

お客様各位

Reaxys アップデートのお知らせ: 2013年4月

Reaxys (リアクシス) が、4月3日に以下のようにインターフェース・収録コンテンツの双方が大幅にアップデートされましたので、お知らせ致します。今回のアップデートではユーザーの皆さまのご意見を反映し、より化学者の皆さまにとって使いやすく、強力な情報収集を実現することを目的とし、以下の強化が行われました。

1. 収録コンテンツの拡大:

収録対象ジャーナルをこれまでの約 400 誌から、16,000 誌 (タイトル、抄録、キーワード) へと大幅に拡大しました。

2. 新しいインターフェース:

Reaxys のトップページから目的に応じた検索フォームにダイレクトにアクセスできるように、検索フォームの最適化を行いました。4月3日より Reaxys の新しいインターフェースがご利用可能です。6月1日までは旧 Reaxys インターフェースとの相互切り替えが可能となっています。

3. 物性値からの検索フォーム:

物性値検索のための新しい検索フォームをご用意しました。

4. Analysis View 機能:

Reaxys の検索結果を可視化し、素早い理解を可能とするための Analysis View 機能が新たに搭載されました。

5. Autoplan 機能:

合成ルート設計をより効率的にする Autoplan 機能が標準搭載されました。

6. Report 機能:

Report 機能の搭載により、よりスムーズなコミュニケーション・情報交換が可能となります。

7. 実験項データの追加:

実験項を表示する雑誌タイトルを拡充します。

1. 収録コンテンツの拡大

従来の Reaxys の収録対象は、約 400 誌の有機化学分野のコアジャーナルと一部の特許でした。今回のコンテンツの拡充で収録対象は大幅に広がり、ライフサイエンス、エンジニアリング、薬理学、環境科学などの多岐にわたる分野の書籍、学会抄録などを含む 16,000 誌以上の定期刊行物が対象となっています。

今回追加されたコンテンツについては、“Literature” 検索フォームからタイトル、抄録、キーワードを対象とした検索が可能です。構造式からの検索対象は従来の Reaxys 収録対象コンテンツのみとなっています。

以下の例は六価クロムについての文献を、従来の Reaxys と新しくなった Reaxys で検索したサンプルです。従来の Reaxys では 270 件しかヒットしなかったのに対して、新しい Reaxys では 2504 件のレコードが見つかっています。収録コンテンツの拡大については、ドキュメントタイプのフィールドをご覧ください。ただでさえ明らかです。

The image illustrates the expansion of Reaxys content through a comparison of search results and document type selection options.

Search Results Comparison:

- 旧 Reaxys (Old Reaxys):** Shows 270 citations out of 148 reactions and 290 substances. The search results table includes:

Title of the Document	Authors	Year	Source
Simultaneous determination of Cr(III) and Cr(VI) in tannery wastewater using low pressure ion chromatography combined with flow injection spectrophotometry	Chen, Xinhua; Lingyi, Li, Hu...		
- 新 Reaxys (New Reaxys):** Shows 2504 citations out of 148 reactions and 290 substances. The search results table includes:

Title of the Document	Authors	Year	Source
Adsorption characteristics of modified sand for the removal of hexavalent chromium ions from aqueous solutions: Kinetic thermodynamic and equilibrium studies	Yadav, Sandeep; Srivastava, Varsha; Sharma, Yogesh C.; Banerjee, Sushmita; Weng, Chih-Huang	2013	Catena, 2013 , vol. 100, p. 120 - 127 Full Text
		2012	Vol. 00, p. 49 - 55 Full Text

Document Type Selection Comparison:

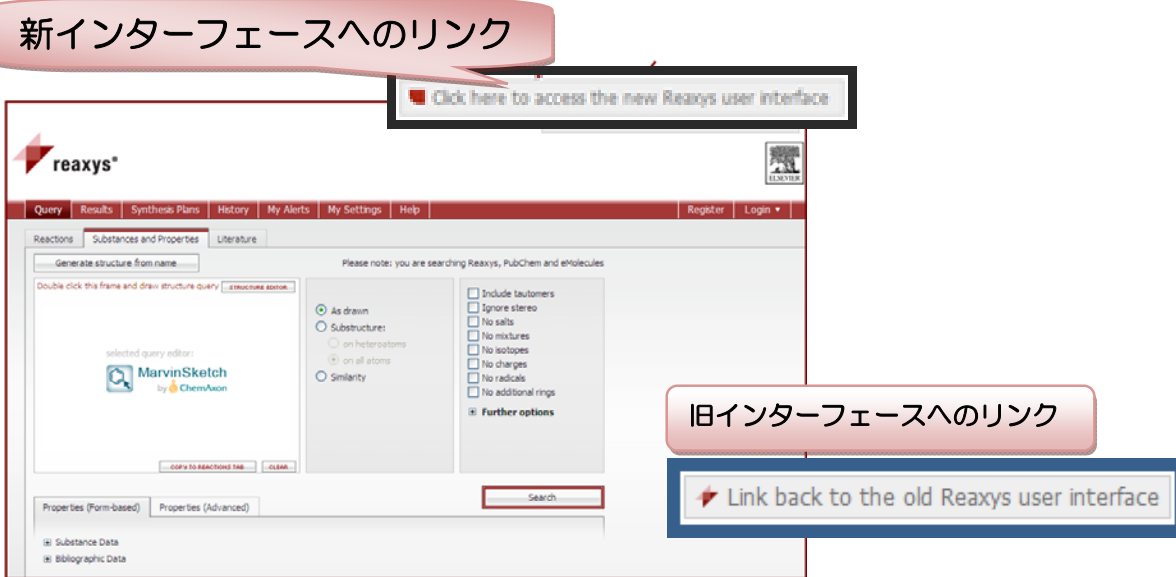
- 旧 Reaxys (Old Reaxys):** The "Select index items and click 'Transfer'" window shows a limited list of document types:
 - book review / secondary ref. (84251)
 - journal (3347950)
 - patent (819776)
- 新 Reaxys (New Reaxys):** The "Select index items and click 'Transfer'" window shows a significantly expanded list of document types:
 - abstract report (15961)
 - article (13418436)
 - book (2915)
 - book review / secondary ref. (84251)
 - business article (27364)
 - conference paper (2550880)
 - conference review (21428)
 - editorial (330263)
 - erratum (82904)
 - letter (351447)
 - note (391017)
 - patent (819776)
 - review (1090916)
 - short survey (201394)

Red arrows labeled "旧" (Old) and "新" (New) point from the bottom panels to the corresponding search result panels above.

2. 新しいインターフェース

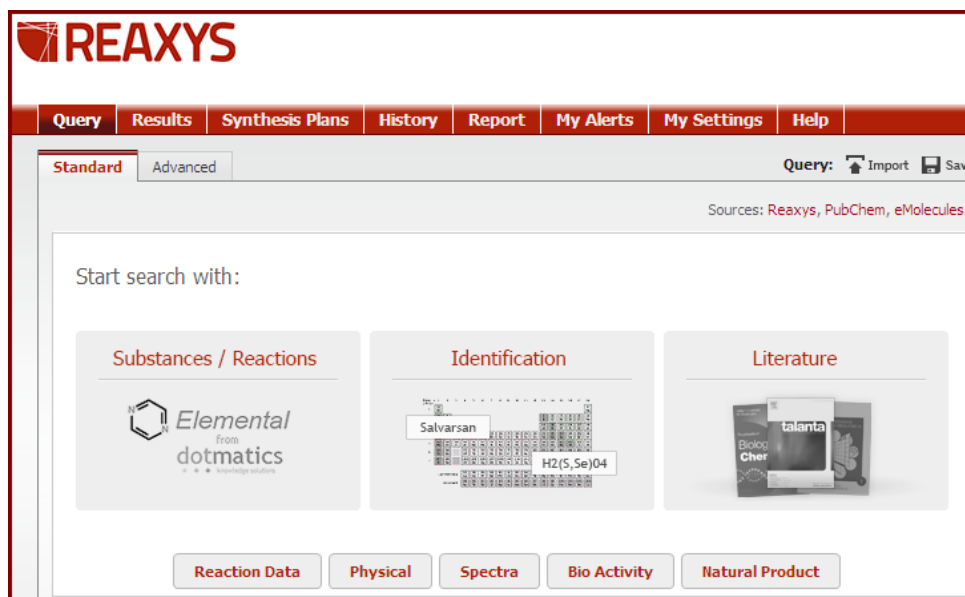
Reaxys のトップページから目的に応じた検索フォームにダイレクトにアクセスできるように、検索フォームの最適化を行いました。4月3日より Reaxys の新しいインターフェースがご利用可能です。

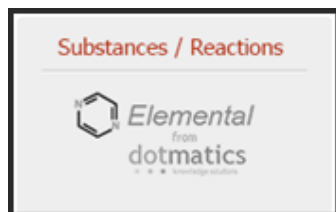
以下の図のように、従来の Reaxys 検索画面右上部のリンクから新しいインターフェースにアクセスできます。新しいインターフェースから従来のものに戻る場合も、同様なリンクが用意されています。6月1日までは、新旧インターフェースの相互切り替えが可能です。



新しい Reaxys インターフェース

※画像は新しいインターフェースのイメージです。変更の可能性がありますので、予めご了承ください。





1). Substances / Reactions

従来のトップページにもっとも近いイメージの検索画面です。構造式から物質や反応の検索を行います。検索対象のコンテンツは従来の Reaxys と同等です。



2). Identification

化合物名、分子式、CAS Registry number など、構造式以外の名称や組成、物性値を利用して物質を検索するフォームです。検索対象のコンテンツは従来の Reaxys と同等です。



3). Literature

著者名、特許番号、出版年などの書誌事項からの検索フォームです。今回拡大された収録コンテンツは、この検索画面から検索可能です。

1) Substances / Reactions

反応検索と物性値検索のタブが統合され、同じ画面からの検索が可能になりました。また、物性値や書誌情報を構造式と組み合わせて検索するためのフォームも備えています。（詳細は **3. 物性値からの検索フォーム** をご参照ください）

※インターフェース改良に伴い、標準の描画ツールが Dotmatics Elemental に変更されます。

The screenshot shows the REAXYS search interface. At the top, there is a navigation bar with tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, Report, My Alerts, My Settings, Help, and Logout. Below this is a search bar with a 'Query' field and 'Import' and 'Save' buttons. The search results are categorized by 'Standard' and 'Advanced'. The search criteria are set to 'Reactions'. The search form includes a 'selected query editor' with the 'Elemental from dotmatics' logo and a 'STRUCTURE EDITOR' button. The search criteria are: Product, Starting material, Reagent / Catalyst, Any role, As Drawn, Substructure, on heteroatoms, on all atoms, and Similarity. The options include: Include tautomers, Ignore stereo, No salts, No mixtures, No isotopes, and No charges. A callout box with a red border and a speech bubble shape contains the text 'フォームの追加も可能' (Additional forms are also possible). At the bottom, there are buttons for 'Structures & Reactions', 'Names & Formulas', 'Literature', 'Reaction Data', 'Physical', 'Spectra', and 'Bio Activity'. There are also buttons for 'Natural Product', 'Reset Form', 'Clear Query', and 'SEARCH'.

2) Identification

構造式以外の名称や組成、物性値を利用して物質を検索するフォームです。

Names & Formulas ✕

Please select the fields you would like to add to your search by selecting the checkboxes and click 'OK'

<input type="checkbox"/> Reaxys Registry Number	=	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> CAS Registry Number	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Chemical Name	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Molecular Formula	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Molecular Weight	=	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Number of Elements	=	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Number of Fragments	=	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Fragment Molecular Formula	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Chemical Name Segment	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Search MF Range	is	<input type="text"/>	Lookup

View more fields

Cancel
OK

3) Literature

著者名、特許番号、出版年などの書誌事項を対象とした検索フォームです

Literature ✕

Please select the fields you would like to add to your search by selecting the checkboxes and click 'OK'

<input type="checkbox"/> Search for	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Patent Number	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Patent Assignee	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Authors	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Document Type	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Patent Year	=	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Journal Title	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Publication Year	=	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Abstract	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Keywords	is	<input type="text"/>	Lookup
<input type="checkbox"/> Patent Country Code	is	<input type="text"/>	Lookup

View more fields

Cancel
OK

3. 物性値からの検索フォーム

物性値検索のための新しい検索フォームをご用意しました。Subject Search Form にキーワードや値を入力するだけで、Reaxys の豊富な物性値の検索を行うことができます。検索フィールドの追加も可能です。

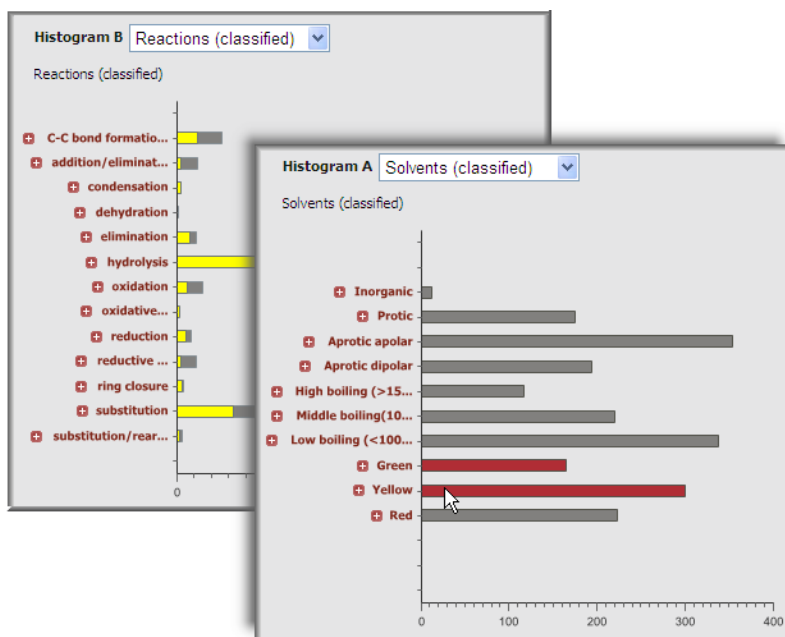
※画像は新しいインターフェースのイメージです。変更の可能性がありますので、予めご了承ください。



4. Analysis View 機能

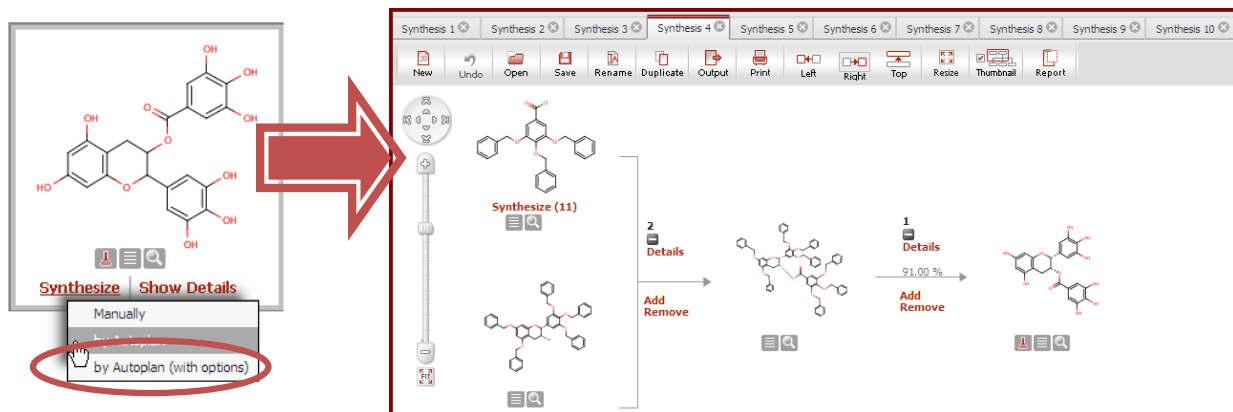
Reaxys の検索結果を可視化し、素早い理解を可能とする Analysis View 機能が新たに搭載されました。グラフ作成には、Reactions、Solvents などの各種指標から選択可能です。またグラフ内でのフィルターや並べ替えをも実行可能です

Analysis View 機能により検索結果を可視化することによって、どの会社がある特許分野で強みを持っているか、ある反応においてどの触媒がよく用いられているかなどを明らかにすることができます。



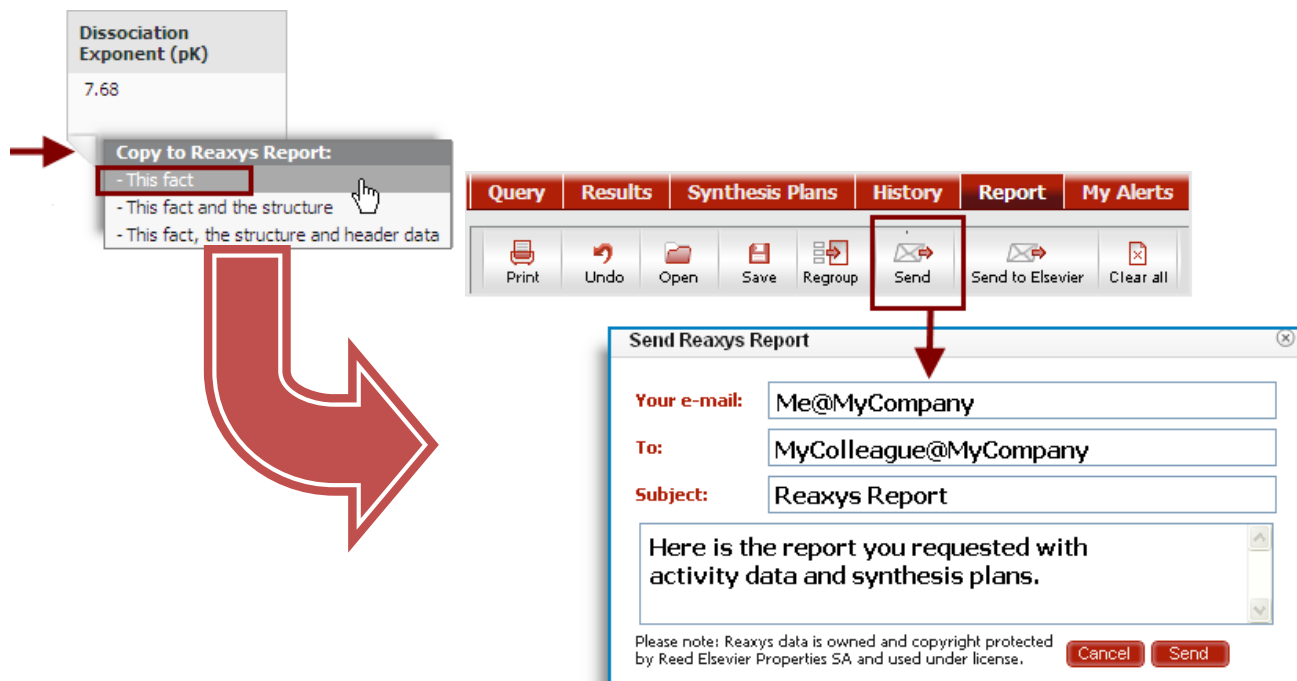
5. Autoplan 機能

合成ルート設計をより効率的にする Autoplan 機能が標準搭載されました。合成プランの作成時に “by Autoplan” を選択するだけで、複数の合成ルートが自動的に作成されます。合成プランの各ステップにマニュアルで情報を追加することによって、オリジナルの合成ルートを考えることも可能です。



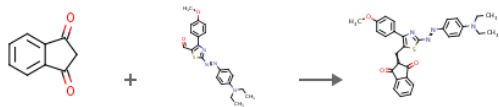



6. Report 機能

複数の検索結果画面から特定の情報のみを選択し、レポート画面に集約、レポート画面上で並べ替えや追加を自由におこなうことができます。独自の必要情報の出力やユーザー間での共有も可能になります。



7. 実験項データの追加:

実験項を表示する雑誌タイトルを拡充します。従来は 18 誌のみが対象でしたが、今後は Elsevier 社が出版する 100 誌を超える雑誌から実験項を収録いたします。（収録は 2013 年発表分から開始）

Yield	Conditions	References
  Synthesize  Synthesize  Synthesize Rx-ID: 34207047 Find similar reactions	75% With piperidine; acetic acid in ethanol T=20°C; Knoevenagel Condensation; Hide Experimental Procedure	El-Shishtawy, Reda M.; Al-Amshany, Zahra M.; Asiri, Abdullah M.; Borbone, Fabio; Tuzi, Angela; Roviello, Antonio; Barsella, Alberto Dyes and Pigments , 2013 , vol. 96, # 1 p. 45 - 51,7 Title/Abstract Full Text Show Details
General procedure for the synthesis of NLO chromophores a-c General procedure: A mixture of dye 6 (1.18 g, 3 mmol) and indandione (0.438 g, 3 mmol) or malononitrile (0.198 g, 3 mmol) or 3-dicyanovinylindan-1-one (0.582 g, 3 mmol) in basic ethanol solution (7 ml) was stirred at room temperature overnight, filtered off and purified by column chromatography on silica gel using CHCl ₃ as the eluent, affording dyes a or b or c, respectively. Yield: 75 percent. Mp 185e187 C. ¹ H NMR (600 MHz, CDCl ₃) 1.3 (t, 6H, J ¼ 7.2 Hz, N(CH ₂ CH ₃) ₂), 3.55 (q, 4H, J ¼ 7.2 Hz, N(CH ₂ CH ₃) ₂), 3.92 (s, 3H, OCH ₃), 6.78 (d, 2H, J ¼ 9 Hz, ArH), 7.08 (d, 2H, J ¼ 9 Hz, ArH), 7.6 (d, 2H, J ¼ 9 Hz, ArH), 7.79 (m, 2H, ArH), 7.96 (m, 1H, ArH), 7.99 (m, 1H, ArH), 8.03 (d, 2H, J ¼ 9.6 Hz, ArH), 8.09 (s, 1H, CH), 13C NMR (125 MHz, CDCl ₃) d 12.77, 45.28, 55.45, 114.20, 122.88, 122.96, 124.96, 125.36, 126.46, 132.17, 134.86, 135.02, 136.03, 140.45, 142.03, 143.50, 152.97, 161.16, 168.24, 181.88, 189.71, 190.26. IR n/cm 1 2924, 1678, 1600, 1564, 1514, 1351, 1292, 1245, 1213, 1140, 1014, 986. HRMS calcd for C ₃₀ H ₂₆ N ₄ O ₃ S: 522.63. Found: 522.91.		

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ー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。



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
 Email: jp.corporate@elsevier.com