

使用指南



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

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



数据



技术



专业知识

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。

Your IP: 202.60.226.217

Create account

First Name

Last Name

Email address

Password

Confirm password

☒

Remember me on this computer
(Do not use on a shared computer!)

☐ Stay informed about Elsevier products and services

☐ I have read and agree to the [Registered User Agreement](#)

Register >

Privacy Policy

Terms and Conditions

个人设置

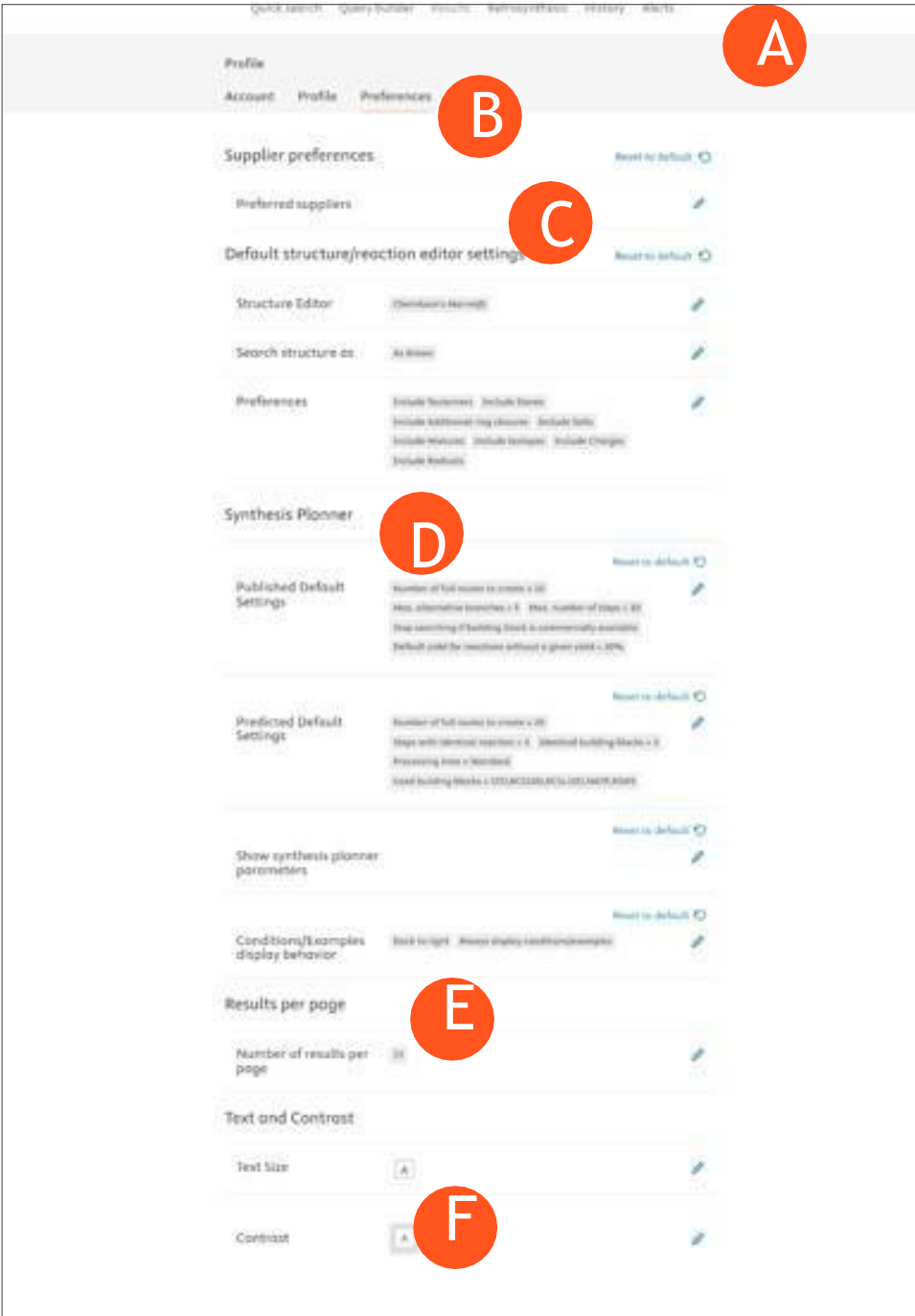
根据您的研发工作流程定制 Reaxys。登录以自定义 Reaxys 设置，包括结构编辑器、合成计划、结果展示和辅助功能选项。

- 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。

- 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。



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。



主页导览

开始您的检索，查找关键数据并加速发现。

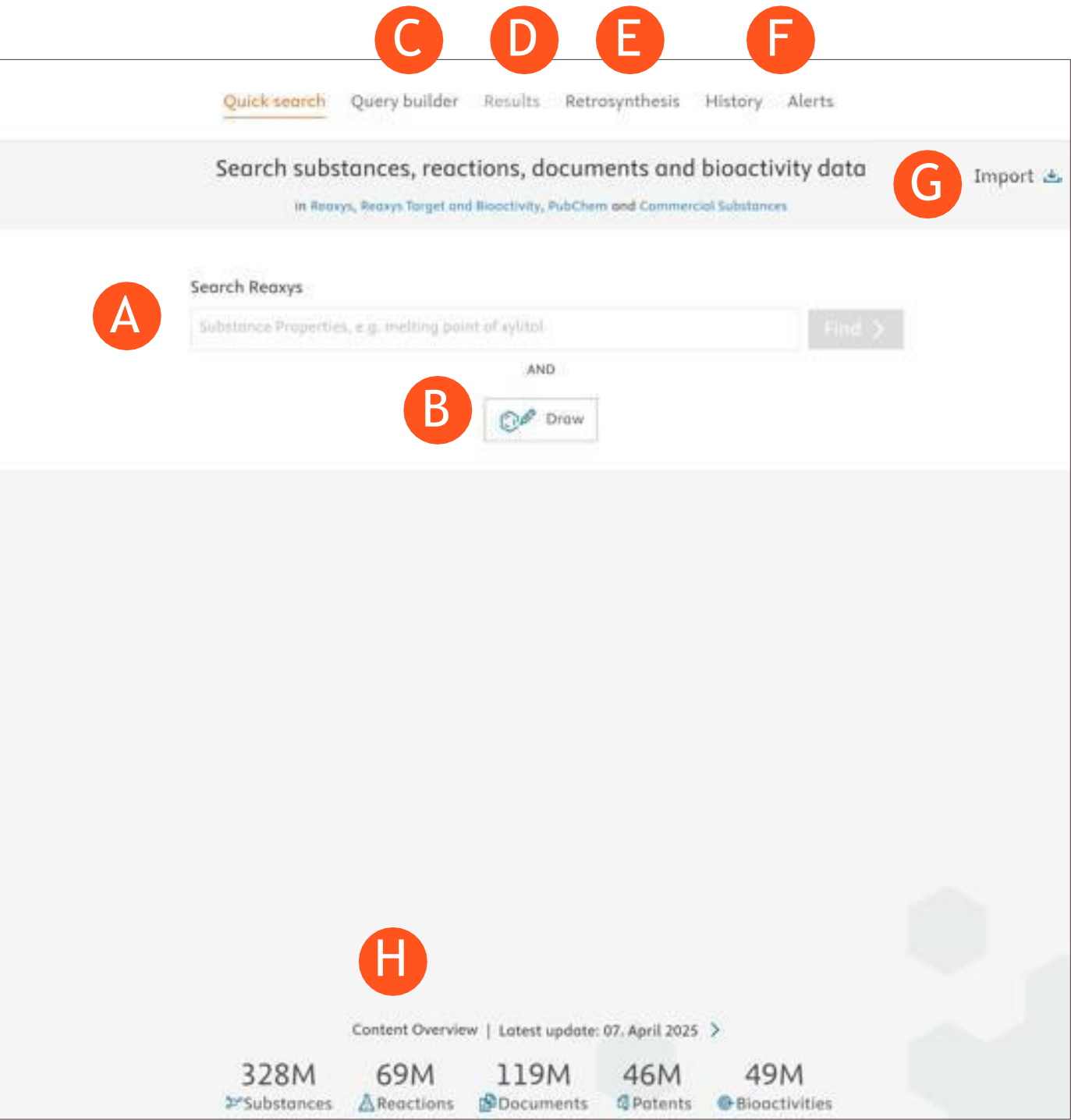
- A. 快速检索：查找物质、反应、专利和文献。
- B. 结构检索：绘制分子（Marvin JS, ChemDraw JS）。
- C. 查询构建器：使用理化性质、谱图、生物活性、专利等字段和布尔运算符组合构建检索。



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

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。

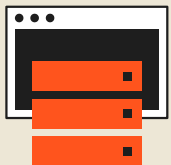


Query Builder

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

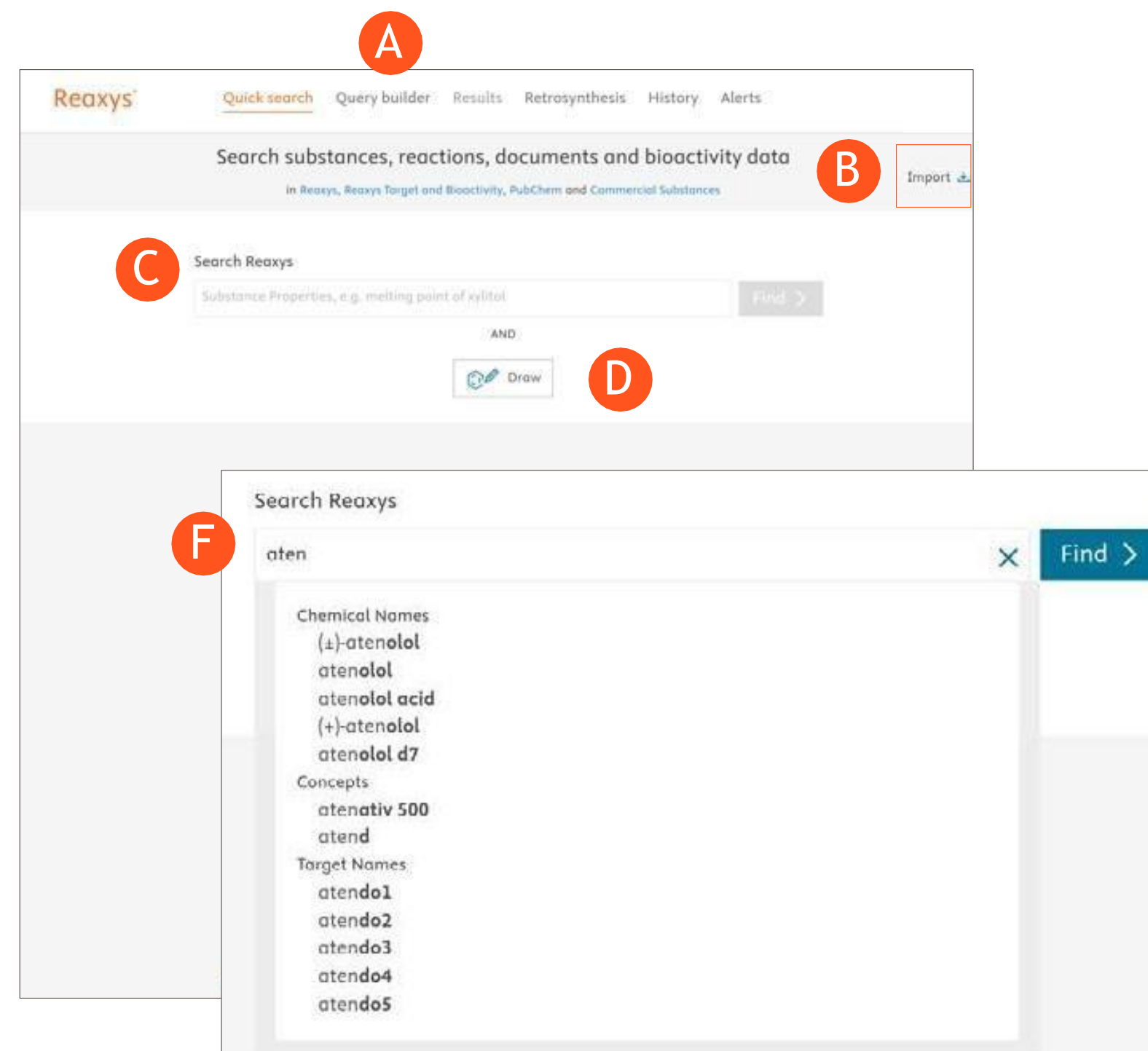
利用AI 计算和已发表的合成路线，以加速成果产出。

- 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。](#)

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）。

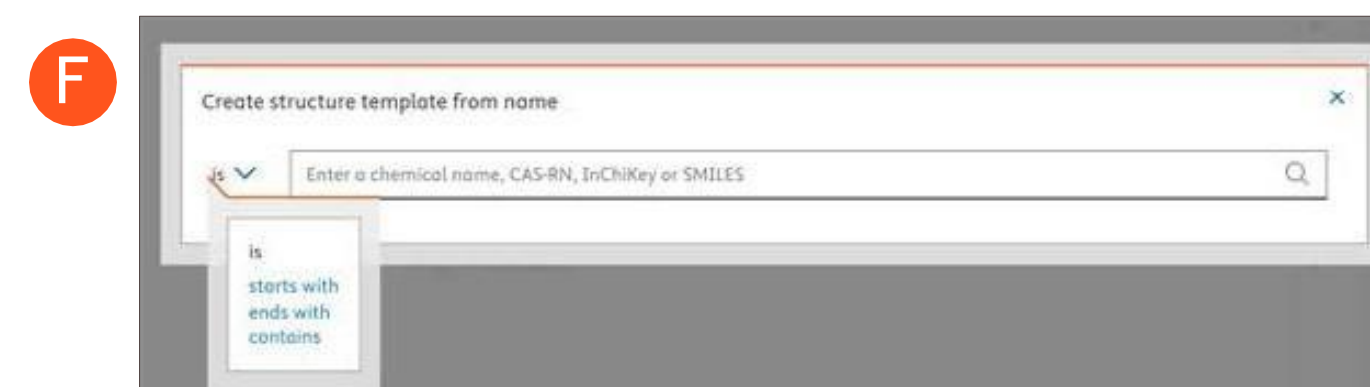
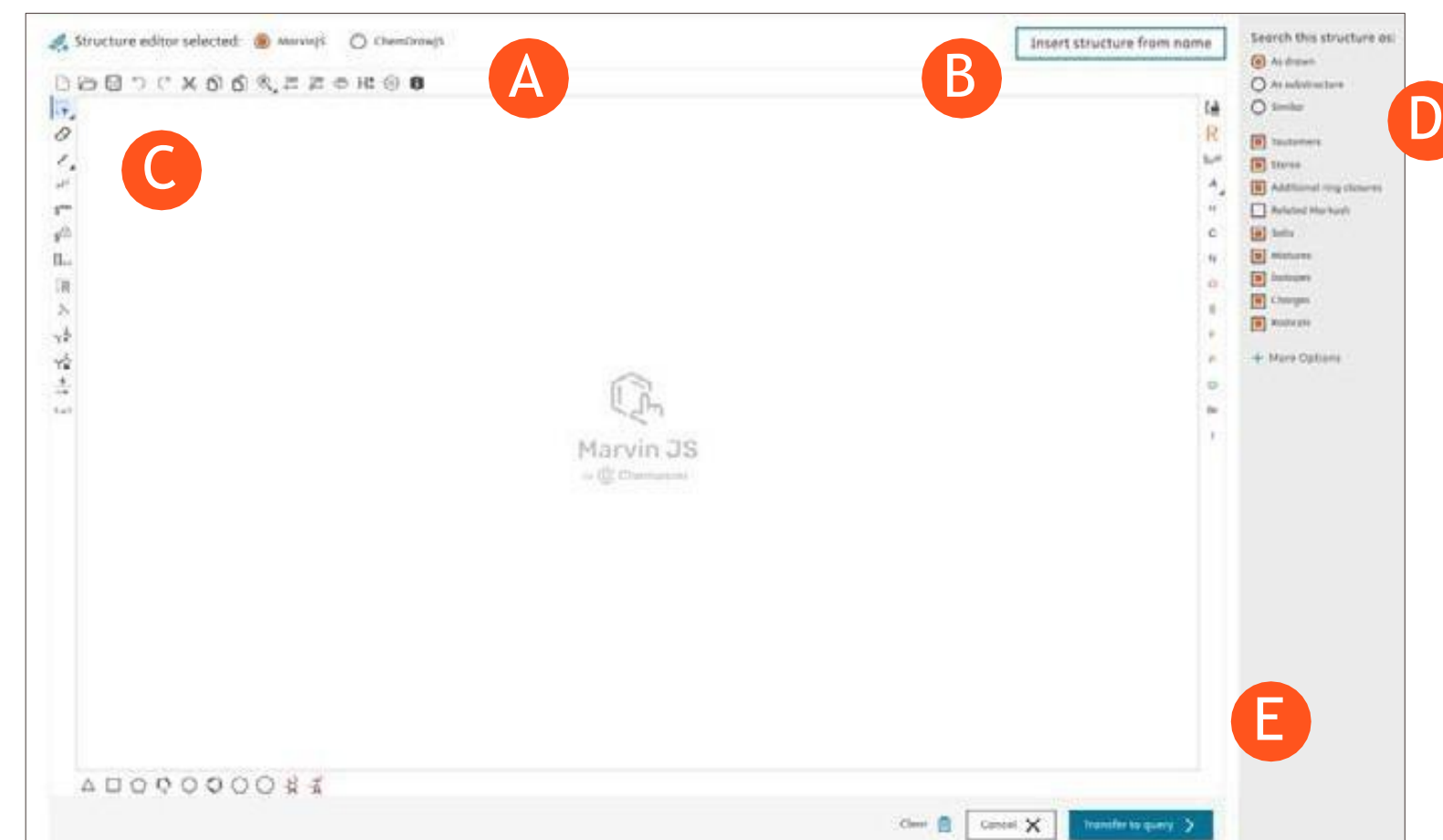
B. 从名称插入结构：输入化学品名称、CAS- RN、InChiKey 或 SMILES 以自动生成结构（见 F）。

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。

Quick search

Query builder

Results

Retrosynthesis

History

Alerts

Results for "her2" AND

New Edit

2

Targets

Structure: as drawn

Target(s): her2

Edit in Query Builder Create Alert

1

Substances

Structure: as drawn

Target(s): her2

Edit in Query Builder Create Alert

11

Documents

Structure: as drawn

Titles, Abstracts, Keywords: "her2"

Preview Results View Results

149

44,116

6

174,964

2

44,116

Substances

Target(s): her2

Edit in Query Builder Create Alert

Preview Results View Results

Top 3 results

cis-Octadecenoic acid

C17H33CH=CH(COOH)

282.487 1726542 11240-1

Identification

Physical Data - 791

Preparations - 138

Druglikeness

Spectra - 206

Reactions - 4,419

Bioactivity (Hit Data)

Other Data - 1,426

Targets - 275

Bioactivity (All)

Documents - 76,708

quercetin

O=C1C2=C(C(=C1)O)C(=C(C=C2)O)C3=C(C(=C(C=C3)O)O)O

302.24 117311 117-39-6

Identification

Physical Data - 1,268

Preparations - 208

Druglikeness

Spectra - 1,938

Reactions - 1,634

Bioactivity (Hit Data)

Other Data - 5,219

Targets - 1,596

Bioactivity (All)

Documents - 67,513

doxorubicin

C22H26N2O11

343.327 8993814 23219-92-8

Identification

Physical Data - 343

Preparations - 92

Druglikeness

Spectra - 356

Reactions - 514

Bioactivity (Hit Data)

Other Data - 8,932

Targets - 773

Bioactivity (All)

Documents - 59,823

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。

[返回目录页](#)

12

结果

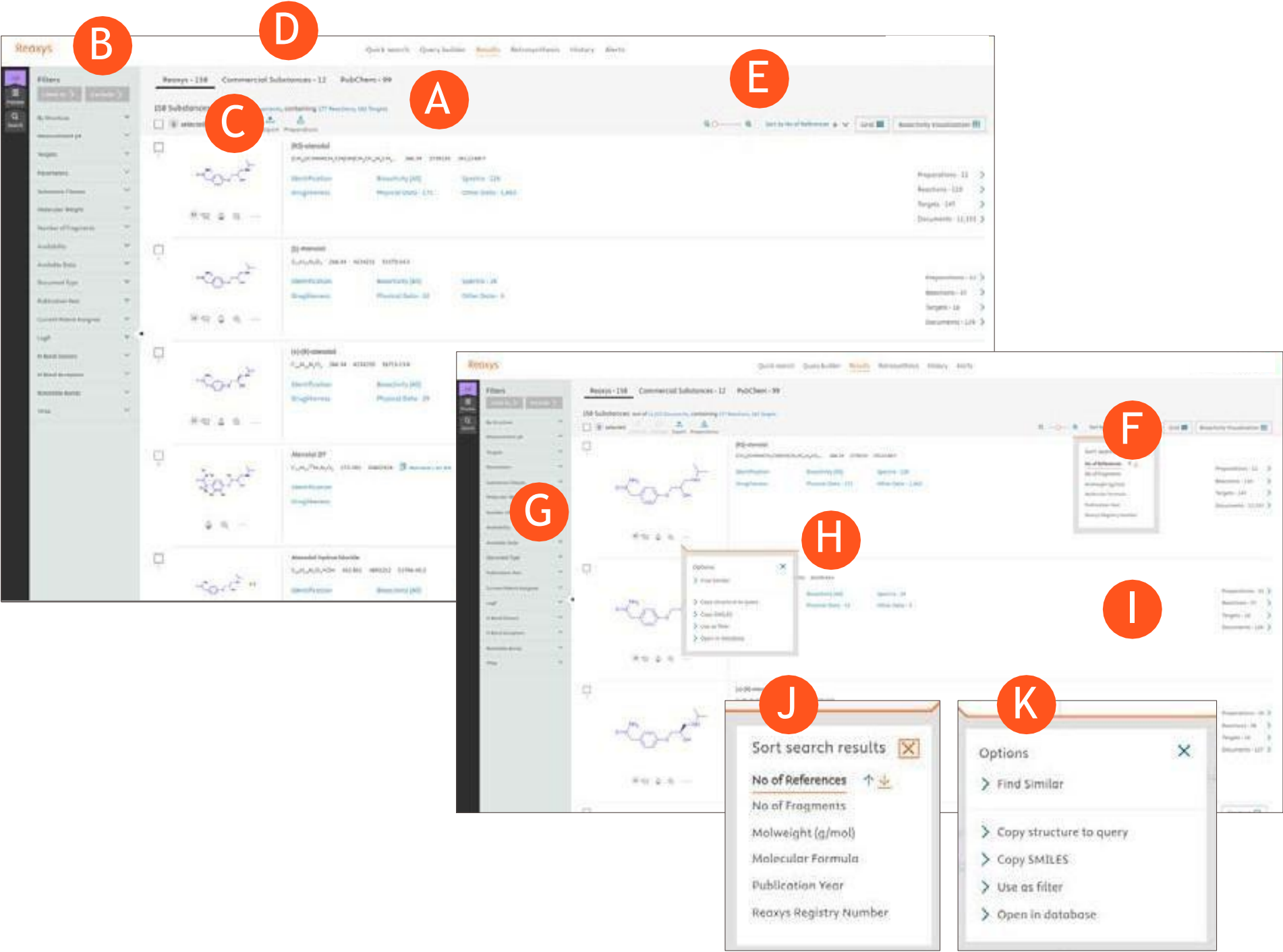
- A. 导航类别：在结果类型之间切换。
- B. 应用筛选器：使用限制或排除（Limit or Exclude）筛选器来优化检索结果。
- C. 导出数据：打开导出对话框以提取数据集。
- D. 更改数据集范围：使用下拉菜单在 Reaxys 数据集 和其他数据集之间切换。



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。

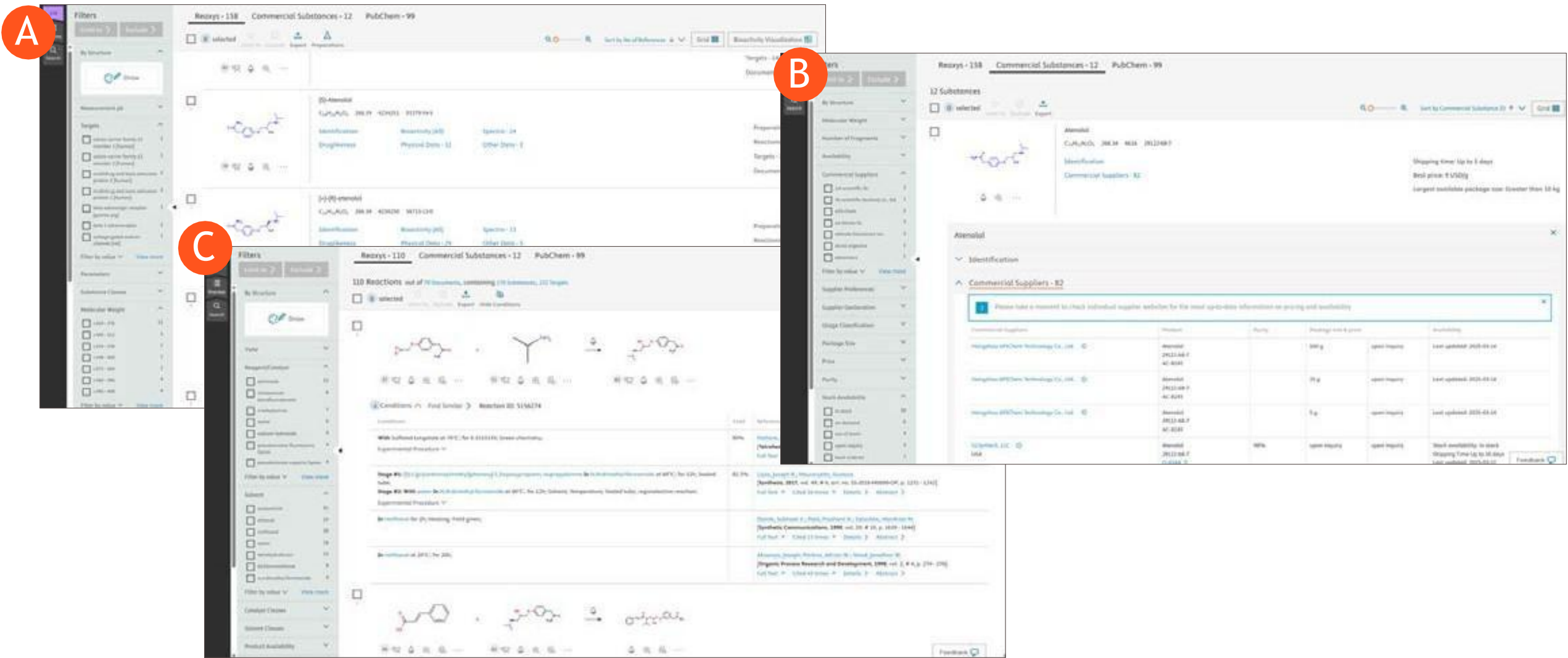
在进行实验之前，使用基于结构的分析识别出关键性质和合成可行性。

- 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。



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。

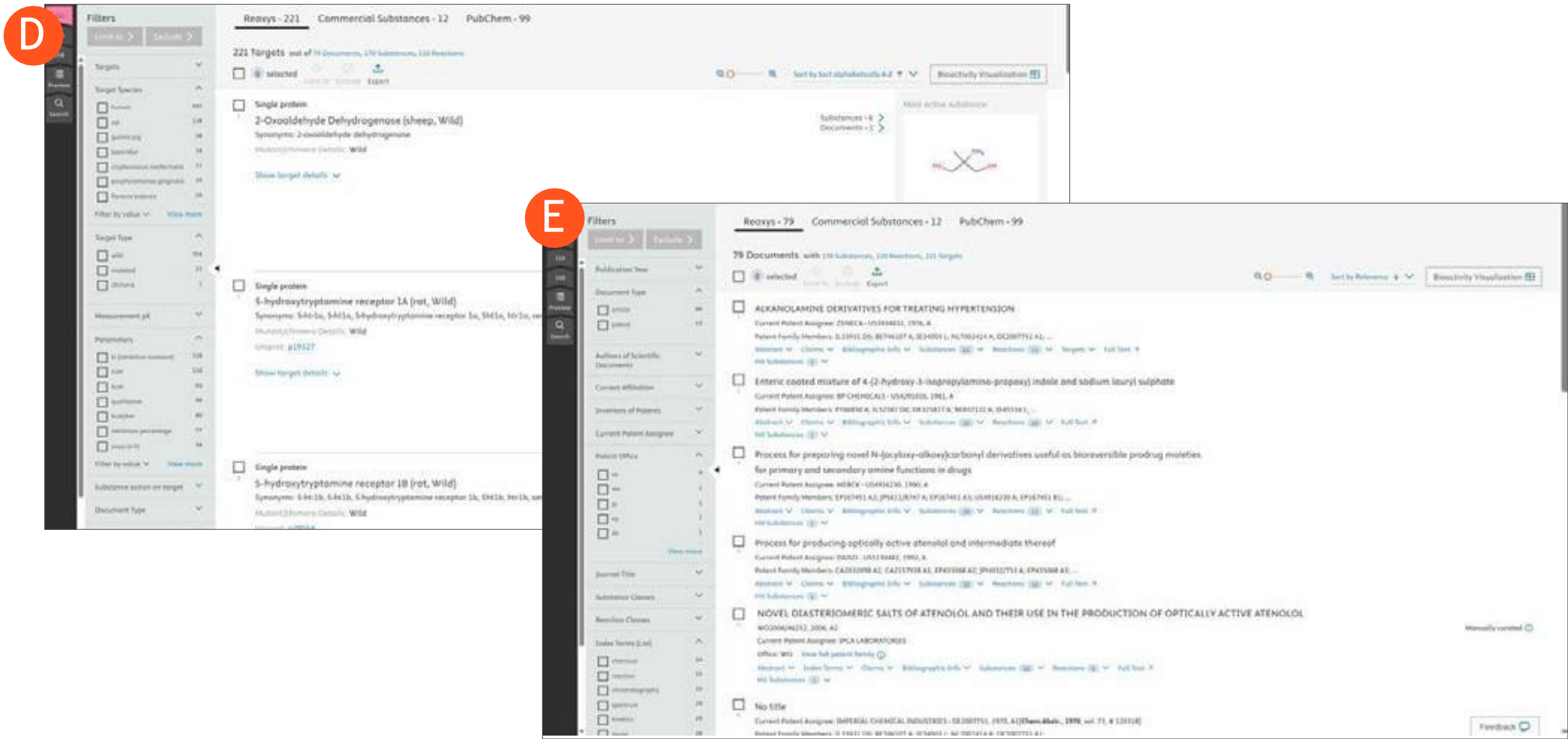


专业提示：**可持续性筛选** – 通过筛选出绿色化学反应和材料，以支持可持续研究。



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

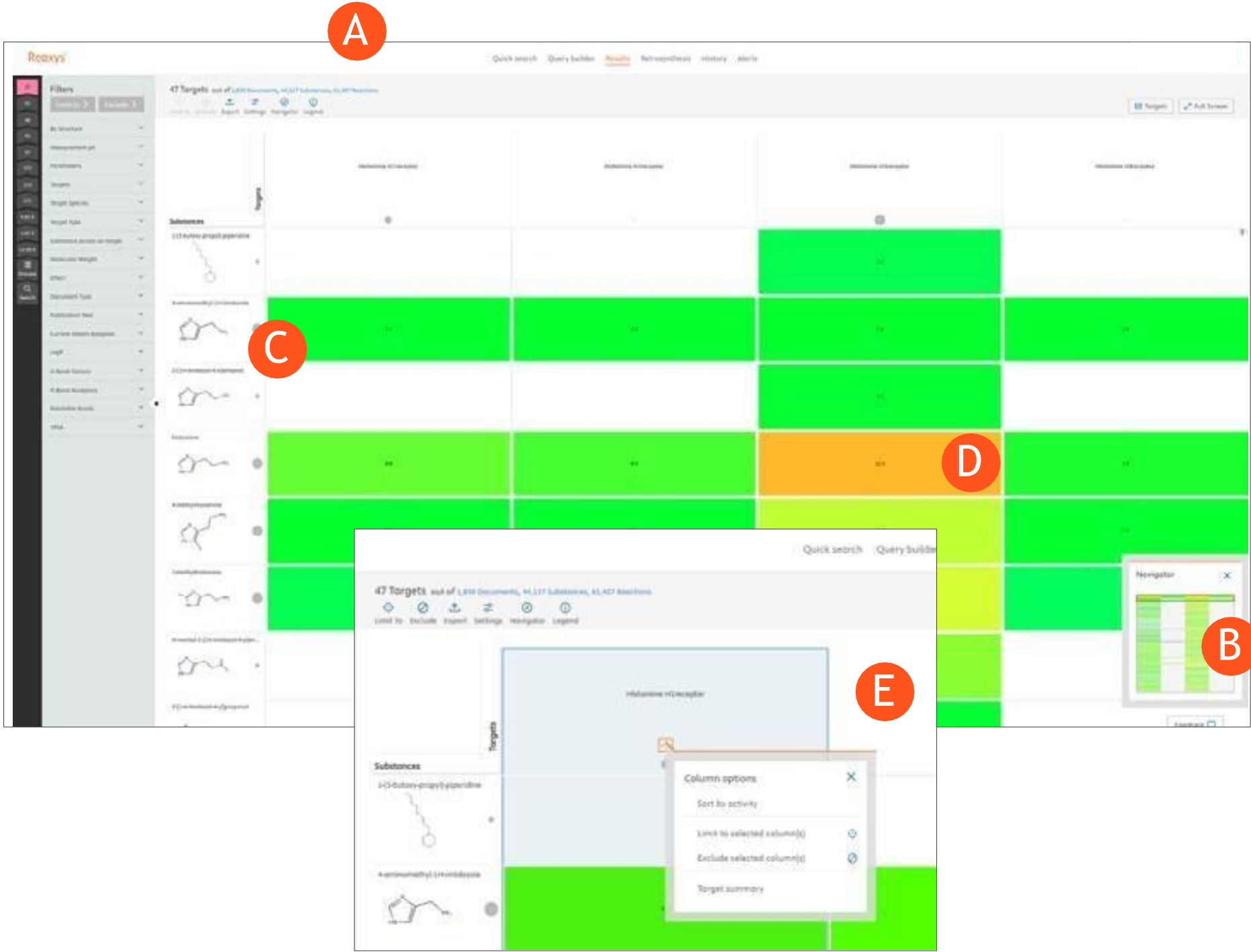
使用“Bioactivity Visualization”功能**可视化生物活性特征**，以评估结构活性关系（SAR）、化合物效力和靶点选择性。在归一化 px 值的支持下，交互式矩阵显示了物质和靶点的生物活性强度。使用导出、设置、导航器和图例自定义视图和提取数据。导出 px 值以进行分析、共享或报告，特别适用于跨靶点比较或识别SAR趋势。



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。

Create Alert

Query: Quick Search: "gpcr"

Alert name: Name GPCR

Send alerts to:

Frequency: Every week on: Wednesday

Send alert: Upon first appearance in the database

☐ Do not send alerts with zero results

ADVANCED ALERT CONTENT:

From databases: Reaxys

Include in email:

Title and bibliographic information

Abstract

Full abstract

Partial abstract

Hit details (keywords, substances, reactions or targets)

Email alerts will produce an email with a maximum of 99 records.

Cancel

Create

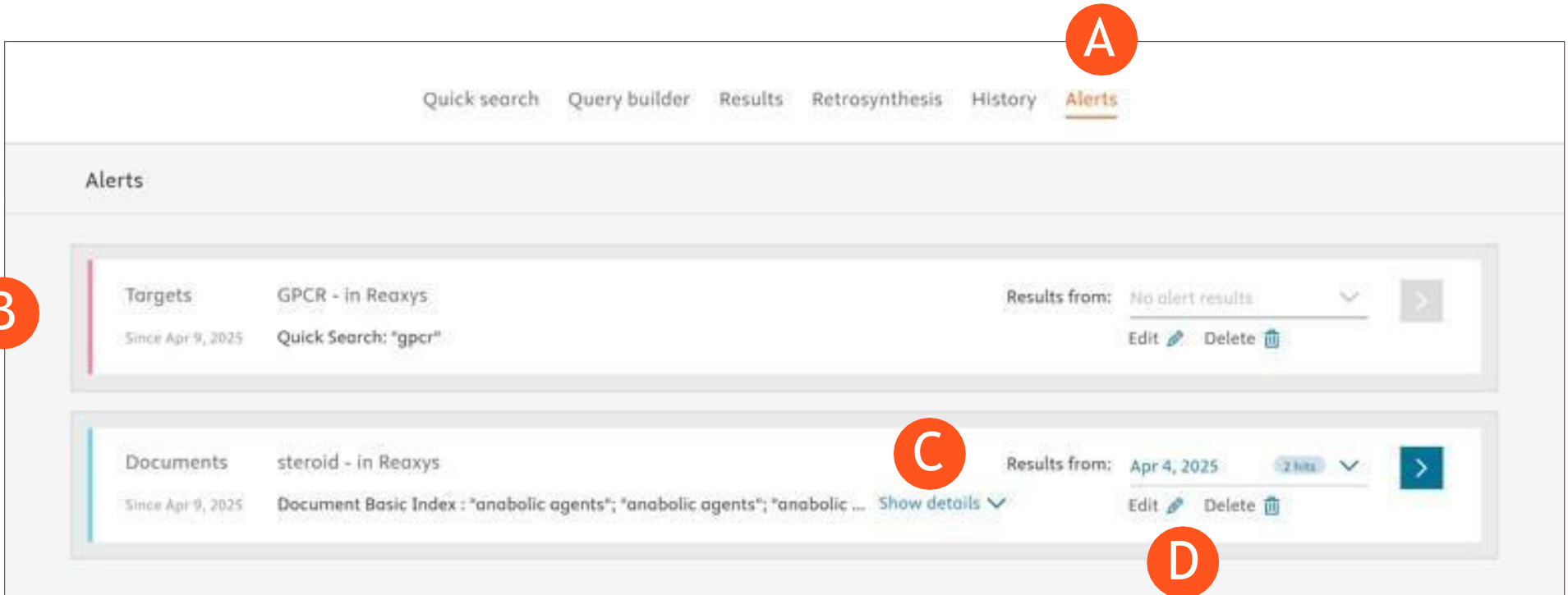
结果：管理提醒

- 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。

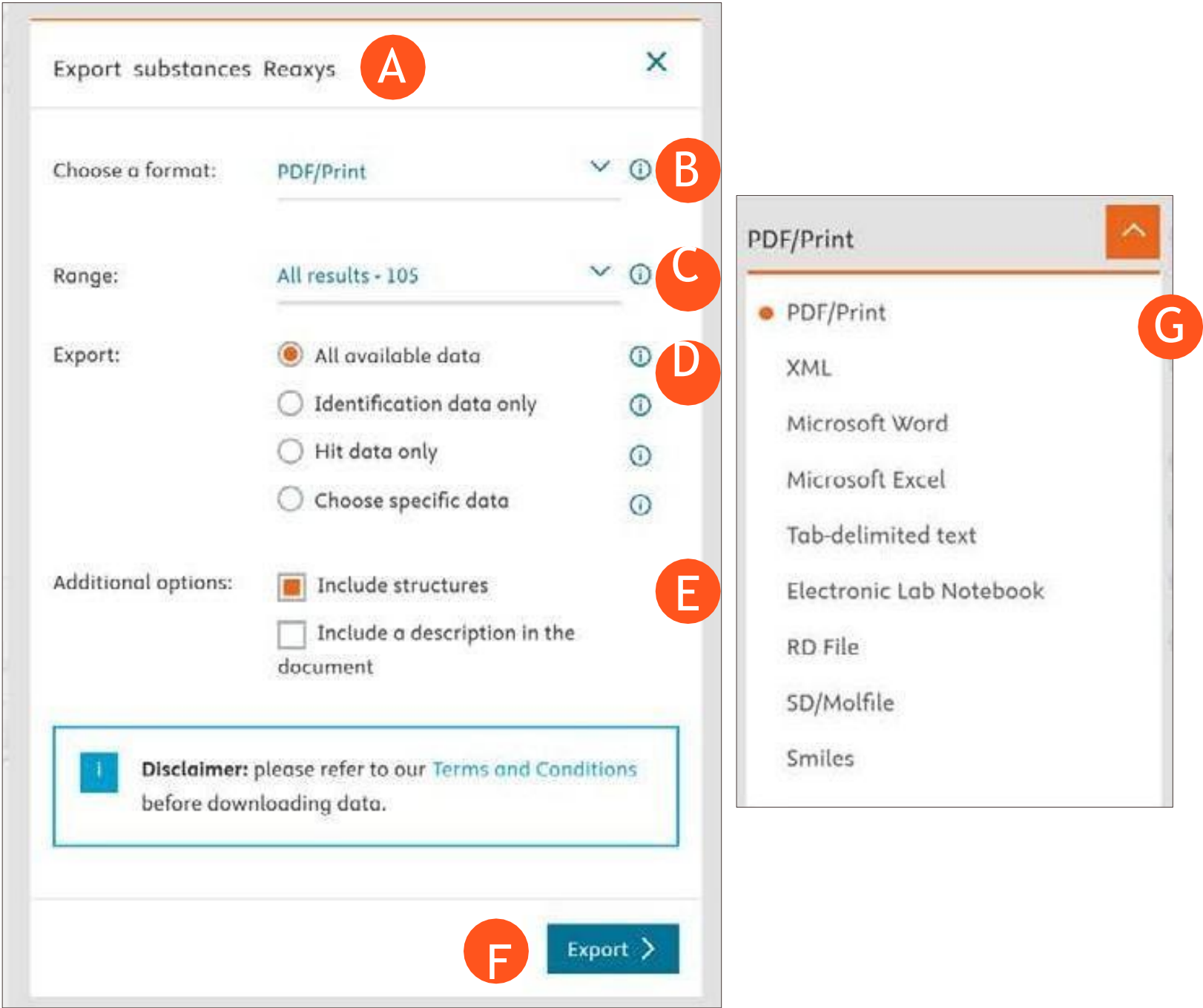
D. 选择要导出的数据：选择所有数据、标识数据、命中数据或特定字段。

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

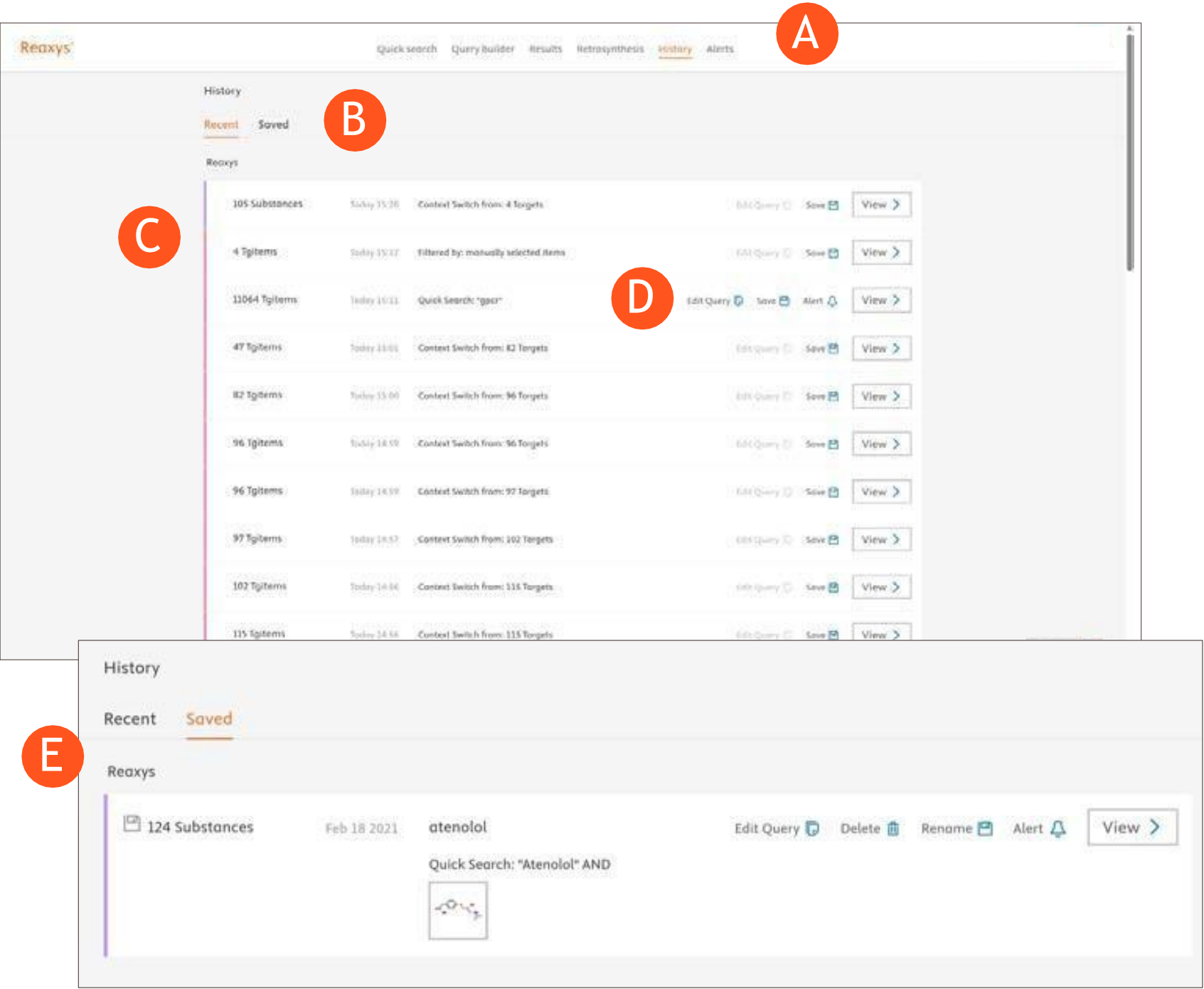
- A. 历史选项卡： 点击"历史"以访问最近和已保存的检索。

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。

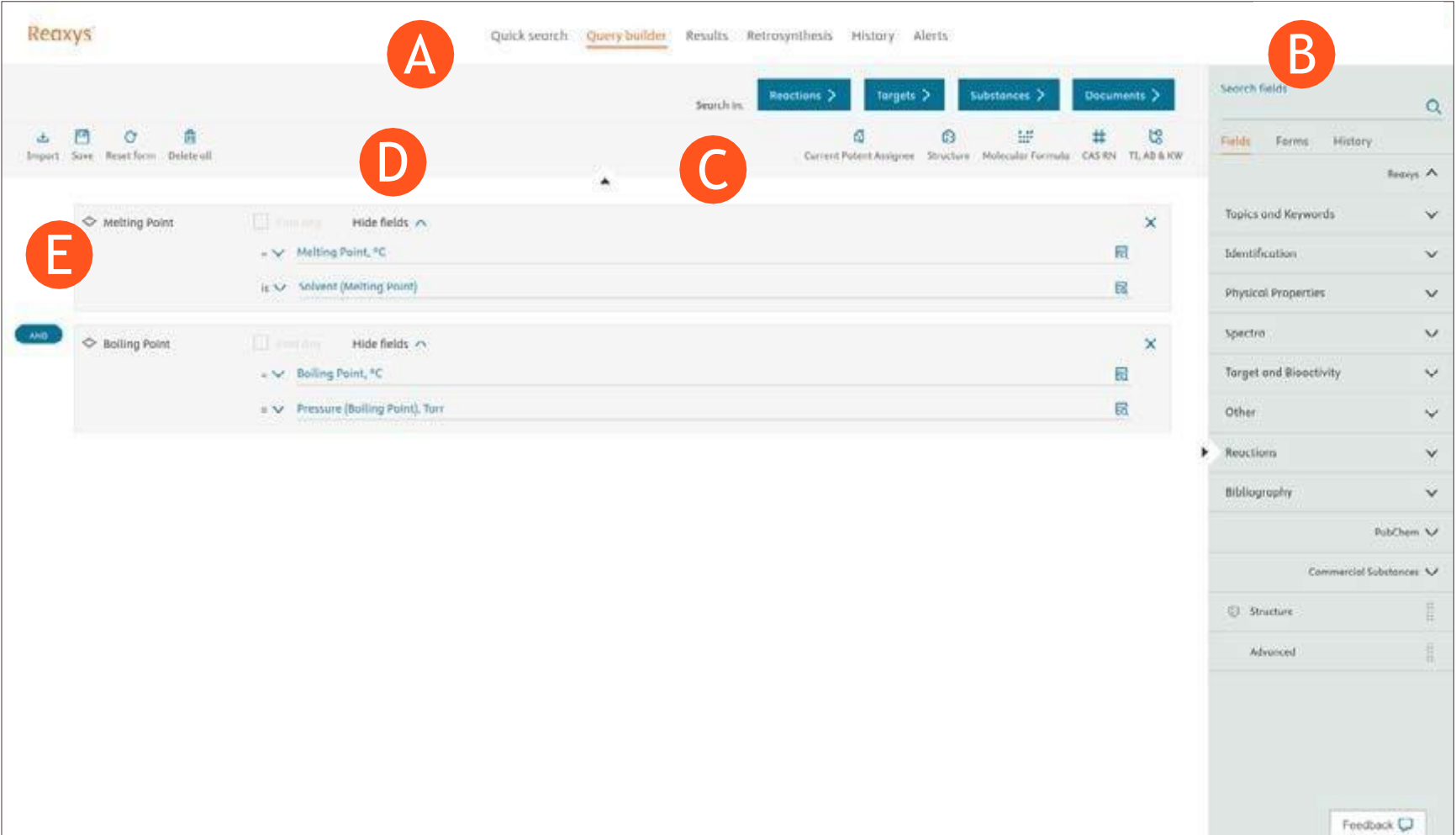
查询构建器

- 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。

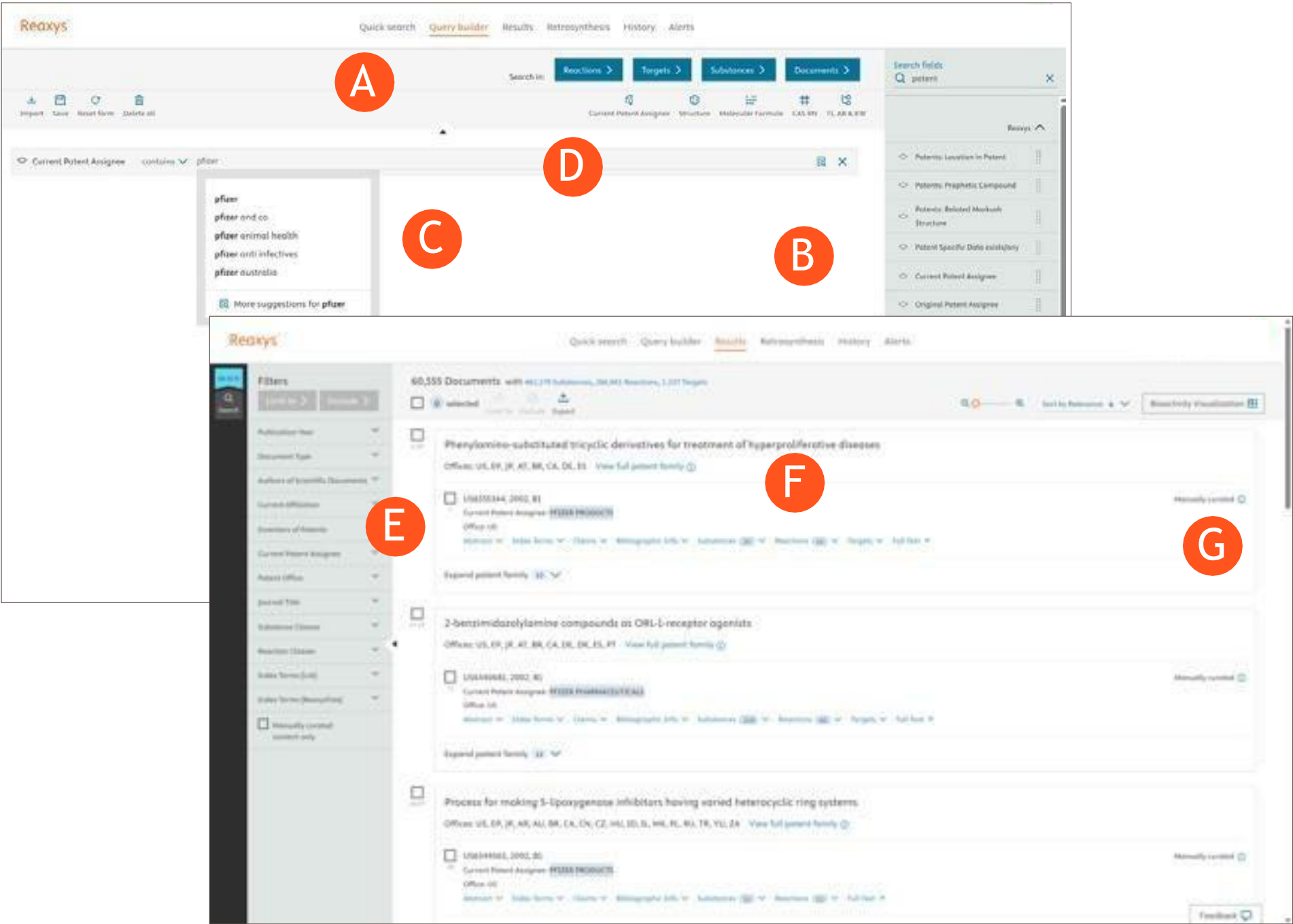


专业提示：结合专利受让人、生物活性和合成字段，加速发现未被专利声明的高效可合成化合物，帮助您解锁新颖的、准备就绪的创新机会。

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。

The screenshot illustrates the Reaxys interface for synthesis analysis. The main window shows a chemical structure of a complex molecule. A sidebar on the right contains parameters for the synthesis query, including 'Predicted' and 'Published' routes. A bottom panel shows a list of projects, with one project selected and its details displayed in a pop-up window. Red circles A through E highlight key features: A points to the 'Synthesis' button, B points to the 'Parameters' sidebar, C points to the 'Predicted' route selection, D points to the project list, and E points to the project details pop-up.



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。

Reaxys

Quick searchQuery builderResultsRetrosynthesisHistoryAlerts

ExportLegend

Published route #2

Step 1Step 2

0 selectedView selected

ConditionsYieldReference

Stage #1: C₁₅H₁₇NO₁₃ with sodium hydroxide in aq. phosphate buffer; water at 37°C; for 3h; pH=8 - 10, Darkness.

Stage #2: In aq. phosphate buffer at 25°C; for 5h; pH 6-6.5; Temperature: pH-value; Time; Darkness.

Experimental Procedure

Full TextDetails

77 %Spectr.

Current Patent assignee: RESEARCH FOUNDATION OF STATE UNIVERSITY OF NEW YORK MISC - US2021/138592, 2021, A1

Location in patent: Paragraphs: 0165; 0267-0269; 0274-0277; 0352; 0354-0356

2 HPLC Assay of Dox Release from DMA Prodrugs 7/4/6 at Different pH Values.

Release of Dox from Dox-DMA 20/h, Dox-DMA-Glu 40/h and Dox-DMA-Cys 80/h were studied at different pH and temperature (25° C. or 37° C.) through monitoring by HPLC condition C (mobile phase at pH 8-9). Various DMA prodrugs of Dox were converted from their corresponding DMI preprodrugs (see general procedure of DMI to DMA conversion section above for more details on DMA solution preparations). The pH of the DMA prodrug solution was adjusted to different pH values in the range of pH 7.4-6.0. Then the solution was allowed to sit at rt (25° C.) or placed in an incubator at 37° C. in the dark for up to a few days (the pH did not change significantly during this time). Release of Dox, consumption of DMA prodrug (μm.) and formation of DMI byproduct were monitored using HPLC condition C (pH 8-9, 480 nm, 5 nmol of c.m. per HPLC run). Representative HPLC traces are shown in FSI FIGS. 5, 26-29 (see these figures and their captions for more detailed information). Areas under the peaks were integrated using the HPLC program LabSolutions Lite to give the percentages reported in FIGS. 24-28.

Feedback

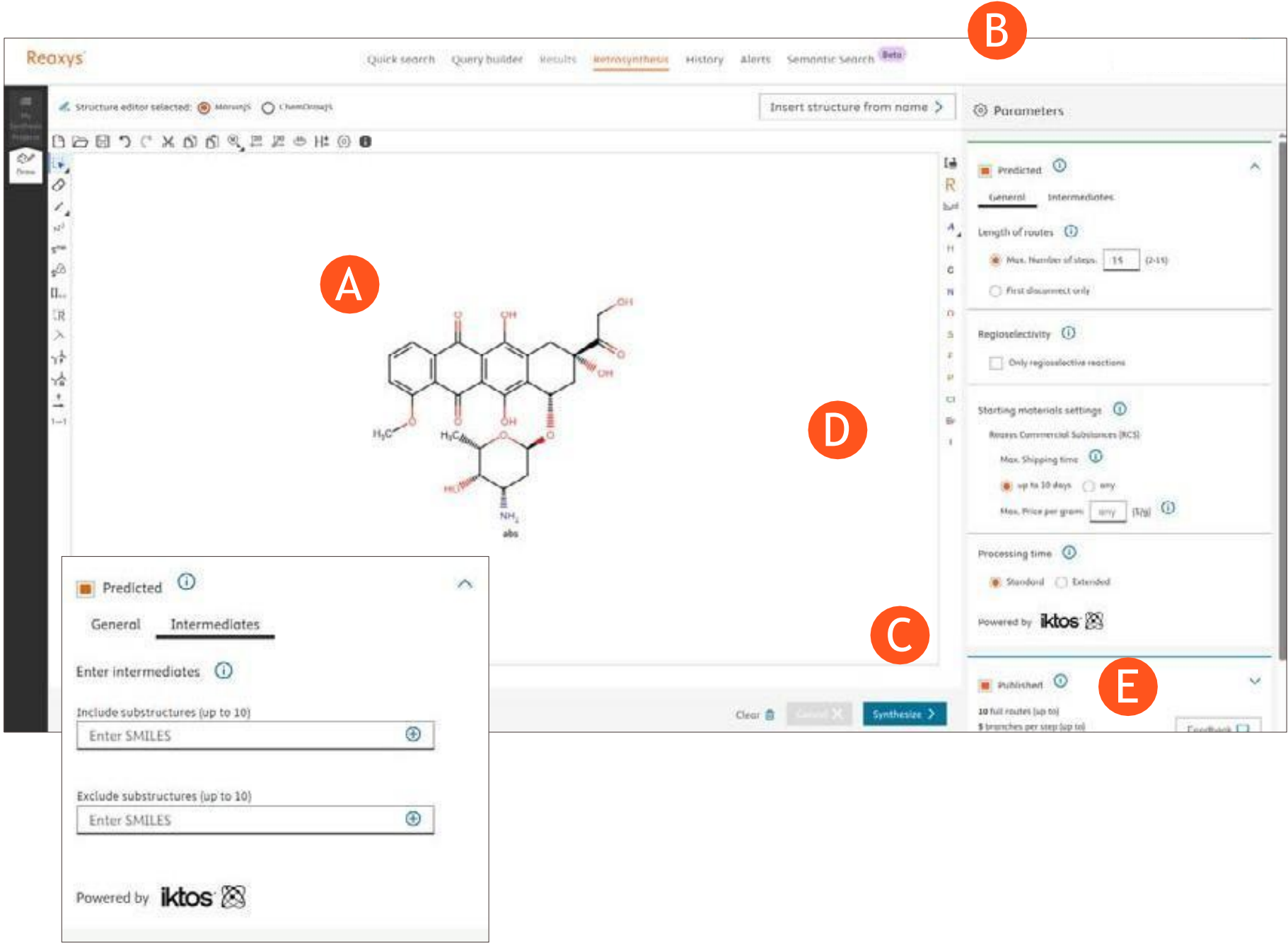
预测逆合成：合成计划

- 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

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。

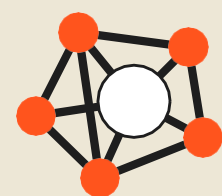


专业提示： 登录以查看最新的 [Reaxys 内容](#) 更新。



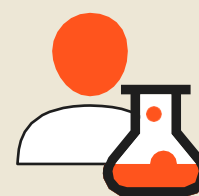
文献

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。

物质

使用经过实验验证的物质设计新分子。

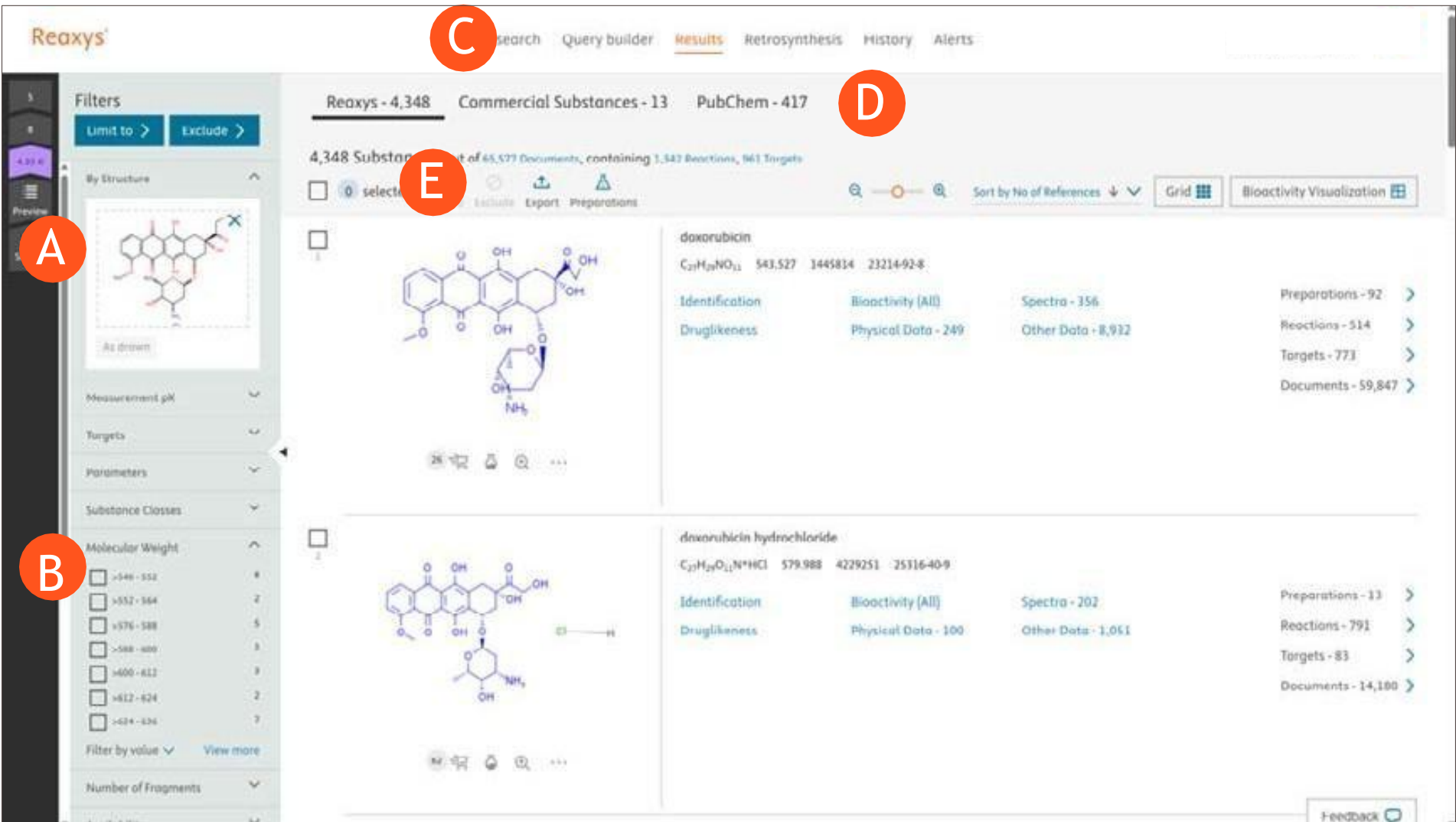
A. 从输入化学结构或名称**开始**。

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。

Reaxys

Quick search Query builder **Results** Retrosynthesis History Alerts

1.34 K
4.35 K
Preview
Search

Filters

Limit to > Exclude >

By Structure


As drawn

Measurement pX
Targets
Parameters
Substance Closes

Reaxys - 4,348 Commercial Substances - 13 PubChem - 417

4,348 Substances 65,577 Documents, 1,342 Reactions, 961 Targets

Limit To Exclude Export Preparations

Na of References Grid Bioactivity Visualization

doxorubicin

C₂₇H₂₉NO₁₁ 543.527 1445814 23214-92-8

1.34 K
4.35 K
Preview
Search

Filters

Limit to > Exclude >

By Structure

Yield

Reagent/Catalyst

Solvent

Catalyst Classes

Solvent Classes

Product Availability

Reactant Availability

Reaction Classes

Reaxys - 1,342 Commercial Substances - 13 PubChem - 417

1,342 Reactions 65,577 Documents, 4,348 Substances, 961 Targets

Limit To Exclude Export Hide Conditions

Reaxys Ranking

Sort search results

Reaxys Ranking
No of References
Reactant Availability
Product Availability
MW of product
Yield
Publication Year

6 Conditions Find Similar > Reaction ID: 32866602

Conditions	Yield	Reference
With N-ethyl-N,N-diisopropylamine in N,N-dimethyl-formamide	100%	Current Patent Assignee: TVA ABC - WO/2013/18048-2013

← [返回目录页](#)

29

← →

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。

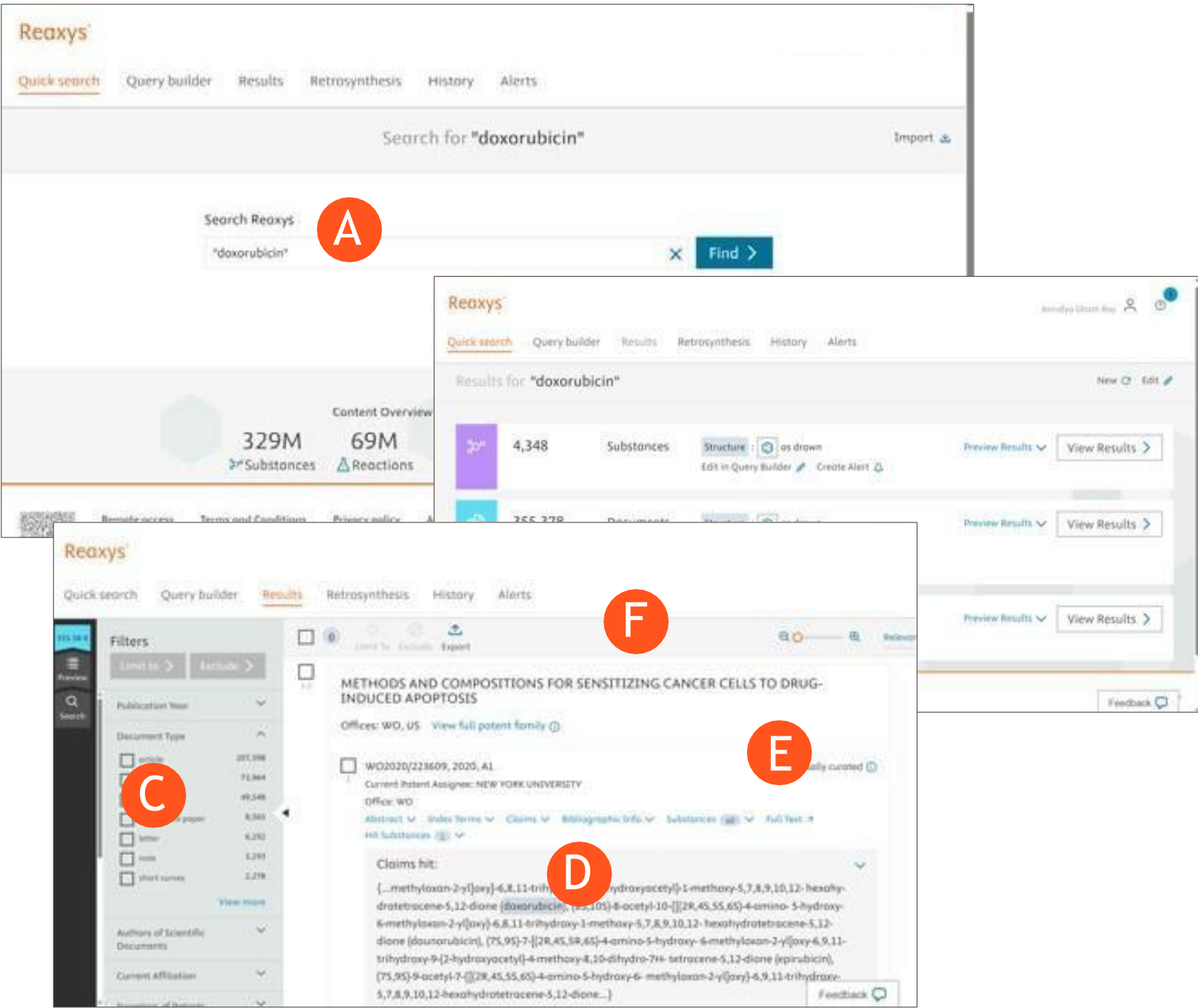
B. 查看文献结果。

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。

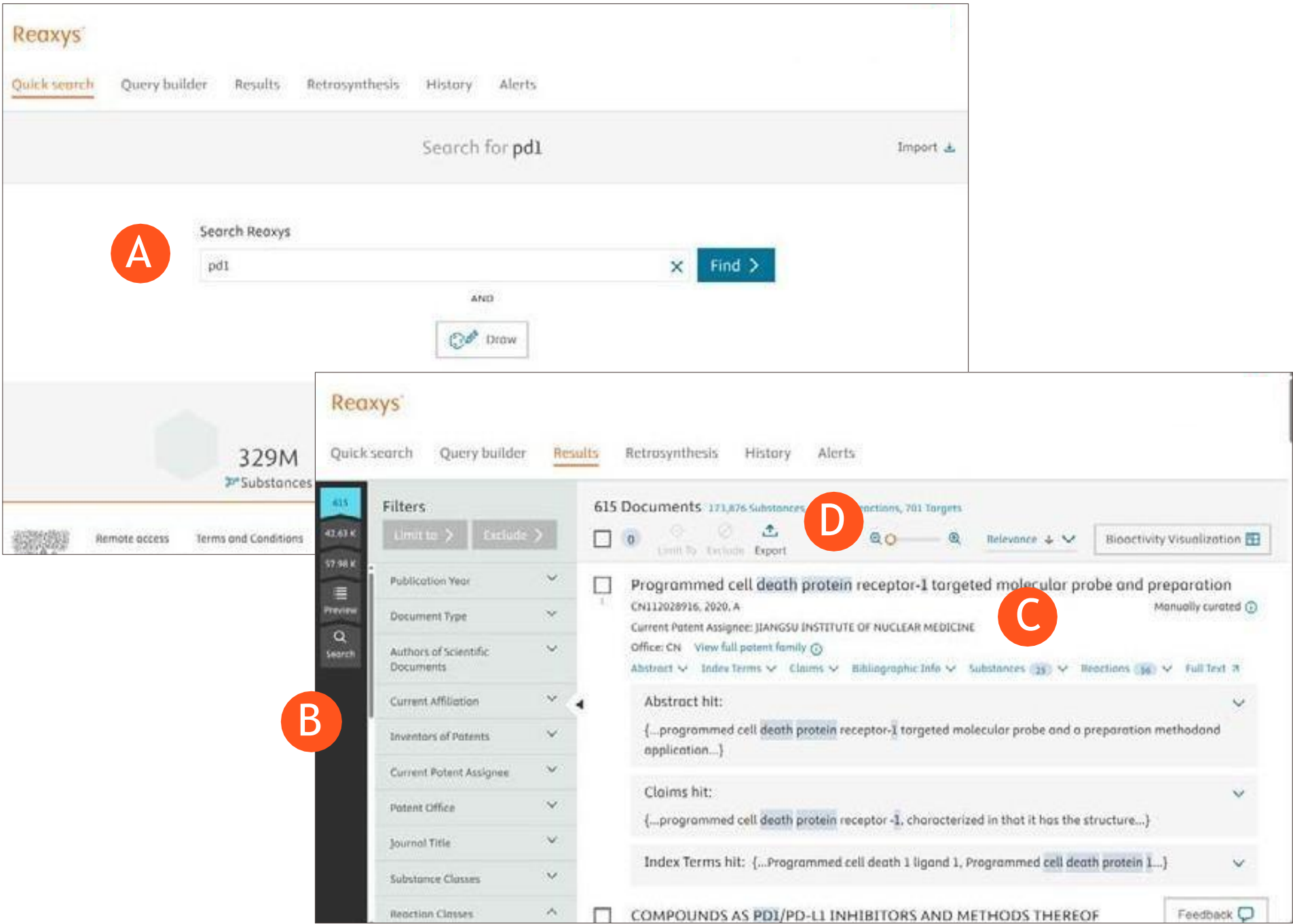


专业提示：将文献直接链接到化合物和反应，跳过泛关键词挖掘，更快地访问真实的实验建议。

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。

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。

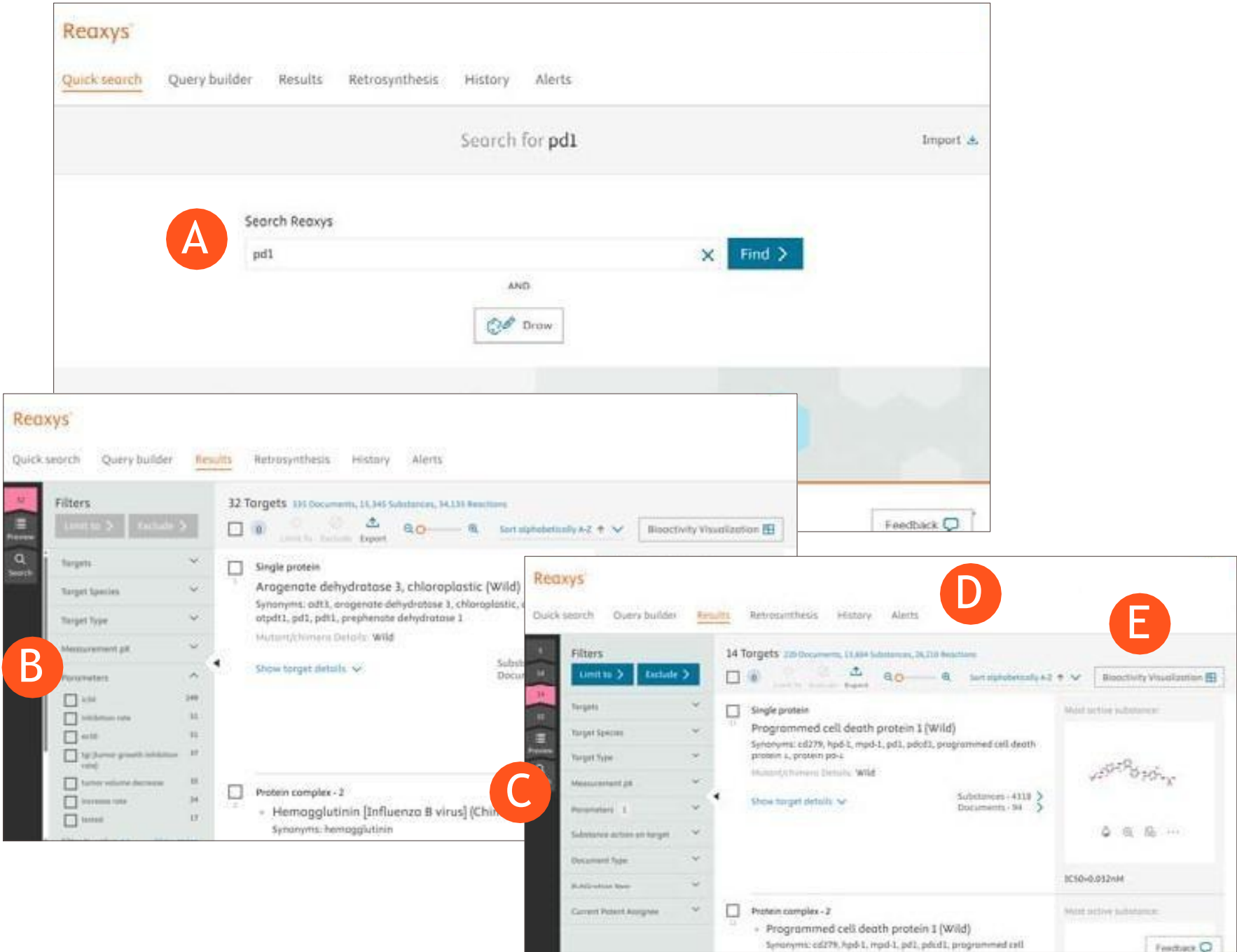
A. 运行结构或化合物名称输入。

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。



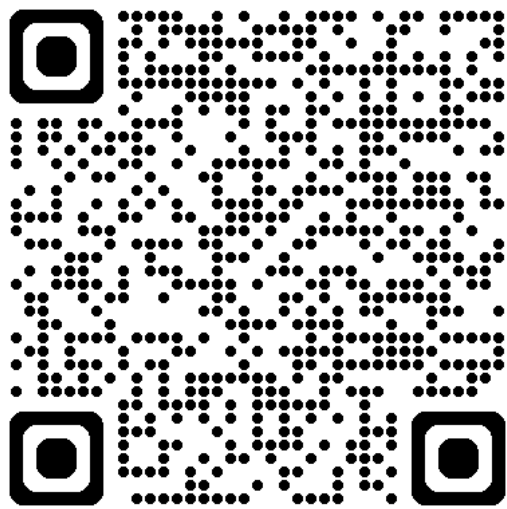
专业提示: [观看靶点与生物活性专家提示。](#)

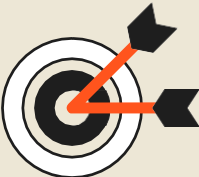
Reaxys

资源与支持

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