

# クイックレファレンスガイド

- 1 Reaxys に関する基本的な情報
- 2 Reaxys のホームページ
- 3 個人設定 (My Settings)
- 4 化学名から構造式を作成 (Generate a Structure from a Name)
- 反応(Reactions)
  - 5 検索タブ (Query tab)
  - 6 検索タブ (Query tab)—フォームベース検索 (Form-based Search)
  - 7 検索タブ (Query tab)—アドバンス検索 (Advanced Search)
  - 8 結果— 一覧表示
  - 9 結果— 反応タブ (Reactions tab)
  - 10 結果— 絞り込み (Filter by)
- 11 合成計画 (Synthesis Plans)
- 12 アウトプット (Output)
- 13 履歴(History)
- 14 アラート機能(My Alerts)
- 物質と物性値 (Substances and Properties)
  - 15 検索タブ (Query tab)
  - 16 検索タブ (Query tab)—構造検索 (Form-based Search)
  - 17 検索タブ (Query tab)—アドバンス検索 (Advanced Search)
  - 18 結果一覧
  - 19 物質(表)タブ (Substances (Table) tab)
  - 20 物質(グリッド)タブ (Substances (Grid) tab)
- テキスト、著者、その他 (Text, Authors and more)
  - 21 検索タブ (Query tab)
  - 22 文献情報タブ (Citations tab)

Reaxys で検索を始める場合、[www.reaxys.com](http://www.reaxys.com) にアクセスしてください。

Reaxys についての詳細は、[www.info.reaxys.com](http://www.info.reaxys.com) を参照してください。下記の情報がございます。

- Reaxys に関するプレスリリース、特性、使用環境
- Reaxys ニュースレター配信のお申し込みフォーム
- サポート情報
  - トレーニング資料(デモ、ビデオ、マニュアル)の取得(全て英語)
  - ネットでのトレーニングの予定表及びお申し込みフォーム
  - よくあるご質問(FAQ)
  - ソフトウェア(プラグイン、構造式エディタ)やトレーニング資料のダウンロード

日本語のサポートページも合わせてご参照ください。

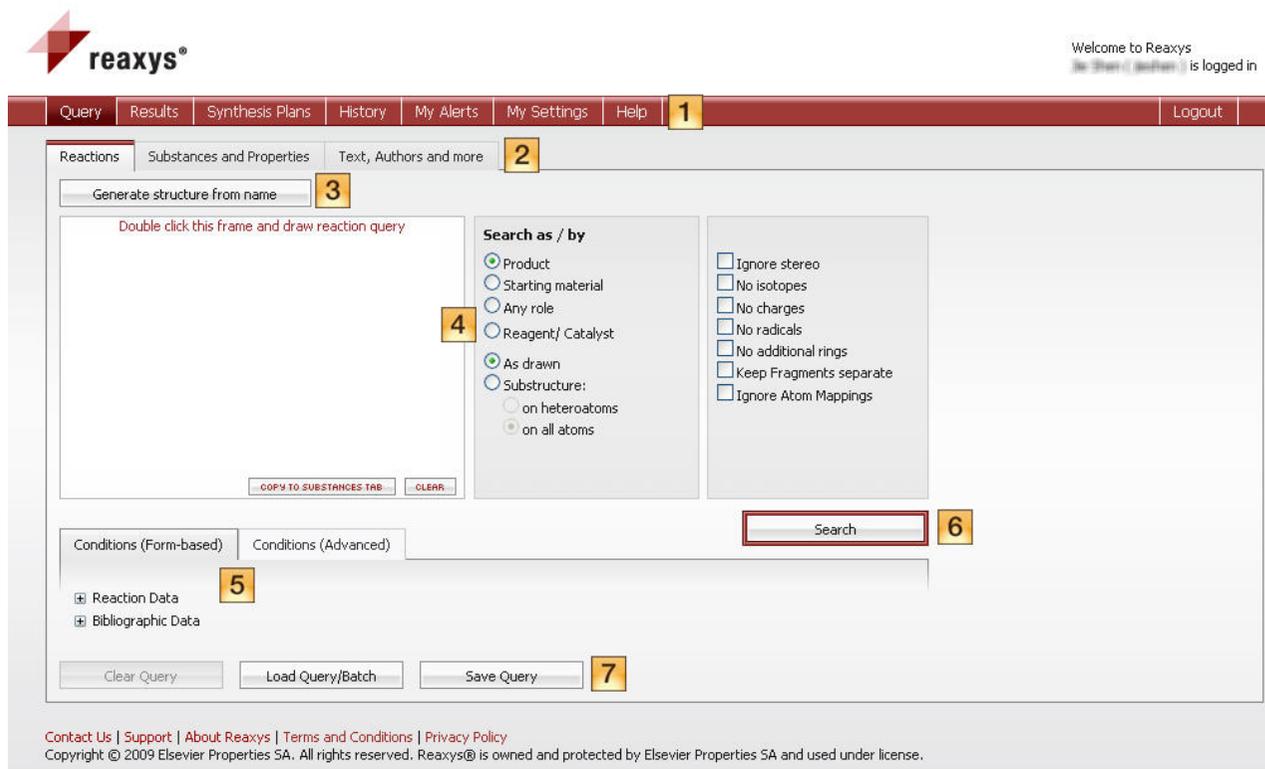
<http://japan.elsevier.com/reaxyssupport/>

### お問い合わせ先

Tel 03-5561-5035 (ヘルプデスク、沈)

Fax 03-5561-0451

E-mail [jpinfo@reaxys.com](mailto:jpinfo@reaxys.com)



The screenshot shows the Reaxys homepage interface. At the top, there is a navigation bar with tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, and Logout. Below this is a secondary navigation bar with tabs: Reactions, Substances and Properties, and Text, Authors and more. The main content area includes a search interface with a 'Generate structure from name' field, a 'Search as / by' section with radio buttons for Product, Starting material, Any role, Reagent/ Catalyst, As drawn, and Substructure (with sub-options for on heteroatoms and on all atoms). There are also checkboxes for 'Ignore stereo', 'No isotopes', 'No charges', 'No radicals', 'No additional rings', 'Keep Fragments separate', and 'Ignore Atom Mappings'. A 'Search' button is located at the bottom right of the search area. Below the search area are 'Conditions (Form-based)' and 'Conditions (Advanced)' tabs, with a 'Reaction Data' checkbox selected. At the bottom, there are buttons for 'Clear Query', 'Load Query/Batch', and 'Save Query'. The footer contains contact information and copyright details.

## 1 ナビゲーション:

以下の画面が選択できます

- 検索画面 (Query)
- 検索結果画面 (Results)
- 合成計画画面 (Synthesis Plans)
- 履歴 (History)
- アラート機能 (My Alerts)
- 個人設定 (My setting)
- ヘルプ (Help)
- ログアウト (Logout)

## 2 クエリータブ (Query tabs)

- 反応検索 (Reactions)
- 物質・物性値検索 (Substances and Properties)
- 引用文献検索 (Text, Authors and more)

## 3 化学名から構造式作成

化学名を構造式へ変換します

## 4 構造式/反応ウィンドウ

検索する構造式や反応を表示するウィンドウ

## 5 反応データ/書誌情報データの追加

フォームベース検索 (Form-based Search) やアドバンスド検索 (Advanced Search) に、反応や書誌情報制限などをつけることができます

## 6 検索 (Search) ボタン

検索を開始します

## 7 コマンドボタン

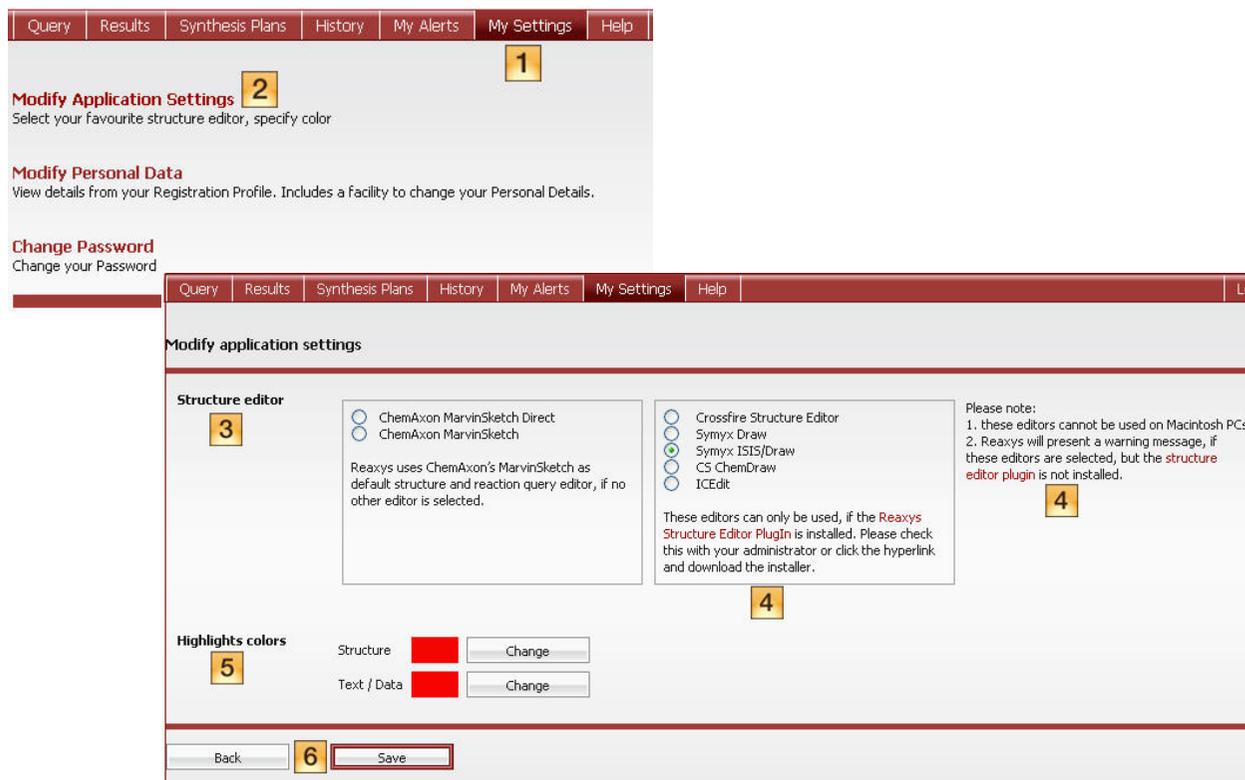
検索条件 (Query) の、クリア (Clear) ・ロード (Load) ・セーブ (Save) 。

バッチ検索ファイル (Batch) のロードもできます

## 化合物合成方法の検索

1. 反応タブを選択し、化学構造式入力ウィンドウをダブルクリック
2. お好みの構造式エディターで構造式を描いてから、エディターを閉じて、Reaxys に戻ります
3. サーチボタンをクリックし、結果を閲覧

注: Reaxys は化合物合成検索がデフォルトとしてセッティングされています



注: 保存ボタンをクリックすると、アップデートされた設定が表示されるので確認して下さい。新しい設定は、次にログインしたときから有効となります。

Marvin Sketch 以外の構造式エディタを利用するにはプラグインのダウンロードとインストールが必要です。

### 1 個人設定(My Settings)

タブを選んで

- アプリケーション設定(Modify application Setting)
- 個人情報設定変更(Modify Personal Data)
- パスワード変更(Change Password)

### 2 アプリケーション設定(Modify Personal Data)

ご使用になりたい化学構造式エディターやハイライトの色を選択できます。

### 3 構造式エディター(Structure editor)

好きな構造式エディターを選択

### 4 情報

お使いのデフォルト設定の情報やインストールが必要なプラグインのダウンロード情報

### 5 ハイライト色設定(Highlights colors)

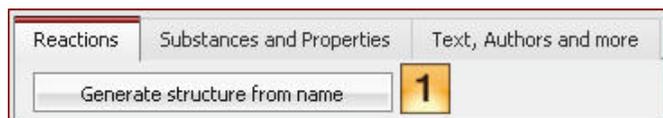
検索した構造式やテキストデータのハイライトを好きな色に設定できます

### 6 戻る(Back) & 保存(Save)ボタン

新しい設定を確認し、よろしければ保存(Save)をやり直すときには戻る(Back)ボタンをクリックしてください。

## 化学名から構造式を作成 4

### Generate a structure from name



Please enter a chemical identifier and then click "Submit" ✕

2

Chemical Name: aspirin  
 InChI-Key: BSYNRYMUTXBXSQ-WXRBYKJCCW  
 CAS-No: 50-78-2  
 Smiles: CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C(O)=O

Double click this frame and draw reaction query

**3**

Search as / by

- Product
- Starting material
- Any role
- Reagent/ Catalyst
- As drawn
- Substructure:
  - on heteroatoms
  - on all atoms

Ignore stereo  
 No isotopes  
 No charges  
 No radicals  
 No additional rings  
 Keep Fragments separate  
 Ignore Atom Mappings

反応検索と物質・物性値検索で利用できます

#### 1 名称から構造式作成ボタン (Generate structure from name button)

このボタンをクリックし、入力フィールドを開く

#### 2 化合物名入力フィールド

体系名(systematic name)や慣用名、CAS レジストリー番号、InChI キーを入力する。Submit ボタンをクリックすると化学構造式を表示します。

#### 3 構造式/反応ウィンドウ

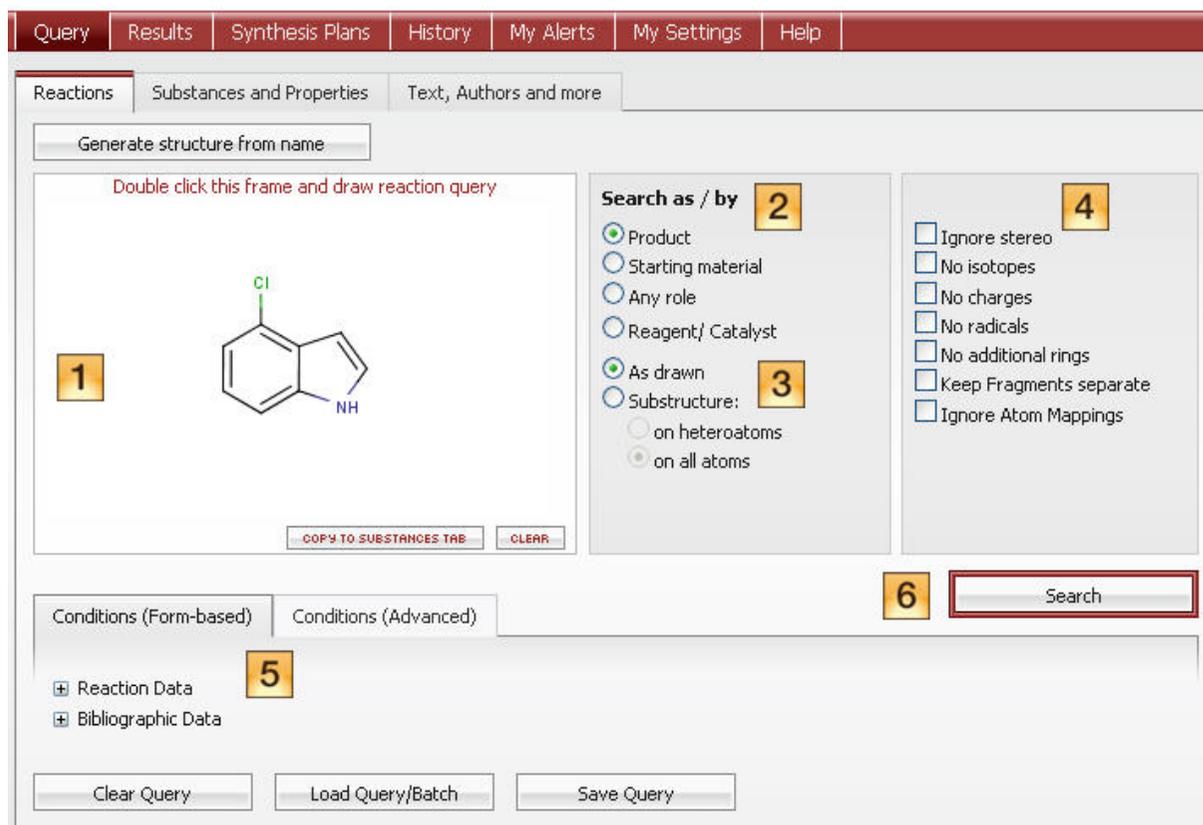
作成した構造式は、構造式/反応ウィンドウに表示されます。

以下の操作が可能です

- a) すぐに検索開始
- b) ボックスをダブルクリック(または、右クリック)すると構造式を構造式エディタで修正できます
- c) 検索タイプを決めます。さらに検索条件を加えたり、付加的な検索オプションを選択できます

注: このオプションは、対応する化合物が Reaxys のデータベース中にあるときのみご使用になれます

## 反応検索タブ 5 Reactions Query tab



### 保存した検索のロード方法

1. ロード検索ボタン(Load Query)をクリック(検索タブ(Query tab)の時に実行できます)
2. 保存したXML ファイルの場所を参照し、ファイルをクリック

File C:\Documents and Settings\rypensc\Desktop\Reaxys\Cycle.xml Browse... Open

### 1 構造式/反応ボックス

このウィンドウは、検索される構造や反応、また、付加的な検索条件のついた構造を表示

### 2 検索条件 (Search as / by)

必要なとき、物質の条件を決定

### 3 検索タイプの選択

As drawn:描いたままの構造を検索,  
Substructure: 付加的置換を含めた結果検索

### 4 付加的検索オプション

検索に変更が必要なときには、付加的オプションを選択

### 5 検索条件を追加 (Add further search conditions)

反応や書誌情報の制限を追加したとき、このリンクをクリック

### 6 検索(Search)

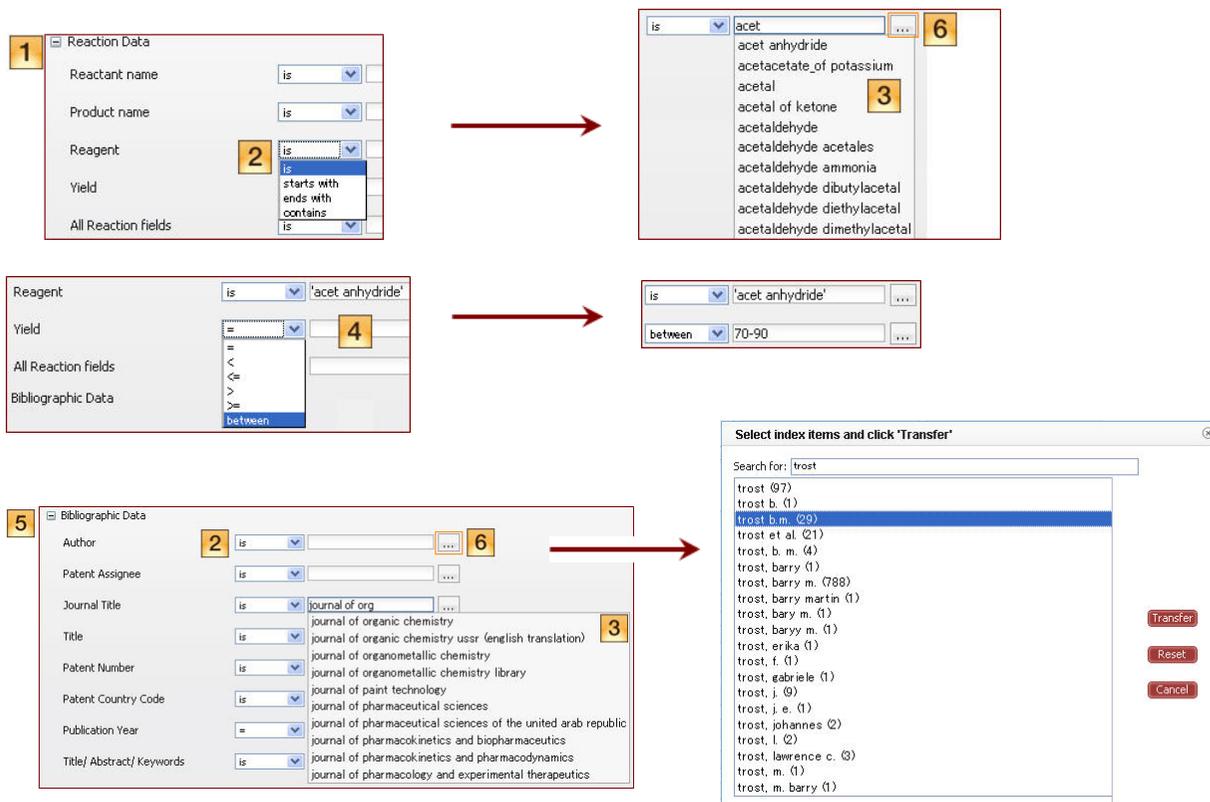
このボタンをクリックすると検索が始まります。検索進行ボックスが現れ、検索のキャンセルまたは、結果の表示を選択できます。

# 反応検索タブフォームベース検索

## Reactions Query tab

### Form-based Search

6



注: フォームベース検索リンクは普段よく使うグループ化されたフィールドが開きます。例、収率や試薬名を含む“Reaction Data”フォーム、ジャーナル名や特許の出願機構名を含む“Bibliographic Date”フォーム。“All Reaction fields”と“Title/ Abstract/ Keywords”フィールドはテキストフィールドです。複数のフィールドを演算子で結び、組み合わせ検索することができます。

#### 1 反応データ

反応物名、生成物名、試薬、収量や全反応フィールド  
フィールドをいくつか選択した時には、ANDで検索されます

#### 2 演算子

ドロップダウンメニューから適切な演算子を選択

#### 3 選択リスト

入力を始めると選択候補が現れます

#### 4 数値フィールド

テキストボックスに数字や値域を入力し、演算子を選択

#### 5 書誌情報 (Bibliographic Data)

著者、特許出願人、ジャーナルタイトル、タイトル、特許番号、特許国コード、出版年やタイトル/要旨/キーワードのフィールドが AND 検索できます。

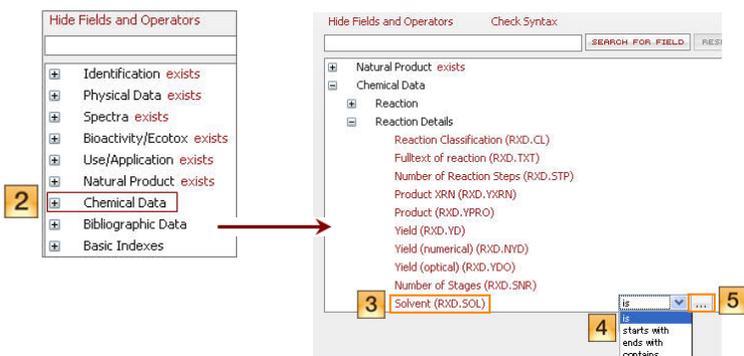
#### 6 インデックス機能の拡張(Expand Index feature)

⋮ ボタンをクリックするとインデックス一覧が表示され、いくつかのタームを入力することができます。Transfer ボタンをクリックすると、選択したデータを検索に追加します

# 反応検索タブーアドバンス検索 7

## Reactions Query tab Advanced Search

1 Show Fields and Operators



Hide Fields and Operators

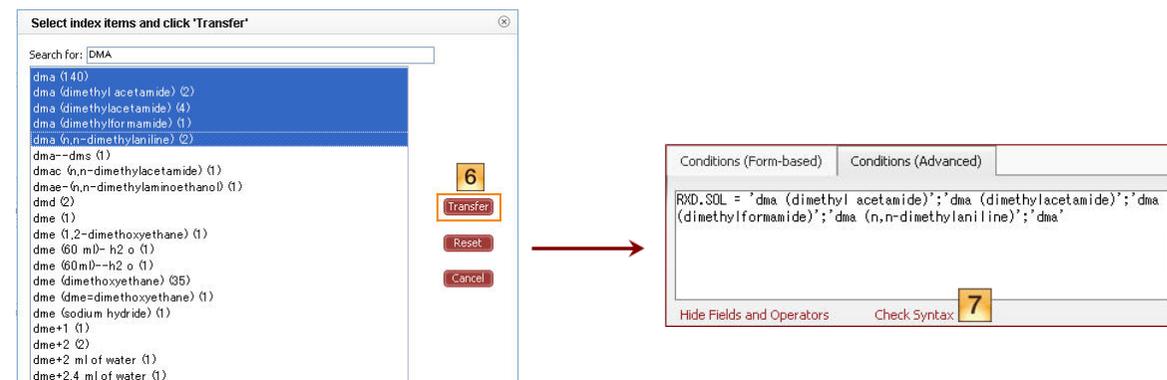
- Identification exists
- Physical Data exists
- Spectra exists
- Bioactivity/Ecotox exists
- Use/Application exists
- Natural Product exists
- Chemical Data**
- Bibliographic Data
- Basic Indexes

Hide Fields and Operators Check Syntax

SEARCH FOR FIELD RES

- Natural Product exists
  - Chemical Data
    - Reaction
      - Reaction Details
        - Reaction Classification (RXD.CL)
        - Fulltext of reaction (RXD.TXT)
        - Number of Reaction Steps (RXD.STP)
        - Product XRN (RXD.YXRN)
        - Product (RXD.YPRO)
        - Yield (RXD.YD)
        - Yield (numerical) (RXD.NYD)
        - Yield (optical) (RXD.YDO)
        - Number of Stages (RXD.SNR)
        - Solvent (RXD.SOL)**

starts with  
ends with  
contains



Select index items and click 'Transfer'

Search for: DMA

- dma (140)
- dma (dimethyl acetamide) (2)
- dma (dimethylacetamide) (4)
- dma (dimethylformamide) (1)
- dma (n,n-dimethylaniline) (2)
- dma--dms (1)
- dmac (n,n-dimethylacetamide) (1)
- dmas--(n,n-dimethylaminoethano) (1)
- dmd (2)
- dme (1)
- dme (1,2-dimethoxyethane) (1)
- dme (60 ml)- h2 o (1)
- dme (60 ml)- h2 o (1)
- dme (dimethoxyethane) (35)
- dme (dme=dimethoxyethane) (1)
- dme (sodium hydride) (1)
- dme+1 (1)
- dme+2 (2)
- dme+2 ml of water (1)
- dme+2.4 ml of water (1)

Transfer  
Reset  
Cancel

Conditions (Form-based) Conditions (Advanced)

RXD.SOL = 'dma (dimethyl acetamide)';'dma (dimethylacetamide)';'dma (dimethylformamide)';'dma (n,n-dimethylaniline)';'dma'

Hide Fields and Operators Check Syntax

注: アドバンス検索では指定したフィールドと構造式や反応式を組み合わせて、検索することができます。

### 1 フィールドとオペレーターの表示

Show Fields and Operators をクリックし、ナビゲーションリストからフィールドコードを選択します

### 2 フィールドの分類

+ をクリックしますとフィールドリストが展開します

### 3 フィールドの選択

検索したいフィールドをクリックします

### 4 オペレーター

ドロップダウンメニューからオペレーションを選択します

### 5 インデックス機能の拡張(Expand Index feature)

... ボタンをクリックするとインデックス一覧が表示され、いくつかのタームを入力することができます。

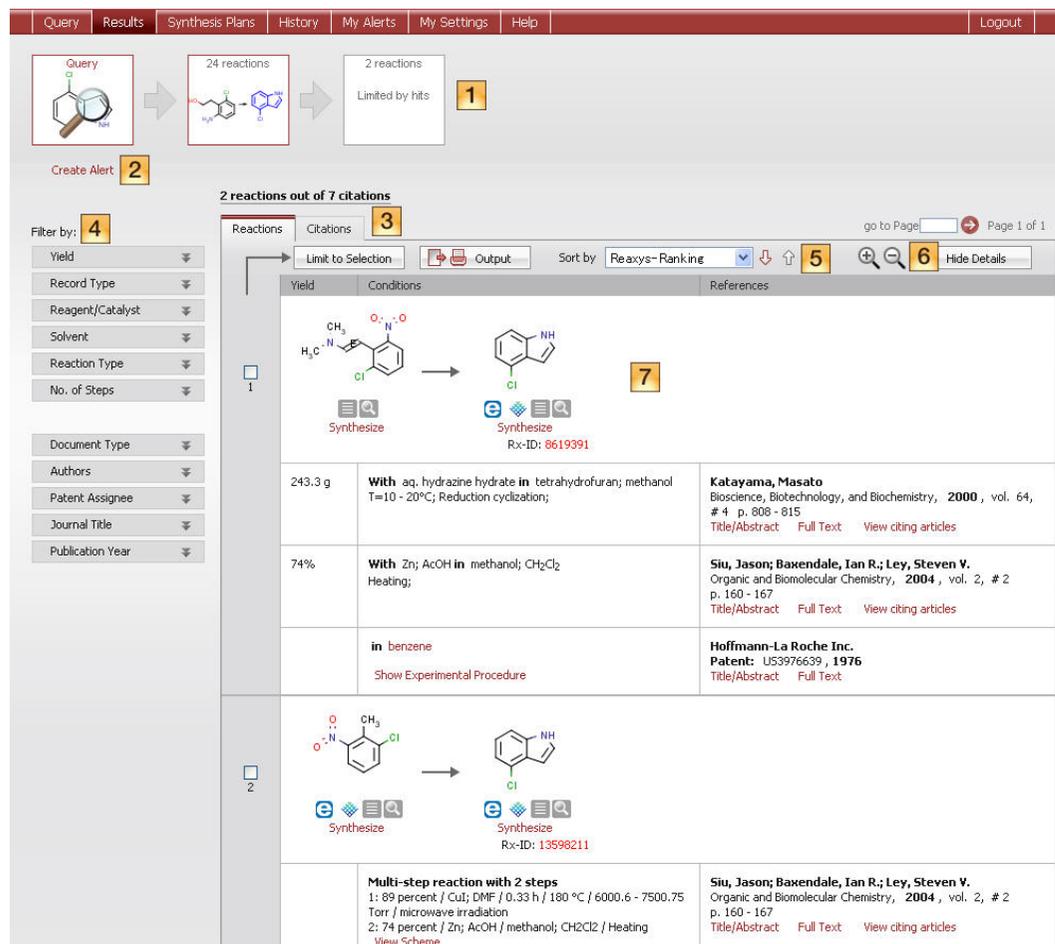
### 6 フィールドデータの転送(Transfer the field data)

必要なデータエントリーを選択し、Transfer ボタンをクリックすると、選択したデータを検索に追加します

### 7 構文のチェック(Check Syntax)

手でフィールドコードを“Advanced Search”ボックスに入力する場合、“Check Syntax”をクリックすると、検索式が正しいかどうか確認します

# 反応検索結果 8 全体の概要



The screenshot shows the Reaxys search results page. At the top, there are tabs for Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, and Logout. Below the navigation bar, a search flow diagram shows a query leading to 24 reactions, which are then limited to 2 reactions based on hits. A 'Create Alert' button is also visible. On the left, a 'Filter by' sidebar allows filtering by Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps, Document Type, Authors, Patent Assignee, Journal Title, and Publication Year. The main results area shows '2 reactions out of 7 citations'. The first reaction is selected, showing its chemical structure, yield (243.3 g), conditions (aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; methanol; T=10 - 20°C; Reduction cyclization;), and reference (Katayama, Masato, Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000, vol. 64, # 4 p. 808 - 815). The second reaction shows a yield of 74%, conditions (Zn; AcOH in methanol; CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>; Heating;), and reference (Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V., Organic and Biomolecular Chemistry, 2004, vol. 2, # 2 p. 160 - 167). A third reaction is partially visible, showing a multi-step reaction with 2 steps and reference (Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V., Organic and Biomolecular Chemistry, 2004, vol. 2, # 2 p. 160 - 167).

## 1 ブレッドクラム機能

グラフィカルナビゲーションにより結果解析の軌跡が確認できます。

## 2 アラートの設定(Create Alert)

リンクをクリックして、アラートを設定

## 3 反応/引用タブ(Reactions/Citations)

反応タブが、デフォルトで表示されますが、引用タブをクリックして切り替えられます。

## 4 絞り込み機能 (Filter by)

反応情報(収量、レコードタイプ、試薬/触媒、溶媒、反応タイプ、ステップ数)や書誌情報(文献タイプ、著者、特許出願人、雑誌名、発行年)へリンクしたフィルターによって結果を絞り込み

## 5 ツールバー

選択したものに限定する(Limit to selection)、アウトプット(Output)、ソート(Sort by)へアクセス

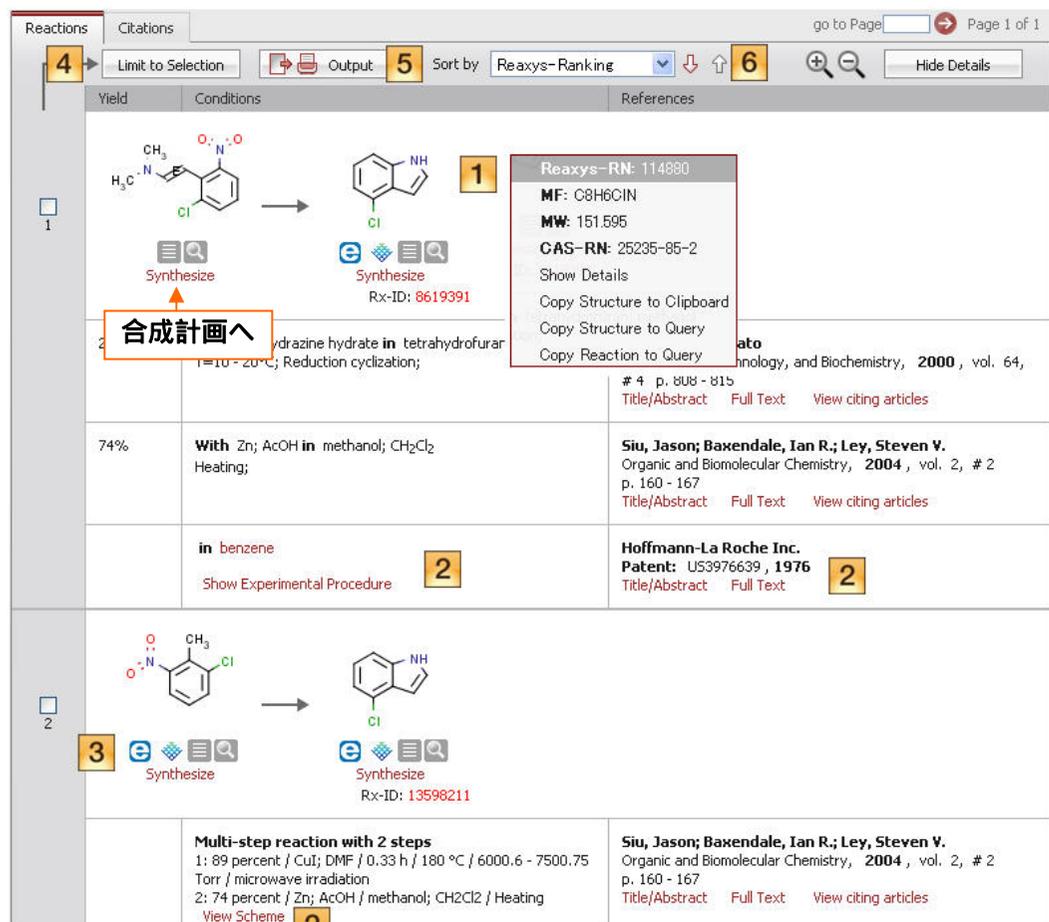
## 6 拡大/縮小ツール

表示された化学構造式のサイズを拡大/縮小します

## 7 反応検索結果

表で必要な情報を表示し、結果を素早く一覧できます。要旨、原著論文・特許(全文)やScopusの関連情報にアクセスできます。

## 反応検索結果 反応タブ



Reactions Citations go to Page Page 1 of 1

4 Limit to Selection 5 Output 6 Sort by Reaxys-Ranking Hide Details

Yield	Conditions	References
74%	With Zn; AcOH in methanol; CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> Heating;	<b>Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V.</b> Organic and Biomolecular Chemistry, <b>2004</b> , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text View citing articles
	in benzene Show Experimental Procedure	<b>Hoffmann-La Roche Inc.</b> Patent: US3976639, 1976 Title/Abstract Full Text
	Multi-step reaction with 2 steps 1: 89 percent / CuI; DMF / 0.33 h / 180 °C / 6000.6 - 7500.75 Torr / microwave irradiation 2: 74 percent / Zn; AcOH / methanol; CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> / Heating View Scheme	<b>Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V.</b> Organic and Biomolecular Chemistry, <b>2004</b> , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text View citing articles

☰ をクリック又は構造式をクリックするとサブアイテムや情報のポップアップメニューが表示

### 1 付加情報/サブアイテム

Reaxys -RN: Reaxys 番号

MF: 分子式

CAS-RN: CAS 番号

Show Details: 物性値、スペクトルデータなどの情報を表示

Copy Structure to Clipboard: クリップボードへ化学構造式をコピー

### 2 詳しい書誌情報へアクセス

タイトル/要旨、引用文献の全文の表示や SCOPUS へアクセス。特許からは、該当する実験項(実施例)本文を表示。合成計画としての多段階反応のスキームを表示

### 3 購入可能

購入可能な物質にアイコンが表示され、適切なプラットフォームへ (eMolecules / ACD) リンク

### 4 選択したものに限定 (Limit to Selection)

ヒットしたうちの重要な反応を選択し、このボタンをクリックすると限定したヒットセットを表示。

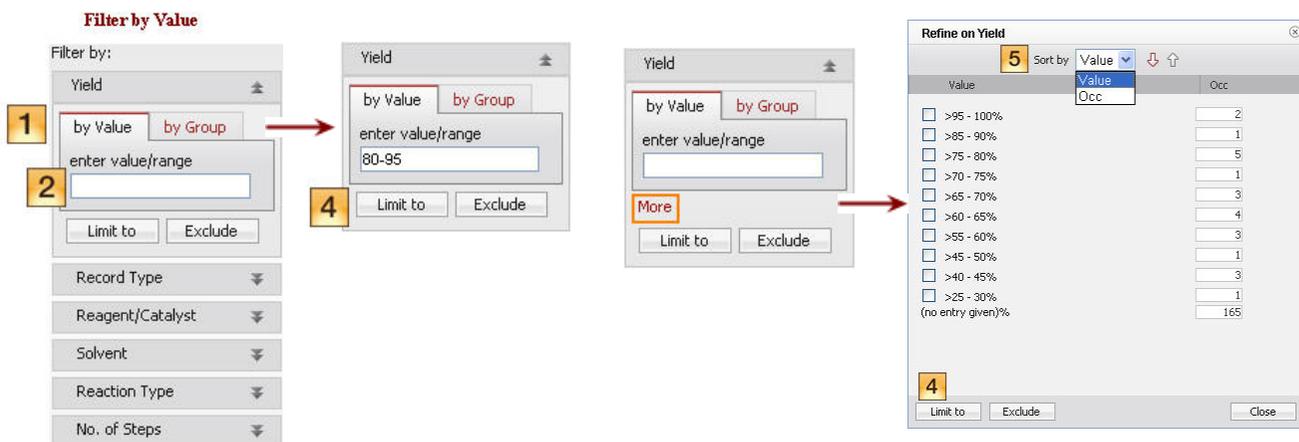
### 5 アウトプット (Output)

必要なフォーマットでデータをエクスポート

### 6 ソート (Sort by)

Reaxys 番号、収率、Reaxys ランキング等で降順 ↓・昇順 ↑ ソート

## 反応検索結果タブ 10 絞り込み (Filter by)



### 1 絞り込み (Filter by)

反応詳細へリンクした選択フィルター

- 収量 (Yield)
- レコードタイプ (Record Type)
- 試薬/触媒 (Reagent/Catalyst)
- 溶媒 (Solvent)
- 反応タイプ (Reaction Type)
- ステップ数 (No. of Steps)

### 2 by Value タブ

値もしくは値の範囲を入力

### 3 by Group タブ

制限又は除外したい項目のボックスにチェックを入れる

### 4 制限(Limit to)/除外(Exclude)ボタン

実行したい動作のボタンをクリック

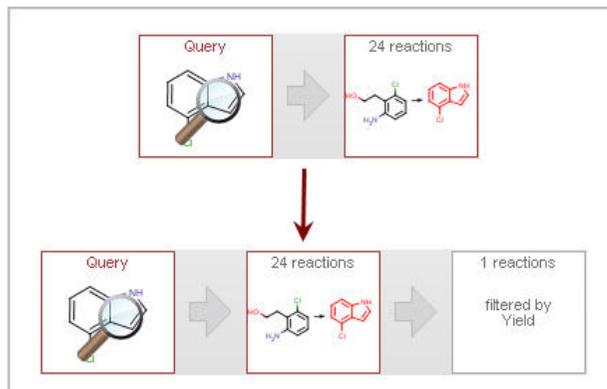
### 5 フィルターのリファイン

More ボタンをクリックすると、選択項目が全て展開画面で表示されます。データの値や頻度でソートできます

### 6 絞り込み

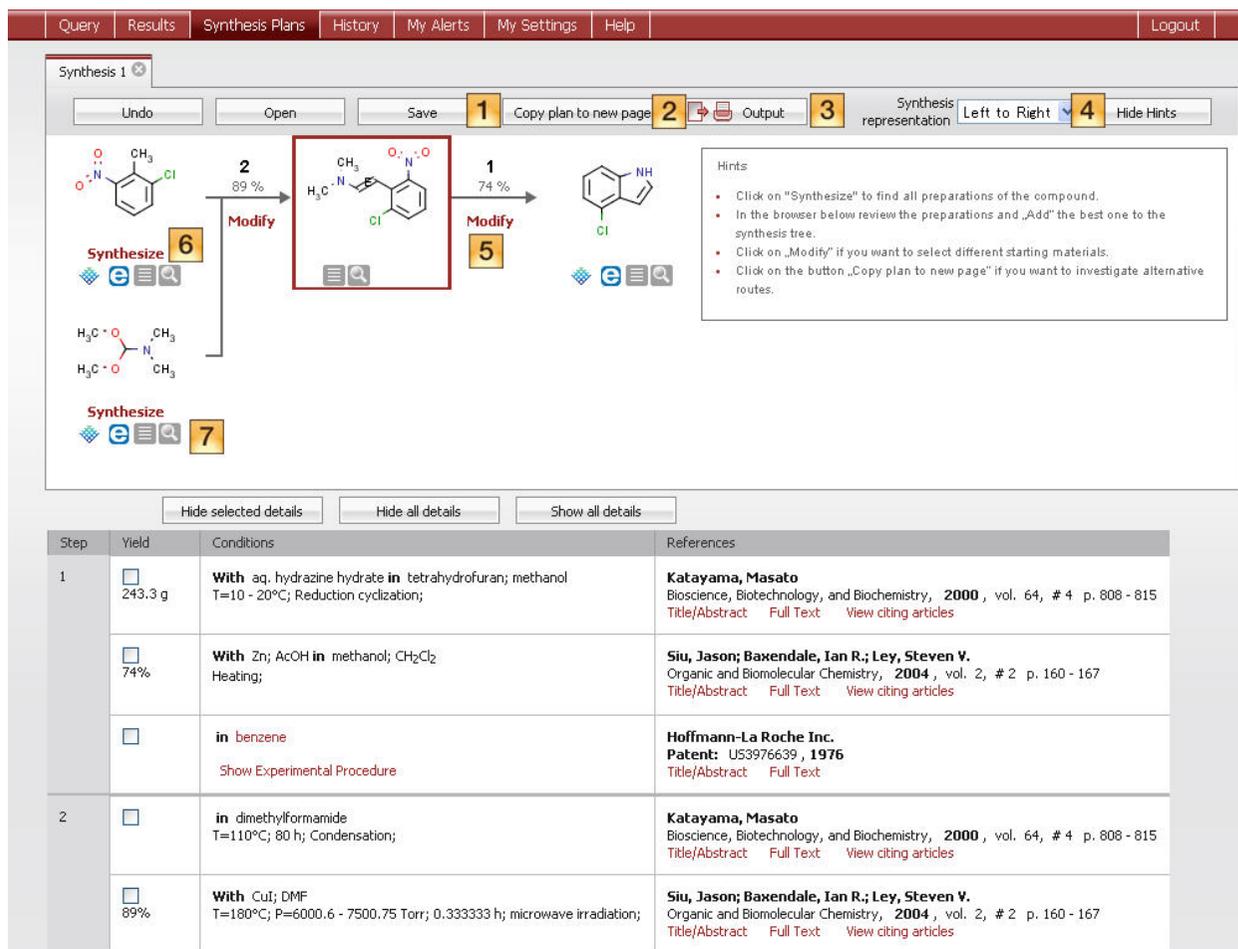
書誌情報にリンクしたフィルター

- 文献タイプ (Document Type)
- 著者 (Authors)
- 特許発願人 (Patent Assignee)
- ジャーナルタイトル (Journal Title)
- 出版年 (Publication Year)

# 合成計画 11

## Synthesis Plans



The screenshot shows the Reaxys Synthesis Plans interface. At the top, there are navigation tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, and Logout. Below the tabs is a toolbar with buttons for Undo, Open, Save, Copy plan to new page, Output, Synthesis representation (Left to Right), and Hide Hints. The main area displays a reaction scheme with three steps. Step 1 is highlighted with a red box and a 'Modify' button. Step 2 is also highlighted with a red box and a 'Modify' button. Step 3 is highlighted with a red box and a 'Synthesize' button. A 'Hints' box on the right provides instructions for using the interface. Below the reaction scheme are buttons for 'Hide selected details', 'Hide all details', and 'Show all details'. At the bottom, there is a table with columns for Step, Yield, Conditions, and References.

Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 243.3 g	With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; methanol T=10 - 20°C; Reduction cyclization;	<b>Katayama, Masato</b> Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, <b>2000</b> , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text View citing articles
	<input type="checkbox"/> 74%	With Zn; AcOH in methanol; CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> Heating;	<b>Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V.</b> Organic and Biomolecular Chemistry, <b>2004</b> , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text View citing articles
	<input type="checkbox"/>	in benzene <a href="#">Show Experimental Procedure</a>	<b>Hoffmann-La Roche Inc. Patent: US3976639, 1976</b> Title/Abstract Full Text
2	<input type="checkbox"/>	in dimethylformamide T=110°C; 80 h; Condensation;	<b>Katayama, Masato</b> Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, <b>2000</b> , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text View citing articles
	<input type="checkbox"/> 89%	With CuI; DMF T=180°C; P=6000.6 - 7500.75 Torr; 0.333333 h; microwave irradiation;	<b>Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V.</b> Organic and Biomolecular Chemistry, <b>2004</b> , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text View citing articles

注: 多段階反応のすべてのスキームが合成計画(Synthesis Plan)のページに表示されます。多段階反応条件の下での"View scheme"をクリックすると 一覧で見やすいように新しい合成計画のページにスキームが表示されます。

- ☰ をクリック又は構造式をクリックするとサブアイテムや情報のポップアップメニューが表示
- 1 取り消し (Undo)、開く(Open)、保存(Save)ボタン**  
最後の動作の取り消し、合成計画を開くまたは、保存ボタン
  - 2 新しいページに計画をコピー(Copy plan to new page)**  
現在の合成計画を新しいタブで開けば、他の逆合成の検索ができます
  - 3 出力(Output)**  
合成計画を出力します
  - 4 合成計画の表示方法**  
垂直ツリーか水平ツリーで表示するかを選択
  - 5 変更 (Modify)**  
すでに表示された合成ステップを破棄して他の合成方法を検討しなします
  - 6 合成 (Synthesize)**  
Synthesize をクリックし、その化合物の様々な合成方法の一覧を表示。ステップを選択し、Add ボタンをクリックすると逆合成経路に組み込みます
  - 7 購入可能**  
購入可能な物質にアイコンが表示され、適切なプラットフォームへ (eMolecules / ACD)リンク

**Output Reaction Results**

**Output** 1  Reactions Table  Reactions Citation Table

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

Microsoft Word  Microsoft Excel

---

Include the following headline 3

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

**Output contains** 5

- include Structures
- include Experimental Procedure
- All available data
- Identification data only
- Hit data only

**Output**  Reactions Table  Reactions Citation Table

**Output contains** 5

- include Abstracts
- include Structures
- include Reactions
- All available data
- Hit data only

**Output**  Substance Grid  Substance Details Table  Substance Citations Table

**Output contains** 5

- include Structures
- All available data
- Identification data only
- Hit data only
- Select data

OK Cancel 6

Select All

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

<input checked="" type="checkbox"/> <b>Physical Data</b>	<input checked="" type="checkbox"/> <b>Spectra</b>	<input checked="" type="checkbox"/> <b>Use/Application</b>	<input checked="" type="checkbox"/> <b>Bioactivity/Ecotox</b>
<input checked="" type="checkbox"/> Melting Point (55)	<input checked="" type="checkbox"/> IR Spectroscopy (43)	<input checked="" type="checkbox"/> Use (18)	<input checked="" type="checkbox"/> Pharmacological Data (15)
<input checked="" type="checkbox"/> Crystal Property Description (38)	<input checked="" type="checkbox"/> UV/VIS Spectroscopy (18)		<input checked="" type="checkbox"/> Ecotoxicology (2)
<input checked="" type="checkbox"/> Solubility (MCS) (16)	<input checked="" type="checkbox"/> NMR Spectroscopy (12)		<input checked="" type="checkbox"/> Concentration in the Environment (1)

## 1 アウトプット (Output)

エクスポートする結果のタイプを選択

## 2 出力形式(to)

エクスポートファイルのフォーマットを決定 (PDF/Print, XML, Microsoft Word or Excel, TXT for Literature Management Systems, or RD File)

## 3 見出し表示機能 (Include the following headline)

チェックボックスにチェックを入れ、見出しを入れると文書のどのページにも見出しが入ります

## 4 アウトプットの範囲 (Output range)

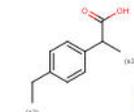
ヒットしたデータのどれをエクスポートするかを決められます: 全ヒット (All Hits), 選択したヒット (Selected Hits, アウトプットボタンをクリックする前に選択), 範囲 (Range, ボックスに入力)

## 5 アウトプットに含まれるもの

**反応アウトプット:** 構造/実験項、全ての利用できるデータ、もしくは、identification data のみ  
**物質アウトプット:** 構造と全ての利用可能なデータまたは identification data のみ、選択データ  
**引用文献アウトプット:** 構造と要旨を含めるかを選択

## 6 OK ボタン

OK ボタンをクリックし、エクスポートを開始します。やめるときには、Cancel ボタンをクリックします。

Query	Results	Synthesis Plans	History	My Alerts	My Settings	Help	Logout
Combine hitsets <b>5</b> Select at least two hitsets for combining							
<b>4</b>	<input type="checkbox"/>	<b>1</b>	Text/Authors: (Authors: 'snyder, p*') AND (Publication Year: All years)	26 citations	View	Store	Today
	<input type="checkbox"/>	<b>2</b>	Text/Authors: (Authors: 'nasielski') AND (Publication Year: All years)	24 citations	View	Store	Today
	<input type="checkbox"/>	<b>3</b>	Text/Authors: (Authors: 'nasielski') AND (Publication Year: All years)	PhD Work 24 citations ULB	View	Remove	2009-01-23
	<input type="checkbox"/>	<b>4</b>		Project 5HT2b 620 substances To test	View	Remove	2009-01-23
	<input type="checkbox"/>	<b>5</b>	Substances: As drawn				



If 2 hits selected



If >2 hits selected

注:履歴の表はクエリーからの結果、または、結果の解析からの全ての現在のセッションのヒットセットを表示します。最も最新のヒットセットはリストの最初に表示されます。ここで、グラフィカルな集合演算が行えます。

## 1 一時的なリスト

上部の表は、現在のセッションの全てのヒットセット

“View”をクリックすると、結果ページでのヒットセットを表示

“Store”をクリックすると (ファイル名とコメントを入力) リストが保存されます

## 2 セーブされたリスト

下部の表は、ユーザーによって保存されたヒットセット。ユーザーがログインしたとき、全ての保存されたヒットセットが表示されます。“Remove”をクリックすれば、保存したリストを消すことができます。

## 3 クエリー

“Edit”をクリックするとクエリーページでのヒットセットと関係のあるクエリーを表示します。

フィルターをかけたヒットセットはこの列では表示されませんのでご注意ください。

## 4 ヒットセットの集合演算

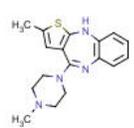
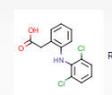
5 チェックボックスにチェックをし、2つ以上の検索を選択し、“Combine hitsets”ボタンをクリックするといくつかの集合演算選択画面が表示されます。

## アラート機能 14 My Alert

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

To create a new Alert perform a new search and click the 'Create Alert' link on the results page **1**

Delete **6**

Name	Query	Description	Date created	Last run	Frequency
olanzapin		Reactions: Product, As drawn, Yield>86 Comment: Olanzapin Synthesis Yield>86%	2009-10-19	2009-10-21 hits: 11	Monthly
testidiclofena		Reactions: Product, As drawn	10-22	2009-10-22 hits: 79	After each update

**5**  **1** Modify alert →

**2**  **2** View results

**3** Modify alert →

**4** Save

My Alerts 画面には、設定しているアラートのリストと各アラートの検索条件が表示されています。

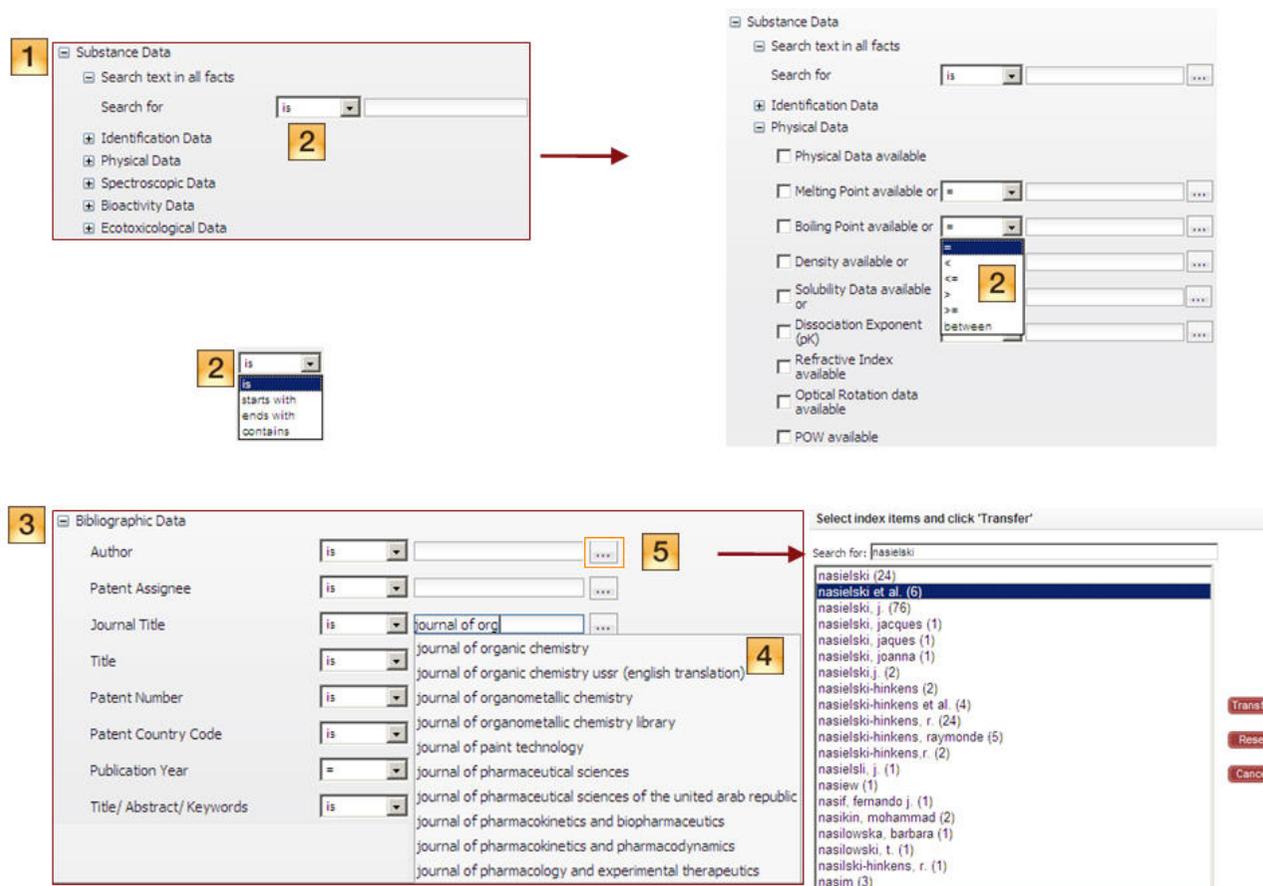
- 1 アラートの設定方法**  
検索結果画面の **Create Alert** リンクをクリックした後、検索条件を登録し、**Save** ボタンをクリックします
- 2 View results ボタン**  
アラートの検索結果画面を表示します
- 3 アラートの変更(Modify alert)**
- 4 アラートの名称(Name of Alert)、コピー送付先(Copy to)、注釈(Comment/Description)、配信頻度(Frequency)、メールのフォーマット(Email format)を変更することができます。修正後、Save ボタンをクリックしてください**
- 5 アラートの削除>Delete)**
- 6 削除したいアラート前のチェックボックスにチェックを入れ、Delete ボタンをクリックします**

注意: アラート機能のご利用には、ユーザー登録が必要です。  
設定したアラートは Reaxys サーバー上に保存され、指定したタイミングで、アラートの検索条件と合致したレコードが Reaxys に搭載されたとき、自動的に実行され、結果がメールで配信されます。

- 1 構造式/反応ボックス**  
このウィンドウは、必要により付加的な検索条件も付加された構造式を表示
- 2 検索条件**  
構造検索のタイプを決定: 完全一致 (As Drawn)、部分構造検索 (Substructure search)
- 3 付加的検索オプション**  
検索に変更が必要などときには、付加的オプションを選択
- 4 他のオプション (Further options)**  
関連 Markush 構造や追加の縮環なしなどのオプションを追加できます
- 5 検索条件の追加 (Add further search conditions)**  
このリンクをクリックにより物質や書誌情報による検索条件を追加(検索は 6 を参照)。
- 6 検索 (Search)**  
このボタンをクリックして検索を開始します。

#### 特定の化合物の情報検索方法

1. 物質・物性値タブを選択し、構造式入力ウィンドウをダブルクリック
2. お好みの構造式エディターで検索したい化合物の構造式を描いてから、エディターを閉じて、Reaxys に戻ります
3. サーチボタンをクリックし、結果を閲覧



The screenshot illustrates the 'Substance Data' search interface. It shows a search for 'is' with a dropdown menu for operators like 'starts with', 'ends with', and 'contains'. The 'Bibliographic Data' section is also visible, with a search for 'journal of org' and a list of results including 'nasielski (24)', 'nasielski et al. (6)', etc. A 'Transfer' button is shown next to the results list.

注: フォームベース検索リンクは普段よく使うグループ化されたフィールドが開きます。  
例、収率や試薬名を含む”Reaction Data”フォーム、ジャーナル名や特許の出願機構名を含む”Bibliographic Date”フォーム。  
各フィールド間で演算子を用いることができます。

## 1 Substance Data

テキストで全ての facts の検索、識別情報、物性情報、スペクトルデータ、生物活性情報、環境毒性情報を検索できます(このテキストボックスにいくつかのタームを入力し、セミコロン”;”で区切ると OR 検索ができます)。

フィールドをいくつか選択した時には、AND で検索されます

## 2 演算子

ドロップダウンメニューから適切な演算子を選択; 数値情報フィールドの場合、テキストボックスに数や閾値を入力

## 3 書誌情報 (Bibliographic Data)

著者、特許出願者、ジャーナルタイトル、タイトル、特許番号、特許国コード、出版年やタイトル/要旨/キーワードのフィールドが AND 検索できます。

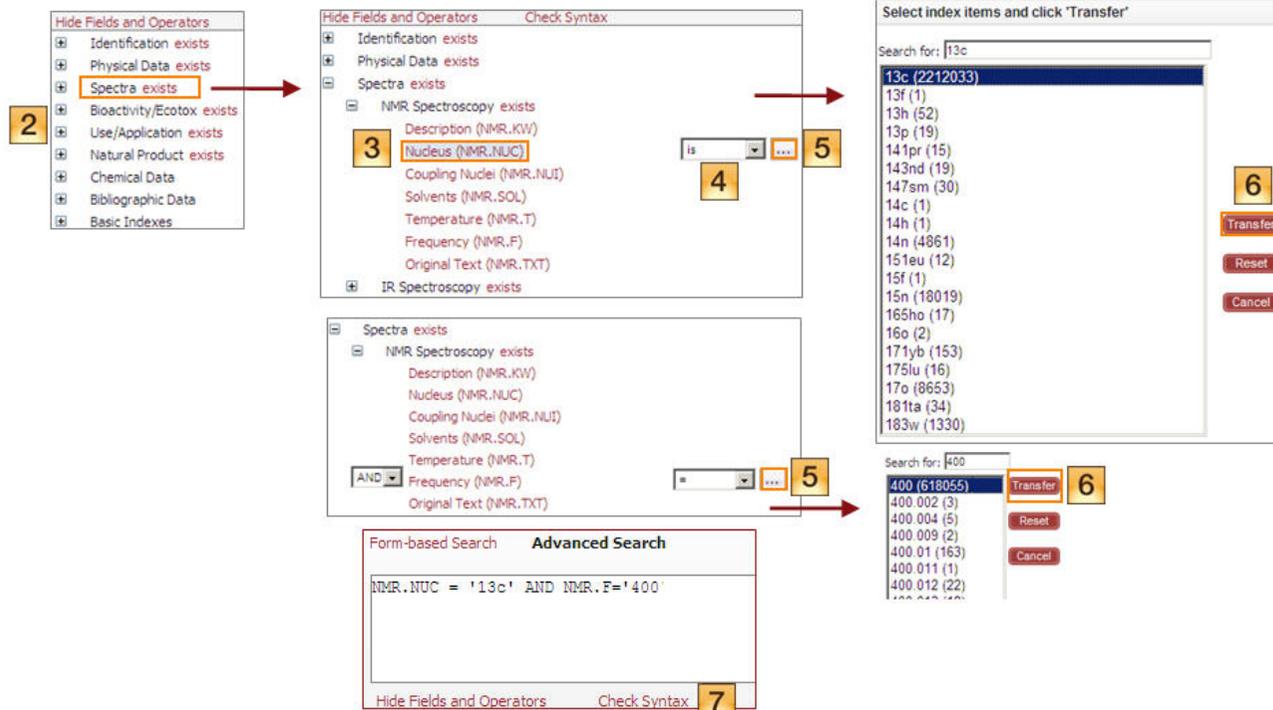
## 4 選択リスト

入力を始めると選択候補が現れます

## 5 インデックス機能の拡張(Expand Index feature)

☰ ボタンをクリックするとインデックス一覧が表示され、いくつかのタームを入力することができます。Transfer ボタンをクリックすると、選択したデータを検索に追加します

1 Show Fields and Operators



1 フィールドとオペレーターの表示

Show Fields and Operators をクリックし、ナビゲーションリストからフィールドコードを選択します

2 フィールドの分類

+ をクリックしますとフィールドリストが展開します

3 フィールドの選択

検索したいフィールドをクリックします

4 オペレーター

ドロップダウンメニューからオペレーションを選択します

5 インデックス機能の拡張(Expand Index feature)

... ボタンをクリックするとインデックス一覧が表示され、いくつかのタームを入力することができます。

6 フィールドデータの転送(Transfer the field data)

必要なデータエントリーを選択し、Transfer ボタンをクリックすると、選択したデータを検索に追加します

7 構文のチェック(Check Syntax)

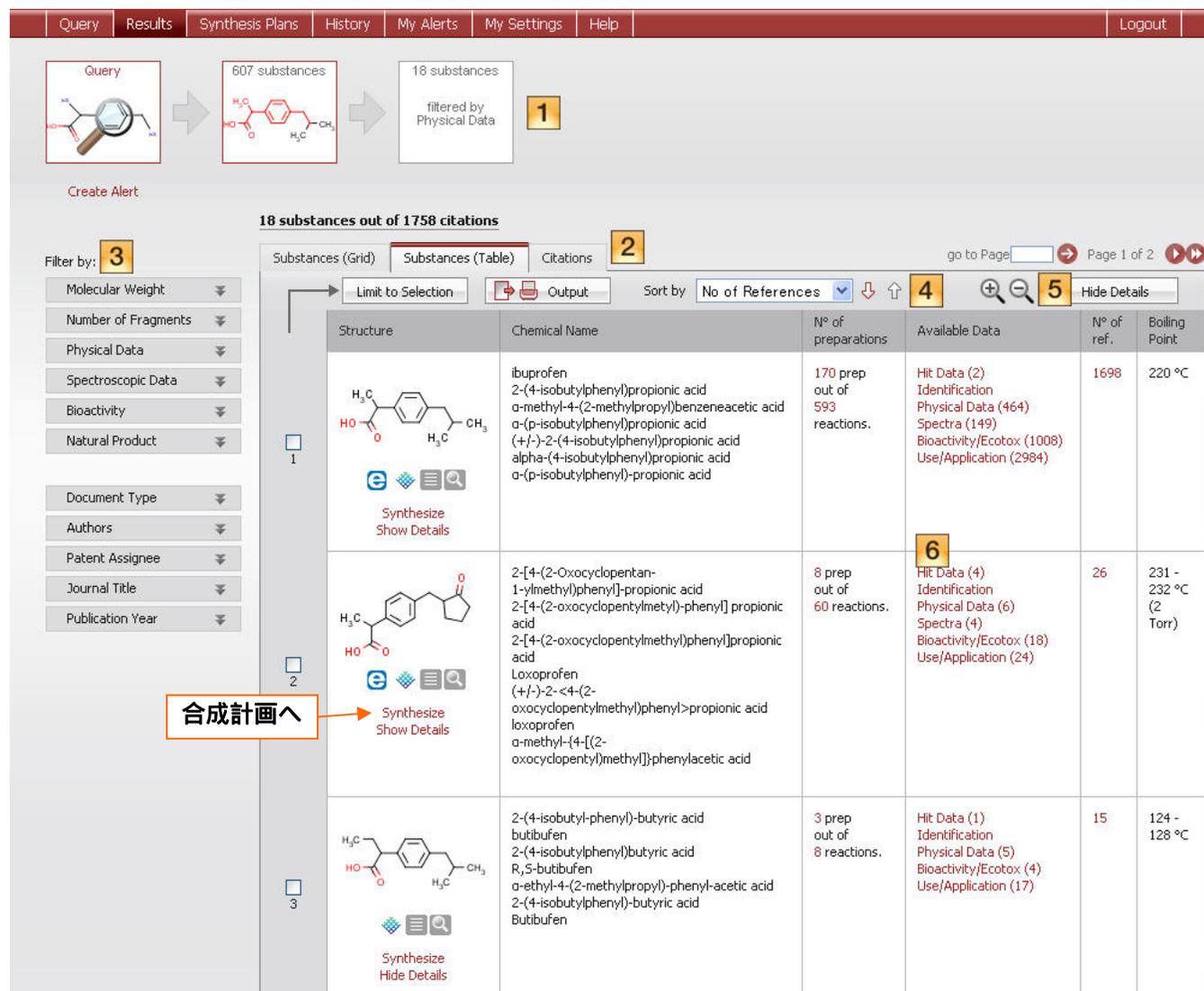
手動でフィールドコードを“Advanced Search”ボックスに入力する場合、“Check Syntax”をクリックすると、検索式が正しいかどうか確認します

注: アドバンス検索では指定したフィールドと構造式や反応式を組み合わせ、検索することができます。

# 物質と物性値 18

## Substances and Properties

### 結果画面の概要



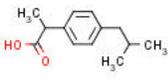
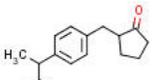
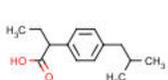
Query → 607 substances → 18 substances filtered by Physical Data **1**

18 substances out of 1758 citations

Filter by: **3**

Substances (Grid) Substances (Table) Citations **2**

Limit to Selection Output Sort by No of References **4** Hide Details **5**

Structure	Chemical Name	N° of preparations	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
	ibuprofen 2-(4-isobutylphenyl)propionic acid α-methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetic acid α-(p-isobutylphenyl)propionic acid (+/-)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid alpha-(4-isobutylphenyl)propionic acid α-(p-isobutylphenyl)-propionic acid	170 prep out of 593 reactions.	Hit Data (2) Identification Physical Data (464) Spectra (149) Bioactivity/ECotox (1008) Use/Application (2984)	1698	220 °C
	2-[4-(2-Oxocyclopentyl-1-ylmethyl)phenyl]-propionic acid 2-[4-(2-oxocyclopentylmethyl)-phenyl] propionic acid 2-[4-(2-oxocyclopentylmethyl)phenyl]propionic acid Loxoprofen (+/-)-2-(4-(2-oxocyclopentylmethyl)phenyl)propionic acid loxoprofen α-methyl-4-[(2-oxocyclopentyl)methyl]phenylacetic acid	8 prep out of 60 reactions.	<b>6</b> Hit Data (4) Identification Physical Data (6) Spectra (4) Bioactivity/ECotox (18) Use/Application (24)	26	231 - 232 °C (2 Torr)
	2-(4-isobutyl-phenyl)-butyric acid butibufen 2-(4-isobutylphenyl)butyric acid R <sub>5</sub> -butibufen α-ethyl-4-(2-methylpropyl)-phenyl-acetic acid 2-(4-isobutylphenyl)-butyric acid Butibufen	3 prep out of 8 reactions.	Hit Data (1) Identification Physical Data (5) Bioactivity/ECotox (4) Use/Application (17)	15	124 - 128 °C

合成計画へ 

#### 1 ブレッドクラム機能

グラフィカルナビゲーションにより結果解析の軌跡が確認できます。

#### 2 物質(グリッド)/物質(表)/引用タブ Substances (Grid)/Substances (Table)/Citations Tab

物質(表)タブは、デフォルトで表示されますが、物質(グリッド)や引用タブをクリックして切り替えられます。

#### 3 絞り込み機能(Filter by)

物質情報(分子量、フラグメント数、物性値、分スペクトルデータ、生物活性)や書誌情報(文献タイプ、著者、特許出願人、雑誌名、発行年)へリンクしたフィルターによって結果を絞り込み

#### 4 ツールバー

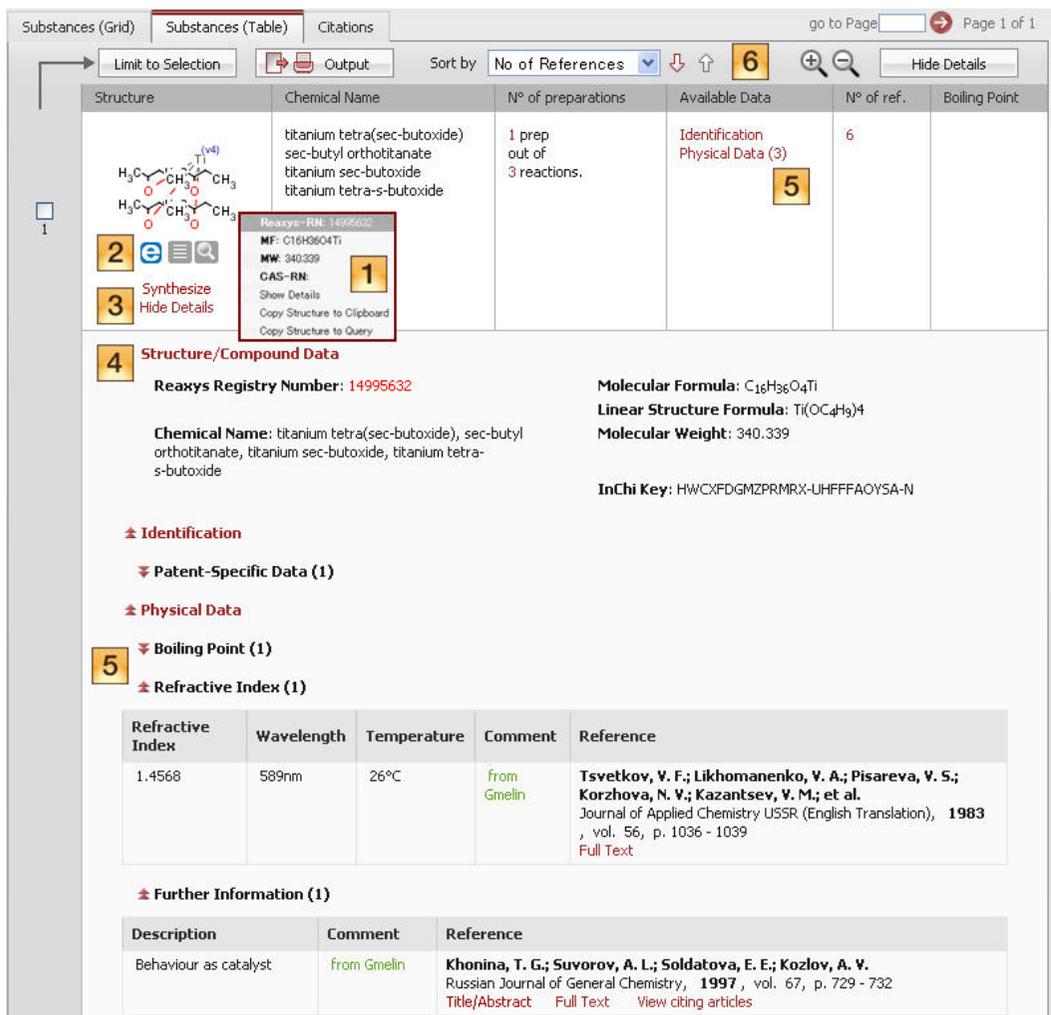
選択したものに限定する(Limit to Selection)、アウトプット(Output)、ソート(Sort by)へアクセス。

#### 5 拡大/縮小ツール

表示された構造式のサイズを拡大/縮小します。

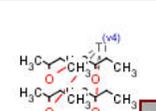
#### 6 物質と物性値の結果表示

表で必要な情報を表示し、結果をさっと素早く一覧できます。要旨、原著論文や特許(全文)や Scopus の関連情報にアクセスできます。



Substances (Grid) | **Substances (Table)** | Citations | go to Page:  Page 1 of 1

Limit to Selection | Output | Sort by: No of References | 6 | Hide Details

Structure	Chemical Name	N° of preparations	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
	titanium tetra(sec-butoxide) sec-butyl orthotitanate titanium sec-butoxide titanium tetra-s-butoxide	1 prep out of 3 reactions.	Identification Physical Data (3)	6	

2 Synthesize  
3 Hide Details

4 Structure/Compound Data

Reaxys Registry Number: 14995632

Chemical Name: titanium tetra(sec-butoxide), sec-butyl orthotitanate, titanium sec-butoxide, titanium tetra-s-butoxide

Molecular Formula: C<sub>16</sub>H<sub>36</sub>O<sub>4</sub>Ti  
Linear Structure Formula: Ti(OC<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>4</sub>  
Molecular Weight: 340.339

InChi Key: HWCXFDGMZPRMRX-UHFFFAOYSA-N

5 Identification

Patent-Specific Data (1)

Physical Data

Boiling Point (1)

Refractive Index (1)

Refractive Index	Wavelength	Temperature	Comment	Reference
1.4568	589nm	26°C	from Gmelin	Tsvetkov, V. F.; Likhomanenko, V. A.; Pisareva, V. S.; Korzhova, N. V.; Kazantsev, V. M.; et al. Journal of Applied Chemistry USSR (English Translation), 1983, vol. 56, p. 1036 - 1039 Full Text

Further Information (1)

Description	Comment	Reference
Behaviour as catalyst	from Gmelin	Khonina, T. G.; Suvorov, A. L.; Soldatova, E. E.; Kozlov, A. V. Russian Journal of General Chemistry, 1997, vol. 67, p. 729 - 732 Title/Abstract Full Text View citing articles

☰ をクリック又は構造式をクリックするとサブアイテムや情報のポップアップメニューが表示

### 1 付加情報/サブアイテム

Reaxys -RN: Reaxys 番号

MF: 分子式

CAS-RN: CAS 番号

Show Details: 物性値、スペクトルデータなどの情報を表示

Copy Structure to Clipboard; クリックボードへ構造をコピー

### 2 購入可能

購入可能な物質にアイコンを表示し、適切なプラットフォーム(eMolecules / ACD)へリンク。

### 3 詳細表示/非表示ボタン(Show/Hide Details)

### 4 構造式/化合物情報

(Structure/Compound Data)

化学構造式/化合物の詳細

### 5 収録情報

この物質について収録されている情報へのリンク(有機、無機と有機金属)Gmelin からの抜粋は“from Gmelin” フラッグが付与

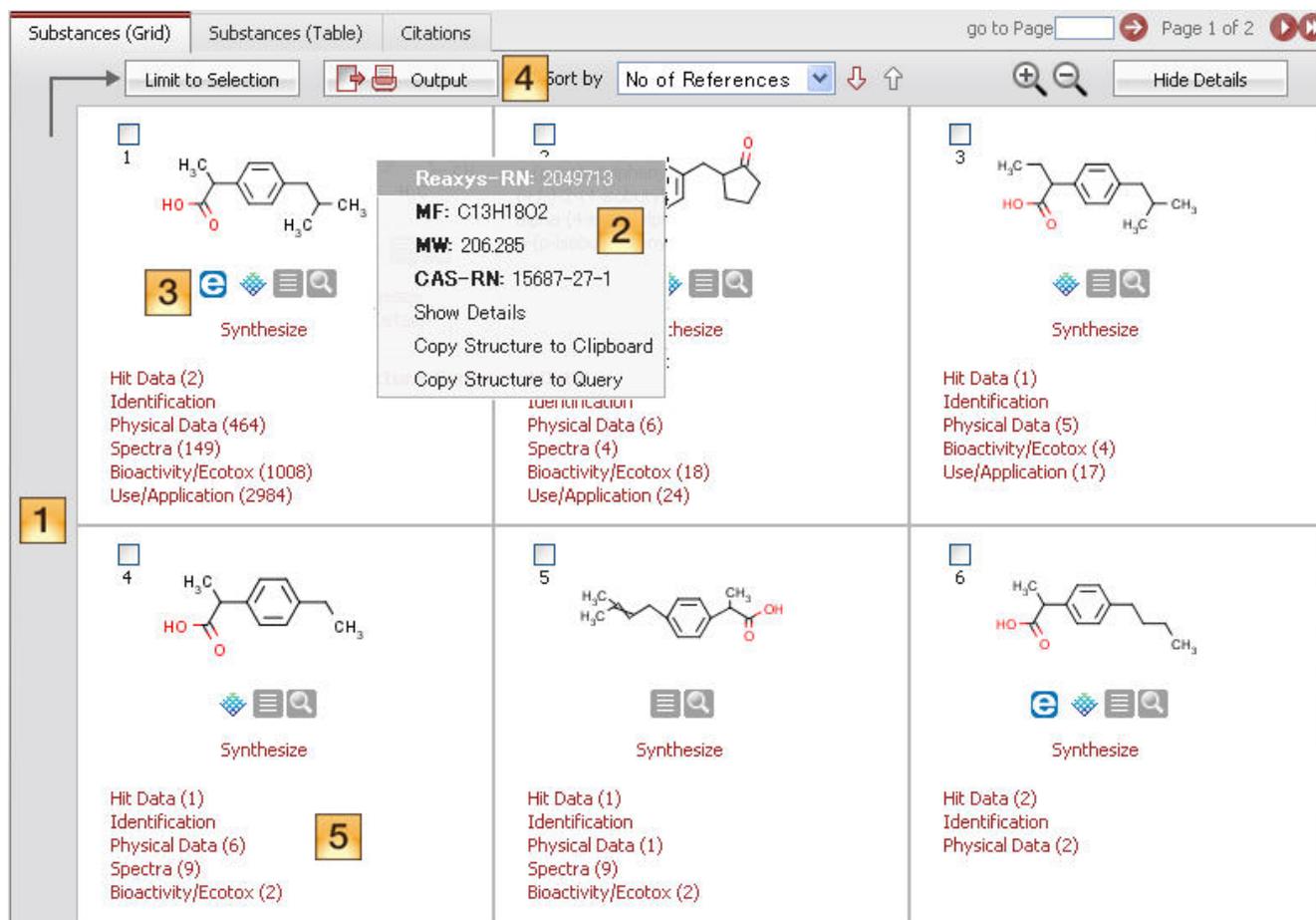
### 6 ソート(Sort by)

Reaxys 番号、分子量、レファレンスの数(デフォルト)等で降順↓・昇順↑ソート

化合物の利用可能なデータの全てのリストは、Show Details をクリックすると開きます。必要なデータのみを見るときは、表中の“Available Data”の項目をクリックしてください

# 物質と物性値(Substances and Properties) 20

## 物質(グリッド)タブ(Substances (Grid) tab)



Substances (Grid) Substances (Table) Citations go to Page: Page 1 of 2

Limit to Selection Output 4 sort by No of References

1

2

3

4

5

Reaxys-RN: 2049713  
MF: C13H18O2  
MW: 206.285  
CAS-RN: 15687-27-1  
Show Details  
Copy Structure to Clipboard  
Copy Structure to Query

Synthesize

Hit Data (2)  
Identification  
Physical Data (464)  
Spectra (149)  
Bioactivity/ECotox (1008)  
Use/Application (2984)

Hit Data (1)  
Identification  
Physical Data (6)  
Spectra (4)  
Bioactivity/ECotox (18)  
Use/Application (24)

Hit Data (1)  
Identification  
Physical Data (5)  
Bioactivity/ECotox (4)  
Use/Application (17)

Hit Data (1)  
Identification  
Physical Data (6)  
Spectra (9)  
Bioactivity/ECotox (2)

Hit Data (1)  
Identification  
Physical Data (1)  
Spectra (9)  
Bioactivity/ECotox (2)

Hit Data (2)  
Identification  
Physical Data (2)

### 1 グリッド表示

結果の素早い概要表示にはグリッド表示が可能

### 2 Additional Information/sub items 付加情報/サブアイテム

構造式をクリックするとサブアイテムや情報のポップアップメニューが表示

Reaxys -RN: Reaxys 番号

MF: 分子式

CAS-RN: CAS 番号

Show Details: 物性値、スペクトルデータなどの情報を表示

Copy Structure to Clipboard; クリックボードへ構造をコピー

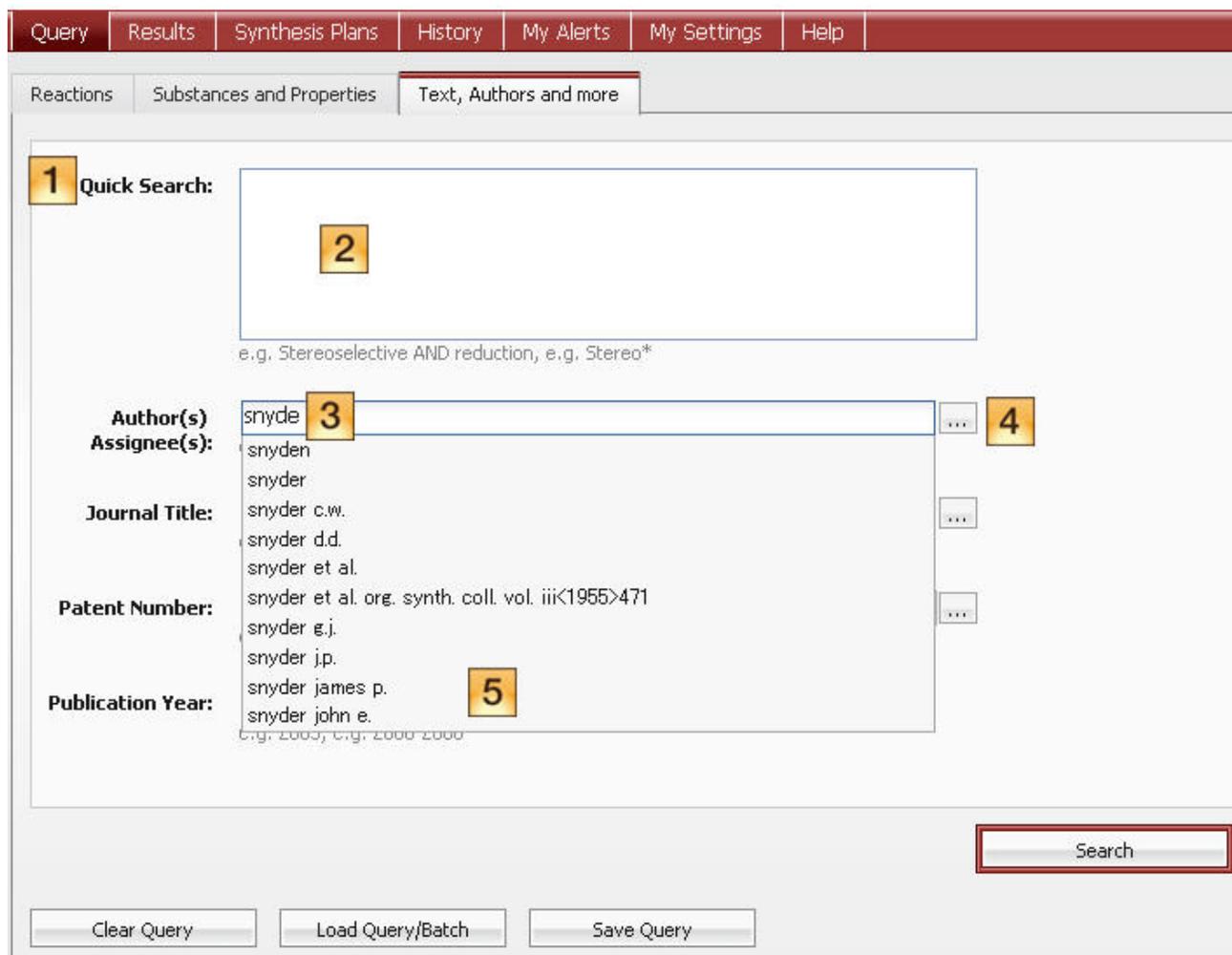
### 3 購入可能

購入可能な物質にアイコンを表示し、適切なプラットフォーム (eMolecules / ACD)へリンク

### 4 アウトプット(Output)

必要なフォーマットでデータをエクスポート。

### 5 この物質についての収録情報一覧



### 1 検索画面

著者、出版(ジャーナルタイトルなど)、特許番号、特許国、フリーテキストや出版年を入力  
フィールドをいくつか指定したときには、AND で検索されます

### 2 Quick Search

フリーテキストを入力し、論理演算子で掛け合わせ検索できます。  
ワイルドカードも利用可能です。  
ワイルドカード  
"\*" = 0 文字以上を置き換えます  
"?" = 一文字を置き換えます

### 3 テキストフィールド/選択リスト

入力を始めると選択候補が現れます

### 4 インデックス機能の拡張(Expand Index feature)

☰ ボタンをクリックするとインデックス一覧が表示され、いくつかの検索語を選択することができます。  
一つのフィールドにいくつかの検索語を選択した場合、OR 検索となります

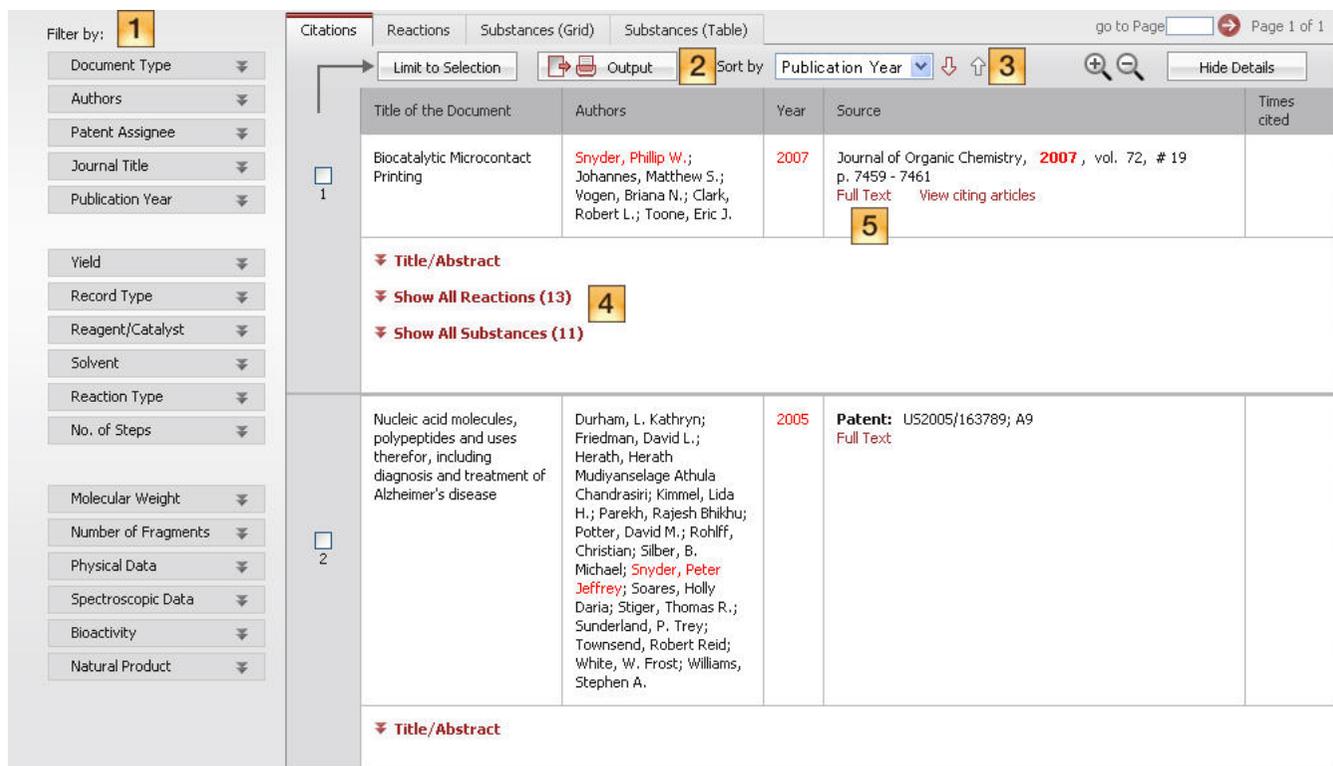
### 5 入力例

検索語の入力方法のヒント

注: 2の Quick Search ボックスでは、AND, OR, PROXIMITY, NEAR, NEXT の演算子が使えます

## テキスト、著者、その他：文献情報タブ Text, Authors and more Citations tabs

22



The screenshot shows the Reaxys interface with the Citations tab selected. On the left, there is a 'Filter by:' section with a dropdown menu set to '1'. Below this are several filter categories: Document Type, Authors, Patent Assignee, Journal Title, Publication Year, Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps, Molecular Weight, Number of Fragments, Physical Data, Spectroscopic Data, Bioactivity, and Natural Product. The main area displays a table of search results. The table has columns for Title of the Document, Authors, Year, Source, and Times cited. The first row shows a document titled 'Biocatalytic Microcontact Printing' from 2007, published in the Journal of Organic Chemistry. The second row shows a patent document from 2005. Below the table, there are options to 'Show All Reactions (13)' and 'Show All Substances (11)'. The interface also includes a 'Limit to Selection' button, an 'Output' button (labeled '2'), a 'Sort by' dropdown menu set to 'Publication Year' (labeled '3'), and a 'Hide Details' button. The page number 'Page 1 of 1' is visible in the top right corner.

### 1 絞り込み(Filter by)

適切なフィルターによって検索結果を絞り込み(文献タイプ、著者、特許出願人、ジャーナルタイトル、出版年)

### 2 アウトプット(Output)

適当なフォーマットに結果をエクスポートできます

### 3 ソート(Sort by)

結果は、出版年、著者で昇順↑、降順↓でソートできます

### 4 要旨/反応/物質 (Abstract/Reactions/Substances)

この要旨や論文に掲載されている全ての反応や物質を表示

### 5 引用情報

参考文献を表示。原著論文の全テキストへのリンクと Scopus の関連情報へアクセス

< Reaxys に関するお問い合わせ先は、本ガイド 1 ページをご参照ください >