

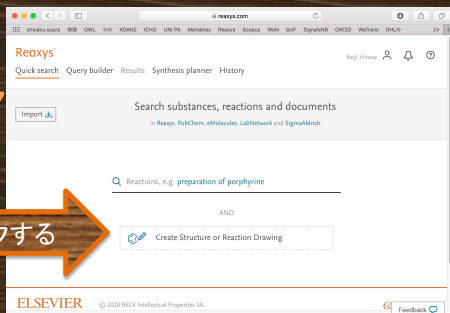
Reaxys New Version (2018)を用いた 化学反応と物性値やスペクトルの検索

Reaxys

開始:まずReaxys Siteにゆく
<https://www.reaxys.com>

次に検索法選択 “Text search”
or “Structure search” ?

①構造検索開始、ここをクリックする



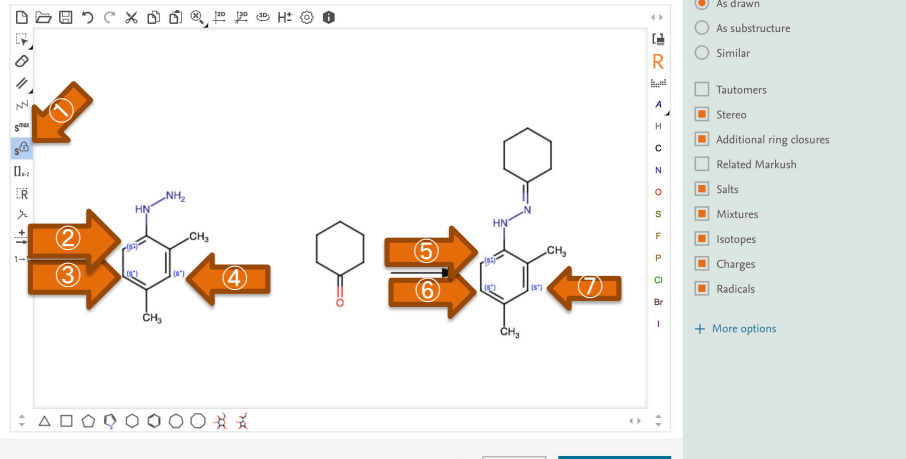
この資料は英語版もあります。各電子データは以下のサイトにアップロードしておきます。
This SHEET can be supplied and downloaded below.
English version: on my Researchgate page by using repository function.
<https://www.researchgate.net/publication/320296190>
Japanese version: on my Book HomePage.
<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b55146.html>
Dr. Keiji Hirose
<http://www.chem.es.osaka-u.ac.jp/supra/en/>

重要な基本操作 2

Reaxys

M検索用反応式の入力2(効果的な制限:置換数の指定)

“置換数の指定”は、望まないヒットを無くするための強力な操作。まず①、そして構造式上でクリックする。“s*”表記が出れば表示以外の置換が制限されます。

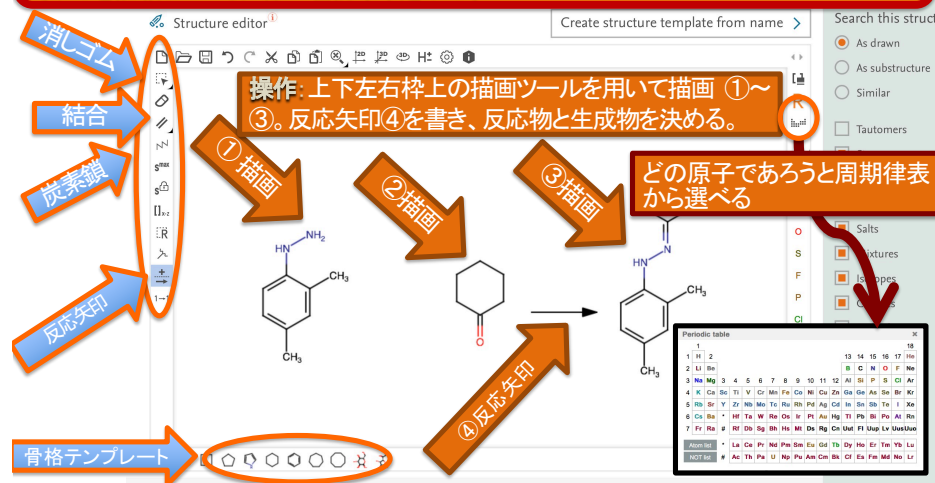


重要な基本操作 1

Reaxys

L検索用反応式の入力1(構造式の描画)

練習課題: Reaxysを用いて、シクロヘキサノールと2,4-ジニトロフェニルヒドラジンから対応するヒドラゾンを作成する実験条件、生成物の融点情報およびNMRスペクトルを入手せよ。尚、それらを記載している文献の書誌事項を示せ。

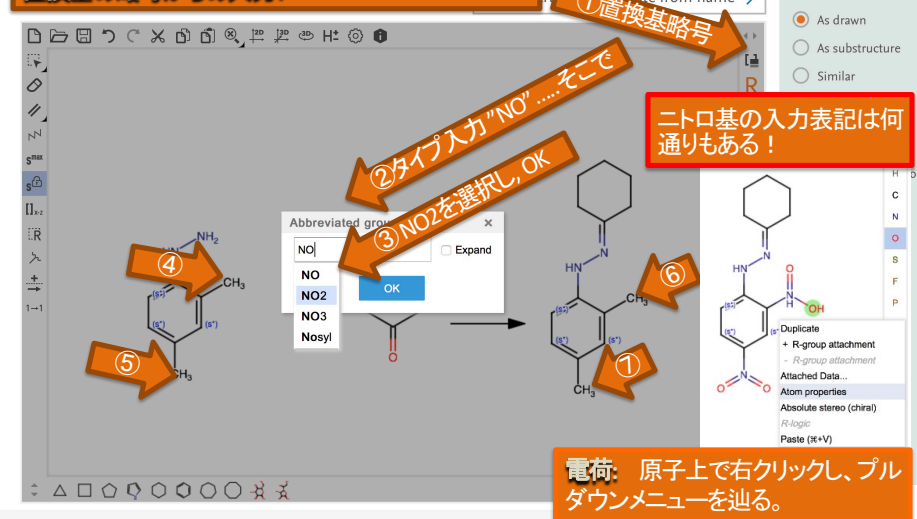


重要な基本操作 3

Reaxys

N検索用反応式の入力3(置換基の入力法)

置換基の略号からの入力:ニトロ基で例示



電荷: 原子上で右クリックし、プルダウンメニューを辿る。

重要な基本操作 4

○ 検索時項目指定と、検索開始

検索前に確認です。“部分構造検索(Substructure Search)”は望まない多くの反応や化合物をヒットさせます。“置換基数の指定”(s*)をしていますか?では、

①部分構造検索

②置換式の移動

③検索

重要な基本操作 5

P 結果と絞り込み 1 (反応収率 > 90%)

① 296 文献内の335 反応がヒット

② 絞り込み (収率 > 90%)

③ 結果の詳細表示

重要な基本操作 6

Q 結果と追加絞り込み (溶媒: Ethanol)

① 28 文献の12 反応がヒット

② 結果の表示

③ 更なる絞り込み (溶媒を規定 Ethanol)

④ エタノール溶媒の検索結果だけに絞り込む

重要な基本操作 7

R 検索件数と文献リストから原著の表示

① 18 文献中の1 反応 になった

② 原著文献 (HP)

文献とのリンク機能は契約内容によって異なります。

重要な基本操作 8

Reaxys

S 検索結果の出力と利用(購入、合成計画)

Export reactions Reaxys

Choose a format:

- PDF/Print
- XML
- Microsoft Word
- Microsoft Excel
- Electronic Lab Notebook
- RD File

Additional options:

- Include structures
- Include experimental procedure
- Include a description in the document

Export

① 出力

② 出力開始

③ 購入情報

④ 合成計画

重要な基本操作 9

Reaxys

T 検索結果のまとめとエクセル表等への出力

Export reactions Reaxys

Choose a format:

- PDF/Print
- XML
- Microsoft Word
- Microsoft Excel
- Electronic Lab Notebook
- RD File

Additional options:

- Include structures
- Include experimental procedure
- Include a description in the document

Export

① 表出力

② 例えばPDF出力

③ 出力開始

エクセル表への出力の際の反応式は、現在はSmiles表記で文字列ですが、化学式表記が出来る様に鋭意努力中と聞いています。検索結果のエクセルによる自由な並び替えは、ブレンストーミングの大きな助けになります。

重要な基本操作 10

Reaxys

U 結果: 化合物データベースへのアプローチ

① 物性情報への入り口

② ウィンドウが開く

③ 融点へはここから

④ NMRスペクトルへはここから

⑤ 特許の操作記述

⑥ 原文へ

⑦ 論文へ

重要な基本操作 11

Reaxys

V 化合物データベースの利用例(融点情報入手)

① データリスト

② 融点情報と文献書誌事項

重要な基本操作 12

Reaxys

W 化合物データベースの利用例 (スペクトル)

①スペクトル
②NMR
③NMRの数値データやスペクトルへのリンク機能は契約内容によって異なります。

NMR データとチャート
NMR情報と文献リスト

Show/Hide columns

Description (NMR Spectroscopy)	Nucleus (NMR Spectroscopy)	Coupling Nuclei	Solvent Spectra	Chemical shifts	Supporting information	Supporting information
Chemical shifts, Spectrum	1H		dimethylsulfoxide-d6	400	supporting information	Shipilovskikh, Sergei A.; Rubtsov, Aleksandr E.; Malkov, Andrei V. - Organic Letters, 2017, vol. 19, # 24, p. 6760 - 6762
Chemical shifts, Spectrum	13C		dimethylsulfoxide-d6	100	supporting information	Shipilovskikh, Sergei A.; Rubtsov, Aleksandr E.; Malkov, Andrei V. - Organic Letters, 2017, vol. 19, # 24, p. 6760 - 6762
Chemical shifts, Spectrum	1H		chloroform-d1	26.84, 400.1	supporting information	Zhou, Shengze; Dani, Ehsan; MacDougall, Scott W.; Irwin, Robert L. - Organic Letters, 2017, vol. 19, # 24, p. 6760 - 6762
Chemical shifts	13C		chloroform-d1	26.84, 125.7	supporting information	Zhou, Shengze; Dani, Ehsan; MacDougall, Scott W.; Irwin, Robert L. - Organic Letters, 2017, vol. 19, # 24, p. 6760 - 6762

1-cyclohexylidene-2-(2,4-dinitrophenyl)hydrazine (2b)
Obtained using method B from **1b** (101 mg, 0.9 mmol), K₂HPO₄ (30% in oil, 133 mg, 1 mmol), 18-crown-6 (238 mg, 0.9 mmol), anhydrous diethyl ether (10 mL), time 60 min. Yellow solid (230 mg, 92%) mp 160-161 °C (lit.³¹ 160-161 °C). ¹H NMR (46-DMSO, 400 MHz) δ (ppm): 1.66 (m, 2H), 1.72 (m, 4H), 2.44 (m, 2H), 2.49 (m, 2H), 7.85 (m, 1H), 8.33 (m, 1H), 8.86 (m, 1H), 10.97 (s, 1H). ¹³C NMR (66-DMSO, 100 MHz) δ (ppm): 25.2, 25.7, 26.9, 27.4, 35.3, 116.4, 123.4, 129.5, 130.3, 137.2, 145.4, 163.4.