掌握化學未來的關鍵工具：Reaxys 全方位版助您突破研究

Customer Success

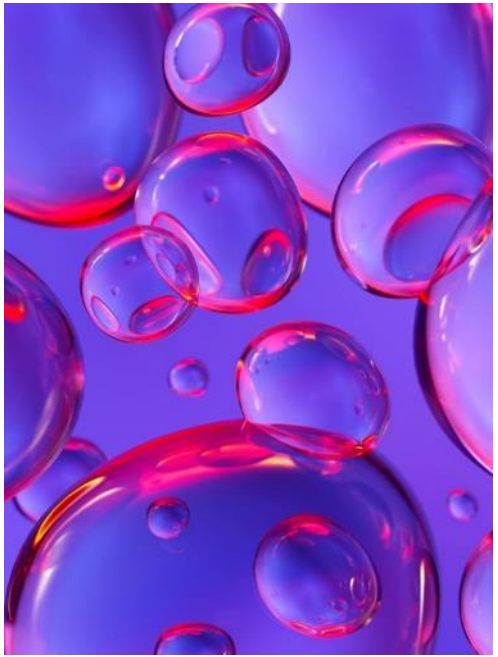
2025

Reaxys

Advancing human progress together

課程內容

1. Reaxys RAE 介紹
2. 檢索介面導覽
3. 搜尋結果種類
4. Retrosynthesis AI: 探索及預測合成途徑
5. 個人化設定及管理
6. 線上自我學習及用戶資源



查詢資料時，您會先從哪一個平台開始搜索?

請將最符合您答案的數字打在聊天室中!

1

Google Scholar

2

PubChem

3

ChatGPT/Other GenAI Tools

4

Reaxys

5

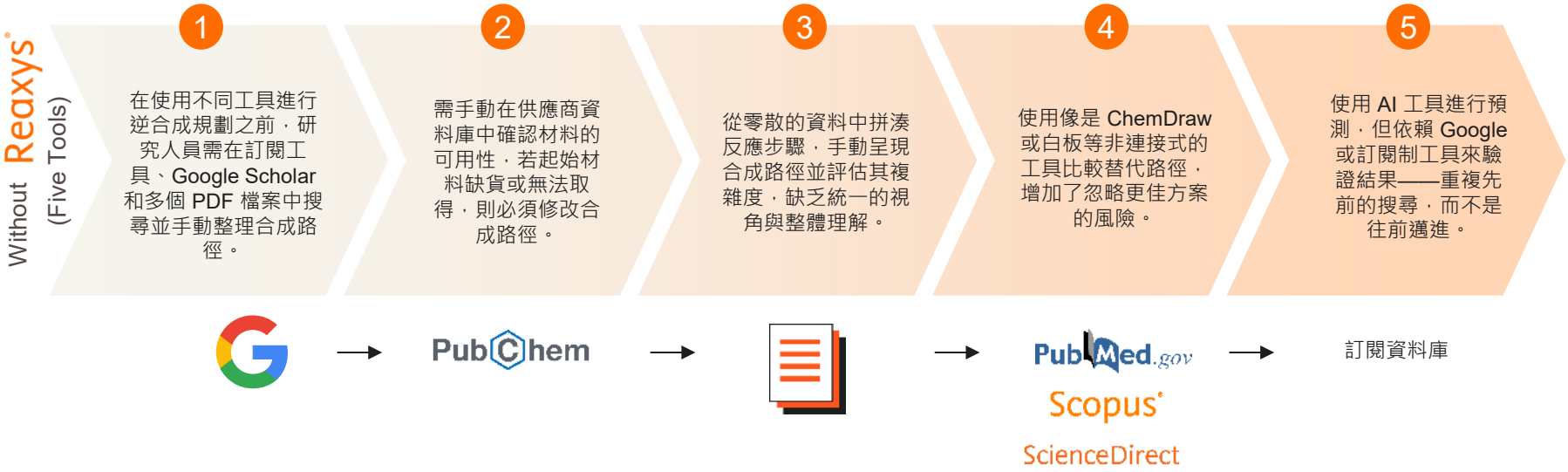
Scopus/WoS

6

SciFinder

訂閱制資料庫常常是碎片化工作流程中的第五個步驟

研究人員相信自己已經具備相關工具，但每一個「簡單」的搜尋背後都藏著一段繁雜、多工具交織的流程。在進行搜尋之前，他們其實已經在其他地方完成了一部分準備工作：



但你只需用 Reaxys 搜尋一次，就能獲得所需的資料。

在其他地方需要五個工具的操作，使用Reaxys只需五個點擊。
使用Reaxys的研究人員不需在不同平台、PDF或預測引擎間跳轉。每一個關鍵的合成決策——從已出版與預測的合成路徑到材料成本與實驗證明——都在一個統一的體驗中呈現。

Reaxys®

1. 在同一個視圖中查看已發表、預測及自訂的合成路徑。
2. 評估合成所需起始材料的市售可用性。
3. 查看合成計劃中步驟的數量，以便更快地優先選擇較短的合成路徑。
4. 輕鬆預覽合成路徑的多樣性，透過路徑拓撲結構快速掌握。
5. 發現真實的預測步驟範例，這是唯一提供已發表範例並將其與合成路徑連結在單一視圖中的化學資料庫。

Reaxys® + Scopus® + ScienceDirect

若需要，Reaxys 可無縫擴展至 Scopus 或 ScienceDirect，實現從搜尋到資料來源、從洞察到輸出的連貫體驗。

Reaxys RAE

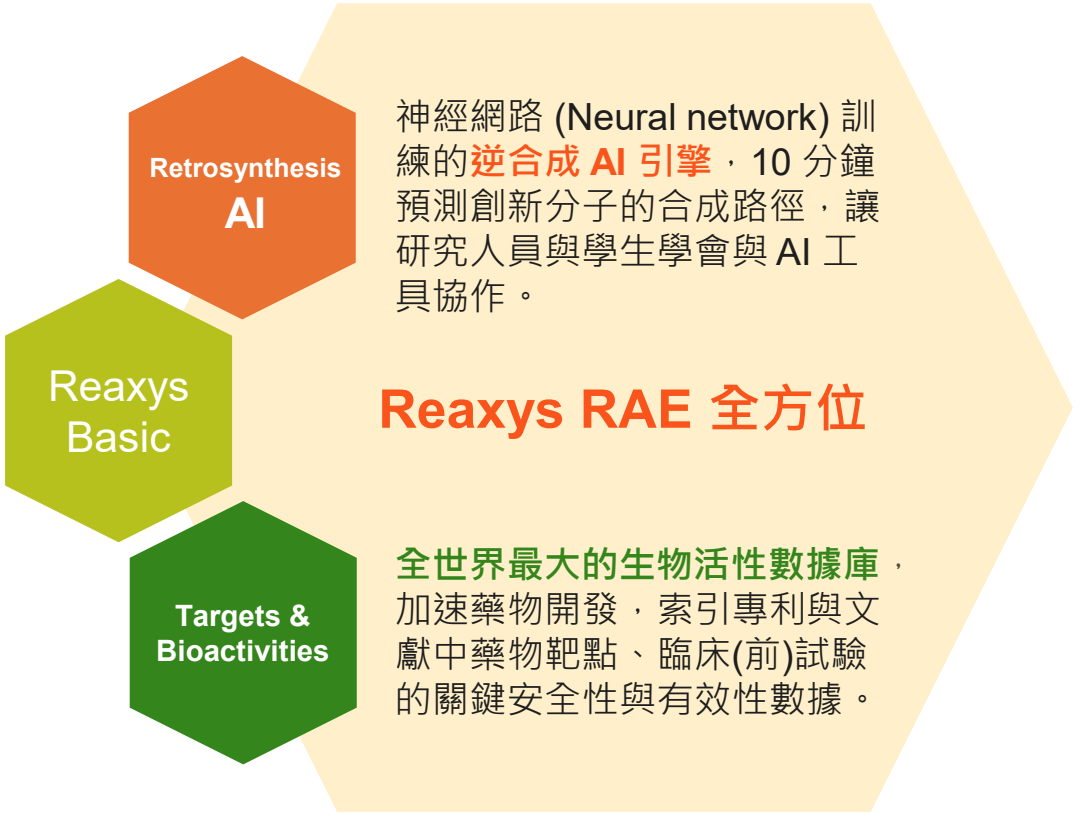
介紹

ELSEVIER

Reaxys 全方位 (RAE) 版與 Reaxys 基本 (Basic) 版差異

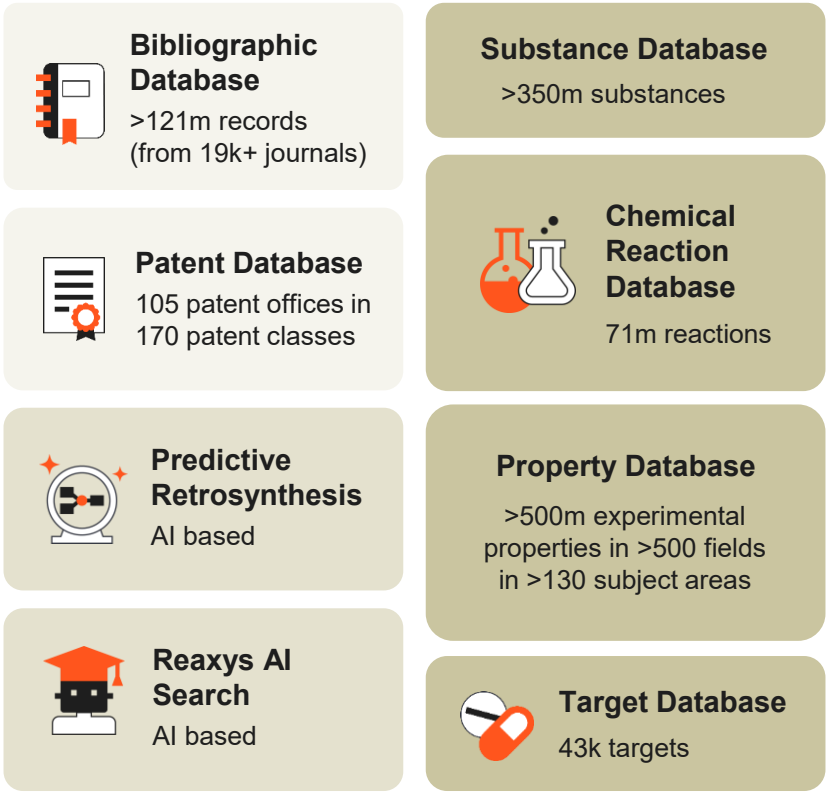
Reaxys Basic Edition

- 有機、無機、有機金屬物理化學特性、實驗量測數據，保留文獻出
- 反應式、產率、試劑與催化劑，保留詳細文獻出處
- 化學研究、藥物開發最快、最詳盡的專利收集與專利空間中文譯本
- 獨家商用材料資料庫



Reaxys Academic Edition
涵蓋的範圍

Reaxys 是最大型收錄**經實驗驗證**（非計算）之物質性質與反應數據的資料庫，以化學為組織原則呈現。



Reaxys 人工整理了科學文獻、專利資料中關鍵的實驗數據，讓您有更豐富的資料查詢方法

Journals, patents, conference proceedings

化合物結構, 物理化學特性 (>500 種), 反應式, 反應條件 實驗材料方法

回答關鍵的研究問題:

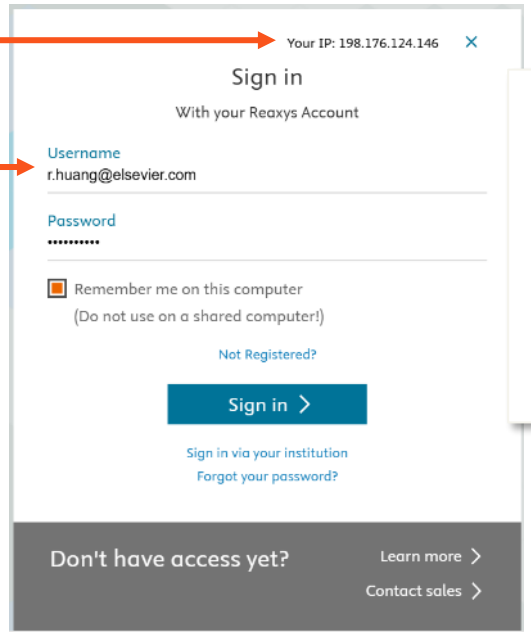
- 我研究的化合物有哪些特性被報導過?
- 有哪些其他化合物曾經報導過類似的特性?
- 這個材料自己合成可行嗎?用買的省下的時間划算嗎?
- 有哪些類似的結構可能可以讓我參考?
- 這是一個值得投入時間與金錢的的藥物靶點嗎?

Reaxys 全國授權本連線說明

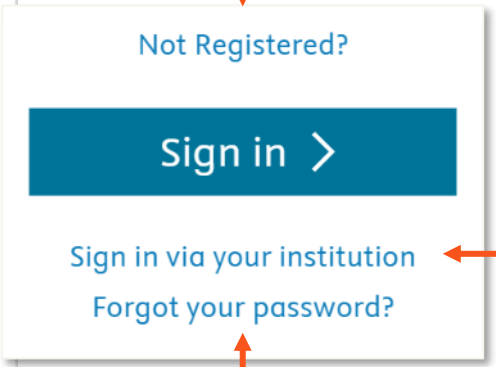
- 連線網址：www.reaxys.com
- 登入帳號：自2025年月起，服務採雙認證模式連線，使用者需於學校機構授權網路範圍，以學校Email自行註冊Reaxys帳號，登入帳號以連線。

請確認位於校內或機構網路範圍

請使用機構 Email、目前不支援免費信箱帳號。



新用戶註冊



台灣大多數學校並不支援機構登入，請嘗試上述雙認證連線。

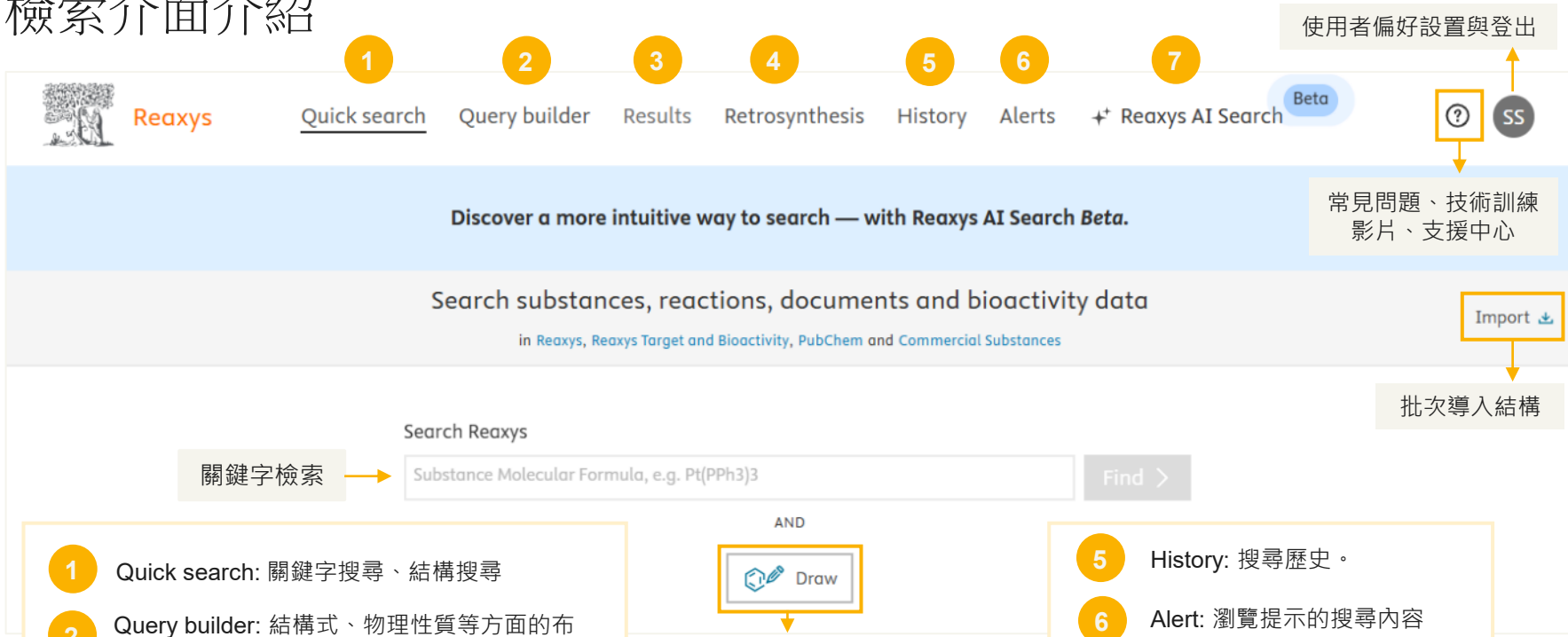
Elsevier 旗下 ScienceDirect、Scopus 、Embase 等資料庫帳號與 Reaxys 互通，若您曾申請過相關帳號，可點擊忘記密碼重新找回帳號。

ELSEVIER

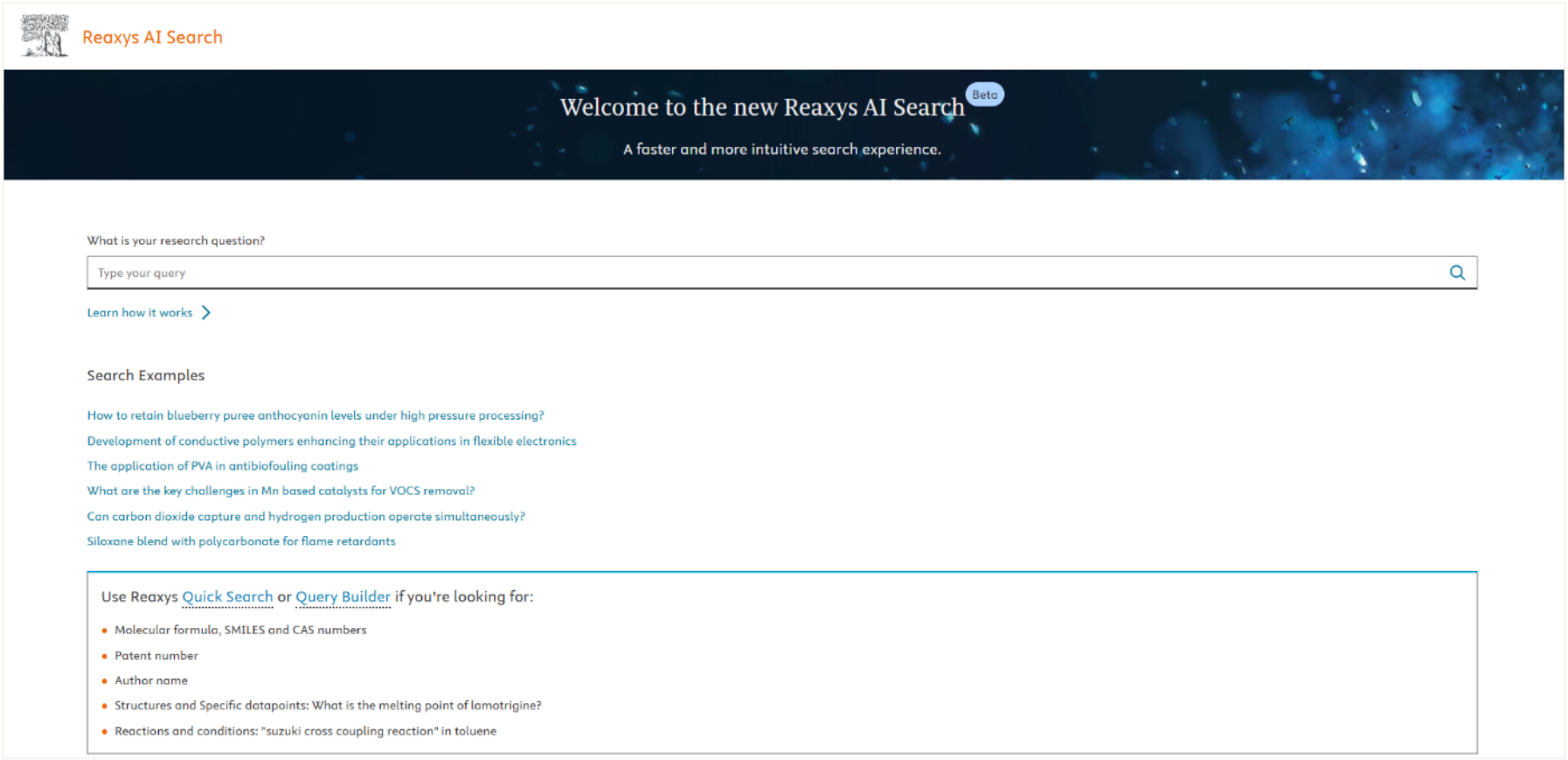
Reaxys RAE
檢索介面導覽

ELSEVIER

檢索介面介紹


使用者偏好設置與登出
1
2
3
4
5
6
7
Reaxys
Quick search
Query builder
Results
Retrosynthesis
History
Alerts
Reaxys AI Search
Beta
SS
常見問題、技術訓練
影片、支援中心
Discover a more intuitive way to search — with Reaxys AI Search Beta.
Search substances, reactions, documents and bioactivity data
in Reaxys, Reaxys Target and Bioactivity, PubChem and Commercial Substances
Import
批次導入結構
Search Reaxys
關鍵字檢索
Substance Molecular Formula, e.g. Pt(PPh3)3
Find
AND
Draw
化學結構檢索 (反應式、結構式)
1 Quick search: 關鍵字搜尋、結構搜尋
2 Query builder: 結構式、物理性質等方面的布林邏輯加成檢索。對搜尋歷史進行加成檢索。
3 Results: 搜尋結果。對資訊進行優先排序。
4 Retrosynthesis: 逆向合成路線搜尋。
5 History: 搜尋歷史。
6 Alert: 瀏覽提示的搜尋內容
7 Reaxys AI Search: AI 搜尋功能

Reaxys AI Search



Reaxys serves a varying profile of chemist

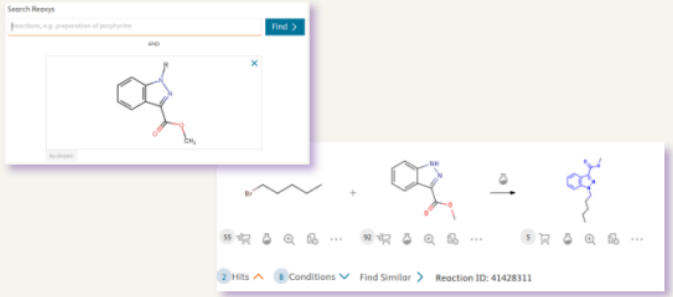
I am a chemist where I mainly search using **structures**

I am a chemist where I search using **structures** and **text**

I am a chemist where I search using **text** because structure searches are difficult or not possible

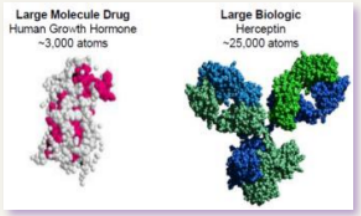
Structure search:

- Search for substances, reaction, properties that have been extracted by structure through structure or text search queries



Text search:

- Use of natural language querying for information retrieval
- Text search supports interdisciplinary fields where chemistry is combined with other subjects, e.g. material science, chemical engineer, polymer scientist etc.



Large molecule researchers require text search for information retrieval

Sample query from chemical engineer:
"Wastewater treatment physical processes"

Sample query from material scientist:
"Advances in hair fibre reinforcement techniques"

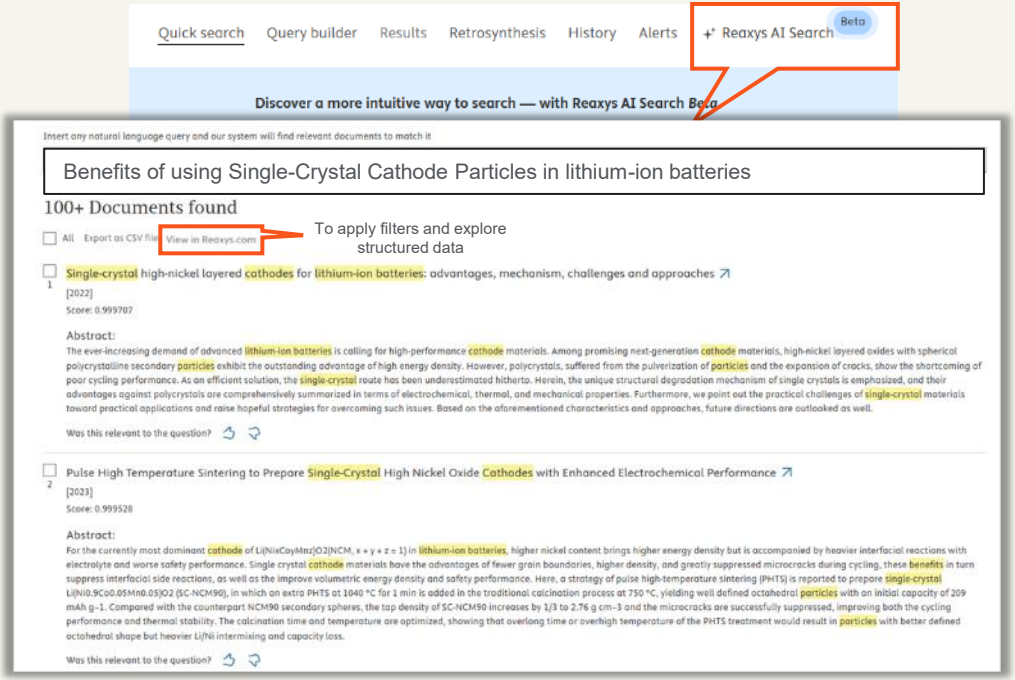
Discoverability: 使用自然語言查詢進行搜尋

Reaxys AI search (beta version) 讓使用者可以透過自然語言搜尋化學文獻。搜尋結果來自於Reaxys索引的所有文件的標題與摘要。

Reaxys AI Search 主要優勢:

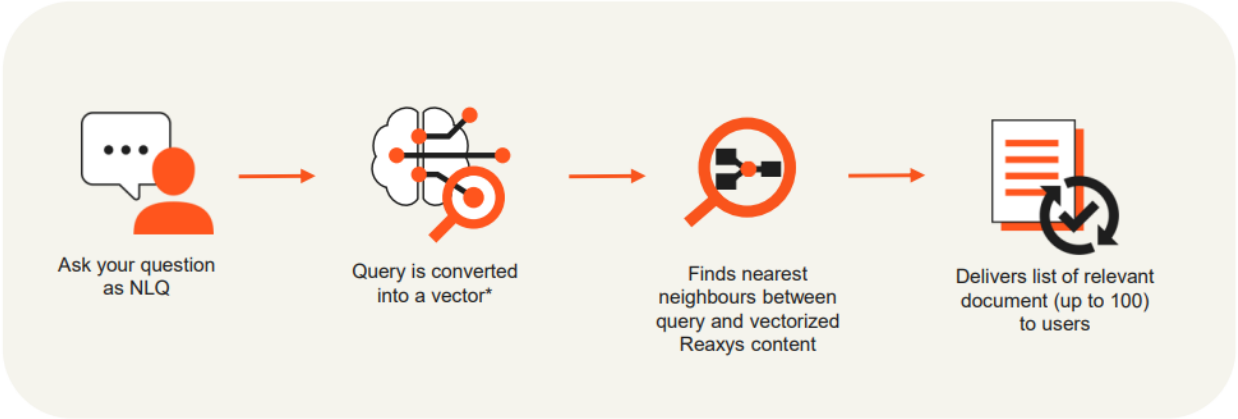
- 支援化學與其他學科結合的跨領域領域，例如聚合物、化學工程、材料科學等。
- 具有彈性的查詢功能，能夠處理拼寫錯誤、單數與複數、縮寫以及同義詞。

詳情請參閱 Release Notes



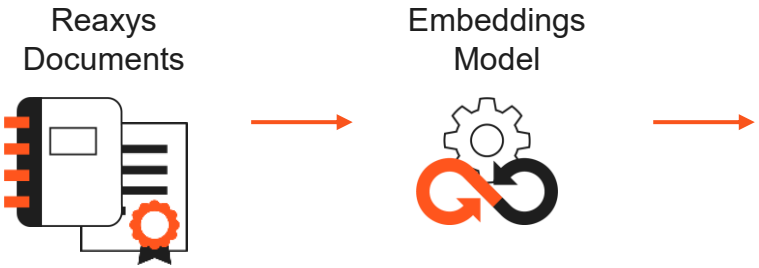
How does Reaxys AI search work?

Reaxys AI is based on vector search, which is a technique to find similar items by comparing numerical representations (“vector”) of content like text, images, or molecules. The upcoming Reaxys AI search focuses on vectorized text only.

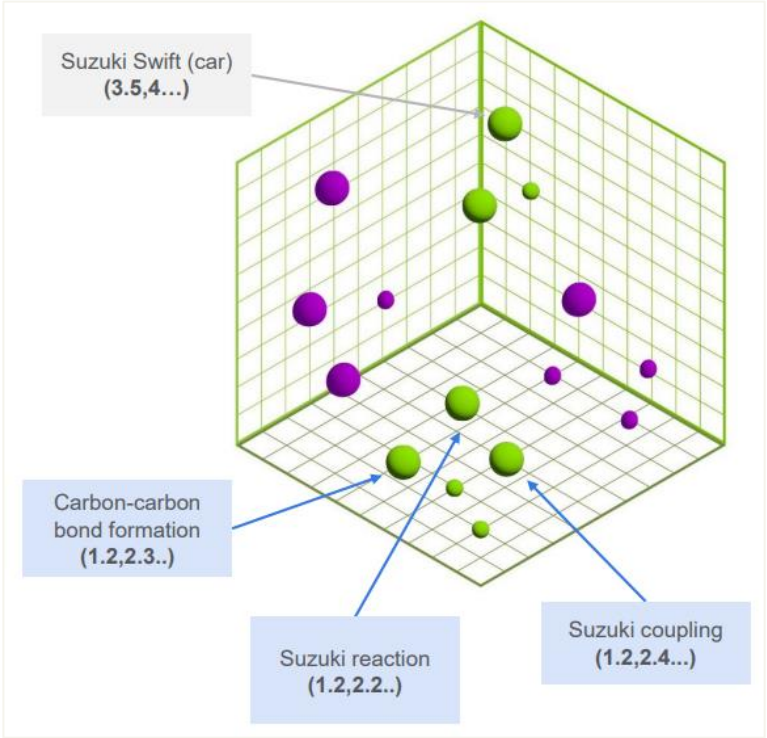


- ✓ BERT model is trained to answer chemistry-related questions with full Reaxys data (Title and Abstracts)
- ✓ Reviews more relevant results for natural language query
- ✓ Leverages strength of both vector & keyword-based search

What is Reaxys Semantic Search?

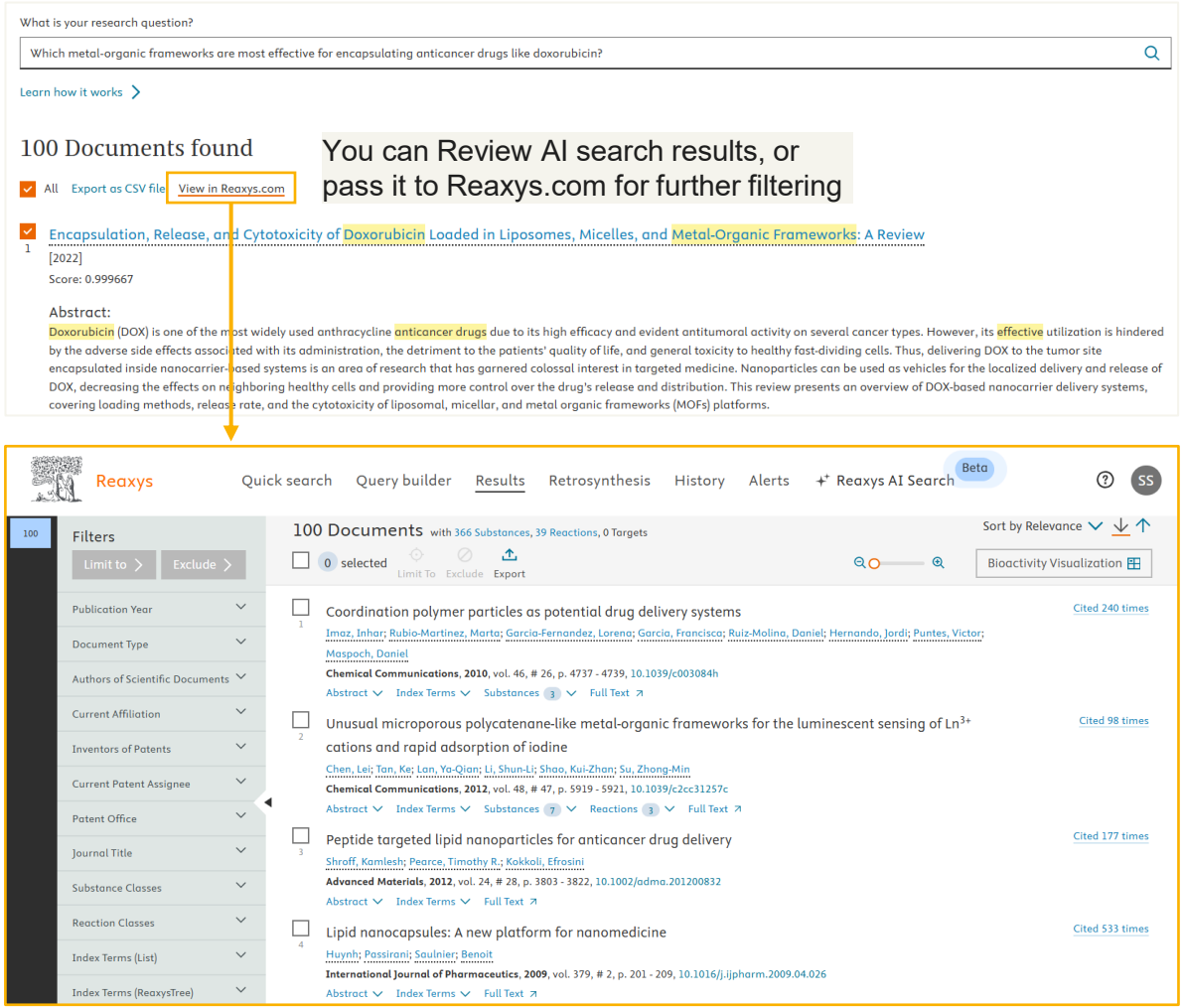


- Textual content from journal articles and patents (abstracts, patent claims, full text) can be transformed into vectors, represented as numerical values
- This numerical representation of this complex text is represented as points in a multidimensional vector space. The embedding model ensures that text with a similar meaning sits in close proximity in the vector space



Reaxys AI Search Demo

Which metal-organic frameworks are most effective for encapsulating anticancer drugs like doxorubicin?



ELSEVIER

Reaxys AI Search 搜尋結果

Go back to main search

What is your research question?

How to retain blueberry puree anthocyanin levels under high pressure processing?

Learn how it works

100 Documents found

All Export as CSV file View in Reaxys.com

1 Method for processing dried blueberry fruit having high anthocyanin content

CN104642949, [2015]

Score: 0.997681

Abstract:

The invention discloses a method for processing a dried blueberry fruit having high anthocyanin content. The method comprises the following steps: step (1) screening fresh blueberry fruits, washing and removing water; step (2) dewaxing the blueberry which is treated in the step (1), cooling and removing water; step (3) firstly performing an osmotic dehydration treatment and then performing a heat pump-hot wind united drying treatment; step (4) cooling the dried blueberry fruits to room temperature, making sure that the retained amount of an anthocyanin type substance in the dried blueberry fruits is above 800mg/100g. By controlling the processing parameters such as pH and temperature that influence the stability of the anthocyanin, a vertical stacked hydrophobic structure is formed by utilizing copigmentation and union of molecules, so that hydration of the anthocyanin type substance is inhibited; the structural stability of the anthocyanin type substance is improved by modification effect of an intra-molecular structure which has reactions such as glycosylation and acylation, and thus the stability of the blueberry anthocyanin is improved, and the loss of the blueberry anthocyanin during processing is reduced.

Was this relevant to the question?

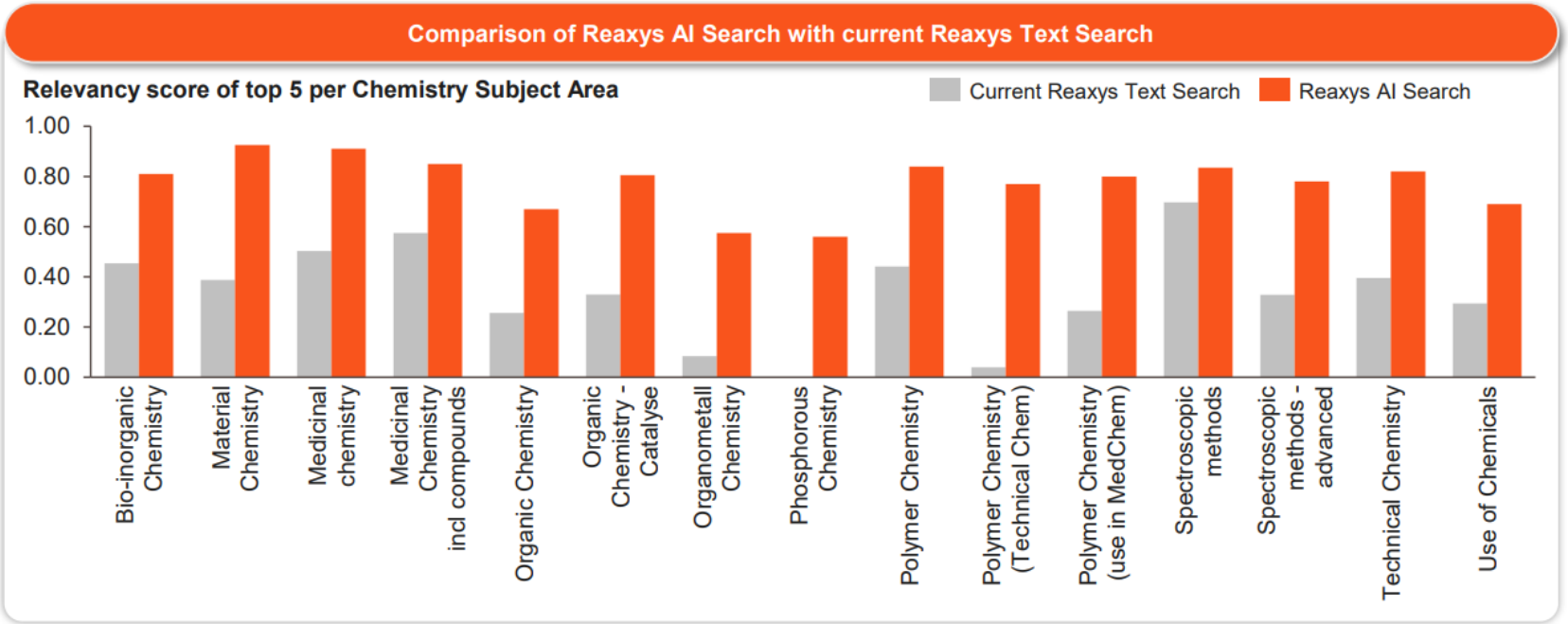
2 Effects of high hydrostatic pressure and thermal processing on anthocyanin content, polyphenol oxidase and β-glucosidase activities, color, and antioxidant activities of blueberry (Vaccinium Spp.) puree

[2021]

Score: 0.995587

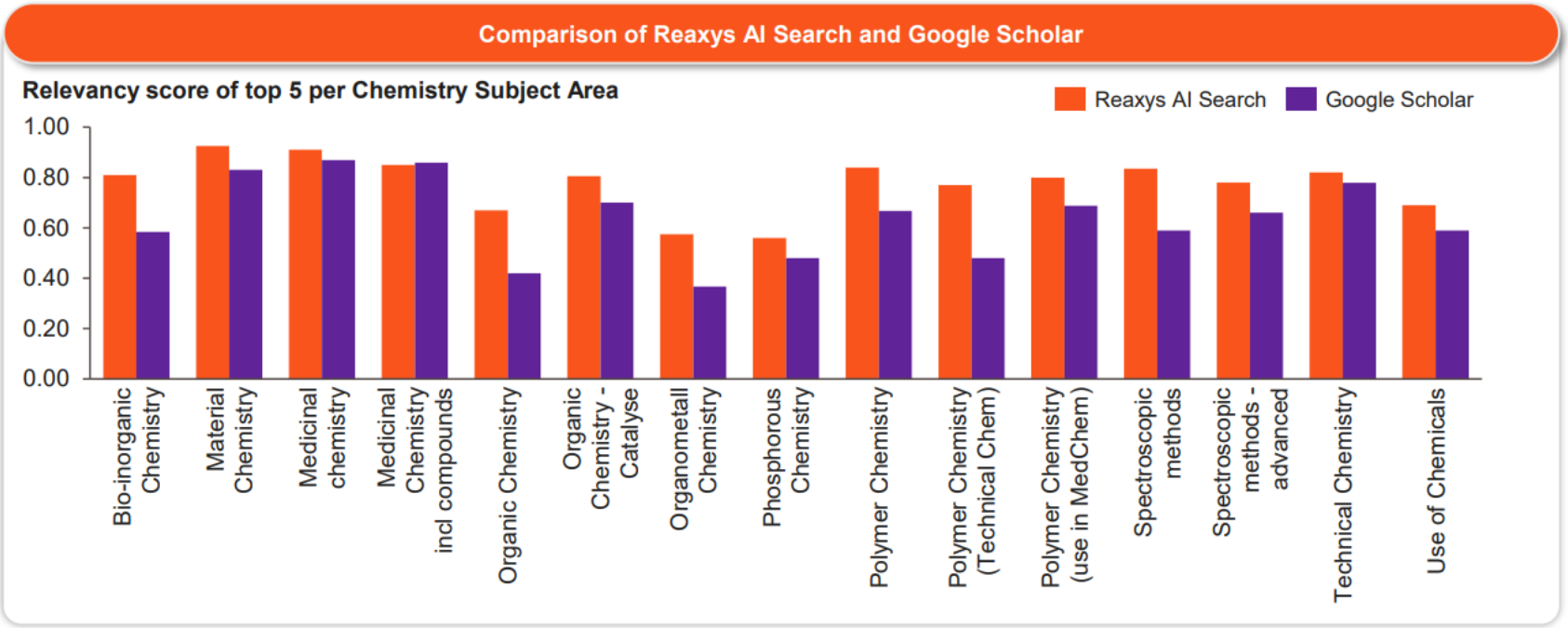
Did the results answer your question? Yes No

Internal evaluation – Significant improvement vs. current Reaxys text search: Relevancy score increased from 38% to 81%



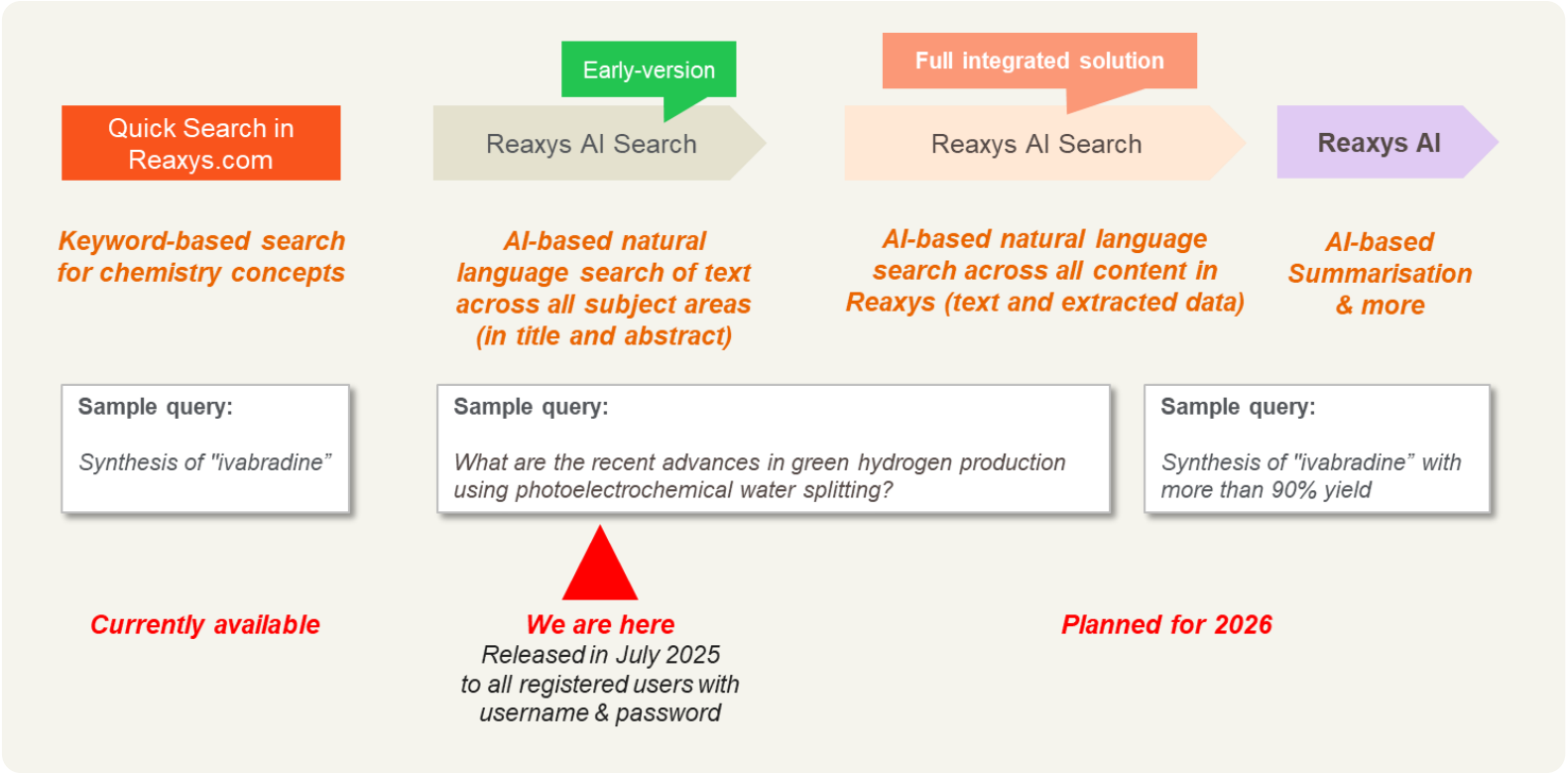
Disclaimer: Reaxys text search wasn't built for natural languages queries

Internal evaluation – Reaxys AI Search is also better than Google Scholar



Relevancy score top 5 results: **Reaxys AI Search 81%** vs. **Google Scholar 64%**

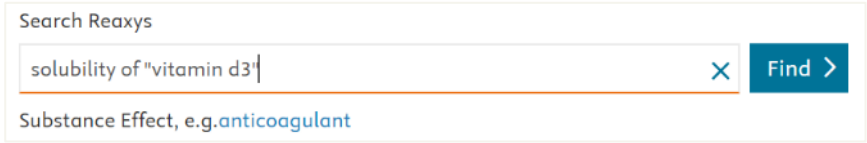
Reaxys AI Search 未來發展



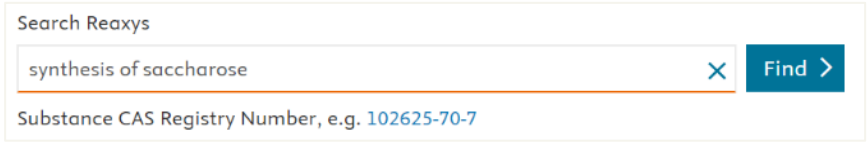
Quick Search 多元搜尋指令

化合物搜尋

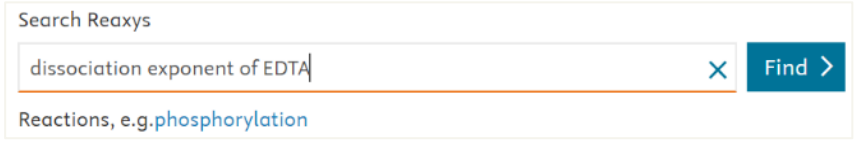
化學性質搜尋



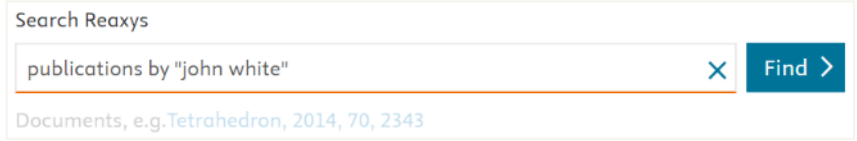
逆合成搜尋



化學作用搜尋



文獻搜尋



天然萃取物檢索:鬼針草 (Bidens Pilosa)

Photo by An Hoàng on Unsplash

Question: 探索藥用植物萃取物的生活性應用，已發表文獻中有哪些 Substances 紀錄?

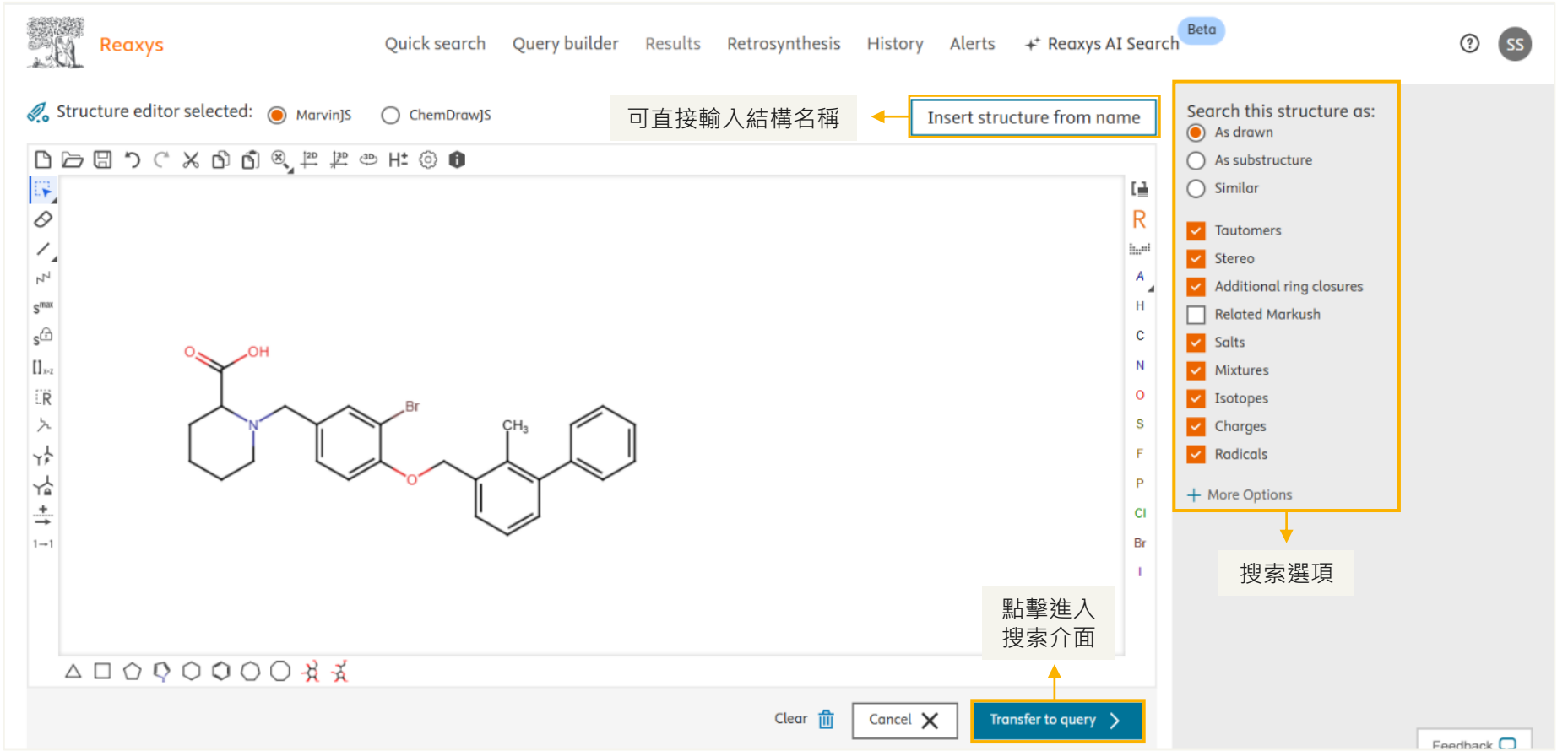
方法一:

1. 檢索 Bidens Pilosa 的文獻
2. 取得文獻中人工提取的 Substances 清單

方法二:

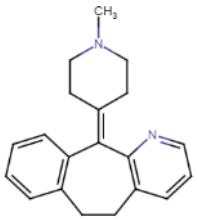
1. 利用進階搜尋工具 Isolated from natural source

結構編輯器介面


Reaxys
Quick search
Query builder
Results
Retrosynthesis
History
Alerts
Reaxys AI Search
Beta
SS
Structure editor selected:
MarvinJS
ChemDrawJS
可直接輸入結構名稱
Insert structure from name
Search this structure as:
As drawn
As substructure
Similar
Tautomers
Stereo
Additional ring closures
Related Markush
Salts
Mixtures
Isotopes
Charges
Radicals
More Options
搜索選項
點擊進入
搜索介面
Clear
Cancel
Transfer to query
Feedback

Reaxys 三種結構搜尋與怎麼用

我感興趣的結構



Azatadine
CAS# 3964-81-6

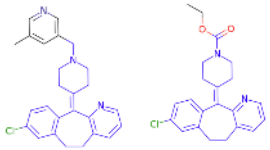
As drawn

尋找跟我畫的**「一模一樣」**結構

針對已知的藥物、已發表的結構想查詢物理化學性質、生醫活性應用製備方法、研究背景。

As substructure

含有相同**「核心結構」**的一群衍生物

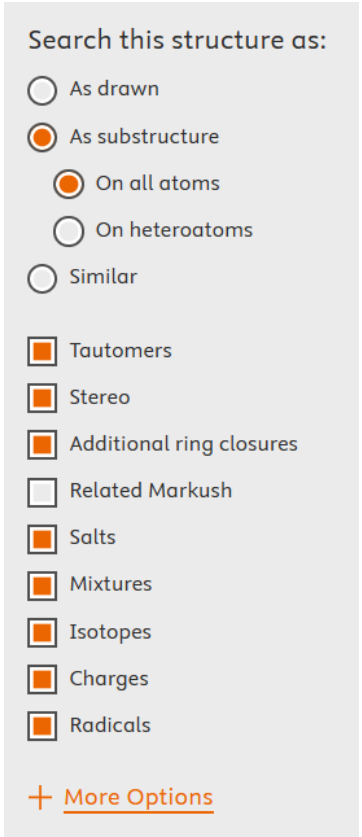


研究新的化合物，從已經發表的結構找線索，例如優化前導化合物 (lead compound)

Similar

「結構類似」的化合物提供不同程度的結構變化

結構編輯器搜尋選項

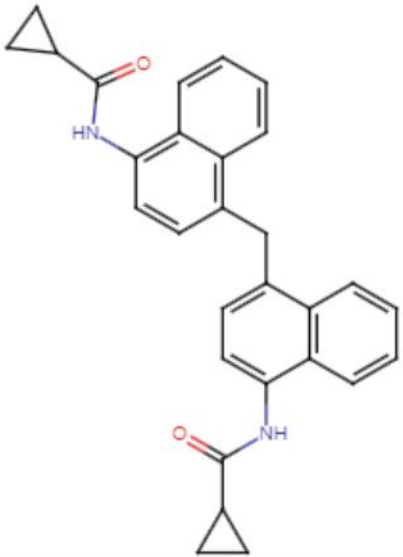


- As drawn: 按照繪製的結構
- As substructure: 部分結構
  - On all atoms: 搜索所有原子的子結構
  - On heteroatoms: 只在雜園子上進行結構搜索
- Similar: 類似的化合物與反應

- Tautomers: 同分異構體
- Stereo: 立體異構體
- Additional ring closures: 額外的環形閉合
- Related Markush: 相關的 Markush 資料
- Salts: 鹽類
- Mixtures: 混合物
- Isotopes: 同位素
- Charges: 帶電分子
- Radicals: 自由基

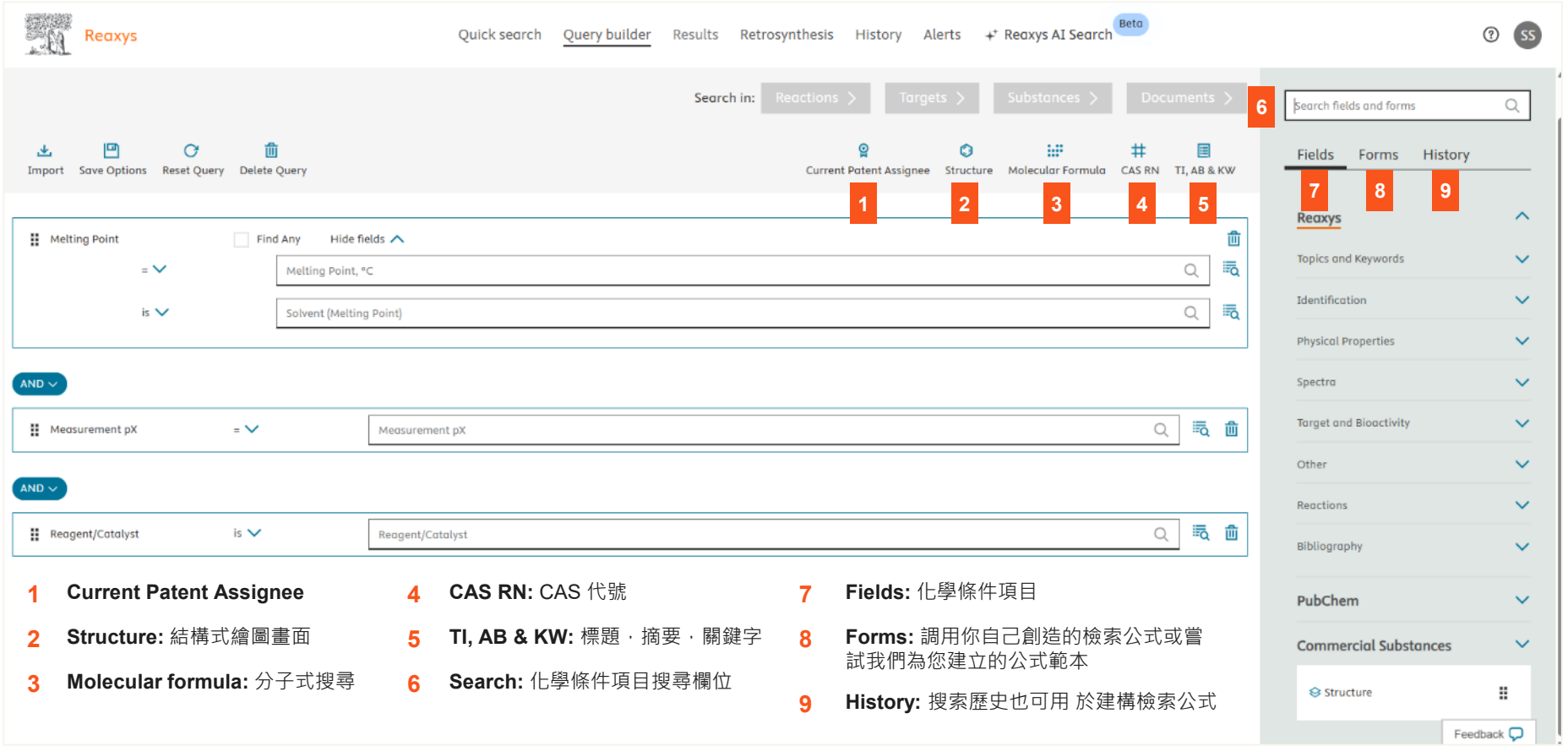
示範: 結構探索

我有一個實驗室感興趣的結構，是沒有人發表過的，如何從有**相似化學結構**的文獻中，找尋可以參考應用、關鍵的實驗數據。



O=C(NC1=CC=C(CC2=C3C=CC=CC3=C(NC(=O)C3CC3)C=C2)C2=C1C=CC=C2)C1CC1

Query builder 檢索介面



1 **Current Patent Assignee**

2 **Structure:** 結構式繪圖畫面

3 **Molecular formula:** 分子式搜尋

4 **CAS RN:** CAS 代號

5 **TI, AB & KW:** 標題，摘要，關鍵字

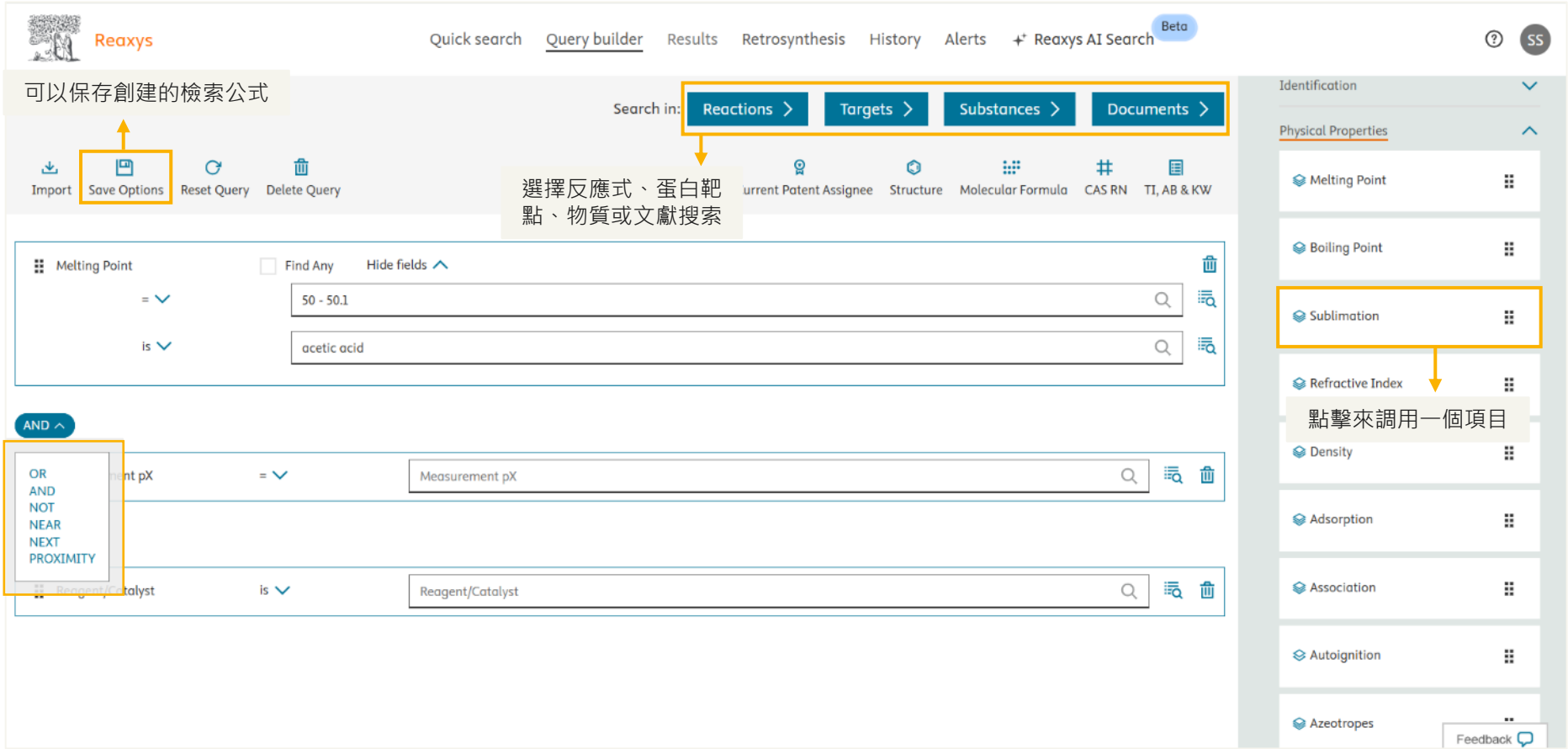
6 **Search:** 化學條件項目搜尋欄位

7 **Fields:** 化學條件項目

8 **Forms:** 調用你自己創造的檢索公式或嘗試我們為您建立的公式範本

9 **History:** 搜索歷史也可用 於建構檢索公式

Query builder 檢索介面



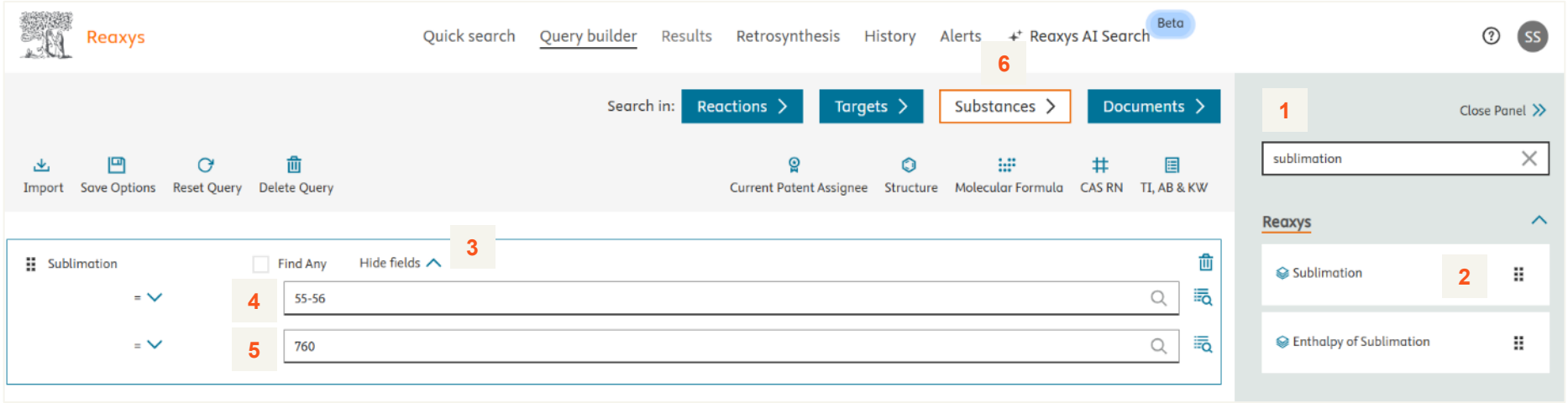
Query builder: 實驗數據檢索

Question:

實驗室需尋找加熱至約 60 度可昇華的材料，然而利用 Google 取得的資訊雜訊太多，如何從實驗數據搜尋符合的材料再連結至相關文獻

利用進階搜尋工具「**Sublimation**」

Query builder: 實驗數據檢索



1 以關鍵字搜尋 Sublimation

2 左鍵點選 Sublimation

3 點擊 Show fields 顯示數據欄位

4 輸入溫度區間 55-65

5 可輸入 760 (torr) 或保持空白

6 點選 Substances 資料類型

Query builder: 實驗數據檢索

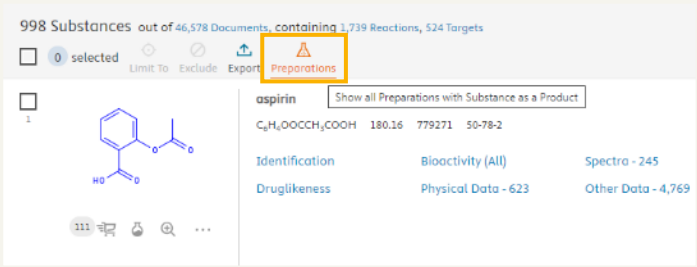
反應式搜尋

How to search chemical reactions

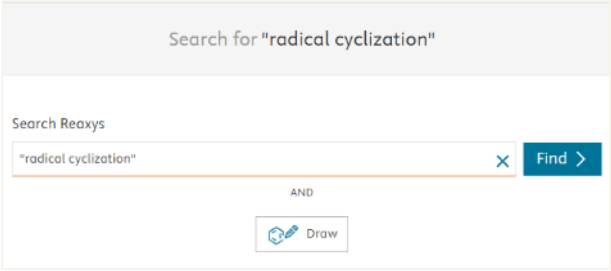
ELSEVIER

尋找反應式 (Chemical equation) 的方法

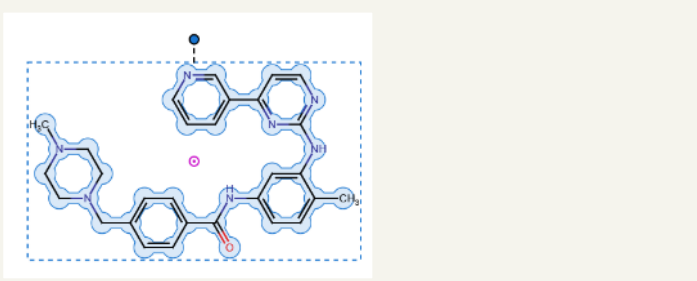
1. **已知物質的製備方式**
   (從 substance介面連結 preparations)



2. **關鍵字檢索** (例：radical cyclization)、命名反應式 (例：Suzuki coupling)

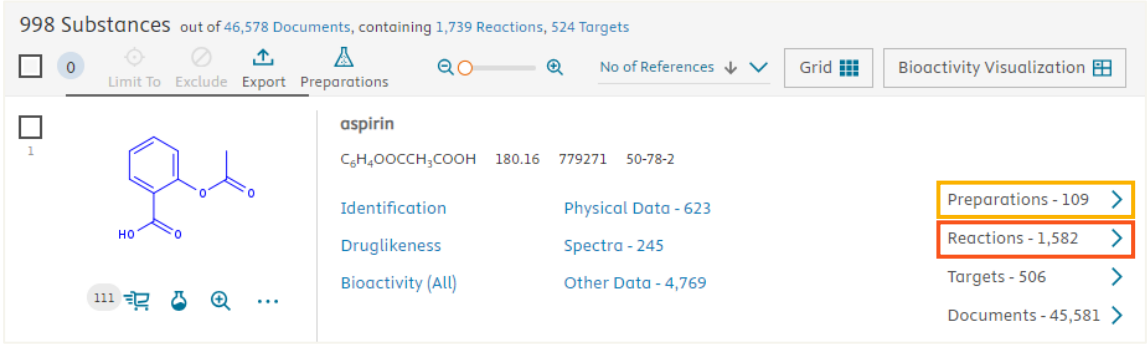


3. **直接畫出反應式**
   (完整、半個反應式)

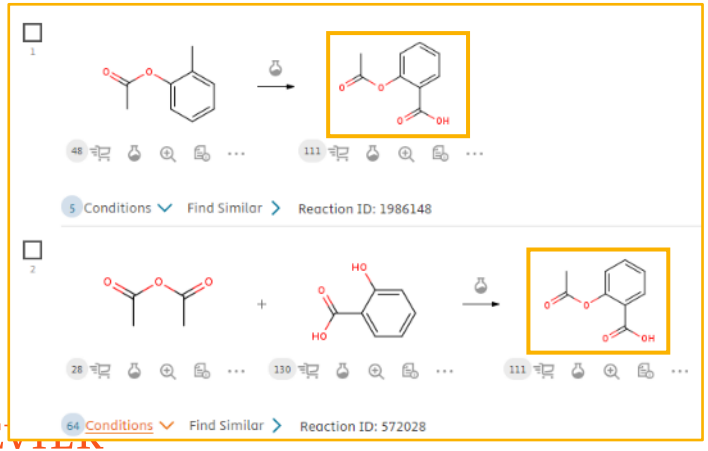


ELSEVIER

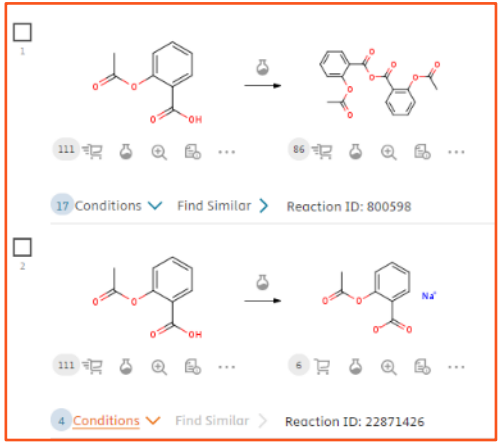
尋找反應式的方法: 已知物質的製備方式



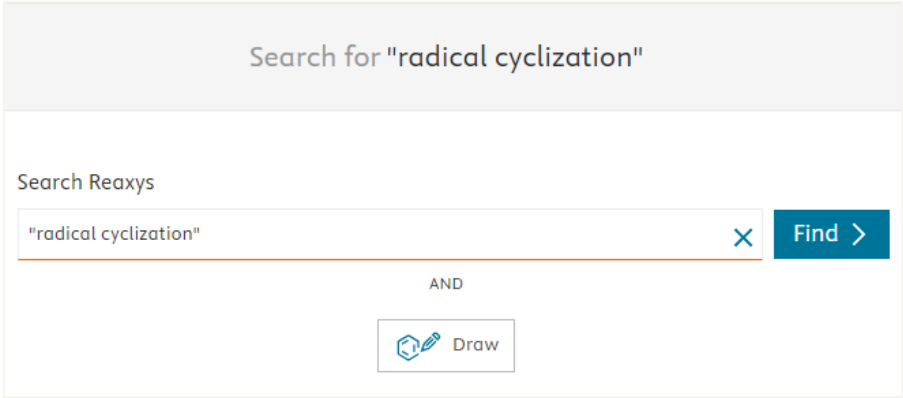
Preparations 指出現在產物 (Product)

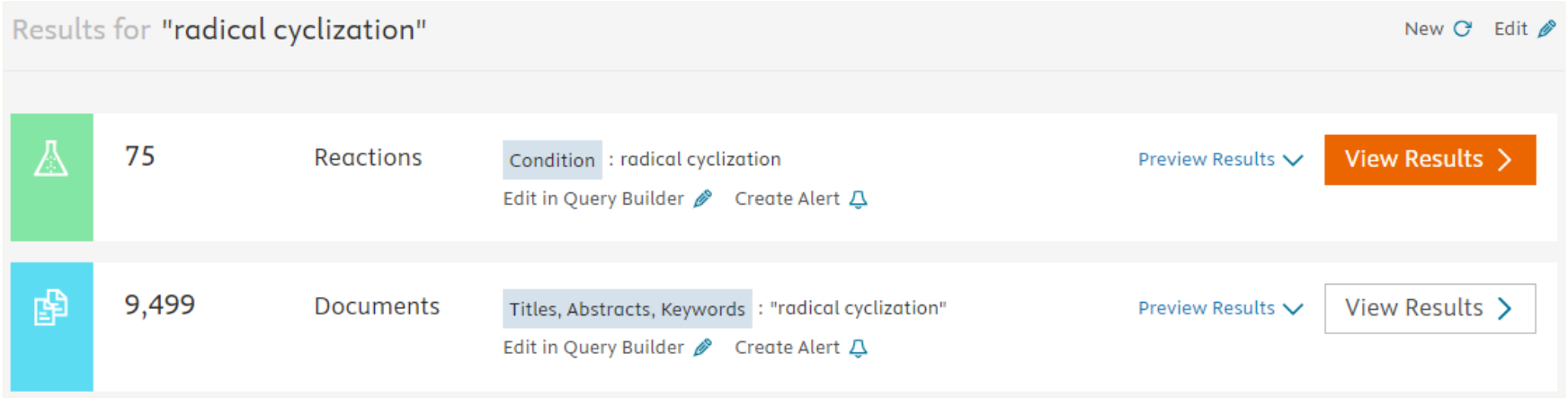


Reactions 產物或起始物 (Reactants or Products)

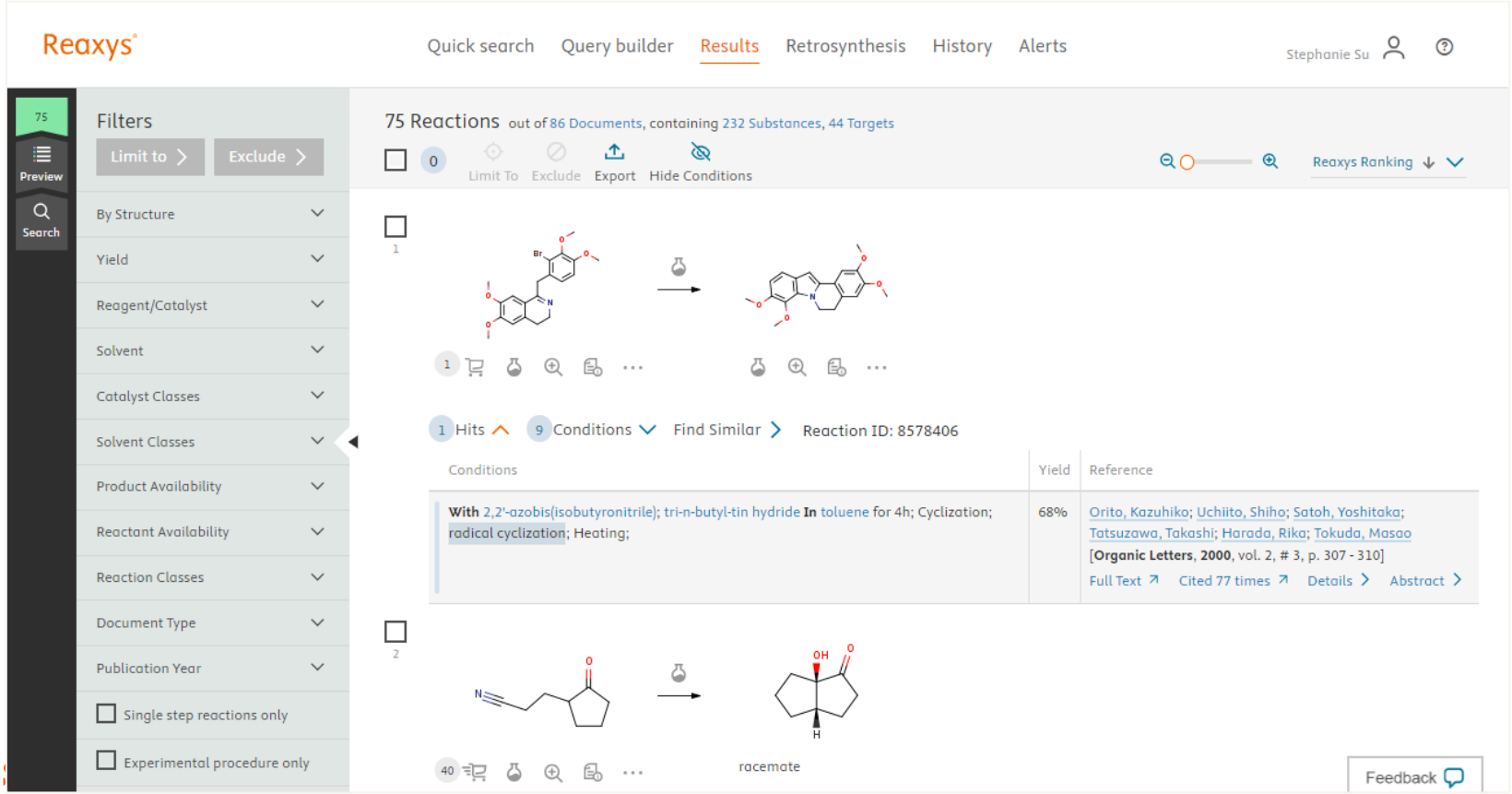


尋找反應式的方法: 關鍵字檢索

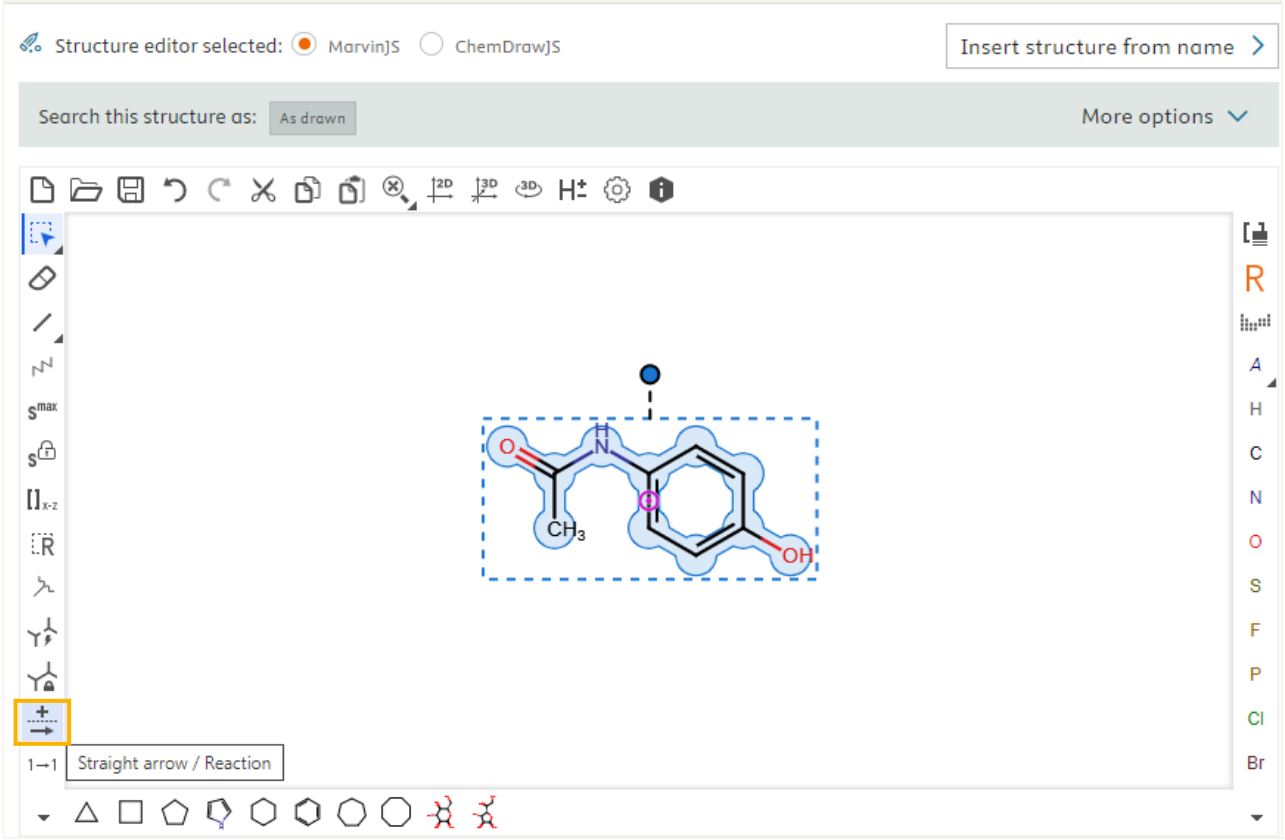




尋找反應式的方法: 關鍵字檢索



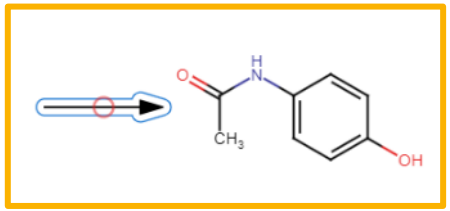
尋找反應式的方法: 繪製反應式

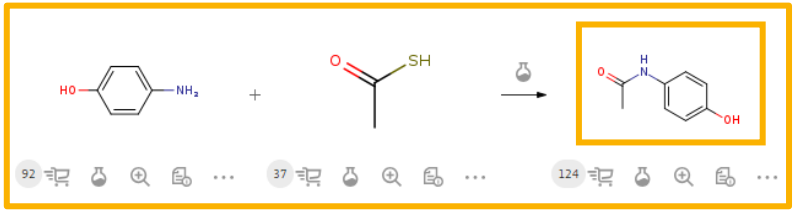


加入反應箭頭

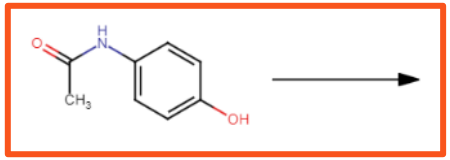
尋找反應式的方法: 繪製反應式

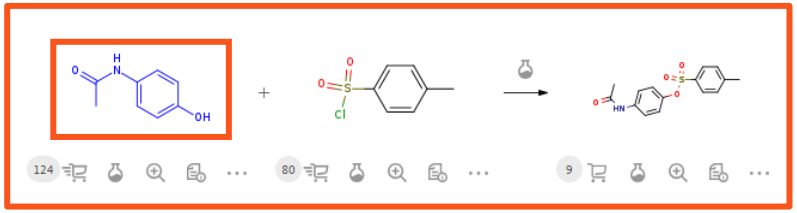
產物: 箭頭在左



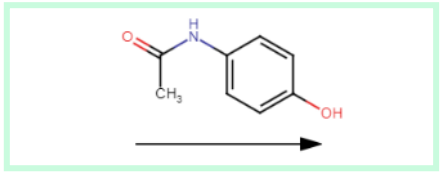


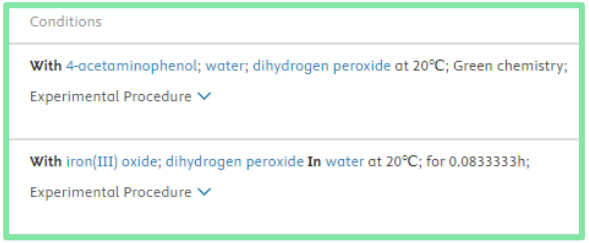
起始物: 箭頭在右





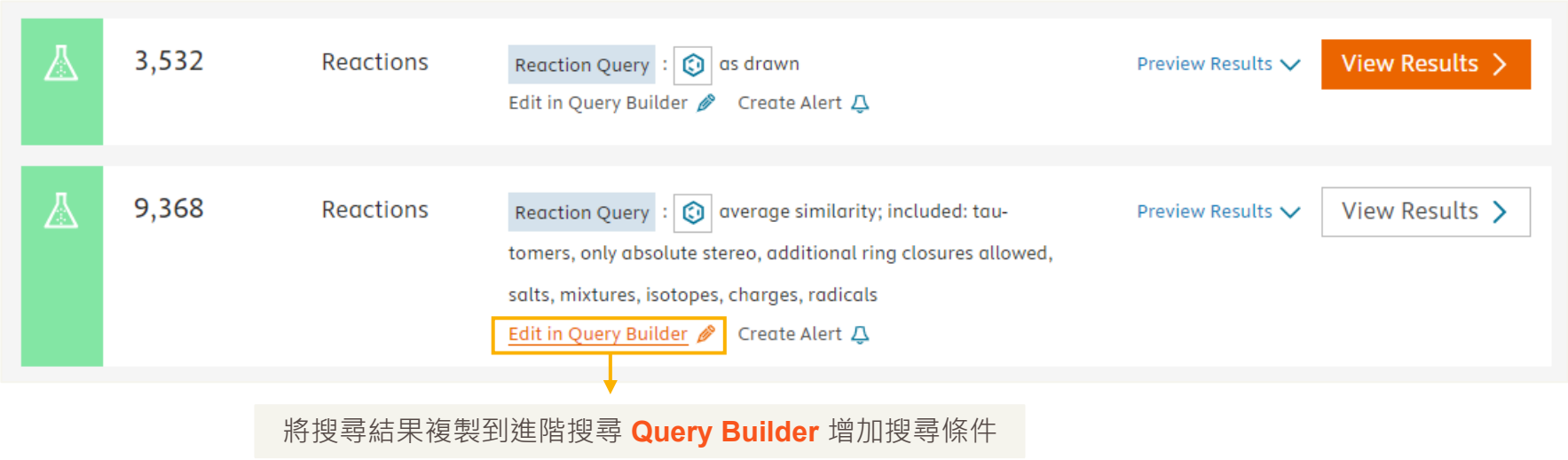
催化劑或溶劑: 箭頭在下





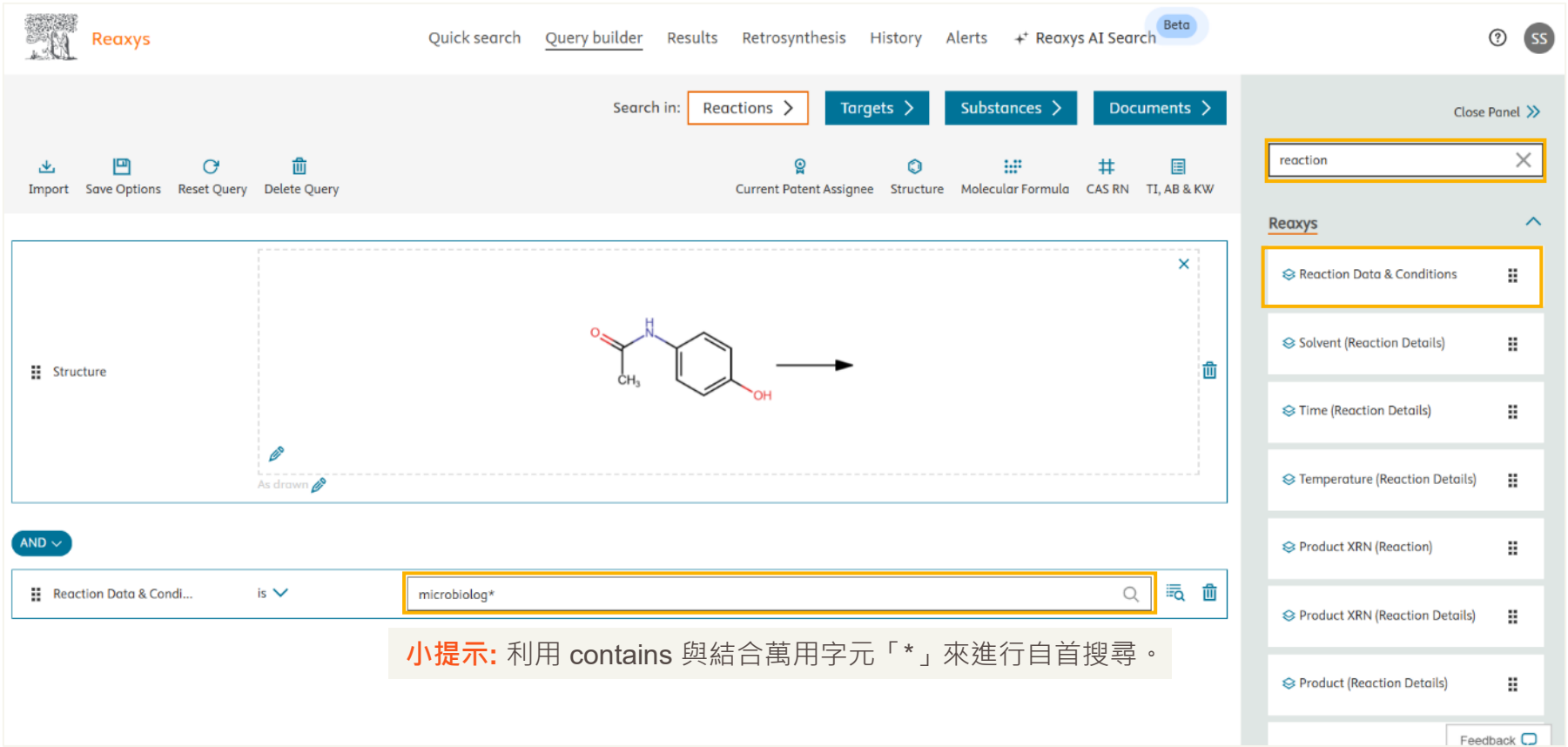
進階反應式檢索: Query builder

利用 **Query builder** 進一步「加工」搜尋條件



將搜尋結果複製到進階搜尋 **Query Builder** 增加搜尋條件

進階反應式檢索: Query builder



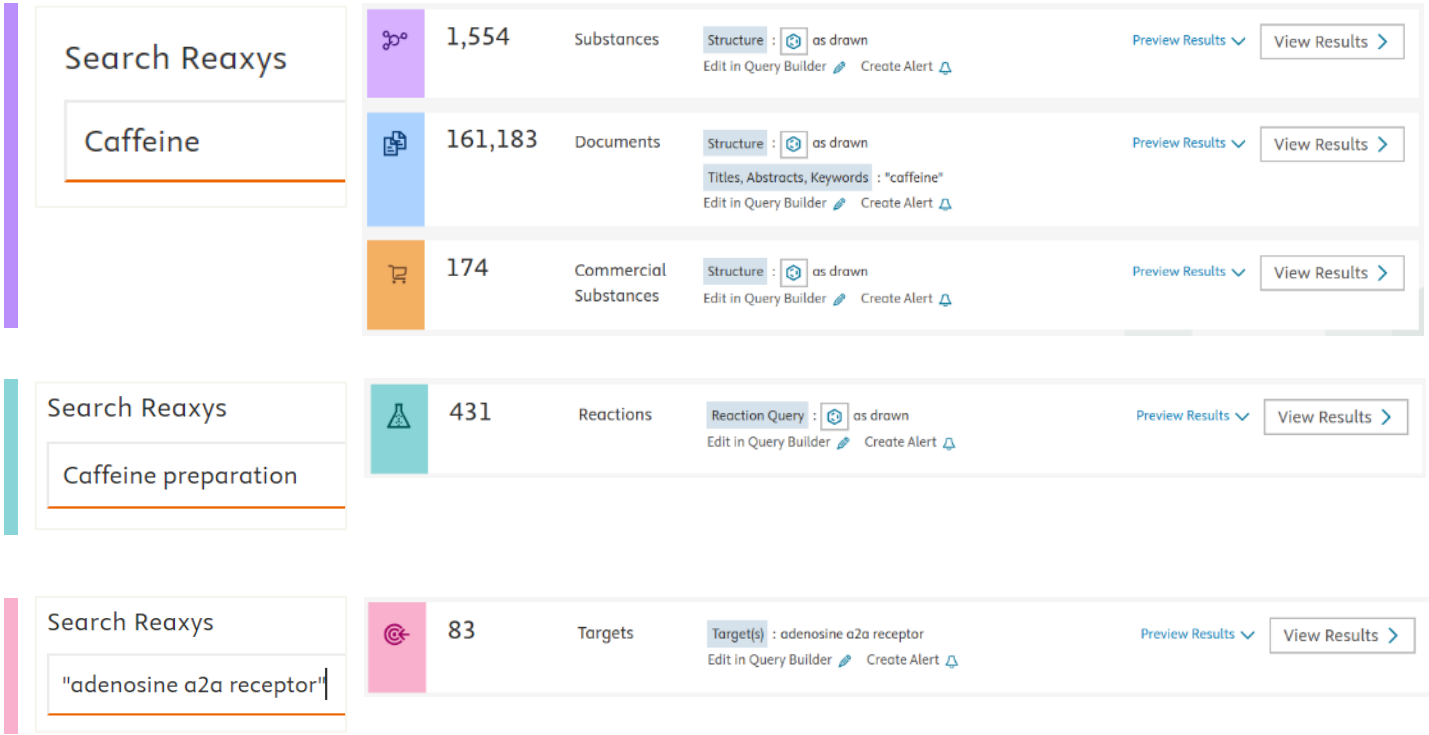
小提示: 利用 contains 與結合萬用字元「*」來進行自首搜尋。

搜尋結果種類

Types of search results

ELSEVIER

搜尋預覽介面



實驗數值與參考出處

文獻、專利

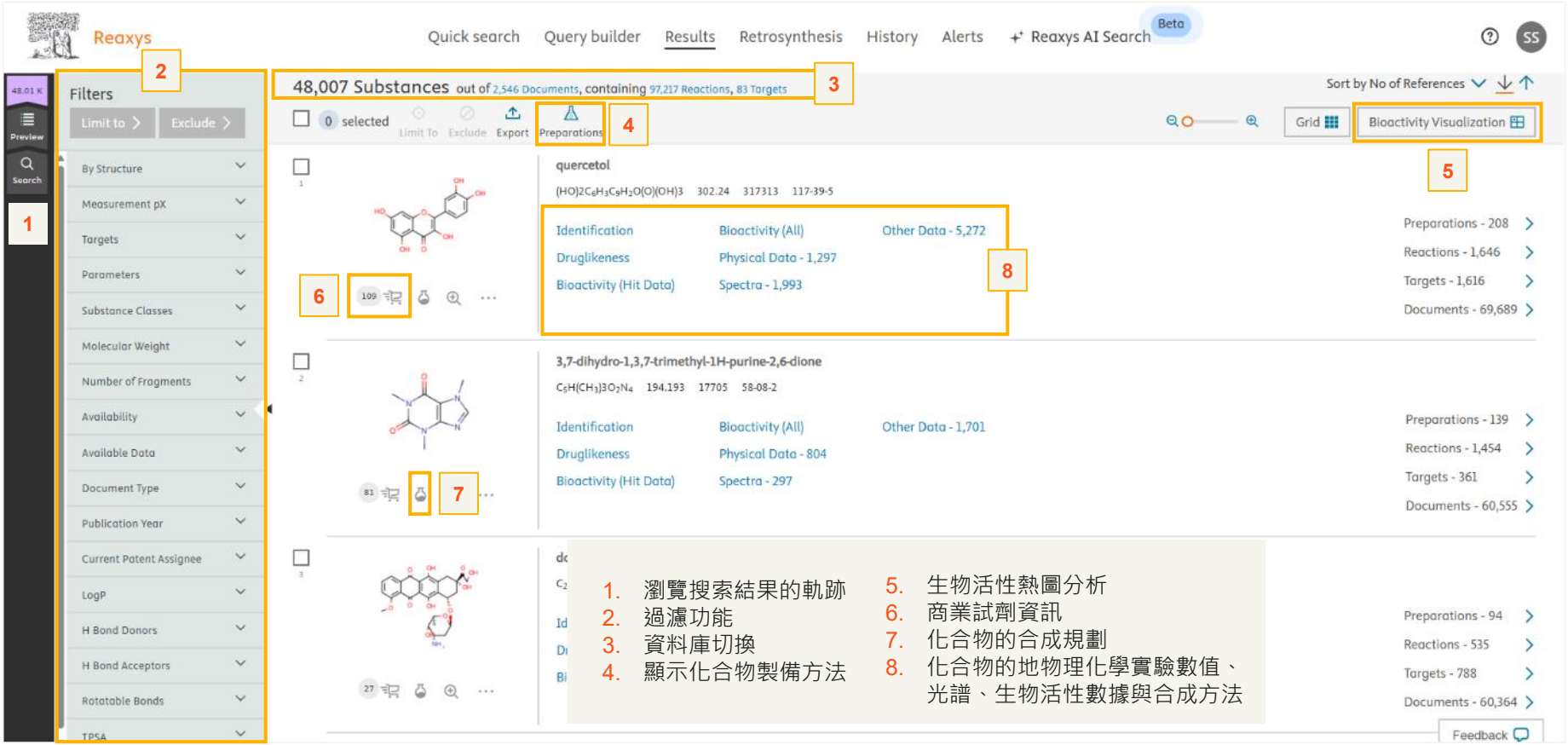
供應商資訊

合成方法

蛋白、可用藥靶點與化合物交互作用的數據

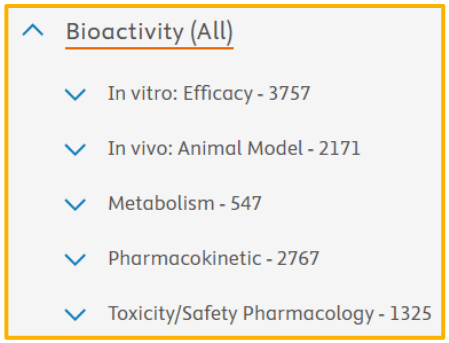
ELSEVIER

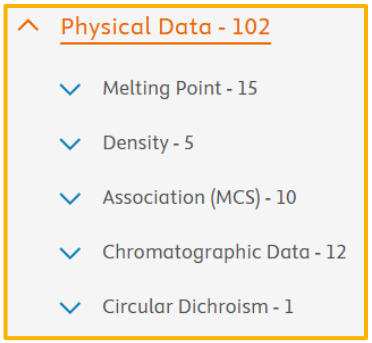
Substances: 化合物搜尋結果

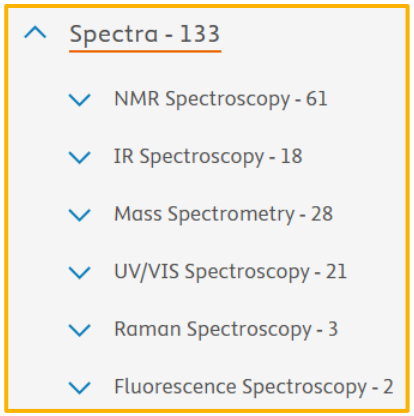


1. 瀏覽搜索結果的軌跡
2. 過濾功能
3. 資料庫切換
4. 顯示化合物製備方法
5. 生物活性熱圖分析
6. 商業試劑資訊
7. 化合物的合成規劃
8. 化合物的地物理化學實驗數值、光譜、生物活性數據與合成方法

詳細的化合物數據







- **Preparations:** 製備反應(作為產物)
- **Reactions:** 包含此化合物的所有反應
- **Targets:** 與此化合物有活性證據的靶點蛋白
- **Documents:** 參考文獻

ELSEVIER

Bioactivity (all): 生物活性數據介面

Bioactivity (All)

- **pX 值:** 數字越大活性越高
- **Value (quant)/Unit:** 實驗數值
- **Action on target:** 作用機制
- **Target:** 活性蛋白靶點

In vitro: Efficacy - 3757

Quantitative Results

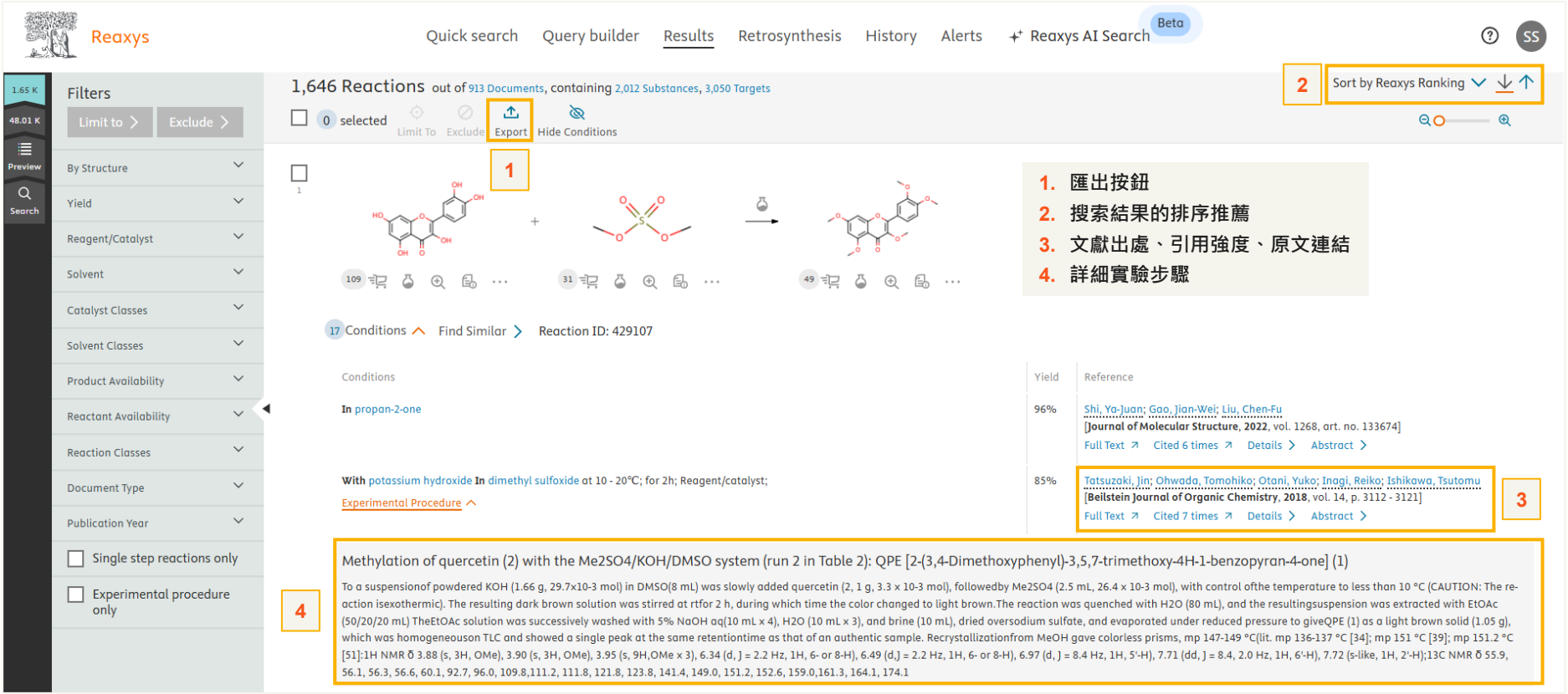
Show/Hide columns

pX	Parameter	Value (qual)	Value (quant)	Unit	Biological Species	Action on target	Target	Tissue/Organ	Cell	Dose	Effect	Concomitants	Referen
11.9	activation percentage (relative to control + more		44	%					Hep-G2 cell line	10E-7 µM		Other compound: Geranylgeranyl pyrophosphate	Current US2017/ Full Tex
11.3	activation percentage (relative to control + more		210	%					Hep-G2 cell line	10E-5 µM		Other compound: Geranylgeranyl pyrophosphate	Current US2017/ Full Tex
10.9	activation percentage (relative to control + more		46	%					Hep-G2 cell line	10E-6 µM		Other compound: Geranylgeranyl pyrophosphate	Current US2017/ Full Tex
10	Ki (inhibition constant)	=	0.1	nM		Radioligand (/ligand)	3-hydroxy-3-methylglutaryl-coenzyme A reductase:Wild						Riganti Bosia, A Chemis Full Tex

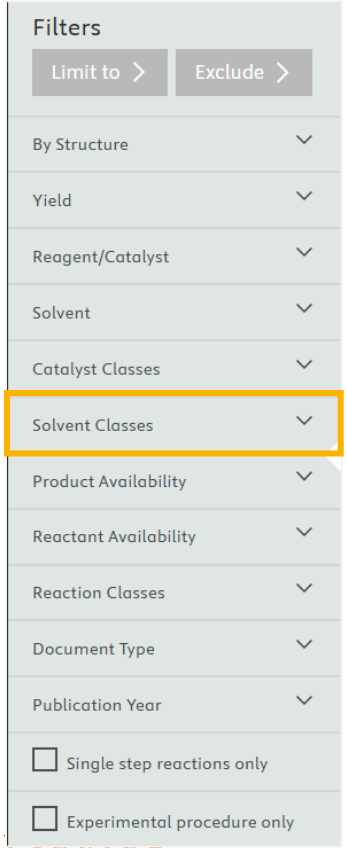
Bioactivity Visualization: 生物活性視覺化分析

生物活性視覺化分析篩選工具

Reactions: 反應式搜尋結果



反應式搜尋結果篩選工具



結構

產率

試劑，催化劑

溶劑

催化劑類別

溶劑類別

產物的可能性

反應物的可能性

反應類別

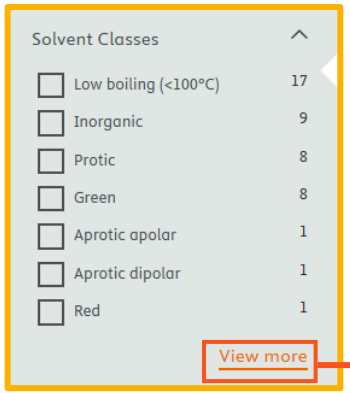
來源種類 (文獻，專利)

出版年份

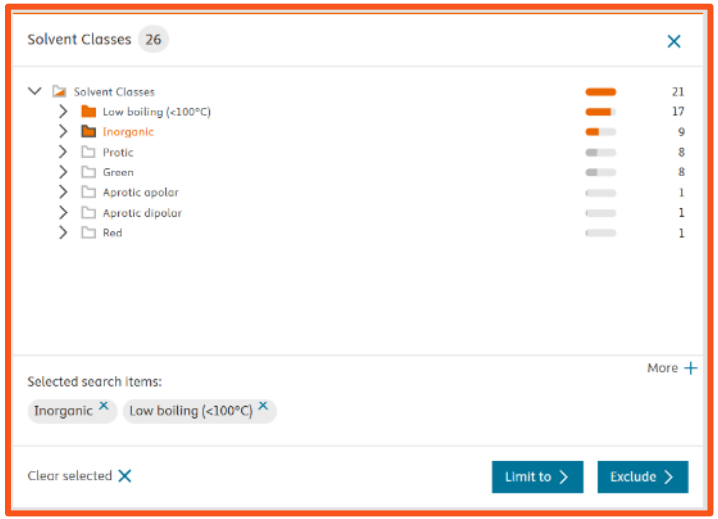
縮小到只有一步反應

縮小到只包含實驗性術語的名單

可展開查看篩選細項

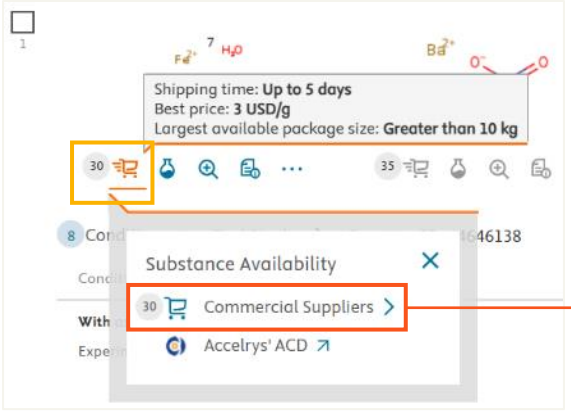


- 每個專案的細目可以通過點擊展開
- 這些專案按照案件數量的順序進行排序
- 可以透過輸入數位或單位詞來過濾專案

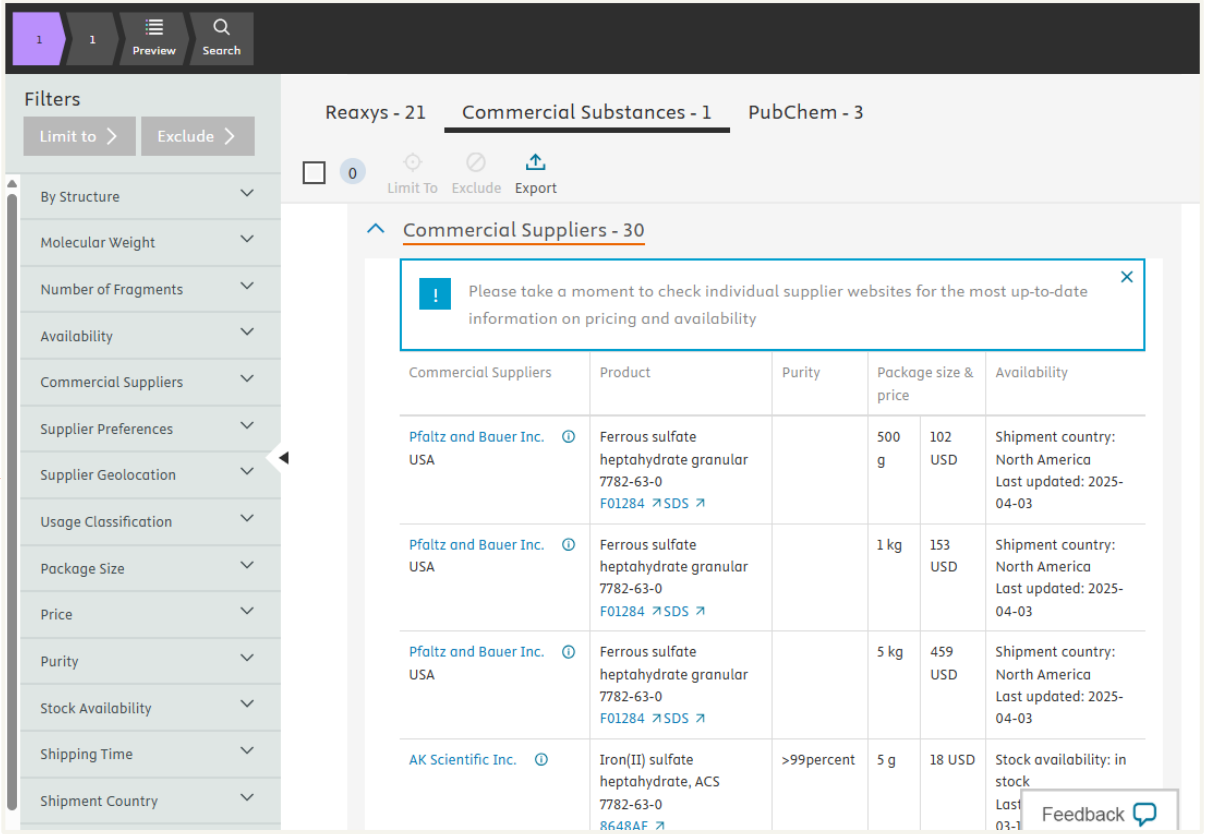


商業試劑目錄資訊

滑鼠滑至購物車上方會自動顯示最佳價格，購物車旁的數字代表全球有多少供應商供應此材料。

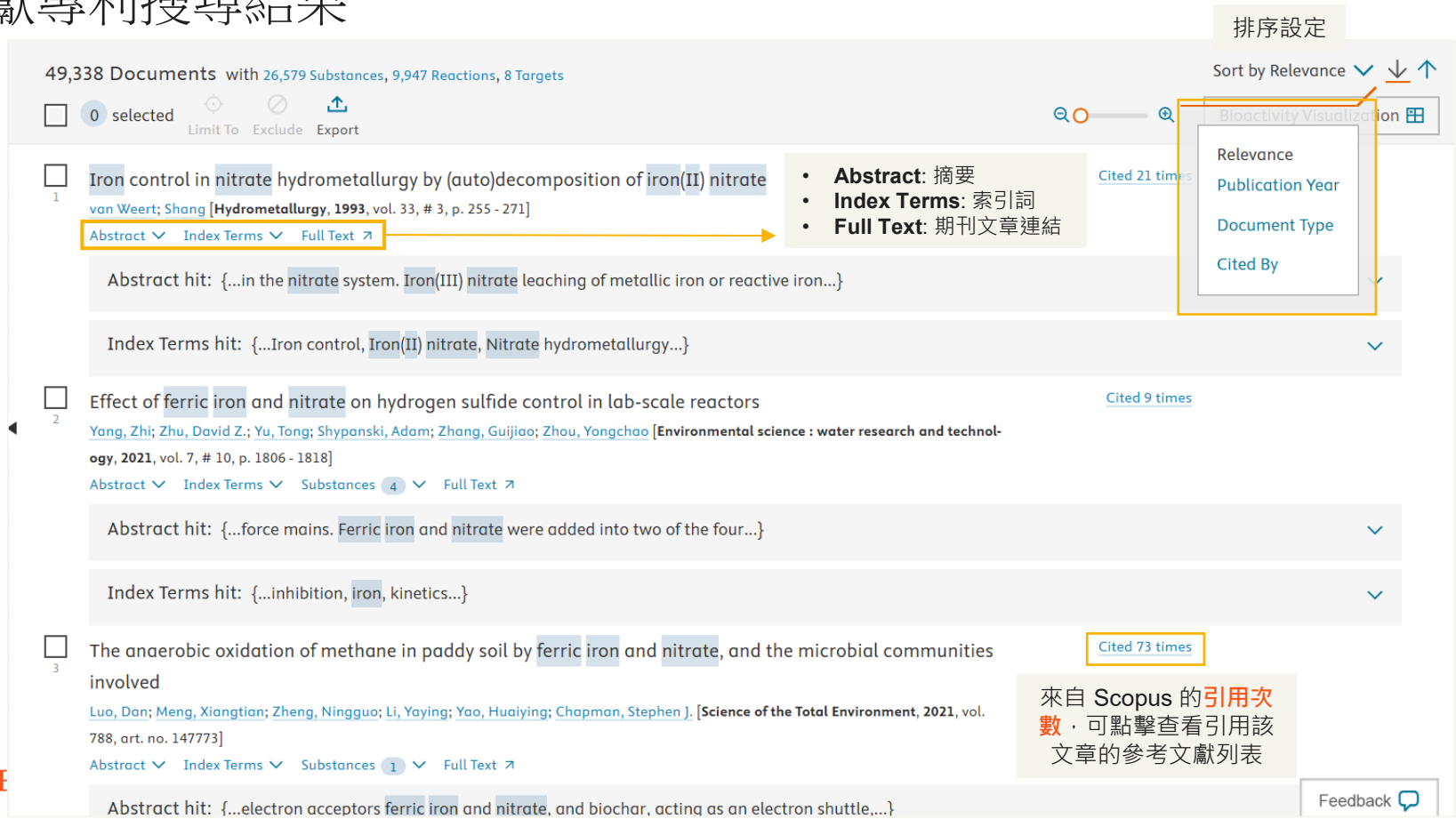


- 可以檢查供應商、商品編號、純度、包裝大小、價格和交貨日期。 篩選功能使您將搜索範圍縮小到特定供應商
- 篩選設定也依供應商相關資訊而定義



ELSEVIER

文獻專利搜尋結果

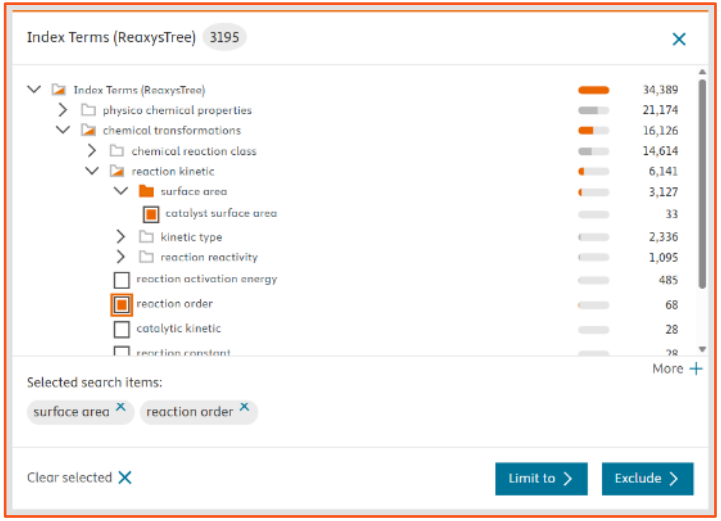


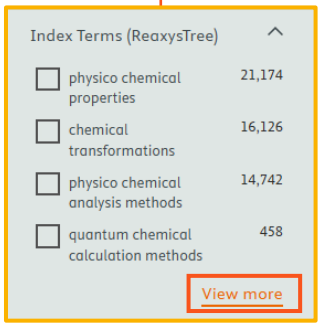
- **Abstract**: 摘要
- **Index Terms**: 索引詞
- **Full Text**: 期刊文章連結

來自 Scopus 的引用次數，可點擊查看引用該文章的參考文獻列表

文獻專利搜尋結果篩選工具

出版年份
文獻類型
文獻作者
目前隸屬機構
專利發明者
目前專利授予者
專利辦公室
期刊名稱
化合物種類
反應式種類
文獻索引詞統計清單
索引詞化學分類





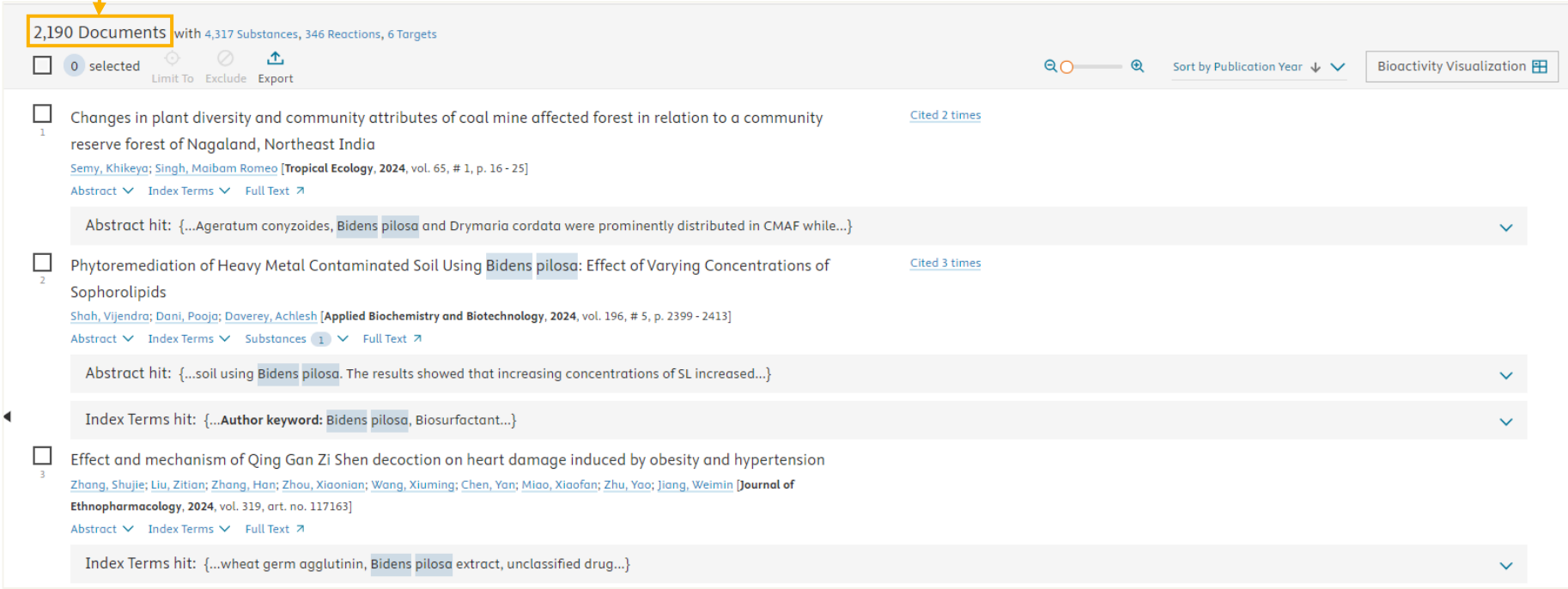
用常見的化學概念來整理索引詞

以「催化劑表面積」**catalyst surface area** 的文獻為例：點擊 View more > chemical transformations > reaction kinetic > surface area > catalyst surface area

ELSEVIER

Reaxys 資料庫中的資料互相串連

取得研究咸豐草的一千篇文獻中被我們**人工索引**的化合物清單。

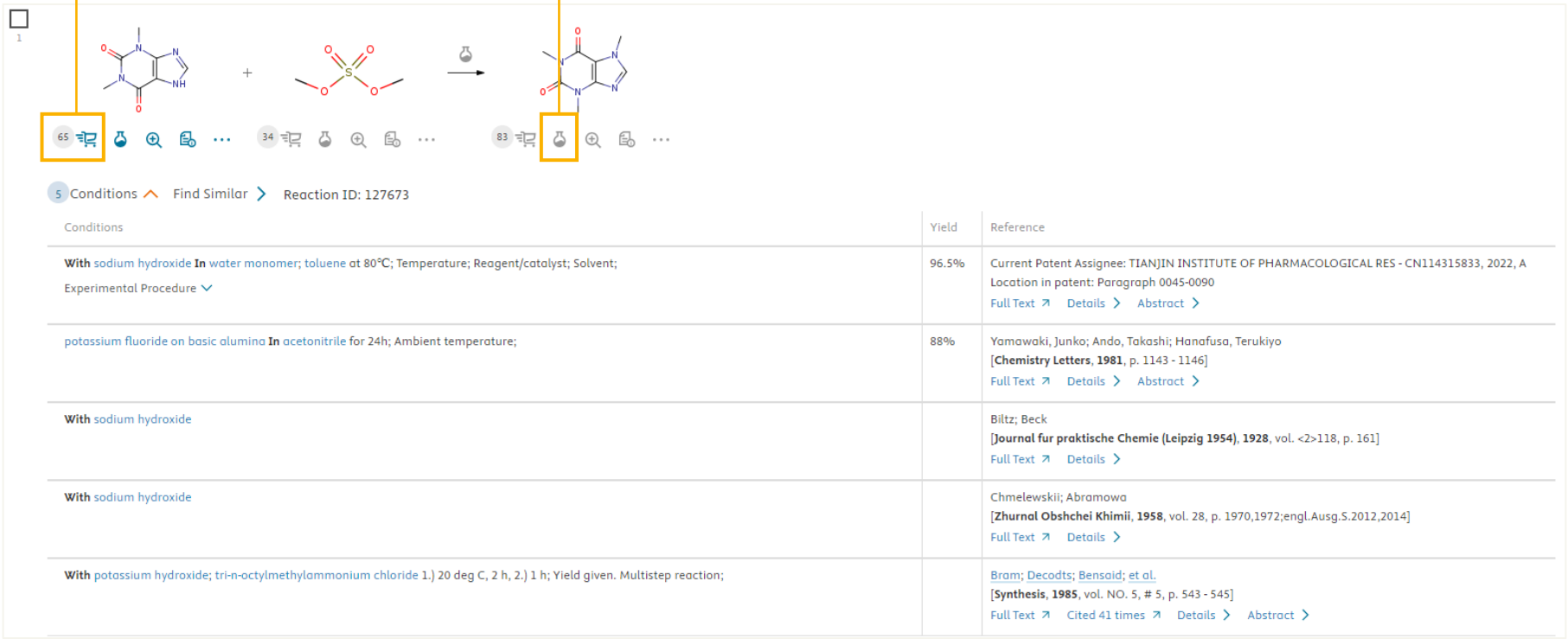


ELSEVIER

Reaxys 資料庫中的資料互相串連

從購物車連結到商用資料庫去評估實驗的成本

你可以從反應式的查詢結果再連結到物質資料庫，查詢這個產物的光譜數據。



藥物靶點與藥物設計

Drug Targets and Drug Design

ELSEVIER

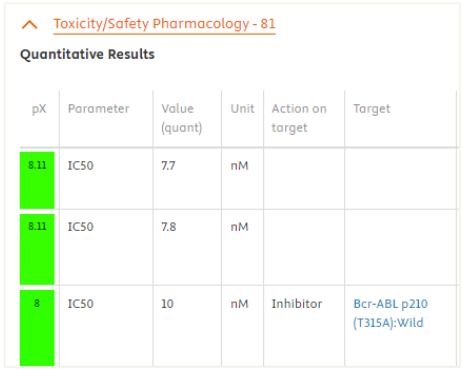
活性化合物的設計與優化

任務

- 建立 Structure-Activity Relationships (SAR) 並辨認哪些結構特徵促進高活性和低活性
- 識別與化合物結構相似的化合物潛在非靶標活性
- 合理化並優化化合物系列的藥物代謝、藥物動力學和毒性特性

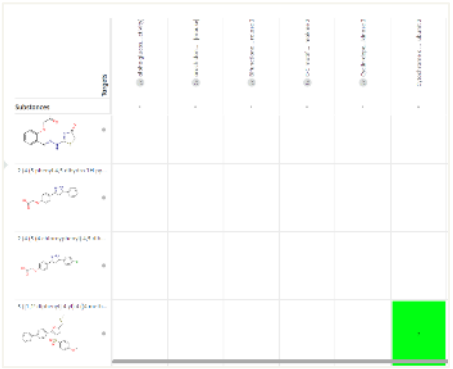
Reaxys 如何協助

- 提供完整的生物活性 (bioactivity) 資訊，以幫助建立已知的結構-活性關係 (Structure-Activity Relationships)、藥物代謝藥物動力學 (DMPK) 和吸收、分佈、代謝、排泄及毒性 (ADME-Tox) 特性
- 提供生物活性熱圖，使結構及其對各種靶標的生物活性值能快速高效地展示


Toxicity/Safety Pharmacology - 81

Quantitative Results

pX	Parameter	Value (quant)	Unit	Action on target	Target
8.11	IC50	7.7	nM		
8.11	IC50	7.8	nM		
8	IC50	10	nM	Inhibitor	Bcr-ABL p210 (T315A):Wild



活性化合物的設計與優化

任務

- 建立 Structure-Activity Relationships (SAR) 並辨認哪些結構特徵促進高活性和低活性
- 識別與化合物結構相似的化合物潛在非靶標活性
- 合理化並優化化合物系列的藥物代謝、藥物動力學和毒性特性

Reaxys 如何協助

- 提供完整的生物活性 (bioactivity) 資訊，以幫助建立已知的結構-活性關係 (Structure-Activity Relationships)、藥物代謝藥物動力學 (DMPK) 和吸收、分佈、代謝、排泄及毒性 (ADME-Tox) 特性
- 提供生物活性熱圖，使結構及其對各種靶標的生物活性值能快速高效地展示

49m
bioactivity data points

8.6m
substances with bioactivity data

44k
biological targets

6.6m
essays with additional insights

26k
cell lines from 102k species

藥物靶點檢索

Question:

如何快速地取得靶點訊息並評估結構活性分析?

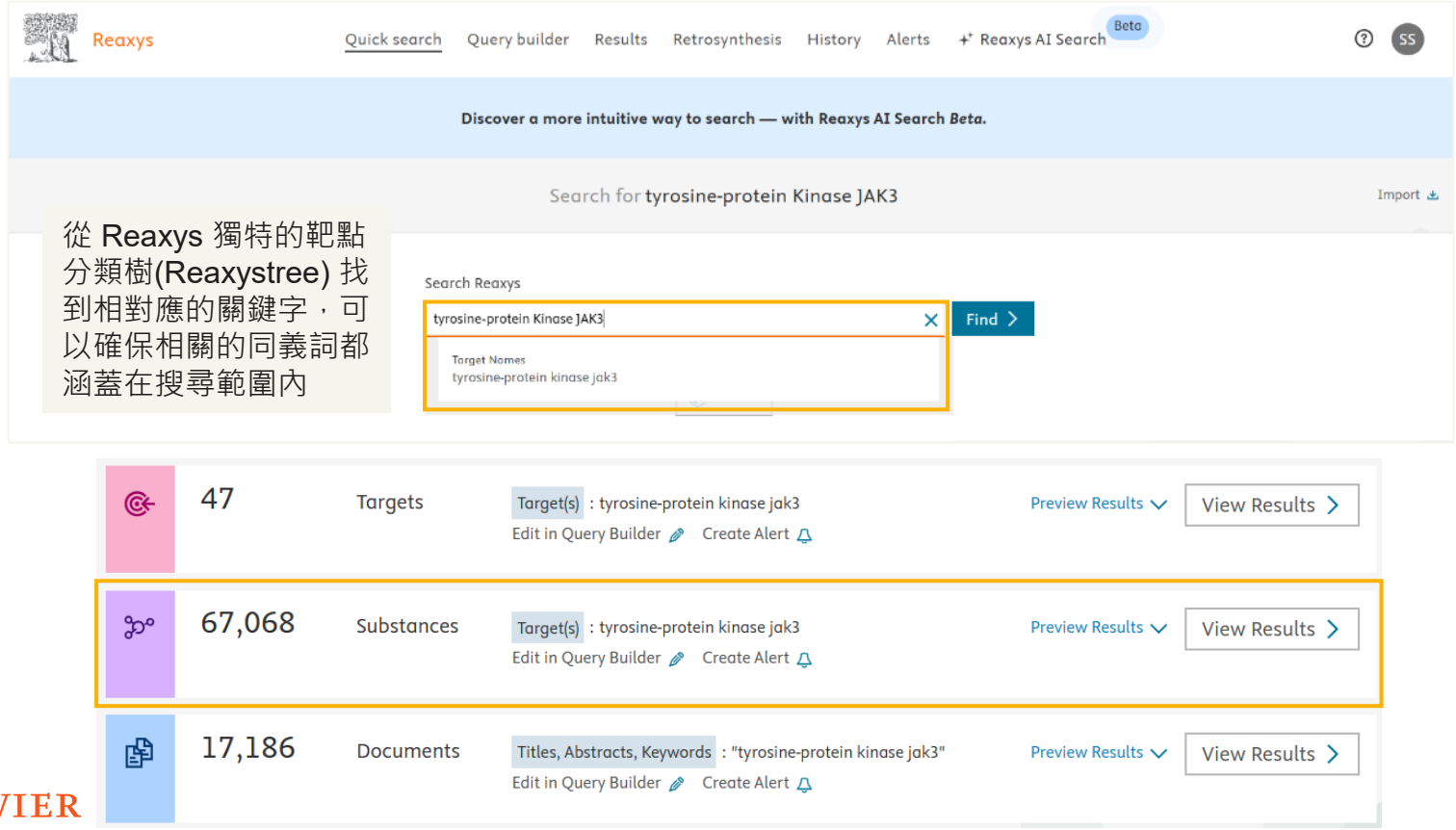
感興趣的靶點:

JAK3 (Tyrosine-protein Kinase JAK3)

與 JAK3 有 interaction 的 substances 有哪些?

結構特徵? 高活性的有那些?

藥物靶點檢索

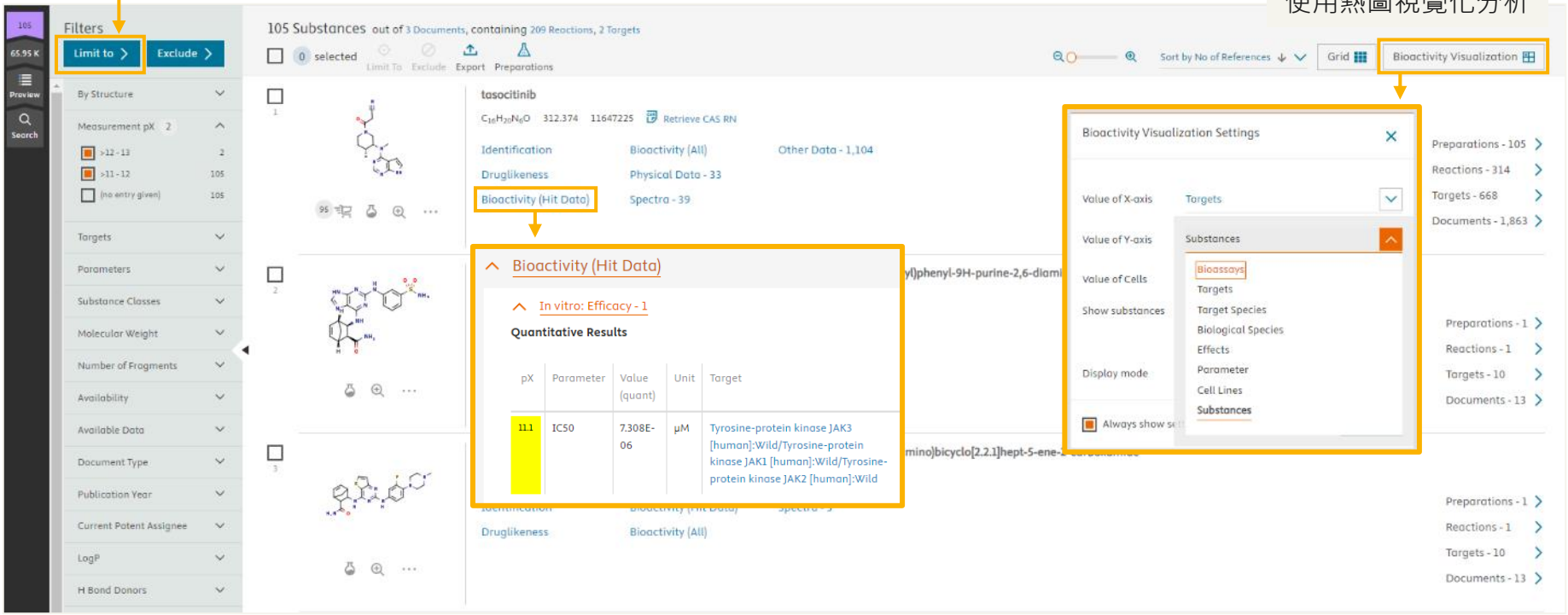


ELSEVIER

藥物靶點檢索

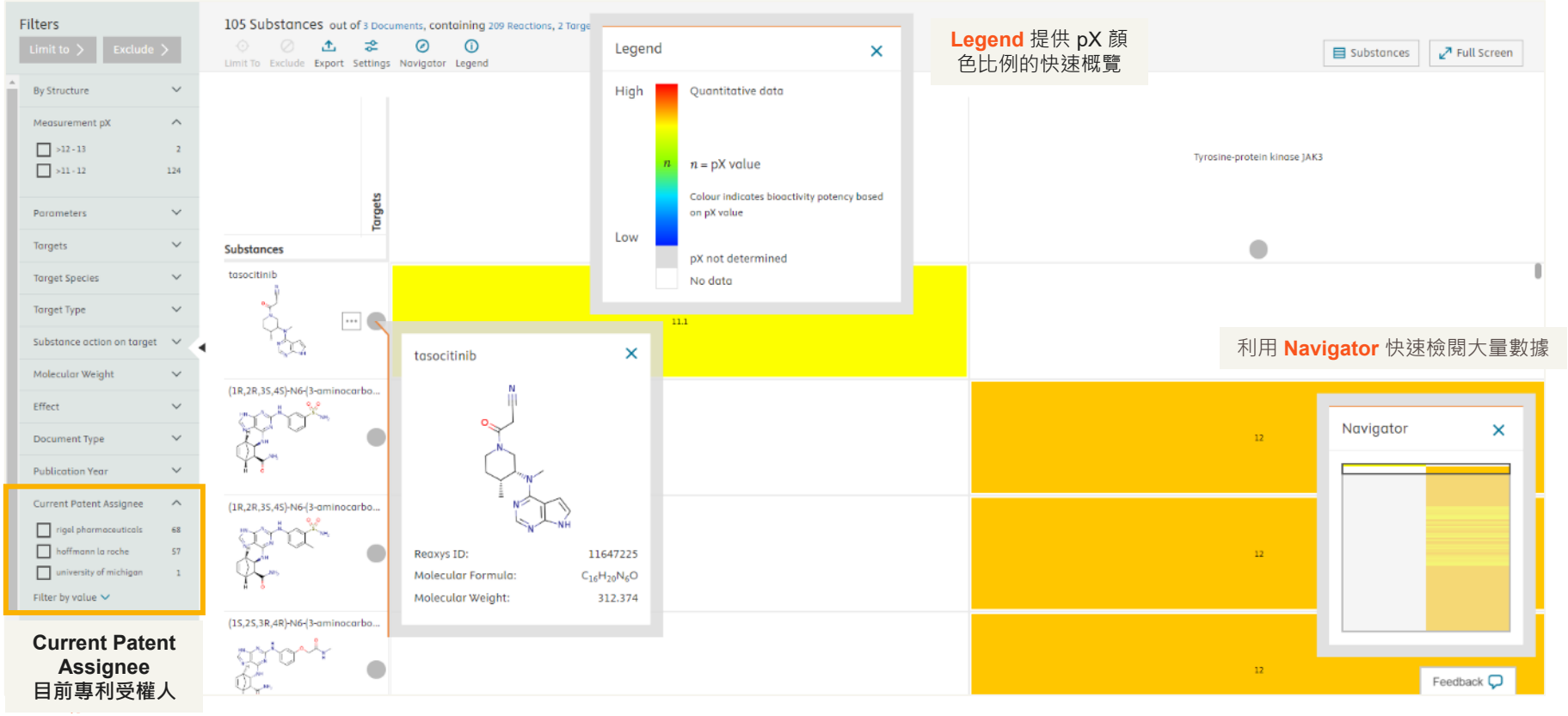
利用生物活性專屬的過濾工具

使用熱圖視覺化分析

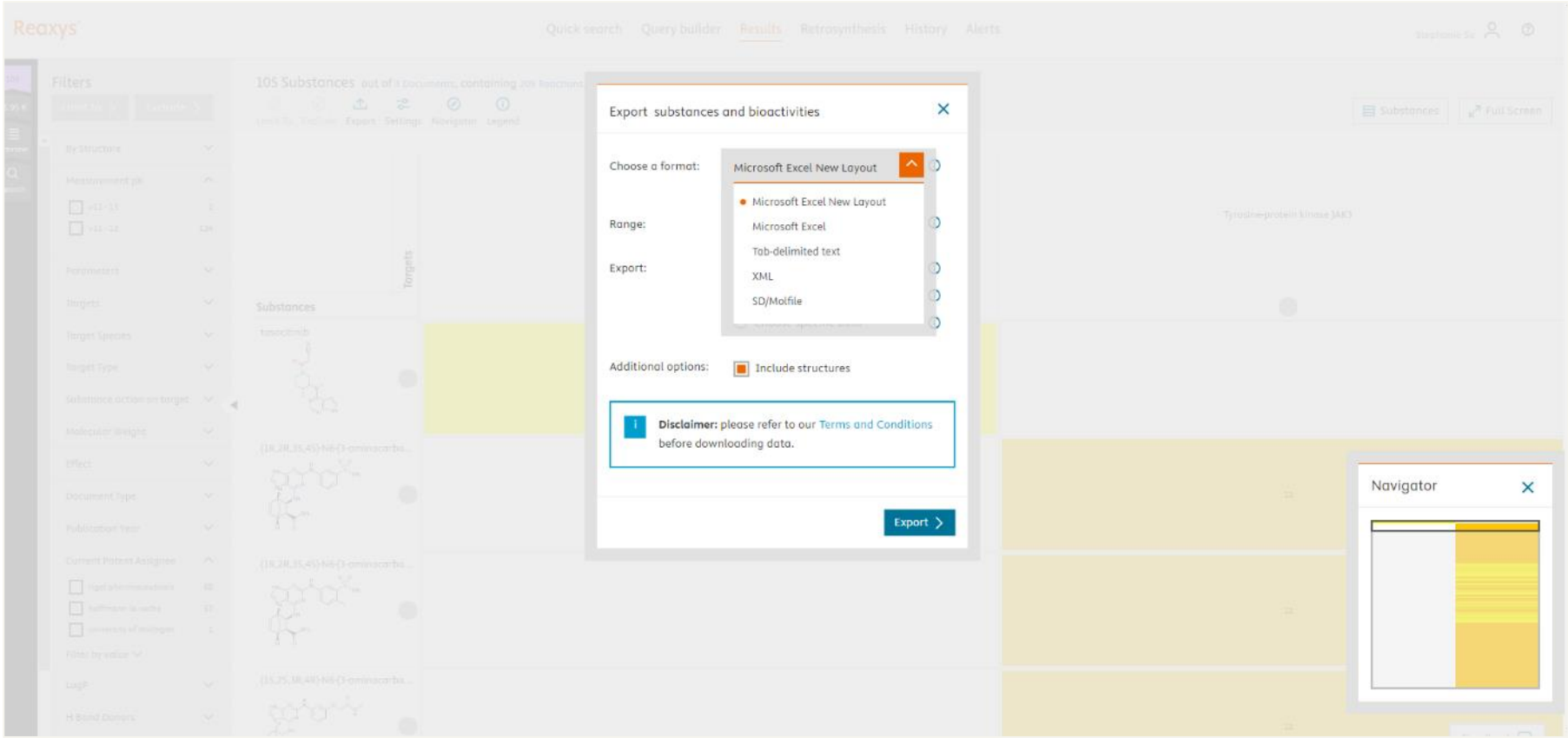


ELSEVIER

藥物靶點檢索: 使用熱圖視覺化分析



藥物靶點檢索: 匯出 SAR 資料做更多分析

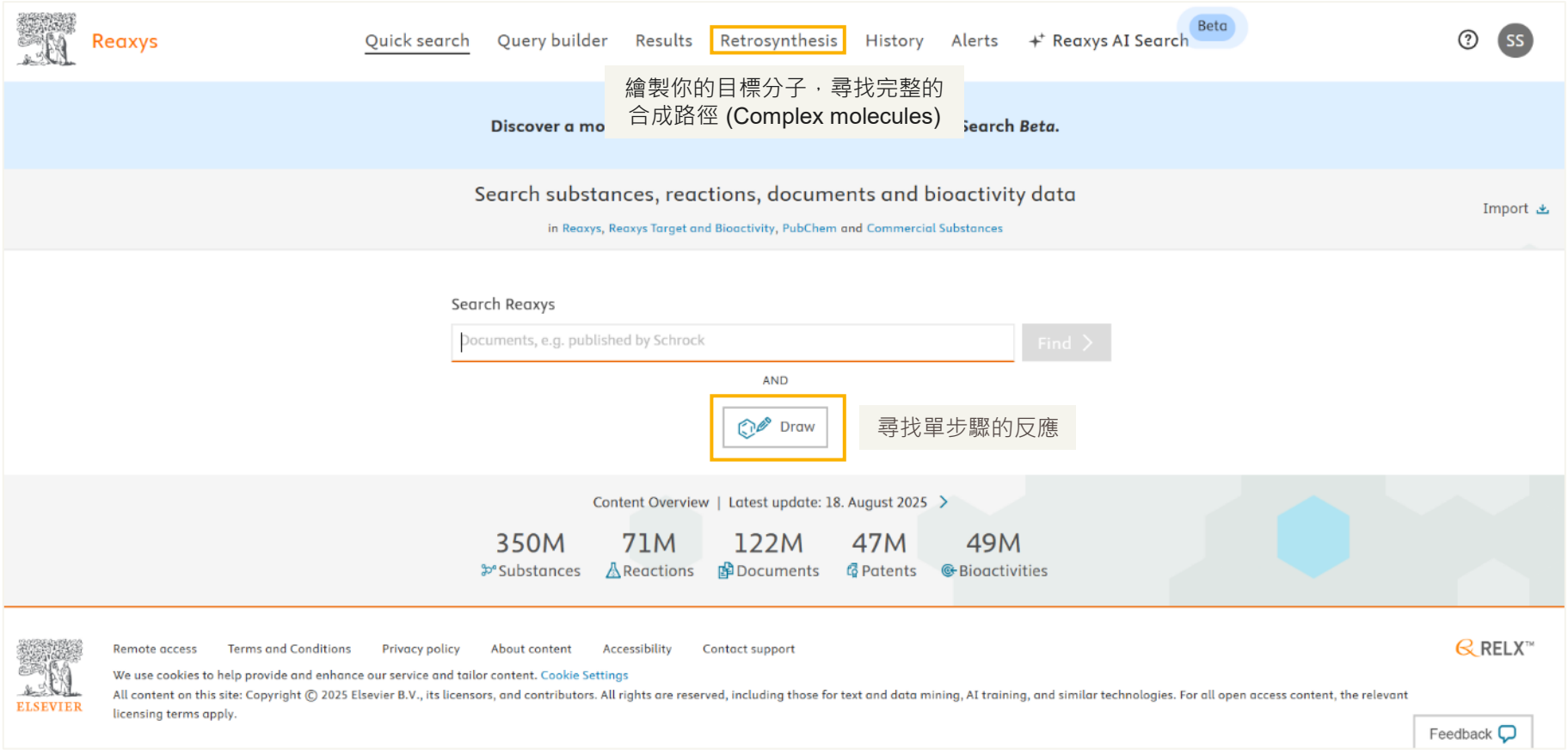


逆合成 AI 工具

Retrosynthesis AI

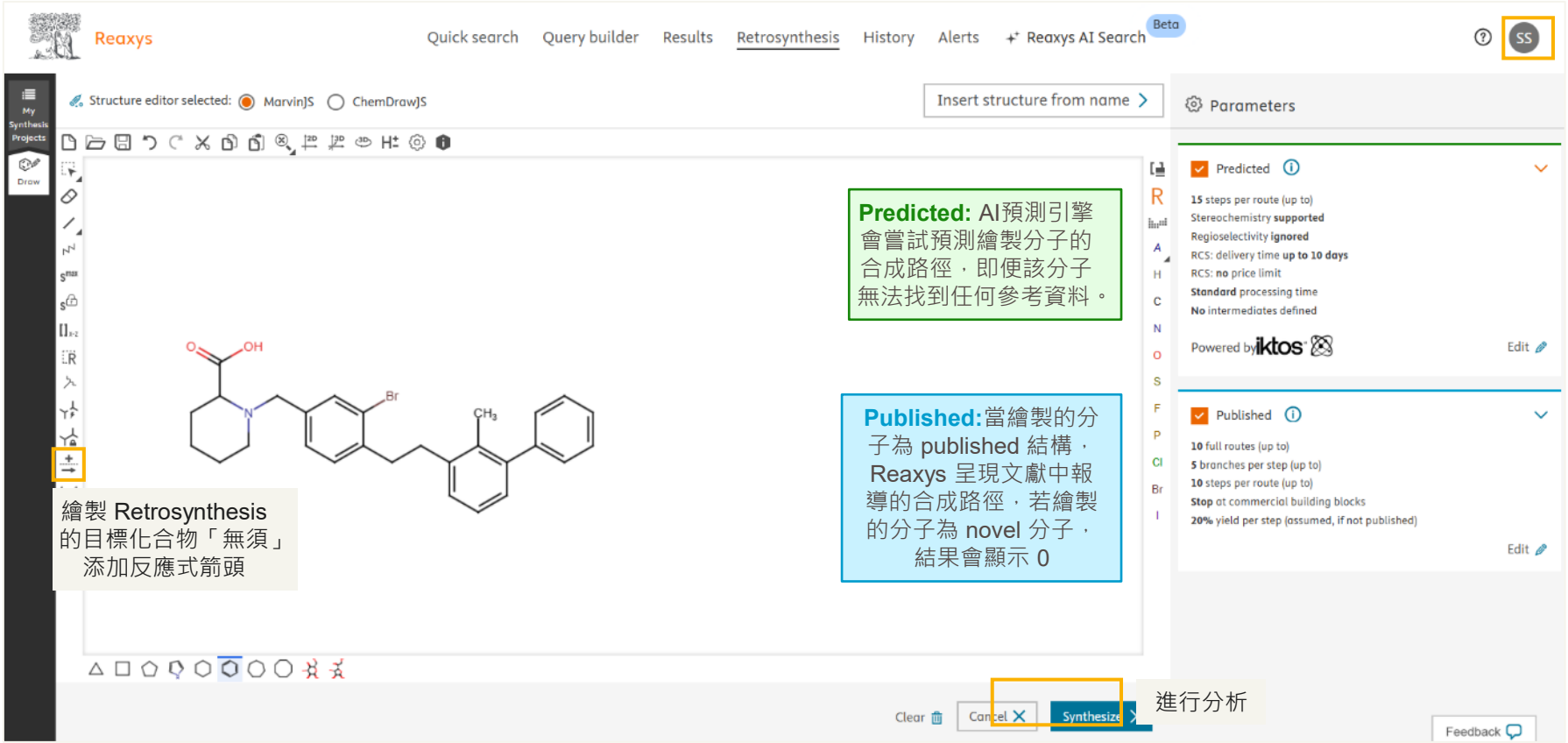
ELSEVIER

Retrosynthesis AI: 探索合成途徑



繪製目標化合物的結構

需登入個人帳號以開啟 AI Predicted 選項



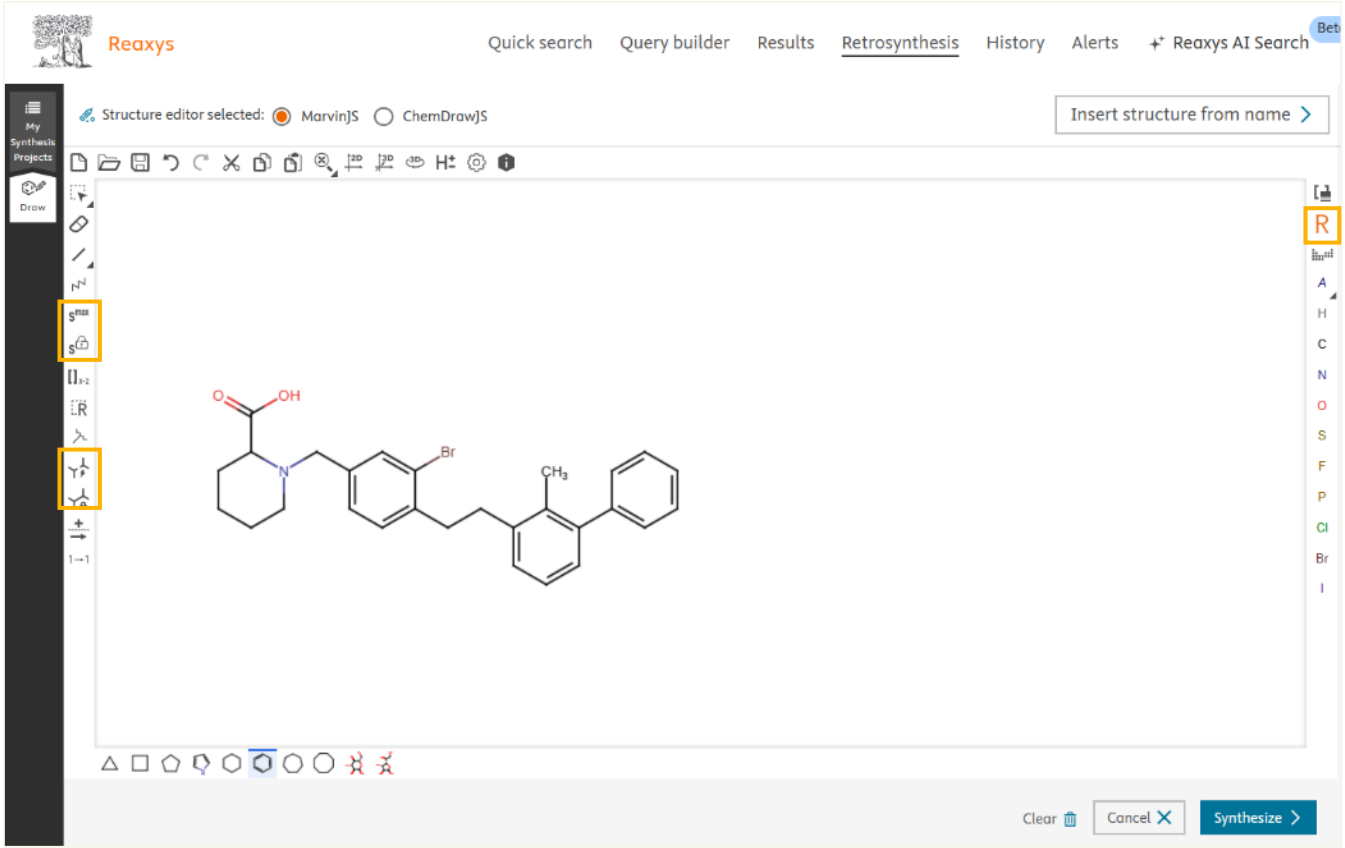
Predicted: AI預測引擎會嘗試預測繪製分子的合成路徑，即便該分子無法找到任何參考資料。

Published: 當繪製的分子為 published 結構，Reaxys 呈現文獻中報導的合成路徑，若繪製的分子為 novel 分子，結果會顯示 0

繪製 Retrosynthesis 的目標化合物「無須」添加反應式箭頭

進行分析

如何更精準地控制 AI 的合成規劃策略



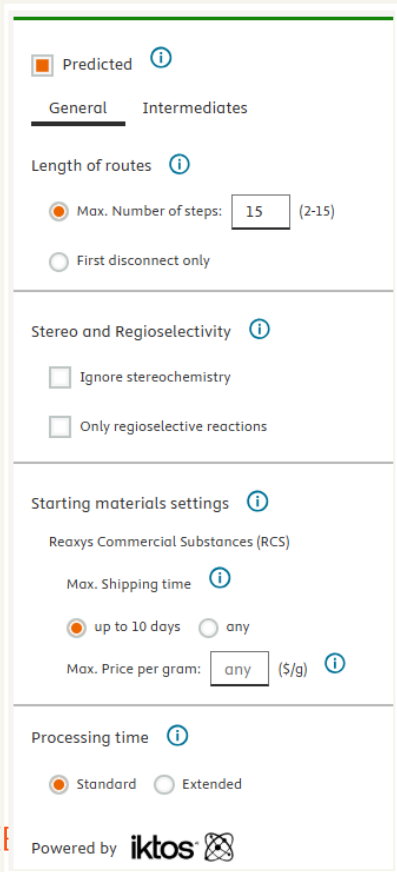
不使用 Atom lock 標記

目標分子需繪製完整，**不使用** Generics group，例用 “ALT” 來代表 Akyl group

Make/Break 工具: 每個目標分子可在一個鍵上標示 Make/Break，該鍵將被優先打斷，主導合成規劃策略

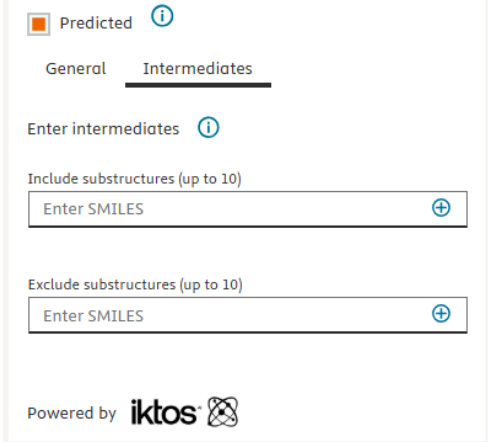
Protect (No change) 工具: 每個目標分子可有數個鍵標示Protect，該鍵將被保留於整個合成計畫，影響合成規劃策略

如何調整逆合成分析參數 Predicted



基本設定

- **Length of routes:**
  生成的路線的最大數目
- **Ignore stereochemistry:**
  忽視立體化學選擇性
- **Only regioselective reactions:**
  只選立體化學選擇性
- **Reaxys Commercial Substance:**
  合成材料最長運送時間
  合成材料價格上限
- **Processing time:**
  AI 計算時間 **(Standard** 約 **10** 分鐘)
  若分子較複雜 **Extended** 設置可長達 **30**分鐘，但有更高機會找出更多路徑



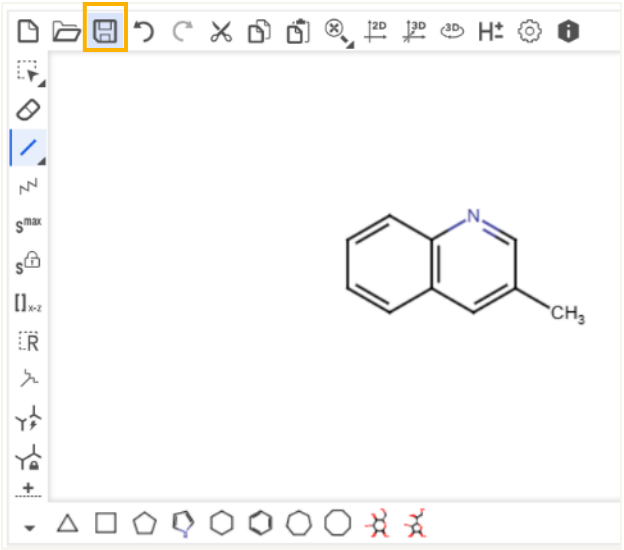
中間產物

- **Include substructures:** 可要求AI一定要採用某個化合物作為中間產物
- **Exclude substructures*:** 可要求AI避免某個化合物作為中間產物
  *(本功能需將結構預先轉換成 SMILES 格式，操作方法見下頁)

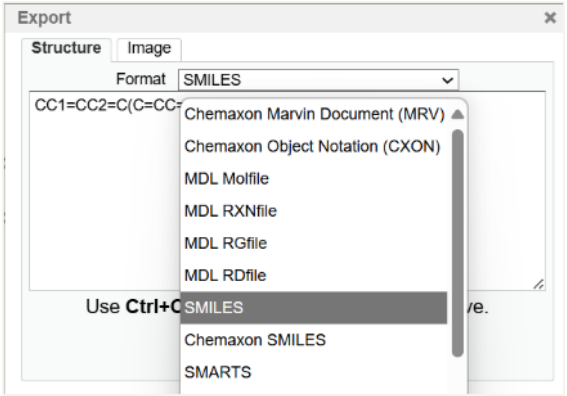
將中間產物結構轉為 SMILES 格式

1 用 Marvin JS 繪製想要轉換成 SMILES 的結構

2 點擊儲存

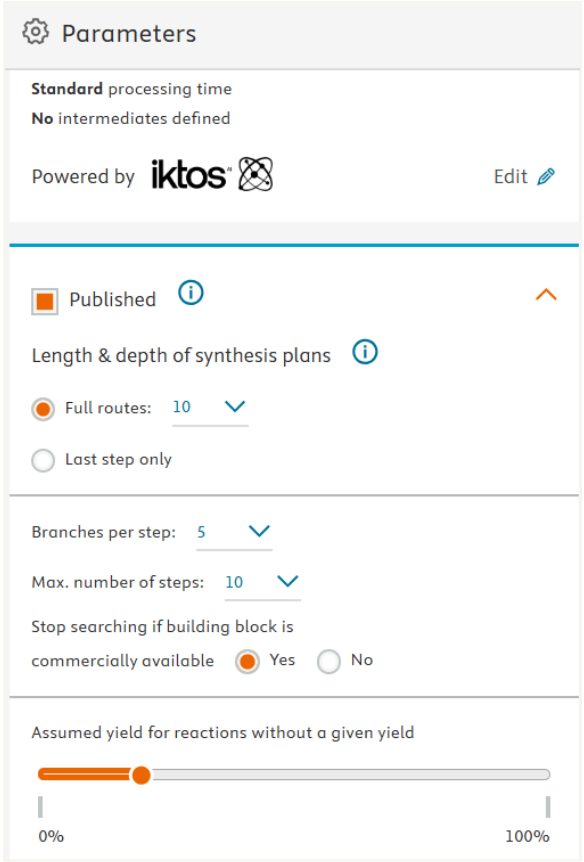


3 選擇 SMILES 格式



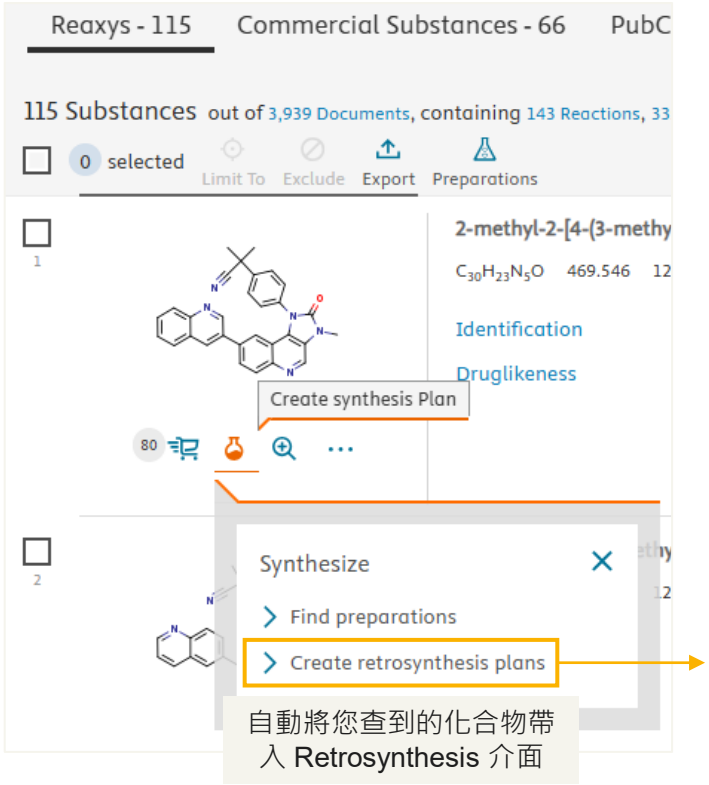
4 呈現的字串為SMILES格式，可反白複製

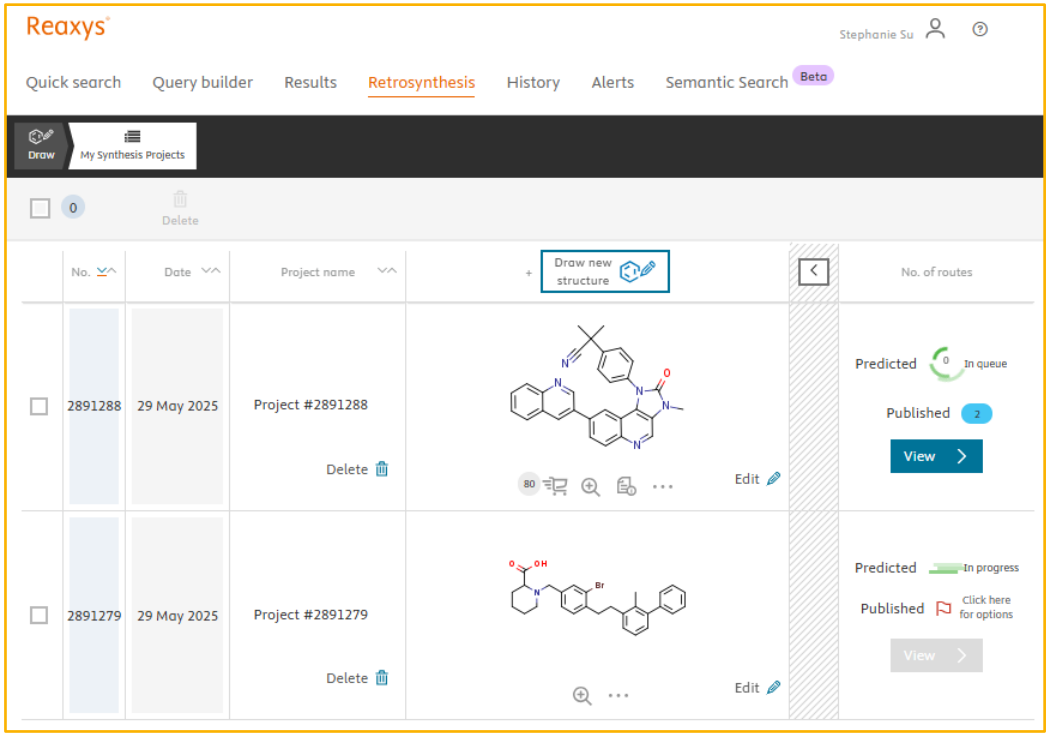
如何調整逆合成分析參數 Published



- **Length & depth of synthesis plans:** 生成的路線的最大數目
- **Branches per step:** 線上的最大分支數量
- **Max. number of step:** 最大的步驟數
- **Stop searching if building block is commercially available:** 當歸因於一種商業化的化合物 時將停止分析 →建議關閉（因為大分子有販售）
- **Assumed yield for reactions without a given yield:** 設定各反應的允許產量

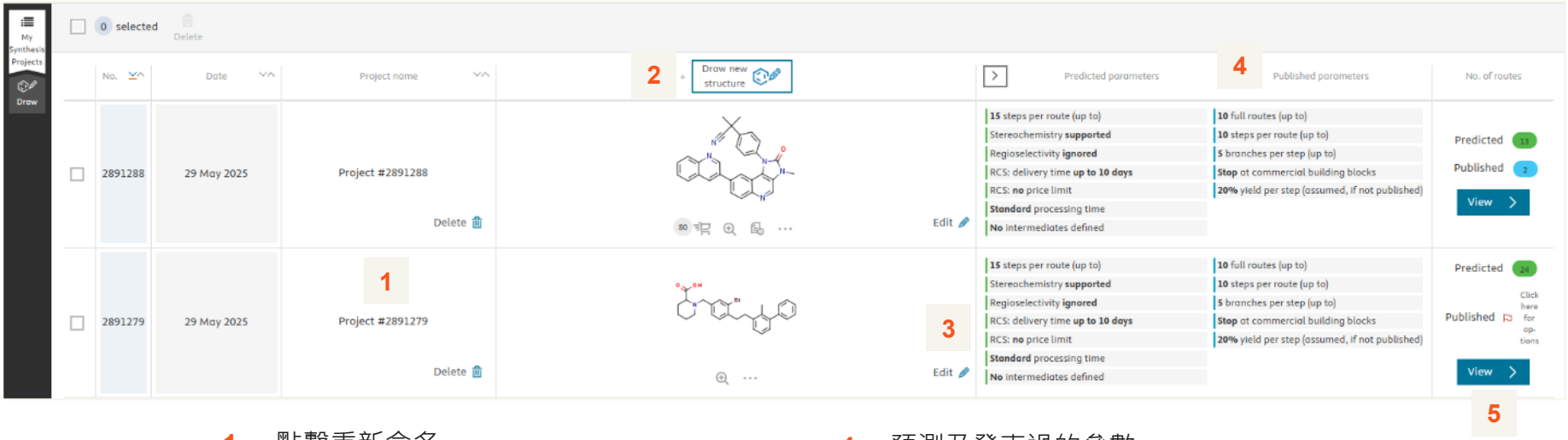
如何分析化合物搜尋結果中感興趣化合物的合成途徑





ELSEVIER

合成途徑開發的專案管理介面



1 點擊重新命名

2 創建並分析一個新的結構

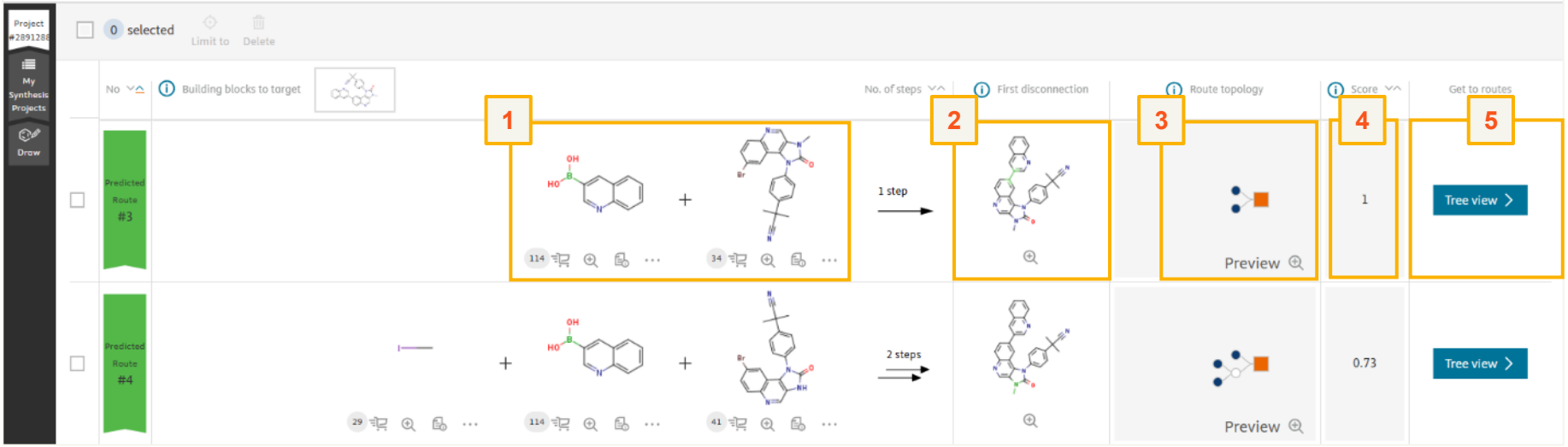
3 調整參數並重新分析或適度修改目標分子

4 預測及發表過的參數

5 確認路徑

ELSEVIER

生成合成路線清單界面



1 該合成路徑需要的起始原料與材料金額

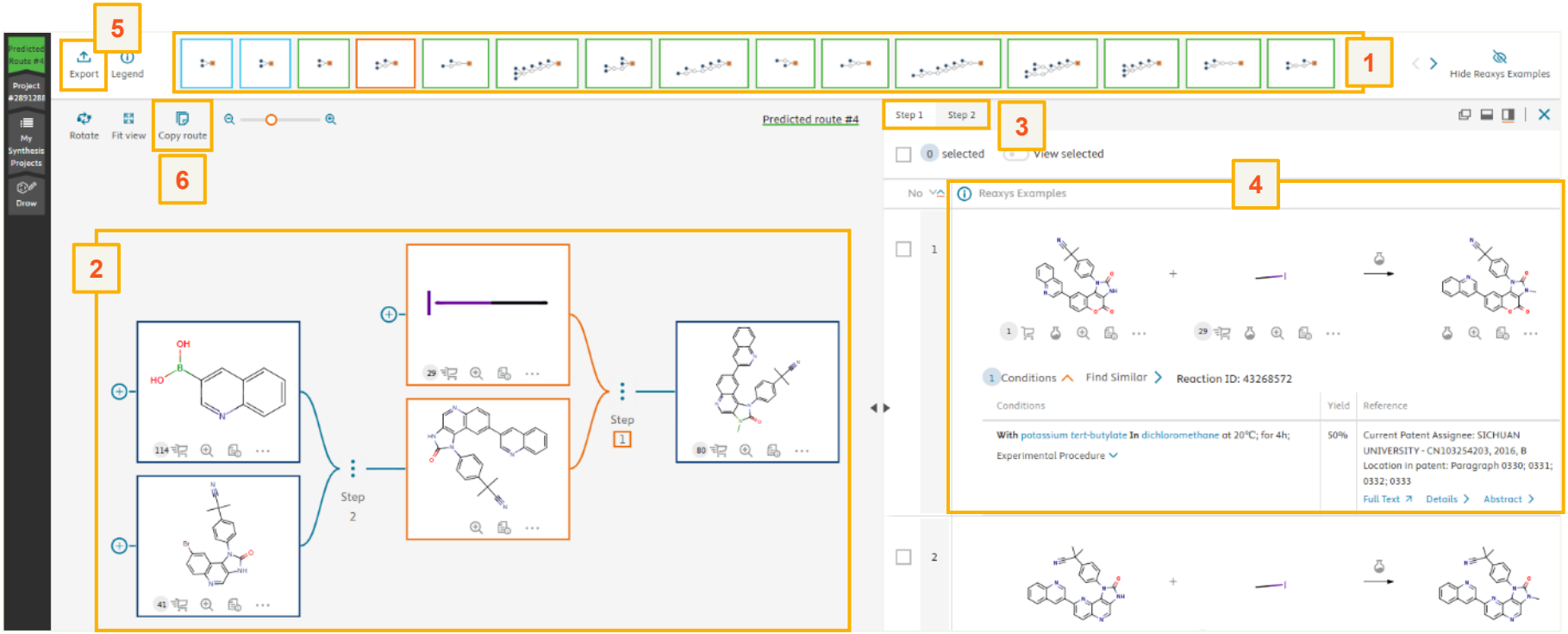
2 **First disconnection:** 第一個斷鍵位置

3 **Route topology:** 路徑長度與分支呈現，方便比較

4 **Confidence Score:** 評估該預測路徑的信賴度，從1分至0分。(1分很有可能，0分非常不可能)

5 **Get to routes:** 詳細路徑以樹狀路徑呈現

合成途徑的樹狀圖畫面



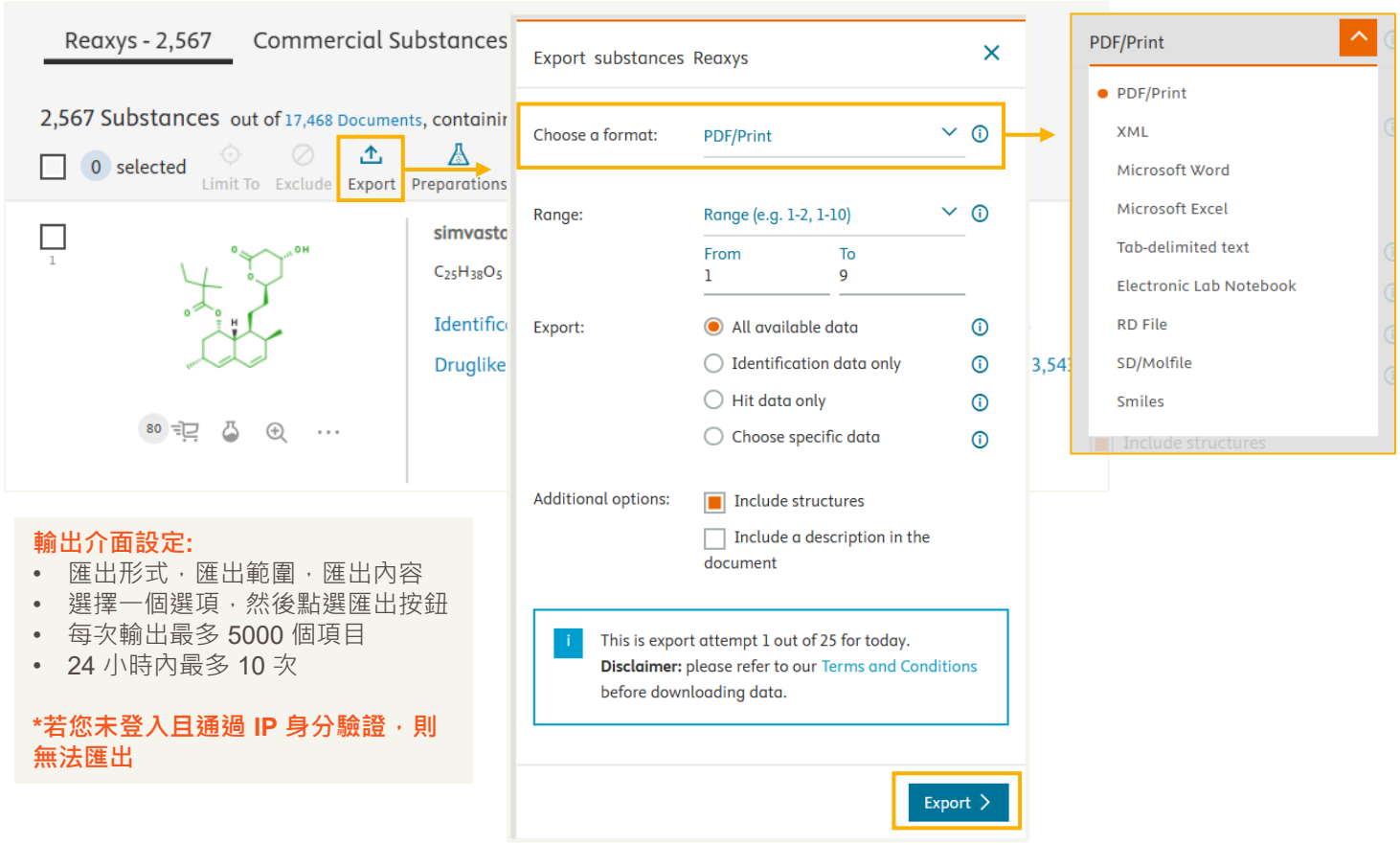
1. 切換至其他合成路徑
2. 預測路徑
3. 合成步驟切換
4. 相似反應的參考文獻
5. 匯出功能
6. 複製路徑可直接於 ChemDraw 貼上

ELSEVIER

個人化設定及管理

ELSEVIER

匯出搜尋結果



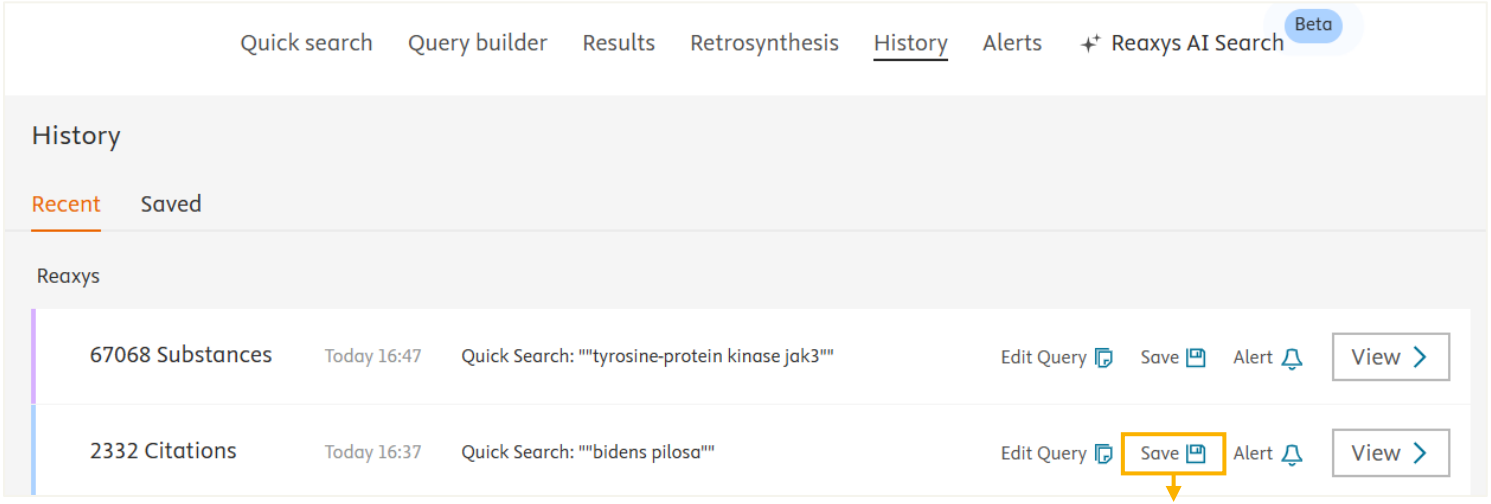
輸出介面設定:

- 匯出形式，匯出範圍，匯出內容
- 選擇一個選項，然後點選匯出按鈕
- 每次輸出最多 5000 個項目
- 24 小時內最多 10 次

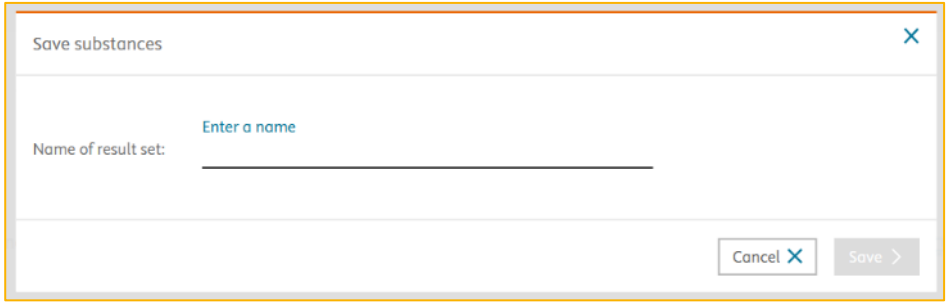
***若您未登入且通過 IP 身分驗證，則無法匯出**

ELSEVIER

儲存搜尋結果



可於 **History** 頁面查看
搜尋紀錄並設定儲存

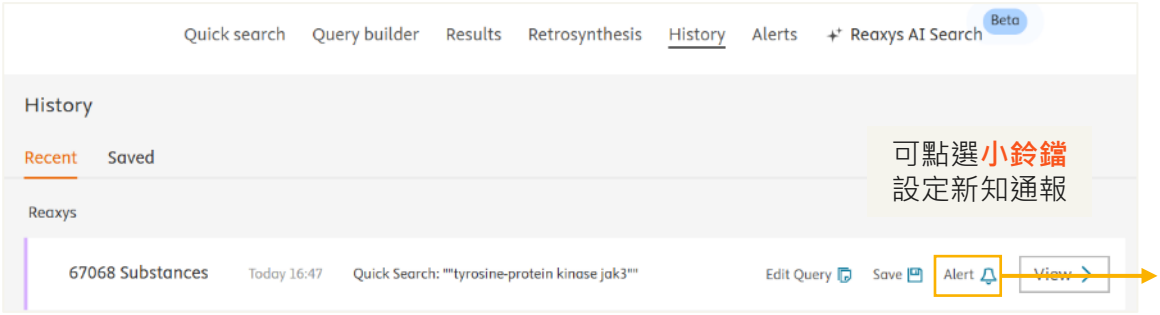


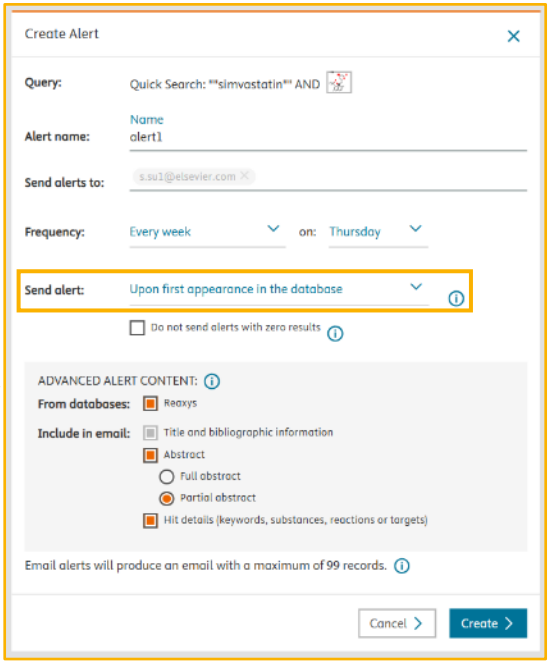
ELSEVIER

Alert: 設定新知通報

Alert 會儲存您的搜尋指令，資料會定期自動提供符合指令的搜尋結果

- 有助於當您想要在相同條件下檢查相關反應，物質和物理性質的資訊
- Alert 結果將會寄到註冊的電子郵件
- Alert 結果也可以分享給其他用戶

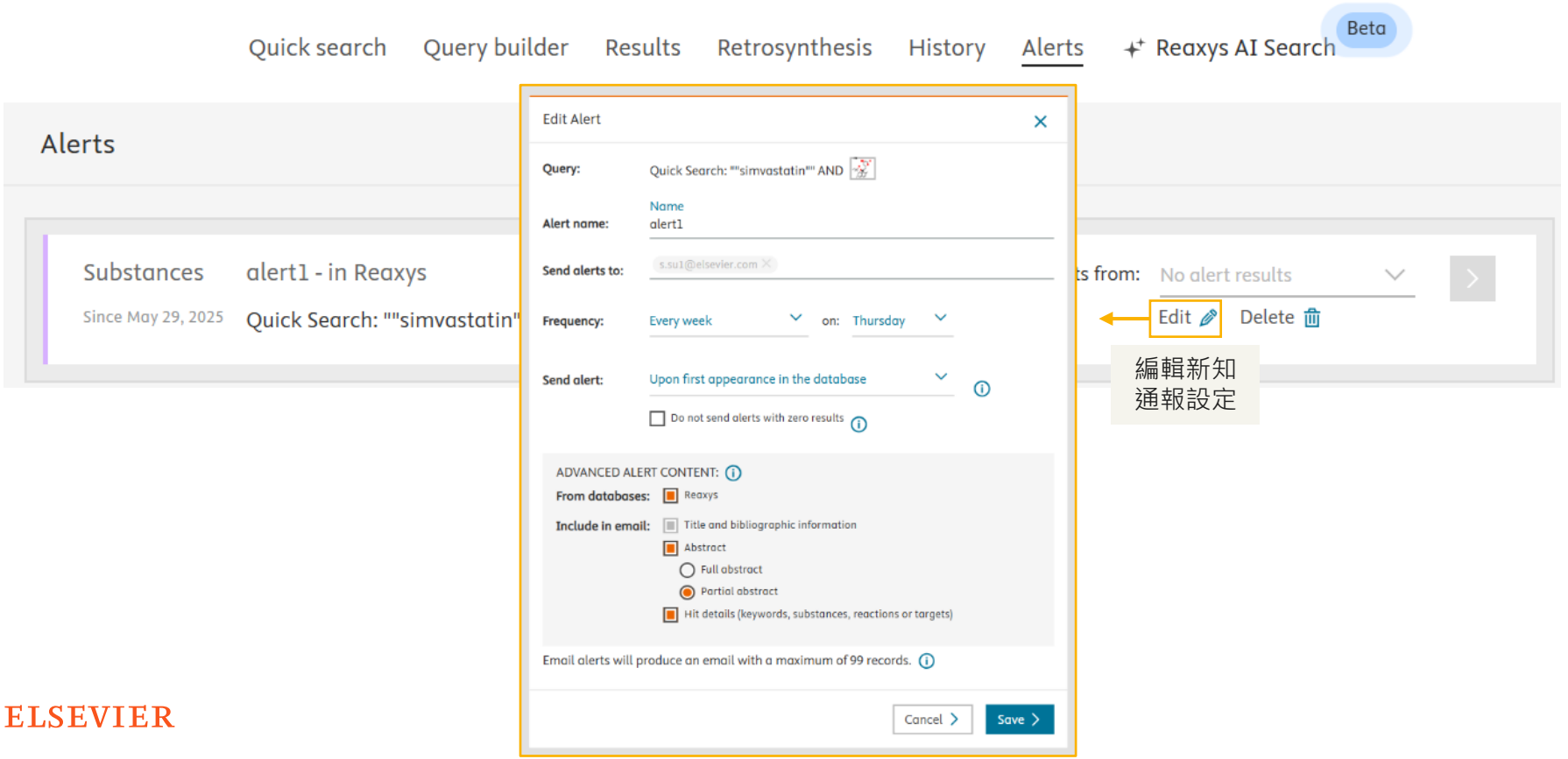




- 若選擇 **Send alert**，建議同時選擇 **After any update:** 每次當 Alert 目標進行屬性，反應或文獻更新時，Alert 都會通過電子郵件發送給使用者
- 若選擇 **Upon first appearance in the database**, 僅包括新化合物等情況下才會發送通知信件，因此，不會傳遞更新的消息

ELSEVIER

Alert: 管理新知通報



ELSEVIER

線上自我學習及用戶資源

ELSEVIER

Reaxys 學院: 線上學習與認證平台

Reaxys Academy

加入我們為學生和教育工作者提供的自訂進度線上化學培訓。了解如何使用 Reaxys 加深您對分析、有機和無機化學的理解。

Reaxys 101

預估完成時間：30-45 分鐘

這個自訂進度課程非常適合圖書館員、教育工作者、研究員和學生，可簡單了解 Reaxys，也能提升自己的技能和對研究平台 Reaxys 的理解。

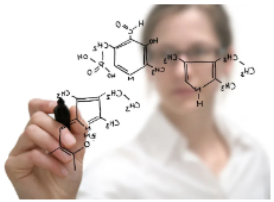
開始測驗

Reaxys 化學 101

預估完成時間：45-60 分鐘

這門自訂進度課程展示，Reaxys 能拓展各層級學生對於化學的了解，從大學生到研究生，甚或更高的層級。

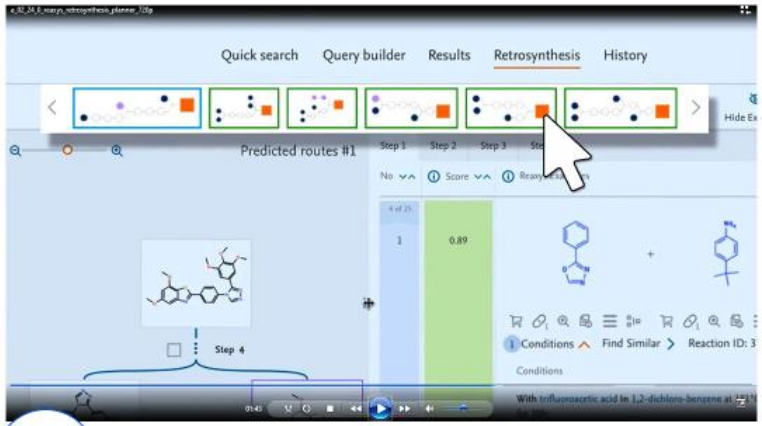
開始測驗



預測逆合成

Reaxys 預測逆合成加速逆合成分析和預測 (網址)

Get a video overview of Predictive Retrosynthesis



觀看 Reaxys 預測逆合成短片

過去，逆合成分析只能完全依靠化學家的專業知識和時間，但是，Reaxys 預測逆合成卻改變了這個模式，並贏得獎項。本產品將人工智慧應用於世界最大的化學反應資料庫，提供強大的預測路徑，從而增強你的知識水準。運用 Reaxys 預測逆合成，能以更快的速度，獲得更廣泛的分子答案。

用戶資源

線上講座

Big data in chemistry

- A universal approach to reaction informatics
- Understanding the history of chemical space through big data
- Reaction condition prediction using Reaxys: from raw data to best-in-class model
- Charting the chemical reaction space for DNA-encoded library design

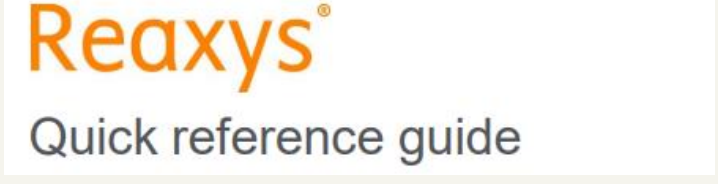
Reaxys Predictive Retrosynthesis

- Reaxys Predictive Retrosynthesis — speed matters
- AI-enabled predictive retrosynthesis tool to advance drug discovery
- Next generation synthesis planning using AI for chemists

線上資源

Chemistry & Bioactivity data factsheet

Reaxys Quick reference guide



Bioactivity Visualization

E

Reaxys 用戶資源

Reaxys 支援中心

Reaxys 用戶資源

用戶資源

使用連線須知

Reaxys 帳號登入機制會於 2025 年 7 月 1 日正式實施，未註冊用學校機構註冊帳號用戶將無法登入使用 Reaxys

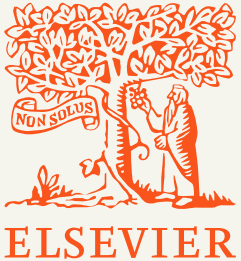
由於 RAE 允許使用者將自己的分子(目標分子)上傳進行 AI 預測，所得之 AI 預測結果(相應的合成計畫)會加密保存在使用者的 Reaxys 個人帳號內。是故能有更好的保護，同時避免非法授權者違法行為影響資料庫系統的穩定性，使用方式將採雙認證機制：

IP + 個人帳號登入 www.reaxys.com

個人帳號：

- 第一次使用者，請於單位IP範圍內，前往 www.reaxys.com，點選 **Register**，以學校機構的 **email** 申請。
- 若過往已於 Reaxys Basic Edition 或其他 Elsevier 資料庫 (ScienceDirect, Scopus, Embase, Engineering Village 等) 申請過帳號，但非以學校機構的 email 申請，則請循第一次使用者方式重新申請；若現有帳號已經是以學校機構的 email 申請，即可直接使用。

ELSEVIE



Advancing human progress together