


リアクシス
**Reaxysは、合成化学研究を効率化する
最先端のワークフローツールです。**

Reaxys = CrossFire Beilstein
+ CrossFire Gmelin
+ Patent Chemistry Database



The screenshot displays the Reaxys software interface. At the top, there is a navigation bar with 'reaxys' logo and menu items: 'Home', 'Results', 'Synthesis Page', 'History', 'My Settings', and 'Help'. Below this is a toolbar with 'Undo', 'Open', 'Save', 'Copy plan to new page', and 'Output'. The main workspace shows a chemical synthesis workflow with three steps, each labeled 'Modify'. The first step shows a starting material reacting with Zn/HCl in ethanol and H_2O at 4% heating. The second step shows a reaction with $SOCl_2$ in ethanol at 3% heating. The third step shows a reaction with $SOCl_2$ in ethanol at 3% heating, resulting in a final product with a yield of 93%. Below the workflow, there is a table of references.

Step	Yield	Conditions	References
1	93%	With Zn/HCl in ethanol, H_2O 4% Heating	Moser, Peter; Salimann, Alfred; Wiesenberg, Irmgard Journal of Medicinal Chemistry, 1990, vol. 33, # 9, p. 2358-2368 Full Text Scope
2	93%	With $SOCl_2$ in ethanol 3% Heating	Tamura, Yasumichi; Uenishi, Jun-ichi; Choi, Hong Dae; Haruka, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 1984, vol. 32, # 5, p. 1995-1997 Full Text Scope

定評あるデータベースを統合

Reaxys (リアクシス) は、最新のIT技術により開発された新しいデータベースです。従来の定評あるデータベースを統合してウェブベースに再構築しました。**2,800万以上の反応情報を搭載**し、フルテキストにアクセスしなくても、複数の関連文献から集めた化合物の実測物性値や生物活性データを調査できます。

有機化合物や無機化合物、特許情報を同時に検索可能

バイルシュタイン CrossFire Beilstein Database (収録期間：1771年以降*)

- 世界最大の有機化合物のファクトデータベース
- 冊子体のBeilstein Handbook of Organic Chemistryの後継
- 収録項目例：有機化合物の構造、反応、実測物性値、生物活性、環境毒性データ

グメリン CrossFire Gmelin Database (収録期間：1772年以降*)

- 世界最大の無機化合物および有機金属錯体のファクトデータベース
- 冊子体のGmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistryの後継
- 収録項目例：物性や構造、合成法

Patent Chemistry Database (収録期間：1976年以降)

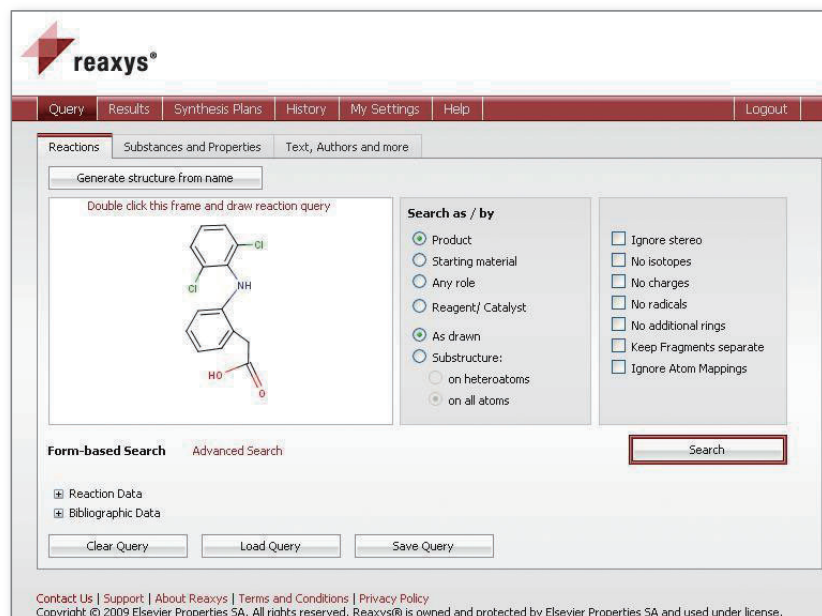
- 世界的な所有権機関 (WIPO)、米国特許商標庁 (USPTO)、ヨーロッパ特許庁 (EPO) への出願特許から抽出したファクトデータベース
- 対象の特許分類はC07 (有機化学)、A01N (消毒薬、殺虫剤、除草剤)、A61K (医薬品、歯科用又は化粧品用製剤)、C09B (染料)
- 収録項目例：化合物の構造・反応・実測物性値、実験項、NMRスペクトルデータ

*冊子体の刊行終了後も更新

ウェブベースならではの利便性

Reaxysは**同時利用者数の制限がなく、24時間365日アクセス可能**です。クライアントソフトウェアが不要なため、インストールや管理の負担が軽減されます。Windowsだけでなく**Macintoshにも対応**しており、より幅広いユーザーが利用可能となります。

また、優れた画面デザインにより、初心者でも迷うことなく操作ができます。検索条件が充実しており、細かい条件指定にも応えることができます。



The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there's a navigation bar with 'Query', 'Results', 'Synthesis Plans', 'History', 'My Settings', 'Help', and 'Logout'. Below this, there are tabs for 'Reactions', 'Substances and Properties', and 'Text, Authors and more'. The main area is titled 'Generate structure from name' and contains a 'Double click this frame and draw reaction query' instruction. A chemical structure is shown in the drawing area. To the right, there's a 'Search as / by' section with radio buttons for 'Product', 'Starting material', 'Any role', 'Reagent/ Catalyst', 'As drawn', and 'Substructure:'. The 'Substructure' section has options for 'on heteroatoms' and 'on all atoms'. Below this, there's a 'Form-based Search' section with 'Advanced Search' and a 'Search' button. At the bottom, there are 'Clear Query', 'Load Query', and 'Save Query' buttons. The footer contains contact information and copyright details.

- ▶ 構造式だけでなく、化合物名やCAS番号からも化合物や反応を検索可能
- ▶ 部分構造検索にも対応
- ▶ 生成物、出発物質、触媒等の条件指定可能

最新の合成計画ツールで研究活動を支援

目的化合物の合成計画を、**複数の合成ルート**を比較しながら立案できるため、研究活動の初期段階における準備作業を大幅に効率化することができます。

市販化合物の有無も表示されるので、もっとも簡単な合成も一目瞭然です。

合成計画 (Synthesis Planning) 画面

- ▶ 複数の文献由来の反応を見比べながら、最適な部分を選択して合成ルートを立案
- ▶ 合成ルートの多段階表示により、目的化合物の経路を効率よく計画



無駄のない検索結果表示と多彩なフィルタ機能

反応物と生成物が同一の場合は複数の**論文や特許からの検索結果が一つにまとめて表示**されるため、比較検討が容易です。豊富なリンクにより、反応例の詳細情報もすぐに確認できます。さらに、多彩なフィルタ機能により、絞り込みも簡単です。

検索結果画面

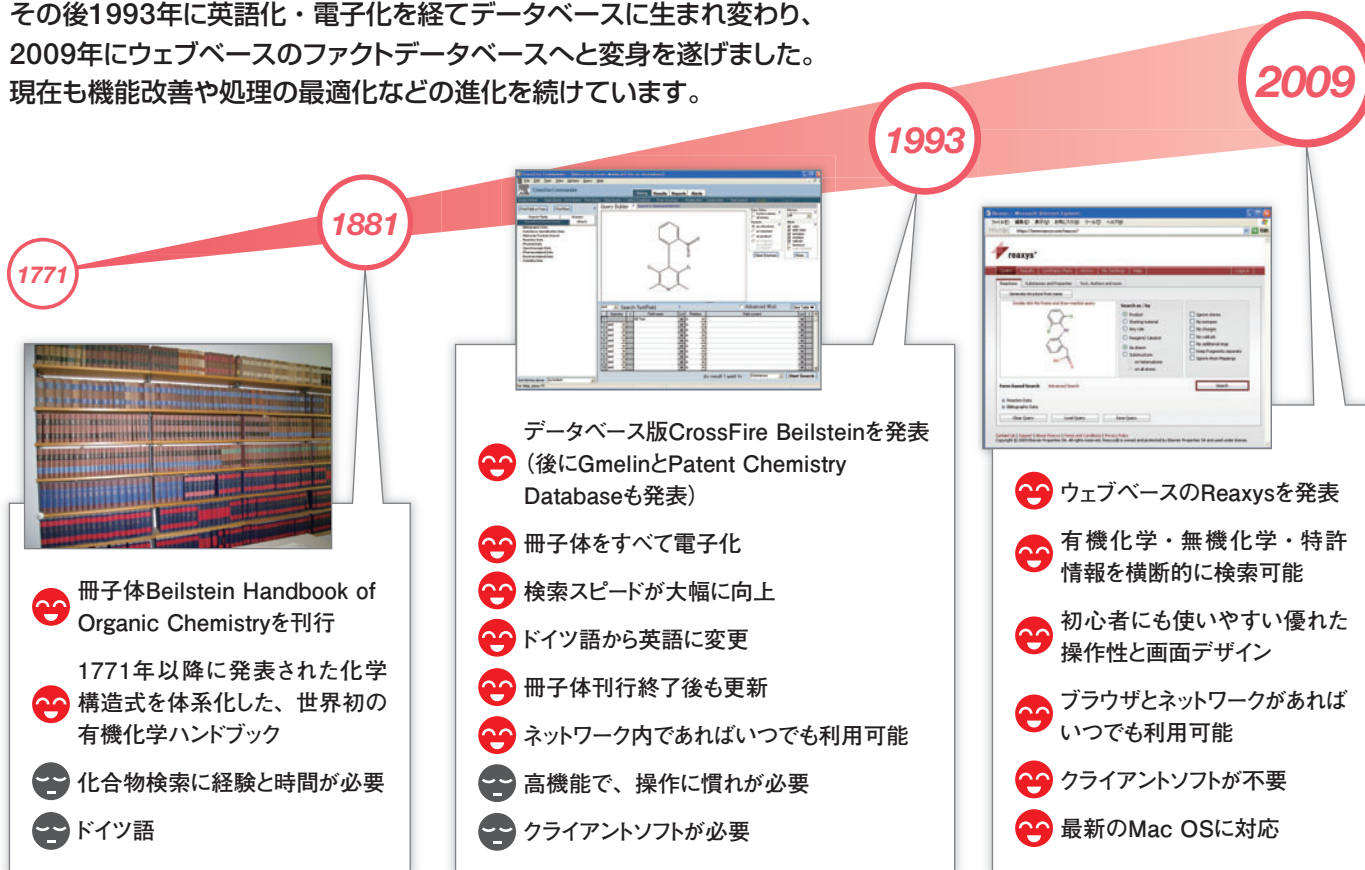
- ▶ 出版社へのリンクで論文のフルテキストを表示
- ▶ 抄録・引用データベースScopus (スコopus) へのリンクにより、被引用情報を表示 (Scopusの契約がない場合は20件までを表示)
- ▶ 特許サイトにリンクして公開特許公報を表示
- ▶ 特許公報で探しにくい実験項を抽出して表示

フィルタ (絞り込み) の例:

- 収率
- 反応形式
- 溶媒
- ステップ数
- 書誌情報 (ジャーナル名他)

Reaxys開発の歴史

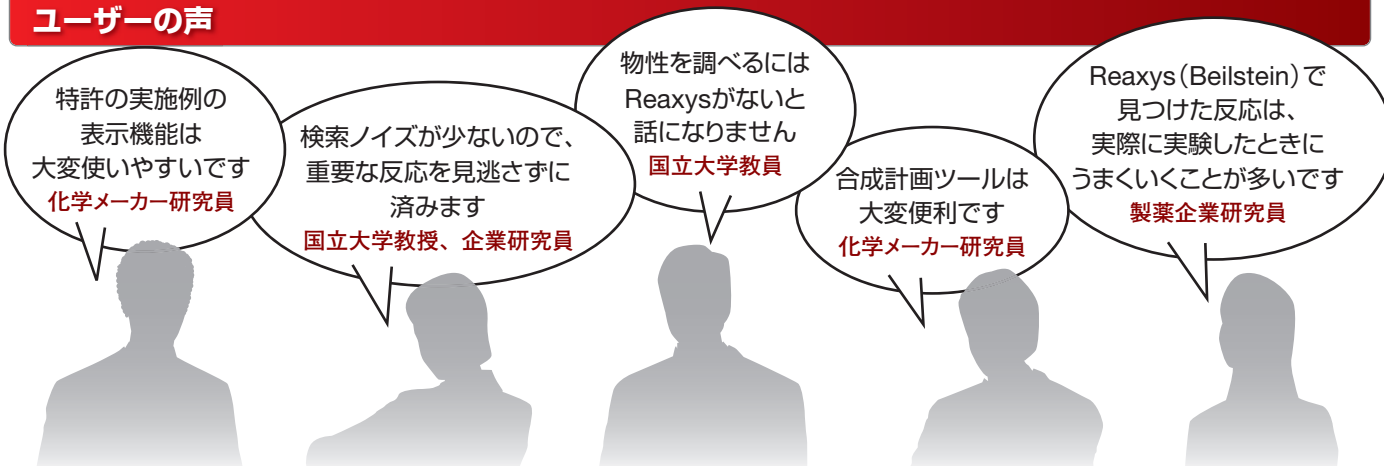
Reaxysの母体となるBeilstein Handbookは、1881年にドイツ語の冊子体として刊行されました。その後1993年に英語化・電子化を経てデータベースに生まれ変わり、2009年にウェブベースのファクトデータベースへと変身を遂げました。現在も機能改善や処理の最適化などの進化を続けています。



Reaxys諮問委員会と開発パートナー

Reaxysの収録対象誌や研究領域、対象化合物等は、ノーベル化学賞受賞者を含む世界の著名な研究者からなる諮問委員会で検討・決定されています。また、Reaxysのインターフェースのデザインには、ユーザーの視点に立った開発パートナーのアドバイスが反映されています。

ユーザーの声



お問い合わせ先
エルゼビア・ジャパン株式会社
電子図書館サービス
TEL: 03-5561-5034 FAX: 03-5561-5047
E-mail: jpinfo@reaxys.com

日本語ホームページ (製品情報)
<http://japan.elsevier.com/products/reaxys/>
日本語ホームページ (エンドユーザーサポート)
<http://japan.elsevier.com/reaxysupport/>
英語情報ページ
<http://www.info.reaxys.com/>