
Reaxys 實用功能介紹

目錄

一、Reaxys 結構面板詳解.....	3
1：Reaxys 中的檢索模式.....	3
2：Reaxys 結構面板中的功能	4
A：選擇，橡皮擦，鍵，鍵工具.....	5
不定位鍵的使用	5
配位鍵的使用.....	6
B：開放取代，原子鎖定，重複基團，R 基團，原子匹配	7
S Max 開放取代.....	8
S Lock 原子鎖定	9
重複基團定義.....	9
R 基團自訂	10
反應箭頭，原子匹配工具.....	12
C：常見的環系結構，糖分子	12
D：縮寫官能基， Generic Group，元素週期表，Atom List/Not List 定義.....	13
縮寫官能基定義	13
Generic Group 通用官能基定義	13
元素週期表，Atom List/Not List 定義.....	15
E：通用原子，原子查詢屬性，常見原子	17
通用原子與原子查詢屬性定義.....	17
s+/s-的使用.....	19
s*的使用.....	19
h+/h-的使用	19
v+/v-的使用	19
rb+/rb-的使用.....	21
rb*的使用	22
u 的使用.....	23
F：滑鼠右鍵的使用.....	24
原子滑鼠右鍵功能.....	24
同位素定義	25
滑鼠右鍵功能.....	26
鍵的拓撲屬性定義	27
反應中心定義.....	27
異構中心定義.....	28
二、Reaxys 中反應查詢	28
1：反應檢索中常用定義工具	28
原子鎖定工具.....	28

環鎖定工具.....	29
碎片反應定義工具.....	30
2：條件篩選時常用的篩選工具.....	31
篩選工具概覽.....	31
催化劑分類工具.....	31
溶劑分類工具.....	33
反應類型分類工具.....	34
3：其他反應檢索.....	34
關鍵字聯合反應檢索方法.....	34
反應中溫度，時間，壓力等條件定義.....	34
三、合成計畫的制定.....	36

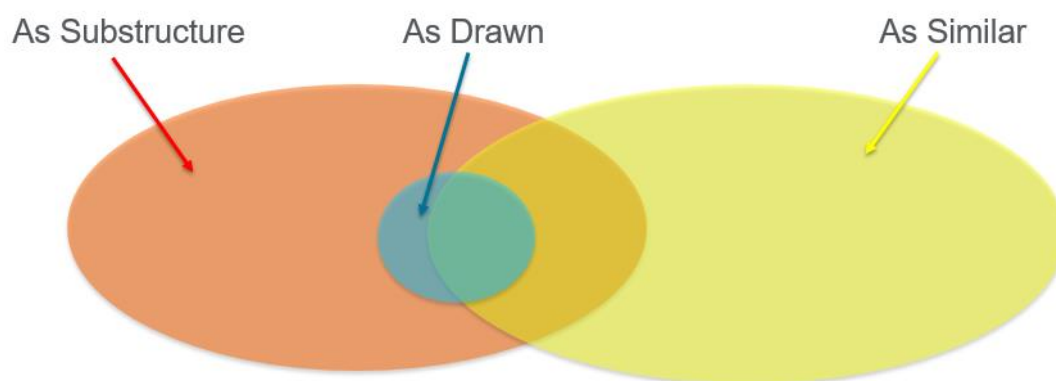
一、Reaxys 結構面板詳解

1：Reaxys 中的檢索模式

Reaxys 中涉及結構，反應的檢索模式一共有 3 種，As Drawn，As Substructure, As Similar，定義如下：

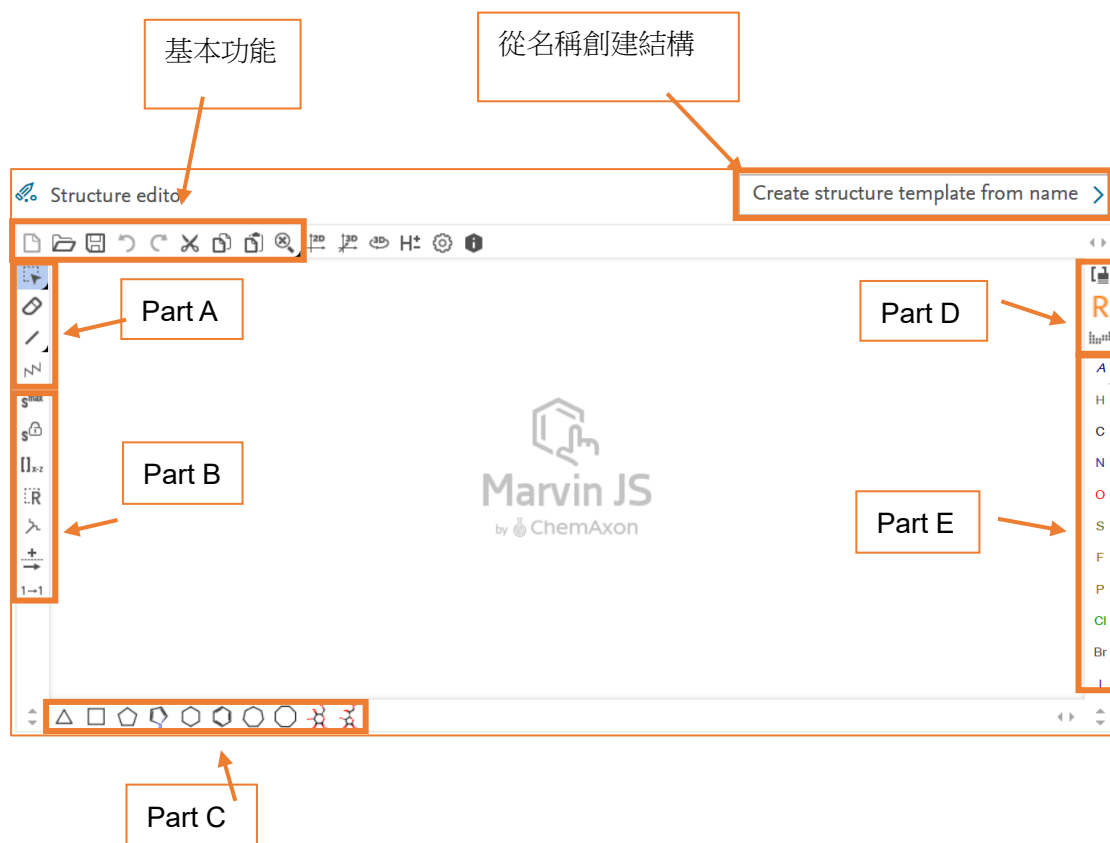
- **As Drawn**：檢索和所繪製結構完全一樣，繪製的結構中可以定義重複片段，可以定義允許開放的原子
- **As Substructure**：對結構中沒有繪製出來或者延展出來的 H 進行任意取代，但是核心結構必須和所繪製的一樣
- **As Similar**：檢索和所繪製結構相似的結構，可以是取代的相似，也可以是母核結構的相似，用不同的相似級別控制結構的輸出。

如果用同一個結構同時進行 3 種結構的檢索，相互之間的包容關係如下：



2：Reaxys 結構面板中的功能

Reaxys 中的結構面板全圖：



基本功能：



從左至右依序是，新建結構，打開結構，儲存結構，復原，重做，剪下，複製，貼上，縮放，滑鼠放置具體功能上，可以看到功能定義。對於絕大多數使用者習慣的從 Chemdraw 中複製結構到 Reaxys 面板，採用的方式是，在 Chemdraw 中將結構複製成 Smile 格式，Ctrl+Alt+C，進入 Reaxys 後，先點擊面板啟動，Ctrl+V 複製過來即可。

A：選擇，橡皮擦，鍵，鍵工具



選擇鍵中的兩個選項，矩形選擇和自由選擇

鉛筆	單鍵	雙鍵	三鍵
芳香鍵	單鍵上	單鍵下	單鍵上或下
雙鍵順或反	順反或未定義	單鍵或雙鍵	單鍵或芳香鍵
雙鍵或芳香鍵	不確定鍵	配位鍵	不定位鍵

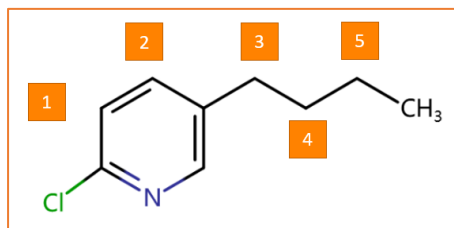
功能詳解（依序從上到下）：

- 選擇功能，矩形選擇框用於矩形選擇，圓形選擇框用於自由選擇，如果所需要選擇的原子和基團太過複雜，可以按住 **Shift**，然後用滑鼠點選所需選擇的原子即可
- 橡皮擦，用於擦掉一個原子或鍵
- 鍵工具，點選右下角的黑色按鈕，可以看到 **Reaxys** 中的 16 種鍵的定義，可以參考上圖表格中的具體定義
- 鍵工具，用於繪製鍵

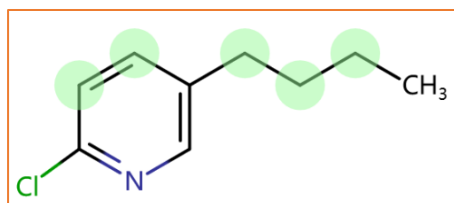
不定位鍵的使用



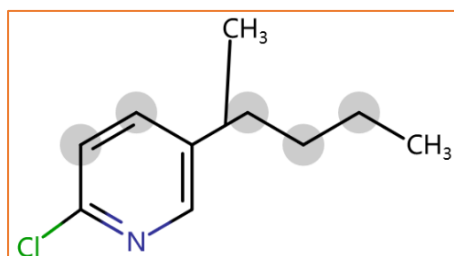
不定位鍵，用於繪製可變位置的取代鍵。連結位置可以在環結構上，也可以在鏈結構上。如以下結構，需要在 1，2，3，4，5 號碳原子上連結一個 NH_2 ，但是具體位置不定，繪製方法如下：



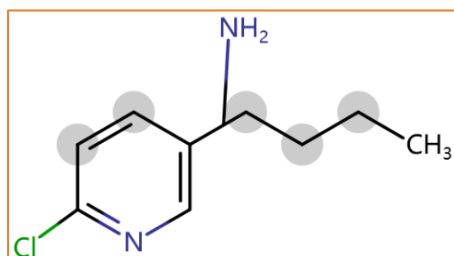
1：用選擇工具選擇 1，2，3，4，5 號原子（可以按住 **Shift**，點選需要的原子）



2：選擇好後，新增不定位鍵，預設新增一個甲基，



3：將 CH3 換成 NH2，如下

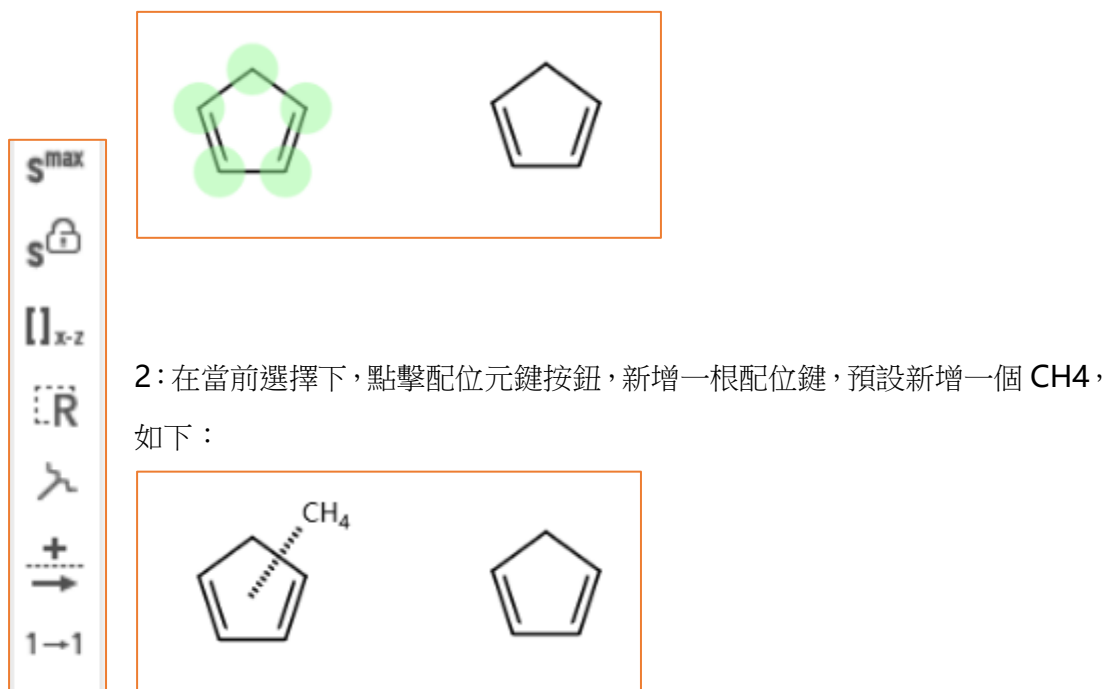


配位鍵的使用

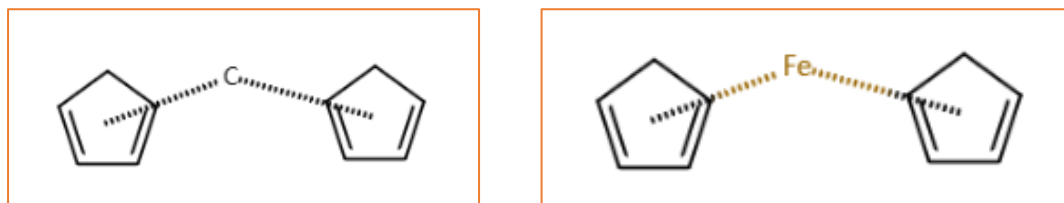


配位鍵，主要用於繪製配位化合物，如二茂鐵的繪製過程如下：

1：先繪製兩個環戊二烯，並選擇其中一個環戊二烯，如下：



3: 重複上述兩個步驟，在另外一個環戊二烯上也新增一根配位鍵，並將這兩個 CH₄ 拖至重疊，並換成 Fe 即可，如下兩個圖



B: 開放取代，原子鎖定，重複基團，R 基團，原子匹配

開放取代功能，適用於 As Drawn 檢索

原子鎖定功能，適用於 As Substructure 功能

重複基團定義工具

Smart R 功能，用於 R 基團自訂功能

R Group Attachment，用於 R 基團自訂時末端原子定義

反應箭頭，反應方向
原子匹配工具，用於定義反應前後匹配原子

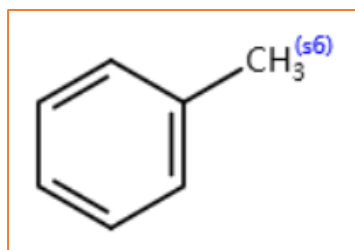
S Max 開放取代



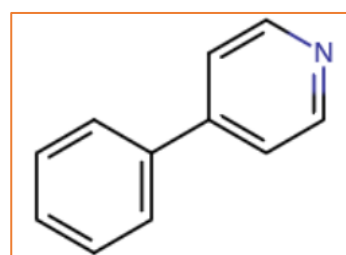
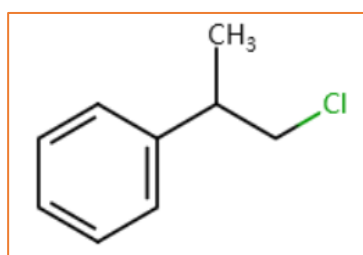
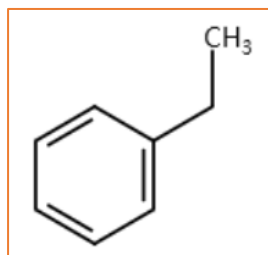
- 功能名稱：開放取代，
- 使用方法：滑鼠點擊該功能後，點擊需要標記的原子即可
- 功能定義：用於 **As Drawn** 檢索，在該檢索模式下，如果使用原子開放取代功能，標記結構中的原子，等同於在進行 **As Drawn** 檢索時，允許在被標記的位元點上發生任意取代，該原子會被標記上 **S6**

如：

As Drawn 檢索以下結構：



可以出現的結構是：



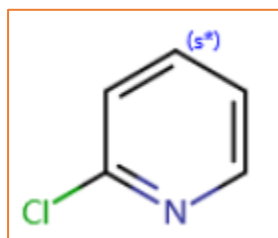
S Lock 原子鎖定



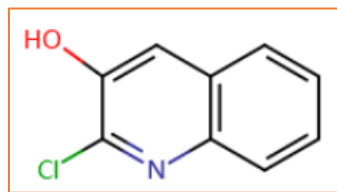
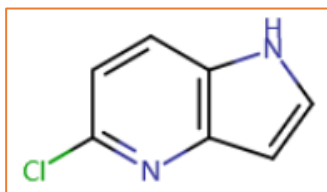
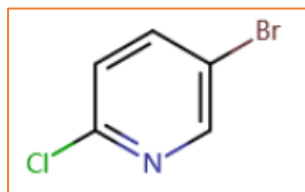
- 功能名稱：原子鎖定功能
- 使用方法：滑鼠點擊該功能後，點擊需要標記的原子即可
- 功能定義：用於 **As Substructure** 檢索，在該檢索模式下，如果使用原子鎖定功能，標記結構中的原子，等同於在進行 **As Substructure** 檢索時，被標記的原子上不能發生取代，該原子會被標記上 **S***

如：

As Substructure 檢索以下結構：



可以出現的結構是：

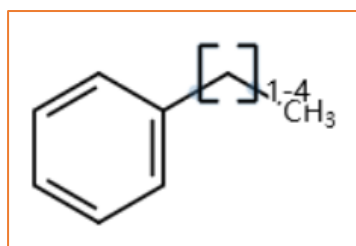
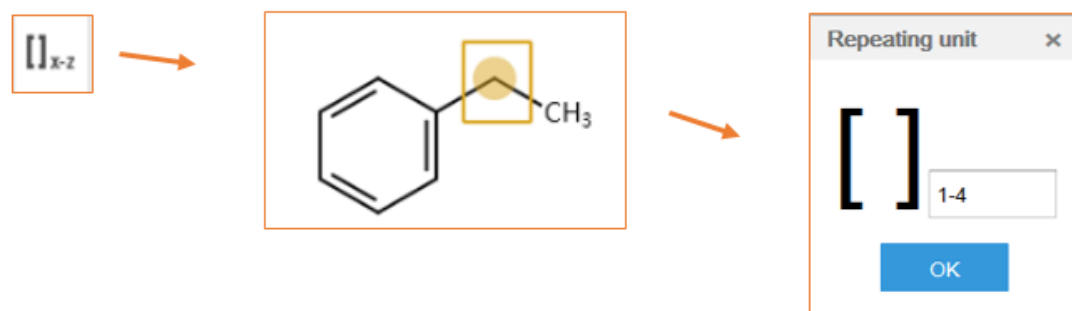


重複基團定義



- 功能名稱：重複基團定義工具
- 使用方法：點擊該工具，選擇需要重複的基團，輸入重複閾值
- 功能定義：**As Drawn**，**As Substructure** 檢索模式下皆能使用，用於定義結構中存在的，確定的重複片段，通常意義上來說，定義在鏈上，用於控制鏈的長短，如果定義在環裡面，可控制環結構的大小。

結構繪製方法：

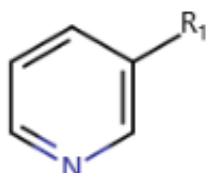


R 基團自訂

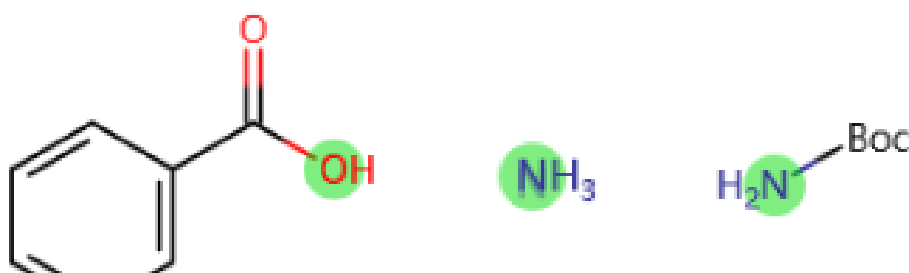


- 功能名稱：Smart R，R Group Attachment，通常會一起使用
- 使用方法：先用 R Group Attachment 定義 R Group 的多個片段中可以連接到母體結構的末端原子，在用 Smart R 將片段全部擴選至一個整體，最後將定義好的 R 連結至母體結構即可
- 功能定義：用於自訂 R 基團

繪製以下結構：



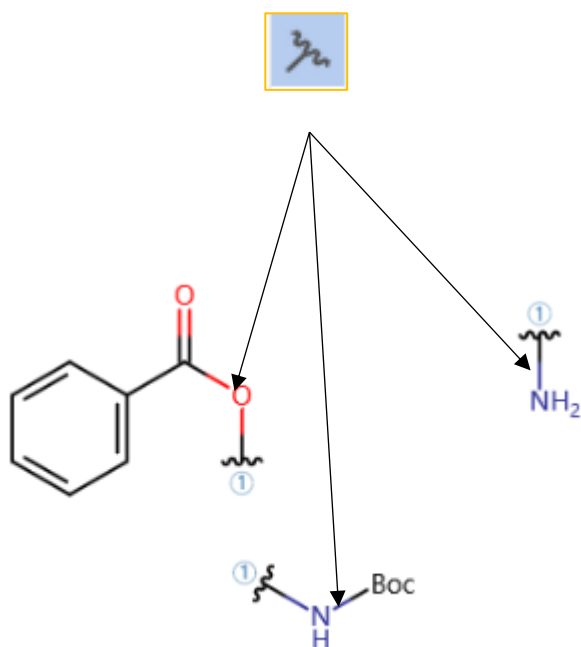
結構中，R1 基團可以是以下 3 種官能基，且通過被標記原子和吡啶環相連接：



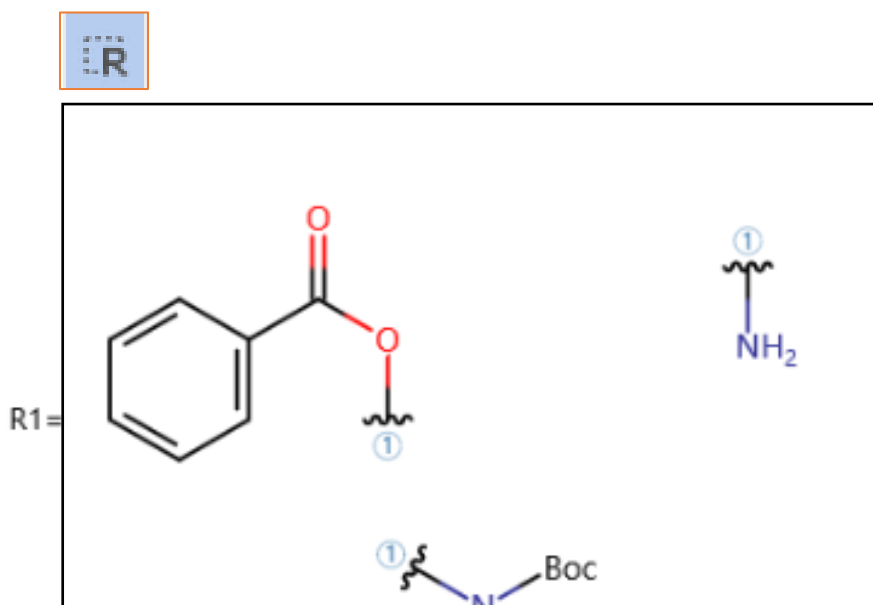
繪製方法：

1：繪製 3 個基團，並用 R Group Attachment 功能分別標記能與吡啶相連接的原子，

可以看到 3 個原子上會出現一個①的標記：



2：繼續用 Smart R 將 3 個片段擴選起來，即可完成 R1 基團的定義

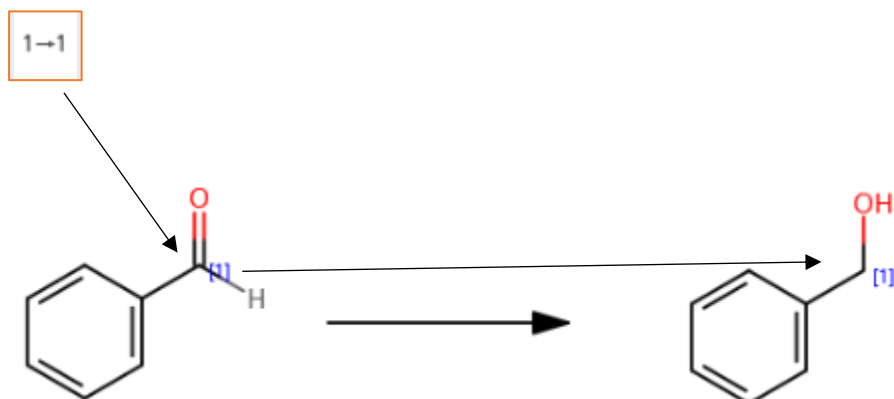


反應箭頭，原子匹配工具

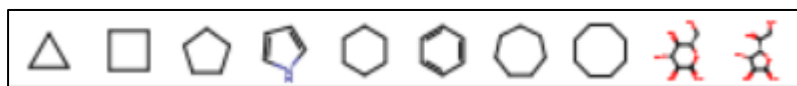


- 功能名稱，反應方向箭頭，原子匹配工具
- 使用方法，反應方向箭頭用於定義反應方向，原子匹配工具用於定義反應前後必須匹配的原子，

使用原子匹配工具，在反應前後必須匹配的原子之間拉一條線，完成標記後，兩個原子上會被標記上同樣的數位，如下：



C：常見的環系結構，糖分子



對於不同的環系結構，糖分子，直接選擇後點擊結構面板即可使用。

D：縮寫官能基， Generic Group，元素週期表，Atom List/Not List 定義



縮寫官能基，用於定義一些常見的縮寫官能基

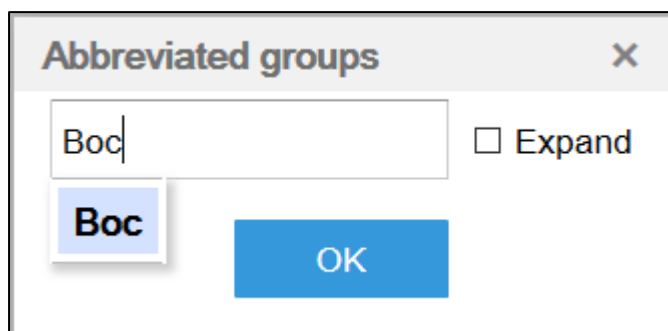
Generic Group，用於定義一些通用官能基

元素週期表，用於定義不同的元素，並包含 Atom List， Not List 功能

縮寫官能基定義



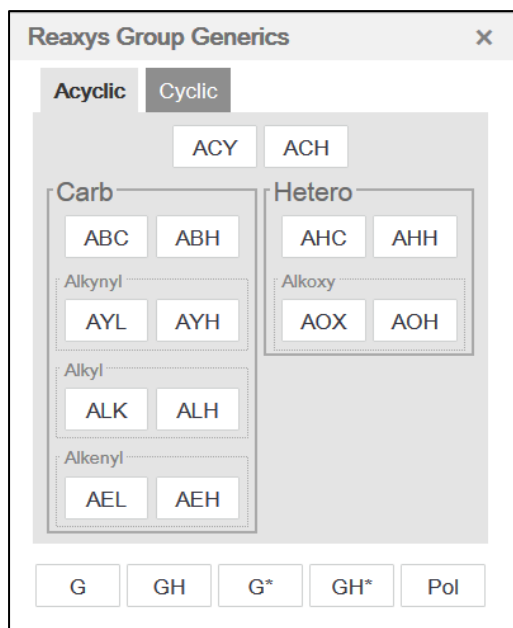
- 點擊功能鍵，直接輸入官能基名稱，即可繪製出對應官能基
- 勾選 Expand，可以展開該官能基



Generic Group 通用官能基定義



- 用於定義一些常見通用官能基，打開後如下，分鏈系，環系兩個表格
鏈系表格：



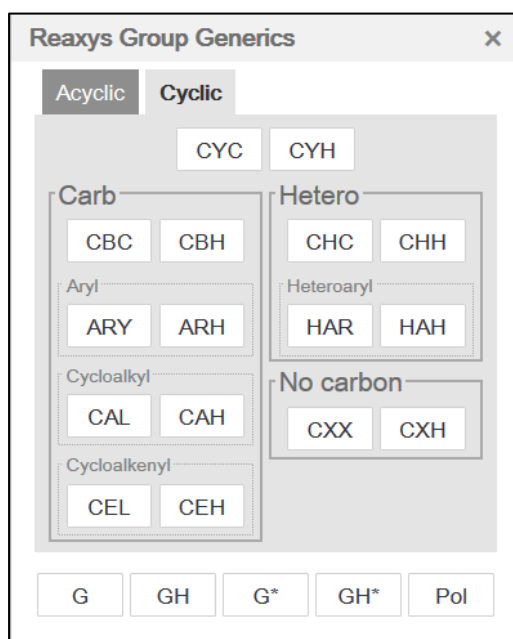
Reaxys 鏈系通用官能團定義：

- ACY： 任意的鏈
- ABC： 任意 C 鏈（只含 C 原子）
- AYL： 含有炔基取代的鏈
- ALK： 含有烷基取代的鏈（飽和鏈）
- AEL： 含有烯基取代的鏈

- AHC： 含有雜原子的鏈
- AOX： 烷氧基

其他帶 H 的分別是，前面對應基團或 H。

環系表格：



Reaxys 環系通用官能團定義：

- CYC： 任意的環
- CBC： 任意 C 環（只含 C 原子）
- ARY： 芳香基（只含 C 原子）
- CAL：環烷基（飽和 C 環）
- CEL：環烯基（不飽和 C 環）

- CHC： 任意雜環
- HAR： 含雜原子的芳香環
- CXX： 不含 C 原子的環

其他帶 H 的分別是，前面對應基團或 H。

G 與 G*的定義：



定義如下：

- G 代表的是任意基團，GH 表示的是任意基團或 H
- G*和 G 的區別是，G*所連接的基團允許和母體成環，G 不允許成環

元素週期表，Atom List/Not List 定義



- 用於定義原子
- 用於定義不允許發生取代的原子列表，和允許發生取代的原子列表

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 用於定義結構上不能發生取代的原子，如希望定義某原子上不能發生

N,O,S 取代，步驟如下：

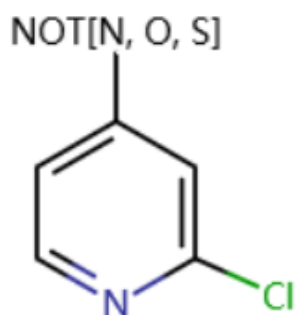
- 1：打開元素週期表，點擊 Not List
- 2：點擊 N，O，S，點擊 OK
- 3：將 Not List 清單連結到原子上

Periodic table

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	S	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

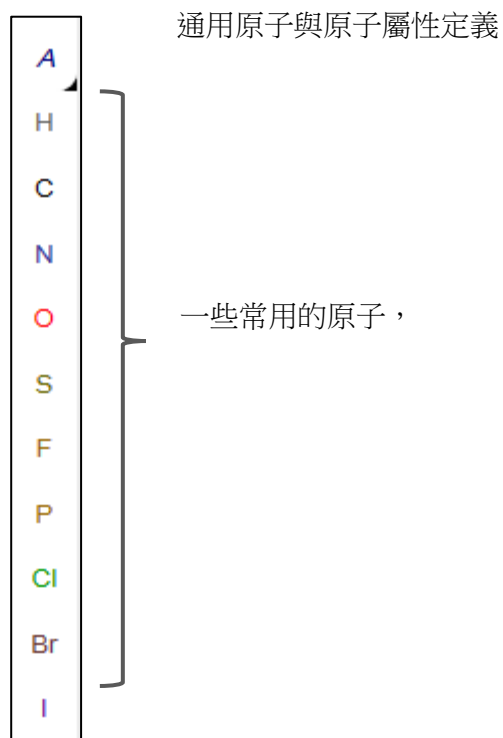
定義好的結構如下：



Not List 和 Atom List 的一些說明：

- 使用 As Drawn，只接 1 個原子，且該原子會處於 Block 狀態
- 使用 As Substructure，相當於原子的允許/不允許，該原子預設開放
- Not List 預設表示該位點是有取代的

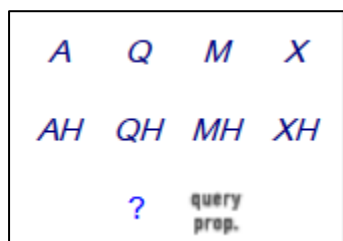
E：通用原子，原子查詢屬性，常見原子



通用原子與原子查詢屬性定義



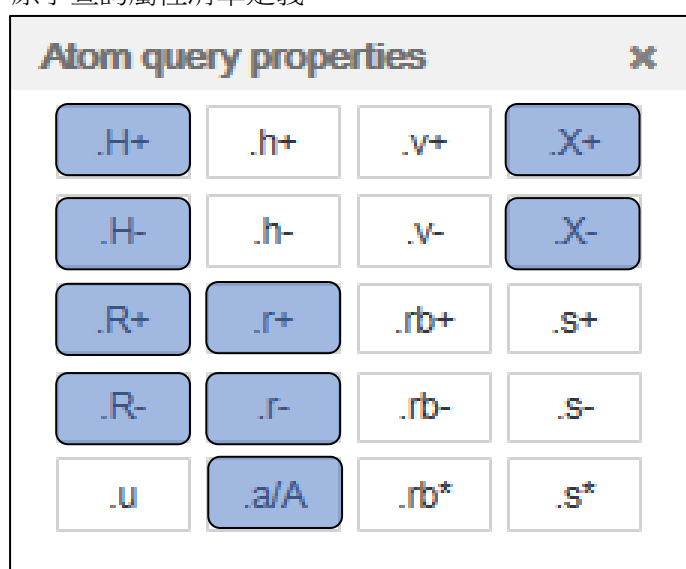
- 用於定義一些通用原子，以及原子屬性的定義
- 點開右下的黑圖示，可以看到



- A：任意非 H 原子
- Q：任意非 C，H 原子
- M：任意金屬
- X：鹵素

- AH : 任意原子 (含 H)
- QH : 任意非 C 原子 (含 H)
- MH : 任意金屬和 H
- XH : 任意鹵素和 H
- Query prop: 原子查詢屬性清單

原子查詢屬性清單定義：



說明：

- Reaxys 目前無法使用顏色標記，
- 功能需要配合 As Drawn/As Substructure 的不同檢索模式，如下：

功能名稱	起作用模式	實現功能
h+/h-	As Substructure	定義原子上確定的 H 的個數
v+/v-	As Substructure	定於原子的價態
rb+/rb-	As Substructure	定義原子上確定的環鍵的個數
rb*	As Substructure	鎖定原子上的環鍵，允許取代，但不允許成環

u	As Substructue	定義原子上一定存在不飽和鍵或在芳環中
s*	As Substructue	鎖定原子，不允許發生取代
s+/s-	As Drawn	定義原子上最大取代基個數

s+/s-的使用

As Drawn 檢索時使用，定義標記的原子的最大非 H 取代數，在 As Drawn 檢索時
 如果需要開放特定原子，可以用該工具標記該原子上的最大取代基個數。s Max 是 s+/s-
 的一個特殊的用法，用於標記最大取代基個數。

s*的使用

As Substructure 檢索時，等同於 S Lock，讓被標記的原子不發生取代，參考 S
 Lock 的使用。

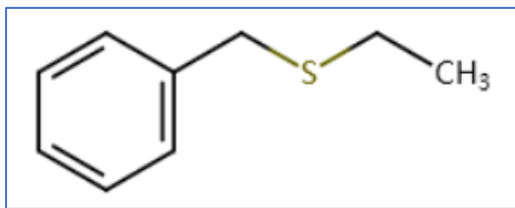
h+/h-的使用

As Substructure 檢索時，定義原子上必須出現的 H 的個數。

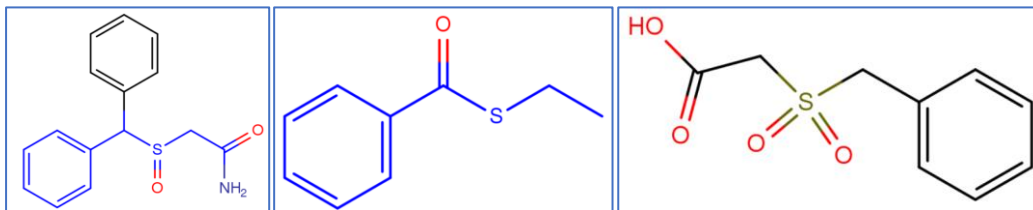
v+/v-的使用

As Substructure 檢索時，定義原子的價位。

如，As Substructure 檢索以下結構：

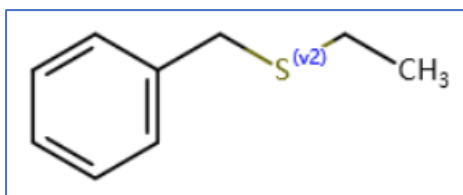


會出現以下的結果：

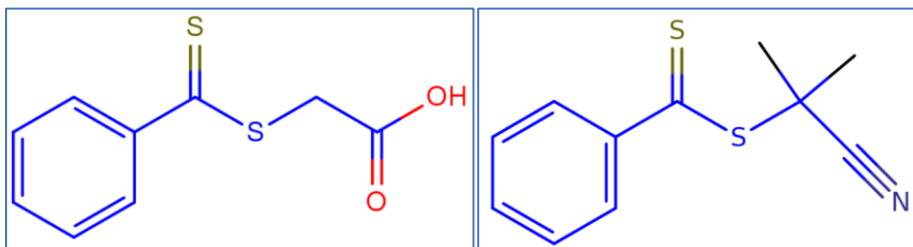


可以發現結構中的 S，可以是 2 價，4 價，6 價，如果需要 S 一定是 2 價，或者是 4 價，可以使用 v+/v-將 S 原子標記為 v2，或者 v4 即可。使用方法，選擇 v+/v-後，點擊 S 原子即可。

如用以下結構進行 As Substructure 檢索，S 一定是 2 價，而不會出現亞磺和磺的結構。



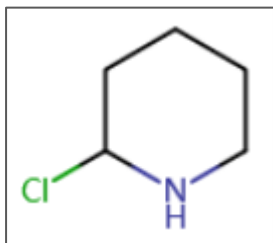
檢索到的結果如下：



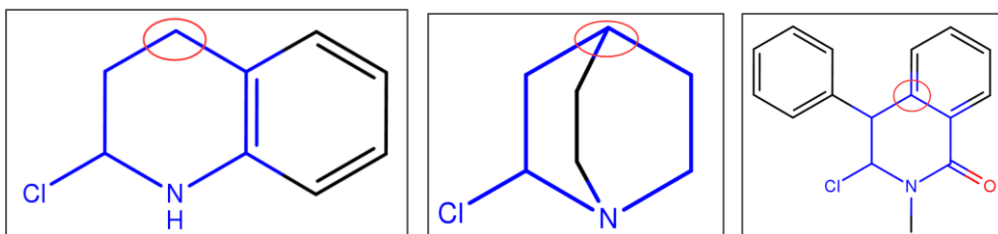
rb+/rb-的使用

As Substructure 檢索時，定義原子上確定的環鍵的個數。

如，亞結構檢索以下結構：



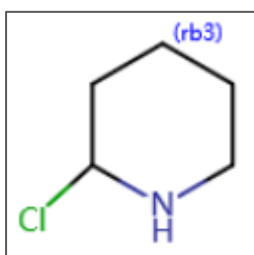
會出現以下結構：



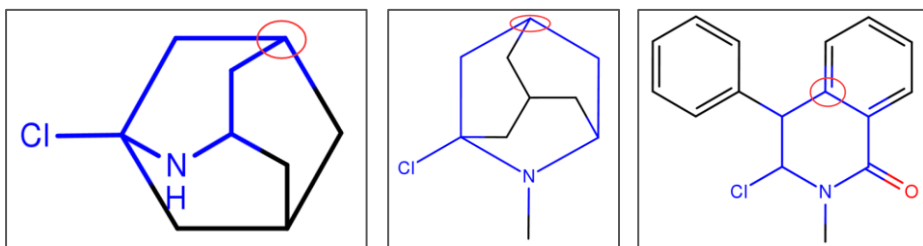
可以發現，被標記的 C 原子上會出現不同數量的環鍵（雙鍵算 1 根環鍵），如果需要被標記的 C 原子上一定要有 3 根環鍵，可以使用 rb+/rb-將 C 原子標記為 rb3 即可。

使用方法，選擇 rb+/rb-後，點擊 C 原子即可。

如用以下結構進行 As Substructure 檢索，C 上一定有 3 根環鍵。



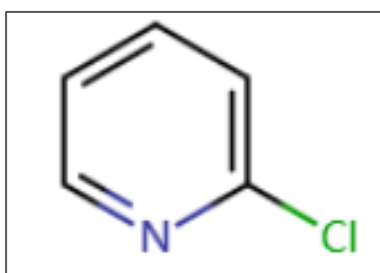
檢索到的結構如下：



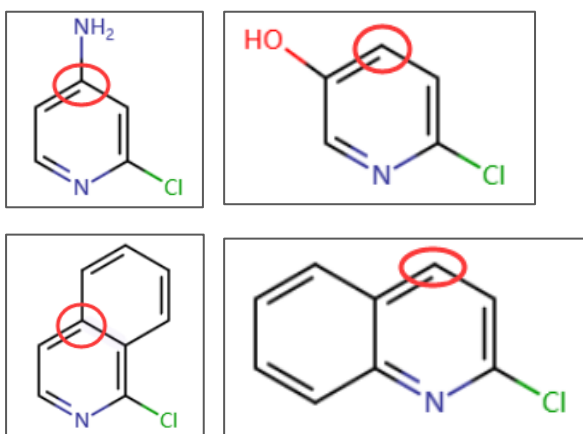
rb*的使用

As Substructure 檢索時，被 **rb***標記的原子不能再發生稠環取代，但允許鏈取代，而結構中的其他未標記的原子，可以發生稠環取代，也可以發生鏈取代。

如用 As Substructure 檢索以下結構：



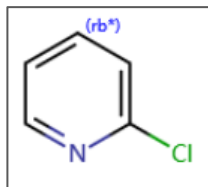
可以出現以下的結果，注意被標記的原子：



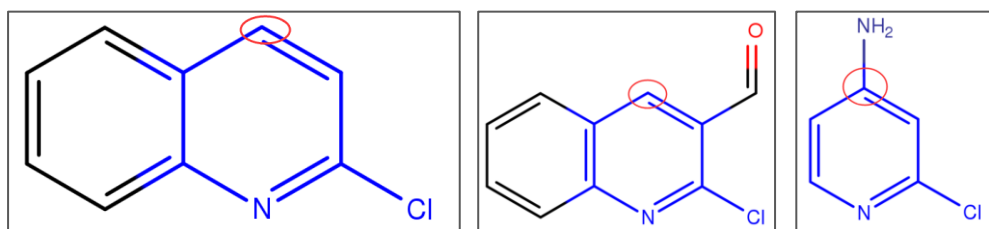
被標記的原子上取代情況：

- 存在鏈取代
- 存在稠環取代
- 沒有取代，而結構中其他位元點存在鏈取代，或者稠環取代。

如果只是希望被標記的原子不允許出現稠環取代，但是其他原子允許發生稠環取代，可以使用 **rb*** 標記該原子。使用方法，選擇 **rb***，點擊該原子即可，如下：

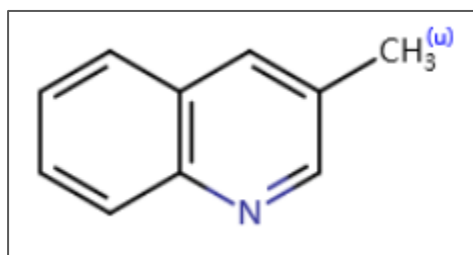


檢索到的結果如下：

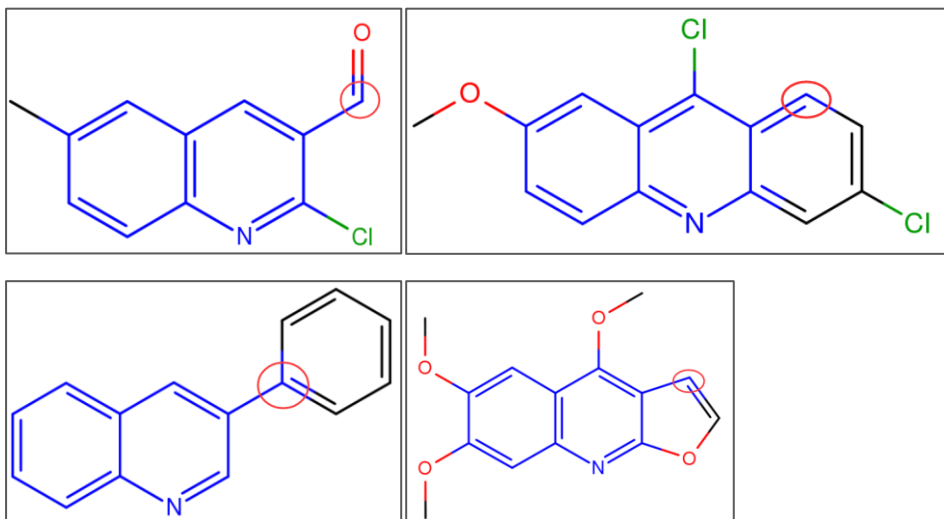


u 的使用

As Substructure 檢索時，被 **u** 標記的原子上一定會存在一個不飽和鍵，或者該原子會出現在芳環中。使用方法，用 **u** 標記該原子即可。如 **As Substructure** 檢索以下結構：



檢索出來的結構如下，注意被 **u** 標記的原子上連結的基團：

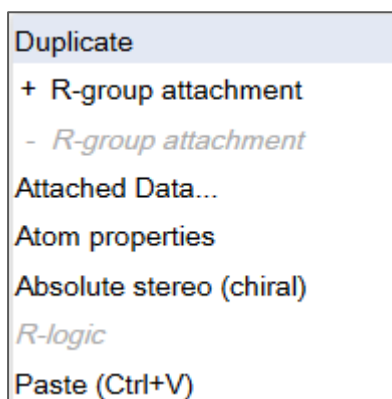


F：滑鼠右鍵的使用

滑鼠處於選擇鍵上時，可以使用滑鼠右鍵，點擊原子和鍵，用於定義被選中的原子和鍵的一些其他屬性，如：同位素屬性，鍵的拓撲性，反應鍵變化，異構中心。

原子滑鼠右鍵功能

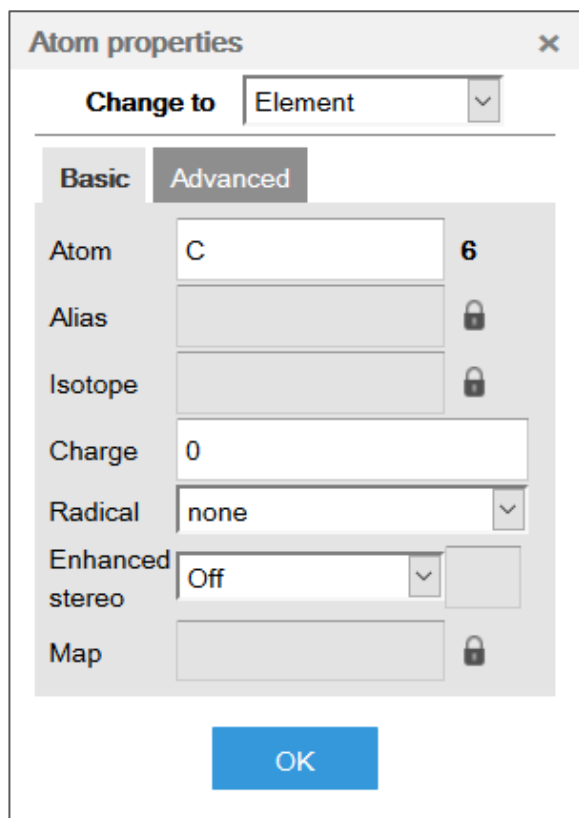
右鍵點擊原子，可以打開原子右鍵功能功能表，如下：



常用功能：

- +R Group attachment，-R Group attachment 等同於結構面板中的 R Group attachment，可以查看之前相關內容。

- Atom Properties，原子屬性清單



同位素定義

如果需要定義同位素，方法如下：

1. 選擇該原子，右鍵打開 **Atom Properties**
2. 點擊 **Isotope** 後面的“鎖定”圖示
3. 輸入同位素的質量數，如需定義 C^{13} ，輸入 **13** 即可。
4. 氘代，氚代，可以用 **D**，**T** 表示，用鍵盤輸入即可。

Atom properties ×

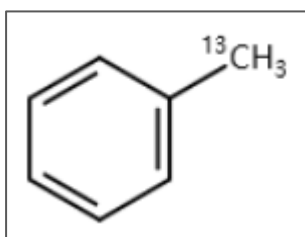
Change to Element ▼

Basic Advanced

Atom	<input style="width: 95%;" type="text" value="C"/>	6	
Alias	<input style="width: 95%;" type="text"/>		🔒
Isotope	<input style="width: 95%;" type="text" value="13"/>		🔒
Charge	<input style="width: 95%;" type="text" value="0"/>		
Radical	none ▼		
Enhanced stereo	Off ▼		<input type="checkbox"/>
Map	<input style="width: 95%;" type="text"/>		🔒

OK

標記完的結構如下：



滑鼠右鍵功能

點擊滑鼠右鍵，可以打開鍵的功能表，如下：

Bond properties ×

Type	single ▼
Topology	undefined ▼
Reacting center	undefined ▼
Stereo search	Off ▼

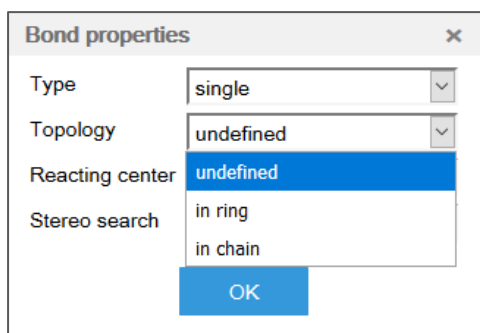
OK

常用功能：

- Topology，鍵的拓撲屬性定義
- Reacting center，反應中心定義
- Stereo search，異構中心定義

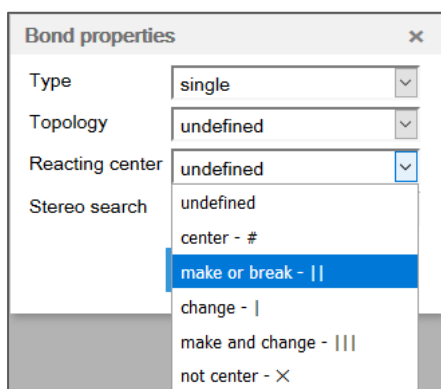
鍵的拓撲屬性定義

Topology，鍵的拓撲屬性定義，可以定義一根鍵是在環中，還是在鏈裡面，常見的應用場景是需要某根鍵一定要在環，或者鏈中，可以定義鍵 **in ring** 或是 **in chain**。



反應中心定義

Reacting center，反應中心定義，可以反應中鍵變化的情況，常見的應用是定義反應中生成或者斷裂的鍵。

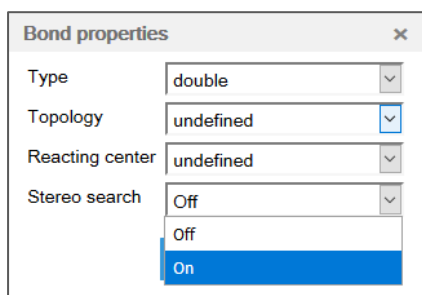


可以定義反應中的某一根鍵的屬性是 **make or break**，被標記的鍵在反應過程中一

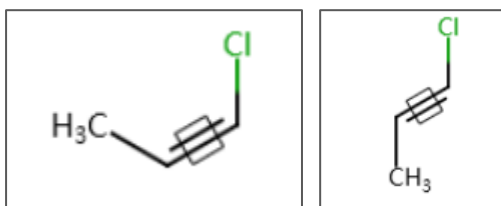
定會發生斷裂或者是一根生成鍵。

異構中心定義

Stereo search，異構中心定義，定義結構中確定的異構構型，如順反異構。



如對於一根雙鍵上進行屬性定義，可以定義該雙鍵的順反屬性，預設是 **off**，不論順反，如繪製成 **on**，系統將按照繪製的順反情況進行檢索，加上 **On** 的結構：

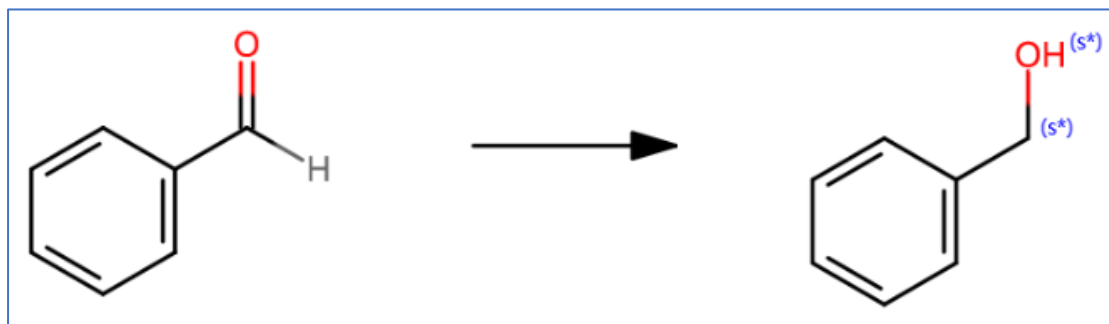


二、Reaxys 中反應查詢

1：反應檢索中常用定義工具

原子鎖定工具

在進行 **As Substructure** 檢索時，如果需要某原子上不能發生任何取代，可以使用原子鎖定工具，可以參考 **s***和 **s Lock** 功能的使用。如下圖的定義：



用 **As Substructure** 對上述結構進行檢索，產物中的亞甲基和羥基都被標記上了 **s***，表示在檢索時不能發生取代。

環鎖定工具

在進行 **As Substructure** 檢索時，如果需要結構中允許發生取代，但是不能發生稠環，可以去除結構面板中 **Additional Ring Closures**，保證整個結構面板中的環系不被破壞。

如下，**As substructure** 檢索這條反應，將結構面板中的 **Additional Ring Closures** 去除。

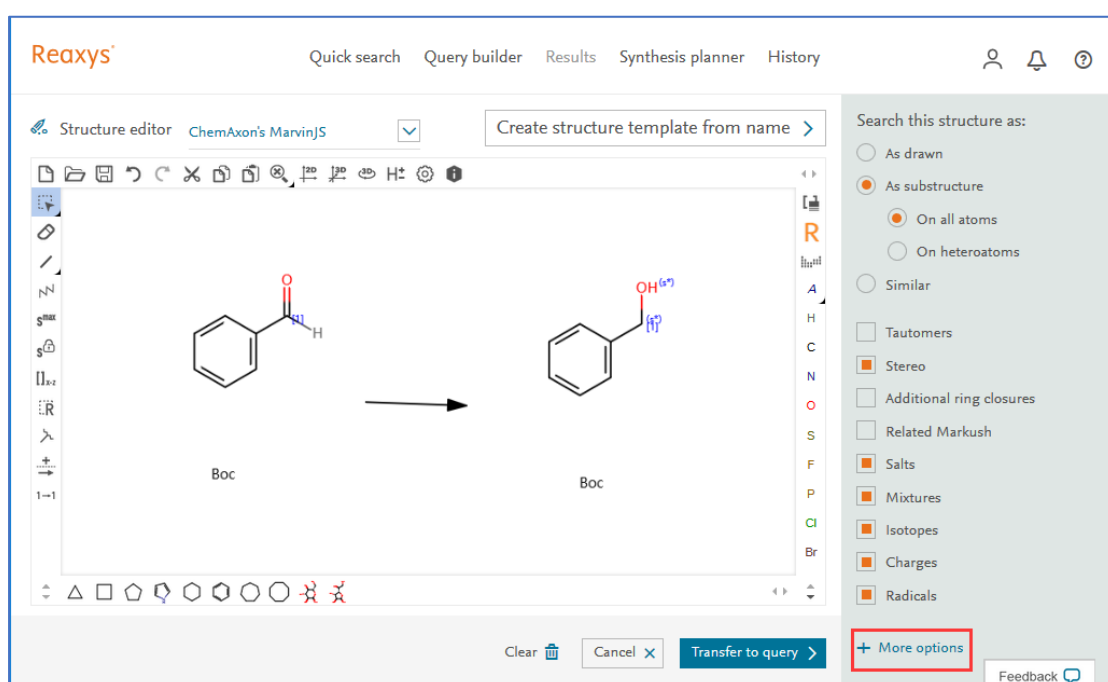
得到的結果中，苯環上允許發生取代，但是都不能發生稠環變化。

碎片反應定義工具

反應檢索時，如果需要一些特定的片段以任意形式相連接，可以採用 **Keep**

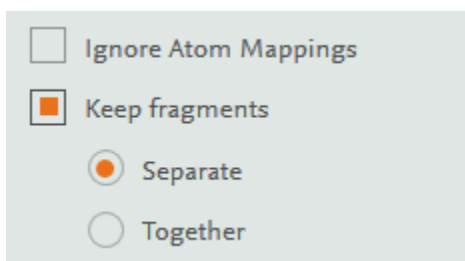
Fragments together 定義。操作步驟如下：

1. 結構面板中定義好片段
2. 點擊右下方 **More Option**
3. 選擇 **Keep Fragments Together** 即可完成定義



The screenshot shows the Reaxys software interface. The main workspace displays a chemical reaction where benzaldehyde (labeled 'Boc') is converted to benzyl alcohol (labeled 'Boc'). The right-hand panel, titled 'Search this structure as:', contains various search filters. The 'More options' button at the bottom of this panel is highlighted with a red box. Below the screenshot, a detailed view of the 'More options' menu is provided.

More Options 下的選項：



The 'More Options' menu is displayed with the following settings:

- Ignore Atom Mappings
- Keep fragments
- Separate
- Together

這樣定義出來的反應，反應箭頭前後的兩個片段都會在一個結構當中。

2：條件篩選時常用的篩選工具

Reaxys 提供了多種反應篩選工具，幫助對反應進行篩選。

篩選工具概覽

獲得反應後，左側可以看到反應篩選的工具列，如下：

Filters and Analysis	
By Structure	通過結構進行反應過濾 產率過濾工具
Yield	催化劑/試劑過濾工具
Reagent/Catalyst	溶劑過濾工具 催化劑類型過濾工具
Solvent	溶劑類型過濾工具 產物可購買性過濾工具
Catalyst Classes	反應物可購買性過濾工具 反應類型過濾工具
Solvent Classes	文獻類型過濾工具 出版年過濾工具
Product Availability	單步反應
Reactant Availability	
Reaction Classes	
Document Type	
Publication Year	
<input type="checkbox"/> Single step reactions only	

催化劑分類工具

Catalyst Classes 可以按照活性中心，非均相催化，生物催化來對催化劑進行分類，說明通過不同的路徑快速獲得最相關的催化劑。使用步驟如下：

1：打開 **Catalyst Classes**，點擊 **More**：

Catalyst Classes

<input type="checkbox"/>	active center	<input type="checkbox"/>	7,919
<input type="checkbox"/>	heterogeneous	<input type="checkbox"/>	266
<input type="checkbox"/>	organism / enzymes	<input type="checkbox"/>	51

+ More

2：呈現出 Catalyst 分類的樹狀圖：

Catalyst Classes

▼ Catalyst Classes	<input type="checkbox"/>	8,986
> active center	<input type="checkbox"/>	7,919
> heterogeneous	<input type="checkbox"/>	266
> organism / enzymes	<input type="checkbox"/>	51

Clear selected × Limit To > Exclude >

3：點擊不同分類前面的箭頭，可按照需求篩選反應或者查看催化劑。

Catalyst Classes 145

▼ Catalyst Classes	<input type="checkbox"/>	8,986
▼ active center	<input type="checkbox"/>	7,919
> B	<input type="checkbox"/>	6,669
> Al	<input type="checkbox"/>	894
▼ Pd	<input type="checkbox"/>	677
<input checked="" type="checkbox"/> tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)	<input type="checkbox"/>	145
<input type="checkbox"/> palladium on activated charcoal	<input type="checkbox"/>	104
<input type="checkbox"/> palladium diacetate	<input type="checkbox"/>	96
<input type="checkbox"/> bis-triphenylphosphine-palladium(II) chloride	<input type="checkbox"/>	92
<input type="checkbox"/> (1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene)palladium(II) dichloride	<input type="checkbox"/>	79
<input type="checkbox"/> dichloro(1,1'-bis(diphenylphosphanyl)ferrocene)palladium(II) dichloromethane adduct	<input type="checkbox"/>	28

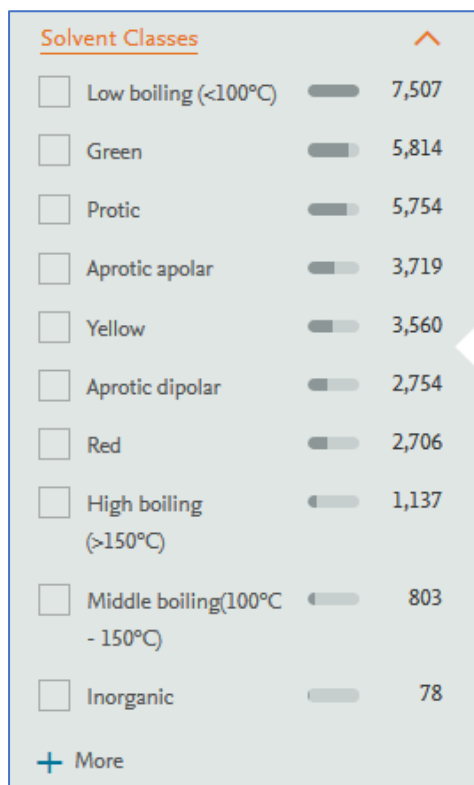
Selected search items:
tetrakis(triphe... adium(0) ×

Clear selected × Limit To > Exclude >

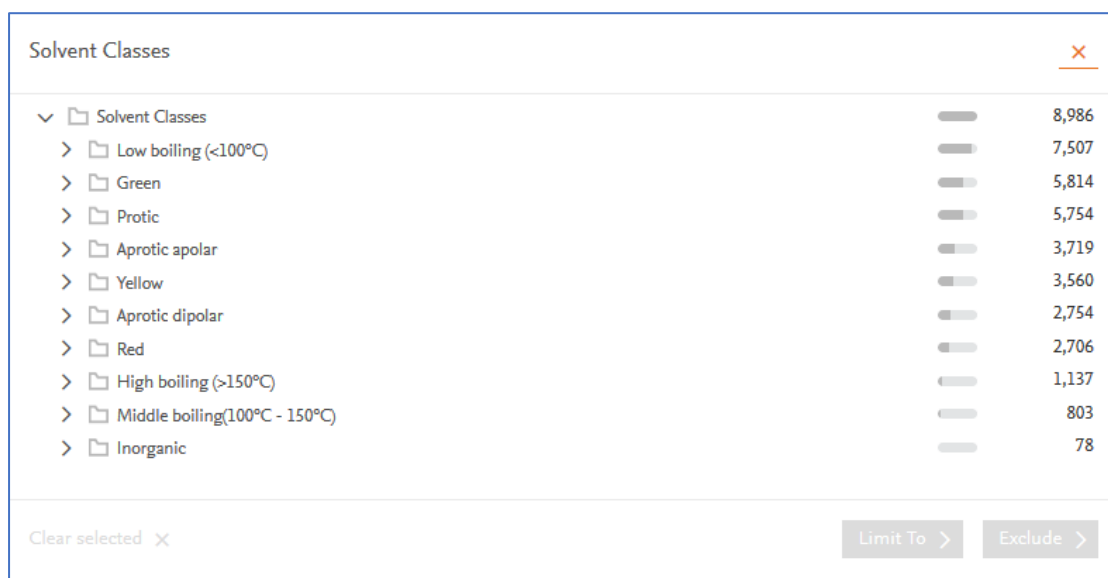
溶劑分類工具

Solvent Classes 可以按照溶劑的不同特性，來對溶劑進行分類，說明通過不同的路徑快速獲得最相關的溶劑劑。使用步驟如下：

1：打開 **Solvent Classes**，點擊最下方的 **More**：



2：呈現出 **Solvent** 分類的樹狀圖，按照 **Catalyst Classes** 的方法進行篩選



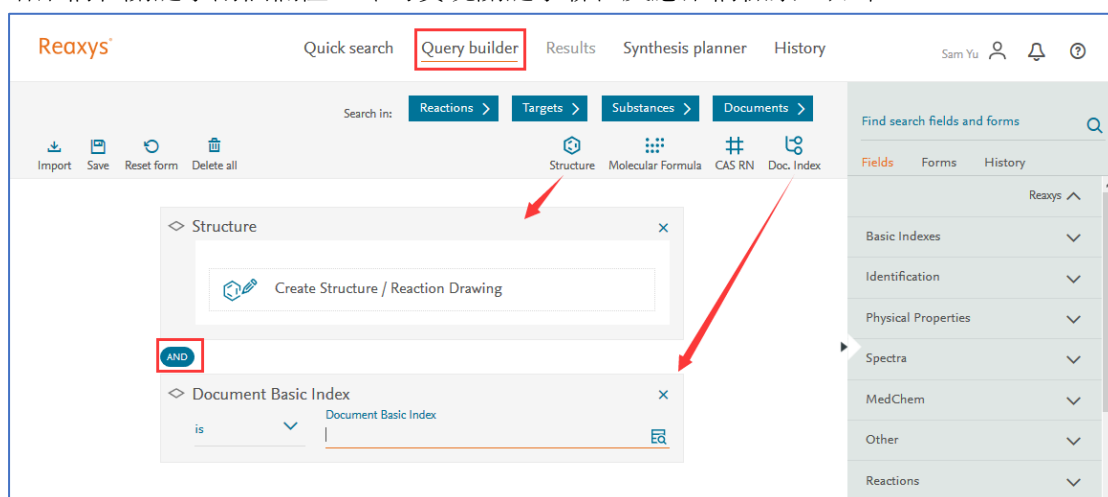
反應類型分類工具

Reaction Classes 可以不同的反應類型對反應進行分類，操作步驟和上述催化劑，溶劑類型相似。

3：其他反應檢索

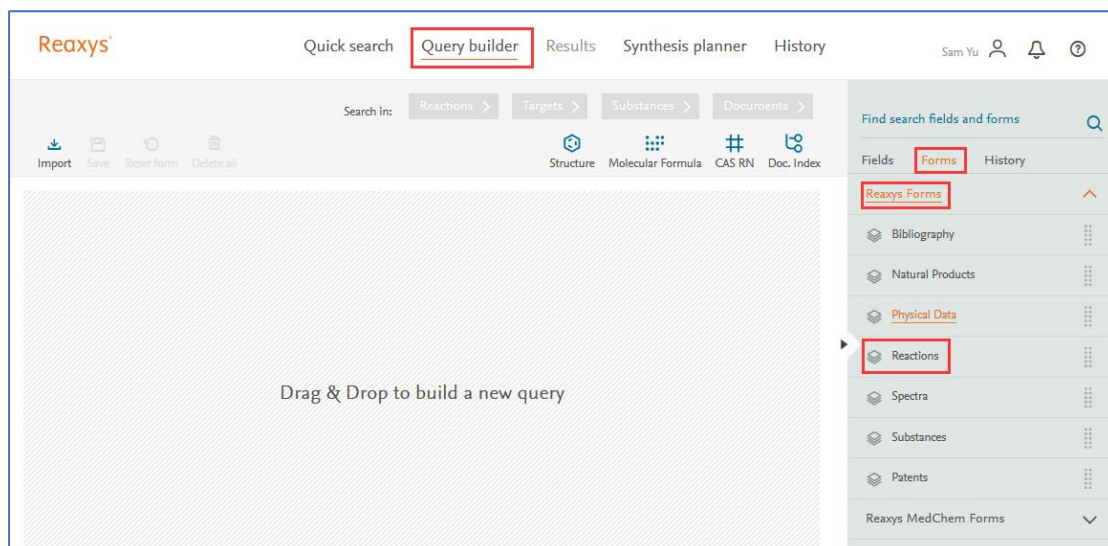
關鍵字聯合反應檢索方法

利用 Query Builder 可以實現關鍵字聯合反應檢索。在 Query Builder 模式下，新增結構和關鍵字兩個欄位，即可實現關鍵字聯合反應結構檢索，如下：

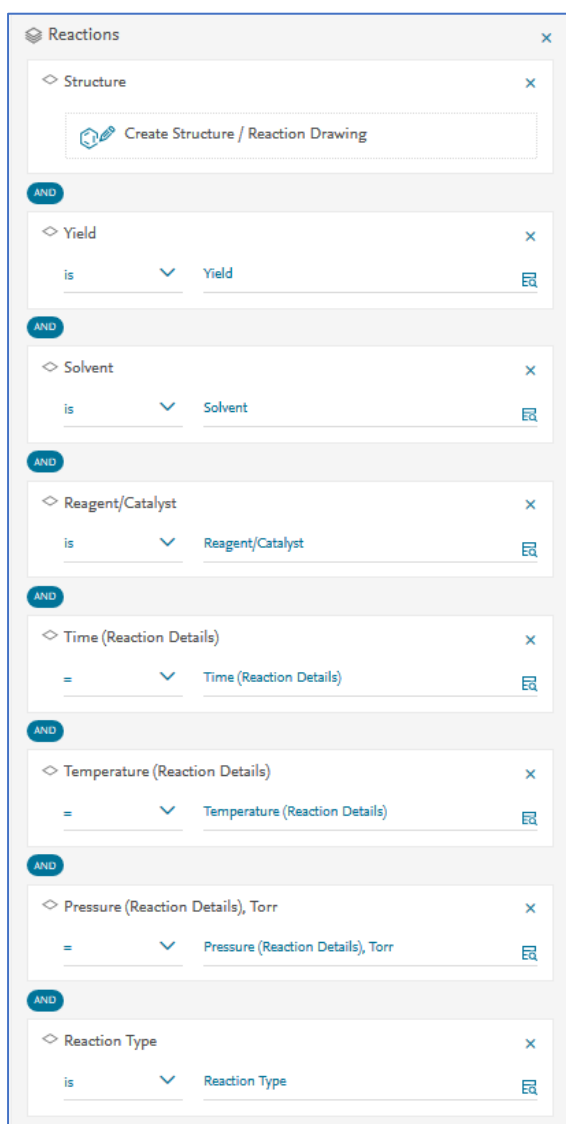


反應中溫度，時間，壓力等條件定義

利用 Reaxys Forms 裡面的 Reaction，實現溫度，時間，壓力的定義，按照以下圖中的標記按鈕，依次點擊 Query Builder，Forms，Reaxys Forms，Reaction 即可打開 Reaxys 系統中的設定的反應定義模式，通過該模組可以新增反應的溫度，時間，壓力等條件。



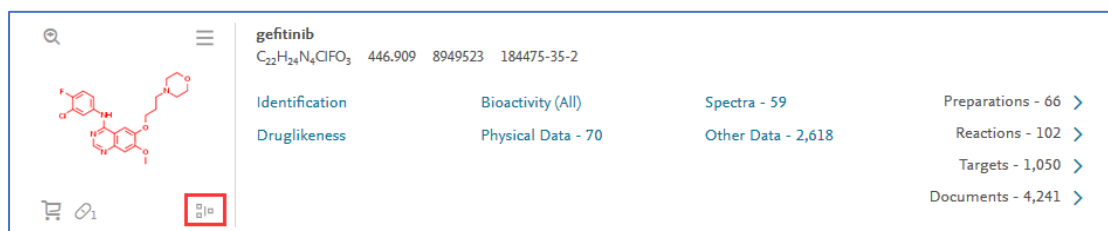
選擇好的頁面如下，在對應欄位新增時間，溫度，壓力即可。



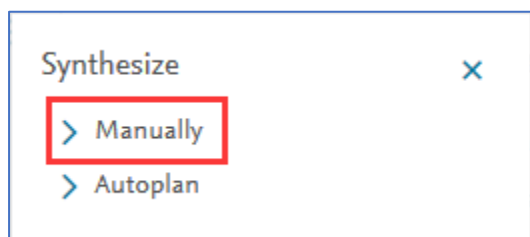
三、合成計畫的制定

可以利用 Reaxys 中的 Synthesis Plan 工具進行合成計畫的制定，如下，制定 Gefitinib 的合成計畫。

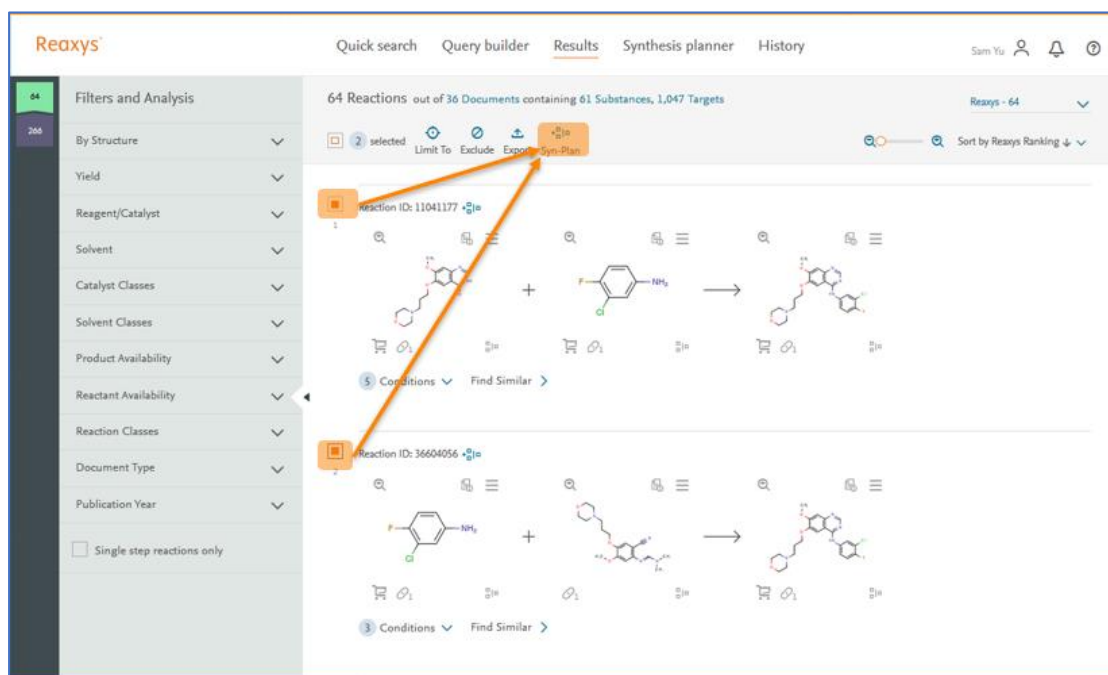
1：Reaxys 中檢索到 Gefitinib，點擊 Synthesis Plan 按鈕進行合成計畫制定，



2：點擊後出現選擇進行手動或自動計畫制定，選擇手動，



3：Reaxys 給出 Gefitinib 的合成路線，選擇合適的反應後，新增到 Synthesis Plan 中，



4：在 Synthesis Plan 中可以點擊虛線查看反應條件。

The screenshot displays a Synthesis Plan interface. On the left, a reaction scheme shows the synthesis of a target molecule from two starting materials, 1a (84% yield) and 1b (78% yield). A blue box highlights the 1b step, with an arrow pointing to a 'Preparation - 1b' table. The table lists three entries with their respective conditions and references:

Yield	Conditions	Reference
78%	With acetic acid at 130°C, for 3h; Temperature; Experimental Procedure	Guangzhou Baiyunshan Pharmaceutical Group Co., Ltd. Baiyunshan Pharmaceutical Zong Factory; Chen Mao; Zhu Shaosun; Huang Xiangqun - CN104072436, 2017, 8 Location in patent: Paragraph 0050, 0051, 0052, 0053, 0054, 0055 Full Text Details Abstract
71.1%	With acetic acid in 5,5-dimethyl-1,3-cyclohexadene at 135°C; Experimental Procedure	Shaanxi Normal University; Li, Baolin; Ren, Yufei; Wang, Luohang; Ju, Yuesi; Ding, Siy; Wang, Wei - CN105539702, 2016, 8 Location in patent: Paragraph 0094-0096 Full Text Details Abstract
70%	With acetic acid at 125 - 130°C, for 3h;	Organic Process Research and Development, 2007, vol. 11, # 5, p. 813 - 816 Full Text Cited 51 times Details Abstract

Below the table, a 'Show conditions' dialog box is shown with options to 'Show conditions', 'Hide preparation', and 'Remove preparation'.

5：對於每一個結構，都可以點擊 Synthesis Plan 按鈕，繼續新增反應

The screenshot shows the Reaxys interface. A 'Synthesize' dialog box is open, with 'Manually' selected. An arrow points from the 'Manually' button to the 'Synthesis Plan' button in the main interface. The main interface shows a reaction scheme with a 'Synthesis Plan' button highlighted. The resulting plan is shown on the right, with a 'Synthesize' button highlighted.

6：最後形成的 Plan 如下，可以存檔，輸出。

