Reaxys结构面板详解

Presented By

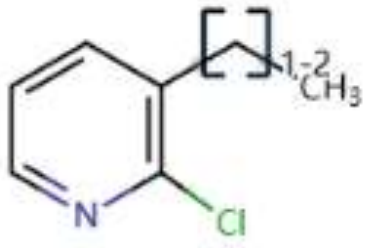
Date

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

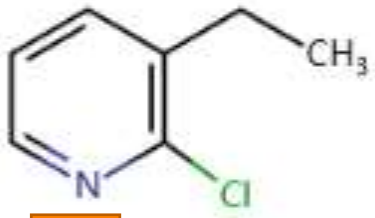
Reaxys结构检索模式介绍

- 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

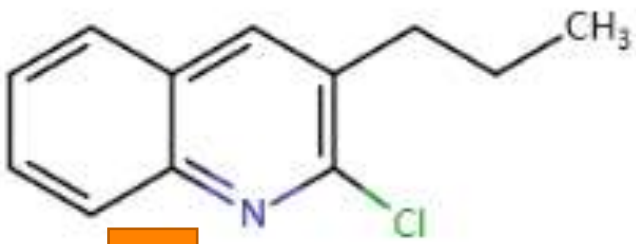


思考：

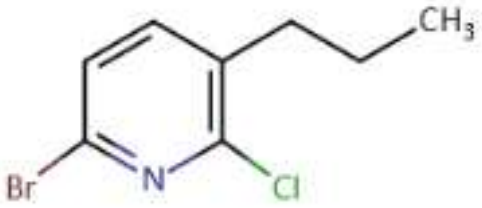
用两种方式检索上述结构，可以获得的结果有？



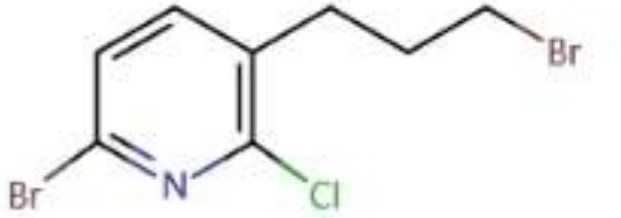
1



2



3



4

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

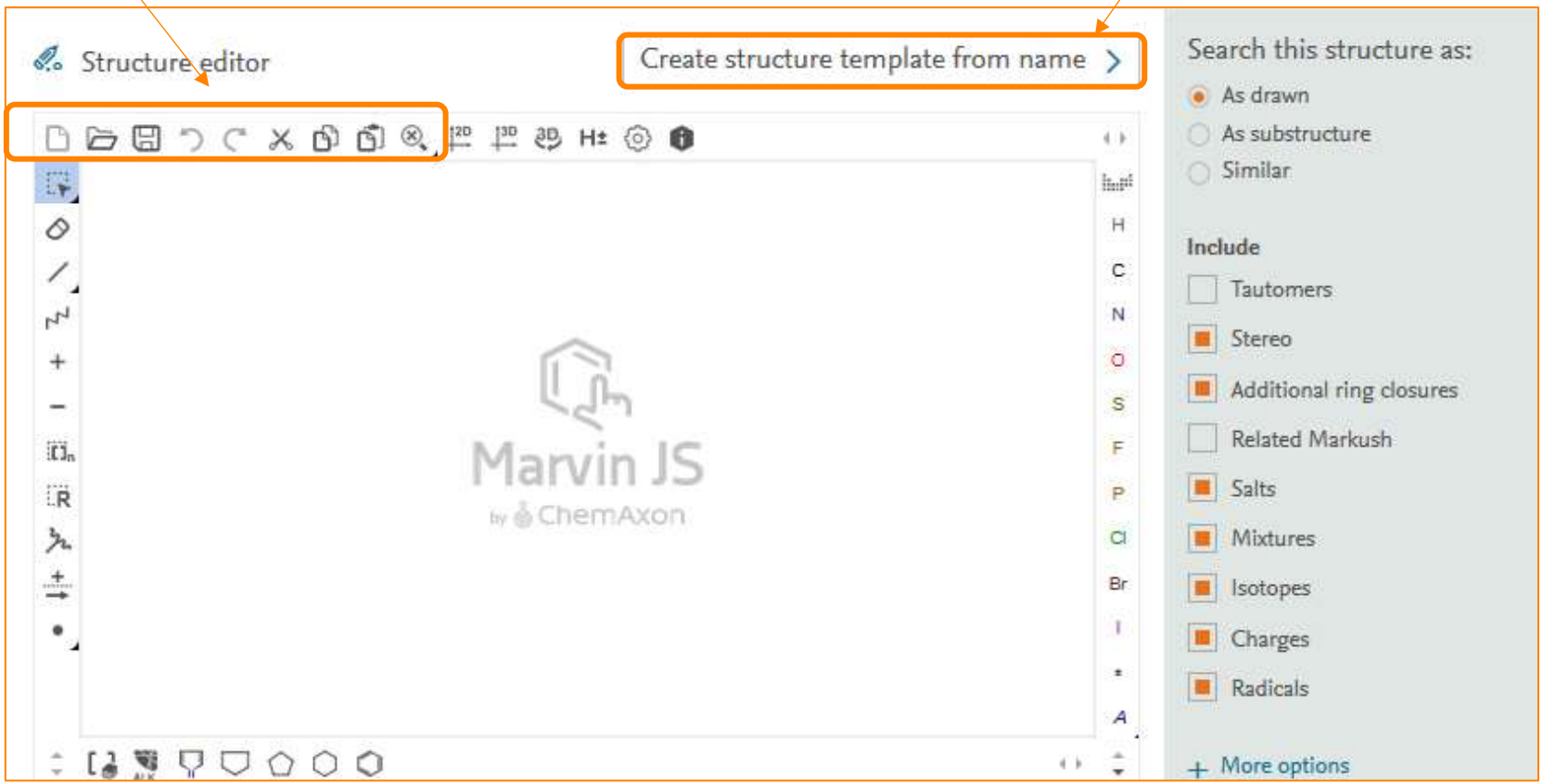
面板中简单功能介绍

Tips

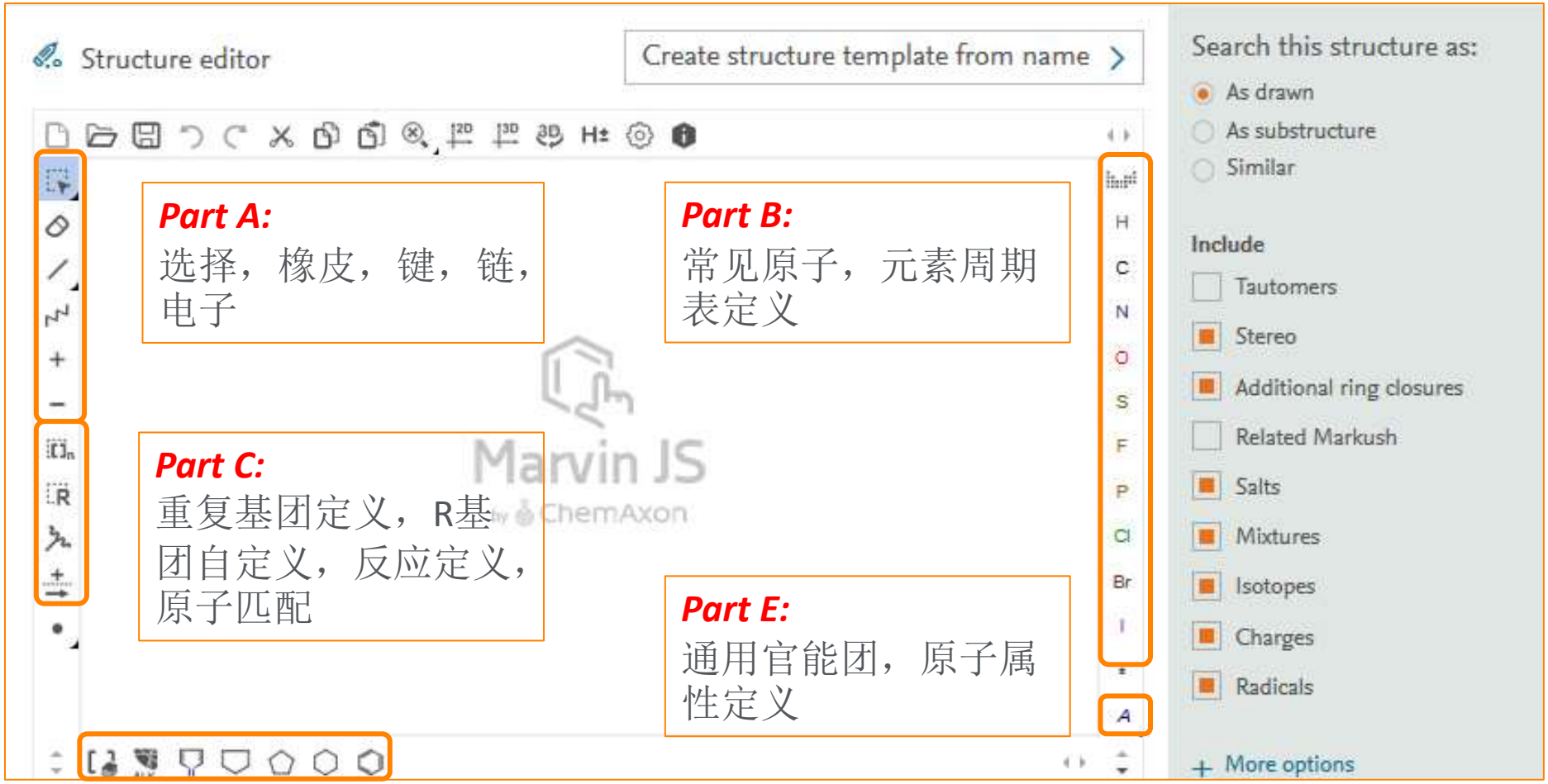
1. 打开，保存结构
2. 复制，剪切，黏贴结构
3. 放大，缩小结构
4. Chemdraw中，复制结构的方式Ctrl+Alt+C

Tips:

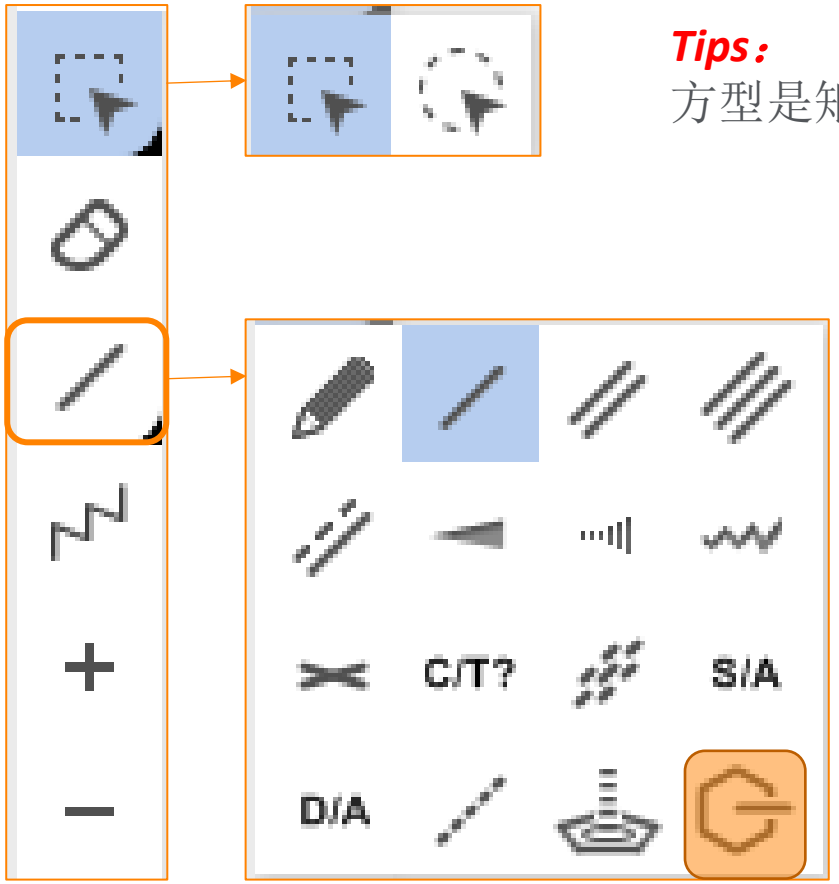
通过化学品名转化结构



Reaxys的结构面板概览



Part A：选择，橡皮，键，链，电子



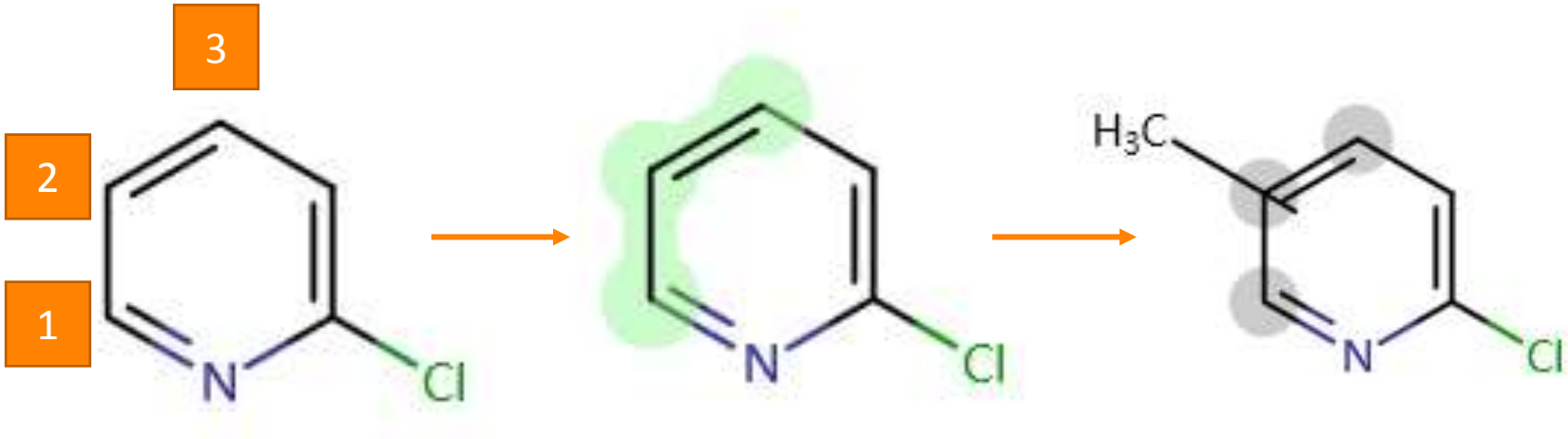
Tips：

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



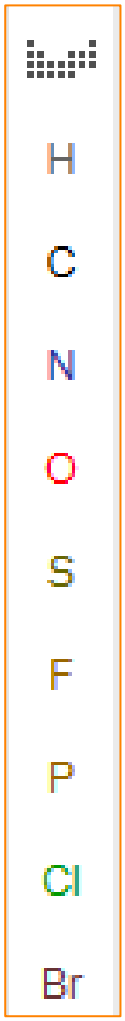
绘制要求：

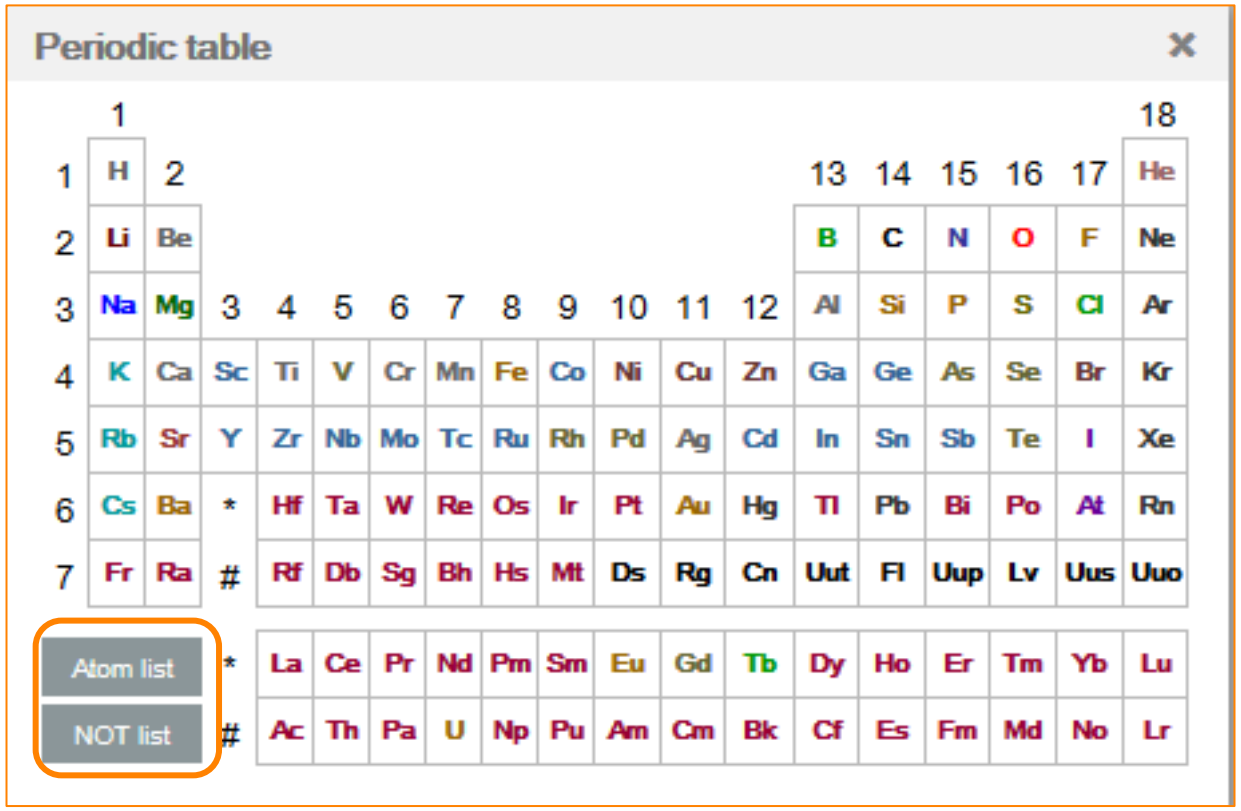
希望1，2，3C上存在一个NH2

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CH3
3. 将CH3换成NH2

Part B:常见原子，元素周期表定义



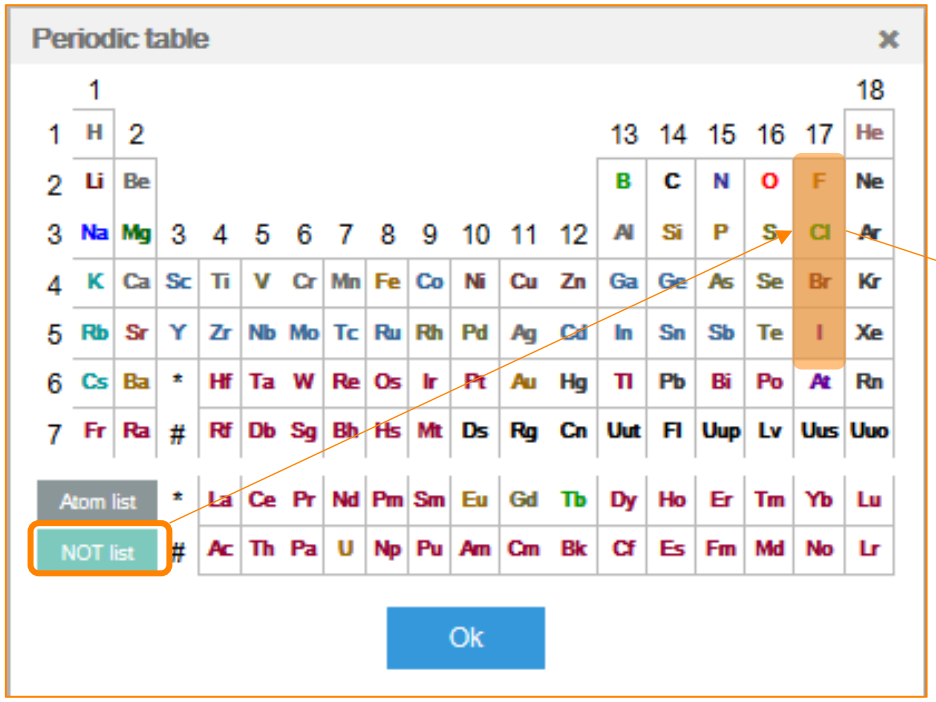


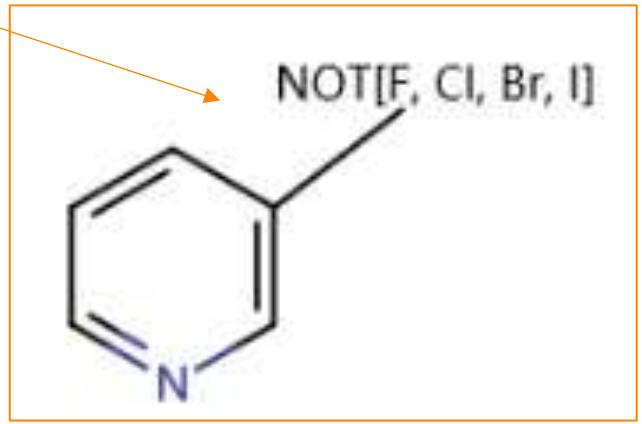
Tips：

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



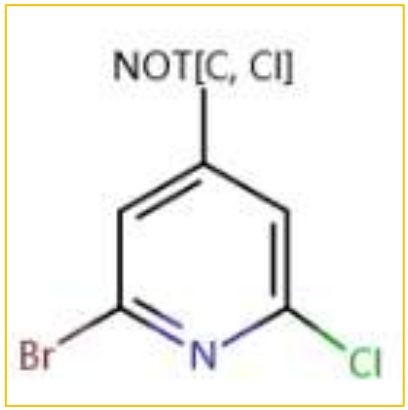


Not List/Atom List定义Tips

- 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

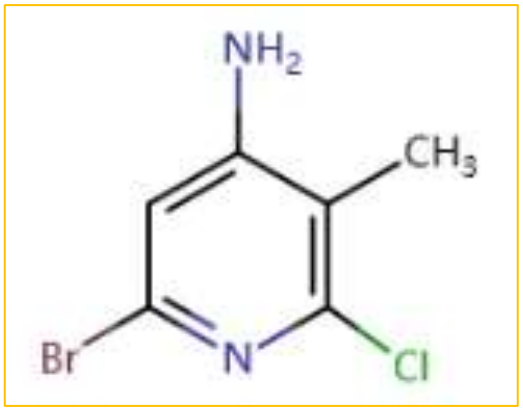
- Not List默认表示该位点是有取代的
  - Not List默认表示该位点是有取代的，即Not Cl 和Not Cl H等效

随堂小练习

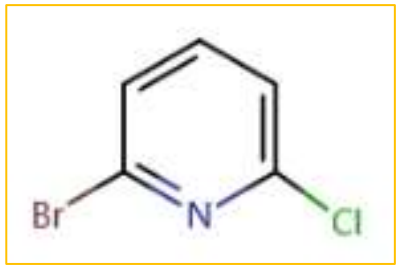


A

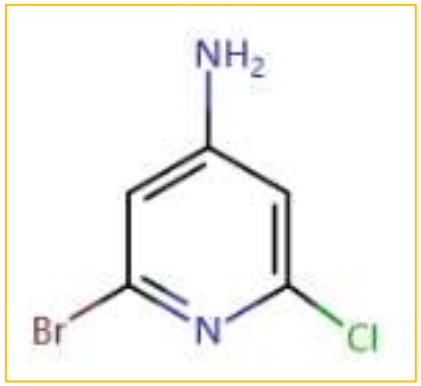
1



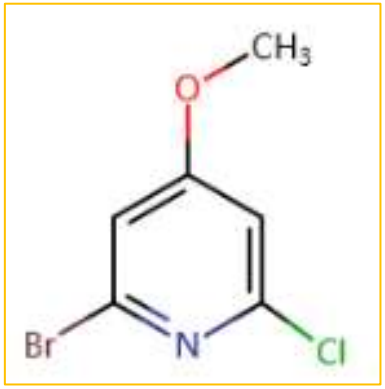
2



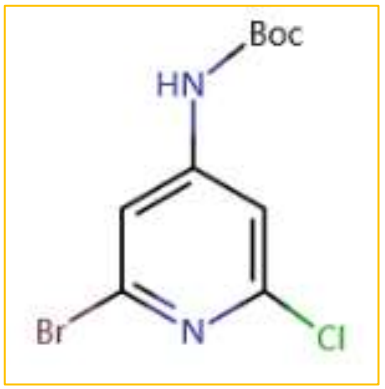
3



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

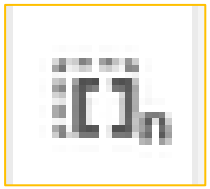
重复基团定义工具，允许用在环和链上

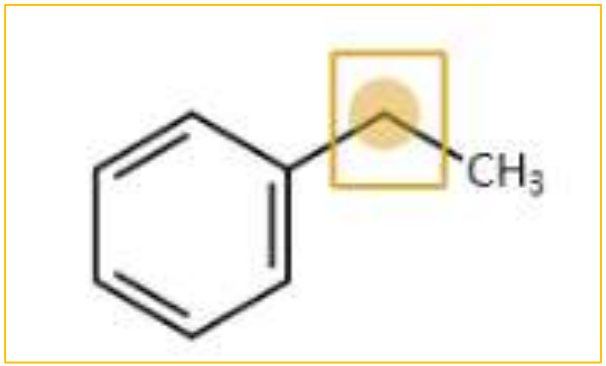
R基团定义工具

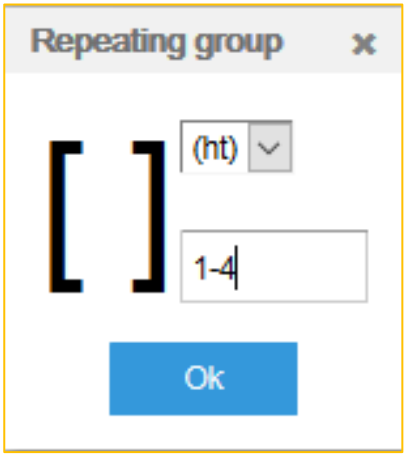
R基团末端定义工具，和R基团定义工具一起用

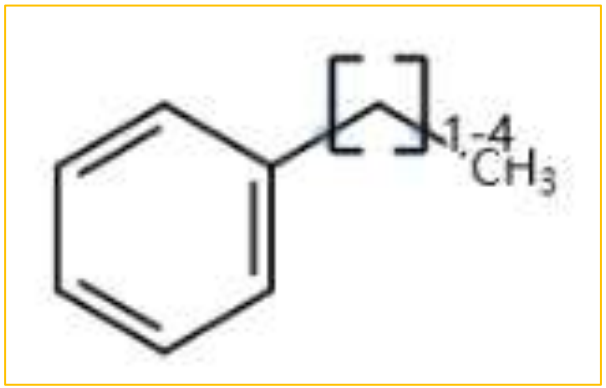
反应箭头，原子匹配工具

重复基团定义工具的使用







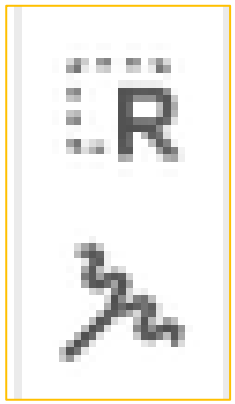


Tips：

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

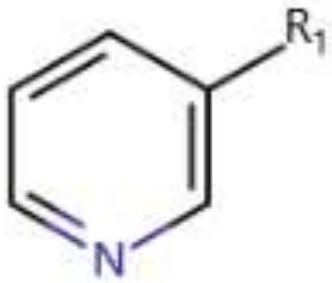
R基团定义及R基团末端定义工具

- R基团定义和R基团末端定义是一组功能

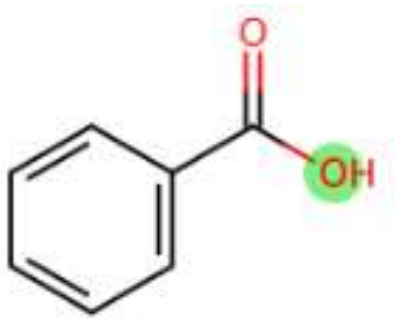


定义要求：

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

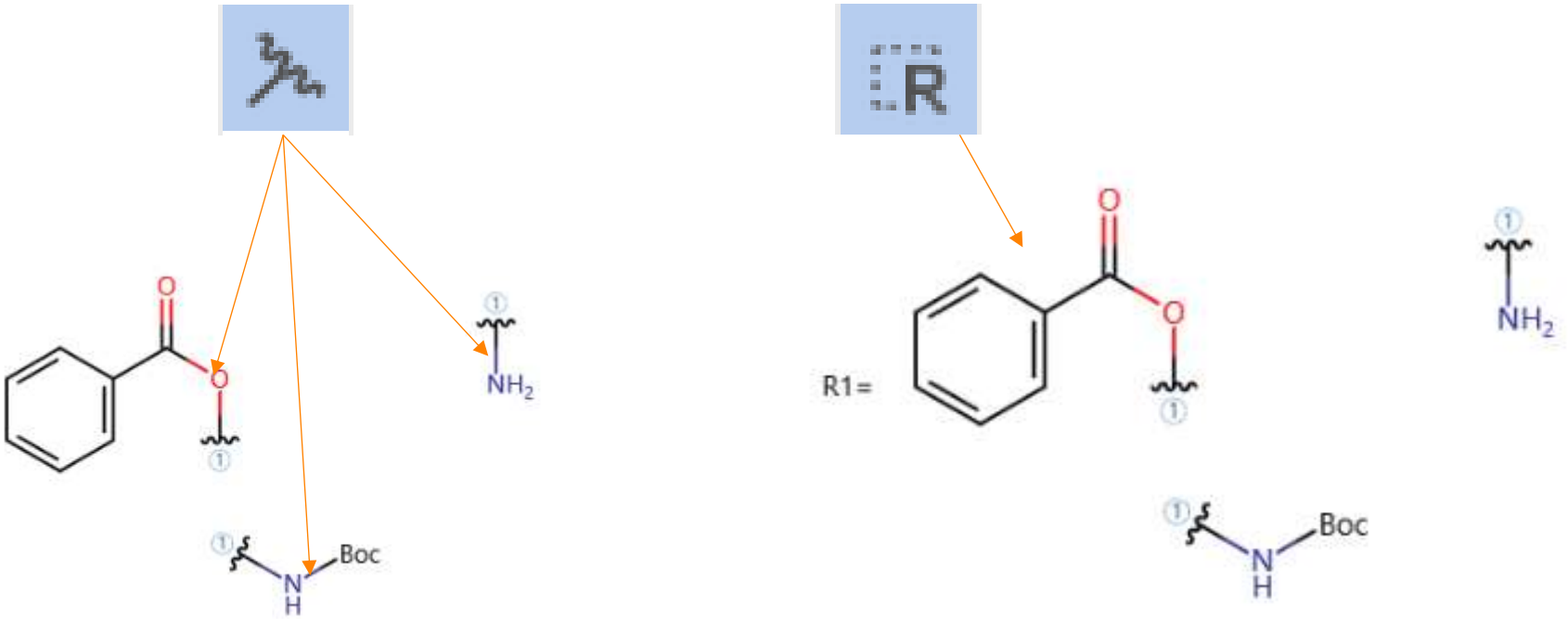


A



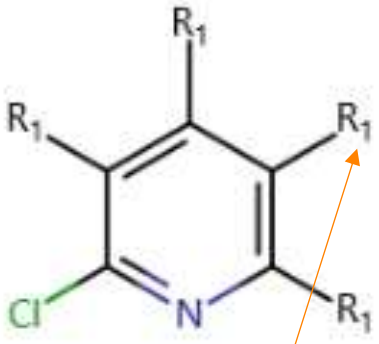
绘制方法

- 定义步骤：
  - 使用R基团末端定义工具定义绿色原子
  - 使用R基团定义工具，选择全部片段，即可完成R1的定义

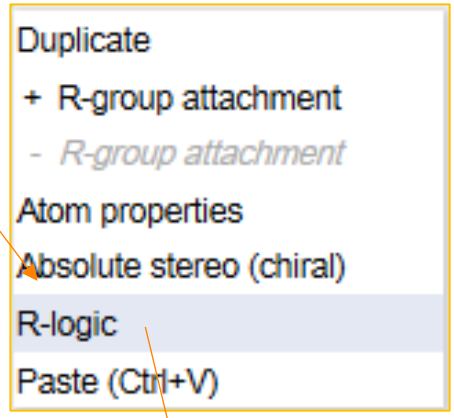


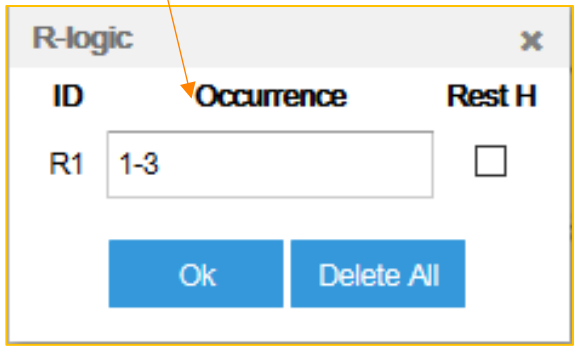
R基团定义的延展

- 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



右键点击R1

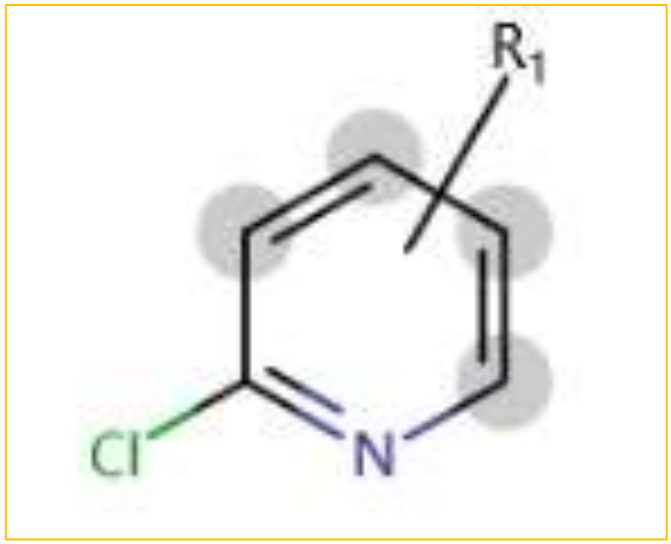




Tips：

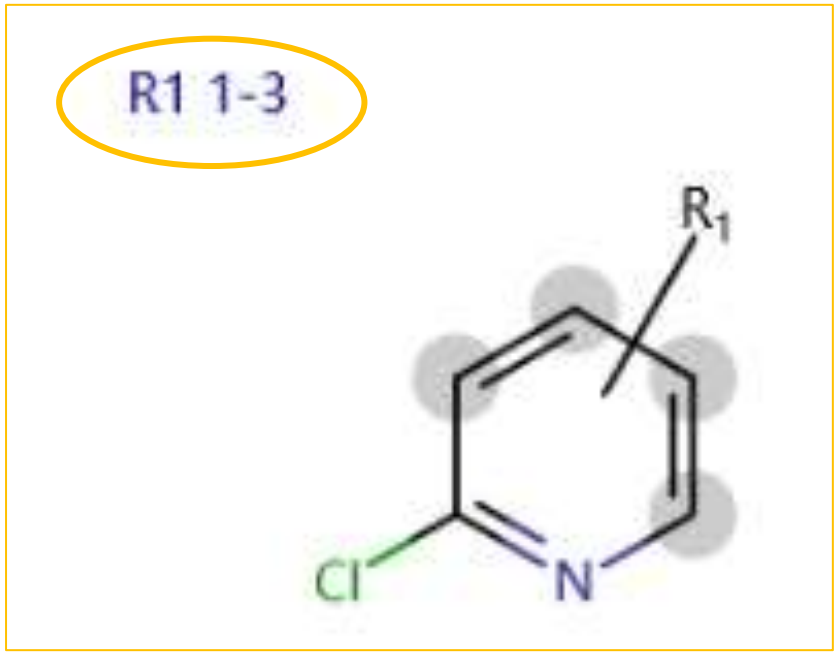
1. 当R基团有多个位点，且R的个数可变的时候，需要用R-Logic定义R的阈值
2. 右键R，打开R-Logic
3. 输入R的阈值

R基团定义和不定位与R联用时

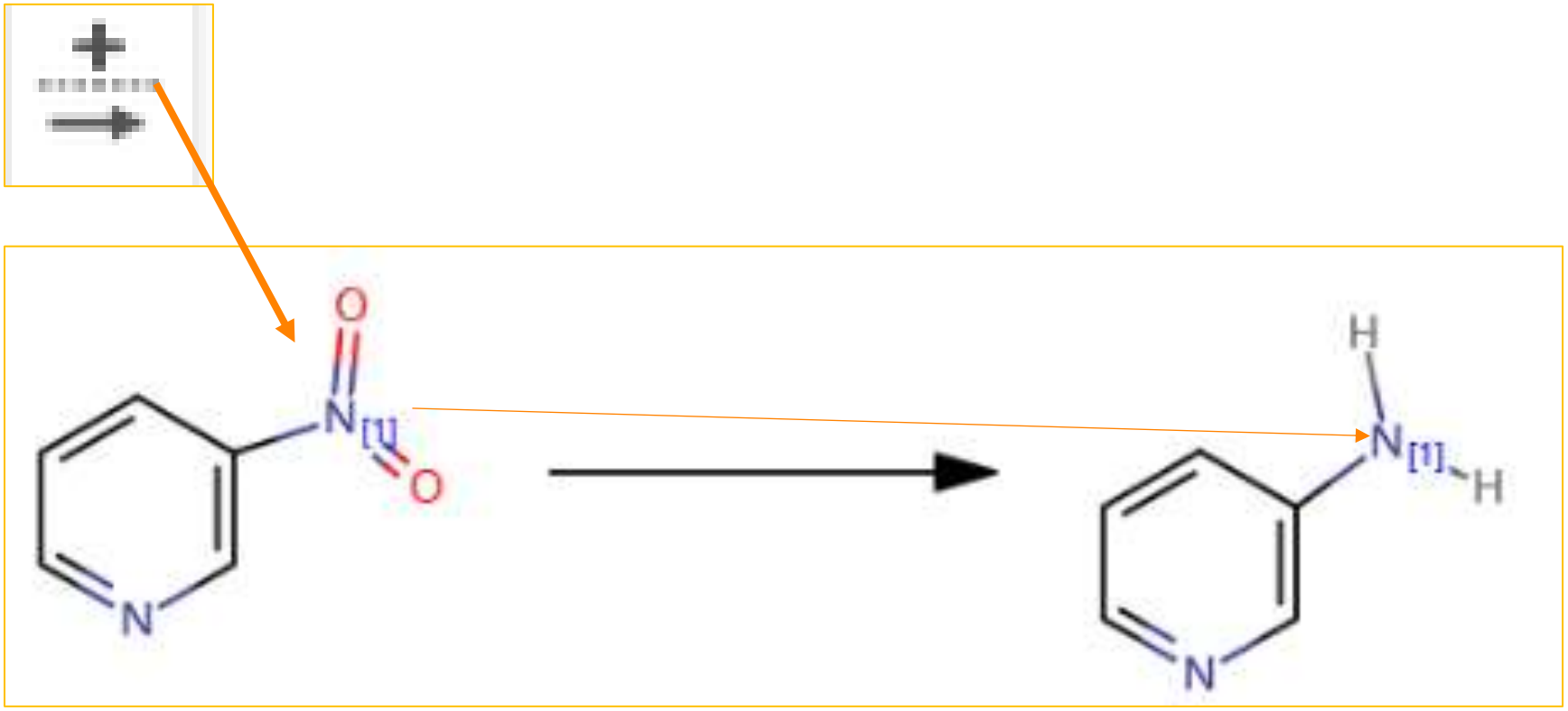


Tips：

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



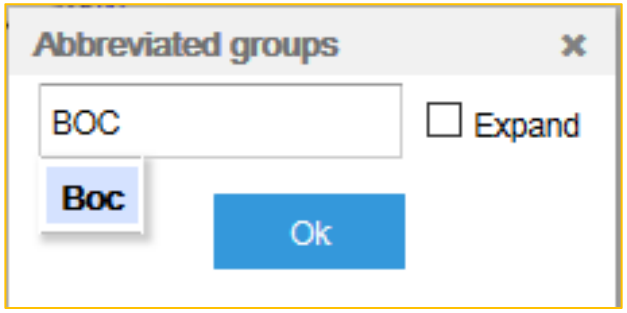
反应原子标记工具

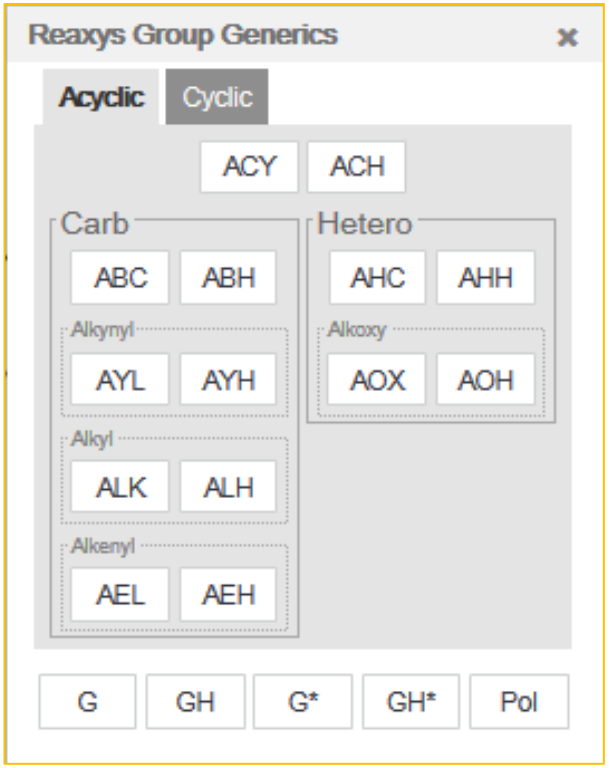


Tips：

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

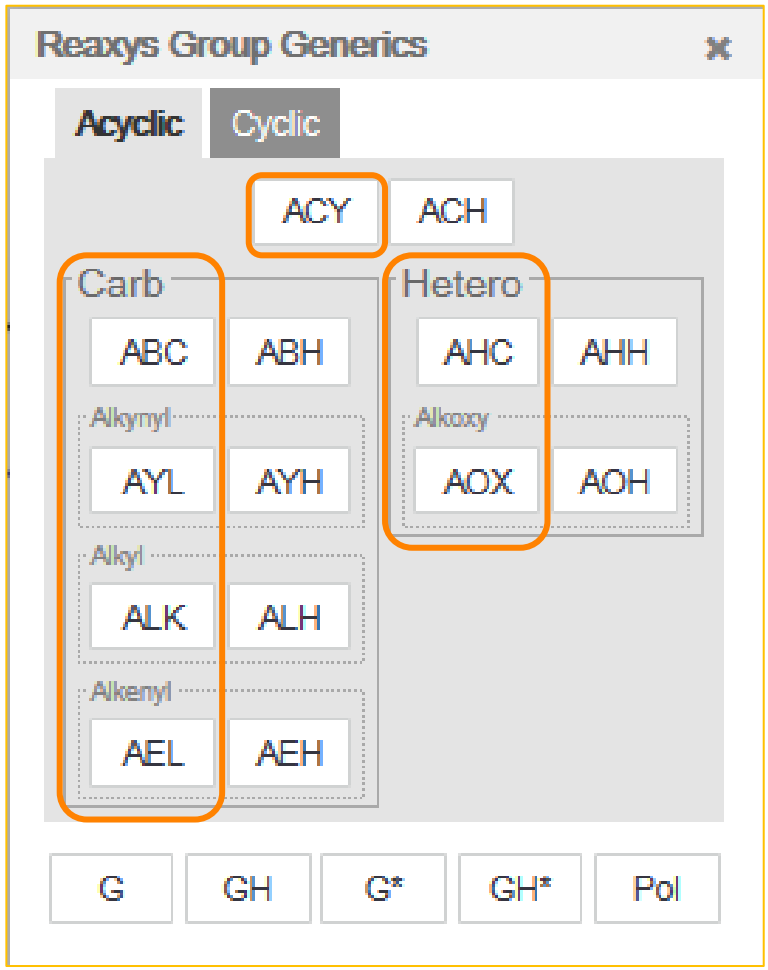




Tips:

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:

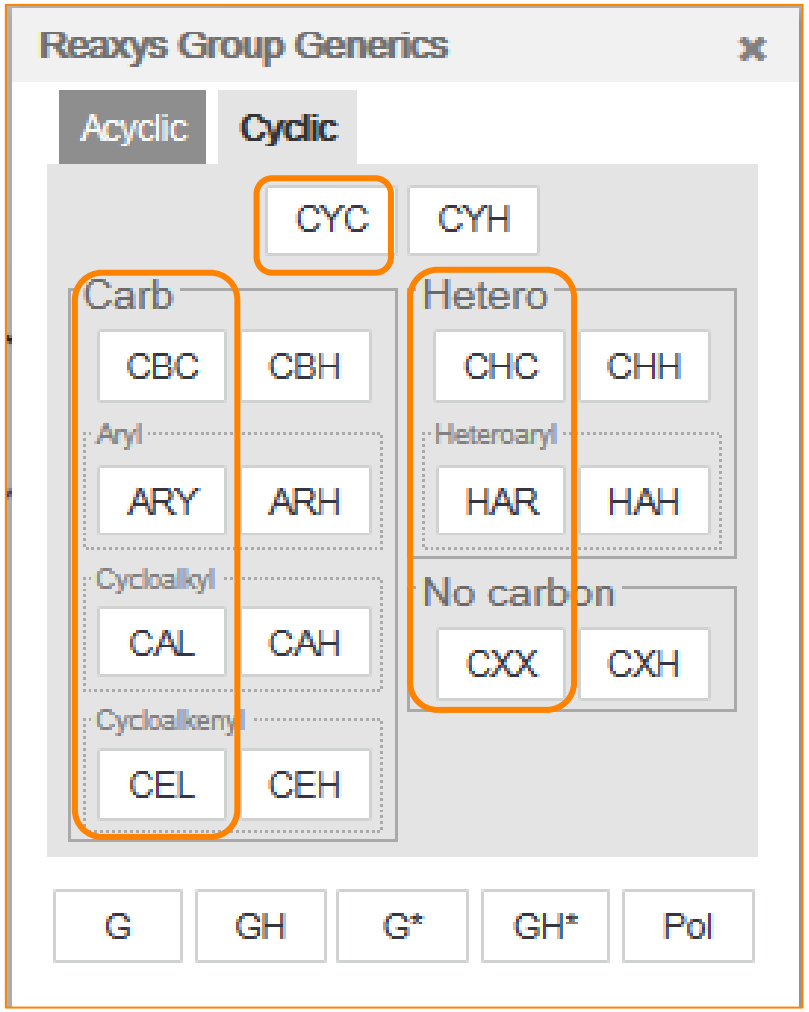
ACY： 任意的链

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

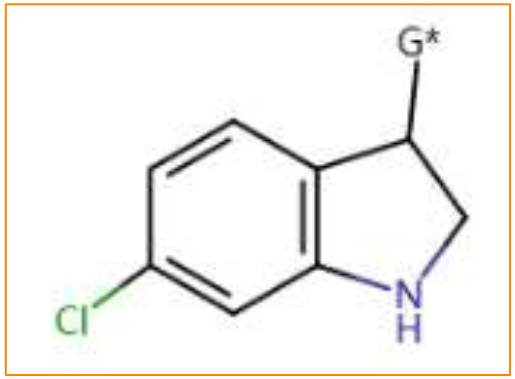
其他带H的分别是，前面对应基团或H

Generic Group定义—G/G*

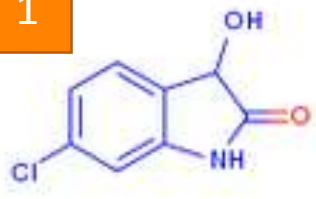
G	GH	G*	GH*

Tips：

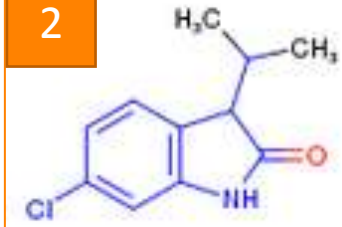
1. G代表的是任意基团，GH表示的是任意基团或H
2. G*和G的区别是，G*所连接的基团允许和母体成环，G不允许成环



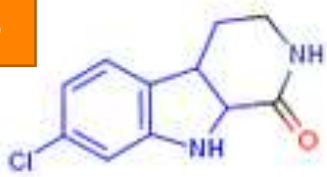
1



2



3

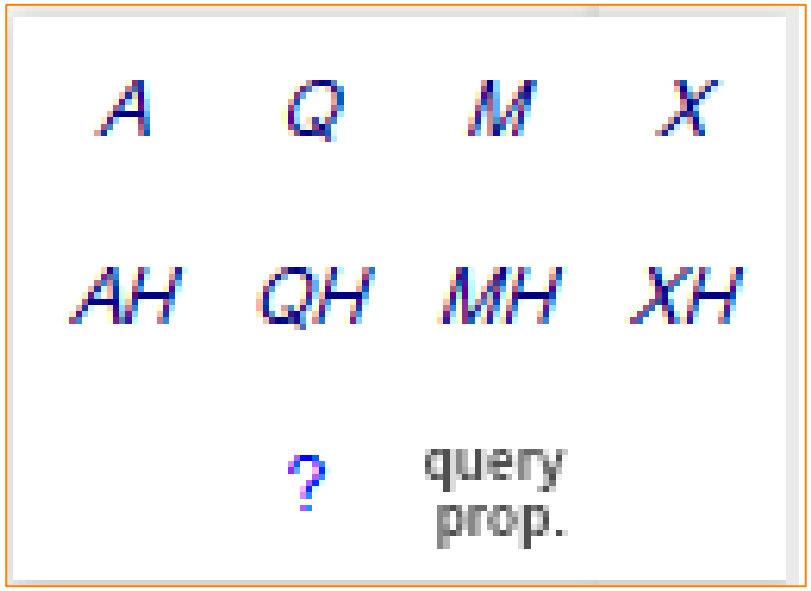


4

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？

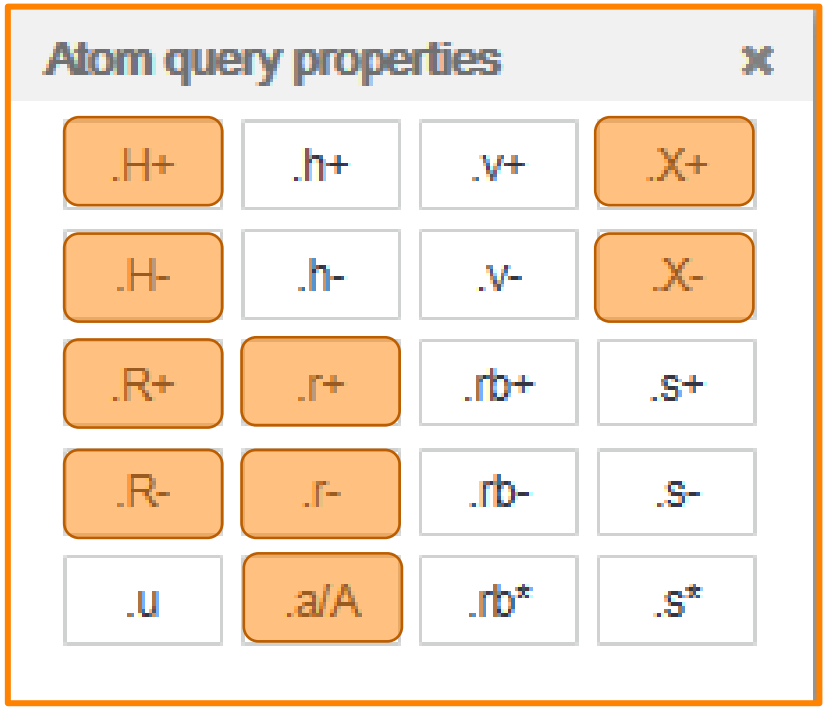
Part E: 通用官能团，原子属性定义



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



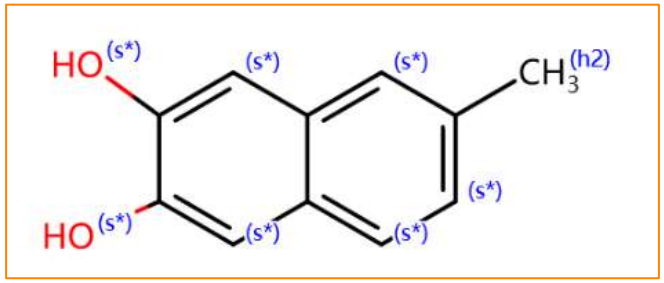
Tips：

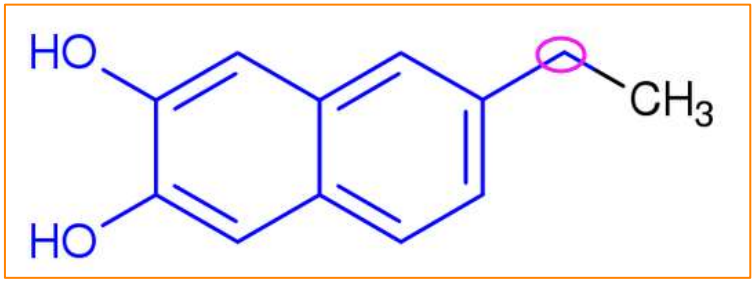
1. 有颜色标记的键目前RX中不起任何作用
2. h+/h-： 定义确定H的个数
3. v+/v-： 定义原子价位
4. rb+/rb-: 定义原子上环键个数
5. s+/s-: 定义原子上取代基个数
6. u: 定义原子取代基类型
7. rb*: 封环
8. s*: 封原子

所有功能使用时，需要配合As Draw，As Substructure。

h+/h-功能

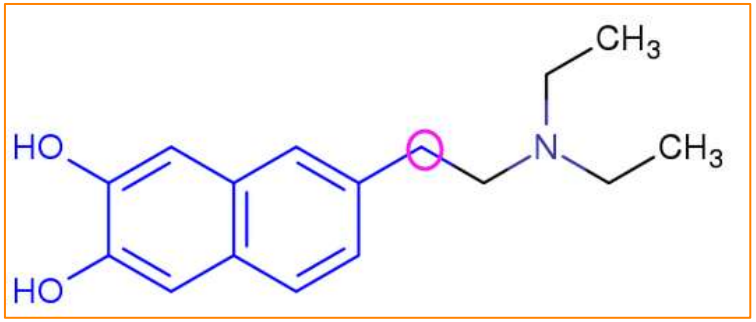
- 定义：确定的H的取代个数
- 亚结构检索下面的结构





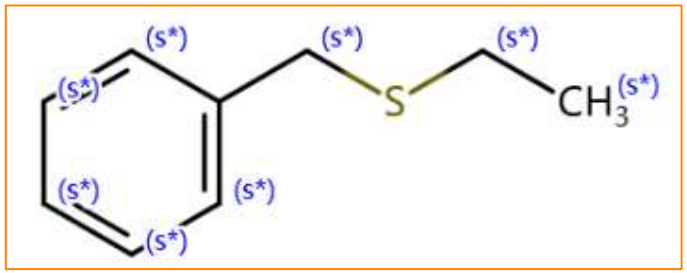
Tips：

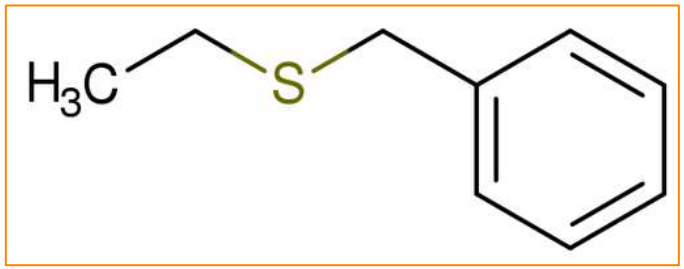
1. 一定要亚结构才有效用
2. 标记h2的C，通过亚结构检索后的结果中，该C上一定存在2个H，

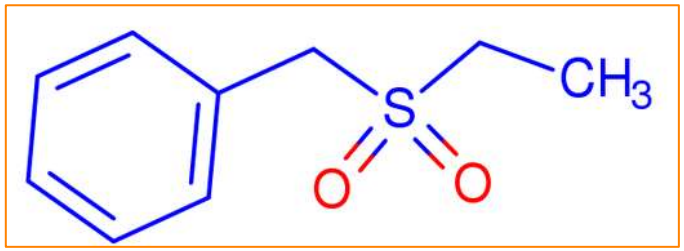


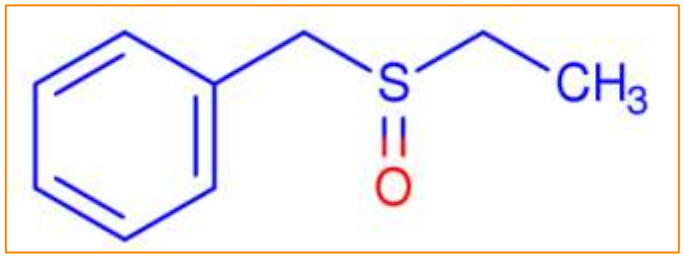
v+/v-功能

- 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





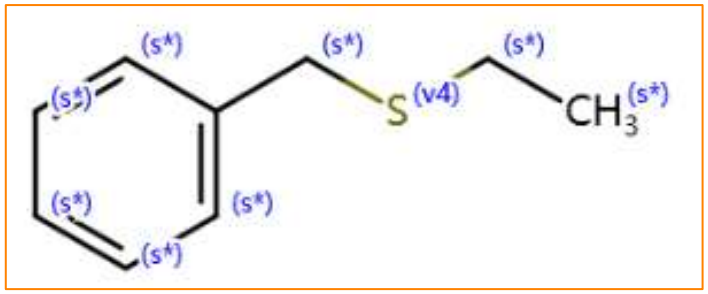


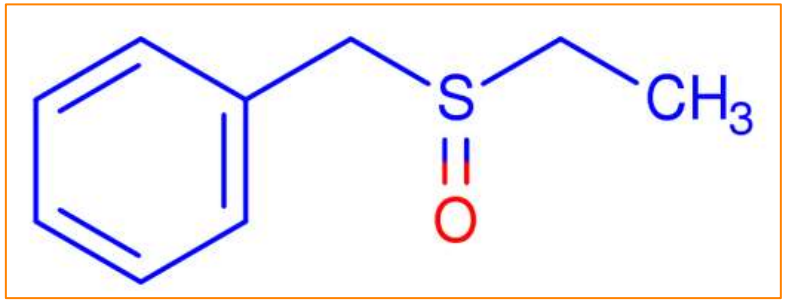


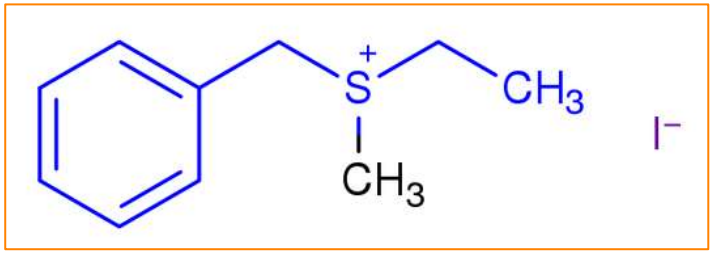
Tips：

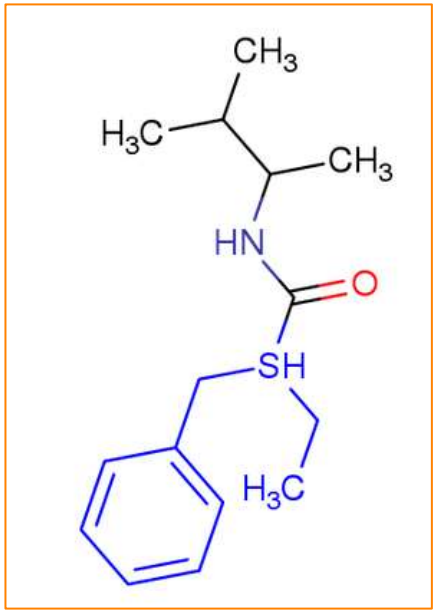
1. 一定在亚结构检索有效
2. 不使用v+/v-，可以拿到上述结构中S的所有效价的化合物，如右图
3. 如果标记V……

v+/v-功能---续







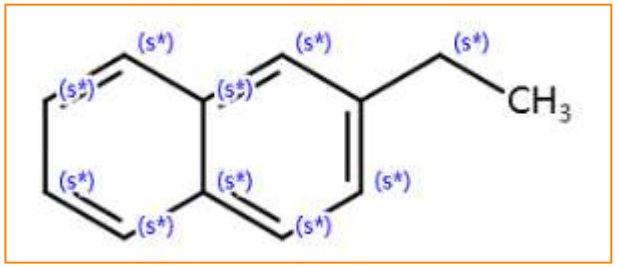


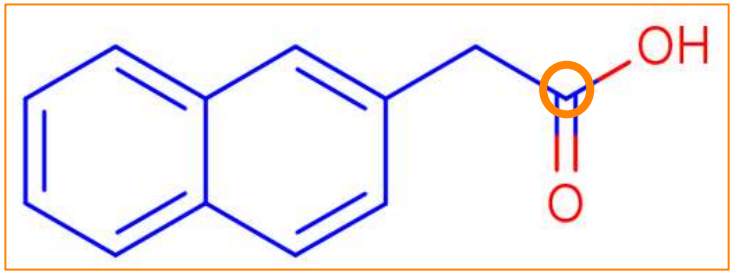
Tips：

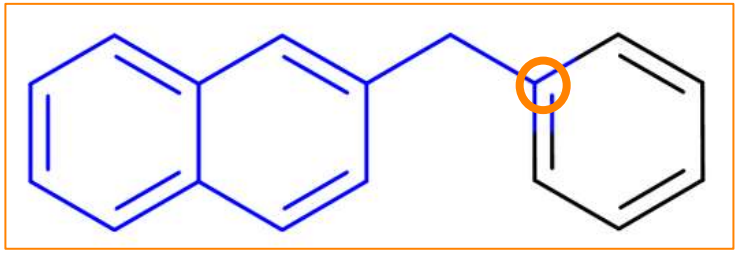
1. S标记V4后，
2. 检索出来的结果，S都是4价的，如亚砜
3. 同样如果标记V6，S都是6价的，会出现砜的结构

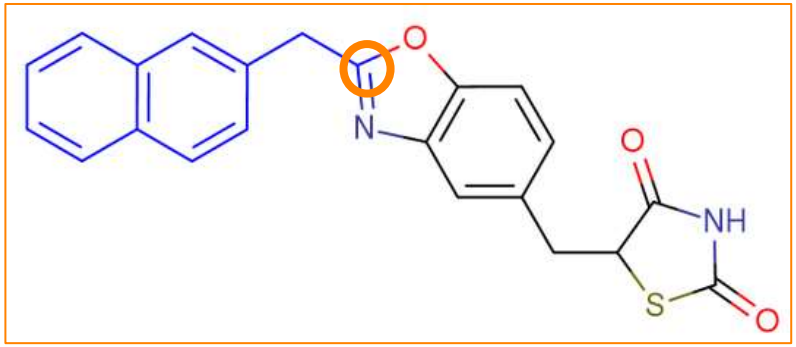
rb+/rb-功能

- 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





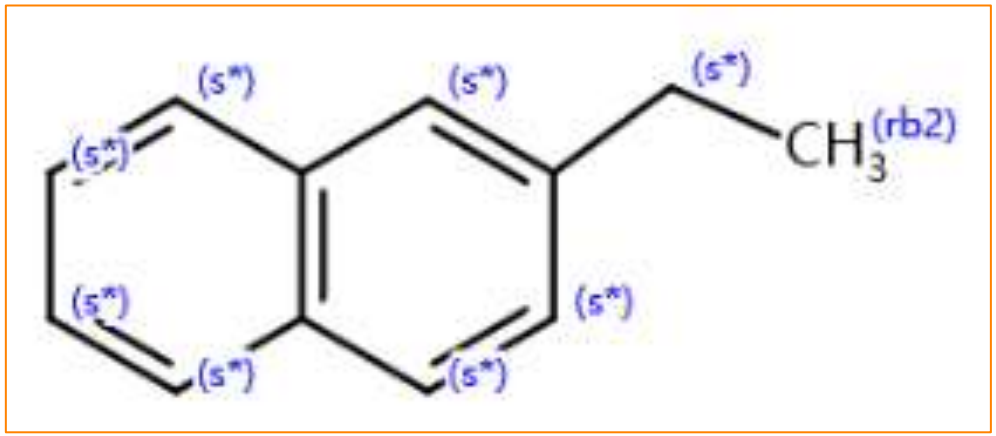


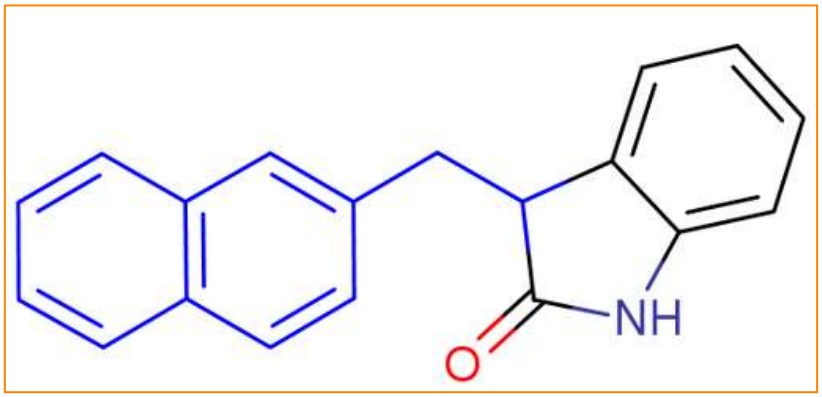


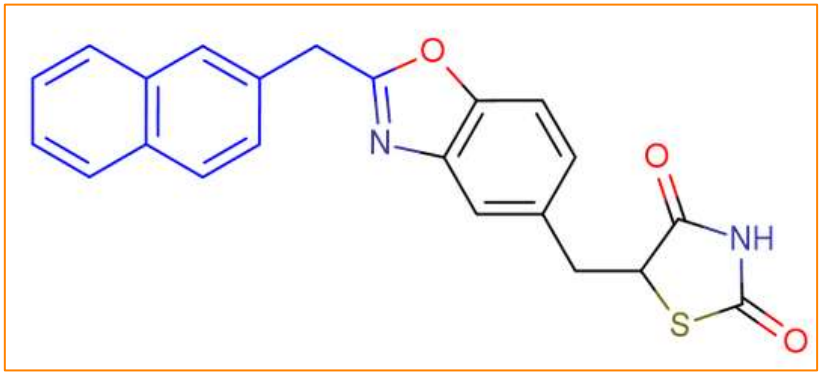
Tips：

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





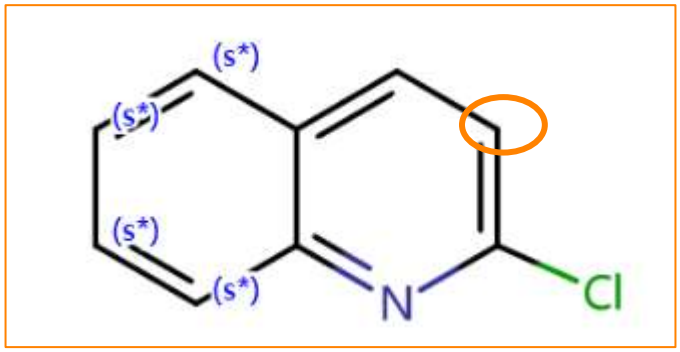


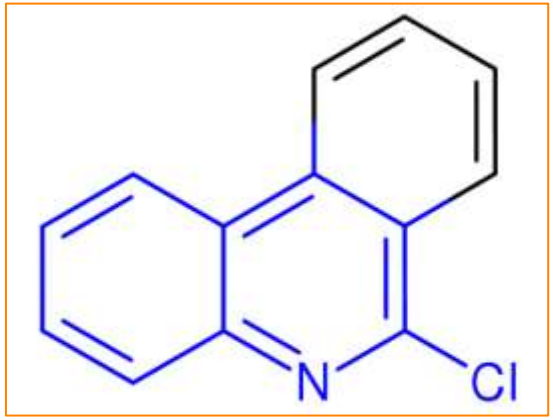
Tips：

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

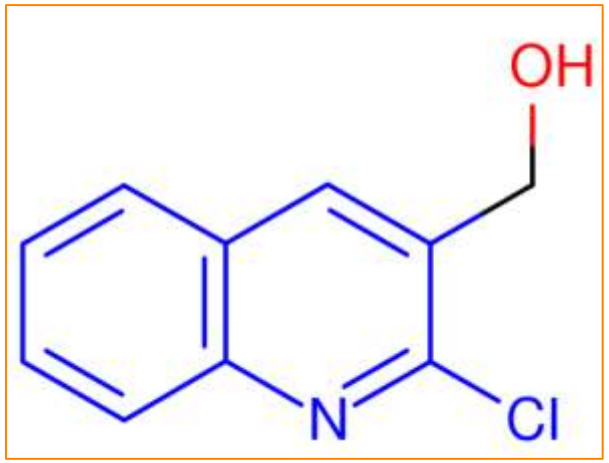
- 定义，在环上的原子，定义rb*后，在进行亚结构检索时，只能是链取代，不能在发生环融合



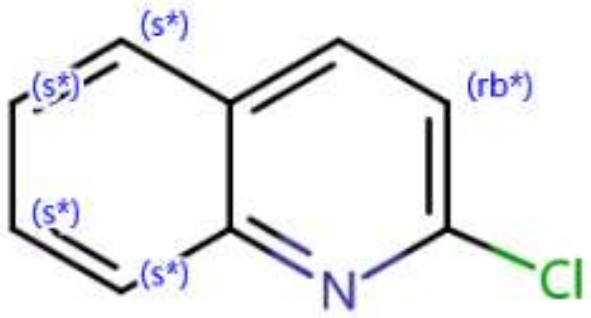


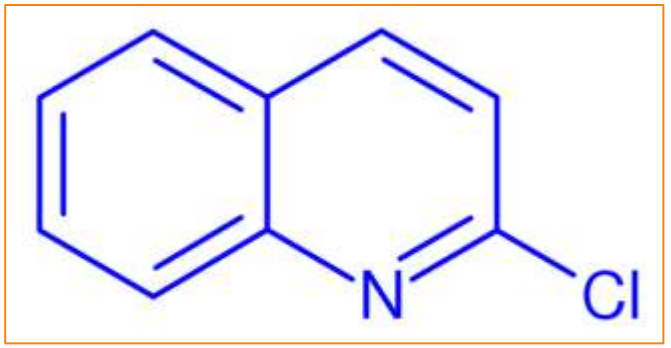
Tips：

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*……

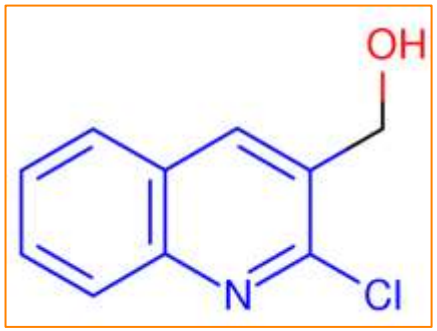


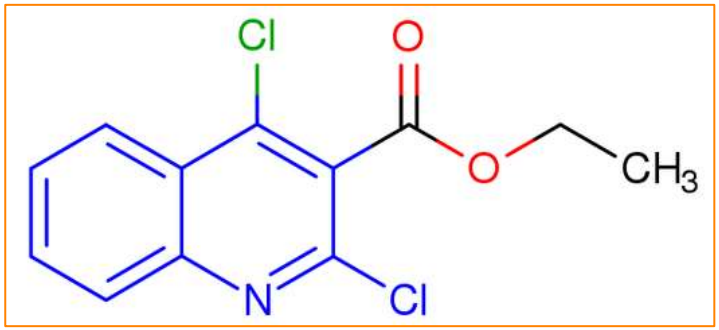
rb*功能—续

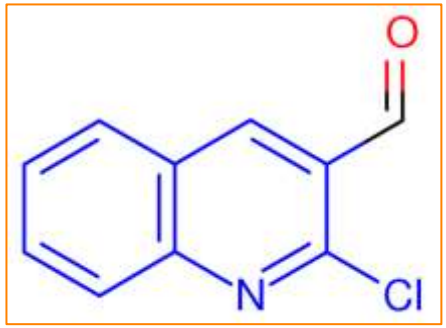




所有在标记位点上在融合成环结构全部去掉

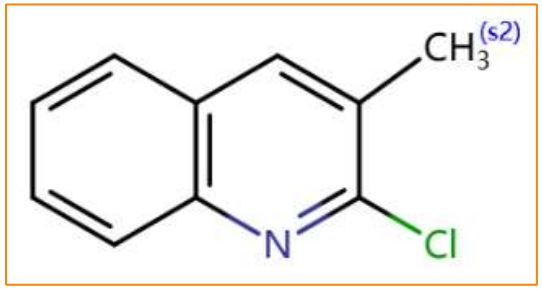


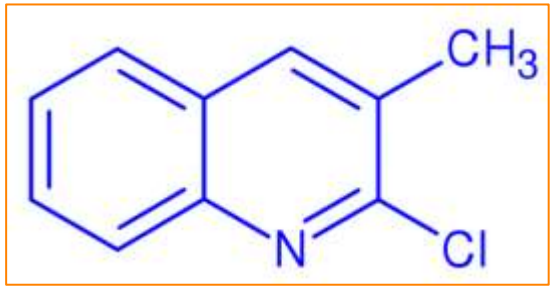


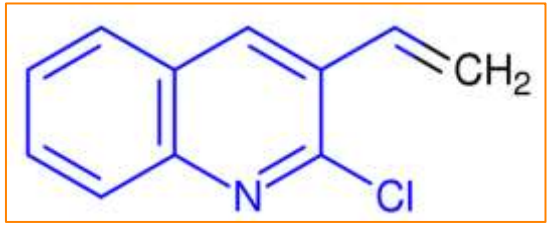


S+/S-功能

- 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。





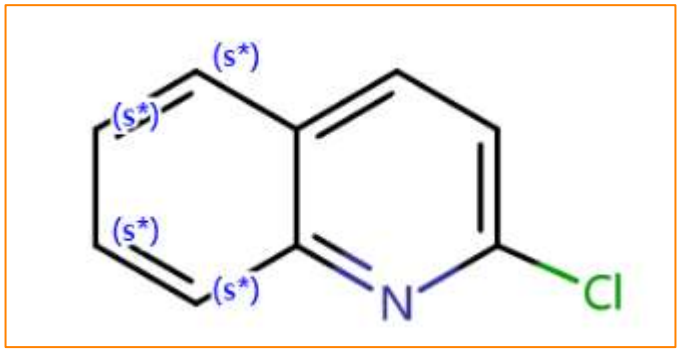


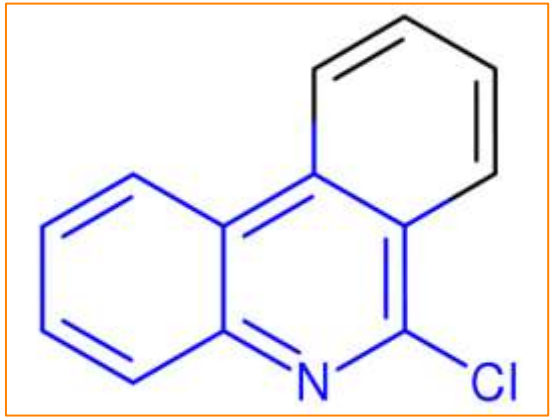
Tips：

1. As Draw中有效，亚结构无效
2. 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

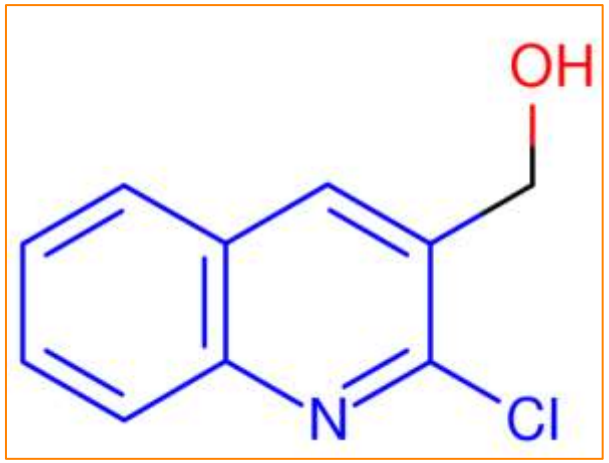
- 定义：在进行亚结构检索的时候，被标记的原子处于封闭状态





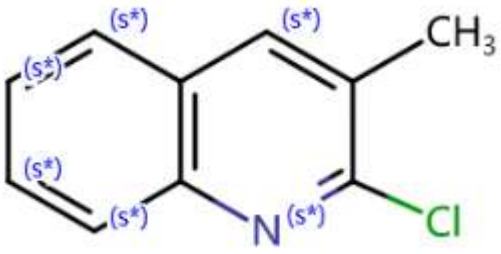
Tips：

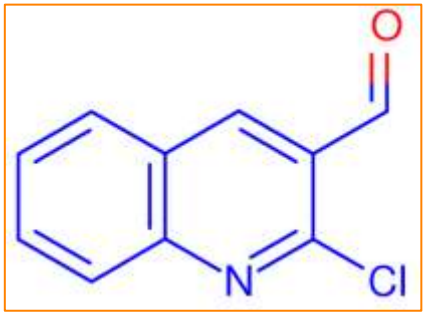
1. 亚结构中有效
2. 这是用Substructure做的检索，可以看到标记的4个C原子在进行检索时都没有取代发生

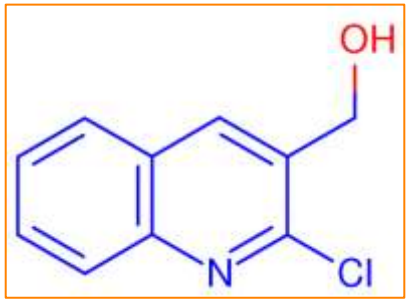


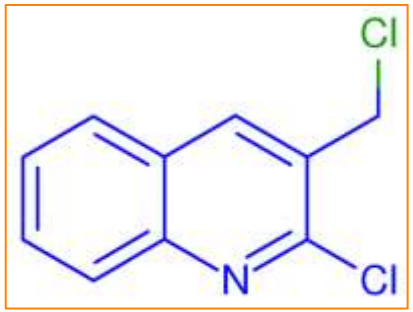
U功能

- 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





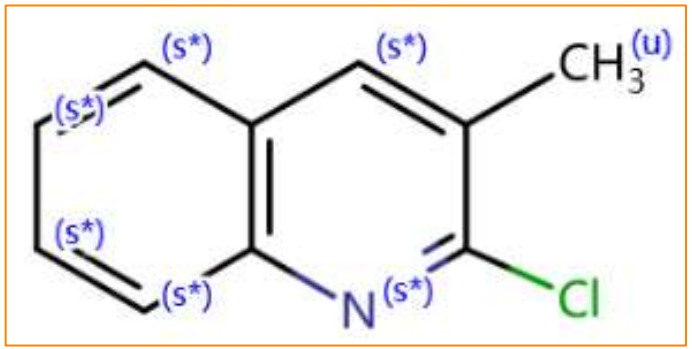


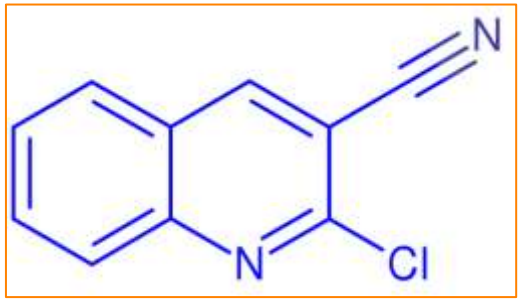


Tips：

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CH3

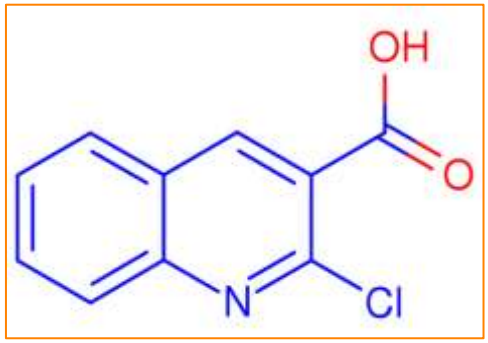
U功能—续





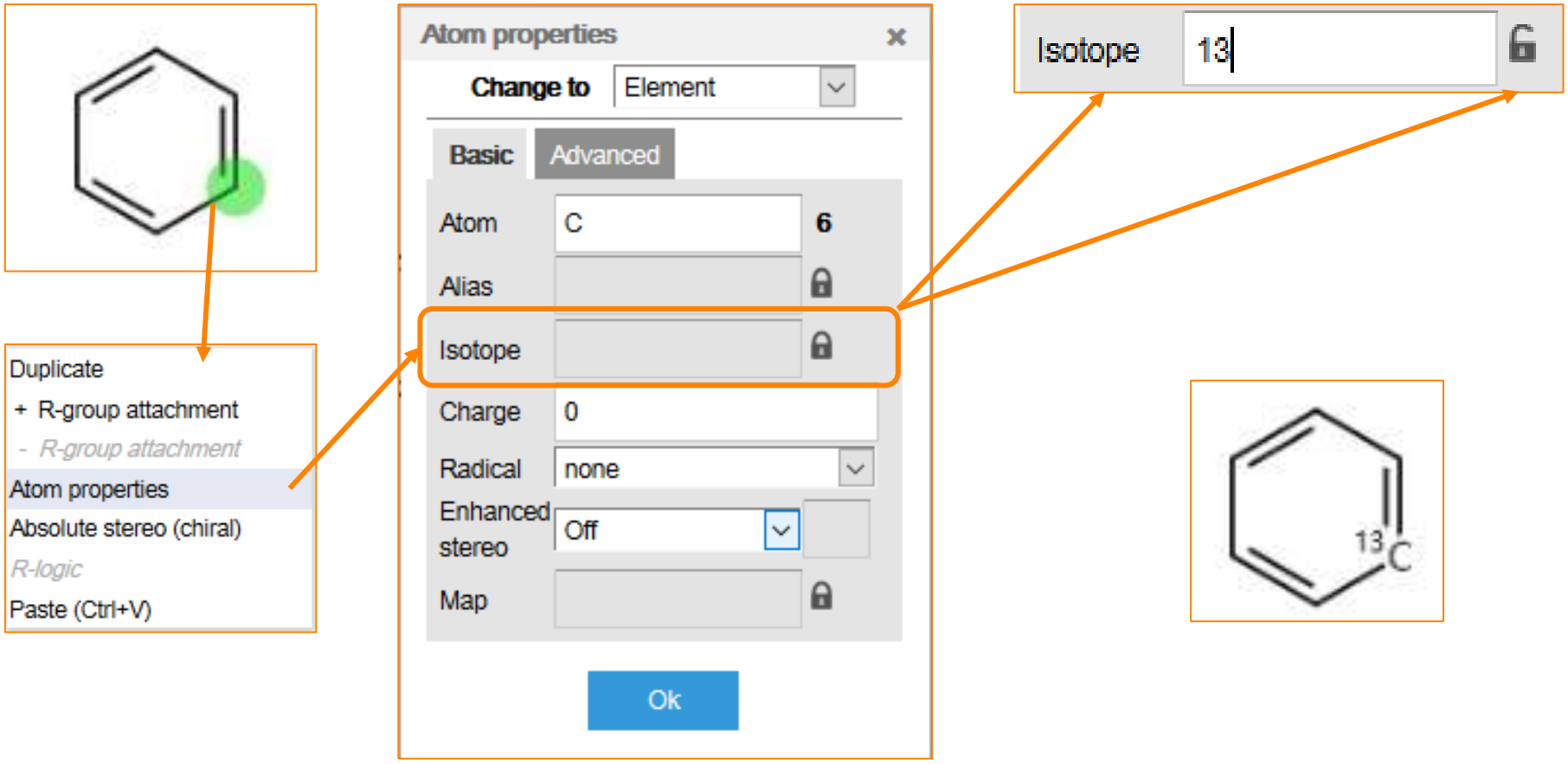
Tips：

1. 标记上U后，这个CH3上的取代，C上必须存在不饱和键



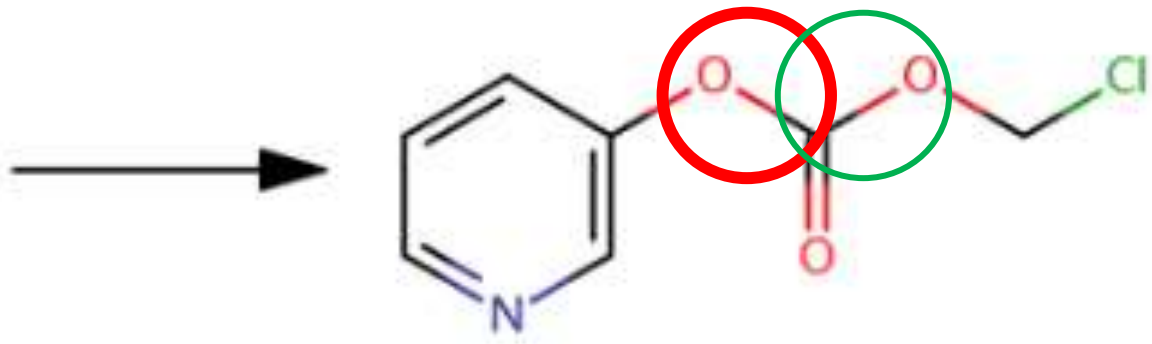
Part F：右键的使用—原子右键的重要功能

- 原子右键的使用，定义同位素



Part F：右键的使用—化学键右键的重要功能

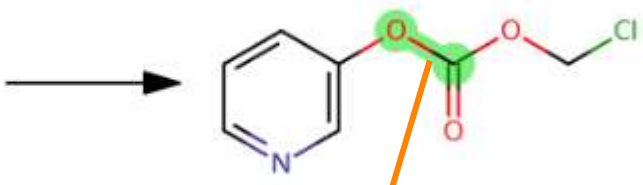
- 化学键右键的使用，定义反应中心

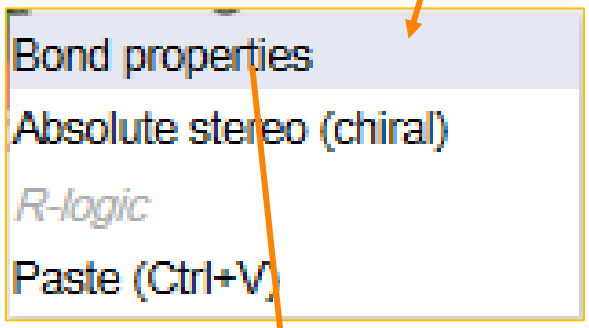


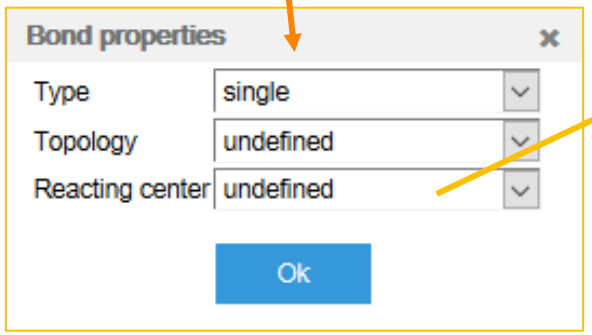
Tips:

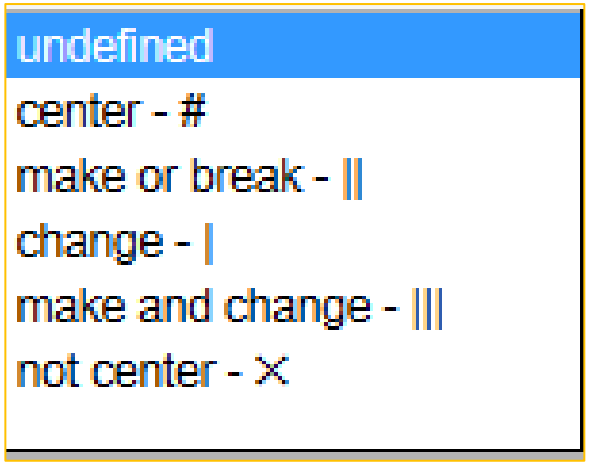
1. 对于这个化合物的合成，可以将结构拆成2个部分，理论上可以从红色和绿色两个部分进行拆分
2. 如果一定要是从红色部分拆分，如何定义

反应中心的定义







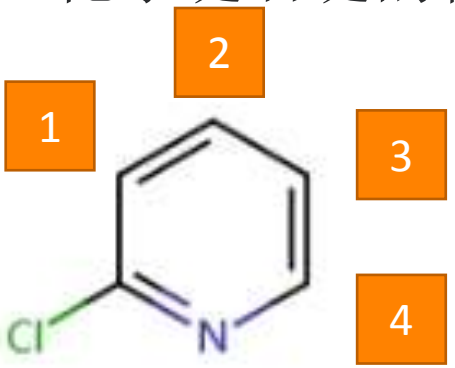


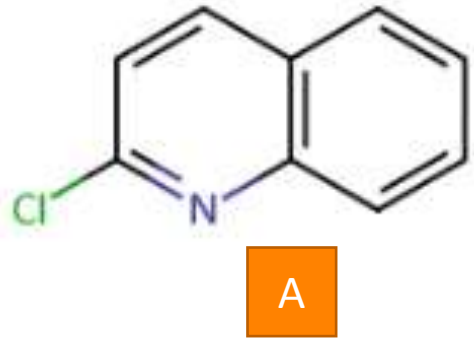
Tips:

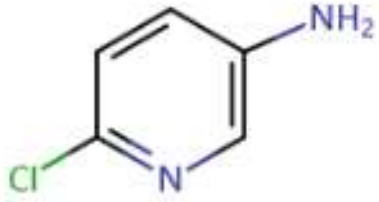
Center:	反应中心
Make or Break:	生成或断裂
Change:	变化
Make and Change:	生成和变化
Not Center:	不是反应中心

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

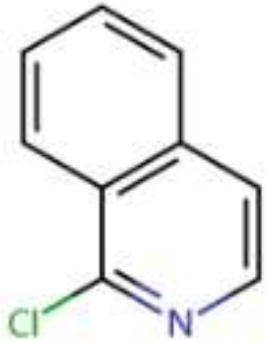


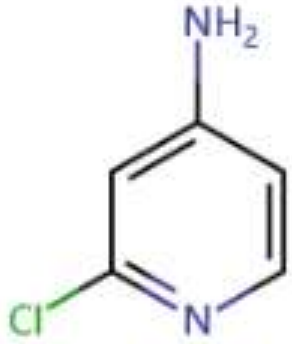




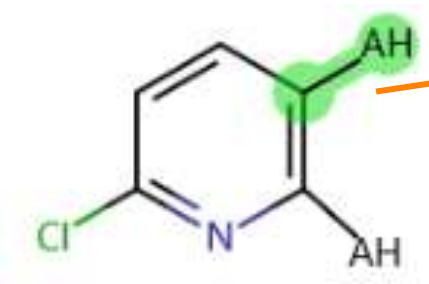
思考：

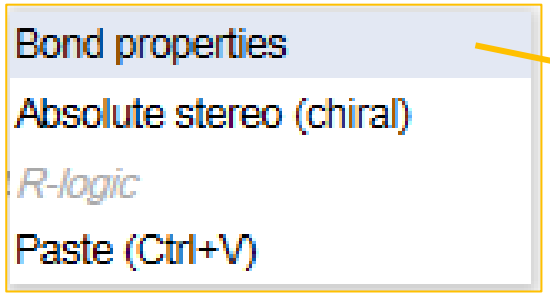
1. 使用As Substructure检索吡啶氯可以获得右侧所有结构
2. 但是如何实现，3，4位点上不发生稠环的检索，即A结构不允许检索到，但其他3个结构可以

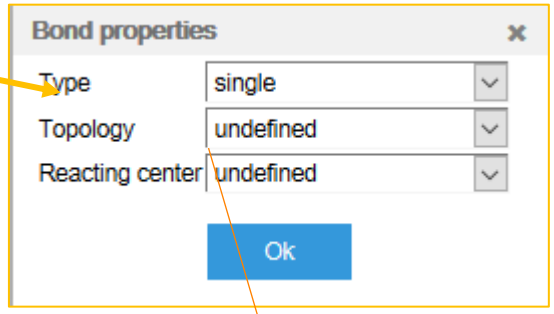




键的属性定义

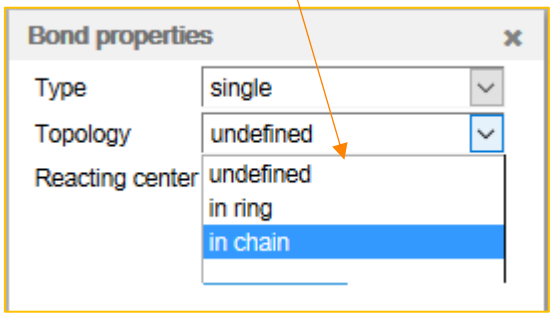






Tips：

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



Thank you!

刘佳

Elsevier生命科学解决方案经理

M: 86-133 0107 0662

e.liu.1@elsevier.com