

# Reaxys结构面板详解

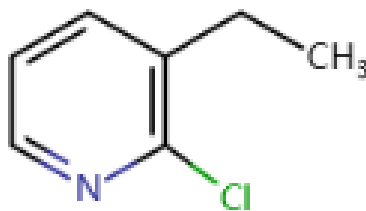
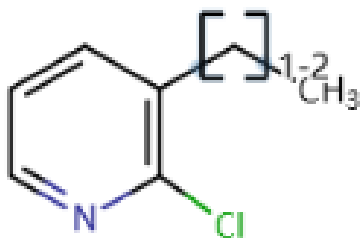
Presented By  
Date

## 提纲

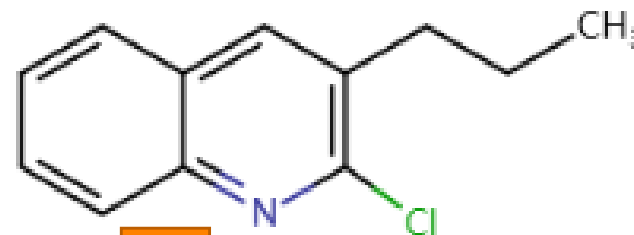
- Reaxys结构检索模式介绍
- Reaxys结构面板详解
  - 面板中简单功能介绍
  - Part A, 选择, 橡皮, 键, 链工具
  - Part B, 常见原子, 元素周期表中功能
  - Part C, 重复基团, R基团, 原子匹配
  - Part D, 常见环, 官能团, **Generic Group**
  - Part E, 通用官能团, 原子属性定义
  - Part F, 右键的应用

## Reaxys结构检索模式介绍

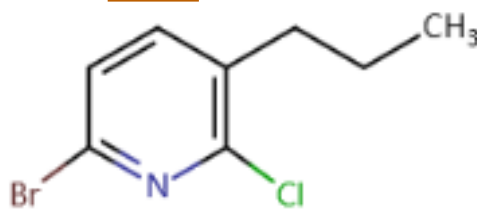
- As Draw
  - 检索到的结构完全和所绘制结构一样
- As Substructure
  - 对结构中没有绘制出来或者延展出来的H进行任意取代，但是核心结构必须和所绘制的一样



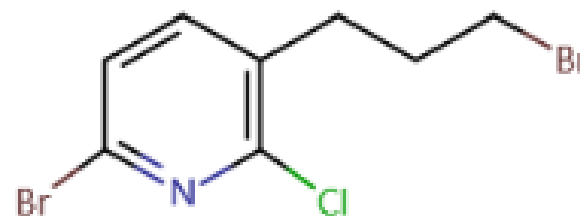
1



2



3



4

**思考:**

用两种方式检索上述结构，可以获得的结果有？

## 提纲

- Reaxys结构检索模式介绍
- Reaxys结构面板详解
  - 面板中简单功能介绍
  - Part A, 选择, 橡皮, 键, 链工具
  - Part B, 常见原子, 元素周期表中功能
  - Part C, 重复基团, R基团, 原子匹配
  - Part D, 常见环, 官能团, **Generic Group**
  - Part E, 通用官能团, 原子属性定义
  - Part F, 右键的应用

## 面板中简单功能介绍

### Tips

1. 打开, 保存结构
2. 复制, 剪切, 黏贴结构
3. 放大, 缩小结构
4. Chemdraw中, 复制结构的方式Ctrl+Alt+C

### Tips:

通过化学品名转化结构

Structure editor

Create structure template from name >

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- Similar

Include

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

+ More options

Marvin JS  
by ChemAxon

# Reaxys的结构面板概览

The screenshot shows the Reaxys Structure editor interface. At the top, there is a 'Structure editor' title and a search bar for 'Create structure template from name'. Below this is a toolbar with various icons for editing and viewing. The main workspace contains a faint chemical structure and the 'Marvin JS by ChemAxon' logo. On the right side, there is a search and include options panel. The interface is annotated with five orange-bordered boxes labeled Part A through Part E, each describing a specific part of the software's functionality.

**Part A:**  
选择, 橡皮, 键, 链, 电子

**Part B:**  
常见原子, 元素周期表定义

**Part C:**  
重复基团定义, R基团自定义, 反应定义, 原子匹配

**Part D:**  
常见的环, 官能团, Reaxys的Generic Group定义

**Part E:**  
通用官能团, 原子属性定义

Search this structure as:

- As drawn
- As substructure
- Similar

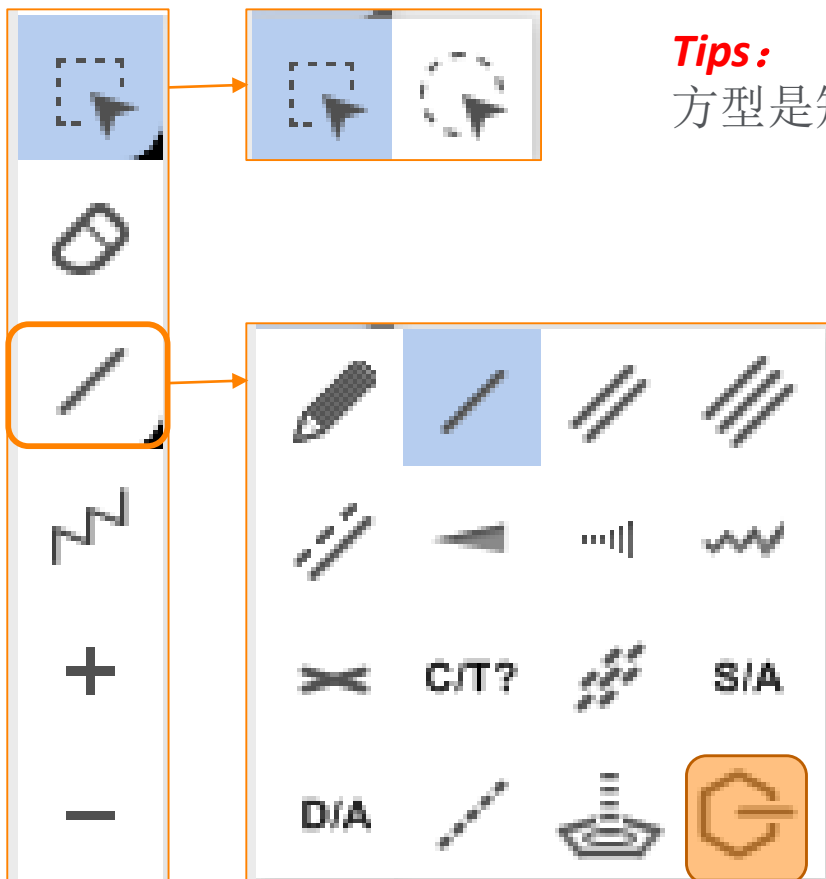
Include

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

+ More options

**Part D:**  
常见的环, 官能团, Reaxys的Generic Group定义

# Part A: 选择, 橡皮, 键, 链, 电子

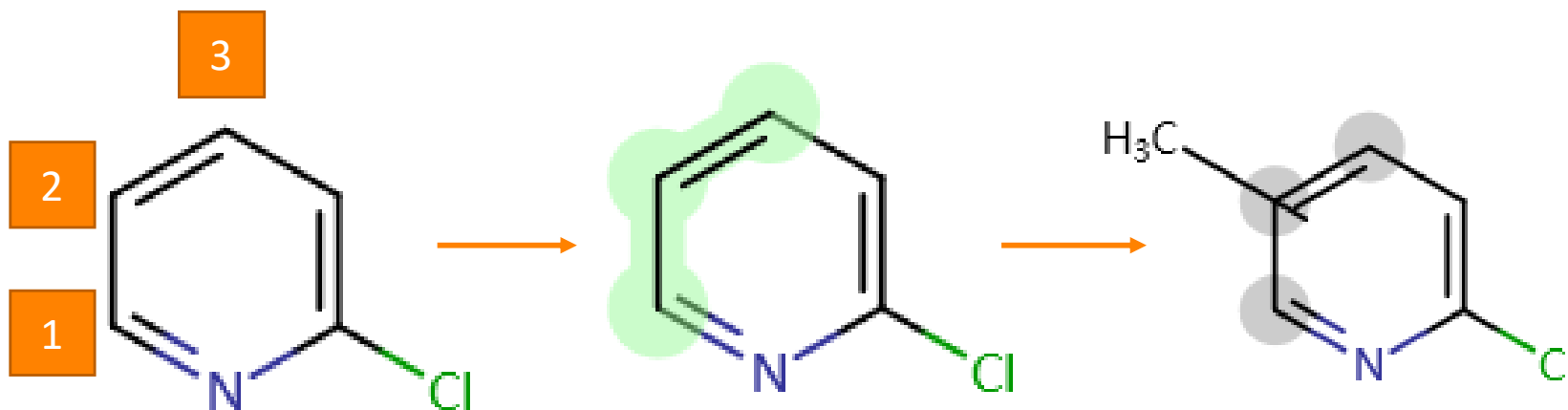


**Tips:**  
方型是矩形选择, 圆形是自由选择工具

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	不定位取代

## 不定位取代键的使用

- 不定位取代键：
  - 在选定的原子上进行基团的链接
  - 可以使用在链上，也可以使用在环上



### 绘制要求:


希望1, 2, 3C上存在  
一个NH<sub>2</sub>

### 绘制步骤:

1. 用选择工具选择1, 2, 3号C原子,
2. 添加不定位取代, 系统默认添加CH<sub>3</sub>
3. 将CH<sub>3</sub>换成NH<sub>2</sub>



## Part B: 常见原子，元素周期表定义



H

C

N

O

S

F

P

Cl

Br

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
			*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			#	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Atom list

NOT list

**Tips:**

1. Atom List: 绘制允许取代的原子列表
2. Not List: 绘制不允许发生取代的原子列表

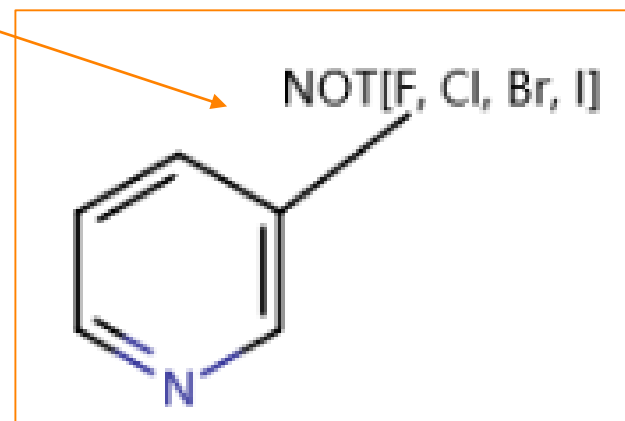
## Atom List/Not List画法

- Atom List/Not List的应用
  - Atom List: 定义允许取代的原子
  - Not List: 定义不允许发生取代的原子

Periodic table

1	H	2																		18
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				

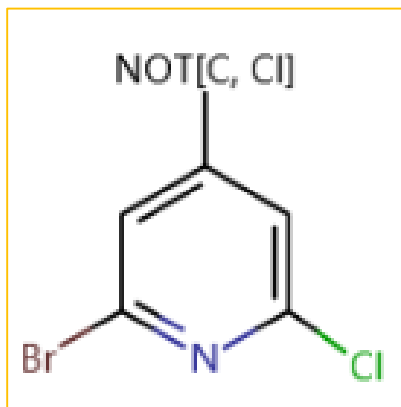
Ok



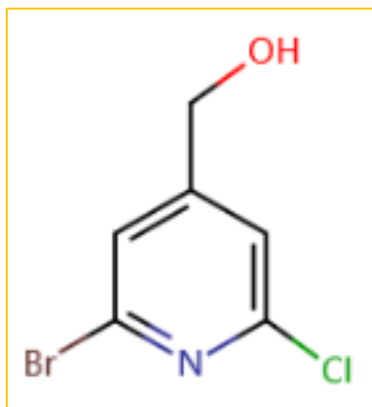
## Not List/Atom List定义Tips

- Atom List和Not List定义的是原子列表
  - 使用As Draw, 只接1个原子, 且该原子会处于Block状态
  - 使用As Substructure, 相当于基团的允许/不允许, 该原子默认开放
- Not List默认表示该位点是有取代的
  - Not List默认表示该位点是有取代的, 即Not Cl 和Not Cl H等效

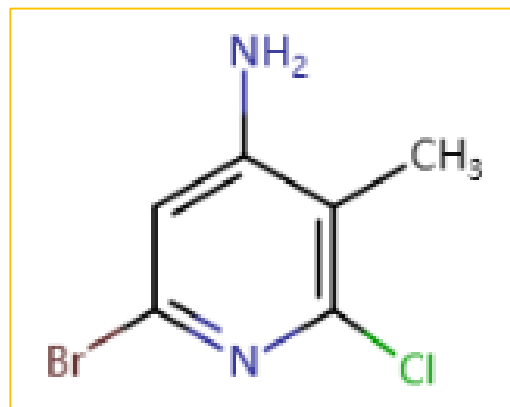
## 随堂小练习



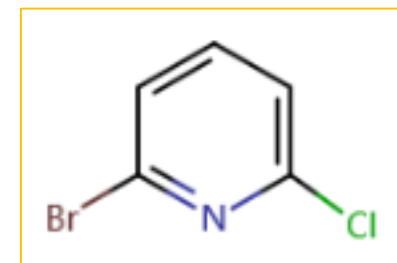
A



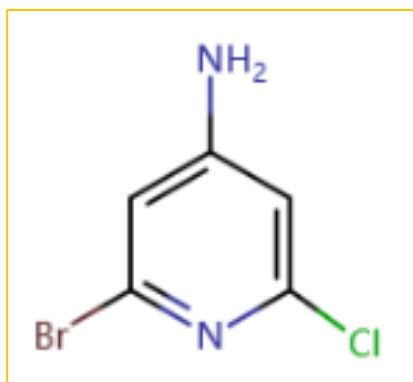
1



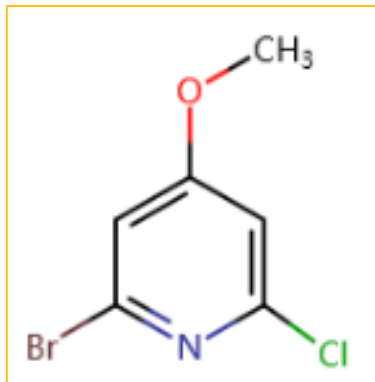
2



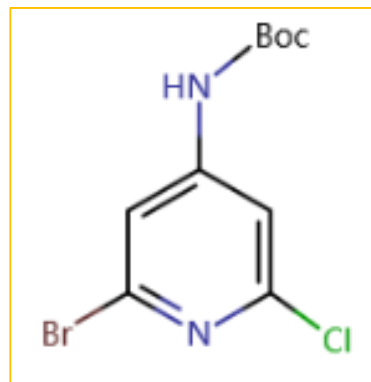
3



4



5



6

**思考:**

分别用As Draw和As Substructure检索结构A, 哪些结构可以被检索出来

## Part C: 重复基团, R基团定义工具, 原子匹配工具



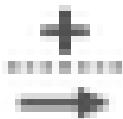
重复基团定义工具, 允许用在环和链上



R基团定义工具

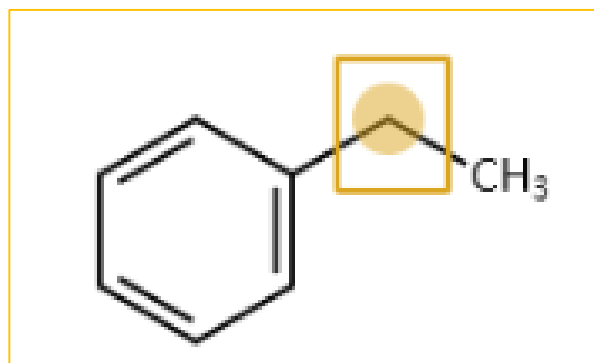


R基团末端定义工具, 和R基团定义工具一起用



反应箭头, 原子匹配工具

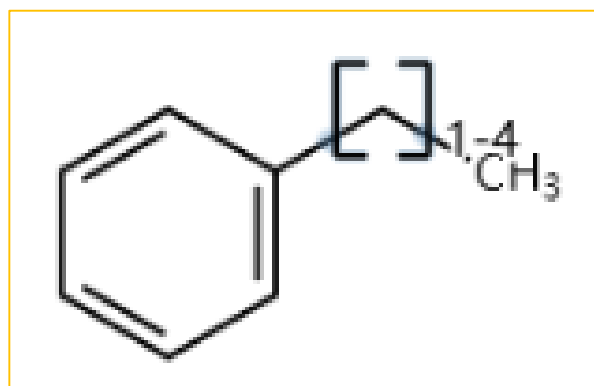
## 重复基团定义工具的使用



Repeating group ✕

[ ] (nt)

Ok

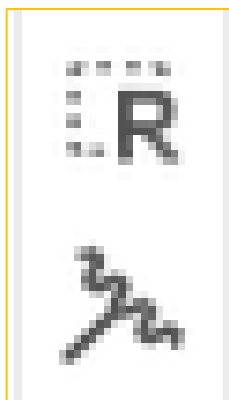


### *Tips:*

1. 使用重复基团工具
2. 选择需要重复的结构
3. 输入范围，确定
4. 重复的阈值，可以写成：2, 4-6

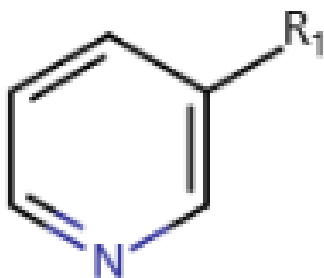
## R基团定义及R基团末端定义工具

- R基团定义和R基团末端定义是一组功能

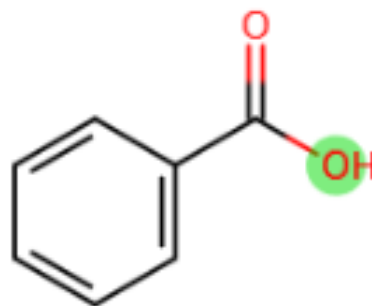


### 定义要求:

1. 定义一个结构A
2. R1分别是下面的这些结构，结构中绿色原子与A结构相连接



A

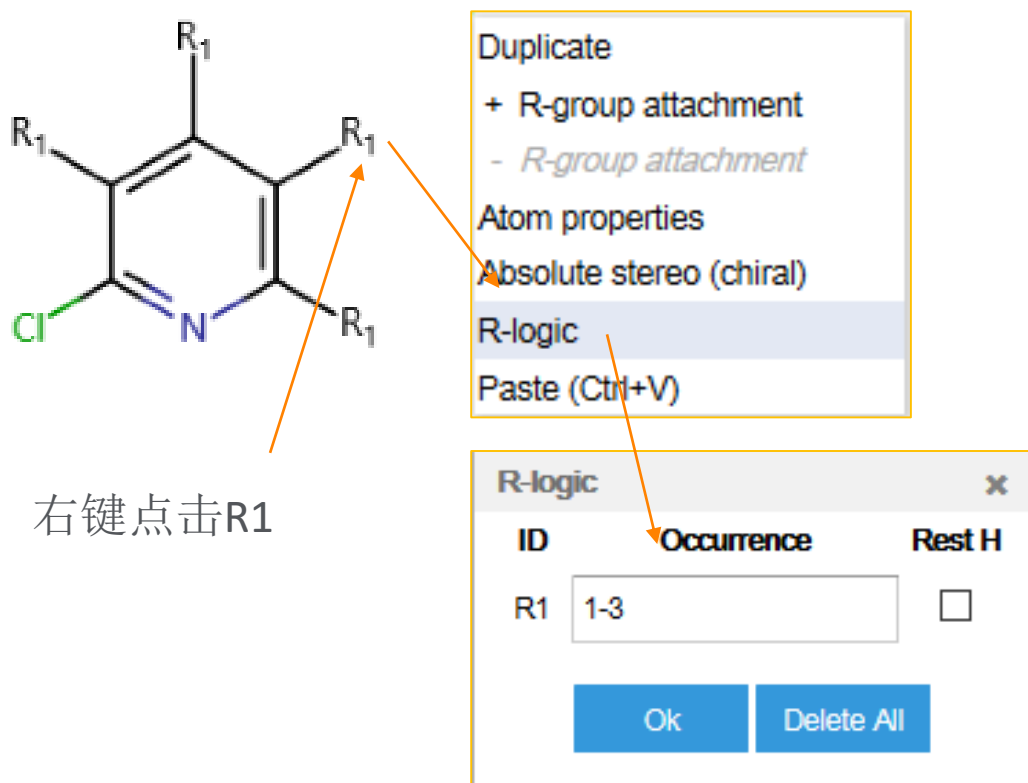






## R基团定义的延展

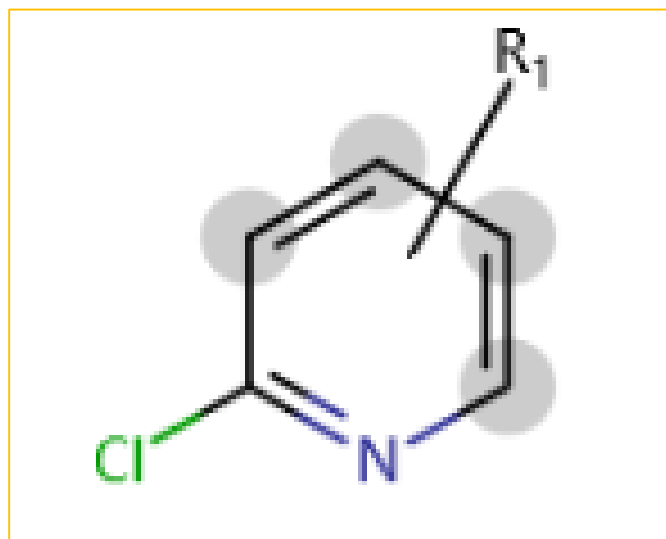
- 如下结构
  - R1可以出现在4个不同的位点，
  - 但是，需要R1基团只能出现1-3次



### Tips:

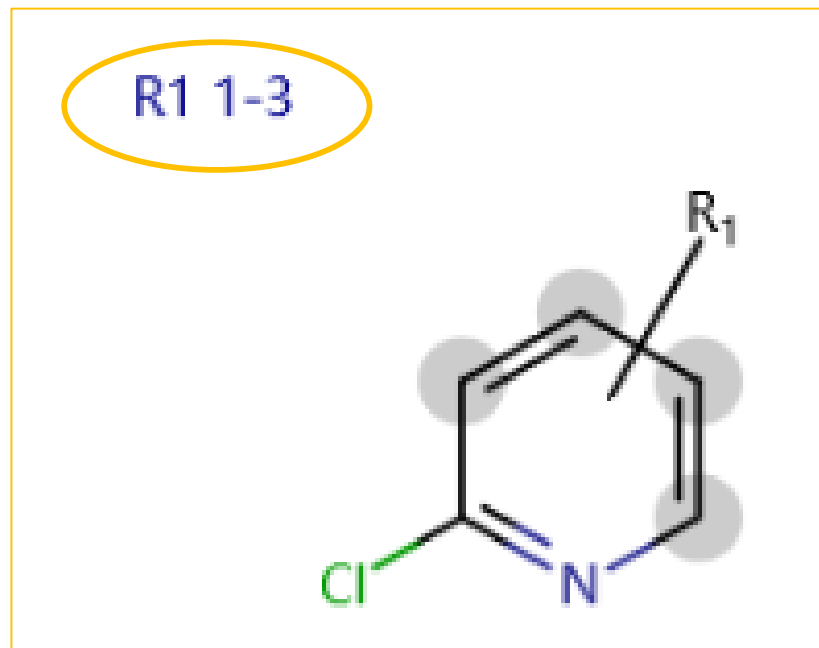
1. 当R基团有多个位点，且R的个数可变的时候，需要用R-Logic定义R的阈值
2. 右键R，打开R-Logic
3. 输入R的阈值

## R基团定义和不定位与R联用时

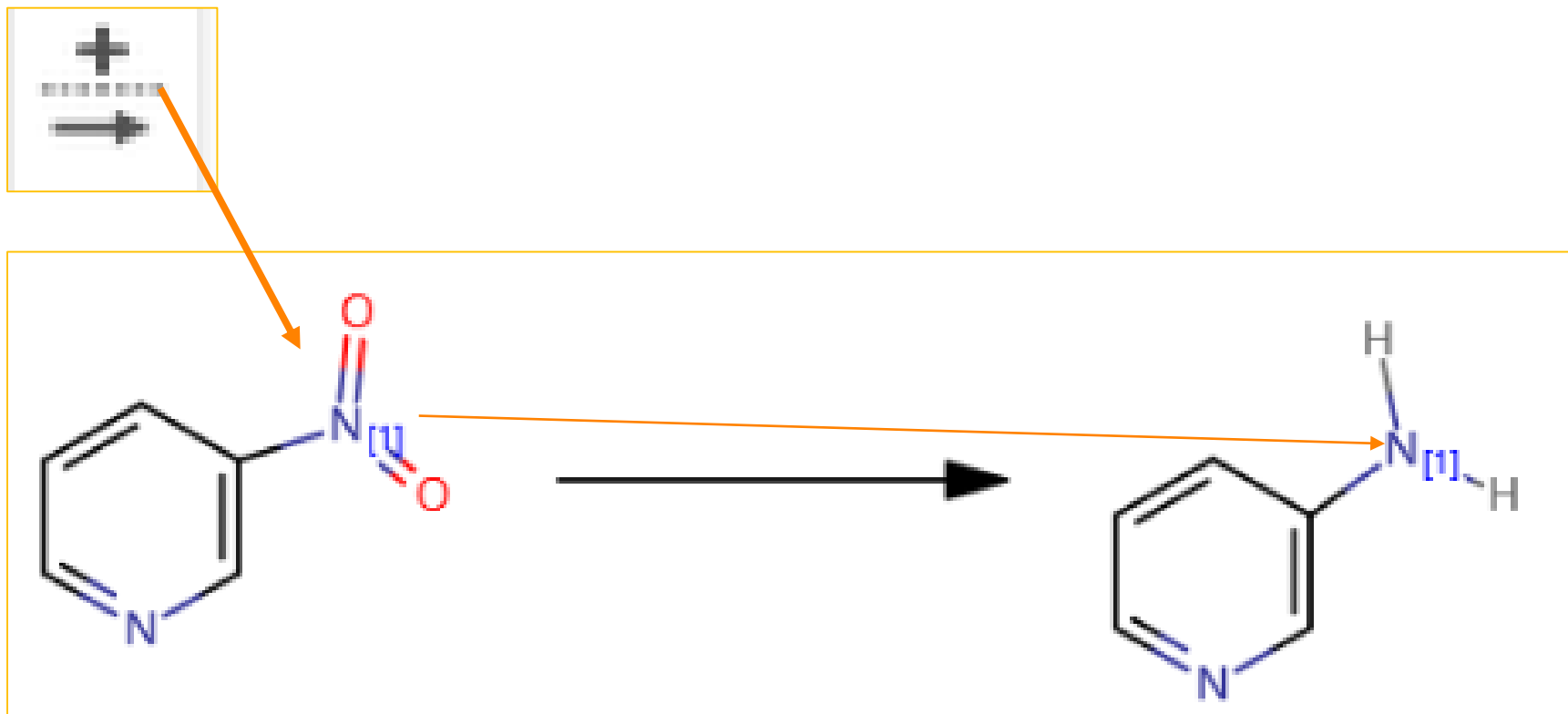


### *Tips:*

1. 当不定位工具和R基团联用时，默认是R接在所有原子上，即左图是必须接有4个R
2. 需要用到R-Logic去定义R的个数



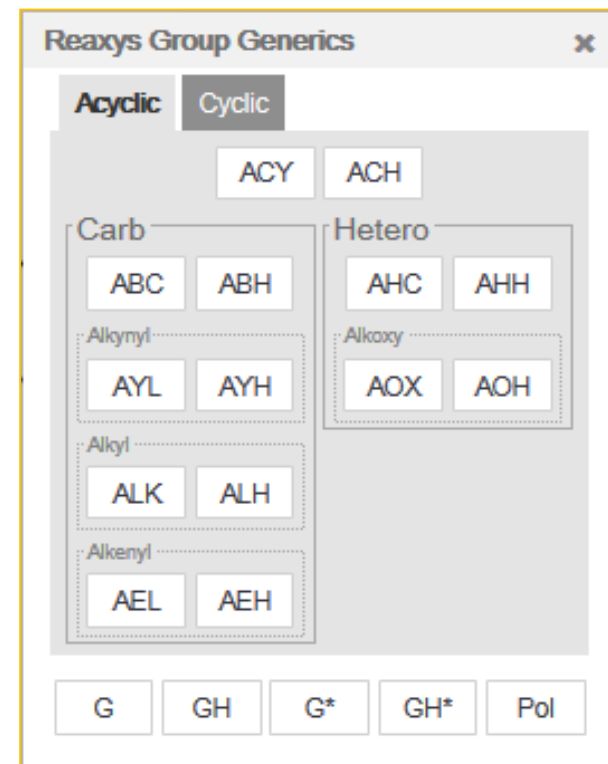
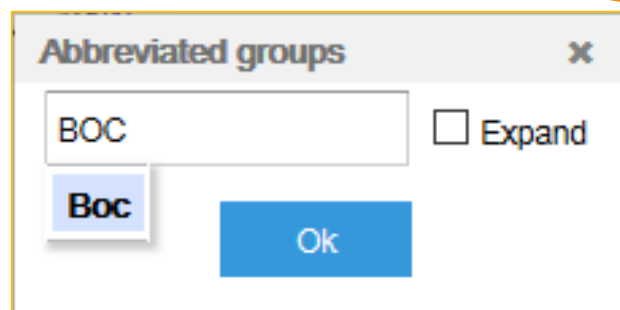
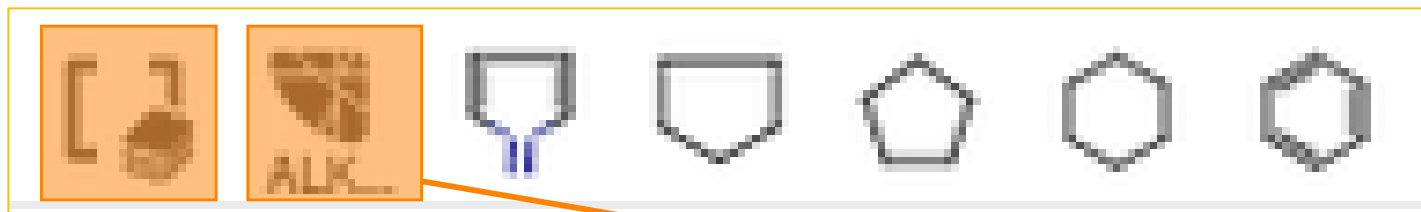
## 反应原子标记工具



### **Tips:**

1. 定义反应前后必须匹配的原子
2. 建议将官能团展开后进行匹配

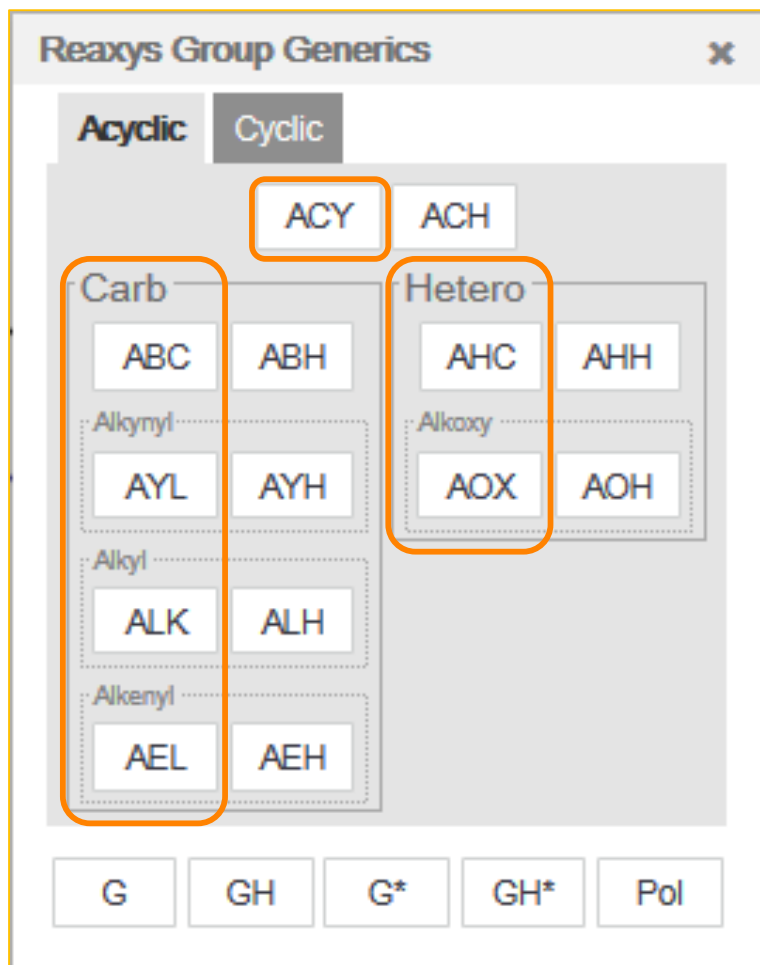
## Part D: 常见环, 官能团, Reaxys的Generic Group定义



### **Tips:**

1. Abbreviated Group: 提供一些缩写的基团, 直接键盘输入即可
2. Reaxys Generic Group: 提供一些通用官能团

## Generic Group定义—链的定义



### Tips:

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）

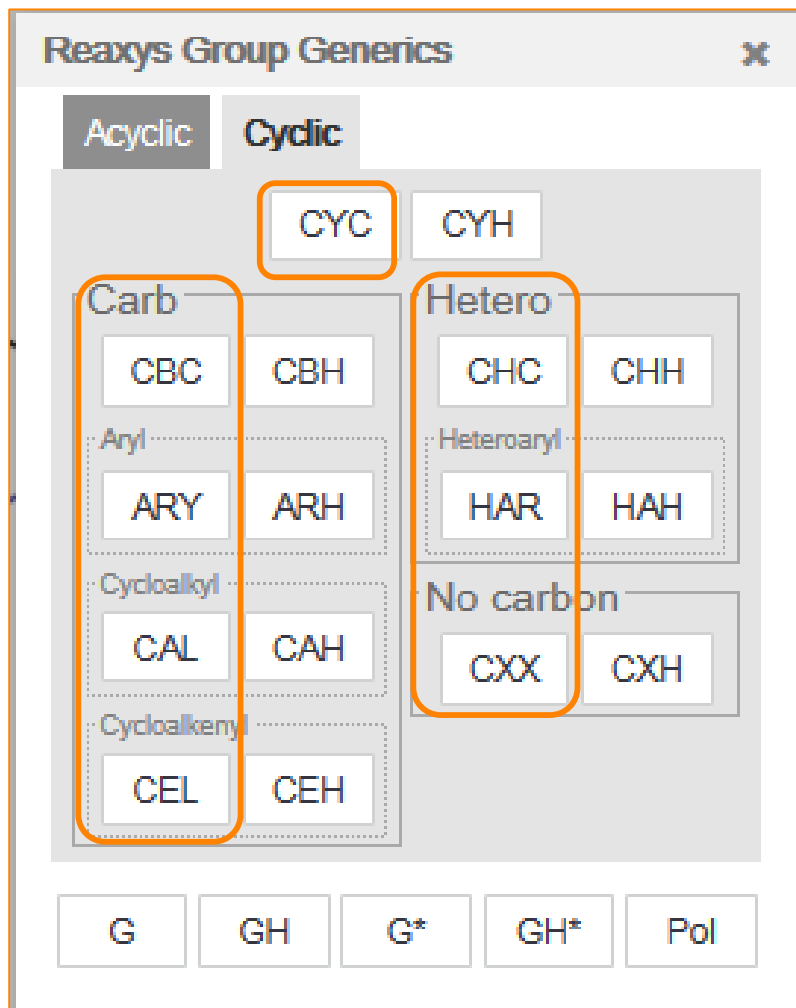
AEL: 含有烯基取代的链

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

## Generic Group定义—环的定义



### Tips:

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

## Generic Group定义—G/G\*

G

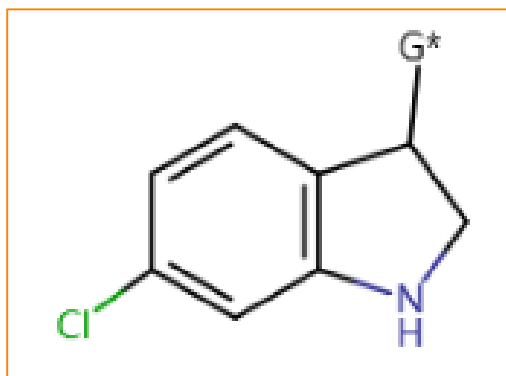
GH

G\*

GH\*

### Tips:

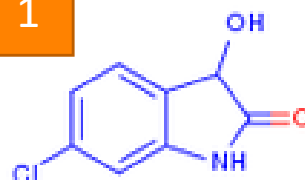
1. G代表的是任意基团，GH表示的是任意基团或H
2. G\*和G的区别是，G\*所连接的基团允许和母体成环，G不允许成环



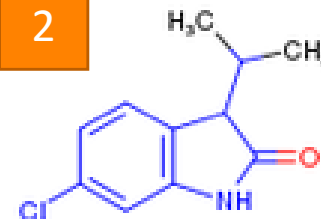
### 思考:

As Substructure检索这个结构，哪些结构可以被检索出来，如果不是G\*，而是G呢？

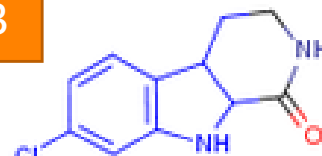
1



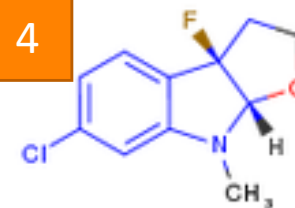
2



3



4



## Part E: 通用官能团, 原子属性定义



<i>A</i>	<i>Q</i>	<i>M</i>	<i>X</i>
<i>AH</i>	<i>QH</i>	<i>MH</i>	<i>XH</i>
	<i>?</i>	query prop.	

### **Tips:**

- 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: 原子属性列表



# Atom Properties全图

Atom query properties x

<b>.H+</b>	.h+	.v+	<b>.X+</b>
<b>.H-</b>	.h-	.v-	<b>.X-</b>
<b>.R+</b>	<b>.r+</b>	.rb+	.s+
<b>.R-</b>	<b>.r-</b>	.rb-	.s-
.u	<b>.a/A</b>	.rb*	.s*

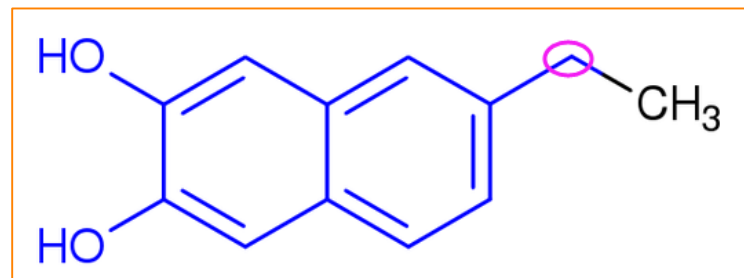
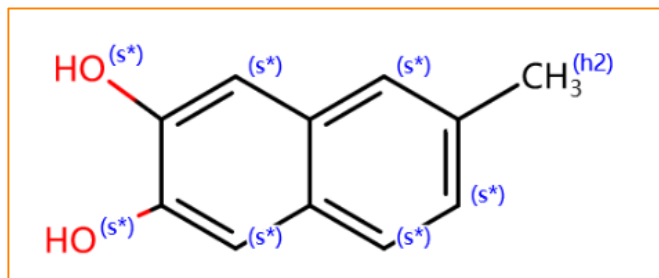
## Tips:

1. 有颜色标记的键目前RX中不起任何作用
2. h+/h-: 定义确定H的个数
3. v+/v-: 定义原子价位
4. rb+/rb-: 定义原子上环键个数
5. s+/s-: 定义原子上取代基个数
6. u: 定义原子取代基类型
7. rb\*: 封环
8. s\*: 封原子

所有功能使用时，需要配合As Draw，As Substructure。

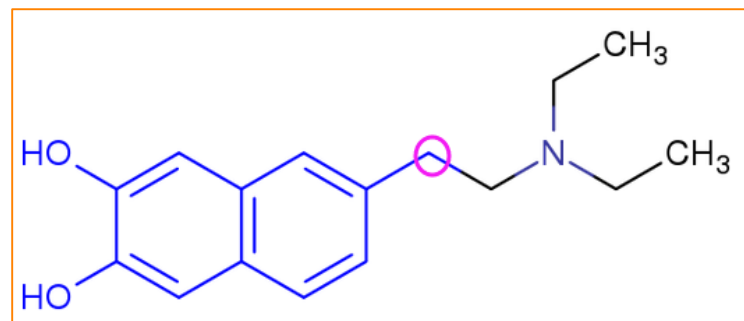
## h+/h-功能

- 定义：确定的H的取代个数
- 亚结构检索下面的结构



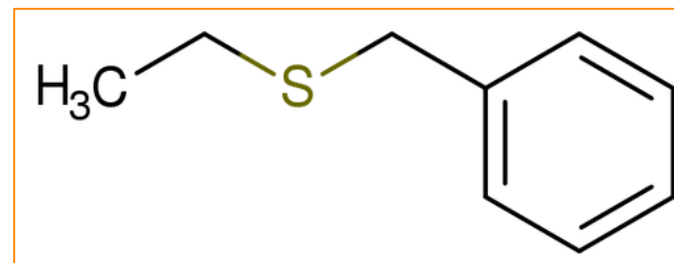
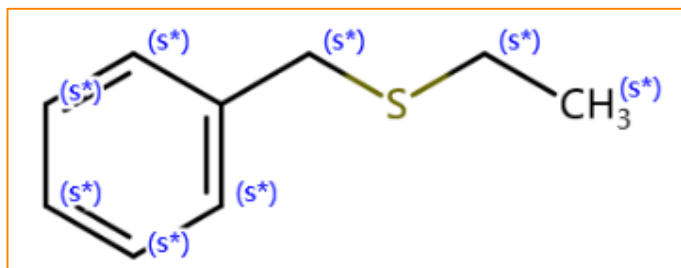
### Tips:

1. 一定要亚结构才有效用
2. 标记h<sub>2</sub>的C，通过亚结构检索后的结果中，该C上一定存在2个H，



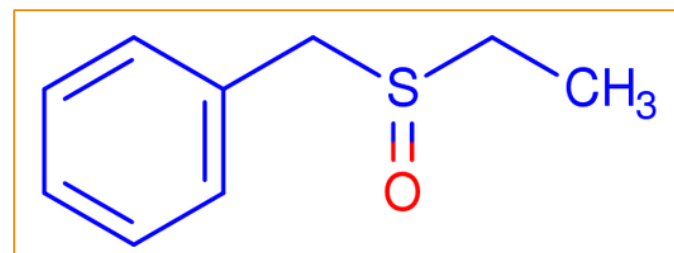
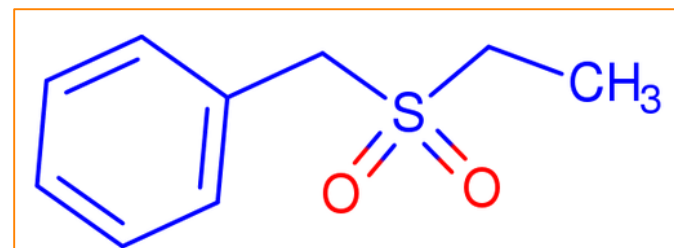
## v+/v-功能

- 定义：键的个数，通常来说指的是原子效价
- 亚结构检索带有S，N的物质中会经常遇到，如

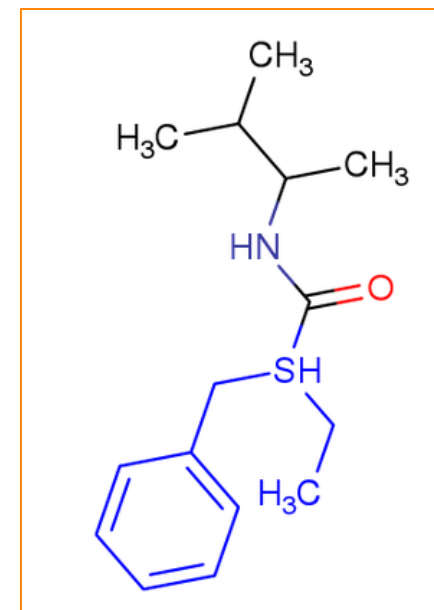
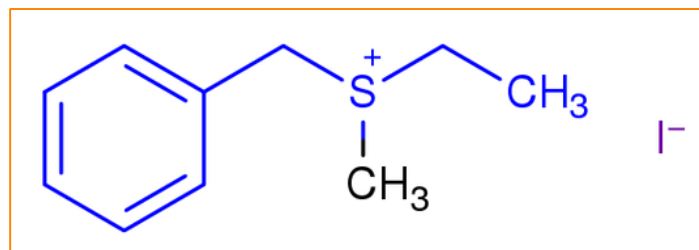
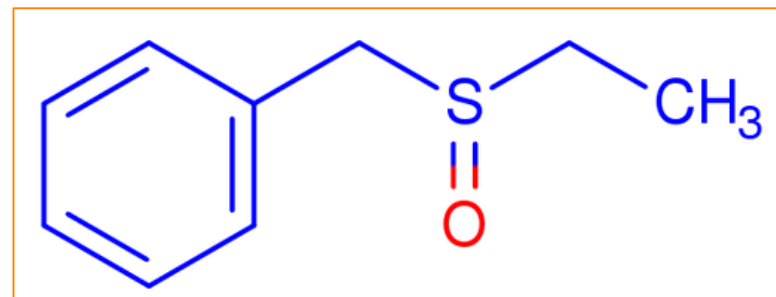
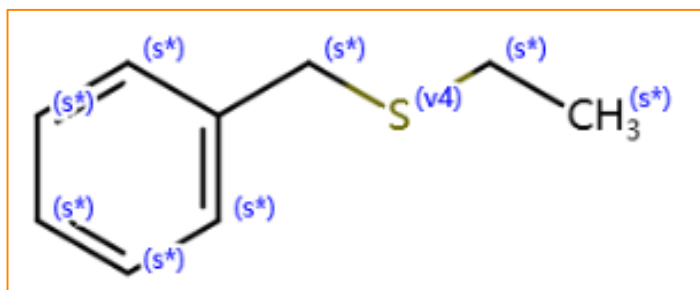


### Tips:

1. 一定在亚结构检索有效
2. 不使用v+/v-，可以拿到上述结构中S的所有价态的化合物，如右图
3. 如果标记v.....



## v+/v-功能---续

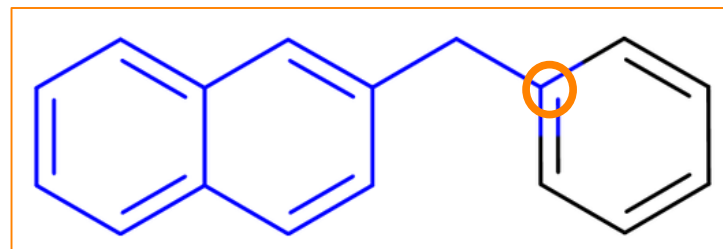
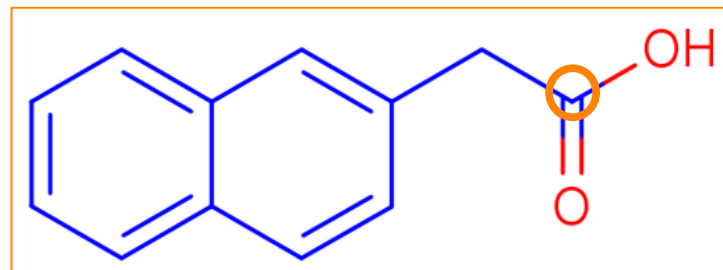
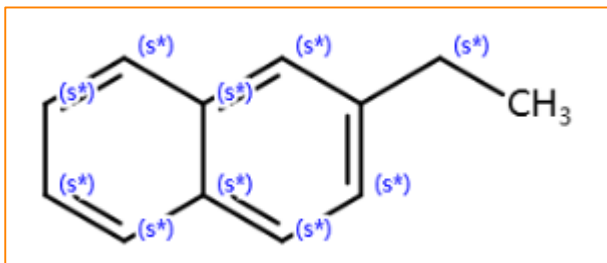


### Tips:

1. S标记V4后,
2. 检索出来的结果, S都是4价的, 如亚砷
3. 同样如果标记V6, S都是6价的, 会出现砷的结构

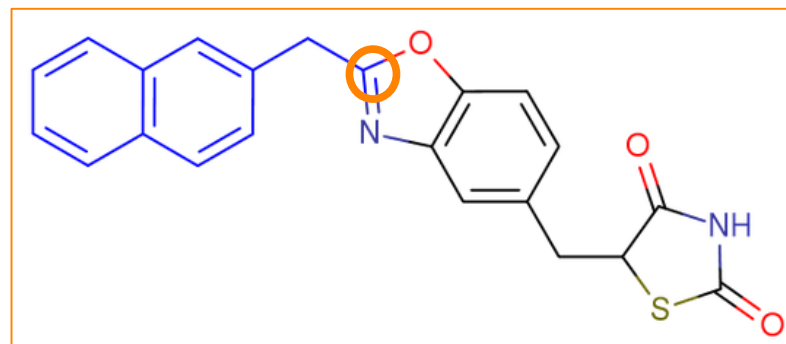
## rb+/rb-功能

- 定义：原子上存在的，确定的，环键的个数
- 最主要的作用是控制原子是否在环上面

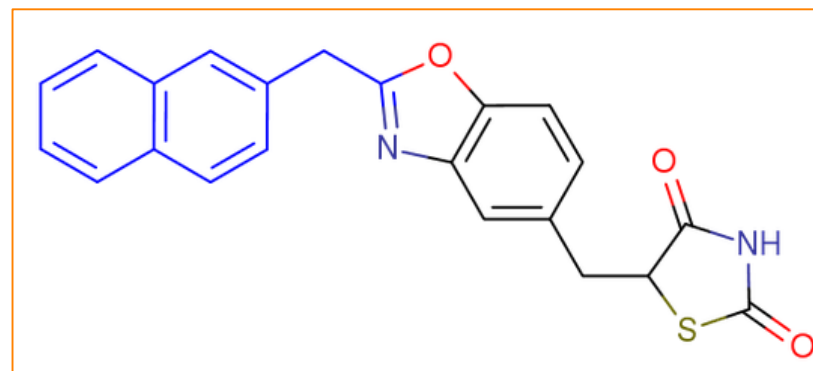
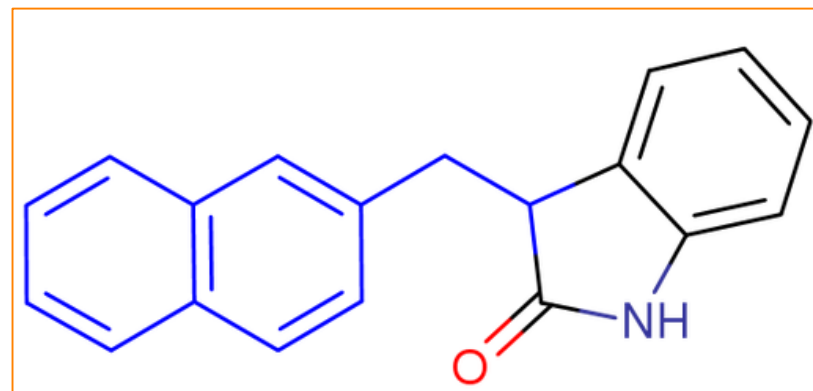
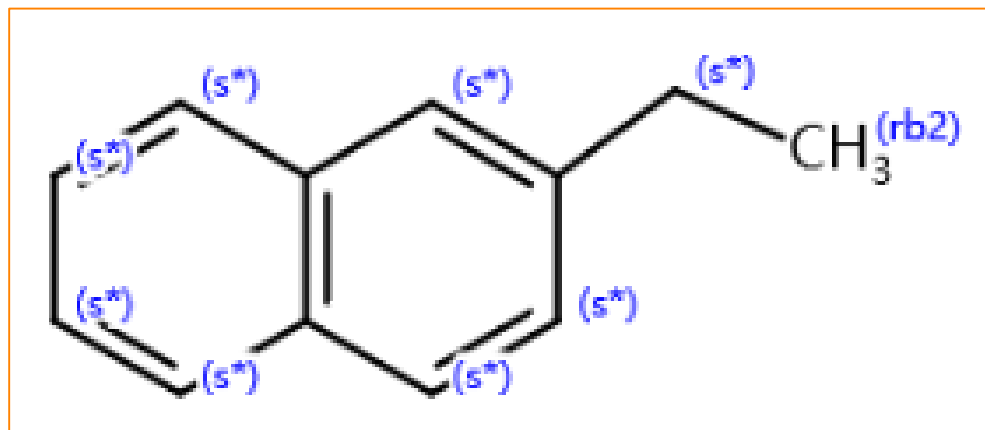


### Tips:

1. 一定要在亚结构中才有效用
2. 如上图，如果不用任何标记，亚结构检索可以获得右图，末端C可以在链中，也可以在环中
3. 如果添加rb+/rb-.....



## rb+/rb-功能—续

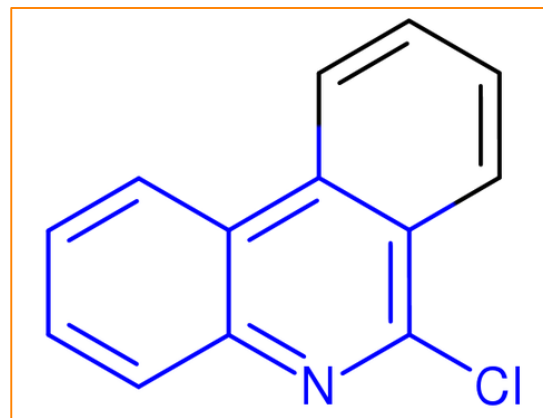
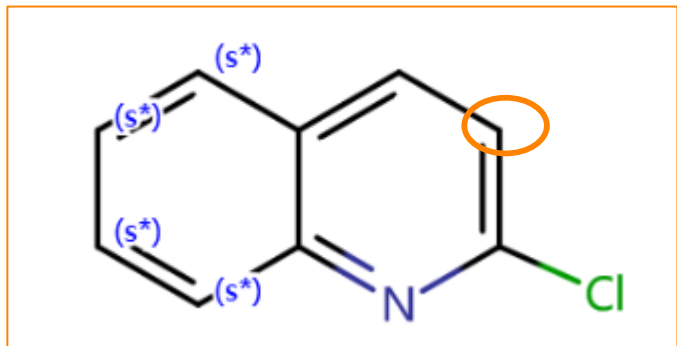


### Tips:

1. 末端C原子定义上rb后，末端C都是在C上的，如右图。
2. 一般来说，r0，r2，r3表示确切的个数，r4表示4跟环键或者更多环键。

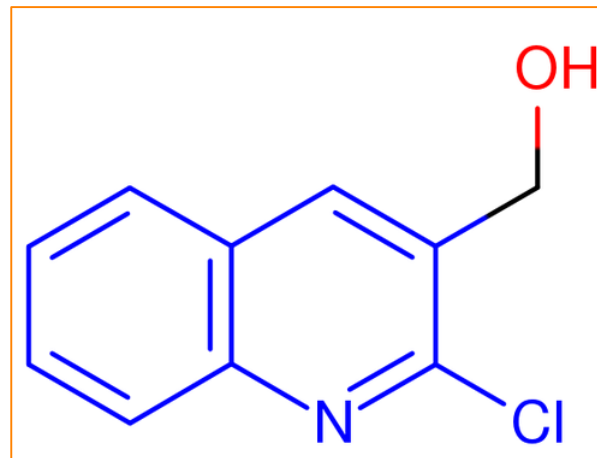
## rb\*功能

- 定义，在环上的原子，定义rb\*后，在进行亚结构检索时，只能是链取代，不能在发生环融合

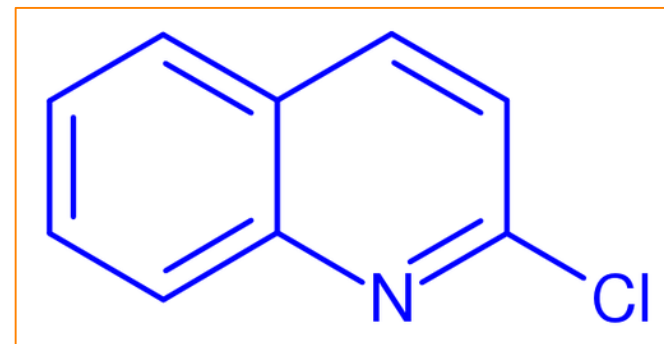
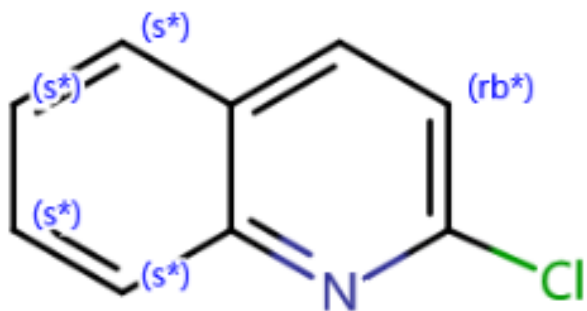


### Tips:

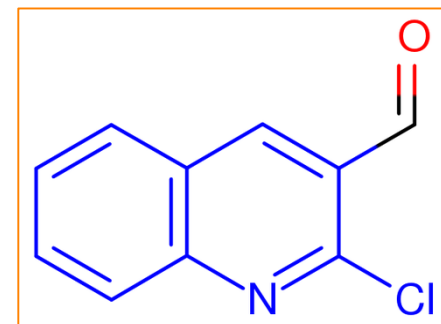
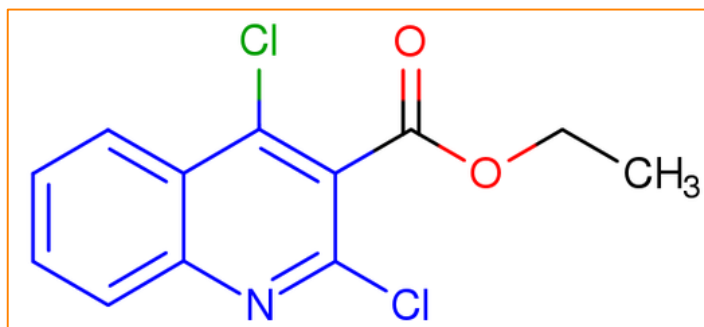
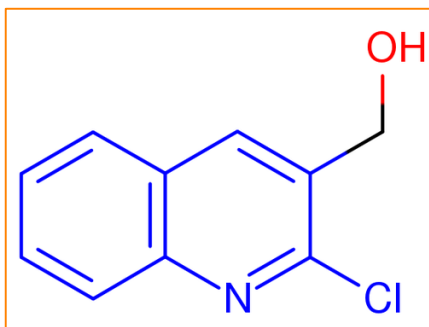
1. 只能使用在环原子上，亚结构检索有效，使用在链原子上无效
2. 如对上述结构进行亚结构检索，可以检索到右侧结构
3. 如果添加rb\* .....



## rb\*功能—续



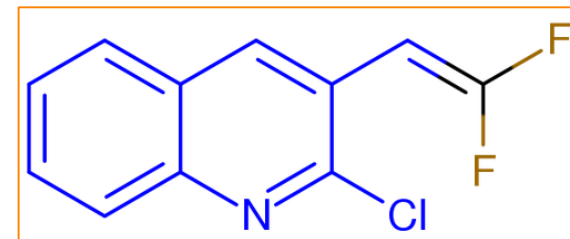
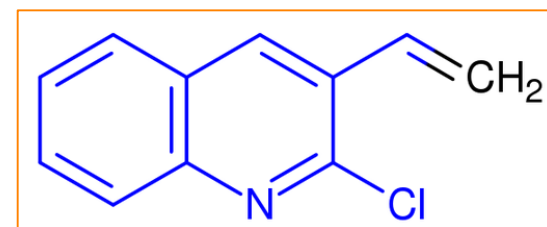
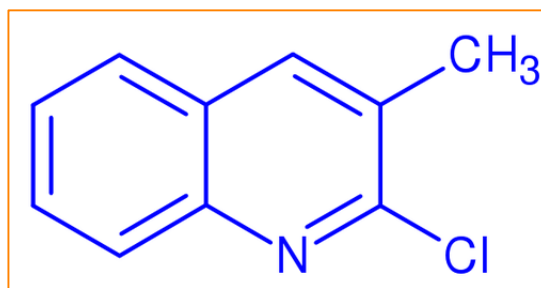
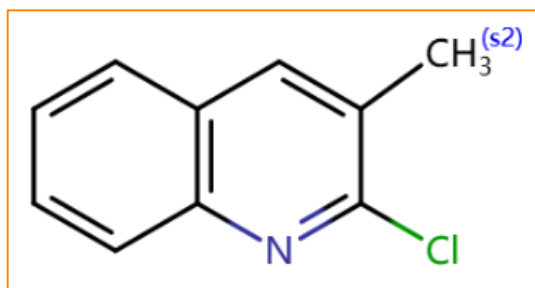
所有在标记位点上在融合成环结构全部去掉





## S+ / S- 功能

- 定义：原子上最大取代基个数，S0-S5，最大取代基个数，S6，开放所有取代。

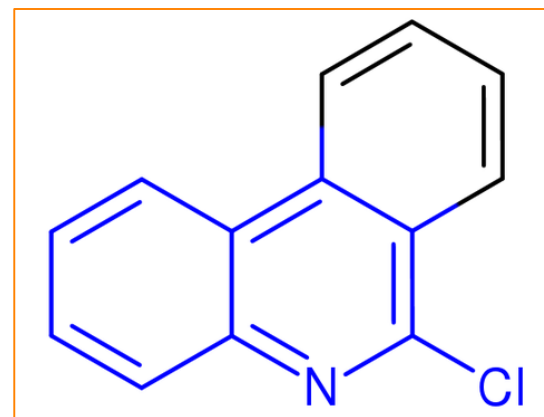
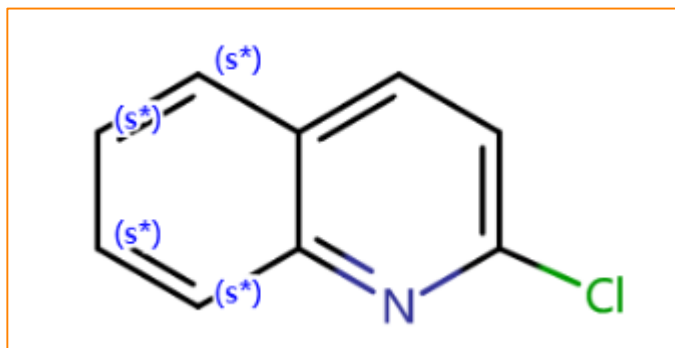


### Tips:

- As Draw中有效，亚结构无效
- 这是用As Draw做的检索，可以看到标记S2的原子在进行检索时都最多存在2个取代基（苯并吡啶算一个）

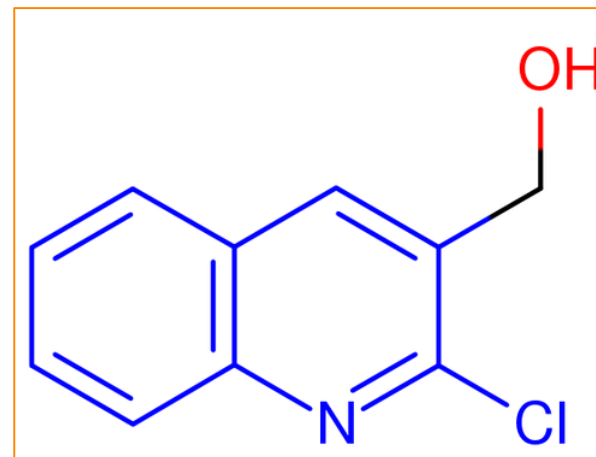
## S\*功能

- 定义：在进行亚结构检索的时候，被标记的原子处于封闭状态



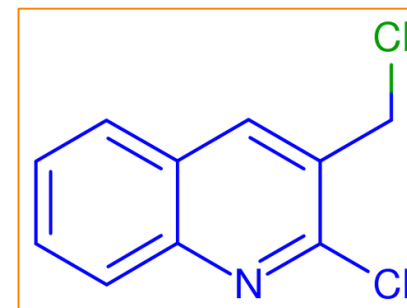
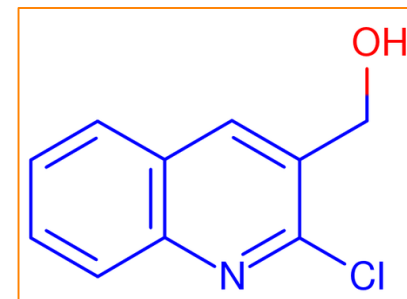
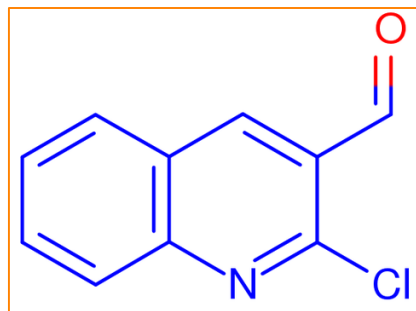
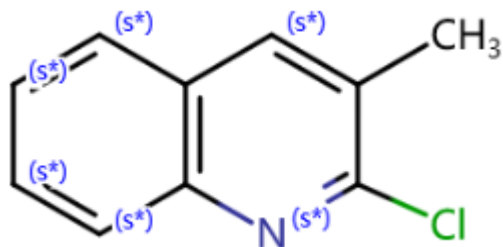
### Tips:

1. 亚结构中有效
2. 这是用Substructure做的检索，可以看到标记的4个C原子在进行检索时都没有取代发生



## U功能

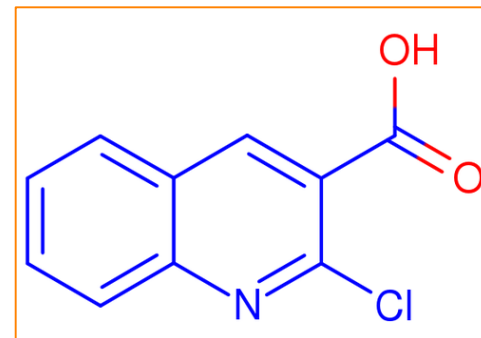
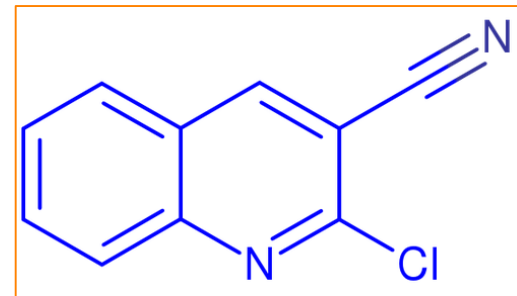
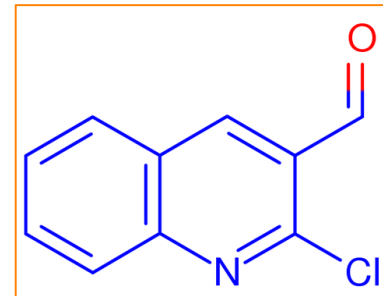
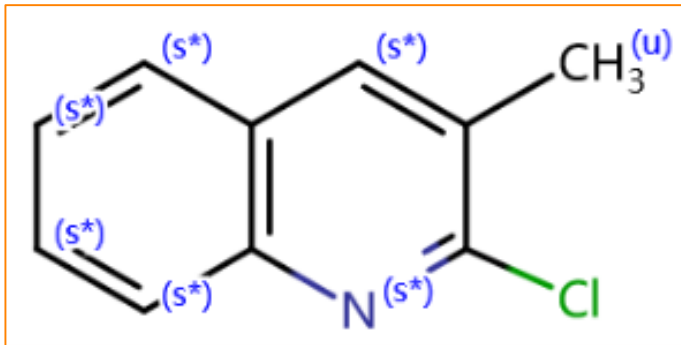
- 定义：在检索时，被标记的原子一定会存在双键，三键或者在芳环中



### Tips:

1. 亚结构中有效
2. 亚结构检索上述物质，可以发现C原子上可以接的键所有可能性都存在，饱和，不饱和
3. 使用U定义苯并吡啶的 $\text{CH}_3$

## U功能—续



### **Tips:**

1. 标记上U后，这个CH3上的取代，C上必须存在不饱和键

## Part F: 右键的使用—原子右键的重要功能

- 原子右键的使用，定义同位素

The diagram illustrates the process of defining an isotope for an atom in a chemical structure using a right-click context menu and the Atom properties dialog.

1. A benzene ring is shown with a green circle highlighting one of its carbon atoms.

2. A context menu is displayed over the highlighted atom, listing options: Duplicate, + R-group attachment, - R-group attachment, Atom properties (highlighted), Absolute stereo (chiral), R-logic, and Paste (Ctrl+V).

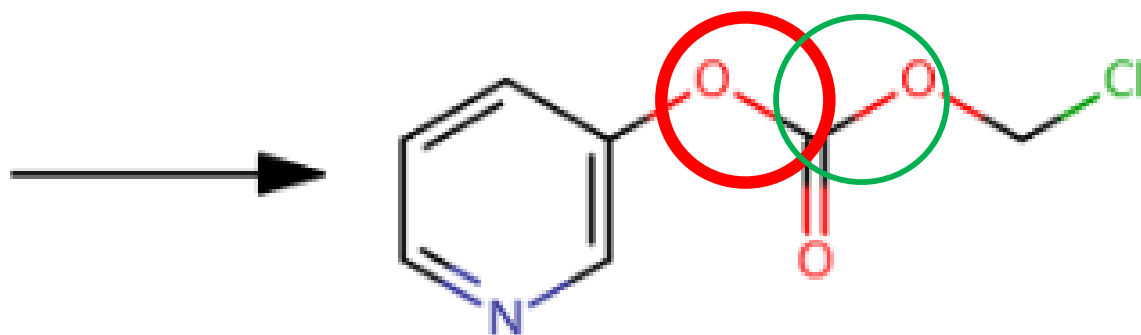
3. The Atom properties dialog is open, showing the Advanced tab. The Isotope field is highlighted with an orange box. The dialog also shows the Atom field set to C and the Atomic Number field set to 6.

4. A separate window shows the Isotope field with the value 13 entered, and a lock icon to its right.

5. The final result is a benzene ring with the highlighted carbon atom labeled as  $^{13}\text{C}$ .

## Part F: 右键的使用—化学键右键的重要功能

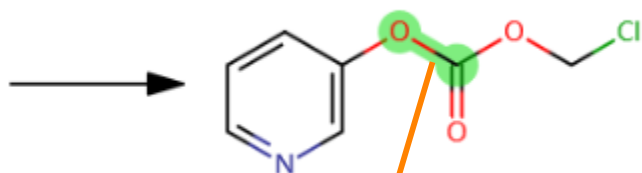
- 化学键右键的使用，定义反应中心



### **Tips:**

1. 对于这个化合物的合成，可以将结构拆成2个部分，理论上可以从红色和绿色两个部分进行拆分
2. 如果一定要是从红色部分拆分，如何定义

# 反应中心的定义



Bond properties

Absolute stereo (chiral)

*R-logic*

Paste (Ctrl+V)

Bond properties ✕

Type	single	▼
Topology	undefined	▼
Reacting center	undefined	▼

Ok

## Tips:

Center:

Make or Break:

Change:

Make and Change:

Not Center:

反应中心

生成或断裂

变化

生成和变化

不是反应中心

undefined

center - #

make or break - ||

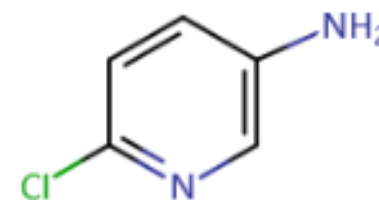
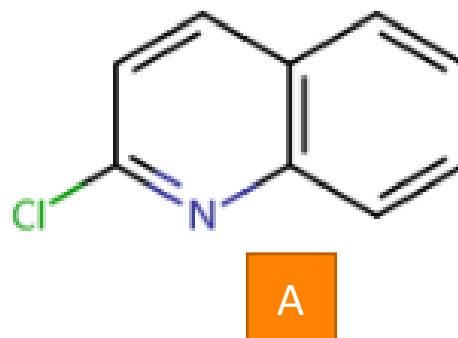
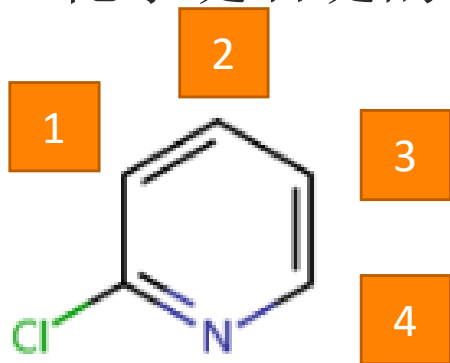
change - |

make and change - |||

not center - ✕

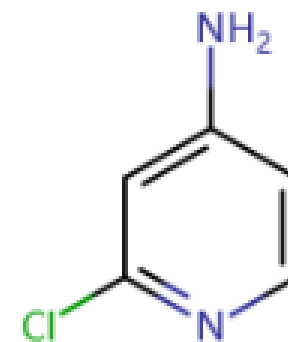
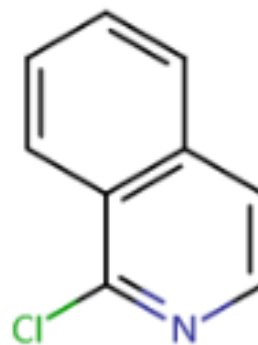
## Part F: 右键的使用—化学键右键的重要功能

- 化学键右键的使用，键的拓扑



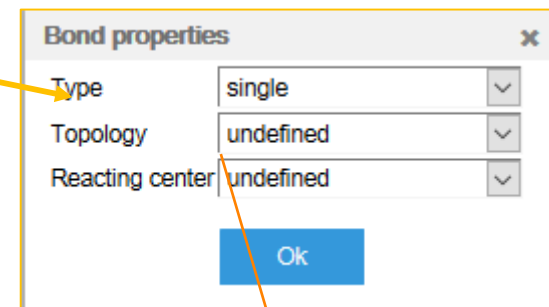
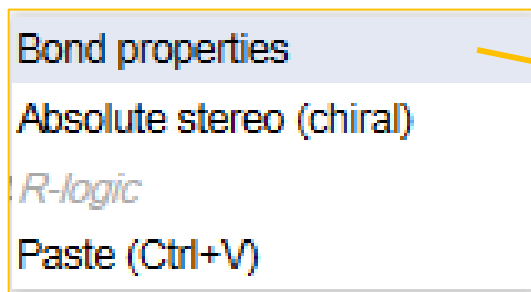
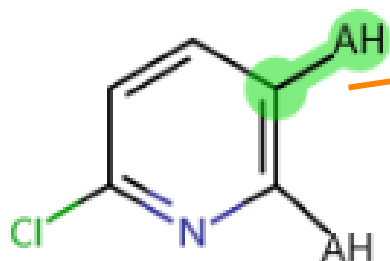
### 思考:

- 使用As Substructure检索吡啶氯可以获得右侧所有结构
- 但是如何实现，3，4位点上不发生稠环的检索，即A结构不允许检索到，但其他3个结构可以



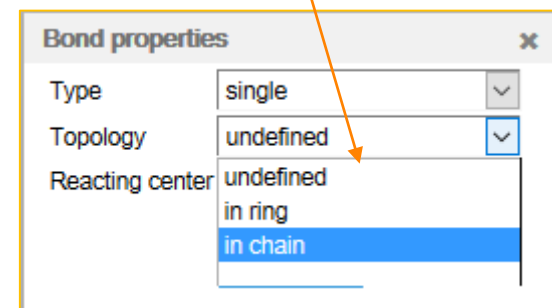


## 键的属性定义



### Tips:

1. 用AH定义吡啶上的可能的取代原子
2. 右键绿色的键，
3. 利用Topology功能定义这根键在环上，还是在链上





ELSEVIER

**Sam Yu 俞靚**

Customer Consultant

Research Solutions- Life Sciences

[s.yu.2@elsevier.com](mailto:s.yu.2@elsevier.com)

m +86 189 3040 8012