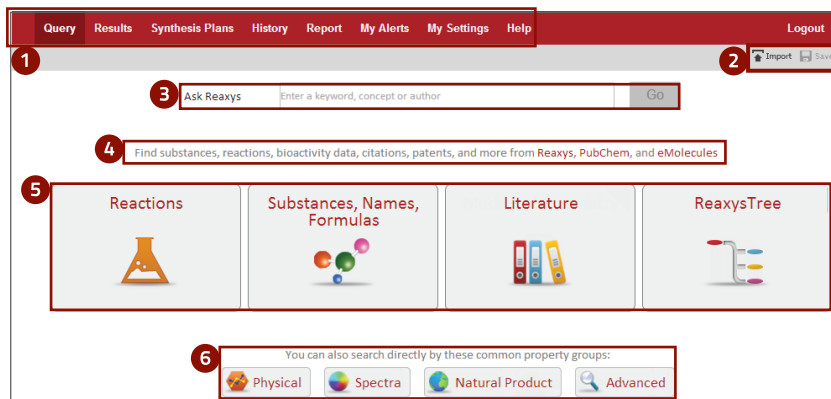


REAXYS® 快速參考指南

www.reaxys.com

新版 Reaxys 化學資料庫內容從原有的 400 本嚴選期刊及專利，擴充至 16,000 筆化學相關出版品！並新增週期表分子式建立系統 (Formula Builder) 以及合金搜尋指令 (Alloy Query Builder) 方便各領域使用者建立不同搜尋指令！除原有三大重要功能：自動合成工具 (Auto plan)、視覺化分析系統 (Analysis view) 以及多樣化結果輸出功能 (Report)，更新增智慧型快速搜尋欄位 (Ask Reaxys) 及 Reaxys 詞彙索引系統 (Reaxys Tree) 至新版 Reaxys 中！全方位支援您的研究！

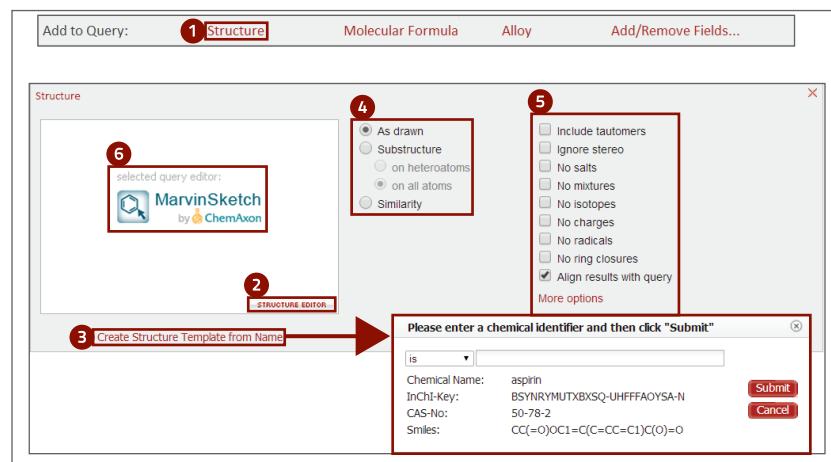
一. 首頁：新版資料庫入口有四種入口：可搜尋反應、化合物、文獻或單純以詞彙做搜尋，滿足您各方面需求！



1. 功能列：包含 Query - 搜尋頁面、Results - 搜尋結果頁面、Synthesis Plans - 合成計畫、History - 搜尋歷史紀錄、Report - 匯出報告、My Alerts - 我的新知通報、My Settings - 我的設定、Help - 求助站等多項功能。
2. Query：匯入已儲存的搜尋，將搜尋設定以網頁檔儲存。
3. Ask Reaxys：您可直接輸入關鍵字、概念或是作者，此智慧型搜尋欄位會自動判斷及提供最相關的搜尋結果。
4. Sources：您目前正同時搜尋 Reaxys、PubChem 以及 eMolecules 三種資料來源。
5. 新版 Reaxys 提供四種入口，讓不同使用者均能建立想要的指令以達成需求！
6. 您也可以直接用相關欄位 (物化性質、光譜資料或是否是天然物) 進行搜尋。

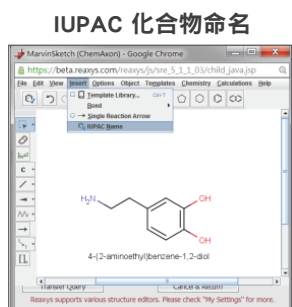
二. 建立搜尋指令：新版資料庫提供以結構、分子式、合金成分/組成比例以及單獨或搭配使用欄位等方式進行搜尋！

● 以結構建立搜尋指令：使用者可利用繪圖軟體繪或是藉由化合物名稱轉換成結構的方式做搜尋！

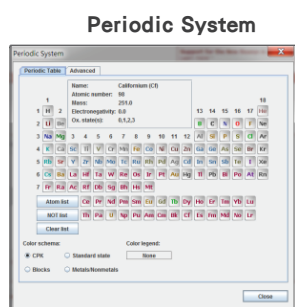


1. 建立搜尋指令：以下為用結構 (Structure) 進行搜尋的說明 (請點一下 Structure)。
 2. Structure Editor：提供 Elemental、MarvinSketch 等 7 種軟體讓使用者選擇，以繪製分子結構或反應。
 3. Create Structure Template from Name：另可依據化合物名稱、InChI-Key、CAS-No (化學物質登錄索引號) 及 Smiles 來做搜尋。
 4. 設定欲搜尋之化合物角色；另可在搜尋不到該化合物時，作衍生物搜尋設定。
 5. 附加搜尋條件設定：使用者可依據自身需求做設定，另可按下 More options 做更多設定。
 6. 點擊視窗空白處兩下以啟動繪圖軟體，預設為 MarvinSketch (需 JAVA 支援)。
- 註：MarvinSketch 見下方說明。

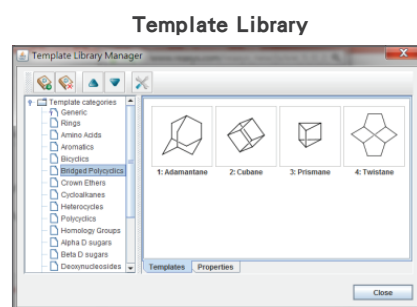
● 線上繪圖軟體 MarvinSketch：利用 MarvinSketch 可繪製分子或反應式，在 Reaxys 進行搜尋！並提供多項功能，如：



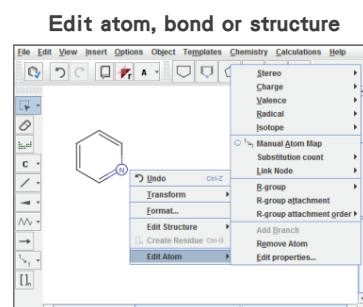
可讓您對新的分子進行化合物系統性命名！



提供 Atom list 以同時搜尋單一位置上有不同原子之雜環分子。



提供各種氨基酸/雜環/架橋分子/無機典型分子等 Template 供使用者作選擇！



提供編輯原子、鍵結及結構的功能，請在欲編輯的單元上按右鍵！

- 以**分子式**建立搜尋指令：提供週期表分子式建立系統（Formula Builder），讓使用者可輕鬆建立欲搜尋的分子式。

1. 建立搜尋指令：以下為用**分子式（Molecular Formula）**進行搜尋的說明（請點一下 Molecular Formula）。
2. 可直接輸入分子式或是點選 Lookup，Lookup 會顯示 Reaxys 資料庫中**所有可搜尋到的分子式**。
3. Formula Builder：也可使用**週期表分子式建立系統**，來建立欲搜尋的分子。
4. 直接利用週期表點選需要的元素，以建立分子式。
5. 預覽元素性質：將滑鼠移到欲預覽的元素上方，即呈現電子組態、同位素、密度及原子量資訊。
6. 標記分子式中，原子的原子數及價數。
7. 標記基團（Group）：可使用常用的 Me（甲基）、Et（乙基）、Ph（苯基）、數學式或是使用 n 表示數量。

- 以**合金成分/組成比例**建立搜尋指令：新版 Reaxys 提供使用者精準的合金搜尋方式，提升搜尋效益！

1. 建立搜尋指令：以下為用**合金成分/組成比例（Alloy）**進行搜尋的說明（請點一下 Alloy）。
2. Component Formula：輸入合金組成。
3. Percentage：輸入合金成分比例。
4. Percentage Type：選擇成分比例型態，有 Atomic、Weight、Volume 或是不設定（Unspecified）。
5. Additional Components：可藉由勾選此項允許其他元素出現在搜尋結果中。

- **單獨或搭配使用欄位**建立搜尋指令：可任意增加欲搜尋的欄位（共提供近 500 個）進行搜尋。

Reaxys 提供近 500 種可搜尋的欄位，範圍涵蓋 130 個主題，讓使用者可以搭配結構或是單獨搜尋，方便使用者以欄位的概念提高搜尋效率；如：Aspirin 加上 NMR 光譜欄位即可一次搜尋到目標資料；或用溶解度欄位，找特定溶解度範圍的化合物。

1. 建立搜尋指令：以下為用**欄位（Fields）**進行搜尋的說明（請點一下 **Add/Remove Fields...**）。
 2. 直接輸入您想要查詢的欄位。
 3. 這裡列出所有 Reaxys 的欄位，您可以點選 **+**，進一步查看該欄位分類內容。
- 註：欄位，內容包括：物化資料、光譜資料、生物活性、生態毒性、使用/應用（專利）資料、量化計算資料、反應相關資料、書目相關資料等等。
4. 為預設欄位，您也可以在此查看您加入的欄位是否成功。
 5. 功能鍵：您可利用 Add 來新增或是 Remove 移除欄位。

三. 搜尋化學反應：Reaxys 提供高達 3,600 萬筆反應資訊，提供您詳細反應式、試劑、產率及購買資訊等等。

- 建立搜尋指令：使用者可附加**結構、分子式、合金成分/組成比例**以及**欄位**等方式進行搜尋！

1. 搜尋項目：新版 Reaxys 提供反應、化合物、文獻及欄位等內容讓您做搜尋，以下為**反應搜尋**說明。
2. 選擇化合物角色：您可設定欲搜尋的化合物是產物、起始物、試劑還是任何角色。
3. 反應搜尋預設欄位：提供您反應相關欄位如：產率、溶劑、時間、溫度、壓力、反應類型及附加詞彙，您可綜合搭配使用。
4. Show AND Buttons：同時有多項搜尋欄位時，可用 AND 或 NOT 來做布林邏輯的連結。
5. Add to Query：可依需求建立各種搜尋指令。

● 反應搜尋結果畫面：以反應式呈現，提供產率、反應條件及文獻出處來源，**每筆數據皆出自於文獻非計算值**！

1. 搜尋結果：呈現 Reaxys 的搜尋筆數，以及這些反應的相關化合物及文獻單數。
2. Filter by：提供產率、溶劑、試劑/催化劑、反應步數、可否購買等作為縮小搜尋項目。
3. 編輯功能：提供使用者對搜尋結果進行輸出、列印、放大或等編輯功能。
4. Sort by：可依 Reaxys 最佳化（預設）、產率、分子量及發表年代等作結果排序。
5. 結果欄位：提供產率、反應條件及參考文獻相關資訊。
6. 可按下 圖示將反應式及條件輸出至 Report。
7. Show Experimental Procedures：按下可立即獲得該反應的詳細實驗步驟。

四. 化合物搜尋：Reaxys 提供高達 5,500 萬筆有機、無機、有機金屬化合物資料，提供物理化學特性、光譜資料、生物活性、生態毒性及專利等等。

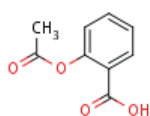
● 建立搜尋指令：使用者可附加**結構、分子式、合金成分/組成比例**以及**欄位**等方式進行搜尋！

1. 搜尋項目：新版 Reaxys 提供反應、化合物、文獻及欄位等內容讓您做搜尋，以下為**化合物搜尋**說明。
2. 化合物搜尋預設欄位：提供您化合物相關欄位如：Reaxys 化合物編號、CAS number、化學名稱、元素符號，您可綜合搭配使用。
3. Show AND Buttons：同時有多項搜尋欄位時，可用 AND 或 NOT 來做布林邏輯的連結。
4. Add to Query：可依需求建立各種搜尋指令。

● 化合物搜尋結果畫面：提供化合物相關的物理化學資訊、光譜資料、生物活性、生態毒性及相關應用等。

1. 搜尋結果：呈現 Reaxys、PubChem 以及 eMolecules 的搜尋結果，使用者可自行切換。
2. 操作方格：紀錄每次操作，方便使用者回到任一步操作結果；也可輸出至 Report。
3. Creat Alert：可設定搜尋新通知報，日後若有相關文獻發表將以 E-mail 做通知。
- 註：此為個人化功能。
4. Filter by：提供物性資料、光譜資料、生物活性、生態毒性、天然物與否、可否購買等作為縮小搜尋項目。
5. 結果表格：提供結構、化合物製備方法、化合物相關資料及參考文獻等豐富資訊。
6. Available Data：提供物理化學特性、光譜資料、生物活性、專利資訊、應用及天然物來源等資訊。
7. 另可按下 圖示將該結構之任何您想要的資訊輸出至 Report。（詳見第五頁第九點）
8. Title/Abstract：點擊後可直接閱讀文獻。
9. FullText：點擊後開啟該篇文獻全文連結。
- 註：若為 Elsevier 出版品，將連至 ScienceDirect 全文資料庫。
10. View Citing articles：點擊後可觀看引用文獻書目資訊，並可連至 Scopus 資料庫。
- 註：Scopus 為世界最大索引摘要資料庫。

● 分子相關資源：以 Aspirin 為例，Reaxys 提供以下豐富相關資訊！

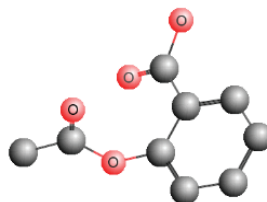


🛒 購買資訊

☰ 更多相關資訊

🔍 檢視分子3D結構：Ball and stick

🔗 連至 PubChem 或 eMolecules



Synthesize

Synthesize 連至合成計畫

1 Available through...

- Accelrys' ACD eMolecules
- CambridgeSoft ACX
- Safety Data... PharmaPendium

1. Reaxys 提供三間國外原料藥供應商的購買資訊。
2. Reaxys 提供以下藥品資訊：
PharmaPendium 能搜尋 FDA 內的藥品審查資訊及相關歷史資料。

Reaxys-RN: 779271
MF: C9H8O4
MW: 180.16
CAS-RN: 50-78-2

- Show Details
- Copy Structure to Clipboard
- Copy Structure to Query
- Use as Sub-structure Filter
- View related Markush

☰ 更多相關資訊

- 按下 Show Details 可連至該化合物搜尋結果畫面，提供大量相關資訊。
- 按下 Copy Structure to Query 可以該結構進行搜尋
- 按下 View related Markush 可找到與該結構相關的專利。

五. 文獻搜尋：Reaxys 提供高達 16,000 萬篇化學相關出版品，並提供預覽文獻內的化合物及反應，讓您掌握文獻重要資訊。

● 建立搜尋指令：使用者可附加結構、分子式、合金成分/組成比例以及欄位等方式進行搜尋！

- Search filters: Reactions, Substances, Literature, ReaxysTree, Physical, Spectra, Natural Product, Advanced.
- Document Type filter: Abstract, Article, Book, etc.
- Show AND Buttons
- Lookup button
- Select Index Items and click 'Transfer'
- Search results list

- 搜尋項目：新版 Reaxys 提供反應、化合物、文獻及欄位等內容讓您做搜尋，以下為**文獻搜尋**說明。
- 文獻預設欄位：提供您文獻相關欄位如：文獻類型、作者、專利編號、刊名、年代、標題、摘要、關鍵字及相關詞彙等等，您可綜合搭配使用。
- 布林邏輯：同時有多項搜尋欄位時，可用 AND 或 NOT 來做布林邏輯的連結。
- Look up：按下 **Lookup** 確認該欄位在 Reaxys 資料庫的資料筆數（以 Document Type 為例）。
- 顯示 Document Type 內容：您可在方框中直接輸入欲搜尋的文獻類型。
- Look up 會顯示該欄位所有的內容；您可從 Document Type 欄位中了解 Reaxys 資料庫收錄的資料類型。

● 文獻搜尋結果畫面：提供預覽文獻內的化合物 & 反應資訊、相關索引詞彙、引用次數以及全文 & 引用文獻連結。

- Open Analysis View
- Filter by: Document Type, Authors, Patent Assignee, etc.
- 48592 citations out of 896656 reactions and 463833 substances
- Table with columns: Title of the Document, Authors, Year, Source, Times cited
- Title/Abstract: Substitution of 6-aminopenicillanic acid at the 6 carbon atom
- Keywords: aldehyde; benzene derivative; formaldehyde; penicillin derivative; Schiff base
- Show All Reactions (31)
- Show All Substances (22)

- 搜尋結果：文獻搜尋結果筆數，以及這些文獻相關的結構和反應式筆數。
- Filter by：提供文獻類型、作者、專利、期刊以及年代等作為縮小搜尋項目。
- Analysis View：提供圖像式的交叉比對工具，提供的項目和 Filter by 內的項目相同！（詳見第六頁第十點）
- 編輯工具：提供 **Output** 及 **Print** 讓使用者輸出搜尋結果。
註：可使用 **Output** 功能，將書目資料輸出至免費書目管理軟體 **MENDELEY**，見下方詳細說明。
- 結果欄位：提供文獻標題、作者、年代、刊名書目資料、引用次數以及全文/引用文獻連結；另可按下 **Report** 圖示將該筆文獻結果輸出至 Report。

Reaxys 提供文獻標題、摘要及預覽反應及化合物

- Title/Abstract：點選可開啟標題/摘要，另提供相關索引詞彙（keywords）如：EMTREE 或 Medline，可提供您初步瀏覽重要詞彙以了解此篇文獻。
- Show All Reactions：可讓您直接預覽文獻內所有反應式，包含產率、條件等資訊。
- Show All Substances：可讓您直接預覽文獻內所有提及之化合物結構，以便快速瀏覽。

● 補充說明：Reaxys 支援免費書目管理軟體 Mendeley，提供免費使用空間 2GB！

- Output to: Citations Table, Citations Reactions Table, Citations Substances Grid, Citations Substances Table
- Output range: All hits, Selected hits, Range
- Output contains: Include abstracts
- Download button

Reaxys 的輸出功能支援 ris 檔案格式，使用者可將 ris 檔匯入至 Mendeley 即可使用！

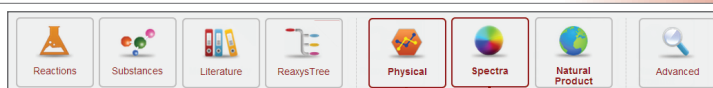
- 請先選擇輸出檔案類型為 ris 檔。
- 在選擇輸出內容的範圍。
- 按下 OK。
- 待輸出檔案完成後，按下 Download 以下載 ris 檔。
註：**MENDELEY** 為免費書目管理軟體，請上：www.mendeley.com 網站申請帳號即可使用！

六. Reaxys Tree：為 Reaxys 依據化學人所建立的詞彙分類系統，可依您的觀點瀏覽化學詞彙。

1. 搜尋項目：新版 Reaxys 提供反應、化合物、文獻及欄位等內容讓您做搜尋，以下為 **Reaxys Tree** 說明。
2. 您可以直接輸入您要搜尋的詞彙，如：**Diels-Alder reaction**、**Coupling reaction**、**Addition reaction** 等等。
3. 編輯功能：可以清除輸入或是去除勾選項目。
4. Reaxys Tree 分類：您可以點選 已開啟分內資料夾瀏覽更多分類詞彙，分成以下四大類：
 - Chemical transformations
 - Physico chemical analysis method
 - Physico chemical properties
 - Quantum chemical calculation methods
 您可用勾選的方式挑選需要查詢的詞彙。

七. 欄位搜尋：您也可以直接利用欄位進行搜尋，如：物理化學特性、光譜資料及天然物。

- 新版 Reaxys 提供反應、化合物、文獻及欄位等內容讓您做搜尋，以下為 Physical 及 Spectra 說明。



物理化學特性搜尋預設欄位：提供您物理化學特性相關欄位如：熔點、沸點、折射率、密度、流動性等等，您可綜合搭配使用。

光譜資料搜尋預設欄位：提供您光譜資料相關欄位如：NMR（還可指定核種）、IR、Mass、UV/VIS 及 ESR 等等。

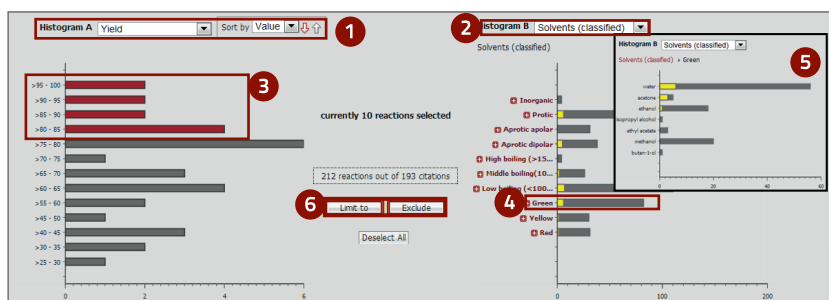
八. Synthesis Plans 合成計畫：Reaxys 提供自行篩選或自動由資料庫提供步驟的合成計畫（Auto plan）供使用者作選擇。

1. 在搜尋結果畫面中，每個化合物下方都有 **Synthesize** 字樣，點選 - **Manually** 後可選擇一步一步建立合成流程或是點選 - **by autoplan** 一次開啟所有有關此化合物在 Reaxys 所有合成方式。
2. 開啟後會連至功能列中的合成計畫。
3. 點選 **Autoplan** 後，開啟 Reaxys 內十個相關合成反應。
4. 編輯功能：可以複製另一個完全相同的檔案（**Duplicate**）、輸出資料（**Output**）或輸出至報告中（**Report**）等等。
5. 反應式：列出反應式及產率，另可新增反應條件或是移除此反應。
6. 反應條件：列出該反應的產率、反應條件及文獻出處。

九. 多樣化結果輸出功能（Report）：只要有 圖示處皆可輸出至 Report，如：搜尋條件、搜尋結果及合成計畫等。

1. 編輯功能 列印 開啟舊檔 儲存報告 將同個化合物的資料整併在一起、將報告 E-mail 給其人等。
2. 可利用 Move up or down 移動資料順序，按下 Annotation 還可自行撰寫相關筆記或按下 Remove 移除資料。
3. 反應搜尋輸出結果：包含結構、製備方法、物理化學資訊、相關應用、活性/毒性資料、參考文獻等等。
4. 化合物搜尋輸出結果：包含產率、反應式、反應條件、文獻來源等...

十. 視覺化分析工具 (Analysis View) : Reaxys 將 filter by 內的欄位視覺化, 可交叉分析兩種欄位並同時進行篩選!



若想進行綠色化學研究, 同時兼顧產率及使用環保的溶劑, 可:

1. 在長條圖一選擇“產率”, 並以 Value 做排序。
2. 在長條圖二選擇“溶劑”, Solvents (Classified)。
3. 在長條圖一點選產率 80 - 100% (紅色部分), 長條圖二會出現相對應的溶劑種類 (黃色部分)。
4. 點選 就會出現被分類為綠色的溶劑群。
5. 黃色部份顯示溶劑為 water、acetone 及 ethanol。
6. 按下 Limit to 將搜尋結果限制在以上條件。

十一. 個人化功能: 註冊後 Reaxys 提供許多個人化功能, 如: combine search、新知通報或是個人化設定等。

1. 註冊、Register - 註冊、Log in - 登錄 (輸入使用者名稱及密碼即可登錄)。
2. 有星號的部分皆為註冊必欄位。
3. 填完後按下註冊即可。
4. 搜尋歷史紀錄: 提供暫存搜尋紀錄, 並可執行 combine search (依照以下步驟)。
5. 選擇欲組合之搜尋結果 (在此以兩項為例)。
6. 按下 即會出現以下圖示。
7. 點選想要的組合即可開始進行 combine search!
8. 按下 Store 可將搜尋紀錄作永久儲存。

● 個人化設定 (My Setting) : 可修改密碼、更改結構/關鍵字呈現顏色、設定搜尋選項及選擇其他繪圖軟體等等。

若需使用其他繪圖軟體 (Accelrys ISIS/Draw、ChemDraw、Accelrys Draw、ICEdit、CrossFire SE):

1. 請先安裝其他結構編輯軟體附加元件!
網址:
http://www.elsevier.com/_data/assets/file/0007/129976/reaxysplugin19.zip 請下載並安裝!
若要使用 ChemDraw 請至
<http://scistore.cambridgesoft.com/ScistoreProductPage.aspx?ItemID=5943> 下載並安裝!
若要使用 ICDedit/Reaxys 請至
<http://www.infochem.de/content/downloads/iceditinreaxys.pdf> 下載並安裝!
2. 請進入 My Settings 並點選 Modify Application Settings 按鍵, 選擇你要的繪圖軟體並按下 Save!

● 補充說明 - 進階搜尋 (Advanced Search) : 使用者可自行輸入搜尋指令或是利用欄位建構搜尋指令。

1. 搜尋項目: 新版 Reaxys 提供除一般搜尋外還提供**進階搜尋**。
2. 輸入搜尋指令: 您自行輸入所需的搜尋指令, 或是利用欄位建立指令 (見以下說明)。
3. **Show Property List**: 提供您 Reaxys 內所有近 500 種的欄位。
4. 您可直接輸入您想要找的欄位, 如: 化合物相關、反應相關或是文獻相關的欄位。
5. 您也可以瀏覽的方式尋找相關欄位, 如點選 Physical Data 前的 , 開啟 Physical Data 內相關欄位, 若需要該欄位資料可直接點選 **exists**, 該欄位就會成為您的搜尋指令。



欲瞭解更多 Reaxys 訊息,
請與台灣愛思唯爾聯絡
電話: (02) 2522-5915
E-mail: elsevier.taipei@elsevier.com

關於 Reaxys 介紹、線上影音教學與操作指南: 請上 <http://taiwan.elsevier.com>
Reaxys on Facebook: <http://facebook.com/reaxysclub>
Reaxys 化學資料庫: <http://www.reaxys.com>