



Reaxys®

Reaxys®が生産性と 効率性に与えるインパクト

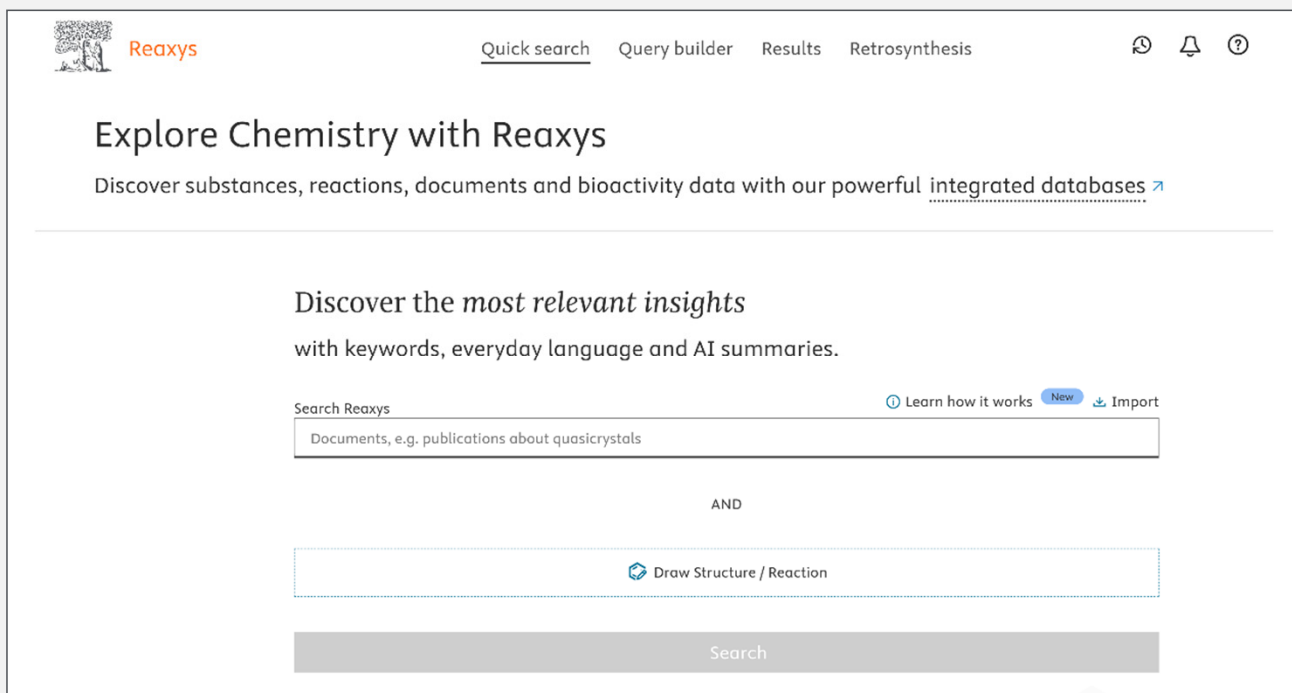


May 2026

大槻篤史
エルゼビア・ジャパン株式会社
a.otsuki@elsevier.com

Reaxysのご紹介

化学研究のあらゆるステップで、化学研究者を支援します。



The screenshot shows the Reaxys website interface. At the top left is the Reaxys logo. To its right are navigation links: [Quick search](#), [Query builder](#), [Results](#), and [Retrosynthesis](#). Further right are icons for a clock, a bell, and a question mark. Below the navigation is the heading "Explore Chemistry with Reaxys" and a sub-heading "Discover substances, reactions, documents and bioactivity data with our powerful [integrated databases](#)". A horizontal line separates this from the main content area. The main content area features the text "Discover the *most relevant insights* with keywords, everyday language and AI summaries." Below this is a search input field with the placeholder text "Search Reaxys" and a "Learn how it works" link, a "New" badge, and an "Import" button. The search field contains the text "Documents, e.g. publications about quasicrystals". Below the search field is an "AND" operator. Below that is a dashed box containing a "Draw Structure / Reaction" button. At the bottom is a large grey "Search" button.

新しいテクノロジーを活用して進化し続けるReaxys



1881:
Beilsteinハンドブック初版
(有機化学)

1988:
Beilstein および
Gmelin データベース
がオンライン化

1817:
Gmelin ハンドブック初版
(有機金属化合物
無機化合物)

1992:
CrossFire
リリース

2009:
Reaxys
リリース

2013/2014:
Reaxys の全面刷新
とコンテンツ拡張

2016:
新しいReaxys
UI リリース

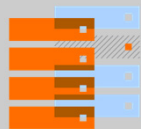
2017:
新しいReaxys
メディシナルケミストリー
(RMC) モジュール

2020:
Reaxys Commercial
Substances
(試薬カタログ)

2021:
特許収録数を
3,400万件へ拡張

2021:
逆合成予測ツール
(AI ベースの合成予測)

Reaxys
アカデミック
エディション



+49 M
特許情報

+127 M
文献情報

105
特許機関

18 K
ジャーナル

AIにより強化された自然言語(質問文)による検索・要約機能

Reaxys Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Explore Chemistry with Reaxys

Discover substances, reactions, documents and bioactivity data with our powerful integrated databases

Discover the most relevant insights with keywords, everyday language and AI summaries.

Search Reaxys Documents, e.g. publications about quasicrystals

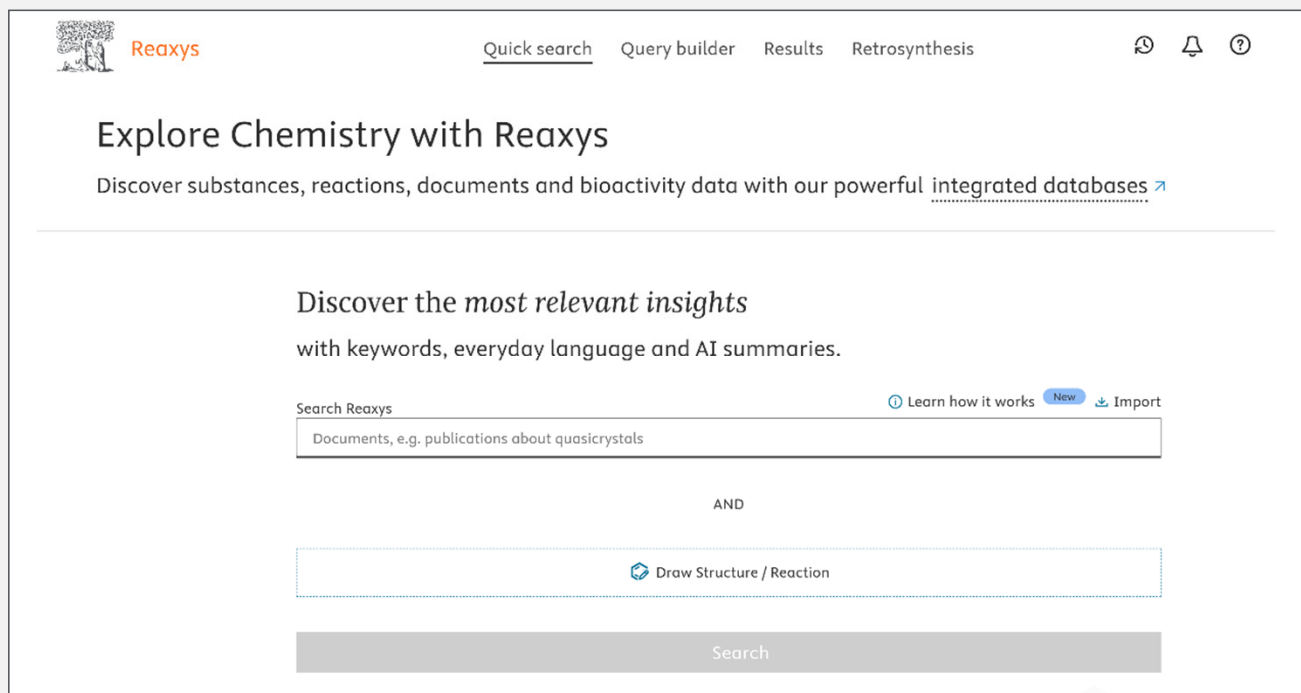
AND

Draw Structure / Reaction

Search

世界最大級の化学および生物活性データベース

化学研究のあらゆるステップで、化学研究者を支援します。



The screenshot shows the Reaxys website interface. At the top left is the Reaxys logo. Navigation links include "Quick search", "Query builder", "Results", and "Retrosynthesis". The main heading is "Explore Chemistry with Reaxys" with a subtext "Discover substances, reactions, documents and bioactivity data with our powerful [integrated databases](#)". Below this, a section titled "Discover the most relevant insights with keywords, everyday language and AI summaries." features a search bar with the text "Documents, e.g. publications about quasicrystals". To the right of the search bar are links for "Learn how it works", "New", and "Import". Below the search bar is an "AND" operator, a "Draw Structure / Reaction" button, and a "Search" button.



1.0B
データポイント



125M
文献情報



353M
物質情報



72M
反応情報

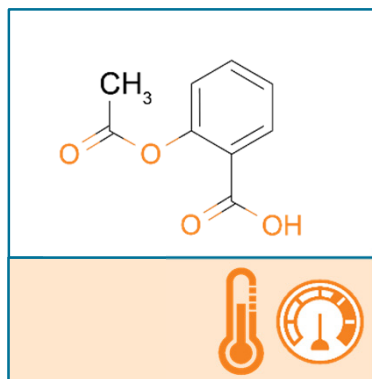


51M
生物活性データ

Reaxysとは



Reaxysは、化学知識の実際の活用方法を反映するように設計された情報システムです。



3億5,100万件の物質レコードに、5億件を超える物性データを収録：物理的性質、化学的性質、スペクトル、環境影響、生物活性データなど

化学研究の基盤データ



7,200万件の反応レコードを収録。反応条件、溶媒、触媒、収率などの抽出データを含みます。



紐づけ



1億2,400万件の文献レコードを収録。18,000誌以上の学術誌を対象に、材料科学、生物医学、地球科学、工学、技術、環境科学、薬理学など幅広い分野の応用をカバーしています。

幅広い分野での活用





Reaxysは、研究者の多様なユースケースとニーズに応えるため、継続的に進化を遂げてきました



コンテンツの拡充

特許および学術誌からの
プログラムによるデータ抽出



見逃しのない知見の提供
7→105の特許庁へと対象を拡大
1億2,400万件の文献情報へと成長

商業サプライヤー情報



500社を超える最新のサプライ
ヤー情報から、用途に応じてお好
みの供給元を選択できます。

CAS番号



CAS APIとの連携によ
り、CAS番号の見落とし
を防ぎます。

ターゲット & 生物活性データ



5,100万件の生物活性データを活用し、
世界最大級かつ最も豊富で、相互にリ
ンクされた専門家キュレーション済み
データによって、SAR解析をはじめとす
る部門横断的な研究を推進します。

卓越した手作業によるデータ抽出



アジアの特許から得られる高品質で
価値の高い知見を、ユーザーに提供
します。



Reaxysは、研究者の多様なユースケースとニーズに応えるため、継続的に進化を遂げてきました



検索機能とユーザーエクスペリエンス

優れた著者名検索機能

初めてのユーザーにも信頼感を与える設計。お気に入りの著者のすべての文献を簡単に見つけられます。



特許ファミリーのクラスタリング機能

時間を節約し、より迅速に知見へ到達します。



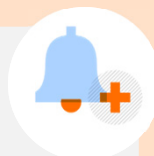
強化された生物活性サマリー機能

ヒートマップと基礎データをエクスポートし、より迅速かつ効率的なSAR解析を実現。



Eメールアラート

パーソナライズされたキュレーション済みのメールアラートサービスにより、最新情報を継続的に把握できます。



強化された検索と発見

AIによって強化された検索・要約機能により、さまざまな分野、レベルの研究者を支援します。



Reaxys は、研究のあらゆるステップで皆さまを支援します。



研究の
提案

知識ネットワークを
構築し、自身の研究
分野を**モニタリ
ング**する

実験を**設計し**、
実行する

結果およびアプリケー
ション試験を**分析**する

報告
出版
成果発信

モニタリング

提案テーマに関する最新研究は？
誰が取り組んでいるのか？
他の研究グループは何をしている
のか？



自分の研究分野の
最新動向を常に把握する

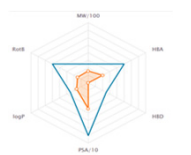
設計と実行

その化合物や材料
は既知か？
その化合物に至る
方法論は既知か？



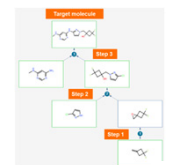
自分の研究の新規性はどうか

物理化学特性、
ドラッグライクネス
はどうか？



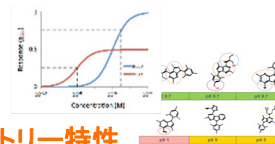
物理化学特性

合成計画、
反応条件、
および出発物質の
商業的入手可能性。



合成プラン

ターゲット活性
および有効性



メディシナルケミストリー特性

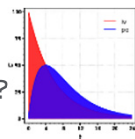
分析

この化合物にはどのような精製
方法が存在するか？
スペクトル特性(NMR, IR, MS
など)は既知か？



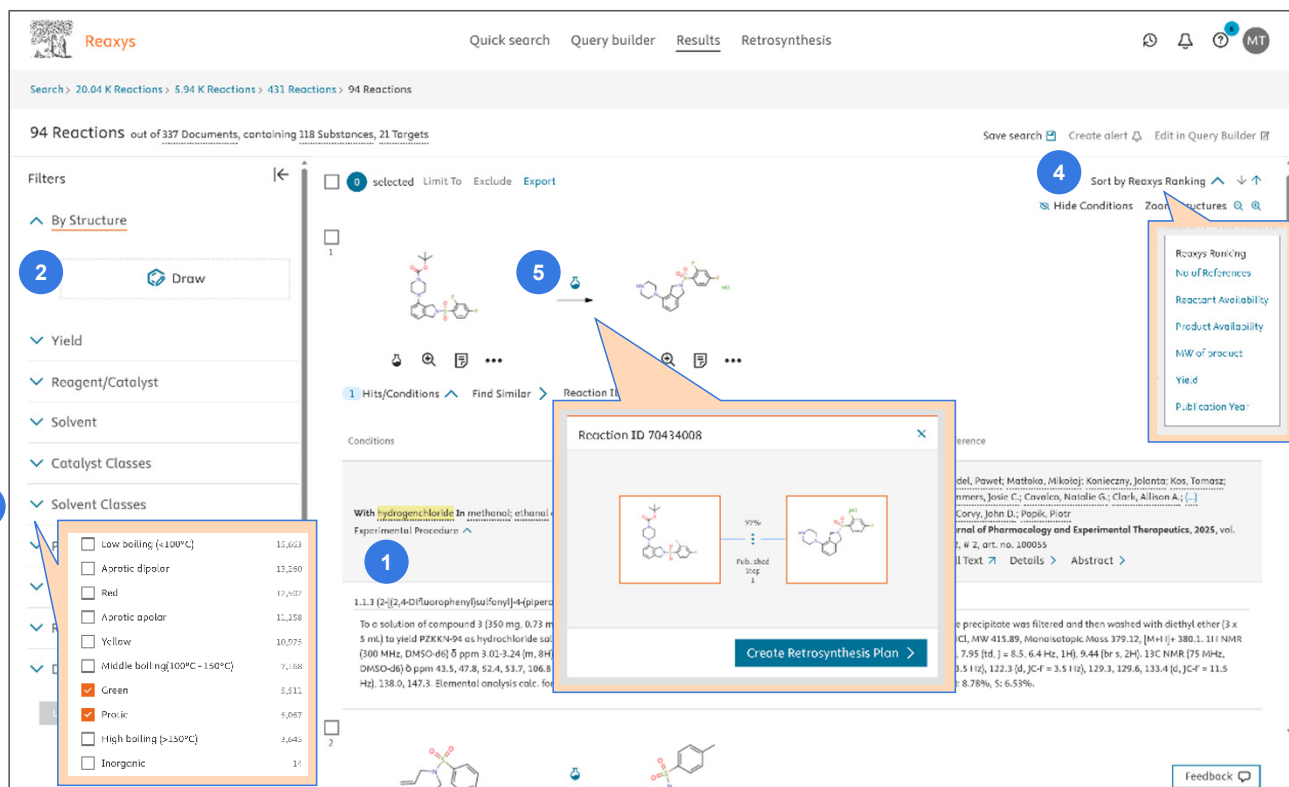
生成物の分析

化合物はドラッグライクか？
毒性プロファイルはどうか？
オフターゲット活性はあるか？



薬理プロファイリング

新しい実験手法を見つけ、結果を検証できます。



Reaxys Quick search Query builder Results Retrosynthesis

Search > 20.04 K Reactions > 5.94 K Reactions > 431 Reactions > 94 Reactions

94 Reactions out of 337 Documents, containing 118 Substances, 21 Targets

Filters

By Structure

2 Draw

Yield

Reagent/Catalyst

Solvent

Catalyst Classes

3 Solvent Classes

- Low boiling (<100°C) 15,692
- Aromatic dipolar 13,280
- Red 17,207
- Aromatic apolar 11,258
- Yellow 10,975
- Middle boiling (100°C - 150°C) 7,188
- Green 5,511
- Proxic 5,067
- High boiling (>150°C) 3,645
- Inorganic 14

4 Sort by Reaxys Ranking

5 Reaction ID 70434008

1 Experimental Procedure

With hydrogen chloride in methanol; ethanol

Experimental Procedure

1.1.1.3 [2-(2,4-difluorophenyl)sulfonyl]-4-piperidine

To a solution of compound 3 (350 mg, 0.73 mmol) in methanol (5 mL) was added hydrogen chloride (300 MHz, DMSO-d6) δ ppm 3.01-3.24 (m, 8H, DMSO-d6) δ ppm 43.5, 47.8, 52.4, 53.7, 106.8 Hz), 138.0, 147.3. Elemental analysis calc. for

99%

Create Retrosynthesis Plan

Reference

del, Paweł; Matyła, Mikolaj; Konieczny, Jolanta; Kos, Tomasz; Hrynysz, Josie C.; Czerwik, Natalia G.; Clark, Allison A.; Corry, John D.; Papik, Piotr

Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics, 2025, vol. 1, # 2, art. no. 100055

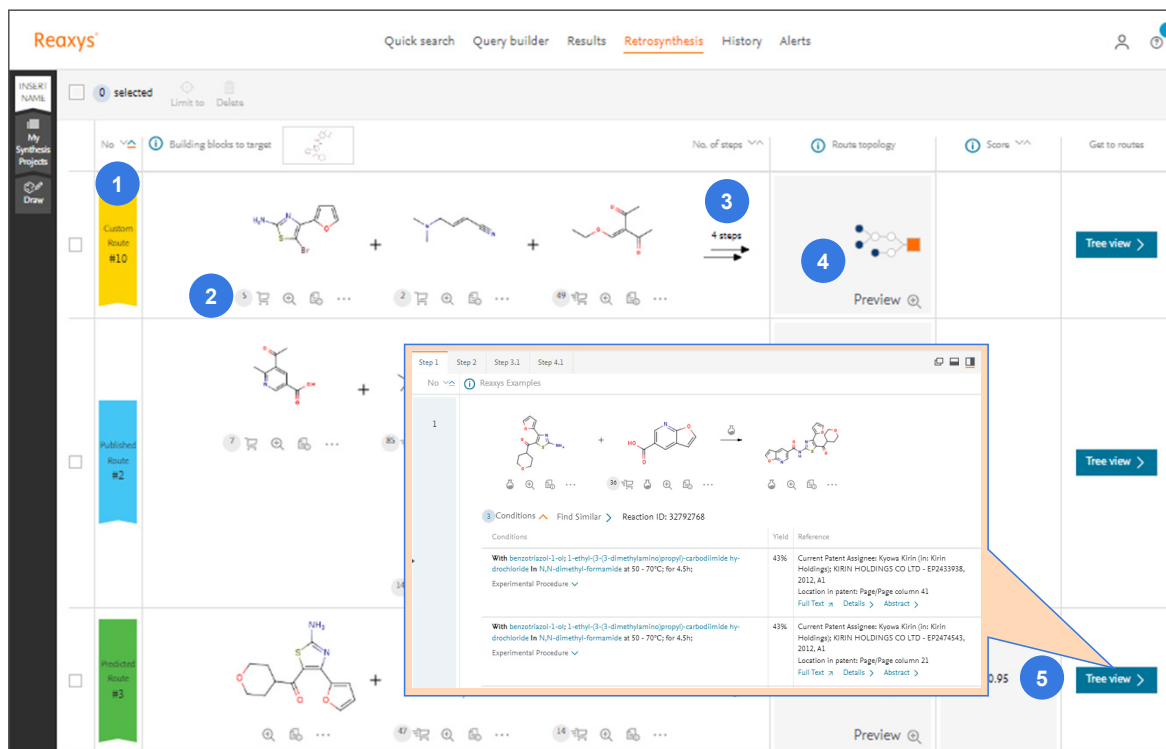
Text Details Abstract

precipitate was filtered and then washed with diethyl ether (3 x 1 mL, MW 415.89, Monoisotopic Mass 379.12, [M+H]+ = 380.1, 1H NMR (7.95 (td, J = 8.5, 6.4 Hz, 1H), 9.44 (br s, 2H), 13C NMR (75 MHz, 15.1 (t), 122.3 (d), JCF = 3.5 Hz), 129.3, 129.6, 133.4 (d), JCF = 11.5 Hz), 138.0, 147.3. Elemental analysis calc. for

Feedback

- 1 精製手法を含む、抽出された実験情報を確認できます。
- 2 部分構造で絞り込み、最も関連性の高い結果に絞り込めます。
- 3 グリーンケミストリー指標、収率、触媒クラスなど、複数のフィルター条件で結果を絞り込めます。
- 4 引用回数、関連度、出版年でコンテンツを並べ替えできます。
- 5 逆合成機能を活用して、新たな合成ルートや化学的知見を発見できます。

合成ルートを迅速に特定し、コストを評価できます。



The screenshot displays the Reaxys Retrosynthesis interface. On the left, there is a sidebar with 'My Synthesis Projects' and 'Draw'. The main area shows a list of routes with columns for 'Building blocks to target', 'No. of steps', 'Route topology', 'Score', and 'Get to routes'. A pop-up window provides a detailed view of a reaction step, including conditions, yield, and references.

Step	Yield	Reference
Step 1	43%	Current Patent Assignee: Kyowa Kirin (In: Kirin Holdings); KIRIN HOLDINGS CO LTD - EP2433938, 2012, A1 Location in patent: Page/Page column 41 Full Text > Details > Abstract >
Step 2	43%	Current Patent Assignee: Kyowa Kirin (In: Kirin Holdings); KIRIN HOLDINGS CO LTD - EP2474543, 2012, A1 Location in patent: Page/Page column 21 Full Text > Details > Abstract >

- 1 文献掲載ルート、予測ルート、カスタマイズしたルートを1つの画面で比較できます。
- 2 合成に必要な出発原料の商業的な入手可能性を評価できます。
- 3 合成計画のステップ数を一覧で確認し、より短いルートを迅速に優先できます。
- 4 ルートポロジータを用いて、多様な合成ルートを簡単に把握できます。
- 5 予測された各ステップについて、文献実例を同一画面で確認できます。Reaxysは、合成ルートに関連付けられた公開文献例を一つのビューで提供する唯一の化学データベースです。

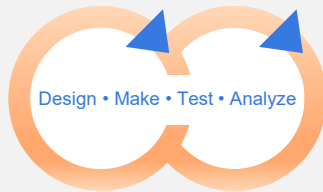
Reaxysで独自の知財ポジションを切り拓く。

研究開発の各段階を通じて、プロジェクトの競争力を維持し、特許性を確保します。

ターゲット検証 ヒット同定 ヒット検証 ヒットからリード化へ リード最適化 後期リード最適化



特許性評価 新規性 知的財産の独占性



49M
特許情報

105
特許機関

173
IPCクラス

58K
IPCコード

非英語の要約および特許請求項まで翻訳して提供する唯一の化学データベースにより、世界中のイノベーションにアクセスできます。



関連する生物学的ターゲットについて、特許全文にわたる詳細なインデックス化を通じてターゲットを検証する。



現在の特許権者、IPC分類、種別コードなどの関連フィルターを用いて、競合に関する詳細分析を実施する。



主要特許庁の特許全文から抽出された物質情報により、より効果的な新規性調査を実現する。



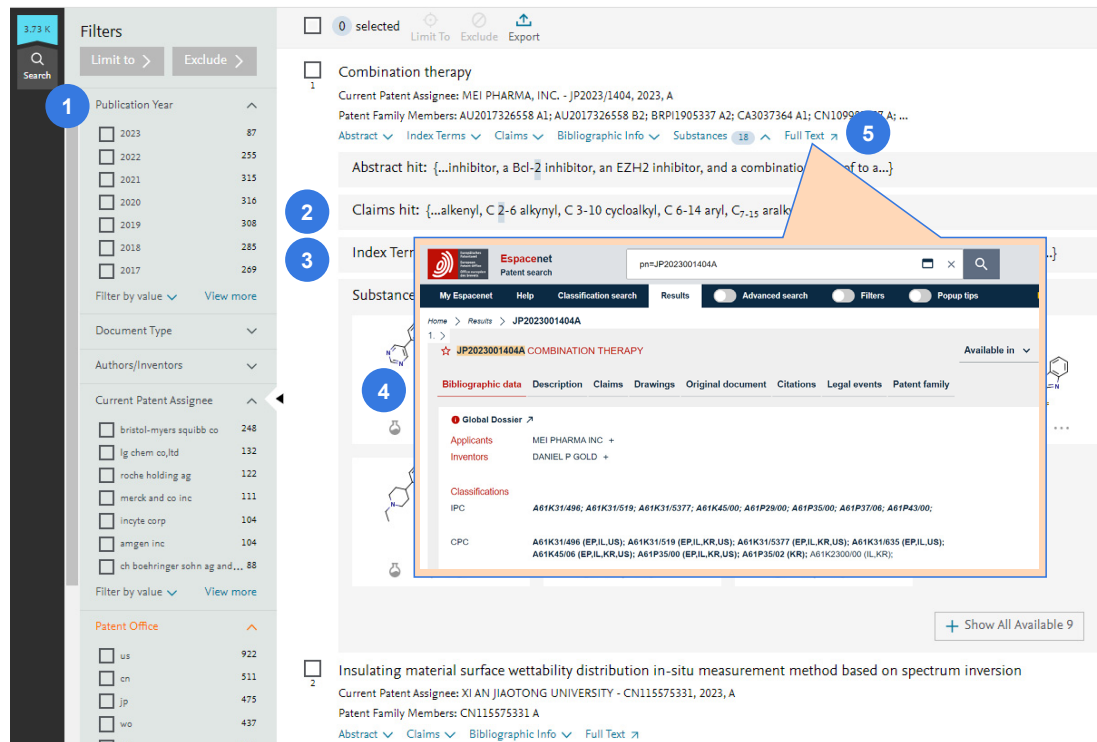
公開から5日後には利用可能となる特許および物質情報を活用して、最新情報を把握しアラートを設定する。



主要特許庁の特許情報に対して、反応・物質・特性を人手で詳細にインデックス化したデータを用いて、化学的知見をレビューする。



世界のイノベーションをレビューし、競争環境をモニタリングする。

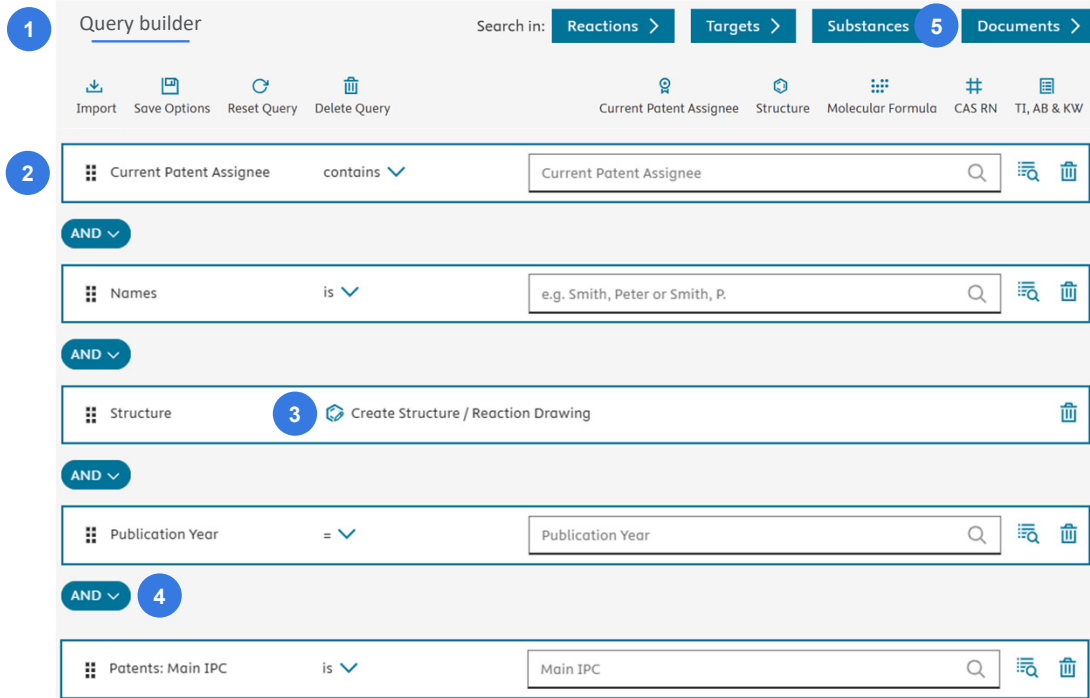


The screenshot shows the Espacenet patent search interface. It includes a search bar at the top left, a filters sidebar on the left, and a main results area. Five numbered callouts highlight specific features:

- 1**: Search bar and filters sidebar.
- 2**: Filter by value dropdown menu.
- 3**: Filter by value dropdown menu (repeated).
- 4**: Patent search results for JP2023001404A, showing bibliographic data, description, claims, drawings, original document, citations, legal events, and patent family.
- 5**: Patent details for JP2023001404A, including abstract, claims, and index terms.

- 1 公開年でフィルタリングすることで、最新の特許を迅速に評価できる。
- 2 要約および特許請求項の高品質な英語翻訳をレビューする。
- 3 Reaxys の索引語によって抽出された化学関連コンセプトを活用し、より関連性の高い特許を発見する。
- 4 特許全文からすべての化合物を抽出することで、より多くの物質情報を閲覧できる。
- 5 元の特許文書への簡単なリンクアウトにより、さらに詳細な評価を行う。

高精度な特許検索を実行する。



The screenshot shows a 'Query builder' interface with the following components:

- 1** Query builder header with search filters: Reactions > Targets > Substances **5** Documents >
- 2** Search criteria: Current Patent Assignee contains Current Patent Assignee
- AND** connector
- Search criteria: Names is e.g. Smith, Peter or Smith, P.
- AND** connector
- 3** Search criteria: Structure **3** Create Structure / Reaction Drawing
- AND** connector
- Search criteria: Publication Year = Publication Year
- AND** connector
- 4** Search criteria: Patents: Main IPC is Main IPC

- 1** クエリビルダー(包括性と関連性を高めるために、独自の分類体系と Querylet を組み合わせた機能)により、最も関連性の高い情報を取得する。
- 2** 特許に関連する項目があらかじめ入力されたフォームにより、検索体験を効率化する。
- 3** 注目するスキャフォールドを描画することで、関連するすべての化合物を取得する。
- 4** 使いやすいブール演算子や近接演算子を含む、より多くのカスタマイズオプションによって検索を自在にコントロールする。
- 5** 複数の検索オプションを用いて、最も重要なコンテンツを評価する。

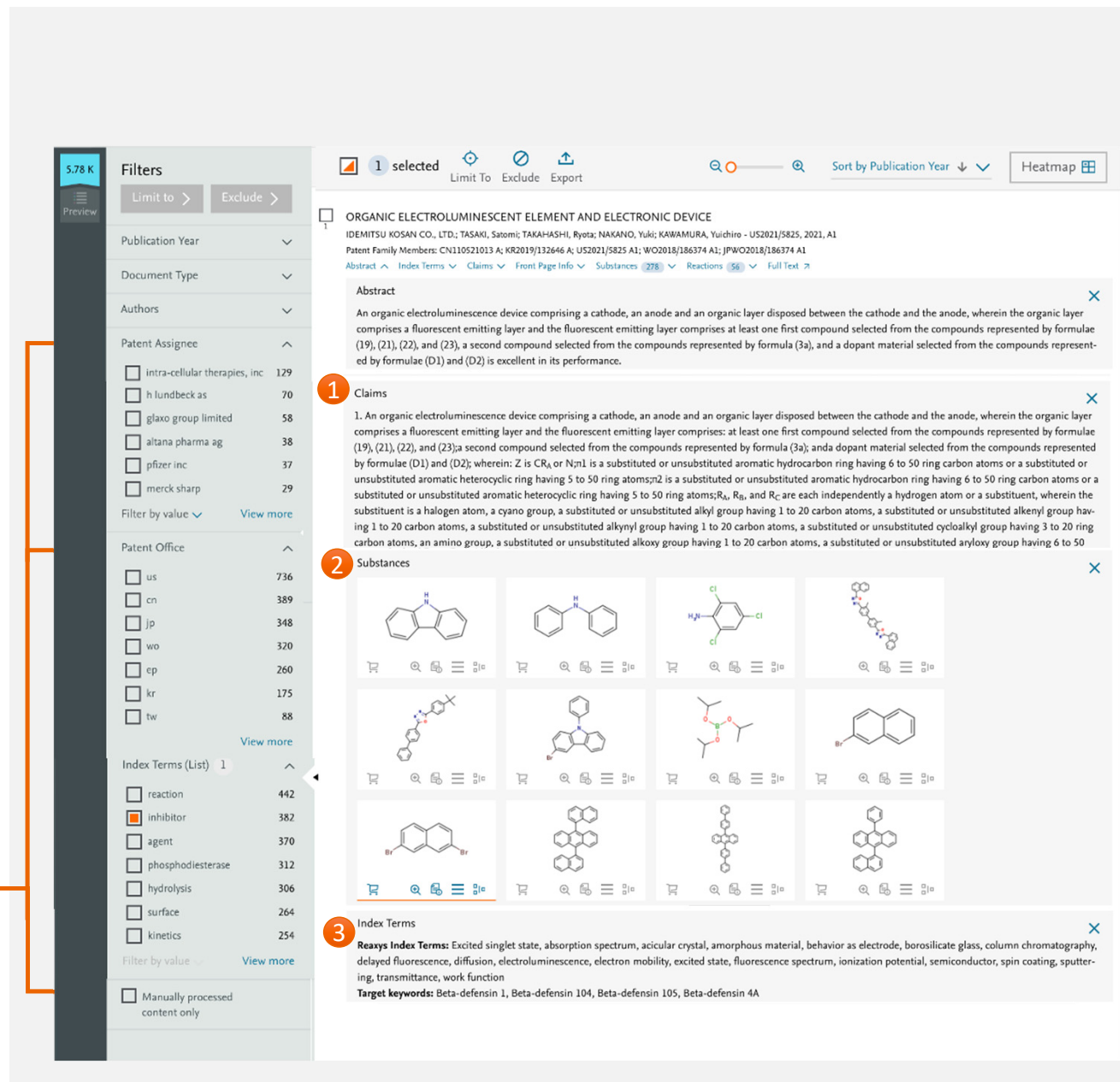
特許情報は、Reaxys のドキュメント結果ページで容易に見つけることができる。

 Reaxys に収録されている特許総数は、2026年第1四半期に170万件から4,900万件へ増加。

1. 要約および請求項の高品質な英語翻訳に、UI 上から簡単にアクセス可能
2. 特許全文からすべての化合物を抽出した物質情報
3. Reaxys の索引語は、生物学的ターゲットや化学関連コンセプトを抽出し、特許検索および発見を強化する。

結果セットのナビゲーションを容易にする新しいフィルター

特許庁、特許権者、および手作業で処理された特許。



The screenshot displays the Reaxys interface for a patent search. On the left, a 'Filters' sidebar shows 5.78 K results and various filter options: Publication Year, Document Type, Authors, Patent Assignee (listing companies like Intra-cellular therapies, Inc., Lundbeck, Glaxo Group Limited, Altana Pharma AG, Pfizer Inc, and Merck Sharp), Patent Office (listing countries like US, CN, JP, WO, EP, KR, TW), Index Terms (List) (listing terms like reaction, inhibitor, agent, phosphodiesterase, hydrolysis, surface, kinetics), and Manually processed content only. The main content area shows the selected patent: 'ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT AND ELECTRONIC DEVICE' by IDEMITSU KOSAN CO., LTD. The abstract and claims are visible, along with a grid of chemical structures under the 'Substances' section. The 'Index Terms' section lists various terms and target keywords.



Reaxys Target & Bioactivity



ソースデータ	人手およびAIによってジャーナルや特許から抽出された独自データ。
データ量	Reaxys Targets and Bioactivities には、4,600万件の生物活性データポイント、生物活性情報を持つ860万件の物質、および4万1,000件のターゲットが含まれています。
データタイプ	SAR, ADME, PK/PDデータ, アッセイデータ, 毒性情報
エクスポート	XLS, XML, RD, SD/MOL, TDT, PDF, DOC
予測機能	NA
価格とパッケージ	Reaxys に統合



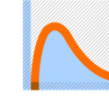
コンテンツは、特許・ジャーナル・書籍を含む60万件以上の引用文献をもとに、専門家チームによって手作業でキュレーションおよび統合されています。



8M+
生物活性データを有する物質



2.4M+
ADME



20M+
PK/PDデータポイント



4.5M+
毒性データポイント



6M+
アッセイ



56K+
種



21k+
細胞株



36K+
生物学的ターゲット

Reaxys にシームレスに統合、関連する生物活性データへ容易にアクセス



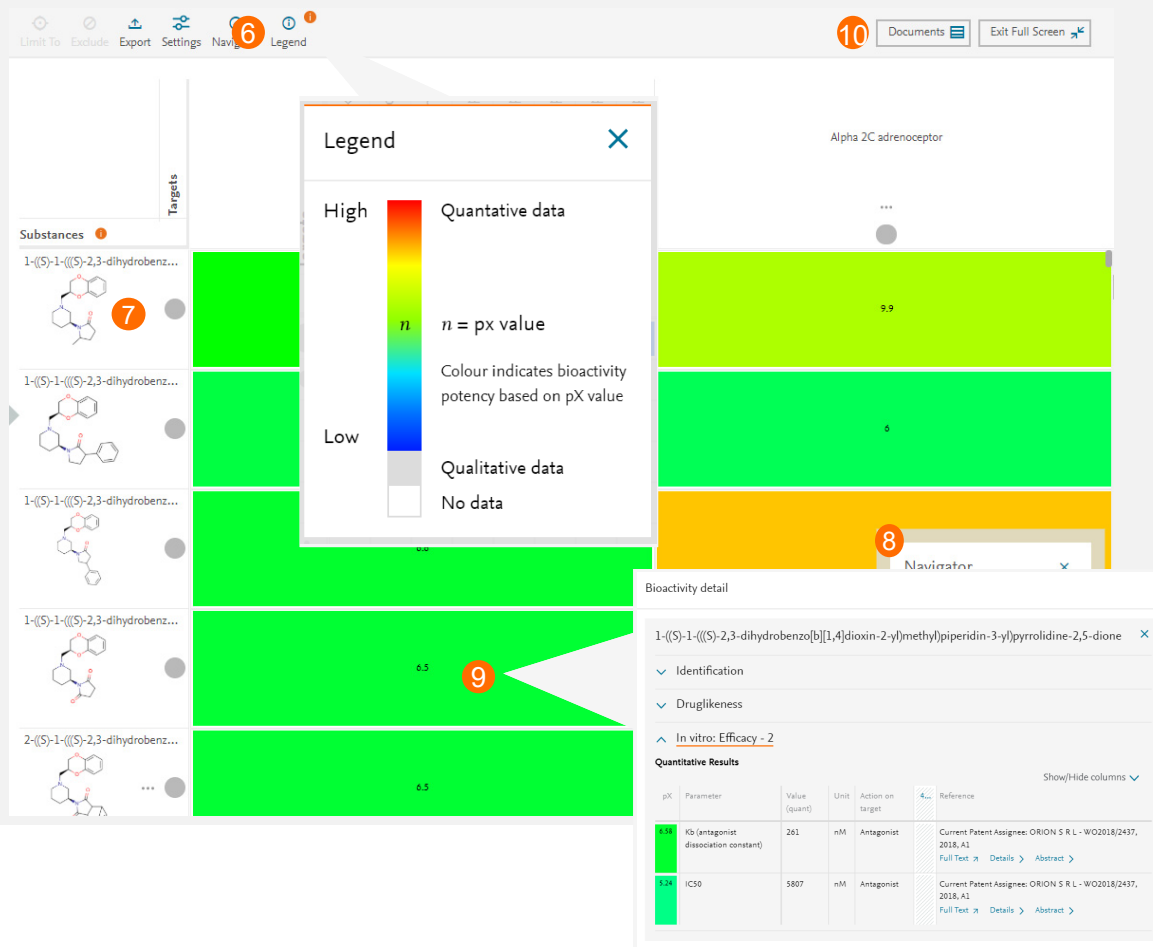
The screenshot displays the Reaxys interface for the search term 'imatinib'. On the left, a 'Filters' sidebar is visible with various criteria like 'Measurement pX', 'Targets', and 'Substance Classes'. The main search results area shows the chemical structure of imatinib and its properties. A 'Heatmap settings' dialog box is open, allowing users to select 'Targets' for visualization. Below the heatmap settings, a table lists various cell lines and their effects, such as 'Ba/F3 cell line' being a 'cytotoxic agent' and 'GIST-T1 cell line' being an 'antineoplastic agent'. At the bottom, a 'Veber rules component' table and a 'logP' vs 'PSA/10' plot are shown.

Cell	Effect
Ba/F3 cell line	cytotoxic agent
GIST-T1 cell line	antineoplastic agent

Veber rules component	Value
Polar Surface Area (PSA)	86.28
Rotatable Bond (RotB)	8
Matching Veber Rules	2

- 1 Lipinski/Veber ルール比較を含む Druglikeness のプロフィールに容易にアクセスできる。
- 2 同じ画面内で生物活性データを確認でき、より迅速に情報に基づいた意思決定を行える。
- 3 検索を最適化する追加の関連フィルター
- 4 さらなる分析のために、生物活性データの知見を複数形式 (PDF、DOC、XLS、XML、RD、SD) でエクスポートできる。
- 5 生物活性の可視化機能について、詳しく見ていきましょう...

Reaxys の生物活性の可視化機能により、関連データを容易に比較可能。



- 6 凡例にアクセスして、活性強度スケールの概要をすばやく確認する。
- 7 データを確認しながら化学構造を表示し、迅速な SAR 解析を行う。
- 8 使いやすいナビゲーションバーを用いて、大規模データセットを評価する。
- 9 セルをクリックすると、特定レコードの詳細情報すべてにアクセスできる。
- 10 ヒートマップと関連文書をシームレスに行き来し、さらなる評価を行う。



Reaxysは、研究者の多様なユースケースとニーズに応えるため、継続的に進化を遂げてきました



データ & 予測テクノロジー

逆合成予測ツール



受賞歴があり実証済みの **AI 駆動型の逆合成予測**により、合成計画にかかる時間と労力を削減し、イノベーションを促進する。

逆合成のカスタマイズ



レトロシンセシスを自分仕様に！ビルディングブロックライブラリ／在庫情報や ELN 反応データを統合することで、ユーザー体験を向上させ、より優れた予測結果が得られる。※

合成容易性*



分子設計アイデアを迅速にランク付けすることで、時間を節約。

*近日リリース予定

ML 最適化済み反応フラットファイル



本当に重要な業務に集中。
予測モデル学習のためのデータ処理にかかる時間と労力を削減する。※

※企業向けオプション

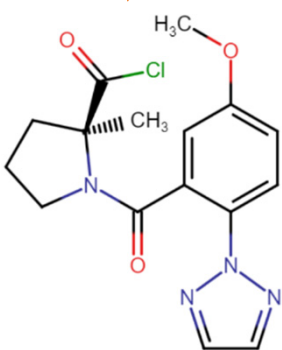
Structure editor selected: MarvinJS ChemDrawJS

Insert structure from name >


Create structure template from name

is Enter a chemical name, CAS-RN, InChiKey or SMILES


COC1=CC=C(N2N=CC=N2)C(=C1)C(=O)N1CCC[C@@]1(C)C(Cl)=O




Parameters

Predicted 


General Intermediates

Length of routes 


Max. Number of steps: (1-15)

Regioselectivity 

Only regioselective reactions


Starting materials settings 


Reaxys Commercial Substances (RCS)


Max. Shipping time 

up to 10 days any

Max. Price per gram: (\$/g)

Powered by 

Published 




位置選択的反応フィルターおよびキラルプールアプローチにより、
選択性を確保する。


Structure editor selected: MarvinJS ChemDrawJS

Insert structure from name >


Parameters

Predicted 


General Intermediates

Length of routes 


Max. Number of steps: (1-15)

Regioselectivity 

Only regioselective reactions

Starting materials settings 


Reaxys Commercial Substances (RCS)

Max. Shipping time 


up to 10 days any



Max. Price per gram: (\$/g)

Powered by IKTOS

Published 

5 full routes (up to)
5 branches per step (up to)
5 steps per route (up to)
Stop at commercial building blocks
50% yield per step (assumed, if not published)

Feedback 

Clear  Cancel  Synthesize >


My Synthesis Projects

Draw


Structure editor selected: MarvinJS ChemDrawJS

Insert structure from name >

Parameters

Predicted 

General Intermediates


Enter intermediates 

Include substructures (up to 10)

Exclude substructures (up to 10)

Powered by IKTOS


Reaxys Commercial Substances (RCS)

Max. Shipping time 


up to 10 days any



Max. Price per gram: (\$/g)

Powered by IKTOS

Published 

5 full routes (up to)
5 branches per step (up to)
5 steps per route (up to)
Stop at commercial building blocks
50% yield per step (assumed, if not published)

Feedback 

Clear  Cancel  Synthesize >

1-1

Reaxys は、1億件を超えるビルディングブロックを備えた、最大規模の商用化合物ライブラリを有しています。

中間体を含める／除外することで、プロジェクトのニーズに合わせてルートを最適化する。

Predicted Route #2

Project #1901031

My Synthesis Projects

Draw

Export Legend


Rotate Fit view Copy route

Predicted route #2

Step 1 Step 2 Step 3 Step 4

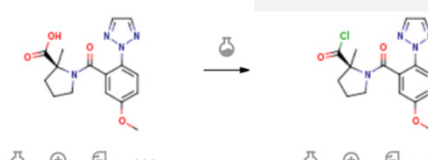
Hide Reaxys Examples



0 selected View selected


No  Reaxys Examples



Similarity score of published reaction that informed the predicted reaction based on their extended reaction centre (the atoms and bonds directly involved in the reaction and their immediate neighbourhood)

1



2 Conditions  Find Similar  Reaction ID: 49949454

Conditions	Yield	Reference
<p>With oxalyl dichloride; N,N-dimethyl-formamide In dichloromethane at 20°C; for 0.5h;</p> <p>Experimental Procedure </p>		<p>Current Patent Assignee: ACTELION PHARMACEUTICALS - WO2018/202689, 2018, A1</p> <p>Location in patent: Page/Page column 34</p> <p>Full Text Details Abstract</p>
<p>With thionyl chloride; N,N-dimethyl-formamide In toluene at 40 - 47°C; for 0.5h; Large scale;</p>		<p>Boss, Christoph; Gatfield, John; Brotschi, Christine; Heidmann, Bibia; Sifferlen, Thierry; von Raumer, Markus; Schmidt, Gunther; Williams, Jodi T.; Treiber, Alexander; Roch, Catherine</p> <p>[ChemMedChem, 2020, vol. 15, # 23, p. 2286 - 2305]</p>


 Score 

1

Shipping time: **Up to 5 days**

Best price: **5 USD/g**

Largest available package size: **Greater than 10 kg**

79 

参照文献および実験手順を含む合成ルートを迅速に提供する。

Reaxys 逆合成は、一流の研究者により試用・検証され、高く評価されている

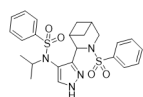
ETH Zurich の Carreira 教授グループおよび ラドバウド大学の Rutjes 教授グループからのフィードバック



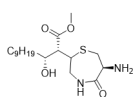
分子およびチームの選択

- 各チーム3~4名の研究者で構成された7チーム編成,各チームに少なくともシニア研究者1名、ジュニア研究者1名を配置
- 30種類の分子を選定**
 - 構造多様性を考慮
 - ドラッグライク化合物および天然物を対象とする

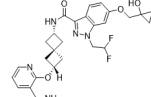
選定された分子の例



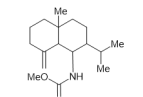
Structure: Novel
Synthesis: Unknown in literature



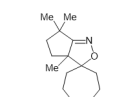
Structure: Novel
Synthesis: Unknown in literature



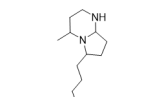
Structure: Novel
Synthesis: Unknown in literature



Structure: Known (balichonadin B)
Synthesis: Unknown in literature



Structure: Novel
Synthesis: Unknown in literature



Structure: Novel
Synthesis: Unknown in literature

逆合成予測を使用せずに合成ルートを作成

- 毎週のグループディスカッションにおいて
- ルートの科学的妥当性を評価
 - 最適なルート生成に必要な時間と労力を評価






逆合成予測を使用して合成ルートを作成

- 毎週のグループディスカッションにおいて
- 予測ルートと専門家が作成したルートを比較
 - 新たなアイデアを収集し、必要な時間と労力を測定する

Rutje教授およびCarreira教授のグループからのフィードバック。

- 逆合成ツールによって、興味深いアプローチと堅牢な合成ルートが提案された。
- このツールはユーザーフレンドリーで直感的。Reaxys に慣れていれば簡単に利用できる。
- このツールは、合成ルート設計や利用可能な反応条件のアイデア創出において、時間短縮を実現する。
- 文献上の先行事例を提示し、それに基づいて予測ルートを示すため、ブラックボックス型のAIではない。

Reaxys 逆合成予測ツールの総括、強み、および限界

- User friendly**  このツールはユーザーフレンドリーで直感的です。Reaxys に慣れていれば、簡単に利用できます。
- Robust routes**  ドラッグライク分子に対して堅牢な予測を提供する。一方で、化学者は予測されたルートを確認し、必要に応じて小規模な調整を行う必要がある。
- Time saving**  このツールは、合成ルート設計や、利用可能な反応条件に関する文献参照およびアイデア取得において、時間短縮を実現する。
- Innovative**  提案されたステップの中には非常に革新的なものもあり、人間支援型合成に応用できる。
- Challenges**  天然物のような複雑な分子には課題があり、そのため完全な合成ルートが提供されない場合がある。しかし、一部のステップについては革新的なディスコネクション(逆合成切断案)を得ることが可能である。

私たちは、Reaxys 逆合成予測ツールのような、優れた設計とユーザーフレンドリー性を備えた CASP ツールが、化学者の知識を補完し、合成計画の加速に役立つと考えています。



化学者の知識



逆合成予測



強力な組み合わせ



- このツールは合成ルート作成ワークフローの一部であり、化学者の代替ではない。化学者の業務を補完し支援するものである。
- 人間と機械の相互作用は強力な組み合わせであり、化学者にとって大きな可能性を秘めている。

化学者の代替ではありません。



Reaxys の商用サプライヤーおよび化合物データベースは、顧客の主要サプライヤーに基づいて構築され、定期的に更新されています。



サプライヤー情報を拡充し、**524社の商用サプライヤー**と**3億3,300万件の製品**をカバー。

1. 優先サプライヤー設定
2. 要約情報
3. 結果セットのナビゲーションを容易にする新しいフィルター：
 - サプライヤー名
 - 地理的情報
 - 価格
 - 純度
 - 在庫状況
 - 納期

The screenshot displays the Reaxys interface with the following elements:

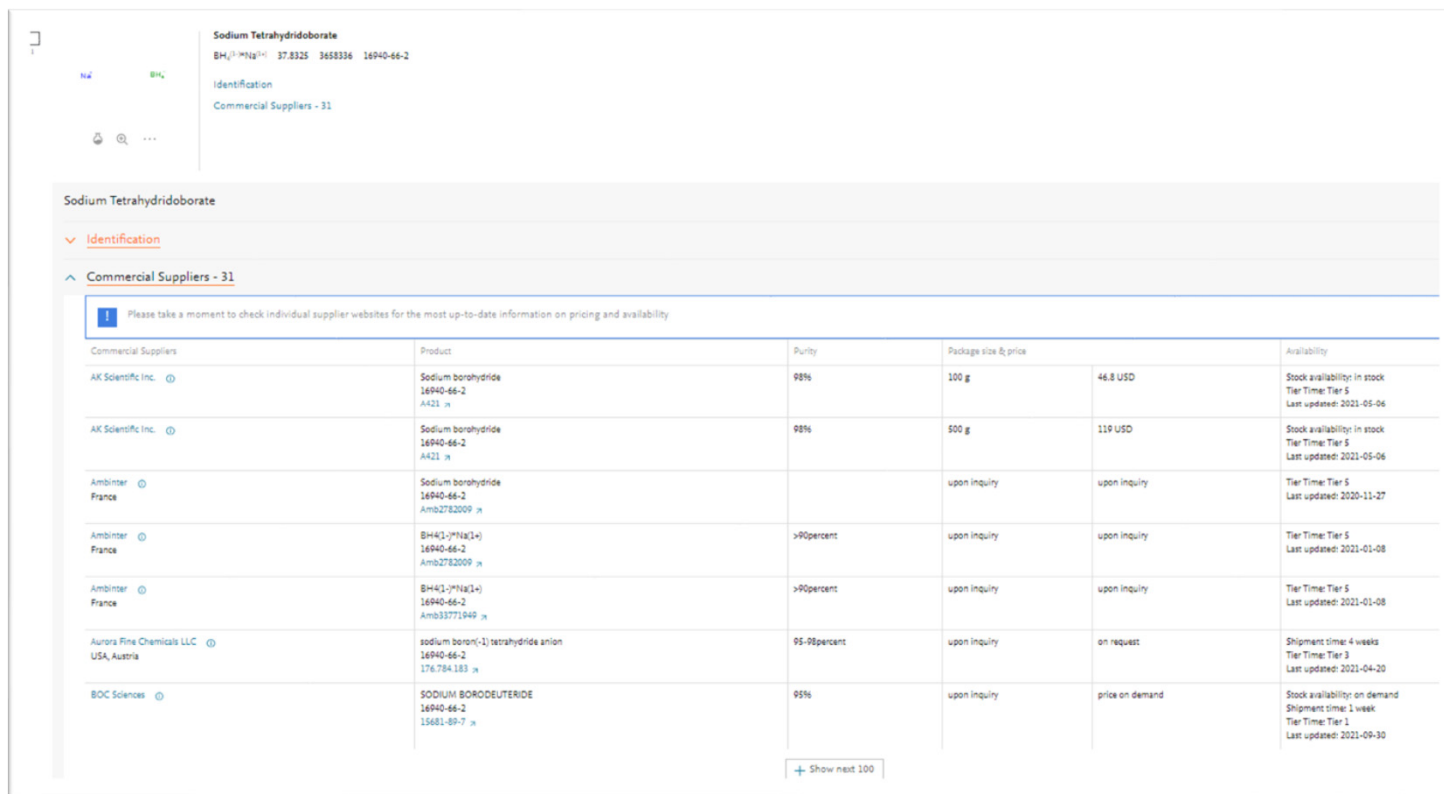
- Filters Panel (Left):** A vertical sidebar with a search icon and a list of filter categories. The 'Commercial Suppliers' filter is highlighted with a red circle '1'. Other filters include 'By Structure', 'Molecular Weight', 'Number of Fragments', 'Availability', 'Supplier Preferences', 'Supplier Geolocation', 'Usage Classification', 'Package Size', 'Price', 'Purity', 'Stock Availability', 'Shipping Time', 'Shipment Country', and 'Products with SDS Links'.
- Substances List (Top Right):** Shows '9 Substances' with a search bar and '0 selected' items. The 'Palbociclib isethionate' entry is selected and highlighted with a red circle '2'.
- Substance Details (Right):** Displays the chemical structure and name of Palbociclib isethionate. A summary box (red circle '2') provides key information: 'Shipping time: Up to 5 days', 'Best price: 50 USD/g', and 'Largest available package size: Up to 1 kg'. Below this, the 'Commercial Suppliers - 48' section is expanded.
- Supplier Table (Bottom Right):** A table listing suppliers for Palbociclib isethionate. The table has two columns: 'Commercial Suppliers' and 'Product'. The data is as follows:

Commercial Suppliers	Product
AbMole Bioscience Inc. USA	Palbociclib Isethionate 827022-33-3 M2913
AbMole Bioscience Inc. USA	Palbociclib Isethionate 827022-33-3 M2913
AbMole Bioscience Inc. USA	Palbociclib Isethionate 827022-33-3 M2913

商用サプライヤー情報へ、より簡単にアクセス可能



機能開発: 優先サプライヤー機能、ショッピングリスト/バスケット機能 (Amazon のようにエクスポート用の商品を収集)、およびエクスポート用の商品レベル選択。



Sodium Tetrahydridoborate
BH₄⁻Na⁺ 37.8325 3658336 16940-66-2

Identification
Commercial Suppliers - 31

Sodium Tetrahydridoborate

Identification

Commercial Suppliers - 31

Please take a moment to check individual supplier websites for the most up-to-date information on pricing and availability

Commercial Suppliers	Product	Purity	Package size & price	Availability
AK Scientific Inc.	Sodium borohydride 16940-66-2 A421	98%	100 g 46.8 USD	Stock availability: In stock Tier Time: Tier 5 Last updated: 2021-05-06
AK Scientific Inc.	Sodium borohydride 16940-66-2 A421	98%	500 g 119 USD	Stock availability: In stock Tier Time: Tier 5 Last updated: 2021-05-06
Ambinter France	Sodium borohydride 16940-66-2 Amb2782009		upon inquiry upon inquiry	Tier Time: Tier 5 Last updated: 2020-11-27
Ambinter France	BH ₄ ⁻ Na ⁺ 16940-66-2 Amb33771949	>90percent	upon inquiry upon inquiry	Tier Time: Tier 5 Last updated: 2021-01-08
Ambinter France	BH ₄ ⁻ Na ⁺ 16940-66-2 Amb33771949	>90percent	upon inquiry upon inquiry	Tier Time: Tier 5 Last updated: 2021-01-08
Aurora Fine Chemicals LLC USA, Austria	sodium boron(-1) tetrahydride anion 16940-66-2 176.784.183	95-98percent	upon inquiry on request	Shipment time: 4 weeks Tier Time: Tier 3 Last updated: 2021-04-20
BOC Sciences	SODIUM BORODEUTERIDE 16940-66-2 15681-69-7	95%	upon inquiry price on demand	Stock availability: on demand Shipment time: 1 week Tier Time: Tier 1 Last updated: 2021-09-30

[+ Show next 100](#)



- Reaxys は現在、専用の検索環境内で500社を超える商用サプライヤーを収録しており、さらに拡大を続けている。
- 以降のリリースでは、ショッピングリスト機能により、ユーザーは Reaxys を通じて購入可能な製品をシームレスに収集し、異なる検索結果から商品をリストに追加しながら、その内容を随時確認できるようになる。
- エクスポート前にショッピングリストの最終確認を行う。

プレスリリース例: [Merck adds Chemical Products to Reaxys' Chemistry Database](#)
商用サプライヤーは、[supplier portal](#)を通じて、自社製品を Reaxys に掲載申請できる。



Reaxys と ScienceDirect および Scopus との連携により、エルゼビア製品間でシームレスなワークフローを実現。



ScienceDirect or Scopus

[View PDF](#) [Download full issue](#)

Tetrahedron
Volume 73, Issue 1, 5 January 2017, Pages 1-7

One-pot synthesis of novel fused pentacyclic chromenopyrimidobenzimidazolones and benzimidazolyl-chromenyl-substituted thiazolidinones

Nicolaos M. Drosos^a, Chrisoula Kakoulidou^a, Marianna Raftopoulou^a, Julia Stephanidou-Stephanatou^a, Constantinos A. Tsoleridis^a, Antonis G. Hatzidimitriou^b

[Show more](#)

[Add to Mendeley](#) [Share](#) [Cite](#)

<https://doi.org/10.1016/j.tet.2016.11.022> [Get rights and content](#)

[Full text access](#)

Abstract

The ultrasound promoted synthesis of a number of novel fused pentacyclic chromenopyrimido[1,2- α]benzimidazolones by the one-pot reaction of 3-formylchromones with 2-aminobenzimidazole is described. Moreover, the isolated pentacyclic **chromone** derivatives upon **microwave irradiation** with 2-mercaptocarboxylic acids afforded benzimidazolyl-chromenylthiazolidinones incorporating three pharmacophoric **heterocycles**; the same **thiazolidinones** were also formed through a **multicomponent reaction** under **microwave irradiation** involving 3-formylchromones, aminobenzimidazole and 2-mercaptocarboxylic acids. The structural elucidation of the products was accomplished by 1D and 2D NMR experiments and for thiazolidinones was also confirmed by X-ray crystallographic analysis. Full assignment of all ¹H and ¹³C NMR chemical shifts has been unambiguously achieved. The proposed reaction mechanism is also discussed.

Graphical abstract

Substances (23)
Generated by Reaxys[®], an expert-curated chemistry database.

Reaxys substance information < 4/23 > X

1H-benzimidazol-2-amine
Other chemical names
2-Aminobenzimidazole
1H-benzo[d]imidazol-2-amine
2-aminobenzimidazole
2-amino-1H-benzimidazole
1H-benzo[d]imidazole-2-amine

Molecular formula
C₇H₇N₂

Molecular weight
133.153

CAS Registry Number
934-32-7

[Suppliers](#) [Druglikeness](#) [Reactions](#)

Available in Reaxys

Physical Data
Melting Point (3)

Adsorption (MCS) (9)
Association (MCS) (3)
Chromatographic Data (6)
Conformation (1)
[View more in physical data](#)

Spectra
NMR Spectroscopy (34)
IR Spectroscopy (17)

Recommended articles
No articles found.

Article Metrics

Citations
Citation Indexes 8

Captures
Mendeley Readers 13

[View details](#)

ScienceDirectとScopusの文献ページを強化:

- ✓ Reaxysのデータにより、論文に含まれる知見をより理解しやすくなります。
- ✓ Reaxys内の関連データへの直接リンクにより、ソリューション間をシームレスに行き来できます。

Reaxys[®] [Link search](#) [Query builder](#) [Results](#) [Retrosynthesis](#) [Reaxys AI Search](#) Beta

1 Substances out of 3,410 Documents, containing 6,417 Reactions, 32 Targets Sort by No of References

selected [Limit To](#) [Exclude](#) [Export](#) [Preparations](#) [Grid](#) [Bioactivity Visualization](#)

1H-benzimidazol-2-amine
C₇H₇NNHNH₂ 133.153 116525 934-32-7

[Identification](#) [Physical Data - 76](#) [Preparations - 52](#)
[Druglikeness](#) [Spectra - 127](#) [Reactions - 6,417](#)
[Bioactivity \(All\)](#) [Other Data - 6](#) [Targets - 32](#)
[Documents - 3,410](#)

1H-benzimidazol-2-amine

[Identification](#)

Chemical Names: 1H-benzimidazol-2-amine • 2-Aminobenzimidazole • 1H-benzo[d]imidazol-2-amine • 2-aminobenzimidazole • 2-amino-1H-benzimidazole • 1H-benzo[d]imidazole-2-amine • 2-amino-1H-benzo[d]imidazole

[+ Show all chemical names](#)

Reaxys ID: 116525
CAS Registry Number(s): 934-32-7
Molecular Formula: C₇H₇N₂
Molecular Weight: 133.153
InChIKey: JWYUPVJZUSCSM-UHFFFAOYSA-N

Substance type: heterocyclic
Linear Structure Formula: C₇H₇NNHNH₂
No of references: 3410

[Substance Label - 180](#)
[Patent-Specific Data - 23](#)



文献レビューおよび競合インテリジェンスのワークフローをさらに強化



改善された著者検索:

- ✓ 姓・名のあらゆる組み合わせで結果を取得できるため、関連性の高い結果を見逃さない
- ✓ 改善された著者フィルターにより、名前のバリエーションを明確に表示し、最新の所属情報と密接に連携
- ✓ 新しい所属機関フィルターにより、結果の絞り込みを強化し、指定した著者に関連する最も適切な文書を取得できる

姓名は順不同で入力でき、アクセント記号の有無も問わない(感動しました!!!)。たとえば“Stephane Vincent”を試してみてください。人間は名と姓をよく取り違えますが、Reaxysはそうではありません。 - アカデミックユーザーのフィードバック

The screenshot displays the Reaxys search interface with several key elements highlighted:

- Filters Panel:** A sidebar on the left contains various filter categories. The 'Authors of Scientific Documents' and 'Affiliations' filters are highlighted with orange boxes.
- Search Results:** The main area shows a list of 123 documents. The first document is highlighted with a blue box, showing the author 'Clark, J. Stephen' and his affiliation 'University of Glasgow'.
- Author Filter Pop-up:** A modal window titled 'Authors of Scientific Documents' is open, showing a list of authors. The entry for 'Clark, J. Stephen' is highlighted with an orange box, showing multiple variations of his name and affiliation.
- Affiliation Filter Pop-up:** Another modal window titled 'Affiliations' is open, showing a list of institutions. The entry for 'university of glasgow' is highlighted with an orange box, showing its frequency in the results.

Reaxys をユニークな存在にしているもの。

化合物カバレッジ

2億8,700万件の化合物を収録した、最も包括的な化学ソリューション

特許カバレッジ

英語翻訳および原文の、最も広範な特許カバレッジ

逆合成予測

より容易なルート設計を実現する、最高水準の逆合成予測ツール。

生物活性データ

ジャーナルおよび特許から抽出された、包括的な毒性・安全性データ

データ

特許および学术论文から得られた、広範な実験特性データと実験手順

インテグレーション

Elsevier の他ソリューションとの多様な連携オプションにより、シームレスなワークフローを実現

高度な検索

独自の分類体系、専用検索フィールド、および自然言語クエリ。

検索インターフェース

使いやすい検索、スマートな同義語展開、およびフィルタリング機能により、1つの画面で知見を把握

Reaxys アカデミー



Reaxys
For every chemist

From staying up-to-date with research to designing and synthesizing compounds, are you looking for ways to broaden your understanding of chemistry?
Look no further

Reaxys Academy
Provide you with educational material to support learning chemistry concepts and digital chemistry literacy with Reaxys. Learn how to get started with Reaxys and how to apply this knowledge to enhance your learning on analytical, organic and inorganic chemistry.

Get certified in 3 easy steps!

1. Explore our intuitive learning modules
2. Complete a short test at the end
3. Download your certificate and share online!

動画、クイズ、修了証を含む、Canvas 上で提供される無料のセルフペース型コース。

- **Reaxys 101** – Reaxys の基礎レベルの入門学習や、研究プラットフォームとしての Reaxys に関するスキルと理解を深めるのに最適。
- **Chemistry 101** – 化学知識のさまざまな分野において、Reaxys をどのように活用できるかを紹介。
- **Teaching 101** – Reaxys へのオンボーディングを担当するすべての人に最適。

Reaction Flash アプリ

ReactionFlash® は、1,250件を超える人名反応、その反応機構、および査読付き文献に掲載された実例へのアクセスを提供する。

ETH Zurich の Carreira 教授研究グループとの共同開発。



- 反応機構をレビューし理解する。
- 査読付き文献に掲載された実例を探索する。
- アプリ内クイズで知識を確認する。

無料ダウンロード:

- [The App Store](#)
- [GooglePlay](#)

<https://www.elsevier.com/products/reaxys/higher-education/teaching-chemistry/reaction-flash#1-tips-and-tricks>

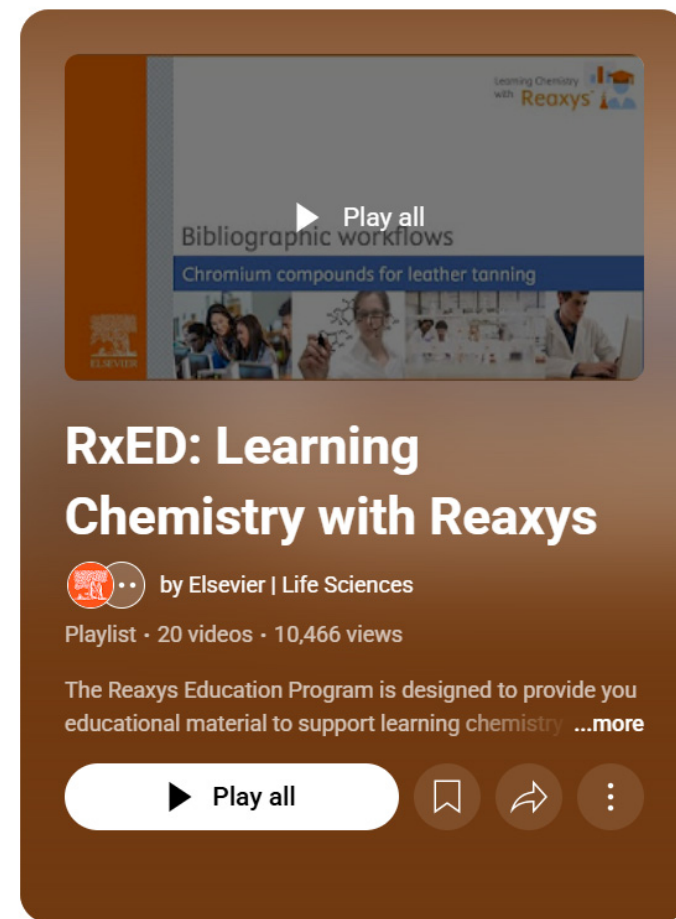
RxED: Reaxys で学ぶ化学



YouTube プレイリスト:

Reaxys Education Program は、Reaxys を活用して分析化学、有機化学、無機化学における化学概念およびデジタルリテラシーの学習を支援する教育用動画を提供しています。

ヒント: 分析化学、有機化学、無機化学の講義資料に、主要トピックに関連した動画を追加しましょう。



https://www.youtube.com/playlist?list=PLQNGOAAhIKDTUZqQJI72_-XZqpmKN_tGG



Reaxys を見ていきましょう！！

Reaxysへのアクセス: www.reaxys.com にサインイン



Reaxys

Quick search

Query builder

Results

Retrosynthesis

History

Alerts

Reaxys AI Search

Beta

?

MB

検索を保存

アラートの作成

サインイン

ヘルプ

Reaxys

6 Reactions Aug 28 2025 reaction

Query Builder: in reactions - AND TIME (Reaction Details) "5" AND Yield (numerical) "90"

350102 Reactions Aug 28 2025 flow reaction

Query Builder: in reactions - Reaction Data & Conditions "flow**"

229 Reactions Aug 28 2025 click_reaction mechanism

Query Builder: in reactions - Subject Studied "mechanism"

Your IP: 198.176.82.34

account

Last Name

computer (computer!)

er products and services

Registered User Agreement

Create Alert >

ter >

Terms and Conditions

AI Search Beta.

oactivity data

Substances

ELSEVIER

Reaxys Support Center

All Topics Search

What's new

- Your guide to the new Reaxys
- Update: Users in China facing access issues
- Details of our new release (August 9, 2019)

Top 10 FAQs

Orders & Renewals

Access

Onboarding

Training

Using the product

Content

Send alerts to:

Frequency:

From databases:

After each update

Deactivate

Monthly

Bi-weekly

Weekly

After each update

Create Alert >

Reaxys サポート／トレーニング資料



ELSEVIER

Elsevier | LibGuides | Reaxys LibGuide | Home

Reaxys LibGuide: Home

A guide for how to get started, search, personalize and take advantage of Reaxys.

[Home](#) [Getting started & access](#) [Using Reaxys](#) [Training & Support](#)

What is Reaxys?

Reaxys®

Designed by chemists, Reaxys is a web-based, chemical search engine that allows you to search for chemical reactions, (parts of) chemical structures and substance properties.

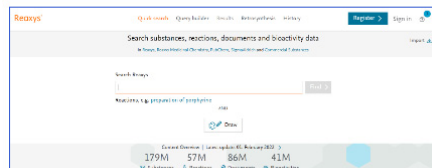
In this LibGuide, you can find more information about the possibilities of Reaxys, using the navigational tabs at the top of the screen.

- Reaxys is a highly curated, easy-to-use, decision support tool, built on high-quality data and harnessing the power of advanced analytics, machine learning and AI. It is also the leading database for bioactivity data. Researchers and students use Reaxys to find, connect and utilize chemistry literature, patents, and property & reaction data to expand their knowledge, accelerate research and advance science. Reaxys also supports teaching excellence in chemistry education.
 - Reaxys excerpts and quickly retrieves the most relevant chemical information, so you can:
 - Decide how and which compounds to make with confidence
 - Find state-of-the-art routes to synthesize molecules with superior properties
 - Discover novel molecules with improved activities against specified targets
 - Stay current with updates on new chemistry publications and patents
 - Find the most reliable vendors of starting materials and intermediates
 - Search integrated in-house and external data
- [Go to Reaxys](#)

Content repositories

- Reaxys contains comprehensive chemistry, medicinal chemistry and pharmacology data. And it indexes chemical information with six taxonomies for an interdisciplinary view. Reaxys offers a broad range of data types from patents, journals and books.
- [See the latest content numbers](#)

Search this Guide



[Home - Reaxys LibGuide - LibGuides at Elsevier](#)

[Release Notes](#)

[Orders & Renewals](#)

[Access](#)

[Onboarding](#)

[Training](#)

[Using the product](#)

[Content](#)

[Video Tutorials](#)

[New and updated FAQs](#)

Training

22 results for "

Welcome to Reaxys

Last updated on September 30, 2023

This video showcases how Reaxys helps you to get the best out of your research.

[Read more](#)

Where can I find video tutorials for Reaxys?

Last updated on January 19, 2025

Reaxys video tutorials provide a visual guide to using the product. Access a selection of videos via the

[Read more](#)

Reaxys Reference Guide

Last updated on May 23, 2025

For a quick overview of key Reaxys and

[Read more](#)

Search for substances by structure

Last updated on September 30, 2023

How to define a structure query for substances and review substance records for a given compound.

[Read more](#)

Search for literature

Last updated on September 30, 2023

How to retrieve documents for a topic or target of interest and how your terms are searched in

<https://service.elsevier.com/app/answers/list/c/10545/supporthub/reaxys/>

Reaxys サポート／トレーニング資料



化学データベースReaxys操作ガイド

Reaxysは10億を超える化学データポイントとAIを組み合わせ、創薬、化学研究開発および学術分野におけるイノベーションをサポートします。化学者は関連する特許、物質および生物活性に関する深い情報や逆合成予測ツールへ迅速にアクセスすることができます。

Reaxysウェブサイト



Break through
with Reaxys

Reaxys操作方法解説 基礎編（日本語）

Reaxysの特徴（動画）

基本的な検索方法（動画）

化合物・物性検索

反応検索

逆合成ルート検索

Query Builder検索（ノイズ除去）

エクスポート・保存・アラート機能

その他（テキスト検索やChemDrawからのコピー&...

Reaxys操作方法解説 実践編（日本語）

原子団の表記（動画）

金属錯体の検索（動画）

無機化合物検索

置換基を制御した検索

R-Groupの表記と選択的官能基

反応また置換基の位置を指定した制御

Query Builder (集合演算による検索)

高分子（ポリマー）の検索

ペプチド・核酸の検索

不斉合成に限定した反応検索

天然化合物の検索

無機化合物の検索事例

金属錯体の検索事例

その他（官能基の描画）

実践編セミナー動画（60分）

化合物の安全性、危険性、取り扱い等の情報検索

Reaxys 操作方法解説動画（英語、日本語字幕選択可能）

Reaxys Video Tutorials

Elsevier からのエンゲージメント。

<https://view.highspot.com/viewer/60e87e1427ecce0d0d2049c9d1439328>



Reaxys®

有難うございました!

Dr. Mandar Bodas, Chemistry & Life Sciences Consultant
m.bodas@elsevier.com

