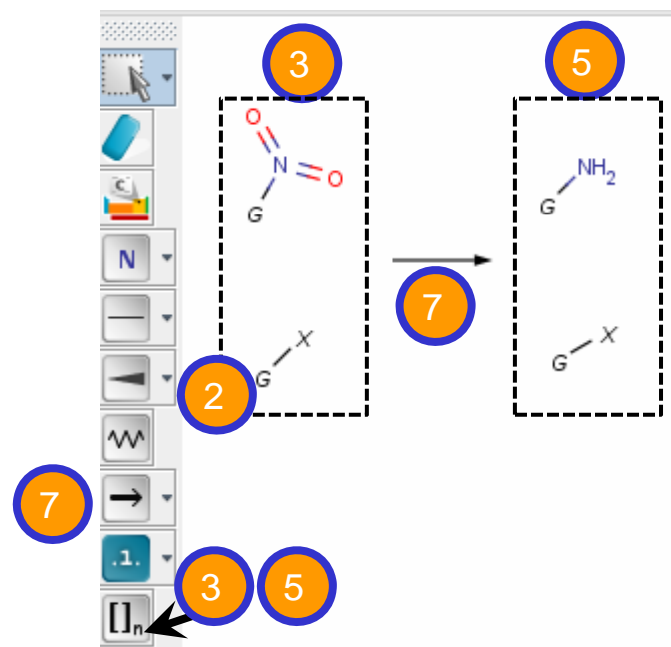


## V - 3) 選択的な官能基変換反応(1)

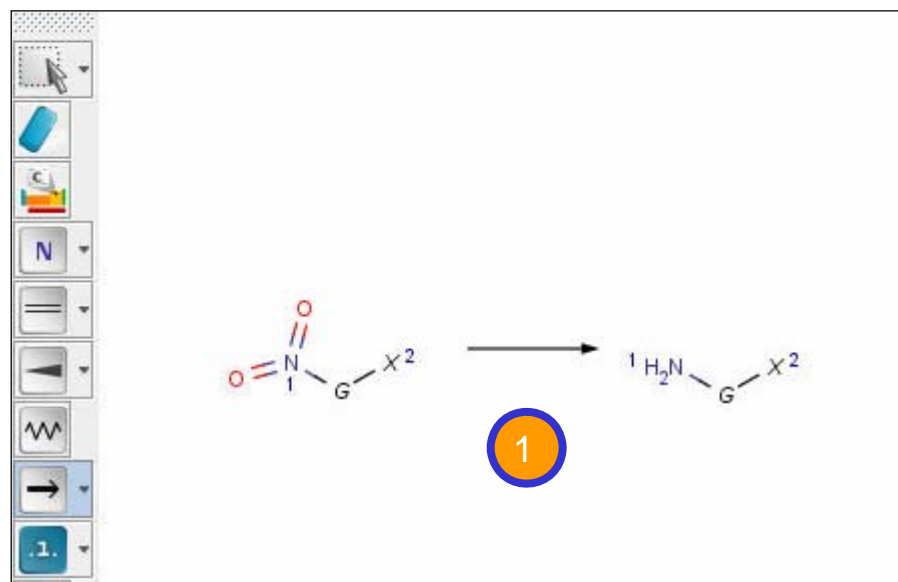
❖ MarvinSketchで反応する置換基と反応しない置換基を明記し、反応物と生成物それぞれでグループ化



- ① 反応前後のそれぞれの官能基を描く
- ② 根元の原子を全てG(any group)に設定
- ③ 反応前の官能基を全て選び、左下の[]nマークをクリックする
- ④ OKをクリック
- ⑤ 反応後の官能基を全て選び、左下の[]nマークをクリックする
- ⑥ OKをクリック
- ⑦ 反応の矢印を描く
- ⑧ Transfer QueryをクリックしてReaxysに戻る
- ⑨ 反応オプションを設定しSearch

## V - 3) 選択的な官能基変換反応(2)

❖ Reaxys Genericsの”G”(Any Group)を活用して、反応しない官能基と反応する官能基を指定した検索を行う



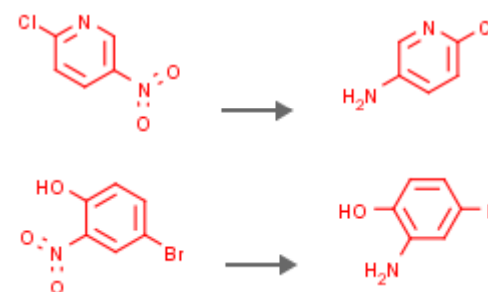
Search as / by

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

2

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

### 検索結果例



- 1 反応する官能基と、反応しない官能基を”G”を挟んで記述し、反応式を描画。必要に応じて、マッピングしておく。
- 2 反応オプションを設定しSearch