

# Reaxys<sup>®</sup>

*Quick Reference Guide*



ELSEVIER

## Reaxys 검색 방법

- Reaxys 검색
- Quick Search – Text
- Quick Search – 구조/반응식
- Query Builder – Field/Forms
- 다수의 물성치 입력 / 연산자 이용

## Reaxys 검색 결과

- 검색 결과
- Quick search 또는 Query builder 결과 – Substances
- Quick search 또는 Query builder 결과 – Documents
- 결과 분석 – Filters 기능

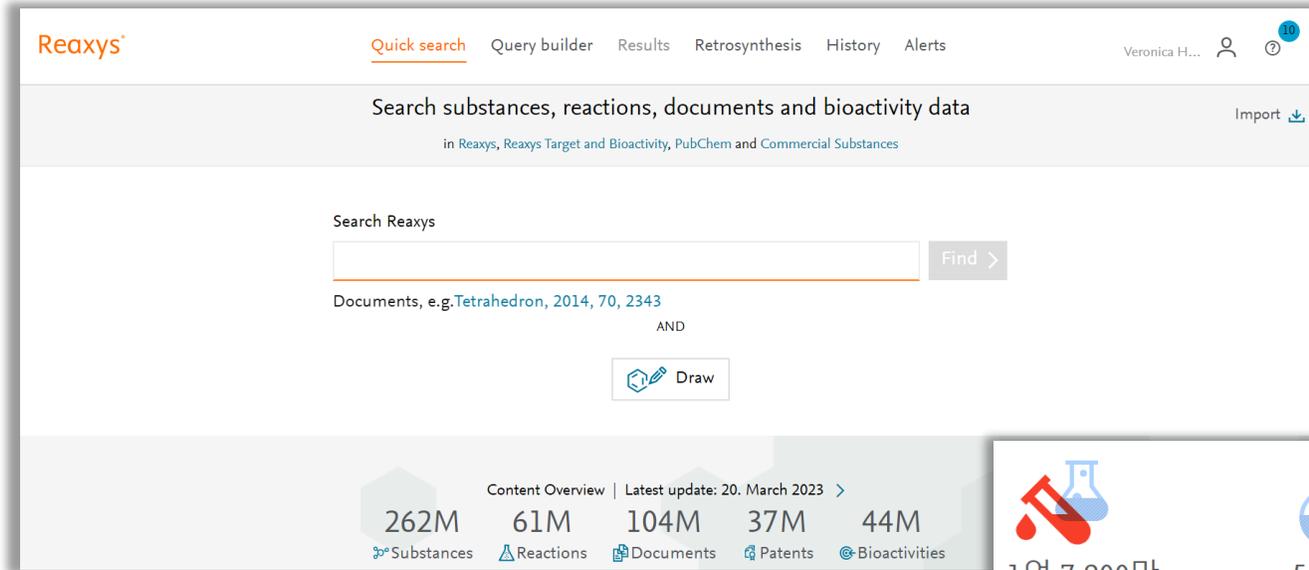
## Retrosynthesis (합성경로)

- Retrosynthesis (합성경로 설계) – Manually
- Retrosynthesis (합성경로 설계) - Autoplan

## 저장 및 반출하기

- 저장하기
- 반출하기 – Result Page
- 반출하기 – Retrosynthesis (합성경로)

# Reaxys® 빠른 검색과 강력한 쿼리 빌더로 R&D 생산성을 향상시키는 화학 데이터베이스



- Reaxys를 이용하여 어떤 화합물을 어떻게 만들지 결정
- 우수한 특성을 가진 분자를 합성하는 최신 경로 확인
- 특정 표적에 대해 향상된 활성을 가진 새로운 분자 발견
- 새로운 화학 간행물과 특허에 대한 최신 정보 확인
- 가장 신뢰할 수 있는 출발 물질과 중간체의 공급업체 확인
- 내부 및 외부 통합 데이터 검색

<p><b>1억 7,900만</b> 중 유래가 있는 천연물에 대한 데이터를 포함하는 유기, 무기, 유기 금속 물질</p>	<p><b>5,700만</b> 화학 반응</p>	<p><b>5억</b> 물질 특성, 스펙트럼 데이터, 반응 데이터를 포함하는 공개된 실험 사실</p>
<p><b>8,600만</b> 여러 출판사에서 출간한 16,000여 편의 화학 관련 정기 간행물 컬렉션에서 제공되는 문서</p>	<p><b>3,000만</b> 105개 특허 사무소의 특허. 제목, 초록 및 청구항은 영어로 번역됩니다</p>	<p><b>6</b> 화학에 대한 학제적 관점을 제공하는 색인 출처</p>

Reaxys에서 제공하는 화학 데이터

# Reaxys® 빠른 검색과 강력한 쿼리 빌더로 R&D 생산성을 향상시키는 화학 데이터베이스



## 빠른 검색

- 구조와 텍스트(특성, 반응, 대상 등) 검색을 결합하여 필요한 정보를 빠르게 검색

Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts

Search for "1h nmr spectrum" AND

Search Reaxys

"1h nmr spectrum"

Substance Properties, e.g. solubility of vitamin D3

AND

CC1=C(C(=O)OC2C=CC(=O)OC2C)C=CC3=C1C=CC(=O)OC3

On all atoms

## 실험 특성

- 다른 어떤 화학 데이터베이스보다 더 많은 실험 특성 유형
- 5억 개 이상의 데이터 포인트 제공

Hit Data - 6

NMR Spectroscopy - 6 hits out of 33

Description (NMR Spectroscopy)	Nucleus (NMR Spectroscopy)	Solvents (NMR Spectroscopy)	Temperature (NMR Spectroscopy), °C	Frequency (NMR Spectroscopy), MHz	Location
Chemical shifts, Spectrum	13C	dimethylsulfoxide-d6		100	
Chemical shifts, Spectrum	1H	chloroform-d1		400	Paragraph 0064
Chemical shifts, Spectrum	13C	chloroform-d1		101	Paragraph 0064

## 결과 필터링

- 각 결과 유형에 대한 적절한 필터 활용
- 반응의 경우, 하부 구조, 수득률, 용매, 개별 단계 반응, 실험 절차에 따른 반응을 기준으로 필터링

Filters

17 Reactions are of this reaction type, containing 15 steps

Reaction Type:

Yield:

Solvent:

Reaction Temperature:

Reaction Time:

Reaction Order:

Reaction Step:

Reaction Step Type:

Reaction Step Name:

Reaction Step Location:

Reaction Step Description:

Reaction Step Reagents:

Reaction Step Conditions:

Reaction Step Mechanism:

Reaction Step Notes:

Reaction Step References:

Reaction Step Comments:

Reaction Step Attachments:

Reaction Step Tags:

Reaction Step Keywords:

Reaction Step Synonyms:

Reaction Step Aliases:

Reaction Step Identifiers:

Reaction Step Descriptors:

Reaction Step Classifiers:

Reaction Step Labels:

Reaction Step Markers:

Reaction Step Indicators:

Reaction Step Signals:

Reaction Step Warnings:

Reaction Step Errors:

Reaction Step Messages:

Reaction Step Notifications:

Reaction Step Alerts:

Reaction Step Announcements:

Reaction Step Updates:

Reaction Step Changes:

Reaction Step Corrections:

Reaction Step Deletions:

Reaction Step Restorations:

Reaction Step Archiving:

Reaction Step Unarchiving:

Reaction Step Purging:

Reaction Step Backup:

Reaction Step Restore:

Reaction Step Export:

Reaction Step Import:

Reaction Step Sync:

Reaction Step Share:

Reaction Step Print:

Reaction Step Download:

Reaction Step Upload:

Reaction Step Move:

Reaction Step Copy:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

Reaction Step Undo:

Reaction Step Redo:

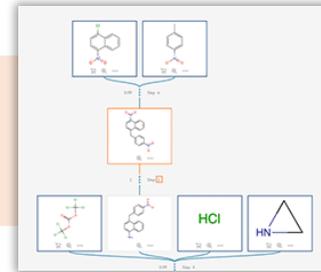
Reaction Step Cut:

Reaction Step Paste:

Reaction Step Delete:

## 역합성

- 공개된 경로와 예측된 경로를 결합하여 알려진 화합물과 새로운 화합물에 대한 혁신적인 합성 경로 설계



## 생체 활성 데이터

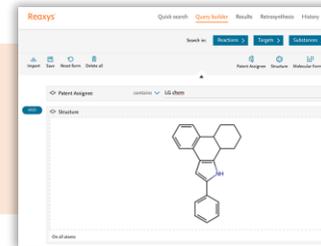
- 히트맵을 사용하여 구조-활성 관계 분석을 제공하는 정규화된 생체활성 데이터

In vitro Efficacy - 11

id	Parameter	Value (SD)	Action	Target	Reference
1	Inhibitor (Relative expression)	Active	Inhibitor	Nuclear factor-erythroid 2-related factor 2 (NRF2)	Wathamon, James H.; Long, Tracy Paul; Valente, Joseph. <i>Journal of Chemical Biology</i> , 2016, vol. 13, 4, p. 139-149. Full Text > Cited 22 times > Details > Abstract >
2	Inhibitor (Relative expression)	Active	Inhibitor	Nuclear factor-erythroid 2-related factor 2 (NRF2)	Wathamon, James H.; Long, Tracy Paul; Valente, Joseph. <i>Journal of Chemical Biology</i> , 2016, vol. 13, 4, p. 139-149. Full Text > Cited 22 times > Details > Abstract >
3	Inhibitor (Relative expression)	Active	Inhibitor	Nuclear factor-erythroid 2-related factor 2 (NRF2)	Wathamon, James H.; Long, Tracy Paul; Valente, Joseph. <i>Journal of Chemical Biology</i> , 2016, vol. 13, 4, p. 139-149. Full Text > Cited 22 times > Details > Abstract >
4	Inhibitor (Relative expression)	Active	Inhibitor	Nuclear factor-erythroid 2-related factor 2 (NRF2)	Wathamon, James H.; Long, Tracy Paul; Valente, Joseph. <i>Journal of Chemical Biology</i> , 2016, vol. 13, 4, p. 139-149. Full Text > Cited 22 times > Details > Abstract >

## 쿼리 빌더

- 화학 구조와 여러 데이터 필드를 결합한 고급 검색 수행
- 양수인 검색으로 경쟁 우위 유지



## 내보내기 / 알림

- 공유, 분석, 구매를 위해 선택한 데이터를 여러 형식으로 반출 가능
- 새로운 논문, 특허에 대한 최신 정보를 위한 알림 설정

Create Alert

Query: Quick Search: [ ]

Alert name:

Send alerts to:

Frequency:  on:

Send alert:

Do not send alerts with zero results

# Reaxys 검색 방법

- [Reaxys 검색](#)
- [Quick Search – Text](#)
- [Quick Search – 구조/반응식](#)
- [Query Builder – Field/Forms](#)
- [다수의 물성치 입력 / 연산자 이용](#)

# Reaxys 검색

물질 (SUBSTANCES)	
기능	설명
<a href="#">텍스트로 Quick search</a>	<p>검색 칸에 물질명, 분자식 또는 CAS 번호를 입력하고 <b>Search</b> 클릭.</p> <p>예 :</p> <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>
<a href="#">구조 또는 반응식에 따른 Quick search</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Draw 라는 아이콘을 클릭</li> <li>물질의 구조식 그리기</li> <li>Marvin JS 혹은 ChemDrawJS의 구조편집기 사용 방법에 대한 상세내용은 아래의 팁 참조             <ol style="list-style-type: none"> <li>구조식을 이용해 <b>물질 검색</b></li> <li><a href="#">ChemAxon Marvin JS 사용에 관한 팁</a></li> <li><a href="#">ChemDrawJS 사용에 관한 팁</a></li> </ol> </li> <li><b>Transfer to Query</b> 를 클릭한 후, <b>Search</b> 를 클릭</li> </ol>
<a href="#">Query builder</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li><b>Query builder</b> 클릭</li> <li>검색버튼에서 쿼리항목 (Structure, Molecular Formula 또는 CAS RN) 중 하나 선택</li> <li><b>Search Fields</b> 를 사용하여 Substance 와 관련된 항목 검색 예) Molecular formula, Cas Number 와 같은 물성과 관련된 원하는 항목 선택</li> <li>복수의 검색항목일 경우, 원하는 Field 를 추가하고 적절한 논리연산자를 사용</li> </ol>

반응 (REACTIONS)	
기능	설명
<a href="#">텍스트로 Quick search</a>	<p>검색 칸에 검색어를 입력 한 후 <b>Search</b> 를 클릭</p> <p>예 :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>preparation of porphyrine</li> <li>phosphorylation</li> <li>Suzuki coupling</li> <li>Adler phenol oxidation</li> </ul>
<a href="#">구조 또는 반응식에 따른 Quick search</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Draw 라는 아이콘을 클릭</li> <li>반응의 구조식을 그리기</li> <li>Marvin JS 의 구조편집기 사용방법에 대한 상세내용은 아래의 팁 참조             <ol style="list-style-type: none"> <li>구조식을 이용해 <b>반응 검색</b></li> <li><a href="#">ChemAxon Marvin JS 의 사용에 관한 팁</a></li> <li><a href="#">ChemDrawJS 사용에 관한 팁</a></li> </ol> </li> <li><b>Transfer to Query</b> 를 클릭한 후, <b>Search</b> 를 클릭</li> </ol>
<a href="#">Query builder</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li><b>Query builder</b> 클릭</li> <li>검색버튼에서 쿼리항목(Structure, Molecular Formula 또는 CAS RN) 중 하나를 선택 또는</li> <li><b>Search Field</b> 를 사용하여 원하는 Reaction 정보 검색 예) Yield, Catalyst, Reaction Condition. 원하는 항목을 선택</li> <li>복수의 검색항목일 경우, 원하는 Field 를 추가하고 적절한 논리연산자 사용</li> <li>화면의 가장 상단의 <b>Search</b> 를 클릭, <b>Reactions</b> 등 검색을 선택 원하는 콘텐츠 선택</li> </ol>

# Reaxys 검색



문헌 (LITERATURE)	
기능	설명
<a href="#">Quick search</a>	<p>검색 칸에서 용어를 입력 한 후 <b>Search</b> 클릭</p> <p>예 :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• publications about quasicrystals</li> <li>• Tetrahedron, 2014, 70, 2343</li> <li>• published by Schrock</li> </ul>
<a href="#">구조 혹은 반응식에 따른 Quick search</a>	<p><b>Note:</b> 구조 또는 반응식 쿼리는 물질과 반응을 검색 결과에서 모든 데이터들은 원문과 연동되도록 정보가 참조되며, 원문링크를 클릭하며 원문 페이지로 연결 (원문을 구독하고 있는 경우 자동으로 페이지 표시)</p>
<a href="#">Query builder</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Query builder 를 클릭</li> <li>2. 검색버튼에서 쿼리항목 (Structure, Molecular Formula 또는 CAS RN) 중 하나를 선택 <b>또는</b></li> <li>3. Search Field 를 사용하여 문헌과 관련된 항목 검색 예) Author, Journal Title</li> <li>4. 복수의 검색항목일 경우, 적절한 논리연산자 사용</li> <li>5. 화면의 가장 상단의 Document 을 클릭 후 검색을 진행</li> </ol>

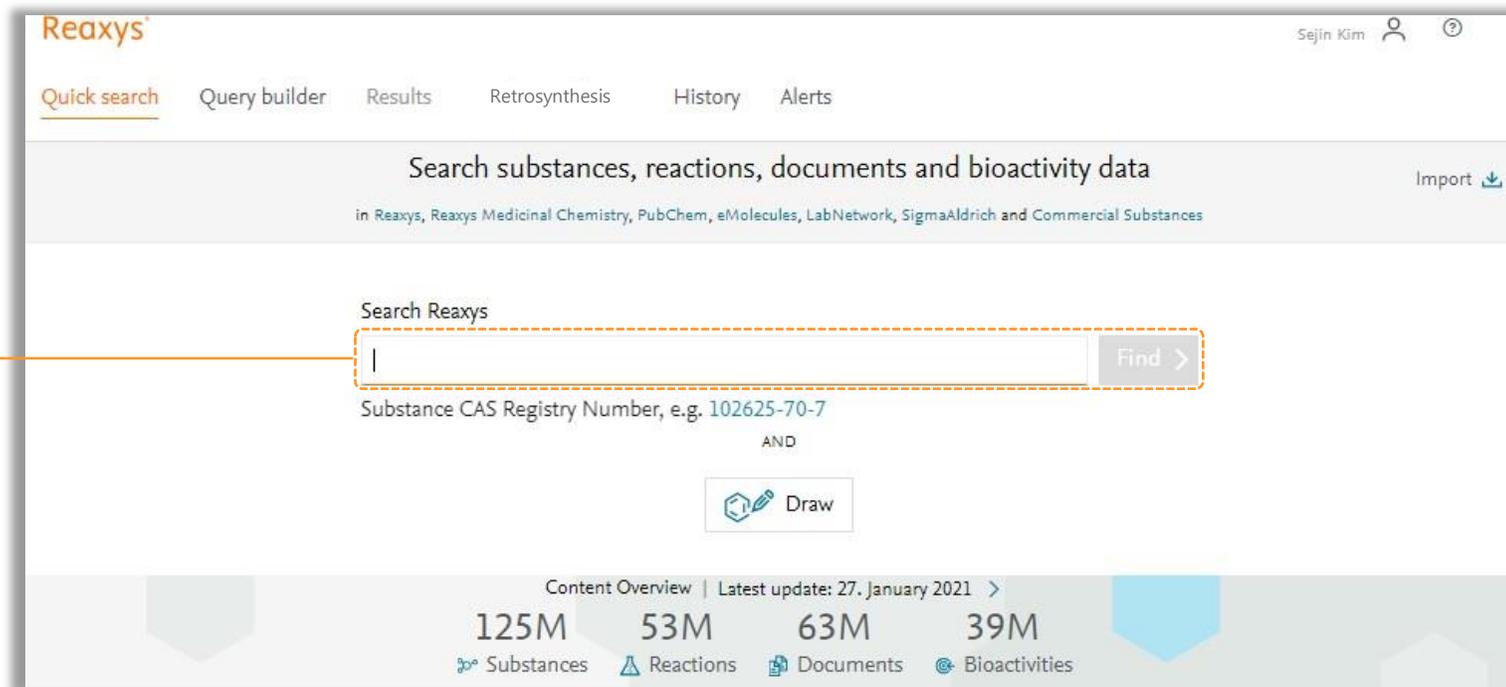
물성 (PROPERTIES)	
기능	설명
<a href="#">Quick search</a>	<p>검색 칸에서 용어를 입력 한 후 <b>Search</b> 를 클릭합니다.</p> <p>예 :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• boiling point of benzene</li> <li>• density of quinolone</li> </ul>
<a href="#">구조 혹은 반응식에 따른 Quick search</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Draw 라는 아이콘을 클릭</li> <li>2. 물질의 구조식을 그리기</li> <li>3. Marvin JS 혹은 ChemDrawJS 의 구조편집기 사용 방법에 대한 상세내용은 아래의 팁 참조             <ol style="list-style-type: none"> <li>a. 구조식을 이용해 <b>물질 검색</b></li> <li>b. <a href="#">ChemAxon Marvin JS 사용 팁</a></li> <li>c. <a href="#">ChemDrawJS 사용 팁</a></li> </ol> </li> <li>4. 키워드 검색창에 물성치를 입력 (예 boiling point)</li> <li>5. 검색하기를 클릭</li> </ol>
<a href="#">Query builder</a>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Query builder 를 클릭</li> <li>2. 검색버튼에서 쿼리항목 (Structure, Molecular Formula 또는 CAS RN) 중 하나 선택 <b>또는</b></li> <li>3. Search Field 를 사용하여 물성과 관련된 항목 검색 예) Melting Point, Spectroscopy</li> <li>4. 복수의 검색항목일 경우, 적절한 논리연산자 사용</li> <li>5. 화면의 가장 상단의 Substance 을 클릭 후 검색 진행</li> </ol>

# Quick Search - Text

검색창에 물질명, 분자식 또는 CAS 번호 입력 후 Find 클릭

Ex)

- 물질명: Atenolol
- 분자식: Pt(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub>
- CAS 번호: 102625-70-7



Reaxys<sup>®</sup> Sejin Kim

Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts

Search substances, reactions, documents and bioactivity data Import

in Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, PubChem, eMolecules, LabNetwork, SigmaAldrich and Commercial Substances

Search Reaxys

| Find >

Substance CAS Registry Number, e.g. 102625-70-7

AND

Draw

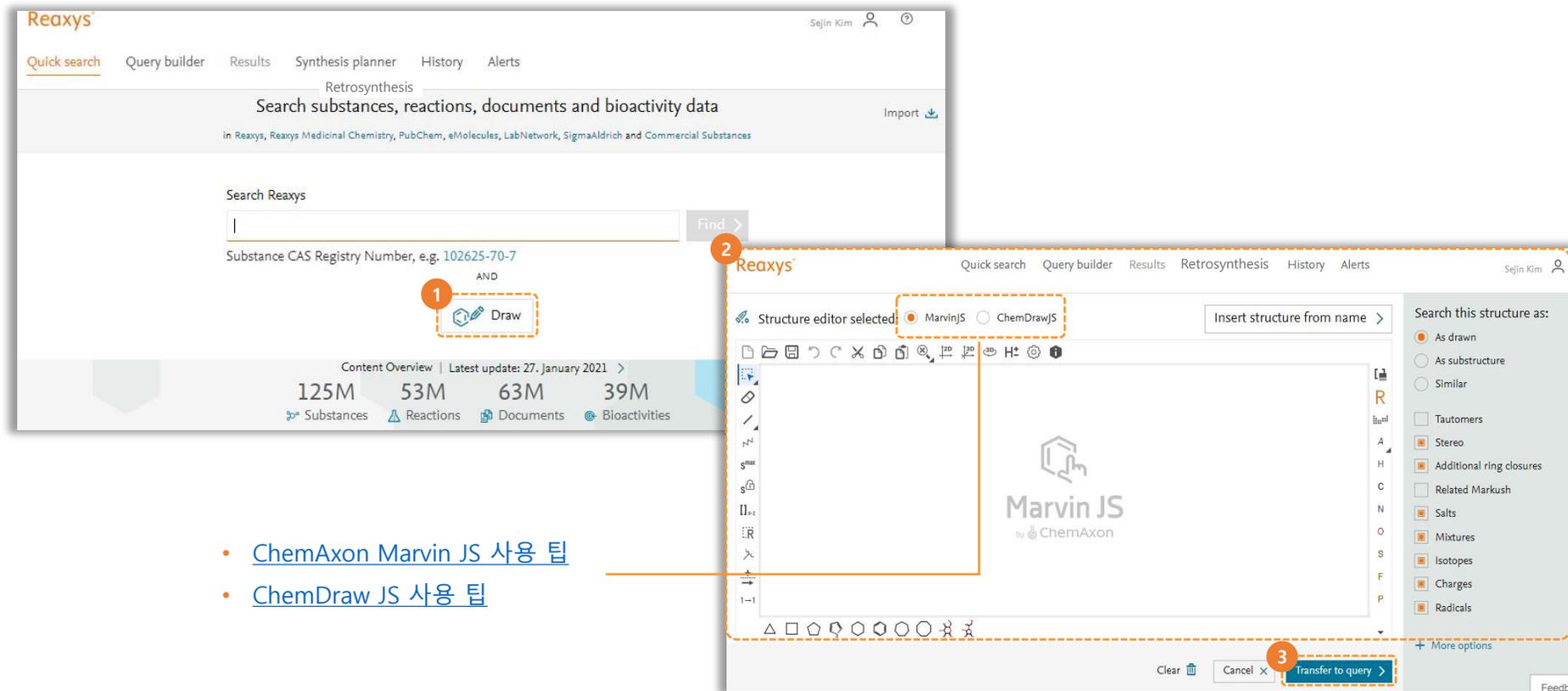
Content Overview | Latest update: 27. January 2021 >

125M 53M 63M 39M

Substances Reactions Documents Bioactivities

# Quick Search – 구조/반응식

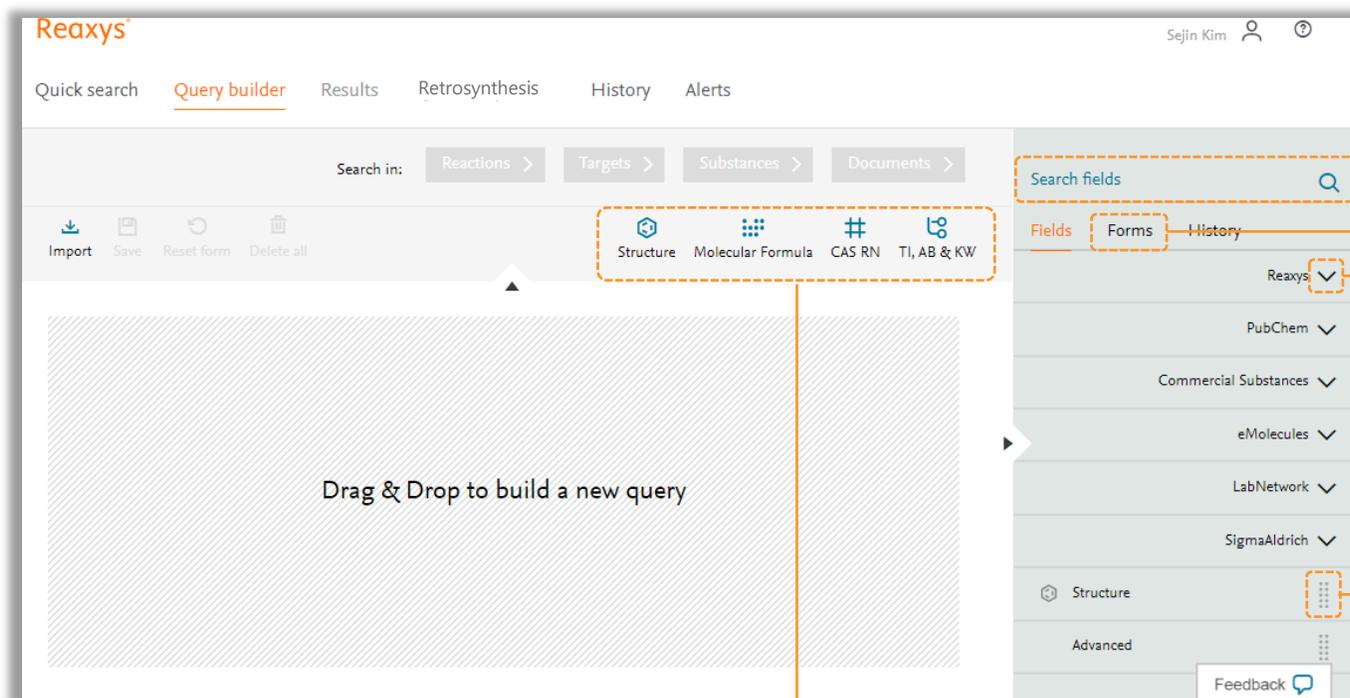
- ① 검색창 아래의 Draw 클릭
- ② ChemAxon Marvin JS 혹은 ChemDraw JS 툴 사용으로 구조 또는 반응식 입력
- ③ Transfer to Query 클릭



The screenshot illustrates the Reaxys interface for quick search. It shows the search bar, the 'Draw' button (Step 1), the 'Structure editor selected' dialog box (Step 2) with 'MarvinJS' selected, and the 'Transfer to query' button (Step 3). The interface also displays search results for 'Retrosynthesis' and 'Search substances, reactions, documents and bioactivity data'.

- [ChemAxon Marvin JS 사용 팁](#)
- [ChemDraw JS 사용 팁](#)

# Query Builder - Fields/Forms



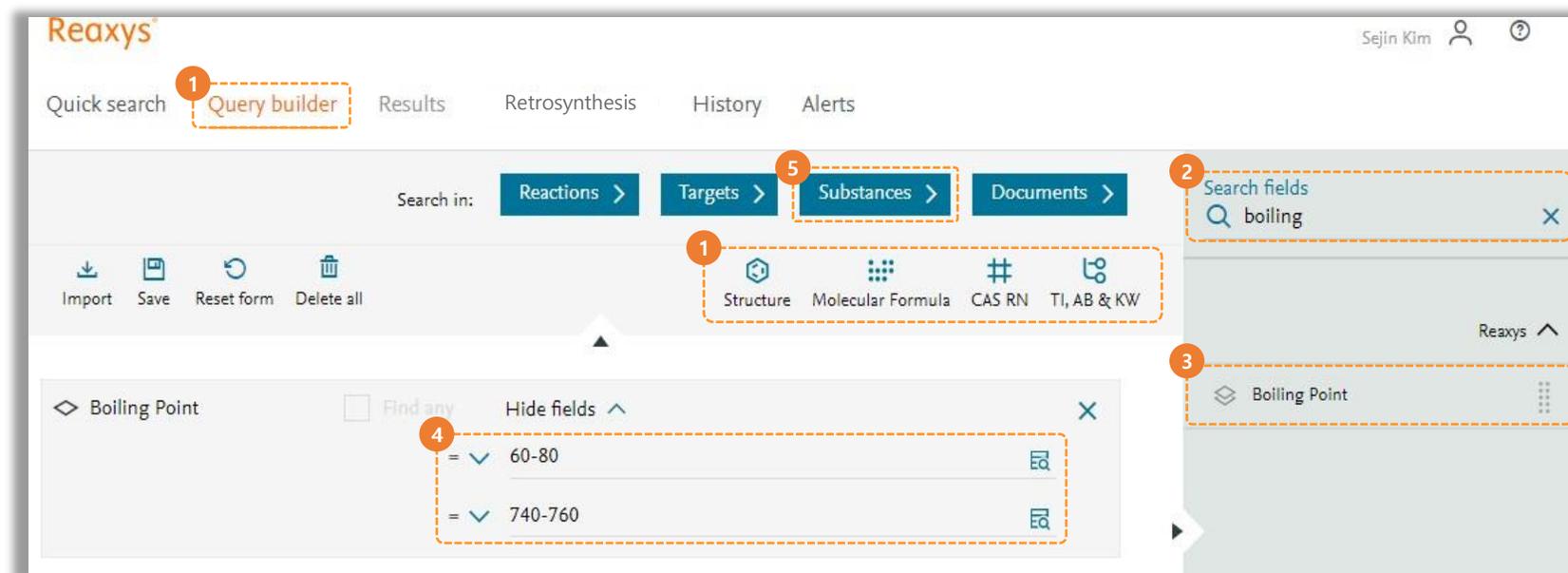
- 검색하고자 하는 필드명 입력  
ex) boiling point 검색을 위해서는 boil 입력
- Forms 클릭 시 일반 종류의 물성치, 기본적인 필드명 표시
- 해당 아이콘 클릭 시, 필드 전체 리스트 표시
- 필드를 드래그하여 Query builder에 드롭하는 것이 가능하다는 기호

- 기본적인 일부 피드 표시 (다양한 필드 검색 후 이용 가능)

# Query Builder - Fields/Forms

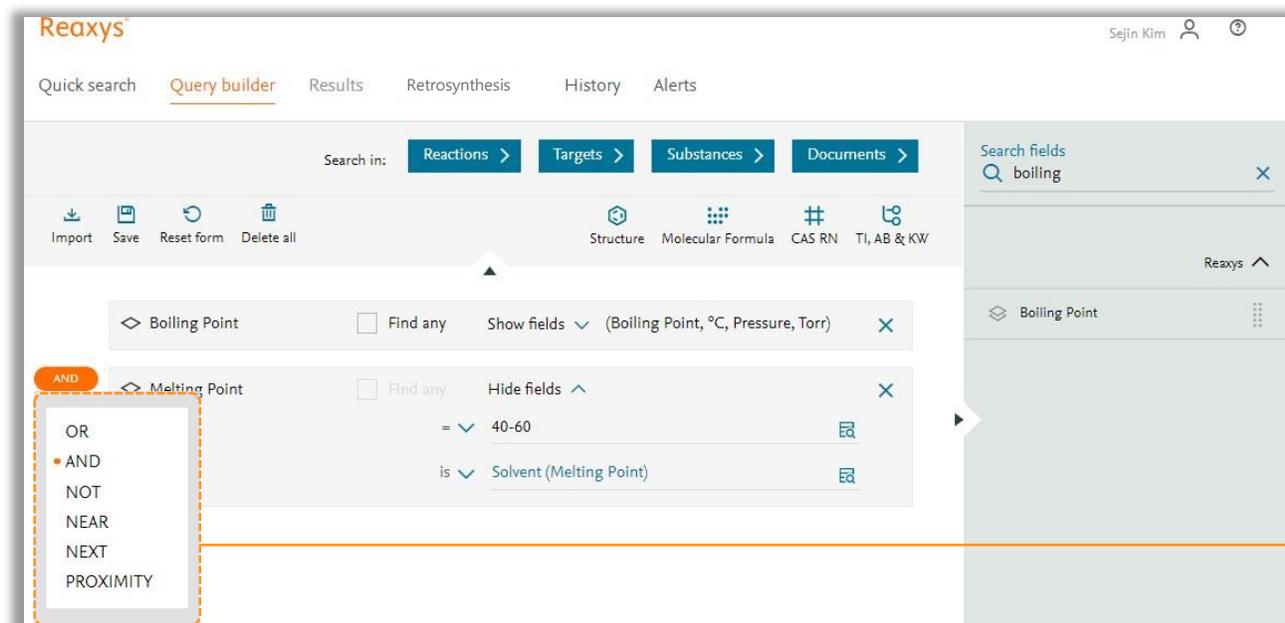
- ① Query builder 클릭 후 쿼리항목 중 한 가지 선택
- ② Search Field에 boiling 등의 물성치명 입력
- ③ 물성치를 클릭 혹은 드래그하여 Query builder에 드롭
- ④ 검색 조건 입력
- ⑤ Substances 클릭

\*복수 검색항목이 있을 경우, 원하는 Field 추가 후 적절한 논리연산자 사용



The screenshot displays the Reaxys Query Builder interface. At the top, the 'Query builder' tab is selected (1). Below it, the 'Search in:' section has 'Substances' selected (5). A search field on the right contains the text 'boiling' (2). In the center, a menu of search criteria is shown, with 'Structure' selected (1). Below this, a 'Boiling Point' field is expanded, showing two value ranges: '60-80' and '740-760' (4). On the right side, the 'Boiling Point' field is also visible in a list (3).

# 다수의 물성치 입력 / 연산자 이용



## 원하는 연산자 클릭

- OR: 필드 중 적어도 하나로부터 데이터를 포함
- AND: 두 필드에서 데이터를 포함
- NOT: 첫 번째 필드의 데이터는 포함, 두 번째는 제외
- NEAR: 순서에 상관없이 근접 용어를 검색
- NEXT: 지정된 순서로 근접 용어 검색
- PROXIMITY: 일반적 매개 변수 (Parameter) 필드에 사용, 서로 연관성이 있는 두 필드 내용 검색

# Reaxys 검색 결과

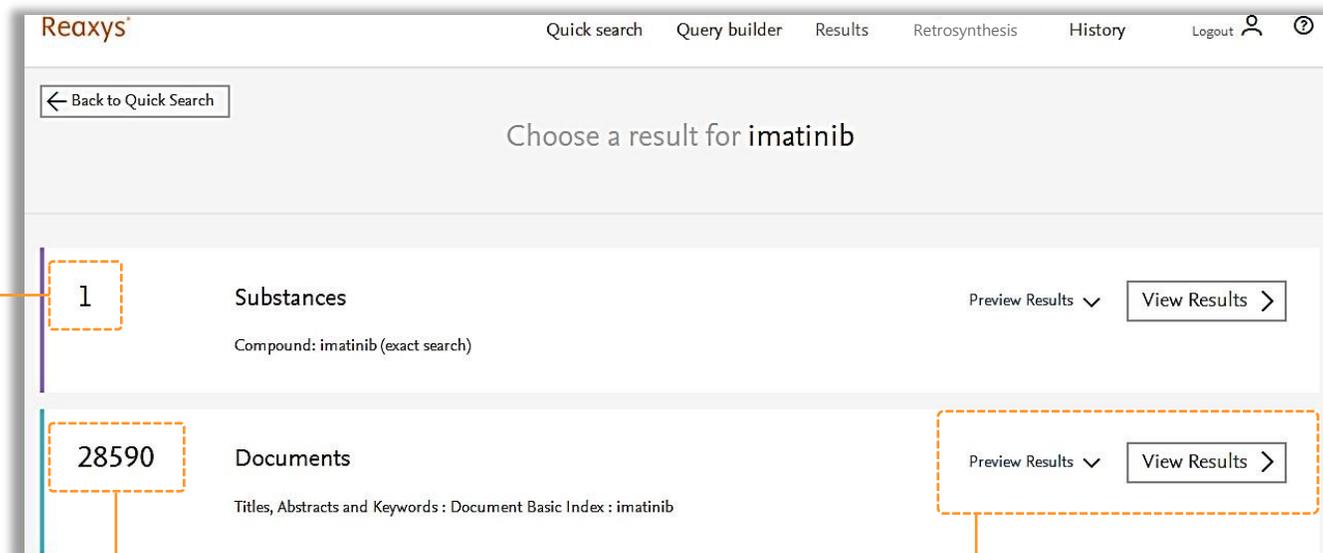
- [검색 결과](#)
- [Quick search 또는 Query builder 결과 – Substances](#)
- [Quick search 또는 Query builder 결과 – Documents](#)
- [결과 분석 – Filters 기능](#)

# 검색 결과

## Quick search에서 검색 리뷰

- Reaxys에서는 Quick search의 입력한 검색 항목을 분석 후, 결과 리뷰에서 여러 결과 전체를 표시 (쿼리 해석 특성에 따라 Quick search 쿼리만 표시하기도 함)
- 검색어에 따라 달라지는 전체 결과  
ex) Reaxys는 물질의 이름은 물질기록에서는 구조식으로, 문서기록에서는 각각의 이름으로 물질 검색

\*Reaxys의 검색은 입력한 검색어의 다른 조합에 대한 반응의 기록 또는 문서기록을 보여주는 옵션 존재



The screenshot shows the Reaxys search results page for the query 'imatinib'. The page title is 'Choose a result for imatinib'. There are two main sections: 'Substances' and 'Documents'. The 'Substances' section shows 'Compound: imatinib (exact search)' with a count of '1' and a 'View Results >' button. The 'Documents' section shows 'Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : imatinib' with a count of '28590' and a 'View Results >' button. A 'Back to Quick Search' button is located at the top left of the results area.

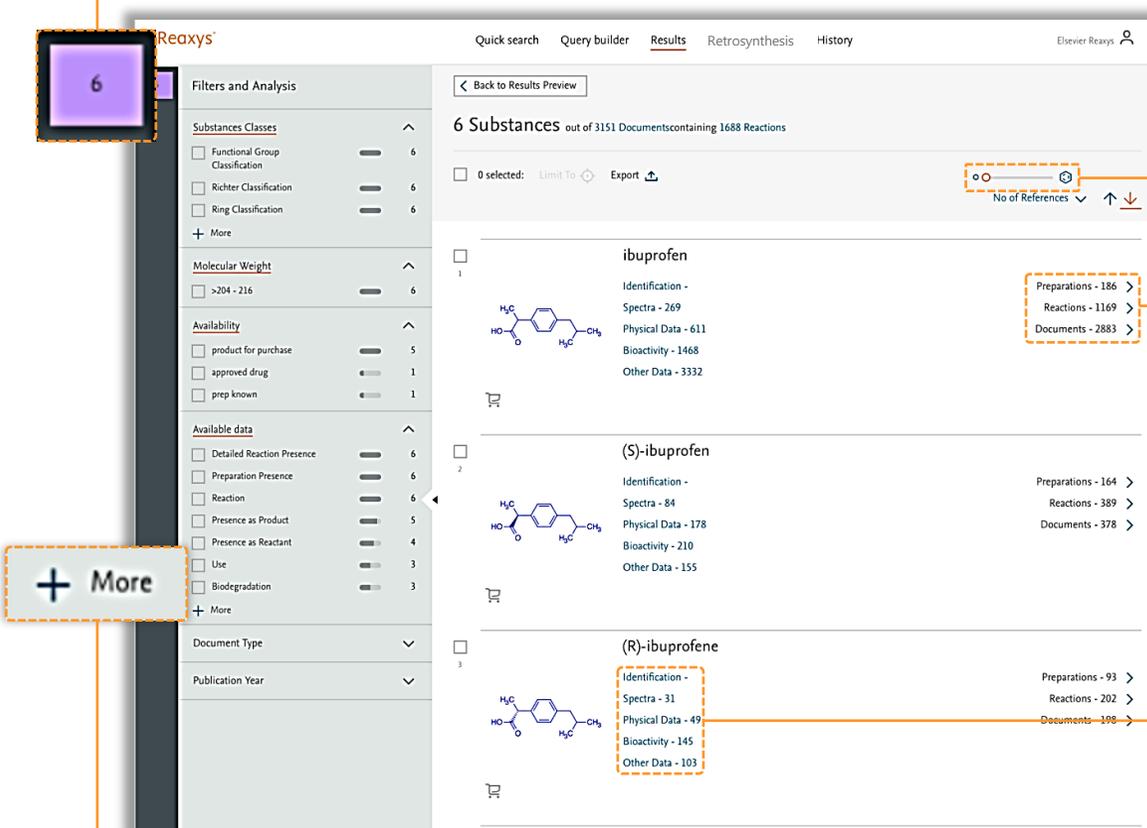
- 구조의 정확한 검색을 통해 나온 물질 기록이 하나라는 표시

- 텍스트 용어의 검색을 통해 발견한 문서 기록이 28,000여개가 있음을 표시

- Preview Results: 검색결과 전체에서 상위 3개의 결과 확인
- View Results: 검색 결과 전체 확인

# Quick search 또는 Query builder 결과 - Substances

- 네비게이션을 사용하여 세션 추적



Reaxys

Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis History Elsevier Reaxys

6 Substances out of 3151 Documents containing 1688 Reactions

0 selected: Limit To Export

No of References

ibuprofen

Identification - Spectra - 269 Physical Data - 611 Bioactivity - 1468 Other Data - 3332

(S)-ibuprofen

Identification - Spectra - 84 Physical Data - 178 Bioactivity - 210 Other Data - 155

(R)-ibuprofene

Identification - Spectra - 31 Physical Data - 49 Bioactivity - 145 Other Data - 103

Preparations - 186 Reactions - 1169 Documents - 2883

Preparations - 164 Reactions - 389 Documents - 378

Preparations - 93 Reactions - 202 Documents - 108

Filters and Analysis

Substances Classes

- Functional Group Classification 6
- Richter Classification 6
- Ring Classification 6

Molecular Weight

- >204 - 216 6

Availability

- product for purchase 5
- approved drug 1
- prep known 1

Available data

- Detailed Reaction Presence 6
- Preparation Presence 6
- Reaction 6
- Presence as Product 5
- Presence as Reactant 4
- Use 3
- Biodegradation 3

Document Type

Publication Year

+ More

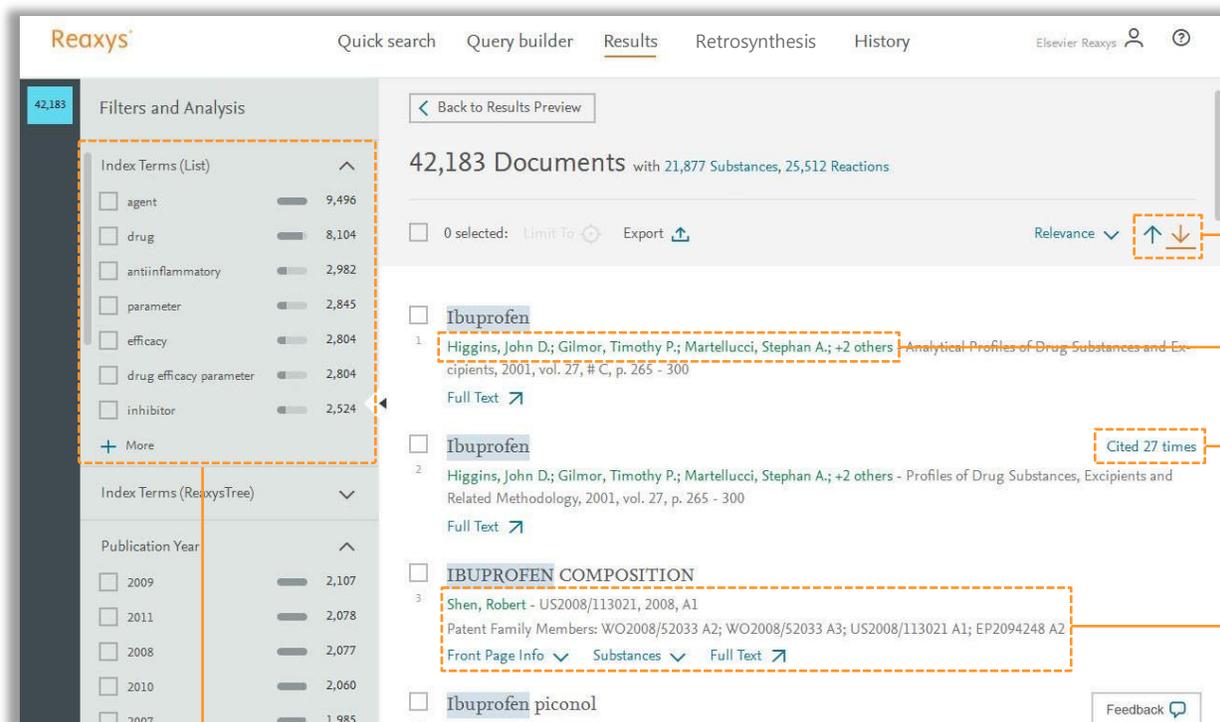
- 기본 표시는 조회수를 나타내지만, 다른 옵션도 사용 가능  
- 슬라이더로 구조식 확대 가능

- 링크 클릭 시, 준비/반응/문서(문헌) 정보 표시

- 링크 클릭 시, 물질에 관한 특성 정보 확인

- More 클릭 시, 나머지 폴더 옵션 표시

# Quick search 또는 Query builder 결과 - Documents



The screenshot shows the Reaxys search results page for 'Ibuprofen'. The interface includes a 'Filters and Analysis' sidebar on the left with 'Index Terms (List)' and 'Index Terms (ReaxysTree)'. The main content area displays '42,183 Documents with 21,877 Substances, 25,512 Reactions'. A list of search results is shown, with the first result highlighted: 'Ibuprofen' by Higgins, John D.; Gilmor, Timothy P.; Martellucci, Stephan A.; +2 others. The result includes a 'Full Text' link and a 'Cited 27 times' indicator. The third result is 'IBUPROFEN COMPOSITION' by Shen, Robert - US2008/113021, 2008, A1, with a 'Front Page Info' link. The interface also features a 'Relevance' dropdown menu and a 'Feedback' button.

• 색인 용어로 주제별 문서 검색

• 기본 표시는 관련성 높은 순으로 표시되지만, 다른 옵션 사용 가능

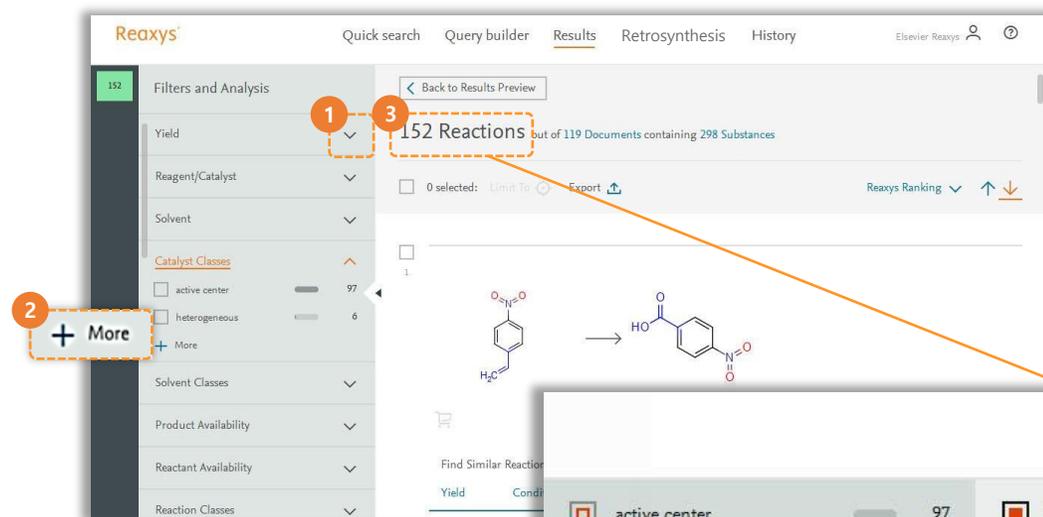
• 저자 링크 클릭 시, 해당 저자의 출판문헌에 관한 상세 정보, Scopus의 추가 분석 검색

• 링크 클릭 시, Scopus 인용 표시

• Front Page info: 특허 기록

• Substances, Reactions, Abstract 또는 Index Terms의 링크 클릭

# 결과 분석 - Filters 기능

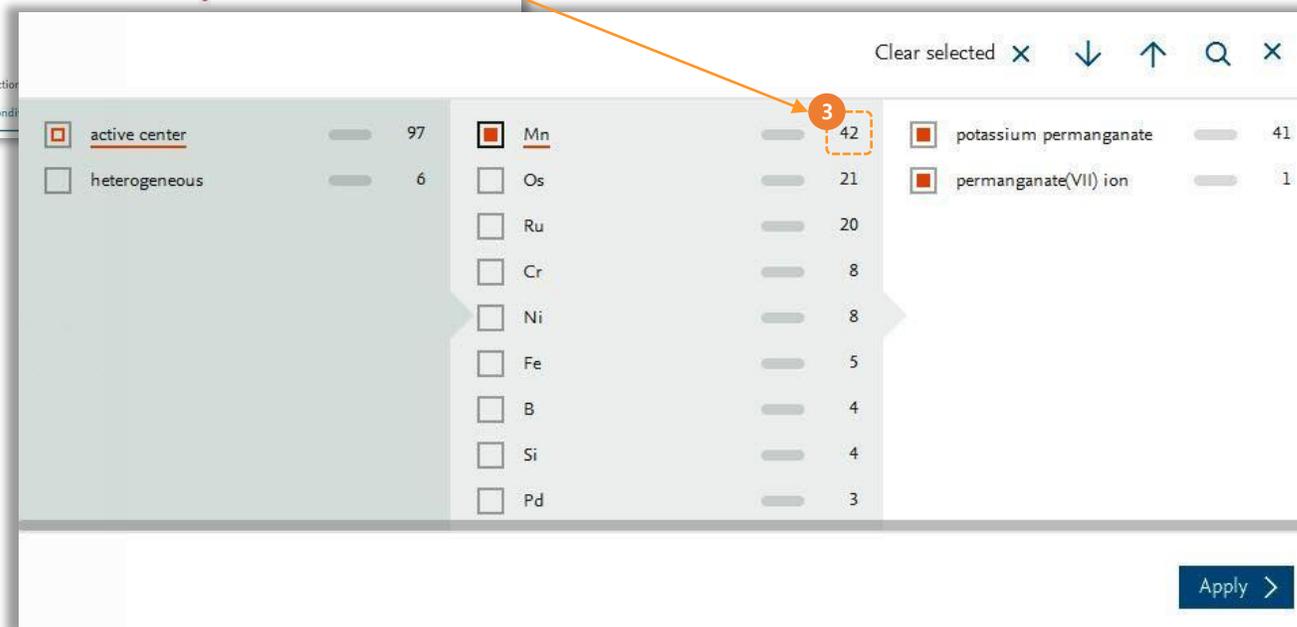


Reaxys interface showing the 'Filters and Analysis' sidebar. The sidebar lists various filter categories such as Yield, Reagent/Catalyst, Solvent, and Catalyst Classes. A red box highlights the '152 Reactions' count, and a red box highlights the '+ More' button. A red circle '1' is next to the sidebar header, a red circle '2' is next to the '+ More' button, and a red circle '3' is next to the '152 Reactions' count.

## Filters 기능으로 결과를 검색

- 색인용어는 체계적으로 되어 있으며, 기록을 필터링하는 데 있어 가장 적합함

- ① 해당 아이콘 클릭 시, 다른 필드에 대한 필터 및 분석 옵션 표시
- ② More 클릭 시, 그 밖의 필터 옵션 표시
- ③ 원하는 필터 적용 후, 152였던 반응기록이 42로 감소



Expanded filter options showing a list of filters and their counts. A red box highlights the '42' count for the 'Mn' filter, and a red circle '3' is next to it. The interface shows a list of filter options with their respective counts.

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

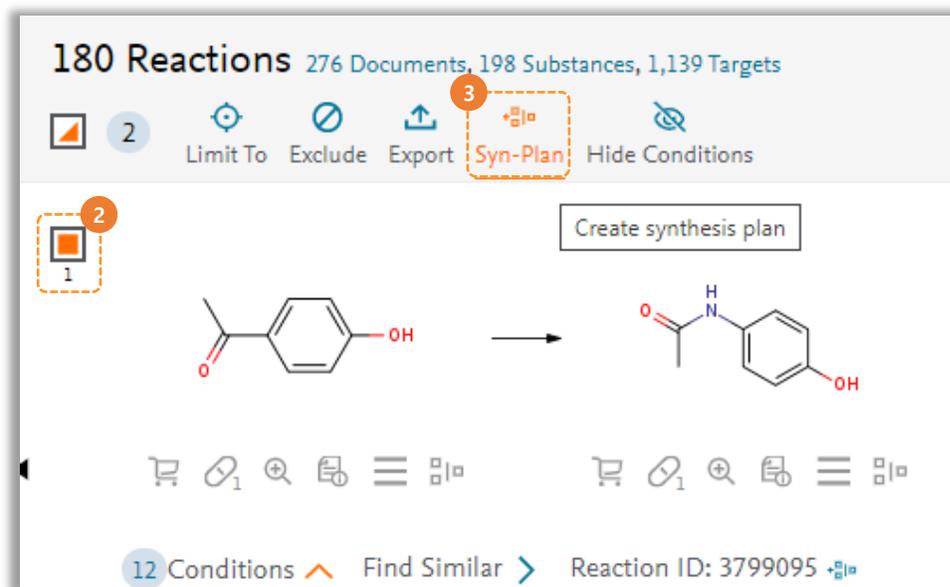
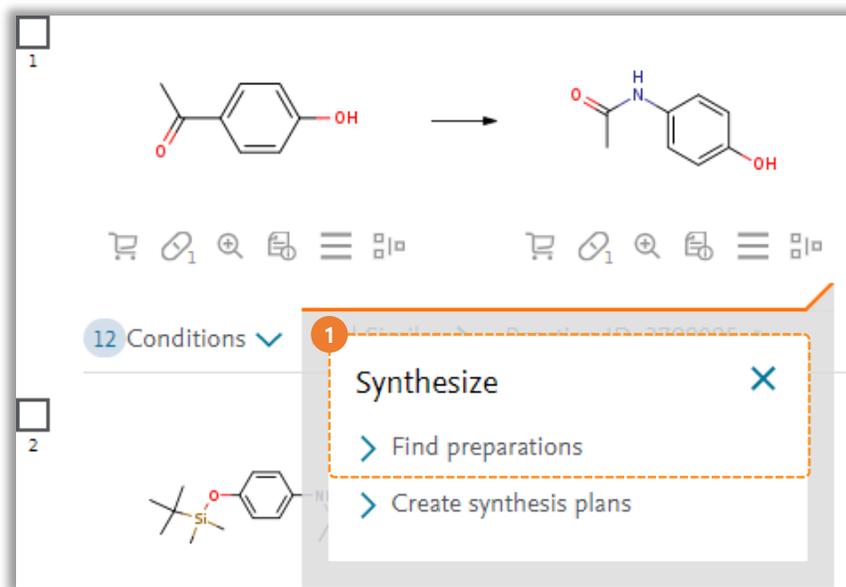
# Retrosynthesis (합성경로)

- [Retrosynthesis \(합성경로 설계\) - Manually](#)
- [Retrosynthesis \(합성경로 설계\) - Autoplan](#)

# Retrosynthesis (합성경로 설계) - Manually

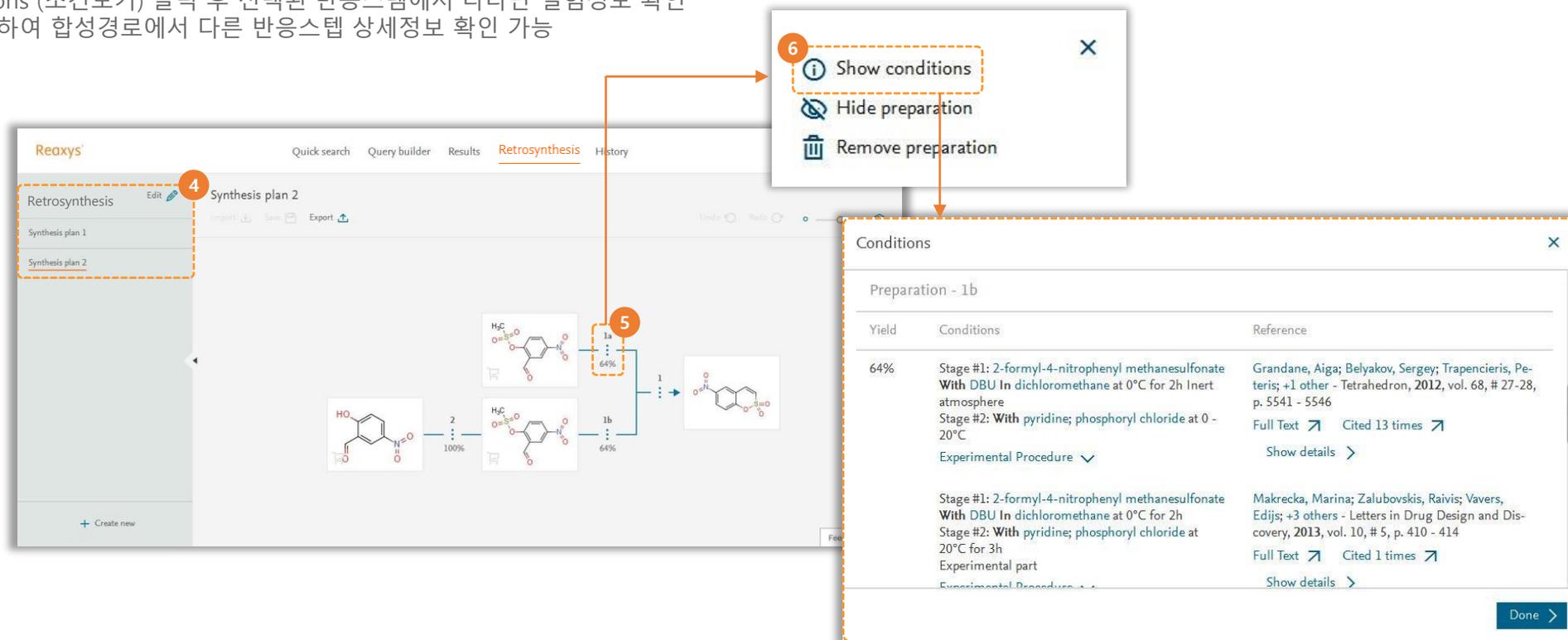
Reaxys에서 수동으로 합성 경로 설계

- ① 구조 아래의 합성 (Synthesize) 클릭 후 Find Preparations 선택
- ② 새로운 창에서 원하는 합성 반응식 여러 가지 선택  
(생성물의 구조는 시작물질 구조와 동일하여 나타나지 않음)
- ③ Syn-Plan 클릭



# Retrosynthesis (합성경로 설계) - Manually

- Retrosynthesis 에서 검토하고자 하는 합성경로 클릭
- Synthesis step options  클릭 후 열어보기
  - Show conditions (조건보기)
  - Hide preparations (숨기기)
  - Add preparations (추가하기)
  - Remove preparations (삭제하기)
- Show conditions (조건보기) 클릭 후 선택된 반응시스템에서 나타난 실험정보 확인
  - 스크롤다운 하여 합성경로에서 다른 반응시스템 상세정보 확인 가능



The screenshot displays the Reaxys Retrosynthesis interface. On the left, a sidebar shows 'Retrosynthesis' with 'Synthesis plan 2' selected. The main area shows a reaction scheme with three steps. Step 1 is highlighted with a red circle '5'. A red circle '6' points to a 'Show conditions' popup menu. A red circle '4' points to the 'Synthesis plan 2' header. The 'Conditions' popup window is open, showing details for 'Preparation - 1b'.

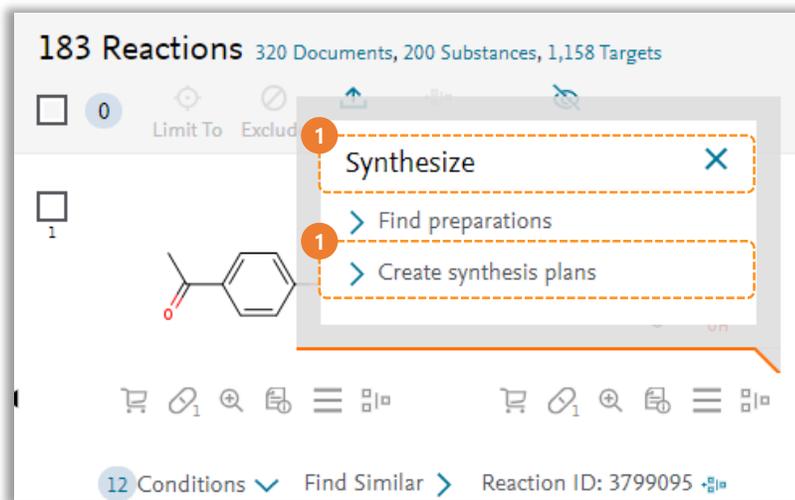
Yield	Conditions	Reference
64%	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate With DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Inert atmosphere Stage #2: With pyridine; phosphoryl chloride at 0 - 20°C Experimental Procedure 	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 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 Experimental Procedure 	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 

# Retrosynthesis (합성경로 설계) - Autoplan

Reaxys에서 **자동으로** 합성 경로 설계

- ① 구조 아래의 합성 (Synthesize) 클릭 후 Create Synthesis plans 클릭
- ② 자동 합성 경로 생성을 위한 Parameter 설정
- ③ Create Plans 클릭



183 Reactions 320 Documents, 200 Substances, 1,158 Targets

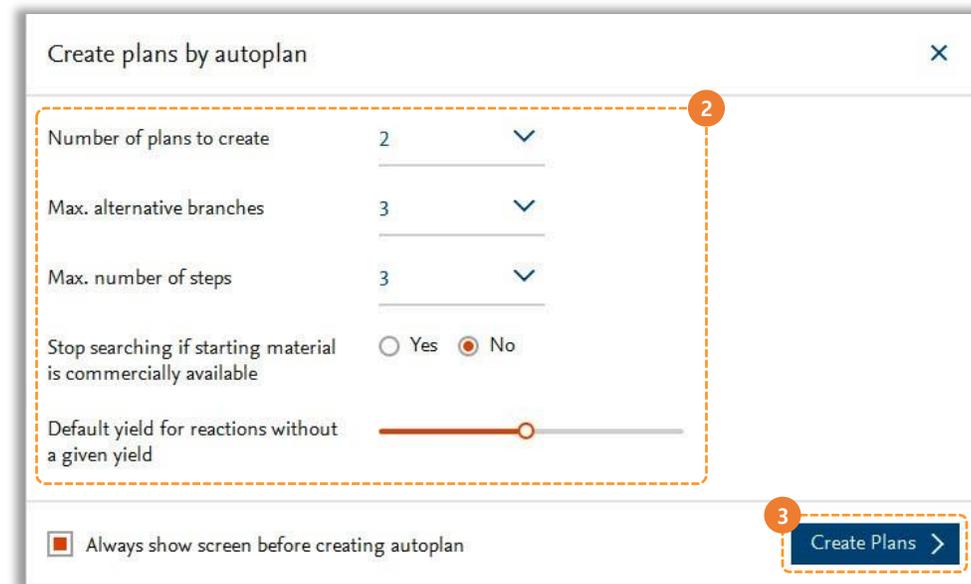
0 Limit To Exclud

1 Synthesize

1 Find preparations

1 Create synthesis plans

12 Conditions Find Similar Reaction ID: 3799095



Create plans by autoplan

Number of plans to create 2

Max. alternative branches 3

Max. number of steps 3

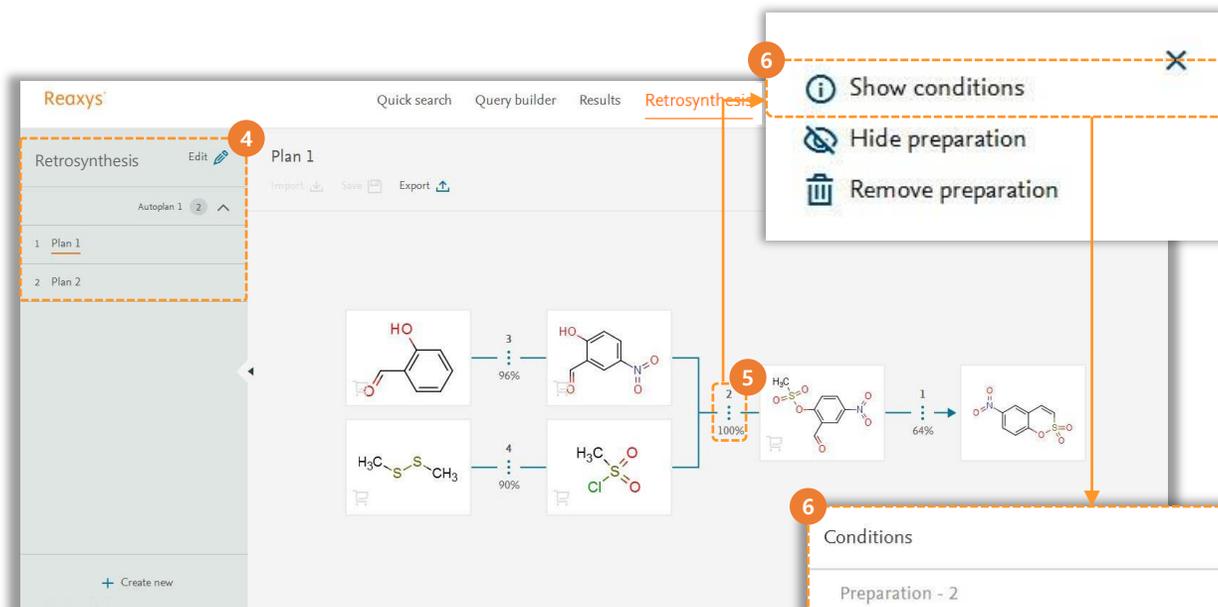
Stop searching if starting material is commercially available  Yes  No

Default yield for reactions without a given yield

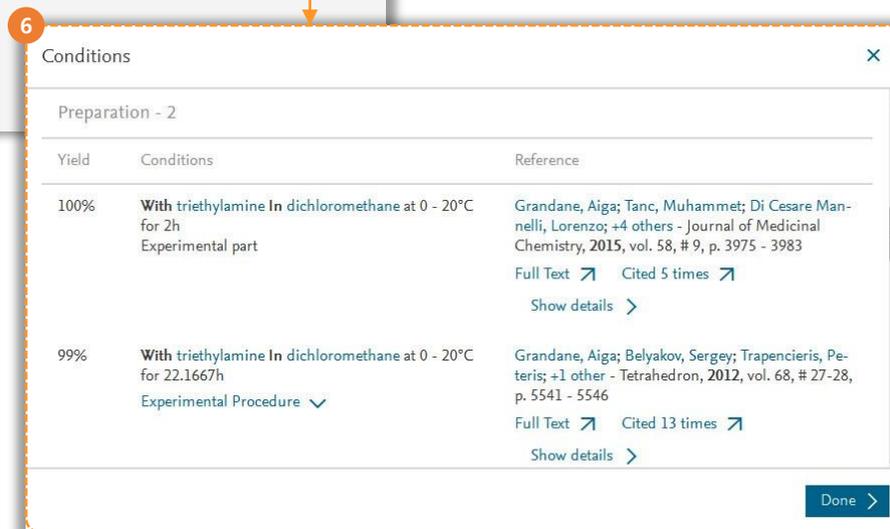
Always show screen before creating autoplan

3 Create Plans

# Retrosynthesis (합성경로 설계) - Autoplan



- ④ Retrosynthesis – 합성경로 클릭
- ⑤ Synthesis step options  클릭 후 열어보기
  - Show conditions (조건보기)
  - Hide preparations (숨기기)
  - Add preparations (추가하기)
  - Remove preparations (삭제하기)
- ⑥ Show conditions (조건보기) 클릭 후 선택된 반응스텝에서 상세한 실험정보 확인
  - 스크롤 다운, 합성경로에서 다른 반응스텝 상세정보 확인

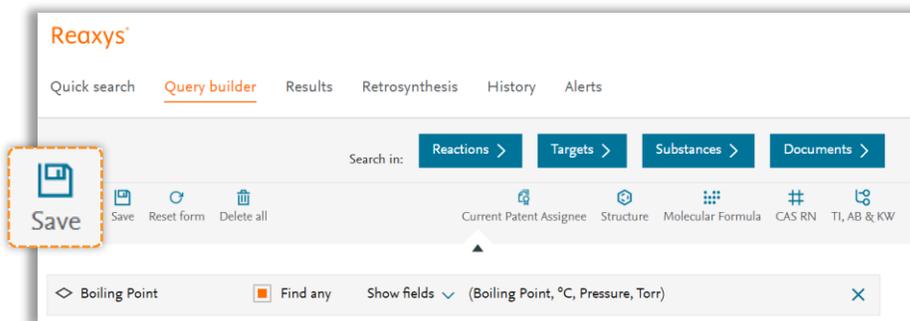


Yield	Conditions	Reference
100%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 2h Experimental part	Grandane, Aiga; Tanc, Muhammet; Di Cesare Manelli, Lorenzo; +4 others - Journal of Medicinal Chemistry, 2015, vol. 58, # 9, p. 3975 - 3983 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 5 times <a href="#">↗</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>

# 저장 및 반출하기

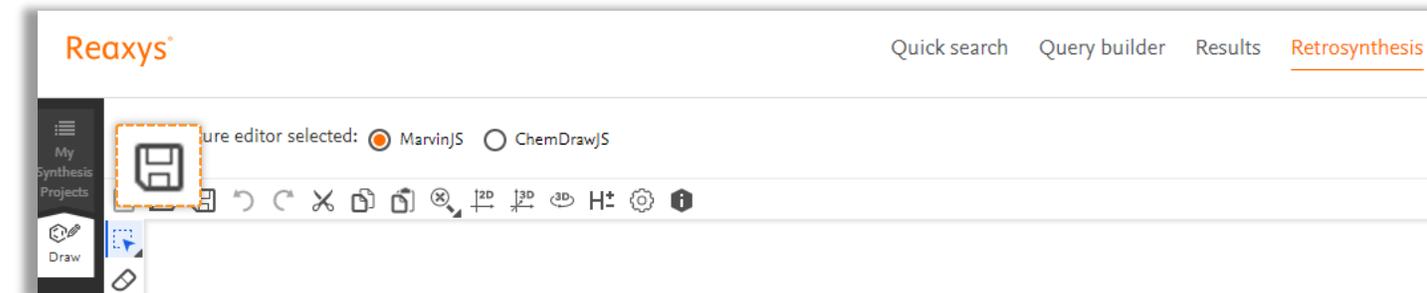
- [저장하기](#)
- [반출하기 – Result Page](#)
- [반출하기 – Retrosynthesis \(합성경로\)](#)

# 저장하기



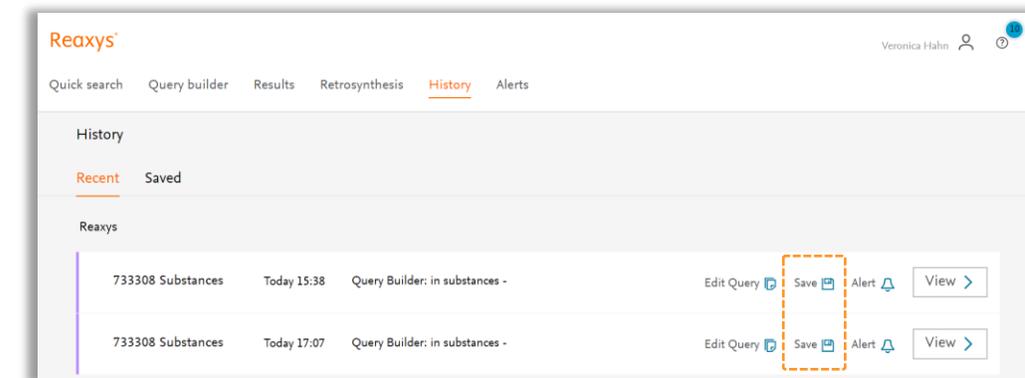
## Query builder 저장

- 왼쪽 상단의 Save 클릭
- 쿼리는 a ,son file 형식으로 저장



## Retrosynthesis (합성경로) 저장

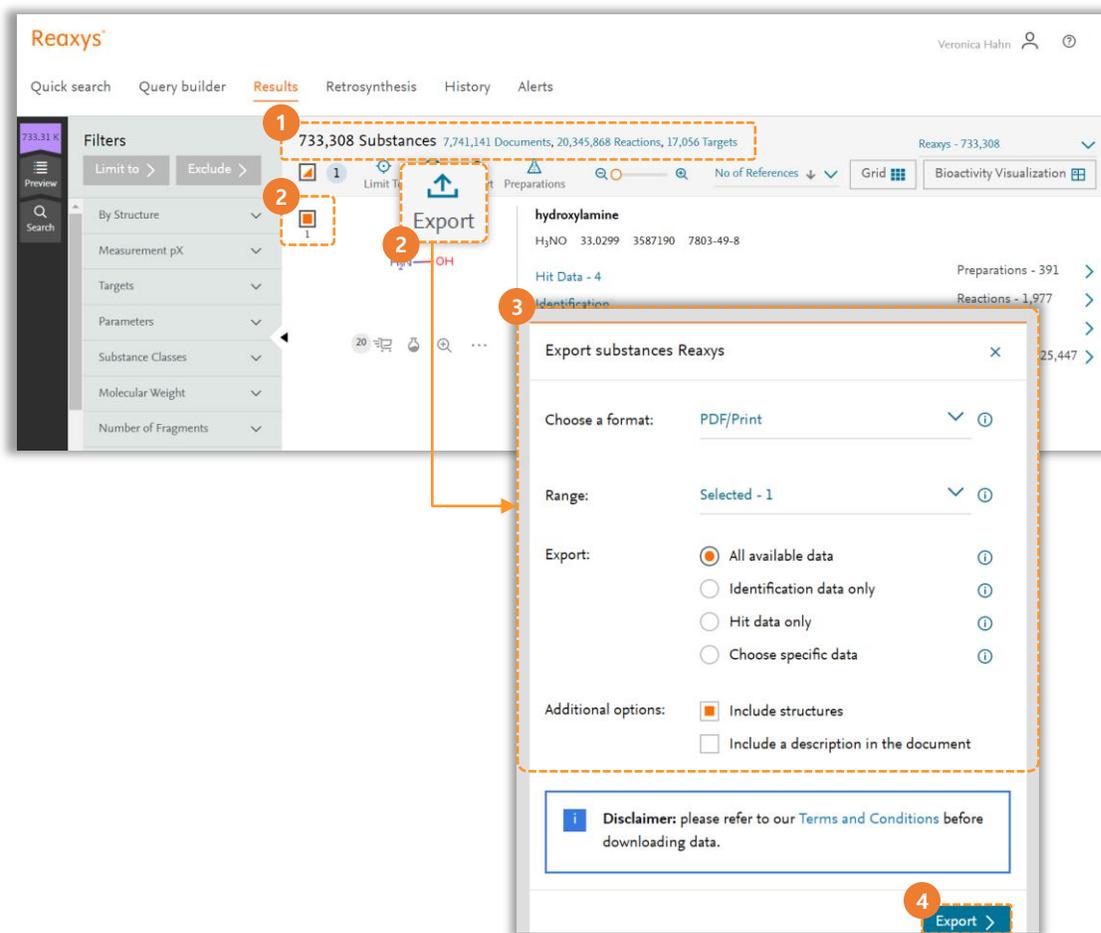
- 왼쪽 상단의 Save 아이콘 클릭



## History page + Recent 탭 저장

- 해당 탭에는 현재 Reaxys 세션에서 연구자가 검색한 내용들을 포함
- 최근 검색 내용의 오른쪽 Save 버튼 클릭 - 이름 입력 후 저장
- 저장된 검색 내역은 오른쪽 Saved 탭에서 확인 가능

# 반출하기 – Result Page



1 733,308 Substances 7,741,141 Documents, 20,345,868 Reactions, 17,056 Targets

2 Export

3

4 Export

Export substances Reaxys

Choose a format: PDF/Print

Range: Selected - 1

Export:  All available data  Identification data only  Hit data only  Choose specific data

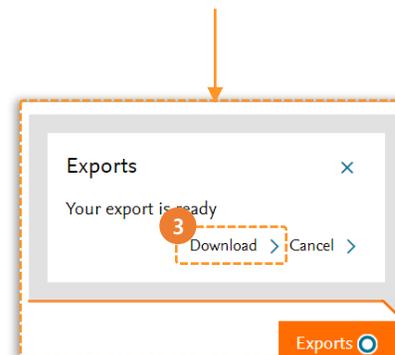
Additional options:  Include structures  Include a description in the document

Disclaimer: please refer to our Terms and Conditions before downloading data.

## Result 페이지에서 반출

- 1 Documents, Reactions, Substances, Targets 중 한 가지 선택
- 2 반출하고자 하는 검색결과 번호 박스를 체크 후 Export (반출하기) 클릭
- 3 반출 포맷, 범위, 데이터 추가 옵션 선택
- 4 Export (반출하기) 클릭 이후 Download 선택

\*반출진행 확인은 스크린 오른쪽 하단의 Exports 클릭



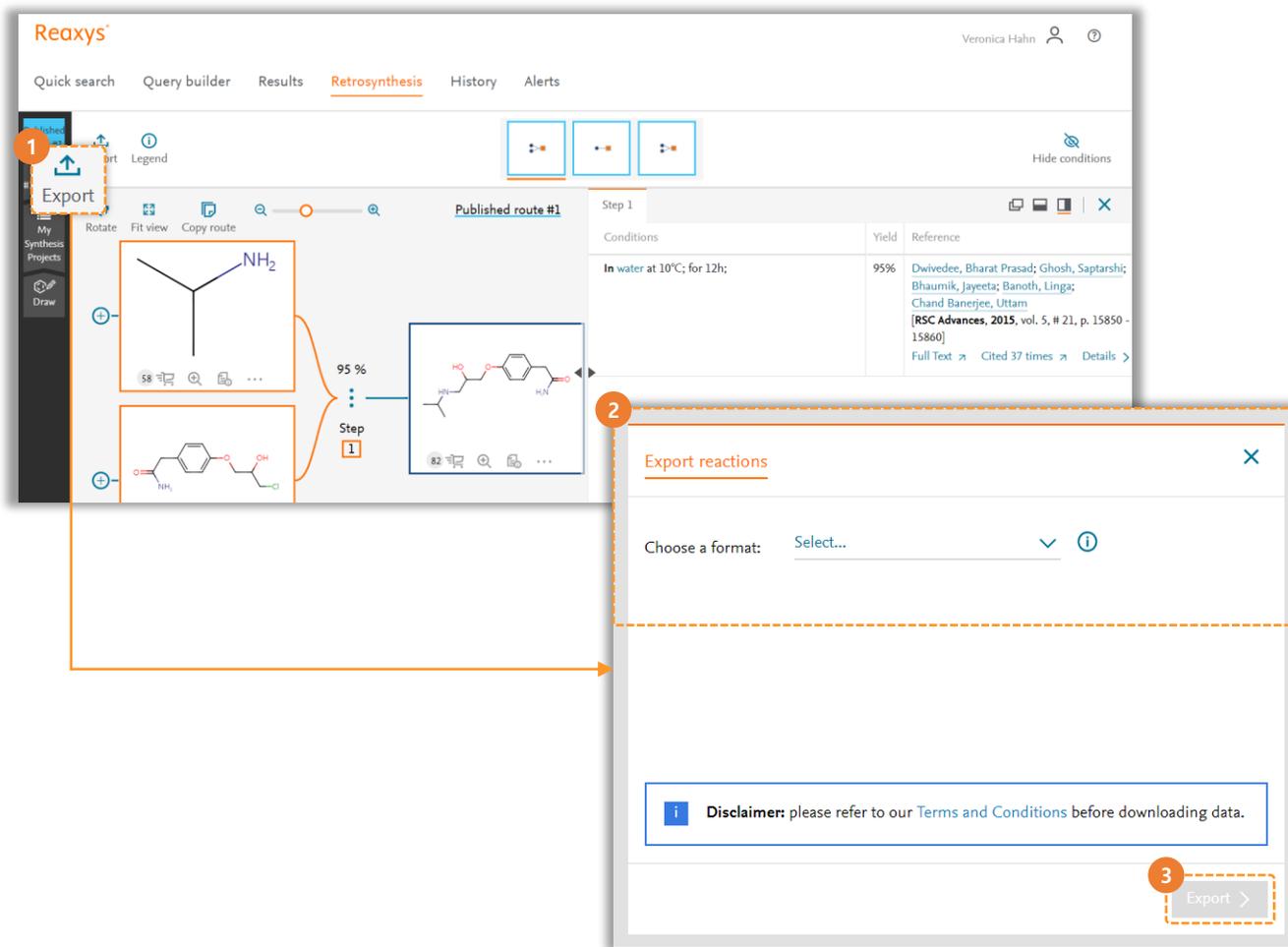
Exports

Your export is ready

3 Download Cancel

Exports

# 반출하기 – Retrosynthesis (합성경로)



1 Export

2

3

Export reactions

Choose a format:

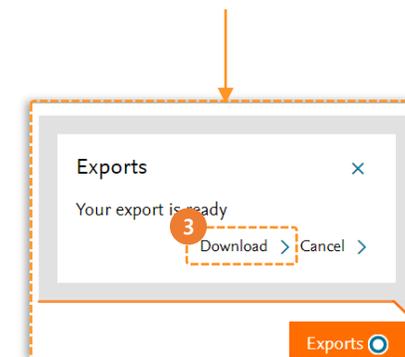
Disclaimer: please refer to our [Terms and Conditions](#) before downloading data.

Export >

## Retrosynthesis (합성경로) 반출

- ① 왼쪽 상단의 Export 클릭
- ② 포맷 선택
- ③ Export (반출하기) 클릭 이후 Download 선택

\*반출진행 확인은 스크린 오른쪽 하단의 Exports 클릭



Exports

Your export is ready

3 Download > Cancel >

Exports