Reaxys

ELSEVIER

# Самый короткий путь к эффективным исследованиям и образованию в химии

# Reaxys PhD Prize

## The world' most prestigious award recognizing young chemists' work

The PhD Prize **recognises the research of extraordinary young chemists** and **celebrates the very best of chemistry research**.

**No other award impacts the career** of a young chemist like the Reaxys PhD Prize

It represents a great opportunity for **applicants, their research Group and academic institution to get further visibility** in Chemistry community.

**2016 will mark the 7th edition of the prize.** 2500 submissions have been received from over 400 universities in its 6-years history.

Each year, **45 finalists are selected by a panel of judges** out of hundreds of applicants. **3 winners** will then be awarded.

The **Chair of Reaxys PhD Prize Review Board** is a selection of **renowned chemistry experts** from around the world

**All 45 entrants** are given an opportunity to present their research **at the PhD Prize Symposium**

The **3 winners will be selected and announced at the banquet** closing the Symposium

Symposium is held in a different but equally **prestigious location**. In 2015, it was hosted in **Hong Kong**

All 45 finalists will be rewarded wide range of benefits including lifetime membership to **PhD Prize Club,** access to the **powerful network of 270 talented chemists** and **free access to Reaxys and Reaxys Medicinal Chemistry**

Each of the 3 winners **receives an additional cheque for $2000**

Want to have a taste of PhD Symposium?

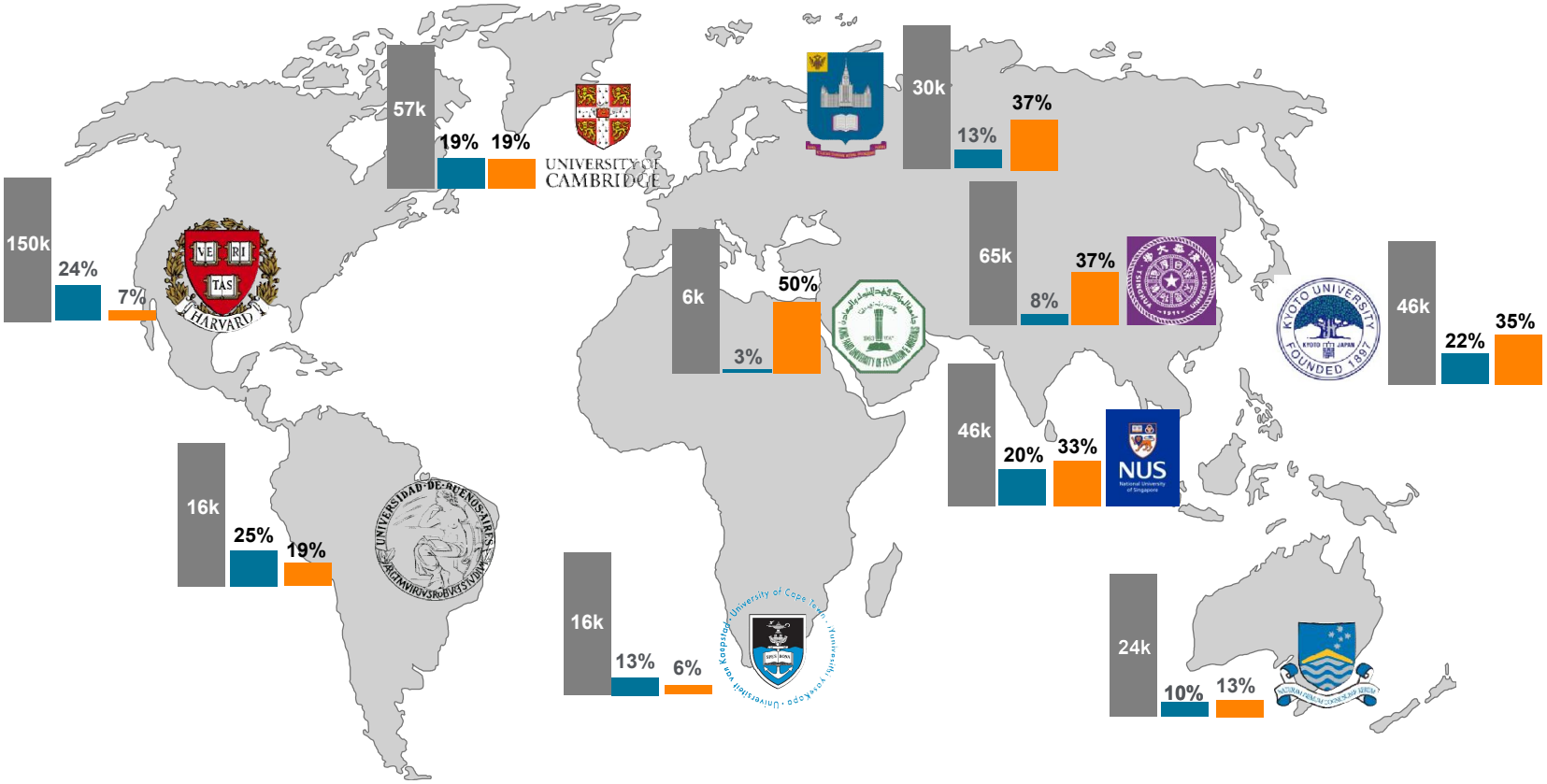

(click to play the video)

**Submissions for 2017 PhD Prize will open soon**

Discover more on our website: http://inspiringchemistry.reaxys.com/phdprize

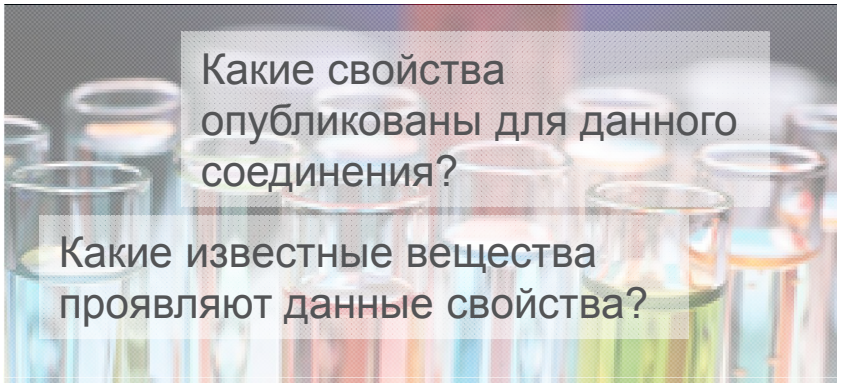
Any question about the Reaxys PhD Prize?
Please email info@reaxys.ch

# Химия является основным сегментом академической науки. Вклад химиков в публикационную активность составляет в среднем 30% по всему миру

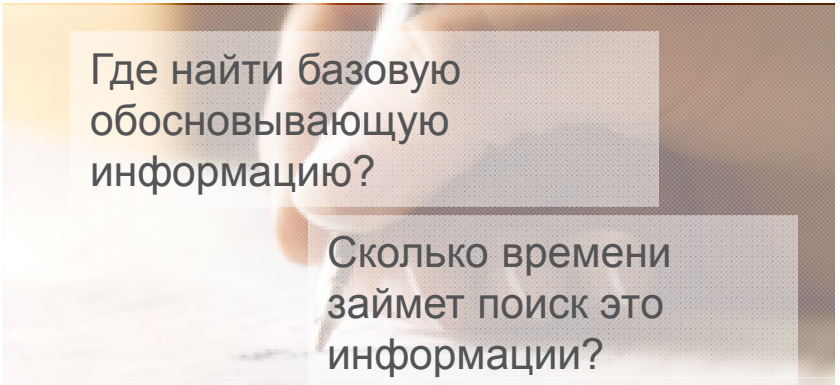



Source: SciVal data

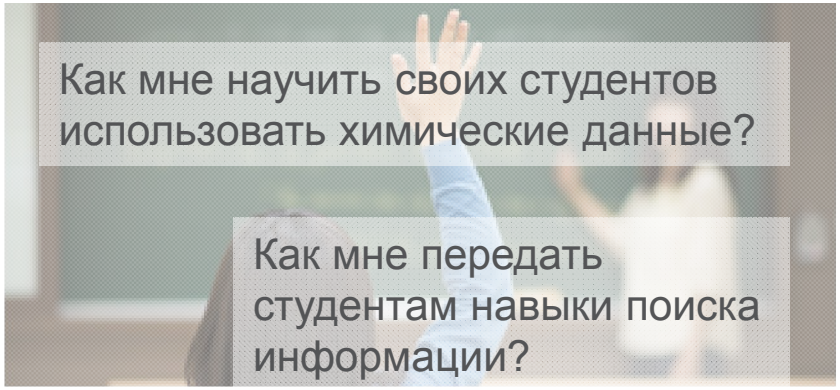
# Химики в повседневной работе сталкиваются с рядом проблем, на решение которых затрачивается время, что снижает производительность труда



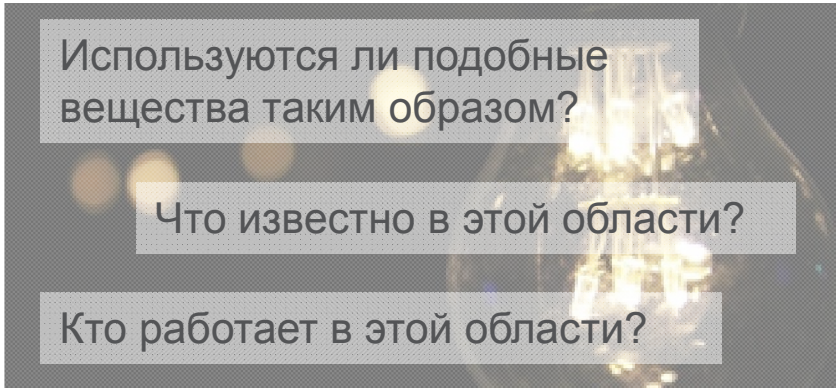

**Руководство и планирование научной работой**




**Написание грантов**




**Обучение и наставничество**




**Новые идеи и сотрудничество**

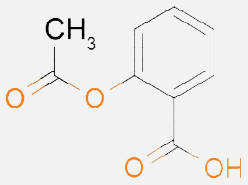
## Поддержка работы студентов и сотрудников химиков:

- Повышает репутацию на международной арене
- Повышает эффективность научной работы
- Увеличивает финансовой отдачи от грантов, услуг, ИС
- Развивает инновационные технологии в рамках реализации стратегии импортозамещения
- Развивает российские фармацевтические НИОКР в рамках программы Фарма-2020

# Вклад такой поддержки выходит далеко за пределы химического факультета

Знания о соединениях..

.




...их свойствах...

...и как это поменять...

**Основные принципы химии**

... актуальны для широкого спектра других дисциплин

Наука о материалах
Природопользование
Геологические Науки
Археология
Палеонтология
Нанотехнологии

С-Х наук
Пищевых наук
Гидрологии
Лимнология
Токсикология
Исследование поверхности
Клинические исследований

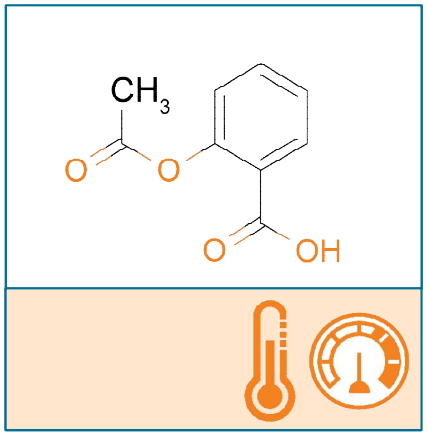
Молекулярная Биология
Клеточная Биология
Фармакология
Биохимия
Биомедицина
Биотехнологии

И многие другие...

**Используются в различных дисциплинах**

Reaxys

# Информационная система, построенная для отражения реального использования химических знаний




**74.9 Млн** Записей **соединений** с >**500 Млн** извлеченных фактов об их **свойствах**: физические, химические, спектральные, экологические, биоактивность

**40.7 Млн** Записей **реакций** включают извлеченные данные об условиях проведения реакций, растворителях, катализаторах, выходе

**Основные принципы химии**

Связь с

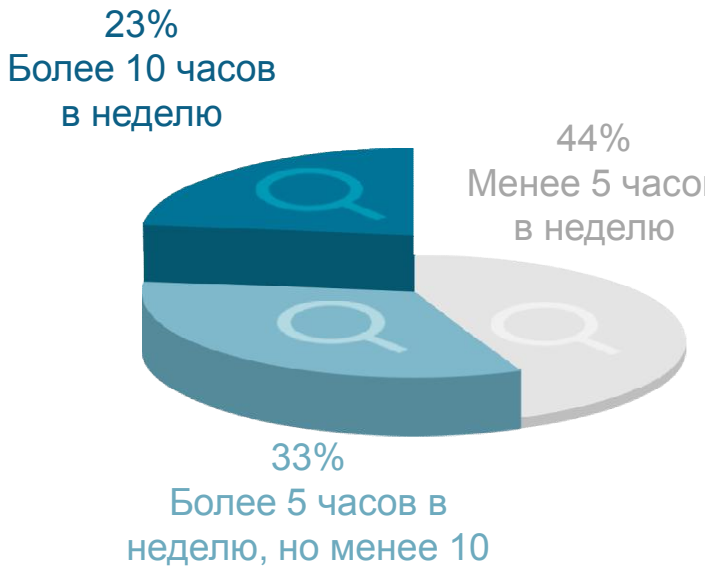
**51.9 Млм записей Литературы** из 16,000 периодических изданий описывая применения в области материало-ведения, биомедицины, наук о Земле, технических и экологических наук, фармакологии...

**Применение в различных дисциплинах**

# Reaxys

**Снижает перегрузку информацией за счет курированных, качественно извлеченных данных**

## Более 50% химиков тратят не менее 5 часов в неделю в поиске информации.




## Химики тратят непропорционально много времени на поиски литературы.


Retrieving extracted data is faster than finding answers in full-text literature.

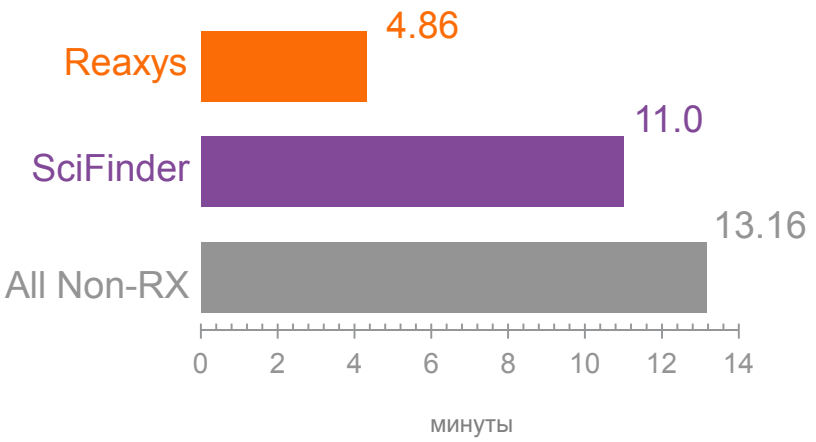
**Поиск извлеченных данных выполняется быстрее, чем поиск ответов в полнотекстовой литературы**

# Reaxys

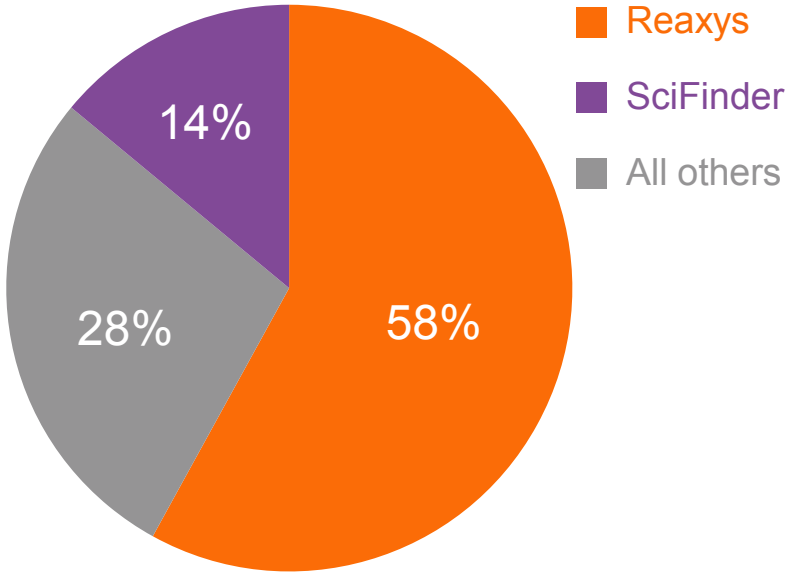
## Информационная система, предназначенная для ответа на исследовательские вопросы на лету

### Опрос The ChemSearch Challenge

Пользователи Reaxys находят ответы более чем вдвое быстрее, чем другие пользователи




Лучшие конкурсанты, 58% использовали Reaxys



# Reaxys

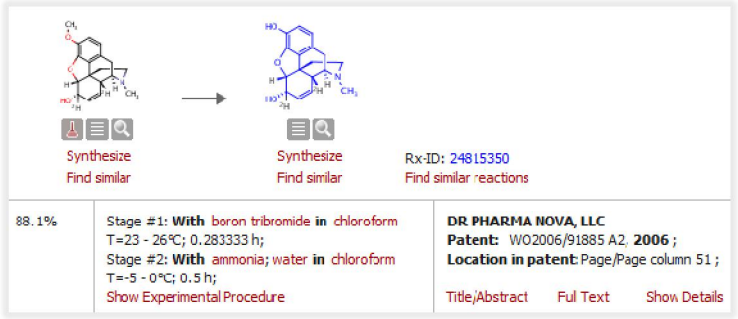
## Responds to what really matters in chemistry (Re)search

# Reaxys

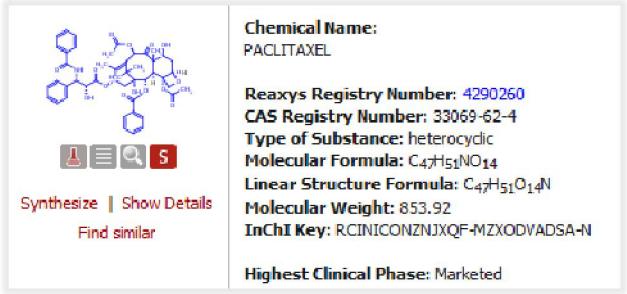
1

## Это мощный комплексный исследовательский инструмент для поиска фактов и литературы

Большинство пользователей используют содержащиеся записи Соединений и Реакций, но мало только некоторые воспользовались всеми преимуществами обширной, качественной базой литературы.





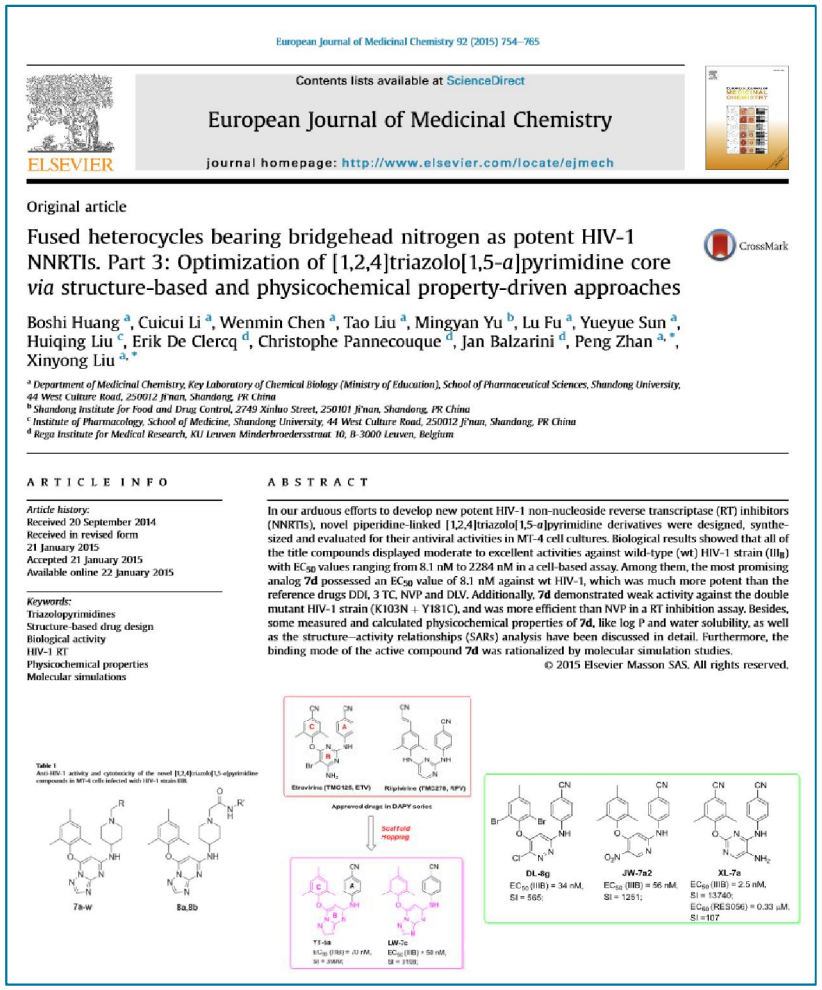




**Эти >51 Млн Записей документов содержат ценную информацию, которую нельзя найти в других системах**

# Reaxys

2

## Обеспечивает информационный „взгляд“ на содержание документа



European Journal of Medicinal Chemistry 92 (2015) 754–765

Contents lists available at ScienceDirect

European Journal of Medicinal Chemistry

journal homepage: http://www.elsevier.com/locate/ejmech

Original article

Fused heterocycles bearing bridgehead nitrogen as potent HIV-1 NNRTIs. Part 3: Optimization of [1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pyrimidine core *via* structure-based and physicochemical property-driven approaches

Boshi Huang [a], Cuicui Li [a], Wenmin Chen [a], Tao Liu [a], Mingyan Yu [b], Lu Fu [a], Yueyue Sun [a], Huiqing Liu [c], Erik De Clercq [d], Christophe Pannecouque [d], Jan Balzarini [d], Peng Zhan [a, *], Xinyong Liu [a, *]

[a] Department of Medicinal Chemistry, Key Laboratory of Chemical Biology (Ministry of Education), School of Pharmaceutical Sciences, Shandong University, 44 West Culture Road, 250012 Ji'nan, Shandong, PR China
[b] Shandong Institute for Food and Drug Control, 2749 Xinhuo Street, 250101 Ji'nan, Shandong, PR China
[c] Institute of Pharmacology, School of Medicine, Shandong University, 44 West Culture Road, 250012 Ji'nan, Shandong, PR China
[d] Rega Institute for Medical Research, KU Leuven Minderbroedersstraat 10, B-3000 Leuven, Belgium

ARTICLE INFO

*Article history:*
Received 20 September 2014
Received in revised form
21 January 2015
Accepted 21 January 2015
Available online 22 January 2015

*Keywords:*
Triazolopyrimidines
Structure-based drug design
Biological activity
HIV-1 RT
Physicochemical properties
Molecular simulations

ABSTRACT

In our arduous efforts to develop new potent HIV-1 non-nucleoside reverse transcriptase (RT) inhibitors (NNRTIs), novel piperidine-linked [1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives were designed, synthesized and evaluated for their antiviral activities in MT-4 cell cultures. Biological results showed that all of the title compounds displayed moderate to excellent activities against wild-type (wt) HIV-1 strain ($IIIB$) with $EC_{50}$ values ranging from 8.1 nM to 2284 nM in a cell-based assay. Among them, the most promising analog **7d** possessed an $EC_{50}$ value of 8.1 nM against wt HIV-1, which was much more potent than the reference drugs DDI, 3 TC, NVP and DLV. Additionally, **7d** demonstrated weak activity against the double mutant HIV-1 strain (K103N + Y181C), and was more efficient than NVP in a RT inhibition assay. Besides, some measured and calculated physicochemical properties of **7d**, like log P and water solubility, as well as the structure–activity relationships (SARs) analysis have been discussed in detail. Furthermore, the binding mode of the active compound **7d** was rationalized by molecular simulation studies.



Запись документа включает библиографическую информацию...

| Title of the Document | Authors | Year | Source |
|---|---|---|---|
| Fused heterocyclic compounds bearing bridgehead nitrogen as potent HIV-1 NNRTIs. Part 1: Design, synthesis and biological evaluation of novel 5,7-disubstituted pyrazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives | Tian, Ye; Du, Deping; Rai, Diwakar; Wang, Liu; Liu, Huiqing; Zhan, Peng; De Clercq, Erik; Pannecouque, Christophe; Liu, Xinyong | 2014 | Bioorganic and Medicinal Chemistry, **2014**, vol. 22, # 7 p. 2052 - 2059<br>Full Text View citing articles |

Название

Авторы

Ссылка

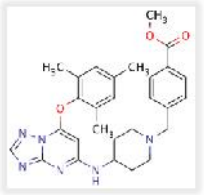
Title/Abstract

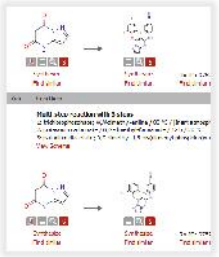
**Fused heterocyclic compounds bearing bridgehead nitrogen as potent HIV-1 NNRTIs. Part 1: Design, synthesis and biological evaluation of novel 5,7-disubstituted pyrazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives**

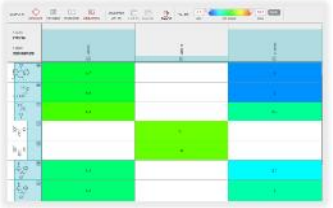
In our continuous efforts to identify novel potent HIV-1 NNRTIs, a novel class of 5,7-disubstituted pyrazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives were rationally designed, synthesized and evaluated for their anti-HIV activities in MT4 cell cultures. Biological results showed [illegible] displayed excellent activity against wild-type HIV-1 with a wide range of $EC_{50}$ values from 5.98 to 0.07 μM. Among the active compounds, 5a was found [illegible] with an $EC_{50}$ of 0.07 μM against wild-type HIV-1 and very high selectivity index (SI, 3999). Compound 5a was more effective than the reference drugs [illegible]. In order to further confirm their binding target, an HIV-1 RT inhibitory assay was also performed. Furthermore, SAR analysis among the newly synthesized compounds was discussed and the binding mode of the active compound 5a was rationalized by molecular modeling studies.

Реферат

...и связана с контентом, организованным в записи Соединений и Реакций, а также с полями свойств







Соединения

Реакции

Свойства

# Reaxys

3

## Отображает соответствие источника ряду дисциплин

В дополнение к ключевым словам автора записи Документов указывают индексацию с другими лидирующими на рынке базами данных

Compendex
Embase
GeoBase
PubMed
REAXYS

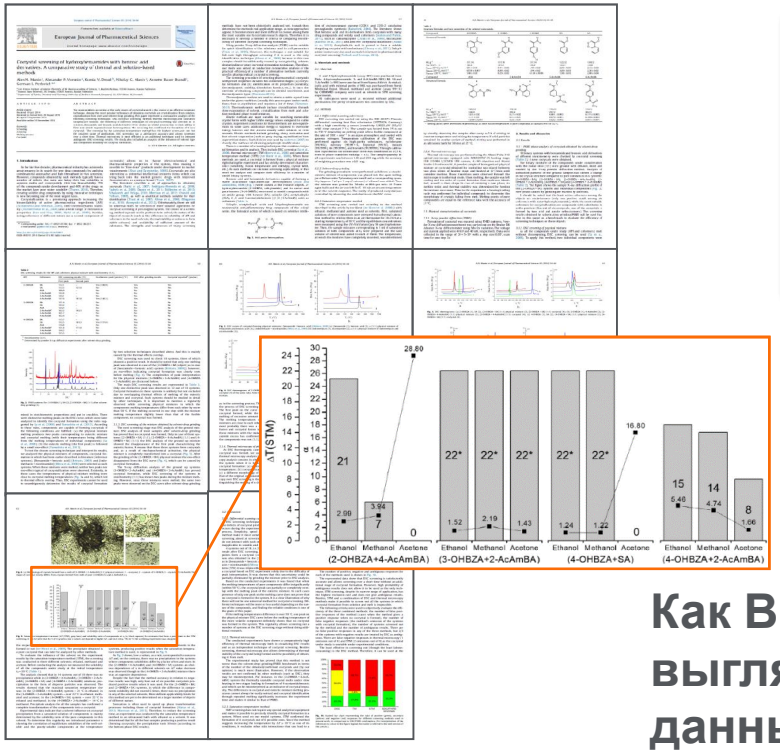
With geographic, species and drug tradename indexing

**Keywords:**
**Author:** antiviral activity; Bignoniaceae; EMCV; HSV-1; in vitro assays; plant extracts; VACV
**Compendex Free Language:** Antiviral activities; Bignoniaceae; EMCV; HSV-1; In-vitro assa
**Compendex Descriptor:** Assays; Bromine compounds; Ethanol
**Compendex Mainhead:** Viruses
**EMTREE drug term:** aciclovir; alpha2a interferon; natural product; plant extract
**GEObase Subject Index:** antimicrobial activity; dicotyledon; ethanol; ethnobotany; medicir
**EMTREE medical term:** animal cell; antiviral activity; article; Bignoniaceae; Brazil; controllec
Murine encephalomyelitis virus; nonhuman; plant leaf; plant stem; Vaccinia virus; Vero cell
**Medline descriptor:** Animals; Antiviral Agents; Bignoniaceae; Brazil; Cercopithecus aethiop
Tests; Plant Extracts; Vaccinia virus; Vero Cells
**Regional Index:** Brazil; Minas Gerais
**Species index:** Bignoniaceae; Encephalomyocarditis virus; Human herpesvirus 1; Murinae; V
**Reaxys Terms:** 3-(4,5-dimethylthiazol-2-yl)-2, 5-diphenyltetrazolium bromide; natural produ
Tradename: bi 201335 (Boehringer Ingelheim)
Tradename: bms 650032 (Bristol Myers Squibb)
Tradename: bms 790052 (Bristol Myers Squibb)
Tradename: incivek (Novartis)
Tradename: nim 811 (Pharmasset)
Tradename: psi 7977 (Scynexis)
Tradename: scy 635 (Johnson and Johnson)
Tradename: tmc 435
Tradename: victrelis

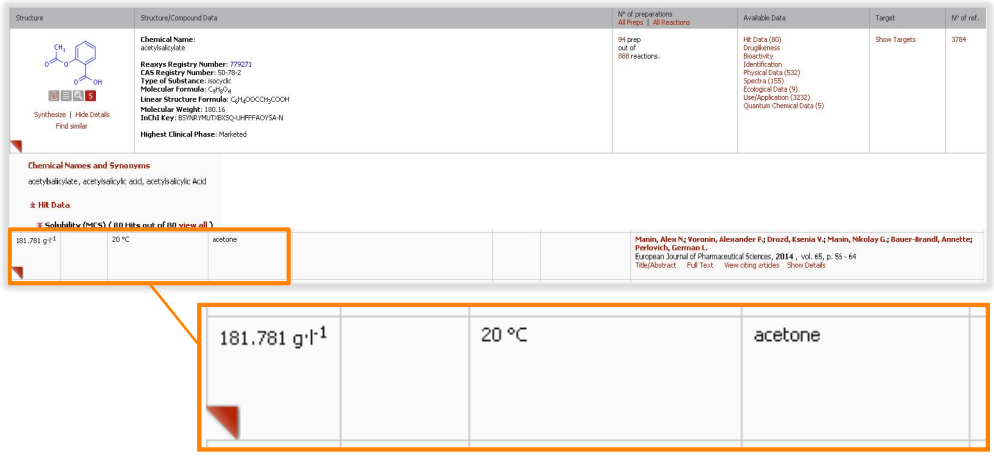
# Reaxys

## 4 Обеспечивает данными, которые можно использовать напрямую

Использование **растворимости соединения** требует знания **температуры** и **растворителя** использованных при измерении




**Как Вы выглядят эти данные в литературе**




**Как Вы выглядят эти данные в Reaxys**

Reaxys



## Это обширные, хорошо проиндексированные данные под рукой

Reaxys является крупнейшим хранилищем данных о свойствах веществ в мире. Растворимость это только одно из **>500 полей данных для поиска** в Reaxys

Melting point
Boiling point
Sublimation
Refractive index
Density
Adsorption
Association
Autoignition
Bound Surface Phenomena
Viscosity
Circular Dichromism
Complex Phase Equilibria
Compressibility
Conformation
Critical Density
Critical Micelle Concentration
Critical Pressure
Critical Tempareture
Critical Volume
Electrical Data
Electrical Moment
Electrochemistry Data
Electron Binding
Energy Barriers
Energy Data

Enthalpy of Formation
Enthalpy of Sublimation
Flash Point
Gas Phase
Dissociation Energy
Crystal System
Crystal Phase
Heat Capacity
Henry Constat
Ionization Potential
Isoelectric Point
Kinematic Viscosity
Liquid Phase
Magnetic Data
Mechanical Properties
Molecular Deformation
Optical Data
Thermochemical Data
Solubility
Solution Behavior
Sound Properites
Static Dielectric Constat
Surface Tension
Transition Points
Transport Data

NMR Spectroscopy
IR Spectroscopy
Mass Spectroscopy
UV/VIS Spectroscopy
ESR Spectroscopy
NQR Spectroscopy
Raman Spectroscopy
Luminscence Spectroscopy
Fluorescence Spectroscopy
Exposure Assessment
Bioaccumulation
Biomagnification
radation
Degradation
Stability in Soil
Oxygen Demand
Uses
Isolation from Natural Prod.
Reaction Yield
Reaction Conditions
Reaction Type
Named Reaction
Pharmacological Data
Route of Administration
Concentration

Target
Substance Effect
Substance Action on Target
Substance Dose
Bioassay
Animal Model
Organs/Tissue
Cells/Cell Lines
Measurment Parameter
Endpoint of Effect
Ecotoxicology Data
Dielectric Constant
Dissociation Exponent
Dynamic Viscosity
Electrolytic Conductivity
Enthalpy of Fusion
Enthalpy of Vaporization
Explosion Limits
Interactomic Distance/Angle
Kinematic Viscosity
Liquid/Solid Systems
Liquid/Vapor Systems
Metarotation

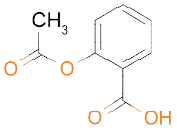
**Solubility**

And many more...

Reaxys

6

# Делает информацию быстро и легко доступной




**Записи Соединений** содержат все извлеченные данные о свойствах соединений.

Быстрый поиск конкретных свойства веществ

Легко найти все вещества, которые имеют определенное свойство

**Записи документов** проиндексированы по ключевым словам из различных источников, включая ведущие базы данных EMBASE, GeoBase и Compendex.

Используйте знакомые термины, чтобы найти релевантные результаты

Создание высокоспецифичных поисков

**Записи реакций** содержат извлеченные данные о реакциях (выход, растворитель температура и др.) из множества исходных источников.

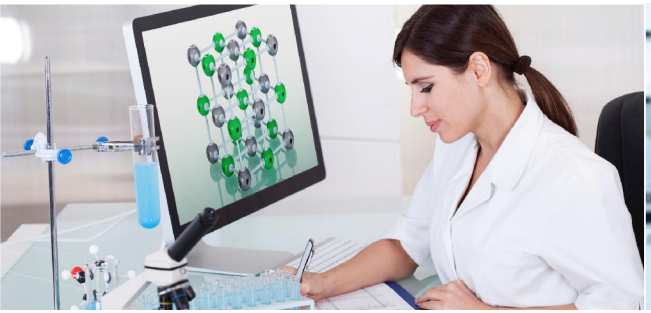
Прямой поиск полезной информацию для планирования работы

Планировщик синтеза упорядочивает реакции из нескольких источников для ретросинтетического планирования

Reaxys



# Разработан для любых видов использования информации и навыки поиска



**Новички**

**Промежуточные пользователей**

**Эксперты**

ПОВЫШЕНИЯ НАВЫКОВ В ПОИСКЕ ИНФОРМАЦИИ

ВСЕ БОЛЕЕ ИЗЯЩНЫЕ СПОСОБЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИИ

## Простота использования

- Google-подобный поисковик
- Интуитивный Интерфейс
- Поддержка при поиске правильных поисковых терминов

## Управление поиском

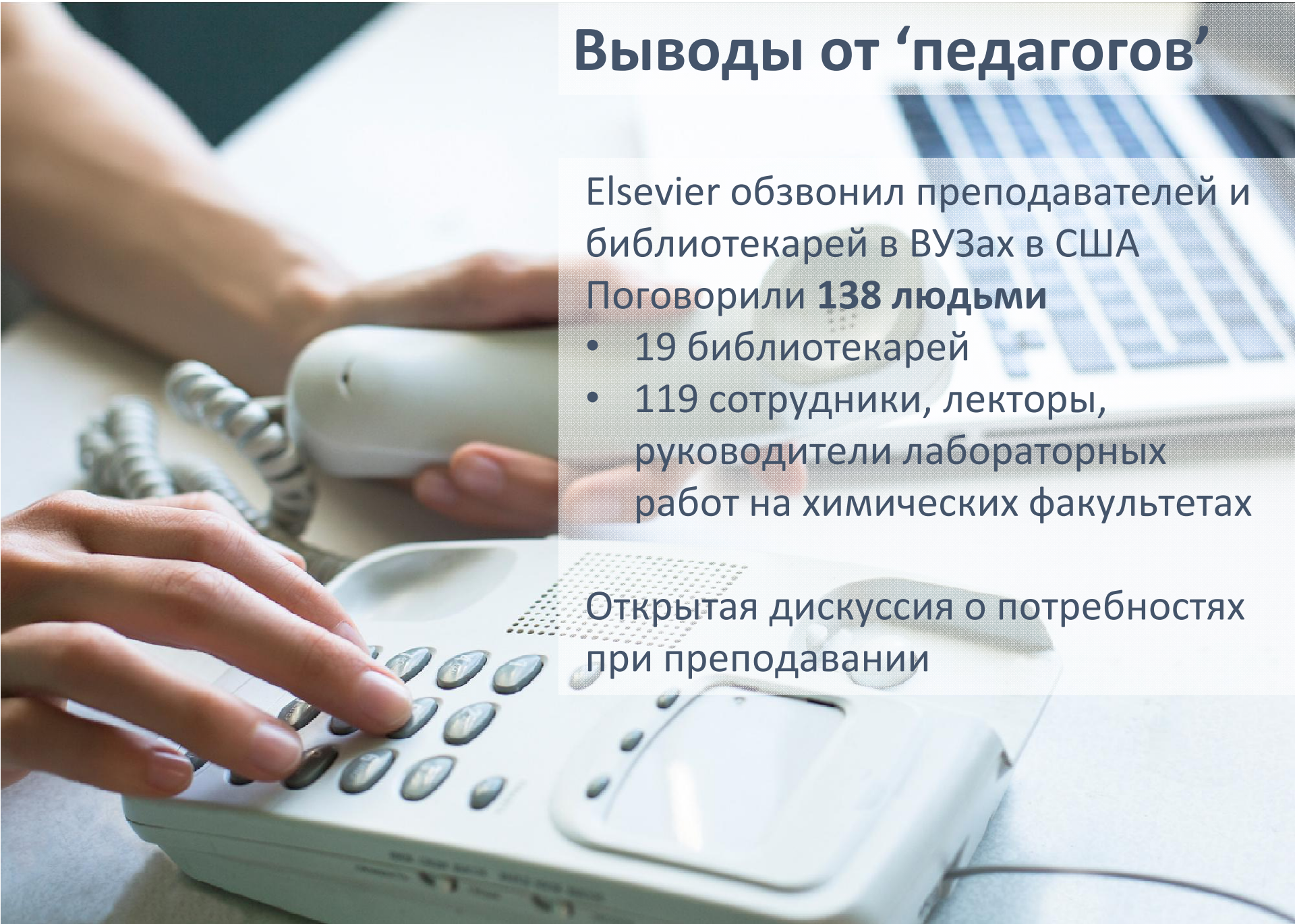
- Прозрачные функциональные возможности
- Объединение понятий в одном поиске
- Усечение, близость и логические операторы

## Комплексное использование данных

- Инструменты расширенного поиска
- Интеллектуальный анализ данных и моделирование

ELSEVIER

# и Reaxys становится только лучше



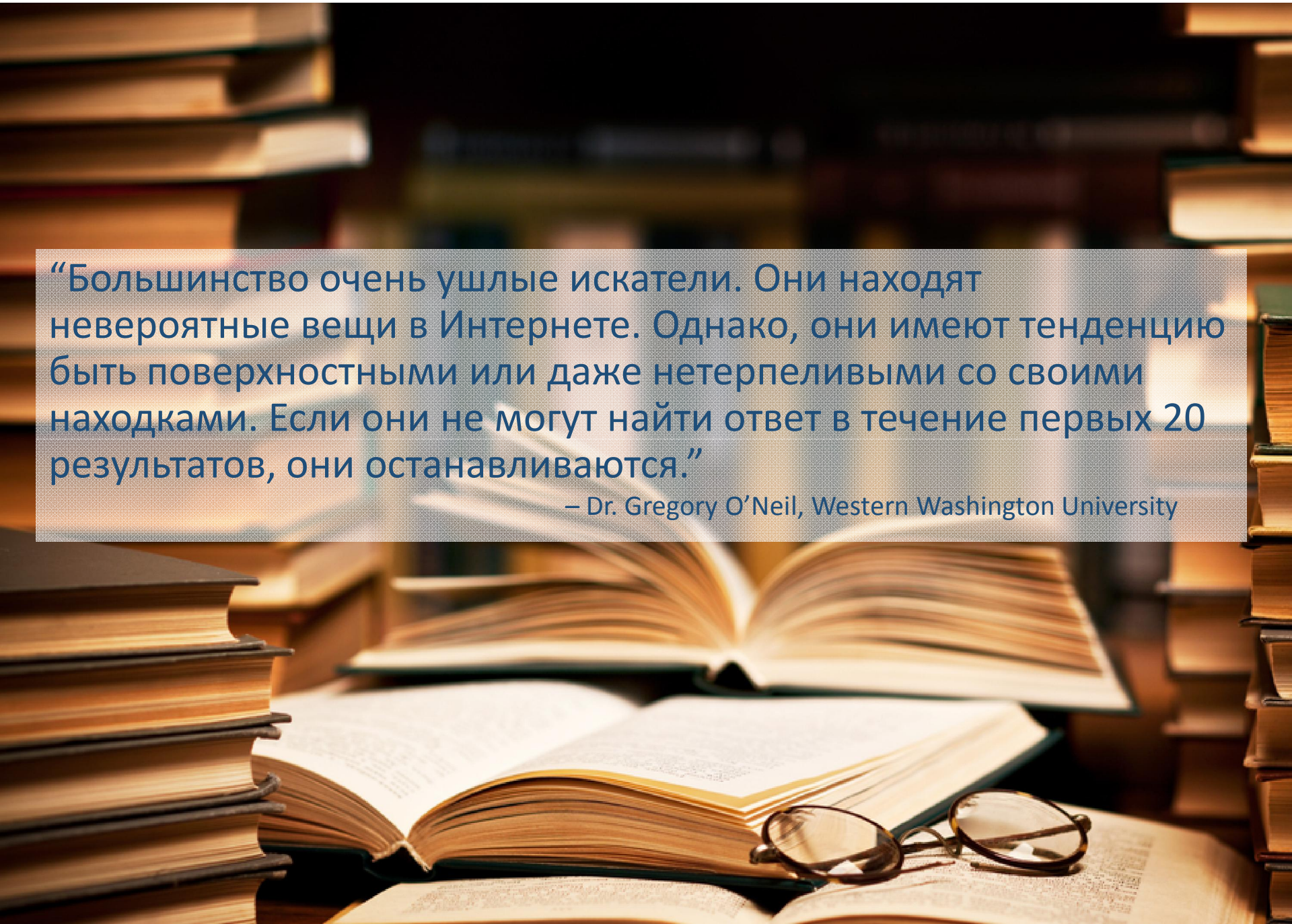
# Выводы от ‘педагогов’

Elsevier обзвонил преподавателей и библиотекарей в ВУЗах в США

Поговорили **138 людьми**

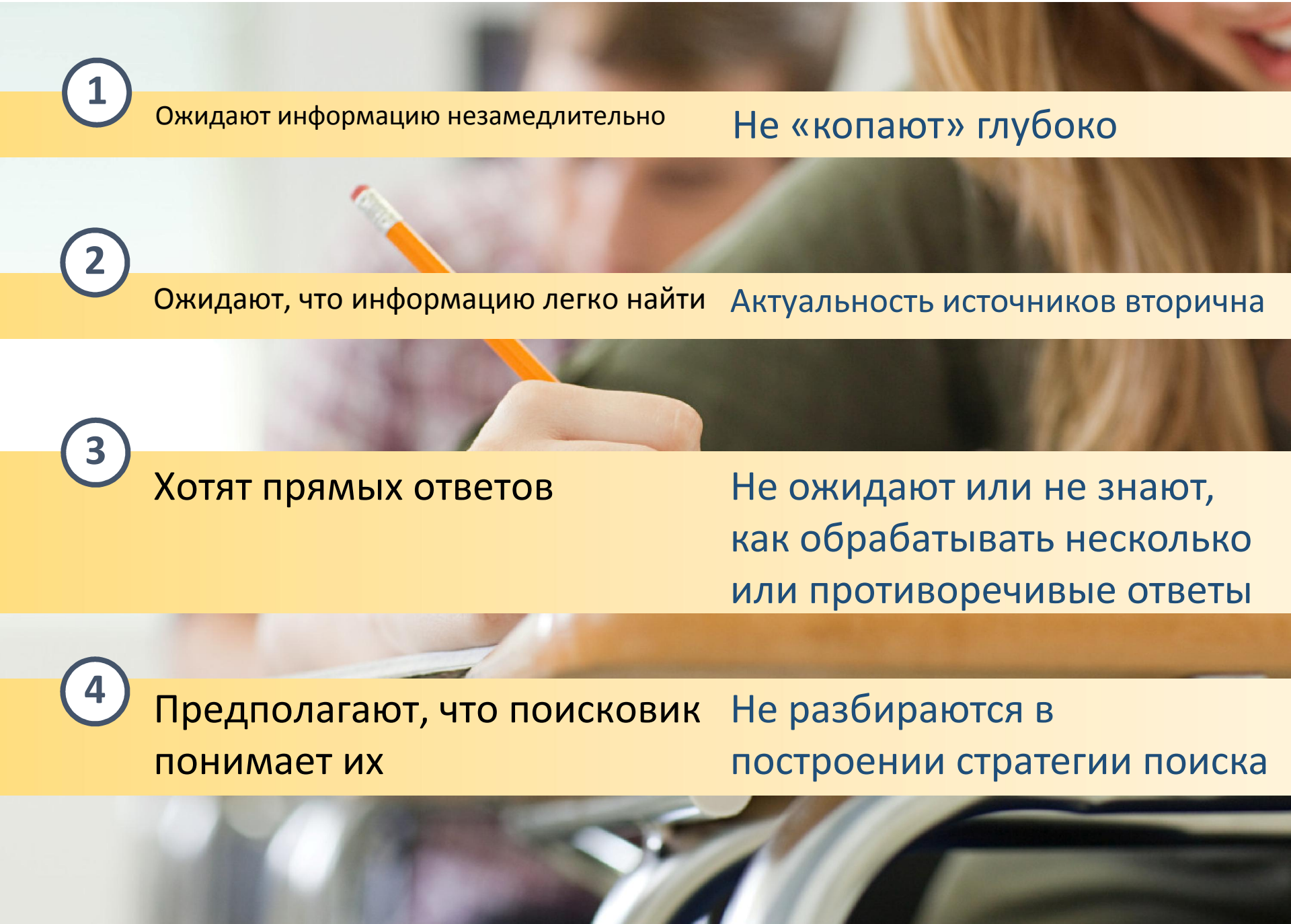
- 19 библиотекарей
- 119 сотрудники, лекторы, руководители лабораторных работ на химических факультетах

Открытая дискуссия о потребностях при преподавании



“Большинство очень ушлые искатели. Они находят невероятные вещи в Интернете. Однако, они имеют тенденцию быть поверхностными или даже нетерпеливыми со своими находками. Если они не могут найти ответ в течение первых 20 результатов, они останавливаются.”

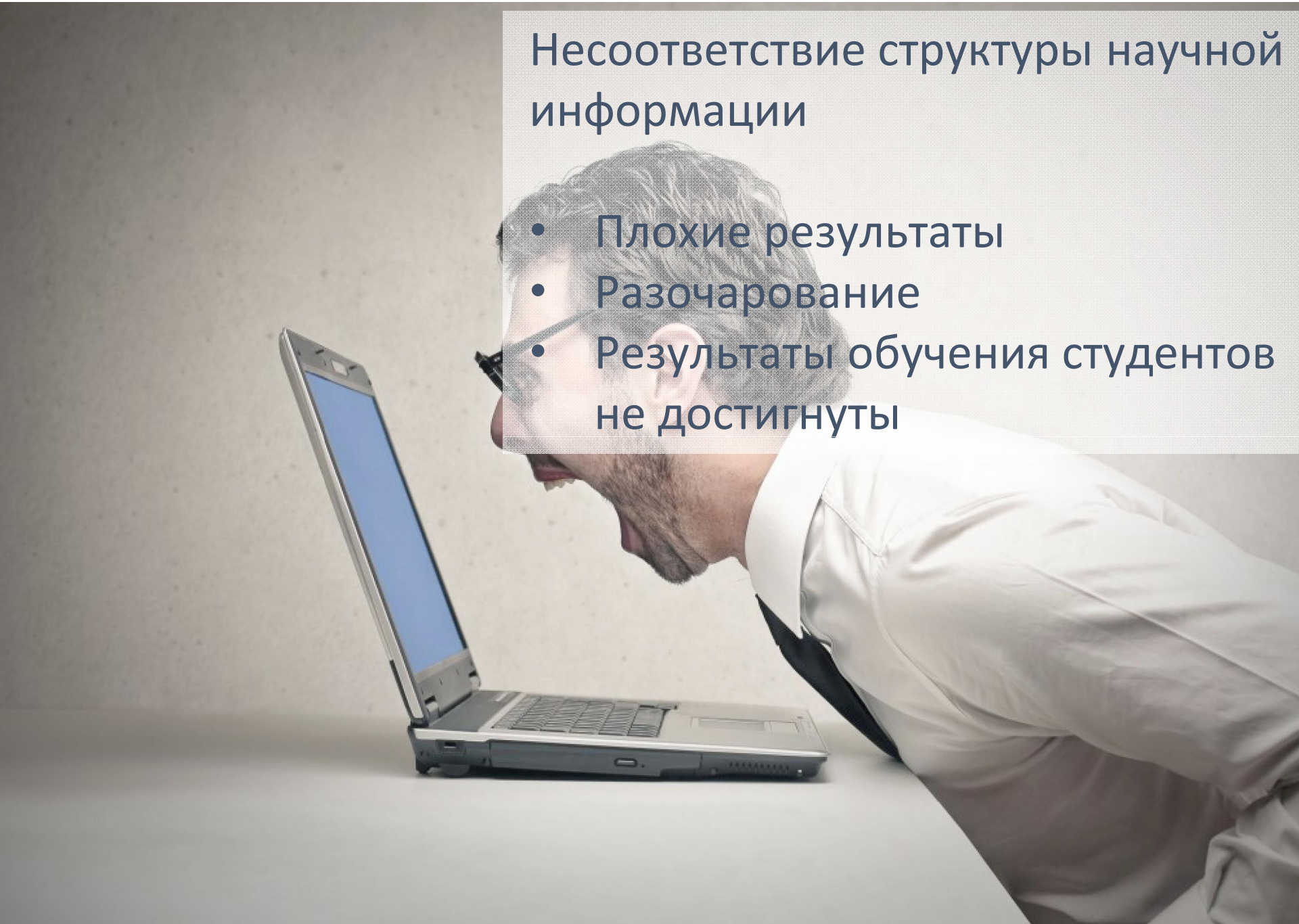
– Dr. Gregory O’Neil, Western Washington University

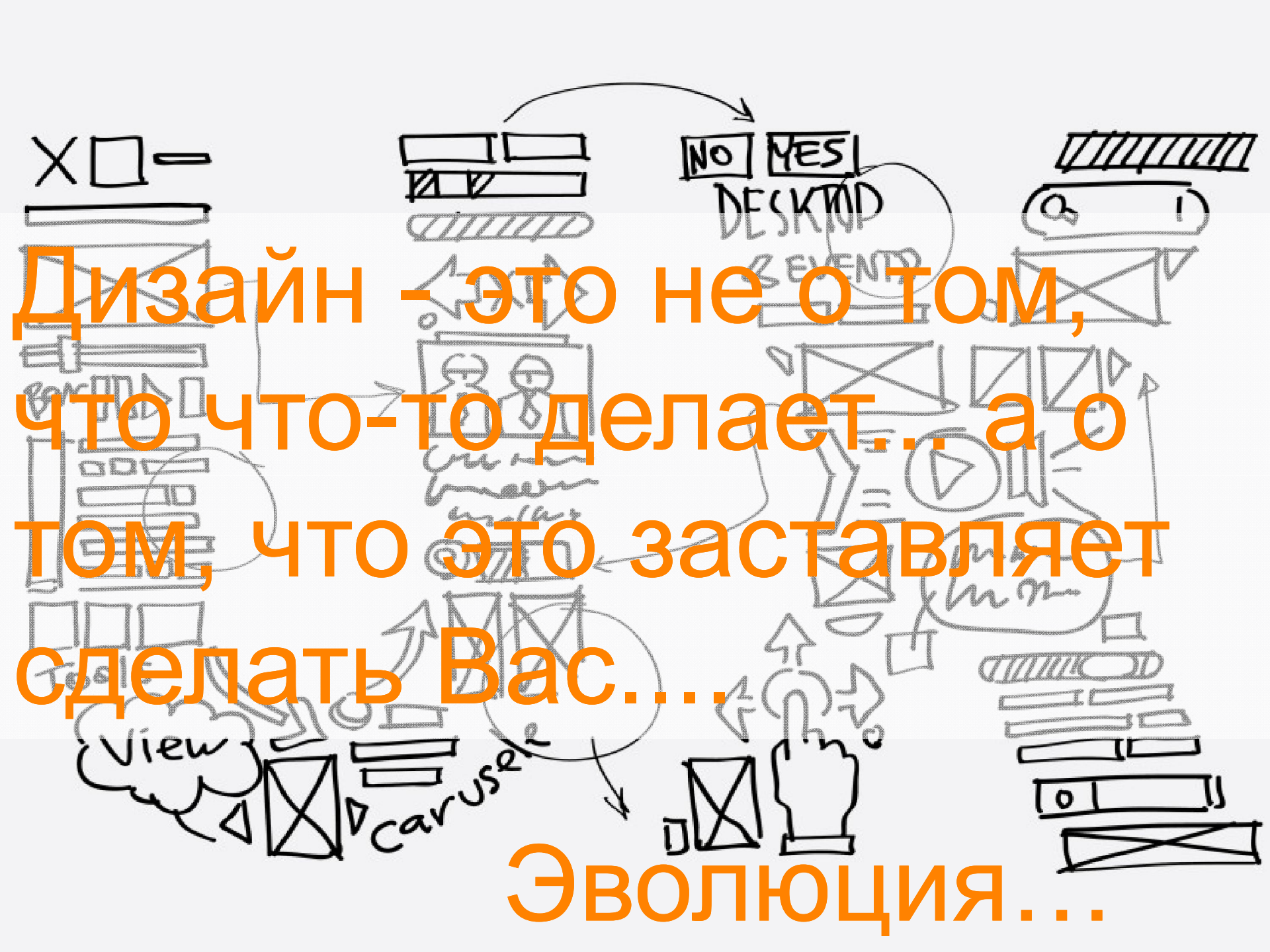


| | | |
|---|---|---|
| 1 | Ожидают информацию незамедлительно | Не «копают» глубоко |
| 2 | Ожидают, что информацию легко найти | Актуальность источников вторична |
| 3 | Хотят прямых ответов | Не ожидают или не знают, как обрабатывать несколько или противоречивые ответы |
| 4 | Предполагают, что поисковик понимает их | Не разбираются в построении стратегии поиска |

# Несоответствие структуры научной информации

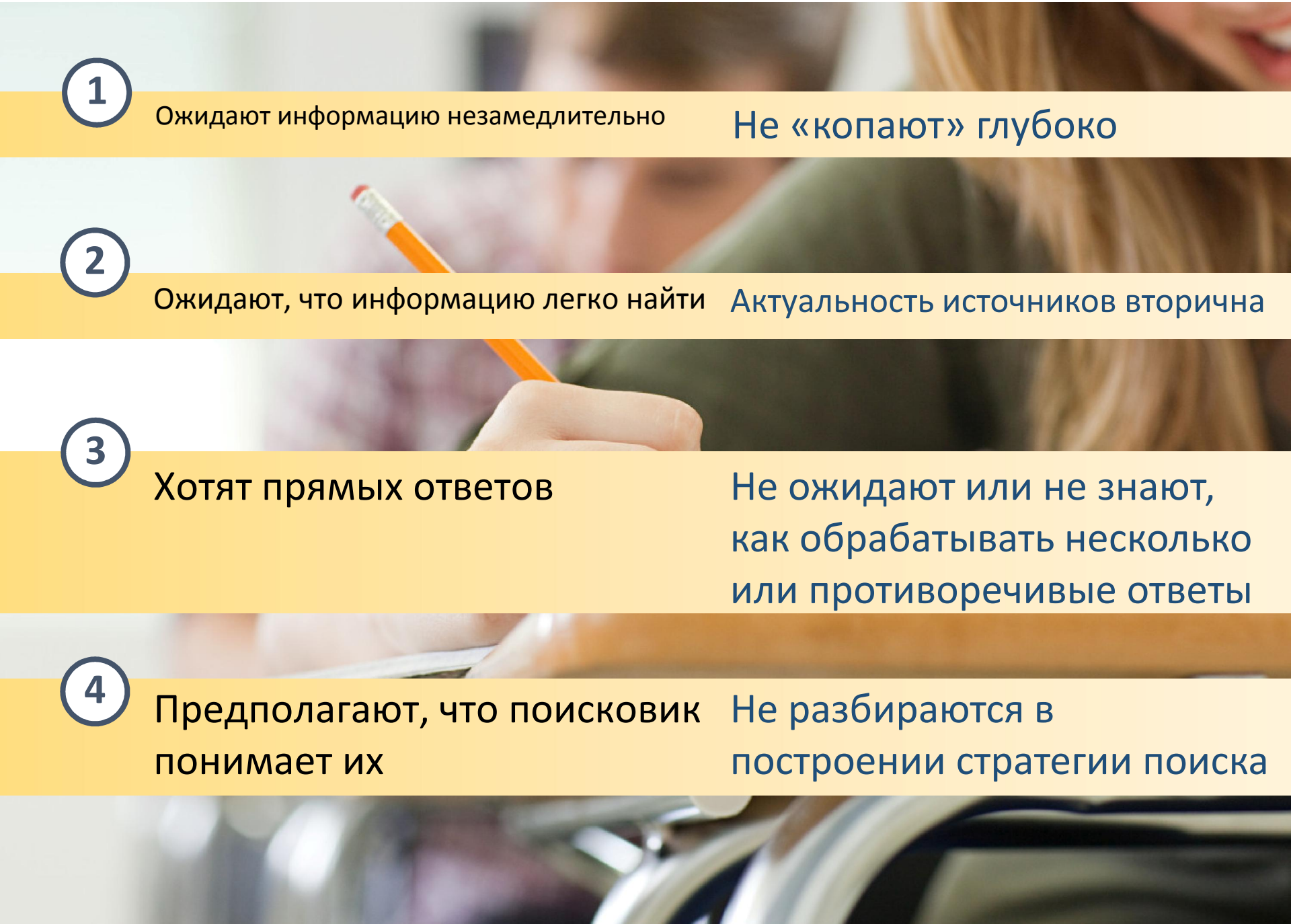
- Плохие результаты
- Разочарование
- Результаты обучения студентов не достигнуты






Дизайн – это не о том, что что-то делает… а о том, что это заставляет сделать Вас….

Эволюция…



| | | |
|---|---|---|
| 1 | Ожидают информацию незамедлительно | Не «копают» глубоко |
| 2 | Ожидают, что информацию легко найти | Актуальность источников вторична |
| 3 | Хотят прямых ответов | Не ожидают или не знают, как обрабатывать несколько или противоречивые ответы |
| 4 | Предполагают, что поисковик понимает их | Не разбираются в построении стратегии поиска |

# Устранение несогласованностей

4

Предполагают, что поисковик понимает их

Не разбираются в построении стратегии поиска

Дать студентам поисковик, который понимает их

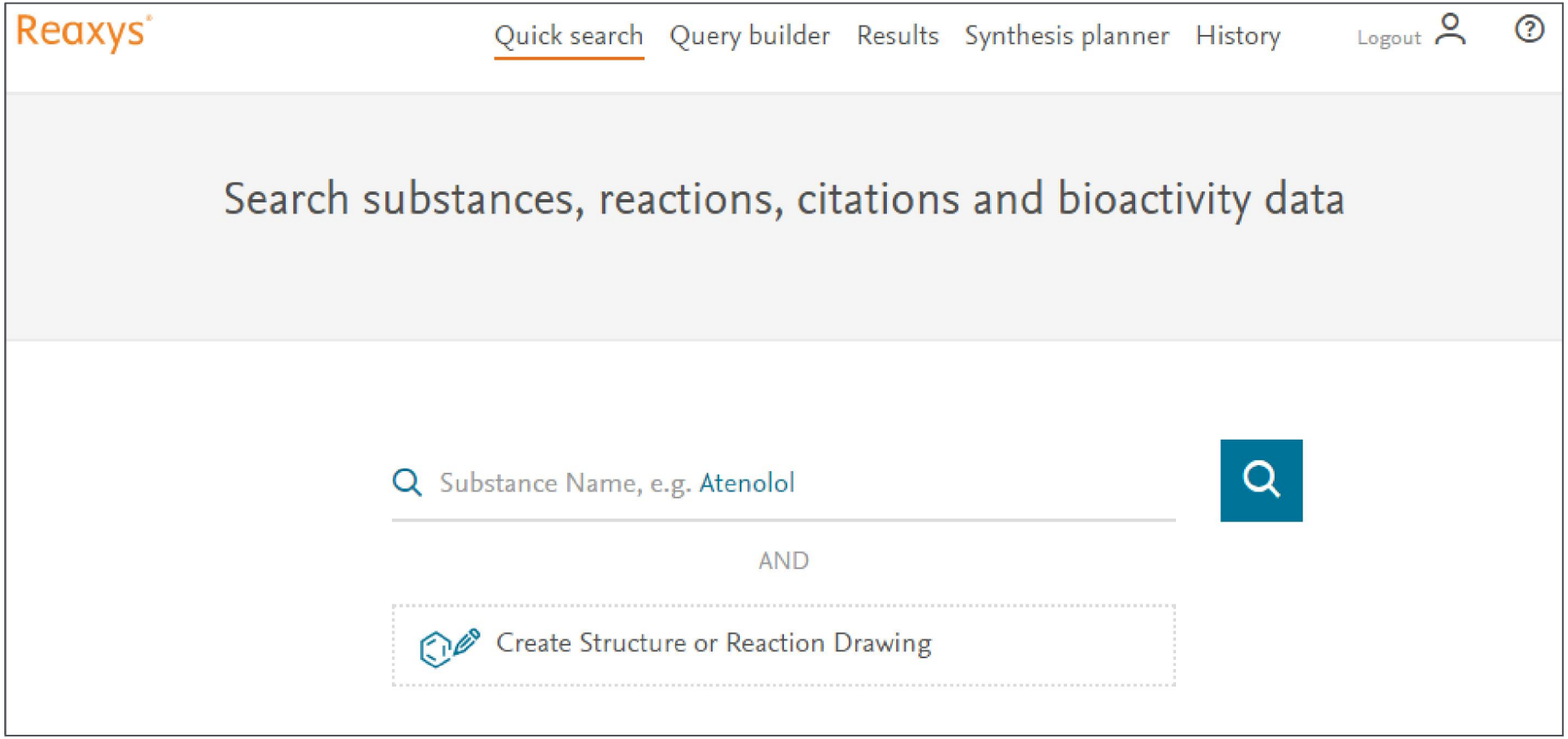
**или**

Научить студентов строить стратегии поиска

**или**

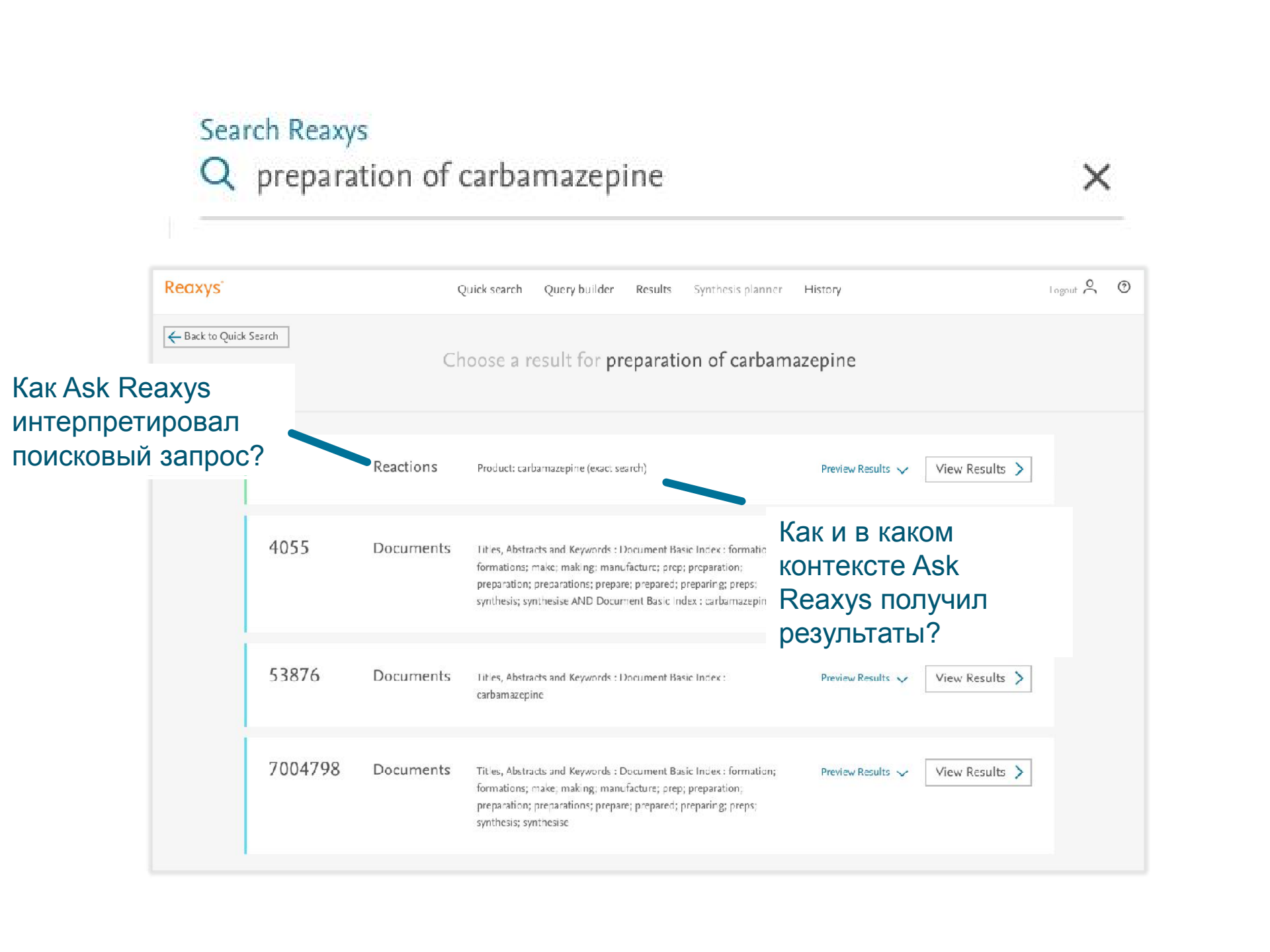
И то и другое

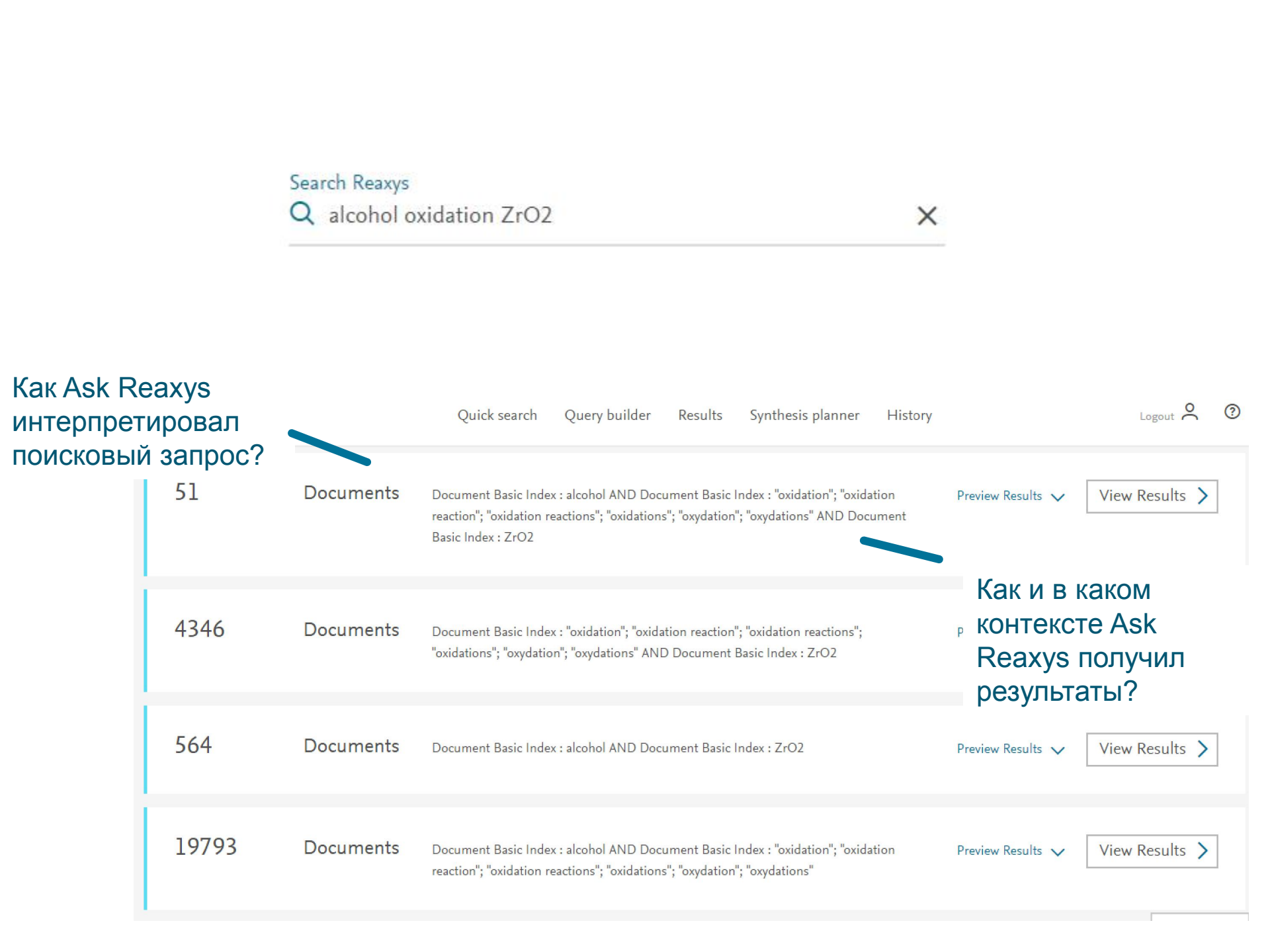
**Ask Reaxys**




- Интерпретирует естественный язык
- Автоматически распознает замысел поиска (реакцию)
- Дает результаты незамедлительно

Позволяет быстрый поиск и беспрепятственное использование для новичков


Search Reaxys
preparation of carbamazepine
Reaxys
Quick search
Query builder
Results
Synthesis planner
History
Logout
Back to Quick Search
Choose a result for preparation of carbamazepine
Как Ask Reaxys интерпретировал поисковый запрос?
Reactions
Product: carbamazepine (exact search)
Preview Results
View Results
4055
Documents
Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : formatio
formations; make; making; manufacture; prep; preparation;
preparation; preparations; prepare; prepared; preparing; preps;
synthesis; synthesise AND Document Basic Index : carbamazepin
Как и в каком контексте Ask Reaxys получил результаты?
53876
Documents
Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index :
carbamazepine
Preview Results
View Results
7004798
Documents
Titles, Abstracts and Keywords : Document Basic Index : formation;
formations; make; making; manufacture; prep; preparation;
preparation; preparations; prepare; prepared; preparing; preps;
synthesis; synthesise
Preview Results
View Results


Search Reaxys
alcohol oxidation ZrO2
Как Ask Reaxys интерпретировал поисковый запрос?
Quick search
Query builder
Results
Synthesis planner
History
Logout
51
Documents
Document Basic Index : alcohol AND Document Basic Index : "oxidation"; "oxidation reaction"; "oxidation reactions"; "oxidations"; "oxydation"; "oxydations" AND Document Basic Index : ZrO2
Preview Results
View Results
4346
Documents
Document Basic Index : "oxidation"; "oxidation reaction"; "oxidation reactions"; "oxidations"; "oxydation"; "oxydations" AND Document Basic Index : ZrO2
Как и в каком контексте Ask Reaxys получил результаты?
564
Documents
Document Basic Index : alcohol AND Document Basic Index : ZrO2
Preview Results
View Results
19793
Documents
Document Basic Index : alcohol AND Document Basic Index : "oxidation"; "oxidation reaction"; "oxidation reactions"; "oxidations"; "oxydation"; "oxydations"
Preview Results
View Results

51 Documents

Document Basic Index : alcohol AND Document Basic Index : "oxidation"; "oxidation reaction"; "oxidation reactions"; "oxidations"; "oxydation"; "oxydations" AND Document Basic Index : ZrO2

Preview Results

View Results

Top 3 results

Investigating the catalytic activity of monoclinic zirconia; oxidation of benzyl alcohol in aqueous medium at mild conditions

Cited 2 times

Sadiq; Ilyas; Alam - Tenside, Surfactants, Detergents, 2012, vol. 49, # 1, p. 37 - 42

Abstract Index Terms Full Text

Index terms

**Author keyword:** Benzoic acid, Benzyl alcohol, Monoclinic zirconia, Oxidation, Wastewater
**Compendex Terms:** Aqueous medium, Benzoic acid, Benzyl alcohol, Catalyst loadings, Contaminated water, Double-walled, Monoclinic phase, Monoclinic zirconia, Optimal conditions, Partial pressure of oxygen, Reaction parameters, Substrate solution
**Compendex Terms:** Atmospheric pressure, Batch reactors, Carboxylic acids, Catalyst activity, Oxidation, Sewage, Wastewater, Zirconia, Zirconium alloys
**Reaxys Index Terms:** catalyst, catalyst activity, catalytic reaction, industrial waste, monoclinic crystal system, oxidation reaction

# Устранение несогласованностей

3

Хотят прямых ответов

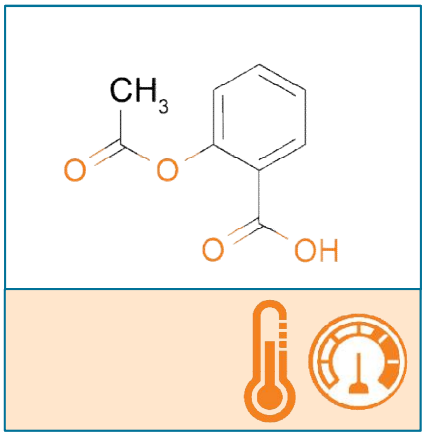
Не ожидают или не знают, как обрабатывать несколько или противоречивые ответы

Дать студентам реальные данные

Дать студентам возможность осмыслить вариабельность данных

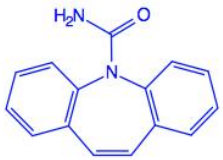
**Извлеченные данные**

# Соединения могут иметь информацию во многих полях свойств, например, соединение carbamazepine содержит данные в ~3,000 полях и подполях.




**>90 М записей соединений** с **>500 М** извлеченных фактов о их **свойствах**: физических, химических, спектральных, экологических, биоактивность и др.

carbamazepin




Identification
Spectra - 120
Physical Data - 306
Bioactivity - 1203
Other Data - 1430

Preparations - 54
Reactions - 157
Documents - 1338

**Spectra - 120**
- Raman Spectroscopy - 9
- UV/VIS Spectroscopy - 40
- Mass Spectrometry - 30
- IR Spectroscopy - 24
- Fluorescence Spectroscopy - 3
- NMR Spectroscopy - 14

**Physical Data - 306**
- Liquid/Solid Systems (MCS) - 6
- Interatomic Distances and Angles - 4
- Further Information - 1
- Solubility (MCS) - 107
- Transport Phenomena (MCS) - 2
- Association (MCS) - 14
- Optics - 4
- Crystal Phase - 20
- Crystal System - 8
- Melting Point - 29

**Bioactivity - 1203**
- Pharmacological Data - 1154
- Ecotoxicology - 49

**Other Data - 1430**
- Abiotic Degradation, Hydrolysis - 3
- Abiotic Degradation, Photolysis - 14
- Transport and Distribution - 13
- Biodegradation - 5
- Exposure Assessment - 3
- Concentration in the Environment - 94
- Use - 1293
- Bioaccumulation, Biomagnification and Biomonitoring - 2
- Quantum Chemical Calculations - 3

Табулированные данные, позволяет студентам изучить эмпирические измерения и понять влияние экспериментальных условий

107 измерений растворимости с экспериментальными данными и ссылками

Solubility (MCS) - 107

| Solubility, g·l-1 | Saturation | Temperature (Solubility (MCS)), °C | Solvent (Solubility (MCS)) | Ratio of Solvents | Reference |
|---|---|---|---|---|---|
| 0.164919 | in pure solvent | | water | | Maswal, Masrat; Chat, Oyais Ahmad; Jabeen, Suraya; +4 others - RSC Advances, 2015, vol. 5, # 10, p. 7696 - 7712 Full Text Show details |
| 0.18 - 0.183 | in pure solvent | 37 | water | | Inoue, Yutaka; Sato, Sayuri; Yamamoto, Chisa; +2 others - Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 2014, vol. 62, # 11, p. 1125 - 1130 Full Text Show details |
| 0.262 | | 37 | water | | Shayanfar, Ali; Asadpour-Zeynali, Karim; Jouyban, Abolghasem - Journal of Molecular Liquids, 2013, vol. 187, p. 171 - 176 Full Text Cited 9 times Show details |

# Устранение несогласованностей

2

Ожидают, что информацию легко найти

Релевантность источников вторична

Покажите студентам, как определить релевантность документа-источника

Предоставить им ”взгляд” в содержание источника

**Записи документов**

# Оценить релевантность в контексте ландшафта литературы

Solubility (MCS) - 107

| Solubility, g·l-1 | Saturation | Temperature (Solubility (MCS)), °C | Solvent (Solubility (MCS)) | Ratio of Solvents | Reference |
|---|---|---|---|---|---|
| 0.164919 | in pure solvent | | water | | Maswal, Masrat; Chat, Oyais Ahmad; Jabeen, Suraya; +4 others - RSC Advances, 2015, vol. 5, # 10, p. 7696 - 7712 Full Text Show details |

Solubilization and co-solubilization of carbamazepine and nifedipine in mixed micellar systems: Insights from surface tension, electronic absorption, fluorescence and HPLC measurements

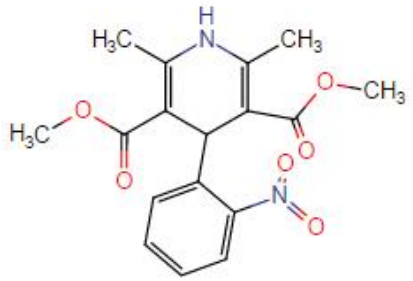
Maswal, Masrat; Chat, Oyais Ahmad; Jabeen, Suraya; +4 others - RSC Advances, 2015, vol. 5, # 10, p. 7696 - 7712

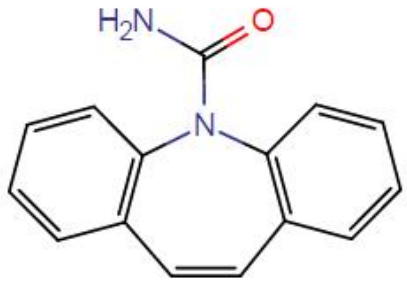
Abstract Index Terms Substances Full Text

## Abstract

UV absorption spectral and HPLC study on the solubilization and co-solubilization behavior of antiepileptic drug Carbamazepine (CBZ) and calcium channel blocker Nifedipine (NFD), which are reported to have a synergistic potentiation, was carried out in sodium cholate based binary and ternary mixed micellar systems with non-ionic polysorbate (Tween20, Tween40) and polyoxyethylene (Brij30, Brij35, Brij56 and Brij58) surfactants. The surfactant-surfactant interactions and their effect on the aggregation number, solubility of drugs, solubilization site, surfactant-drug interactions and drug-drug interactions were evaluated and explained. Synergism in mixed micellization increases the aggregation number and decreases the polarity of palisade layer resulting in enhancement of core solubilization of drugs with concomitant decrease in palisade layer solubilization. In the $C_{12}$ series, CBZ shows a decrease in solubility upon surfactant mixing, indicating an appreciable solubilization in the palisade layer, whereas in the $C_{16}$ series an increase in its solubility was observed. For NFD, a decrease in solubility follows the trend of synergism in mixed micellization, which is more for strongly interacting surfactant systems. During co-solubilization, because CBZ occupies preferentially the palisade layer, its solubility is decreased and the solubilization of NFD, which mainly occurs within the micellar core, is favored. The magnitude of drug-drug interactions increases in mixed micelles and is more for the surfactant systems, showing more synergism in the mixed micelle formation. The mixed micellar media used in the present study, being biocompatible, are expected to be employed as solubilization and drug delivery vehicles for co-administration of these two drugs in vivo. This journal is

## Substances



# Устранение несогласованностей

1

Ожидают информацию незамедлительно

Не «копают» глубоко

Показать студентам, как сделать новейшие взамосвязи

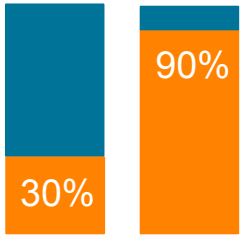
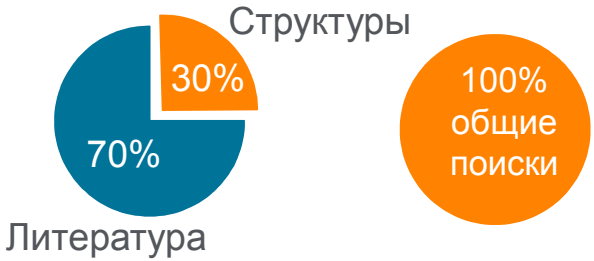
**Глубокое индексирование**

# Увидеть химию через междисциплинарные границы

Compendex
Embase
GeoBase
PubMed
REAXYS®

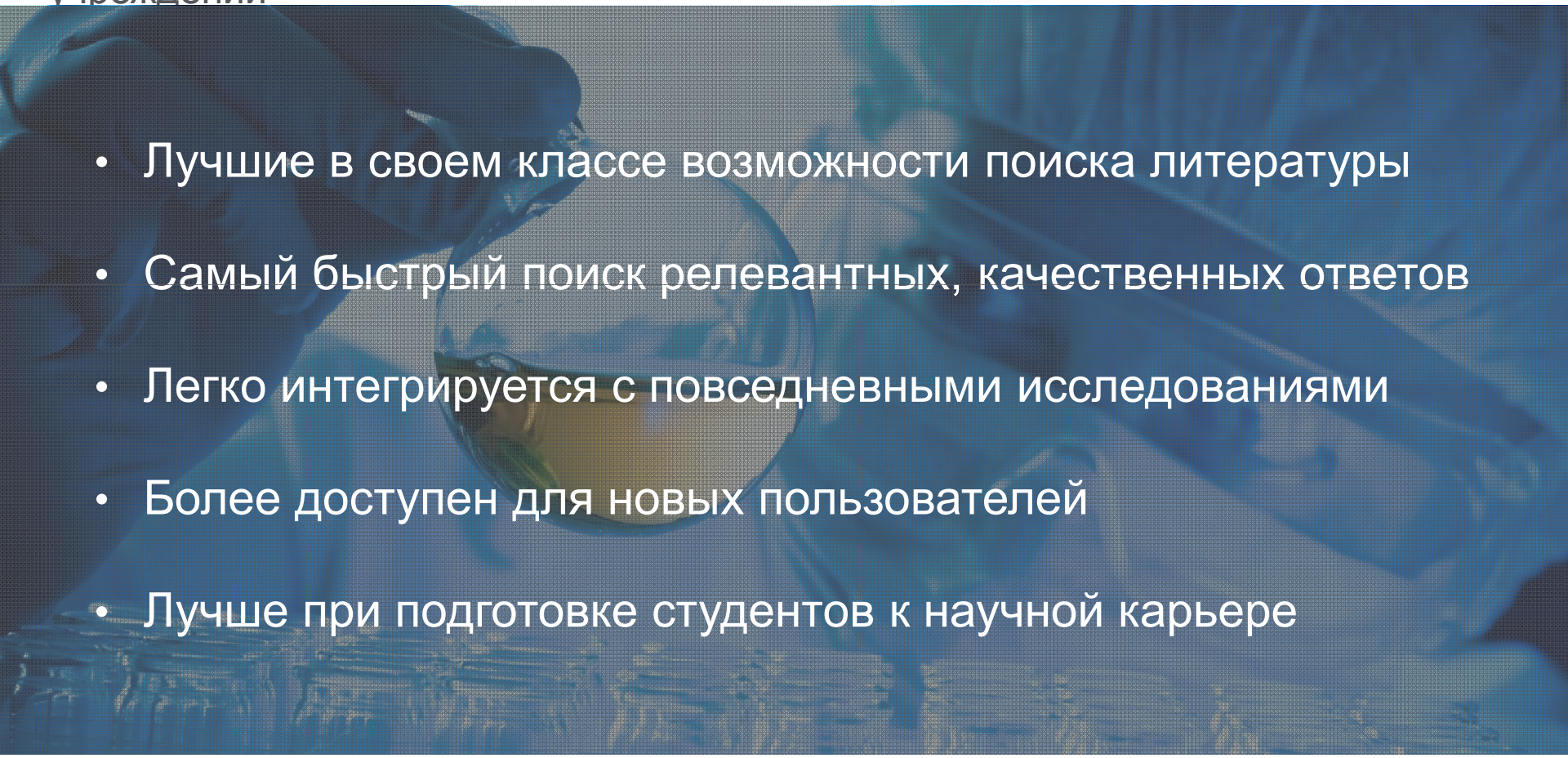
**Keywords:**
**Author:** antiviral activity; Bignoniaceae; EMCV; HSV-1; in vitro assays; plant extracts; VACV
**Compendex Free Language:** Antiviral activities; Bignoniaceae; EMCV; HSV-1; In-vitro assays; Plant extract; VACV
**Compendex Descriptor:** Assays; Bromine compounds; Ethanol
**Compendex Mainhead:** Viruses
**EMTREE drug term:** aciclovir; alpha2a interferon; natural product; plant extract
**GEObase Subject Index:** antimicrobial activity; dicotyledon; ethanol; ethnobotany; medicinal plant; plant extract; taxonomy; virus
**EMTREE medical term:** animal cell; antiviral activity; article; Bignoniaceae; Brazil; controlled study; cytopathogenic effect; cytotoxicity; ethnopharmacology; Murine encephalomyelitis virus; nonhuman; plant leaf; plant stem; Vaccinia virus; Vero cell
**Medline descriptor:** Animals; Antiviral Agents; Bignoniaceae; Brazil; Cercopithecus aethiops; Encephalomyocarditis virus; Herpesvirus 1, Human; Humans; L
Tests; Plant Extracts; Vaccinia virus; Vero Cells
**Regional Index:** Brazil; Minas Gerais
**Species index:** Bignoniaceae; Encephalomyocarditis virus; Human herpesvirus 1; Murinae; Vaccinia virus
**Reaxys Terms:** 3-(4,5-dimethylthiazol-2-yl)-2, 5-diphenyltetrazolium bromide; natural products - antiviral agent
Tradename: bi 201335 (Boehringer Ingelheim)
Tradename: bms 650032 (Bristol Myers Squibb)
Tradename: bms 790052 (Bristol Myers Squibb)
Tradename: incivek (Novartis)
Tradename: nim 811 (Pharmasset)
Tradename: psi 7977 (Scynexis)
Tradename: scy 635 (Johnson and Johnson)
Tradename: tmc 435
Tradename: victrelis

1. Технология И Инжиниринг
2. Биомедицины И Фармакологии
3. Геонауки и окружающая среда
4. Науки о жизни и медицина
5. Химия
   Препараты
   Виды и география

| | Изменение | Значение для вас |
|---|---|---|
| **Дополни-тельное содержание** |  <br>Больше индексируемой периодики<br>  <br>Больше охват патентов | • Больше соединений, свойств, реакций и литературы<br>• Быстрое и глубокое понимание литературы из широкого спектра дисциплин<br>• Актуальные и напрямую используемые данные, размещенные в мировой патентной литературе |
| **Новый опыт пользовате лей** |  <br>Повышена производительность в 100% из наиболее распространенных видов поиска | • Легкий доступ к запросам, которые вы используете чаще всего<br>• Помощь в поиске и предпросмотр результатов<br>• Интуитивная навигация и анализ результатов |
| **Улучшенна я интеграция** | Время, затраченное на интеграцию данных<br>  <br>Оптимизированное управление данными | • Мгновенный доступ к контенту Reaxys<br>• Беспрепятственная интеграция с платформами и инструментами обработки данных<br>• Быстрый и простой мэшап данных |

# Reaxys – устраняет препятствия в академической науке

Помогает укрепить научные исследования, инновации и образование в вашем учреждении

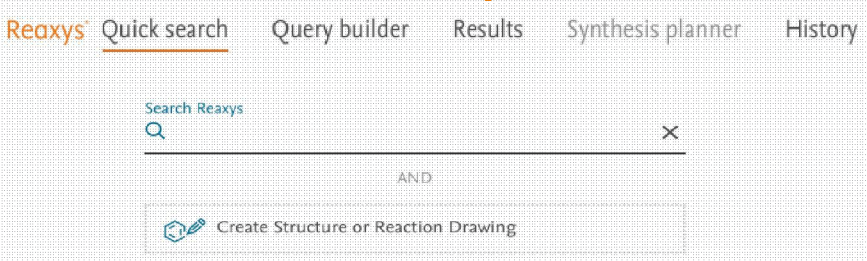


- Лучшие в своем классе возможности поиска литературы
- Самый быстрый поиск релевантных, качественных ответов
- Легко интегрируется с повседневными исследованиями
- Более доступен для новых пользователей
- Лучше при подготовке студентов к научной карьере

# Возможности поиска литературы

## Резюме по основным параметрам текстового поиска

Reaxys




- **Содержит автозаполнения**
- **Осмысляет естественный язык**
- Автоматически распознает формы единственного/множественного числа, английский/американский варианты написания, синонимы
- **Автоматически распознает намерение поиска (темы, вещества, реакции, свойства, авторов, источник публикации) – не делает ни одна другая поисковая система**
- Дает возможности для комбинации введенных понятий
- Интерпретирует усечения и логическое/близость
- **Позволяет одновременно производить текстовой/числовой поиск совместно с структурным поиском**
- **Также позволяет пользователям управлять усечения и близость**

Результаты поиска ранжируются по релевантности.

Конкурирующая база данных

Возможность текстового поиска является Explore by Research Topic (ERT):
ERT работает, если пользователи знают, что надо поставить связи между понятиями: A c b c C.
Затем пользователи выбирают из списка кандидатов:
A, Б, B – ‘тесно связана’
A, Б, B – ‘B любом месте в записи’
Комбинации A, Б; A, C; B, C, то a; Б; B – ‘тесно связаны и в любом месте в записи’
Для одного понятия автоматически включено: форм единственного/множественного числа (в основном), английский/американский варианты написания, синонимы из ‘словарь синонимов’;  записи соединений, если они обнаружены, также осуществляется автоматически.

**Нет автозаполнения или подсказок.**
**Не показывает, как происходил поиск.**

Ответы всегда ранжируются в обратном хронологическом порядке.

# Возможности поиска литературы

## Резюме по охвату литературы

Reaxys

Часть Elsevier

(ScienceDirect, Scopus, Embase, Ei Village and more)

**Покрытие более 16000 периодических изданий.**

**>53 M оригинальных реферативных статей**
**~1M патентных документов**

**Замечание: Индексируемые ключевые слова из Compendex, EMTREE, GeoBase, MEDLINE, Reaxys находятся в единой Литературной записи.**

**Если их считать "независимо", Reaxys будет покрывать >82 млн документов**

**"Итого"**
**>82 M**

**>>**

Конкурирующая база данных

**Покрытие более 10000 периодических изданий**

Общий индекс **>35 млн оригинальных записей**
**(включая абстракты конференций /заметки ред колеегии)**

**MEDLINE: ~24млн оригинальных записей**

Общий индекс **>8M патентных документов**

Общий индекс **и MEDLINE размещены раздельно. Всего записей >67 млн.**

**Возможны повторяющиеся записи!!!**

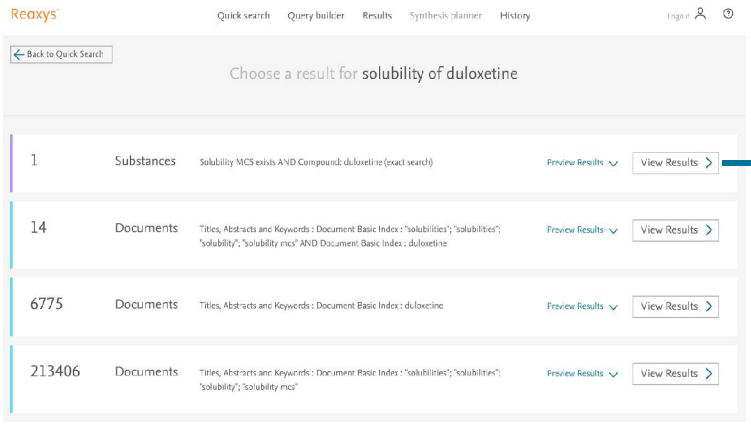
**"Итого"**
**>67 M**

Reaxys содержит на много больше реферируемых статей из журналов. В Reaxys отсутствуют дублирующиеся записи, которые необходимо разделять в ручную.

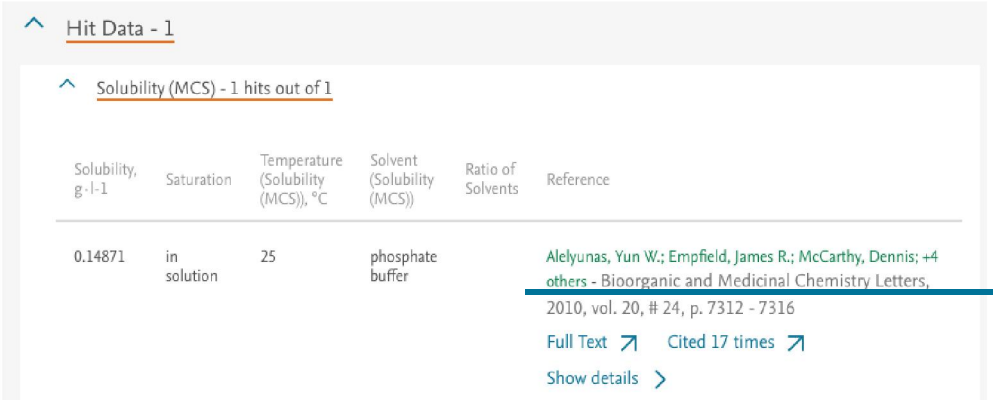
# Поиска Reaxys обеспечивает результат напрямую

1. Введите термины на естественном языке без усечения/близости…


2. Обзор вариантов. Поиск дает одно вещество с информацией в области растворимости.

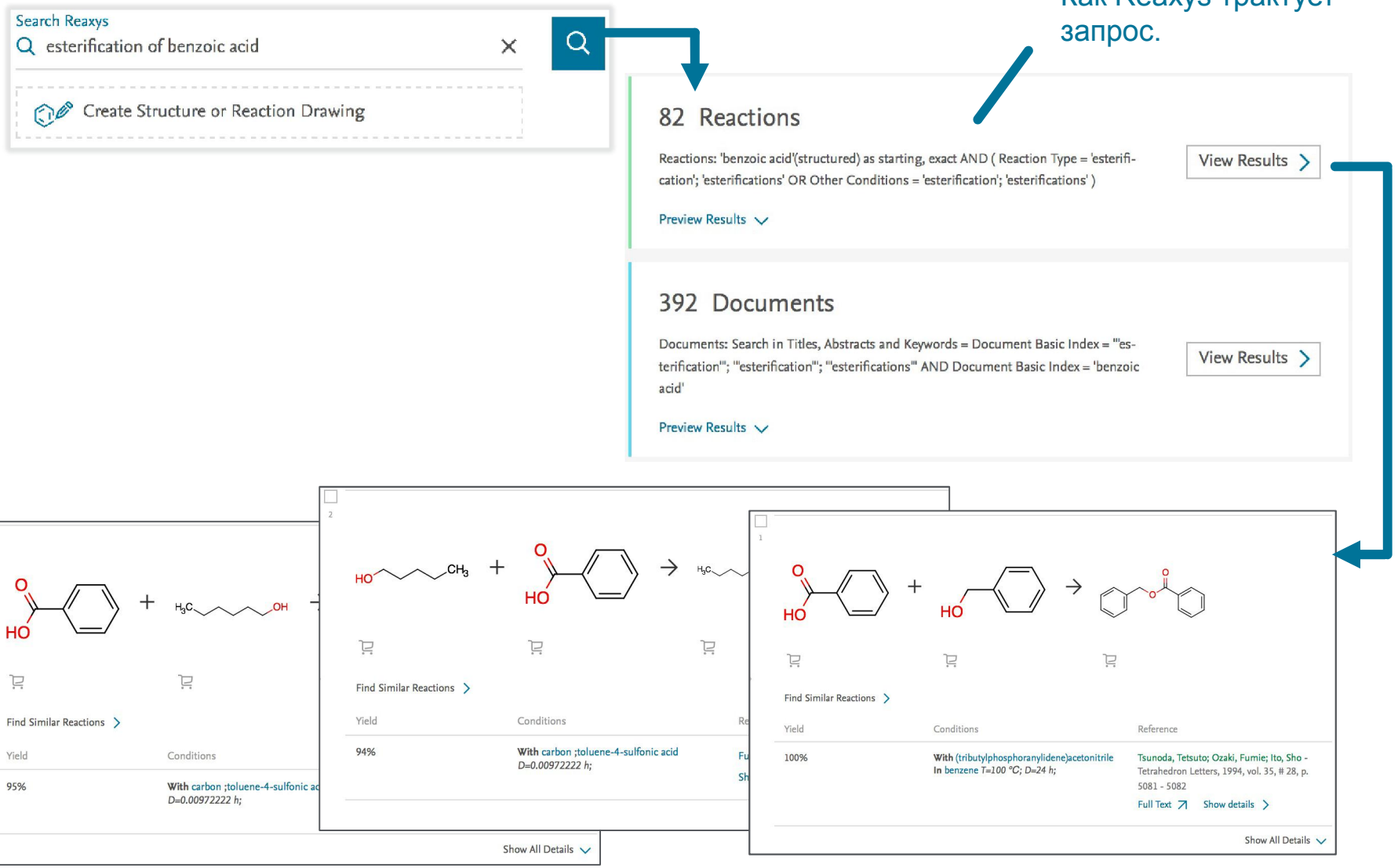







3. Нажмите View Results … и Reaxys показывает конкретные данные в записи соединения

# Поиска Reaxys обеспечивает результат напрямую



# Применение Reaxys
# Ингибирование коррозии?

# Reaxys

## Обеспечивает релевантные ответы по дисциплинам, связанным с химией

**Записи в Reaxys** глубоко проиндексированных по ключевым словам из **автора**, таксономии **Reaxys,** а также ведущими на рынке базами данных **EMBASE**, **MedLine**, **GeoBase** и **Compendex**.

**Детализированные данные о свойствах** с **>500 поля данных для поиска,** Reaxys является крупнейшим хранилищем данных о свойствах вещества в мире.

Получает литературу по большим веществам — **полимерам биологическим продуктам и материалам** — используя общеизвестные имена

Находит сведения о свойствах малых молекул — **органических, неорганических, координационных соединений и мономеров** — которые имеют отношение к вашей дисциплине

Осуществлять целенаправленный поиск по **процессам и продуктам, характерным для вашей отрасли.**

- Фармацевтика
- Биотехнологии
- Исследования в области полимеров
- Материаловедение
- Биомедицина
- Окружающая среда
- Синтетическая химия
- Токсикология
- Нанотехнологии
- Инженерия
- Тонкая химия
- Нефть И Газ
- Новые материалы
- и многое другое...

# Reaxys

## Это обширные, хорошо проиндексированные данные под рукой

Reaxys является крупнейшим хранилищем данных о свойствах веществ в мире. Растворимость это только одно из **>500 полей данных для поиска** в Reaxys

Melting point
Boiling point
Sublimation
Refractive index
Density
Adsorption
Association
Autoignition
Bound Surface Phenomena
Viscosity
Circular Dichromism
Complex Phase Equilibria
Compressibility
Conformation
Critical Density
Critical Micelle Concentration
Critical Pressure
Critical Tempareture
Critical Volume
Electrical Data
Electrical Moment
Electrochemistry Data
Electron Binding
Energy Barriers
Energy Data

Enthalpy of Formation
Enthalpy of Sublimation
Flash Point
Gas Phase
Dissociation Energy
Crystal System
Crystal Phase
Heat Capacity
Henry Constat
Ionization Potential
Isoelectric Point
Kinematic Viscosity
Liquid Phase
Magnetic Data
Mechanical Properties
Molecular Deformation
Optical Data
Thermochemical Data
Solubility
Solution Behavior
Sound Properites
Static Dielectric Constat
Surface Tension
Transition Points
Transport Data

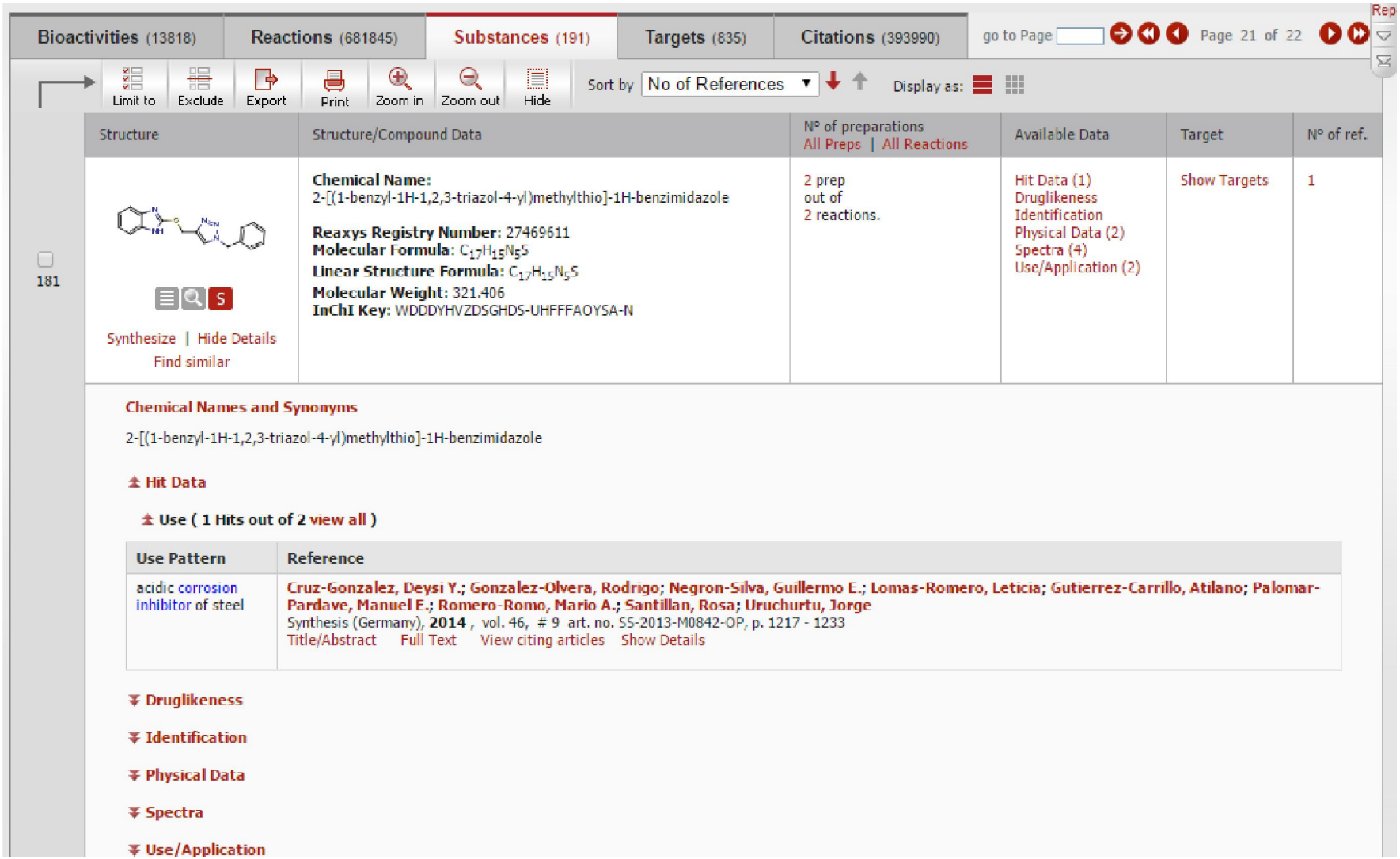
NMR Spectroscopy
IR Spectroscopy
Mass Spectroscopy
UV/VIS Spectroscopy
ESR Spectroscopy
NQR Spectroscopy
Raman Spectroscopy
Luminscence Spectroscopy
Fluorescence Spectroscopy
Exposure Assessment
Bioaccumulatio
Biomagnificatio
Biodegradation
Abiotic Degrad
Stability in Soil
Oxygen Demand
Uses
Isolation from Natural Prod.
Reaction Yield
Reaction Conditions
Reaction Type
Named Reaction
Pharmacological Data
Route of Administration
Concentration

**Информация о применении**

Target
Substance Effect
Substance Action on Target
Substance Dose
Bioassay
Animal Model
Organs/Tissue
Cells/Cell Lines
Measurment Parameter
Endpoint of Effect
Data
stant
Exponent
osity
Electrolytic Conductivity
Enthalpy of Fusion
Enthalpy of Vaporization
Explosion Limits
Interactomic Distance/Angle
Kinematic Viscosity
Liquid/Solid Systems
Liquid/Vapor Systems
Metarotation

And many more...

# Reaxys нашел 191 запись соединений, применяемых как “corrosion inhibitor”



# Reaxys нашел 21473 запись документов по теме ингибиторов коррозии

Back to Quick Search

Choose a result for corrosion inhibitor

21473 Documents

Titles, Abstract, Keywords : corrosion, inhibitor

Preview Results | View Results

Top 3 results

Streptomycin: A commercially available drug as corrosion inhibitor for mild steel in hydrochloric acid solution

Cited 91 times

Shukla, Sudhish Kumar; Singh, Ashish Kumar; Ahamad, Ishtiaque; +1 other - Materials Letters, 2009, vol. 63, # 9-10, p. 819 - 822

Abstract | Index Terms | Full Text

Inhibition effect of thioureidoimidazoline inhibitor for the flow accelerated corrosion of an elbow

Cited 4 times

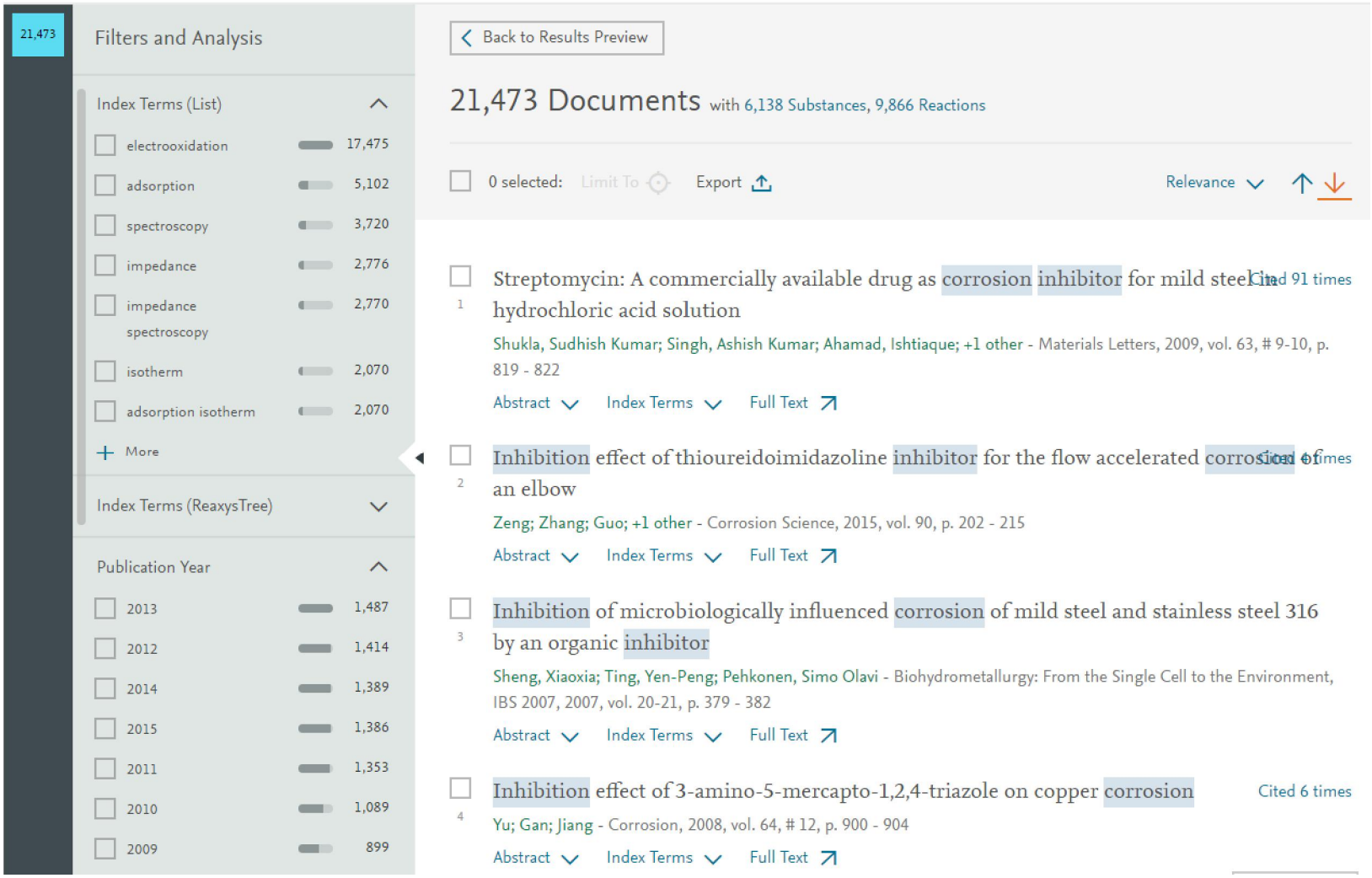
Zeng; Zhang; Guo; +1 other - Corrosion Science, 2015, vol. 90, p. 202 - 215

Abstract | Index Terms | Full Text

Inhibition of microbiologically influenced corrosion of mild steel and stainless steel 316 by an organic inhibitor

Sheng, Xiaoxia; Ting, Yen-Peng; Pehkonen, Simo Olavi - Biohydrometallurgy: From the Single Cell to the Environment, IBS 2007, 2007, vol. 20-21, p. 379 - 382

Abstract | Index Terms | Full Text


21,473
Filters and Analysis
Index Terms (List)
electrooxidation 17,475
adsorption 5,102
spectroscopy 3,720
impedance 2,776
impedance spectroscopy 2,770
isotherm 2,070
adsorption isotherm 2,070
More
Index Terms (ReaxysTree)
Publication Year
2013 1,487
2012 1,414
2014 1,389
2015 1,386
2011 1,353
2010 1,089
2009 899
Back to Results Preview
21,473 Documents with 6,138 Substances, 9,866 Reactions
0 selected: Limit To Export
Relevance
1 Streptomycin: A commercially available drug as corrosion inhibitor for mild steel in hydrochloric acid solution
Cited 91 times
Shukla, Sudhish Kumar; Singh, Ashish Kumar; Ahamad, Ishtiaque; +1 other - Materials Letters, 2009, vol. 63, # 9-10, p. 819 - 822
Abstract Index Terms Full Text
2 Inhibition effect of thioureidoimidazoline inhibitor for the flow accelerated corrosion of an elbow
Cited 41 times
Zeng; Zhang; Guo; +1 other - Corrosion Science, 2015, vol. 90, p. 202 - 215
Abstract Index Terms Full Text
3 Inhibition of microbiologically influenced corrosion of mild steel and stainless steel 316 by an organic inhibitor
Sheng, Xiaoxia; Ting, Yen-Peng; Pehkonen, Simo Olavi - Biohydrometallurgy: From the Single Cell to the Environment, IBS 2007, 2007, vol. 20-21, p. 379 - 382
Abstract Index Terms Full Text
4 Inhibition effect of 3-amino-5-mercapto-1,2,4-triazole on copper corrosion
Cited 6 times
Yu; Gan; Jiang - Corrosion, 2008, vol. 64, # 12, p. 900 - 904
Abstract Index Terms Full Text

# Поля поиска помогают разобраться в исследовательском вопросе и найти конкретные ответы

Identify an unknown substance isolated from a **natural product** 3. Experimental results indicate that the substance has **30 carbon atoms** 1 and an **optical rotation of 75-85°** 2**.** Has it been tested for **antimicrobial** activity 4 ?

1

Molecular Formula

eg.C6H5COOH
C30*

Look up

3

Isolation from Natural Product — Exist

2

Optical Rotatory Power — Exist

| | | |
|---|---|---|
| is | | Type (Optical Rotatory Power) |
| is | | Concentration (Optical Rotatory Power) |
| = | | Length of Path, cm |
| is | | Solvent (Optical Rotatory Power) |
| = | | Optical Rotatory Power, deg<br>75-85 |
| = | | Wavelength (Optical Rotatory Power), nm |
| = | | Temperature (Optical Rotatory Power), °C |

4

Basic Indexes

| | |
|---|---|
| is | Substance Basic Index<br>antimicrobi* |

This search illustrates how searches through querylets can be combined to give very precise answers. When this search is done, 6 substances are obtained and it is a simple task to look through data for all of them.

# Пост-обработка литературного запроса

711
13,011

Filters and Analysis

Index Terms (List)

- cyclic voltammetry 711
- x-ray diffraction 349
- electrochemical property 321
- scanning electron microscopy 275
- impedance spectroscopy 258
- transmission electron microscopy 124
- sol gel process 82

+ More

Index Terms (ReaxysTree)

Publication Year

- 2014 127
- 2013 99
- 2015 86
- 2012 69
- 2011 55
- 2010 42
- 2008 41

+ More

Document Type

- article 632
- conference paper 77
- review 1

Tsutsumi, Hiromori; Oyari, Yoshiaki; Onimura, Kenjiro; +1 other - Journal of Power Sources, 2001, vol. 92, # 1-2, p. 228 - 233

Abstract Index Terms Full Text

4 Synthesis, characterization and application of $Li_3Fe_2(PO_4)_3$ nanoparticles as cathode of lithium-ion rechargeable batteries — Cited 11 times

Karami, Hassan; Taala, Foroozandeh - Journal of Power Sources, 2011, vol. 196, # 15, p. 6400 - 6411

Abstract Index Terms Full Text

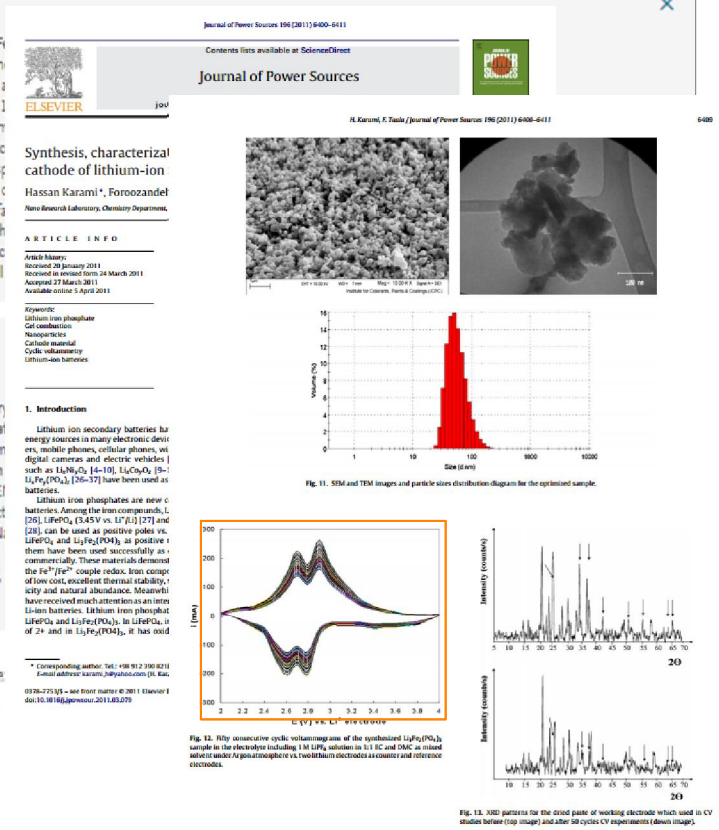
Abstract

This work introduces a new method to synthesize $Li_3Fe$ electrochemical performance by cyclic voltammetry an combustion method based on polyvinyl alcohol (PVA) include 8 wtpercent PVA, 0.34 wtpercent lithium slat, phosphate, ethanol-water 50:50 as solvent, 675 °C cor Characterization of the samples is performed by the sc microscopy (TEM), EDX analysis, XRD patterns, BET s conditions, a nanopowder is obtained that consisting The optimized sample shows 12.5 $m^2 g^{-1}$ specific surfa synthesized compound has good reversibility and high tests. The obtained results show that the synthesized c 125.5 mAh $g^{-1}$ approximately same with its theoretical

Index terms

**Author keyword:** Cathode material, Cyclic voltammetry
**Compendex Terms:** Ammonium dihydrogen phosphat materials, Combustion temperatures, Combustion tim water, Gel combustion, Gel-combustion method, Iron cycles, Nano powders, Optimum conditions, SEM, TE
**Compendex Terms:** Ammonium compounds, Bioelect Lithium alloys, Lithium compounds, Nanoparticles, N Transmission electron microscopy
**Reaxys Index Terms:** combustion, cyclic voltammetry,

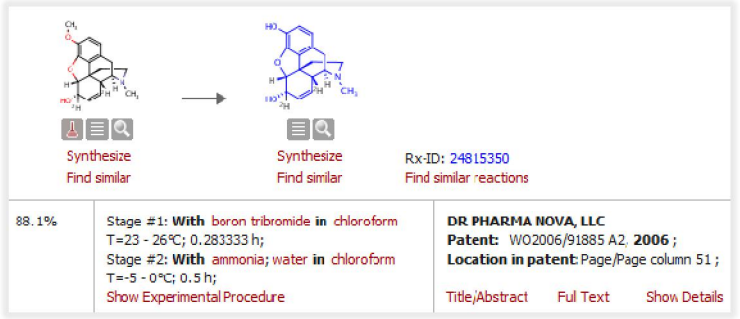
5 Effects of $MoS_2$ doping on the electroche lithium-ion batteries



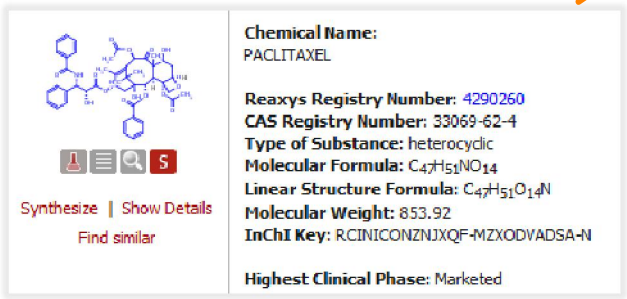
# Reaxys

## Как искать информацию в области катализа?

### Что ищет каталитик?



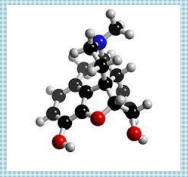


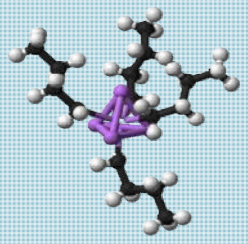
# Поиск информации в области катализа

Находятся в записях Веществ REAXYS … и …

Находятся в КЛЮЧЕВЫХ СЛОВАХ в REAXYS БИБЛИОГРАФИЧЕСКИХ Записях

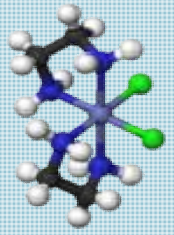


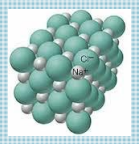
Органические вещества



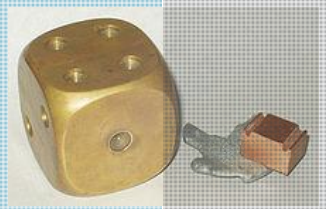
Металлоорганические

Координационные соединения





Неорганические

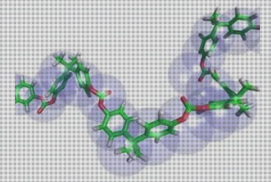


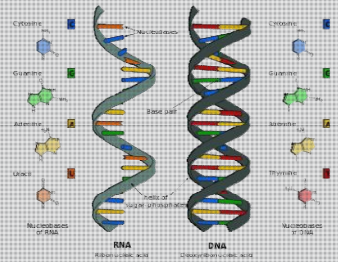
Сплавы & Металлы

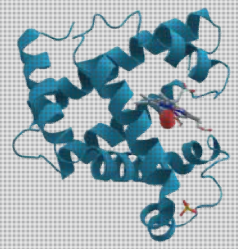
Катализатор

Керамика

Полимеры





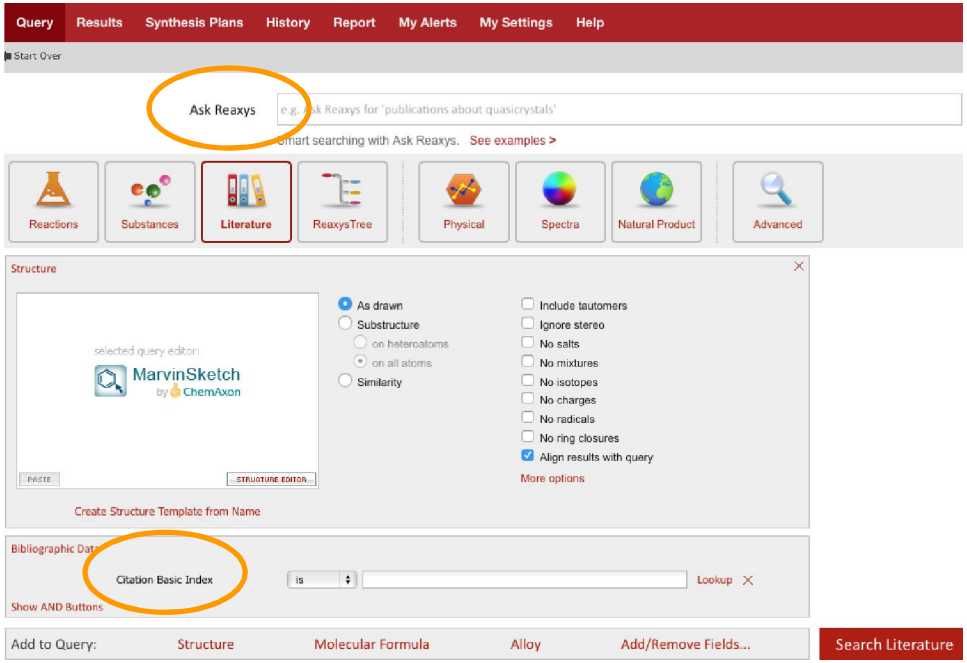
Нуклеиновые кислоты И Белки

Поиск в записях Соединений

Поиск в записях Литературы

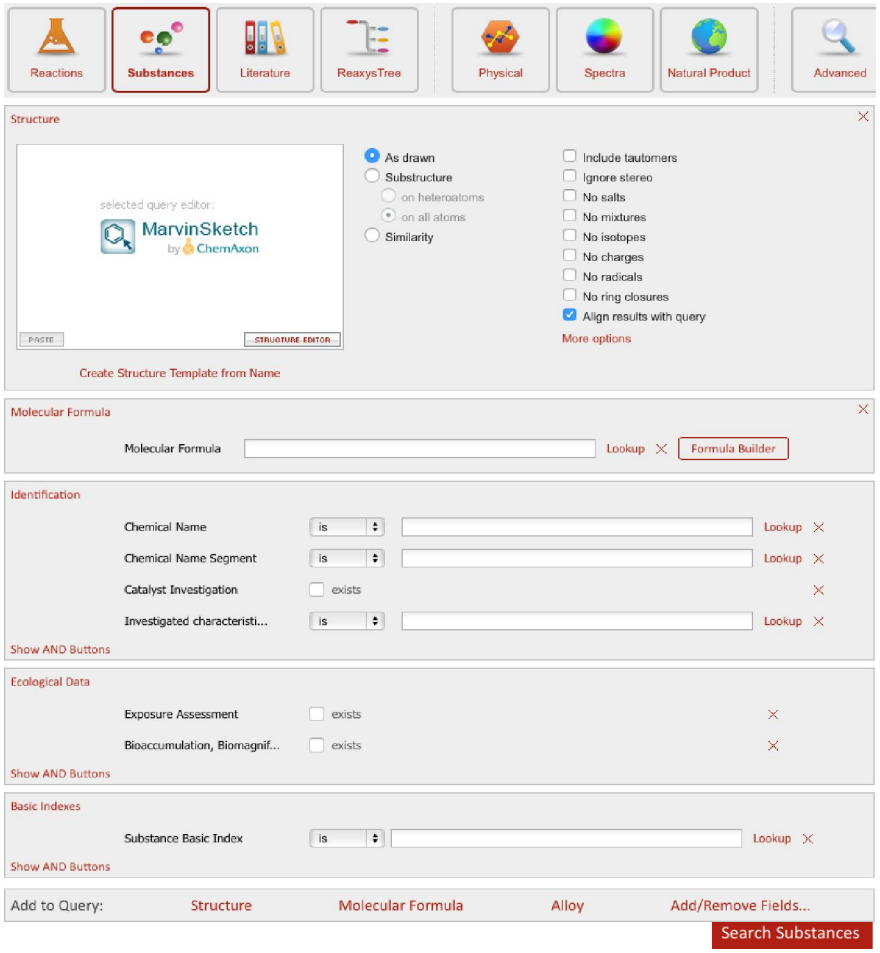
# Search Reaxys: Bibliographic Records

- The two main ways to search for text terms in bibliographic records are:
  - Ask Reaxys
    - An intelligent natural language search interface
    - Used to find initial information quickly
  - Citation Basic Index Querylet
    - Allows users to control the search
    - Allows truncation (left-, right- and left/right-)
    - Allows proximity/Boolean (NEAR, NEXT, AND, NOT, OR)
    - Suggests individual terms or phrases through auto-suggest as you type in the Entry Box or in the box through Lookup
- Over 50 million bibliographic records are searched



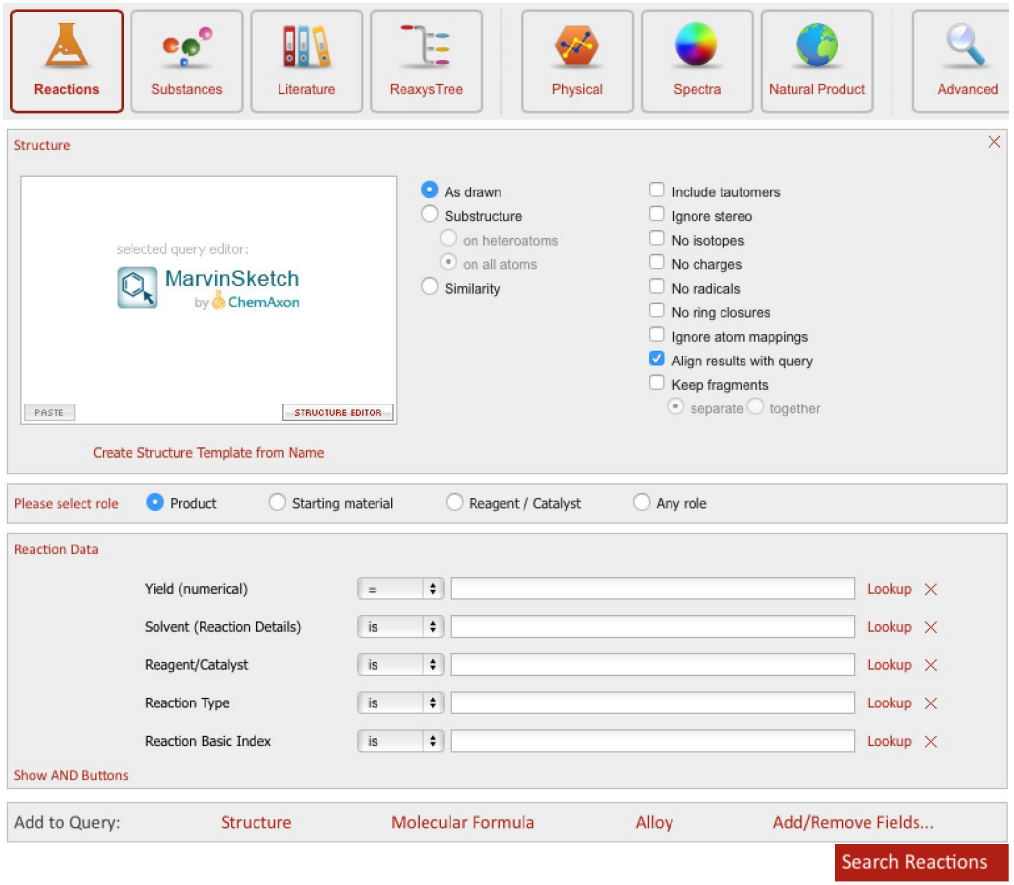
# Search Reaxys: Substance Records

- The main ways to search for substances in substance records are:
  - Full/part structure through the Structure Editor(s)
  - Full/part name through the Chemical Name or Chemical Name Segment Querylets
  - Full/part formula through the Formula Builder (=> Molecular Formula Querylet)
- Substances may be found through the > 500 Property Querylets
  - Specific querylets may be set up through Add/Remove fields…
- The Substance Basic Index Querylet is very useful to search for specific terms in substance records
- Notes
  - Information on all substances may also be found through bibliographic searches (previous slide)
  - For substances with “simple names” try Ask Reaxys



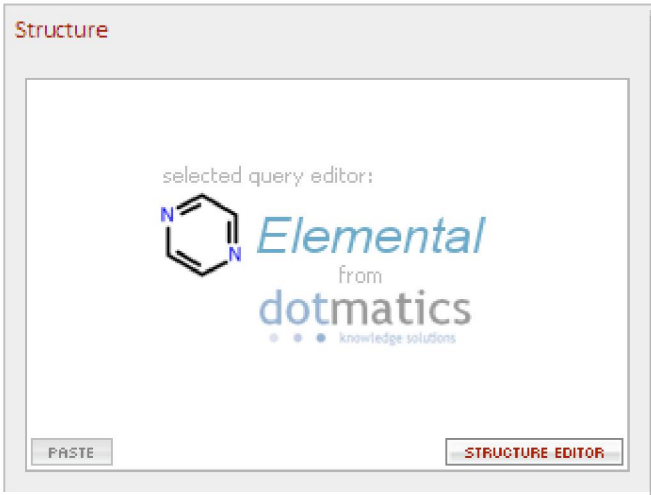
# Search Reaxys: Reaction Records

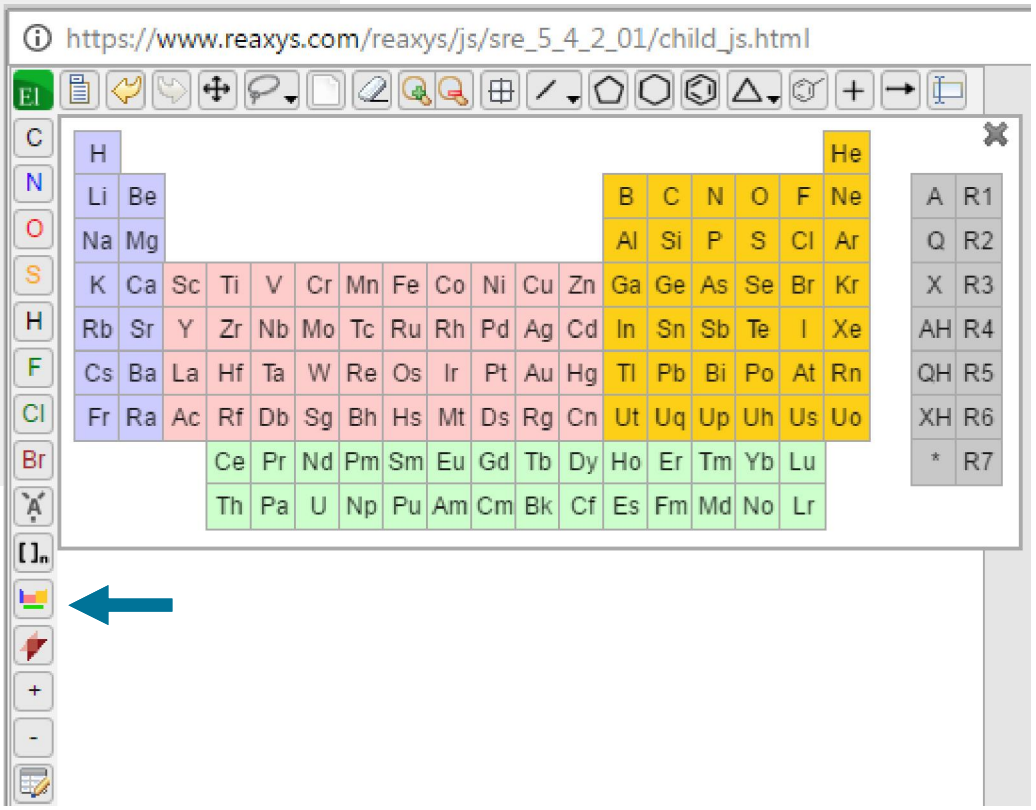
- The main ways to search in reaction records are through:
  - Full/part structure for reactants, catalysts, products through the Structure Editor(s)
  - Reaction-based Querylets
    - For example through the Reaction Type Querylet that searches for Named Reactions and Types of Reactions
  - Reaction Basic Index Querylet is particularly useful to search for specific terms in reaction records (including in the Experimental Details)
- Remember that auto-suggest terms appear as you type in the Entry Box or in the box through Lookup in all Querylets



# Гомогенные, металлорганические, твердые растворы и др. в качестве катализаторов.

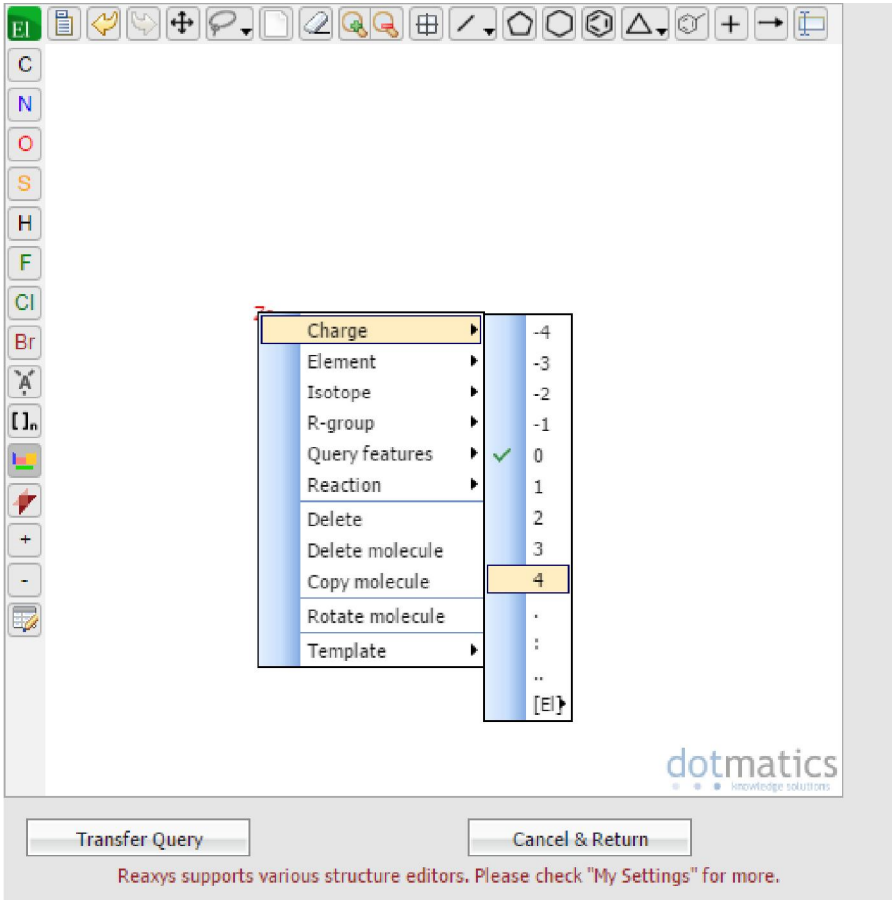
## ПОИСК ИНФОРМАЦИИ В ЗАПИСЯХ СОЕДИНЕНИЙ. $Zr^{4+}$ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ?

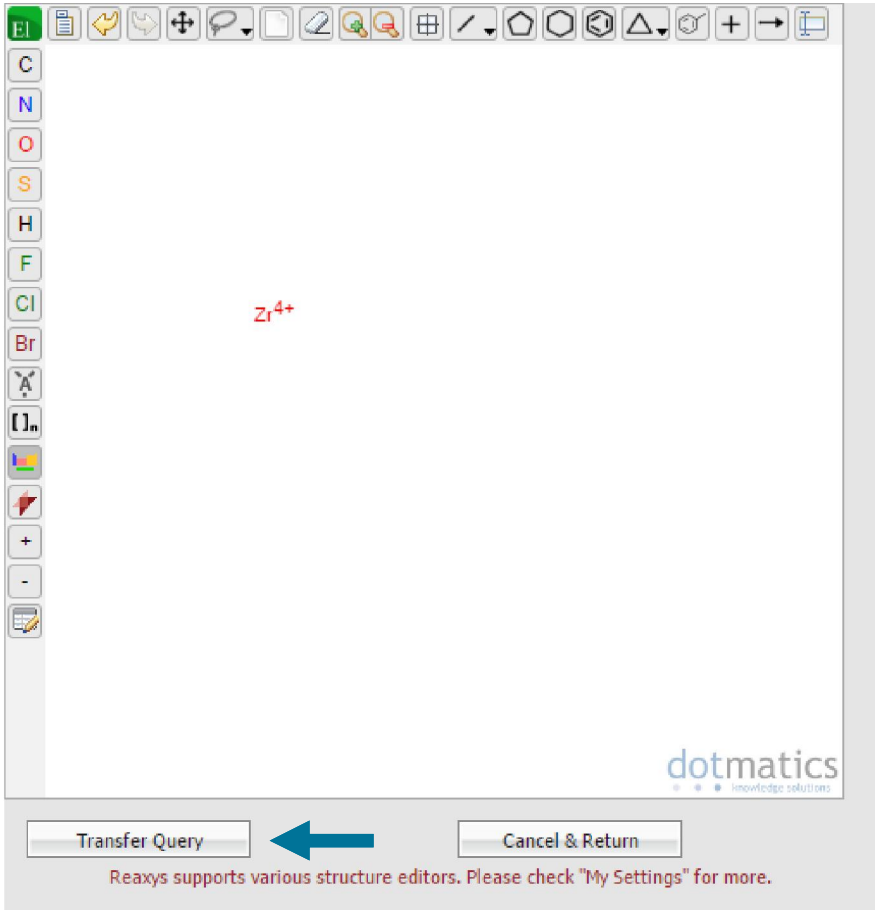



# Гомогенные, металлорганические, твердые растворы и др. в качестве катализаторов.

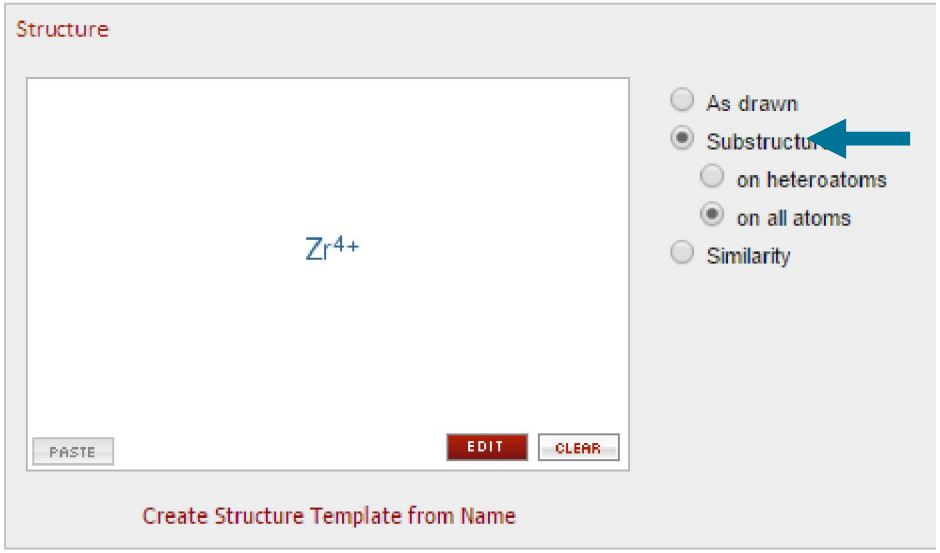
## ПОИСК ИНФОРМАЦИИ В ЗАПИСЯХ СОЕДИНЕНИЙ. $Zr^{4+}$ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ?



# Гомогенные, металлорганические, твердые растворы и др. в качестве катализаторов.

ПОИСК ИНФОРМАЦИИ В ЗАПИСЯХ СОЕДИНЕНИЙ.
$Zr^{4+}$ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ?





Search Substances

# Гомогенные, металлорганические, твердые растворы и др. в качестве катализаторов.

## ПОИСК ИНФОРМАЦИИ В ЗАПИСЯХ СОЕДИНЕНИЙ. $Zr^{4+}$ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ?

Bioactivities (1) | Reactions (2988) | Substances (1196) | Targets (0) | Citations (1751) | go to Page

Limit to | Exclude | Export | Print | Zoom in | Zoom out | Hide | Sort by: No of References | Display as:

| Structure | Structure/Compound Data | N° of preparations (All Preps \| All Reactions) | Available Data |
|---|---|---|---|
| $Zr^{4+}$ 2 $O=S=O$ | **Chemical Name:** zirconium(IV) sulfate<br>**Reaxys Registry Number:** 14201579<br>**Molecular Formula:** $2O_4S*Zr$<br>**Linear Structure Formula:** $Zr^{(4+)}*2SO_4^{(2-)} = Zr(SO_4)2$<br>**Molecular Weight:** 283.351<br>**InChI Key:** QMBDLUWQOUXKMJ-UHFFFAOYSA-L | 21 prep out of 144 reactions. | Hit Data (14)<br>Druglikeness<br>Identification<br>Physical Data (31)<br>Spectra (8)<br>Use/Application (10) |

1

Synthesize | Hide Details

Find similar

**Chemical Names and Synonyms**

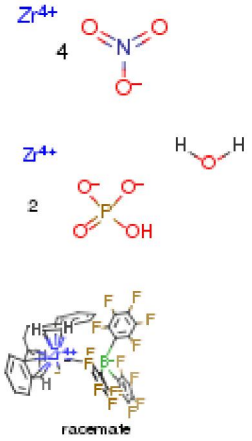
zirconium(IV) sulfate, zirconium (IV) sulphate, zirconium bis-sulphate, zirconium disulfate, zirconium sulphate, zirconium sulfate, sulfated zirconia

**Hit Data**

**Further Information ( 11 Hits out of 11 view all )**

**Use ( 3 Hits out of 10 view all )**

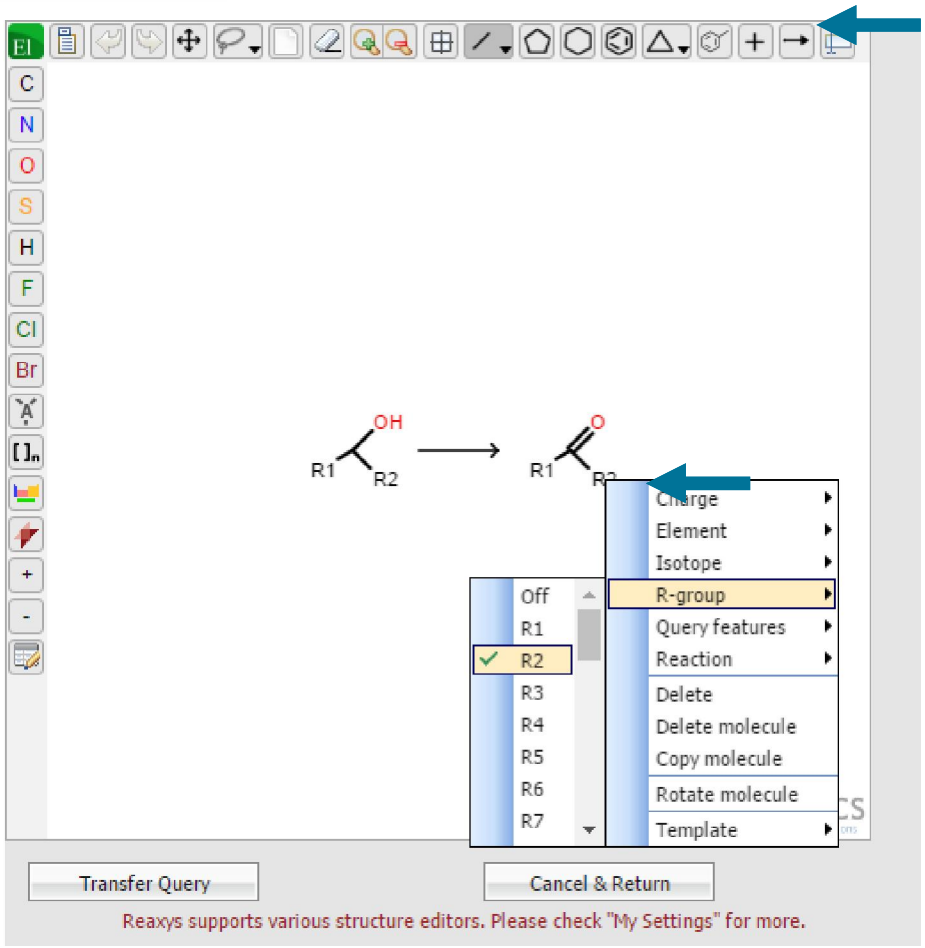
| Use Pattern | Reference |
|---|---|
| Acetalization catalyst | **CLARIANT PRODUKTE (DEUTSCHLAND) GMBH** **Patent:** WO2006/119940 A1, **2006** ;<br>Title/Abstract Full Text Show Details |
| catalyst for deodorize the polyether-modified siloxane composition | **Nishijima, Kazuhiro; Tamura, Seiki; Shoji, Hiroaki** **Patent:** US2006/18935 A1, **2006** ;<br>Title/Abstract Full Text Show Details |
| catalyst | **Nishijima, Kazuhiro; Tamura, Seiki; Shoji, Hiroaki** **Patent:** US2006/18935 A1, **2006** ;<br>Title/Abstract Full Text Show Details |




**Molecular Formula:** $5H*O_{40}PW_{11}Zr$

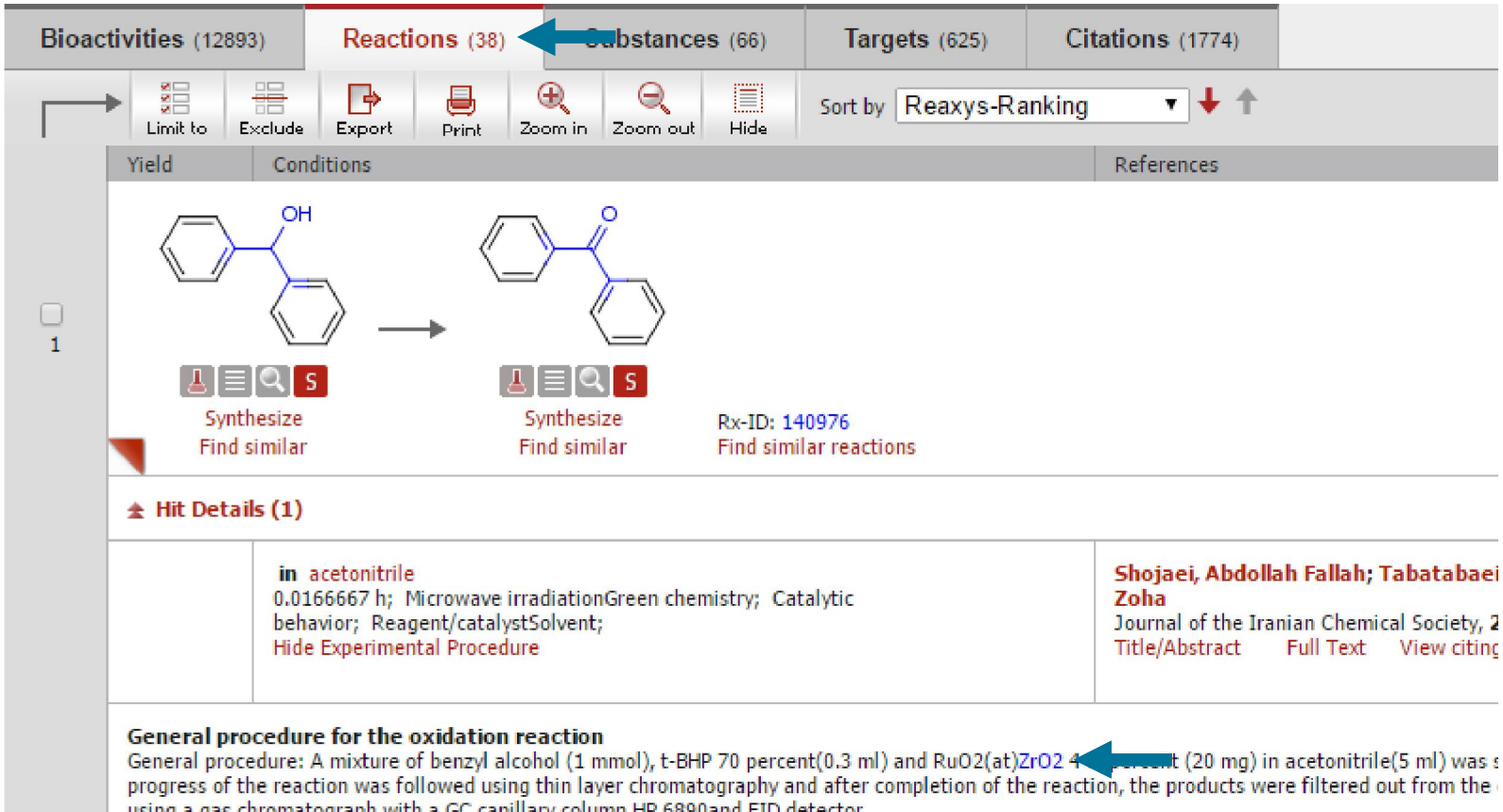
# Конкретная реакция, проходящая на Zr катализаторе.


ПОИСК ИНФОРМАЦИИ В ЗАПИСЯХ СОЕДИНЕНИЙ.
$Zr^{4+}$ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ?




# Конкретная реакция, проходящая на Zr катализаторе.

ПОИСК ИНФОРМАЦИИ В ЗАПИСЯХ СОЕДИНЕНИЙ.
$Zr^{4+}$ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ?



# Поиск литературы по окислению спирта на $ZrO_2$

Поиск Литературы | Контекст

Два основных пути:

- Ask Reaxys
  - Разумная “Google-like” функция обработки естественного языка
  - Нет автоматических форм единственного/множественного числа, английское/американское правописание
  - Часто дает отличные ответы, очень быстро
- Citation Basic Index поле для поиска
  - Позволяет искать по усеченным формам
  - Позволяет соседство и логические операции
  - Предлагает авто-продолжение терминов и фраз
  - Пользователь контролирует поиск

**Усеченная форма**

left-, right-, L-/R- *

**Близость/Логические**

NEXT NEAR AND NOT OR

Parentheses Help!

(A NEAR B) AND (C OR D)

**Синонимы**

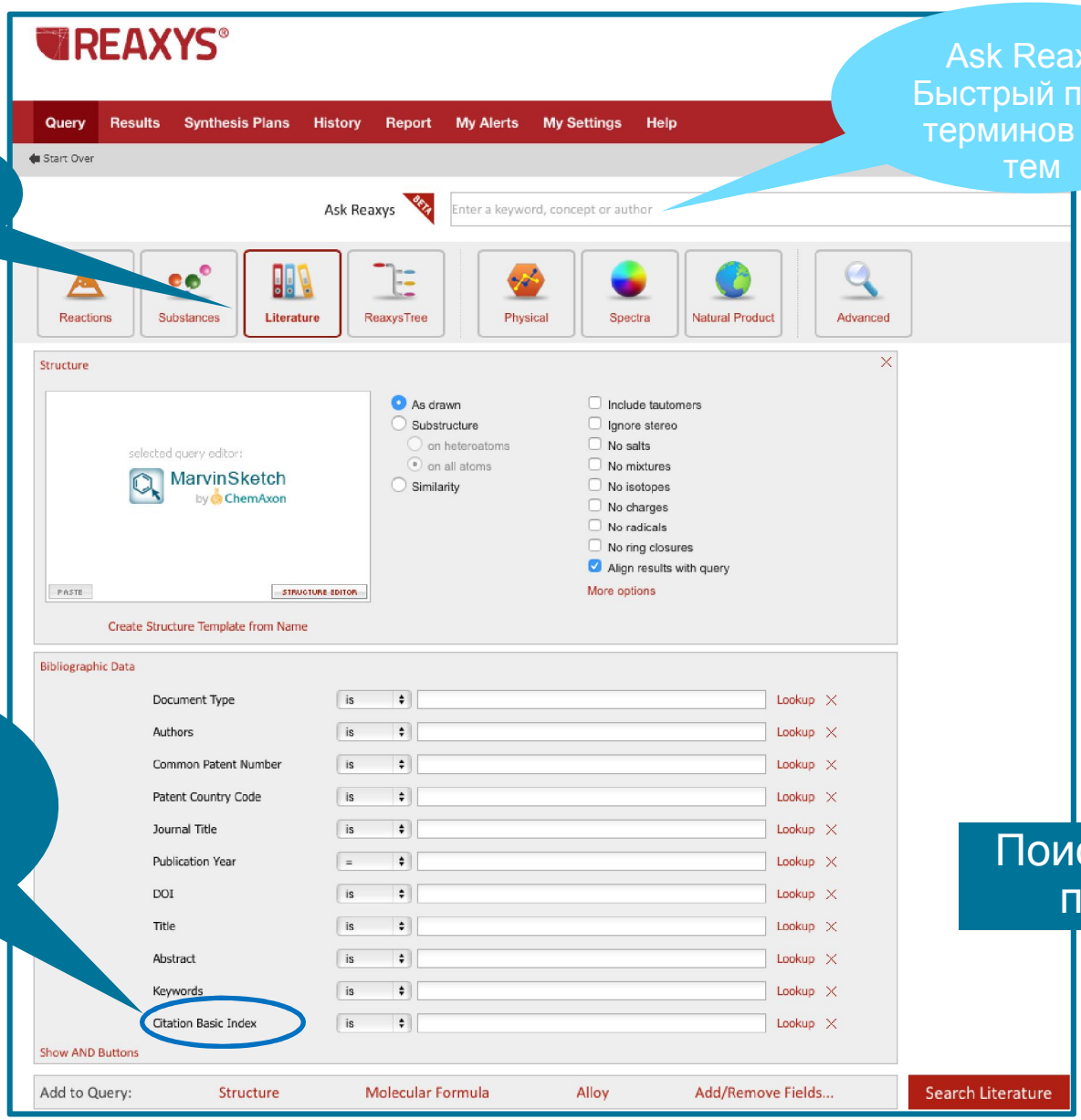
Auto-suggest Help!!

- Ответы
- Пост-обработка (Analysis View, Filter by: )

REAXYS®

HOW YOU THINK HOW YOU WORK

# Где искать литературу в области катализа в Reaxys




1. Выберите Икону Literature

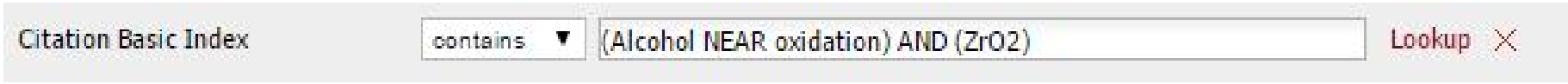
Ask Reaxys
Быстрый поиск терминов или тем

2. Основное поле для поиска терминов и тем

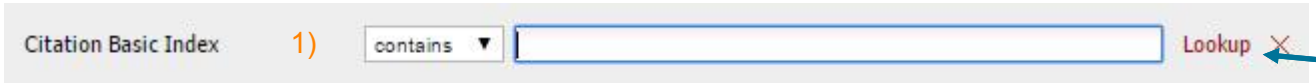
Поисковые поля

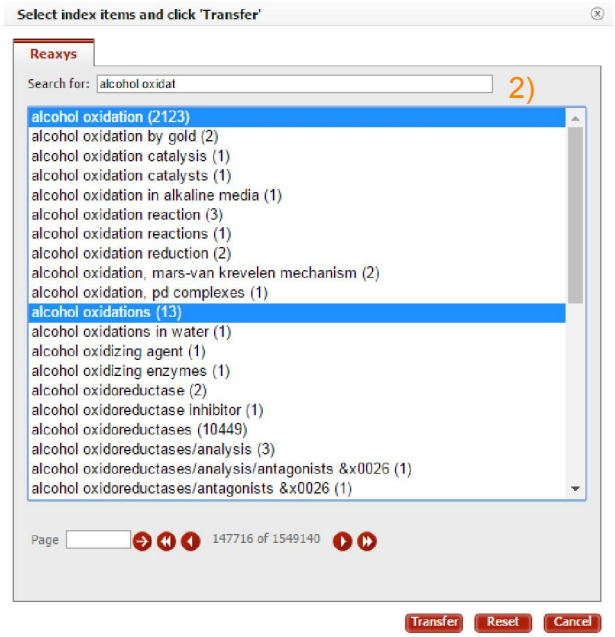
# Поиск информации в области катализа в Reaxys

## Поиск литературы по окислению спирта на ZrO2

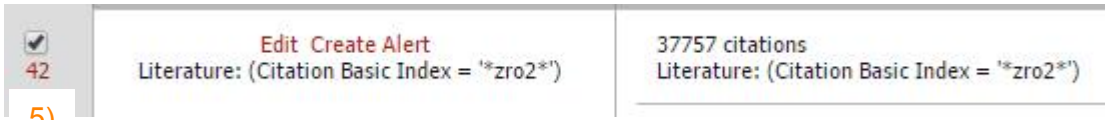



ИЛИ

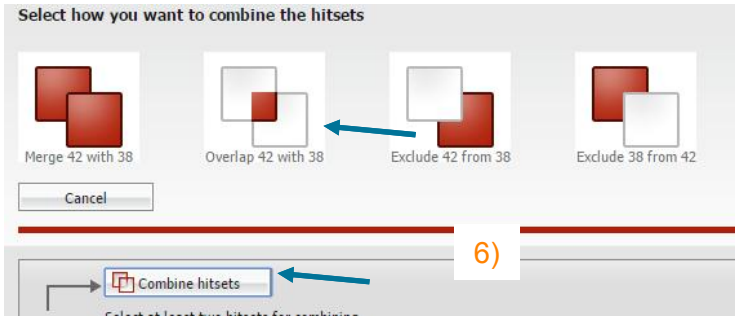




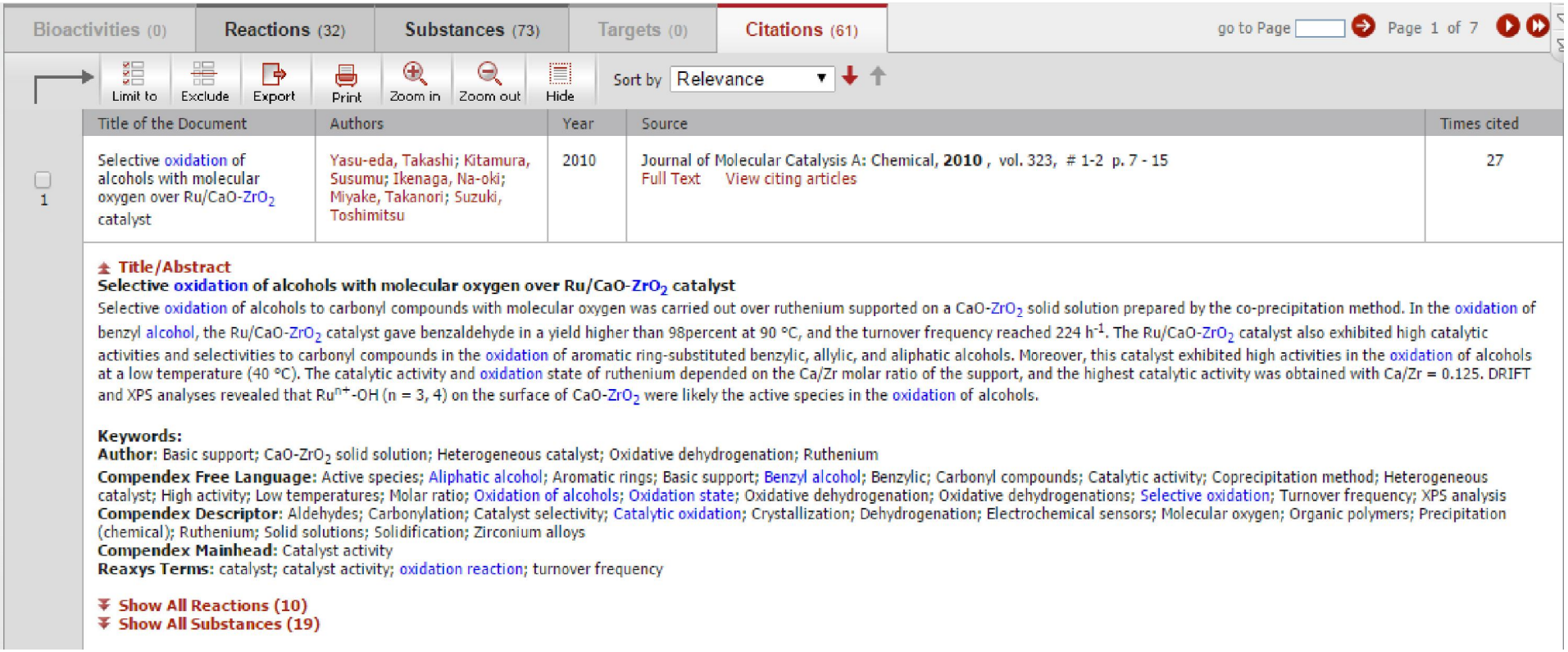




5)

# Поиск информации в области катализа в Reaxys

## Поиск литературы по окислению спирта на ZrO2



Bioactivities (0) | Reactions (32) | Substances (73) | Targets (0) | Citations (61)

go to Page Page 1 of 7

Limit to | Exclude | Export | Print | Zoom in | Zoom out | Hide | Sort by Relevance

| | Title of the Document | Authors | Year | Source | Times cited |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Selective oxidation of alcohols with molecular oxygen over Ru/CaO-$ZrO_2$ catalyst | Yasu-eda, Takashi; Kitamura, Susumu; Ikenaga, Na-oki; Miyake, Takanori; Suzuki, Toshimitsu | 2010 | Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, **2010**, vol. 323, # 1-2 p. 7 - 15<br>Full Text View citing articles | 27 |

**Title/Abstract**

**Selective oxidation of alcohols with molecular oxygen over Ru/CaO-$ZrO_2$ catalyst**

Selective oxidation of alcohols to carbonyl compounds with molecular oxygen was carried out over ruthenium supported on a CaO-$ZrO_2$ solid solution prepared by the co-precipitation method. In the oxidation of benzyl alcohol, the Ru/CaO-$ZrO_2$ catalyst gave benzaldehyde in a yield higher than 98percent at 90 °C, and the turnover frequency reached 224 $h^{-1}$. The Ru/CaO-$ZrO_2$ catalyst also exhibited high catalytic activities and selectivities to carbonyl compounds in the oxidation of aromatic ring-substituted benzylic, allylic, and aliphatic alcohols. Moreover, this catalyst exhibited high activities in the oxidation of alcohols at a low temperature (40 °C). The catalytic activity and oxidation state of ruthenium depended on the Ca/Zr molar ratio of the support, and the highest catalytic activity was obtained with Ca/Zr = 0.125. DRIFT and XPS analyses revealed that $Ru^{n+}$-OH (n = 3, 4) on the surface of CaO-$ZrO_2$ were likely the active species in the oxidation of alcohols.

**Keywords:**

**Author:** Basic support; CaO-$ZrO_2$ solid solution; Heterogeneous catalyst; Oxidative dehydrogenation; Ruthenium

**Compendex Free Language:** Active species; Aliphatic alcohol; Aromatic rings; Basic support; Benzyl alcohol; Benzylic; Carbonyl compounds; Catalytic activity; Coprecipitation method; Heterogeneous catalyst; High activity; Low temperatures; Molar ratio; Oxidation of alcohols; Oxidation state; Oxidative dehydrogenation; Oxidative dehydrogenations; Selective oxidation; Turnover frequency; XPS analysis

**Compendex Descriptor:** Aldehydes; Carbonylation; Catalyst selectivity; Catalytic oxidation; Crystallization; Dehydrogenation; Electrochemical sensors; Molecular oxygen; Organic polymers; Precipitation (chemical); Ruthenium; Solid solutions; Solidification; Zirconium alloys

**Compendex Mainhead:** Catalyst activity

**Reaxys Terms:** catalyst; catalyst activity; oxidation reaction; turnover frequency

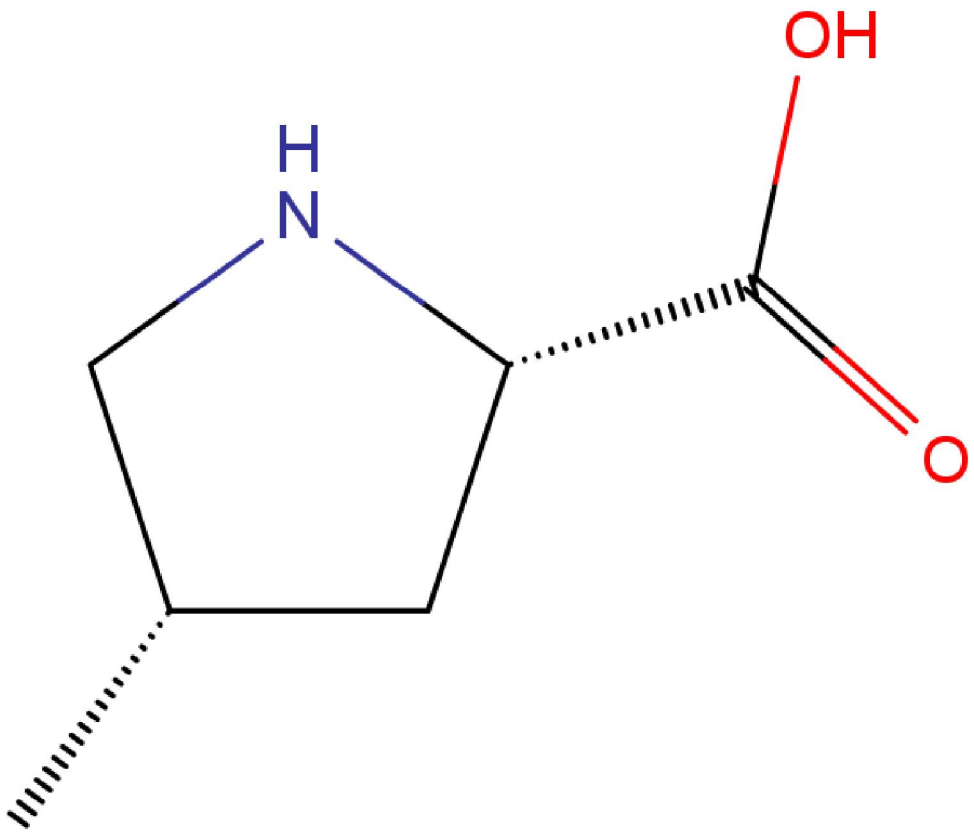
**Show All Reactions (10)**

**Show All Substances (19)**

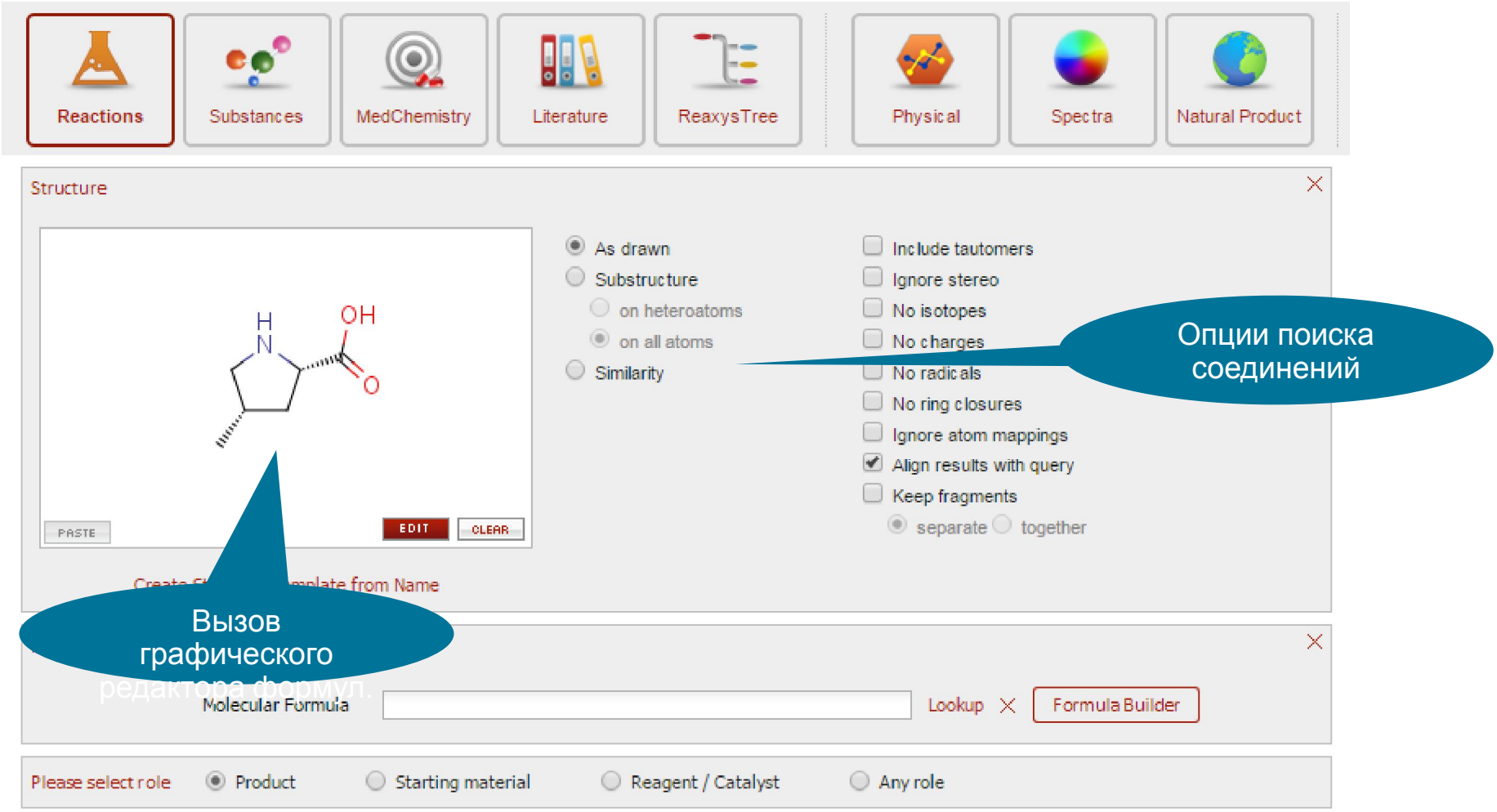
# Разработка методики синтеза химических веществ

С помощью Reaxys можно гораздо эффективнее решать задачу поиск оптимальных условий синтеза неорганического или органического соединения.

Допустим, Вас интересует  методика синтеза данного соединения




# Разработка методики синтеза химических веществ




Вы рисуете его в графическом редакторе формул или пишите название.
Также можно выбрать поиск всех подструктур.
Нажимаете кнопку Search Reaction

# Разработка методики синтеза химических веществ

Reaxys выдает Вам все реакции синтеза заданного соединения сразу с обзором экспериментальных условий, что позволит сэкономить деньги на реактивах, так как Вы сможете выбрать оптимальную методику.

Synthesize
Find similar



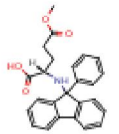
Synthesize
Find similar

Rx-ID: 19858449
Find similar reactions

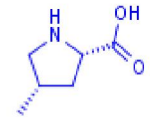
Synthesize - Запускает автоматического построения ретросинтетического

**Multi-step reaction with 6 steps**
1: lead nitrate, $Et_3N$ / $CHCl_3$ / 87 h / Ambient temperature
2: 75 percent / $CH_2Cl_2$ / 16 h / Ambient temperature
3: 1.) potassium hexamethyldisilazide (KHMDS) / 1.) THF, toluene, -78 deg C, 1 h, 2.) THF, toluene, 3 h
4: 24 percent / $LiAlH_4$ / tetrahydrofuran / 4 h / -78 °C
5: 88 percent / $PPh_3$, $CBr_4$, $iPr_2NEt$ / tetrahydrofuran / 1 h / Ambient temperature
6: 90 percent / $CF_3CO_2H$ / $CH_2Cl_2$ / 16 h
View Scheme

**Koskinen, Ari M. P.; Rapoport, Henry**
Journal of Organic Chemistry, **1989** , vol. 54, # 8 p. 1859 - 1866
Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details



Synthesize
Find similar



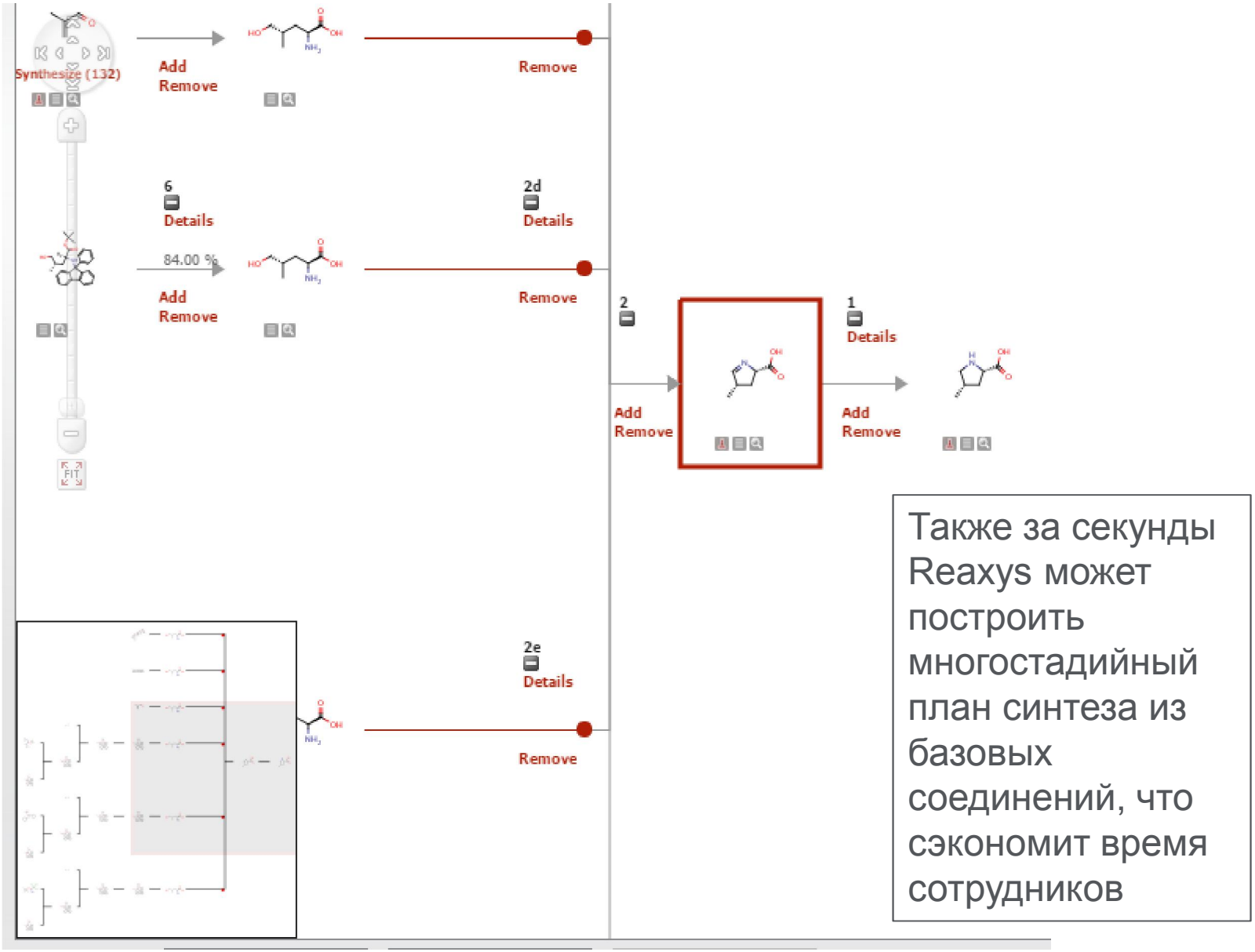
Synthesize
Find similar

Rx-ID: 19868434
Find similar reactions

**Multi-step reaction with 5 steps**
1: 75 percent / $CH_2Cl_2$ / 16 h / Ambient temperature
2: 1.) potassium hexamethyldisilazide (KHMDS) / 1.) THF, toluene, -78 deg C, 1 h, 2.) THF, toluene, 3 h
3: 24 percent / $LiAlH_4$ / tetrahydrofuran / 4 h / -78 °C
4: 88 percent / $PPh_3$, $CBr_4$, $iPr_2NEt$ / tetrahydrofuran / 1 h / Ambient temperature
5: 90 percent / $CF_3CO_2H$ / $CH_2Cl_2$ / 16 h
View Scheme

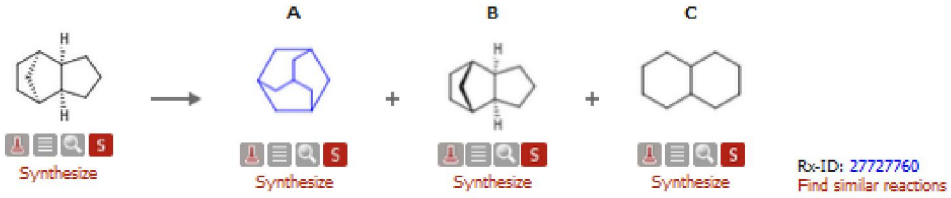
**Koskinen, Ari M. P.; Rapoport, Henry**
Journal of Organic Chemistry, **1989** , vol. 54, # 8 p. 1859 - 1866
Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

# Разработка методики синтеза химических веществ




Также за секунды Reaxys может построить многостадийный план синтеза из базовых соединений, что сэкономит время сотрудников

# Просмотр экспериментальных условий




With $AlCl_3$, aluminium chloride in dichloromethane
Hide Experimental Procedure

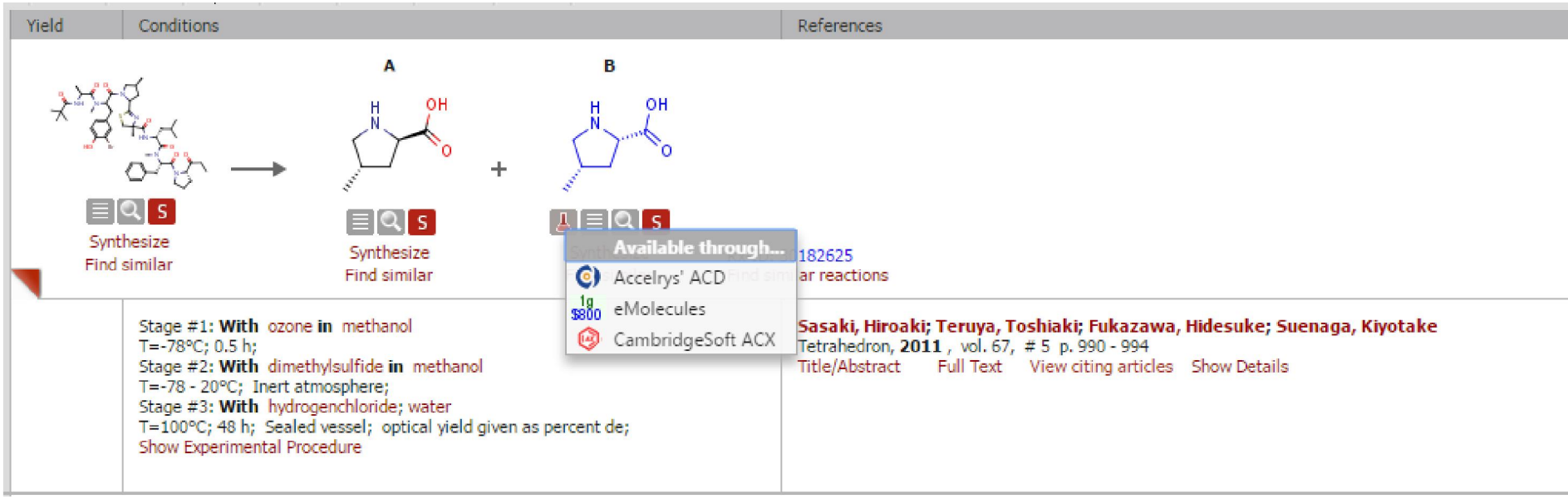
Tsao, Ying-Yen; Liao, Chyuan-Neng; Chen, Chi-Yu; Lin, Chin-Ming; Wei, Kuo-Min
**Patent:** US2008/249341 A1, **2008** ;
**Location in patent:** Page/Page column 8 ;

Title/Abstract Full Text Show Details

**5:**
EXAMPLE 5 is the comparative example of EXAMPLE 4.65 g of endo-THDCPD crystals from the same source of EXAMPLE 4 are placed in a 250 ml of glass bottle, followed by adding 40 g of dichloromethane thereto to dissolve these crystals, purging with dry nitrogen and stirring in the ice bath. Subsequently, 10 g of $AlCl_3$ is added to the dichloromethane solution of endo-THDCPD, followed by stirring for 2 hours in the ice bath, and continuously stirring for 16 hours at room temperature. The resulting mixture is washed with 100 ml of saturated KCl solution, followed by adding it to a separatory funnel, shaking to allow to separate into two layers and leaving the upper layer in the separatory funnel. The above saturated KCl solution washing procedure is repeated for three times. Subsequently, the mixture washed with the saturated KCl solution is washed with 100 ml of deionized water, followed by adding it to a separatory funnel, shaking to allow to separate into two layers and leaving the lower layer in the separatory funnel. The above deionized water washing procedure is repeated for three times. Subsequently, the lower layer is distilled to remove dichloromethane and water. The bottoms is collected, and determined by chemical analysis. The chemical analysis shows that the bottoms is composed of 85.7 wt percent of exo-THDCPD, 0.5 wt percent of endo-THDCPD, 1.2 wt percent of Decalin, 5.8 wt percent of adamantane, 1.3 wt percent of exo-THMDCPD, and the other two-stage hydrotreated and saturated $C_{11}^+$ derivatives, namely CPD and/or MCPD diners. The bottoms has a volumetric heating value of 39.17 MJ/L, a density of 0.9339 at 15° C., and a viscosity of 3.52 cSt at 20° C. and more than 26.7 cSt at -20° C. In this example, the isomerization reaction is violent because isomerization reaction time is too long so that portions of exo-THDCPD is further isomerized to adamantane which will increase the viscosity of the high energy fuel. Under such a violent reaction conditions, a small amount of THDCPD will be ring opened by hydrogen to give decalin (the side product) with relatively less volumetric heating value as well as density. Therefore, the isomerization reaction of this example is not suitable for preparing the high energy fuels because the freezing point of the isomerization product is too high.

В Reaxys приведены экспериментальные методики проведения реакция из более чем 280 химических журналов, что позволяет выбрать оптимальную процедуру химического синтеза. Тем самым экономя деньги на реактивы и время для выхода на стадию доклинических исследований

# Проверка коммерческой доступности

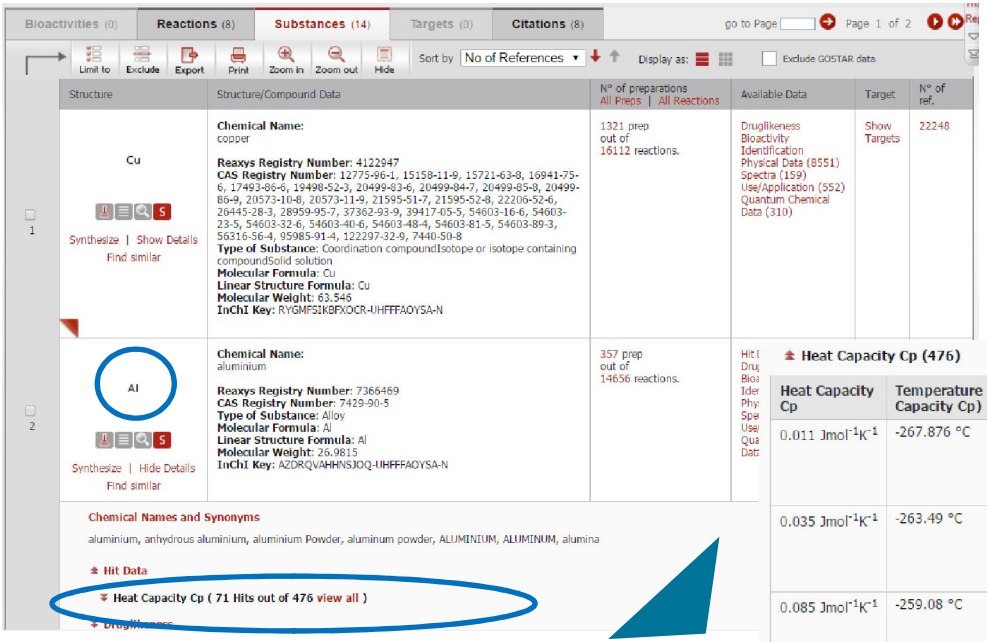



Чтобы разработать наиболее экономически эффективную методику синтеза в Reaxys есть информация о стоимость молекул

# Теплопроводность Алюминия при различных температурах

**Ask Reaxys** | Heat Capacity Cp of Aluminium | **Search**

Smart searching with Ask Reaxys. See examples >

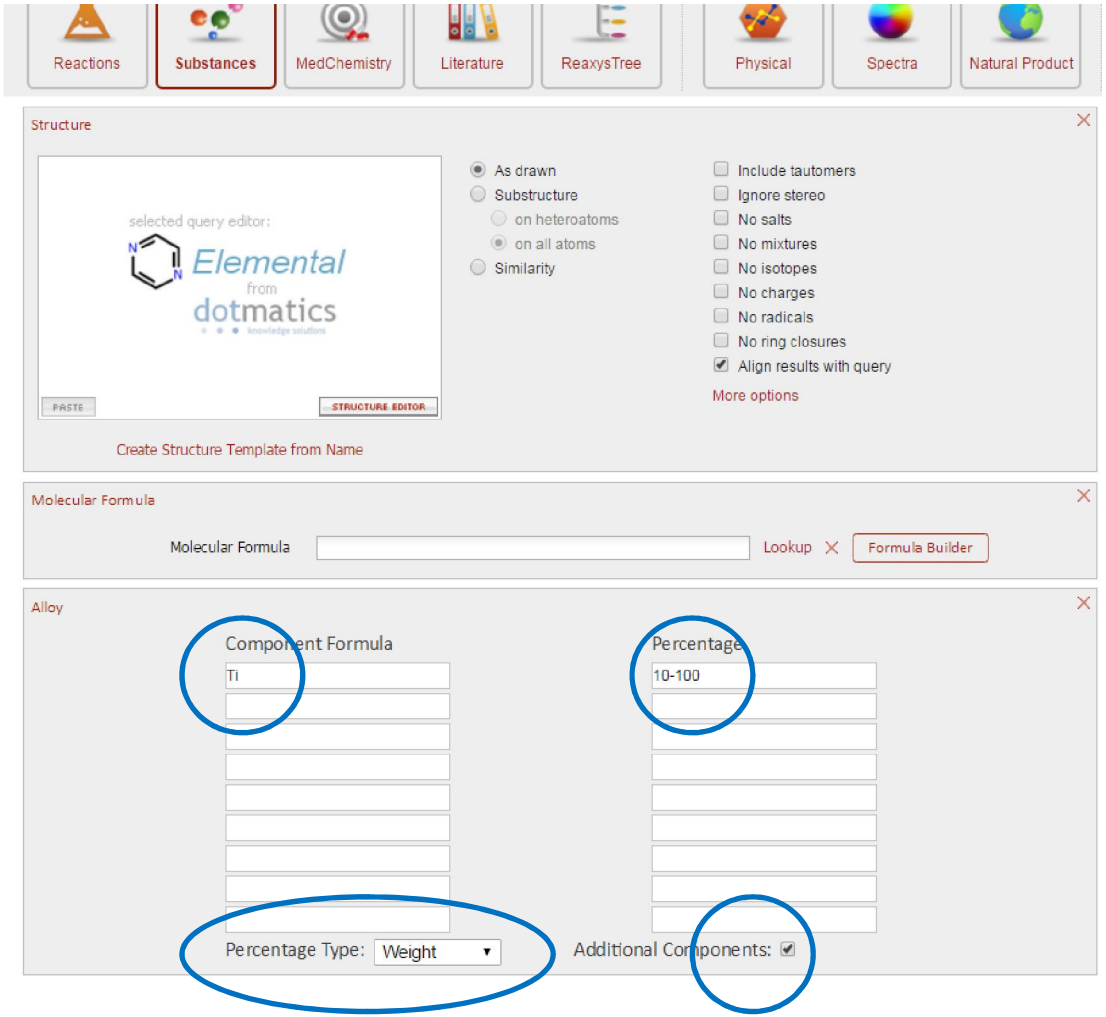



**Heat Capacity Cp (476)**

| Heat Capacity Cp | Temperature (Heat Capacity Cp) | Comment (Heat Capacity Cp) | Reference |
|---|---|---|---|
| 0.011 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -267.876 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** Thermochimica Acta, **2011** , vol. 526, # 1-2 p. 90 - 98 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| 0.035 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -263.49 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** Thermochimica Acta, **2011** , vol. 526, # 1-2 p. 90 - 98 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| 0.085 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -259.08 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** Thermochimica Acta, **2011** , vol. 526, # 1-2 p. 90 - 98 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| 0.181 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -254.71 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** Thermochimica Acta, **2011** , vol. 526, # 1-2 p. 90 - 98 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| 0.341 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -250.34 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** Thermochimica Acta, **2011** , vol. 526, # 1-2 p. 90 - 98 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| 0.602 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -246.04 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** Thermochimica Acta, **2011** , vol. 526, # 1-2 p. 90 - 98 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| 0.992 $Jmol^{-1}K^{-1}$ | -241.67 °C | 1 atm Solid | **Morishita, Masao; Yamamoto, Hiroaki; Kodera, Masahiro; Ikeda, Keiichiro; Miura, Seiji; Yamada, Yoshihiro** |

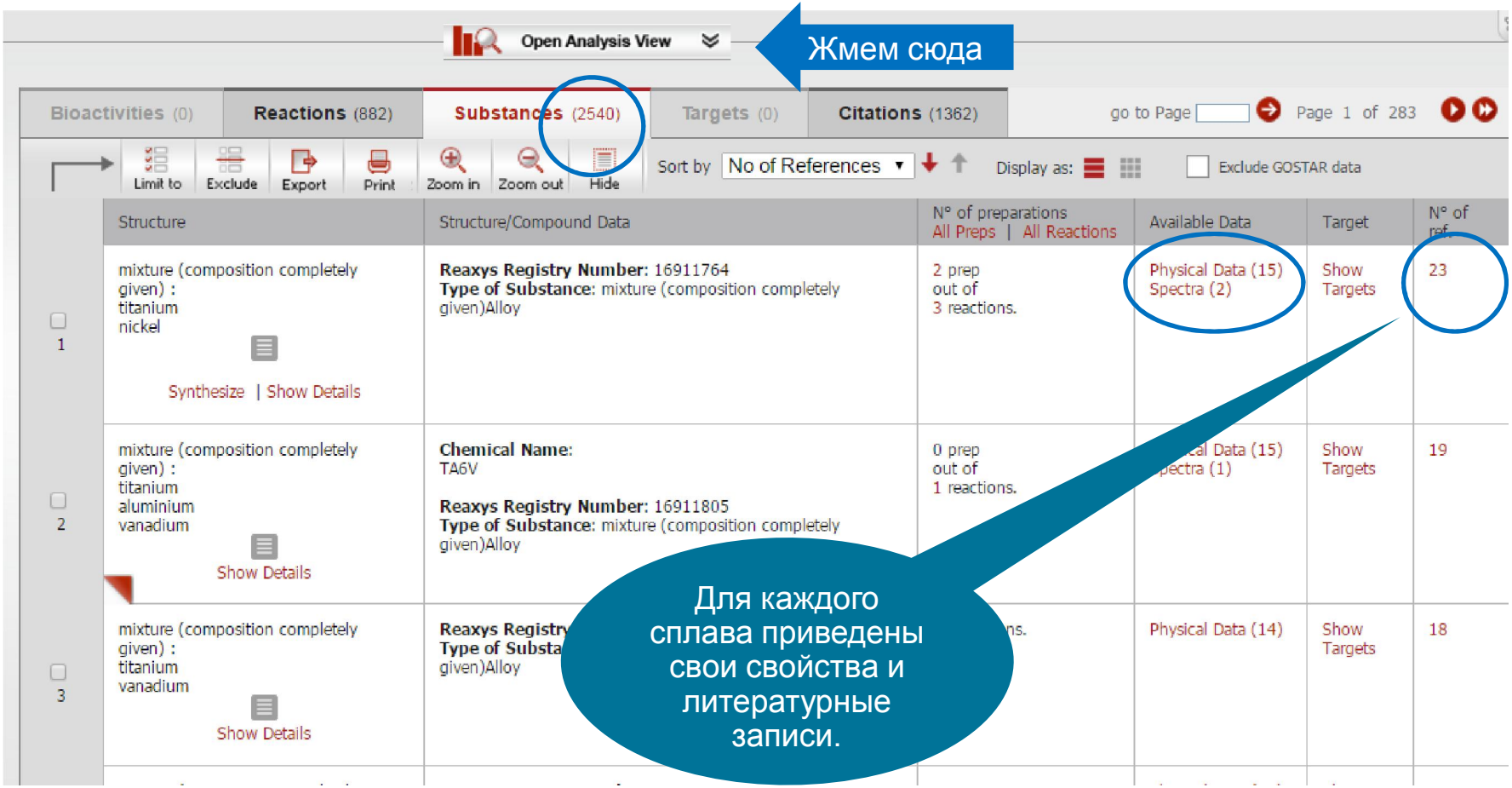
REAXYS®
HOW YOU THINK HOW YOU WORK

# Поиск сплавов титана с температурой плавления 1320 – 1370 °C, Содержащих не менее 10% Ti

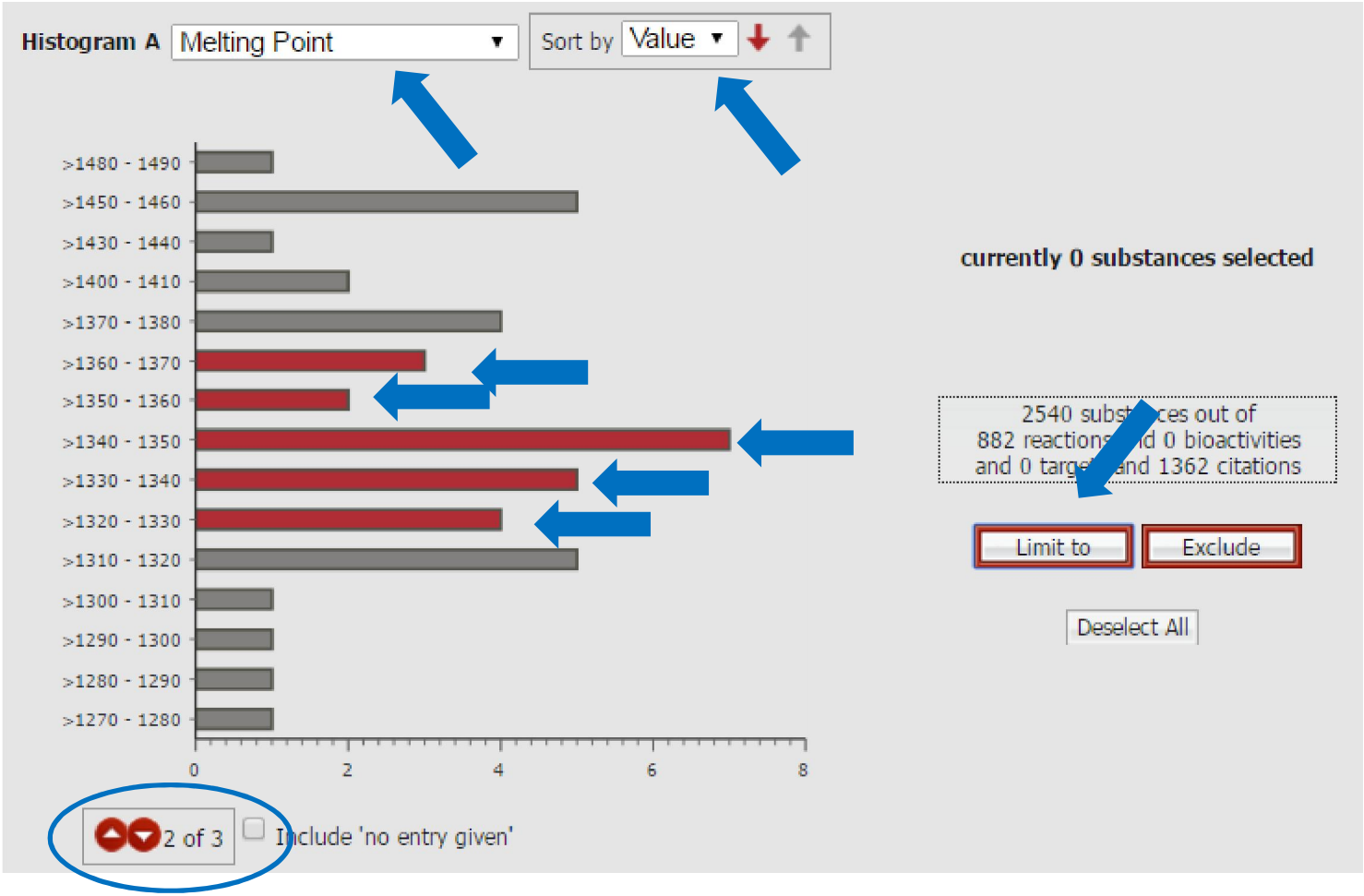


# Поиск информации в области Наук о материалах в Reaxys

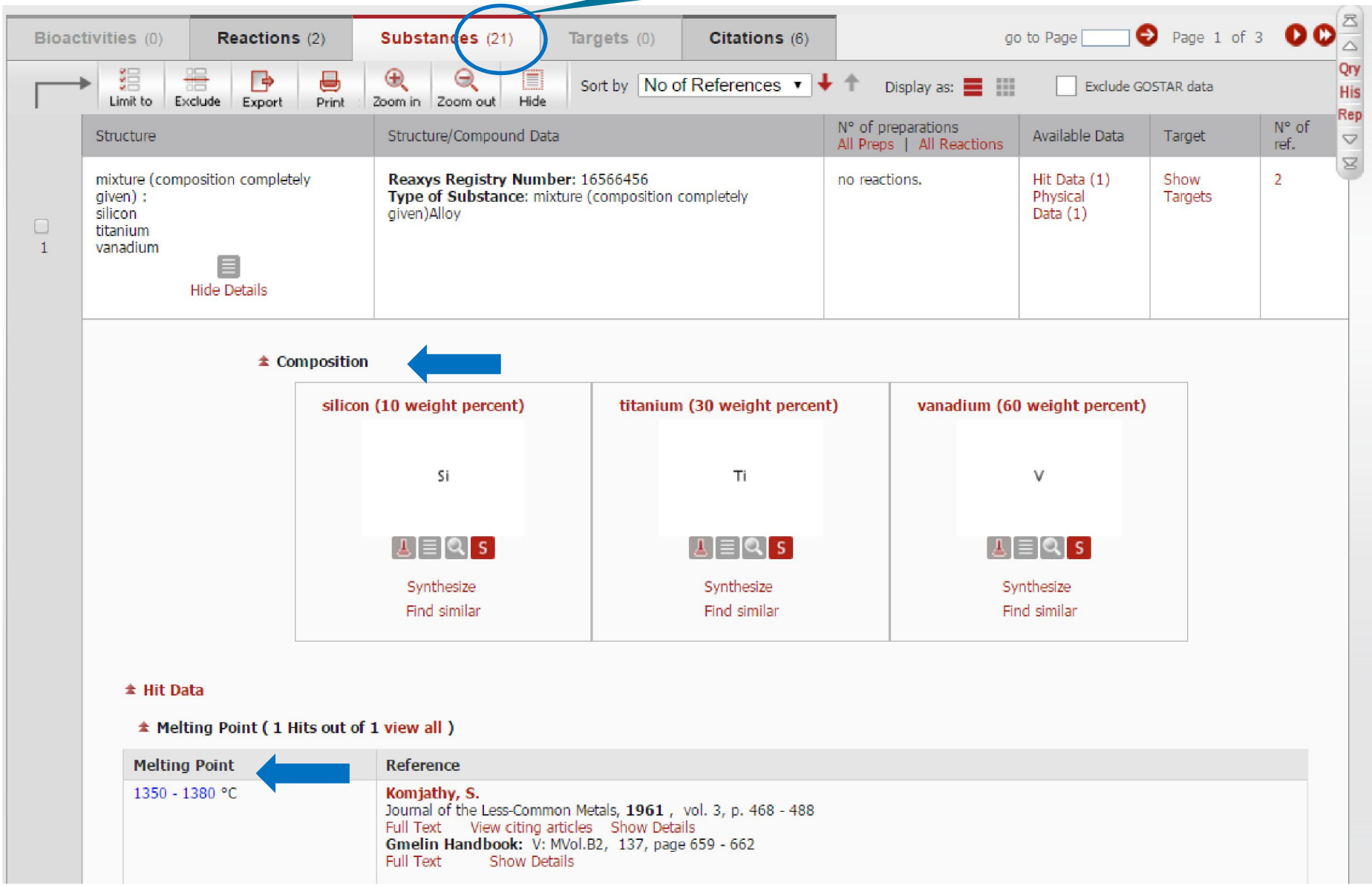
## Поиск сплавов титана с температурой плавления 1320 – 1370 °C, Содержащие не менее 10% Ti



# Поиск сплавов титана с температурой плавления 1320 – 1370 °C, Содержащие не менее 10% Ti



Мы нашли 21 соединение титана с заданной температурой плавления

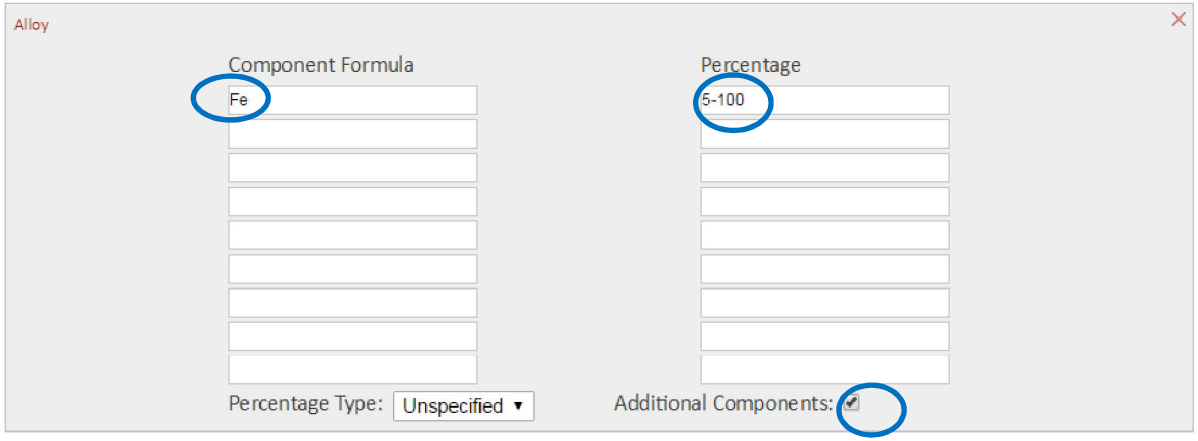


# Поиск сплавов любых железа с магнитными свойствами


1.

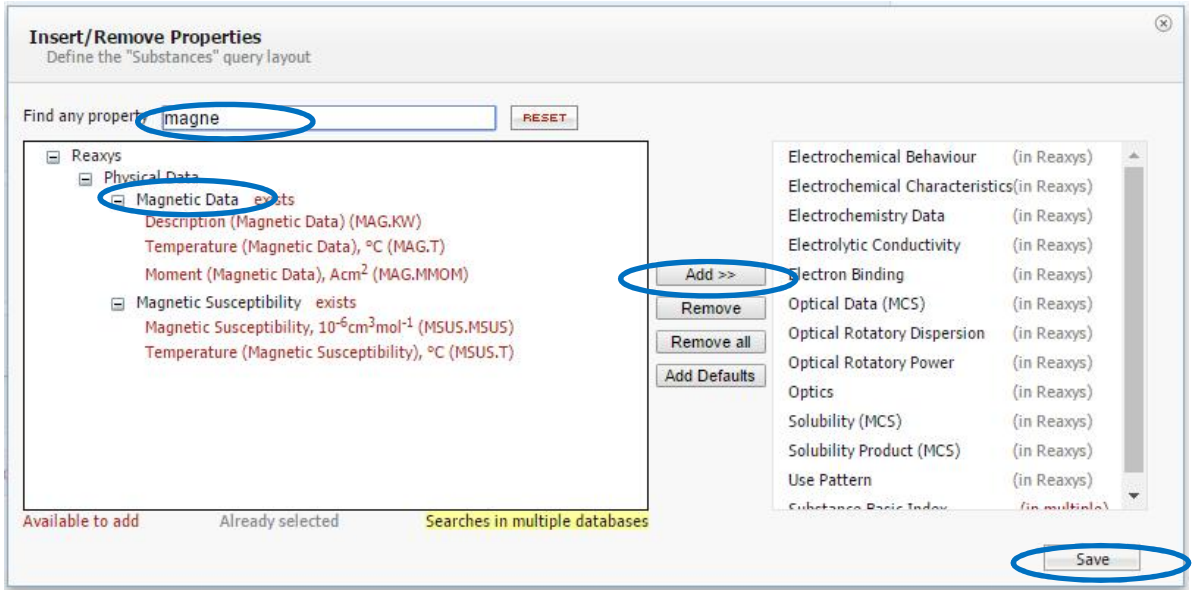

В Reaxys есть возможность поиска по комбинации из 400 полей. Для поиска сплавов с магнитными свойствами необходимо воспользоваться полями Alloy и Magnetic data. Инструкция для вывода этих полей приведена на слайдах

2.




3.


4.



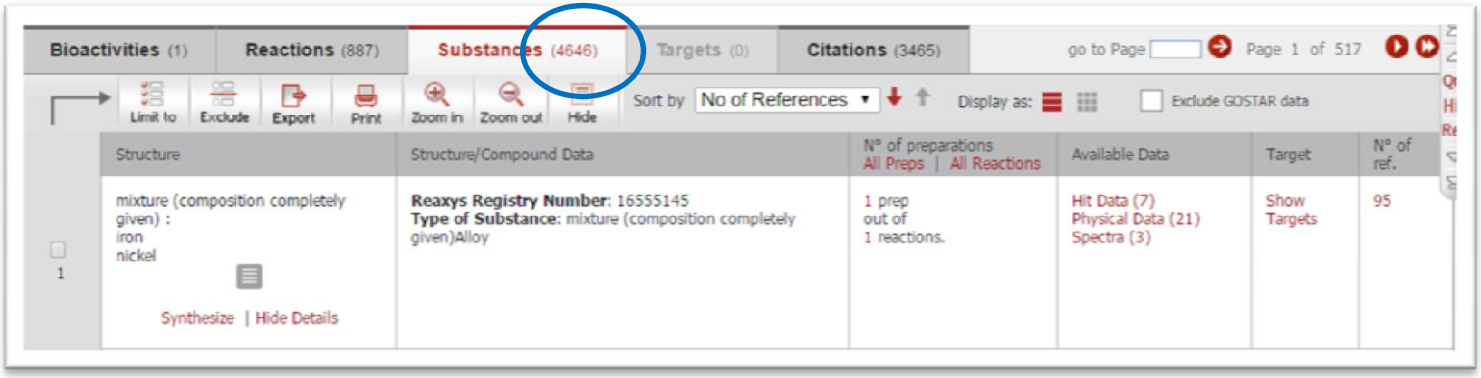
# Поиск сплавов железа с магнитными свойствами

5.


6. Search Substances

# Поиск информации в области Наук о материалах в Reaxys

## Сплавы железа с магнитными свойствами



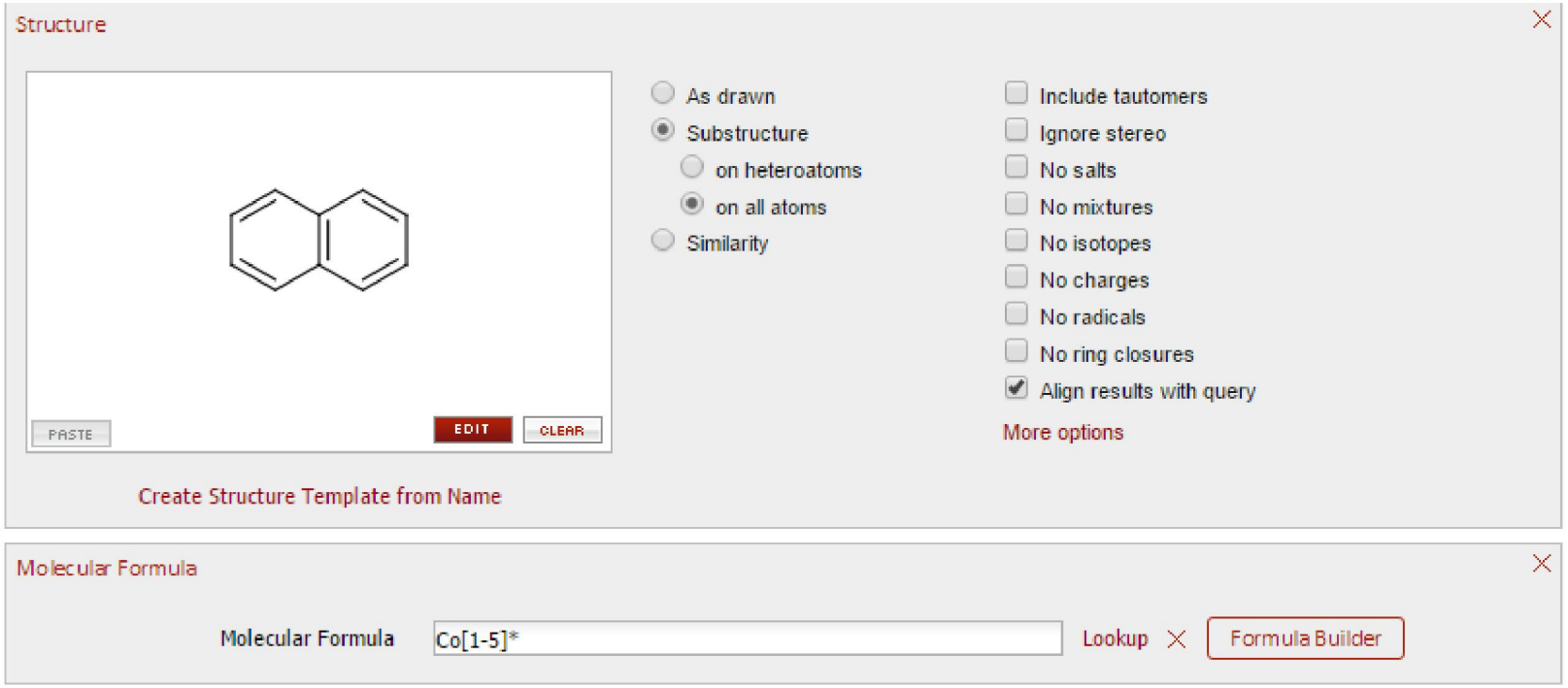

**Magnetic Data ( 7 Hits out of 7 view all )**

| Description (Magnetic Data) | Temperature (Magnetic Data) | Moment (Magnetic Data) | Reference |
|---|---|---|---|
| Ferromagnetic | | | **Ali; Mahmoud; Farid; Atef**<br>Physica Status Solidi (A) Applied Research, **1998** , vol. 165, # 2 p. 377 - 387<br>Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| Magnetostriction | | | **Auwers, O. v.**<br>Wiss. Veroeffentl. Siemens-Werke, **1936** , vol. 15, # 2 p. 117 - 117<br>Full Text Show Details |
| Magnetization diagram | | | **Dahl, O.; Pfaffenberger, J.**<br>Metallwirtsch., Metallwiss., Metalltech., **1934** , vol. 13, p. 528 - 528<br>Full Text Show Details<br>**Dahl, O.; Pfaffenberger, J.**<br>Z. Tech. Phys., **1934** , vol. 15, p. 103 - 103<br>Full Text Show Details |

| | | |
|---|---|---|
| Curie temperature | 562 °C | |
| Magnetic moment | | 1.5469E-19 $Acm^2$ |

# Найдем в Reaxys органометаллические соединения кобальта с нафталиновым фрагментом.

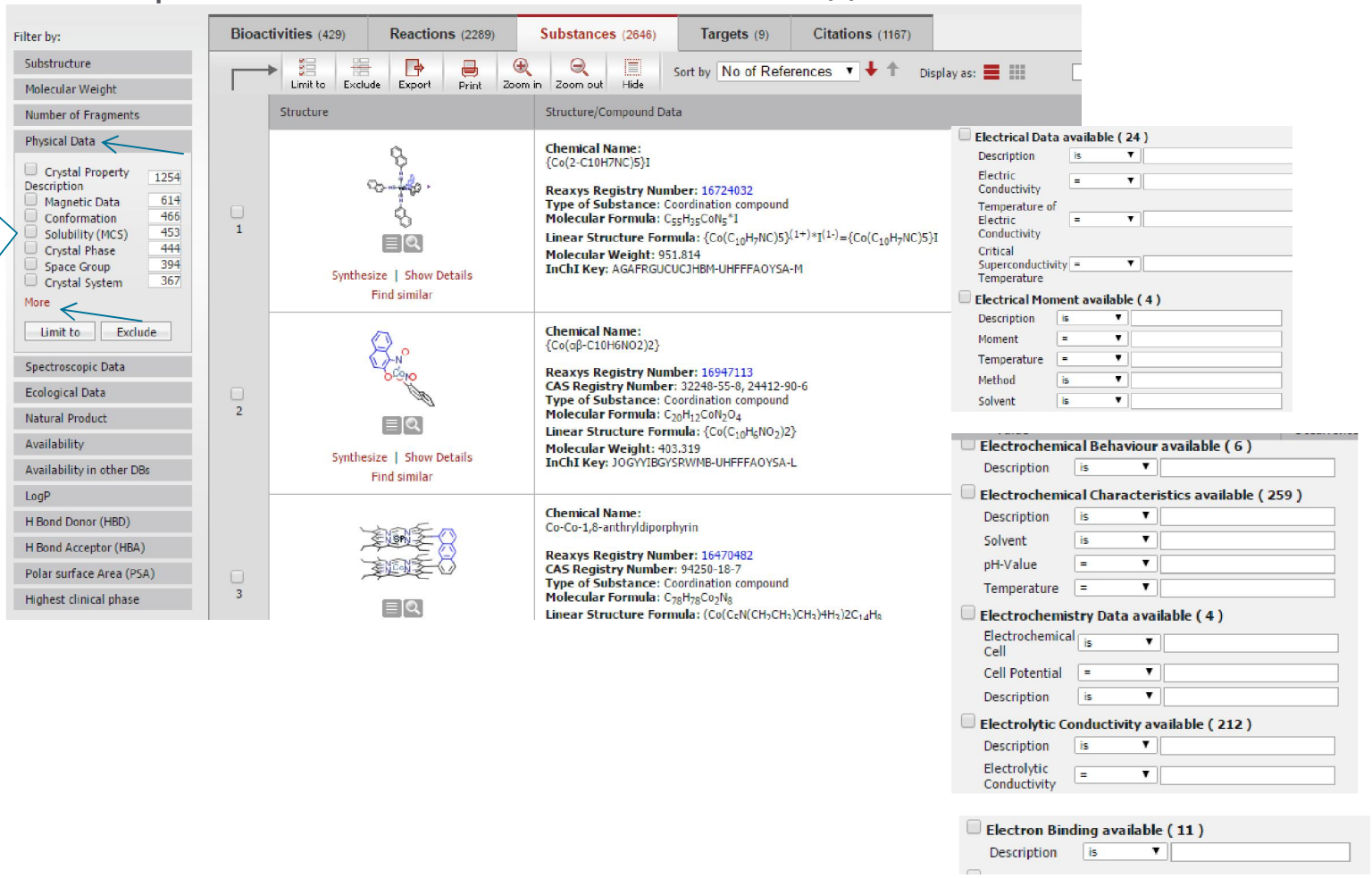
Какие соединения известны?



# За один запрос в Reaxys найдено 2646 соединений кобальта с нафталиновым фрагментом

Что известно о электрохимических свойствам этих соединений?

Все найденные соединения в Reaxys можно отфильтровать. И оставить только те, по которым известны электрохимические свойства

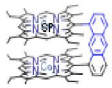


# За один запрос в Reaxys найдено 2646 соединений кобальта с нафталиновым фрагментом

Что известно о электрохимических характеристиках этих соединений?

ivities (16) | Reactions (156) | Substances (259) | Targets (0) | Citations (108) | go to Page | Page 1 of 29

Limit to | Exclude | Export | Print | Zoom in | Zoom out | Hide | Sort by No of References | Display as: | Exclude GOSTAR data

| Structure | Structure/Compound Data | N° of preparations<br>All Preps \| All Reactions | Available Data | Target | N° of re |
|---|---|---|---|---|---|
|  <br>Synthesize \| Hide Details<br>Find similar | **Chemical Name:**<br>Co-Co-1,8-anthryldiporphyrin<br><br>**Reaxys Registry Number:** 16470482<br>**CAS Registry Number:** 94250-18-7<br>**Type of Substance:** Coordination compound<br>**Molecular Formula:** $C_{78}H_{78}Co_2N_8$<br>**Linear Structure Formula:** $(Co(C_5N(CH_2CH_3)(CH_3)H_3)2C_{14}H_8$<br>**Molecular Weight:** 1245.52<br>**InChI Key:** QFSWQSYTBKLGAM-NBIXCZRWSA-N | 1 prep<br>out of<br>5 reactions. | Hit Data (4)<br>Druglikeness<br>Identification<br>Physical Data (7)<br>Spectra (2) | Show Targets | 7 |

**Chemical Names and Synonyms**

Co-Co-1,8-anthryldiporphyrin

**Hit Data**

**Electrochemical Characteristics ( 4 Hits out of 4 view all )**

| Description (Electrochemical Characteristics) | Solvent (Electrochemical Characteristics) | Product XRN (Electrochemical Characteristics) | Product | Comment (Electrochemical Characteristics) | Reference |
|---|---|---|---|---|---|
| Electrochemical characteristics given | | | | | Chen, Ping; Lau, Hoyi; Habermeyer, Benoit; Gros, Claude P.; Barbe, Jean-Michel; Kadish, Karl M.<br>Journal of Porphyrins and Phthalocyanines, **2011** , vol. 15, # 5-6 p. 467 - 479<br>Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| cyclovoltammetry | benzonitrile | 16706155 | [Co(C32H35N4)]2C14H8O2(1+) | transmitted electrons: 1; ferrocene/ferrocenium; 0.2 M Bu4NPF6; -0.04 V | Mest, Yves Le; Inisan, Claude; Laouenan, Andre; L'Her, Maurice; Talarmin, Jean; Khalifa, Moulay El; Saillard, Jean-Yves<br>Journal of the American Chemical Society, **1997** , vol. 119, # 26 p. 6095 - 6106<br>Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| cyclovoltammetry | benzonitrile | 16706157 | [Co(C20H3N4(CH3)4(C2H5)4)]2(C14H8)(2+) | transmitted electrons: 2; ferrocene/ferrocenium; 0.2 M Bu4NPF6; 0.05 V | Le Mest; L'Her; Saillard<br>Inorganica Chimica Acta, **1996** , vol. 248, # 2 p. 181 - 191<br>Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |
| cyclovoltammetry | methylene chloride=methylene dichloride | | | saturated calomel electrode (SCE); potential diagram; 0.1 M (C4H9)4NClO4 | Liu, Hsue-Yang; Abdalmuhdi, I.; Chang, C. K.; Anson, Fred C.<br>Journal of Physical Chemistry, **1985** , vol. 89, # 4 p. 665 - 670<br>Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details |