

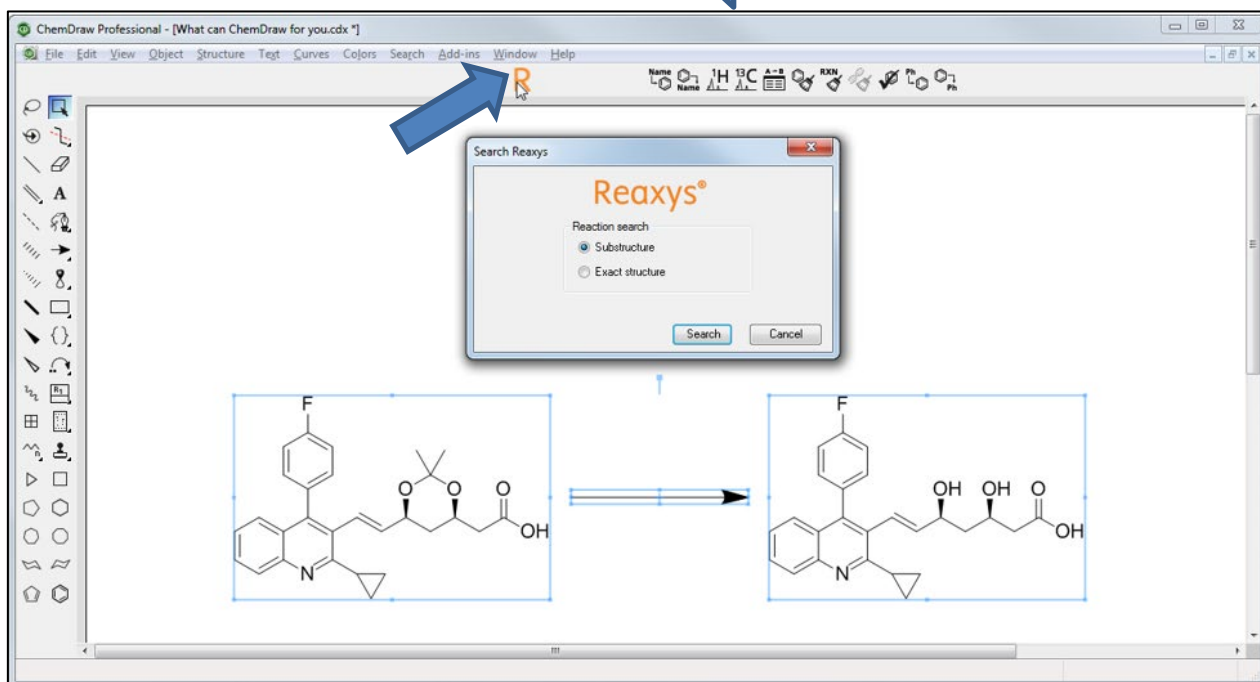
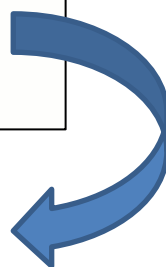
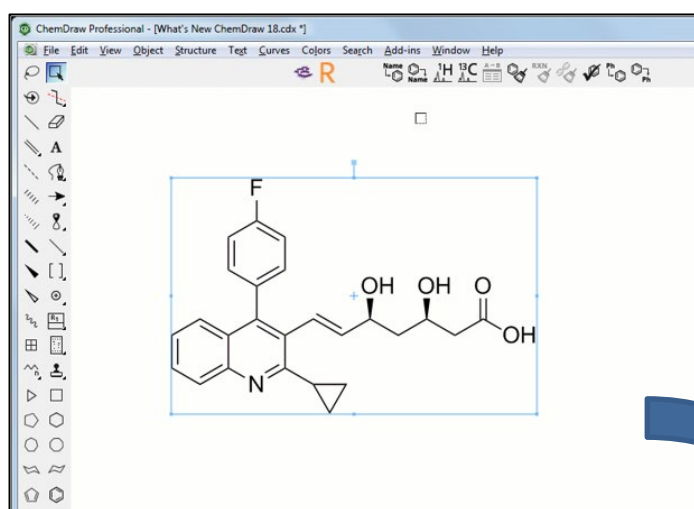
お客様各位

Reaxys 機能強化のお知らせ

平素は格別のご高配を賜り、厚くお礼申し上げます。
この度、Reaxys（リアクシス）の機能強化を行いましたのでお知らせいたします。

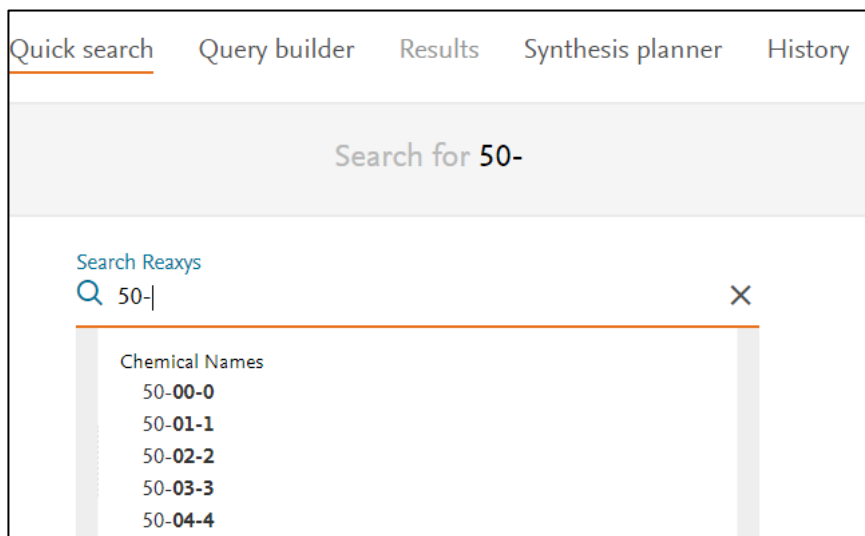
1. ChemDraw との連携機能

ChemDraw で構造式作図後、直接 Reaxys で検索できる連携機能を実装しました。
（ChemDraw ver.18 以降）。



Reaxys

2. テキスト検索利便性の向上
構造式による検索に加えて、キーワード検索でも Reaxys をより一層ご活用いただくことに主眼を置いた拡充を行いました。
 - a. タキシノミーの強化
Embase Emtree 由来の統制語や Reaxys 独自の統制語を約 61,000 語から約 160,000 語に拡充しました。
※Embase：医薬文献検索データベースであり、360,000 語以上の医薬用語を収録
 - b. CAS RN における auto suggest 機能の強化
従来は Query Builder 内でのみ CAS RN の auto suggest 機能が利用できましたが、トップページ Quick Search にも auto suggest 機能が実装されました。



3. 検索結果画面の改良
検索結果画面やプレビュー画面の視認性・利便性が向上しました。
 - a. プレビュー画面における表示順の変更
検索実行後に表示されるプレビュー画面は、常に Substances, Documents, Reactions の順番に表示されていましたが、検索語あるいは構造式に対して最も関連性の高いと思われる順に表示されるようになりました。

Reaxys | Quick search | Query builder | Results | Synthesis planner | History | Takashi Isobe

New | Edit

Results for Fukuyama reduction

	428	Reactions	Condition : Fukuyama reduction Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results	View Results >
	90	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : Fukuyama reduction Edit in Query Builder Create Alert	Preview Results	View Results >

Reaxys

- b. 検索結果画面のレイアウト変更
アイコンの配置を変更し、1画面あたりの情報量を増やすとともに罫線による視認性が向上しました。

<変更前>

The screenshot shows the Reaxys interface with 2,892 reactions. The left sidebar contains filter categories such as 'By Structure', 'Yield', 'Reagent/Catalyst', 'Solvent', 'Catalyst Classes', 'Solvent Classes', 'Product Availability', 'Reactant Availability', 'Reaction Classes', 'Document Type', and 'Publication Year'. The main content area displays a reaction card for Reaction ID: 28096702, including a chemical structure, a table of conditions and yields, and a list of references.

Yield	Conditions	References
93.5%	With $C_{68}H_{72}N_4O_{10}Ti_2$; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction;	Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. - Catalysis Today, 2017, vol. 279, p. 84 - 89 Full Text ↗ Cited 1 times ↗ Details > Abstract >
86%	With N-methyl-6-aza-5 β ,6 β -epoxy-cholestane-3 β -tert-butylidiphenylsilyloxy tetrafluoroborate In dichloromethane at	Zhou, Guobin; Guan, Yueqing - Heterocyclic Communications, 2016, vol. 22, # 1, p. 17 - 19

<変更後>

The screenshot shows the updated Reaxys interface with 3,082 reactions. The layout is more compact, with a larger chemical structure and a more prominent table of conditions and yields. The table includes a 'Reference' column with links to full text, citation counts, and details/abstract options.

Yield	Conditions	Reference
93.5%	With $C_{68}H_{72}N_4O_{10}Ti_2$; dihydrogen peroxide In water; ethyl acetate at 0°C; for 24h; Reagent/catalyst; enantioselective reaction;	Talsi, Evgenii P.; Bryliakov, Konstantin P. - [Catalysis Today, 2017, vol. 279, p. 84 - 89] Full Text ↗ Cited 2 times ↗ Details > Abstract >
86%	With N-methyl-6-aza-5 β ,6 β -epoxy-cholestane-3 β -tert-butylidiphenylsilyloxy tetrafluoroborate In dichloromethane at -70 - 20°C; for 3h; Inert atmosphere; enantioselective reaction;	Zhou, Guobin; Guan, Yueqing - [Heterocyclic Communications, 2016, vol. 22, # 1, p. 17 - 19] Full Text ↗ Details > Abstract >

Reaxys

- c. 文献・特許情報における検索キーワードハイライト表示
キーワード検索を行った際、これまではヒットした箇所を確認する際、Index Terms をクリックする必要がありましたが、初期状態でハイライト表示されるようになりました。

The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, a search box contains 'Negishi Cross Coupling'. Below it, the search results are displayed. The first result is 'Heterogenized nickel catalysts for various organic transformations' by Yadav, Manavi; Sharma, Rakesh Kumar. The 'Index Terms' section for this result is highlighted with a blue box, showing terms like 'Baeyer-Villiger oxidation', 'Buchwald-Hartwig cross coupling reaction', and 'Heck reaction...'. The second result is '1,3-P,N hybrid ligands in mononuclear coordination chemistry and homogeneous catalysis' by Rong, Mark K.; Holtrop, Flip; Slootweg, J. Chris; Lammertsma, Koop. Its 'Index Terms' section is also highlighted, showing 'Beckmann rearrangement', 'Buchwald-Hartwig cross coupling reaction', and 'Heck reaction...'. The third result is 'Mimicking salmochelin S1 and the interactions of its Fe(III) complex with periplasmic iron siderophore binding proteins CeuE and VctP' by Wilde, Ellis J.; Blagova, Elena V.; Sanderson, Thomas J.; Raines, Daniel J.; Thomas, Ross P.; Routledge, Anne; Duhme-Klair, Anne-Kathrin; Wilson, Keith S. Its 'Index Terms' section is highlighted, showing 'Hydrogen bond', 'Negishi coupling', and 'circular dichroism...'. A blue arrow points from the search box to the search results.

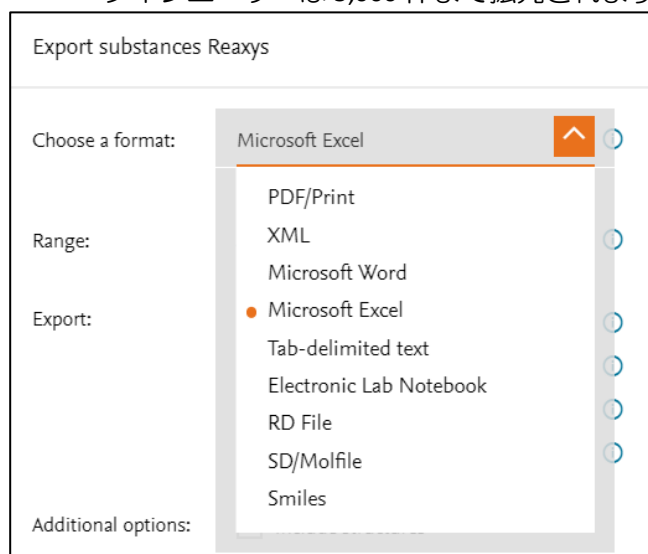
- d. Synthesis Planner における実験条件表示場所選択機能の追加
実験条件の表示を Separate window, 画面下部あるいは画面右に表示されることできるようになりました。また、ログインユーザーは preference 画面においていずれかを default 設定することができます。

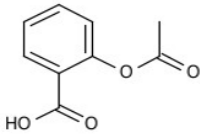
The screenshot shows the Reaxys Synthesis Planner interface. On the left, there is a 'Plan 1' section with chemical structures and a reaction arrow. On the right, the 'Conditions' section is displayed. The 'Conditions' section is divided into 'Preparation - 1' and a table of conditions. The table has three columns: 'Yield', 'Conditions', and 'Reference'. The first row shows a 100% yield with conditions 'In neat (no solvent) Molecular sieve; Microwave irradiation; Green chemistry; Experimental Procedure'. The second row shows a 99% yield with conditions 'With erbium(III) chloride for 0.2h; Heating;'. The 'Reference' column contains citations for each condition. A blue box highlights the window control buttons (minimize, maximize, close) in the top right corner of the 'Conditions' panel.

Reaxys

e. Export の仕様変更・機能強化

.xlsx 形式で Substances 検索結果を Export した場合、従来の smiles 形式に加えて、構造式が表示されるようになりました。なお、1 回の操作で 1,000 件まで Export することができますが、ログインユーザーは 5,000 件まで拡充されます。



Structure: Image	SMILES
	<chem>CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O</chem>

f. IE11 における検索結果画面表示件数変更

初期設定で 15 件、最大で 30 件に変更させていただきました（他ブラウザは初期設定 15 件、最大 99 件）。Reaxys は Google Chrome や Microsoft Edge など各ブラウザにおける最新バージョンに最適化するように設計しており、これらブラウザにおけるレスポンスが IE11 よりも優るため、Google Chrome や Edge のご利用を推奨しております。IE11 での検索パフォーマンスが著しく劣る場合は担当にお知らせください。環境に応じて調査させていただきます。

Reaxys

4. Query Builder レイアウトの変更

レイアウトを調整し、より多くの検索条件が1画面に収まるようになりました。

<変更前>

Reaxys Quick search Query builder Results Synthesis planner History Sign in

Search Substances

Import Save Reset form Delete Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

Melting Point Find any Hide fields ^ x

>= Melting Point, °C 80

is Solvent (Melting Point)

AND

Refractive Index Find any Hide fields ^ x

>= Refractive Index 2

= Wavelength (Refractive Index), nm

= Temperature (Refractive Index), °C

Search properties Fields Forms History

Physical Properties

- Melting Point
- Boiling Point
- Sublimation
- Refractive Index
- Density
- Adsorption

Spectra

<変更後>

Reaxys Quick search Query builder Results Synthesis planner History Takashi Isobe

Search in: Reactions Substances Documents

Import Save Reset form Delete all Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

Melting Point Find any Hide fields ^ x

>= 80

is Solvent (Melting Point)

AND

Refractive Index Find any Hide fields ^ x

>= 2

= Wavelength (Refractive Index), nm

= Temperature (Refractive Index), °C

AND

Document Basic Index is Document Basic Index

AND

NMR Spectroscopy Find any Show fields (Description...Original Text)

Find search fields and forms Fields Forms History

Reaxys

- Basic Indexes
- Identification
- Physical Properties
- Spectra
 - NMR Spectroscopy
 - IR Spectroscopy
 - Mass Spectrometry
 - UV/VIS Spectroscopy
 - Raman Spectroscopy

詳細、ご不明点については下記の宛先までお問い合わせ下さい。

以上



エルゼビア・ジャパン株式会社
〒106-0044 東京都港区東麻布1-9-15 東麻布一丁目ビル4階
TEL : 03-5561-5035 Email : jp.corporate@elsevier.com