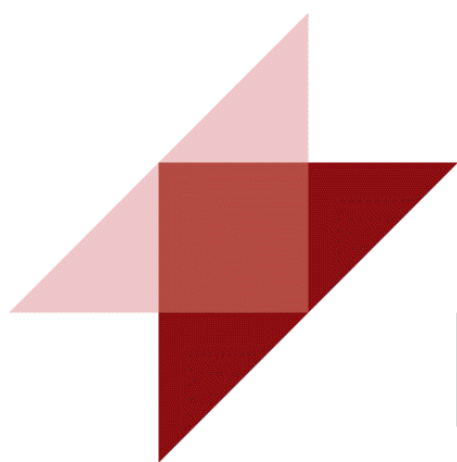




reaxysTM

manuál

Predstavovaná databázová kolekcia je sprístupňovaná v rámci projektu:

Národný informačný systém podpory výskumu a vývoja na Slovensku – prístup k elektronickým informačným zdrojom (NISPEZ)

<http://nisppez.cvtisr.sk/>

V portfóliu databáz / kolekcií sprístupňovaných prostredníctvom projektu NISPEZ je možné nájsť **plnotextové, bibliografické, citačné a scientometrické** elektronické informačné zdroje. Všetky e-zdroje v portfóliu projektu pochádzajú od dôveryhodných a svetovo renomovaných vydavateľov.

Vyšli nasledovné manuály:

- **ACM/Association for Computing Machinery**
- **Art Museum Image Gallery**
- **Gale Virtual reference Library: Art**
- **IEEE/IET electronic Library (IEL)**
- **Knovel Library**
- **ProQuest Central**
- **REAXYS**
- **ScienceDirect**
- **SpringerLink**
- **Wiley Online Library**
- **SCOPUS**
- **Web of Knowledge**

Všetky manuály je možné nájsť na adrese <http://nisppez.cvtisr.sk/> v sekcii Výstupy špecifického cieľa 1, a taktiež pri podrobnom popise každého EIŽ.

Licenčné podmienky

Využívanie databázy podlieha týmto licenčným podmienkam:

- Zákaz sťahovať plné texty pomocou akýchkoľvek robotov či iných programov na automatické a zrýchlené sťahovanie dát
- Prezeranie, tlačenie alebo uchovávanie plnotextových článkov je povolené iba pre vlastnú potrebu, a to aj v elektronickej forme
- Zákaz hromadného sťahovania dát, ich ďalšej distribúcie či komerčného využívania

Nerešpektovanie uvedených licenčných podmienok vedie k zablokovaniu prístupu k databázovej kolekcií.

Čo je REAXYS?

REAXSYS je rozsiahla databáza štruktúr, fyzikálno-chemických vlastností, biologických, farmakologických, ekologických informácií a reakcií týkajúcich sa organických zlúčenín. V súčasnosti zahŕňa vyše 1 000 000 abstraktov odborných článkov. Poskytuje prístup k vyhľadávaniu štruktúrnych vzorcov, chemických zlúčenín, chemických reakcií a bibliografických údajov. Pomáha rýchlo a efektívne nájsť experimentálne údaje pre konkrétnu zlúčeninu alebo reakciu z rozdielnych zdrojov.

Súčasťou vyhľadávania sú aj bibliografické odkazy na publikované články s prepojením na ich plné texty nachádzajúce sa v databázach SciVerse Scopus a SciVerse ScienceDirect.

Tematické zameranie:

- organická, anorganická chémia
- analytická a fyzikálna chémia
- environmentálna chémia
- materiálová chémia
- lekárska chémia
- biochémia
- prírodné vedy

Historické koncepty budovania databázy:

Databáza ponúka obsah prestížnych databáz **CrossFire Beilstein**, **CrossFire Gmelin** a **Patent Chemistry**. Databáza Beilstein z oblasti organickej chémie obsahuje časopisy už od r. 1771 a patentové publikácie z rokov 1869-1980. Gmelin, pôvodne Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry obsahuje periodiká z r. 1772-1980. Patent Chemistry obsahuje patenty z oblasti organickej chémie a prírodných vied – patenty z USA od r. 1976, z Európy a zvyšku sveta od r. 1978.

Aké dokumenty:

- 1 000 000 abstraktov odborných článkov
- 8 mil. chemických zlúčenín
- 5 mil. záznamov o reakciách
- 3 mil. záznamov bibliografických citácií
- faktografické údaje – chemické štruktúry, chemické reakcie, fyzikálne vlastnosti
- plné texty článkov

REAXYS obsahuje všetky dokumenty a údaje z databázy Crossfire v dostupnejších formách a s možnosťou generovať štruktúry priamo z mien alebo fráz.

Prístup k rozhraniu

1 <http://nispez.cvtisr.sk>

NÁRODNÝ INFORMAČNÝ SYSTÉM PODPORY VÝSKUMU A VÝVOJA NA SLOVENSKU
prístup k elektronickým informačným zdrojom
NISPEZ

*** Vyhľadací portál pre vedu a výskum scientia.sk *** Ďalšie

mapa stránok výtlač

Úvodná stránka

O PROJEKTE

ŠPECIFICKÝ CIEĽ 1

ŠPECIFICKÝ CIEĽ 2

ŠPECIFICKÝ CIEĽ 3

ŠPECIFICKÝ CIEĽ 4

KONTAKTY

E-ZDROJE pre VaV

SCIENTIA.SK

ČASOPISY pre VaV (SK)

PODJIATIA

MÉDIA

FOTOGALÉRIA

OPÝTAJTE SA

ZÓNA RIEŠITEĽOV

Aktuality

13.9.2012
Elsevier Science
CVTI SR, 13.9.2012

celý článok

12.7.2012
Dotazníkový prieskum
Prosimte Vás o vyplnenie

celý článok

21.6.2012
Praktické ukážky vyhľadávania v elektronických informačných zdrojoch
Pracovný seminár, 21.6.2012

celý článok

archív aktualít

scientia.sk
vyhľadací portál pre vedu a výskum

projekt NISPEZ

Vzdialený prístup e-zdroje

<<< September 2012 >>>

Po	Ut	St	Št	Pi	So	Ne
					1	2
3	4	5	6	7	8	9
10	11	12	13	14	15	16
17	18	19	20	21	22	23
24	25	26	27	28	29	30

ZÁKLADNÉ ÚDAJE O PROJEKTE

NÁZOV:
Národný informačný systém podpory výskumu a vývoja na Slovensku – prístup k elektronickým informačným zdrojom (NISPEZ)

REALIZUJE:
Centrum vedecko-technických informácií SR
Lamačská cesta 8/A
811 04 Bratislava

OPERAČNÝ PROGRAM:
Výskum a vývoj

PROJEKT FINANCOVANÝ:
Európsky fond regionálneho rozvoja

NENÁVRATNÝ FINANČNÝ PRÍSPEVOK:
19 881 676,23 eur

OBDOBIE REALIZÁCIE:
december 2008 – máj 2014

ITMS KÓD PROJEKTU:
26220220001
26240220001

NÁRODNÝ INFORMAČNÝ SYSTÉM PODPORY VÝSKUMU A VÝVOJA NA SLOVENSKU
– prístup k elektronickým informačným zdrojom
NISPEZ

*** V

mapa stránok výtlač

ÚVOD > E-ZDROJE pre VaV

Elektronické informačné zdroje projektu NISPEZ

V portfóliu databáz / kolekcii sprístupňovaných prostredníctvom projektu NISPEZ je možné nájsť **phoetextové, bibliografické, citačné a scientometrické** elektronické informačné zdroje. Všetky e-zdroje v portfóliu projektu pochádzajú od dôveryhodných a svetovo renomovaných vydavateľov.

Podmienky využívania e-zdrojov

Jednotlivé inštitúcie zapojené do projektu a ich používatelia sa zaväzujú dodržiavať licenčné podmienky pre prístup a využívanie EIZ. Viac informácií je možné nájsť na tejto stránke.

Niektoré inštitúcie ponúkajú prístup k e-zdrojom aj **prostredníctvom vzdialeného prístupu**.

Filter:
Všetky | technické vedy | prírodné vedy | lekárske vedy | pôdohospodárske vedy | spoločenské vedy | humanitné vedy | bibliografické, abstraktové, citačné, scientometrické - multidisciplinárne

ACM DIGITAL LIBRARY ACM / Association for Computing Machinery	Art Museum Image Gallery	Gale Virtual Reference Library: Art	IEEE/ET ELEC (EL)
Knovel Knovel Library	ProQuest ProQuest Central	reaxys® REAXYS	SciVerse ScienceDirect
SCOPUS	SpringerLink SpringerLink	CURRENT CONTENTS CONNECT® Web of Knowledge – Current Contents Connect	ESSENTIAL SCIENCE INDICATORS® Web of Knowledge – Essential Science Indicators
JOURNAL CITATION REPORTS® Web of Knowledge – Journal Citation Reports	MEDLINE® Web of Knowledge – MEDLINE	WEB OF SCIENCE® WITH CONFERENCE PROCEEDINGS Web of Knowledge – Web of Science with Conference Proceedings	WILEY ONLINE LIBRARY Wiley Online Library

3

Možnosti prístupu k databáze REAXYS ako aj k ponuke ostatných EIZ:

- webová stránka projektu NISPEZ (<http://nispez.cvtisr.sk/>)
- webové stránky akademických knižníc VŠ a univerzít na Slovensku, ÚK SAV a vybraných vedeckých knižníc
- Vyhľadávací portál pre vedu a výskum – scientia.sk (<http://scientia.cvtisr.sk/>)
- Alternatívne môžete použiť aj webovú stránku www.reaxys.com

Lokálny prístup

- používateľ môže e-zdroje využívať na počítačoch, ktoré sa fyzicky nachádzajú v študovniach alebo prostredníctvom svojho PC či iného mobilného zariadenia v iných cez WiFi sieť v rámci budovy CVTI SR.
- ak váš počítač (IP adresa) patrí do preddefinovaného rozsahu a licencie sú k dispozícii, budete okamžite rozpoznaný a prihlásený.

Vzdialený prístup

- používateľ k e-zdrojom môže pristupovať prostredníctvom vzdialeného prístupu – t.j. využívanie EIZ sa v tomto prípade neviaže fyzicky na budovu inštitúcie, ale ich môže využívať napr. z domu, internetovej kaviarne, kancelárie a pod. Vzdialený prístup k e-zdrojom znamená, že používateľ nemusí fyzicky prísť do budovy knižnice, ale môže vyhľadávať v e-zdrojoch a pracovať s nimi v súlade s licenčnými podmienkami a po registrácii z ktoréhokoľvek miesta s prístupom na internet (napr. z domu, internetovej kaviarne, kancelárie a pod.).
- **podmienky využívania a viac informácií o vzdialenom prístupe k EIZ možno nájsť na webových stránkach jednotlivých inštitúcií, ktoré sú zapojené do projektu NISPEZ.**

Scientia.sk – vyhľadávací portál pre vedu a výskum

- Účelom portálu je efektívne sprístupniť e-zdroje pre výskum a vývoj. Portál z jedného rozhrania umožňuje súbežne vyhľadávať informácie v rôznorodých e-zdrojoch, ktorých ponuku tvoria voľne prístupné ako aj licencované zdroje všetkých inštitúcií, ktoré sú zapojené do projektu NISPEZ. Používatelia majú k dispozícii aj portál elektronických časopisov, ktorý je budovaný pre tú-ktorú inštitúciu.
- Portál scientia.sk ďalej poskytuje používateľom prostredníctvom linkovacej služby SFX efektívny prístup do plnotextových dokumentov, ktorý sú oprávnení využívať. Súčasťou portálu je odporúčacia služba bX, ktorá pre vyhľadaný článok vygeneruje zoznam ďalších odporúčaných článkov na základe analýzy využívania článkov ostatnými používateľmi.

Vyhľadavanie chemických reakcií

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

CH₃
O
O
Na⁺
(v0)

COPY TO SUBSTANCES TAB CLEAR

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

Search

Conditions (Form-based) Conditions (Advanced)

☒ Reaction Data
☒ Bibliographic Data

Clear Query Load Query/Batch Save Query

Contact Us | Support | About Reaxys | Terms and Conditions | Privacy Policy | Performance Page
 Copyright © 2010 Elsevier Properties SA. All rights reserved. Reaxys® is owned and protected by Elsevier Properties SA and used under license.

Vyhľadavanie chemických reakcií

Dvojitým kliknutím do vyhľadávacieho okna štruktúr sa spustí externý editor, ktorým je možné:

- nakresliť dotaz na štruktúru alebo reakciu,
- doplniť, upraviť uložené štruktúry,
- preniesť nakreslený dotaz do vyhľadávacieho okna,
- nájsť a spresniť výsledky pomocou filtrov.

Ďalšie požiadavky na vyhľadavanie je možné označiť vo vyhľadávacom formulári.

Properties (Form-based) Properties (Advanced) **Search**

☒ Substance Data

☒ Search text in all facts

Search for is

☒ Identification Data

☒ Physical Data

☒ Spectroscopic Data

☒ Bioactivity Data

☒ Ecotoxicological Data

☒ Natural Products

☒ Bibliographic Data

Author starts with 'mill s.'

Patent Assignee is

Journal Title starts with 'journal de pharmacie'

Title is

Patent Number is

Patent Country Code is

Publication Year >= 2000

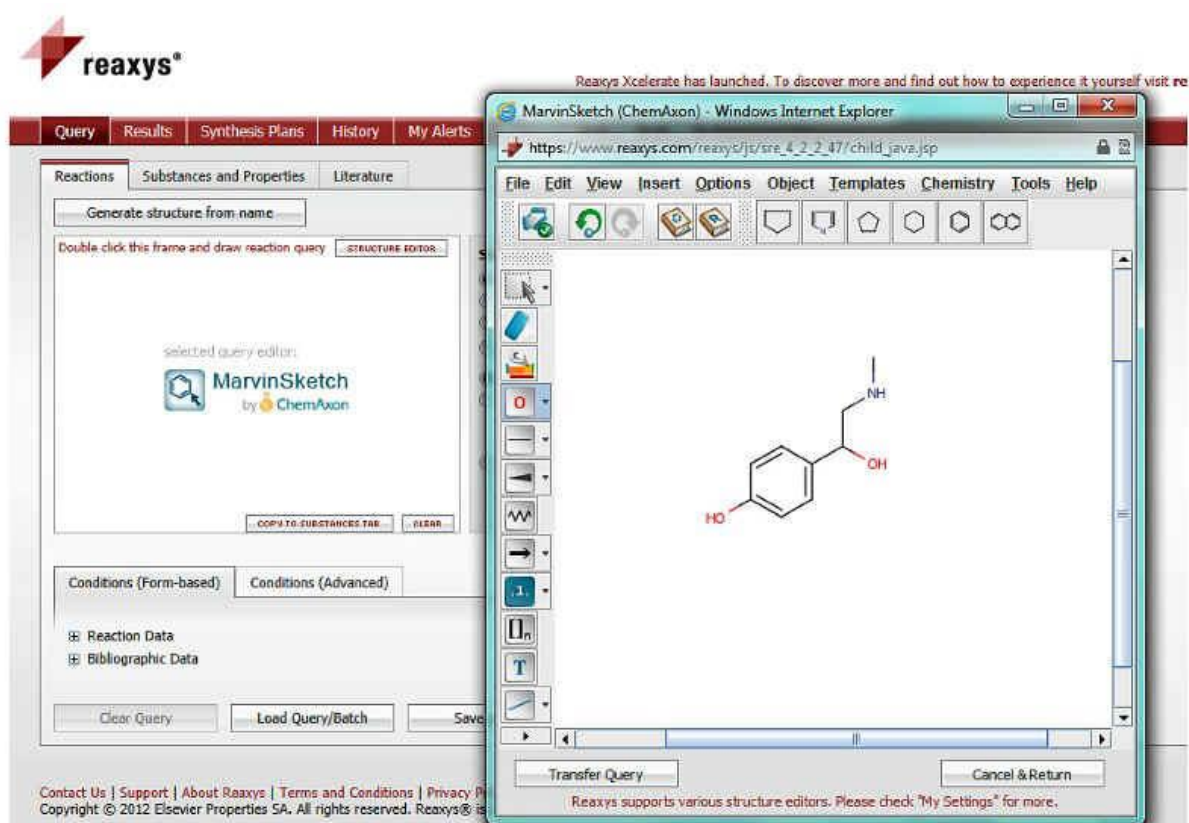
Title/ Abstract/ Keywords starts with acilthiones

Clear Query Load Query/Batch Save Query

Okrem chemických reakcií ponúka **REAXYS** možnosť hľadať chemické látky a ich vlastnosti, dokumenty a autorov.

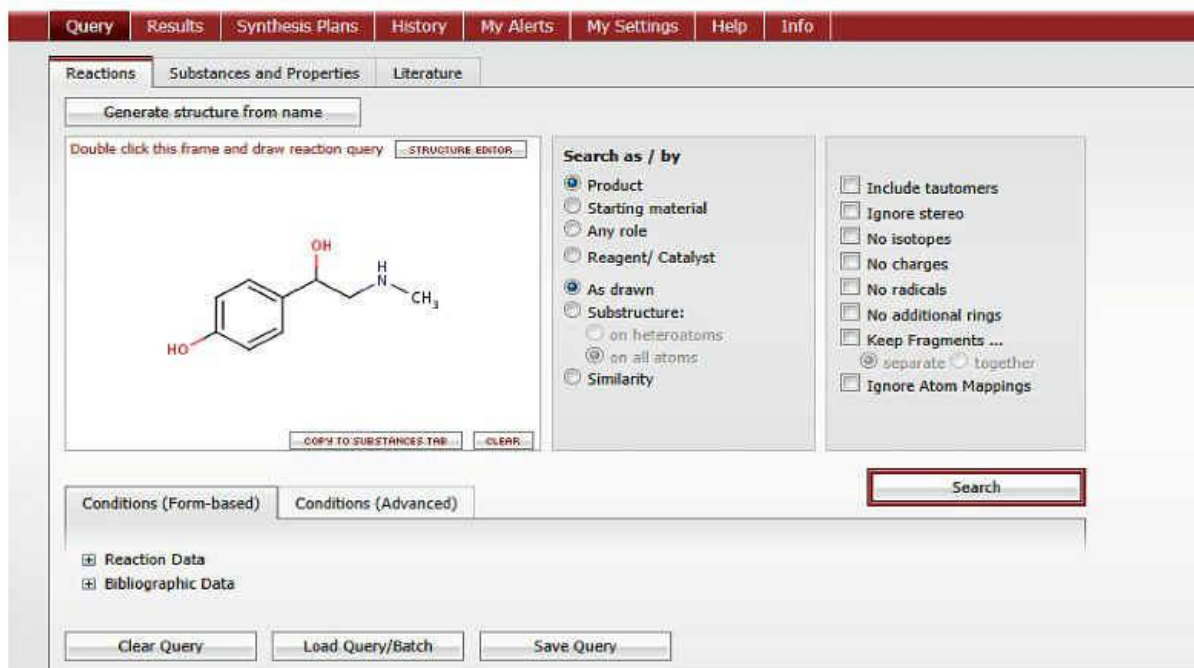
REAXYS podporuje rôzne editory na kreslenie štruktúrnych vzorcov (Isis Draw, Symyx, Crossfire Structure Editor). Predvoleným editorom je MarvinSketch. K plnohodnotnému vyhľadávaniu v databáze je nevyhnutné mať v PC nainštalovaný okrem editora na kreslenie štruktúrnych vzorcov aj programovací jazyk Java.

MarvinSketch



MarvinSketch – okno pre písanie štruktúry

V záložke **Query** – **Reactions** – **Generate structure from name** po dvojkliknutí na okno v strede s textom MarvinSketch sa otvorí nové okno na písanie štruktúry.



Náhľad prenesenej chemickej štruktúry do základného okna po kliknutí na TRANSFER QUERY

Tu pomocou základných skeletov, väzieb a prvkov nakreslíme chemickú štruktúru, ktorú prenesieme do základného okna kliknutím na text **Transfer Query** v ľavej dolnej časti kresliaceho okna.

Výsledky vyhľadávania

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

Query 17 substances

Create Alert

17 substances out of 43 citations

Filter by:

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

Substances (Grid) Substances (Table) Citations

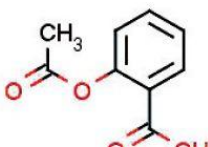
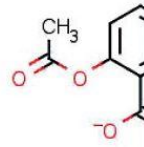
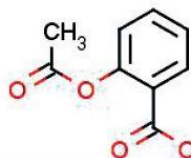
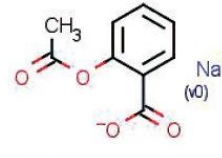
go to Page Page 1 of 2

Sort by: No of References

Structure	Chemical Name	No of References	Reaxys-RN	Comm. Availability	Molecular Formula	No of Fragments	Molweight (g/mol)	Publication Year	No of References	Available Data	Nº of ref.	Boiling Point
	sodium salt of acetylsalicylic acid acetyl salicylic acid sodium salt acetylsalicylic acid, sodium salt sodium acetylsalicylate sodium salt of aspirin Aspirin sodium salt sodium salicylate									Identification (9) Physical Data (9) Spectra (5) Bioactivity/ECotox (12) Use/Application (54)	39	
	2-benzoyloxy-benzoic acid ; sodium-compound 2-Benzoyloxy-benzoeseure; Natrium-Verbindung	no reactions.								Physical Data (2)	1	

Výsledky vyhľadávania sa zobrazia vo forme tabuľky. Každá chemická reakcia má svoje číslo v rámci databázy **REAXYS** (Rx-ID), ktoré je unikátnym identifikačným číslom.

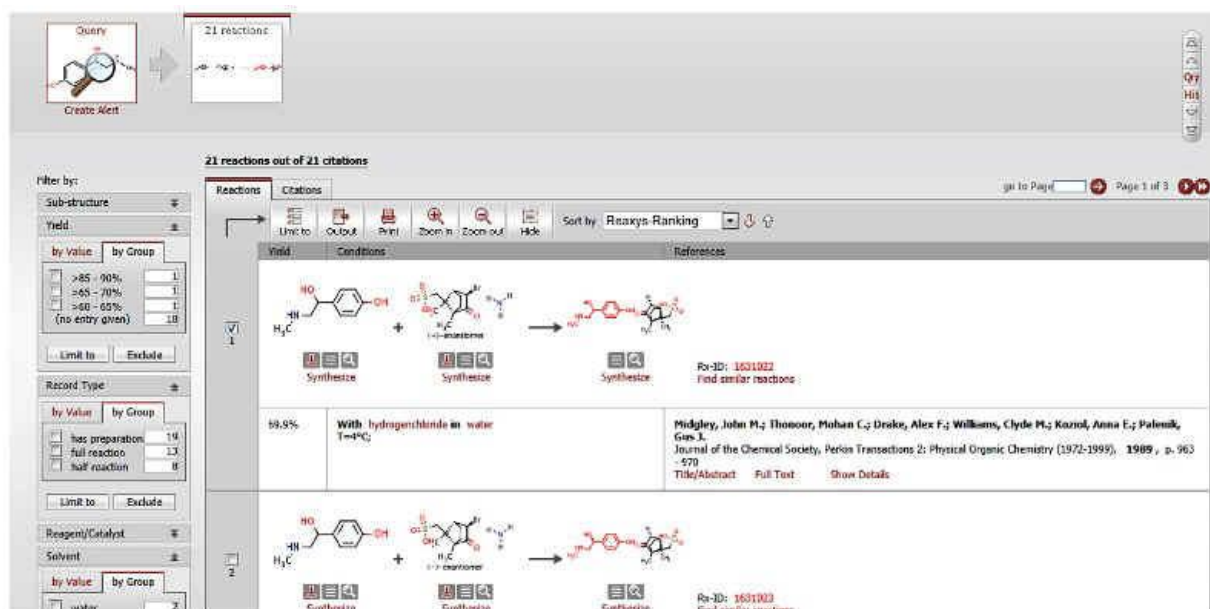
Add Selection Zoom in Zoom out Hide Sort by: Reaxys-Ranking

Yield	Conditions	References
		
Synthesize	No structure RN: 14599441 Synthesize	Synthesize
With sodium hydroxide in water Show Experimental Procedure		Sorenson; John R. J. Patent: U54999347 A1, 1991 ; Title/Abstract Full Text Show Details
With sodium hydroxide in water Show Experimental Procedure		Sorenson; John R. J. Patent: U54221785 A1, 1980 ; Title/Abstract Full Text Show Details
		

Každá nájdená substancia obsahuje:

- údaje o vlastnostiach a zväčšený obraz jej štruktúry v 2 alebo 3-rozmernom zobrazení,
- možnosti jej komerčného využitia (prostredníctvom databázy eMolecule),

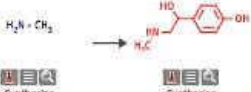
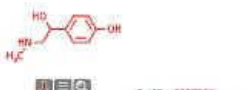
- možnosť vytvoriť plán syntézy prostredníctvom nástroja Synthesis Plan,
- možnosť kopírovať štruktúrne vzorce,
- odkazy na plné texty článkov predplatených časopisov a patentov.



Obrázok A: Okno zobrazujúce hľadajú látku v chemických reakciách ako východiskovú zlúčeninu alebo aj produkt

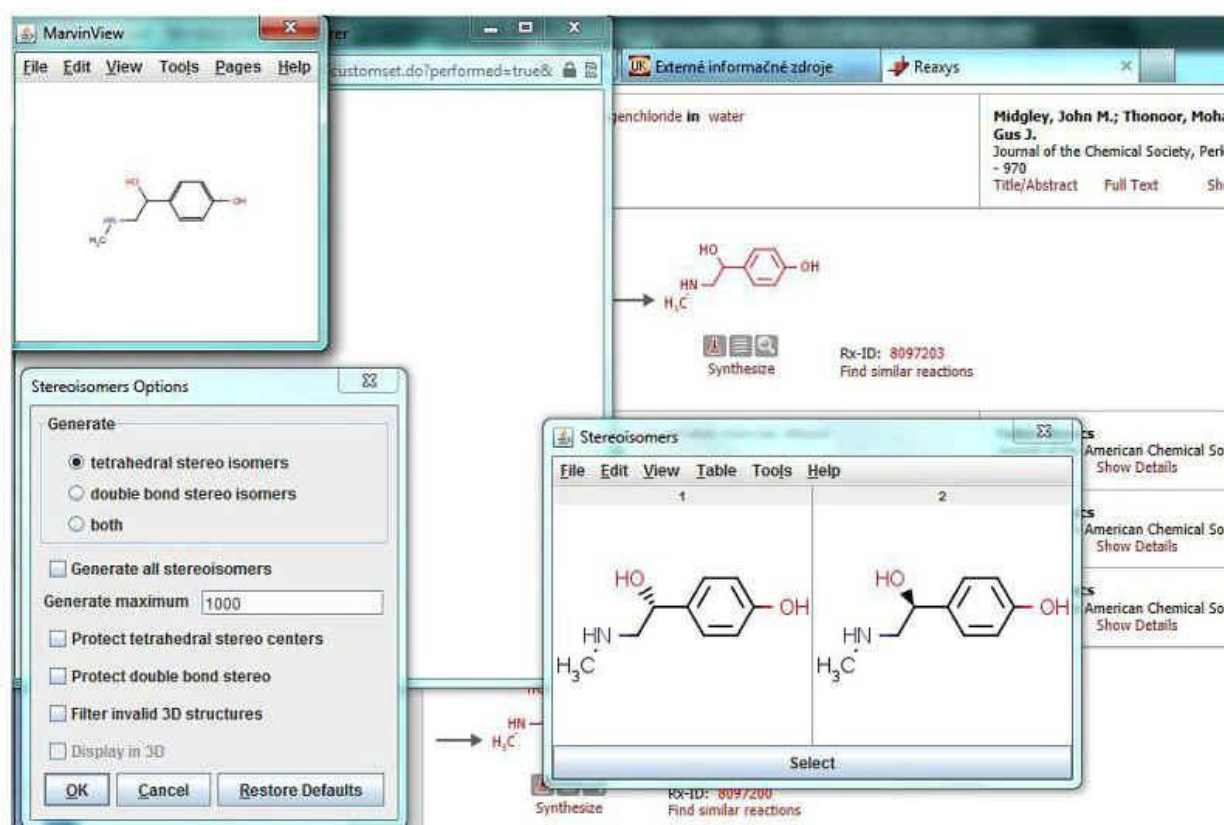
Po kliknutí na **Search** sa otvorí okno (obr. A), kde sa nami hľadaná látka zobrazí v chemických reakciách ako východisková zlúčenina, ale aj ako produkt. V hornej časti okna vľavo je uvedený počet nájdených reakcií. Na ľavej strane sa nachádzajú možnosti na zúženie vyhľadávania, ako sú výťažok reakcie, katalyzátor, rozpúšťadlá a ďalšie podmienky reakcií. Pod každou reakciou sa nachádzajú zdroje jednotlivých reakcií, citácie.

Prepojenie so Scopusom a ScienceDirect umožňuje po kliknutí na **Full Text** otvoriť plný text článku, patentu hovoriacom o danej reakcii; nutné je však mať licenciu na daný časopis a ročník. Tu si môžeme vybrať určité reakcie a po stlačení **Limit to** sa nám zobrazia len vybrané reakčné schémy s literárnymi odkazmi, ktoré je možné tak ako aj pri nelimitovaných reakciách si ich vytlačiť, zväčšiť, zmenšiť, usporiadať podľa zvolených kritérií alebo záložkou **Output** sa dostať k výstupnej správe v pdf formáte (obr. B).

50.1%	With hydrogen chloride in water T=4°C	Midgley, John M.; Thonoor, Mohan C.; Drake, Alex F.; Williams, Clyde H.; Kozioł, Anna E.; Peleňik, Gus J. Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2: Physical Organic Chemistry (1972-1999), 1969, p. 970 Title/Abstract Full Text Show Details
	 Synthesize  Synthesize Rx-ID: 8097203 Find similar reactions	
	With palladium on activated charcoal ethanol Hydrogenation	Fodor; Kovacs Journal of the American Chemical Society, 1949, vol. 71, p. 1045,1047 Full Text Show Details
	With ethanol platinum Hydrogenation	Fodor; Kovacs Journal of the American Chemical Society, 1949, vol. 71, p. 1045,1047 Full Text Show Details
	With ethanol nickel Hydrogenation	Fodor; Kovacs Journal of the American Chemical Society, 1949, vol. 71, p. 1045,1047 Full Text Show Details
	 Synthesize Rx-ID: 8097208 Find similar reactions	
	With water nickel T=90°C; Hydrogenation under Druck	I.G.Farbenind. Patent: DE526087, 1928; Farbtech. Teerfarbenfabr. Verw. Industriezweige, vol. 17, p. 463 Full Text Show Details

<https://www.reaxys.com/reaxys/secure/booms.do?performed=true&action=restore&...>

Obrázok B: Výstupná správa o hľadanej chemickej látke v pdf formáte záložka OUT-PUT



The screenshot displays the MarvinView software interface. The main window shows a chemical structure of 1-(4-hydroxyphenyl)ethan-1-amine. A 'Stereoisomers Options' dialog box is open, showing the 'Generate' section with the following settings:

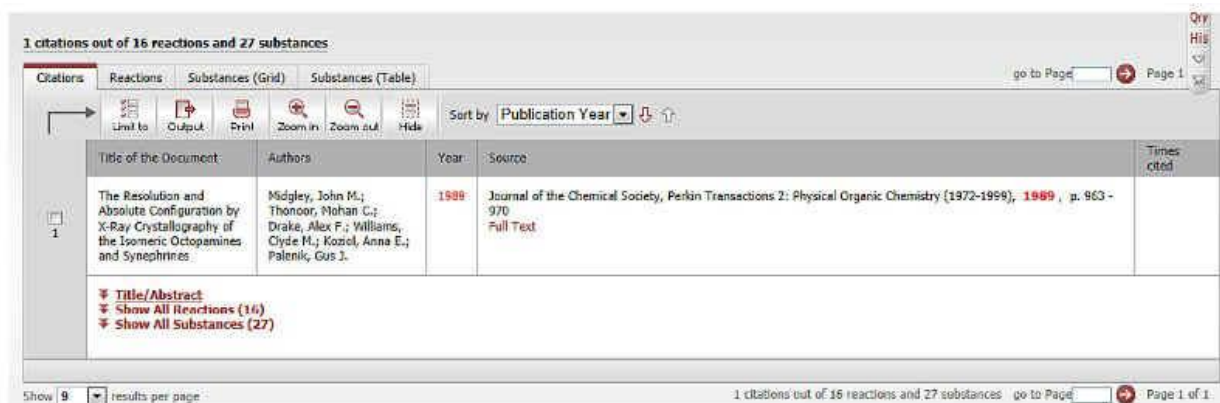
- ☒ tetrahedral stereo isomers
- ☐ double bond stereo isomers
- ☐ both
- ☐ Generate all stereoisomers
- Generate maximum: 1000
- ☐ Protect tetrahedral stereo centers
- ☐ Protect double bond stereo
- ☐ Filter invalid 3D structures
- ☐ Display in 3D

Buttons at the bottom of the dialog are 'OK', 'Cancel', and 'Restore Defaults'. A 'Stereoisomers' window is also open, showing two stereoisomers of the molecule. The background window displays search results for the compound, including a list of references and a 'Synthesize' button.

Zobrazenie ďalších informácií o jednotlivých vstupných reaktantoch a produktoch

Ak sa chceme dozvedieť viac informácií o jednotlivých vstupných reaktantoch a produktoch, klikneme na ikony pod chemickými štruktúrami v rovniciach .

Napr. na ikonu 



1 citations out of 16 reactions and 27 substances

go to Page Page 1

Sort by Publication Year

Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
The Resolution and Absolute Configuration by X-Ray Crystallography of the Isomeric Octopamines and Synephrines	Midgley, John M.; Thonoor, Mohan C.; Drake, Alex F.; Williams, Clyde M.; Kozol, Anna E.; Palenik, Gus J.	1989	Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2: Physical Organic Chemistry (1972-1998), 1989, p. 963 - 970 Full Text	

[Title/Abstract](#)
[Show All Reactions \(14\)](#)
[Show All Substances \(27\)](#)

Show 9 results per page

1 citations out of 16 reactions and 27 substances go to Page Page 1 of 1

Plná citácia článku po kliknutí na **SHOW DETAILS**

Originálny manuál databázy **REAXYS** v anglickom jazyku je dostupný na adrese:

https://www.reaxys.com/info/files/Reaxys_QRG_Feb2010.pdf

Databázu REAXYS sprístupňujú:

1. Chemický ústav SAV - www.chem.sk
2. Slovenská technická univerzita v Bratislave - www.stuba.sk
3. Univerzita Komenského v Bratislave - www.uniba.sk
4. Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach - www.upjs.sk
5. Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave - www.ucm.sk
6. Ústav experimentálnej farmakológie SAV - www.uef.sav.sk
7. Ústav polymérov SAV - www.polymer.sav.sk

Garant obsahu/gestor

PhDr. Daniela Džuganová
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v
Košiciach
daniela.dzuganova@upjs.sk

Zostavovateľ

Mgr. Roman Herda
CVTI SR
roman.herda@cvtisr.sk

Táto publikácia bola pripravená ako súčasť národného projektu

Národný informačný systém podpory výskumu a vývoja na Slovensku – prístup k elektronickým informačným zdrojom (NISPEZ)

Aktivita 1.1: Zabezpečenie nákupu a prístupu k elektronickým informačným zdrojom a optimalizácia ich portfólia pre potreby výskumu a vývoja

Kódy ITMS projektov: 26220220001 , 26240220001

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku / Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ

© 2012 CVTI SR Bratislava