Reaxys

Reaxys
使用指南

ELSEVIER

Advancing human progress together

目录

本文档包含交互式内容。您可以使用本页的目录导航，也可通过各页面上的箭头按钮切换章节。

欢迎使用 Reaxys

核心功能

1 快速检索

2 查询生成器

3 逆合成

核心内容

1 物质

2 反应

3 文献

4 专利

5 生物活性

Reaxys 资源与支持

欢迎使用 Reaxys

欢迎使用Reaxys

用化学数据与AI加速研发进程

Reaxys是面向化学、药物研发、材料科学及相关领域研究人员的综合性化学信息平台。平台涵盖物质、反应、文献、专利及生物活性数据，数据总量超过十亿条。

在这里，您可以检索化学信息、设计合成路线，并验证跨领域的实验依据，应用场景包括：

- **工业领域：**制药、生物技术、CRO与CDMO、化工与材料、能源、工程及技术。
- **学术与政府机构：**高校、政府单位、研究院所及实验室。

立即开始
注册 | 登录

企业级隐私与安全

您在Reaxys上的所有操作都经过加密，不会泄露，也不会被窥探。您的提问不会被保存，更不会用来训练任何大语言模型。
了解爱思唯尔如何全程保障您的隐私与安全。

Reaxys 最新动态，一手掌握

2026 路线图・版本更新说明
Release Notes
2026 Roadmaps

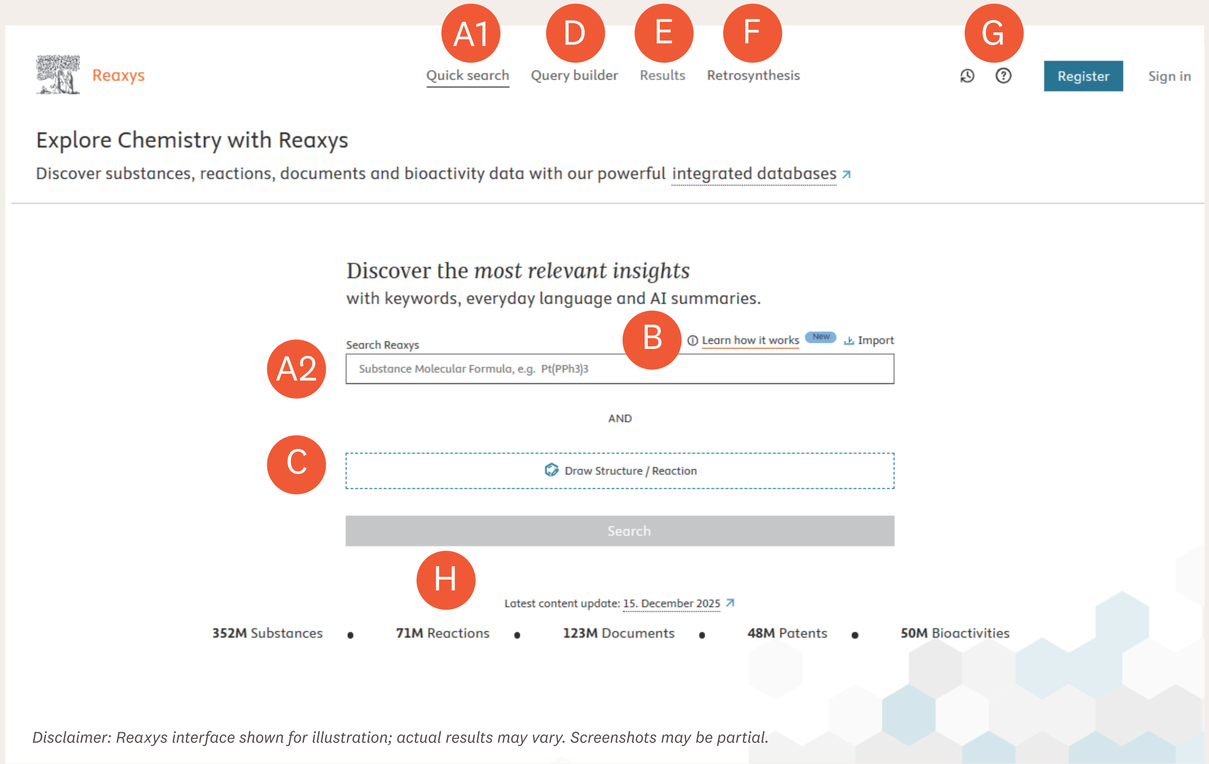
可靠的数据、技术与专业积累，为化学研究保驾护航

首页导览

开启检索，锁定关键数据，让发现快人一步

- **A. 快速检索：**输入关键词、绘制结构式，或用日常语言描述，查找物质、反应和文献。
- **B. AI自然语言检索：**用日常提问方式输入问题，结果页面会显示 AI 生成的摘要，并附上引用来源。
- **C. 结构式检索：**通过 Marvin JS 或 ChemDraw JS 绘制分子结构。
- **D. 高级查询构建：**利用结构化字段、布尔逻辑、检索运算符，以及生物活性、波谱和专利等专项条件，构建复杂检索。
- **E. 结果处理：**查看结果，按反应类型、生物活性、专利等条件筛选，并可导出做进一步分析。
- **F. 逆合成分析：**借助 AI 规划合成路线。
- **G. 历史记录与订阅：**保存检索式和研究记录，设置提醒，随时跟进。
- **H. 内容概览：**登录后查看最新数据总量。

登录后即可保存检索式并设置提醒。了解访问权限详情。



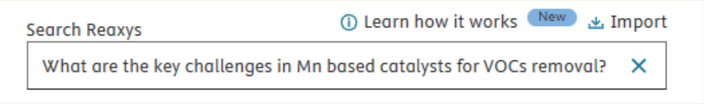
Disclaimer: Reaxys interface shown for illustration; actual results may vary. Screenshots may be partial.

核心功能

快速检索：选择输入方式，或组合多种输入方式

输入文本并绘制结构或反应式，可在同一次检索中进一步精准限定检索范围。

通过日常语言提问



Quick Search 中的 AI 自然语言检索与摘要

系统会识别您的自然语言提问，并结合关键词检索逻辑，对文献进行筛选和排序。符合条件的检索，会从排名前二十的文献标题和摘要中生成一份带引用来源的摘要。

您将获得

按相关性排序的文献结果
带引用来源的摘要
文内引用 → 点击可预览参考文献 → 进一步查看摘要或全文

适用场景

- 快速了解一个研究方向
- 在深入阅读前先筛选重点文献
- 获取一份带引文的初始文献集合

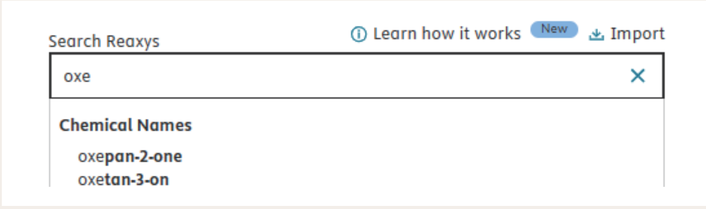
验证与筛选

- 点击文内引用即可预览参考文献，进而查看摘要或全文
- 筛选条件可随时调整，但需要注意的是，筛选后会改变当前文献集，摘要也可能不再显示

注意

摘要功能仅适用于 Quick Search 中符合条件的文献检索，结构式检索、混合检索以及 Query Builder 检索暂不提供此功能。

通过索引关键词进行检索



利用索引字段与提取实体进行高精度检索

系统通过关键词逻辑，在索引元数据和已提取的化学信息中进行匹配。检索结果按结构化的方式分类呈现（文献、物质、反应、商业化物质），如有相关的靶点与生物活性证据，也会同时提供链接。

您将获得

- 按检索类型分类的结构化结果集
- 筛选条件（限定/排除）及排序功能
- 关联记录与证据对象的链接

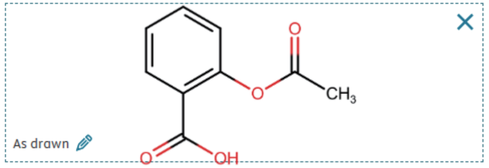
适用场景

- 检索精确术语或已知实体
- 以标识符为主的检索（如名称、专利号、CAS号）
- 需要可控召回率和可重复检索的情形

验证与调整

- 使用筛选条件，然后打开关联记录与来源进行核对
- 如需显式调整字段逻辑，可使用“在 Query Builder 中编辑”功能

Draw structure/reaction



基于结构式与反应输入的化学原生检索

使用 Marvin JS 或 ChemDraw JS 工具绘制结构式或反应式。Reaxys 会按精确匹配、子结构匹配或相似度匹配进行检索，并将结果关联至反应、文献（含专利）、靶点与生物活性证据（如有），以及商业化供应信息。

您将获得

- 关联了证据来源的物质与反应结果集
- 可跳转至文献（含专利）、靶点与生物活性证据，以及商业化供应信息的链接
- 筛选与排序功能，方便快速圈定候选对象

适用场景

- 类似物与骨架的探索
- 反应类型与反应条件的筛选
- 基于供应信息判断是自行合成还是对外采购

验证与核对

- 查看关联的反应步骤、反应条件及原始记录
- 结合理化性质与实验证据，对相似度匹配结果进行验证

总览

在 Reaxys 中，所有检索都从同一个入口开始。

快速检索是Reaxys最快捷的检索入口。选择检索类型，输入文本或绘制结构式，即可获得按相关性排序的结果，后续还可以筛选和导出。

操作流程

A. 从顶部菜单进入 快速检索。

B. 导入已保存的检索：加载之前保存的检索式。

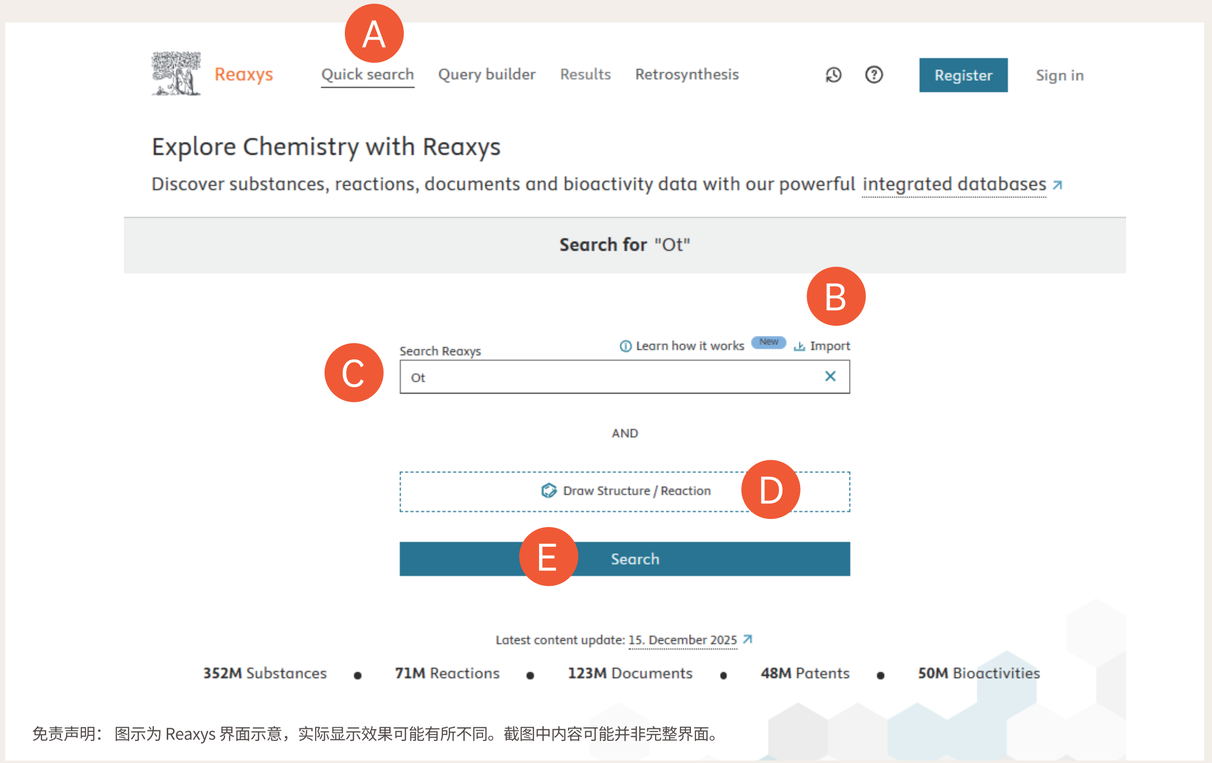
C. 输入自然语言提问或关键词（如CAS号、专利号）。

D. 结构式检索：使用“绘制”功能手画或粘贴化学结构式、反应式。Reaxys同时支持Marvin JS和ChemDraw。

E. 执行检索。快速检索支持物质、反应和文献检索。符合条件的文献检索，开启后还可显示带引文的 AI 摘要。

文章：
了解更多检索相关

进阶技巧： 将文本关键词与结构式结合使用，再通过溶剂或产率等条件筛选，能快速缩小范围。这样既减少了干扰信息，也能让后续导出的分析数据集更干净。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

借助 AI 提升文献发现效率，并自动生成摘要

对于符合条件的文献检索，系统会生成一份带引用来源的摘要。

混合检索（语义+关键词）对文献和专利进行相关性排序，从排名前二十的标题与摘要中生成结构化摘要，并附上可追溯的引用来源。

操作流程

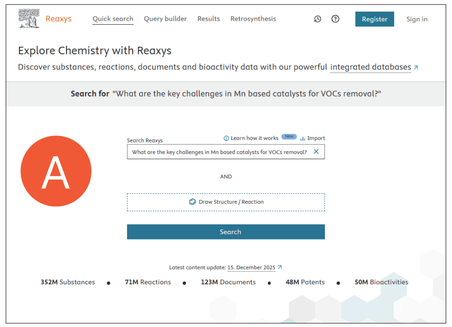
A. 在 快速检索 中输入自然语言问题或关键词，开始文献检索。

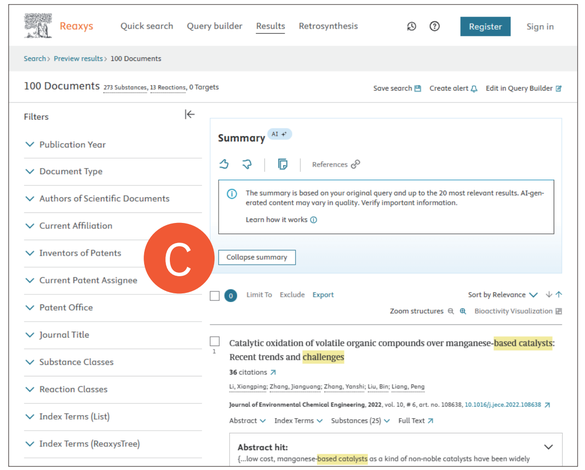
B. 在结果预览页面中，选择标有“包含摘要（AI+）”的结果集，点击“查看结果”→“AI 摘要”。

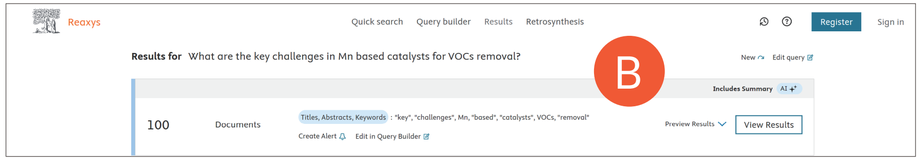
C. 验证与溯源：阅读摘要后，点击编号引用→打开参考文献预览→跳转至文献详情/摘要/全文进行核对→导出。

注意：添加筛选条件会改变当前文献集，摘要可能会因此隐藏。返回未筛选的原始结果即可恢复显示。

进阶技巧：先用日常语言提问，快速摸清一个领域的大致情况，再用关键词精确定位。如需核实摘要中的说法，可在结果列表视图中打开对应的引用文献进行查证。所有操作均仅限您个人可见，不会用作外部模型训练数据。







免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

结构编辑器

绘制或粘贴结构式，按结构进行检索

通过结构编辑器绘制、粘贴或生成分子结构或反应式，即可进行结构检索。将画好的结构直接传入检索条件，系统就会返回匹配的物质或反应结果，供您查看和导出。

操作流程

A. 选择结构编辑器：可在 MarvinJS 和 ChemDrawJS 之间切换（默认推荐 MarvinJS）。

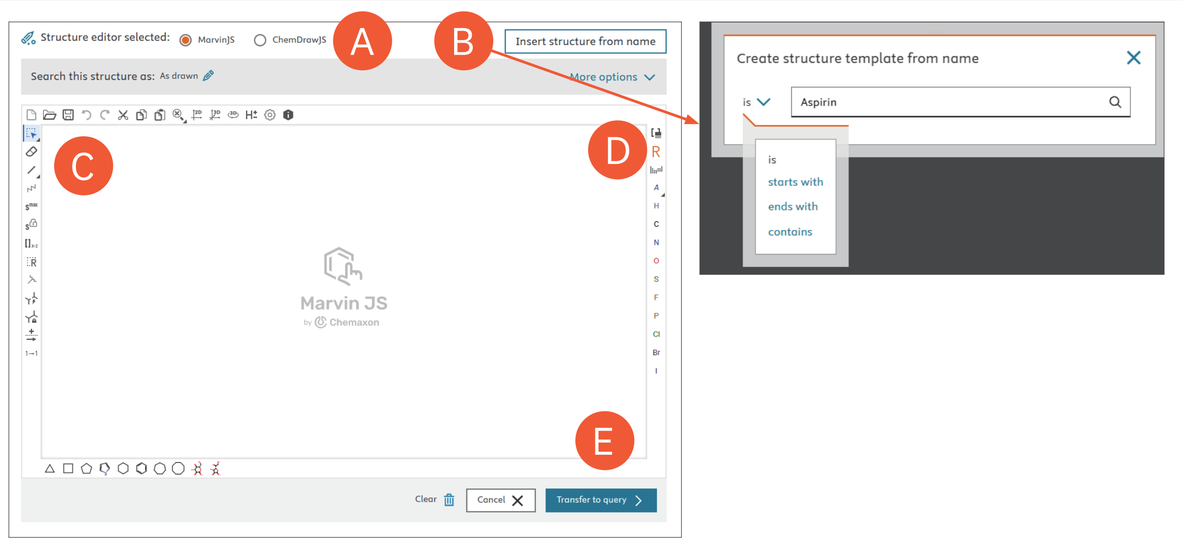
B. 按名称生成结构：输入化学名称、CAS号、InChIKey 或 SMILES，系统自动生成对应结构（见 F）。

C. 手动画结构：使用绘图工具绘制或编辑结构式、反应式。

D. 扩展检索范围：通过勾选互变异构体、立体构型、同位素或自由基等选项，扩大匹配范围。

E. 传入检索：点击“传入检索”，将结构添加到检索条件中，并进一步调整参数。

F. 按名称生成结构：也可利用结构模板，按精确或部分匹配生成结构。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

进阶技巧：先按名称或标识符生成结构，确认无误后再传入检索条件。

Article:
How to create a Structure Drawing in Reaxys
Reaxys 结构式绘制指南

结果：预览

先筛选结果类别，锁定重点目标，再做深度筛选

结果预览会展示检索式、返回的结果类别，以及部分重点命中记录。点击“查看结果”，即可筛选、查看关联数据，并只导出需要的内容。

操作流程

A. 检索式显示区：展示您当前执行的检索式，包括文本关键词和结构式标记（如有）。

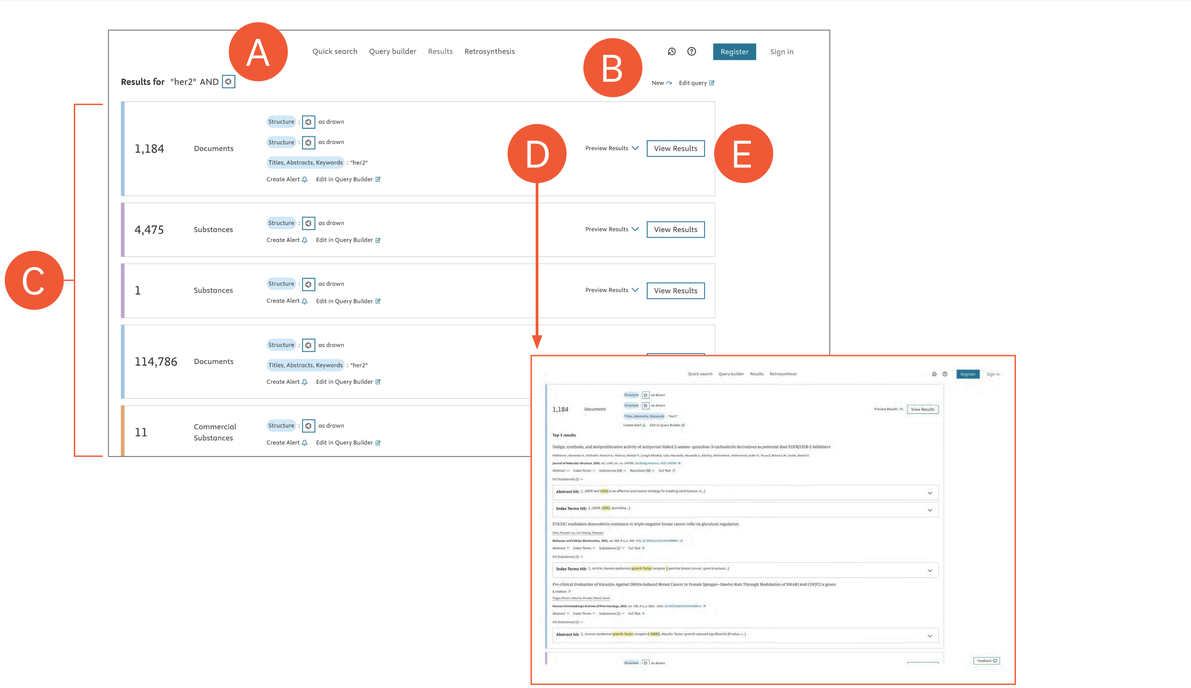
B. 新建或编辑：点击“新建”开始新的检索，或点击“编辑”修改当前检索条件。

C. 结果集：查看返回的结果类型，如文献、物质、靶点或商业化物质。

D. 预览结果：快速预览某一结果类别中的重点命中记录。

E. 查看结果：打开完整结果列表，进行筛选、导出和详细查看。

进阶技巧： 初步了解某个领域时，建议先从文献入手。如果页面显示了摘要，先通读一遍把握大致方向，再打开引用文献核实关键内容。需要字段级精准检索时，可在查询构建器中编辑。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面

结果：概览

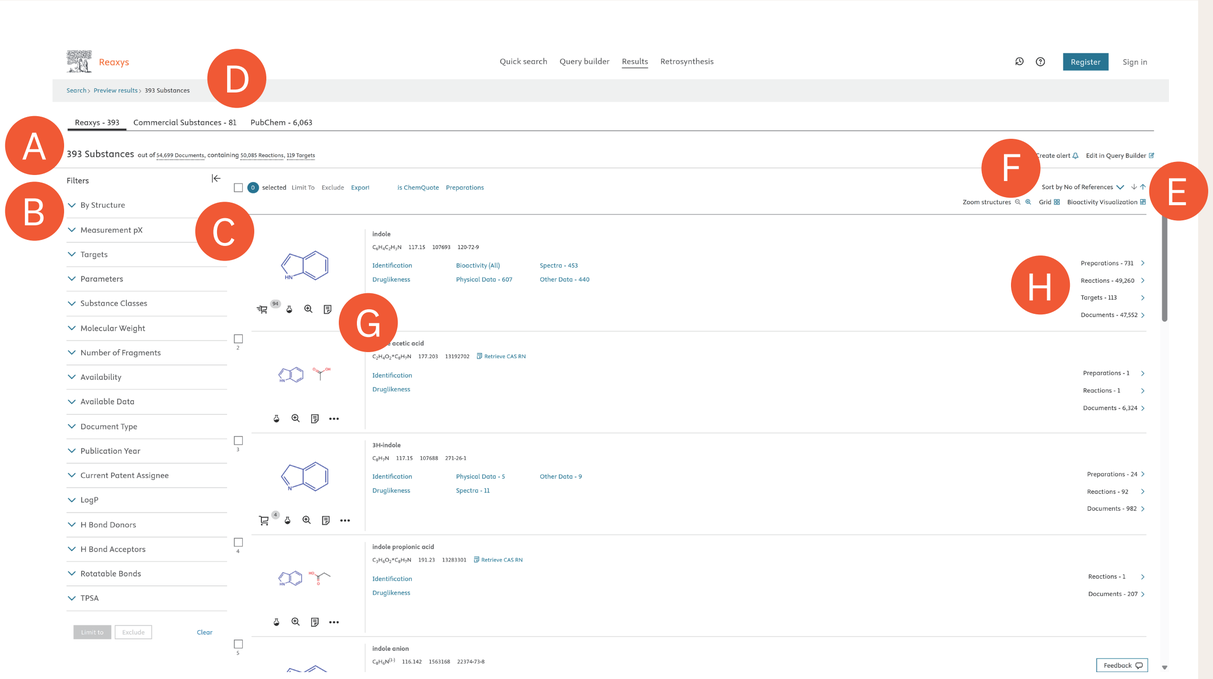
筛选、查看并导出可用于证据分析的结果集。

结果页面是您通过筛选、排序和行内操作来查看和精炼结果的集中区域。您可以打开关联的物质、反应、靶点和文献，最后只导出需要的那部分数据。

操作流程

- **A. 结果概览区：**显示当前类别和数据库下的结果数量及构成。
- **B. 筛选面板：**使用筛选条件精炼结果。“限定”或“排除”可分别决定哪些结果保留、哪些剔除。
- **C. 结构缩略图：**结果列表中每条记录都可预览其结构式。
- **D. 切换数据库范围：**通过下拉菜单在Reaxys及其他数据库之间切换。
- **E. 结果工具栏：**使用页内工具，如在结果中检索、网格视图，以及生物活性可视化功能（如有提供）。
- **F. 排序方式：** 按不同类别的条件对结果进行排序。
- **G. 行内操作：**针对单条结果执行相应操作，如“查找相似结构”、“复制结构至检索条件”、“复制SMILES”、“设为筛选条件”或“在数据库中打开”。
- **H. H. 关联数据快捷入口：**从当前结果快速跳转至关联数据，如制备方法、反应、靶点或文献。

进阶技巧：先放宽条件，再逐步缩小范围。用“限定”聚焦最相关的结果，用“排除”去掉不想要的数据。导出前，可打开关联的反应、靶点或文献，验证依据是否充分。



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面

结果筛选选项

按不同结果类型对应的字段精炼检索结果。

筛选条件会随结果类型自动调整，方便您按关键字段精准缩小范围。物质侧重理化性质，商业化物质侧重供应商信息，反应则侧重反应条件和实验细节。

操作流程

A. 物质结果：按结构、分子量、pH、供应情况、出版年份和专利持有人筛选。

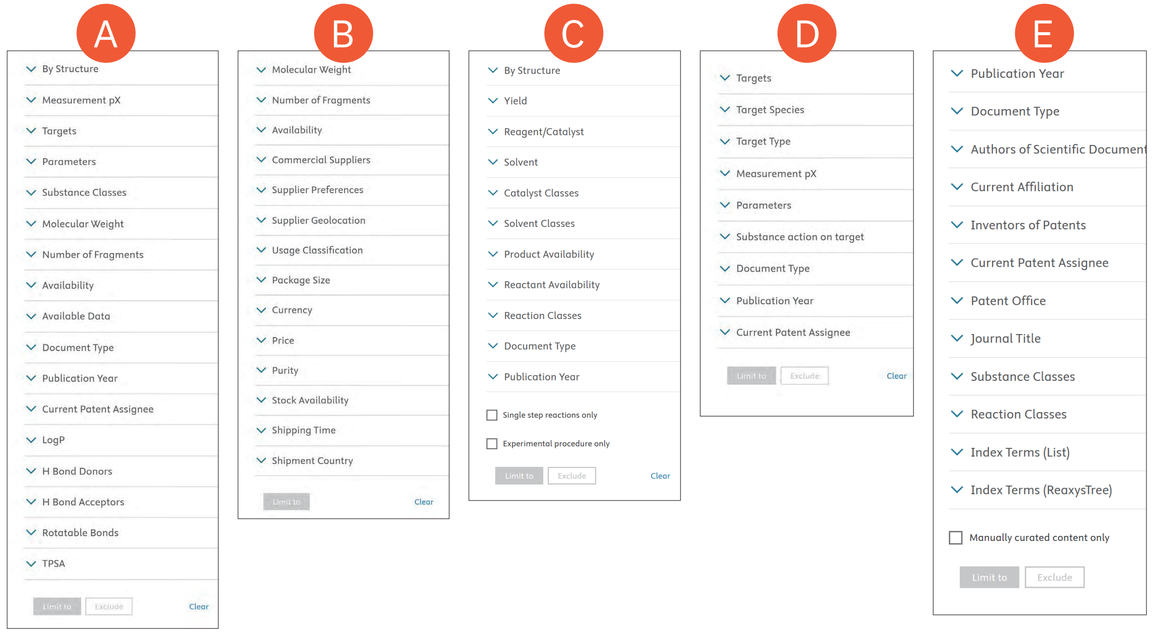
B. 商业化物质结果：按供应商、库存、价格、纯度、所在地和包装规格筛选。

C. 反应结果：按反应条件、试剂、催化剂和溶剂筛选，可勾选只查看单步反应或实验操作步骤。

D. 靶点结果：按物种、靶点类型、测量方法和参数等靶点属性筛选。

E. 文献结果：按出版年份、文献类型筛选，也可按专利局、索引词、物质类别等文献及化学相关字段进一步细化

进阶技巧：先用“限定”和“排除”框定大致范围，再添加一个高区分度的化学相关筛选条件，效果更佳。



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

结果：生物活性可视化

在同一处视图中比较不同物质与目标之间的生物活性，通过可视化生物活性图谱来评估结构–活性关系（SAR）、效力和目标选择性。该矩阵显示了各物质与目标之间的标准化pX值。使用导出、设置、导航器和图例来调整视图，并提取pX数据用于分析和报告。

操作流程

A. 使用导出、设置、导航器和图例来配置视图并导出pX值。

B. 使用导航器面板在大矩阵中移动。

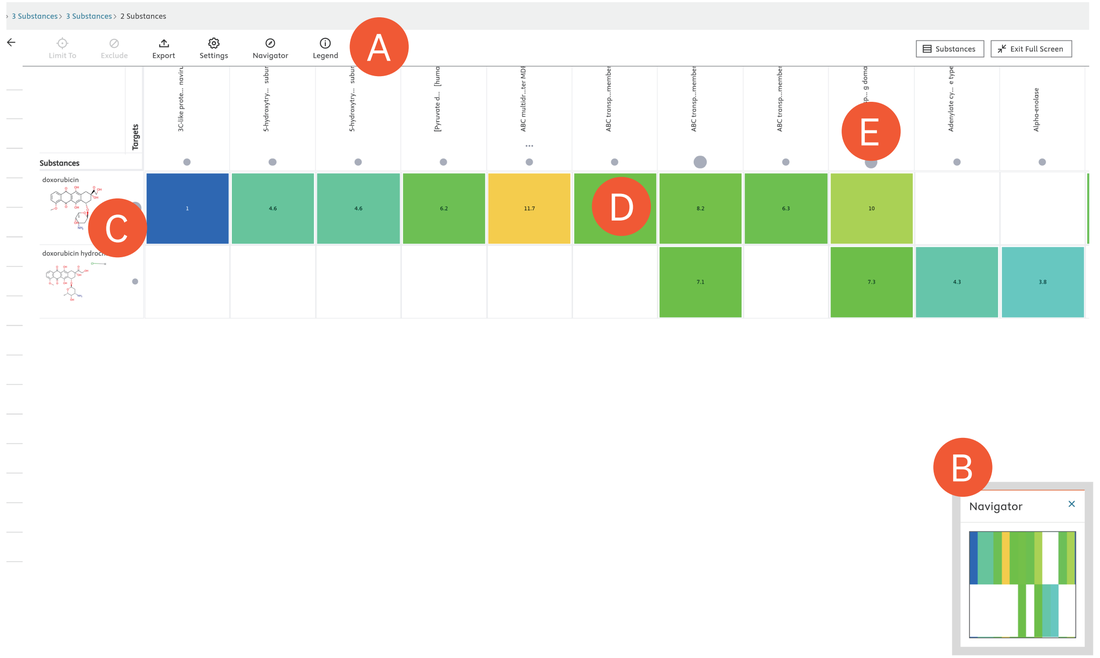
C. 悬停在物质或靶点上以查看结构和标识符。

D. 选择一个单元格以打开详细的生物活性证据及其关联来源。

E. 使用列选项按活性排序，并限制或排除列。

文章：
什么是生物活性可视化地图?

进阶技巧：利用生物活性可视化来捕捉SAR的拐点——结构上微小的改变，即可引起活性的显著跃升。



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

导出与检索历史

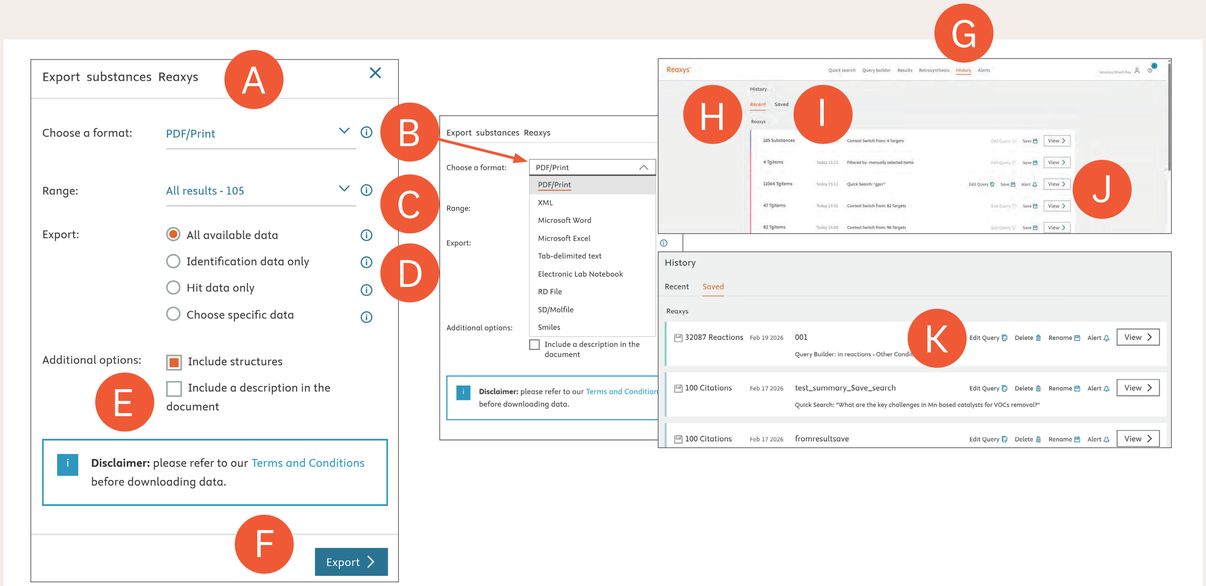
下载结果，无需重新输入即可复用已有检索。

操作流程：导出

- **A. 打开导出窗口：**在结果页面点击导出，进入导出选项。
- **B. 选择格式：**选择需要的文件格式（见 G）。
- **C. 设定范围：**导出全部结果、已选结果或自定义范围。
- **D. 选择导出内容：**可选择全部数据、仅ID、仅命中记录或特定字段。
- **E. 附加选项：**可勾选包含结构式或说明，丰富报告内容。
- **F. 执行导出：**点击“导出”即可开始，也可随时取消。

操作流程：历史查询

- **G. 历史记录选项卡：**点击 History 可查看近期检索和已保存检索。
- **H. 近期检索：**显示当前会话中的检索式及操作记录。
- **I. 已保存检索：**显示之前会话中保存的检索式（见右下角小图 E）。
- **J. 编辑与复用：**可对近期检索执行“编辑检索”、“保存”、“设置提醒”或“查看结果”等操作。
- **K. 已保存检索管理：**在已保存列表中可编辑、重命名或删除检索式。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

进阶技巧：将常用检索保存下来，方便随时调用，避免重复输入，提高研究效率。

创建和管理提醒

监控已保存的查询，并在新匹配项出现时收到提醒。

操作流程：创建提醒

A. 在结果预览页面或历史记录中点击“创建提醒”。

B. 为提醒命名，方便按主题归类（如分子、竞品、项目等）。

C. 添加收件人：系统会自动填入您的邮箱，也可按需添加其他人。

D. 设置发送频率：可选择每周、每两周、每月，或每次数据库更新后发送。

E. 设置触发条件：可选择在文献更新或首次出现时触发提醒（可勾选不发送零结果提醒）。

F. 定制提醒内容：选择数据来源（如Reaxys）及包含内容（标题、摘要、命中详情）。如需高级提醒，可先在 Query Builder 中构建检索式。

G. 激活提醒：点击“创建”，即可完成设置并接收通知。

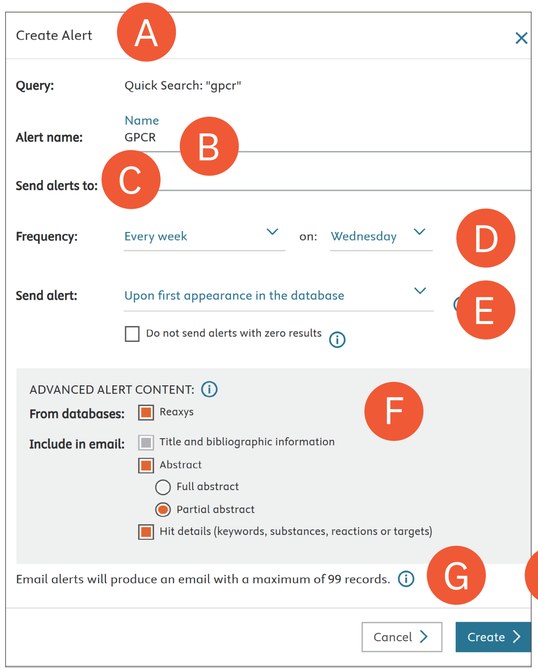
操作流程：管理提醒

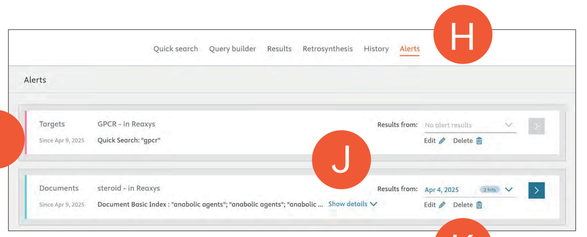
H. 在主导航栏中点击“提醒”，查看和管理所有已保存提醒。

I. 提醒按创建时间从新到旧排列，显示检索类型（物质、反应、靶点、文献、商业化物质）、创建日期、数据库及提醒名称。

J. 通过下拉菜单可查看以往提醒结果，便于追踪新增内容。

K. 可编辑提醒名称和发送频率。如需修改检索式，请在Query Builder中调整后新建提醒。





进阶技巧: Set alert frequency based on research needs – weekly for updates and monthly for trends.

进阶技巧: Monitor competitors by setting an alert using Current Patent Assignee.

免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面

个性化设置

按自己的习惯调整 Reaxys 中的检索、逆合成分析和结果展示方式。

个性化设置：按自己的习惯设定Reaxys的检索方式、路线规划和结果展示。选定结构编辑器、Autoplan 限制和显示选项后，每次登录都会沿用这些设置.

操作流程

A. 点击您的姓名或头像图标登录，然后选择“个人资料”。

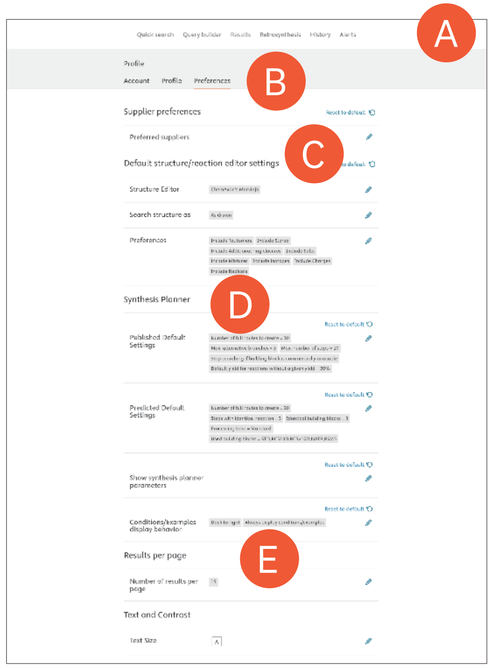
B. 点击“账户”可编辑用户名、邮箱和密码。进入“偏好设置”可调整检索相关选项。

C. 在“结构编辑器”中，选择MarvinJS或ChemDrawJS作为默认编辑器，并可修改相关参数（如包含或排除互变异构体、盐类等）。

D. 在Autoplan设置中，可指定自动生成的路线条数及最大反应步数。

E. 选择每页显示的结果数量。

进阶技巧：一次性设置好常用的结构编辑器和互变异构体选项，之后所有项目都沿用同一套配置，这样便于对比和导出时保持一致。



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

概述

构建精准多参数查询，支持字段筛选及布尔逻辑运算。

Query Builder支持通过拖拽字段和布尔逻辑来构建精准的多参数检索。用户可组合化学、生物活性和专利相关字段，从而精确锁定所需记录，并可将检索式保存下来重复使用。

操作流程

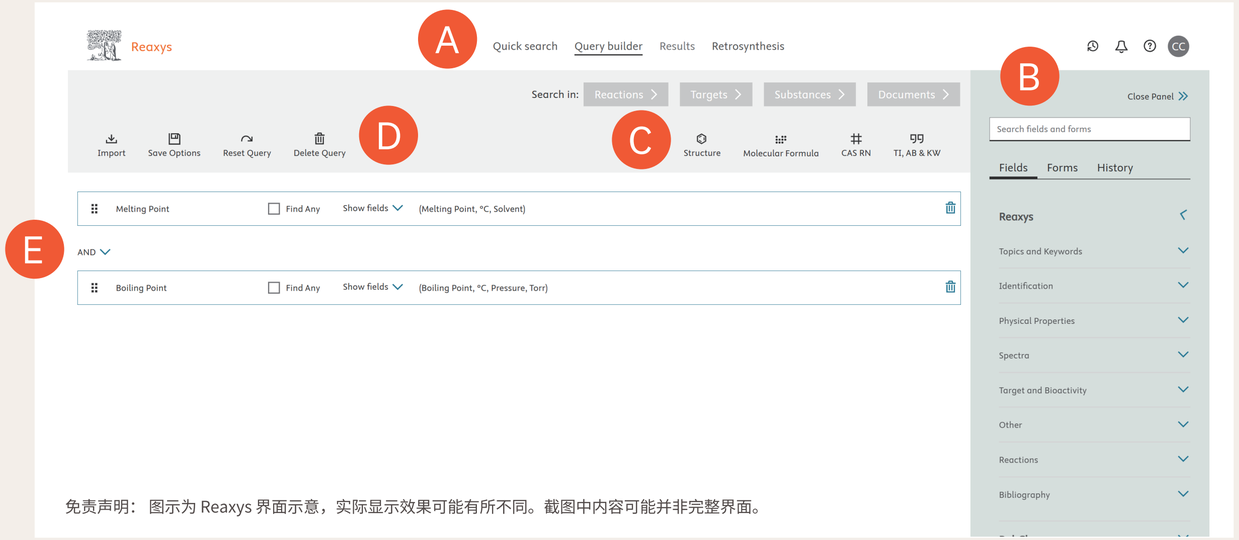
A. 打开Query Builder：用户可从顶部导航栏启动该功能，或通过"编辑检索"来调整检索条件。

B. 拖拽添加字段：用户可拖拽化学、生物和专利相关字段（如熔点、CAS号、专利受让人）进行组合。

C. 融合科学数据与IP信息：用户可借此查找具备已知合成路线且未被竞争对手申请专利的高活性化合物。

D. 保存、复用和设置提醒：用户可保存检索式以供后续使用，并可针对新数据（物质、反应、专利）设置更新提醒。

E. 布尔逻辑及其他运算符：系统支持AND、OR、NOT 等布尔运算符，以及邻近运算符、文本运算符和比较运算符。用户可利用这些运算符来放宽、收紧或限定检索范围，尤其适用于精细调整SAR（构效关系）或专利筛选条件。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

进阶技巧：用户可将"当前专利受让人"、"生物活性"和"合成"字段组合使用，以加快发现高活性、可合成且未受专利保护的新化合物，从而挖掘具备创新潜力的新机会。

进阶技巧： 用户还可将"当前专利受让人"与"生物活性"、"合成"字段搭配检索，快速锁定活性强且可合成的候选化合物，并在早期阶段排查专利所有权问题。

分析专利所有权

通过统一视图，分析关联专利结果的权属情况。

Query Builder能够在关联的物质、反应和文献中梳理专利所有权的归属。用户选择受让人和结果类型后，即可筛选并查看专利家族，从而发现趋势和空白。

操作流程

A. 用户可从主导航栏启动Query Builder。

B. 用户可选择"当前专利受让人"、"原始受让人"或"最终所有人"（位于"文献目录信息"下），以聚焦于物质、反应和文献中的所有权数据。

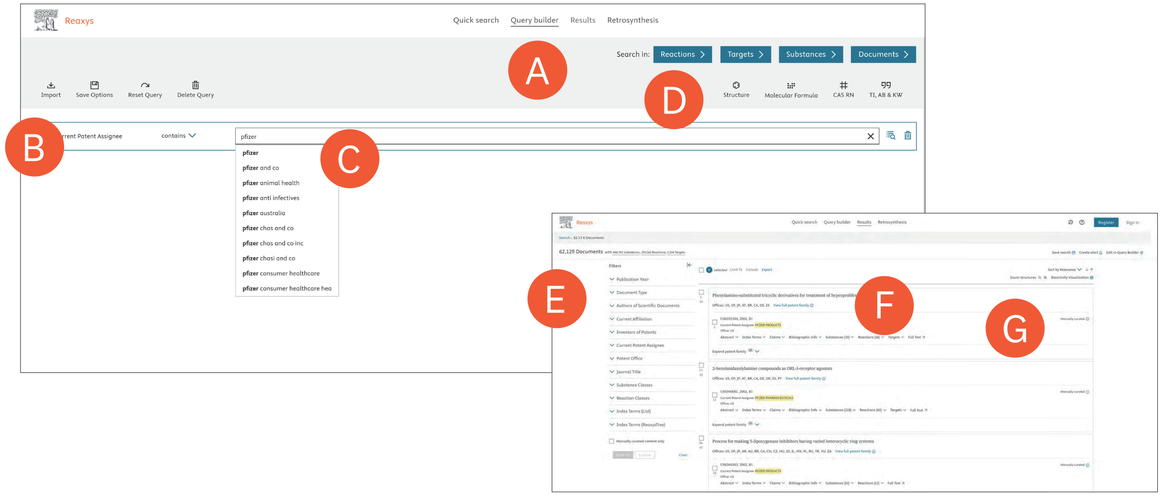
C. 用户可输入公司或机构名称进行检索。使用"包含"模式可实现灵活匹配，输入完整或部分名称（例如 Pfizer）即可获得广泛的匹配结果。

D. 用户可选择结果类型，包括物质、反应、靶点或文献，以浏览与选定受让人关联的数据。

E. 用户可使用结果筛选器，按靶点、结构、性质或文献类型进一步筛选和分析结果，并识别所有权趋势。

F. 用户可点击查看专利家族列表，以查阅完整专利家族集群信息。

G. 系统会标注数据为人工整理或自动生成，用户可据此判断数据来源。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

文章:
Query Builder 相关文章

进阶技巧：利用结果筛选器分析关联物质、反应和靶点中的所有权趋势，适用于空白领域分析或产品组合对标。

已发表路线与预测路线

用户可查找基于文献的合成路线，并获取详细步骤及引用来源。

通过Published Retrosynthesis，用户可以发现由文献验证并与Reaxys反应数据关联的合成路线。输入目标化合物后运行Synthesize，即可逐步查看和比较不同路线的反应步骤、实验条件以及参考来源。

操作流程

A. 用户进入逆合成页面，绘制或导入目标化合物。

B. 用户设定已发表合成路线的检索参数。所有Reaxys用户均可使用此功能。

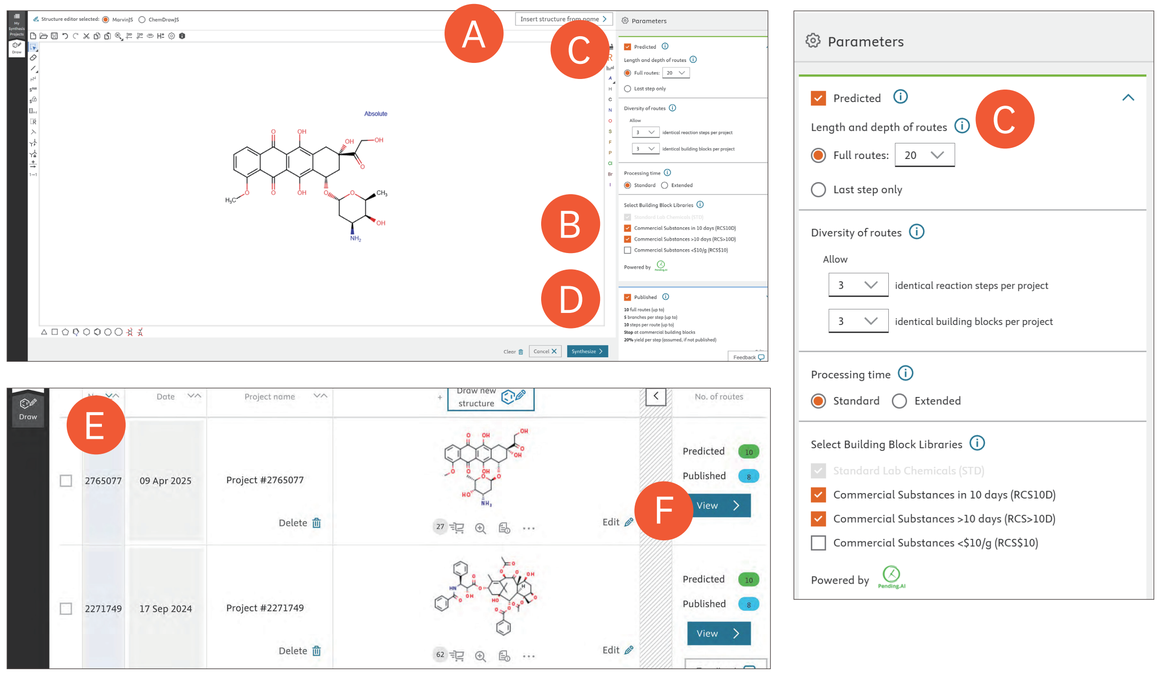
C. 若用户所在机构已订阅预测逆合成模块，系统会额外显示预测路线的选项。

D. 用户点击Synthesize，系统将根据所绘结构生成可用的逆合成路径。

E. 系统将逆合成项目添加至用户的项目页面。用户需登录方可保存、再次查看或追踪项目进展。

F. 用户可在结构化的交互视图中查看完整反应步骤、中间体和实验条件，并据此分析合成路线。

进阶技巧：用户可使用已发表路线获取经文献验证的合成路径。若遇到合成瓶颈，可尝试预测路线（需订阅）来探索机器学习推荐的新颖替代方案。



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

分析结果

用户可在树状视图中比较不同路线、查看各步骤详情并扩展路径分支。

分析结果功能可帮助用户比较不同的合成路线，并查看每一步的详细信息。用户可在树状视图中切换路线和步骤视图，查阅反应条件，还可插入多步方案，从而更快地扩展合成路径。

操作流程

A. 用户点击导航按钮，可在已发表路线与预测路线之间切换，比较不同的合成方案。

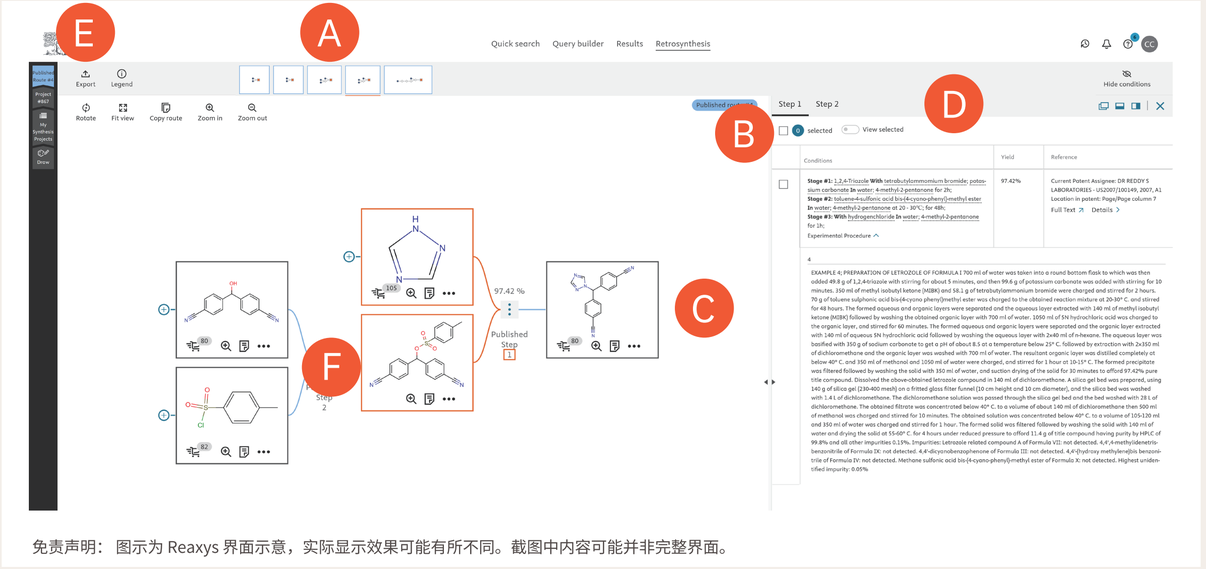
B. 用户可查看每一步的反应条件，包括产率、温度、溶剂和参考文献。

C. 如有完整的实验操作，用户可查阅全文，以便重复或评估反应。

D. 用户可切换垂直或水平布局，也可使用自适应视图，更清晰地查看复杂路线。

E. 用户可导出合成路线，下载结构图与实验数据，或直接导出至ChemDraw，便于实验规划或团队协作。

F. 用户可直接在树状视图中查看或插入多步方案，从而加快路线扩展速度。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

了解更多：

Pending.AI Reaxys Predictive Retrosynthesis

Predictive Retrosynthesis Guide – Iktos

Pending.AI Reaxys预测逆合成指南 – Iktos

联系我们：如需订阅 Reaxys 预测逆合成模块，请联系我们

进阶技巧：用户可插入反应步骤，对合成路线进行优化调整，以满足特定的合成目标。

核心内容

核心内容

Reaxys 提供经过验证的化学和生物活性数据，所有数据均可追溯至原始文献和专利来源。

物质 3.52亿

经过验证的物质记录，涵盖有机、无机及有机金属化学领域

工作原理

系统将物质录入结构化字段（包括名称、标识符、结构和性质），并将物质与反应、文献、专利及生物活性证据相互关联。

用户可获得的内容

- 结构式，以及对应的标识符和同义词
- 化学、物理、光谱和环境方面的性质数据
- 与反应、文献、专利、生物活性及商业化供应信息的关联

验证方式

用户可打开每条提取数据所对应的原始文献或专利进行核实。

说明

Reaxys约含5亿条实验性质数据，分布在约500个性质检索与显示字段中。

反应 7100万

经人工整理的实验反应，包含反应条件及相应证据支持

工作原理

系统将反应步骤作为结构化转化信息进行录入，并与原始期刊或专利来源相关联。

用户可获得的内容

- 反应条件及产率（如有）
- 操作步骤及支持性参考文献，便于逐步查阅
- 与物质、文献、专利及商业化供应信息的关联

验证方式

用户可打开引用的原始来源，以查看反应范围、局限性和实验背景信息。

•••

文献 1.23亿

文献与专利文档，将叙述性证据与提取的化学实体相关联

工作原理

系统对文档进行索引，并建立文档与物质、反应、生物活性数据之间的关联。用户可从文献阅读直接跳转至证据对象，无需重新检索。

用户可获得的内容

- 包含书目信息的文档记录
- 与物质、反应和生物活性证据的关联链接
- 数据每周更新。文献从发表到入库的时间因来源和内容类型而异。

验证方式

用户可打开文档记录，通过链接查看底层证据及来源文本。

说明

部分文献发表后两周内可入库，另有部分因来源和内容类型不同，需约两个月完成入库。

专利 4800万

化学专利覆盖全球主要专利机构，数据便于检索和关联查询。

工作原理

系统在索引专利文献时，会录入主要书目信息，并将专利与相关实体关联，以支持所有权分析和竞争态势分析。

用户可获得的内容

- 专利文献涵盖化学领域研发和知识产权分析需求，覆盖全球105家专利机构。标题、摘要和权利要求均提供英文翻译。
- 提供书目信息和分类字段，便于进行竞争分析和知识产权分析。
- 专利与已提取的物质、反应和生物活性证据相互关联。

验证方式

用户可查看专利家族的整体情况，必要时可打开原始专利来源进行核实。

•••

生物活性数据据 5000万

经整理的生物活性与靶点数据，支持构效关系和选择性分析

工作原理

系统整合生物活性测定数据与靶点信息，并将其与物质、来源文献和专利相关联，实现可追溯的构效关系分析。

用户可获得的内容

- 生物活性测定数据与靶点、物质的对应关系
- 关联文献和专利的链接，便于验证
- 结构化字段支持构效关系分析流程

验证方式

用户可打开关联的来源文献，确认测定方法、终点类型及其局限。

•••

商业化供应信息是物质与逆合成分析的一个供应来源。该信息整合了Reaxys工作流程中的供应商数据。
Reaxys的内容经过专业化学家整理，每周更新，并可追溯至原始文献或专利。当前内容截至2026年3月。
Reaxys将持续更新，用户可登录查看最新数据。

物质

用户可利用经整理的物质记录及关联证据来设计分子。

物质检索结果页面展示经整理的化合物记录，包含关键性质和关联链接。用户可从化合物名称或结构式出发，通过筛选条件缩小范围，打开关联的反应或文献，最后导出所需数据集。

操作流程

A. 输入化学结构或化合物名称作为检索起点。

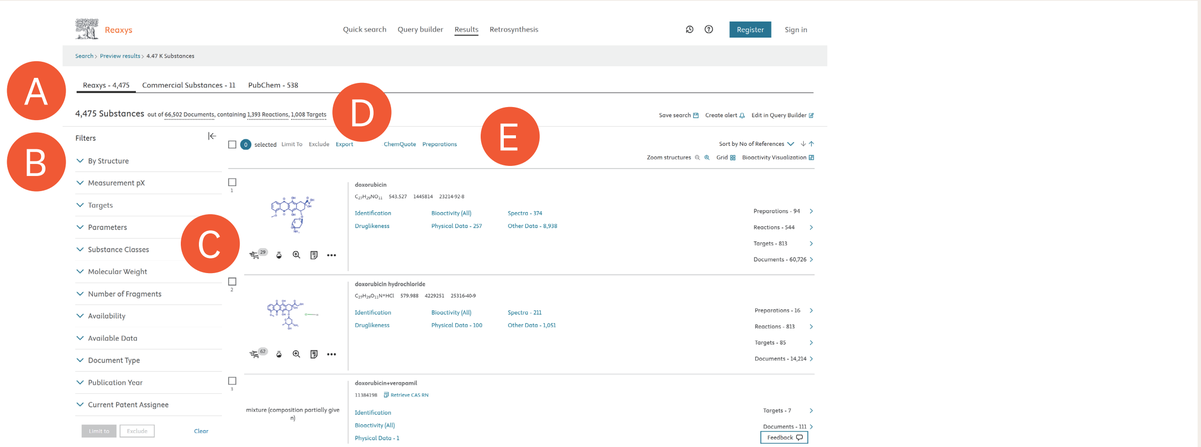
B. 按理化性质（如logP、分子量、溶解度）进行筛选。

C. 开启供应商供应信息，查看与物质记录关联的商业供应情况。

D. 浏览关联的反应、靶点和文献。

E. 导出或复用整理后的数据集。

F. 在结构化的交互视图中分析合成路线，查看完整的反应步骤、中间体和实验条件。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

进阶技巧：按相似度排序以查找相近类似物，再按关键属性和供应情况筛选，从而更快选出可行的候选物。

How to search for substances by name?
按名称检索物质的方法？观看2分钟视频

How to quickly obtain a commercial substance?
如何快速获取商业化供应物质？

How to set your supplier preferences
如何设置供应商偏好

How to avoid structural motifs with known safety issues
如何避开已知有安全性问题的结构片段？

反应

依据实验报道的反应证据规划合成路线。

反应检索结果页面展示实验报道的合成转化信息，包含反应条件、产率和参考文献。用户可按试剂、溶剂、产率和温度进行筛选和排序，从中选出可行的合成路线。

操作流程

A. 绘制或导入目标分子。

B. 打开反应选项卡，浏览所有可行的合成转化路径。

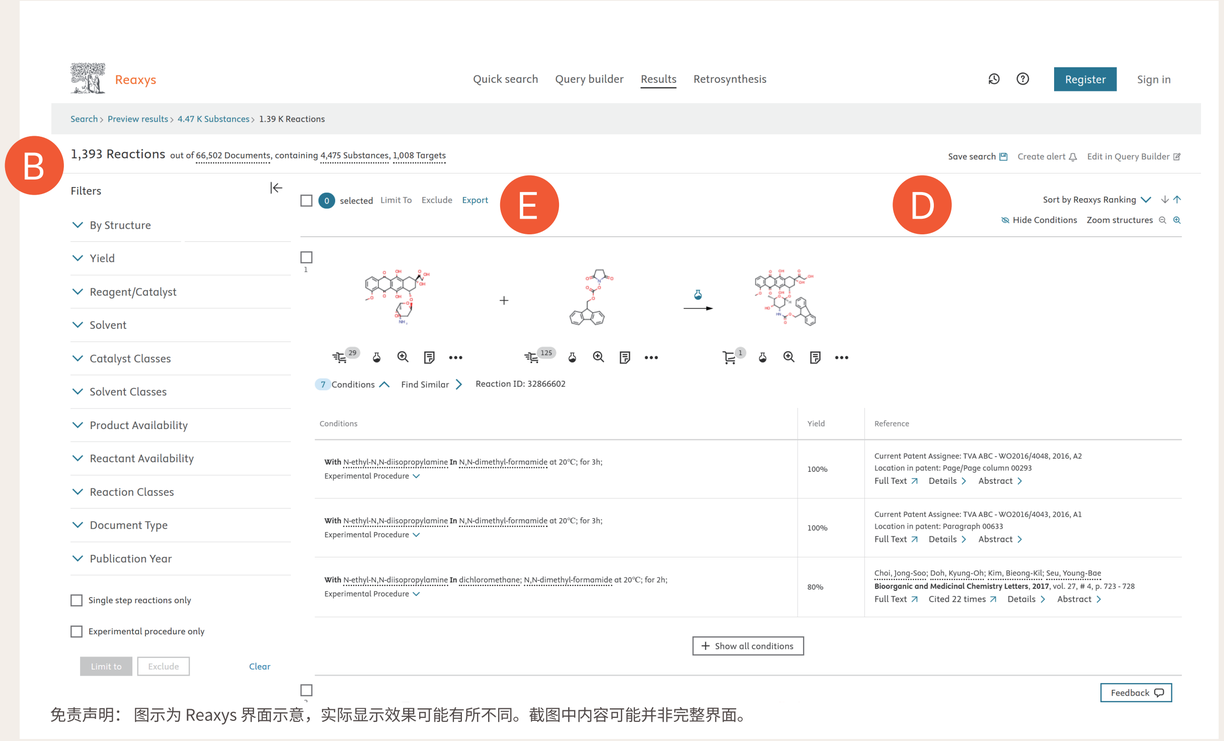
C. 按试剂、催化剂、溶剂、产率和温度进行筛选。

D. 按反应产率或实验条件进行排序。

E. 导出候选路线，并在引用的实验步骤和条件中验证其可行性。

进阶技巧：先从产率和关键条件入手，再查阅实验操作步骤以确认适用范围，最后导出路线或比较不同方案。

进阶技巧： 参考文献实验条件快速识别最可行合成路径，而非预测结果。



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

文献

检索跨学科文献（含期刊和专利）时，须查找明确提及目标化合物或反应的文献，而非仅依靠关键词匹配。

操作流程

A. 按结构、物质、关键词或自然语言检索。

B. 查看文档结果，阅读AI摘要（如有）及其附带的参考文献链接。

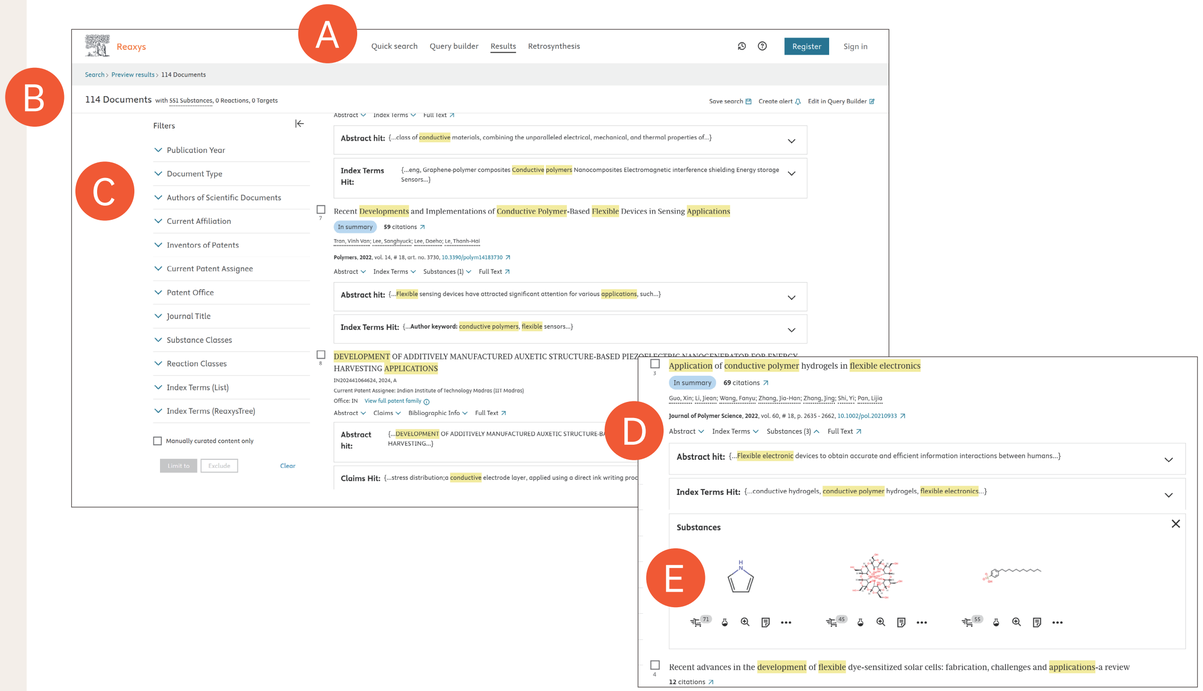
C. 按期刊类型、专利局等条件筛选。

D. 查看全文、摘要、权利要求和索引术语中高亮显示的化学上下文。

E. 追溯至已提取的物质、反应和生物活性数据。

注意：文档涵盖期刊和专利。

进阶技巧：用通俗语言提问，先阅读摘要以了解概况，再通过参考文献预览打开引用文档及其摘要或全文，核实关键信息。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

专利

利用专利关联的化学证据，追踪新颖性和所有权归属。

专利检索结果将专利文献与已标引的化学信息相关联，便于追踪新颖性和所有权归属。可按专利局进行筛选，并导出所需数据集以供查阅或报告使用。

操作流程

A. 输入化合物或关键词。

B. 按专利局进行筛选（如EPO、USPTO）。

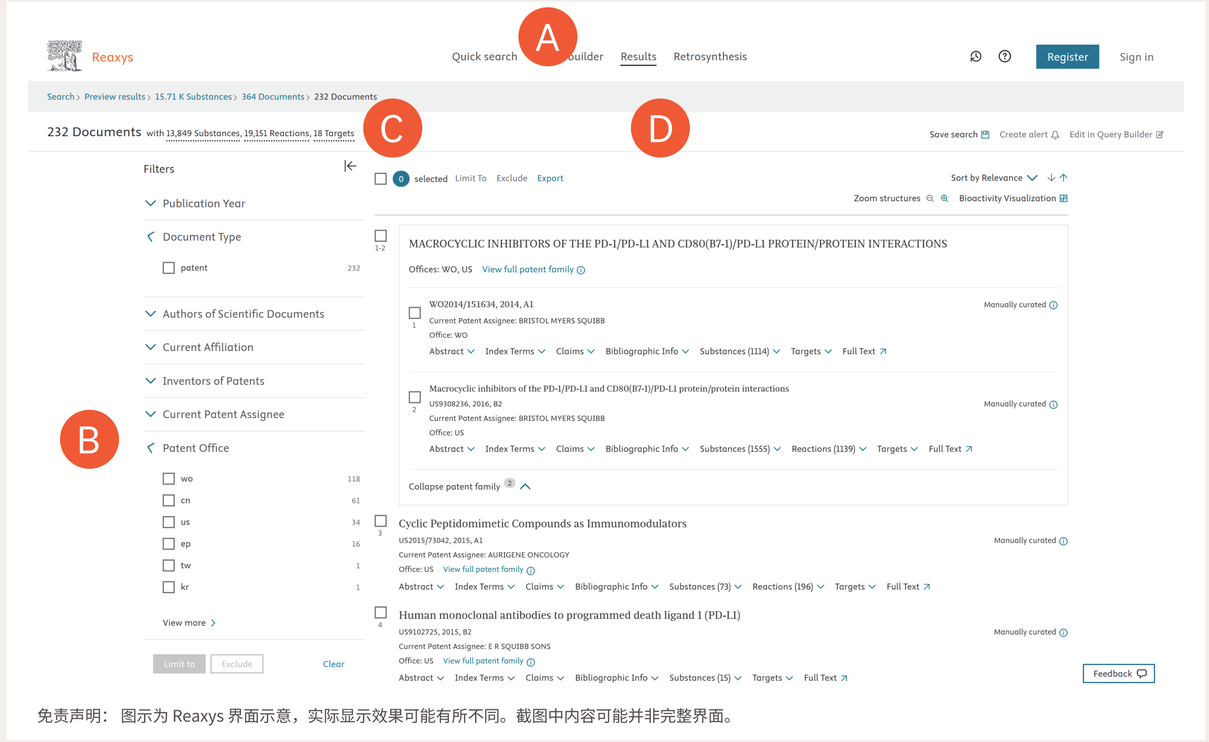
C. 查看已标引的反应或靶点。

D. 导出专利报告。

进阶技巧：检索专利数据库，查找化合物和反应，识别治疗相关权利要求，并比较不同司法管辖区内的受保护合成路线。

如何获取专利中化合物的构效关系数据？
观看短视频

文章：
Reaxys中的专利覆盖范围是什么？
参见快读文章。



免责声明：图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

生物活性

分析靶点和活性结果，为构效关系及作用机制研究提供指导。

生物活性检索结果将化合物与靶点及测定结果相关联，以支持构效关系和作用机制研究。用户可按终点类型和靶点属性进行筛选，并导出数据表以供分析或提交。

操作流程

A. A.输入结构或化合物名称。

B. B. 按生物活性结果进行筛选（如IC50、Ki、EC50）。

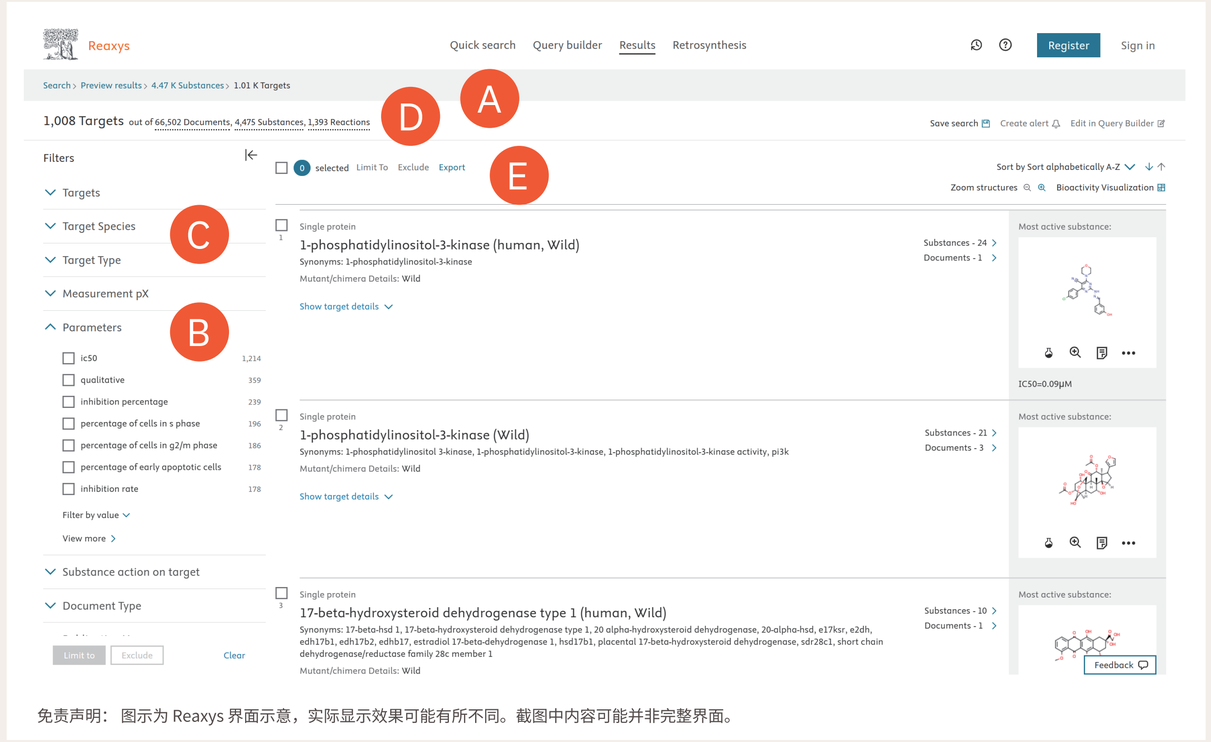
C. C. 开启靶点类型、靶点分类或物种筛选条件。

D. D. 跳转至关联的靶点、化合物和文献。

E. E. 导出生物活性数据表，用于构效关系分析、验证或提交。

进阶技巧：利用可信的实验验证生物活性数据，探究化合物对生物靶点的作用机制，识别治疗潜力、安全性警示或优化方向。

查看靶点与生物活性专家技巧播放列表



免责声明： 图示为 Reaxys 界面示意，实际显示效果可能有所不同。截图中内容可能并非完整界面。

用户评价

Reaxys支持检索、下载化学结构，将结构与生物活性数据关联，并研究构效关系……依托Reaxys，我们有把握不会遗漏任何关键研究线索。”

Dr Christine Richardson
Signature Discovery 首席科学家

“每位化学从业者都应该试试Reaxys！操作简单直观，信息检索速度极快，必定能节省大量科研时间。”

Fabrizio Fabris
威尼斯大学 分子科学与纳米系统系 副教授

“Reaxys可自动整合各类数据，让科研人员能专心开展数据分析，做出更可靠的研究判断。”

Colin Sambrook Smith
Signature Discovery 计算科学与信息学部主管

“Reaxys能够帮助学生掌握化学反应数据的实操应用方法。”

Prof. Keiji Hirose
大阪大学 副教授

“Reaxys提供海量数据和多种分析视角，辅助科研人员解决有机合成中的实际问题。”

马汝建
药明康德 化学部副总裁

“在我看来，Reaxys是覆盖范围最全面的数据库，科研人员可借助它快速、精准地查阅海量化学领域文献与知识。”

Gustavo Pablo Romanelli, Dr.
拉普拉塔国立大学 GISOE课题组负责人

立即开始
注册 | 登录

ELSEVIER
Copyright © 2026 Elsevier B.V.

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

观看教程、注册课程和网络研讨会，并访问操作指南。

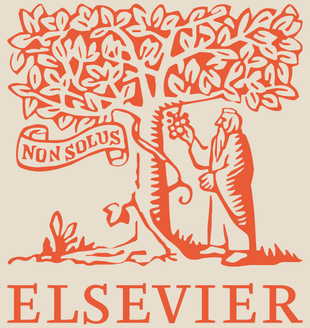
产品

观看教程、注册课程和网络研讨会，并访问操作指南。

社区

观看教程、注册课程和网络研讨会，并访问操作指南。

需要更多帮助?
访问 Reaxys 资源 或者
联系我们。



Advancing Human Progress Together