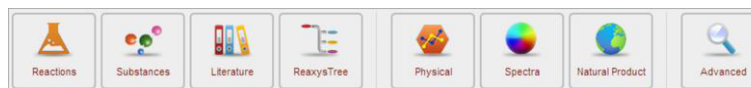


Ghid de utilizare al platformei științifice

REAXYS



1. Selectează o temă de căutare:




Ask Reaxys

SUBSTANCES	
Acțiuni	Pași de urmat
Căutare directă în caseta "Ask Reaxys"	Scrie denumirea unei substanțe sau numărul de registru CAS. Exemplu: quinolone, 91-22-5
Creează o structură model, plecând de la o denumire	Click pe fereastra Substances apoi accesați adresa "Create Structure Template from Name". Este scrisă cu roșu și se află sub caseta STRUCTURE EDIDOR pozioționată în partea central-stângă a ecranului.
Modalități de căutare	Click pe fereastra "Substances" și completați în caseta "Identificaton" termenii, denumirile și codurile de interes. Caseta "Identification" se află sub caseta "Structure". "Lookup" vă va ajuta să căutați un termen anume. Pentru a adăuga câmpuri de căutare, selectați "Add/Remove fields".
Editor de structură	Click pe fereastra "Substances" apoi pe "Structure editors" aflat în caseta "Structure". Selecteați una din cele trei opțiuni. Butonul "Help" vă va oferi informații despre ChemDraw, AccelrysDraw, ISISDraw și ICEdit.

REACTIONS	
Acțiuni	Pași de urmat
Căutare directă în caseta "Ask Reaxys"	Introduceți un termen. Exemplu: synthesis of p-phenylnitrobenzene, Suzuki coupling, adel phenol oxidation
Creează o structură model, plecând de la o denumire	Click pe fereastra "Reactions" apoi pe adresa de culoare roșie aflată sub caseta "Structure". Introdu denumirea, codul, numărul de identificare a unui produs, reactant, etc.
Modalități de căutare	Click pe fereastra "Reactions" și folosiți caseta "Reaction data", aflată sub caseta "Structure". Introdu numele unui produs, tipul reacției, etc. "Lookup" vă va ajuta să căutați un termen anume. Pentru a adăuga câmpuri de căutare, selectați "Add/Remove fields".
Editor de structură	Click pe fereastra "Reactions" apoi pe "Structure editors" aflat în caseta "Structure". Selecteați una din cele trei opțiuni. Butonul "Help" vă va oferi informații despre ChemDraw, AccelrysDraw, ISISDraw și ICEdit.

LITERATURE	
Acțiuni	Pași de urmat
Căutare directă în caseta "Ask Reaxys"	Introduceți un termen. Exemplu: cycloaddition of CO2 to epoxides, tropical deforestation, green solvents
Reaxys Tree	Click pe fereastra "Reaxys Tree" și deschideți fișiere pentru a găsi o temă de căutare sau scrieți ce căutați în casetă. Dați click pe "Search" și deselectați subiectele nedorite. La final, click pe "Search Literature"
Modalități de căutare	Click pe fereastra "Literature" și folosiți caseta "Bibliographic Data" pentru a introduce date despre autor, tipul documentului, titlului revistei, etc. "Lookup" vă va ajuta să căutați un termen anume. Pentru a adăuga câmpuri de căutare, selectați "Add/Remove fields".
Căutare după structură	Click pe adresa "Structure" pentru a adăuga un câmp de căutare pentru structură. Această adresă se află sub caseta "Bibliographic Data" în tabul "Add to Query".

PROPERTIES	
Ațiuni	Pași de urmat
Căutare directă în caseta "Ask reaxys"	Introduceți un termen: Exemplu: boiling point of benzene, density of quinoline.
Formula moleculară și căutarea aliajului Molecular Formula Alloy	Accesați fereastra "Substances" și selectați adresele aflate sub caseta "Structure". Formula moleculară: Selectați un element, folosiți săgețile pentru a adăuga un interval. Folosiți abrevierile pentru a adăuga grupuri din tabelul-P. În partea dreaptă a ferestrei Formulă moleculară aveți mai multe opțiuni. Aliaj: Selectați procentul din meniul cascadă. Adăugați elemente aflate în caseta din partea stângă. Adăugați procente în coloanele din partea dreaptă. Dacă este nevoie, selectați "Additional Components" pentru componente adiționale.
Metode de căutare	Accesați fereastra "Physical" sau "Spectral". Folosiți câmpurile libere. Dacă este nevoie mai adăugați sau scoateți câmpuri cu "Add/Remove fields". Pentru a selecta un termen, click pe Lookup.
Adaugă o structură Add to Query: Structure	Accesați fereastra Structure pentru a adăuga caseta de structură.

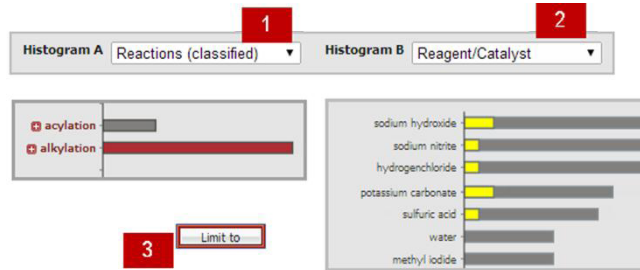
NATURAL PRODUCT	
Ațiuni	Pași de urmat
Căutare directă în caseta "Ask reaxys"	Introduceți un termen. Exemplu: isolation from olives, nmr of luteolin, luteolin patents
Căutare (Natural Product)	Accesați adresa "Natural Product" din bara de selecție. Pentru a selecta un termen, click pe Lookup. 
Metode de căutare (Literature)	Accesați fereastra "Literature". Folosiți câmpul predefinit de citare pentru a efectua căutarea în titluri, abstract sau cuvinte cheie.
Editor de structură	Desenați substanța care a fost izolată de un produs natural. Accesați fereastra "Substances". Selectați una din cele trei opțiuni de editare aflate în "Structure Editors". Meniul Help vă va ajuta să obțineți informații despre cum să utilizați, ChemDraw, AceleysDraw, ISISDraw sau ICEDit.

2. Filtre de căutare



Analizați rezultatele conform acestor categorii folosind histograme pentru a observa relaționarea dintre categorii.

Document Type	Catalysts (classified)	Compounds (classified)
Authors	Reactions (classified)	Boiling Point
Patent Assignee	Reagent/Catalyst	Density
Journal Title	Solvent	Melting Point
Publication Year	Solvents (classified)	Molecular Formula
	Yield	Molecular Weight
		Pharmacological Effects
		Physical Data
		Solubility
		Spectroscopic Data



Pasul 1 - Selectați o categorie pentru histograma A din meniul cascadă.

Pasul 2 - Selectați o categorie pentru histograma B din meniul cascadă.

Pasul 3 - După analiză, selectați Limit to (sau Exclude)

Mod de filtrare

categoriile de rafinare sunt afișate în partea stângă a rezultatelor

Unele filtre oferă **Mai mult** o adresă care vă permite să filtrați mai în profunzime.

3. Planuri de sinteză

Creați o analiză retrosintetică manual sau automat prin Reaxys. Pentru a începe, accesați Synthesize aflat sub caseta "Structure". Apoi alegeți una din cele trei opțiuni

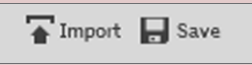



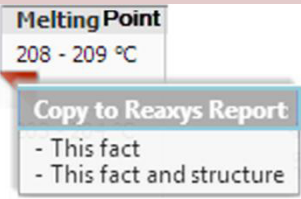


The image displays the Reaxys Synthesis Planner interface with three options highlighted in red boxes:

- Opțiunea 3 (AutoPlan Settings):** A dialog box for configuring automatic plan generation. It includes fields for "No of plans to create" (set to 10), "Max. alternative branches" (set to 5), and "Max. steps" (set to 5). There is a checkbox for "All starting materials commercially available" and a "Default yield for reactions without a given yield" set to 50%. An "Autoplan" button is at the bottom.
- Opțiunea 1 (Manual):** A window titled "Synthesis 1" showing a chemical structure of 4-methyl-2,6-diformylaniline. Below the structure are buttons for "Synthesize" and "Show Details". A dropdown menu is open, showing "Manual", "AutoPlan", and "AutoPlan(cu opțiuni)".
- Opțiunea 2 (AutoPlan):** A window showing a list of generated synthesis plans. The top row shows "Synthesis 1" through "Synthesis 8". Below, a reaction scheme is shown with a yield of 96.70% and a "Synthesize (19)" button. Another reaction scheme shows a yield of 93.00% and a "Synthesize (55)" button.

Text boxes provide instructions for each option:

- Opțiunea 1:** "Manual" - Selectați reacțiile de adăugat în plan, dintr-o listă generată sub "Synthesis Planner"
- Opțiunea 2:** "AutoPlan" - Reaxys creează automat până la 10 sinteze diferite bazate pe opțiunile preselectate.
- Opțiunea 3:** "prin AutoPlan (cu opțiuni)" - Selectați parametrii necesari pentru a genera automat analize sintetice.

4. Salvare, Printare, Exportare și Repoarte.

Acțiuni	Pași de urmat
<p>Salvați</p> 	<p>Click pe "Save" din partea dreapta sus.</p>
<p>Salvați lista de rezultate</p> 	<p>Click pe butonul "History". Click pe adresa "Store" din partea dreaptă a paginii.</p>
<p>Printare</p> 	<p>Click pe butonul "Print" aflat în partea stîngă a ecranului.</p>
<p>Exportarea rezultatelor</p> 	<p>Click pe butonul "Output". Selectați din opțiuni formatul, intervalul și conținutul.</p>
<p>Raport</p> 	<p>Selectați rezultatele. Click pe triunghiul roșu care apare lângă datele individuale și structuri. Selectați din opțiunile ce apar. Selectați datele, substanțele, reacțiile și planurile de sinteză.</p>
<p>Vizualizare raport</p> 	<p>Click pe butonul "Raport". Aranjați elementele folosind "Show, Move up, Move down și Remove". Adăugați notițe folosind "Annotate".</p>
<p>Trimite raportul prin email</p> 	<p>Click pe butonul "Send" de pe pagina Report și completați spațiile libere. Raportul va fi trimis ca arhivă html.</p>