

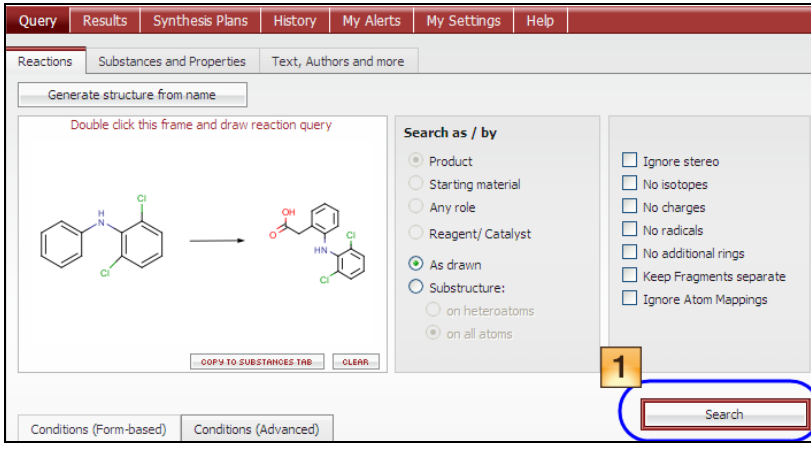
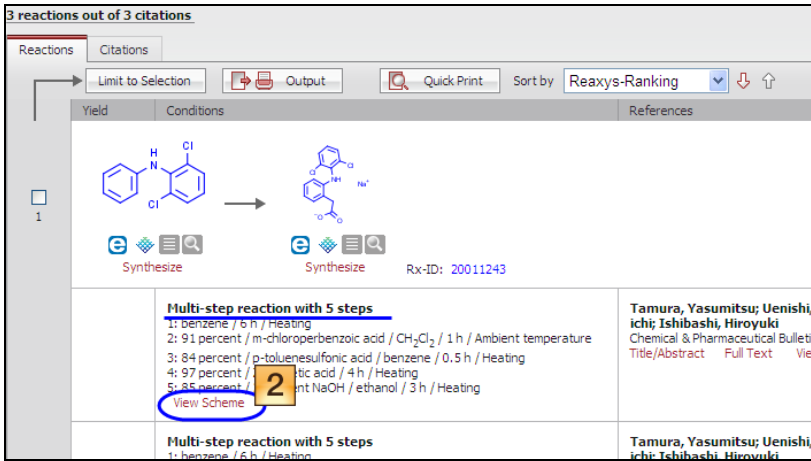
## 多段階反応の検索方法

**Question** : 多段階反応はどのように検索できますか？

**Answer** : 検索結果画面では、全ての反応過程のスキームを一覧で見ることができます。

途中の化合物を出発物質に指定した場合も、その後の反応過程を見ることができます。

検索例：N-(2,6-ジクロロフェニル)アニリン から ジクロフェナク (diclofenac) を合成する多段階反応 A→B→C→D→E→F のうち、A→F と B→F を検索する

<p>Step 1</p> <p>A→F の反応式を描画し、検索する。</p>	
<p>Step 2</p> <p>3 件の結果がヒットする。</p> <p>多段階反応のときには、"Multi-step reaction with xx steps" という記載がある。</p> <p>A→F の全過程のスキームを一覧で見するには、「View Scheme」をクリックする。</p>	

## Step 3

A→B→C→D→E→F の反応スキームが表示される。

Step	Yield	Conditions	References
1	93%	With sodium hydroxide in ethanol/water 4h; Heating;	Moser, Peter; Sallmann, Alfred; Wiesenberg, Irmgard Journal of Medicinal Chemistry, 1990, vol. 33, # 9, p. 2268-2268 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
	85%	With sodium hydroxide in ethanol 3h; Heating;	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Choi, Hong Dae; Haruta, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 1984, vol. 32, # 5, p. 1005-1005 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

## Step 4

今度は、B を出発物質に指定して、B→F を検索する。

Search as / by

- Product
- Starting material
- Any role
- Reagent/ Catalyst
- As drawn
- Substructure:
  - on heteroatoms
  - on all atoms

Ignore stereo  
 No isotopes  
 No charges  
 No radicals  
 No additional rings  
 Keep Fragments separate  
 Ignore Atom Mappings

4

## Step 5

検索結果が表示される。

B→F の全過程のスキームを一覧で見るとは、「View Scheme」をクリックする。

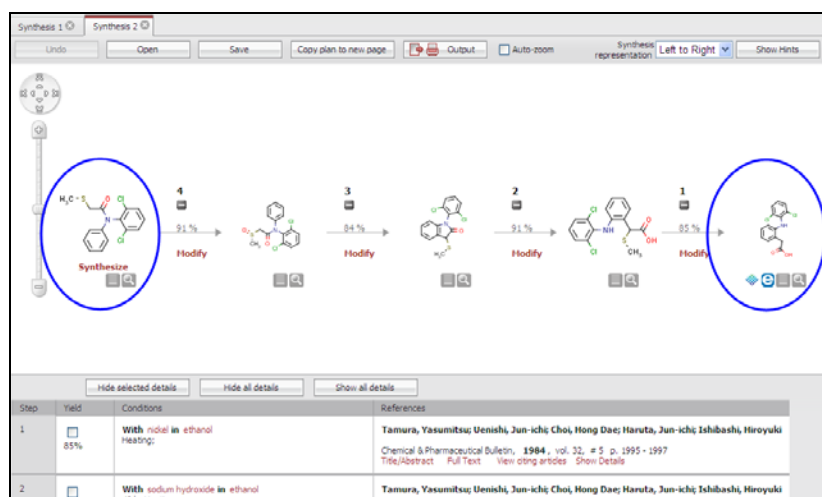
2 reactions out of 1 citations

Yield	Conditions	References
91%	m-chloroperbenzoic acid / CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> / 1h / Ambient temperature	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 1984, vol. 32, # 5, p. 1005-1005 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
85%	Nickel / ethanol / Heating	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 1984, vol. 32, # 5, p. 1005-1005 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

5 [View Scheme](#)

## Step 6

B→C→D→E→F の反応スキームが表示される。



Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 85%	With nickel in ethanol heating	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Choi, Hong Dae; Haruta, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 1984, vol. 32, # 5, p. 1995 - 1997 <a href="#">Title/Abstract</a> <a href="#">Full Text</a> <a href="#">View citing articles</a> <a href="#">Show Details</a>
2	<input type="checkbox"/>	With sodium hydroxide in ethanol	Tamura, Yasumitsu; Uenishi, Jun-ichi; Choi, Hong Dae; Haruta, Jun-ichi; Ishibashi, Hiroyuki