



## Вас устраивает Ваш исследовательский процесс?

Reaxys поддерживает исследовательский процесс ученых и студентов, повышая производительность и результативность научной деятельности всей организации.

[www.info.reaxys.com](http://www.info.reaxys.com)



Объединяя поиск данных по реакциям и веществам с функцией планирования синтеза, Reaxys оказывает незаменимую помощь в исследовательской работе и обучении.

Удобный доступ к соответствующим и применимым на практике результатам позволяет исследователям и студентам быстрее преодолевать стадии технологического процесса, повышая эффективность и производительность своей работы.

# Основные сведения о Reaxus

Сложно быть эффективным при нехватке времени, усиливающемся давлении и слишком большом объеме информации для эффективного отбора. Reaxus помогает быстро получить релевантные и применимые на практике результаты. Чего еще желать от технологического инструмента?

## Соответствующая информация

Исследователи и студенты могут найти здесь именно то, что им нужно, среди подтвержденных экспериментальным путем (не расчетных) данных и обширной, качественной информации по органической, металлоорганической, органометаллической и неорганической химии.

## Интегрированные средства

В информационной системе Reaxus поиск данных по реакциям и веществам объединен с механизмом планирования синтеза и превосходными аналитическими функциями, что позволяет исследователям на любом уровне эксперимента быстрее преодолеть различные стадии технологического процесса.

## Высокая производительность

Reaxus предоставляет релевантные и применимые на практике результаты, что позволяет исследователям и студентам перейти к практической деятельности немедленно, помогает процессу принятия решений химиками, повышая эффективность и производительность их деятельности.

Мы много общаемся с химиками. Слушая их и наблюдая за их работой, мы видим, как часто на их долю выпадают разочарования. Так много усилий, чтобы найти и получить необходимые данные для начала экспериментов, так много времени для проверки и подтверждения результатов, так много неудачных попыток.

На последующих страницах мы подробнее расскажем об информационной системе Reaxus и о том, как она поддерживает работу исследователей и студентов, помогая повысить их производительность и результативность деятельности Вашей организации. Вы узнаете больше о том, как наши средства помогают экономить время исследователей. Мы расскажем Вам об исключительном качестве предоставляемой информации, а также покажем, как легко пользоваться интерфейсом Reaxus.

# Как Reaxus поддерживает исследования в области химии

В информационной системе Reaxus поддерживается актуальный мультидисциплинарный подход к современному исследованию с использованием множества экспериментально подтвержденных данных из журналов и патентов. Исследователи и студенты, изучающие любые химические дисциплины, могут воспользоваться всеми соответствующими и применимыми на практике результатами, которые предоставляет им система Reaxus.

## Химия синтеза

Экспериментальные данные по реакциям и веществам из областей органической, неорганической и металлоорганической химии в сочетании с механизмом планирования синтеза удовлетворяют всем требованиям химиков-синтетиков.

## Медицинская химия, биохимия и биологические науки

Исследователи в области медицинской химии, биохимии и биологических наук найдут здесь соответствующую информацию, например данные о взаимосвязи структура-активность.

## Аналитическая и физическая химия

Проверенные спектральные данные, например данные о смещении ЯМР и данные о дополнительных физических свойствах, могут быть применимы в аналитической и физической химии.

## Химия окружающей среды

В области химии окружающей среды Reaxus предоставляет, например, информацию о поглощении токсических веществ в биологических системах.

## Химия материалов

Хотя координация соединений и катализаторов важна для всех ученых (например, в исследовании полимеров), однако сплавы, стекло и керамика также увеличивают ценность этих данных для химиков в области материаловедения. Предоставляемые Reaxus фактографические данные о полупроводниках и сверхпроводимости, магнетизме, оптических и механических свойствах незаменимы для разработки новых современных материалов.

# Экспериментально проверенные данные о реакциях и веществах

Исследователям и студентам необходима высококачественная, релевантная информация, которой они могут доверять. С помощью Reaxus они могут получить экспериментально подтвержденные данные о реакциях и веществах, не тратя много времени на получение собственных результатов и неудачные попытки.

## Обширная база данных

Система Reaxus располагает обширной базой достоверной информации в области органической, органометаллической и неорганической химии, включая:

- данные по одностадийным и многостадийным реакциям;
- информацию о катализаторах;
- экспериментальные данные о свойствах веществ;
- описание процедур проведения реакций.

## Многостадийные реакции

Система Reaxus предоставляет более полную информацию о ходе реакции. Благодаря многостадийным реакциям химики получают более точное представление о промежуточных стадиях процесса синтеза. Определение

предшествующей реакции позволяет усовершенствовать рабочий процесс химика.

## Богатое наследие

Reaxus объединяет содержание авторитетных баз данных **CrossFire Beilstein**, **CrossFire Gmelin** и **Patent Chemistry Database**.

Располагая таким богатым, проверенным временем наследием, исследователи и студенты могут быть уверены в том, что найденная ими информация соответствует всем стандартам качества.

## Экспертный отбор

Эксперты-химики тщательно отбирают высококачественные, экспериментально подтвержденные данные о реакциях и веществах из выбранных журналов и патентов.

## Качество и глубина информации

The screenshot displays the Reaxus software interface. At the top, there are tabs for 'Substances (Grid)', 'Substances (Table)', and 'Citations'. Below these are search and filter options, including 'Limit to Selection', 'Output', and 'Sort by' (set to 'Molweights'). A table lists substances with columns for 'Structure', 'Chemical Name', 'Available Data', 'N° of ref.', 'N° of prep.', and 'Boiling Point'. The first entry is selected, showing its chemical structure and name: '5-methoxy-2-[[[4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl]-methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole'. Below the table, the 'Structure/Compound Data' section provides detailed information: 'Reaxys Registry Number: 3528192', 'CAS Registry Number: 73590-58-6', 'Chemical Name', 'Molecular Formula: C<sub>17</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O<sub>5</sub>', 'Linear Structure Formula: C<sub>17</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O<sub>5</sub>', and 'Molecular Weight: 345.422'. The 'InChI Key' is also provided. A sidebar on the left contains a 'Filter by' menu with options like 'Molecular Weight', 'Number of Fragments', 'Physical Data', 'Spectroscopic Data', 'Bioactivity', 'Document Type', 'Authors', 'Patent Assignee', 'Journal Title', and 'Publication Year'. A 'Structure/Compound Data' sidebar on the right lists various data categories such as 'Identification', 'Physical Data', 'Melting Point (4)', 'Conformation (2)', 'Crystal Property Description (1)', 'Crystal Phase (1)', 'Crystal System (1)', 'Space Group (1)', 'Density of the Crystal (1)', 'Optics (1)', 'Optical Rotatory Power (3)', 'Electrochemical Behaviour (2)', 'Dissociation Exponent (7)', 'Electrochemical Characteristics (2)', and 'Solubility (MCS) (2)'. A table at the bottom right shows NMR data with columns for 'Description', 'Nucleus', 'Solvents', 'Temperature', 'Frequency', and 'Original Text'.

Доступ к исчерпывающим, экспериментально подтвержденным, нерасчетным данным, отобранным из литературы.

# Механизмы оценки найденных результатов и разработки стратегий синтеза

Дело во времени. Экономьте и приумножайте его так, чтобы Ваши исследователи и студенты могли уверенно двигаться вперед, от основной идеи к искомому соединению. И они должны иметь возможность делать это так, как им удобно: в любое время, в любом месте.

## Записи с одним результатом

Реакции с одним и тем же реагентом и конечным продуктом, но с разными реагентами, растворителями и условиями объединяются в одну запись о реакции в уникальном табличном обзоре. Из этой записи химики могут перейти к другим свойствам и оценить оптимальные пути синтеза, не тратя времени на выделение дублирующих результатов вручную.

Описание процессов из патентных публикаций сокращает необходимость перехода к полному тексту патента для проверки актуальности.

## План синтеза

Уникальная функция планирования синтеза осуществляет оценку возможных путей синтеза и позволяет определить и скомбинировать выбранные стадии реакции для создания наиболее эффективной стратегии синтеза.

## В любое время, в любом месте

Благодаря механизму единого доступа химики Вашей организации могут получать необходимую информацию незамедлительно и одновременно. Информационная система Reaxys функционирует на веб-платформе, поэтому пользователи могут обращаться к ней в любое время и в любом месте. А поскольку для этого не требуется запуска какого-либо программного обеспечения и доступ не ограничен, работа по администрированию сводится к минимуму.

## Расширенный поиск

Проводить поиск в системе Reaxys очень легко. Пользователи могут создавать запросы по структурам и реакциям с помощью одного из предоставленных редакторов. Можно комбинировать свой запрос с поиском свойств или искать только свойства с помощью следующих методов:

- Поиск на основе форм предоставляет формы для самых распространенных свойств и подходит для всех пользователей.
- Расширенный поиск позволяет опытным пользователям определять в запросе свойства с использованием сотен доступных полей данных.

## Экономия времени

1. Поиск реакций и план синтеза или

2. Проверка коммерческой доступности и данных поставщиков для участников реакции

# Интуитивный интерфейс, созданный химиками для химиков

С помощью информационной системы Reaxys Ваши исследователи и студенты могут быть уверены, что быстро и легко смогут найти всю необходимую информацию. Это объясняется тем, что система Reaxys разработана в тесном сотрудничестве с химиками, представляющими различные дисциплины и географические регионы, и с использованием химии в качестве организующего начала.

## Партнеры по разработке

Для того чтобы информационная система Reaxys могла поддерживать каждую стадию технологического процесса химика, мы работаем в тесном сотрудничестве с партнерами-разработчиками из известных университетов, фармацевтических компаний и других, связанных с химией, производственных и государственных организаций.

## Фильтрация результатов

Легко находить, фильтровать и анализировать данные. Упорядоченные результаты отображаются в виде удобного табличного представления, так что химики могут с первого взгляда выделить наиболее важную информацию. С помощью средств группировки, фильтрации и анализа результатов можно легко упорядочить найденные результаты и определить наиболее релевантные из них.

## Функциональная совместимость

С помощью Reaxys можно экспортировать структуры и реакции вместе с соответствующими данными, например, в виде таблиц реакция-данные. Поддерживаются следующие форматы (без дополнительной платы): Microsoft Word, Excel, PDF, SD-/RD-/ Mol File, XML и RIS (Endnote, ReferenceManager).

Вы можете легко переходить в другие системы и загружать структуры/реакции и данные/текст. Информационная система Reaxys совместима с набором продуктов компании Elsevier. Легко, практически одним «кликом», можно перейти к Scopus, крупнейшей базе данных рефератов и цитирования. И так же легко получить доступ к первичному исследованию, найденному в полнотекстовой базе данных компании Elsevier: ScienceDirect.

## Обучение и поддержка

Интерфейс Reaxys прост в использовании, поэтому Вам не нужно тратить много времени на обучение. Вы всегда можете рассчитывать на нашу поддержку, включая интерактивное обучение, руководства пользователя, ответы на часто задаваемые вопросы и многое другое.

## Применение

The screenshot displays the Reaxys web application interface. At the top, there is a navigation bar with tabs for 'Query', 'Results', 'Synthesis Plans', 'History', 'My Settings', and 'Help'. Below this, there are sub-tabs for 'Reactions', 'Substances and Properties', and 'Text, Authors and more'. The main content area features a search bar with the text 'Generate structure from name' and a red box labeled '1' around it. Below the search bar is a large frame with a red border and a red box labeled '2' around it, containing a chemical structure of Geldanamycin. A dialog box is overlaid on the right side of the frame, titled 'Please enter a chemical identifier and then click "Submit"'. The dialog box contains a text input field with 'Geldanamycin' entered, and three example entries: 'Example 1: aspirin', 'Example 2: BSYNRYMUTXBXSQ-WXRBYKCCW', and 'Example 3: 50-78-2'. There are 'Submit' and 'Cancel' buttons in the dialog box. Below the search bar, there is a 'Search' button. At the bottom of the main content area, there are three buttons: 'Clear Query', 'Load Query', and 'Save Query'. The interface also includes a section for 'Hide further search conditions' with expandable categories: 'Substance Data', 'Identification Data', 'Physical Data', 'Spectroscopic Data', 'Bioactivity Data', 'Ecotoxicological Data', and 'Bibliographic Data'. A search filter is set to 'is'.

1. Поиск по названию химических структур  
или

2. Нарисованной структуре

Получить дополнительные сведения или подать  
запрос на пробное ознакомление с Reaxys можно  
по адресу:

[www.info.reaxys.com](http://www.info.reaxys.com)

**Америка:**

E-Customer Service  
360 Park Avenue South  
New York  
NY 10010-1710  
Бесплатный звонок: +1 888 615 4500  
Телефон: +1 212 462 1978  
Факс: +1 212 462 1974  
Эл. почта: usinfo@reaxys.com

**Европа и все прочие регионы:**

E-Customer Service  
Theodor-Heuss-Allee 108  
60486 Frankfurt/Main, Germany  
Телефон: +49-69-5050 4268  
Факс: +49-69-5050 4213  
Эл. почта: nlinfo@reaxys.com

**Япония:**

E-Customer Service  
1-9-15 Higashi-Azabu  
Minato-ku Tokyo  
106-0044 Japan  
Телефон: +81 3 5561 5034  
Факс: +81 3 5561 5047  
Эл. почта: jpinfo@reaxys.com



Reaxys® является товарным знаком, защищенным  
правом собственности Elsevier Properties SA  
и используемым по лицензии.