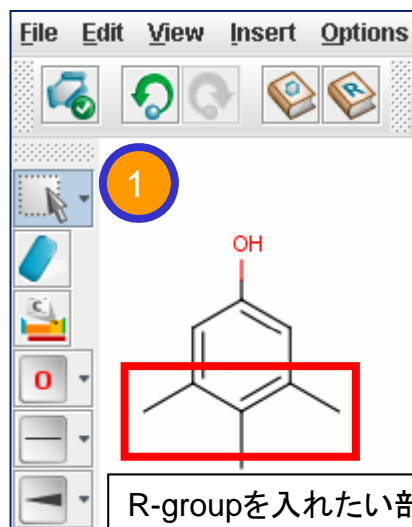


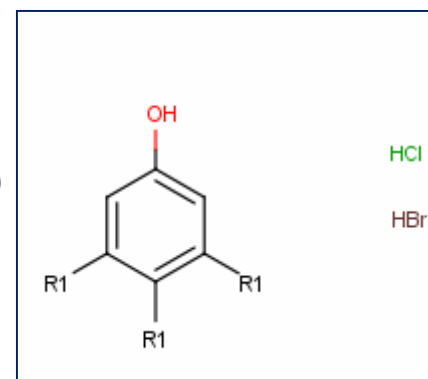
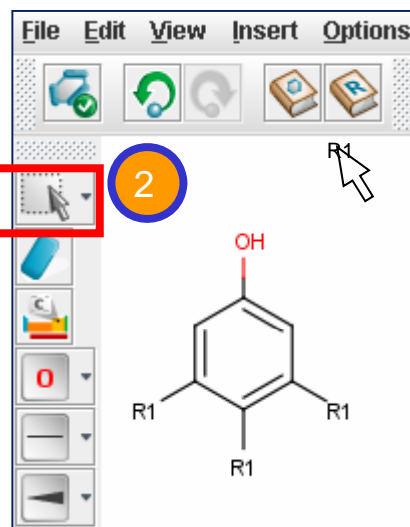
## V - 2) R-Groupを表記(1)

❖ R-Group機能を利用して、複数個所の何れかに置換基が入るような構造式を記述することが可能

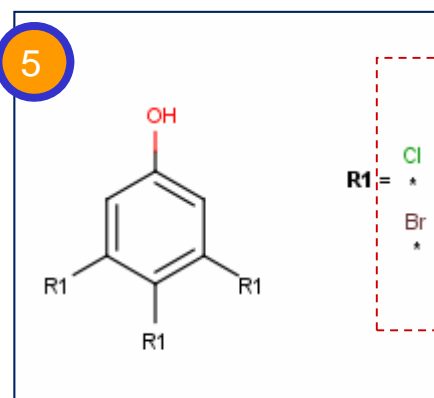
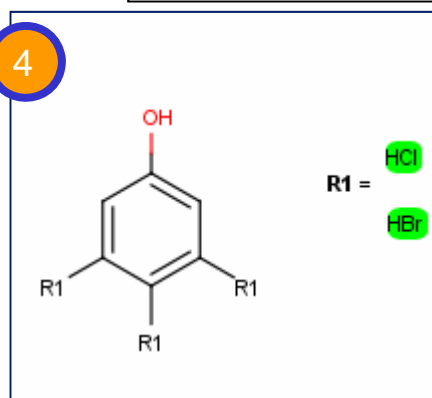
例: フェノールのメタ位、パラ位のいずれか1ヶ所が-Clまたは-Brと置換する反応を検索する



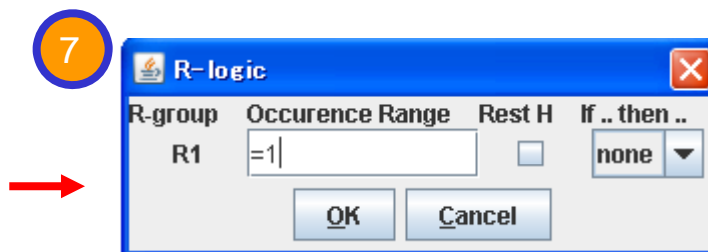
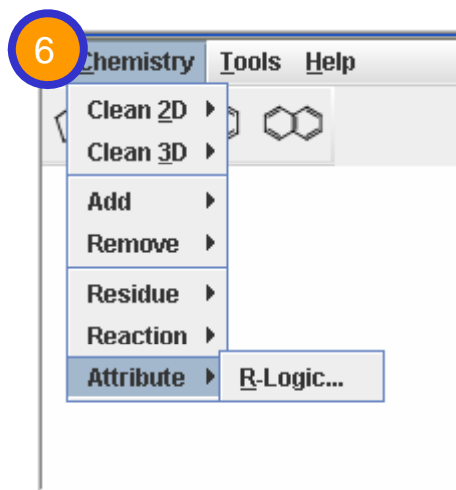
R-groupを入れたい部分にボンドを描いておく



- ① メインの構造式を記述
- ② 選択ツールをクリックし、「R1」とタイプ。カーソル下に「R1」と表示された状態で、R1グループを入れたい部分を順次クリック
- ③ R1グループとして定義したい置換基を描く (例: ClとBrと表記すると、自動でHが補足される)
- ④ R1グループの置換基を選択し、「R1」とタイプ
- ⑤ 「R1=」の表示後、Attachment point (メインの構造に接続する部分) を順次クリック



# V - 2) R-Groupを表記(2)



- 6 [Chemistry]メニューの[Attribute]-[R-Logic]を選択
- 7 R1グループの出現範囲を指定 (=, >, <が使用可)  
今回は1ヶ所なので、「=1」と入力
- 8 Transfer QueryをクリックしてReaxysへ戻る
- 9 反応オプションを設定しSearch

## 検索結果例

	para-bromotoluene p-methylphenyl bromide 1-bromo-4-methylbenzene 4-methyl-1-bromobenzene 4-methylphenyl bromide 4-methylbromobenzene p-tolyl bromide
	4-methyl-chlorobenzene 1-chloro-4-methylbenzene 1-chloro-4-methylbenzene para-chlorotoluene 4-tolyl chloride p-tolyl chloride 4-chlorotoluene
	1-bromo-3-methyl-benzene 3-bromo-1-methylbenzene 3-methylbromobenzene 3-bromo-toluene 3-bromotoluene m-bromotoluene 3-Me-C6H4Br
	1-chloro-3-methylbenzene meta-chlorotoluene 3-chloro-toluene 3-chloromethylbenzene 3-methylchlorobenzene m-chloromethylbenzene m-tolyl chloride

