ELSEVIER

Reaxys®

快速搜索指南

June 2022

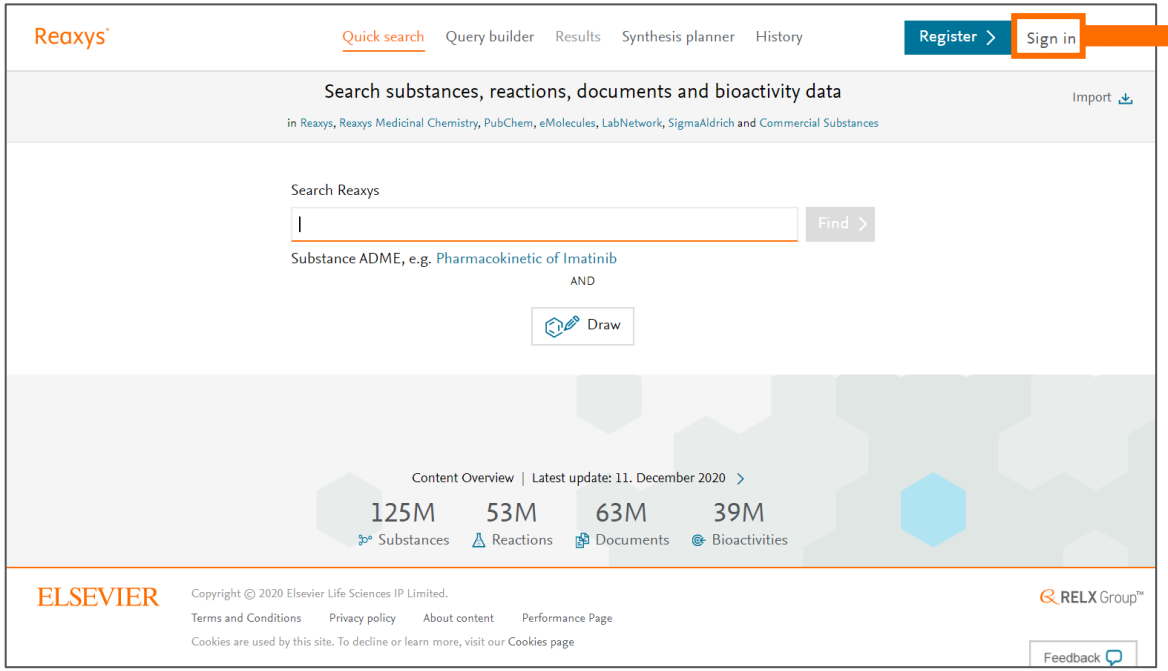
目錄

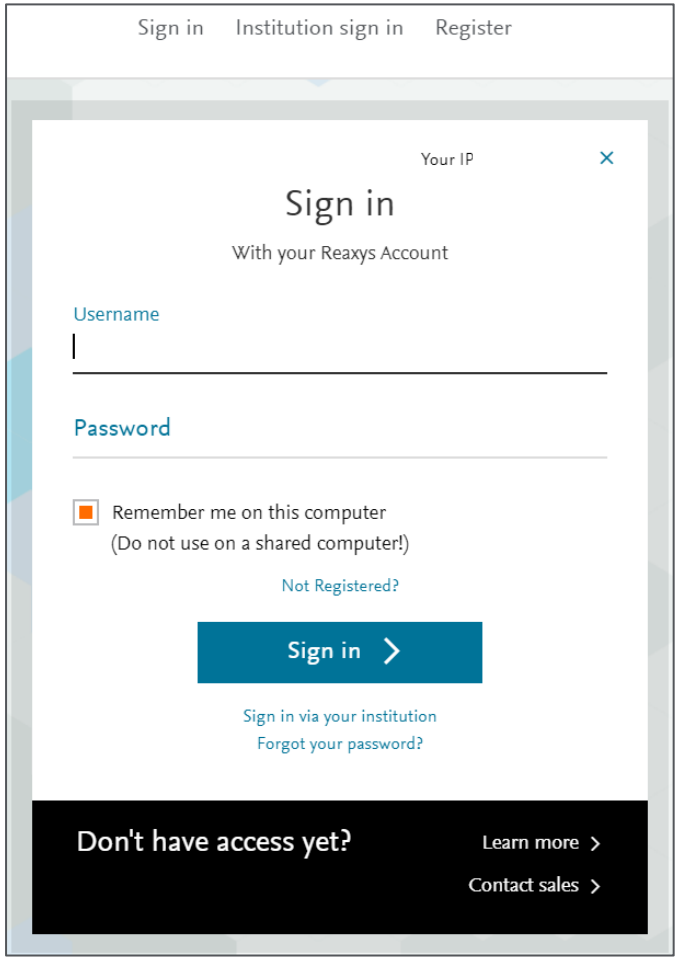
ELSEVIER

Reaxysの取得

連結: https://www.reaxys.com

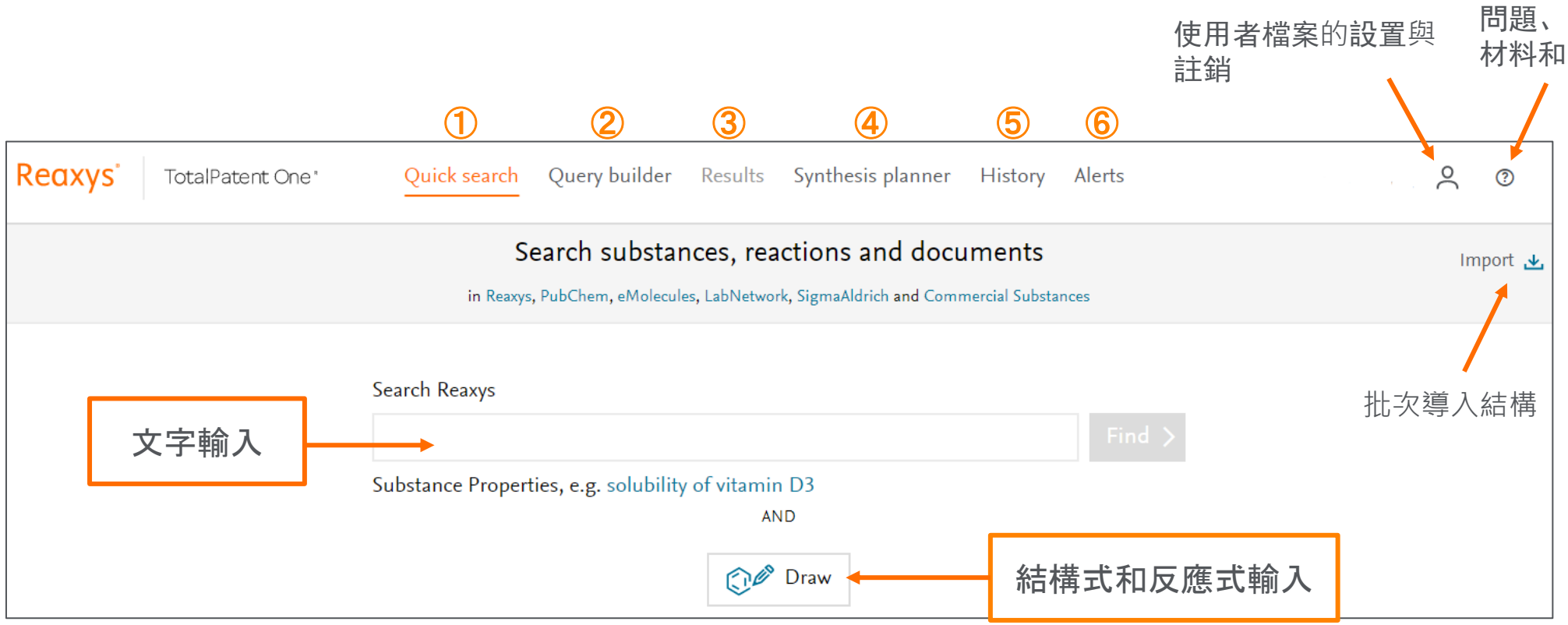
登入畫面
連結:https://www.reaxys.com/#/login





ELSEVIER

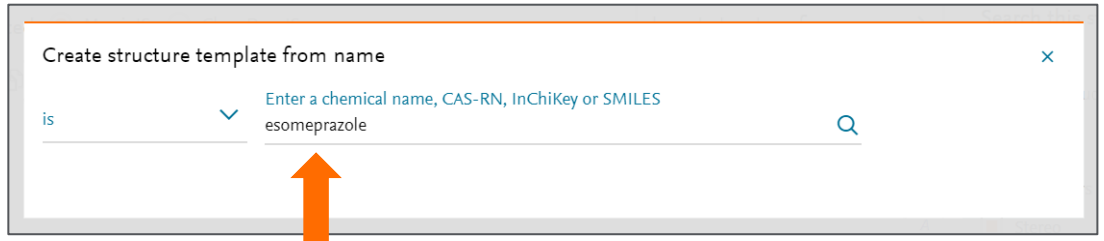
Reaxys首頁畫面



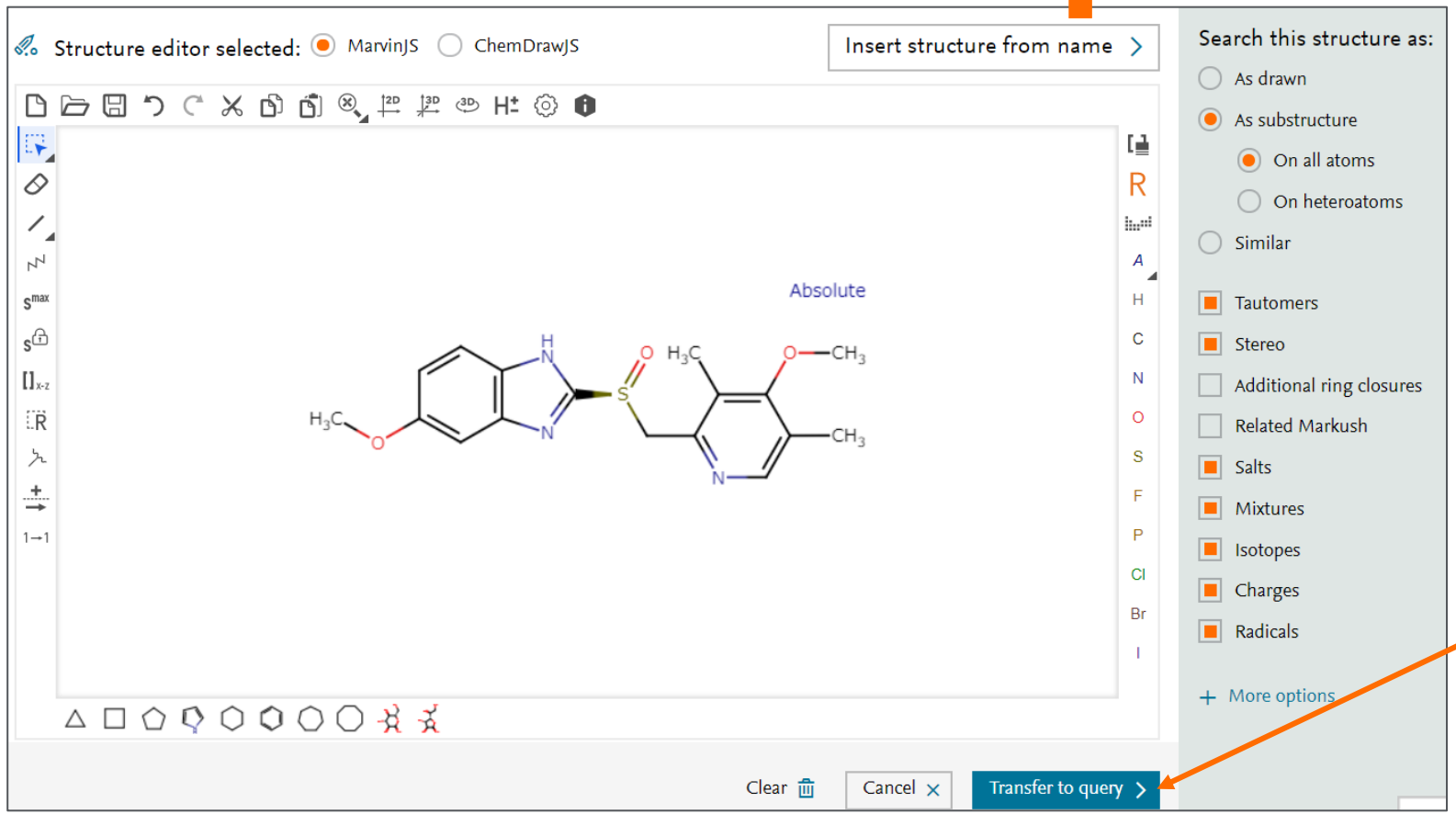
① Quick search：結構搜索，關鍵字搜索。
② Query builder：結構式、物理性質等方面的乘法搜索。對搜索歷史進行乘法搜索。
③ Results：搜索結果。 對使用者需要的資訊進行優先排序。
④ Synthesis planner：逆向合成路線搜索。
⑤ History：搜索歷史。
⑥ Alerts：瀏覽提示的搜索內容。

介面

可以從化合物的名稱中調出結構。



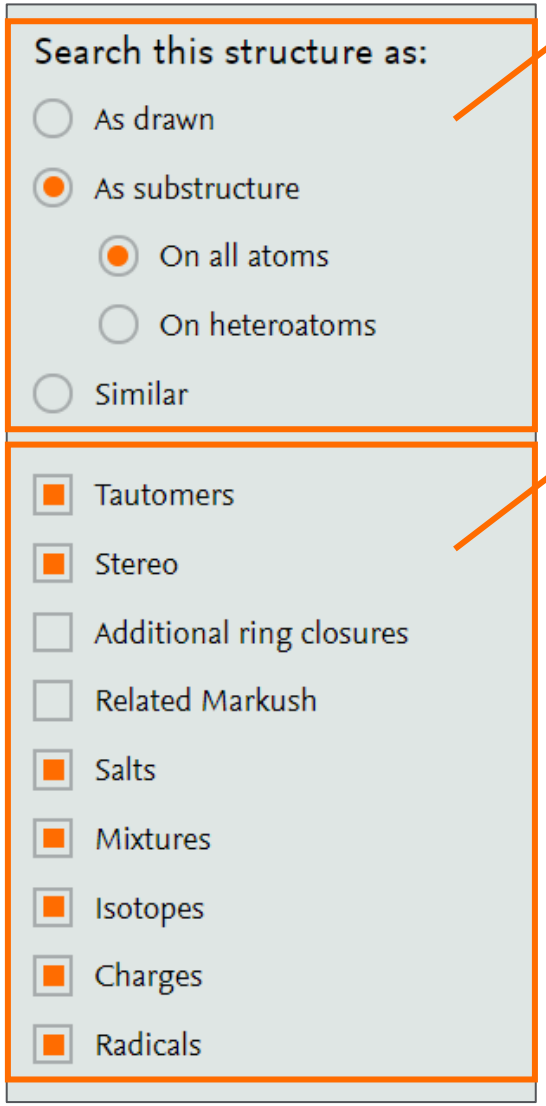
可以用 “ctrl+alt+C ”複製ChemDraw中繪製的結構黏貼到Marvin JS上。



點擊「Transfer to query」，進入搜索介面。

結構式和反應式繪製的搜索選項

搜索選項



① 結構搜索選項

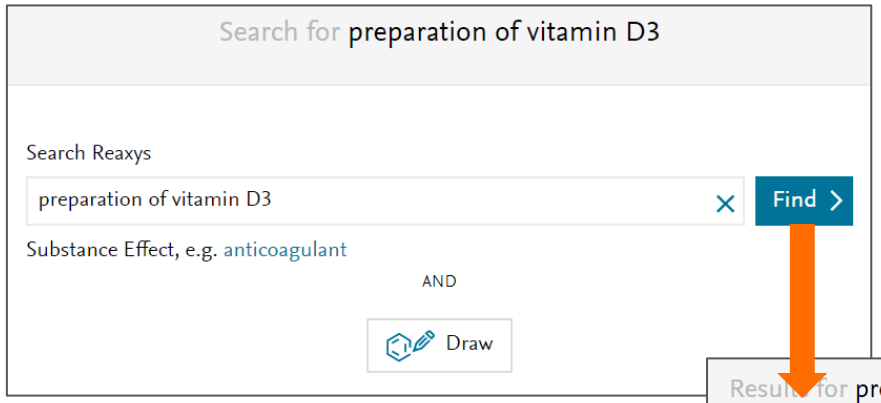
- As drawn ： 按照繪製的結構
- As substructure ： 部分結構
  - On all atoms ：搜索所有原子的子結構
  - On heteroatoms ：只在雜原子上進行結構搜索
  - Similar ： 類似的化合物與反應

② 其他搜索選項

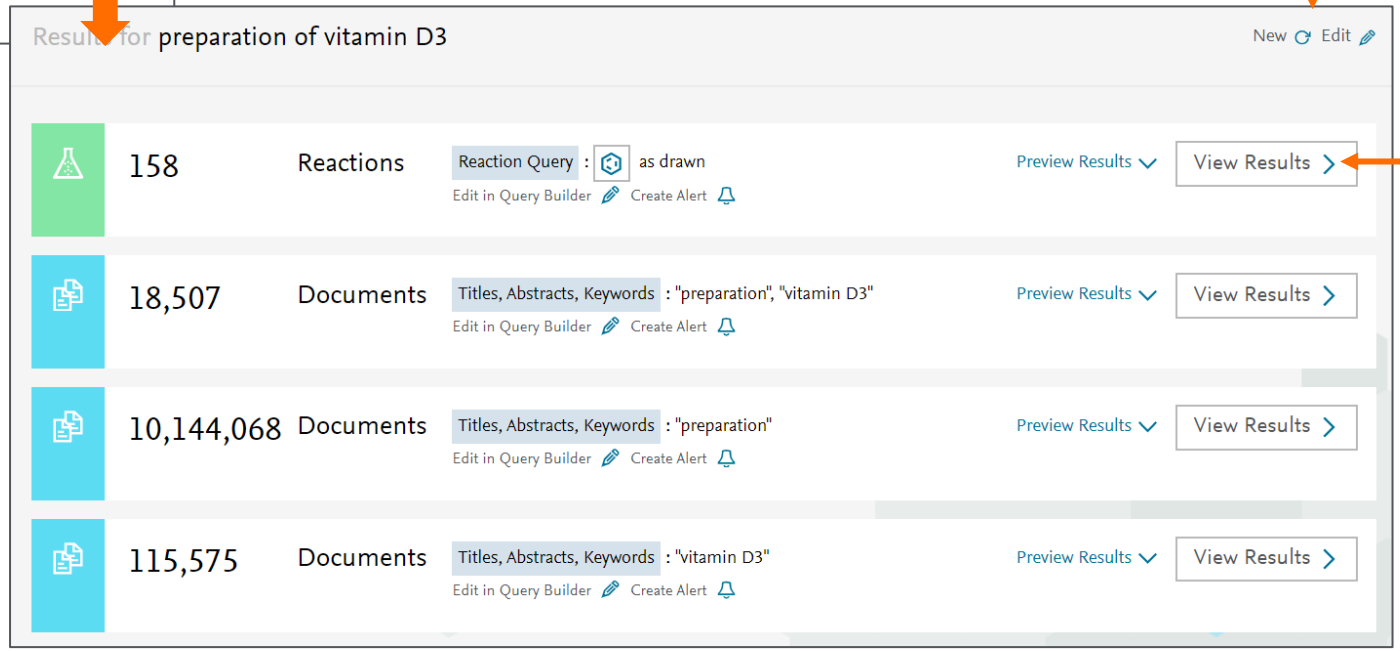
- Tautomers：同分異構體
- Stereo：立體異構體
- Additional ring closures：額外的環形閉合
- Related Markush：相關的Markush資料
- Salts ：鹽類
- Mixtures：混合物
- Isotopes：同位素
- Charges ： 帶電分子
- Radicals ： 自由基

ELSEVIER

Quick Search搜索預覽介面



修改和編輯搜索公式



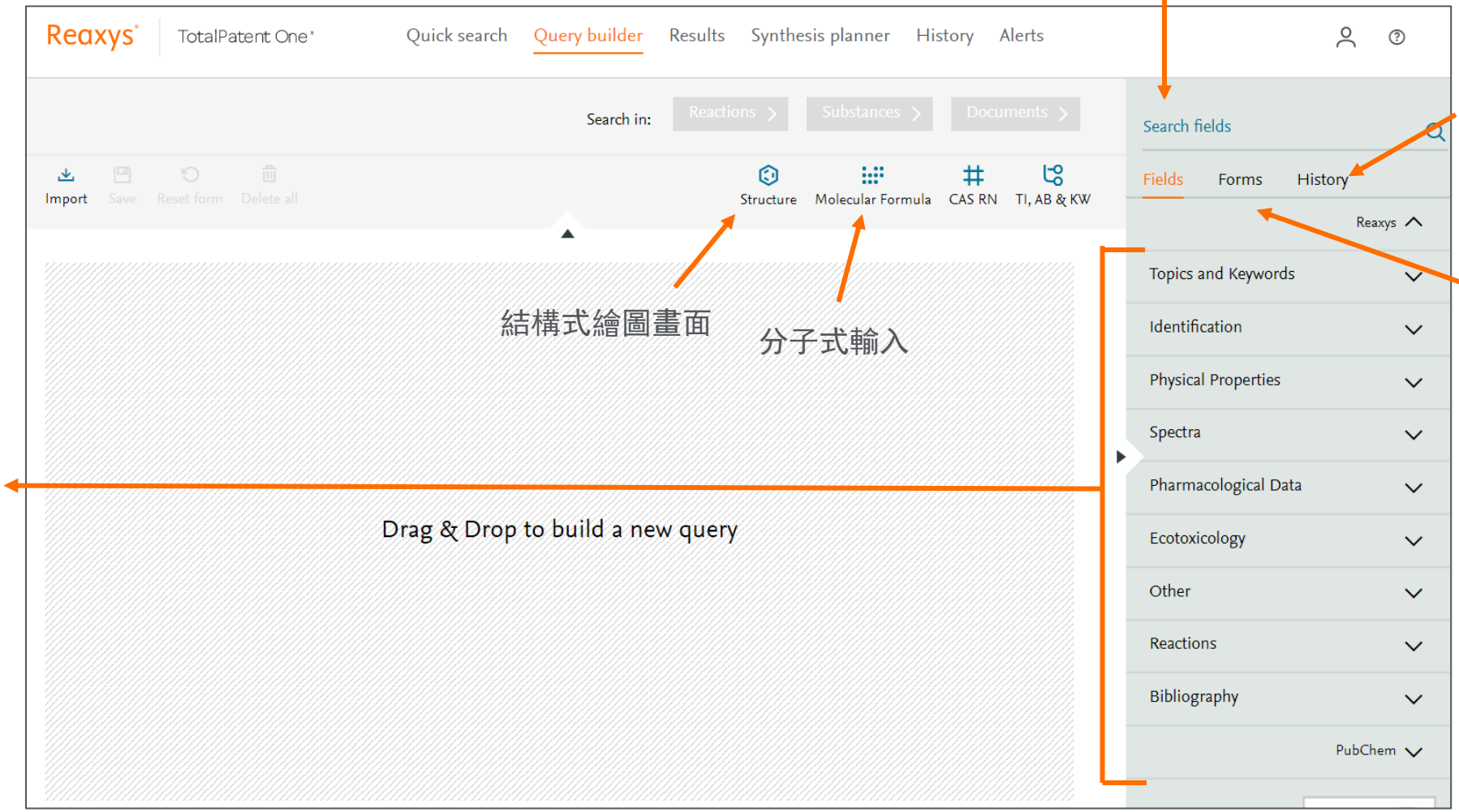
「View Results」進入搜索結果介面

快速搜尋會分析輸入的關鍵字，提供物質、反應式、文件或商業物質的選擇。

Query Builder

靈活組合>100種搜索方式來減少雜訊

輸入關鍵字以查找特定搜索器。
例如：輸入”Boil”來尋找”boiling point”搜索器。



搜索歷史也可用於搜索公式中。

調用你自己創造的搜索公式和我們為您建立的搜索公式範本。

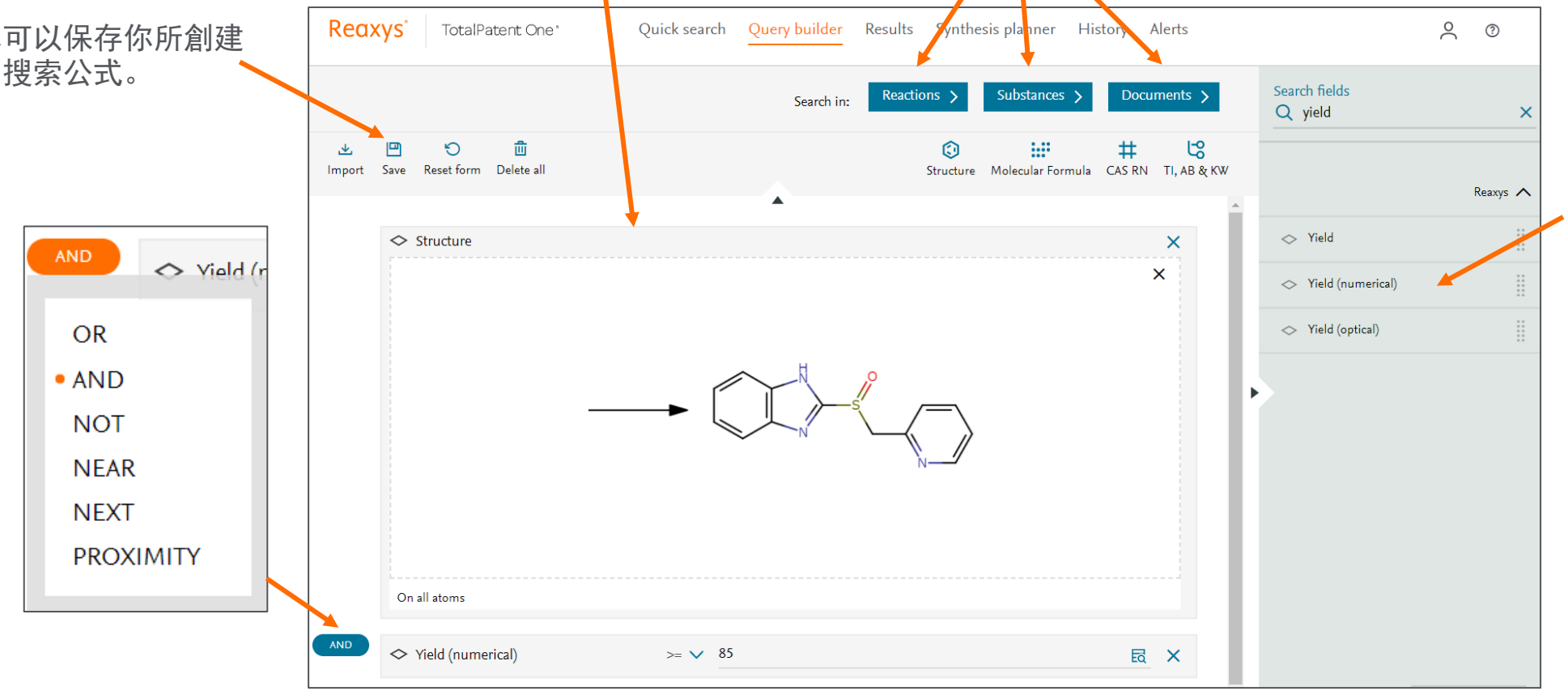
超過100搜索器，供您挑選。

Query Builder

選擇反應搜索、物質搜索和文獻搜索。

你所選擇的搜索專案會被顯示出來。

你可以保存你所創建的搜索公式。



點擊或按下Drug&Drop來調用一個項目。

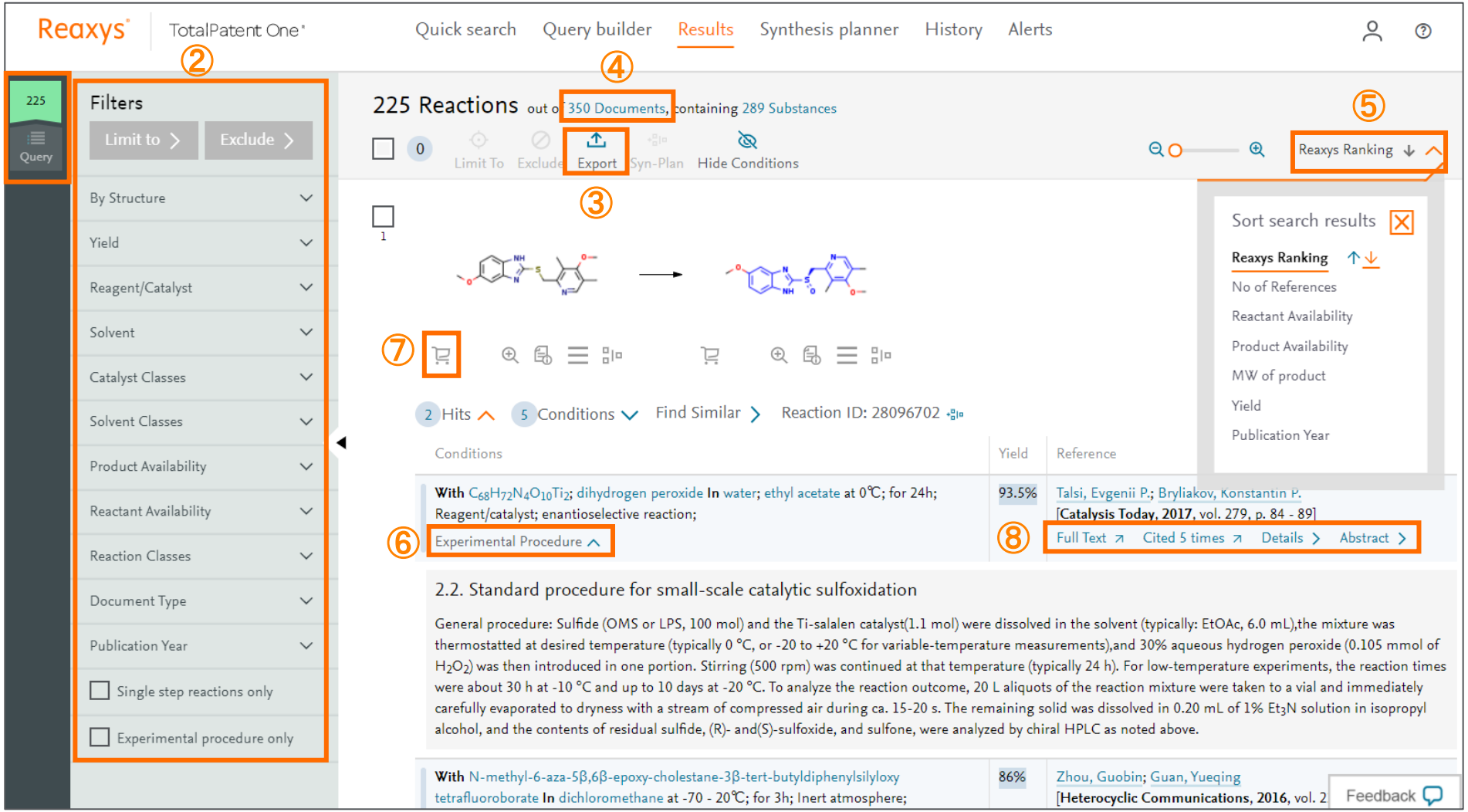
- OR：或
- AND：和
- NOT：不包括
- NEAR：雙方必須靠近對方
- NEXT：雙方必須靠在一起
- PROXIMITY：雙方都很接近

反應搜索結果介面

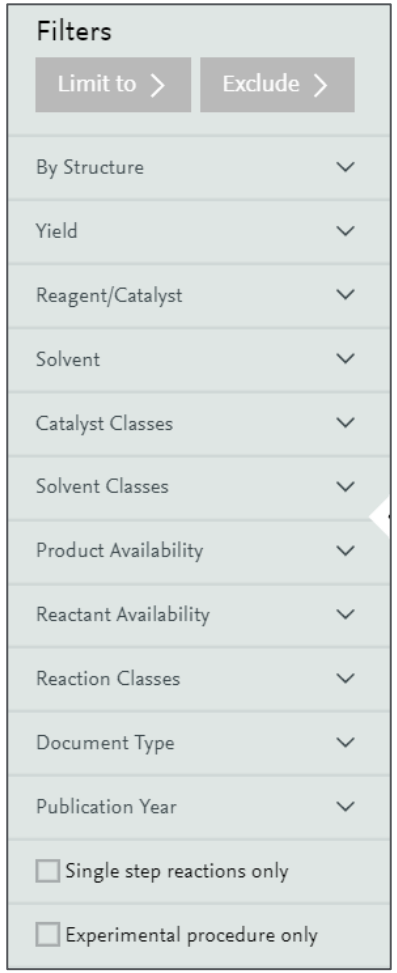
Reaxys Ranking:
按認為有用的順序排列，而非依年份或產量排列。

＜項目＞

① 瀏覽搜索結果的軌跡
② 過濾功能
③ 匯出按鈕（參考 P. 22）
④ 反應數據的來源文獻
⑤ 搜索結果的反應功能
⑥ 實驗式表示
⑦ 商業試劑資訊
⑧ 紀錄的詳細資訊連結

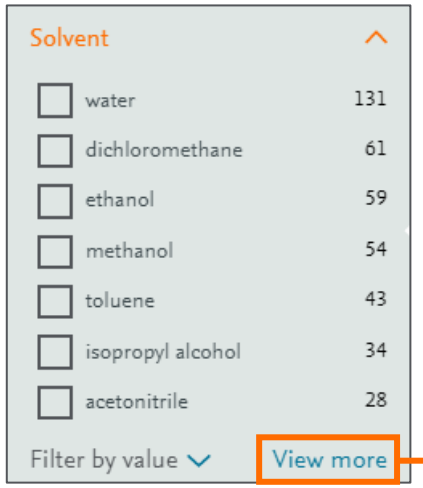


反應搜索結果中的篩選

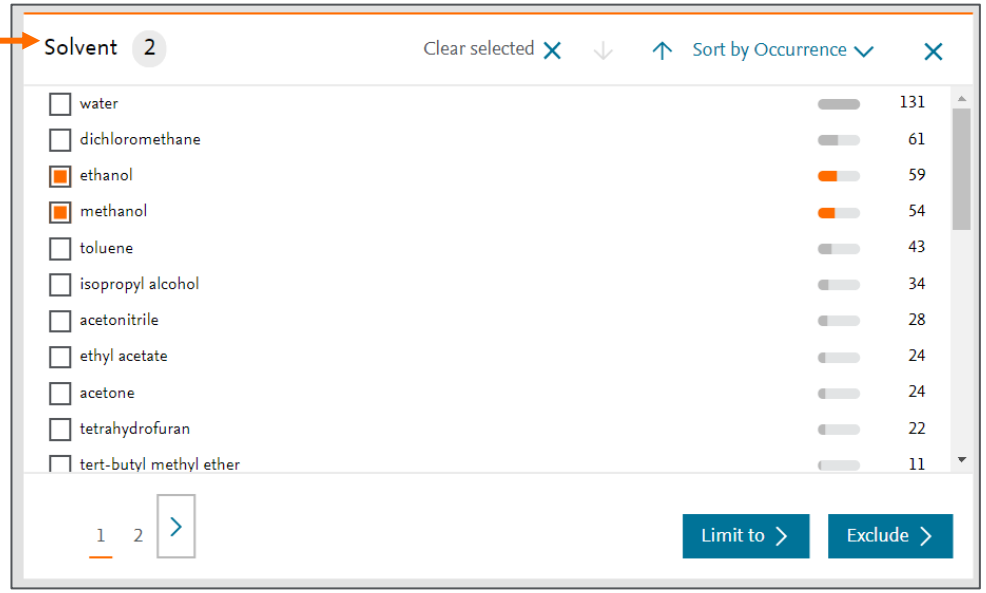


← 結構
← 產率
← 試劑、催化劑
← 溶劑
← 催化劑類別
← 溶劑類別
← 產物的可能性
← 反應物的可能性
← 反應類別
← 來源的種類(文獻、專利)
← 出版年份
← 縮小到只有一步反應
← 縮小到只包含實驗性術語的名單

例如：溶劑的過濾

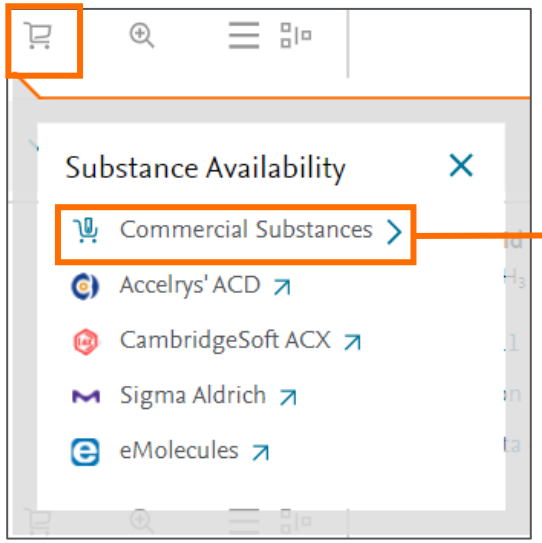


- 每個專案的細目可以通過點擊打開。
- 這些專案按照案件數量的順序進行排序。
- 可以通過輸入數位或單詞來過濾專案。

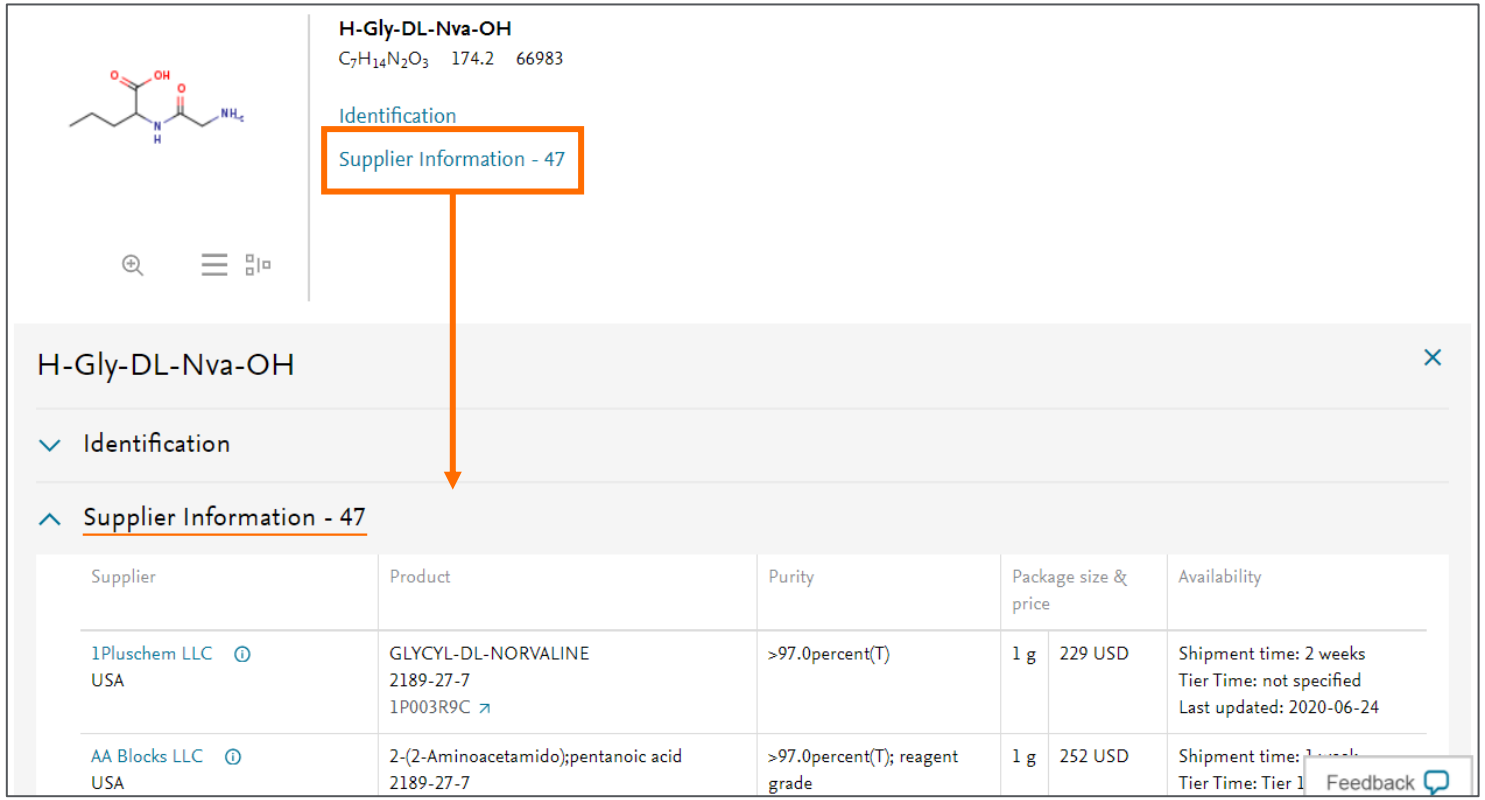


商業試劑目錄資訊

點擊查看目錄資料庫，並通過點選連結到相應網站。



*Accelrys ACD, Cambridgesoft ACX為付費資料庫，欲使用需單獨簽訂合同。



可以檢查供應商、零件編號、純度、容量、價格和交貨日期。

篩選功能使您將搜索範圍縮小到日本供應商。

詳細的來源文獻連結

Full Text：您可以移動到期刊的文章頁面。

Cited X times：來自 Scopus 的引用數量(點擊查看引用該文章的參考文獻列表)。

Details：文章的細節(包括文章中的索引詞、物質和反應的細節）。

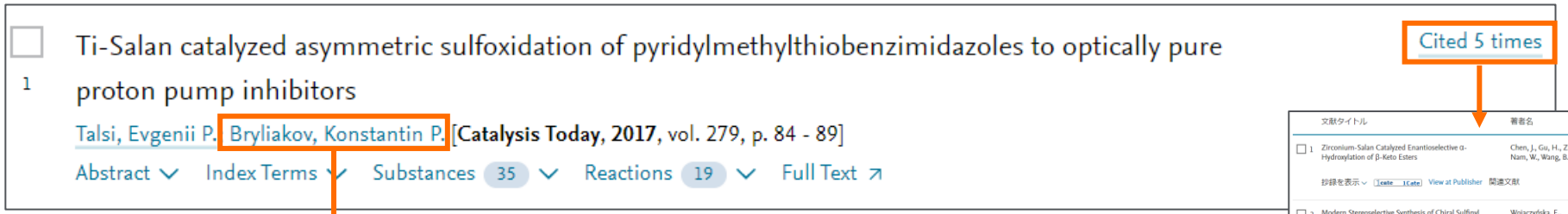
Abstract：查看文章的摘要。

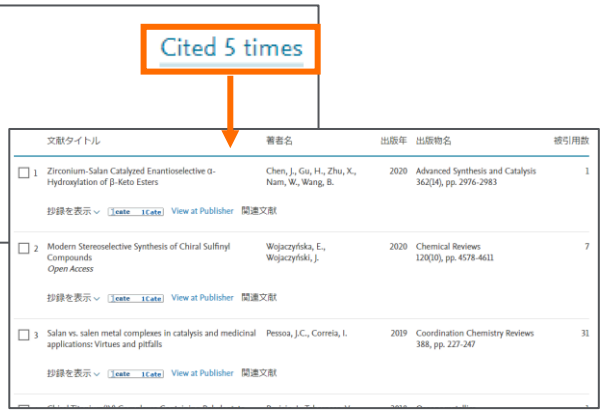
※對於專利，也有權利要求的部分

文獻中的作者和引用資料

點擊一個作者的名字將顯示該作者的Scopus搜索結果。

*不需要訂閱Scopus就可以查看預覽介面





Cited X times以查看引用該文章的參考文獻列表。

什麼是Scopus？

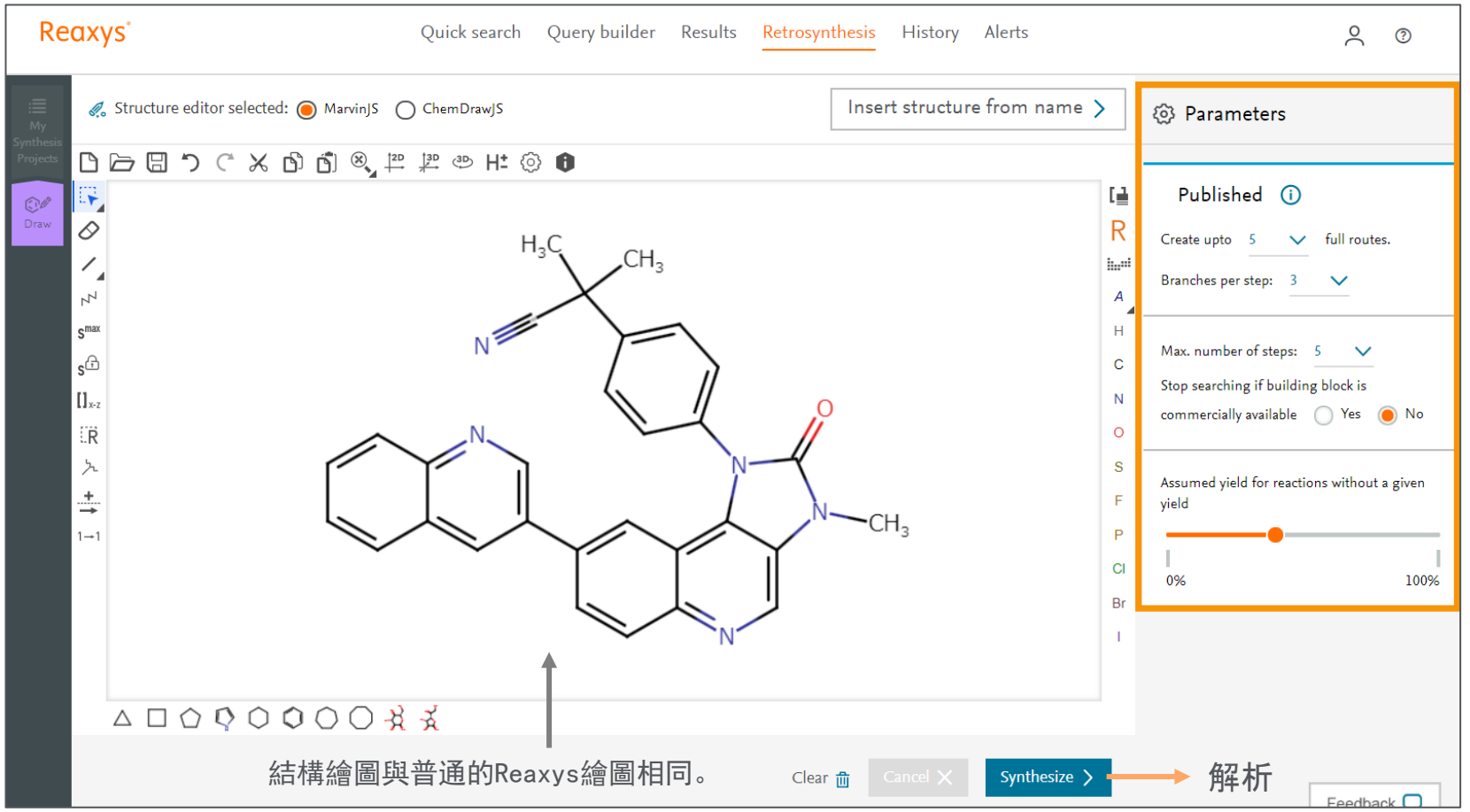
Scopus 是Elsevier提供的世界上最大的摘要和引用資料資料庫。

不僅可以追踪引用與被引用的關係，還可以高效地搜索文獻，利用文獻信息搜索共同研究者、分析趨勢。

通過Retrosynthesis制定合成途徑 ①

～如何繪製目標化合物的結構並進行路徑分析～

Retrosynthesis是一個根據Reaxys中包含的反應資料為目標化合物創建合成途徑的功能。



・生成的路線的最大數目

・線上的最大分支數量

・最大的步驟數

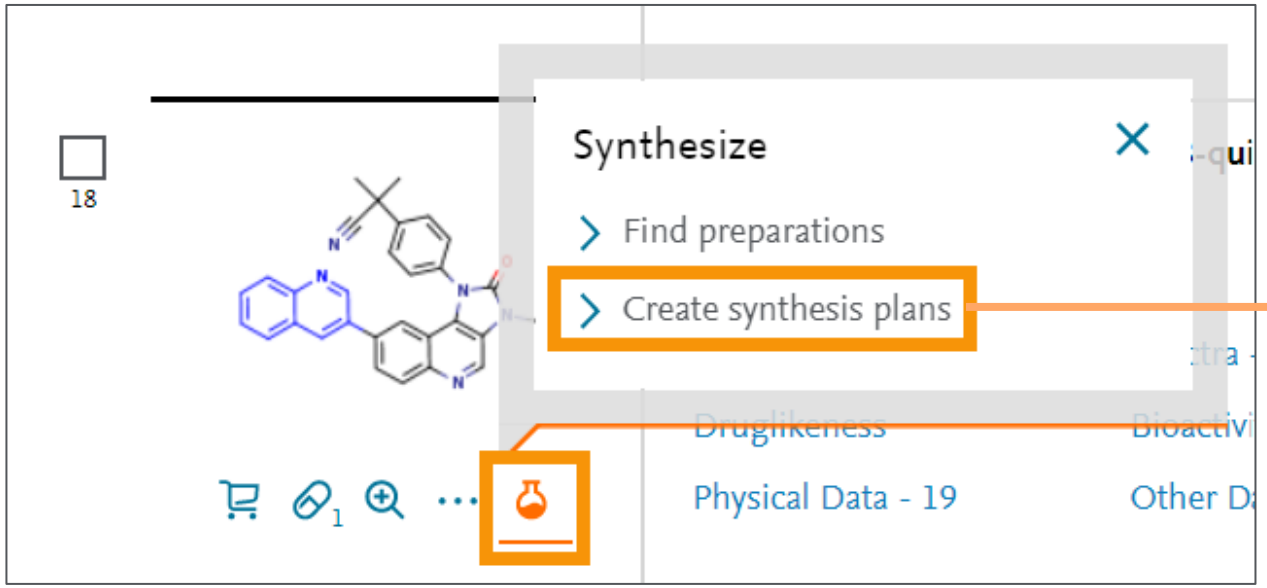
・當歸因於一種商業化的化合物時將停止分析
→建議不要使用（因為大分子有販售）

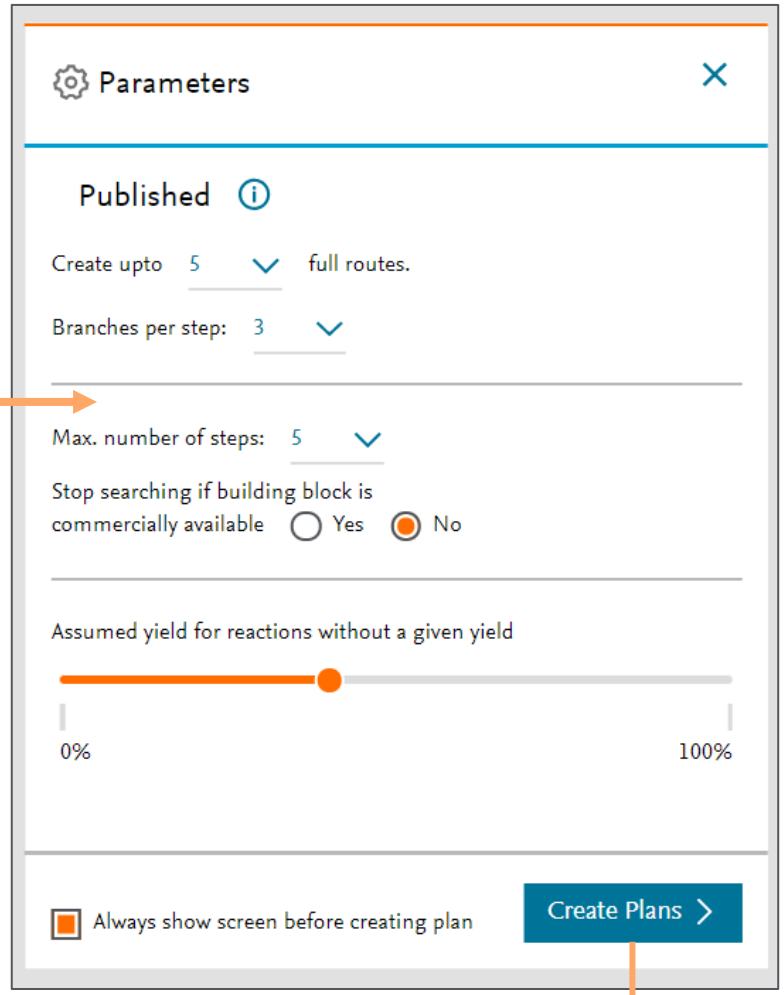
・設定各反應的允許產量

※Retrosynthesis目前提供額外的付費模組，以AI引擎預測創新分子的合成路徑

通過Retrosynthesis制定合成途徑 ②

～如何分析化合物搜索結果中感興趣的化合物的途徑～



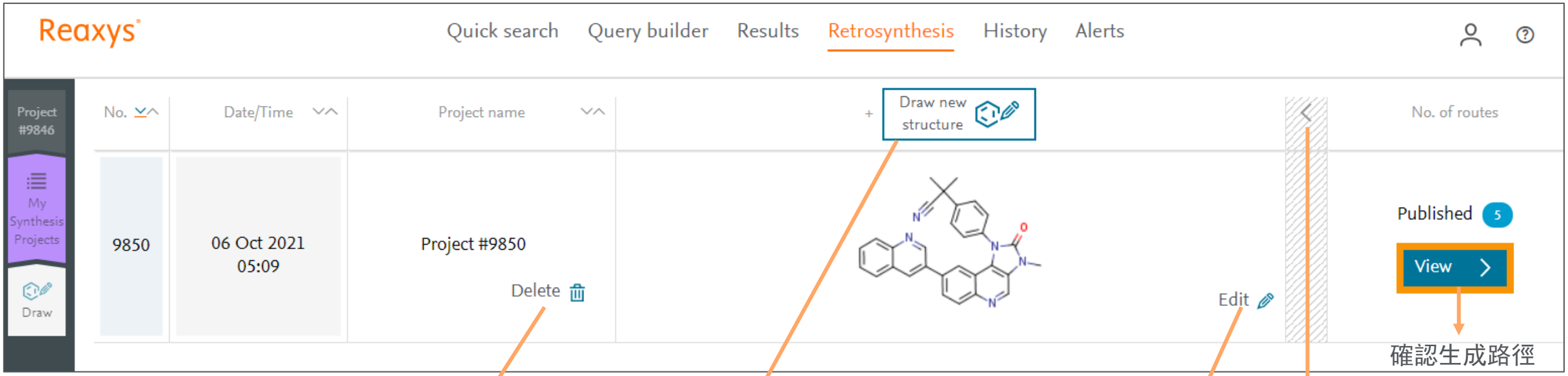


解析

ELSEVIER

通過Retrosynthesis制定合成途徑 ③

～合成途徑開發的專案管理介面～



如果您想繪製並分析一個新的結構

刪除

這個結構是以這個結構為基礎的
如果您想編輯和分析

ELSEVIER

通過Retrosynthesis制定合成途徑 ④

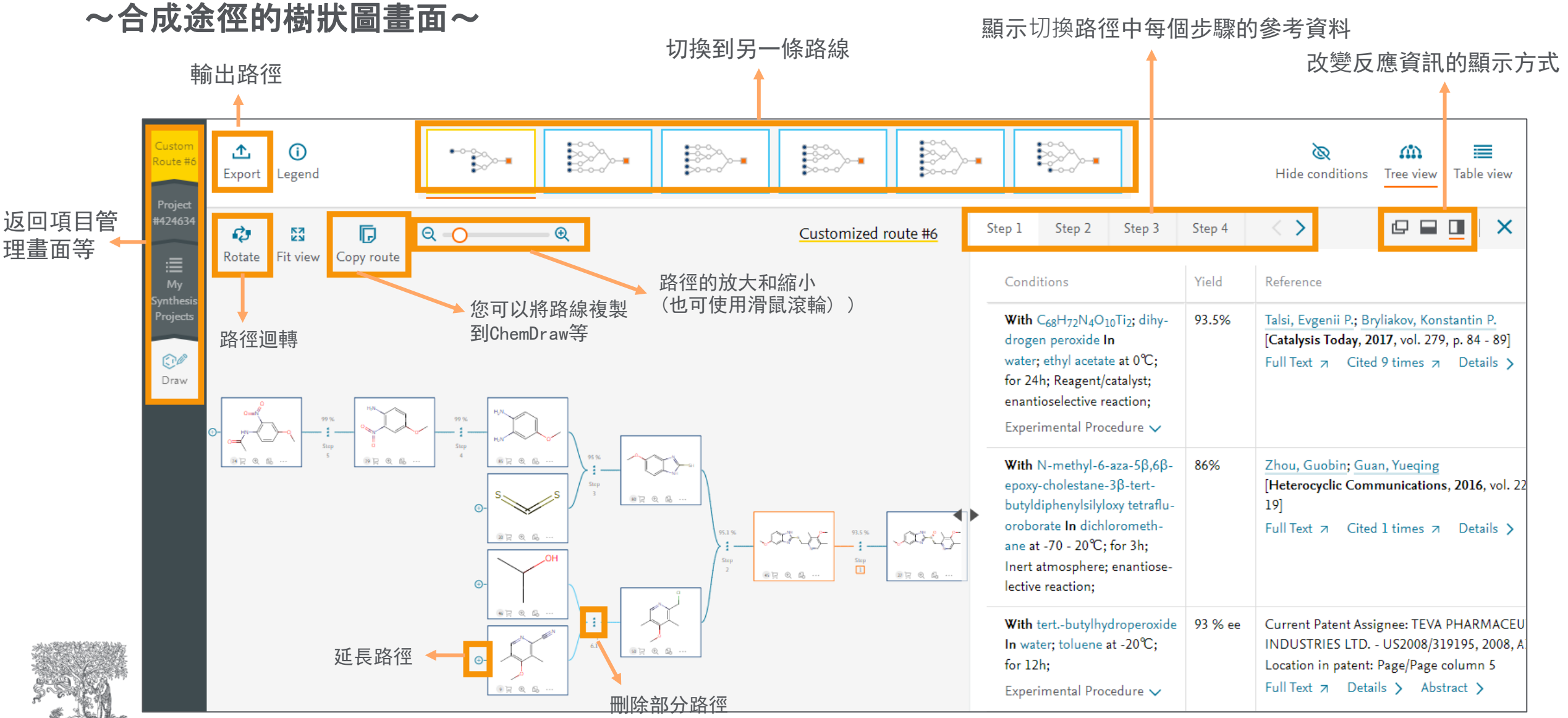
～生成的合成路線的清單界面～

可以根據每條路線的步數進行排序

詳細的路徑
「Tree View」：以枝狀的形式展示

通過Retrosynthesis制定合成途徑 ⑤

～合成途徑的樹狀圖畫面～

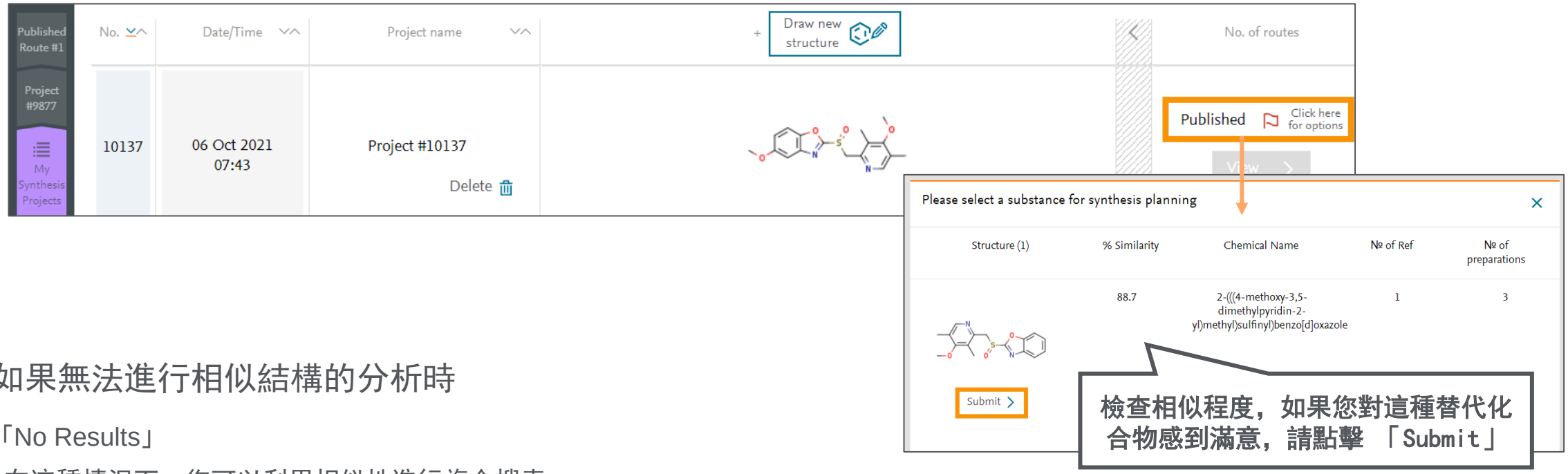


ELSEVIER

通過Retrosynthesis制定合成途徑 ⑥

～當無法獲得合成途徑時～

①如果該途徑可以由與被分析化合物結構相似的化合物產物



②如果無法進行相似結構的分析時

→「No Results」

在這種情況下，您可以利用相似性進行複合搜索、
建議從搜索結果中找到與您的目標相近的化合物，並用第4頁的方法對其進行分析。

ELSEVIER

化合物檢索結果畫面

<項目>

① 瀏覽搜索結果的軌跡

② 過濾功能

③ 顯示合成熱門化合物的反應

④ 搜索結果的排序功能

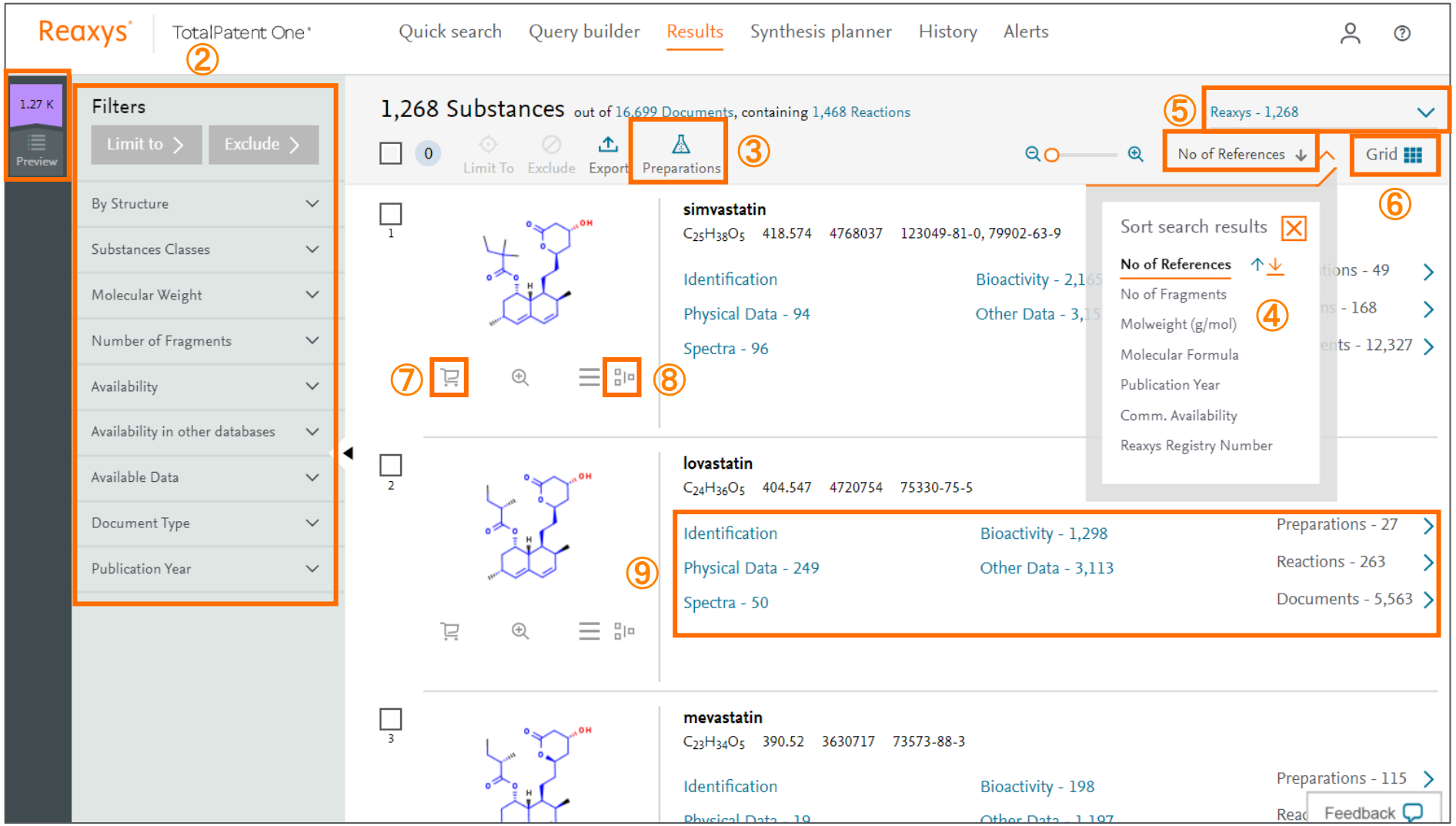
⑤ 切換數據庫

⑥ 切換到網格顯示

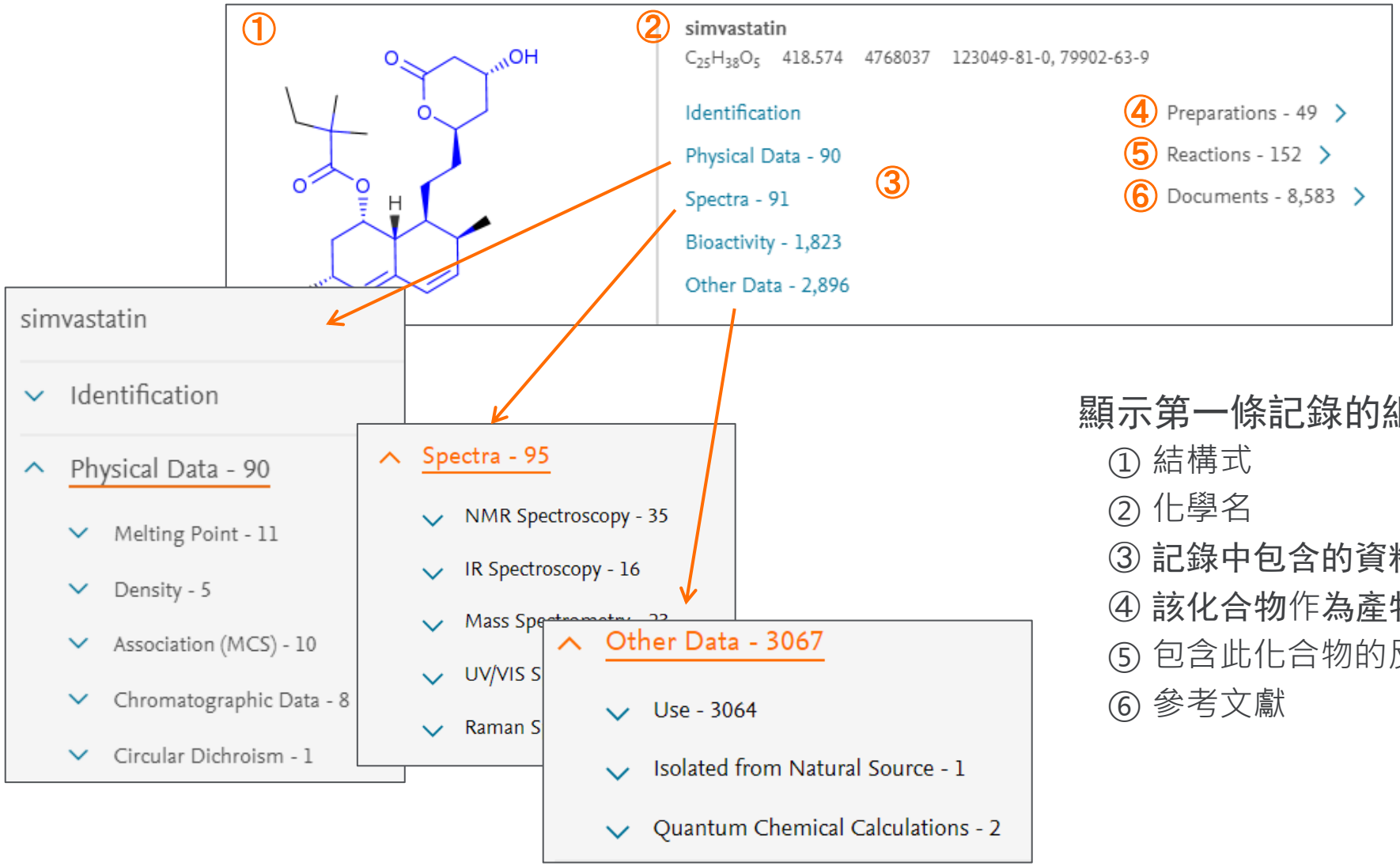
⑦ 商業試劑資訊

⑧ 化合物的合成規劃

⑨ 連結到各化合物的合成方法和測量的物理性質



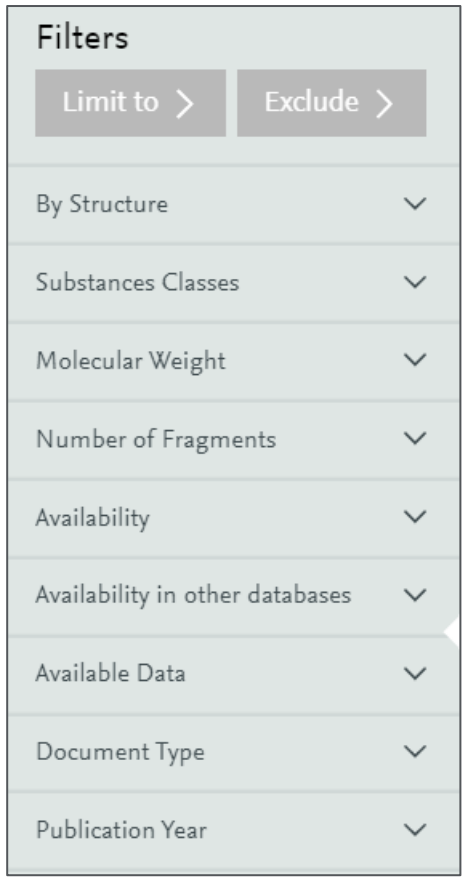
詳細的化合物數據



顯示第一條記錄的細節

① 結構式
② 化學名
③ 記錄中包含的資料
④ 該化合物作為產物的反應
⑤ 包含此化合物的反應
⑥ 參考文獻

複合搜索結果的過濾



← 構造

← 化合物分類

← 分子量

← 分支數

← 取得的可能性

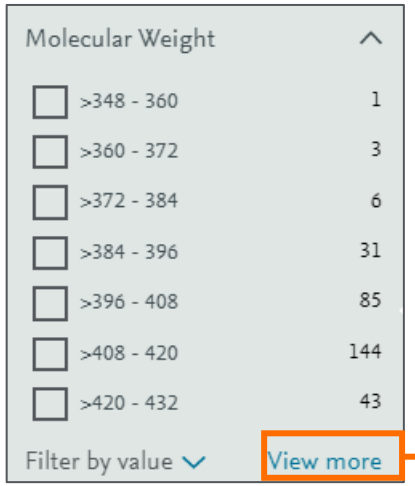
← 包括在其他資料庫中

← 可供查看的資料（如反應、物理特性等）

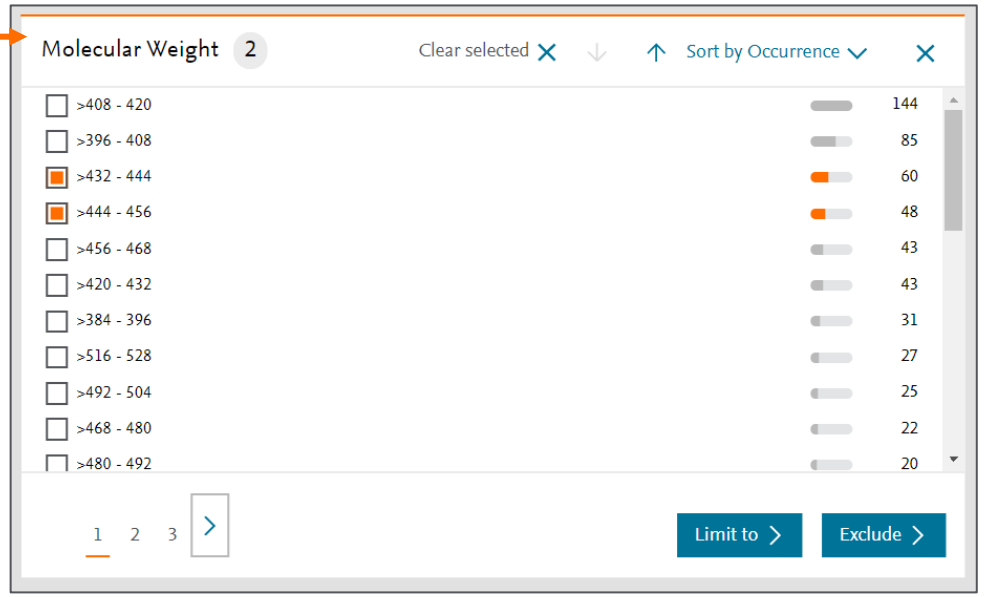
← 文獻的種類（文獻、專利等）

← 出版年份

例如：分子量的過濾

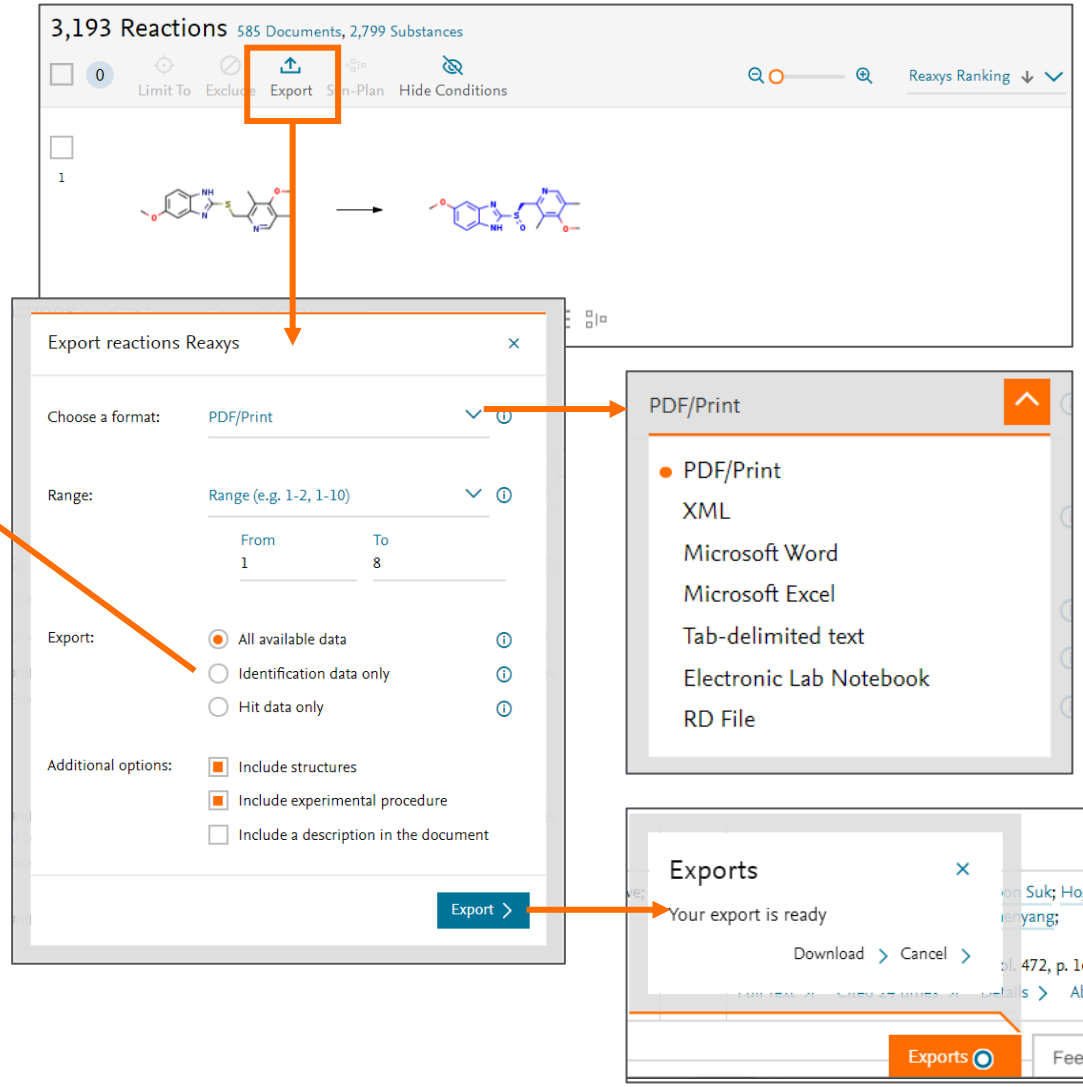


· 每個專案的細目可以通過點擊打開。
· 這些專案按照案件數量的順序進行排序。
· 可以通過輸入數位或單詞來過濾專案。



搜索結果的匯出

以PDF格式或XML/Word/Excel等檔案格式匯出搜索結果



任何記錄或欄位都可以從搜索結果中選擇並匯出

在搜索結果界面上，點擊 「Export」

輸出設定界面：

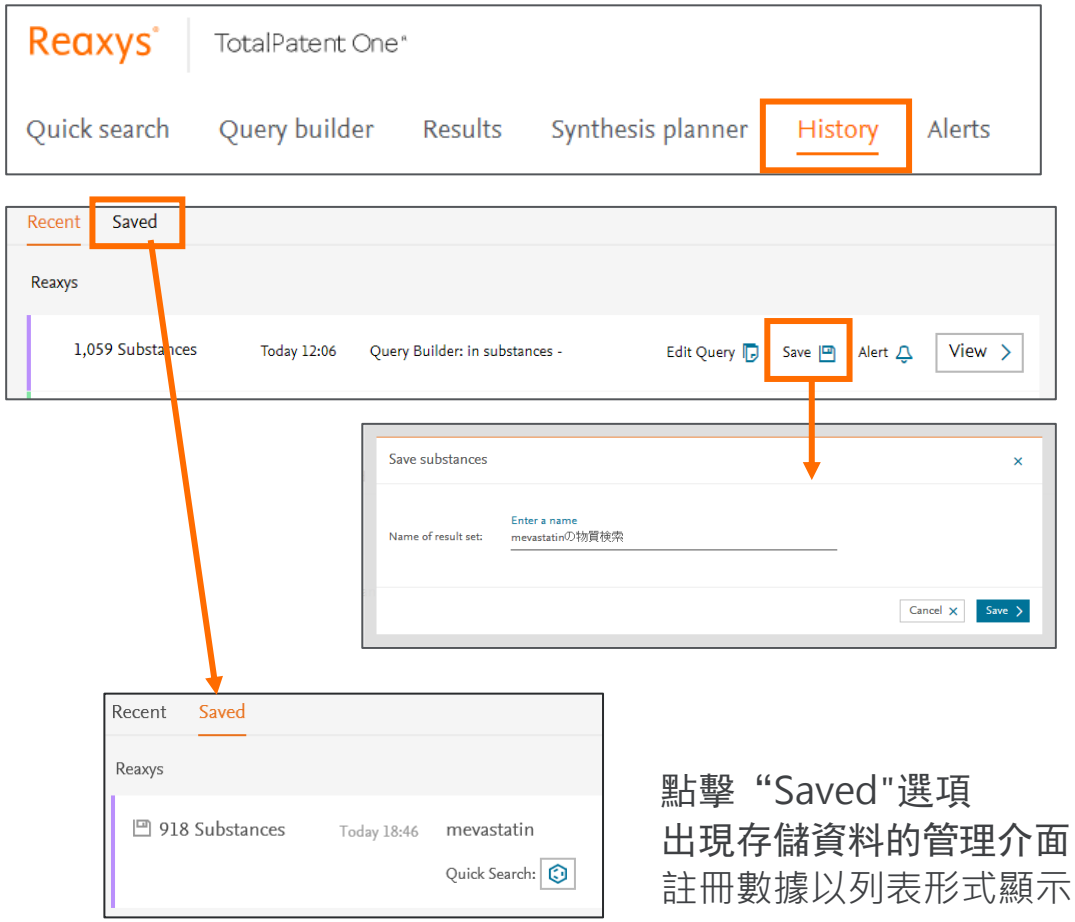
輸出形式、輸出範圍、輸出內容
選擇一個選項，然後點擊輸出按鈕
每次輸出最多5000個項目
24小時內最多10次

*如果您未登錄通過IP身份驗證，則無法導出。

搜索結果的保存

可以存儲搜索結果中的任意記錄

- 保存的記錄可以在”History“介面上查看(如果使用者登錄個人帳號，在關閉視窗後將不會被刪除。)



打開畫面最上面的”History”標籤

點擊你想保存的記錄的「Save」圖示
點擊 Save

為結果輸入一個名稱，然後點擊「Save」
*您也可以使用日文輸入名稱

點擊“Saved"選項
出現存儲資料的管理介面
註冊數據以列表形式顯示

Alert的設定與管理①

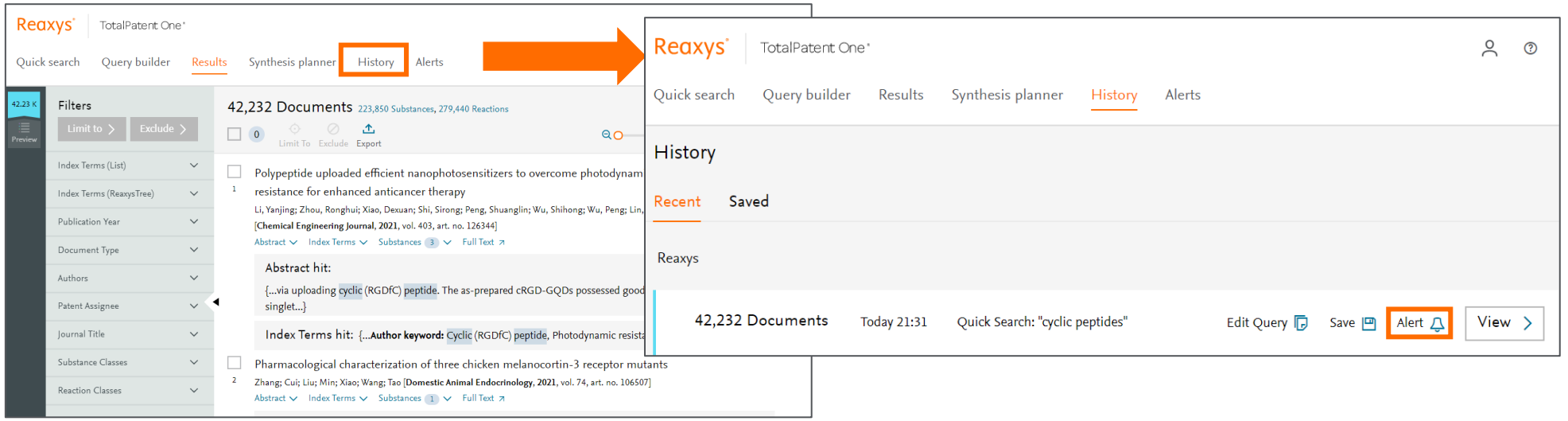
Alert會儲存你的搜索指令，資料庫會定期自動提供符合標準的搜索結果。

- 有助於當您想要在相同條件下檢查相關反應、物質和物理性質的資訊。
- Alert結果將被發送到註冊的電子郵寄地址，同樣地Alert結果也可以發送給其他用戶並分享。
  * 使用Alert需要登入

Alert的設定：

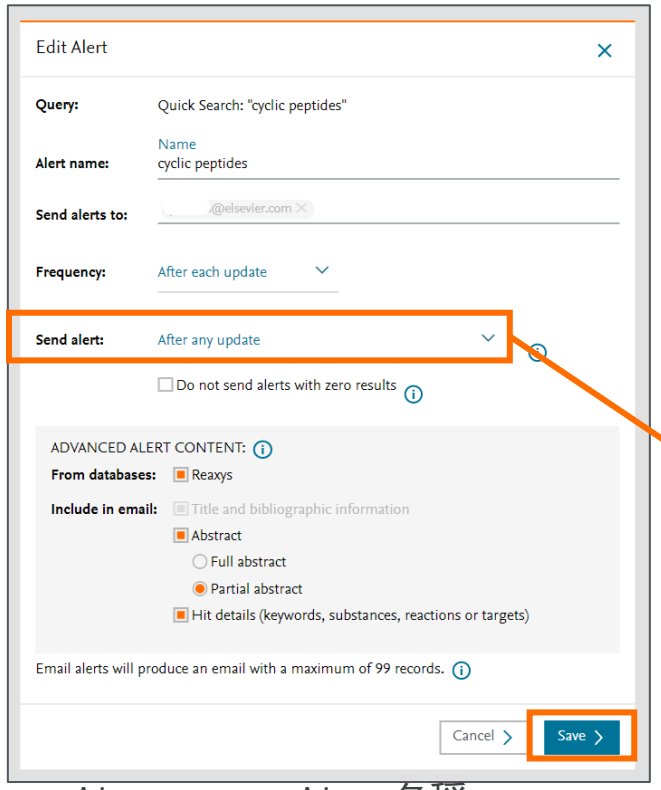
① 在執行了您設置的Alert搜索後，打開歷史記錄。

② 在“History”介面上，選擇要設置Alert的搜索歷史記錄。
搜索歷史中會顯示各種選項，點擊”Alert”。



Alert的設定與管理②

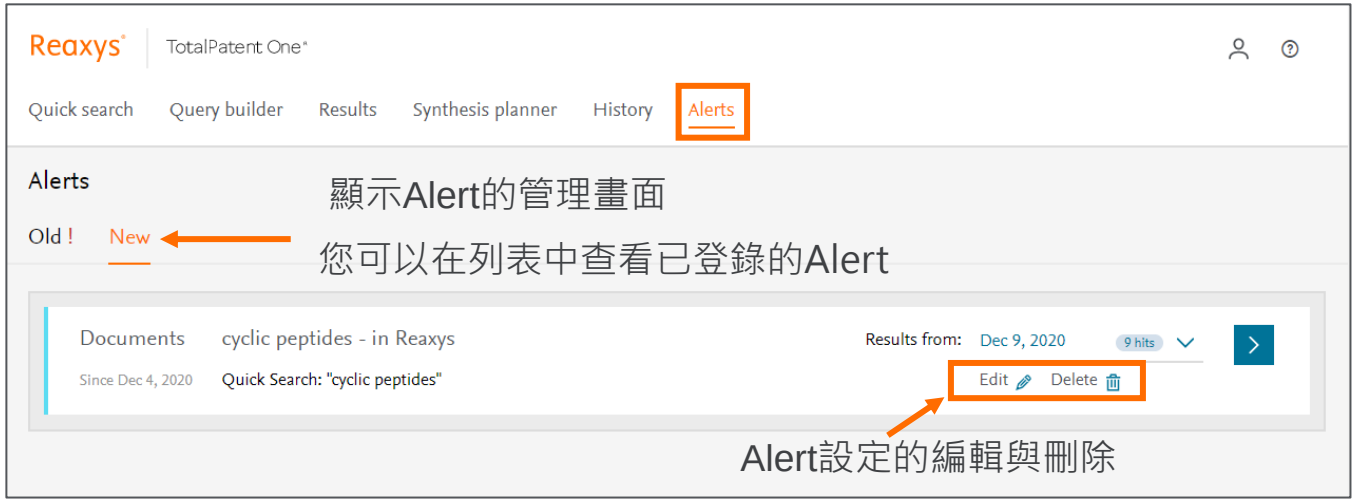
Alert的設定：

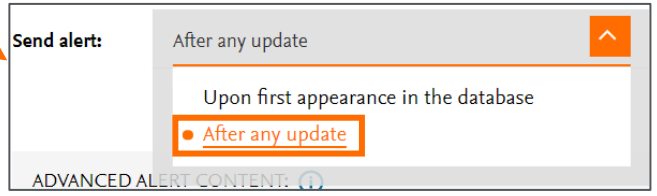


- Alert name: Alert名稱
- Send alerts to: 設定送達的電子郵件地址(可複數輸入)
- Frequency: 通知頻率（可以指定星期和日期。）
- Alert Content: 所需的資訊內容

設置上述內容並點擊「Save」

Alert的管理：





※若選擇「Send alert:」，建議同時選擇「After any update」。
每次當Alert目標進行屬性、反應或文獻更新時，Alert都會通過電子郵件發送給使用者。
若選擇「Upon first appearance in the database」，僅在包括新化合物等情況下才會傳送資訊。
因此，不會傳遞持續更新資訊。

操作環境/聯繫細節

操作環境:

- Firefox (版本49以上)
- Chrome (版本53以上)
- Edge (版本14以上)
- Safari (版本9)
- Internet Explorer (版本11)

-Reaxys可以在無Java的環境中使用
-可用於Windows和Macintosh

如需近一步訊息，請聯繫：

如果您在使用Reaxys方面有任何問題，請聯繫Elsevier Japan

- 聯絡資訊： https://jp.service.elsevier.com/app/contact/supporthub/reaxys/
- 電話號碼：03-5561-5035

有關Reaxys的資訊可以在以下連結中找到
- https://www.elsevier.com/ja-jp/solutions/reaxys/reaxys-for-user

ELSEVIER

Thank you

如果您在使用Reaxys方面有任何問題，請聯繫Elsevier

- 聯絡資訊: r.huang@elsevier.com
- 電話號碼:+886-2-2522-5937

有關Reaxys的資訊可以在以下連結中找到

- https://www.elsevier.com/zh-tw/solutions/reaxys