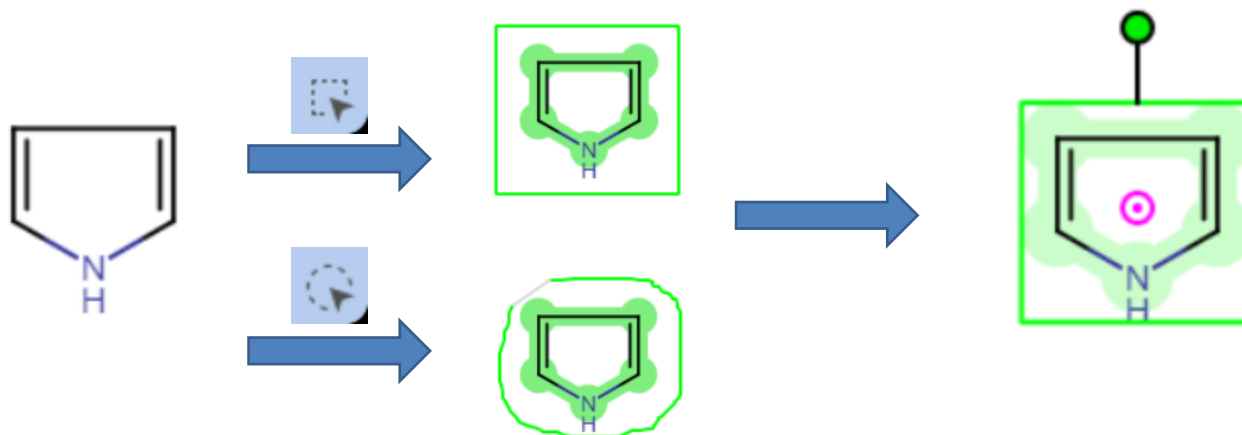




選擇/移動分子



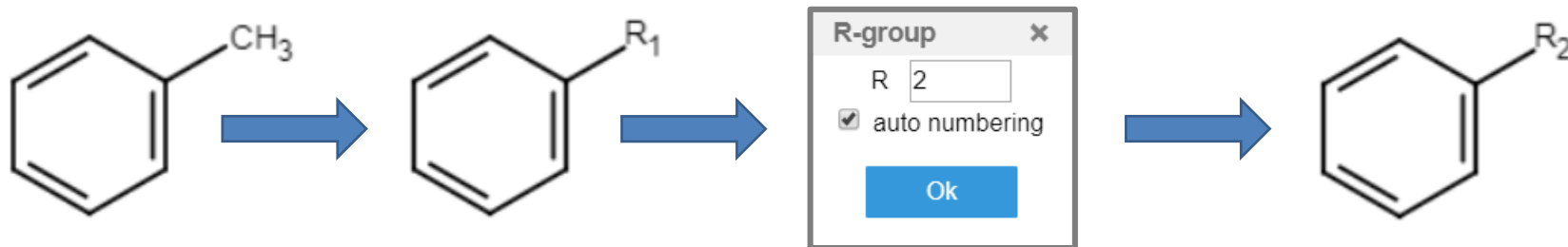
1. 點擊  或  。
2. 持續按住滑鼠按鍵並拖曳或圈選結構。
3. 點擊結構中綠色的部分(如原子)，並拖曳以移動結構。


NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

R 基團 (R-Group)

步驟一：標出R group 位置



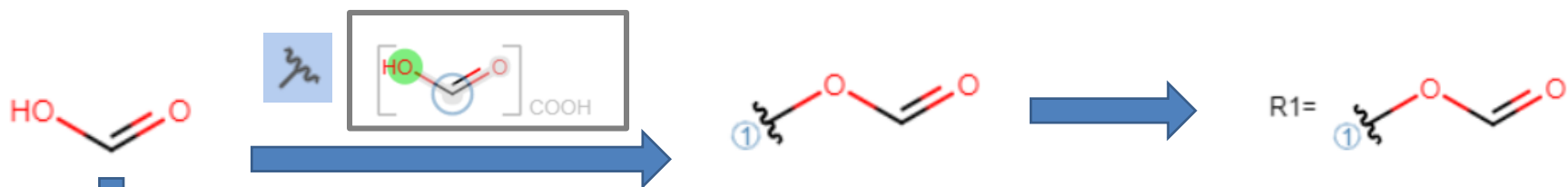
1. 畫出母結構。
2. 點擊左側工具列中的 ，然後點擊相應的原子，標示 R-group 位置。
3. 點擊 R1，在跳出的對話框中修改 R-group 編號。



NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

R 基團 (R-Group)

步驟二：畫出 R-group 接上的官能基



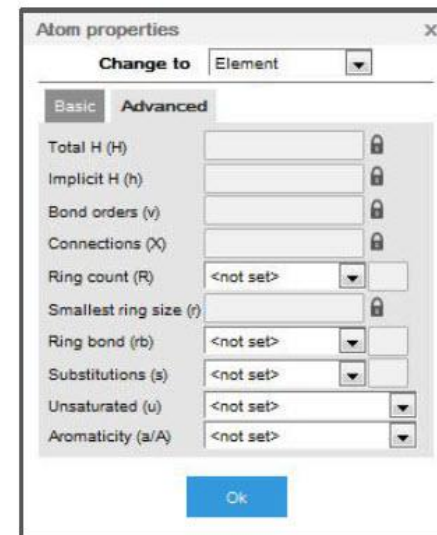
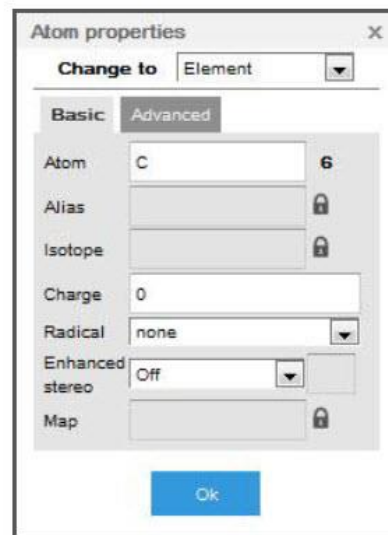
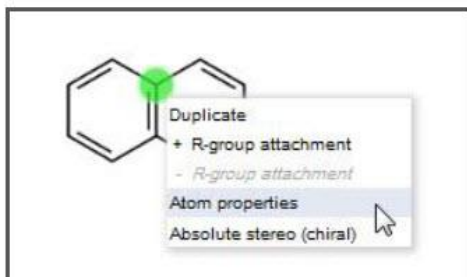
1. 畫出官能基，如 COOH。
2. 點擊 ，並點選官能基上要與母結構連接的原子。
3. 或在該原子上點右鍵並選擇 + R-group attachment。
4. 點擊 ，持續按住滑鼠按鍵並拖曳以選擇官能基。

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

原子性質

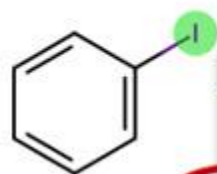
在原子上按右鍵，開啟 Atom Properties 選單，並根據需要修改設定，如 Charge、Radical、Substitution



NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

選擇特定的同位素



Duplicate
+ R-group attachment
- R-group attachment
Atom properties
Absolute stereo (chiral)
R-logic
Paste (Ctrl+V)

1

Atom properties

Change to Element

Basic Advanced

Atom I 53

Alias

Isotope 125

Charge 0

Radical none

Enhanced stereo Off

Map

Ok

2

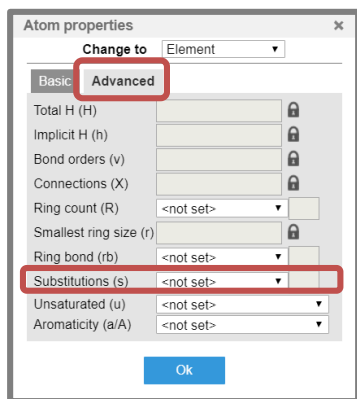
1. 在 I 原子上點右鍵，開啟 Atom properties 選單。
2. 點擊鎖定圖標以解鎖 isotope 項，並設定質量數為 125。

NewReaxys new.reaxys.com

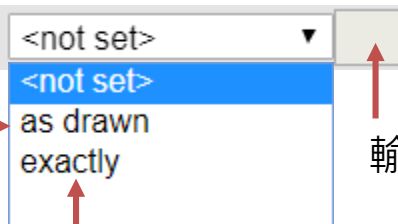
中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

取代 (Substitution)

方式一：Atom Property 進階設定



Substitutions (s)



選擇 as drawn，
可在結構檢索時，
避免取代。

輸入0-6 數字

選擇 exactly 並輸入數字，
可在結構檢索時，指定
該原子最高取代基數量。

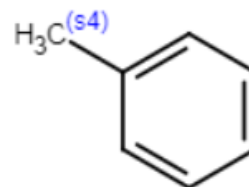
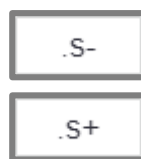
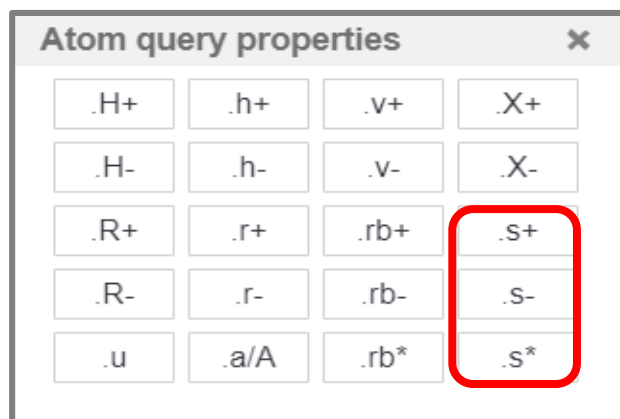
1. 在原子上點右鍵，開啟 Atom properties 並選擇進階功能 (Advanced)。
2. 找到 Substitutions(s) 項。

NewReaxys new.reaxys.com

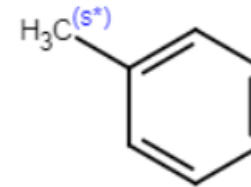
中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

取代 (Substitution)

方法二：快捷鍵。



S0-S6
代表最高取代基數量



S*
代表 as drawn
不接上任何取代基

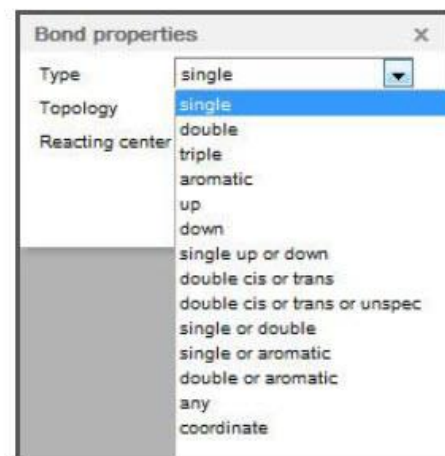
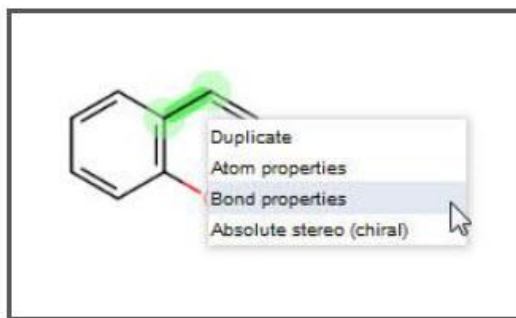
1. 點擊空白處，並按下鍵盤的 (.) 叫出 Atom Query Properties 選單
2. 選擇 或 , 點擊原子調整最高取代基數量。

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

化學鍵性質

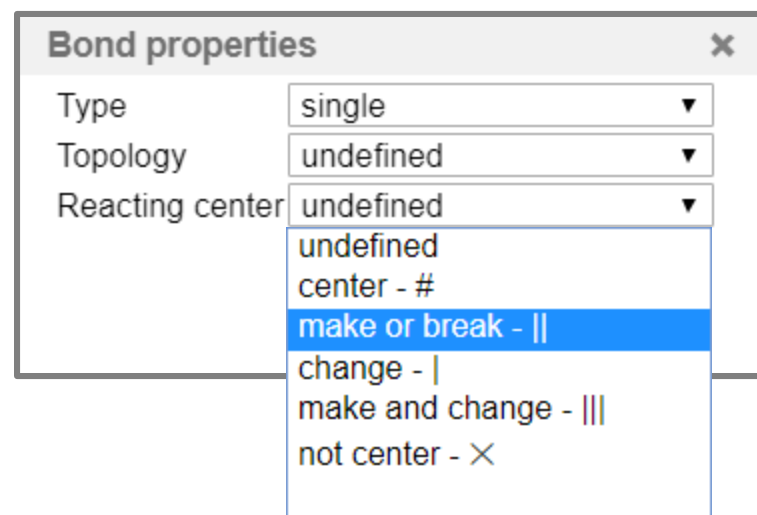
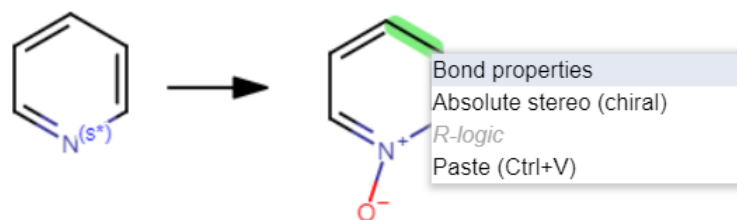
在鍵結上按右鍵，開啟 Bond Properties 選單，並根據需要修改設定。Type – 鍵結種類、Topology – 鍵結位於環上或碳鍊上、Reacting center – 反應前後鍵結是否生成、斷裂、或改變。



NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

建立或切斷化學鍵



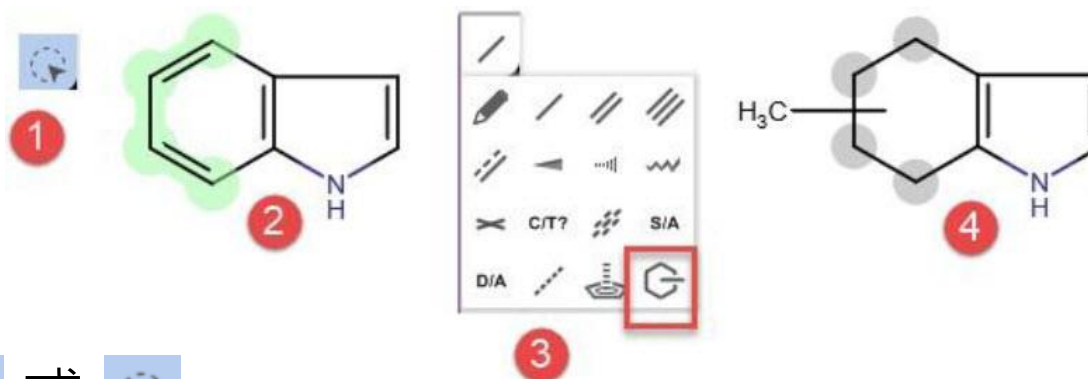
1. 在鍵結上按右鍵，打開 bond properties 選單。
2. 選擇 Reaction Center 選單中的 make or break。





NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

位置變異鍵 (Position Variation Bond)

不確定鍵結位置時使用

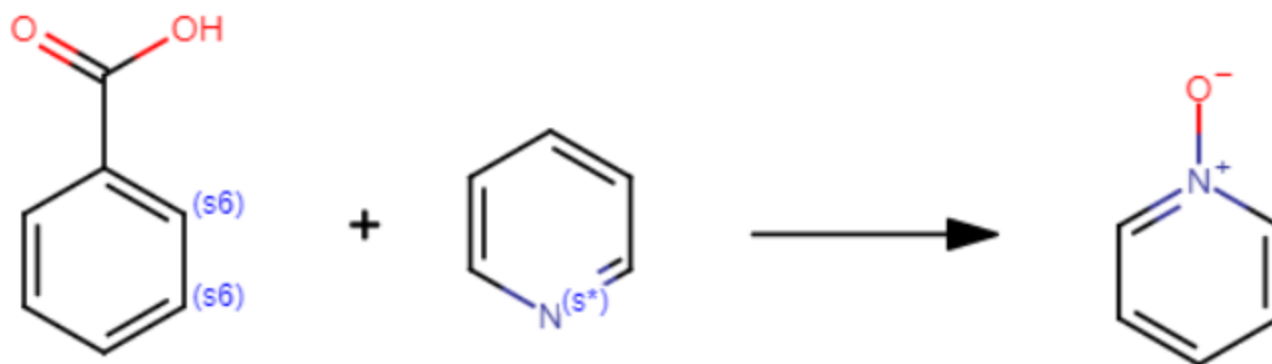


1. 點擊  或  。
2. 持續按住滑鼠按鍵，拖曳以選擇所有可能接上鍵結的原子。
3. 點擊  右下角三角形產開選單，選擇  。
4. 化學鍵上的原子可以修改，如不同元素、官能基等等。

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

繪製反應式




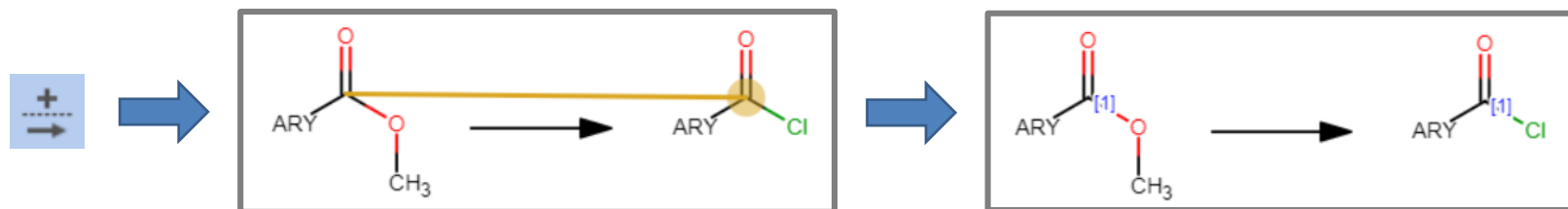
1. 點擊 ，可繪製反應式中的 \rightarrow 及 $+$ 。

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

原子配對 (Atom Mapping)

1. 畫出反應。
2. 點擊  按鈕。
3. 點擊反應物中的原子並將其拖曳至產物中的原子。
4. 配對的原子具有標記，重複步驟 3 則標記消失。



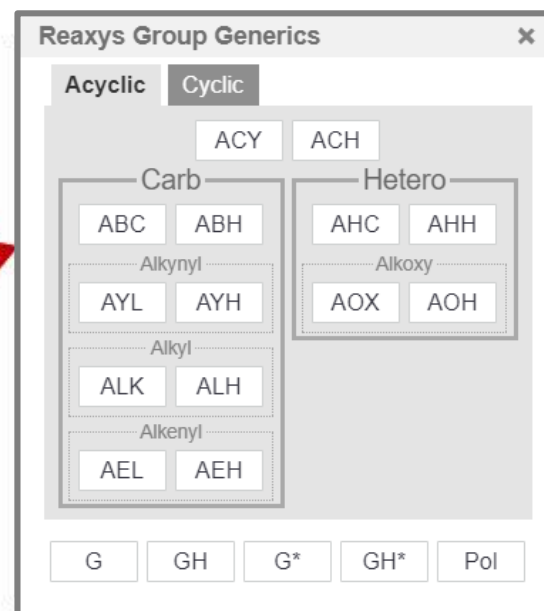
NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

Reaxys 預定義通用基團 (Predefined Generic Groups)

1. 點擊  。
2. 選擇 Acyclic 或 Cyclic 欄。

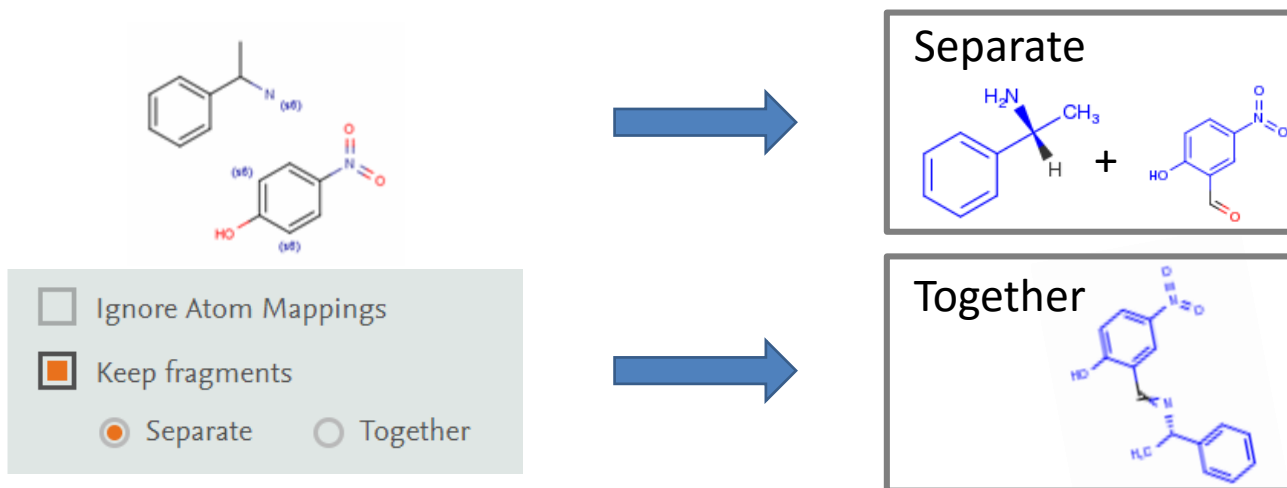
更多資訊請見 [Defining Generic Groups](#)



NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub

保持結構片段分離或合併



1. 點擊深色選單中的 more options (可能在上方或左方)
2. 點選「保持片段 (Keep fragments)」，使片段在搜尋結果中保持分離 (Separate) 或合併為一個分子 (Together)。

NewReaxys new.reaxys.com

中文FB www.facebook.com/ReaxysClub