

## 화학 부문의 정보와 문헌을 찾는 가장 빠른 방법 REAXYS

검색: (Quick Search): 구조 + 텍스트 검색

❶ 텍스트 검색 옵션 키워드를 입력합니다.

물성치 (e.g. nmr, solubility, melting point),  
CAS# 등 검색

❷ 구조를 그려 물질과 반응 검색

❸ 구조와 키워드 통합검색도 가능합니다.

The screenshot shows the Reaxys search interface. At the top, there is a navigation bar with links: Quick search, Query builder, Results, Synthesis planner, History, Elsevier Reaxys, and a user icon. Below this is a large search bar with the text "Search substances, reactions, citations and bioactivity data". Inside the search bar, the text "Substance Property, e.g. Melting point of Xylitol" is entered. To the right of the search bar is a blue button labeled "Search >". Below the search bar, the word "AND" is displayed. Below "AND" is a button labeled "Create Structure or Reaction Drawing" with a pencil icon. To the right of this button is a red text label: "‘Create Structure or Reaction Drawing’ 을 클릭 구조를 그립니다." Below this is a smaller screenshot of the Reaxys interface showing the "Marvin JS" drawing tool. The drawing tool has a toolbar with various chemical drawing tools. In the center, a chemical reaction is shown: CC(=O)OCC1=CC=CC=C1 (Aspirin) is drawn. To the right of the drawing tool is a sidebar with search options. The sidebar has a section "Search this structure as:" with three radio buttons: "As drawn" (selected), "As substructure", and "Similar". Below this is a section "Include" with several checkboxes: "Tautomers", "Stereo", "Additional ring closures", "Related Markush", "Salts", "Mixtures", "Isotopes", "Charges", and "Radicals". At the bottom of the sidebar is a button labeled "More options". At the bottom of the drawing tool is a button labeled "Transfer to query >".

## Aspirin 의 크로마토그래피 데이터 검색 예

Reaxys®

Quick search Query builder Results Synthesis planner History

Search substances, reactions and documents  
in Reaxys, PubChem, eMolecules and LabNetwork

Search Reaxys **① 텍스트 검색 옵션 키워드를 입력합니다.**  
Q Chromatography X

AND

**② 물질의 구조를 입력합니다.** X

As drawn

## 결과보기

## 문헌 검색

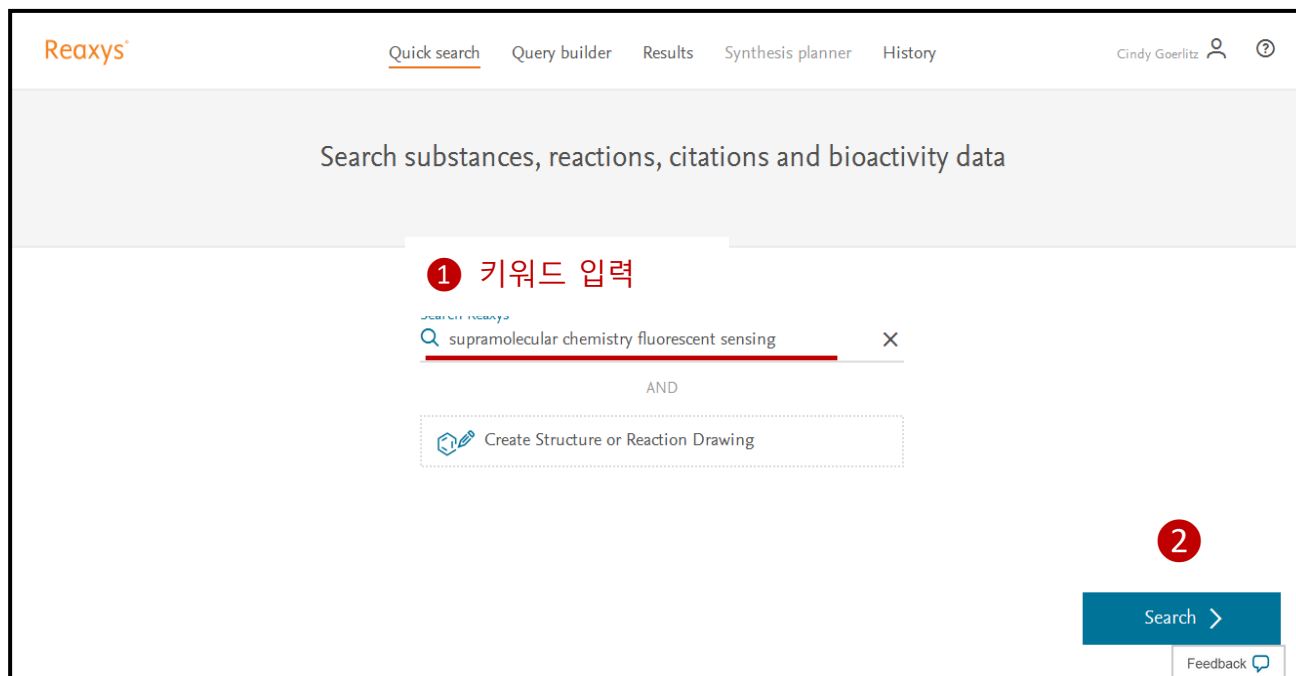
Reaxys는 화학 분야 최대의 데이터베이스로서 화학 관련 문헌 검색에 대한 다양한 방법을 제공합니다.

- Reaxys 저널, 특허, 회의록과 책 등의 광범위한 콘텐츠에서 신중하게 선정한 핵심 저널과 특허에서 관련 정보들을 색인하여 제공합니다.
- **400여 종의 핵심저널과 특허**는 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 정보**가 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 모니터링 시스템 등 다양한 분야에 적용 가능합니다. 예로 「**Supramolecular chemistry fluorescent sensing**」 키워드를 검색합니다.

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

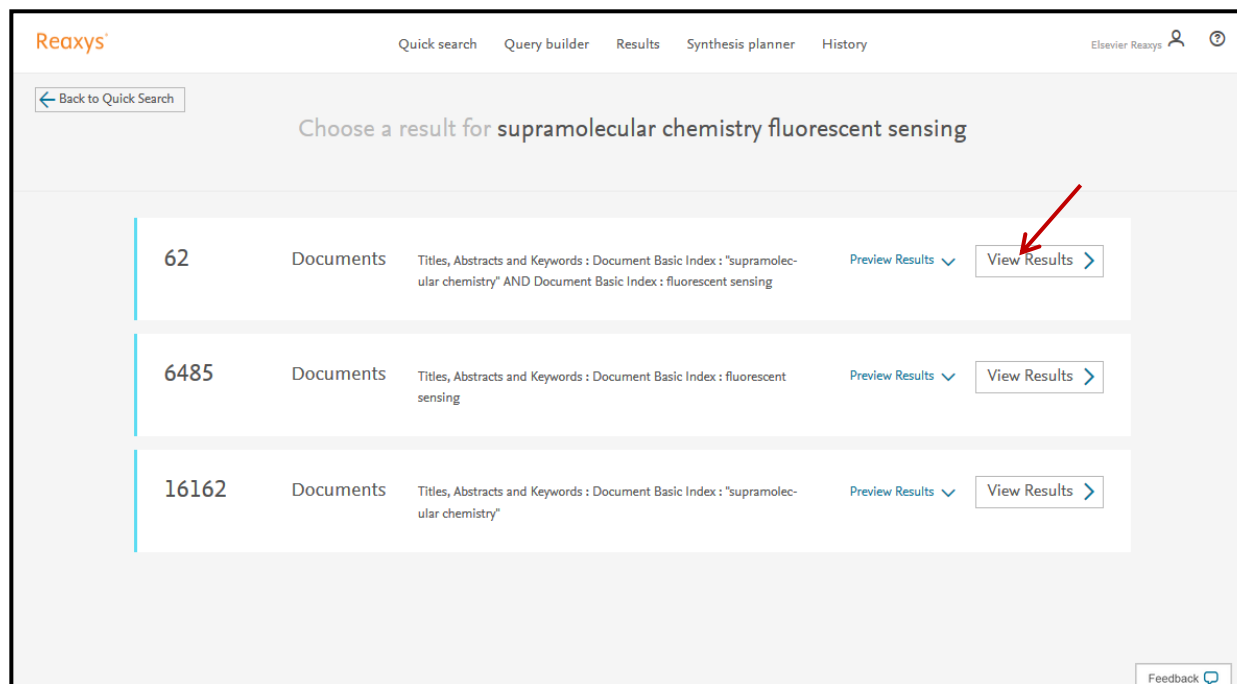


## 1. 검색결과 미리 보기

Reaxys에서는 상세내용으로 가기 전 단계로 검색 결과를 일차적으로 확인 가능합니다.

1번째 라인인 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.



## 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

[Back to Query Builder](#)

139 Documents with 628 Substances, 396 Reactions

☐ 0 selected: [Limit To](#) [Exclude](#) [Export](#) [Relevance](#) [↑](#) [↓](#)

☐ Montmorillonite-supramolecular hydrogel hybrid for fluorocolorimetric sensing of  
1 polyamines  
Ikeda, Masato; Yoshii, Tatsuyuki; Matsui, Toshihiro; +3 others - Journal of the American Chemical Society, 2011, vol. 133, # 6, p. 1670 - 1673  
[Abstract](#) [Index Terms](#) [Substances](#) [Reactions](#) [Full Text](#)

Cited 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

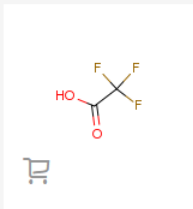
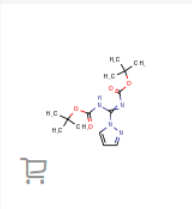
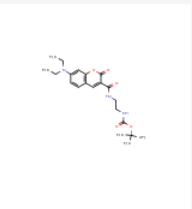
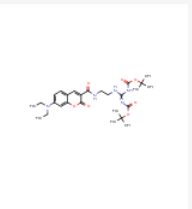
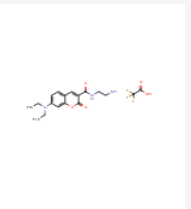


### 3. 문헌검색결과에서 본문의 물질과 반응 정보 바로 확인 가능

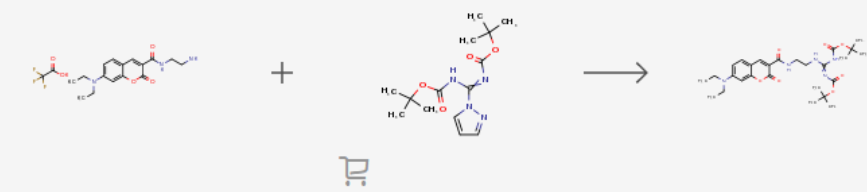
☐ Montmorillonite-supramolecular hydrogel hybrid for fluorocolorimetric sensing of polyamines<sup>1</sup>  
Ikeda, Masato; Yoshii, Tatsuyuki; Matsui, Toshihiro; +3 others - Journal of the American Chemical Society, 2011, vol. 133, # 6, p. 1670 - 1673

Abstract ▾ Index Terms ▾ **Substances** ▴ **Reactions** ▴ Full Text ↗

**Substances**

**Reactions**



Find Similar Reactions >

Yield	Conditions	Reference
97%	With N-ethyl-N,N-diisopropylamine In acetonitrile at 20°C	

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

① 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)

- ☐ fluorescent dye 33
- ☐ fluorescence 25
- ☐ fluorescence intensity 23
- ☐ hydrophobic surface 19
- ☐ titration 18
- ☐ fluorescence quenching 16
- ☐ luminescence type 13
- [+ More](#)

### Index Terms (List)

Clear selected × ↓ ↑ Sort by Occurrence ×

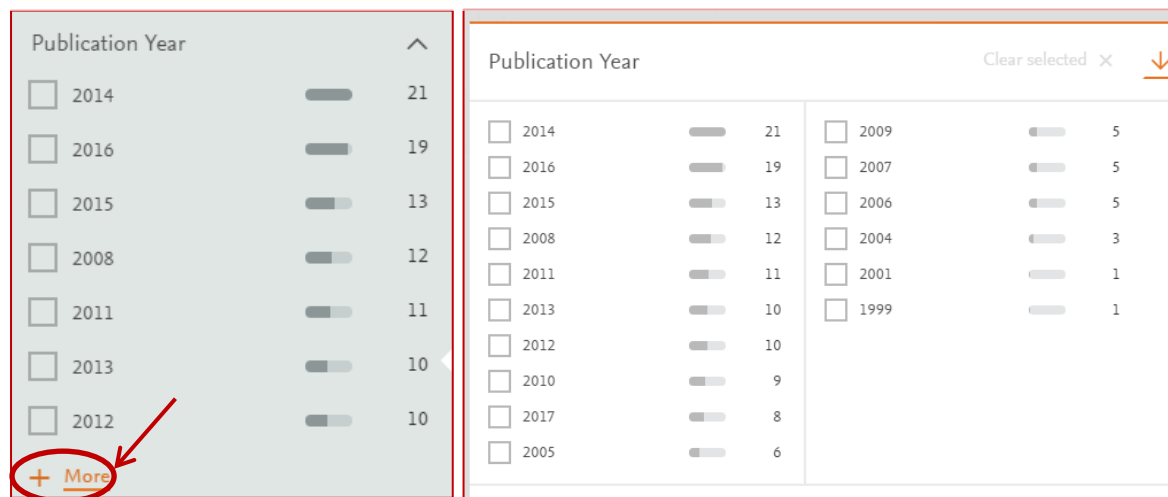
<input type="checkbox"/> fluorescent dye 33	<input type="checkbox"/> spectroscopical ana... 10	<input type="checkbox"/> intermolecular force 7
<input type="checkbox"/> fluorescence 25	<input type="checkbox"/> nanoparticle 10	<input type="checkbox"/> density functional t... 7
<input type="checkbox"/> fluorescence intens... 23	<input type="checkbox"/> 1h-nmr spectroscopy 10	<input type="checkbox"/> x-ray diffraction 6
<input type="checkbox"/> hydrophobic surface 19	<input type="checkbox"/> molecular recognit... 8	<input type="checkbox"/> solubilizer 6
<input type="checkbox"/> titration 18	<input type="checkbox"/> fret measurement 8	<input type="checkbox"/> separation method 6
<input type="checkbox"/> fluorescence quenc... 16	<input type="checkbox"/> fluorescence spectr... 8	<input type="checkbox"/> protonation 6
<input type="checkbox"/> luminescence type 13	<input type="checkbox"/> deprotonation 8	<input type="checkbox"/> fluorescence quant... 6
<input type="checkbox"/> fluorescence spectr... 13	<input type="checkbox"/> adsorption 8	<input type="checkbox"/> fluorescence emiss... 6
<input type="checkbox"/> colorant 13	<input type="checkbox"/> surface-active agent 7	<input type="checkbox"/> atomic force micro... 6
<input type="checkbox"/> emission spectrum 12	<input type="checkbox"/> photon correlation ... 7	<input type="checkbox"/> transmission electr... 5

1 2 3 4 5 ... 12 >

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.

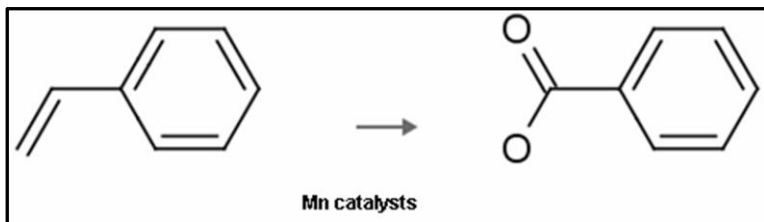


③ 문헌의 종류나 저널 타이틀을 제한하여 검토가 가능합니다.



## 반응검색 (Reaction Searching)

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



이 반응검색에서 아래 내용을 예로 보여줍니다.

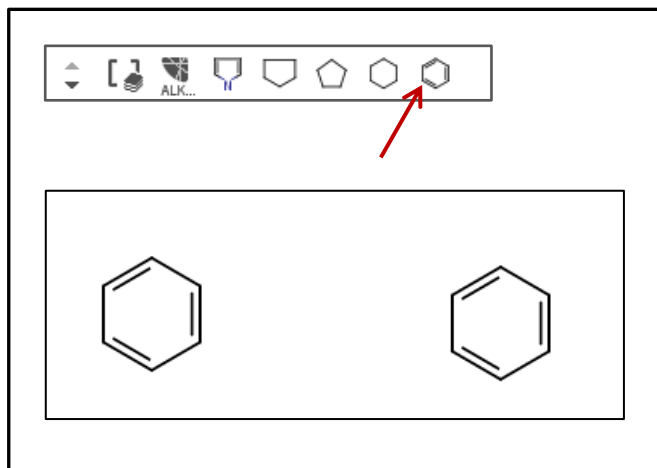
- 반응검색을 입력하는 방법
- 시작화합물과 생성물의 맵핑(정확한 위치 매칭) 방법
- 결합(bond) 기본값 변경 방법
- 반응 검색 방법 “As substructure”
- 처음 검색 결과에서 특정 촉매나 시약을 포함하는 반응으로 결과를 재 검색하는 방법

## 구조 검색 입력 (Create a Structure Query)

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

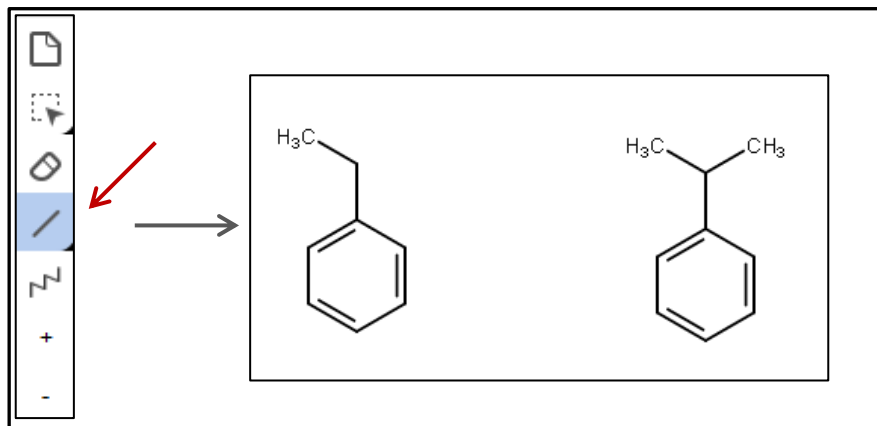


2. 방향족 (aromatic) 구조를 그립니다.
  - a. 벤젠 톨을 선택합니다.
  - b. 두 개 벤젠링을 아래와 같이 그립니다.



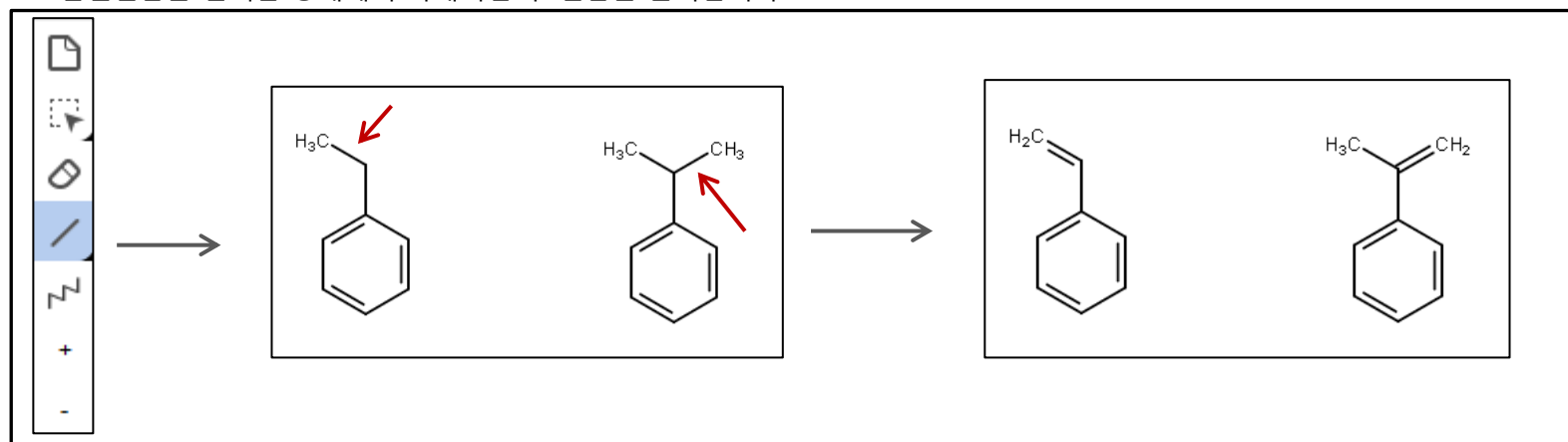
3. 단일결합을 선택합니다..

a. 아래와 같이 결합을 추가합니다.



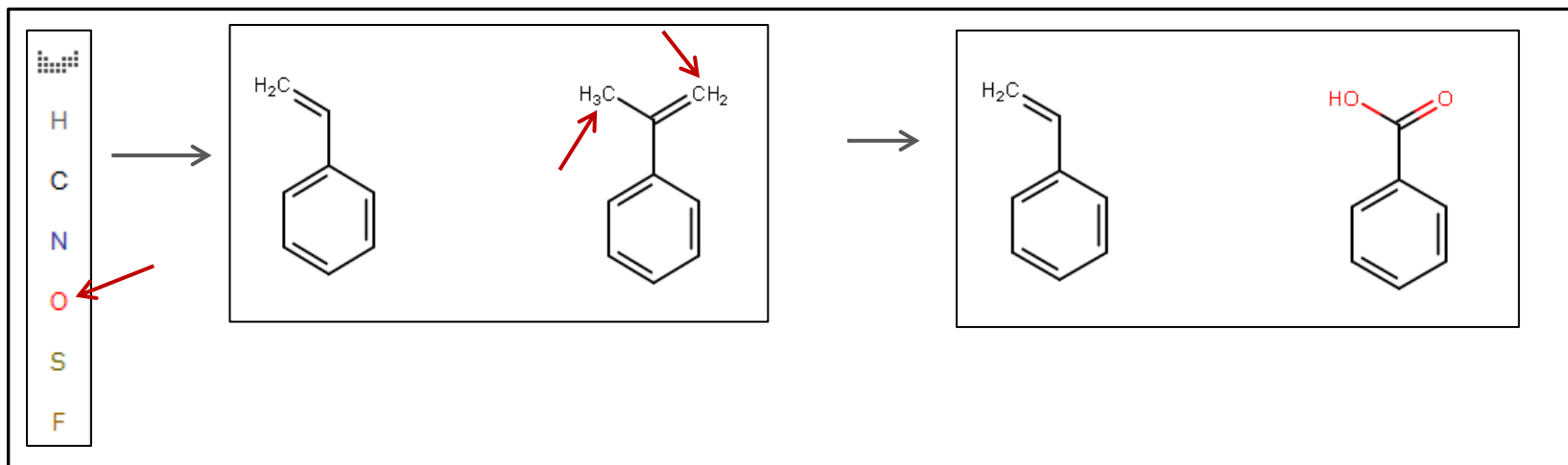
4. 이중결합으로 그립니다.

a. 단일결합을 선택한 상태에서 아래처럼 두 결합을 클릭합니다.



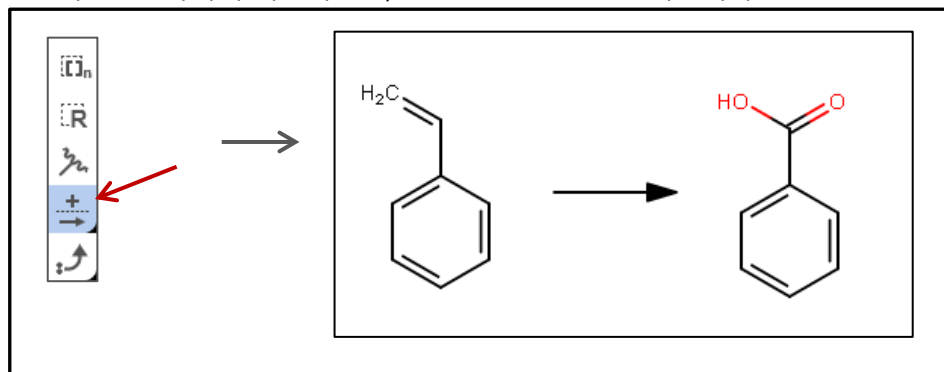
5. 필요하다면, 원자들을 변경합니다.

- 원자 툴에서 'O'를 선택하고, 'CH<sub>2</sub>' 원자 위치를 클릭하면 'O'로 변경됩니다.
- 'H<sub>3</sub>C'도 클릭해서 'O'로 변경합니다.



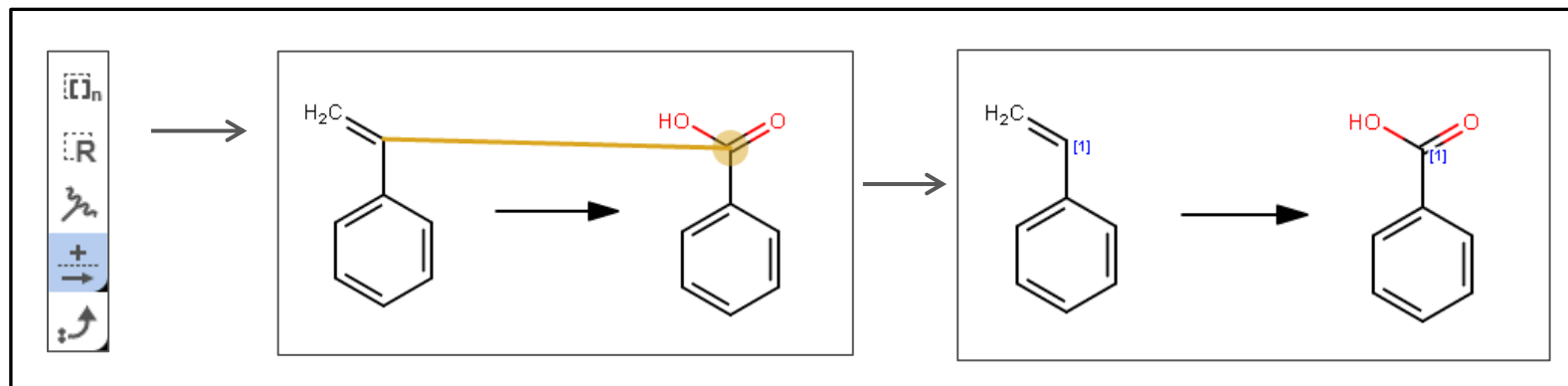
6. 반응으로 표시합니다.

- 두 물질 사이에 직선화살표/반응 툴로 반응을 표시합니다.

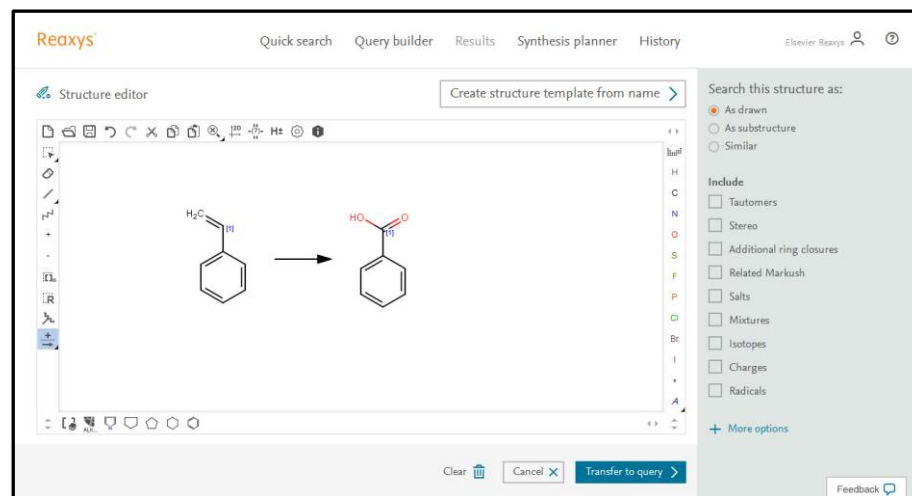


## 7. 원자 맵핑(Atom Mapping)

- 직선 화살표/ 반응 툴을 사용하여 반응물의 탄소원자와 생성물의 대응하는 탄소원자 사이를 화살표로 표시합니다.  
이에 따라 2 개의 원자가 맵핑 됩니다. (또는 반응물의 탄소 원자를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 'Atom properties' 대화 상자, 'Map field'에 1 을 추가합니다. 생성물의 탄소 원자에 대해 동일한 작업을 수행).



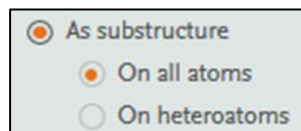
최종반응식은 아래와 같습니다.





8. **Search this structure as:** 패널에는 3가지 옵션이 선택 가능합니다.

- **As drawn:** 그려진 구조대로 검색합니다.
- **As substructure:** 두 가지 옵션 중

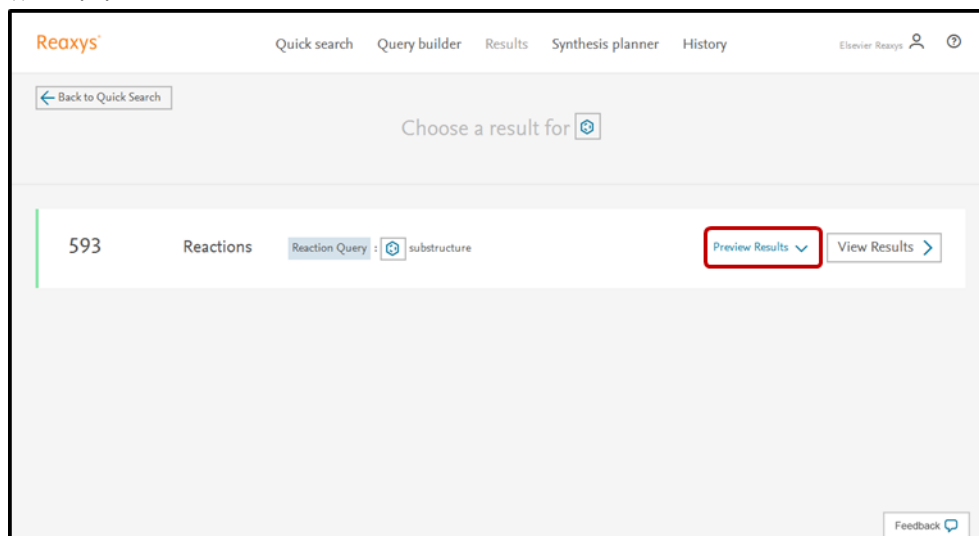


- **On all atoms:** 모든 원자를 검색 합니다.
- **On heteroatoms:** 헤테로 원자를 검색합니다.
- **Similar:** 그려진 구조를 바탕으로 유사물질을 검색합니다.

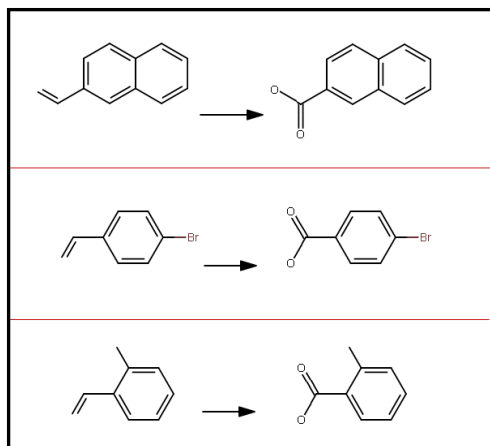
1. 부분구조검색과 모든 원자에서 치환이 발생을 허용하는 **As substructure + On all atoms** 클릭

9. **Transfer to Query** 클릭, **Search** 버튼 클릭

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



10. **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.

1. 물질은 화학 반응에서 역할로 분류하고, Reaxys에서 시약/ 촉매는 일반적으로 촉매 클래스에 그룹화됩니다. 필터 패널에 표시 목록이 구성 분류된 첫 번째 계층에서 확인할 수 있습니다.
  - a. Catalysis class 용어들을 확장합니다.
  - b. + **More**을 클릭하여 Catalysts Classes 하위 용어를 검색합니다.

- c. '**active center**' 클릭
- d. **Ag** 박스 체크 – 11개의 반응 결과를 표시합니다. Silver oxide, silver nitrate and silver acetate
- e. **Apply** 클릭: 결과는 은(silver)함유 촉매를 사용한 화합물의 반응만을 표시합니다

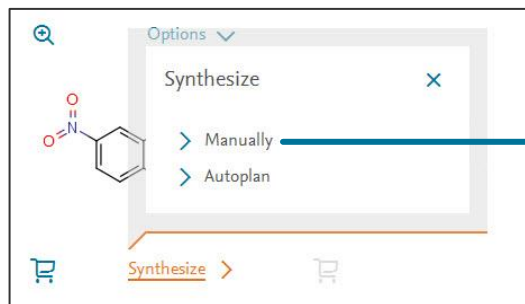
Clear selected x    ↓ ↑ Q x

<div style="margin-bottom: 10px;"> <input checked="" type="checkbox"/> active center    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 255         </div> <div> <input type="checkbox"/> heterogeneous    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 13         </div>	<div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Mn    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 100</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Os    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 39</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Fe    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 33</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Ru    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 28</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Cu    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 21</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Pd    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 18</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Ni    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 14</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input type="checkbox"/> Cr    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 14</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input checked="" type="checkbox"/> Ag    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 11</div>	<div style="margin-bottom: 10px;"><input checked="" type="checkbox"/> silver(I) oxide    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 6</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input checked="" type="checkbox"/> silver nitrate    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 5</div> <div style="margin-bottom: 10px;"><input checked="" type="checkbox"/> silver(I) acetate    <div style="width: 100px; height: 10px; background: linear-gradient(to right, #ccc, #0070C0);"></div> 1</div>
--	---	---

Apply >

## 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.

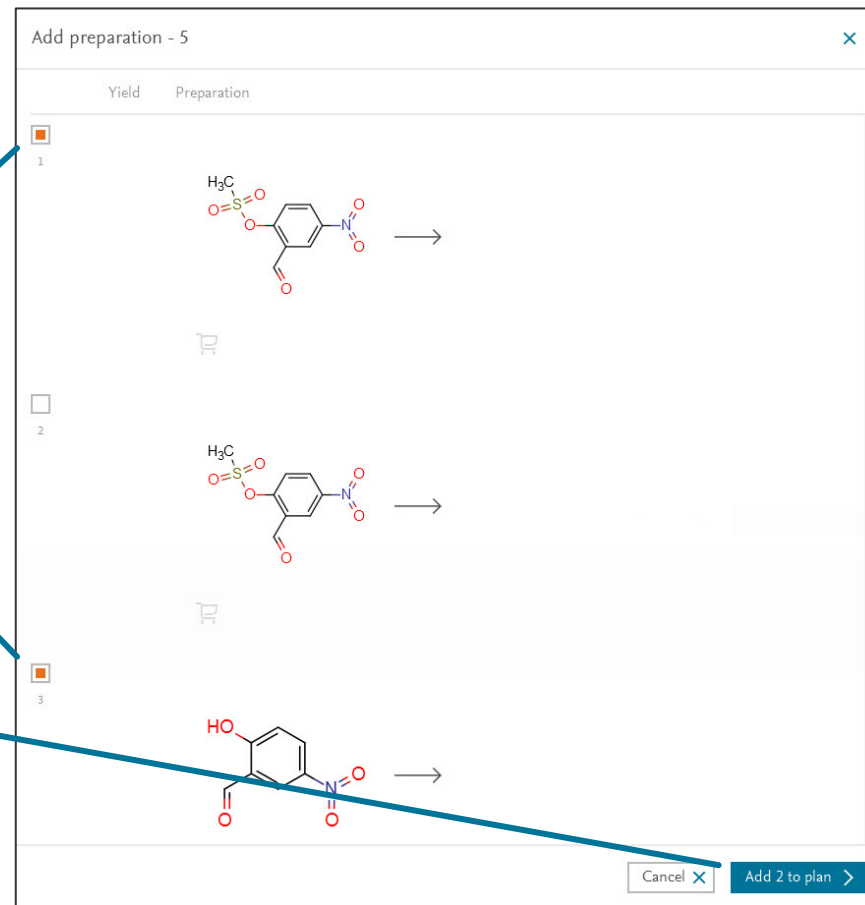


1. **Manually**  
(직접설계하기) 클릭

2. **Add preparation** 창에서 경로에  
추가할 반응을 선택합니다.

Note: 시작물질 구조와 같기 때문에  
생성물의 구조는 나타나지 않습니다.

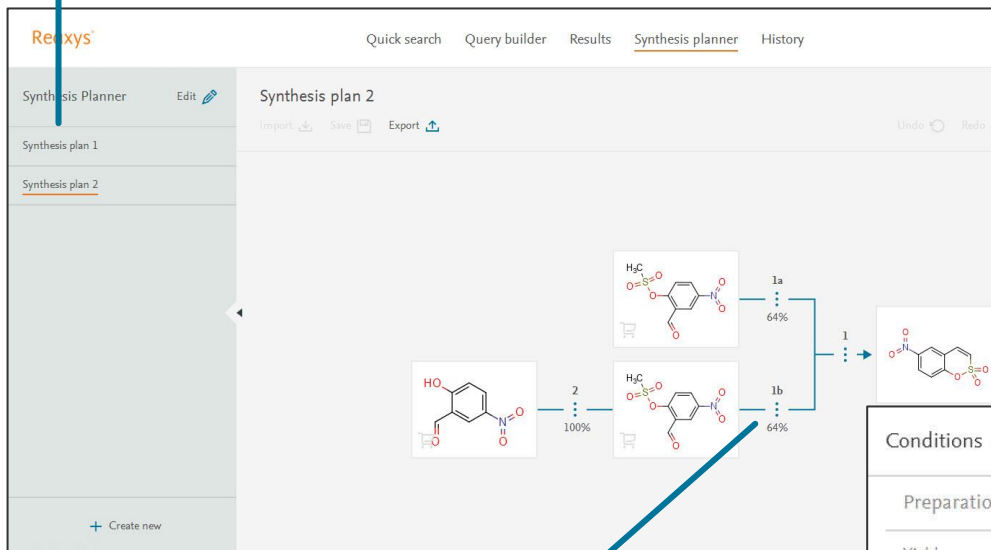
3. **Add #** 클릭합니다.



## Synthesis planner (합성경로 설계) – Manually (계속)

### 1. Synthesis planner 에서, 보기할

합성경로 클릭



- Show conditions
- Hide preparation
- Remove preparation

### 3. Show conditions (조건보기) 클릭

선택된 반응스텝에서 상세한 실험정보가 나타납니다. 스크롤다운, 합성경로에서 다른 반응스텝 상세정보 보기

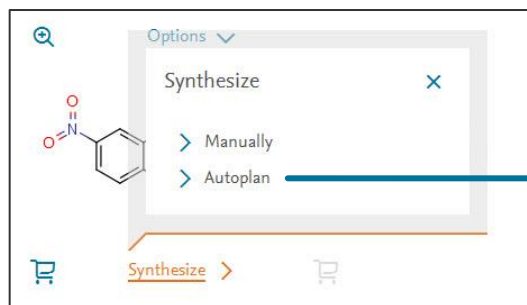
### 1. Synthesis step options (⋮) 열어보기

- Show conditions (조건 보기)
- Hide preparations (숨기기)
- Add preparations (추가하기)
- Remove preparations (삭제하기)

Conditions		
Preparation - 1b		
Yield	Conditions	Reference
64%	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate <b>With</b> DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Inert atmosphere Stage #2: <b>With</b> pyridine; phosphoryl chloride at 0 - 20°C Experimental Procedure	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, <b>2012</b> , vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text  Cited 13 times Show details
	Stage #1: 2-formyl-4-nitrophenyl methanesulfonate <b>With</b> DBU In dichloromethane at 0°C for 2h Stage #2: <b>With</b> pyridine; phosphoryl chloride at 20°C for 3h Experimental part Experimental Procedure	Makrecka, Marina; Zalubovskis, Raivis; Vavers, Edijs; +3 others - Letters in Drug Design and Discovery, <b>2013</b> , vol. 10, # 5, p. 410 - 414 Full Text  Cited 1 times Show details

## Synthesis planner (합성경로설계) - Autoplan

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



1. Autoplan 클릭

2. 자동 합성 경로를 생성하기 위한  
파라미터를 설정합니다.

3. Create Plans 클릭

Create plans by autoplan

Number of plans to create

2

▼

Max. alternative branches

3

▼

Max. number of steps

3

▼

Stop searching if starting material is commercially available

☐ Yes
 ☒ No

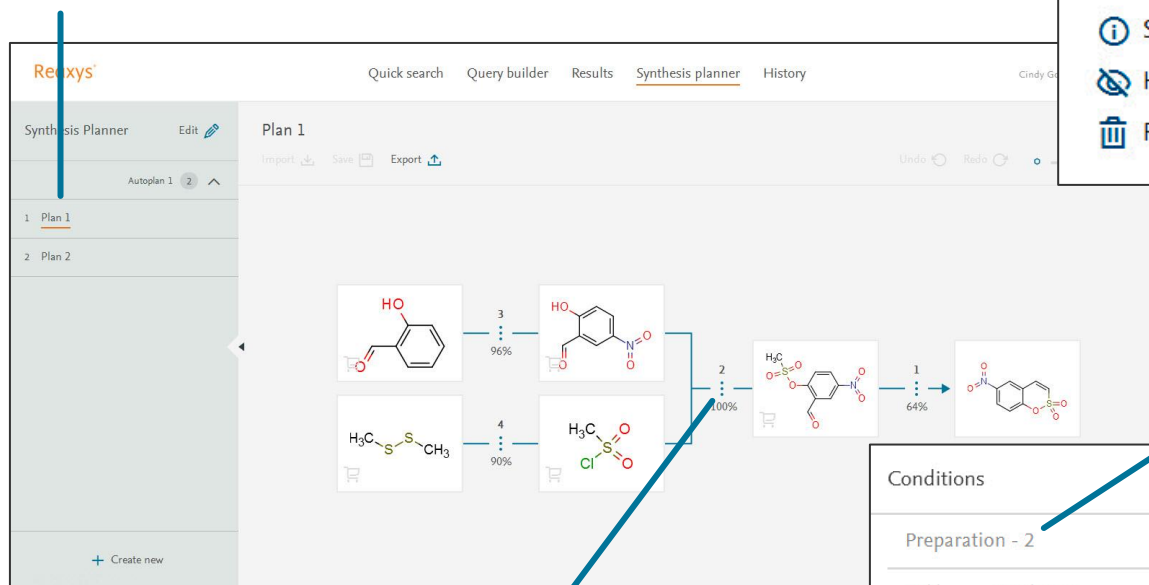
Default yield for reactions without a given yield

☐ Always show screen before creating autoplan

Create Plans >

## Synthesis planner (합성경로설계) – Autoplan (계속)

### 1. Synthesis planner 에서, 보기할 합성경로 클릭



### 2. Synthesis step options ( : ) 열어보기

- Show conditions (조건 보기)
- Hide preparations (숨기기)
- Add preparations (추가하기)
- Remove preparations (삭제하기)

Show conditions  
 Hide preparation  
 Remove preparation

### 3. Show conditions (조건보기) 클릭

선택된 반응스텝에서 상세한 실험정보가 나타납니다. 스크롤다운, 합성경로에서 다른 반응스텝 상세정보 보기

Conditions		
Preparation - 2		
Yield	Conditions	Reference
100%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 2h Experimental part	Grandane, Aiga; Tanc, Muhammet; Di Cesare Mannelli, Lorenzo; +4 others - Journal of Medicinal Chemistry, 2015, vol. 58, # 9, p. 3975 - 3983 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 5 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>
99%	With triethylamine In dichloromethane at 0 - 20°C for 22.1667h Experimental Procedure <a href="#">v</a>	Grandane, Aiga; Belyakov, Sergey; Trapencieris, Peteris; +1 other - Tetrahedron, 2012, vol. 68, # 27-28, p. 5541 - 5546 Full Text <a href="#">↗</a> Cited 13 times <a href="#">↗</a> Show details <a href="#">&gt;</a>



# 물질검색 (Reaction Searching)

## 1 화학명으로 찾기: 화합물 이름, CAS#, SMILES...

Create structure template from name

is

▼

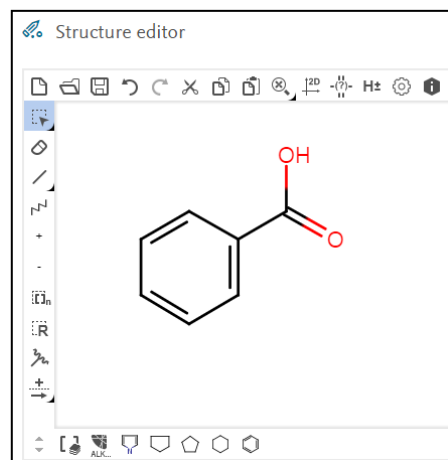
Enter a chemical name, CAS-RN, InChIKey or SMILES

benzoic acid

Q

## 2 화학구조식으로 찾기 (부분구조 검색 가능)

Create Structure or Reaction Drawing



## 3 분자식으로 찾기

Molecular Formula

is

▼

Molecular Formula

[Cd(H2O)6](ClO4)2

Molecular Formula

is

▼

Molecular Formula

C(10-100)X(1-20)H(1-100)



## 결과 보기 - 물질

Filters and Analysis 을 사용하여 결과를 검색합니다.

기본 표시는 조회수를 나타내나, 다른 옵션도 이용 가능합니다. 슬라이더로 구조식을 확대할 수 있습니다.

Filters and Analysis

By Structure

Substances Classes

☐ Functional Group Classification 406

☐ Richter Classification 406

☐ Ring Classification 406

+ More

Molecular Weight

Availability

☐ no prep, not for purchase 322

☐ prep known 154

☐ product for purchase 126

☐ approved drug 3

Available Data

[Back to Results Preview](#)

Database: Reaxys - 602

602 Substances

out of 5,954 Documents containing 1,944 Reactions

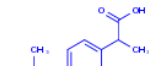
☐ 0 selected: Options

No of References

↑

↓

1



ibuprofen

C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub> 206.285 2049713 15687-27-1

Identification

Bioactivity - 1803

Preparations - 187

Physical Data - 621

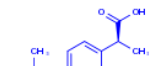
Other Data - 3507

Reactions - 1243

Spectra - 278

Documents - 5424

2



(S)-ibuprofen

C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub> 206.285 3590020 51146-56-6

Identification

Bioactivity - 235

Preparations - 170

Physical Data - 182

Other Data - 167

Reactions - 402

Spectra - 93

Documents - 436

링크를 클릭하면 준비, 반응, 문서(문헌) 정보가

물질에 관한 특정 정보를 보려면 링크를 클릭하세요.

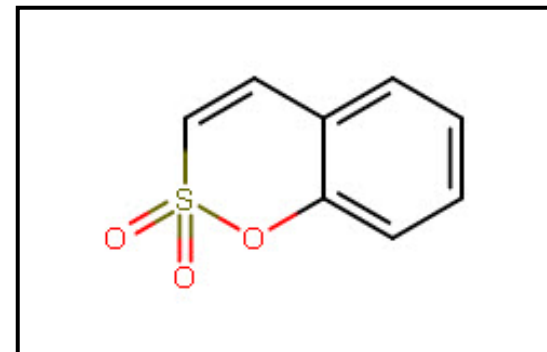
Copyright ©2019 Elsevier B.V.

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

27

## 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.



아래 내용을 포함하는 예를 보여줍니다

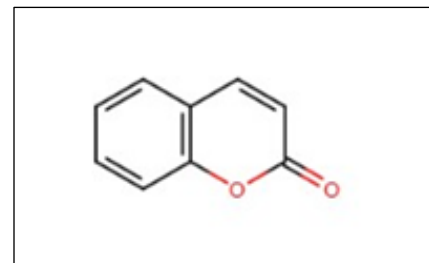
- 화학명으로 구조 그리기 방법
- 처음 구조 간단하게 변경하는 방법
- 결합 기본값을 변경하는 방법
- 구조에 다양한 위치에 제너릭 그룹으로 변경하는 방법
- 구조에서 선택된 위치에서 치환기를 허용하는 방법
- 구조를 검색하는 방법 " As drawn"
- 첫 결과에서 특정 작용기 만이 포함되도록 범위를 결과에서 결과 정렬하는 법

## ❖ 구조식 입력 (Create a Structure Query)

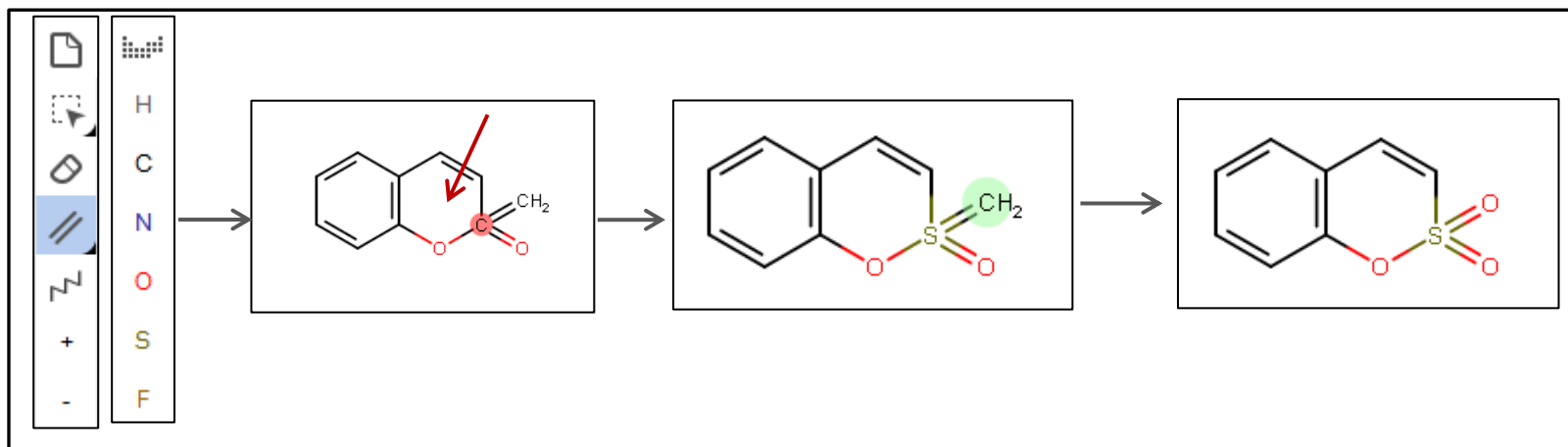
1. Reaxys 홈페이지 구조편집기 Marvin JS 를 '**Create Structure or Reaction Drawing**' 박스를 클릭하여 엽니다.



2. Marvin JS 그리기 패널에서 부분 구조를 그립니다.
  - a. **Create structure template from name** 클릭
  - b. **coumarin** 입력 후 Enter.
  - O-CO- group 을 -O-SO<sub>2</sub>-로 바꿔서 구조를 편집합니다.



3. 2 중결합을 추가합니다.
  - a. 2 중결합 툴에서 선택합니다.
  - b. 아래처럼 본드를 추가합니다.
  - c. 필요하면 원자를 변경합니다.
  - d. 원자 툴에서 'S' 클릭, 'C' 원자 클릭
  - e. 원자 툴에서 'O' 클릭, 'CH<sub>2</sub>' 원자 클릭

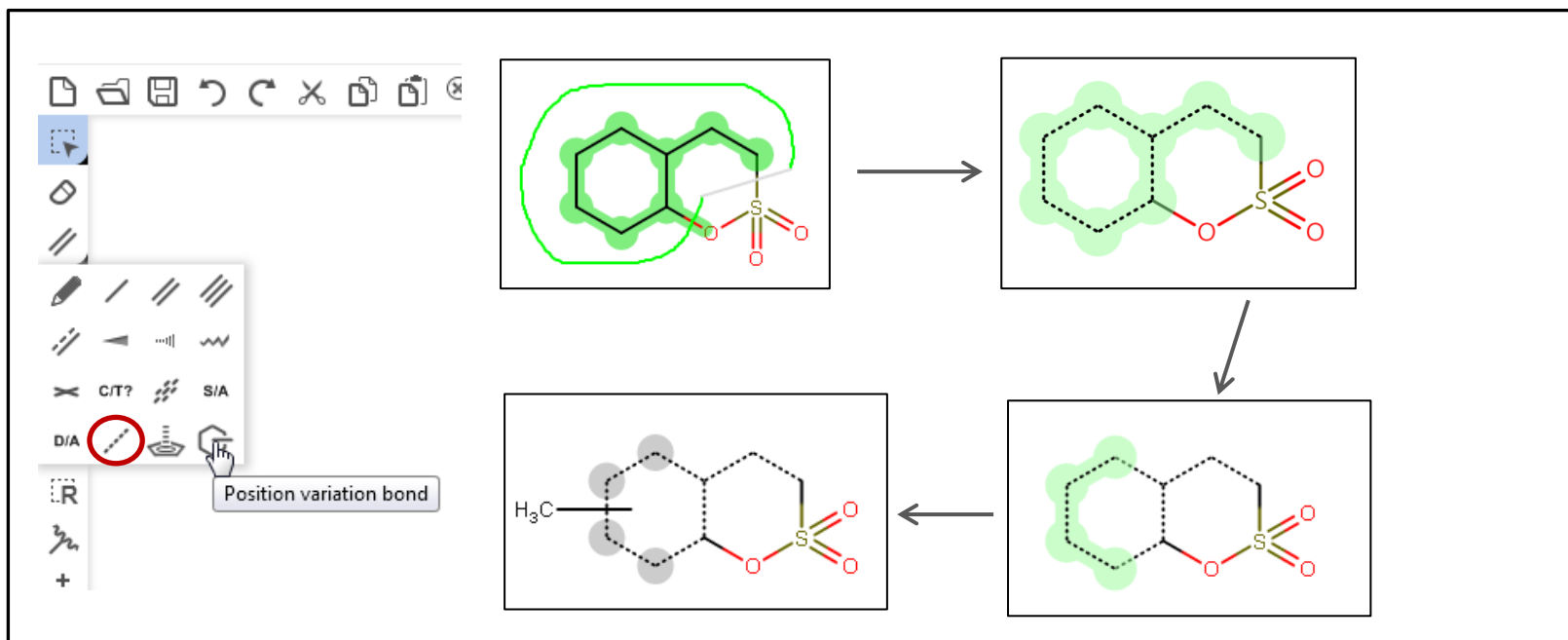


#### 4. Bond Properties 추가합니다.

- 아래 선택 툴을 사용하여 결합위치를 선택합니다. (아래처럼 사각형 또는 자유 선택 툴을 선택합니다. 또는 여러 곳을 선택할 때는 Shift 키를 사용합니다.)
- 왼쪽 Bond properties 에서 any bond를 클릭합니다.

#### 5. Position Variation Bond 추가

- 보기처럼 결합위치를 선택합니다.
- 툴에서 Position Variation Bond 선택합니다.



## 6. 알맞은 Reaxys Generic Group (G) 추가하기

- ALK 톨 클릭
- Acyclic** 탭에서, Any Group- **G** 클릭
- Position Variation Bond (**H3C**) 를 **G**로 바꾼다

The diagram illustrates the process of adding a Reaxys Generic Group (G) to a chemical structure. It shows the 'Reaxys Group Generics' dialog box with the 'Acyclic' tab selected. The 'Any Group' section is highlighted, and the 'G' button is clicked. The resulting chemical structure shows the 'G' group attached to a carbon atom in a bicyclic system, replacing a previously attached 'H3C' group.

7. 2군데에서 치환(Substituents) 허용

- 아래처럼 2 원자를 선택합니다.
- 대화상자에서 S+, S-, S\*등의 치환 기호를 선택 클릭합니다.
- 원자 위치에 마우스를 대고 클릭합니다.

The diagram illustrates the process of adding substituents to a chemical structure. It shows a chemical structure with a sulfur atom being edited. A menu on the left shows options like Cl, Br, I, \*, and query prop. The 'query prop.' option is selected, leading to a dialog box titled 'Atom query properties'. In this dialog, the '.s+' option is circled in red. The diagram shows the structure being updated with '(s6)' labels on the sulfur atom.

8. **Search this structure as:** 패널에는 3가지 옵션이 선택 가능합니다.

- **As drawn:** 그려진 구조대로 검색합니다.
- **As substructure:** 두 가지 옵션 중
  - **On all atoms** 모든 원자를 검색 합니다.



- **On heteroatoms** 헤테로 원자를 검색합니다.
- **Similar**: 그려진 구조를 바탕으로 유사물질을 검색합니다.

The screenshot displays the Reaxys Marvin JS interface. At the top, there are navigation tabs: Quick search, Query builder, Results, Synthesis planner, and History. The user's name, Cindy Goerlitz, is visible in the top right corner. The main workspace shows a chemical structure of a substituted tetrahydrothiophene derivative. The structure features a five-membered ring with a sulfur atom (S) and two oxygen atoms (O). A substituent 'G' is attached to the ring. The interface includes a toolbar with various drawing tools and a sidebar on the right with search options.

**Search this structure as:**

- ☒ As drawn
- ☐ As substructure
- ☐ Similar

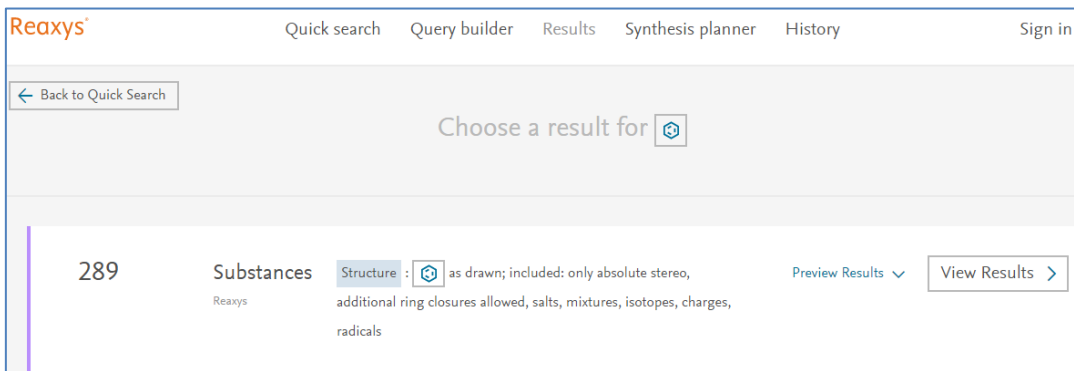
**Include**

- ☐ Tautomers
- ☐ Stereo
- ☐ Additional ring closures
- ☐ Related Markush
- ☐ Salts
- ☐ Mixtures
- ☐ Isotopes
- ☐ Charges
- ☐ Radicals

[+ More options](#)

At the bottom of the interface, there are buttons for Clear, Cancel, and Transfer to query.

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



## 결과 분석

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.

- +More를 클릭하여 Substance Classes를 찾습니다

Reaxys® Quick search Query builder Results Synthesis planner History Cindy Goerlitz

274 Filters and Analysis

Substances Classes

- ☐ Functional Group Classification 273
- ☐ Richter Classification 273
- ☐ Ring Classification 273
- + More

Molecular Weight

- ☐ >240 - 252 13
- ☐ >264 - 276 11
- ☐ >204 - 216 8
- ☐ >252 - 264 8
- ☐ >216 - 228 7
- ☐ >192 - 204 5
- ☐ >228 - 240 5
- + More

274 Substances out of 55 Documents containing 645 Reactions

0 selected: Limit To Export

No of References

(R)-4,7-dimethyl-5,6,7,8-tetrahydro-benz[e][1,2]oxathiin-2,2-dioxide

Physical Data - 3

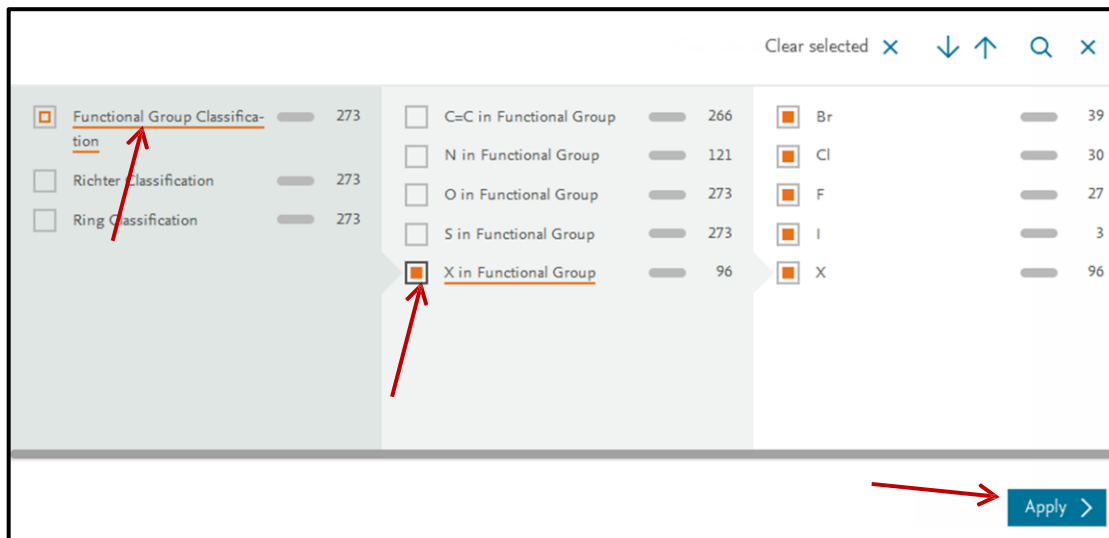
Preparations - 2

Reactions - 2

Documents - 5

Feedback

- Functional Group Classification 클릭
- X in Functional Group 클릭 – 할로겐 화합물의 결과에 한정합니다.
- Apply클릭



## 2. 고급 검색 (Query builder): 여러 조건 통합검색

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

1. **Query builder** 클릭합니다.

2. Searchproperties 필드에 **boiling** 등의  
물성치명을 입력합니다.

6. **Search** (물질)을  
클릭합니다.

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. At the top, there are tabs for 'Quick search', 'Query builder' (highlighted with a red underline), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. Below these tabs is a toolbar with icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete'. To the right of the toolbar are options for 'Structure', 'Molecular Formula', 'CAS', 'CAS RN', and 'Doc. Index'. A 'Search' button with a dropdown arrow is located in the top right. On the left side, there is a 'Boiling Point' section with two input fields: 'Boiling Point, °C' with a range of '60-80' and 'Pressure (Boiling Point), Torr' with a range of '740-760'. Each field has a dropdown arrow and a search icon. To the right of these fields is an 'Exist' button with an upward arrow and a trash icon. On the far right, there is a 'Search properties' panel with a search bar containing 'boiling' and a close button. Below the search bar are tabs for 'Fields', 'Forms', and 'Saved searches'. The 'Fields' tab is active, showing a list of properties including 'Boiling Point'.

3. 물성치를 드래그하여  
**Query builder**에  
드롭합니다.

4. **Exist** 을 클릭합니다.

5. 검색 조건을 입력합니다.

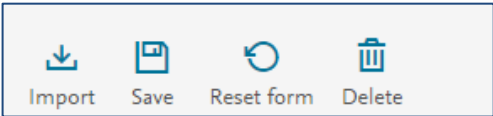
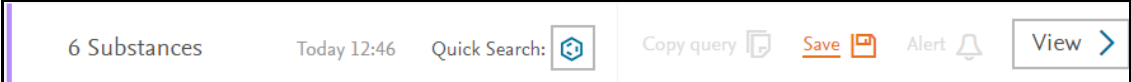
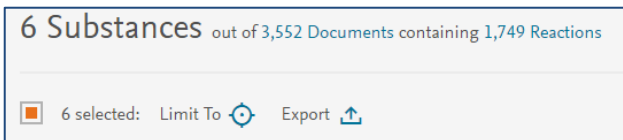
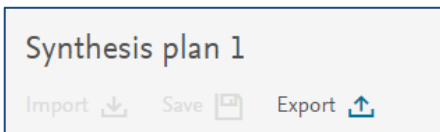
## Query builder: 여러 물성치 입력과 연산자 이용 안내

The screenshot shows the Reaxys Query Builder interface. The top navigation bar includes 'Quick search', 'Query builder' (selected), 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The 'Query builder' section has a 'Search' button and a dropdown menu. Below the search bar, there are icons for 'Import', 'Save', 'Reset form', and 'Delete'. The main area displays a search query for 'Boiling Point' and 'Melting Point'. The 'Boiling Point' field is set to 'Boiling Point, °C' with a range of '60-80'. The 'Melting Point' field is set to 'Pressure (Boiling Point), Torr' with a range of '740-760'. A dropdown menu is open, showing logical operators: 'AND' (selected), 'OR', 'NOT', and 'PROXIMITY'. A callout box on the right explains the operators.

**원하는 연산자 클릭**

- **OR**: 필드 중 적어도 하나로부터 데이터를 포함
- **AND**: 두 필드에서 데이터를 포함
- **NOT**: 첫 번째 필드의 데이터를 포함하고 두 번째는 제외
- **NEAR**: 근접 용어를 검색하지만, 임의의 순서로
- **NEXT**: 근접 용어를 검색하고, 순서대로 지정
- **PROXIMITY**: 일반적 매개 변수 (Parameter) 필드에 사용 서로 연관성이 있는 두 필드 내용 검색 (예 melting point and solvent)

## 4. 저장하기와 반출하기

기능	설명
<b>저장하기(Saving)/ 반출하기 (Export)</b>	
<b>Query builder 저장하기</b>	<p>쿼리 저장하기: 왼쪽상단의 <b>Save</b> 클릭</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>쿼리는 a.json file 로 저장됩니다.</li> </ul> 
<b>History Page + Recent 탭 저장하기</b>	<p><b>History Page + Recent</b> 탭은 현재 Reaxys 세션에서 연구자가 검색한 내용들을 포함하고 있습니다.</p> <p>최근 검색 위로 마우스를 이동, 저장 (Save)을 클릭합니다. 이름을 입력하고 저장을 클릭합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>저장된 검색은 저장된 탭 (Saved)에서 찾을 수 있습니다.</li> </ul> 
<b>결과 (Result)페이지에서 반출하기</b>	<p>반출하고 싶은 검색결과 번호 위의 박스에 체크하여 문서를 선택</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Export</b> 클릭</li> </ul> 
<b>Synthesis planner (합성경로) 반출하기/ 저장하기</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Export / Save/ Import</b> 클릭</li> </ul> 

문의: 엘스비어 한국사무소, 생명과학 솔루션 팀 T:

02-6714-3116 | a.hong@elsevier.com

교육 및 기술 지원

Homepage: [www.elsevier.com/ko-kr](http://www.elsevier.com/ko-kr)

