

Краткая инструкция по работе с базой данных Reaxys

1	Начало работы
2	Домашняя страница
3	Персональные настройки
4	Генерация структуры из названия
5	Запрос по реакциям – закладка Reactions
6	Запрос по реакциям – дополнительные условия поиска
7	Результаты поиска по реакциям – общий вид
8	Результаты поиска по реакциям – закладка Reactions
9	Результаты поиска по реакциям – фильтрация
10	Планирование синтеза
11	Вывод результатов
12	История
13	Запрос по веществам и свойствам – закладка Substances and Properties
14	Запрос по веществам и свойствам – дополнительные условия поиска
15	Вещества и свойства – просмотр результатов
16	Результаты поиска по веществам и свойствам – вывод в виде таблицы
17	Результаты поиска по веществам и свойствам – вывод в виде сетки
18	Поиск библиографической информации – закладка Text, authors and more
19	Результаты поиска библиографической информации – закладка Citations

Начало работы

Для запуска **Reaxys**: www.reaxys.com

Дополнительная информация по работе с **Reaxys**: www.info.reaxys.com, в том числе:

- Охват, применение и технические требования
- Регистрационная форма для получения **Reaxys Newsletter**
- Пользовательская поддержка:
 - Расписание Web-семинаров – регулярные обучающие сеансы – и регистрационная форма для них
 - Часто задаваемые вопросы (FAQ)
 - Программное обеспечение (плагины и структурные редакторы) и документация (учебные материалы)
 - Контактная информация:

Европа, Ближний Восток, Азия и Африка

+49-69-5050 4268

nlinfo@reaxys.com

Америка

+1 888 615 4500

usinfo@reaxys.com

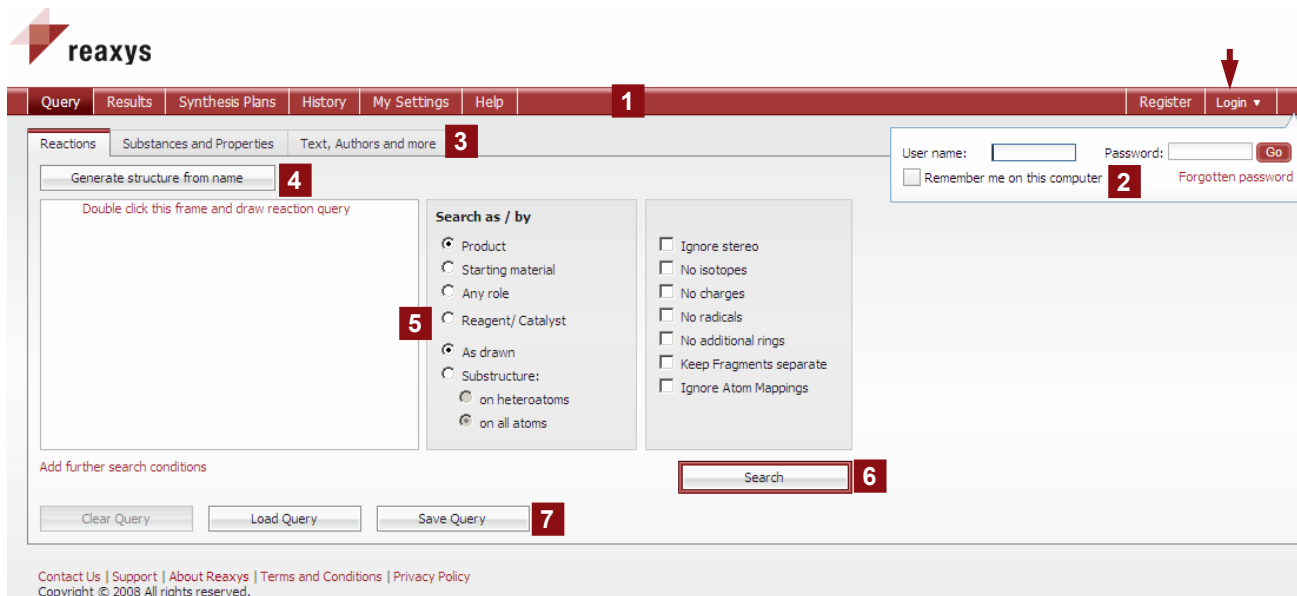
+1 212 462 1978 при звонке извне США и Канады

Япония

+81 3 5561 5034

jpinfo@reaxys.com

Домашняя страница



The screenshot shows the Reaxys home page interface. A red navigation bar at the top contains links for Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings, Help, Register, and Login. Below this is a main content area with several sections:

- 1**: The main navigation bar.
- 2**: A login box with fields for 'User name', 'Password', and a 'Go' button, along with a 'Remember me on this computer' checkbox and a 'Forgotten password' link.
- 3**: A set of tabs for 'Reactions', 'Substances and Properties', and 'Text, Authors and more'.
- 4**: A 'Generate structure from name' input field.
- 5**: A 'Search as / by' section with radio buttons for 'Product', 'Starting material', 'Any role', 'Reagent/ Catalyst', 'As drawn', and 'Substructure: on heteroatoms' or 'on all atoms'. There are also checkboxes for 'Ignore stereo', 'No isotopes', 'No charges', 'No radicals', 'No additional rings', 'Keep Fragments separate', and 'Ignore Atom Mappings'.
- 6**: A 'Search' button.
- 7**: A row of buttons for 'Clear Query', 'Load Query', and 'Save Query'.

At the bottom of the page, there is a footer with links for 'Contact Us', 'Support', 'About Reaxys', 'Terms and Conditions', and 'Privacy Policy', along with a copyright notice: 'Copyright © 2008 All rights reserved.'.

1 Основная навигационная панель: Содержит следующие опции

- Query: Запрос
- Results: Результаты поиска
- Synthesis Plans: Планы синтеза
- History: История
- My Settings: Персональные настройки
- Help: Помощь
- Register: Регистрация
- Login: Вход в систему

2 Вход в систему Ввод имени пользователя и пароля

3 Закладки для запросов – по реакциям – по веществам и свойствам – по тексту, авторам и другим полям

4 Генерация структуры из названия Трансформация химического названия в структуру

5 Окно Структура / Реакция Окно ввода структуры или реакции с дополнительными поисковыми возможностями

6 Клавиша поиска Search Запуск поиска

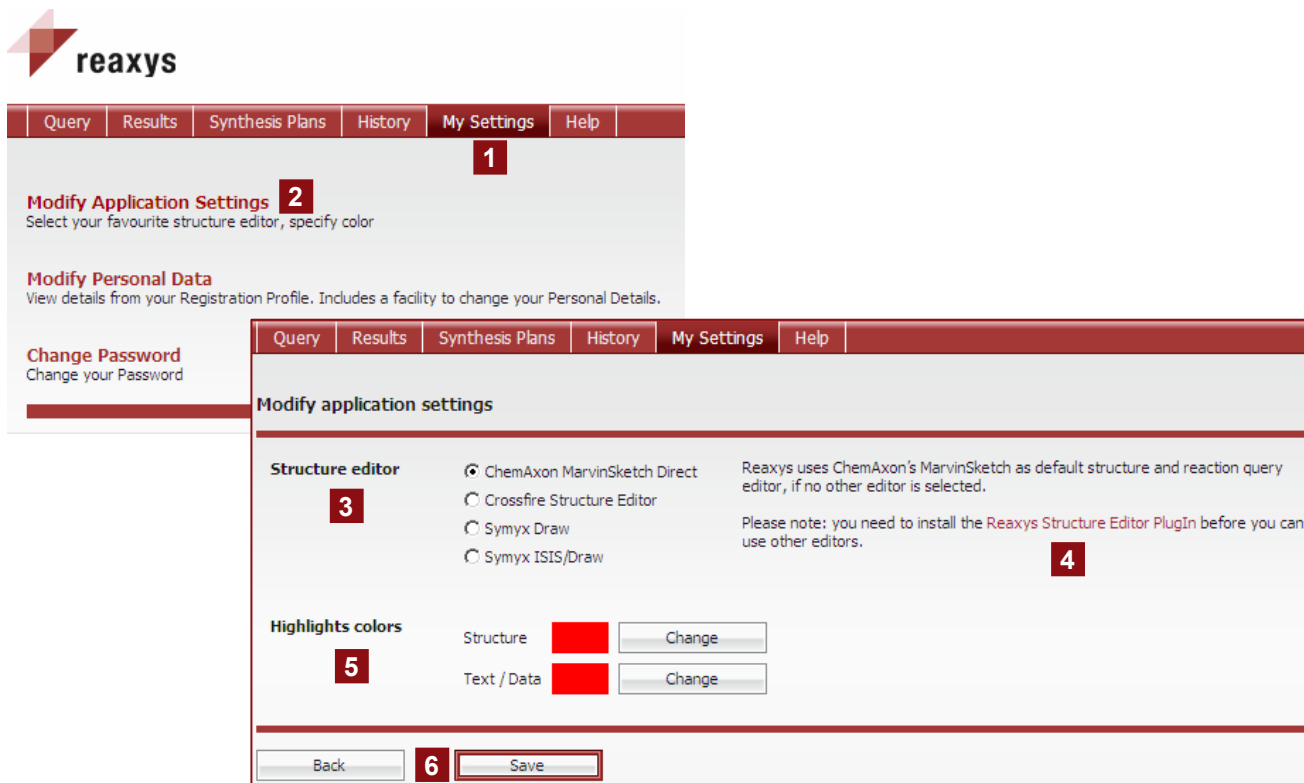
7 Командные клавиши Очистить окно запроса – Clear Загрузить запрос – Load Сохранить запрос – Save

Как найти получение вещества?

1. Выберите из закладок (3) опцию Reactions и дважды щелкните в окне (5)
2. Нарисуйте структуру нужного вещества в предпочитаемом редакторе. Закрыв редактор, Вы вернетесь в Reaxys (окно 5)
3. Щелкните клавишу Search (6) для запуска поиска и просмотра результатов

Примечание: исходные установки Reaxys таковы, что программа начинается с поиска способов получения вещества.

Персональные настройки



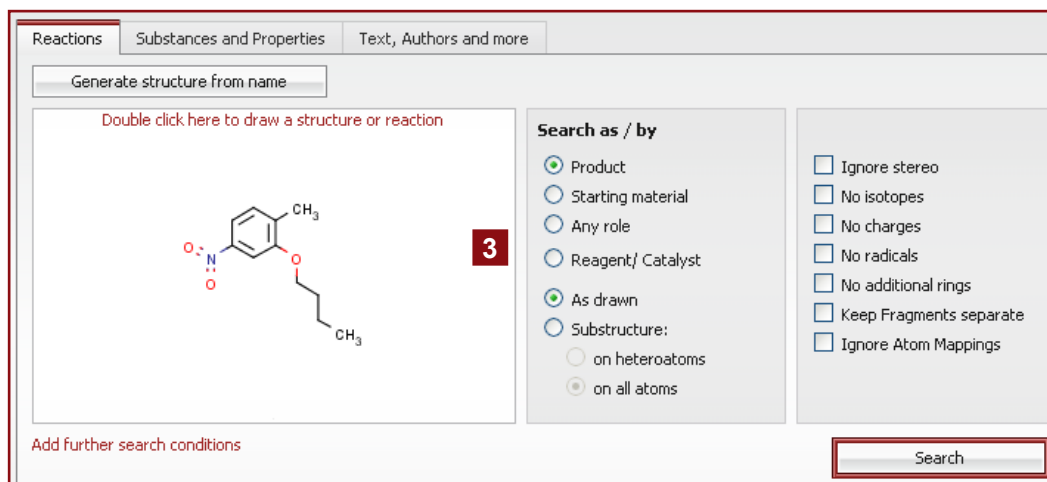
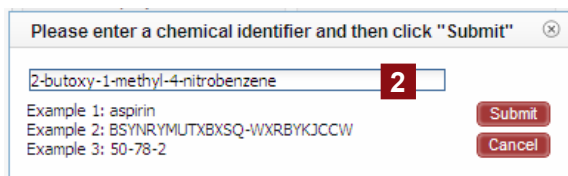
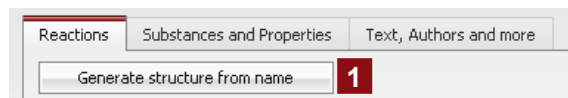
The screenshot shows the 'My Settings' page in the Reaxys application. The page has a navigation bar with tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings (selected), and Help. The main content area is titled 'Modify application settings' and contains several sections:

- Modify Application Settings** (2): Select your favourite structure editor, specify color.
- Modify Personal Data**: View details from your Registration Profile. Includes a facility to change your Personal Details.
- Change Password**: Change your Password.
- Structure editor** (3): A list of radio buttons for selecting a structure editor: ChemAxon MarvinSketch Direct (selected), Crossfire Structure Editor, Symyx Draw, and Symyx ISIS/Draw (4). A note states: 'Reaxys uses ChemAxon's MarvinSketch as default structure and reaction query editor, if no other editor is selected. Please note: you need to install the Reaxys Structure Editor PlugIn before you can use other editors.'
- Highlights colors** (5): Two rows for selecting colors for 'Structure' and 'Text / Data', each with a 'Change' button.
- Buttons** (6): 'Back' and 'Save' buttons at the bottom.

Примечание: щелкните клавишу Save и на экране появится подтверждение, что установки обновлены. Новые установки будут действовать при последующем входе в систему.

- 1 Персональные настройки**
Используйте опцию *My settings* для:
 - изменения настроек
 - изменения персональных данных
 - изменения пароля
- 2 Изменение настроек**
Используйте опцию *Modify application settings* для задания предпочитаемого структурного редактора, цвета структуры и текстовых данных
- 3 Структурный редактор**
Выбор предпочитаемого редактора
- 4 Информация**
об используемом по умолчанию структурном редакторе; о плагине, требуемом для инсталляции других редакторов
- 5 Выбор цвета**
для искоемых структур и / или текста / данных
- 6 Возврат и сохранение**
Подтверждение новых настроек – *Save*.
Для возврата к списку настроек – *Back*

Генерация структуры из названия



Опция доступна для запросов по реакциям и веществам / свойствам

1

Генерация структуры из названия

Щелкните эту клавишу, чтобы открыть поле ввода

2

Поле ввода

Ввод систематического или тривиального химического названия, регистрационного номера CAS, или ключа InChI. Для генерации структуры - клавиша **Submit**

3

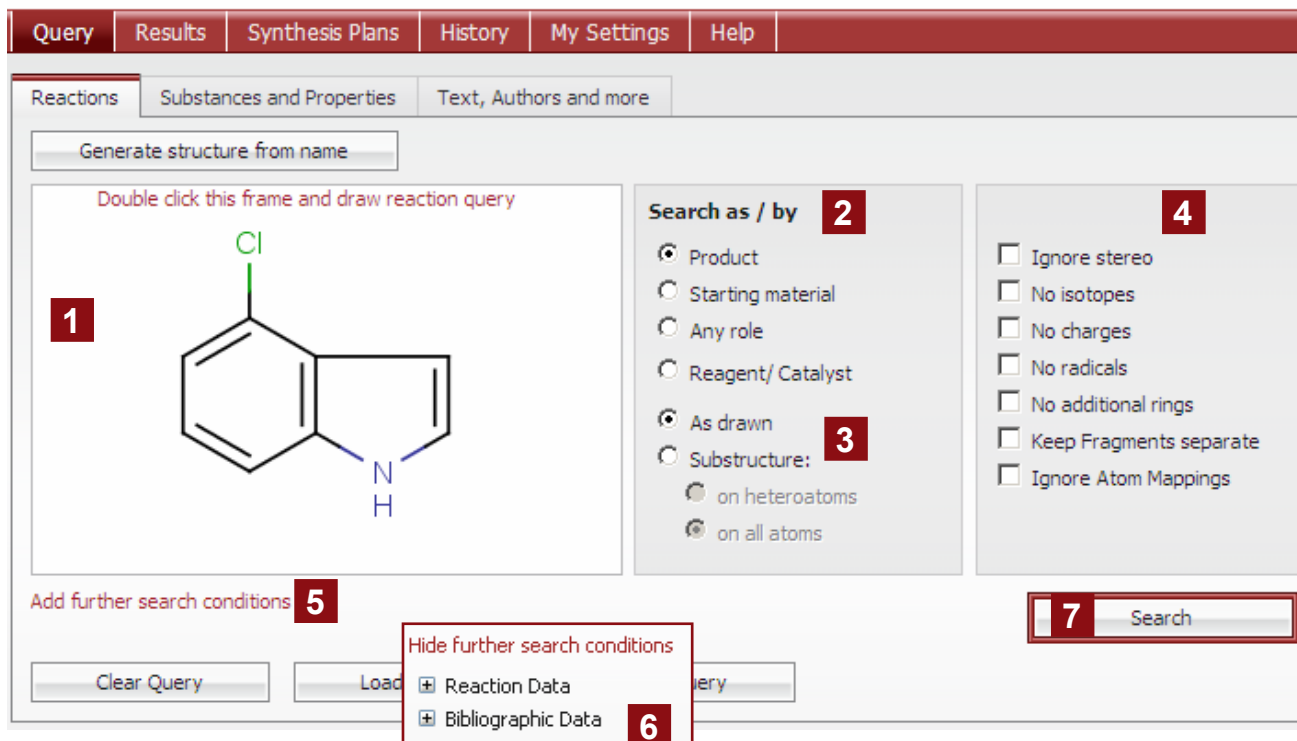
Окно ввода Структуры / Реакции

После появления сгенерированной структуры в окне можно:

- Начать поиск.
- Отредактировать структуру (двойной щелчок в окне или посредством правой клавиши); изменить ее в структурном редакторе.
- Определить тип поиска, добавить дополнительные поисковые условия и / или выбрать дополнительные опции

Примечание: эта опция работает только при наличии соответствующих веществ в базе данных Reaxys.

Запрос по реакциям Закладка Reactions



The screenshot shows the Reaxys Reactions search interface. At the top, there are navigation tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings, and Help. Below these are sub-tabs: Reactions, Substances and Properties, and Text, Authors and more. A search bar at the top left contains the text "Generate structure from name". Below this is a large frame labeled "Double click this frame and draw reaction query" containing a chemical structure of a chlorinated indole derivative, marked with a red box and the number 1. To the right of this frame is a "Search as / by" section with radio buttons for "Product", "Starting material", "Any role", "Reagent/ Catalyst", "As drawn" (selected), and "Substructure:". Under "Substructure:", there are options for "on heteroatoms" and "on all atoms" (selected). To the right of this is a section with checkboxes for "Ignore stereo", "No isotopes", "No charges", "No radicals", "No additional rings", "Keep Fragments separate", and "Ignore Atom Mappings". Below the search options is a "Search" button marked with a red box and the number 7. At the bottom left, there is a "Clear Query" button and a "Load" button. A "Hide further search conditions" button is also present, with a dropdown menu showing "Reaction Data" and "Bibliographic Data" (selected), marked with a red box and the number 6. A "Add further search conditions" button is marked with a red box and the number 5.

1 Окно ввода Структуры / реакции

Содержит искомую структуру или реакцию и дополнительные опции

2 Поиск по ролям As / by

Задание роли искомого вещества: продукт, исходное вещество, любая роль, реагент / катализатор

3 Выбор типа поиска

As drawn – как нарисовано в окне (включая дополнительные опции); *Substructure* – как структурный фрагмент (в этом случае результаты будут включать дополнительные заместители)

4 Дополнительные опции

Используются для уточнения поиска

5 Добавление дополнительных условий поиска

Ввод ограничений (на реакционные или библиографические данные)

6 Данные о реакции / библиографические данные

Уточнение поиска – добавление данных о реакции (например, выход) и / или авторе

7 Поиск

Запуск поиска – Search. Появление окна Search Progression позволит прервать поиск (Cancel) или перейти к просмотру результатов (View)

Как загрузить сохраненный запрос?

1. На закладке Query выбрать опцию Load Query
2. Использовать клавишу Browse для выбора сохраненного XML-файла, затем клавишу Open

File [C:\Documents and Settings\rypensc\Desktop\Reaxys\Cycle.xml] Browse... Open

Запрос по реакциям Дополнительные условия поиска

1 Reaction Data

Reactant name is

Product name is

Reagent is **2**

Yield is

All Reaction fields

is acet

acet anhydride

acetacetate_of potassium

acetal

acetaldehyde **3**

acetaldehyde ammonia

acetaldehyde dibutylacetal

acetaldehyde diethylacetal

acetaldehyde dimethylacetal

acetaldehyde dipropylacetal

acetaldehyde oxime

Reagent is acet anhydride

Yield =

All Reaction fields

<

<=

>

>=

between **4**

is acet anhydride

between 70-90

5 Bibliographic Data

Author is **2**

Patent Assignee is

Journal Title is journal of org

Title is journal of organic chemistry

Patent Number is journal of organic chemistry ussr (english translation) **3**

Patent Country Code is journal of organometallic chemistry

Publication Year = journal of organometallic chemistry library

Title/ Abstract/ Keywords is journal of pharmaceutical sciences

journal of pharmaceutical sciences of the united arab republic

journal of pharmacokinetics and biopharmaceutics

journal of pharmacokinetics and pharmacodynamics

journal of pharmacology and experimental therapeutics **6**

1 Данные о реакции

Задание реактанта, продукта, реагента, выхода и / или все поля реакции.
Разные поля объединяются булевым оператором AND

2 Операторы

Выберите соответствующие операторы в выпадающем меню

3 Список терминов для выбора

Появляется при начале печати

4 Числовые поля

Для числовых полей – выбрать оператор и ввести число или интервал в текстовое окно

5 Библиографические данные

Ввод автора, патентовладельца, названия журнала, заглавия, номера патента, кода страны патентования, года публикации, и / или названия / реферата / ключевых слов

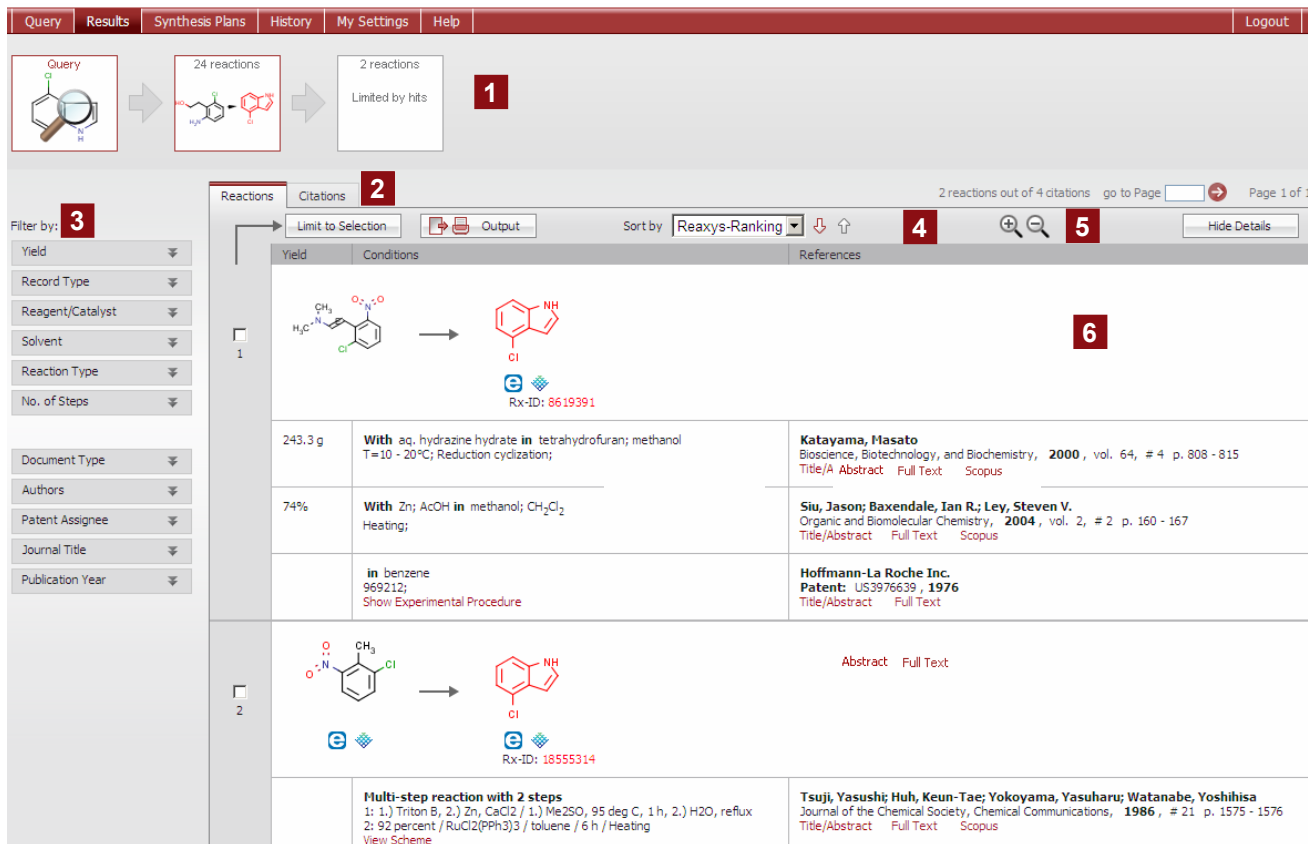
Разные поля объединяются булевым оператором AND.

6 Название / реферат / ключевые слова

При введении нескольких терминов в это текстовое окно разделяйте их знаком “;” – они будут объединены булевым оператором OR

Примечание: сходные результаты можно достичь, применяя фильтры к наборам полученных результатов

Результаты поиска по реакциям Общий вид



Query Results Synthesis Plans History My Settings Help Logout

Query 24 reactions 2 reactions Limited by hits

Filter by: Yield Record Type Reagent/Catalyst Solvent Reaction Type No. of Steps Document Type Authors Patent Assignee Journal Title Publication Year

Reactions Citations 2 reactions out of 4 citations go to Page Page 1 of 1

Limit to Selection Output Sort by Reaxys-Ranking

Yield	Conditions	References
243.3 g	With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; methanol T=10 - 20°C; Reduction cyclization;	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus
74%	With Zn; AcOH in methanol; CH ₂ Cl ₂ Heating;	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus
	in benzene 969212; Show Experimental Procedure	Hoffmann-La Roche Inc. Patent: US3976639, 1976 Title/Abstract Full Text
		Abstract Full Text
	Multi-step reaction with 2 steps 1: 1.) Triton B, 2.) Zn, CaCl ₂ / 1.) Me ₂ SO, 95 deg C, 1 h, 2.) H ₂ O, reflux 2: 92 percent / RuCl ₂ (PPh ₃) ₃ / toluene / 6 h / Heating View Scheme	Tsuji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshihisa Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, 1986 , # 21 p. 1575 - 1576 Title/Abstract Full Text Scopus

Этапы поиска (1) в верхней части экрана показывают действия, выполненные с исходным набором результатов. Для быстрого перехода к предыдущему набору данных или запросу – щелкните одно из окон с красной рамкой

1 Этапы поиска

Графическая навигация помогает отслеживать результаты поиска

2 Закладки Reactions / Citations

По умолчанию выводятся реакции, но можно переключиться на ссылки

3 Фильтрация

Уточнение результатов с помощью фильтров, связанных с реакцией (выход, тип записи, реагент / катализатор, растворитель, тип реакции, число стадий) или библиографической информацией (тип документа, авторы, патентовладелец, название журнала и год публикации)

4 Инструментальная панель

Limit To Selection – ограничения; Output – вывод результатов; Sort – сортировка данных

5 Увеличение / Уменьшение

Для увеличения или уменьшения размера выведенных на экран структур

6 Результаты поиска по реакции

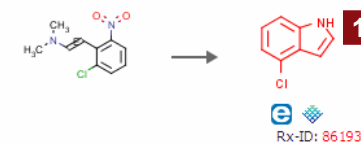
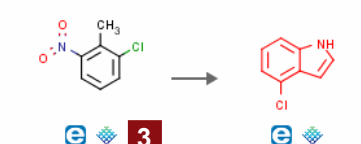
Общий обзор выведенных на экран результатов с ключевыми данными в табличном виде, с доступом к заглавию и реферату оригинальной статьи или патента (полному тексту), к родственной информации в базе данных Scopus.

Результаты поиска по реакциям Закладка Reactions

Щелкните по структуре для появления меню с информацией

Reactions Citations 2 reactions out of 4 citations go to Page Page 1 of 1

4 Limit to Selection Output 5 Sort by Reaxys-Ranking 6 Hide Details

Yield	Conditions	References
<input type="checkbox"/> 1  <p>243.3 g With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; T=10 - 20°C; Reduction cyclization;</p>	<p>74%</p> <p>With Zn; AcOH in methanol; CH₂Cl₂; Heating;</p> <p>in benzene 969212; Show Experimental Procedure 2</p>	<p>Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000, vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus</p> <p>Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004, vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus</p> <p>Hoffmann-La Roche Inc. Patent: US3976639, 1976 Title/Abstract Full Text 2</p>
<input type="checkbox"/> 2 	<p>Multi-step reaction with 2 steps 1: 1.) Triton B, 2.) Zn, CaCl₂ / 1.) Me₂SO, 95 deg C, 1 h, 2.) H₂O, reflux 2: 92 percent / RuCl₂(PPh₃)₃ / toluene / 6 h / Heating View Scheme 2</p>	<p>Tsuji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshihisa Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, 1986, # 21 p. 1575 - 1576 Title/Abstract Full Text Scopus</p>

- 1 Дополнительная информация**
Регистрационный номер Reaxys; Молекулярная формула; Молекулярный вес; Регистрационный номер CAS; Вывод физических свойств, спектральных и др. данных; Создание схемы ретросинтеза; Копирование структуры в буфер обмена
- 2 Доступ к библиографическим деталям**
Название / реферат, полный текст, доступ к Scopus; Показ экспериментальных процедур из патентов; Просмотр схемы многостадийных последовательностей в виде плана синтеза
- 3 Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества с указанием подходящего поставщика (eMolecules / ACD)
- 4 Отбор результатов**
Ограничение набора ответов избранными результатами
- 5 Вывод**
Экспорт данных в желаемом формате
- 6 Сортировка**
Сортировка результатов по возрастанию ↑ или убыванию ↓ по номерам Reaxys-RxID, выходам или по умолчанию (ранжирование Reaxys).

Примечание: информация о закладке Citations в окне результатов находится на стр. 19.

Результаты поиска по реакциям Фильтрация

1 Filter by:

Yield ▾

Record Type ▾

Reagent/Catalyst ▾

Solvent ▾

Reaction Type ▾

2 reduction **3**

cyclization

(no entry given) **4**

Limit to Exclude

No. of Steps ▾

Document Type ▾

Authors ▾

5 Patent Assignee

hoffmann-la roche inc.

(no entry given)

Limit to Exclude

Journal Title ▾

tetrahedron letters

organic and biomolecular chemistry

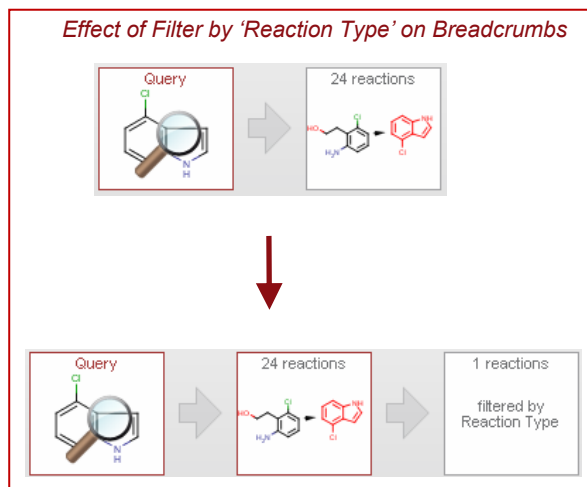
journal of the american chemical society

journal of organic chemistry

6 More

Limit to Exclude

Publication Year ▾



Примечание: фильтрация (по реакциям, библиографии) обеспечивает быстрое и легкое уточнение полученных результатов.

1 Фильтрация

Выбор фильтра (ов), относящихся к характеристикам реакции:

- выход
- тип записи
- реагент / катализатор
- растворитель
- тип реакции
- число стадий

Щелкните двойные стрелки, чтобы получить список терминов.

2 Кнопки выбора терминов

Для ограничения (Limit to) или исключения (Exclude) терминов

3 Встречаемость терминов

Например, количество реакций восстановления / циклизаций – 1

4 Ограничение / Исключение термина

Limit to - ограничение результатов выбранным термином

Exclude -исключение термина из результатов

5 Фильтрация

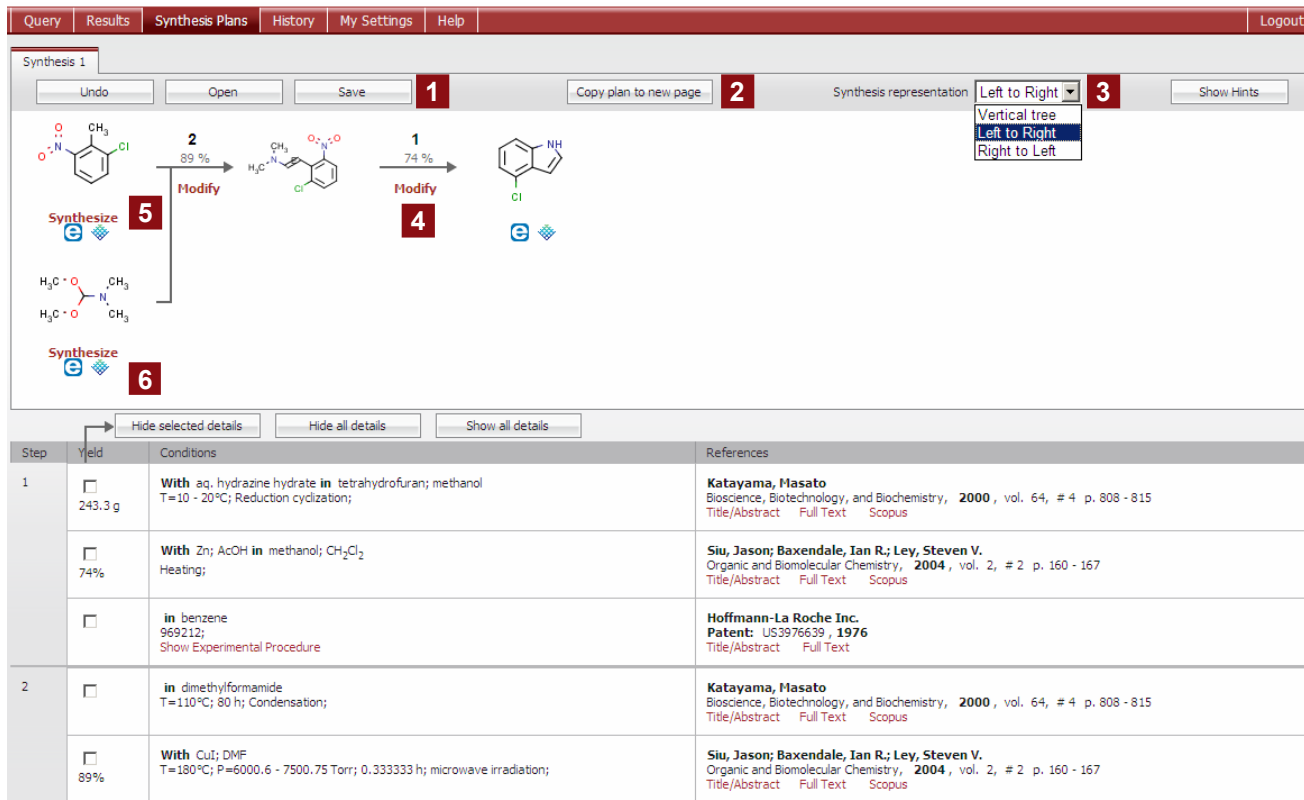
Выбор фильтра, относящегося к библиографическим данным:

- тип документа
- авторы
- патентовладелец
- название журнала
- год публикации

6 Дополнительные опции

Вывод дополнительных опций

Планирование синтеза



Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 243.3 g	With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; methanol T=10 - 20°C; Reduction cyclization;	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/> 74%	With Zn; AcOH in methanol; CH ₂ Cl ₂ Heating;	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/>	in benzene 969212; Show Experimental Procedure	Hoffmann-La Roche Inc. Patent: US3976639, 1976 Title/Abstract Full Text
2	<input type="checkbox"/>	in dimethylformamide T=110°C; 80 h; Condensation;	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/> 89%	With CuI; DMF T=180°C; P=6000.6 - 7500.75 Torr; 0.333333 h; microwave irradiation;	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus

Примечание: на странице планирования синтезов Synthesis Plans можно вывести полные схемы многостадийных реакций. Для более удобного просмотра щелчок по View scheme открывает многостадийную последовательность как новый План синтеза.

Щелкните по структуре в любой закладке результатов. При выборе опции "Plan a synthesis" произойдет переход на страницу планирования синтеза.

- Отмена, Открытие, Сохранение**
Undo – отмена последнего действия
Open – открытие плана синтеза
Save – сохранение плана синтеза
- Копирование Плана на новую страницу**
Открывается новая закладка текущего плана синтеза, где можно разработать другой ретросинтез.
- Представление Планов синтеза**
Выбор горизонтальной или вертикальной развертки вывода
- Изменение**
Опция Modify отменяет уже определенную синтетическую стадию и предлагает другие способы получения вещества
- Синтез**
Опция Synthesize выводит различные методы получения вещества. Клавиша Add включает выбранную стадию в ретросинтез
- Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества и поставщиках (eMolecules / ACD)

Вывод данных

Output Reaction Results

Output 1 Reactions Table Reactions Citation Table

to 2 PDF/Print XML Literature Management Systems (e.g. ReferenceManager, EndNote etc.) RD File

Microsoft Word Microsoft Excel

Include the following headline 3

Output range 4 All Hits Selected hits Range:
e.g. 1, 2-5, 10

Output contains 5

include Structures
 include Experimental Procedure
 All available data
 Identification data only

6

Output Reactions Table Reactions Citation Table

Output contains 5

include Structures
 include Abstracts

Output Substance Grid Substance Details Table Substance Citations Table

Output contains 5

include Structures
 All available data
 Identification data only
 Select data

<input checked="" type="checkbox"/> Spectra	<input checked="" type="checkbox"/> Physical Data	<input checked="" type="checkbox"/> Bioactivity/Ecotox	<input checked="" type="checkbox"/> Use/Application	<input checked="" type="checkbox"/> Natural Product
<input checked="" type="checkbox"/> NMR Spectroscopy (30)	<input checked="" type="checkbox"/> Melting Point (26)	<input checked="" type="checkbox"/> Ecotoxicology (23)	<input checked="" type="checkbox"/> Use (21)	<input checked="" type="checkbox"/> Isolation from Natural Product (3)
<input checked="" type="checkbox"/> IR Spectroscopy (29)	<input checked="" type="checkbox"/> Crystal Property Description (21)	<input checked="" type="checkbox"/> Pharmacological Data (12)		<input checked="" type="checkbox"/> Derivative (2)
<input checked="" type="checkbox"/> Mass Spectrometry (22)	<input checked="" type="checkbox"/> Further Information (15)	<input checked="" type="checkbox"/> Concentration in the Environment (2)		<input checked="" type="checkbox"/> Purification (1)

1 Вывод данных

Выбор типа вывода результатов:

2 В формат

Определение формата экспортируемого файла: PDF/Print, XML, Microsoft Word Microsoft Excel, TXT (Literature Management Systems), RD.

3 Введение заголовка

Отметьте окно и введите заголовок, который появится на каждой странице документа

4 Диапазон вывода данных

Определите данные для вывода: все результаты – All Hits; избранные результаты – Selected Hits (отберите их прежде, чем щелкните клавишу Вывод); диапазон результатов (в окне Range)

5 Содержание вывода данных

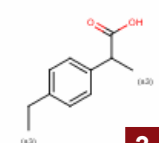
Определите тип данных для вывода:
Вывод реакций: включает структуры и / или экспериментальные процедуры, все имеющиеся данные или только данные по идентификации.
Вывод веществ: включает структуры и все имеющиеся данные, или только данные по идентификации, или избранные данные.
Вывод ссылок: включает структуры и / или рефераты

6 Клавиша ОК

OK – начать экспорт результатов;
Cancel – остановить экспорт.

*Примечание: функция вывода данных имеется на каждом экране Результатов; она обеспечивает экспорт результатов любого типа (Реакции, Вещества и Библиографические данные) в любом желаемом формате. В таблице Substance Details опция **Select data** позволяет выбрать тип свойств, которое желаете экспортировать.*

История

Query	Results	Synthesis Plans	History	My Settings	Help	Logout
Combine hitssets 5 Select at least two hitsets for combining						
4	<input type="checkbox"/>	1	Text/Authors: (Authors: 'snyder, p th ') AND (Publication Year: All years)	26 citations	View Store	Today
	<input type="checkbox"/>	2	Text/Authors: (Authors: 'nasielski') AND (Publication Year: All years)	24 citations	View Store	Today
	<input type="checkbox"/>	3	Text/Authors: (Authors: 'nasielski') AND (Publication Year: All years)	PhD Work 24 citations ULB	View Remove	2009-01-23
	<input type="checkbox"/>	4		Project 5HT2b 620 substances To test	View Remove	2009-01-23
	<input type="checkbox"/>	5	Substances: As drawn			

Combine hitssets **5** →

Select how you want to combine the hitsets

Merge 3 with 4
 Overlap 3 with 4
 Exclude 3 from 4
 Exclude 4 from 3

Cancel

If 2 hits selected

Select how you want to combine the hitsets

Merge all
 Overlap all

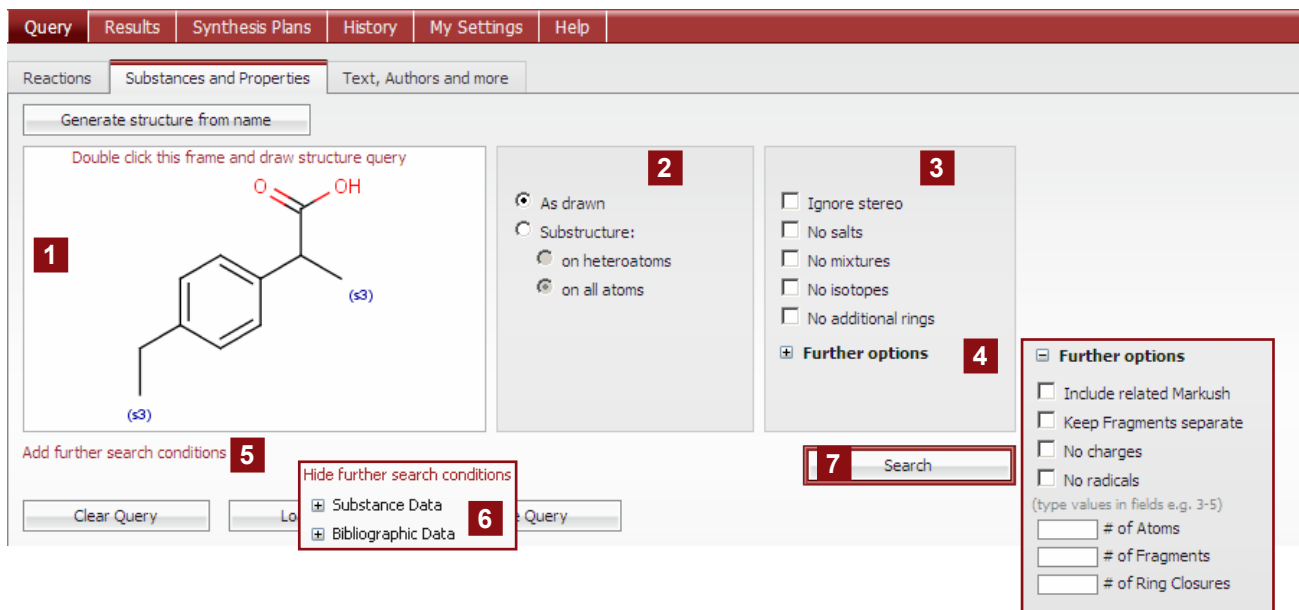
Cancel

If >2 hits selected

Примечание: таблица History показывает все итоги текущего сеанса поиска, полученные в результате запросов или анализа результатов; самые свежие наборы результатов находятся вверху списка. Здесь также возможно графическое объединение наборов.

- 1 Временные списки**
Верхняя часть таблицы показывает все наборы результатов текущего сеанса. Опция **View** – вывод списка как активного набора на странице Результаты
Опция **Store** (введите имя файла и комментарий) – для сохранения списка
- 2 Сохраненные списки**
Нижняя часть таблицы показывает наборы результатов, сохраненные пользователем. Все сохраненные наборы результатов выводятся, если пользователь входит в Reaxys
Опция **Remove** – для удаления сохраненного списка
- 3 Колонка запросов**
Опция **Edit** – вывод на экран исходного запроса, связанного с набором результатов со страницы Query.
Учтите, что для набора результатов, полученного с использованием Фильтрация, исходный запрос в этой колонке не выводится
- 4 Объединение наборов результатов**
- 5** Выберите два или более списков, отметив их номера в колонке Запрос; при этом активируется клавиша Combine hitssets, обеспечивающая графический инструмент для объединения выбранных наборов разными способами.

Запрос по веществам и свойствам Закладка Substances and Properties



1 Окно структура / реакция

Содержит искомую структуру и дополнительные опции

2 Искать как

Определите тип структурного поиска:
As drawn – поиск на полное соответствие
Substructure – как фрагмент структуры

3 Дополнительные опции запроса

Выбор дополнительных опций, уточняющих запрос

4 Дальнейшие опции

При необходимости используйте дальнейшие опции: включить родственную структуру Маркуша, задать отсутствие зарядов, т.д.

5 Дополнительные условия поиска

Ввод дополнительных ограничений на данные о веществе или библиографические данные. При этом появится меню 6

6 Данные о веществе / библиографические данные

Уточнение запроса, например, конкретным физическим свойством и / или автором

7 Поиск

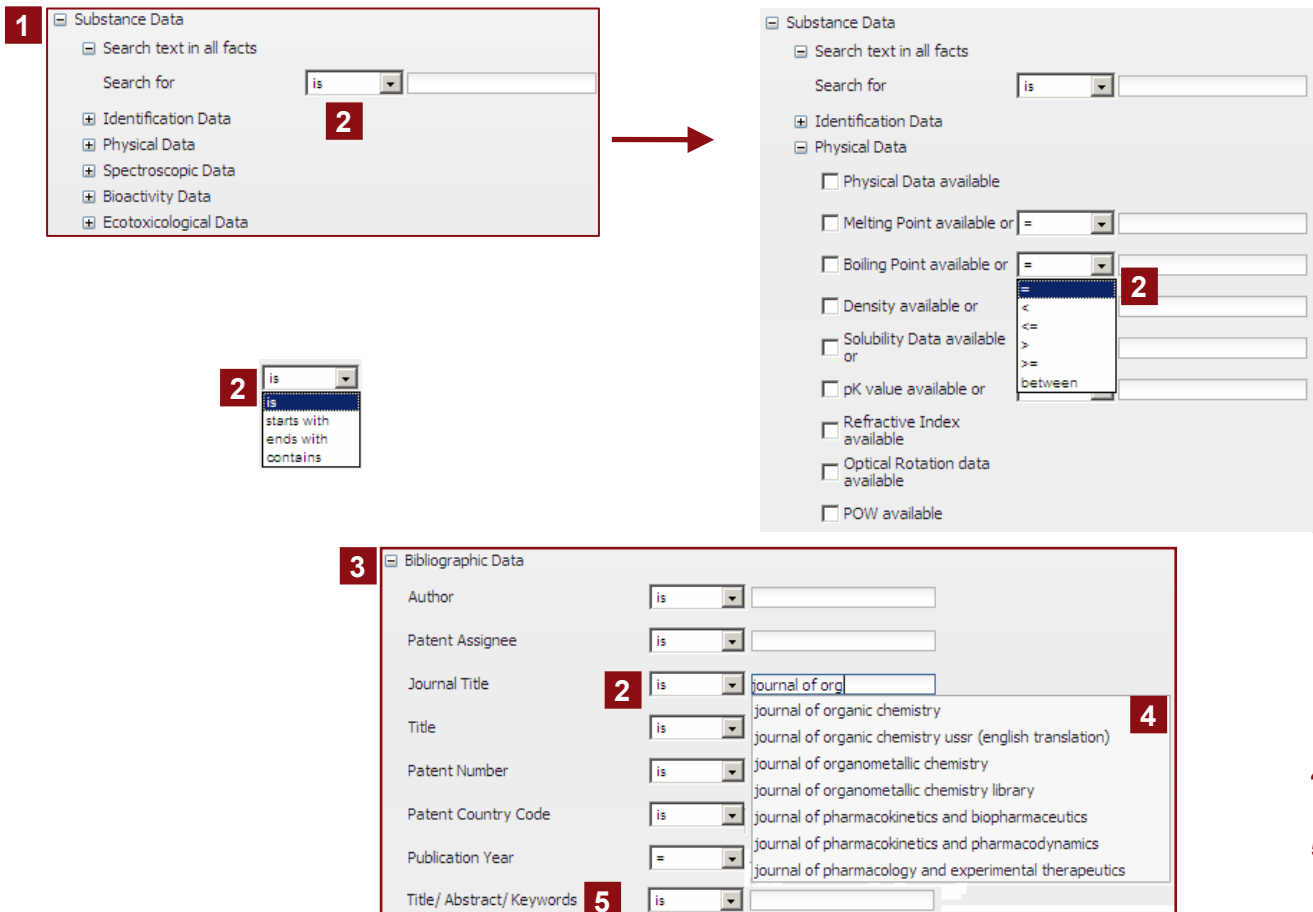
Search – начало поиска

Как найти информацию о конкретных веществах?

1. Выберите закладку *Substances and Properties* и дважды щелкните в окне (1)
2. Нарисуйте структуру нужного вещества в предпочитаемом редакторе. Закрыв редактор, Вы вернетесь в Reaxys (окно 1)
3. Щелкните клавишу *Search* (7) для запуска поиска и просмотра результатов

Примечание: Reaxys запоминает последнюю использованную форму запроса и открывает ее при следующем поиске; в таком случае закладка *Substances and Properties* может стать входной формой запроса по веществам и свойствам.

Запрос по веществам Дополнительные условия поиска



1 Substance Data

Search text in all facts

Search for

2

Identification Data

Physical Data

Spectroscopic Data

Bioactivity Data

Ecotoxicological Data

2

is

starts with

ends with

contains

Substance Data

Search text in all facts

Search for

Identification Data

Physical Data

Physical Data available

Melting Point available or

Boiling Point available or

Density available or

Solubility Data available or

pK value available or

Refractive Index available

Optical Rotation data available

POW available

2

3 Bibliographic Data

Author

Patent Assignee

Journal Title journal of org

Title journal of organic chemistry

Patent Number journal of organic chemistry ussr (english translation)

Patent Country Code journal of organometallic chemistry

Publication Year journal of organometallic chemistry library

Title/ Abstract/ Keywords journal of pharmacokinetics and biopharmaceutics

journal of pharmacokinetics and pharmacodynamics

journal of pharmacology and experimental therapeutics

2

4

5

1 Данные по веществам

Задайте поиск: текстовый по всем фактам (свойствам) (при добавлении в это окно нескольких терминов разделяйте их знаком “;” – они будут связаны булевым оператором OR); по данным для идентификации веществ; по физическим и спектроскопическим данным; по биоактивности и / или экотоксикологическим данным. Разные поля объединяются булевым оператором AND

2 Операторы

Выберите подходящие операторы в выпадающем меню; для числового поля введите в текстовое окно число или интервал чисел

3 Библиографические данные

Задайте авторов, патентовладельца, название журнала, заглавие, номер патента, код страны патентования, год публикации и / или название / реферат / ключевые слова. Разные поля объединяются булевым оператором AND

4 Список терминов для выбора

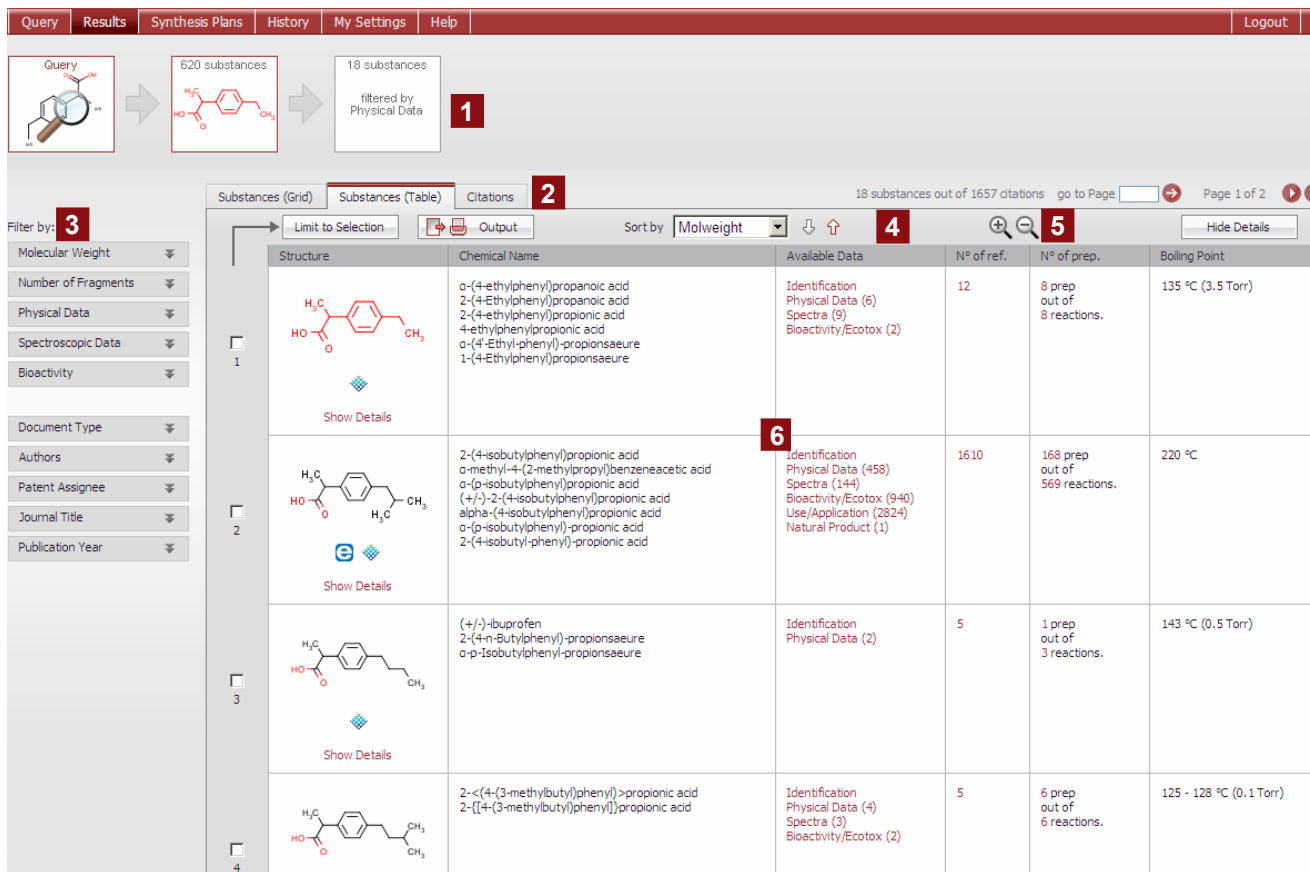
Появляется при начале печати

5 Название / Реферат / Ключевые слова

При добавлении нескольких терминов в это текстовое окно разделяйте их знаком “;” – они будут связаны булевым оператором OR

Примечание: подобные результаты можно получить, применяя фильтры к наборам поисковых ответов.

Вещества и свойства Просмотр результатов



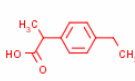
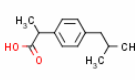
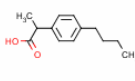
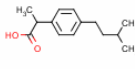
Query Results Synthesis Plans History My Settings Help Logout

620 substances → 18 substances filtered by Physical Data **1**

Substances (Grid) Substances (Table) Citations **2** 18 substances out of 1657 citations go to Page Page 1 of 2

Filter by: **3**

Limit to Selection Output Sort by Molweight **4** **5** Hide Details

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.	Boiling Point
 1	o-(4-ethylphenyl)propionic acid 2-(4-Ethylphenyl)propionic acid 2-(4-ethylphenyl)propionic acid 4-ethylphenylpropionic acid o-(4-Ethyl-phenyl)-propionsaeure 1-(4-Ethylphenyl)propionsaeure	Identification Physical Data (6) Spectra (9) Bioactivity/ECotox (2)	12	8 prep out of 8 reactions.	135 °C (3.5 Torr)
 2	2-(4-isobutylphenyl)propionic acid o-methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetic acid o-(p-isobutylphenyl)propionic acid (+/-)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid alpha-(4-isobutylphenyl)propionic acid o-(p-isobutylphenyl)-propionic acid 2-(4-isobutyl-phenyl)-propionic acid	6 Identification Physical Data (458) Spectra (144) Bioactivity/ECotox (940) Use/Application (2824) Natural Product (1)	1610	168 prep out of 569 reactions.	220 °C
 3	(+/-)-ibuprofen 2-(4-n-Butylphenyl)-propionsaeure o-p-Isobutylphenyl-propionsaeure	Identification Physical Data (2)	5	1 prep out of 3 reactions.	143 °C (0.5 Torr)
 4	2-<(4-(3-methylbutyl)phenyl)>propionic acid 2-[[4-(3-methylbutyl)phenyl]]propionic acid	Identification Physical Data (4) Spectra (3) Bioactivity/ECotox (2)	5	6 prep out of 6 reactions.	125 - 128 °C (0.1 Torr)

Примечание: информация о закладке Citation в окне результатов по веществам находится на стр. 19.

1 Этапы поиска

Графическая навигация помогает при анализе результатов поиска

2 Закладки Вещества (сетка) / Вещества (таблица) / Ссылки

Вывод результатов в табличном виде - по умолчанию; можно переключиться на вывод в виде сетки или на вывод Ссылок

3 Фильтрация

Уточнение результатов с помощью фильтров, связанных с веществом (молекулярный вес, число фрагментов, физические или спектроскопические данные, биоактивность) или с библиографией (тип документа, авторы, патентовладелец, название журнала и год публикации)

4 Инструментальная панель

Limit To Selection – ограничение выбора; Output – вывод результатов; Sort – сортировка данных

5 Увеличение / Уменьшение

Увеличение или уменьшение размера выведенных на экран структур

6 Результаты по веществам и свойствам

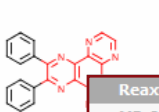
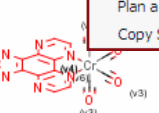
Обзор результатов с выводом ключевых данных в табличном виде. Гиперссылки на детали и данные позволяют вывести свойства для каждого найденного вещества

Результаты поиска по веществам и свойствам

Вывод в виде таблицы

Substances (Grid) Substances (Table) Citations 533 substances out of 116 citations go to Page Page 1 of 36

Limit to Selection Output Sort by Molweight 6 Hide Details

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.	Boiling Point
	2,3-Diphenyl-1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene	Identification Spectra (4)	2	4 prep out of 7 reactions.	
	[1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene]chromium(0)	Physical Data (2) Spectra (3)	2	1 prep out of 1 reactions.	

1 Reaxys-RN: 3630324
MF: C₂₄H₁₄N₆
MW: 386.415
CAS-RN: 129012-12-0
Show Details
Plan a Synthesis
Copy Structure to Clipboard

2 Hide Details

3 Hide Details

4 Structure/Compound Data
Reaxys Registry Number: 17417054
CAS Registry Number:
Chemical Name: tetracarbonyl[1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene]chromium(0)
Type of Substance:
Molecular Formula: C₁₆H₆CrN₆O₄
Linear Structure Formula: (C₁₂H₆N₆)Cr(CO)₄
Molecular Weight: 398.257
InChi Key:

5 Physical Data
Molecular Deformation (1)
Crystal Property Description (1)

Colour & Other Properties	Comment	Reference
blue violet	from Gmelin	Nasielski-Hinkens, R.; Benedek-Vamos, M.; Maetens, D.; Nasielski, J. J. Organomet. Chem., 1981, vol. 217, p. 179 - 182 Full Text

5 Spectra

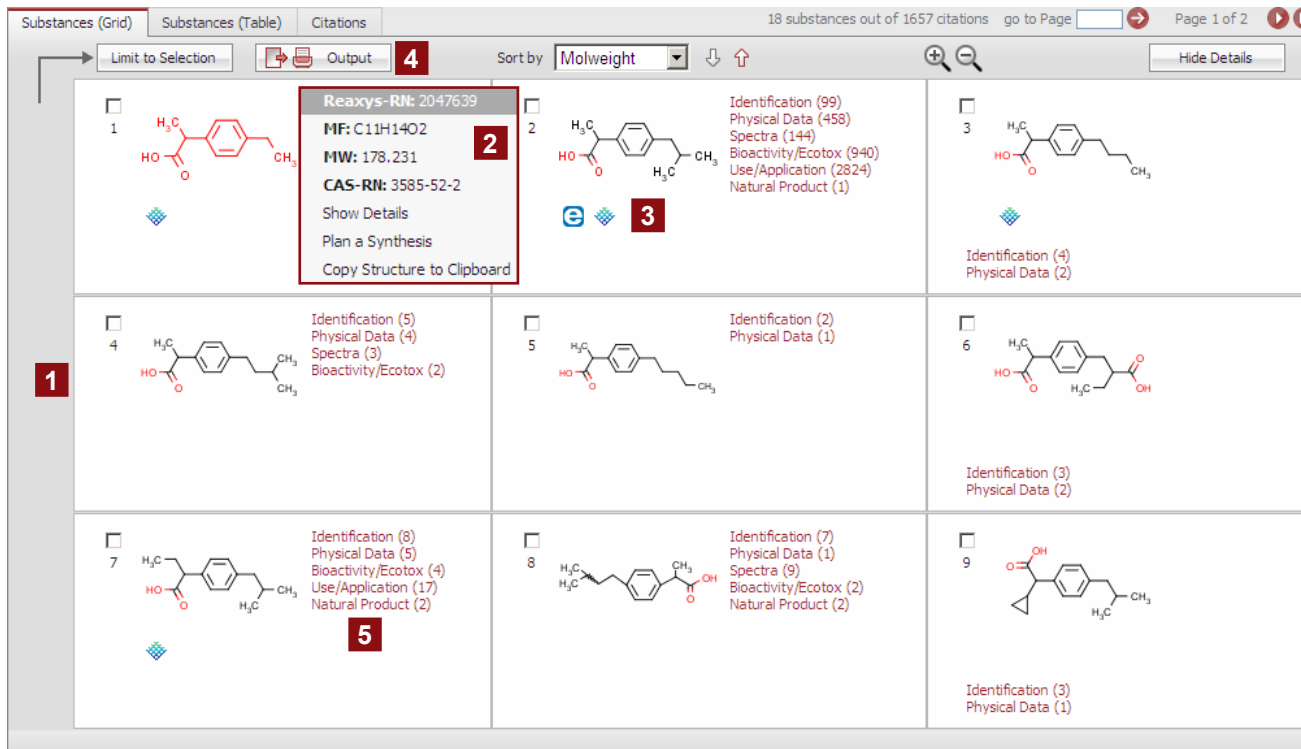
Щелкните по структуре для появления меню с дополнительной информацией

- Дополнительная информация**
Регистрационный номер Reaxys;
Молекулярная формула;
Молекулярный вес;
Регистрационный номер CAS; Вывод данных о структуре / веществе;
Создание схемы ретросинтеза;
Копирование структуры в буфер обмена
- Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества и компаниях-поставщиках (eMolecules / ACD).
- Клавиша показать / спрятать детали**
- Данные структура / соединение**
Поиск деталей о структуре / соединении
- Доступные данные**
Доступ к данным из источников по органической, неорганической и элементарорганической химии. Сведения из базы данных Gmelin имеют флажок from Gmelin
- Сортировка**
Сортировка результатов по возрастанию ↑ или убыванию ↓ регистрационного номера Reaxys и молекулярного веса (по умолчанию)

Show Details - вывод списка всех типов данных, доступных для вещества.
В колонке Available Data - вывод нужных данных о веществе.

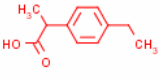
Результаты поиска по веществам и свойствам

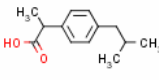
Вывод в виде сетки

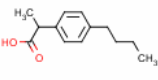


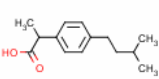
Substances (Grid) Substances (Table) Citations 18 substances out of 1657 citations go to Page Page 1 of 2

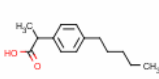
Limit to Selection 4 Sort by Molweight

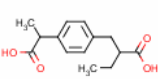
1  **2** **Reaxys-RN: 2047639**
MF: C11H14O2
MW: 178.231
CAS-RN: 3585-52-2
Show Details
Plan a Synthesis
Copy Structure to Clipboard

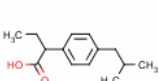
2  Identification (99)
Physical Data (458)
Spectra (144)
Bioactivity/ECotox (940)
Use/Application (2824)
Natural Product (1)

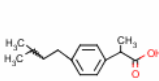
3  Identification (4)
Physical Data (2)

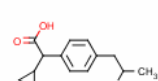
4  Identification (5)
Physical Data (4)
Spectra (3)
Bioactivity/ECotox (2)

5  Identification (2)
Physical Data (1)

6  Identification (3)
Physical Data (2)

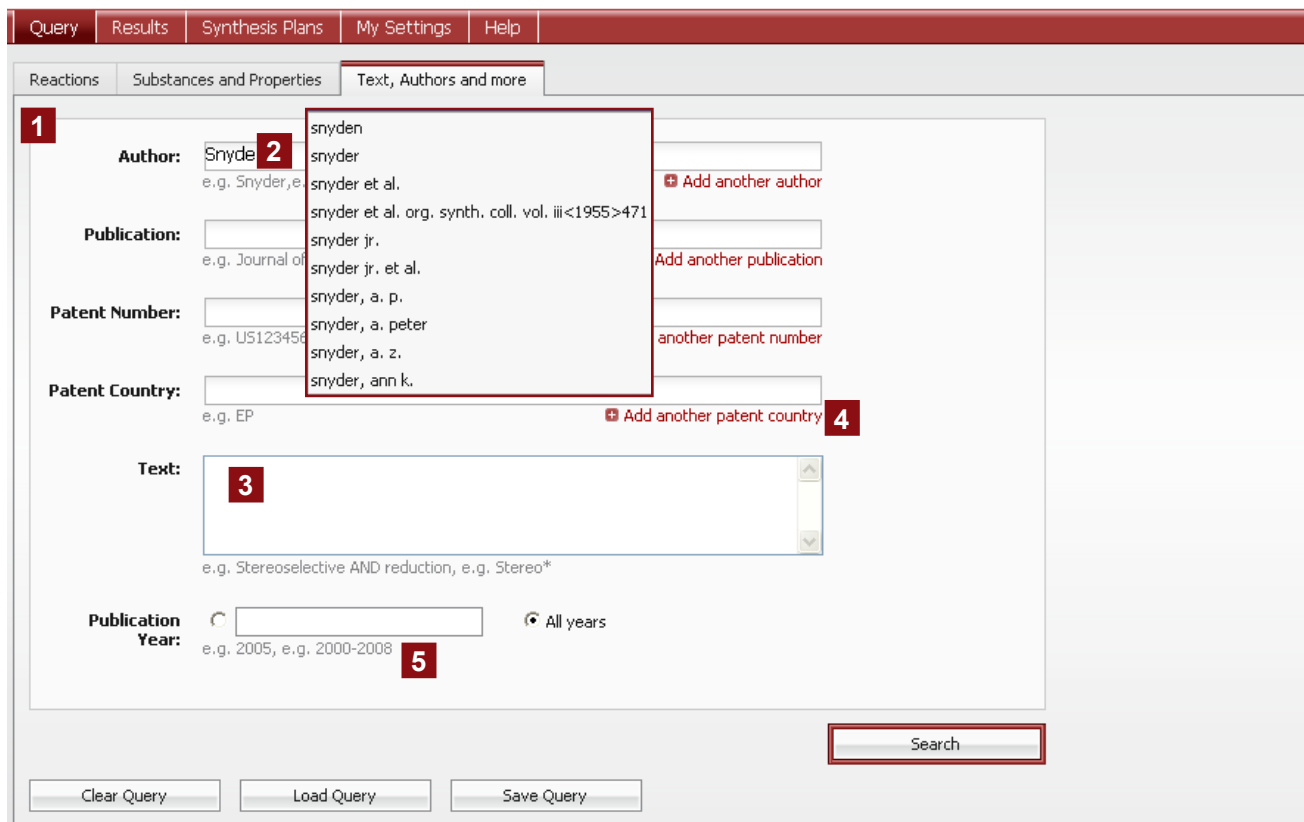
7  Identification (8)
Physical Data (5)
Bioactivity/ECotox (4)
Use/Application (17)
Natural Product (2)

8  Identification (7)
Physical Data (1)
Spectra (9)
Bioactivity/ECotox (2)
Natural Product (2)

9  Identification (3)
Physical Data (1)

- 1 Вывод результатов в виде сетки**
Быстрый просмотр результатов - в виде сетки
- 2 Дополнительная информация**
Щелкните по структуре для появления меню с дополнительной информацией:
Регистрационный номер Reaxys;
Молекулярная формула;
Молекулярный вес;
Регистрационный номер CAS;
Вывод данных о структуре / веществе; Создание схемы ретросинтеза; Копирование структуры в буфер обмена
- 3 Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества и компаниях-поставщиках (eMolecules / ACD).
- 4 Вывод результатов**
Экспорт результатов в желаемом формате
- 5 Доступные данные для этого вещества**

Поиск библиографической информации Закладка Text, authors and more



Примечание: в окне Text (3) можно использовать и вводить следующие булевы операторы: AND, OR, PROXIMITY, NEAR и NEXT.

1 Страница поиска

Ввод автора, публикации (например, названия журнала), номера патента, страны патентования, текстовой информации и / или года публикации

Разные поля будут связаны булевым оператором AND

2 Список терминов для выбора

Появляется при начале печати.

3 Текст

Введите текстовые термины и свяжите их с помощью булевых операторов по своему выбору. При необходимости используйте усечения:

"*" = любое число знаков

"?" = один знак

4 Добавить другой термин

Ввод текстовых полей для дополнительных поисковых терминов (например, страна патентования)

Если в одном поле выбраны несколько терминов, они будут связаны булевым оператором OR

5 Примеры

Год публикации

Результаты поиска библиографической информации Закладка Citations

26 citations go to Page Page 1 of 3

Filter by: **1**

- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Limit to Selection Output **2** Sort by: Publication Year **3** Hide Details

	Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
<input type="checkbox"/> 1	Biocatalytic Microcontact Printing	Snyder, Phillip W.; Johannes, Matthew S.; Vogen, Briana N.; Clark, Robert L.; Toone, Eric J.	2007	Journal of Organic Chemistry, 2007, vol. 72, # 19 p. 7459 - 7461 Full Text Scopus	
	Title/Abstract Show All Reactions (13) 4 Show All Substances (11)				
<input type="checkbox"/> 2	Nucleic acid molecules, polypeptides and uses therefor, including diagnosis and treatment of Alzheimer's disease	Durham, L. Kathryn; Friedman, David L.; Herath, Herath Mudiyansele Athula Chandrasiri; Kimmel, Lida H.; Parekh, Rajesh Bhikhu; Potter, David M.; Rohlf, Christian; Silber, B. Michael; Snyder, Peter Jeffrey; Soares, Holly Dana; Stiger, Thomas R.; Sunderland, P. Trey; Townsend, Robert Reid; White, W. Frost; Williams, Stephen A.	2005	Patent: US2005/163789; A9 Full Text	
	Title/Abstract				
<input type="checkbox"/> 3	Nucleic acid molecules, polypeptides and uses therefor, including diagnosis and treatment of Alzheimer's disease	Durham, L. Kathryn; Friedman, David L.; Herath, Herath Mudiyansele Athula Chandrasiri; Kimmel, Lida H.; Parekh, Rajesh Bhikhu; Potter, David M.; Rohlf, Christian; Silber, B. Michael; Snyder, Peter Jeffrey; Soares, Holly Dana; Stiger, Thomas R.; Sunderland, P. Trey; Townsend, Robert Reid; White, W. Frost; Williams, Stephen A.	2004	Patent: US2004/22794; A1 Full Text	
	Title/Abstract				
<input type="checkbox"/> 4	Ethylene. Experimental Evidence for New Assignments of Electronic Transitions in the n - >n* Energy Region. Absorption and Magnetic Circular Dichroism Measurements with Synchrotron Radiation	Snyder, Patricia Ann; Atanasova, Sylvia; Hansen, Roger W. C.	2004	Journal of Physical Chemistry A: Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory, 2004, vol. 108, # 19 p. 4194 - 4201 Full Text Scopus 5	
	Title/Abstract				

- Фильтрация**
Уточнение поисковых результатов с помощью фильтров (тип документа, авторы, патентовладелец, название журнала и год публикации)
- Вывод результатов**
Экспорт результатов в подходящем формате
- Сортировка**
Сортировка результатов в восходящем ↑ или нисходящем ↓ порядке по году публикации (по умолчанию) или авторам
- Реферат / Реакции / Вещества**
Вывод на экран реферата и показ всех реакций или всех веществ, относящихся к статье
- Источник**
Ссылка на публикацию. Можно вывести оригинальный текст посредством ссылки Full Text и получить доступ к родственной информации в базе данных Scopus

Закладки Reactions – Substances & Properties – Citations имеют почти те же структуру и содержание, что и закладка Bibliographic citations. Различие лишь в присутствии одной дополнительной ссылки на каждой из этих закладок, а также дополнительных фильтров:

- в закладках Reactions / Citations – на реакции из статьи: *Hit Reactions in this article (# out of total #)*
- в закладках Substances & Properties / Citations – на вещества из статьи: *Hit Substances in this article (# out of total #)*