

Reaxys

Reaxys يك پایگاه شیمی وب - پایه می باشد که برای محققان امکان جستجو در حوزه شیمی و علوم وابسته را فراهم می آورد. این پایگاه با انجام جستجوهای منسجم به منظور کشف واکنشها و مواد شیمیایی با طراحی سنتز و منبع شیمیایی طراحی شده است. این پایگاه به دانشمندان شیمی زمان بیشتری برای خلاقیت و ابتکار میدهد و آنها را قادر میسازد تا در دنیای رقابت برای رسیدن به اهداف خود پیشگام باشند. تعامل در این پایگاه با دقت بسیار طراحی و برنامه ریزی شده است تا استفاده پذیری بالایی داشته باشد.

این پایگاه اطلاعات با کیفیت بالا و استثنایی را فراهم می آورد، اطلاعاتی درباره واکنشهای شیمیایی و سنتز، داده های کتابشناختی در تحقیقات شیمی آلی، شیمی معدنی، ترکیبات شیمی آلی فلزی، ویژگیهای واقعی و غیره. پوشش تاریخی این پایگاه به ۱۷۷۱ تا اکنون می رسد و بنابراین این پایگاه اطلاعات مهم متون شیمی و پروانه های ثبت اختراع را شامل می شود.

میان پایگاه Reaxys و پایگاه Sciencedirect کنش متقابل وجود دارد که این قابلیت اکتشاف ساختارهای شیمیایی را بهبود می بخشد. پایگاه Reaxys برای محققان اطلاعات بی نظیری در رابطه با اکتشاف واکنشها و ترکیبات داده ها فراهم می آورد و Science direct دستیابی به متون اصلی مورد اطمینان از قبیل متن کامل مقالات داور شده و بخشهای کتابهای با تاثیر بالارا فراهم می سازد.

مقاله ای که در [sciencedirect](http://sciencedirect.com) منتشر می شود دارای محتوایی غنی است و خواننده را قادر میسازد تا مستقیماً به ارزشیابی اهمیت ترکیبات ارائه شده در تحقیقش بپردازد. محقق می تواند محتوای مقاله را بصورت مستقیم بفهمد و به محتویات جاری در [Reaxys](http://Reaxys.com) پیوند بزند، که باعث می شود هر دوفرد یعنی خواننده و محقق به افزایش تولید تحقیقاتی بپردازند.

استفاده کنندگان از پایگاه [Reaxys](http://Reaxys.com) چهار گروه عمده از محققین در رشته های زیر هستند که شامل موارد زیر هستند:

شیمی سنتز: عمق داده های شیمی موجود در پایگاه امکان خوبی را برای شما فراهم می آورد که به ارزیابی و طراحی بهترین راه و روش ممکن برای سنتز ترکیب مورد نظر خود دست یابید. دانشمندان شیمی سنتز از امکانات سایت بهره مند می شوند.

شیمی دارویی: امکانات چند گانه پایگاه [Reaxys](http://Reaxys.com) از داده های معتبر تجربی فراهم آمده که با دقت از ژورنالها و پروانه های ثبت اختراع انتخاب شده اند. این پایگاه داده هایی با کیفیت بالا برای دانشمندان علوم زیستی نظیر داروشناسان، سم شناسان، زیست شیمییدانان فراهم می آورد.

متخصصان اطلاعاتی شیمی: این پایگاه امکان جستجوی مناسبی را برای شیمییدانان برقرار می سازد که دامنه تاریخی آن از سال ۱۷۷۱ تا به امروز تحقیقات علم

میشود.

شامل

را

شیمی

علم مواد Reaxys : دانشمندان علم مواد را قادر می سازد که داده های ارزشمند اخیر را که شامل ویژگیها و ساختارهای شیمیایی و فیزیکی است بدست آورند بنابراین قبل از مراجعه شیمیدانان به آزمایشگاه آنها بهتر میتوانند ویژگیهای يك ماده جدید را پیش بینی کنند و تخمین بزنند.

Reaxye تحقیق و توسعه را از طریق ارائه پاسخها به نحوی که شیمیدانها به آنها نیازمند باشند، بهبود می بخشد؛

_ آیا یک ترکیب وجود دارد؟

_ در مورد این ترکیب چه میدانیم؟

_ چطور میتوان به این ترکیب دست یافت؟

_ چه شخص دیگری بر روی این ترکیب کار میکند؟

پایگاه Reaxys شامل موارد زیر است:

- ۵۰۰ میلیون حقایق شیمیایی انتشار یافته
- ۷/۴۰ میلیون واکنش های شیمیایی
- ۹/۷۴ میلیون ترکیبات آلی، معدنی و آلی-فلزی
- ۱۶ هزار نشریات مربوط به شیمی
- ۱۳۰ زمینه موضوعی

ویژگی ها

-محتوای بسیار سازمان یافته جامع

ASK REAXYS-

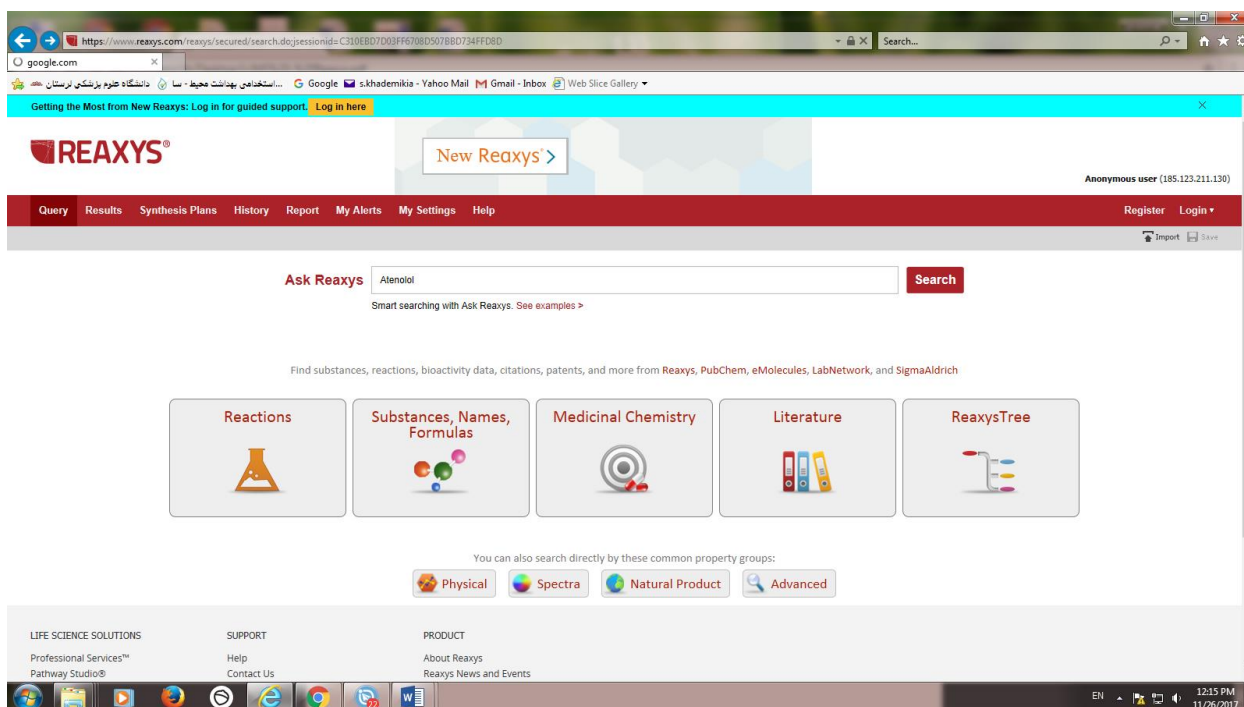
این گزینه جستجوی بسیار ساده و نوآورانه را تنها با یک کلیک میسر میسازد، راهی شهودی را جهت یافتن سریع جزئیات یک واکنش، خاصیت شیمیایی، مفاهیم و استنادها فراهم میکند. فهم و تفسیر متن را تسهیل میکند. بازیابی مرتبط ترین نتایج

-ساختار انعطاف پذیر جستجو

جستجو در طبقه بندیهای مختلف (واکنشها، مواد، نامها، فرمولها، شیمی دارویی و متون)

ورودی مبتنی بر متن، عدد و ساختار شیمیایی شامل ۵۰۰ زمینه قابل جستجو با پوشش ۱۳۰ موضوع

ساختار فرمول بر پایه جدول تناوبی جهت تسهیل جستجوهای شیمی معدنی و آلی فلزی بر اساس فرمولهای شیمیایی کامل



مرور بانک اطلاعاتی

Reaxys tree طبقه بندی Reaxys را قابل تجسم میکند. مرور سلسله مراتب عبارت.

-تمرکز سریع بر نتایج مرتبط

دارای مجموعه جامعی از فیلترها بر اساس ساختار و خصوصیات، پارامترهای واکنش، نوع انتشار و ... برای شناسایی مرتبط ترین نتایج.

-نقشه ریزی مسیرهای سنتز

ایجاد مسیرهای سنتز برای ترکیبات، شامل لینک به پایگاههای داده برای انتخاب بهترین گزینه برای خرید ترکیبات

The screenshot shows the Reaxys web interface. At the top, there's a search bar and navigation links. Below that, a 'Query' section shows a chemical structure and '06 substances' found. The main area is a table of search results. The table has columns for 'Structure', 'Structure/Compound Data', 'N° of preparations', 'Available Data', 'Target', and 'N° of ref.'. Three results are visible, all for different enantiomers of atenolol. Each result includes a chemical structure, CAS number, molecular formula, and a list of available data types like 'Druglikeness', 'Bioactivity', and 'Spectra'.

به اشتراک گذاری یافته ها با سایر محققان

Reaxys report راهی ساده جهت تفسیر و خروجی گرفتن از نتایج پژوهش و ارسال گزارش به چندین دریافت کننده.

چگونگی جستجو در پایگاه: Reaxys

در قسمت Reaxys Help شما می توانید به اطلاعات جامعی درباره شش قسمت نوار ابزار این پایگاه دست یابید Synthesis , Results , Query , Plans , History , My Alerts , My Settings

در قسمت Query می توانید نام یک واکنش ، یک ماده شیمیایی و یا یک عبارت را

وارد کنید. در واقع قسمت Query از سه قسمت تشکیل شده است:

- Text Authors & more -1
- Reactions -2
- Substance & Properties -3

شما میتوانید عبارت پرسش را به شیوه های مختلف وارد کنید. می توانید يك ساختار یا واکنش را با استفاده از ویرایشگر ساختار بکشید ، به بارگذاری يك ساختار و یا واکنشی که قبلا ذخیره کرده اید بپردازید و یا نام يك ساختار را تایپ کنید . شما همچنین می توانید جستجوی خود را با استفاده از Save Query ذخیره کنید.

در قسمت Results بسته به نوع پرسش این پایگاه برای شما پاسخهای متفاوتی را فراهم می آورد.

امکان استفاده از Synthesis Plan به سه شکل برای شما فراهم است:

-با وارد کردن عبارت جستجو در قسمت query و کلیک بر روی قسمت Synthesize به ساختارها در صفحات نتایج لینک برقرار می شود.

-با بارگذاری يك Synthesis Plan ذخیره شده

-با کلیک بر روی قسمت New در صفحه Synthesis plan و وارد کردن عبارت جستجو

در قسمت History امکان ذخیره جستجوها و نمایش آنها در یک جدول تاریخی وجود دارد که شما را قادر می سازد که در میان جستجو هایی که انجام داده اید به جستجوی مورد نظرتان برسید. هنگامیکه شما در سایت ثبت نام کنید و اصطلاحاً log in شوید امکان دسترسی نتایج جاری و همچنین ذخیره شده قبلی برای شما فراهم است .

پایگاه ریکسیس (www.reaxys.com) یک محصول از انتشارات الزویر است که مبتنی بر وب می باشد .

پلتفرمی را تحت وب برای محققان رشته های شیمی و پزشکی امکان جستجو در حوزه شیمی و علوم وابسته را فراهم می آورد.

این پایگاه با انجام جستجوهای منسجم به منظور کشف واکنشها و مواد شیمیایی با طراحی سنتز و منبع شیمیایی طراحی شده است.

مراحل انجام جستجوی یک فرمول در reaxys :

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Sign in

Search for pt(pph3)3 Find

Search Reaxys
pt(pph3)3

AND

Create Structure or Reaction Drawing

REAXYS® Version 1

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Sign in

1 Substances out of 150 Documents, containing 312 Reactions, 0 Targets

By Structure Measurement pX Highest Clinical Phases Targets Parameters Substance Classes Molecular Weight Number of Fragments Availability Availability in other databases Available Data Document Type

1 C1=CC=C(C=C1)P2=CC=CC=C2P3=CC=CC=C3P4=CC=CC=C4Pt5=CC=CC=C5

1 Pt(triphenylphosphine)platinum(0)
C₁₈H₁₅P₃Pt 981.953 16473567 13517-35-6

Identification Physical Data - 18 Other Data - 4 Preparations - 68
Druglikeness Spectra - 20 Reactions - 312
Documents - 150

ELSEVIER © 2017 RELX Intellectual Properties SA. Terms and Conditions Privacy policy Performance Page RELX Group™

Cookies are used by this site. To decline or learn more, visit our Cookies page

Reaxys - Add preparation - 68

Preparation

1

2

+ Load more Cancel X Add 0 to plan >

ذد

مراحل انجام یک جستجو در ask reaxys :

REAXYS®

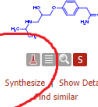
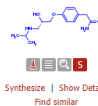
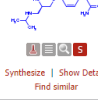

Ask Reaxys atanolol Search

Reactions Substances, Names, Formulas Medicinal Chemistry Literature ReaxysTree

Physical Spectra Natural Product Advanced

مطابق شکل زیر با کلیک روی قسمت synthesize میتوان نقشه و مسیر سنتز ماده مورد نظر را مشاهده کرد(تصویر بعدی). و از طریق گزینه available data میتوان مواد مربوط به ماده مورد جستجو را نیز مشاهده کرد.

The screenshot shows the Reaxys search results page for the query 'Synthesize'. The interface includes a filter sidebar on the left, a top navigation bar with tabs for Bioactivities (2676), Reactions (120), Substances (86), Targets (128), and Citations (2835). The main content area displays a table of search results. The 'Available Data' column is circled in red, and the 'Synthesize' button for the first result is also circled in red.

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps All Reactions	Available Data	Target	N° of ref.
	Chemical Name: (R)-atenolol Reaxys Registry Number: 2739235 CAS Registry Number: 29122-68-7 Type of Substance: isosyclic Molecular Formula: C ₁₄ H ₂₁ N ₂ O ₃ Linear Structure Formula: (CH ₃) ₂ CHNHCH ₂ CH(OH)CH ₂ OC ₆ H ₄ CH ₂ CO ₂ H Molecular Weight: 266.34 InChI Key: HETKJMKYRPLQGS-UHFFFAOYSA-N Highest Clinical Phase: Withdrawn	12 prep out of 62 reactions.	Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (137) Spectra (100) Other Data (435)	Show Targets	2761
	Chemical Name: (S)-atenolol Reaxys Registry Number: 4234251 CAS Registry Number: 93379-94-5 Type of Substance: isosyclic Molecular Formula: C ₁₄ H ₂₁ N ₂ O ₃ Linear Structure Formula: C ₁₄ H ₂₁ N ₂ O ₃ Molecular Weight: 266.34 InChI Key: METKJMKYRPLQGS-LBRGRKZSA-N	32 prep out of 33 reactions.	Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (30) Spectra (24) Other Data (3)	Show Targets	55
	Chemical Name: (+)-(R)-atenolol Reaxys Registry Number: 4234250 CAS Registry Number: 56715-13-0 Type of Substance: isosyclic Molecular Formula: C ₁₄ H ₂₁ N ₂ O ₃ Linear Structure Formula: C ₁₄ H ₂₁ N ₂ O ₃ Molecular Weight: 266.34 InChI Key: HETKJMKYRPLQGS-GFCVCGCSA-N	26 prep out of 26 reactions.	Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (27) Spectra (12)	Show Targets	43
	Chemical Name: atenolol hydrochloride Reaxys Registry Number: 4893252	0 prep out of 1 reactions.	Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (7)	Show Targets	18

The screenshot shows the Reaxys synthesis editor interface. It features a top toolbar with options like New, Undo, Open, Save, Rename, Duplicate, Export, Print, Left, Right, Top, Reset, Thumbnail, and Report. The main workspace displays a chemical reaction scheme. The starting material is isopropylamine (H₃C-CH(NH₂)-CH₃). The reaction is labeled 'Synthesize (144)' and shows a yield of 95.00%. The product is a complex molecule with a hydroxyl group, an amine group, and a benzamide moiety. A 'Hints' box provides instructions: 'Click on "Synthesize" to find all preparations of the compound.', 'In the browser below review the preparations and "Add" the best one to the synthesis task.', and 'Add a branch or click on the button "Duplicate" if you want to investigate alternative routes.'. Below the reaction, there are buttons for 'Details', 'Add', and 'Remove'. At the bottom, there are tabs for 'Step', 'Yield', 'Conditions', and 'References'.

تهیه و تنظیم: گلاره خادمی کیا-کتابدار دانشکده داروسازی