

COMPAGNIE ALGERIENNE
DE DOCUMENTATION
ET DE CONSEIL

Bases de données.Livres.Revues.Traités.Normes

partenaire du



Guide d'utilisation de la base de données : Reaxys



Adresse: Rue la flanelle, cité Ain ullah Dely brahim
Tél: (021) 91 03 52, Mob: (0770) 87 66 38, Fax: (021) 91 03 51
E-mail: cadoc@cadoc.dz site: www.cadoc.dz

REAXYS en quelques mots

Accéder à REAXYS

Créer un compte sur REAXYS

- 1- Page d'accueil
- 2- My Settings Mes paramètres
- 3- Créer une structure à partir d'un nom Generate a structure from name
- 4- Dessiner une structure avec l'éditeur de formules
- 5- Onglet de requête lié aux réactions
 - 1- Recherche basée sur l'emploi de formulaires (Form-based Search)
 - 2- Recherche avancée (Advanced Search)
- 6- Résultats – Réactions
 - 1- Vue d'ensemble
 - 2- Onglet des Réactions
 - 3- Onglet des citations
 - 4- Employer les Filtres
 - a- Filtrer par sous structure
 - b- Filtrer par Valeur ou par groupe
 - 5- Output
 - 5- Output aperçu d'un fichier
- 7- Plans de synthèse
Synthesis plans - OUTPUT
- 8- Onglet de requête lié aux Substances et propriétés
 - 1- Recherche basée sur l'emploi de Formulaires (Form-based Search)
 - 2- Recherche avancée (Advanced Search)
- 9- Résultats – Substances et Propriétés
 - 1- Vue d'ensemble
 - 2- Onglet des Substances (table)
 - 3- Onglet des Substances (grille)
 - 4- Onglet des Substances (Citations)
 - 5- Output
- 10- Onglet requête liée à Text, Authors and more
- 11- Résultats - Text, Authors and more : Onglet Citations
- 12- Historique (History)
 - 1- Vue d'ensemble
 - 2- Combinaison de requêtes
- 13- Mes alertes
 - 1- Vue d'ensemble
 - 2- Modification d'une alerte
- 14- Sauvegarde d'une recherche et Rappel d'une recherche sauvegardée
- 15- Liste des établissements ayant un accès par adresse IP à la base de données REAXYS

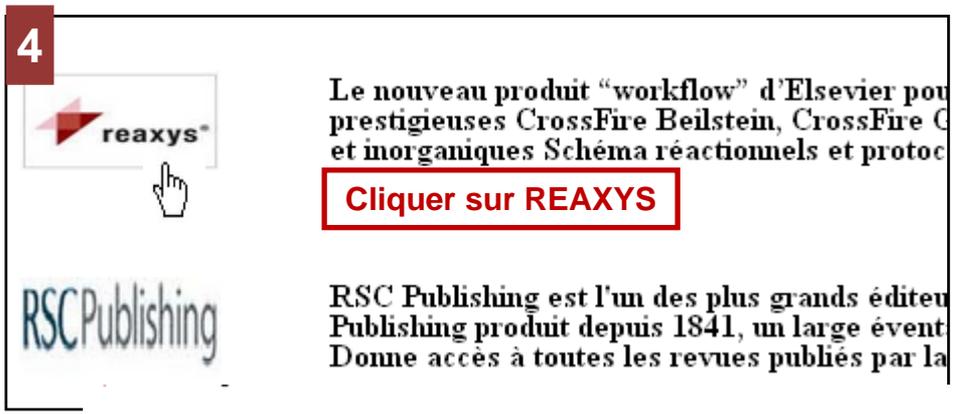
Le nouveau produit de “workflow” d’Elsevier pour les chercheurs en chimie et en sciences regroupe les trois bases de données prestigieuses CrossFire Beilstein, CrossFire Gmelin et la base de données des brevets en chimie à travers une interface unique et intuitive.

- **CrossFire Beilstein** : est une base qui couvre la chimie organique de base depuis 1771 et les publications de brevets datant de 1869 à 1980. Beilstein CrossFire fournit tous les renseignements sur **la chimie organique** dont les chimistes ont besoin pour identifier **les voies de synthèse**, allant des **propriétés physiques des substances** aux **essais** pharmacologiques, toxicologiques et écologiques.
- **CrossFire Gmelin** : c’est la seule base exhaustive et consultable par voie électronique des réactions, des structures, des propriétés et des citations de revues de **chimie inorganique et organométallique**, avec des sources remontant à 1772.
- **La base de données des brevets en chimie (CPD)** : contient l’index et le descriptif expérimental des réactions de chimie organique provenant de brevets de chimie organique et de sciences de la vie publiés depuis 1976. CPD complète CrossFire Beilstein qui ne couvre la littérature de brevets que jusqu’à 1980.

Accéder à REAXYS

A- Accès direct (reconnaissance par adresse IP) Pour démarrer Reaxys, allez sur le site www.reaxys.com ; cet accès est possible sur les campus des institutions de la liste annexée à la fin de ce manuel.

B- Accès via le portail SNDL : <https://www.sndl.cerist.dz>



Vous serez reconnu par l'adresse IP du SNDL

Anonymous user (193.194.64.99)

CREATION D'UN COMPTE sur à REAXYS

Créer un compte sur REAXYS : pour pouvoir utiliser les options avancées de REAXYS telles que la création des alertes et la sauvegarde des recherches. Pour cela, cliquer sur **REGISTER**.

reaxys®

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

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

1 Anonymous user (193.194.64.99)

Query Results Synthesis Plans History My Alerts My Settings Help Info

Welcome to Reaxys Registration

Registration allows you to personalize Reaxys, save History and create Alerts.

User Name: mguebbas*

Title: Mr*

First Name: Mourad*

Last Name: Guebbas*

Email: mguebbas@gmail.com*

Job title: trainer*

Institution: CADOC*

Location: Algiers*

Password: ******

Confirm password: ******

I wish to sign-up to receive product update bulletins and the bi-monthly Reaxys newsletter.

Register

2

1- Remplir le formulaire et cliquer sur **Register**.

2- A votre prochaine visite:
Utiliser votre Username et password pour vous
loguer.(3)

reaxys®

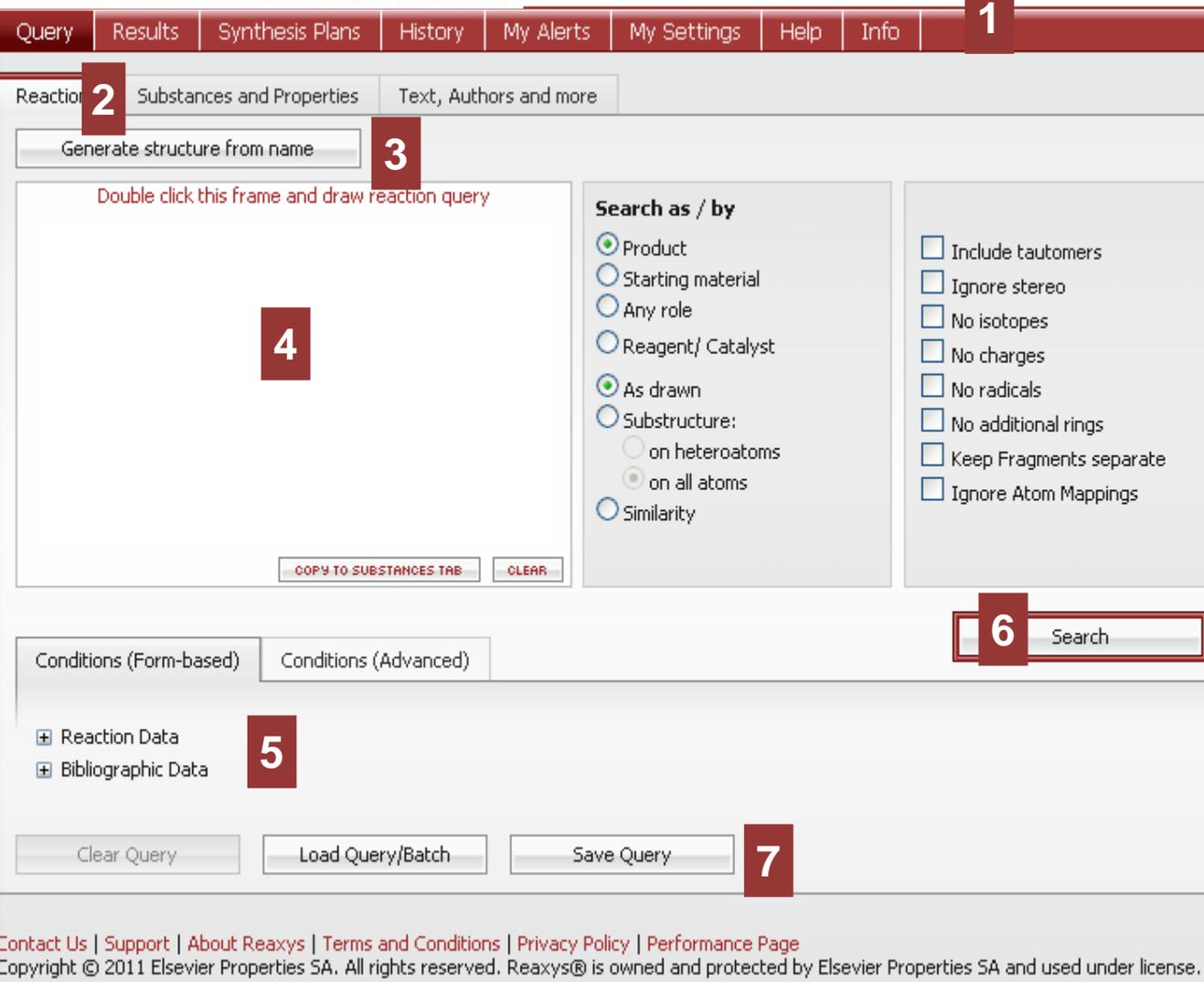
3

Mourad Guebbas (mguebbas) is logged in

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

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

3 Mourad Guebbas (mguebbas) is logged in



The screenshot shows the Reaxys homepage interface with the following numbered callouts:

- 1**: Navigation bar (Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, Info)
- 2**: Tabbed interface (Reaction, Substances and Properties, Text, Authors and more)
- 3**: "Generate structure from name" button
- 4**: Main search area with "Search as / by" options (Product, Starting material, Any role, Reagent/ Catalyst, As drawn, Substructure, Similarity) and checkboxes for search filters (Include tautomers, Ignore stereo, No isotopes, No charges, No radicals, No additional rings, Keep Fragments separate, Ignore Atom Mappings)
- 5**: "Conditions (Form-based)" and "Conditions (Advanced)" tabs, and expandable sections for "Reaction Data" and "Bibliographic Data"
- 6**: "Search" button
- 7**: "Clear Query", "Load Query/Batch", and "Save Query" buttons

1 Barre de navigation

Les menus suivants sont disponibles: Requête (*Query*), Résultats (*Results*), Rétrosynthèses (*Synthesis plans*), Historique (*History*), Mes Alertes (*My Alerts*), Mes Paramètres (*My settings*), Aide (*Help*), Déconnexion (*Logout*).

2 onglets de requête

- Réactions
- Les substances et les propriétés
- Texte, auteurs et plus

3 Générer une structure du nom

Un nom chimique sera traduit dans une structure.

4 Fenêtre de Structure/Réaction

Ajout d'une structure ou d'une réaction, avec également des possibilités supplémentaires de recherche.

5 Ajout de contraintes réactionnelle ou bibliographique

Les onglets *Form-based Search* et *Advanced Search* permettent l'entrée de contraintes réactionnelles ou bibliographiques supplémentaires.

6 Le bouton de recherche

Lancez une recherche.

7 boutons de commande

Effacer, charger ou sauver une requête. Des requêtes en série peuvent également être chargées

2-My Settings Mes paramètres (1)

2 Modify Application Settings

Select your favourite 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

ChemAxon MarvinSketch

Reaxys uses ChemAxon's MarvinSketch as default structure and reaction query editor, if no other editor is selected.

Crossfire Structure Editor

Symyx Draw

Symyx ISIS/Draw

CambridgeSoft ChemDraw

ICEdit

These editors can only be used, if the **Reaxys Structure Editor PlugIn** is installed. 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 results per page

Highlights colors

Structure

Text / Data

Back

Save

1 Menu My settings

Sélectionnez ce menu pour :

- Modifier les paramètres de l'application
- modifier des données personnelles
- Changer le mot de passe

2 Section Modify Application settings

Sélectionnez cette option pour spécifier votre éditeur de dessin préféré et les couleurs employées pour l'accentuation des structures et des textes.

3 Structure editor

Choisissez votre éditeur de dessin préféré..

4 Information

Ce lien permet l'accès aux informations sur les paramètres employés par défaut, et au téléchargement du connecteur à l'éditeur de dessin choisi (plugin).

5 Section Highlights colors

Sélectionnez la couleur employée pour l'accentuation des structures et des textes.

6 Boutons Back & Save

Confirmez vos nouveaux paramètres (save) ou conservez la configuration précédente (Back).

Modify application settings

Structure editor

ChemAxon MarvinSketch

Reaxys uses ChemAxon's MarvinSketch as default structure and reaction query editor, if no other editor is selected.

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

These editors can only be used, if the **Reaxys Structure Editor PlugIn** is installed. 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.

Options d'affichage des structures développées.

Structure display options

Structure display options

Reaction search options

Substance search options

Hits per page

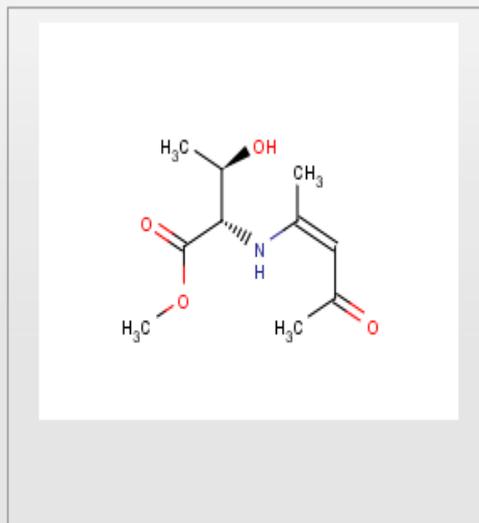
Show

Highlights colors

Structure
Text / Data

Back

Save



Carbon Labels

- Always
- Never
- At straight angles and H atoms

Implicit Hydrogens

- On All
- On Hetero
- On Hetero and Terminal
- Off

Display atom numbers

- On
- Off

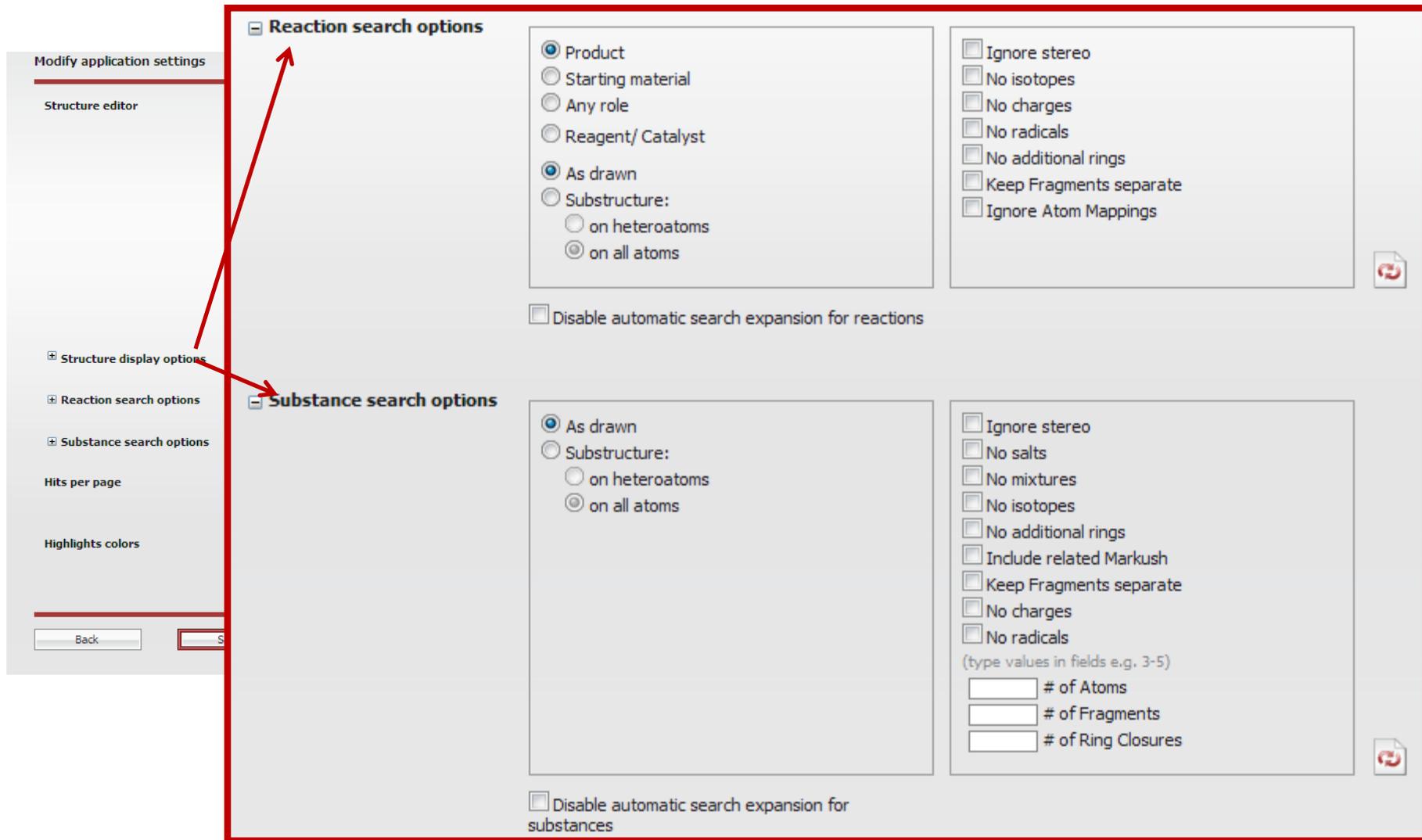
R/S Labels

- On All
- Absolute Stereo
- None

E/Z Labels

- On
- Off

Sélectionner pour votre compte les options d'affichage par défaut.



Reaction search options

- Product
- Starting material
- Any role
- Reagent/ Catalyst
- As drawn
- Substructure:
 - on heteroatoms
 - on all atoms

Ignore stereo

No isotopes

No charges

No radicals

No additional rings

Keep Fragments separate

Ignore Atom Mappings

Disable automatic search expansion for reactions

Substance search options

- As drawn
- Substructure:
 - on heteroatoms
 - on all atoms

Ignore stereo

No salts

No mixtures

No isotopes

No additional rings

Include related Markush

Keep Fragments separate

No charges

No radicals

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

of Atoms

of Fragments

of Ring Closures

Disable automatic search expansion for substances

Sélectionner les options de recherche de réaction ou substance par défaut pour votre compte.

Cette fonctionnalité est disponible sur les menus de requête des Réactions, et des Substances et Propriétés.

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name **1**

Remarque : cette option fonctionne seulement si le composé correspondant est disponible dans la base de données de Reaxys.

Please enter a chemical identifier and then click "Submit" ✕

2-butoxy-1-methyl-4-nitrobenzene **2**

Chemical Name: aspirin
InChI-Key: BSYNRYMUTXBXSQ-WXRBYKJCCW **Submit**
CAS-No: 50-78-2 **Cancel**
Smiles: CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C(O)=O

1 Bouton generate structure from name

Cliquez sur ce bouton pour accéder une forme où entrer les données.

2 Forme d'entrée des données

Tapez un nom chimique tel qu'un nom trivial ou un nom systématique, une clé InChI*, un numéro d'enregistrement CAS** ou un SMILES*** string. Pressez le bouton *Submit* pour créer votre structure.

3 Fenêtre de structure/Réaction

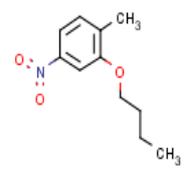
La structure créée est affichée dans cette fenêtre, vous pouvez alors:

- Démarrer immédiatement la recherche.
- Editer la structure par un double click dans la fenêtre (ou par un click droit), et la modifier dans l'éditeur de dessin.
- Définir le type de recherche, ajouter des contraintes en plus et/ou sélectionner des options de recherche supplémentaires.

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name

Double click this frame and draw reaction query



3

By name translation **COPY TO SUBSTANCES TAB** **CLEAR**

Search as / by

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

Include tautomers
 Ignore stereo
 No isotopes
 No charges
 No radicals
 No additional rings
 Keep Fragments separate
 Ignore Atom Mappings

Conditions (Form-based) Conditions (Advanced)

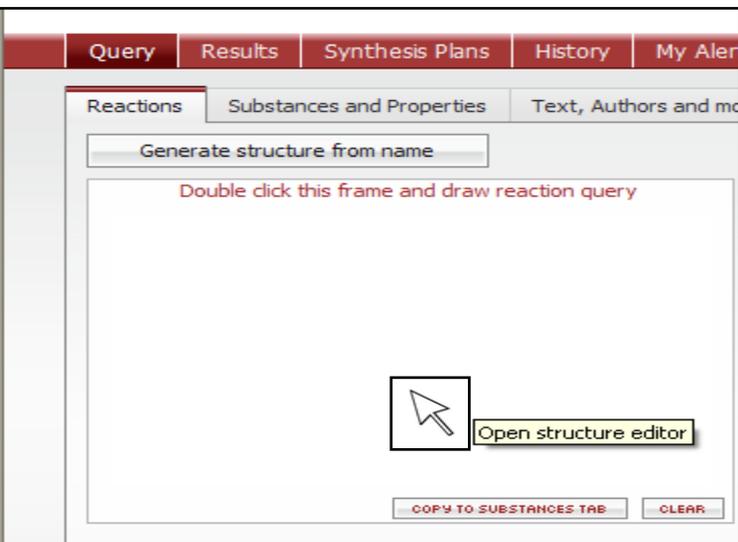
Search

* **Clé Inchi** : IUPAC International Chemical Identifier(InChiKey) : est un identifiant textuel pour les substances chimiques, conçu pour fournir un moyen standard et lisible pour coder les informations moléculaires et de faciliter la recherche de telles informations dans des bases de données et sur le web.

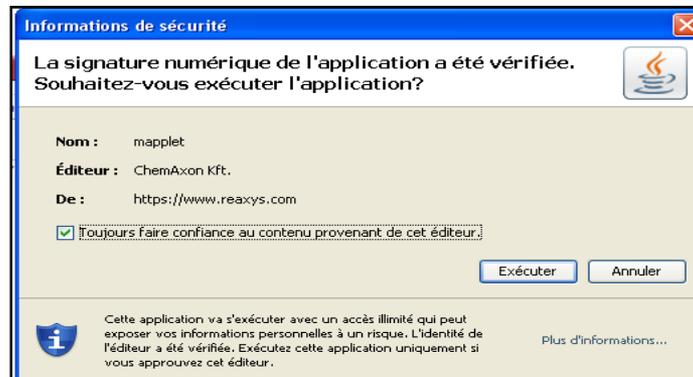
** **Le numéro CAS** (*CAS number* ou *CAS registry number*) d'un produit chimique, est son numéro d'enregistrement unique auprès de la banque de données de Chemical Abstracts Service (CAS), une division de l'American Chemical Society (ACS). Le CAS assigne ces numéros à chaque produit chimique qui a été décrit dans la littérature. le numéro CAS de l'eau est 7732-18-5

*****Le Simplified Molecular Input Line Entry Specification ou SMILES** est un langage symbolique de description de la structure des molécules chimiques sous forme de courtes chaînes de caractères ASCII. Exp : CC(=O)O représente l'acide acétique

1- Double- cliquer à l'intérieur de ce cadre pour lancer l'éditeur



2- lors de votre première utilisation, vous le système vous demandera une autorisation d'exécuter l'application Java de l'éditeur si vous cochez toujours faire confiance au contenu provenant de cet éditeur cette demande ne sera plus faite aux prochaines utilisations.

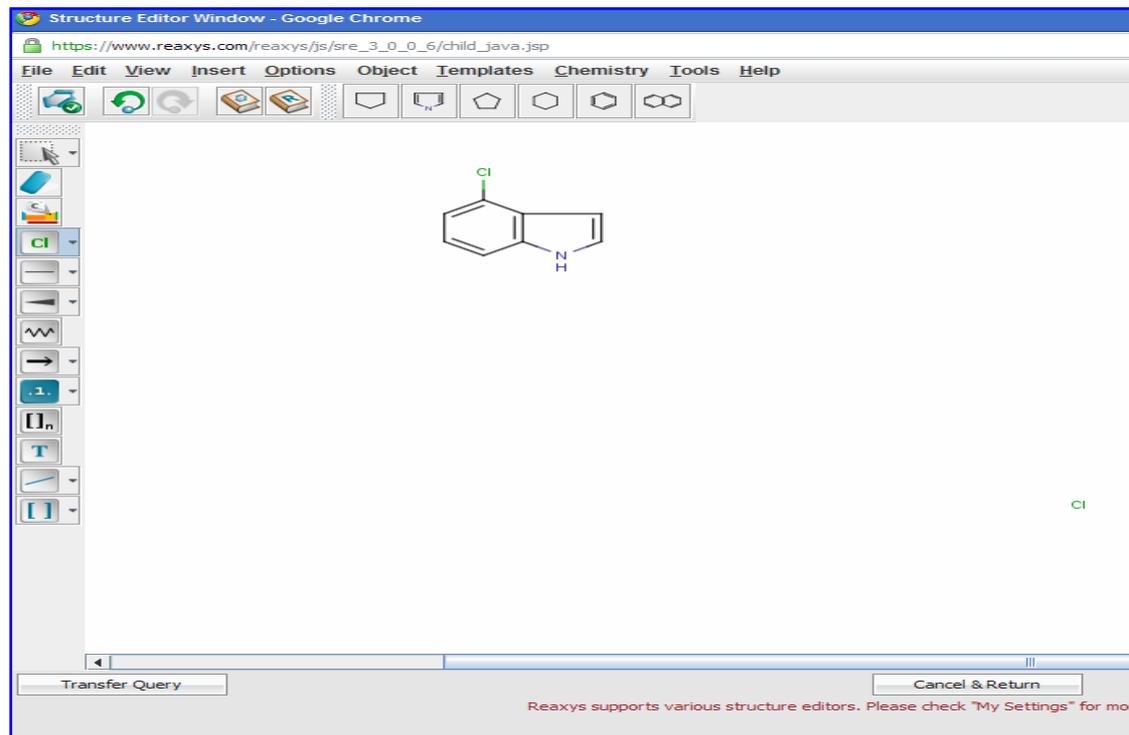


3- la fenêtre de l'éditeur s'affiche et vous pouvez alors éditer la formule chimique du composé que vous recherchez sur Reaxys.

Une fois la formule dessinée, cliquer sur transférer la formule sur la page de recherche de Reaxys.

Note : un guide d'utilisation peut être consulté sur la page suivante :

<http://www.chemaxon.com/marvin/help/sketch/sketch-index.html>



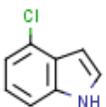
5-Onglet de requête lié aux Réactions

Query Results Synthesis Plans History My Alerts My Settings Help Info

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name

Double click this frame and draw reaction query

1 

By name translation

2 Search as / by

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

3

Include tautomers

Ignore stereo

No isotopes

No charges

No radicals

No additional rings

Keep Fragments separate

Ignore Atom Mappings

4

Conditions (Form-based) Conditions (Advanced)

Reaction Data

Bibliographic Data

5

6

1- Boîte de Structure/réaction

Cette forme contient la structure ou la réaction recherchée. Un bouton permet de copier la structure vers l'onglet des Substances et Propriétés.

2- Fonctionnalité *Search as/by*

Si nécessaire, définir le rôle attribué à la substance.

3- Sélection du type de recherche

Sélectionnez comment la structure sera cherchée: *As drawn* (avec les contraintes incluses dans le dessin) ou *As Substructure* (dans ce cas les résultats contiennent des substituants supplémentaires).

4- Options supplémentaires

Sélectionnez d'autres options pour affiner votre recherche.

5- Ajouter d'autres contraintes

Cliquez les hyperliens *Form-based Search* ou *Advanced Search* afin d'affiner votre requête en ajoutant des contraintes réactionnelles ou bibliographiques (*i.e.* un rendement et/ou un auteur).

6- Bouton Search

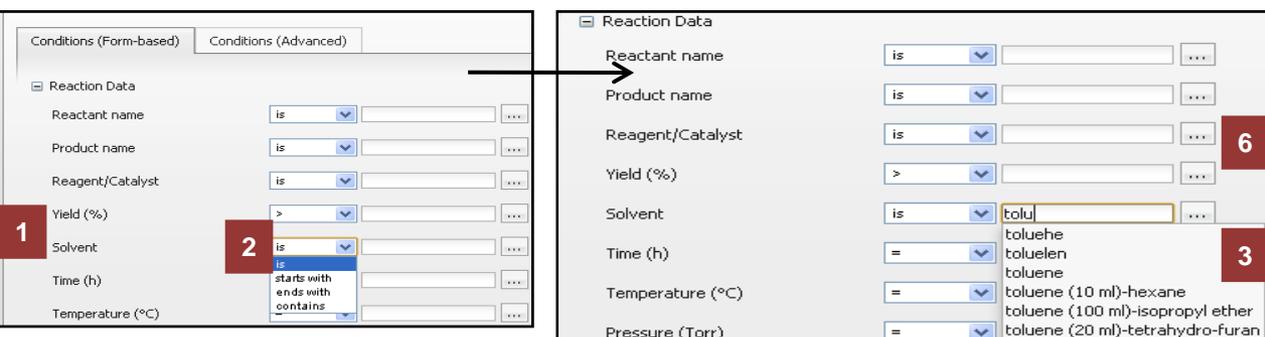
Ce bouton lance la recherche. L'évolution de la recherche s'affiche, vous permettant d'annuler celle-ci ou d'afficher les résultats trouvés

5- Onglet de requête lié aux réactions

Recherche basée sur l'emploi de formulaires

1- Form-based Search

le menu *Form-based Search* permet d'accéder aux champs les plus couramment utilisés en fonction de la recherche effectuée; ces champs sont groupés en données réactionnelles (telles le rendement ou le nom d'un réactif) et en données bibliographiques (telles le nom d'un journal ou le dépositaire d'un brevet). Les champs "All Reaction fields" et "Title/Abstract/Keywords" sont des champs de texte, où vous utiliserez les opérateurs Booléens.



1- Données réactionnelles

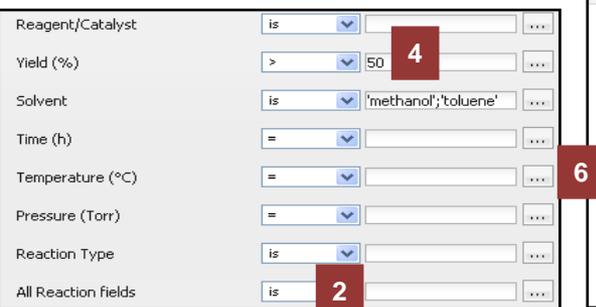
Spécifiez les champs Reactant name, Product name, Reagent, Yield et/ou All Reactions fields. Des champs différents sont combinés avec l'opérateur Booléen ET.

2- Opérateurs

L'opérateur approprié sera choisi à l'aide du menu déroulant.

3- Liste de données

Dès qu'une donnée est tapée, une liste de sélections apparaît.



Select index items and click 'Transfer'

Search for: methan

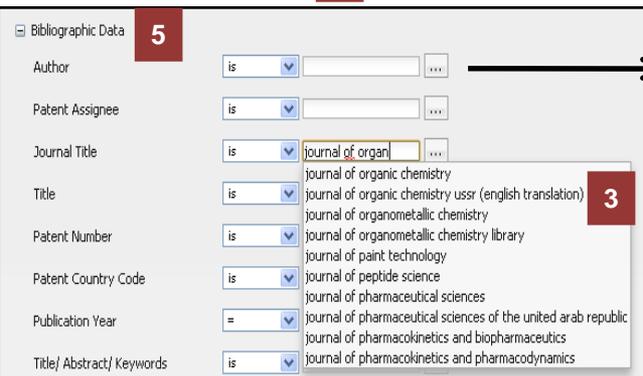
- methanogenic culture (4)
- methanogenic reductive dechlorinating bacterial
- methanoic acid (1)
- methanol (383460)
- methanol * triethylamin (12)
- methanol clusters (1)
- methanol hydrochloric acid (1)
- methanol or dild. acetic acid (1)
- methanol or ethanol (3)
- methanol or ethanol or 1-propanol or 1-butanol (1)
- methanol or ethanol or 2-propanol or nachoo (1)
- methanol or ethanol or n-propanol or acetone (1)
- methanol or ethanol or nacl (1)
- methanol or ethanol or oxalic acid (2)
- methanol or ethanol or propanol (2)

4- Champ numérique

Dans un champ numérique, sélectionnez l'opérateur et tapez ensuite la valeur dans la boîte disponible.

5- Donnée Bibliographique

Spécifiez les champs *Authors*, *Patent Assignee*, *Journal Title*, *Title*, *Patent Number*, *Patent Country Code*, *Publi-cation Year* et/ou *Title/Abstract/Key-words*. Des champs différents sont combinés avec l'opérateur Booléen ET.



Select index items and click 'Transfer'

Search for: trost

- trost (97)
- trost b. (1)
- trost b.m. (29)
- trost et al. (21)
- trost, andrea (1)
- trost, andreas (1)
- trost, b. m. (6)
- trost, barry (1)
- trost, barry m. (863)
- trost, barry martin (1)
- trost, barry, martin (1)
- trost, bary m. (1)
- trost, baryy m. (1)

6- Accéder à l'index

Le bouton permet l'accès à l'index où diverses sélections peuvent être faites. Le bouton Transfer ajoute des données à la requête.

5- Onglet de requête lié aux réactions

Recherche avancée 2- Advanced Search

la forme **Advanced Search** permet la création de requêtes complexes et sophistiquées, mêlant propriétés et structure chimique ou réactionnelle; elle peut être employée de deux façons:

1. Tapez directement votre requête dans la case disponible, en entourant les valeurs attribuées aux champs par des guillemets,
2. Ou sélectionnez les valeurs pour chaque champ dans la liste hiérarchisée.

1

Check Syntax

RX.RCT=

SEARCH FOR FIELD

RESET

2

- Reaction Data
- Identification exists
- Physical Data exists
- Spectra exists
- Bioactivity/Ecotox exists
- Use/Application exists
- Natural Product exists
- Quantum Chemical Data
- Bibliographic Data
- Basic Indexes

3

4

Check Syntax

SEARCH FOR FIELD

RESET

Reaction Data

- Reaction
- Reaction ID (RX.ID)
- Reactant XRN (RX.RXRN)
- Reactant (RX.RCT)
- Product XRN (RX.PXRN)
- Product (RX.PRO)
- Number of Reaction Details (RX.NVAR)
- Record Type (RX.RTYP)
- Reaction Details
- Reaction Basic Index

5

Select index items and click 'Transfer'

Search for: phenylam

- phenylamide acenaphthene quinone (1)
- phenylamido(dinitrogen)tetrakis(trimethylphosphine) rhenium(v) (2)
- phenylamine (3)
- phenylamine perchlorate (14)
- phenylamine-nonaborane (1)
- phenylamine; compound with benzene (1)
- phenylamine; compound with cyclohexane (1)
- phenylamine; compound with generic inorganic neutral component
- phenylamine; compound with methoxy-acetic acid (1)
- phenylamine; compound with trifluoro-thioacetic acid (1)
- phenylamino bis(dichlorophosphine oxide) (3)
- phenylamino magnesium bromide (1)
- phenylamino magnesium iodide (1)

Transfer

Reset

Cancel

1- Check Syntax

Vous pouvez saisir les codes de conditions ou Sélectionnez le code du champ nécessaire à l'aide d'une liste hiérarchisée, Si la requête est manuellement entrée, vérifiez-en la syntaxe à l'aide de la commande **check syntax**.

2- Types de champs

Cliquez sur le signe + pour ouvrir la liste des champs nécessaires.

3

and

and

or

proximity

not

near

next

4

Check Syntax

SEARCH FOR FIELD

RESET

Record Type (RX.RTYP)

- Reaction Details
- Reaction Classification (RXD.CL)
- Fulltext of reaction (RXD.TXT)
- Number of Reaction Steps (RXD.STP)
- Product XRN (RXD.YXRN)
- Product (RXD.YPRO)
- Yield (RXD.YD)
- Yield (numerical) (RXD.NYD)
- Yield (optical) (RXD.YDO)
- Number of Stages (RXD.SNR)
- Solvent (RXD.SOL)
- Reagent/Catalyst (RXD.RGTCAT)
- Time_h (RXD.TIM)

5

Select index items and click 'Transfer'

Search for: dma

- dma (183)
- dma (dimethyl acetamide) (2)
- dma (dimethylacetamide) (4)
- dma (dimethylformamide) (1)
- dma (n,n-dimethylacetamide) (1)
- dma (n,n-dimethylaniline) (2)
- dma-dms (1)
- dmac (n,n-dimethylacetamide) (1)
- dmae-(n,n-dimethylaminoethanol) (1)
- dmd (2)
- dme (1)
- dme (1,2-dimethoxyethane) (1)
- dme (60 ml)- h2 n (1)

Transfer

Reset

Cancel

3- Opérateurs

Sélectionnez à l'aide du menu déroulant, l'opération à effectuer (and, or, proximity, not, near, next).

4- accéder à l'index

Le bouton ... permet l'accès à l'index où diverses sélections peuvent être faites.

5- Transférer la donnée choisie

Sélectionnez la (les) valeurs nécessaires pour le champ, et transférez-les dans votre requête à l'aide du bouton **Transfer**.

6- champ d'affichage des codes des conditions:

Les codes s'affichent automatiquement dans ce champ et elles sont liées entre eux par les opérateurs logiques choisis.

6

Conditions (Form-based)

Conditions (Advanced)

RX.RCT = 'phenylamine' AND RXD.SOL = 'dma (dimethyl acetamide)'; 'dma (dimethylacetamide)'; 'dma (dimethylformamide)'; 'dma (n,n-dimethylacetamide)'; 'dma (n,n-dimethylaniline)'; 'dma'

6- Résultats – Réactions

1- Vue d'ensemble

1-Outil de navigation

Un affichage graphique montre l'effet des actions effectuées sur les résultats.

2- Create alert : définir une alerte par rapport à la recherche en cours.

3- Nombre de résultats et nombre des références sources de ces réactions.

4- Onglets des réactions/Citations
L'onglet des réactions s'affiche par défaut; vous pouvez également afficher l'onglet des citations.

5- Menu Filter by

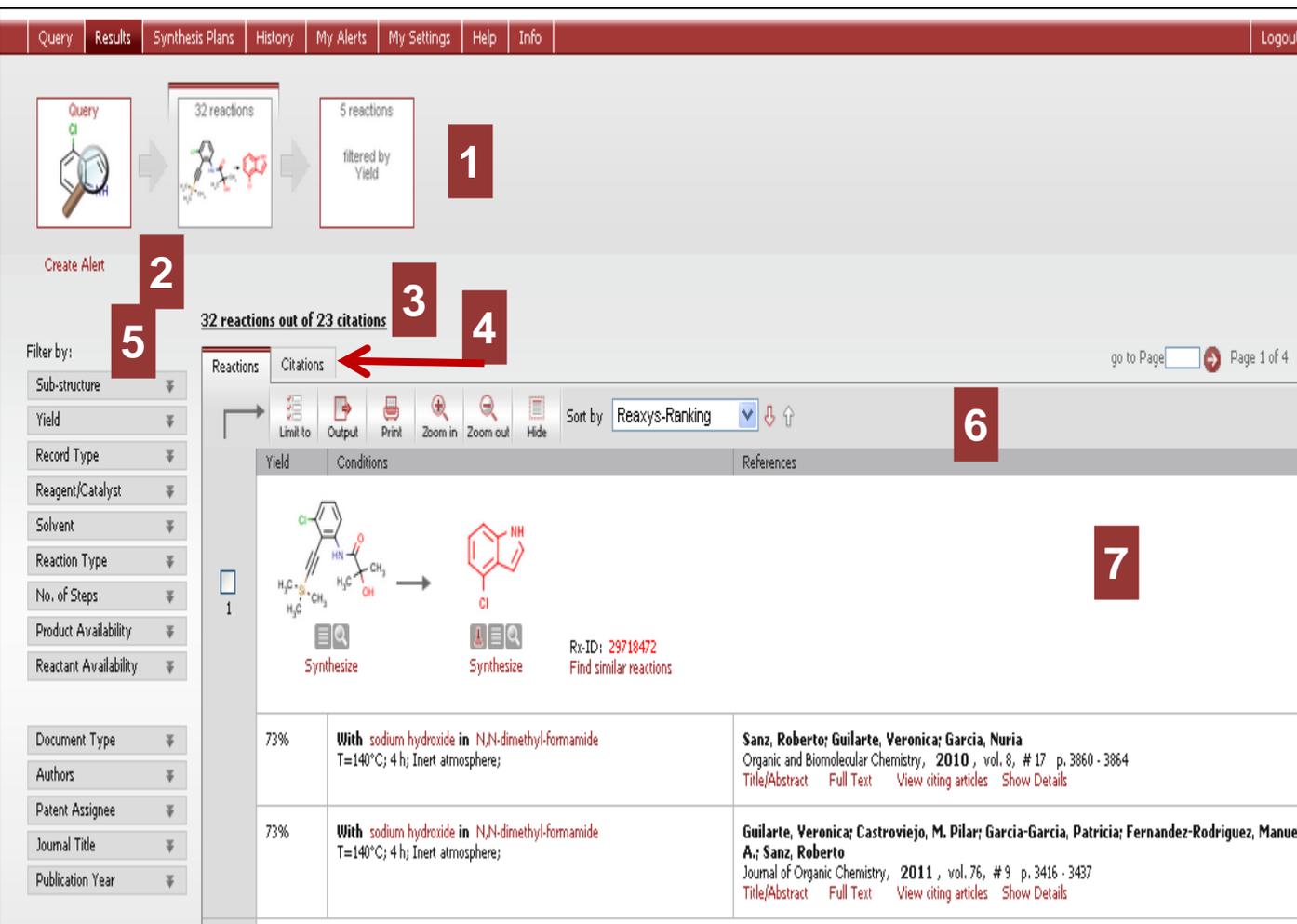
Pour affiner les résultats, utilisez les filtres réactionnels (*Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps*) ou bibliographiques (*Document Type, Authors, Patent Assignee, Journal Title, Publication Year*).

6- Barre d'outils

Accédez aux fonctionnalités *Limit to Selection, Output* et *Sort by* ainsi que *zoom in* et *zoom out*.

7- Résultats-Réactions

Cette table présente un aperçu des réactions trouvées avec leurs propriétés. Elle contient le titre et l'abstract de la référence, ainsi qu'un lien vers le texte original de l'article ou du brevet, et un accès à toute information corrélée issue de Scopus.



32 reactions out of 23 citations

Filter by:

- Sub-structure
- Yield
- Record Type
- Reagent/Catalyst
- Solvent
- Reaction Type
- No. of Steps
- Product Availability
- Reactant Availability
- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Reactions Citations

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide

Sort by Reaxys-Ranking

Yield Conditions References

1

Synthesize Synthesize Rx-ID: 29718472 Find similar reactions

73%	With sodium hydroxide in N,N-dimethyl-formamide T=140°C; 4 h; Inert atmosphere;	Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria Organic and Biomolecular Chemistry, 2010, vol. 8, # 17 p. 3860 - 3864 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
73%	With sodium hydroxide in N,N-dimethyl-formamide T=140°C; 4 h; Inert atmosphere;	Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Garcia-Garcia, Patricia; Fernandez-Rodriguez, Manuel A.; Sanz, Roberto Journal of Organic Chemistry, 2011, vol. 76, # 9 p. 3416 - 3437 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

L'outil de navigation situé en haut de l'écran indique les actions effectuées sur votre set initial de résultats.

Cliquez sur une des boîtes entourées d'une ligne rouge pour accéder à une liste précédente ou à la requête.

6- Résultats – Réactions

2- Onglet des Réactions

Cliquez sur une structure ou sur menu :contenant des informations et des options possibles s'affiche.

32 reactions

Reactions **4** **5** **6**

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide

Sort by Reaxys-Ranking

1 Reaxys-RN: 20661081
 MF: C15H20ClNO2Si
 MW: 309.868
 CAS-RN:
 Show Details
 Copy Structure to Clipboard
 Copy Structure to Query
 Use as Sub-structure Filter
 Copy Reaction to Query

Yield	Conditions	References
73%	With sodium hydroxide in N,N-dimethyl-formamide T=140°C; 4 h; Inert atmosphere;	Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria Organic and Biomolecular Chemistry, 2010, vol. 8, # 17 p. 3860 - 3864 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
73%	With sodium hydroxide in N,N-dimethyl-formamide T=140°C; 4 h; Inert atmosphere;	Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Garcia-Garcia, Patricia; Fernandez-Rodriguez, Manuel A.; Sanz, Roberto Journal of Organic Chemistry, 2011, vol. 76, # 9 p. 3416 - 3437 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

1 Synthesize Synthesize Rr-ID: 29718472 Find similar reactions

2

3

Multi-step reaction with 2 steps 1: 89 percent / CuI; DMF / 0.33 h / 180 °C / 6000.6 - 7500.75 Torr / microwave irradiation 2: 74 percent / Zn; AcOH / methanol; CH ₂ Cl ₂ / Heating View Scheme	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004, vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Multi-step reaction with 2 steps 1: dimethylformamide / 80 h / 110 °C 2: 243.3 g / aq. hydrazine hydrate / tetrahydrofuran; methanol / 10 - 20 °C View Scheme	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000, vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Multi-step reaction with 3 steps 1: DMSO; TritonB / methanol 2: H ₂ / 5percent Pd-C / ethyl acetate 3: 80 percent / RuCl ₂ (PPh) ₃ / toluene / Heating View Scheme	Sakagami, Youji; Manabe, Kan; Aitani, Takayuki; Thiruvikraman, S. V.; Marumo, Shingo Tetrahedron Letters, 1993, vol. 34, # 6 p. 1057 - 1060 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

3 Show All Remaining Details (3)

1- Options et données supplémentaires

Reaxys – RN (N° d'enregistrement Reaxys), MF (formule brute), CAS-RN (N° d'enregistrement CAS), show de-tails (affiche les propriétés), plan a synthesis (créer une rétrosynthèse), copy structure to clipboard (copier la structure).

2- Accès à des détails bibliographiques

Affichage du titre/abstract, accès au texte original de la référence et à Sco-pus. Accès au mode opératoire extrait des brevets. Affichage des étapes des réactions multi-steps dans le menu des plans de synthèse.

3- Disponibilité commerciale

Ces icônes affichent la disponibilité commerciale et les fournisseurs potentiels d'une substance (eMolecules-Symyx ACD).

4- Fonctionnalité Limit to selection

Sélectionnez des hits et cliquez sur ce bouton pour restreindre votre liste.

5- Commande Output

Exportez les données dans un format choisi.

5- Fonctionnalité Sort by

Triez les résultats de façon (dé)croissante en fonction d'un critère

32 reactions out of 23 citations

Reactions Citations go to Page Page 1 of 3

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide Sort by Publication Year

	Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
<input type="checkbox"/> 1	Approaches to the synthesis of 2,3-dihaloanilines. Useful precursors of 4-functionalized-1 H-indoles	Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Garcia-Garcia, Patricia; Fernandez-Rodriguez, Manuel A.; Sanz, Roberto	2011	Journal of Organic Chemistry, 2011 , vol. 76, # 9 p. 3416 - 3437 Full Text View citing articles	3
Title/Abstract Show All Reactions (438) Hit Reactions in this article (8 out of 438) Show All Substances (166)					
<input type="checkbox"/> 2	Synthesis of 4-functionalized-1H-indoles from 2,3-dihalophenols	Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria	2010	Organic and Biomolecular Chemistry, 2010 , vol. 8, # 17 p. 3860 - 3864 Full Text View citing articles	8
Title/Abstract Show All Reactions (59) Hit Reactions in this article (1 out of 59) Show All Substances (77)					
<input type="checkbox"/> 3	Microwave assisted Leimgruber-Batcho reaction for the preparation of indoles, azaindoles and pymoylquinolines	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V.	2004	Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Full Text View citing articles	45

Dans l'onglet citations, les sources bibliographiques sont affichées dans une table donnant le titre du document (article, brevet), les auteurs, l'année de publication ainsi que la source. Une colonne donne également le nombre de citations reçus par l'article (source : SCOPUS).

4- Employer les Filtres

a- Filtrer par sous structure

filtrer par sous structure : les résultats d'une recherche de réactions peuvent être filtrés par rapport à une structure particulière en utilisant :

1- Filtrer by substructure ou alors **2-** use as substructure filter dans le menu d'informations supplémentaires

3- limit to ou exclude .

Une fenêtre de recherche s'ouvre et on peut alors limiter les résultats à cette structure ou l'exclure en choisissant également le rôle de cette substance.

1

Filter by:

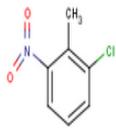
- Sub-structure
- Yield
- Record Type
- Reagent/Catalyst
- Solvent
- Reaction Type
- No. of Steps
- Product Availability
- Reactant Availability

- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Filter by Sub-structure

Generate structure from name

Double click this frame and draw reaction query



Search as / by

- Product
- Starting material
- Any role
- Reagent/ Catalyst
- As drawn
- Substructure:
 - on heteroatoms
 - on all atoms

- Include tautomers
- Ignore stereo
- No isotopes
- No charges
- No radicals
- No additional rings
- Keep Fragments separate
- Ignore Atom Mappings

CLEAR

Copy Structure to Query Copy Structure from Query

3 Limit to Exclude Close

Résultats filtrés par rapport à structure

2

Reaxys-RN: 20661081

MF: C15H20ClNO2Si

MW: 309.868

CAS-RN:

Show Details

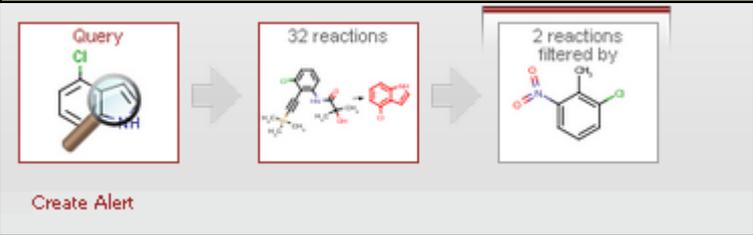
Copy Structure to Clipboard

Copy Structure to Query

Use as Sub-structure Filter

Copy Reaction to Query

Effet du filtre /structure sur les résultats d'une requête.



2 reactions out of 7 citations

Reactions Citations

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide Sort by Reaxys-Ranking

Yield	Conditions	References
		Rx-ID: 13598211
	Multi-step reaction with 2 steps 1: 99 percent / CuI; DMP; 0.33 h / 180 °C / 6000.6 - 7500.75 Torr / microwave irradiation 2: 74 percent / Zn; AcOH / methanol; CH ₂ Cl ₂ / Heating View Scheme	Siu, Jason; Basendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2, p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
	Multi-step reaction with 2 steps 1: dimethylformamide / 90 h / 110 °C 2: 243.3 g / as; hydrazine hydrate; tetrahydrofuran; methanol / 10 - 20 °C View Scheme	Katayama, Masato BioScience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4, p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
	Multi-step reaction with 3 steps 1: DMSO; Triton B / methanol 2: H ₂ / 5 percent Pd-C / ethyl acetate 3: 80 percent / RuCl ₂ (PPh ₃) ₃ / toluene / Heating View Scheme	Sakagami, Youji; Manabe, Kan; Aitani, Takayuki; Thiruvikraman, S. V.; Marumo, Shingo Tetrahedron Letters, 1993 , vol. 34, # 6, p. 1057 - 1060 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Show All Remaining Details (3)		
		Rx-ID: 1855314
	Multi-step reaction with 2 steps 1: 1) Triton B, 2) Zn, CaCl ₂ / 1) Me ₂ SO, 95 deg C, 1 h, 2) H ₂ O, reflux 2: 92 percent / RuCl ₂ (PPh ₃) ₃ / toluene / 6 h / Heating View Scheme	Tsuji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshihisa Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, 1986 , # 21, p. 1575 - 1576 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

Show 9 results per page

2 reactions out of 7 citations go to Page 1 Page 1 of 1

Filtre 'by value'

Filter by:

Sub-structure

Yield

by Value by Group

enter value/range

80-95

Limit to Exclude

Record Type

Reagent/Catalyst

Solvent

Reaction Type

No. of Steps

Product Availability

Reactant Availability

1

2

Filtre 'by group'

Journal Title

by Value by Group

journal of organic chemistry 4

tetrahedron letters 3

organic and biomolecular chemistry 2

chemical pharmaceutical bulletin 2

organic letters 1

journal of the chemical society, chemical communications 1

journal of the chemical society 1

More

Limit to Exclude

Filtre 'by group'

Filter by:

Sub-structure

Yield

by Value by Group

>90 - 95% 1

>75 - 80% 1

>70 - 75% 2

>60 - 65% 1

>35 - 40% 1

>30 - 35% 1

(no entry given) 25

Limit to Exclude

Record Type

Reagent/Catalyst

Solvent

Reaction Type

No. of Steps

Product Availability

Reactant Availability

Filtre 'by group'

Document Type

by Value by Group

journal 20

patent 3

Limit to Exclude

Authors

Patent Assignee

Journal Title

Publication Year

3

6- Résultats-réactions 4- Employer les Filtres b- Filtrer par Valeur ou par groupe

les filtres permettent d'affiner rapidement et facilement vos résultats. Cliquez sur la double flèche pour ouvrir la liste des sélections. Deux options sont à chaque fois disponibles:

1. L'onglet by Group permet d'accéder à une sélection prédéfinie.
2. L'onglet by Value permet de choisir une valeur spécifique (ou une gamme de valeurs) pour le filtre.

1- Employer les Filtres (Filter by) : conditions de réaction:

Choisir les filtres en fonction des spécifications de la réaction :

- ✓ **Yield** : rendement
- ✓ **Record type** : type du résultat (ex: 1 ou plusieurs étapes)
- ✓ **Reagent/catalyst** (réactif/catalyseur)
- ✓ **Solvent** (solvant)
- ✓ **Reaction type** : type de réaction ex : réduction, cyclisation.
- ✓ **N° of steps** : Nbre d'étapes.

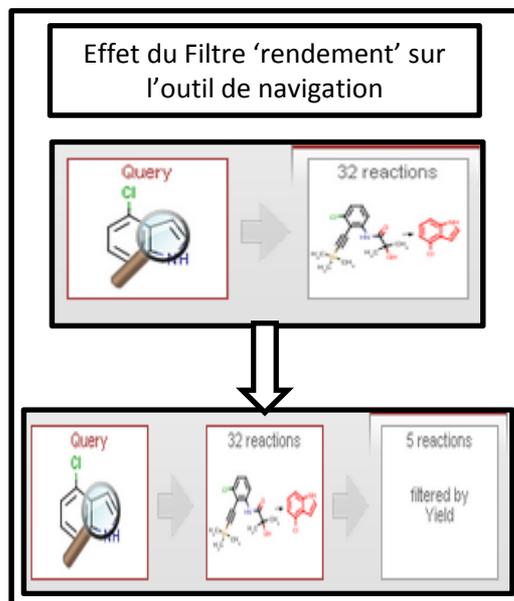
2- Boutons Limit to et Exclude

Cliquez sur le bouton adéquat.

3- Employer les Filtres (Filter by): données bibliographiques

Spécifiez le(s) filtre(s) lié(s) aux données bibliographiques :

- ✓ **Document type** : type de document : article ou brevet
- ✓ **Authors** : auteurs
- ✓ **Patent Assignee** : dépositaire de brevet
- ✓ **Journal title**: titre de la revue
- ✓ **Publication Year** : année de la publication



I- Exporter la table de réactions

1 Output Reaction Results

2 Output to: Reactions Table Reactions Citation Table

PDF/Print XML Literature Management Systems (e.g. ReferenceManager, EndNote etc.) RD File

Microsoft Word Microsoft Excel

Include the following headline **3** _____

Output range: All Hits Range: _____ **4**
e.g. 1, 2-5, 10

Output contains **5**

include Structures
 include Experimental Procedure
 All available data
 Identification data only
 Hit data only

6 OK Cancel

II- Exporter la table de références des réactions

1 Output Reaction Results

2 Output to: Reactions Table Reactions Citation Table

PDF/Print XML Literature Management Systems (e.g. ReferenceManager, EndNote etc.) RD File

Microsoft Word Microsoft Excel

Include the following headline **3** _____

Output range: All Hits Range: _____ **4**
e.g. 1, 2-5, 10

Output contains **5**

include Abstracts
 include Structures
 include Reactions
 include Front page Information
 All available data
 Hit data only

6 OK Cancel

6- Résultats-réactions 5- Output

1 Section Output

Choisir le type de résultat à exporter :
I-Reactions Table ou
II- Reactions citation table.

2 Section to

Définir le format du fichier exporté: PDF/Print, XML, Microsoft Word ou Excel, TXT pour les Systèmes gérant la Littérature, ou RD File.

3 Include the following headline

Cochez la case et tapez le titre qui s'affichera sur chaque page du document.

4 Section Output range

Définir les données à exporter: *All hits*, *Selected hits* (à sélectionner avant de cliquer sur le bouton *Output*), ou *Range* (à définir dans la case).

5 Section output contains

Définir le type de données à exporter:

I- Reactions output: include Structures et/ou Experimental Procedure, All available data ou Identification data only.

II- Reaction citations table : Include abstracts structures reactions include front page information all available data

6 Boutons *OK* et *Cancel*

Le bouton *OK* démarre l'export, tandis que le bouton *Cancel* l'annule.

préparation du 4-chloro... (x) Batch convert PDFs

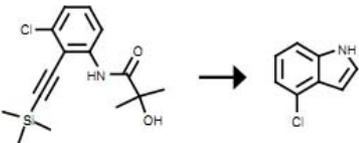
reaxys[®] préparation du 4-chloroindole-resultats

Query

	Query	Results	Date
1. Query	 Search as: Product, As drawn, No salts, No mixtures	32 reactions	2011-12-27 07h:27m:51s (EST)
2. refined	LAST_RESULT and itemno in (1,2,3)	3 reactions	2011-12-27 07h:28m:32s (EST)

*Aperçu du fichier PDF
contenant l'export des
résultats d'une recherche de
réactions.*

reaxys[®] préparation du 4-chloroindole-resultats

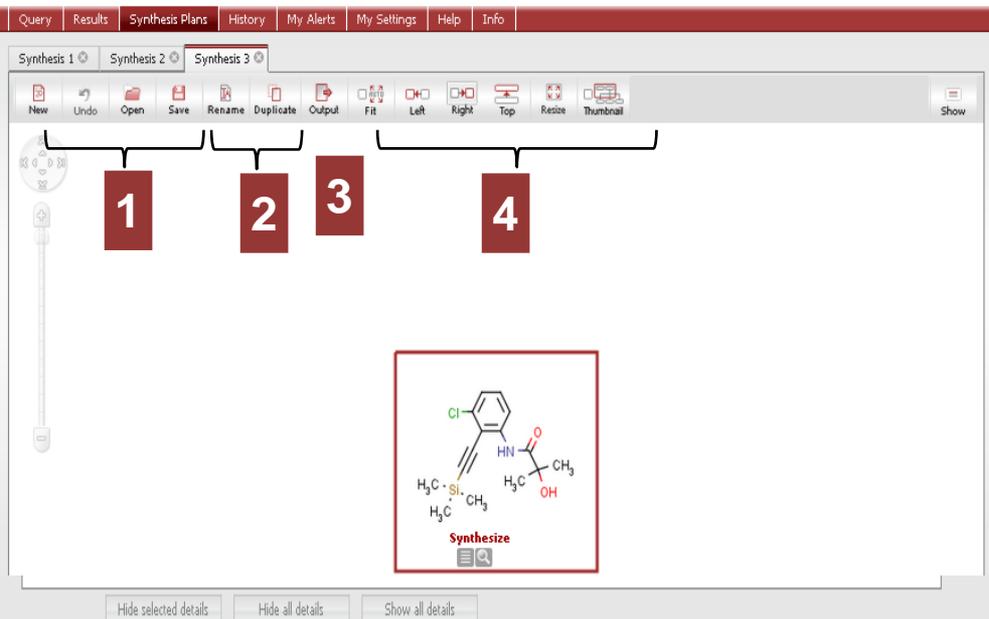


Rx-ID: 29718472 [View in Reaxys](#)

Yield	Conditions & References
73 %	With sodium hydroxide in N,N-dimethyl-formamide, Time= 4h, T= 140 °C , Inert atmosphere Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria; Organic and Biomolecular Chemistry; vol. 8; nb. 17; (2010); p. 3860 - 3864 View in Reaxys
73 %	With sodium hydroxide in N,N-dimethyl-formamide, Time= 4h, T= 140 °C , Inert atmosphere Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Garcia-Garcia, Patricia; Fernandez-Rodriguez, Manuel A.; Sanz, Roberto; Journal of Organic Chemistry; vol. 76; nb. 9; (2011); p. 3416 - 3437 View in Reaxys

Vous pouvez créer/ouvrir un plan de synthèse :

1. **Créer une requête et cliquez sur le lien synthesis** disponible en dessous de chaque structure sur la page de résultats.
2. En ouvrant un plan sauvegardé sur votre disque avec l'outil Save.
3. en cliquant sur le bouton "New" sur la page synthesis plans et en entrant une requête de réactions.



1-Boutons undo, open, et save

Annuler la dernière action, ouvrir ou sauvegarder un plan de synthèse.

2- Boutons Rename et duplicate

Renommer ou dupliquer la page actuelle

3- Bouton Output

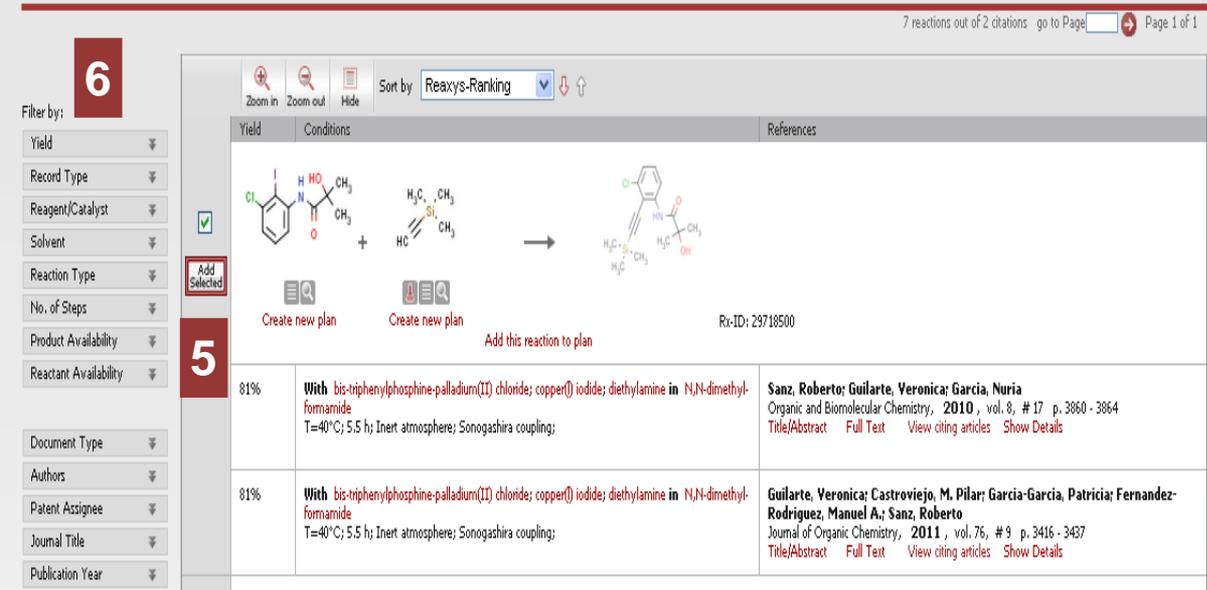
Exporter le plan de synthèse.

4- Représentation des rétrosynthèses

Le plan de synthèse s'affiche verticalement (Top) ou horizontalement (Left, Right). Le bouton Fit permet de dimensionner le plan à la taille de la fenêtre

5- Add selected : ajouter une réaction au plan de synthèse voir la page plan de synthèse (2) de ce guide.

6- Filter by : Les réactions pouvant être utilisés pour la synthèse de la molécule peuvent être filtrés tout comme les réactions d'une recherche.



7 reactions out of 2 citations go to Page 1 of 1

Filter by: 6

Yield Conditions References

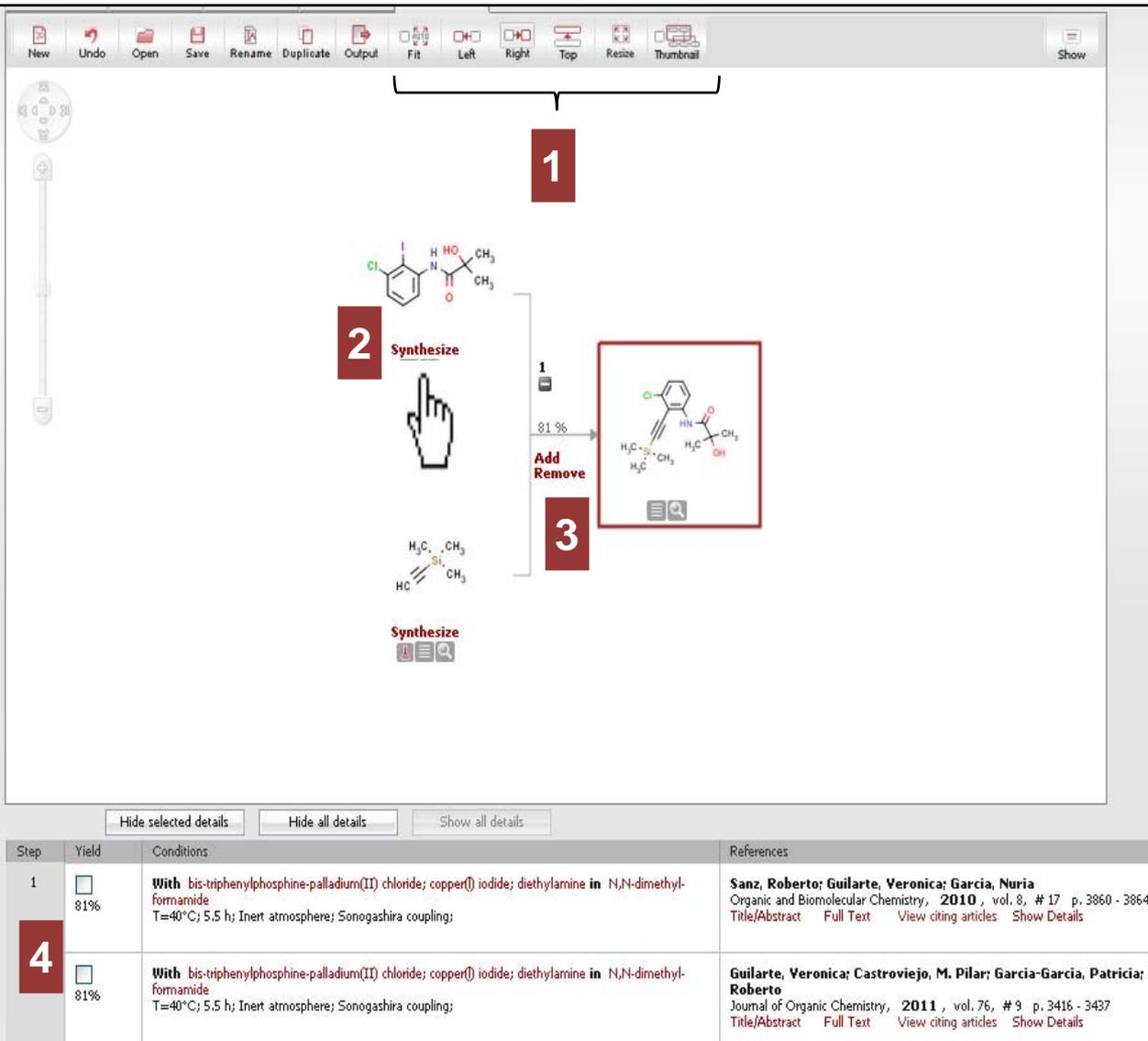
81% With bis-triphenylphosphine-palladium(II) chloride; copper(I) iodide; diethylamine in *N,N*-dimethylformamide
T=40°C; 5.5 h; Inert atmosphere; Sonogashira coupling; **Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria**
Organic and Biomolecular Chemistry, 2010, vol. 8, # 17 p. 3860 - 3864
[Title/Abstract](#) [Full Text](#) [View citing articles](#) [Show Details](#)

81% With bis-triphenylphosphine-palladium(II) chloride; copper(I) iodide; diethylamine in *N,N*-dimethylformamide
T=40°C; 5.5 h; Inert atmosphere; Sonogashira coupling; **Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Garcia-Garcia, Patricia; Fernandez-Rodriguez, Manuel A.; Sanz, Roberto**
Journal of Organic Chemistry, 2011, vol. 76, # 9 p. 3416 - 3427
[Title/Abstract](#) [Full Text](#) [View citing articles](#) [Show Details](#)

6

7- Plans de synthèse Synthesis plans (2)

Lorsque une réaction est sélectionnée et ajoutée (l'outil add/select), elle s'affiche dans la fenêtre supérieure d'affichage du plan de synthèse.



1 (Toolbar icons: New, Undo, Open, Save, Rename, Duplicate, Output, Fit, Left, Right, Top, Resize, Thumbnail, Show)

2 Synthesize

3 Add Remove

4

Step	Yield	Conditions	References
1	81%	With bis-triphenylphosphine-palladium(II) chloride; copper(I) iodide; diethylamine in N,N-dimethyl-formamide T=40°C; 5.5 h; Inert atmosphere; Sonogashira coupling;	Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria Organic and Biomolecular Chemistry, 2010 , vol. 8, # 17 p. 3860 - 3864 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
	81%	With bis-triphenylphosphine-palladium(II) chloride; copper(I) iodide; diethylamine in N,N-dimethyl-formamide T=40°C; 5.5 h; Inert atmosphere; Sonogashira coupling;	Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Garcia-Garcia, Patricia; F Roberto Journal of Organic Chemistry, 2011 , vol. 76, # 9 p. 3416 - 3437 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

1- Représentation des rétrosynthèses : Left, Right and Top :

Le plan de synthèse s'affiche verticalement (Top) ou horizontalement (Left and Right).

2- Hyperlien Synthesize : Affiche différentes préparations pour une molécule. On peut alors rajouter d'autres étapes de synthèse au plan.

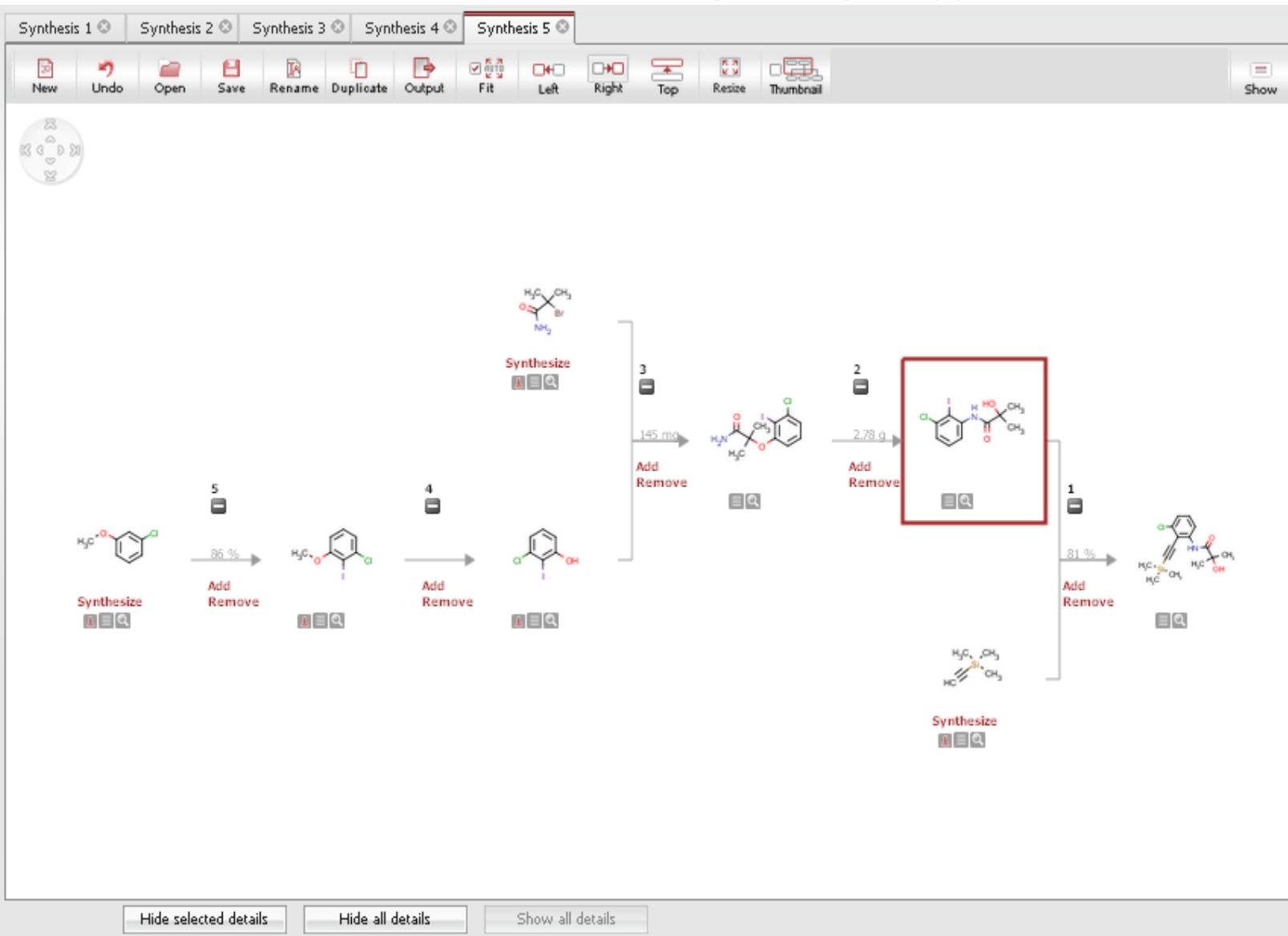
3- Hyperlien Add/Remove : ajoute ou supprime l'étape de synthèse affichée en proposant d'autres voies de synthèse pour le composé.

4- Détails des étapes de synthèse : rendement, conditions et références bibliographiques de la source de ces réactions.

En cliquant sur le lien **synthesize** d'un produit de départ, on peut rajouter au plan de synthèse les réactions qui permettent la préparation de ce composé → voir le résultat sur la page suivante.

Voir la page suivante

7- Plans de synthèse Synthesis plans (3)



Plan de synthèse avec plusieurs étapes.

Output Synthesis 5

Output
 Synthesis Plan
 Citations
 to
 PDF/Print
 Microsoft Word
 RD File

Include the following headline

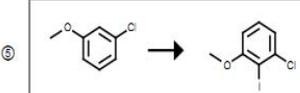
Include experimental text

Fichier PDF contant le plan de synthèse exporté détaillant chaque étape du plan.

plan synthèse.pdf

Copyright © 2011 Elsevier Properties SA. All rights reserved. Authorized use only. Reaxys® is a trademark owned and protected by Elsevier Properties SA and used under license. 7/8 2011-12-27 09:49:57

reaxys® synthèse publi

⑤ 

Rx-ID: 10400201 [View in Reaxys](#)

Yield	Conditions & References
86 %	Stage 1: With 2,2,6,6-tetramethylpiperidinyllithium, Zn-t-Bu ₂ in tetrahydrofuran, T= -78 - -45 °C Stage 2: With iodine in tetrahydrofuran, Time= 2h, T= 20 °C Sanz, Roberto; Guilarte, Veronica; Garcia, Nuria; Organic and Biomolecular Chemistry; vol. 8; nb. 17; (2010); p. 3860 - 3864 View in Reaxys
84 %	Stage 1: With t-Bu ₂ Zn(tmp)Li in tetrahydrofuran, T= -78 - -30 °C Stage 2: With iodine in tetrahydrofuran, T= -30 - 20 °C Guilarte, Veronica; Castroviejo, M. Pilar; Alvarez, Estela; Sanz, Roberto; Beilstein Journal of Organic Chemistry; vol. 7; (2011); p. 1255 - 1260; Art.No: 146 View in Reaxys

8- Onglet de requête lié aux Substances et propriétés

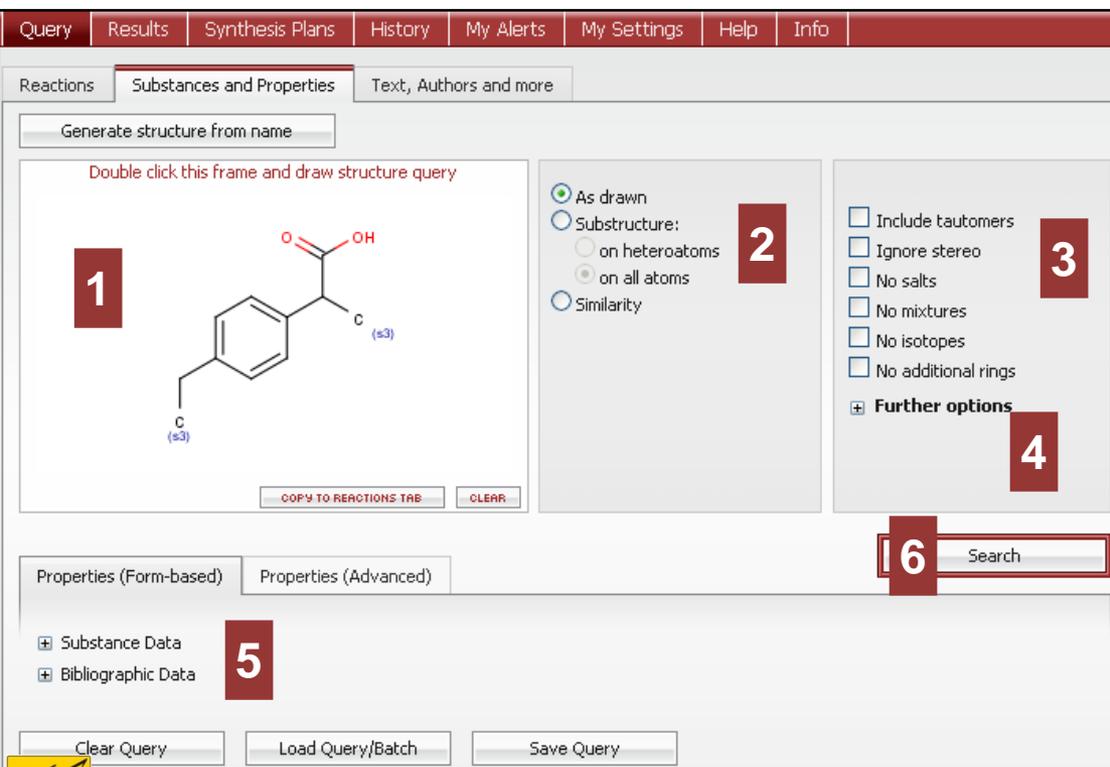
Comment trouver les informations liées à une substance particulière?

1. Vérifier que vous êtes dans l'onglet Substances & Properties et éditer (double click) la zone de dessin.
2. Dessinez la structure chimique souhaitée et retourner dans Reaxys à l'aide du bouton de transfert. Vous pouvez aussi utiliser l'outil Generate structure from name.
3. Cliquez sur le bouton Search et analysez vos résultats.

1- Boîte de Structure/Réaction : Cette forme contient la structure. Un bouton permet de copier la structure vers l'onglet des Réactions ; il est également possible de supprimer la structure représentée (clear).

2- Fonctionnalité Search as : Définir le type de recherche: *As drawn* (avec les contraintes incluses dans le dessin) ou *As Substructure*.

3- Options supplémentaires : Ajoutez si nécessaire d'autres options, telles que : nombre de cyclisations, inclure les formes tautomères...



Query Results Synthesis Plans History My Alerts My Settings Help Info

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name

Double click this frame and draw structure query

1

2

3

4

5

6 Search

Clear Query Load Query/Batch Save Query

4- Fonctionnalité Further options : Ajoutez si nécessaire d'autres options, telles que *Include related Markush* ou *Number of Ring Closures* ...

5- Ajouter d'autres contraintes : Cliquez sur les hyperliens *Form-based Search* ou *Advanced Search* afin d'affiner votre requête en ajoutant des contraintes liées aux substances ou à la littérature.

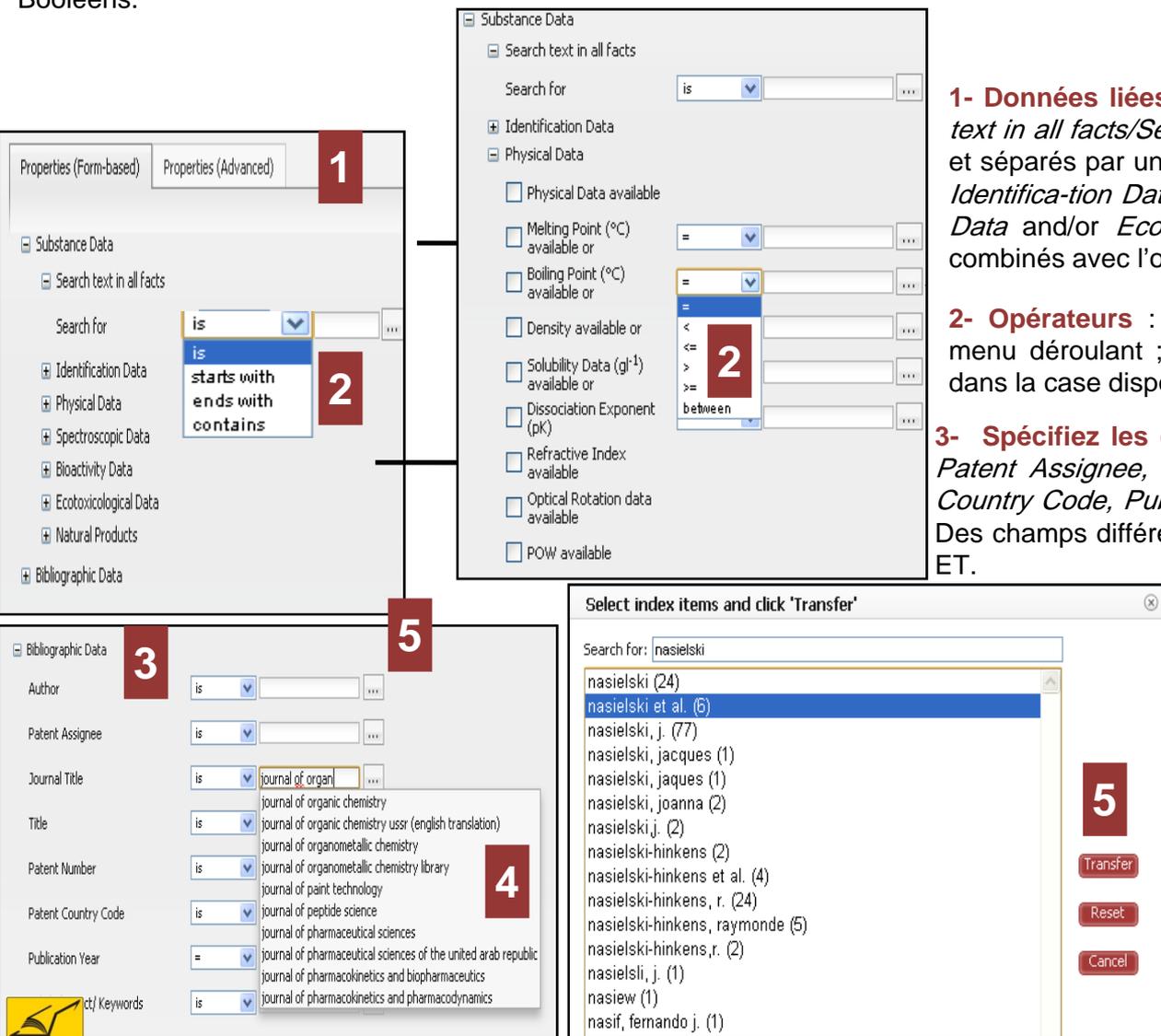
6- Bouton Search : Ce bouton lance la recherche. L'évolution de la recherche s'affiche, vous permettant d'annuler celle-ci ou d'afficher les résultats trouvés.

8- Onglet de requête lié aux substances

Recherche basée sur l'emploi de Formulaires

A- Form-based Search

le menu **Form-based Search** permet d'accéder aux champs les plus couramment utilisés; ces champs sont groupés en données liées à la substance (telles des données spectroscopiques ou de bioactivité) et en données bibliographiques (telles le nom d'un journal ou le dépositaire d'un brevet). Les champs « search text in all facts » et « Titel/Abstract/Keywords » sont des champs de texte, où vous utiliserez les opérateurs Booléens.



1 Substance Data

- Search text in all facts
 - Search for:
- Identification Data
- Physical Data
 - Physical Data available
 - Melting Point (°C) available or
 - Boiling Point (°C) available or
 - Density available or
 - Solubility Data (g/l) available or
 - Dissociation Exponent (pK)
 - Refractive Index available
 - Optical Rotation data available
 - POW available

2 Search for:

- is
- starts with
- ends with
- contains

3 Bibliographic Data

- Author:
- Patent Assignee:
- Journal Title:
 - journal of organic chemistry
 - journal of organic chemistry ussr (english translation)
 - journal of organometallic chemistry
 - journal of organometallic chemistry library
 - journal of paint technology
 - journal of peptide science
 - journal of pharmaceutical sciences
 - journal of pharmaceutical sciences of the united arab republic
 - journal of pharmacokinetics and biopharmaceutics
 - journal of pharmacokinetics and pharmacodynamics
- Patent Number:
- Patent Country Code:
- Publication Year:
- Title/Abstract/Keywords:

4 Select index items and click 'Transfer'

Search for:

- nasielski (24)
- nasielski et al. (6)**
- nasielski, j. (77)
- nasielski, jacques (1)
- nasielski, jaques (1)
- nasielski, joanna (2)
- nasielski, j. (2)
- nasielski-hinkens (2)
- nasielski-hinkens et al. (4)
- nasielski-hinkens, r. (24)
- nasielski-hinkens, raymonde (5)
- nasielski-hinkens, r. (2)
- nasielski, j. (1)
- nasiew (1)
- nasif, fernando j. (1)

5 Transfer, Reset, Cancel

1- Données liées à la substance : Spécifiez les champs *Search text in all facts/Search for* (différents termes tapés dans cette case et séparés par un “;” sont combinés avec l’opérateur Booléen OU), *Identification Data*, *Physical Data*, *Spectroscopic Data*, *Bioactivity Data* and/or *Ecotoxicological Data*. Des champs différents sont combinés avec l’opérateur Booléen ET.

2- Opérateurs : L’opérateur approprié sera choisi à l’aide du menu déroulant ; en cas de champ numérique, tapez la valeur dans la case disponible.

3- Spécifiez les champs liés à la bibliographie : *Authors*, *Patent Assignee*, *Journal Title*, *Title*, *Patent Number*, *Patent Country Code*, *Publication Year* et/ou *Title/Abstract/Key-words*. Des champs différents sont combinés avec l’opérateur Booléen ET.

4- Liste de données

Dès qu’une donnée est tapée, une liste de sélections apparaît.

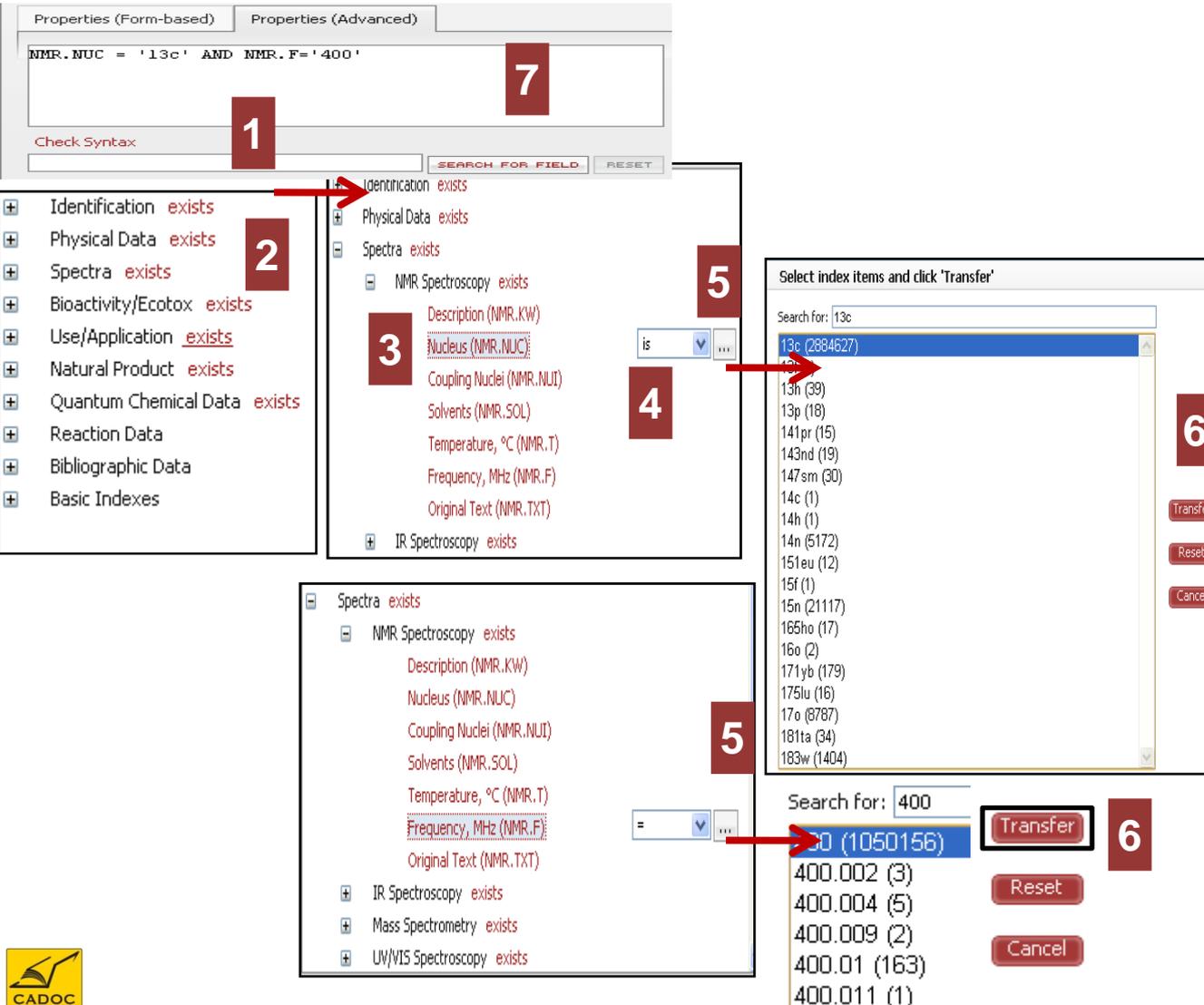
5- Accéder à l’Index

Le bouton  permet l’accès à l’index où diverses sélections peuvent être faites. Le bouton **Transfer** ajoute ces données à la requête.

8- Onglet de requête lié aux substances Recherche avancée B- Advanced Search

La forme de recherche Advanced Search : permet la création de requêtes complexes et sophistiqués, mêlant propriétés et structure chimique; elle peut être employée de deux façons :

1. Tapez directement votre requête dans la boîte disponible, en entourant les valeurs attribués aux champs par des guillemets.
2. Si le champ nécessaire est inconnu, localisez-le à l'aide de l'hyperlien Show fields and Operators.



The screenshot shows the Reaxys Advanced Search interface. At the top, there are two tabs: 'Properties (Form-based)' and 'Properties (Advanced)'. The search input field contains the query: `NMR.NUC = '13c' AND NMR.F='400'`. Below the input field is a 'Check Syntax' button and a 'SEARCH FOR FIELD' button. A left sidebar lists various search categories, with 'Spectra' expanded to show 'NMR Spectroscopy'. A dropdown menu for operators is open, showing 'is'. A dialog box titled 'Select index items and click 'Transfer'' is open, showing a list of NMR parameters with '13c (2884627)' selected. Another dialog box is open, showing a list of NMR frequencies with '400 (1050156)' selected. The 'Transfer' button is highlighted in both dialog boxes.

1- Sélection de conditions

Vous pouvez saisir les codes de conditions ou Sélectionnez le code du champ nécessaire à l'aide d'une liste hiérarchisée, Si la requête est manuellement entrée, vérifiez-en la syntaxe à l'aide de la commande **check syntax**.

2- Types de champs

Cliquez sur le signe + pour ouvrir la liste des champs nécessaires.

3- Sélection d'un Champ

Cliquez sur champ choisi

4- Opérateurs

Sélectionnez à l'aide du menu déroulant, l'opération à effectuer.

5- accéder à l'index

Le bouton  permet l'accès à l'index où diverses sélections peuvent être faites.

6- Transférer la donnée choisie

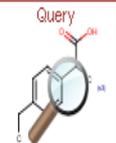
Sélectionnez la (les) valeurs nécessaires pour le champ, et transférez-les dans votre requête à l'aide du bouton **Transfer**.

7- champ d'affichage des codes des conditions:

Les codes s'affichent automatiquement entre eux par les opérateurs logiques choisis.

Un affichage graphique montre l'effet des actions effectuées sur les résultats.

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

Query  675 substances **1**

Create Alert **2**

675 substances out of 2308 citations **3**

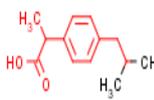
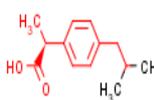
Substances (Grid) Substances (Table) Citations **4**

Filter by: **5**

- Sub-structure
- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Physical Data
- Spectroscopic Data
- Bioactivity
- Natural Product
- Availability
- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide **6**

Sort by No of References

Structure	Chemical Name	N° of preparations All Preps All Reactions	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
 1	ibuprofen 2-(4-isobutylphenyl)propionic acid α-methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetic acid 2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid α-(p-isobutylphenyl)propionic acid (+/-)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid alpha-(4-isobutylphenyl)propionic acid	174 prep out of 692 reactions.	Identification Physical Data (547) Spectra (188) Bioactivity/ECOTOX (1236) Use/Application (3026)	1849	
 2	(S)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid (S)-(+)-2-(4-(2-methylpropyl)phenyl)propanoic acid (2S)-2-(4-isobutylphenyl)-propanoic acid (2S)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid S-2-(p-isobutylphenyl)propionic acid seratir™ (S)-(+)-ibuprofen	136 prep out of 279 reactions.	Identification Physical Data (153) Spectra (66) Bioactivity/ECOTOX (178) Use/Application (151)	256	

7

2- Create alert : définir une alerte par rapport à la recherche en cours.

3- Nombre de résultats et nombre des références sources de ces substances.

4- Onglets Substances (grid)/ Substances (table)/Citations

La table des Substances s'affiche par défaut; vous pouvez aussi afficher les autres onglets *Substances (grid)* ou *Citations*.

5- Menu Filter by

Pour affiner les résultats, utilisez les filtres liés à la substance (*molecular weight, number of fragments, physical data, spectroscopic data, bioactivity, natural product*) ou aux références bibliographiques (*document type, authors, patent assignee, journal title et publication year*).

6- Barre d'outils

Accédez aux fonctionnalités *Limit to Selection, Output* et *Sort by* ainsi que *zoom in* et *zoom out*.

7- Résultats- Substances et propriétés

Cette table présente la liste des substances trouvées avec leurs propriétés accessibles par des hyper-liens

9-Résultats – Substances et Propriétés

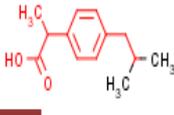
2- Onglet des Substances (table)

675 substances out of 2308 citations

Substances (Grid) **Substances (Table)** Citations

5 go to Page Page 1 of 75

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide Sort by No of References

Structure	Chem	N° of preparations All Preps All Reactions	Available Data	N° of ref.	Boiling Point
 <p>2</p> <p>Synthesize Hide Details</p>	<p>Reaxys-RN: 2049713</p> <p>MF: C₁₃H₁₈O₂</p> <p>MW: 206.285</p> <p>CAS-RN: 15687-27-1</p> <p>1</p> <p>Show Details</p> <p>Copy Structure to Clipboard</p> <p>Copy Structure to Query</p> <p>Use as Sub-structure Filter</p> <p>View related markush</p> <p>3</p>	<p>174 prep out of 692 reactions.</p>	<p>Identification</p> <p>Physical Data (547)</p> <p>Spectra (188)</p> <p>Bioactivity/ECotox (1236)</p> <p>Use/Application (3026)</p>	1849	

4 **Structure/Compound Data**

Reaxys Registry Number: 2049713
CAS Registry Number: 15687-27-1

Chemical Name: ibuprofen, 2-(4-isobutylphenyl)propionic acid, α-methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetic acid, 2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid, α-(p-isobutylphenyl)propionic acid, (+/-)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid, alpha-(4-isobutylphenyl)propionic acid

Type of Substance: isocyclic

Molecular Formula: C₁₃H₁₈O₂
Linear Structure Formula: HO₂CCH(CH₃)C₆H₄CH₂CH(CH₃)₂
Molecular Weight: 206.285

InChi Key: HEFNW5XXWATR-W-UHFFFAOYSA-N

- Identification
- Physical Data
- Spectra
- Bioactivity/ECotox
- Use/Application

1- Options et données supplémentaires
Reaxys – RN (N° d'enregistrement Reaxys), MF (formule brute), CAS-RN (N° d'enregistrement CAS), show de-tails (affiche les propriétés), plan a synthesis (créer une rétrosynthèse), copy structure to clipboard (copier la structure).

2- Disponibilité commerciale:

L'icône  affiche la disponibilité commerciale et les fournisseurs potentiels d'une substance (eMolecules-Symyx ACD)

3- Commande Show/Hide details

4- Structure/Compound data

Affiche les identifiants du composé.

5- Fonctionnalité Sort by

Triez les résultats de façon (dé)croissante  en fonction d'un critère

9- Résultats - Substances et Propriétés

3- Onglet des Substances (grille)

1- Affichage selon une Grille

Affiche les composés en un rapide coup d'oeil.

2- Options et données supplémentaires

Cliquez sur une structure ou sur pour afficher le menu contenant des informations et des options possibles. Reaxys – RN (N° d'enregistrement Reaxys), MF (formule brute), CAS-RN (N° d'enregistrement CAS), show de-tails (affiche les propriétés), plan a synthesis (créer une rétrosynthèse), copy structure to clipboard (copier la structure).

3- Disponibilité commerciale:

L'icône  affiche la disponibilité commerciale et les fournisseurs potentiels d'une substance (eMolecules-Symyx ACD)

4- Fonction OUTPUT

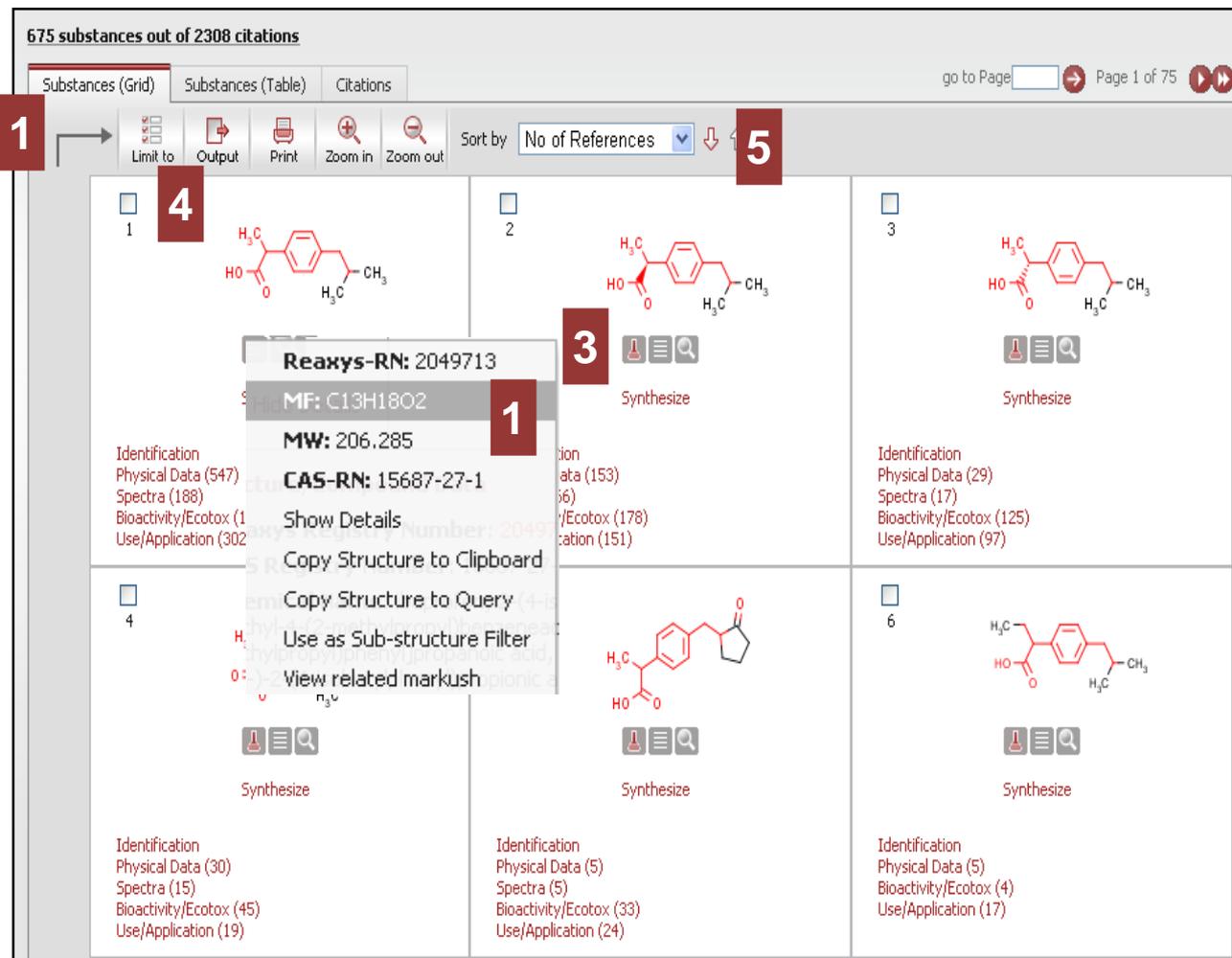
Exporte une sélection de résultats.

5- Fonctionnalité Sort by

Triez les résultats de façon  (dé)croissante en fonction d'un critère

6- Propriétés disponibles

Les propriétés disponibles pour chaque substance sont affichées *via* des commandes écrites en rouge.



The screenshot displays the Reaxys interface with a grid of chemical structures. A context menu is open over the first structure, listing various actions and properties. The interface includes a top navigation bar with tabs for 'Substances (Grid)', 'Substances (Table)', and 'Citations'. A toolbar contains icons for 'Limit to', 'Output', 'Print', 'Zoom in', and 'Zoom out'. A 'Sort by' dropdown menu is set to 'No of References'. The grid shows six chemical structures, each with a 'Synthesize' button and a list of available properties in red text.

Grid Content:

- Structure 1:** CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)O. Properties: Identification, Physical Data (547), Spectra (188), Bioactivity/ECOTOX (1), Use/Application (302).
- Structure 2:** CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)O. Properties: Identification, Physical Data (153), Spectra (36), Bioactivity/ECOTOX (178), Use/Application (151).
- Structure 3:** CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)O. Properties: Identification, Physical Data (29), Spectra (17), Bioactivity/ECOTOX (125), Use/Application (97).
- Structure 4:** CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)O. Properties: Identification, Physical Data (30), Spectra (15), Bioactivity/ECOTOX (45), Use/Application (19).
- Structure 5:** CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)O. Properties: Identification, Physical Data (5), Spectra (5), Bioactivity/ECOTOX (33), Use/Application (24).
- Structure 6:** CC(C)Cc1ccc(cc1)C(=O)O. Properties: Identification, Physical Data (5), Bioactivity/ECOTOX (4), Use/Application (17).

Context Menu (Structure 1):

- Reaxys-RN: 2049713
- MF: C13H18O2
- MW: 206.285
- CAS-RN: 15687-27-1
- Show Details
- Copy Structure to Clipboard
- Copy Structure to Query
- Use as Sub-structure Filter
- View related markush
- Synthesize

9- Résultats - Substances et Propriétés

4- Onglet des Substances (Citations)

Dans l'onglet citations, les sources bibliographiques sont affichées dans une table donnant le titre du document (article, brevet), les auteurs, l'année de publication ainsi que la source. Une colonne donne également le nombre de citations reçus par l'article (source : SCOPUS).

675 substances out of 2308 citations

Substances (Grid) Substances (Table) Citations go to Page Page 1 of 257

Limit to Output Print Zoom in Zoom out Hide Sort by Publication Year

	Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
<input type="checkbox"/> 1	SPIRO PHOSPHORUS-OXAZOLINE, SYNTHESIS AND USE THEREOF	Zhejiang Jiuzhou Pharmaceutical Co., Ltd.	2011	Patent: EP2272853 A1, 2011 ; Patent Family: WO2009/129700 A1; EP2272853 A1; US2011/118472 A1; Full Text	

▲ Title/Abstract
SPIRO PHOSPHORUS-OXAZOLINE, SYNTHESIS AND USE THEREOF
 The present invention belongs to a spiro phosphine-oxazoline and preparation method and application thereof, particularly, publishes a novel spiro phosphine-oxazoline and the preparation method of its iridium complex. The substituted 7-diaryl phosphino-7'-carboxy-1,1'-Lo-dihydro-indene is used as the starting raw material to synthesize the novel spiro phosphine-oxazoline of the present invention through a two-step reaction. The novel spiro phosphine-oxazoline and the iridium precursor are complexed to become a complex, and then through ion exchange, an iridium/phosphine spiro-oxazoline complex with different anions can be obtained. The present invention overcomes the shortcomings of the existing technology. The cheap readily available amino alcohol is used as the raw material to synthesize the novel spiro phosphine-oxazoline, on the fourth position of the oxazoline ring of which there is no substituent. The iridium complex of this novel spiro phosphine-oxazoline can catalyze the asymmetric hydrogenation of α -substituted acrylic acid, and shows very high activity and enantioselectivity, therefore has a very high research value and an industrialization prospect.

▼ **Front page Information**
 ▼ **Show All Reactions (26)**
 ▼ **Show All Substances (36)**
 ▼ **Hit Substances in this article (2 out of 36)**

Output Substance Results

1 **Output** Substance Grid Substance Details Table Substance Citations Table

2 **to** PDF/Print XML Literature Management Systems (e.g. ReferenceManager, EndNote etc.) RD File SD/Molfile Smiles

Include the following headline **3**

4 **Output range** All Hits Range: e.g. 1, 2-5, 10

5 **Output contains** include Structures All available data Identification data only Hit data only Select data

6

1 Section Output

Choisir le type de résultat à exporter.

2 Section to

Définir le format du fichier exporté: PDF/Print, XML, Microsoft Word ou Excel, TXT pour les Systèmes gérant la Littérature, ou RD File.

3 Include the following headline

Cochez la case et tapez le titre qui s'affichera sur chaque page du document.

4 Section Output range

Définir les données à exporter: *All hits*, *Selected hits* (à sélectionner avant de cliquer sur le bouton *Output*), ou *Range* (à définir dans la case).

5 Section output contains

Substances output: *include Structures* et *All available data* ou *Identification data only* ou *Select data*. **Citations output:** *include Structures* et/ou *Abstracts*.

6 -Boutons OK et Cancel

Le bouton *OK* démarre l'export, tandis que le bouton *Cancel* l'annule.

7- Sélectionner des données à exporter .

7

Please select the facts you want to export from the list below.

<input type="checkbox"/> Physical Data	<input type="checkbox"/> Spectra	<input type="checkbox"/> Bioactivity/Ecotox	<input type="checkbox"/> Use/Application
<input type="checkbox"/> Melting Point (148)	<input checked="" type="checkbox"/> NMR Spectroscopy (125)	<input checked="" type="checkbox"/> Pharmacological Data (139)	<input type="checkbox"/> Use (87)
<input type="checkbox"/> Optical Rotatory Power (37)	<input checked="" type="checkbox"/> IR Spectroscopy (86)	<input type="checkbox"/> Ecotoxicology (7)	
<input type="checkbox"/> Crystal Property Description (37)	<input type="checkbox"/> Mass Spectrometry (25)	<input type="checkbox"/> Concentration in the Environment (4)	
<input type="checkbox"/> Dynamic Viscosity (23)	<input type="checkbox"/> UV/VIS Spectroscopy (10)	<input type="checkbox"/> Biodegradation (4)	
<input checked="" type="checkbox"/> Boiling Point (18)	<input type="checkbox"/> Fluorescence Spectroscopy (3)	<input type="checkbox"/> Abiotic Degradation, Hydrolysis (1)	

10- Onglet requête liée à Text, Authors and more

1- Page de requête :

Spécifiez les champs *Quick Search*, *Author(s)/Assignee(s)*, *Journal Title*, *Patent Number*, *Patent Country*, et/ou *Publication Year*.

Des champs différents sont combinés avec l'opérateur Booléen

2- Fonctionnalité Quick search :

Combinez les termes tapés avec des opérateurs Booléens. L'emploi de troncatures est possible.

Troncature: "" = plusieurs caractères "?" = un seul caractère*

3- Liste de données

Dès qu'une donnée est tapée, une liste de sélections apparaît.

Query Results Synthesis Plans History My Alerts My Settings Help

Reactions Substances and Properties **Text, Authors and more**

Form-based Advanced

1 Quick Search: **2**
e.g. Stereoselective AND reduction, e.g. Stereo*

Author(s) Assignee(s): **3**
e.g. Snyder, Peter A. or e.g. Sny*

Journal Title: **4**
e.g. Journal of Organic Chemistry, e.g. *organic*

Patent Number: Patent Country:
e.g. US12345678 e.g. EP

Publication Year: **5** All years
e.g. 2005, e.g. 2000-2008

Clear Query Load Query/Batch Save Query **Search**

Select index items and click 'Transfer' **4**

Search for:

- snyden (1)
- snyder (284)
- snyder c.w. (1)
- snyder d.d. (1)
- snyder et al. (51)
- snyder et al. org. synth. coll. vol. iii<1955>471 (1)
- snyder g.j. (2)
- snyder i.p. (5)

4- Accéder à l'Index

Le bouton **Search** permet l'accès à l'index où diverses sélections peuvent être faites. Le bouton *Transfer* ajoute ces données à la requête.

5- Exemples : Affichage sous chaque case liée aux champs d'indications permettant d'entrer correctement vos termes de recherche.

11- Résultats - Text, Authors and more Onglet Citations

1-Outil de navigation

Un affichage graphique montre l'effet des actions effectuées sur les résultats.

2- Create alert : définir une alerte par rapport à la recherche en cours.

3- Nombre de citations et le nombre de réactions et substances figurant dans ces citations.

4- Onglet Citations

L'onglet des Citations s'affiche par défaut; vous pouvez également afficher l'onglet des citations.

5- Menu Filter by

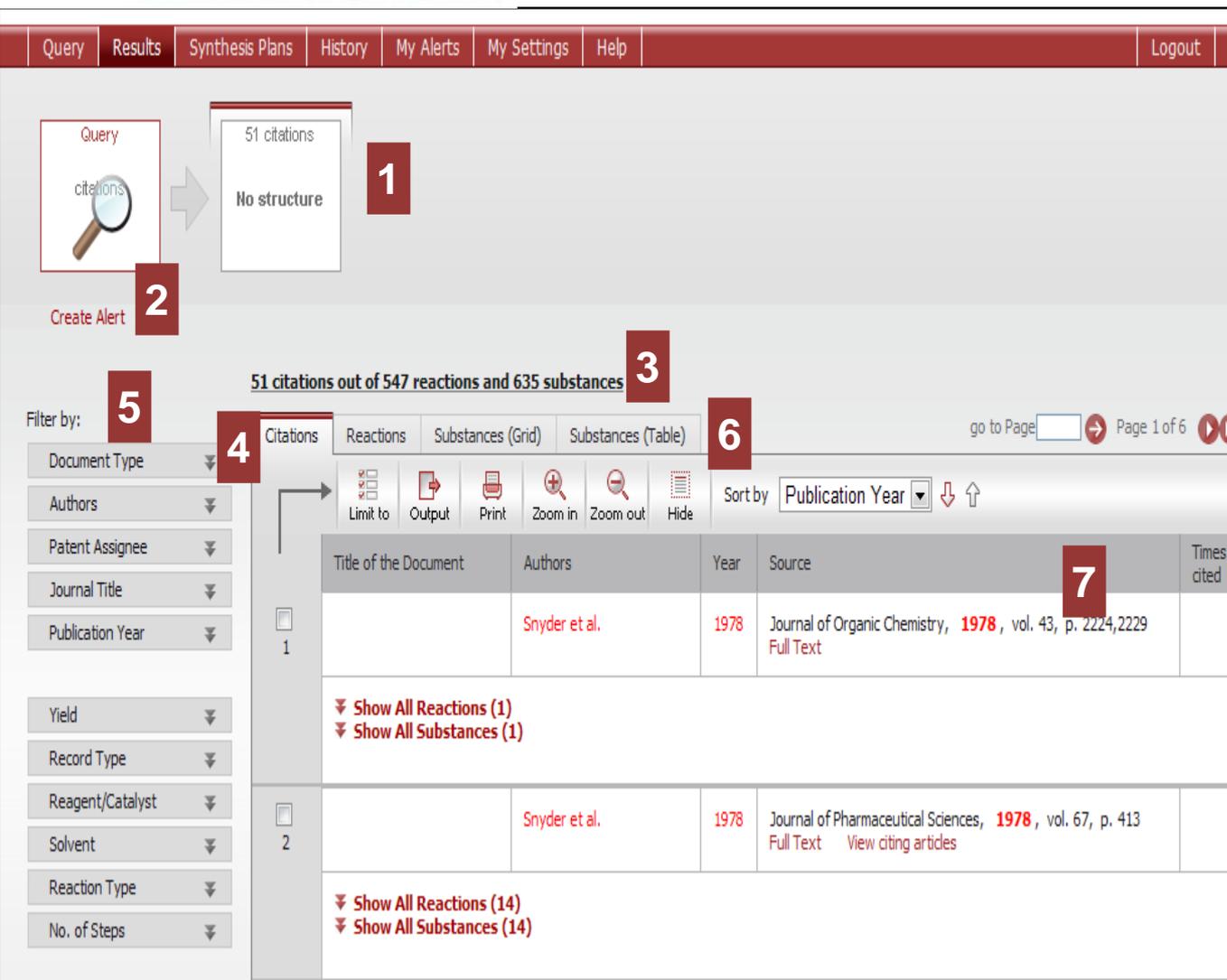
Pour affiner les résultats, utilisez les filtres bibliographiques (*Document Type, Authors, Patent Assignee, Journal Title, Publication Year*) ou réactionnels (*Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps*).

6- Barre d'outils

Accédez aux fonctionnalités *Limit to Selection, Output* et *Sort by* ainsi que *zoom in* et *zoom out*.

7- Résultats-Citations

Cette table présente un aperçu des références trouvées. Elle contient le titre et l'abstract de la référence, ainsi qu'un lien vers le texte original de l'article ou du brevet, et un accès à toute information corrélée issue de Scopus.



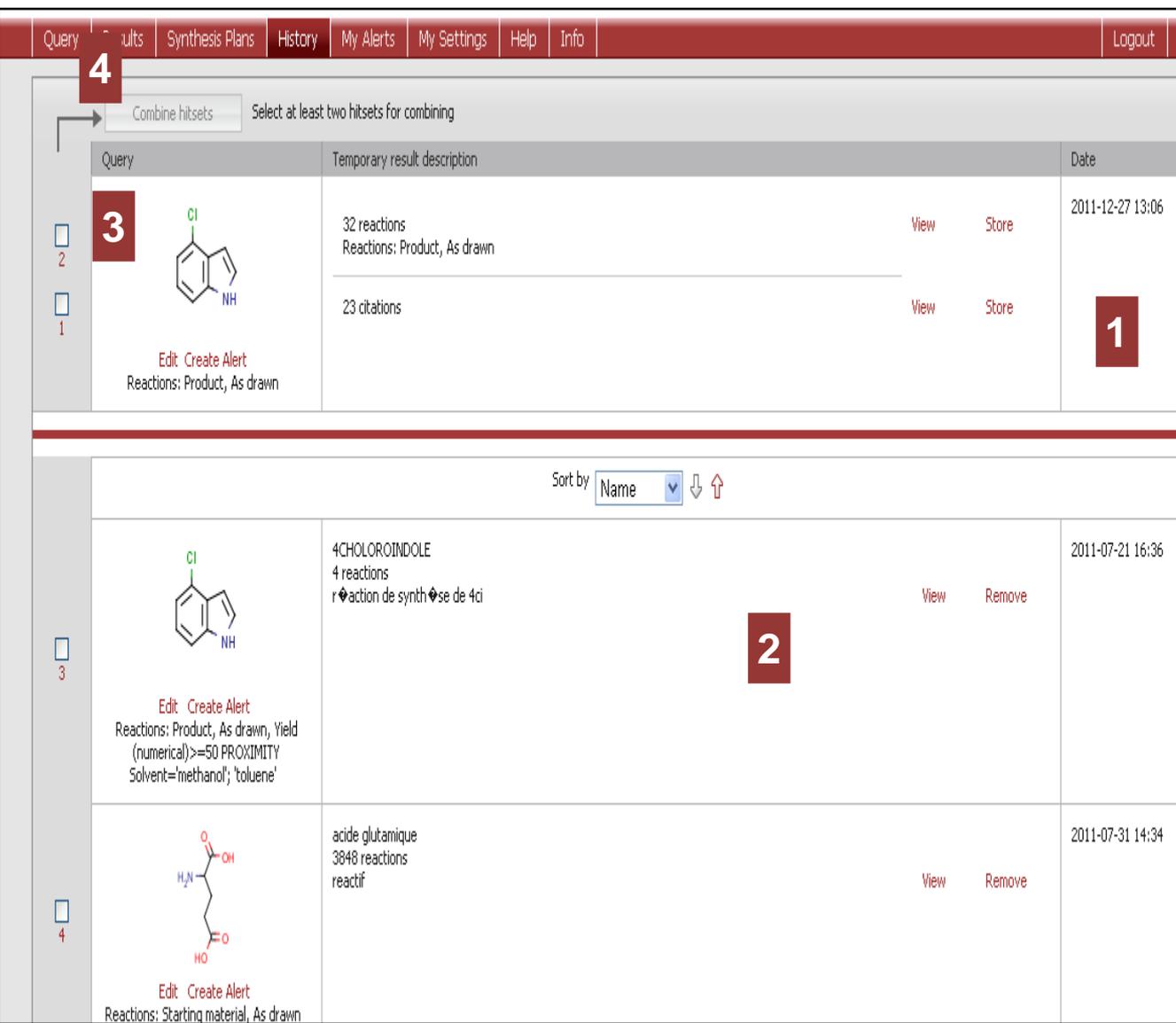
The screenshot shows the Reaxys search results page for the query 'citations'. The interface includes a navigation bar at the top with tabs for Query, Results, Synthesis Plans, History, My Alerts, My Settings, Help, and Logout. A search box on the left contains 'citations' and a 'Create Alert' button. The main content area displays '51 citations out of 547 reactions and 635 substances'. Below this, there are tabs for 'Citations', 'Reactions', 'Substances (Grid)', and 'Substances (Table)'. A filter menu on the left allows filtering by Document Type, Authors, Patent Assignee, Journal Title, Publication Year, Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, and No. of Steps. A toolbar includes options for Limit to, Output, Print, Zoom in, Zoom out, and Hide. The results are sorted by Publication Year. The table shows two entries for Snyder et al. from 1978, with links to Full Text and View citing articles.

Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
	Snyder et al.	1978	Journal of Organic Chemistry, 1978, vol. 43, p. 2224,2229 Full Text	
Show All Reactions (1) Show All Substances (1)				
	Snyder et al.	1978	Journal of Pharmaceutical Sciences, 1978, vol. 67, p. 413 Full Text View citing articles	
Show All Reactions (14) Show All Substances (14)				

12- Historique (History)

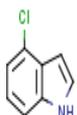
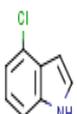
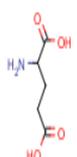
1- Vue d'ensemble

le menu *History* affiche toutes les listes de la session en cours : listes issues de requêtes ou des analyses effectuées sur vos résultats. Les listes les plus récentes se trouvent en tête. Ce menu permet également de combiner graphiquement vos résultats.



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

4 Combine hitsets Select at least two hitsets for combining

Query	Temporary result description	Date
3  Edit Create Alert Reactions: Product, As drawn	32 reactions Reactions: Product, As drawn View Store 23 citations View Store	2011-12-27 13:06
2  Edit Create Alert Reactions: Product, As drawn, Yield (numerical)>=50 PROXIMITY Solvent='methanol'; 'toluene'	4CHLOROINDOLE 4 reactions r action de synth se de 4ci View Remove	2011-07-21 16:36
4  Edit Create Alert Reactions: Starting material, As drawn	acide glutamique 3848 reactions reactif View Remove	2011-07-31 14:34

Sort by Name ↓ ↑

1- Listes temporaires :

La partie supérieure de la table affiche toutes les listes créées pendant la session en cours. La commande *View* affiche la liste dans le menu *Results*. *Store* permet de sauver la liste (entrez un nom et un commentaire).

2- Listes permanentes

La partie inférieure de la table montre les listes sauvegardées par l'utilisateur. Ces listes ne sont affichées que si l'utilisateur s'est identifié. *Remove* permet de supprimer une liste sauvegardée.

3- Colonne Query

La commande *Edit* affiche la requête associée à la liste de résultats dans le menu *Query*. Notez que cette colonne ne contient pas de requête pour les listes créées par emploi des filtres.

4- Bouton Combine hitsets

Le bouton *Combine hitsets* devient disponible dès qu'au moins deux listes ont été sélectionnées (en cochant les cases situées près de la colonne *Query*); ce bouton donne accès à quatre graphes permettant de combiner de différentes façons les listes choisies.

12- Historique (History)

2- Combinaison de requêtes

Query Results Synthesis Plans **History** My Alerts My Settings Help Info

Select how you want to combine the hitsets



Merge 3 with 4



Overlap 3 with 4



Exclude 3 from 4



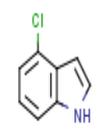
Exclude 4 from 3

Cancel

1- Bouton Combine hitsets

Le bouton donne accès à quatre graphes permettant de combiner de différentes façons les listes choisies.

Sort by ↓ ↑

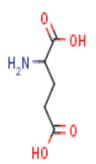
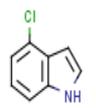
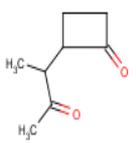
<input checked="" type="checkbox"/> 3	 Edit Create Alert Reactions: Product, As drawn, Yield (numerical)>=50 PROXIMITY Solvent='methanol'; 'toluene'	4CHOLOROINDOLE 4 reactions raction de synthese de 4ci View Remove	2011-07-21 16:36
<input checked="" type="checkbox"/> 4	 Edit Create Alert Reactions: Product, As drawn	INDOLE 640 reactions synthese de l'indole aucun critere View Remove	2011-07-28 17:22

13- Mes alertes

1- Vue d'ensemble

Le menu *My Alerts* affiche la liste des alertes disponibles.

Les alertes sont des questions définies par l'utilisateur et sauvegardées sur le serveur de Reaxys; elles peuvent donc être accédées chaque fois que vous vous identifiez. Les alertes fonctionnent tous les lois ou à chaque update de la base de données. Vous recevrez un mail vous notifiant des résultats de l'alerte, et contenant un hyperlien pour accéder à ceux-ci.

Query	Results	Synthesis Plans	History	My Alerts	My Settings	Help	Info	Logout
To create a new Alert perform a new search and click the 'Create Alert' link on the results page 1								
Delete 4								
Name	Query	Description	Date created	Last run	Frequency			
acideglutamiq Modify alert	 Edit query	Reactions: Starting material, As drawn Comment: acide glutamique	2011-07-31	2011-12-13 hits: 28 View results 2	After each update	Créer et lancer votre requête. Sur le menu Results, cliquez sur le lien <i>Create Alert</i> situé sous l'outil de navigation. Complétez la forme d'alerte et sauvez-la.		
cgdf Modify alert 3	 Edit query	Reactions: Product, As drawn, Yield (numerical)>=50 PROXIMITY Solvent='methanol';'toluene'	2011-07-31	2011-12-05 hits: 3 View results	Monthly			
ketocbone Modify alert	 Edit query	Reactions: Product, As drawn Comment: keto cyclo butanone synthese	2011-07-31		After each update			

1- Comment créer une alerte?

Créer et lancer votre requête. Sur le menu Results, cliquez sur le lien *Create Alert* situé sous l'outil de navigation. Complétez la forme d'alerte et sauvez-la.

2- Bouton View results

Cette fonctionnalité vous permet de voir les résultats lié à l'alerte dans la page *Results*.

3-Fonctionnalité Modify alert

Permet de modifier les critères définissant votre alerte

4- Bouton Delete

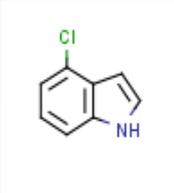
Cochez la boîte située à gauche de la colonne contenant le nom de l'alerte ; le bouton *Delete* s'active. Cliquez-le pour supprimer l'alerte concernée.

Query Results Synthesis Plans History My Alerts My Settings Help Info

Modify an existing alert **1**

Hint: you may change the e-mail address of a person, who should be copied on the alert, the comment/description, the frequency of the alert, or the E-mail format. If you want to modify the query of the alert, then please return to the list of available alerts, select 'Edit query', run the search and click 'Create alert'. [Privacy Policy](#)

Query



Reactions: Product, As drawn, Yield (numerical)>=50 PROXIMITY
Solvent='methanol';'toluene'

Name of Alert

E-mail Address send copy to
e.g. a.smith@test.com;b.smith@test.com

Comment/Description

Frequency

E-mail format html text

2

1-Fonctionnalité Modify alert

Permet de modifier les critères définissant votre alerte (*Name of Alert, Copy to, Comment/Description, Frequency and Email format*).

2- Le bouton Save

permet de sauvegarder les modifications apportées.

14-Sauvegarde d'une recherche Rappel d'une recherche sauvegardée

Reactions | Substances and Properties | Text, Authors and more

Generate structure from name

Double click this frame and draw reaction query

Search as / by

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

Include tautomers
 Ignore stereo
 No isotopes
 No charges
 No radicals
 No additional rings
 Keep Fragments separate
 Ignore Atom Mappings

Conditions (Form-based) | Conditions (Advanced)

Reaction Data
Bibliographic Data

Clear Query | Load Query/Batch | Save Query

Search

Comment sauvegarder une requête?

1. À n'importe quel moment, vous pouvez revenir sur la page de requête « query » et sauvegarder la requête en cours., en cliquant sur « save query ».

Conditions (Form-based) | Conditions (Advanced)

Reaction Data
Bibliographic Data

File: C:\Documents and Settings\name\My documents\reaxys\search_ Parcourir... Open

Click "Browse..." - button to open a previously saved Reaxys query or a file containing batch queries. Refer to help for more details.

Clear Query | Load Query/Batch | Save Query

Search

Comment afficher une requête préalablement sauvegardée?

1. Vérifiez que vous êtes sur un onglet de requête et cliquer le bouton Load query.
2. Localisez à l'aide du bouton Browse votre fichier sauvegardé en format XML et cliquez le bouton open.

N°	Etablissement
1	Université Badji Moktar de Annaba
2	Université El Hadj Lakhdar de Batna
3	Université de Béchar
4	Université Abderrahmane Mira de Béjaia
5	Université Mohamed Khider de Biskra
6	Université Saad Dahlab de Blida
7	Université M'hamed Bougara de Boumerdès
8	Université Mentouri de Constantine
9	Université Ziane Achour de Djelfa
10	Université 8 mai 1945 de Guelma
11	Université Omar Telidji de Laghouat
12	Université de Mascara
13	Université de M'Sila
14	Université d'Oran - Sénia
15	Université Kasdi Merbah de Ouargla
16	Université Larbi Ben Mhidi de Oum El Bouaghi
17	Université Ferhat Abbas de Sétif
18	Université El Djilali Liabès de Sidi Bel Abbès
19	Université des sciences et de la technologie Houari Boumediène (USTHB)
20	Université des sciences et de la technologie Mohamed Boudiaf d'Oran (USTO)
21	Université Larbi Tebessi de Tébessa
22	Université Ibn Khaldoun de Tiaret
23	Université Mouloud Maameri de Tizi Ouzou
24	Université Aboubeker Belkaid de Tlemcen
25	Centre universitaire de Khenchela
26	Ecole normale supérieure de Kouba
27	Ecole Nationale Polytechnique (ENS-P ex-ENP)

Pour toute information contactez :

CADOC

Rue de la flanelle cité Ain Allah, Delly Brahim –
16320 Alger

BP 143 – 16000 Alger-Gare

Tel : 021910352 Fax : 021910351

E-mail: cadoc@cadoc.dz

Reaxys E-Customer Service

Theodor-Heuss-Allee 108

60486 Frankfurt/Main, Allemagne

Tel: +49-69-5050 4268

Fax: +49-69-5050 4213

Email: ninfo@reaxys.com

