

---

## インターネットセミナー

# ReaxysFile 2012年8月のリロードに伴う強化



1

---

## 本日の内容

- ・ ReaxysFile ファイルの概要
- ・ リロードによる強化
- ・ 検索例

---

## ReaxysFile ファイル - 概要

- ・ 化学物質同定情報, 物性情報, 反応情報を収録するデータベース
- ・ 有機化合物, 有機金属化合物, 無機化合物の情報を収録
- ・ 収録年代は 1771 年以降

2012 年 8 月にリロードされ, 収録内容, 検索・表示機能が強化された

---

## 強化内容のまとめ

- ・ 約 800 万件の物質情報追加
  - 無機化合物, 特許由来の物質
- ・ 新規フィールドの追加
  - 電気化学セル, 熱膨張など
- ・ 反応情報の強化
  - 反応レコードの追加, 特許の実施例データ追加
- ・ 表示形式の強化
  - 特許情報, REACH

## 収録の強化

### ・ 約 800 万件の物質情報を追加

無機化合物	GMELIN の全情報 旧 GMELIN97 ファイル (1817-1997 年) * 1998 年以降のデータ
特許由来の物質	PCD (Patent Chemistry Database) 1976 年以降の、英語で書かれた PCT 出願 (WO), ヨーロッパ特許 (EP), 米国特許 (US) で、下記の 国際特許分類を有する特許中の物質 ・ C07 (有機化学) ・ A61K (医薬用, 歯科用又は化粧品用製剤) ・ C09B (染料)

\* 旧 GMELIN97 ファイルに含まれていた MAC (合金成分表) 情報は収録されていない

## 主な新規フィールド

フィールド ドコード	内容	検索フィールド
ELCH	(Electrochemical Cell : 電気化学セル)	/ELCH.ECELL (Electrochemical Cell : 電気化学セルの材料)
		/ELCH.POT (Cell Potential : 電池電位)
		/ELCH.KW (Keyword : キーワード)
		/ELCH.COM (Comment : コメント)
INCHI	(InChI Key : InChI 表記)	/INCHI
LB	(Substance Label : 物質の記載位置)	/LB
QCC	(Quantum Mechanical Calculations : 量子化学計算)	/QCC.TYP (Typ : タイプ)
		/QCC.MET (Method : 方法)
TEC	(Thermal Expansion : 熱膨張)	/TEC.T (Temperature : 温度)
		/TEC.VAL (Coefficient : 係数)
		/TEC.KW (Keyword : キーワード)

## 削除されたフィールド

フィールド	内容
HSO	ハンドブック記事
LN	Lawson 番号
CONSID	構造 ID
TAUTID	互変異性体 ID

- 旧 GMELIN97 ファイルの情報で利用できないフィールド
  - 合金関連のフィールド (/MAC, /RC)
  - 統制語 (/CT)

## 反応情報の強化

- 反応レコードが 300 万件以上追加された
- 溶媒や触媒もレコード番号から検索可能に
- 特許の実施例のデータを収録
- 主な新規フィールド

検索フィールド	内容
/RX.CAAN	触媒のレコード番号
/RX.SOLAN	溶媒のレコード番号
/RX.TXT	反応フルテキスト(実施例)中のキーワード
/RX.RTYP	レコードのタイプ
/RX.YDN	収率 (リロード前は /RX.YD)

## 反応情報の強化 - レコード例

Reaction RID (.RID): 29605999.1  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Reagent (.RGT): caesium carbonate  
Catalyst (.CAT): triphenylphosphine, palladium dichloride  
Solvent (.SOL): tetrahydrofuran, water  
Temperature (.T): 85 Cel  
Other Conditions (.COND): Sealed tube  
Location (.LCN): Page/Page column 17  
Catalyst AN (.CAAN): 610776, 8128173  
Fulltext of reaction (.TXT): Example 10:  
3-<(1S)-1-<(tert-butoxycarbonyl)amino>-2-hydroxyethyl>-5-(trifluoromethyl)benzoic acid; Step 1  
Preparation of tert-butyl 3-(trifluoromethyl)-5-vinylbenzoate  
A mixture of tert-butyl 3-bromo-5-(trifluoromethyl)benzoate (1.83 g, 5.60 mmol) . . .

Example label (.LB): 10.1  
Reactant AN (.RCAN): 4546405  
Solvent AN (.SOLAN): 102391, 3587155

触媒のレコード番号

反応フルテキスト(実施例)

溶媒のレコード番号

## 新規表示形式 - PSD (Patent Specific Data)

- ・ 特許情報を表示するための表示形式
- ・ 特許中の記載位置や Prophetic 物質を確認できる

Patent Specific Data:  
PSD  
Location in Patent: Claim 2  
Reference(s):  
1. Patent: Aspartyl protease inhibitors; for details see display format ALLPAT

特許中の記載位置  
(/PSD.LCN)

Patent Specific Data:  
PSD  
Prophetic compound:  
Reference(s):  
:

prophetic product

Prophetic 物質

## 新規表示形式 – ALLPAT

- 特許情報の詳細を確認するための表示形式

Reference: Patent  
Title: PREPARATION OF AMINOTETRALIN COMPOUNDS  
Patent Number: US2010/197924  
Inventor: Gould, Alexandra E.; Harrison, Sean J.; Mizutani, Hirotake; Shen, Ming; Smyser, Thomas E.; Stroud, Stephen G.  
Patent Assignee: Millennium Pharmaceuticals, Inc.  
Abstract: The present invention relates to synthetic processes for preparation of aminotetralin compounds with kinase inhibitory activity. The invention also provides synthetic intermediates useful in the processes of the invention.  
Main IPC: C07D 471/04  
Secondary IPC: C07C 209/26; C07C 211/38; C07C 227/04; C07C 229/54; C07C 67/00; C07C 67/24; C07C 69/76; C07D 231/12; C07D 233/64  
PATENT INFORMATION

特許番号, 発明者, 出願人, 抄録  
などを確認できる

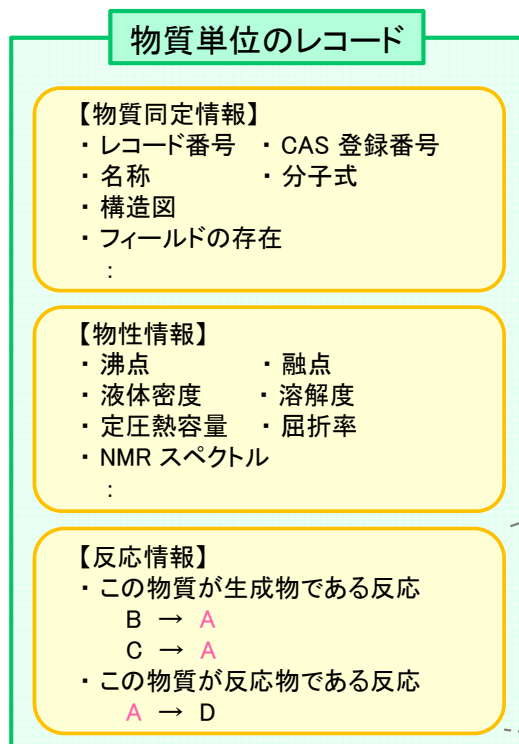
## 新規表示形式 – REACH

- REACH 申請に関連する物性情報を  
まとめて表示するための表示形式

BP (沸点), CP (定圧熱容量), CV (定容熱容量),  
DE (解離指数), DEN (液体密度), ECO (生態学的データ),  
FP (引火点), HFOR (生成エンタルピー),  
HVAP (蒸発エンタルピー), MP (融点), MUT (変旋光),  
ORP (旋光度), PHARM (薬理学データ), RI (屈折率),  
SLB (溶解度), SP (昇華点), VP (蒸気圧)

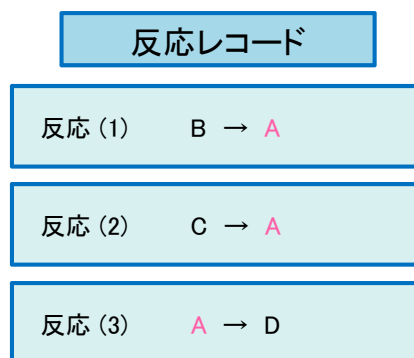
 表示料金は表示されるフィールド数に依存

# レコード構成



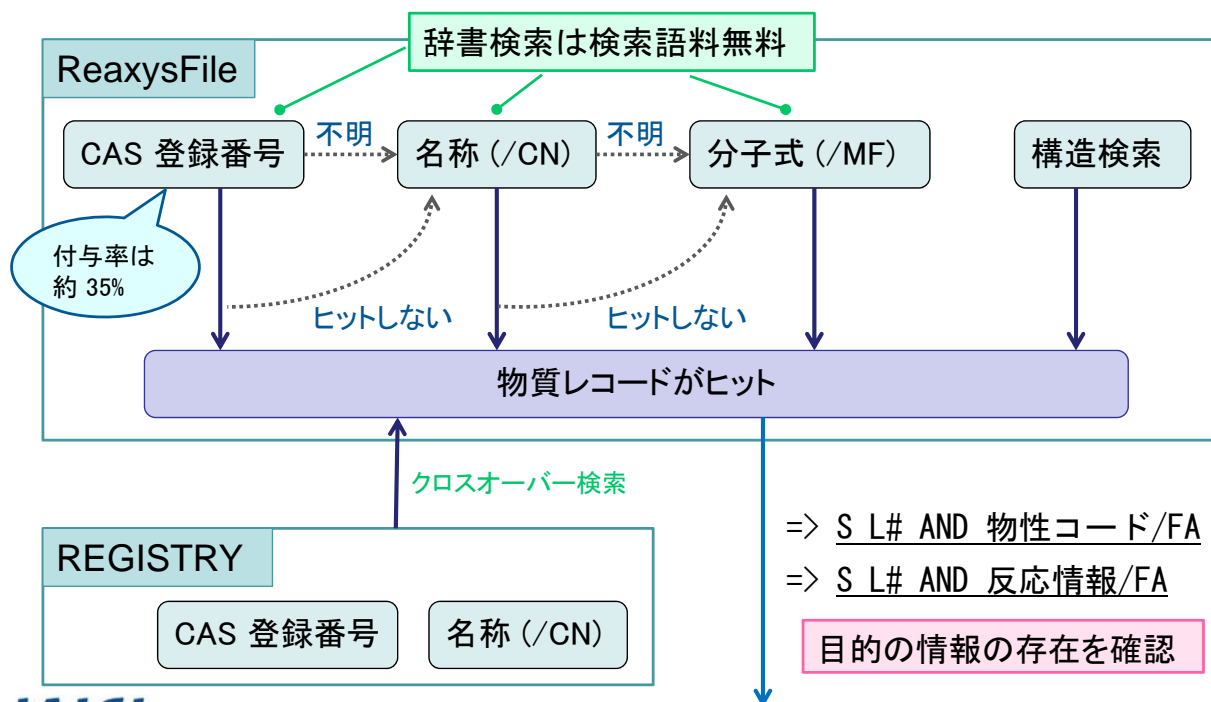
## レコード構成は変更なし

- 物質レコードに、物質同定情報、物性情報、反応情報を収録
- 物質レコードの反応は、1 反応 = 1 レコードとして反応レコードに収録



13

# 検索のポイント

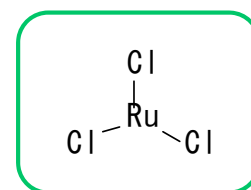


## 表示のポイント

- ・ 無料の表示形式はない
  - 目的のデータの存在は, /FA で検索して確認
- ・ 表示料金は, 原則 1 フィールドごとに課金
  - 必要なフィールドのみ指定
- ・ 個別のフィールドコード, スーパーフィールドコードでは, 最大 20 データを表示. すべてを表示するには, 個別のコードに F をつける  
例: => D FRX ← すべての反応を表示

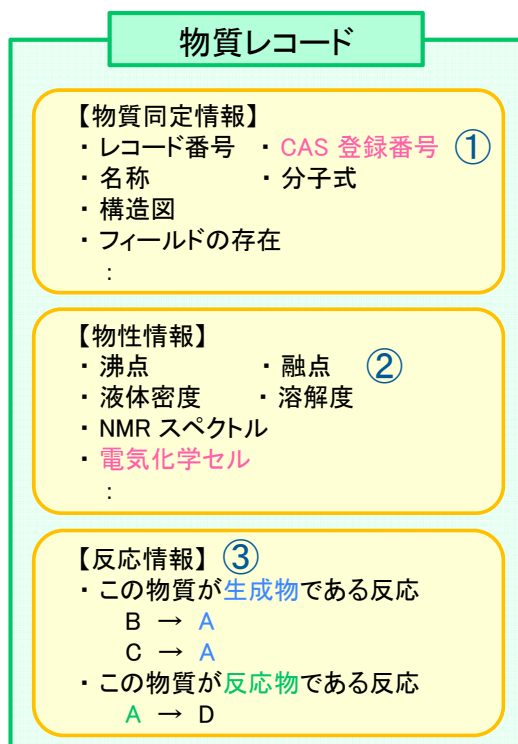
## 検索例

- ・ 三塩化ルテニウム  
(CAS 登録番号 10049-08-8)  
について調査する
  - 電池電位を調べる
  - この物質が触媒である反応を調べる.
  - 文献情報を表示する





## 検索のポイント (1)



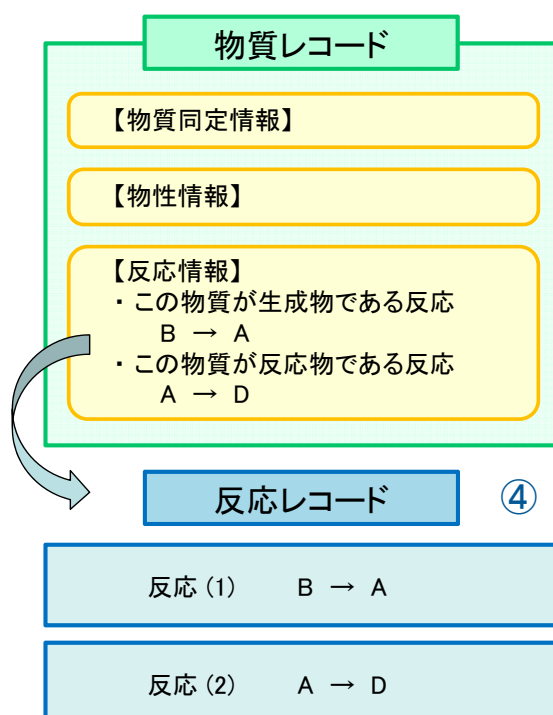
① CAS 登録番号が既知の場合は、  
まず CAS 登録番号で検索する。  
=> S CAS 登録番号

② 物性情報の存在は、検索で確認  
する。  
=> S L# AND ELCH/FA  
(ELCH: 電気化学セル)

③ 物質レコードの反応情報は、その  
物質が反応物、生成物である反応  
が収録されている。触媒は反応レ  
コードで検索する。

17

## 検索のポイント (2)



④ 反応情報の検索フィールドを用いて  
検索すると、反応レコードが得られる。  
=> S 触媒のレコード番号/RX.CAAN

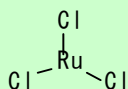
18

検索例: 三塩化ルテニウム (CAS 登録番号 10049-08-8) を検索し, 電池電位を調べる

- => FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る  
=> S 10049-08-8 ← CAS 登録番号で検索する  
L1 6 10049-08-8  
=> S L1 AND ELCH/FA ← 電池電位の情報が存在するかを確認する  
L2 1 L1 AND ELCH/FA  
=> D IDE FELCH ← 物質同定情報と電気化学セルを表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2012 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 3660162 ← レコード番号  
Basic Pref. RN (BPR): 10049-08-8  
CAS Reg. No. (RN): 10049-08-8 ← CAS 登録番号  
Chemical Name (CN): ruthenium (III) chloride, ruthenium(III) trichloride, ruthenium(III) chloride, Ruthenium trichloride, ruthenium chloride, Rutheniumtrichlorid, ruthenium(III)chloride  
Lin. Struct. Formula (LSF): Cl3Ru  
Molec. Formula (MF): Cl3 Ru  
Formula Weight (FW): 207.429  
InChi Key: (INCHI): YBCAZPLXEGKKFM-UHFFFAOYSA-K  
Alternate InChi Key: (AINCHI): YBCAZPLXEGKKFM-APXYLRHICG  
Markush Ref. Count (MARKREF): 0  
Entry Date (DED): 1993/07/22  
Update Date (DUPD): 2011/03/17



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
BPR	Basic Preferred RN	1
RN	CAS Registry Number	1
CN	Chemical Name	7
LSF	Linearized Structure Formula	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formula Weight	1
INCHI	InChi Key	1
AINCHI	Alternate InChi Key	1
MARKREF	Markush Reference Count	1
DED	Entry Date	1
DUPD	Update Date	1
ADSM	Adsorption (MCS)	2
CDEN	Density (Crystal)	2
CPD	Crystal Property Description	12
CRYPH	Crystal Phase	3
CTP	Crystal Transition Point	4
DP	Decomposition Point	1
EDIS	Energy of Dissociation	1
ELCH	Electrochemistry Data	27 ← 電気化学セル
ELE	Electrical Data (MCS)	1
ELYC	Electrolytic Conductivity	1
ESR	ESR Data	1
FINFO	Further Information	159
GEO	Interatomic Distanc and Angle	1

HFOR	Enthalpy of Formation	7
HSUB	Enthalpy of Sublimation	2
IR	Infrared Spectrum	1
LB	Substance Label	1
LUM	Luminescence	1
MAG	Magnetic Data	1
MEC	Mechanical Property	1
MSUS	Magnetic Susceptibility	15
OSM	Other Spectroscopic Methods	2
OTHE	Other Thermochemical Data	1
PHARM	Pharmacological Data	1
POT	Electrochemical Characteristics	7
PUR	Purification	1
QCC	Quantum Chemical Calculations	1
SLB	Solubility (MCS)	9
USC	Use of Compound	4
UVS	UV and Visible Spectrum	20
VP	Vapour Pressure	11

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence	
RX	Reaction Documents	920	← 反応データ数
RX. RAN	Reactant AN	895	
RX. PAN	Product AN	25	

Electrochemistry Data:

Part 1 of 2	Value (ELCH)	Cell. Pot. (. POT)	Keyword (. KW)	Ref.
1			Behaviour as electrode	1
2	normal	0.924		2, 3
3	H-electrode/(RuCl3			
4	(13.0 percent),			
5	RuCl4 (0.0338 M			
6	Ru)), HCl (1.1 n)/Pt			
7	(polished, N2)			
8	normal	0.943		2, 3
9	H-electrode/(RuCl3			
10	(21.4 percent),			
11	RuCl4 (0.0338 M			
12	Ru)), HCl (0.5 n)/Pt			
13	(polished, N2)			
14	normal	0.913		2, 3
15	H-electrode/(RuCl3			
16	(21.5 percent),			
17	RuCl4 (0.0338 M			
18	Ru)), HCl (1.1 n)/Pt			
19	(polished, N2)			
20	normal	0.895		2, 3
21	H-electrode/(RuCl3			
22	(35.4 percent),			
23	RuCl4 (0.0338 M			
24	Ru)), HCl (1.1 n)/Pt			
25	(polished, N2)			
26	normal	0.924		2, 3
27	H-electrode/(RuCl3			
28	(35.5 percent),			
29	RuCl4 (0.0338 M			
30	Ru)), HCl (0.5 n)/Pt			
31	(polished, N2)			
:				
146	normal	0.837		2, 3
147	H-electrode/(RuCl3			

148	(81.9 percent),		
149	RuCl <sub>4</sub> (0.0338 M		
150	Ru)), HCl (2.1 n)/Pt		
151	(polished, N <sub>2</sub> )		
152		Decomposition potential	4, 5

Electrochemistry Data:

Part 2 of 2	Com. (.COM)	Note	Ref.
1			1
2	T = 25 Deg C	1	2, 3
3			
4			
5			
6			
7			
8	T = 25 Deg C	1	2, 3
9			
10			
11			
12			
13			
14	T = 25 Deg C	1	2, 3
15			
16			
17			
18			
19			
20	T = 25 Deg C	1	2, 3
21			
22			
23			
24			
25			
26	T = 25 Deg C	1	2, 3
27			
28			
29			
30			
31			
:			
146	T = 25 Deg C	1	2, 3
147			
148			
149			
150			
151			
152	potential value = 0.8 V	2	4, 5

Reference(s):

1. Funakawa, Akiyasu; Yamanaka, Ichiro; Takenaka, Sakae; Otsuka, Kiyoshi, Journal of the American Chemical Society, CODEN: JACSAT, 126, <2004>, 5346 - 5347
2. , Ru: SVol., 25, page 57 - 59
3. Grube, G.; Fromm, G., Zeitschrift fuer Elektrochemie, CODEN: ZEELAI, 47, <1941>, 208 - 211
4. , Ru: MVol., 21, page 47 - 49
5. Kratz, E., Dissert. Darmstadt T. H. 1929, S. 49

Notes(s):

1. T = 25 Deg C
2. potential value = 0.8 V

三塩化ルテニウムが触媒である反応を検索する

=> S 3660162/RX.CAAN ← 触媒のレコード番号で検索する  
L3 47 3660162/RX.CAAN

=> D 36 RX ← 36 件目の回答を RX 表示形式で表示する

L3 ANSWER 36 OF 47 REAXYSFILE COPYRIGHT 2012 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

Reaction ID: 24438961  
 Reactant AN (.RAN): 14804627, 8487525  
 Reactant (.RCT): sodium periodate (NaIO<sub>4</sub>),  
 (4S-trans)-4,5-dihydro-5-(2-hydroxyethyl)-  
 4-isobutyl-2-phenyloxazoline  
 Product AN (.PAN): 8490084  
 Product (.PRO): (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyl  
 oxazoline-5-acetic Acid  
 React. Struct. Keywords (.SKW): mapped reaction  
 Record type (.RTYP): full reaction, has preparation  
 Number of Bond Changes (.NBC): 1  
 No. of React. Details (.NVAR): 1  
 Preparation reactants (.BLB): 14804627, 8487525, 8490084  
 Det. React. reactants (.BLC): 14804627, 8487525, 8490084  
 No. of References (.NUMREF): 1

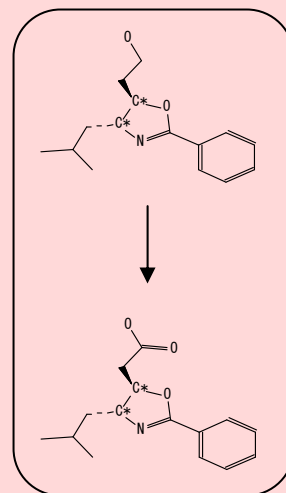
Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 24438961.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 87percent  
 Reagent (.RGT): sodium hydrogencarbonate  
 Catalyst (.CAT): ruthenium (III) chloride ← 触媒  
 Solvent (.SOL): tetrachloromethane, water, acetonitrile  
 Catalyst AN (.CAAN): 3660162 ← 触媒のレコード番号  
 Example title (.TI): Synthesis of  
 (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyl  
 oxazoline-5-acetic Acid

Fulltext of reaction (.TXT):  
 EXAMPLE 31 <br/>Synthesis of  
 (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyl  
 oxazoline-5-acetic Acid <br/>10 ml of a  
 mixed solution of acetonitrile/carbon  
 tetrachloride/water (1:1:1) was added to  
 247 mg (1.0 mmol) of  
 (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-5-(2-hyd  
 roxyethyl)-2-phenyl-oxazoline. <br/>Then,  
 the mixture was added with 546 mg (6.50  
 mmol) of sodium bicarbonate and 1.18 g  
 (5.50 mmol) of sodium periodate (NaIO<sub>4</sub>),  
 followed by stirring for 5 minutes.  
 <br/>Next, 33.2 mg of ruthenium chloride,  
 as a catalyst, was added thereto, followed  
 by stirring for 24 hours. <br/>At the end  
 of the reaction, the resulting material  
 was extracted with 20 ml of diethyl ether.  
 <br/>Following this, a water layer was  
 acidified with 1N HCl, and then extracted  
 with methylene chloride, thereby obtaining  
 227 mg (87percent yield) of  
 (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyl  
 -oxazoline-5-acetic acid. <br/>

← 実施例中の  
実験項情報



Example label (.LB): 31  
 Product AN (.PRAN): 8490084  
 Reactant AN (.RCAN): 4153970  
 Solvent AN (.SOLAN): 1098295, 3587155, 741857

Number of R. steps (.STP): 1  
Yield numerical (.YDN): 87  
Product (.YPRO): (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyl  
oxazoline-5-acetic Acid  
Reference(s):  
1. Patent: Process for the preparation of oxazoline compound; for details  
see display format **ALLPAT**

#### 特許情報を表示する

=> D 36 ALLPAT

L3 ANSWER 36 OF 47 REAXYSFILE COPYRIGHT 2012 Elsevier Properties SA. on STN

All Patents:  
ALLPAT

Reference: Patent  
Title: Process for the preparation of oxazoline compound  
Patent Number: US6127546  
Inventor: Park; Jin Kyu; Ham; Won Hun; Lee; Kee Young; Park; Min  
Sung; Kim; Yong Hyun; Oh; Chang Young; Seo; Sung Ki; Choi;  
Kyung Seok; Lee; Han Won  
Patent Assignee: Dong Kook Pharmaceutical Co., Ltd.  
Abstract: The present invention relates to a process for the  
preparation of an oxazoline compound which is easily  
chemically converted to a beta-amino-alpha-hydroxy acid or  
a gamma-amino-beta-hydroxy acid. The method comprises  
producing a compound of the following formula (4) using  
 $\alpha$ -amino acid. The produced compound (4) is subjected  
to an intramolecular cyclization to produce an oxazoline  
compound of the following formula (3). The oxazoline  
compound (3) is oxidized at a vinyl group with RuCl<sub>3</sub> or  
NaIO<sub>4</sub> to produce an oxazoline compound of the following  
formula (1) which is easily chemically converted to a  
beta-amino-alpha-hydroxy acid. Alternatively, the oxazoline  
compound (3) may also be treated with  
9-borabicyclo[3.3.1]nonane such that a hydroxy group is  
introduced into the end of the vinyl group of the oxazoline  
compound(3). The introduced end hydroxy group is oxidized  
with RuCl<sub>3</sub> or NaIO<sub>4</sub> to produce an oxazoline compound of the  
following formula (2) which is easily chemically converted  
to a gamma-amino-hydroxy acid.

Main IPC: C07D 263/14

#### PATENT INFORMATION

Patent Title: Process for the preparation of oxazoline compound

### EXAMPLE 31

#### Synthesis of (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyloxazoline-5-acetic Acid

10 ml of a mixed solution of acetonitrile/carbon tetrachloride/water (1:1:1) was added to 247 mg (1.0 mmol) of (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-5-(2-hydroxyethyl)-2-phenyl-oxazoline. Then, the mixture was added with 546 mg (6.50 mmol) of sodium bicarbonate and 1.18 g (5.50 mmol) of sodium periodate ( $\text{NaIO}_4$ ), followed by stirring for 5 minutes. Next, 33.2 mg of ruthenium chloride, as a catalyst, was added thereto, followed by stirring for 24 hours. At the end of the reaction, the resulting material was extracted with 20 ml of diethyl ether. Following this, a water layer was acidified with 1N HCl, and then extracted with methylene chloride, thereby obtaining 227 mg (87% yield) of (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyl-oxazoline-5-acetic acid. To the obtained product was added 10 ml of diethyl ether, and then 1.0 ml of diazomethane dropwise. The resulting mixture was concentrated under reduced pressure, thereby obtaining 240 mg of (4S-trans)-4,5-dihydro-4-isobutyl-2-phenyloxazoline-5-acetic acid methyl ester.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.98(d, 6H), 1.41(m, 1H), 1.60(m, 1H), 1.89(m, 1H), 2.61(dd,  $J=5.5$  Hz,  $J=16.0$  Hz, 1H), 2.77(dd,  $J=7.5$  Hz,  $J=16.0$  Hz, 1H), 3.75(s, 3H), 3.98(m,  $J=5.5$  Hz,  $J=6.0$  Hz,  $J=8.0$  Hz, 1H), 4.67(m,  $J=5.5$  Hz,  $J=6.0$  Hz,  $J=7.5$  Hz, 1H), 7.38–7.48((m, 3H), 7.92–7.94(m, 2H)

$^{13}\text{C}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  23.5, 25.6, 28.0, 40.6, 52.7, 70.9, 81.6, 128.5, 129.0, 132.0, 162.9, 171.3

---

## まとめ

- ・ 2012年8月に ReaxysFile ファイルがリロードされた
  - 無機化合物, 特許由来の物質が約 800 万件追加された
  - 反応情報が強化された
  - 特許情報の表示形式が強化された

ReaxysFile をご活用ください

---

## 参考資料

- ・ データベースサマリーシート  
<http://www.jaici.or.jp/stn/dbsummary/pdf/ReaxysFile.pdf>
- ・ 講習会テキスト「反応情報検索」  
[http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text\\_react.pdf](http://www.jaici.or.jp/stn/pdf/text_react.pdf)
- ・ FIZ Karlsruhe 提供の英語資料  
[http://www.stn-international.com/stn\\_chemistry\\_reaxysfile.html](http://www.stn-international.com/stn_chemistry_reaxysfile.html)