

1. 搜尋

化合物	
特性	說明
根據文字內容 Quick search (參見第 3 頁)	輸入化合物名稱、分子式、或 CAS 註冊編號，並點擊 Search 。 例： · Atenolol · Pt(PPh ₃) ₃ · 102625-70-7
透過繪製結構式或反應式進行 Quick search (參見第 3 頁和第 4 頁)	1. 點擊 Create Structure or Reaction Drawing 2. 繪製化合物的結構式 更多 Marvin JS 結構編輯器的使用技巧，請參考： a. 化合物的結構搜尋方法 b. ChemAxon Marvin JS 應用技巧 c. ChemAxon Marvin JS 官方網站上的 Marvin JS 使用者指南 3. 點擊 Transfer to query ，然後點擊 Search
Query builder (參見第 5 頁)	1. 點擊 Query builder (參見第 6 頁) 2. 在搜尋按鈕下方選擇一項快速查詢 (Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index) 或 2. 透過 Search properties 欄位尋找搜尋欄位，並將欄位拖放至 Query builder 3. 如果有多個搜尋欄位，請選擇適當的布林邏輯運算子 (參見第 7 頁) 4. 點擊螢幕上方的 Search ，並選擇希望搜尋的目標內容：如 Substances 備註：點擊 Exist 可展開更多欄位，輸入具體數值

化學反應	
特性	說明
根據文字內容 Quick search (參見第 3 頁)	輸入一個或多個反應相關詞彙，並點擊 Search 。 例： · preparation of porphyrine · phosphorylation · Suzuki coupling · Adler phenol oxidation
透過繪製結構式或反應式進行 Quick search (參見第 3 頁和第 4 頁)	1. 點擊 Create Structure or Reaction Drawing 2. 繪製反應結構式 更多 Marvin JS 結構編輯器的使用技巧，請參考： a. 化學反應的結構搜尋方法 b. ChemAxon Marvin JS 應用技巧 c. ChemAxon Marvin JS 官方網站上的 Marvin JS 使用者指南 3. 點擊 Transfer to query ，然後點擊 Search
Query builder (參見第 5 頁)	1. 點擊 Query builder (參見第 6 頁) 2. 在搜尋按鈕下方選擇一項快速查詢 (Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index) 或 2. 透過 Search properties 欄位尋找搜尋欄位，並將欄位拖放至 Query builder 3. 如果有多個搜尋欄位，請選擇適當的布林邏輯運算子 (參見第 7 頁) 4. 點擊螢幕上方的 Search ，並選擇希望搜尋的目標內容：如 Reactions 備註：點擊 Exist 可展開更多欄位，輸入具體數值

搜尋 (繼續)

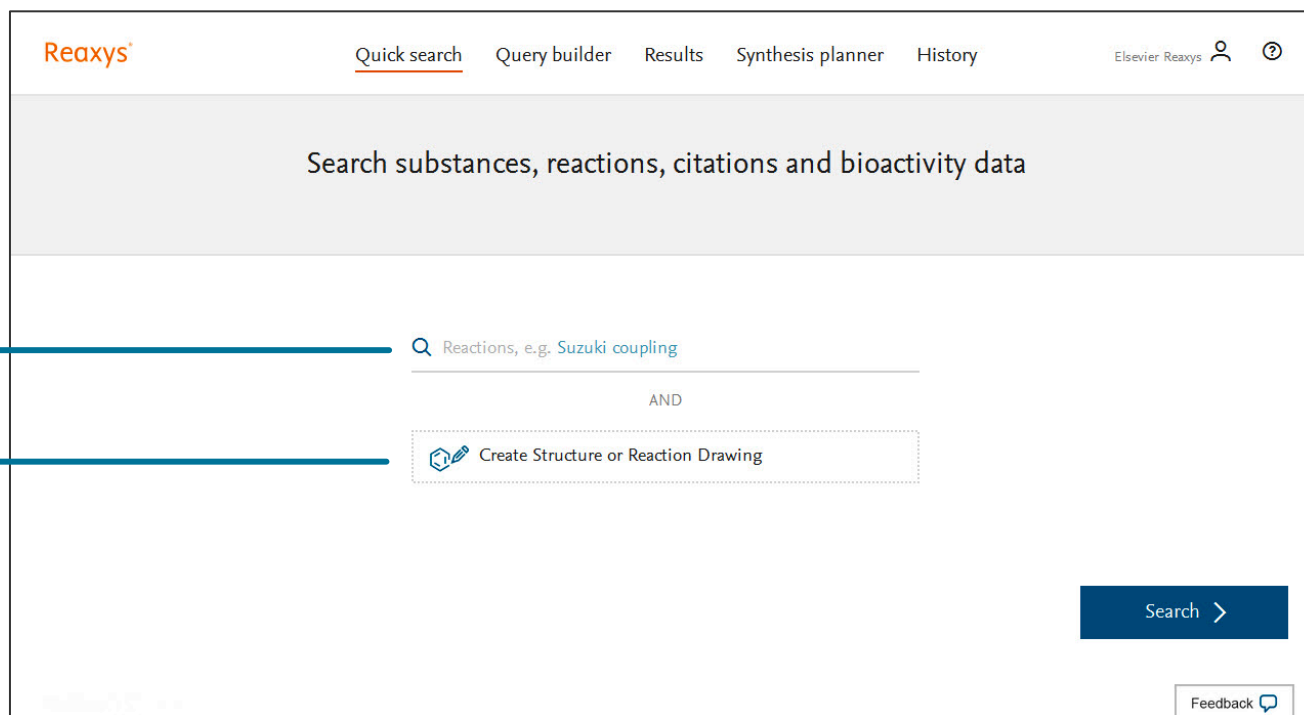
參考文獻	
特性	說明
Quick search (參見第 3 頁)	輸入一個或多個詞彙，並點擊 Search 例： · publications about quasicrystals · Tetrahedron, 2014, 70, 2343 · published by Schrock
透過繪製結構式或反應式進行 Quick search (參見第 3 頁和第 4 頁)	注意：任何一個結構或反應搜尋 (參見頁 1) 都會優先找出化合物或化學反應。搜尋結果中的每一筆結果都有引用文獻及全文連結。此外，您可以透過點擊查看所有化合物或是反應搜尋的引用文獻，點擊搜尋結果頁面最上方的文獻數量連結，以查看該組查詢結果。
Query builder (參見第 5 頁)	1. 點擊 Query builder (參見第 6 頁) 2. 在搜尋按鈕下方選擇一項快速查詢 (Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index) 或 2. 透過 Search properties 欄位尋找搜尋欄位，並將欄位拖放至 Query builder 3. 如果有多個搜尋欄位，請選擇適當的布林邏輯運算子 (參見第 7 頁) 4. 點擊螢幕上方的 Search，並選擇希望搜尋的目標內容：如 Substances 備註：點擊 Exist 可展開更多欄位，輸入具體數值

性質	
特性	說明
Quick search (參見第 3 頁)	輸入詞彙，並點擊 Search 例： · boiling point of benzene · density of quinolone
透過繪製結構式或反應式進行 Quick search (參見第 3 頁和第 4 頁)	1. 點擊 Create Structure or Reaction Drawing 2. 繪製化合物的結構式 更多 Marvin JS 結構編輯器的使用技巧，請參考： a. 化合物的結構搜尋方法 b. ChemAxon Marvin JS 應用技巧 c. ChemAxon Marvin JS 官方網站上的 Marvin JS 使用者指南 3. 點擊 Transfer to query 4. 在搜尋框中輸入性質相關的關鍵字 (如 boiling point) 5. 點擊 Search
Query builder (參見第 5 頁)	1. 點擊 Query builder (參見第 6 頁) 2. 在搜尋按鈕下方選擇一項快速查詢 (Structure、Molecular Formula、CAS RN 或 Doc Index) 或 2. 透過 Search properties 欄位尋找搜尋欄位，並將欄位拖放至 Query builder。 3. 並根據需要重複查詢其他的性質 4. 如果有多個搜尋欄位，請選擇適當的布林邏輯運算子 (參見第 7 頁) 5. 點擊螢幕上方的 Search，並選擇希望搜尋的目標內容：如 Substances 備註：點擊 Exist 可展開更多欄位，輸入具體數值

快速搜尋

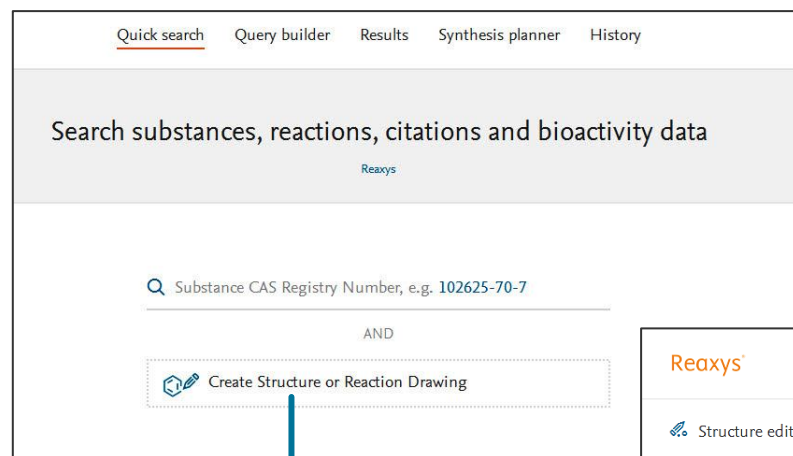
您可在搜尋欄位中輸入詞彙(若詞彙不完整，可加上*符號，代表任意數量的萬用字元，用來取代詞彙缺失的部分)

您可以在結構搜尋選項中畫出化學式和反應式並進行檢索

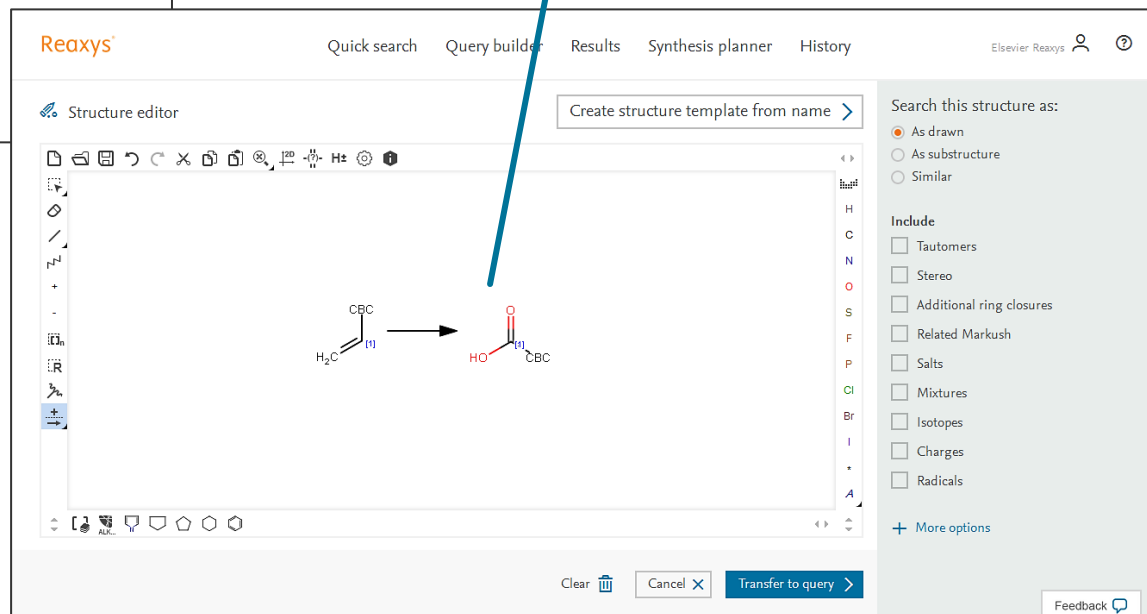


The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there is a navigation bar with the Reaxys logo, a 'Quick search' link, and other options like 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. Below the navigation bar, there is a large search area with the heading 'Search substances, reactions, citations and bioactivity data'. A search input field contains the text 'Reactions, e.g. Suzuki coupling'. Below the input field, there is a button labeled 'Create Structure or Reaction Drawing'. A 'Search' button is located at the bottom right of the search area. A 'Feedback' button is also visible at the bottom right.

結構式或反應式的快速搜尋



1. 點擊 **Create Structure or Reaction Drawing**

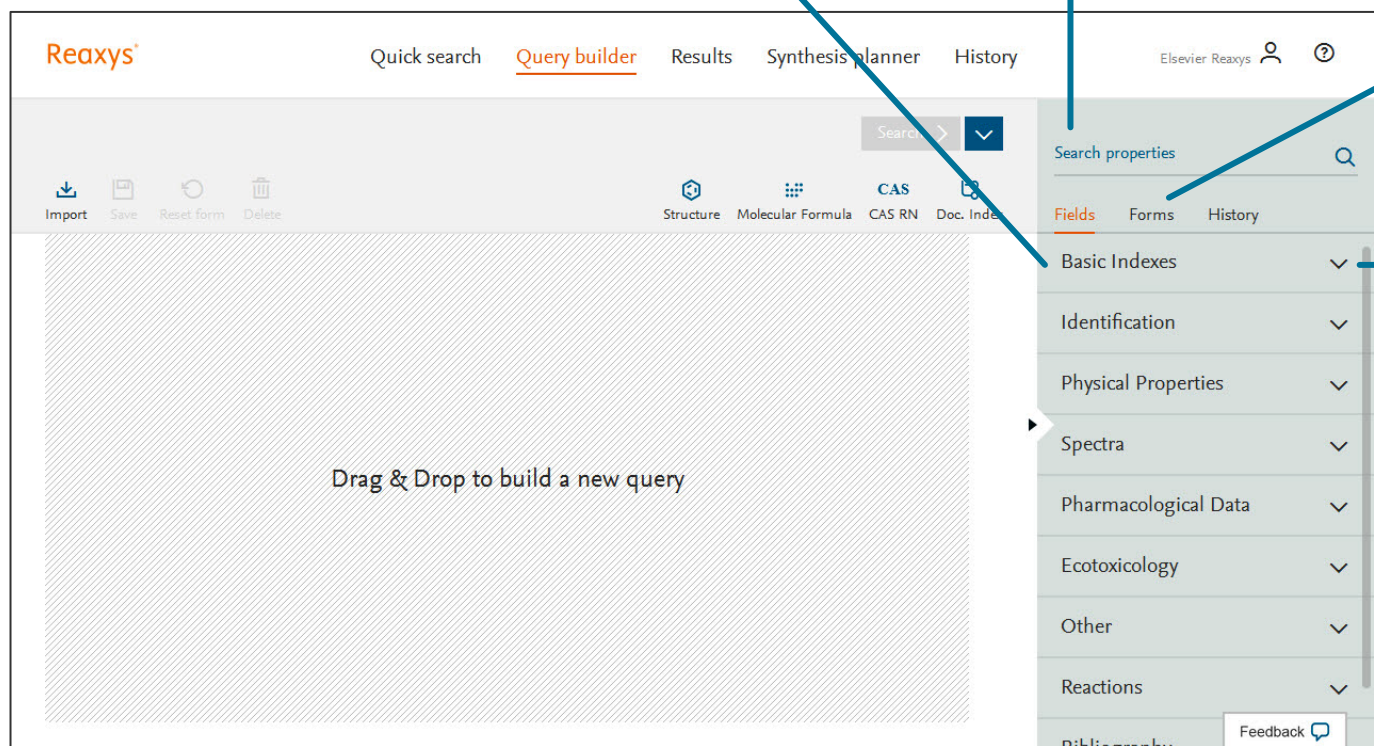


2. 使用 ChemAxon's Marvin JS 工具來繪製結構式或反應式

Query builder Fields 和 Forms 面板

在此處輸入字詞以查找欄位名稱。例：輸入 **boil**, 可以查找 **boiling point**

顯示預設欄位



點擊 **Forms**，顯示預設的一般欄位

點擊 **▼**，開啟下拉式選單

Query builder 步驟

The screenshot shows the Reaxys Query builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (highlighted), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. Below the navigation bar are icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete'. The main area is divided into two sections. The left section is titled 'Boiling Point' and contains two search criteria: 'Boiling Point, °C' with a value range of '60-80' and 'Pressure (Boiling Point), Torr' with a value range of '740-760'. The right section is titled 'Search properties' and contains a search bar with the text 'boil' and a list of properties including 'Boiling Point' and 'Physical Data'. The interface is annotated with six numbered steps: 1. 點擊 Query builder (Click Query builder), 2. 輸入字詞查找欄位，例如，在 Search Properties 欄位內輸入 boiling (Enter words to search for, e.g., enter boiling in the Search Properties field), 3. 將欄位拖至 Query builder (Drag the field to the Query builder), 4. 點擊 Exist (Click Exist), 5. 輸入明確具體的搜尋條件 (Enter specific search conditions), and 6. 點擊 Search (Substances) (Click Search (Substances)).

1. 點擊 Query builder

2. 輸入字詞查找欄位，例如，在 Search Properties 欄位內輸入 boiling

3. 將欄位拖至 Query builder

4. 點擊 Exist

5. 輸入明確具體的搜尋條件

6. 點擊 Search (Substances)

Query builder: 多種欄位和布林運算

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

Search > ▾

Import Save Reset form Delete

Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

Search properties
Q melt

Derivative
Melting Point
Physical Data

Boiling Point

Exist ^ X

= Boiling Point, °C 60-80

= Pressure (Boiling Point), Torr 740-760

Melting Point

AND
OR
AND
NOT
PROXIMITY

點擊所需的布林運算子

- **OR** : 至少包含一個欄位內的資料
- **AND** : 包含兩個欄位內都具備的資料
- **NOT** : 包含第一個欄位內的資料，同時排除第二個欄位
- **NEAR** : 搜尋相似詞語，但不限順序
- **NEXT** : 搜尋相似詞語，但指定順序
- **PROXIMITY** : 用在參數欄位的查詢，可確保二個欄位間的內容具關聯性 (如 melting point 和 solvent)

2. 結果

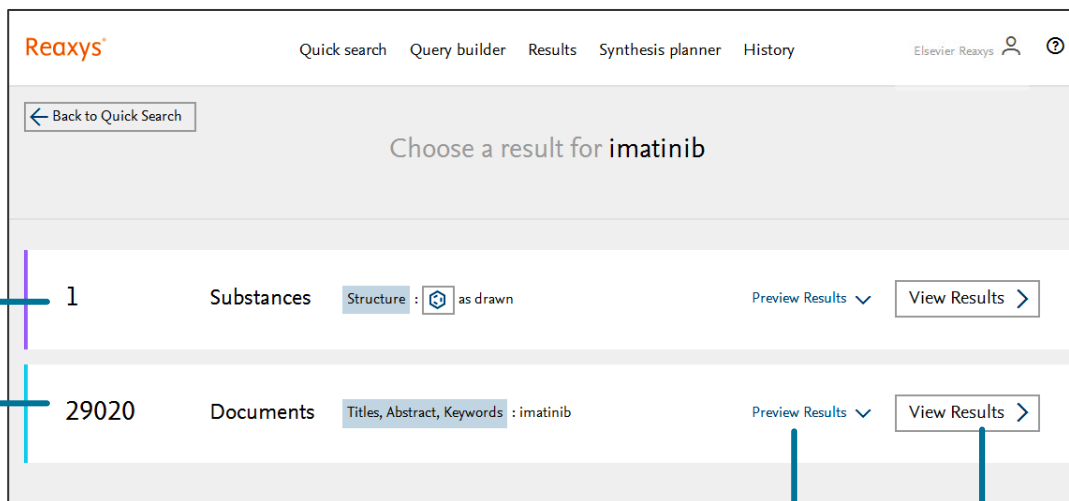
Quick search 結果預覽

Reaxys 會分析 **Quick search** 中輸入的搜尋條件，並提供一系列查詢結果給您預覽 (由於查詢的獨特機制，只有 **Quick search** 查詢會出現結果預覽)。

搜尋結果取決於輸入的詞彙。在這種情況下，Reaxys 會識別該化合物名稱，並分別在資料庫的化合物記錄中，透過結構式搜尋，以及在文獻記錄中搜尋化合物名稱。

該選項說明此處有 1 筆化合物記錄—由結構式的精確搜尋而來。

該選項說明此處有超過 28,000 筆文獻記錄—由文獻中的詞彙搜尋得知。



點擊 **Preview Results**，查看搜尋結果中的前三項

點擊 **View Results**，查看搜尋結果中所有的搜尋結果

在其他情況下，**Quick Search** 可能會提供一些反應或文獻記錄組合成的選項。

Quick search 或 Query builder 的結果—化合物(Substances)

使用 **Filters and Analysis**

篩選搜尋結果

透過“導覽列”記錄本次搜尋過程。

點擊 **More**，顯示更多選項

The screenshot displays the Reaxys search results for 4 substances. The left sidebar contains filters for Substances Classes (Functional Group Classification, Richter Classification, Ring Classification), Molecular Weight (>204 - 216), Availability (product for purchase, approved drug, prep known), and Available data (Detailed Reaction Presence, Preparation Presence, Reaction, Presence as Product, Presence as Reactant). The main results area shows two entries: 'ibuprofen' and '(S)-ibuprofen'. Each entry includes a chemical structure, a list of data types (Identification, Spectra, Physical Data, Bioactivity, Other Data), and a list of related documents (Preparations, Reactions, Documents). A 'Feedback' button is located at the bottom right.

預設值是根據參考文獻的數量顯示內容，但也可以選擇其他選項。可縮放調整放大元素結構圖

點擊相關連結，查看化合物製備和反應資訊，以及檔案（文獻）記錄。

按一下連結查看該化合物的特定資訊

Quick search 或 Query builder 的結果- 文獻(Documents)

使用 **Filters and Analysis**

篩選搜尋結果

使用 **Index Terms** 限

縮特定主題相關的文
獻資料範圍

點擊作者連結，可連

結到 **Scopus**，查看
作者發表的文章以及
其他的分析選項

The screenshot displays the Reaxys search results page. On the left, the 'Filters and Analysis' sidebar is visible, showing 'Index Terms (List)' with categories like agent, drug, antiinflammatory, parameter, efficacy, drug efficacy parameter, and inhibitor, each with a count. Below this is 'Index Terms (ReaxysTree)' and 'Publication Year' with a range from 2009 to 2007. The main area shows '42,183 Documents with 21,877 Substances, 25,512 Reactions'. A list of search results is shown, including 'Ibuprofen' by Higgins, John D.; Gilmor, Timothy P.; Martellucci, Stephan A.; +2 others, and 'IBUPROFEN COMPOSITION' by Shen, Robert. Each result has a 'Full Text' link. A 'Feedback' button is at the bottom right.

預設值為相關性排序，但也
可以按照其他方式排序

點選連結，查看 **Scopus** 資
料庫中的引用次數

查看全文連結、專利封面資
訊 (Front Page Info)、化
合物、化學反應、摘要、索
引詞彙

3. 分析和篩選

使用 **Filter & Analysis** 限縮搜尋結果:

使用 **Filters and Analysis** 篩選搜尋結果。系統性的索引詞彙，是篩選搜尋結果的首選

1. 點擊 顯示其他類別的篩選和分析選項

2. 點擊 **More**，顯示更多的篩選選項

3. 採用該篩選方式可將原來的 152 項反應減少至 42 項

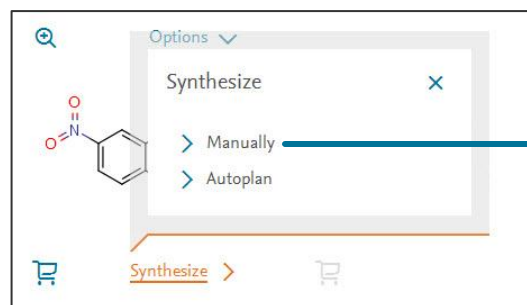
The screenshot shows the Reaxys 'Filters and Analysis' sidebar on the left and the 'Results' panel on the right. The sidebar has a '152' badge next to the 'Filters and Analysis' header. Under 'Catalyst Classes', the 'active center' checkbox is selected, and the 'More' link is highlighted. The 'Results' panel shows '152 Reactions out of 119 Documents containing 298 Substances'. Below this, a table lists the selected filters and their 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

The 'Apply' button is visible at the bottom right of the results panel.

4. Synthesis planner – 手動

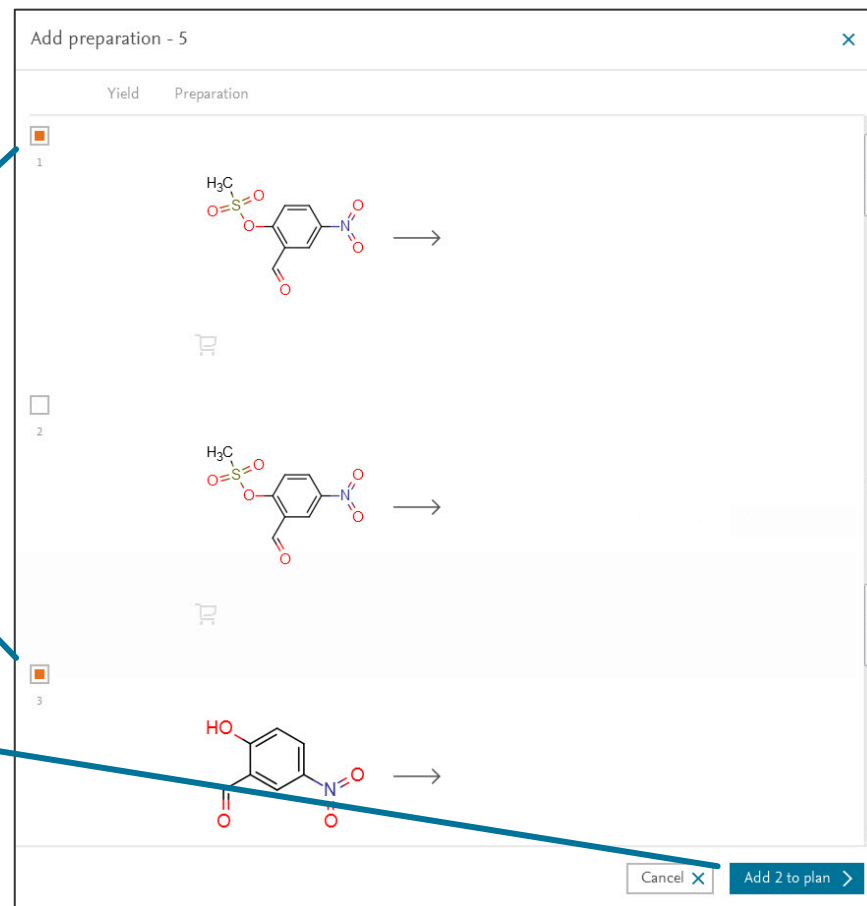
手動建立一個合成路徑，或者讓 Reaxys 自動規劃（參見 第 13 頁）。首先，點擊結構下方的 **Synthesize**



1. 點擊 **Manually**.

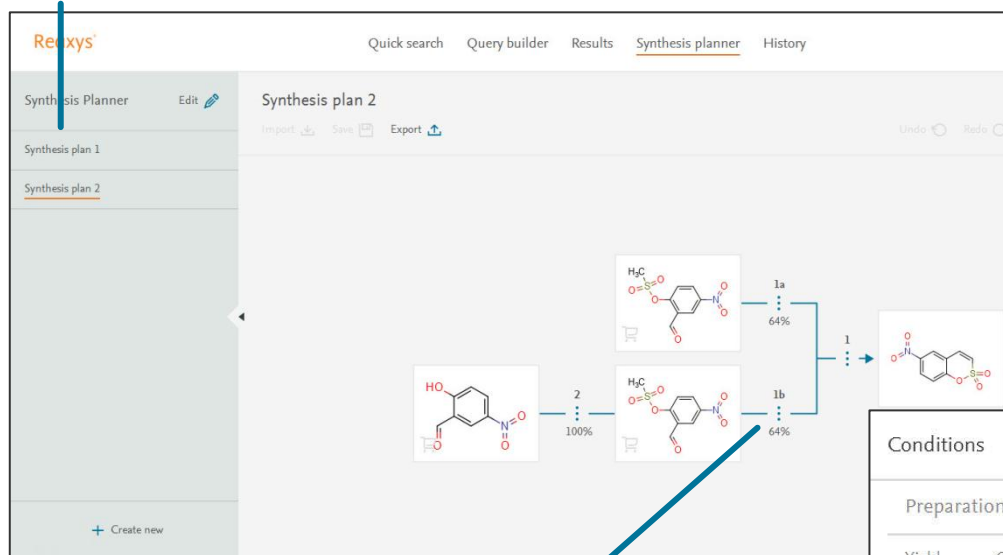
2. 在 **Add preparation** 視窗內，選擇反應加入您的規劃方案。注意：圖中不會顯示產物結構，因為它和起始結構相同

3. 點擊 **Add # to plan**.



Synthesis planner – 手動 (繼續)

1. 在 Synthesis planner 內點擊 Synthesis plan 並查看



3. 點擊 Show conditions.

顯示該製備步驟的實驗細節。上下滾動視窗，以查看合成規劃中各個步驟的細節

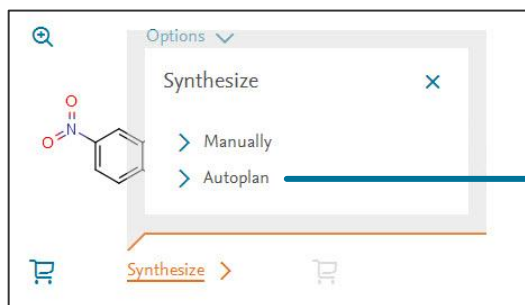
2. 點擊 Synthesis step options (⋮) to 進入

- Show conditions
- Hide preparations
- Add preparations
- Remove preparations

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 ➤
64%	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 ➤

Synthesis planner – 自動規劃

使用 Reaxys 自動規劃一個合成路徑。首先，點擊結構下方的 **Synthesize**



1. 點擊 Autoplan.

2. 調整自動合成規劃的的參數

3. 點擊 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

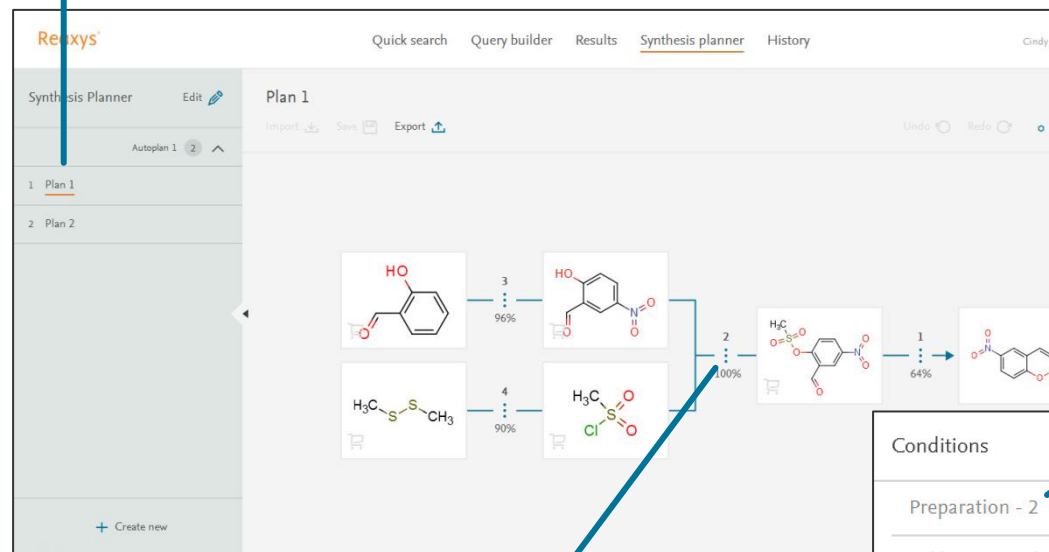
Default yield for reactions without a given yield

☐ Always show screen before creating autoplan

Create Plans >

Synthesis planner – 自動規劃 (繼續)

1. 在 Synthesis planner 內點擊 Plan 並查看



ⓘ Show conditions
 🔍 Hide preparation
 🗑️ Remove preparation

3. 點擊 Show conditions。

顯示該製備步驟的實驗細節。上下滾動視窗，以查看合成設計中各個步驟的細節

2. 點擊 Synthesis step options (⋮) to 進入

- Show conditions
- Hide preparations
- Add preparations
- Remove preparations

Conditions		
Preparation - 2		
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 ↗ 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 >
		Done >

儲存和匯出

特性	說明
儲存	
來自 Query builder	確認搜尋條件，點擊左上角的 Save 搜尋條件已存至 .json 檔案中
來自 Synthesis planner	尚不支援
來自 History Page + Recent 頁籤	在 History 下的 Recent 頁面中儲存您目前在 Reaxys 內查找的一系列結果。將滑鼠移至 Recent Search 中想要儲存的紀錄上，點擊浮現的 Save 按鍵，輸入儲存名稱，點擊 Save 已存的查詢結果現在可以在 Saved 頁面中找到
匯出	
從 Results Page:	從搜尋結果中勾選出您想要匯出的搜尋結果 - 點擊 Export - 確認檔案格式 (Format), 匯出範圍 (Range), 匯出數據種類(Export data) 以及其他選項 (Additional options) - 點擊 Export - 如若想查看匯出進度，點擊螢幕右下角的 Exports - 當匯出完成，點擊 Download 下載檔案
從 Synthesis planner:	- 點擊 Export - 點擊 Export documents 或 Export reactions - 確認檔案格式 (Format) 以及其他選項 (Additional options) - 點擊 Export - 如若想查看匯出進度，點擊螢幕右下角的 Exports - 當匯出完成，點擊 Download 下載檔案