

REAXYS (pôvodne Beilstein – CrossFire Direct) je online vyhľadávač a rešeršná faktografická databáza pre oblasť organickej chémie. Databáza obsahuje viac ako 8 mil. chemických zlúčenín, 5 mil. záznamov o reakciách a 3 mil. záznamov bibliografických citácií. V databáze je možné vyhľadávať podľa štruktúrnych vzorcov, chemických reakcií a chemických zlúčenín. Súčasťou vyhľadávania sú aj bibliografické odkazy na publikované články, ktorých plné texty je možné vyhľadať vďaka prelinkovaniu sa do databázy Scopus a ScienceDirect.

Zdroj: ŠILHÁNEK, J. *Chemická informatika*. Praha: Vydavatelství VŠCHT, 2002. 355 s.

Ďalšie informácie:

<http://www.info.reaxys.com/>

Technické požiadavky

Operačný systém

Windows 2000

Windows XP

Windows Vista

Internetový prehliadač

Microsoft Internet Explorer 6

Microsoft Internet Explorer 7

Microsoft Internet Explorer 8 (s Java 1.6.0_11 a vyššie)

Firefox 2

Java

Sun Microsystems Java Version 5.0 tiež neskôr známy ako Java Runtime Environment (JRE) Version 1.5.0

Ďalšie aplikácie

MarvinSketch (ChemAxon)

ISIS/Draw (Symyx)

Symyx Draw (Symyx)

CrossFire Structure Editor (Elsevier)

Ďalšie informácie o technických požiadavkách:

https://www.reaxys.com/documentation/about_login.htm

K PLNOHODNOTNÉMU VYHĽADÁVANIU V DATABÁZE JE NEVYHNUTNÉ MAŤ V PC NAINŠTALOVANÚ JAVU A ŠPECIÁLNY NÁSTROJ MARVINSKETCH.

NÁVOD NA INŠTALÁCIU JAVY

Voľne stiahnuteľná verzia Javy sa nachádza napríklad na stránke:
<http://www.java.com/en/download/index.jsp>



Po kliknutí na nápis Free Java Download s modrým pozadím sa stránka aktualizuje a je potrebné opäť kliknúť na identický nápis. Systém ponúkne uloženie súboru, ktorý treba potom spustiť a napokon reštartovať internetový prehliadač.

Pre overenie je možné v ovládacom paneli, príp. na pravej strane spodnej lišty vyhľadať ikonku Javy.



NÁVOD NA INŠTALÁCIU MARVINSKETCH – nástroj na kreslenie chemických štruktúr vytvorený spoločnosťou ChemAxon, tvorcom chemických softvérov pre biochemický a farmaceutický priemysel.

Na stránke firmy ChemAxon sa nachádza voľne stiahnuteľná verzia. Po kliknutí na jej názov si ju stačí uložiť na plochu a následne spustiť.

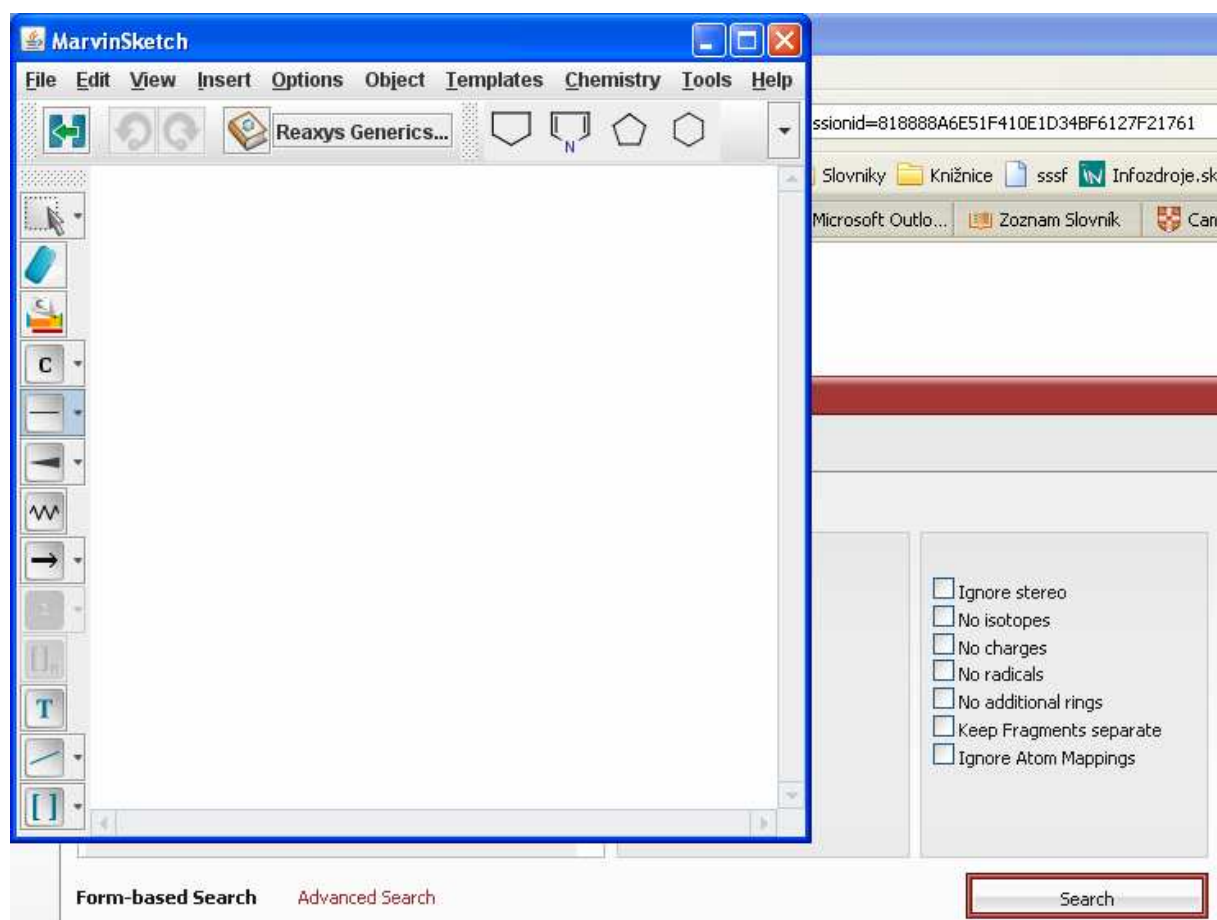
<http://www.chemaxon.com/marvin/examples/webstart/index.html>

The screenshot shows the ChemAxon website interface. At the top, there is a navigation bar with links: Home, Products, Documentation, Download, Forum, About us, and Contact us. Below this, a section titled "Marvin Applications via Internet" explains that MarvinSketch, MarvinView, and MarvinSpace can be launched via the Internet using Java Web Start technology. A list of applications is provided, with "The MarvinSketch application" highlighted by a red box. Below the list, there is a form to "Start MarvinSketch with your molecule:" which includes a text input field labeled "Enter URL here" and a "Start!" button.

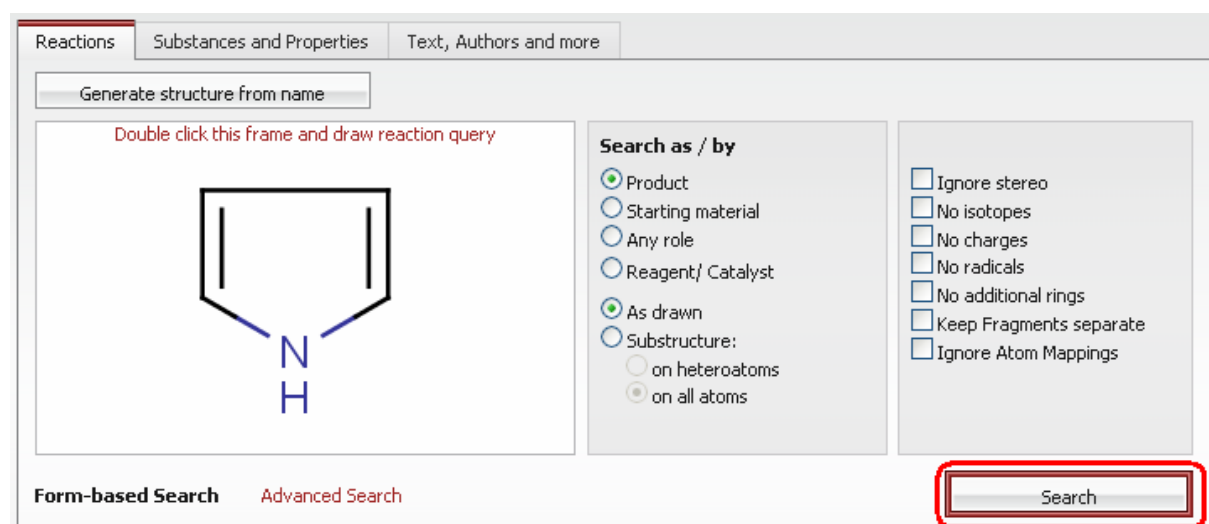
V niektorých prípadoch je nutné prehliadač reštartovať, opäť otvoriť stránku www.reaxys.com a dvojklíknúť na prázdny rámik.

The screenshot shows the Reaxys website interface. At the top, there is a navigation bar with links: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings, and Help. Below this, a section titled "Reactions" is active, showing a search interface. A large empty frame is labeled "Double click this frame and draw reaction query". To the right of the frame, there are search options: "Search as / by" with radio buttons for "Product", "Starting material", "Any role", "Reagent/ Catalyst", "As drawn", and "Substructure:". The "Substructure:" option has sub-options "on heteroatoms" and "on all atoms". To the right of these options, there are checkboxes for "Ignore stereo", "No isotopes", "No charges", "No radicals", "No additional rings", "Keep Fragments separate", and "Ignore Atom Mappings". At the bottom right, there is a "Search" button highlighted with a red box. Below the search options, there are tabs for "Form-based Search" and "Advanced Search". Under "Form-based Search", there are checkboxes for "Reaction Data" and "Bibliographic Data". At the bottom, there are buttons for "Clear Query", "Load Query", and "Save Query".

Následne sa otvorí nové okno, do ktorého je možné jednoducho nakresliť chemickú štruktúru.



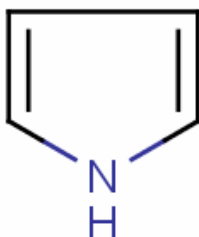
Po dokreslení stačí okno aplikácie MarvinSketch zatvoriť a obrázok sa automaticky prekopíruje do otvorenej stránky internetového prehliadača. Následný postup vyhľadávania je rovnaký ako pri bežných prehliadačoch.



Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name

Double click this frame and draw reaction query



Search as / by

Search Progress

Search finished. **273 hits found.**

100%

searching for 4 sec

Cancel View results

Form-based Search Advanced Search

Search

Vo výsledku je možné dostať sa k abstraktom, príp. plným textom článkov cez dtb. Elsevier alebo Scopus.

Query 273 reactions



Filter by:

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

Reactions Citations

273 reactions out of 256 citations go to Page 1 of 31

Limit to Selection Output Sort by Reaxys-Ranking

Yield	Conditions	References
100%	With lithium in fluessigem NH₃ ; With n-BuLi in tetrahydrofuran; hexane T=0°C; With n-BuLi in tetrahydrofuran; hexane 1 h; Heating;	Treibs; Dietl Justus Liebigs Annalen der Chemie, 1958, vol. 619, p. 80,90 Full Text Simon, Richard A.; Ricco, Antonio J.; Wrighton, Mark S. Journal of the American Chemical Society, 1982, vol. 104, # 7 p. 2031 - 2034 Title/Abstract Full Text Scopus Frenzel, A.; Gluth, M.; Herbst-Irmer, R.; Klingebiel, U. Journal of Organometallic Chemistry, 1996, vol. 514, # 1-2 p. 281 - 286 Title/Abstract Full Text Scopus
78.7%	With H₂; Pt(0.6percent)-Al₂O₃-In₂O₃(2.3percent)-Re₂O₇(0.5percent) T=400°C; other bifunctional Pt/Al₂O₃ modified catalysts; Product distribution;	Gitis, K. M.; Neumoeva, G. E.; Isagulyants, G. V. Chemistry of Heterocyclic Compounds (New York, NY, United States), 1993, vol. 29, # 11 p. 1308 - 1315 Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii 1993, # 11 n. 1516 - 1525