



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: 2018-Apr

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の方法は、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)

MarvinJS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: s_{lock} ⇒ 置換数を設定したい原子の順にクリック
- 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: s_{max} ⇒ 置換数を設定したい原子の順にクリック

<上記ショートカットを使用しない場合の手順>

○の原子上での置換を制御

- 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

ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

3

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

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

検索結果例

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

ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

4

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

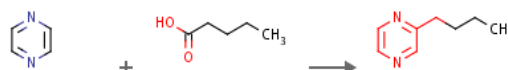
※ Not Centerを使うと、
”反応させたくない位置”の指定が可能

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

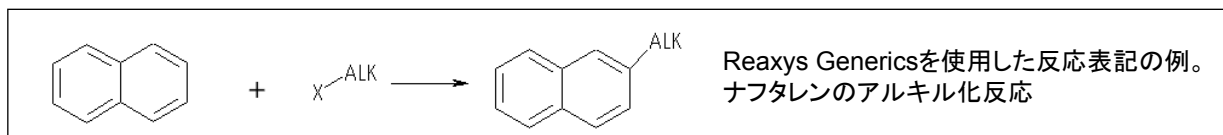
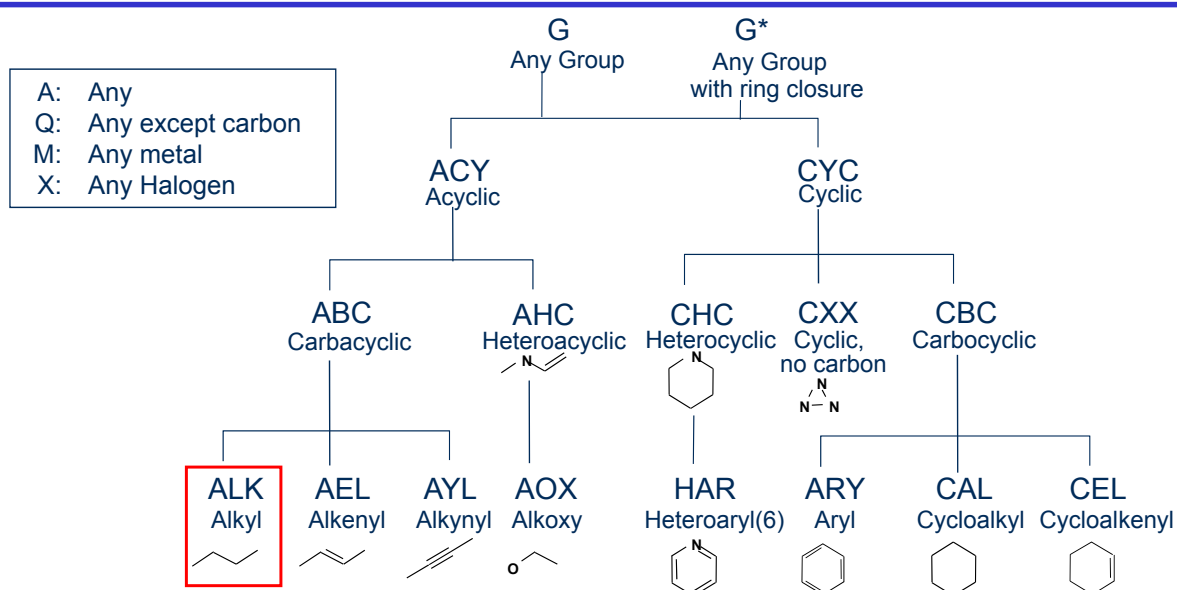
ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

6

III - 1) 原子団の表記(1)

❖ Reaxys Generics/Atom Genericsの利用



III - 1) 原子団の表記(2)

Create structure template from name >

Atom query properties

.H+	.h+	.v+	.X+
.H-	.h-	.v-	.X-
.R+	.r+	.rb+	.s+
.R-	.r-	.rb-	.s-
.u	.a/A	.rb*	.s*

Atom query properties

A Q M X
AH QH MH XH
? query prep.

※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

Reaxys Group Generics

Acyclic

ABC	ABH
AYL	AYH
ALK	ALH
AEL	AEH

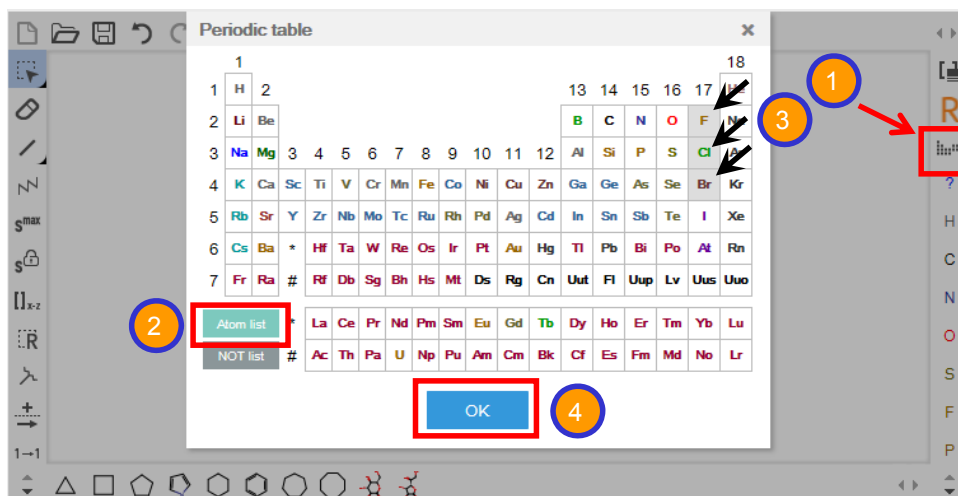
Reaxys Group Generics

Cyclic

CBC	CBH
ARY	ARH
CAL	CAH
CEL	CEH

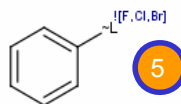
III - 2) 複数の原子を許容する表記

❖ List機能を使用



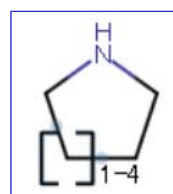
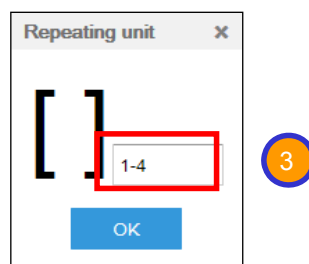
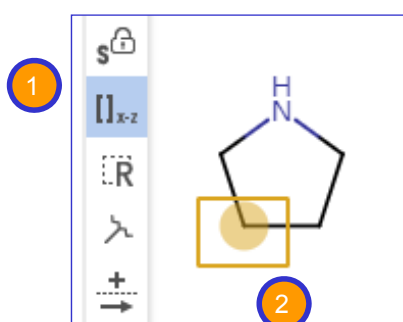
- 1 [Periodic Table] ボタンをクリック
- 2 [Atom list]をクリック
- 3 周期律表からリストに加えたい元素を順次クリック(ここではF, Cl, Br,)
- 4 [Ok]をクリック
- 5 対象となる原子をクリック

※ NOT listを使うと”許容しない”原子の指定が可能



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

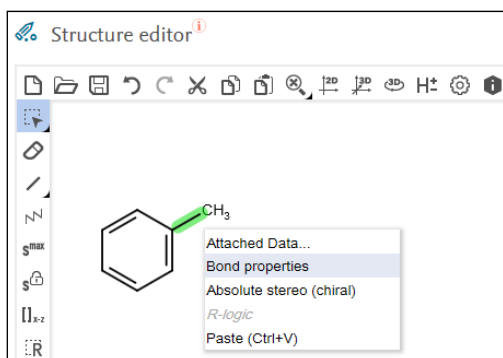


検索結果例

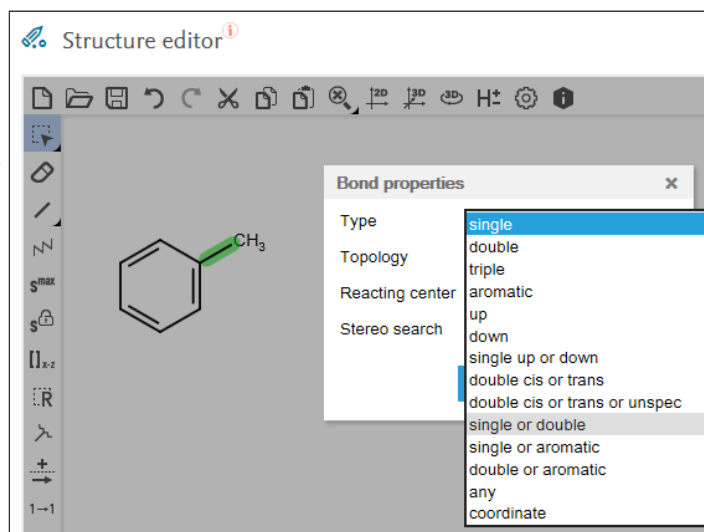
- 1 Repeating Unitをクリック、 2 長さを設定したい原子を囲んで選択
- 3 ダイアログボックスに設定したい長さを入力(ここではL1-4)
- 4 指定した炭素の数が1-4になる(5員環~8員環)

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



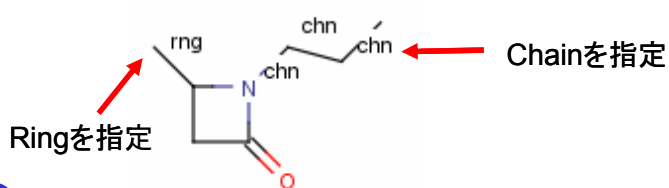
1 結合を指定したいボンドの上で右クリック



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



1

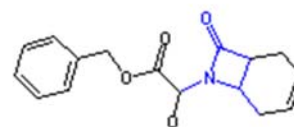
Bond properties
Absolute stereo (chiral)

Bond properties

Type: single
Topology: undefined
Reacting center: undefined
in ring
in chain

2

検索結果例



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

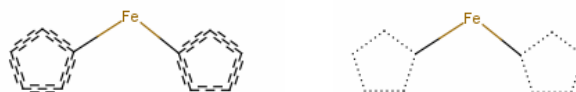
ハロゲン化物 (Halogenides)	$M - Cl$ $M - Br$ $M - I$
水酸化物 (Hydroxides)	$M - OH$ $M - O - R$
シアン化物 (Cyanides)	$M \equiv N$
チオシアン酸塩 (Thiocyanate)	$M - S \equiv N$
イソチオシアン酸塩 (Isothiocyanate)	$M - N = C = S$
カルボニル (Carbonyl)	$M \equiv O$
金属との配位結合	・単結合 Single bond — または ・配位結合 Coordinative bond →

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

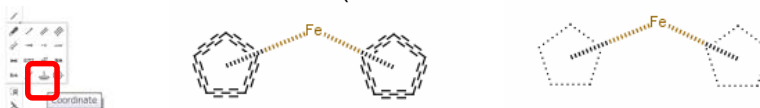
eta-1(η^1)

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)。



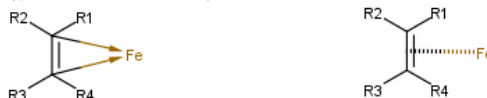
・ アリル(Allyl)

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(※)。

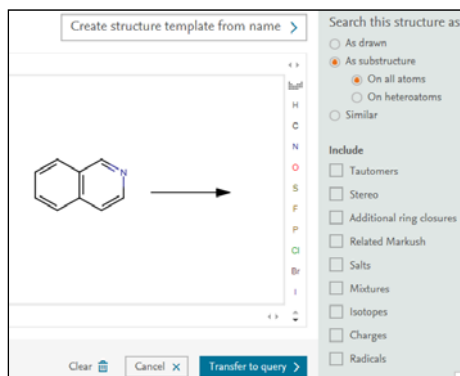
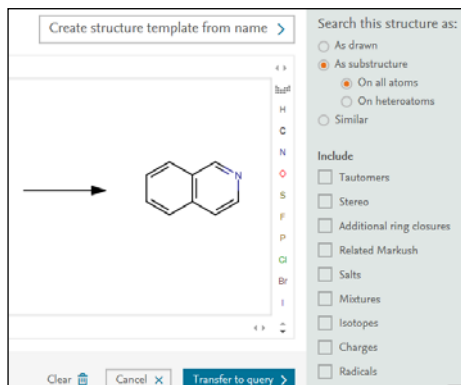


※: 配位結合を用いると結合様式が幅広く解釈されるので、より多くの化合物がヒットする

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



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

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)

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

3

4

5

6

7

8

クリックまたは 部分を
ドラッグ&ドロップ

クリックまたは 部分を
ドラッグ&ドロップ

集合演算結果例

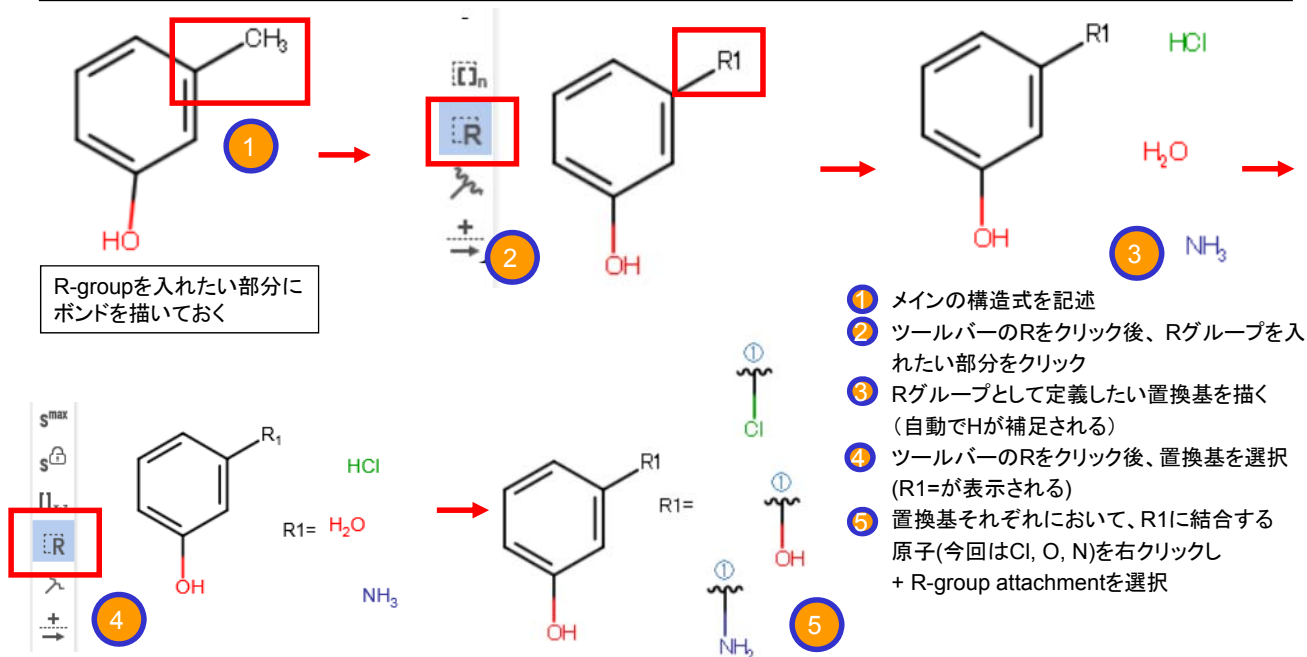
イソキノリンの骨格を持たない化合物をStarting materialとする反応のみに絞り定める

※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

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



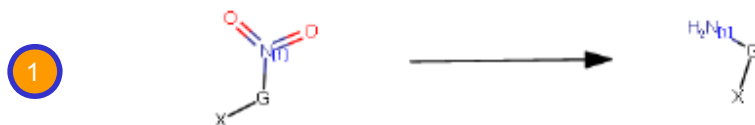
ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

17

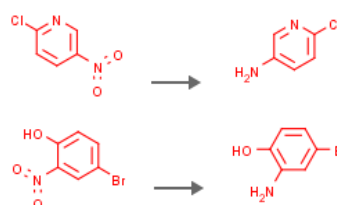
V - 3) 選択的な官能基変換反応

❖ 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



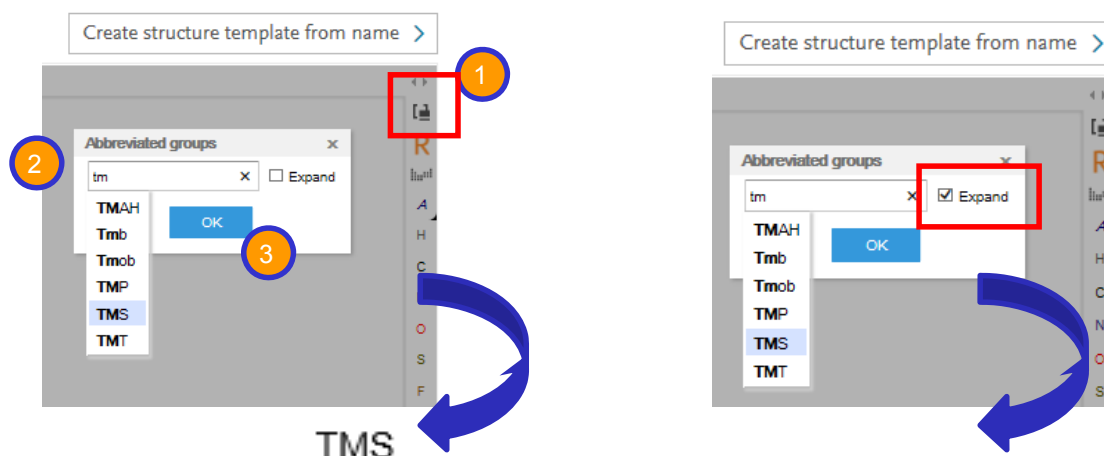
ELSEVIER

Building Insights. Breaking Boundaries.™

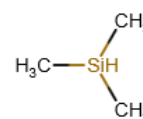
18

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



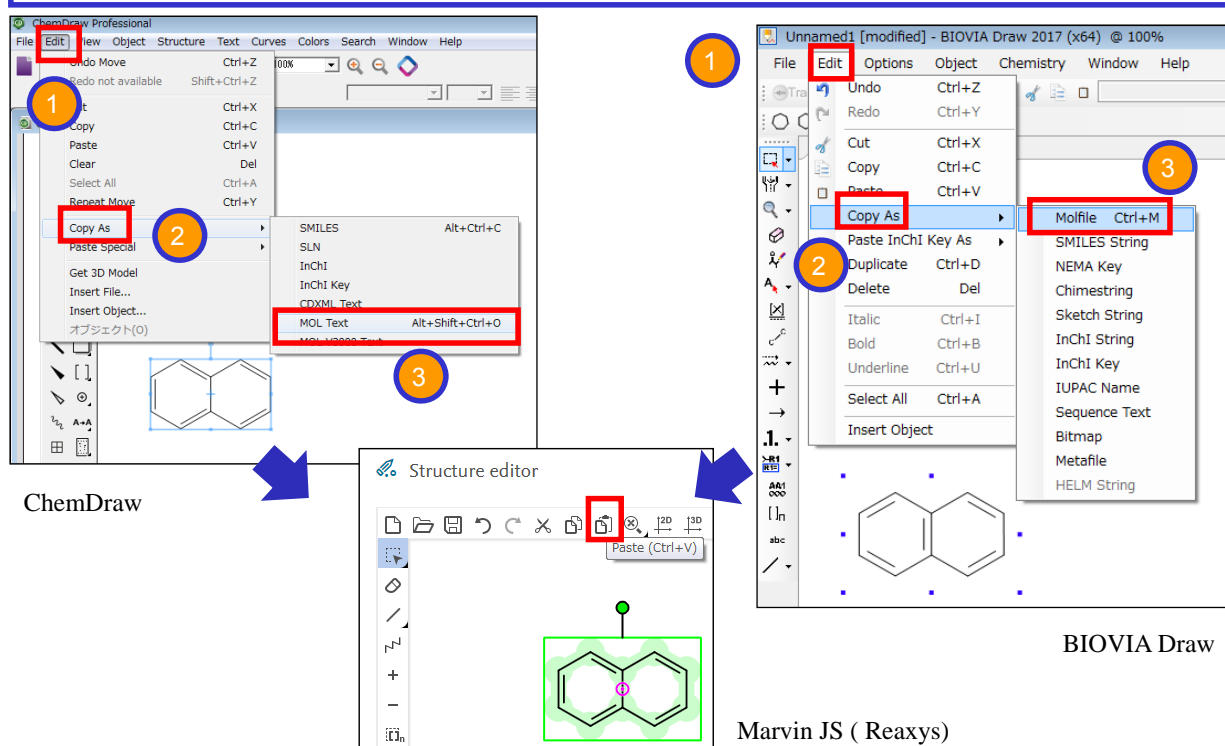
- 1 をクリック
- 2 描画したい官能基の名称を入力し、表示された候補を選択
- 3 をクリック



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://jp.service.elsevier.com/app/contact/supporthub/reaxys/>

- ◆ 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>

