



화학 연구분야의 정보와 문헌을 찾는 가장 빠른 방법 REAXYS





간편검색가이드

목차

1.	검색: (Quick Search): 구조 + 텍스트 검색	3
2.	문헌검색 (Literature Search)	6
3.	반응검색 (Reaction Search)	13
4.	합성경로설계 (Synthesis Planner Manually)	17
5.	합성경로설계 (Synthesis Planner Autoplan)	19
6.	물질검색 (Substance Search)	21
7.	고급검색 (Query Builder): 여러 검색조건 통합검색	26
8.	저장 및 반출하기	28
9.	동영상 가이드	29
10	. 문의 및 연락처	30



검색: (Quick Search): 구조 + 텍스트 검색





Aspirin 의 크로마토그래피 데이터 검색 예





결과보기

2	Substance	S Structure : 🕥 as dra additional ring closures a radicals AND Propert	wn; included: only absolute Illowed, salts, mixtures, isoto y : Chromatography	stereo, Preview Results View R opes, charges, Edit Query 1결과	tesults ▶ 과보기를 클릭합니다.
Filters and Analysis			aspirin C9H8O4 180.16 7792	71 50-78-2	
Available Data Use Pharmacological Data Chromatographic Data	2 2 2 2	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	Hit Data - 6 Identification Physical Data - 543	Spectra - 165 Bioactivity - 3297 Other Data - 3466	Preparations - 95 > Reactions - 1026 > Documents - 7181 >
UV/VIS Spectroscopy IR Spectroscopy Crystal Phase	2 2 2 2	 <u>Hit Data - 6</u> <u>Chromatographic</u> 	2 Hit Data	에서 원하는 결과만 표시합니다.	
Interatomic Distances and Angles + More	2	LC (Liquid chromatography)	Page/Page column 61	THE ARIZONA BOARD OF REGENTS ON BEHALF OF TH Steven, Scott; ASPINWALL, Craig, A.; +3 others - WO2016 Full Text 기 Show details > 기과고 데이더더에 대하 무허 저너르 고 시	HE UNIVERSITY OF ARIZONA; SAAVEDRA, 5/4029, 2016, A1
Document Type patent article	2	GC (Gas chromatography)		Mandlimath, Triveni Rajashekhar; Moliya, Akshit; Sathiyar General, 2016, vol. 519, p. 34 - 47 Full Text 7 Show details >	narayanan, Kulathu I Applied Catalysis A:
short survey	1	HPLC (High performance liquid chromatography)	supporting information	Ijaz, Saadia; Hasnain, Shahida - Natural Product Research Full Text 7 1 Show details >	n, 2016, vol. 30, # 11, p. 1297 - 1300
 letter erratum More 	1	LC (Liquid chromatography)		Wabaidur, Saikh Mohammad; Alothman, Zeid Abdullah; H Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2013, v Full Text 7 Cited 14 times 7 Show details >	Khan, Mohammad Rizwan - Spectrochimica Acta - /ol. 108, p. 20 - 25



문헌 검색 (Literature Search)

Reaxys는 화학 분야 최대의 데이터베이스로서 화학 관련 문헌 검색에 대한 다양한 방법을 제공합니다.

- Reaxys 저널, 특허, 회의록과 책 등의 광범위한 컨텐츠에서 신중하게 선정한 핵심 저널과 특허에서 관련 정보들을 색인하여 제공합니다.
- 400여 종의 핵심저널과 특허는 지속적으로 리뷰가 되어 업데이트가 진행되어 왔으며, 16,000종 이상 추가 저널 및 기타 문헌 소스에서 추가 콘텐츠가 색인되어 제공됩니다.
- Reaxys 는 서지정보 및 인용 정보만을 색인하여 제공하였으나, 새로운 Reaxys 2.0 에서는 비 핵심 저널의 전체 텍스트의 내용이 포함하여, 연구자들이 필요로 하는 관련 데이터에 액세스가 가능하도록 상당한 화학정보를 추가하고 있습니다.
- 미국, 유럽, 세계 특허와 일본, 대만, 한국, 중국의 아시아 특허문헌 정보가 Reaxys에서 검색이 가능하도록 포함되고, 이는 세계 특허 문헌의 90 %의 정보 검색이 가능함을 의미합니다.



형광센서 관련 문헌 검색 예

형광분자센서는 의학적 진단, 생리학적 이미지, 생화학, 화학적 분석 및 모니타링 시스템 등 다양한 분야에 적용 가능합니다. 예로 「Supramolecular chemistry fluorescent sensing」 키워드를 검색합니다.

 Reaxys의 첫 화면에서, Search Reaxys를 클릭 후 supramolecular chemistry fluorescent sensing입력합니다.
 (단어들간의 검색 연관성을 높이기 위해 두 단어 이상인 경우 "fluorescent sensing" 과 같이 작은 따옴표 혹은 큰 따옴표를 사용하면 보다 정확한 검색결과를 표시합니다.)

Reaxys	Quick search Query builder Results Synthesis planner History	Cindy Goerlitz 🗙 🕜
S	earch substances, reactions, citations and bioactivity data	
	1 키워드 입력 Q supramolecular chemistry fluorescent sensing ×	
	Create Structure or Reaction Drawing	
		2
		Search > Feedback 📿



1. 검색결과 미리 보기

Reaxys에서는 상세내용으로 가기 전 단계로 검색 결과를 일차적으로 확인 가능합니다. 1번째 라인은 모든 검색 용어에 대한 검색 결과, 2번째와 3번째 라인에서는 검색용어의 일부를 검색한 결과를 보여줍니다.

• 결과 목록에서 재 수정하지 않고도 검색 목적에 제일 잘 맞는 결과 보기 선택 가능 합니다.

Reaxys			Quick search Query builder Results Synthesis planner Histor	ry Elsevier Reaxys 🞗 📀
- Back to Quick	Search	Choose a	result for supramolecular chemistry fluoresce	nt sensing
	62	Documents	Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : "supramolec- ular chemistry" AND Document Basic Index : fluorescent sensing	review Results 🗸 View Results 🔪
	6485	Documents	Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : fluorescent P sensing	review Results 🗸 View Results 🔪
	16162	Documents	Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : "supramolec- ular chemistry"	review Results 🗸 View Results 🔪
				Feedback 💭



2. 문헌검색 결과에서 서지, 관련 색인 용어 (index term) 등을 참고할 수 있습니다.

- 이 아티클을 인용한 문서들을 보려면 'Cited # times'을 클릭합니다
- 'Full Text' 를 클릭하면 원본을 볼 수 있는 출판사 웹으로 연결됩니다.

※ 참고: 아티클 또는 특허에 따라서, 추가 옵션들이 표시됩니다. 물질, 반응, 앞 페이지 정보

	K Back to Query Builder	
1	39 Documents with 628 Substances, 396 Reactions	
] 0 selected: Limit To ⊙ Exclude ⊘ Export <u>↑</u> Relevance ∨	$\uparrow \downarrow$
1	Montmorillonite-supramolecular hydrogel hybrid for fluorocolorimetric sensing of Cited polyamines Ikeda, Masato; Yoshii, Tatsuyuki; Matsui, Toshihiro; +3 others - Journal of the American Chemical Society, 2011, vol. 133 # 6, p. 1670 - 1673 Abstract \land Index Terms \land Substances \lor Reactions \lor Full Text \urcorner	d 75 times
	Abstract Fluorescent sensor materials for rapidly and conveniently detecting polyamines in biological fluids are highly desirable for cancer diagnosis. We herein describe the hybridization of a supramolecular hydrogel with a layered inorganic host adsorbing a fluorescent dye which produces a fluorocolorimetric sensor for spermine and spermidine, important biomarkers for cancers, in artificial urine.	×
	Index terms EMTREE drug term: biological marker, fluorescent dye, lysine, montmorillonite, polyamine, propylamine, protamine, putrescine, spermidine, spermine EMTREE medical term: article, cancer diagnosis, chemical analysis, colorimetry, fluorocolorimetric sensing, hybrid, hybridization, hydrogel, sensor, supramolecular chemistry Compendex Terms: Biological fluids, Cancer diagnosis, Fluorescent dyes, Fluorescent sensors, Polyamines, Spermidine, Supramolecular hydrogels Compendex Terms: Amines, Body fluids, Clay minerals, Diseases, Fluorescence, Hydrogels, Silicate minerals, Supramolecular chemistry Reaxys Index Terms: fluorescent dye	×





3. 문헌검색결과에서 본문의 물질과 반응 정보 바로 확인 가능





4. Filter & analysis 에서 추가적인 연구분야에 대한 분석이 가능합니다.

Index Terms 는 관련 문헌들에서 저자들이 keywords 로 등록한 관련 용어들을 출현 회수에 따라 표시합니다. 입력한 검색어 외에 색인 용어들을 참고하여 연구의 범위를 넓힐 수 있는 아이디어와 통찰력을 얻을 수 있도록 도움을 드립니다.

Filters and Analysis	Index Terms (List) Clear selected × 🔸 Sort by Occurrence					nce 🗸	×				
Index Terms (List)		^	fluorescent dye	_	33	spectroscopical ana	-	10	intermolecular force	-	7
fluorescent dye	-	33	fluorescence	_	25	nanoparticle	-	10	density functional t	-	7
fluorescence	_	25	fluorescence intens		23	lh-nmr spectroscopy	-	10	x-ray diffraction		6
		22	hydrophobic surface	-	19	molecular recognit	-	8	solubilizer	-	6
fluorescence intensity	_	23	titration		18	fret measurement	-	8	separation method		6
hydrophobic surface		19	fluorescence quenc		16	fluorescence spectr	-	8	protonation		6
titration	_	18	luminiscence type		13	deprotonation	-	8	fluorescence quant	-	6
	_	16	fluorescence spectr		13	adsorption	-	8	fluorescence emiss		6
	_	10	colorant		13	surface-active agent	-	7	atomic force micro	-	6
quenening			emission spectrum		12	photon correlation	-	7	transmission electr		5
+ More		13	<u>1</u> 2 3 4 5 1	2 >					Limit to 🗦	Exclude	• >



4. Filter & analysis 에서 추가적인 연구분야에 대한 분석이 가능합니다.

2 연도별 아티클 출판 횟수를 분석하는 것으로, 연구의 최신성을 평가 하거나, 최근 아티클만 제한하여 검색결과를 검토할 수 있습니다.

Publication Year		^	Publication Year				Clear selected X	
2014	_	21						<u> </u>
2016	_	19	2014	—	21	2009	-	5
			2016		19	2007	-	5
2015		13	2015		13	2006	-	5
2008	_	12	2008		12	2004	-	3
2008			2011		11	2001	-	1
2011	-	11	2013	-	10	1999	_	1
		10	2012		10			
2013		10	2010		9			
2012	-	10	2017		8			
			2005	-	6			
+ More								

3 문헌의 종류나 저널 타이틀을 제한하여 검토가 가능합니다.





반응검색 (Reaction Searching)

망간함유 촉매를 활용한 카르복실 산에서 C-C 결합의 산화분열 반응(Styrene 에서와 같은) 을 포함하는 특허정보를 검색합니다.



구조 검색 입력 (Create a Structure Query)

1. Reaxys 홈페이지 구조편집기 MarvinJS 를 '*Create Structure or Reaction Drawing*' 박스를 클릭하여 엽니다.







2. Transfer to Query 클릭, Search 버튼 클릭

Results Preview: 각 결과 옵션은 Preview Results 가 표시되고, 미리 보기를 통해 전체 결과를 보기 전 상위 3개 결과를 확인할 수

있습니다.

Re	eaxys'		Quick search	Query builder	Results	Synthesis planner	History	Elsevier Reaxys 🙎	0
<	Back to Quick Search			Choose	a result	for ©			
	593	Reactions	Reaction Query	: 😥 substructure			Preview Results 🗸	View Results >]
								Feedbac	k 🖓

3. *View Results* 를 클릭합니다. 아래와 같이 수백개의 반응들이 검색됩니다.





✤ 결과 분석 (Analyze the Results)

망간함유 촉매를 사용한 반응만을 검색하기 위해서 결과 화합물들의 정보를 Filter & Analysis 패널을 사용해 가시화하여 분석합니다. 예로 시약/촉매를 포함하는 Silver 를 활용한 반응을 검색합니다.

물질은 화학 반응에서 역할로 분류하고, Reaxys에서 시약/ 촉매는 일반적으로 촉매 클래스에 그룹화됩니다.

- a. Catalysis class 용어들을 확장합니다.
- b. + More을 클릭하여 Catalysts Classes 하위 용어를 검색하고, 'active center' 클릭
- C. Ag 박스 체크 11개의 반응 결과를 표시합니다. Silver oxide, silver nitrate and silver acetate
- d. Apply 클릭: 결과는 은(silver) 함유 촉매를 사용한 화합물의 반응만을 표시합니다

Re	axys'	Qui	uick search Query builder Results Synthesis planner History Elsevier Resuys 🙎 💿	
\$93	Filters and Analysis		Kack to Results Preview	
	Yield	~	593 Reactions out of 393 Documents containing 903 Substances	
	Reagent/Catalyst	~	□ 0 Clear selected × ↓ ↑ C	(×
	Solvent	~	active center 255 Mn 100 silver(i) oxide	6
	Catalyst Classes	~	heterogeneous 13 Os 39 silver nitrate	5
	active center 4	255	Fe 33 silver(i) acetate	. 1
	heterogeneous	13	Ru 28	
	+ More		🗌 Cu 21	
			🗌 Pd 🛛 18	
	Solvent Classes	~	🗌 Ni 📃 14	
	Product Availability	~	🗌 Cr — 14	
		~	Ag 11	
	Reactant Availability	\sim		
	Reaction Classes	~	Ap	ply >



결과보기-반응





Synthesis Planner (합성경로 설계) – Manually

수동으로 합성 경로를 설계하거나 Reaxys 가 자동으로 할 수 있습니다 (13 페이지 참조). 시작하려면, 구조 아래에서 합성 (Synthesize)을 클릭합니다.





Synthesis planner (합성경로 설계) – Manually (계속)





Synthesis planner (합성경로설계) - Autoplan

Reaxys 자동으로 합성 경로를 설계할 수 있습니다. 시작하려면, 구조 아래에서 합성 (Synthesize)을 클릭합니다.







Synthesis planner (합성경로설계) – Autoplan (계속)

1. Synthesis planner 에서, 보기할 합성경로 클릭





물질검색 (Substance Searching)

1 화학명으로 찾기: 화합물이름, CAS#, SMILES...



2 화학구조식으로 찾기 (부분구조 검색 가능) 3 분자식으로 찾기







Copyright ©2016 Elsevier B.V.

Reaxys® and the Reaxys® trademark are owned and protected by Elsevier B.V. All rights reserved.



결과 보기 – 물질



Copyright ©2016 Elsevier B.V.

 $\label{eq:reaction} Reaxys \circledast \text{ and the Reaxys} \circledast \text{ trademark are owned and protected by Elsevier B.V. All rights reserved.}$





물질-물성 검색 예:

치환된 sulfocoumarins (1,2-benzoxathiine-2,2-dioxides)을 검색하고, 결과에서 부분 또는 전체가 포화된 유사물질을 비교하려고 합니다. Sulfur 를 포함하는 링의 탄소원자에 다른 치환체들이 치환되고, 다른 링에는 한 개 치환체만 허용하려고 합니다. 그리고는 기능기 그룹과 다양한 특성(물성)간의 관계를 분석하려고 합니다.



구조식 입력 (Create a Structure Query)

1. Reaxys 홈페이지 구조편집기 Marvin JS 를 '*Create Structure or Reaction Drawing*' 박스를 클릭하여 엽니다.

Create Structure or Reaction Drawing

2. Marvin JS 그리기 패널에서 부분 구조를 그립니다.

Reaxys®

간편검색가이드

Reaxys	Quick search Query builder	Results Synthesis planner	History	Cindy Goerlitz 👌 🔞
 Marvin JS 日日日つてメロー 	S] ⊗, म∞ म∞ છ, أ1/3 -0″. H± ⊚ 6	Create structure template fro	om name 义	Search this structure as: As drawn As substructure
1 0 0 ¹			H C N	Similar
in IR			S F P	Additional ring closures Related Markush Salts
≥> + :♪]			CI Br I	Mixtures Isotopes Charges Radicals
	0	Clear 🛍 Cancel 🗙 Trans	fer to query 💙	+ More options

첫 번째 Substances - as drawn, View Results 를 클릭합니다.

Reaxys	Quic	k search	Query builder	Results	Synthesis planner	History	Sign in
- Back to Quick Search			Choose	a result	for 💿		
289	Substances Reaxys	Structure additional radicals	: 💿 as drawn; inc ring closures allowed,	luded: only ab , salts, mixture	solute stereo, s, isotopes, charges,	Preview Results 🗸	View Results 义



결과 분석

Reaxys

Filter & Analysis 패널을 사용하여 이러한 화합물에 대한 정보를 시각화합니다. 예: 할로겐화 알킬에 대한 특정 기능기를 가지는 화합물에 관한 기록 검색합니다. 화합물은 Substance Classes에서 선택 가능한 구조 기능으로 분류됩니다. 필터 패널에 표시되는 목록은 계층 적으로 정리 된 분류의 첫 번째 계층입니다.

a. +More를 클릭하여 Substance Classes를 찾습니다

Red	axys			Quick search Query builde	r Results Synthesis planner	History	Cindy Goerlit		0
274	Filters and Analysis			K Back to Results Preview					
	Substances Classes		^	274 Substances	out of 55 Documents containing 645 Rea	actions			
	Functional Group Clas- sification	-	273						
	Richter Classification	_	273	0 selected: Limit To 💮		00)	0	
	Ring Classification	-	273				INO OF RE	terences	~
	+ More							个	<u> </u>
	Molecular Weight		~	٠					
	>240 - 252	_	13		(R)-4,7-dimethyl-5,6,7,8-	-tetrahydro-benz[<i>e</i>][1,2]c	oxathiin-2,2	2-diox	ide
	>264 - 276	-	11	1	Physical Data - 3		Preparat	tions - 2	>
	>204 - 216		8	H ₃ C 0 %=0			React	tions - 2	>
	>252 - 264		8				Docum	nents - 5	>
	>216 - 228		7	ĊH ₃					
	>192 - 204		5						
	>228 - 240	-	5	년					
	+ More						F	eedback	Q



2. 고급 검색 (Query builder): 여러 조건 통합검색

약 500 여가지 문헌, 물질, 물성, 반응 검색 관련된 검색 창을 추가할 수 있습니다.





Query builder: 여러 물성치 입력과 연산자 이용 안내

Reaxys	Quick search Query builder	Results Synthesis planner	History	Elsevier Reaxys 🙎 🗿	
내 🗐 🅤 🛍 Import Save Reset form Delete		Search Image: Structure CAS CAS RN Do	C, Index	Search properties Q melt X	
Boiling Point = ~ ~ = ~ ~	Boiling Point, °C 60-80 Pressure (Boiling Point), Torr 740-760	Exist 🔨 🗙 Q	2	 Derivative Melting Point Physical Data 	
Melting Point	AND OR AND NOT PROXIMITY	원하는 연신 • OR : 필드 중 • AND : 두 필 • NOT : 첫 번 • NEAR : 근접 • NEXT : 근접 • PROXIMITY 있는 두 필드	난자 클릭 중 적어도 히 필드에서 데(번째 필드의 법 용어를 검 법 용어를 검 Y : 일반적 미 내용 검색 (나나로부터 데이터를 포함 이터를 포함 데이터를 포함하고 두 번째는 제외 냄색하지만, 임의의 순서로 색하고, 순서대로 지정 매개 변수 (Parameter) 필드에 사용 서 (예,melting point and solvent)	로 연관성이





저장하기와 반출하기

기능	설명			
저장하기(Saving)/ 반출하기 (Export)				
Query builder 저장하기	쿼리 저장하기: 왼쪽상단의 Save 클릭			
	• 쿼리는 a.json file 로 저장됩니다.			
	.v. IPI 6) 前			
	Import Save Reset form Delete			
History Page + Recent 탭	History Page + Recent 탭은 현재 Reaxys 세션에서 연구자가 검색한 내용들을 포함하고			
저장하기	있습니다.			
	최근 검색 위로 마우스를 이동, 저장 (Save)을 클릭합니다. 이름을 입력하고 저장을 클릭합니다•			
	• 저장된 검색은 저장된 탭 (Saved)에서 찾을 수 있습니다.			
	6 Substances Today 12:46 Quick Search: 💿 Copy query 🕞 Save 🖳 Alert 🗘 View 🔪			
결과 (Result)페이지에서	반출하고 싶은 검색결과 번호 위의 박스에 체크하여 문서를 선택			
반출하기	• Export 클릭			
	6 Substances out of 3,552 Documents containing 1,749 Reactions			
	● 6 selected: Limit To ↔ Export .↑.			
Synthesis planner (압성경로)	• Export / Save/ Import 클릭			
만술하기/ 서상하기	Synthesis plan 1			
	Import 🛃 Save 🖾 Export 🛧			



동영상 가이드

Reaxys 에서 구조 검색 방법



Reaxys 에서 정보 반출하기



간편검색가이드



문의: 엘스비어 한국사무소, 생명과학 솔루션 팀 T: 02-6714-3134

김혜령 과장, 교육 및 기술 지원

