ELSEVIER

Reaxys

2018.3.9更新

俞靓

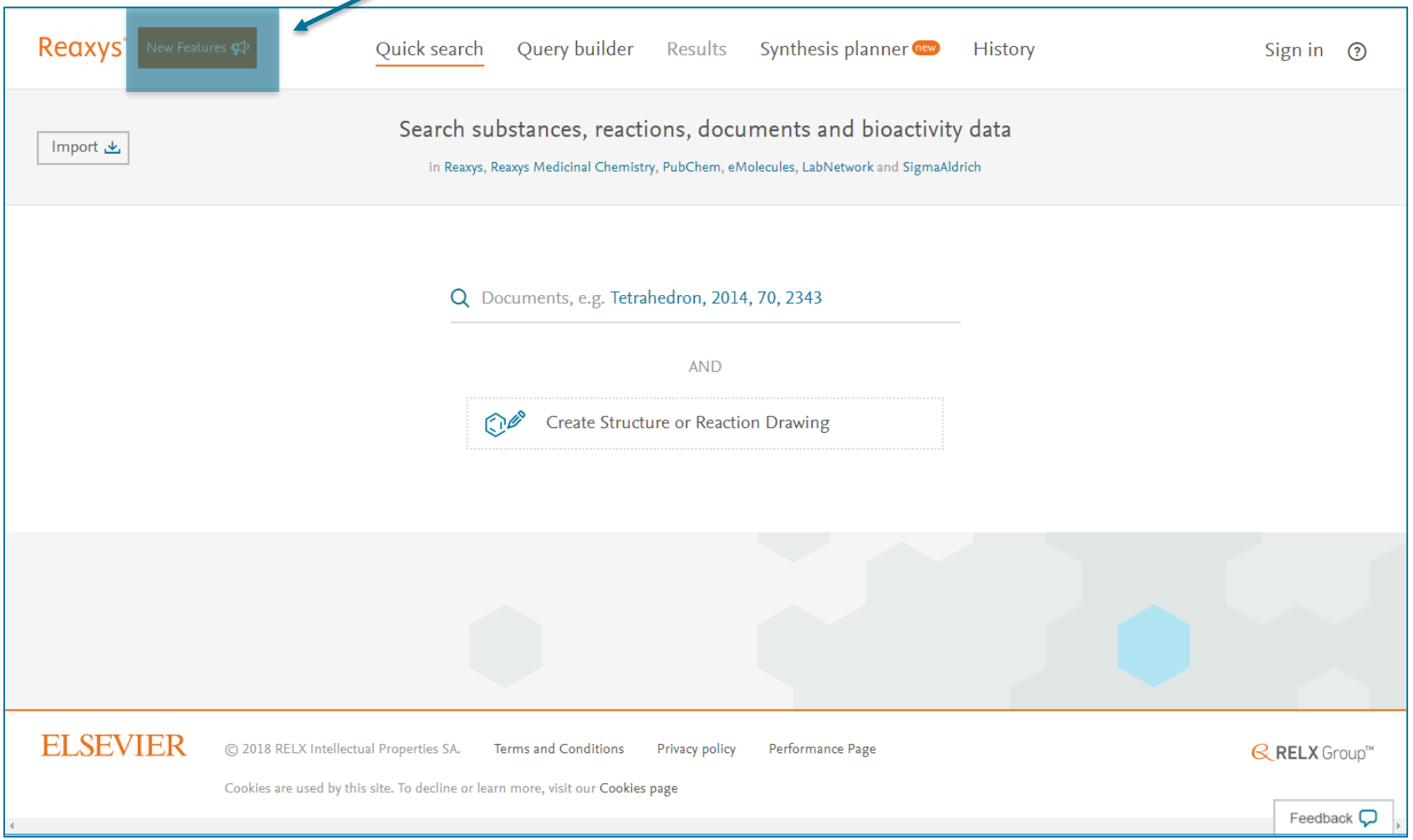
Elsevier生命科学产品客户顾问

20180309更新主要内容

- 结构面板更新
- Query Builder更新
- 单页显示结果条数更新
- 物质结果界面更新
- 反应结果界面更新
- Synthesis Plan流程更新

Reaxys主界面细看更新内容

20180309更新内容



结构面板更新

- 将常用功能，S*，S6，Atom Mapping移动至结构面板显着处
- 移动缩写官能团，通用官能团从下方移动至右侧

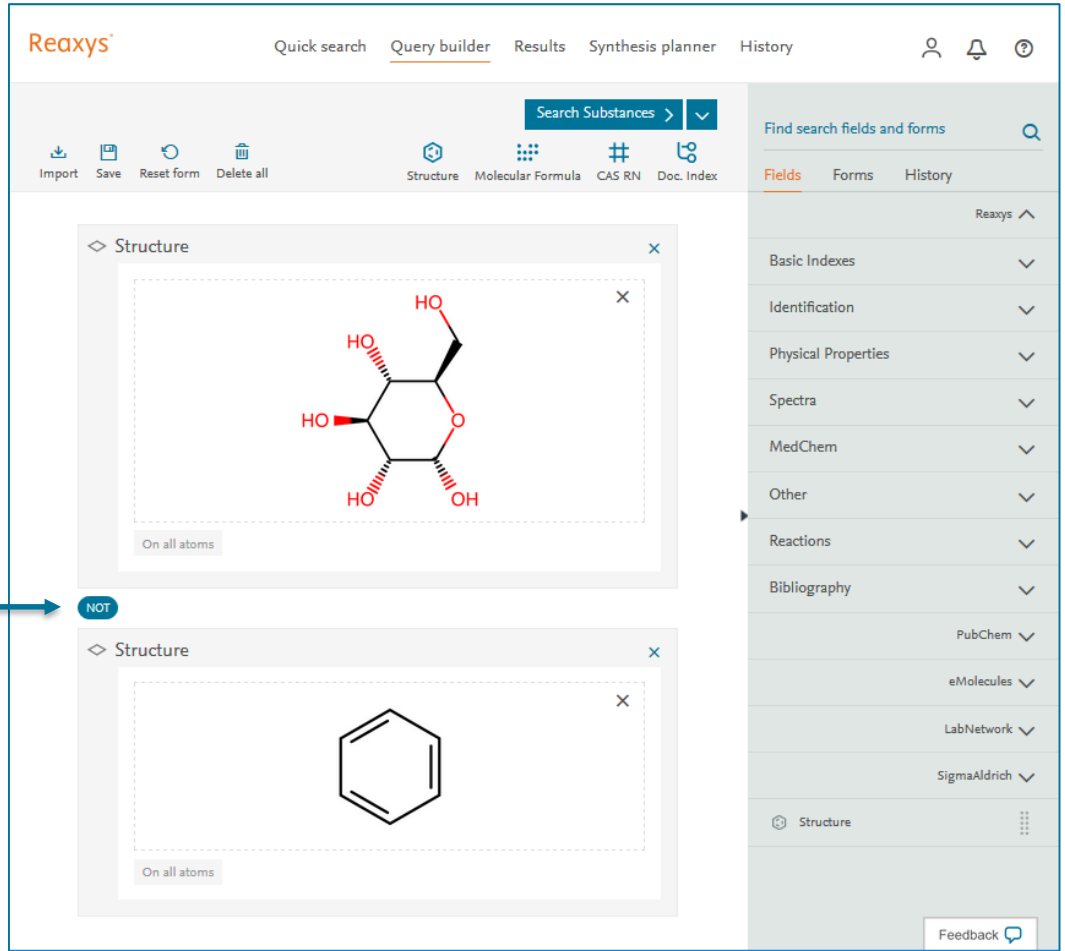
功能解析

- S Max
  - As Drawn检索时起效果
  - 使用后，检索时的意思是该位点处于完全开放状态，等同于S6
- S Lock
  - As Substructure检索时起效果
  - 使用后，在进行Substructure，该位点处于完全封闭状态，等同于S*
- 1->1
  - 手动的Atom Mapping，用于标记反应前后相同的原子
- [ ]
  - 缩写官能团定义，可以通过该功能输入Boc，Fmoc等常见官能团
- R
  - Reaxys通用官能团定义，可以通过该功能输入ALK，ARY，HAR，G等官能团。

Query Builder更新

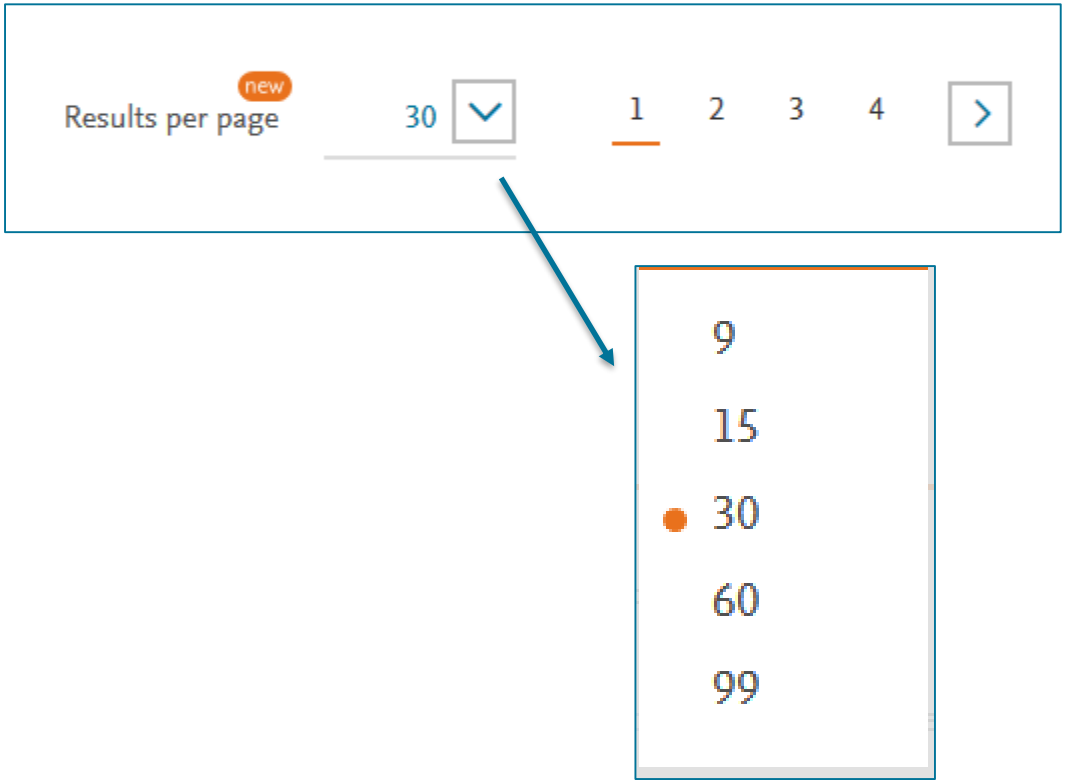
- Query Builder中可以利用2个或多个片段进行组合检索（原先只能1个）
- 如以下案例，寻找糖分子衍生物，但是在衍生物中不能出现苯环结构

Query Builder中可以同时添加多个结构片段，且可以设置这些片段的逻辑关系



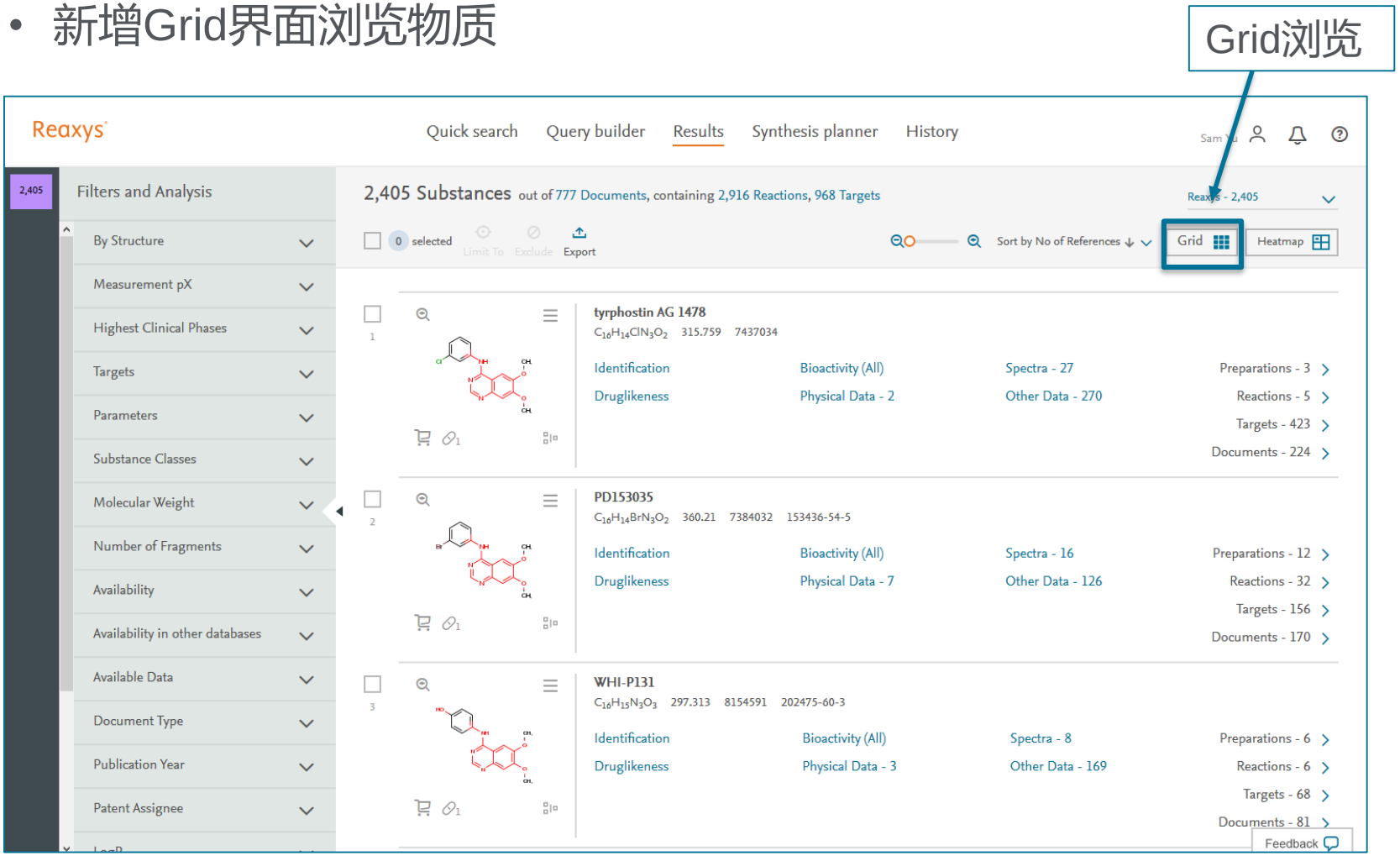
单页结果条目数更新

- 单页结果数可以调整，默认是30条记录，更改无需登录Reaxys账号

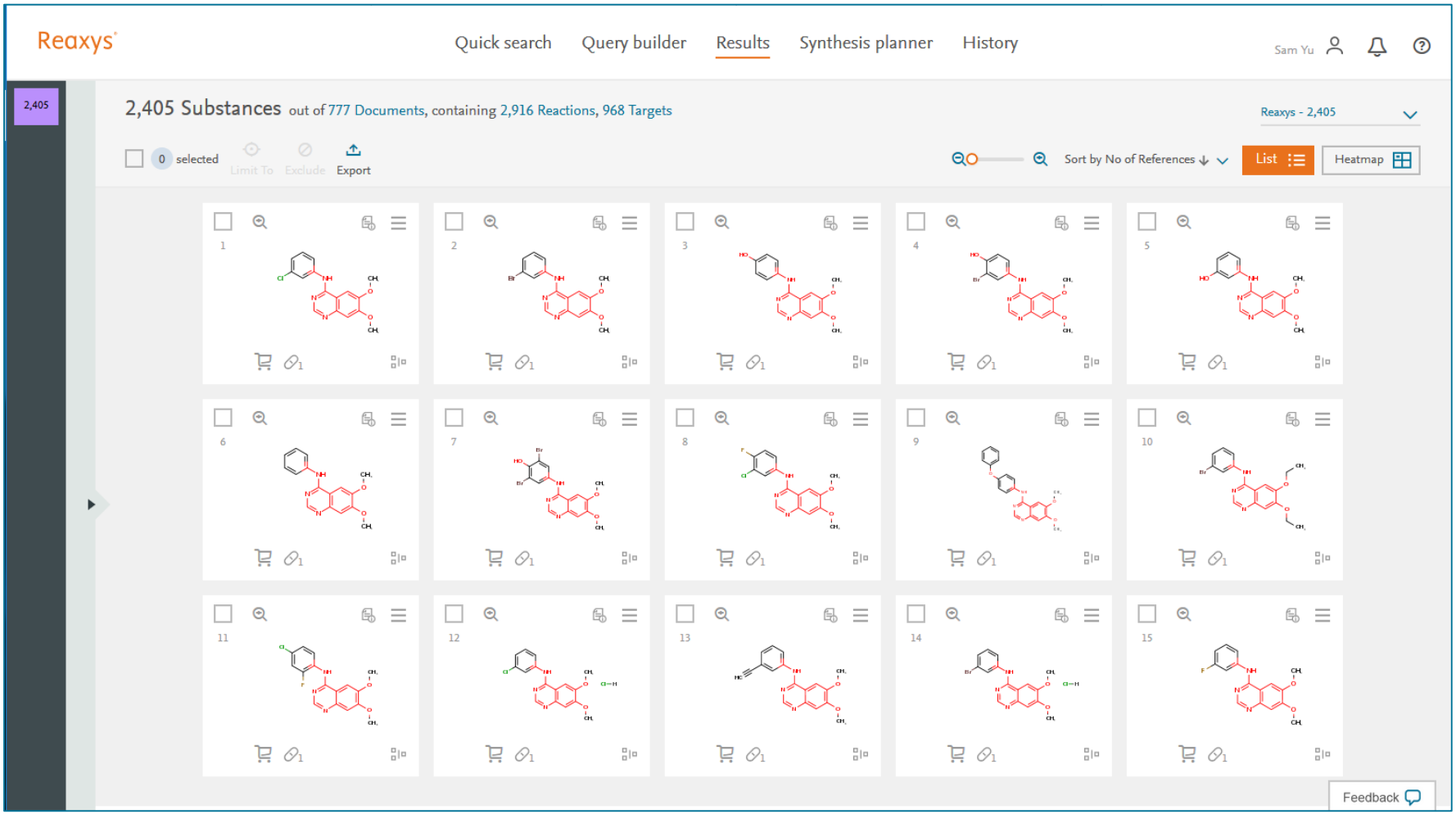


物质结果界面更新

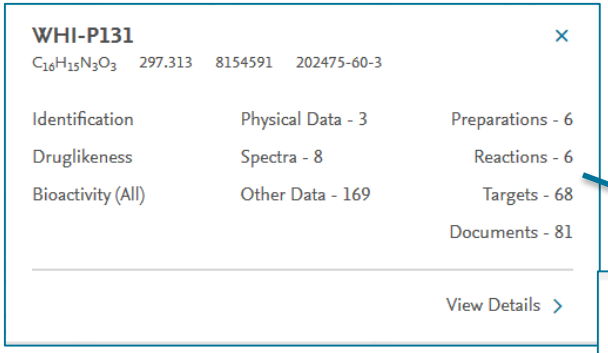
- 增强原有界面内容的区分度
- 新增Grid界面浏览物质



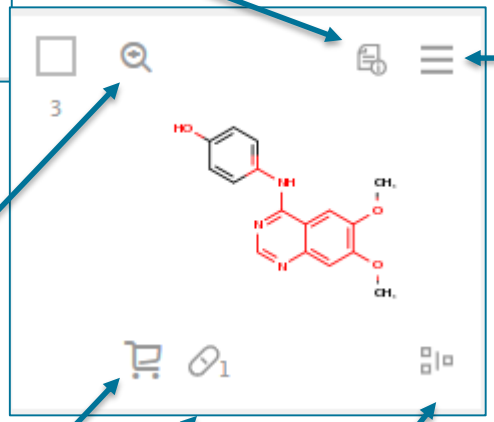
Grid浏览界面

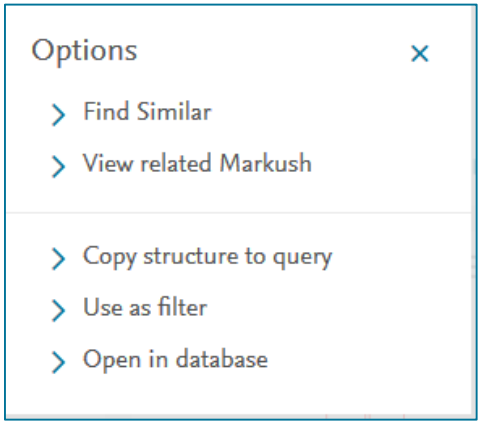

Reaxys
Quick search
Query builder
Results
Synthesis planner
History
Sam Yu
2,405
2,405 Substances out of 777 Documents, containing 2,916 Reactions, 968 Targets
Reaxys - 2,405
0 selected
Limit To
Exclude
Export
Sort by No of References
List
Heatmap
Feedback

Grid页面物质界面详解



物质信息概览，无需点击Detail即可查看物质包含信息条数和基本信息，如CAS No，理化性质，谱图，反应，文献数量，如要看具体内容，可点击Detail





放大功能看大结构

物质结果的其他选项

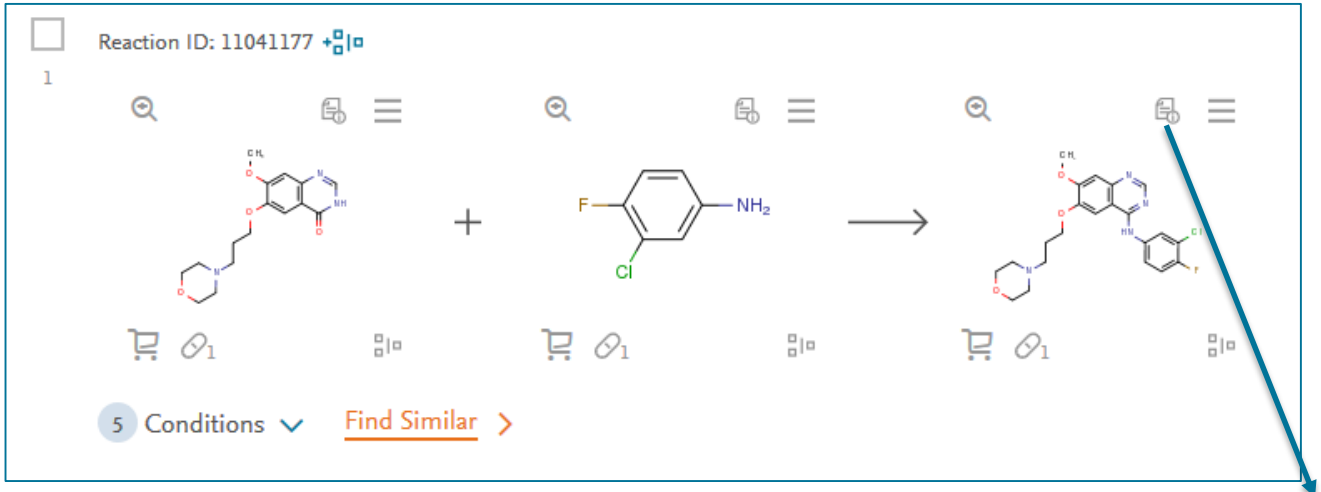
物质商业信息

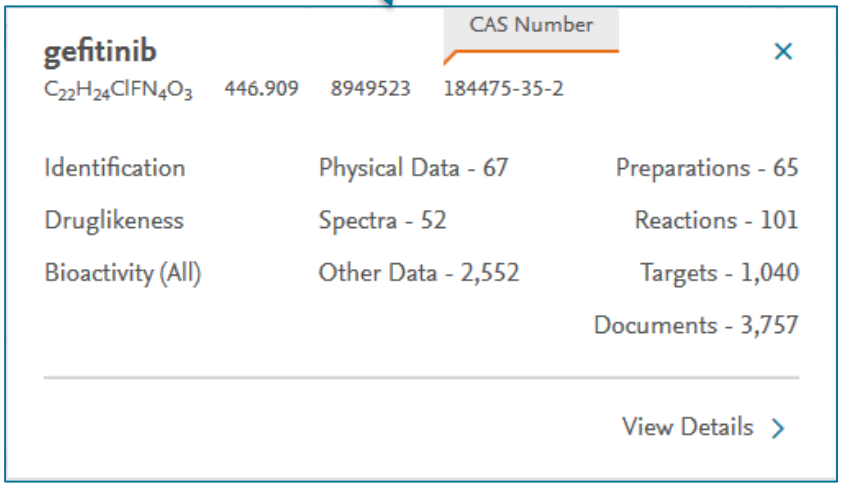
类药性性质

物质合成计划

反应界面更新

- 反应中的每个物质界面和Gird物质界面相同，可直接查看基本信息



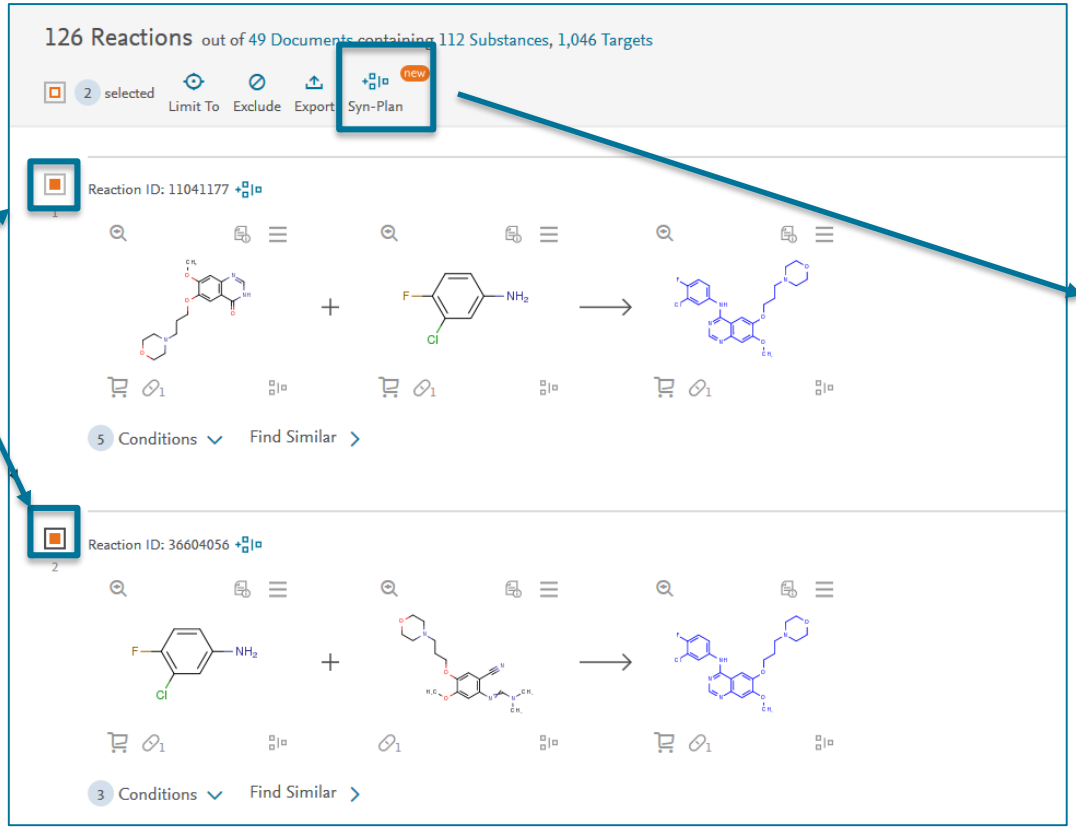


界面呈现形式和Grid物质界面相同，对于每一个物质，可以直接查看基本信息，如物质的分子式，分子量，CAS No，是否有谱图，理化性质等

Synthesis Plan流程更新

- 手动流程更新
  - 可以直接从反应结果集中添加反应到Synthesis Plan
  - 从Synthesis Plan中继续扩展反应，可以看到条件

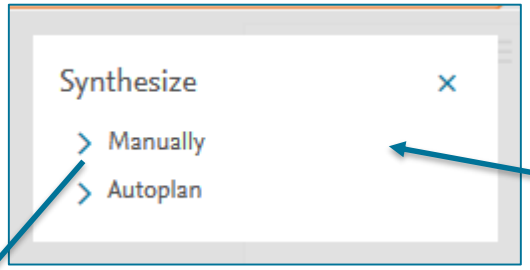
Step1：
从反应结果集中选择反应

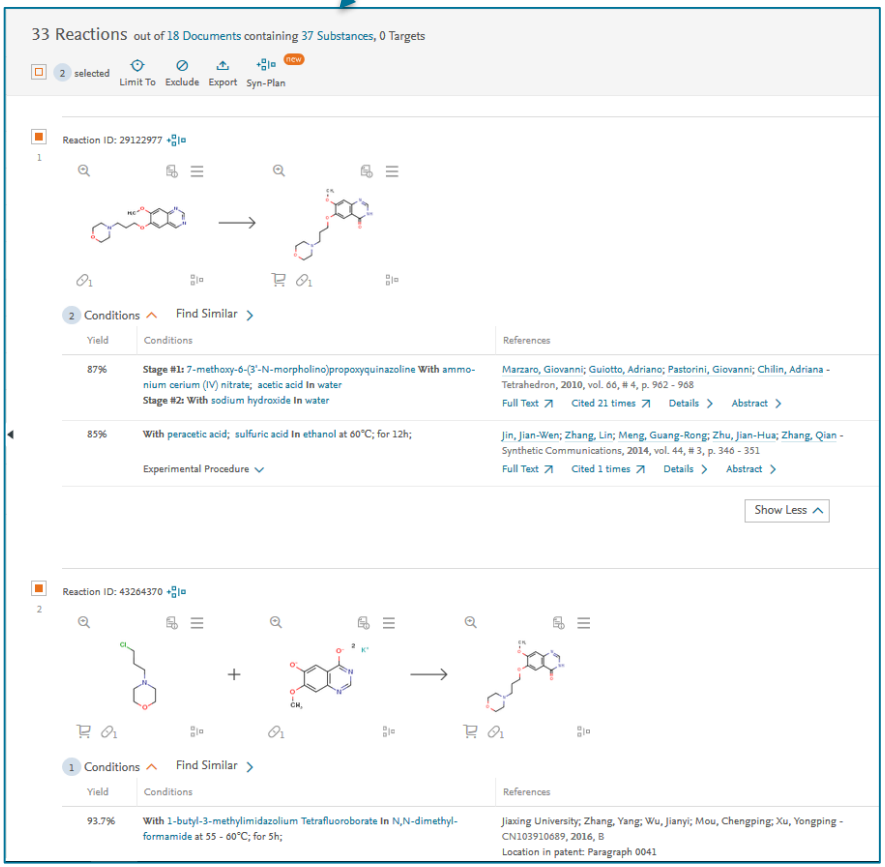


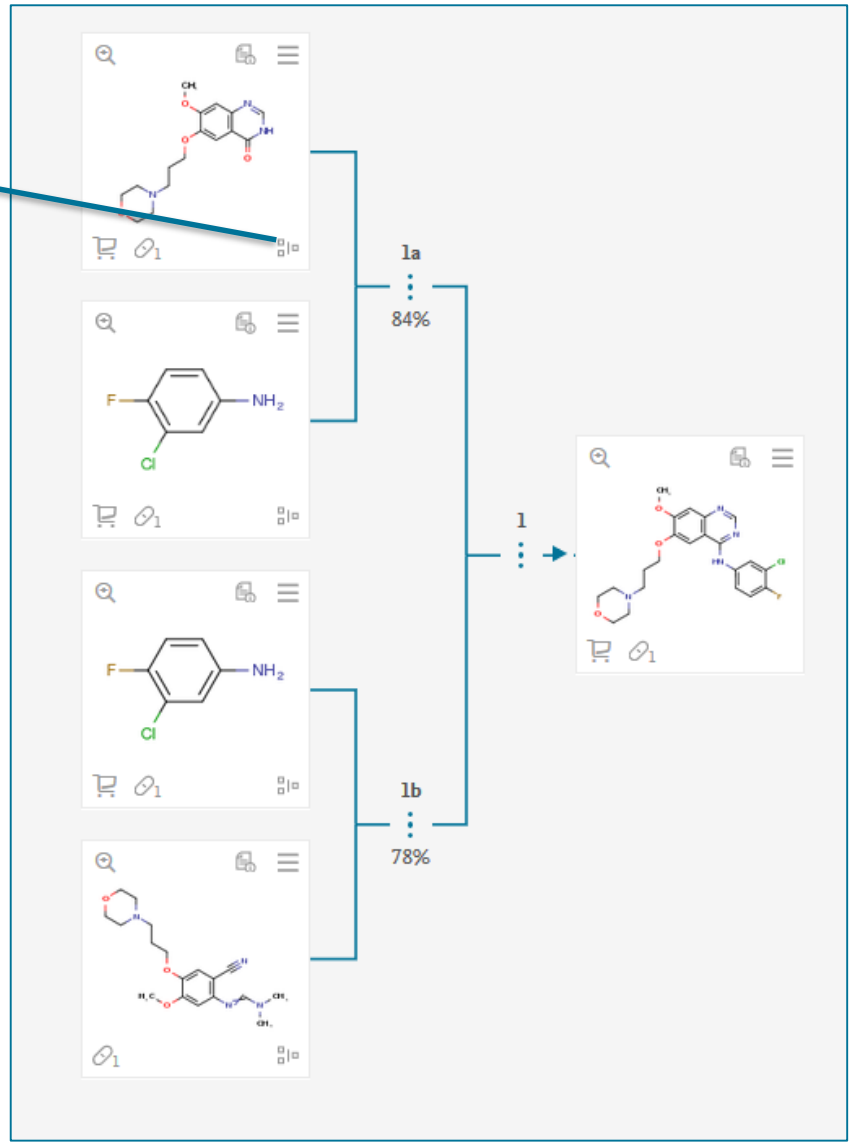
Step2：
利用这两条反应创建Synthesis Plan

创建好的Synthesis Plan

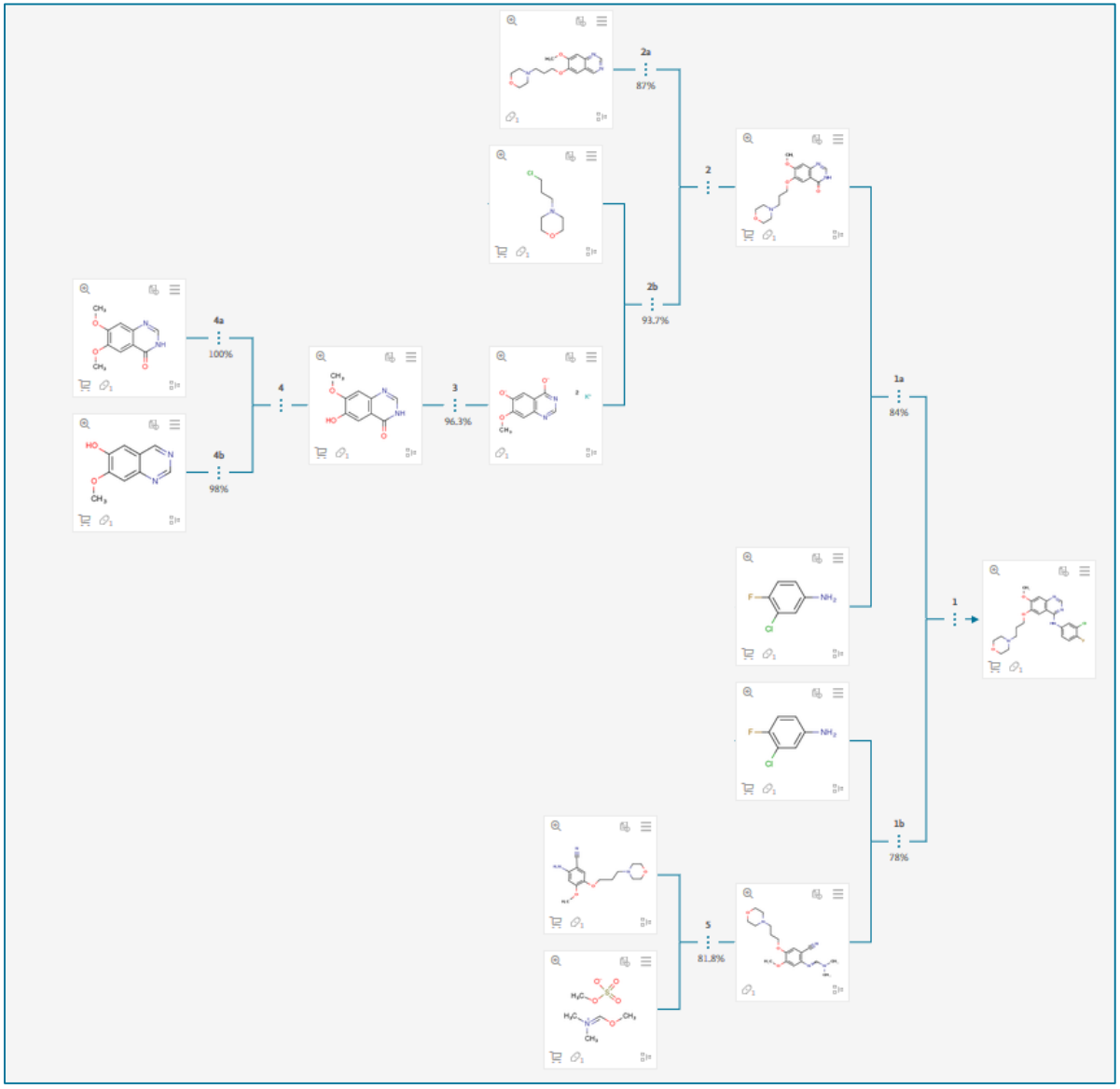
继续通过反应结果集添加反应







最后的结果



可以将Synthesis Plan继续导出

ELSEVIER

If you have questions feel free to reach out

Sam Yu
S.yu.2@Elsevier.com