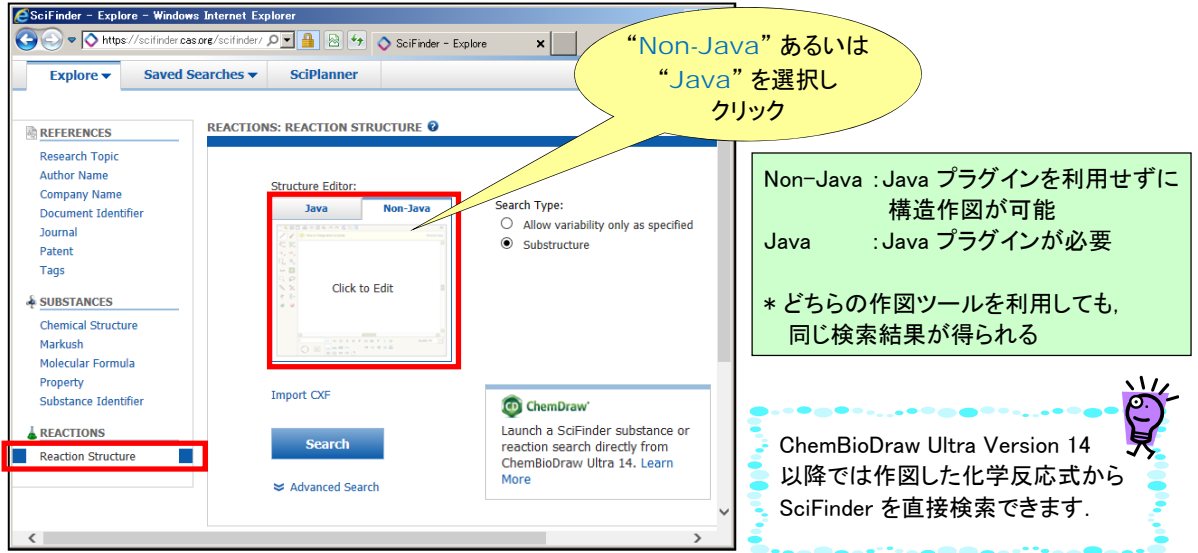


## 化学反応検索

- 化学反応を、生成物、あるいは反応物／試薬を指定し、部分構造で検索できます。
- 反応物、生成物の各々に対して、複数の構造フラグメントを作図することもできます。
- 反応サイトの指定、反応物と生成物中の原子マッピングにより検索精度を向上できます。

① “Non-Java” タブあるいは “Java” タブを選択し、反応作図画面を起動します。



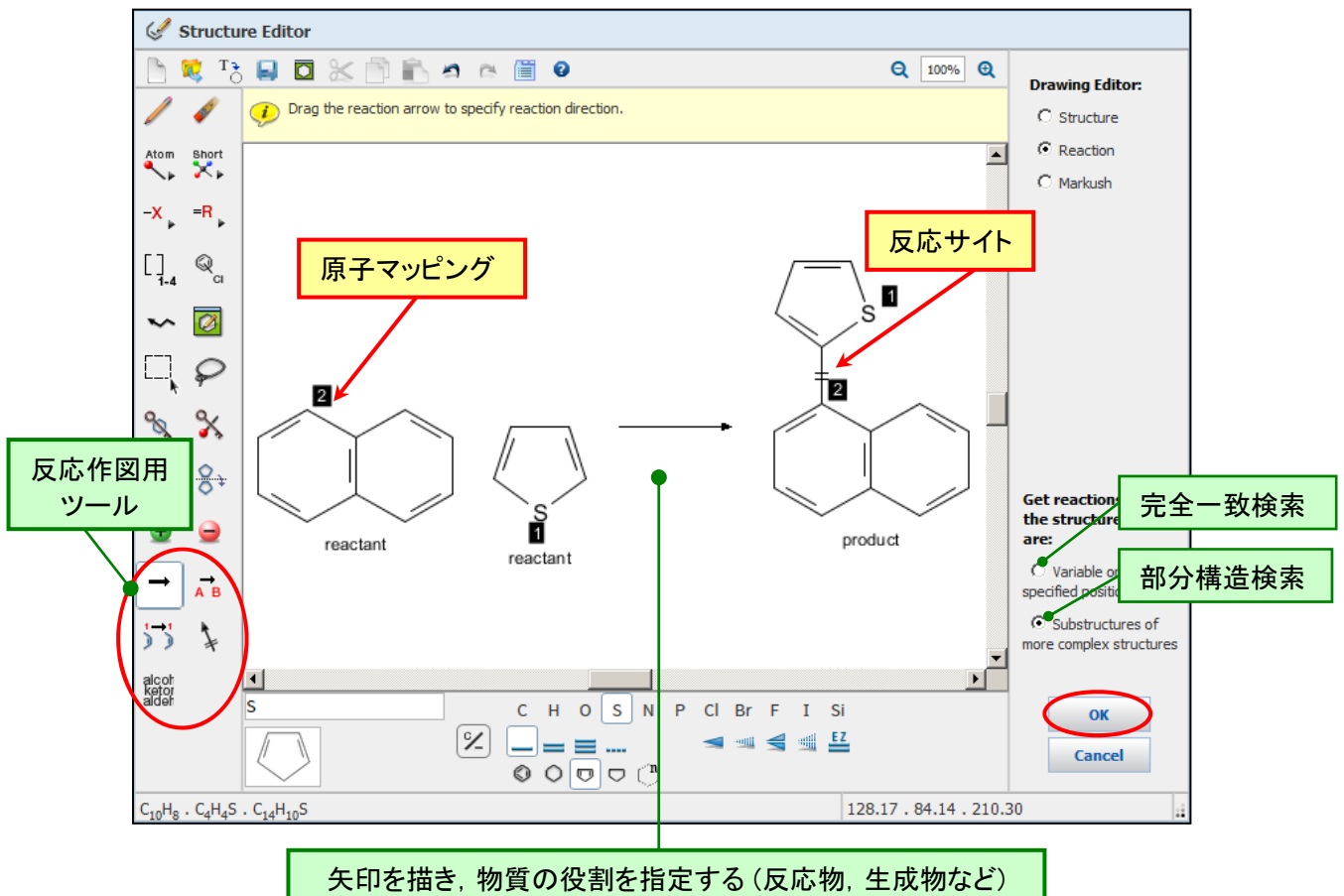
“Non-Java” あるいは “Java” を選択し クリック

Non-Java : Java プラグインを利用せずに 構造作図が可能  
Java : Java プラグインが必要

\* どちらの作図ツールを利用してても、 同じ検索結果が得られる

ChemBioDraw Ultra Version 14 以降では作図した化学反応式から SciFinder を直接検索できます。

② 反応式を作図し、検索条件を選択します。



原子マッピング

反応サイト

反応作図ツール

完全一致検索

部分構造検索

OK

矢印を描き、物質の役割を指定する (反応物, 生成物など)

## 化学反応検索

- ③ “Search” ボタンをクリックし、検索を実行します。Advanced Search をクリックすると、反応情報の由来やステップ数を限定することも可能です。

Advanced Search をクリックすると限定項目が表示される

溶媒の種類

反応に関与しない官能基

- ④ 検索結果が類似度の順に表示されます。“View Reaction Detail” をクリックすると詳細情報が参照できます。また、“Overview”, “Experimental Procedure” は、▼ をクリックすることで表示・非表示を選択できます。

回答件数

クリックして詳細情報へ

カタログ情報へのリンク

実験項情報

文献情報へのリンク

1 反応タイプ別、あるいは文献単位別にグルーピングできる (10 万件以下)。

2 回答のソートができる (20,000 件以下)。昇順・降順の指定も可能。

3 1 ページあたりの回答の表示件数 (最大 50 件) や反応式以外の情報の表示・非表示を選択できる。

## 化学反応検索

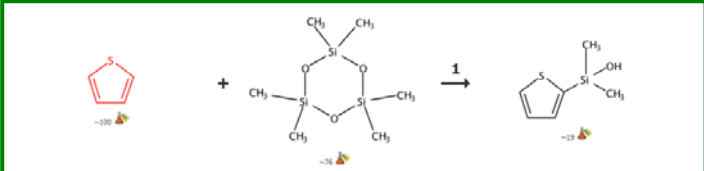
⑤ 反応詳細画面では、多段階反応の中間体の確認や、各ステップでの収率が確認できます。

C : 62586-36-1 🔍

物質の名称や構造、CAS 登録番号にカーソルを合わせ、🔍をクリックすると、物質情報が確認できる

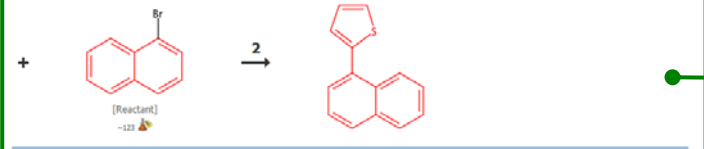
REACTION DETAIL Get Reference Detail Link to Other Sources Send to SciPlanner

30. 2 Steps *Hover over any structure for more options.*



Overview	Notes	Yield
<b>1</b> 1.1 R:BuLi, S:Et <sub>2</sub> O, S:Me(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> Me, rt → -70°C, 5 min, -70°C; -70°C → rt; 2 h; rt → -71°C 1.2 16 h, -71°C → rt; rt → 0°C 1.3 R:ACONa, S:CH <sub>2</sub> O, 0°C, pH 5.0	Reactants: 2, Reagents: 2, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 3	<b>72%</b>

Experimental Procedure



Overview	Notes	Yield
<b>2</b> 2.1 R:NaNH, S:PhMe, rt C:62586-36-1, 7 h, 50°C 2.3 S:CH <sub>2</sub> O, S:ACDEt	Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 3	<b>74%</b>

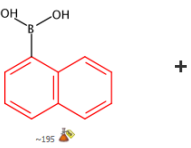
第 1 段階

第 2 段階

⑥ 各反応関与物質に付与されたリンクから、物質の詳細や文献、カタログ情報、反応などの情報をさらに検索・表示できます。

6. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*

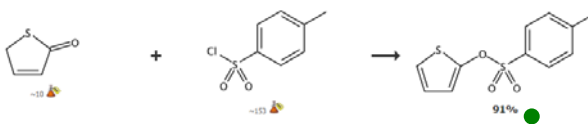


Overview	Notes	Product
<b>1.1</b> C: Pd(OAc) <sub>2</sub> , C: 564483-18-7, S: BuOH, 15 min, 25°C <b>1.2</b> R: K <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> , S: H <sub>2</sub> O, 5 min, 25°C	CAS Registry Number: 1027005-83-9 View Substance Detail Explore by Structure Synthesize this... Get Reactions where Substance is a Get Commercial Sources Get Regulatory Information Get References Export as Image Send to SciPlanner References	Product Reactant Reagent Reactant/Reagent Catalyst Solvent Any Role

この反応の原料を合成する方法を調べる。  
Synthesize this... をクリックしても同様の結果が得られる。

1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*



Overview	Notes	References
<b>1.1</b> R: Et <sub>3</sub> N, S: CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> , 15 min, 0°C <b>1.2</b> C: 4-DMAP, 30 min, 0°C → 25°C; 2 h, 25°C	slow addition of triethylamine stage 1, portionwise addition of TsCl stage 2, Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2, Most stages in any one step: 2	Room temperature and tosylates Quick View By Yang, Jianfeng From European

指定した物質を生成物とする反応

💡 ヒント

化学物質から「Get Reactions」を利用して反応検索も可能。