

## 1. Поиск

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

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

## Поиск (продолжение)

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

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

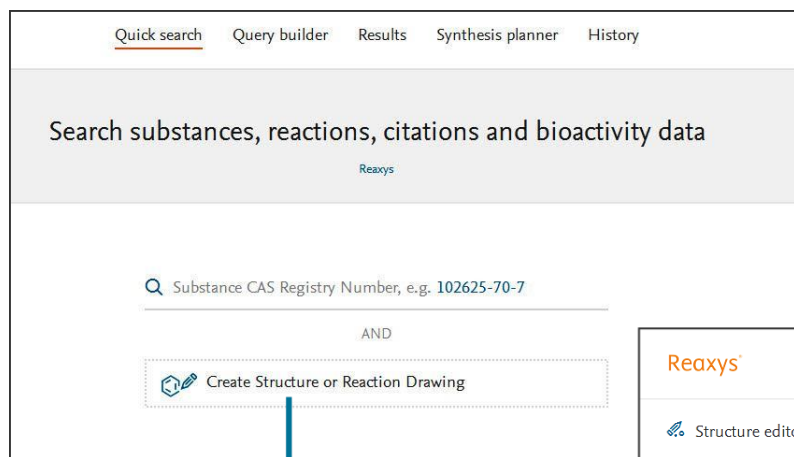
## Быстрый поиск

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)).

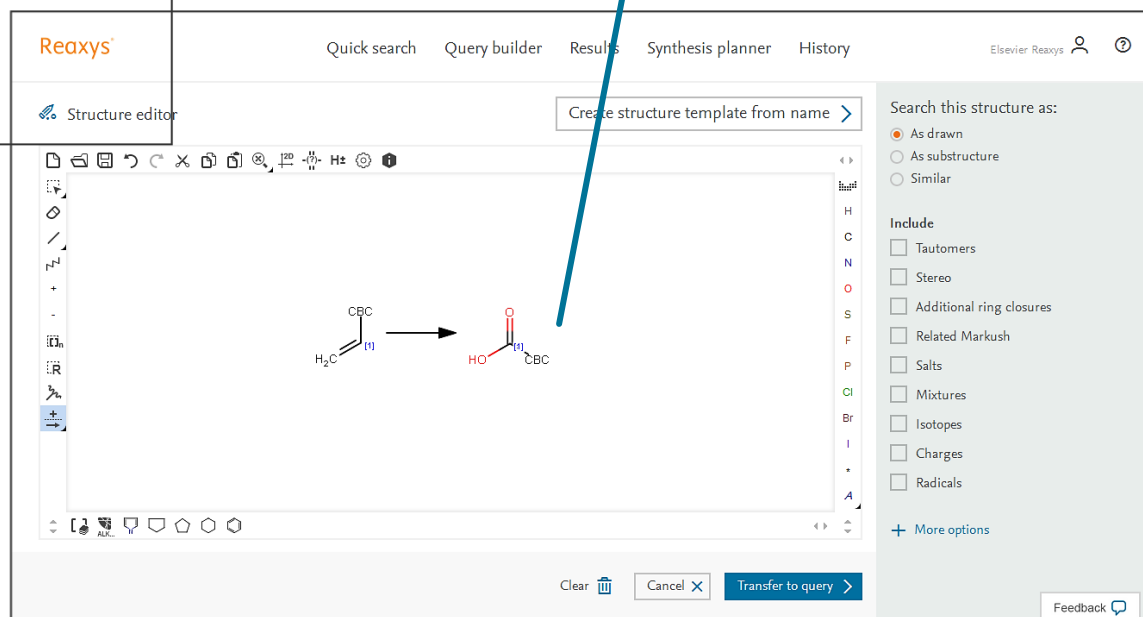
Поиск по структуре позволяет осуществлять поиск веществ и реакций в схематичном виде.

The screenshot displays the Reaxys search interface. At the top, there is a navigation bar with the Reaxys logo, a 'Quick search' link, and other menu items: 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. On the right side of the navigation bar, there is a user profile icon and a help icon. Below the navigation bar, a large grey header contains the text 'Search substances, reactions, citations and bioactivity data'. The main search area features a search input field containing the text 'Reactions, e.g. Suzuki coupling'. Below the input field, the word 'AND' is centered. A dashed box highlights a button labeled 'Create Structure or Reaction Drawing' with a pencil icon. To the right of the search area is a blue 'Search >' button. At the bottom right, there is a 'Feedback' button with a speech bubble icon.

## Быстрый поиск по структурной схеме или по схеме реакции



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

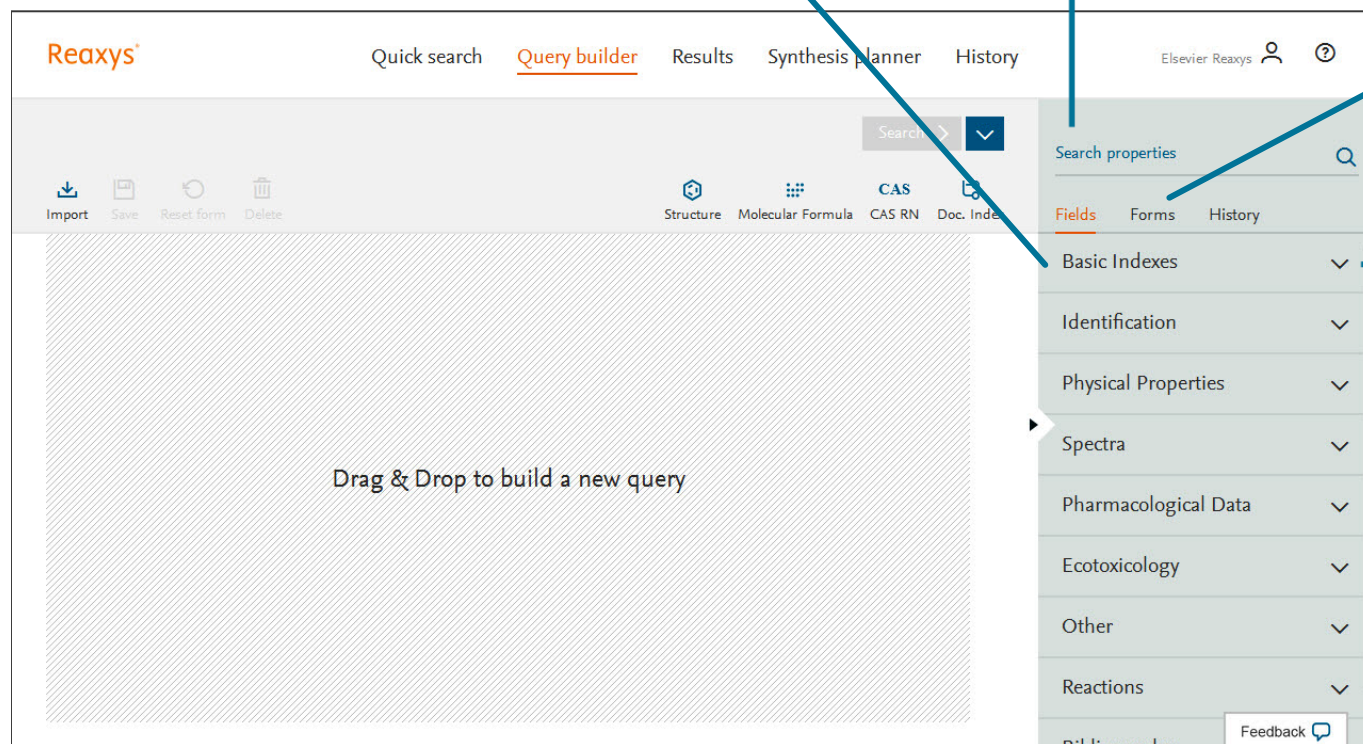


2. Используйте Marvin JS компании ChemAxon для создания схемы структуры или реакции.


## 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»)

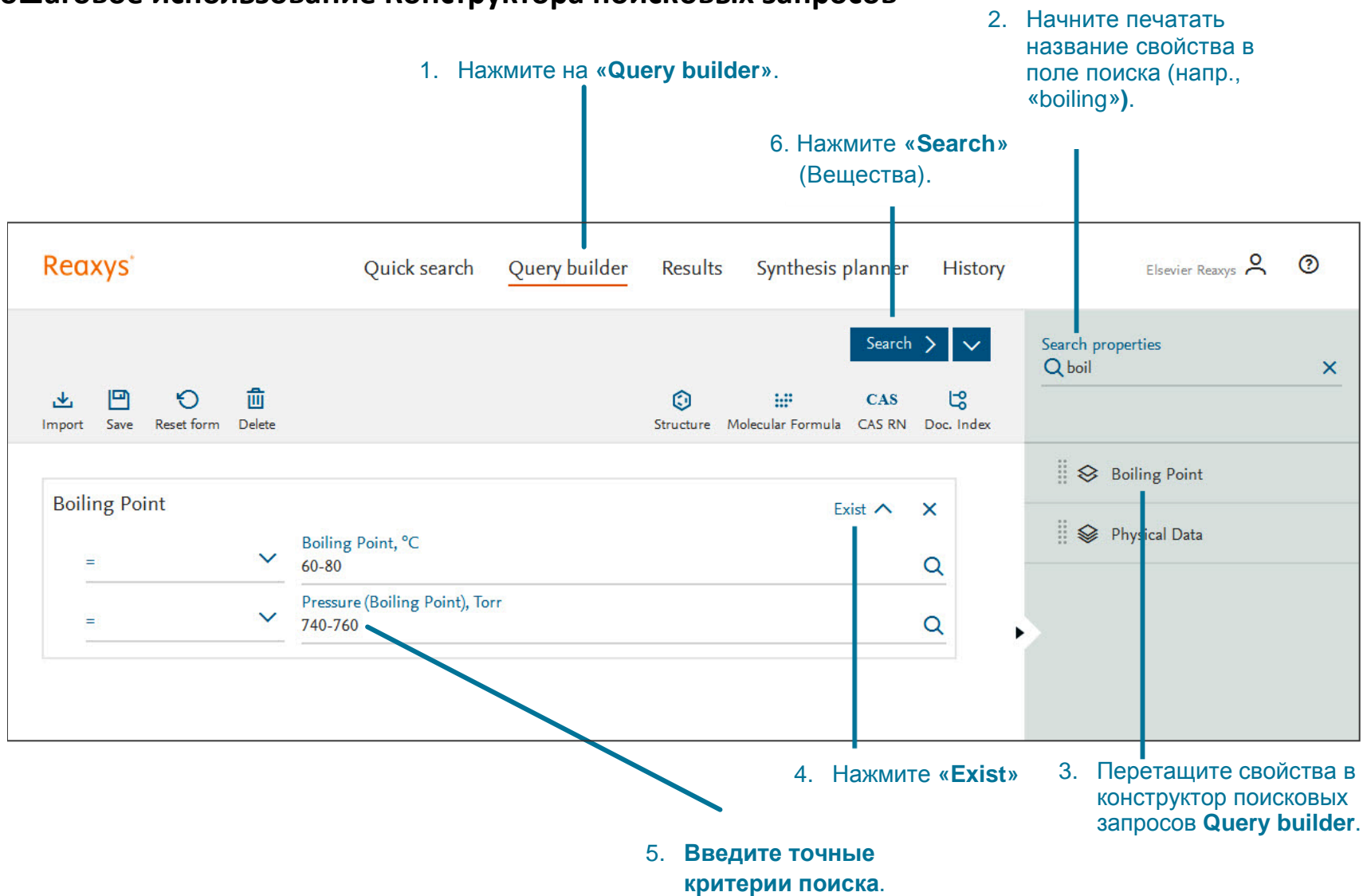
В исходном окне содержатся различные категории полей для поиска.



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

Нажмите на  для того, чтобы развернуть список полей поиска.

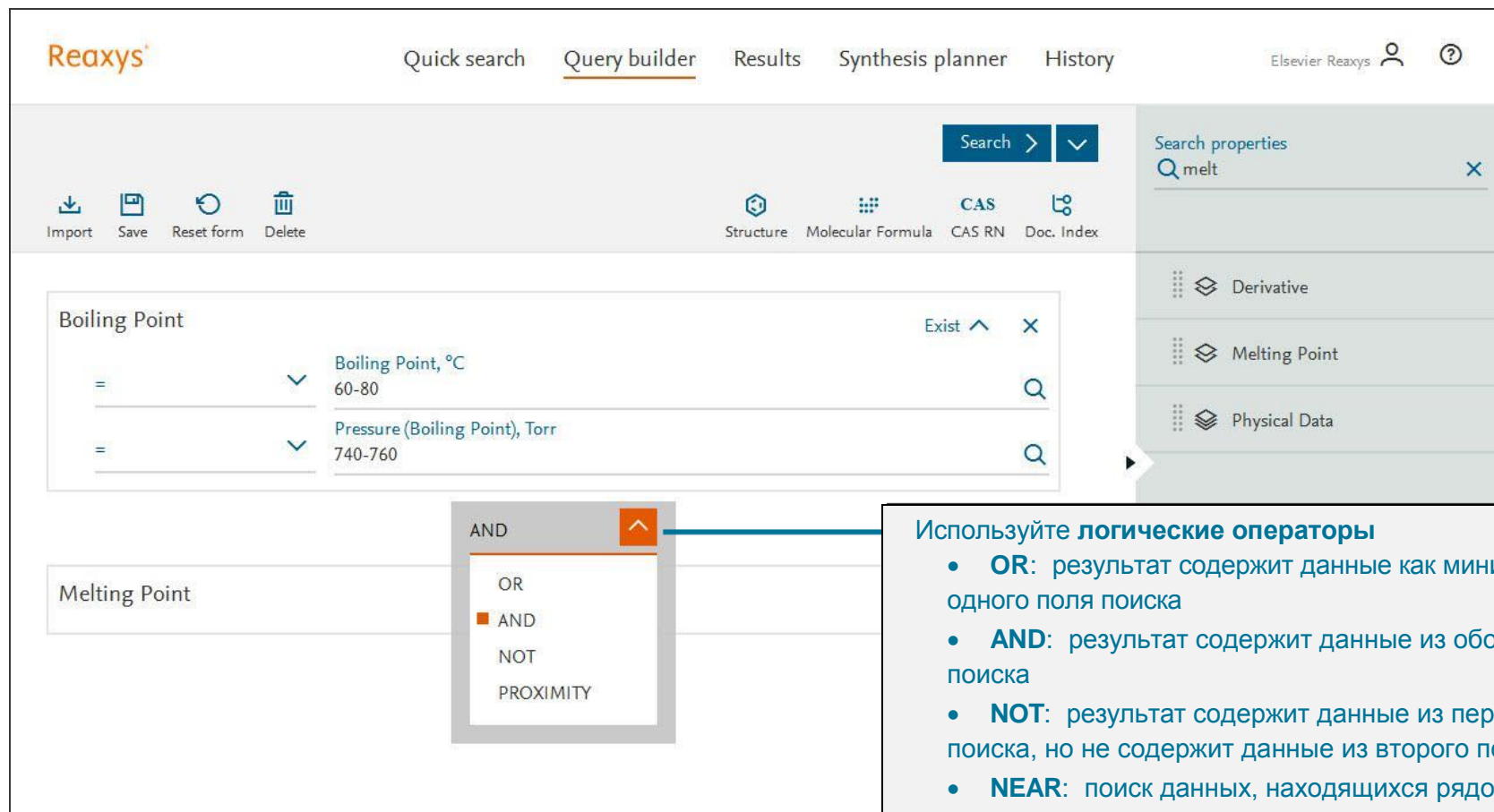
## Пошаговое использование Конструктора поисковых запросов



The screenshot shows the Reaxys Query builder interface. At the top, there are navigation tabs: Quick search, Query builder, Results, Synthesis planner, and History. On the right, there is a user profile for Elsevier Reaxys and a help icon. Below the navigation, there are icons for Import, Save, Reset form, and Delete. In the center, there are icons for Structure, Molecular Formula, CAS RN, and Doc. Index. A 'Search' button is visible. On the right side, there is a 'Search properties' panel with a search input containing 'boil' and a list of properties: Boiling Point and Physical Data. The main area contains a 'Boiling Point' section with two rows of criteria: 'Boiling Point, °C' with a value of '60-80' and 'Pressure (Boiling Point), Torr' with a value of '740-760'. An 'Exist' dropdown menu is open above the second row. A 'Search' button is also present in the main area.

1. Нажмите на «**Query builder**».
2. Начните печатать название свойства в поле поиска (напр., «boiling»).
3. Перетащите свойства в конструктор поисковых запросов **Query builder**.
4. Нажмите «**Exist**»
5. Введите точные критерии поиска.
6. Нажмите «**Search**» (Вещества).

## Конструктор поисковых запросов: использование нескольких свойств и логические операторы



The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. At the top, there are navigation tabs: 'Quick search', 'Query builder' (selected), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. Below the navigation is a search bar with 'melt' entered and a 'Search' button. To the right of the search bar is a 'Search properties' dropdown menu with options: 'Derivative', 'Melting Point', and 'Physical Data'. Below the search bar, there are two search criteria: 'Boiling Point' with values '60-80' and '740-760', and 'Melting Point'. A dropdown menu for logical operators is open, showing 'AND' selected. A blue arrow points from the 'AND' operator to a text box on the right.

### 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

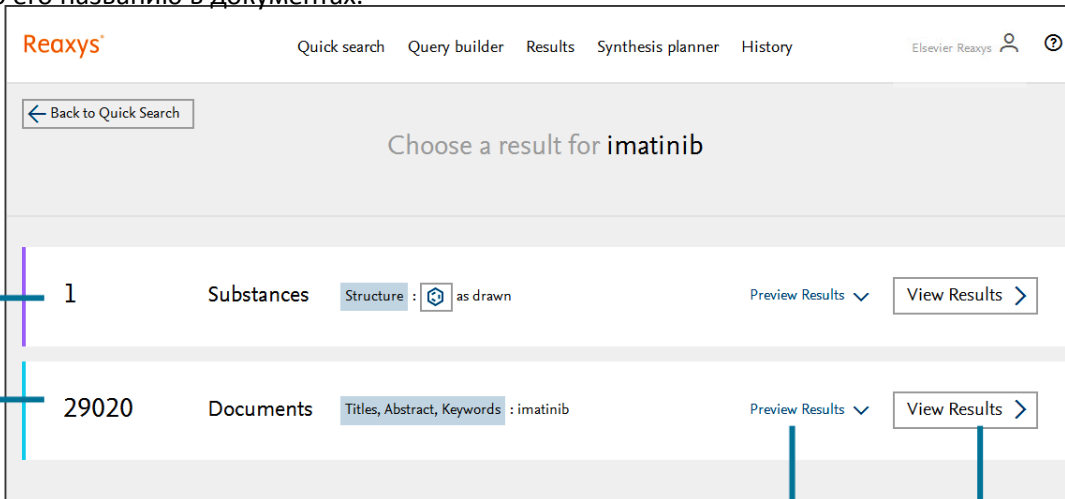
### Предварительный просмотр результатов быстрого поиска

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).



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.

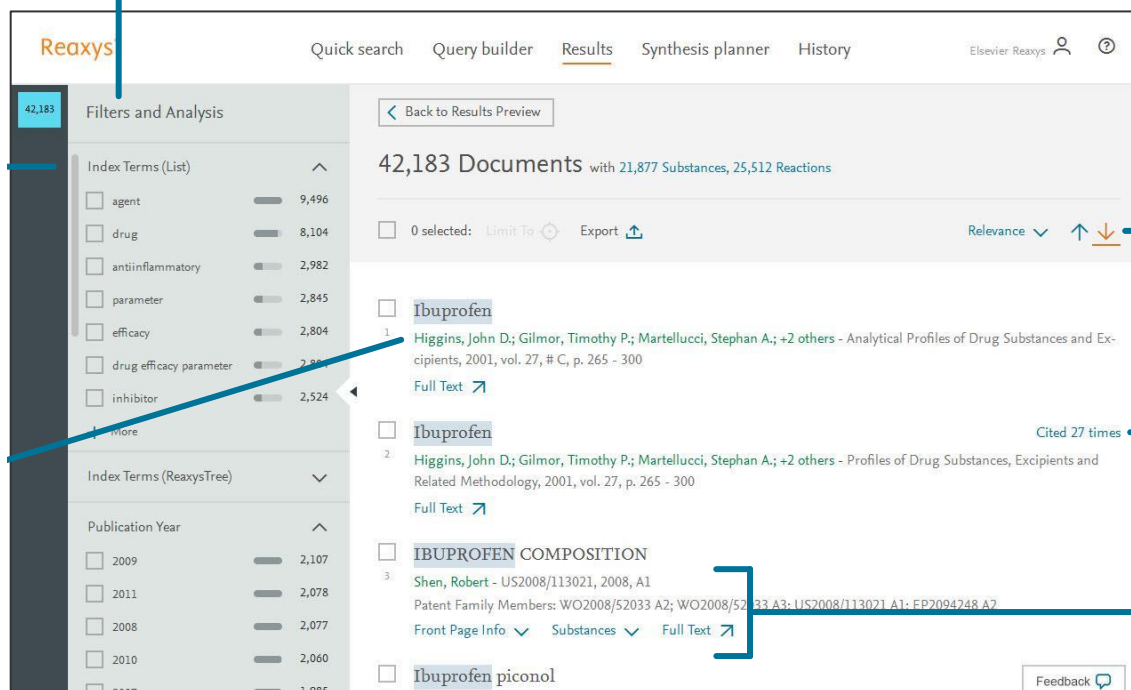
Используйте ссылки на данные о различных свойствах веществ.

## 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.



The screenshot displays the Reaxys search results interface. On the left, the 'Filters and Analysis' sidebar shows 42,183 results and lists various index terms like 'agent', 'drug', and 'inhibitor' with corresponding counts. The main results area shows 42,183 documents with 21,877 substances and 25,512 reactions. A list of results is shown, including articles by Higgins, John D. et al. and a patent by Shen, Robert. Annotations with blue lines point to the 'Filters and Analysis' sidebar, the 'Relevance' sorting dropdown, the 'Full Text' link for a patent, and the 'Cited 27 times' link for an article.

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

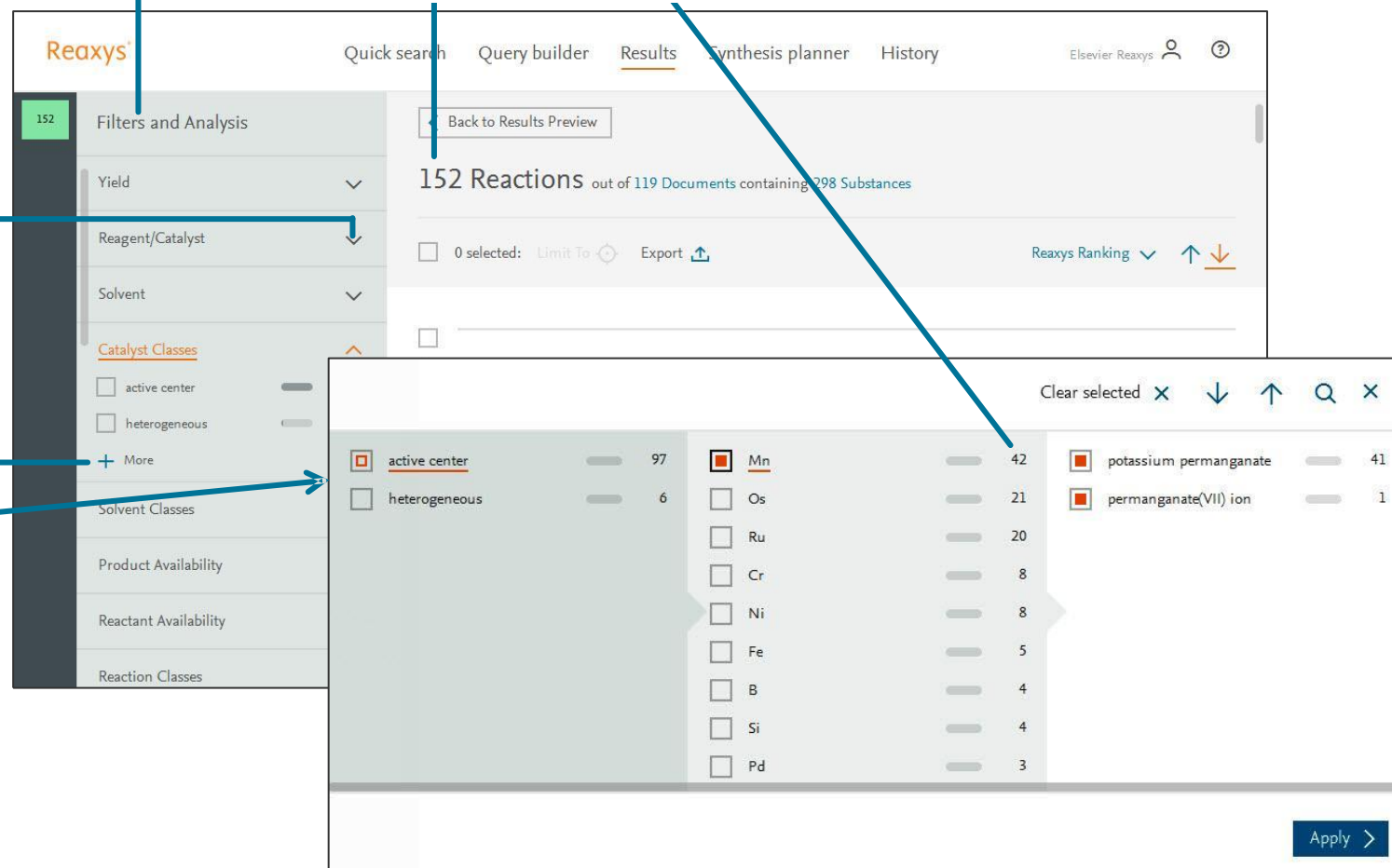
Функция «Фильтры и анализ» позволяет сузить результаты поиска:

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.

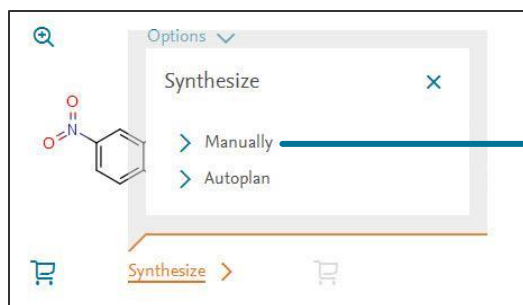


The screenshot shows the Reaxys interface with the 'Filters and Analysis' sidebar on the left. The main area displays '152 Reactions' and a list of filters. A zoomed-in view of the 'Catalyst Classes' filter is shown, with 'active center' selected, resulting in 42 reactions. The zoomed view also shows other filters like 'Mn', 'potassium permanganate', and 'permanganate(VII) ion'.

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

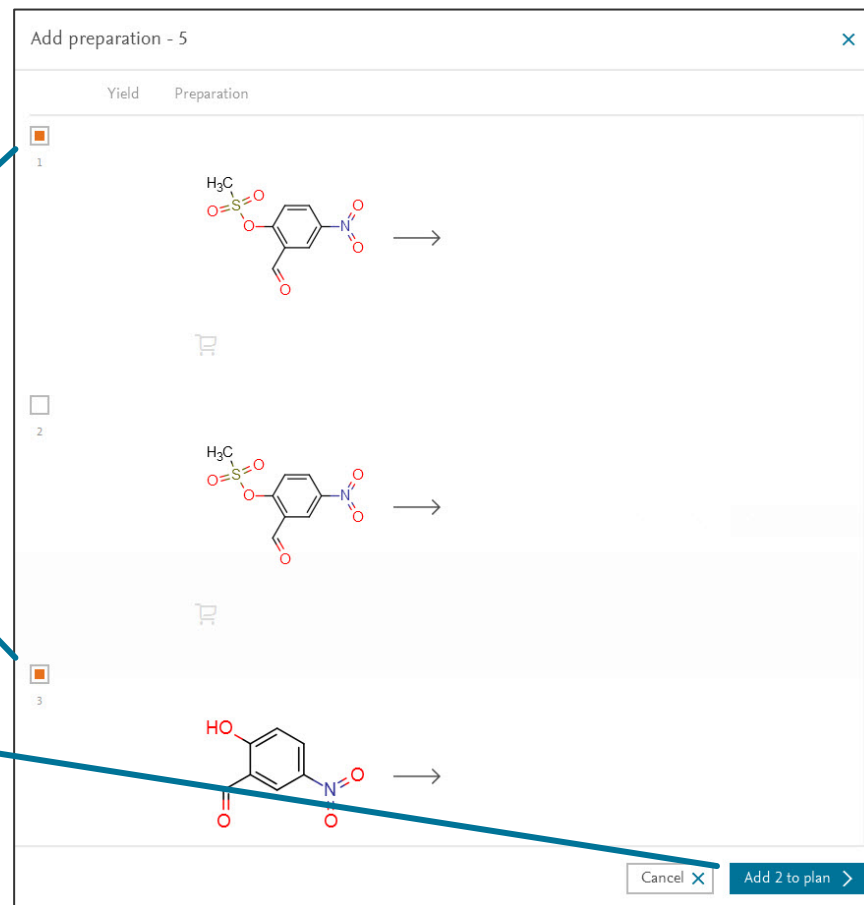
Вы можете планировать пути синтеза вручную, либо воспользоваться функцией автоматического планирования путей синтеза Reaxys (см. стр. 14). Для начала планирования путей синтеза нажмите **«Synthesize»**.



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.

The screenshot displays the Reaxys Synthesis Planner interface. A reaction scheme is shown with starting materials and intermediates (1a, 1b) leading to a final product. A context menu is open over the reaction, and a 'Conditions' window is displayed for 'Preparation - 1b'.

**Context Menu:**

- Show conditions
- Hide preparation
- Remove preparation

**Conditions Window:**

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, <b>2012</b> , vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 13 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>
	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, <b>2013</b> , vol. 10, # 5, p. 410 - 414 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 1 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>

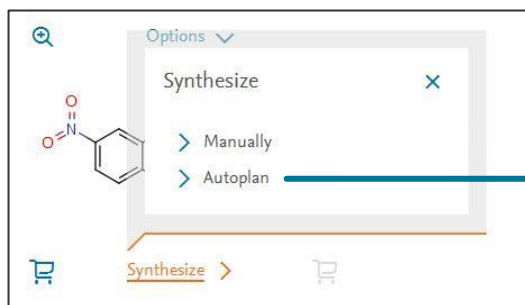
3. Нажмите на «**Show conditions**». Появятся экспериментальные данные для выбранного этапа синтеза, перемещайтесь вверх и вниз для просмотра деталей о других этапах синтеза.

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

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

## Автоматическое планирование путей синтеза

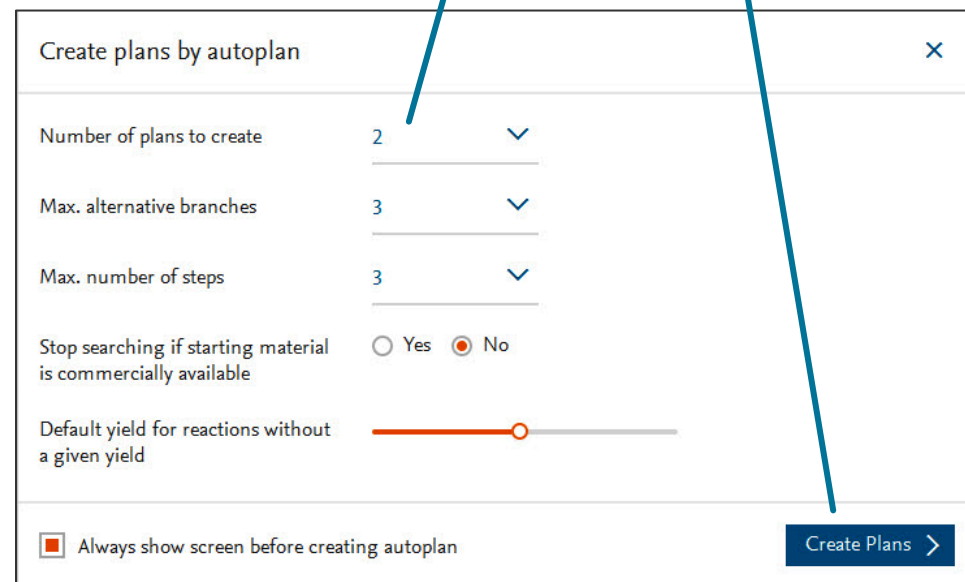
Позвольте Reaxys автоматически спланировать пути синтеза. Для начала планирования путей синтеза нажмите на **«Synthesize»**.



1. Выберите **«Autoplan»**.

2. Определите параметры для автоматического планирования путей синтеза.

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



## 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. A reaction scheme is displayed with four steps. Step 2 is highlighted with a blue box. A context menu is open over step 2, showing options: 'Show conditions', 'Hide preparation', and 'Remove preparation'. A 'Conditions' window is also open, showing details for 'Preparation - 2'.

**Conditions**

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 <a href="#">↗</a> Cited 5 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>
99%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 22.1667h Experimental Procedure <a href="#">v</a>	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 2012, vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 13 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>

Done [>](#)

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



## 5. Сохранение и экспорт результатов

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