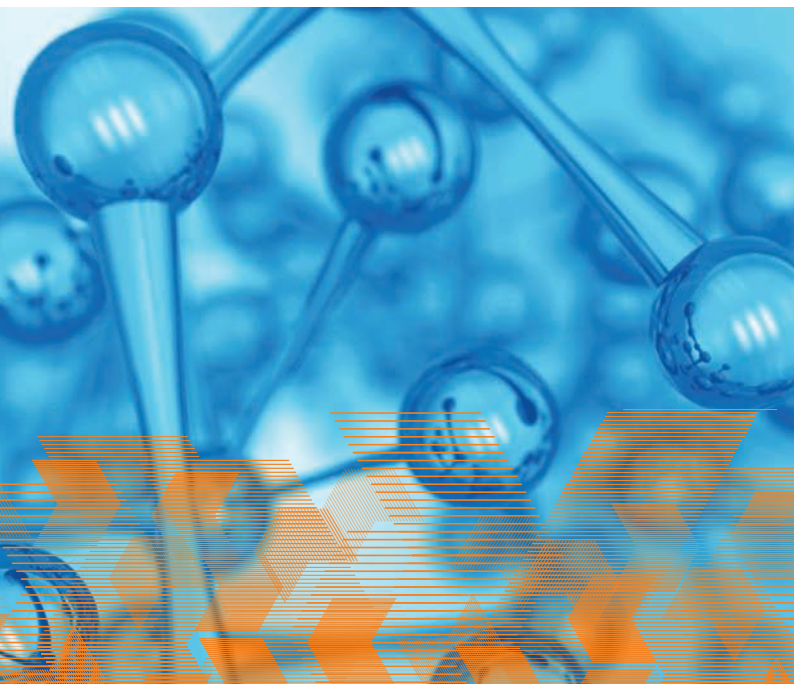


# Reaxys<sup>®</sup>

## 快速使用指南

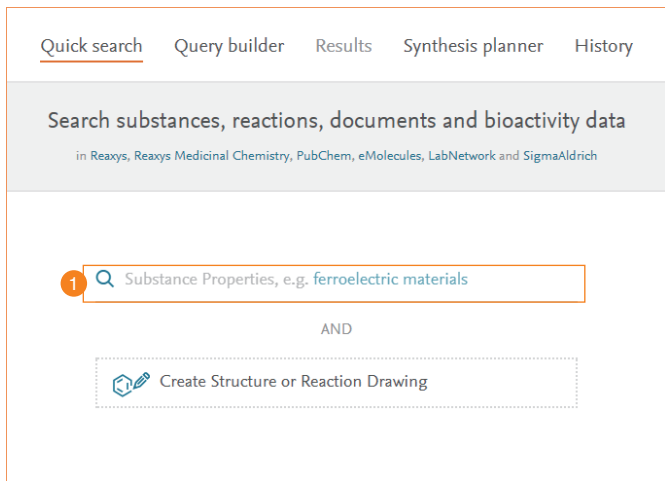


### 化学数据与文献的最简路径

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的搜索界面，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。



# 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

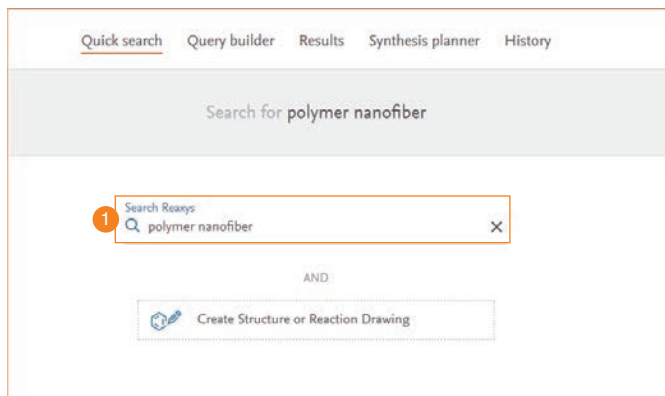
1

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(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>; lapatinib; 102605-70-7 etc.）。

## 1.1.1 Quick search-文献检索




Quick search   Query builder   Results   Synthesis planner   History

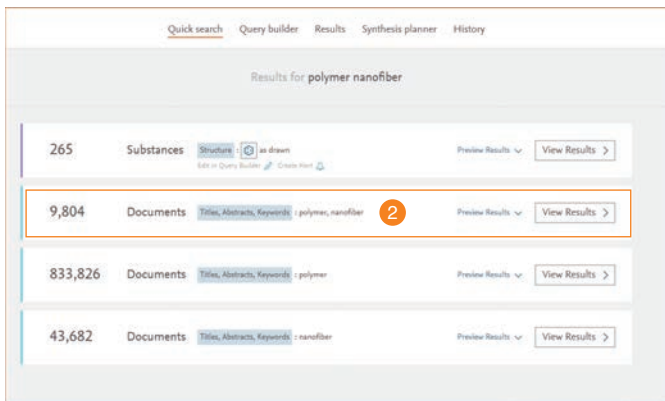
Search for polymer nanofiber

1

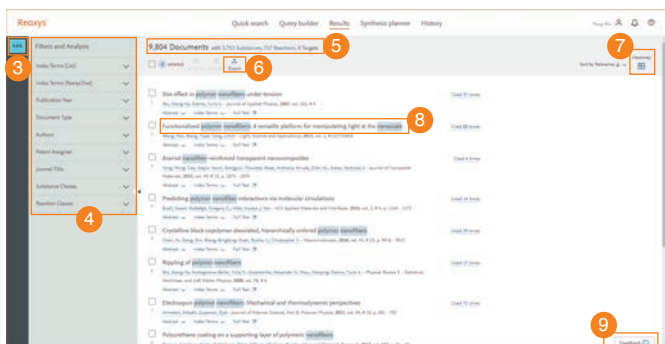
AND

 Create Structure or Reaction Drawing

- 1 例如：检索检索 ‘聚合纳米纤维相关的文献’

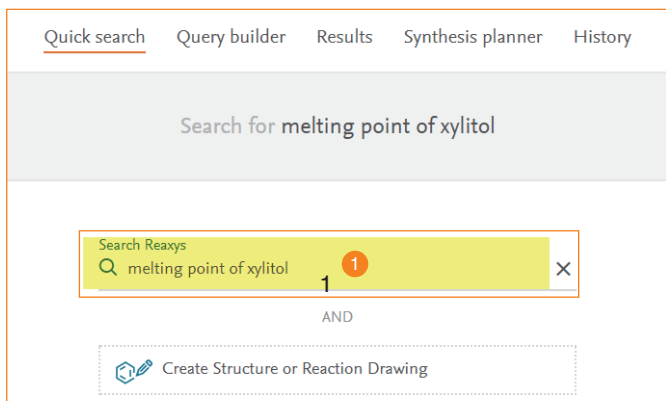


- 2 预览界面不但给出‘polymer nanofiber相关文献’，还给出了相关化合物供参

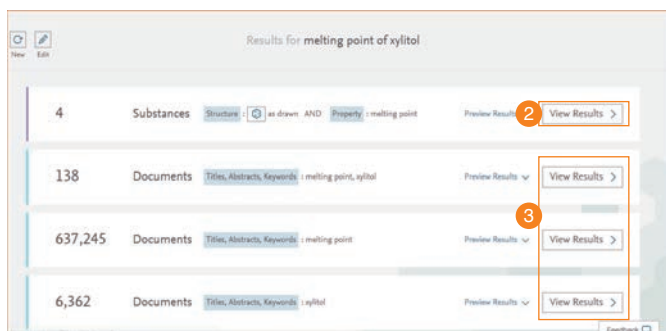


- 3 导航栏
- 4 Filter（筛选器），对文献集进一步筛选，如：
- 5 结果集总结，可以直接查看这些文献中的，化合物，反应，以及靶点信息
- 6 结果导出
- 7 这些文献中，涉及到的，化合物靶点生物活性构效关系图
- 8 检索词高亮
- 9 问题反馈

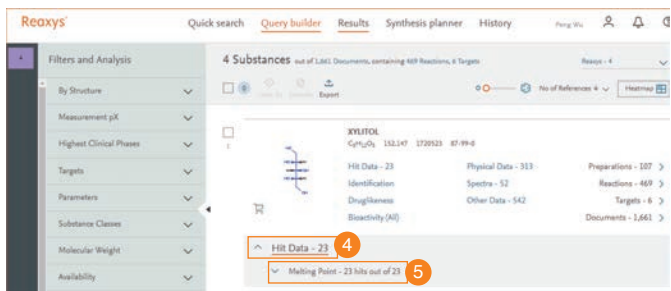
## 1.1.2 Quick search-化合物性质检索



- 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



- 4 Hit data 显示希望检索的具体数据      5 点击展开结果

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location (Melting Point)	Comment (Melting Point)	Reference
92 - 98		Paragraph 0126		Yonsei University Industry-Academic Cooperation Foundation.; woosin medice co. ltd; Hwang, Sung Joo; Kang, Han; Song, In Ho; Kwon, Min Jun; Seon, Bo Kyung - KR2016/79954, 2016, A Full Text <a href="#">↗</a> Details <a href="#">&gt;</a> Abstract <a href="#">&gt;</a>
107.2				Fuji, Kahori; Itatsu, Ken-Ichi; Kume, Mijae; Yoshino, Takeshi; Yoshitani, Yasuo; Sugano, Kyojiko; Terada, Katsuhide - Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 2015, vol. 63, # 5, p. 311 - 317 Full Text <a href="#">↗</a> Details <a href="#">&gt;</a> Abstract <a href="#">&gt;</a>
93				Gowda, Jayant L; Nandibewor, Sharanappa T. - Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry, 2012, vol. 42, # 8, p. 1183 - 1191,9 Full Text <a href="#">↗</a> Details <a href="#">&gt;</a> Abstract <a href="#">&gt;</a>
94.49	H2O		Decomposition	Wang, Shui Li; Qiu-Sheng; Li, Zhao; Su, Ming-Gao - Journal of Chemical and Engineering Data, 2007, vol. 52, # 1, p. 186 - 188 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 12 times <a href="#">↗</a> Details <a href="#">&gt;</a> Abstract <a href="#">&gt;</a>

- 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  

×

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**

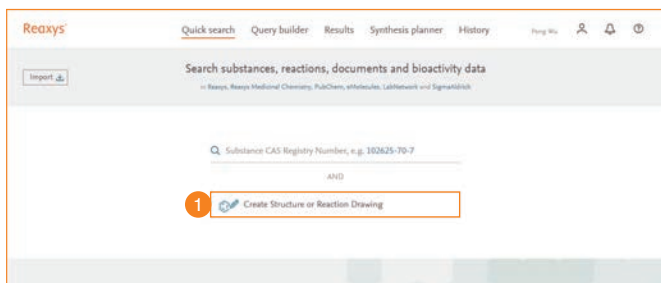
127,608	Reactions <span style="border: 1px solid #ccc; border-radius: 3px; padding: 2px;">Condition : suzuki coupling</span>	Preview Results <a href="#">↕</a>	View Results <a href="#">&gt;</a>
15,369	Documents <span style="border: 1px solid #ccc; border-radius: 3px; padding: 2px;">Titles, Abstracts, Keywords : suzuki coupling</span>	Preview Results <a href="#">↕</a>	View Results <a href="#">&gt;</a>

- 2 一次性获得相关反应及其相关文献

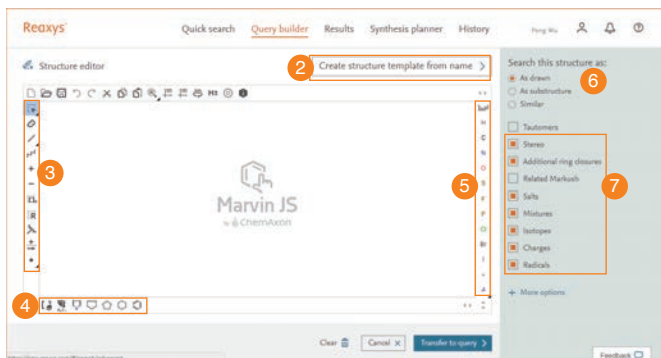


- ③ 各种反应相关筛选器
- ④ 高亮检索词条，和相关试剂，与检索词条相关条件结果集
- ⑤ 该反应全部反应条件，包含‘非检索词条（Suzuki coupling）’
- ⑥ 增加显示更多反应条件

## 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



Count	Category	View Results
226	Substances	1
1,039	Targets	2
198	Substances	3
117	Reactions	4

- 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

The screenshot shows the Reaxys interface with the 'Results' tab selected. On the left, a 'Filters and Analysis' sidebar is visible, with a red box labeled '5' around it. The main area displays '226 Substances' with a search bar labeled '6' and a 'No of References' field labeled '7'. The first substance, gefitinib, is highlighted with a red box labeled '8' around its 'Synthesize' button. To its right, a table of properties is shown with a red box labeled '9' around it. Further right, a list of related data is shown with a red box labeled '10' around it.

- 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

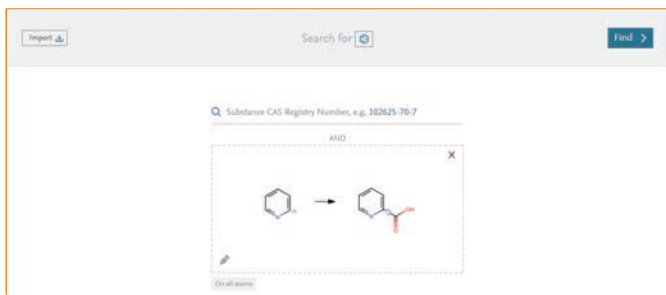
## 快速设计合成路线，直观清晰

The screenshot shows the Reaxys 'Synthesis planner' interface. It displays a reaction scheme for 'Synthesis plan 1'. The scheme starts with three starting materials on the left, which are combined into an intermediate (2) with a 98% yield. This intermediate is then converted into another intermediate (3) with an 87% yield, which is finally converted into the target molecule (4) with a 94% yield. A red box labeled '1' is around the 'Export' button at the top left. A red box labeled '5' is around a zoom control icon at the top right.

- 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



The screenshot shows the Reaxys search results page. The top navigation bar includes "Quick search", "Query builder", "Results", "Synthesis planner", and "History". The main content area displays "2,346 Reactions out of 983 Documents containing 3,120 Substances, 402 Targets". A specific reaction is highlighted, showing a benzene ring with a fluorine and bromine substituent reacting with methanol (H<sub>3</sub>C-OH) and a carbonyl compound (C=O) to form a substituted benzene ring. The reaction is labeled "Reaction ID: 10794027". Below the reaction, there are sections for "Conditions" and "References". The "Conditions" section lists three entries, each with a yield, conditions, and experimental procedure. The "References" section lists three entries, each with a location in a patent page and a full text link. The interface includes a left sidebar with "Filters and Analysis" options, a top navigation bar, and a bottom feedback button.

- 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，以及不同文章的相同反应归纳在一起
- 4 反应来源

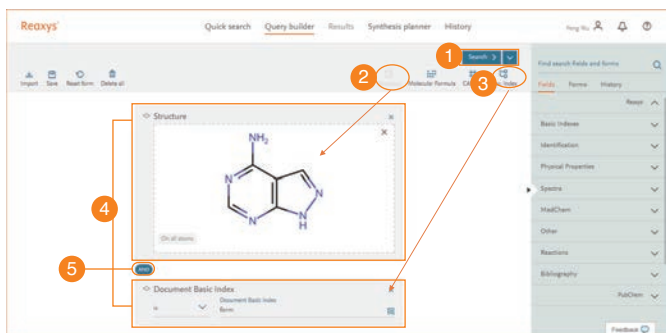
## 2. Query builder-自定义检索

The screenshot shows the Reaxys Query builder interface. The top navigation bar includes "Quick search", "Query builder", "Results", "Synthesis planner", and "History". The main content area is a large empty space with the text "Drag & Drop to build a new query". On the right side, there is a "Find search fields and forms" panel with a search bar and a list of search fields: "Fields", "Names", "History", "Basic Indexes", "Identification", "Physical Properties", "Species", "InChI", "Other", "Reactions", "Bibliography", and "FullChen". The interface includes a top navigation bar, a left sidebar with "Import" and "Export" buttons, and a bottom feedback button.

- 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

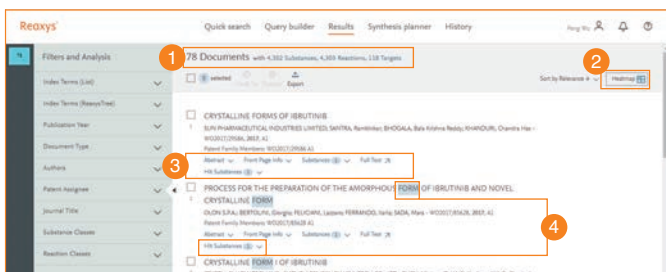
## 2.1 Query builder-组合信息检索

(检索某母核相关化合物，制剂信息)



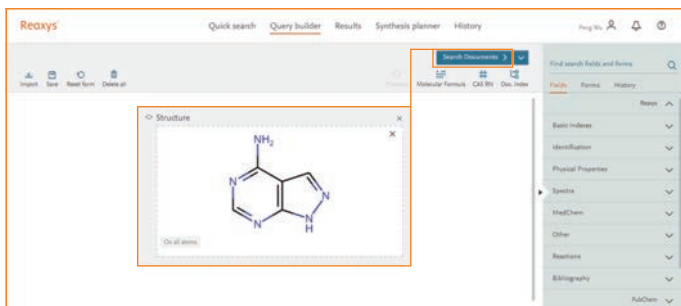
- 1 选择检索文献
- 2 结构编辑器
- 3 关键词索引
- 4 组合成综合信息检索组
- 5 逻辑连接符，确定不同模块之间逻辑关系

检索结果 - 检索某母核相关化合物，制剂信息



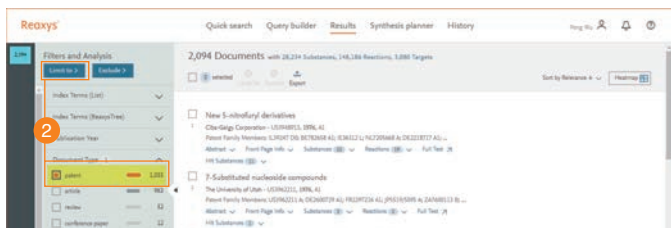
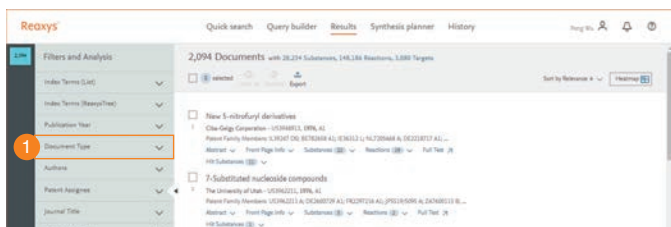
- 1 关于整个检索结果的总结，点击查看，相关化合物，反应以及靶点信息等
- 2 关于这个结果集，涉及到的生物活性的构效关系图
- 3 关于单篇文章的总结，摘要，专利标记信息，化合物（事实列），化学反应，原文来源等
- 4 检索关键词，检索结构式高亮，直接表现出与检索条件相关性

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



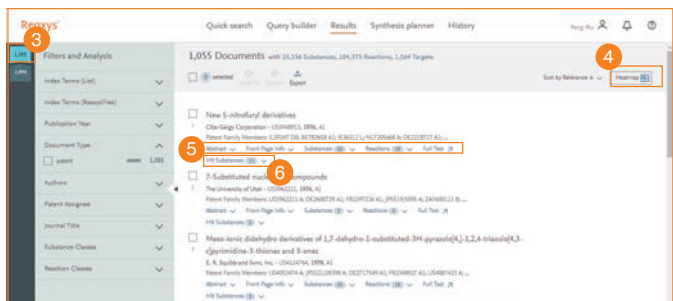
1 画入结构直接检索文献

### 检索结果



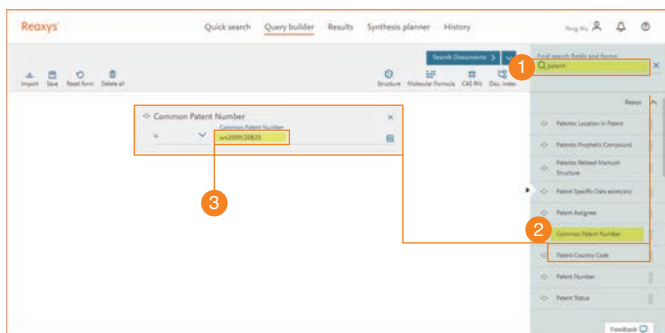
1 文献分类，筛选专利

2 勾选并筛选得到相关结构化合物的所有专利

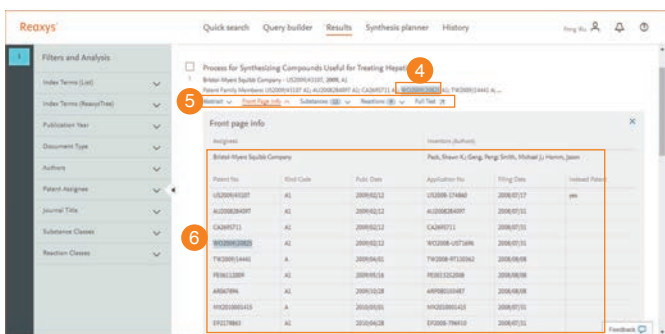


- 历史导航栏，点击回看历史筛选结果
- 该专利结果集包含的生物活性构效关系图
- 专利相关信息总结，摘要，家族专利号相关信息，实例化合物，反应等
- 专利中与检索结构相关化合物

## 2.2.2 Query builder – 专利标记检索专利（专利号）

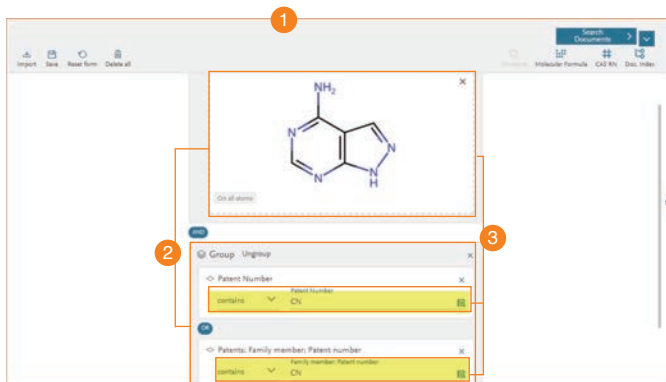


- 输入‘patent’，获得专利相关所有检索模块
- 点击添加，专利号检索模块
- 其他途径获得的专利号需要加工才能在Reaxys数据中检索专利，如：‘WO2009/020825’是专利原文中专利号，需要去掉‘斜线后面的0’变成‘WO2009/20825’才是Reaxys中收录的专利号

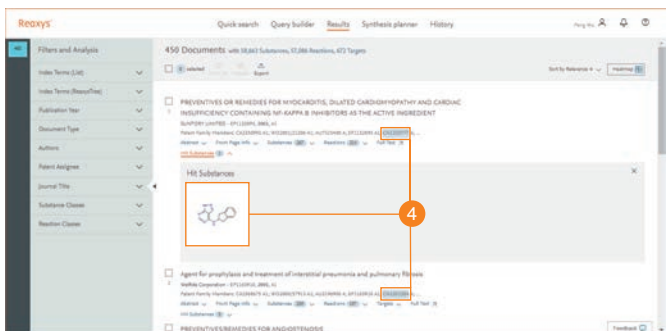


- 高亮检索的专利号
- 专利相关总结
- 家族号，以及其他专利标记的总结，可以通过任意的专利标记，检索到该篇专利

## 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

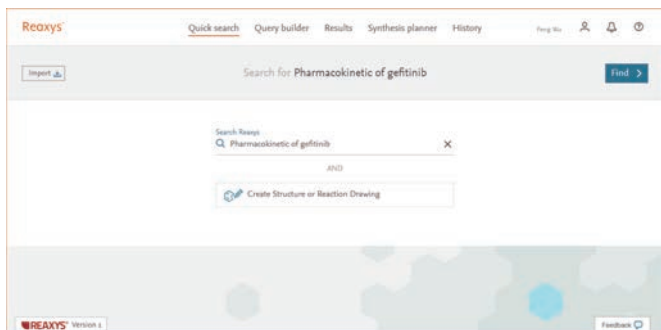
## 3. Reaxys Medicinal Chemistry – 药化信息检索

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

版权所有©2017 Elsevier B.V.

Reaxys, RELX Group 和 RE 符号是 RELX Intellectual Properties SA 的商标，并经过许可后使用。

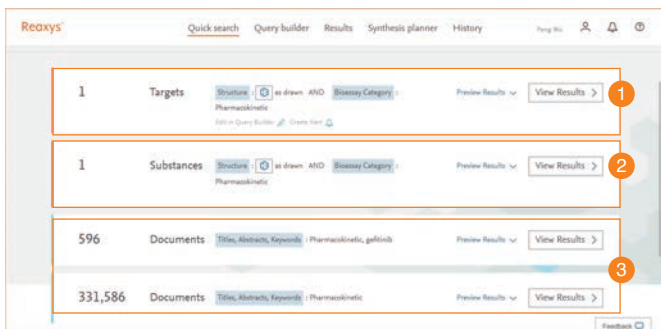
## 3.1 检索吉非替尼药代动力学生物活性数据



Quick Search中可以使用的方方式：

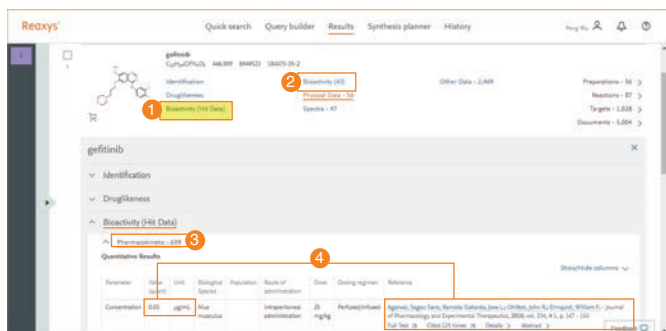
1. 靶点，或者基因名称，5-ht1a
2. 靶点活性，PIP4K2C Activity
3. 靶点抑制性，Inhibitors of CXCR4
4. 物质在靶点上的抑制性，PIP4K2C by imatinib
5. 靶点作用机制，Agonist of GLP-1
6. 物质作用效果，Atenolol Pharmacological effect
7. 物质药物代谢动力学研究，Pharmacokinetic of Imatinib
8. 结构

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’



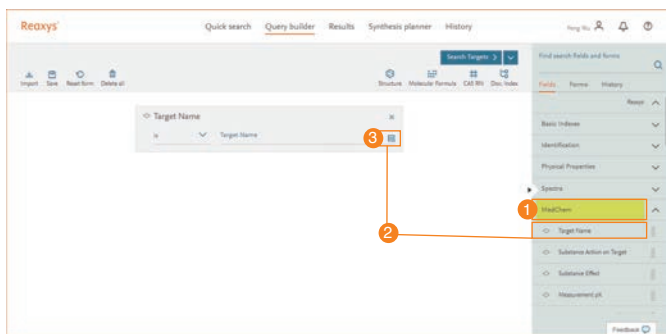
- 1 结构对应的药代动力学‘靶点信息’
- 2 结构对应的药代动力学信息
- 3 关键词相关文献

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

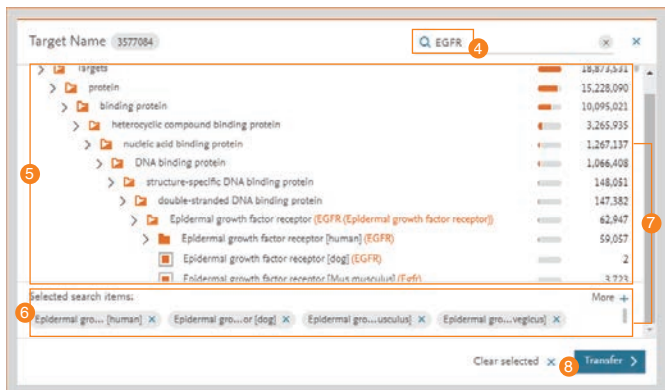


- 1 具体的‘药代’生物活性
- 2 全部生物活性
- 3 点击查看具体数据
- 4 完整版Reaxys才能查看具体数，并且得到详细出处

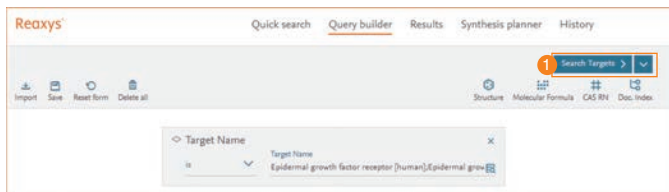
### 3.2 RMC-靶点相关生物活性检索（如：EGFR）



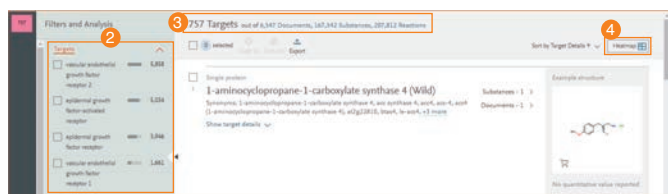
- 1 靶点转换器帮助科研人员，把靶点‘缩写’，‘同义词’等转化为标准索引词，以尽可能确保不会漏检相关信息
- 2 完整版Query builder会增加药化模块
- 3 点击靶点模块，从靶点出发检索生物活性



- 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，增加或删除想要检索的靶点相关信息
- 8 选择好后点击转换即可

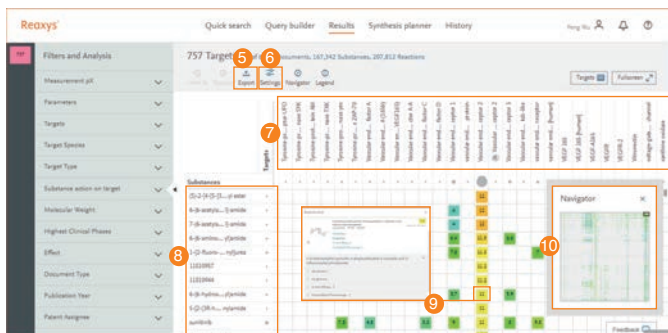


- 1 选择检索靶点



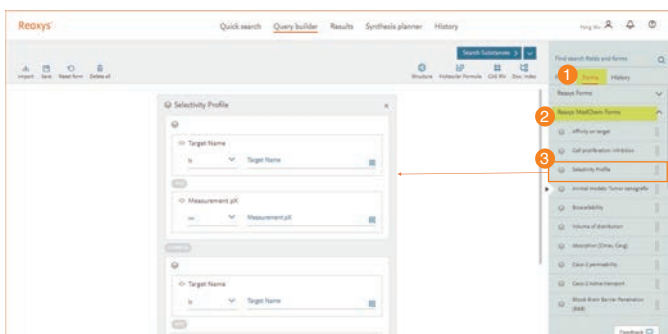
- 2 Filter中可以看到，具体每个靶点生物活性数量，并且可以进一步筛选关注的主要信息
- 3 EGFR相关靶点结果集，包含，EGFR家族所有靶点，以及相关的脱靶靶点和适应症靶点
- 4 一键拿到，靶点相关生物活性构效关系图





- 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)



- 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

Reaxys interface showing search results for 62 substances. Callout 1 points to the '62 Substances' count, and callout 2 points to the 'Histogram' button.

- 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

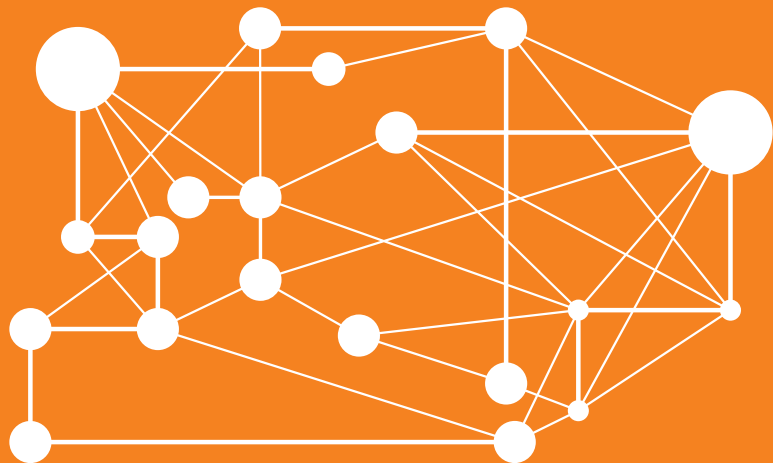
Reaxys interface showing a list of substances and their associated data. Callout 1 points to the 'Export' button, callout 2 points to the 'COX-1' standard name, callout 3 points to the 'COX-2' standard name, and callout 4 points to a data row in the table.

- 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

Reaxys<sup>®</sup>

版权所有©2017 Elsevier B.V.

Reaxys, RELX Group 和 RE 符号是 RELX Intellectual Properties SA 的商标, 并许可后使用。



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