

I - 1) 置換基の発生を制御

Reaxys上の検索オプション:

- 置換基の発生を原則許可し、禁止位置を明示: Substructure / on all atomsにチェック
- 置換基の発生を原則禁止し、許可位置を明示: As drawnにチェック

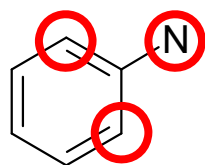
→ 一番簡単な置換基発生ブロックの方法は、水素を明示して記述する方法

❖ 置換基数を設定し、置換基の発生を制御

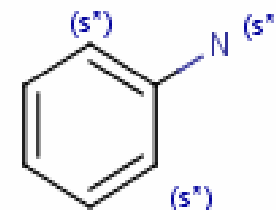
例) アニリン誘導体の検索(ただし第一級アミンであり、オルト位には置換基がないこと)

MarvinSketch上での置換数の設定

- 置換数とは、H以外の結合の最大数を示す
- * : 構造式で描いた以外の置換基は発生しない
- 6 : その原子に許される最大価数までの置換を許す



○の原子上での置換を制御



- ① キーボードで「.」, 「s」と順次タイプし、次に「*」をタイプ
- ② 置換数を指定したい原子の上でカーソルをクリック



- 括弧の中に置換数を示すサインが表示
- 置換基の発生をブロック