

1. 搜尋

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

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

搜尋 (繼續)

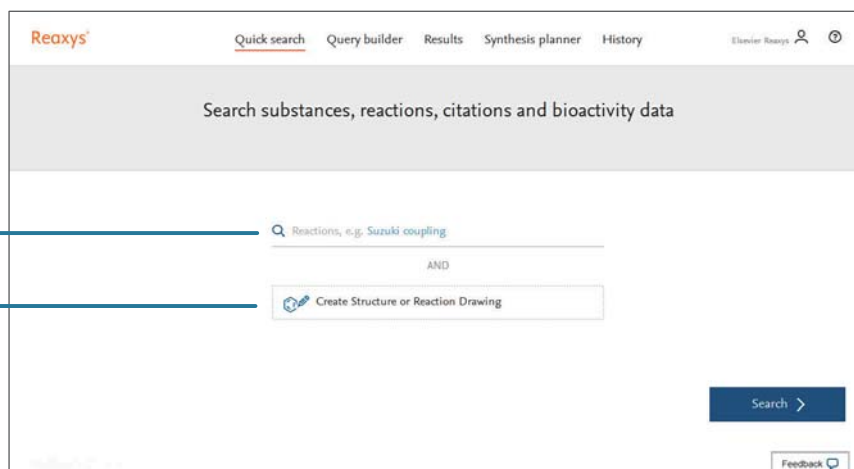
參考文獻	
特性	說明
Quick search (參見第 3 頁)	輸入一個或多個詞彙，並點擊 Search 例： · publications about quasicrystals · Tetrahedron, 2014, 70, 2343 · published by Schrock
透過繪製結構式或反應式進行 Quick search (參見第 3 頁和第 4 頁)	注意：任何一個結構或反應搜尋 (參見頁 1) 都會優先找出化合物或化學反應。搜尋結果中的每一筆結果都有引用文獻及全文連結。此外，您可以透過點擊查看所有化合物或是反應搜尋的引用文獻，點擊搜尋結果頁面最上方的文獻數量連結，以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

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

快速搜尋

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

您可以在結構搜尋選項中畫出化學式和反應式並進行檢索



Copyright ©2016 Elsevier B.V.
Reaxys® 和 Reaxys® 商標屬於 Elsevier B.V. 所有，並受其保護。保留所有權利。

3

結構式或反應式的快速搜尋

1. 點擊 Create Structure or Reaction Drawing

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

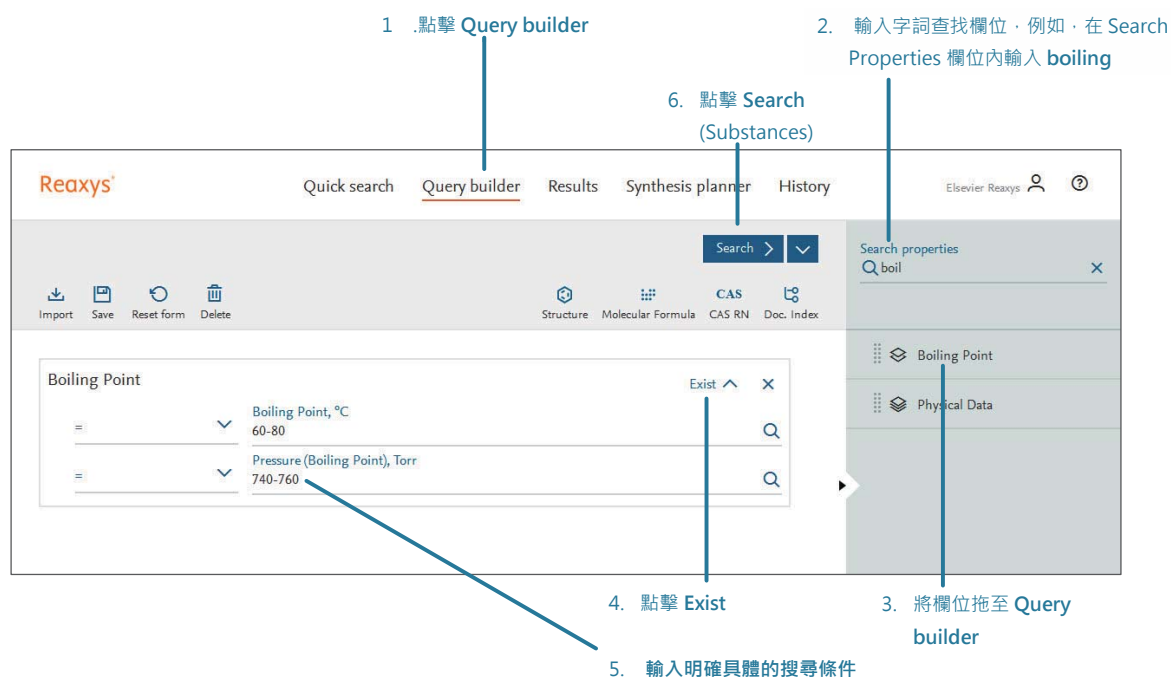
Copyright ©2016 Elsevier B.V.
Reaxys® 和 Reaxys® 商標屬於 Elsevier B.V. 所有，並受其保護。保留所有權利。

4

Query builder Fields 和 Forms 面板



Query builder 步驟



Query builder: 多種欄位和布林運算

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. The main search area contains two criteria: "Boiling Point" with a value range of "60-80" and "Pressure (Boiling Point), Torr" with a value range of "740-760". Below this, a dropdown menu is open, showing Boolean operators: OR, AND (selected), NOT, and PROXIMITY. A callout box on the right explains the operators:

點擊所需的布林運算子

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

Copyright ©2016 Elsevier B.V.
Reaxys® 和 Reaxys® 商標屬於 Elsevier B.V. 所有，並受其保護。保留所有權利。

7

2. 結果

Quick search 結果預覽

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

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

該選項說明此處有 1 筆化合物記錄—由結構式的精確搜尋而來。

該選項說明此處有超過 28,000 筆文獻記錄—由文獻中的詞彙搜尋得知。

The screenshot shows the search results for "imatinib". There are two main sections:

- Substances:** 1 result. Includes a "Structure" icon and a "View Results" button.
- Documents:** 29020 results. Includes "Titles, Abstract, Keywords: imatinib" and a "View Results" button.

點擊 **Preview Results**，查看搜尋結果中的前三項

點擊 **View Results**，查看搜尋結果中所有的搜尋結果

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

Copyright ©2016 Elsevier B.V.
Reaxys® 和 Reaxys® 商標屬於 Elsevier B.V. 所有，並受其保護。保留所有權利。

8

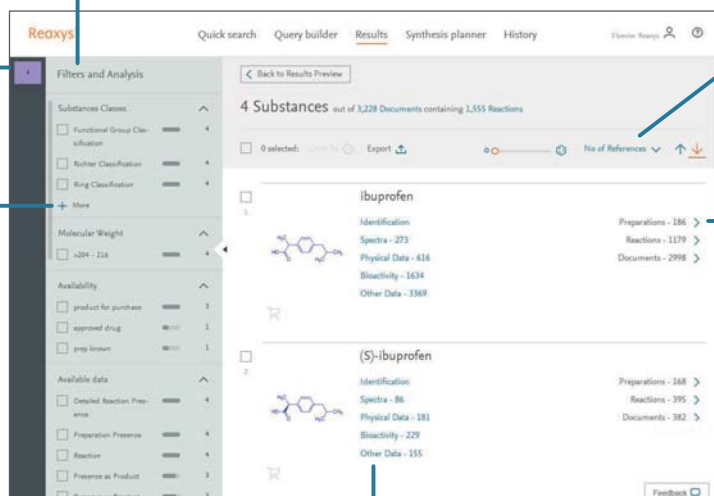
Quick search 或 Query builder 的結果—化合物(Substances)

使用 Filters and Analysis

篩選搜尋結果

透過“導覽列”記錄本次搜尋過程。

點擊 More，顯示更多選項



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

點擊相關連結，查看化合物製備和反應資訊，以及檔案(文獻)記錄。

按一下連結查看該化合物的特定資訊

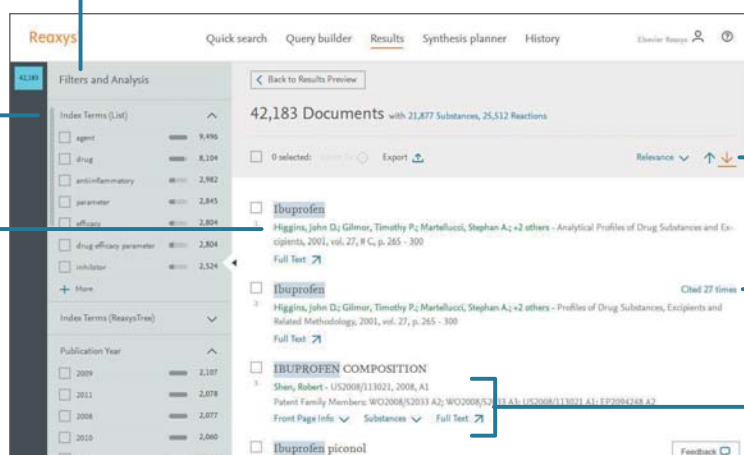
Quick search 或 Query builder 的結果—文獻(Documents)

使用 Filters and Analysis

篩選搜尋結果

使用 Index Terms 限縮特定主題相關的文獻資料範圍

點擊作者連結，可連結到 Scopus，查看作者發表的文章以及其他的分析選項



預設值為相關性排序，但也可以按照其他方式排序

點選連結，查看 Scopus 資料庫中的引用次數

查看全文連結、專利封面資訊(Front Page Info)、化合物、化學反應、摘要、索引詞彙

3. 分析和篩選

使用 Filter & Analysis 限縮搜尋結果:

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

1. 點擊 **More** 顯示其他類別的篩選和分析選項

2. 點擊 **More**，顯示更多的篩選選項

3. 採用該篩選方式可將原來的 152 項反應減少至 42 項

The screenshot shows the Reaxys 'Filters and Analysis' interface. On the left, a sidebar lists various filter categories: Yield, Reagent/Catalyst, Solvent, Catalyst Classes, Solvent Classes, Product Availability, Reactant Availability, and Reaction Classes. The 'Catalyst Classes' window is open, displaying a list of filters with their respective counts. The filters include 'active center' (97), 'heterogeneous' (0), 'Mn' (42), 'Os' (21), 'Ru' (20), 'Cr' (8), 'Ni' (8), 'Fe' (5), 'B' (4), 'Si' (4), and 'Pd' (3). There are also checkboxes for 'potassium permanganate' (41) and 'permanganate(VII) ion' (1). The main interface shows '152 Reactions' out of 119 Documents containing 298 Substances. A 'Back to Results Preview' button is visible at the top of the filter window.

4. Synthesis planner – 手動

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

The screenshot shows the Reaxys Synthesis planner interface. On the left, a 'Synthesize' dialog box is open, showing 'Manually' and 'Autoplan' options. The 'Add preparation - 5' window is open, showing a list of chemical reactions with their respective yields and preparation methods. The reactions are: 1. Yield: 1, Preparation: H₃C-O-SO₃-O₂-C₆H₃(NO₂)₂-CHO → ...; 2. Yield: 2, Preparation: H₃C-O-SO₃-O₂-C₆H₃(NO₂)₂-CHO → ...; 3. Yield: 1, Preparation: HO-C₆H₃(NO₂)₂-CHO → ... The 'Add # to plan' button is highlighted at the bottom right of the 'Add preparation - 5' window.

Synthesis planner – 手動 (繼續)

1. 在 Synthesis planner 內點擊 Synthesis plan 並查看

3. 點擊 Show conditions.

顯示該製備步驟的實驗細節。上下滾動視窗，以查看合成規劃中各個步驟的細節

2. 點擊 Synthesis step options (⋮) 以進入

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

Yield	Conditions	Reference
64%	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate With DBU in dichloromethane at 0°C for 2h Inert atmosphere Stage #2: With pyridine; phosphoryl chloride at 0 - 20°C Experimental Procedure	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 2012, vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text ↗ Cited 13 times ↗ Show details >
	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate With DBU in dichloromethane at 0°C for 2h Stage #2: With pyridine; phosphoryl chloride at 20°C for 3h Experimental part	Makrecka, Marina; Zalubovskis, Raivis; Vavers, Edijs; +3 others - Letters in Drug Design and Discovery, 2013, vol. 10, # 5, p. 410 - 414 Full Text ↗ Cited 1 times ↗ Show details >

Synthesis planner – 自動規劃

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

1. 點擊 Autoplan.

2. 調整自動合成規劃的的參數

3. 點擊 Create Plans.

Synthesis planner – 自動規劃 (繼續)

1. 在 Synthesis planner 內點擊 Plan 並查看

The screenshot shows the Synthesis Planner interface with a chemical reaction scheme. A 'Conditions' pop-up window is open, displaying details for 'Preparation - 2'. The pop-up includes a table with columns for Yield, Conditions, and Reference. The table lists two entries: one with 100% yield and another with 99% yield, both using triethylamine in dichloromethane at 0-20°C. The 'Reference' column provides journal citations and links to full text and show details.

2. 點擊 Synthesis step options (?) to 進入

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

3. 點擊 Show conditions .

顯示該製備步驟的實驗細節。上下滾動視窗，以查看合成設計中各個步驟的細節

儲存和匯出

特性	說明
儲存	
來自 Query builder	確認搜尋條件，點擊左上角的 Save <ul style="list-style-type: none"> • 搜尋條件已存至 .json 檔案中
來自 Synthesis planner	尚不支援
來自 History Page + Recent 頁籤	在 History 下的 Recent 頁面中儲存您目前在 Reaxys 內查找的一系列結果。將滑鼠移至 Recent Search 中想要儲存的紀錄上，點擊浮現的 Save 按鈕，輸入儲存名稱，點擊 Save <ul style="list-style-type: none"> • 已存的查詢結果現在可以在 Saved 頁面中找到
匯出	
從 Results Page:	從搜尋結果中勾選出您想要匯出的搜尋結果 <ul style="list-style-type: none"> • 點擊 Export • 確認檔案格式 (Format), 匯出範圍 (Range), 匯出數據種類 (Export data) 以及其他選項 (Additional options) • 點擊 Export • 如若想查看匯出進度，點擊螢幕右下角的 Exports <ul style="list-style-type: none"> ◦ 當匯出完成，點擊 Download 下載檔案
從 Synthesis planner:	<ul style="list-style-type: none"> • 點擊 Export • 點擊 Export documents 或 Export reactions • 確認檔案格式 (Format) 以及其他選項 (Additional options) • 點擊 Export • 如若想查看匯出進度，點擊螢幕右下角的 Exports <ul style="list-style-type: none"> ◦ 當匯出完成，點擊 Download 下載檔案