



ELSEVIER

Reaxys検索で有用なテクニック集

Marvin JS編

エルゼビア・ジャパン株式会社

最終更新: 2017-May

コンテンツ

I.	置換基の制御		
1.	置換基の発生を制御	スライド	3
2.	反応Mapping情報の追加	スライド	4
II.	反応または置換基の位置の指定		
1.	反応中心の指定 (Reaction Center)	スライド	5
2.	特定の置換が起こる原子の位置の指定 (Multi Center)	スライド	6
III.	原子・原子団の表記		
1.	原子団の表記 (Reaxys Generics)	スライド	7-8
2.	複数の原子を許容する表記 (List)	スライド	9
3.	特定部位の環の大きさや側鎖の長さの設定 (Link Node)	スライド	10
IV.	結合次数・状態の指定		
1.	結合次数の指定 (Types)	スライド	11
2.	環状・鎖状結合の指定 (Topology)	スライド	12
3.	配位化合物の結合表記	スライド	13
4.	π 配位子をもつ配位化合物の結合表記	スライド	14
V.	実践的テクニック		
1.	検索結果の集合演算	スライド	15-16
2.	R-Groupの表記	スライド	17
3.	選択的官能基	スライド	18
VI.	構造式の描画		
1.	官能基の描画	スライド	19
2.	ChemDrawやBIOVIA Drawからのコピー&ペースト	スライド	20

I - 1) 置換基の発生を制御

Reaxys上の検索オプション:

- 置換基の発生を原則許可し、禁止位置を明示: Substructure / on all atomsにチェック
- 置換基の発生を原則禁止し、許可位置を明示: As drawnにチェック

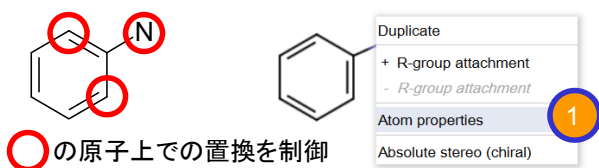
→ 一番簡単な置換基発生ブロック方法は、水素を明示して記述する方法

❖置換基数を設定し、置換基の発生を制御

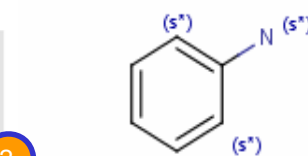
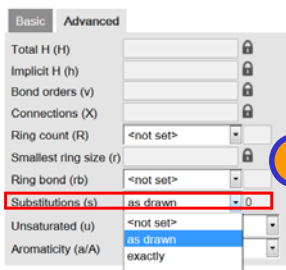
例) アニリン誘導体の検索(ただし第一級アミンであり、オルト位には置換基がないこと)

MarvinSketch上での置換数の設定

- 置換数とは、その原子に結合するH以外の原子の最大数を示す
- Substitutions(s) : as drawn : 構造式で描いた以外の置換基は発生しない
- Substitutions(s) : exactly 6 : その原子に許される最大価数までの置換を許す



- 置換数を指定したい原子を右クリック、Atom propertiesを選択
- AdvancedタブのSubstitutions(s)からas drawnを選択



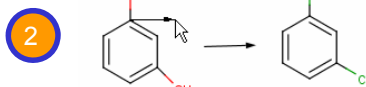
括弧の中に置換数を示すサインが表示
置換基の発生をブロック

I - 2) 反応Mapping情報の追加

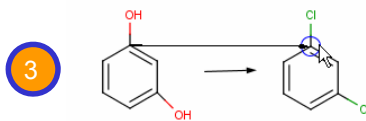
❖Mapping情報を追加することで、反応前後の原子を対応付け



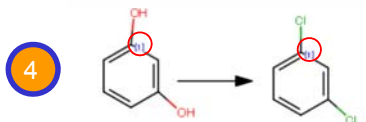
1 反応の矢印マークをクリック



Reactantのマップしたい原子をクリック

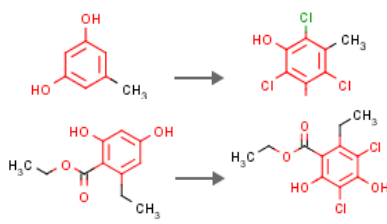


Productのマップしたい原子までマウスドラッグ

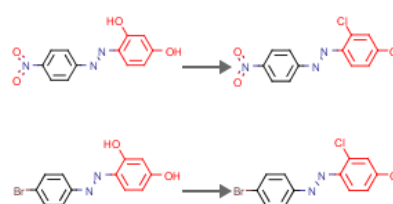


マップされた原子には番号が付けられる

Mappingなしの検索結果に混入したノイズ



Mappingした場合の検索結果



転移反応等、マッピング情報が付加されていない収録データは、マッピングを指定した検索ではヒットしないので要注意

II - 1) 反応中心の指定

❖ Reacting Center機能を使って反応位置を限定

1 反応位置を指定したいボンドの上で右クリック、Bond propertiesを選択

2 Reaction centerからmake or breakを選択

3 ボンド表示が変わる

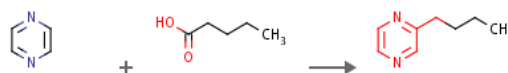
※ Not Centerを使うと、
”反応させたくない位置”の指定が可能

反応位置を指定しない検索結果に混入したノイズ

検索結果例



反応位置を指定した場合の結果



ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

5

II - 2) 特定の置換が起こる原子の位置の指定

❖ Multi-Centerの設定

1 原子を選択し、メニューから を選択

2 図のように表示される

3 結合したい原子を描く

検索結果例

ELSEVIER

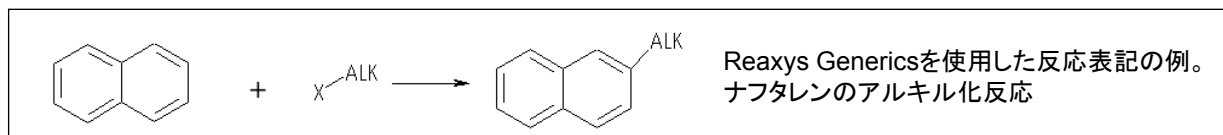
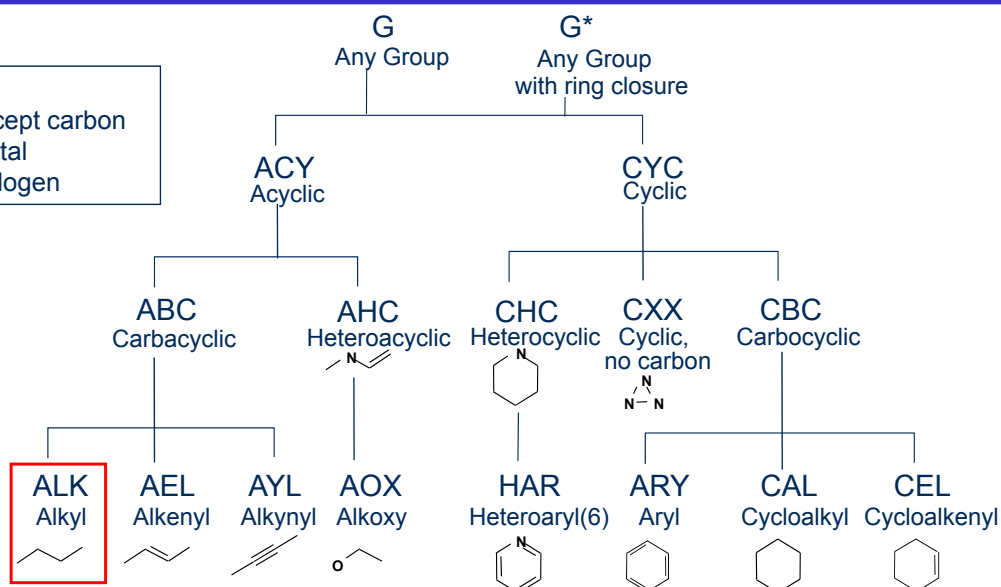
Building Insights. Breaking Boundaries.™

6

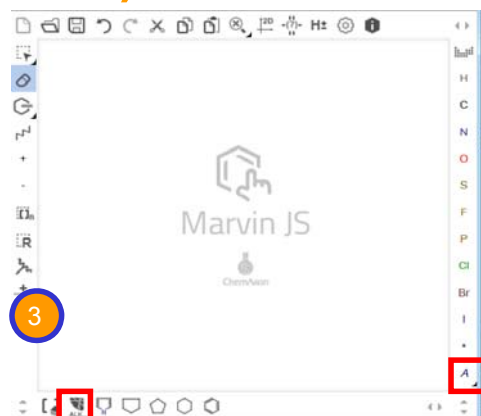
III - 1) 原子団の表記(1)

❖ Reaxys Generics/Atom Genericsの利用

A: Any
Q: Any except carbon
M: Any metal
X: Any Halogen

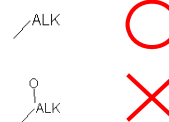


III - 1) 原子団の表記(2)



※注意

• Reaxys Genericsは、
末端で指定する



• A, G, Mは末端以外でも指定が可能

A	Q	M
X	AH	QH
MH	XH	?

III - 2) 複数の原子を許容する表記

❖ List機能を使用

1 [Periodic Table] ボタンをクリック

2 [Atom list]をクリック

3 周期律表からリストに加えたい元素を順次クリック(ここではF, Cl, Br,)

4 [OK]をクリック

5 対象となる原子をクリック

※ NOT listを使うと”許容しない”原子の指定が可能

ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

9

III - 3) 特定部位の環の大きさや側鎖の長さの設定

❖ Link node機能の利用

1 Repeating Groupをクリック、 2 長さを設定したい原子を囲んで選択

3 ダイアログボックスに設定したい長さを入力(ここでは1-4)

4 指定した炭素の数が1-4になる(5員環~8員環)

検索結果例

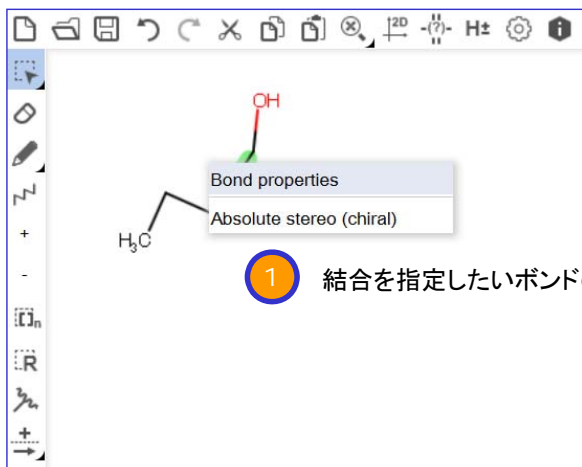
ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

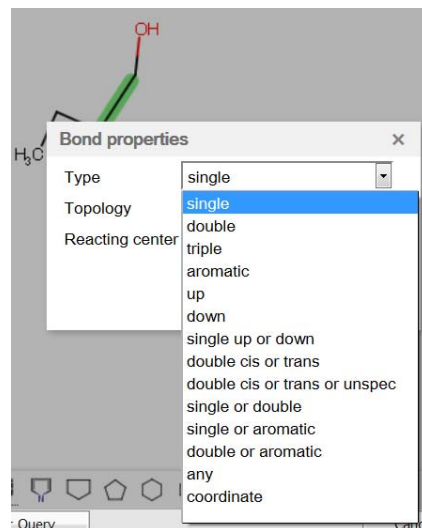
10

IV - 1) 結合次数の指定

❖ 任意の結合や、一重または二重結合といった結合次数を指定

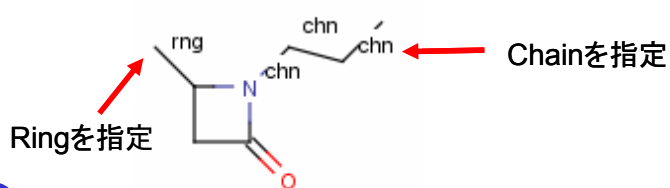


2 Typeから項目を選択

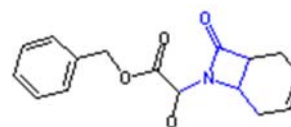


IV - 2) 環状・鎖状結合の指定

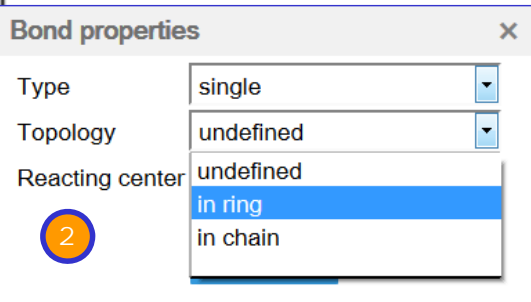
❖ Topology機能を使って鎖状か環状結合を指定



検索結果例



Bond properties
Absolute stereo (chiral)



Reaxysの検索オプション指定:

- As substructureを指定
- Additional ring closuresをチェック

- 1 反応位置を指定したいボンドの上で右クリック
- 2 [Edit Bond]-[Topology]から、項目を選択
 - None 指定なし
 - In Ring 環状
 - In Chain 鎖状

IV - 3) 配位化合物の結合表記

ハロゲン化物 (Halogenides)	$M - Cl$ $M - Br$ $M - I$
水酸化物 (Hydroxides)	$M - OH$ $M - O - R$
シアン化物 (Cyanides)	$M \equiv N$
チオシアン酸塩 (Thiocyanate)	$M - S \equiv N$
イソチオシアン酸塩 (Isothiocyanate)	$M - N = C = S$
カルボニル (Carbonyl)	$M \equiv O$
金属との配位結合	<ul style="list-style-type: none"> ・単結合 Single bond — または ・配位結合 Coordinative bond →

IV - 4) π 配位子をもつ配位化合物の結合表記

・ シクロペンタジエニル(Cyclopentadienyl)環

eta-1(η^1)

シクロペンタジエニル環の全ての結合は、“Single or Double”または、“Any”で表記する。
シクロペンタジエニル環と金属原子間の結合は、単結合または配位結合1本で表記する(※)。



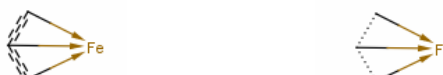
eta-5 (η^5)

シクロペンタジエニル環の結合は、“Single or Double”または、“Any”で描画する。
環全体を選択してMulti-Center設定を行い、Feと配位結合でつなぐ(赤枠のボタンを使用)。



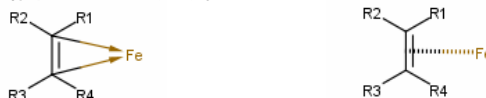
・ アリル(Allyl)

C-C結合は、“Single or Double”または、“Any”で描画する。金属と各炭素の結合は、単結合または配位結合で表記する(※)。



・ オレフィン (Olefines)

骨格は単結合および2重結合で描画し、金属とは単結合またはでつなぐ。
またはC=Cを選択してMulti-Center設定を行い、金属と配位結合でつなぐ(※)。

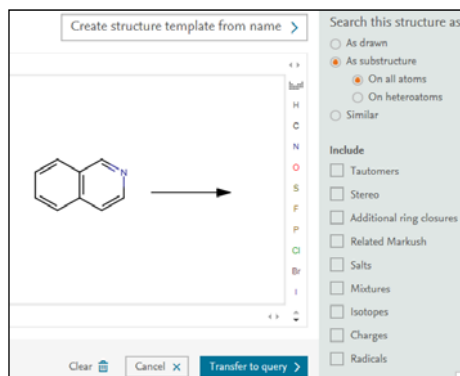
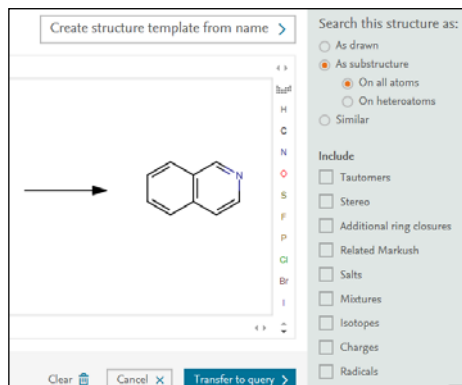


※: 配位結合を用いると結合様式が幅広く解釈されるので、より多くの化合物がヒットする

V - 1) 検索結果の集合演算

例: イソキノリンの骨格を作る反応を検索する

「ノイズ」のみが含まれるような検索式を検討して検索し、元の検索結果から除く
→ 出発物質に既に目的骨格が含まれている反応を検索



出発物質がイソキノリンの骨格を持つ反応を検索 (ノイズのみが含まれる検索結果)

もともと同一骨格を持ったものが大量にヒット

検索結果に混入したノイズ

1 2 の検索を実施後、Query Builder上で
1 NOT 2 の演算を実施 (次ページ)

V - 1) 検索結果の集合演算

Yield	Conditions	Reference
90%	With trichlorophosphate in methanol at 120°C for 0.166667h; Microwave irradiation	Sears, Rainey Teerman, Jesse Cartey, Nevadine, Tegan; <i>Organic and Medicinal Chemistry</i> , 2011, vol. 11, # 2, p. 919-950
	Experimental Procedure	Full Text Cited 53 times Show details
87%	With N-ethyl-N,N-disopropylamine; trichlorophosphate in toluene for 5h; Reflux	Yuan, Yunqiang Elbegovic, Ogric, Belitskiy, Ima O2 + 2 others; <i>Organic and Medicinal Chemistry Letters</i> , 2011, vol. 23, # 18, p. 5045-5048
	Experimental Procedure	Full Text Cited 4 times Show details

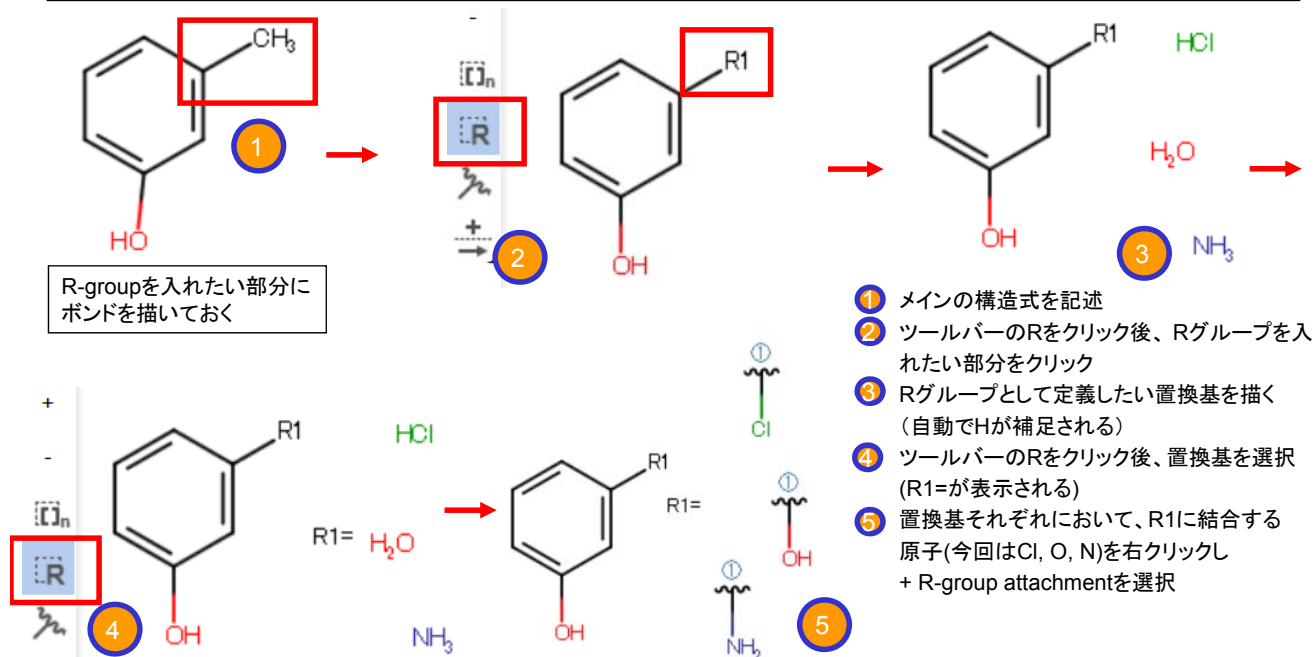
集合演算結果例

イソキノリンの骨格を持たない化合物をStarting materialとする反応のみに絞り込める

V - 2) R-Groupを表記

❖ R-Group機能を利用して、複数箇所に置換基が入るような構造式を記述することが可能

例: フェノールのメタ位が-Cl、OHあるいはNH₂と置換する反応を検索する



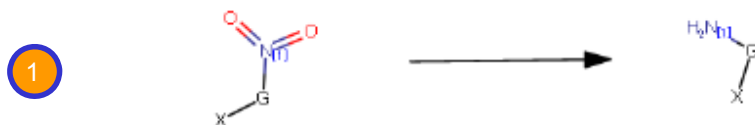
ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

17

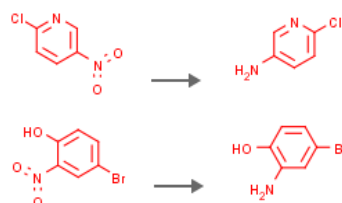
V - 3) 選択的な官能基変換反応

❖ Reaxys Genericsの"G"(Any Group)を活用して、反応しない官能基と反応する官能基を指定した検索を行う



- ① 反応する官能基と、反応しない官能基を"G"を挟んで記述し、反応式を描画。必要に応じて、マッピングしておく。

検索結果例



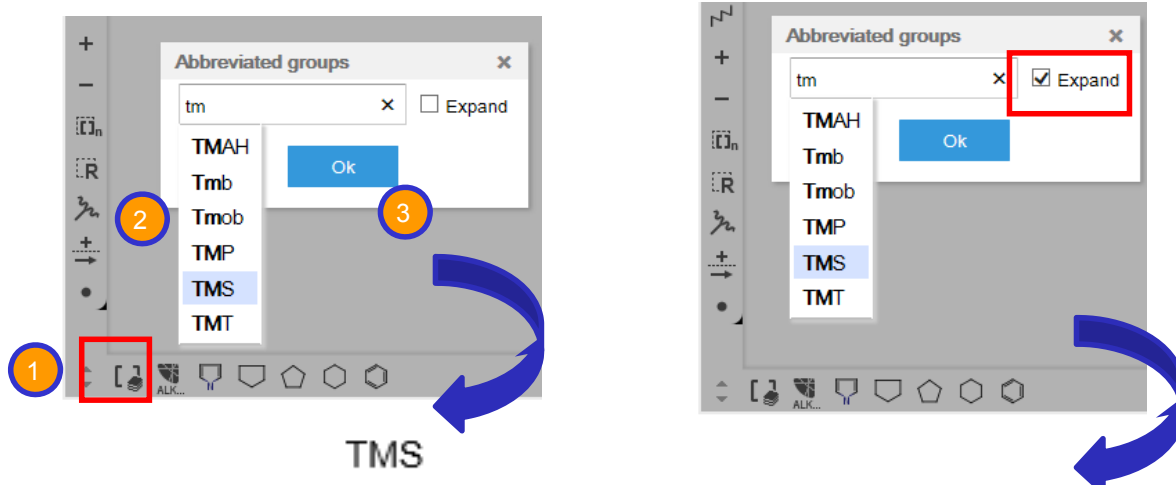
ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

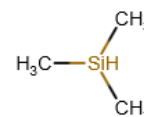
18

VI - 1)官能基の描画

❖以下の手順により官能基の描画が可能です。原子をクリックして直接描画することはできません



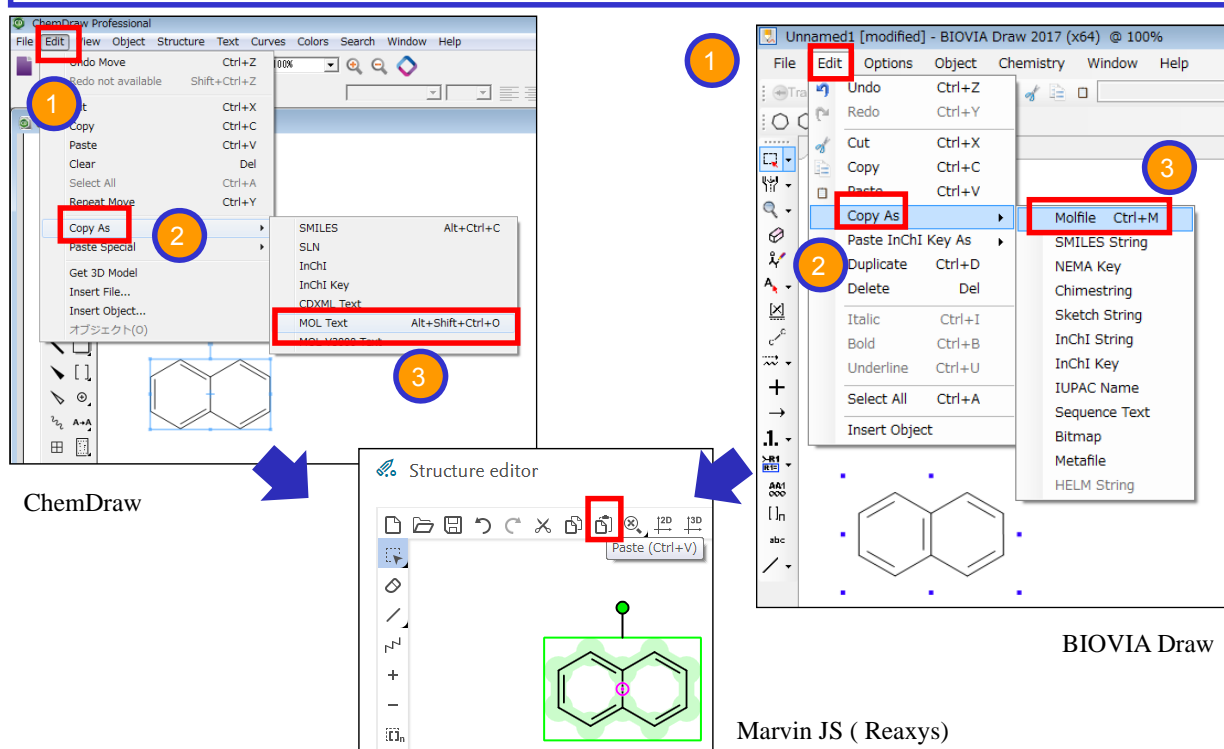
- 1 をクリック
- 2 描画したい官能基の名称を入力し、表示された候補を選択
- 3 をクリック



Expandをチェックした場合
(検索結果には影響しません)

VI - 2) ChemDrawやBIOVIA Drawからのコピー&ペースト

❖ChemDrawやBIOVIA Drawで構造式を描画後、以下のメニューあるいは該当するショートカットにより構造をコピーし(単純なコピーでは動作しません)、Marvin JS側ではCtrl+Vあるいは赤枠で囲ったボタンを押下します



ChemDraw

BIOVIA Draw

Marvin JS (Reaxys)

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://service.elsevier.com/app/contact/supporthub/reaxys/>
(日本語でご入力いただきますと、日本語でご対応いたします)
- ◆ 03-5561-5035

Reaxysに関する情報は、以下のサポートページ上に随時掲載されています。

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

