Reaxys Academic Edition

快速參考指南

May 2025

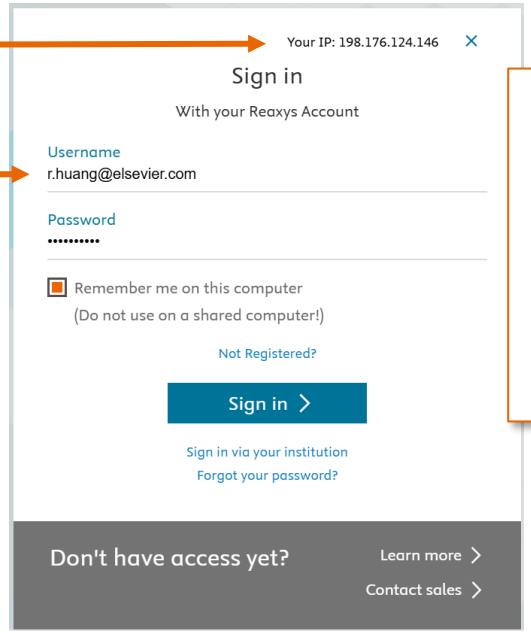
目錄

Reaxys全國授權本連線說明

- 版本 Reaxys Academic Edition
- 連線網址：www.reaxys.com
- 登入帳號：自2025年七月起，服務採雙認證模式連線，使用者需於學校機構授權網路範圍，以學校Email自行註冊Reaxys帳號，登入帳號以連線。

請確認位於校內網路範圍

請使用學校Email、目前不支援免費信箱帳號。

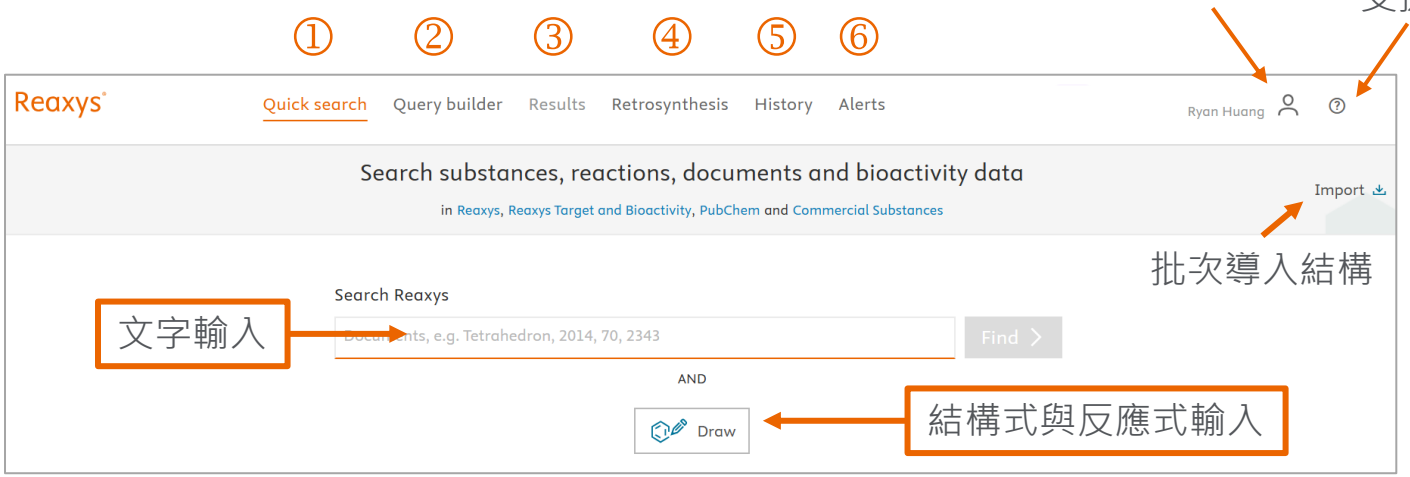


新用戶註冊

台灣大多數學校並不支援機構登入，請嘗試上述雙認證連線。

Elsevier旗下ScienceDirect、Scopus資料庫帳號與Reaxys互通，若您曾申請過相關帳號，可點擊忘記密碼重新找回帳號。

Reaxys首頁畫面



① Quick search: 關鍵字搜尋、結構搜尋

② Query builder: 結構式、物理性質等方面的布林邏輯加成檢索。對搜尋歷史進行加成檢索。

③ Results: 搜尋結果。對資訊進行優先排序。

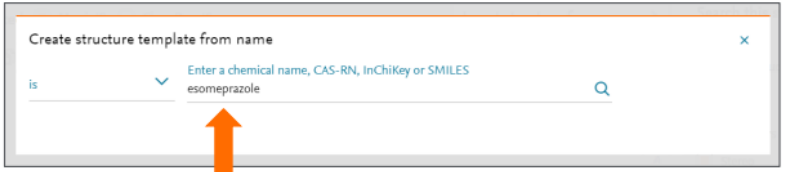
④ Retrosynthesis: 逆向合成路線搜尋。

⑤ History: 搜尋歷史。

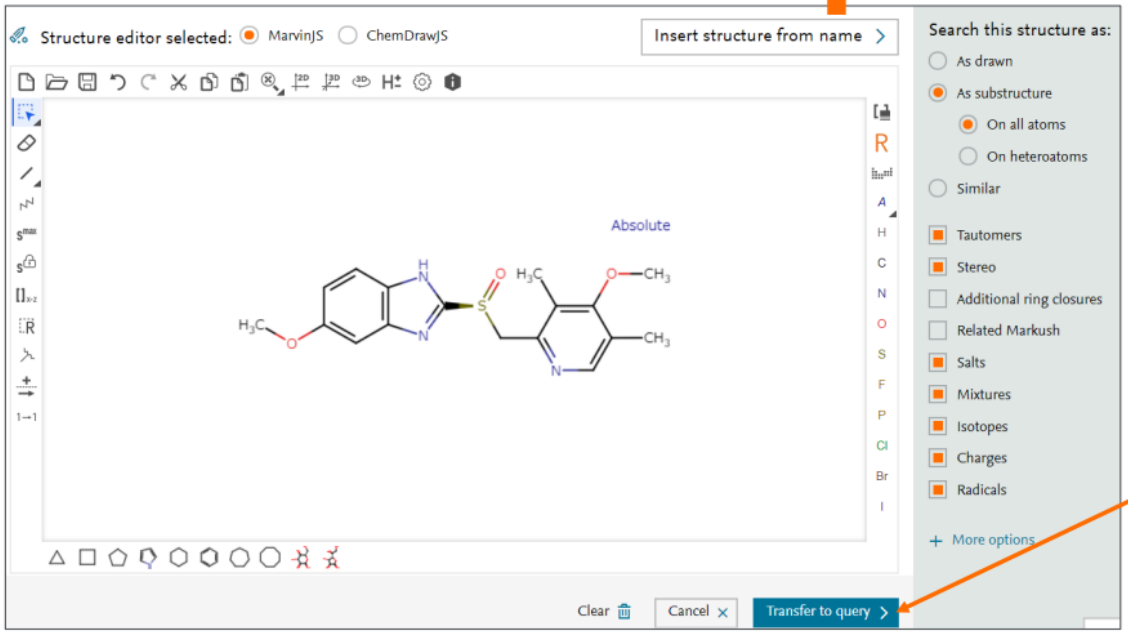
⑥ Alert: 瀏覽提示的搜尋內容。

結構編輯器介面

可以從化合物的名稱中調出結構。



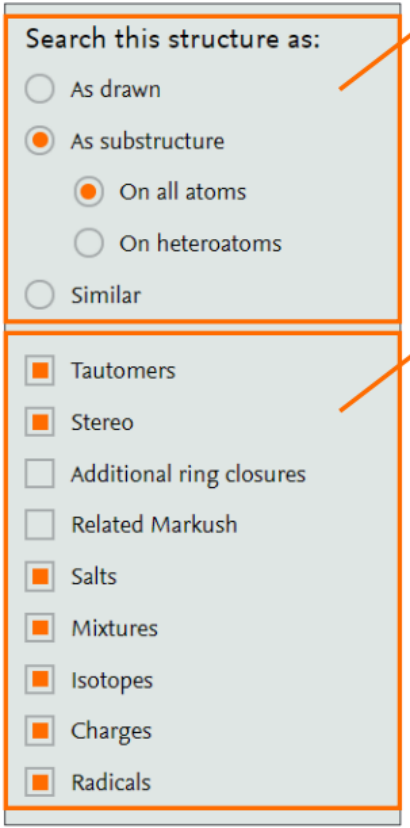
可以用 “ctrl+alt+C ”複製ChemDraw中繪製的結構黏貼到Marvin JS上。



點擊「Transfer to query」，進入搜索介面。

結構編輯器的搜尋選項

搜索選項



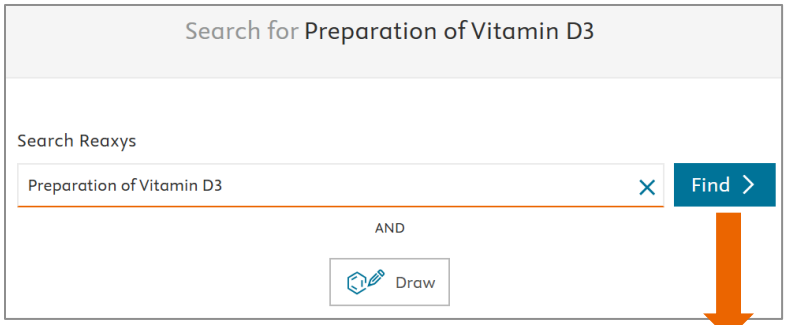
① 結構搜索選項

- 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

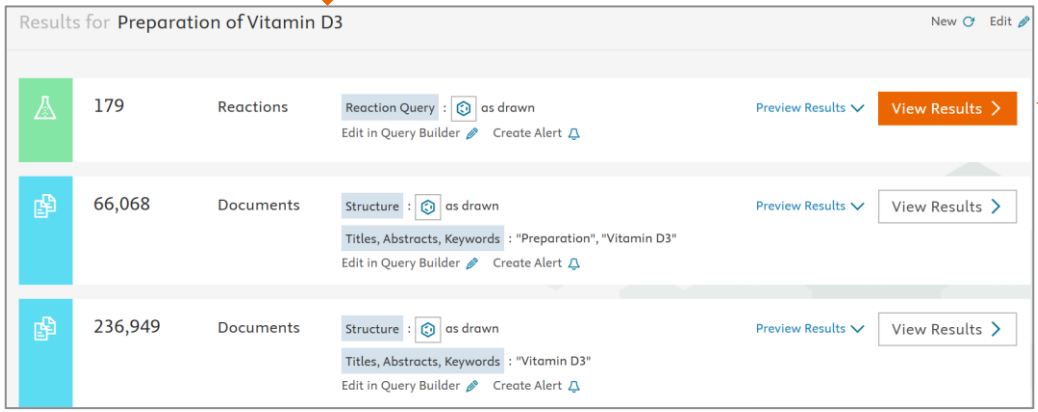
② 其他搜索選項

- 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

Quick Search搜尋預覽介面



重新或編輯目前的搜索



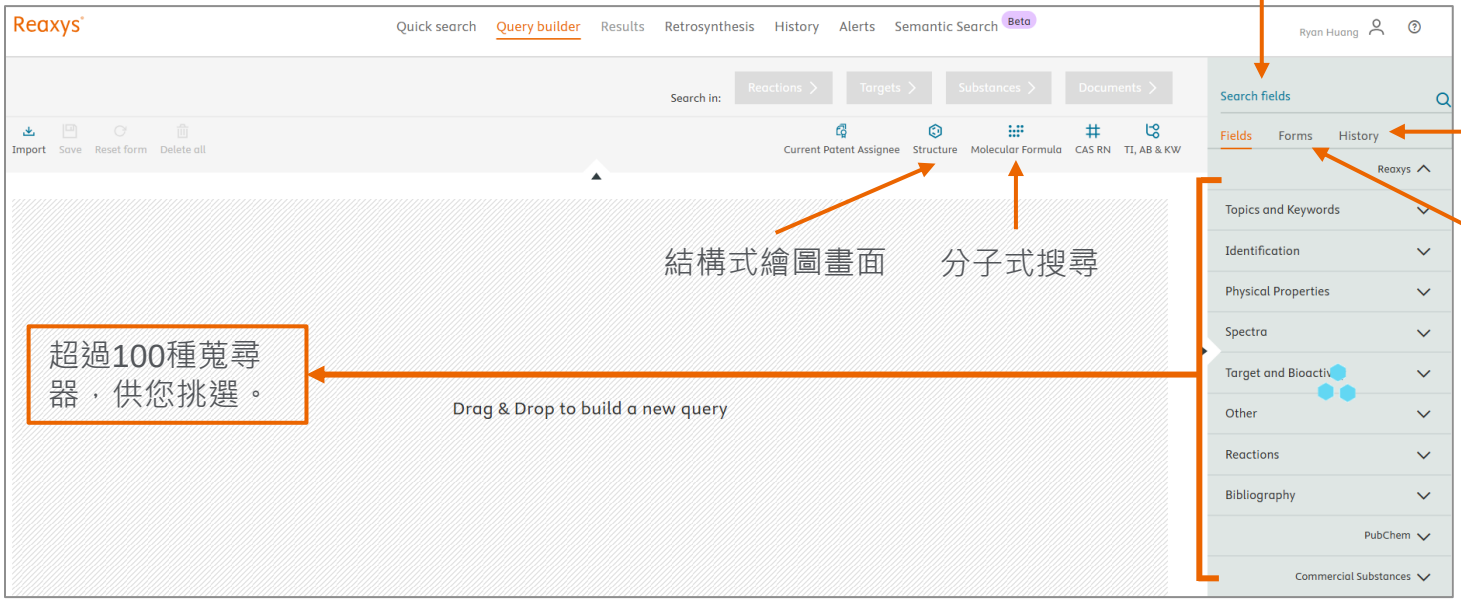
View Result
進入搜尋結果介面

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項。

Query Builder①

靈活組合>100種蒐尋器組成檢索公式以減少雜訊

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。



搜索歷史也可用於建構檢索公式。

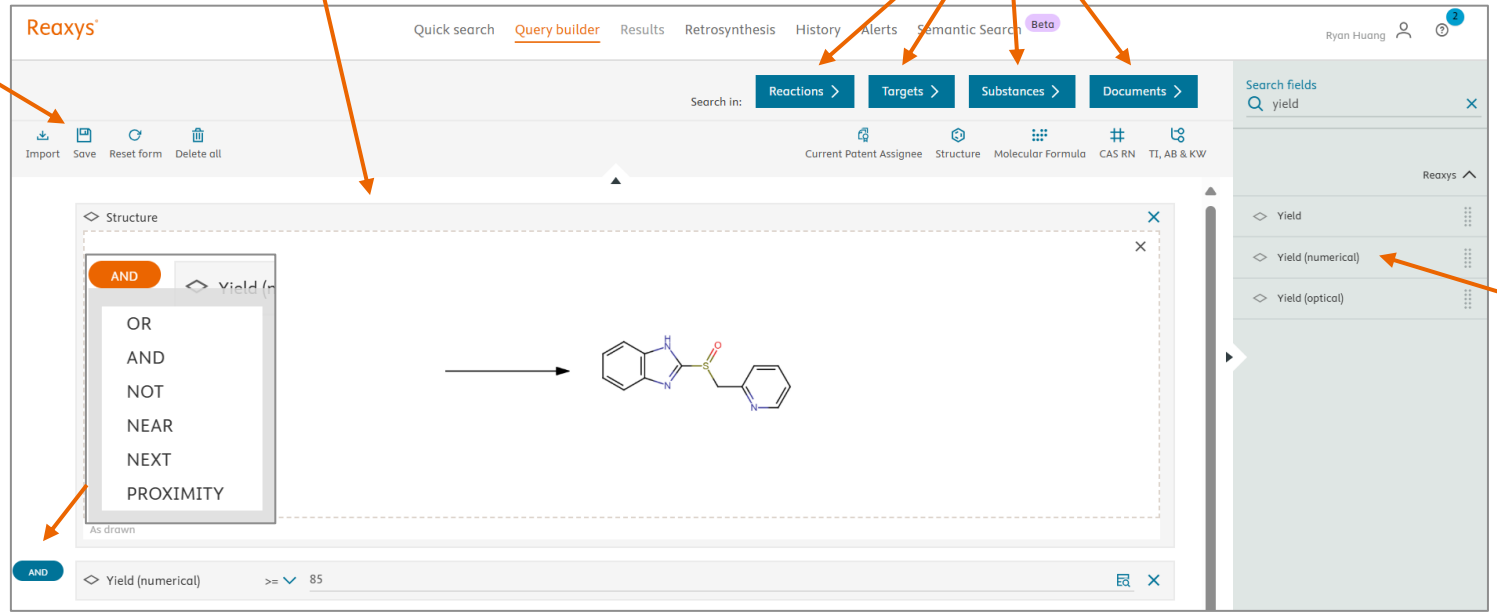
調用你自己創造的檢索公式或嘗試我們為您建立的公式範本。

Query Builder②

選擇反應式、蛋白靶點、物質或文獻搜索。

你所選擇的搜索器會被顯示出來。

你可以保存你所創建 的檢索公式。



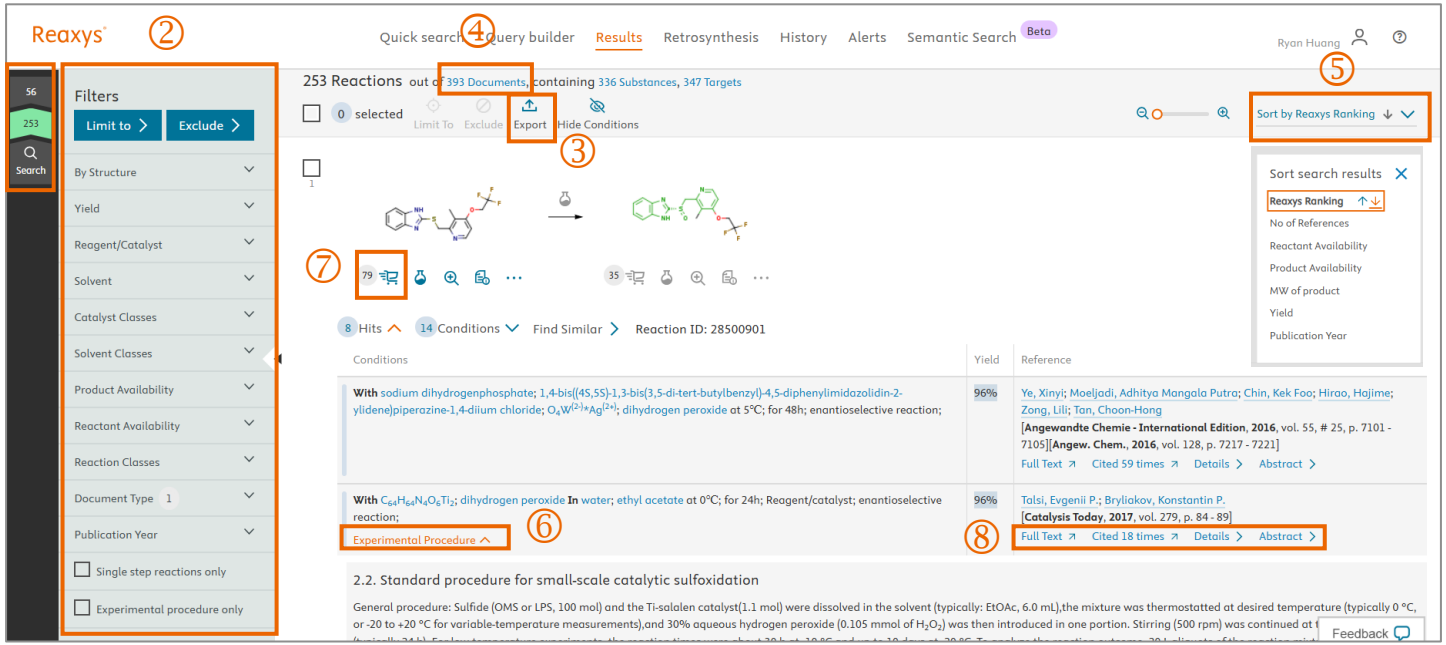
點擊來調用一個項目。

- OR ： 或
- AND ： 和
- NOT ： 不包括
- NEAR ：雙方必須靠近對方
- NEXT ：雙方必須靠近並保留前後順序
- PROXIMITY ：兩個靠近的資料格

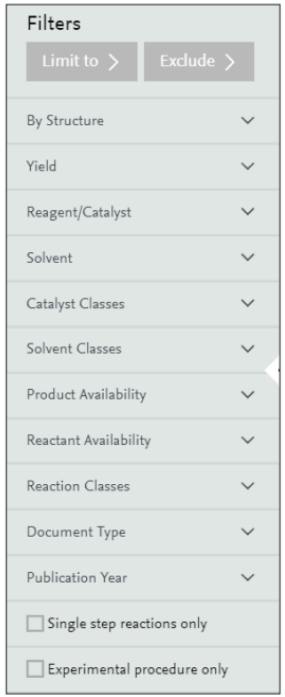
反應式搜尋結果介面

Reaxys Ranking:
預設依實用性順序推薦，可調整依年份或產量排序。

< 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 搜索結果的排序推薦
⑥ 詳細實驗步驟
⑦ 商業試劑資訊
⑧ 文獻出處、引用強度、原文連結

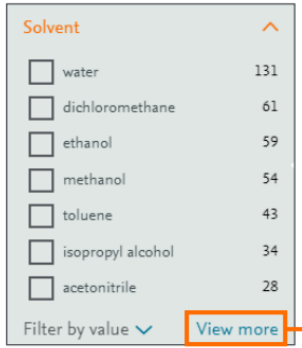


反應式搜尋結果篩選工具

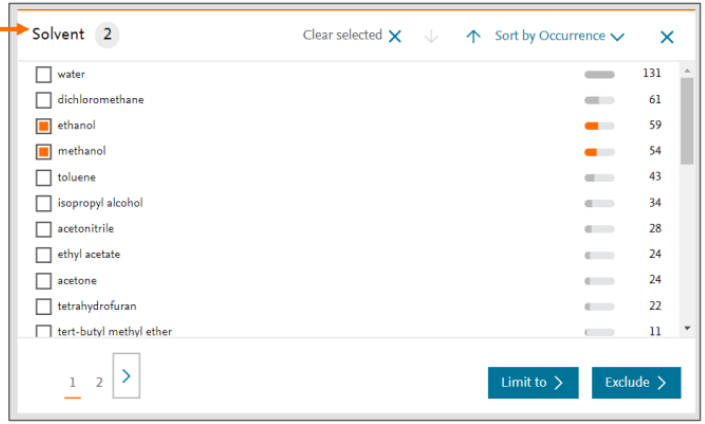


← 結構
← 產率
← 試劑、催化劑
← 溶劑
← 催化劑類別
← 溶劑類別
← 產物的可能性
← 反應物的可能性
← 反應類別
← 來源的種類(文獻、專利)
← 出版年份
← 縮小到只有一步反應
← 縮小到只包含實驗性術語的名單

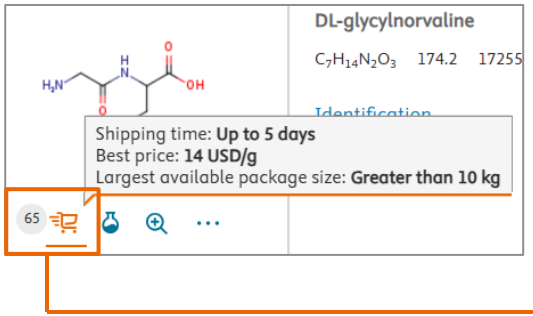
例如：溶劑的過濾



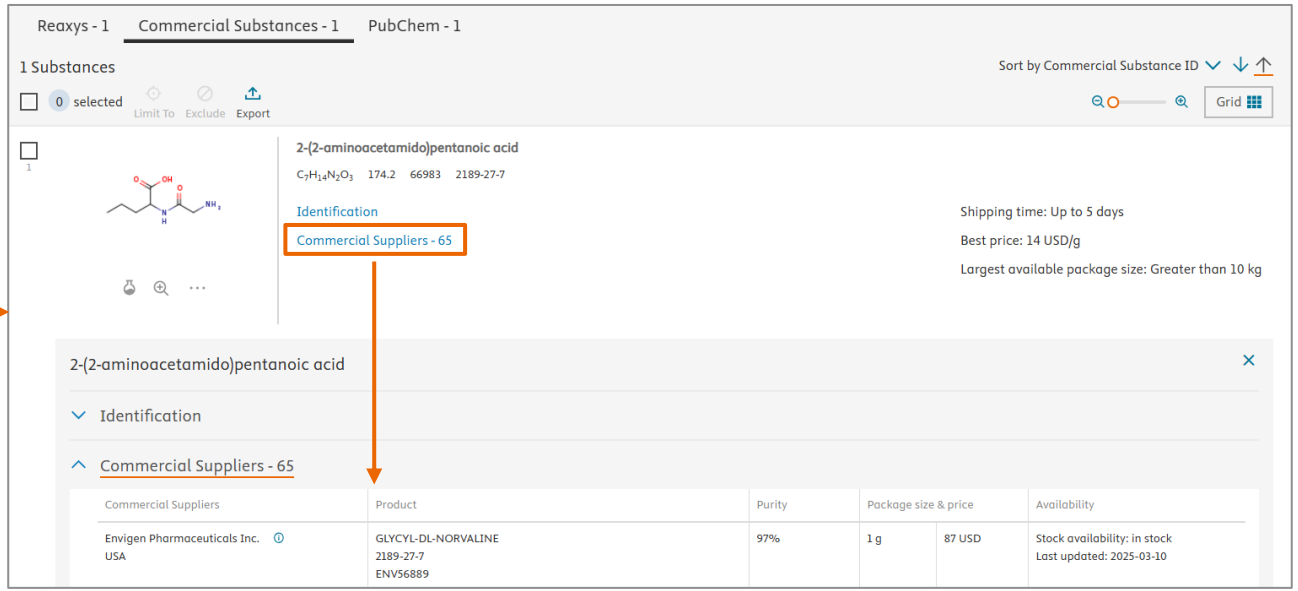
- 每個專案的細目可以通過點擊打開。
- 這些專案按照案件數量的順序進行排序。
- 可以通過輸入數位或單詞來過濾專案。



商業試劑目錄資訊



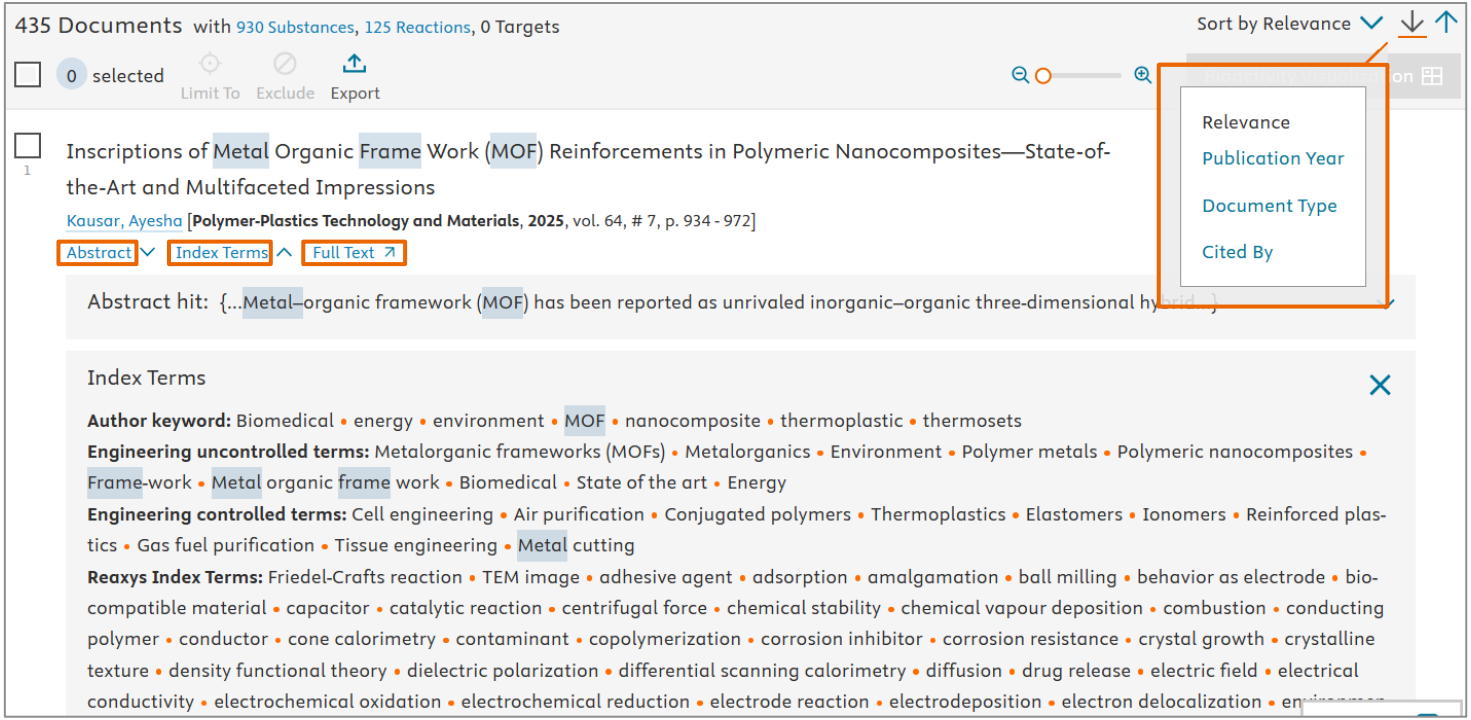
滑鼠滑至購物車上方會自動顯示最佳價格，購物車旁的數字代表全球有多少供應商供應此材料。



可以檢查供應商、商品編號、純度、包裝大小、價格和交貨日期。
篩選功能使您將搜索範圍縮小到特定供應商

文獻搜尋結果介面

Full Text：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)。
Index Term：文章的索引詞。
Abstract：查看文章的摘要。

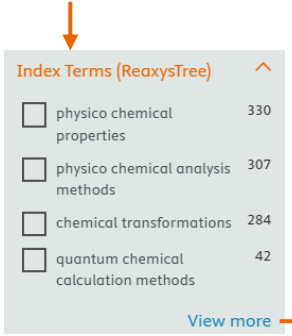


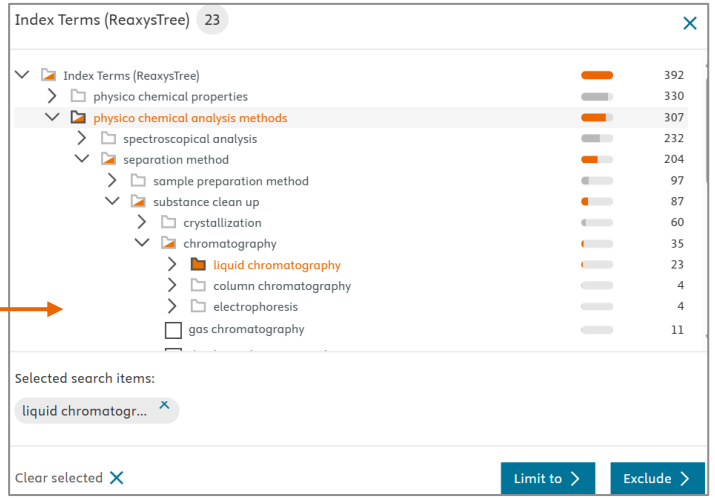
文獻搜尋結果篩選工具

- Publication Year ← 出版年份
- Document Type ← 文獻類型
- Authors of Scientific Documents ← 文獻作者
- Current Affiliation ← 目前隸屬機構
- Inventors of Patents ← 專利發明者
- Current Patent Assignee ← 目前專利授予者
- Patent Office ← 專利辦公室
- Journal Title ← 期刊名稱
- Substance Classes ← 化合物種類
- Reaction Classes ← 反應式種類

Index Terms (List) ← 文獻索引詞統計清單

Index Terms (ReaxysTree) ← 索引詞化學分類





用常見的化學概念來整理索引詞
以「層析」chromatography的文獻為例：點擊View more >physical chemical analysis methods >separation method >substance clean up >chromatography >liquid chromatography

Retrosynthesis探索合成途徑①

~如何繪製目標化合物的結構並進行合成分析~

需登入個人帳號以開啟
AI Predicted選項

X

繪製Retrosynthesis的目標化合物「**無須**」添加反應式箭頭

進行分析

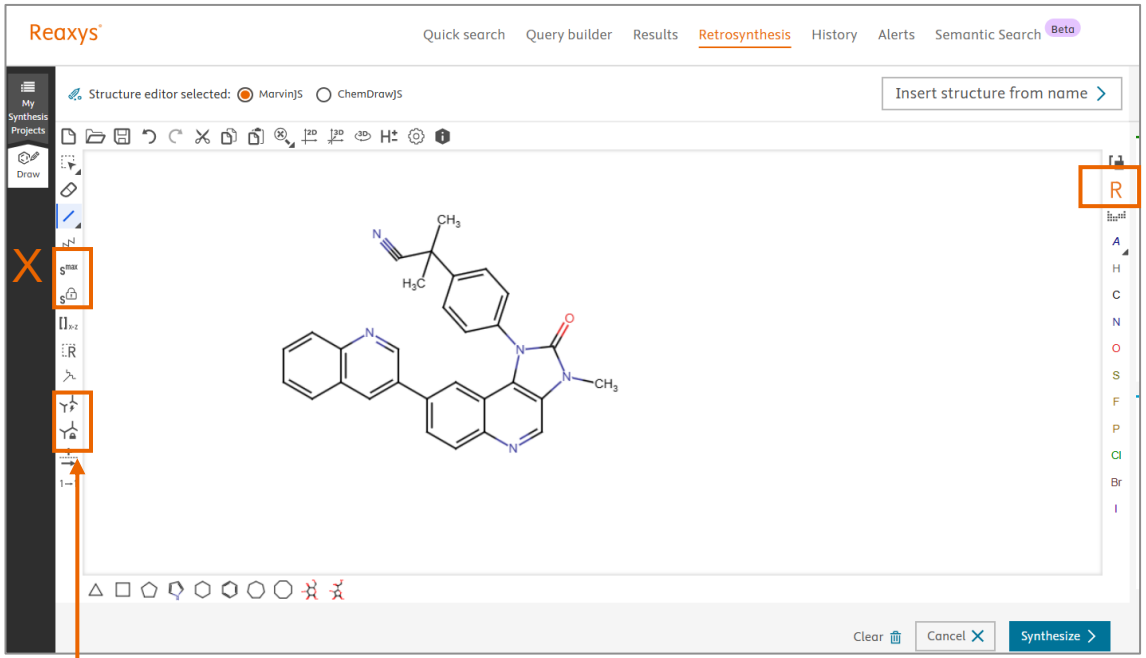
AI預測引擎會嘗試預測繪製分子的合成路徑，即便該分子無法找到任何參考資料。

當繪製的分子為published 結構，Reaxys呈現文獻中報導的合成路徑，若繪製的分子為novel分子，結果會顯示0

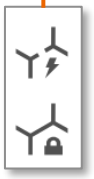
Retrosynthesis探索合成途徑②

~如何更精準地控制AI的合成規劃策略~

不使用Atom lock標記



目標分子需繪製完整，不使用Generics group，例用「ALT」來代表Akyl group

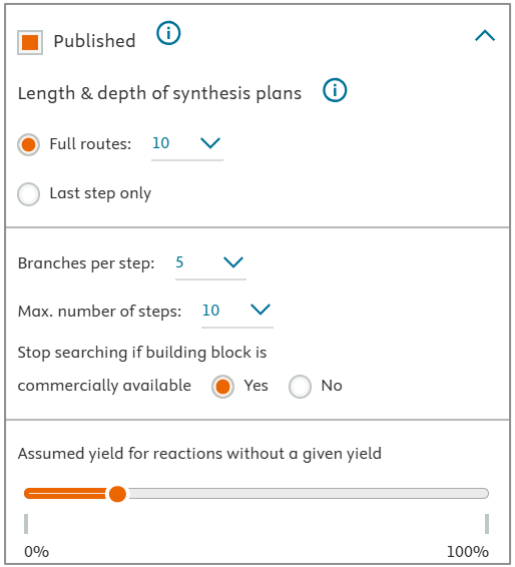


Make/Break工具，每個目標分子可在一個鍵上標示Make/Break，該鍵將被優先打斷，主導合成規劃策略。

Protect(No change)工具，每個目標分子可有數個鍵標示Protect，該鍵將被保留於整個合成計畫，影響合成規劃策略。

Retrosynthesis探索合成途徑③

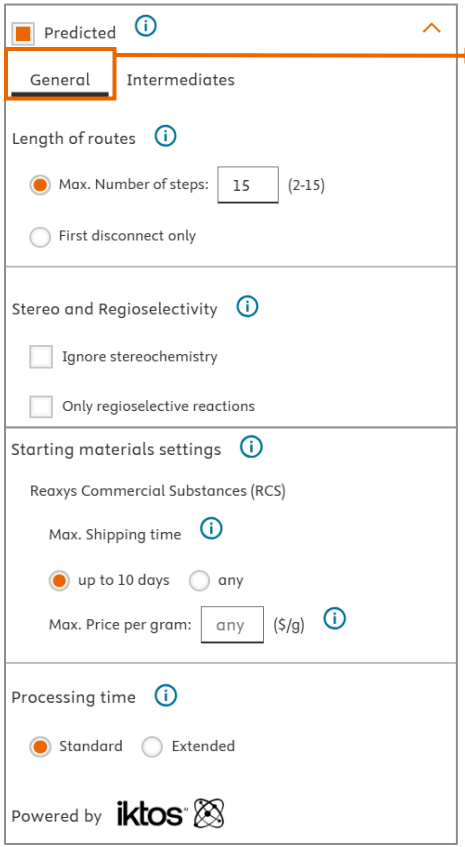
~如何調整逆合成分析參數Published~



- **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 →建議關閉(因為大分子有販售)**
- **設定各反應的允許產量**

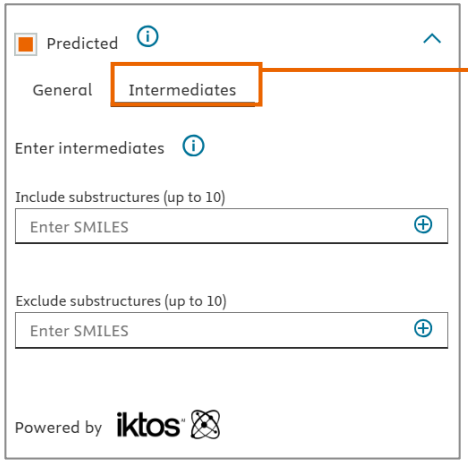
Retrosynthesis探索合成途徑④

~如何調整逆合成分析參數Predicted~



基本設定

- 生成的路最大的步驟數
- 忽視立體化學選擇性
- 考慮立體化學選擇性
- 合成材料僅使用有庫存材料
- 合成材料價格上限
- AI計算時間(Standard約10分鐘)
若分子較複雜Extended設置可長達30分鐘，但有更高機會找出更多路徑。



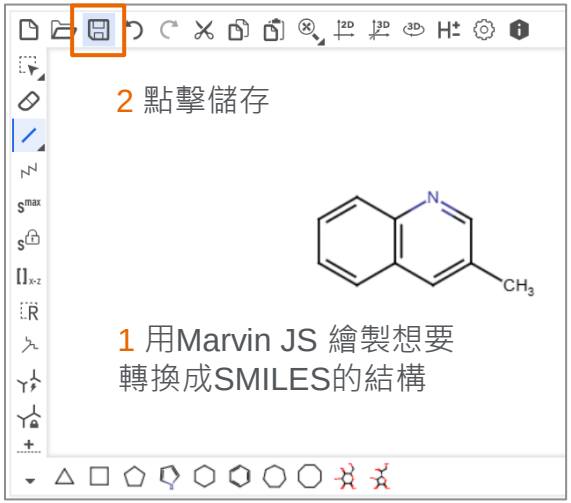
中間產物

- 可要求AI一定要採用某個化合物作為中間產物
- 可要求AI避免某個化合物作為中間產物

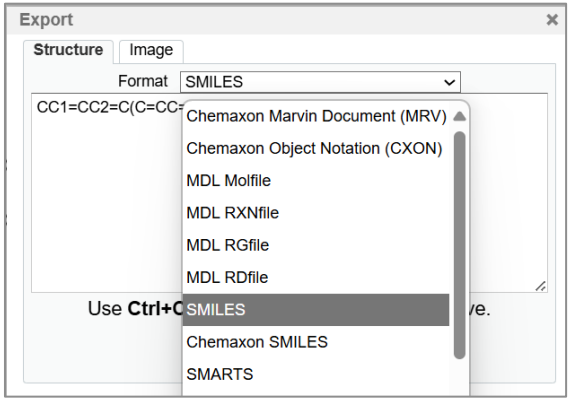
本功能需將結構預先轉換成SMILES格式，操作方法見下頁。

Retrosynthesis探索合成途徑⑤

~將中間產物結構轉為SMILES格式~



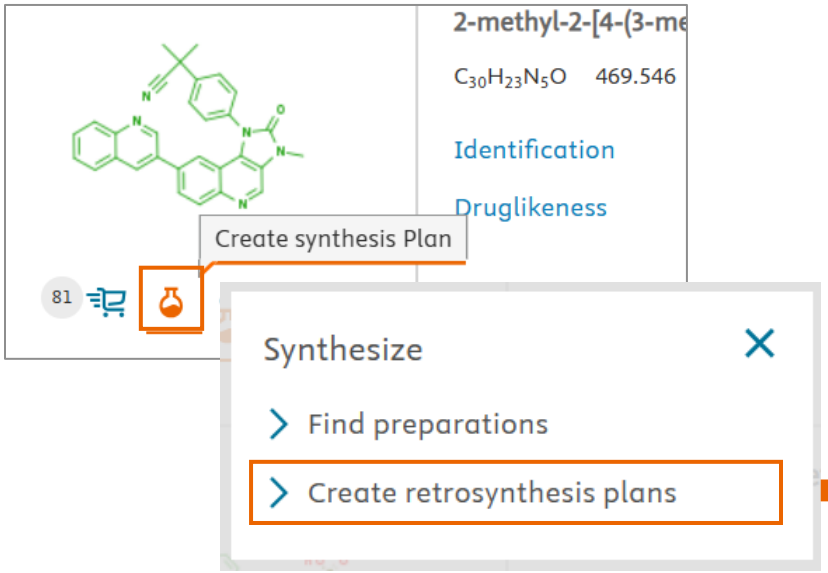
3 選擇SMILES格式



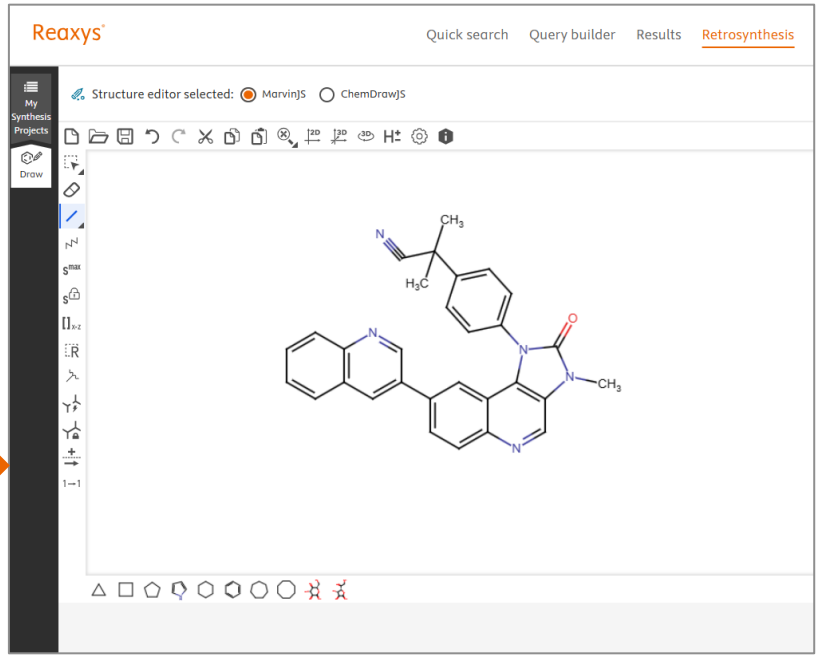
4 呈現的字串為SMILES格式，可反白複製

Retrosynthesis探索合成途徑⑥

~如何分析化合物搜尋結果中感興趣化合物的合成途徑~

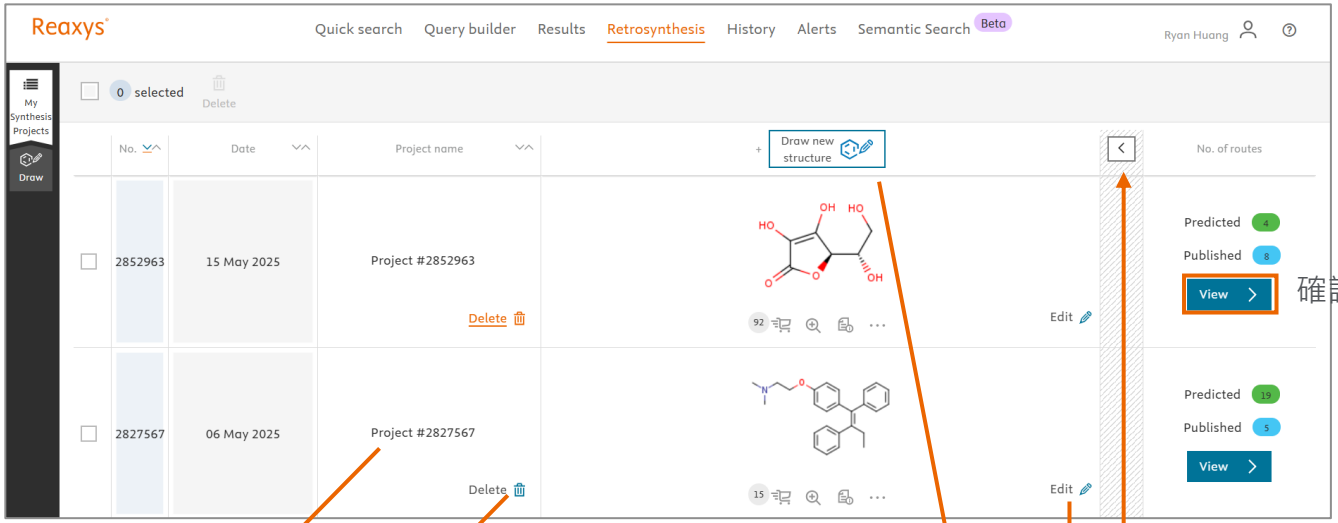


自動將您查到的化合物代入Retrosynthesis面板



Retrosynthesis探索合成途徑⑦

~合成途徑開發的專案管理介面~



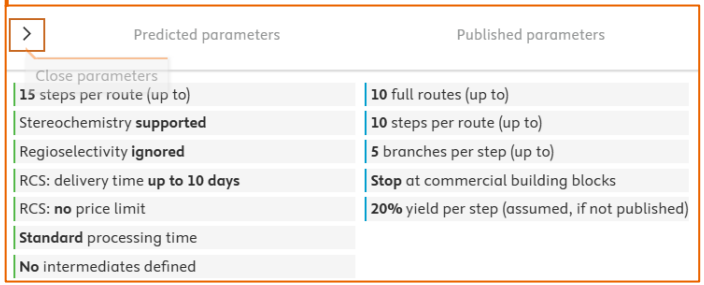
確認路徑

點擊重新命名

刪除

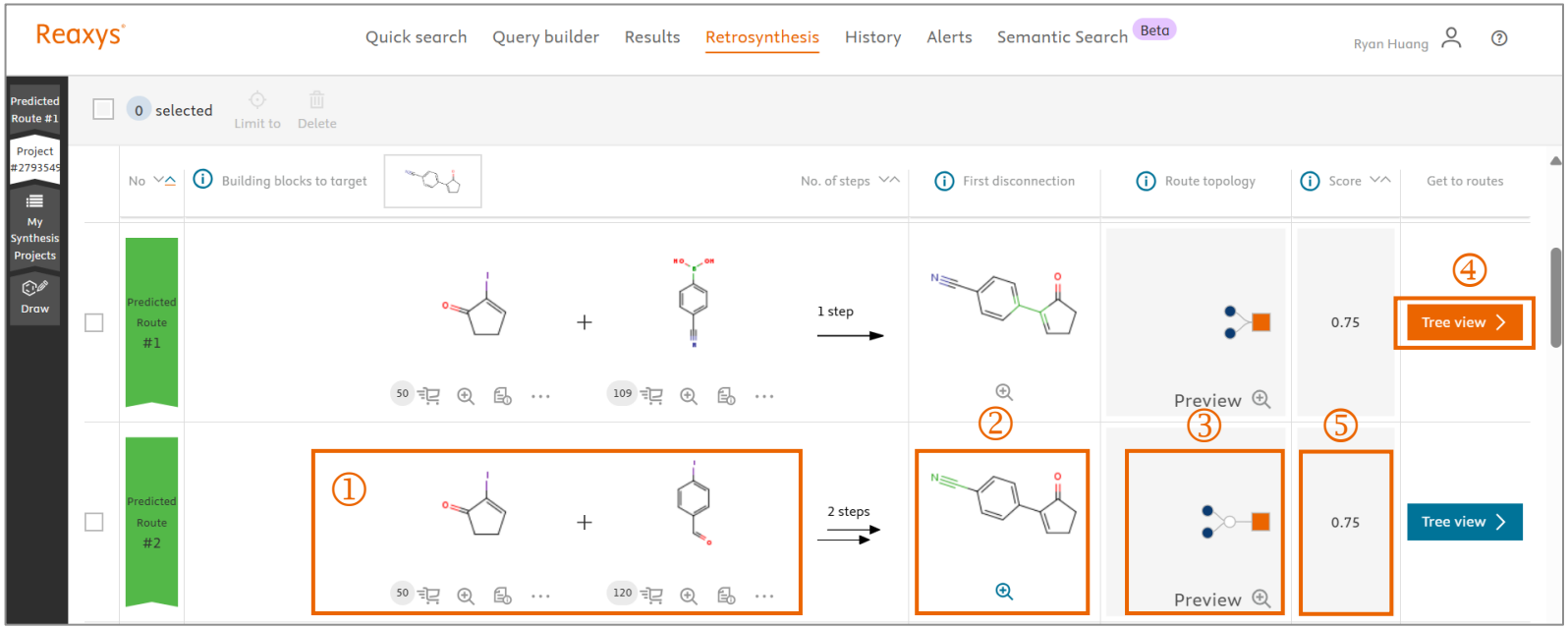
創建並分析一個新的結構

調整參數並重新分析
或適度修改目標分子



Retrosynthesis探索合成途徑⑧

~生成的合成路線的清單界面~



①該合成路徑需要的起始原料與材料金額

②第一個斷鍵位置

③路徑長度與分支呈現，方便比較。

④詳細路徑以樹狀路徑呈現

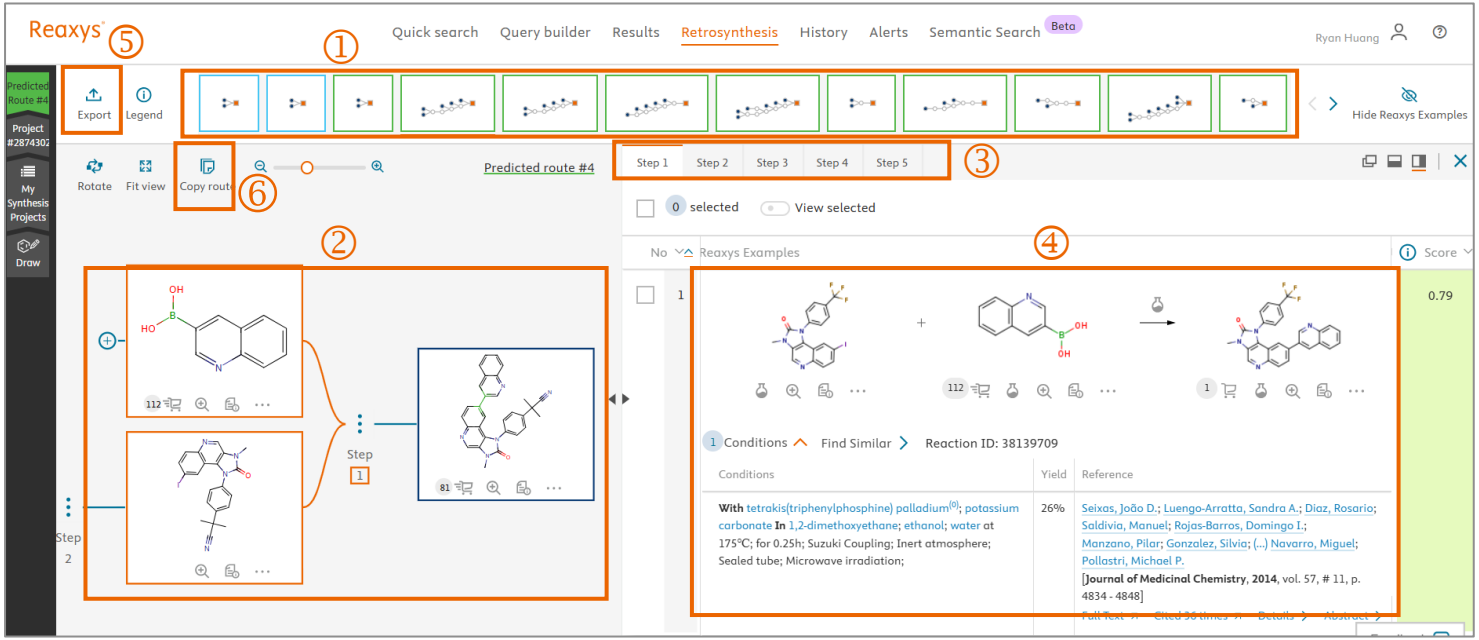
⑤Confidence Score：評估該預測路徑的信賴度，從1分至0分。(1分很有可能，0分非常不可能)

Retrosynthesis探索合成途徑⑨

~合成途徑的樹狀圖畫面~

＜項目＞

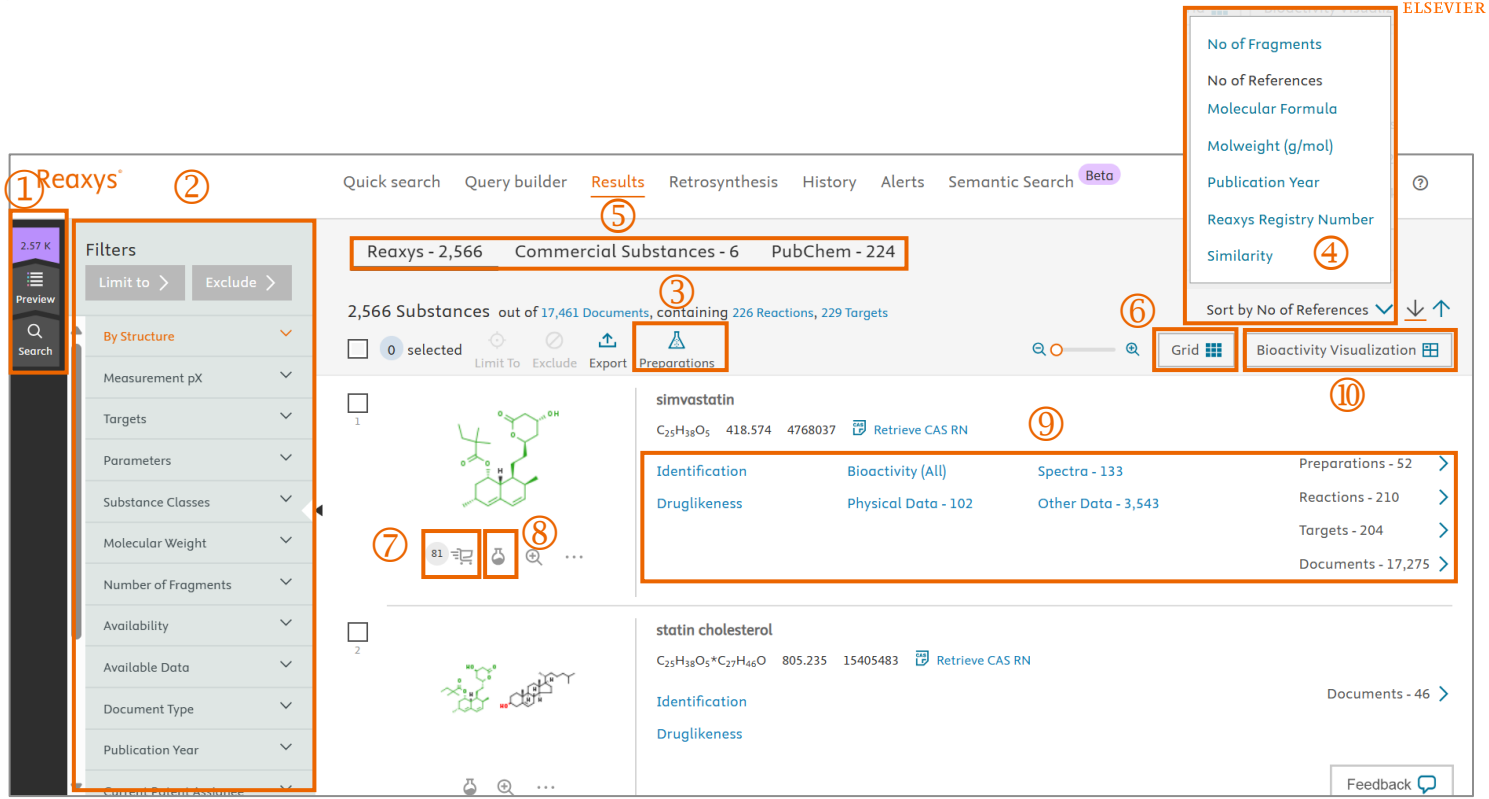
① 切換至其他合成路徑
② 預測路徑
③ 合成步驟切換
④ 相似反應的參考文獻
⑤ 匯出功能
⑥ 複製路徑可直接於ChemDraw貼上



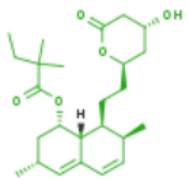
化合物檢索結果畫面

＜項目＞

① 瀏覽搜索結果的軌跡
② 過濾功能
③ 顯示化合物製備方法
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 化合物的地物理化學實驗數值、光譜、生物活性數據與合成方法
⑩生物活性熱圖分析



詳細的化合物數據



simvastatin

$C_{25}H_{38}O_5$ 418.574 4768037 79902-63-9

Identification | Bioactivity (All) | Spectra - 133

Druglikeness | Physical Data - 102 | Other Data - 3,543

④ Preparations - 52 >

⑤ Reactions - 210 >

⑥ Targets - 204 >

⑦ Documents - 17,275 >

Bioactivity (All)

- In vitro: Efficacy - 3692
- In vivo: Animal Model - 2145
- Metabolism - 547
- Pharmacokinetic - 2767
- Toxicity/Safety Pharmacology - 1305

Physical Data - 102

- Melting Point - 15
- Density - 5
- Association (MCS) - 10
- Chromatographic Data - 12
- Circular Dichroism - 1

Spectra - 133

- NMR Spectroscopy - 61
- IR Spectroscopy - 18
- Mass Spectrometry - 28
- UV/VIS Spectroscopy - 21
- Raman Spectroscopy - 3

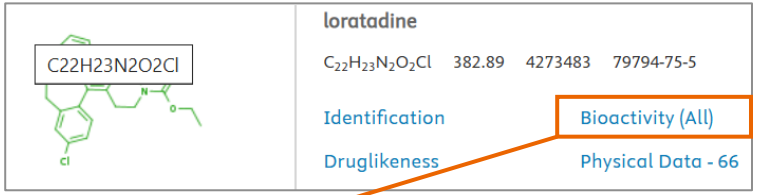
④製備反應(作為產物)

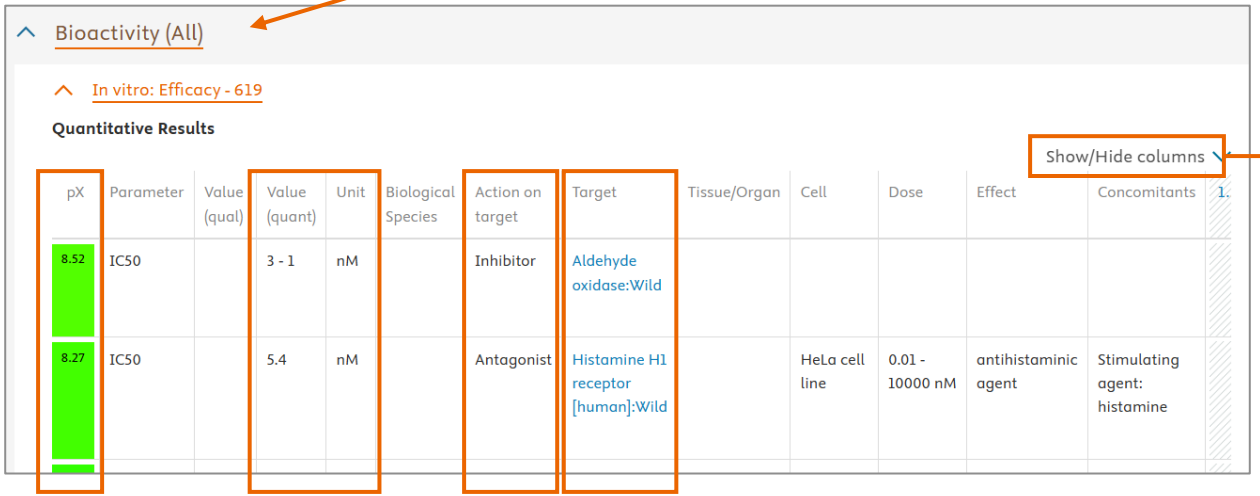
⑤包含此化合物的所有反應

⑥與此化合物有活性證據的靶點蛋白

⑦參考文獻

生物活性數據介面





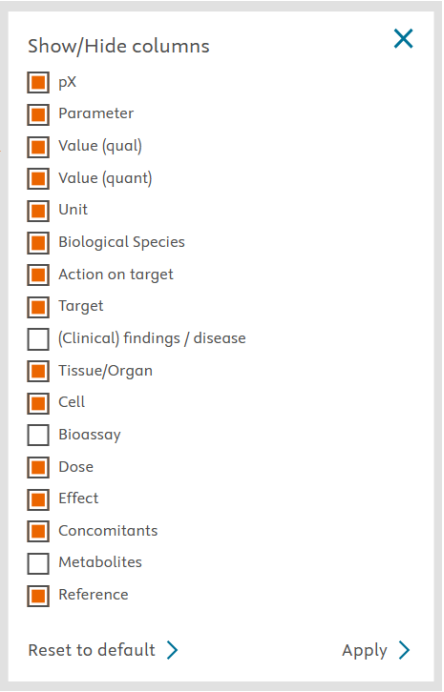
pX值。數字越大活性越高

實驗數值

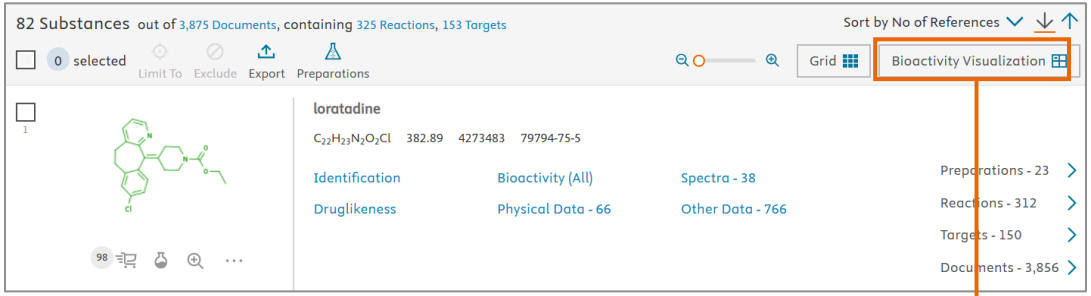
作用機制

活性蛋白靶點

更多的參數預設隱藏，手動開啟。



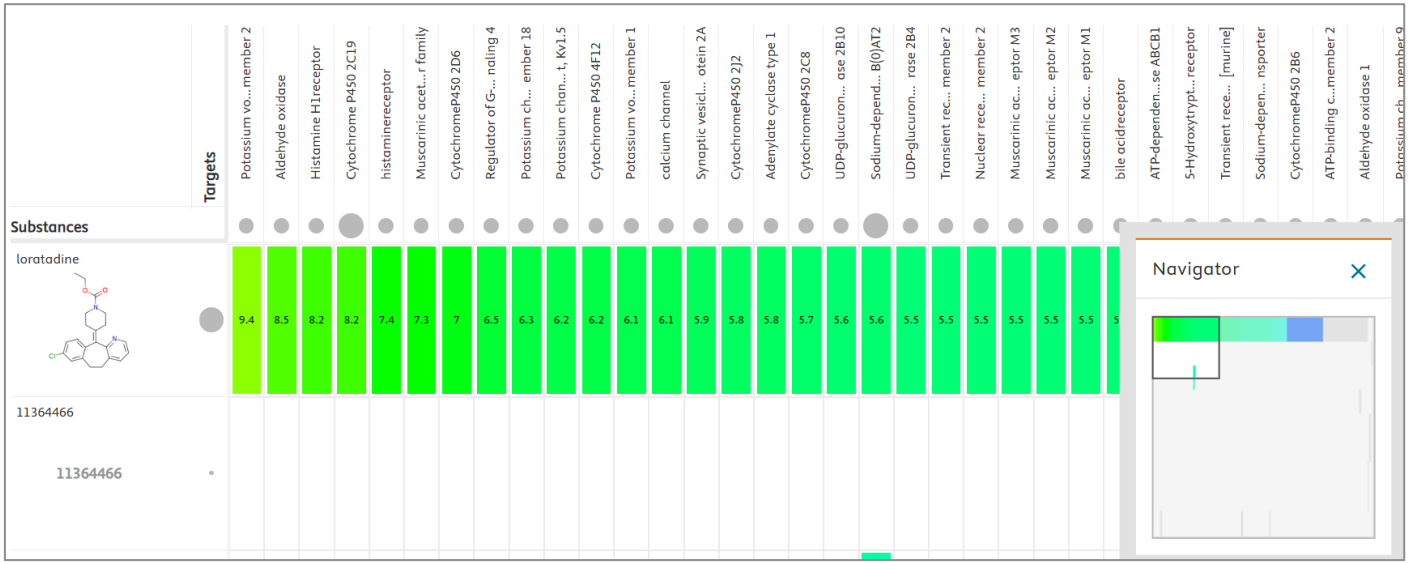
生物活性視覺化分析①



針對一個或多個化合物進行
生物活性視覺分析

橫軸：蛋白質靶點/生物效應

縱軸 化合物文庫



生物活性視覺化分析②

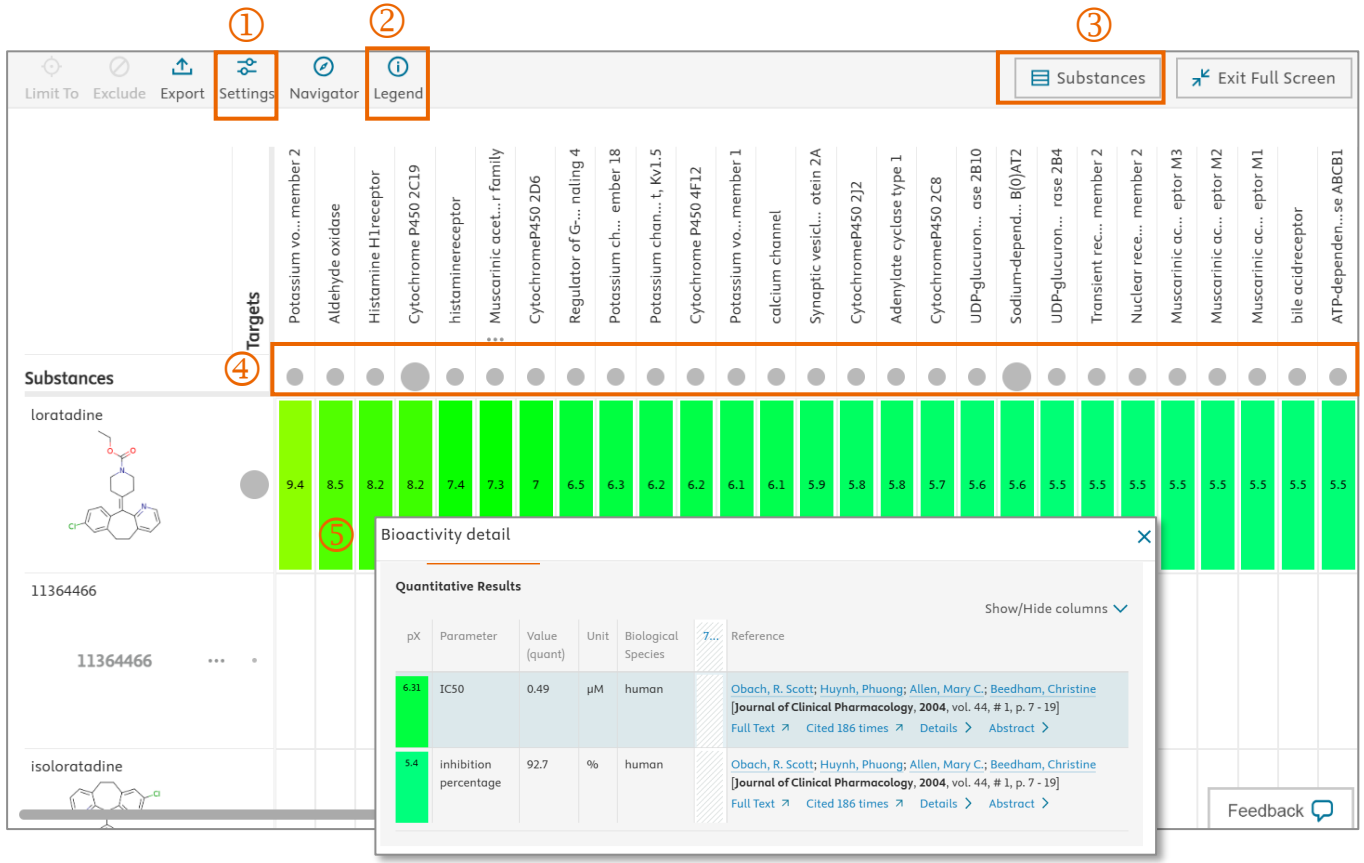
①橫軸調整Target/Effects

②圖示說明

③返回化合物列表

④資料量指示，資料越多圓圈越大

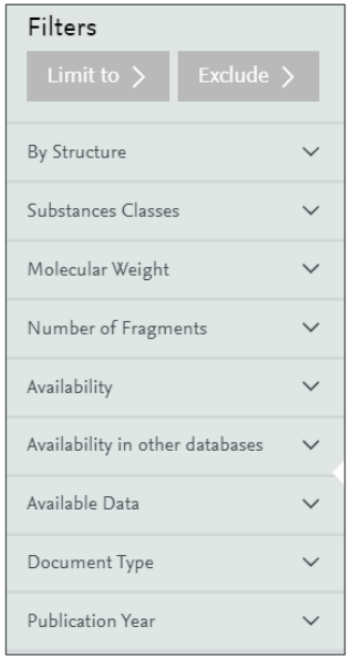
⑤追蹤文獻出處



生物活性視覺化分析篩選工具

- By Structure ← 以次結構篩選
- Measurement pX ← pX值篩選
- Parameters ← 實驗數值類型 (IC50；Quantatative；Cmax、Tmax)
- Targets ← 蛋白靶點
- Target Species ← 蛋白靶點物種
- Target Type ← 蛋白靶點類型 (野生型；突變型)
- Substance action on target ← 化合物作用機轉
- Molecular Weight ← 分子量篩選
- Effect ← 生物活性效益
- Document Type ← 文獻類型
- Publication Year ← 發表年份
- Current Patent Assignee ← 目前專利授予者

複合搜尋結果的篩選工具



← 構造

← 化合物分類

← 分子量

← 分支數

← 取得的可能性

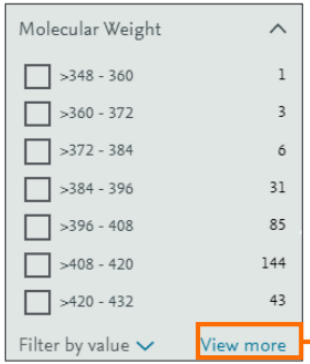
← 包括在其他資料庫中

← 可供查看的資料（如反應、物理特性等）

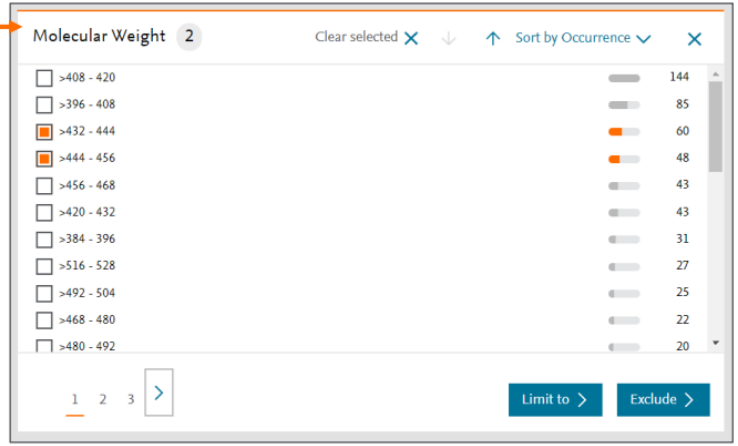
← 文獻的種類（文獻、專利等）

← 出版年份

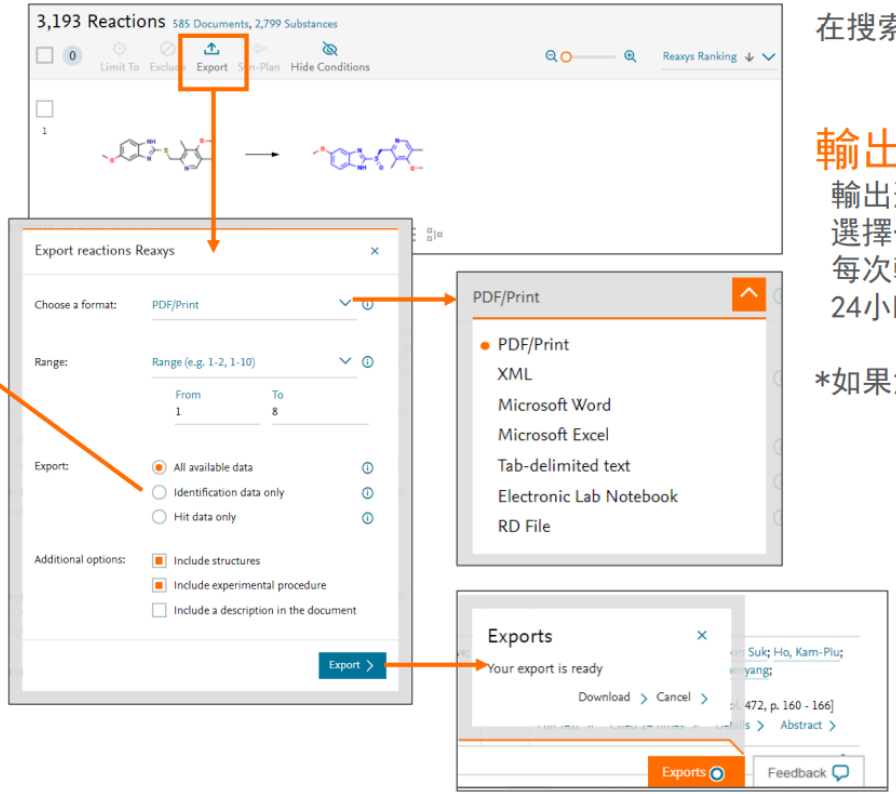
例如：分子量的過濾



· 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。



搜尋結果的輸出



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：

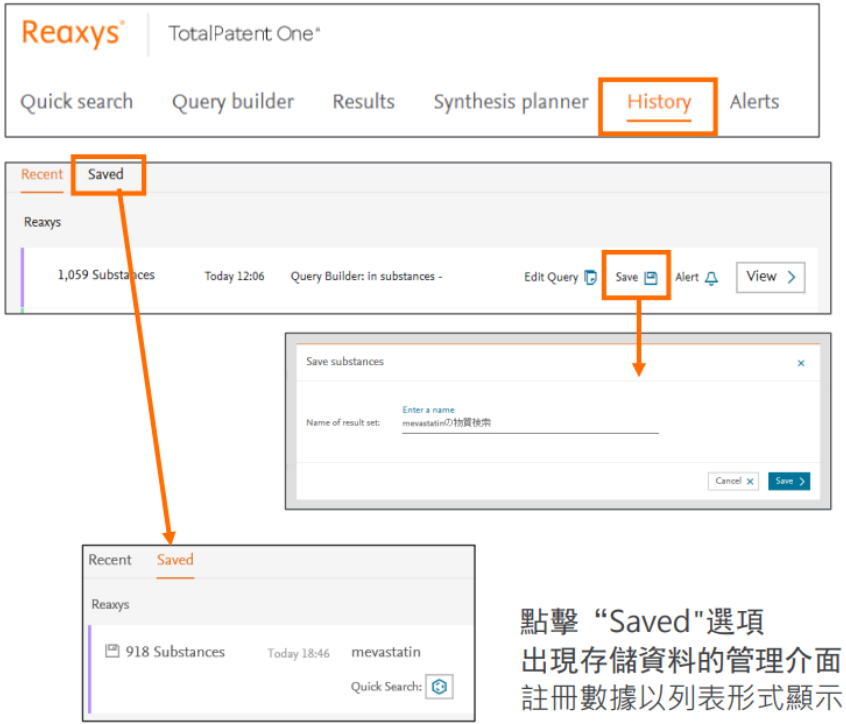
輸出形式、輸出範圍、輸出內容
選擇一個選項，然後點擊輸出按鈕
每次輸出最多5000個項目
24小時內最多10次

*如果您未登錄通過IP身份驗證，則無法導出。

搜尋結果的保存

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」

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

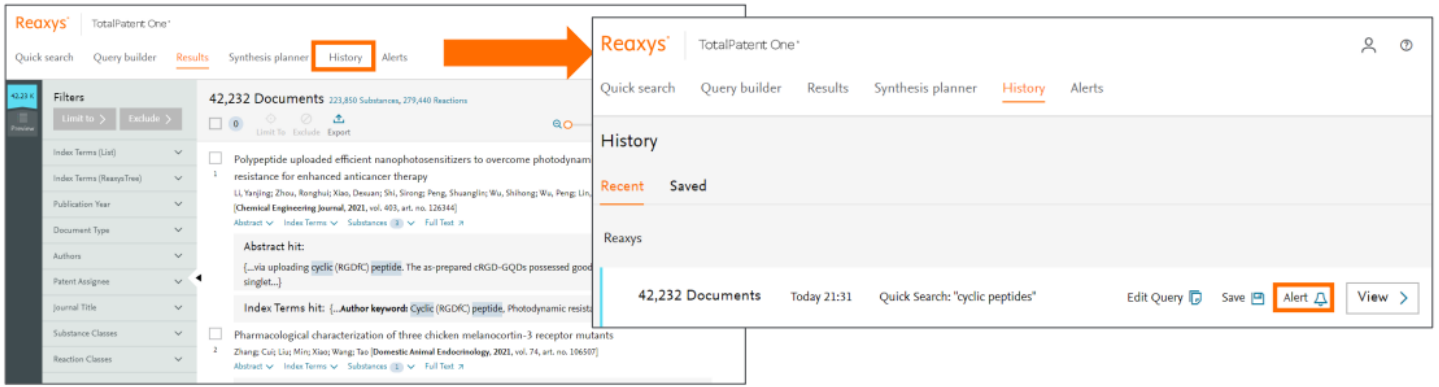
Alert會儲存你的搜索指令，資料庫會定期自動提供符合標準的搜索結果。

- 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：

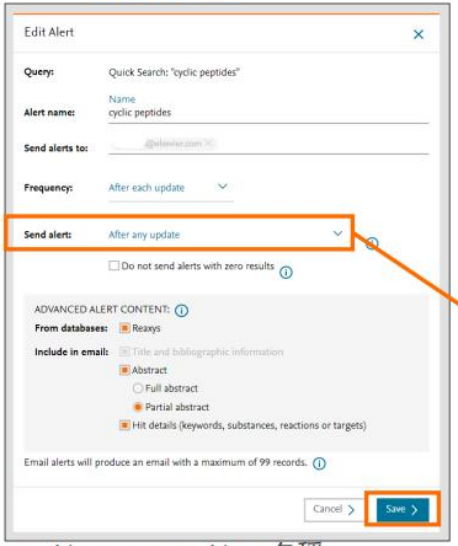
① 在執行了您設置的Alert搜索後，打開歷史記錄。

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

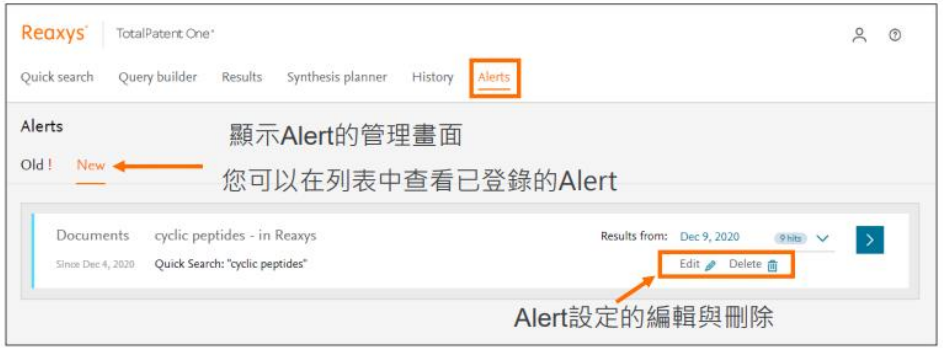
Alert的設定：

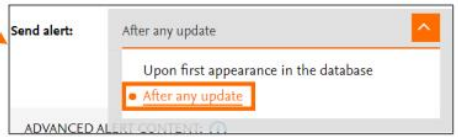


- Alert name: Alert名稱
- Send alerts to: 設定送達的電子郵件地址(可複數輸入)
- Frequency: 通知頻率（可以指定星期和日期。）
- Alert Content: 所需的資訊內容

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

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

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