

## 第6章 物質・物性値からの検索

### 1. 検索条件の設定

Reaxys では化学構造式、物質名、物性値、書誌情報などからも検索を行うことができます。反応検索同様、構造式作画ソフトで構造式を作画したり、名称から自動的に構造式を作画させることもできます。

#### 検索例：メバスタチン(Mevastatin)の類似化合物を検索する

##### 1. 物質・物性値検索画面です。

“Generate structure from name”のアイコンをクリックします。

物質・物性値検索画面

Generate structure from name

Reactinon Searchとは情報を共有していません。必要に応じて構造式をコピーしてください。

COPY TO REACTIONS TAB

Search

##### 2. 名称の入力画面です。

“mevastatin”で始まる化合物を探すために、Submit ボタンをクリックします。

候補化合物が表示されるので、必要なものを選択します。

(化合物名称の入力方法は P.10 参照)

Please enter a chemical identifier and then click "Submit"

starts with ▼ mevastatin

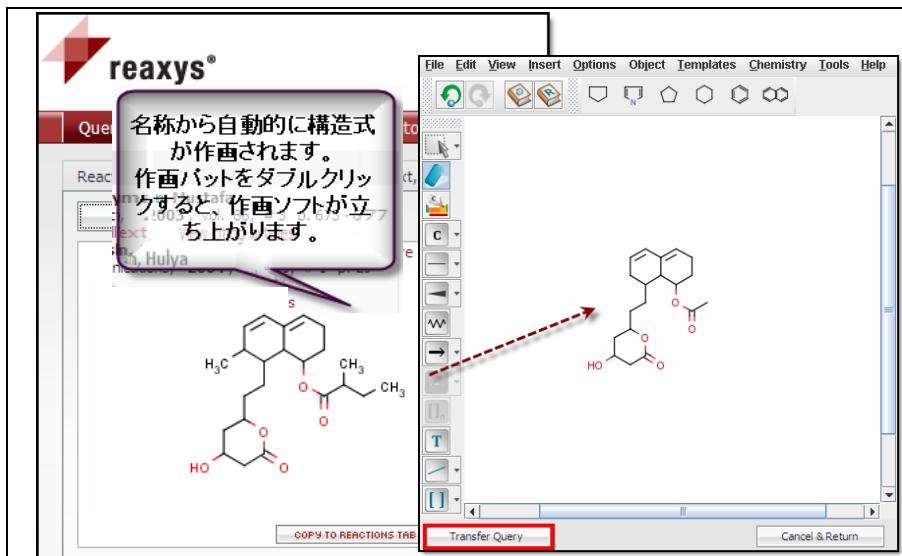
Submit

Found chemical structures

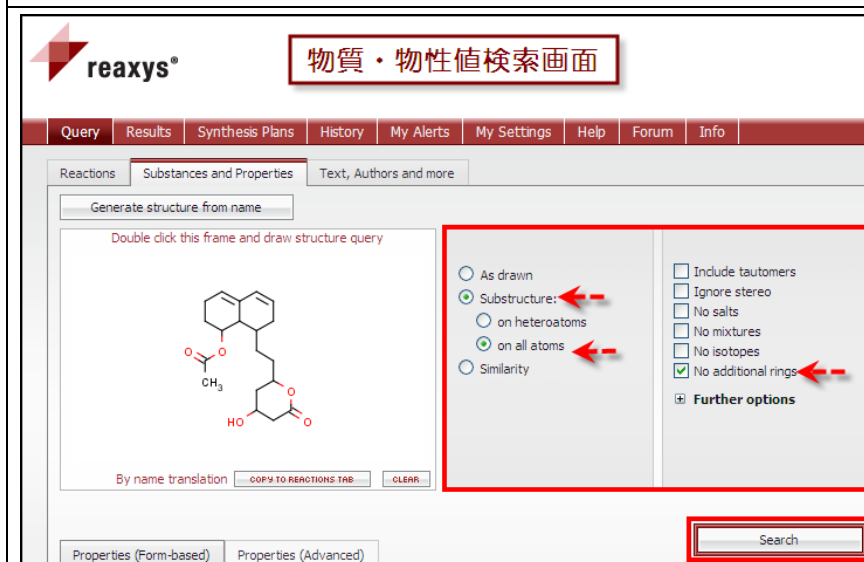
Reaxys found 8 structure candidates, which matched your chemical name input. The list below shows the first 10 sorted by No of references. Please select one for transferring into the Query window by clicking a Submit button.

Structure (8)	Chemical Name	Nº of Ref
	<b>MEVASTATIN</b> compactin (1S,7S,8S,8aR)-[8-[2-((2R,4R)-4-hydroxy-6-oxo-tetrahydropyran-2-yl)ethyl]-7-methyl-1,2,3,7,8,8a-hexahydronaphthalen-1-yl] 2-methylbutanoate mevastatin lactone (+)-compactin mevastatin statin I	133
	mevastatin	6

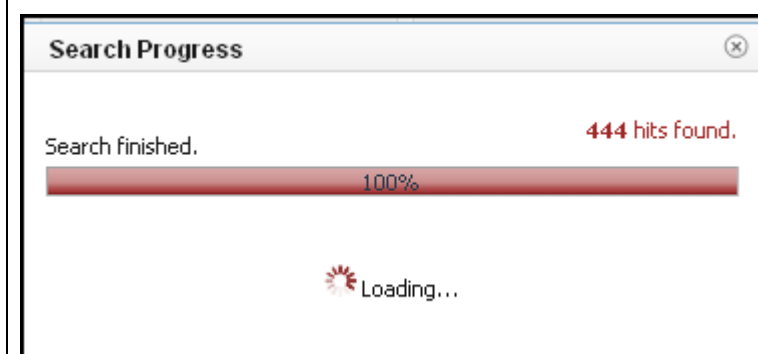
3. 自動的に名称から構造式が生成されます。ここでは、mevastatinの骨格を含むものを検索したいので、作画ソフトを立ち上げて、編集を行います。編集後、Transfer query ボタンをクリックすると、Reaxys の検索画面に転記されます。



4. 物質・物性値検索画面です。検索オプションを設定したら（設定方法は P.8 参照）、Search ボタンをクリックします。



5. 検索経過画面です。444 件がヒットしました。



## II. 検索結果の閲覧

検索結果は表形式で表示されます。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です。

ブレッドクラムと呼ばれる、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。

検索例は前項からの続きです。

### 6. 検索結果画面です。

#### ① 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です（詳細は下図参照）。

#### ② ソート機能

分子量、参考文献数などでレコードを並べ替えることができます（詳細は下図参照）

#### ③ 各化合物の合成法、誘導体の合成法へのリンク

ここでは、[Show Details](#) をクリックして 1 件目の詳細レコードを確認します。

検索結果画面

444件ヒットしました。

444 substances out of 1089 citations

Filter by:

- Sub-structure
- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Physical Data
- Spectroscopic Data
- Bioactivity
- Natural Product
- Availability
- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Sort by: No of References

Structure	Chemical Name	No of References	Available Data	No of ref.	Boiling Point
	SMVASTATIN simvastatin simvastatin Vasacor(R) Zocor(R) Lipoval MC-753	44 prep out of 113 reactions.	Identification Physical Data (26) Spectra (49) Bioactivity/Etoxox (92.1) Use/Application (227.4) Natural Product (1)	678	
	2-methyl-1,2,3,7,8,8a-hexahydro-2,7-dimethyl-8-[2-(tetrahydro-4-hydroxy-6-oxo-2H-pyridin-2-yl)ethyl]-1-methylthiazole ester butanoic acid mevastatin Mevacor (R) lovastatin mevinolin MEVACOR Lov	27 prep out of 196 reactions.	Identification Physical Data (218) Spectra (13) Bioactivity/Etoxox (74.6) Use/Application (227.3) Natural Product (2)	617	
	MEVASTATIN compaction methyl-1,2,3,7,8,8a-hexahydro-2H-pyridin-2-yl(ethyl)-7-mevastatin lactone (+)-compaction mevastatin	115 prep out of 147 reactions.	Identification Physical Data (13) Spectra (15) Bioactivity/Etoxox (8.1) Use/Application (82.7) Natural Product (1)	133	

各化合物の合成法、誘導体の合成法へのリンク

<フィルターとして利用可能なフィールド・物質/物性値検索の場合>

Filter by:

- Sub-structure
- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Physical Data
- Spectroscopic Data
- Bioactivity
- Natural Product
- Availability
- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

- ← 部分構造 (P.16 参照)
- ← 分子量
- ← フラグメント数
- ← 物性値
- ← 分光スペクトルデータ
- ← 生物活性データ
- ← 天然物由来化合物
- ← 入手可能性
- ← 資料の種類 (文献・特許)
- ← 著者名
- ← 特許出願人
- ← ジャーナル名
- ← 発行年

<ソート可能なフィールド>

No of References

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

- ← Reaxys 番号
- ← 商業的入手可能性
- ← 分子式
- ← フラグメント数
- ← 分子量
- ← 発行年
- ← 参考文献数

7. 詳細結果画面です。

1 件目のレコードを詳細表示させました。

- ① 構造式
- ② 化学名
- ③ 関連する反応の数とリンク
- ④ 収録されているデータ
- ⑤ 参考文献数

ここでは、Physical Data をクリックして物性値を確認します。

更に、融点のデータを確認するために、Melting Point をクリックします。

444 substances out of 1089 citations

Substances (Grid) Substances (Table) Citations

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

Structure ①	Chemical Name ②	N° of preparations All Preps   All Reactions ③	Available Data ④	N° of ref. ⑤	Boiling Point
	SIMVASTATIN simvastatin symvinolin Vascor(R) Zocor(R) Lipovas MK-733	44 prep out of 113 reactions.	Identification Physical Data (36) Spectra Bioactivity/ECotox (931) Use/Application (2271) Natural Product (1)	678	

④ Structure/Compound Data

Reaxys Registry Number: 4768037  
CAS Registry Number: 123049-81-0, 79902-63-9  
Chemical Name: SIMVASTATIN, simvastatin, symvinolin, Vascor(R), Zocor(R), Lipovas, MK-733  
Type of Substance: heterocyclic

Molecular Formula: C<sub>25</sub>H<sub>38</sub>O<sub>5</sub>  
Linear Structure Formula: C<sub>25</sub>H<sub>38</sub>O<sub>5</sub>  
Molecular Weight: 418.574  
InChi Key: RYMZZMWNJRMUDD-HGQWQNEA-N

④ Identification

- ④ Physical Data (7)
- Association (MCS) (9)
- Circular Dichroism (1)
- Conformation (2)
- Crystal Property Description (3)
- Electrochemical Characteristics (1)
- Enthalpy of Fusion (1)
- Interatomic Distances and Angles (1)
- Liquid/Liquid Systems (MCS) (4)
- Optics (1)
- Partition octan-1-ol/water (MCS) (1)
- Solubility (MCS) (5)

8. 融点のデータです。

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・検討が容易です。

★ Physical Data

★ Melting Point (7)

**融点のデータ**

Melting Point	Solvent	Reference
133 - 135 °C		<b>PFICKER PHARMACEUTICALS LTD.</b> Patent: US2009/43115 A1, 2009 ; Title/Abstract Full Text Show Details
135 - 138 °C		<b>Oh, Dong-Joon; Lee, Byung-Chul; Hwang, Sung-Joo</b> Journal of Chemical and Engineering Data, 2007, vol. 52, # 4 p. 1273 - 1279 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
139.5 °C		<b>Askin, D.; Verhoeven, T. R.; Liu, T. H.-H.; Shinkai, I.</b> Journal of Organic Chemistry, 1991, vol. 56, # 16 p. 4929 - 4932 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details <b>Ambike, Anshuman A.; Mahadik, K. R.; Paradkar, Anant</b> Pharmaceutical Research, 2005, vol. 22, # 6 p. 990 - 998 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
132 - 134 °C	toluene hexane	<b>Dabak, Kadir; Adiyaman, Mustafa</b> Helvetica Chimica Acta, 2003, vol. 86, # 3 p. 673 - 677 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details <b>Dabak, Kadir; Keskin, Hulya</b> Heterocyclic Communications, 2004, vol. 10, # 1 p. 29 - 34 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
124 - 127 °C		<b>BIOCON LIMITED</b> Patent: WO2004/69819 A1, 2004 ; Title/Abstract Full Text Show Details
134 - 136 °C		<b>Hong Il, Chung; Kim, Jung Woo; Shin, Hee Jong; Kang, Tae Won; Cho, Dong Ock</b> Patent: US2004/68123 A1, 2004 ; Title/Abstract Full Text Show Details
135 - 138 °C	hexane various solvent(s)	<b>Hoffman, W. F.; Alberts, A. W.; Anderson, P. S.; Chen, J. S.; Smith, R. L.; Willard, A. K.</b> Journal of Medicinal Chemistry, 1986, vol. 29, # 5 p. 849 - 852 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

ワンポイント

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・検討が容易です。

### 9. NMR スペクトル情報

Spectra のリンクからは NMR スペクトルなどの分光スペクトルデータを表示させることができます。

Spectra								
NMR Spectroscopy (20)								
Description	Nucleus	Coupling Nuclei	Solvents	Temperature	Frequency	Original Text	Comment	Reference
	1H		chloroform-d1			<sup>1</sup> H-NMR (δ, CDCl <sub>3</sub> ): 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)	Signals given	PFICKER PHARMACEUTICALS LTD. Patent: US2009/431115 A1, 2009; Title/Abstract Full Text Show Details
	1H		chloroform-d1		300 MHz	<sup>1</sup> H NMR (CDCl <sub>3</sub> , 300 MHz): 66.00(d, J=9.3, 1H) 65.78 (dd, J=6, 1H) 65.5 (br t, 1H) 65.37(q, 1H) 64.6(m, 1H) 64.38 (m, 1H) 62.78-1.33(m, 16H) 01.13(m, 9H) 0.85 (m, 6H) 00.87(m, 6H).	Signals given	Glenmark Pharmaceuticals Limited Patent: US2005/239885 A1, 2005; Title/Abstract Full Text Show Details
Chemical shifts	1H		CDCl3		300 MHz			Dabak, Kadir; Adiyaman, Mustafa Helvetica Chimica Acta, 2003, vol. 86, # 3 p. 673 - 677 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details Dabak, Kadir; Keskin, Hulya Heterocyclic Communications, 2004, vol. 10, # 1 p. 29 - 34 Title/Abstract Full Text

### ワンポイント

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ますので（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です。

### 10. フィルター機能による絞り込み

ここでは、NMR の測定核による絞り込みを行います。

フィルター機能の、“Spectroscopic Data”を開いて、More をクリックします。

絞り込みの詳細画面がポップアップウィンドウで表示されますので、核種として“13C”を設定し、Limit to をクリックします。

The screenshot shows the Reaxys search results page with a list of substances. On the left, the 'Filter by:' section is expanded to 'Spectroscopic Data', and the 'More' button is highlighted. A dialog box titled 'Refine on Spectroscopic Data' is open, showing filter criteria for NMR Spectroscopy available (89). The 'Nucleus' field is set to '13C' and is circled in red. The 'Limit to' button at the bottom of the dialog is also circled in red.

### 11. 絞り込み結果画面

検索結果が 18 件に絞り込まれました。詳細レコードを確認するためには、Hit Data の下の

“NMR Spectroscopy” をクリックします。

ここでは、核種が 13C のデータ（検索条件にマッチしたもの）のみが表示されています。すべてのデータを表示させるためには、“view all” をクリックします。

#### ※Hit Data とは※

検索条件を満たした項目のデータのみを表示することができます。

絞り込み結果画面

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps   All Reactions	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
	SIMVASTATIN simvastatin synvinolin Vasacor(R) Zocor(R) Lipovas MK-733	44 prep out of 113 reactions.	Hit Data (9) Identification Physical Data (36) Spectra (44) Bioactivity/ECotox (931) Use/Application (2271) Natural Product (1)	678	

Structure/Compound Data  
 Reaxys Registry Number: 4768037  
 CAS Registry Number: 123049-81-0, 79902-63-9  
 Chemical Name: SIMVASTATIN, simvastatin, synvinolin, Vasacor(R), Zocor(R), Lipovas, MK-733  
 Type of Substance: heterocyclic

Hit Data  
 NMR Spectroscopy (9 Hits out of 20 view all)

Hit Data

NMR Spectroscopy (9 Hits out of 20 view all)

Description	Nucleus	Solvents	Temperature	Frequency	Comment	Reference
Chemical shifts	13C	CDCl3		75MHz		Dabak, Kadir, Adiyaman, Mustafa Helvetica Chimica Acta, 2003, vol. 86, # 3 p. 673-677 Title/Abstract Full Text View citing articles Dabak, Kadir, Keskin, Hulya Heterocyclic Communications, 2004, vol. 10, # 1 p. 29-34 Title/Abstract Full Text View citing articles
Spectrum	13C	solid				Brus, Jiri, Jegorov, Alexandr Journal of Physical Chemistry A: Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory, 2004, vol. 108, # 18 p. 3955-3964 Title/Abstract Full Text View citing articles
2D-NMR	13C					Brus, Jiri, Jegorov, Alexandr Journal of Physical Chemistry A: Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory, 2004, vol. 108, # 18 p. 3955-3964 Title/Abstract Full Text View citing articles
2D-NMR	13C				Second Nucleus: 1H	Brus, Jiri, Jegorov, Alexandr Journal of Physical Chemistry A: Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory, 2004, vol. 108, # 18 p. 3955-3964 Title/Abstract Full Text View citing articles

ここでは、核種が13Cのデータ（検索条件にマッチしたもの）のみが表示されています。すべてのデータを表示させるためには、“view all”をクリックします。

12. 物質・物性値のレコードから、反応データ・合成計画ツールに移動することも可能です。

18 substances out of 1001 citations

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps   All Reactions	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
	SIMVASTATIN simvastatin synvinolin Vasacor(R) Zocor(R) Lipovas MK-733	44 prep out of 113 reactions.	Hit Data (9) Identification Physical Data (36) Spectra (44) Bioactivity/ECotox (931) Use/Application (2271) Natural Product (1)	678	

Structure/Compound Data  
 Reaxys Registry Number: 4768037  
 CAS Registry Number: 123049-81-0, 79902-63-9  
 Chemical Name: SIMVASTATIN, simvastatin, synvinolin, Vasacor(R), Zocor(R), Lipovas, MK-733  
 Type of Substance: heterocyclic

Hit Data  
 NMR Spectroscopy (9 Hits out of 20 view all)

反応データへの移動

合成計画ツールへの移動

### III. 検索結果のアウトプット

検索結果を見やすい PDF 形式や、XML、Word、Excel などのファイル形式でエクスポートすることができます。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です。

検索例は前項からの続きです。

#### 13. 検索結果のアウトプット

検索結果画面で、 Output をクリックします。

18 substances out of 1001 citations.

Substances (Grid) Substances (Table) Citations

go to Page  Page 1 of 2

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

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps   All Reactions	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
	SIMVASTATIN simvastatin synvinolin Vasacor(R) Zocor(R) Lipovas MK-733	44 prep out of 113 reactions.	Hit Data (9) Identification Physical Data (36) Spectra (44) Bioactivity/Ecotox (931) Use/Application (2271) Natural Product (1)	678	

Synthesize Hide Details

#### 14. アウトプットの設定画面です。

(設定方法詳細については次頁参照)

ここでは、物質レコードの 1-3、5 件目を詳細形式で、Excel ファイルとして出力します。

①から⑤までの設定が完了したら、

OK をクリックします。

reaxys®

Output: Substance Results

Output ①  Substance Grid  Substance Details Table  Substance Citations Table

to ②  PDF/Print  XML  Literature Management Systems (e.g., ReferenceManager, EndNote etc.)  RD File

Microsoft Word  SD/Molfile

Microsoft Excel  Smiles

Include the following headline ③

Output range ④  All Hits  Range:  e.g., 1, 2-5, 10

Output contains ⑤  include Structures  All available data  Identification data only  Hit data only  Select data

Select data を選択すると、収録されているデータの各項目に関しても選択的に出力可能になります。

OK Cancel

Select All

Please select the facts you want to export from the list below.

Spectra	Physical Data	Bioactivity/Ecotox	Use/Application	Natural Product
<input type="checkbox"/> NMR Spectroscopy (18)	<input type="checkbox"/> Melting Point (7)	<input type="checkbox"/> Pharmacological Data (6)	<input type="checkbox"/> Use (4)	<input type="checkbox"/> Isolation from Natural Product (3)
<input type="checkbox"/> Mass Spectrometry (6)	<input type="checkbox"/> Optical Rotatory Power (5)	<input type="checkbox"/> Ecotoxicology (2)		
<input type="checkbox"/> IR Spectroscopy (6)	<input type="checkbox"/> Solubility (MCS) (4)	<input type="checkbox"/> Bioaccumulation		
<input type="checkbox"/> UV/VIS Spectroscopy (4)	<input type="checkbox"/> Liquid/Liquid Systems (MCS) (4)	<input type="checkbox"/> Biomagnification and Biomonitoring (1)		
	<input type="checkbox"/> Crystal Property Description (3)			
	<input type="checkbox"/> Conformation (3)			
	<input type="checkbox"/> Partition octan-1-ol/water (MCS) (2)			
	<input type="checkbox"/> Circular Dichroism (2)			
	<input type="checkbox"/> Association (MCS) (1)			
	<input type="checkbox"/> Electrochemical Characteristics (1)			
	<input type="checkbox"/> Optics (1)			
	<input type="checkbox"/> Enthalpy of Fusion (1)			
	<input type="checkbox"/> Interatomic Distances and Angles (1)			

OK Cancel

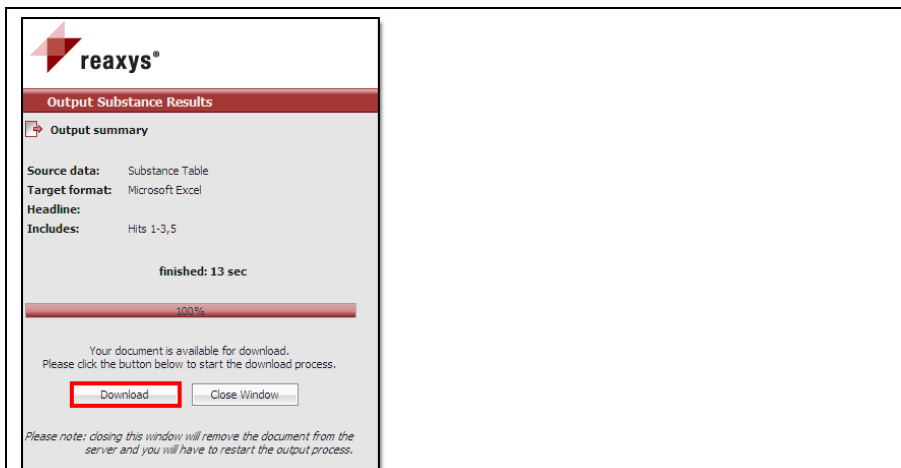
15. サマリー表示

アウトプットのサマリー表示です。

ファイルの生成が終了すると

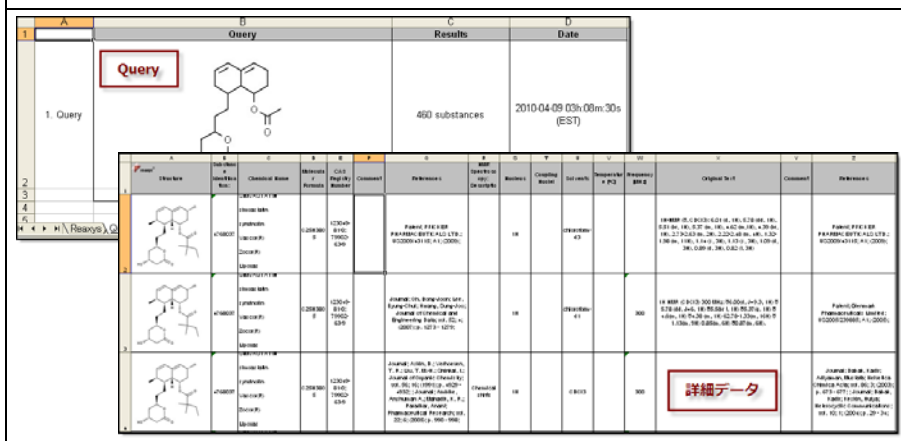
Download ボタンをクリックすることができます。

ここでは Excel ファイルを表示させます。



16. Excel ファイル

検索結果が、Query と詳細データとで別シートに保存されます。



<エクスポート形式の設定詳細>

① Output	<p>エクスポートする結果のタイプを以下の 3 種類から選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Substance Grid : 構造式のグリッド表示</li> <li>Substance Detail Table : 化合物の詳細データ</li> <li>Substance Citation Table : 文献ごと</li> </ul>
② to	<p>エクスポート先のファイル形式を以下から選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>PDF/Print</li> <li>RD File</li> <li>XML</li> <li>SD/Molfile</li> <li>Microsoft Word</li> <li>Smiles</li> <li>Microsoft Excel</li> <li>Literature Management Systems</li> </ul>
③ include...	<p>チェックボックスにチェックを入れ、見出しとして設定したい文字列を入力すると、エクスポート先のすべての文書に見出しが挿入されます。</p>
④ Output range	<p>エクスポート対象のレコードを選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>All Hits : すべての検索結果</li> <li>Range : 必要な範囲を「1,2-5,10」などのように選択可能</li> </ul>
⑤ Output contains	<p>エクスポート対象に含める項目を選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>include structures : 構造式を含める</li> <li>All available data : 全ての利用可能なデータ</li> <li>Identification data only : 物質の基本情報</li> <li>Hit data only : 検索条件に合致したデータのみ</li> <li>Select data : 選択したデータのみ出力</li> </ul>