

Reaxys 实用功能介绍

目录

一、Reaxys 结构面板详解	4
1: Reaxys 中的检索模式	4
2: Reaxys 结构面板中的功能	4
基本功能:	5
A: 选择, 橡皮, 键, 链工具	5
不定位键的使用	6
配位键的使用	7
B: 开放取代, 原子锁定, 重复基团, R 基团, 键断裂, 键保护, 反应箭头, 原子匹 配	8
S Max 开放取代	8
S Lock 原子锁定	9
重复基团定义	10
R 基团自定义	10
键断裂, 键保护工具	12
反应箭头, 原子匹配工具	12
C: 常见的环系结构, 糖分子	13
D: 缩写官能团, Generic Group, 元素周期表, Atom List/Not List 定义	13
Generic Group 通用官能团定义	13
元素周期表, Atom List/Not List 定义	15
E: 通用原子, 原子查询属性, 常见原子	16
通用原子与原子查询属性定义	16
s+/s-的使用	18
s*的使用	18

h+/h-的使用	18
v+/v-的使用	18
rb+/rb-的使用.....	19
rb*的使用	20
u 的使用	21
F: 鼠标右键的使用.....	22
原子鼠标右键功能	22
同位素定义	23
离子定义	24
键鼠标右键功能	25
键的拓扑属性定义	25
反应中心定义	25
异构中心定义	26
二、Reaxys 中反应查询	27
1: 反应检索中常用定义工具	27
原子锁定工具	27
环锁定工具	27
碎片反应定义工具	28
2: 条件筛选时常用的筛选工具	28
筛选工具概览	29
催化剂分类工具	29
溶剂分类工具	30
反应类型分类工具	31
3: 其他反应检索	31
关键词联合反应检索方法	31
反应中温度, 时间, 压力等条件定义.....	32
三、合成计划的制定	32

四、数据库常见问题整理	35
1. 选择性氧化还原脱保护反应的定义.....	35
2. 盐化合物检索:	36
3. 将检索获得反应按文献归类筛选的方法:	38
4. 多元环定义 (以三-六元环为例)	39
5. 多片段检索和结构筛选的应用 (包含特定片段化合物和其他化合物的反应)	39
6. 非手性碳原子的顺反异构(E/Z 标记)的设置。	41
7. 不确定位点上发生取代, 且取代基团的数量不确定。	42

一、Reaxys 结构面板详解

1: Reaxys 中的检索模式

Reaxys 中涉及结构，反应的检索模式一共有 3 种，As Drawn, As Substructure, As Similar, 定义如下：

- As Drawn: 检索到的结构完全和所绘制结构一样，绘制的结构中定义重复片段，可以定义允许开放的原子
- As Substructure: 对结构中没有绘制出来或者延展出来的 H 进行任意取代，但是核心结构必须和所绘制的一样
- As Similar: 检索和所绘制结构相似的结构，可以是取代的相似，也可以是母核结构的相似，用不同的相似级别控制结构的输出。

2: Reaxys 结构面板中的功能

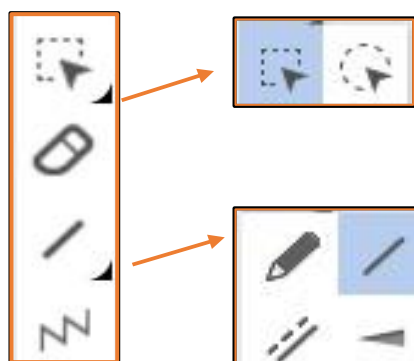


基本功能：



从左至右依次是，新建结构，打开结构，保存结构，向前撤销，向后撤销，剪切，复制，粘贴，放大缩小，鼠标放置具体功能上，可以看到功能定义。对于绝大多数用户习惯的从 Chemdraw 中复制结构到 Reaxys 面板，采用的方式是，在 Chemdraw 中将结构通过 Ctrl+Alt+C 复制，进入 Reaxys 后先点击面板激活，Ctrl+V 复制过来即可。

A：选择，橡皮，键，链工具



选择键中的两个选项，矩形选择和自由选择



铅笔	单键	双键	三键
芳香键	单键上	单键下	单键上或下
双键顺或反	顺反或未定义	单键或双键	单键或芳香键
双键或芳香键	不确定键	配位键	不定位键

功能详解（依次从上到下）：

- 选择功能，矩形选择框用于矩形选择，圆形选择框用于自由选择，如果所需要选择的原子和基团太过复杂，可以按住 Shift，然后用鼠标点选所需选择的原子。
- 橡皮工具，用于擦掉一个原子或键
- 键工具，点选右下角的黑色按钮，可以看到 Reaxys 中的 16 种键的定义，可以参考上图表格中的具体定义

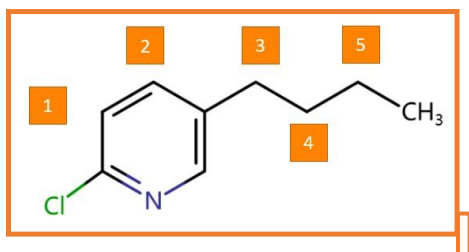
- 链工具，用于绘制链

不定位键的使用

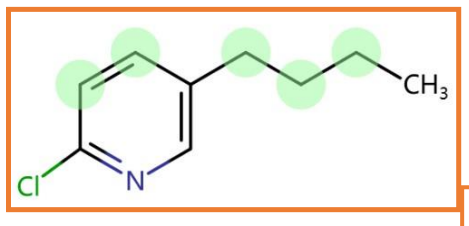


不定位键，用于绘制可变位置的取代键。链接位置可以在环结构上，也可以在链结构上。如以下结构，需要在 1, 2, 3, 4, 5 号碳原子上链接一个 NH_2 ，但是具体位置不定，

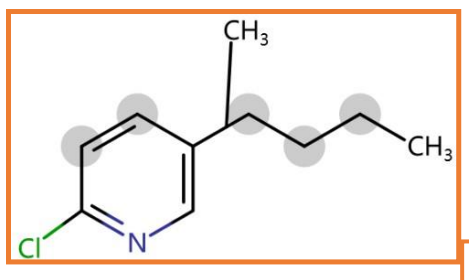
绘制方法如下：



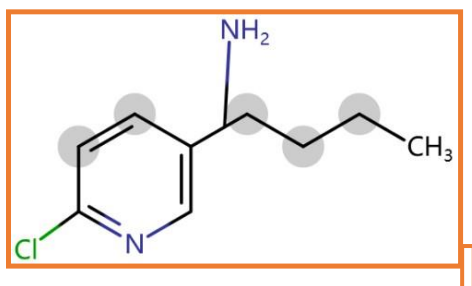
1: 用选择工具选择 1, 2, 3, 4, 5 号原子（可以按住 Shift，点选需要的原子）



2: 选择好后，添加不定位键，默认添加一个甲基，



3: 将 CH_3 换成 NH_2 ，如下



配位键的使用

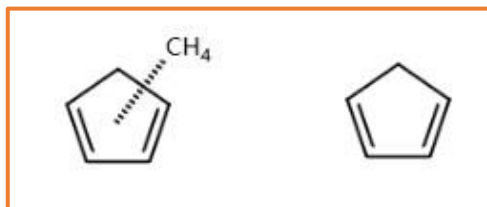


配位键，主要用于绘制配位化合物，如二茂铁的绘制过程如下：

1：先绘制两个环戊二烯，并选择其中一个环戊二烯，如下

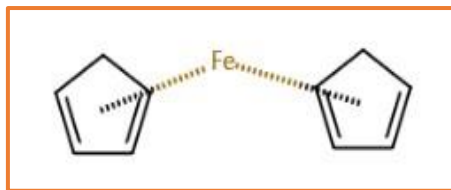
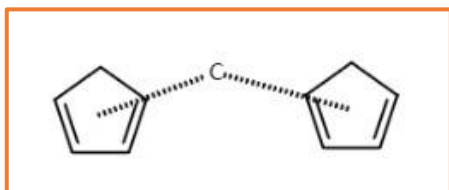


2：在当前选择下，点击配位键按钮，添加一根配位键，默认添加一个 CH₄，如下：



3：重复上述两个步骤，在另外一个环戊二烯上也添加一根配位键，并将这两个 CH₄ 拖

至重叠，并换成 Fe 即可，如下两个图



B: 开放取代, 原子锁定, 重复基团, R 基团, 键断裂, 键保护, 反应箭头, 原子匹配

	开放取代功能, 适用于AsDrawn检索
	原子锁定功能, 适用于AsSubstructure功能
	重复基团定义工具
	Smart R功能, 用于 R 基团自定义功能
	R Group Attachment, 用于 R 基团自定义时末端原子定义
	Make/break, 用于规定化学反应时断裂的键
	Protect, 用于保护化学键不变
	反应箭头, 反应方向
	原子匹配工具, 用于定义化学反应前后匹配原子

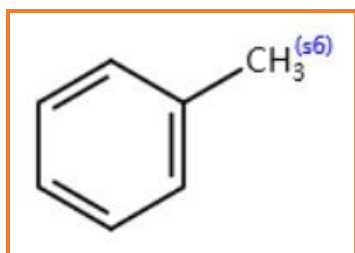
S Max 开放取代



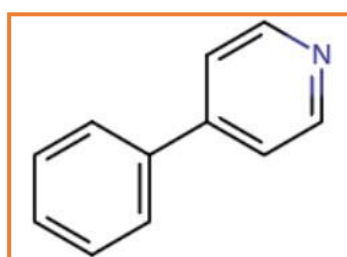
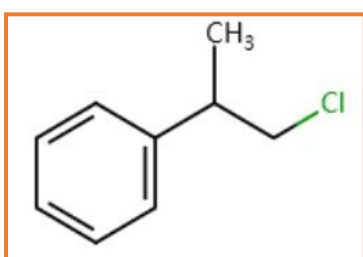
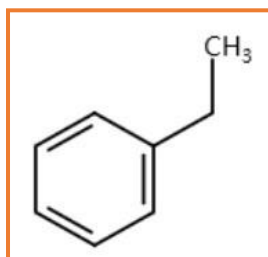
- 功能名称: 开放取代,
- 使用方法: 鼠标点击该功能后, 点击需要标记的原子即可
- 功能定义: 用于 As Drawn 检索, 在该检索模式下, 如果使用原子开放取代功能, 标记结构中的原子, 等同于在进行 As Drawn 检索时, 允许在被标记的位点上发生任意取代, 该原子会被标记上 S6

如:

As Drawn 检索以下结构:



可以出现的结构是:



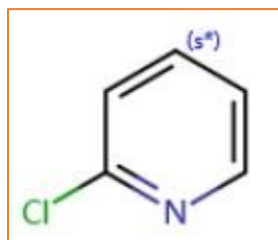
S Lock 原子锁定



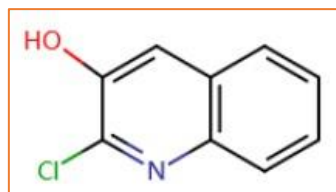
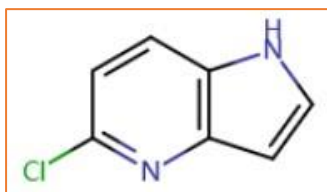
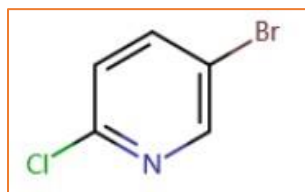
- 功能名称：原子锁定功能
- 使用方法：鼠标点击该功能后，点击需要标记的原子即可
- 功能定义：用于 As Substructure 检索，在该检索模式下，如果使用原子锁定功能，标记结构中的原子，等同于在进行 As Substructure 检索时，被标记的原子不能发生取代，该原子会被标记上 S*

如：

As Substructure 检索以下结构：



可以出现的结构是：

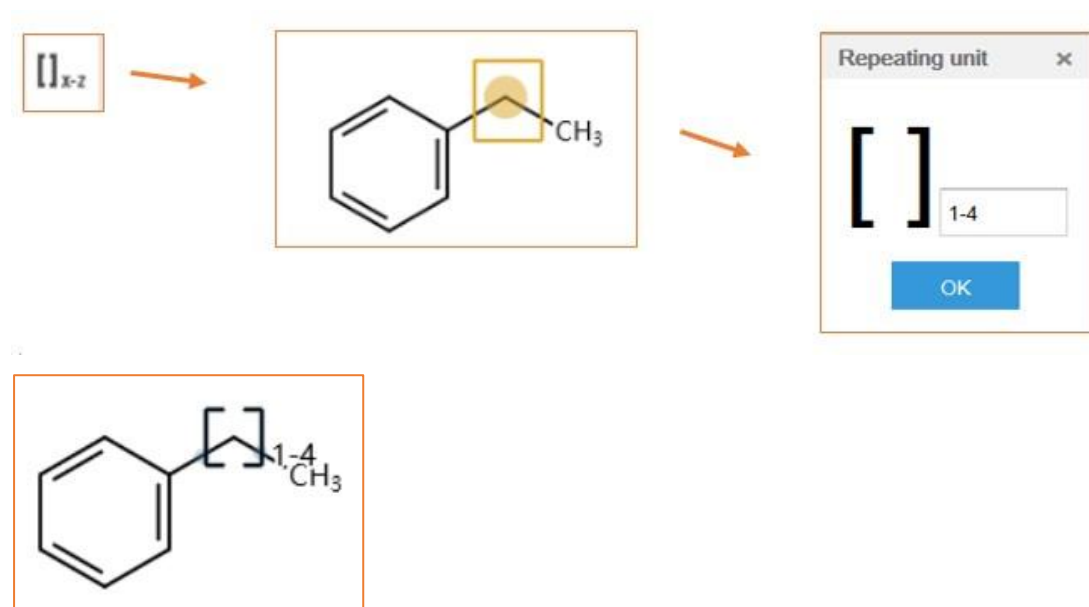


重复基团定义



- 功能名称：重复基团定义工具
- 使用方法：点击该工具，选择需要重复的基团，输入重复阈值
- 功能定义：As Drawn, As Substructure 检索模式下皆能使用，用于定义结构中存在的，确定的重复片段，通常意义上来说，定义在链上，用于控制链的长短，如果定义在环里面，可控制环结构的大小。

结构绘制方法：

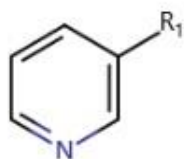


R 基团自定义

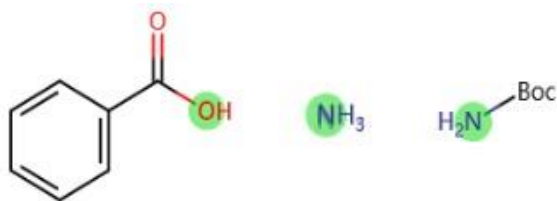


- 功能名称：Smart R, R Group Attachment, 通常会一起使用
- 使用方法：先用 R Group Attachment 定义 R Group 的多个片段中可以连接到母体结构的末端原子，在用 Smart R 将片段全部扩选至一个整体，最后将定义好的 R 链接至母体结构即可
- 功能定义：用于自定义 R 基团

绘制以下结构：

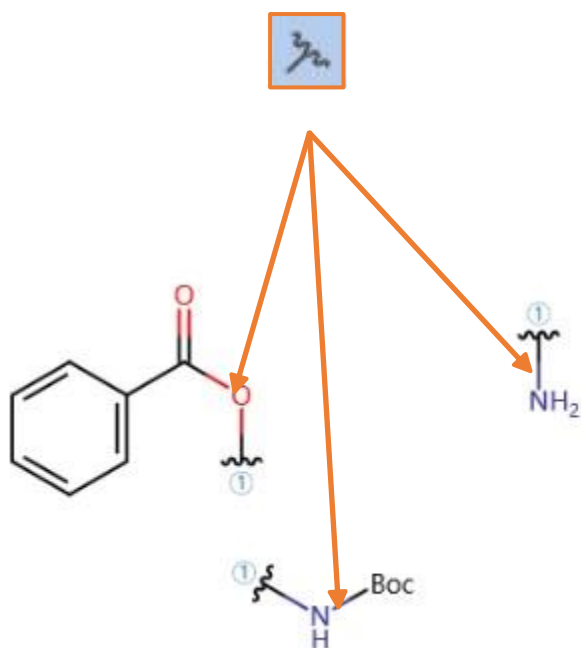


结构中，R1 基团可以是以下 3 种官能团，且通过被标记原子和吡啶环相连接：

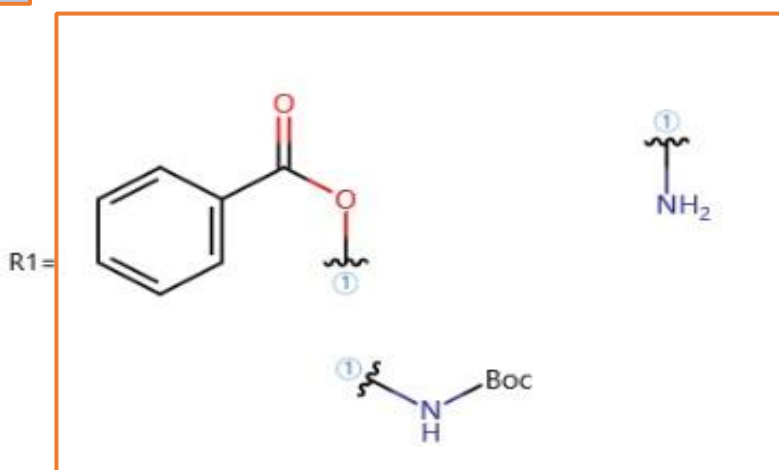


绘制方法：

1：绘制 3 个基团，并用 R Group Attachment 功能分别标记能与吡啶相连接的原子，
可以看到 3 个原子上会出现一个①的标记：



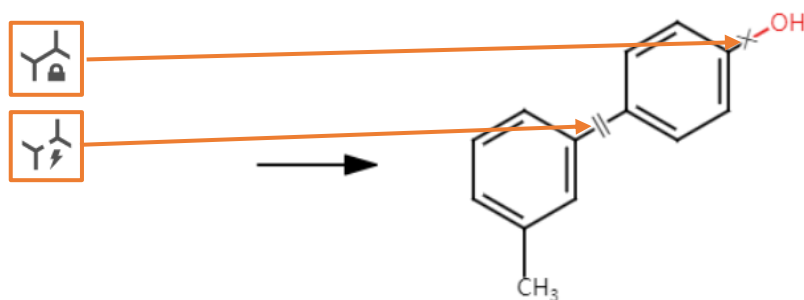
2：继续用 Smart R 将 3 个片段扩选起来，即可完成 R1 基团的定义



键断裂，键保护工具



- 功能名称，键断裂，键保护
- 使用方法，反应方向箭头用于定义反应方向，原子匹配工具用于定义反应前后必须匹配的原子，
- 使用方法，键断裂用于规定反应前后发送断裂的化学键，定义反应中心。键保护用于保护反应前后化学键不发生变化。



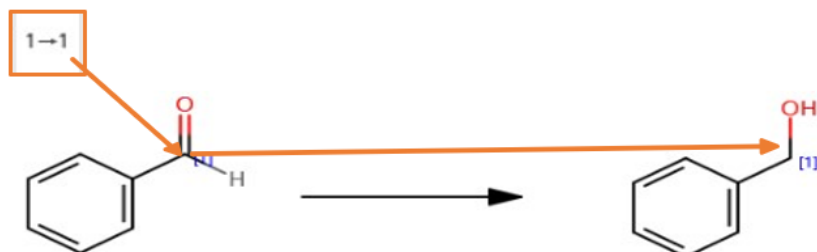
反应箭头，原子匹配工具



- 功能名称，反应方向箭头，原子匹配工具

- 使用方法，反应方向箭头用于定义反应方向，原子匹配工具用于定义反应前后必须匹配的原子，

使用原子匹配工具，在反应前后必须匹配的原子之间拉一条线，完成标记后，两个原子上会被标记上同样的数字，如下：



C: 常见的环系结构，糖分子



对于不同的环系结构，糖分子，直接选择后点击结构面板即可使用。

D: 缩写官能团， Generic Group，元素周期表， Atom List/Not List 定义

	缩写官能团，用于定义一些常见的缩写官能团
	Generic Group，用于定义一些通用官能团
	元素周期表，用于定义不同的元素，并包含 Atom List， Not List 功能

Generic Group 通用官能团定义



- 用于定义一些常见通用官能团，打开后如下，分链系，环系两个表格

链系表格：

Reaxys 链系通用官能团定义：

ACY: 任意的链
 ABC: 任意 C 链 (只含 C 原子)
 AYL: 含有炔基取代的链
 ALK: 含有烷基取代的链 (饱和链)
 AEL: 含有烯基取代的链

AHC: 含有杂原子的链
 AOX: 烷氧基

其他带 H 的分别是，前面对应基团或 H。

环系表格：

Reaxys 环系通用官能团定义：

CYC: 任意的环
 CBC: 任意 C 环 (只含 C 原子)
 ARY: 芳香基 (只含 C 原子)
 CAL: 环烷基 (饱和 C 环)
 CEL: 环烯基 (不饱和 C 环)

CHC: 任意杂环
 HAR: 含杂原子的芳香环
 CXX: 不含 C 原子的环

其他带 H 的分别是，前面对应基团或 H。

G 与 G*的定义：

定义如下：

- G 代表的是任意基团，GH 表示的是任意基团或 H
- G*和 G 的区别是，G*所连接的基团允许和母体成环，G 不允许成环

元素周期表，Atom List/Not List 定义



- 用于定义原子
- 用于定义不允许发生取代的原子列表，和允许发生取代的原子列表

Periodic table

X

1																	18	
1	H	2											13	14	15	16	17	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
Atom list			*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
NOT list			#	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Not List 的使用：

Not List 用于定义结构上不能发生取代的原子，如希望定义某原子上不能发生 N, O, S 取代，步骤如下：

1：打开元素周期表，点击 Not List。

2：点击 N, O, S, 点击 OK。

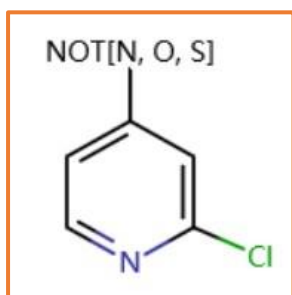
3：讲 Not List 列表链接到原子上。

Periodic table

X

1																			18
1	H	2																	He
2	Li	Be												B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12		Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd		In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg		Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn		Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
Atom list		*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
NOT list		#	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

OK

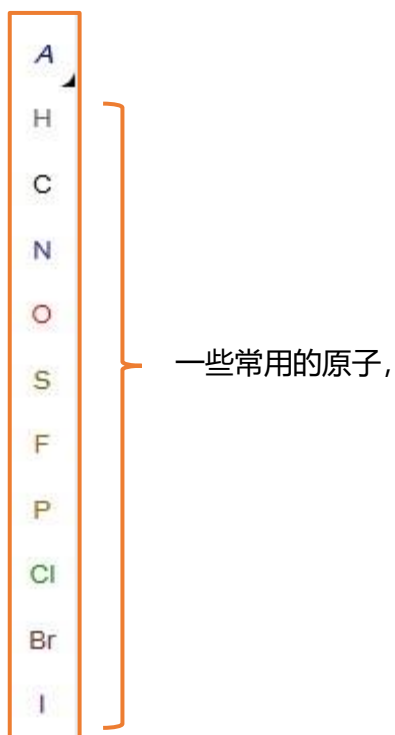


Not List 和 Atom List 的一些说明:

- Not List 默认表示该位点是有非氢取代的, 且一定不能是选择的原子

E: 通用原子, 原子查询属性, 常见原子

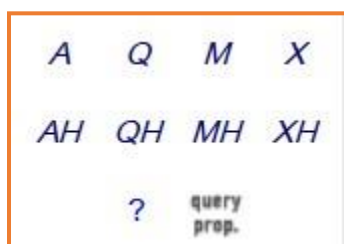
通用原子与原子属性定义



通用原子与原子查询属性定义



- 用于定义一些通用原子, 以及原子属性的定义
- 点开右下的黑图标, 可以看到



A: 任意非 H 原子

Q: 任意非 C, H 原子

M: 任意金属

X: 卤素

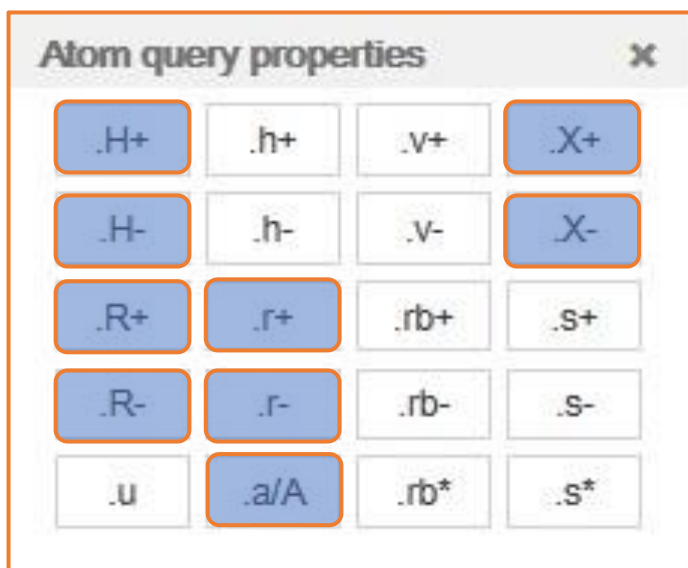
AH: 任意原子 (含 H)

QH: 任意非 C 原子 (含 H)

MH: 任意金属和 H

XH: 任意卤素和 H

Query prop: 原子查询属性列表



- 功能需要配合 As Drawn/As Substructue 的不同检索模式，如下：

功能名称	起作用模式	实现功能
------	-------	------

h+/h-	As Substructue	定义原子上确定的 H 的个数
v+/v-	As Substructue	定于原子的价态
rb+/rb-	As Substructue	定义原子上确定的环键的个数
rb*	As Substructue	锁定原子上的环键，允许取代，但不允许成环
u	As Substructue	定义原子上一定存在不饱和键或在芳环中
s*	As Substructue	锁定原子，不允许发生取代
s+/s-	As Drawn	定义原子上最大取代基个数

s+/s-的使用

As Drawn 检索时使用，定义标记的原子的最大非 H 取代数，在 As Drawn 检索时

如果需要开放特定原子，可以用该工具标记该原子上的最大取代基个数。s Max 是 s+/s-的一个特殊的用法，用于标记最大取代基个数。

s*的使用

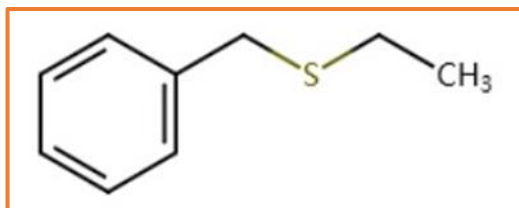
As Substructure 检索时，等同于 S Lock，让被标记的原子不发生取代，参考 S Lock 的使用。

h+/h-的使用

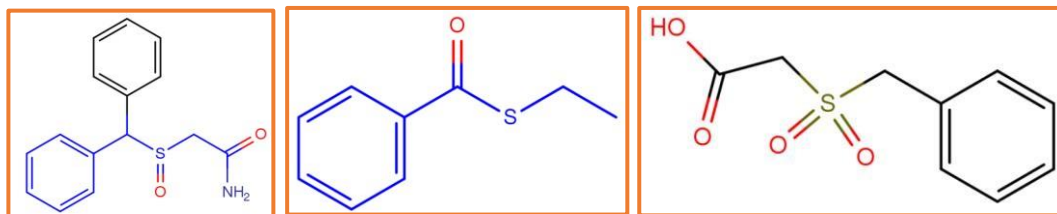
As Substructure 检索时，定义原子上必须出现的 H 的个数。

v+/v-的使用

As Substructure 检索时，定义原子的价位。如，As Substructure 检索以下结构：

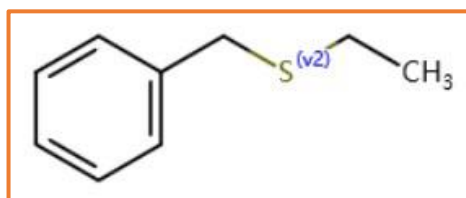


会出现以下的结果：

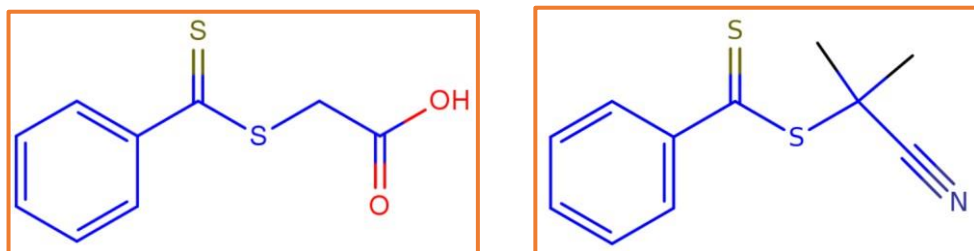


可以发现结构中的 S，可以是 2 价，4 价，6 价，如果需要 S 一定是 2 价，或者是 4 价，可以使用 v+/v-将 S 原子标记为 v2，或者 v4 即可。使用方法，选择 v+/v-后，点击 S 原子即可。

如用以下结构进行 As Substructure 检索，S 一定是 2 价，而不会出现亚砷和砷的结构。

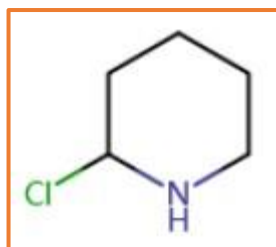


检索到的结果如下：

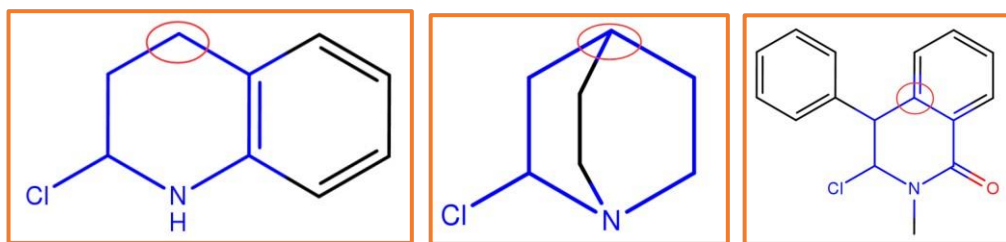


rb+/rb- 的使用

As Substructure 检索时，定义原子上确定的环键的个数。如，亚结构检索检索以下结构：



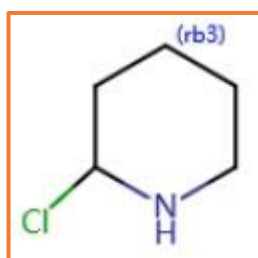
会出现以下结构：



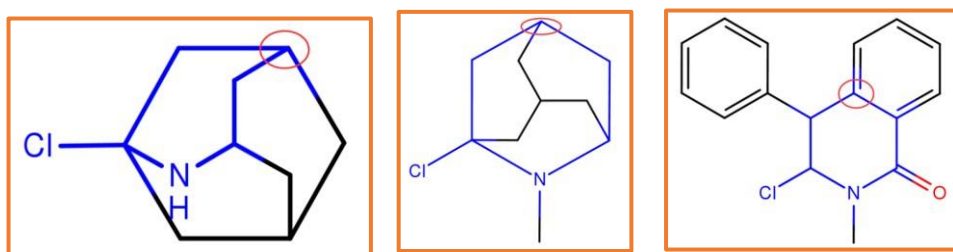
可以发现，被标记的 C 原子上会出现不同数量的环键（双键算 1 根环键），如果需要被标记的 C 原子上一定要有 3 根环键，可以使用 rb+/rb-将 C 原子标记为 rb3 即可。

使用方法，选择 rb+/rb-后，点击 C 原子即可。

如用以下结构进行 As Substructure 检索，C 上一定有 3 根环键。



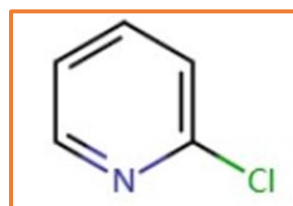
检索到的结构如下：



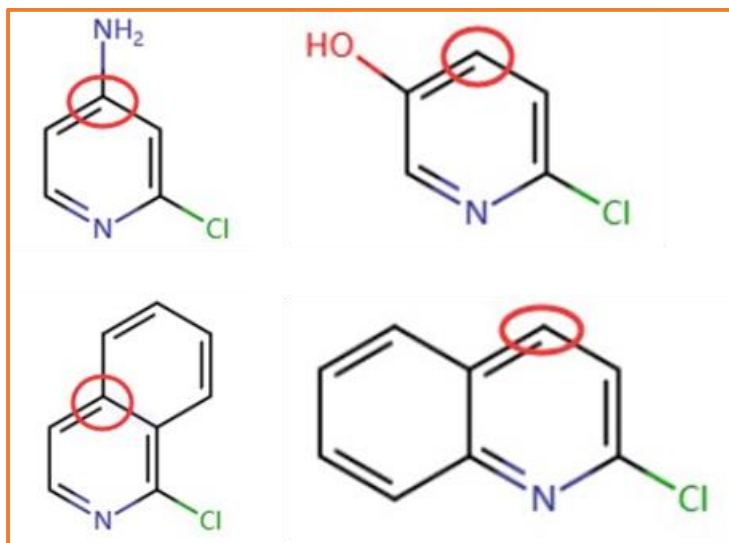
rb*的使用

As Substructure 检索时，被 rb*标记的原子不能再发生稠环取代，但允许链取代，而结构中的其他未标记的原子，可以发生稠环取代，也可以发生链取代。

如用 As Substructure 检索以下结构：



可以出现以下的结果，注意被标记的原子：

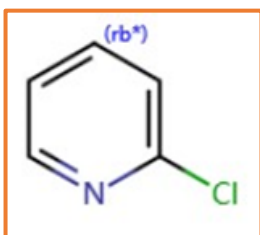


被标记的原子上取代情况：

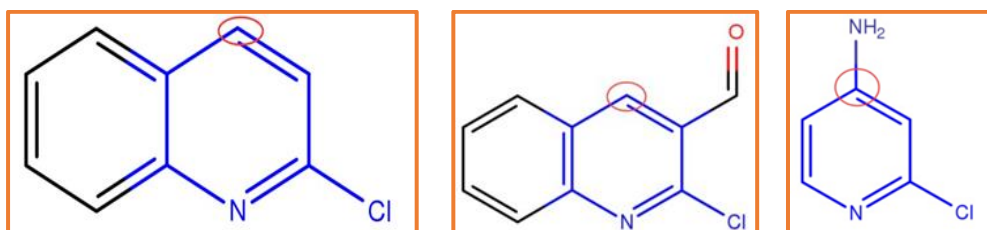
- 存在链取代
- 存在稠环取代
- 没有取代，而结构中其他位点存在链取代，或者稠环取代。

如果只是希望被标记的原子不允许出现稠环取代，但是其他原子允许发生稠环取代，

可以使用 rb* 标记该原子。使用方法，选择 rb*，点击该原子即可，如下：



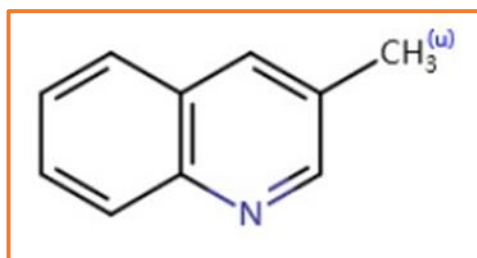
检索到的结果如下：



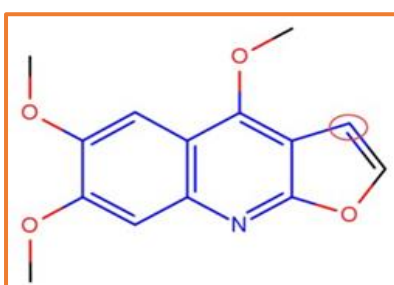
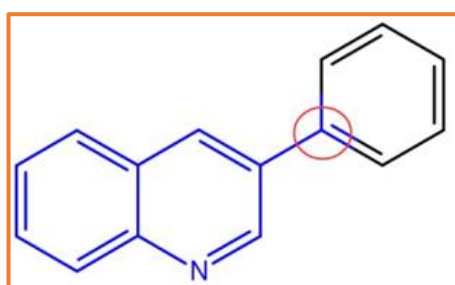
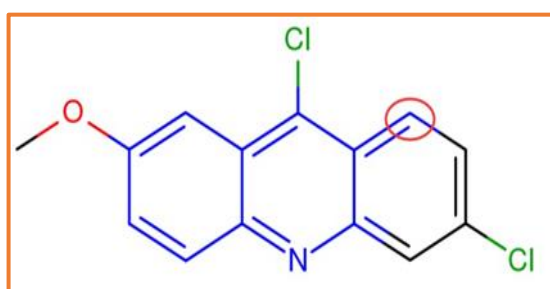
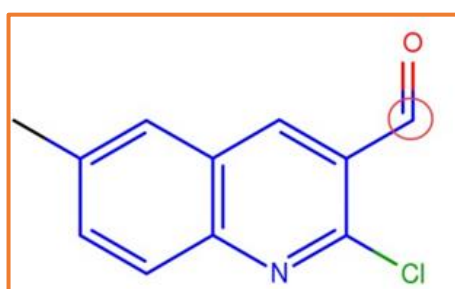
u 的使用

As Substructure 检索时，被 u 标记的原子上一定会存在一个不饱和键，或者该原

子会出现在芳环中。使用方法，用 u 标记该原子即可。如 As Substructure 检索以下结构：



检索出来的结构如下，注意被 u 标记的原子上链接的基团：

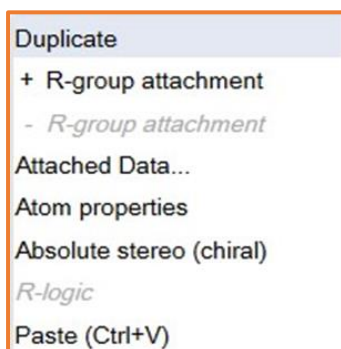


F: 鼠标右键的使用

鼠标处于选择键上时，可以使用鼠标右键，点击原子和键，用于定义被选中的原子和键的一些其他属性，如：同位素属性，键的拓扑性，反应键变化，异构中心。

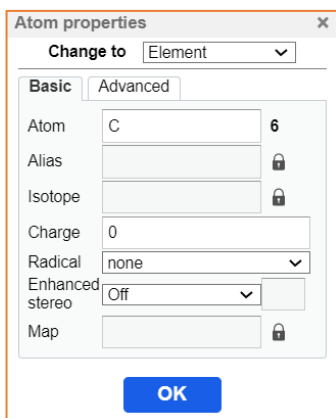
原子鼠标右键功能

右键点击原子，可以打开原子右键功能菜单，如下：



常用功能：

- +R Group attachment, -R Group attachment 等同于结构面板中的 R Group attachment, 可以查看之前相关内容。
- Atom Properties, 原子属性列表：



同位素定义

如果需要定义同位素，方法如下：

1. 选择该原子，右键打开 Atom Properties
2. 点击 Isotope 后面的“锁”
3. 输入同位素的质量数，如需定义 C¹³，输入 13 即可。
4. 氘代，氚代，可以用 D, T 表示，用键盘输入即可。

Atom properties

Change to: Element

Basic | Advanced

Atom: C 6

Alias:

Isotope: 13

Charge: 0

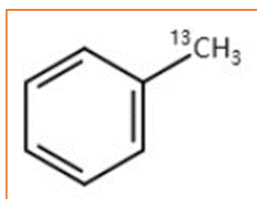
Radical: none

Enhanced stereo: Off

Map:

OK

标记完的结构如下：



离子定义

如果需要定义离子，方法如下：

1. 选择该原子，右键打开 Atom Properties
2. 在 Charge 输入框中输入离子的价态。

Atom properties

Change to: Element

Basic | Advanced

Atom: O 8

Alias:

Isotope:

Charge: -1

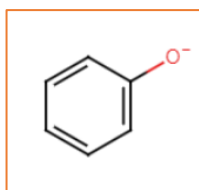
Radical: none

Enhanced stereo: Off

Map:

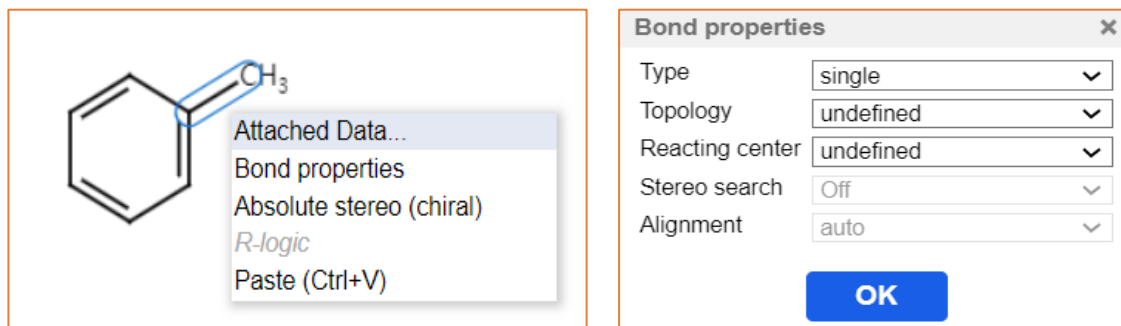
OK

结果如下：



键鼠标右键功能

右键点击键，可以打开键的右键功能菜单，如下：

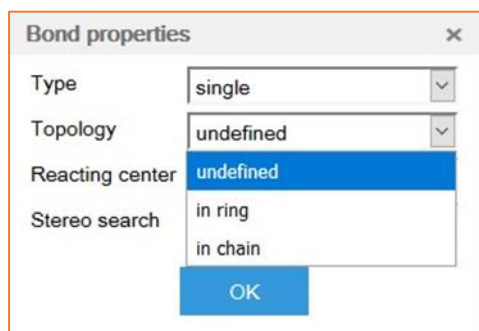


常用功能：

- Topology, 键的拓扑属性定义
- Reacting center, 反应中心定义
- Stereo search, 异构中心定义

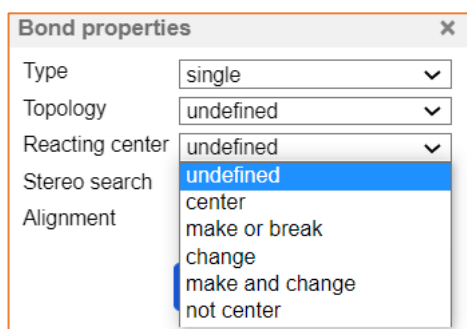
键的拓扑属性定义

Topology, 键的拓扑属性定义，可以定义一根键是在环中，还是在链里面，常见的应用场景是需要某根键一定要在环，或者链中，可以定义键 in ring 或是 in chain。



反应中心定义

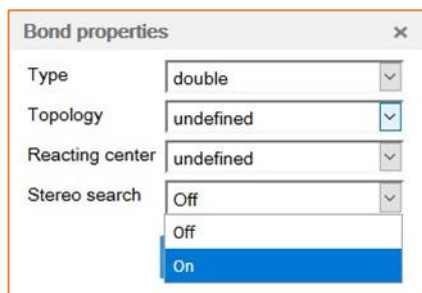
Reacting center, 反应中心定义，可以反应中键变化的情况，常见的应用是定义反应中生成或者断裂的键。



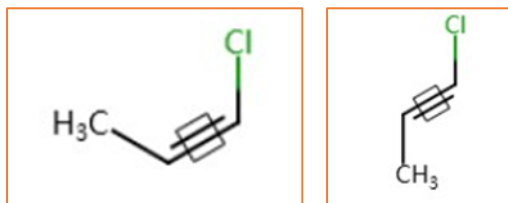
可以定义反应中的某一根键的属性是 make or break，被标记的键在反应过程中一定会发生断裂或者是一根生成键。

异构中心定义

Stereo search，异构中心定义，定义结构中确定的异构构型，如顺反异构。



如对于一根双键上进行属性定义，可以定义该双键的顺反属性，默认是 off，不论顺反，如绘制成 on，系统将按照绘制的顺反情况进行检索，加上 On 的结构：



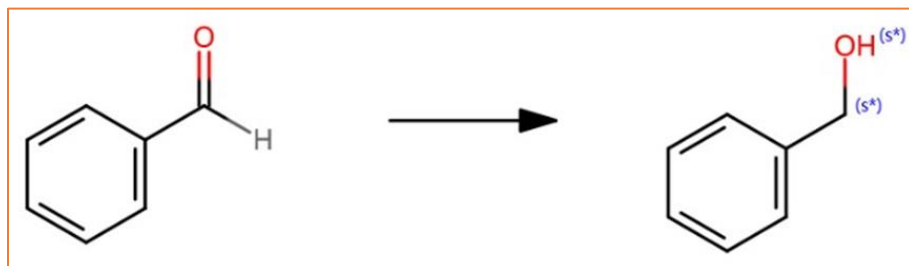
二、Reaxys 中反应查询

1: 反应检索中常用定义工具

原子锁定工具

在进行 As Substructure 检索时，如果需要某原子上不能发生任何取代，可以使用

原子锁定工具，可以参考 s*和 s Lock 功能的使用。如下图的定义：

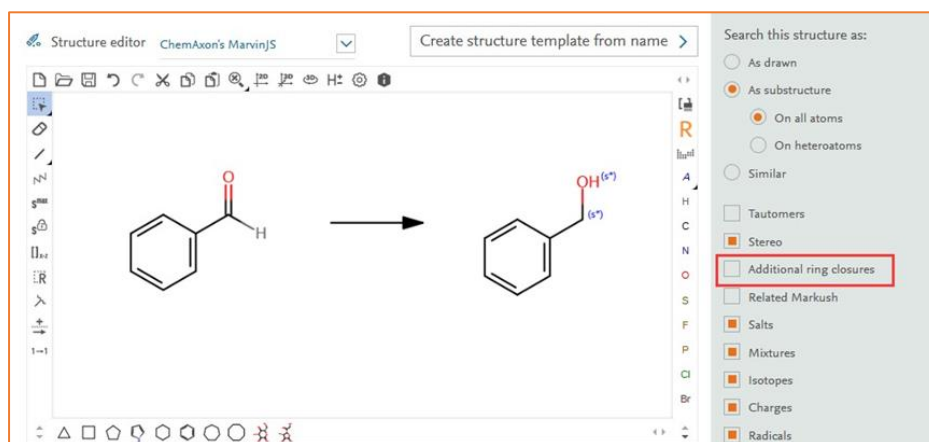


用 As Substructure 对上述结构进行检索，产物中的亚甲基和羟基都被标记上了 s*，表示在检索时不能发生取代。

环锁定工具

在进行 As Substructure 检索时，如果需要结构中允许发生取代，但是不能发生稠环，可以去除结构面板中 Additional Ring Closures，保证整个结构面板中的环系不发生破坏。

如下，As substructure 检索这条反应，将结构面板中的 Additional Ring Closures 去除。



得到的结果中，苯环上允许发生取代，但是都不能发生稠环变化。

碎片反应定义工具

反应检索时，如果需要一些特定的片段以任意形式相连接，可以采用 Keep Fragments together 定义。操作步骤如下：

1. 结构面板中定义好片段
2. 点击右下方 More Option
3. 选择 Keep Fragments Together 即可完成定义

More Options 下的选项：

The screenshot displays the Reaxys 'Structure editor' interface. The main workspace shows a chemical reaction scheme where a benzaldehyde fragment (labeled 'Boc') is converted into a benzyl alcohol fragment (also labeled 'Boc'). The reaction arrow points from the aldehyde to the alcohol. On the right side, the 'Search this structure as:' panel is visible, with the 'More options' button highlighted by a red box. Below this, a detailed panel shows the 'Keep fragments' options: 'Ignore Atom Mappings' is unchecked, 'Keep fragments' is checked, and under the 'Keep fragments' section, 'Together' is selected with a radio button, while 'Separate' is unselected.

这样定义出来的反应，反应箭头前后的两个片段都会在一个结构当中。

2：条件筛选时常用的筛选工具

Reaxys 提供了多种反应筛选工具，帮助对反应进行筛选。

筛选工具概览

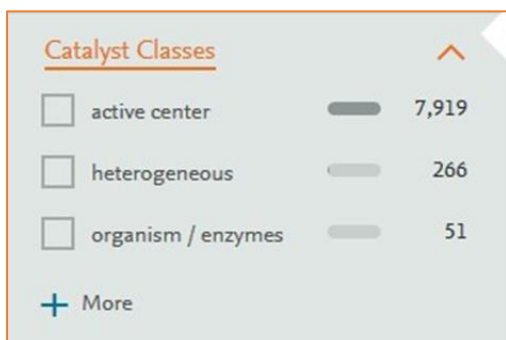
获得反应后，左侧可以看到反应筛选的工具栏，如下：

Filters and Analysis	
By Structure	通过结构进行反应过滤
Yield	产率过滤工具
Reagent/Catalyst	催化剂/试剂过滤工具
Solvent	溶剂过滤工具
Catalyst Classes	催化剂类型过滤工具
Solvent Classes	溶剂类型过滤工具
Product Availability	产物可购买性过滤工具
Reactant Availability	反应物可购买性过滤工具
Reaction Classes	反应类型过滤工具
Document Type	文献类型过滤工具
Publication Year	出版年限过滤工具
☐ Single step reactions only	单步反应

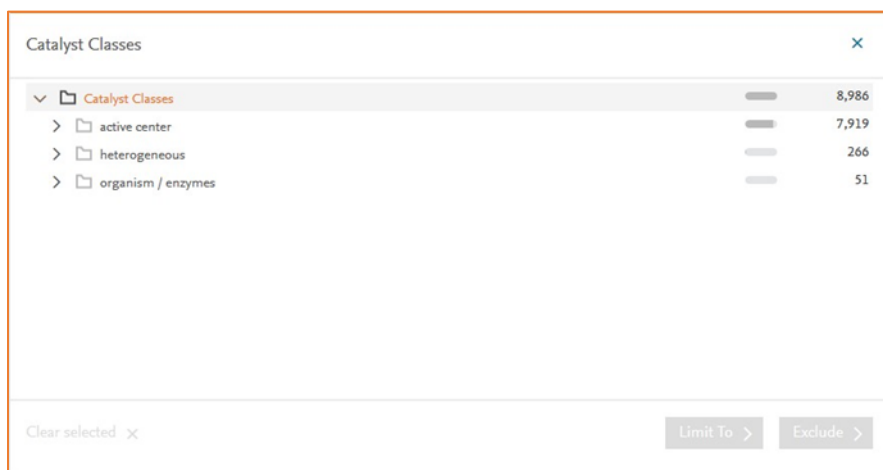
催化剂分类工具

Catalyst Classes 可以按照活性中心，非均相催化，生物催化来对催化剂进行分类，帮助通过不同的路径快速获得最相关的催化剂。使用步骤如下：

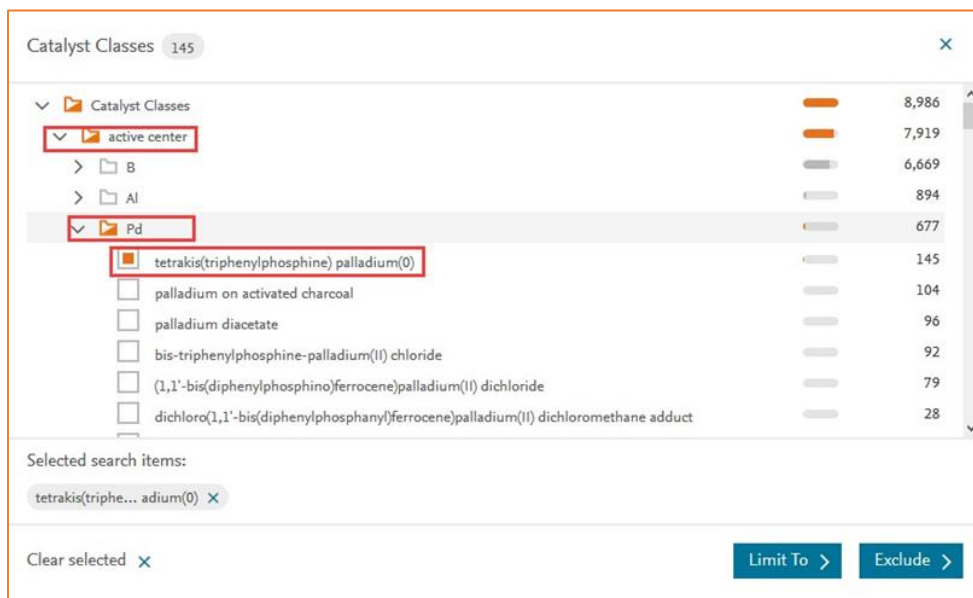
1：打开 Catalyst Classes，点击 More：



2：呈现出 Catalyst 分类的树状图：



3：点击不同分类前面的箭头，可按照需求筛选反应或者查看催化剂。

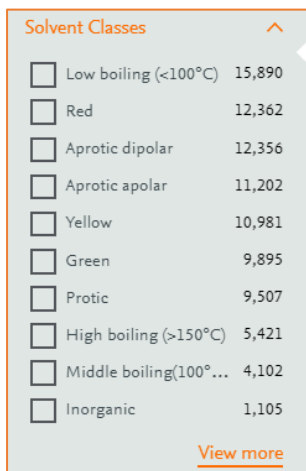


溶剂分类工具

Solvent Classes 可以按照溶剂的不同特性，来对溶剂进行分类，帮助通过不同的

路径快速获得最相关的溶剂剂。使用步骤如下：

1：打开 Solvent Classes，点击最下方的 More：



2：呈现出 Solvent 分类的树状图，按照 Catalyst Classes 的方法进行筛选



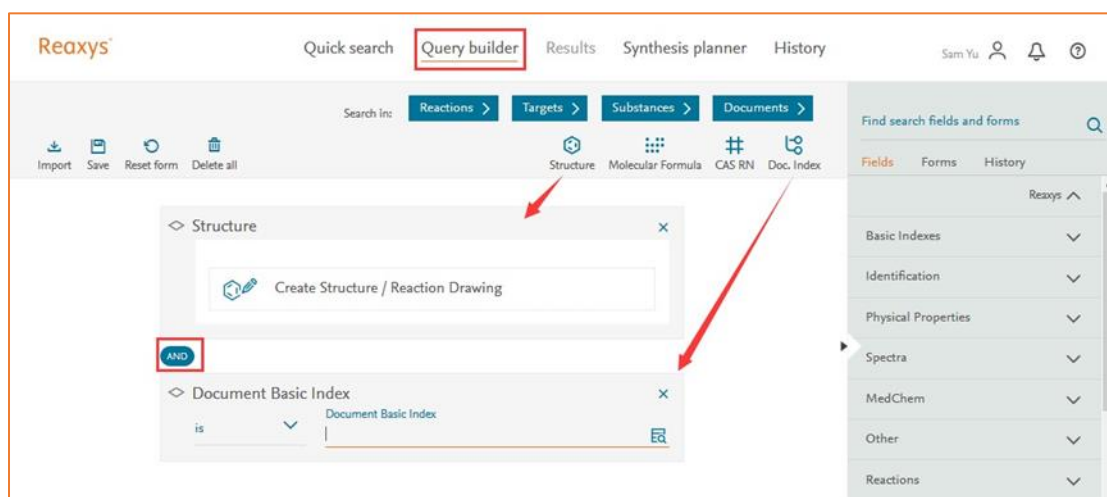
反应类型分类工具

Reaction Classes 可以不同的反应类型对反应进行分类，操作步骤和上述催化剂，溶剂类型相似。

3：其他反应检索

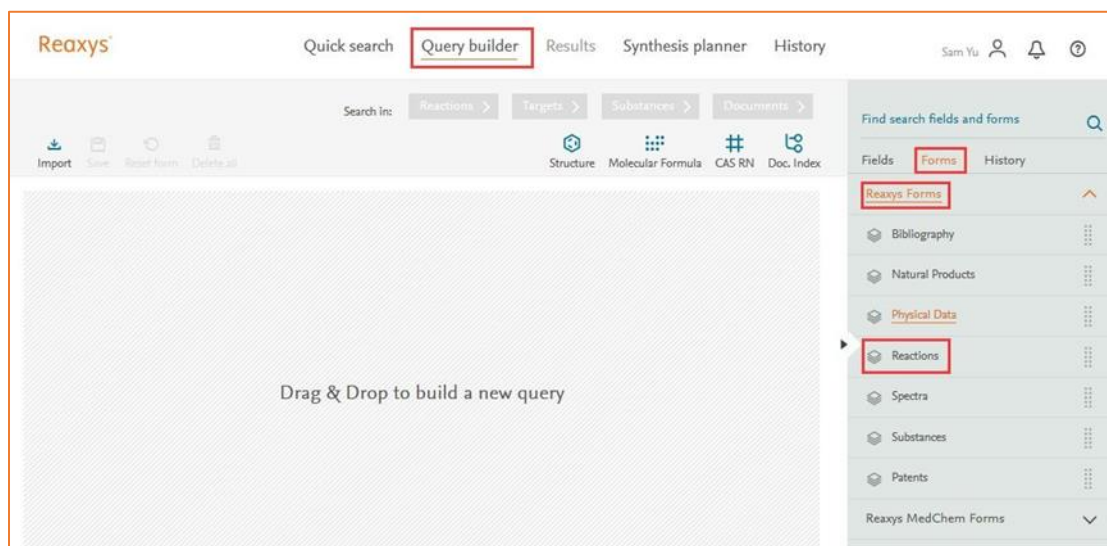
关键词联合反应检索方法

利用 Query Builder 可以实现关键词联合反应检索。在 Query Builder 模式下，添加结构和关键词两个字段，即可实现关键词联合反应结构检索，如下：



反应中温度，时间，压力等条件定义

利用 Reaxys Forms 里面的 Reaction，实现温度，时间，压力的定义，按照以下图中的标记按钮，依次点击 Query Builder，Forms，Reaxys Forms，Reaction 即可打开 Reaxys 系统中的设定的反应定义模式，通过该模块可以添加反应的温度，时间，压力等条件。

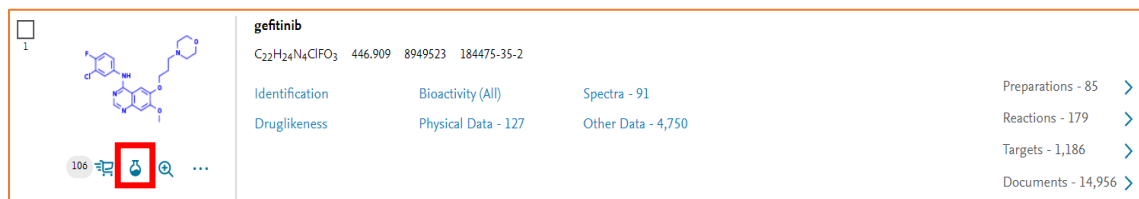


三、合成计划的制定

可以利用 Reaxys 中的 Synthesis Plan 工具进行合成计划的制定，如下，制定

Gefitinib 的合成计划。

1. Reaxys 中检索到 Gefitinib, 点击 Synthesis Plan 按钮进行合成计划制定,

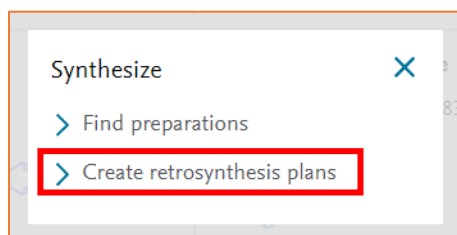


gefitinib
C22H24N4ClFO3 446,909 8949523 184475-35-2

Identification Bioactivity (All) Spectra - 91
Druglikeness Physical Data - 127 Other Data - 4,750

Preparations - 85 >
Reactions - 179 >
Targets - 1,186 >
Documents - 14,956 >

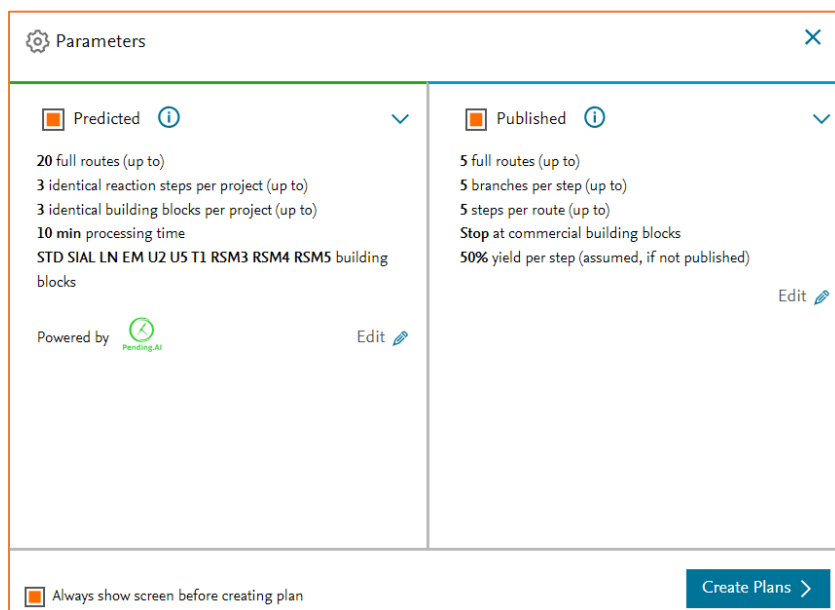
2. 点击选择 Create retrosynthesis plans



Synthesize X

> Find preparations
> Create retrosynthesis plans

3. 跟进需求, 选择 Predicted / Published, 通过 Create Plans



Parameters X

☒ Predicted ⓘ

20 full routes (up to)
3 identical reaction steps per project (up to)
3 identical building blocks per project (up to)
10 min processing time
STD SIAL LN EM U2 U5 T1 RSM3 RSM4 RSM5 building blocks

Powered by Pending AI Edit

☒ Published ⓘ

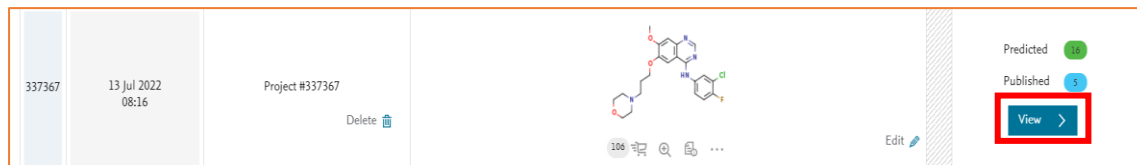
5 full routes (up to)
5 branches per step (up to)
5 steps per route (up to)
Stop at commercial building blocks
50% yield per step (assumed, if not published)

Edit

☒ Always show screen before creating plan

Create Plans >

4. 选择合适的方案, 查看即可。

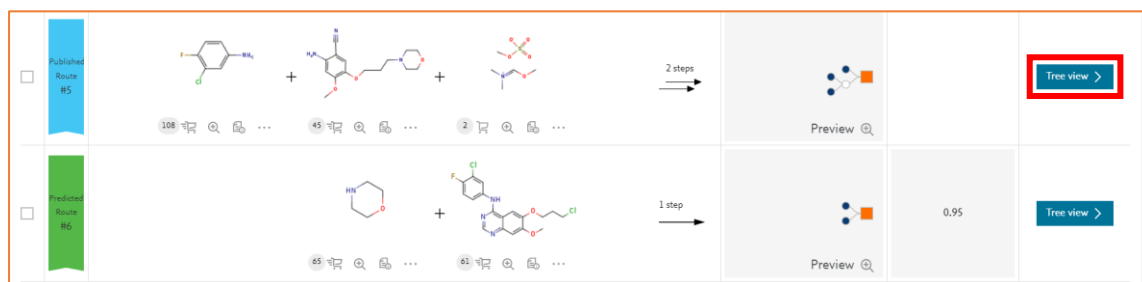


337367 13 Jul 2022 08:16 Project #337367 Delete

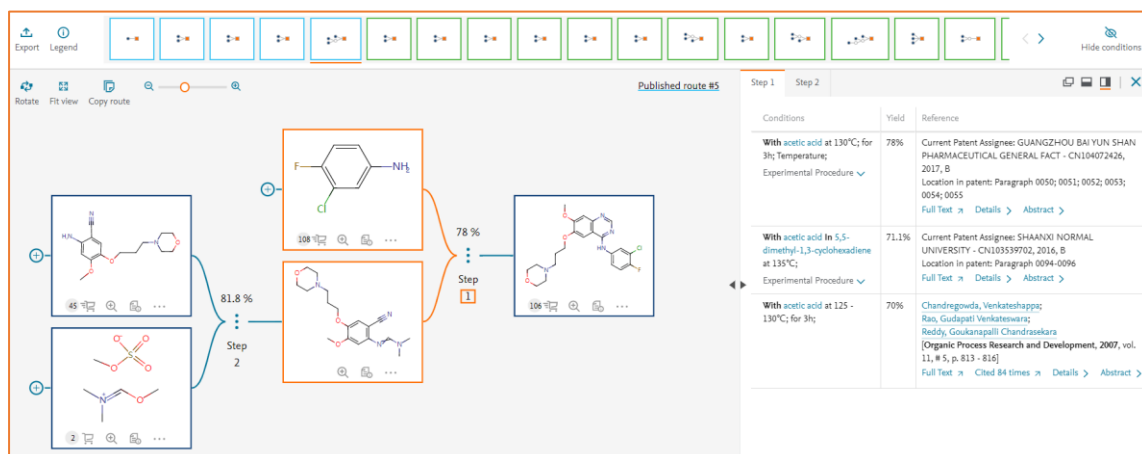
Chemical structure of Gefitinib

Predicted 16
Published 5

View >



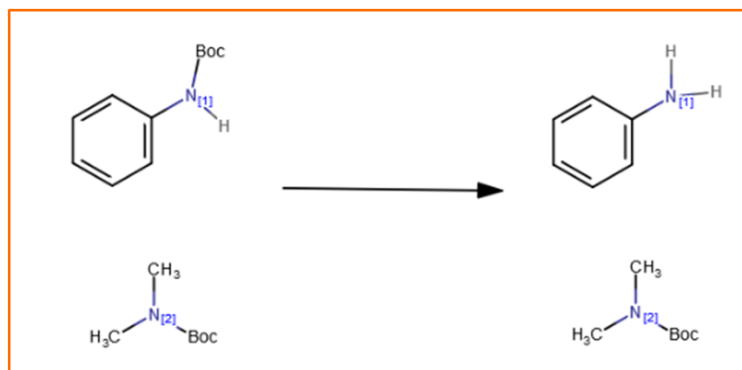
5. 结果如下:



四、数据库常见问题整理

1. 选择性氧化还原脱保护反应的定义

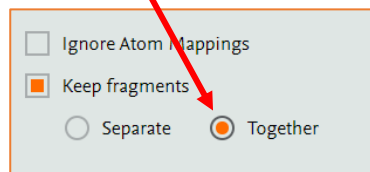
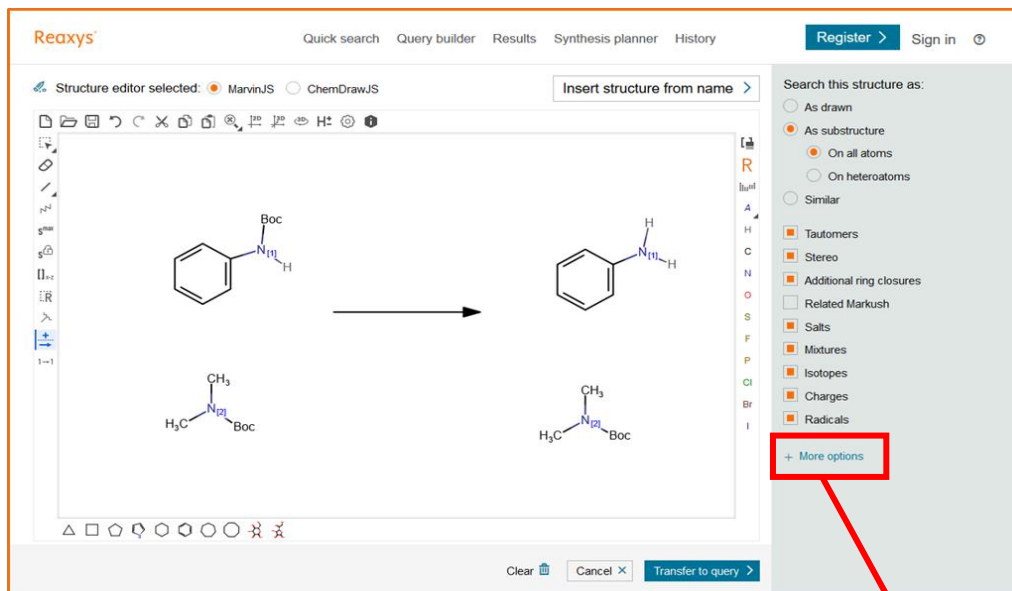
结构中两个带 Boc 的片段，两个片段以任意的形式相接在一个分子中反应过后把其中一个片段的 Boc 脱掉，但是另外一个 Boc 不变。



检索方法如下：

1. 按照需求画出化合物包含的片段
2. 使用 1→1 原子匹配键，标点反应前后匹配的原子
3. More Options 中选择 together，使用亚结构进行检索。

图例如下：



检索结果如下：

Reaxys[®] Quick search Query builder **Results** Synthesis planner History

12 Reactions out of 8 Documents containing 22 Substances, 5 Targets

Limit to > Exclude >

By Structure > Yield > Reagent/Catalyst > Solvent > Catalyst Classes > Solvent Classes > Product Availability > Reactant Availability > Reaction Classes > Document Type > Publication Year >

☐ Single step reactions only
☐ Experimental procedure only

12 Reactions

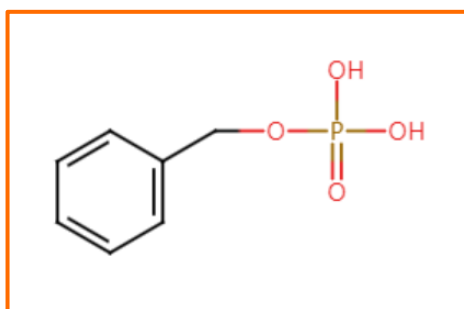
1 Conditions > Find Similar > Reaction ID: 51038227

2 Conditions > Find Similar > Reaction ID: 51038186

3 Conditions > Find Similar > Reaction ID: 51038186

2. 盐化合物检索：

检索含有以下骨架结构，且产物为钠盐的反应



检索方法如下：

- 按照需求画出化合物结构
- 使用右键，原子属性功能，标记目标原子所带电荷（方法见 P25 离子定义）
- More Options 中选择 Separate，使用亚结构进行检索。

图例如下：

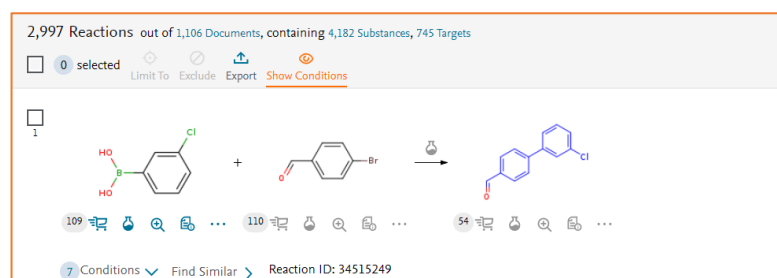
The screenshot shows the Reaxys interface. At the top, there are navigation links: Quick search, Query builder, Results, Retrosynthesis, History, and a Register button. Below this, the structure editor is active, showing a chemical structure of a sodium salt. A red arrow points from the 'Na' atom in the structure to the 'Atom properties' dialog box. Another red arrow points from the 'More options' button in the search filters to the 'Keep fragments' checkbox in the 'Atom properties' dialog. The 'Atom properties' dialog has tabs for 'Basic' and 'Advanced'. The 'Basic' tab is selected, showing fields for Atom (Na), Charge (1), Radical (none), Enhanced stereo (Off), and Map. The 'Advanced' tab is also visible. The search filters on the right include options like 'As drawn', 'As substructure', 'On all atoms', 'On heteroatoms', 'Similar', 'Tautomers', 'Stereo', 'Additional ring closures', 'Related Markush', 'Salts', 'Mixtures', 'Isotopes', 'Charges', and 'Radicals'. The 'More options' button is highlighted with a red box.

检索结果如下：

The screenshot shows the Reaxys search results page. On the left, there are filters for 'By Structure', 'Yield', 'Reagent/Catalyst', 'Solvent', 'Catalyst Classes', 'Solvent Classes', 'Product Availability', 'Reactant Availability', 'Reaction Classes', 'Document Type', and 'Publication Year'. The 'Limit to' and 'Exclude' buttons are also present. The main area displays 131 reactions out of 31 documents, containing 160 substances and 3 targets. Three reaction results are shown, each with a chemical structure and a reaction ID. The first reaction has a reaction ID of 54754695, and the second has a reaction ID of 25852656. The third reaction is partially visible. The 'Show Conditions' button is highlighted with a red box.

3. 将检索获得反应按文献归类筛选的方法：

按照文章归类检索获得的 2997 个反应，并筛选来自特定期刊的反应。



检索方法如下：

1. 检索结果界面 2997 个反应，来自于 1106 个文献，点击 1106 Documents，进入文献列表，点击 Hit Reaction 按键，查看文献中符合要求的反应情况。
2. 可使用左侧筛选栏选择特定期刊和文献类型，例如筛选 Journal of the American Chemical Society 发表的期刊。
3. 有 24 篇文献，涉及 66 个反应，点击 66 个反应，可在反应界面查看详细情况。

图例如下：

2,997 Reactions out of 1,106 Documents, containing 4,182 Substances, 745 Targets

0 selected Limit To Exclude Export Show Conditions

1,106 Documents with 4,182 Substances, 2,997 Reactions, 745 Targets

0 selected Limit To Exclude Export

Filters

Publication Year

Document Type

Authors/Inventors

Current Patent Assignees

Patent Office

Journal Title

Substance Classes

Reaction Classes

Index Terms (set)

Index Terms (essayTree)

Manual Unprocessed

Identification and optimization of biphenyl derivatives as novel tubulin inhibitors targeting colchicine-binding site overcoming multidrug resistance

Cheng, Bing; Zhu, Guirong; Meng, Linghua; Wu, Guolin; Chen, Qinyi; Ma, Shengming [European Journal of Medicinal Chemistry, 2022, vol. 228, art. no. 111930]

Substances (118) Reactions (138) Targets Full Text

Hit Reactions (31)

Hit Reactions

24 Documents with 180 Substances, 66 Reactions, Targets

0 selected Limit To Exclude Export

1 Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Remote Control of Axial Chirality at Boron-Carbon Bond

Yang, Junxiang; Zhang, JiaWei; Bao, Wen; Qiu, Sheng-Qi; Li, Shaoyu; Xiang, Shao-Hua; Song, Jun; Zhang, Junmin; Tan, Bin [Journal of the American Chemical Society, 2021, vol. 143, # 33, p. 12924 - 12929]

Abstract Index Terms Substances (149) Reactions (358) Full Text

Hit Reactions (1)

66 Reactions out of 24 Documents, containing 180 Substances, 0 Targets

0 selected Limit To Exclude Export Hide Conditions

1

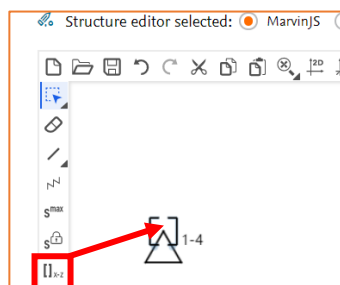
108

4. 多元环定义（以三-六元环为例）

检索方法如下：

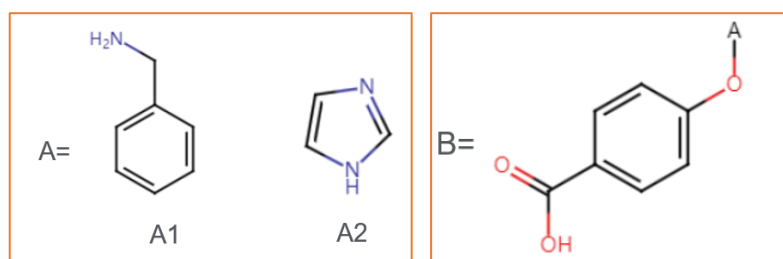
1. 在结构面板中绘制三元环，然后使用重复基团键对其中一个碳的重复数量进行定义。
2. 定义 1-4 个碳的循环。

图例如下：



5. 多片段检索和结构筛选的应用（包含特定片段化合物和其他化合物的反应）

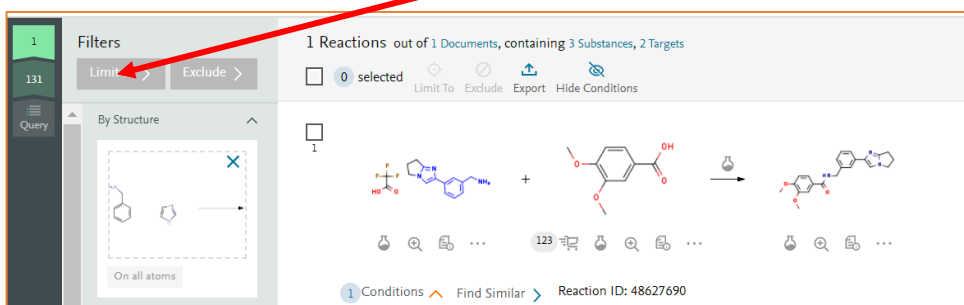
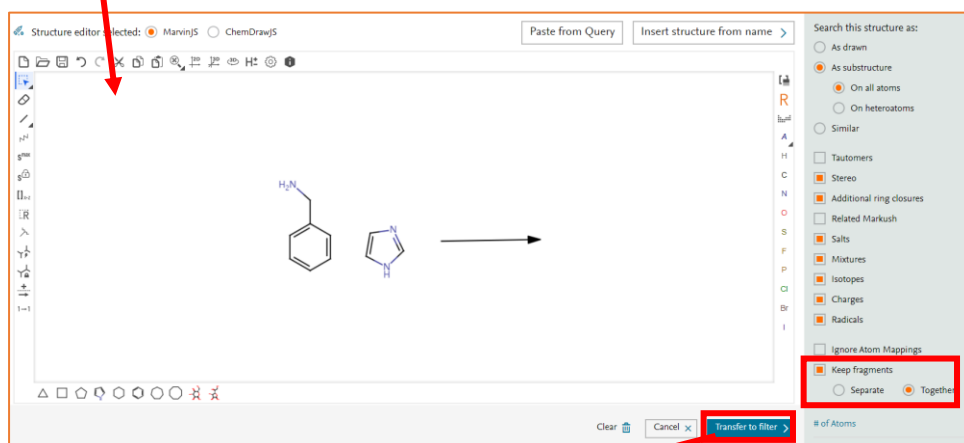
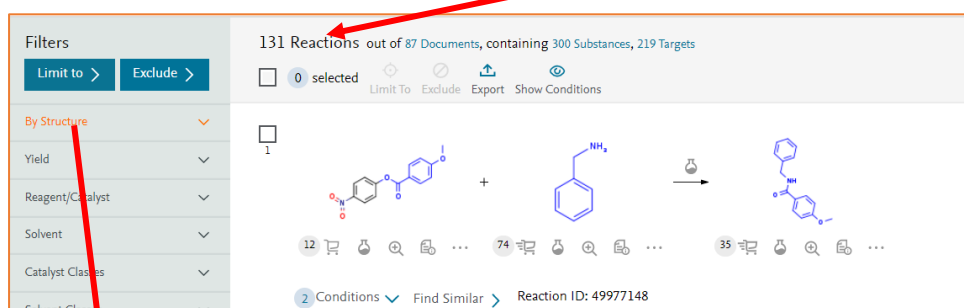
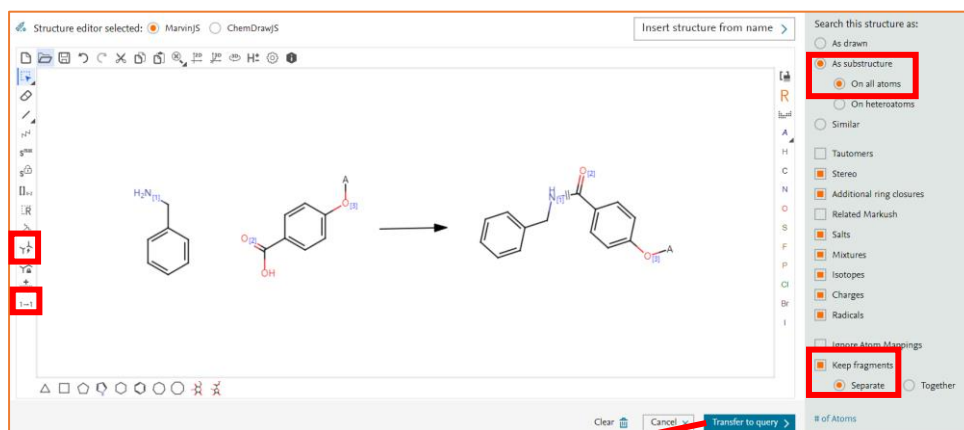
如下所示，要求化合物 A 与化合物 B 发生反应，化合物 A 包含两个片段 A1 和 A2，反应中心为 A1 片段的氨基和 B 化合物的羧酸发生缩合反应。



检索方法如下：

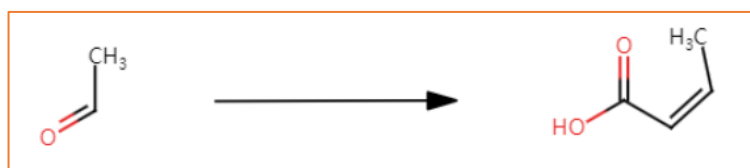
1. 由于 A1 片段的氨基和 B 化合物的羧酸发生缩合反应，在结果面板中绘制 A1 和 B 结构，绘制缩合产物。
2. 使用原子匹配功能和键断裂/生产功能标记反应前后匹配原子和反应中心，勾选 Keep Fragments 中的 Separate，使用亚结构检索。
3. 获得满足要求的反应，使用左侧栏中的 structure 筛选功能，点击在结果中筛选。
4. 在结构面板中绘制片段 A1 和 A2，并在底物右侧绘制反应箭头，勾选 Keep Fragments 中的 Together，勾选亚结构（As Substructure），点击 Transfer to Filter。
5. 通过 limit to 功能进行筛选，获得符合要求的结果。

图例如下:



6. 非手性碳原子的顺反异构(E/Z 标记)的设置。

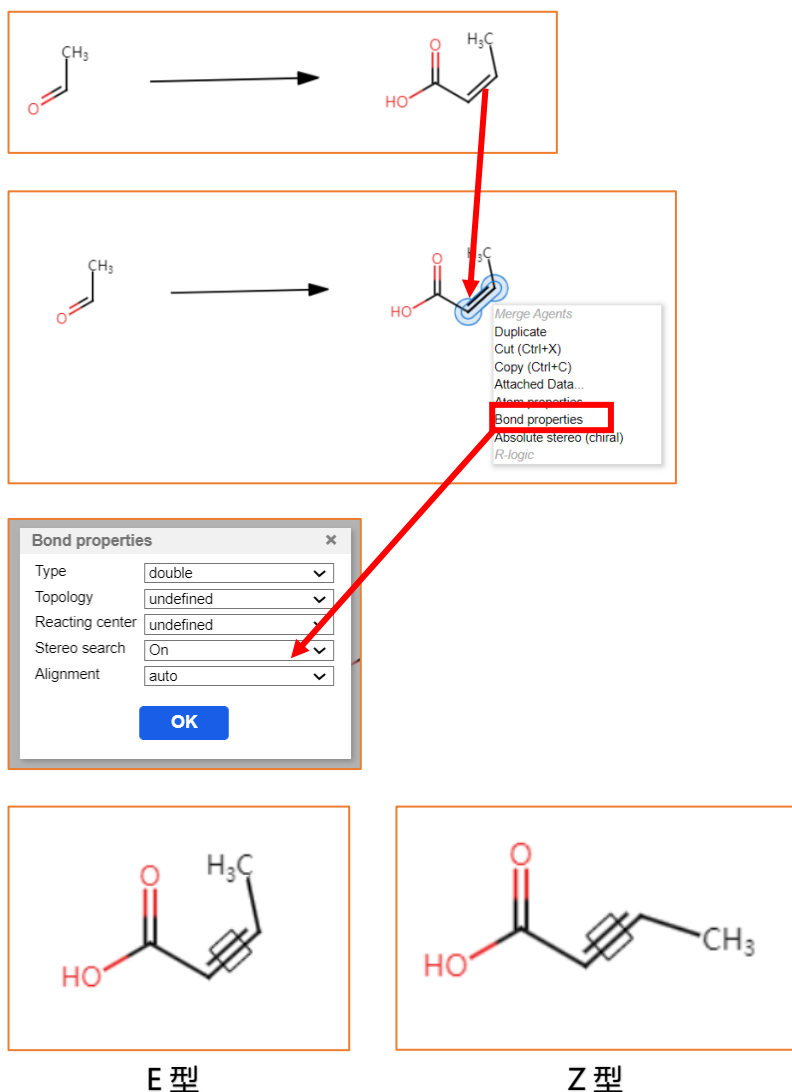
如下所示检索以下反应，要求仅检索 E/Z 型结构

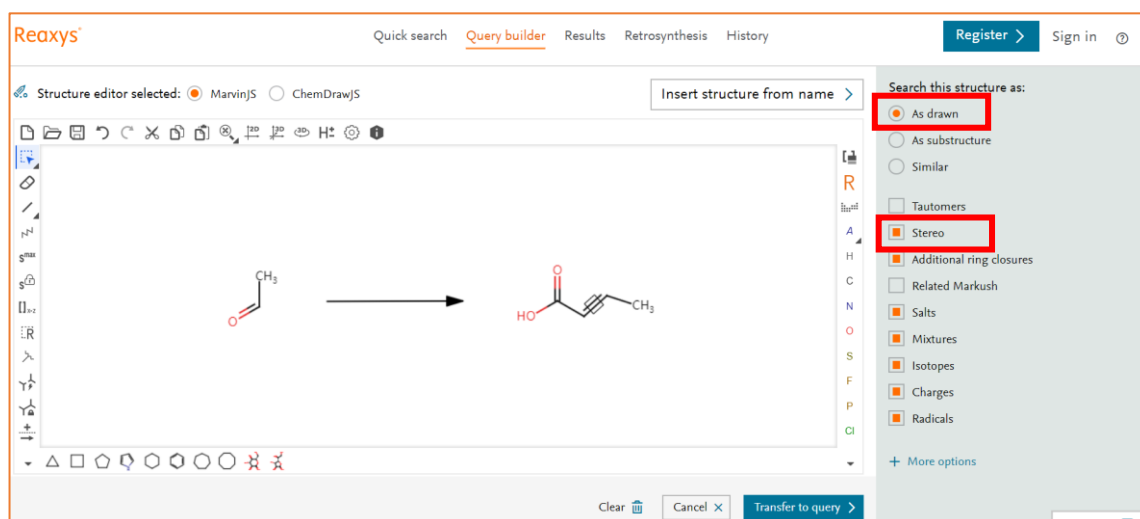


检索方法如下：

1. 在结构面板中绘制如上反应
2. 使用选择键，左键单击选择产物的双键，右键单击，选择 Bond properties
3. 在 Stereo search 中将 OFF 改为 ON
4. 绘制好后，勾选 Stereo，使用 AS Drawn 检索

图例如下：





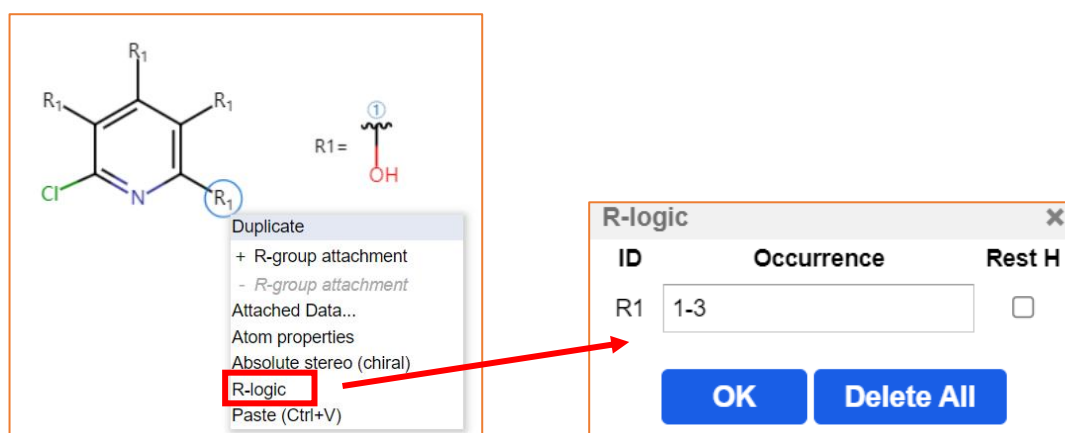
7. 不确定位点上发生取代，且取代基团的数量不确定。

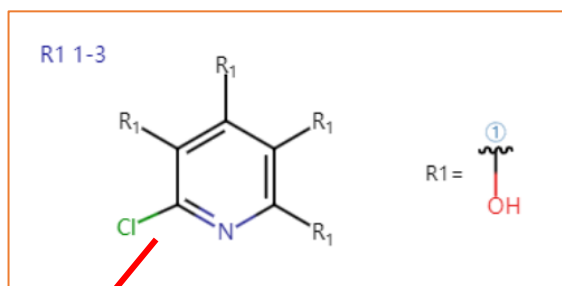
检索以下结构，要求在氯苯的 1, 2, 3, 4 位碳上有不定位取代的甲基，且取代基的数量为 1-3 个。

检索方法如下：

1. 在结构面板中绘制氯苯
2. 在氯苯的 1, 2, 3, 4 位碳上绘制 R1 Group，注意 1, 2, 3, 4 位碳上的 R 基团需要一致，R1 等于羟基。
3. 右键单击 R1 Group，选择 R-Logic，设置 1-3，代表 R1 Group 会随机出现 1-3 次。
4. 绘制好后，使用 AS Drawn/ As substructure 检索

图例如下：





3 78	6-chloro-2-hydroxypyridine <chem>ClC5H3N(OH)</chem> 129.546 108665 16879-02-0 Identification Bioactivity (All) Spectra - 30 Preparations - 8 > Druglikeness Physical Data - 14 Other Data - 1 Reactions - 438 > Documents - 219 >
4 9	2-chloropyridine-3,4-diol <chem>C5H4ClNO2</chem> 145.545 21048636 1204295-69-1 Identification Spectra - 1 Preparations - 3 > Druglikeness Reactions - 10 > Documents - 3 >