

お客様各位

Reaxys アップデートのお知らせ 2012年1月

Reaxys (リアクシス) が、1月21日に以下のようにアップデートされましたので、お知らせ致します。

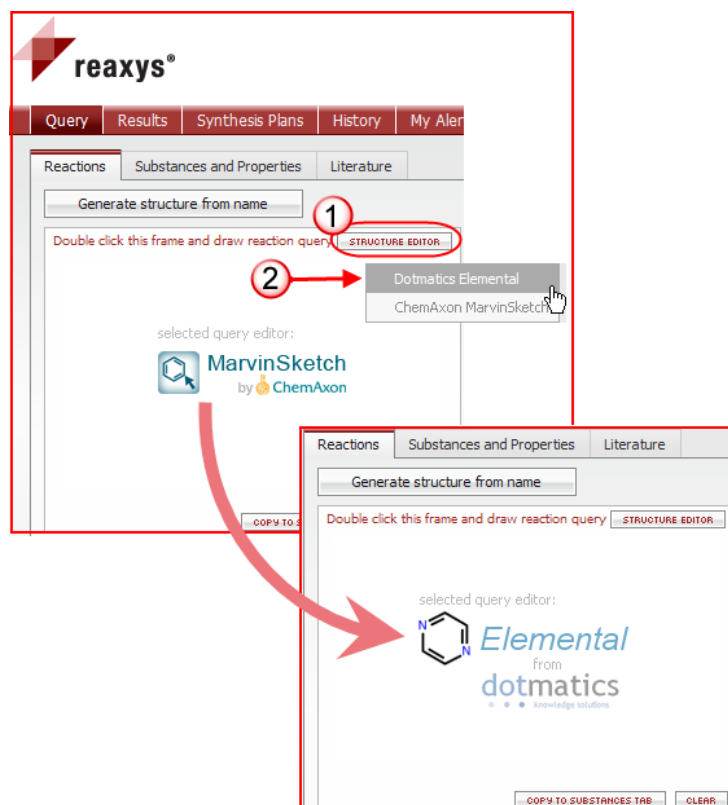
- 1. Java 不要の構造式描画ソフトの追加:**
Java 不要の構造式描画ソフト Elemental に新たに対応致しました。
- 2. 構造式検索機能の強化:**
Reaxys 検索エンジンが Coordinative bond の設定を認識できるようになりました。
- 3. 合成計画ツールの機能の追加:**
合成ルート上の化合物の合成法がない場合、類似構造を持つ化合物を表示し、その合成ルートを活用できるようになりました。

1. Java 不要の構造式描画ソフトの追加

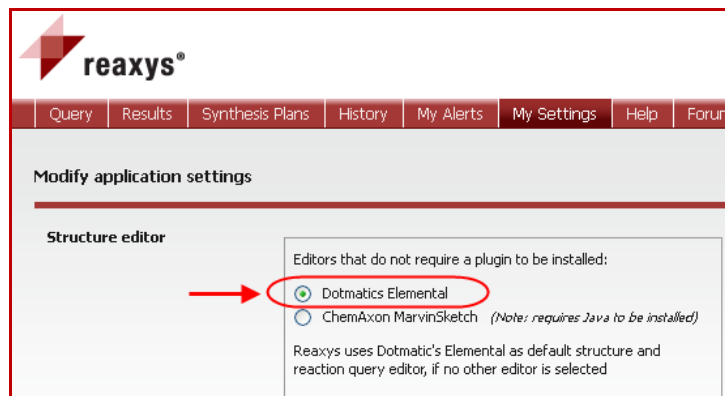
Java 不要の構造式描画ソフト Elemental に新たに対応致しました。
Java 必要な描画ソフトと比べ、Elemental の起動スピードは速くなっておりませんが、現時点では一部機能に未対応となっております。

Elemental をご利用されたい場合

ログインせずにご利用の場合は、下記のように構造式描画フレーム右上にある **STRUCTURE EDITOR** ボタンをクリックし、表示されるポップアップメニューから「Dotmatics Elemental」を選択ください。



ログインしてご利用の場合は、「My Settings」 > 「Modify application settings」画面にて、Structure editor を「Dotmatics Elemental」に変更してください。



Elemental の利用ガイドは下記の URL をご参照ください（英語のみ）。
https://www.reaxys.com/reaxys/js/sre_4_2_0_43/elemental/docs/Elemental.pdf

2. 構造式検索機能の強化

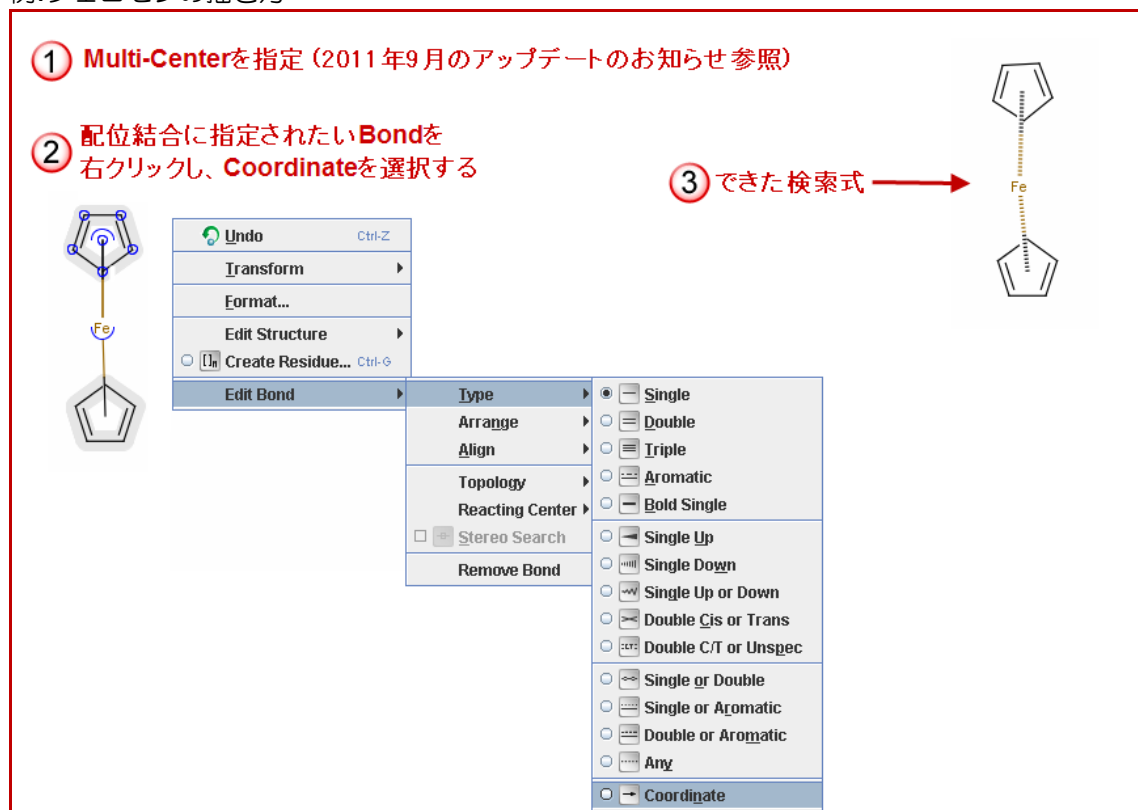
Reaxys 検索エンジンが Coordinative bond の設定を認識できるようになりました。

例: フェロセンの描き方

① **Multi-Center**を指定 (2011年9月のアップデートのお知らせ参照)

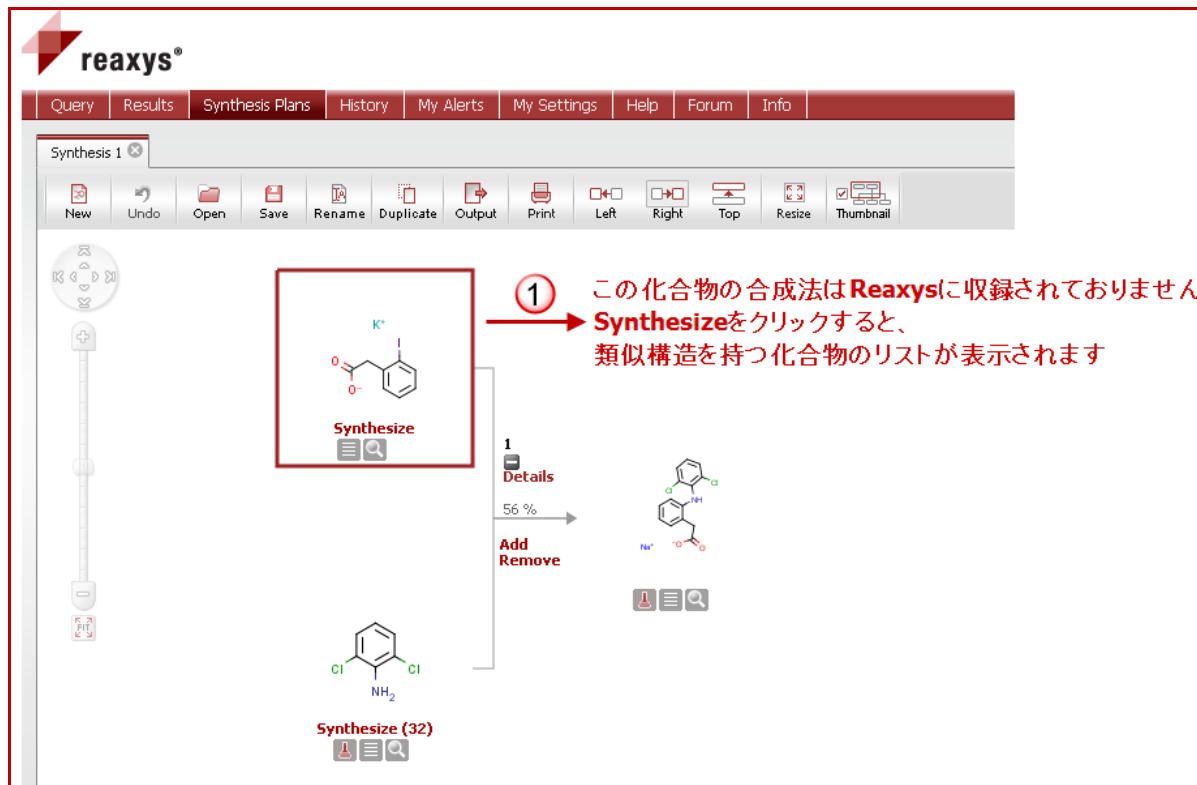
② 配位結合に指定されたい **Bond** を右クリックし、**Coordinate**を選択する

③ できた検索式 →



3. 合成計画ツールの機能の追加:

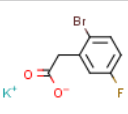
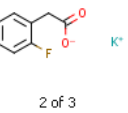
合成ルート上の化合物の合成法がない場合、類似構造を持つ化合物を表示し、その合成ルートを活用できるようになりました。



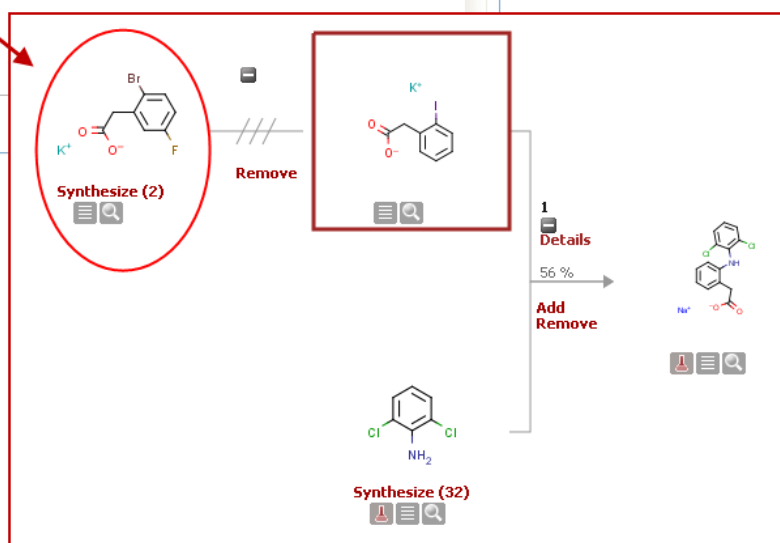
The screenshot displays the Reaxys software interface. At the top, there is a navigation bar with tabs for Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, Forum, and Info. Below this is a toolbar with icons for New, Undo, Open, Save, Rename, Duplicate, Output, Print, Left, Right, Top, Resize, and Thumbnail. The main workspace shows a synthesis plan for 'Synthesis 1'. A red box highlights a compound with a potassium ion (K⁺) and a carboxylate group, labeled 'Synthesize'. A red arrow points from this box to a text box containing the following Japanese text:
① この化合物の合成法は **Reaxys** に収録されておりません **Synthesize** をクリックすると、類似構造を持つ化合物のリストが表示されます
Below the highlighted compound, there is a list of similar compounds. The first entry is a benzene ring with two chlorine atoms and an amino group (NH₂), labeled 'Synthesize (32)'. To the right of this list, there is a 'Details' section showing a chemical structure of a similar compound with a 56% match, and 'Add' and 'Remove' buttons.

Found similar structures

Reaxys couldn't find syntheses for the selected compound. Instead a similarity searching on that compound retrieved **3 alternative structure candidates**. If you want to proceed with the synthesis planning using one of the similar compounds, then please select it from the list below by clicking a Submit button.

Structure (3)	Chemical Name	Nº of Ref	Nº of preparations
 1 of 3 Submit	potassium 2-bromo-5-fluorophenylacetate	1	2
 2 of 3 Submit			

② 利用したい構造の下部の**Submit**をクリックすると、この化合物が合成ルートに表示されます



さらなる詳細に関しては、Reaxys の Query ページ下部の“About Reaxys” リンクをクリックし、情報ページをご覧ください。また、ご質問等は、お気軽に当社ヘルプデスクまでお問い合わせ下さい。

Reaxys は今後とも機能、パフォーマンスの向上を進めてまいります。機能やインターフェイス等に関するご要望をお待ちしておりますので、よろしくお願い致します。



ELSEVIER

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: jpinfo@reaxys.com