可能性があるのが特徴です。

また、ヒットした文献・特許のうち、最大で上位20件の要約が表示されます。

検索例：クロスカップリング反応において、パラジウム触媒を用いるメリットについてのAI検索



The screenshot displays the Reaxys search interface. At the top left, the text "Search Reaxys" is visible. To its right are links for "Learn how it works" (with an information icon), a "New" button, and an "Import" button (with a download icon). Below these, a search input field contains the text "benefits of using palladium complexes in cross coupling reactions". A red rectangle highlights this input field. To the right of the input field is a blue "X" icon for clearing the search. Below the search field, the word "AND" is centered. At the bottom, there is a dashed blue box containing a drawing icon and the text "Draw Structure / Reaction".

AIテキスト検索

③

Filters

Publication Year

Document Type

Authors of Scientific Documents

Current Affiliation

Inventors of Patents

Current Patent Assignee

Patent Office

Journal Title

☐ journal of organometallic chemistry 9

☐ tetrahedron letters 5

☐ journal of organic chemistry 4

☐ applied organometallic chemistry 4

☐ advanced synthesis and catalysis 4

☐ tetrahedron 3

☐ synthesis 3

Filter by value

View more

Substance Classes

Reaction Classes

Summary AI

Benefits of Using Palladium Complexes in Cross-Coupling Reactions

Key Advantages

- High Efficiency and Selectivity
 - Palladium complexes, including those with N-heterocyclic carbene (NHC) ligands, exhibit high catalytic activity and coupling reactions, enabling efficient synthesis of complex molecules under mild conditions (1), (2), (3), (4).
- Broad Substrate Scope
 - These catalysts can couple a wide range of substrates, including aryl bromides, aryl chlorides, and various nucleophilic groups and challenging substrates (1), (4), (5).
- Operational Simplicity and Mild Conditions
 - Palladium complexes often operate under mild reaction conditions, reducing the need for harsh reagents or elevated temperatures for sensitive substrates and sustainable chemistry (6), (7), (2).
- Reusability and Sustainability
 - Many palladium catalysts, especially those immobilized on magnetic or polymer supports, are easily recoverable and reusable, lowering costs (6), (8), (9), (10), (11).
- Stability
 - Palladium complexes, particularly those with robust ligands (e.g., NHCs, Schiff bases, pyrazoles), show excellent thermal and chemical stability, making them practical for industrial and laboratory use (2), (12), (13).
- Economic and Environmental Benefits
 - Some palladium complexes are derived from waste or designed for easy recovery, contributing to greener and more sustainable processes.

Summary Table

Benefit	Supporting Contexts
High catalytic efficiency	(1), (2), (3)
Broad substrate scope	(1), (4), (5)

Reference 1

palladium/nucleophilic carbene catalysts for cross-coupling reactions

Platinum Metals Review, 2002, vol. 46, # 2, p. 50 - 64

Hillier, Anna C.; Nolan, Steven P.

Cited 67 times

Document Details Full Text

Abstract

palladium complexes bearing N-heterocyclic nucleophilic carbenes can function as efficient and convenient mediators of C-C and C-N cross-coupling reactions. These phosphine-free systems are highly effective in coupling reactions of aryl bromides and aryl chlorides with a variety of coupling partners. Some applications of these palladium complexes in a range of coupling reactions are described here and catalysts, conditions and results are presented.

Was this relevant to the question?

②

- ① ヒットした文献・特許のうち最大上位20件を用いた要約
- ② 要約対象文献・特許の詳細
- ③ フィルター

Filters

Publication Year

Document Type

Authors of Scientific Documents

Current Affiliation

Inventors of Patents

Current Patent Assignee

Patent Office

Journal Title

☐ journal of organometallic chemistry 9

☐ tetrahedron letters 5

☐ journal of organic chemistry 4

☐ applied organometallic chemistry 4

☐ advanced synthesis and catalysis 4

1

Palladium/nucleophilic carbene catalysts for cross-coupling reactions

In summary 67 citations

Hillier, Anna C.; Nolan, Steven P.

Platinum Metals Review, 2002, vol. 46, # 2, p. 50 - 64

Abstract Index Terms Full Text

Abstract hit: {...palladium complexes bearing N-heterocyclic nucleophilic carbenes can function as efficient and convenient...}

Index Terms Hit: {...Engineering uncontrolled terms: Cross-coupling reactions, Nucleophilic catalysts...}

2

Why You Really Should Consider Using Palladium-Catalyzed Cross-Coupling of Silanols and Silanolates

153 citations

Denmark, Scott E.; Ambrosi, Andrea

Organic Process Research and Development, 2015, vol. 19, # 8, p. 982 - 994, 10.1021/acs.oprd.5b00201

Abstract Index Terms Full Text

Abstract hit: {...the added benefits of low cost, low toxicity, and high chemical stability. However,...}

Index Terms Hit: {...chemical stability, cross-coupling reaction, total synthesis...}

反応検索

Search Reaxys

① Learn how it works

New



esterification of benzoic acid



86

Reactions

Reaction Query :  as drawn

Condition : esterification

Create Alert Edit in Query Builder

19,366

Documents

Structure :  as drawn

Titles, Abstracts, Keywords : "esterification",
"benzoic acid"

Create Alert Edit in Query Builder

477,139

Documents

Titles, Abstracts, Keywords : "esterification"

文献・特許検索：esterification

471,163

Documents

Structure : as drawn

Titles, Abstracts, Keywords : "benzoic acid"

文献・特許検索：“benzoic acid”

Search: **Reaction** Previous results: 32 Reactions

86 Reactions out of 436 Documents, containing 375 Substances, 96 Targets

Find search history

Filters

- By Structure
- Yield
- Reagent/Catalyst
- Solvent
- Catalyst Classes
- Solvent Classes
- Product Availability
- Reaction Availability
- Reagent Classes
- Document Type
- Publication Year

1 selected Limit To Exclude Export

1

1 Hits 126 Conditions Find Similar Reaction ID: 737704

Conditions	Yield	Reference
With <i>N</i> -methylmorpholine, 4-(6,6-dimethyl-1,3,5-trioxo-2,4-dihydrophenyl)phosphonium chloride at 20°C, for 18h, EsterKits	76%	Karimkhan, Humayun; Kowshik, Chitra; Horita, Jun; Torres, Raji; Swamid, Rumiati; Tan, Shih-Hong; <i>Tetrahedron</i> , 2009, vol. 65, # 44, p. 12123-12170 Full Text ? Cited 444 times ? Details ? Abstract ?
With <i>tert</i> -butyl isocyanide for 12h, EsterKits , heating	75%	Isomura, Naoki; Shikama, Naoyuki; <i>Bulletin of the Chemical Society of Japan</i> , 1994, vol. 67, # 1, p. 403-408 Full Text ? Cited 54 times ? Details ? Abstract ?

1

1 Hits 12 Conditions Find Similar Reaction ID: 8577229

Conditions	Yield	Reference
With <i>tert</i> -butyl isocyanide, toluene- <i>n</i> -hexane acid for 1800 min, EsterKits , microwave irradiation (80 W)	95%	Rui, Jingqian; Yuan, Ruiqian; Min, Caoli; Li, Xue; Tan, Guozuo; Yu, Xianbo; <i>Organic Preparations and Procedures International</i> , 2008, vol. 32, # 1, p. 187-190

<http://www.reaxos.com/#/>

Preview Results [View Results](#)

AI検索：検索フレーズをベクトルに変換、
Reaxysコンテンツ内文献・特許ベクトル
と比較
ヒットした文献・特許のうち最大20件
を要約・表示

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 Results Retrosynthesis

Import Save Options Reset Query Delete Query

Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

There are no queries yet.

To build a new query, select fields and/or forms from the right panel by clicking on them or by dragging and dropping them here.

Learn More

Search fields and forms

Fields Forms History

Reaxys

PubChem

Commercial Substances

Structure

Advanced

Search in: Reactions Targets Substances Documents

Feedback

- 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、種々の検索用項目が用意されており、複数条件を設定した検索を行うことができます。

「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 shows the Reaxys Query Builder interface. The main area displays a message: "There are no queries yet. To build a new query, select fields and/or forms from the right panel by clicking on them or by dragging and dropping them here. Learn More". The right-hand panel is open, showing a search bar with the text "natu" and a list of search fields and forms: "Target Nature", "Isolated from Natural Source", and "Natural Products". The "Natural Products" option is highlighted with a red box.

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

検索履歴との
掛け合わせも可能

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface with a query built. The query is: "Bibliography is e.g. Smith, Peter or Smith, P. AND Journal Title is Journal Title AND Publication Year is Publication Year AND Titles, Abstracts & Keywords is Titles, Abstracts & Keywords". The right-hand panel is open, showing a search bar with the text "natu" and a list of search fields and forms: "Bibliography", "Natural Products", "Physical Data", "Reactions", "Spectra", "Substances", and "Patents". The "Bibliography" option is highlighted with a red box.

Completing all fields in the form is not necessary. Please ensure that at least one field is filled to start your search.

The screenshot shows the "Find search fields and forms" panel. The "History" tab is selected, showing a list of recent searches: "950 Substances" and "158 Substances". The "History" tab is highlighted with a red box.

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', 'Results', and 'Retrosynthesis'. The 'Query builder' tab is active, and the 'Molecular Formula' sub-tab is selected. The main search area shows a condition: 'Molecular Formula is C30*'. The right sidebar is open, showing a list of search fields under the 'Identification' section. The 'Molecular Weight' field is highlighted with a red circle. The bottom of the interface has a 'Search in:' section with buttons for 'Reactions', 'Targets', 'Substances', and 'Documents'.

- 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（原子組成）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' (selected), 'Results', and 'Retrosynthesis'. Below these are icons for 'Import', 'Save Options', 'Reset Query', and 'Delete Query'. The main query area shows a search for 'Molecular Formula' with the criteria 'is' and 'C30*'. A second criterion, 'Isolated from Natural Source', is added below, with the 'Find Any' checkbox checked. On the right sidebar, a search filter 'natu' is entered, and the 'Isolated from Natural Source' filter is selected. The bottom of the interface features a 'Search in:' section with buttons for 'Reactions', 'Targets', 'Substances', and 'Documents'.

- ③ 検索フィールド「Isolation from Natural Source」を検索します。“natu”と入力すると、「Isolation from Natural Source」が表示されます。

「Natural Products」は「Isolation from Natural Source」と構造式の掛け合わせプリセットフォームです。

- ③ 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

Reaxys

Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Import Save Options Reset Query Delete Query

Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Molecular Formula is C30*

AND

Isolated from Natural Source ☒ Find Any Show fields (Isolated from Natural Source)

AND

Substance Properties & Comments is antimicrobi*

Search in: Reactions Targets Substances Documents

Close Panel

sub

Reaxys

Substance Properties & Comments

Sublimation

Enthalpy of Sublimation

Substance Action on Target

Substance Effect

Substance RN

Substance Route of Adm.

Substance Dosing Regimen

- ⑤ Search fields and formsにsubを入力、Substance Properties & Commentsをクリック
- 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。

※ Substance Properties & Comments: 化合物に紐づく物性・スペクトルあるいはそのほかの記述に対して検索を行うフィールド。上記の場合は変化形を含めた抗菌活性という記載を持つ化合物を検索

Query Builderでの検索1-④

Reaxys

Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis

arch > 112 Substances

Reaxys - 112 Commercial Substances - 0 PubChem - 0

112 Substances out of 34,626 Documents, containing 13,993 Reactions, 962 Targets

Save search Create alert Edit in Query Builder

0 selected Limit To Exclude Export Preparations

Sort by No of References

Zoom structures Grid Bioactivity Visualization

By Structure

Measurement pX

Targets

Parameters

Substance Classes

Molecular Weight

Number of Fragments

Availability

Available Data

Document Type

Publication Year

Current Patent Assignee

Leap

1

Oleanolic acid
C₃₀H₄₈O₃ 456.709 2228570 508-02-1

Hit Data - 1,021
Identification
Druglikeness

Bioactivity (All)
Physical Data - 474
Spectra - 487

Other Data - 1,403

Preparations - 181
Reactions - 3,720
Targets - 315
Documents - 10,949

Hit Data - 1021

Isolated from Natural Source - 1021 hits out of 1021

Isolated from Natural Source	Location	Reference
fruits of Tetrapleura tetraptera (Schumm. & Thonn.) Taub.; purchased from local market in Dachang		Chi, G. Fru; Khan, Serab; Kuete, Jennifer R. N.; Matieta, Valaire Y.; Ombito, Japheth O.; Tamfu, Alfred. N.; Megaptche, Junior F.; Kuete, Victor; Shaheen, Farzana <i>Natural Product Research</i> , 2026, vol. 40, # 3, p. 826-838 Full Text Cited 1 times Details Abstract
leaves of Pieris formosa; collected at longitude 105°2'47"-111°0'21" East, latitude 30°00'13"-31°04'07" North, Dalaoing National Forest Park, Yichang, Hubei Province, China	supporting information	Yu, Jiaxing; Zhou, Dongzhu; Zheng, Guijuan; Liu, Lizhen; Feng, Yuanjuan; Wu, Yan; Zhang, Hanqi; Abudurexiti, Adila; Yao, Guangmin <i>Bioorganic Chemistry</i> , 2026, vol. 168, art. no. 109365 Full Text Details Abstract

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。

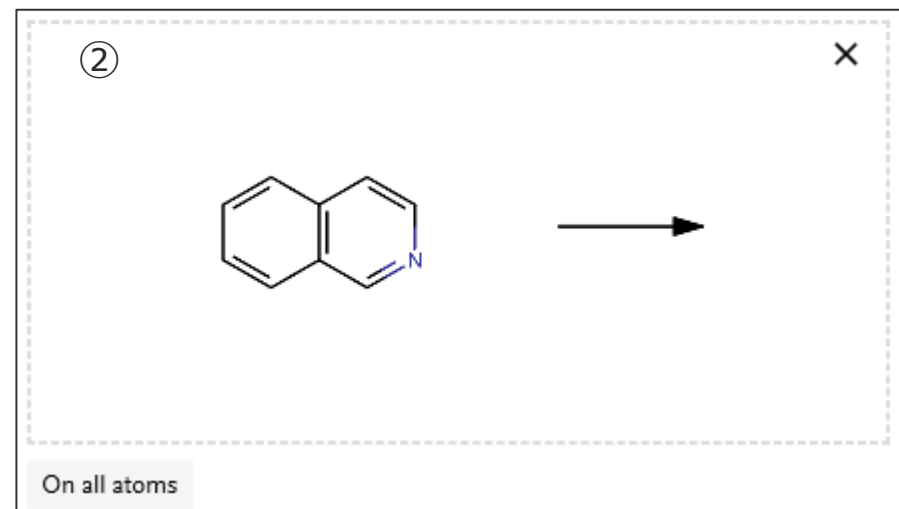
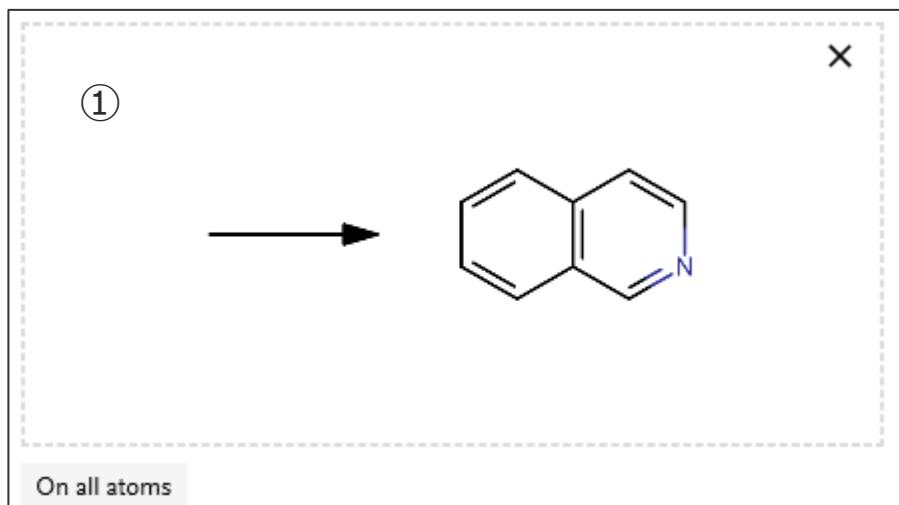
* ノイズに相当する検索を行い、Query Builderを利用して全体の検索結果から除くことができます。

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 Results Retrosynthesis

Import Save Options Reset Query Delete Query

Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Search fields and forms

Fields Forms History

Reaxys

Recent

189,022 reactions
Reagent (substructure...)

380,103 reactions
Product (substructure ...)

112 substances
substances: (IDE.MF is *C30...)

3,866 substances
Compound (substruct...)

3,390 reactions
COMPOUNDProduct {...}

There are no queries yet.

To build a new query, select fields and/or forms from the right panel by clicking on them or by dragging and dropping them here.

Learn More

Search in: Reactions Targets Substances Documents

Saved Feedback

* 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。

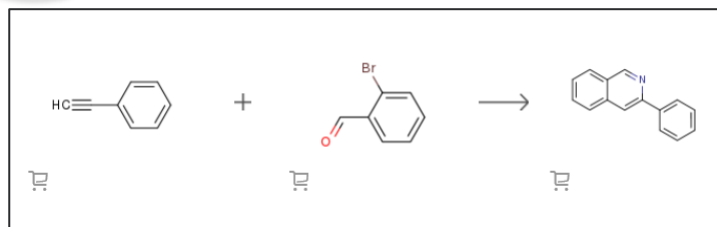
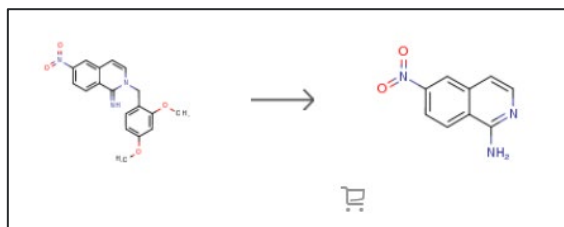
Query Builderでの検索2-③

- 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 Query Builder interface showing search results for 'Product (substructure search)' and 'Reagent (substructure search)'. The 'NOT' dropdown is highlighted in red. The 'Reactions' tab is selected in the bottom navigation bar, also highlighted in red.

※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

Reaxys Query Builder interface showing a chemical reaction scheme. The 'Query builder' tab is highlighted in red. The reaction scheme shows a starting material (a benzene ring with a triple bond) reacting with a reagent (a benzene ring with a bromine atom) to form a product (a benzene ring with a triple bond and a bromine atom). The 'AND' button is highlighted in red.



結果例

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' (circled in red), 'Results', and 'Retrosynthesis'. Below this, a toolbar contains icons for 'Import', 'Save Options', 'Reset Query', and 'Delete Query'. On the right side of the toolbar, there are icons for 'Structure', 'Molecular Formula' (circled in red), 'CAS RN', and 'TI, AB & KW'. The main search area features a dropdown menu set to 'Molecular Formula' and a text input field containing 'Pb????' (circled in red). To the right of the input field are icons for search, filters, and deletion. On the far right, a sidebar titled 'Close Panel >>' contains a search bar and tabs for 'Fields', 'Forms', and 'History'. Under the 'Fields' tab, a list of search fields is shown: 'Chemical Name', 'Element Symbols', 'Molecular Formula' (circled in red), 'Molecular Weight', 'Preferred CAS Registry Number', and 'CAS Registry Number'. At the bottom, a 'Search in:' section has buttons for 'Reactions >', 'Targets >', 'Substances >' (circled in red), and 'Documents >'. A 'Feedback' link is located at the bottom right.

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	A _n B _{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

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