

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。

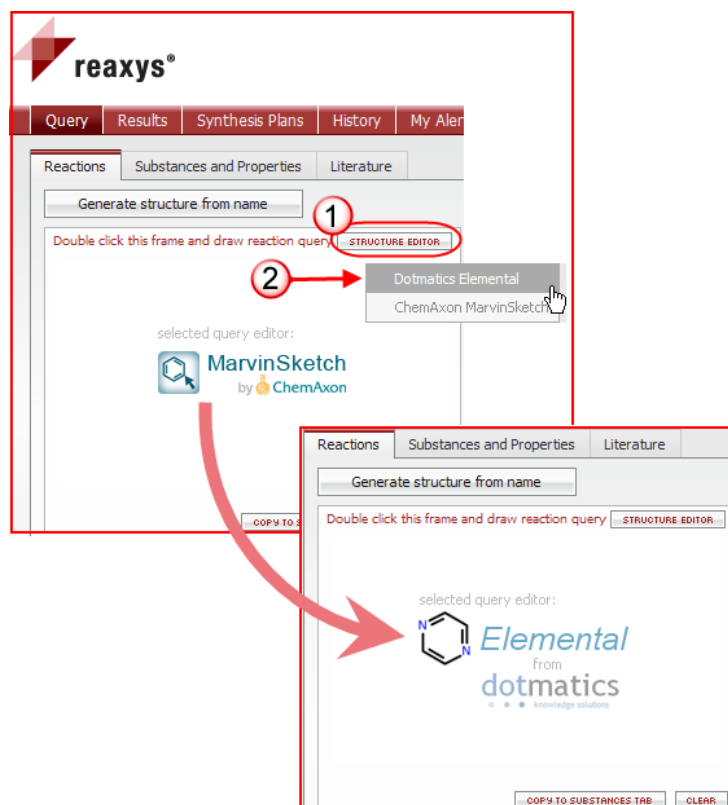
- 1. Java 不要の構造式描画ソフトの追加:**
Java 不要の構造式描画ソフト Elemental に新たに対応致しました。
- 2. 構造式検索機能の強化:**
Reaxys 検索エンジンが Coordinative bond の設定を認識できるようになりました。
- 3. 合成計画ツールの機能の追加:**
合成ルート上の化合物の合成法がない場合、類似構造を持つ化合物を表示し、その合成ルートを活用できるようになりました。

1. Java 不要の構造式描画ソフトの追加

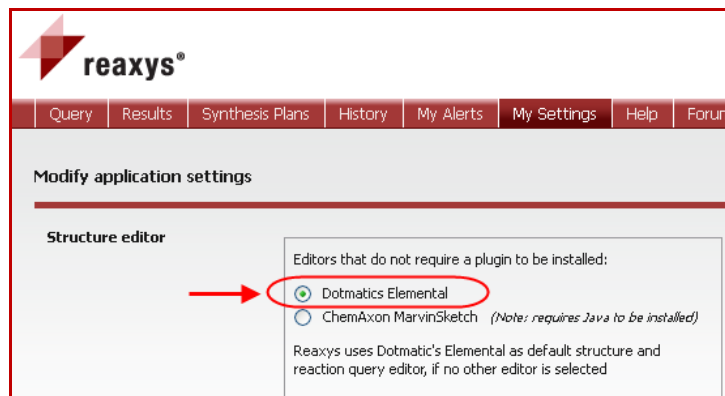
Java 不要の構造式描画ソフト Elemental に新たに対応致しました。
Java 必要な描画ソフトと比べ、Elemental の起動スピードは速くなっておりませんが、現時点では一部機能に未対応となっております。

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

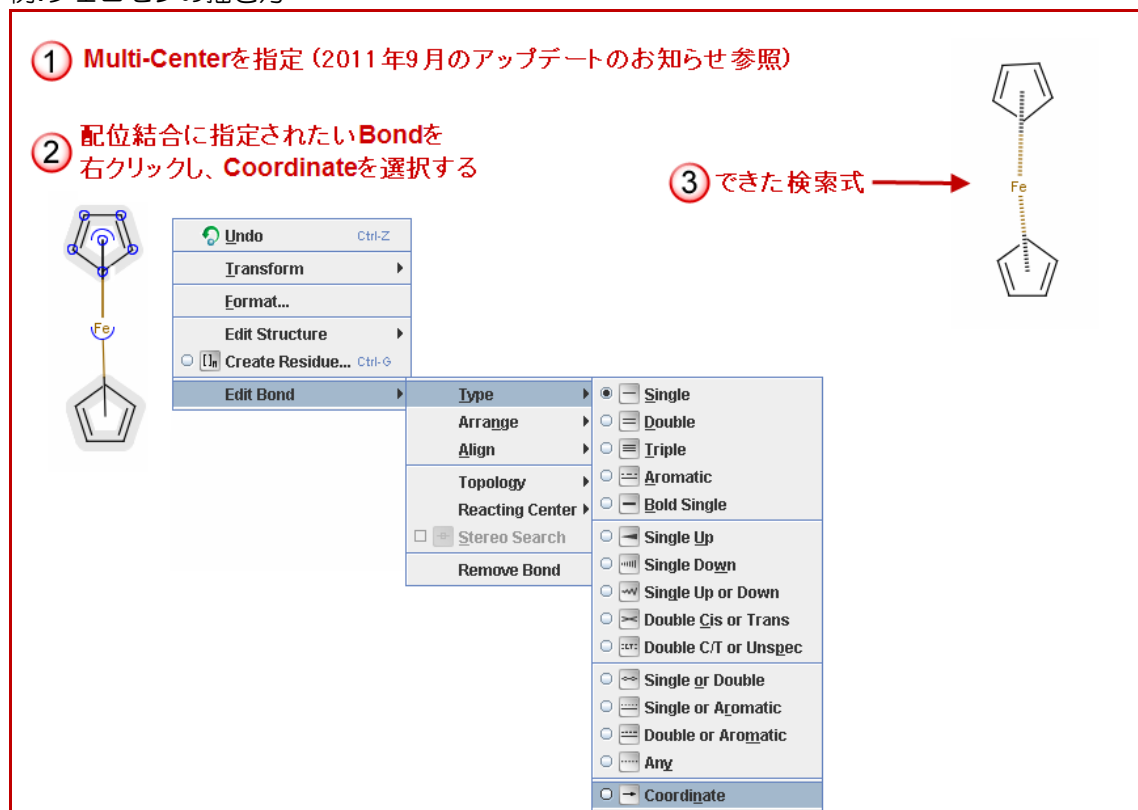
Reaxys 検索エンジンが Coordinative bond の設定を認識できるようになりました。

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

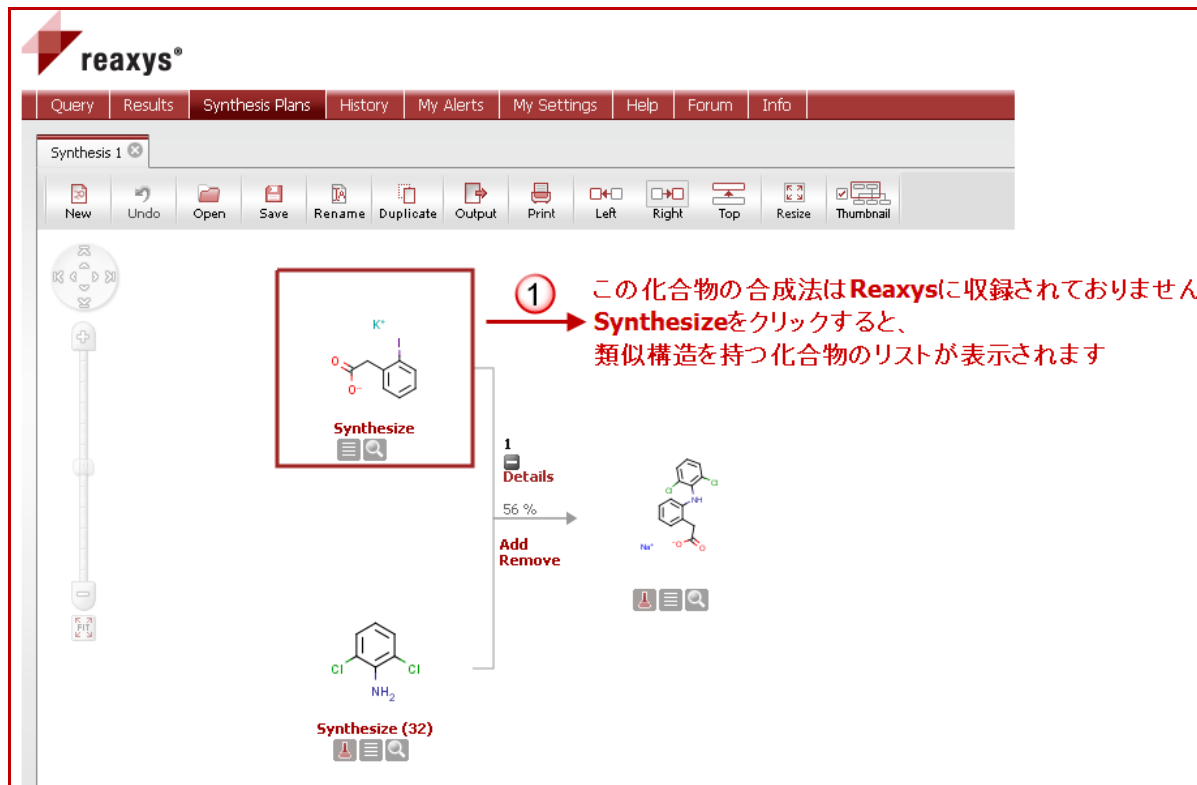
③ できた検索式 →



Menu Item	Sub-Item	Selected
Edit Bond	Type	Single
	Arrange	Double
	Align	Triple
	Topology	Aromatic
Reacting Center	Bold Single	
	Stereo Search	
Remove Bond	Single Up	
	Single Down	
	Single Up or Down	
	Double Cis or Trans	
	Double C/T or Unspec	
	Single or Double	
	Single or Aromatic	
	Double or Aromatic	
	Any	
	Coordinate	

3. 合成計画ツールの機能の追加:

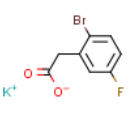
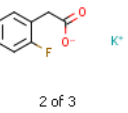
合成ルート上の化合物の合成法がない場合、類似構造を持つ化合物を表示し、その合成ルートを活用できるようになりました。



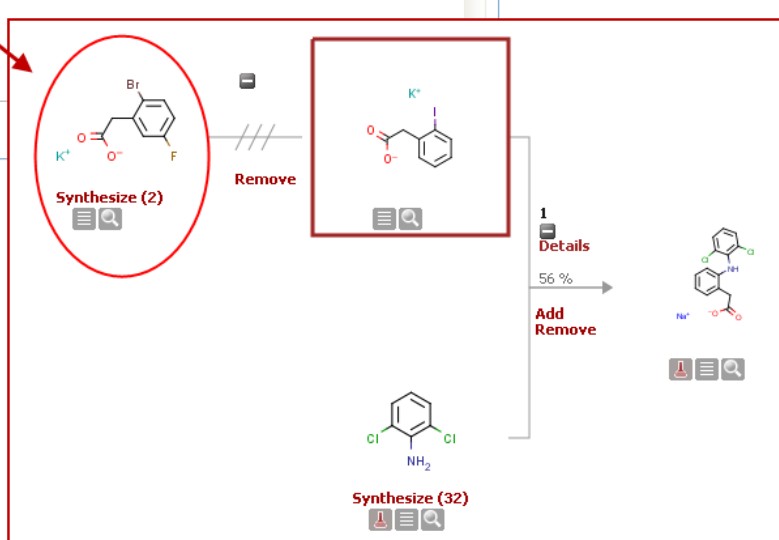
The screenshot displays the Reaxys software interface. At the top, there is a navigation menu with options: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, Forum, and Info. Below this is a toolbar with icons for New, Undo, Open, Save, Rename, Duplicate, Output, Print, Left, Right, Top, Resize, and Thumbnail. The main workspace shows a synthesis plan for 'Synthesis 1'. A red box highlights a compound in the plan, with a red arrow pointing to it from a text box. The text box contains the following text: **①** この化合物の合成法は **Reaxys** に収録されていません **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 'Synthesize' button. To the right, a list of similar compounds is shown, with the first one having a '1' next to it and a 'Details' button. Below the list, there are 'Add' and 'Remove' buttons. At the bottom left, another compound is shown with a 'Synthesize (32)' button.

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