新版 Reaxys 化學資料庫

收錄內容更多、操作更直覺

www.reaxys.com
new.reaxys.com

Elsevier 生命科學解決方案經理 梁成芝

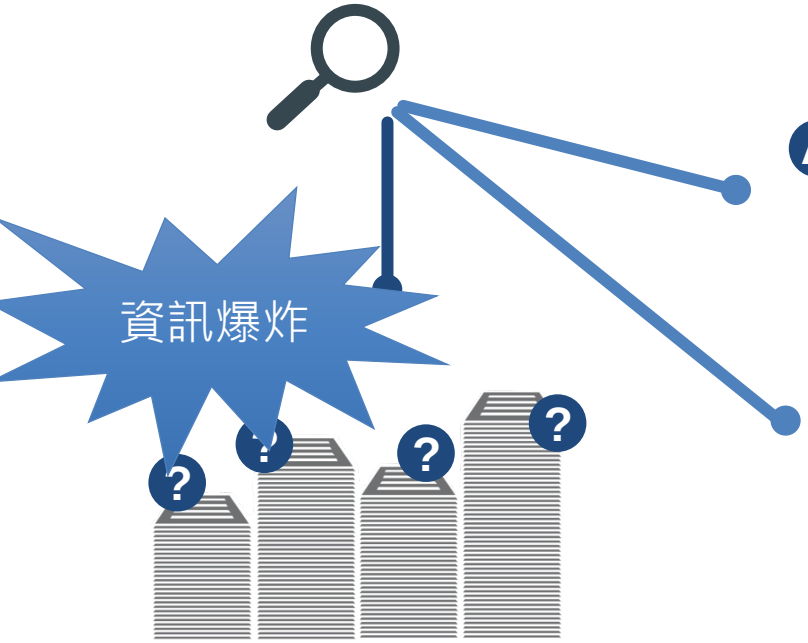
2017

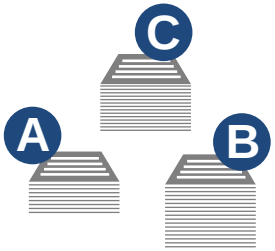
Reaxys 化學資料庫如何開啟?

- **Reaxys 化學資料庫**
  - IP 開放，免帳號密碼
  - www.reaxys.com
  - 新介面 https://new.reaxys.com

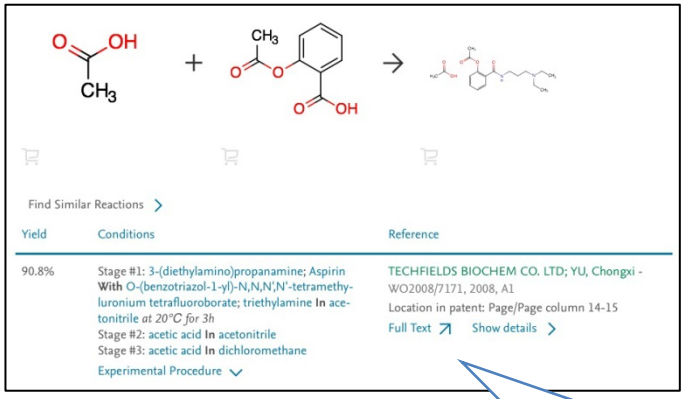
  - 可使用 proxy 或 VPN 遠端連線或加購遠端連線帳號

Elsevier R&D Solution 致力於更快找到答案





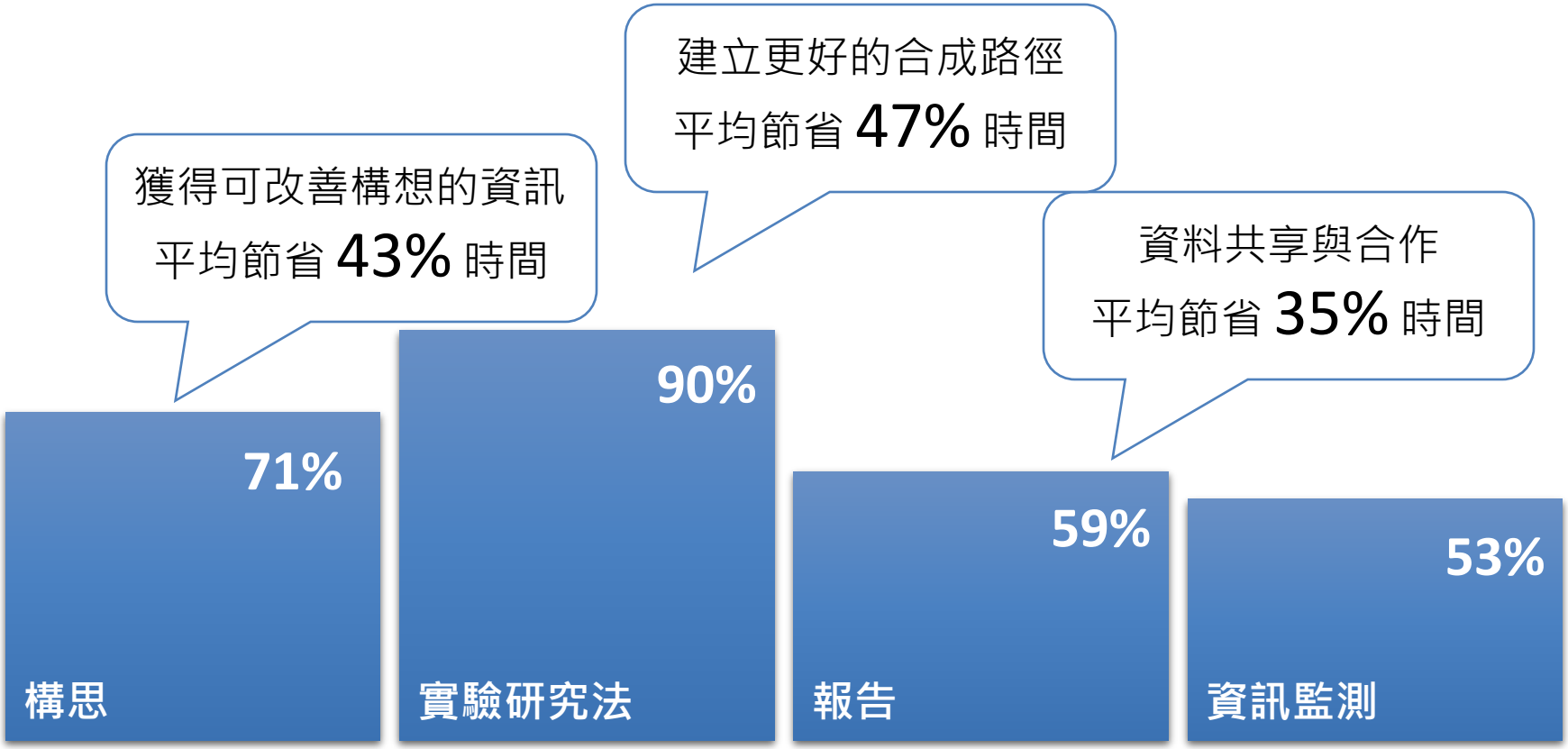
更系統性的
分類篩選文獻



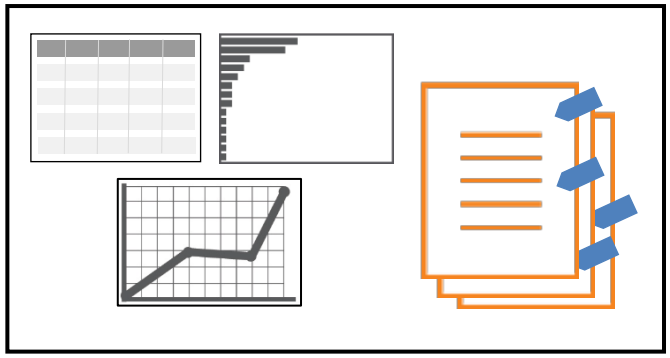
當其他資料庫的目標是提供更多
與關鍵字相關的**文獻列表**

直接摘錄重要資訊

Reaxys 可有效提升研究效率，平均省下 35 - 47% 時間

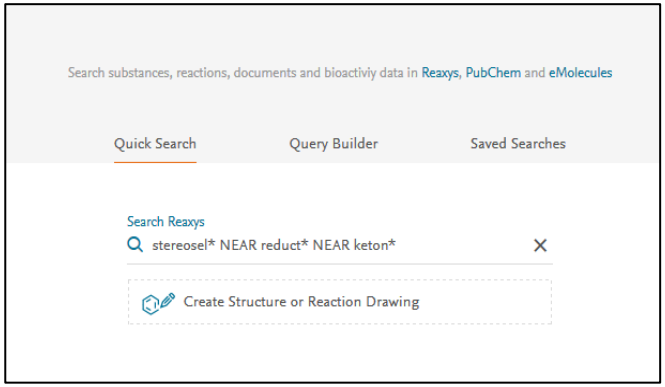


新版 Reaxys 三大變化



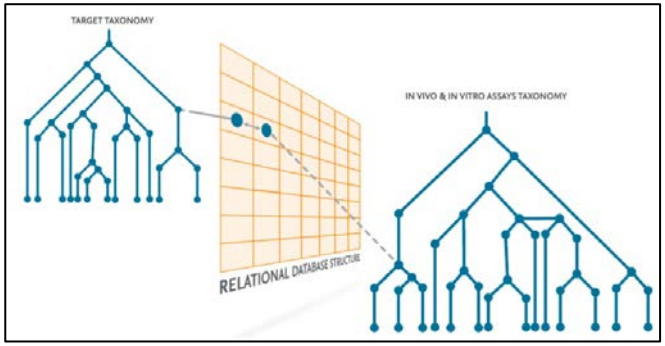
擴充收錄內容

- 16,000種期刊與主要專利局
- 5億筆實驗數據摘錄
- 281本期刊及專利**化學反應**全文材料方法摘錄



使用者介面

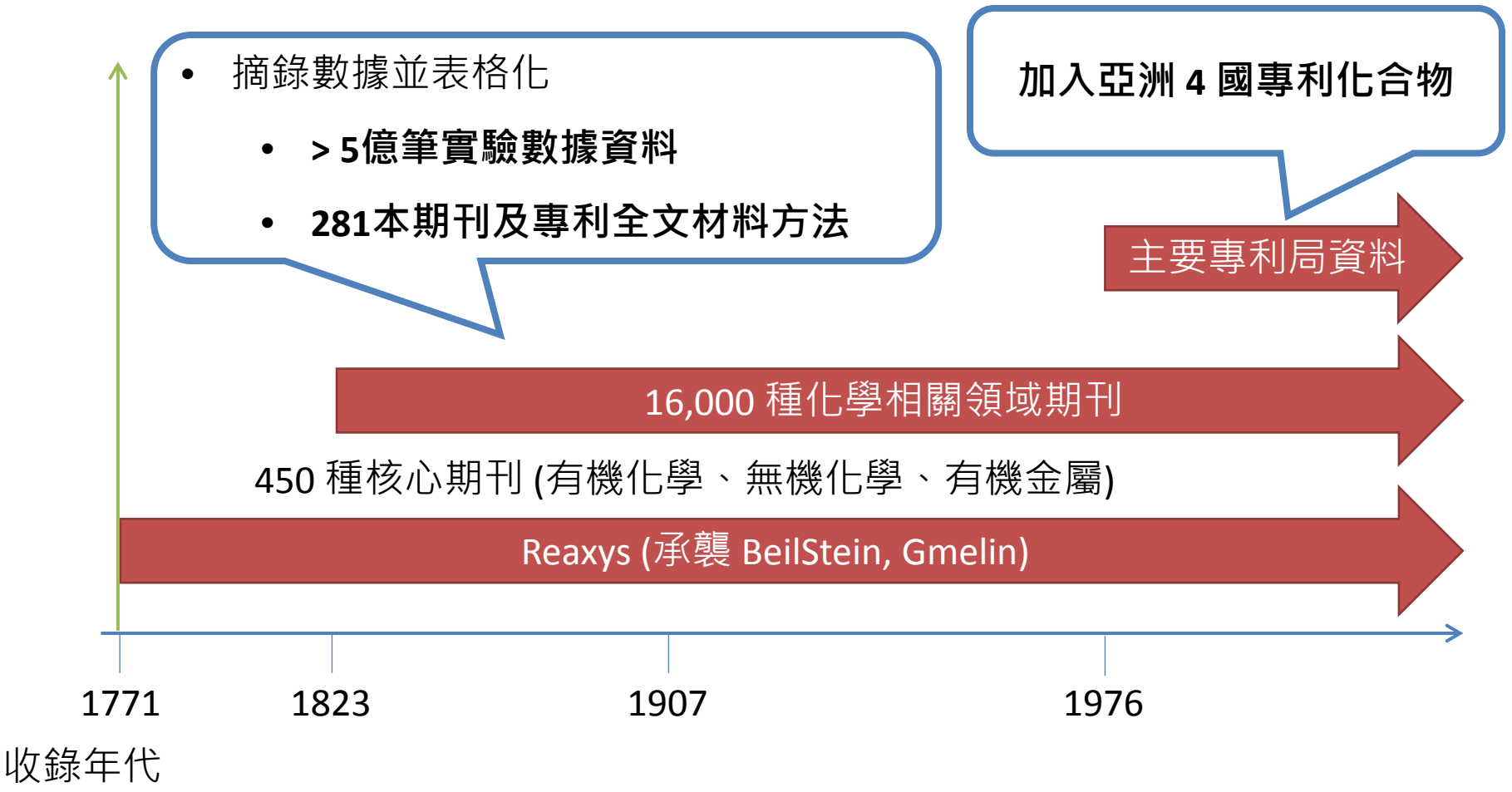
依據實際使用頻率設計
常用功能一目了然



自動索引技術與資料庫架構

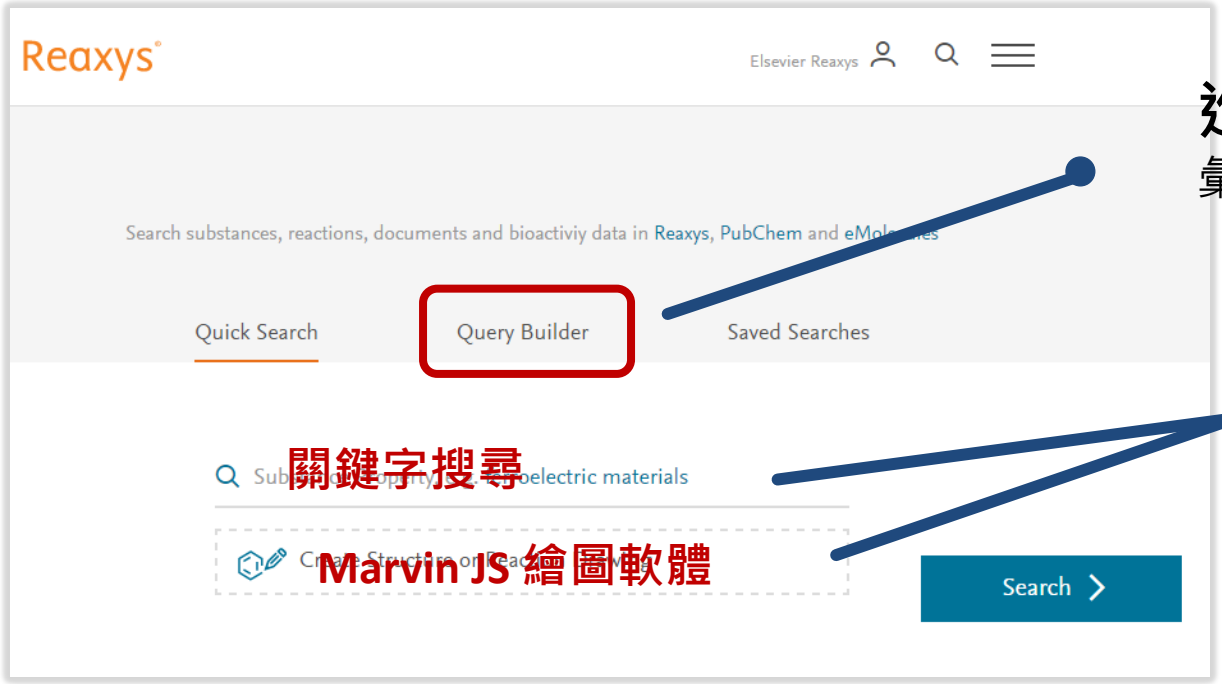
- 先進的全文自動索引技術
- 多元搜尋工具，如結構、實驗數值....更多
- 表格化整理與超連結串連

Reaxys 收錄內容


• 摘錄數據並表格化
• > 5億筆實驗數據資料
• 281本期刊及專利全文材料方法
加入亞洲 4 國專利化合物
主要專利局資料
16,000 種化學相關領域期刊
450 種核心期刊 (有機化學、無機化學、有機金屬)
Reaxys (承襲 BeilStein, Gmelin)
1771
1823
1907
1976
收錄年代

使用者介面

依據實際使用頻率設計，常用功能一目了然



進階搜尋

彙整 > 400 種搜尋欄位

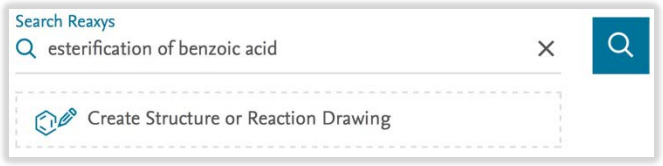
> 95% 使用者

最常使用

關鍵字 + 結構搜尋

智慧辨識與預覽功能

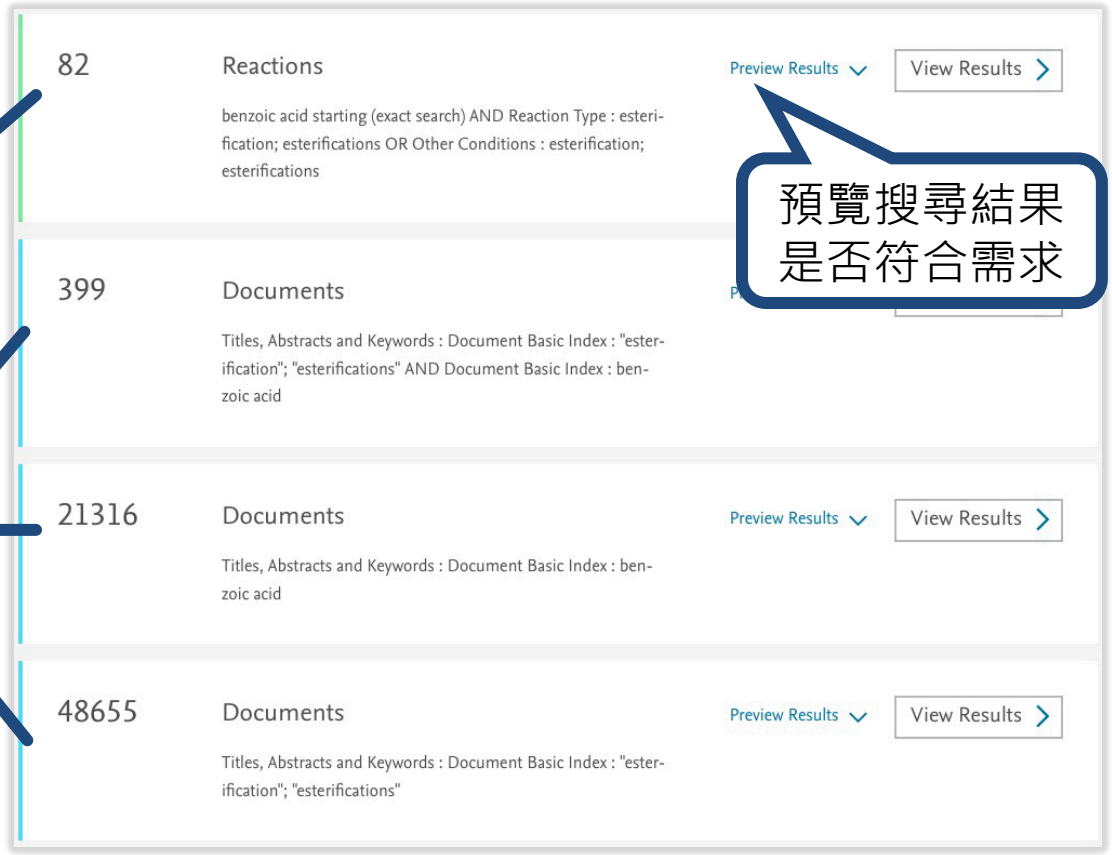
自動辨識關鍵字，推薦相關結果，供您預覽及挑選



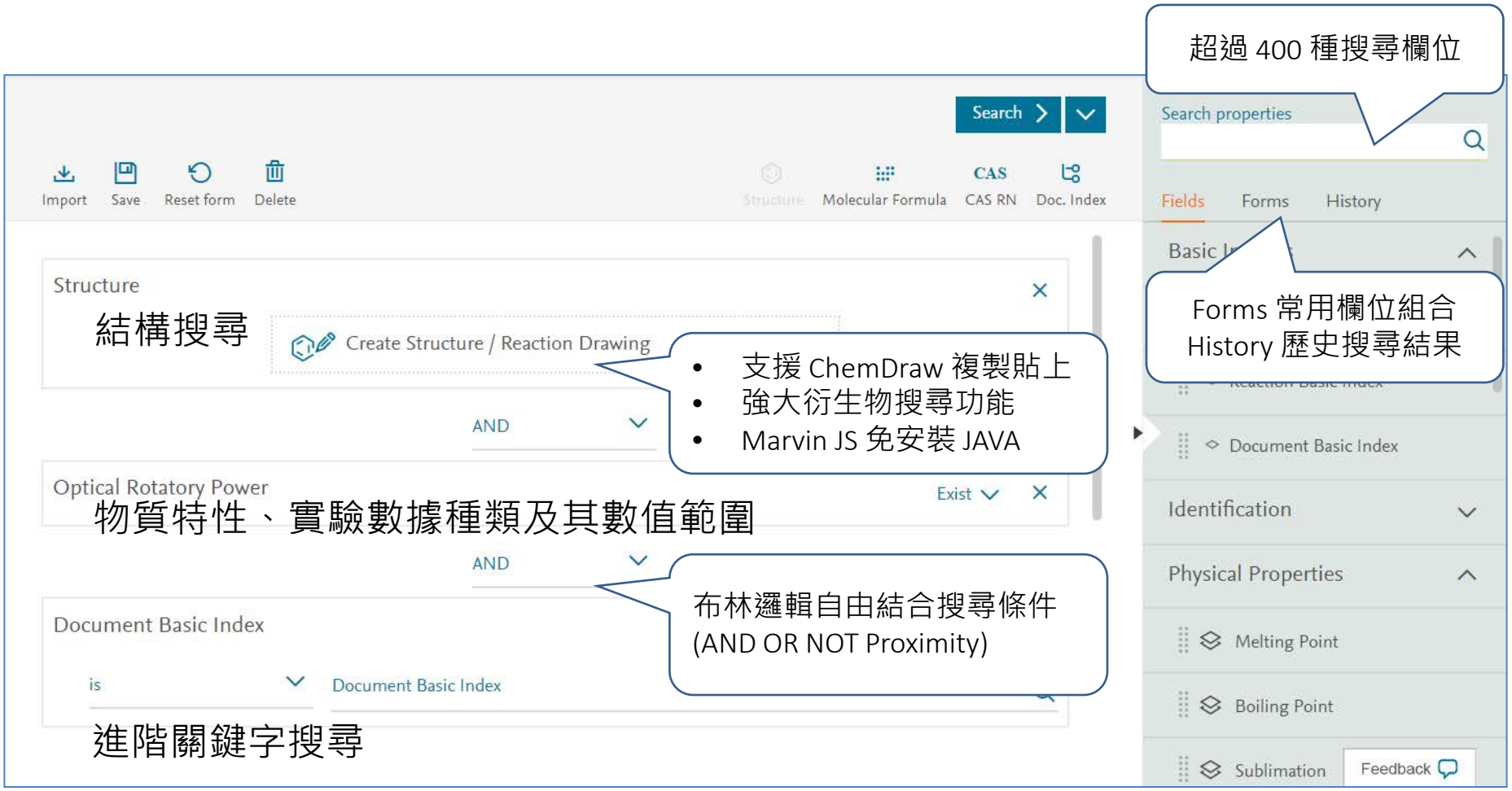
關鍵字搜尋
支援 AND OR NOT * 等指令

自動辨識提供
化學反應搜尋結果

自動推薦其他相關結果

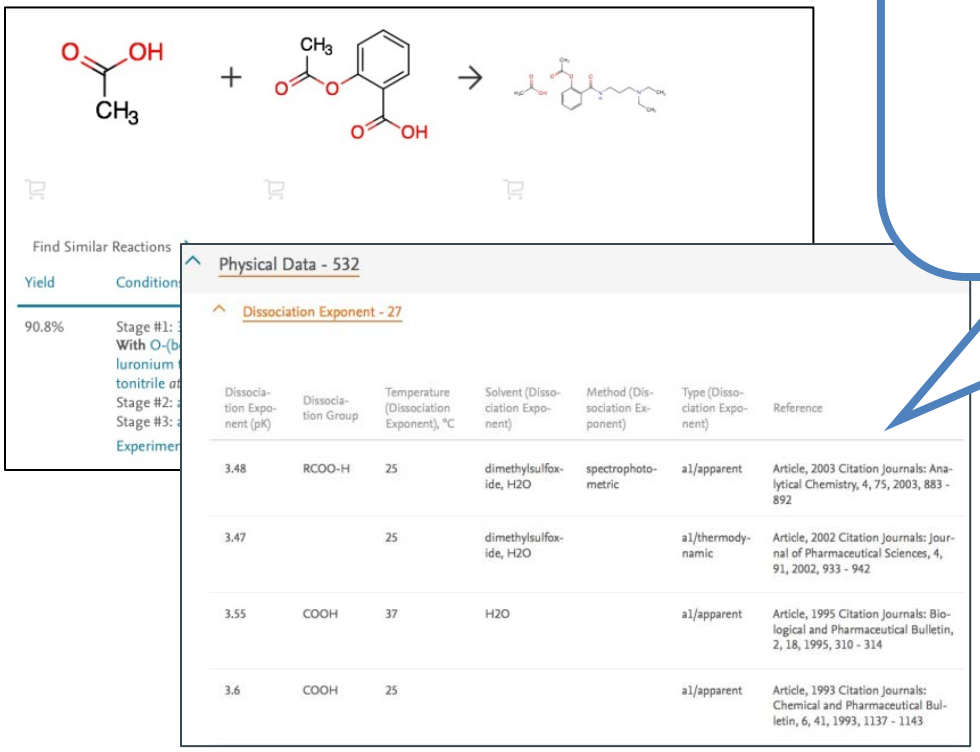


多元搜尋工具 – Query Builder



資料表格化

直接比較數據資料，節省全文閱讀的時間與經費

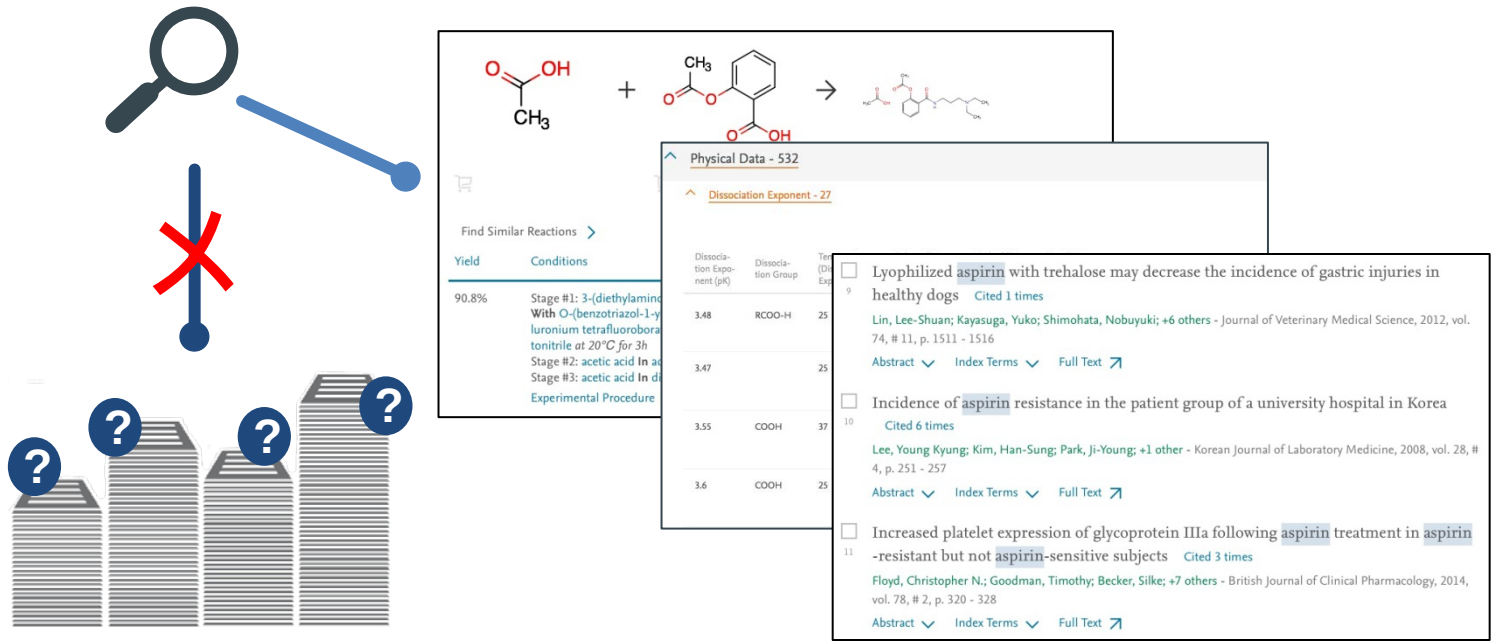


- 表格中的文字皆可篩選
- 沒有購買全文也可以獲得
  - 5 億筆實驗數據資料
  - 281 種期刊及專利的合成材料方法

450 → 12,000 本期刊

開始使用 Reaxys

- ✓ 找到**答案**而非堆積如山的待唸文獻
- ✓ 摘錄更多數據資料、合成方法
- ✓ 搜尋方法更多元彈性



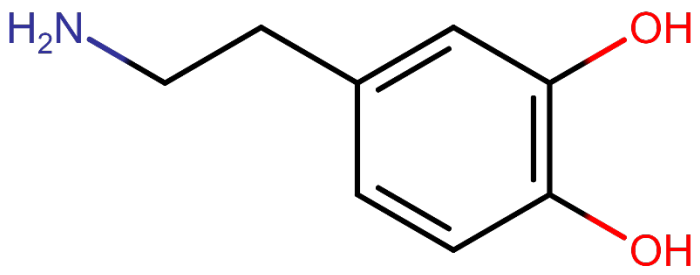
Reaxys 搜尋實例與技巧

Presented By

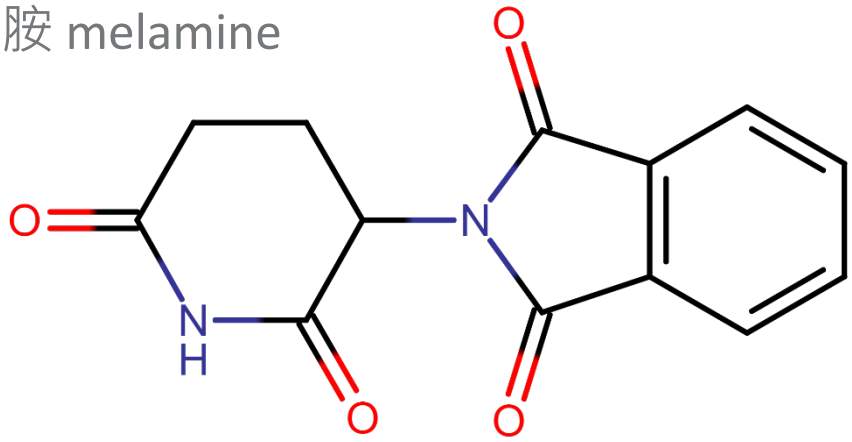
Date

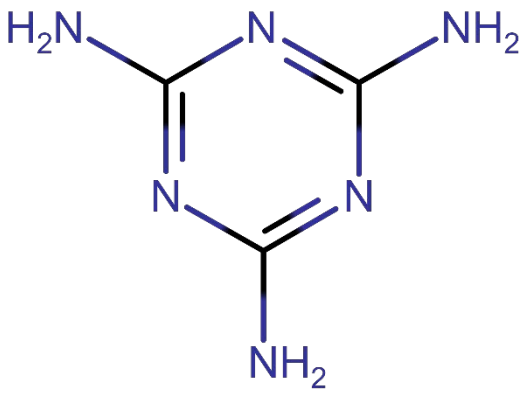
結構繪製與搜尋技巧

- 多巴胺 dopamine



- 其他範例
  - 沙利竇邁 thalidomide
  - 三聚氰胺 melamine





關鍵字搜尋化合物 & 實驗數據

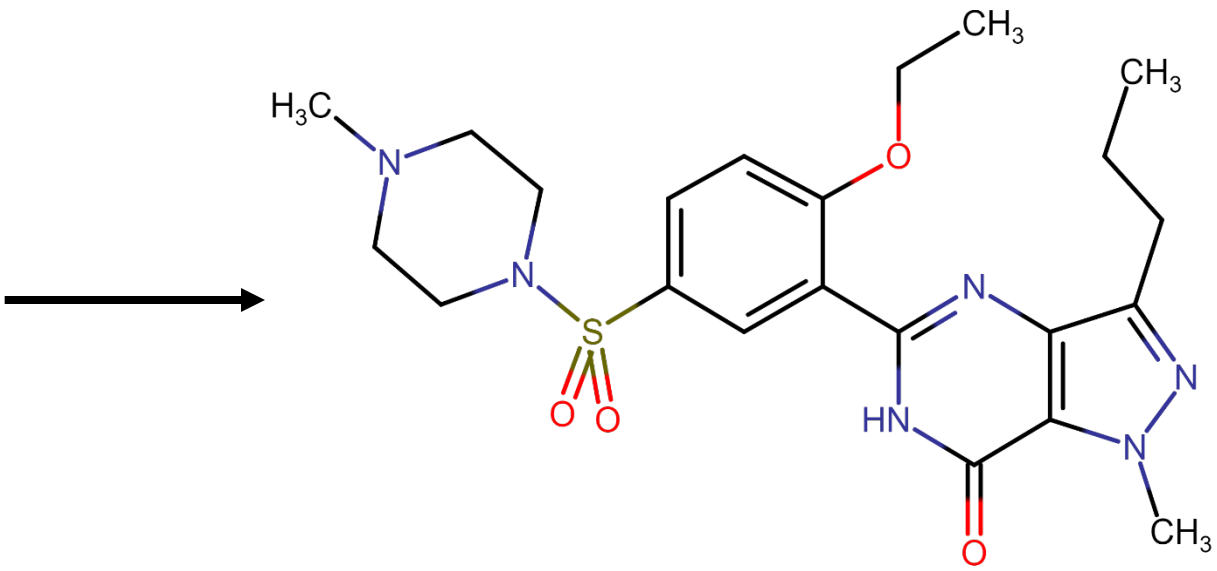
- 神經傳導物質 多巴胺 Dopamine

- 其他範例
  - Tamiflu 克流感
  - Melamine 三聚氰胺

  - Melting point 熔點
  - Boiling point 沸點
  - HPLC 液相層析數據

化學反應搜尋

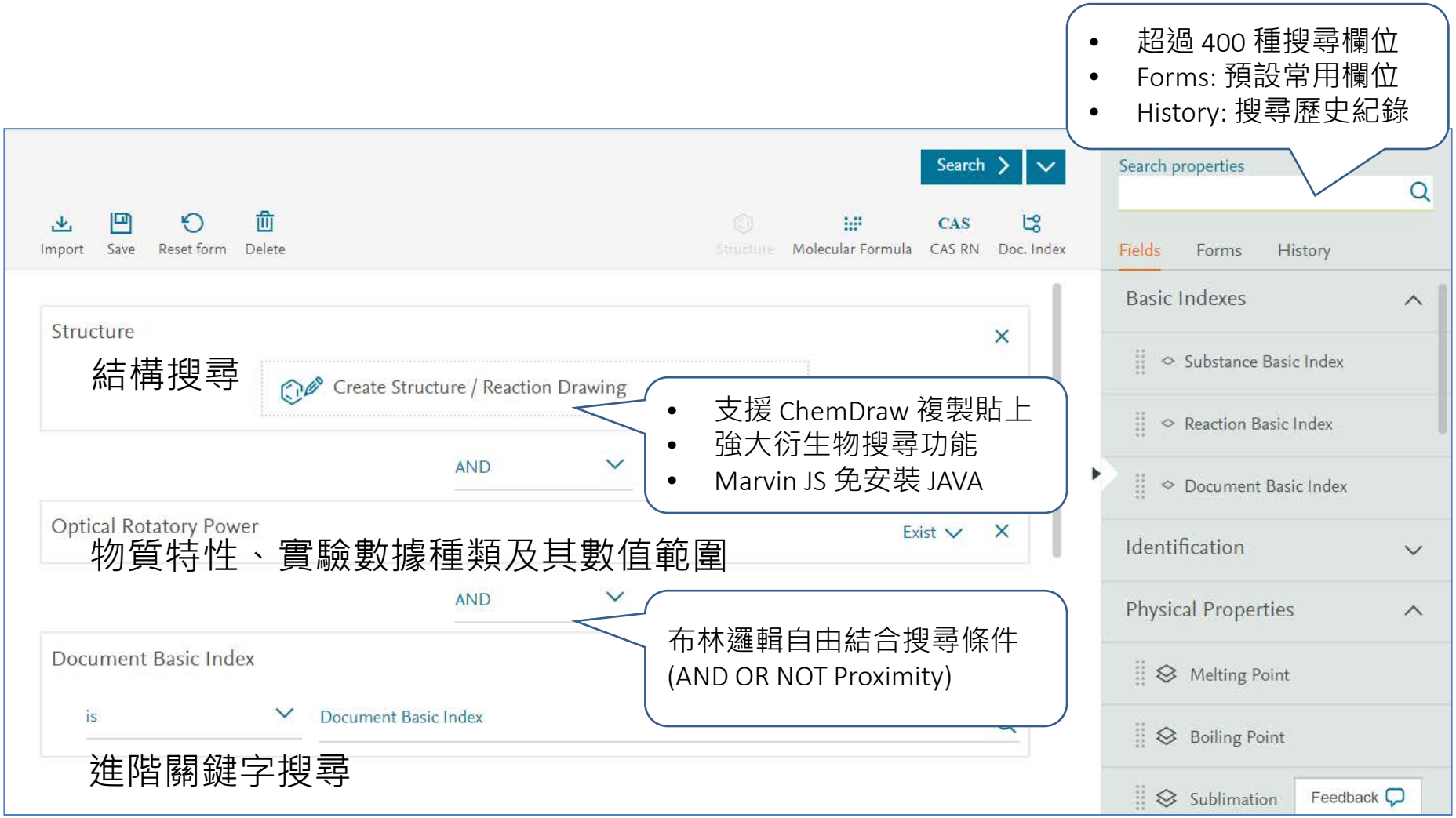
- 多巴胺合成 **dopamine synthesis**
- 其他範例
  - 苯佐卡因合成 Benzocaine Synthesis



關鍵字搜尋

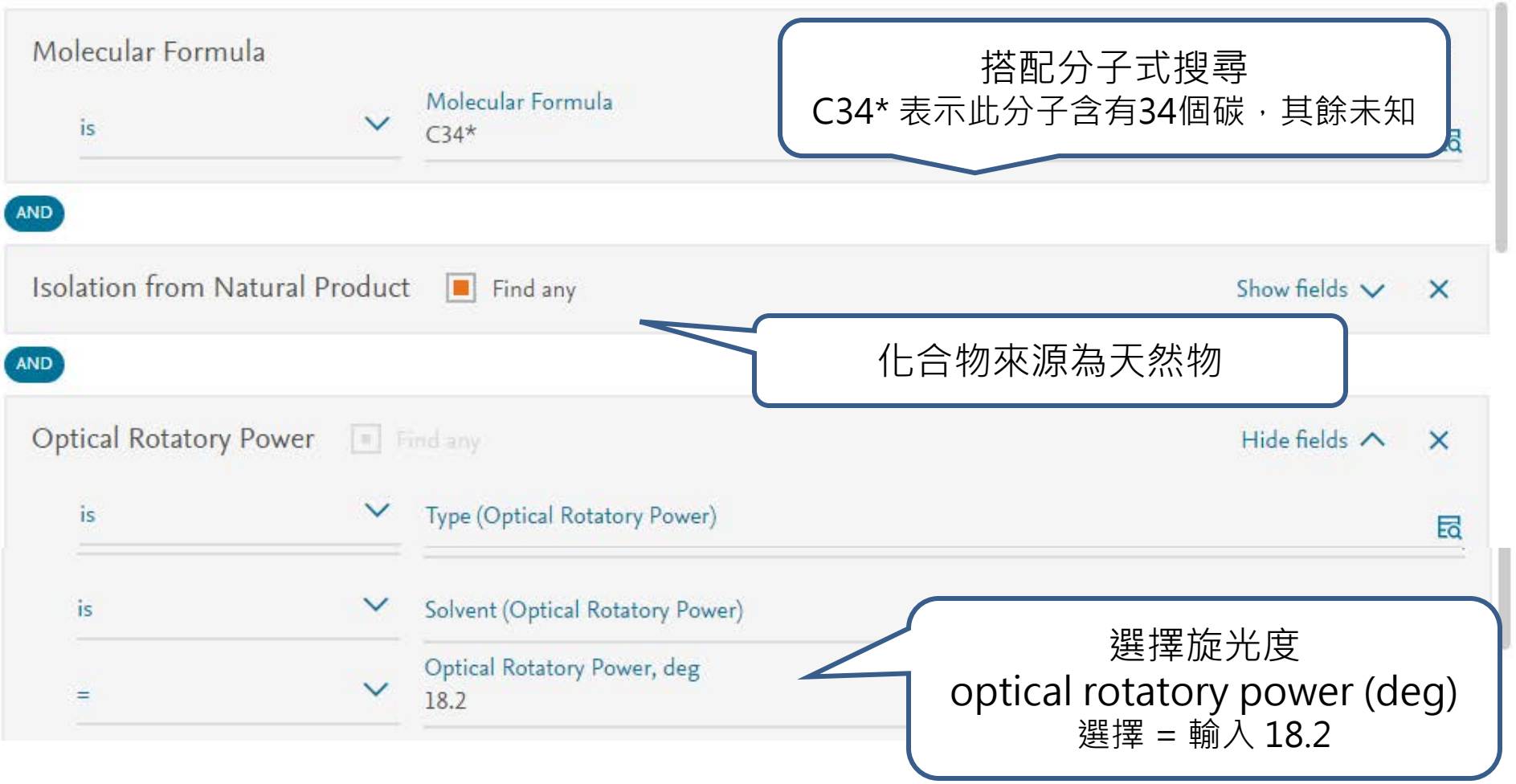
- **化合物名稱、分子式**
  - 多巴胺 Dopamine, 三聚氰胺 Melamine
- **化學反應**
  - Esterification, 合成 synthesis, 製備 preparation
  - 起始物 to 產物
- **實驗數據或物化特性名稱**
  - 物化特性 melting point, boiling point, solubility, log POW
  - 光譜 HPLC, NMR, IR
- **其他關鍵字**
  - 藥物劑型 Drug formulation
  - 掌性異構物分離 Chiral separations

多元搜尋工具 – Query Builder



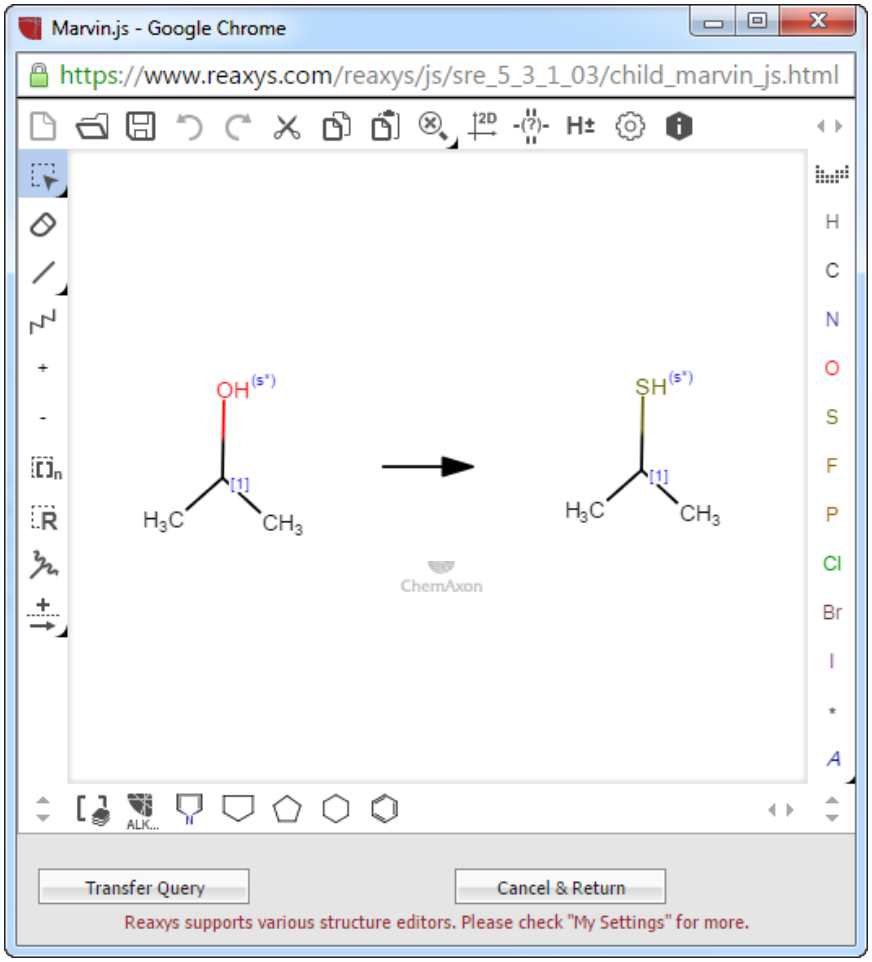
Query Builder 進階搜尋

搜尋包含34個碳，旋光度=18.2的所有化合物



繪圖軟體 – Marvin JS

Reaxys 支援新版 Marvin JS 種繪圖軟體

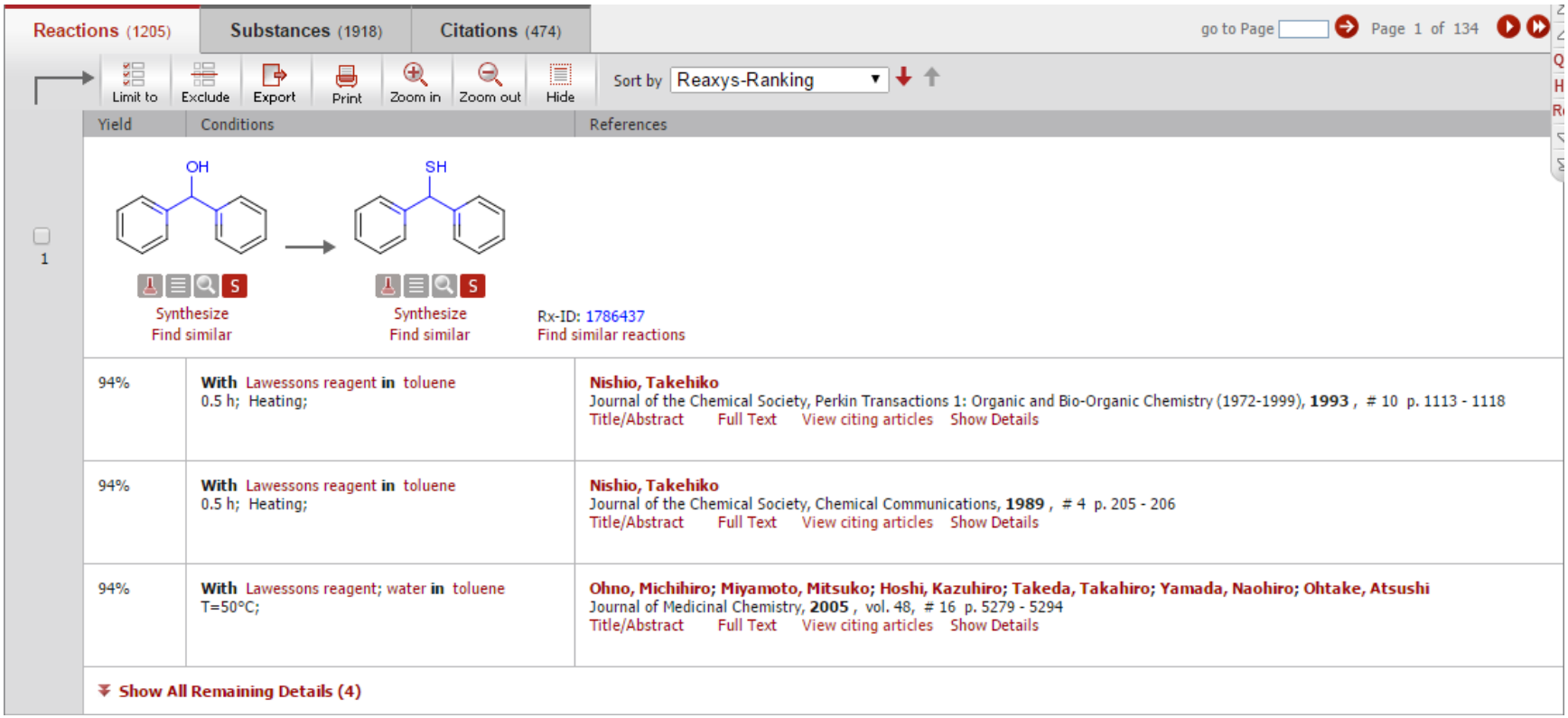


- **無須安裝 JAVA**
- **可從 ChemDraw 複製貼上**
- **衍生物搜尋功能**
  - 限定特定位置的鍵結、原子、或官能基種類，並具備多種彈性選項
  - R-group 及 R-logic 功能
  - Substitution 限定特定原子是否接上官能基或接上鍵結的數量
  - Position variation bond 限定指定鍵結或官能基可能連接的多個位置
- **繪製完畢的結構可存成透明背景圖檔，並可調整檔案解析度**

*更多Marvin JS 技巧請參考 Facebook 粉絲團
https://www.facebook.com/ReaxysClub

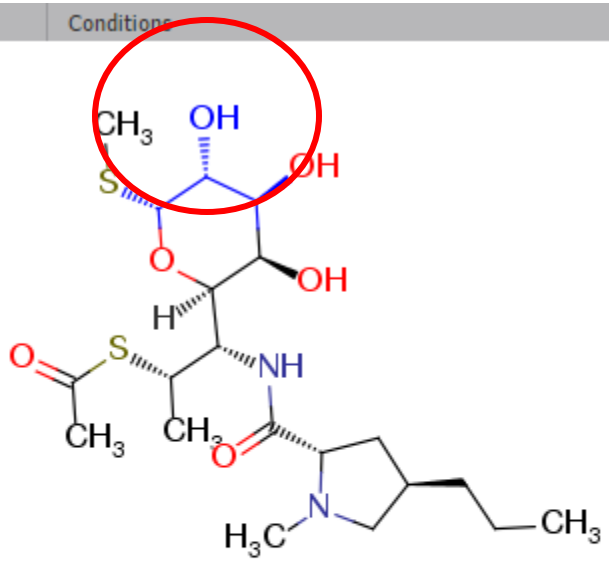
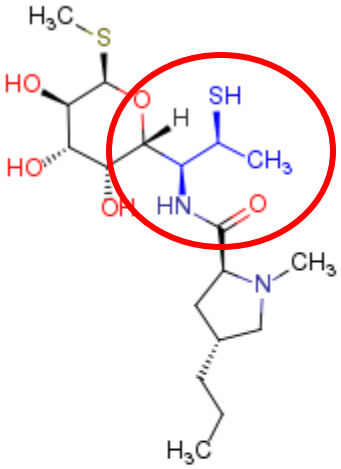
Reaction 搜尋結果

找到 1205 筆反應

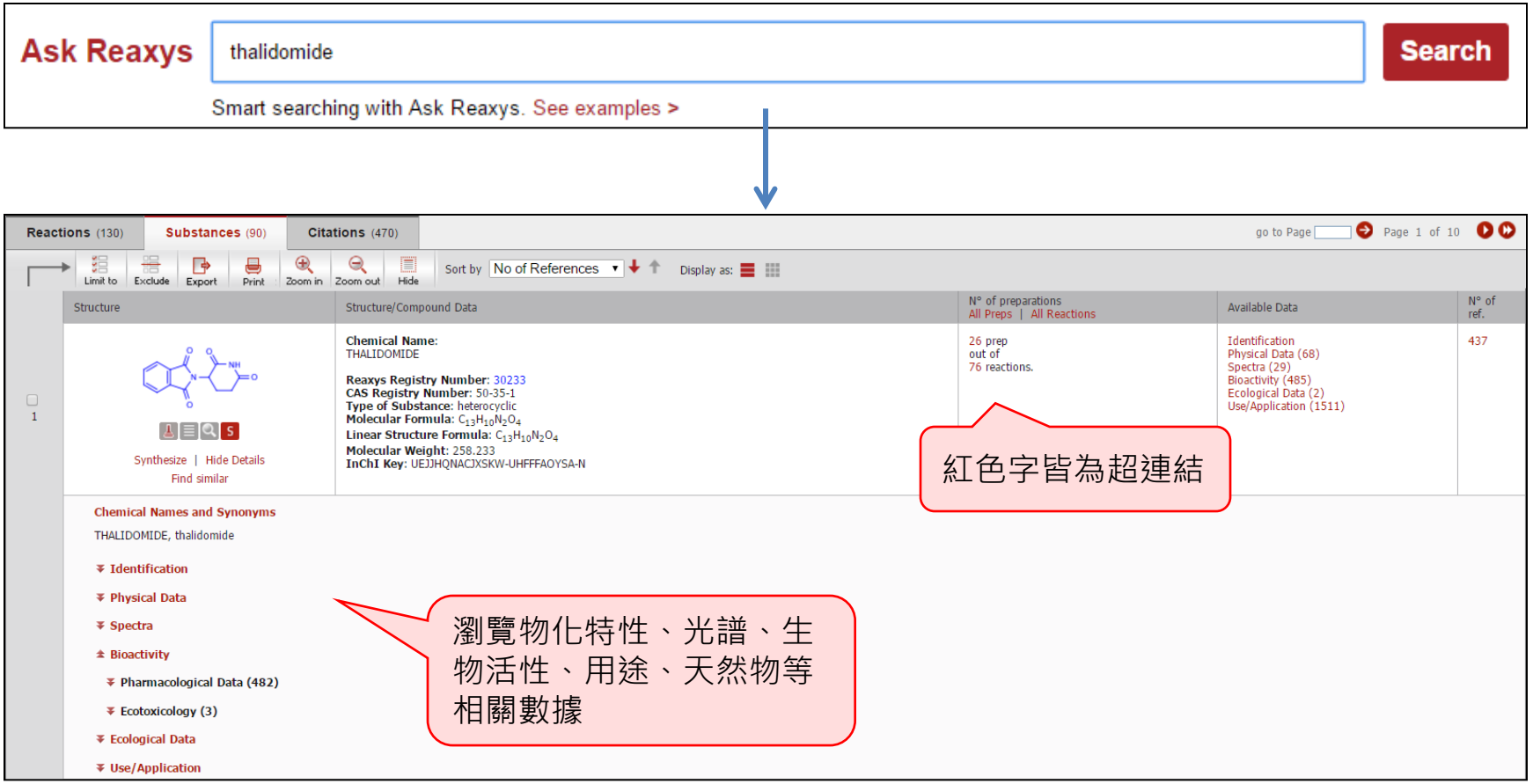


若不使用 atom mapping

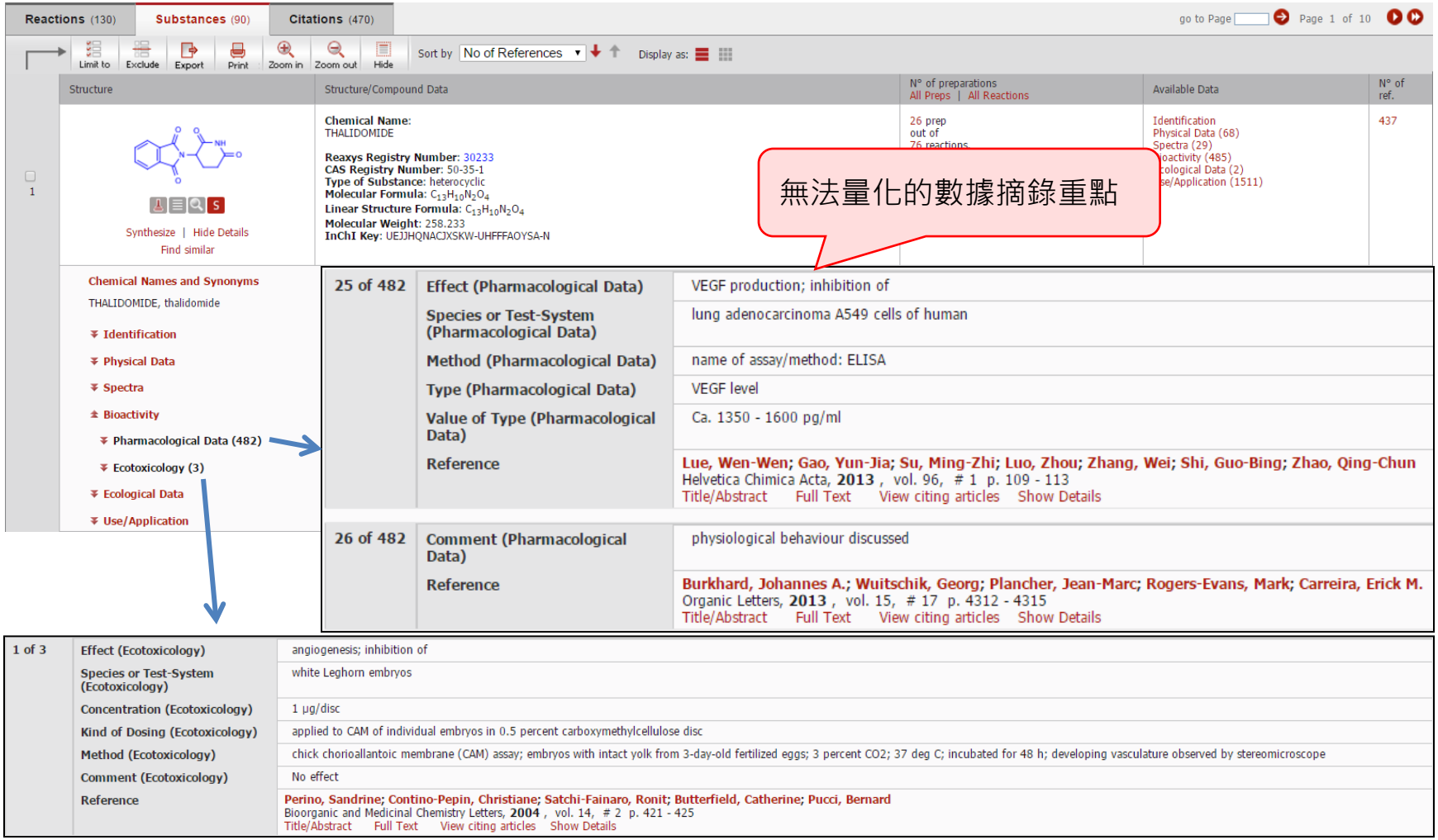
找到 3158 個反應，但官能基的位置可能不同

Yield	Conditions	References
	 Synthesize Find similar	 Synthesize Find similar Rx-ID: 27887377 Find similar reactions
94%	**With** methanol; sodium methylate T=20°C; 0.333333 h; Show Experimental Procedure	**Meiji Seika Kaisha, Ltd.** **Patent:** EP1970377 A1, **2008** ; **Location in patent:** Page/Page column 48 ; Title/Abstract Full Text Show Details

快速搜尋 – Ask Reaxys

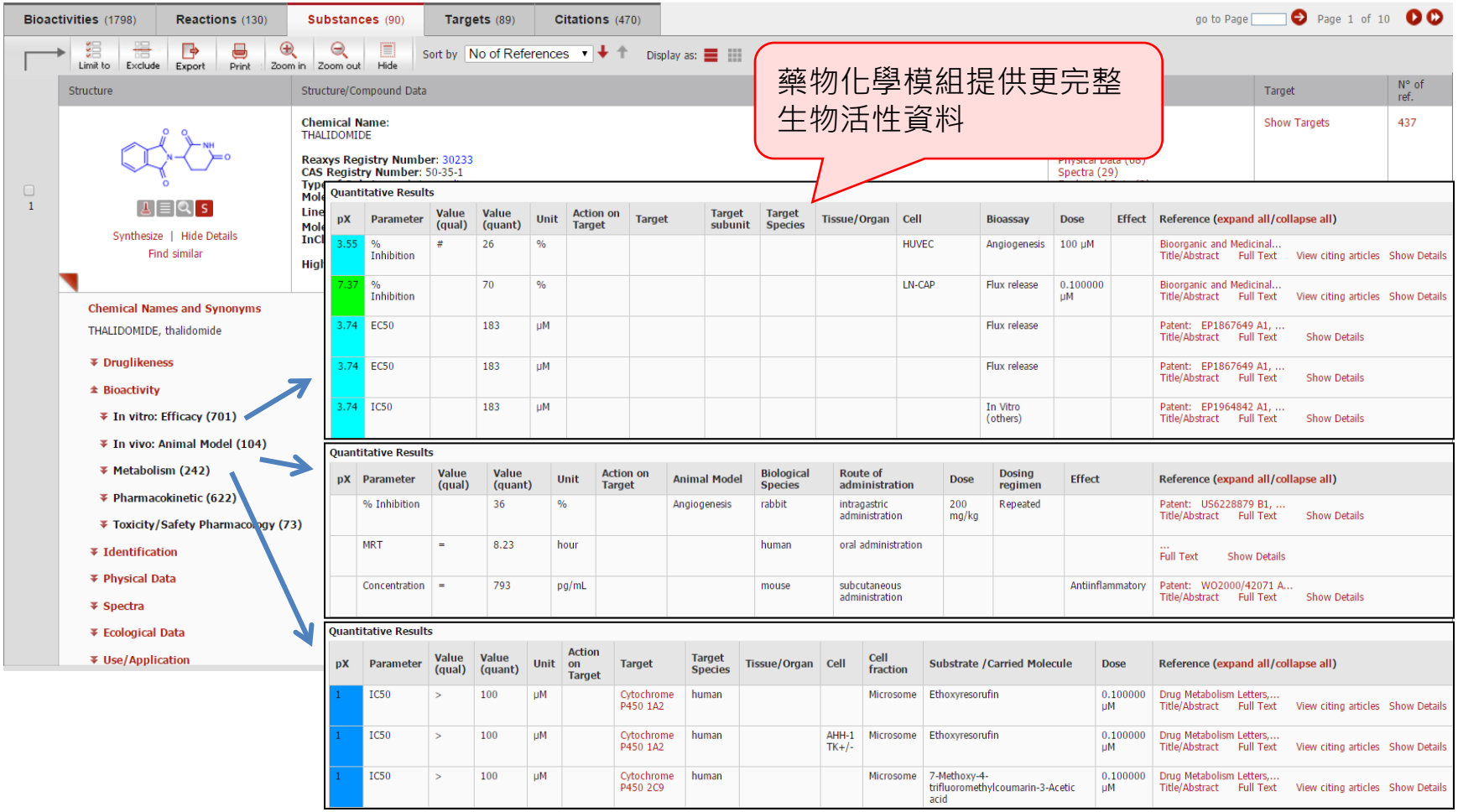


Bioactivity (Reaxys only)



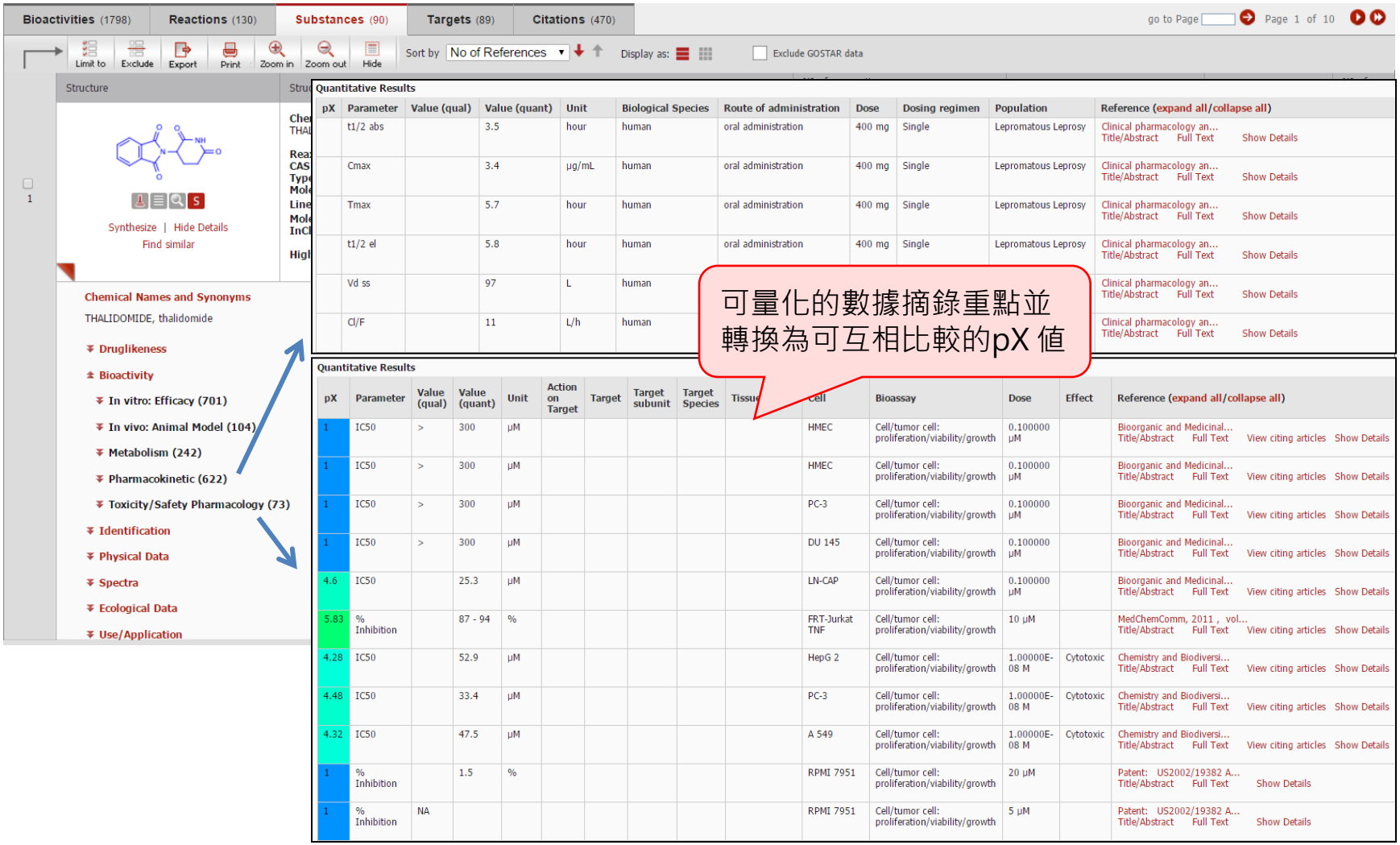
Bioactivity (RMC 藥物化學資料庫)

In Vitro: Efficacy、In Vivo: Animal Model、Metabolism



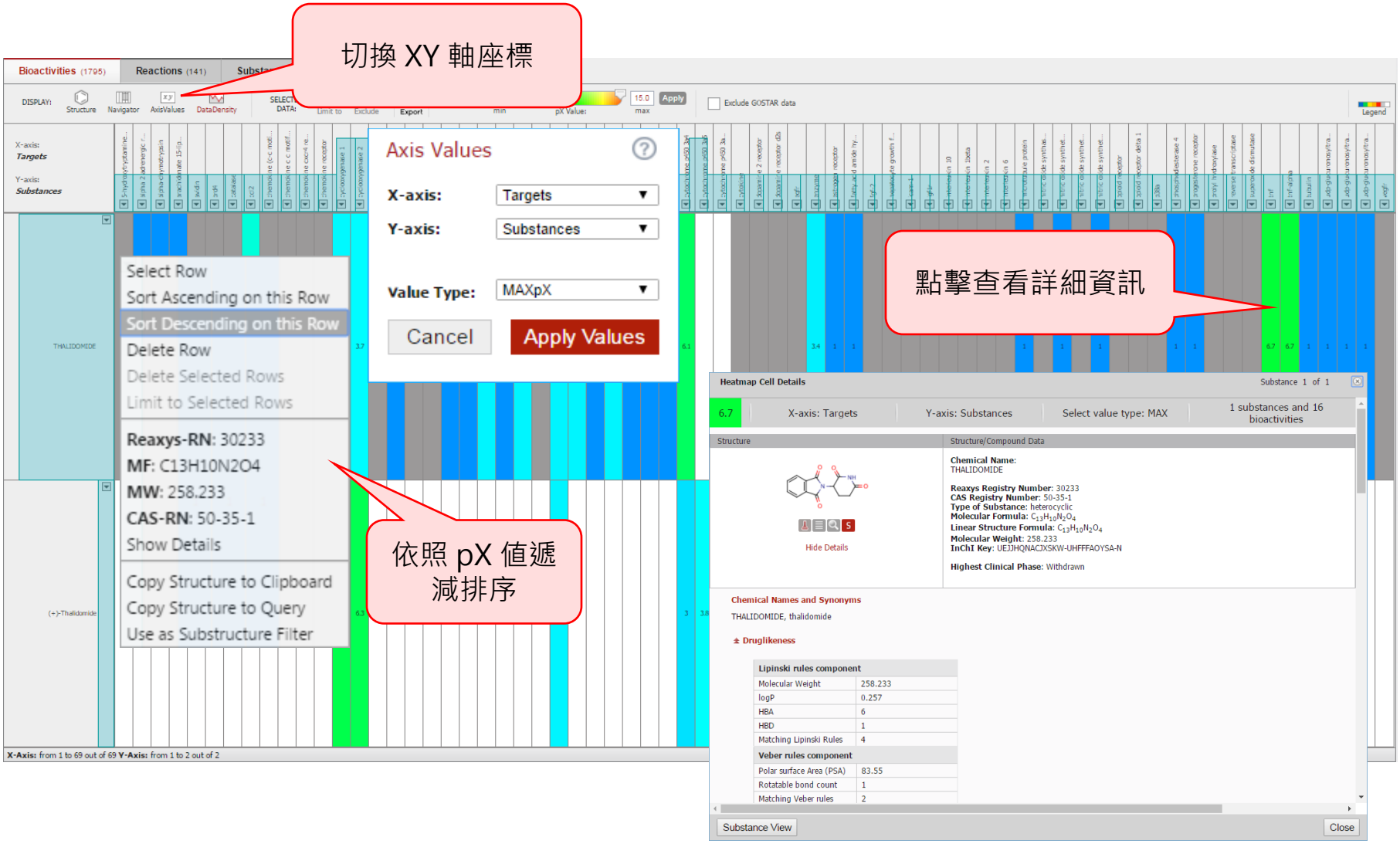
Bioactivity (RMC 藥物化學資料庫)

Pharmacokinetic、Toxicity/Safety Pharmacology



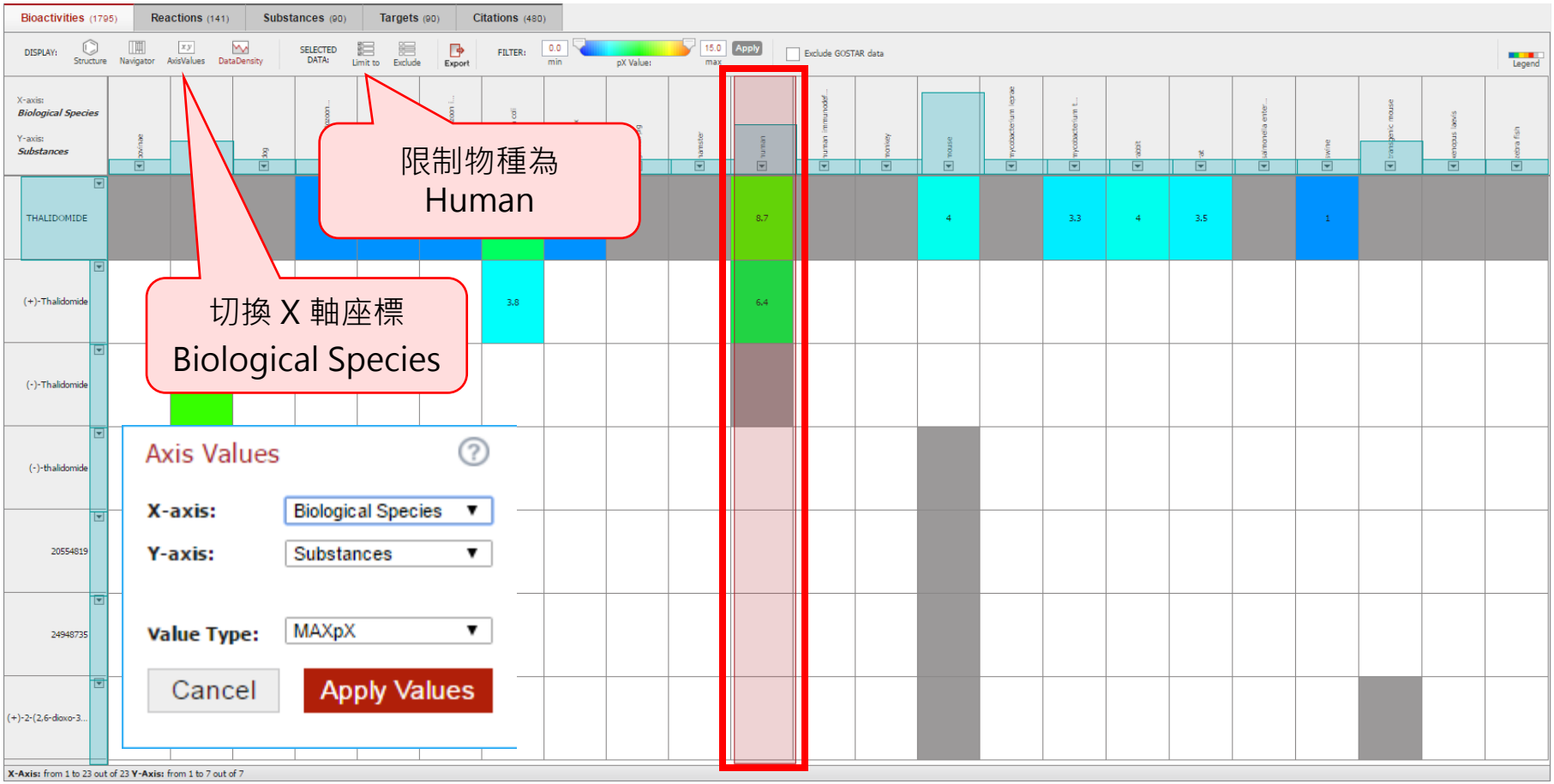
HeatMap 協助篩選生物活性資料

預設 THALIDOMIDE 與結合的標靶蛋白質



Heatmap 範例

THALIDOMIDE 人類試驗數據



Reaxys 中文學習平台

taiwan.elsevier.com/reaxyshelp

FB 不定期更新
搜尋小技巧

ELSEVIER

Thank You!

附錄

Marvin JS 搜尋小技巧

由 ChemDraw 複製結構到 MarvinJS

Reaxys 結構搜尋 – 匯入與匯出 – 1

Edit → Copy as → SMILES

Ctrl + V 貼上

NewReaxys new.reaxys.com

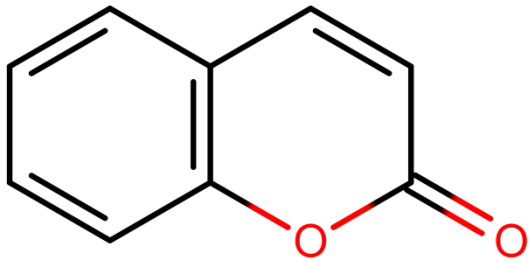
中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

由化合物名稱產生結構

Reaxys 結構搜尋 – 匯入與匯出 – 2

化合物名稱
Coumarin

Create structure template from name >

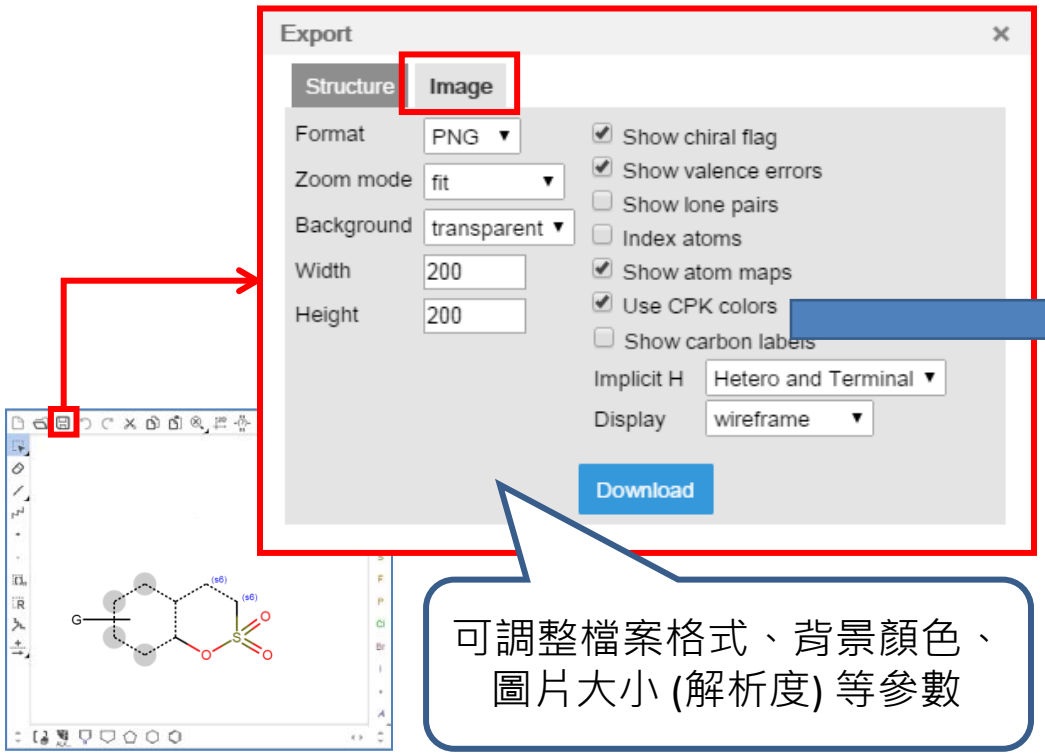


https://youtu.be/Y2sBPaQpt4o

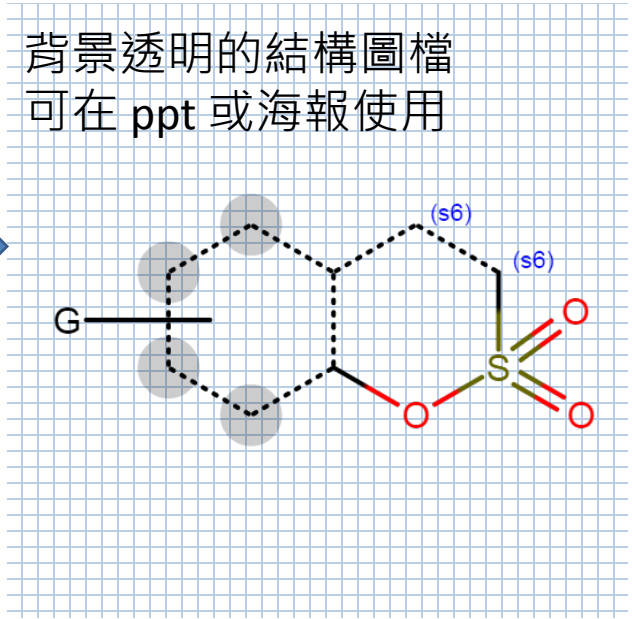
NewReaxys new.reaxys.com
中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

將化學結構存成透明背景的圖檔

Reaxys 結構搜尋 – 匯入與匯出 – 3



可調整檔案格式、背景顏色、圖片大小 (解析度) 等參數



NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

儲存可編輯的結構檔 .mrv

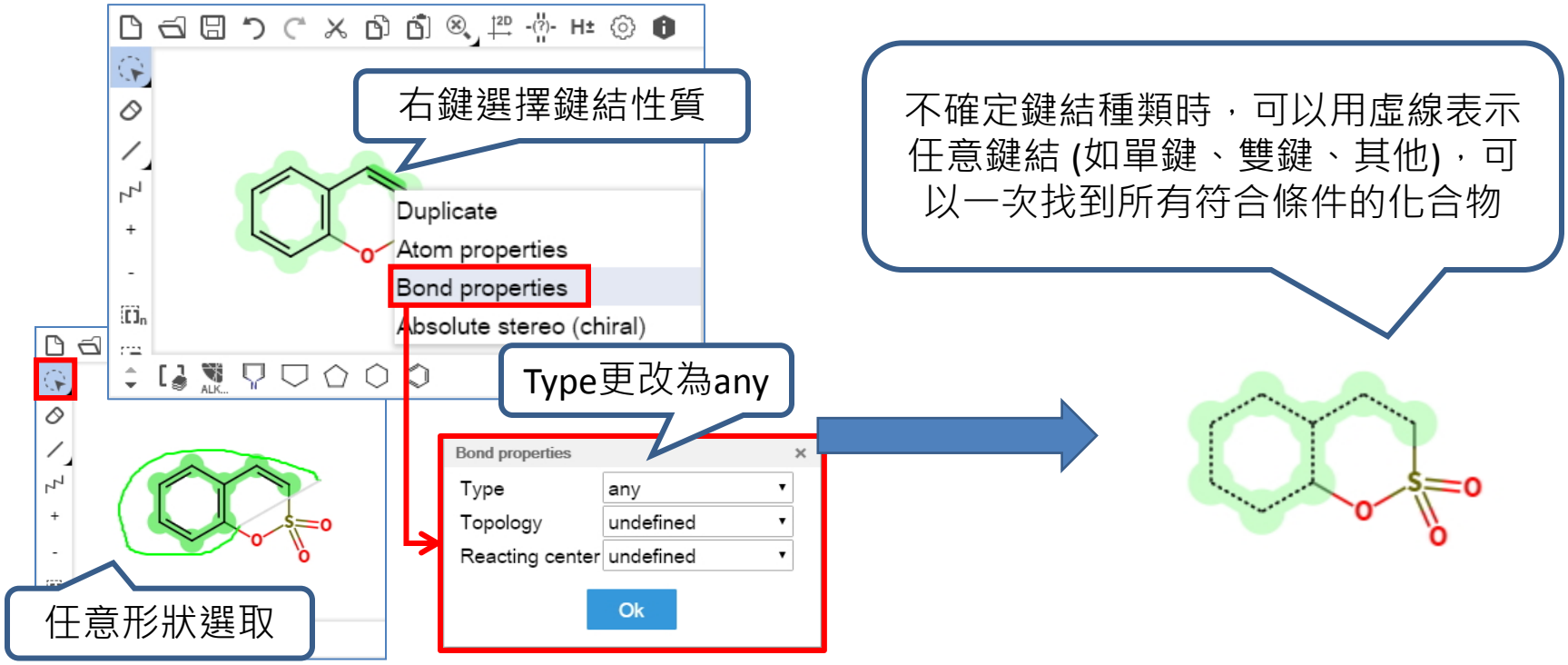
Reaxys 結構搜尋 – 匯入與匯出 – 4

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

不確定鍵結種類，該如何搜尋?

Reaxys 結構搜尋 – 衍生物搜尋 – bond property

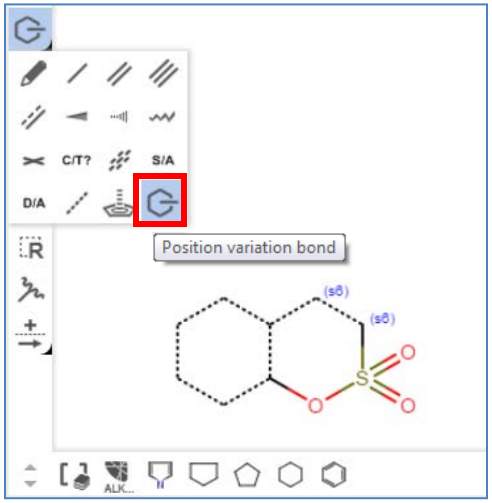


NewReaxys new.reaxys.com

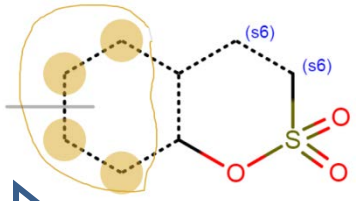
中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

不確定鍵結位置，該如何搜尋?

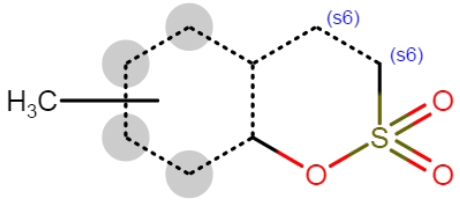
Reaxys 結構搜尋 – 衍生物搜尋 – position variation bond



圈選可能接上
取代基的原子



鍵結與官能基種類
可以再調整

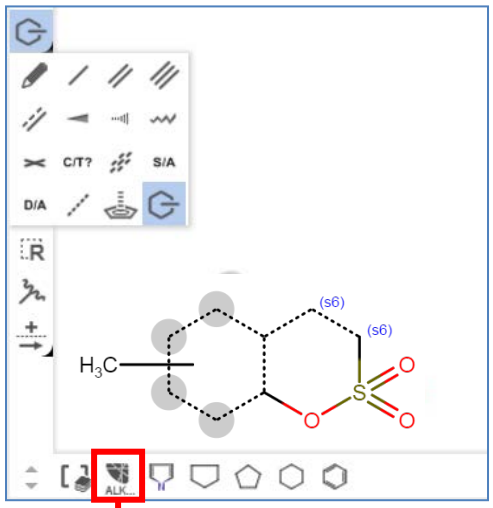


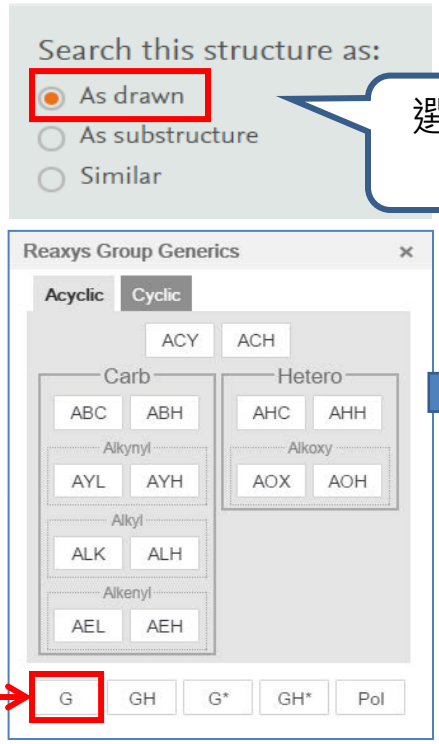
4 個灰色標記的原子
任 1 個接上甲基
就會被搜尋到

NewReaxys new.reaxys.com
中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

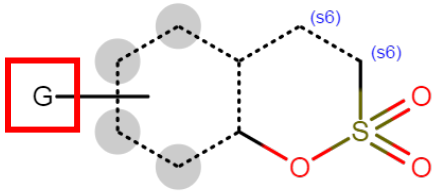
在指定位置，搜尋任意官能基

Reaxys 結構搜尋 – 衍生物搜尋 – G 代表 any functional group





選擇精準搜尋
As drawn



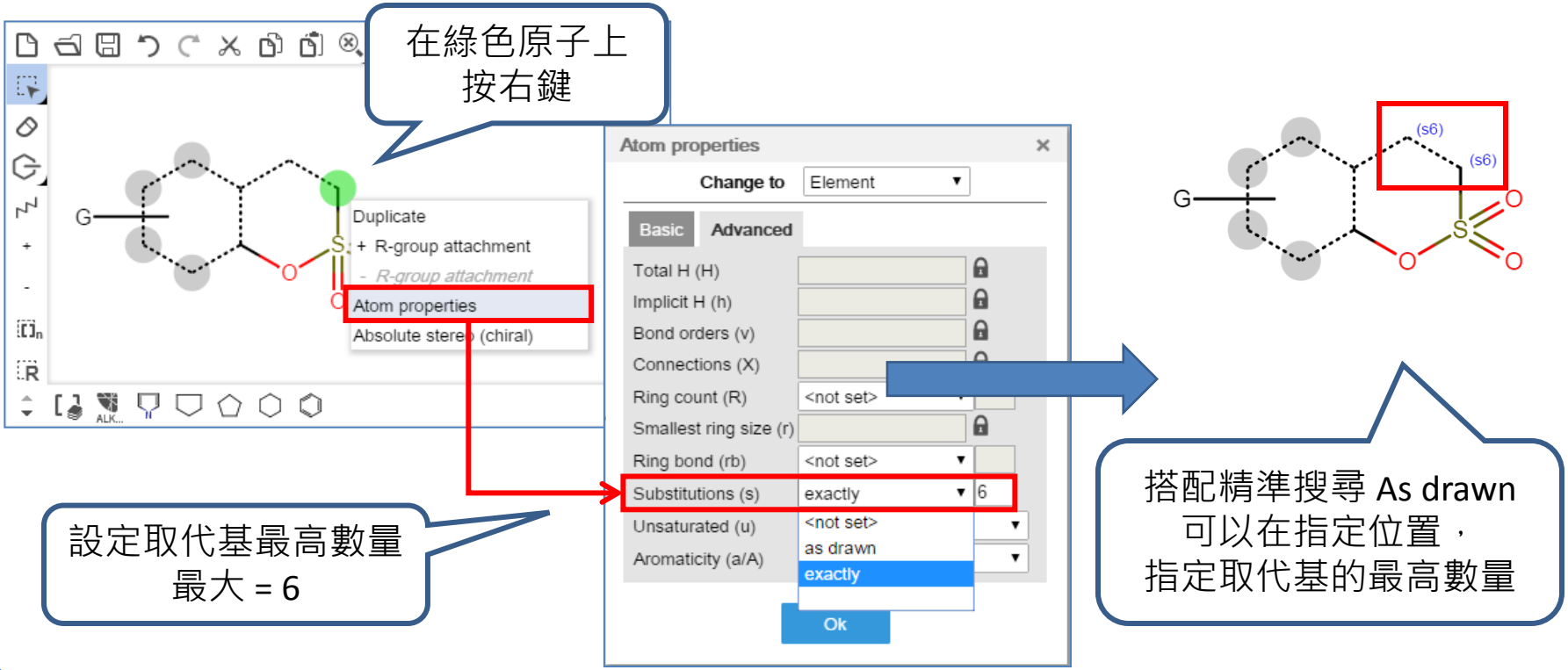
搜尋結果中 G 的位置
可能接上任意官能基

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

允許取代基

Reaxys 結構搜尋 – 衍生物搜尋 – Substitution 最高數量



NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub