

Elsevier R&D Solutions

Reaxys<sup>®</sup>

Skrócona  
instrukcja



ELSEVIER



## Spis treści

1. Strona Zapytanie	3
2. Tworzenie zapytań	
Reakcje	4
Substancje	5
Chemia medyczna	7
Literatura	8
Właściwości	9
Produkty naturalne	10
3. Wyniki	
Filtry	11
Widok analityczny	12
Mapa cieplna	13
Plany syntezy	14
4. Zapisywanie, drukowanie, eksportowanie i wysyłanie raportów	15

## 1. Strona Zapytanie

Wyszukiwanie można rozpocząć na kilka sposobów (zob. rysunek 1).

**Ask Reaxys** – interpretuje słowa kluczowe wyszukiwania napisane w języku naturalnym i zwraca najlepiej dopasowane wyniki.

**Reactions** – umożliwia dostęp do pól danych, takich jak *Yield*, *Solvent Reaction Details*, *Reagent/Catalyst* oraz *Reaction Type*.

**Substances, Names, Formulas** – umożliwia dostęp do pól danych, takich jak *Molecular Formula*, *CAS Registry Number* oraz *Chemical Name*.

**Medicinal Chemistry** – umożliwia dostęp do pól danych z możliwością przeszukiwania, takich jak *Target Name*, *Substance Action on Target*, *Bioassay Category*, *Bioassay Animal Model*, *Cells/Cell Lines* oraz *Measurement pX*.

**Literature** – umożliwia dostęp do formularza zawierającego pola takie jak *Authors*, *Patent Number* oraz *Publication Year*.

**ReaxysTree** – umożliwia przeglądanie terminów, szczególnie dotyczących transformacji chemicznych i właściwości substancji, uporządkowanych hierarchicznie. Pozwala to odkrywać powiązania między pozornie różnymi aspektami chemii, a także ułatwia znajdowanie potrzebnej literatury.

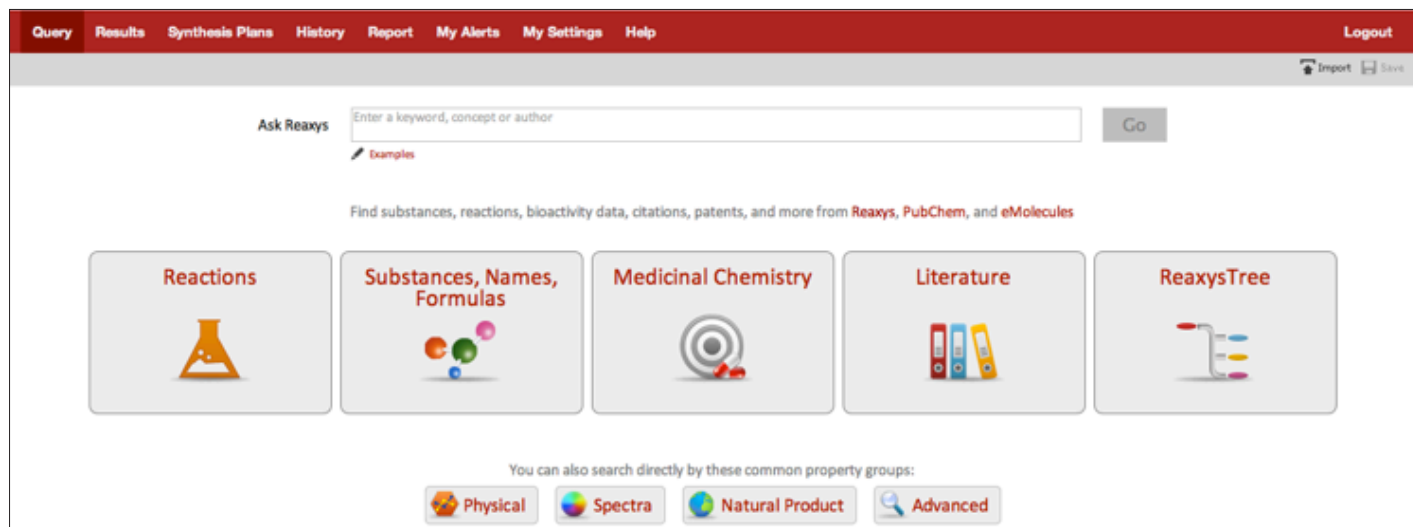
**Physical** – umożliwia dostęp do pól danych, takich jak *Melting Point*, *Boiling Point* oraz *Refractive Index*.

**Spectra** – umożliwia dostęp do pól danych, takich jak *NMR Spectroscopy*, *IR Spectroscopy* oraz *Mass Spectrometry*.

**Natural Product** – umożliwia dostęp do formularza służącego do znajdowania informacji na temat produktów naturalnych i sposobów ich wyodrębniania.

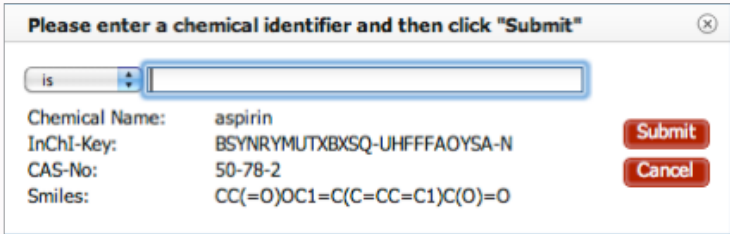
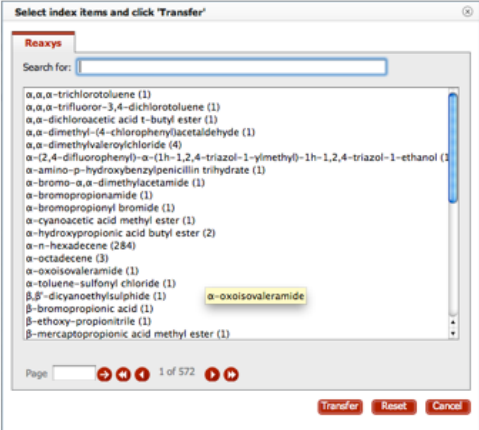
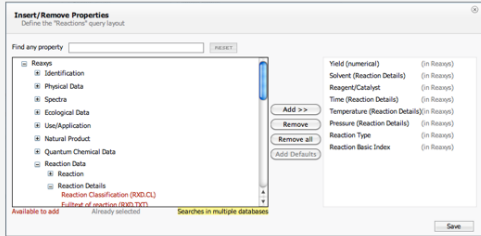
**Advanced** – po wybraniu tej opcji należy kliknąć pozycję **Show Property List**. Umożliwi to dostęp do struktury danych i pozwoli szczegółowo przeszukiwać bibliografię oraz dane, a także korzystać ze słów kluczowych. W oknie **Property List** można tworzyć zapytania przy użyciu definicji pól, szukanych terminów oraz operatorów danych.

**Uwaga:** podczas wyszukiwania przy użyciu opcji Reactions, Substances, Medicinal Chemistry i Advanced można korzystać ze struktury chemicznej. Strukturę można narysować za pomocą funkcji **Structure Editors** wygenerować na podstawie nazwy albo identyfikatora struktury.

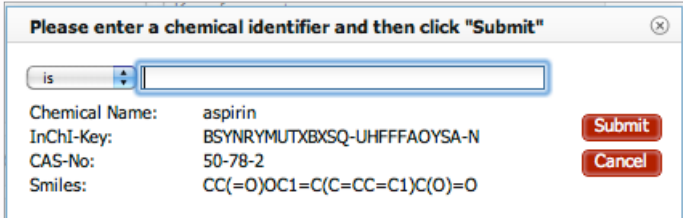
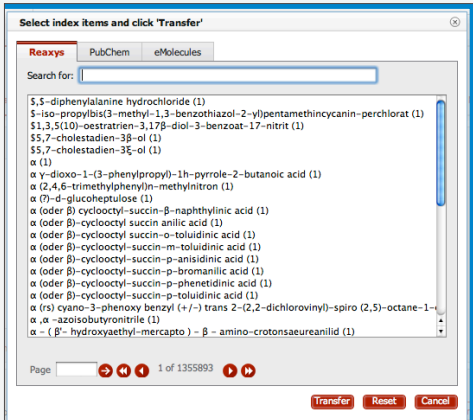
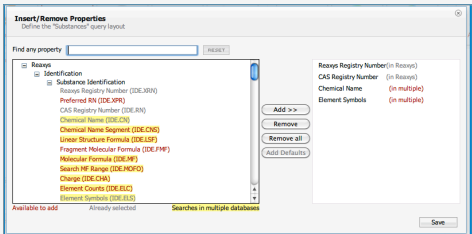


Rysunek 1.  
Strona Zapytanie

## 2. Tworzenie zapytań: Reakcje

Funkcja	Komentarz
Ask Reaxys	Wprowadź szukane terminy w języku naturalnym. Na przykład: „synthesis of p-phenylnitrobenzene” (synteza p-fenylnitrobenzenu), „Suzuki coupling” (wiązanie Suzukiego), „adler phenol oxidation” (utlenianie fenolu adler)
Tworzenie szablonu struktury na podstawie nazwy substancji	<p>Wybierz opcję <b>Reactions</b> i kliknij czerwone łącze poniżej pola <b>Structure</b>. W polu tekstowym (1) wpisz nazwę, numer CAS lub inny identyfikator produktu, substratu albo katalizatora i kliknij przycisk <b>Submit</b>.</p>  <p>1. Pole tekstowe służące do tworzenia struktury na podstawie identyfikatora chemicznego</p>
Formularze wyszukiwania	<p>Wybierz opcję <b>Reactions</b> i przejdź do formularza <b>Reaction Data</b> poniżej pola struktury. Wybierz rolę danego związku: <i>Product, Starting material, Reagent/Catalyst</i> lub <i>Any role</i>.</p> <p>Wypełnij pola <i>Product Name, Yield, Reaction Type</i> itd.</p> <p>Kliknij pozycję <b>Lookup</b>, aby otworzyć menu (2) zawierające terminy w pełni zgodne z taksonomią Reaxys.</p> <p>Kliknij przycisk <b>Add/Remove</b> poniżej formularza, aby otworzyć menu umożliwiające dostosowanie szukanego terminu (3).</p>  <p>2. Menu przeglądania szukanych terminów (w tym przykładzie: rozpuszczalniki)</p>  <p>3. Menu dostosowywania terminów w formularzu wyszukiwania <b>Reaction Data</b></p>
Edytory struktury	Wybierz opcję <b>Reactions</b> , kliknij przycisk <b>Structure Editors</b> w polu struktury i wybierz jedną z dostępnych opcji. Więcej informacji na temat korzystania z funkcji edytorów struktury zawiera sekcja <b>Reaxys Help</b> .

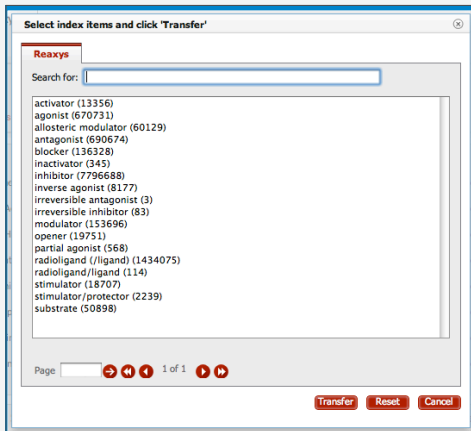
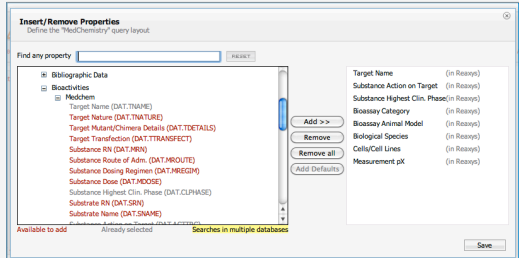
## 2. Tworzenie zapytań: **Substancje**

Funkcja		Komentarz
Ask Reaxys		Wpisz nazwę chemiczną lub numer CAS. Na przykład: „quinolone” (chinolon), „91-22-5”
Tworzenie szablonu struktury na podstawie nazwy substancji	Wybierz opcję <b>Substances</b> i kliknij czerwone łącze poniżej pola <b>Structure</b> . W polu tekstowym (1) wpisz nazwę, numer CAS lub inny identyfikator związku i kliknij przycisk <b>Submit</b> .	 <p>1. Pole tekstowe służące do tworzenia struktury na podstawie identyfikatora chemicznego</p>
Formularze wyszukiwania	<p>Wybierz układ zapytania <b>Substances</b> i przejdź do formularza <b>Identification</b> poniżej pola <b>Structure</b>.</p> <p>Wypełnij pola <i>Reaxys Registry Number</i>, <i>CASRegistry Number</i>, <i>Chemical Name</i> itd.</p> <p>Wybierz rolę danego związku: <i>Product</i>, <i>Starting material</i>, <i>Reagent/Catalyst</i> lub <i>Any role</i>.</p> <p>Kliknij pozycję <b>Lookup</b>, aby otworzyć menu (2) zawierające terminy w pełni zgodne z taksonomią Reaxys.</p> <p>Kliknij przycisk <b>Add/Remove fields</b> poniżej formularza, aby otworzyć menu umożliwiające dostosowanie szukanego terminu (3).</p>	  <p>2. Menu przeglądania szukanych terminów (w tym przykładzie: nazwy chemiczne)</p> <p>3. Menu dostosowywania terminów w formularzu wyszukiwania <b>Identifications</b></p>
Edytory struktury	Wybierz opcję <b>Substances</b> , kliknij przycisk <b>Structure Editors</b> w polu struktury i wybierz jedną z dostępnych opcji. Więcej informacji na temat korzystania z funkcji edytorów struktury zawiera sekcja <b>Reaxys Help</b> .	

## 2. Tworzenie zapytań: **Substancje**

Funkcja	Komentarz																																																																																																																																																																																												
<p>Kreator wzorów</p>	<p>Aby ułatwić tworzenie wzorów związków nieorganicznych lub metaloorganicznych, w systemie Reaxys dostępny jest kreator wzorów korzystający z układu okresowego pierwiastków (1).</p> <p>Wybierz opcję <b>Substances</b> i kliknij pozycję <b>Formuła Builder</b>.</p> <p>Kliknij pierwiastek i ustaw zakres liczby atomów za pomocą strzałek. Możesz dodać grupy specjalne z układu okresowego, klikając ich skrót. Po prawej stronie dostępne są także inne opcje (1).</p> <div data-bbox="1003 397 1885 906" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p><b>Formuła Builder</b></p> <p>Click any element, group, or series to start building your query.</p> <table border="1" style="width: 100%; text-align: center; border-collapse: collapse;"> <tr> <td>1A</td><td>2A</td><td>3B</td><td>4B</td><td>5B</td><td>6B</td><td>7B</td><td>8B</td><td>9B</td><td>10B</td><td>1B</td><td>2B</td><td>3A</td><td>4A</td><td>5A</td><td>6A</td><td>7A</td><td>8A</td> </tr> <tr> <td>1</td><td>H</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>He</td> </tr> <tr> <td>2</td><td>Li</td><td>Be</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>B</td><td>C</td><td>N</td><td>O</td><td>F</td><td>Ne</td> </tr> <tr> <td>3</td><td>Na</td><td>Mg</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>Al</td><td>Si</td><td>P</td><td>S</td><td>Cl</td><td>Ar</td> </tr> <tr> <td>4</td><td>K</td><td>Ca</td><td>Sc</td><td>Ti</td><td>V</td><td>Cr</td><td>Mn</td><td>Fe</td><td>Co</td><td>Ni</td><td>Cu</td><td>Zn</td><td>Ga</td><td>Ge</td><td>As</td><td>Se</td><td>Br</td><td>Kr</td> </tr> <tr> <td>5</td><td>Rb</td><td>Sr</td><td>Y</td><td>Zr</td><td>Nb</td><td>Mo</td><td>Tc</td><td>Ru</td><td>Rh</td><td>Pd</td><td>Ag</td><td>Cd</td><td>In</td><td>Sn</td><td>Sb</td><td>Te</td><td>I</td><td>Xe</td> </tr> <tr> <td>6</td><td>Cs</td><td>Ba</td><td>La</td><td>Hf</td><td>Ta</td><td>W</td><td>Re</td><td>Os</td><td>Ir</td><td>Pt</td><td>Au</td><td>Hg</td><td>Tl</td><td>Pb</td><td>Bi</td><td>Po</td><td>At</td><td>Rn</td> </tr> <tr> <td>7</td><td>Fr</td><td>Ra</td><td>Ac</td><td>Rf</td><td>Db</td><td>Sg</td><td>Bh</td><td>Hs</td><td>Mt</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td> </tr> <tr> <td></td><td></td><td></td><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td></td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td><td></td> </tr> <tr> <td></td><td></td><td></td><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td></td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td><td></td> </tr> </table> <div style="margin-top: 10px;"> <p><b>Special groups:</b></p> <p>Me Et Ph</p> <p><small>Note: its also possible to enter</small></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>ranges or enumerations defined via variables, e.g. Fe<sub>x</sub>O<sub>y</sub>, x=2,3 y=2-4</li> <li>Arithmetic terms, e.g. C<sub>n</sub>H<sub>2n-2</sub> n=3,4,5</li> </ul> </div> </div> <p style="text-align: center;">1. Kreator wzorów</p>	1A	2A	3B	4B	5B	6B	7B	8B	9B	10B	1B	2B	3A	4A	5A	6A	7A	8A	1	H																He	2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt													Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy		Ho	Er	Tm	Yb	Lu					Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf		Es	Fm	Md	No	Lr	
1A	2A	3B	4B	5B	6B	7B	8B	9B	10B	1B	2B	3A	4A	5A	6A	7A	8A																																																																																																																																																																												
1	H																He																																																																																																																																																																												
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne																																																																																																																																																																											
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar																																																																																																																																																																											
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																																																																																																																																																																											
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																																																																																																																																																																											
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																																																																																																																																																																											
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt																																																																																																																																																																																				
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy		Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																																																																																																																																																												
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf		Es	Fm	Md	No	Lr																																																																																																																																																																												

## 2. Tworzenie zapytań: **Chemia medyczna**

Funkcja	Komentarz
Ask Reaxys	<p>Wpisz szukane terminy dotyczące bioaktywnych związków i związków docelowych lub danych bioaktywności.</p> <p>Na przykład: „5-ht1a inhibitor” (inhibitor 5-ht1a), „Na channel” (kanał sodowy), „CXCR4 inhibitor” (inhibitor CXCR4), „Lupeol”</p>
Formularze wyszukiwania	<p>Wybierz opcję <b>Medicinal Chemistry</b> i przejdź do formularza <b>Bioactivities</b>.</p> <p>Wypełnij pola <i>Target Name</i>, <i>Substance Action on Target</i>, <i>Bioassay Category</i> itd.</p> <p>Kliknij pozycję <b>Lookup</b>, aby otworzyć menu (1) zawierające terminy w pełni zgodne z taksonomią Reaxys.</p> <p>Kliknij przycisk <b>Add/Remove fields</b> poniżej formularza, aby otworzyć menu umożliwiające dostosowanie szukanego terminu (2).</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; margin-top: 20px;"> <div style="text-align: center;">  <p>1. Menu przeglądania szukanych terminów (w tym przykładzie: działania substancji na związki docelowe)</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>2. Menu dostosowywania terminów w formularzu wyszukiwania <b>Bioactivities</b></p> </div> </div>
Edytory struktury	<p>Wybierz opcję <b>Medicinal Chemistry</b> i kliknij łącze <b>Structure</b> na pasku narzędzi u dołu. W górnej części formularza wyszukiwania zostanie otwarte pole struktury. Kliknij przycisk <b>Structure Editors</b> i wybierz jedną z opcji. Więcej informacji na temat korzystania z funkcji edytorów struktury zawiera sekcja <b>Reaxys Help</b>.</p>

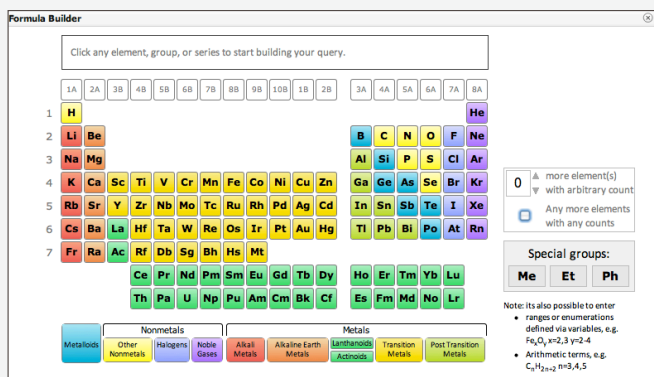
## 2. Tworzenie zapytań: Literatura

Funkcja	Komentarz
Ask Reaxys	Wpisz szukane terminy. Na przykład: „publications about quasicrystals” (publikacje na temat kwazikryształów), „published by Schrock” (publikacje Schrocka), „Tetrahedron, 2014, 70, 2343” (Tetrahedron, 2014, 70, 2343)
ReaxysTree	<p>Wybierz opcję <b>ReaxysTree</b> (1). Przejdź do odpowiedniego tematu w drzewie folderów lub wpisz termin w polu wyszukiwania, kliknij przycisk <b>Search</b> i usuń zaznaczenia tematów, które Cię nie interesują. Kliknij przycisk <b>Search Literature</b>.</p> <div data-bbox="1186 435 1682 787" data-label="Image"> </div> <p>1. ReaxysTree</p>
Formularze wyszukiwania	<p>Wybierz opcję <b>Literature</b> i przejdź do formularza <b>Bibliographic Data</b>, w którym możesz wpisywać zapytania, korzystając z pól <i>Document Type</i>, <i>Authors</i>, <i>Journal Title</i> oraz <i>Publication Year</i>. Kliknij pozycję <b>Lookup</b>, aby otworzyć menu (2) zawierające terminy w pełni zgodne z taksonomią.</p> <p>Kliknij przycisk <b>Add/Remove fields</b> poniżej formularza, aby otworzyć menu umożliwiające dostosowanie szukanego terminu (3).</p> <div data-bbox="953 865 1394 1263" data-label="Image"> </div> <p>2. Menu przeglądania szukanych terminów (w tym przykładzie: słowa kluczowe)</p> <div data-bbox="1430 938 1955 1195" data-label="Image"> </div> <p>3. Menu dostosowywania terminów w formularzu <b>Bibliographic Data</b></p>
Dodawanie struktury do zapytania o literaturę	Wybierz opcję <b>Literature</b> i kliknij łącze <b>Structure</b> na pasku narzędzi u dołu. W górnej części formularza wyszukiwania zostanie otwarte pole struktury. Kliknij przycisk <b>Structure Editors</b> i wybierz jedną z opcji. Więcej informacji zawiera sekcja <b>Reaxys Help</b> .



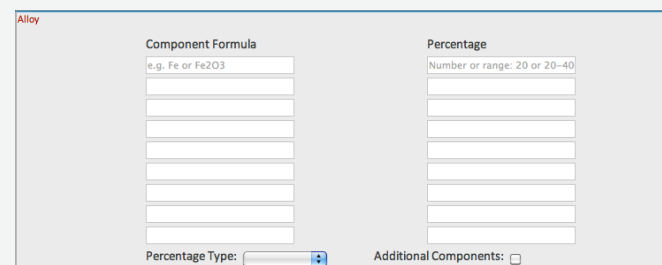
## 2. Tworzenie zapytań: Właściwości

Funkcja	Komentarz
Ask Reaxys	Wprowadź szukane terminy dotyczące właściwości fizycznych. Na przykład: „boiling point of benzene” (temperatura wrzenia benzenu), „density of quinoline” (gęstość chinoliny).
Formularze wyszukiwania	Wybierz opcję <b>Physical</b> lub <b>Spectra</b> i przejdź do odpowiedniego formularza. Kliknij pozycję <b>Lookup</b> , aby otworzyć menu zawierające terminy w pełni zgodne z taksonomią. Kliknij przycisk <b>Add/Remove fields</b> poniżej formularza, aby dostosować układ zapytania.
Dodawanie struktury do zapytania o właściwości	Wybierz opcję <b>Physical</b> lub <b>Spectra</b> i kliknij łącze <b>Structure</b> na pasku narzędzi u dołu. W górnej części układu zapytania zostanie otwarte pole struktury. Kliknij przycisk <b>Structure Editors</b> i wybierz jedną z opcji. Więcej informacji na temat korzystania z funkcji edytorów struktury zawiera sekcja <b>Reaxys Help</b> .
Wyszukiwanie wzorów molekularnych i stopów	Wybierz opcję <b>Substances</b> . Kliknij jedno z łączy na pasku narzędzi u dołu strony.



1. Kreator wzorów

**Molecular Formula (1):** Kliknij pierwiastek i ustaw zakres liczby atomów za pomocą strzałek. Możesz dodać grupy specjalne z układu okresowego, klikając ich skróty. Po prawej stronie kreatora wzorów dostępne są także inne opcje.

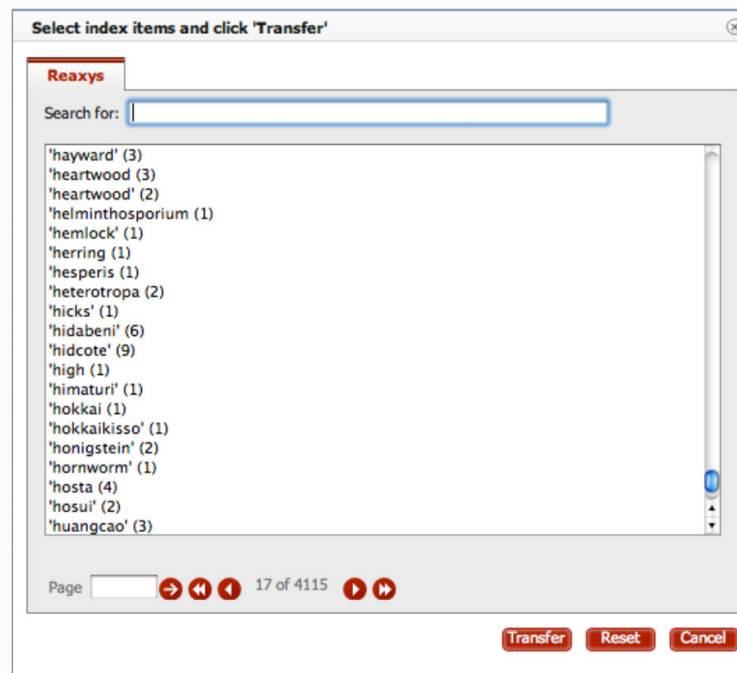


2. Formularz tworzenia zapytań do wyszukiwania stopów

**Alloy (2):** Z menu rozwijanego **Percentage Type**, wybierz odpowiedni typ. Dodaj pierwiastki w kolumnach po lewej stronie. Pamiętaj, że w nazwach jest rozróżniana wielkość liter. Dodaj wartości procentowe (lub zakresy) w kolumnach po prawej stronie. W razie potrzeby zaznacz pole **Additional Components**.

## 2. Tworzenie zapytań: Produkty naturalne

Funkcja	Komentarz
Ask Reaxys	Wprowadź szukane terminy dotyczące produktów naturalnych. Na przykład: „isolation from olives” (wyodrębniane z oliwek), „nmr of luteolin” (nmr luteoliny), „luteolin patents” (patenty na luteolinę)
Formularze wyszukiwania	<p>Wybierz opcję <b>Natural Product</b>. W polu <b>Isolation from Natural Product</b> można wprowadzać nazwy produktów naturalnych.</p> <p>Kliknij pozycję <b>Lookup</b>, aby otworzyć menu (1) zawierające terminy w pełni zgodne z taksonomią.</p> <p>Do znajdowania źródeł informacji o produktach naturalnych doskonale nadaje się także układ zapytania Literature.</p> <p>Więcej informacji zawiera sekcja poświęcona wyszukiwaniu literatury na stronie 6.</p>
Dodawanie struktury do zapytania o produkt naturalny	<p>Wybierz opcję <b>Natural Product</b> i kliknij łącze <b>Structure</b> na pasku narzędzi u dołu. W górnej części formularza wyszukiwania zostanie otwarte pole struktury.</p> <p>Kliknij przycisk <b>Structure Editors</b> i wybierz jedną z opcji. Więcej informacji na temat korzystania z funkcji edytorów struktury zawiera sekcja <b>Reaxys Help</b>.</p>



1. Menu przeglądania szukanych terminów (w tym przykładzie: produkty naturalne)

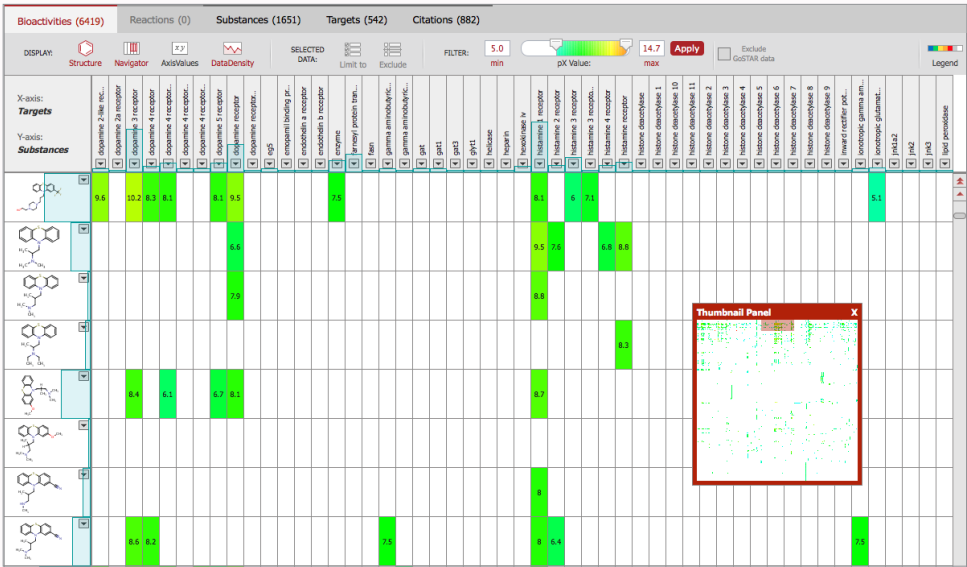
## 3. Wyniki: Filtry

Zadanie	Komentarz	
<p>Filtrowanie wyników</p>	<p>W lewej części strony wyników są wyświetlane kategorie filtrów (1). Aby wyświetlić wszystkie filtry w ramach danej kategorii, należy otworzyć wybraną kategorię. Do wyników można zastosować filtry z wielu kategorii.</p> <p>Niektóre filtry mają kartę <b>by value</b> lub <b>by group</b>. Czasem dostępne jest także łącze <b>More</b> umożliwiające dodanie kolejnych szczegółów.</p>	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div data-bbox="821 516 1178 1227" style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px;"> <p>Filter by:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Substructure</li> <li>Molecular Weight</li> <li>Number of Fragments</li> <li>Physical Data</li> <li>Spectroscopic Data</li> <li>Ecological Data</li> <li>Natural Product</li> <li>Availability</li> <li>Availability in other DBs</li> <li>LogP</li> <li>H Bond Donor (HBD)</li> <li>H Bond Acceptor (HBA)</li> <li>Polar surface Area (PSA)</li> <li>Highest clinical phase</li> </ul> </div> <div data-bbox="1203 792 1560 1227" style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px;"> <ul style="list-style-type: none"> <li>Yield</li> <li>Record Type</li> <li>Reagent/Catalyst</li> <li>Solvent</li> <li>Reaction Type</li> <li>No. of Steps</li> <li>Product Availability</li> <li>Reactant Availability</li> <li>Availability in other DBs</li> </ul> </div> <div data-bbox="1585 605 1942 1227" style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px;"> <ul style="list-style-type: none"> <li>Targets</li> <li>Target Species</li> <li>Cells Lines</li> <li>Effect</li> <li>Parameters</li> <li>pX(-log(Affinity))</li> <li>Document Type</li> <li>Authors</li> <li>Patent Assignee</li> <li>Journal Title</li> <li>Publication Year</li> </ul> </div> </div> <p style="text-align: center; margin-top: 20px;">1. Kategorie filtrów</p>

## 3. Wyniki: Widok analityczny

Zadanie	Komentarz
<p data-bbox="121 865 336 917">Analiza wyników w widoku Analysis View</p>	<p data-bbox="394 574 877 829">W widoku Analysis View systemu Reaxys użytkownicy mogą wybierać kryteria analityczne umożliwiające określenie relacji między wynikami. Za pomocą tej funkcji można na przykład szybko znaleźć osoby i organizacje działające w danym obszarze badań, sortować wyniki według wydajności, a także określać katalizatory i rozpuszczalniki dla wybranej klasy reakcji. Przycisk <b>Open Analysis View</b> nad listą wyników (1) umożliwia otwarcie panelu z histogramami analiz dotyczącymi danego zestawu wyników (2).</p> <p data-bbox="394 846 877 943">Z menu rozwijanego Histogram A wybierz kategorię histogramu. Liczba pasujących wyników w zestawie odpowiadającym wybranej kategorii zostanie wyświetlona na histogramie w kolorze czerwonym.</p> <p data-bbox="394 959 877 1081">Z menu rozwijanego Histogram B wybierz kategorię histogramu. Liczba pasujących wyników w wybranej kategorii, które należą także do kategorii z histogramu A, zostanie wyświetlona na histogramie B w kolorze żółtym.</p> <p data-bbox="394 1097 877 1122">Można badać relacje między różnymi kategoriami.</p> <p data-bbox="394 1138 877 1211">Aby ograniczyć zestaw wyników do potrzebnego zakresu, kliknij przycisk <b>Limit to</b>. Aby usunąć nieistotne wyniki, kliknij przycisk <b>Exclude</b>.</p> <div data-bbox="995 542 1913 688"> </div> <p data-bbox="1192 711 1717 735">1. Przycisk otwierający widok Analysis View znajduje się nad wynikami</p> <div data-bbox="995 829 1913 1208"> </div> <p data-bbox="1262 1230 1646 1255">2. Podstawowe histogramy w widoku Analysis View</p>

## 3. Wyniki: Mapa cieplna

Funkcja	Komentarz
<p style="text-align: center;">Analiza relacji powinowactwa związków i związków docelowych w widoku mapy cieplnej</p>	<p>Widok mapy cieplnej pozwala uzyskać klarowny obraz relacji między związkami a związkami docelowymi z uwzględnieniem kluczowych parametrów, umożliwiając szybkie identyfikowanie najważniejszych oddziaływań. Dzięki możliwości swobodnej zmiany parametrów można znajdować nowe relacje między związkami a białkami docelowymi lub liniami komórkowymi.</p> <p>Kliknięcie przycisku <b>Bioactivities</b> w prawym górnym rogu listy wyników spowoduje otwarcie widoku Heatmap (1). Domyślnie na osi Y są wyświetlane substancje, a na osi X — związki docelowe. Można to zmienić w menu rozwijanym pod ikoną <b>Axis Values</b>.</p> <p>Kliknij ikonę <b>Structure</b>, aby wyświetlić struktury. Kliknij menu rozwijane dowolnej struktury, aby wyświetlić szczegóły dotyczące substancji i opcje kopiowania. Kliknij linię nagłówka kolumny, aby zmienić jej szerokość i wyświetlić większe struktury.</p> <p>Kliknij ikonę <b>Navigator</b>, aby wyświetlić mapę danych. Kliknięcie w obrębie mapy spowoduje przejście do różnych danych w zestawie wyników.</p> <p>Kliknij ikonę <b>Data Density</b>, aby wyróżnić kolumny zawierające najwięcej danych.</p> <p>Kliknij strzałkę listy rozwijanej w dowolnej kolumnie, aby wyświetlić opcje usuwania i sortowania.</p> <p>Aby zaznaczyć kolumny, kliknij ich nagłówki. Następnie możesz doprecyzować dane widoczne na mapie cieplnej, korzystając z opcji <b>Limit to</b> i <b>Exclude</b>. Wartości pX w systemie Reaxys to znormalizowane wartości powinowactwa związków i związków docelowych obliczone na podstawie eksperymentalnych punktów danych, aby możliwe było porównywanie danych z różnych źródeł i prób. Aby ograniczyć wyniki do określonego zakresu wartości pX, użyj suwaków <b>pX Value</b>. Kolor w polu suwaka wskazuje powinowactwo: od najniższego (niebieski) do najwyższego (czerwony).</p> <p>Zaznaczenie opcji <b>Exclude GoSTAR data</b> umożliwia wykluczenie danych pochodzących z baz danych GVK Bio GoSTAR.</p>
	 <p style="text-align: center;">1. Mapa cieplna (dostępna tylko w Reaxys Medicinal Chemistry)</p>

## 3. Wyniki: Plany syntezy

Funkcja	Komentarz
<p data-bbox="142 829 317 906">Tworzenie retrosyntetycznego planu syntezy</p>	<p data-bbox="394 443 842 667">Plan syntezy można utworzyć na dwa sposoby:</p> <p data-bbox="394 483 842 581">A. Wybierz opcję <b>Synthesis Plans</b> na górnym pasku nawigacyjnym. Kliknij przycisk <b>New</b> i wpisz zapytanie o strukturę lub reakcję, aby rozpocząć tworzenie planu (1).</p> <p data-bbox="394 597 842 667">B. Na ekranie <b>Results</b> wybierz odpowiedni związek na karcie <b>Reactions</b>, <b>Substances</b> lub <b>Citations</b> i kliknij łącze <b>Synthesize</b> (2).</p> <p data-bbox="394 699 842 743">Zostaną wyświetlone trzy opcje generowania drogi syntezy:</p> <p data-bbox="394 760 842 803"><b>Manually</b> — ta opcja umożliwia wybrane reakcje u dołu strony <b>Synthesis Plans</b>.</p> <p data-bbox="394 820 842 878"><b>by AutoPlan</b> — ta opcja umożliwia automatyczne tworzenie do 10 dróg syntezy zgodnie z ustalonymi opcjami.</p> <p data-bbox="394 894 842 954"><b>by AutoPlan (with options)</b> — ta opcja umożliwia automatyczne tworzenie do 10 planów zgodnie z opcjami wybranymi przez użytkownika.</p> <p data-bbox="394 976 842 1219">Aby edytować plan syntezy, kliknij łącze <b>Synthesize</b> pod dowolną substancją w planie (3). Zostaną wyświetlone opcje <b>Manually</b>, <b>by AutoPlan</b> oraz <b>AutoPlan (with options)</b>, których działanie opisano powyżej. Dostępna jest też opcja <b>by Query</b>, która powoduje otwarcie formularza zapytania o strukturę. Aby dodać i porównać alternatywne drogi, kliknij łącze <b>Add</b>. Aby usunąć część planu, kliknij łącze <b>Remove</b>. Aby wyświetlić warunki reakcji, kliknij łącze <b>Details</b> na planie.</p> <p data-bbox="394 1240 842 1338">Aby zapisać plan jako plik .xml, kliknij przycisk <b>Save</b>. Aby wyeksportować plan do wybranego formatu, kliknij przycisk <b>Output</b>. Aby zapisać plan na stronie Report, kliknij czerwoną trójkąt.</p> <div data-bbox="968 370 1885 813"> </div> <p data-bbox="1310 841 1598 862">1. Generowanie nowego planu syntezy</p> <div data-bbox="968 954 1402 1268"> </div> <p data-bbox="1020 1338 1377 1382">2. Łącze <b>Synthesize</b> poniżej struktury w zestawie wyników <b>Substances</b></p> <div data-bbox="1461 906 1896 1312"> </div> <p data-bbox="1482 1338 1875 1359">3. Łącza <b>Synthesize</b>, <b>Add</b> i <b>Remove</b> w planie syntezy.</p>

## 4. Zapisywanie, drukowanie, eksportowanie i wysyłanie raportów

**Zapisywanie zapytania** — kliknij przycisk **Save** w prawym górnym rogu strony zapytania.

**Zapisywanie listy wyników** — kliknij przycisk **History**, a następnie kliknij łącze **Store** w prawej części strony (1).

**Drukowanie bieżącej strony** — kliknij ikonę **Print** na pasku narzędzi z lewej strony (2).

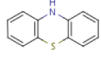
**Eksport wyników** — kliknij ikonę **Export** (2). Następnie wybierz żądany format, zakres i zawartość.

**Dodawanie danych do raportu** — wskaż myszą wynik (strukturę, punkt danych, substancję, reakcję lub drogę syntezy).

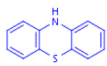
Kliknij czerwony trójkąt, który pojawi się obok (2). Wybierz odpowiednią opcję.

**Wyświetlanie raportu** — kliknij pozycję **Report**. Rozmieść elementy za pomocą łącz **Show**, **Move up**, **Move down** oraz **Remove**. Dodaj tekst, korzystając z łącz **Annotate**.

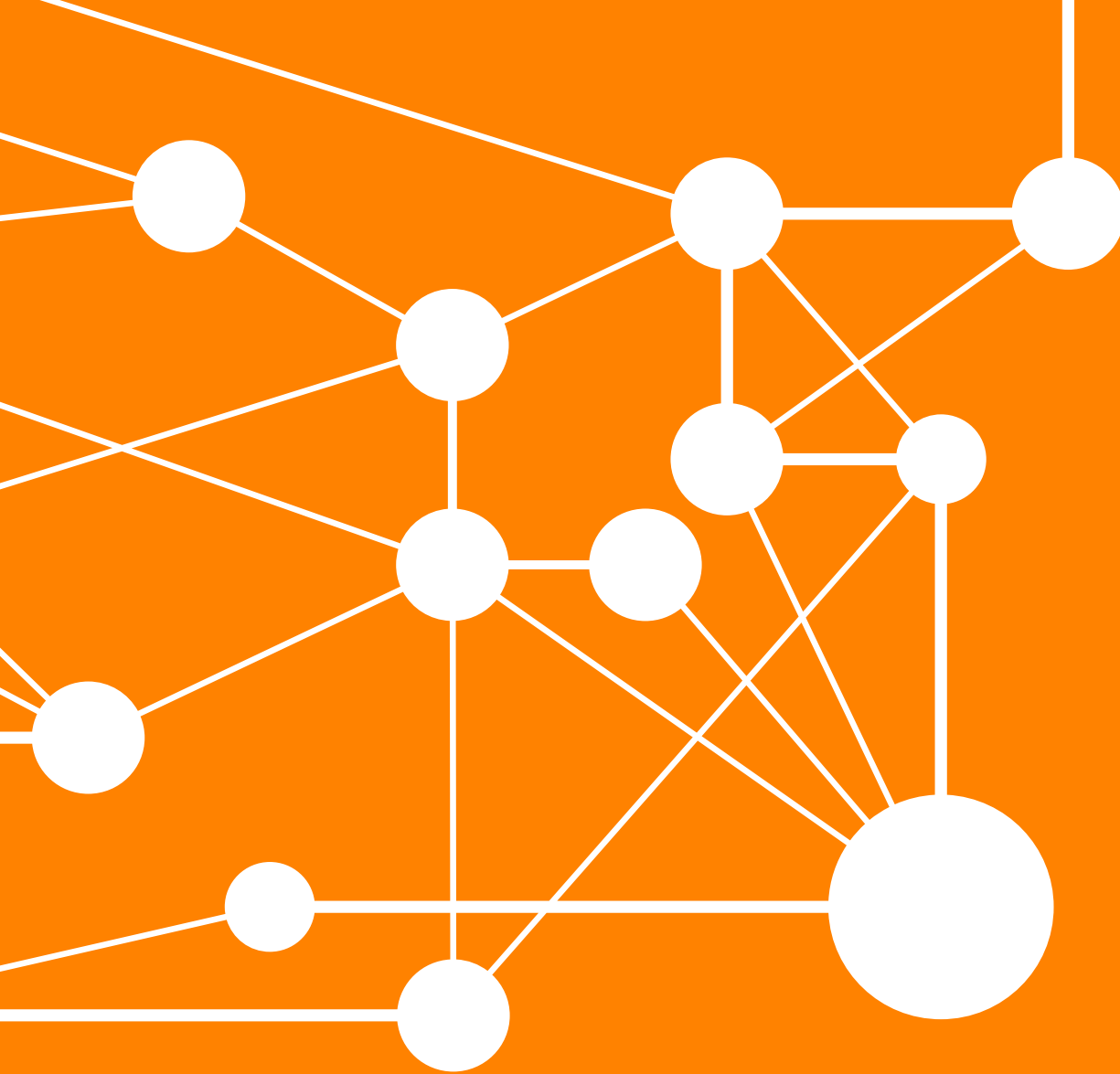
**Wysyłanie raportu pocztą e-mail** — kliknij ikonę **Send** na stronie **Report** i wypełnij formularz. **Report** zostanie wysłany jako spakowany załącznik w formacie HTML.

Query	Temporary result description	Date
	116 substances Ask Reaxys Substances: As drawn, Align results with query	2015-07-24 18:02
	2742 reactions	
	135 bioactivities	
	19 targets	
	1361 citations	

1. Łącze **Store** w zapytaniu

Structure	Structure/Compound Data	N° of preparations All Preps   All Reactions	Available Data	Target	N° of ref.
	<b>Chemical Name:</b> (10H)-phenothiazine <b>Reaxys Registry Number:</b> 143237 <b>CAS Registry Number:</b> 92-84-2 <b>Type of Substance:</b> heterocyclic <b>Molecular Formula:</b> C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NS <b>Linear Structure Formula:</b> S(C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> ) <sub>2</sub> NH <b>Molecular Weight:</b> 199.276 <b>InChI Key:</b> WJFRNYYWRSNBZNX-UHFFFAOYSA-N	78 prep out of 2622 reactions.	Druglikeness Bioactivity Identification Physical Data (306) Spectra (194) Ecological Data (3) Use/Application (113)	Show Targets	1305
	<b>Chemical Name:</b> phenothiazine radical cation <b>Reaxys Registry Number:</b> 1216388	3 prep out of 8 reactions.	Druglikeness Identification Physical Data (5) Spectra (33)	Show Targets	29

2. Ikony **Print** i **Export** u góry listy wyników. Widoczne są też opcje dodawania danych do raportu.



## KONTAKT

W przypadku pytań do naszego działu obsługi klienta odwiedź stronę [elsevier.com/reaxys](http://elsevier.com/reaxys).

Odwiedź stronę [www.elsevier.com/rd-solutions](http://www.elsevier.com/rd-solutions) lub skontaktuj się z najbliższym oddziałem firmy Elsevier.

### AZJA I AUSTRALIA

Tel.: + 65 6349 0222

E-mail: [sginfo@elsevier.com](mailto:sginfo@elsevier.com)

### JAPONIA

Tel.: + 81 3 5561 5034

E-mail: [jpinfo@elsevier.com](mailto:jpinfo@elsevier.com)

### KOREA I TAJWAN

Tel.: +82 2 6714 3000

E-mail: [krinfo.corp@elsevier.com](mailto:krinfo.corp@elsevier.com)

### EUROPA, BLISKI WSCHÓD I AFRYKA

Tel.: +31 20 485 3767

E-mail: [nlinfo@elsevier.com](mailto:nlinfo@elsevier.com)

### AMERYKA PÓŁNOCNA, AMERYKA ŚRODKOWA I KANADA

Tel.: +1 888 615 4500

E-mail: [usinfo@elsevier.com](mailto:usinfo@elsevier.com)

### AMERYKA POŁUDNIOWA

Tel.: +55 21 3970 9300

E-mail: [brinfo@elsevier.com](mailto:brinfo@elsevier.com)