



ELSEVIER

Reaxys[®]

Reaxys 介紹

ELSEVIER Life Science Solutions

2022年4月



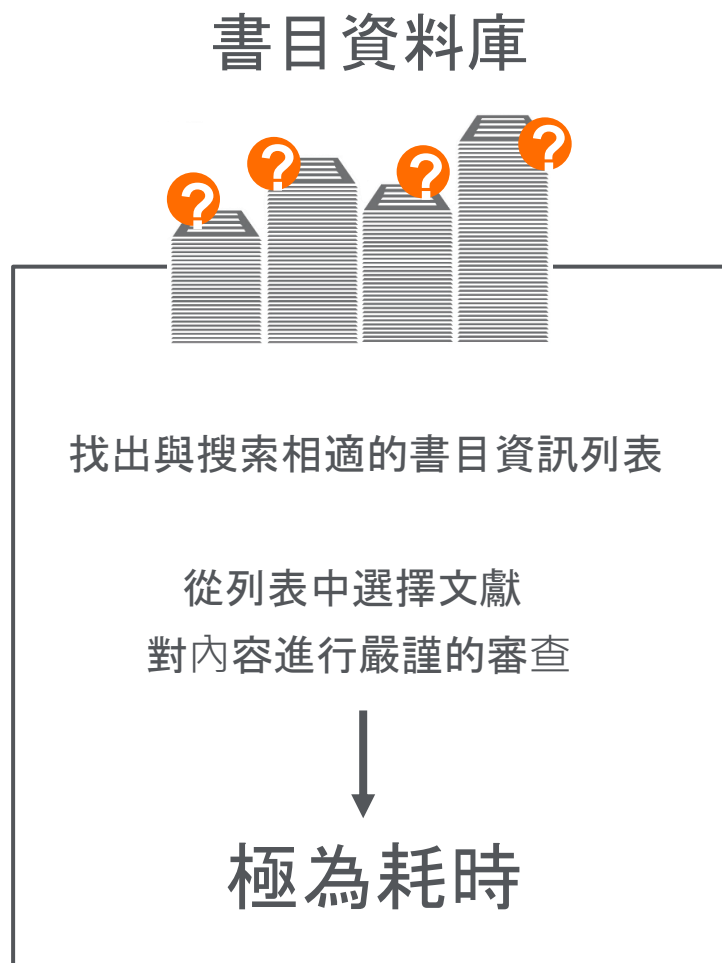
Reaxys[®] 是一個數據資料庫

從化學相關的論文和專利中透過人工提取和整理
必要的「資訊」

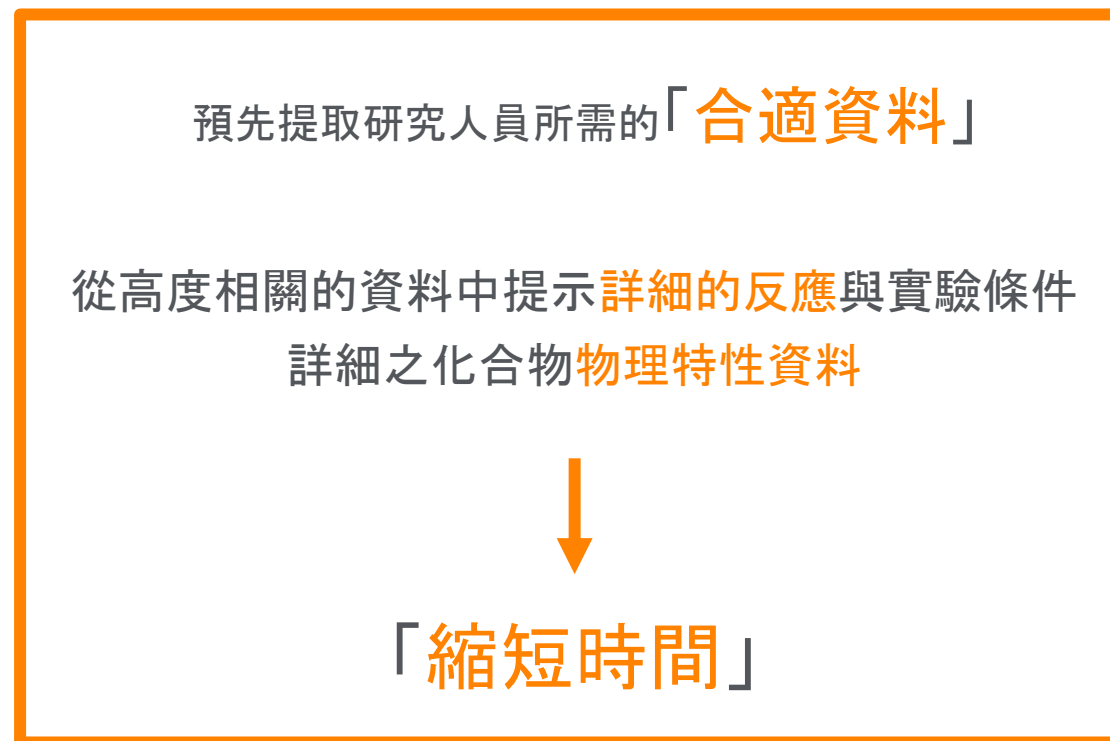


並非收集情報而是更注重於縮短資料活用的時間

Reaxys 與書目資料庫之間的差異



Reaxys[®]



Reaxys[®] 能做些什麼？

從分子設計到安全性

從化合物合成方法到考慮放大的條件

Go/No-Go決定和實驗設計

用於快速的合成計畫規劃

從大量的反應資料中綜合呈現已知的合成途徑

利用深度神經網路技術預測未知合成途徑

作為材料信息和DX推廣的數據庫

提供物理化學、材料化學開發現場有用的物理性質

可與內部資料庫整合，促進數據化轉型 (DX)

內容包含學術論文與專利

學術論文

專家從大約460個期刊標題中手動提取實驗數據

- 有機化学 1771年~
- 無機化学·有機金屬錯合物 1772年~

此外，從16,000個期刊標題中機器提取結構和其他資訊

專利

目前七個專利局手動提取，主要為有機化合物(WO,US,EP,JP,CN,KR,TW)

2021年起，覆蓋範圍將擴大到105個專利局和所有化學品分類

Reaxys 專利覆蓋面擴大的概述。

 它為新化合物的開發提供了一個重要的使用案例。**新穎性**和**競爭性調查**對於評估**專利獨占性**極為重要，並且是該項目是**否盈利**的主要決定因素之一。

現狀 + 新的覆蓋範圍

Critical search success factors

使用範例/ 實例	覆蓋範圍 (申請+批准的專利)	收錄的速度	通過搜索發現的可 能性	結果
競爭性調查 + 新穎性調查 : 增加的收錄信息包括 (標題、摘要、要求)	New: >15 times more offices! 從7個專利機構擴大到105個專利機構和170個IPC分類	7-10天至5天內	現在可以依照專利機構和專利受讓者進行篩選。	專利號和關鍵字搜索使您處於 最新研究的最前沿 。
競爭性調查 : 目標基因及蛋白質的擴展	New: x4 times more offices! 從3個專利機構擴大到12個專利機構和7個IPC分類	30-45天至5天內	統一管理之同義詞搜索可以按照目標名稱進行有效搜索。	快速全面地搜索最新專利，包括相關目標名稱， 可進行目標驗證 ：對目標有什麼了解以及誰在從事這項工作？
新穎性調查 : 擴展紀錄的化合物	New: x2 times more offices! 從7個專利機構擴大到12個專利機構和170個IPC分類	10-20天至5天內	對Reaxys中的複合搜索提供重要支援。	快速、全面地獲取最新的化合物數據，可應用於新穎性搜索：我們的化合物是否新穎或是否可申請專利？

Periodic releases

2021

2022

進行中

- 至於在手冊中記錄的資料，與以前相同。
- 關於專利著錄信息，上述擴展範圍將被納入2000年至2020年紀錄（2021年完成）。
- 關於化合物的結構信息，上述擴展範圍將從2000年追溯至2020年。（2022年完成）。

實用的反應資訊和大量的測量物理性質

反應資訊一目了然，包括反應公式、產率、反應條件和實例

論文的實驗部分和專利實例可以直接在Reaxys上閱讀。

400多種化合物資訊，包括溶解度、折射率、分配係數、紫外吸收波長等

約500項的光譜資料和超過5.5億條的數據。

全世界有436家公司提供化合物的商業資訊，包括日本的試劑公司。

以化合物和反應為主的資料結構

將資訊匯總為每個化合物一條記錄、每個反應一條記錄，無論來源是學術論文還是專利

反應搜索結果畫面

lovastatin
C₂₄H₃₆O₅ 404.547 4720754 75

Identification
Physical Data - 244
Spectra - 49
Bioactivity - 1,237
Other Data - 2,934

Physical Data - 244

- Melting Point - 6
- Density - 1
- Association (MCS) - 5
- Chromatographic Data - 6
- Circular Dichroism - 1
- Conformation - 1
- Crystal Phase - 1
- Crystal Property Description - 2
- Crystal System - 1
- Liquid/Liquid Systems (MCS) - 4
- Optical Rotatory Power - 5**

Optical Rotatory Power - 5

Type (Optical Rotatory Power)	Concentration (Optical Rotatory Power)	Solvent (Optical Rotatory Power)	Optical Rotatory Power, deg	Wavelength (Optical Rotatory Power), nm	Temperature (Optical Rotatory Power), °C	Reference
[alpha]	5 g/100ml	acetonitrile	329	589	25	Parthasarathy, Ramalingam; Sathiyabama, Mutl [Natural Product Research, 2015, vol. 29, # 24, 2286] Full Text ↗ Cited 12 times ↗ Details >
[alpha]	5.0 g/l	acetonitrile	330	589	20	Lazarova; Mindjova; Georgieva; Atanassova; Ma [Pharmazie, 1998, vol. 53, # 10, p. 727 - 728] Full Text ↗ Details > Abstract >
[alpha]	0.10675 g/100ml	acetonitrile	331.6	589	27.5	Clive; Murthy; Wee; Prasad; Da Silva; Majewski; (...) Heerze; Barrie]Journal of the American Chemical Society, 1990, vol. 112, # 8, p. 3018 - 3028] Full Text ↗ Details > Abstract >
[alpha]	0.254275 g/100ml	acetonitrile	334.67	589	27.5	Clive; Murthy; Wee; Prasad; Da Silva; Majewski; (...) Heerze; Barrie]Journal of the American Chemical Society, 1990, vol. 112, # 8, p. 3018 - 3028] Full Text ↗ Details > Abstract >

從不同的文獻中獲取豐富的測量物理性質的一站式檢索

以化合物和反應為主的資料結構

反應搜索結果畫面

DL-glycylnorvaline
C₇H₁₄N₂O₃ 174.2

Identification
Physical Data - 9
Spectra - 1
Bioactivity - 2

Substance Availability

- Commercial Substances >
- Accelrys' ACD
- CambridgeSoft ACX
- Labnetwork
- Sigma Aldrich
- eMolecules

H-Gly-DL-Nva-OH
C₇H₁₄N₂O₃ 174.2 66983

Identification
Supplier Information - 47

H-Gly-DL-Nva-OH

Identification

Supplier Information - 47

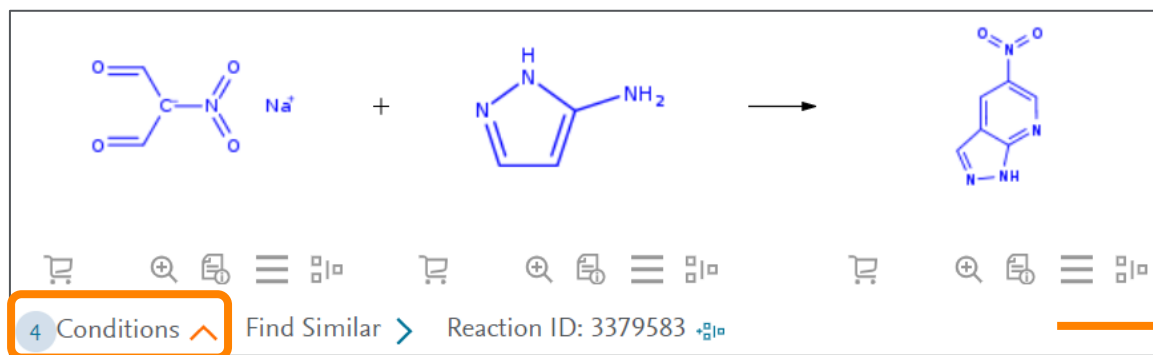
可查詢供應商、零件編號、純度、容量、價格和交貨日期。

Supplier	Product	Purity	Package size & price	Availability
1Pluschem LLC USA	GLYCYL-DL-NORVALINE 2189-27-7 1P003R9C	>97.0percent(T)	1 g 229 USD	Shipment time: 2 weeks Tier Time: not specified Last updated: 2020-06-24
AA Blocks LLC USA	2-(2-Aminoacetamido);pentanoic acid 2189-27-7	>97.0percent(T); reagent grade	1 g 252 USD	Shipment time: 1 week Tier Time: Tier 1

以化合物和反應為主的資料結構

將資訊匯總為每個化合物一條記錄、每個反應一條記錄，無論來源是學術論文還是專利

反應搜索結果畫面



列出了該反應的文獻(文章和專利)和反應條件。

In acetic acid at 90°C; Experimental Procedure ^	84%	ARRAY BIOPHARMA INC.; GENENTECH, INC.; GRADL, Stefan; LAIRD, Ellen; MORENO, David; REN, Li; WENGLOWSKY, Steven Mark WO2011/25968, 2011, A1 Location in patent: Page/Page column 49 Full Text > Details > Abstract >
7.A A suspension of 1H-pyrazol-5-amine (0.804 g, 9.48 mmol) and sodium nitromalonate monohydrate (1.56 g, 9.96 mmol) in acetic acid (12 mL) was heated to 90°C overnight. The reaction mixture was cooled to room temperature and poured into water (50 mL). The resulting solids were collected by filtration. The solids were washed with water (3 X 20 mL) and dried in vacuo to give 5-nitro-1 H-pyrazolo [3 ,4-b]pyridine (1.40 g, 84%) as a solid.		
In acetic acid at 90°C; Experimental Procedure v	84%	ARRAY BIOPHARMA INC.; GENENTECH, INC.; AHRENDT, Kateri A.; BUCKMELTER, Alexandre J.; DE MEESE, Jason; GRINA, Jonas; HANSEN, Joshua D.; (...) WEN, Zhaoyang; YOUNG, Wendy B. WO2009/111279, 2009, A1 Location in patent: Page/Page column 96 Full Text > Details > Abstract >
In water for 0.25h; Heating;	65%	Rusinov, V. L.; Petrov, A. Yu.; Chupakhin, O. N. [Chemistry of Heterocyclic Compounds, 1992, vol. 28, # 11, p. 1335 - 1339][Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii, 1992, # 11, p. 1560 - 1564] Full Text > Cited 2 times > Details > Abstract >
at 90°C;		Wenglowsky, Steve; Ren, Li; Ahrendt, Kateri A.; Laird, Ellen R.; Aliagas, Ignacio; Alicke, Bruno; Buckmelter, Alex J.; (...) Young, Wendy B.; Grina, Jonas [ACS Medicinal Chemistry Letters, 2011, vol. 2, # 5, p. 342 - 347] Full Text > Cited 51 times > Details > Abstract >

專利

原文中的實驗部分被逐字記載

專利

論文

論文

順利連結每項資料的來源

容易顯示文獻記錄中的更多資訊

前往Scopus的引用信息

Fused heterocyclic compounds bearing bridgehead nitrogen as potent HIV-1 NNRTIs.
1 Part 1: Design, synthesis and biological evaluation of novel 5,7-disubstituted pyrazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives

Cited 40 times

Tian, Ye; Du, Deping; Rai, Diwakar; Wang, Liu; Liu, Huiqing; Zhan, Peng; De Clercq, Erik; Pannecouque, Christophe; Liu, Xinyong [Bioorganic and Medicinal Chemistry, 2014, vol. 22, # 7, p. 2052-2059]

前往Scopus的作者信息

Abstract Full Text [↗](#)

Abstract hit: {...the tested compounds displayed excellent activity against wild-type HIV-1 with a wide range...}

只需按照論文連結的索引就可以確定內容。

Index Terms

Author keyword: Activity assay, Heterocycle, HIV-1, Molecular modeling, NNRTIs, Pyrazolo[1,5-a]pyrimidine, RT, Synthesis
EMTREE drug term: 4 [5 (4 bromophenylamino)pyrazolo[1,5 a]pyrimidin 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [5 (4 chlorophenylamino)pyrazolo[1,5 a]pyrimidin 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [5 (4 cyanophenylamino)pyrazolo[1,5 a]py 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [5 (4 fluorophenylamino)pyrazolo[1,5 a]pyrimidin 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [5 (4 methoxyphenylamino)pyrazolo[1,5 a]pyrimidin 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [5 (4 methylphenylamino)pyrazolo[1,5 a] 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [5 (4 nitrophenylamino)pyrazolo[1,5 a]pyrimidin 7yloxy] 3,5 dimethylbenzonitrile, 4 [7 (

從文獻中摘錄的化合物清單。

從文獻中摘錄的反應清單。

方便用戶的兩個入口

快速搜尋Quick Search 與查詢生成器Query Builder

Quick Search 為簡單的文本或結構式檢索

當您想在擴大搜索結果後縮小搜索結果時很方便

高度的自然語言處理技術允許你從文本搜索中獲取文獻和反應數據

Query Builder 能夠簡便地進行多項條件的交叉搜索

在搜索前縮小必要條件，可以顯示雜訊較少的搜索結果

獨特的高效資訊收集有助於節省時間和提高研究活動的效率

Quick Search快速搜索將使用者需要的資訊進行優先排序

Quick search Query builder Results Synthesis planner History Alerts

Search for esterification of benzoic acid

Search Reaxys

esterification of benzoic acid

檢索範例: esterification of benzoic acid



識別自然語言


除了所需的結果外, 還建議額外的相關選項

被自然語言處理識別為“搜索苯甲酸的酯化”。




86

Reactions

Reaction Query :  as drawn AND Condition : esterification

Preview Results 

View Results 



Edit in Query Builder  Create Alert 

上述搜索的相關選項包括:
找出了三種文獻的文本



1,866

Documents

Titles, Abstracts, Keywords : "esterification", "benzoic acid"
Edit in Query Builder  Create Alert 



Preview Results 

View Results 



95,881

Documents

Titles, Abstracts, Keywords : "esterification"
Edit in Query Builder  Create Alert 



Preview Results 

View Results 



94,257

Documents

Titles, Abstracts, Keywords : "benzoic acid"
Edit in Query Builder  Create Alert 

Preview Results 

View Results 

Query Builder 促進了複雜的交叉搜索

The screenshot displays the Reaxys Query Builder interface. At the top, there are navigation tabs for 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', 'History', and 'Alerts'. Below this, there are buttons for 'Reactions', 'Substances', and 'Documents'. A search bar contains the text 'Search in:'. Below the search bar, there are icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete all'. The main area shows a query builder with three criteria: 'Structure', 'UV/VIS Spectroscopy', and 'Use'. The 'UV/VIS Spectroscopy' criterion is expanded, showing sub-criteria: 'Description (UV/VIS Spectroscopy)', 'Solvent (UV/VIS Spectroscopy)', '350-410', and 'Ext./Abs. Coefficient, l·mol-1cm-1'. The 'Use' criterion is also expanded, showing sub-criteria: 'Laboratory Use and Handling' and '"hole transport*"'. On the right side, there is a sidebar with a 'Fields' tab, showing a list of search fields: 'Topics and Keywords', 'Identification', 'Physical Properties', 'Spectra', 'Pharmacological Data', 'Ecotoxicology', 'Other', 'Reactions', and 'Bibliography'. The sidebar also shows 'Reaxys' and 'PubChem' as data sources.

選擇 "反應"、"物質" 和 "文獻搜索" 按鈕進行搜索。

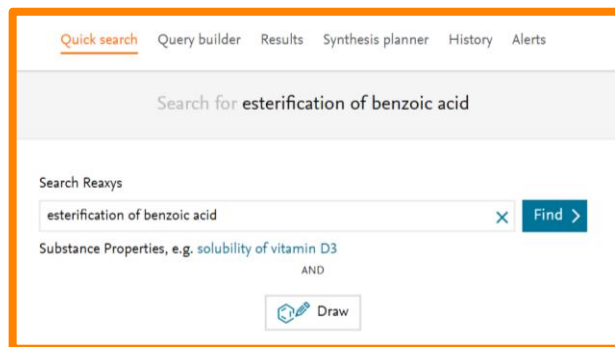
只需點擊一下，就可以添加多個屬性、結構和關鍵字的搜索欄位

使用布林邏輯運算子進行

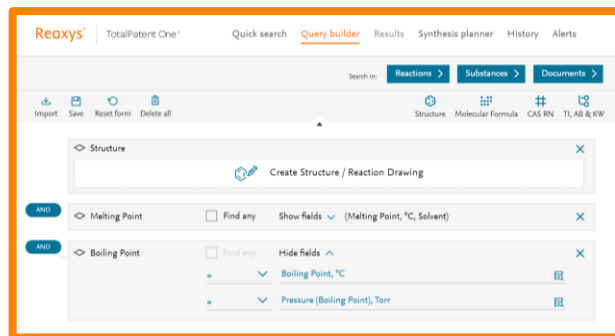
可以輕鬆地組裝查詢結果，並對其進行乘法搜索。

Reaxys[®] 現在，你可以一站式獲得所有你需要的相關資訊。

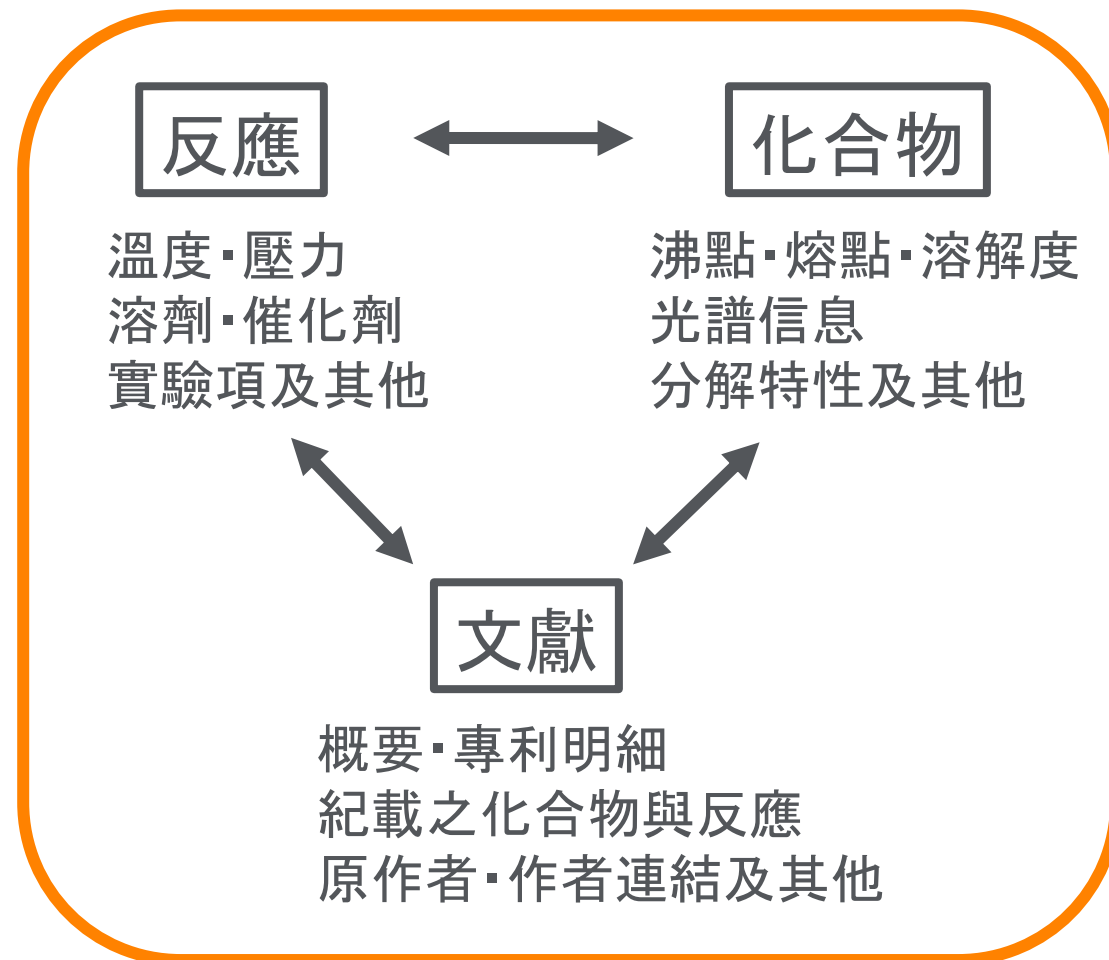
Quick Search



Query Builder



查詢





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>

