



بسم الله الرحمن الرحيم

راهنمای آموزشی پایگاه شیمی دارویی

Reaxys

تهیه کننده: ماریا سپهوند

مسئول کتابخانه دانشکده داروسازی

خرداد 1401

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

این پایگاه مرتبط ترین اطلاعات شیمیایی را استخراج و به سرعت بازایی می‌کند، بنابراین می‌توانید:

- ❖ تصمیم بگیرید که چگونه و کدام ترکیبات را با اطمینان درست کنید.
- ❖ راه‌های پیشرفته‌ای را برای سنتز مولکول‌هایی با خواص برتر بیابید.
- ❖ با به روزرسانی‌ها، در مورد انتشارات و پتنت‌های جدید شیمی در جریان قرار بگیرید.
- ❖ مطمئن ترین فروشندگان مواد اولیه و واسطه‌ها را بیابید.
- ❖ جستجوی داده‌های داخلی و خارجی یکپارچه، که با ادغام داده‌های داخلی و خارجی، **Reaxys** یک گردش کار تحقیقاتی کارآمد ایجاد می‌کند.

محتوای شیمی در **Reaxys** شامل چیست؟ **Reaxys** حاوی اطلاعات جامع شیمی، شیمی دارویی و فارماکولوژی است که قدمت آن به سال 1771 می‌رسد. **Reaxys** هر هفته به روز می‌شود و اطلاعات شیمیایی را با شش طبقه‌بندی برای یک دیدگاه بین رشته‌ای نمایه می‌کند.

Reaxys طیف گسترده‌ای از انواع داده‌ها را از پتنت‌ها، مجلات و کتاب‌ها ارائه می‌دهد:

- ❖ 179 میلیون: مواد آلی، معدنی و آلی فلزی، از جمله داده‌های مربوط به محصولات طبیعی با مشتقات گونه‌ای آنها.
- ❖ 57 میلیون: واکنش‌های شیمیایی
- ❖ 500 میلیون: حقایق تجربی منتشرشده، از جمله خواص ماده، خواص طیفی و واکنش‌های داده‌ها
- ❖ 86 میلیون: اسنادی از مجموعه بیش از 16000 نشریه ادواری مرتبط با شیمی از ناشران متعدد
- ❖ 30 میلیون: اختراعات از 105 دفتر ثبت اختراع

Reaxys همچنین حق ثبت اختراعات را با هدف اطلاعات بیولوژیکی ارائه می کند و گزینه هایی برای خرید مجموعه داده های مختلف برای تجزیه و تحلیل کاربردی دارد.

جستجو در **Reaxys** چه تفاوتی با جستجو در سایر پایگاه های داده شیمی دارد؟

پاسخ های دقیق برای سوالات شیمی را سریعتر از هر پایگاه داده دیگری می توانید در **Reaxys** پیدا کنید. جستجوهای بهتر در **Reaxys** نتیجه موارد زیر است:

- ❖ گزینه هایی برای جستجوی ساختارها، واکنش ها، کلمات کلیدی و مقادیر دارا می باشد.
- ❖ توانایی منحصر بفرد برای ترکیب ساختار و جستجوهای متنی دارد.
- ❖ اطلاعات بیولوژیکی معمول و مرتبط از اختراعات و مجلات را دارا می باشد.
- ❖ نقشه های حرارتی که روابط بین مواد و اهداف آنها را نشان می دهد.
- ❖ انواع بیشتری از ویژگی ها و داده های طیفی را بیش از هر پایگاه دیگری دارا می باشد.
- ❖ به روزرسانی ماهانه اطلاعات تامین کننده تجاری

قیمت اشتراک **Reaxys**:

Reaxys از طریق اشتراک های سالانه سازمانی با دسترسی چند کاربره در دسترس سازمان های دانشگاهی و شرکتی است. قیمت گذاری بر اساس اندازه شرکت و استفاده است.

چگونگی جستجو در Reaxys:

ابتدا از طریق آدرس (www.reaxys.com) وارد این پایگاه شوید. در صفحه اصلی، شما می‌توانید به اطلاعات جامعی درباره شش نوار ابزار این پایگاه دست یابید.

Reaxys®

Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts

Search substances, reactions and documents

Import

Search Reaxys

Find >

Reactions, e.g. Suzuki coupling

AND

Draw

Content Overview | Latest update: 14 June 2022 >

261M	58M	97M	33M	42M
Substances	Reactions	Documents	Patents	Bioactivities

Quick Search-1 (جستجوی سریع):

با جستجوی سریع می‌توانید مواد، واکنش‌ها و اسناد را در *Reaxys* و *Reaxys Medicinal Chemistry* و همه پایگاه‌های داده یکپارچه مانند *LabNetwork Pubchem* و ... جستجو کنید.

انواع جستجو Quick Search:

- *Literature Search* (جستجوی عبارتی)
- *Substances by name* (جستجوی مواد بر اساس نام)
- *Search for Substances by Structure* (جستجوی مواد بر اساس ساختار)

• Literature Search (جستجوی عبارتی)

در صفحه اصلی **Reaxys**، روی قسمت "جستجوی سریع" کلیک کنید. اکنون می‌توانید جستجوی خود را در قسمت متن وارد کنید. فرض کنید می‌خواهیم به دنبال کاربردهای نانولوله در فناوری باتری باشیم. کلیدواژه **Nanotubes with battery** را در باکس جستجو وارد کنید و روی **Find** کلیک نمایید.

The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there is a navigation bar with "Quick search" highlighted in a red box. Below it, a search bar contains the text "nanotubes with battery" (also highlighted in a red box) and a "Find >" button (highlighted in a red box). Below the search bar, there are options for "Substance Properties, e.g. ferroelectric materials" and "AND". A "Draw" button is also visible. Below the search bar, there is a summary bar with "Content Overview | Latest update: 09. June 2022 >". The summary bar shows the following counts: 261M Substances, 58M Reactions, 97M Documents, 32M Patents, and 42M Bioactivities.

پیش نمایش نتایج نشان داده می‌شود.

The screenshot shows the Reaxys search results page for "nanotubes with battery". The page title is "Results for nanotubes with battery". The results are displayed in a table with three rows, each representing a different search result. The first row is highlighted with a red box and shows 18,590 Documents for the search "nanotubes", "battery". The second row shows 311,058 Documents for the search "nanotubes". The third row shows 1,615,087 Documents for the search "battery". Each row includes a "View Results >" button.

Count	Search Term	View Results
18,590	Documents Titles, Abstracts, Keywords : "nanotubes", "battery"	View Results >
311,058	Documents Titles, Abstracts, Keywords : "nanotubes"	View Results >
1,615,087	Documents Titles, Abstracts, Keywords : "battery"	View Results >

در این مثال اولین مجموعه از نتایج جستجو، هر دو عبارت جستجو را در نظر می‌گیرد، در حالی که مجموعه دوم و سوم از نتایج برای عبارات فردی جستجو می‌کنند.

The screenshot shows the Reaxys search results page for the query "nanotubes with battery". The page header includes the Reaxys logo, navigation links for "Quick search", "Query builder", "Results", "Retrosynthesis", and "History", and buttons for "Register" and "Sign in". The main content area displays three search results:

Document Count	Keywords	Action
18,590	"nanotubes", "battery"	View Results >
311,058	"nanotubes"	View Results >
1,615,087	"battery"	View Results >

View Result نتایج اول اجازه می‌دهد تا اولین مجموعه نتایج را مشاهده کنیم، نتایج بر اساس ارتباط فهرست‌بندی شده است. شما می‌توانید ترتیب را به تاریخ انتشار تغییر دهید. عبارات شما در عناوین، چکیده، عبارات نمایه شده و ادعای ثبت اختراع جستجو می‌شوند. اختراعات زبان غیرانگلیسی نیز به لطف ترجمه عناوین، چکیده‌ها و ادعاها یافت می‌شوند. عبارات جستجوی ما به صورت انتزاعی در چکیده برجسته شده‌اند و شامل نسخه‌های مفرد و جمع نانولوله‌ها و باتری است.

فیلترهای سمت چپ که بر اساس آنها می‌توانید جستجو را تغییر دهید. که شامل:

Publication year: سال انتشار

Document year: نوع مدرک

Authors/inventors: نویسندگان، مخترعان

Current patent Assignee: حق ثبت اختراع فعلی

Patent office: اینکه کدام دفاتر دارای ثبت اختراع، دارای پتنت فعال هستند.

Journal Title: عنوان مجله

Substance Classes: طبقه بندی مواد

Reaction Classes: طبقه بندی واکنش‌ها

Index Terms (List): فهرست کلمات نمایه شده در جستجو

Index Terms (Reaxys tree): کلمات نمایه شده (درخت Reaxys)

The screenshot shows the Reaxys search results page for the query 'battery'. The page features a navigation bar with 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Retrosynthesis', and 'History'. On the right, there are 'Register' and 'Sign in' buttons. The main content area displays 18,590 documents, with 1,665 substances and 257 reactions. A left sidebar contains a 'Filters' panel with options like 'Limit to' and 'Exclude'. The search results are sorted by 'Publication Year'. Three results are visible, each with an abstract hit and index terms hit. The first result is 'Fabrication of AgWO4/CNT nanomaterial for high capacity lithium ion battery' by Brijesh; Prajli; Nagaraja, published in Materials Technology in 2022. The second result is 'A flame retardant separator modified by MOFs-derived hybrid for safe and efficient Li-S batteries' by Wu, Na; Wang, Junling; Liao, Can; Han, Longfei; Song, Lei; Hu, Yuan; Mu, Xiaowei; Kan, Yongchun, published in Journal of Energy Chemistry in 2022. The third result is 'The use of FCNT/PANI nanocomposites to extend the life of lithium-ion batteries' by Deyab, Mohamed A.; Al-Qhatani, Mohsen Mohammed, published in Zeitschrift für Physikalische Chemie in 2022. A 'Sort search results' dropdown menu is open, showing options for Relevance, Publication Year, Document Type, and Cited By.

با اعمال فیلترها نتایج جستجو تغییر پیدا می کنند.

Reaxys® Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis History Register > Sign in

18.59 K Filters Limit to > Exclude >

Current Patent Assignee 1

- lg chem co,ltd 888
- chinese academy of sciences 408
- tsinghua university (china) 376
- hon hai precision industr... 352
- global graphene group 250
- samsung sdi co,ltd 244
- showa denko k k 243

Filter by value View more

Patent Office 1

- cn 5,610
- us 2,362
- kr 1,673
- jp 1,671

0 Limit To Exclude Export Publication Year ↓

Index Terms hit: {...Bamboo-like, Lithium-ion battery, Nanotube...}

5 Freestanding strontium vanadate/carbon nanotube films for long-life aqueous zinc-ion batteries Cited 6 times
Du, Ye-Hong; Liu, Xian-Yu; Wang, Xin-Yu; Sun, Jun-Cai; Lu, Qiong-Qiong; Wang, Jian-Zhi; Omar, Ahmad; Mikhailova, Daria [Rare Metals, 2022, vol. 41, # 2, p. 415 - 424]
Abstract Index Terms Substances 1 Full Text

Abstract hit: {...rechargeable zinc-ion battery (ZIB) is considered to be a potential energy storage system...}

Index Terms hit: {...Author keyword: Aqueous zinc-ion battery, Carbon nanotubes network...}

5 Co_{0.85}Se hollow polyhedrons entangled by carbon nanotubes as a high-performance cathode for magnesium secondary batteries Cited 2 times
Chen, Dong; Du, Fuying; Cao, Shun-an; Li, Ting; Xu, Fei [Chemical Engineering Journal, 2022, vol. 428]
Abstract Index Terms Substances 4 Full Text

Abstract hit: {...by carbon nanotubes (Co_{0.85}Se/CNTs) are fabricated and investigated as rechargeable magnesium battery cathodes...}

Index Terms hit: {...Author keyword: Carbon nanotubes, Co_{0.85}Se...}

Reaxys® Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis History Register > Sign in

138 Filters 138 Documents with 0 Substances, 0 Reactions

18.59 K Limit to > Exclude > Export

Publication Year Document Type Authors/Inventors Current Patent Assignee Patent Office Journal Title

- lg chem co,ltd 138
- sogang university 2
- ulsan national institute of sc... 1

Filter by value

us 138

0 Limit To Exclude Export Publication Year ↓

1 NEGATIVE ELECTRODE ACTIVE MATERIAL AND METHOD OF PREPARING THE SAME
Current Patent Assignee: LG CHEM CO.,LTD, - US2022/6077, 2022, A1
Patent Family Members: US2022/6077 A1
Abstract Claims Bibliographic Info Full Text

Abstract hit: {...and carbon nanotubes (CNT), wherein one ends of the carbon nanotubes are connected...}

Claims hit: {...metal; and carbon nanotubes (CNT), wherein one ends of the carbon nanotube is connected to...}

2 FUNCTIONAL SEPARATOR HAVING CATALYTIC SITES INTRODUCED THEREINTO, MANUFACTURING METHOD THEREFOR, AND LITHIUM SECONDARY BATTERY COMPRISING SAME
Current Patent Assignee: LG CHEM CO.,LTD, - US2022/6131, 2022, A1
Patent Family Members: CN112913075 A; EP3859823 A1; EP3859823 A4; JP2022/508931 A; KR2020/127869 A; ...
Abstract Claims Bibliographic Info Full Text

Abstract hit: {...lithium secondary battery including the same, which can improve the capacity and lifetime...}

نحوه خروجی گرفتن از نتایج (*Exporting*):

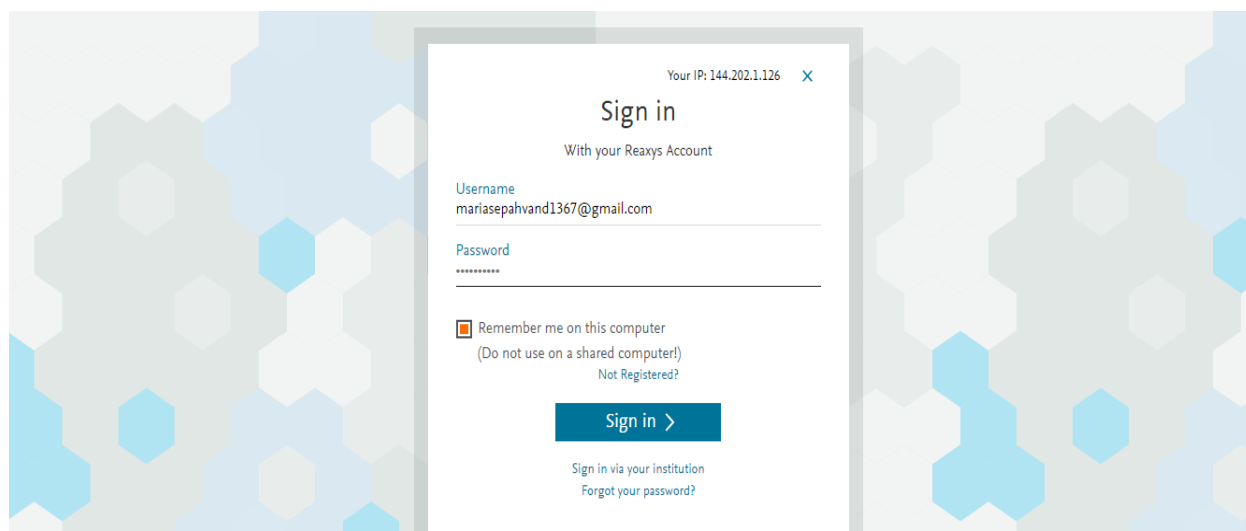
ابتدا یک جستجو انجام خواهیم داد، سپس روی مشاهده نتایج، مجموعه نتایج مواد کلیک نمایم. هنگامی که از نتایج خود راضی هستید می توانید از آنها خروجی بگیرید.

The screenshot shows the Reaxys search results interface. On the left, there is a 'Filters' sidebar with various options like 'Publication Year', 'Document Type', and 'Current Patent Assignee'. The main area displays search results for '138 Documents'. The first result is titled 'NEGATIVE ELECTRODE ACTIVE MATERIAL AND METHOD OF PREPARING THE SAME'. Below the title, there are links for 'Abstract', 'Claims', 'Bibliographic Info', and 'Full Text'. The 'Export' button is highlighted with a red box. The second result is titled 'FUNCTIONAL SEPARATOR HAVING CATALYTIC SITES INTRODUCED THEREINTO, MANUFACTURING METHOD THEREFOR, AND LITHIUM SECONDARY BATTERY COMPRISING SAME'. It also has links for 'Abstract', 'Claims', 'Bibliographic Info', and 'Full Text'. The 'Export' button is also highlighted with a red box.

قبل از انجام *Exporting* حتما باید ثبت نام کنید یا وارد شوید. این یک فرایند سریع و آسان برای خروجی و تنظیم هشدارها (*Allerts*) است. اگر روی *Export* کلیک نمایید، پیام زیر به شما داده می شود.

The screenshot shows the Reaxys search results interface with a 'Login required' dialog box overlaid. The dialog box contains the text 'Please sign-in/register to be able to Export data.' and has two buttons: 'Cancel' and 'Sign in >'. The 'Sign in >' button is highlighted with a red box. The background shows the search results page with the 'Export' button highlighted in a red box.

Sign in همچنین به شما این امکان را می دهد که تنظیمات برگزیده جستجو را تنظیم کنید و نتایج جستجو را ذخیره نمایید.



از نتایج فیلترشده، مواردی را که می‌خواهید **Export** کنید انتخاب نمایید. با علامت زدن کادرهای کنار نتایج جستجو، نتایج 1، 2 و 3 را انتخاب می‌کنیم. بعد از تیک زدن یک کادر، به تعداد اسناد انتخاب شده اضافه می‌شود.

Reaxys® Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria sepa...

138 Filters 18.66 K Limit to Exclude Export

138 Documents with 0 Substances, 0 Reactions

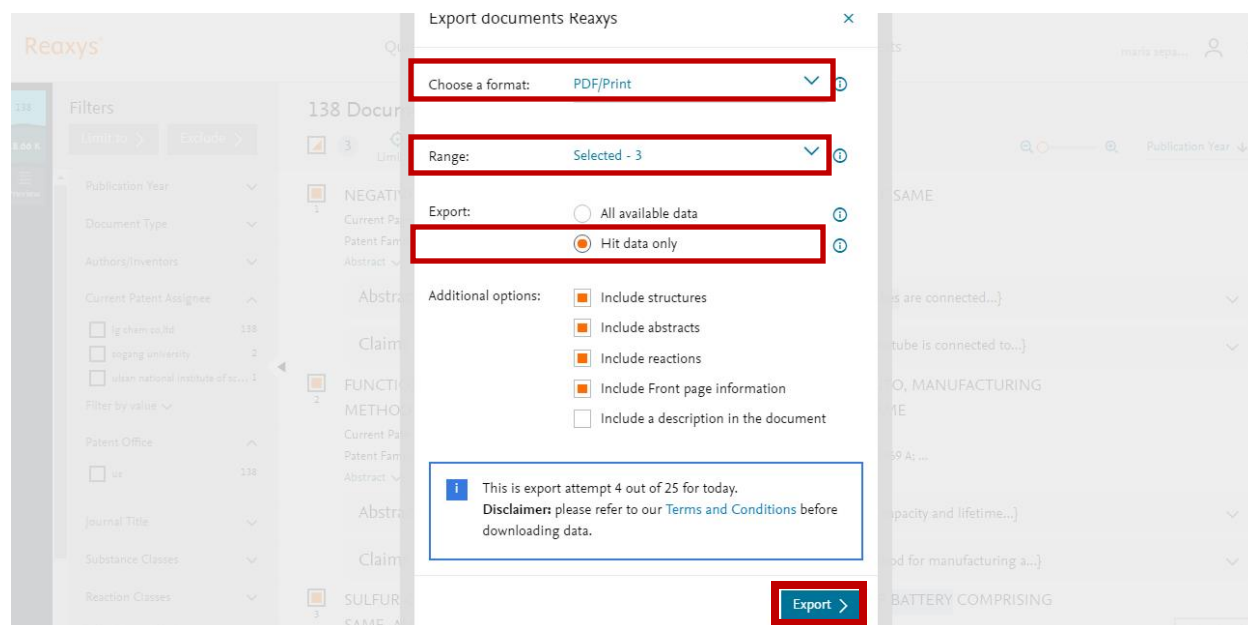
1 NEGATIVE ELECTRODE ACTIVE MATERIAL AND METHOD OF PREPARING THE SAME
Current Patent Assignee: LG CHEM CO.,LTD. - US2022/6077, 2022, A1
Patent Family Members: US2022/6077 A1
Abstract Claims Bibliographic Info Full Text
Abstract hit: {...and carbon nanotubes (CNT), wherein one ends of the carbon nanotubes are connected...}
Claims hit: {...metal; and carbon nanotubes (CNT), wherein one ends of the carbon nanotube is connected to...}

2 FUNCTIONAL SEPARATOR HAVING CATALYTIC SITES INTRODUCED THEREINTO, MANUFACTURING METHOD THEREFOR, AND LITHIUM SECONDARY BATTERY COMPRISING SAME
Current Patent Assignee: LG CHEM CO.,LTD. - US2022/6131, 2022, A1
Patent Family Members: CN112913075 A; EP3859823 A1; EP3859823 A4; JP2022/508931 A; KR2020/127869 A; ...
Abstract Claims Bibliographic Info Full Text
Abstract hit: {...lithium secondary battery including the same, which can improve the capacity and lifetime...}
Claims hit: {...of carbon nanotubes, graphene, and reduced graphene oxide.11. A method for manufacturing a...}

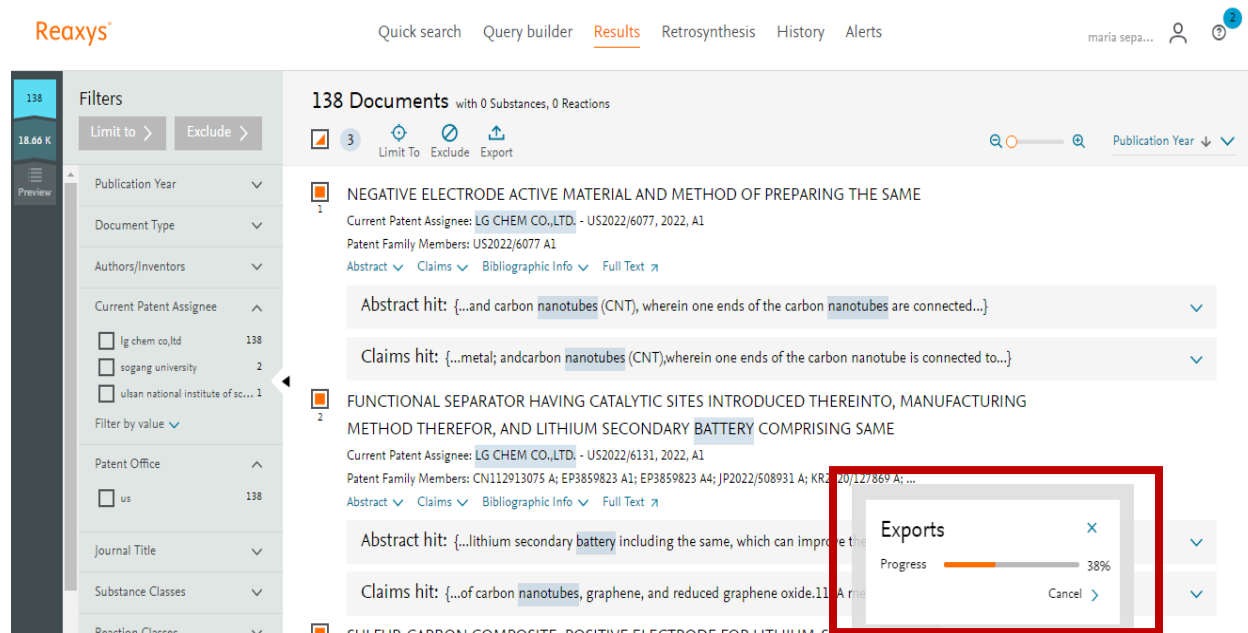
3 SULFUR-CARBON COMPOSITE, POSITIVE ELECTRODE FOR LITHIUM-SULFUR BATTERY COMPRISING SAME, AND LITHIUM-SULFUR BATTERY COMPRISING POSITIVE ELECTRODE
Current Patent Assignee: LG CHEM CO.,LTD. - US2022/6077, 2022, A1

Feedback

Export با انتخاب فرمت خروجی (*output format*)، که ما از **PDF** آن استفاده می‌کنیم. همچنین محدوده‌ای را که باید **Export** شود، تعریف کنید، مانند همه نتایج، نتایج انتخاب شده یا نتایج یک محدوده خاص. در این مورد، ما روی **Hit data only** کلیک می‌کنیم.



در نهایت، گزینه **Export** را تعریف کنید. پیشرفت دانلود نمایش داده می‌شود (**Progress**). وقتی **Export** کامل شد روی دانلود کلیک نمایید. فایل خروجی (**Export**) الان در حال آماده شدن است.



• *Search Substances by Name* (جستجوی مواد بر اساس نام)

در صفحه اصلی *Reaxys*، روی قسمت "جستجوی سریع" کلیک کنید. برای دستیابی به یک ترکیب معین، جستجو را بر اساس نام یا فرمول ماده انجام دهید. برای مثال: ما می‌خواهیم اطلاعاتی از *Atenolol* پیدا کنیم. را وارد باکس جستجو نمایید و روی *Find* کلیک می‌نمائیم.

The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there are navigation links: Quick search, Query builder, Results, Retrosynthesis, History, Alerts. The user's name 'maria sepa...' is visible. The search bar contains 'atenolol' and a 'Find' button is highlighted with a red box. Below the search bar, a dropdown menu lists search results under 'Chemical Names' and 'Concepts'. The 'Chemical Names' list includes: atenolol, atec, atenolol acid, atelec, atevirdine. The 'Concepts' list includes: atelectasis, atelectasis pulmonis, atelectasis pulmonum, atelerix, ateles. A large watermark 'M' is visible in the background.

Reaxys سه مجموعه از نتایج را در پیش نمایش ارائه می‌دهد. *Reaxys* مجموعه اول را به عنوان نام یک ماده تشخیص داده و جستجوی دقیقی در ساختار آن انجام داده است. *Reaxys* همچنین این عبارت را در مجموعه دوم یعنی سوابق اسناد جستجو کرده است، جایی که می‌توانیم اطلاعاتی برای آتنولول پیدا کنیم و مجموعه سوم مواد تجاری هستند.

The screenshot shows the search results for 'atenolol'. The results are displayed in a table with three rows, each representing a different category of results. The first row is for 'Substances' with 135 results, a 'View Results' button, and a 'Structure' icon. The second row is for 'Documents' with 36,364 results, a 'View Results' button, and a 'Titles, Abstracts, Keywords' icon. The third row is for 'Commercial Substances' with 8 results, a 'View Results' button, and a 'Structure' icon. A large watermark 'M' is visible in the background.

Category	Count	View Results
Substances	135	View Results >
Documents	36,364	View Results >
Commercial Substances	8	View Results >

روی **View Result** نتایج مواد کلیک نمایید. از صفحه نتایج می توانید، مقدمات (**Preparations**)، واکنش‌ها (**Reactions**) و اهداف و اسناد (**Document**) را در سمت راست مشاهده نمایید. همچنین در ستون وسط، شما می توانید ویژگی‌های ماده آزمایشی منتشر شده برای یک ترکیب خاص را بررسی نمایید.

The screenshot shows the Reaxys search results page. On the left, there is a 'Filters' sidebar with options like 'By Structure', 'Substances Classes', 'Molecular Weight', etc. The main search results area shows two entries: (S)-Atenolol and (+)-(R)-atenolol. For (S)-Atenolol, the 'Physical Data - 165' link is highlighted with a red box. In the right sidebar, the 'Preparations - 12', 'Reactions - 95', and 'Documents - 9,652' links are also highlighted with a red box.

برای این منظور روی **Physical Data** کلیک نمایید.

This screenshot shows the 'Physical Data' section for (RS)-atenolol expanded. The 'Physical Data - 165' link in the main results area is highlighted with a red box. The expanded view shows a list of physical data points: 'Identification', 'Druglikeness', 'Physical Data - 165' (which is expanded to show 'Melting Point - 10' and 'Adsorption (MCS) - 19'), 'Spectra - 116', 'Bioactivity - 1,292', and 'Other Data - 1,527'. The right sidebar also shows 'Preparations - 12', 'Reactions - 95', and 'Documents - 9,652'.

اکنون شما به ویژگی‌هایی مانند **Melting - Point** (نقطه ذوب)، **Adsorption** (جذب)، **Association** (تجمع، اضافه شدن دو یا چند مولکول به مجموعه بزرگتری از مولکول‌ها)، **Chromatographic Data** (داده‌های کروماتوگرافی)، **Circular Dichroism** (رنگک تابی دورانی) دسترسی دارید.

از طریق فیلترهای سمت چپ نیز می‌توانید نتایج جستجو را تغییر دهید. که شامل:

By Structure: توسط ساختار

Substances Classes: طبقه بندی مواد

Molecular Weight: جرم مولکولی

Number of Fragments: تعداد قطعات

Availability: دسترسی

Availability in other Databases: در دسترس بودن در سایر پایگاه‌های داده

Available Data: داده‌های موجود

Document Type: نوع مدرک

Publication Year: سال انتشار

LogP: ضریب توزیع

H Bond Donors: دهنده پیوند هیدروژنی

H Bond Acceptors: پذیرنده پیوند هیدروژنی

Rotatable Bonds: پیوندهای قابل چرخش

The screenshot shows the Reaxys search results page for (RS)-atenolol. On the left, a 'Filters' sidebar is highlighted with a red box, listing various filter categories such as 'By Structure', 'Substances Classes', 'Molecular Weight', 'Number of Fragments', 'Availability', 'Availability in other databases', 'Available Data', 'Document Type', 'Publication Year', and 'LogP'. The main results area shows a chemical structure of (RS)-atenolol and a table of data points: Identification, Spectra - 116, Preparations - 12, Druglikeness, Bioactivity - 1,292, Reactions - 95, Physical Data - 165, and Other Data - 1,527, Documents - 9,652. Below the table, a detailed view for (RS)-atenolol is shown, including sections for Identification, Druglikeness, and Physical Data - 165, with sub-sections like Melting Point - 10 and Adsorption (MCS) - 19.

با برگشت به صفحه اصلی *Reaxys* شما همچنین می توانید جستجو را از طریق فرمول انجام دهید. این روش به ویژه برای یافتن مواد آلی یا آلی فلزی مفید است. برای مثال فرمول مختصر ماده آلی-فلزی *Tetrakis-Triphenyl phosphine-Platinum* ($C_{72}H_{60}P_4$) را وارد باکس جستجو می کنیم. یک ماده زرد رنگ که به عنوان پیش ساز سایر کمپلکس های پلاتین استفاده می شود.

The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there are navigation links for 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Retrosynthesis', 'History', and 'Alerts'. The search bar contains the text 'Search for c72H60P4pt'. Below the search bar, there is a 'Search Reaxys' section with a search box containing 'c72H60P4pt' and a 'Find >' button. Below the search box, it shows 'Documents, e.g. Tetrahedron, 2014, 70, 2343' and 'AND' followed by a 'Draw' button. At the bottom, there is a 'Content Overview' section with statistics: 261M Substances, 58M Reactions, 97M Documents, 32M Patents, and 42M Bioactivities. The latest update is dated 09. June 2022.

دوباره **Reaxys** نتایج رابه صورت مواد، اسناد و مواد تجاری ارائه می دهد.

Reaxys[®] Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria.sepa... 3

Results for C72H60P4Pt New Edit

Icon	Count	Category	Search Criteria	Actions
	4	Substances	Molecular formula : C72H60P4Pt	Preview Results View Results >
	323	Documents	Titles, Abstracts, Keywords : "C72H60P4Pt"	Preview Results View Results >
	2	Commercial Substances	Molecular formula : C72H60P4Pt	Preview Results View Results >

• *Search for Substances by Structure* (جستجوی مواد بر اساس ساختار)

در صفحه اصلی **Reaxys** روی گزینه **Draw** کلیک نمایید. در این جستجو، توجه داشته باشید که می توانید ویرایشگرهای ساختاری مختلف **MarvinJS** یا **ChemdrawJS** را انتخاب کنید.

Reaxys[®] Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria.sepa... 3

Search substances, reactions and documents Import

in Reaxys, PubChem, SigmaAldrich and Commercial Substances

Search Reaxys Find >

Substance CAS Registry Number, e.g. 102625-70-7

AND

Draw

Content Overview | Latest update: 09. June 2022 >

261M	58M	97M	32M	42M
Substances	Reactions	Documents	Patents	Bioactivities

اکنون می توانیم یک ساختار ترسیم کنیم یا از ساختار **MarvinJS** استفاده کنیم. روی **Insert Structure from name** کلیک کنید.

Reaxys[®] Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria sepa... 3

Structure editor selected **MarvinJS** ChemDrawJS **Insert structure from name >**

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- Similar
- Tautomers
- Stereo
- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

+ More options

و *5-amino-quinoline-8-carbonitrile* را وارد کنید.

Reaxys[®] Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria sepa... 3

Structure editor selected **Create structure template from name**

is

Search this structure as:

- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

+ More options

یک اسکلت اساسی برای سازه نمایش داده می شود.

Reaxys® Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria sepa... 3

Structure editor selected: MarvinJS ChemDrawJS

Insert structure from name >

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- Similar
- Tautomers
- Stereo
- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

+ More options

در جستجوی این ساختار به عنوان پانل سه گزینه وجود دارد.

- **As drawn**: به این معنی است که **Reaxys** نتایج جستجو را به صورت **As drawn** (ترسیم شده) پیدا می کند، یعنی بدون جایگزین های هیدروژنی بیشتر.
- **As Substructure** (به عنوان زیرساخت): اگر علاقمند به جستجوی مواد حاوی چهارچوب ساختاری و ترکیب جایگزین های غیرهیدروژنی مختلف هستید مفید است.

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
 - On all atoms
 - On heteroatoms
- Similar
- Tautomers
- Stereo
- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

- **Similar** (موارد مشابه): می توان از آنها برای یافتن ترکیباتی استفاده کرد که ساختار یا ظاهر آنها به ساختاری که اخیراً ترسیم کرده اید نزدیک است.

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- Similar
- Tautomers
- Stereo
- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

+ More options

برای مثال از *As Substructure* استفاده می کنیم. روی *Transfer to query* کلیک نمایید.

Reaxys® Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria.sepa...

Structure editor selected: MarvinJS ChemDrawJS

Insert structure from name >

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- On all atoms
- On heteroatoms
- Similar
- Tautomers
- Stereo
- Additional ring closures
- Related Markush
- Salts
- Mixtures
- Isotopes
- Charges
- Radicals

Transfer to query >

سپس روی *Find* کلیک کنید.

Reaxys® Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria.sepa...

Search Reaxys

Substance CAS Registry Number, e.g. 102625-70-7

Find >

On all atoms

Content Overview | Latest update: 09. June 2022 >

261M	58M	97M	32M	42M
Substances	Reactions	Documents	Patents	Bioactivities

پیش نمایش نتایج با نشان دادن چهار نوع مختلف از سوال پژوهشی وارد شده گزینه هایی را ارائه می دهد.

Reaxys® Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria.sepa...

2,498	Substances	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, additional ring closures allowed, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results	View Results >
129	Documents	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, additional ring closures allowed, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results	View Results >
5,167	Reactions	Reaction Query : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, additional ring closures allowed, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results	View Results >
124	Commercial	Structure : substructure; included: tautomers, only absolute stereo, additional ring closures allowed, salts, mixtures, isotopes, charges, radicals	Preview Results	View Results >

نتایج شامل مواد، اهداف یا اسناد، واکنش‌ها و مواد تجاری هستند. روی **View Result** اولین مجموعه نتایج ماده کلیک نمایید. **Reaxys** داده‌های تجربی منتشر شده برای این ماده را نشان می‌دهد.

Reaxys® Quick search Query builder Results Retrosynthesis History Alerts maria.sepa...

2,498 Substances out of 129 Documents, containing 5,193 Reactions

Reaxys - 2,498

Limit To Exclude Export Preparations No of References Grid

2.50 K Filters

- By Structure
- Substances Classes
- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Availability
- Availability in other databases
- Available Data
- Document Type
- Publication Year
- LogP
- H Bond Donors
- H Bond Acceptors

1

C16H17N3O2 283.33 27982508 Retrieve CAS RN

5-[(2R,6R)-2-(hydroxymethyl)-6-methylmorpholin-4-yl]quinoline-8-carbonitrile

Identification Spectra - 6 Preparations - 24 >

Druglikeness Bioactivity - 2 Reactions - 151 >

Physical Data - 4 Documents - 18 >

2

C16H13F3N4 320.317 31610401 Retrieve CAS RN

5-[(3R,5S)-3-amino-5-trifluoromethyl-piperidin-1-yl]-quinoline-8-carbonitrile

Identification Spectra - 2 Preparations - 9 >

Druglikeness Bioactivity - 4 Reactions - 10 >

Physical Data - 1 Other Data - 7 Documents - 17 >

برای نمایش اطلاعات بیشتر کافی است روی پیوندها کلیک نمایید، که می‌توان مجموعه را بیشتر اصلاح و داده‌ها را با استفاده از فیلترها و ابزارهای تجزیه و تحلیل صادر کرد.

2,498 Substances out of 129 Documents, containing 5,193 Reactions Reaxys - 2,498

Limit To Exclude Export Preparations No of References ↓ Grid

Filters

Limit to > Exclude >

- By Structure >
- Substances Classes >
- Molecular Weight >
- Number of Fragments >
- Availability >
- Availability in other databases >
- Available Data >
- Document Type >
- Publication Year >
- LogP >
- H Bond Donors >
- H Bond Acceptors >

1 5-((2R,6R)-2-(hydroxymethyl)-6-methylmorpholin-4-yl)quinoline-8-carbonitrile

C14H17N3O2 28 (2R,6R)-2-(hydroxymethyl)-6-methylmorpholin-4-ylquinoline-8-carbonitrile

Identification Spectra - 6 Preparations - 24 >

Druglikeness Bioactivity - 2 Reactions - 151 >

Physical Data - 4 Documents - 18 >

2

5-((3R,5S)-3-amino-5-(trifluoromethyl)piperidin-1-yl)quinoline-8-carbonitrile

C14H15F3N4 320.317 31610401 [Retrieve CAS RN](#)

Identification Spectra - 2 Preparations - 9 >

Druglikeness Bioactivity - 4 Reactions - 10 >

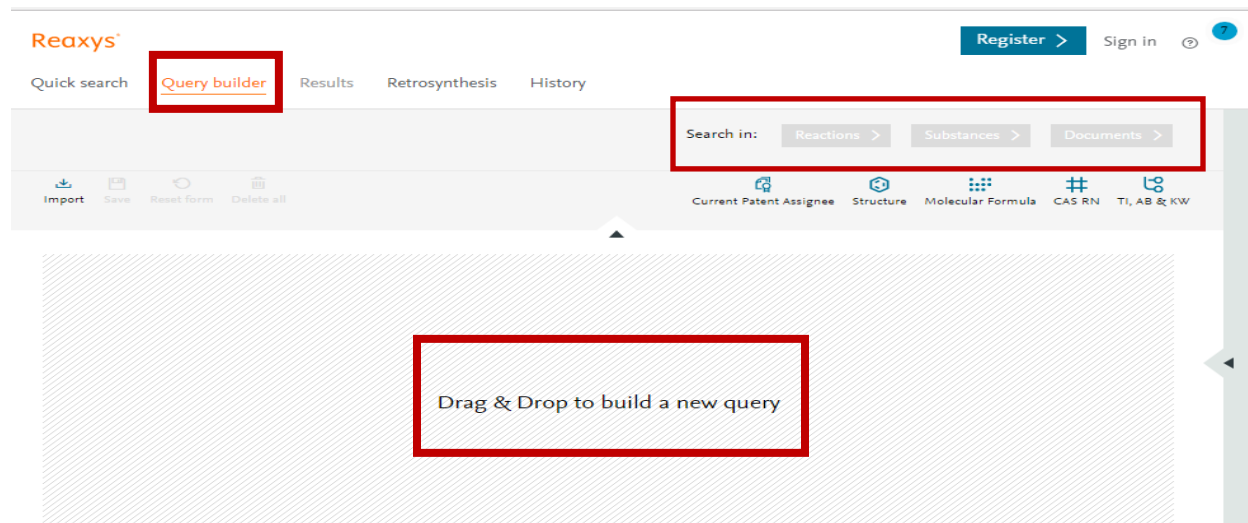
Physical Data - 1 Other Data - 7 Documents - 17 >

Activate Windows
Go to PC settings to activate Windows.
[Feedback](#)

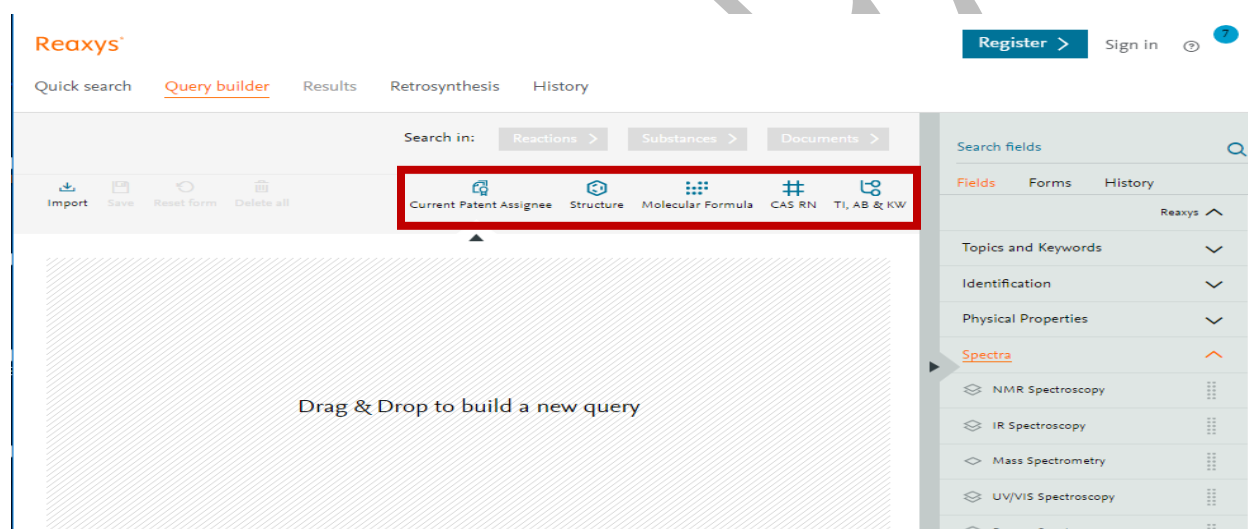
Query builder-2

Query builder کوتاه ترین مسیر از سوال تا پاسخ *Reaxys* است که گزینه های جستجوی بسیار قدرتمندی را برای یافتن اطلاعات دارویی در مورد مواد خاص ارائه می دهد. در حالی که *Quick Search* عبارات ساده را به سوال پژوهشی تبدیل می کند، گاهی اوقات به سوال با *Query builder* پاسخ موثرتری داده می شود.

Query builder یک رابط کشیدن و رها کردن است که به شما امکان می دهد فیلدهای داده را انتخاب کنید و اطلاعات خاصی را در آنها جستجو کنید. برای جستجوی واکنش ها، مواد و اسناد نیز می توانید از آن استفاده کنید.



برای افزودن معیارهای جستجو به *Query builder* می‌توانید از *Query lets* های *Current patent* ، *Assignee* ، *Structure* ، *Molecular Formula* ، *CAS RN* ، *TI, AB & KW* استفاده کنید.



Search Propreties : شما می‌توانید با استفاده از *Search Propreties* ، فیلدها یا فرم‌ها را جستجو کنید..

Reaxys®

Quick search [Query builder](#) Results Retrosynthesis History

Search in: Reactions > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all

Current Patent Assignee Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Drag & Drop to build a new query

Search fields

Fields Forms History

Reaxys ^

Topics and Keywords v

Identification v

Physical Properties v

Spectra ^

- NMR Spectroscopy
- IR Spectroscopy
- Mass Spectrometry
- UV/VIS Spectroscopy
- Raman Spectroscopy

1- در قسمت *Search Field* کلیدواژه *Point* را وارد کنید.

Reaxys®

Quick search [Query builder](#) Results Retrosynthesis History

Search in: Reactions > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all

Current Patent Assignee Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Drag & Drop to build a new query

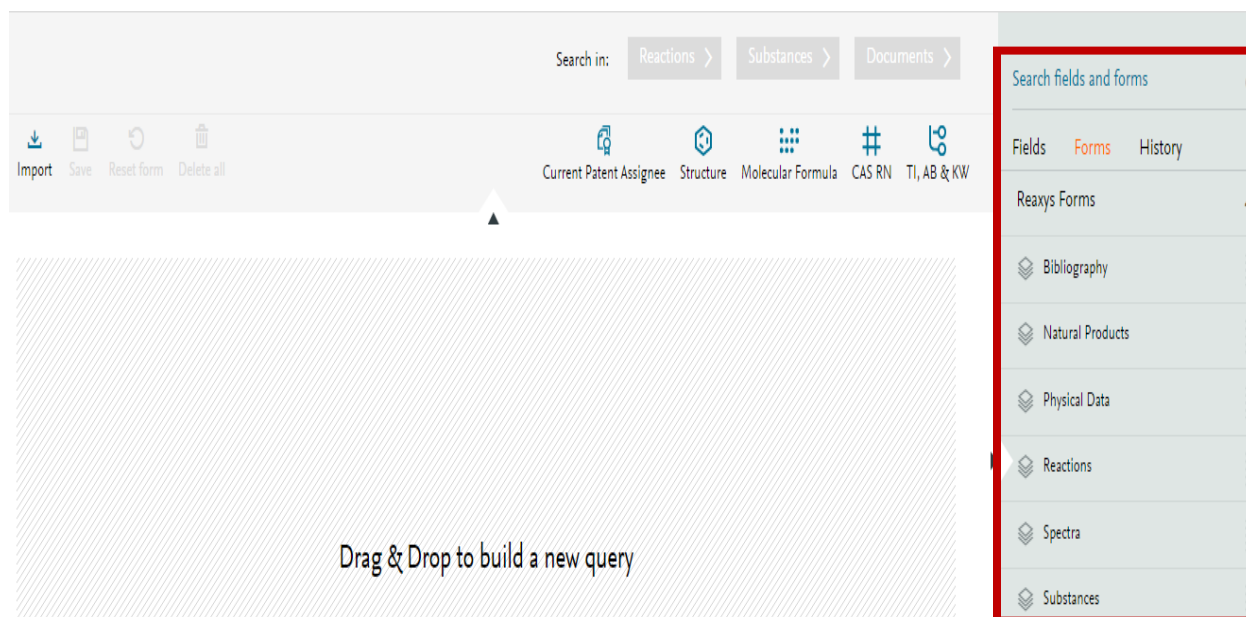
Search fields

point

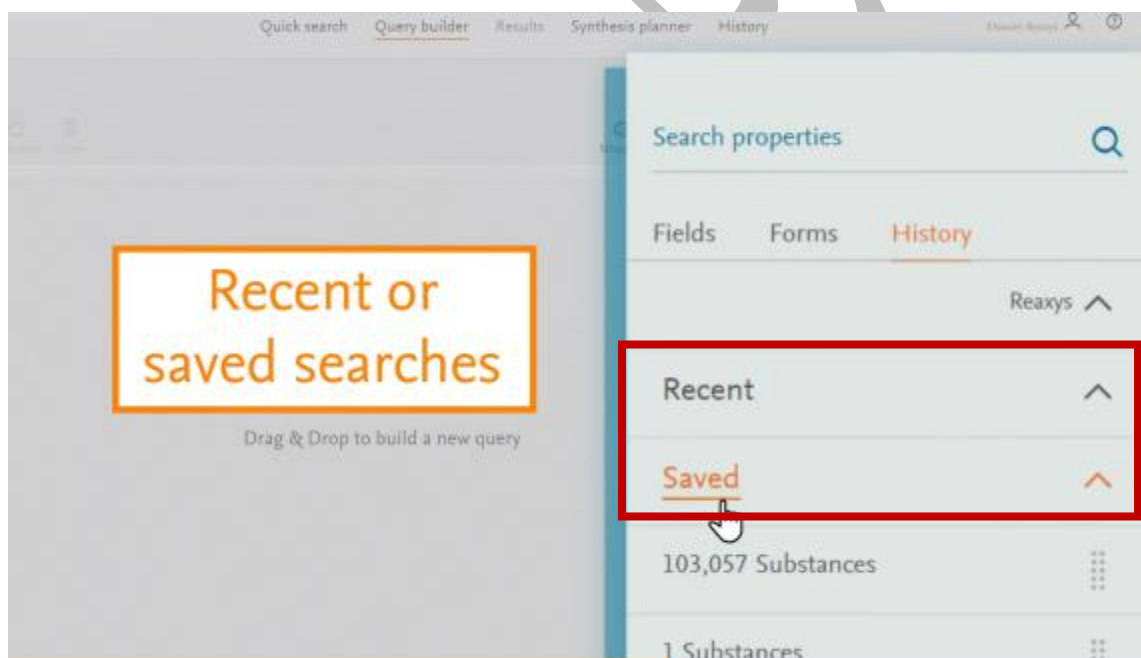
Reaxys ^

- Melting Point
- Boiling Point
- Flash Point
- Isoelectric Point pH
- Transition Point(s) of Crystalline Modification(s)
- Transition Point(s) of Liquid Modification(s)
- Triple Point
- Endpoint of Effect (PharmData)

2- در قسمت *Forms* می‌توانید از *Predfined Form* (فرم‌های از پیش تعریف شده) استفاده کنید.



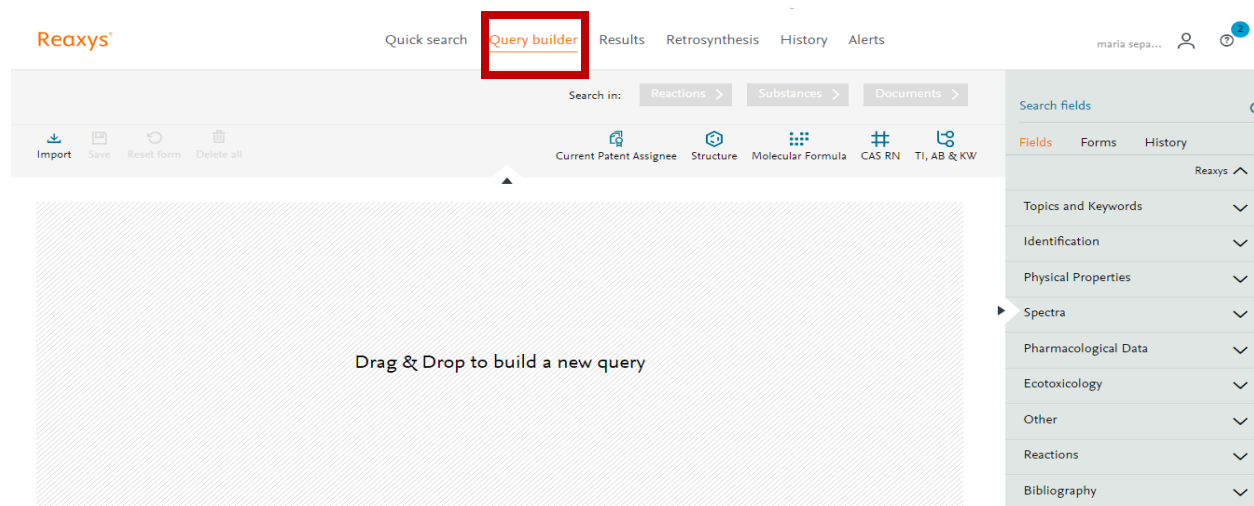
History -3: در این قسمت شما می‌توانید از جستجوهای اخیر یا ذخیره شده استفاده کنید.



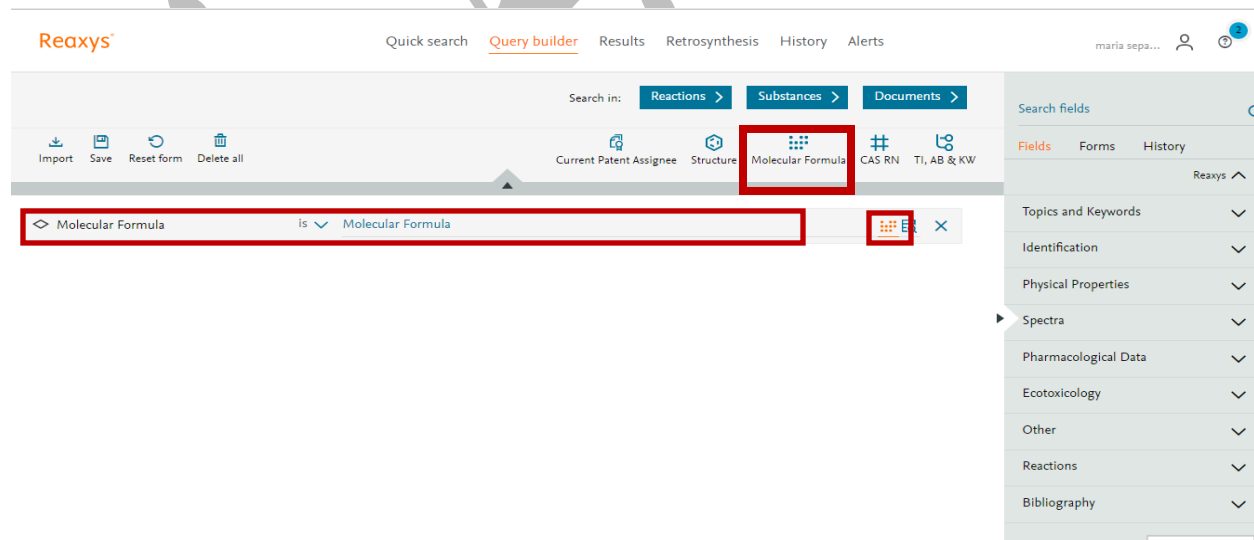
چگونه یک جستجو با استفاده از *Query builder* انجام دهیم؟


برای مثال ما علاقمند به یافتن اطلاعاتی در مورد *Polychlorinated biphenyls* هستیم. آنها به عنوان مواد حیاتی برای محیط زیست شناخته می شوند. آنها بسیار پایدار هستند و در شرایط عادی به سختی تخریب می شوند. ما بی فنیل های کلردار (*chlorinated biphenyls*) را جستجو می کنیم و بررسی می کنیم که چه چیزی در مورد تجزیه آنها توسط فوتولیز گزارش شده است.

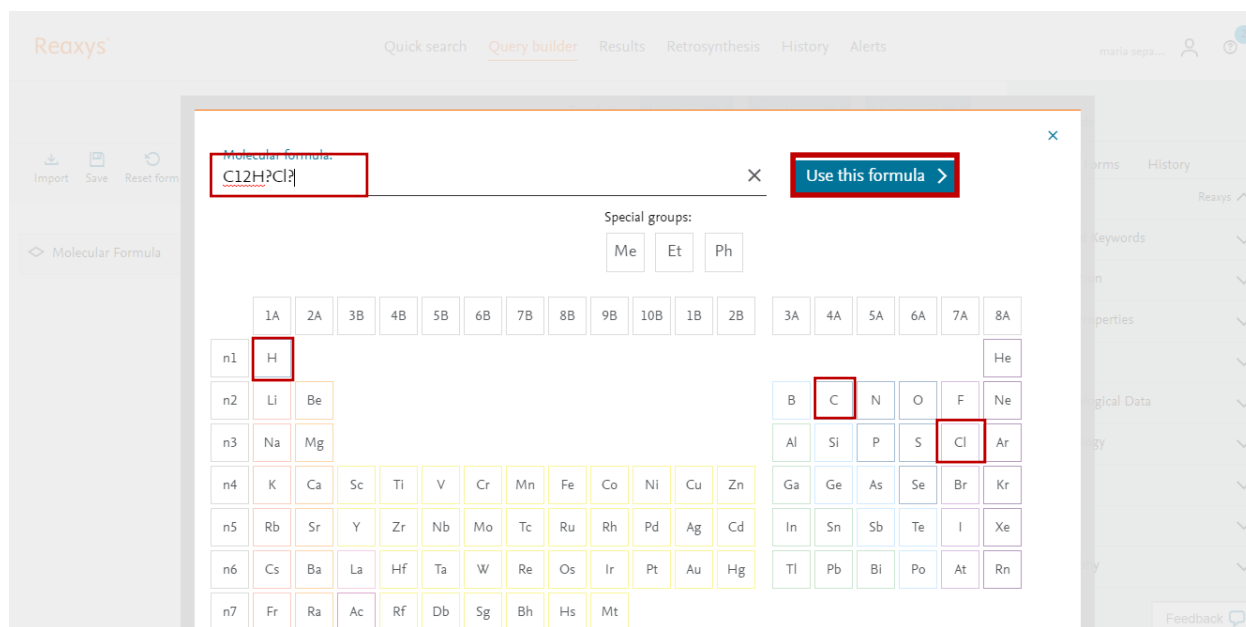
در صفحه اصلی *Reaxys*، روی *Query builder* کلیک نمایید.



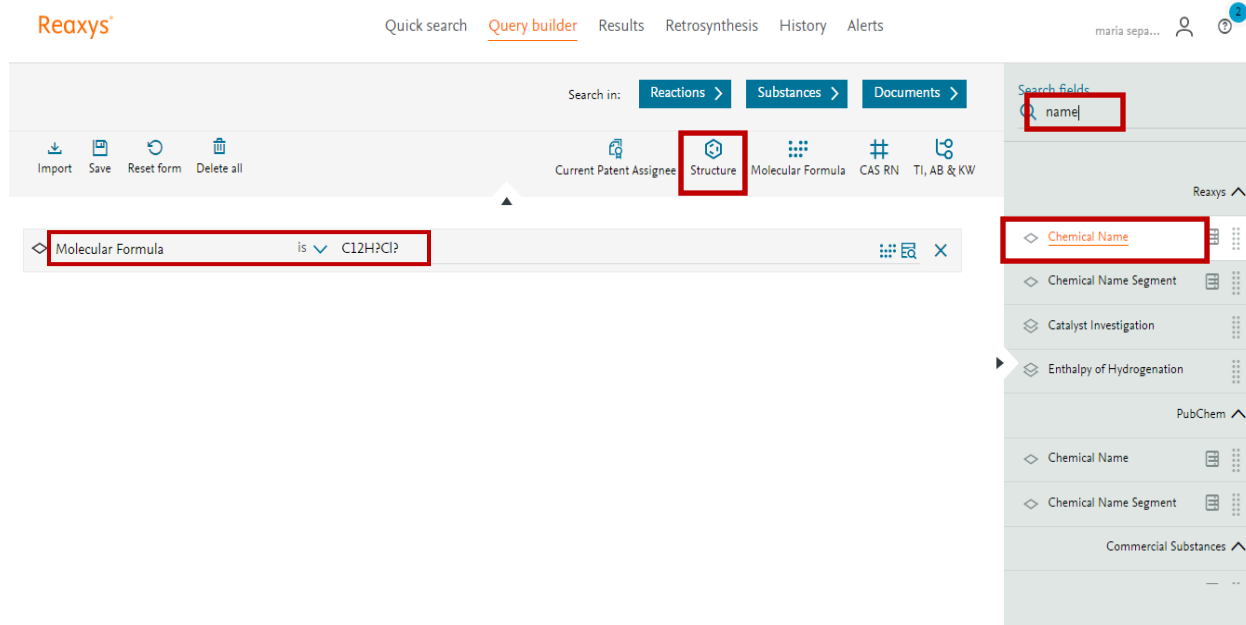
در قسمت *Query lets* ها، *Molecular Formula* را انتخاب و روی آن کلیک نمایید که در قسمت پایین ظاهر می شود.



سپس در گوشه سمت راست روی  کلیک نمایید. فرمول مولکولی *Polychlorinated biphenyls* را وارد می‌کنیم.



روی *Use this formula* کلیک نمایید، صفحه زیر باز می‌شود. برای طراحی ساختار، در قسمت *Search field* کلیدواژه *Name* را تایپ کرده، روی *Search* کلیک و *Chemical Name* را انتخاب نمایید.



در قسمت **Chemical Name** ، کلیدواژه ***biphenyl*** را وارد می کنیم. علامت (*) یک نماد برش است و نشان می دهد که نام ماده ممکن است شامل کاراکترها یا عباراتی قبل و بعد از بی فنیل باشد.

Reaxys® Quick search **Query builder** Results Retrosynthesis History Alerts maria sepa... 2

Search in: Reactions > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all Current Patent Assignee Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Molecular Formula is C12H?Cl?

AND Chemical Name is *biphenyl*

Search fields: name

Reaxys ^

- Chemical Name
- Chemical Name Segment
- Catalyst Investigation
- Enthalpy of Hydrogenation

PubChem ^

- Chemical Name
- Chemical Name Segment

Commercial Substances ^

در قسمت **Search field** ، به جای **Name** ، کلیدواژه **degradation** را جایگزین و روی **Search** کلیک نمایید. سپس گزینه **Abiotic Degradation, Photolysis** را انتخاب نمایید.

Reaxys® Quick search **Query builder** Results Retrosynthesis History Alerts maria sepa... 2

Search in: Reactions > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all Current Patent Assignee Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Molecular Formula is C12H?Cl?

AND Chemical Name is *biphenyl*

Search field: degradation

Reaxys ^

- Biodegradation
- Abiotic Degradation, Hydrolysis
- Abiotic Degradation, Photolysis

با کلیک بر روی *Abiotic Degradation, Photolysis* در قسمت سوال پژوهشی ظاهر می‌شود. سپس گزینه *Find any* (فقط موادی که حاوی اطلاعاتی در این زمینه هستند) را انتخاب نمایید. عملگر بولی که در این جستجو مورد استفاده قرار می‌گیرد عملگر *AND* است. که کاربرد عملگرهای بولی و مجاورتی این است که با ترکیب فیلدها از طریق این عملگرها می‌توانید جستجوهای پیچیده ایجاد کنید.

Search in: Reactions > **Substances** > Documents >

Search fields: degradation

Import Save Reset form Delete all

Current Patent Assignee Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

Reaxys

Biodegradation

Abiotic Degradation, Hydrolysis

Abiotic Degradation, Photolysis

Molecular Formula is C12H2Cl6

Chemical Name is *biphenyl*

Abiotic Degradation, ... **Find any** Show fields (Type...Method, Remarks)

و در نهایت با کلیک بر روی *Substances* صفحه نتایج برای شما ظاهر می‌شود.

102 Filters

Limit to > Exclude >

By Structure

Substances Classes

Molecular Weight

Number of Fragments

Availability

Availability in other databases

Available Data

Document Type

Publication Year

LogP

H Bond Donors

H Bond Acceptors

Abiotic Degradation, Photolysis - 13 hits out of 13

2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl
C12H2Cl6 360.882 2508233 35065-28-

Hit Data - 10 Spectra - 12

Identification Bioactivity - 190

Druglikeness Other Data - 2,312

Physical Data - 38

Preparations - 4 >

Reactions - 5 >

Documents - 944 >

Hit Data - 10

Abiotic Degradation, Photolysis - 10 hits out of 10

2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl
(C6H3Cl2)2 291.992 2053828 35693-99-3

Hit Data - 14 Spectra - 29

Identification Bioactivity - 174

Preparations - 16 >

Reactions - 21 >

Documents - 937 >

نحوه ایجاد و طراحی یک ساختار (*Structure drawing*) در *Reaxys*

هنگام جستجوی پاسخ‌های شیمی خود، گاهی اوقات لازم است یک ساختار یا نقاشی از واکنش ایجاد کنید. برای ایجاد و طراحی ساختار، روی **Draw** کلیک کنید.

The screenshot shows the Reaxys website interface. At the top left is the Reaxys logo. To the right of the logo are user profile icons and a search icon. Below the logo is a navigation menu with links: Quick search, Query builder, Results, Retrosynthesis, History, and Alerts. The main header area contains the text "Search substances, reactions and documents" and "Import" with a download icon. Below this is a search bar labeled "Search Reaxys" with a "Find >" button. Underneath the search bar, it says "Reactions, e.g. phosphorylation" and "AND". A red box highlights a button with a pencil icon and the text "Draw". Below the search bar is a content overview section with statistics: 261M Substances, 58M Reactions, 97M Documents, 33M Patents, and 42M Bioactivities. The latest update is dated 14. June 2022.

که ویرایشگر ساختار *MarvinJS* را باز می‌کند.

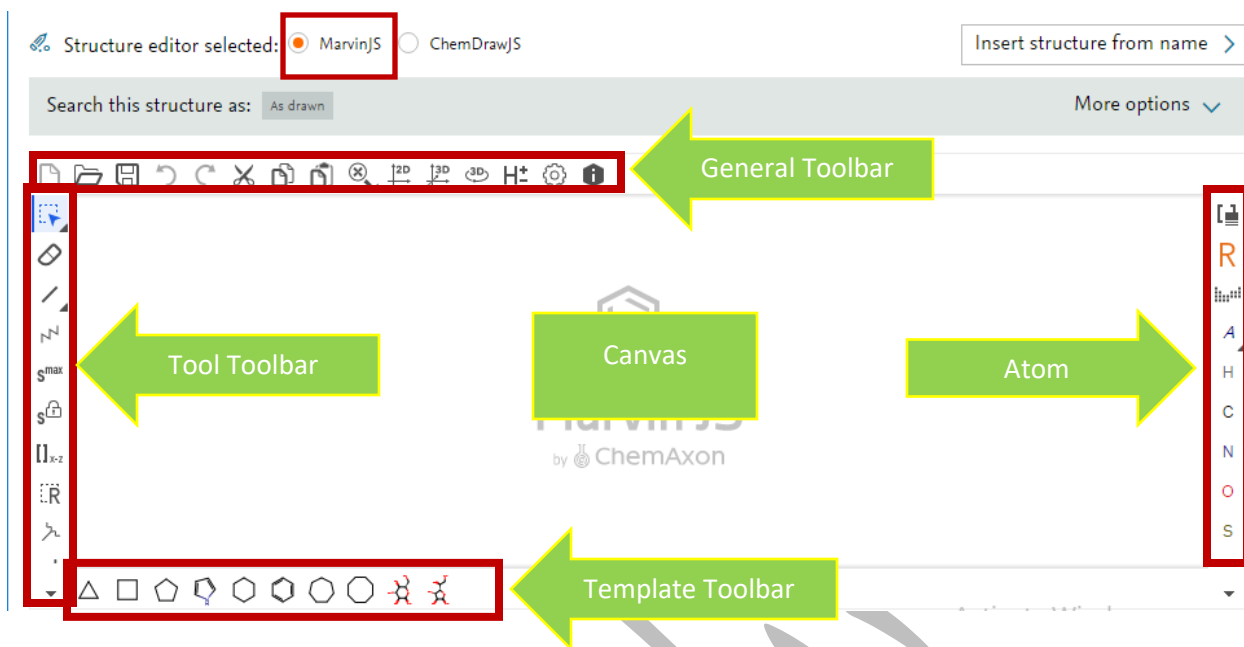
در این صفحه، در امتداد بالا نوار ابزار *General Toolbar* قرار داده شده است که از ابزارهایی برای مدیریت فایل تشکیل شده است.

نوار ابزار *Tool Toolbar* شامل ابزارهایی برای کشیدن ساختار است.

نوار ابزار *Template Toolbar* شامل ساختارها و عناصر ساختمانی از پیش تعریف شده است.

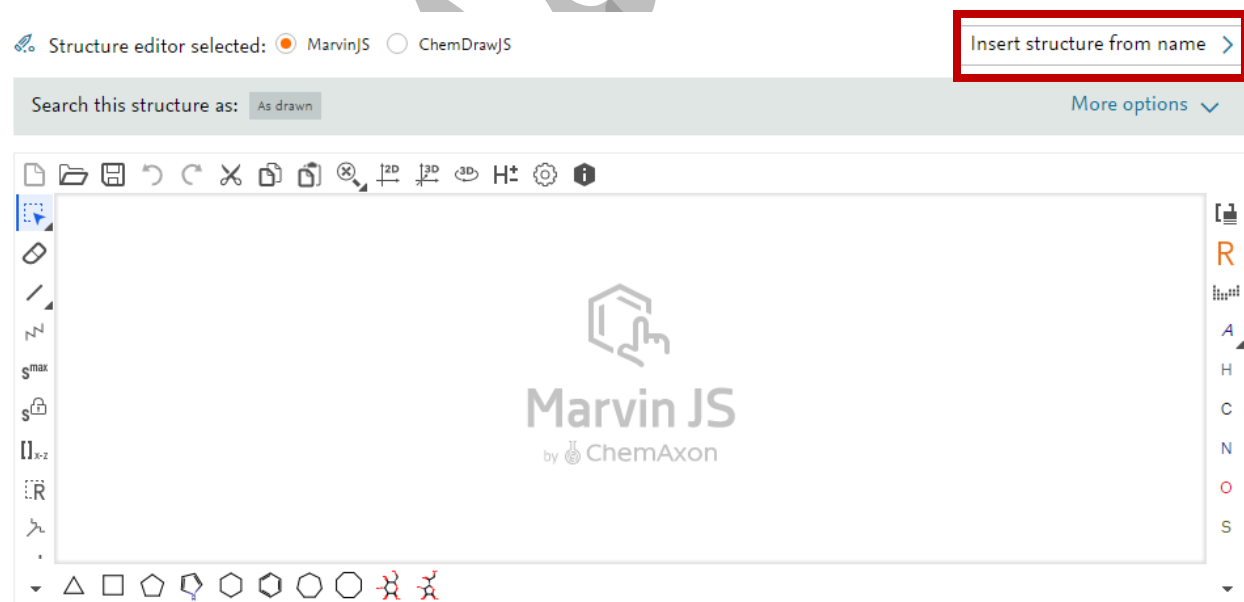
نوار ابزار *Atom* که شامل انواع اتم‌ها است.

و در مرکز *Canvas* است که در آن ساختار خود را می‌سازید.

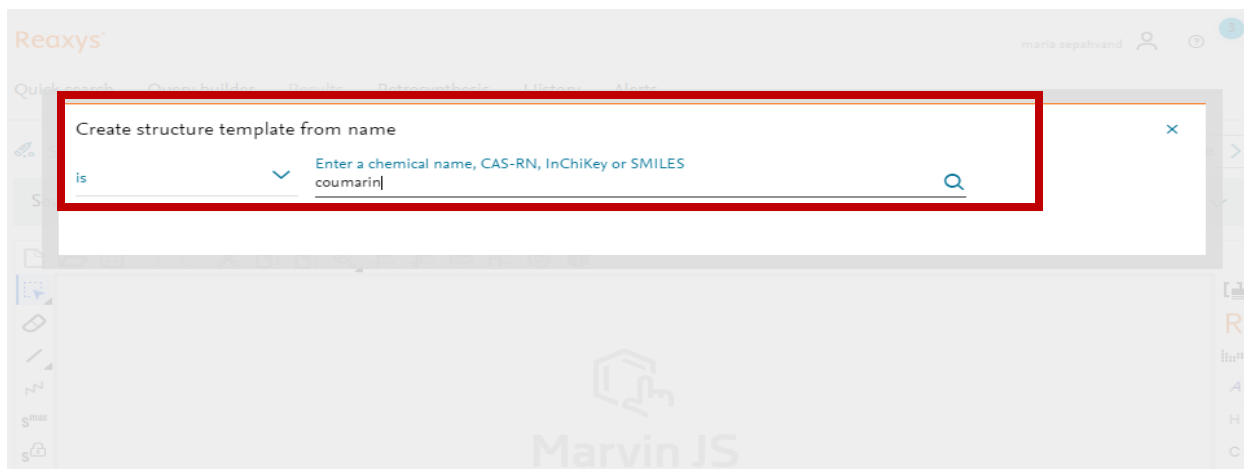


طراحی ساختار از نام یک ماده (*Substance Name*):

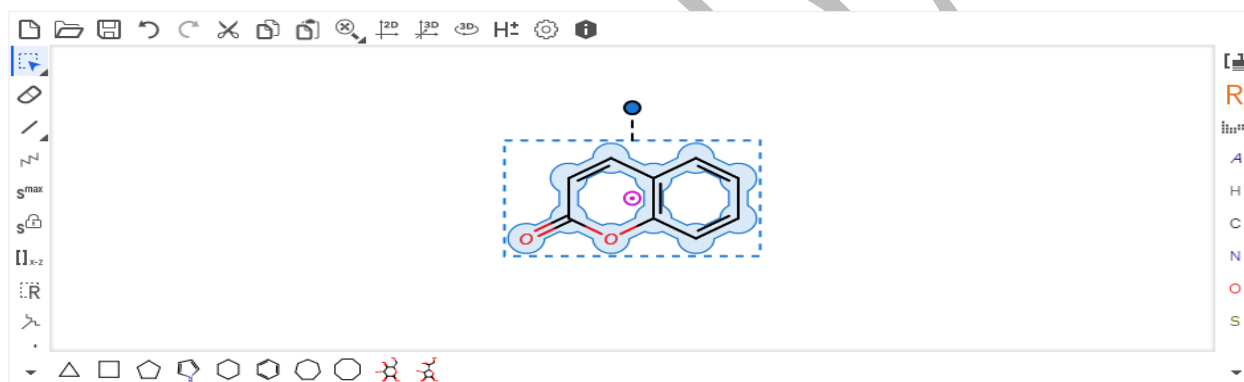
برای مثال از ساختار کومارین (*Coumarin*) استفاده می‌کنیم. برای انجام این کار، روی ایجاد الگوی ساختار *Draw* و سپس *Insert structure from name* کلیک کنید.



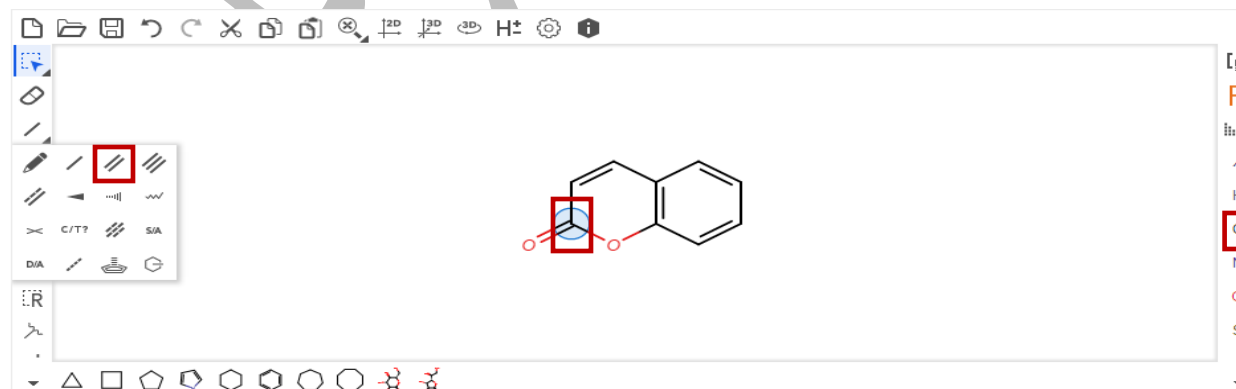
در قسمت *Create structure template from name*، کلیدواژه *Coumarin* را تایپ کنید.



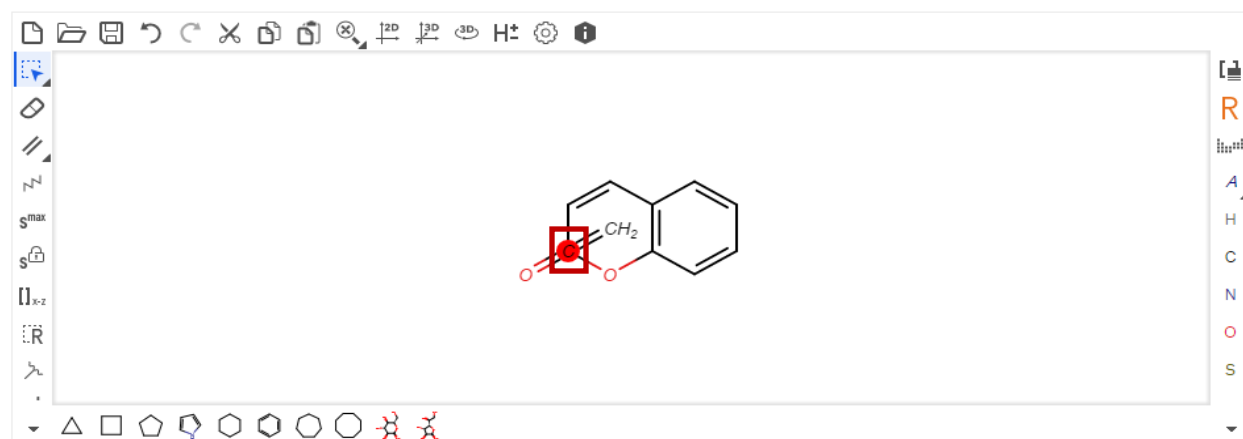
یک اسکلت اساسی برای سازه نمایش داده می شود.



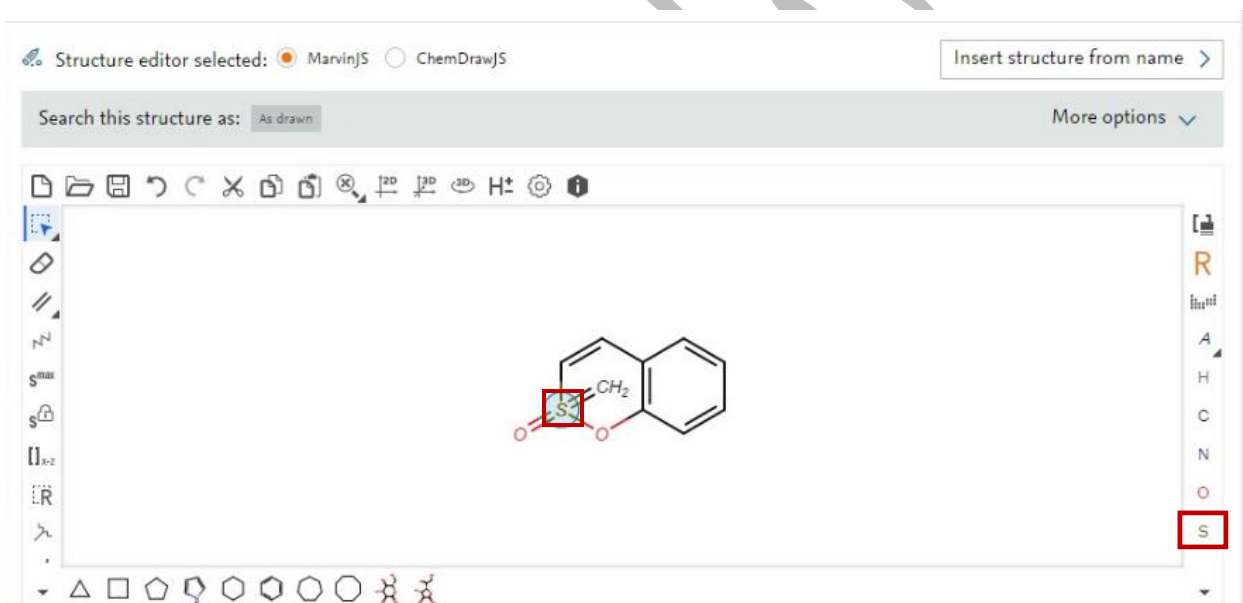
می خواهیم گروه *Carbonyl* را با یک گروه *Sulfonyl* جایگزین کنیم. ابتدا روی ابزار پیوند دو گانه (*Double Bond Tool*) و سپس اتم *C* کلیک کنید.



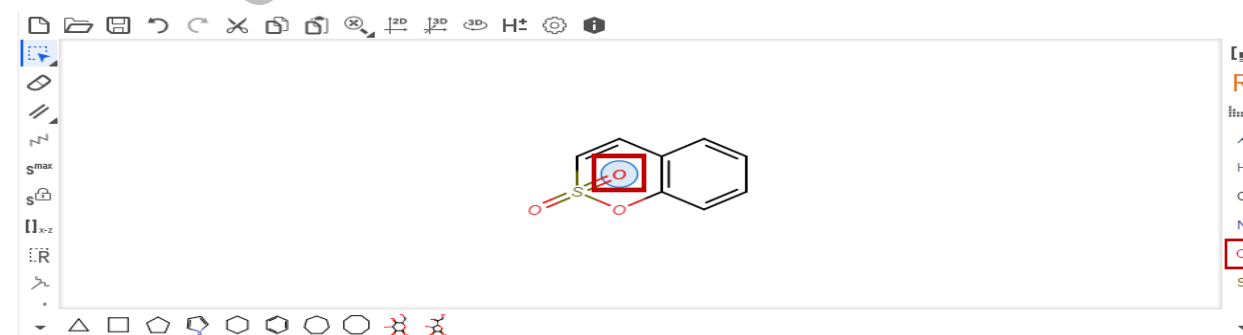
با انجام تغییرات بالا شکل زیر ایجاد می شود.



با کلیک بر روی نماد گوگرد (S) در نوار ابزار سمت راست، اتم کربن را به گوگرد تغییر دهید.

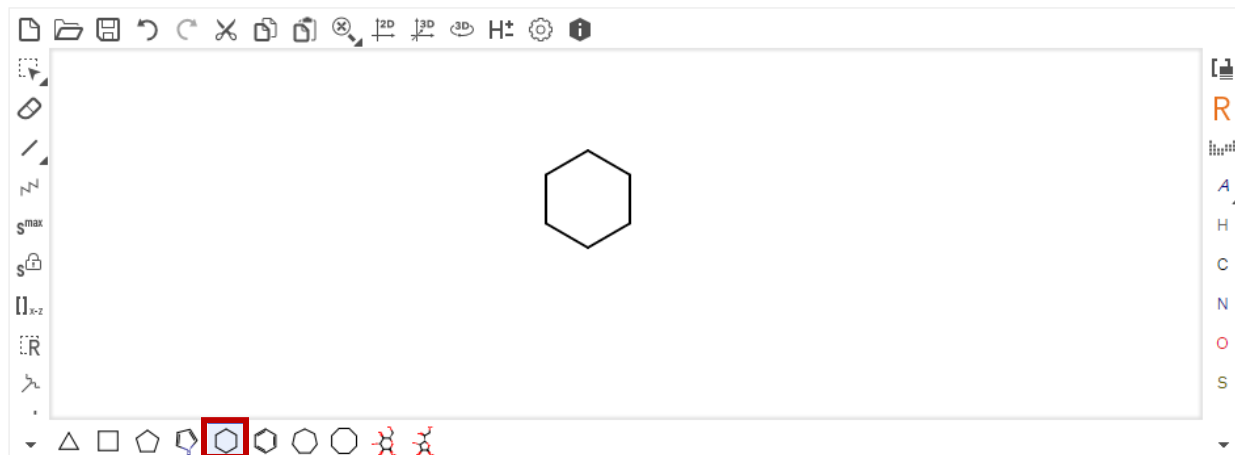


و در نهایت از اتم کربن تغییرات متیلن (CH2) به اکسیژن (O) حاصل می شود.

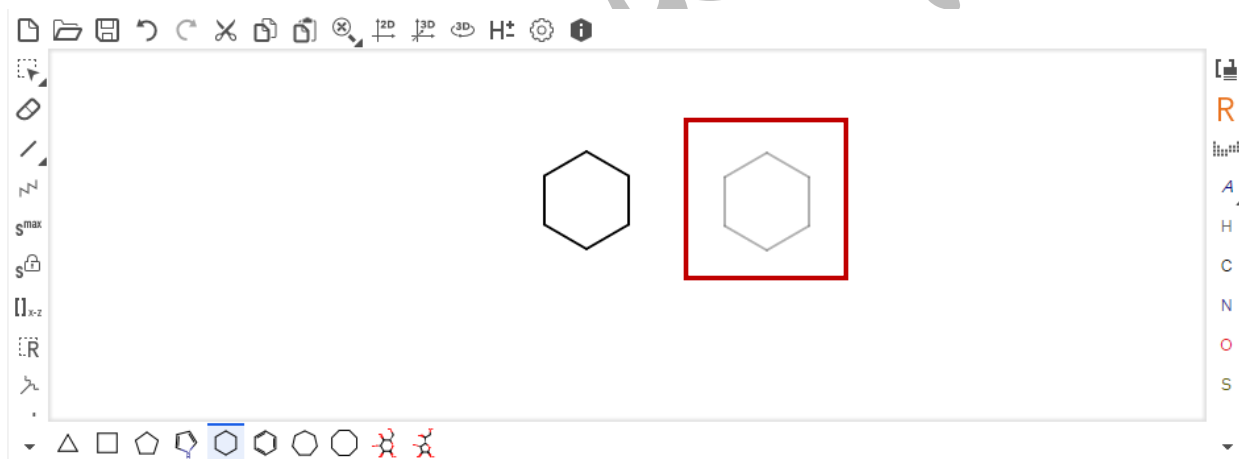


چگونگی طراحی ساختار با *Scratch* :

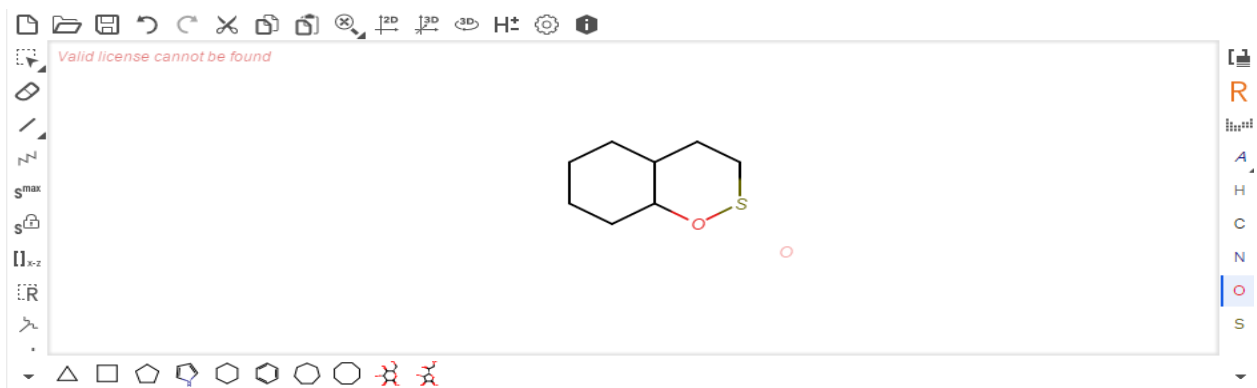
از نوار ابزار الگو *Template* سیکلو هگزان (*Cyclohexane*) را انتخاب کنید. برای قرار دادن قالب ساختار روی *Canvas* نیز *MarvinJS* را انتخاب نمایید.



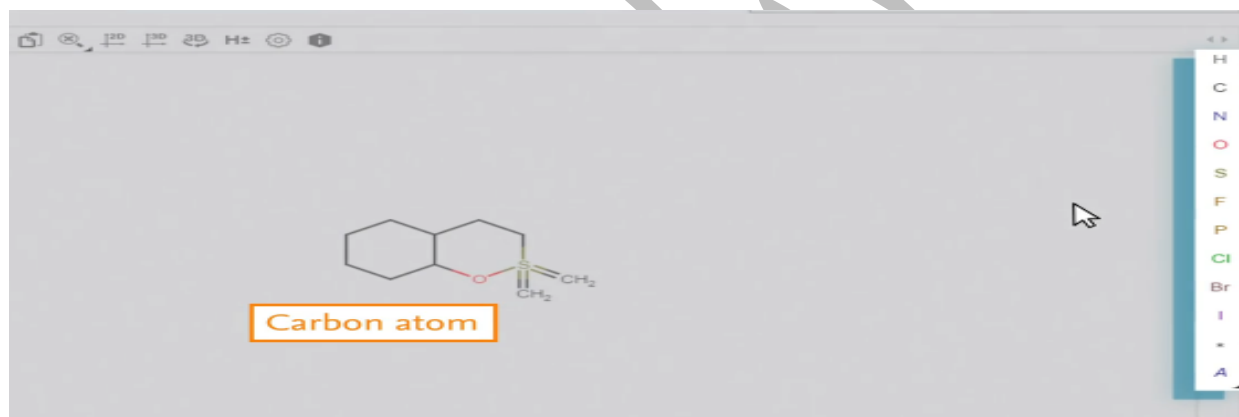
برای اضافه کردن یک الگوی دوم به قالب موجود با یک کلیک و کشیدن روی *Canvas* یک ساختار خاکستری برای نشان دادن موقعیت قالب جدید ظاهر می‌شود.



هنگامی که عنصر زیرساختی کشیده شده و به دیگری نزدیک می‌شود یک نور ارغوانی در گوشه‌های اتم ظاهر می‌شود. با رها کردن دکمه ماوس، این دو پیوند به طور خودکار با هم ادغام می‌شوند. در اینجا یک اتم گوگرد (*S*) با کلیک کردن روی نماد گوگرد و سپس اتم اضافه کنید و سپس یک اتم اکسیژن (*O*) را نیز اضافه کنید.



برای انجام این کار دوبار روی ابزار تک پیوند و اتم گوگرد کلیک کنید. این کار دو پیوند منفرد ایجاد می کند. در حالیکه پیوندهای واحد ایجاد شده اند دوباره روی پیوندهای واحد تازه ایجاد شده کلیک کنید، تا آنها را به عنوان پیوندهای دو گانه تعریف کنیم.



در نهایت اتم های کربن هر گروه متیلن از اتم ها را به اکسیژن تغییر دهید.

