

1. Поиск

ВЕЩЕСТВА	
ФУНКЦИЯ	КОММЕНТАРИЙ
Быстрый текстовый поиск с помощью Quick search (см. стр. 3)	Введите название вещества, молекулярную формулу, или номер CAS в поле поиска и нажмите «Search» . Например: <ul style="list-style-type: none"> • Atenolol • Pt(PPh₃)₃ • 102625-70-7
Быстрый поиск по структурной схеме или по схеме реакции с помощью Quick search (см. стр. 3 и 4)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на поле «Create Structure or Reaction Drawing». 2. Создайте структурную схему вещества. Для получения дополнительной информации об использовании редактора структуры Marvin JS см.: <ol style="list-style-type: none"> а. Создайте поисковой запрос по структуре в разделе «Поиск веществ». б. Ознакомьтесь с «Практическими рекомендациями по использованию ChemAxon Marvin JS» в. Перейдите на сайт ChemAxon Marvin JS и ознакомьтесь с «Руководством пользователя MarvinJS». 3. Нажмите «Transfer to query», нажмите «Search».
Конструктор поисковых запросов (см. стр. 5 и 6)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на «Query builder» (см. стр. 6). 2. Выберите одну из быстрых форм поиска (Структура, Молекулярная формула, Регистрационный номер CAS, или Индекс Doc Index) под кнопкой поиска. ЛИБО 2. Осуществляйте поиск по свойствам с помощью поля «Search properties», переместив свойства в поле «Query builder». 3. Для использования нескольких критериев поиска вы можете применять логические операторы (см. стр. 7). 4. Нажмите на кнопку «Search» в верхней части экрана и выберите желаемый контент: напр., Substances. Примечание: Нажмите на «Exist» для ввода определенных значений поиска.

РЕАКЦИИ	
ФУНКЦИЯ	КОММЕНТАРИЙ
Быстрый текстовый поиск с помощью Quick search (см. стр. 3)	Введите ключевое(-ые) слово(-а) в поле поиска и нажмите «Search» . Например: <ul style="list-style-type: none"> • preparation of porphyrine • phosphorylation • Suzuki coupling • Adler phenol oxidation
Быстрый поиск по структурной схеме или по схеме реакции с помощью Quick search (см. стр. 3 и 4)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на поле «Create Structure or Reaction Drawing». 2. Создайте структурную схему реакции. Для получения дополнительной информации об использовании редактора структуры Marvin JS см.: <ol style="list-style-type: none"> а. Создайте поисковой запрос по реакции в разделе «Поиск реакций». б. Ознакомьтесь с «Практическими рекомендациями по использованию ChemAxon Marvin JS» в. Перейдите на сайт ChemAxon Marvin JS и ознакомьтесь с «Руководством пользователя MarvinJS». 3. Нажмите «Transfer to query», нажмите « Search ».
Конструктор поисковых запросов (см. стр. 5 и 6)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на «Query builder» (см. стр. 6). 2. Выберите одну из быстрых форм поиска (Структура, Молекулярная формула, Регистрационный номер CAS, или Индекс Doc Index) под кнопкой поиска. ЛИБО 2. Осуществляйте поиск по свойствам с помощью поля «Search properties», переместив свойства в поле «Query builder». 3. Для использования нескольких критериев поиска вы можете применять логические операторы (см. стр. 7). 4. Нажмите на кнопку «Search» в верхней части экрана и выберите желаемый контент: напр., Substances. Примечание: Нажмите на «Exist» для ввода определенных значений поиска.

Поиск (продолжение)

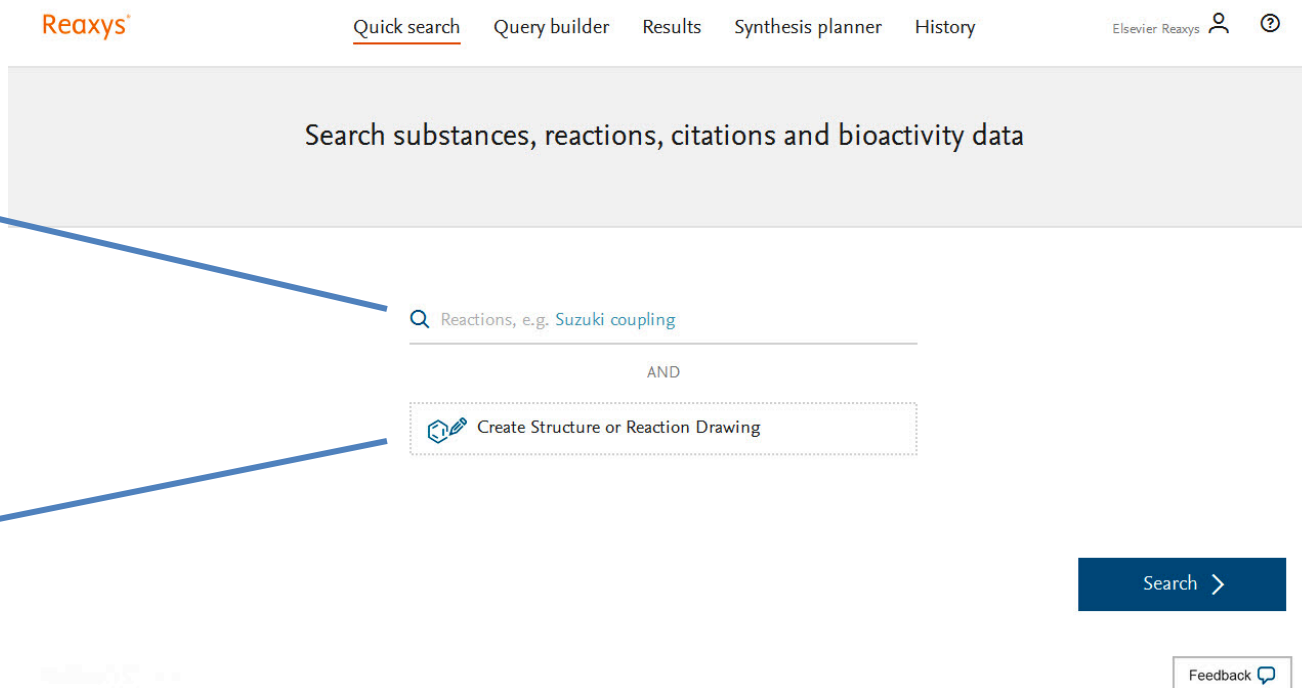
ЛИТЕРАТУРА	
ФУНКЦИЯ	КОММЕНТАРИЙ
Быстрый текстовый поиск с помощью Quick search (см. стр. 3)	Введите ключевое(-ые) слово(-а) в поле поиска и нажмите «Search» . Например: <ul style="list-style-type: none"> • publications about quasicrystals • Tetrahedron, 2014, 70, 2343 • published by Schrock
Быстрый поиск по структурной схеме или по схеме реакции с помощью Quick search (см. стр. 3 и 4)	Примечание: результаты поиска по структурной схеме или по схеме реакции (см. стр. 1) в первую очередь будут содержать вещества и реакции. Все результаты поиска содержат ссылки на дополнительные документы. Кроме того, вы можете нажать на ссылку в верхней части страницы для просмотра документов, связанных с результатами поиска.
Конструктор поисковых запросов Query builder (см. стр. 5 и 6)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на «Query builder» (см. стр. 6). 2. Выберите одну из быстрых форм поиска (Структура, Молекулярная формула, Регистрационный номер CAS, или Индекс Doc Index) под кнопкой поиска. <p>ЛИБО</p> <ol style="list-style-type: none"> 2. Осуществляйте поиск по свойствам с помощью поля «Search properties», переместив свойства в поле «Query builder». 3. Для использования нескольких критериев поиска вы можете применять логические операторы (см. стр. 7). 4. Нажмите на кнопку «Search» в верхней части экрана и выберите желаемый контент: напр., для поиска документов выберите Documents. <p>Примечание: Нажмите на «Exist» для ввода определенных значений поиска.</p>

СВОЙСТВА	
ФУНКЦИЯ	КОММЕНТАРИЙ
Быстрый текстовый поиск с помощью Quick search	Введите ключевое(-ые) слово(-а) в поле поиска и нажмите «Search» . Например: <ul style="list-style-type: none"> • boiling point of benzene • density of quinolone
Быстрый поиск по структурной схеме или по схеме реакции с помощью Quick search (см. стр. 3 и 4)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на поле «Create Structure or Reaction Drawing». 2. Создайте структурную схему вещества. Для получения дополнительной информации об использовании редактора структуры Marvin JS см.: <ol style="list-style-type: none"> а. Создайте поисковой запрос по структуре в разделе «Поиск веществ». б. Ознакомьтесь с «Практическими рекомендациями по использованию ChemAxon Marvin JS» в. Перейдите на сайт ChemAxon Marvin JS и ознакомьтесь с «Руководством пользователя MarvinJS». 3. Нажмите «Transfer to query». 4. Введите свойство в поле поиска (напр., температура кипения). 5. Нажмите «Search».
Конструктор поисковых запросов Query builder (см. стр. 5 и 6)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Нажмите на «Query builder» (см. стр. 6). 2. Выберите одну из быстрых форм поиска (Структура, Молекулярная формула, Регистрационный номер CAS, или Индекс Doc Index) под кнопкой поиска. <p>ЛИБО</p> <ol style="list-style-type: none"> 2. Осуществляйте поиск по свойствам с помощью поля «Search properties», переместив свойства в поле «Query builder». 3. При необходимости, повторите процедуру для других свойств. 4. Для использования нескольких критериев поиска вы можете применять логические операторы (см. стр. 7). 5. Нажмите на кнопку «Search» в верхней части экрана и выберите желаемый контент: напр., для поиска соединений выберите Substances. <p>Примечание: Нажмите на «Exist» для ввода определенных значений поиска.</p>

Быстрый поиск

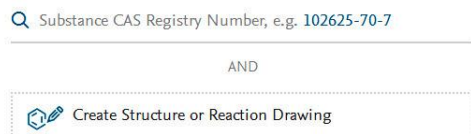
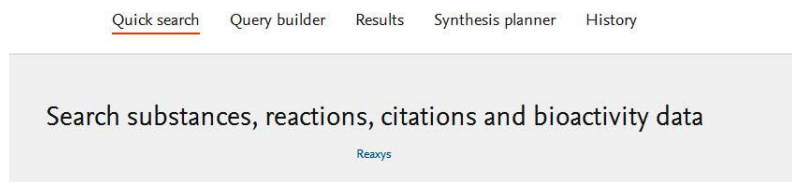
Текстовый поиск позволяет осуществлять поиск по ключевым словам, написанным на естественном языке (слова могут быть урезаны с левой/правой стороны, или в центре при условии использования вместо недостающих символов звездочки (поиск по шаблону)).

Поиск по структуре позволяет осуществлять поиск веществ и реакций в схематичном виде.



The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there is a navigation bar with the Reaxys logo, a 'Quick search' link (underlined), and other options: 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. On the right side of the navigation bar, there are icons for 'Elsevier Reaxys', a user profile, and a help icon. Below the navigation bar is a large grey search bar containing the text 'Search substances, reactions, citations and bioactivity data'. Below the search bar is a search input field containing the text 'Reactions, e.g. Suzuki coupling'. Below the input field is a horizontal line, followed by the word 'AND'. Below 'AND' is a dashed box containing a pencil icon and the text 'Create Structure or Reaction Drawing'. To the right of the search bar is a dark blue 'Search >' button. Below the search bar is a 'Feedback' button with a speech bubble icon. Two blue arrows point from the text on the left to the search input field and the 'Create Structure or Reaction Drawing' button.

Быстрый поиск по структурной схеме или по схеме реакции



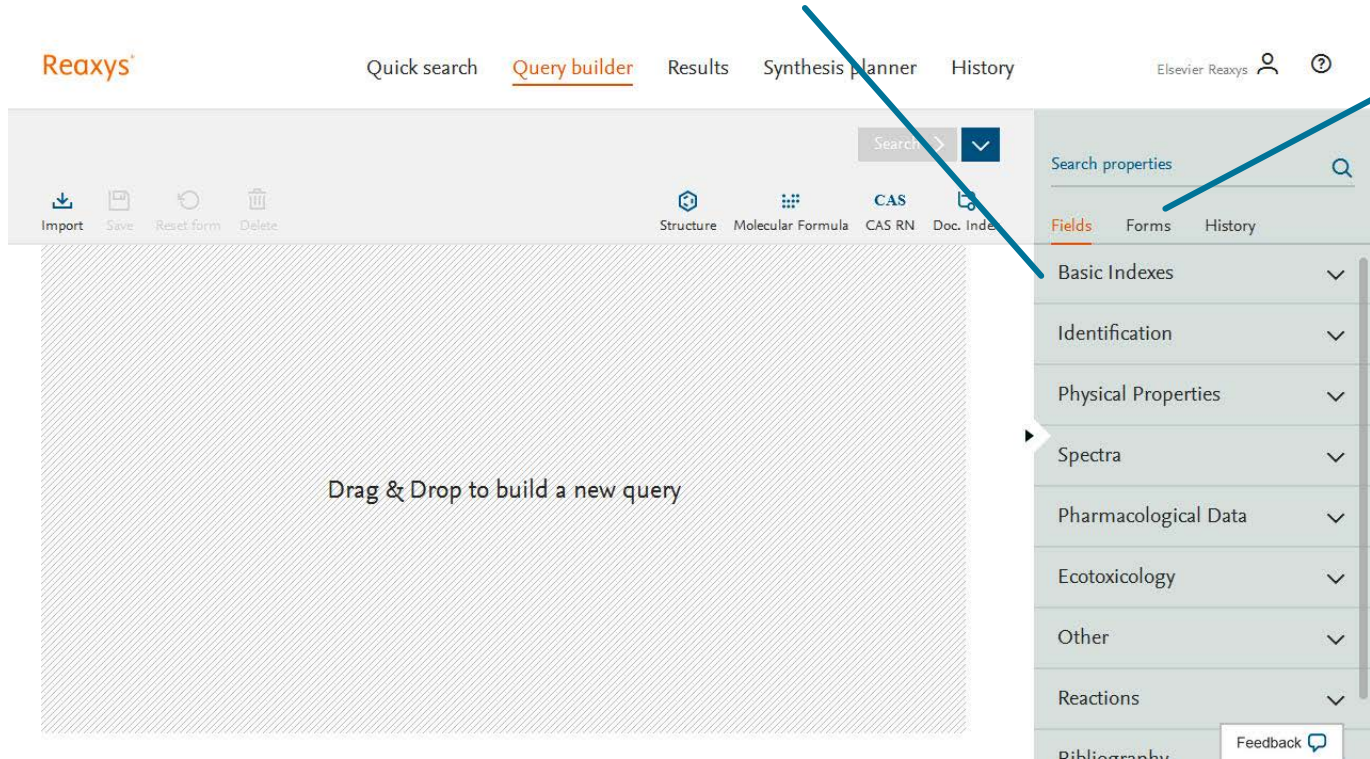
1. Нажмите на поле «**Create Structure or Reaction Drawing**».

2. Используйте Marvin JS компании ChemAxon для создания схемы структуры или реакции.

Панели Forms и Fields конструктора поисковых запросов Query builder

Для того чтобы найти названия полей поиска, введите ключевые слова (напр., введите «boil» для «boiling point»)

В исходном окне содержатся различные категории полей для поиска.



Нажмите на вкладку «Forms» для просмотра стандартных полей поиска для общих видов свойств.

Нажмите на для того, чтобы развернуть список полей поиска.

Пошаговое использование Конструктора поисковых запросов

1. Нажмите на «**Query builder**».

2. Начните печатать название свойства в поле поиска (напр., «boiling»).

6. Нажмите «**Search**» (Вещества).

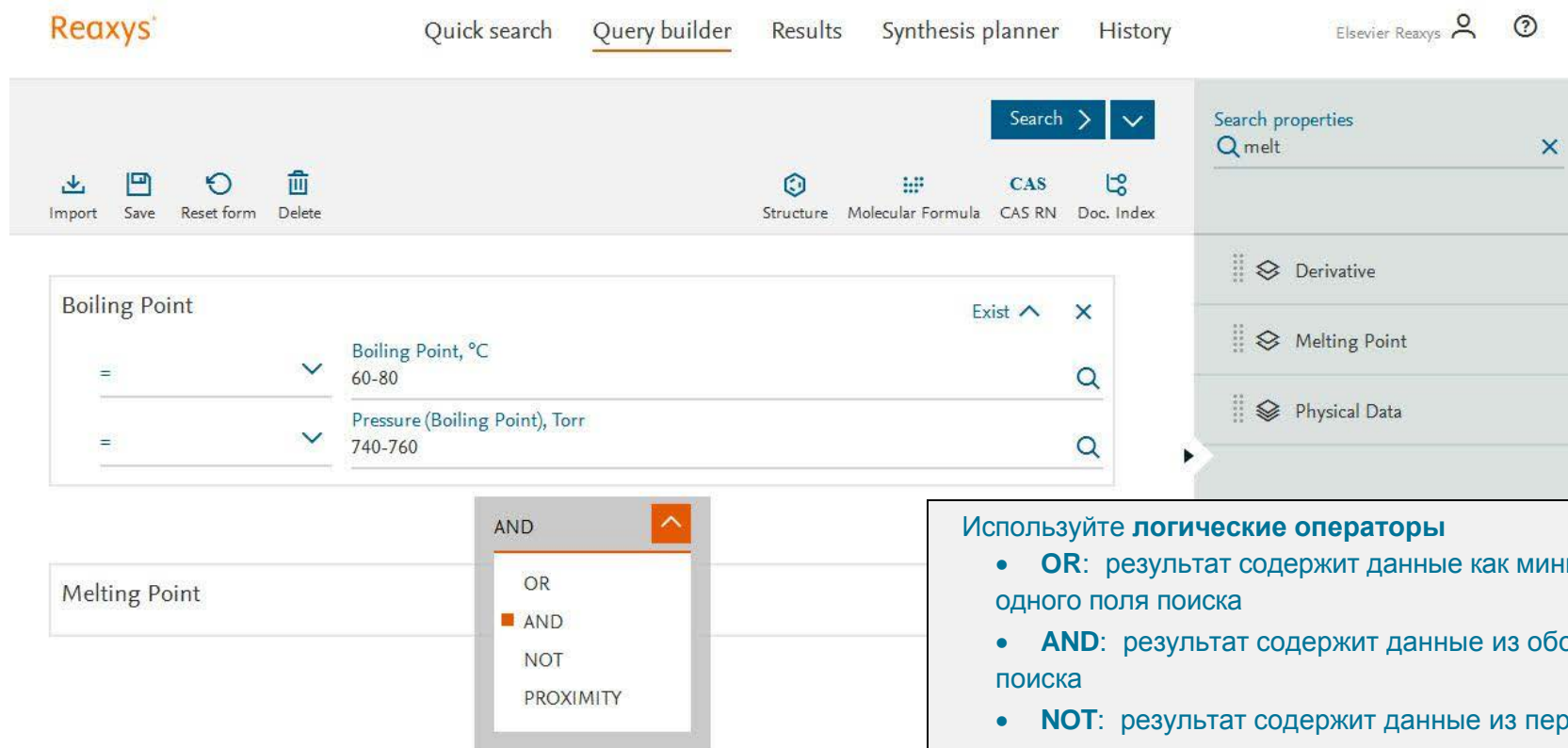
The screenshot shows the Reaxys interface with the 'Query builder' tab selected. A search for 'boiling' has been performed, and the results are displayed in a sidebar. The 'Boiling Point' property is selected, and its details are shown in the main area. The 'Exist' button is visible next to the selected property.

4. Нажмите «**Exist**»

3. Перетащите свойства в конструктор поисковых запросов **Query builder**.

5. Введите точные критерии поиска.

Конструктор поисковых запросов: использование нескольких свойств и логические операторы



Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Elsevier Reaxys

Search > Search properties
melt

Import Save Reset form Delete Structure Molecular Formula CAS CAS RN Doc. Index

Boiling Point Exist ^ X
= Boiling Point, °C 60-80
= Pressure (Boiling Point), Torr 740-760

Melting Point
AND
OR
AND
NOT
PROXIMITY

Derivative
Melting Point
Physical Data

Используйте логические операторы

- **OR**: результат содержит данные как минимум из одного поля поиска
- **AND**: результат содержит данные из обоих полей поиска
- **NOT**: результат содержит данные из первого поля поиска, но не содержит данные из второго поля поиска
- **NEAR**: поиск данных, находящихся рядом, в любой последовательности
- **NEXT**: поиск данных, находящихся рядом, в указанной последовательности
- **PROXIMITY**: как правило, используется для поиска данных по взаимосвязанным параметрам (напр., температура плавления и растворяющее вещество)

2. Результаты

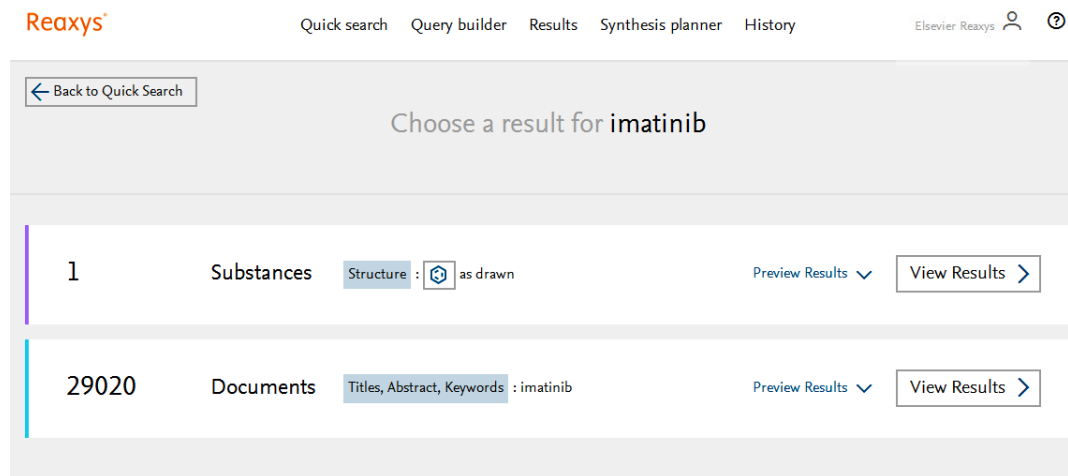
Предварительный просмотр результатов быстрого поиска

Reaxys анализирует поисковой запрос в поле **Quick search** и выводит группы результатов в окне предварительного просмотра результатов **Results Preview** (прим.: функция предварительного просмотра доступна исключительно для результатов быстрого поиска с функцией **Quick search**; это связано с характером интерпретации запросов).


Группы результатов зависят от используемых ключевых слов. В нашем примере, Reaxys осуществил поиск вещества по его структуре в базе данных о структурах веществ, а также по его названию в документах.

Первая группа результатов поиска указывает на 1 **запись структур** (поиск по структуре вещества).

Вторая группа содержит более 29,000 результатов в **записях документов** (поиск по ключевым словам).



The screenshot shows the Reaxys interface with a search for 'imatinib'. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. A user profile icon and a help icon are also visible. Below the navigation, there is a 'Back to Quick Search' button and the text 'Choose a result for imatinib'. The results are displayed in two rows:

Count	Category	Search Criteria	Preview Results	View Results
1	Substances	Structure :  as drawn	Preview Results ▾	View Results >
29020	Documents	Titles, Abstract, Keywords : imatinib	Preview Results ▾	View Results >

Нажмите на **«Preview Results»** для просмотра трех наиболее актуальных результатов в данной категории.

Нажмите на **«View Results»** для отображения всех результатов из данной категории.

При использовании различных комбинаций ключевых слов Search Reaxys может показать варианты, которые показывают результаты поиска в **записях реакций** или в **записях документов** с различными комбинациями искомым терминов.

Быстрый поиск и Конструктор поисковых запросов: Результаты поиска в категории «Вещества»

Используйте функцию «**Filters and Analysis**» для уточнения результатов поиска.

Отслеживайте ваши действия, выполненные с исходным набором результатов

Для отображения дополнительных параметров нажмите на «**More**»

По умолчанию, результаты поиска расположены в порядке убывания количества ссылок на результат поиска (можно изменить). С помощью ползунка можно увеличивать структурные диаграммы.

Используйте ссылки на данные о получении вещества, его реакциях, а также о документах (литературе), содержащих упоминания об искомом веществе.

Используйте ссылки на данные о различных свойствах веществ.

Быстрый поиск и Конструктор поисковых запросов: Результаты поиска в категории «Документы»

Используйте функцию «**Filters and Analysis**» для уточнения результатов поиска.

Используйте индексные термины для уточнения результатов поиска в зависимости от темы

С помощью ссылок на авторов вы сможете получить информацию об их публикациях, а также прочую аналитическую информацию из Scopus.

По умолчанию, результаты поиска расположены в порядке убывания релевантности (можно изменить).

Ссылки на информацию о цитировании в Scopus

Ссылки на полнотекстовые статьи; ключевую информацию, содержащуюся на первой странице патентов; вещества; реакции; аннотации; индексные термины

3. Анализ и сортировка результатов поиска с помощью фильтров

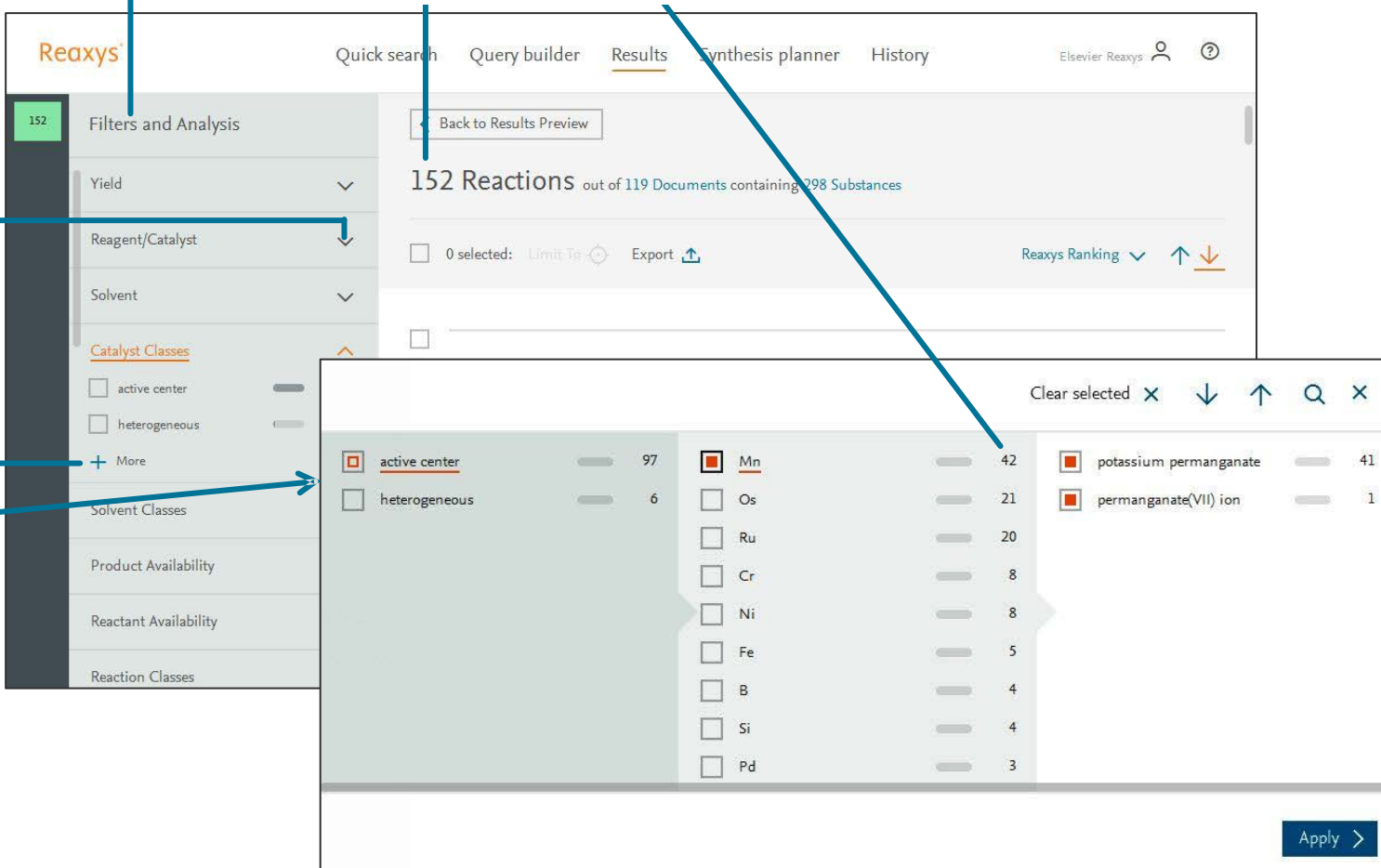
Функция «Фильтры и анализ» позволяет сузить результаты поиска:

Используйте функцию «**Filters and Analysis**» для уточнения результатов поиска. С помощью систематизированных индексных терминов, вы можете без труда сузить результаты поиска.

1. Нажмите на для отображения опций полей поиска.

2. Нажмите на «**More**» для просмотра дополнительных опций фильтров.

3. Использование данного фильтра сузит результаты поиска со 152 реакций to 42.

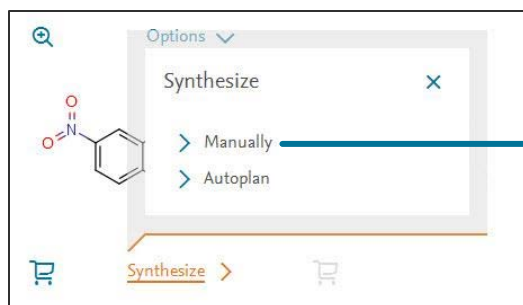


The screenshot shows the Reaxys interface with the 'Filters and Analysis' sidebar on the left and the main results area on the right. The sidebar shows a count of 152 reactions. The main area shows '152 Reactions out of 119 Documents containing 298 Substances'. A zoomed-in view of the filter options is shown below, with the 'active center' filter selected, resulting in 42 reactions.

Filter	Count
active center	97
heterogeneous	6
Mn	42
Os	21
Ru	20
Cr	8
Ni	8
Fe	5
B	4
Si	4
Pd	3
potassium permanganate	41
permanganate(VII) ion	1

4. Ручное планирование путей синтеза

Вы можете планировать пути синтеза вручную, либо воспользоваться функцией автоматического планирования путей синтеза Reaxys (см. стр. 14). Для начала планирования путей синтеза нажмите «Synthesize».



1. Выберите «Manually».

2. В окне «Add preparation» вы можете выбрать реакции для использования в вашем плане синтеза. Прим.: структура продукта не отображается в связи с тем, что она соответствует начальной структуре.

3. Нажмите на «Add # to plan».

Ручное планирование путей синтеза (продолжение)

1. Нажмите на любой план синтеза (Synthesis plan #) в разделе «**Synthesis planner**» для его просмотра.

2. Нажмите на Опции этапа синтеза (⋮) для того, чтобы:

- Увидеть условия
- Спрятать способы получения
- Добавить способы получения
- Удалить способы получения

- ⓘ Show conditions
- 🔍 Hide preparation
- 🗑️ Remove preparation

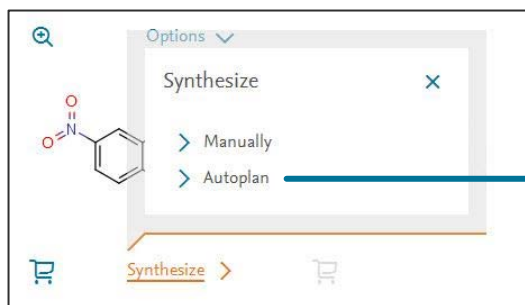
3. Нажмите на «**Show conditions**». Появятся экспериментальные данные для выбранного этапа синтеза, перемещайтесь вверх и вниз для просмотра деталей о других этапах синтеза.

Yield	Conditions	Reference
64%	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate With DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Inert atmosphere Stage #2: With pyridine; phosphoryl chloride at 0 - 20°C Experimental Procedure	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 2012 , vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text ↗ Cited 13 times ↗ Show details >
	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate With DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Stage #2: With pyridine; phosphoryl chloride at 20°C for 3h Experimental part	Makrecka, Marina; Zalubovskis, Raivis; Vavers, Edijs; +3 others - Letters in Drug Design and Discovery, 2013 , vol. 10, # 5, p. 410 - 414 Full Text ↗ Cited 1 times ↗ Show details >

Done [>](#)

Автоматическое планирование путей синтеза

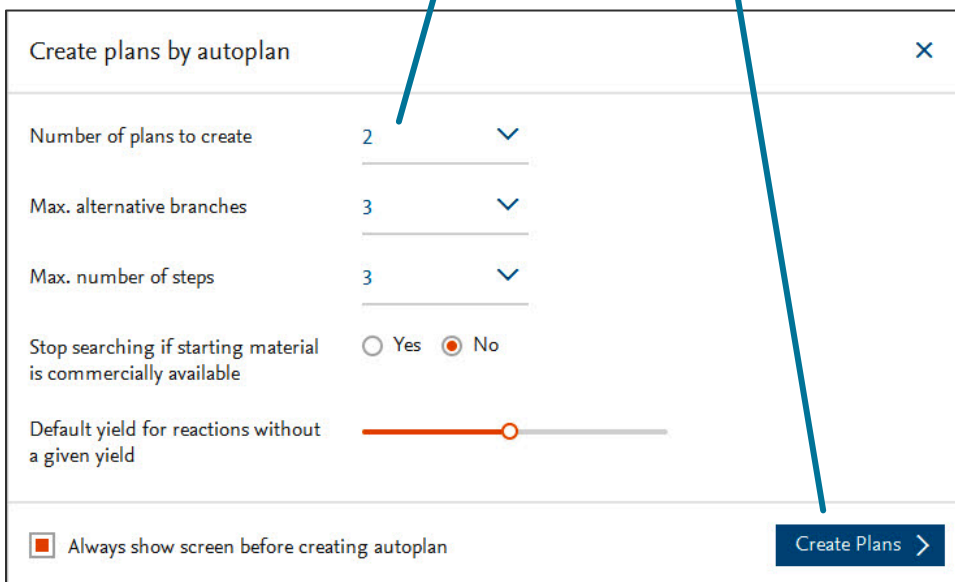
Позвольте Reaxys автоматически спланировать пути синтеза. Для начала планирования путей синтеза нажмите на **«Synthesize»**.



1. Выберите **«Autoplan»**.

2. Определите параметры для автоматического планирования путей синтеза.

3. Нажмите на кнопку **«Create Plans»**.



Create plans by autoplan

Number of plans to create: 2

Max. alternative branches: 3

Max. number of steps: 3

Stop searching if starting material is commercially available: Yes No

Default yield for reactions without a given yield:

Always show screen before creating autoplan

Create Plans

Автоматическое планирование путей синтеза (продолжение)

1. Нажмите на любой план синтеза в разделе «**Synthesis planner**» для его просмотра.

The screenshot shows the Reaxys Synthesis Planner interface. It displays a reaction plan with four steps. Step 2 is highlighted with a blue arrow pointing to its options menu. The interface includes a top navigation bar with 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. A left sidebar shows 'Synthesis Planner' and 'Autoplan 1'. The main area shows the reaction scheme with chemical structures and yields for each step.

3. Нажмите на «**Show conditions**». Появятся экспериментальные данные для выбранного этапа синтеза, перемещайтесь вверх и вниз для просмотра деталей о других этапах синтеза.

2. Нажмите на Опции этапа синтеза (⋮) для того, чтобы:

- Увидеть условия
- Спрятать способы получения
- Добавить способы получения
- Удалить способы получения

The screenshot shows the 'Conditions' panel in the Reaxys Synthesis Planner. It displays experimental data for a specific step, including yield, conditions, and reference information. The panel is titled 'Conditions' and has a close button (X). Below the title, it shows 'Preparation - 2' and a table with columns for 'Yield', 'Conditions', and 'Reference'.

Yield	Conditions	Reference
100%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 2h Experimental part	Grandane, Aiga; Tanc, Muhammet; Di Cesare Mannelli, Lorenzo; +4 others - Journal of Medicinal Chemistry, 2015, vol. 58, # 9, p. 3975 - 3983 Full Text ↗ Cited 5 times ↗ Show details >
99%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 22.1667h Experimental Procedure v	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 2012, vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text ↗ Cited 13 times ↗ Show details >

At the bottom right of the panel, there is a 'Done' button with a right arrow.

5. Сохранение и экспорт результатов

ФУНКЦИЯ	КОММЕНТАРИЙ
Сохранение	
Из « Query builder »	Задайте параметры поиска; нажмите « Save » в левой верхней части экрана. <ul style="list-style-type: none"> Поисковой запрос сохранится в файле формата .json.
Из раздела « Synthesis planner »	На данный момент данная функция не поддерживается.
Во вкладке « History Page » и « Recent »	Вкладка « History Page + Recent » содержит перечень поисковых запросов, осуществленных в рамках вашей текущей сессии. Наведите курсор мыши над « Recent Search », нажмите « Save », введите название, нажмите « Save ». <ul style="list-style-type: none"> Сохраненный поисковой запрос будет доступен во вкладке «Saved».
Экспорт	
Со страницы « Results Page »	Выберите документы, которые вы желаете экспортировать, с помощью флажков, находящихся над номером результата поиска. <ul style="list-style-type: none"> Нажмите на «Export». Установите формат, диапазон, данные для экспорта, а также дополнительные опции. Нажмите на «Export». Чтобы следить за ходом экспорта, нажмите на «Exports» в правом нижнем углу экрана. <ul style="list-style-type: none"> После завершения экспорта, нажмите на кнопку «Download».
В разделе « Synthesis planner »	<ul style="list-style-type: none"> Нажмите на «Export». Выберите «Export documents» или «Export reactions». Укажите формат и дополнительные опции. Нажмите на «Export». Чтобы следить за ходом экспорта, нажмите на «Exports» в правом нижнем углу экрана. <ul style="list-style-type: none"> После завершения экспорта, нажмите на кнопку «Download».