

お客様各位

## Reaxys 機能強化のお知らせ 2015 年 3 月

平素は格別のご高配を賜り、厚くお礼申し上げます。

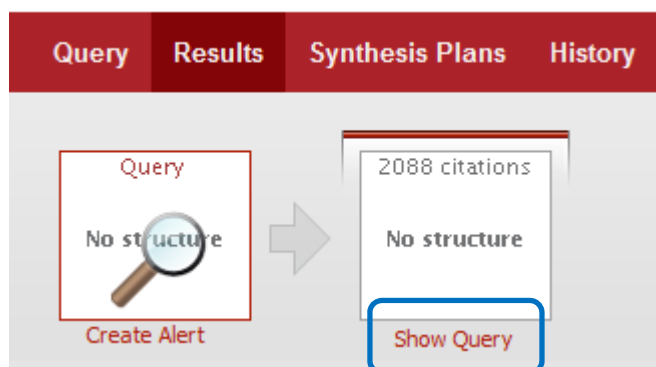
この度、反応・化合物データベース Reaxys（リアクシス）は新機能の追加とインターフェースの改良を行いました。

### 1. Ask Reaxys の機能拡充

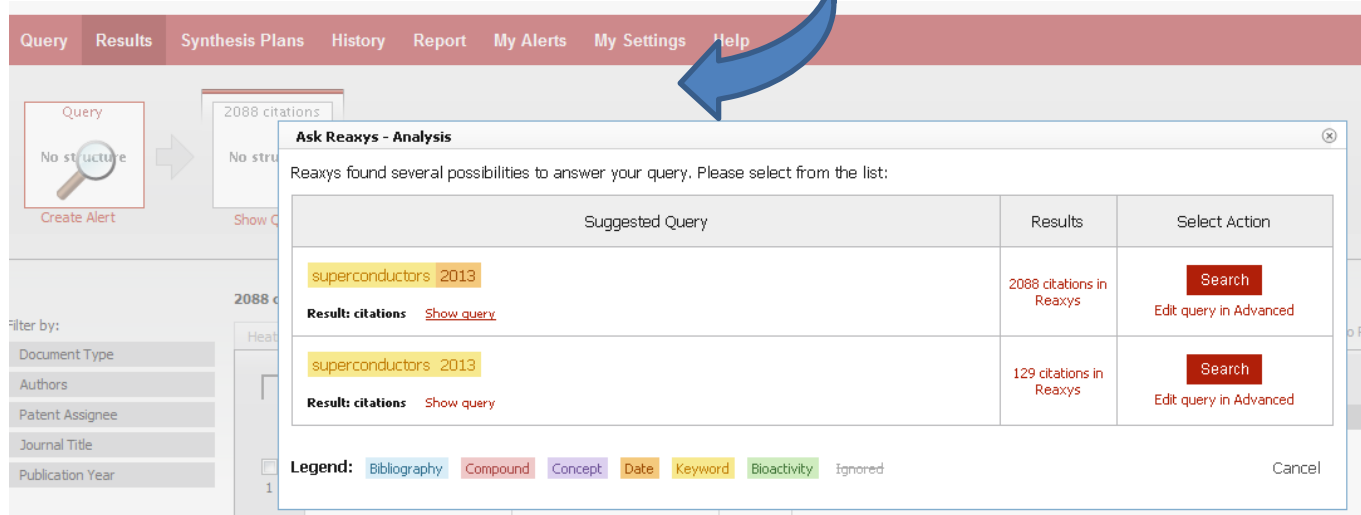
#### 1.1. 検索キーワード複数選択機能の追加

入力した文章あるいはキーワードにおいて複数の検索候補がある場合、検索結果画面から検索候補を指定して再検索することができます。

(検索例) superconductors 2013 と入力し検索



検索結果画面において“Show Query”を押下



“2013”を年号として検索する Query と、一般的なキーワードとして検索する Query それぞれを選択することができます。

## 1.2. 検索例の表示

Example ボタンを押下することで検索例が表示されるようになりました。

Ask Reaxys: Enter a keyword, concept or author Go

**Examples**

Query Examples X

**Substances**

- Substance name**  
"Atenolol" Substance name will be translated into a structure and searched Try it
- CAS-NO**  
"102625-70-7" CAS-NO will be looked up and searched on success Try it
- Molecular Formula**  
"Pt(PPh3)3" Molecular Formula will be searched as formula Try it

**Substance Properties**

- MELTING POINT**  
"melting point of xylitol" "Xylitol" will be translated into a structure and combined with a search for any melting point data Try it
- SOLUBILITY**  
"solubility of vitamin D3" "Vitamin D3" will be translated into a structure and combined with a search for any solubility data Try it
- FERROELECTRICITY**  
"ferroelectric materials" Substances with ferroelectric data will be searched Try it

**Reactions**

## 2. 原子団の表記法に Polymer を追加

Polymer を示す原子団の表記方法として"Pol"が使用できるようになりました。

Reactions **Substances** MedChemistry Literature

Structure

MarvinSketch (ChemAxon) - Internet

File Edit View Insert Option: Object Template

selected qu... Me

①

PASTE

Create Structure

Molecular Formula

Molecu

Reaxys supports various structure editors

Identification

CAS Registry Number is

Chemical Name is

Show AND Buttons

Periodic Table of Chemical Elements

Periodic Table Advanced

Description

Generic query atoms: A Q M X AH QH MH XH

Atom query properties: .H+ .v+ .X+ .R+ .r+ .rb+ .s+ .h+ .D+ .u .H- .v- .X- .R- .r- .rb- .s- .h- .D- .a/A

Periodic Table Groups: G1 G2 G3 G4 G5 G6 G7 G8 G9 G10 G11 G12 G13 G14 G15 G16 G17 G18

Special nodes: LF Pol \* Alkyl

②

R-groups: R1 R2 R3 R4 R5 R6 R7 R8 R9 R10 R11 R12 R13 R14 R15 R16 R17 R18 R19 R20 R21 R22 R23 R24 R25 R26 R27 R28 R29 R30 R31 R32

Custom Property

Type: R-group Alias Pseudo SMARTS Value

Value:

Close

### 3. Sort 機能の拡充

物質検索結果画面の Sort 機能において"Similarity"が追加されました。  
 また、Find similar ボタンを押下することで、類似化合物の検索も可能になりました。  
 反応検索においても Find similar ボタンを使用することができます。

412 substances out of 948 reactions and 5499 bioactivities and 375 targets and 3838 citations

Heatmap Reactions Substances (Grid) **Substances (Report)** Targets Citations

Limit to Exclude Export Print Zoom in Zoom out Hide Sort by No of References

Structure Structure/Compound Data

Chemical Name: Aspirin

Reaxys Registry Number: 779271  
 CAS Registry Number: 50-78-2  
 Type of Substance: isocyclic  
 Molecular Formula:  $C_9H_8O_4$   
 Linear Structure Formula:  $C_6H_4OOCCH_3COOH$   
 Molecular Weight: 180.16  
 InChI Key: BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N  
 Highest Clinical Phase: Marketed

Synthesize Show Details Find similar

Reaxys-RN  
 No of Fragments  
 Molweight (g/mol)  
 Molecular Formula  
 Publication Year  
 Comm. Availability  
 No of References  
**Similarity**

### 4. Reaction Planner 検索結果における Report への取り込み

以前は、Reaction Planner によって算出した逆合成経路は Report に保存することができましたが、  
 実験条件に関しては Report に保存することができませんでした。  
 今回の update により、実験条件も Report に保存することができるようになりました。

Query Results Synthesis Plans History Report **My Alerts** My Settings Help

Synthesis 1 Synthesis 2 Synthesis 3 Synthesis 4

New Undo Open Save Rename Duplicate Export Print Lock Right Top Assist Thumbnail Report Show

Synthesize (11)

| Step | Yield | Conditions   | References   |
|------|-------|--|--|
| 1    | 90%   | With sodium hydroxide; 2-chloro-1H-imidazole-1,2(1H)-dione in DMF (N,N-dimethyl formamide); water; acetonitrile; T=-10 - 20°C; 1.75 h; Show Experimental Procedure | TEVA PHARMACEUTICAL INDUSTRIES LTD.; TEVA PHARMACEUTICALS USA, INC. Patent: WO2004/111028 A2, 2004; Location in patent: Page 23; Title/Abstract Full Text Show Details |
|      | 90%   | With sodium hydroxide; trichloroacetic acid in DMF (N,N-dimethyl formamide); water; acetonitrile; T=-10 - 20°C; 1.75 h; Show Experimental Procedure                | TEVA PHARMACEUTICAL INDUSTRIES LTD.; TEVA PHARMACEUTICALS USA, INC. Patent: WO2004/111028 A2, 2004; Location in patent: Page 24; Title/Abstract Full Text Show Details |
|      |       | Copy to Reaxys Report: - This detail - This detail including main reaction procedure   | Syn-Tech Chem. and Pharm. Co., Ltd. Patent: US2009/3570 A1, 2009; Location in patent: Page/column 3; Title/Abstract Full Text Show Details                             |

Show Next 20 Details Show All Remaining Details (42)

## 5. Scopus へのリンク機能の拡充

Literature Search の結果画面において、Author 名に対して、Scopus（書誌・引用データベース）へのダイレクトリンクが付与されるようになりました。

The screenshot shows the Scopus interface with a search result for "Asymmetric synthesis of andavadoic acid via base-catalyzed 5-exo-tet cyclization of a  $\beta$ -hydroperoxy epoxide" by Barnych, Bogdan; Fenet, Bernard; and **Vatèle, Jean-Michel**. A blue arrow points from the author name to the Scopus author profile page for Jean-Michel Vatèle. The profile page displays his affiliation (Université Claude Bernard Lyon 1), Scopus ID (7004270318), and a list of his publications, including "Regioselective oxidative cleavage of benzylidene acetals of glycopyranosides with periodic acid catalyzed by tetrabutylammonium bromide".

上記の他、検索ロジックの改良により、パフォーマンスも向上しております。  
 更なる詳細、ご不明点については下記の宛先までお問い合わせ下さい。

以上