

SciFinder Web

源于化学，超越化学的一站式检索平台

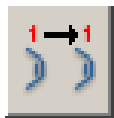
反应定义工具案例




A division of the American Chemical Society

www.cas.org

原子对应工具 (Atom Mapping Tool)



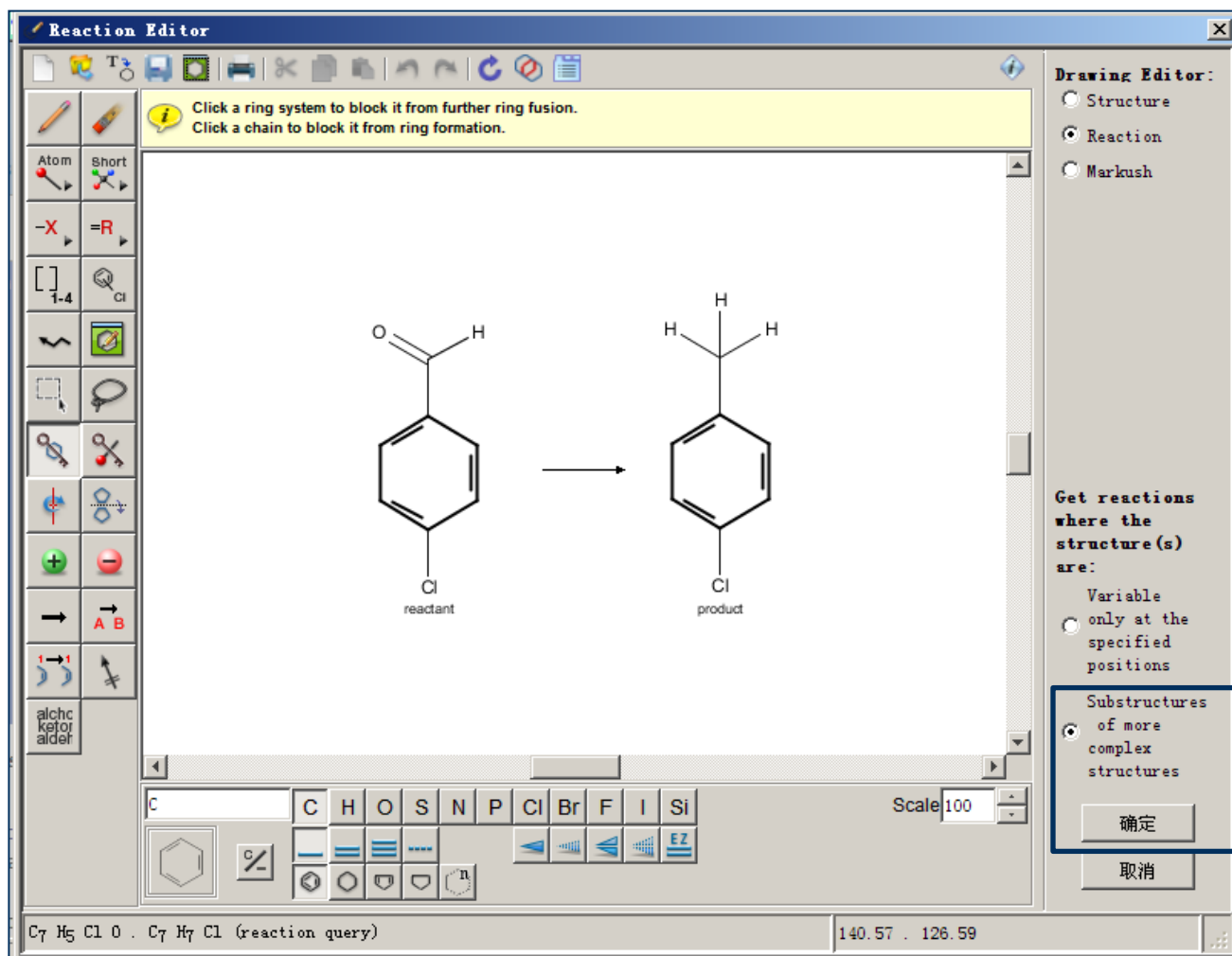
- 原子对应工具用于定义反应物/产物或试剂/产物的原子对应。
- 可以在反应式中标记多组对应原子，这可缩小答案数量，作更准确的检索。
- 指定原子对应的方法：
 - 在垂直工具面板上，点击 
 - 光标变为图标的样子。
 - 将光标置于合适的反应物或试剂节点上（会高亮显示），然后点击该节点。
 - 将光标置于合适的产物节点上（会高亮显示），然后点击该节点。
 - 所选节点的附近会出现相同的数字。

原子对应工具应用案例

■ 检索要求

- 对氯苯甲醛的醛基还原为甲基
- 苯环环系保持
- 苯环上允许存在其他取代基

有些人会这样定义

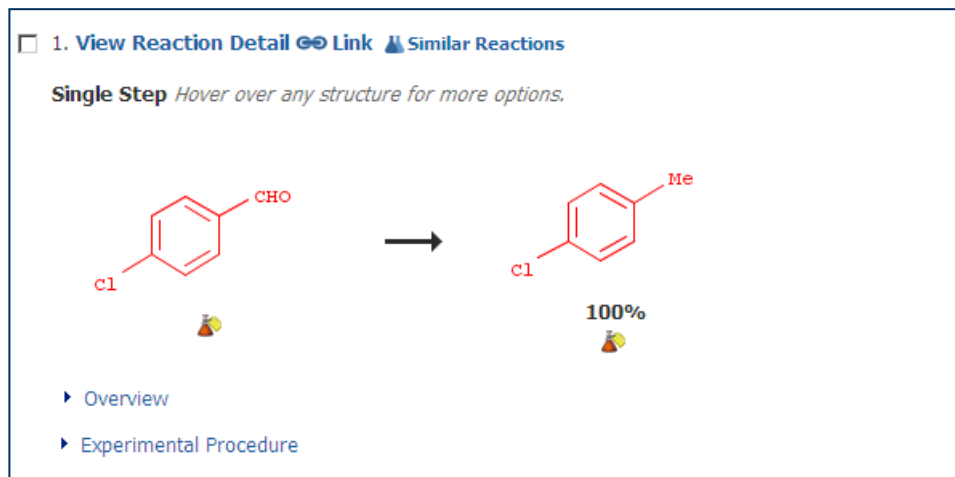


环锁定工具锁定苯环，苯环环系保持；苯环上其他碳原子未锁定，允许有取代。

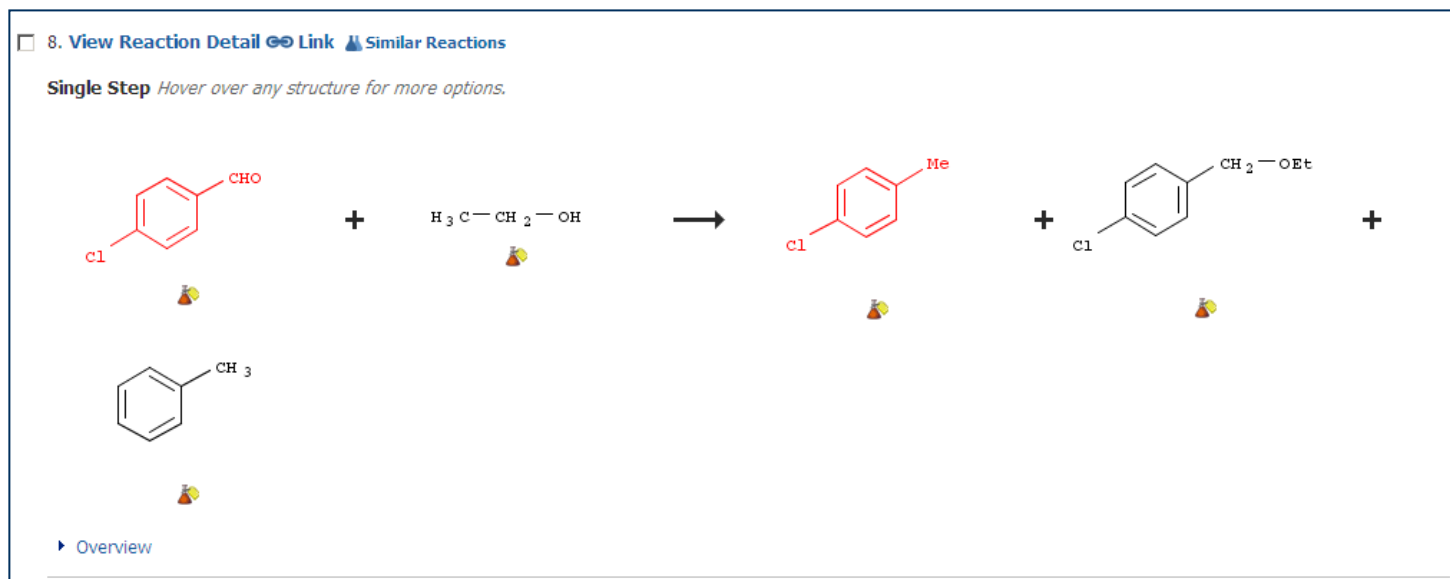
但是这样的定义是否完全满足检索要求呢？

我们先尝试检索

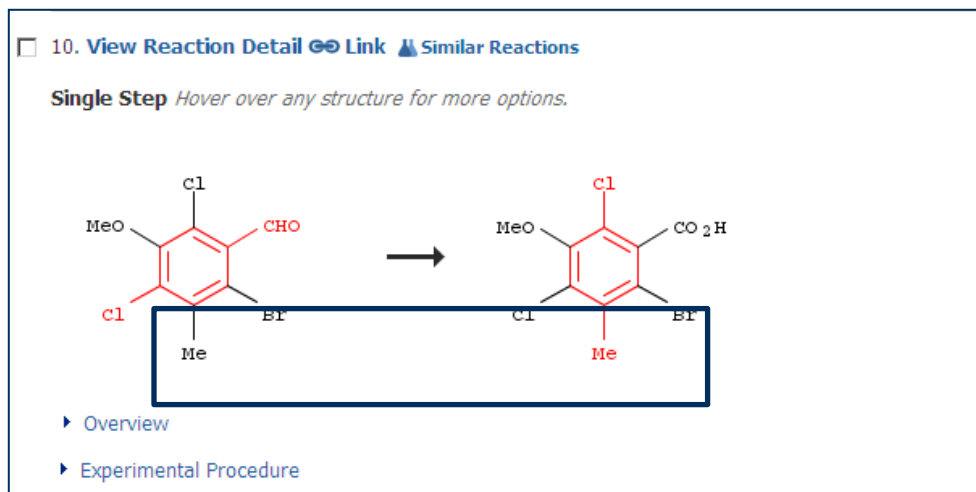
检索出来的结果



存在我们想要的结果集

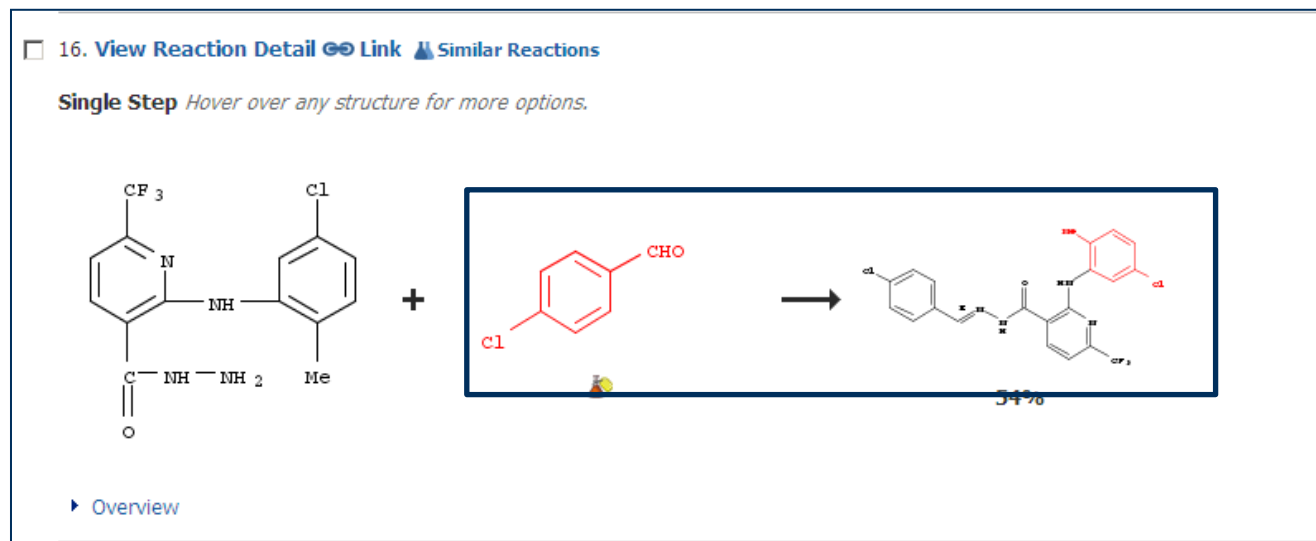


但是，也存在以下结果.....



产物中苯环上虽然存在甲基，却不是来自反应物苯环上的醛基

思考：需要添加原子对应工具，让反应中心明确。



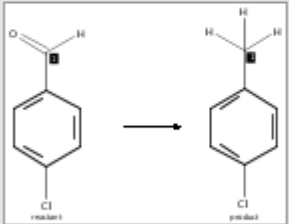
限定反应中心

Analysis **Refine**

Refine by:

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Reaction Structure:

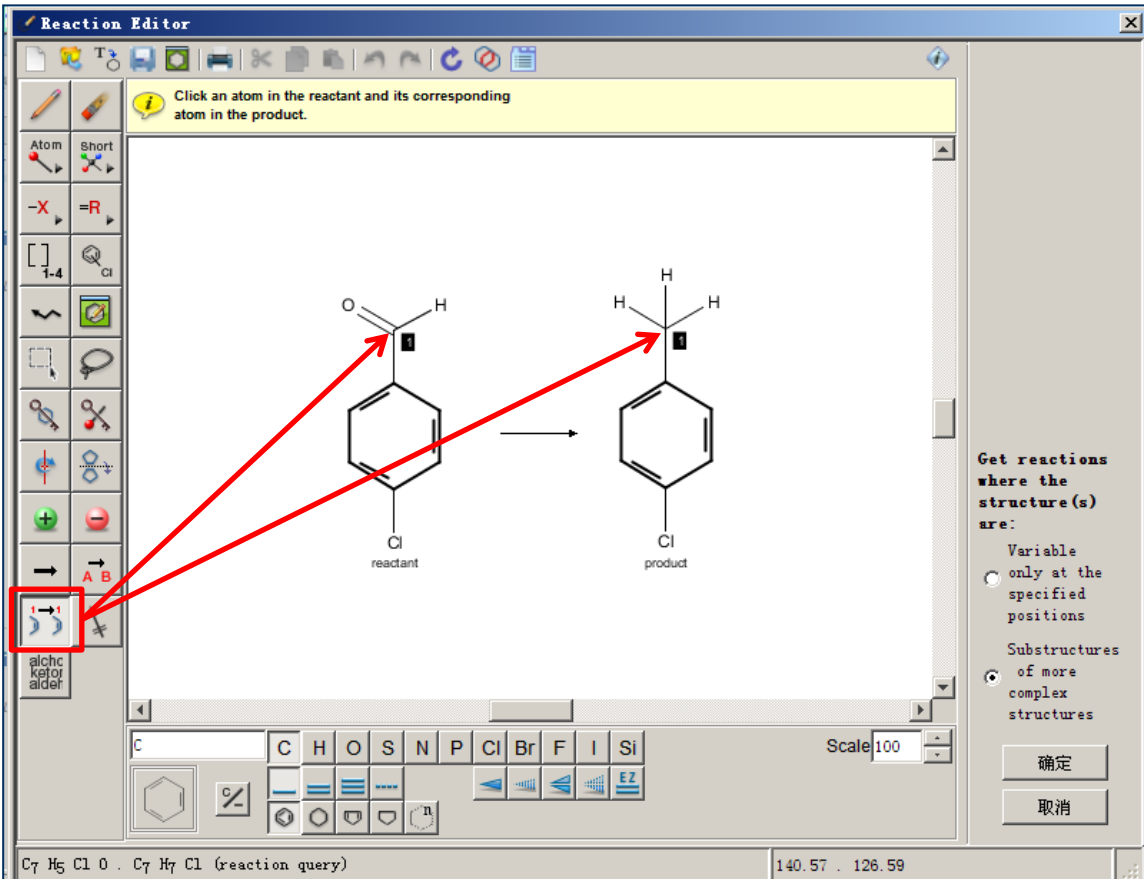


Click image to change structure or view detail
Search type: **Substructure**

Refine

Reaction Editor

Click an atom in the reactant and its corresponding atom in the product.



Get reactions where the structure(s) are:

- Variable only at the specified positions
- Substructures of more complex structures

确定
取消

C7 H5 Cl O . C7 H7 Cl (reaction query) 140.57 . 126.59

利用原子对应工具指定反应中心

限定后的结果

Reactions Get References Tools Send to SciPlanner


8 Reactions 0 Selected

NEW Group by: No Grouping Sort by: Relevance

Select All Deselect All

1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*

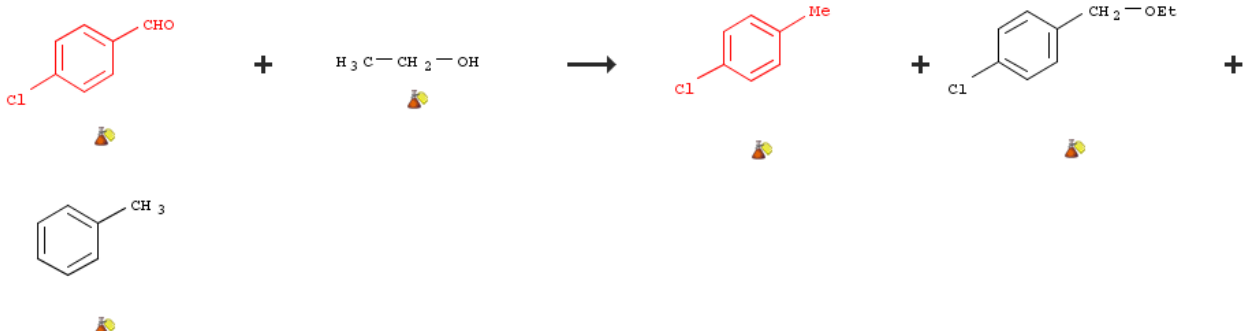


► Overview
► Experimental Procedure

都是我们想要的反应结果

8. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*



► Overview

Comprehensive Content

Sophisticated Analysis

Unprecedented Results



iGroup亚太资讯集团
iGroup是CAS产品在中国地区的唯一合法代理

Contact us if you need further information~

iGroup北京办公室
Tel: 010-82335058
Fax: 010-82318736

iGroup上海办公室
Tel: 021-64453167
Fax: 021-64155180

iGroup广州办公室
Tel: 020-83274076
Fax: 020-83274078

E-mail: scifinder@igroup.com.cn