



# 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

2019.3

## 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.	$\pi$ 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 19-20
2.	ChemDrawやBIOVIA Drawからのコピー&ペースト	スライド 21



# 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)

## 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:  $s_{\text{lock}}$  ⇒ 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:  $s_{\text{max}}$  ⇒ 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

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

- または 1-1 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

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

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

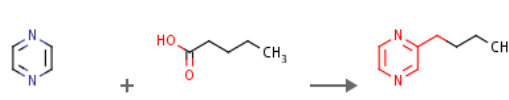
※ Not Centerを使うと、  
"反応させたくない位置"の指定が可能

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



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

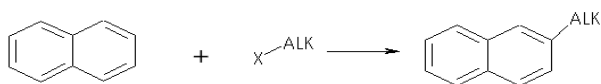
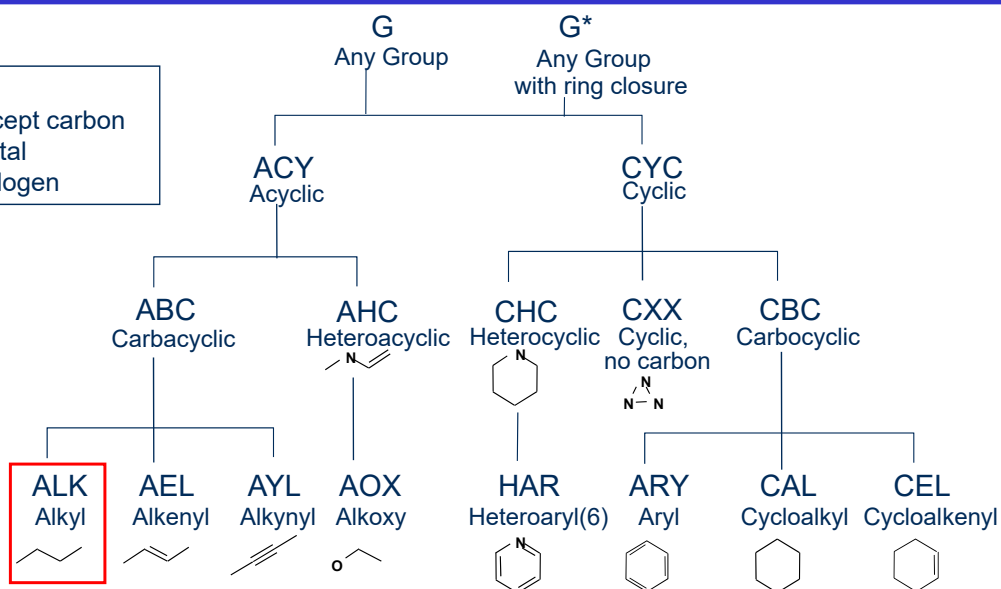


6

### 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



Reaxys Genericsを使用した反応表記の例。  
ナフタレンのアルキル化反応

7

### III - 1) 原子団の表記(2)

Create structure template from name >

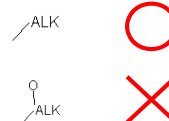
R

A

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

※注意

• Reaxys Genericsは、  
末端で指定する



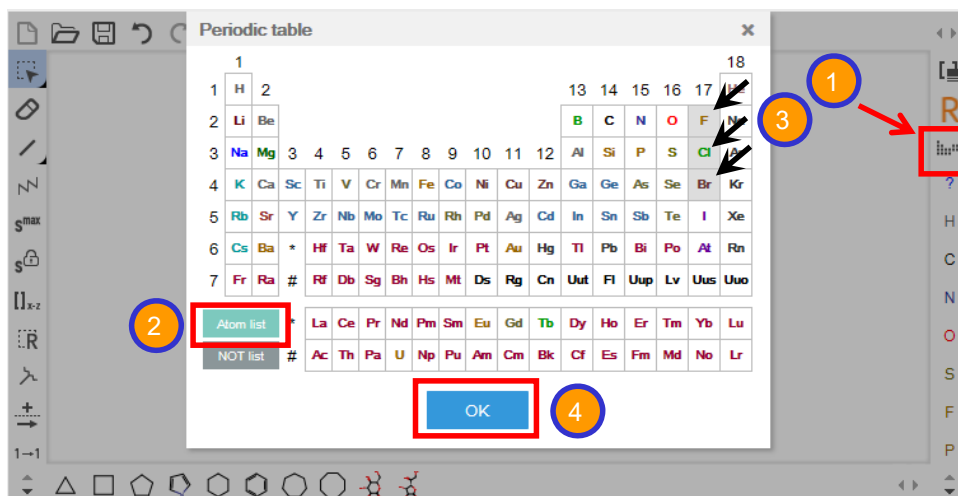
• A, G, Mは末端以外でも指定が可能



8

### III - 2) 複数の原子を許容する表記

❖ List機能を使用

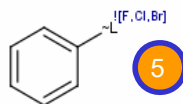


- 1 [Periodic Table] ボタンをクリック
- 2 [Atom list]をクリック
- 3 周期律表からリストに加えたい元素を順次クリック(ここではF, Cl, Br, )
- 4 [Ok]をクリック

※ NOT listを使うと"許容しない"原子の指定が可能



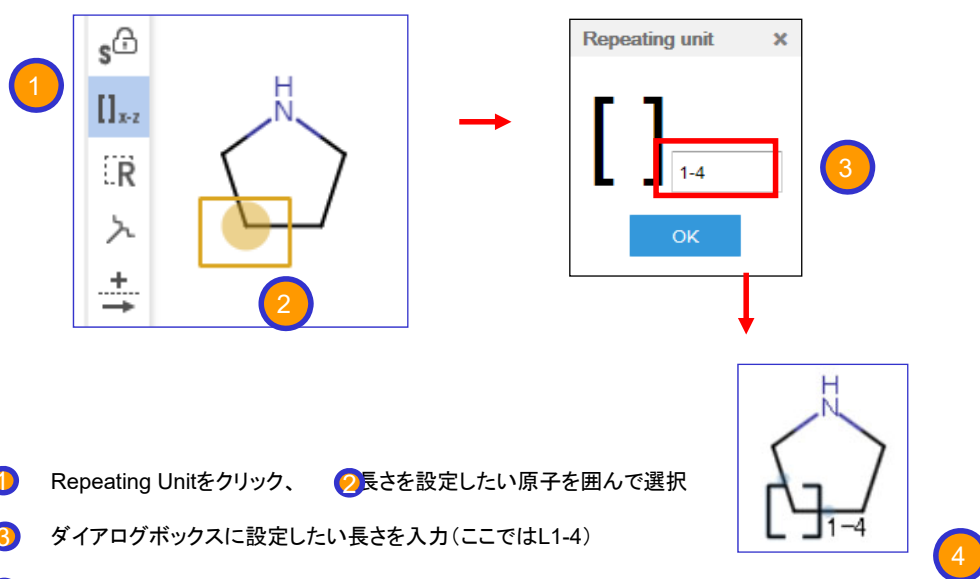
- 5 対象となる原子をクリック



9

### III - 3) 特定部位の環の大きさや側鎖の長さの設定

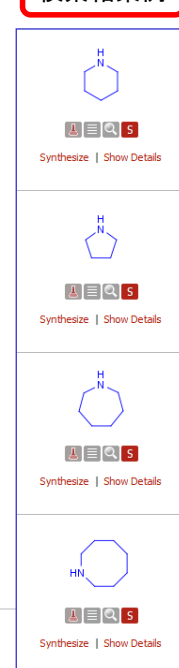
❖ Link node機能の利用



- 1 Repeating 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)



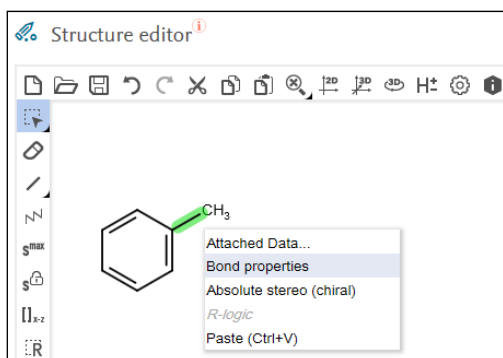
検索結果例



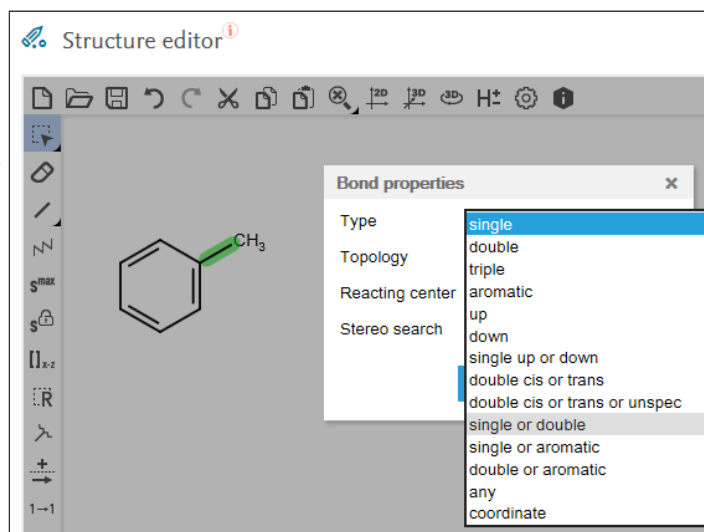
10

## 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



1 結合を指定したいボンドの上で右クリック



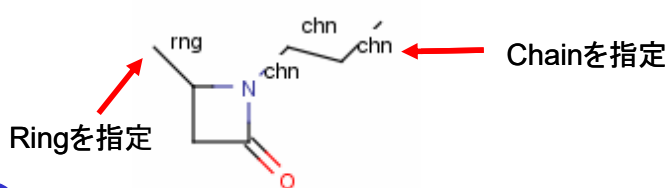
2 Typeから項目を選択



11

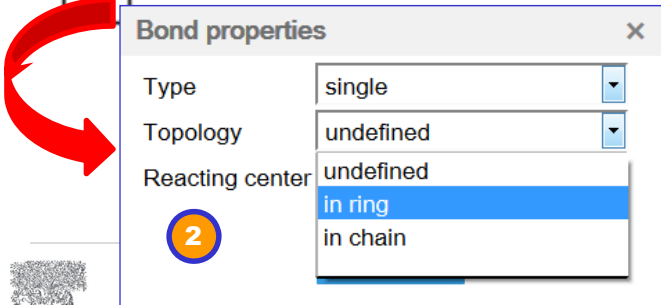
## IV - 2) 環状・鎖状結合の指定

❖ Topology機能を使って鎖状か環状結合を指定

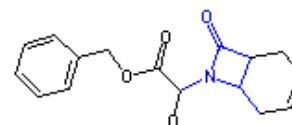


1

Bond properties  
Absolute stereo (chiral)



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



12

## 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    →



13

## IV - 4) $\pi$ 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

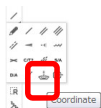
#### eta-1( $\eta^1$ )

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 ( $\eta^5$ )

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)。



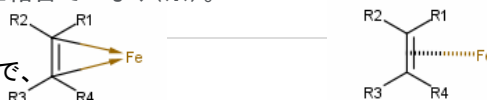
### ・ アリル(Allyl)

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

14

## 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)

15

## V - 1) 検索結果の集合演算



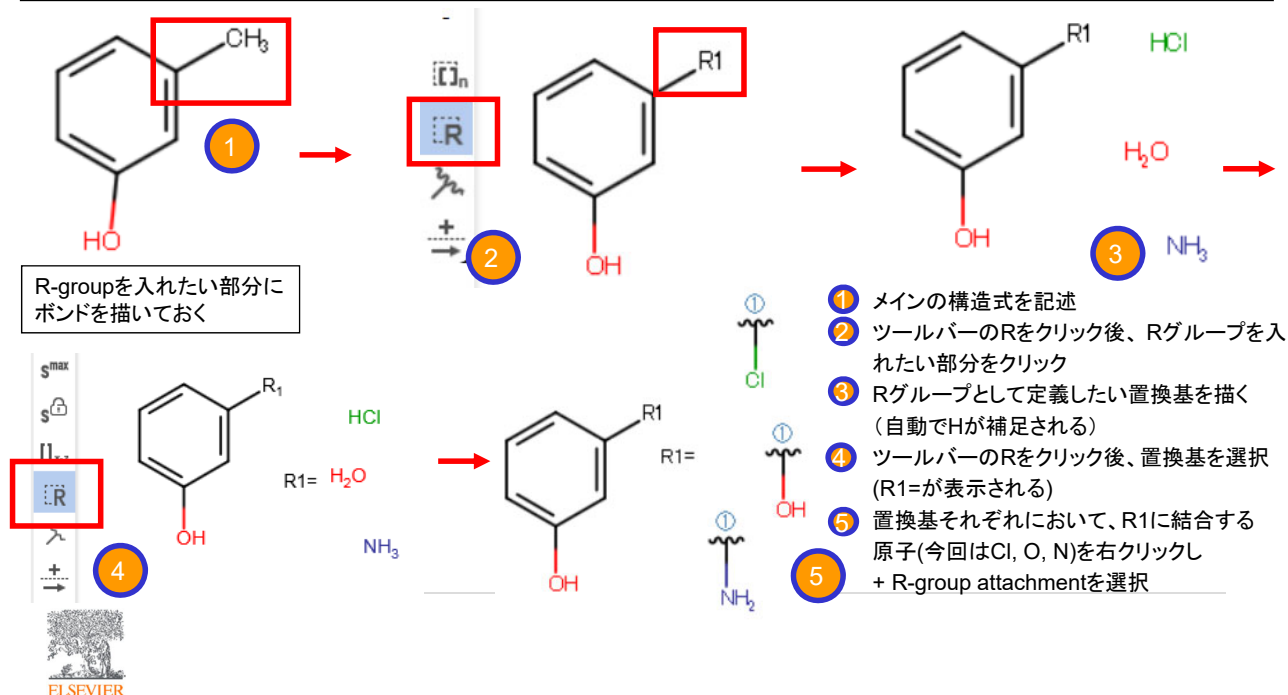
16



## 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

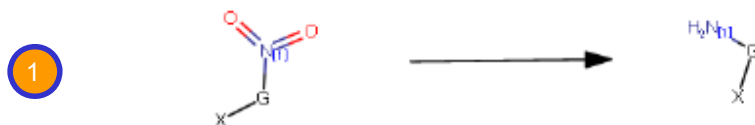
例: フェノールのメタ位が-Cl、OHあるいはNH<sub>2</sub>と置換する反応を検索する



17

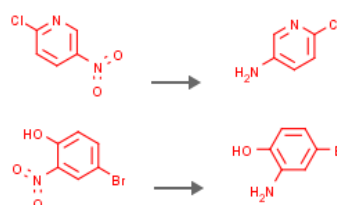
## V - 3) 選択的な官能基変換反応

❖ 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。

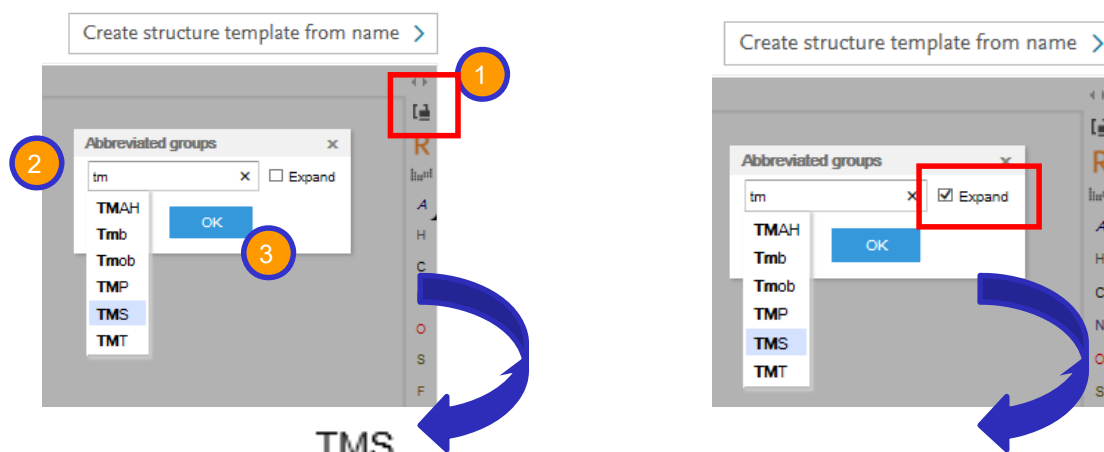
検索結果例



18

## VI - 1)官能基の描画(1);メニューの利用

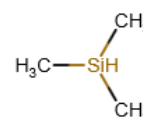
❖ 以下の手順により官能基の描画が可能です。



- 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



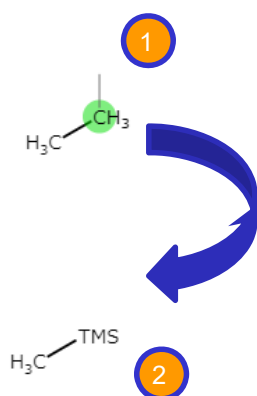
Expandをチェックした場合  
(検索結果には影響しません)



19

## VI - 1)官能基の描画(2);直接入力

❖ メニューを用いずキーボード上から直接入力することもできます。但し元素記号が優先的に認識されます。



- 1 官能基部分を含めた任意の構造式を描画、官能基を描画したい原子にマウスオーバー
- 2 官能基略号をタイプ

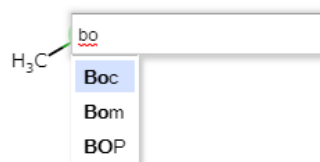


※ 官能基略号を2文字入力した時点でその2文字に相当する原子が存在する場合、該当原子が優先的に反映されます。

左記例のようにtmsと入力する際、以下の表示を遷移しTMSと表示されます。  
この際、間隔を空けずに連続してtmsと入力する必要があります。



※ 手順 2 において、2文字入力時点で該当する原子が存在しない場合、官能基候補が表示されます。



20

## 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)

ELSEVIER

21

## 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

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>

