

Reaxys –
die Faktendatenbank aus dem
Informationsangebot der



THÜRINGER UNIVERSITÄTS- UND LANDESBIBLIOTHEK JENA

Heike Hotzel
Fachreferentin für Chemie

17. Februar 2014

Übersicht



- Inhalt, Umfang, Möglichkeiten der Datenbank, Voraussetzungen
- Substanzsuche
- Reaktionssuche
- Syntheseplanung
- Einstellungen und Hilfen
- Vergleich der Datenbanken Reaxys und SciFinder

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Verwendung der Farben in Fließbildern:

Dunkelrot Erklärung

Blau Vorgehensweise am Computer

- Reaxys ist eine Faktendatenbank, die chemische Verbindungen und Reaktionen enthält. Diese Datenbank ist ein webbasiertes System. Es ist nicht nötig, am eigenen Rechner irgendwelche Installationen von exotischer Software vorzunehmen. Worauf Reaxys zurückgreift sind übliche Programme wie ein Internet-Explorer und Java.
- Die Datenbank besteht aus drei großen Bestandteilen:
 - Beilstein-Crossfire
 - Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry
 - Patent Chemistry Database (WO, EP, US) aus Life Science und organischer Chemie

Begründer:

Leopold Gmelin (1788-1853)

Ziel:

Sammlung **aller** relevanten Daten der Chemie und deren kritische Begutachtung

Den „Gmelin“, wie das ursprüngliche Handbuch und anschließend die entsprechende Datenbank genannt wurden, begründete Leopold Gmelin mit dem Ziel, **alle** relevanten Daten der Chemie aus der gesamten veröffentlichten chemischen Literatur zusammenzutragen. Die Daten wurden jedoch nicht nur einfach gesichtet und zusammengestellt, sondern vorher überprüft. Nur was der Prüfung standhielt, wurde in das Handbuch aufgenommen.

- Von 1817 bis 1819 erschien die 1. Auflage des Handbuches, damals bereits in 3 Bänden, von denen die Organische Chemie den kompletten dritten Band ausmachte war.
- Gmelin konnte vor seinem Tod 1853 noch die 4. Auflage fertig stellen. Die Organische Chemie umfasste da bereits die Bände 4 und 5. Es wurde klar, dass durch das schnelle Anwachsen der Daten eine Trennung zwischen den organischen und den anorganischen Verbindungen notwendig werden würde.
- Nach Gmelins Tod 1853 wurde das Handbuch nur noch mit der anorganischen Chemie weitergeführt.
- Diese Weiterführung des Gmelin-Handbuchs übernahm eine Arbeitsgruppe der Deutschen Chemischen Gesellschaft.
- Die organischen Daten wurden von diesem Zeitpunkt an nicht mehr ausgewertet. Ihnen widmete sich später Friedrich Konrad Beilstein mit dem Beilstein-Handbuch.

- Aus der Arbeitsgruppe der Deutschen Chemischen Gesellschaft ging 1922 das Gmelin-Institut hervor, das in unterschiedlichen Trägerschaften bis 1997 existierte.
- Inhaltlich wurde von 1817 bis 1975 die gesamte anorganische Literatur ausgewertet, ab 1975 bis zur Einstellung der Arbeiten im Jahre 1997 nur noch die 110 wichtigsten Zeitschriften der anorganischen, physikalischen und metallorganischen Chemie. Diese Komplettauswertung verursachte damals einen riesigen Rückstand zur aktuellen Literatur.
- Deshalb wurde ein Schnitt gemacht und ab dem Jahrgang 1975 nur noch die 110 wichtigsten Zeitschriften der anorganischen, physikalischen und metallorganischen Chemie ausgewertet.
- Ab 1982 wurde ausschließlich in englischer Sprache publiziert.
- Neben dem Aufholen der Rückstände bis zur aktuellen Literatur begann man 1984, die Daten in einer Datenbank zu sammeln, die ab Dezember 1991 von STN angeboten wurde.

- Ab 1990 hieß das Handbuch „Gmelin Handbook of Anorganic and Organometallic Chemistry“.
- Ab 1991 wurden die Daten vom Host STN International Karlsruhe elektronisch bereitgestellt.
- Die 8. Auflage erschien zwischen 1924 und 1997. In ihr wurden auch metallorganische Verbindungen aufgenommen.
- Mit der Auflösung des Gmelin-Instituts wurde 1997 die Arbeit am Handbuch, die Auswertung und Aufnahme neuer Daten beendet und die Herausgabe des gedruckten Werkes eingestellt.
- Bis zur Einstellung der Produktion des „Gmelins“ in Buchform erschienen 760 Bände mit 240.000 Seiten.
- Die Daten wurden vom Elsevier-Verlag erworben und ab 2009 ein Teil der Reaxys-Datenbank.

Begründer:

Friedrich Konrad Beilstein (1838-1906)

Ziel:

Sammlung aller relevanten Daten der **organischen** Chemie und deren kritische Begutachtung

Der „Beilstein“, wie das ursprüngliche Handbuch auch genannt wurde, wurde von Friedrich Konrad Beilstein begründet. Er war der erste Herausgeber dieses Handbuches. Da sich der „Gmelin“ auf die anorganische Chemie spezialisiert hatte, wurde der organische Teil nach einer Pause von 27 Jahren von Friedrich Konrad Beilstein in ähnlicher Weise publiziert.

- Die 1. Auflage des Handbuches wertete die Literatur ab 1771 aus und enthielt bereits 15.000 organische Verbindungen. Sie erschien zwischen 1880 und 1882 auf 2.200 Seiten.
- Zwischen 1885 und 1889 erschien die 2. Auflage des Handbuches bereits in drei Bänden auf 4.080 Seiten.
- Zwischen 1892 und 1899 erschien die 3. Auflage in vier Bänden auf 6.844 Seiten.
- Da Beilstein diese gewaltige Arbeit nicht allein fortführen konnte, wurde das Handbuch in der Obhut der Deutschen Chemischen Gesellschaft ab 1896 fortgeführt. Durch die Überprüfung aller aufgenommenen Daten wurde der Abstand zur aktuellen Literatur immer größer. Das hatte zwar den Vorteil, dass man sich auf die Daten absolut verlassen konnte, aber die Daten im Handbuch hinkten der aktuellen Forschung um Jahre hinterher und der Abstand wurde immer größer.

Historischer Abriss des Handbuches



- Da Anfang der 1990er Jahre der Computer in Büros und Labore Einzug hielt, die Online-Nutzung von Datenbanken Standard wurde, entschloss man sich 1994 die Daten ebenfalls in eine Datenbank aufzunehmen.
- Da die Arbeit mit dem Handbuch in gedruckter Form im angebrochenen Zeitalter des Computers nicht mehr zeitgemäß erschien, die Entwicklung von benutzerfreundlichen Endnutzersystemen voranschritt, zudem beim Handbuch der Abstand zur aktuellen Literatur inzwischen mehr als 20 Jahre betrug, wurde über eine sinnvolle Weiterführung nachgedacht. Man entschloss sich, auf die umfangreiche und zeitraubende Evaluierung der aufgenommenen Daten und die Herausgabe eines gedruckten Werkes zu verzichten und die Daten nur noch elektronisch zu erfassen.
- Außerdem sollte der Abstand zur aktuellen Literatur schnell aufgehoben werden.
- Bis zur Einstellung der Produktion des Beilstein in Buchform (1998) erschienen 503 Bände auf 440.814 Seiten.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

- Nach Beendigung der Herausgabe eines gedruckten Werkes wurden die Daten an die Firma MDL verkauft, die sie unter dem Namen „Beilstein-Crossfire“ vermarktete.
- Damit ging eine Ära zu Ende, die Deutschland viele Millionen an Steuergeldern gekostet hatte.



Ausgewählte Publikationen aus Chemiepatenten von 1869 bis 1980

Ausgewählte englischsprachige Patente von 1978 bis heute (WO, US, EP)

Ausgewählte Patentklassifikationen von 1976 bis heute

Ausgewählte Patentklassifikationen



Medizinische Produkte	A01N	Preservation of bodies of humans or animals or plants or parts thereof; biocides, e.g. as disinfectants, as pesticides, as herbicides
	A61K	Preparations for medical, dental, or cosmetics
Organische Chemie	C07B	General methods of organic chemistry, apparatus thereof
	C07C	acyclic or carbocyclic compounds
	C07D	heterocyclic compounds
	C07F	acyclic or carbocyclic compounds or heterocyclic compounds containing elements other than carbon, hydrogen, halogen, oxygen, nitrogen, sulfur, selenium or tellurium
	C07G	compounds of unknown constitution
	C07H	sugars; derivatives thereof; nucleosides; nucleotides; nucleic acids
	C07J	steroids
Farbstoffe	C07K	peptides
	C07M	indexing scheme associated with subclasses C07B to C07K, relating to specific properties of organic compounds
	C09B	organic dyes or closely-related compounds for producing dyes; mordants; lakes

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Inhalt von Reaxys



36 Mill. Reaktionen

23 Mill. Substanzen

48 Mill. Literaturverweise

Bellstein-CrossFire

Gmelin

Ausgewählte Patentklassen

PubChem und eMolecules



Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Identifizierung von Substanzen

Finden von Reaktionen



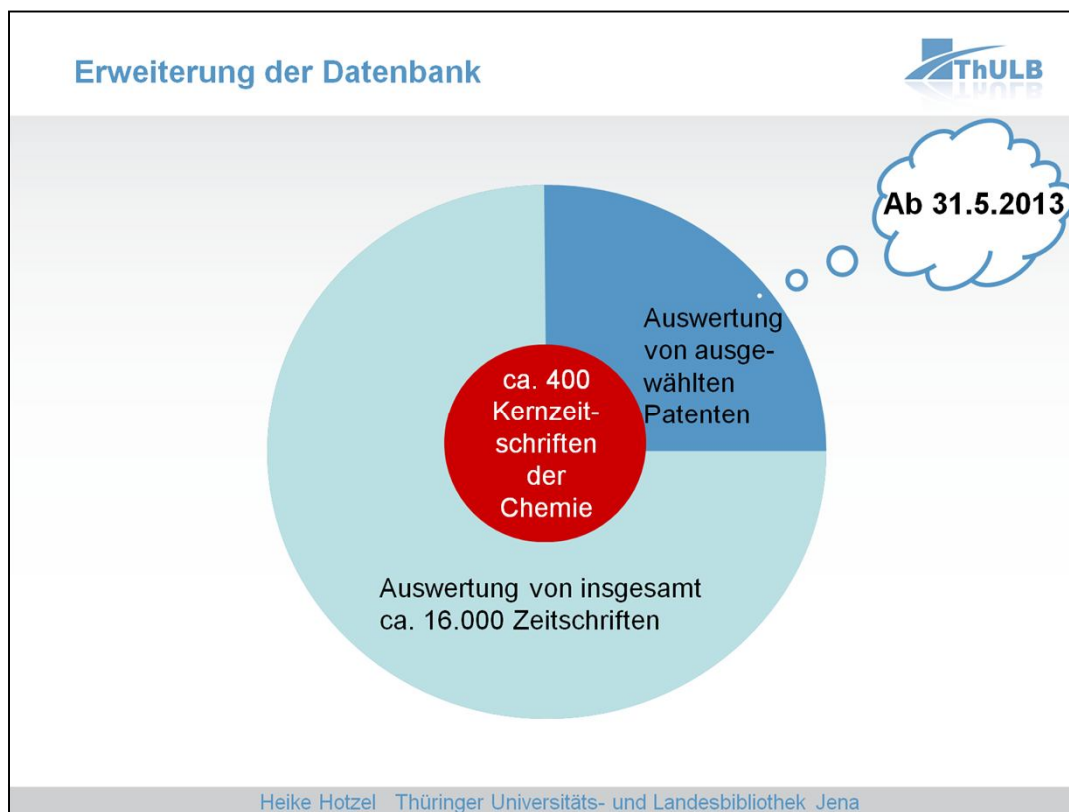
REAXYS®

durch
Erfassung von über 400 verschiedenen Eigenschaften

und

chemische Informationen
physikalische Eigenschaften, Spektren, ...
pharmakologische, toxikologische
und ökologische Daten



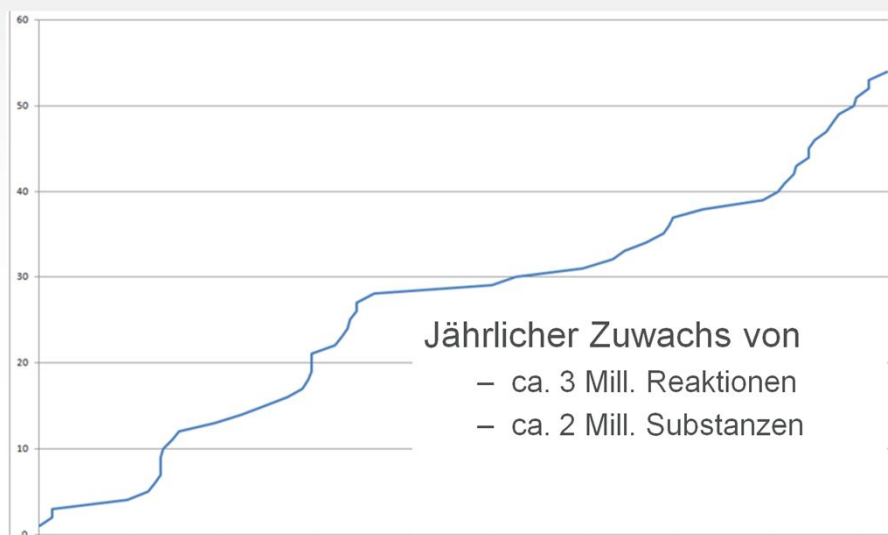


Der Unterschied von Reaxys zu einer Literaturdatenbank war bisher die klare Absage, die komplette chemische Literatur auswerten zu wollen. Es war eine Sammlung von **Fakten** zu Substanzen und Reaktionen. Es wurden nicht akribisch alle chemischen Zeitschriften ausgewertet, sondern nur die **wichtigsten** Zeitschriften des Faches herangezogen, die die Fakten für die Datenbank liefern können. Für Beilstein-Crossfire waren das insgesamt nur 174 Zeitschriften. In Reaxys wurden anfänglich ca. 200 Zeitschriften komplett ausgewertet und weitere 3.800 auszugsweise, wenn Eigenschaften in den Beiträgen beschrieben waren.

In der neuen Version ab 31. Mai 2013 werden ca. 400 Zeitschriften als Kernzeitschriften ausgewertet. Insgesamt finden nunmehr ca. 16.000 Zeitschriften in Reaxys Berücksichtigung

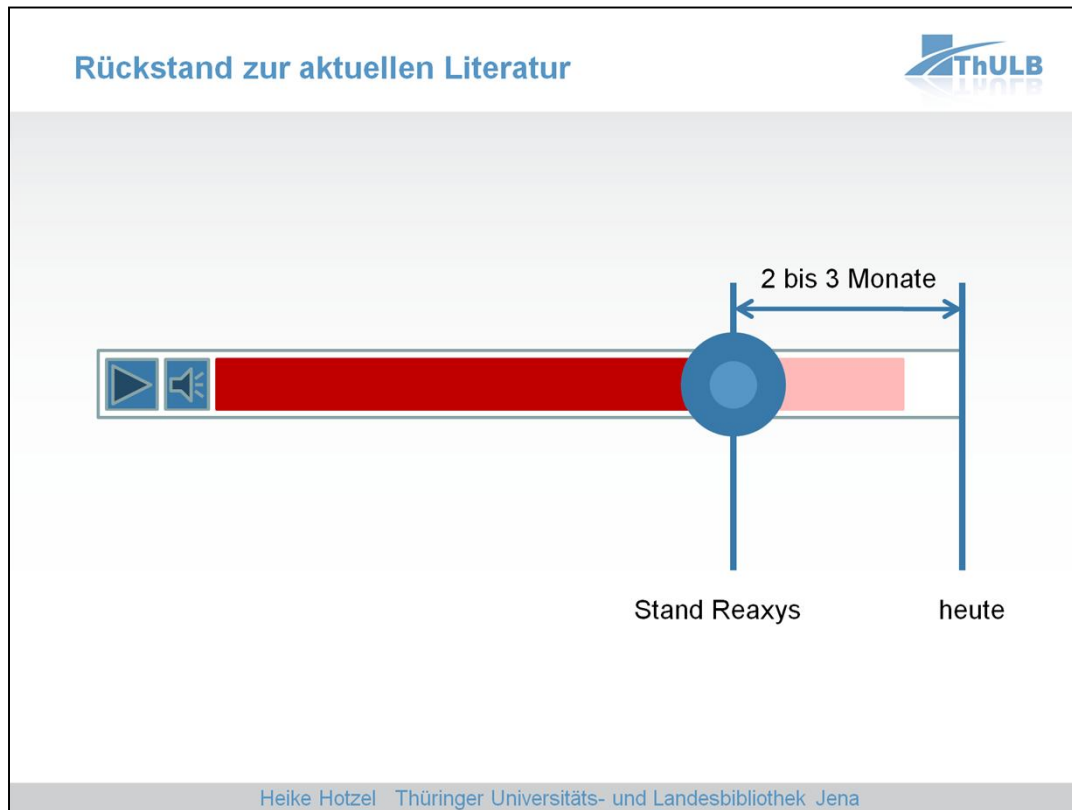
In Reaxys suchte man bisher, wenn man Eigenschaften von Verbindungen brauchte; in SciFinder suchte man, wenn man einen umfassenden Überblick in der Literatur haben möchte. Dieser „Mangel“ soll in Reaxys mit der extremen Erhöhung des Literaturanteils aufgehoben werden. Nach der Umstellung erhöhte sich der Anteil von ca. 5.000 Zitaten auf ca. 20.000.

Tägliches Update



Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Jährlich wächst die Datenbank um ca. 3 Mill. Reaktionen, ca. 2 Mill. Substanzen und bisher ca. 140.000 Zitate. Jetzt sind bereits seit 31. Mai 2013 nach der Umstellung 40 Mill. Zitate eingeflossen.



Der Rückstand zur aktuellen Literatur hat sich verkürzt. Waren es bei Beilstein-Crossfire noch sechs Monate, sind es bei Reaxys nur noch ca. zwei bis drei Monate.

Wichtigste Punkte zusammengefasst



- Möglichkeit der Suche nach chemischen Verbindungen über die Struktur und Substruktur und deren Eigenschaften und umgedreht
- Reaktionssuche
- Syntheseplanung
- Verknüpfungen zwischen chemischen Verbindungen, Reaktionen und den entsprechenden Literaturzitat und Patenten
- Literatursuche ist möglich

Technische Voraussetzungen



Windows PC

- Betriebssysteme
 - Windows
 - 2000
 - XP
 - Vista
 - 7
- Internet Browser
 - Explorer 6 bis 10
 - Firefox 3 und höher
 - Google Chrome 10 und höher
- Java
 - Ab Version 1.6.0_11
 - JRE ab 5.0 und höher

Mac PC

- Hardware:
 - Mac OS X 10.4 oder höher
- Internetbrowser
 - Safari 4.0 oder höher
 - Firefox 3.x oder höher

JavaScript und Cookies
müssen zugelassen werden.

Reaxys-Nutzung ist unter
Linux möglich.

Reaxys kann man in Linux-Systemen mit Mozilla FireFox in einem **Original** Sun Java Runtime-Environment recherchieren.

im Universitäts-Netz oder durch Anmelden im VPN

Personalisiertes Arbeiten

Bei Anmeldung alle Vorteile des personalisierten Arbeitens...

...oder anonymes Arbeiten ohne Anmeldung

Start von Reaxys



Eingangsseite der ThULB

Datenbankinformationssystem DBIS


Fachgebiete	Anzahl
Allgemein / Fachübergreifend	631
Allgemeine und angewandte Sprach- und Literaturwissenschaft	37
Anglistik, Amerikanistik	82
Archäologie	56
Architektur, Bauingenieur- und Vermessungswesen	44
Biologie	204
Chemie	91
Elektrotechnik, Mess- und Regelungstechnik	17
Energie, Umweltschutz, Kerntechnik	39
Ethnologie (Völker- und Völkerkunde)	44
Geographie	59
Gebirgswissenschaften	40
Germanistik, Niederländische Philologie, Skandinavistik	150
Geschichte	278
Informelle	28
Informations-, Buch- und Bibliothekswesen, Handschriftenkunde	71
Klassische Philologie	69
Kunstgeschichte	60
Land- und Forstwirtschaft, Gartenbau, Fischereiwirtschaft, Hauswirtschaft, Ernährung	91
Maschinenwesen, Werkstoffwissenschaften, Fertigungstechnik, Bergbau und Hüttenwesen, Verkehrstechnik, Fernwerkzeuge	29
Mathematik	25
Medien- und Kommunikationswissenschaften, Publizistik, Film- und Theaterwissenschaft	107
Medizin	199
Musikwissenschaft	33
Naturwissenschaft allgemein	35
Pädagogik	55


Reaxys

<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.do>

Beschreibung der Datenbank

Benutzungshilfe



Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek 

Home Katalog E- Zeitschriften Digitale Bibliothek Fachinformation Schulungen

Schnelle Suche

Erweiterte Suche

Aktuelles

Fachübersicht

Alphabetsche Liste


Hinweise zur Benutzung

Ansprechpartner

Bibliotheksauswahl /
Einstellungen


Über DBIS

Gefördert durch:



Reaxys (Beilstein, Gmelin)

Recherche starten: <https://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.d...>

Verfügbar: Uninetz 

Inhalt: Reaxys kombiniert und ersetzt die folgenden 3 Datenbanken:

- **CrossFire Beilstein** (beinhaltet die Druckausgabe der Beilstein Chemie[®] von K. F. Beilstein)
- **CrossFire Gmelin** (beinhaltet die Daten des Gmelin-Handbuchs für Organometallicchemie und anorganische Chemie)
- **Patent Chemistry Database**


Reaxys bietet Informationen über chemische Reaktionen, chemische Verbindungen mit Strukturformeln (Reaktionen) sowie der zugehörigen Literatur (Reaktionen) aus Life Sciences und Life Sciences.

verschiedene chemische Informationen oder physikalische Eigenschaften, sowie pharmakologische, toxikologische und ökologische Daten verzeichnet sein, die mit der entsprechenden Literatur verknüpft sind. Insgesamt beinhaltet das System derzeit ca. 29 Millionen Reaktionen und 18 Millionen Substanzen, zu der jährlich ca. 1 Million Reaktionen und Substanzen hinzukommen.

Fachgebiete: Chemie
Pharmazie
Verfahrenstechnik, Biotechnologie, Lebensmitteltechnologie

Schlagwörter: Chemische Verbindungen
Chemische Reaktion
Substanzeigenschaften

Reaxys –
die Faktendatenbank aus dem
Informationsangebot der



THÜRINGER UNIVERSITÄTS- UND LANDESBIBLIOTHEK JENA

Heike Hotzel
Fachreferentin für Chemie

10. Februar 2011
innen mens 400

Version vom ...

Weitere
Bemerkungen:

Eine Benutzungshilfe finden Sie [hier](#)

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Eine Benutzungshilfe mit dem Aktualisierungsdatum ist im Internet abgelegt.

Hauptbildschirm (1)

The Reaxys team added new features and functionality. Details may be found [here](#)

REAXYS®

Workflow of the Week #10
Search for reactions by ccbay1 structure: filter by reaction structures

Anonymous user (141.35.23.110)

Query Results Synthesis Plans History Report My Alerts My Settings Help Register Login

Standard Advanced Query: Import Save Sources: Reaxys, PubChem, eMolecules.

Start search with:

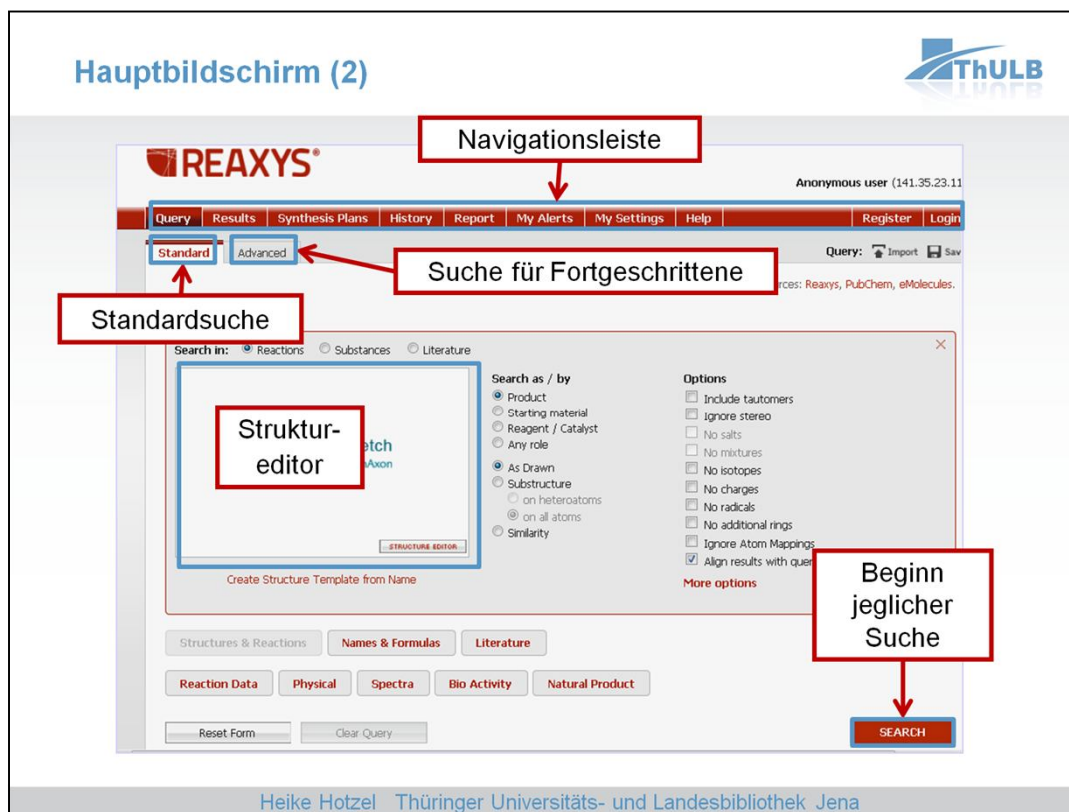
Structures & Reactions Names & Formulas Literature

Reaction Data Physical Spectra Bio Activity Natural Product

Contact Us | Support | About Reaxys | [Terms and Conditions](#) | Privacy Policy | Performance Page
Copyright © 2013 Reed Elsevier Properties SA. All rights reserved. Authorized use only.
Reaxys® and the Reaxys® trademark are owned and protected by Reed Elsevier Properties SA and used under license.
Cookies are set by this site. To decline them or learn more, visit our [Cookie Info](#) page.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man sich zum ersten Mal in Reaxys einwählt, sieht man diesen Bildschirm in der Standardsuche. Drückt man auf das Tableau <Structures & Reactions>, öffnet sich ein Fenster mit dem Struktureditor, wie auf der nächsten Folie zu sehen ist.



Der Hauptbildschirm bietet zwei verschiedene Möglichkeiten, in die Suche einzusteigen:

- die Suche im Standardmodus,

Je nach Auswahl der Suche verändert sich das Angebot der Felder. Im Standardmodus sind die häufig genutzten Möglichkeiten für weniger geübte Rechercheure zusammengestellt. Um chemische Strukturen zeichnen zu können, ist ein Struktureditor integriert

- die Suche im Advanced-Modus

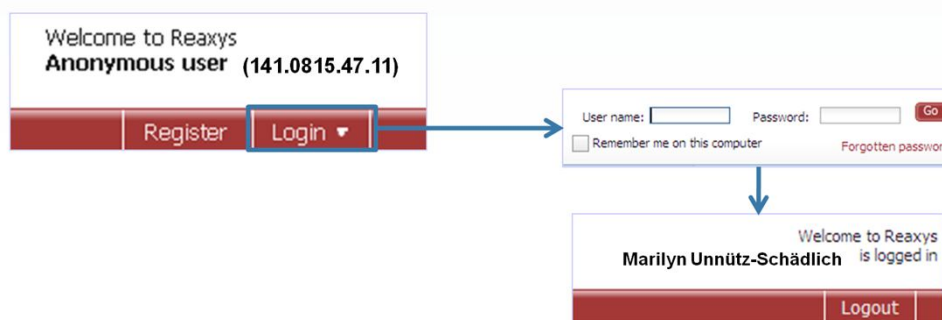
Im Fortgeschrittenen-Modus dagegen werden alle Möglichkeiten der Suche angeboten, die Reaxys bietet.

Um chemische Strukturen zeichnen zu können, ist hier ebenfalls ein Struktureditor integriert.

In der Navigationsleiste kann man zwischen Suche, Ergebnis, Syntheseplanung, Anzeige durchgeführter Suchen usw. hin- und herspringen.

Vorteile des personalisierten Arbeitens:

- Abspeichern von Einstellungen
- Abspeichern von Suchfragen
- Abspeichern von Ergebnissen
- Auslösen von regelmäßigen Suchläufen (Alerts)
- Längeres Halten der aktuellen Suche (statt 30 Minuten sechs Stunden)



Welcome to Reaxys
Anonymous user (141.0815.47.11)

REAXYS®

Anonymous user 141.0815.47.11

Register

Login ▾

Synthesis Plans

History

Report

My Alerts

My Settings

Help

Register

Login ▾

Register

Why register? Registration is free and allows you to gain access to special features, such as alerts and saved searches, which you can customize to your interests. The same username and password can be used to access these features on all of the Elsevier websites on this platform. Re-registration is not required.

[Privacy Policy](#)

[Terms and Conditions](#)

Title ▾

First Name

Last Name

Email

Job title

Institution

Location

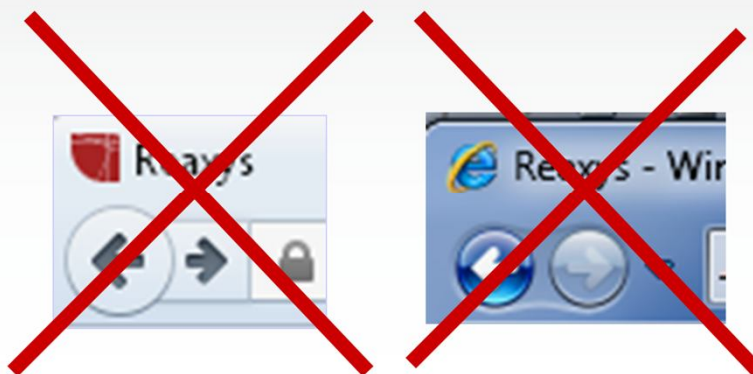
Password

Confirm password

Ausfüllen des Formulars

Anmelden für Reaxys zum personalisierten Arbeiten


Register




Nicht mit den Vorwärts- und Rückwärtstasten der Internetbrowser bewegen!

Die Vorwärts- und Rückwärtstasten von Reaxys funktionieren sicher ebenfalls einigermaßen. Es kann jedoch nicht sichergestellt werden, dass die Zwischenergebnisse erhalten bleiben. Nach einer aufwendigen Suche wäre es sicherlich ärgerlich, wenn die Ergebnisse verschwunden wären.

Bewegen in der Datenbank (2)



Um jederzeit verlässlich auf seine Ergebnisse zurückgreifen zu können, sollte man sich nur mit den vorgegebenen „Reitern“ und Button in der Datenbank bewegen



The screenshot displays the Reaxys database interface. At the top, there is a navigation bar with tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, Report, My Alerts, My Settings, and Help. Below this is a toolbar with icons for Limit to, Exclude, Output, Zoom in, Zoom out, and Hide. A second toolbar contains icons for New, Undo, Open, Save, Rename, Duplicate, Output, Print, Left, Right, Top, Resize, Thumbnail, and Report. A third toolbar shows 'Standard' and 'Advanced' views. The main area shows a sequence of filter steps: Query (with a 'Create Alert' button), 296 reactions (with a chemical structure), 49 reactions (filtered by solvent), 12 reactions (filtered by yield), and 9 reactions (filtered by Record Type). On the right, there are tabs for 'Reactions' and 'Citations'. Blue arrows indicate the flow from the top toolbar to the navigation bar, from the navigation bar to the view tabs, from the view tabs to the main filter sequence, and from the main filter sequence to the right-hand tabs.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Die Zwischenergebnisse bleiben sicher erhalten, wenn man sich nur mit den Tasten von Reaxys bewegt.

- Einstiegsmöglichkeiten in die Suche
- Voreinstellungen
- Trunkierung von Begriffen oder Einschränkung von Suchbereichen
- Standardsuche
- Expertensuche (Advanced)
- Verknüpfung mehrerer Suchen
- Überprüfung der Suchsyntax bei manueller Eingabe der Suchfrage

Eingangsbildschirm


Standard-Suche (SS)

Advanced-Suche (AS)

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man Reaxys aufruft, ist der Bildschirm für die Standard-Suche eingeschaltet. Mit Klicken auf den Reiter kann man in den Modus für Fortgeschrittene umschalten.

AS – Suche für Fortgeschrittene



Advanced

Expertensuche ausgewählt


Query Results Synthesis Plans History Report My Alerts My Settings Help Logout

Standard **Advanced** Query: Import Save
Sources: Reaxys, PubChem, eMolecules.

Search

Search in: Reactions Substances Literature

**Struktur-
editor**

selected query editor:

by ChemAxon

Create Structure Template from Name

Suche as / by

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Substructure
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query

More options

**Zusätzlich
einstellbare
Einschrän-
kungen
oder
Bedingun-
gen
für die Suche**

**Schnelleinstieg, wenn der
chemische Name bekannt ist**

Show searchable fields **Suche nach
Eigenschaften**

Clear Query SEARCH

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Nach Auswahl der Suche, hier <Advanced>, kann man mit dem Struktureditor die Struktur zeichnen. Wenn der Name der gesuchten Substanz bekannt ist, kann man diesen in die Schnellsuche eingeben. Das sollte man nur in Ausnahmefällen und nur für sehr gängige Namen tun. Besser ist es immer, mit dem Struktureditor zu arbeiten und die benötigte Struktur zu zeichnen.

Sucht man anhand von Eigenschaften die passenden Substanzen, kann man dies über die formularbasierte oder die Expertensuche tun.

AS – Substanzname über Schnelleinstieg

Advanced

Please enter a chemical identifier and then click "Submit"

is

Chemical Name: aspirin
 InChI-Key: BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N
 CAS-No: 50-78-2
 Smiles: CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C(O)=O

Bei der Eingabe zwingend zu beachten:

1. Keine Schreibfehler!
2. Groß- und Kleinschreibung unwichtig
3. Auflösung von Umlauten, ä in ae usw.
4. Griechische Buchstaben in Code mit \$ (siehe nebenstehende Tabelle)
5. Hochgestellte Zahlen müssen heruntergezogen werden.
6. Trunkierung ist möglich.

DISPLAY	SUCHE	
α	Α	\$a
β	B	\$b
γ	X	\$c
δ	Δ	\$d
ε	E	\$e
φ	Φ	\$f
γ	Γ	\$g
η	H	\$h
ι	I	\$i
θ	Θ	\$j
κ	K	\$k
λ	Λ	\$l
μ	M	\$m
ν	N	\$n
ο	O	\$o
π	Π	\$p
θ	Θ	\$q
ρ	P	\$r
σ	Σ	\$s
τ	T	\$t
υ	Υ	\$u
ϖ	Ϙ	\$v
ω	Ω	\$w
Ξ	Ξ	\$x
ψ	Ψ	\$y
ζ	Z	\$z

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Bei der Eingabe zwingend zu beachten:

1. Schreibfehler müssen vermieden werden! Der kleinste Schreibfehler führt zu Null Treffern.
2. Groß- und Kleinschreibung ist unwichtig.
3. Umlaute müssen aufgelöst werden, ä in ae, ö in oe, ü in ue.
4. Griechische Buchstaben werden mit \$ codiert. (siehe Tabelle)
5. Hochgestellte Zahlen müssen heruntergezogen werden
6. Trunkierung ist links, rechts und in der Mitte des Namens möglich. Ein <?> steht für ein variables Zeichen, <??> steht für zwei variable Zeichen und <*> steht für beliebig viele variable Zeichen.

Tipp: So viel Zeit sollte sein, die Substanz zu zeichnen oder anders eindeutig zu suchen. Mit dem Schnelleinstieg kommt man nicht zwingend schneller zu einem vor allem brauchbaren Ergebnis.

AS – Voreinstellungen für die Substanzsuche

Advanced

Search as / by

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query

More options

- Include related Markush
- Keep Fragments
 - separate together

(type values in fields e.g. 3-5)

- # of Atoms
- # of Fragments
- # of Ring Closures

Sehr weite Suche:
bringt bei wenigen Einschränkungen
und vielen Substitutionsmöglich-
keiten viele potentielle Ergebnisse

Sehr spezifische Suche:
bringt bei vielen Einschränkungen
nur wenige Ergebnisse

Search as / by

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query

More options

- Include related Markush
- Keep Fragments
 - separate together

(type values in fields e.g. 3-5)

- # of Atoms
- # of Fragments
- # of Ring Closures

Standard

The Reaxys team added new features and functionality. Details may be found [here](#)

REAXYS®

Workflow of the Week #9
Selecting reduction of amides to amines

Anonymous user
(141.35.23.110)

Query Results Synthesis Plans History Report My Alerts My Settings Help Register Login

Standard Advanced Query: Import Save

Sources: Reaxys, PubChem, eMolecules.

Mögliche Auswahl

Start search with:

Structures & Reactions

Names & Formulas

Salvarsan

H₂(S,Se)₂

Literature

Reaction Data

Physical

Spectra

Bio Activity

Natural Product

Contact Us | Support | About Reaxys | Terms and Conditions | Privacy Policy | Performance Page
 Copyright © 2013 Reed Elsevier Properties SA. All rights reserved. Authorized use only.
 Reaxys® and the Reaxys® trademark are owned and protected by Reed Elsevier Properties SA and used under license.
 Cookies are set by this site. To decline them or learn more, visit our [Cookie Info](#) page.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena


In der Standardsuche wählt man zu Beginn zwischen der Suche für Strukturen und Reaktionen, chemischen Namen und Formeln und der Literatursuche. Je nach Auswahl verändert sich auf dem Bildschirm das Angebot.

SS – Substanzsuche nach Namen und Formeln



The screenshot displays the REAXYS search interface. At the top, a navigation bar includes 'Query', 'Results', 'Synthesis Plans', 'History', 'Report', 'My Alerts', 'My Settings', and 'Help'. The main search area is titled 'Standard' and has two sub-tabs: 'Standard' and 'Advanced'. The 'Standard' tab is active, and the 'Substances' radio button under 'Search in' is selected. The 'selected query editor' shows the 'MarvinSketch' logo by Chemaxon. Below this, there are buttons for 'Structures & Reactions', 'Names & Formulas' (highlighted with a red box), and 'Literature'. Further down, there are buttons for 'Reaction Data', 'Physical', 'Spectra', 'Bio Activity', and 'Natural Product'. At the bottom of the search area are 'Reset Form' and 'Clear Query' buttons. On the right side, there are sections for 'Search as / by' (with options like Product, Starting material, Reagent / Catalyst, Any role, As Drawn, Substructure, and Similarity) and 'Options' (with checkboxes for Include tautomers, Ignore stereo, No salts, No mixtures, No isotopes, No charges, No radicals, No additional rings, Ignore Atom Mappings, and Align results with query). A 'More options' link is also present.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

SS – Trunkierung und Eingrenzung von Bereichen 

Standard → **Substances** → **Names & Formulas**

Names & Formulas

Please select the fields you would like to add to your search by selecting the checkboxes and click 'OK'

Reaxys Registry Number = Lookup

CAS Registry Number is Lookup

Chemical Name **is** Lookup

Molecular Weight = Lookup

Element Symbols is Lookup

Element Counts is Lookup

View more fields

Advanced

Substances → **Identification**

Identification

Reaxys Registry Number (IDE.XRN)

Preferred RN (IDE.XPR)

CAS Registry Number (IDE.RN)

Chemical Name (IDE.CN) **is** Lookup

Chemical Name Segment (IDE.CNS)

Linear Structure Formula (IDE.LSF)

1 substances

159 substances

892 substances

1498 substances

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Eine Trunkierung von Begriffen kann in der Standardsuche und in der Advanced Search vorgenommen werden.

<is> : genau wie eingegeben

(diese Suche, die die meisten Einschränkungen hat, erzielt die wenigsten Ergebnisse: genau eine Substanz mit dem Namen Benzidin)


<starts with> : das Eingegebene muss am Wortanfang stehen

<ends with> : das Eingegebene muss am Wortende stehen

<contains> : das Eingegebene kann irgendwo im Wort, hier chemischer Name, vorkommen

(die am weitesten gefasste Suche hat die meisten Ergebnisse)

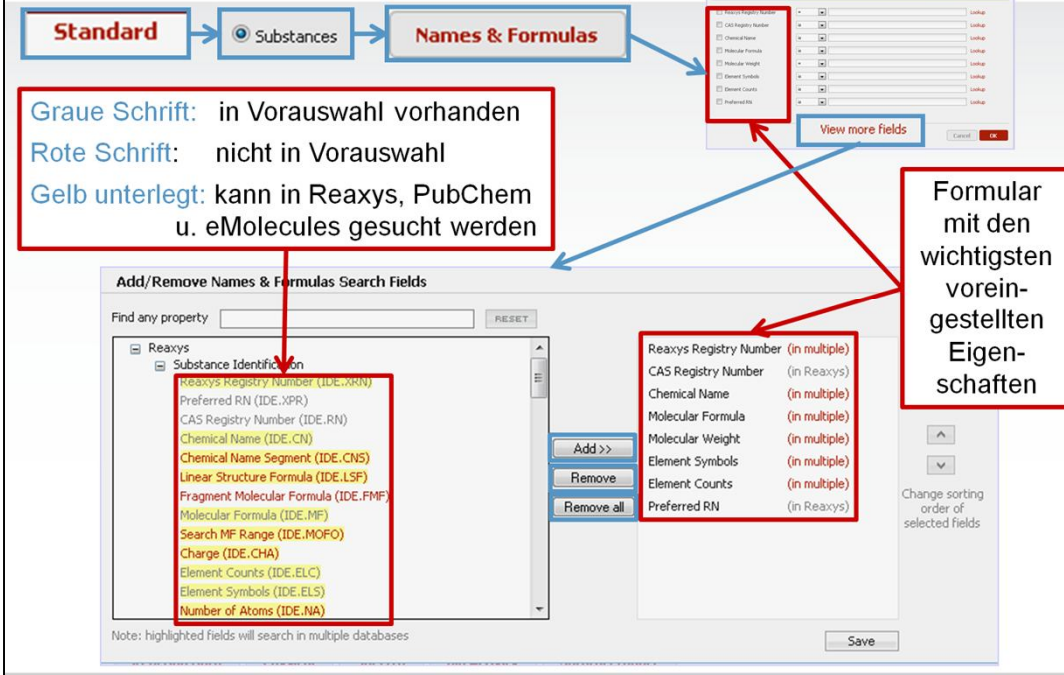
SS – Suche von Eigenschaften (1)



Standard →
 Substances →
 Names & Formulas

Graue Schrift: in Vorauswahl vorhanden
Rote Schrift: nicht in Vorauswahl
Gelb unterlegt: kann in Reaxys, PubChem u. eMolecules gesucht werden

Formular mit den wichtigsten voreingestellten Eigenschaften



Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man Substanznamen und Formeln in der Standardsuche nachschlagen möchte, bekommt man ein einfaches Formular mit den wichtigsten Eigenschaften angeboten. Wenn das nicht reicht, kann man sich durch Anklicken von <View more fields> den kompletten Baum der „Substance Identification“ anzeigen lassen.


Hier unterscheidet man drei verschiedene Anzeigen:

- mit grauer Schrift sind alle Eigenschaften geschrieben, die sich in der Vorauswahl befinden,
- mit roter Schrift sind alle Eigenschaften aufgeführt, die sich noch nicht in der Vorauswahl befinden und die man aufnehmen könnte und
- gelb hinterlegt sind alle Eigenschaften, die in den drei verschiedenen Systemen von Reaxys, PubChem und eMolecules vorhanden sind.

Mit <Add> kann man aus allen Eigenschaften weitere gewünschte dem Menü hinzufügen, mit <Remove> kann man Eigenschaften aus der Auswahl wieder entfernen.

Falls man eine völlig andere Auswahl treffen möchte, kann man das Menü mit <Remove all> komplett leeren und mit <Add> die Auswahl neu aufbauen.

SS – Suche von Eigenschaften (2)



Standard →
 Substances →
 Names & Formulas

Add/Remove Names & Formulas Search Fields

Find any property: RESET

Reaxys

- Substance Identification
- Reaxys Registry Number (IDE.XRN)
- Preferred RN (IDE.XPR)
- CAS Registry Number (IDE.RN)
- Chemical Name (IDE.CN)
- Chemical Name Segment (IDE.CNS)**
- Linear Structure Formula (IDE.LSF)
- Fragment Molecular Formula (IDE.FMF)
- Molecular Formula (IDE.MF)
- Search MF Range (IDE.MOFO)
- Charge (IDE.CHA)
- Element Counts (IDE.ELC)
- Element Symbols (IDE.ELS)
- Number of Atoms (IDE.NA)

Note: highlighted fields will search in multiple databases

- Reaxys Registry Number (in multiple)
- CAS Registry Number (in Reaxys)
- Chemical Name (in multiple)
- Molecular Formula (in multiple)
- Molecular Weight (in multiple)
- Element Symbols (in multiple)
- Element Counts (in multiple)
- Preferred RN (in Reaxys)
- Chemical Name Segment (in multiple)

Change sorting order of selected fields

- Reaxys Registry Number (in multiple)
- CAS Registry Number (in Reaxys)
- Chemical Name (in multiple)
- Molecular Formula (in multiple)
- Chemical Name Segment (in multiple)**
- Molecular Weight (in multiple)
- Element Symbols (in multiple)
- Element Counts (in multiple)
- Preferred RN (in Reaxys)

Add >>
Remove
Remove all
Save

Reaxys Registry Number CAS Registry Number Chemical Name Molecular Formula
 Molecular Weight Element Symbols Element Counts Preferred RN
 Chemical Name Segment

Möglichkeit der Veränderung der Sortierung der Eigenschaften

Aufnahme weiterer Eigenschaften in das Suchformular

Heike Holzer | Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Um eine oft benutzte Eigenschaft in das Formular zu laden, klickt man auf diese Eigenschaft. Sie ist dunkel unterlegt, gleichzeitig wird der <Add>-Button aktiv. Wenn man diesen anklickt, wird die neue Eigenschaft an das Ende der Liste mit aufgenommen. Die Sortierung der Eigenschaften kann man mit den beiden Buttons rechts neben den Eigenschaften verändern. Zum Schluss speichert man die neuen Einstellungen mit <Save> ab und die neu eingefügte Eigenschaft steht zur Suche im Formular bereit

SS – Suche von Eigenschaften (3)

Standard

CAS Registry Number

Chemical Name

Molecular Formula

Chemical Name Segment

Molecular Weight

Element Symbols

Element Counts

Preferred RN

Eingabe der Summenformel in Hill-Ordnung:

1. Kohlenstoff
2. Wasserstoff
3. Alle weiteren Elemente in alphabetischer Reihenfolge

Durch Anklicken wählt man die erste Substanz aus, alle weiteren durch Drücken von <Alt Gr> und linker Maustaste.

Voraussichtliche Anzahl der Treffer

Select index items and click 'Transfer'

Reaxys PubChem eMolecules

Search Form:

C6H6O (167)	
C6H6O*Al3 (1)	
C6H6O*Ar3 (2)	
C6H6O*Ar4 (2)	
C6H6O*C6H13O-C12H39P4Ru (1)	
C6H6O*C6H6 (2)	
C6H6O*Cr16O115P (1)	
C6H6O*2C6H6 (1)	
C6H6O*C6H7N (3)	
C6H6O*C6H7N*2C18H18O3 (1)	
C6H6O*C6H7NO (4)	
C6H6O*C6H8N2 (4)	
C6H6O*C6H10O (1)	
C6H6O*C6H10O2 (1)	
C6H6O*C6H10O4 (1)	
C6H6O*C6H11NO (1)	
C6H6O*2C6H11NO (1)	
C6H6O*C6H11NO3 (1)	
C6H6O*C6H11NO3 (1)	
C6H6O*C6H11N5O3*C8H16FeN4O6 (1)	
C6H6O*C6H12N2 (1)	

Page 42270 of 209617

Molecular Formula


Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Um eine Eigenschaft in der Standardsuche zu suchen, klickt man bei der entsprechenden Eigenschaft auf <Lookup>, woraufhin sich ein Fenster mit den zur Verfügung stehenden Substanzen öffnet. Hier gibt man die Molekülformel in Hill-Ordnung (zuerst den Kohlenstoff, dann den Wasserstoff und die restlichen Elemente in alphabetischer Reihenfolge, wenn die Formel keinen Kohlenstoff enthält, dann gleich alphabetisch) ein.

Es öffnet sich eine Liste von Substanzen, aus der man sich die gesuchte auswählen kann. Die Anzahl der voraussichtlichen Treffer steht in Klammern hinter der Substanz. Mit <Transfer> bekommt man die Summenformel in das Suchformular, drückt <OK> und es erscheint diese Suchzeile unter dem Structureditor auf dem Suchschirm. Mit Anklicken von <Search> beginnt man die Suche.

Falls man es sich mit der Suche noch einmal anders überlegt, kann man durch Drücken von <Lookup X> die Suchzeile wieder entfernen.

SS – Suche von Eigenschaften (4)





Standard would like to add to your search by selecting the checkboxes and click 'OK'

<input type="checkbox"/> Reaxys Registry Number	=		Lookup
<input type="checkbox"/> CAS Registry Number	is		Lookup
<input checked="" type="checkbox"/> Chemical Name	is	benzid	Lookup
<input checked="" type="checkbox"/> Molecular Formula	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Chemical Name Segment	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Molecular Weight	=		Lookup
<input type="checkbox"/> Element Symbols	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Element Counts	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Preferred IUPAC	is		Lookup

- benzidine
- benzidine yellow gr
- benzidine
- benzidine (phenyl-u-14c)
- benzidine [czech]
- benzidine, komplex m. 4,4'-dinitro-biphenyl
- benzidine, 5-tinitrobenzol-komplex
- benzidine-15n2
- benzidine-3,3'-dicarbonsaeuredimethylester
- benzidine-3-yl hydrogen sulfate
- benzidine-3-yl hydrogen sulphate
- benzidine-3,3'-disulfonsaeure
- benzidine-7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethan
- benzidine-7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethan
- benzidine-carbonsaeure-(2)
- benzidine-carbonsaeure-(3)
- benzidina
- benzidina [italian]
- benzidine
- benzidine yellow vid-266 (water dispersible)
- benzidine (and its salts)

OK

Suche in: Reactions | Substances | Literature

selected query action:  

Search in / by:

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
- In parentheses
- In all atoms
- Uniquely

Options:

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore atom mapping
- Ignore stereo quality

SEARCH

Chemical Name is Lookup X

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Durch Schreiben in das Feld klappt sich eine Wortliste entsprechend den bereits eingetragenen Buchstaben auf.

Man muss nicht zwingend mit <Lookup> die hinterlegte Auswahl benutzen. Man kann in das Feld für die gesuchte Eigenschaft einfach hineinschreiben, dabei öffnet sich sofort eine Wortliste entsprechend den eingetragenen Buchstaben, aus der man ebenfalls die gewünschten Begriffe auswählen kann.

Hat man die gesuchten Begriffe gefunden, drückt man <OK>, der Suchbegriff erscheint in der Suchzeile im Suchschirm. Die Suche löst man mit Drücken von <Search> aus.

Analog kann man so mit allen Suchfeldern in der Standardsuche verfahren. Die hinterlegten Listen sind den jeweiligen Suchbegriffen immer angepasst.

AS – Verfügbare Eigenschaften

Beim Schreiben in das Feld klappen sich bereits die Eigenschaftsfelder auf, in denen die Buchstaben-gruppe enthalten ist.

Eingabe der gesuchten Eigenschaft ins Feld

Durch Klicken auf die Eigen-schaft öffnet sich die Suche in diesem Feld

Show searchabe fields

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man wissen möchte, ob eine bestimmte Eigenschaft verfügbar ist, drückt man auf <Show searchabe fields>. Es klappt sich der komplette Menübaum auf. Die gelb hinterlegten Eigenschaftsfelder sind in Reaxys, PubChem und eMolecules zu finden, die nicht hinterlegten Felder sind nur in Reaxys besetzt. Während man die gewünschte Eigenschaft in das Feld schreibt, klappen sich die entsprechenden Eigenschaftsfelder bereits auf. Hier im Beispiel sollte die Suche nach „natural products“ erfolgen, nach Eintragen von „natu“ ist der Menübaum bereits bei „Natural products“ aufgeklappt. Beispiele für weitere suchbare Eigenschaften sind „mechanical properties“, „UV“, „crystal“, „sublimation“, „boiling point“, „use/application“.

AS – Substanzsuche mit Summenformel

Öffnen der Baumstruktur

Eingabe der Summenformel in Hill-Order:

1. Kohlenstoff
2. Wasserstoff
3. Alle weiteren Elemente in alphabetischer Reihenfolge

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Es wurde in die Fortgeschrittenen-Suche (Advanced Search) unter Suche nach Substanzen gesucht:

Gesucht wird hier eine Substanz mit der Summenformel: $C_{10}H_{14}N_2$.


Ganz wichtig: Bei der Eingabe muss die Groß- und Kleinschreibung der Buchstaben für die Elemente eingehalten werden.

Die Suche hat über 1.000 Ergebnisse, das sind zu viele.

Weiterhin bekannt sind die Namensfragmente : methyl, pyridine, pyrrolidine

(Für Mehrkomponentenverbindungen wie z.B. das Hydrochlorid des Pyridins schreibt man: $C_5H_5N \cdot HCl$)

AS – Substanzsuche mit Namensfragmenten



Advanced
Substances

CAS Registry Number (IDE.RN)

Chemical Name (IDE.CN)

Chemical Name Segment (IDE.CNS) contains Lookup

Linear Structure Formula (IDE.LSF)



Fragment Molecular Formula (IDE.FMF)

Molecular Formula (IDE.MF)

Search MF Range (IDE.MOFO)

Charge (IDE.CHA)

920 substances out of 889 citations

Structure	Structure/Compound Data	N° of preparations All Prep: All Reactions:	Available Data
	<p>Chemical Name: 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)pyridine</p> <p>Reaxys Registry Number: 82108</p> <p>CAS Registry Number: 22083-74-9</p> <p>Type of Substance: heterocyclic</p> <p>Molecular Formula: C₉H₁₀N₂</p> <p>Linear Structure Formula: N₂H₄CH₂(CH₂NHCH₃)</p> <p>Molecular Weight: 162.235</p> <p>InChI Key: SNI0C0GAKADSCV-UHFFFAOYSA-N</p>	57 prep out of 218 reactions.	Identification Physical Data (4 Spectra (56) Bioactivity/Ecol Use/Applicator Natural Product
	<p>Chemical Name: D-nicotine</p> <p>Reaxys Registry Number: 82110</p> <p>CAS Registry Number: 25163-00-9</p> <p>Type of Substance: heterocyclic</p> <p>Molecular Formula: C₁₀H₁₄N₂</p> <p>Linear Structure Formula: C₁₀H₁₄N₂</p> <p>Molecular Weight: 162.235</p> <p>InChI Key: SNI0C0GAKADSCV-SIWIWGLBSA-N</p>	17 prep out of 33 reactions.	Identification Physical Data (3 Spectra (1) Bioactivity/Ecol

Select index items and click "Transfer"

Reaxys PubChem eMolecules

Search: methyl

- methyl (4)
- methyla (10)
- methylb (4)
- methyl01 (1)
- methyl02 (1)
- methyl05 (1)
- methylc (1)
- methylf (1)
- methylg (1)
- methylh (1)
- methylin (1)
- methylj (1)
- methylk (1)
- methylm (1)
- methyln (1)
- methylo (1)
- methylp (1)
- methylq (1)
- methylr (1)
- methyls (1)
- methylt (1)
- methylu (1)
- methylv (1)
- methylw (1)
- methylx (1)
- methylz (1)

Transfer Print Cancel

IDE.CNS = '*methyl*' AND

IDE.CNS = '*pyrrolidine*' AND

IDE.CNS = '*pyridine*' SEARCH

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Bei der Suche mit Verbindungsnamen ist folgendes zu beachten:

Der chemische Name muss in geeignete Fragmente zerlegt und mit „and“ gesucht werden. Die Namensfragmente müssen links und rechts trunziert werden (Benutzung von „contains“).

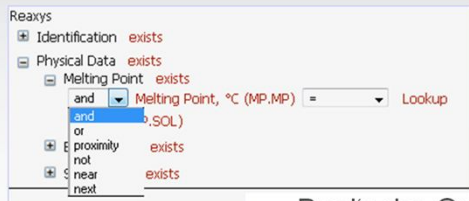
Die alleinige Suche nur mit den Namensfragmenten führt ebenfalls nicht zum Ziel, weil auch hier zu viele Ergebnisse gefunden werden. Ist eine Suche mit Namen oder Namensfragmenten ergebnislos oder brachte sie zu viele Treffer, sollte zwingend eine Struktursuche durchgeführt werden.

Weitere Hinweise zu Namensfragmenten:

- In der Datenbank werden IUPAC-Namen verwendet, das heißt, die Namen sind in englischer Sprache.
- Deutsche Verbindungsnamen sind sehr selten.
- Trivialnamen werden nur unvollständig aufgeführt.
- Handelsnamen sind nicht enthalten, jedoch bekommt man zu jeder chemischen Struktur eine Liste von Anbietern gezeigt, soweit die Substanz im Handel zu kaufen ist.

Es ergibt sich, dass eine Suche mit Namensfragmenten oder Summenformeln entweder zu viele Ergebnisse liefert oder zu keinem eindeutigen Ergebnis führt. Im Falle des Beispiels könnte man beide Teilfragen verbinden und käme zu einem Ergebnis mit nur noch 4 Substanzen. Das könnten bei einer anderen Suchfrage jedoch immer noch sehr viel mehr sein, deshalb ist es immer besser, mit einer gezeichneten Struktur in die Suche zu gehen.

AS – Suchoperatoren für Verknüpfung mehrerer Suchen



- Bool'sche Operatoren sind möglich: **and, or, not**
- Abstandsoperatoren
 - **PROXIMITY**
zur Suche in Unterkategorien
z.B. BP.BP='120' PROXIMITY (BP.P>='750' AND BP.P<='760')
(Siedepunkt unter bestimmten Druckverhältnissen)
 - **NEAR**
zur Suche im gleichen Feld mit beliebiger Reihenfolge
z.B. pharm.com=ld* near pharm.com=50*
(Suche nach der letalen Dosis)
 - **NEXT**
zur Suche im gleichen Feld mit festgelegter Reihenfolge
z.B. AB.AB = '*capillar*' NEXT AB.AB = '*electrophor*'
Kapillarelektrophorese

Advanced → Substances

Reaxys

- Identification exists
- Physical Data exists
 - Melting Point exists
 - and Melting Point, °C (MP.MP) > Lookup
 - Solvent (MP.SOL)
 - Boiling Point exists
 - Sublimation exists

MP.MP<'100' AND MP.MP>'200'

mit
<, >, <=, >=, =
sind Einschränkungen von
Bereichen möglich


Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Advanced Search:

= steht für einen bestimmten Wert

Mit <, >, <=, >= können Bereiche festgelegt werden.

AS – Verknüpfung der Suchfragen





Advanced → **Substances**


	Query	Temporary result description	Date
<input checked="" type="checkbox"/> 11 <input type="checkbox"/> 10 <input checked="" type="checkbox"/> 4 <input type="checkbox"/> 3	Edit Create Alert Substances: (IDE.CNS="methyl*" AND IDE.CNS="pyrrolidine*" AND IDE.CNS="pyridine*")	920 substances Substances: (IDE.CNS="methyl*" AND IDE.CNS="pyrrolidine*" AND IDE.CNS="pyridine*") 889 citations	View Store View Store View Store
	Edit Create Alert Substances: (IDE.MF="c10H14n2")	1007 substances Substances: (IDE.MF="c10H14n2") 5911 citations	View Store View Store


Combine hitsets


6 substances out of 444 citations


Structure	Substances (Table)	Citations
 1	Chemical Name: 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)pyridine Reaxys Registry Number: 82109 CAS Registry Number: 22083-74-5 Type of Substance: heterocyclic Molecular Formula: C ₁₀ H ₁₄ N ₂ Linear Structure Formula: Nc1ccncc1C2CCNC2	N° of preparations: All Prep: 1 All Reactions: 57 prep out of 218 reactions.
 2	Chemical Name: D-nicotine Reaxys Registry Number: 82110 CAS Registry Number: 2355200-9 Type of Substance: heterocyclic Molecular Formula: C ₁₀ H ₁₄ N ₂ Linear Structure Formula: Cc1cccnc1C2CCNC2	Identification: Physical Data (5 Spectra (6)) Bioactivity/Ecot Use/Application: Natural Product

Select how you want to combine the hitsets


 Merge 11 with 4


 Overlap 11 with

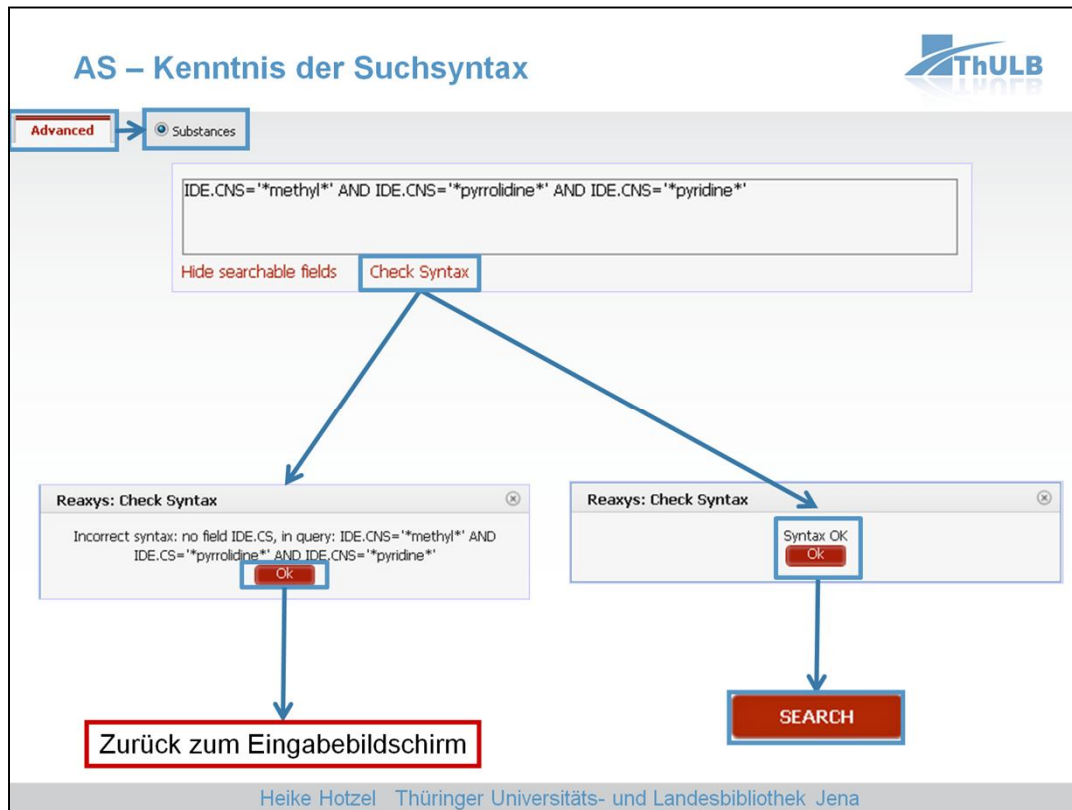

 Exclude 11 from 4


 Exclude 4 from 11

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man beide Suchfragen miteinander verknüpft, bekommt man für dieses Beispiel immer noch mehr als eine Substanz angezeigt, jedoch ist die Auswahl hier bereits ziemlich begrenzt.

Es könnten bei einem anderen Beispiel bei der Verknüpfung der einzelnen Suchfragen mehr Ergebnisse angezeigt werden. Deshalb ist es sinnvoller, von vornherein mit der Struktur zu suchen.



Bei häufigerem Gebrauch der Datenbank kennt man die einzelnen Feldkürzel und ist in der Lage, die Suchfrage direkt in das Suchfeld einzugeben.

Wenn man sich nicht sicher ist, ob die Syntax stimmt, kann man sie vom System überprüfen lassen. Wenn nach der Prüfung angezeigt wird, dass die Syntax „Ok“ ist, kann man den Such-Button betätigen. Bei Fehlern kommt man zum Eingabebildschirm zurück und muss die Suchfrage überarbeiten.

AS – Substanzsuche mit CAS-Registry-Nummer

Advanced → **Substances**

Reaxys

- Identification exists
- Substance Identification
 - Reaxys Registry Number (IDE.XRN)
 - Preferred RN (IDE.XPR)
 - CAS Registry Number (IDE.RN) is **Lookup**
 - Chemical Name (IDE.CN)
 - Chemical Name Segment (IDE.CNS)
 - Linear Structure Formula (IDE.LSF)

Select index items and click "Transfer"

Reaxys

Search:

- 123-08-0 (1)
- 123-09-1 (1)
- 123-10-4 (1)
- 123-11-5 (2)
- 123-12-6 (1)
- 123-13-7 (1)
- 123-15-9 (1)
- 123-17-1 (1)
- 123-18-2 (1)
- 123-19-3 (1)
- 123-20-6 (1)
- 123-22-8 (1)
- 123-23-9 (1)
- 123-24-0 (1)
- 123-25-1 (1)
- 123-28-4 (1)
- 123-29-5 (1)
- 123-30-8 (2)
- 123-31-9 (4)
- 123-32-0 (4)

Page: of 97113 of 452249

Query: →

1 substances

O=Cc1ccc(O)cc1

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps All Reactions	Available Data	N° of ref.
	Chemical Name: 4-hydroxy-benzaldehyde Reaxys Registry Number: 471352 CAS Registry Number: 123-08-0 Type of Substance: isocyclic Molecular Formula: C ₇ H ₆ O ₂ Linear Structure Formula: C ₆ H ₄ (OH)CHO Molecular Weight: 122.123 InChI Key: R6H9SNM/TDWUBI-UHFFFAOYSA-N	274 prep out of 16762 reactions.	Identification Physical Data (327) Spectra (298) Bioactivity/Ecolox (217) Use/Application (25) Natural Product (200) Quantum Chemical Data (1)	8657

Search Progress

Search finished. 1 hits found.

100%

Loading...

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Die einfachste Suche ist die Suche mit der CAS-Registry-Nummer als eindeutige Bezeichnung für chemische Substanzen. Wenn diese Nummer bekannt ist, braucht man die Substanz nicht zu zeichnen.

Nur für ca. 80 % der chemischen Substanzen existiert ein Substanz-, Handels- oder Trivialname, auch die IUPAC-Namen sind nicht eindeutig. Nur bei der Verwendung der CAS-Nummern kann es nicht zu Verwechslungen kommen, jedoch existiert nur für 2/3 der Substanzen eine CAS-Registry-Nummer. Ist diese Nummer nicht bekannt, ist die Struktursuche die einzige Möglichkeit, Verbindungen gezielt zu finden. Man sollte also die gesuchte Substanz mit dem Structureditor zeichnen.

- Verfügbare Struktureditoren
- Zeichenwerkzeuge im Struktureditor ChemAxon MarvinSketch
- Suche einer exakten Struktur
- Substruktursuche
- Einschränken der Ergebnismengen
- Ergebnisanzeige in der Datenbank
- Ausgabe der Ergebnisse

Verfügbare Struktureditoren




- ChemAxon MarvinSketch (voreingestellt)
- Dotmatics Elements
- GGA Ketcher
- CrossFire Structure Editor
- Accelrys Draw
- Accelrys ISIS/Draw
- CambridgeSoft ChemDraw
- ICEdit

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Unter <My Settings> kann man aus acht unterschiedlichen Struktureditoren auswählen. Voreingestellt ist der ChemAxon MarvinSketch.

Der Struktureditor unterscheidet nicht in Standardsuche und Advanced Search.

Struktureditorauswahl



My Settings

Modify Application Settings
Select your favorite structure editor, reaction and substance search options, hits per page and specify color.

Modify Personal Data
View details from your Registration Profile. Includes a facility to change your Personal Details.

Change Password
Change your Password.

Modify application settings

Structure editor

Editors that do not require a plugin to be installed:

- Detemix Elemental
- ChemAxon MarvinSketch (Note: requires Java to be installed)
- GGA Ketcher

Reaxys uses Detemix Elemental as default structure and reaction query editor, if no other editor is selected.

The following editors can only be used, if the Reaxys Structure Editor Plugin is installed:

- Crossfire Structure Editor
- Symyx Draw
- Symyx ISIS/Draw
- CambridgeSoft ChemDraw
- ICSSet

Please check this with your administrator or click the hyperlink and download the installer.
Reaxys will present a warning message, if these editors are selected, but the structure editor plugin is not installed.

Structure display options

Reaction search options

Substance search options

Hits per page Show: 50 results per page

Highlights colors

Structure	<input type="color" value="#0000FF"/>	Change
Text/Data	<input type="color" value="#0000FF"/>	Change

Save

User preferences have been updated.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena


Um den Struktureditor wechseln zu können, muss man angemeldet sein. Man geht in der Menüleiste auf <My Settings>, dann auf <Modify Application Settings>. Es öffnet sich ein weiteres Fenster, in welchem alle verfügbaren Struktureditoren aufgeführt sind.

Der Struktureditor ChemAxon MarvinSketch ist voreingestellt. Wenn man einen der anderen Editoren verwenden möchte und nötige Plug-Ins fehlen, gibt das System eine Warnung aus.

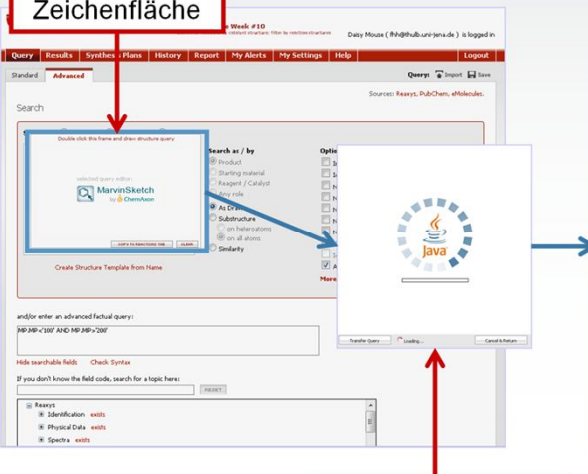
Nach der veränderten Auswahl speichert man mit <Save> die Einstellung ab.

In diesen Unterlagen wird auf die voreingestellte ChemAxon MarvinSketch-Version eingegangen.

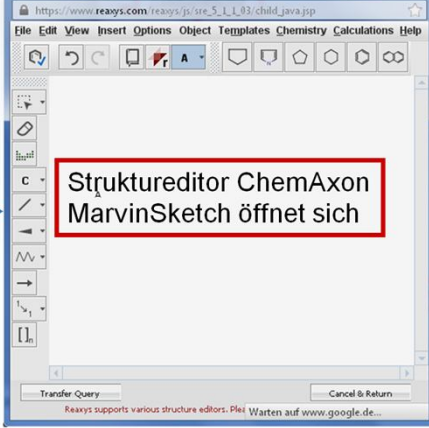
Struktureditor öffnen



Doppelklick auf Zeichenfläche



Struktureditor ChemAxon MarvinSketch öffnet sich



Java wird gestartet

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Beim ersten Mal kann es einige Zeit dauern, bis sich der Editor öffnet. Die abgebildete Kaffeetasse hat hier eine gewisse Berechtigung. Beim späteren Öffnen geht es zügiger.

Menüleiste
ermöglicht Zugriff auf alle Funktionen zum Zeichnen, Ändern und Definieren von (Sub-) Strukturen

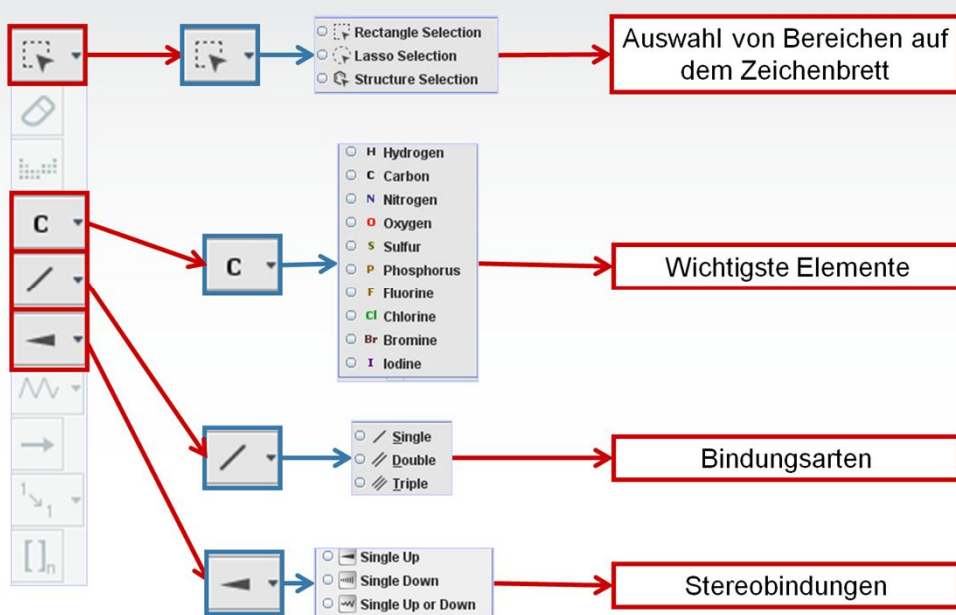
Funktionsleiste waagrecht:
enthält häufig gebrauchte Button, ermöglicht schnelle Auswahl von Strukturen, Templates (vorgefertigte Strukturfragmente) usw.

Funktionsleiste senkrecht:
enthält Basiselemente zum Zeichnen von Strukturen wie Atome, Bindungen, Ketten usw.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Hier wird nur der voreingestellte Struktureditor ChemAxin MarvinSketch erklärt.

Struktureditor – Zeichenwerkzeuge (2)



The image shows a toolbar for a chemical editor with several tools highlighted by red boxes and arrows pointing to descriptive text boxes:

- Längere Ketten:** Points to a tool icon that opens a menu with options for "Chain" and "Curved Chain".
- Reaktionspfeile:** Points to a simple right-pointing arrow icon.
- Atom mapping:** Points to a tool icon that opens a menu with options for "Manual Atom Map" and "Unmap Atoms".
- N-mal Wiederholungen eines ausgewählten Fragments:** Points to a tool icon that opens a "Create Group" dialog box. The dialog shows options for "Type", "Polymer repeat pattern", and "Bracket style".

Periodensystem der Elemente

Daten zum angeklickten Atom Hier: Kohlenstoff

Periodic Table of Chemical Elements - Advanced

Name: Potassium (K)																						
Atomic number: 19																						
Mass: 39.0983																						
Electronegativity: 0.8																						
Ox. state(s): 1.0																						
1	H	2															13	14	15	16	17	18
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne				
3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar				
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn				
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt													

Atom list: Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu

NOT list: Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr

Clear list

Color schema: CPK Standard state

Color legend: s Block d Block

Blocks Metals/Nonmetals p Block f Block

Verschiedene Ansichten einstellbar

Advanced

Description
Any halogen. The query atom X matches any halogen atom.

Generic query atoms

A	Q	M	X
AH	QH	MH	XH Any halogen

Atom query properties

.H*	.X*	.R*	.D*	.I*
.H	.X	.R	.D	.I

Periodic Table Groups

G1	G2	G3	G4	G5	G6	G7	G8	G9
G10	G11	G12	G13	G14	G15	G16	G17	G18

R-groups

R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	R10	R11	R12	R13	R14	R15	R16
R17	R18	R19	R20	R21	R22	R23	R24	R25	R26	R27	R28	R29	R30	R31	R32

Special nodes

LP Pol

Alias

Custom Property

Type: R-group Alias Pseudo SMARTS Value

Value:

Close

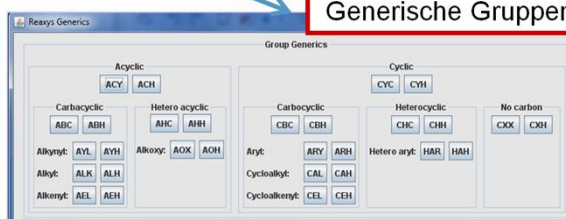
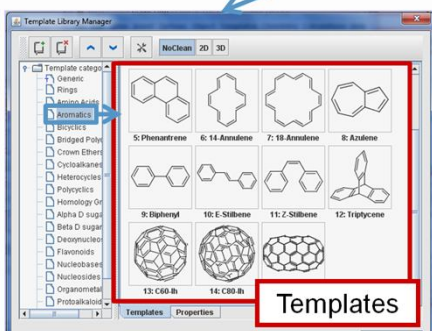
Erläuterung zur angeklickten generischen Gruppe
Hier: Halogene

Funktionsleiste waagerecht

Vor- und Zurück-Button (mehrere Schritte möglich)



Vordefinierte Generische Gruppen



The screenshot illustrates the workflow for customizing the toolbar with templates. A horizontal toolbar at the top contains various icons. A red box highlights a subset of these icons, labeled 'Vom Benutzer ausgewählte Strukturelemente aus den Templates zur schnellen Verfügung'. A red box labeled 'Kontrolle der Struktur' points to the first icon in the toolbar, which is linked to a 'Structure Checker' dialog box showing '2 valence errors found'. Below the toolbar, two 'Template Library Manager' windows are shown. The left window displays a list of templates, with a red box highlighting a selection of six templates: 1: Cyclopentane, 2: Pyrrole, 3: Cyclopentane, 4: Cyclohexane, 5: Benzene, and 6: Naphthalene. The right window shows the 'Template Set Properties' for the selected templates, with a red box highlighting the 'Display on Toolbar' checkbox, which is checked. A 'Reload' button is also visible in this window.

Die wichtigsten Strukturelemente kann man sich in der waagerechten Funktionsleiste anzeigen lassen.

Als erster Button in der waagerechten Strukturleiste erscheint der Button <Check Structure>. Hier kann man die gezeichnete Struktur auf evtl. Fehler absuchen lassen. Bei komplexen Strukturen kann das hilfreich sein, obwohl man direkt beim Zeichnen bereits auf Fehler hingewiesen wird.

Die Auswahl der angezeigten Strukturelemente kann den eigenen Vorstellungen angepasst werden, indem man die Eigenschaften des gewünschten Templates aufschlägt und bei <Display on Toolbar> ein Häkchen setzt. Nach dem Drücken von <Reload> hat man alle Strukturen des/der ausgewählten Templates in der waagerechten Funktionsleiste.

Funktionsleiste waagerecht

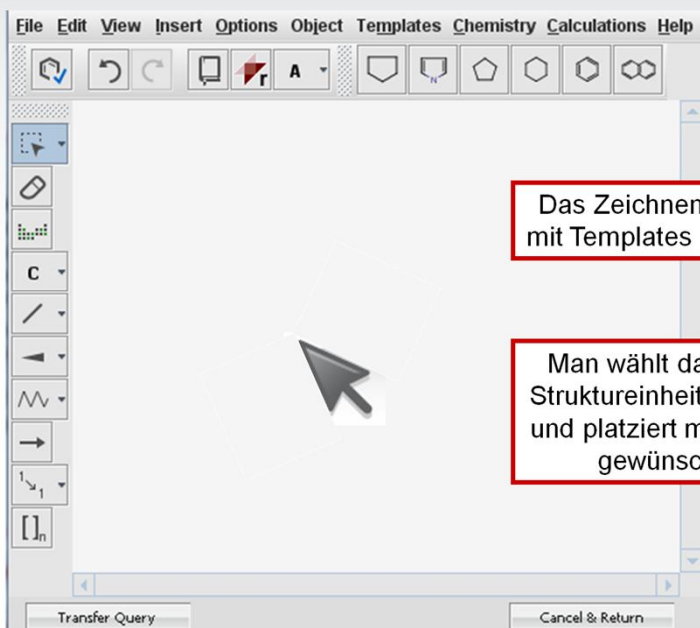


- A Any atom except H (A)
- AH Any atom including H (AH)
- Q Hetero atom (Q)
- QH Any atom except C (QH)
- M Any metal (M)
- MH Any metal or H (MH)
- X Any halogen (X)
- XH Any halogen or H (XH)
- G Any group (G)
- GH Any group or hydrogen (GH)
- G* Any group; ring closure between groups allowed (G*)
- GH* Any group or hydrogen; ring closure between groups allowed (GH*)

Ausgewählte generische Gruppen zur schnellen Verfügung

In der waagerechten Funktionsleiste hat man schnellen Zugriff auf die wichtigsten generischen Gruppen.

Zeichnen von Strukturen (1)



Das Zeichnen erfolgt entweder mit Templates oder mit der Maus

Man wählt das Atom oder die Struktureinheit und Bindung aus und platziert mit dem Cursor die gewünschte Struktur

ThULB

Zeichnen von Strukturen (2)

The screenshot shows a software window with a menu bar (File, Edit, View, Insert, Options, Object, Templates, Chemistry, Calculations, Help) and a toolbar. The main workspace contains three diagrams illustrating merging:

- Vereinigung von Strukturen an Atomen (1):** A benzene ring and a small fragment are shown. A pink circle highlights the atom where they will merge.
- Vereinigung von Strukturen an Bindungen (2):** A cyclopentane ring and a fragment are shown. A pink circle highlights the bond where they will merge.
- Vereinigung zweier Strukturen (3):** Two separate structures are shown. A blue lightning bolt indicates the final merged structure.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena


Man muss nicht alles zeichnen, sondern kann beliebig Strukturelemente aneinander reihen und miteinander verschmelzen lassen.

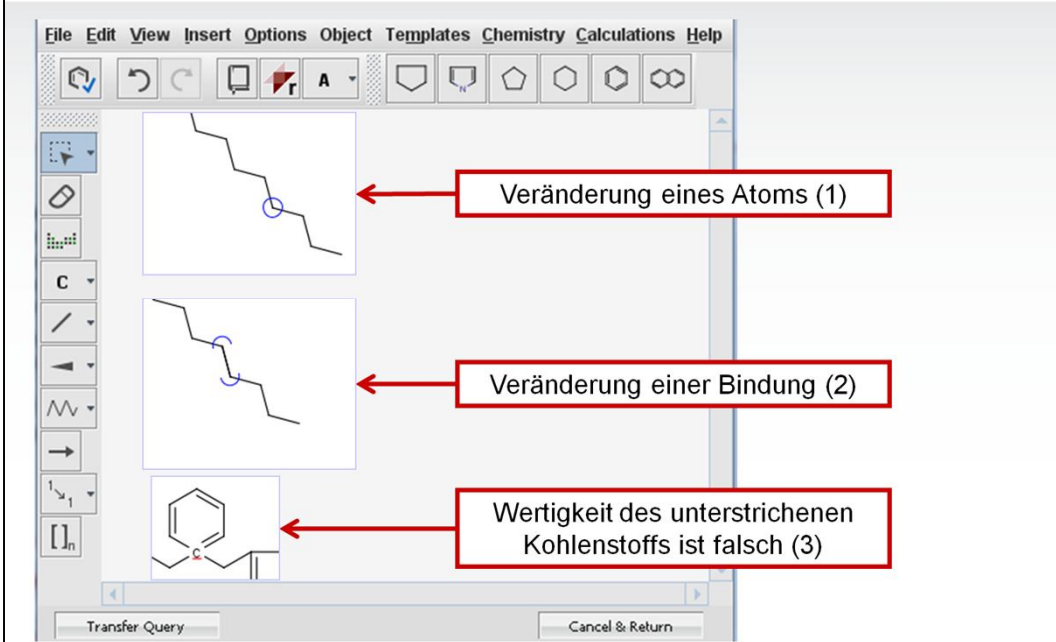
(1) Wenn man mit einem Atom eines Strukturelements im Cursor in die Nähe eines anderen Strukturelements kommt, wird das Verschmelzungsatom vom Editor pinkfarben angezeigt.

(2) Wenn man mit einer Bindung eines Strukturelements im Cursor in die Nähe einer anderen Bindung kommt, wird die Verschmelzungsbindung pinkfarben angezeigt.

(3) Die Vereinigung der Strukturen wird mit einem blauen „Blitz“ angezeigt.

Zeichnen von Strukturen (3)





Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Man kann Atome nach dem Zeichnen noch beliebig verändern.


(1) Wenn man mit einem beliebigen Atom im Cursor in die Nähe eines Strukturelements kommt, wird das Verschmelzungsatom vom Editor blau angezeigt.

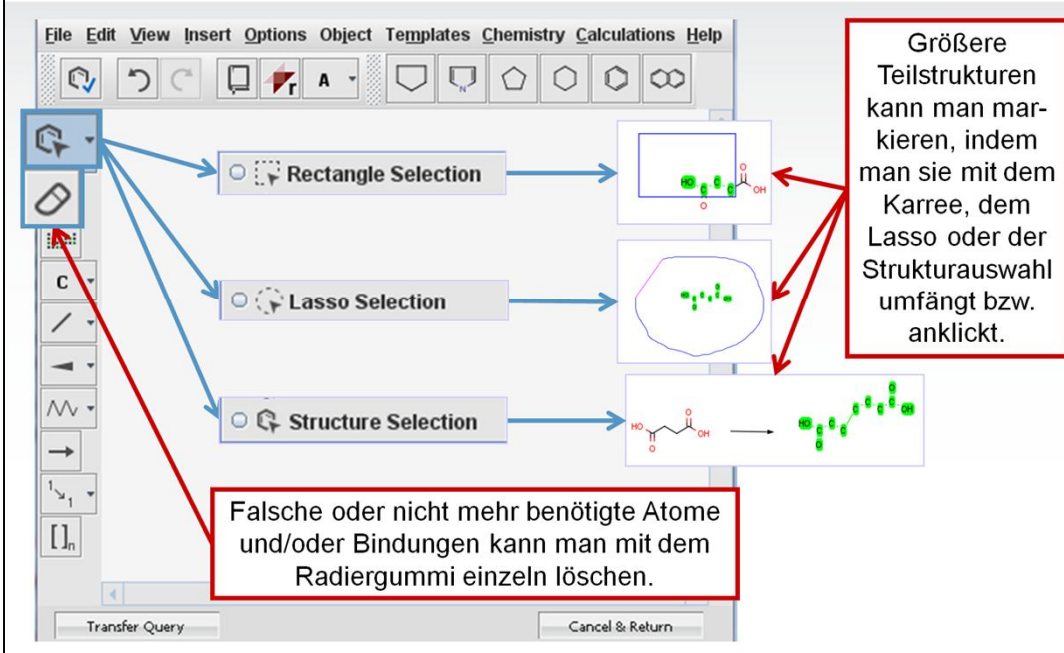
(2) Wenn man mit einem Atom im Cursor in die Nähe einer Bindung kommt, wird die Verschmelzungsbindung blau angezeigt. Hier wird jedoch nicht das Atom verändert, sondern die Bindung eingefügt, die man zuletzt verwendet hat.

(3) Vom Structureditor wird man auf evtl. Fehler bei der Wertigkeit der Elemente hingewiesen. Den Fehler kann man beheben, indem man entweder ein anderes Element einfügt oder die Bindung verändert und es verschwindet die Unterstreichung.

Die Bindung kann man verändern, indem man auf eine Einfachverbindung klickt, die sich zu einer Doppelbindung aufbaut, eine Doppelbindung zu einer Dreifachbindung, beim nächsten Klicken fällt die Bindung auf eine Einfachbindung zurück, beim nächsten Klicken geht es zu einer Doppelbindung usw.

Löschen von Strukturen





The screenshot shows a software interface with a menu bar (File, Edit, View, Insert, Options, Object, Templates, Chemistry, Calculations, Help) and a toolbar. Three selection methods are highlighted with blue arrows: Rectangle Selection, Lasso Selection, and Structure Selection. A red box on the left highlights the Eraser tool (Rasiergummi) in the toolbar. A red box on the right explains that larger substructures can be marked with the Rectangle, Lasso, or Structure Selection tools. A red box at the bottom explains that the Eraser tool can be used to delete individual atoms or bonds that are no longer needed.

Größere Teilstrukturen kann man markieren, indem man sie mit dem Karree, dem Lasso oder der Strukturauswahl umfängt bzw. anklickt.

Falsche oder nicht mehr benötigte Atome und/oder Bindungen kann man mit dem Rasiergummi einzeln löschen.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Man kann mit dem Rasiergummi entweder einzelne Bindungen oder Atome löschen oder mit dem Karree, dem Lasso oder der Strukturauswahl schnell große Bereiche markieren und mit der Löschtaste am Computer diese löschen.

Suche der exakten Struktur

Zeichnen der Struktur

Übertragung ins Suchfeld

Festlegen der Suchbedingungen

Ergebnis der Suche: genau eine Substanz

SEARCH

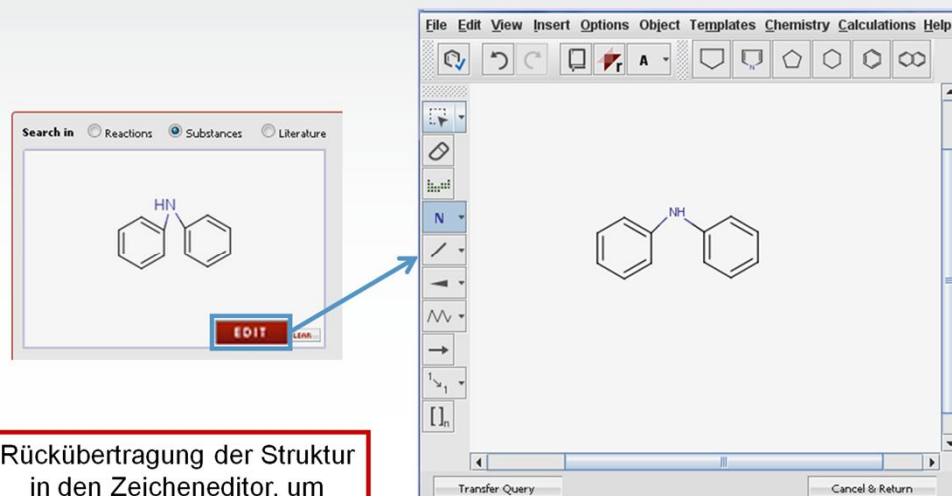
Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Im Zeicheneditor zeichnet man die gesuchte Struktur, schaltet über <Transfer Query> um und die Struktur erscheint im Strukturfeld von Reaxys. Man setzt Häkchen, um die Suchbedingungen festzulegen. Man kann Stereoverbindungen, Isotope, Ladungen, Radikale usw. ein- bzw. ausschließen. Ebenfalls angekreuzt muss <As drawn> sein.

Außerdem legt man fest, ob man eine Struktursuche, eine Reaktionssuche oder Literatursuche macht. Dann drückt man auf <Search>.

Bei Reaktionen ist noch die Rolle der Substanz festzulegen, ob sie als Ausgangsstoff, als Endprodukt oder beides gesucht werden soll. Der Struktureditor arbeitet in der Standardsuche und in der Advanced Search gleich.

Editieren der gezeichneten Struktur



The screenshot displays two windows from a chemistry software application. On the left is a search window titled 'Search in' with radio buttons for 'Reactions', 'Substances', and 'Literature'. The 'Substances' option is selected. Inside the search window, a chemical structure of N-phenylbenzylamine is shown. A red 'EDIT' button is located at the bottom right of the search window. A blue arrow points from this button to the 'N' button in the left-hand toolbar of the main editor window. The main editor window has a menu bar with 'File', 'Edit', 'View', 'Insert', 'Options', 'Object Templates', 'Chemistry', 'Calculations', and 'Help'. It also features a toolbar with various drawing tools and a central canvas displaying the same chemical structure. At the bottom of the editor window, there are buttons for 'Transfer Query' and 'Cancel & Return'.

Rückübertragung der Struktur
in den Zeicheneditor, um
Veränderungen vornehmen
zu können

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Mit dem kleinen Button <Edit> kann man die Struktur schnell in den Zeicheneditor zurückübertragen, um weitere Veränderungen vornehmen zu können.

Ergebnis einer exakten Struktursuche

The screenshot shows the REAXYS interface with search results for diphenylamine. Red boxes highlight the following information:


- Alle Substanznamen:** Chemical Name: diphenylamine
- Alle Reaktionen und Präparationen:** 572 prep out of 1485 reactions.
- Alle Literaturstellen:** 3880
- Strukturformel, wichtigste Eigenschaften und kommerzielle Verfügbarkeit:** Reaxys Registry Number: 508755, CAS Registry Number: 122-29-4, Molecular Formula: C₁₂H₁₁N, Molecular Weight: 169.226, InChI Key: DNIBHRLUKUJCEG-LHFFFAOYSA-N
- Alle verfügbaren Eigenschaften:** Identification: Physical Data (842), Spectra (279), Bioactivity/Ecolox (81), Use/Application (31), Natural Product (1)

Das Ergebnis einer **exakten Suche** ist genau **eine Verbindung**. Zu dieser Substanz sind alle verfügbaren Eigenschaften abrufbar.

Dazu wurde unter <Options> voreingestellt, dass Stereoverbindungen ignoriert und keine Salze, keine Mischungen, keine Isotope, keine Ladungen, keine Radikale und keine angehängten Ringe berücksichtigt werden sollen.

Substruktursuche nach Diphenylamin





Zeichnen der Struktur

Übertragung ins Suchfeld

Transfer Query

Reaktionen

Substanzen

SEARCH

Reaktionen

Substanzen

106151 reactions out of 16297 citations

64198 substances out of 24105 citations

Eine Substruktursuche findet alle Substanzen, die die gezeichnete Verbindung als Grundfragment enthalten. Je nach gewählten Suchbedingungen sind dabei mehr oder weniger Substitutionen erlaubt.

Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Im Zeicheneditor zeichnet man die gesuchte Struktur, schaltet über <Transfer Query> um und die Struktur erscheint im Strukturfeld von Reaxys. Man setzt Häkchen, um Stereoverbindungen, Isotope, Ladungen, Radikale und/oder Atommapping (je nach Bedarf bei der gesuchten Verbindung) auszuschließen. Anders als bei der exakten Suche muss nun <Substructure> angekreuzt sein. Hier muss man sich zwischen Substruktursuche an allen Atomen oder nur an Heteroatomen entscheiden.

Bei Reaktionen ist noch die Rolle der Substanz festzulegen, ob sie Ausgangsstoff, Endprodukt oder beides sein kann.

Wenn man die gesuchte Substruktur zu offen wählt, ist die Anzahl der Ergebnisse meist sehr hoch. Hier müsste man auf jeden Fall mit weiteren Einschränkungen die Anzahl der Treffer minimieren.

Substruktursuche mit Strukturfragmenten

Search in Reactions Substances Literature

Methylchlorid **Nitromethan**

Cl-CH3 H3C-N(=O)=O

Search as / by
 Product
 Starting material
 Reagent / Catalyst
 Any role
 As Drawn
 Substructure
 on heteroatoms
 on all atoms
 Similarity

Options
 Include tautomers
 Ignore stereo
 No salts
 No mixtures
 No isotopes
 No charges
 No radicals
 No additional rings
 Ignore Atom Mappings
 Align results with query

More options
 Keep Fragments
 separate together


of Atoms
of Fragments
of Ring Closures

SEARCH

Dadurch, dass hier nichts angekreuzt wurde, müssen die beiden gezeichneten Fragmente zu ein- und derselben Struktur-formel gehören.

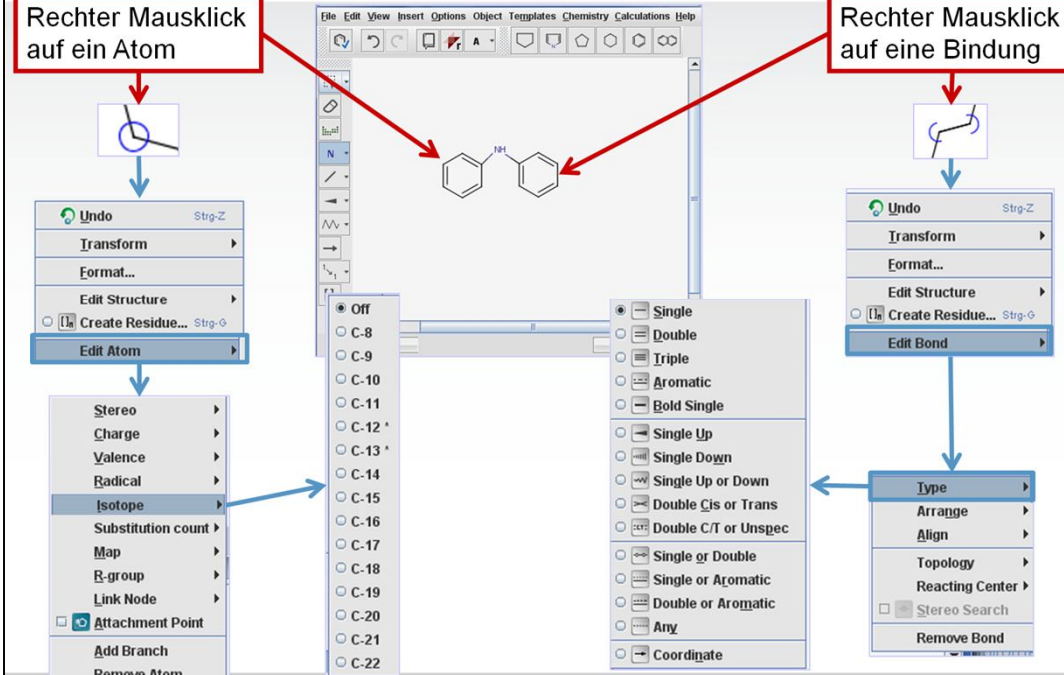
 1 Synthese Identification Physical Data (64) Spectra (28)	 2 Synthese Identification Physical Data (387) Spectra (169) Bioactivity/Ecolox (80) Use/Application (1)	 3 Synthese Identification Physical Data (196) Spectra (79) Bioactivity/Ecolox (213) Use/Application (10)	 4 Synthese Identification Physical Data (19) Spectra (24) Use/Application (1)	 5 Synthese Identification Physical Data (23) Spectra (7)	 6 Synthese Identification Physical Data (225) Spectra (17) Bioactivity/Ecolox (48) Use/Application (2) Natural Product (1)
---	---	--	--	--	---

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Substruktursuche mit Atom- und Bindungsattributen 

Rechter Mausklick auf ein Atom

Rechter Mausklick auf eine Bindung



Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man mit der rechten Maustaste ein Atom anklickt, erhält man unter der Option <Edit Atom> eine Auswahl an Atomattributen

Mit einem rechten Mausklick an einer Bindung hat man Zugang zu deren Bindungsattributen.

Gezielte Öffnung von Substitutionszentren (1)



Zeichnen eines Pyridinmoleküls

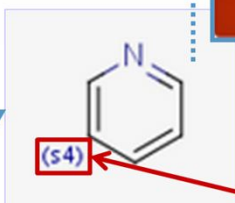


Rechter Mausklick auf ein Atom

- Undo Strg-Z
- Transform
- Format...
- Edit Structure
 - Create Residue... Strg-Q
 - Edit Atom
 - Stereo
 - Charge
 - Valence
 - Radical
 - Isotope
 - Substitution count
 - Off
 - s'
 - s0
 - s1
 - s2
 - s3
 - s4**
 - s5
 - s6
 - Map
 - R-group
 - Link Node
 - Attachment Point
 - Add Branch
 - Remove Atom

 Synthese Identification: Physical Data (475) Spectra (122) Bioactivity/Ecotox (204) Bioisophores (455) Quantum-Chemical Data (1)	 Synthese Identification: Physical Data (1344) Spectra (249) Bioactivity/Ecotox (195) Bioisophores (4) Quantum-Chemical Data (1)	 Synthese Identification: Physical Data (64) Spectra (236) Bioactivity/Ecotox (4) Bioisophores (1) Quantum-Chemical Data (2)
 Synthese Identification: Physical Data (139) Spectra (132) Bioactivity/Ecotox (28) Bioisophores (24) Quantum-Chemical Data (1)	 Synthese Identification: Physical Data (14) Spectra (132) Bioactivity/Ecotox (22) Bioisophores (14) Quantum-Chemical Data (1)	 Synthese Identification: Physical Data (185) Spectra (132) Bioactivity/Ecotox (27) Bioisophores (1)
 Synthese Identification: Physical Data (180) Spectra (132) Bioactivity/Ecotox (4) Bioisophores (12) Quantum-Chemical Data (1)	 Synthese Identification: Physical Data (137) Spectra (17) Bioactivity/Ecotox (1)	 Synthese Identification: Physical Data (118) Spectra (17) Bioactivity/Ecotox (1) Bioisophores (1)

SEARCH



Eingestellte Substitution erscheint im Zeicheneditor

Gezielte Öffnung von Substitutionszentren (2)



Zeichnen eines Pyridinmoleküls



Mausklick auf Button

Periodic Table **Advanced**

Description

Generic query atoms: A Q M X AH QH MH XH

Atom query properties: H+ X+ R+ Jb+ S+ h+ D+ u H- X- R- r- f- h- h- D- aIA

Periodic Table Groups: G1-G18

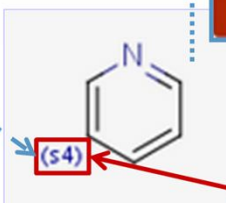
R-groups: R1-R32

Special nodes: LP Pol

Custom Property: Type: R-group Alias Pseudo SMARTS Value

Value:

SEARCH



Mehrmals Klicken auf das entsprechende Atom

Gezielte Blockade von Substitutionspositionen



Zeichnen eines Indolderivats mit Methylgruppe in Position 3

Rechter Mausklick auf Methylgruppe

Ergebnisanzeige zeigt keine Substitution an der Methylgruppe

The screenshot illustrates the process of blocking substitution at a methyl group in an indole derivative. On the left, a chemical structure of 3-methylindole is shown with a red box around the methyl group and a red arrow pointing to it from the text 'Rechter Mausklick auf Methylgruppe'. Below the structure is a context menu with 'Edit Atom' selected. The 'Substitution count' option is highlighted, and a sub-menu shows 's+' selected. A red box around the 's+' option is linked to the text 'Ergebnisanzeige zeigt keine Substitution an der Methylgruppe'. To the right, a grid of search results for indole derivatives is shown, with a red box around the text 'Ergebnisanzeige zeigt keine Substitution an der Methylgruppe'. Below the grid, search options are visible, including 'Search as / by' and 'Options'.

Undo Strg-Z

Transform

Format...

Edit Structure

Create Residue... Strg-G

Edit Atom

- Stereo
- Charge
- Valence
- Radical
- Isotope
- Substitution count**
 - Off
 - s+
 - s0
 - s1
 - s2
 - s3
 - s4
 - s5
 - s6
- Map
- R-group
- Link Node
- Attachment Point
- Add Branch
- Remove Atom

Search as / by

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query

More options

Gezielte Suche nach Isotopenspezies

Zeichnen eines Benzolrings

Rechter Mausklick auf das C-Atom

Ergebnisanzeige zeigt die gesuchte Isotopenspezies

SEARCH

Undo Strg-Z

Transform

Format...

Edit Structure

Create Residue... Strg-Q

Edit Atom

- Off
- C-8
- C-9
- C-10
- C-11
- C-12
- C-13
- C-14
- C-15
- C-16
- C-17
- C-18
- C-19
- C-20
- C-21
- C-22

Stereo

Charge

Valence

Radical

Isotope

Substitution count

Map

R-group

Link Node

Attachment Point

Add Branch

Remove Atom

2 substances out of 2 citations

	Reaxys Registry Number: 2019542 Type of Substance: isocyclic Molecular Formula: C ₇ H ₅ O ₂ Linear Structure Formula: C ₇ ¹² C ₆ H ₄ O ₂ Molecular Weight: 226.209 InChI Key: ADHOESRVUJGLTF-ZEIXOTXRMSA-N	1 prep out of 2 reactions.	Identification	1
	Chemical Name: [¹³ C]benzene Reaxys Registry Number: 2346576 Type of Substance: isocyclic Molecular Formula: C ₆ H ₆ Linear Structure Formula: C ₆ ¹² CH ₆ Molecular Weight: 78.1105 InChI Key: UHQVQNZJYSORNB-SGMARMGPSA-N			

SEARCH

Search as / by


- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query


More options

12CH

Ergebnis einer Substruktursuche nach Diphenylamin 

Query Results **Synthesis Plans** History Report My Alerts My Settings Help Logout

Reaxys PubChem eMolecules

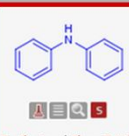
Query  → 64198 subs

Alle Substanznamen
Alle Reaktionen und Präparationen
Alle Literaturstellen

64198 substances out of 24105 citations

Filter by:

- Sub-structure
- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Physical Data
- Spectroscopic Data
- Bioactivity
- Natural Product
- Availability
- Availability in other DBs
- Document Type

Structure	Structure/Compound Data	N° of preparations All Prep All Reactions	Available Data	N° of citations
 Synthesize Show Details	Chemical Name: diphenylamine Reaxys Registry Number: 508755 CAS Registry Number: 122-39-4 Type of Substance: itocyclic Molecular Formula: C ₁₂ H ₁₁ N Linear Structure Formula: HNC ₁₂ H ₁₀ Molecular Weight: 169.226 InChI Key: DMBHRLKUKUOEG-UHFFFAOYSA-N	572 prep out of 4455 reactions.	Identification Physical Data (842) Spectra (278) Bioactivity/ECotox (81) Use/Application (31) Natural Product (1)	3880

Strukturformel, wichtigste Eigenschaften und kommerzielle Verfügbarkeit
Alle verfügbaren Eigenschaften

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Die Ergebnisanzeige sieht genauso aus, wie bei einer exakten Suche.

Bei einer großen Anzahl von Ergebnissen aus einer Substruktursuche bekommen jedoch die Filter, die rechts neben der Anzeige der ersten Substanz stehen, ihre Bedeutung. Mit Hilfe dieser Filter kann man das Ergebnis sinnvoll eingrenzen.

Möglich sind folgende Filter:

Molekülmasse, Anzahl der Fragmente, physikalische Eigenschaften, spektroskopische Daten, Bioaktivität, Naturprodukte, Verfügbarkeit, Dokumenttypen, Autoren, Patente, Zeitschriftentitel und Jahr der Veröffentlichung.

Das Fenster mit den Filtern ist immer links vom Ergebnis platziert.

Ergebnis einschränken (Substrukturen)

ThULB

The screenshot illustrates a workflow for refining search results using substructures. It shows a search interface with a 'Filter by' dropdown set to 'Sub-structure'. A 'Filter by sub-structure' dialog box is open, showing search options and a 'Copy Structure from Query' button. The search results grid shows '14 substances out of 820 citations'. A 'Limit to' button is highlighted. Red and blue arrows and text boxes explain the workflow: copying a structure from a query, changing it in the editor, and then applying it to limit the search results.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Einschränken mit Hilfe von Substrukturen

Man kann die Struktur aus der Fragestellung zurück in den Structureditor laden, entsprechende Modifikationen vornehmen und mit der veränderten Frage erneut in die Suche gehen. Die voreinstellbaren Bedingungen kann man ebenfalls verändern, sowie Stereoverbindungen, Salze usw. ein- oder ausschließen.

Die neue Frage kann mit <Limit to> oder <Exclude> abgeschickt werden.

Ergebnis einschränken (Molgewicht)

The screenshot illustrates the workflow for filtering search results by molecular weight. It shows the initial search results, the selection of 'Molecular Weight' as a filter, and the subsequent steps to refine the results. The 'Sort by' section allows sorting by 'Value' and 'Occurrence'. The 'Refine on Molecular Weight' dialog box provides options to 'Limit to' or 'Exclude' a specific range. The final result shows a list of substances, with a 'Limit to' button highlighted in blue.

13757 substances out of 5657 citations


Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

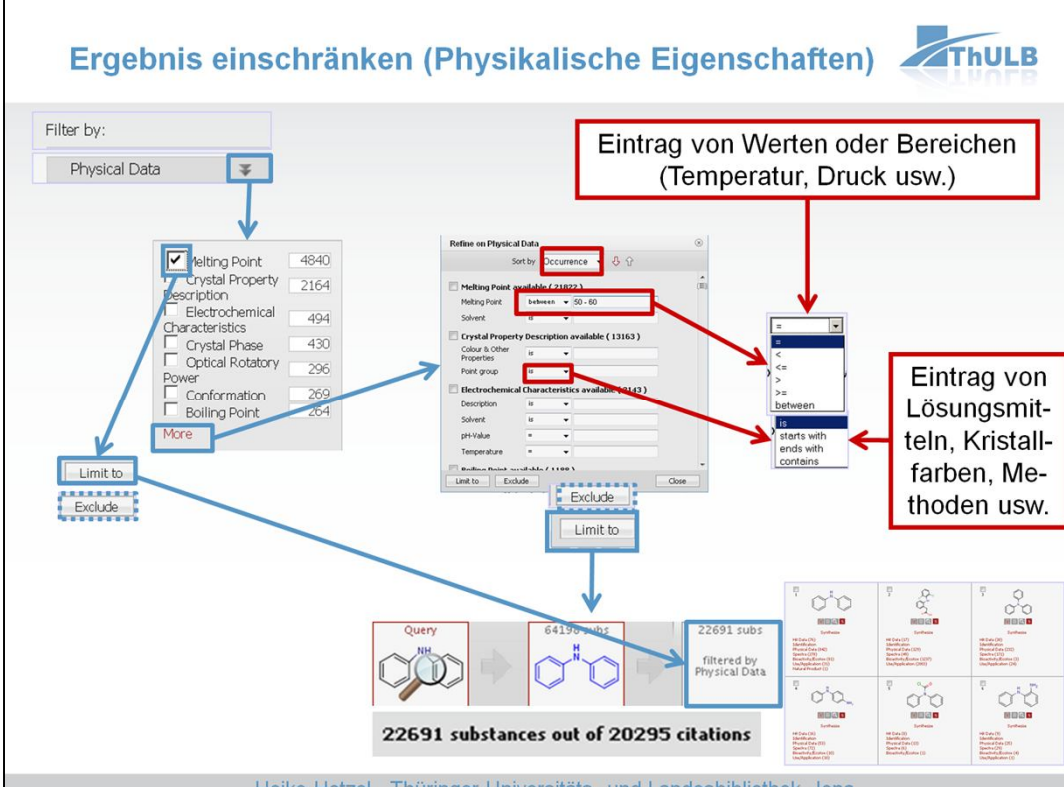
Einschränken auf ein bestimmtes Molgewicht (hier 400 – 500)

By Group: Durch Drücken des Doppelpfeils bei <Molecular Weight> öffnet sich ein Fenster, in welchem bereits einige Werte angezeigt werden. Genügt das nicht zur Auswahl, kann man durch Drücken von <More> ein weiteres Fenster öffnen, in welchem sich alle Werte aus der aktuellen Suche befinden. Diese Liste kann man sich nach den Werten oder nach dem Aufkommen auf- und absteigend sortieren lassen. Man kann mit der getroffenen Auswahl ausschließen oder mit dieser limitieren.

By Value: Eine weitere Möglichkeit ist, den Bereich, in welchem sich das gesuchte Molgewicht bewegen soll, selbst einzutragen. Man kann mit der getroffenen Auswahl ebenfalls ausschließen oder mit dieser limitieren. Falls man doch keine Werte eintragen möchte, kann man auch hier mit <More> die gesamte Auswertung der Ergebnisse nach Molgewicht anzeigen lassen.

Nach Abschicken der Suche mit <Limit to> oder <Exclude> wird das neue Ergebnis angezeigt.

Ergebnis einschränken (Physikalische Eigenschaften) 



22691 substances out of 20295 citations

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Einschränken auf physikalische Eigenschaften

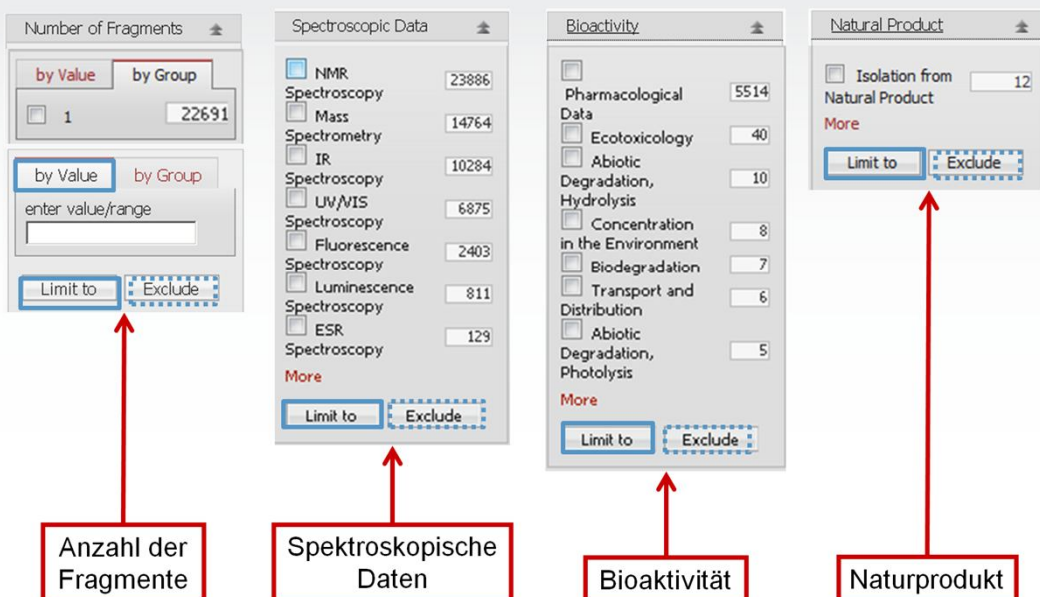
Man kann das Ergebnis durch Filtern aus der Fülle der physikalischen Eigenschaften auf eine oder mehrere Eigenschaften einschränken. Hier werden ebenfalls die Eigenschaftsfelder mit den größten Treffermengen angezeigt.

Man kann durch Ankreuzen eine Auswahl treffen und mit <Limit to> oder <Exclude> eingrenzen oder ausschließen.

Falls diese Anzeige nicht ausreicht, kann man sich mit <More> alle Eigenschaftsfelder anzeigen lassen und die gewünschte Eigenschaft ankreuzen oder gewünschte Werte eintragen. Mit <is>, <starts with>, <ends with> oder <contains> bzw. =, <, <=, >, >= oder <between> kann man Lösungsmittel, pH-Werte, Temperaturen, Bereiche, Farben, Drücke usw. eingeben und damit eingrenzen oder ausschließen.

Nach Abschicken der Suche mit <Limit to> oder <Exclude> wird das neue Ergebnis angezeigt.

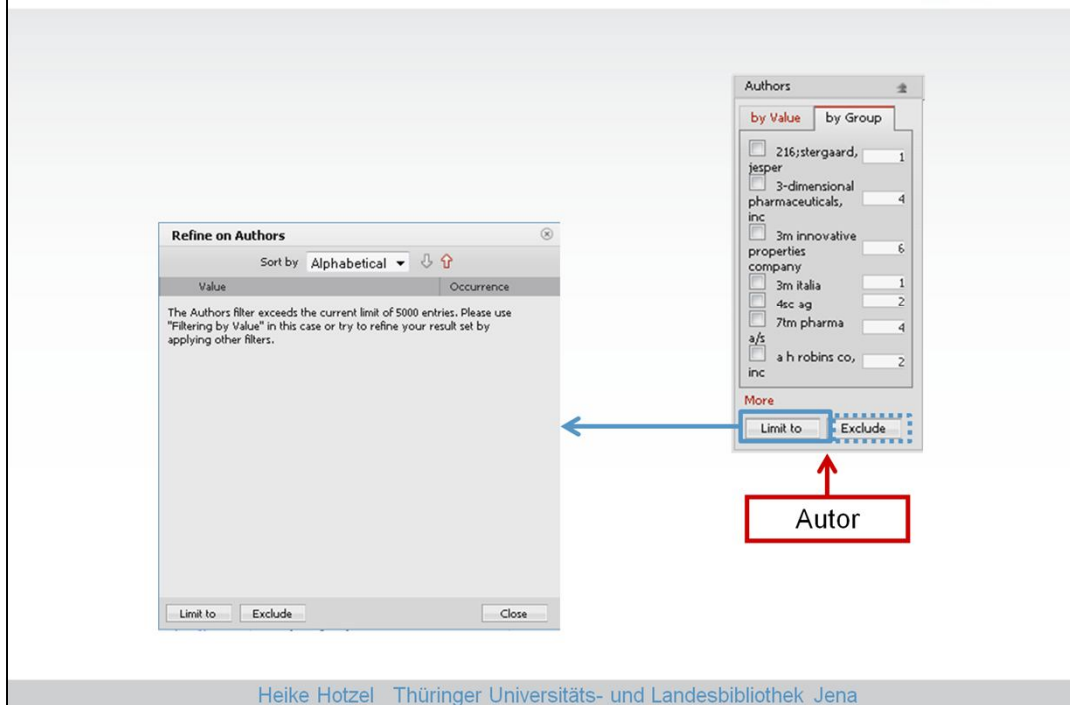
Weitere Einschränkungen (1)



The screenshot shows a search interface with four filter panels. Red boxes and arrows highlight specific filter options and their corresponding labels:

- Number of Fragments:** The "by Value" tab is selected, showing a value of "1" and a count of "22691". The "Limit to" button is highlighted, with an arrow pointing to the label "Anzahl der Fragmente".
- Spectroscopic Data:** The "Limit to" button is highlighted, with an arrow pointing to the label "Spektroskopische Daten".
- Bioactivity:** The "Limit to" button is highlighted, with an arrow pointing to the label "Bioaktivität".
- Natural Product:** The "Limit to" button is highlighted, with an arrow pointing to the label "Naturprodukt".

Weitere Einschränkungen (2)



The screenshot displays two windows from a library search system. On the left is a 'Refine on Authors' dialog box with a 'Sort by' dropdown set to 'Alphabetical'. It contains a message: 'The Authors filter exceeds the current limit of 5000 entries. Please use "Filtering by Value" in this case or try to refine your result set by applying other filters.' At the bottom are 'Limit to', 'Exclude', and 'Close' buttons. On the right is an 'Authors' filter panel with 'by Value' and 'by Group' tabs. It lists various author names with checkboxes and occurrence counts. At the bottom are 'More', 'Limit to', and 'Exclude' buttons. A blue arrow points from the 'Limit to' button in the 'Authors' panel to the dialog box. A red box labeled 'Autor' has a red arrow pointing to the 'Limit to' button.

Author	Occurrence
<input type="checkbox"/> 216;stergaard, jesper	1
<input type="checkbox"/> 3-dimensional pharmaceuticals, inc	4
<input type="checkbox"/> 3m innovative properties company	6
<input type="checkbox"/> 3m italia	1
<input type="checkbox"/> 4sc ag	2
<input type="checkbox"/> 7m pharma s/s	4
<input type="checkbox"/> a h robins co, inc	2

Bei bestimmten Einschränkungen muss man ein Limit von 5.000 beachten. Wenn man z.B. beim Filtern nach Autoren mehr als 5.000 Treffer zu bearbeiten hat, bricht das System die Aktion mit dem Hinweis auf zu viele Ergebnisse ab.

Weitere Einschränkungen (3)

The screenshot shows a search interface with the following filter panels:

- Journal Title:**

by Value	by Group
<input type="checkbox"/> chemische berichte	1142
<input type="checkbox"/> journal of the american chemical society	983
<input type="checkbox"/> journal of organic chemistry	742
<input type="checkbox"/> journal of the chemical society	546
<input type="checkbox"/> tetrahedron letters	501
<input type="checkbox"/> tetrahedron	391
<input type="checkbox"/> justus liebig annalen der chemie	391
- Patent Assignees:**

by Value	by Group
<input type="checkbox"/> 3-dimensional pharmaceuticals, inc	4
<input type="checkbox"/> 3m innovative properties company	6
<input type="checkbox"/> 3m italia	1
<input type="checkbox"/> 4sc ag	2
<input type="checkbox"/> 7tm pharma	4
<input type="checkbox"/> a/s	
<input type="checkbox"/> a h robins co, inc	2
<input type="checkbox"/> a h robins company incorporated	1
- Document Type:**

by Value	by Group
<input type="checkbox"/> article	17661
<input type="checkbox"/> patent	6208
<input type="checkbox"/> conference paper	94
<input type="checkbox"/> book review / secondary ref.	91
<input type="checkbox"/> review	22
<input type="checkbox"/> letter	21
<input type="checkbox"/> note	4
- Publication Year:**

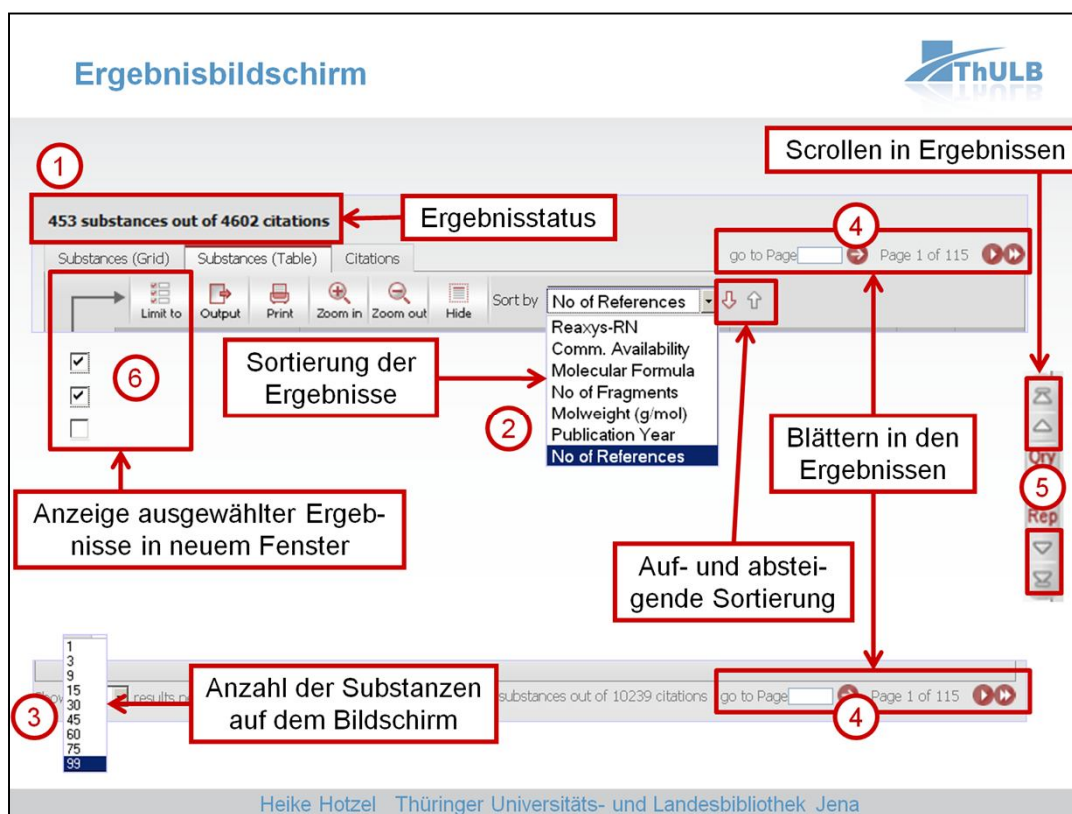
by Value	by Group
<input type="checkbox"/> 2014	4
<input type="checkbox"/> 2013	850
<input type="checkbox"/> 2012	1084
<input type="checkbox"/> 2011	922
<input type="checkbox"/> 2010	861
<input type="checkbox"/> 2009	655
<input type="checkbox"/> 2008	739
- Availability:**

by Value	by Group
<input type="checkbox"/> prep known	50802
<input type="checkbox"/> no prep, not for purchase	10552
<input type="checkbox"/> product for purchase	2844
<input type="checkbox"/> approved drug	6
- Availability in other DBs:**

by Value	by Group
<input type="checkbox"/> PubChem	27938
<input type="checkbox"/> eMolecules (no entry given)	36232

Red boxes and arrows highlight the following filters and their corresponding labels:

- Titel der Zeitschrift:** Points to the 'Journal Title' filter panel.
- Patent:** Points to the 'Patent Assignees' filter panel.
- Dokumententyp:** Points to the 'Document Type' filter panel.
- Erscheinungsjahr:** Points to the 'Publication Year' filter panel.
- Verfügbarkeit:** Points to the 'Availability' filter panel.
- Vorkommen in anderen Datenbanken:** Points to the 'Availability in other DBs' filter panel.



Zur Ergebnisanzeige hat man auf dem Bildschirm verschiedene Möglichkeiten zur Einstellung bzw. Orientierung.

Man bekommt den Ergebnisstatus (1) und die Art der Sortierung (2) der Ergebnisse angezeigt. Dieses Ranking ist immer kontextbezogen.

Man kann ebenfalls wählen, wie viele Strukturen man sich auf einer Bildschirmseite anzeigen lassen möchte (3).

Man hat bei großen Ergebnismengen die Wahl zwischen Blättern (abhängig vom System) oder Scrollen (abhängig von der eigenen Fingerfertigkeit). Beim Blättern (4) hat man einen übersichtlicheren Bildschirm, beim Scrollen (5) den schnelleren Überblick über verschiedene Strukturen bzw. Reaktionen.

Durch Anklicken (Setzen eines Häkchens) kann man sich eine Anzahl von Ergebnissen auswählen und in einem neuen Fenster öffnen (6).

Substanzeintrag in der Datenbank (1)

Anzeige von Molekülformel, CAS-Nr., usw. und Weiterverarbeitung der Struktur

Zugriff auf ein drei dimensional drehbares Molekül

Anzeigen von Details

Kommerzielle Verfügbarkeit der Substanz

Chemische Namen, Synonyme, Eigenschaftsfelder mit Eintragungen

Suche in anderen Systemen

Reaxys-RN: 508755
MF: C₁₂H₁₁N
HW: 169.226
CAS-RN: 122-39-4
Show Details
Copy Structure to Clipboard
Copy Structure to Query
Use as Sub-structure Filter
View related Markush

Available through...
Accelrys' ACD
eMolecules
CambridgeSoft ACX
Safety Data...
PharmaPendium

Chemical Names and Synonyms
N-phenyl aniline, Ph-2H, bisphenylamine, diphenyl amine

- Identification
- Physical Data
- Spectra
- Bioactivity/ECOTOX
- Use/Application
- Natural Product

Chemical Name: diphenylamine
Reaxys Registry Number: 508755
CAS Registry Number: 122-39-4
Type of Substance: isocyclic
Molecular Formula: C₁₂H₁₁N
Linear Structure Formula: HNC₁₂H₁₀
Molecular Weight: 169.226
InChI Key: DMBHRLKUKJOEG-UHFFFAOYSA-N

Synthesize Show Details

Show corresponding substances in...
PubChem
eMolecules

Substanzeintrag in der Datenbank (2)

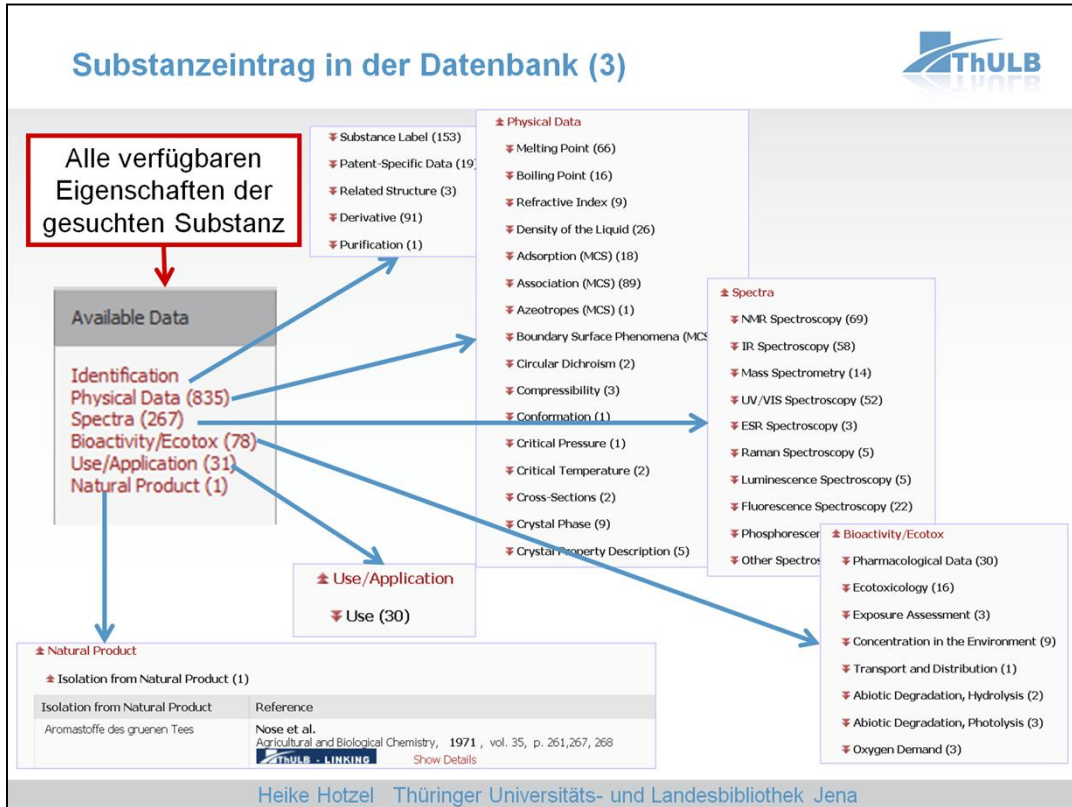
ThULB

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Am Substanzeintrag unter der Strukturformel ist der Button <Synthesize> zu sehen. Hier kann man sich unter <Manually> selbst einen Syntheseplan für die Substanz zusammenstellen (1).

Wenn man auf den Button <by Autoplan> klickt, bekommt man viele verschiedene Vorschläge für die Synthese der eingegebenen Struktur. Die Bedingungen und der Reaktionsbaum werden komplett angezeigt, sodass man nach Vergleich der einzelnen Synthesen die beste auswählen kann (2).

Wenn man den Button <by Autoplan (with options)> anklickt, kann man vor der Ausgabe von automatisch erstellten Synthesen deren Anzahl begrenzen, die minimalste Ausbeute dafür festlegen und nur mit verfügbaren Chemikalien arbeiten lassen (3). Nach Anklicken vom Button <Autoplan> werden die Bedingungen und der Reaktionsbaum komplett angezeigt, sodass man nach Vergleich der einzelnen Synthesen die Beste für die eigenen Zwecke auswählen kann.



Bereits in der ersten Anzeige kann man sich ein Bild über die verfügbaren Eigenschaften machen, weil angezeigt wird, wie viele Einträge jeweils gespeichert sind. Drückt man auf diese Links, wird die Anzahl der Ergebnisse weiter aufgeschlüsselt.

Anzeige der Präparationen und Reaktionen

Anzeige aller Reaktionen und Präparationen aller gefundenen Substanzen anzeigen lassen.

The screenshot displays a chemical database interface with the following elements:

- Left Panel:** A list of synthesis reactions for a selected substance. Each reaction includes a chemical structure, a 'Synthesize' button, and a 'Show Details' link. The first reaction has Rx-ID: 4271459. The second has Rx-ID: 8830001. The third has Rx-ID: 1427887 and 1428481.
- Central Panel:** A summary box titled 'N° of preparations' with a sub-header 'All Preps | All Reactions'. It contains the text '547 prep out of 4194 reactions'.
- Right Panel:** A list of synthesis reactions for a different selected substance. Each reaction includes a chemical structure, a 'Synthesize' button, and a 'Show Details' link. The first reaction has Rx-ID: 668395. The second has Rx-ID: 5007520. The third has Rx-ID: 5211343.
- Annotations:** Red arrows point from the text boxes to the corresponding panels. A blue box highlights the statistics in the central panel.

Alle Präparationen der ausgewählten Substanz

Alle Reaktionen der ausgewählten Substanz

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Zur ausgewählten Substanz findet man alle Präparationen und Reaktionen.

Anzeige der Eigenschaften

Alle verfügbaren Referenzen für den Siedepunkt der gesuchten Substanz

Boiling Point (16)

Boiling Point

Reference


Zwei Literaturstellen, wo die gesuchte Substanz unter den vorangestellten Bedingungen zu finden ist

Boiling Point	Pressure	Reference
302 °C	760 Torr	Nahas, Nariman H. A. Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements, 2006 , vol. 181, # 10 p. 2327- Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
		Graebe Justus Liebig's Annalen der Chemie, 1887 , vol. 238, p. 363 Full Text Show Details
		Bowen Analytical Chemistry, 1976 , vol. 48, p. 1584 Full Text View citing articles Show Details
302 °C		Kazim et al. Zhurnal Analiticheskoi Khimii, 1974 , vol. 29, p. 1918 Full Text Show Details
299 - 303 °C	760 Torr	Sumitomo Patent: DE2120641, 1971 ; Chem.Abstr. 1972 , vol. 76, # 59185 Full Text Show Details
119 °C	3 Torr	Inoue,S.; Yamada,T. Journal of Organometallic Chemistry, 1970 , vol. 25, p. 1 - 9 Full Text View citing articles Show Details
106 - 110 °C	0.06 Torr	Aubrey et al. Journal of the Chemical Society, 1962 , p. 4088,4092 Full Text Show Details
132 °C	4 - 5 Torr	Taroo et al. Scientific Papers of the College of General Education, University of Tokyo, 1961 , vol. 11, p. 195 Chem.Abstr. 1963 , vol. 58, # 3348b Full Text Show Details
132 °C	3 Torr	Costello; Bowden Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas, 1959 , vol. 78, p. 391,392 Full Text Show Details
300 °C		Muller Patent: FR1240704, 1959 ; Chem.Abstr. 1962 , vol. 56, # 410 Full Text Show Details
302 - 499 °C	735.5 - 14710.2 Torr	Glaser; Rueland Ch. Ing. Tech. 1957 , vol. 29, p. 772,773 Full Text Show Details

Durch Anklicken von <Boiling Point> bekommt man zu den einzelnen Temperatur- und Druckbereichen die Literaturstellen angezeigt.

Hier dient als Beispiel der Siedepunkt der gesuchten Substanz Diphenylamin.

Anzeige der Literatur



Beim Anklicken des Links wird man zu den elektronischen Volltexten, soweit lizenziert, weitergeleitet oder man bekommt einen Hinweis zum Volltext.

Verlinkung zu Scopus

Aufschlüsselung der Literaturstellen nach Reaktions- und Substanzeinträgen

120 - 125 °C 3 Torr

Nahas, Nariman M. A.
 Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements. **2006**, vol. 181, # 10 p. 2327 - 2335

[Title/Abstract](#) [Full Text](#) [View citing articles](#) [Show Details](#)

Title of the Document	Authors	Year
The Thermal Fragmentation of Some O-Arylsulfonyl Diphenylhydroxylamine Derivatives	Nahas, Nariman M. A.	2006

[Title/Abstract](#)
[Show All Reactions \(1\)](#)
[Show All Substances \(18\)](#)

The Thermal Fragmentation of Some O-Arylsulfonyl Diphenylhydroxylamine Derivatives

Thermal fragmentation of O-Aryl-N,N-diphenylhydroxylamines I and II were investigated. Neat heating in an atmosphere of nitrogen afforded arenes, biaryl, diaryl sulfide, diphenylamine, diaryl sulfone, phenols, arenesulfonic acid, carbazole, thianthrene. In the presence of isoquinoline as a radical trap, I gave 1-phenylisoquinoline as well as the previous products. Analogous results were obtained on heating of I in boiling tetraline, which lead to the formation of 1-hydroxytetralin, o-tetralone, and 1,1'-bitetralyl as the major products. A free-radical mechanism has been postulated to take place in the initial homolysis of N-O and S-O bonds to account for the identified products.

Keywords: Free radicals; Hydroxylamines; Thermolysis

Title of the Document	Authors	Year	Source	Open Full Text
Synthesis and structure of novel phosphorane-containing organic phosphazenes	Su, M.; Takita, H.; Okada, K.	1997	Organometallics, 1997, vol. 16, p. 4034-4035 View citing articles, Full text	12
Electronic and geometrical structure of substituted phosphazenes and their radical anions: the case study of NCF ₂ PO (R = H, Et, n-Pr, i-C ₄ H ₉)	Belikov, I.; Demchenko, L.; Solovov, P.	1997	Chemistry - A European Journal, 1996, vol. 3, p. 1889-1892 View citing articles, Full text	8
Reactions of 1,3-dithiane(1,2,4,5)-dithiolane with secondary amines: formation of phosphorane phosphazenes	Nahas, M.; Tawqir, T.	2009	Zeitschrift für Naturforschung - Section B: Journal of Chemical Sciences, 2009, vol. 64, p. 179-177 View citing articles, Full text	8

Die einzelnen Temperaturen werden mit den entsprechenden Literaturstellen angezeigt. Durch Klicken auf die Links unter den bibliographischen Angaben bekommt man

- Titel, Zusammenfassung und Keywords,
- den Volltext oder
- die zitierten Artikel angezeigt.

Bei den zitierten Artikeln arbeitet im Hintergrund das System Scopus. Man kann die zitierte Literatur ebenfalls in der Datenbank „Web of Science“ recherchieren oder wenn der Volltext elektronisch vorhanden ist, gleich den Originalartikel ansehen.

Scopus ist eine große multidisziplinäre Datenbank, die mit dem Datenbanksystem „Web of Science“ von Thomson konkurrieren möchte. Bei „Web of Science“ wird die zitierte Literatur jedoch bereits seit 1945 ausgewertet, bei Scopus erst ab 1996.

Vollständige bibliographische Angabe

Nahas, Nariman M. A.

Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements, 2006, vol. 181, # 10
p. 2327 - 2335

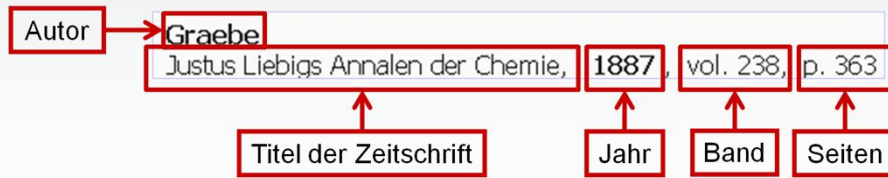
Seiten

Titel der Zeitschrift

Jahr

Band


Literaturzitat Beispiel 2



Selbst bei sehr alten Literaturstellen landet man inzwischen mit wenigen Klicks beim Volltext.

Benzophenons so nahe liegt. Für die anderen Basen sind die Bestimmungen nicht ganz so scharf, doch sind auch für dieselben die Fehler keinesfalls erheblich.

	Barometerstand	
Diphenylamin	727,5 mm 300°	760 mm 302°
Phenylorthotoluidin	305°	—
Diorthotolylamin	312°	—
Phenylparatoluidin	317 bis 318°	—
Diparatolylamin	328,5	330,5°.



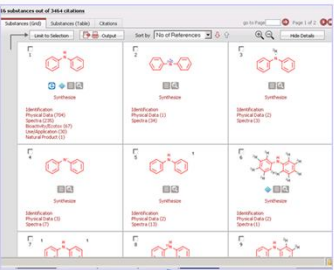
Anzeige der Suchergebnisse (1)

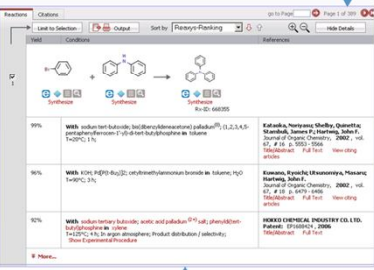
Reaktionssuche


3500 reactions out of 2564 citations

Reactions

Citations







Substanzsuche

Substances (Grid)

Substances (Table)

Citations

16 substances out of 3464 citations

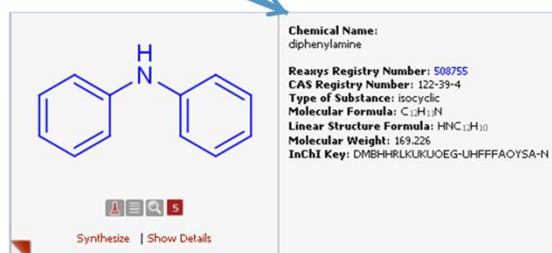
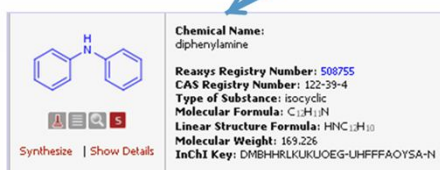
Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Je nach Art der Suche hat man die Möglichkeit, sich die Ergebnisse anzeigen zu lassen. **Reaktionen** kann man sich als Tabelle entweder mit allen gespeicherten Eigenschaften oder mit der Literatur, aus der die Reaktionen stammen, anzeigen lassen. **Substanzen** können im Grid-Format, wo die Strukturen übersichtlich je zu drei Stück nebeneinander zu sehen sind, als Tabelle mit allen gespeicherten Eigenschaften oder als Tabelle mit der Literatur, aus der die Strukturen stammen angezeigt werden.


Anzeige der Suchergebnisse (2)

Vergrößern
des Moleküls

Verkleinern
des Moleküls

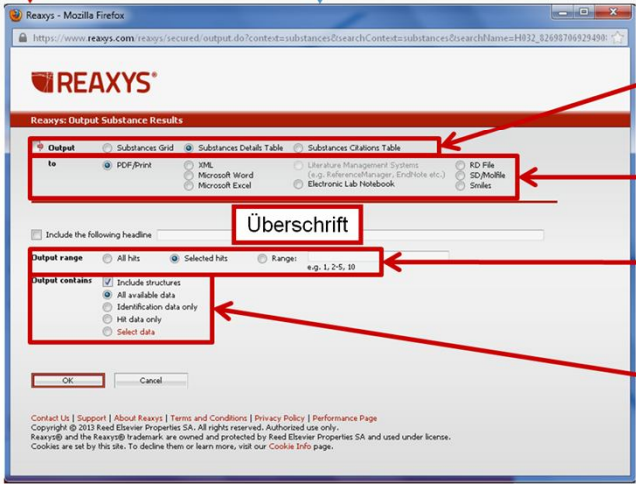


Ausgabe der Suchergebnisse in eine Datei (1)



Fenster für weitere Spezifizierung öffnet sich

Limit to
Output
Print
Zoom in
Zoom out
Hide



Verschiedene Ergebnisansichten

Verschiedene Formate

Auswahl der Treffer

Auswahl der gewünschten Eigenschaften und Daten

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man sich die Ergebnisse als Datei ausgeben lassen möchte, drückt man auf den Button <Output>. Für die Ausgabe in eine Datei ist es gleichgültig, in welcher Ergebnisanzeige man sich befindet.

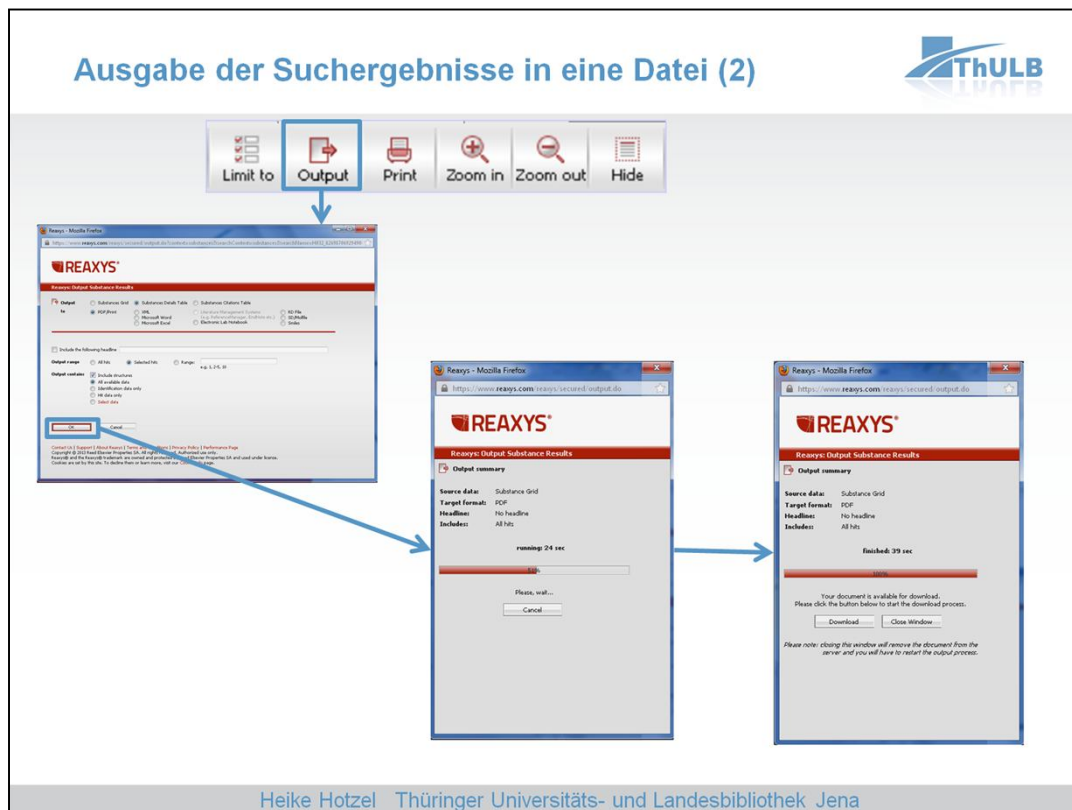
Es öffnet sich ein neues Fenster, in welchem man festlegen kann, welche Angaben übernommen werden sollen.

Möglich sind die Auswahl

- verschiedener Ansichten (Grid, Substanztable, Zitierungen in Tabellenform)
- Art des Dokuments (PDF, Word, Excel, XML und mehr)
- Übernahme in Literaturverwaltungsprogramme
- Eingabe einer Überschrift
- Auswahl der auszugebenden Treffer
- Ausgabe der Struktur der gesuchten Substanz oder Reaktion
- Ausgabe der gewünschten Daten und Eigenschaften

Das Formular passt sich je nach Auswahl von Parametern immer wieder neu an.

Wenn man die Ergebnisse für ein zu erstellendes Dokument braucht, sollte man sie sich in einem Format herunterladen, in welchem sie weiterverarbeitet werden können.



Nach Auswahl der Ausgabeparameter beginnt nach Drücken von <OK> das Download. Das System benötigt für große Dokumente einige Zeit (kann im Minutenbereich liegen), um das Dokument zu generieren. Danach kann man sich das Dokument abspeichern oder gleich anzeigen lassen und weiterverarbeiten.

Der Dokumentname wird vom System aus dem Datum, dem Login und verschiedenen Nummern generiert.

Für jedes Download wird eine neue Datei eröffnet. Es ist nicht möglich, bei einem zweiten Download zum gleichen Thema auf eine bereits vorliegende Datei zuzugreifen.

Ausgabe der Suchergebnisse gedruckt

Anzeigeformat vor Ausgabe auf den Drucker wählen

Substances (Grid)

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide

Citations

Substances (Grid) - Page 1 of 4

Substances (Table) - Page 1 of 4

Substance	Chemical Compound Data	n° of publications	Available State
<chem>c1ccc(O)cc1</chem>	Phenol Pubchem: 100000000 Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O	11	Available
<chem>c1ccc(O)cc1</chem>	Phenol Pubchem: 100000000 Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O	11	Available
<chem>c1ccc(O)cc1</chem>	Phenol Pubchem: 100000000 Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O	11	Available
<chem>c1ccc(O)cc1</chem>	Phenol Pubchem: 100000000 Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O Mol Weight: 94.076 Mol Formula: C6H6O	11	Available

Citations - Page 1 of 43

Title of the Document	Author	Year	Source	Open Access
...
...
...
...
...

Substances (Table)


Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Möchte man die Ergebnisse ausgedruckt haben, klickt man auf <Print>. Vor dem Drucken muss man sich für die Ansicht <Substances (Grid)>, <Substances (Table)> oder <Citations> entscheiden.

Dabei ist zu beachten, wie viele Seiten zum Drucken dabei entstehen. Im Beispiel sind es für das Format <Citations> 43 Seiten. Vor dem Drucken sollte man sich überlegen, ob man wirklich alles auf Papier ausgegeben haben möchte. Für die anderen beiden Formate würden nur 4 Seiten gedruckt.

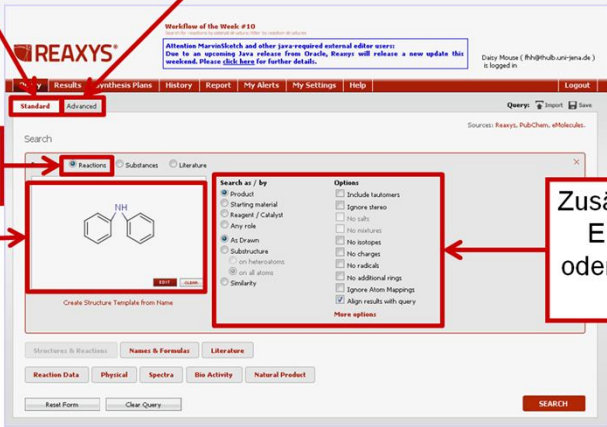
- Einstiegsmöglichkeiten in die Suche
- Voreinstellungen
- Trunkierung von Begriffen oder Einschränkung von Suchbereichen
- Standardsuche
- Advanced Search – Suche einer vollständigen einstufigen Reaktion

Einstieg in die Suche von Reaktionen



Standardsuche

Advanced Search



Reaktionssuche
ausgewählt

Struktureditor

Zusätzlich einstellbare
Einschränkungen
oder Bedingungen für die Suche

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Nach Auswahl der Suche, hier Suche nach Reaktionen, kann man mit dem Struktureditor die Struktur(en) zeichnen.

Man kann sich für die Standard- oder die Expertensuche entscheiden und bestimmte Bedingungen für die Suche festlegen.

Voreinstellungen für Reaktionssuche

Search as / by

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query

More options

- Include related Markuzh
- Keep Fragments
 - separate together
 - (type values in fields e.g. 3-5)
 - # of Atoms
 - # of Fragments
 - # of Ring Closures

Sehr weite Suche ohne Einschränkungen und vielen Substitutionsmöglichkeiten bringt viele Ergebnisse

Sehr spezifische Suche mit vielen Einschränkungen bringt nur wenige Ergebnisse

Standardsuche für Reaktionen



Names & Formulas

Reaction Data

Names & Formulas

Please select the fields you would like to add to your search by selecting the checkboxes and click 'OK'

<input type="checkbox"/> Reaxys Registry Number	*		Lookup
<input type="checkbox"/> CAS Registry Number	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Chemical Name	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Molecular Formula	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Chemical Name Segment	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Molecular Weight	*		Lookup
<input type="checkbox"/> Element Symbols	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Element Counts	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Preferred IUPAC	is		Lookup

View more fields

Cancel OK

Reaction Data

Please select the fields you would like to add to your search by selecting the checkboxes and click 'OK'

<input type="checkbox"/> Reactant	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Product	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Reagent/Catalyst	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Yield (numerical)	*		Lookup
<input type="checkbox"/> Solvent	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Time (h)	*		Lookup
<input type="checkbox"/> Temperature (°C)	*		Lookup
<input type="checkbox"/> Pressure (Torr)	*		Lookup
<input type="checkbox"/> Reaction Type	is		Lookup
<input type="checkbox"/> Reaction Basic Index	is		Lookup

View more fields

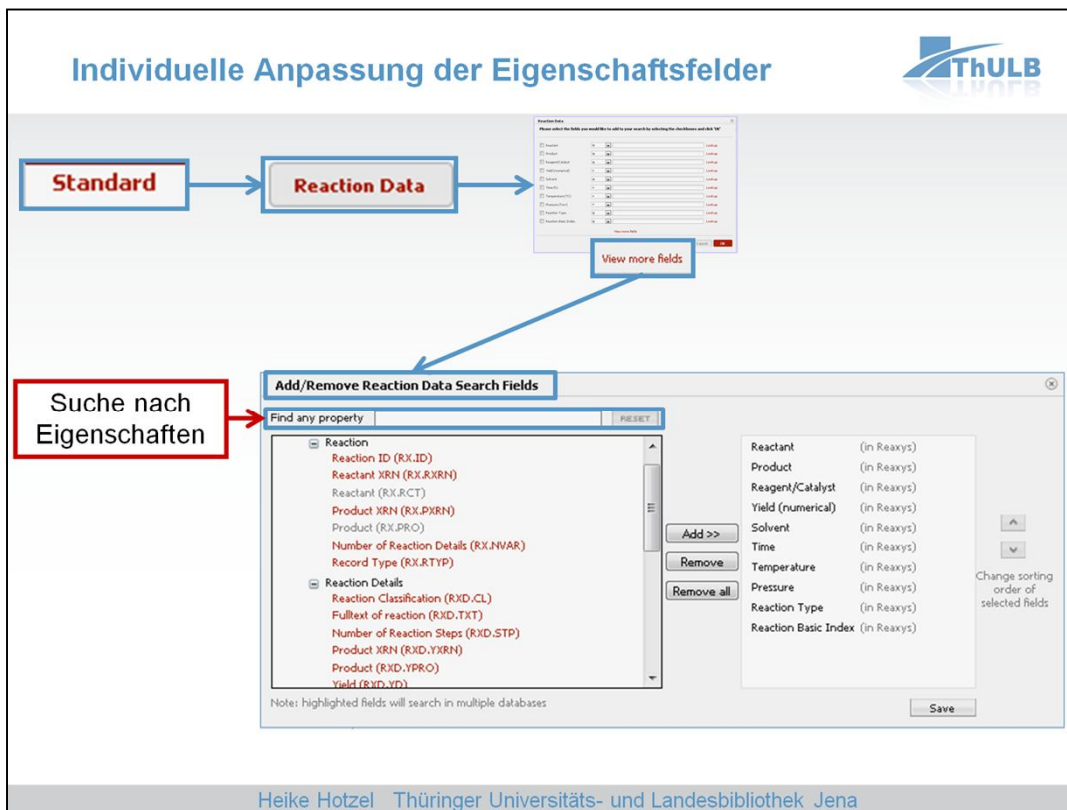
Cancel OK

Nur wenige ausgewählte Suchfelder stehen in der Standardsuche zu Verfügung

Möglichkeit zur individuellen Anpassung der ausgewählten Eigenschaftsfelder

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Für jede Vorauswahl wie <Names & Formulas>, <Literature>, <Reaction Data>, <Physical>, <Spectra>, <Bio Activity> und <Natural Product> steht ein Formular mit ausgewählten Eigenschaften zur Verfügung. Unter <View more fields> kann man diese Auswahl individuell verändern.




Unter <View more fields> öffnet sich eine Baumstruktur, welche alle Eigenschaftsfelder unter der gewählten Überschrift (hier im Beispiel <Reaction Data>) enthält

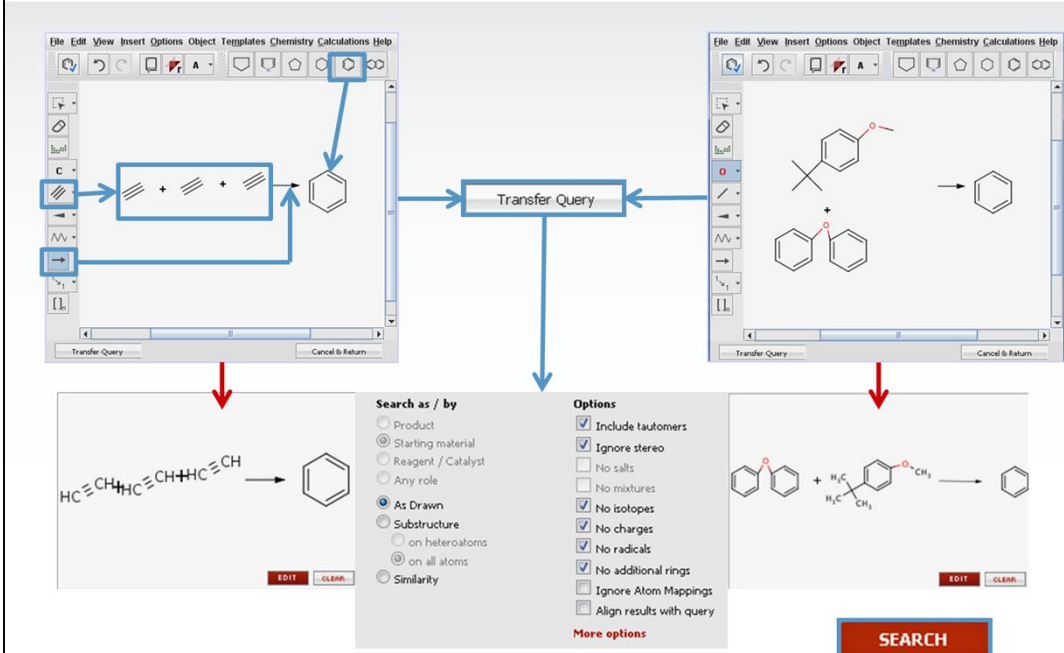
Mit <Add> kann man aus diesen Eigenschaften weitere gewünschte der Auswahl hinzufügen, mit <Remove> kann man Eigenschaften wieder entfernen.

Falls man eine völlig andere Auswahl treffen möchte, kann man das Menü mit <Remove all> komplett leeren und mit <Add> die Auswahl neu aufbauen.

Wenn man die Baumstruktur nicht nach der gewünschten Eigenschaft absuchen möchte, gibt es die schnellere Möglichkeit nach der Eigenschaft unter <Find any property> zu suchen.

Wenn man mit der Auswahl fertig ist, drückt man auf <Save>, um die Auswahl dauerhaft abzuspeichern.

Suche einer vollständigen einstufigen Reaktion (A → B) 



The screenshot illustrates the process of searching for a reaction in a chemical software environment. It shows two editor windows. The left window shows the construction of a reaction: three ethyne molecules (HC≡CH) are added to a central plus sign, and a benzene ring is added to the right, with a reaction arrow pointing to the product. The right window shows a more complex reaction involving a substituted benzene ring and a benzene ring reacting to form a product. A central 'Transfer Query' button is used to move the reaction from the editor to the search interface. Below, the search interface shows the reaction structure in a search field, a central 'Options' panel with various search criteria, and a 'SEARCH' button.

Search as / by

- Product
- Starting material
- Reagent / Catalyst
- Any role
- As Drawn
- Substructure
 - on heteroatoms
 - on all atoms
- Similarity

Options

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No salts
- No mixtures
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Ignore Atom Mappings
- Align results with query

SEARCH

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Für eine Reaktionssuche wird oft mehr als eine Struktur erforderlich sein.

Zuerst zeichnet man im Struktureditor die Strukturen von Ausgangsstoff(en) und Endprodukt(en) und verbindet sie mit dem Reaktionspfeil. Das Plus zwischen den Ausgangsstoffen wird vom System hinzugefügt. Man überträgt die Struktur ins Suchfeld <Transfer Query> und schickt die Suche ab.

Die Einschränkungen wie Ausschluss von Radikalen usw. vor der Suche gelten hier genauso wie bei der Substanzsuche.

Der Syntheseplaner und Report



- Aufstellen eines Syntheseplans
- Modifizieren eines Syntheseplans
- Verschiedene Anzeigen
- Abspeichern des Syntheseplans
- Übernahme des Syntheseplans in „Report“

Aufstellen eines Synthesepfades

The screenshot shows a search interface for a chemical compound. The search criteria are set to 'Substances'. The search results show one substance out of two citations. The substance is ethyl 6-methyl-2H-quinazolin-1-carboxylate. The interface includes a search bar, a 'SEARCH' button, and a 'Synthesize' button. A red box highlights the '2 prep' (2 preparations) in the 'No. of preparations' column. A blue box highlights the 'Synthesize' button, which opens a menu with three options: 'Manually', 'by Autoplan', and 'by Autoplan (with options)'.

Die Substanz ist mit zwei Präparationen im System vertreten

Structure	Structure/Compound Data	No. of preparations	Available Data	No. of ref.
	<p>Chemical Name: ethyl 6-methyl-2H-quinazolin-1-carboxylate CAS Registry Number: 919769-95-2 Type of Substance: heterocyclic Molecular Formula: C₁₂H₁₄N₂O₂ Linear Structure Formula: (CH₃)C₆H₄N₂CO₂C₂H₅ Molecular Weight: 218.255 InChI Key: KBLZLADXXQWIXH-UHFFFAOYSA-N</p>	2 prep 5 reactions.	Identification Spectra (2)	2

Synthesize

- Manually
- by Autoplan
- by Autoplan (with options)

Mit dem Synthesepfader kann man sich für eine Substanz einen Syntheseweg zusammenstellen lassen oder selbst zusammenstellen. Dazu geht man folgendermaßen vor:

Man zeichnet die Struktur im Struktureditor, schickt die Suche ab und lässt sich die Ergebnisse anzeigen. Man bekommt in der Ergebnisanzeige unter anderem den Button <Synthesize> angezeigt. Wenn man diesen anklickt, hat man drei Möglichkeiten...

Drei Möglichkeiten zum Syntheseplan

The screenshot illustrates the AutoPlan software interface. On the left, a menu offers three options: 'Manually', 'by AutoPlan', and 'by AutoPlan (with options)'. The 'Manually' option leads to a reaction editor (labeled '1') where a chemical reaction is defined with reagents and conditions. The 'by AutoPlan' and 'by AutoPlan (with options)' options lead to the 'AutoPlan Settings' dialog box (labeled '3'), which includes parameters such as 'No of plans to create' (set to 10), 'Max. alternative branches' (set to 5), and 'Max. steps' (set to 5). The 'AutoPlan' button in this dialog is highlighted with a red circle '2'. The main area of the interface displays a tree of ten synthesized reaction plans, labeled 'Synthesis 1' through 'Synthesis 10', each accompanied by a chemical reaction scheme. The 'AutoPlan' button in the settings dialog is also highlighted with a red circle '2'.

1. Manuelles Aufstellen eines Synthesepfades (1)

Literatur zur Herstellung der Substanz

Hofmann, A. W.
Chemische Berichte, 1870, vol. 3, p. 655
 Full Text Show Details

Der Versuch hat diese Erwartung in erfreulicher Weise bestätigt. Phenylcyanat. Erhitet man ein Gemenge von Phenylurethan mit wasserfreier Phosphorsäure, so destillirt eine reichliche Menge farblos, das Licht in auffallender Weise stark brechender Flüssigkeit von stechendem, die Augen zu Thränen reizendem Geruch. Diese Flüssigkeit ist Phenylcyanat, welches nur noch einmal destillirt zu werden braucht, um als reiner Körper erhalten zu werden. Die Ausbeute ist wie bei allen Operationen in der aromatischen Reihe, bei denen das Phosphorsäureanhydrid eine Rolle spielt, keineswegs die theoretische aber doch eine der Theorie nahe kommende.

Manually

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

... im Beispiel sind es hier nur zwei Reaktionen (a und b), jedoch wird vom System die Ausbeute der einzelnen Reaktionen aufgelistet. Die Reaktionen mit den höchsten Ausbeuten werden als erstes gezeigt.

Im Beispiel fiel die Wahl auf die Präparation (b). Gesichtspunkte zur Auswahl können neben einer hohen Ausbeute Beschaffbarkeit und/oder Preis der Ausgangsstoffe sein.

Man setzt im Auswahlkästchen ein Häkchen und klickt bei der ausgewählten Reaktion auf <Add Selected>. Der Synthesepfad erweitert sich um diese Reaktion, und die Präparationen mit der entsprechenden Literatur werden weiter unten auf der Seite mit Anzeige des Versuchsschritts angezeigt. Gleichzeitig enthält der Synthesepfader weiterhin den Hinweis auf die andere Präparation. Wenn man hier bei (a) auf <Synthesize> klickt, könnte man den Synthesepfad entsprechend erweitern. Möchte man diesen Syntheseweg doch nicht weiter verfolgen, kann man die Erweiterung mit <Remove> wieder rückgängig machen und diese Reaktion verschwindet vom Plan.

Bei der Auswahl der Reaktionen sollte man sich durchaus von den Jahreszahlen leiten lassen. Bis Mitte der 1970er Jahre wurden alle Reaktionen nachgekocht und nur in das Handbuch aufgenommen, wenn diese funktionierten.

Muss eine mehrstufige Präparation erzeugt werden, klickt man dafür bei einem der Ausgangsprodukte wieder auf <Synthesize> ...

Manuelles Aufstellen eines Synthesepfades (2)

The screenshot displays a chemical synthesis software interface. On the left, a reaction plan is shown with three steps: Synthesize (26), Synthesize (58), and Synthesize (579). The Synthesize (579) step is highlighted with a red box. A red arrow points from this box to the 'Add Selected' button in the right-hand panel. The right-hand panel shows a list of four alternative reactions for the Synthesize (579) step, each with an 'Add Selected' button. The reactions are:

- Reaction 1: BrCc1ccc(N)cc1 → Nc1ccc(N)cc1 (Re-ID: 2009396)
- Reaction 2: ClCc1ccc(N)cc1 → Nc1ccc(N)cc1 (Re-ID: 9948979)
- Reaction 3: O=C(N)Cc1ccc(N)cc1 → Nc1ccc(N)cc1 (Re-ID: 280420)
- Reaction 4: Ic1ccc(N)cc1 → Nc1ccc(N)cc1 (Re-ID: 2818368)

At the bottom left, there is a 'Manually' button. At the bottom center, the text 'Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena' is visible.

... und für diese Substanz werden Synthesewege angezeigt. Die unten aufgeführten Reaktionen bieten Synthesewege für die braun umrandete Reaktion. Hier kann man mit <Add Selected> die entsprechende Präparation auswählen. Möchte man zusätzlich die zweite Ausgangssubstanz für diese Reaktion herstellen, drückt man entsprechend auf <Synthesize> und der Reaktionsweg verzweigt sich immer weiter.


Manuelles Aufstellen eines Synthesepfades (3)

Symbol zeigt an, dass die Substanz käuflich zu erwerben ist


Step	Yield	Conditions	References
1	80%	With trifluoroacetic acid T=110°C 0.166667 h; microwave irradiation	Chilic, Adriana; Marzaro, Giovanni; Zanatta, Samuele; Giolotto, Adriano Tetrahedron Letters, 2007, vol. 48, # 18, p. 3229-3231 Title/Abstract Full Text View online articles Show Details
2	90%	With TEA in tetrahydrofuran T=20°C 1 h	Chilic, Adriana; Marzaro, Giovanni; Zanatta, Samuele; Barbieri, Verze; Pastori, Giovanni; Giolotto, Adriano Tetrahedron, 2006, vol. 62, # 52, p. 12351-12356 Title/Abstract Full Text View online articles Show Details
3	99%	With trimethylsilyloxy based Lewis acid catalyst in acetonitrile T=20°C 0.166667 h	Pandey, Rajesh K.; Daga, Sharda P.; Dongare, Hoban K.; Kumar, Pradeep Synthetic Communications, 2008, vol. 38, # 21, p. 4029-4038 Title/Abstract Full Text View online articles Show Details
? Show All Remaining Details (7)			
	99%	With methanol; calcium dichloride in ethanol T=20°C 0.5 h; inert atmosphere	Mirza-Aghayan, Haryam; Rahimi-Nia, Mahdi; Bolourchian, Mohammad; Boukherroub, Abdelhakim Applied Organometallic Chemistry, 2010, vol. 24, # 8, p. 477-480 Title/Abstract Full Text View online articles Show Details
	99%	With hydrazine hydrate; nickel in ethanol; 1,2-dichloro-ethane T=50-60°C 2.5 h	Ayyangar, N. R.; Lugade, A. G.; Bikkad, P. V.; Sharma, V. K. Synthesis, 1981, # 8, p. 640-643 Title/Abstract Full Text Show Details
	99%	With hydrazine hydrate; iron(III) oxide; magnesium oxide in methanol T=50.00°C 6 h	Kumbhar, Pramod S.; Sanchez-Valente, Jaime; Figueras, Francois Tetrahedron Letters, 1998, vol. 39, # 17, p. 2271-2274 Title/Abstract Full Text View online articles Show Details


Nach der Auswahl eines weiteren Synthese sieht der Synthesepfad danach wie oben aus. Die aufgeführte Literatur beinhaltet die Beschreibung der Synthesewege für alle ausgewählten Reaktionen.

Erweitern bzw. verzweigen des Synthesepfades



Synthesize (26)





3

Add
Remove

3a

Add Selected

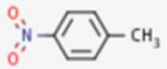
3b

Add Selected


100 %
Remove

<input type="checkbox"/> 100%	With triethylenyl palladium dichloride in ethanol T=20°C; 0.5 h; Inert atmosphere;	Mirza-Aghayan, Maryam; Rahmifard, Habibollah; Bobou Applied Organometallic Chemistry, 2010, vol. 24, # 6 p. Title/Abstract Full Text View citing articles Show Det
<input type="checkbox"/> 99%	With hydrazine hydrate; nickel in ethanol; 1,2-dichloroethane T=55 - 60°C; 2.5 h;	Ayyangar, N. R.; Lugade, A. G.; Nikrad, P. V.; Sharma, Synthesis, 1981, # 8 p. 640 - 643 Title/Abstract Full Text Show Details
<input type="checkbox"/> 99%	With hydrazine hydrate; iron(III) oxide; magnesium oxide in methanol T=59.85°C; 6 h;	Kumbhar, Pramod S.; Sanchez-Valente, Jaime; Figueroa Tetrahedron Letters, 1998, vol. 39, # 17 p. 2573 - 2574 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Det
<input type="checkbox"/> 98%	With butyltriphenylphosphonium tetrahydroborate in dichloromethane T=20°C; 0.266667 h;	Hajjipour, Abdol Reza; Mallakpour, Shadpour E. Synthetic Communications, 2001, vol. 31, # 8 p. 1177 - Title/Abstract Full Text View citing articles Show Det
<input type="checkbox"/> 97%	With iron(III) chloride sodium iodide in acetonitrile T=20°C; 0.166667 h;	Kamal, Ahmed; Ramana, K. Venkata; Ankati, Hari Bab Tetrahedron Letters, 2002, vol. 43, # 38 p. 6861 - 6864 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Det
<input type="checkbox"/> 97%	With chloro-trimethylsilane; sodium iodide in acetonitrile 0.00333333 h; Ambient temperature;	Kamal, Ahmed; Rao, N. Venugopal; Laxman, E. Tetrahedron Letters, 1999, vol. 38, # 39 p. 6945 - 6948 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Det

98 %
Remove



Synthesize (37)



Manually
Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Mit <Add> bekommt man die Auswahl aller möglichen Reaktionen wieder angezeigt, wobei auf die bereits in den Synthesepfad aufgenommenen Reaktionen hingewiesen wird (Note: This reaction is already added as a branch of the current synthesis step). Mit Drücken von <Add Selected> an der weiteren ausgewählten Reaktion wird der Synthesepfad um diese Reaktion erweitert. Da diese Reaktionen zum gleichen Ergebnis führen, werden sie im Plan mit „a“ und „b“ bezeichnet. Mit <Remove> könnten beide Reaktionen entfernt werden.

Manuelles Erweitern bzw. Verzweigen des Synthesepfades


<input type="checkbox"/>	With TEA in tetrahydrofuran T=20°C; 1 h;	Barbieri, Vera; Chin, Adriano; Guiotto, Adriano; Manzini, Paolo; Marzaro, Giovanni; Zanatta, Samuele; Pastorini, Giovanni <i>Tetrahedron</i> , 2006 , vol. 62, # 52, p. 12251 - 12256 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
<input type="checkbox"/>	With yttrium-trifluoromethane based Lewis acid catalyst in acetonitrile T=20°C; 0.116667 h;	Kumar, Pradeep; Pandey, Rajesh K.; Dagade, Sharda P.; Dongare, Mohan K. <i>Synthetic Communications</i> , 2003 , vol. 33, # 23, p. 4019 - 4027 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
<input type="checkbox"/>	With diethyl ether	Hofmann, A. W. <i>Chemische Berichte</i> , 1870 , vol. 3, p. 655 Full Text Show Details
Show All Remaining Details (7)		
<input type="checkbox"/>	With ammonium hydroxide iron in methanol T=25°C; Reduction; condensation; 0.5 h; sonication;	Chandrasekhar; Narasimulu <i>Tetrahedron Letters</i> , 2000 , vol. 41, # 41, p. 7969 - 7972 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

Manually

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

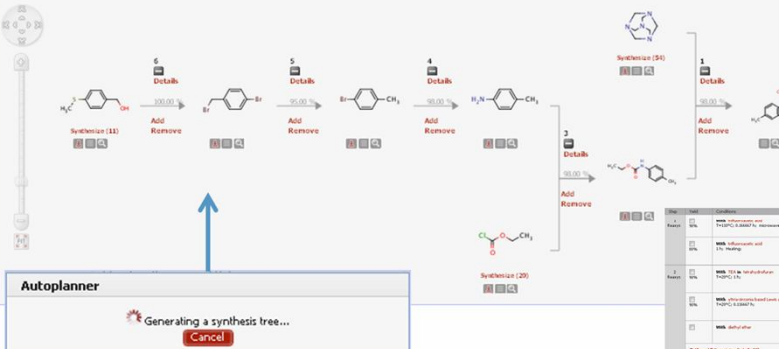
Mit <Add> bekommt man die Auswahl aller möglichen Reaktionen wieder angezeigt, wobei auf die bereits in den Synthesepfad aufgenommenen Reaktionen hingewiesen wird (Note: This reaction is already added as a branch of the current synthesis step). Mit Drücken von <Add Selected> an der weiteren ausgewählten Reaktion wird der Synthesepfad um diese Reaktion erweitert. Da diese Reaktionen zum gleichen Ergebnis führen, werden sie im Plan mit „a“ und „b“ bezeichnet. Mit <Remove> könnten beide Reaktionen entfernt werden.

2. Syntheseplan mit Autoplan



Synthesis 1 Synthesis 2 Synthesis 3 Synthesis 4 Synthesis 5 Synthesis 6 Synthesis 7 Synthesis 8 Synthesis 9 Synthesis 10

New Undo Open Save Rename Duplicate Output Print Left Right Top Reset Thumbnail Report



Manually
by Autoplan
by Autoplan (with options)

10 verschiedene Synthesebäume waren entstanden.

Autoplanner
Generating a synthesis tree...
Cancel

by Autoplan

Zu jedem Synthesebaum wird der komplette Syntheseweg ausgegeben.

Step	Reaction	Reference
1	Reaction 1	Reference 1
2	Reaction 2	Reference 2
3	Reaction 3	Reference 3
4	Reaction 4	Reference 4
5	Reaction 5	Reference 5
6	Reaction 6	Reference 6
7	Reaction 7	Reference 7
8	Reaction 8	Reference 8
9	Reaction 9	Reference 9
10	Reaction 10	Reference 10

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man <by Autoplan> anklickt, dauert es eine Zeit bis die Pläne komplett mit den Reaktionen und den Synthesewegen samt Literatur ausgegeben werden. Im Beispiel werden 10 verschiedene Synthesepäne mit der kompletten Literatur angezeigt. Auf all diesen Plänen könnte man ebenfalls mit <Add>, <Remove> usw. manuell oder durch das System über <by Autoplan> weitere Änderungen vornehmen.

3. Syntheseplan mit „Autoplan mit Optionen“

by Autoplan (with options)

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Wenn man <by Autoplan (with options)> anklickt, dann bekommt man die Autoplan-Einstellungen angezeigt. Diese kann man nach den eigenen Vorstellungen verändern, in dem man die Ausbeute anhebt, die Anzahl der Reaktionsschritte herunternetzt usw. Nach Drücken von <Autoplan> wird der Syntheseplan entsprechend der Anforderungen generiert.

Möglichkeiten während der Syntheseplanung (1)

Anlegen eines neuen Synthesepans durch Zeichnen einer neuen Struktur

Letzten Schritt rückgängig machen

Öffnen eines abgespeicherten Synthesepans, der noch nicht fertig war oder der verändert werden soll

Möglichkeiten während der Syntheseplanung (2)

Save → **planner_2013_01_18_09_04_51.xml** → **Ab speichern**

Rename → **Synthesis 1** → **Rename Synthesis:** → **Syntheseplan Übung** → **Synthesisplan Übung**

Duplicate → **Synthesis 5**

Ab speichern eines Syntheseplans.
Diese Datei wird immer in XML erstellt und der Name aus dem aktuellen Datum und einer laufenden Nummer vom System generiert.

Umbenennen des Syntheseplans

Aktuellen Syntheseplan kopieren und in neues Fenster einfügen

Möglichkeiten während der Syntheseplanung (3)

Synthesepan:
Ausgabe in PDF, MS Word oder RD-File

Bezogen auf die Art der Ausgabe verändern sich die Ausgabeparameter.

Zitierungen:
Ausgabe in PDF, XML, MS Word, MS Excel, RD-File oder in Literaturverwaltungsprogramme

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Möglichkeiten während der Syntheseplanung (4)



Synthesis 1
Synthesis 2

New Undo Open Save Rename Duplicate Output **Print** Left Right Top Resize Thumbnail Report Hide

Print

Hide

Step	Yield	Conditions	References
1	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 100°C, 1.5h, 1000 rpm, 10 min irradiation	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132
2	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 1% (w/v) NaOH	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132
	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 1% (w/v) NaOH, 1.5h	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132
	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 1% (w/v) NaOH, 1.5h, 1000 rpm, 10 min irradiation	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132
	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 1% (w/v) NaOH, 1.5h, 1000 rpm, 10 min irradiation, 10 min irradiation	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132
	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 1% (w/v) NaOH, 1.5h, 1000 rpm, 10 min irradiation, 10 min irradiation	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132
	90%	MSA, 3.0% (v/v) acetic acid, 1% (w/v) NaOH, 1.5h, 1000 rpm, 10 min irradiation, 10 min irradiation	Chiba, A.; Imai, M.; Inoue, S.; Otsu, S.; Otsu, S.; Otsu, S. <i>Chem. Lett.</i> 2007 , 36, 1131-1132

Hints

- 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 tree.
- "Add" a branch or click on the button "Copy plan to new page" if you want to investigate alternative routes.

Man kann sich den Plan mit allen Reaktionen ausdrucken.

Den Hilfetext kann man sich anzeigen lassen oder nicht.

Anzeige des Synthesepfades (1)

Der Ausgangsstoff befindet sich links

Zur Anzeige der Synthesepfäne kann man aus drei verschiedenen Ansichten wählen

Der Ausgangsstoff befindet sich oben

Der Ausgangsstoff befindet sich rechts

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Anzeige des Synthesepfades (2)


Veränderung der Bildschirmauflösung, um alle Stufen der Reaktion auf dem Bildschirm sehen zu können.

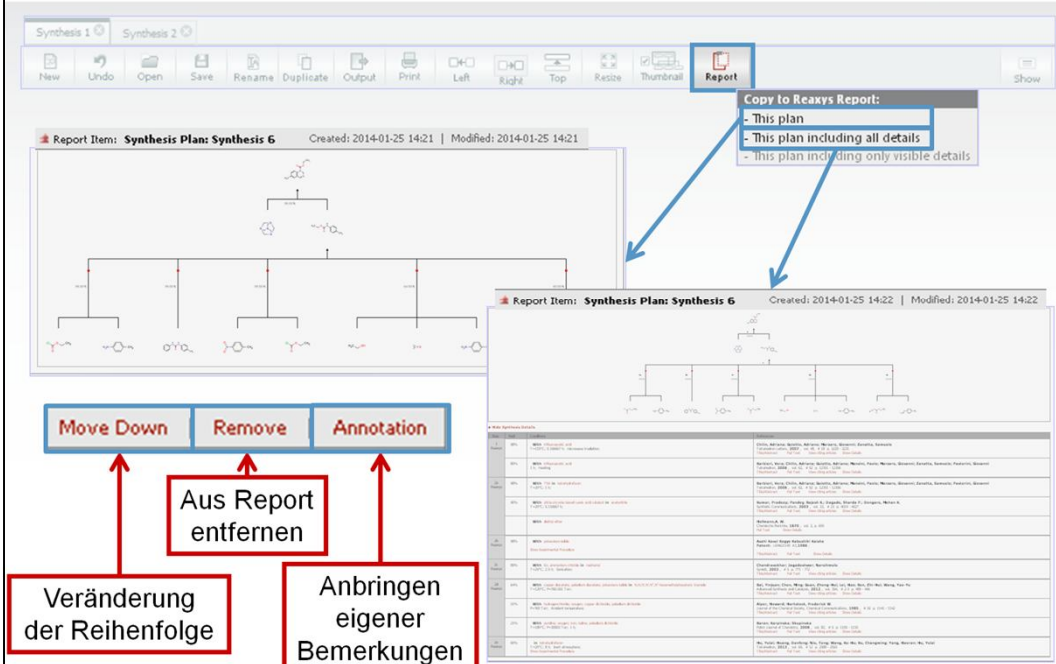
Nur der grau unterlegte Teil der Reaktion ist auf dem Bildschirm zu sehen.

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Auf dem Hilfsfenster, welches sich links unten an der Darstellung der Reaktionen befindet, kann man beobachten, wie viel der Reaktion bzw. von den Reaktionsschritten nicht sichtbar ist.

Übertragung des Syntheseplans in Report





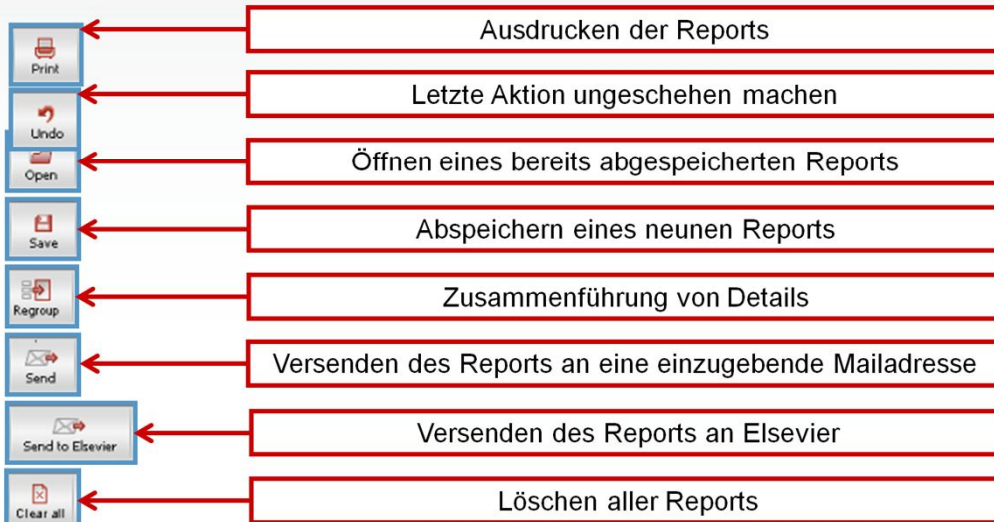
Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Die einzelnen Synthesepäne können in „Report“ übertragen werden. Dazu drückt man auf den Button <Report> in der waagerechten Leiste. Man muss sich entscheiden, ob man nur den Synthesebaum oder den kompletten Plan mit aller Literatur übertragen haben möchte. Mit <Remove> kann man den Plan aus „Report“ herauslöschten, mit <Move Down> die Reihenfolge der einzelnen Pläne verändern und unter <Annotation> kann man Bemerkungen schreiben. Dauerhaft abspeichern kann man die Reports nur, wenn man im System angemeldet ist.

Arbeiten unter Report



Query | Results | Synthesis Plans | History | **Report** | My Alerts | My Settings | Help



Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

- [Suchverlauf – History](#)
- [Kombinieren von Suchfragen – Combine](#)
- [Automatisierte Suchläufe – Alerts](#)
- [Einstellungen – Settings](#)
- [Hilfe vom System – Help](#)
- [Neuigkeiten und mehr – Forum](#)
- [Eingangsseite zu Reaxys – Info](#)

Suchgeschichte (History)

Gezeichnete Struktur

Anzeige der aktuellen Suche

4. Suchschritt

3. Suchschritt

2. Suchschritt

1. Suchschritt

Query	Transaction description	Date
22 substances filtered by Bioactivity	5446 citations	2014-01-25 15:21
6568 substances filtered by Spectroscopic Data	13850 citations	2014-01-25 15:21
247596 substances filtered by Molweight	55338 citations	2014-01-25 15:20
250636 substances: Substructures on all atoms. Align results with query	53961 citations	2014-01-25 15:19

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Die aktuelle Suche kann man oberhalb der Ergebnisanzeige in kleinen Quadraten sehen. Diese Art der Darstellung wird Breadcrumbs (Brösel) genannt.

Auf die Ergebnisse der einzelnen Suchschritte kann man zurückgreifen, wenn man auf das entsprechende Quadrat klickt. An welcher Stelle in der Ergebnisanzeige man sich befindet, sieht man an der Farbe der Umrandung der kleinen Quadrate. In der aktuellen Anzeige ist das Quadrat braun gekennzeichnet.

Wenn man eine weitere Suche startet, ohne am Ende der Suchkette zu sein, werden die späteren Suchschritte gelöscht.

Braucht man ein Ergebnis dauerhaft, muss man es in der History-Ansicht abspeichern. Die History der aktuellen Sitzung bleibt bis zum Schließen von Reaxys erhalten.

Eine weitere Möglichkeit auf einzelne Suchschritte zurückzugreifen, bekommt man in der History-Anzeige. Hier findet man eine Auflistung der einzelnen Suchschritte mit der Möglichkeit, auf die Suchergebnisse zurückzugreifen oder das Ergebnis des Suchschritts dauerhaft abzuspeichern. Hierbei wird zwischen den Substanzen mit den zugehörigen Eigenschaften zum einen und den Literaturstellen zum anderen unterschieden.

Combine

Combine Hits select at least two hits for combining

Temporary result description	Date
2 substances Filtered by Bioactivity	2011-02-09 13:41
1078 citations	
223 substances Filtered by Spectroscopy data available	2011-02-09 13:40
1800 citations	
240 substances Filtered by Molecular Weight (g/mol)	2011-02-09 13:39
2002 citations	
1156 substances Substructure: on heteroatoms, ignore stereo, no salts, no mixtures, no isotopes, no additional emp, no charges, no radicals	2011-02-09 13:39
1000 citations	

Boole'sche Operatoren

OR AND NOT

Kombination von mindestens zwei Treffermengen: Auswahl durch Ankreuzen

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Um Suchfragen im Sinne Boole'scher Operatoren miteinander zu kombinieren, muss man in die History-Anzeige wechseln. Hier werden alle Suchfragen aus der aktuellen Sitzung und unter einem dicken braunen Strich alle abgespeicherten Suchfragen aus früheren Sitzungen angezeigt, sofern man angemeldet war. Vor jeder Suchfrage gibt es in einem Kästchen durch Ankreuzen die Möglichkeit der Auswahl. Es können aktuelle und abgespeicherte Suchanfragen miteinander kombiniert werden.


Nach Ankreuzen einer zweiten Suchfrage wird der Button <Combine Hits> aktiv. Es gibt ebenfalls die Möglichkeit, mehr als zwei Suchfragen zu kombinieren. In diesem Fall werden jedoch nur noch „AND“ und „OR“ angeboten.

The screenshot displays the 'My Alerts' interface with the following components and annotations:

- Alerts List:** A list of alerts with columns for Name, Comment/Description, Date created, Last run, and Frequency. Annotations point to 'Löschen des Alerts nach Ankreuzen' (Delete) and 'Modifizieren des Alerts' (Modify alert, Edit query).
- Create Alert Form:** A form to create a new alert. Annotations include:
 - 'Name des Alerts' pointing to the 'Name of Alert' field (value: 'uebung').
 - 'Frequenz der Sendungen' pointing to the 'Frequency' dropdown (value: 'After each update').
 - 'Eigener Kommentar' pointing to the 'Comment/Description' field.
 - 'Ergebnisse des Alerts' pointing to the 'View results' button.
- Buttons:** 'Create Alert', 'Delete', 'Modify alert', 'Edit query', and 'View results' are highlighted with red boxes.

Es ist möglich in Reaxys Suchabfragen automatisch in regelmäßigen Abständen laufen zu lassen und sich die Ergebnisse per E-Mail schicken zu lassen. Aus allen Anzeigen, wo <Create Alert> angeboten wird (History und Results), ist es möglich, solch eine Suchanfrage zu generieren. Man drückt auf diesen Button, es öffnet sich ein Fenster, in welchem man die angebotenen Leerzeilen ausfüllen kann, jedoch nicht muss. Lediglich ein Name für das Alert ist zwingend erforderlich. Die Verwendung von Umlauten und Großbuchstaben ist für den Namen nicht möglich. Man kann das Alert an weitere Personen per E-Mail senden lassen, ebenso die Frequenz der Sendungen aussuchen und das Format der E-Mail bestimmen.

Es ist jederzeit möglich, das Alert zu ändern, zu löschen oder zu deaktivieren.



My Settings

Modify application settings

Structure editor

Editors that do not require a plugin to be installed:

- Chemical Structure Editor
- ChemDraw MermaidSketch (these require Java to be installed)
- GSK Editor

Editors that require a plugin to be installed:

- Double Structure Editor
- Simple Editor
- Simple 2D/3D Editor
- Chem3D/MSK/ChemDraw
- CAS

These editors can only be used, if the relevant Structure Editor Plugin is installed. Please check this with your administrator or call the helpdesk and download the plugin. Reuser will present a warning message, if these editors are selected, but the structure editor plugin is not installed.

Structure display options

Reaction search options

Substance search options

Hits per page: Show results per page

Highlights colors

Structure Change

Text / CAS Change

Modify personal data

User Name:

Title: Mrs

First Name: Daisy

Last Name: Mouse

Email: Daisy.Mouse@ertenhausen.de

Job title: librarian

Institution: Thuringer Univ- und Landesbibliothek

Location: Postfach

Change Password

Current password:

New password:

Confirm password:

My Settings

Modify Application Setting
 Select your favorite structure editor, reaction and substance search options, hits per page and specify...

Modify Personal Data
 View details from your registration profile. Includes a facility to change your Personal Details.

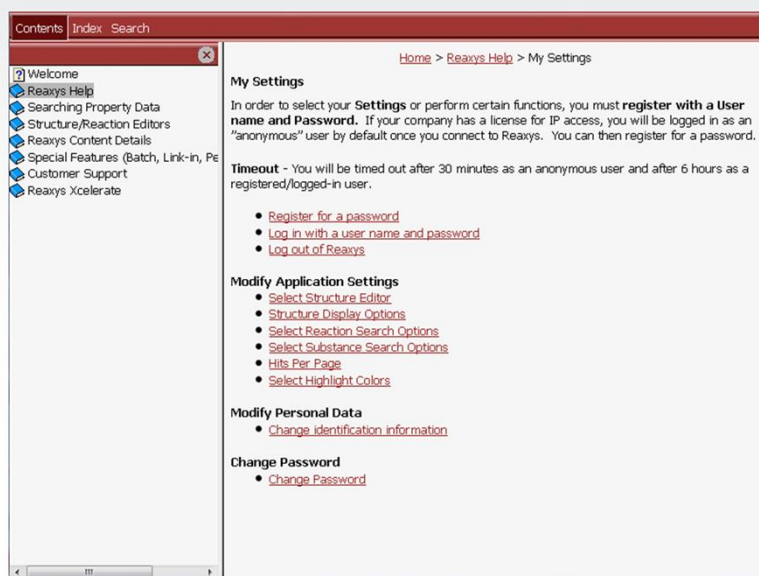
Change Password
 Change your password.

Auswahl des
Struktureditors,
Anzeigefarben,
Ergebnisse pro
Seite usw.

Änderung der
persönlichen
Angaben

Änderung des
Passwortes

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena



The screenshot shows a web browser window with a red header bar containing 'Contents', 'Index', and 'Search'. The main content area is titled 'My Settings' and includes a breadcrumb trail: 'Home > Reaxys Help > My Settings'. On the left, a navigation menu lists: 'Welcome', 'Reaxys Help', 'Searching Property Data', 'Structure/Reaction Editors', 'Reaxys Content Details', 'Special Features (Batch, Link-in, Pe)', 'Customer Support', and 'Reaxys Xcelerate'. The main text explains that users must register with a username and password. It also details a 30-minute timeout for anonymous users and a 6-hour timeout for registered users. A list of links is provided for registration, login, and logout. Below this, there are sections for 'Modify Application Settings' (with links for Structure Editor, Display Options, Reaction Search, Substance Search, Hits Per Page, and Highlight Colors) and 'Modify Personal Data' (with a link for Change Identification Information). Finally, a 'Change Password' section contains a link for Change Password.

Contents Index Search

Home > Reaxys Help > My Settings

My Settings

In order to select your **Settings** or perform certain functions, you must **register with a User name and Password**. If your company has a license for IP access, you will be logged in as an "anonymous" user by default once you connect to Reaxys. You can then register for a password.

Timeout - You will be timed out after 30 minutes as an anonymous user and after 6 hours as a registered/logged-in user.

- [Register for a password](#)
- [Log in with a user name and password](#)
- [Log out of Reaxys](#)

Modify Application Settings

- [Select Structure Editor](#)
- [Structure Display Options](#)
- [Select Reaction Search Options](#)
- [Select Substance Search Options](#)
- [Hits Per Page](#)
- [Select Highlight Colors](#)

Modify Personal Data

- [Change identification information](#)

Change Password

- [Change Password](#)

ELSEVIER [Advanced search](#) Follow us: [f](#) [in](#) [t](#) [+](#) [Help & Contact](#)


[Journals & books](#) [Online tools](#) [Authors, editors & reviewers](#) [About Elsevier](#) [Community](#) [Store](#)

Online tools

- Corporate Solutions ▶
- Reaxys ▶
 - About
 - Who uses Reaxys
 - Training and Support
 - News
 - Discover Chemistry
 - Reaxys Medicinal Chemistry
- Embase ▶
- PharmaPendium ▶
- Pathway Studio ▶
- QUOSA ▶
- Elsevier BioSource ▶
- Geofacets ▶
- illumin8 ▶
- Scopus ▶
- ScienceDirect ▶
- EnCompass ▶

Leading researchers choose Reaxys: Chemical Database

<https://www.reaxys.com/info/about-overview>



REAXYS
Even more relevant content,
even greater discoverability.
[See what's new](#)

What does Reaxys offer?
Solutions for every type of chemical research

Reaxys goes beyond giving you access to critical chemistry information. Each chemistry workflow solution is designed to help you gain deeper insight into chemical data so that you can do the most cost-effective research. The Reaxys Chemistry Discovery Engine provides answers to questions in all fields of chemistry, while Reaxys Medicinal Chemistry focuses on crucial data for preclinical phase drug development.

Eingangsseite von Reaxys mit Informationen rund um die Datenbank, Trainingsmöglichkeiten usw.

Vergleich der Datenbanken Reaxys und SciFinder (1)



	Reaxys	SciFinder
Art der Datenbank	Faktendatenbank mit umfangreicher Literatur	Bibliographische Datenbank (Literaturdatenbank)
Gebiet	Verbindungen und Reaktionen der organischen und anorganischen Chemie	Chemie und angrenzende Bereiche mit chemischen Aspekten (Physik, Lebens- und Ingenieurwissenschaften)
Besonderheit	<ul style="list-style-type: none"> • umfangreiche Sammlung spektroskopischer Datenverweise • große Anzahl physikochemischer, pharmakologischer, ökologischer und toxikologischer Daten von Naturstoffen und Informationen zu deren Nutzung • kritische Bewertung der Daten unter dem jeweiligen Wissensstand mit Hinweisen auf Fehler bis 1975; unschlüssige Aussagen wurden später mit Hilfe der neueren Literatur überprüft und evtl. verändert • Verbindung zu e-Molecules: kommerzielle Chemikalienanbieter mit ca. 6 Mill. Substanzen • Verbindung zu PubChem mit 48 Mill. Substanzen 	enthält weitere Datenbanken: <ul style="list-style-type: none"> • Chemcats – Chemikalienanbieter • EINECS – Zulassungsdaten • MEDLINE – medizinische Literatur
Zeitraum	1771 bis heute	1800 bis heute
Update	täglich	täglich

Vergleich der Datenbanken Reaxys und SciFinder (2)



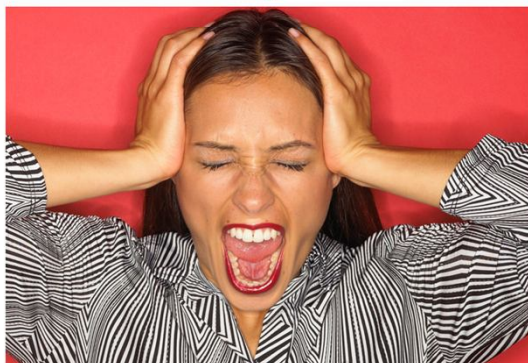
	Reaxys	SciFinder
Quellen	<ul style="list-style-type: none"> • Auswertung von 400 Kernzeitschriften der Chemie vollständig und von weiteren 16.000 Zeitschriften teilweise • Englischsprachige Patente der Ämter PCT (WIPO), Europäisches Patentamt (EPO), US-Patentamt 	<ul style="list-style-type: none"> • Auswertung von mehr als 10.000 wissenschaftlicher Zeitschriften • Patente von 63 nationalen und internationalen Patentämtern
Umfang	ca. 36 Mill. Reaktionen ca. 22 Mill. Substanzen ca. 46 Mill. bibliographische Nachweise	ca. 70 Mill. organische und anorganische Substanzen ca. 64 Mill. Biosequenzen ca. 36 Mill. bibliographische Nachweise (incl. Patente) ca. 62 Mill. Reaktionen
Patente	Ab 1869 vollständig in den IPC-Unterklassen: <ul style="list-style-type: none"> • C07 organische Chemie • A61K Präparate für medizinische, zahnärztliche oder kosmetische Zwecke • C09B Farbstoffe 	Ab 1800 alle Patente aus: <ul style="list-style-type: none"> • 7 Unterklassen der Sektion A (Täglicher Lebensbedarf) • 13 Unterklassen der Sektion B (Arbeitsverfahren, Transportieren) • Alle Unterklassen der Sektion C (Chemie, Hüttenwesen) • 8 Unterklassen der Sektion D (Textilien, Papier) • 2 Unterklassen der Sektion F (Maschinenbau, Beleuchtung, Heizung, Waffen, Sprengen) • 6 Unterklassen der Sektion G (Physik) • 6 Unterklassen der Sektion H (Elektronik)

Heike Hotzel Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek Jena

Vergleich der Datenbanken Reaxys und SciFinder (3)



	Reaxys	SciFinder
Rückstand zur Primärliteratur	ca. 2 bis 3 Monate	1.500 Kernzeitschriften innerhalb einer Woche, Patente aus CA, EP, FR, JP, RU, US, GB, WO innerhalb von zwei Tagen
Patente	ab 1869 vollständig in angegebenen Patentklassen	ab 1800
Datensuche	für mehr als 400 Eigenschaften	für mehr als 40 Eigenschaften
Textsuchen/Schlagnwortrecherchen	Möglich, jedoch schlecht nachvollziehbar, da als Ergebnis immer Substanzen bzw. Reaktionen angezeigt werden.	ja
Struktursuche	ja	ja
Substruktursuche	ja	ja
Reaktionssuche	ja	ja
Syntheseplanung	sehr gut möglich	zufriedenstellend möglich
Vorteile	<ul style="list-style-type: none"> • reicht etwas weiter zurück • Substanzen verknüpft mit Eigenschaften sind sehr viel besser suchbar • bis 1975 wurden die Angaben kritisch evaluiert, die Vorschriften „nachgekocht“. Sie sind absolut verlässlich. 	<ul style="list-style-type: none"> • chemische Literatur wird vollständig ausgewertet • Suche nach generischen Strukturen in Patenten (Markush Strukturen) möglich



Reaxys und SciFinder ergänzen einander und sollten **beide** für eine möglichst vollständige Recherche durchsucht werden!