

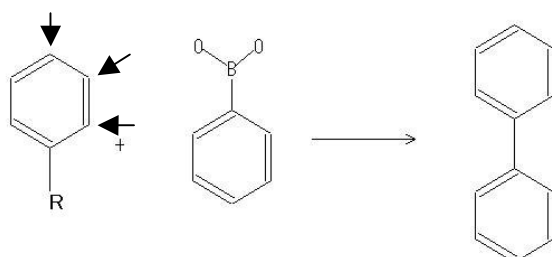
2006 年 12 月
社団法人 化学情報協会

■ SciFinder Scholar の反応検索

- ・ 化学反応式からの検索 (検索例 1)
 - 化学構造を作図し, その構造に完全に一致する化学物質の反応だけでなく, 部分構造を持つ化学物質の反応の検索も可能です!
- ・ 官能基検索 (検索例 2)
 - 例えばアルコールからケトンへの酸化反応といった検索が可能です!
- ・ 官能基と構造を組み合わせた検索も可能です! (検索例 3)
- ・ リンク機能により, 興味ある化学物質を合成している反応や, 生成物として得られる反応, ある試薬が販売されているかどうかなども簡単に調べることができます (検索例 1)

■ 検索例

1) 下記の反応を検索する



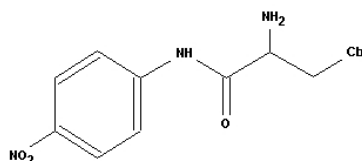
R : Cl, O
→ のところのどこかには少なくとも窒素原子が 1 つ置換している
指定していないところは, 何が置換してもよい.

窒素には C と H どちらか一つ置換しているものに限定
収率が 70 % 以上のものに限定
興味ある触媒を使っている反応に限定した検索

さらに限定

2) 第一級アルコール存在下で, 第二級アルコールのみがケトンへ酸化される反応を検索する

3) 下記の化学物質とカルボン酸が反応して, アミドが生成する反応を検索する

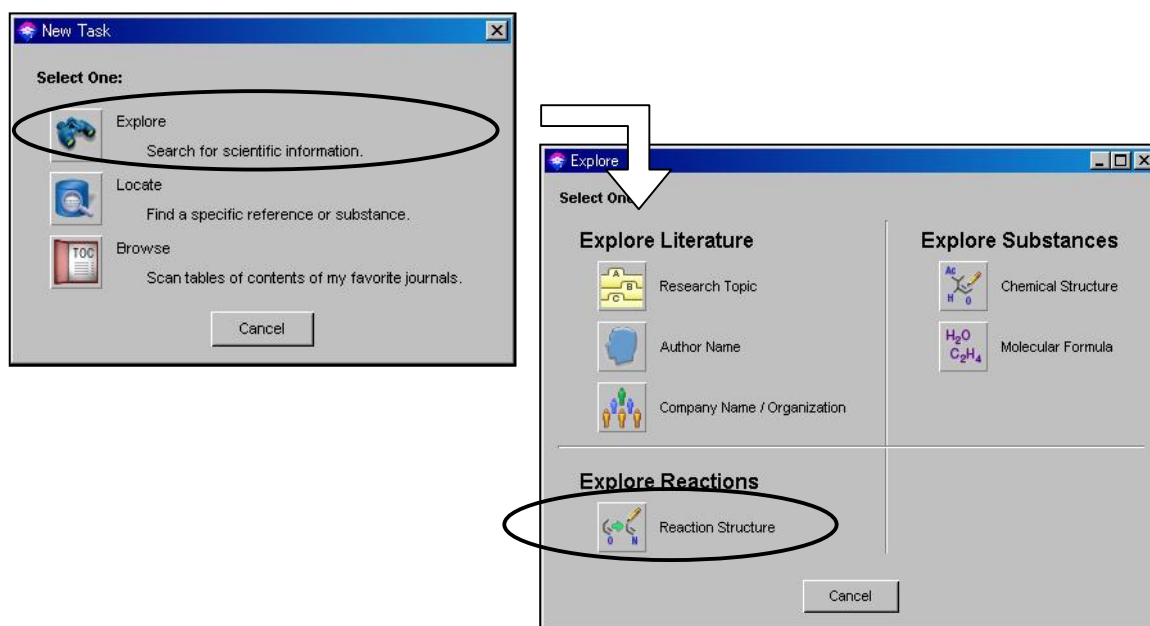


■ その他の便利な作図機能 / エラーメッセージへの対応方法

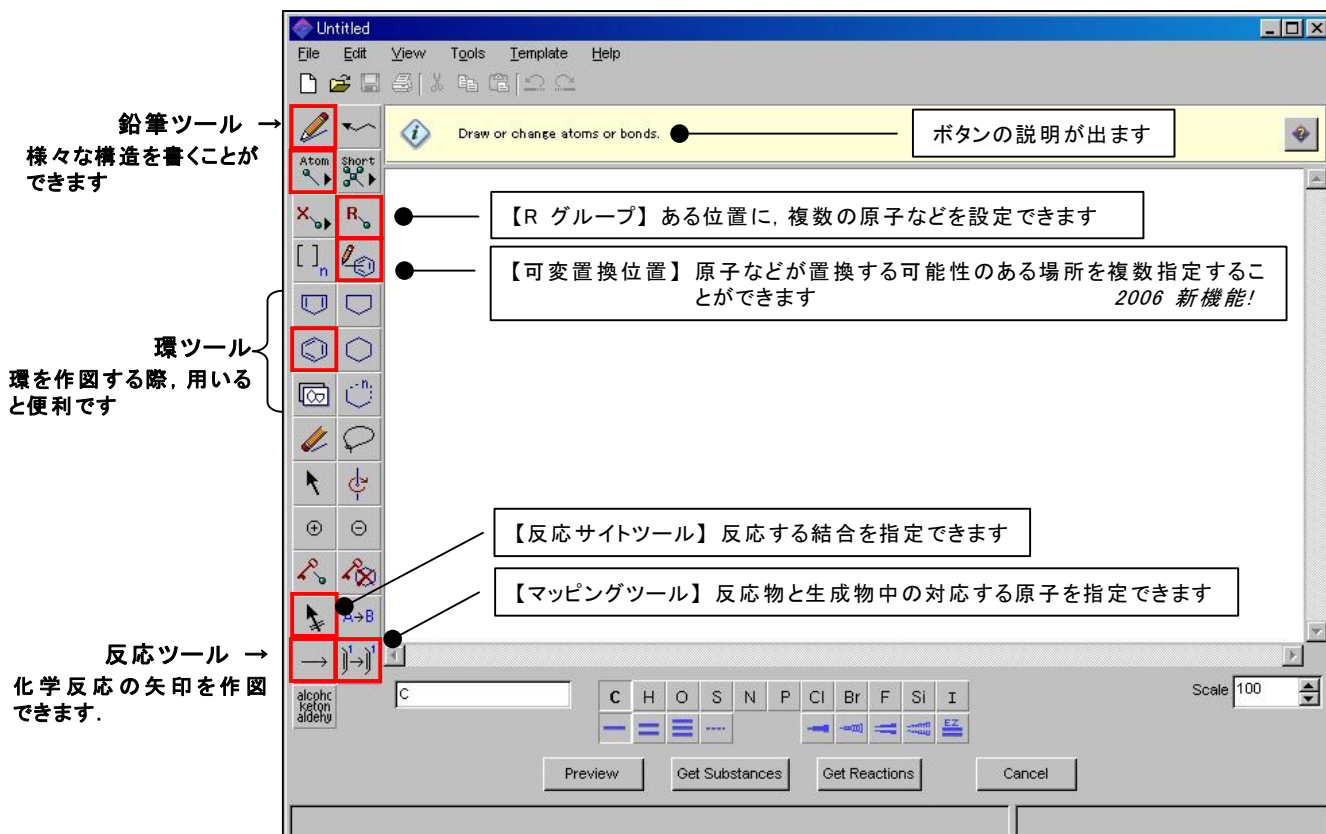
検索例 1：ある化学反応式から検索する

Step 1 化学反応式の作図

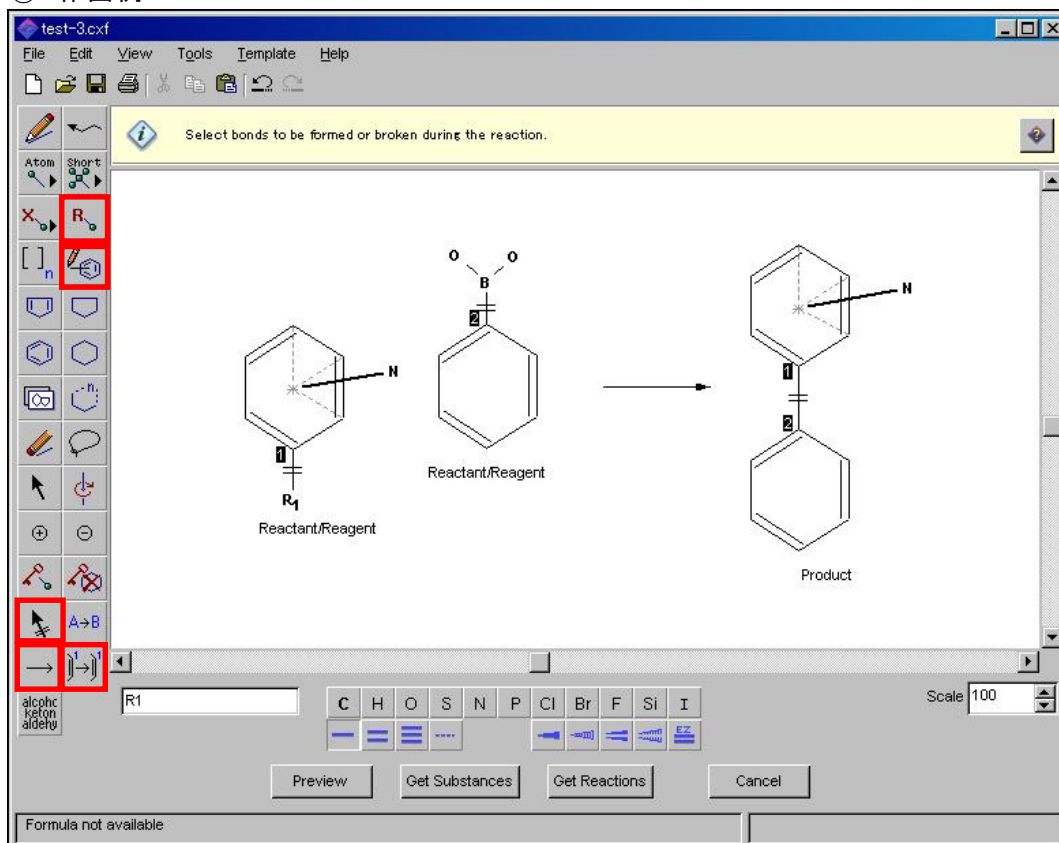
- ① まず, SciFinder Scholar を起動します. New Task 画面から, Explore ボタンをクリックします. 次に, Explore 画面が立ち上がりましたら, Explore Reactions の Reaction Structure をクリックします.



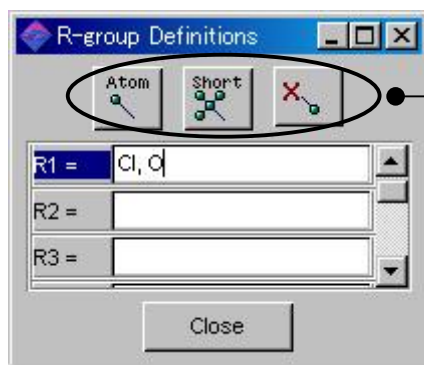
- ② 構造作図画面に切り替わります (今回の作図で利用するボタンです)



③ 作図例



【R グループ】ある位置に、複数の原子などを設定できます

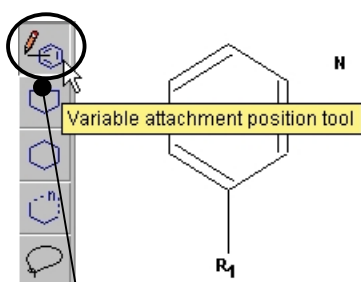


R 中の指定は、このボタンから行います。
R₁ = Cl, O と定義すると、R₁ は、塩素か酸素の原子になります

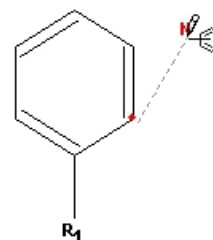
他にも、R₁ = X (ハロゲン一般: 右側のボタンから指定),
OH (官能基ショートカット: 真ん中のボタン) など
といった指定もできます



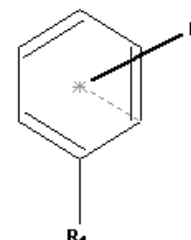
【可変置換位置】原子などが置換する可能性のある場所を複数指定することができます
注意) 結合指定先は、環のみ



結合させたい原子を離して書いた
のち、可変置換位置のボタンをクリックします



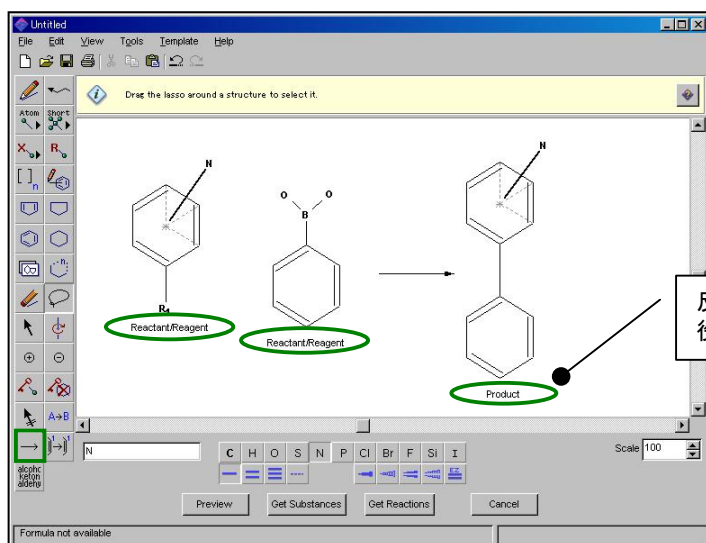
置換する可能性のある一
つの場所と、原子をつな
ぎます



指定できると図のようになり
ます。その他の置換する可能性
場所にも同様に指定します



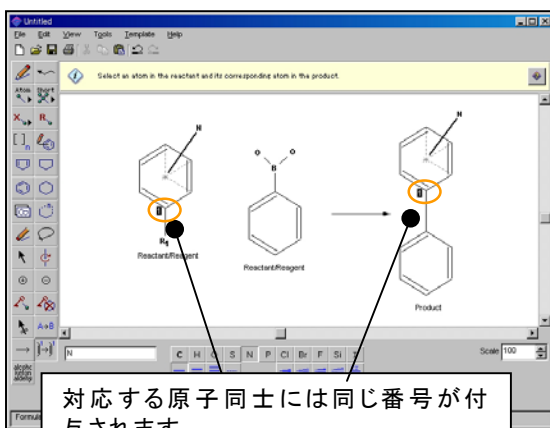
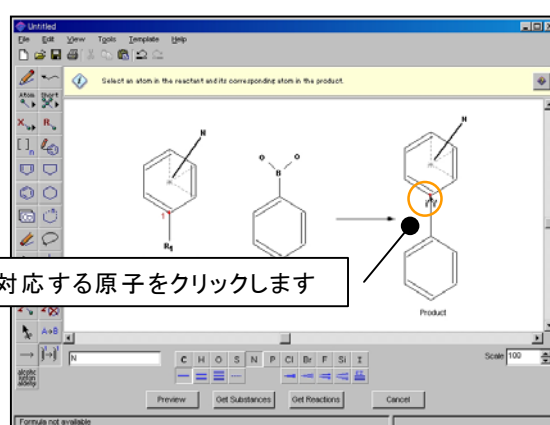
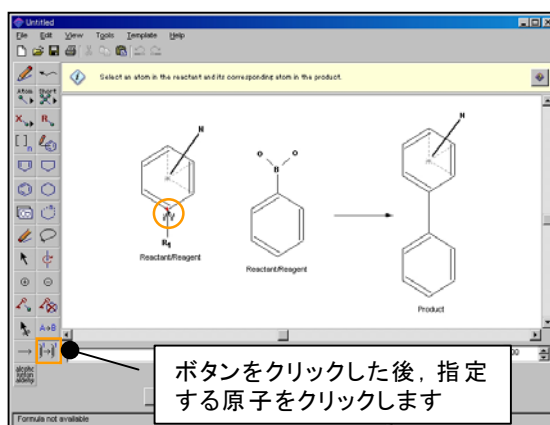
【反応ツール】 化学反応の矢印を作図し、反応物と生成物の指定を行います



反応の矢印を作図すると、矢印の向きにあった役割（反応物/試薬、生成物）が付与されます

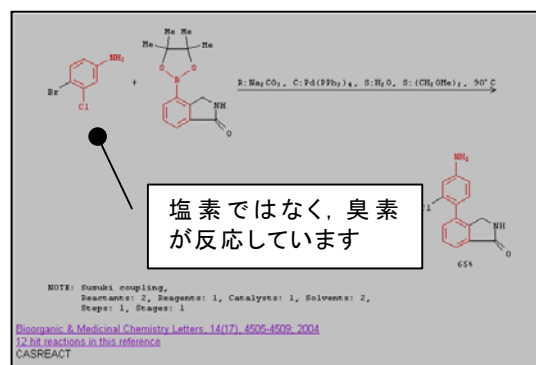


【マッピングツール】 反応物と生成物中の対応する原子を指定できます



対応する原子同士には同じ番号が付与されます
指定する際には、反応点の近傍を数点指定するのがオススメです。
(多く指定しすぎると、ヒット数が少なくなります)

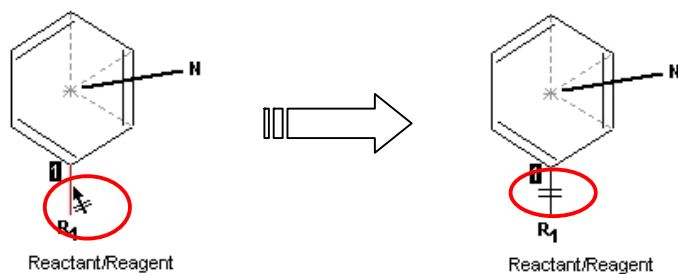
【注意】 マッピングを設定せずに、反応検索を行うと、「反応物と生成物にそれぞれ作図した構造を含む反応」が検索されますので、目的以外の回答も含まれる場合があります。



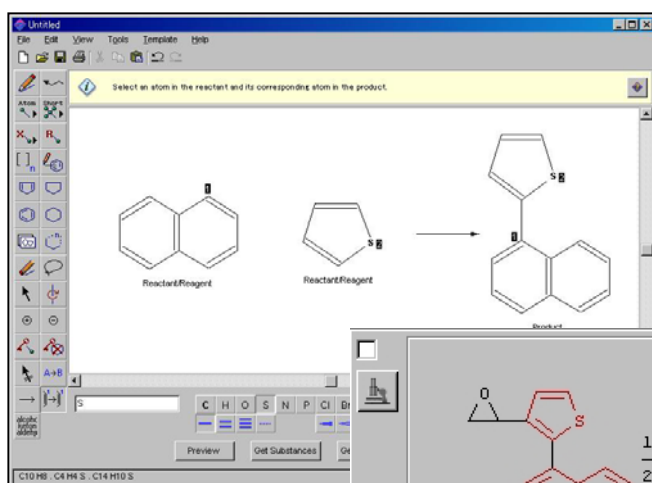


【反応サイトツール】 反応する結合を指定できます

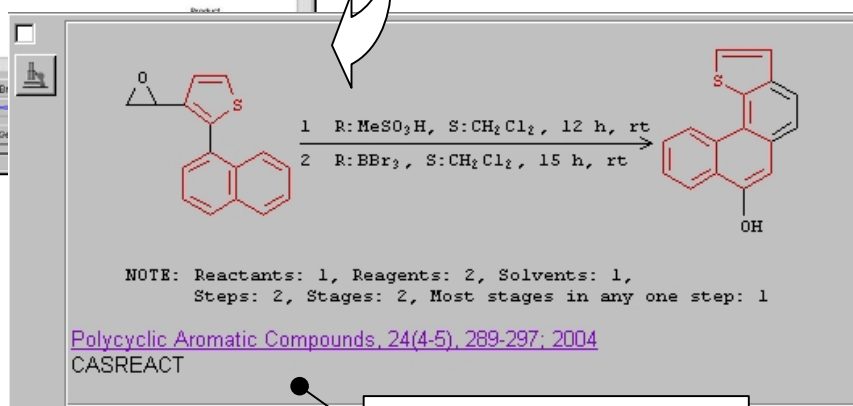
「反応サイトツール」 ボタンをクリックした後、指定したい結合にカーソルを合わせ、クリックします。



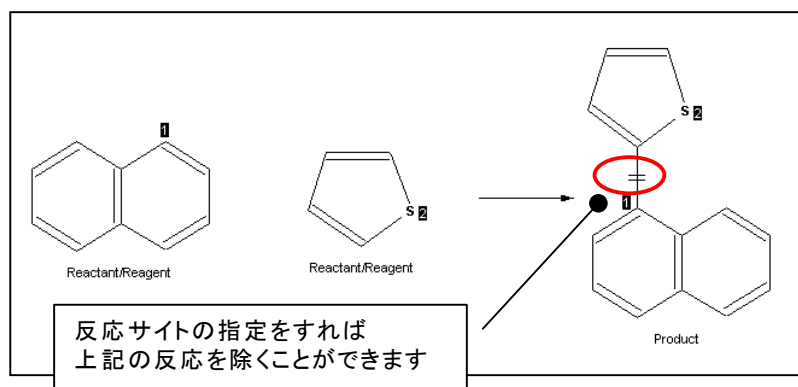
【注意】 反応サイトを指定しない場合には、下記のような反応も含まれてしまいます。



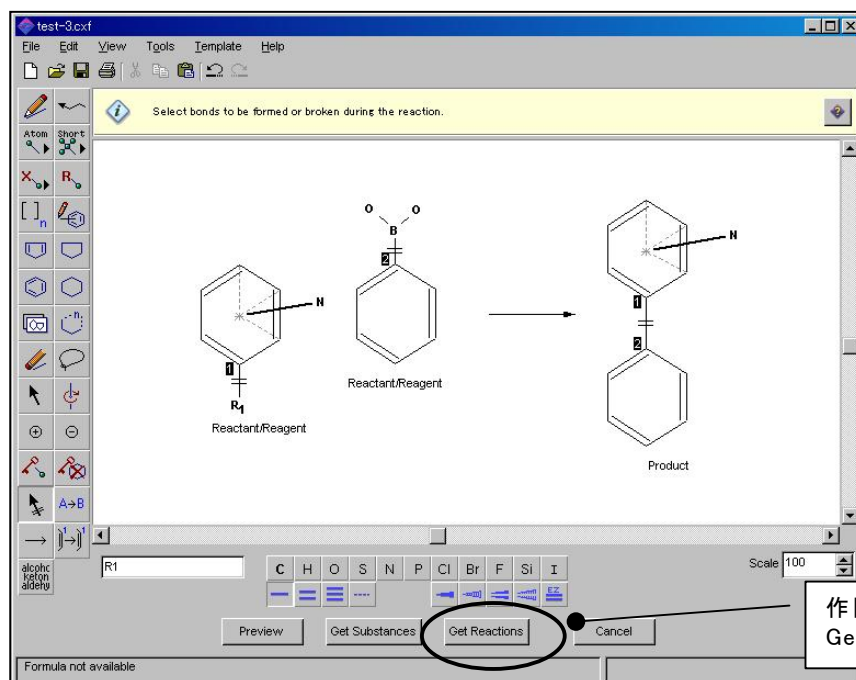
反応サイトを指定しない場合には、
反応物や、生成物に作図した構造が
含まれる反応を検索するので...



このような、ノイズも含まれます



Step 2 化学反応検索



作図が終了しましたら、
Get Reactions ボタンを押します

- ④ Get Reactions ボタンをクリックすると、Get Reactions ダイアログボックスが表示されます。今回は substructures of more complex structures を選び、OK ボタンをクリックします。
また、Filters の設定を行うと、あらかじめ指定した回答のみに限定することができます。

指定していないところは、すべて水素が置換している反応を検索

作図で指定していないところはあらゆる置換を許容した反応を検索

← 反応ステップ数 例：2 ステップ以内 -2

← 反応の分類

← 出典による分類

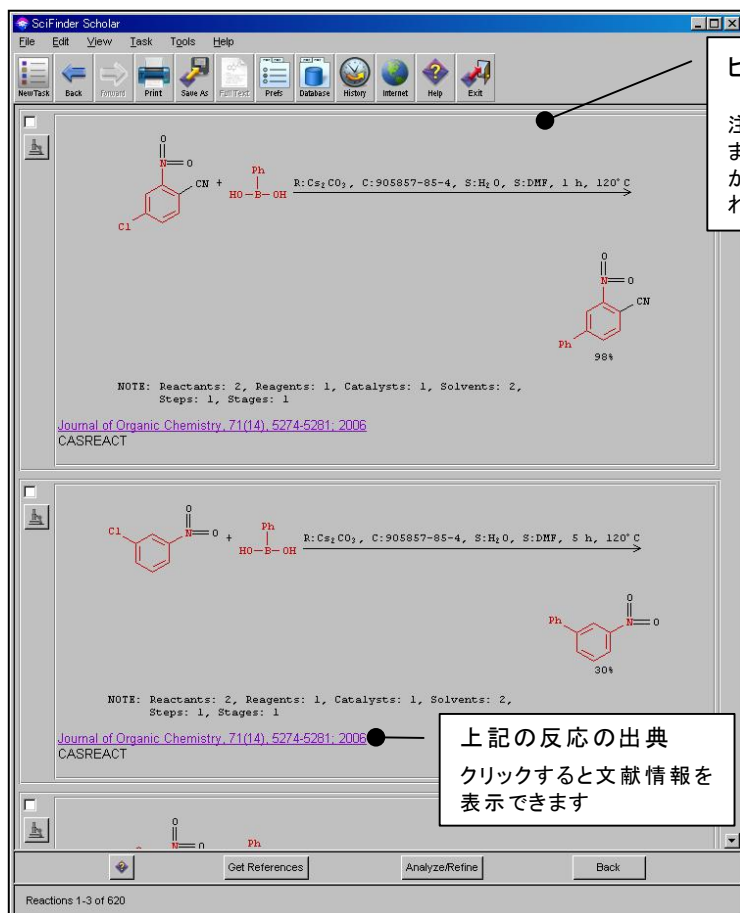
・ 特許 と 特許以外に分類できる

← 出典文献の発行年

例：1980 年以降 1980-

Filters の設定をすると、検索結果をあらかじめ特定の回答に限定することができます。
なお、ここで指定しない場合でも、後で指定することはできます。

Step 3 回答表示 -1 反応情報



ヒットした構造部分は赤くハイライトされます

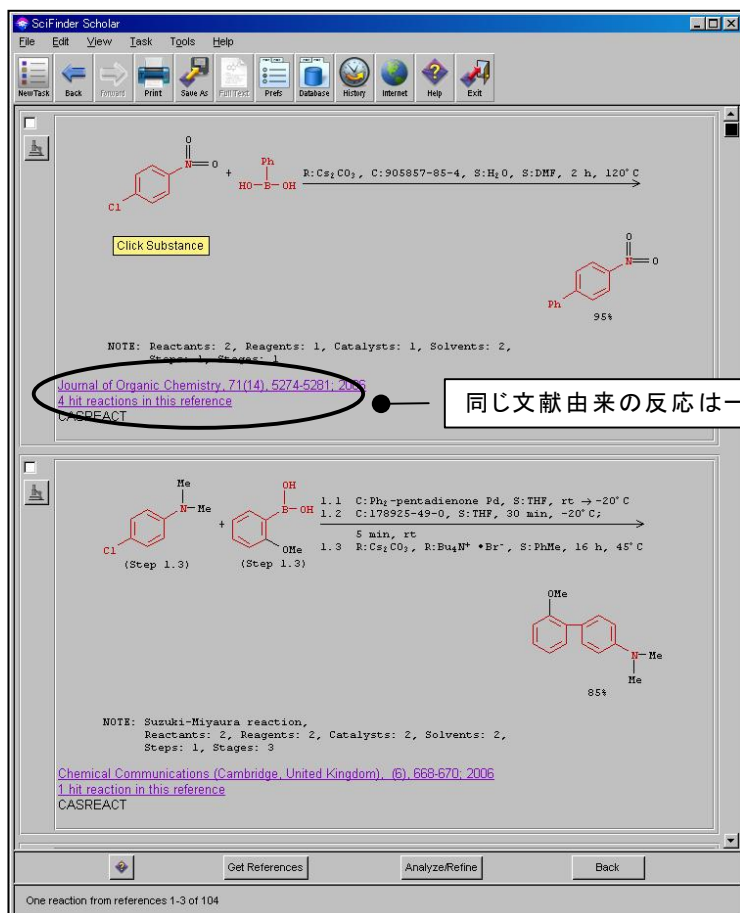
注意)
 まれにハイライトがない反応が含まれることがありますが、これは、システムが目的の反応かどうかを判断しきれなかった場合です。

回答は、ヒットした反応ごとに表示されます。従って、ヒットした多くの反応の出典が、ある一つの文献だったということもあります。

上記の反応の出典
 クリックすると文献情報を表示できます

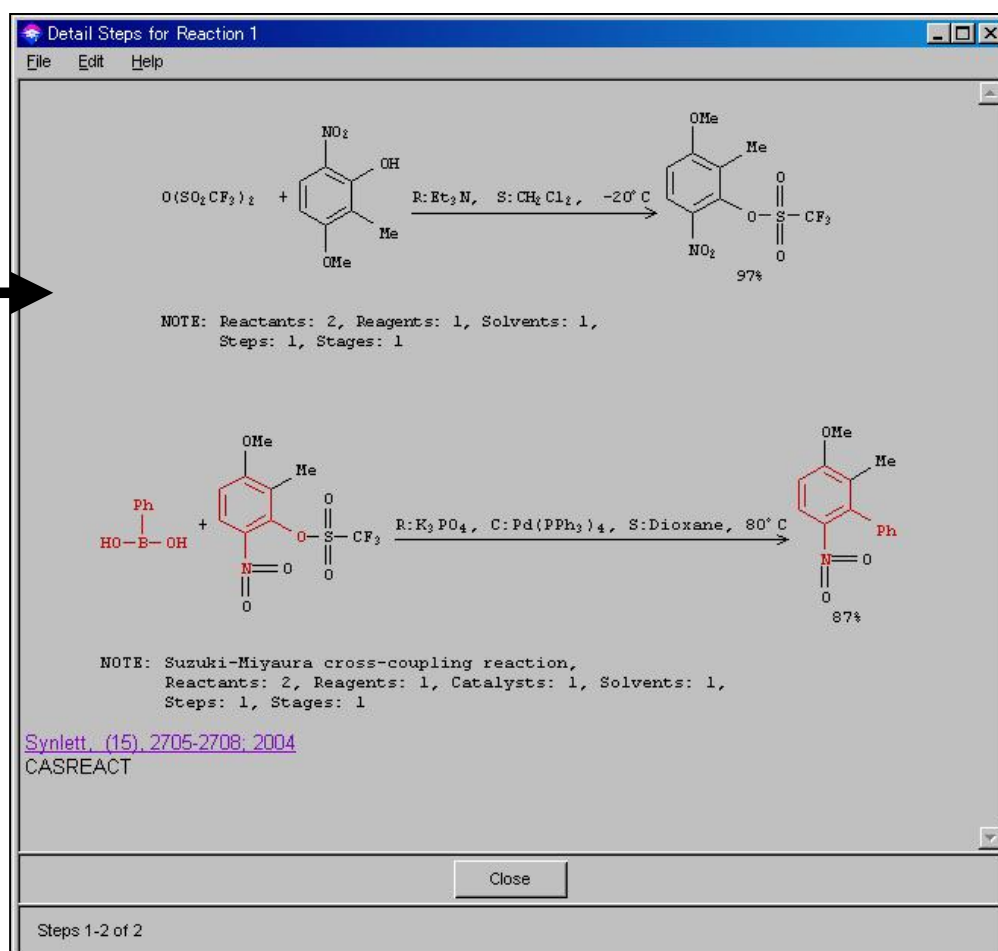
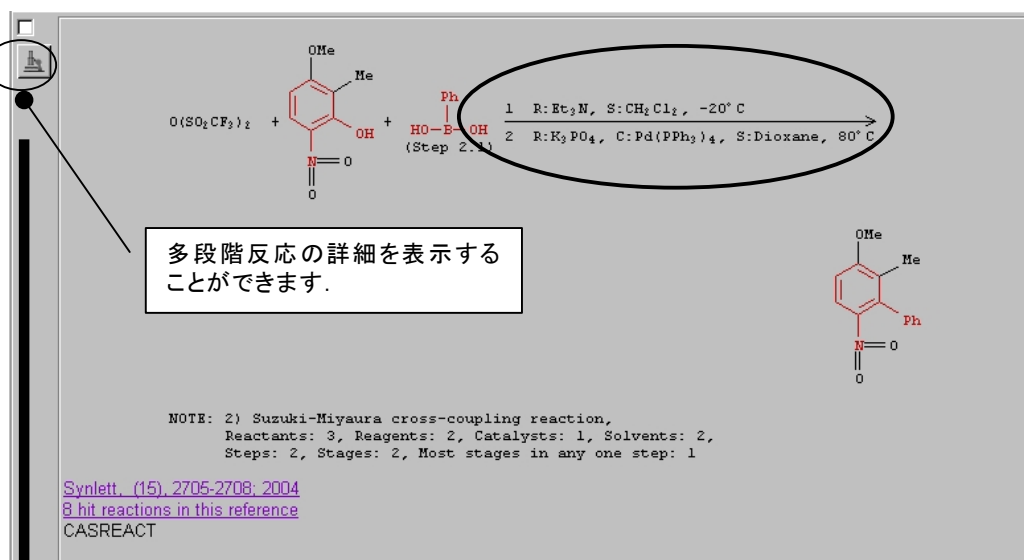
文献単位で表示したい場合には...

View メニューから
 One Reaction per Reference
 を選択します



同じ文献由来の反応は一つにまとめられています

Step 3 回答表示 -2 関連情報の表示 (多段階反応の中間体の表示)



Step 3 回答表示 -2 関連情報の表示 (特定の化学物質の関連情報の表示)

化学構造図や、試薬 (名称・CAS 登録番号) にポインタを合わせて、クリックすると、その物質の関連情報を表示することができます

指定した化学物質が、生成物の反応を表示

NOTE: Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Steps: 1, Stages: 1
[Journal of Organic Chemistry, 71\(14\), 5274-5281; 2006](#)
 4 hit reactions in this reference
 CASREACT

NOTE: Safety, BF₃ complexes are highly irritating and toxic, superacidic, regioselective, Reactants: 1, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1
[Journal of Organic Chemistry, 71\(10\), 3952-3958, 2006](#)
 1 hit reaction in this reference
 CASREACT

NOTE: regioselective, solid-supported catalyst, 64:36 para:ortho, MCM-41 used, Reactants: 1, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 1
[Applied Catalysis, A: General, 295\(2\), 170-176, 2005](#)
 1 hit reaction in this reference
 CASREACT

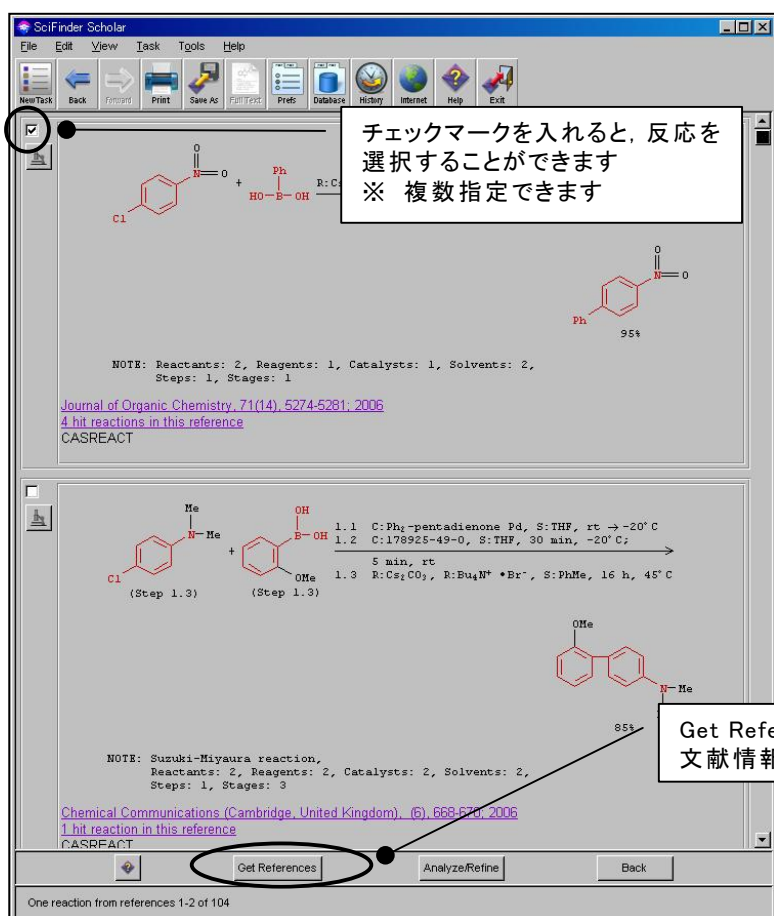
試薬 (名称・CAS 登録番号) にポインタを合わせて、クリックすると、同様に関連情報を見ることができます

Substance Detail をクリックすると、その構造が分かります。
 また、Commercial Sources から、その化学物質の市販先が分かります

Registry Number: 905857-85-4
 Component Registry Number: 905857-84-3
 Formula: C₁₅ H₁₇ Cl N₅ Pd

Component Registry Number: 14874-70-5
 Formula: B F₄

Step 3 回答表示 -2 関連情報の表示 (文献情報の表示)



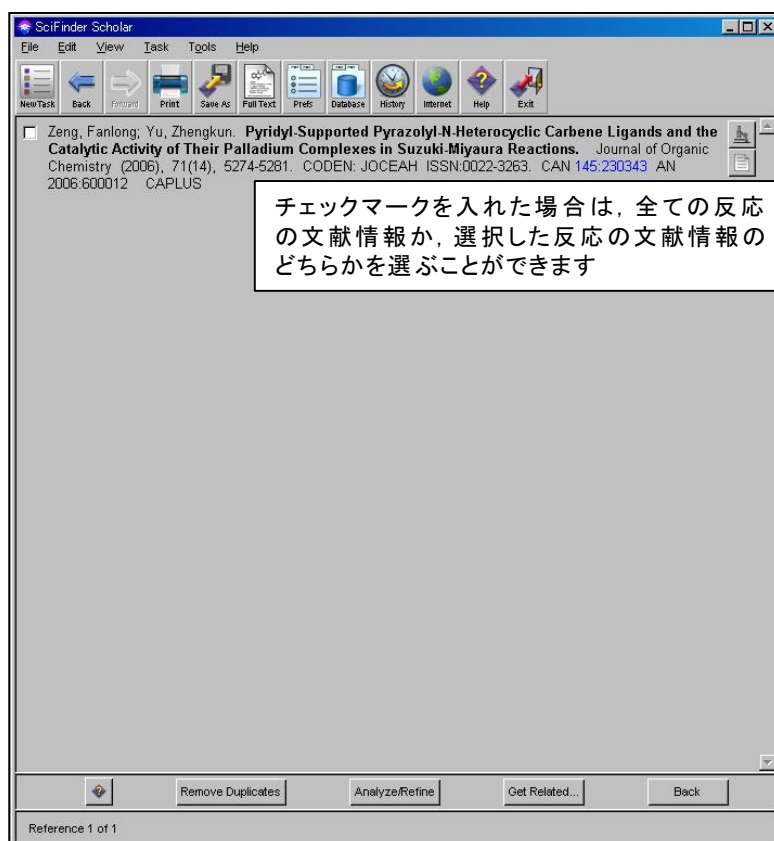
チェックマークを入れると、反応を選択することができます
※ 複数指定できます

NOTE: Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 1
[Journal of Organic Chemistry, 71\(14\), 5274-5281, 2006](#)
[4 hit reactions in this reference](#)
CASREACT

NOTE: Suzuki-Miyaura reaction, Reactants: 2, Reagents: 2, Catalysts: 2, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 3
[Chemical Communications \(Cambridge, United Kingdom\), \(6\), 668-670, 2006](#)
[1 hit reaction in this reference](#)
CASREACT

Get References

Get References を選択すると文献情報を表示できます

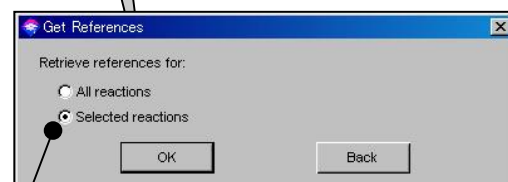


チェックマークを入れた場合は、全ての反応の文献情報か、選択した反応の文献情報のどちらかを選ぶことができます

Zeng, Fanlong; Yu, Zhengkun. **Pyridyl-Supported Pyrazolyl-N-Heterocyclic Carbene Ligands and the Catalytic Activity of Their Palladium Complexes in Suzuki-Miyaura Reactions.** *Journal of Organic Chemistry* (2006), 71(14), 5274-5281. CODEN: JOCEAH ISSN:0022-3263. CAN 145:230343. AN 2006:600012 CAPLUS

Remove Duplicates Analyze/Refine Get Related... Back

Reference 1 of 1



Get References

Retrieve references for:

☐ All reactions

☒ Selected reactions

OK Back

もっと便利に！ < 回答の絞り込み -1 : Refine ボタン >

- ⑤ さらに回答を限定したいときには、Analyze/Refine ボタンをクリックします。Analyze と Refine ボタンが出てきますので、目的にあわせてどちらかを選択します。
今回は、Refine を選択し、さらに反応式を使って限定するために、Reaction Structure を選択します。

Journal of Organic Chemistry, 71(14), 5274-5281; 2006
4 hit reactions in this reference
CASREACT

Get References Analyze/Refine

One reaction from reference 1 of 104

回答の解析・絞り込みを行うことができます

【Analyze ボタン】
雑誌名、反応ステップ数、発行年などの解析ができます
また、解析結果を用いて、目的の回答に絞り込むこともできます

【Refine ボタン】
構造や、収率、反応ステップ数や反応分類からさらに回答を絞り込むことができます

Analyze or Refine

Select One:

Analyze
Display histograms by Journal, Number of steps, Publication Year, etc.

Refine
Narrow your answer set by Structure, Yield, Number of steps, Classifications, etc.

Cancel

Analyze

Display histograms by Journal, Number of steps, Publication Year, etc.

Analyze Reactions

Analyze By:

☒ Catalyst ☐ Number of Steps in Reaction

☐ Solvent ☐ Product Yield

☐ Author ☐ Journal Name

☐ Company/Organization ☐ Language

☐ Document Type ☐ Publication Year

☐ Analyze only selected reactions

☒ Analyze all reactions

☐ Sort results alphabetically

☒ Sort results by frequency

OK Cancel

Refine

Narrow your answer set by Structure, Yield, Number of steps, Classifications, etc.

Refine Reactions

Refine by:

Reaction Structure
Limit results by structural information.

Product Yield
Limit results by product yield.

Number of Steps
Limit results by number of steps.

Reaction Classification
Limit results by reaction classification.

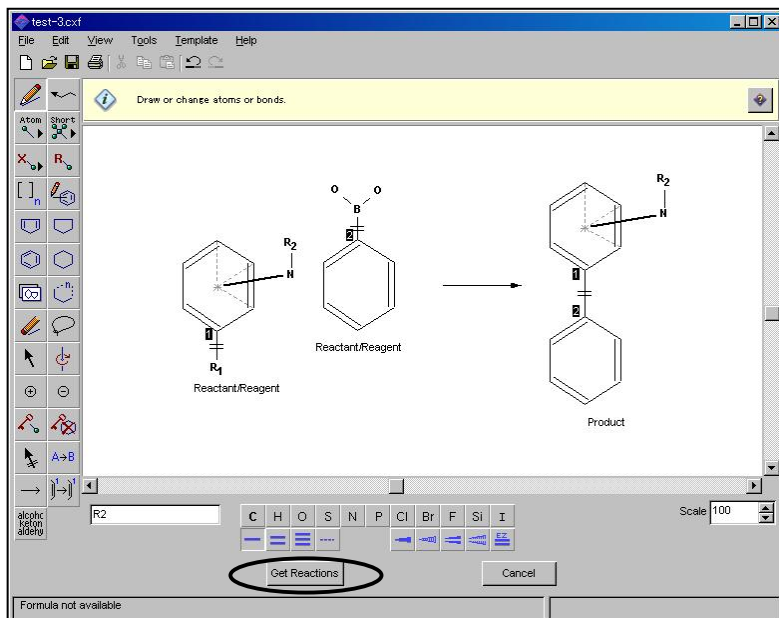
Cancel

今回は、さらに反応式を限定することになります。
反応ステップ数もよく使われる絞りこみの項目です。(例：1段階反応に限定する)

- ⑥ 最初の作図した検索画面が出てきますので、さらに指定します。

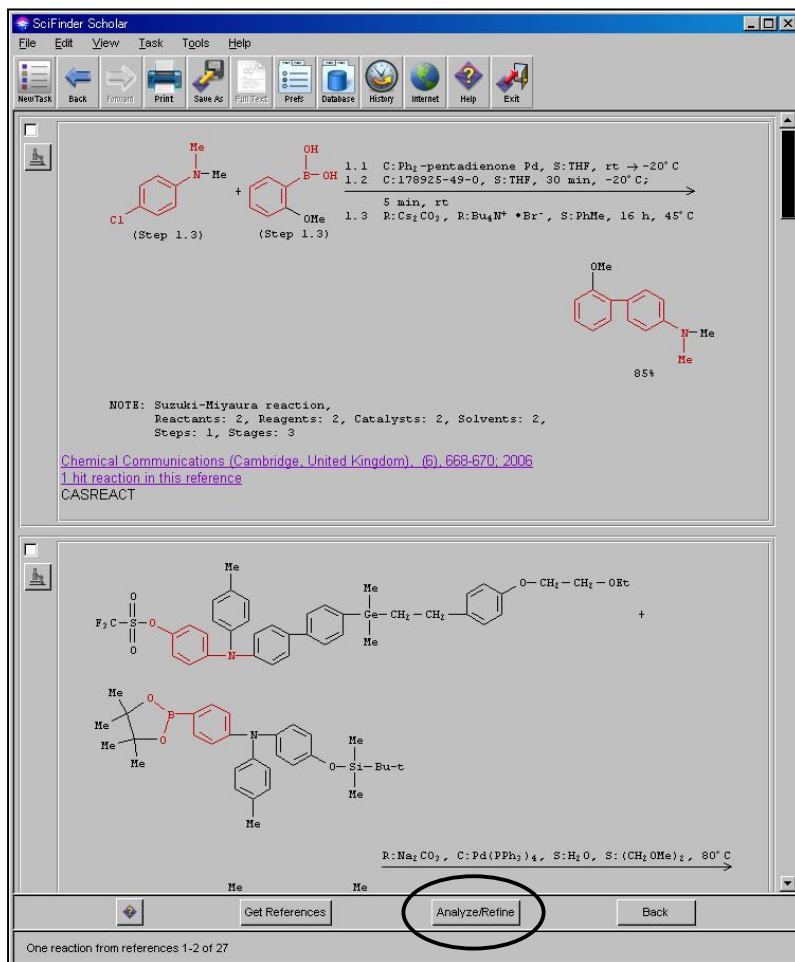
検索結果をブラウズした結果、N 原子に対応する置換基としては、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NMe}_2$ 、 $-\text{NHCO}-$ があることが分かりました。そこで、 $-\text{NO}_2$ を除くために、今回の場合には、窒素原子に一つ以上の H あるいは C がついているものに限定します。

作図が終わったら、Get Reactions ボタンを押します。



$\text{R}_2 = \text{H}, \text{C}$

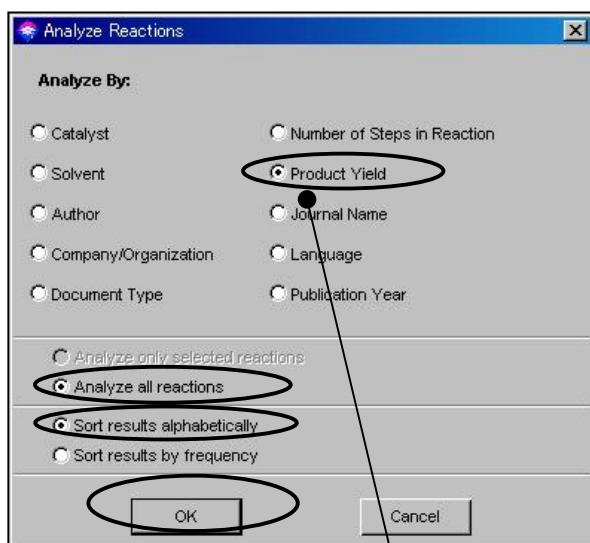
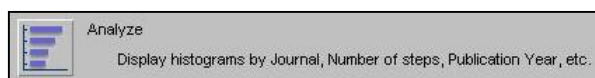
- ⑦ 回答が表示されました。次に、低収率の反応を除くため、反応収率で絞りこみを行います。先ほどと同様に Analyze/Refine ボタンをクリックします。



もっと便利に！ < 回答の絞り込み -2 : Analyze ボタン >

Analyze ボタンでは、回答を解析することができますが、解析結果を用いてさらに回答を限定することができます。

- ⑧ 回答を解析するため Analyze/Refine ボタンをクリックした後、Analyze ボタンをクリックします。Analyze Reactions ダイアログボックスが出現しますので、【解析項目】、【解析対象】、【解析結果の表示順】を選択したのち、OK をクリックします。



【解析項目】

触媒	反応ステップ数
溶媒	反応収率
著者	雑誌名
所属機関	出典文献の言語
資料種類 (特許、雑誌由来など)	発行年

【解析対象】

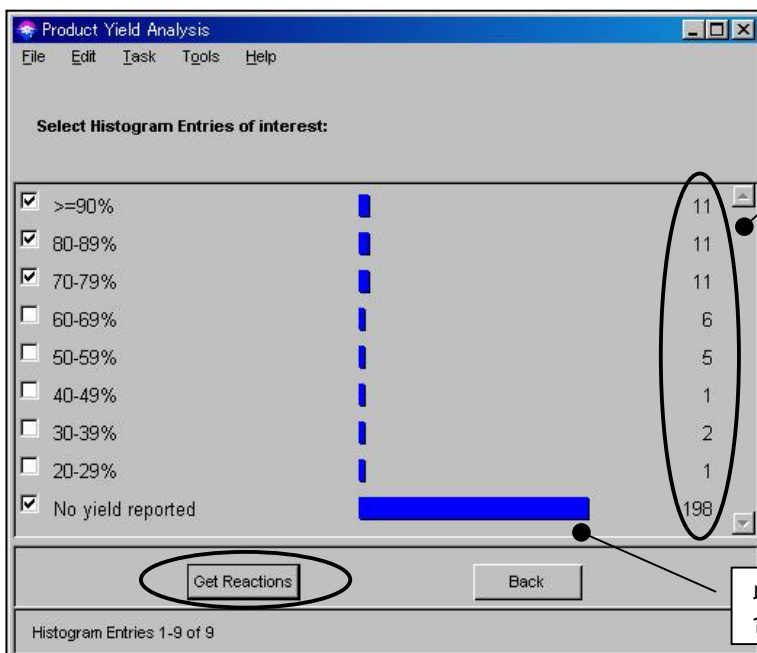
選択ボタンで選択した反応
全ての反応

【解析結果の表示順】

解析結果をアルファベット順に表示
解析結果を頻度順に表示

今回は、この反応の収率を解析します
解析対象は全ての反応、さらに解析結果はアルファベット順で表示します

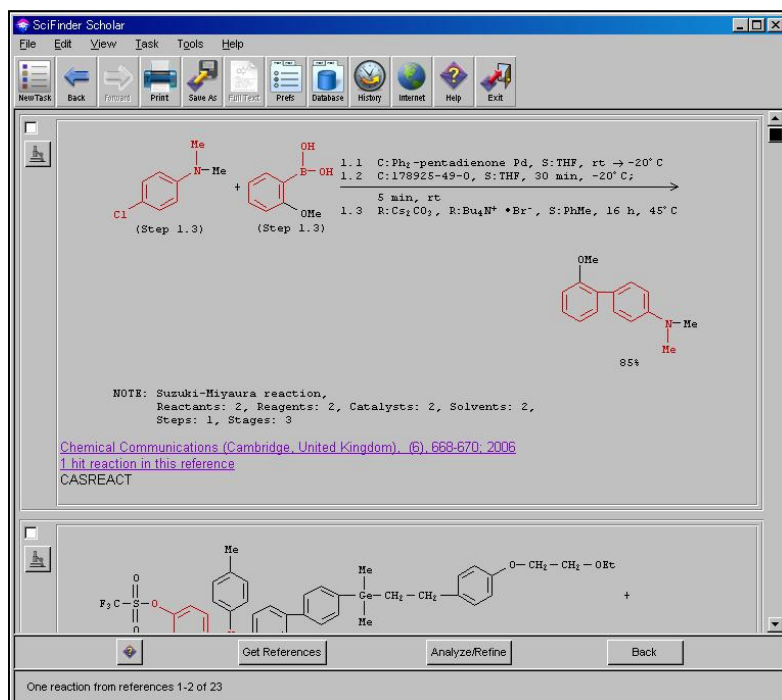
- ⑨ 解析結果が表示されます。今回は 70%以上の反応に限定します。該当するところにチェックマークを入れたのち、Get Reactions ボタンをクリックします。



この数は反応数
(文献数ではない)

収率データが収録されていない反応も含める場合には、チェックを入れます

⑩ OK をクリックすると回答が表示されます。

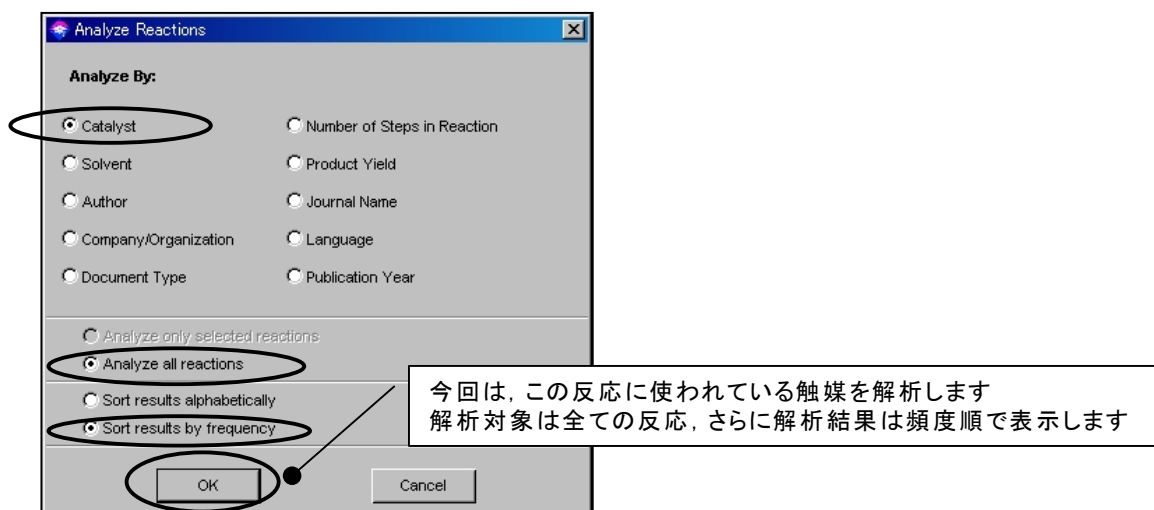


他にも, Analyze でのみ絞り込み可能な項目がたくさんあります. 必要に応じて使うと目的の回答を効率よく得ることができます.

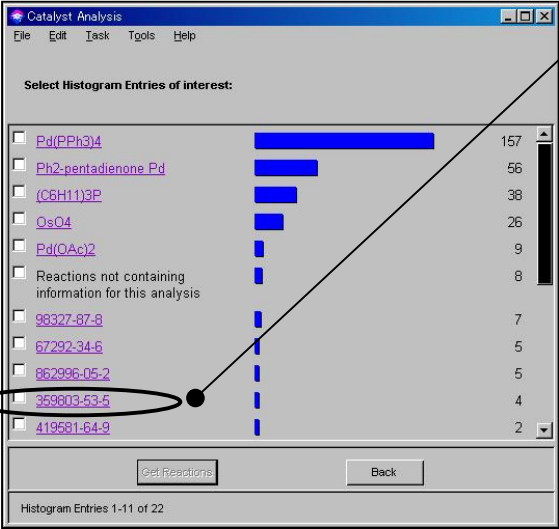
Analyze でのみ絞り込み可能な項目

- ・ 触媒 (例: ある特定の触媒を使った反応に限定)
- ・ 発行年 (例: 比較的新しい文献に限定)
- ・ 資料種類 (例: 雑誌に限定, 特許や会議録を除く)
- ・ 溶媒 (例: ハロゲン系溶媒を除く)
- ・ 雑誌名 (例: JACS, TL, JOC.....に限定)
- ・ 著者名 (例: @@ 氏の論文に限定)
- ・ 言語 (例: 英語に書かれているものに限定)
- ・ 著者の所属機関 (例: @@大学の論文)

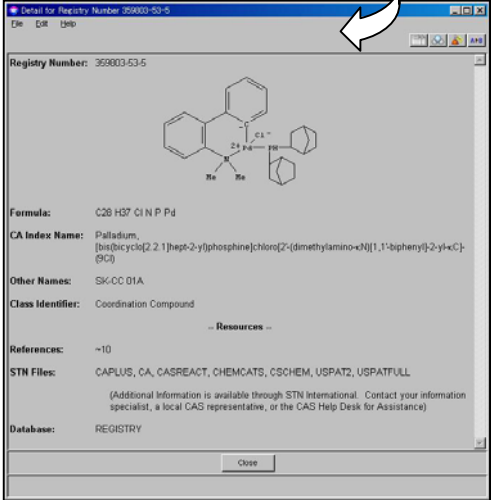
⑪ 例えば, この反応に使われている触媒を解析し, 特定の触媒の反応に限定します. Analyze/Refine ボタンをクリックした後, Analyze ボタンをクリックしてください.



- ⑫ この反応で、触媒として使われている化学物質を解析した結果が表示されます。



リンクをクリックすると、その化学物質情報が表示されます



Registry Number: 359803-53-5

Formula: C₂₀H₃₇ClN₂Pd

CA Index Name: Palladium, [binuclear[2,2,1]hept-2-ylphosphine]chloro[2-(dimethylamino-κN)(1,1'-biphenyl-2-yl-κC)-9C]

Other Names: SK-CO 01A

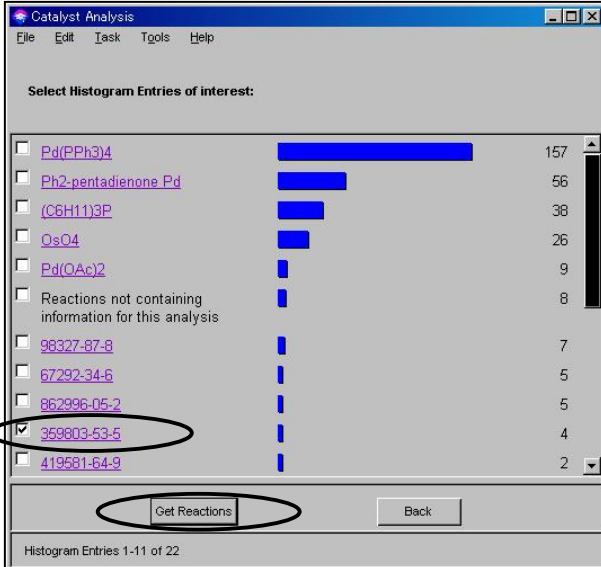
Class Identifier: Coordination Compound

References: ~10

STN Files: CAPLUS, CA, CASREACT, CHEMCATS, CSCHEM, USPAT2, USPATFULL
(Additional information is available through STN International. Contact your information specialist, a local CAS representative, or the CAS Help Desk for Assistance)

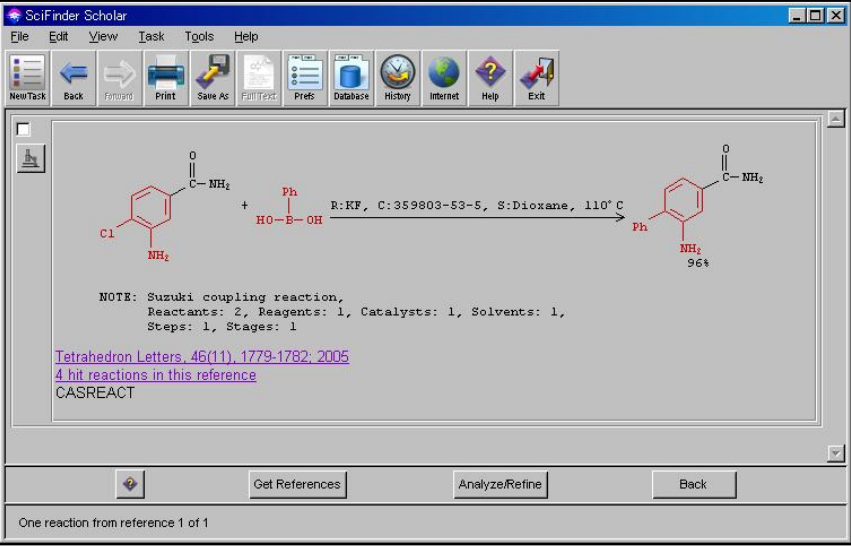
Database: REGISTRY

- ⑬ 解析した特定の項目についての反応を確認したい場合には、チェックマークを入れた後、Get Reactions ボタンをクリックします。



Get Reactions

- ⑭ 該当する反応が表示されます。



NOTE: Suzuki coupling reaction,
Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1,
Steps: 1, Stages: 1

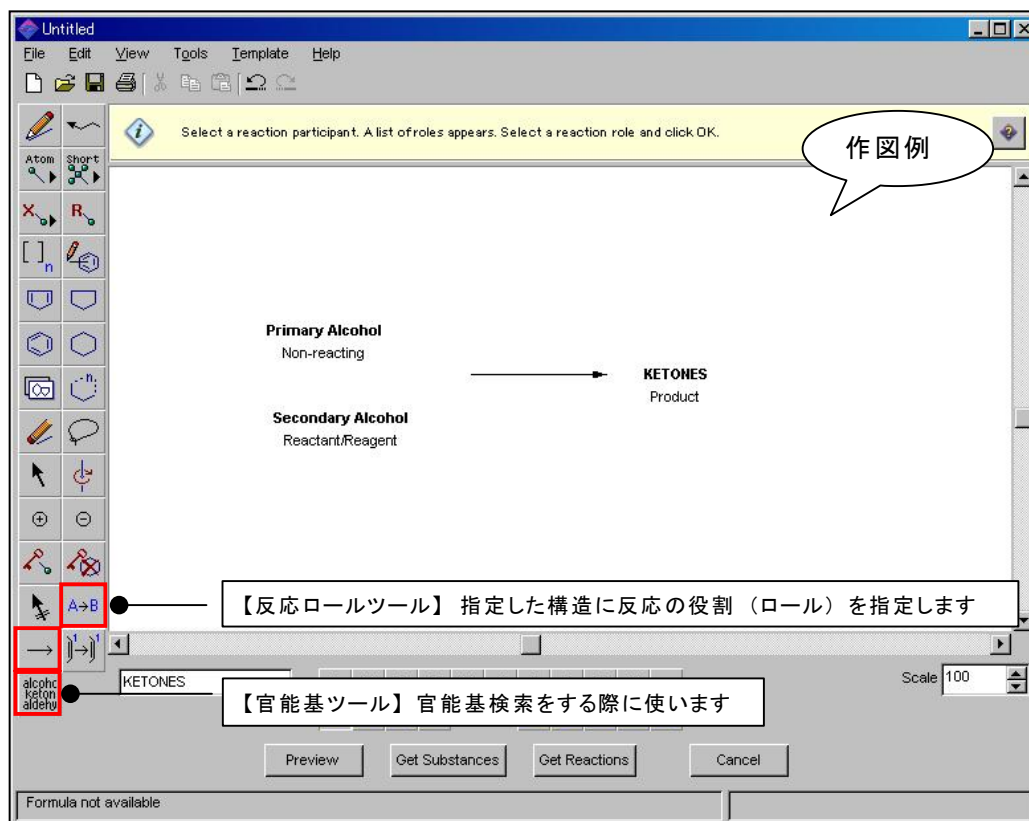
[Tetrahedron Letters, 46\(11\), 1779-1782, 2005](#)
[4 hit reactions in this reference](#)
CASREACT

Get References Analyze/Refine Back

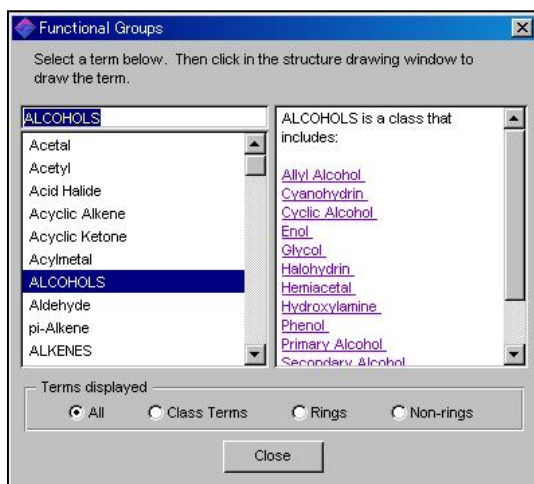
One reaction from reference 1 of 1

検索例 2 : 第一級アルコール存在下で, 第二級アルコールのみがケトンへ酸化される反応を検索する

Step 1: 官能基の反応式を作図する (今回の検索で利用するボタンです)



【官能基ツール】. 官能基を指定することができます



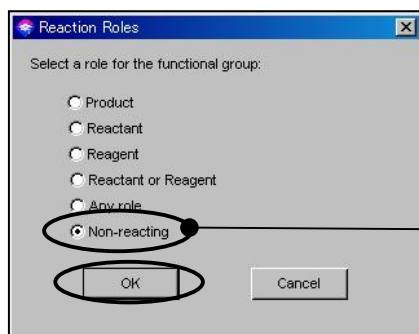
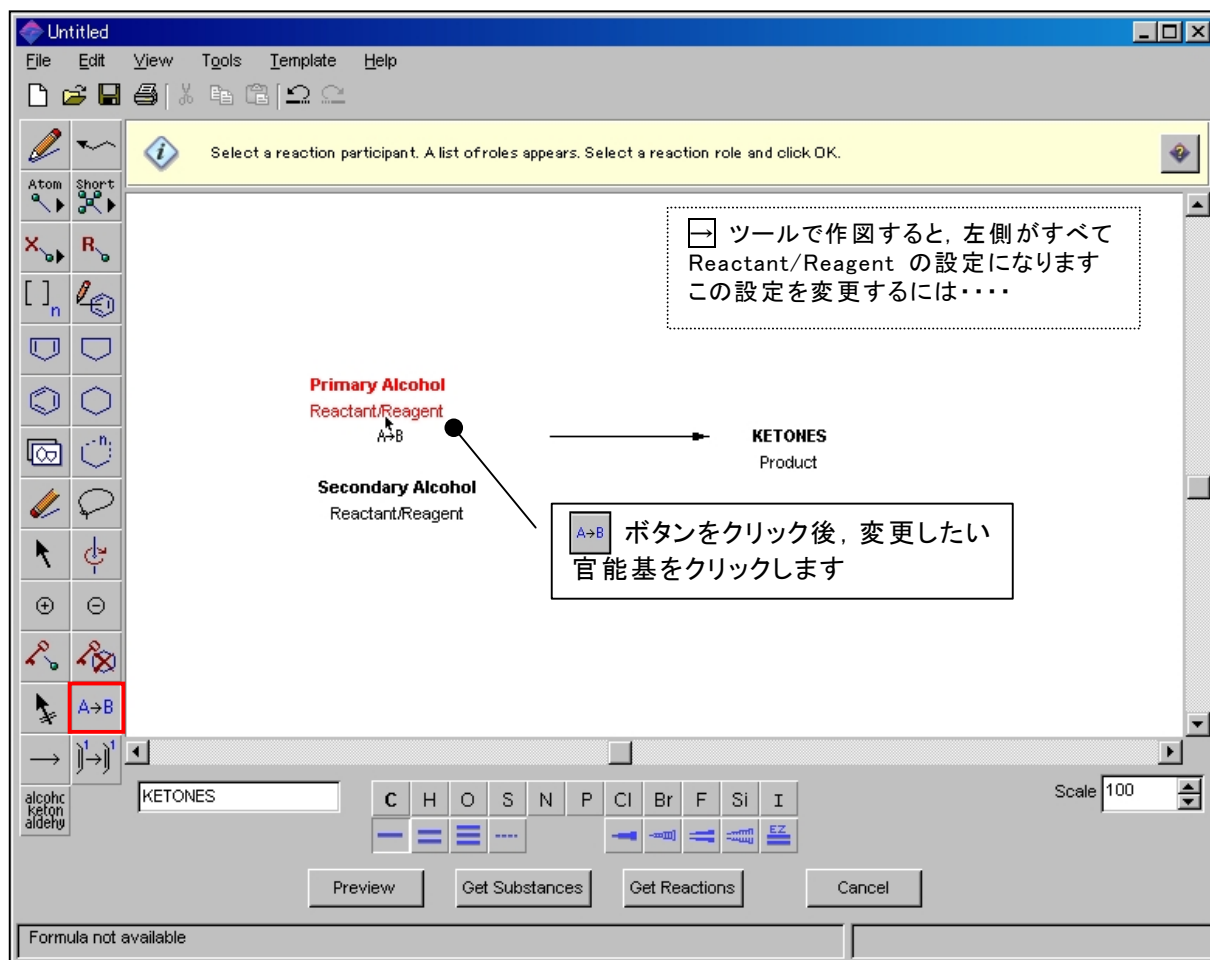
官能基ツールボタンをクリックすると、
左のダイアログボックスが表示されます。

左側に、官能基の一覧が表示されます
ALCOHOLS を選択すると、その中に含まれる
アルコール類が表示されます。
今回は、Primary Alcohol と Secondary Alcohol
と KETONES を利用します。

Primary Alcohol を選択した後、
作図画面をクリックすると Primary Alcohol を
作図することができます。

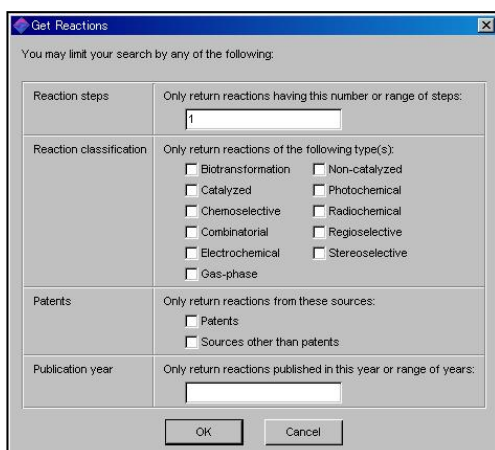


【反応ロールツール】 反応のロールを指定することができます（官能基・構造共通）



反応ロールダイアログボックスが表示されるので, 変更したい役割(ロール)を選択し, OK をクリックします。

1 級アルコールは反応しないので, Non-reacting を選択する



作図が完了したら, 検索例-1 と同様に Get Reactions ボタンをクリックします。



官能基選択的な反応を検索する場合には, Reaction Steps を 1 にする

Step 2: 回答の表示

SciFinder Scholar

File Edit View Task Tools Help

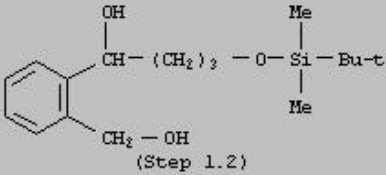
NewTask Back Forward Print Save As FullText Prefs Database History Internet Help Exit

$\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{O} + \text{HO}-\text{CH}_2-\overset{\text{OH}}{\underset{|}{\text{CH}}}-\text{CH}_2-\text{OH}$
 C:9028-14-2, C:81611-70-3, C:9077-68-3, S:H₂O,
 10 min, 45° C

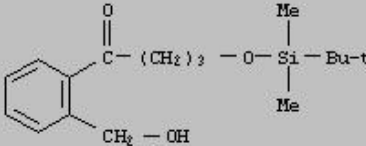
$\text{HO}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{OH} + \text{HO}(\text{CH}_2)_3\text{OH}$

NOTE: enzymic, biotransformation, Tris-HCl buffered solution,
 Reactants: 2, Catalysts: 3, Solvents: 1,
 Steps: 1, Stages: 1

[Faming Zhuanli Shengqing Gongkai Shuomingshu, 1840668, 04 Oct 2006](#)
 CASREACT



1.1 R: ClC(=O)CC(=O)Cl, S: CH₂Cl₂, S: DMSO, 30 min, -70° C
 1.2 -70° C → -60° C; 30 min, -60° C
 1.3 R: Et₃N, 30 min, -60° C
 1.4 R: HCl, S: H₂O, 5 min, -60° C



NOTE: Swern oxidation,
 Reactants: 1, Reagents: 3, Solvents: 3,
 Steps: 1, Stages: 4

[Tetrahedron, 62\(33\), 7699-7711; 2006](#)
 CASREACT

Get References Analyze/Refine Back

Reactions 1-2 of 1104

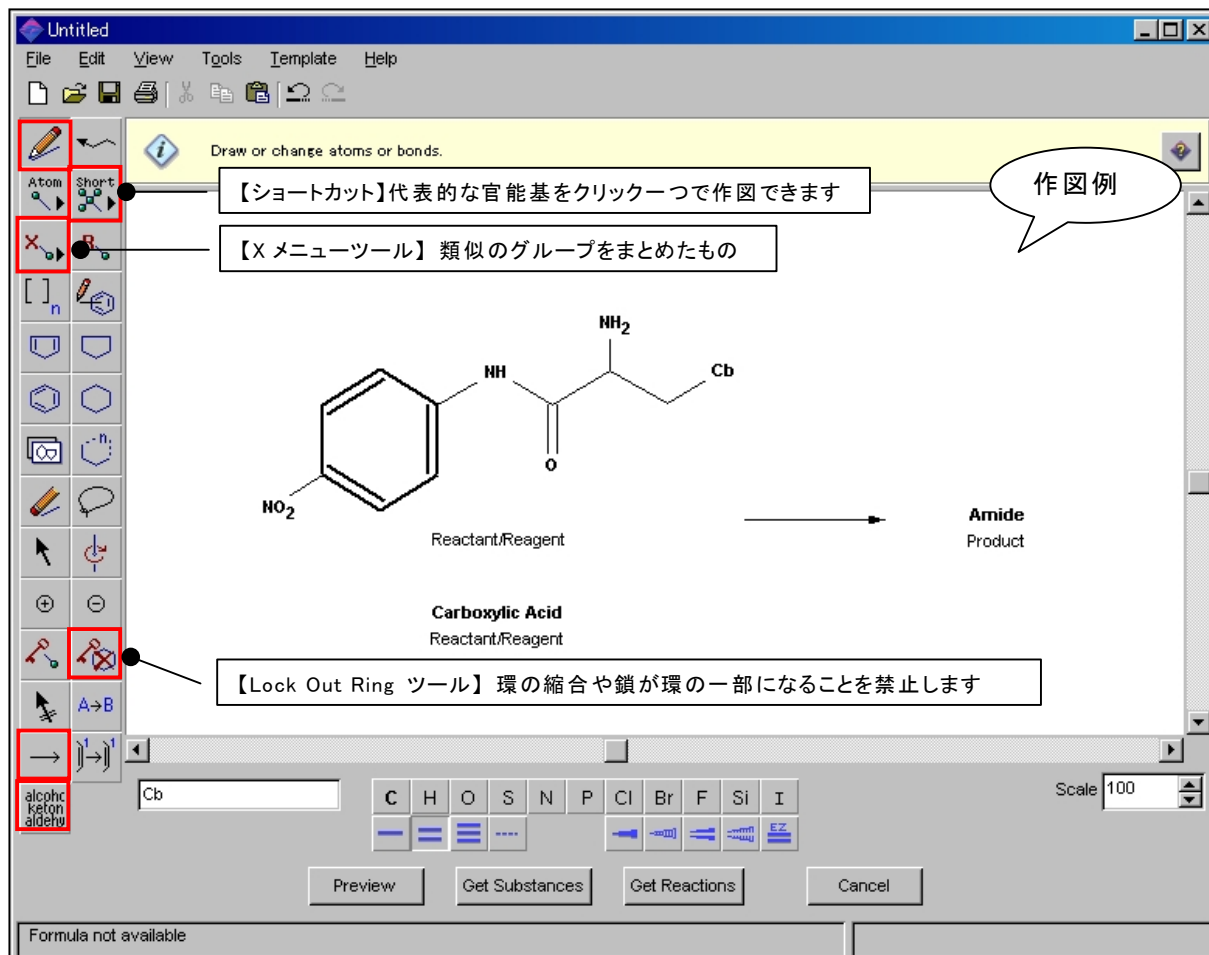
※ この後は、検索例-1 と同様に関連情報を表示したり、回答を絞り込んだりすることができます。
 (検索例-1 の Step 3 以降参照)

※ 官能基検索は、「反応物にある官能基が入っている」→「生成物にある官能基が入っている」という検索になりますので、ノイズが含まれやすくなります。従って、この後 Refine → Reaction Structure ボタンをクリックし、構造（およびマッピング、反応サイトの指定）による絞り込みを行って、目的の反応に限定して使うのがおすすめです。
 (検索の流れは P. 10～, あるいは P. 23～参照)

検索例 3: ある化学物質と官能基の組み合わせた検索

Step 1 化学反応式の作図 (今回の検索で利用するボタンです)

※ ポイント: 官能基と構造両方入った反応式を作図します



【ショートカット】
代表的な官能基をクリック一つで
作図できます

Short				
CH	Bu-n	o-C6H4	Cl3	NH2
CH2	Bu-i	m-C6H4	CHO	NH3
Me	Bu-s	p-C6H4	CN	NO2
OMe	Bu-t	CF2	C(O)CH3	OH
Et	OBu-n	CF3	CO2H	OPO3H2
OEt	OBu-i	CCl2	COOH	OSO3H
Pr-n	OBu-s	CCl3	COSH	PO3H2
Pr-i	OBu-t	CBR2	CS2H	SH
OPr-n	Ph	CBR3	CSSH	SO2
OPr-i	OPh	Cl2	NH	SO3H



【X メニューツール】
類似のグループをまとめたもの

X	R
X	Any halogen
M	Any metal
A	Any atom except H
Q	Any atom except C or H
Ak	Any alkyl chain
Cy	Any cycle
Cb	Any carbocycle
Hy	Any heterocycle

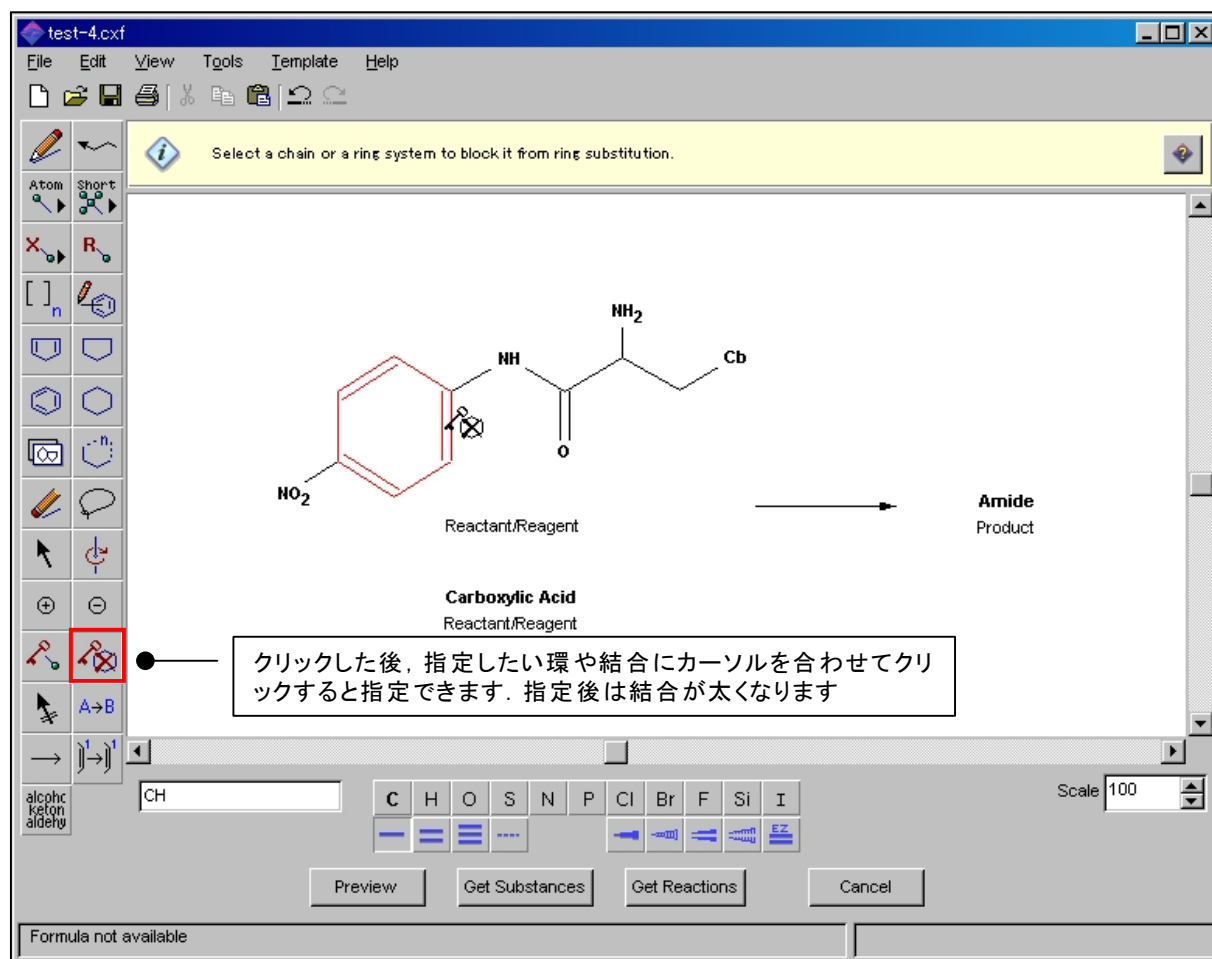
ハロゲン一般
金属一般
H以外の原子
C,H 以外の原子
炭素鎖
環
炭素のみからなる環
非炭素原子を一つ以上含む環



【Lock Out Ring ツール】環の縮合や、鎖が環の一部になることを禁止します

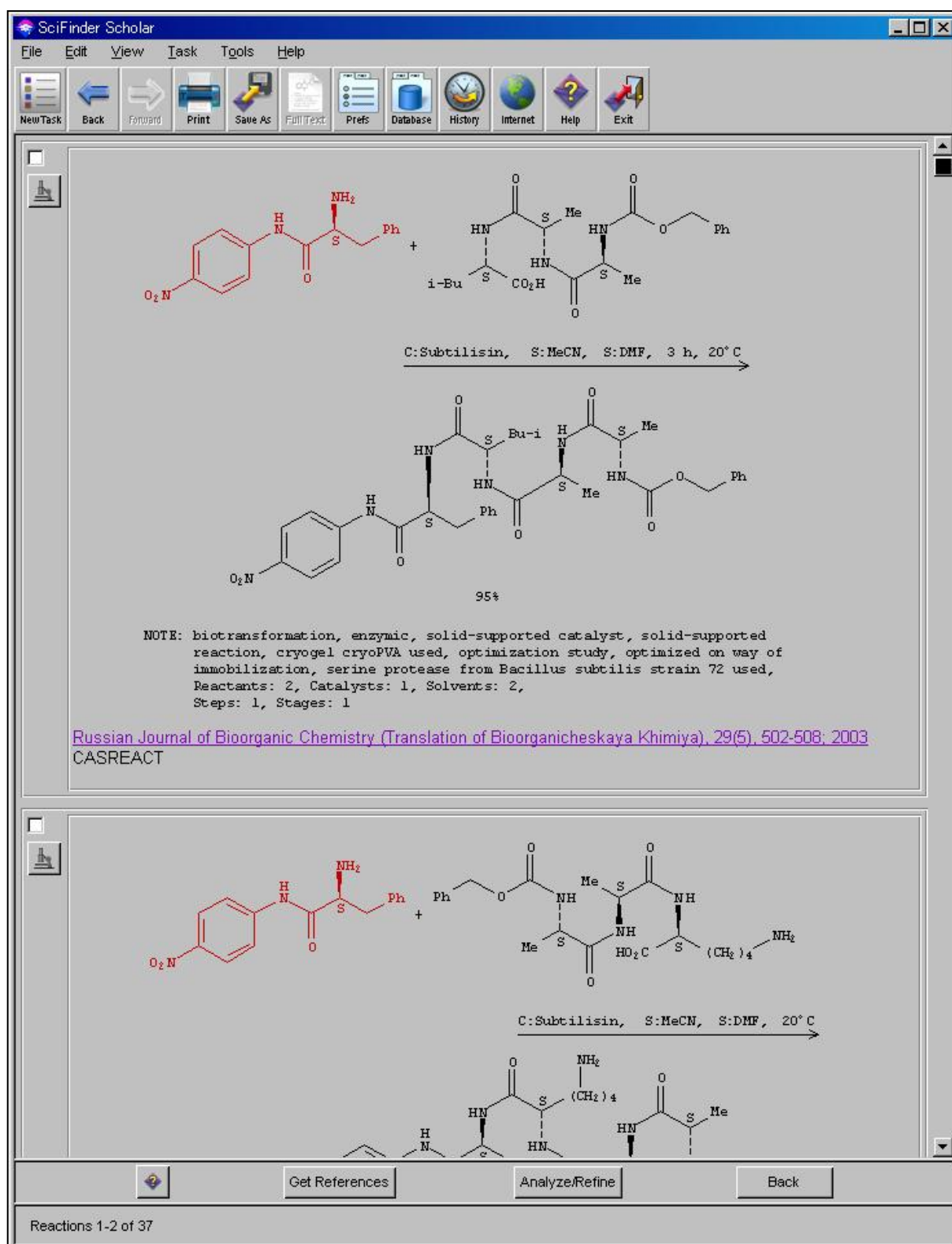


この指定をすると、ベンゼン環を作図したときにはナフタレン環はヒットしません(指定しない場合には、回答に含まれてきます)。また、鎖状の結合に指定すると、環状のものはヒットしません。



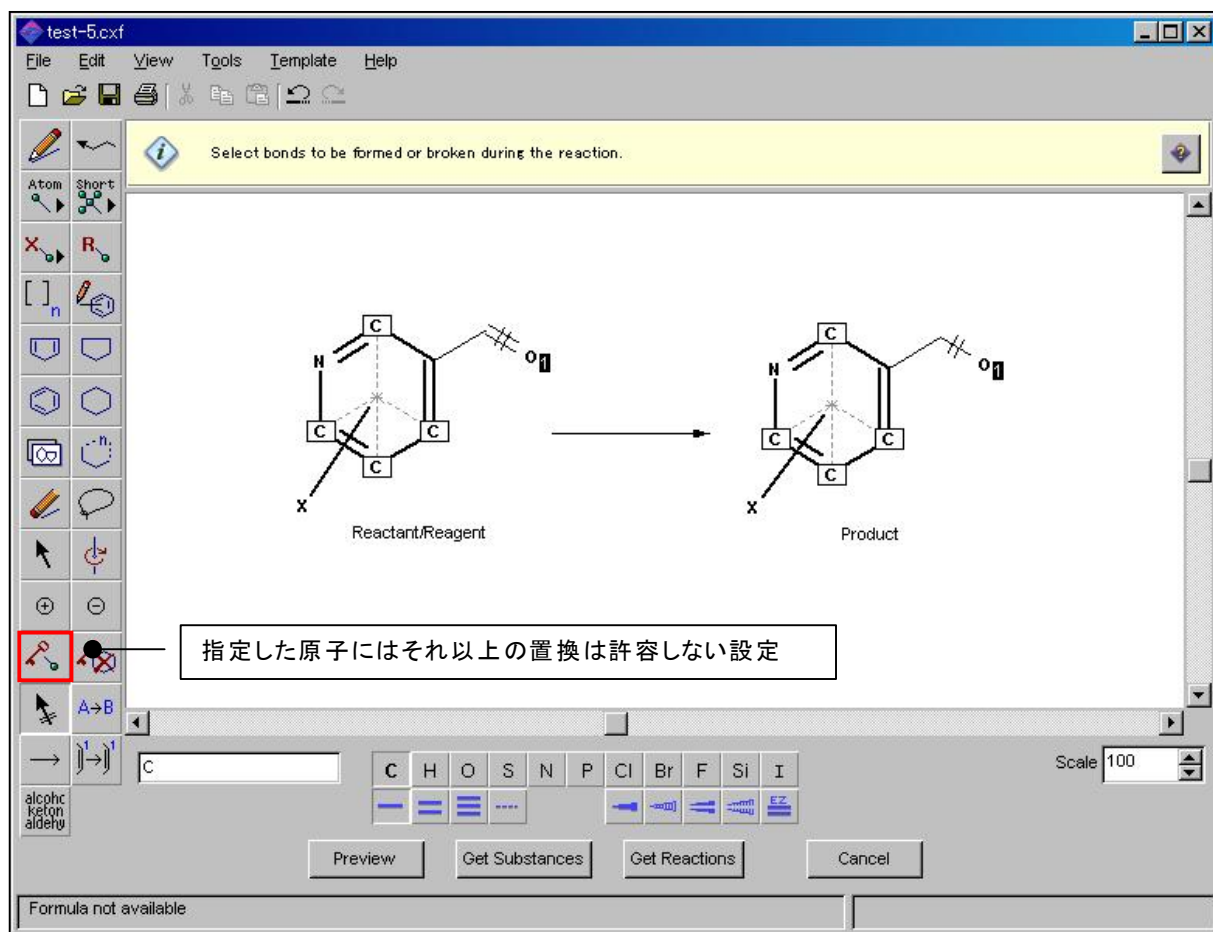
- 作図が終わりましたら、検索例-1 と同様に Get Reactions ボタンをクリックすると検索が実行されます。

Step 2 回答表示



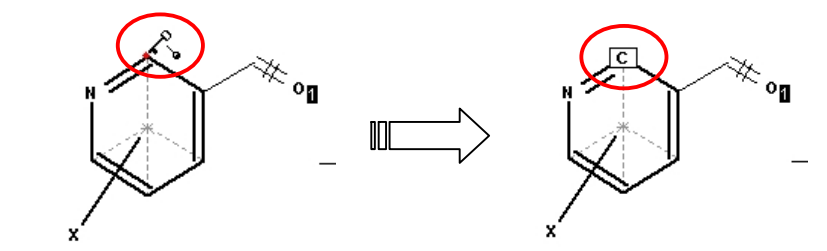
※ この後は、検索例-1 と同様に関連情報を表示したり、回答を絞り込んだりすることができます。
(検索例-1 の Step 3 以降参照)

その他の便利な作図機能



【Lock Out Substitution ツール】 指定した原子にはそれ以上の置換は許容しない設定
※ 原子だけでなく、ショートカットや R-グループにも指定できます

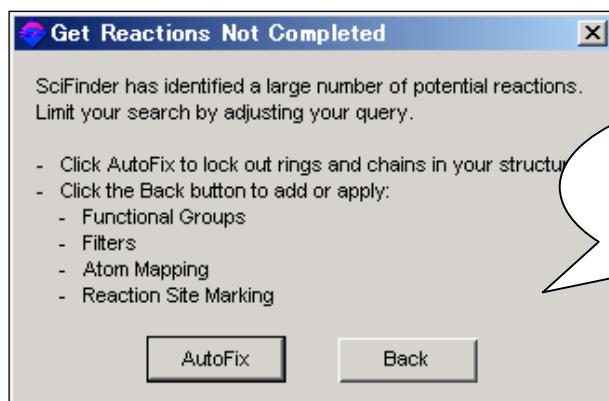
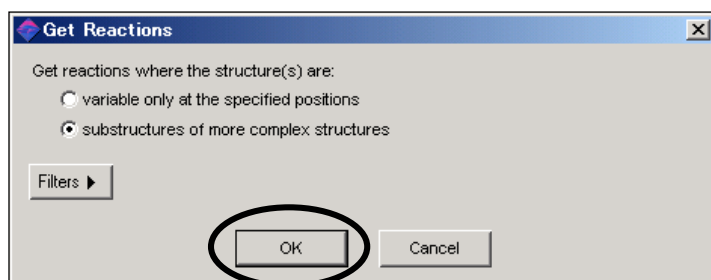
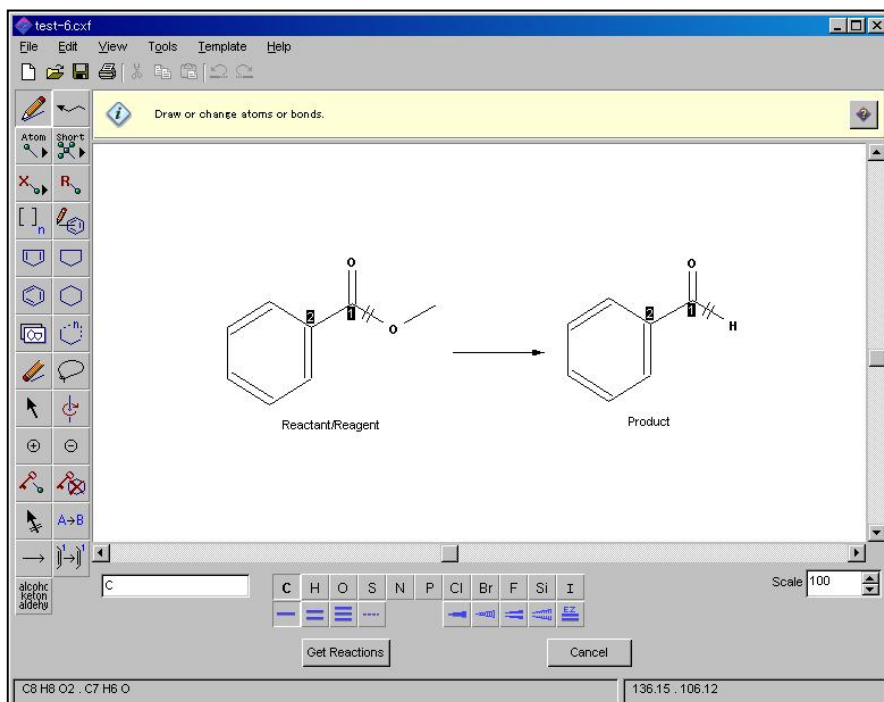
「Lock Out Substitution ツール」 ボタンをクリックした後、指定したい原子にカーソルを合わせ、クリックすると指定することができます。



☛ substructures of more complex structures（作図していないところはあらゆる置換を許容した検索 P.5 参照）を選択した場合に、特定の原子には、指定した以外の置換基は許容したくないというときに便利。

※ 一番上の作図では、ピリジン環上に、必ずハロゲン原子が一つ置換し、他の環状の炭素はすべて水素が置換しているカルボニル誘導体のアルコールへの変換反応が検索できます。

エラーメッセージへの対応



システム制限により、検索できないため 構造質問式等を修正する旨のエラーメッセージ

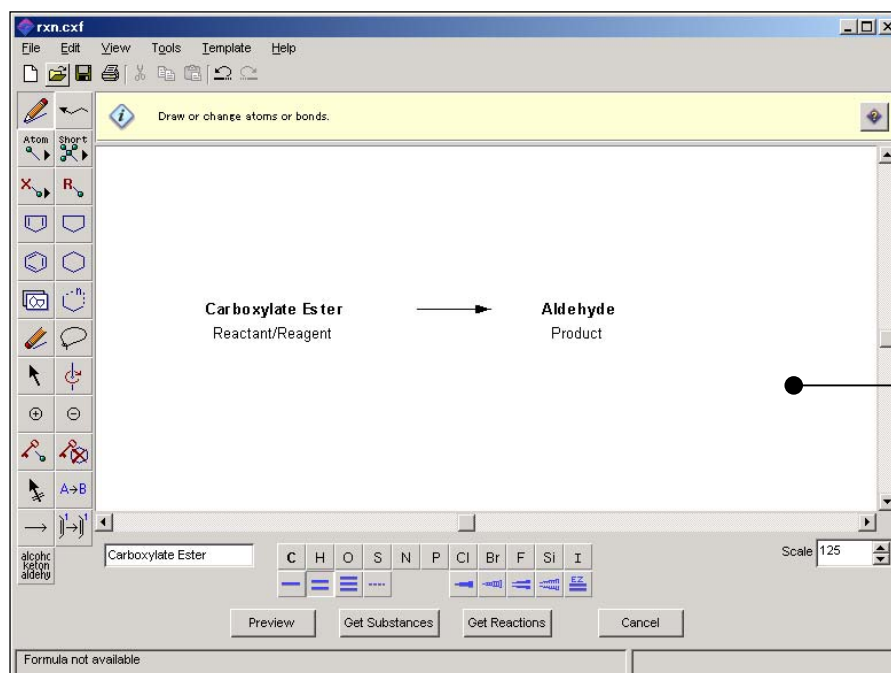
反応検索では、以下の対応によって検索できるようになります！

- 方法 1. 官能基による検索で一度検索した後に、当初の質問式により限定
- 方法 2. フィルターを使って、限定して検索
- 方法 3. より限定した構造作図を行う

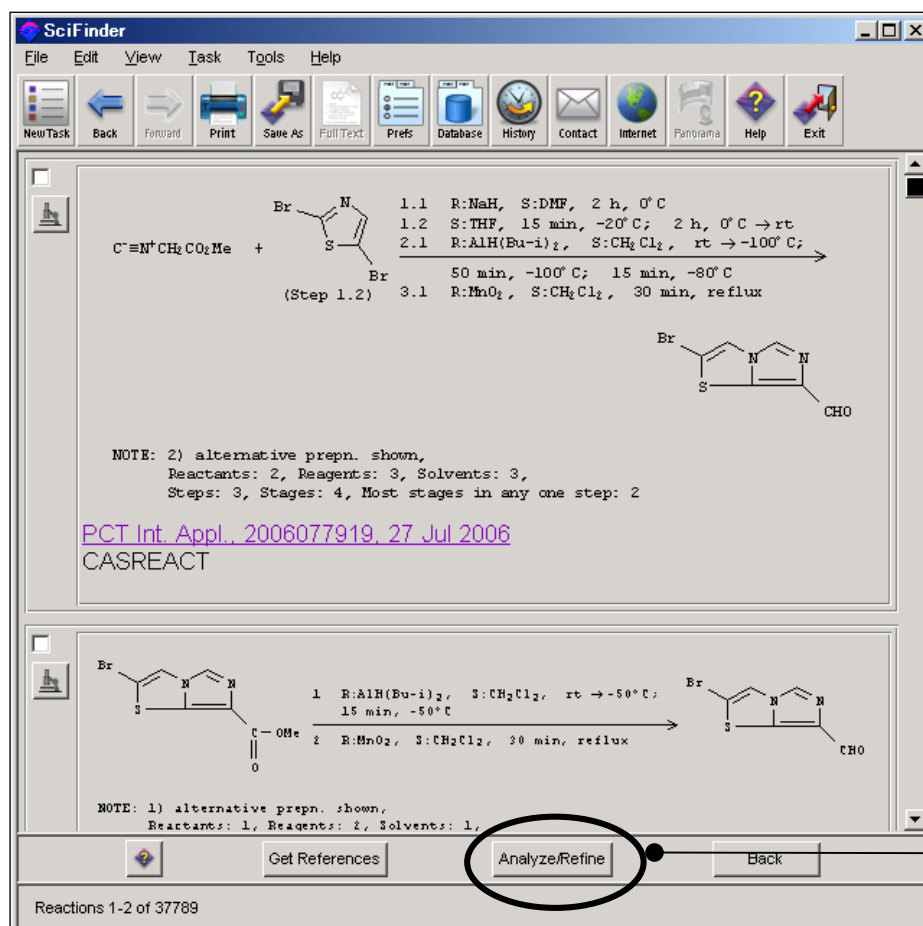
方法 1 : 官能基による検索 → 当初の質問式による限定

Recommend

Step 1 官能基検索

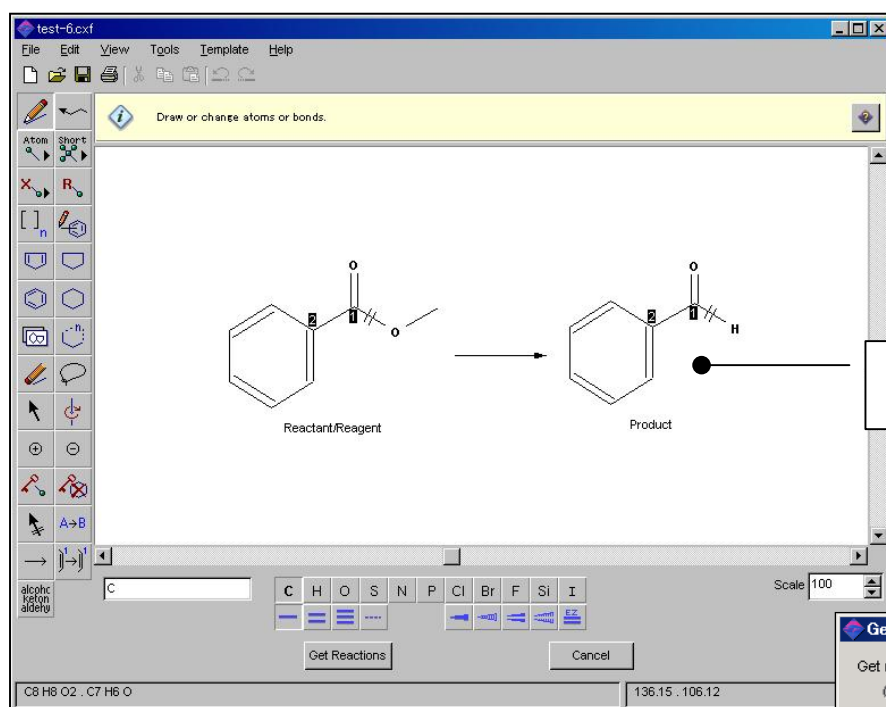


初めに官能基検索を行います

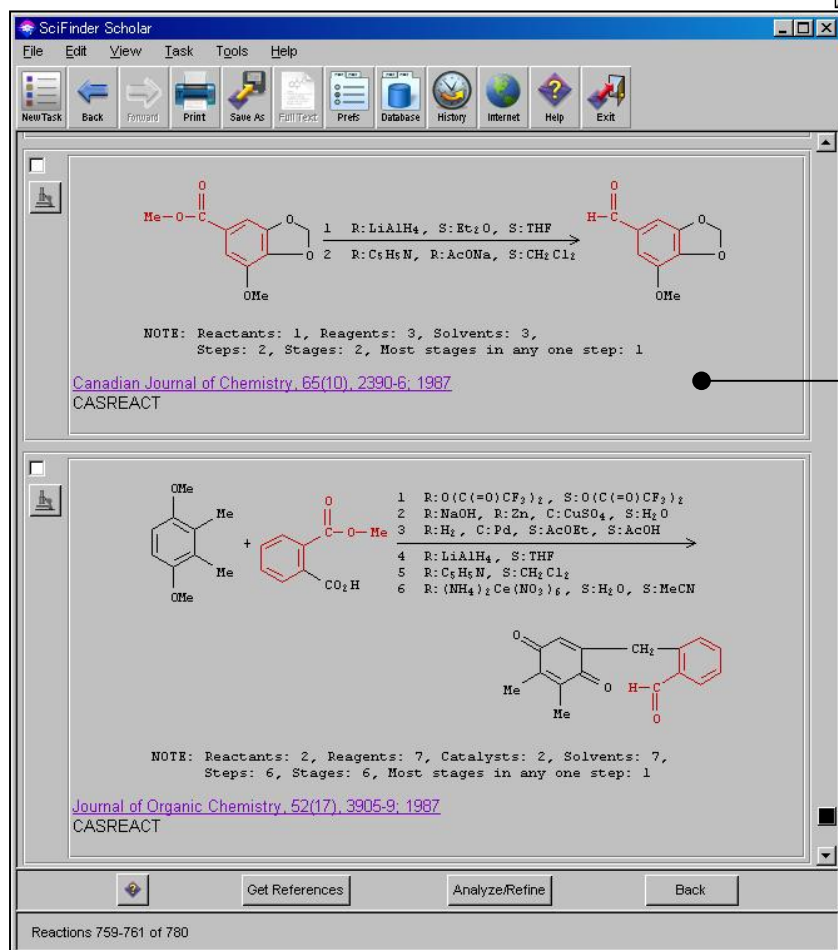
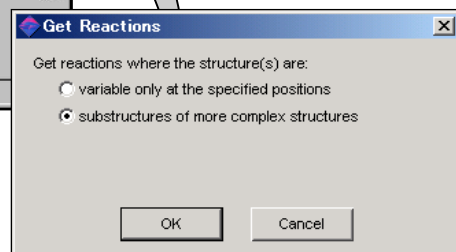


この回答を絞り込みます

Step 2 構造検索

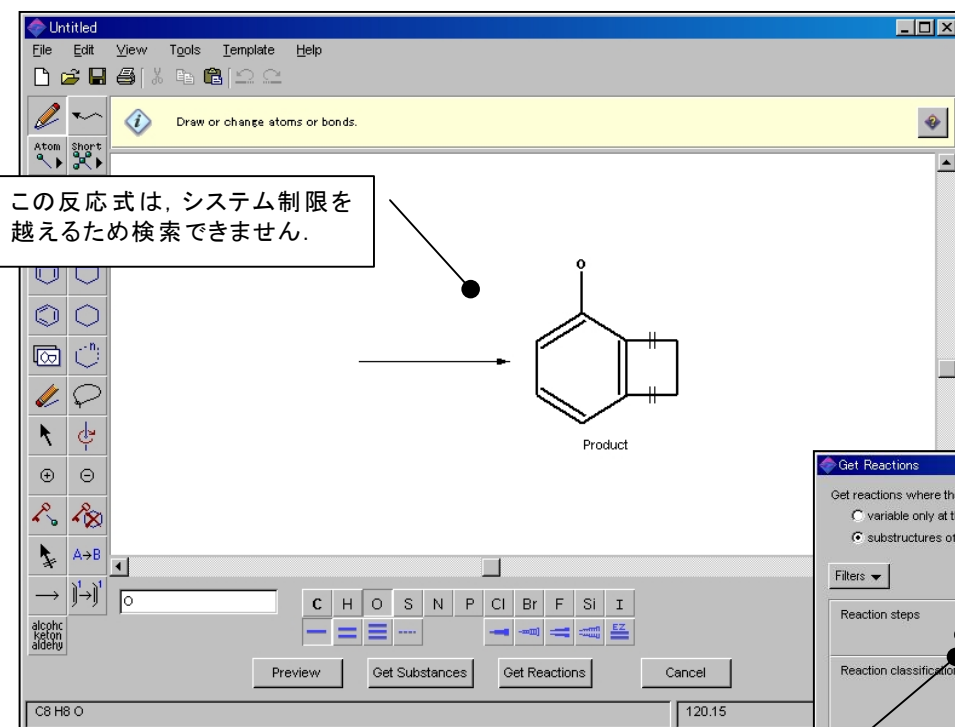


最初は実行できなかった反応式でもう一度検索してみます



検索することができました！

方法 2 : フィルターを使って限定して検索する



反応式を修正しないで、もう一度 Get Reactions ボタンを押した後、Filters で限定すると検索できる場合があります。ただし、回答は設定した条件で絞り込んだものになるので注意してください。(例は、一段階反応に限定して検索)

Get Reactions

Get reactions where the structure(s) are:

☐ variable only at the specified positions

☒ substructures of more complex structures

Filters

Reaction steps: Only return reactions having this number or range of steps:

Reaction classification: Only return reactions of the following type(s):

<input type="checkbox"/> Biotransformation	<input type="checkbox"/> Non-catalyzed
<input type="checkbox"/> Catalyzed	<input type="checkbox"/> Photochemical
<input type="checkbox"/> Chemoselective	<input type="checkbox"/> Radiochemical
<input type="checkbox"/> Combinatorial	<input type="checkbox"/> Regioselective
<input type="checkbox"/> Electrochemical	<input type="checkbox"/> Stereoselective
<input type="checkbox"/> Gas-phase	

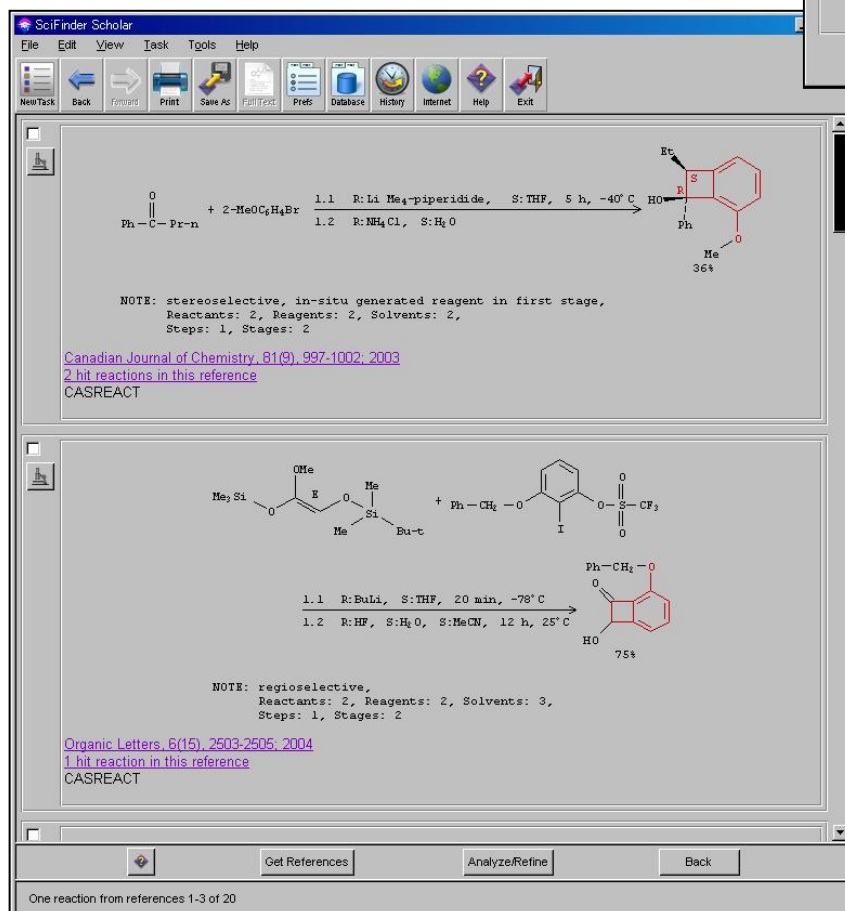
Patents: Only return reactions from these sources:

☐ Patents

☐ Sources other than patents

Publication year: Only return reactions published in this year or range of years:

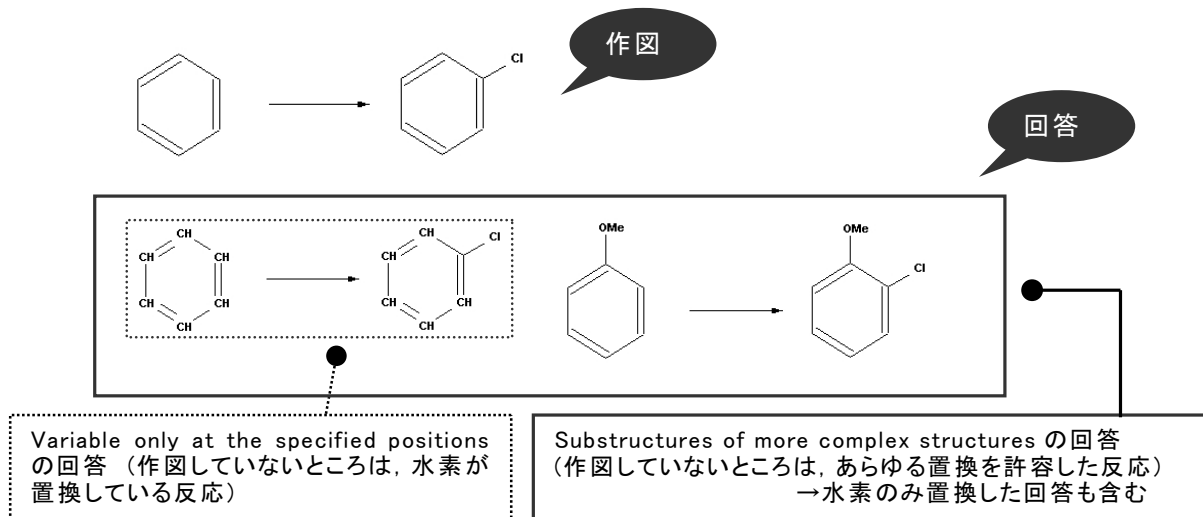
OK Cancel



まとめ - 検索のポイント

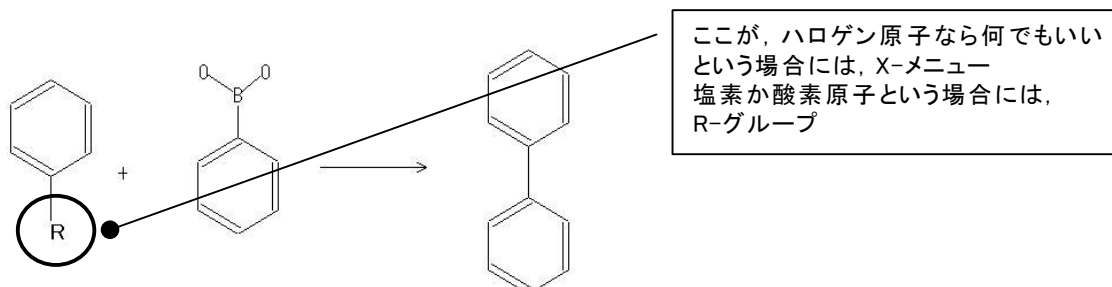
① 検索タイプの指定

- 同じ作図をしても、検索タイプが異なると回答が異なります。P.5



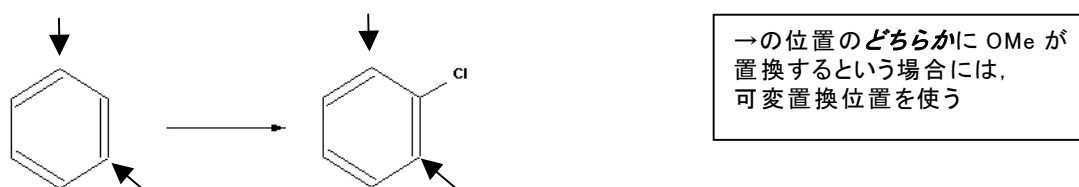
② ある特定の置換基ではなく、幅広く置換基の種類を指定したい

- R-グループ, X メニュー P.2, P.18



③ 置換する可能性のある場所を複数指定したい.

- 可変置換位置 P.2



④ 目的の反応と異なる反応がヒットしている.

- Analyze, Refine コマンドを使って、さらに限定します。P.10～
 - ・ 構造作図で絞り込む (Lock Out Ring ツール P.19 / 反応サイト P.4 / マッピング P.3)
 - ・ 多段階反応が不要な場合には、1 段階反応に限定する。P. 10
 - ・ 官能基検索の場合には、構造検索で絞り込む(マッピング・反応サイトの指定をする)

便利な作図機能一覧

これらの作図機能や, Analyze, Refine を使うと目的の回答を簡単に得ることができますので, ぜひご活用ください!

また, これらの機能の詳細は, 下記の URL に資料がございます.
http://www.jaici.or.jp/sci/sf2006_str.pdf



【R-グループ】 ある位置に複数の原子などをしてすることができます. P. 2



【可変置換位置】 原子などが置換する可能性のある場所を複数指定することができます. P. 2



【反応ツール】 化学反応の矢印を作図し, 反応物を生成物の指定を行います. P. 3



【マッピング】 反応物と生成物中の対応する原子を指定できます. P. 3



【反応サイト】 反応する結合の指定. P. 4



【官能基ツール】 官能基を指定することができます. P. 15



【反応ロール】 反応のロール(役割)を指定できます. P. 16



【ショートカット】 代表的な官能基をクリック一つで作図できます. P. 18



【X メニュー】 類似のグループをまとめたもの. P. 18



【Lock Out Ring】 環の縮合や, 鎖が環の一部になることを禁止します. P. 19



【Lock Out Substitution】 指定した原子・ショートカット・X-グループに, それ以上の置換は許容しない設定 P. 21



情報事業部 ヘルプデスク

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-3600

URL: www.jaici.or.jp

E-mail: helpdesk@jaici.or.jp