



# Reaxys 快速使用手册

支持化学相关领域科技人员的工作流程  
帮助您提高工作效率和科研产出

[reaxys.com](http://reaxys.com)





Reaxys 应用程序版本: 2.13106.8.1

MarvinSketch 版本 5.8.2

---

# 目录

## 简介

简介 .....	1-2
搜索提示.....	3
Reaxys 图表.....	4
访问 Reaxys.....	5

## 结构查询

按照名称生成结构.....	6
结构编辑器.....	7
MarvinSketch 图.....	8
MarvinSketch 绘图提示.....	9-10
管理置换.....	11
查看搜索结果.....	12
原子列表.....	13
链节点.....	14
查看搜索结果 – 筛选.....	15
立体化学.....	16
Reaxys 通用符号 .....	17
位置变异键.....	18
查看搜索结果 – PubChem.....	19
键型/键拓扑.....	20
查看搜索结果 – 保存和导出.....	21
使用、创建和保存模板.....	22

## 反应查询

简介.....	23
原子映射.....	24

反应中心功能.....	25
构型的转化/保持 .....	26
合并反应物或产品 .....	27
<b>合成计划的制定</b>	
合成计划的设计 .....	28-32
合成计划的保存和导出 .....	33-34
合成计划制定技巧 .....	35
<b>实践练习</b>	
练习列表 .....	36-37
双环羧酸 .....	38-39
波利维 .....	40-41
甲酯转至碳酰氯.....	42-43
非反应性官能团.....	44-45
邻苯二甲酰亚胺合成 .....	46-47
<b>快速参考指南</b>	
原子查询功能 .....	48
化学键查询功能 .....	49
反应查询功能 .....	50

# 简介

## Reaxys:

作为 Elsevier 的产品之一，Reaxys 是一种化学家工作流程完美解决方案工具。其完全摆脱了客户端的束缚，是一款完全基于网页形式的检索平台。

- Reaxys 拥有全球最大的化学反应和物质理化性质库，涵盖有超过 3100 万的反应词条，超过 2200 万的物质及性质词条和多于 440 万的引文词条。
- Reaxys 的所有反应和物质理化性质数据均有相应的实验支持，保证了其真实性和可信性。
- Reaxys 具有友好的互交界面和高效的检索功能工具。
- Reaxys 中的 Synthesis Planer 作为一种全新的，基于化学工作流程考虑的合成路线设计工具被提出，兼之配合有大量的条件限制和二次检索功能，使 Reaxys 成为获得化学信息的利器。
- Reaxys 所涵盖的化学反应已经相当全面，而且有较高的质量，特别在成熟的经典反应方面，适合工艺的放大和优化，节省了工艺改进中的试剂和原料的成本，并为工艺放大和优化提供了有力的保障。
- Reaxys 可以帮助优化工作流程，提高每个员工的工作效率，节约人力资源成本，从而获得更高的研发效率。

## 内容

Reaxys 中的化合物数据、结构和反应摘自化学领域专家的期刊文献和专利文献。为了确保内容可靠，仅摘录了具有化学结构和测量事实等可信参考的小分子信息。Reaxys 的摘录资料历史可追溯到 1771 年，并一直延续到当今前沿研究，涵盖了最重要的化学相关文献和专利资料。

**文献中的信息** - Reaxys 中的 400 本期刊都依据严格的相关标准进行过筛选，且针对期刊重点不断演变、扩展和中止出版等因素不断对其进行监控。部分期刊名称有 Advanced Synthesis and Catalysis、Journal of American Chemical Society、Journal of Organometallic Chemistry、Synlett 和 Tetrahedron。

**专利中的信息 – 专利信息**历史可追溯到19 世纪初至 1980 年左右。从这些专利中摘取的信息包括物质和反应数据以及专利引用信息（专利权人、作者、专利号、专利年份和国家/地区代码）。

**详细专利信息**包括从 1976 年左右至今的专利。这些专利是在美国、欧洲以及世界专利局注册的英文专利。除了上述段落提及的信息类型，所有专利族成员（索引专利的所有专利号和申请号）、Markush 物质显示、预测性物质和专利分类代码也包括在内。

有关 Reaxys 所含期刊和专利的完整列表，请查看[www.Reaxys.com/info](http://www.Reaxys.com/info)。

## 与其他数据库相集成

Reaxys 与其他化学信息来源相集成。

**PubChem\*** – 当您在 Reaxys 中搜索物质时，您同时也在 PubChem 中进行搜索。PubChem 是一个存储有机小分子化学结构及其生物活性信息的免费使用数据库。搜索结果将在结果页面上的单独选项卡中显示。

**供应商信息\*** – 可购买的物质下将显示红色烧瓶图标。单击相应链接将转到以下任何一个或全部供应商数据库：

1. **eMolecules**，包含价格和是否有货的免费在线数据库（当您在 Reaxys 中搜索结构时，将自动搜索该数据库，且搜索结果将在结果页面上的单独选项卡中显示。）
2. **Accelrys ACD**，需要另外获得许可
3. **CambridgeSoft ACX**，需要另外获得许可。

**安全\*** – 单击物质下的烧瓶图标，也能转到两个 Elsevier 数据库：

**Hazmat Navigator** 和 **PharmaPendium**。两个数据库都需要单独的许可。

**PharmaPendium 批准药品** – Reaxys 的化合物组已经与 PharmaPendium 化合物进行了匹配，从而使 Reaxys 用户可以筛选批准药品的给定检索结果组，并轻松链接至 PharmaPendium。PharmaPendium 中提供了药品安全信息和美国食品及药物管理局 (FDA) 批准文件，可供用户进行进一步分析和审核。此功能对药物学家和药品开发团队十分有用，因为它提供了在典型的化学信息检索工作流程中访问相关药品信息的便捷方法，从而使用户能够同时检索出最为重要的信息资源。

**Hazmat Navigator** – 基于 Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards 的化学安全数据库，可帮助化学家和安全人员快速访问详实关键的化学危险物质信息。

**书目链接** – Full text 链接，将转到出版商或专利网站，以便下载完整文本。联系 Reaxys 客户支持团队，可将这些链接配置到您的书目链接系统（有关联系信息，请参见本文档的尾页）。  
**查看引用文章 (View citing Articles)** 链接可创建引用文章的列表，并包含转到科技文献数据库 Scopus 和 Full text 的链接。

**电子笔记本** – Reaxys 目前链接至 IDBS、Perkin Elmer 和 Accelrys 电子笔记本。

**内部数据库** – 要获得此类集成的相关信息，请联系 Elsevier 客户经理或客户支持团队（有关联系信息，请参见本文档的尾页）。

\* 如果您不希望用户看到这些链接，请联系 Reaxys 客户支持团队。有关联系信息，请参见本文档的尾页。

## 搜索提示

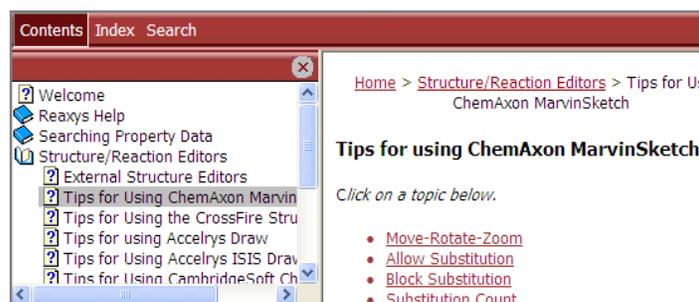
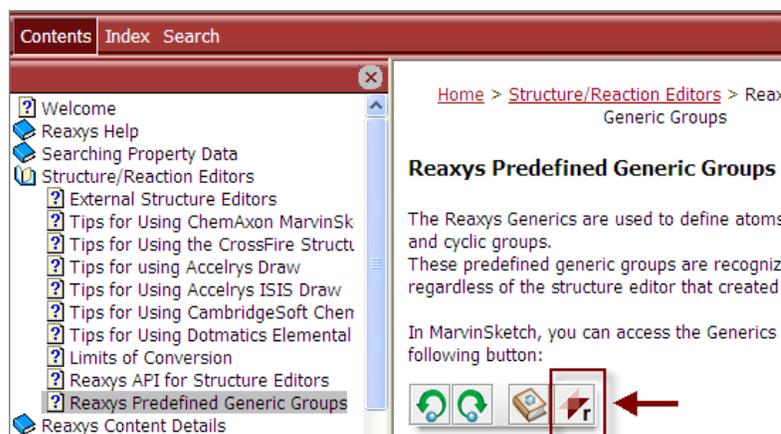
搜索**特定化合物**的最佳方法是按照结构搜索。您既可以使用 **Reaxys** 功能按照名称生成结构，也可以使用结构编辑器画出此物质。按照**名称 (name)** 搜索和按照**化学式 (formula)** 搜索都很可能得出相关搜索结果，但也可能会漏掉按照结构搜索可以得到的搜索结果。

您可以在结构编辑器内或 **Reaxys** 内使用各种**结构查询功能 (structure query features)** 搜索结构类似的物质。您还可以根据自己的优势，创新使用这些功能。

将 **Reaxys** 中的数百个属性字段以各种方式结合和使用，可以搜索具有**特定属性的物质 (substances with specific properties)**，不过本手册中没有讲述此内容。尝试使用**高级 (Advanced)** 搜索选项卡，您会对搜索结果赞叹不已。请参见 **Reaxys 帮助文件**，了解如何使用这些查询字段。

您还可以在 **Reaxys 帮助文件** 中找到其他信息，例如使用 **Reaxys** 和不同的**结构编辑器 (structure editors)** 的提示以及关于 **Reaxys 非专利药物 (Reaxys Generics)** 的详情。

如果您在构建查询条件方面遇到任何困难，请联系我们。搜索结果为“无检索结果”不表示一定“不存在检索结果”，改变查询条件可能会得到您需要的结果。



**通过 IP 访问时，单击此处可在 ChemAxon MarvinSketch、Dotmatics Elemental 和 GGA Ketcher 之间进行切换。登录后，可在我的设置 (My Settings) 页面中更改结构编辑器。**

**如果您想要将化学物质查询添加到反应查询 (Reactions Query) 选项卡，请单击此按钮。**

**加载保存的 xml 文件或 txt 文件 (即 CAS 编号或化学名称的列表)**

**在您的计算机上另存为 xml 文件**

**查找特定字段**

**查找最近更新和已测试环境**

Reaxys®

Query Results Synthesis Plans History My Alerts My Settings Help

Reactions Substances and Properties Literature

Generate structure from name

Please note: you are searching Reaxys and P

DOUBLE CLICK THIS FRAME AND DRAW STRUCTURE QUERY

STRUCTURE EDITOR

As drawn

Substructure:

on heteroatoms

on all atoms

Similarity

Include tautomers

Ignore stereo

No salts

No mixtures

No isotopes

No charges

No radicals

No additional rings

Further options

Further options

Include related Markush

Keep Fragments ...

separate together

(type values in fields e.g. 3-5)

# of Atoms

# of Fragments

# of Ring Closures

Search

Properties (Form-based) Properties (Advanced)

Substance Data

Search text in all facts

Search for *e.g. nitrobenzene; e.g. decrease AND 'enzyme activity'*

Identification Data

Reaxys-RN =

CAS Registry Number is

Chemical Name / Synonyms is

Molecular Formula is

Molweight (g/mol) =

No of Elements =

Check Syntax

SEARCH FOR FIELD RESET

Identification exists

Physical Data exists

Spectra exists

Bioactivity/ECotox exists

Application exists

Final Product exists

Chemical Data exists

ion Data

ographic Data

Indexes

Clear Query Load Query/Batch Save Query

Contact Us | Support | About Reaxys | Terms and Conditions | Privacy Policy | Performance Page

Copyright © 2012 Elsevier Properties SA. All rights reserved. Reaxys® is owned and protected by Elsevier Properties SA and used u

## Reaxys 物质查询页面

## 访问 Reaxys

每个搜索页面都包含基于表单 (form-based) 选项卡和高级 (Advanced) 选项卡

注册密码，以便保存查询、查询结果和首选项

- 已测试环境
- 最近添加的功能
- 当前版本
- 物质和反应数量

Contact Us | Support | **About Reaxys** | Terms and Conditions | Privacy Policy | Performance Page  
 Copyright © 2012 Elsevier Properties SA. All rights reserved. Reaxys® is owned and protected by Elsevier Properties SA and used under license.

- 当您访问 **www.reaxys.com** 时，Reaxys 将显示查询页面。选择相应选项卡即可执行反应、物质或书目搜索。
- 建议您注册 **UN/PW**，以便保存查询、查询结果和用户首选项。
- “关于 Reaxys” (**About Reaxys**) 链接显示关于当前版本的 Reaxys 的信息，包括反应、物质和引文的数量。它还提供关于已测试环境的信息，并列出了最近添加的功能。

## 按照名称生成结构

Generate structure from name

单击按照名称生成结构 (Generate Structure from Name) 按钮, 打开对话框

Please enter a chemical identifier and then click "Submit"

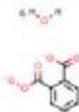
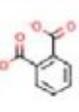
is mmpp

aspirin  
BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N  
50-78-2  
CC(=O)OC1=C(C=CC=C1)C(O)=O

Submit  
Cancel

输入 CAS 编号、Smiles 字符串或 InChi 编码, 并单击提交 (Submit)

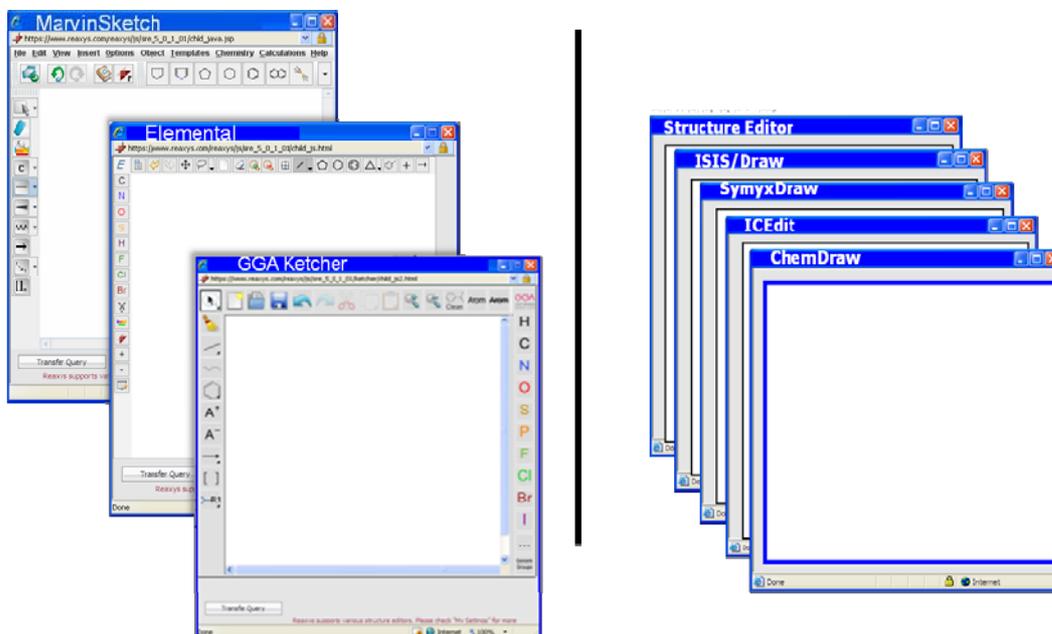
Reaxys found 7 structure candidates, which matched your chemical name input. The list below shows the first 10 sorted by No of references. Please select one for transferring into the Query window by clicking a Submit button.

Structure (7)	Chemical Name	Nº of Ref
 1 of 7 Submit	MMPP monoperoxyphthalic acid magnesium salt hexahydrate magnesium monoperoxyphthalate hexahydrate hexahydrate magnesium salt of monoperoxyphthalic acid monoperoxyphthalic acid, magnesium salt, hexahydrate magnesium monoperoxyphthalic acid hexahydrate	10
 2 of 7 Submit	magnesium monoperoxyphthalate hexahydrate magnesium monoperoxyphthalate magnesium monoperoxyphthalate MMPP magnesium bis(monoperoxyphthalate) magnesium mono-peroxyphthalate monoperoxyphthalic acid, magnesium salt	9

单击提交 (Submit), 以选择最相关的结构

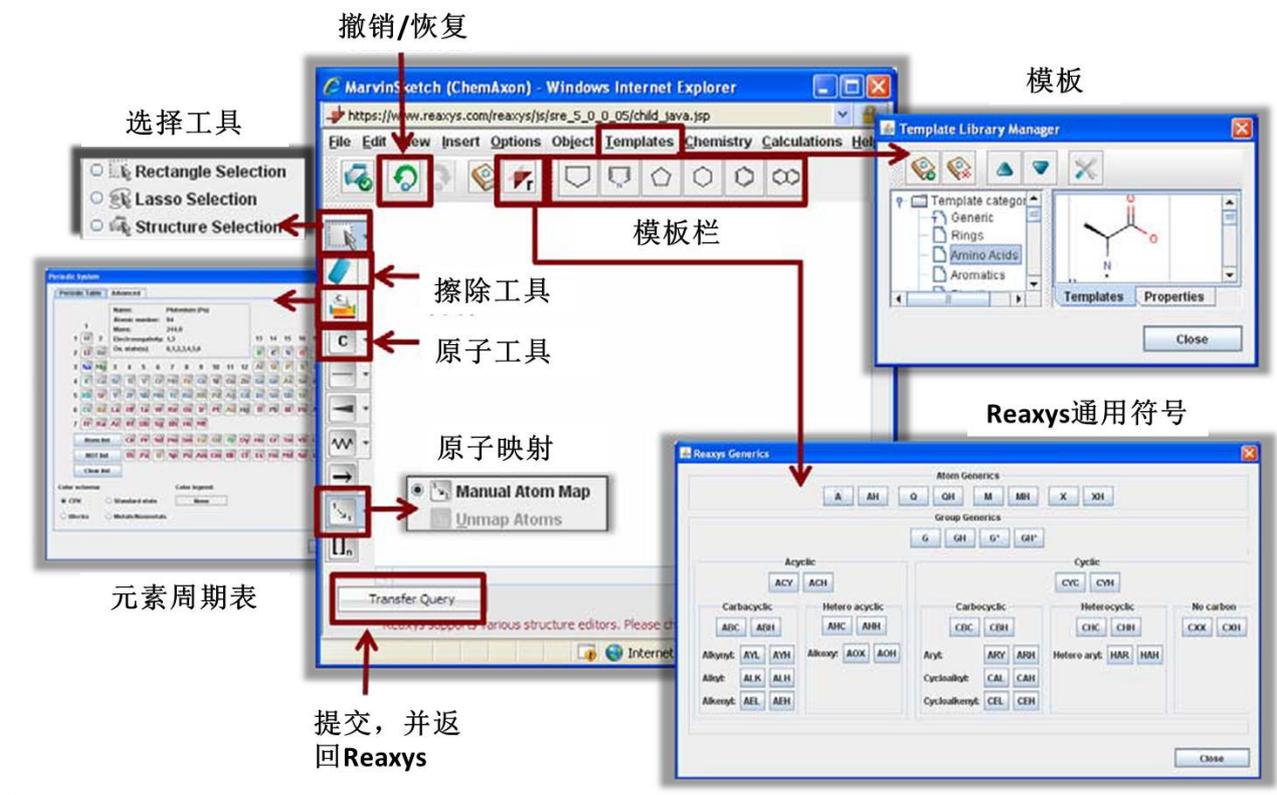
- 按照名称生成结构 (Generate Structure from name functionality) 功能可让您无需进行绘图, 便可创建一个结构查询。
- 输入化学名称 (如, 乙二胺四乙酸 ethylenediaminetetraacetic acid)、商品名/俗名或缩略名 (如 EDTA)、CAS 编号 (如 60-00-4)、smiles 字符串或 InChi 编码, 便可生成结构。
- 下拉菜单中包含的运算符有 *is*、*starts with*、*ends with* 和 *contains* 以及通配符 (\*), 可让您灵活使用该功能。
- 如果与您输入的条目相关的结构有多个, 将出现一张按参考文献数 (Number of References) 排序的列表, 可方便您选择一种物质。

## 结构编辑器



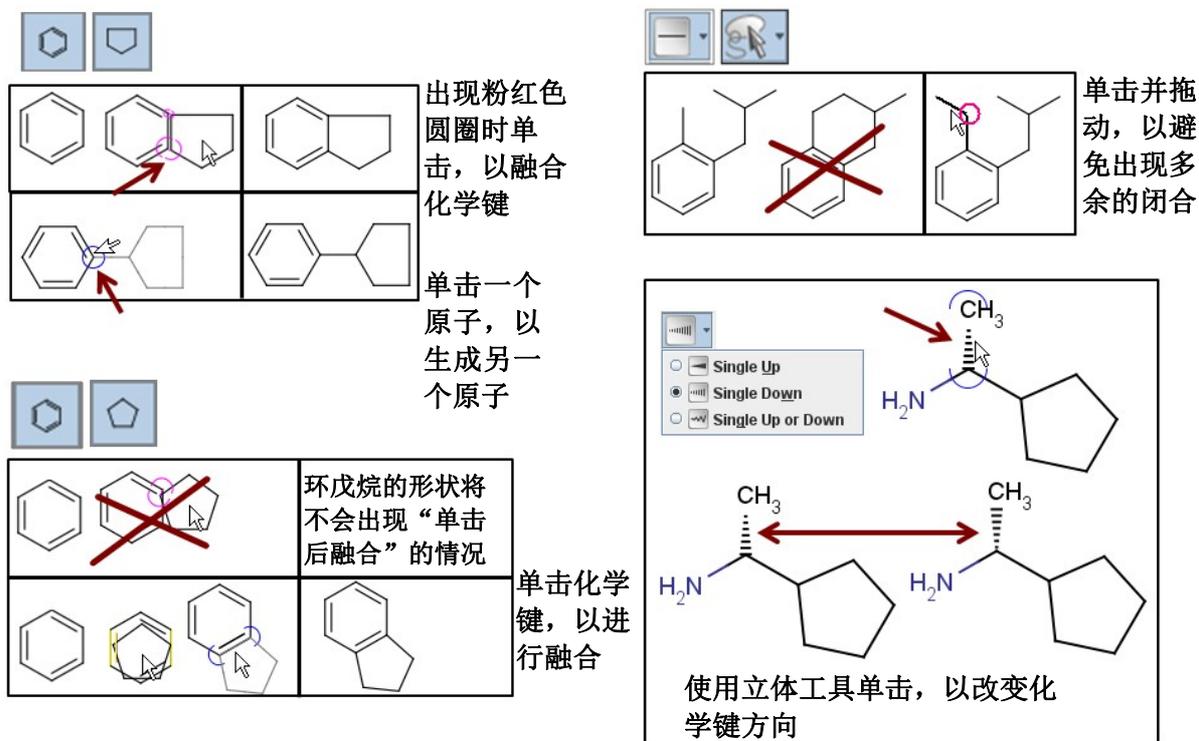
- 结构查询可包含完整结构或部分结构，同时还包含**原子**和**化学键**查询功能。
- Reaxys 随附有如下 3 种结构编辑器，而且无需进行安装：MarvinSketch、Elemental 和 GGA Ketcher（显示在左侧）。
- Reaxys 还可使用右侧显示的 5 种结构编辑器。需要连接软件，可从 Reaxys 资讯网站下载。网址为 [www.reaxys.com/info/support\\_downloads](http://www.reaxys.com/info/support_downloads)。
- 该文档中，将使用 **MarvinSketch** 作为示例讲解。
- 查询 **Reaxys 帮助文件**，可获得更多绘图提示。

# MarvinSketch



- 常用工具如上所示。
- 右键单击原子、化学键或空白区域，将显示不同的菜单。
- **矩形选择 (Rectangle Selection)** 工具和**套索选择 (Lasso Selection)** 工具可选择原子、化学键或整个结构。
- **结构选择 (Structure Selection)** 工具只能选择整个结构。
- 有两种方法可以使用菜单改变显示尺寸：**选项 (Options) > 缩放 (Zoom)** 以及**查看 (View) > 转换 (Transform) > 缩放 (Zoom)**。
- 要**移动**结构，先将其选中，然后将鼠标在其上悬停，直到看到一个**蓝框**，然后使用鼠标进行拖动。
- 要**旋转**结构，先将其选中，然后将鼠标在其上悬停，直到看到一个**蓝色风车**，然后使用鼠标进行拖动。

## MarvinSketch 绘图提示

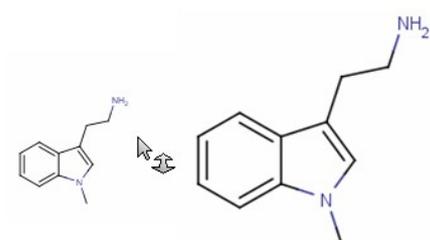


The image contains four panels illustrating drawing tips in MarvinSketch:

- Top Left Panel:** Shows icons for benzene and cyclopentane. Below, a grid of four diagrams shows the fusion of benzene and cyclopentane rings. A pink circle highlights the fusion point. Text: "出现粉红色圆圈时单击，以融合化学键" (Click when a pink circle appears to fuse the chemical bond).
- Top Right Panel:** Shows icons for a bond and a ring. Below, a grid of two diagrams shows a benzene ring with a cyclopentane ring attached. A red 'X' is over the first diagram, and a pink circle highlights the fusion point in the second. Text: "单击并拖动，以避免出现多余的闭合" (Click and drag to avoid extra closures).
- Bottom Left Panel:** Shows icons for benzene and cyclopentane. Below, a grid of four diagrams shows the fusion of benzene and cyclopentane rings. A blue circle highlights a single atom. Text: "单击一个原子，以生成另一个原子" (Click an atom to generate another atom).
- Bottom Right Panel:** Shows a 3D structure of a cyclopentane ring with an amino group (H<sub>2</sub>N) and a methyl group (CH<sub>3</sub>). A red arrow points to the methyl group. A legend shows options: "Single Up", "Single Down", and "Single Up or Down". Text: "使用立体工具单击，以改变化学键方向" (Use the 3D tool to click and change the direction of the chemical bond).

- **融合模板:** 单击模板，然后在空白区域单击。单击要融合到新结构的模板，然后将鼠标移动到新结构的融合位置。出现粉红色圆圈后单击。
- 一些模板不如其他模板那样易于融合。只需将鼠标移动到要融合模板的化学键上，然后单击。
- **新生成模板:** 单击模板，然后在空白区域单击。单击要从新结构生成的模板，然后单击新结构中的一个原子。
- 要添加化学键时，可以通过如下方法控制化学键的角度：选择化学键工具、单击相应的原子、使用鼠标拖动，然后释放。
- 通过选择相应的向上或向下化学键、单击原子（或现有的化学键），然后单击形成的化学键，来控制向上和向下的化学键。

## MarvinSketch 绘图提示

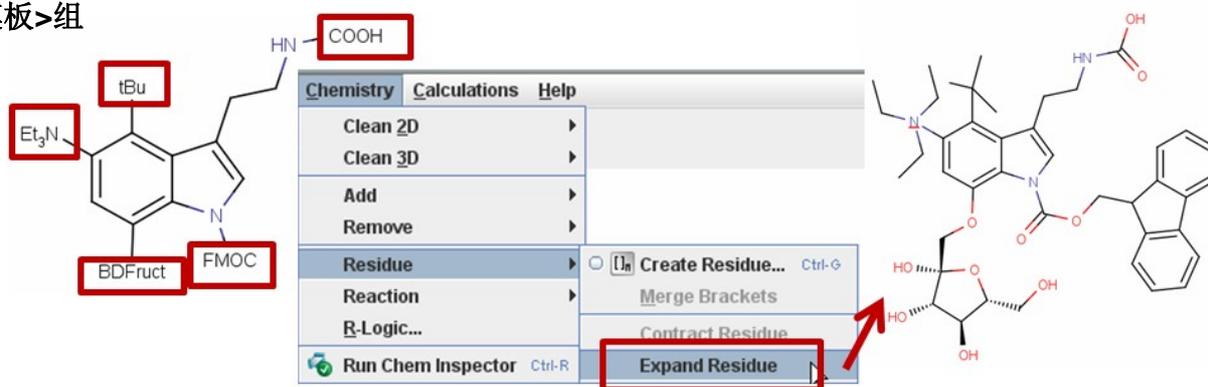


F6 改变结构大小



鼠标滚轮可垂直滚动画布

模板>组



- 单击 **F6 键**（快捷键）可以改变结构的大小。
- 使用鼠标滚轮垂直移动屏幕。
- Reaxys 可识别多种缩略形式。使用**模板 (Templates) > 组 (Groups)** 菜单，查看缩略形式。
- **要添加缩略形式**：使用化学键工具，单击添加化学键并立刻输入缩略形式，或使用选择工具，单击原子结构并输入缩略形式。
- 使用化学 (**Chemistry**) > 残基 (**Residue**) > 扩展 (**Expand**) 菜单，将缩略形式转换为片段。  
使用化学 (**Chemistry**) > 残基 (**Residue**) > 缩小 (**Contract**) 菜单，将片段转换为缩略形式。

## 管理置换

	查询	搜索选项	可能的结果
		<input checked="" type="radio"/> As drawn <input type="radio"/> Substructure: <input type="radio"/> on heteroatoms <input checked="" type="radio"/> on all atoms <input type="radio"/> Similarity	
		<input checked="" type="radio"/> As drawn <input type="radio"/> Substructure: <input type="radio"/> on heteroatoms <input checked="" type="radio"/> on all atoms <input type="radio"/> Similarity	
		<input type="radio"/> As drawn <input checked="" type="radio"/> Substructure: <input type="radio"/> on heteroatoms <input checked="" type="radio"/> on all atoms <input type="radio"/> Similarity	

**使用置换数** – 通过指定硫原子上允许的**置换数**，查找噻吩化合物。

- 通过打开置换数量最多的位置，或指定置换的数量，来管理置换。还可以在特定位置限制置换。
- 数量最多的自由位置** – 该指定将检索原子上允许的**最多置换数**。使用套索选择工具，单击原子，然后在键盘上输入 **.-s-6**（依次输入，而非同时输入）。将 Reaxys 中的**查询选项 (Query Options)** 设置为**按图 (As Drawn)**。
- 指定自由位置数** – 在上例中，标记 **s3** 的原子表示该原子最多有 3 个置换。硫原子已经有 2 个置换（2 个 C 环），因此选择 **s3** 将使得该物质可另外拥有一个置换（或可能没有其他置换）。因此，使用套索选择工具，单击原子，然后在键盘上输入 **.-s-3**。将 Reaxys 中的**查询选项 (Query Options)** 设置为**按图 (As Drawn)**。
- 限制特定位置的置换** – 检索除在特定位置外带有置换的物质。使用套索选择工具，单击原子，然后在键盘上输入 **.-s-\***。将**查询选项 (Query Options)** 设置为**所有原子的子结构 (Substructure on all atoms)**。

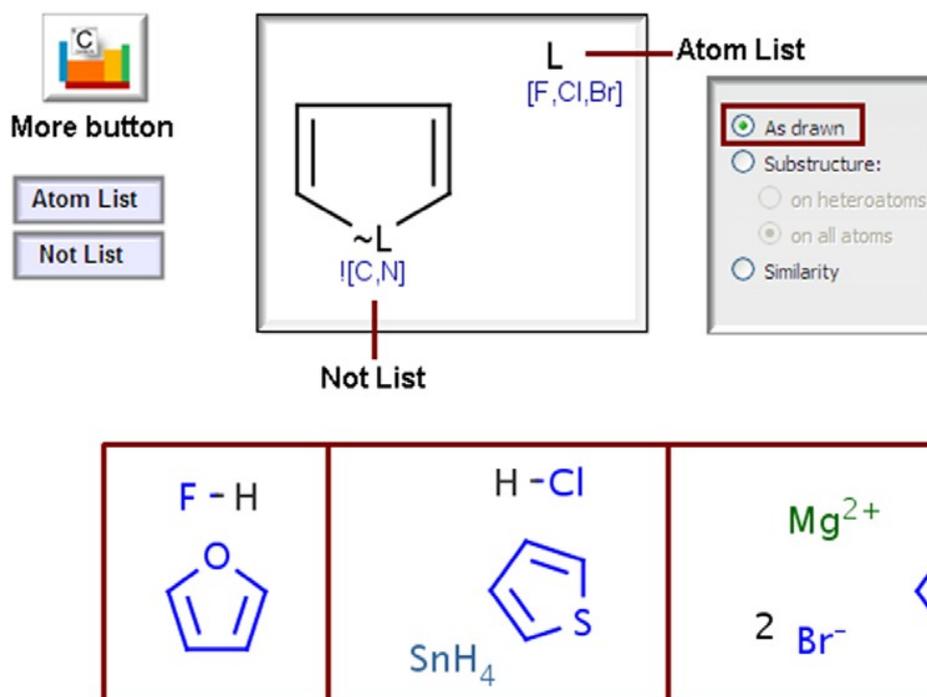
## 查看搜索结果

The screenshot displays the Reaxys search results page for 322 substances. The interface includes a top navigation bar with tabs for 'Substances (Grid)', 'Substances (Table)', and 'Citations'. A search bar at the top right contains 'Page 21' and navigation icons. Below the search bar are buttons for 'Limit to', 'Exclude', 'Output', 'Print', 'Zoom in', and 'Zoom out'. The main area shows three chemical structures (61, 62, 63) with 'Synthesize' buttons and magnifying glass icons. A 'Show 3 results per page' dropdown is visible at the bottom left. A 'Modify Application Settings' dialog box is open, showing 'Hits per page' set to 15. Red arrows and text annotations highlight key features: '网格视图' (Grid view), '输入页码' (Enter page number), '单击缩放 (Zoom), 可放大结构图' (Click zoom, can enlarge structure diagram), and '临时更改每页的搜索结果数.....或保存在您设置中的结果数' (Temporarily change the number of search results per page..... or save the number of results in your settings).

此处是使用上页中显示的第一个查询条件搜索的结果。

- 默认情况下，结果以**表格 (Table)** 视图显示。单击**网格 (Grid)** 视图的选项卡，可以查看物质，而不显示详细信息。
- 默认情况下，每页显示 9 种物质。从屏幕左下角的下拉菜单中选择一个数字，可以临时更改每页显示的数量。单击**我的设置 (My Settings)** 按钮，并选择**修改应用程序设置 (Modify Application Settings)**，然后更改**每页搜索结果 (Hits per page)** 旁边的数字，可**保存 (Save)** 您希望每页显示的数量。
- 单击**缩放 (Zoom)**，可放大物质显示。
- 可以**三维 (3D)** 模式查看物质：只需单击物质下方的**放大镜 (magnifying glass)**，然后拖动**缩放 (Zoom)** 框内的鼠标，可在 Reaxys 中查看大多数有机金属和配位化合物。
- 如果您发现缩放框内的结构未以三维模式显示，可以在缩放结构旁边单击右键，选择**结构 (Structure) > 清晰 3D (Clean 3D)**，生成三维视图。

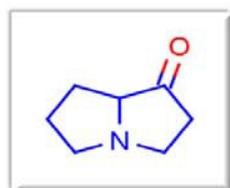
## 原子列表



使用原子列表 (Atom lists) – 查找五键卤盐杂环物质。将卤元素限制为氯、氟和溴。指定该杂环为非吡咯环。

- 原子列表 (Atom lists) 可用于在某一位置包含或排除某种原子。
- 原子列表 (Atom lists) 可代替原子，列表也可作为单独的片段代表其自身
- 如果选择所有原子亚结构 (Substructure on all atoms)，或用 .s6 标记列表，或列出的原子是配位化合物的一部分时，将置换列出的原子。
- 在 MarvinSketch 中，选择环戊烷原子环，并添加双键。创建原子列表 (Atom List)：选择更多 (More) 按钮，单击原子列表 (Atom List) 按钮，然后选择 Cl、F 和 Br。单击关闭 (Close)，然后单击环旁边的空白处。
- 单击套索 (Lasso) 工具，然后单击环内相应的原子。单击更多 (More) 按钮，单击未列出 (Not List) 按钮，然后选择 C 和 N。在 MarvinSketch 中，单击传输查询 (Transfer Query) 按钮。
- 为查询类型 (Query Type) 选择按图 (As Drawn)。单击搜索 (Search)
- 注意所检索盐的不同类型。注意：查询没有显示吡咯环。

## 链节点



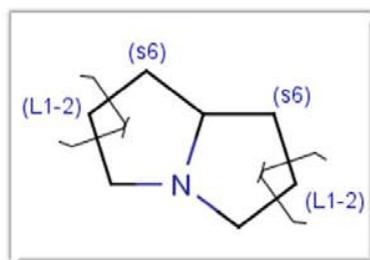
五键环



六键环



五键和六键环



As drawn

Substructure:

on heteroatoms

on all atoms

Similarity

Include tautomers

Ignore stereo

No salts

No mixtures

No isotopes

No charges

No radicals

No additional rings

**Further options**



使用链节点 – 使用链节点 (Link nodes) 查找各种大小的氮杂双环。

- 链节点 (Link Nodes) 用于定义重复的单元。
- 这些单元可以是环或链。
- 链节点是选中的原子。链节点内的任何结构都是重复的。
- 创建上述氮杂双环查询。使用套索 (Lasso) 工具右键单击一个原子。然后依次选择编辑原子 (Edit Atom) > 链节点 (Link Nodes) 和 L1-2。对其他原子重复该步骤。
- 打开其中两个原子，使用 ,s6 使置换数量达到最多。在 Reaxys 中，使用按图 (As Drawn) 查询选项。
- 为防止环在打开位置闭合，选中无其他环 (No Additional Rings) 复选框。

## 查看搜索结果 - 筛选

搜索结果数据链接比其他链接突出

单击**更多 (More)**链接, 进一步细化数据

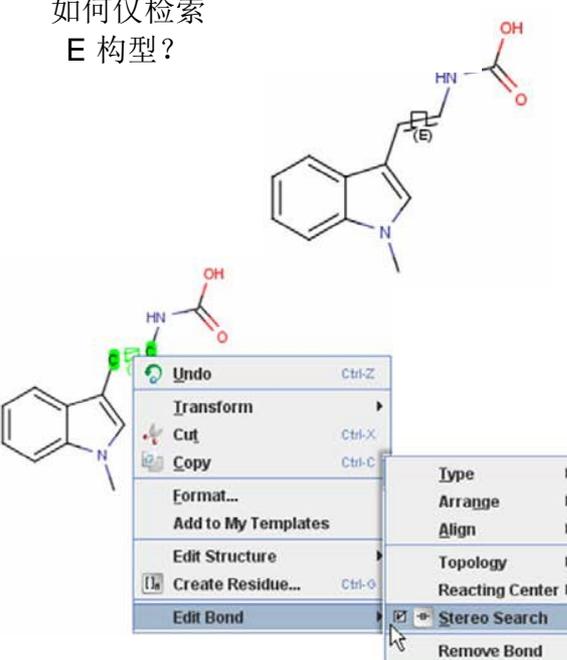
新筛选的列表显示在导航栏中

使用**链节点**, 可检索出几千种物质。使用**筛选器**可将列出的物质限制为有**熔点**、**旋光性**或**折光率**等数据的物质。

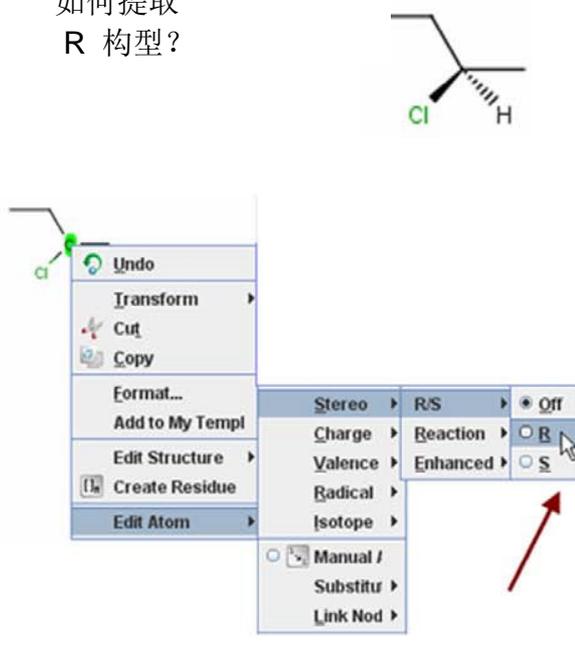
- 大多数筛选器可让用户通过输入所需的值/术语, 或从一组选项列表中选择所需的值/术语, 来进行搜索。
- 一些筛选器有**更多 (More)**链接, 可打开更详细的数据筛选选择框。
- 每次筛选后会显示新的结果列表, 并显示在屏幕上方的导航栏中。
- 列表中的每条记录都带有**检索结果数据**的链接, 因此可将所需数据与其他数据进行区分, 从而能够立刻进行查看。一次使用几个条件筛选列表时, 结果可能包含符合**所有**要求条件的搜索结果链接, 或仅是符合**部分**要求条件的链接, 即 Reaxys 在一次应用几个筛选条件时, 使用数据运算符 **OR**。
- 要获得符合**所有**要求条件的物质的筛选列表, 可一次使用一个条件进行多次搜索。

## 立体化学

如何仅检索 E 构型?



如何提取 R 构型?



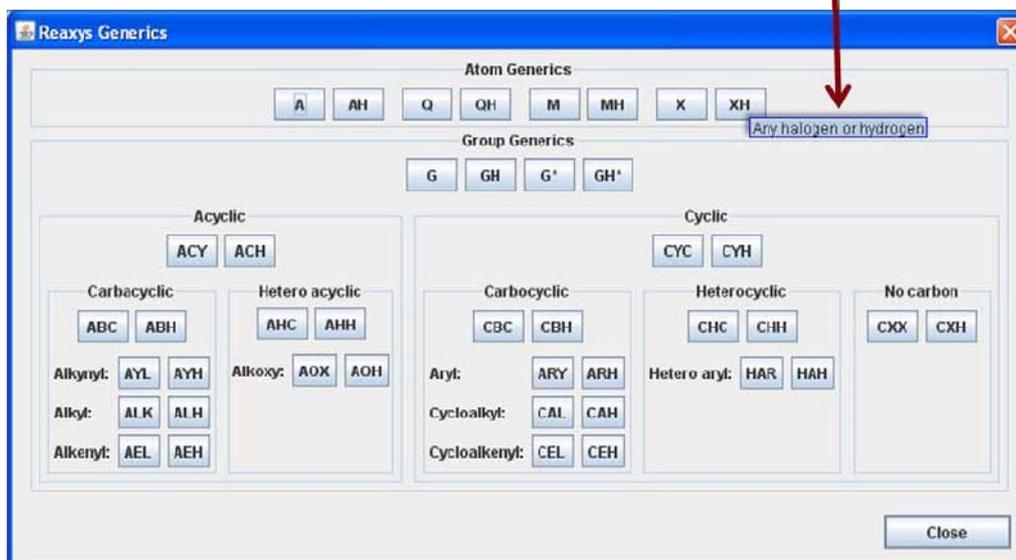
- 可以在 **E/Z** 双键构型中提取结构。但是，除非用“**立体 (stereo)**”标签标记双键，否则 Reaxys 将检索这两个构型。
- 在 MarvinSketch 中，使用立体标签标记键的方法是，右键单击该键，然后选择**编辑键 (Edit bond) > 立体搜索 (stereo search)**。搜索时，Reaxys 将仅检索具有所提取构型的物质。
- 使用上 (**Up**) 键和下 (**Down**) 键转换 **R/S** 或 **D/L** 构型时，搜索前无需设置任何标签。Reaxys 将检索所提取的构型。
- 提取手性中心时，如果不确定哪个键在上，哪个键在下，可以让 MarvinSketch 帮助您。在手性原子上单击右键，选择**编辑原子 (Edit atom) > 立体 (Stereo) > R/S >** 然后选择 **R** 或 **S**。
- 如果提取的手性物质带常见单键（非上键和下键），Reaxys 将检索所有构型。
- 如果用**立体 (Stereo)** 标签标记一个双键，或提取带上键和下键的物质，但随后决定检索所有构型，则无需重新提取该物质。而是，单击 Reaxys **查询 (Query)** 页面上的**忽略立体 (Ignore Stereo)** 方框。

## Reaxys 通用符号



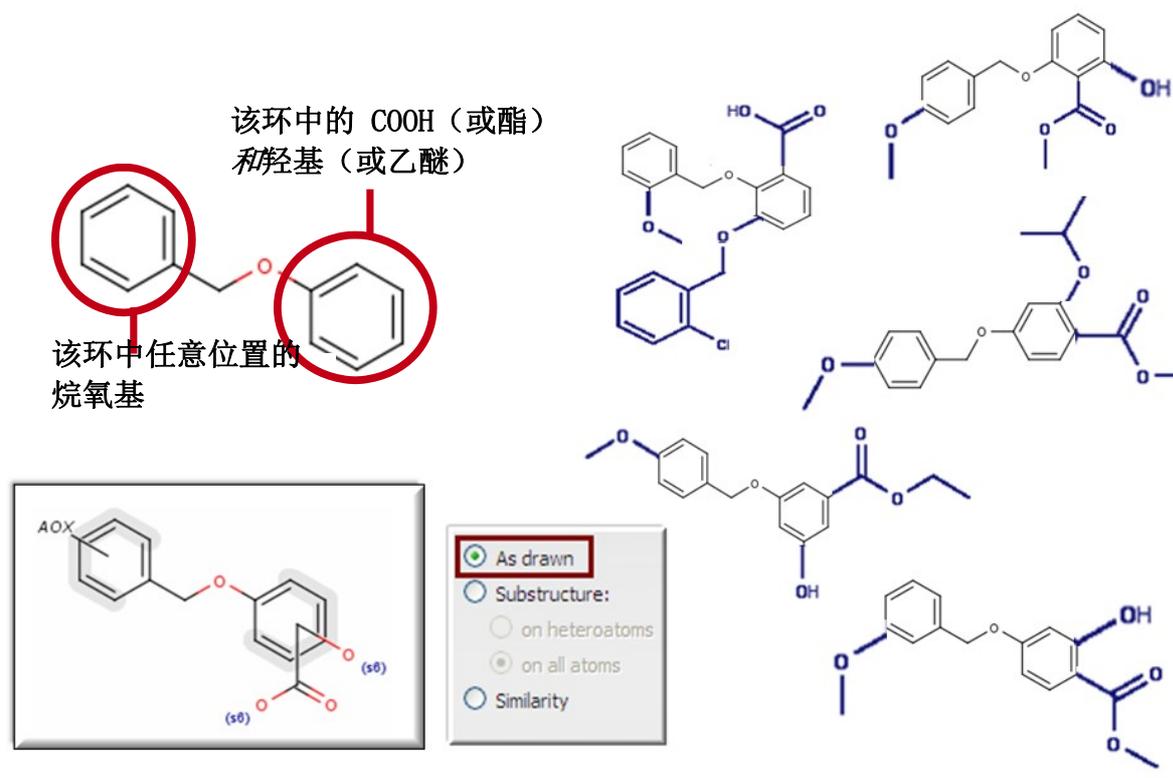
单击 MarvinSketch 中的“r”，可以访问非专利药物

在组别上悬停，可以查看定义



- **Reaxys 通用符号**提供缩写，您可归纳查询。
- 通用符号分成**原子通用符号**和**基团通用符号**。
- 除了已定义的**原子或基团**外，所有以“H”结尾的符号都含有氢原子。  
例如，ALK 是烷基组的缩写。缩写 ALH 表示结构中有一个烷基组或一个氢原子。
- 任何组可以以 G 开始，有序分层排列。
- G\* 和 GH\* 是唯一允许在位置中有闭环的通用符号。
- G 和 G\* 可以有多个结构连接点。其他预定义的通用符号分组可以仅有一个结构连接点。
- 有关详细信息，请查看 **Reaxys 帮助**文件。

## 位置变异键



使用位置变异键 – 查找苯氧基环中任意位置带 COOH (或酯) 和羟基 (或乙醚) 的物质, 以及苯甲基环中任意位置带烷氧基的物质。

- 位置变异键 (Position Variation Bond) 可在环中进行特定置换, 而无需指定环中的具体位置。
- 可以是碳原子或改用其他原子、功能组、原子列表或环来进行置换。
- 应用位置变异键 (Position Variation bond): 套住相关原子, 然后右键单击空白区域, 并依次选择编辑结构 (Edit Structure) > 添加 (Add) > 位置变异键 (Position Variation bond)。
- 在上述示例中, 对左侧的环应用位置变异键 (Position Variation bond)。单击 Reaxys 非专利药物 (Reaxys Generics) 按钮, 并为烷氧基选择 AOX。
- 现在对右侧的环应用位置变异键。应用后, 且环仍为选中状态, 右键单击, 并再次选择编辑结构 (Edit Structure) > 添加 (Add) > 位置变异键 (Position Variation bond)。为一个键添加 O, 为另一个键添加 COOH。使用 .s6, 以进行置换。
- 将查询传输至 Reaxys。在物质查询 (Substances Query) 选项卡中, 选择按图 (As Drawn)。

## 查看搜索结果 — PubChem

查询页面通知 → Please note: you are searching Reaxys and PubChem

光标悬停在选项卡上

68 Substances out of 32 citations

42 Substances

Reaxys PubChem eMolecules

Query

42 substances

选中列表的导航栏

在 PubChem 选项卡上:

单击查看 Reaxys 记录

单击进入 PubChem

Structure

Synthesize

Available Data

Classification, Chemical and Physical Properties, Identification and Related Records

PubChem Compound

CID 107421 - Cor

Molecular Formula: C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>

3D Structure 3D Conform

PubChem

Filter by:

Sub-structure

Molecular Weight

Number of Fragments

Availability in Reaxys

by Value

by Group

no 17

yes 13

Limit to Exclude

Reaxys

Filter by:

Sub-structure

Molecular Weight

Number of Fragments

Physical Data

Spectroscopic Data

Bioactivity

Natural Product

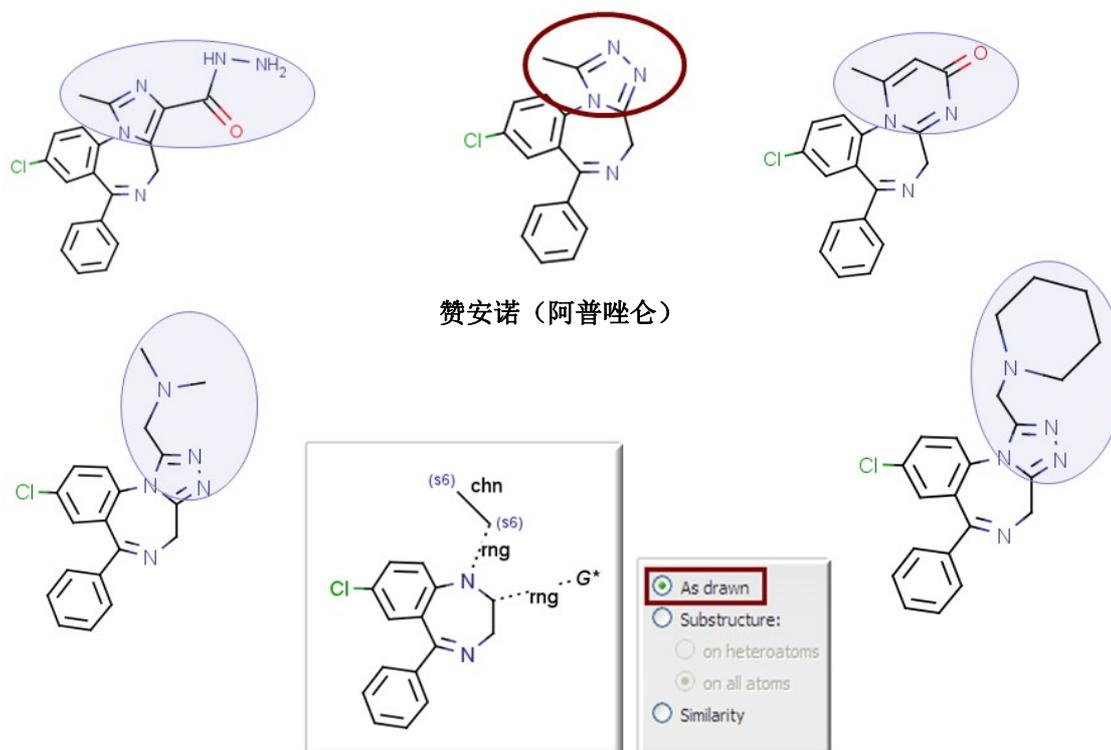
Availability

各种筛选器和排序选项

数据库重叠

- 在 Reaxys 上的物质查询 (Substances Query) 选项卡上执行搜索操作时，也会自动搜索 PubChem 数据库。这就意味着，您将搜索超过 4000 万种物质。而这种整合搜索丝毫不会影响搜索速度。
- PubChem 免费提供关于小分子生物活性的信息。
- 搜索结果视图显示 Reaxys 搜索结果 (Reaxys results) 选项卡和另一个 PubChem 搜索结果 (PubChem results) 选项卡，用户可以选择单独查看并在每个结果集内进行导航。每个数据库中的排序和筛选选项都有所不同。
- PubChem 选项卡中的可用数据 (Available Data) 链接将直接链接到 PubChem 中的数据。
- 在 PubChem 选项卡上，您可以单击显示的结构下的 Reaxys 徽标，链接到 PubChem 化合物的 Reaxys 记录。还可以对 PubChem 搜索结果进行筛选，使其只显示 PubChem 独有的化合物。
- 如果一种物质是 PubChem 中独有的，您可以单击结构下的 Synthesize 链接，在 Reaxys 中创建合成计划。Reaxys 将自动执行相似性搜索 (Similarity Search)，并提供相关物质列表以供选择。

## 键型/键拓扑



使用**任何键（Any Bonds）**和**环状拓扑（Ring Topology）**查找苯二氮卓类药物。

使用**键型（Use Bond Type）**可指定键级。

- 可为键指定几种键型，如**任何键（Any Bonds）**和**单键（Single）**或**双键（Double Bonds）**。Reaxys 将仅检索具有该键型的检索结果。
- 对于以上示例：**1.** 画出以上物质，使用单键画出 **3** 个查询键。**2.** 使用**套索（Lasso）**工具，然后右键单击右边的查询键。依次选择**键（Bond）> 类型（Type）> 任何类型（Any）**。**3.** 对于与 **N** 相连的键执行相同操作。  
使用**键拓扑（Bond Topology）**将键指定为键环或键链的一部分。
- 对于以上示例：**1.** 使用**套索（Lasso）**工具，然后右键单击右边的查询键。依次选择**键（Bond）> 拓扑（Topology）> 环（Ring）**。对于与 **N** 相连的键执行相同操作。**2.** 对于第三个查询键执行相同操作，但是请依次选择**键（Bond）> 拓扑（Topology）> 链（chain）**。

从 **Reaxys 通用符号（Reaxys Generics）** 中添加 **G\***，以指定任何闭环组（any group with ring closure）。向图示的 **2** 个位置添加 **.s6**。单击**转移查询（Transfer Query）**按钮。将 **Reaxys** 中的**查询选项（Query Options）** 设置为**按图（As Drawn）**。



## 使用、创建和保存模板

打开模板库

文件 (File) > 保存 (File) > 我的文档 My Documents > 我的 Marvin 模板 (My Marvin Templates)

模板 (Templates) > 模板库 (Template Library)

您的模板已显示

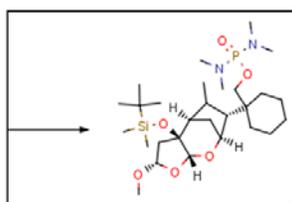
选中属性 (Properties) 选项卡上的“显示” (Display) 复选框

模板库 (Template Library) 包含很多预制模板。选择模板 (Templates) > 模板库 (Template Library)，然后单击一个模板，并在空白区域单击，即可访问模板。

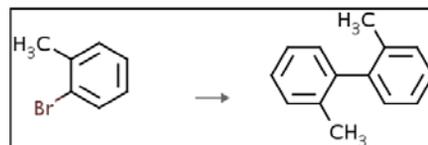
您可按照以下步骤创建自己的模板，并保存至您的模板工具栏 (Template Toolbar)：

1. 画出结构，然后依次选择文件 (File) > 保存 (Save) > 我的文档 (My Documents) > 我的 Marvin 模板 (My Marvin Templates)，将其保存至您的电脑。
2. 在 MarvinSketch 中，单击模板 (Templates) > 模板库 (Template Library)，打开模板库。单击上面的图标，向库中添加模板。然后滚动鼠标，在列表中查找。
3. 单击列表中的新增模板。单击属性 (Properties) 选项卡，然后选中在工具栏上显示 (Display on Toolbar) 复选框。此时，会在工具栏上看到您的新模板。（采用相同方法，模板库 (Template Library) 中的任何模板都可添加到模板工具栏 (Template Toolbar) 上。）

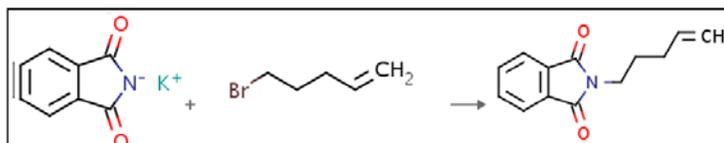
# 反应查询



半反应



完全反应



物质在反应中充当的角色

- 从反应查询页 (**Reactions Query page**) 中搜索到的反应可以是完全反应 (反应物和生成物之间标有箭头), 或是半反应 (显示反应物或生成物)。
- 除了得出反应, 您还可以输入结构, 并将其指定为生成物 (**Product**)、原料 (**Starting Material**)、试剂/催化剂 (**Reagent/Catalyst**) 或任何角色 (**Any Role**)。
- 目前为止, 本手册中介绍的物质查询功能也可用于搜索反应。
- 还有些查询功能是反应搜索所特有的。下面将介绍以下功能:

原子映射

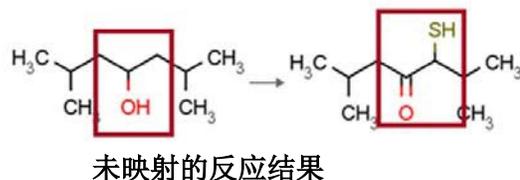
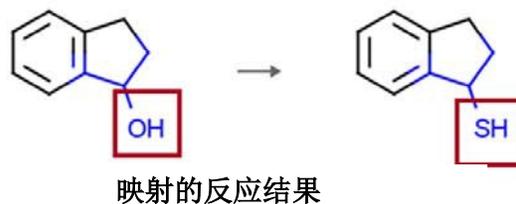
反应中心功能

构型转化/构型保持

合并反应物或生成物

# 原子映射

## 乙醇转化为硫醇

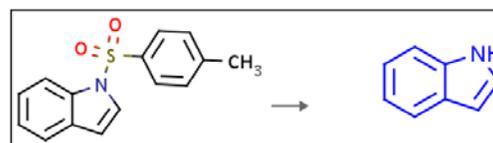
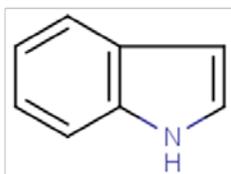
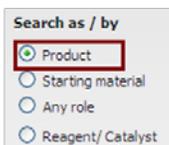


- 原子映射通过指定与生成物中原子对应的反应物中的原子，使查询的准确性更高。
- 映射反应的方法为：单击人工原子映射 (**Manual Atom Map**) 工具，并单击反应物中的原子，然后拖放至生成物中的相应原子上。
- 您也可以使用以下快捷方式：在画出反应物与生成物之间的箭头后，直接单击反应物中的原子，然后拖放至生成物中的原子上。
- 多数反应都可以进行映射。如果映射操作未得到需要的结果，可以重新运行搜索，而不进行映射。

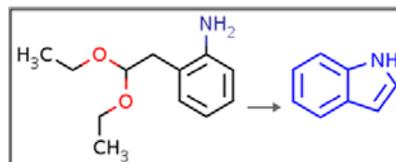
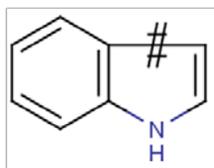
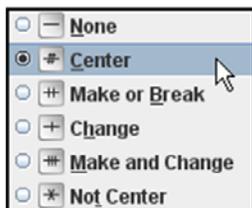
# 反应中心功能

## 酰基合成

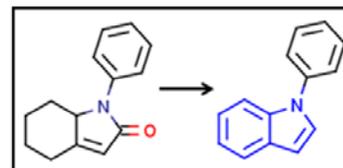
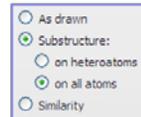
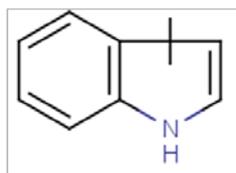
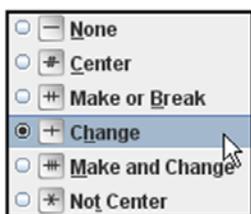
编辑化学键 (Edit Bond) > 反应中心 (Reacting Center)



未标注 标签 (695 个反应)



标注“中心”(Center) 标签 (74 个反应)

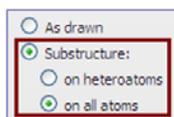


标注“更改”(Change) 标签 (10 个反应)

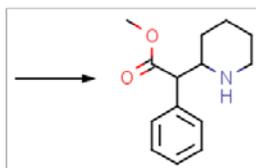
- 通过指定在反应过程中要生成、中断或更改键级的键，使用反应中心功能可以使反应查询的准确性更高。
- 在 MarvinSketch 中，选择该键，然后依次选择编辑化学键 (Edit Bond) > 反应中心 (Reacting Center) > 中心 (Center)。
- 注意使用标签和未使用标签的检索结果数量有所不同。
- 对同一键使用更改 (Change) 标签并重新执行物质搜索。

# 构型转化/构型保持

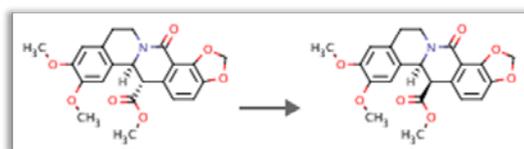
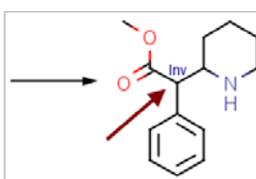
## 利他林合成



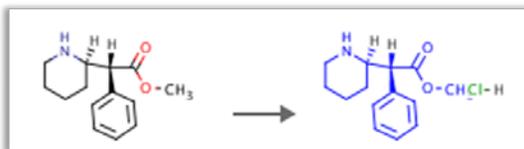
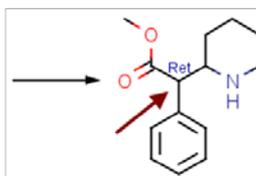
编辑原子 (Edit Atom) > 立体 (Stereo) > 反应 (Reaction)



未使用标签  
(906 个反应)



使用转化标签  
(4 个反应)

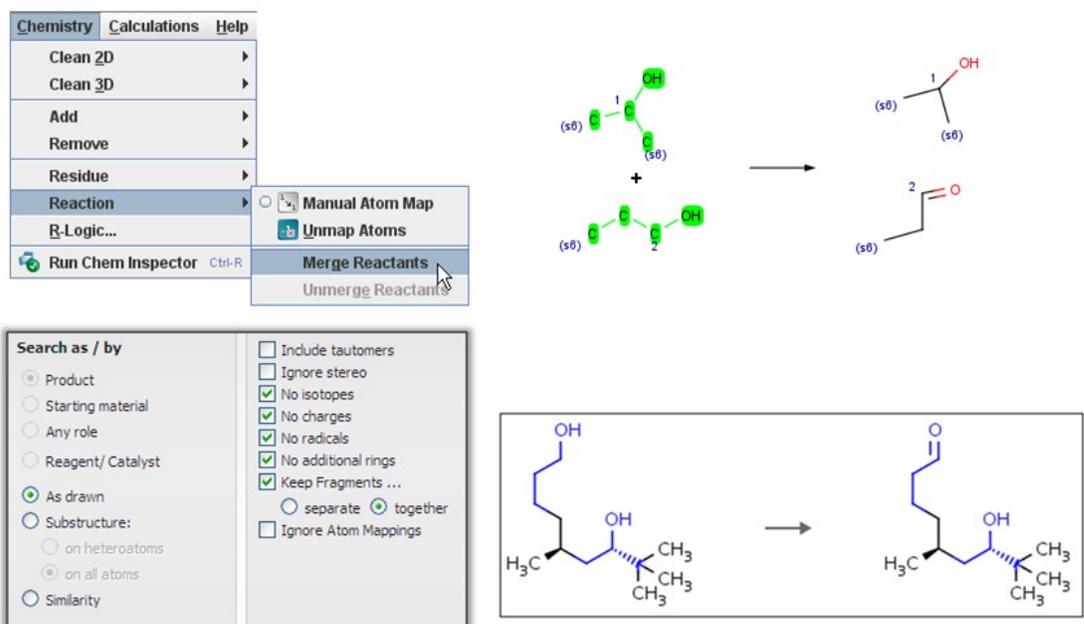


使用保持标签  
(74 个反应)

- 构型转化/构型保持标签可以用于反应中的手性原子。
- 这种标签用于指定反应物和生成物中对应原子的立体化学是否为相同构型。
- 此标签应用于利他林的手性中心时，比较检索的结果。
- 使用从名称获取结构 (Generate Structure from Name) 以生成利他林结构，将其放入 MarvinSketch，右键单击相应原子并选择编辑原子 (Edit Atom) > 立体 (Stereo) > 反应 (Reaction) > 转化 (Inversion)。
- 使用保持 (Retention) 标签重复搜索。

# 合并反应物或生成物

在非反应仲醇存在的情况下，将伯醇转换为乙醛



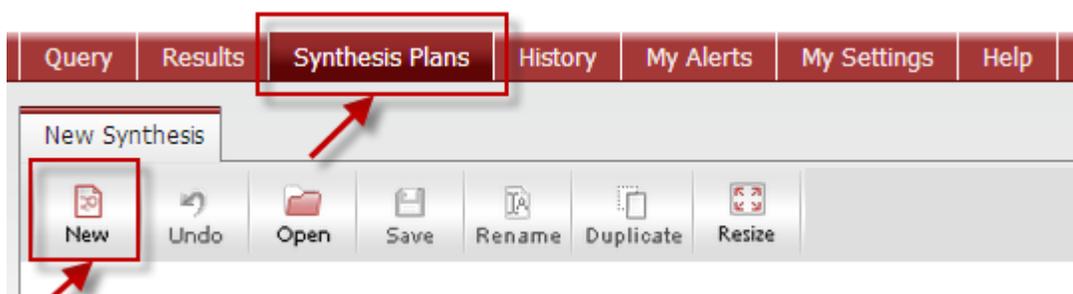
- 在关注转化时，一个生成结构的简便方法就是使用碎片。
- 在本示例中，我们关注的重点不是醇类或乙醛的具体结构；我们只关注非反应仲醇如何不受转化影响和伯醇是否可以转换为乙醛。
- 如图所示，画出碎片。使用 **.s6**，打开要置换的相应碳。
- 选择**箭头 (Arrow)** 工具，画出箭头。您会看到加号出现。
- 反应物碎片和生成物碎片合并后，加号即会消失。为了实现碎片合并，请使用**套索 (Lasso)** 工具，选择 2 个**反应物 (Reactant)** 碎片。然后依次选择**化学 (Chemistry) > 反应 (Reaction) > 合并 (Merge) > 反应物 (Reactants)**。选择 2 个生成物 (**Product**) 碎片，并依次选择**化学 (Chemistry) > 反应 (Reaction) > 合并 (Merge) > 生成物 (Products)**。
- 单击**手动原子映射 (Manual Atom Map)** 工具，然后单击**羟基**附近的碳元素，并将其拖至**乙醛**上的碳元素碳 - 氧键 (C=O)，对此反应进行**映射**。
- 转移至 **Reaxys** 并选择**按图 (As Drawn)**。选中上图所示的复选框，对搜索结果进行限制。检索到约 67 个反应。

# 合成计划的制定 (Synthesis Plan)

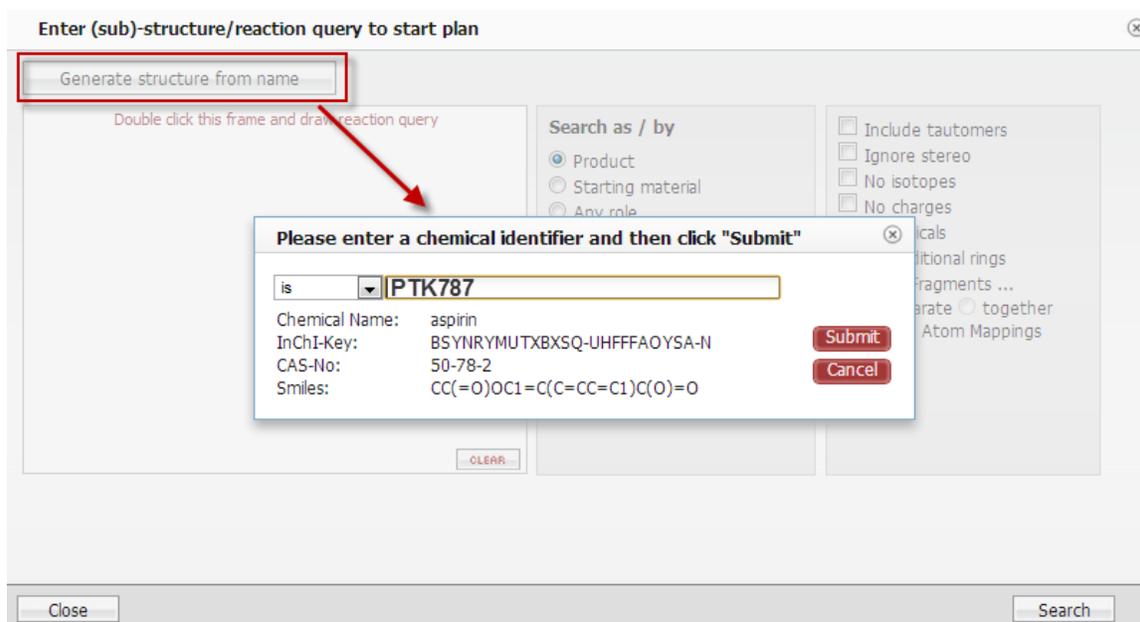
## 目标化合物PTK787合成计划的制定

### 合成路线的设计

- 在Reaxys导航栏中找到**Synthesis Plan**，并点击打开界面。并点击**New**创建一个新的Synthesis Plan:



- 使用画图软件或者使用**Generate Structure from Name**提交目标分子的结构式，并点击**Submit, Search**进行提交查询:



Tips: 可以使用名称（包括化合物代号），CAS No.或者InChi-Key等进行提交。

- 所获得的反应条件为最后一步生成目标产物的条件列表既反合成分析的第一步。可以根据**Filter By**功能的选项进行筛选，也可根据自身实验室条件进行选择。
- 选取采纳的某一条或者几条路线并在其条件的选择框中打√，并点击**Add Selected**，将其添加到**Synthesis Plan**中。

The screenshot shows a search results interface. On the left, a 'Filter by:' sidebar lists various criteria like Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps, Product Availability, and Reactant Availability. The main area displays a table with columns for Yield, Conditions, and References. A reaction scheme is shown above the table, with a red box highlighting the 'Add Selected' button and a red arrow pointing to it. The table contains the following data:

Yield	Conditions	References
82%	With phosphorus pentoxide; triethyl amine hydrochloride T=170°C; 2 h; Condensation;	Bold, Guido; Altmann, Karl-Heinz; Frei, Jo Bernhard; Brueggen, Josef; Buchdunger Journal of Medicinal Chemistry, 2000, vol. Title/Abstract Full Text View citing
	With P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ; conc. ammonia; triethyl amine hydrochloride in chloroform; water	Brazzell, Romulus Kimbro Patent: US2003/171375 A1, 2003 ; Title/Abstract Full Text Show Dep

- 可获得**Synthesis Plan**中反合成分析的第一步。也可在此界面中点击**Add**添加另外一条路线，或者点击**Remove**删除一条路线。

The screenshot shows a 'Synthesis Plan' interface. At the top, there is a toolbar with icons for New, Undo, Open, Save, Rename, Duplicate, Output, Print, Left, Right, Top, Resize, and Thumbnail. Below the toolbar, a reaction scheme is displayed. The reactant is 4-chloroaniline, and the product is a quinoline derivative. The reaction is labeled '1 Details' with a yield of '82 %'. Below the reaction, there are two 'Synthesize' buttons: 'Synthesize (428)' and 'Synthesize (3)'. A red box highlights the 'Add Remove' button, and a red arrow points to it.

- 点击中间体下方的**Synthesize**来获得合成该中间体的方法，如：

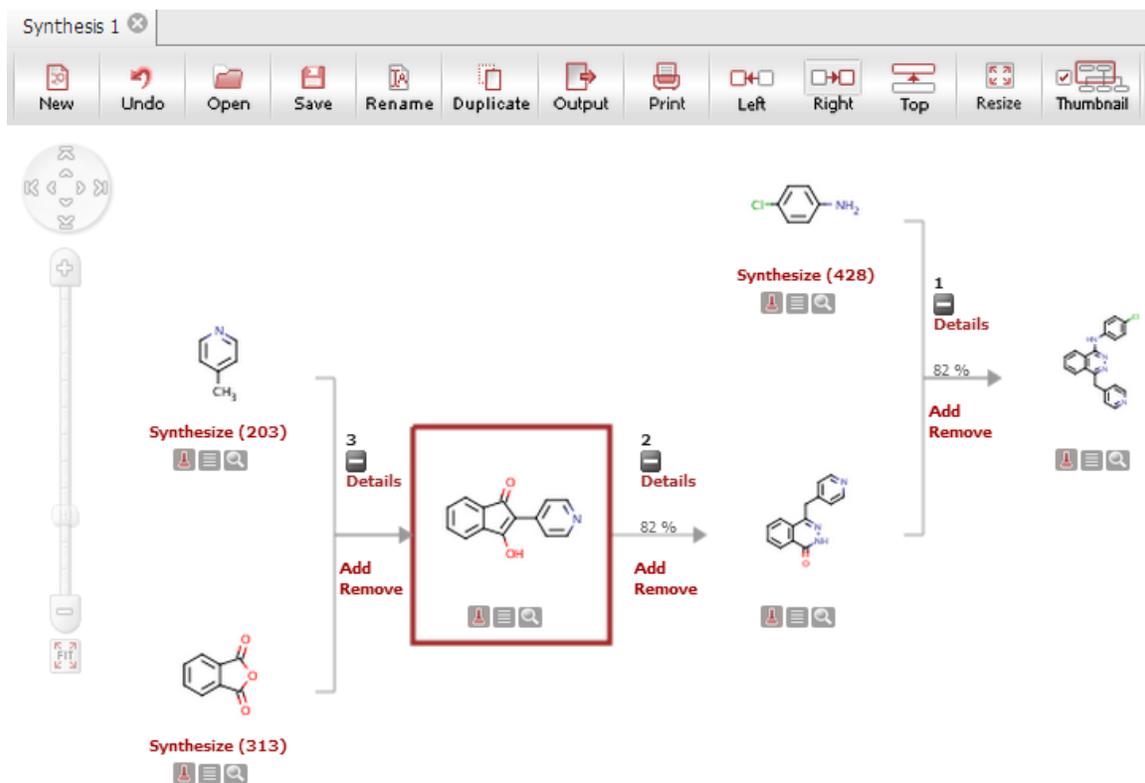
Yield	Conditions	References
82%	With hydrazine hydrate T=110°C; 8 h; cyclocondensation;	Bold, Guido; Altmann, Karl-H. Wietfeld, Bernhard; Bruegger al. Journal of Medicinal Chemistry, Title/Abstract Full Text
75%	With hydrazine hydrate T=100°C; 5 h;	Zhang, Shulan; Zhao, Yanfan Chengcheng; Xia, Lin; Gong, European Journal of Medicinal C Title/Abstract Full Text

- 选择合适的反应条件选项，并点击**Add Selected**，把所选条件添加到Synthesis Plan中：

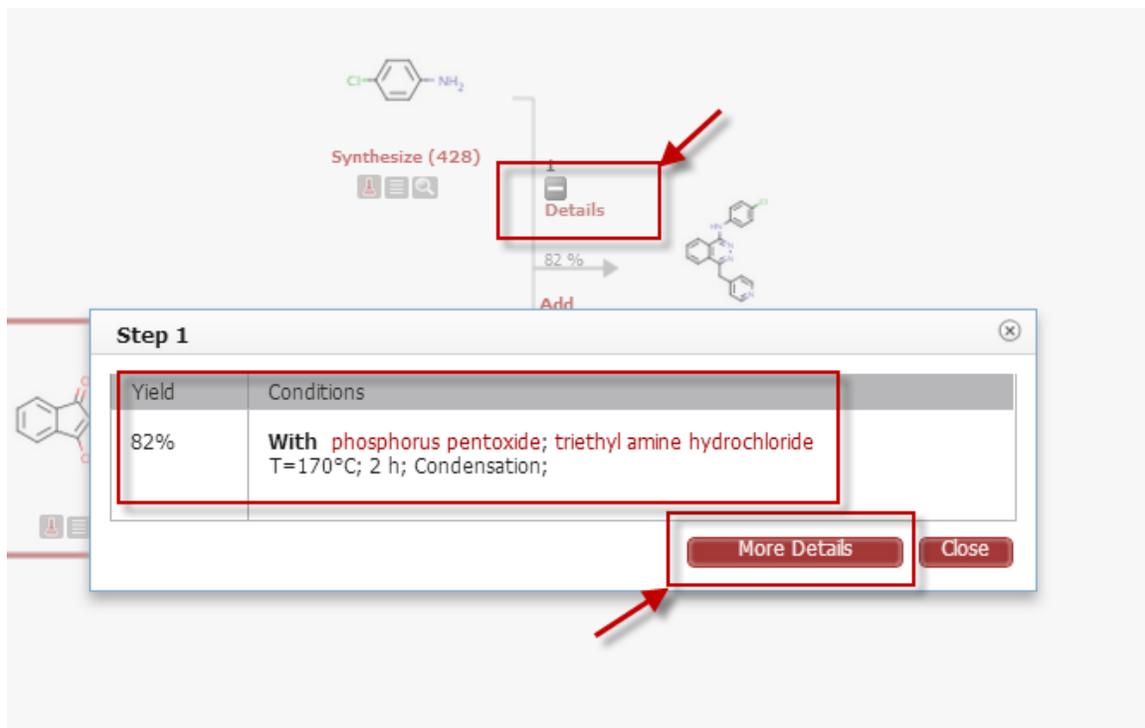
Synthesis Plan interface showing a reaction network:

- Reaction 1: 4-chloroaniline (Synthesize (428)) reacts to form an intermediate (Synthesize (3)) with 82% yield.
- Reaction 2: The intermediate (Synthesize (3)) reacts to form the final product (Synthesize (428)) with 82% yield.

- 并按照此操作，点击中间体下方的**Synthesize**，来完成整个路线的设计：



- 可以点击每一步反应箭头上方的**Details**来查看该步反应的条件：



- 也可以点击**More Details**来查看更为详细的反应条件和所引文献，并可以点击**Full Text**，找到全文下载界面。

Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 82%	With phosphorus pentoxide; triethyl amine hydrochloride T=170°C; 2 h; Condensation;	<b>Bold, Guido; Altmann, Karl-Heinz; Frei, Joerg; Lang, Marc; Manley, Paul; Buchdunger, Elisabeth; Cozens, Robert; Ferrari, Stefano; et al.</b> Journal of Medicinal Chemistry, <b>2000</b> , vol. 43, # 12 p. 2310 - 2323 Title/Abstract <a href="#">Full Text</a> View citing articles Show Details
	<input type="checkbox"/>	With P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ; conc. ammonia; triethyl amine hydrochloride in chloroform; water <a href="#">Show Experimental Procedure</a>	<b>Brazzell, Romulus Kimbro</b> Patent: US2003/171375 A1, <b>2003</b> ; Title/Abstract <a href="#">Full Text</a> Show Details
	<input type="checkbox"/>	With P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ; conc. ammonia; triethyl amine hydrochloride in chloroform; water <a href="#">Show Experimental Procedure</a>	<b>CIBA Vision Corporation</b> Patent: US6271233 B1, <b>2001</b> ; Title/Abstract <a href="#">Full Text</a> Show Details

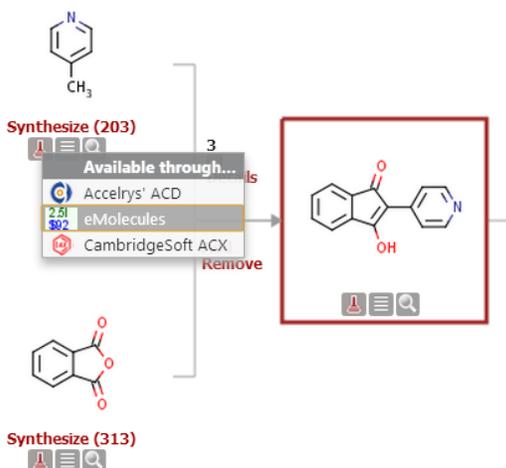
▼ Show All Remaining Details (2)

- 可以点击**Show Experimental Procedure**来查看该步反应的操作步骤：

Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 82%	With phosphorus pentoxide; triethyl amine hydrochloride T=170°C; 2 h; Condensation;	<b>Bold, Guido; Altmann, Karl-Heinz; Frei, Joerg; Lang, Marc; Manley, Paul; Buchdunger, Elisabeth; Cozens, Robert; Ferrari, Stefano; et al.</b> Journal of Medicinal Chemistry, <b>2000</b> , vol. 43, # 12 p. 2310 - 2323 Title/Abstract <a href="#">Full Text</a> View citing articles Show Details
	<input type="checkbox"/>	With P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ; conc. ammonia; triethyl amine hydrochloride in chloroform; water <a href="#">Hide Experimental Procedure</a>	<b>Brazzell, Romulus Kimbro</b> Patent: US2003/171375 A1, <b>2003</b> ; Title/Abstract <a href="#">Full Text</a> Show Details

**4: 1-(4-Chloroanilino)-4-(4-pyridylmethyl)phthalazine**  
Example 4  
1-(4-Chloroanilino)-4-(4-pyridylmethyl)phthalazine  
A mixture of 14.19 g (0.1 mol) phosphorus pentoxide, 13.77 g (0.1 mol) triethylamine hydrochloride and 12.76 g (0.1 mol) 4-chloroaniline is heated. A homogeneous melt has formed (about 20 min).  
To the melt, 5.93 g (0.025 mol) 4-(4-pyridylmethyl)-1(2H)-phthalazinone (for preparation see German Auslegeschrift no. 1 061 788 [published 23.07.2000] C.  
After the reaction mixture has cooled to about 100° C., 200 ml of water is added.  
Stirring is continued until the temperature reaches about 30° C., and then 20 ml conc. ammonia (30percent aqueous ammonium hydroxide solution) is then added, and the mixture is cooled in an ice bath.  
The crystallate obtained is filtered off and washed with acetate and ether.  
After recrystallization from methanol and drying under HV for 3 h at 120° C., the title compound is obtained; m.p.: 94-95° C.; ESI-MS: (M+H)<sup>+</sup>=

- 可以点击试剂左下方的红色小三角烧瓶来查看该化合物的供应商信息：



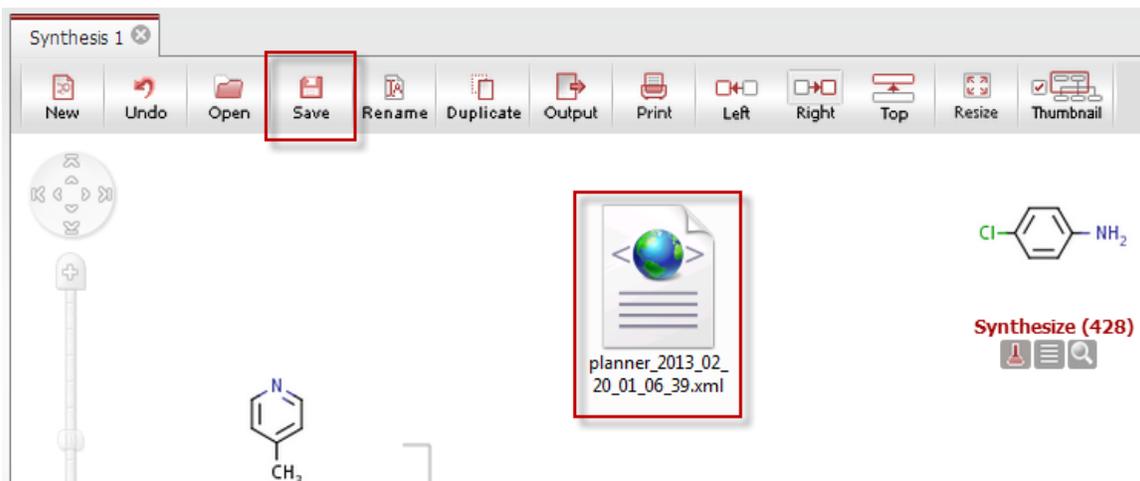
1. **eMolecules**，包含价格和是否有货的免费在线数据库（当您在 **Reaxys** 中搜索结构时，将自动搜索该数据库，且搜索结果将在结果页面上的单独选项卡中显示。）

2. **Accelrys ACD**，需要另外获得许可

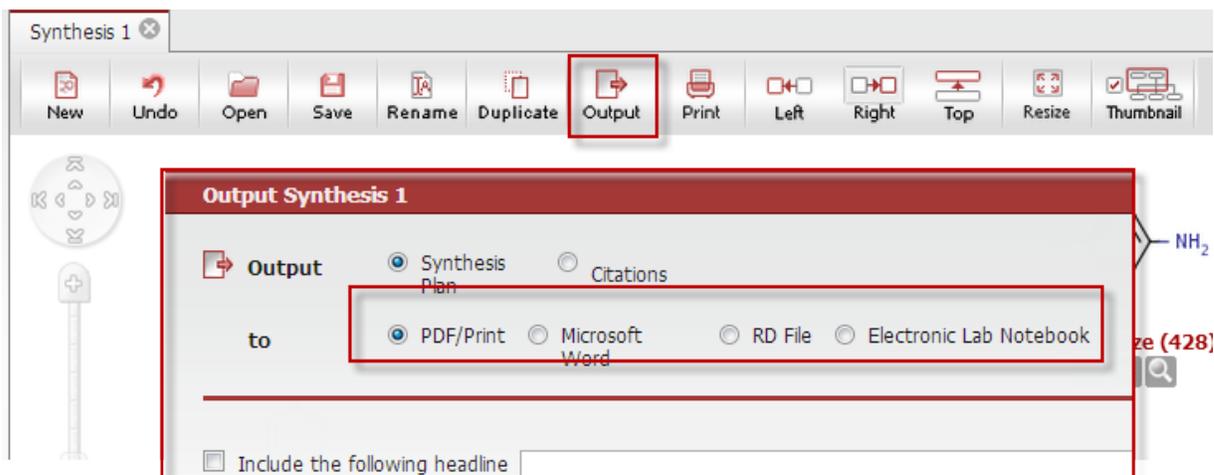
3. **CambridgeSoft ACX**，需要另外获得许可。

## 合成路线的保存和导出

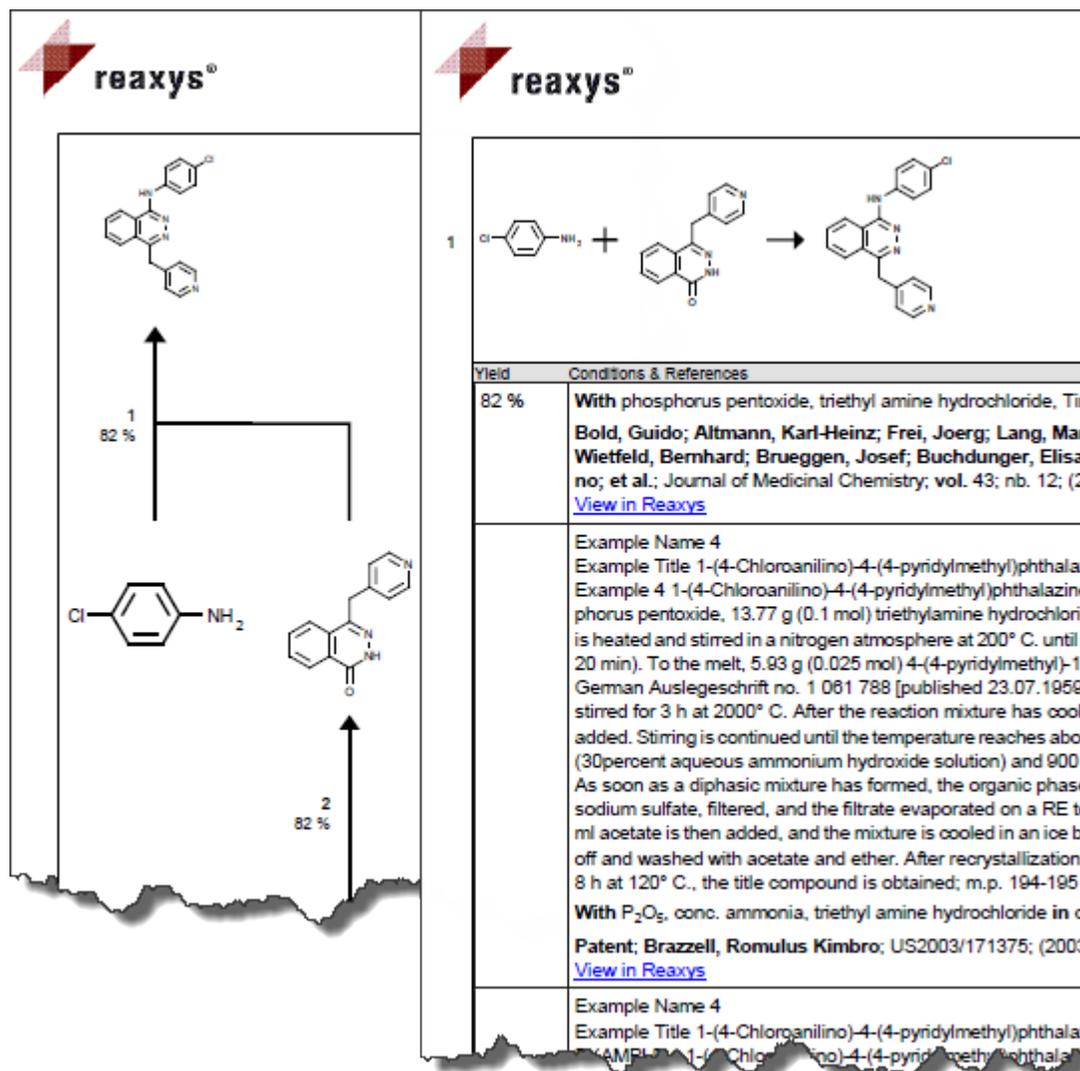
- 可以单击功能条中的**Save**将Synthesis Plan进行保存成XML格式文件，并随时可以使用**Open**键进行打开：



- 可以单击功能条中的**Output**将Synthesis Plan进行导出，导出格式包括PDF, Word, RD File, Electronic Lab Notebook:



- 所导出报告包括合成路线、每一步的反应的方程式、条件、操作步骤、引用文献链接等等：（以PDF为例）



# 合成路线设计技巧

**Tip 1:** 可以在Reaxys的任意一个界面点击化合物下方的**Synthesize**来启动Synthesis Plan:

Structure	Structure/Compound Data	N° of preparations All Preps   All Reactions	Available Data
 Synthesize Hide Details	<b>Chemical Name:</b> 1-(4-chloro-anilino)-4-(pyridin-4-yl-methyl)-phthalazine <b>Reaxys Registry Number:</b> 8638800 <b>CAS Registry Number:</b> 212141-54-3 <b>Type of Substance:</b> heterocyclic <b>Molecular Formula:</b> C <sub>20</sub> H <sub>15</sub> ClN <sub>4</sub> <b>Linear Structure Formula:</b> C <sub>20</sub> H <sub>15</sub> ClN <sub>4</sub> <b>Molecular Weight:</b> 346.819 <b>InChi Key:</b> YCOYDOIWSSHVCK-UHFFFAOYSA-N	6 prep out of 8 reactions.	Identification Physical Data (3) Spectra (4) Bioactivity/Ecotox (154) Use/Application (904)

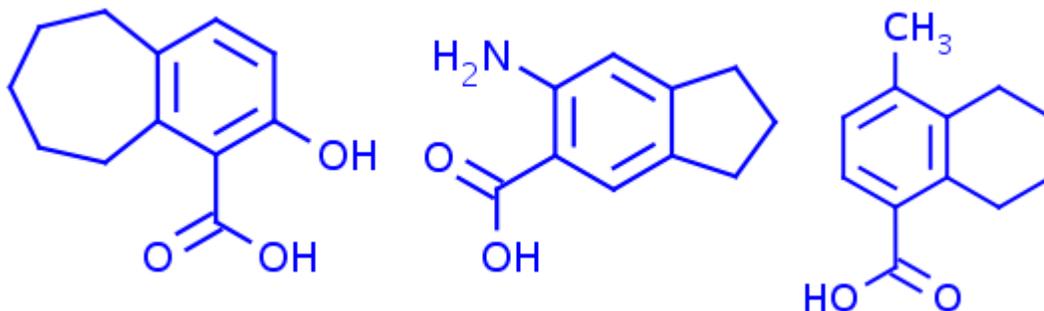
**Tip 2:** 可以点击箭头并选择**Copy Reaction to Synthesis Plan**来调用**Synthesis Plan**功能:

Yield	Conditions	References
 Synthesize	 Synthesize	 8237 reactions

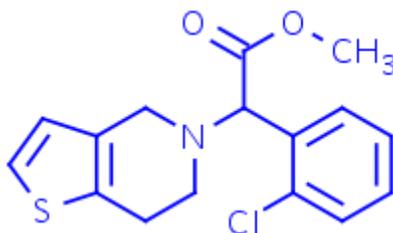
**Tip 3:** 如果在设计路线时，所涉及的中间体没有相应的合成条件，Reaxys会自动启用**Similar Search**找到相似化合物的合成条件。

## 实践练习

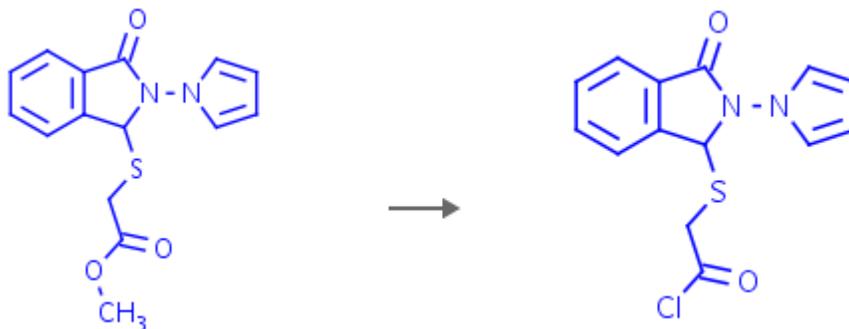
- I. **双环羧酸**。找出类似如下物质，一个环为包括 5 - 7 元大小不等的烷基环，另一个环包括一个附着羧基且附着氨基、羟基、或甲基的化学物质。



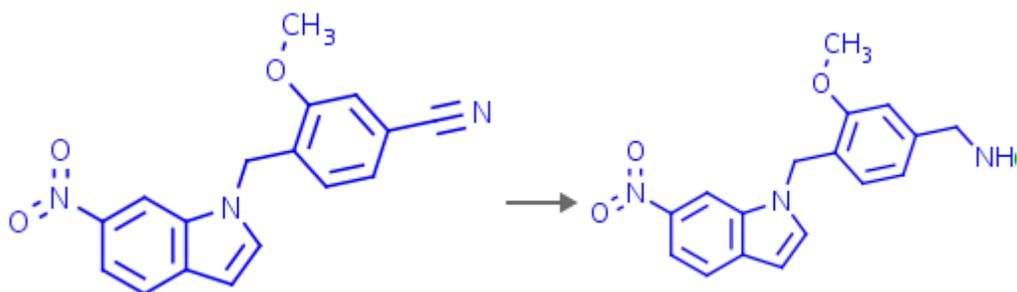
- II. **波利维**。画出如下所示的波利维结构（氯吡格雷）。按图（As Drawn）搜索。检索到多少种物质？再次搜索，但这次搜索前，请确保波利维是 R 构型。检索到多少种物质？现在编辑结构，扩大搜索范围；结果是下列杂环可以是“任何杂环”。检索到多少种物质？



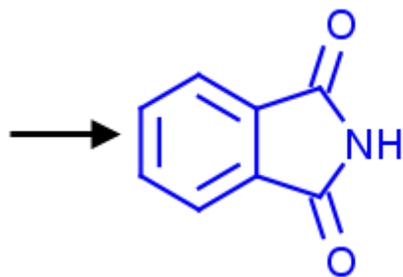
- III. **甲酯转换为碳酰氯**。找出将甲酯转换为碳酰氯的方法。示例如下所示。

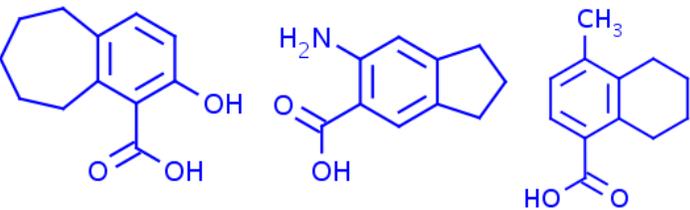
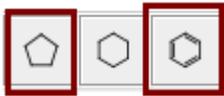
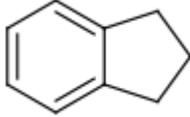
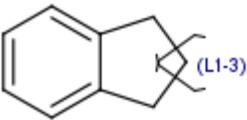
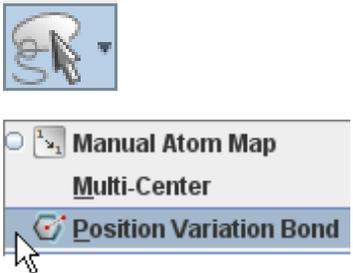
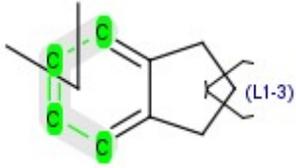


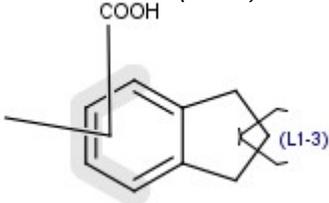
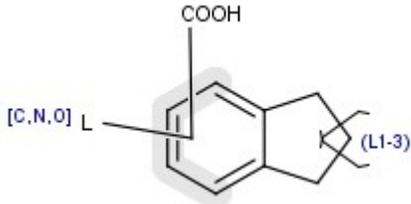
- IV. **非反应官能团。** 找出在非反应硝基存在的情况下，芳香腈转换为胺类的反应。示例如下所示。

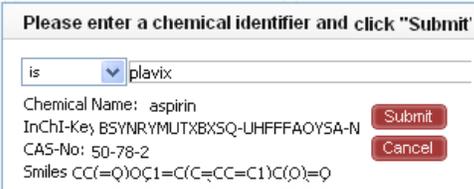
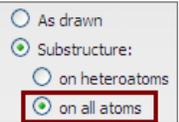
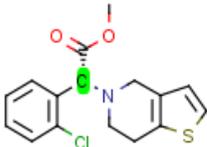


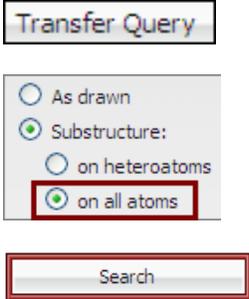
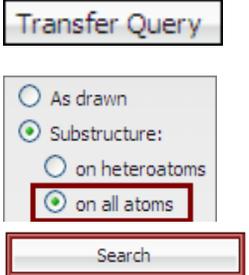
- V. **邻苯二甲酰胺合成。** 搜索邻苯二甲酰胺制备方法。指出生成物中形成的化学键或断裂的化学键。

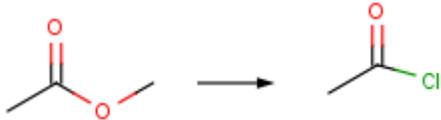
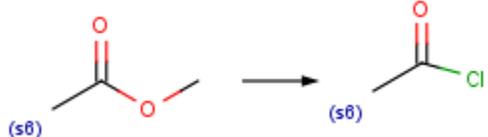
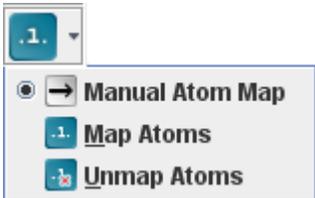
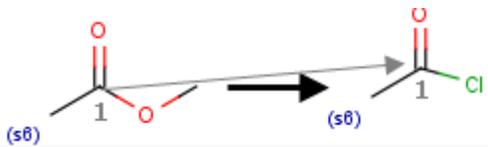
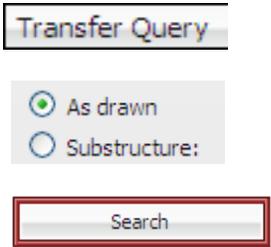


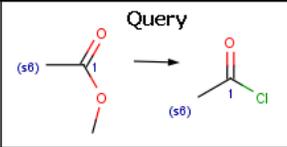
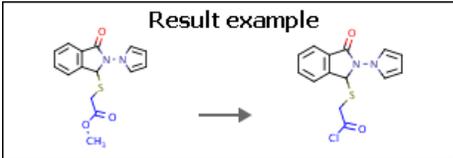
	双环羧酸
<p><b>练习 1</b></p>	<p>找出类似如下物质，一个环为包括 5 - 7 元大小不等的烷基环，另一个环包括一个附着羧基且附着氨基、羟基、或甲基的化学物质。</p> 
	<p>1. 使用模板画出二氢化茚。</p> 
	<p>2. 使用套索工具选择原子。右键单击并依次选择<b>编辑原子 (Edit Atom)</b> &gt; <b>链节点 (Link Node)</b> &gt; <b>L1-3</b>。</p> 
	<p>3. 选择如下所示的 4 个原子。然后右键单击空白区域，并依次选择<b>编辑结构 (Edit Structure)</b> &gt; <b>添加 (Add)</b> &gt; <b>位置变异键 (Position Variation Bond)</b>。立即再次右键单击，并再次依次选择<b>编辑结构 (Edit Structure)</b> &gt; <b>添加 (Add)</b> &gt; <b>位置变异键 (Position Variation Bond)</b>。</p> 

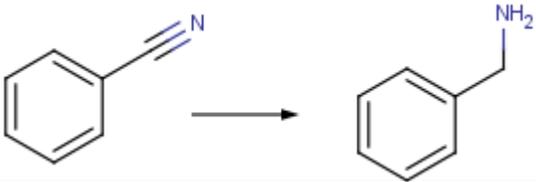
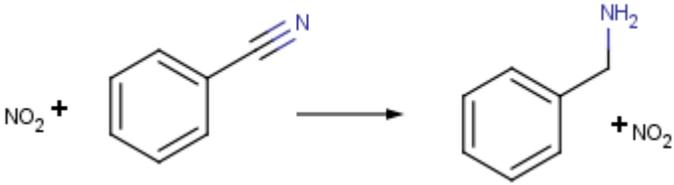
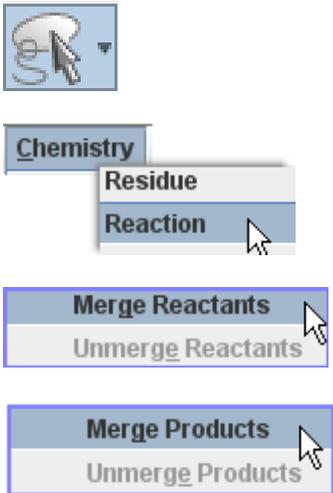
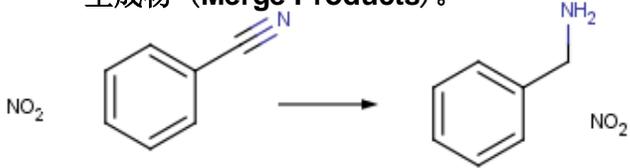
	<p>4. 在其中一个位置变异键 (<b>Position Variation Bonds</b>) 上, 单击原子; 然后键入羧基 (<i>cooh</i>)。</p> 
 <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; display: inline-block; margin: 5px;">Atom list</div> <div style="display: flex; gap: 10px; margin: 5px;"> <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; display: inline-block; background-color: #f4a460;">C</div> <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; display: inline-block; background-color: #f4a460;">N</div> <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; display: inline-block; background-color: #f4a460;">O</div> </div> <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; display: inline-block; margin: 5px;">Close</div>	<p>5. 在另一个位置变异键 (<b>Position Variation Bonds</b>) 上, 单击<b>更多 (More)</b> 按钮, 创建原子列表; 然后单击<b>原子列表 (Atom List)</b> 按钮, 并选择 <b>C</b>、<b>N</b> 和 <b>O</b>。</p> 
<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; display: inline-block; margin: 5px;">Transfer Query</div> <div style="margin: 5px;"> <input checked="" type="radio"/> As drawn           <input type="radio"/> Substructure:       </div> <div style="border: 2px solid red; padding: 5px; display: inline-block; margin: 5px;">Search</div>	<p>6. 单击<b>转移查询 (Transfer Query)</b> 按钮。选择<b>按图 (As Drawn)</b>。 单击<b>搜索 (Search)</b>。</p>
	<p><b>结果:</b> 约 29 种物质。</p>

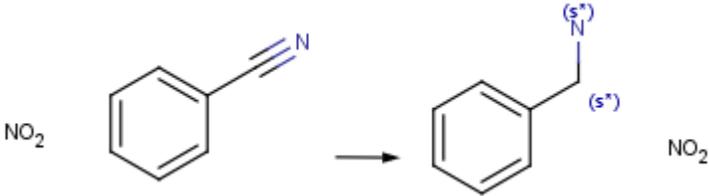
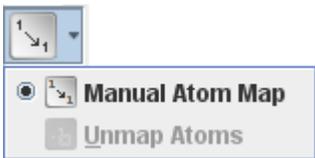
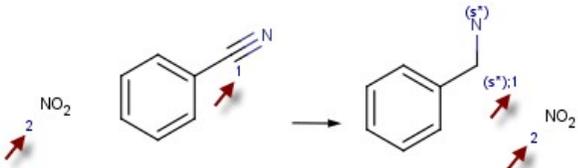
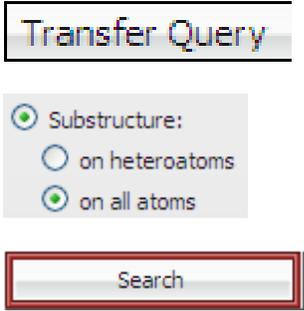
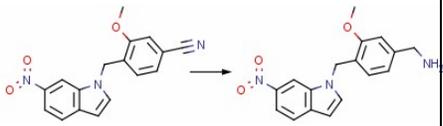
	波利维
<p><b>练习 2</b></p>	<p><b>波利维。</b> 搜索如下所示的波利维（氯吡格雷）子结构。检索到多少种物质？现在编辑结构，以便它可描述 R 构型并返回子结构搜索。检索到多少种物质？</p> <p>现在编辑结构，扩大搜索范围；以便下列杂环可以是“任何杂环”。检索到多少种物质？</p> 
	<p>1. 使用<b>按照名称生成结构 (Generate Structure from Name)</b>，获得波利维结构。</p> 
 	<p>2. 将搜索类型设置为<b>所有原子的子结构 (Substructure on all atoms)</b>。单击<b>搜索 (Search)</b>。</p> <p><b>结果：约 171 种物质。</b></p>
 	<p>3. 返回到查询页面。双击，将该结构放入 MarvinSketch。选择手性原子；右键单击并依次选择：<b>编辑原子 (Edit Atom) &gt; 立体 (Stereo) &gt; R/S &gt; R。</b></p> 

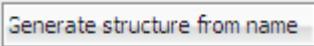
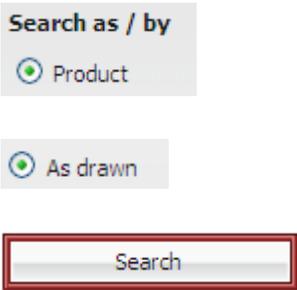
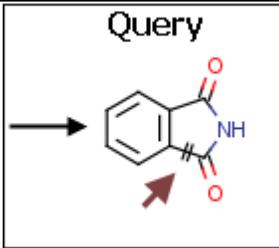
	<p>4. 单击<b>转移查询 (Transfer Query)</b> 按钮。选择<b>所有原子</b>的子结构 (<b>Substructure on all atoms</b>)。单击<b>搜索 (Search)</b>。</p> <p><b>结果:</b> 约 12 种物质。</p>
	<p>5. 返回到<b>查询页面 (Query page)</b>；然后双击，打开 MarvinSketch。删除杂环（删除全部，但不包括 <b>N</b>）。单击 <b>Reaxys 非专利药物组 (Reaxys Generic Groups)</b> 中的“<b>r</b>”按钮，选择 <b>CHC</b>，再单击<b>关闭 (Close)</b>，最后单击 <b>N</b>，</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>以便使用 <b>CHC</b> 代替。</p>
	<p>6. 单击<b>转移查询 (Transfer Query)</b>。选择<b>所有原子</b>的子结构 (<b>Substructure on all atoms</b>)。单击<b>搜索 (Search)</b>。</p>
	<p><b>结果:</b> 约 16 种物质。</p>

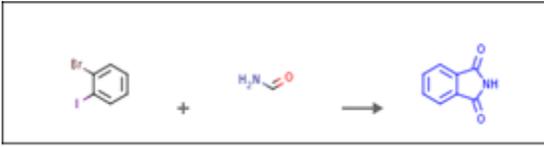
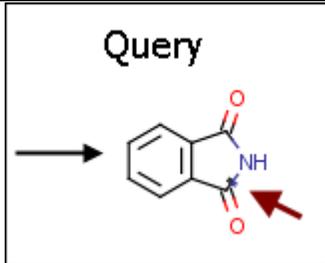
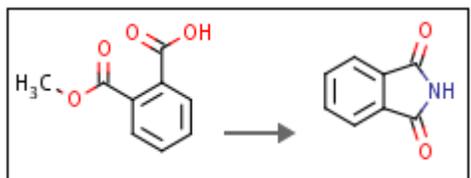
	甲酯转换为碳酰氯
<p>练习 3</p>	<p>找出将甲酯转换为碳酰氯的反应。</p>
	<p>1. 在 MarvinSketch 设置查询：首先，画出骨干：</p> 
	<p>2. 键入 <code>[.s 6]</code>。然后在相应的原子上单击，允许置换：</p> 
	<p>3. 单击原子映射 (Atom Mapping) 工具 (箭头 (Arrow) 工具下方)，然后再单击反应物中的 CO 中的碳原子，并将其拖拽至生成物中的 CO 中的碳原子，从而映射反应中的相应原子：</p> 
	<p>4. 单击转移查询 (Transfer Query)。选中查询页面上的“无其他环”复选框 (您还可以选中“无同位素”、“无根基”等复选框)。选择按图 (As Drawn)。单击搜索 (Search)。</p>

	<p>5. </p>
<p></p>	<p>结果：约 1857 个反应。</p>

	非反应硝基
<p>练习 4</p>	<p>找出在非反应硝基存在的情况下，芳香腈转变为胺类的反应</p>
	<p>1. 首先，绘制该反应的核心并添加箭头。</p> 
	<p>2. 可将硝基作为碎片绘制，这样，其最终位置就不会十分确定。可以使用套索 (Lasso) 选择工具，单击空白区域，然后键入 “NO2”，进行添加。</p> 
	<p>3. 注意，该图将 NO2 显示为另一种反应物。将所有碎片合并，可改变该情况。使用套索 (Lasso) 工具，选择 2 种反应物的碎片，然后依次选择化学 (Chemistry) &gt; 反应 (Reaction) &gt; 合并反应物 (Merge Reactants)。选择生成物碎片，然后依次选择化学 (Chemistry) &gt; 反应 (Reaction) &gt; 合并生成物 (Merge Products)。</p> 

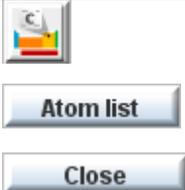
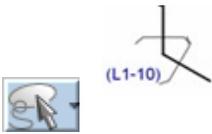
	<p>4. 限制生成物中的 <b>C</b> 和 <b>N</b> 上的替代物，这样，在进行子结构搜索时，生成物仍是胺类。单击空白区域，键入 <b>.S*</b>，然后单击 <b>C</b> 和 <b>N</b>。</p> 
	<p>5. 最后，<b>映射</b>该反应。选择<b>映射 (Map)</b> 工具，在腈化物上单击 <b>C</b>，然后拖至胺类的 <b>C</b> 上。使用 <b>NO2</b> 重复。</p> 
	<p>6. 单击<b>转移查询 (Transfer Query)</b>。在 Reaxys 中，选择<b>所有原子的子结构 (Substructure on all atoms)</b>。单击<b>搜索 (Search)</b>。</p>
<p>结果示例:</p> 	<p>结果: 约 59 个反应。</p>

	邻苯二甲酰亚胺的制备。
练习 5	搜索邻苯二甲酰亚胺制备方法。指出生成物中形成的化学键或断裂的化学键。
	1. 在反应查询 (Reactions Query) 页面, 单击从名称产生结构 (Generate Structure from Name) 按钮并键入邻苯二甲酰亚胺 (phthalimide)。
	2. 选择生成物 (Product) 和按图 (As Drawn)。单击搜索 (Search)。
	结果: 约 511 个反应。
	3. 单击查询导航栏, 返回至查询 (Query) 页面。双击打开 MarvinSketch。
	4. 使用套索工具, 右键单击下方显示的化学键。然后依次选择编辑化学键 (Edit Bond) > 反应中心 (Reacting Center) > 形成 (Make) 或断裂 (Break)。

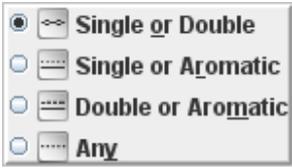
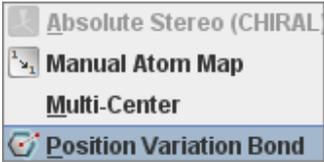
<p>Search as / by</p> <p><input checked="" type="radio"/> Product <input checked="" type="radio"/> As drawn</p> <p>Search</p>	<p>5. 单击<b>转移 (Transfer)</b>。选择生成物 (<b>Product</b>) 和<b>按图 (As Drawn)</b>。单击<b>搜索 (Search)</b>。</p>
<p>结果示例:</p> 	<p>结果: 约 16 个反应。</p>
	<p>6. 单击查询导航栏, 返回至<b>查询 (Query)</b> 页面。双击打开 MarvinSketch。</p>
<p>Query</p> 	<p>7. 右键单击标记的化学键, 然后选择<b>编辑化学键 (Edit Bond)</b> &gt; <b>反应中心 (Reacting Center)</b> &gt; <b>无 (None)</b>。然后右键单击下方显示的化学键, 之后选择<b>编辑化学键 (Edit bond)</b> &gt; <b>反应中心 (Reacting Center)</b> &gt; <b>形成 (Make)</b> 或<b>断裂 (Break)</b>。</p>
<p>Search as / by</p> <p><input checked="" type="radio"/> Product <input checked="" type="radio"/> As drawn</p> <p>Search</p>	<p>8. 单击<b>转移 (Transfer)</b>。选择生成物 (<b>Product</b>) 和<b>按图 (As Drawn)</b>。单击<b>搜索 (Search)</b></p>
	<p>结果: 约64个反应</p>

## 快速参考指南

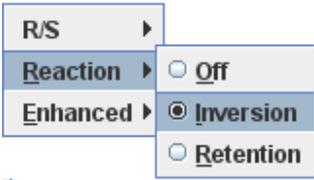
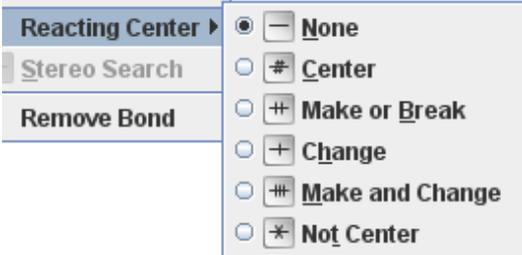
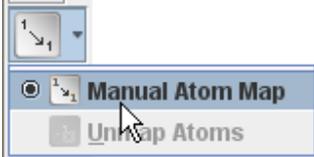
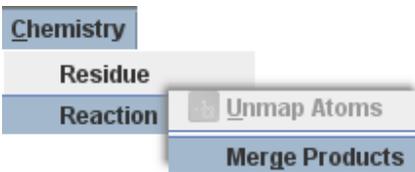
## 原子查询功能

	<p><b>原子列表 (Atom Lists)</b> — 要创建原子列表，请单击<b>更多 (More)</b> 按钮。然后单击<b>原子列表 (Atom List)</b> 按钮，单击所需元素，之后单击<b>关闭 (Close)</b>。鼠标光标指到此处时，列表即会出现。在查询中单击所需原子，即可应用<b>原子列表 (Atom List)</b>。</p>
	<p><b>允许的最大置换 (Allow maximum substitution)</b> — 进行<b>按图 (As Drawn)</b> 查询时，要打开网页进行置换，请在查询页面单击原子，然后键入 <b>.s 6</b> (点-s-6)。[依次按键，不能一起按] (根据美国键盘布局)</p>
	<p><b>限制置换 (Block substitution)</b> — 执行子结构搜索时，要限制网站上的置换，请在查询页单击原子，然后键入 <b>.s</b> (点-s-星号)。[依次按键，不能一起按] (根据美国键盘布局)</p>
	<p><b>链节点 (Link Node)</b> — 要定义重复原子的范围，请使用<b>套索选择 (Lasso Select)</b> 工具选择用作重复单元的原子，右键单击，然后选择<b>编辑原子 (Edit Atom) &gt; 链节点 (Link Node)</b>。然后选择数字。</p>
	<p><b>Reaxys 通用符号 (Reaxys Generic Groups)</b> — 要使用缩写，请在查询页单击原子，单击 <b>r</b> 按钮，然后选择缩略词。(更多 <b>Reaxys 通用符号 (Reaxys Generic Groups)</b> 的详情，请参见 <b>Reaxys 帮助文档</b>。)</p>
	<p><b>R/S 指定</b> — 右键单击手性原子，选择<b>编辑原子 (Edit Atom) &gt; 立体 (stereo) &gt; R/S</b>。</p>

## 化学键查询功能

	<p><b>键型 (Bond type)</b> — 要允许不同的化学键键型，请右键单击化学键，然后选择<b>编辑 (Edit) &gt; 化学键 (Bond) &gt; 类型 (Type)</b>。然后选择适当的选项。</p>
	<p><b>键拓扑 (Bond topology)</b> — 要指定检索环内键或链键，请右键单击相应的化学键，然后选择<b>编辑 (Edit) &gt; 化学键 (Bond) &gt; 拓扑 (Topology)</b>。然后选择适当的选项。</p>
	<p><b>位置变异键 (Position Variation Bond)</b> — 要允许在环内键上进行特定置换，同时不指定环内键的确切位置，请在允许置换的位置选择环内键的原子。然后选择<b>编辑结构 (Edit Structure) &gt; 添加 (Add) &gt; 位置变异键 (Position Variation Bond)</b>。</p>
	<p><b>E/Z 立体标签</b> — 要指定两个化学键，如 <b>E</b> 或 <b>Z</b>，请右键单击化学键，然后选择<b>编辑化学键 (Edit Bond) &gt; 立体搜索 (Stereo Search)</b>。</p>

## 反应查询功能

	<p><b>转化 (Inversion)/保持 (Retention)</b> — 要指定反应物和生成物间相应的构型，请右键单击原子并选择<b>编辑原子 (Edit Atom) &gt; 立体 (Stereo) &gt; 反应 (Reaction)</b>。然后选择适当的选项。</p>
	<p><b>反应中心 (Reacting Center)</b> — 要指定反应中哪个化学键会形成、断裂或改变，请右键单击化学键，然后选择<b>编辑化学键 (Edit Bond) &gt; 反应中心 (Reacting Center)</b>。然后选择适当的选项。</p>
	<p><b>映射 (Map)</b> — 要绘制反应，请单击<b>原子映射 (Atom Map)</b> 工具，然后在反应物中单击原子。将鼠标移至生成物中相应的原子上。</p>
	<p><b>合并反应物 (Merge Reactants)/生成物 (Products)</b> — 要合并碎片，请选择反应物或生成物碎片，然后选择<b>化学 (Chemistry) &gt; 反应 (Reaction) &gt; 合并反应物 (Merge Reactants)</b> (或<b>合并生成物 (Merge Products)</b>)。</p>

更多信息，请访问

[www.reaxys.com](http://www.reaxys.com)

**中国：**

上海，北京时间，上午 9: 00 至下午 6: 00

电话：+86 (021) 6133 3057; +86 (021) 6133 3078

电子邮件：[A.Xiang@elsevier.com](mailto:A.Xiang@elsevier.com); [Ya.Zhang@elsevier.com](mailto:Ya.Zhang@elsevier.com)

**美国：**

客户电子服务

（圣路易斯，中欧标准时间，上午 8: 00 至下午 8: 00）

电话：美国免费电话：+1 (888) 615 4500

电话：付费电话：+1 (314) 523 4900

电子邮件：[usinfo@elsevier.com](mailto:usinfo@elsevier.com)

巴西分公司电子邮件：[brinfo@elsevier.com](mailto:brinfo@elsevier.com)

**欧洲和所有其他地区：**

客户电子服务

（阿姆斯特丹，格林尼治时间加一小时，上午 9: 00 至下午 6: 00）

电话：+31 20 485 3767

电子邮件：[nlinfo@elsevier.com](mailto:nlinfo@elsevier.com)

**日本：**

客户电子服务

（东京办公室，日本标准时间，上午 9:30 至 下午 5:30）

电话：+81 (3) 5561 5035

电子邮件：[jinfo@elsevier.com](mailto:jinfo@elsevier.com)

网址：[japan.elsevier.com](http://japan.elsevier.com)

**亚太地区：**

客户电子服务

（新加坡办公室，新加坡标准时间，上午 9: 00 至下午 6: 00）

电话：+65 6349 0222

电子邮件：[sginfo@elsevier.com](mailto:sginfo@elsevier.com)



Reaxys® 是 Elsevier Properties SA 的注册商标，受法律保护，未经许可，不可擅用。