

Reaxys<sup>®</sup>

Guide de Démarrage Rapide



« Reaxys est une solution Web gratuite sans Java qui fonctionne sur les navigateurs modernes. En raison de l'environnement complexe des différentes versions des navigateurs disponibles, l'équipe Reaxys a testé le système sur les versions suivantes de navigateur :

- Firefox (version 49 ou ultérieure)
- Chrome (version 53 ou ultérieure)
- Edge (version 14 ou ultérieure)
- Safari (version 9 ou ultérieure)
- Internet Explorer (version 11)

Nous recommandons d'utiliser un de ces navigateurs pour bénéficier de performances optimales. Reaxys peut être compatible avec d'autres navigateurs, mais certaines fonctions et fonctionnalités pourraient ne pas fonctionner correctement. Veuillez nous contacter si vous avez des questions au sujet de la prise en charge des navigateurs.

## Quick search (Recherche rapide)

Vous pouvez glisser-déposer votre fichier ou naviguer pour importer un fichier.

La barre des tâches vous permet de naviguer entre **Quick search** (Recherche rapide), **Query builder** (Constructeur de requête), **Results** (Résultats), **Synthesis planner** (Planificateur de synthèse) et **History** (Historique).

Cliquez sur l'icône représentant une cloche pour accéder aux alertes que vous avez créées à partir des résultats d'une requête développée à l'aide de **Quick search** (Recherche rapide) ou de **Query builder** (Constructeur de requête).

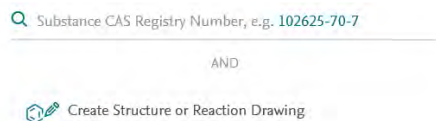
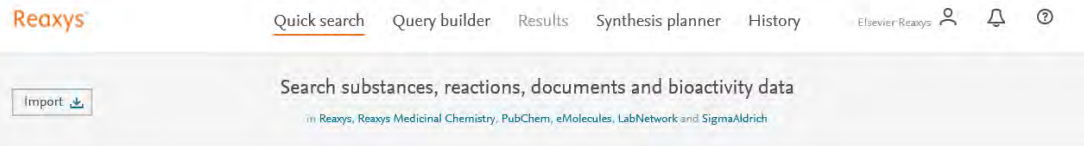
L'option texte de **Quick search** (Recherche rapide) permet de saisir des termes en langage naturel (les termes peuvent être tronqués à gauche, à droite ou au milieu à l'aide d'un astérisque [recherche par caractères génériques]).

**Structure search** (Recherche de structure) permet de rechercher des substances et des réactions par dessin.

The screenshot shows the Reaxys web interface. At the top left is the Reaxys logo. A navigation bar contains tabs for 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. Below the navigation bar is a search bar with the text 'Search substances, reactions, documents and bioactivity data' and a subtext 'In Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, PubChem, eMolecules, LabNetwork and SigmaAldrich'. An 'Import' button with a download icon is on the left. The search bar contains the text 'Substance Properties, e.g. melting point of xylital'. Below the search bar are two options: 'AND' and 'Create Structure or Reaction Drawing' with a drawing icon. In the top right corner, there are three icons: a user profile, a bell (notifications), and a question mark (help).

Aide : cliquez ici pour trouver les FAQ, les nouveautés et le matériel de formation.

Profil utilisateur : définissez certaines préférences de structure/réaction pour personnaliser Reaxys et l'adapter à vos besoins, p. ex. les correspondances par page

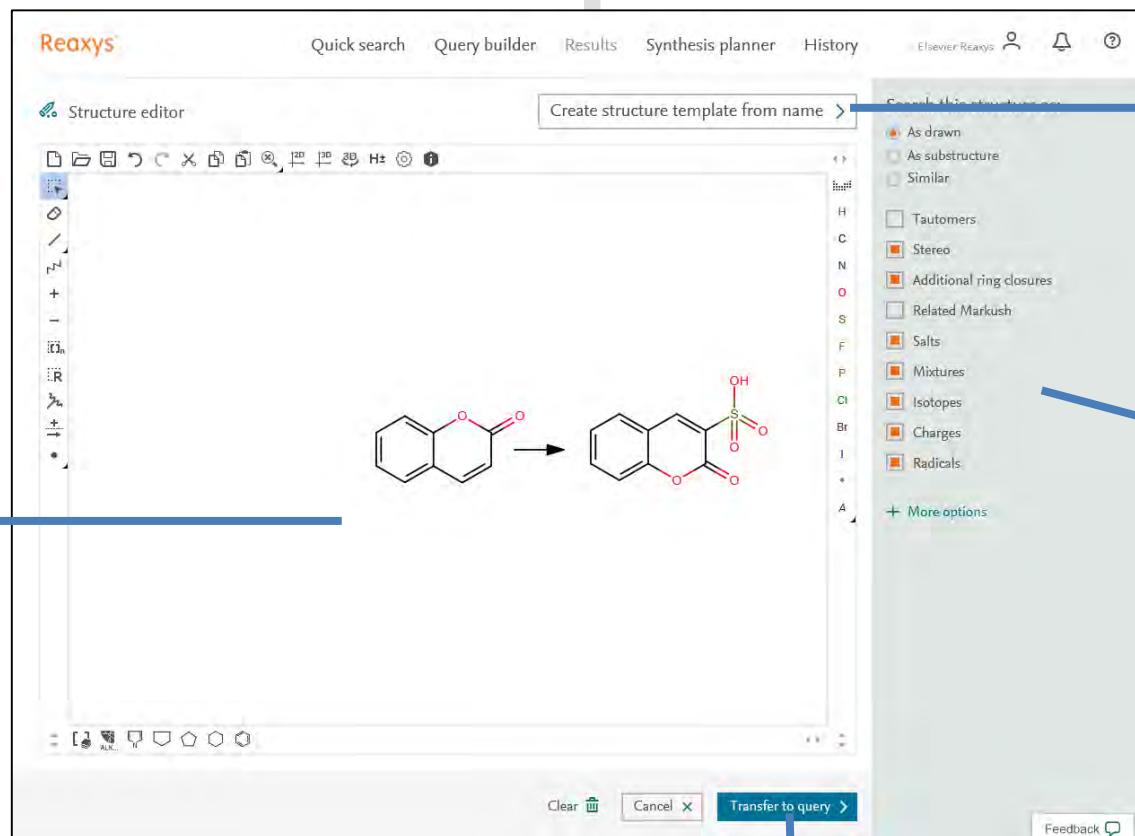


1. Cliquez sur la boîte **Create Structure** ou **Reaction Drawing** (Créer dessin de structure ou de réaction).

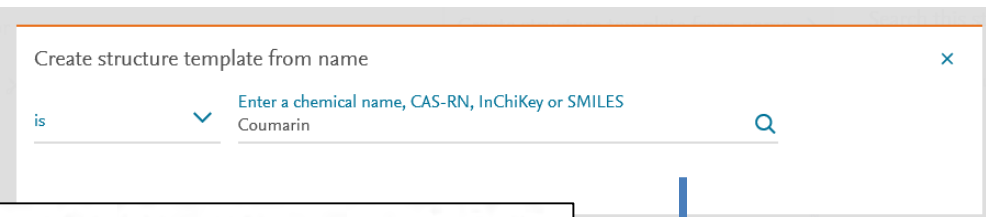
2. Utilisez les outils **Marvin JS** de ChemAxon pour créer un dessin de structure ou de réaction.

### Petites astuces !

- Mappage d'atomes : dessinez une flèche de réaction entre les atomes mappés.
- Nombres de substitutions : cliquez dans l'espace blanc et saisissez la touche « point » (.). Puis, dans le menu Atom Query Properties (Propriétés de requête d'atome), sélectionnez « .s+ » et cliquez pour modifier le nombre.
- Cliquez [ici](#) pour voir d'autres astuces.



3. Cliquez sur **Transfer to query** (Transférer à la requête) pour afficher les résultats.

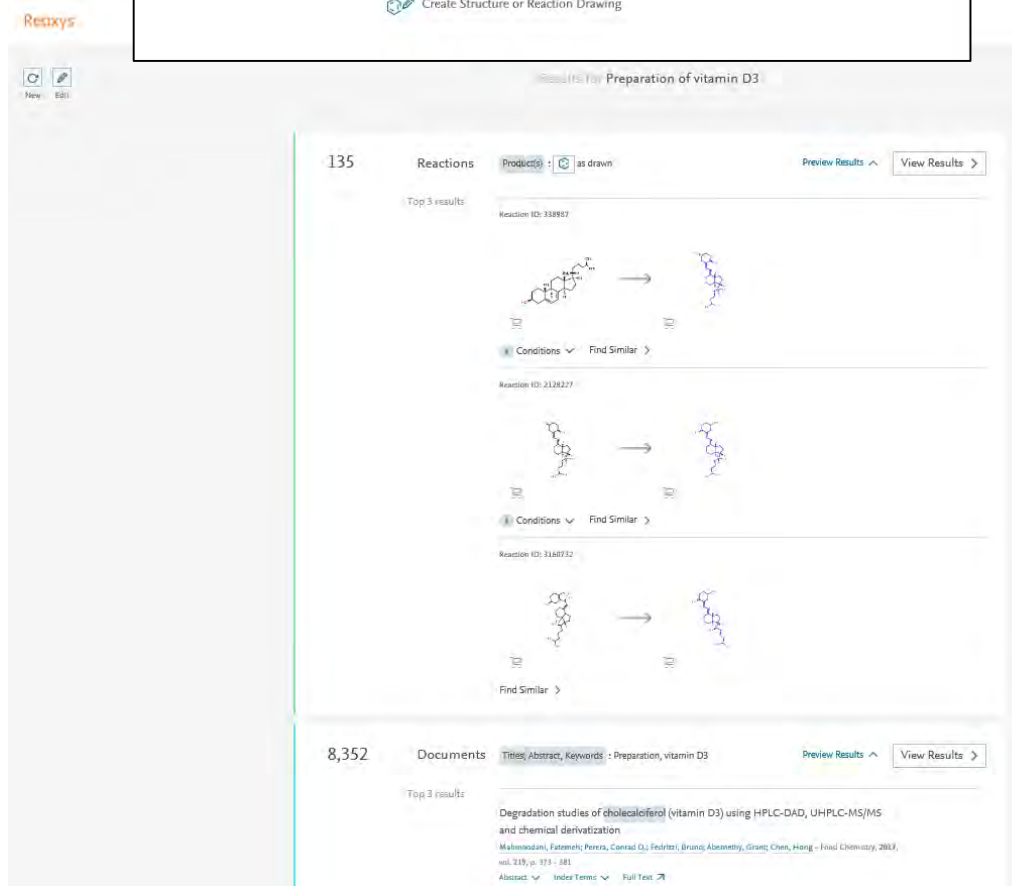
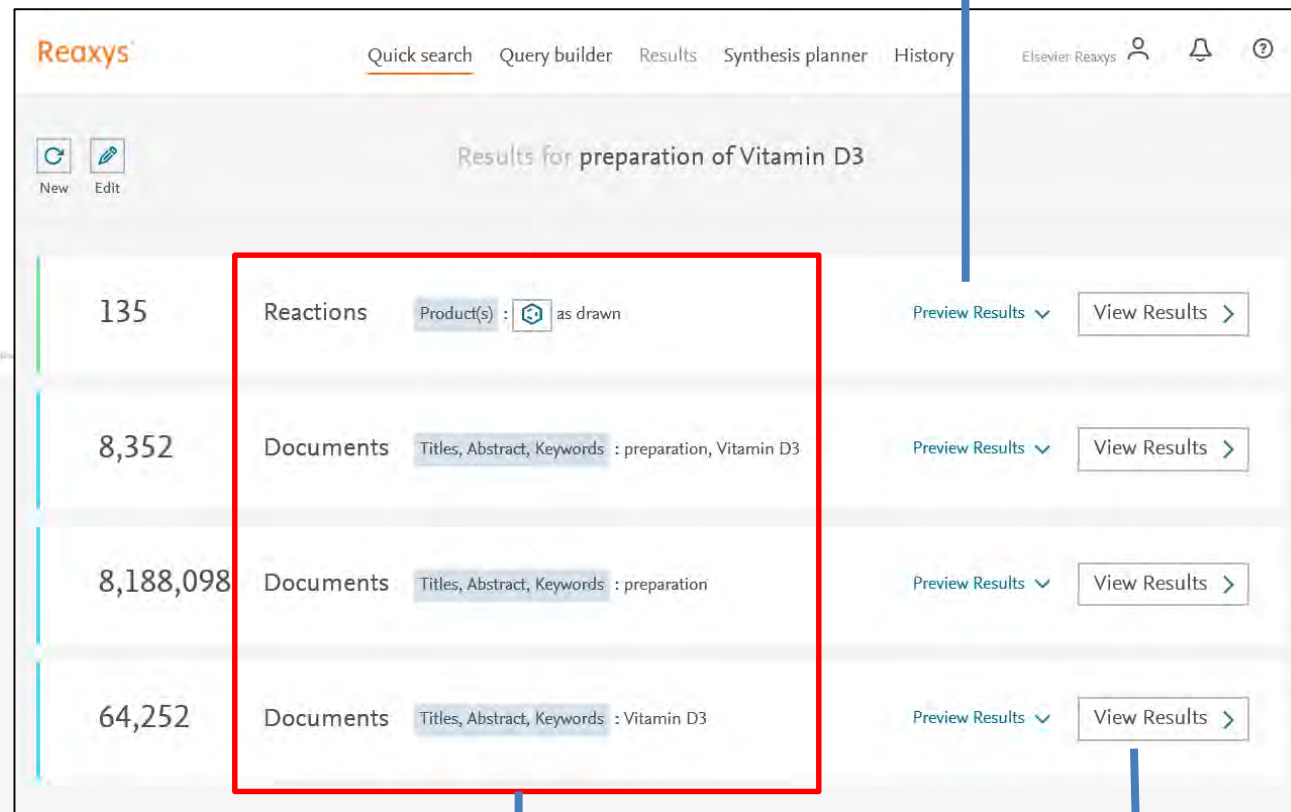
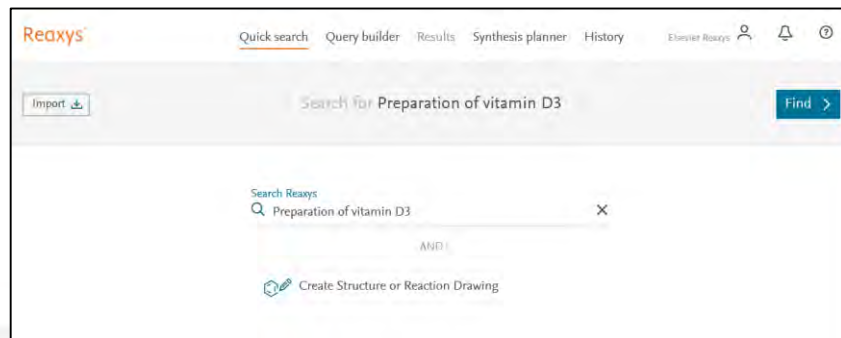


Vous pouvez créer un modèle de structure à partir du nom (par ex., *Coumarin*)

Vous pouvez rechercher une structure **As drawn** (Tel que dessinée), **As substructure** (En tant que sous-structure) ou une structure **Similar** (Similaire) et limiter davantage votre recherche (par ex., Tautomers [Tautomères], Stereo [Stéréo], etc.).

# Aperçu des résultats Quick search (Recherche rapide)

Cliquez sur **Preview Results** (Aperçu des résultats) pour afficher les trois premiers résultats d'un jeu de résultats.



Reaxys analyse l'entrée de requête Quick search (Recherche rapide) et fournit des options basées sur l'interprétation (Substances, Réactions et/ou Documents).

Cliquez sur **View Results** (Afficher les résultats) pour afficher tous les résultats d'un jeu de résultats.

## Panneau Fields (Champs), Forms (Formulaires) et History (Historique) de Query builder

Cliquez pour accéder à **Query builder** (Constructeur de requête).

Pour rechercher des **Fields** (Champs) ou des **Forms** (Formulaires) saisissez les termes ici, par ex. « boil » pour rechercher les champs *boiling point* (point de fusion).

Cliquez sur **Forms** (Formulaires) pour accéder aux formulaires de recherche prédéfinis ou personnalisés couvrant certains sujets.

La vue initiale affiche diverses catégories de champs de recherche.

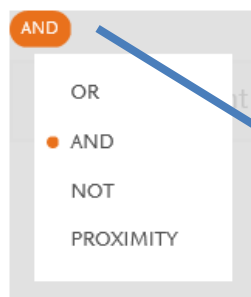
Drag & Drop to build a new query

Cliquez sur **History** (Historique) pour afficher les recherches récentes et enregistrées qui peuvent être utilisées dans **Query builder** (Constructeur de requête) pour être combinées entre elles ou avec d'autres champs de recherche

## Query builder (Constructeur de requête)

1. Saisissez « melt » dans la boîte **Find search fields and forms** (Rechercher des champs et formulaires de recherche) pour rechercher les champs *melting point* (point de fusion).

7. Pour enregistrer la requête (sous forme de fichier .json), cliquez sur **Save** (Enregistrer).



5. Cliquez sur le booléen de votre choix.
- **OR (OU)** : contient des données d'au moins un des champs
  - **AND (ET)** : contient des données des deux champs
  - **NOT (SANS)** : contient les données du premier champ et exclut le second
  - **PROXIMITY (PROXIMITÉ)** : généralement utilisé avec les champs de paramètres, garantissant que les contenus des deux champs sont liés (par ex., point de fusion et solvant)

2. Cliquez (ou glissez-déposez) sur la propriété **Melting Point** (Point de fusion) par exemple. Elle apparaîtra alors dans Query builder (Constructeur de requête).

4. Définissez des critères de recherches spécifiques (contraintes numériques).

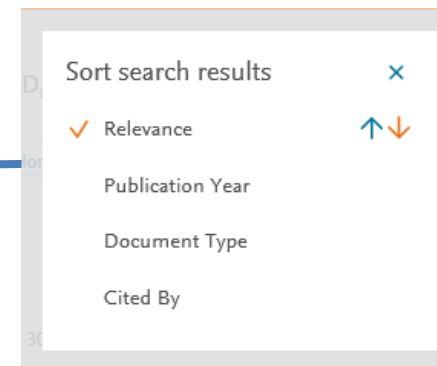
3. Cliquez sur **Show fields** (Afficher les champs).

6. Cliquez sur **Search** (Rechercher) pour afficher les résultats.

**Remarque** : les Querylets, tel qu'indiqué ici pour le point d'ébullition, comportent au moins deux champs de recherche. Ils sont automatiquement combinés à l'aide du paramètre PROXIMITY (PROXIMITÉ).

Le tri par défaut est effectué par ordre décroissant de pertinence, mais d'autres options sont disponibles :

- **Publication Year (Année de publication).**
- **Document Type (Type de document).**
- **Cited By (Cité par).**



Utilisez les options **Filters (Filtres)** et **Analysis (Analyse)** pour affiner les résultats.

Utilisez **Index Terms (List) (Termes d'indexation [Liste])** et/ou **Index Terms (ReaxysTree) (Termes d'indexation [ReaxysTree])** pour affiner les documents par rubriques.

Cliquez sur le lien pour le ou les auteurs afin d'explorer les détails de leur publication et obtenir des options d'analyse supplémentaires dans Scopus.

Cliquez sur les liens pour afficher le **Full Text** (Texte complet), sur les informations de la première page (pour les enregistrements de brevet), Substances, Reactions (Réactions), l'Abstract (Résumé) ou Index Terms (Termes d'indexation).

Cliquez sur le lien pour afficher les citations dans Scopus.

Résultats de l'exportation :

- Cliquez sur **Export** (Exporter) dans la barre d'outils (si ce bouton n'est pas visible, cliquez sur Options)
- Définissez les **options Format, Range (Plage), Export data** (Exporter les données) et **Additional** (Supplémentaire).
- Cliquez sur **Export** (Exporter).
- La progression du téléchargement s'affiche dans le coin inférieur droit de l'écran.
- Lorsque l'exportation est terminée, cliquez sur **Download** (Télécharger).
- **Remarque** : vous pouvez également sélectionner des jeux de résultats individuels lorsque vous parcourez le jeu de correspondances, et commencer alors l'exportation pour exporter uniquement les correspondances sélectionnées.



1. Cliquez sur le texte ou sur le bouton pour développer le filtre **Catalyst Classes** (Classes de catalyseurs).
2. Cliquez sur **More (Plus)** pour afficher les options de filtre supplémentaires.

L'application de ce filtre réduira les 135 réactions originales à 23.

Cliquez [ici](#) pour en savoir plus sur **Filters** (Filtres).

3. Cliquez sur **Limit To** (Limiter à) pour afficher les 23 résultats ou sur **Exclude** (Exclure) pour afficher tous les résultats, hormis les 23 sélectionnés.

# Synthesis planner (Planificateur de synthèse) : Manually (Manuellement)

7. Cliquez sur **Export** (Exporter) pour exporter les réactions ou les documents.

4. Dans **Synthesis planner** (Planificateurs de synthèse), cliquez sur le **Synthesis plan** (Plan de synthèse) pour l'afficher.

1. Cliquez sur **Manually** (Manuellement).

3. Cliquez sur **Add # to plan** (Ajouter # au plan).

2. Dans la fenêtre **Add preparation** (Ajouter la préparation), sélectionnez les réactions à ajouter à votre plan.

6. Pour enregistrer la requête (sous forme de fichier .json), cliquez sur **Save** (Enregistrer).

5. Cliquez sur les options d'étape de Synthesis (: ) pour accéder à :

- Show conditions (Afficher les conditions)
- Hide preparations (Masquer les préparations)
- Add preparations (Ajouter les préparations)
- Remove preparations (Supprimer les préparations)

# Synthesis planner (Planificateur de synthèse) : Autoplan (Planification automatique)

135 Reactions Product(s) : as drawn

Top 3 results

Reaction ID: 338

Synthesize

- Manually
- Autoplan

Synthesize

4. Conditions Find Similar

1. Cliquez sur **Autoplan** (Planification automatique).

2. Définissez les paramètres pour générer automatiquement les voies de synthèse.

Create plans by autoplan

Number of plans to create: 10

Max. alternative branches: 5

Max. number of steps: 5

Stop searching if starting material is commercially available:  Yes  No

Default yield for reactions without a given yield:

Always show screen before creating autoplan

Create Plans

3. Cliquez sur **Create Plans** (Créer des plans).

Reaxys Quick search Query builder Results Synthesis planner History Elsevier Reaxys

Synthesis Planner Edit

Plan 1

Import Save Export

Autoplan 1

1 Plan 1

2 Plan 2

3 Plan 3

85.4%

Show conditions

Hide preparation

+ Add preparations

Remove preparation

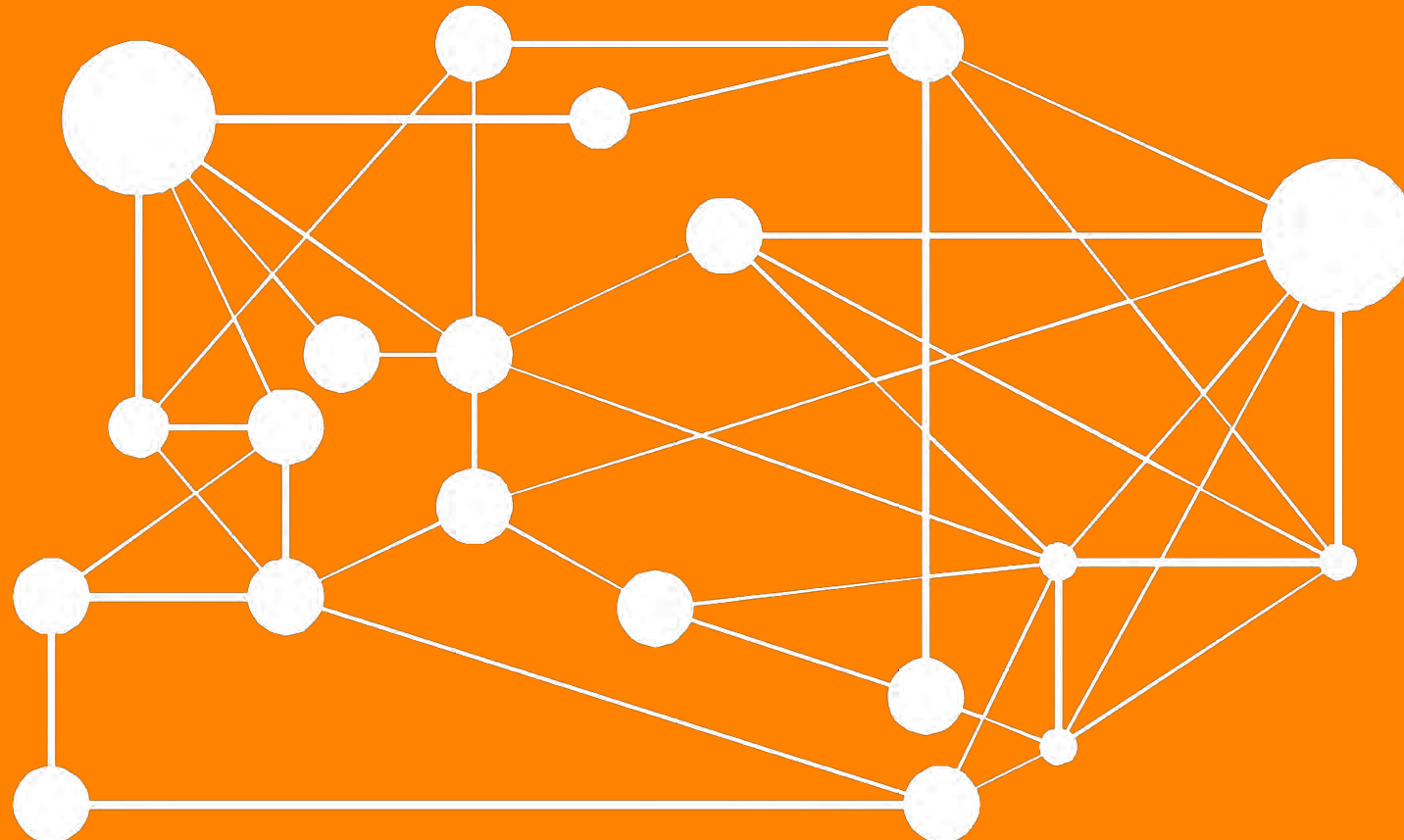
4. Cliquez sur les options d'étape Synthesis (Synthèse) (⋮) pour accéder à :

- Show conditions (Afficher les conditions)
- Hide preparations (Masquer les préparations)
- Add preparations (Ajouter les préparations)
- Remove preparations (Supprimer les préparations)

Conditions

Preparation - 1

Yield	Conditions	Reference
85.4%	With sodium hydroxide in ethanol at 80°C; for 0.5h;	Jia, Menglu; Zhao, Rui; Xu, Bing; Yan, Wenqiang; Chu, Fuhao; Gu, Hongshun; Xie, Tianxi; (...) Wang, Penglong; Lei, Haimin - MedChemComm, 2017, vol. 8, # 1, p. 148 - 151 Full Text Details Abstract
	With sodium tetrahydroborate in methanol	Ur Rahman, Faiz; Tan, Tian Wei - Bulletin of the Chemical Society of Ethiopia, 2011, vol. 25, # 2, p. 247 - 254 Full Text Cited 2 times Details Abstract



# REAXYS

Visit <https://www.reaxys.com> to log in.

Visit the [Reaxys Support Center](#) for more helpful information about using Reaxys