Reaxys

使用指南

ELSEVIER

Advancing Human Progress Together

目录

本文档包含交互式元素。使用本页的目录和每页上的箭头在各个部分之间导航。



欢迎使用 Reaxys

Reaxys 核心功能

Reaxys 核心内容

Reaxys 资源与支持

欢迎使用Reaxys

返回目录页

欢迎使用Reaxys

通过AI驱动的化学技术、独家的数据和先进的工具，加速研发进程。

Reaxys 将超过十亿的化学数据点与人工智能结合，赋能更快速的创新。快速探索专利、物质、生物活性和逆合成分析，以推动药物研发、化学研发和学术发现。

在各行各业解锁更快的发现并提出可执行的建议，包括：

工业界：制药、CRO、CDMO、化学与材料科学、农用化学品、咨询、IT、软件、银行与金融、制造业等。

学术界与政府机构：顶尖大学、政府、研究实验室等。

值得信赖的数据、技术和专业知识，为化学研究提



返回目录页

登录

登录以获取最全面的数据集并使用最先进的 AI 工具。

如何注册：

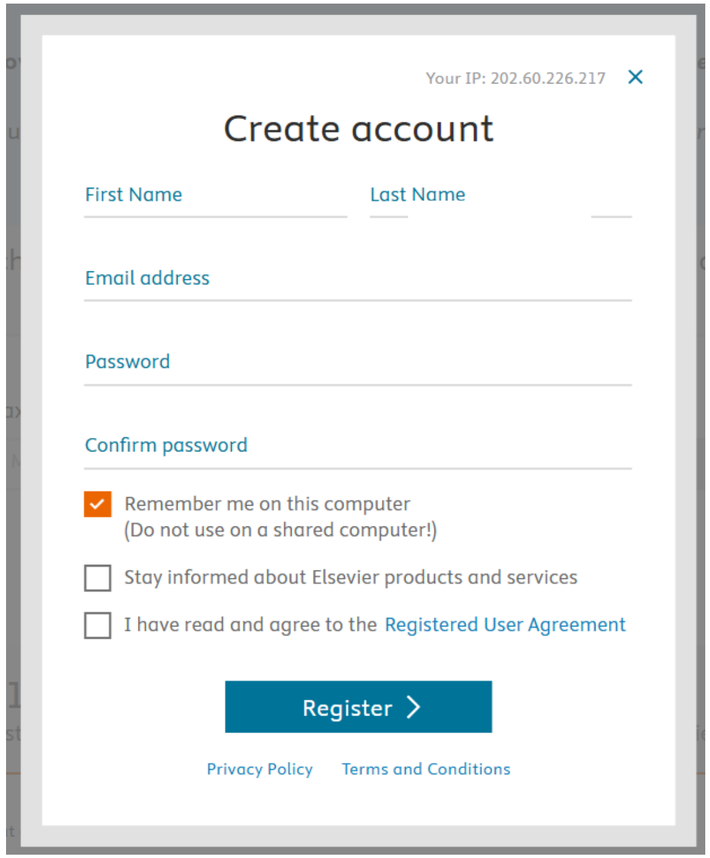
- 点击"Register"，然后填写您的详细信息。
- 同意条款并点击" Register "。
- 要使用机构注册 ID 进行注册时，请访问注册 ID 网站，输入您的详细信息以关联账户。

专业提示：登录以保存检索记录并设置提醒。

了解更多关于访问的信息。

注册用户可以：

- 保存检索记录并设置提醒，以便及时了解研究进展。
- 导出结果以便整合到报告或幻灯片中。
- 将在线时长延长至 6 小时（访客为30 分钟）。
- 点击 Reaxys.com 资源中心的帮助图标，访问 Knowledge、 Learning和Support。



个人设置

根据您的研发工作流程定制 Reaxys。登录以自定义 Reaxys 设置，包括结构编辑器、合成计划、结果展示和辅助功能选项。

A. 登录：点击您的姓名或人物图标，然后选择"Profile"。

B. 账户：点击"Account"编辑用户名、邮箱和密码。访问"偏好设置"调整查询设置。

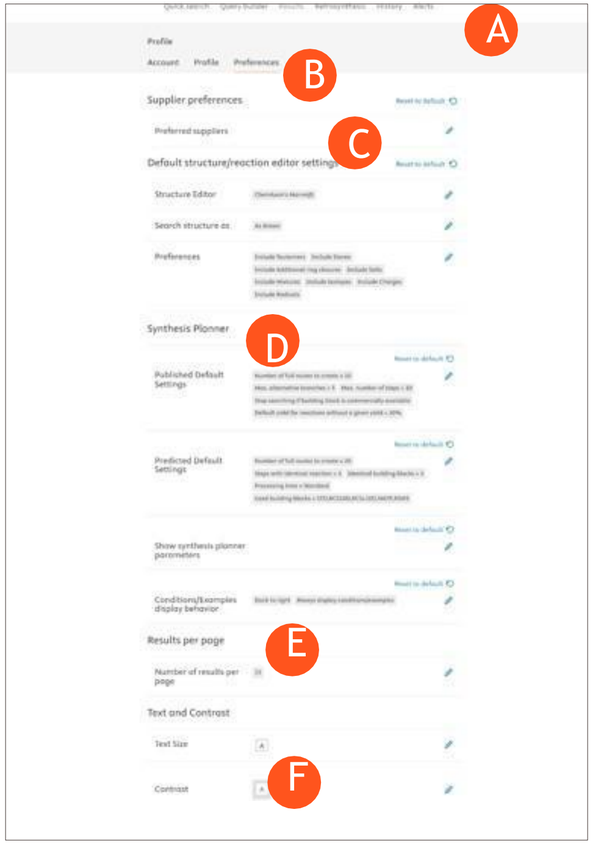
专业提示：优化 Reaxys 以适应您的工作流程 – 调整结构编辑器、自动化步骤和显示偏好设置，以提高效率。

C. 结构编辑器：选择 MarvinJS 或 ChemDrawJS 作为您偏好的编辑器，并修改设置（例如，包含/排除互变异构体、盐）。

D. 合成计划：选择自动生成的计划数量和最大步骤数。

E. 结果展示：选择每页显示的结果数量。

F. 辅助功能：调整文本大小、对比度和文本颜色以获得更好的访问体验。



主页导览

开始您的检索，查找关键数据并加速发现。

A. **快速检索：**查找物质、反应、专利和文献。

B. **结构检索：**绘制分子（Marvin JS, ChemDraw JS）。

C. **查询构建器：**使用理化性质、谱图、生物活性、专利等字段和布尔运算符组合构建检索。

专业提示：AI 预测逆合成可提供更快速、更智能的合成路线，帮助您节省时间、降低成本并加速。

联系我们 升级。

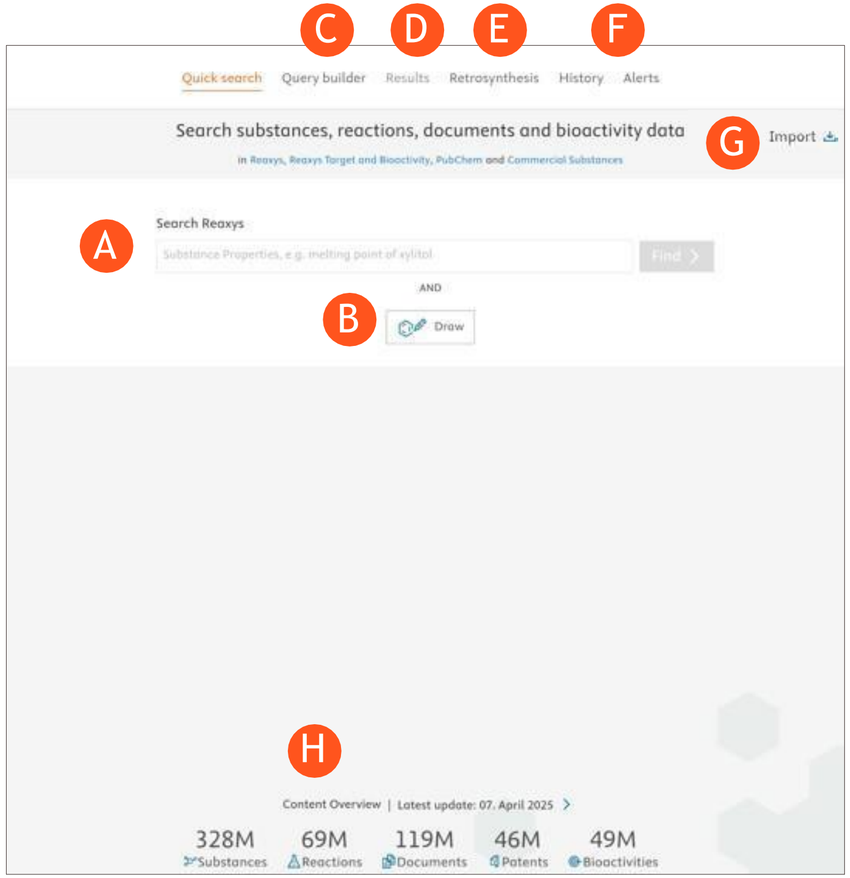
D. **结果：**查看结果，并按照反应类型、生物活性、专利类型等条件进行筛选，可导出进行分析。

E. **逆合成分析：**规划合成路线。

F. **历史/提醒：**查看检索记录、设置提醒。

G. **导入/集成数据：**上传查询式或数据集。

H. **内容概览：**查看最新的收录内容数量。



Reaxys
核心功能

返回目录页

Reaxys 核心功能

跨行业推进发现、规划合成路线并做出可靠决策。

专业提示：登录以获取最新的Reaxys更新。



Quick Search

即时查找物质、反应、文献、专利和生物活性。

- 探索实验数据
- 绘制分子
- 筛选结果

获得经过实验验证的数据以快速洞察，从而实现快速探索。



Results

利用经过确认、上下文支撑丰富的数据，做出可靠的研发决策。

- 分析实验数据
- 比较化学结构
- 导出并分享洞察

分析构效关系、产率和化合物数据，为合成路线提供信息。



Query Builder

构建精准的多参数查询，以增强发现能力。

- 组合字段
- 应用筛选器
- 查询属性

进行多参数检索，以进行有效的设计和分析。



Retrosynthesis

利用AI 计算和已发表的合成路线，以加速成果产出。

- 规划合成
- AI 驱动路线合成
- 反应路径

利用 AI 计算的路径提升路线设计效率，实现高效的合成规划。

快速检索

A. **导航至快速检索：**从顶部菜单一键进入。

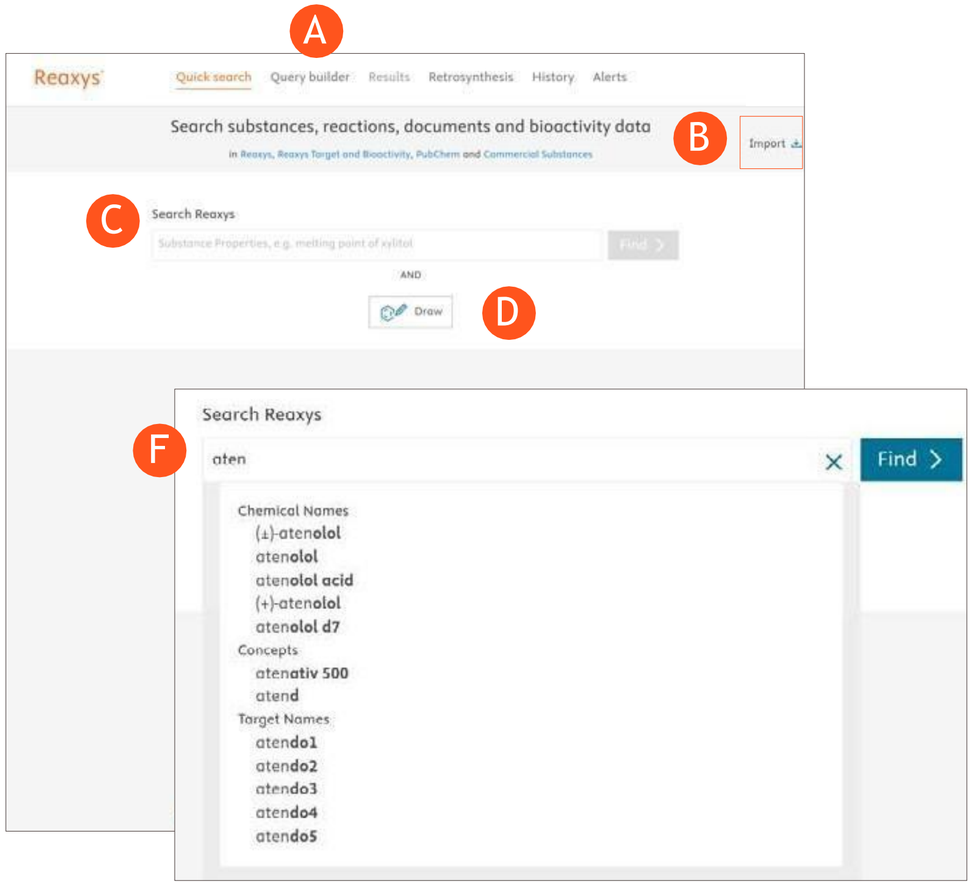
B. **导入已保存的查询：**重新加载已保存的检索。

C. **输入检索词：**可以通过化学品名称、反应、靶点、专利受让人或作者进行检索。自动建议功能会推荐术语和同义词（见 F）。

D. **基于结构的检索：**使用绘图功能绘制或粘贴化学结构。Reaxys 支持Marvin JS 和 ChemDraw JS，实现直观的、基于网络的结构输入。

E. **运行检索：**点击"Find"以检索和排序结果。结果预览显示关键命中项。

F. **自动建议辅助：**AI 驱动的自动建议可帮助您补齐检索词，如作者姓名、化学同义词和靶点，加快精确查询式的构建。



专业提示：结合化学品名称和结构可提高检索精度。

文章: 了解更多关于检索的信息。

返回目录页

快速检索：结构编辑器

A. 选择结构编辑器：选择 MarvinJS 或 ChemDrawJS（默认推荐 MarvinJS）。

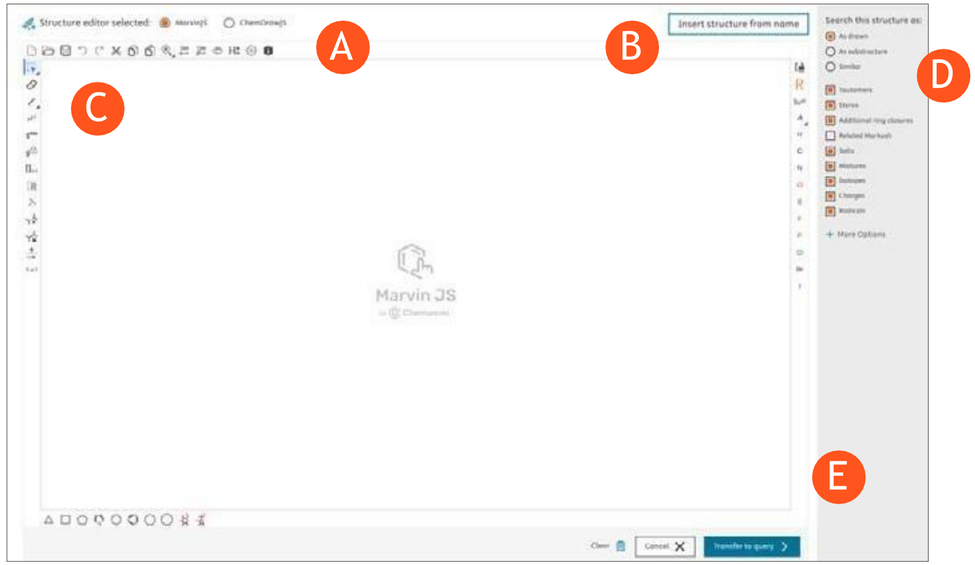
B. 从名称插入结构：输入化学品名称、CAS- RN、InChIKey 或 SMILES 以自动生成结构（见 F）。

C. 绘制您的结构：使用绘图工具创建或修改您的结构或反应。

D. 应用检索修饰：通过选择互变异构体、立体构型、同位素或自由基来扩展检索。

E. 转至查询：点击"Transfer to query"将结构添加到您的检索中。

F. 从名称创建结构：使用结构匹配模板生成完整或部分结构。





专业提示：使用布尔运算符（AND、OR、NOT）进行复杂检索。

如何在 Reaxys 中创建结构图

结果：预览

A. **检索词显示：**查看您的原始查询 – 关键词、结构和筛选器。

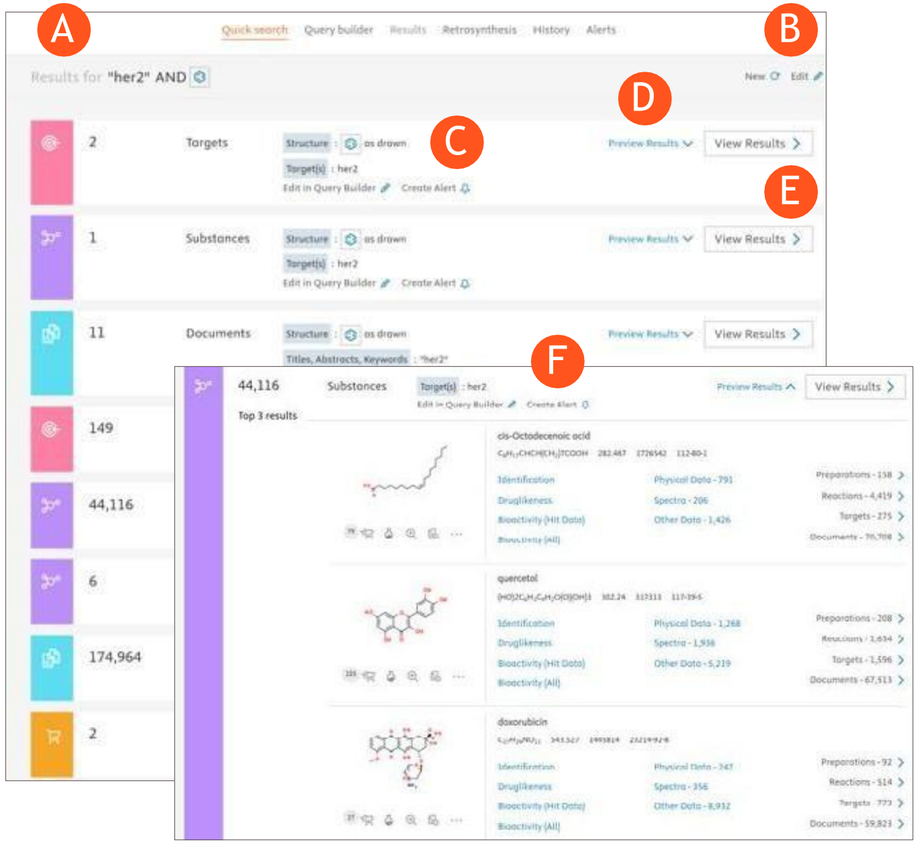
B. **开始新的或编辑检索：**点击"新建"开始新检索，或点击"编辑"进行修改。

C. **数据概览：**按物质、反应、文献、靶点或供应商对结果进行分类。

D. **预览关键结果：**查看任何数据类型的前三个条目。

E. **访问完整结果：**点击"View Results"获取完整结果以进行筛选和进一步分析。

F. **插图：**预览热门命中项，并查看关键属性和结构。



专业提示：使用"Edit in Query Builder"功能来优化您的检索，并突出分类方法，以获得更具针对性和准确性的结果。

结果

A. **导航类别**：在结果类型之间切换。

B. **应用筛选器**：使用限制或排除（Limit or Exclude）筛选器来优化检索结果。

C. **导出数据**：打开导出对话框以提取数据集。

D. **更改数据集范围**：使用下拉菜单在Reaxys数据集和其他数据集之间切换。

专业提示：策略性地使用筛选器以更快地精炼结果。通过反应类型、产率、溶剂甚至**专利所有者**等选项排除或限制结果集，使最相关的结果显现。

在进行实验之前，使用基于结构的分析识别出关键性质和合成可行性。

E. **排序结果**：按相关指标对结果进行排序。

F. **动态结果筛选**：每个结果类别都有独特的选项。

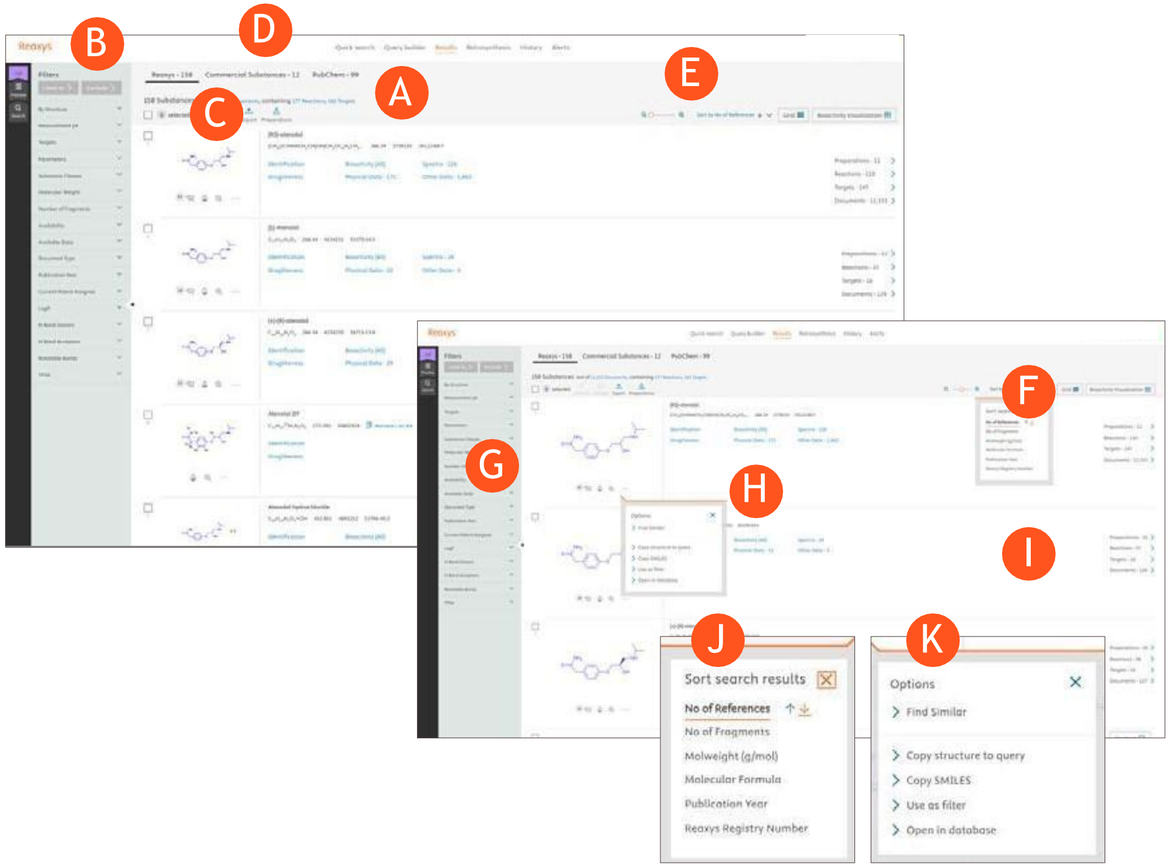
G. **商业物质可用性**：使用购物车图标检查物质是否有商业供应商（见插图 J）。

H. **基于结构的分析**：精炼的合成方法和基于类药性质和真实谱图信息的结构细节。

I. **探索文献链接**：访问关键数据摘录和相关结果集。

J. **插图**：显示各供应商的商业可用性。

K. **基于结构的分析**：基于结构的精炼和数据库探索的选项。



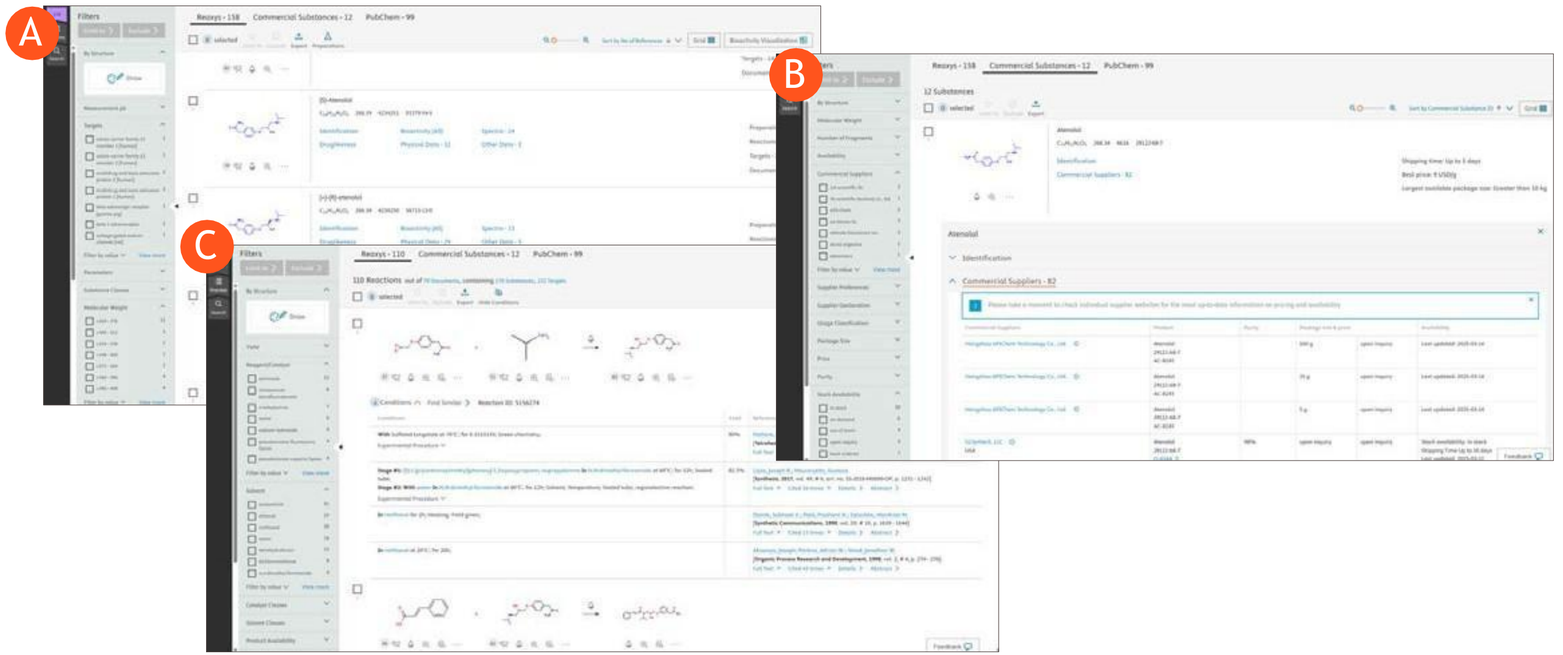
返回目录页

结果：筛选选项 1

A. **物质结果：**按结构、分子量、pH、可用性、出版年份和专利受让人筛选。

B. **商业物质结果：**按供应商、库存、价格、纯度、地点和包装尺寸筛选。

C. **反应：**按条件、试剂、催化剂和溶剂筛选；切换单步反应或实验步骤。

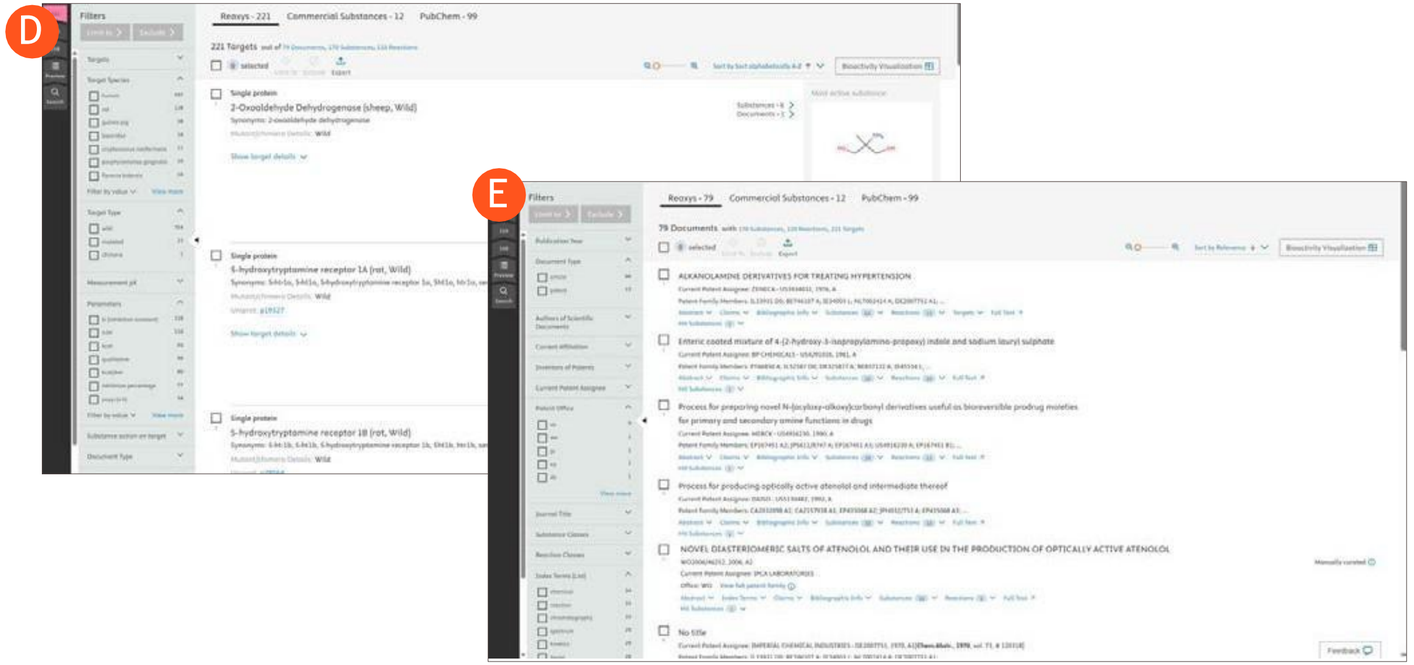


专业提示：**可持续性筛选** – 通过筛选出绿色化学反应和材料，以支持可持续研究。

结果：筛选选项 1（续）

D. **靶点结果：**按物种、靶点类型、生物学参数和对靶点的作用类型筛选。

E. **文献结果：**按索引术语、专利局和文献类型进行筛选。切换经过确认的数据集以获取经过验证的文献。



专业提示：**可持续性筛选** – 通过筛选出绿色化学反应和材料，以支持可持续研究。

结果：生物活性可视化

使用**“Bioactivity Visualization”功能可视化生物活性特征**，以评估结构活性关系（SAR）、化合物效力和靶点选择性。在归一化pX 值的支持下，交互式矩阵显示了物质和靶点的生物活性强度。使用导出、设置、导航器和图例自定义视图和提取数据。导出pX值以进行分析、共享或报告，特别适用于跨靶点比较或识别SAR趋势。

专业提示：可以使用*Bioactivity Visualization*发现构效关系拐点 – 即微小的结构变化导致效力发生重大变化。

了解更多: 什么是生物活性可视化图谱?

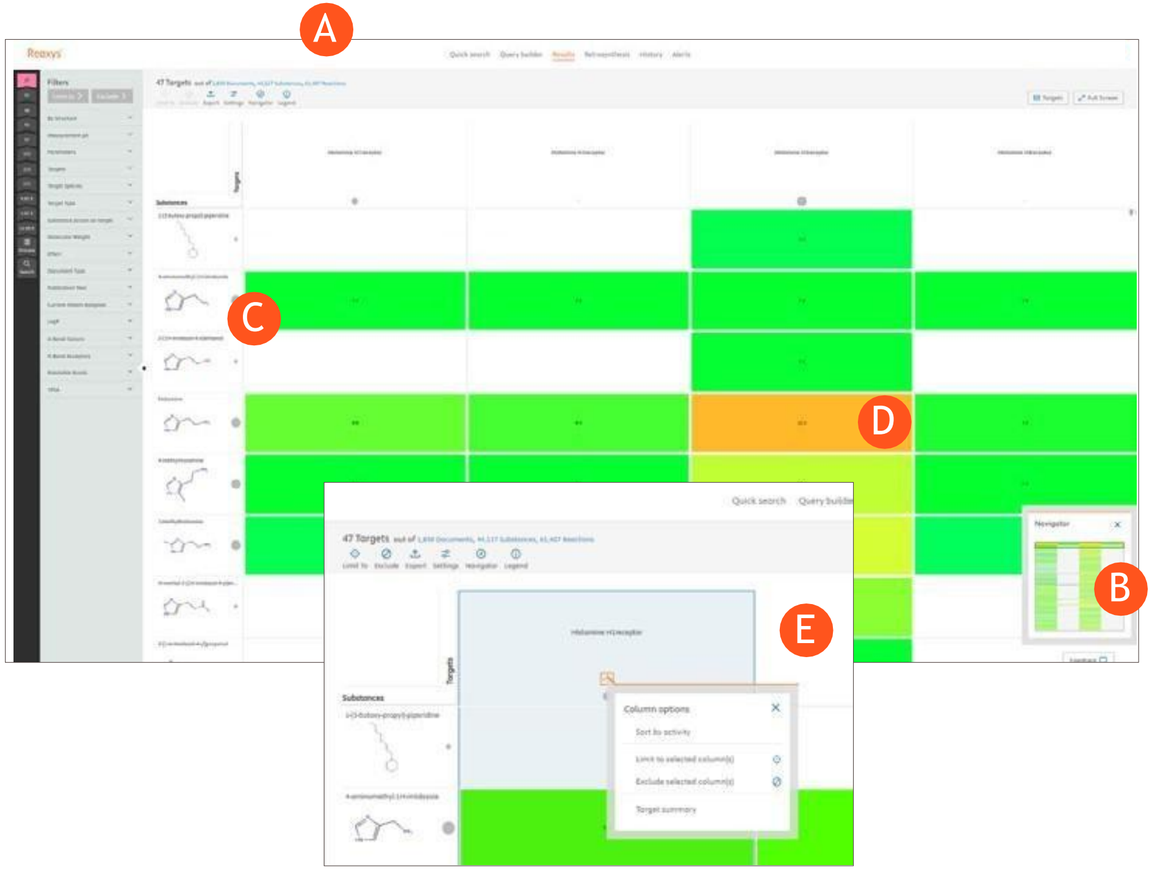
A. 使用导出、设置、导航器和图例自定义视图和提取数据。导出pX值以进行分析、共享或报告，尤其适用于比较不同靶点或识别SAR趋势

B. 使用导航器面板（右下角）跳转到大型矩阵中感兴趣的区域。

C. 将鼠标悬停在物质或靶点名称上以显示结构、同义词和标识符。

D. 单击任何单元格以解锁详细的生物活性信息– 效力、类药性、靶点验证和相关文献。

E. 通过排除列和行来自定义您的可视化图谱。



结果：创建提醒

A. 打开提醒窗口：从结果预览或历史记录中点击"Create Alert"。

B. 定义提醒名称：输入名称以构建主题（例如，分子、竞争对手、项目）。

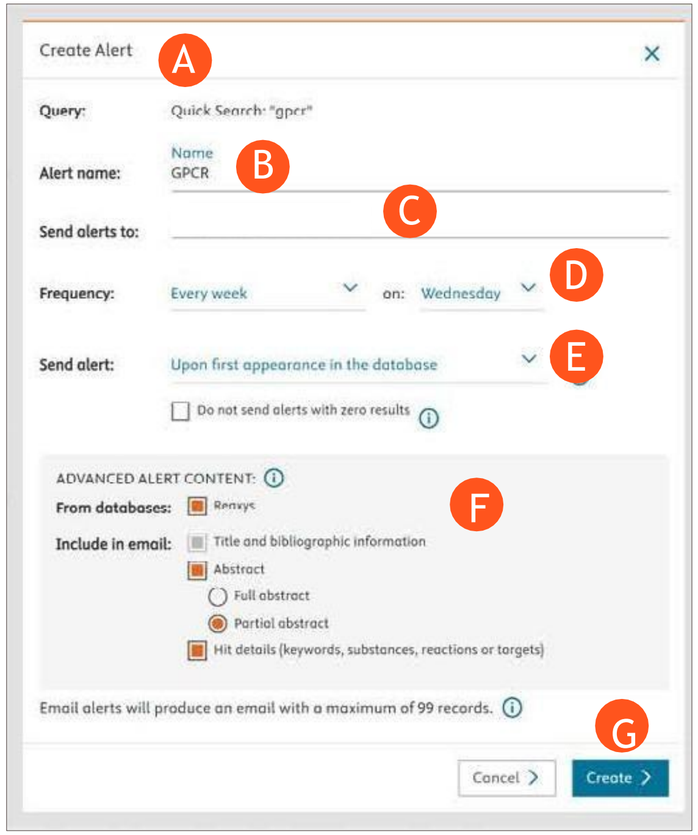
C. 添加收件人：您的邮箱会自动添加；如果需要，添加其他人。

D. 设置频率/时间：选择每周、每两周、每月或数据库更新后。

E. 设置触发条件：根据文献更新或首次出现触发提醒。（可选：排除结果为零的提醒）。

F. 自定义提醒内容：选择数据源（例如，Reaxys）和要包含的内容（标题、摘要、命中详情）。对于高级提醒，请先使用Query Builder。

G. 激活提醒：点击"Create"以最终确定并接收通知。



专业提示：监控您的竞争对手 – 按**专利受让人**设置提醒，从而持续关注您所在领域关键参与者的新申请。

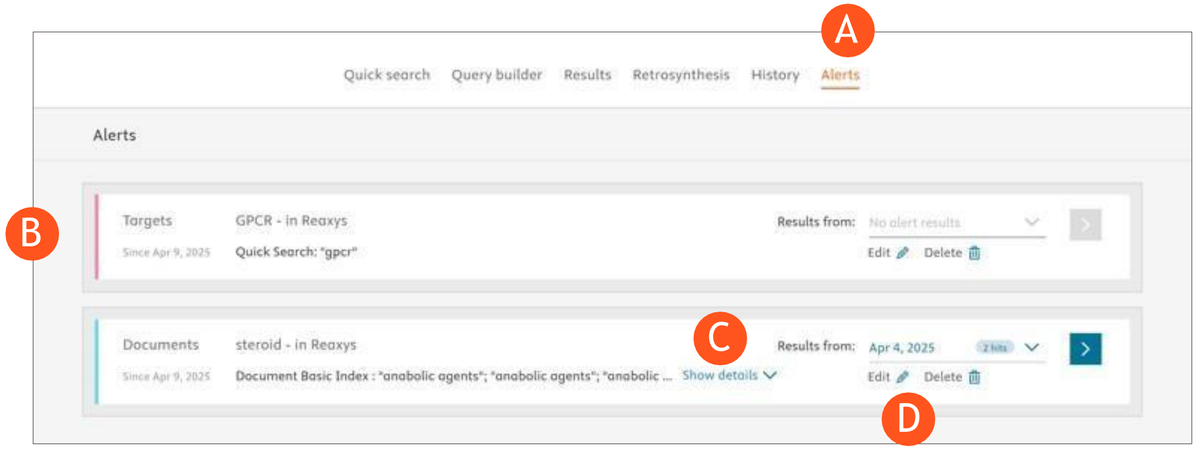
结果：管理提醒

A. 提醒选项卡：点击主导航上的"Alerts"以查看和管理您保存的提醒。

B. 提醒列表概览：提醒按从新到旧顺序显示，包含查询类型（物质、反应、靶点、文献、商业物质）、创建日期、数据库和提醒名称等详细信息。

C. 先前结果：使用下拉菜单中的结果查看提醒的早期迭代 – 对于发现新内容非常有用。

D. 编辑或删除提醒：点击"编辑"更新提醒频率或名称（查询和邮箱设置无法更改）。使用"删除"永久移除提醒。



专业提示：根据研究需求设置提醒频率 – 每周更新用于跟进动态，每月用于观察趋势。

结果：导出

A. 打开导出窗口：从结果页面点击"Export"以访问导出选项。

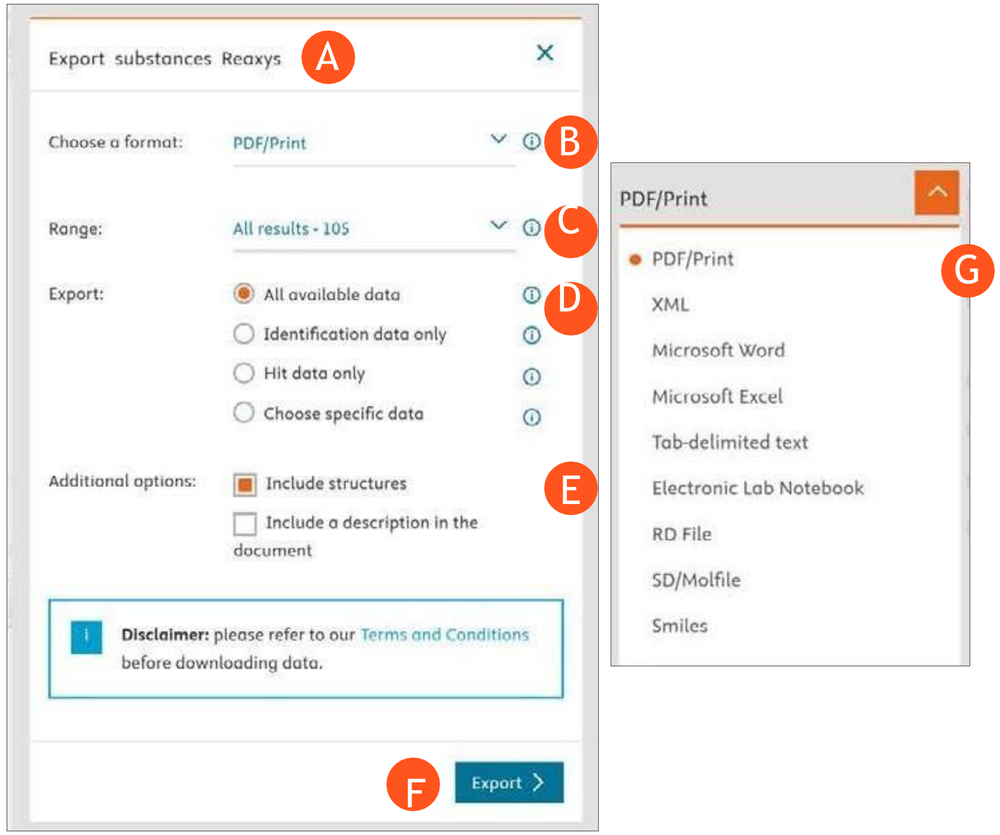
B. 选择格式：选择文件格式（见G），包括 PDF、Word、Excel、SDfile 等。

C. 定义范围：导出所有结果、选定的结果或自定义选择。

D. 选择要导出的数据：选择所有数据、标识数据、命中数据或特定字段。

E. 附加选项：包含结构或描述以丰富报告内容。

F. 启动导出：点击"Export"开始，或随时取消。



专业提示：使用 **Excel** 或 **SDFile** 格式进行建模和分析时。Reaxys 每批最多导出 500 条记录 - 如果选择更多，则仅包含前 500 条。

结果：查询历史

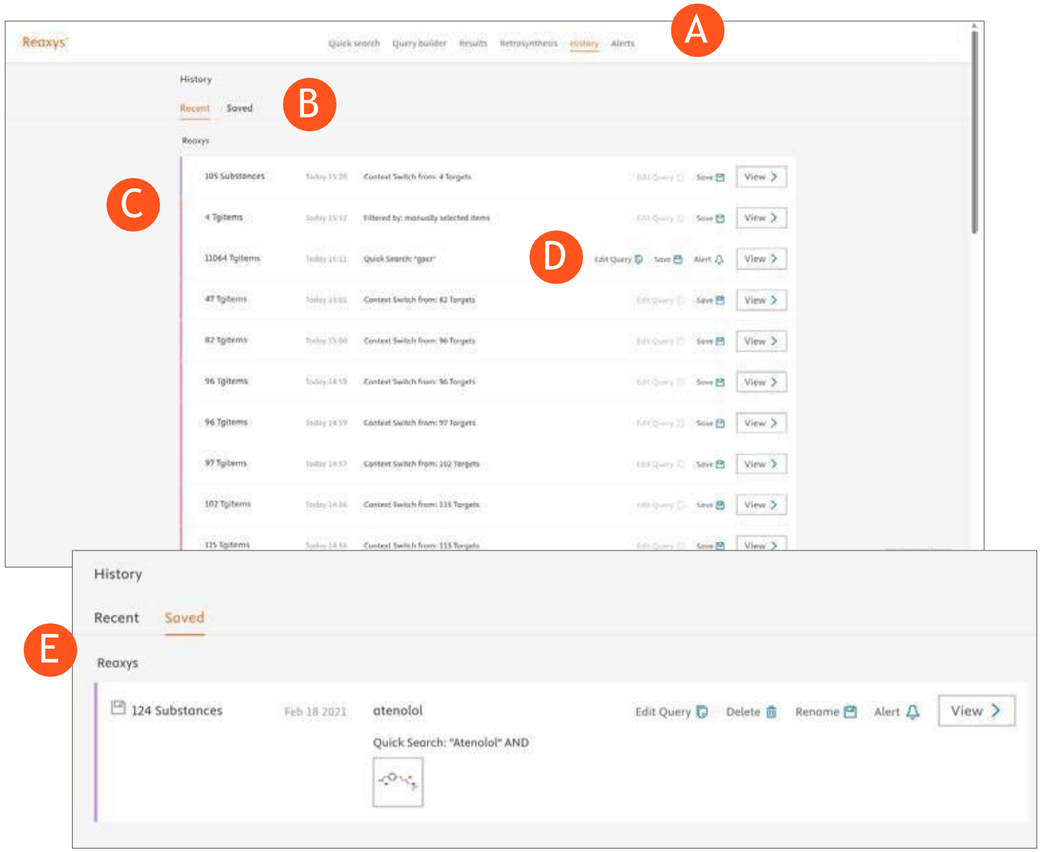
A. **历史选项卡**：点击"历史"以访问最近和已保存的检索。

B. **最近查询**：显示您当前会话的查询和操作。

C. **已保存查询**：显示从早期会话保存的查询（见插图 E）。

D. **编辑和重用**：点击"编辑查询"、"保存"、"提醒"或"查看"以修改或重用已保存的检索。

E. **已保存查询选项**：从已保存列表中编辑、重命名或删除查询。



专业提示：保存关键查询以便快速调用，减少重复操作，提高研究效率。

查询构建器

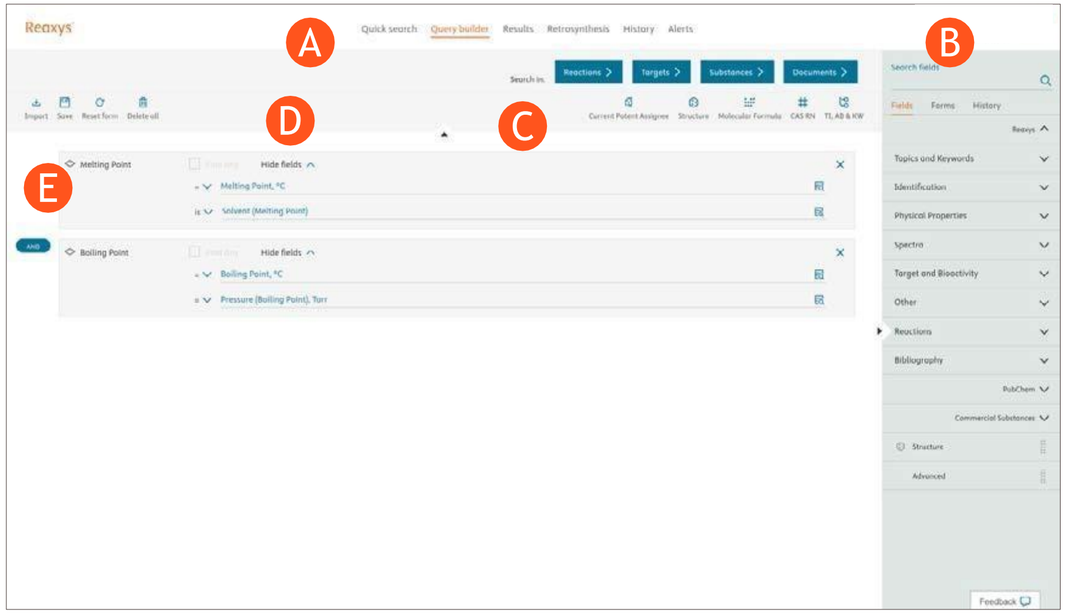
A. **打开查询构建器**：从顶部导航启动，或使用"Edit Query"来自定义检索。

B. **通过拖放添加字段**：组合化学、生物学和专利字段（例如，熔点、CAS 号、专利受让人）。

C. **结合科学与IP数据**：查找具有已知合成路线且未被竞争对手申请专利的高效力化合物。

D. **保存、重用和设置提醒**：保存查询以供以后使用，并为新数据（物质、反应、专利）设置提醒。

E. **布尔逻辑**：使用 AND、OR 和 NOT 来扩展或缩小查询范围 - 非常适合优化构效关系或专利筛选。



专业提示：结合专利受让人、生物活性和合成字段，加速发现未被专利声明的高效可合成化合 物，帮助您解锁新颖的、准备就绪的创新机会。

返回目录页

查询构建器结果：分析专利所有权

A. 从主导航**启动查询构建器。**

B. **选择**当前专利受让人、原始受让人或最终所有者（在"Bibliography"下），以专注于跨物质、反应和文献的所有权数据。

C. **输入公司或机构名称：**使用"contains"进行灵活检索。键入完整或部分名称（例如，Pfizer）以实现广泛匹配。

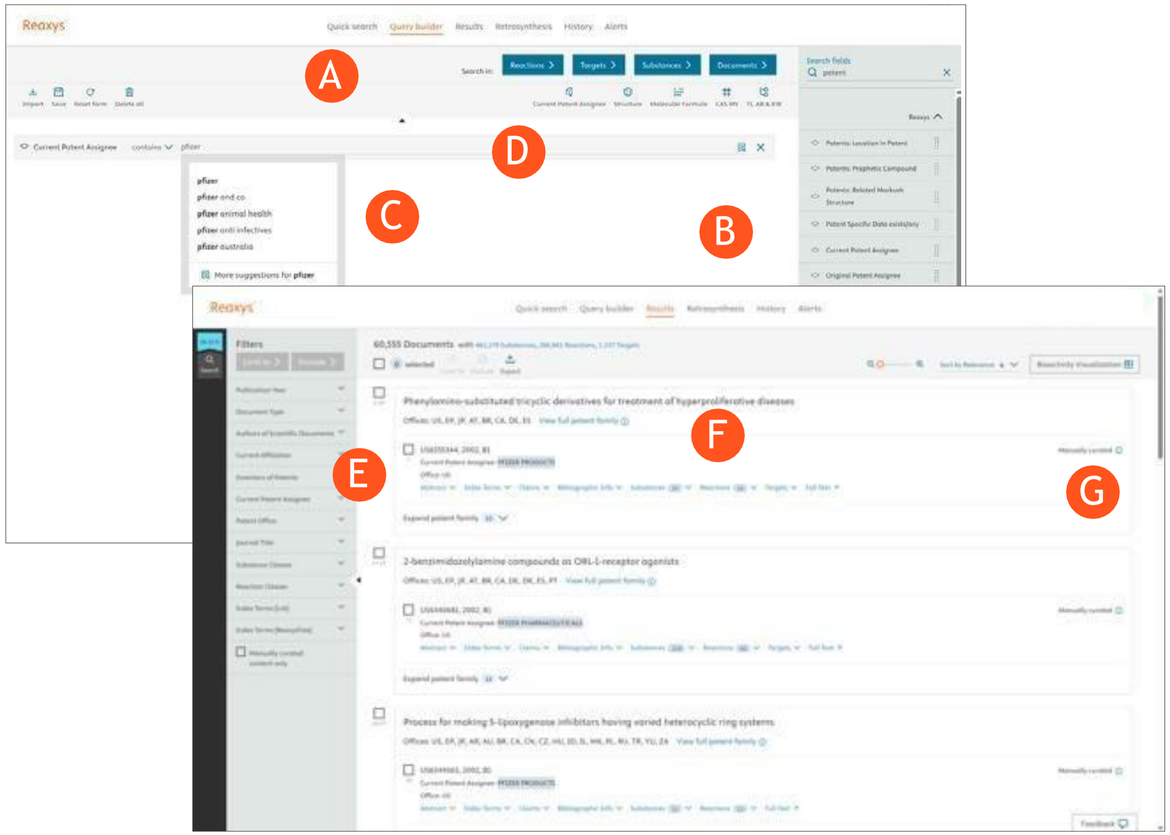
D.

选择结果类型：选择物质、反应、靶点或文献，以探索与所选受让人关联的数据。

E. **筛选和分析结果：**在结果页面按靶点、结构或性质进行筛选，并识别与专利关联的化合物、反应和趋势。

F. **查看专利族列表：**点击查看整个专利族。

G. **数据是手动提炼还是自动生成：**查看数据是手动提炼还是自动生成的。



专业提示：使用结果筛选器分析跨关联物质、反应和靶点的所有权趋势 – 非常适合空白领域分析或对标分析。

了解更多: 查询构建器文章。

逆合成分析：已发表

设置逆合成查询

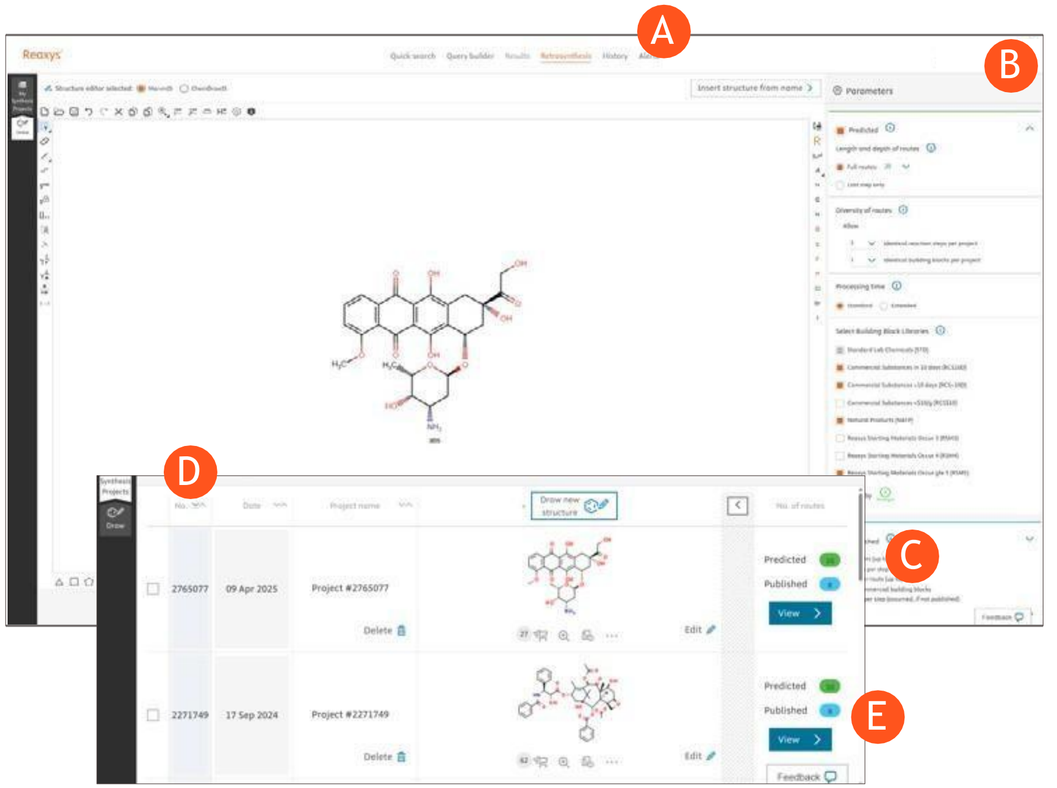
A. 转到逆合成页面并绘制化合物：启动结构 编辑器绘制或导入您感兴趣的化合物。

B. 为已发表的合成路线定义检索参数：所有拥有 Reaxys 账户的用户均可使用。如果您的机构有预测逆合成（AI）模块的权限，您还将看到选择"Predicted routes"的选项。

C. 点击"Synthesis"：基于您的结构生成可用的逆合成路径。

D. 一条逆合成项目已经添加到您的项目页面：需要登录才能保存、重新访问或跟踪逆合成工作流程。

E. 分析合成路线：在交互式视图中查看完整的反应步骤、中间体和实验条件。



专业提示：使用 *Published routes*获取经过验证的、基于文献的合成路径。遇到合成瓶颈？尝试"预测路线"（需要 AI 模块）以探索新颖的、机器辅助的替代方案。

逆合成分析：分析结果

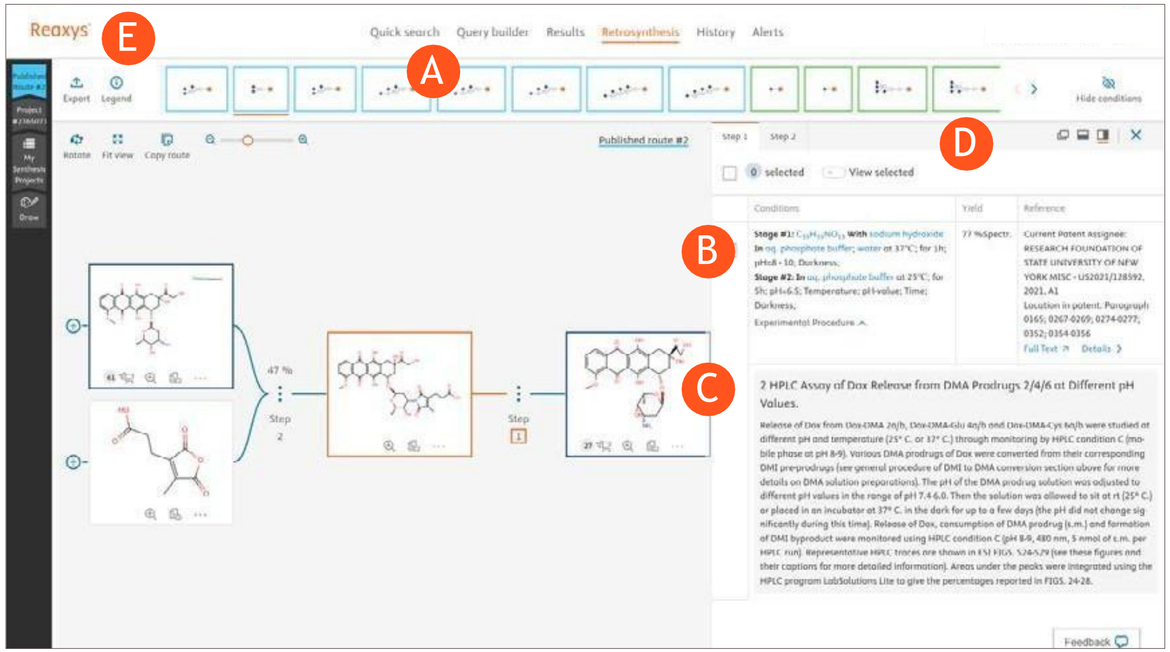
A. 在合成路线和反应步骤之间切换：使用导航按钮在合成方案和逐步路径之间切换。

B. 查看实验条件：查看每个步骤的反应产率、温度、溶剂和文献参考。

C. 访问实验步骤：在可用时，打开全文步骤以重复或评估反应。

D. 切换布局或使用"适应视图"：在垂直/水平布局之间切换，并缩放以适应复杂路径。

E. 导出合成路线：下载结构图和实验数据，或直接导出到 ChemDraw 用于实验室规划或协作。



专业提示：使用"切换"和"适应视图"快速比较替代合成路线，并评估可行性、产率和条件，以选择最佳路径。

预测逆合成：合成计划

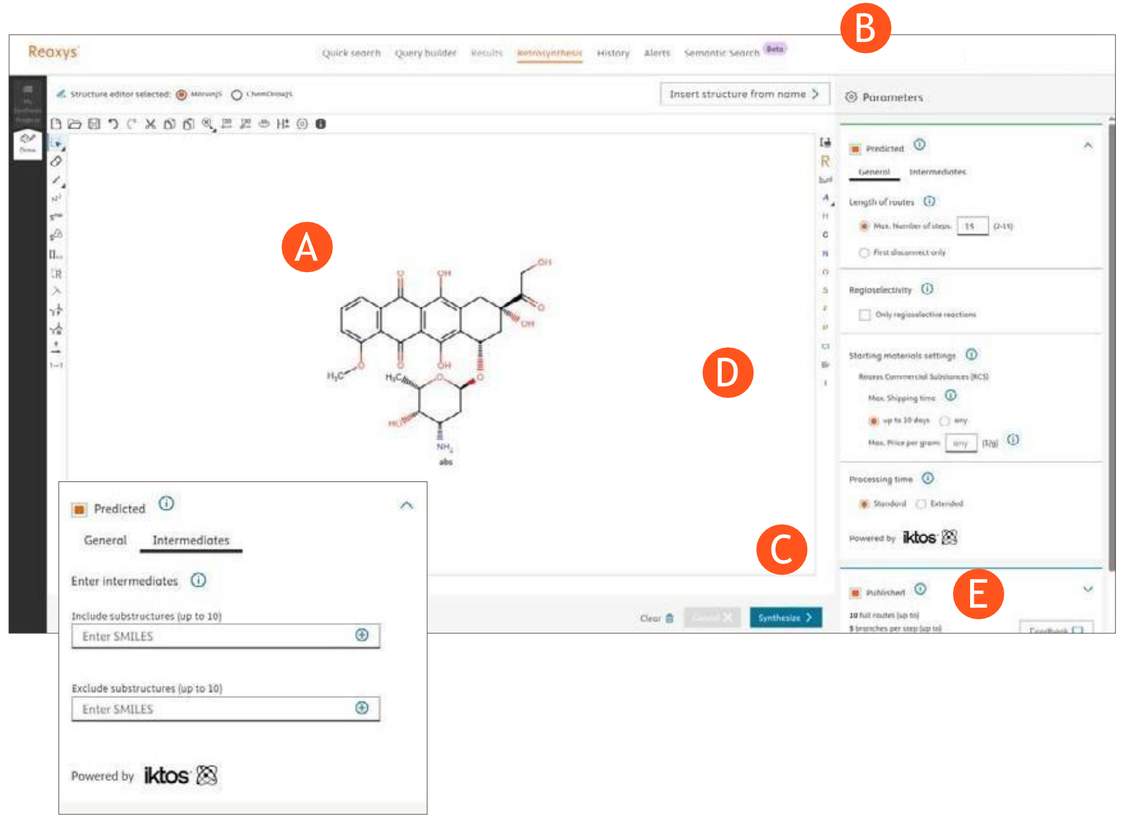
A. **打开逆合成**页面并绘制您的化合物。使用结构编辑器绘制或导入感兴趣的化合物。

B. **选择预测合成路线**：仅当您的机构有权访问预测逆合成模块时可见。

C. **调整参数**：自定义多样性、速度和构建块以指导 AI 输出。

D. **点击"Synthesis"**：基于内部算法和已发表知识生成AI 预测的合成路线。

E. **在项目页面查看**：将 AI 路线与已发表路线（如果可用）进行比较，并根据需要进行优化。需要登录才能保存或重新访问。



专业提示：当已发表选项遇到瓶颈时，使用 AI 预测路线。快速发现未专利或新颖的合成路线，并根据您的标准进行定制。

联系我们 以订阅Reaxys 预测逆合成。

了解更多：[Pending AI指南] [Iktos指南]。

Reaxys
核心内容

返回目录页

Reaxys 核心内容

探索最全面的经过验证的化学和生物活性洞察。



文献

检索数千种期刊和参考文献来源 – 将文献与化学结构、反应和生物活性链接。



物质

探索数亿个经过实验验证的化合物 – 包含完整的物理化学数据、商业可用性和供应商来源信息。



反应

访问世界上最大的合成反应数据集之一 – 包含详细的条件、催化剂、产率和预测性路线规划。



生物活性

发现数千万个经过提炼的生物活性数据 – 映射到靶点、构效关系、作用机制和治疗结果。



专利

挖掘来自全球权威机构的与化学有关的专利，可通过反应、靶点和权利要求进行检索。



专业提示： 登录以查看最新的 Reaxys 内容 更新。

物质

使用经过实验验证的物质设计新分子。

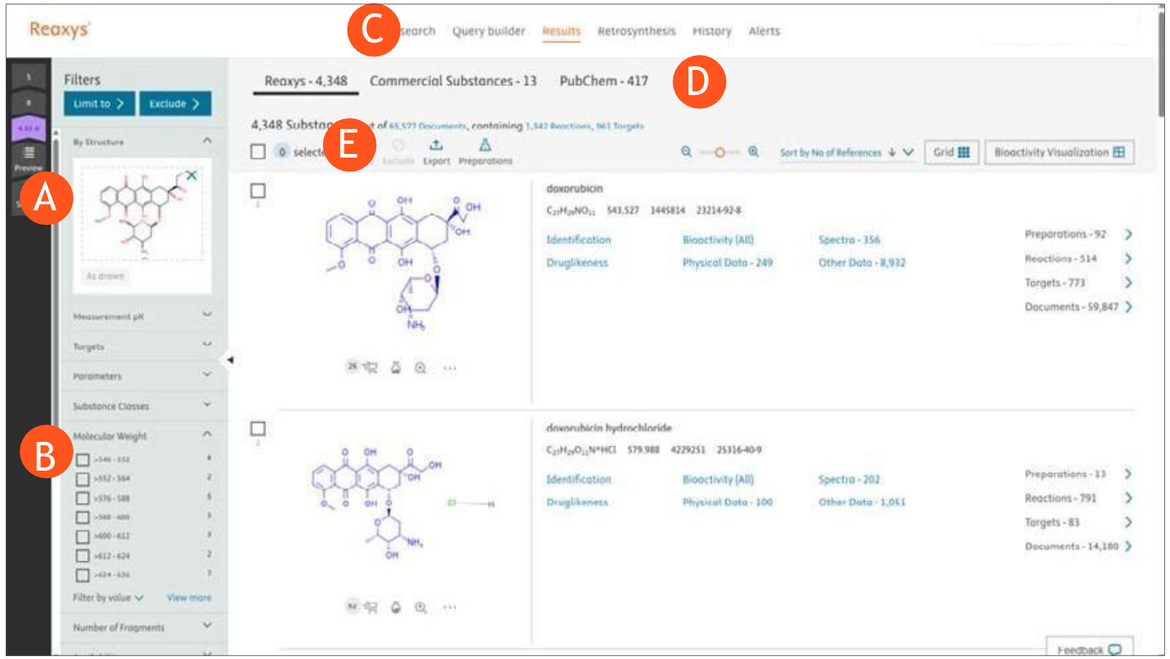
A. 从输入化学结构或名称**开始。**

B. 按物理化学性质（例如，logP、分子量、溶解度）**筛选。**

C. 切换到供应商可用性以进行采购： 探索全球数百家供应商的商业可用性 – 直接链接到 Reaxys物质记录。

D. 探索关联的反应、靶点和文献。

E. 导出或重用精炼的数据集。



专业提示： 使用 Reaxys 即刻完成查找、验证和采购化合物。

如何按名称检索物质？观看 2 分钟视频。

如何快速获取商业物质？

如何设置您的供应商偏好？

如何避免已知安全问题的结构。

反应

使用经过实验验证的反应规划优化合成路线。

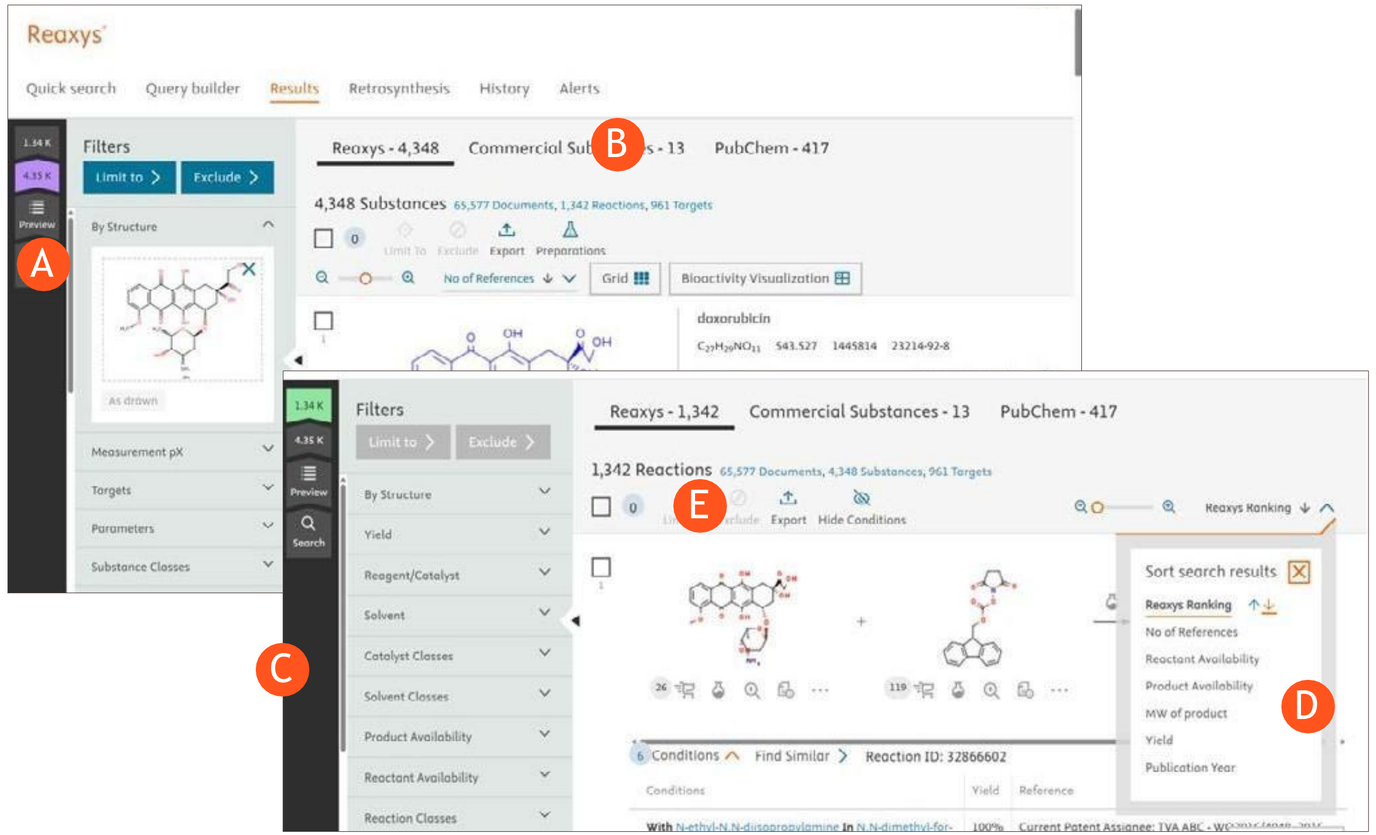
A. **绘制或导入**目标分子。

B. **打开反应选项卡以探索**所有可行的合成转化。

C. 按试剂、催化剂、溶剂、产率和温度**筛选。**

D. 按反应产率或实验条件**排序。**

E. **导出**路线或使用预测性 AI 工具进行验证，这些工具基于真实的实验室报告数据。



专业提示：利用文献中报道的条件，快速识别最可行的合成路径 – 而不仅仅是预测。

文献

跨学科查找提及确切化合物或反应的文献 – 不仅仅是关键词。

A. **运行**结构、物质或关键词检索。

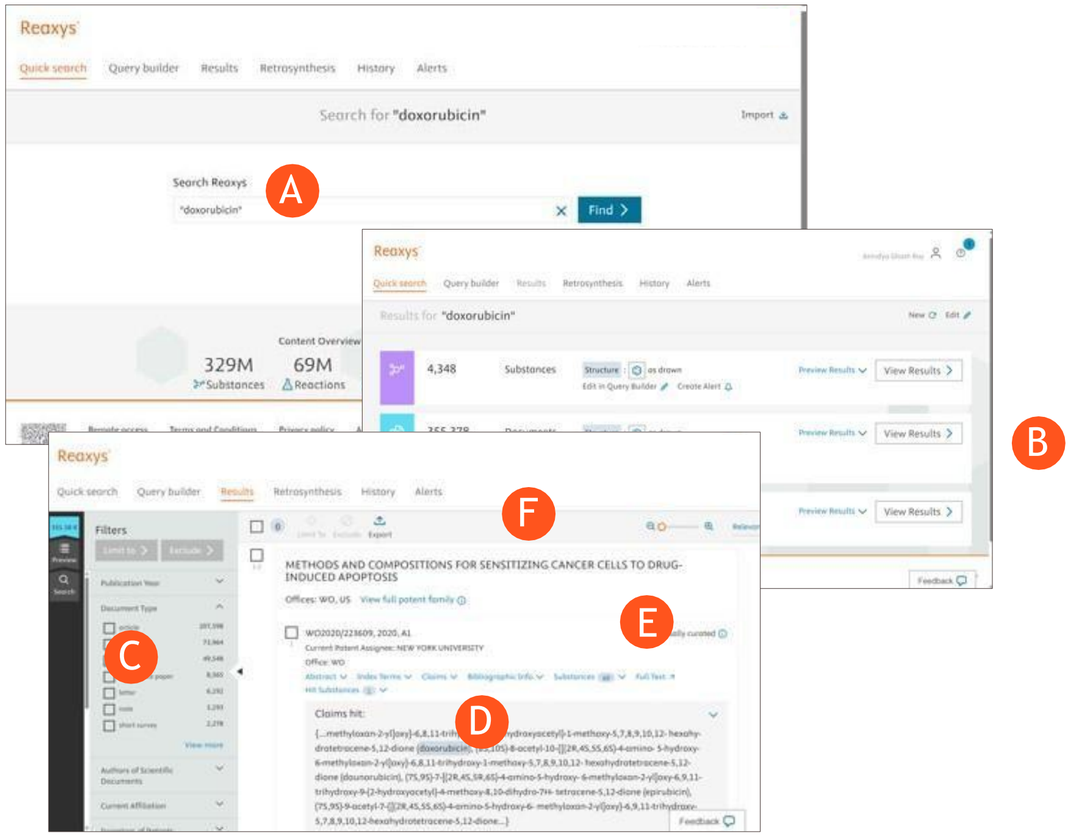
B. **查看**文献结果。

C. 按来源类型（例如，期刊 vs. 专利）**筛选。**

D. **访问**全文中的有关化学的重点部分。

E. **追溯**关联的物质、反应和生物活性。

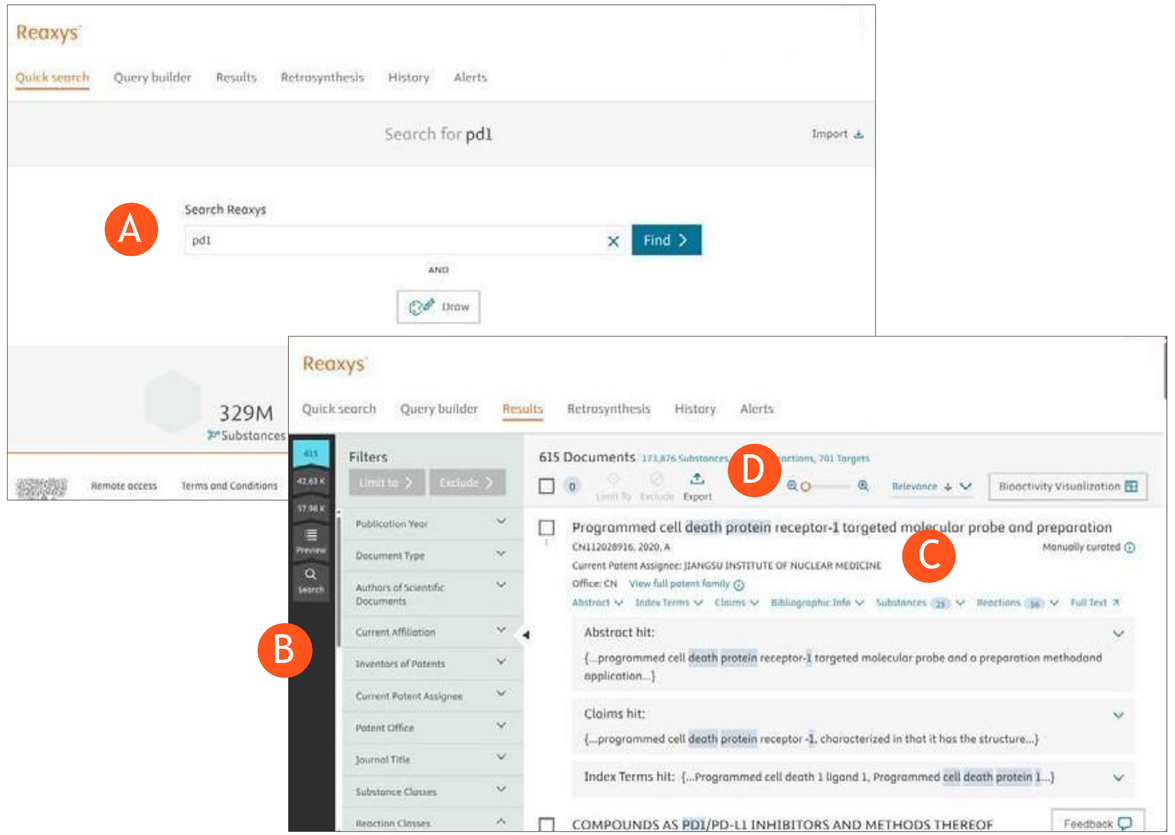
F. **导出并重用**筛选后的参考文献，用于报告、合规性或配方见解。



专业提示：将文献直接链接到化合物和反应，跳过泛关键词挖 掘，更快地访问真实的实验建议。

专利

发现全球专利中公开的新颖化合物、反应或靶点。



A.输入化合物或关键词。

B. 按专利所属组织**筛选**（例如，EPO, USPTO）。

C.查看映射的反应或靶点。

D.导出到专利报告。

专业提示：挖掘专利数据库以发现新颖化合物和反应，识别治疗权利要求，并比较跨专利组织受保护的合成路线。

返回目录页

生物活性

分析分子靶点和生物活性结果，以指导构效关系、作用机制和药理学见解。

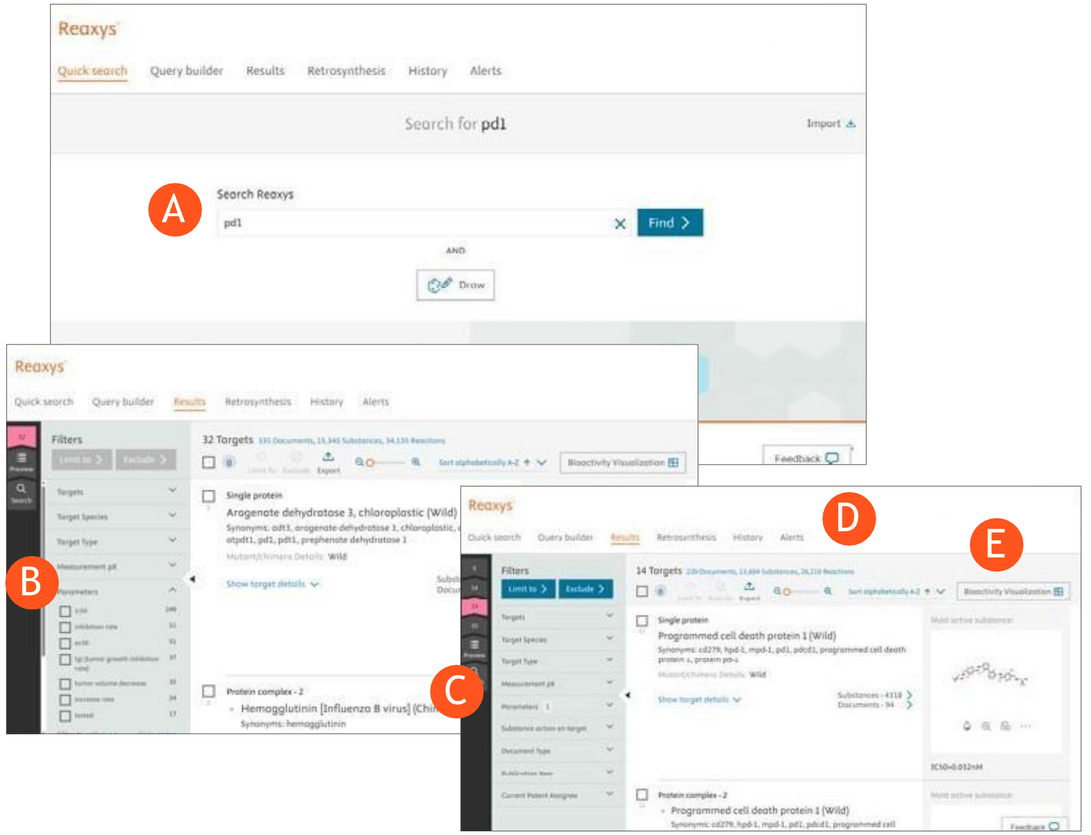
A. **运行**结构或化合物名称输入。

B. **按生物活性结果筛选**（例如，IC50, KI, EC50）。

C. **切换**靶点类型、靶点类别或物种的筛选器。

D. **导航**至关联的靶点、化合物和文献。

E. **运行您的检索**：点击"查找"以检索和排序结果。结果预览显示关键命中项。AI 驱动的自动建议可帮助您完成检索词，如作者姓名、化学同义词和靶点，从而加快精确查询的构建。



专业提示：观看靶点与生物活性专家提示。

Reaxys
资源与支持

返回目录页

Reaxys 资源与支持

通过学习、构建知识、获取见解、了解产品进展并通过社区活动与同行联系。**扫描下方二维码访问思唯学苑Reaxys一站式内容**：

学习

观看教程、注册课程和网络研讨会，并访问操作指南。

.

知识

通过科学文章、网络研讨会、视频和专家提示快速拓展您的知识面。

产品

阅读 API 参考文档，浏览解决方案和手册，查看最新版本并联系支持。

社区

了解真实客户如何将 Reaxys 用于其业务。参与 Reaxys 活动并与您的同行建立联系。

需要更多帮助?
访问 Reaxys 资源 或者
联系我们。



Advancing Human Progress Together