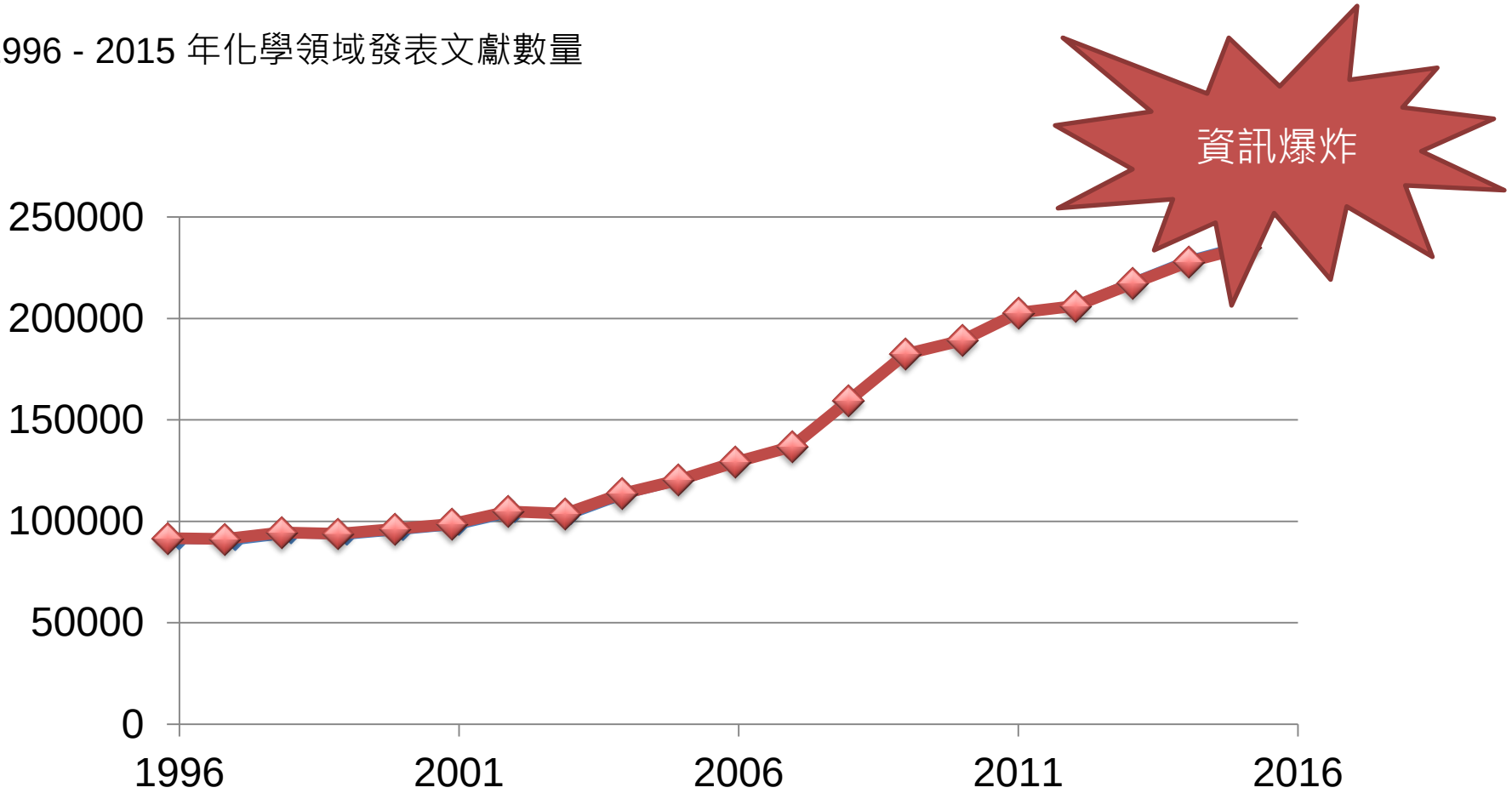
Reaxys 化學資料庫
教育訓練

www.reaxys.com

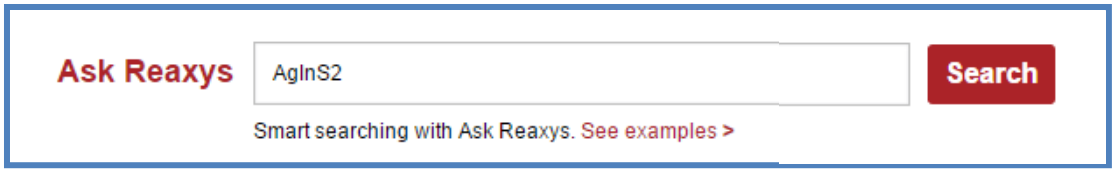
梁成芝 Olivia Liang
o.liang@elsevier.com

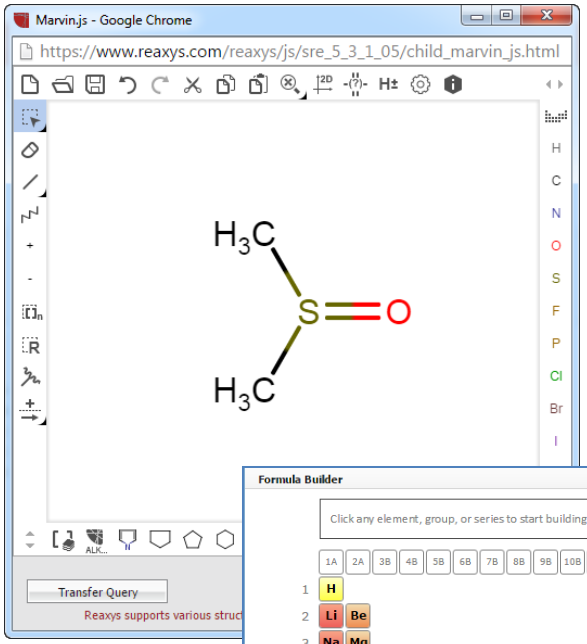
資訊爆炸的年代，是否有更好的選擇?

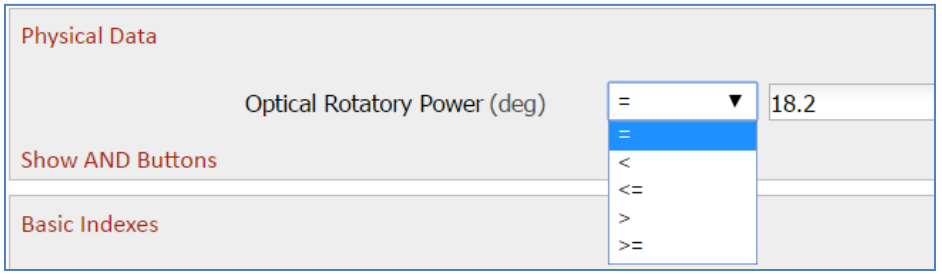
1996 - 2015 年化學領域發表文獻數量

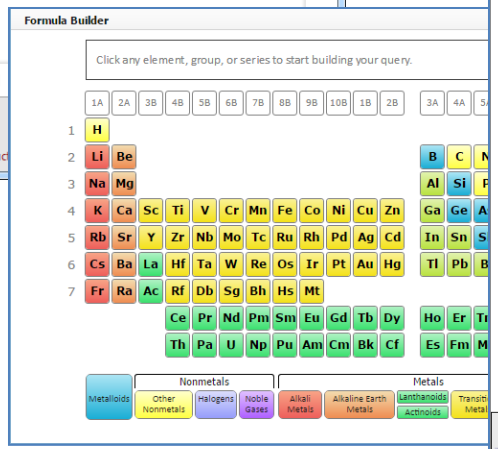


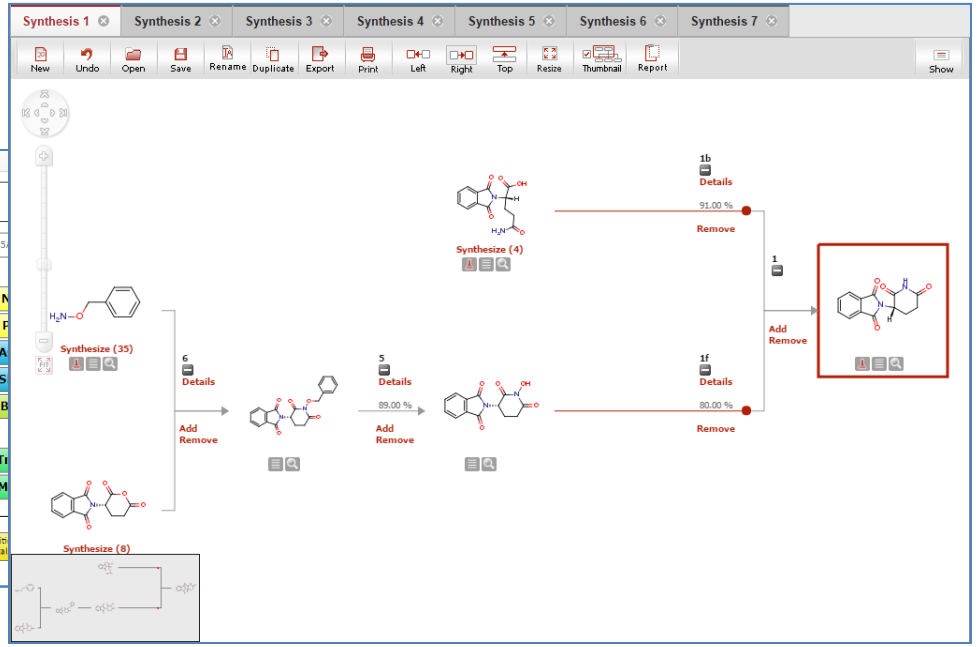
更化學的搜尋方法


Ask Reaxys
AgInS2
Search
Smart searching with Ask Reaxys. See examples >


Marvin.js - Google Chrome
https://www.reaxys.com/reaxys/js/sre_5_3_1_05/child_marvin_js.html
Transfer Query
Reaxys supports various struc


Physical Data
Optical Rotatory Power (deg)
=
18.2
<
<=
>
>=
Show AND Buttons
Basic Indexes


Formula Builder
Click any element, group, or series to start building your query.
Nonmetals
Metals


Synthesis 1
Synthesis 2
Synthesis 3
Synthesis 4
Synthesis 5
Synthesis 6
Synthesis 7
Synthesize (35)
Synthesize (4)
Synthesize (8)
Details
Add
Remove

Reaxys 可以用來搜尋哪些資料?

一般資料庫無法搜尋特定數值範圍的化學特性或實驗數據

搜尋結果

反應 (Reactions)

化合物 (Substances)

文獻 (Citations)

化學反應資料庫

收錄 > 4,100萬筆
單一或多步驟化學反應

化合物資料庫

收錄 > 2,650萬種
有機、無機、有機金屬化合物

文獻資料庫

收錄 > 5,200萬筆資料
來自 **>16,000種期刊**及**主要專利局**

特性資料庫

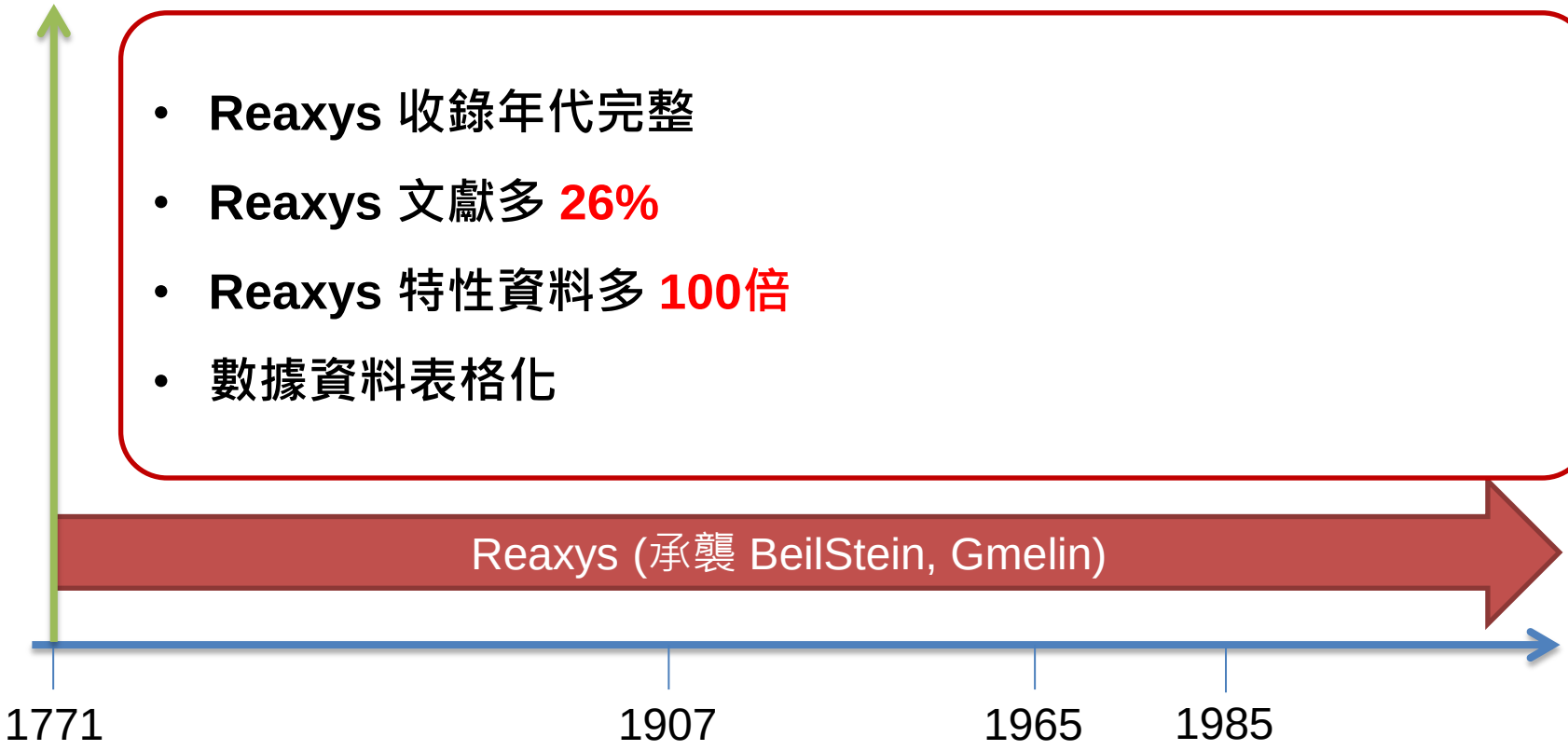
收錄 > 5億筆實驗數據
> 500種欄位
來自 > 130 個研究子領域

可直接瀏覽 281 本化學期刊及專利全文中的合成材料方法

可搜尋數值範圍。
例如：沸點= 100°C 或沸點>100 °C 的所有化合物

Reaxys 與 SciFinder 收錄內容比較

- **Reaxys 收錄年代完整**
- **Reaxys 文獻多 26%**
- **Reaxys 特性資料多 100倍**
- **數據資料表格化**

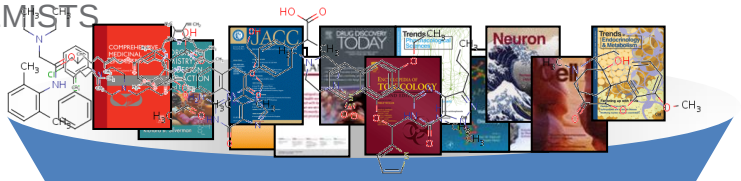


參考資料
https://www.lib.utexas.edu/chem/scifinder_faq.html#props2
http://www.cas.org/content/chemical-substances/propertydata

Reaxys 化學及藥物化學資料庫

我們的目標是為您節省更多時間

CATALOGUED AND TAXONMISED BY CHEMISTS FOR CHEMISTS



涵蓋 16,000 期刊及三大專利局

從 1771 年開始收錄

分類整理各種數據

高度相關的答案

RELEVANT ANSWERS

各種數據分門別類整理成表格

Structure	Structure/Compound Data	N° of preparations All Preps | All Reactions	Available Data	Target	N° of ref.
Synthesize | Hide Details Find similar	**Chemical Name:** propene **Reaxys Registry Number:** 1696878 **CAS Registry Number:** 187737-37-7 **Type of Substance:** acyclic **Molecular Formula:** C_3H_6 **Linear Structure Formula:** $C_3H_3CH_3$ **Molecular Weight:** 42.0806 **InChI Key:** QQONPFPTGQHPMA-UHFFFAOYSA-N	2824 prep out of 7655 reactions.	Hit Data (67) Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (1078) Spectra (183) Ecological Data (60) Use/Application (29) Natural Product (4)	Show Targets	9151

Chemical Names and Synonyms

propene, 1-propene, propylene

± Hit Data

± IR Spectroscopy (67 Hits out of 67 view all)

Description (IR Spectroscopy)	Solvent (IR Spectroscopy)	Temperature (IR Spectroscopy)	Comment (IR Spectroscopy)	Reference
Bands	gaseous matrix			**Maier, Guenther; Lautz, Christian** Angewandte Chemie - International Edition, **1999**, vol. 38, # 13-14 p. 2038 - 2041 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Spectrum	gas	26.9 °C	3500 - 500 cm**(-1)	**Street; Gellman** Journal of Physical Chemistry B, **1997**, vol. 101, # 8 p. 1389 - 1395 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Spectrum	solid matrix	-262.2 °C	3300 - 800 cm**(-1)	**Rowland, Brad; Hess, Wayne P.** Journal of Physical Chemistry A, **1997**, vol. 101, # 43 p. 8049 - 8056 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Bands	solid matrix	-262.2 °C	3086 - 916 cm**(-1)	**Rowland, Brad; Hess, Wayne P.** Journal of Physical Chemistry A, **1997**, vol. 101, # 43 p. 8049 - 8056 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Spectrum	solid matrix	-261.2 °C	3200 - 400 cm**(-1)	**Radziszewski, Juliusz G.; Downing, John W.; Gudipati, Murthy S.; Balaji; Thulstrup, Erik W.; Michl, Josef** Journal of the American Chemical Society, **1996**, vol. 118, # 42 p. 10275 - 10284 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Bands	solid matrix	-261.2 °C	3075 - 578 cm**(-1)	**Radziszewski, Juliusz G.; Downing, John W.; Gudipati, Murthy S.; Balaji; Thulstrup, Erik W.; Michl, Josef** Journal of the American Chemical Society, **1996**, vol. 118, # 42 p. 10275 - 10284 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

Show next 20 Show next 47

Druglikeness

Bioactivity

Identification

Physical Data

Spectra

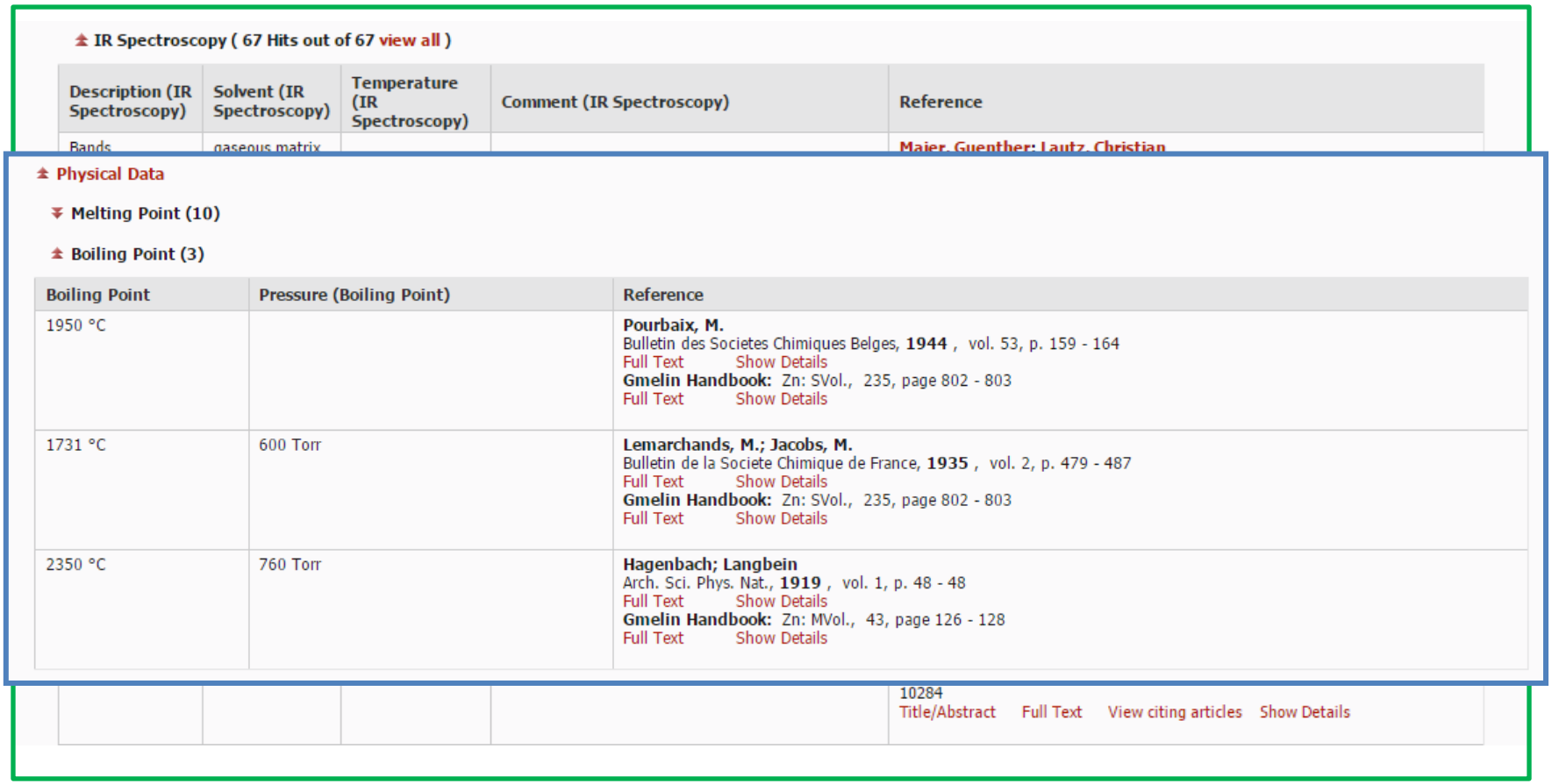
Ecological Data

Use/Application

Natural Product

各種資料分門別類整理為表格，並抽出重要數據

表格中的文字皆可分類搜尋



IR Spectroscopy (67 Hits out of 67 view all)

Description (IR Spectroscopy)	Solvent (IR Spectroscopy)	Temperature (IR Spectroscopy)	Comment (IR Spectroscopy)	Reference
Bands	gaseous matrix			Maier, Guenther; Lautz, Christian

Physical Data

Melting Point (10)

Boiling Point (3)

Boiling Point	Pressure (Boiling Point)	Reference
1950 °C		**Pourbaix, M.** Bulletin des Societes Chimiques Belges, **1944** , vol. 53, p. 159 - 164 Full Text Show Details **Gmelin Handbook:** Zn: SVol., 235, page 802 - 803 Full Text Show Details
1731 °C	600 Torr	**Lemarchands, M.; Jacobs, M.** Bulletin de la Societe Chimique de France, **1935** , vol. 2, p. 479 - 487 Full Text Show Details **Gmelin Handbook:** Zn: SVol., 235, page 802 - 803 Full Text Show Details
2350 °C	760 Torr	**Hagenbach; Langbein** Arch. Sci. Phys. Nat., **1919** , vol. 1, p. 48 - 48 Full Text Show Details **Gmelin Handbook:** Zn: MVol., 43, page 126 - 128 Full Text Show Details

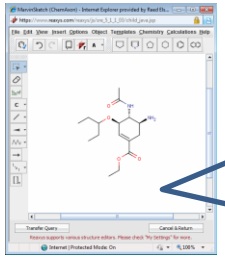
10284
Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

多元搜尋方式 -- 超過 400 種欄位可獨立或合併搜尋。

例如：搜尋包含34個碳，旋光度=18.2的所有化合物

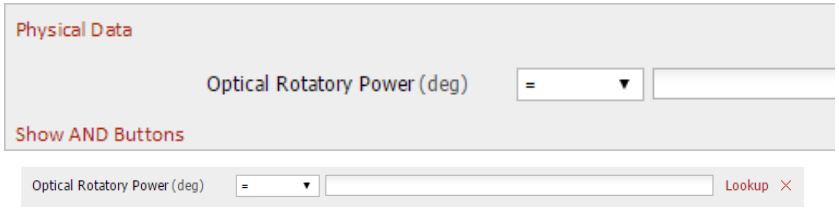
關鍵字

結構



- 支援 9 種繪圖軟體
- 強大衍生物搜尋功能
- Marvin JS 免安裝 JAVA

物質特性、實驗數據種類及其數值範圍



分子式、合金、及其它 > 500 種欄位搜尋

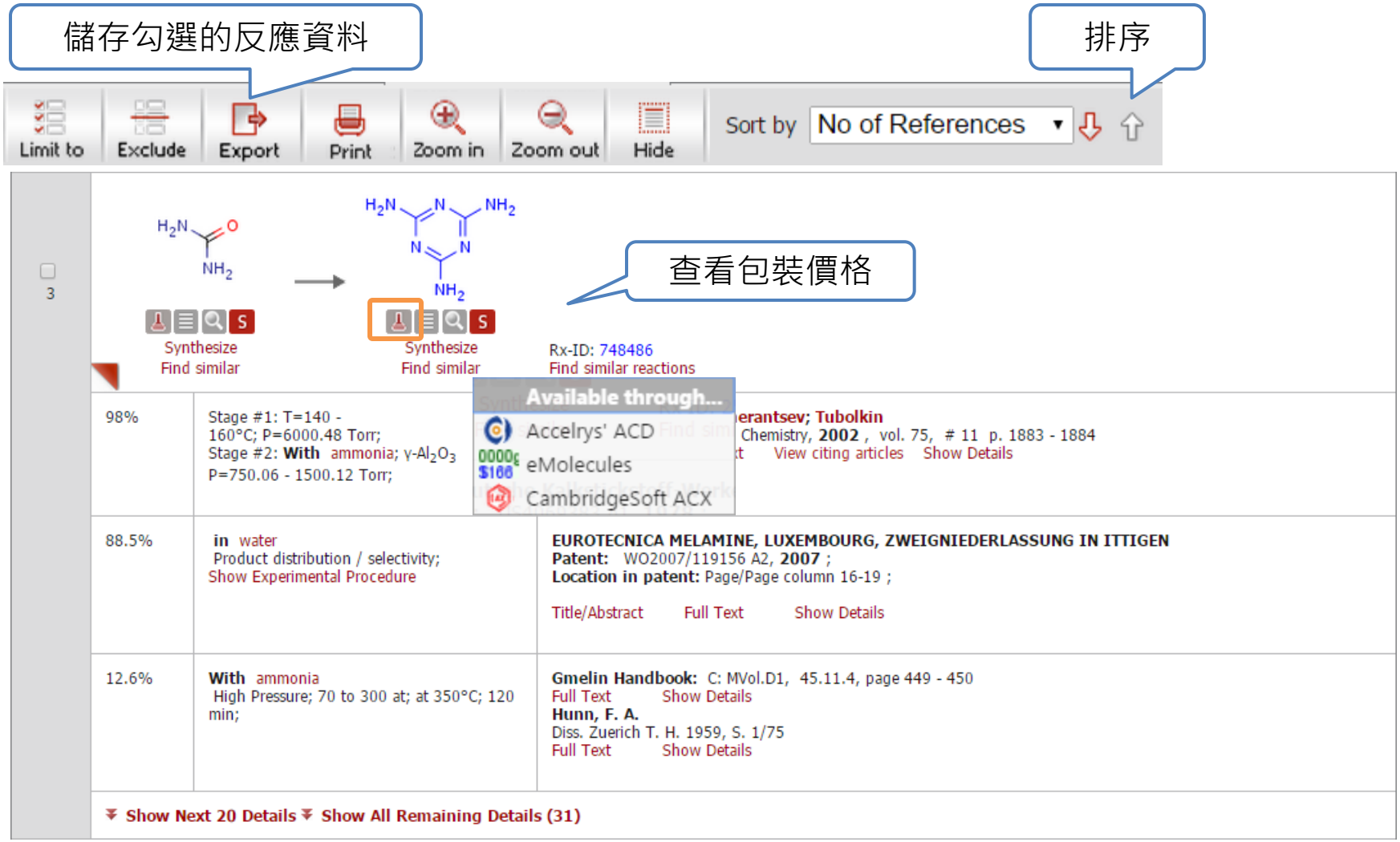
布林邏輯

反應 (Reactions)

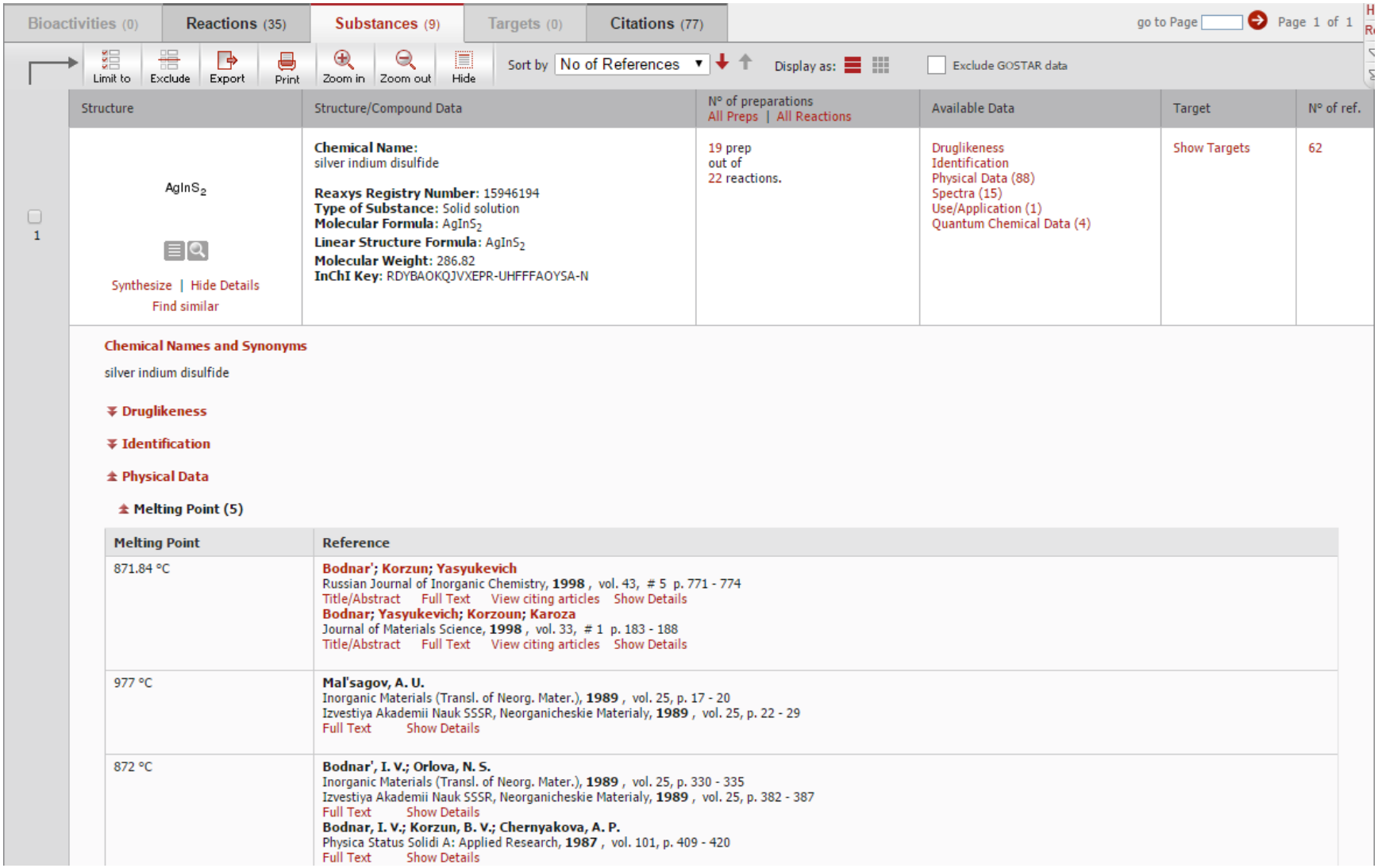
化合物* (Substances)

引用文獻 (Citations)

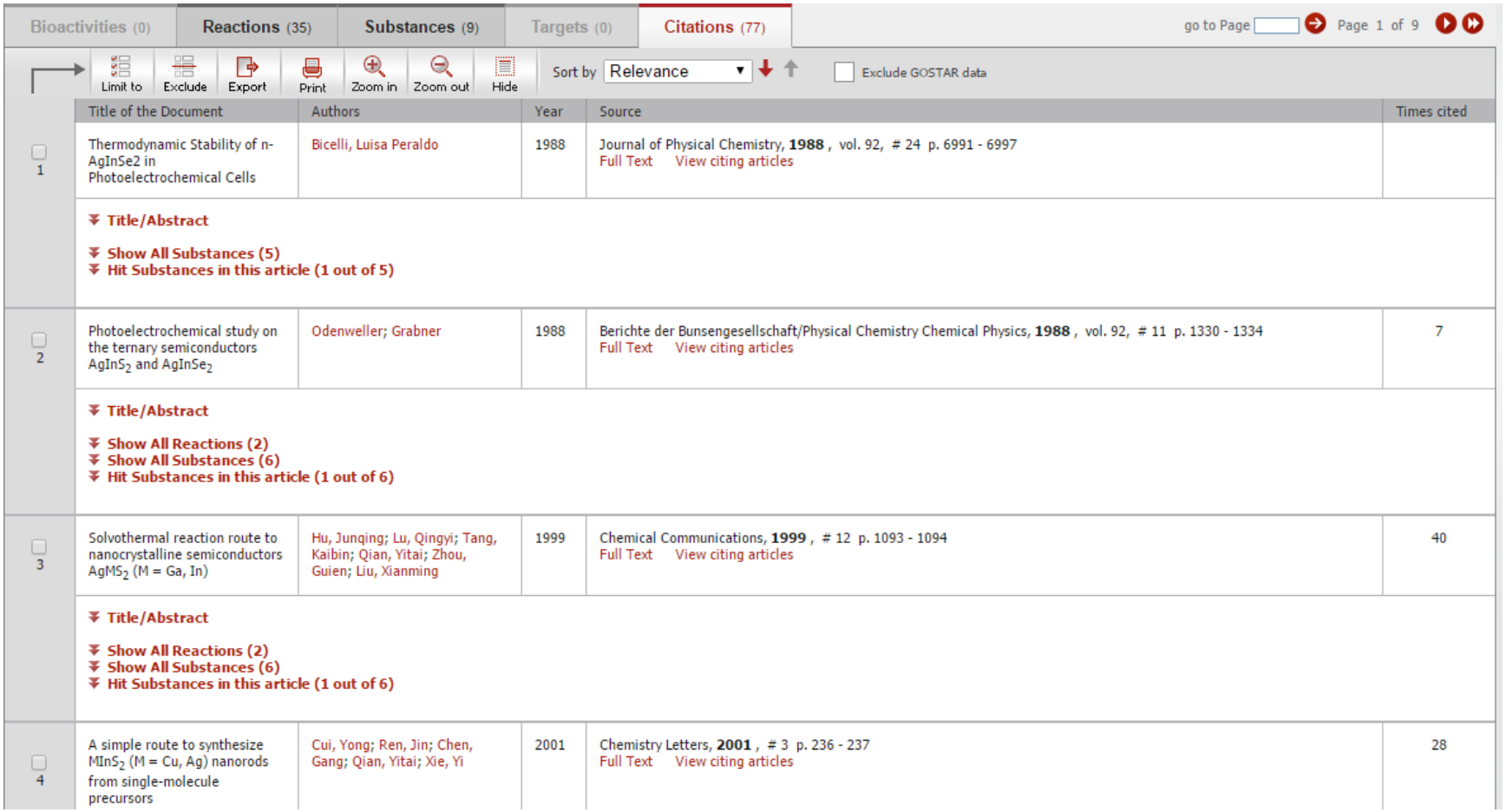
反應搜尋結果


儲存勾選的反應資料
排序
Limit to
Exclude
Export
Print
Zoom in
Zoom out
Hide
Sort by
No of References
查看包裝價格
3
Synthesize
Find similar
Synthesize
Find similar
Rx-ID: 748486
Find similar reactions
Available through...
Accelrys' ACD
eMolecules
CambridgeSoft ACX
98%
Stage #1: T=140 - 160°C; P=6000.48 Torr;
Stage #2: With ammonia; γ-Al2O3
P=750.06 - 1500.12 Torr;
erantsev; Tubolkin
Chemistry, 2002 , vol. 75, # 11 p. 1883 - 1884
View citing articles
Show Details
88.5%
in water
Product distribution / selectivity;
Show Experimental Procedure
EUROTECNICA MELAMINE, LUXEMBOURG, ZWEIGNIEDERLASSUNG IN ITTIGEN
Patent: WO2007/119156 A2, 2007 ;
Location in patent: Page/Page column 16-19 ;
Title/Abstract
Full Text
Show Details
12.6%
With ammonia
High Pressure; 70 to 300 at; at 350°C; 120 min;
Gmelin Handbook: C: MVol.D1, 45.11.4, page 449 - 450
Full Text
Show Details
Hunn, F. A.
Diss. Zuerich T. H. 1959, S. 1/75
Full Text
Show Details
Show Next 20 Details
Show All Remaining Details (31)

搜尋結果 – substances



搜尋結果 -- Citations



Bioactivities (0) | Reactions (35) | Substances (9) | Targets (0) | Citations (77)

go to Page Page 1 of 9

Limit to | Exclude | Export | Print | Zoom in | Zoom out | Hide | Sort by Relevance | Exclude GOSTAR data

	Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
1	Thermodynamic Stability of n-AgInSe2 in Photoelectrochemical Cells	Bicelli, Luisa Peraldo	1988	Journal of Physical Chemistry, **1988** , vol. 92, # 24 p. 6991 - 6997 Full Text View citing articles	
	Title/Abstract Show All Substances (5) Hit Substances in this article (1 out of 5)				
2	Photoelectrochemical study on the ternary semiconductors $AgInS_2$ and $AgInSe_2$	Odenweller; Grabner	1988	Berichte der Bunsengesellschaft/Physical Chemistry Chemical Physics, **1988** , vol. 92, # 11 p. 1330 - 1334 Full Text View citing articles	7
	Title/Abstract Show All Reactions (2) Show All Substances (6) Hit Substances in this article (1 out of 6)				
3	Solvothermal reaction route to nanocrystalline semiconductors $AgMS_2$ (M = Ga, In)	Hu, Junqing; Lu, Qingyi; Tang, Kaibin; Qian, Yitai; Zhou, Guien; Liu, Xianming	1999	Chemical Communications, **1999** , # 12 p. 1093 - 1094 Full Text View citing articles	40
	Title/Abstract Show All Reactions (2) Show All Substances (6) Hit Substances in this article (1 out of 6)				
4	A simple route to synthesize $MInS_2$ (M = Cu, Ag) nanorods from single-molecule precursors	Cui, Yong; Ren, Jin; Chen, Gang; Qian, Yitai; Xie, Yi	2001	Chemistry Letters, **2001** , # 3 p. 236 - 237 Full Text View citing articles	28

Reaxys 搜尋結果分析及輸出

分析篩選搜尋結果，並輸出報告與同儕分享討論

搜尋結果

- 反應 (Reactions)
- 化合物* (Substances)
- 引用文獻 (Citations)

合成路徑規畫

Synthesis Plans

資料庫連結

PubChem 10 Years

eMolecules

包裝價格資料

篩選功能：Analysis View 及 28 種 Filter

多元資料儲存或輸出方式

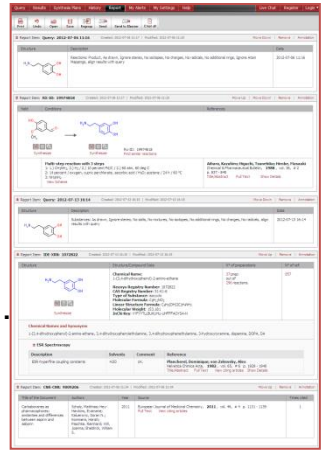
- 彙整各種搜尋結果
- 一鍵 e-mail 分享

Report

檔案格式：E-mail、HTML網頁、PDF
可儲存：搜尋條件、化合物、反應、文獻、合成路徑
優點：適合儲存少量資料、操作簡便、格式簡明、保留超連結

Export

檔案格式：PDF、XML、Word、Excel、電子實驗記錄本、書目資料..
可儲存：化合物、反應、文獻、合成路徑
優點：可大量輸出搜尋結果、多種檔案格式可與進階分析軟體相容



New Reaxys 2016.10 更新

新版網頁 new.reaxys.com

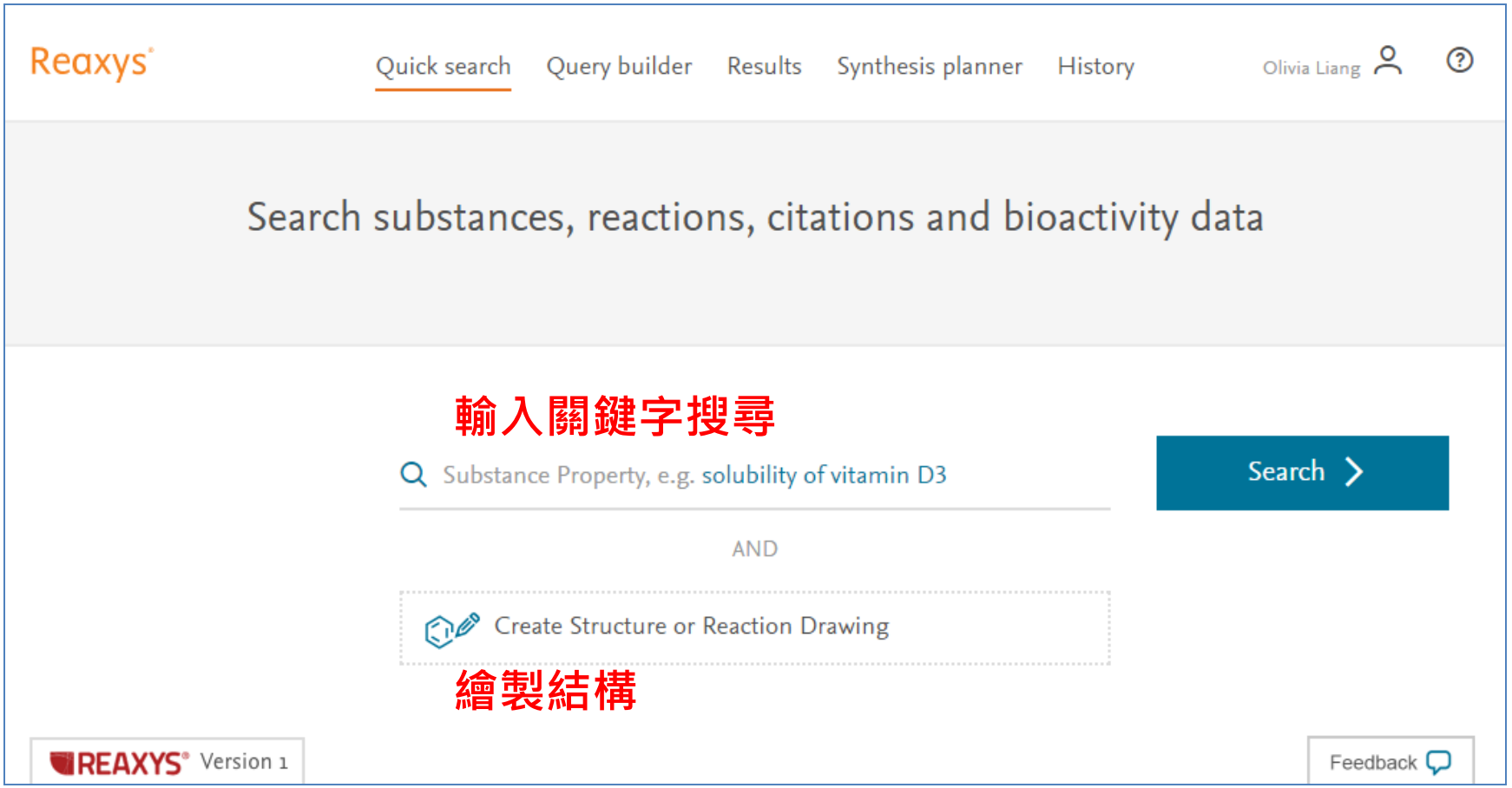
- 內容擴充
  - 加入亞洲專利 (日本、韓國、中國、臺灣)
  - 摘錄 281 本期刊與專利的合成材料方法
  - 摘錄更多實驗數據內容，由 400 本擴充為 16000 本期刊

- 介面更新
  - 依據使用頻率重新調整介面

* 新版將與舊版並行至少半年

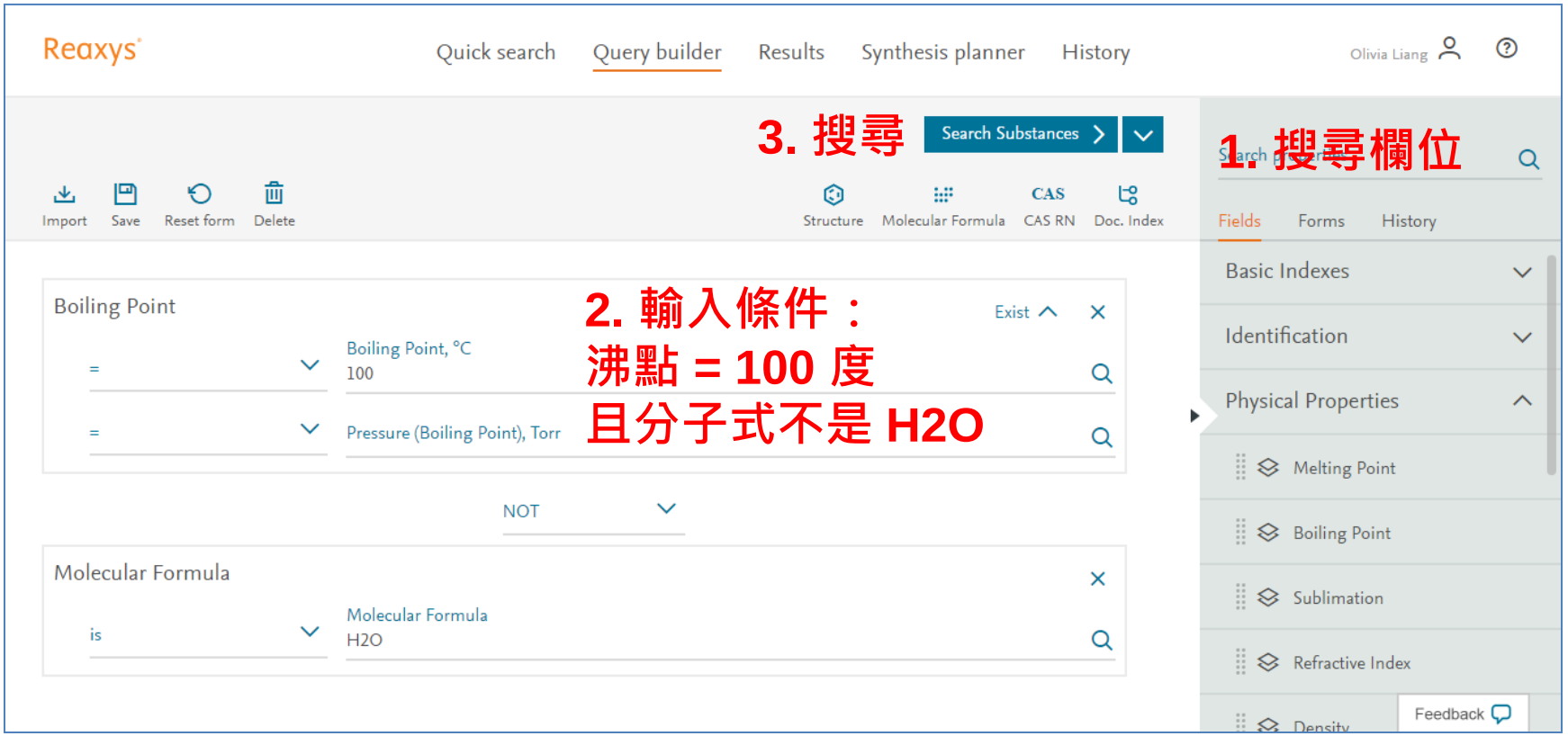
首頁 Quick Search

關鍵字搭配結構搜尋是使用頻率最高的搜尋方式

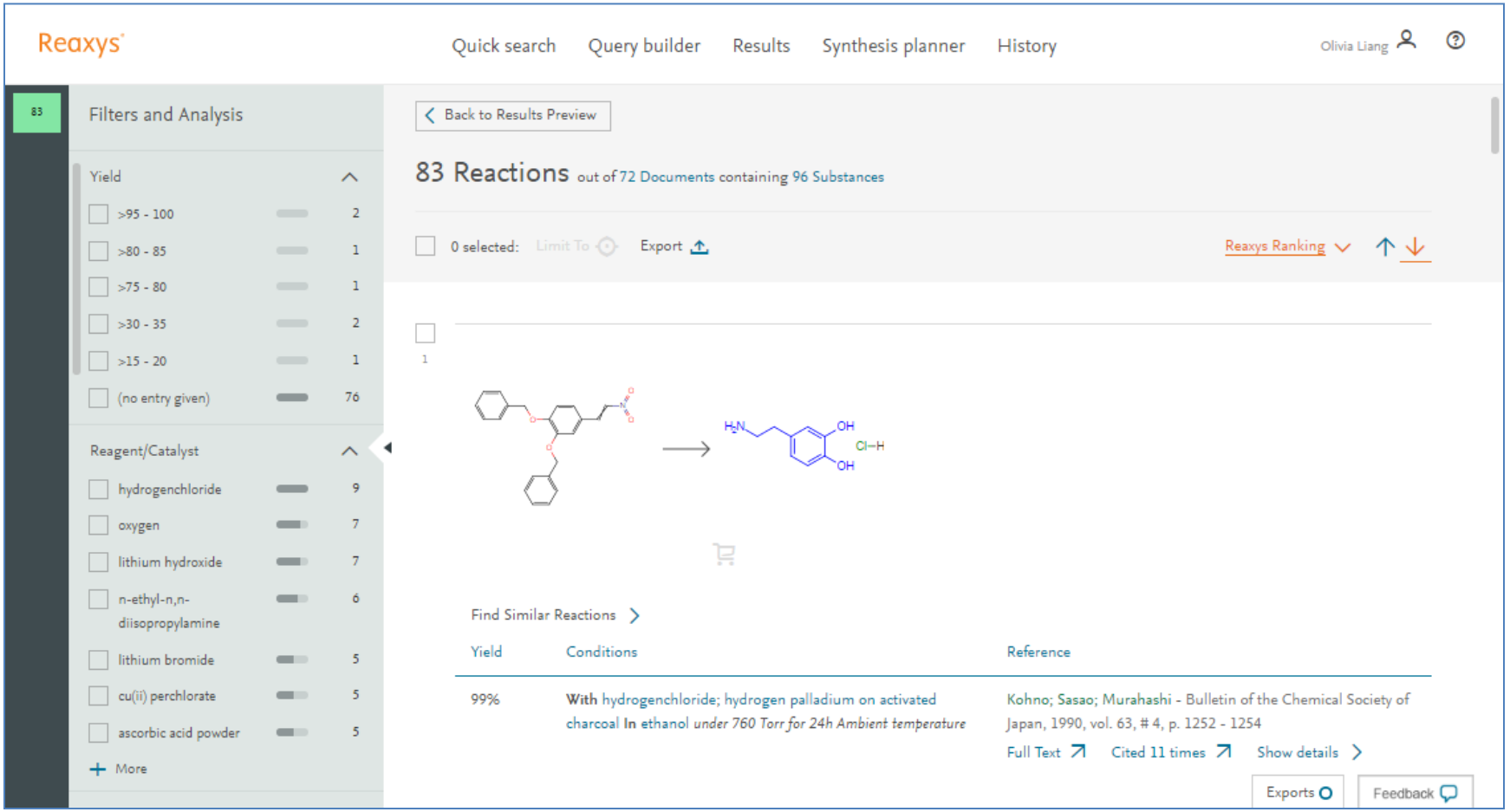


進階搜尋 – Query Builder

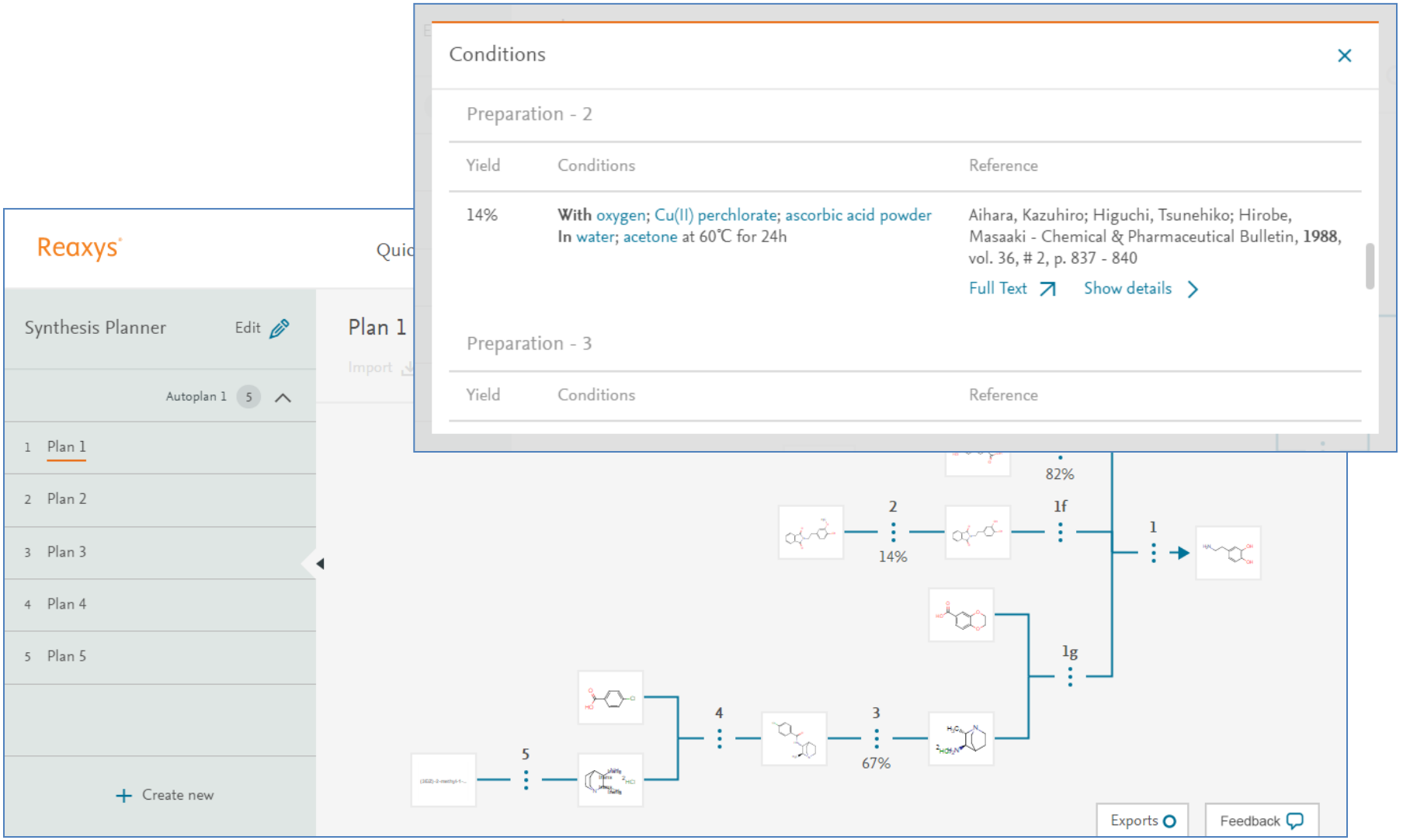
整合超過 400 個欄位



化學反應搜尋結果


Reaxys
Quick search
Query builder
Results
Synthesis planner
History
Olivia Liang
83
Filters and Analysis
Yield
>95 - 100 2
>80 - 85 1
>75 - 80 1
>30 - 35 2
>15 - 20 1
(no entry given) 76
Reagent/Catalyst
hydrogenchloride 9
oxygen 7
lithium hydroxide 7
n-ethyl-n,n-diisopropylamine 6
lithium bromide 5
cu(ii) perchlorate 5
ascorbic acid powder 5
More
Back to Results Preview
83 Reactions out of 72 Documents containing 96 Substances
0 selected:
Limit To
Export
Reaxys Ranking
1
Find Similar Reactions
Yield
Conditions
Reference
99%
With hydrogenchloride; hydrogen palladium on activated charcoal In ethanol under 760 Torr for 24h Ambient temperature
Kohno; Sasao; Murahashi - Bulletin of the Chemical Society of Japan, 1990, vol. 63, # 4, p. 1252 - 1254
Full Text
Cited 11 times
Show details
Exports
Feedback

Autoplan 合成路徑規劃

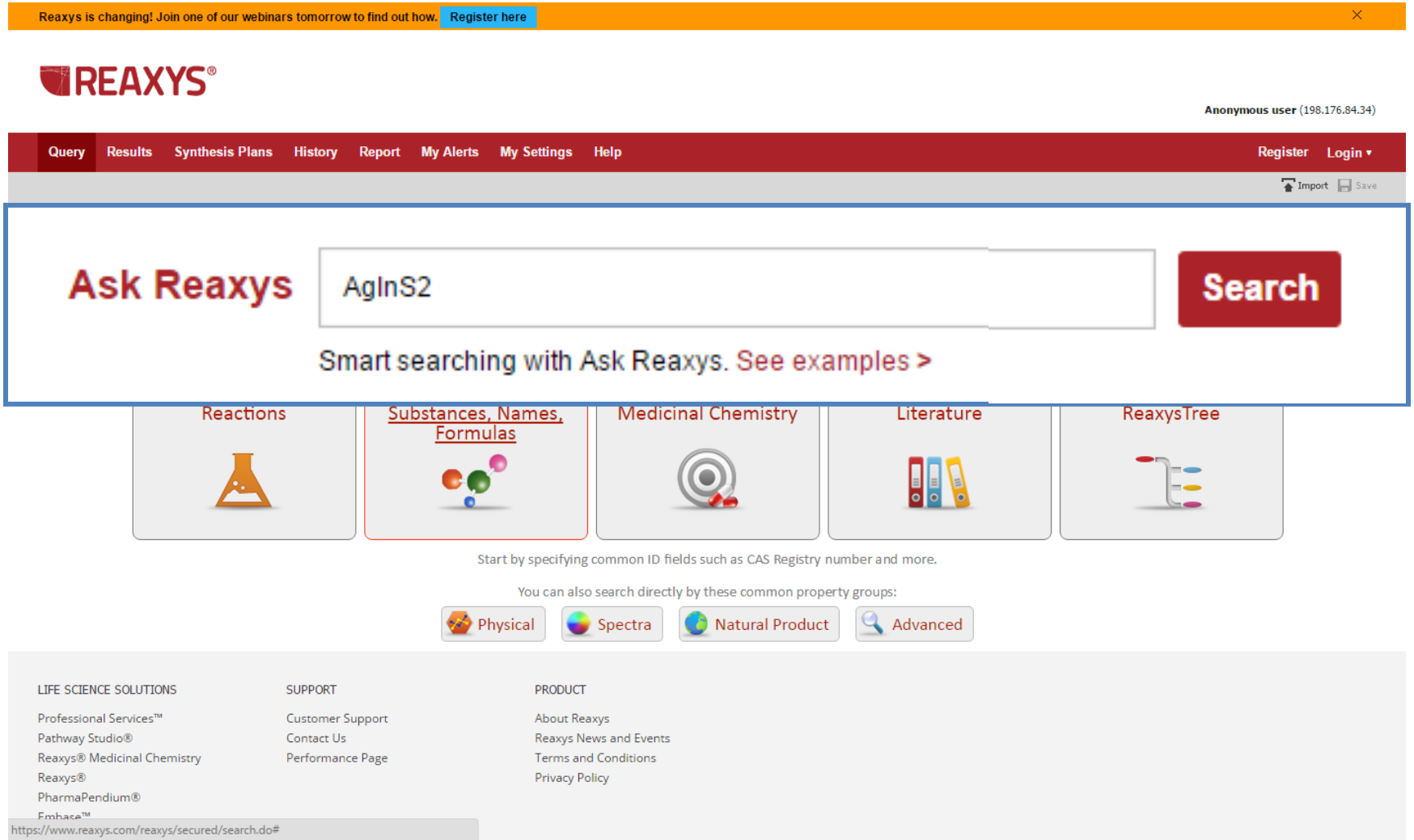


ELSEVIER

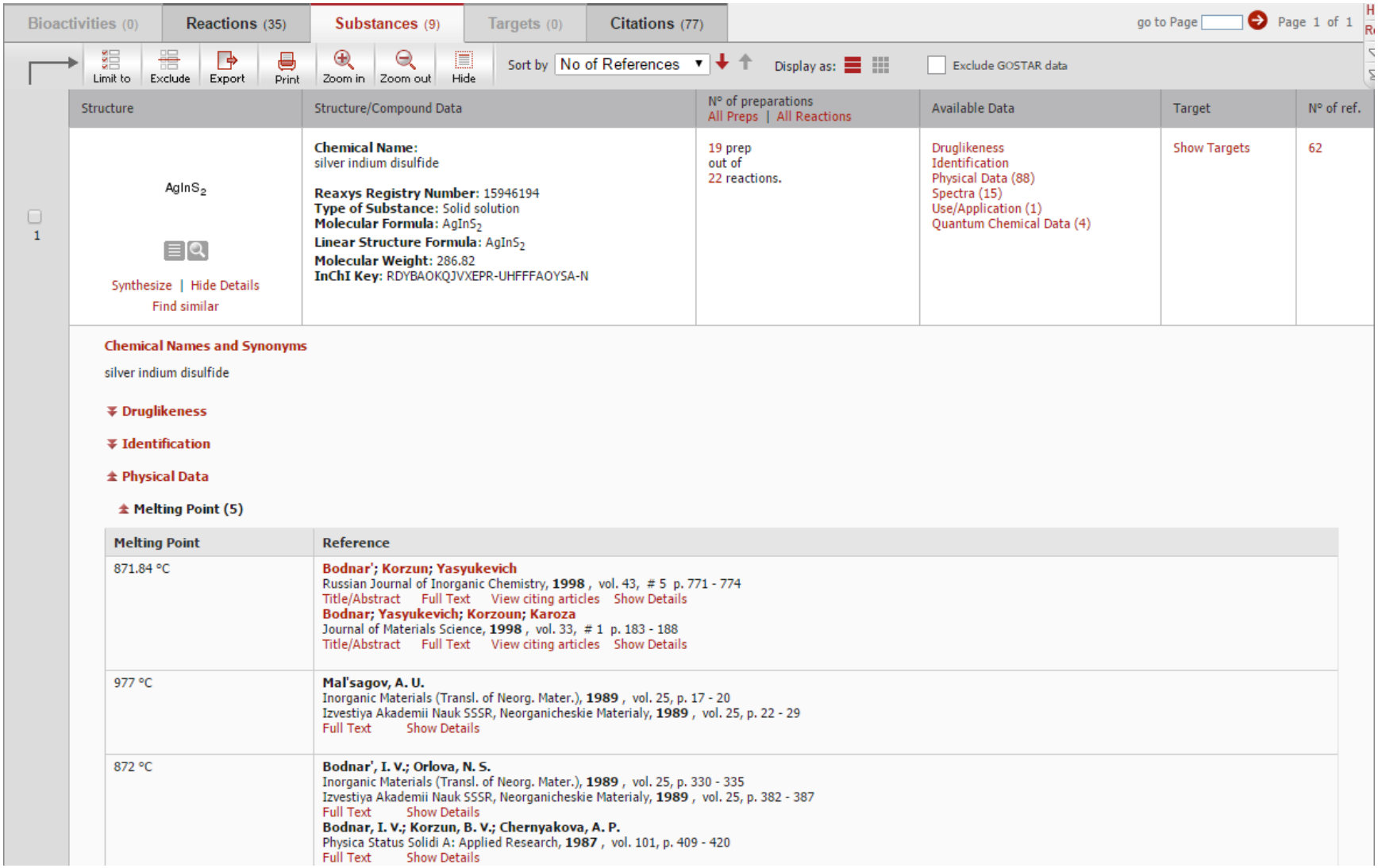
Reaxys Demo & Case Study

Ask Reaxys

分子式 $AgInS_2$

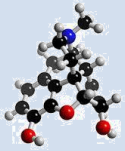


搜尋結果 – substances

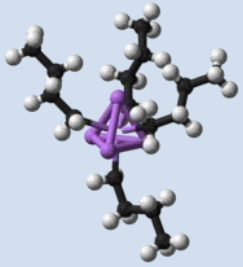


不同研究領域，適合不同的搜尋方式

Found in REAXYS SUBSTANCE RECORDS … and …

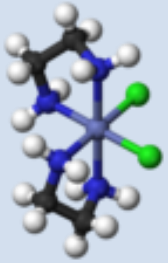


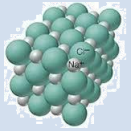
CLASSIC ORGANICS



ORGANOMETALLICS

COORDINATION COMPOUNDS

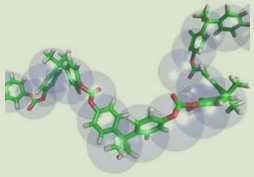


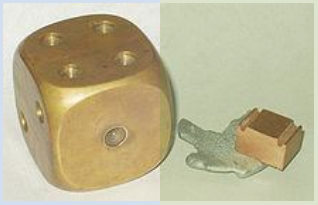


CLASSIC INORGANICS

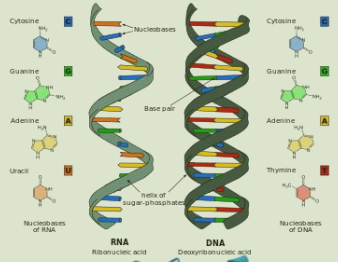
Found in KEYWORDS in REAXYS BIBLIOGRAPHIC RECORDS

POLYMERS

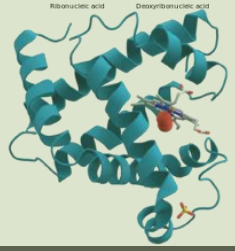




ALLOYS & METALS



CERAMICS



NUCLEIC ACIDS & PROTEINS

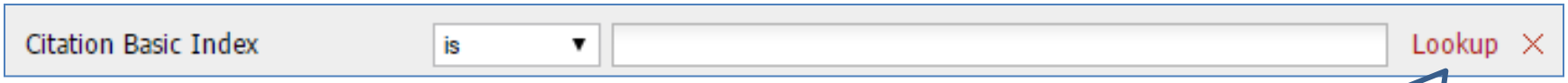
搜尋化合物 Substances

搜尋文獻 Literature

關鍵字文獻搜尋 – 結合多個關鍵字

使用 Citation Basic Index 欄位或 Advanced Search

可使用多種指令
結合關鍵字



布林邏輯 Boolean operators

- AND 涵蓋所有關鍵字
- OR 涵蓋任一關鍵字
- NOT 不涵蓋指定關鍵字

鄰近搜尋指令 Proximity Operators

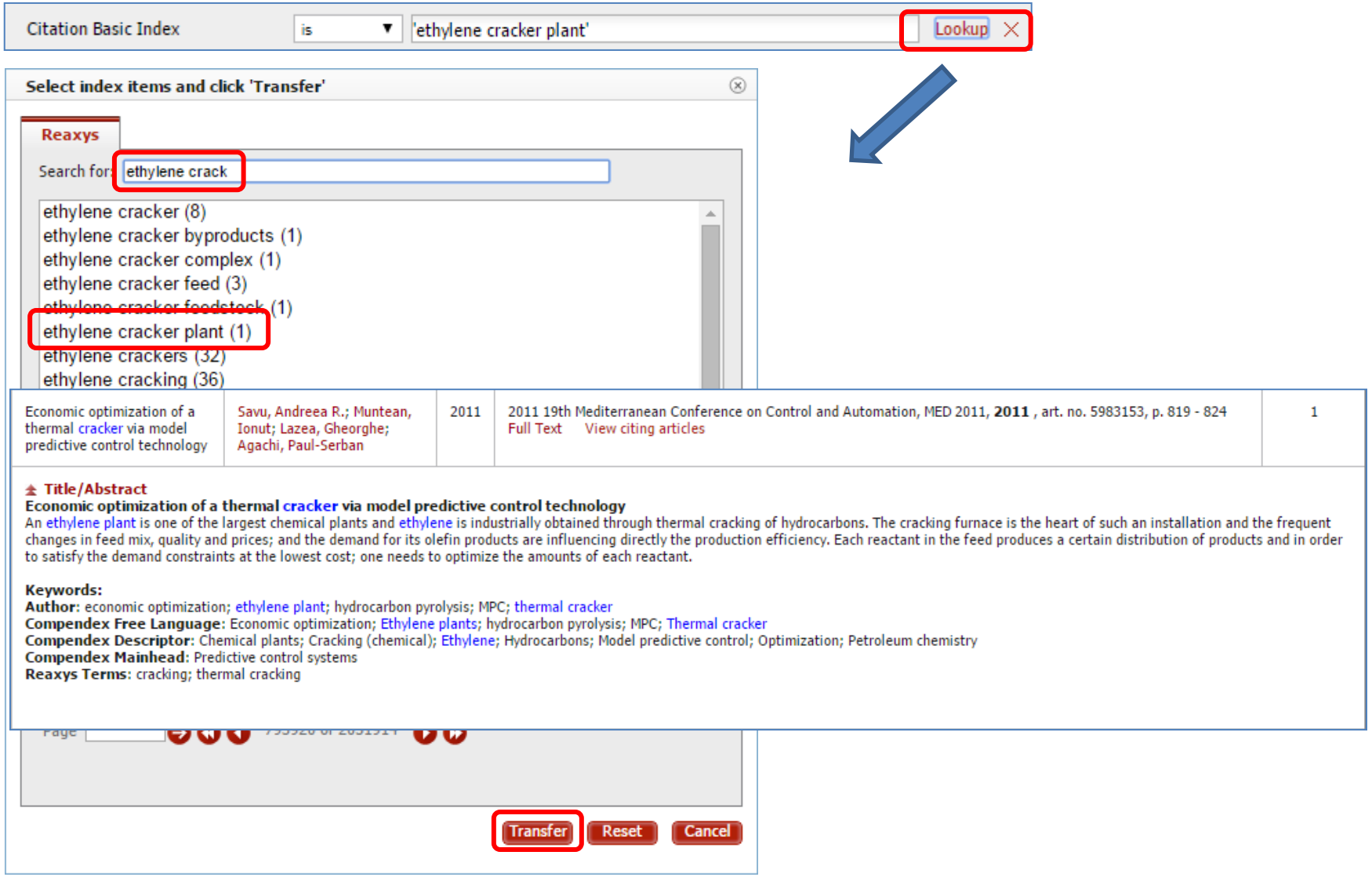
- Next 兩個相鄰關鍵字依指定順序排列
- Near 兩個關鍵字無須依指定順序排列

其它搜尋指令

- 通用字元 * 可加在單字的左右側，用來搜尋不完整單字 (例如 cataly* 可找到 catalyst, catalysis 等)
- 括弧 () 優先運算括弧內指令
- 空格 = AND
- ; = OR
- - 連接詞彙 (例如 low-density)

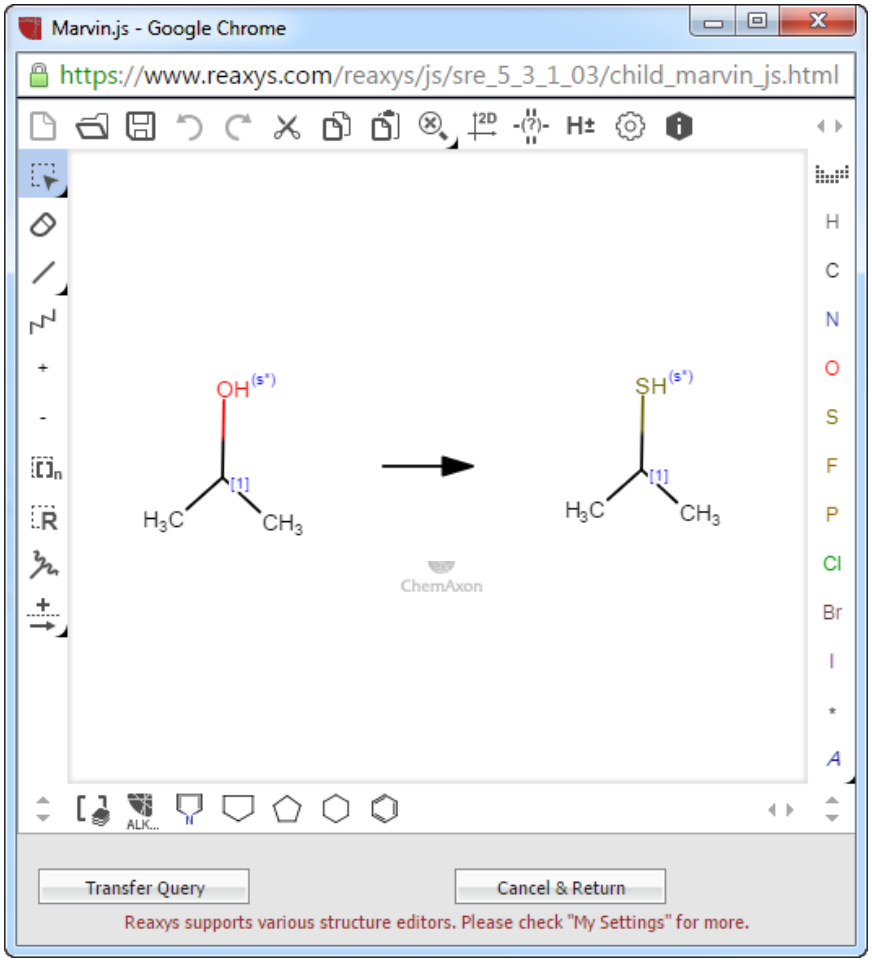
小分子化合物文獻搜尋結果

乙烯裂解廠



繪圖軟體 – Marvin JS

Reaxys 共支援 9 種繪圖軟體，包含常用的 Chemdraw, Accelrys, Marvinsketch 等

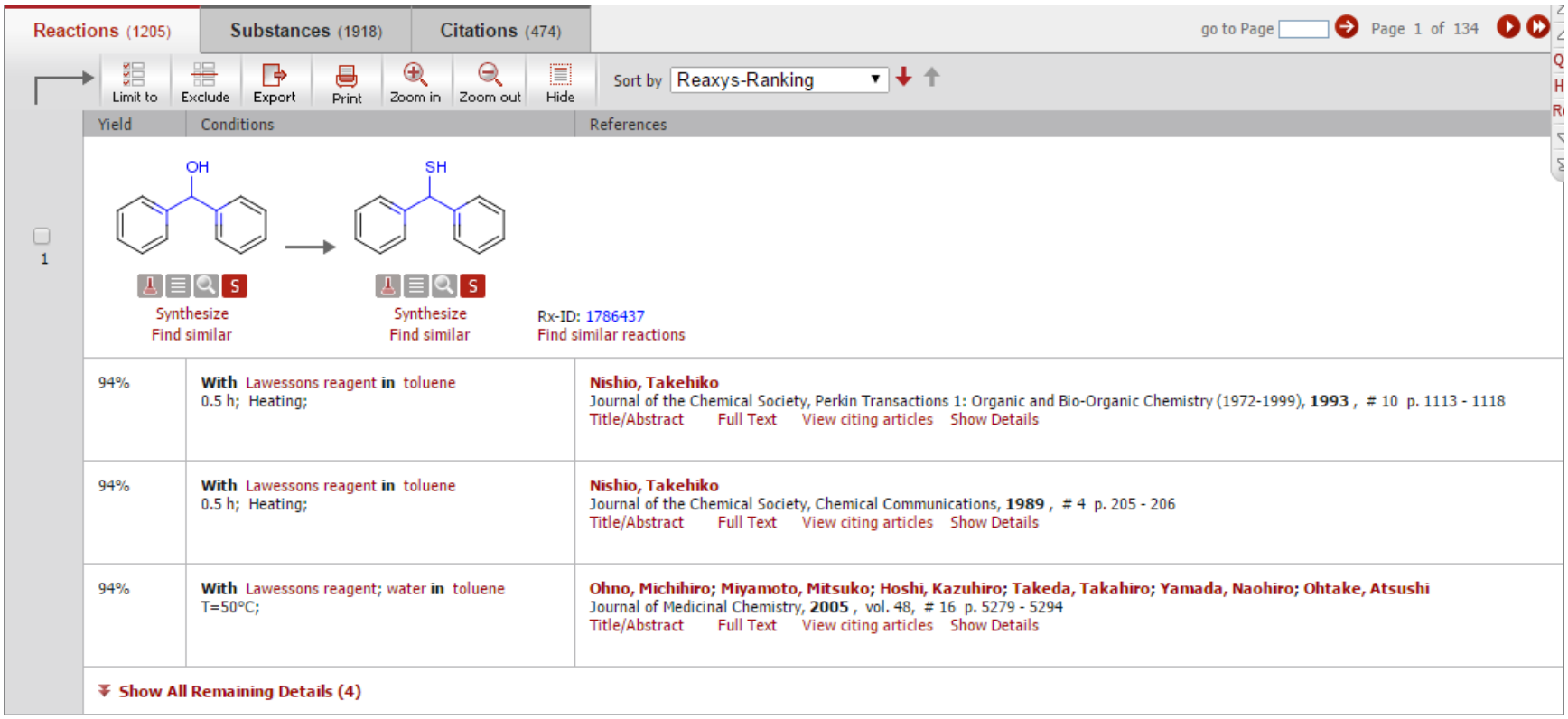


- 豐富的功能協助您搜尋各種衍生物與反應類型
  - 限定特定位置的鍵結、原子、或官能基種類，並具備多種彈性選項
  - R-group 功能
  - Substitution 限定特定原子是否接上官能基或接上鍵結的數量
  - Position variation bond 限定指定鍵結或官能基可能連接的多個位置
- 無須 Java 支援
- 可從 ChemDraw 複製貼上
- 繪製完畢的結構可存成去背圖檔，並可調整檔案大小

原廠線上教學短片
https://docs.chemaxon.com/display/docs/Video+Tutorials+JS

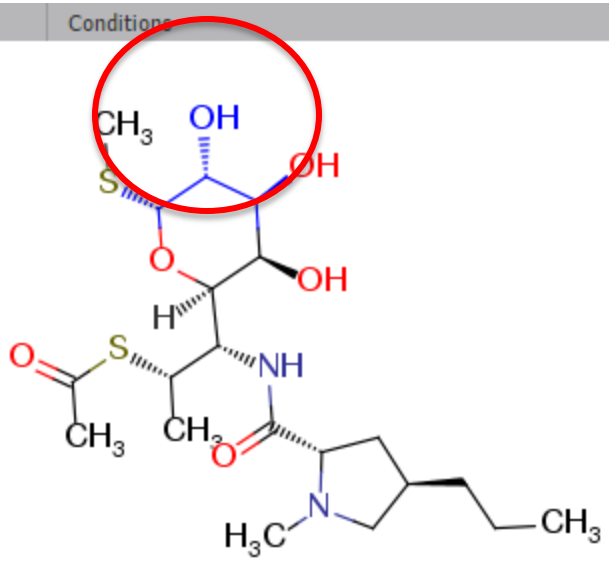
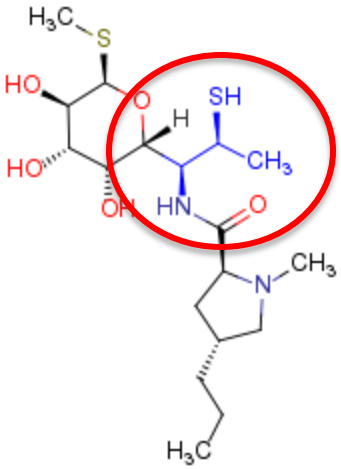
Reaction 搜尋結果

找到 1205 筆反應



若不使用 atom mapping

找到 3158 個反應，但官能基的位置可能不同

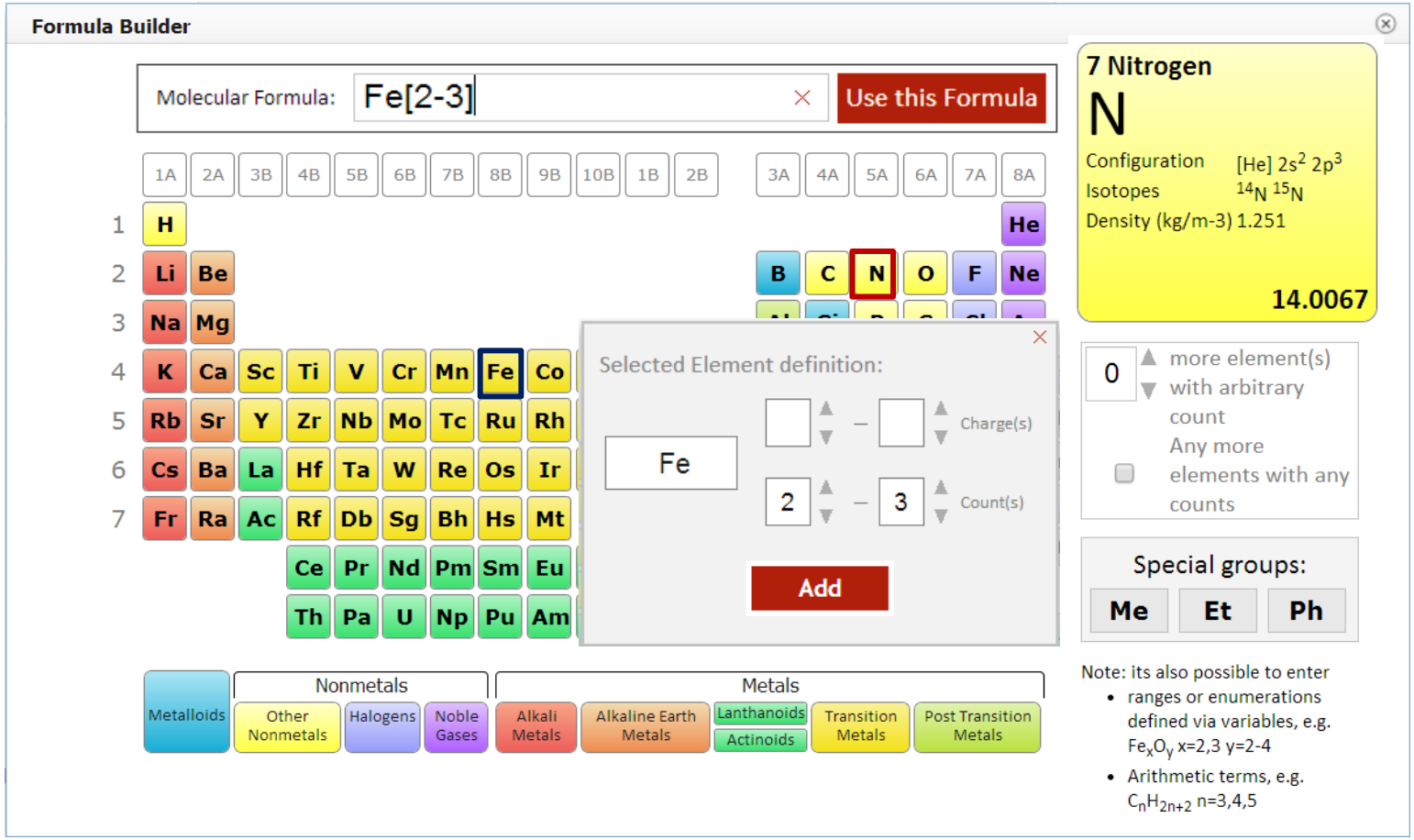
Yield	Conditions	References
	 Synthesize Find similar	 Synthesize Find similar
		Rx-ID: 27887377 Find similar reactions
94%	**With** methanol; sodium methylate T=20°C; 0.333333 h; Show Experimental Procedure	**Meiji Seika Kaisha, Ltd.** **Patent:** EP1970377 A1, **2008** ; **Location in patent:** Page/Page column 48 ; Title/Abstract Full Text Show Details

合金搜尋

輸入元素成份搜尋合金、陶瓷複合材料
例如鈦合金 Ti-6Al-4V、貴金屬催化劑 Pd/C、
陶瓷材料Yttria(y2o3)/Zirconia Ceramics (ZrO2)

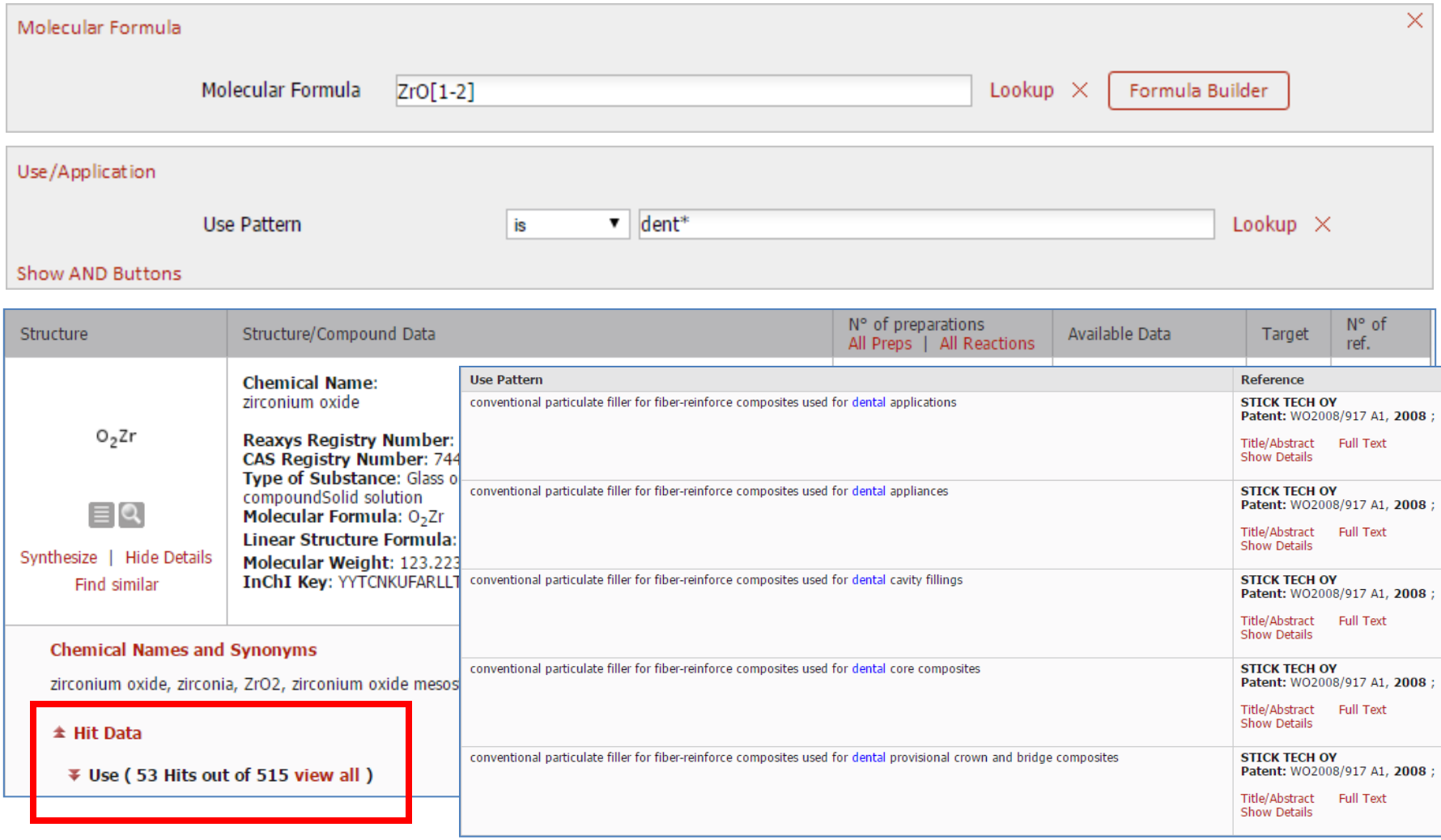
分子式搜尋

不完整分子式，例如只知道包含 34 個碳，輸入 C34*
多種分子數量組合，例如 FexOy, X=2,3 Y=2-4
不同元素比例固定，例如 CnH2n, n=2-4



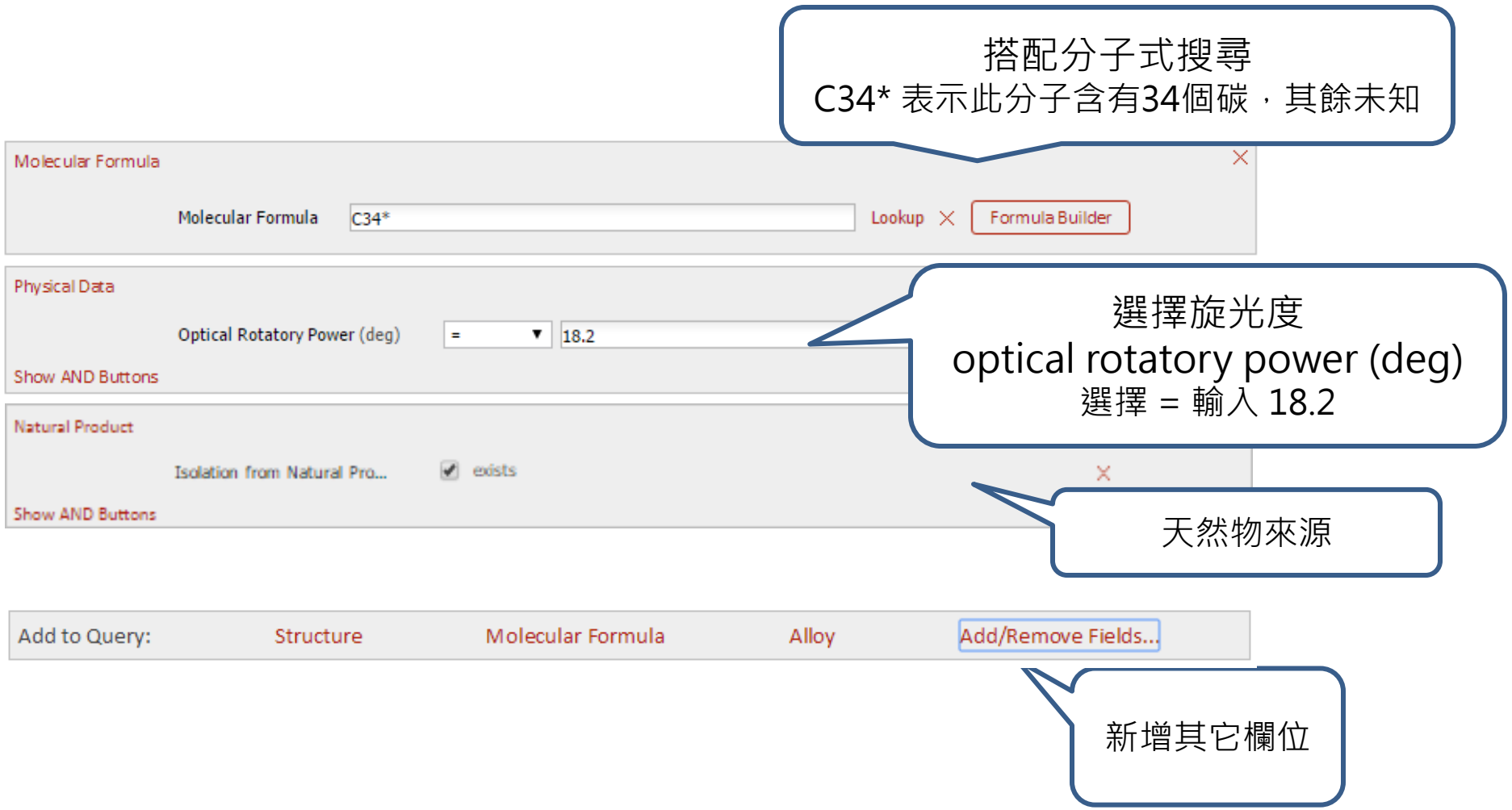
分子式搭配其它欄位搜尋

分子式：氧化鋯 ZrO[1-2]
用途：牙科材料



物化特性搜尋範例

搜尋包含34個碳，旋光度=18.2，且萃取自天然物的所有化合物



Reaxys 搜尋結果分析及輸出

分析篩選搜尋結果，並輸出報告與同儕分享討論

搜尋結果

- 反應 (Reactions)
- 化合物* (Substances)
- 引用文獻 (Citations)

合成路徑規畫

Synthesis Plans

資料庫連結

PubChem 10 Years

eMolecules

包裝價格資料

篩選功能：Analysis View 及 28 種 Filter

多元資料儲存或輸出方式

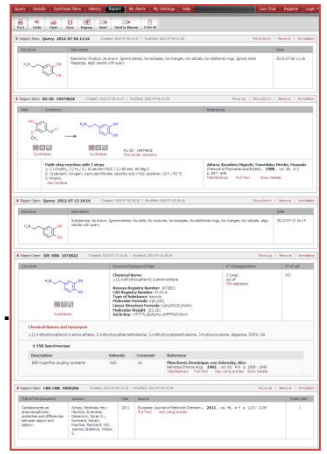
- 彙整各種搜尋結果
- 一鍵 e-mail 分享

Report

檔案格式：E-mail、HTML網頁、PDF
可儲存：搜尋條件、化合物、反應、文獻、合成路徑
優點：適合儲存少量資料、操作簡便、格式簡明、保留超連結

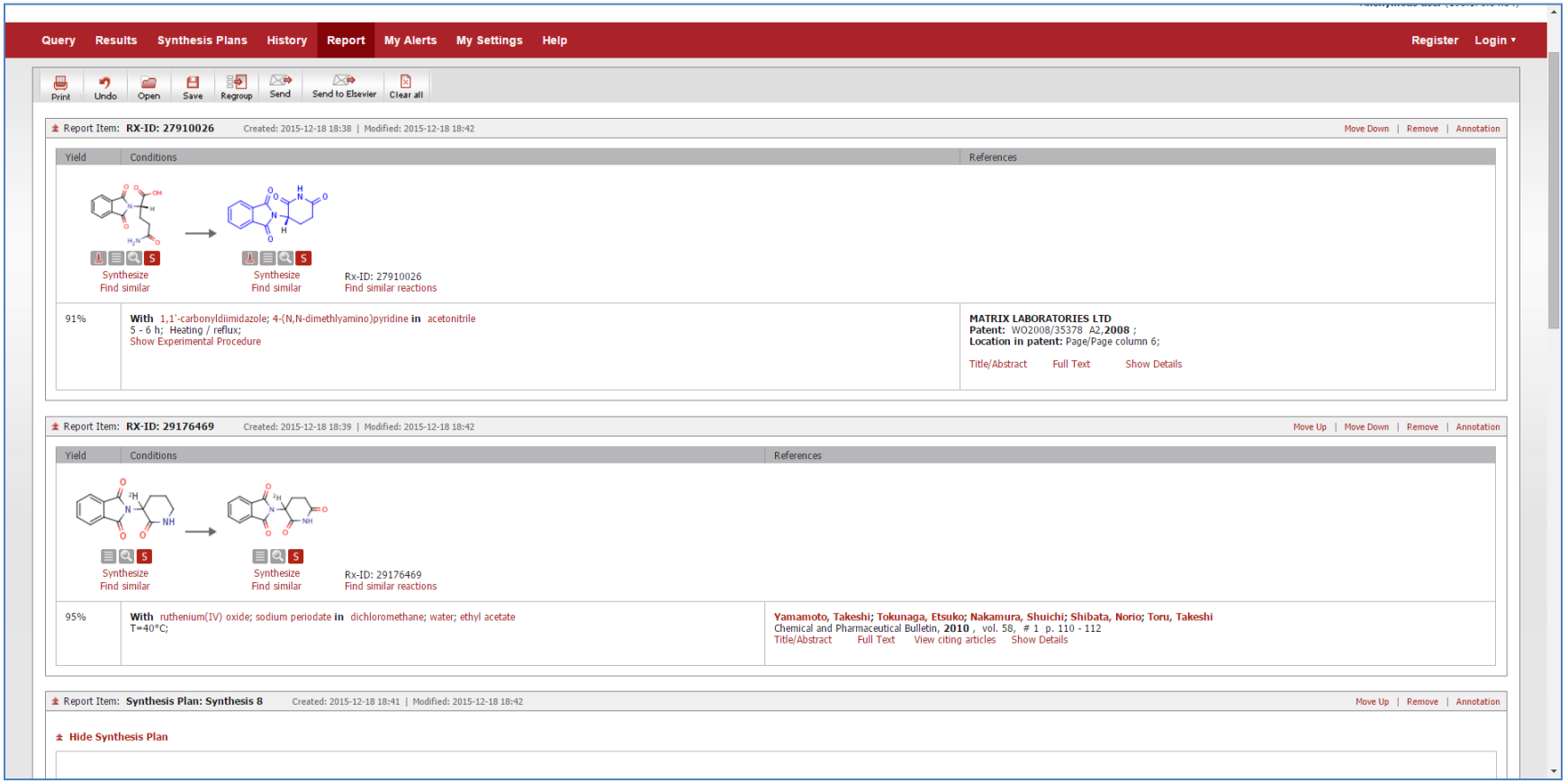
Export

檔案格式：PDF、XML、Word、Excel、電子實驗記錄本、書目資料..
可儲存：化合物、反應、文獻、合成路徑
優點：可大量輸出搜尋結果、多種檔案格式可與進階分析軟體相容



Report – 快速比較多種反應式並與同儕分享

可儲存 XML 檔案或直接以 e-mail 分享搜尋結果

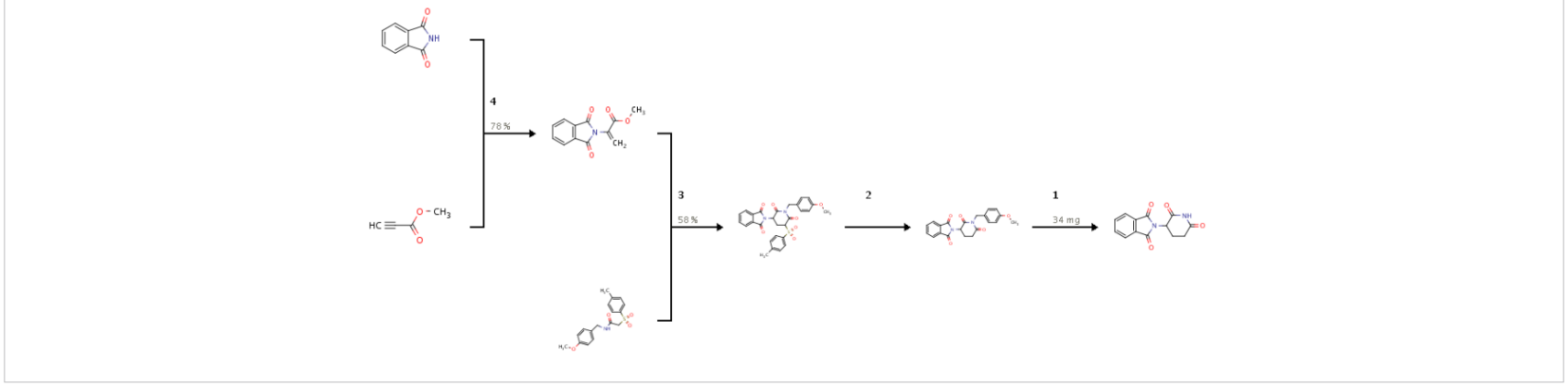


Report – 儲存並分享規劃好的合成路徑

可使用 autoplan 自動規劃、瀏覽反應條件、產量、包裝價格、並挑選符合需求的路徑輸出成報告

Report Item: **Synthesis Plan: Synthesis 8** Created: 2015-12-18 18:41 | Modified: 2015-12-18 18:42 Move Up | Remove | Annotation

Hide Synthesis Plan



Hide Synthesis Details

Step	Yield	Conditions	References
1 Reaxys	34 mg	**With** ammonium cerium(IV) nitrate **in** acetonitrile T=20°C; 5 h;	**Chang, Meng-Yang; Chang, Chung-Ho; Chen, Shui-Tein; Chang, Nein-Chen** Journal of the Chinese Chemical Society, **2002** , vol. 49, # 3 p. 383 - 385 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
	34 mg	**With** ammonium cerium(IV) nitrate **in** water; acetonitrile 5 h;	**Chang, Meng-Yang; Chen, Shui-Tein; Chang, Nein-Chen** Synthetic Communications, **2003** , vol. 33, # 8 p. 1375 - 1382 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
2 Reaxys		**With** disodium hydrogenphosphate; sodium amalgam **in** methanol T=20°C; 1 h;	**Chang, Meng-Yang; Chang, Chung-Ho; Chen, Shui-Tein; Chang, Nein-Chen** Journal of the Chinese Chemical Society, **2002** , vol. 49, # 3 p. 383 - 385 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
		With sodium amalgam; sodium salt of phosphorous acid **in** methanol T=20°C; 1 h;	**Chang, Meng-Yang; Chen, Shui-Tein; Chang, Nein-Chen** Synthetic Communications, **2003** , vol. 33, # 8 p. 1375 - 1382 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

Report – 透過 e-mail 快速分享搜尋結果

點 Report 查看儲存資料

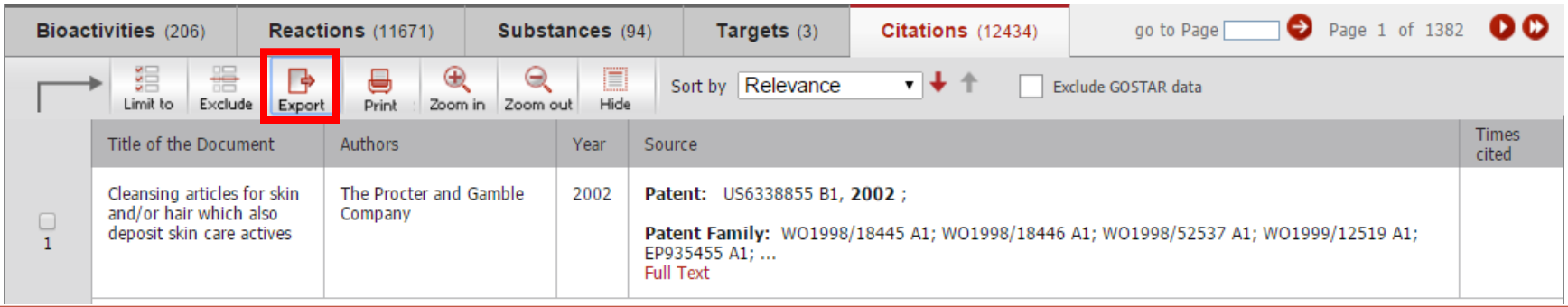
儲存或讀取 XML 檔

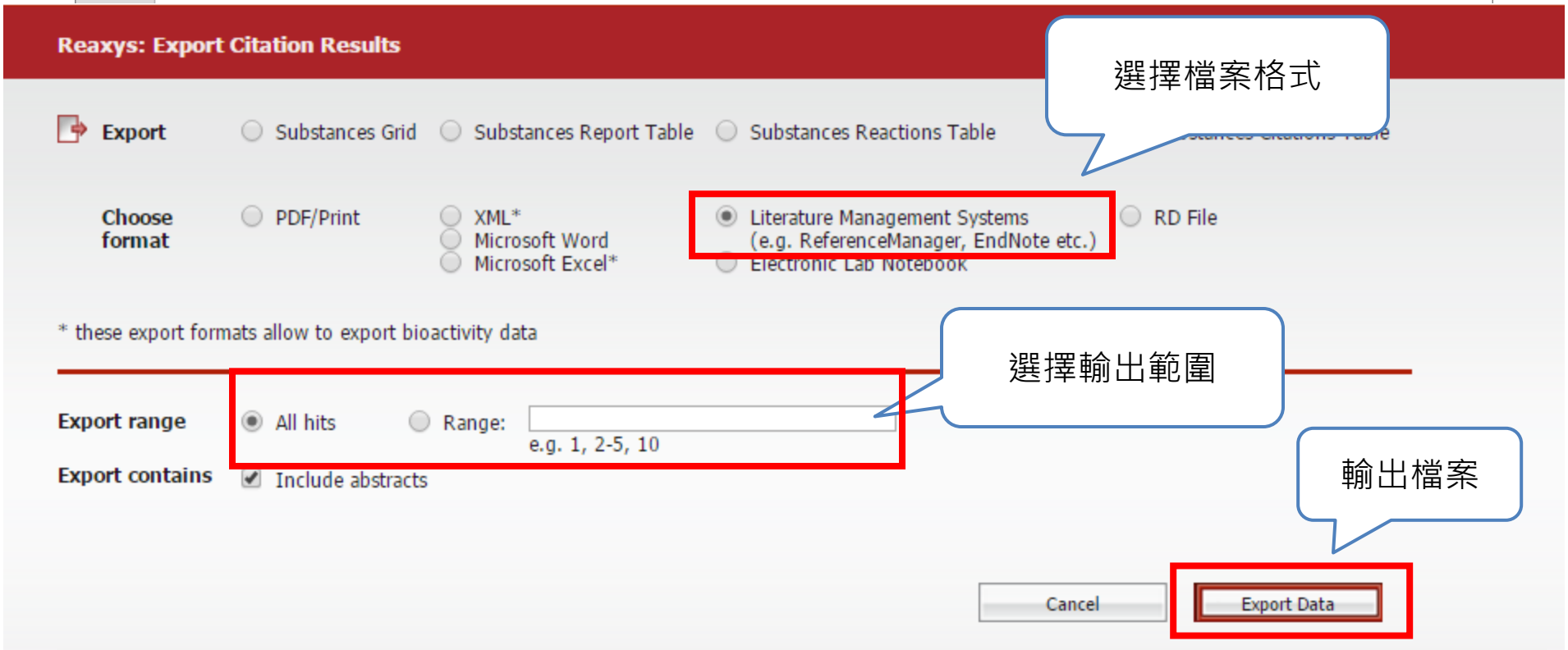
直接 E-mail 儲存資料

E-mail 搜尋問題及儲存資料給 Elsevier

搜尋指令、化合物數據、反應、合成路徑、文獻資料皆可儲存到 Report

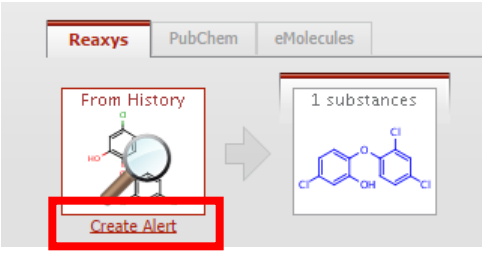
Export 輸出搜尋文獻至 EndNote 或 Mendeley

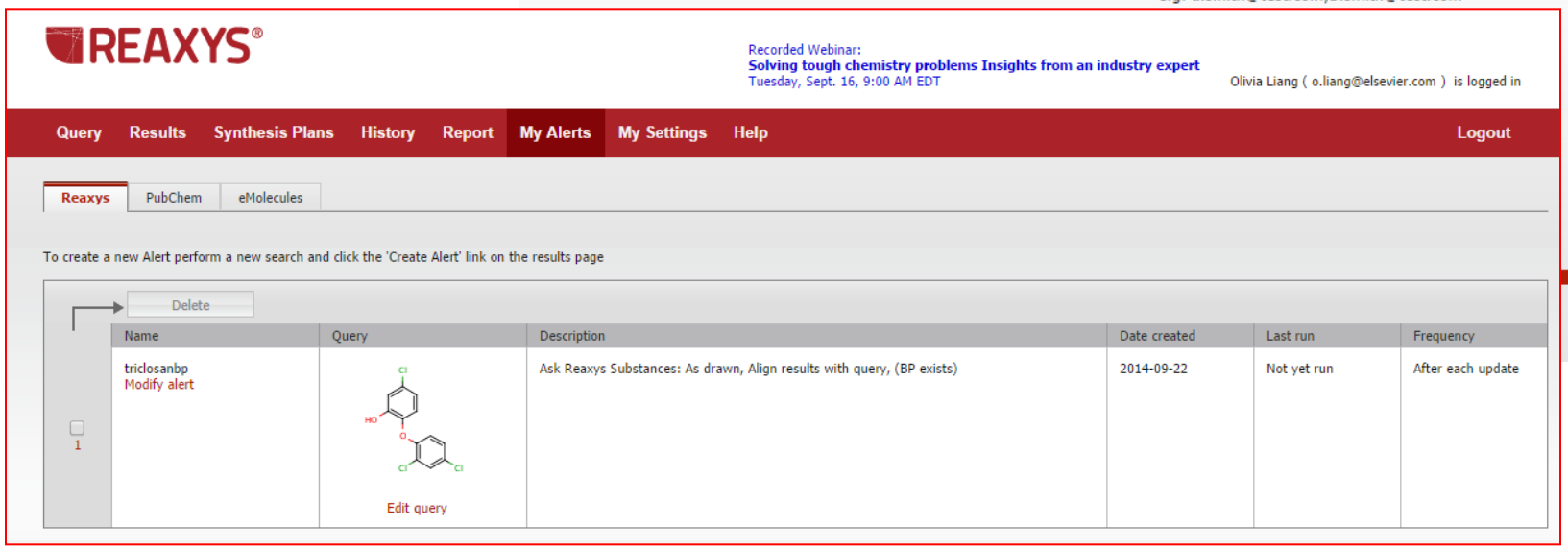




My Alerts – 持續關注特定主題

新知通報 (My Alerts)：訂閱常用搜尋條件，隨時閱讀最新資料。





中文線上學習平台

短片、應用範例、進階講座、線上測驗

- 網址：Taiwan.elsevier.com/reaxyshelp

中文線上資源


ELSEVIER
English | 简体中文 | 繁體中文 | 한국어 | 日本 | India
Elsevier.com 此網站 搜索
首頁
產品
快速上手Elsevier資料庫
活動與講座
Elsevier相關新聞剪報
如何投稿Elsevier旗下期刊
關於我們
網站地圖
首頁
理工類資料庫—讓你掌握研究先機
Reaxys 線上學習平台
首頁 線上學習 線上研討會 考試認證 聯絡我們
Reaxys 收錄期刊及專利資料，協助您搜尋整理好的化學反應、文獻、化合物及其特性與實驗數據，並輕鬆與他人分享
Reaxys 化學資料庫為國研院科資中心免費提供全國大專院校使用
熱門學習影片
Ask Reaxys
Reaxys tree
Engineering Village
EV工程類資料庫
提供一系列的優質的應用科學及工程領域專業資源、資訊
REAXYS
由化學家專為化學家所設計
進入Reaxys化學資料庫
Reaxys中文支援
加入粉絲團
Scopus
請上線！世界最大單一索摘資料庫
進入Scopus
Scopus中文支援
Scopus研究迷俱樂部
加入粉絲團
facebook
Email or Phone
Password
Log In
Keep me logged in
Forgot your password?
Elsevier:「Reaxys」的研究迷俱樂部 is on Facebook.
To connect with Elsevier:「Reaxys」的研究迷俱樂部, sign up for Facebook today.
Sign Up
Log In
REAXYS
Elsevier:「Reaxys」的研究迷俱樂部
776 likes · 11 talking about this
Like
Product/Service
About
Photos
Reaxys - 新手入門
Likes
Notes 12
776
公告
lsevier 台灣電子報 - 2013年八月號新上架！
lsevier 台灣電子報 - 2013年七月號
lsevier 台灣電子報 - 2013年六月號
lsevier 台灣電子報 - 2013年五月號
lsevier 台灣電子報 - 2013年四月號
lsevier 台灣電子報 - 2013年三月號
lsevier 台灣電子報 - 2013年二月號
lsevier 台灣電子報 - 2013年一月號
lsevier 台灣電子報 - 十二月號
lsevier 台灣電子報 - 十一月號
lsevier 台灣電子報 - 十月號
lsevier 台灣電子報 - 九月號
Elsevier 台灣電子報 - 八月號

ELSEVIER

Thank You!