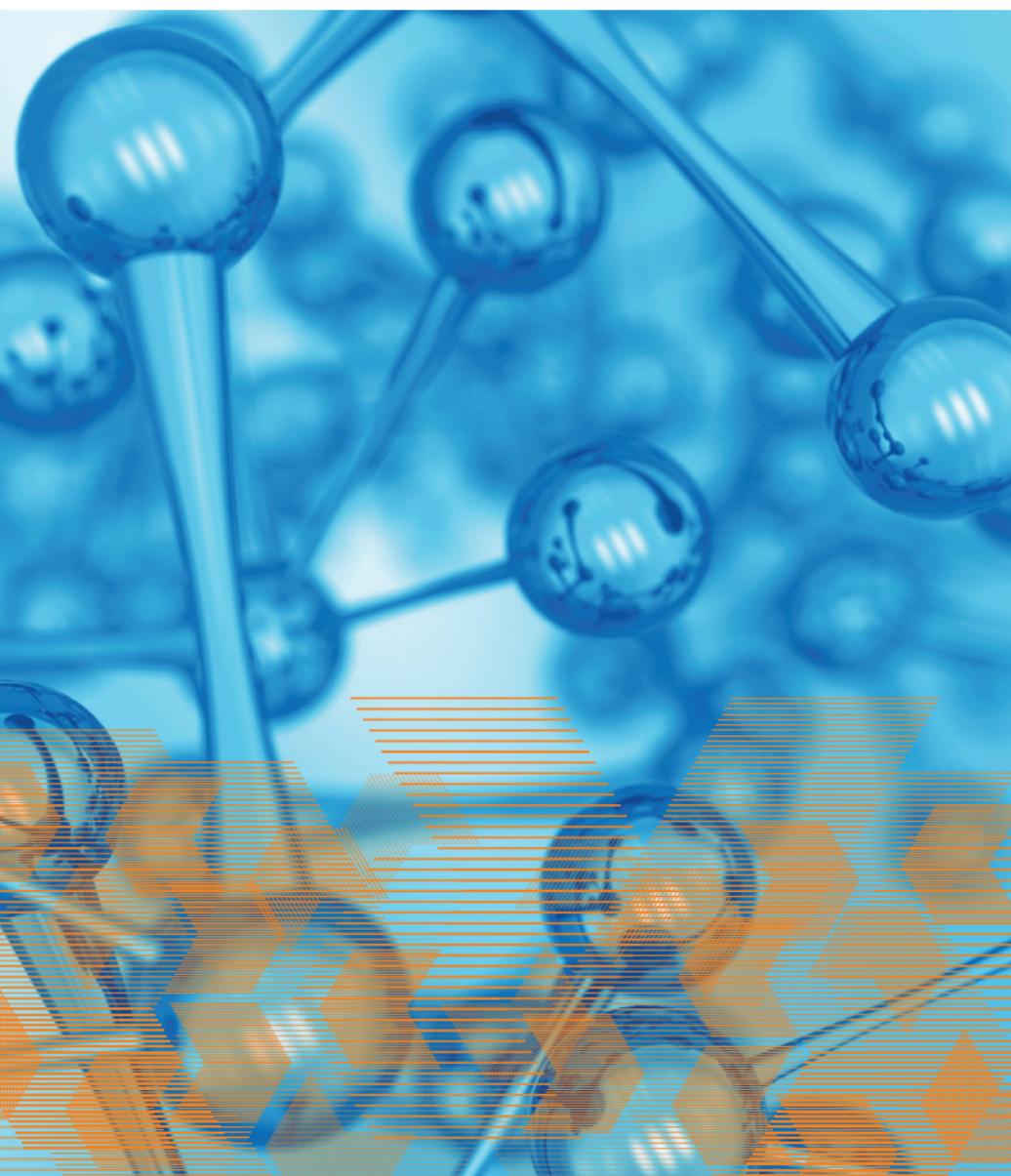


Reaxys[®]

快速使用指南



化学数据与文献的最简路径

为了支持全方位化学研究，包括药物开发、环境健康与安全以及材料科学研究，Reaxys为从新手到专家的每一位科学家，提供解决问题的最简路径。化学查询经由高度直观搜索界面，迅速检索相关文献和专利信息，以及有效的物质属性和实验操作流程。寻找答案从未如此简易。



ELSEVIER

1. Quick search-自然语言检索

Quick search Query builder Results Synthesis planner History

Search substances, reactions, documents and bioactivity data
in Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, PubChem, eMolecules, LabNetwork and SigmaAldrich

1

AND

Create Structure or Reaction Drawing

- 1 文本搜索选项支持输入自然语言术语，既可以直接用关键词检索文献，也可以检索化合物具体性质数据，反应等（例如：melting point of xylitol, Pharmacokinetic of imatinib; Pt(PPh₃)₄; lapatinib; 102605-70-7 etc.）。

1.1.1 Quick search-文献检索

Quick search Query builder Results Synthesis planner History

Search for polymer nanofiber

1

AND

Create Structure or Reaction Drawing

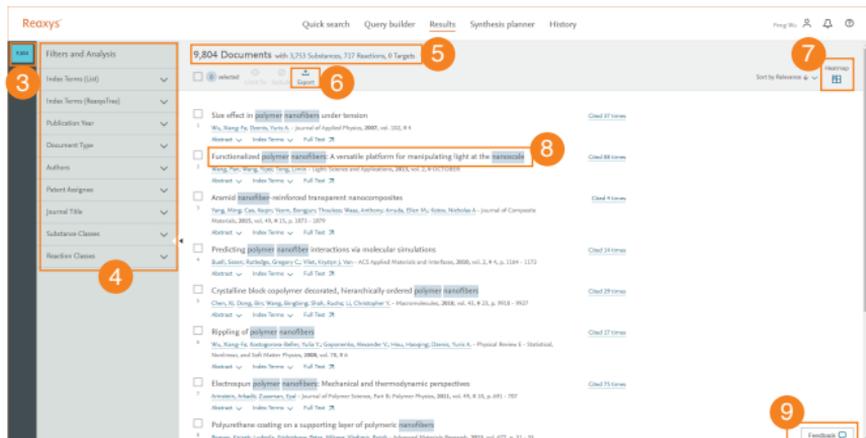
- 1 例如：检索检索 ‘聚合纳米纤维相关的文献’

Quick search Query builder Results Synthesis planner History

Results for polymer nanofiber

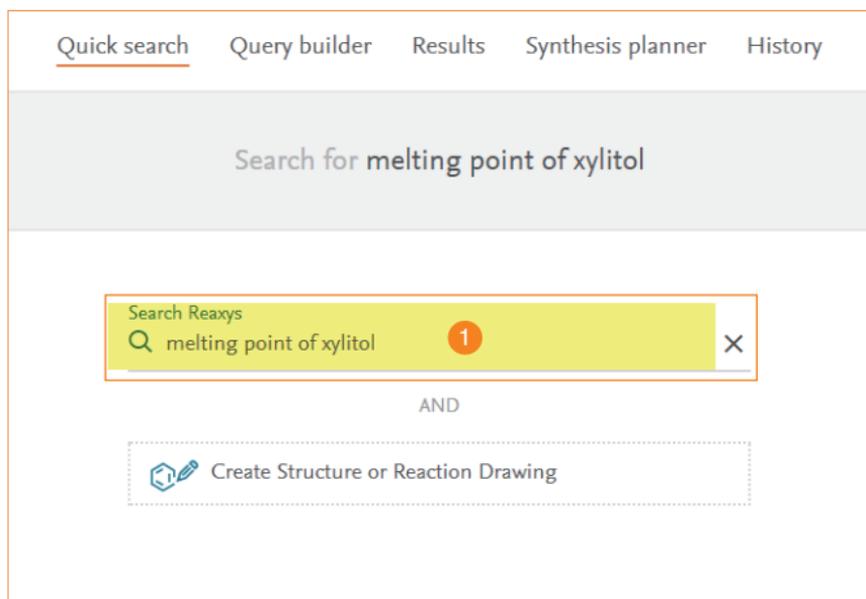
265	Substances	Structure: as drawn <small>Edit in Query Builder Create Alert</small>	Preview Results ▾	View Results >
9,804	Documents	Titles, Abstracts, Keywords: polymer, nanofiber	Preview Results ▾	View Results >
833,826	Documents	Titles, Abstracts, Keywords: polymer	Preview Results ▾	View Results >
43,682	Documents	Titles, Abstracts, Keywords: nanofiber	Preview Results ▾	View Results >

- 2 预览界面不但给出‘polymer nanofiber相关文献’，还给出了相关化合物供参

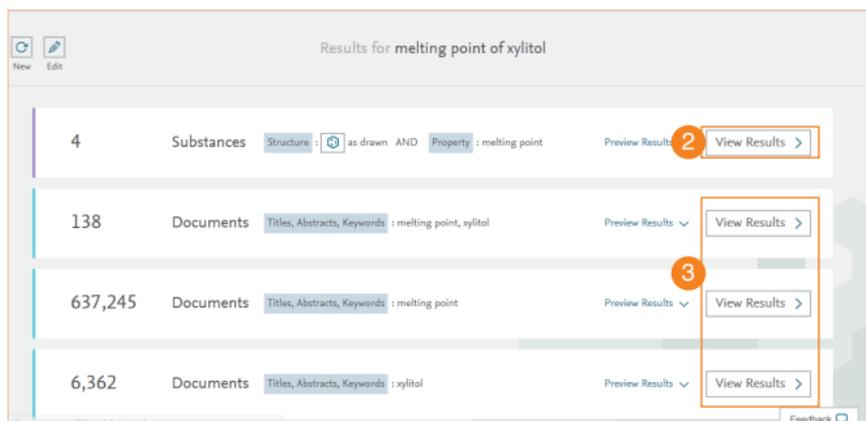


- 3 导航栏
- 4 Filter（筛选器），对文献集进一步筛选，如：
- 5 结果集总结，可以直接查看这些文献中的，化合物，反应，以及靶点信息
- 6 结果导出
- 7 这些文献中，涉及到的，化合物靶点生物活性构效关系图
- 8 检索词高亮
- 9 问题反馈

1.1.2 Quick search-化合物性质检索



- 1 检索化合物的具体性质，能够直击结果



- 2 具体信息结果集
- 3 相关信息结果集，关键词相关文献

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Peng Wu

4 Substances out of 1,661 Documents, containing 469 Reactions, 6 Targets

XYLITOL
 $C_7H_{12}O_6$ 152.147 1720523 87-99-0

Hit Data - 23
 Identification
 Druglikeness
 Bioactivity (All)

Physical Data - 313
 Spectra - 52
 Other Data - 542

Preparations - 107
 Reactions - 469
 Targets - 6
 Documents - 1,661

4 Hit Data - 23
 5 Melting Point - 23 hits out of 23

4 Hit data 显示希望检索的具体数据

5 点击展开结果

^ Melting Point - 23 hits out of 23

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location	Comment (Melting Point)	Reference
92 - 96		Paragraph 0126		Yonsei University Industry-Academic Cooperation Foundation.; wooshin medics co. ltd; Hwang, Sung Joo; Kang, Han; Song, In Ho; Kwon, Min Jun; Seon, Bo Kyung - KR2016/79954, 2016, A Full Text Details Abstract
107.2				Fujii, Kahori; Izutsu, Ken-ichi; Kume, Migiwa; Yoshino, Takeshi; Yoshihashi, Yasuo; Sugano, Kyohiko; Terada, Katsuhide - Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 2015, vol. 63, # 5, p. 311 - 317 Full Text Details Abstract
93				Gowda, Jayant L; Nandibewoor, Sharanappa T. - Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry, 2012, vol. 42, # 8, p. 1183 - 1191,9 Full Text Details Abstract
94.49	H2O		Decomposition	Wang, Shui; Li, Qun-Sheng; Li, Zhao; Su, Ming-Gao - Journal of Chemical and Engineering Data, 2007, vol. 52, # 1, p. 186 - 188 Full Text Cited 12 times Details Abstract

6 具体数据

7 文献中位置

8 原文出处

1.1.3 Quick search-用词汇进行反应检索

Quick search Query builder Results Synthesis planner History

Search for suzuki coupling

1 Search Reaxys
 Q suzuki coupling

AND

Create Structure or Reaction Drawing

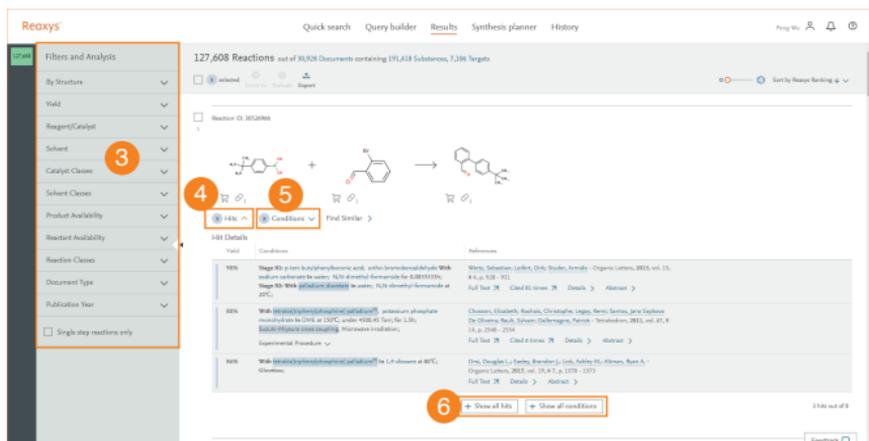
1 输入反应名称：Suzuki coupling，Wittig reaction等，或者输入反应类型‘substitution，oxidation reaction’等

Results for suzuki coupling

127,608 Reactions Condition : suzuki coupling Preview Results View Results >

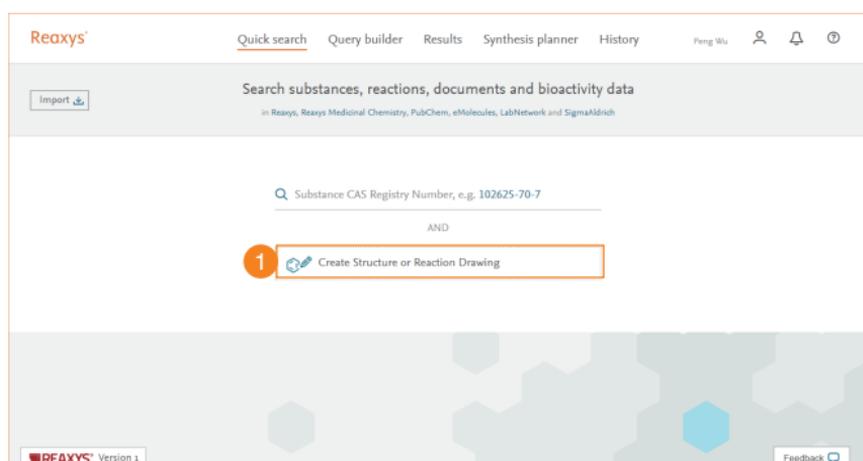
15,369 Documents Titles, Abstracts, Keywords : suzuki coupling Preview Results View Results >

2 一次性获得相关反应及其相关文献

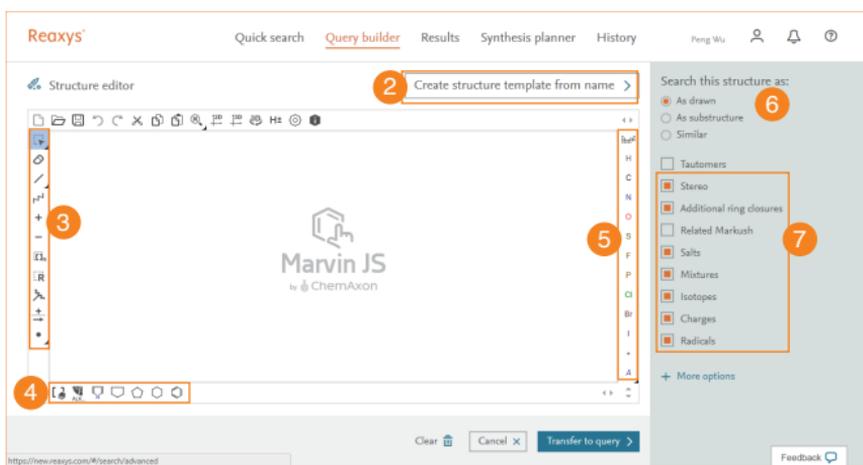


- 3 各种反应相关筛选器
- 4 高亮检索词条，和相关试剂，与检索词条相关条件结果集
- 5 该反应全部反应条件，包含'非检索词条（Suzuki coupling）'
- 6 增加显示更多反应条件

1.2 Quick search-结构检索



- 1 Java-Free结构编辑器，点击打开，可以在智能手机，平板电脑等任意移动设备上直接画图。



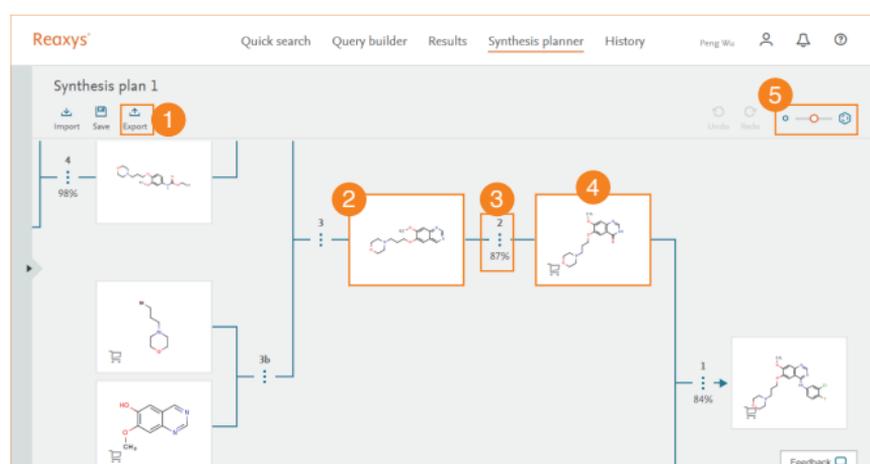
- 2 名字，CAS RN 导入结构
- 3 工具栏
- 4 模板栏
- 5 原子相关设定
- 6 检索逻辑：1. 如图所画；2. 亚结构检索；3. 相似检索
- 7 结构相关异构体

1.2.1 结构检索—化合物检索

- 1 如图所画化合物，及其相关盐类异构体
- 2 化合物测试过的靶点信息，及其对应生物活性数据
- 3 相似结构衍生物
- 4 相关反应

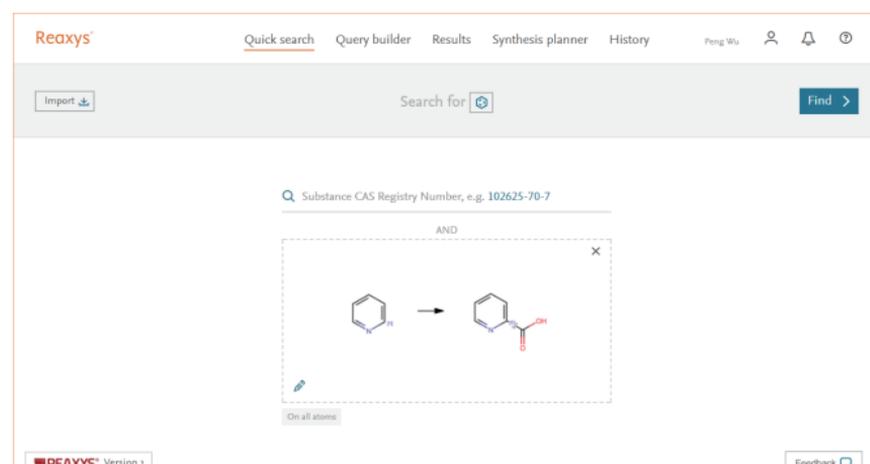
- 5 各种筛选器，结构，临床阶段等
- 6 结果来源数据库
- 7 构效关系图
- 8 自动设计合成路线
- 9 化合物相关性质信息，点击查看具体数据
- 10 相关反应，文献，靶点信息

快速设计合成路线，直观清晰



- 1 导出结果（多种文件格式）
- 2 鼠标点击图片，能查看该化合物其他详细信息，添加合成步骤等
- 3 点击查看反应操作
- 4 购物车，化合物供应商信息
- 5 放大缩小，便于查看

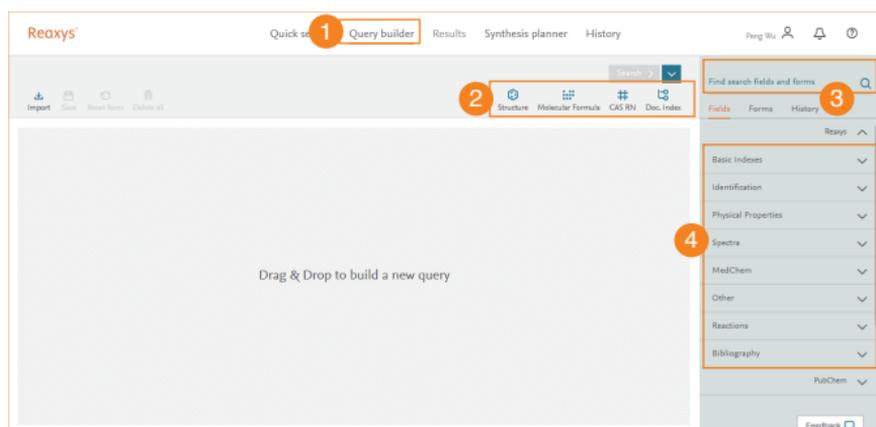
1.2.2 结构检索-化学反应检索



Yield	Conditions	References
78%	With 1,1'-bis-(diphenylphosphino)ferrocene; tris(4-methylphenyl)amine; palladium diacetate in N,N-dimethyl-formamide at 50°C under 760.051 Torr; for 3h	SHIONOGI and CO., LTD.; (EURO-CELTIQUE S.A. - WC0008)8391, 2008, A2 Location in patent: Page/Page column 354 Full Text > Details > Abstract >
	With sodium acetate; 1,1'-bis-(diphenylphosphino)ferrocene; palladium diacetate at 90°C under 5171.62 - 15514.9 Torr; for 7h	MERCK and CO., INC. - WC0009)58298, 2009, A1 Location in patent: Page/Page column 138-139 Full Text > Details > Abstract >
	With sodium acetate; 1,1'-bis-(diphenylphosphino)ferrocene; palladium diacetate at 90°C under 5171.62 - 15514.9 Torr; for 7h	MERCK and CO., INC. - WC0009)58299, 2009, A1 Location in patent: Page/Page column 55

- 1 各种反应筛选器，如：结构筛选，反应试剂筛选，催化剂筛选，反应类型筛选等
- 2 包含反应相关文献，化合物，靶点信息等
- 3 反应条件，操作步骤，以及不同文章的同反应归纳在一起
- 4 反应来源

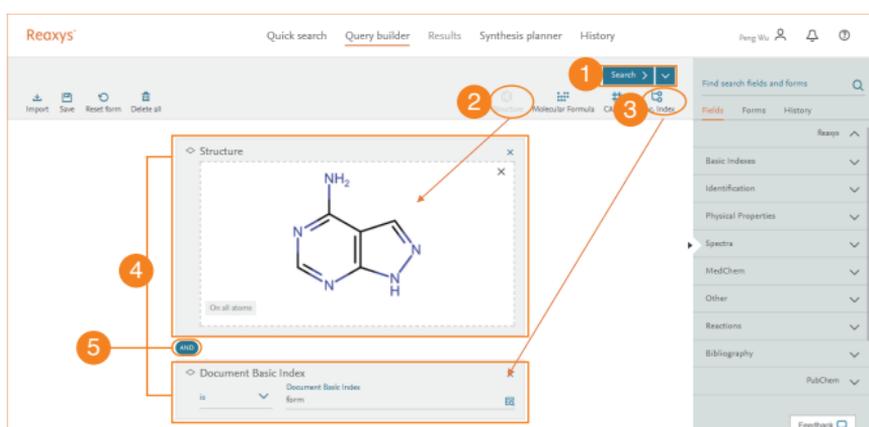
2. Query builder-自定义检索



- 1 点击进入自定义检索界面
- 2 常用检索模块，结构，分子式，CAS RN, 索引词
- 3 通过词汇搜索相关检索模块，如：patent，target等
- 4 其他检索模块，包含Reaxys，RMC以及其他数据库

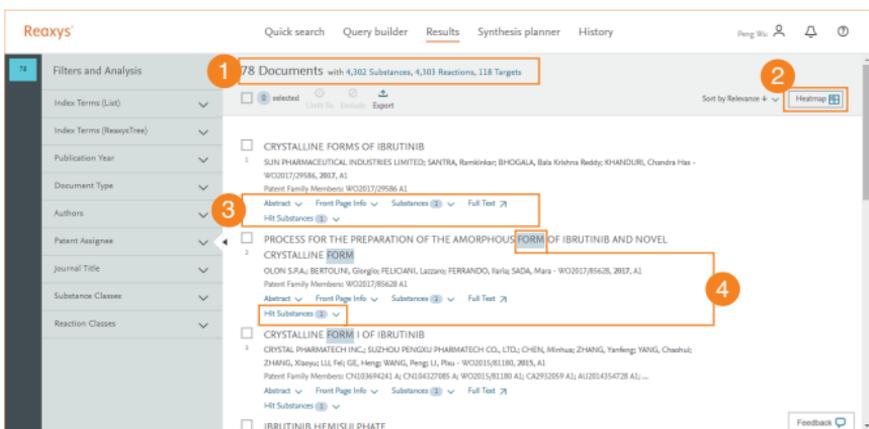
2.1 Query builder-组合信息检索

(检索某母核相关化合物，制剂信息)



- 1 选择检索文献
- 2 结构编辑器
- 3 关键词索引
- 4 组合成综合信息检索组
- 5 逻辑连接符，确定不同模块之间逻辑关系

检索结果 - 检索某母核相关化合物，制剂信息



- 1 关于整个检索结果的总结，点击查看，相关化合物，反应以及靶点信息等
- 2 关于这个结果集，涉及到的生物活性的构效关系图
- 3 关于单篇文章的总结，摘要，专利标记信息，化合物（事实列），化学反应，原文来源等
- 4 检索关键词，检索结构式高亮，直接表现出与检索条件相关性

2.2.1 Query builder – 专利检索 (结构式检索相关专利)

1 画入结构直接检索文献

检索结果

1 文献分类, 筛选专利

2 勾选并筛选得到相关结构化合物的所有专利

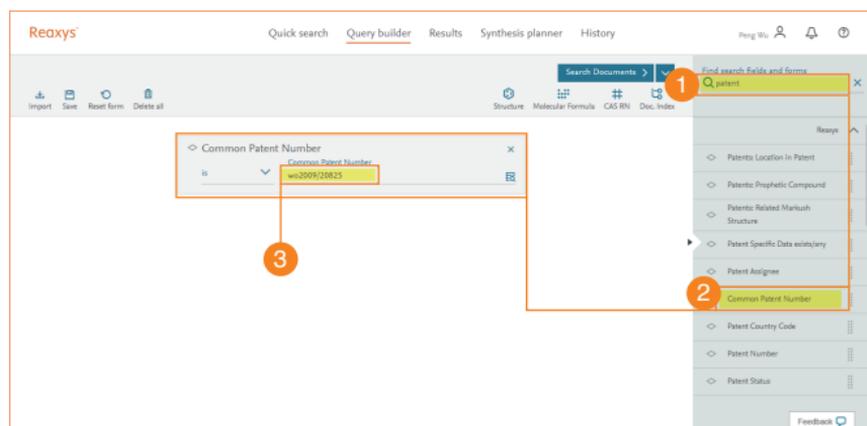
3 历史导航栏, 点击回看历史筛选结果

4 该专利结果集包含的生物活性构效关系图

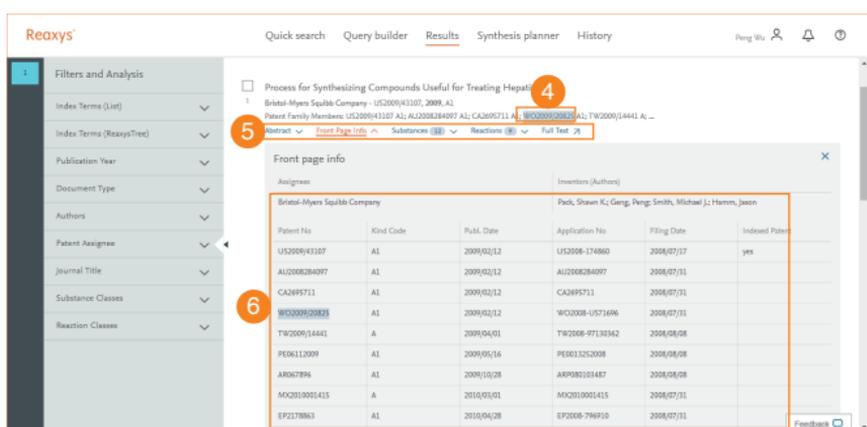
5 专利相关信息总结, 摘要, 家族专利号相关信息, 实例化合物, 反应等

6 专利中与检索结构相关化合物

2.2.2 Query builder – 专利标记检索专利（专利号）



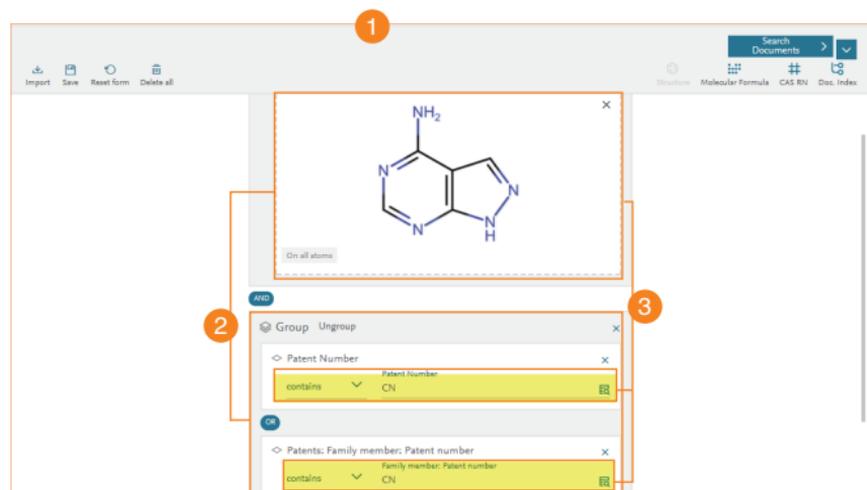
- 1 输入 ‘patent’，获得专利相关所有检索模块
- 2 点击添加，专利号检索模块
- 3 其他途径获得的专利号需要加工才能在Reaxys数据中检索专利，如：‘WO2009/020825’是专利原文中专利号，需要去掉‘斜线后面的0’变成‘WO2009/20825’才是Reaxys中收录的专利号



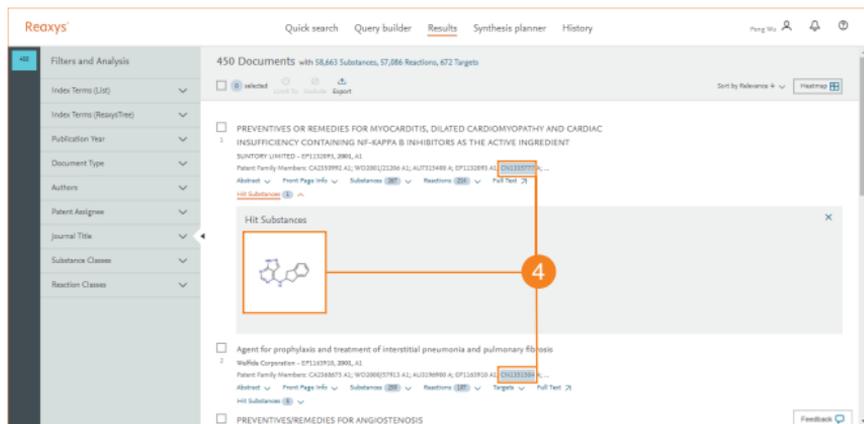
- 4 高亮检索的专利号
- 5 专利相关总结
- 6 家族号，以及其他专利标记的总结，可以通过任意的专利标记，检索到该篇专利

2.2.3 Query builder – 组合信息检索

（母核结构相关在中国发表过的专利）



- 1 Query builder允许进行，多重逻辑关系的组合检索
- 2 检索时从上往下，‘组内’逻辑关系会先满足，再满足组间逻辑关系
- 3 首发专利号或者家族专利号，含有CN标记的专利，优先匹配，再与结构交集匹配

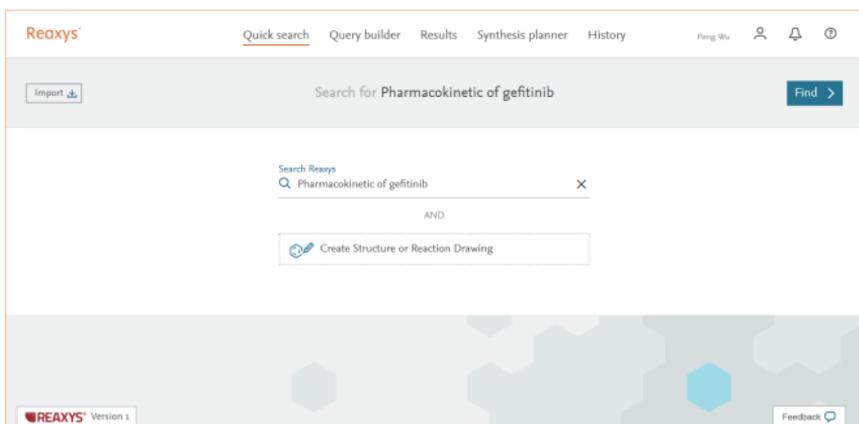


4 匹配的专利号高亮，结构时高亮

3. Reaxys Medicinal Chemistry – 药化信息检索

当购买了Reaxys完整版，及包含了RMC模块的Reaxys以后，在Quick search和Query builder界面可以方便的检索各种生物活性

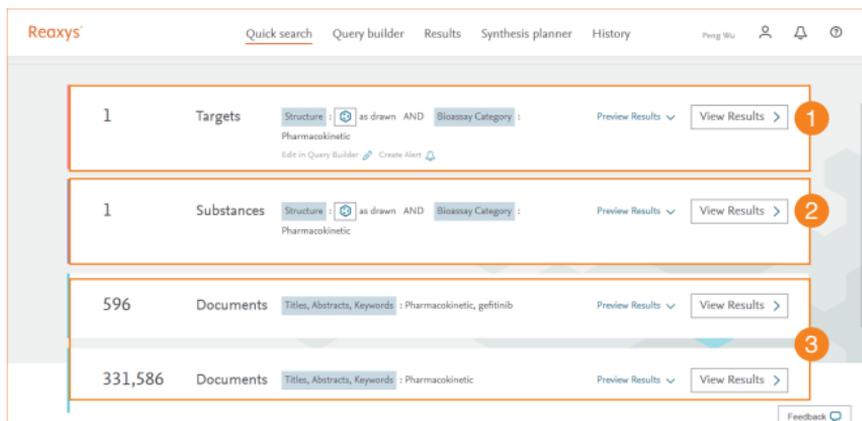
3.1 检索吉非替尼药代动力学生物活性数据



Quick Search中可以使用的方

1. 靶点，或者基因名称，5-ht1a
2. 靶点活性，PIP4K2C Activity
3. 靶点抑制性，Inhibitors of CXCR4
4. 物质在靶点上的抑制性，PIP4K2C by imatinib
5. 靶点作用机制，Agonist of GLP-1
6. 物质作用效果，Atenolol Pharmacological effect
7. 物质药物代谢动力学研究，Pharmacokinetic of Imatinib
8. 结构

完整版的Reaxys 在检索‘吉非替尼药代动力学’会出现以下‘预览结果’



- 1 结构对应的药代动力学 ‘靶点信息’
- 2 结构对应的药代动力学信息
- 3 关键词相关文献

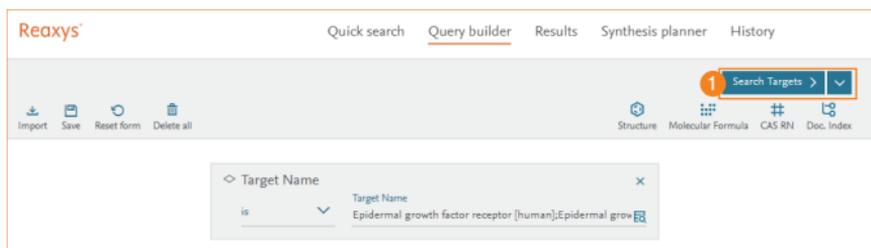
当查看 ‘吉非替尼药代动力学信息’ 时，会看到具体的药代动力学数据

- 1 具体的 ‘药代’ 生物活性
- 2 全部生物活性
- 3 点击查看具体数据
- 4 完整版Reaxys才能查看具体数，并且得到详细出处

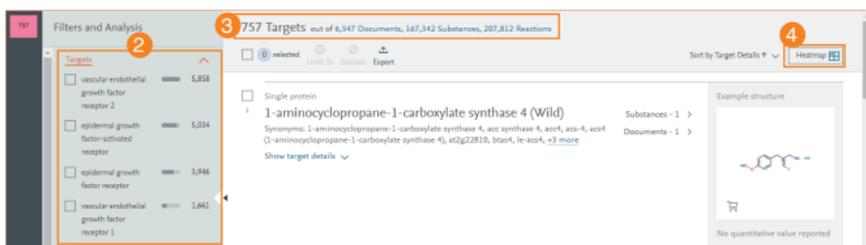
3.2 RMC-靶点相关生物活性检索（如：EGFR）

- 1 靶点转换器帮助科研人员，把靶点 ‘缩写’，‘同义词’ 等转化为标准索引词，以尽可能确保不会漏检相关信息
- 2 完整版Query builder会增加药化模块
- 3 点击靶点模块，从靶点出发检索生物活性

- 4 直接输入靶点缩写，按 ‘enter’ 键即可转换为标准索引词
- 5 靶点所属蛋白的分类
- 6 靶点便准索引词
- 7 可以在这些区域内，增加或删减想要检索的靶点相关信息
- 8 选择好后点击转换即可



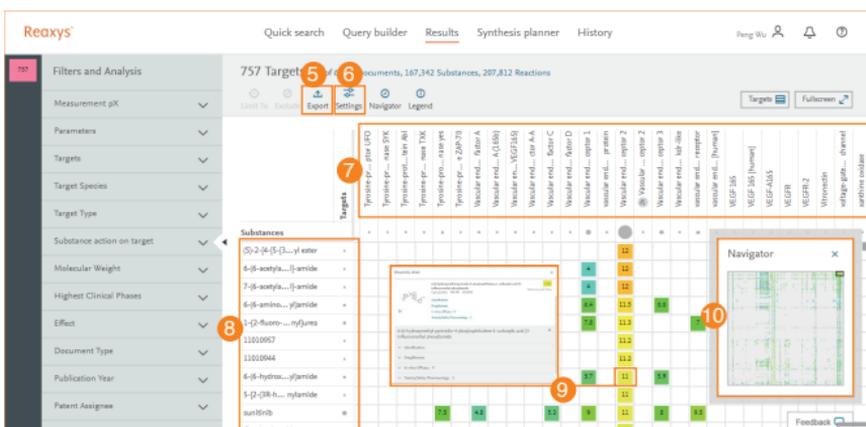
1 选择检索靶点



2 Filter中可以看到，具体每个靶点生物活性数量，并且可以进一步筛选关注的主要信息

3 EGFR相关靶点结果集，包含，EGFR家族所有靶点，以及相关的脱靶靶点和适应症靶点

4 一键拿到，靶点相关生物活性构效关系图



5 结果导出

6 改变X,Y轴的参数值等设置工具

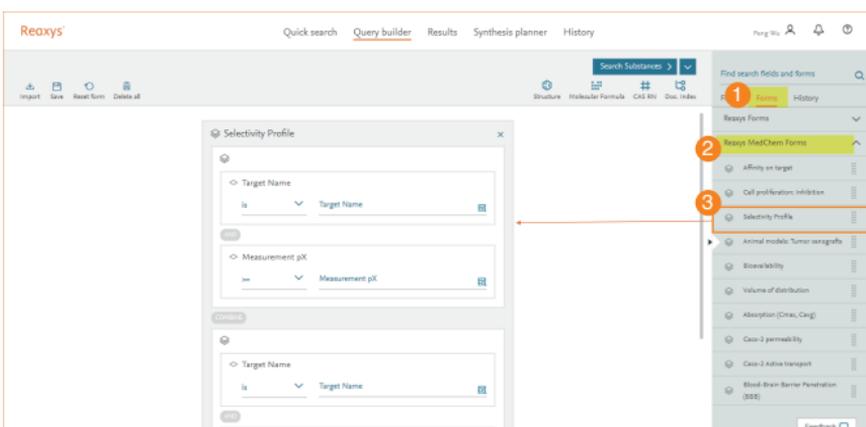
7 X轴以EGFR为基础的，家族靶点，家族突变靶点，适应症靶点，脱靶靶点

8 Y轴，靶点做过生物活性的化合物

9 具体信息点击可以查看详细数据

10 导航栏显示数据总量概况

3.3 RMC-药化信息预设模块专项检索
(化合靶点检索靶点选择性)



Reaxys®

- 1 Query builder中已经预设好了各种专项检索模块
- 2 点击直接得到组合信息模块，填入相关数据即可检索
- 3 如：靶点选择性， hERG阻断, 血脑屏蔽等

检索，对COX-1 抑制能力高于uM 级别, 对COX-2 抑制能力低于nM 级别

Selectivity Profile

Target Name
is Target Name 1

AND

Measurement pX
>= Measurement pX 2

COMBINE

Target Name
is Target Name

AND

Measurement pX
<= Measurement pX

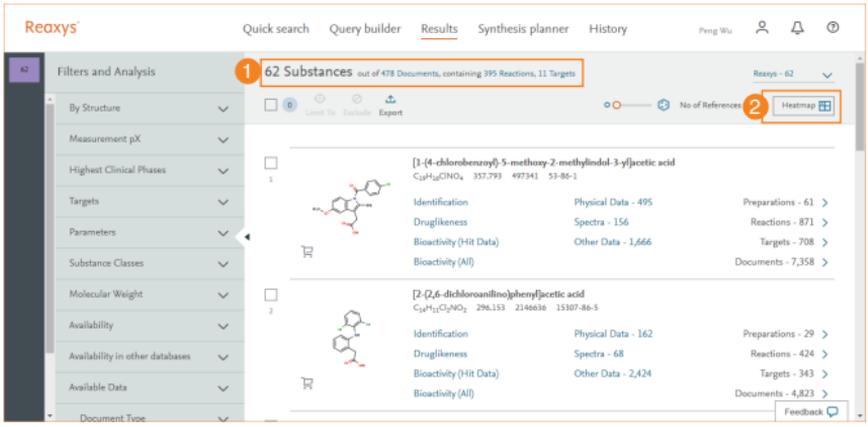
Target Name
cox-2 1

Measurement pX
9 2

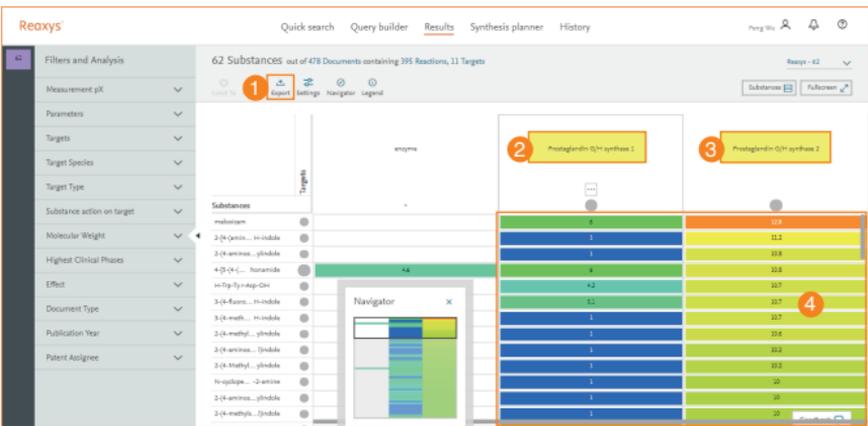
Target Name
cox-1

Measurement pX
6

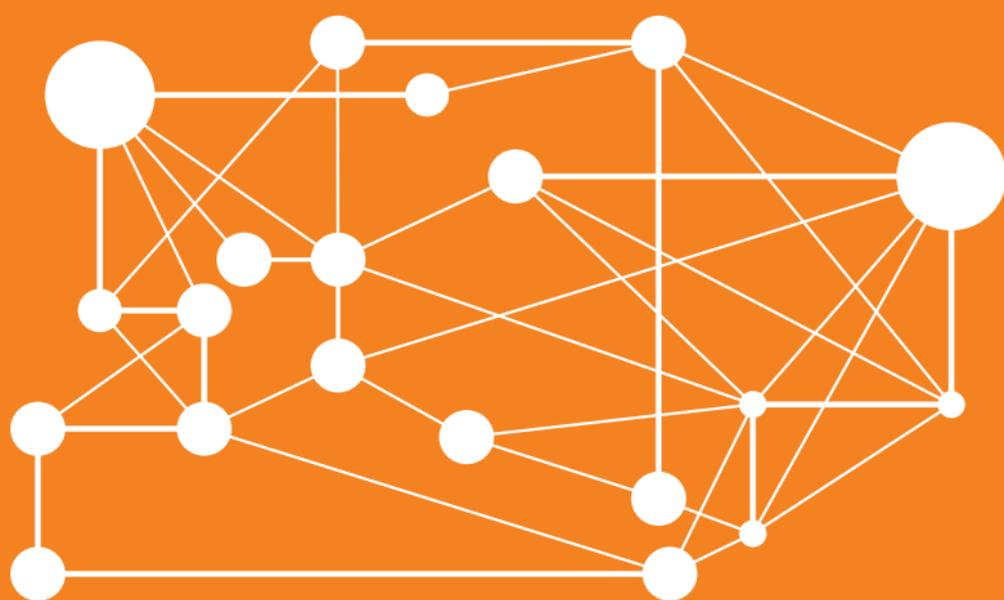
- 1 靶点信息
- 2 量级数值，9为 10^9 次方



- 1 已报到过的做过双靶点选择性的化合，都被检索出来
- 2 直接点击获得构效关系图



- 1 直接导出具有对比性的构效关系图数据
- 2 COX-1标准名称
- 1 COX-2标准名称
- 2 点击查看具体数据



ELSEVIER官方微信



ELSEVIER官方微博

励德爱思唯尔信息技术（北京）有限公司

地址：北京市东城区东长安街1号 东方广场W1座701室

客服热线：(010) 85208765