Reaxys

ELSEVIER

Как использовать возможности Reaxys на 100% для решения задач химии?

Худошин Андрей Григорьевич, к.х.н.

19.09.2017

План:

1. Как базы данных помогают решать задачи химии?
2. Некоторые нетривиальные примеры поиска в Reaxys

Для чего нужны химические базы данных?

Распространенное представление о применении химических баз данных

Химические базы данных помогают определить синтезировано и описано ли ранее данное органическое соединение.

Химические базы данных помогают найти информацию, как именно и кем данное соединение синтезировано.

И все? А есть ли другие применения?

Задачи органической химией

1. **Главные задачи органической химии** [В.Г. Ненайденко: Органическая химия – современные проблемы, http://teacher.msu.ru]:
   a) ОПРЕДЕЛИТЬ СТРУКТУРУ ОРГАНИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ, даже если оно доступно в очень маленьких количествах.
   b) Понять МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ взаимодействия молекул. Предсказать направление реакций.
   c) СПЛАНИРОВАТЬ ОРГАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ И ОСУЩЕСТВИТЬ ЕГО. Переход от одной структуры к другой. При необходимости осуществить стереоселективный синтез соединений с заданной конфигурацией.

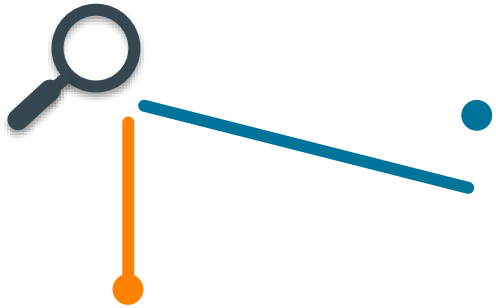
2. Получение природных и синтез новых органических соединений с ценными свойствами (биоактивных веществ, лекарственных препаратов, красителей, пищевых продуктов и пр.).

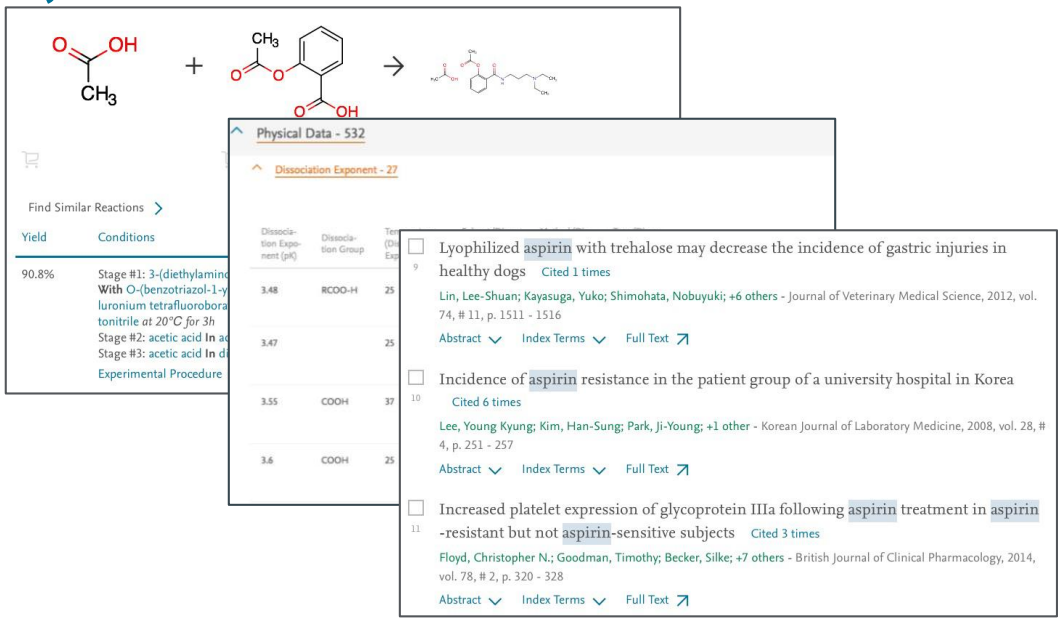
3. Внедрение достижений органической химии в практику человеческой деятельности.

Некоторые примеры применение баз данных для решения задач органической химии

1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации для анализу известных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в промышленной практике?

Reaxys нацелен для обеспечения мгновенного доступа к информации, связанной с химией





В том время философия других решений связана **предоставлением списка ссылок,** которые могут быть релевантны с запросом…

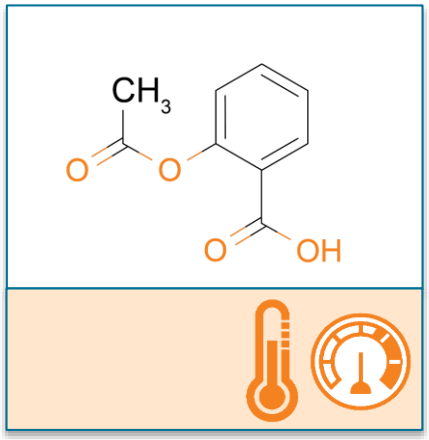
…Reaxys стремится **предоставить релевантные ответы незамедлительно:**

- Ссылки отсортированы по релевантности, (не по хронологии)
- Реакции с методиками проведения
- Соединения с множеством свойств

Сосредоточьтесь на **использовании** информации, а не на поиске информации

Reaxys

Информационная система, построенная для отражения реального использования химических знаний



>105 Млн Записей **соединений** с >**500 Млн** извлеченных фактов об их **свойствах**: физические, химические, спектральные, экологические, биоактивность

>41 Млн Записей **реакций** включают извлеченные данные об условиях проведения реакций, растворителях, катализаторах, выходе

Основные принципы химии

Связь с

51.9 Млн записей Литературы из **16,000** периодических изданий описывая применения в области материало-ведения, биомедицины, наук о Земле, технических и экологических наук, фармакологии...

Применение в различных дисциплинах

Reaxys – самый быстрый путь для поиска информации

- Reaxys сохраняет Ваше время на то, чтобы Добыть , Прочитать и Сравнить литературу

Если Вы ИЩЕТЕ химическую информацию в первичных источниках **В ручную**

Необходимо Добыть источники → Необходимо Прочитать информацию → Необходимо Сравнить информацию → Ответ

Если Вы ИЩЕТЕ в Reaxys **ответы на химические вопросы** → Reaxys® → Ответ

Сохранение времени

Ценность извлеченных данных

Например 2300+ извлеченных свойств Цетана

Reaxys извлекает более **500** типов данных о различных свойствах веществ!!

1600+ статей и патентов о Цетане

Запись соединения: “Цетан”

Structure	Structure/Compound Data	Available Data
Synthesize | Hide Details Find similar	**Chemical Name:** cetane **Reaxys Registry Number:** 1736592 **CAS Registry Number:** 544-76-3 **Type of Substance:** acyclic **Molecular Formula:** $C_{16}H_{34}$ **Linear Structure Formula:** $C_{12}H_{26}C$ **Molecular Weight:** 226.446 **InChI Key:** DCAYPVUWAIABOU-UHFF	Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (2307) Spectra (103) Ecological Data (255) Use/Application (12) Natural Product (25)

Chemical Names and Synonyms

cetane, Hexadecane, Hexadecan

- Druglikeness
- Bioactivity
- Identification
- Physical Data
  - Melting Point (28)
  - Boiling Point (57)
  - Refractive Index (76)
  - Density (119)
  - Adsorption (MCS) (30)
  - Association (MCS) (366)
  - Azeotropes (MCS) (3)
  - Boundary Surface Phenomena (MCS) (1
  - Chromatographic Data (8)
  - Complex Phase Equilibria (MCS) (4)
  - Compressibility (9)
  - Conformation (3)
  - Critical Density (1)
  - Critical Pressure (4)
  - Critical Temperature (5)
  - Critical Volume (2)
  - Crystal Phase (7)
  - Crystal Property Description (2)
  - Crystal System (1)
  - Decomposition (1)
  - Dielectric Constant (6)
  - Dynamic Viscosity (29)
  - Electrical Data (3)
  - Electrical Polarizability (2)
  - Electrochemical Behaviour (1)
  - Electrochemical Characteristics (1)
  - Energy Data (MCS) (250)
  - Enthalpies of Other Phase Transitions (3)
  - Enthalpy of Combustion (3)
  - Enthalpy of Formation (1)
  - Enthalpy of Fusion (5)
  - Enthalpy of Sublimation (2)
  - Enthalpy of Vaporization (7)
  - Further Information (110)
  - Heat Capacity Cp (14)
  - Heat Capacity Cp0 (2)
  - Heat Capacity Cv (1)
  - Ionization Potential (1)
  - Kinematic Viscosity (31)

Dynamic Viscosity (29)

Kind of measurement (Dynamic Viscosity)	Dynamic Viscosity	Temperature (Dynamic Viscosity)	Reference
	0.03179 P	25 °C	Lane, Thomas J.; Cheng, Connie Y. H.; Dixon, Matthew C.; Analytical Chemistry, 2008, vol. 80, # 20 p. 7840 - 7845 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Ubbelohde viscometer	0.03041 P	24.99 °C	Dubey, Gyan P.; Sharma, Monika Journal of Chemical and Engineering Data, 2008, vol. 53, # 4 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Ubbelohde viscometer	0.02706 P	29.99 °C	Dubey, Gyan P.; Sharma, Monika

Solution Behaviour (MCS) (48)

Description (Solution Behaviour (MCS))	Partner (Solution Behaviour (MCS))	Solvent (Solution Behaviour (MCS))	Temperature (Solution Behaviour (MCS))	Reference
Mutual solubility	2,2'-iminobis[ethanol]		105.4 - 222.4 °C	Abedinzadegan Abdi, Majid; Heisen, Axel Journal of Chemical and Engineering Data, 1998, vol. 43, # 2 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Mutual solubility	1,4-bis(2-hydroxyethyl)piperazine		69.4 - 193.2 °C	Abedinzadegan Abdi, Majid; Heisen, Axel Journal of Chemical and Engineering Data, 1998, vol. 43, # 2 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Miscibility	3,3,4,4,5,5,6,6,7,7-decafluorononane		25 °C	Poy, Michael Van Der; Poss, Andrew J.; Persichini, Phillip

Self-diffusion (8)

Self-diffusion Coefficient	Temperature (Self-diffusion)	Reference
3.88E-06 cm^2s^{-1}	25 °C	Marbach, Wolfgang; Hertz, Hermann Gerhard; Weingaertner, Herr Zeitschrift fuer Physikalische Chemie (Muenchen, Germany), 1995, vol. 189 Title/Abstract Full Text Show Details
5E-06 cm^2s^{-1}	40.4 °C	Vardag; Karger; Luedemann Berichte der Bunsengesellschaft/Physical Chemistry Chemical Physics, 1991 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
8.2E-06 cm^2s^{-1}	67.4 °C	Vardag; Karger; Luedemann Berichte der Bunsengesellschaft/Physical Chemistry Chemical Physics, 1991 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
1.3E-05 cm^2s^{-1}	98.4 °C	Vardag; Karger; Luedemann Berichte der Bunsengesellschaft/Physical Chemistry Chemical Physics, 1991 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

Reaxys

Обеспечивает данными, которые можно использовать незамедлительно

Использование **растворимости соединения** требует знания **температуры** и **растворителя** использованных при измерении

Solubility (MCS) - 107

Solubility, g·l-1	Saturation	Temperature (Solubility (MCS)), °C	Solvent (Solubility (MCS))	Ratio of Solvents	Reference
0.164919	in pure solvent		water		Maswal, Masrat; Chat, Oyais Ahmad; Jabeen, Suraya; +4 others - RSC Advances, 2015, vol. 5, # 10, p. 7696 - 7712 Full Text Show details

Как выглядят данные в Reaxys

Как выглядят данные в литературе

Reaxys

Это обширные, хорошо проиндексированные данные под рукой

Reaxys является крупнейшим хранилищем данных о свойствах веществ в мире. Растворимость это только одно из **>500 полей данных для поиска** в Reaxys

Melting point
Boiling point
Sublimation
Refractive index
Density
Adsorption
Association
Autoignition
Bound Surface Phenomena
Viscosity
Circular Dichromism
Complex Phase Equilibria
Compressibility
Conformation
Critical Density
Critical Micelle Concentration
Critical Pressure
Critical Tempareture
Critical Volume
Electrical Data
Electrical Moment
Electrochemistry Data
Electron Binding
Energy Barriers
Energy Data

Enthalpy of Formation
Enthalpy of Sublimation
Flash Point
Gas Phase
Dissociatio
Crystal Sys
Crystal Ph
Heat Capa
Henry Con
Ionization Potential
Isoelectric Point
Kinematic Viscosity
Liquid Phase
Magnetic Data
Mechanical Properties
Molecular Deformation
Optical Data
Thermochemical Data
Solubility
Solution Behavior
Sound Properites
Static Dielectric Constat
Surface Tension
Transition Points
Transport Data

NMR Spectroscopy
IR Spectroscopy
Bioaccumulatio
Biomagnificatio
Biodegradation
Abiotic Degrad
Stability in Soil
Oxygen Demand
Uses
Isolation from Natural Prod.
Reaction Yield
Reaction Conditions
Reaction Type
Named Reaction
Pharmacological Data
Route of Administration
Concentration

Target
Substance Effect
on Target
meter
Endpoint of Effect
Data
stant
Exponent
osity
Electrolytic Conductivity
Enthalpy of Fusion
Enthalpy of Vaporization
Explosion Limits
Interactomic Distance/Angle
Kinematic Viscosity
Liquid/Solid Systems
Liquid/Vapor Systems
Metarotation

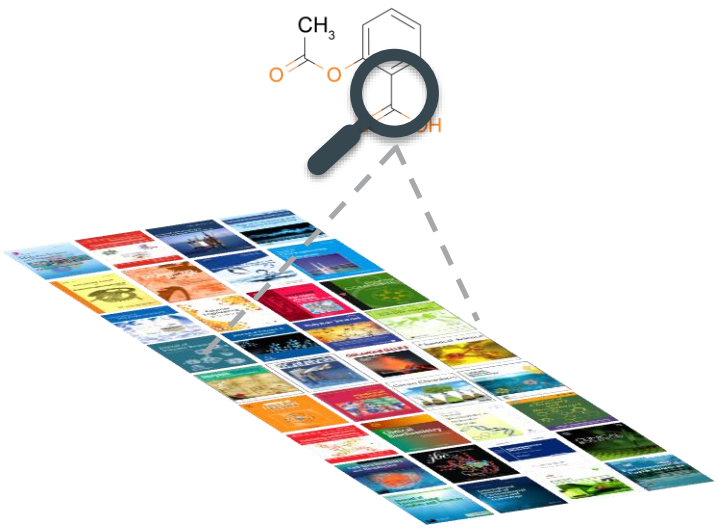
And many more...

В том числе в Reaxys представлена информация по применению соединения, по которой можно проводить поиск

Информация о применении

Новый первоклассный механизм индексирования наращивает богатство содержимого и подчеркивает информацию из различных дисциплин

Индексирование полных текстов статей подчеркивает полный информационный ландшафт



Дополнительное индексирование на основе ключевых слов 4 ведущих баз данных предоставляет междисциплинарный взгляд на химию

Antiviral activity of Bignoniaceae species occurring in the state of Minas Gerais (Brazil): Part 1 Cited 6 times

Brandao; Kroon; Dos Santos; +3 others - Letters in Applied Microbiology, 2010, vol. 51, # 4, p. 469 - 476

Abstract Index Terms Full Text

Index terms

Author keyword: antiviral activity, Bignoniaceae, EMCV, HSV-1, in vitro assays, plant extracts, VACV
Compendex Terms: Antiviral activities, Bignoniaceae, EMCV, HSV-1, In-vitro assays, Plant extract, VACV
Compendex Terms: Assays, Bromine compounds, Ethanol
EMTREE drug term: aciclovir, alpha2a interferon, natural product, plant extract
EMTREE medical term: animal cell, antiviral activity, article, Bignoniaceae, Brazil, controlled study, cytopathogenic effect, cytotoxicity, ethnopharmacology, fruit, Herpes simplex virus 1, in vitro study, Murine encephalomyelitis virus, nonhuman, plant leaf, plant stem, Vaccinia virus, Vero cell
Species index: Bignoniaceae, Encephalomyocarditis virus, Human herpesvirus 1, Murinae, Vaccinia virus
Reaxys Index Terms: antiviral agent

Наращивает содержание :

- **~300K** соединений ежегодно
- **Множество** терминов Reaxys к каждой статье

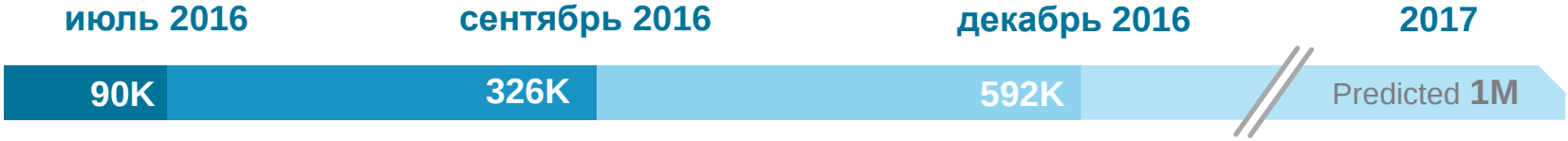
- **Compendex**: Technology & Engineering
- **EMBASE**: Biomedicine & Pharmacology
- **GeoBase**: Geosciences & Environment
- **MedLine**: Life Sciences & Medicine

Reaxys2016 построен на источниках знаний, которые имеют значение

Тщательный процесс обработки данных увеличивает патентное покрытие Reaxys, подчеркивая патенты с полезной информацией и реальными веществами

	World	US	Europe	Japan	S. Korea	China	Taiwan
≤2014	✓	✓	✓				
2015	✓	✓	✓	✓	✓		
2016	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
2017	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

Ориентировочное количество соединений, которые добавлены из Азиатских патентов в последнее время

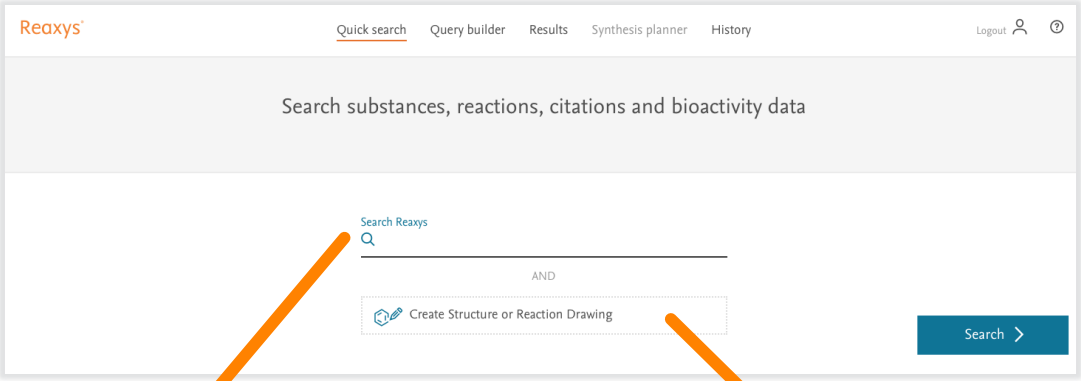


Знайте, что Ваши исследования базируется на данных со всего мира

Поиск в новом Reaxys – **Quick Search**

https://new.reaxys.com

Две отправные точки для поиска в новом Reaxys со стартовой страницы:



Search Reaxys предназначен для текстового поиска:

1. Введите термины на ‘естественном английском язык’, используя предлоги, но без усечения, логических операторов или операторов близости.

ИЛИ

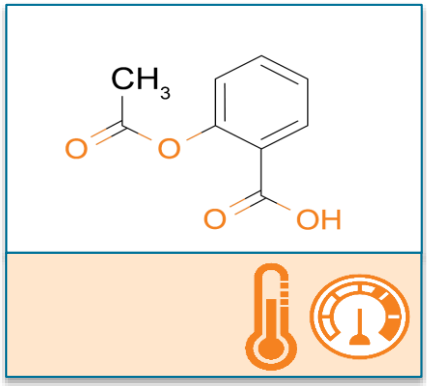
2. Введите термины с помощью логических и/или операторов близости и усеченных форм, но без предлогов.

Create Structure or Reaction Drawing, отображает MarvinJS структурный редактор :

1. Нарисуйте структуры вещества (или используйте *Create Structure Template from Name* для ускорения), реагентов или продуктов.

2. Выберите тип поиска (*As drawn*, *As substructure*, *Similar*) и класс соединений и другие параметры.

Reaxys



>105 Млн Записей **соединений** с >**500 Млн** извлеченных фактов об их **свойствах**: физические, химические, спектральные, экологические, биоактивность

>41 Млн Записей **реакций** включают извлеченные данные об условиях проведения реакций, растворителях, катализаторах, выходе

Основные принципы химии

Связь с

51.9 Млм записей Литературы из 16,000 периодических изданий описывая применения в области материало-ведения, биомедицины, наук о Земле, технических и экологических наук, фармакологии...

Применение в различных дисциплинах

Quick search может использован без понимания структуры и механики работы Reaxys. Однако, понимания «внутренностей» помогает оценить ответы и определить, будет ли использование **Query builder** более эффективным.

Контент в Reaxys приходит из двух источников: авторы и индексаторы

	Соединения & свойства	Реакции	Документы
Авторы	Числовые значения и текст в большинстве полей/ подполей свойств	Условия реакций и текст в методиках проведения реакций	Текст в заголовках и рефератах
	Ищутся только с помощью поисковых полей **Query builder**		
Индексаторы	Текст в подполе Description внутри полей свойств	Имена и типы реакций в поле Reaction Type	Термины Индекса
	Ищутся с помощью **Search Reaxys** и поисковых полей		

Примерно половина от общих содержащихся в Reaxys данных описаны в оранжевых ячейках.

Сканировать или искать?

Рабочий процесс **сканирования**

Воспользуйтесь обширным контентом по веществам и реакциям

Найдите **конкретное** Соединение или Реакцию и просканируйте доступные данные или информацию о реакции с помощью **Search Reaxys**

Рабочий процесс **поиска**

В некоторых случаях лучше искать специфическую информацию:

- Требуется поиск информации по многим соединениям
- Требуется поиск соединений или реакций соответствующих определенным критериям

Используйте **Query builder** для выбора и комбинирования релевантных поисковых полей и введите поисковые критерии в виде текста и/или числовых значений

Поиск в Reaxys 2016 – *Quick Search*

Введите термины с усечением и/или логическими операторами/операторами близости, но без предлогов, Reaxys будет искать информацию только в **Записях литературы.**

Search Reaxys

metabol* carbamazepine

Такой общий поиск дает 6,014 Записей литературы. Усечение (*) обозначает нулевое или любое количество знаков, и может быть использовано до и/или после буквенное основы. Введенные термины автоматически объединяются логическим оператором AND, что в Записях литературы обозначает любое место в **Заглавии, Реферате**, или **Индексируемых терминах**.

Identification of fungal metabolites of anticonvulsant drug carbamazepine

Cited 15 times

Kang, Su-Il; Kang, Seo-Young; Hur, Hor-Gil - Applied Microbiology and Biotechnology, 2008, vol. 79, # 4, p. 663 - 669

Abstract Index Terms Full Text

Abstract

Carbamazepine, which has been used in the treatments of epilepsy, is often found in the environment. Although metabolism of carbamazepine by humans and rats has been characterized, the environmental fate of carbamazepine has not been studied. In this study, two model fungi Cunninghamella elegans ATCC 9245 and Umbelopsis ramanniana R-56, which have previously shown diverse metabolic activities, were tested for metabolism of carbamazepine. Both fungi produced three metabolites each (C1-C3 and M1-M3). All six metabolites showed $[M + H]^+$ at m/z 253, suggesting addition of one oxygen to the parent compound. High-performance liquid chromatography and liquid chromatography-mass spectrometric analysis detected 10, 11-dihydro-10, 11-epoxycarbamazepine as a major product (C3 (47percent) and M3 (85percent)) and 3-hydroxycarbamazepine (C2 (15percent) and M2 (7percent)) from carbamazepine through mixed mono-oxidation reactions in both fungal strains. C. elegans was confirmed to produce 2-hydroxycarbamazepine (C1 (38percent)) while U. ramanniana produced a yet unidentified ring-hydroxylated metabolite (M1 (8percent)). The current study suggests that carbamazepine is likely to be subjected to initially diverse mono-oxygenation reactions by fungal metabolisms, resulting in the formation of the corresponding metabolites, which were similarly found in mammalian metabolisms.

Index terms

Author keyword: Carbamazepine, Cunninghamella elegans, Epoxidation, Mono-oxygenation, Umbelopsis ramanniana
Compendex Terms: Carbamazepine, Cunninghamella elegans, Mono-oxygenation, Umbelopsis ramanniana
Compendex Terms: Disease control, Metabolism, Metabolites, Rats
EMTREE drug term: 2 hydroxycarbamazepine, 3 hydroxycarbamazepine, anticonvulsive agent, carbamazepine, carbamazepine 10,11 oxide, drug metabolite, oxygen
EMTREE medical term: article, Cunninghamella elegans, drug hydroxylation, drug metabolism, drug oxidation, fungal metabolism, fungal strain, high performance liquid chromatography, nonhuman, Umbelopsis ramanniana
Species index: Caenorhabditis elegans, Cunninghamella elegans, Fungi, Mammalia, Rattus, Umbelopsis ramanniana
Reaxys Index Terms: anticonvulsive agent, high performance liquid chromatography, liquid liquid chromatography

Search Reaxys

metabol* next carbamazepine

Данный более специфический поиск дает 385 Записей литературы, которые содержат искомые термины с несколькими словами между друг другом.

Identification of fungal metabolites of anticonvulsant drug carbamazepine

Cited 15 times

Kang, Su-Il; Kang, Seo-Young; Hur, Hor-Gil - Applied Microbiology and Biotechnology, 2008, vol. 79, # 4, p. 663 - 669

Abstract Index Terms Full Text

Abstract

Carbamazepine, which has been used in the treatments of epilepsy, is often found in the environment. Although metabolism of carbamazepine by humans and rats has been characterized, the environmental fate of carbamazepine has not been studied. In this study, two model fungi Cunninghamella elegans ATCC 9245 and Umbelopsis ramanniana R-56, which have previously shown diverse metabolic activities, were tested for metabolism of carbamazepine. Both fungi produced three metabolites each (C1-C3 and M1-M3). All six metabolites showed $[M + H]^+$ at m/z 253, suggesting addition of one oxygen to the parent compound. High-performance liquid chromatography and liquid chromatography-mass spectrometric analysis detected 10, 11-dihydro-10, 11-epoxycarbamazepine as a major product (C3 (47percent) and M3 (85percent)) and 3-hydroxycarbamazepine (C2 (15percent) and M2 (7percent)) from carbamazepine through mixed mono-oxidation reactions in both fungal strains. C. elegans was confirmed to produce 2-hydroxycarbamazepine (C1 (38percent)) while U. ramanniana produced a yet unidentified ring-hydroxylated metabolite (M1 (8percent)). The current study suggests that carbamazepine is likely to be subjected to initially diverse mono-oxygenation reactions by fungal metabolisms, resulting in the formation of the corresponding metabolites, which were similarly found in mammalian metabolisms.

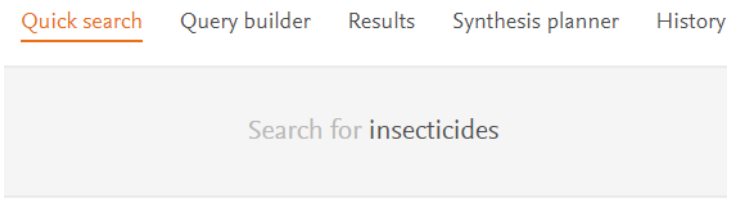
Index terms

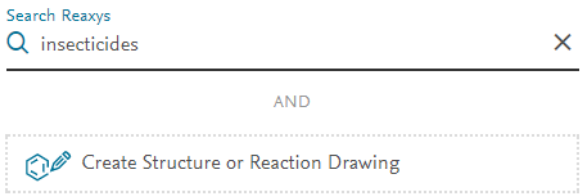
Author keyword: Carbamazepine, Cunninghamella elegans, Epoxidation, Mono-oxygenation, Umbelopsis ramanniana
Compendex Terms: Carbamazepine, Cunninghamella elegans, Mono-oxygenation, Umbelopsis ramanniana
Compendex Terms: Disease control, Metabolism, Metabolites, Rats
EMTREE drug term: 2 hydroxycarbamazepine, 3 hydroxycarbamazepine, anticonvulsive agent, carbamazepine, carbamazepine 10,11 oxide, drug metabolite, oxygen
EMTREE medical term: article, Cunninghamella elegans, drug hydroxylation, drug metabolism, drug oxidation, fungal metabolism, fungal strain, high performance liquid chromatography, nonhuman, Umbelopsis ramanniana
Species index: Caenorhabditis elegans, Cunninghamella elegans, Fungi, Mammalia, Rattus, Umbelopsis ramanniana
Reaxys Index Terms: anticonvulsive agent, high performance liquid chromatography, liquid liquid chromatography

Замечание: использование NEXT может сильно ограничить результаты поиска. Обычно лучше использовать стандартное AND. Reaxys ранжирует найденные Записи литературы **по релевантности**. Если это необходимо, инструменты **пост-обработки** позволяют сузить количество ответов.

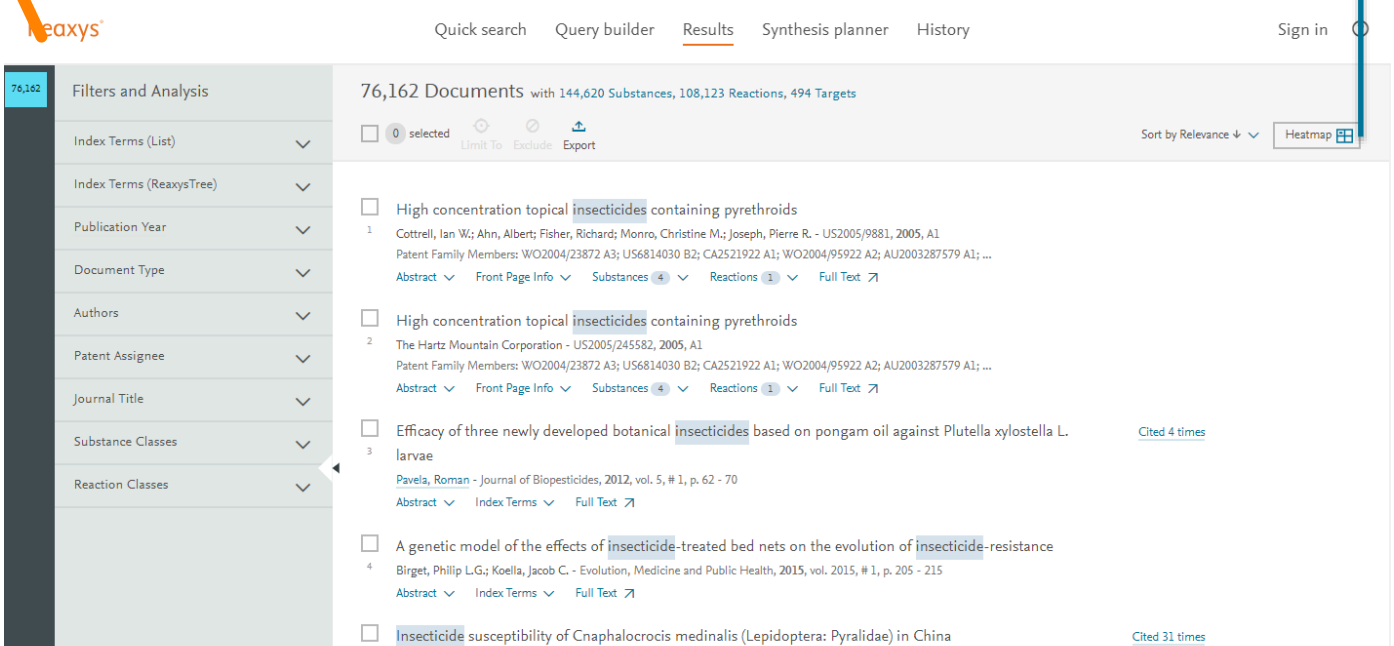
Как провести анализ литературы по теме инсектициды?

В Reaxys есть возможность поиска по литературе более 16000 периодических изданий (ведущие журналы, конференции и др.) и 7 патентных агентств

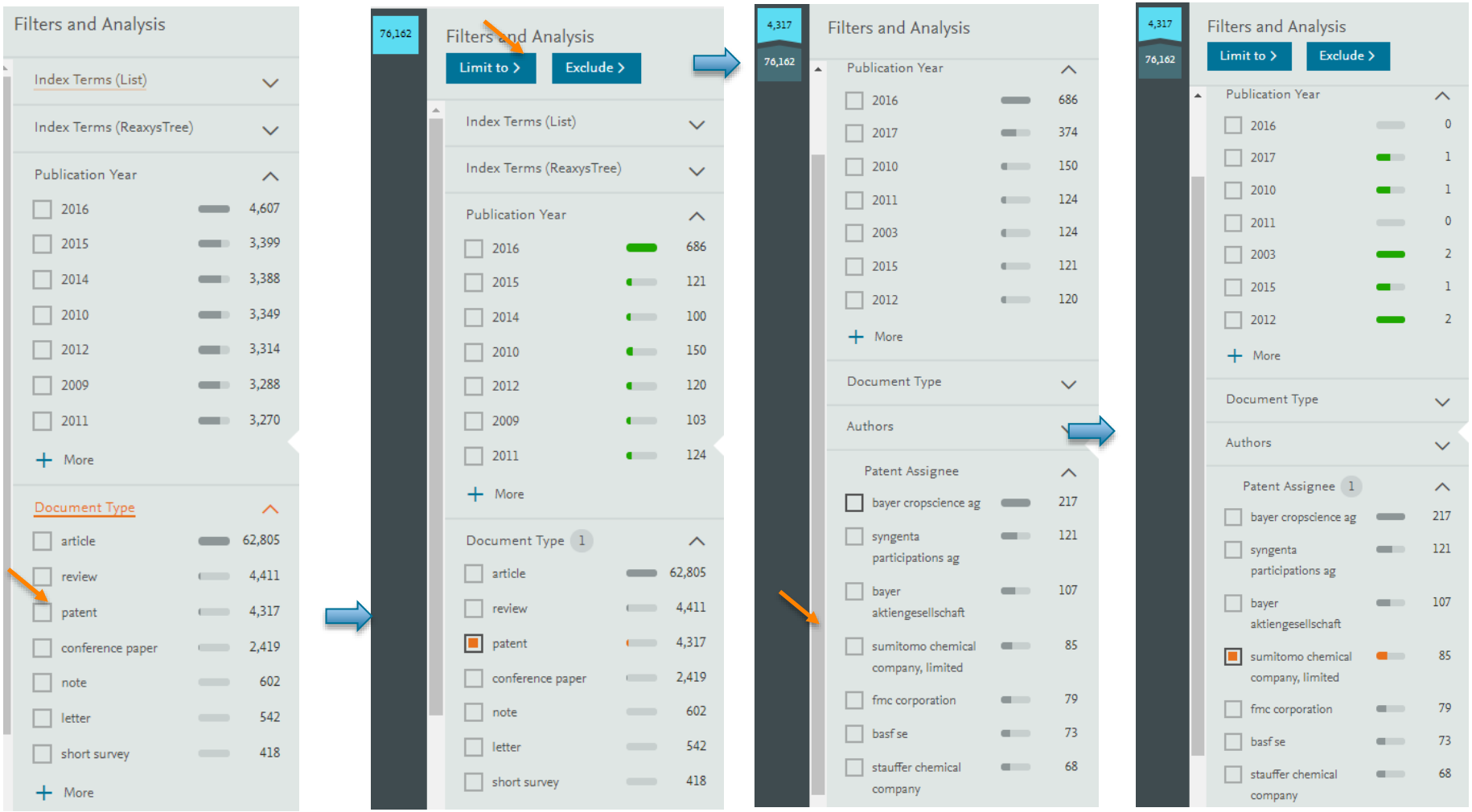




Для фильтрации и анализа результатов поиска используйте вкладку

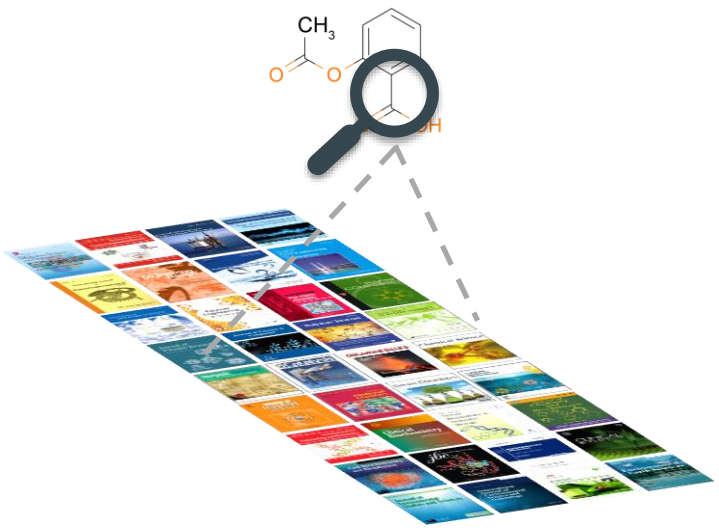


Какие возможны фильтры и анализ доступны?



Новый первоклассный механизм индексирования наращивает богатство содержимого и подчеркивает информацию из различных дисциплин

Индексирование полных текстов статей подчеркивает полный информационный ландшафт



Дополнительное индексирование на основе ключевых слов 4 ведущих баз данных предоставляет междисциплинарный взгляд на химию

Antiviral activity of Bignoniaceae species occurring in the state of Minas Gerais (Brazil): Part 1 Cited 6 times

Brandao; Kroon; Dos Santos; +3 others - Letters in Applied Microbiology, 2010, vol. 51, # 4, p. 469 - 476

Abstract Index Terms Full Text

Index terms

Author keyword: antiviral activity, Bignoniaceae, EMCV, HSV-1, in vitro assays, plant extracts, VACV
Compendex Terms: Antiviral activities, Bignoniaceae, EMCV, HSV-1, In-vitro assays, Plant extract, VACV
Compendex Terms: Assays, Bromine compounds, Ethanol
EMTREE drug term: aciclovir, alpha2a interferon, natural product, plant extract
EMTREE medical term: animal cell, antiviral activity, article, Bignoniaceae, Brazil, controlled study, cytopathogenic effect, cytotoxicity, ethnopharmacology, fruit, Herpes simplex virus 1, in vitro study, Murine encephalomyelitis virus, nonhuman, plant leaf, plant stem, Vaccinia virus, Vero cell
Species index: Bignoniaceae, Encephalomyocarditis virus, Human herpesvirus 1, Murinae, Vaccinia virus
Reaxys Index Terms: antiviral agent

Наращивает содержание :

- **~300K** соединений ежегодно
- **Множество** терминов Reaxys к каждой статье

- **Compendex**: Technology & Engineering
- **EMBASE**: Biomedicine & Pharmacology
- **GeoBase**: Geosciences & Environment
- **MedLine**: Life Sciences & Medicine

План:

1. Как базы данных помогают решать задачи органической химии?
2. Некоторые нетривиальные примеры поиска в Reaxys

Применение Reaxys для решения задач органической химии

1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск информации по механизму заданной реакции. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

Определить неизвестное соединение X:

1. Элементный анализ показал следующее соотношение атомов C:F:N = 16:6:5
2. Угол оптического вращения раствора X с концентрацией 1 г на 100 г хлороформа при длине волны 589 нм при 20°C составляет -22.6 - -21.8
3. Какими дополнительными методами можно подтвердить предположение?

Определить неизвестное соединение X:

Reaxys

Quick search | Query builder | Results | Synthesis planner | History | Sign in

Search Substances

Import | Save | Reset form | Delete all | Structure | Molecular Formula | CAS RN | Doc. Index

Find search fields and forms

Fields | Forms | History

Optical Rotatory Power — Find any — Hide fields

is	Type (Optical Rotatory Power)
is	Concentration (Optical Rotatory Power)
=	Length of Path, cm
is	Solvent (Optical Rotatory Power) chloroform
=	Optical Rotatory Power, deg -22.6 - -21.8
=	Wavelength (Optical Rotatory Power), nm
=	Temperature (Optical Rotatory Power), °C

AND

Molecular Formula

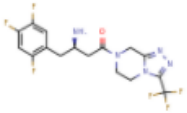
is	Molecular Formula F6N5C16*

Reaxys

- Basic Indexes
- Identification
- Physical Properties
- Spectra
- MedChem
- Other
- Reactions
- Bibliography
- PubChem
- eMolecules
- LabNetwork
- SigmaAldrich
- Structure

Определить неизвестное соединение X:

1



sitagliptin

$C_{16}H_{15}F_6N_5O$ 407.318 9962060 486460-32-6

Hit Data - 3
Identification
Druglikeness
Bioactivity (All)

Physical Data - 46
Spectra - 75
Other Data - 914

Preparations - 153
Reactions - 236
Targets - 68
Documents - 421

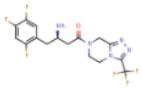
Hit Data - 3

Optical Rotatory Power - 3 hits out of 7

Show/Hide columns

Type (Optical Rotatory Power)	Concentration (Optical Rotatory Power)	Length of Path, cm	Solvent (Optical Rotatory Power)	Optical Rotatory Power, deg	Wavelength (Optical Rotatory Power), nm	Temperature (Optical Rotatory Power), °C	Location	Reference
alpha	0.92 g/100ml		chloroform	-22.4	589	25	Page/Page column 28	COUNCIL OF SCIENTIFIC and INDUSTRIAL RESEARCH; BARUA, Nabin Chandra; SAIKIA, Bishwajit; BORAH, Preetismita; BAISHYA, Gakul - WO2015/189862, **2015**, A1 Full Text Details Abstract
[alpha]	1 g/100ml	1	chloroform	-22.6	589	25	supporting information	Zhou, Shengbin; Wang, Jiang; Chen, Xia; Acena, Jose Luis; Soloshonok, Vadim A.; Liu, Hong - Angewandte Chemie - International Edition, **2014**, vol. 53, # 30, p. 7883 - 7886, Angew. Chem., **2014**, vol. 126, # 30, p. 8017 - 8020 Full Text Details Abstract
[alpha]	1 g/100ml	10	chloroform	-22	589	25	supporting information	Davies, Stephen G.; Fletcher, Ai M.; Lv, Linlu; Roberts, Paul M.; Thomson, James E. - Tetrahedron Letters, **2012**, vol. 53, # 24, p. 3052 - 3055 Full Text Cited 24 times Details Abstract

Определить неизвестное соединение X. Какими дополнительными методами можно подтвердить предположение?



sitagliptin

$C_{16}H_{15}F_6N_5O$ 407.318 9962060 486460-32-6

Hit Data - 3
Bioactivity (All)
Identification
Physical Data - 46
Druglikeness
Spectra - 75

Hit Data - 3

Optical Rotatory Power - 3 hits out of 7

Type (Optical Rotatory Power)	Concentration (Optical Rotatory Power)	Length of Path, cm	Solvent (Optical Rotatory Power)	Optical Rotatory Power, deg	Wavelength (Optical Rotatory Power), nm	Temperature (Optical Rotatory Power), °C
alpha	0.92 g/100ml		chloroform	-22.4	589	25
[alpha]	1 g/100ml	1	chloroform	-22.6	589	25

Spectra - 75

- NMR Spectroscopy - 49
- IR Spectroscopy - 6
- Mass Spectrometry - 18
- UV/VIS Spectroscopy - 2

- Melting Point - 15
- Chromatographic Data - 7
- Crystal Property Description - 15
- Optical Rotatory Power - 7
- Partition octan-1-ol/water (MCS) - 2

Chemical shifts	1H		d(4)-methanol	400	^{1}H NMR (CH_3OD, 400MHz): 1.37 (s, 9H), 2.61~3.00 (m, 4H), 3.92~4.30 (m, 5H), 4.93 (s, 1H), 4.95~5.12 (m, 1H), 5.22~5.35 (br, 1H), 6.83~6.95, (m, 1H), 7.02~7.12 (m, 1H)	Paragraph 0211

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location
117.4		
118 - 120		Paragraph 0039; 0040

UV/VIS Spectroscopy - 2

Description (UV/VIS Spectroscopy)	Solvent (UV/VIS Spectroscopy)	Absorption Maxima (UV/VIS), nm
Spectrum	dimethyl sulfoxide	580

Применение Reaxys для решения задач органической химии

1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

Что такое реакция Трофимова?

Reaxys

Quick search | Query builder | Results | Synthesis planner | History | Sign in

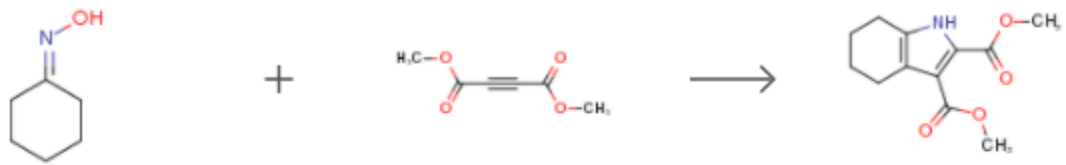
Search Reactions

Import | Save | Reset form | Delete all | Structure | Molecular Formula | CAS RN | Doc. Index

Find search fields and forms

Fields | Forms | History

Reaxys



1 Hits | 3 Conditions | Find Similar

Hit Details

Yield	Conditions	References
62%	**With** europium(III) trifluoromethanesulfonate **In** toluene for 12h; Trofimov reaction; Reflux; Inert atmosphere;	Madabhushi, Sridhar; Vangipuram, Venkata Sairam; Mallu, Kishore Kumar Reddy; Chinthala, Narsaiah; Beeram, China Ramanaiah - Advanced Synthesis and Catalysis, **2012**, vol. 354, # 8, p. 1413 - 1416 Full Text ↗ Cited 13 times ↗ Details › Abstract ›

Применение Reaxys для решения задач органической химии

1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

Предсказание условий реакций?

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РАСПОРЯЖЕНИЕ

от 28 июля 2017 г. № 1632-р

МОСКВА

Утвердить прилагаемую программу "Цифровая экономика Российской Федерации".

Председатель Правительства
Российской Федерации Д.Медведев

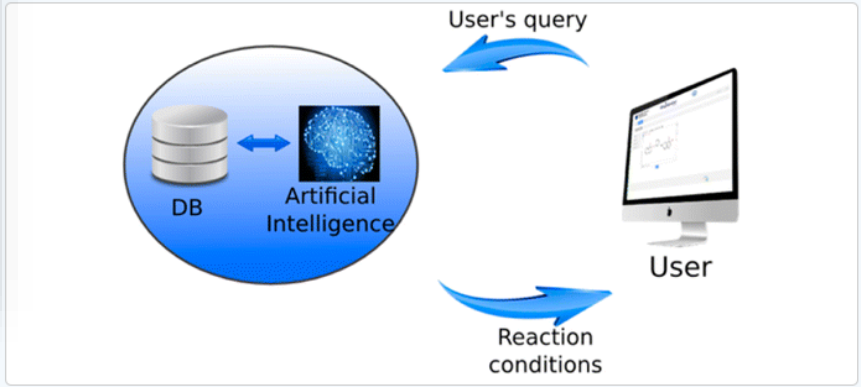
Automatized Assessment of Protective Group Reactivity: A Step Toward Big Reaction Data Analysis

Arkadii I. Lin[†‡], Timur I. Madzhidov[†], Olga Klimchuk[‡], Ramil I. Nugmanov[†], Igor S. Antipin[†], and Alexandre Varnek*[†‡]
[†] Laboratory of Chemoinformatics and Molecular Modeling, Department of Organic Chemistry, A.M. Butlerov Institute of Chemistry, Kazan Federal University, Kremlyovskaya Str. 18, Kazan, Russia, 420008
[‡] Laboratory of Chemoinformatics, Faculty of Chemistry, University of Strasbourg, rue Blaise Pascal 1, Strasbourg, France, 67000

J. Chem. Inf. Model., **2016**, *56* (11), pp 2140–2148
DOI: 10.1021/acs.jcim.6b00319
Publication Date (Web): October 26, 2016
Copyright © 2016 American Chemical Society

*E-mail: varnek@unistra.fr.

Abstract

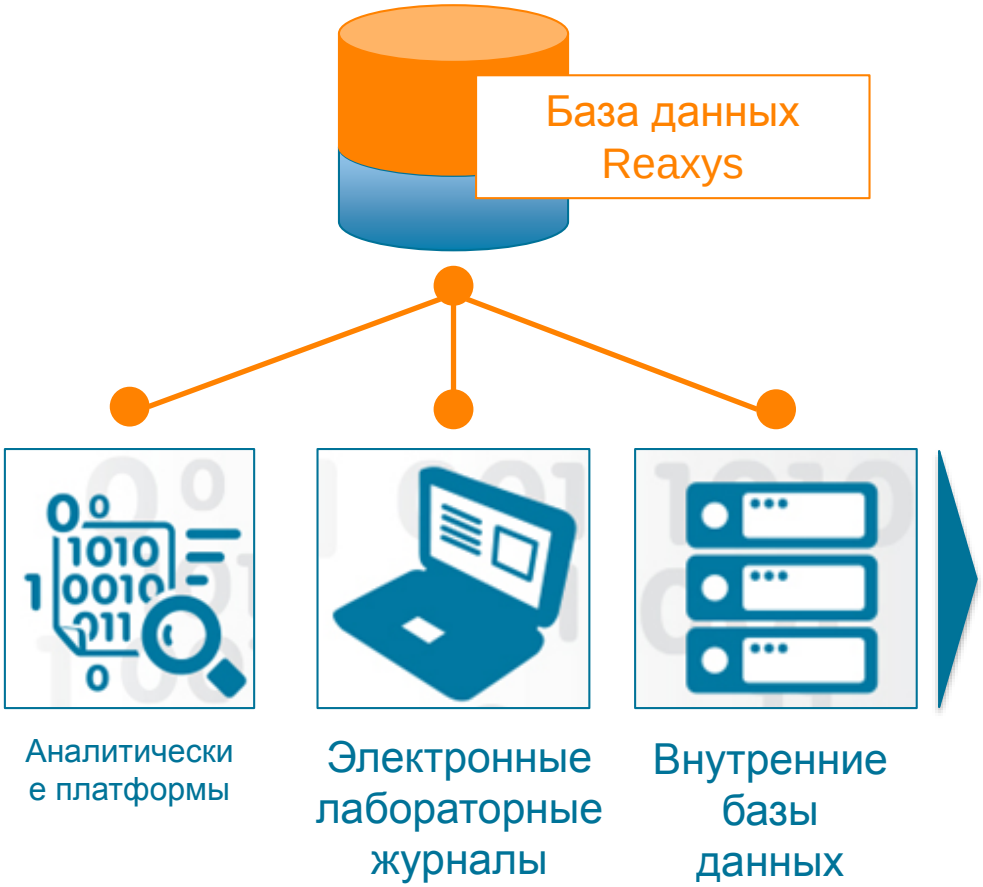


We report a new method to assess protective groups (PGs) reactivity as a function of reaction conditions (catalyst, solvent) using raw reaction data. It is based on an intuitive similarity principle for chemical reactions: similar reactions proceed under similar conditions. Technically, reaction similarity can be assessed using the Condensed Graph of Reaction (CGR) approach representing an ensemble of reactants and products as a single molecular graph, i.e., as a pseudomolecule for which molecular descriptors or fingerprints can be calculated. CGR-based in-house tools were used to process data for 142,111 catalytic hydrogenation reactions extracted from the Reaxys database. Our results reveal some contradictions with famous Greene's Reactivity Charts based on manual expert analysis. Models developed in this study show high accuracy (ca. 90%) for predicting optimal experimental conditions of protective group deprotection.

Предсказательная система для оптимизации условий реакций снятия защитных групп

Reaxys

„Drag and drop“ интеграция данных Reaxys



Функция экспорта позволяет:

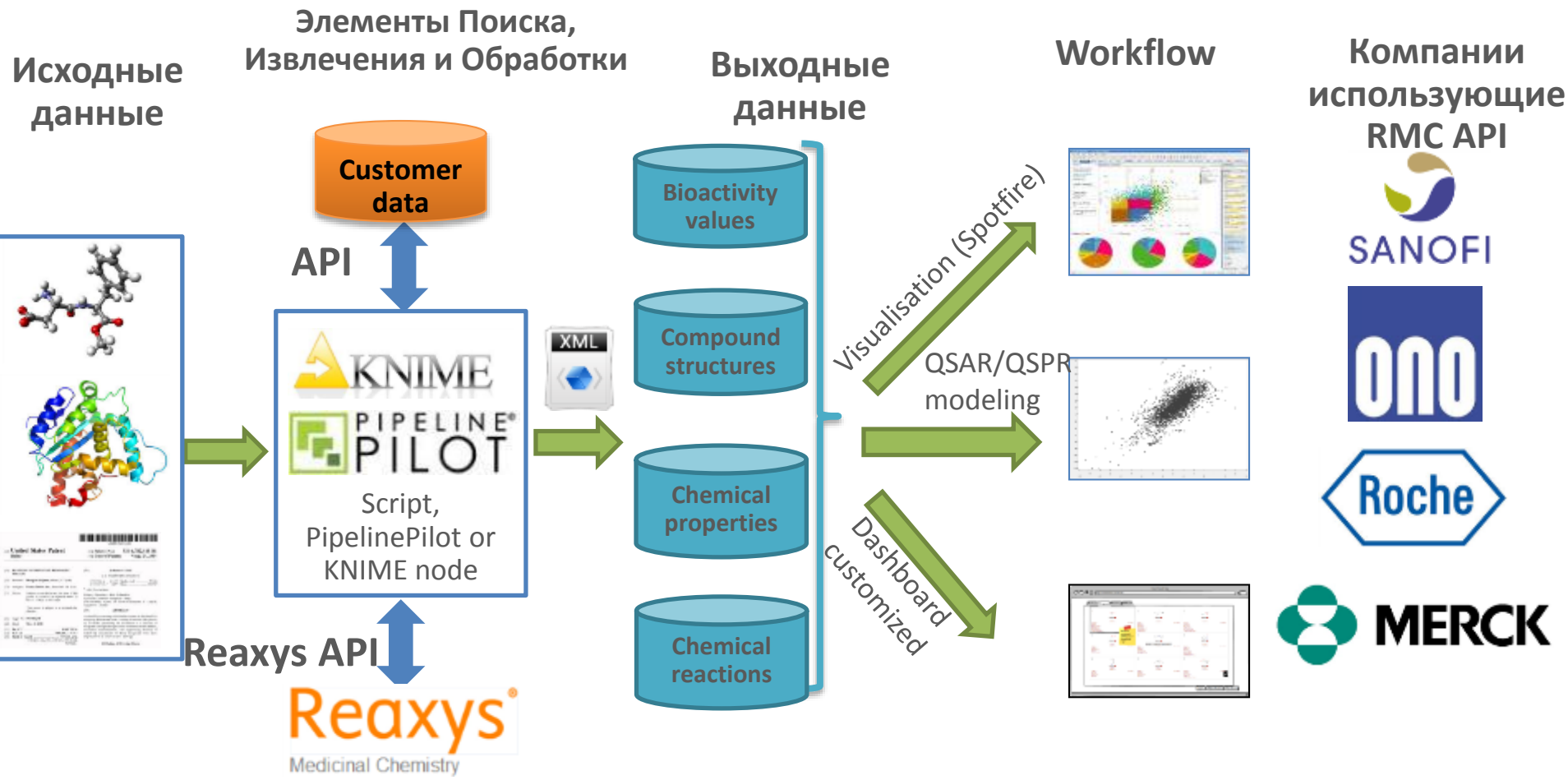
- **экспорт реакций свойств соединений и соединений, литературных записей**
- **в форматы pdf, xml, Microsoft Word, Microsoft Excel, RD file, SD/Molfile.**

Улучшенный API интерфейс позволяет :

- **Мгновенный доступ к контенту Reaxys по API**
- **Беспрепятственная интеграция**
- **Быстрый и простой мэшап данных**

API баз данных Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry обеспечивает интеграцию данных в workflow

Готовые модули KNIME node и Pipeline pilot node для интеграции Reaxys и RMC с инструкциями по инсталляции и применению теперь доступны для удобной интеграции данных Elsevier в workflow

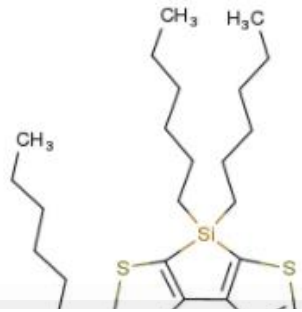


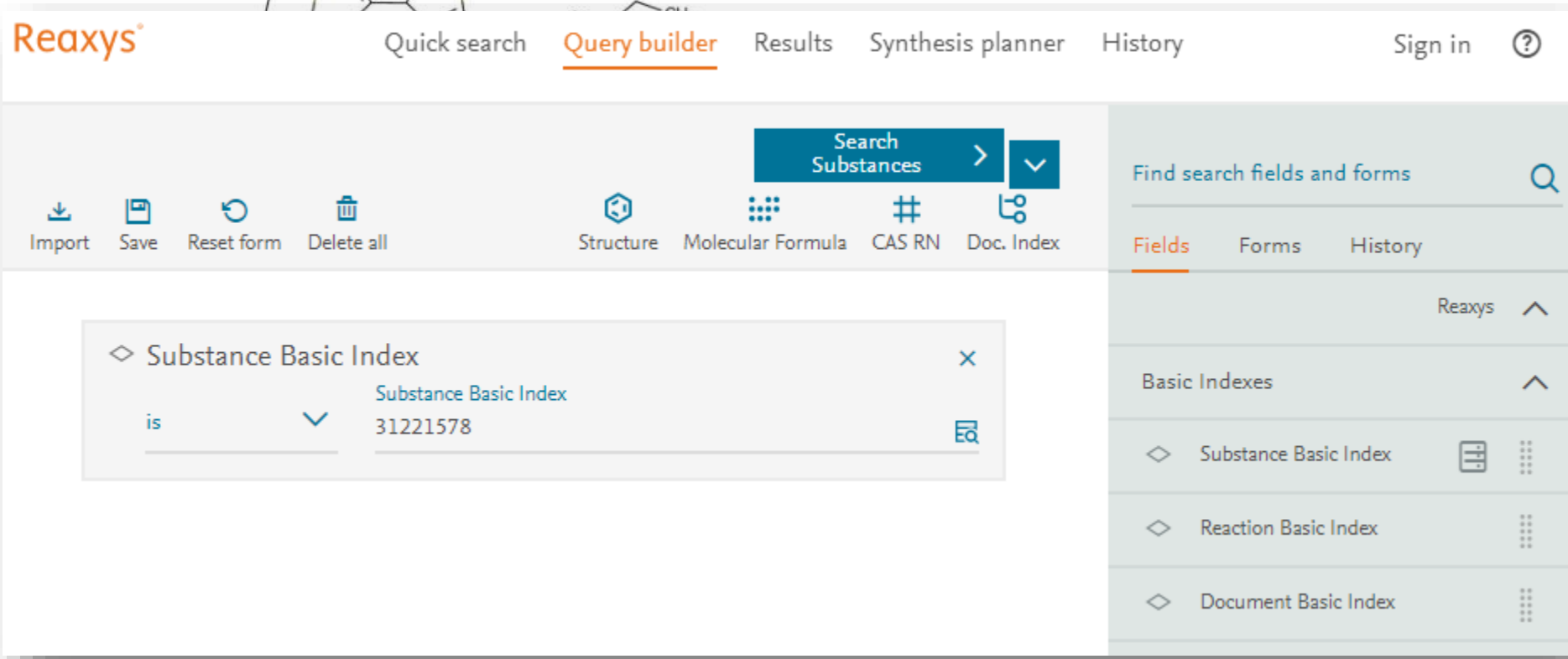
Применение Reaxys для решения задач органической химии

1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

Как синтезировать гетероциклический циркулен с «усиками»?

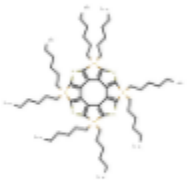
Reaxys ID: 31221578





Как синтезировать гетероциклические циркулен с «усиками»?

1



Reaxys ID: 31221578

$C_{64}H_{104}S_4Si_4$ 1114.14 31221578

Identification

Druglikeness

Physical Data - 1

Spectra - 5

Preparations - 1

Reactions - 1

Documents - 1

1

Reaction ID: 45384994

Options

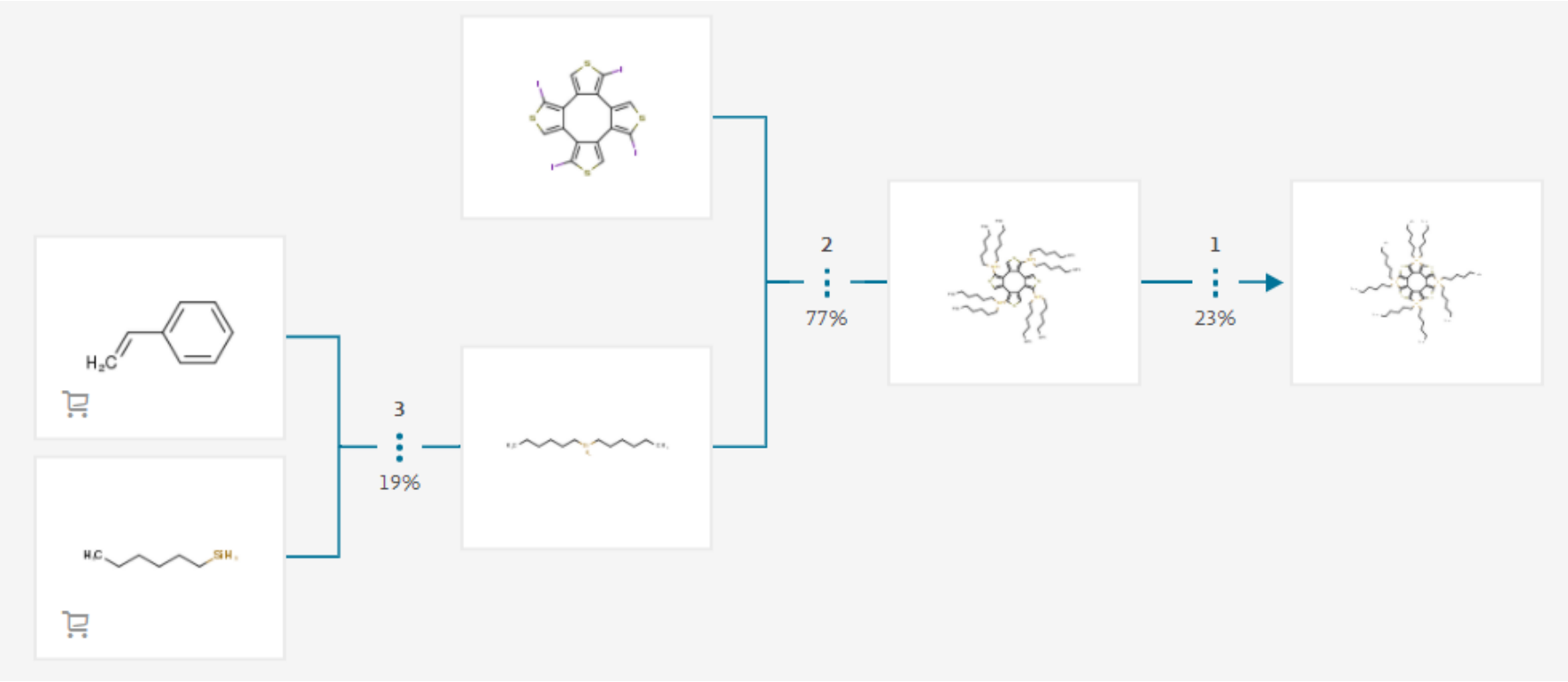
Synthesize

1 Conditions

Find Similar

Yield	Conditions	References
23%	**With** 1,1'-bis-(diphenylphosphino)ferrocene; chloro(1,5-cyclooctadiene)rhodium(I) dimer **In** toluene at 140°C; for 24h; Schlenk technique; Inert atmosphere;	Serizawa, Yuma; Akahori, Shuhei; Kato, Shohei; Sakai, Hayato; Hasobe, Taku; Miyake, Yoshihiro; Shinokubo, Hiroshi - Chemistry - A European Journal, **2017**, vol. 23, # 29, p. 6948 - 6952 Full Text Details Abstract

А бывают ли гетероциклические циркулены с «усиками»? И как их синтезировать?



Есть ли дополнительное описание Schlenk technique?

Reaction Basic Index

is

Reaction Basic Index

Schlenk technique

2 Hits 43 Conditions Find Similar

Hit Details

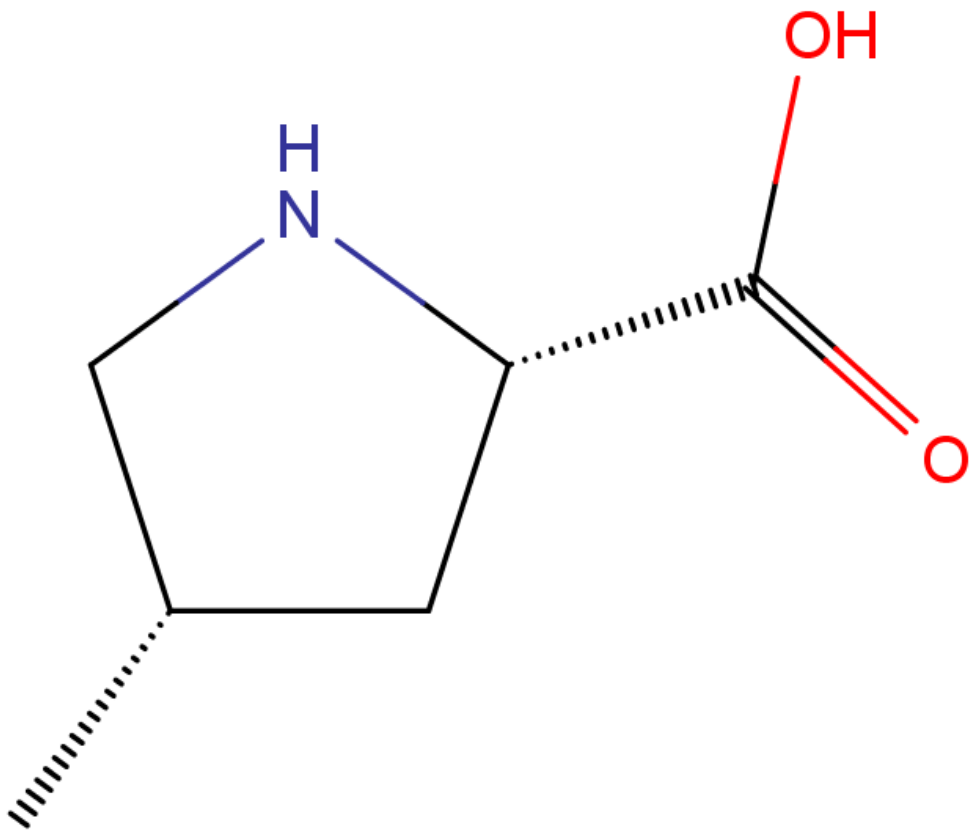
Yield	Conditions	References
91%	**With** copper(II) nitrate **In** dimethyl sulfoxide at 100°C; for 4h; Schlenk technique; Sealed tube;	Wang, Zheng-Jun; Wang, Peng-Hui; Lv, Jing-Jing; Feng, Jiu-Ju; Xu, Xinhua; Wang, Ai-Jun; Au, Chak-Tong; Qiu, Renhua - RSC Advances, **2015**, vol. 5, # 117, p. 96372 - 96376 Full Text Cited 1 times Details Abstract
73%	**With** N,N,N,N,-tetramethylethylenediamine; copper **In** 1,4-dioxane; chloroform at 50°C; Schlenk technique; Inert atmosphere; Experimental Procedure	Thiel, Niklas O.; Kemper, Sebastian; Teichert, Johannes F. - Tetrahedron, **2017**, vol. 73, # 33, p. 5023 - 5028 Full Text Details Abstract

General procedure: Following a modified literature procedure[11] in a flame dried 100 mL-Schlenk tube copper powder (6.4 mg, 0.1 mmol, 5 molpercent), TMEDA (47 mg, 0.4 mmol, 20 molpercent) and terminal alkyne S3a-d, S4-8, S10 (2.0 mmol, 1.0 equiv.) are suspended in chloroform (1.0 mL) and 1,4-dioxane (0.3 mL). The mixture is stirred at 50 °C overnight. After cooling the mixture is diluted with dichloromethane (4 mL) and filtered through a plug of silica (1 cm) and concentrated under reduced pressure.

Разработка методики синтеза химических веществ

С помощью Reaxys можно гораздо эффективнее решать задачу поиск оптимальных условий синтеза неорганического или органического соединения.

Допустим, Вас интересует методика синтеза данного соединения

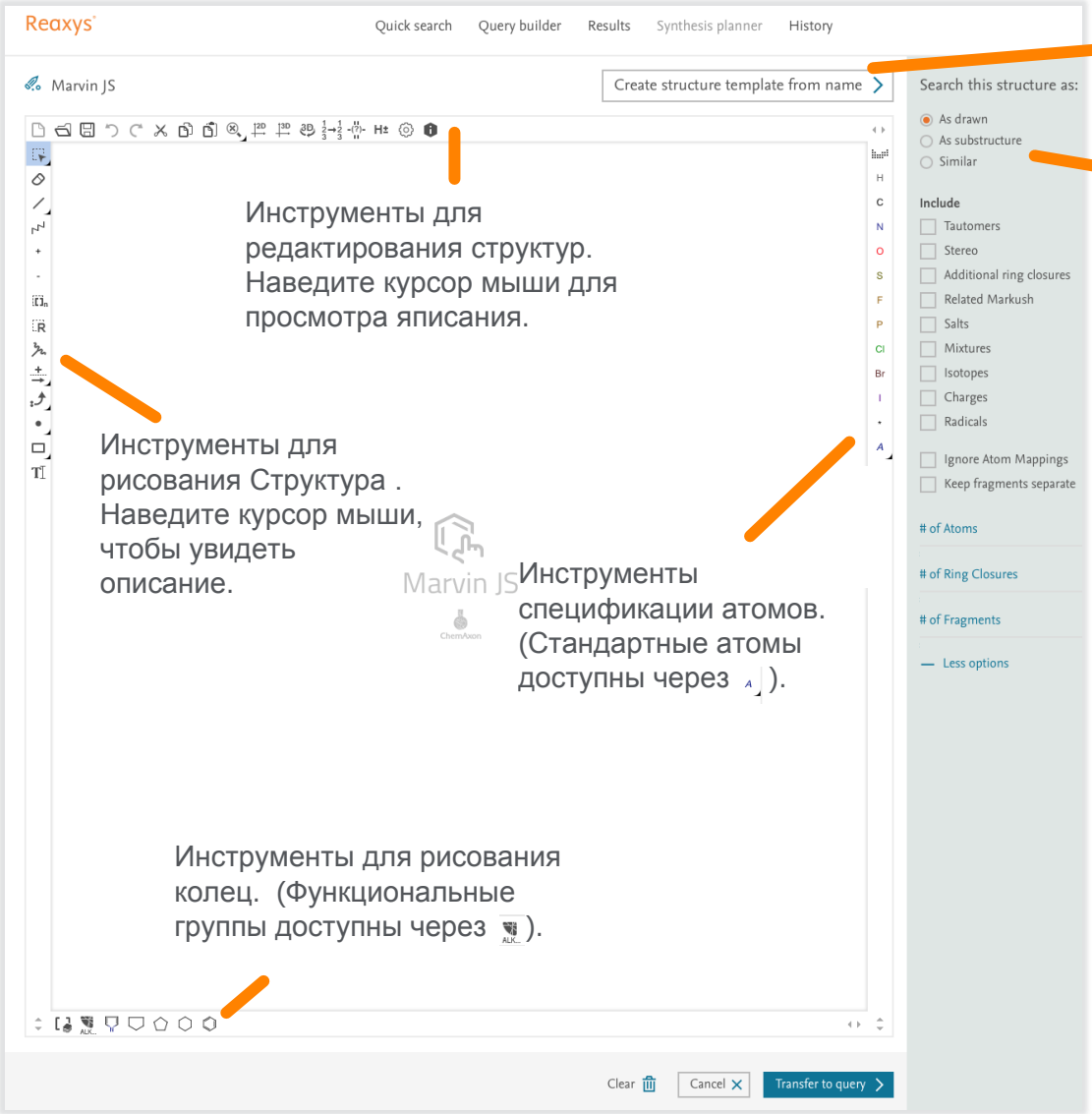


?

Поиск в Reaxys 2016 – *Quick Search*

Создание Структур или рисование реакций

Кликните Create Structure or Reaction Drawing для открытия редактора структур MarvinJS .



Инструменты для редактирования структур. Наведите курсор мыши для просмотра яписания.

Инструменты для рисования Структура . Наведите курсор мыши, чтобы увидеть описание.

Инструменты спецификации атомов. (Стандартные атомы доступны через).

Инструменты для рисования колец. (Функциональные группы доступны через).

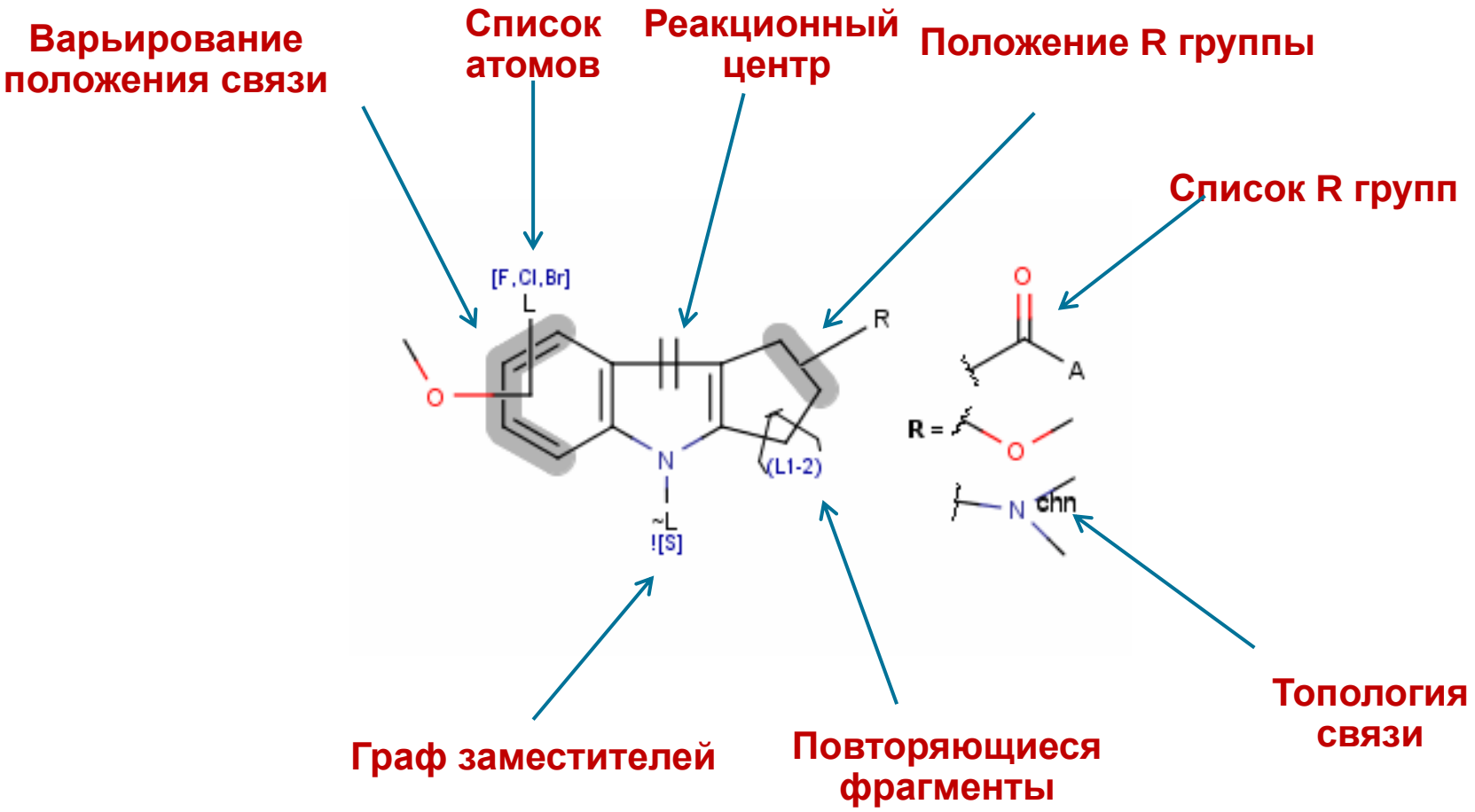
Введите название вещества и Reaxys построит структуру для Вас. Затем измените ее по мере необходимости.

Проверьте Тип требуемого поиска.

Проверьте как опции необходимы.
Замечание: отметьте **Salts и Mixtures** для дополнительного поиска данных классов соединений (часто требуются для веществ в фармацевтике и сельском хозяйстве).

Инструкция пользователя MarvinJS доступна по адресу https://docs.chemaxon.com/display/docs/Marvin+JS+User%27s+Guide

MARVIN JS – НАДЕЖНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РИСОВАНИЯ СТРУКТУР И РЕАКЦИЙ



Дополнительная инструкция по Marvin JS https://docs.chemaxon.com/display/docs/Basic+Features+of+Marvin+JS

Применение Reaxys для решения задач органической химии

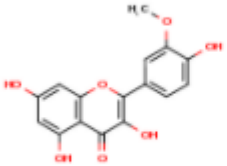
1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

Какие соединения были найдены в тысячелистнике Yarrow?

Isolation from Natural Product Find any Hide fields

contains Isolation from Natural Product

Yarrow



isorhamnetin

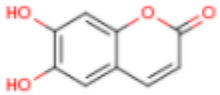
$C_{16}H_{12}O_7$ 316.267

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Bioactivity (All)



aesculetin

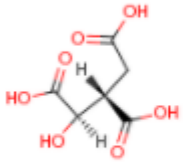
$C_9H_6O_4$ 178.144 152788

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Bioactivity (All)



threo-D-isocitric acid

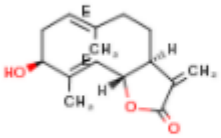
$C_6H_8O_7$ 192.125 1727947

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Bioactivity (All)



hanphyllin

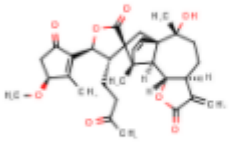
$C_{15}H_{20}O_3$ 248.322 1623169

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Bioactivity (All)



achillinin B

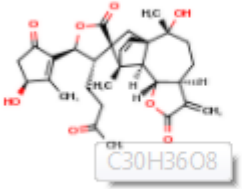
$C_{31}H_{38}O_8$ 538.638

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Options



Synthesize

achillinin C

$C_{30}H_{36}O_8$ 524.611

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Применение Reaxys для решения задач органической химии

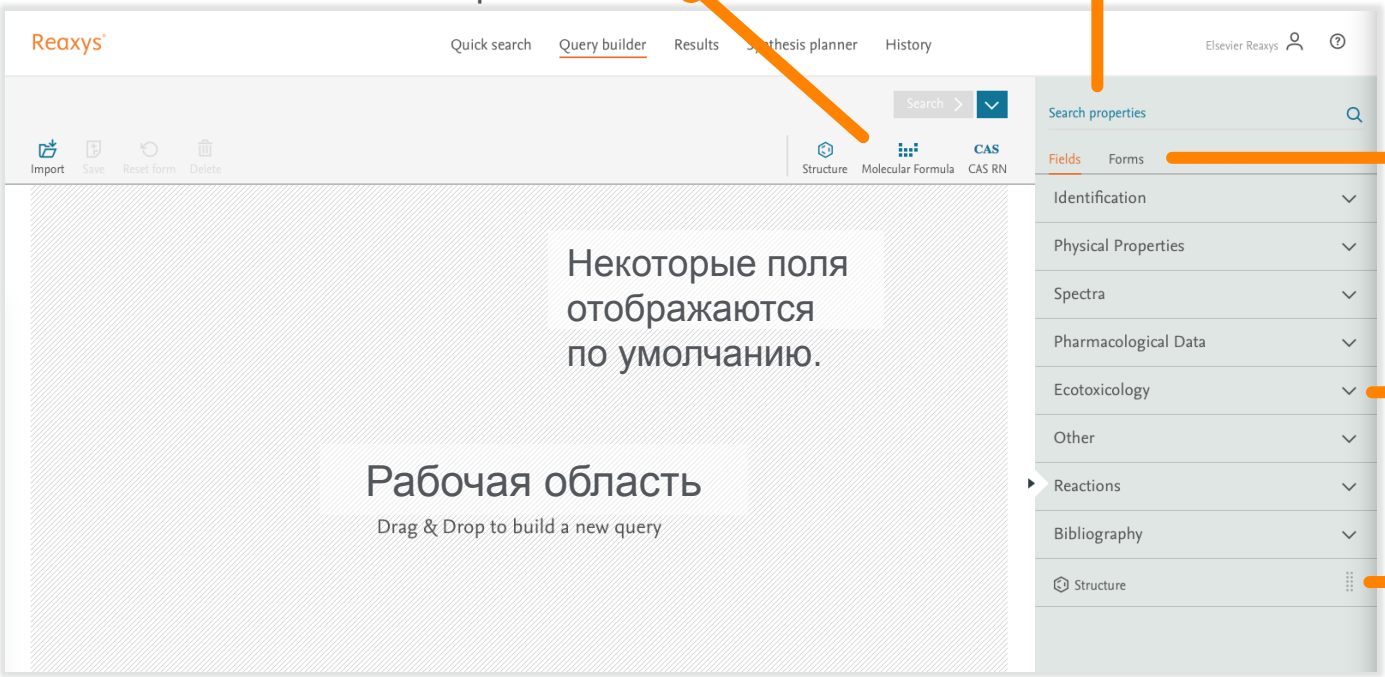
1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

Поиск в Reaxys2016 – **Query builder**

Поиск в Query builder дает доступ к специфическим полям поиска в in Reaxys.

Наберите здесь для поиска конкретных поисковых полей

Добавление структуры, молекулярной формулы или CAS номера



Forms отображает поля для общих видов свойств.

Щелкните стрелку для отображения полей в данной категории

Бары указывают на то, что поле можно перетаскивать в рабочую область

Какие соединения используются в качестве ингибиторов коррозии?

Reaxys

Quick search | Query builder | Results | Synthesis planner | History

Andrey Khudoshin

1. кликнуть

6. кликнуть

Search Documents

Reactions
Targets
Substances
Documents

Find search fields and forms

2. набрать

Import | Save | Reset form | Delete | Structure | Molecular Formula

Reaxys

Use

3. перетянуть

4. кликнуть

Use | Find any | Hide fields

is — Laboratory Use and Handling

Use Pattern

is — *corros* OR (corros* NEAR *inhib*)

5. набрать

544 Substances out

N-(fluoren-9-ylmethoxycarbonyl)glycine

$C_{17}H_{15}NO_4$ 297.31 2163967 29022-11-5

Hit Data - 1 | Spectra - 24 | Preparations - 40

Identification | Bioactivity - 136 | Reactions - 9,315

Physical Data - 32 | Other Data - 2 | Documents - 2,447

Hit Data - 1

Use - 1 hits out of 2

Use Pattern	Location	Reference
corrosion inhibitor	Page/Page column title page; 2	Southwest Petroleum University; He, Yi; Yang, Ranran; +5 others - CN105622457, 2016, A Full Text Show details

Применение Reaxys для решения задач органической химии

1. Идентификация неизвестных органических соединений по имеющимся данным. Поиск информации по анализу заданных соединений.
2. Поиск реакций, протекающих по заданному механизму.
3. Предсказание направления реакции. Предсказание условий реакции.
4. Поиск методик синтеза заданного соединения. Ретросинтетический анализ.
5. Поиск соединений, найденных в заданных природных объектах.
6. Поиск соединений с заданными ценными свойствами.
7. Какие условия проведения реакций используются в крупных масштабах?

В каких крупномасштабных реакциях используется палладий?

Reaction Basic Index

contains

Reaction Basic Index

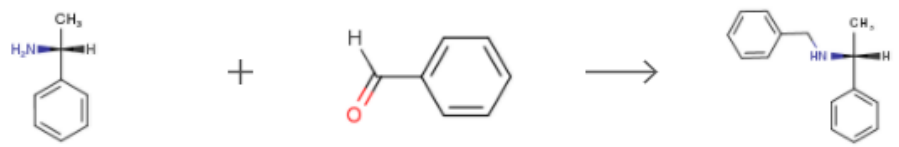
palladium NEAR Large NEAR scale

1,747 Reactions out of 539 Documents containing 1,389 Substances, 1,693 Targets

0 selected Limit To Exclude Export

Reaction ID: 2680642

1



1 Hits 13 Conditions Find Similar

Hit Details

Yield	Conditions	References
	Multi-step reaction with 2 1: toluene / 2 h / |Reflux; |Large scale 2: hydrogen; 5-palladium/activated carbon / water / 0.5 h / 20 - 25 °C / 3345.86 Torr / |Large scale View Scheme	Huckabee, Brian K.; Lin, Sechoing; Smith, Traci L.; Stuk, Timothy L. - Organic Process Research and Development, 2000, vol. 4, # 6, p. 594 - 595 Full Text Cited 2 times Details Abstract

Reaxys PhD Prize

The world' most prestigious award recognizing young chemists' work

The PhD Prize **recognises the research of extraordinary young chemists** and **celebrates the very best of chemistry research**.

No other award impacts the career of a young chemist like the Reaxys PhD Prize

It represents a great opportunity for **applicants, their research Group and academic institution to get further visibility** in Chemistry community.

2016 will mark the 7th edition of the prize. 2500 submissions have been received from over 400 universities in its 6-years history.

Each year, **45 finalists are selected by a panel of judges** out of hundreds of applicants. **3 winners** will then be awarded.

The **Chair of Reaxys PhD Prize Review Board** is a selection of **renowned chemistry experts** from around the world

All 45 entrants are given an opportunity to present their research **at the PhD Prize Symposium**

The **3 winners will be selected and announced at the banquet** closing the Symposium

Symposium is held in a different but equally **prestigious location**. In 2015, it was hosted in **Hong Kong**

All 45 finalists will be rewarded wide range of benefits including lifetime membership to **PhD Prize Club,** access to the **powerful network of 270 talented chemists** and **free access to Reaxys and Reaxys Medicinal Chemistry**

Each of the 3 winners **receives an additional cheque for $2000**

Want to have a taste of PhD Symposium?

(click to play the video)

Submissions for 2018 PhD Prize will open soon

Discover more on our website: **http://inspiringchemistry.reaxys.com/phdprize**

Any question about the Reaxys PhD Prize?
Please email info@reaxys.ch

Спасибо за внимание!