

### 3.2.3. 化学反应数据库

#### 服务介绍:

本数据库包括反应物和生成物的结构、名称、试剂、溶剂、催化剂、反应温度等反应条件及参考文献等。由于结构输入和反应显示均需要 java applet 插件, 因此用户的浏览器请勿禁用 java 程序。

#### 检索方式与示例:

用户可以通过反应物、生成物的英文名称、反应条件、催化剂等来检索相关反应, 也可以输入化合物结构检索其相关的反应。还可以从反应物或者生成物进行继续检索, 扩展反应链。

##### 3.2.3.1 化学反应条件检索

**基本原理** 所谓化学反应条件检索, 就是通过反应物、生成物、催化剂、溶剂、试剂等英文名称和反应类型等化学反应的条件在数据库中查询到匹配的化学反应。

注意, 反应物和生成物的名称都是模糊检索。

化学反应的各个条件为组合关系, 即条件 1 and 条件 2。有些检索得到的结果较多, 可能超过 100 条, 用户可以调整需要显示的记录数和每页显示的记录数, 方便查看检索结果。

如图 3.2.3.1 所示, 表示检索“使用 benzene 做反应溶剂, 并且生成物名称包含 chalcone 的化学反应” (例 1)。

图 3.2.3.1 化学反应的条件输入 (例 1)

输入条件, 点击 **提交查询**, 系统便会检索并返回用户要求的结果。见图 3.2.3.2。

No.	反应物	产物	反应细节
1	2,3-dibromo-1-phenyl-3-p-tolyl-propan-1-one	$\alpha$ -bromo-4-methyl-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
2	2,3-dibromo-1,3-diphenyl-propan-1-one	$\alpha$ -bromo-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
3	2-hydroxy-benzaldehyde +1-(4-nitro-phenyl)-ethanone	2-hydroxy-4-nitro-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
4	1-phenyl-3-(toluene-4-sulfonyl)-ethanone +benzaldehyde	$\alpha$ -(toluene-4-sulfonyl)-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
5	1-(4-nitro-phenyl)-ethanone +4-methoxy-benzaldehyde	4-methoxy-4-nitro-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
6	methanesulfonyl acid 2-(4-bromo-phenyl)-4-oxo-chroman-3-yl ester +benzenethiol	2-(4-bromo-phenyl)-3-phenylsulfanyl-chroman-4-one +2-(4-bromo-phenyl)-3-phenylsulfanyl-chroman-4-one +diphenylsulfane +4-bromo-2-hydroxy-trans-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
7	Chalcone oxime	Chalcone +5-(4-methoxy-phenyl)-3-m-tolyl-isoxazole	<a href="#">反应细节</a>
8	2,3-dibromo-3-(4-methoxy-phenyl)-1-phenyl-propan-1-one	$\alpha$ -bromo-4-methoxy-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
9	acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester	2-hydroxy-4-methyl-trans-chalcone	<a href="#">反应细节</a>
10	acetic acid 2-[3-hydroxy-3-(2-methoxy-phenyl)-prop-1-ynyl]-phenyl ester	2-hydroxy-3-methoxy-trans-chalcone	<a href="#">反应细节</a>

图 3.2.3.2 化学反应条件检索结果 (例 1)

#### 反应细节

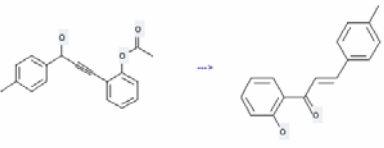
点击第 9 条记录的 [反应细节](#) 的连接, 即可查看该反应的数据细节。见图 3.2.3.3。

化学反应数据, 总共包括三大内容: 反应物和生成物的名称与结构、反应条件、参考文献。

反应条件可以进一步细化为: 反应类型、试剂、溶剂、反应时间、反应温度、催化剂、反应压强、反应步数、研究目的等内容。

当前位置: [化学反应数据库](#) -> [化学反应数据库](#) [返回上一页](#) [我要纠错](#)

反应物	acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-enyl)-phenyl ester	<a href="#">相关反应</a>	<a href="#">化合物属性</a>
生成物	2-hydroxy-4-methyl-trans-chalcone	<a href="#">相关反应</a>	<a href="#">化合物属性</a>



[放大基本反应](#)

**反应条件**

反应条件 1

反应类型	Deacetylation/Meyer-Schuster rearrangement
试剂	p-toluenesulfonic acid
溶剂	benzene
反应时间	24 hour(s)
反应温度	20 °C
产率	71 %

**参考文献**

文献 1 De, Mahuya; Majumdar, Dyuti P.; Kundu, Nitya G.; *J. Indian Chem. Soc.* EN:11-12. 1999, 76, 665 - 674.

图 3.2.3.3 化学反应数据细节

化学反应数据库的参考文献是简记的，其格式含义如图 3.2.3.4 所示。

	<b>作者名</b>	<b>来源文献</b>	
	De, Mahuya; Majumdar, Dyuti P.; Kundu, Nitya G.;	<i>J. Indian Chem. Soc.</i>	EN:11-
	12. 1999, 76, 665 - 674.		
<b>年卷页</b>			

图 3.2.3.4 化学反应文献的格式和含义

在图 3.2.3.3 中，反应物和生成物名称的后面还有[相关反应](#)和[化合物属性](#) 2 个链接，分别可以检索化合物的相关反应和化合物的属性。点击[化合物属性](#)的链接，则可以查看化合物属性页面，如图 3.2.3.5 所示。

<b>SRN号:</b>	133125493
<b>所有名称:</b>	1) 2'-hydroxy-4-methyl-trans-chalcone:
<b>CAS号:</b>	N/A
<b>分子式:</b>	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>
<b>化合物结构:</b>	
<b>更多信息:</b>	<a href="#">三维结构</a> <a href="#">化学反应</a>

图 3.2.3.5 生成物的化合物属性

化合物相关反应继续查询

用户可以点击反应物和生成物的相关反应，对该化合物进行相关反应的继续检索，即进入相关反应查询的页面，如图 3.2.3.6。

**基本原理** 系统首先利用结构检索的原理找到目标化合物，然后检索目标化合物相关的化学反应。

用户可以指定该化合物在反应中的角色是反应物或者是生成物。如指定了角色是反应物，则可以指定从该物质开始的反应步数，检索多步反应，最多可以到 5 步。作为生成物只能检索一步反应。

### 1. 继续查询该化合物作为生成物的反应（例 2）

图 3.2.3.6 中，继续查询化合物 acetic acid 2-(3-hydroxy-3-*p*-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester 作为生成物的反应（例 2）。

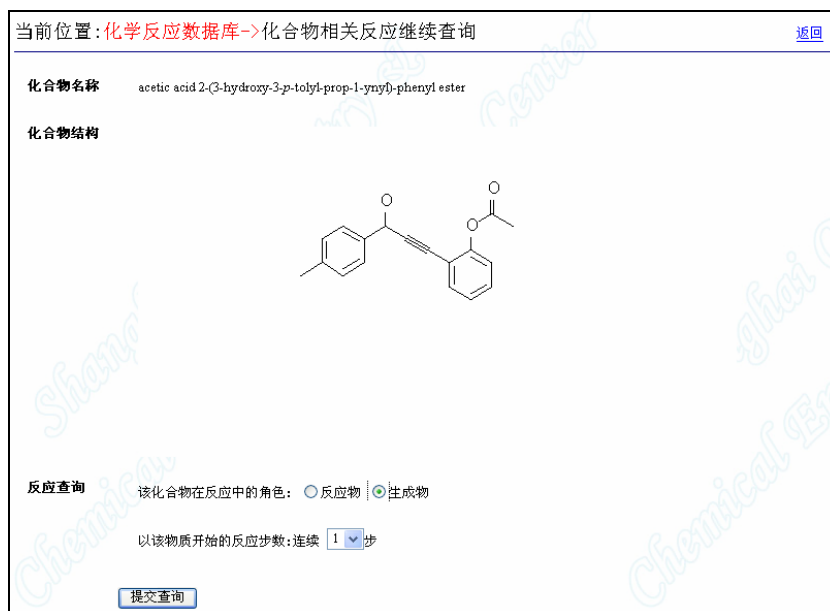


图 3.2.3.6 化合物相关反应继续查询（例 2）

结果如下图 3.2.3.7。



图 3.2.3.7 化合物作为生成物继续查询的结果（例 2）

图 3.2.3.7 中显示，系统查询到 acetic acid 2-(3-hydroxy-3-*p*-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester 作为生成物的反应有 2 条，以 反应物→生成物 的方式显示。

点击反应路线的链接，即可以化学结构的方式展示反应路线示意图，见图 3.2.3.8。

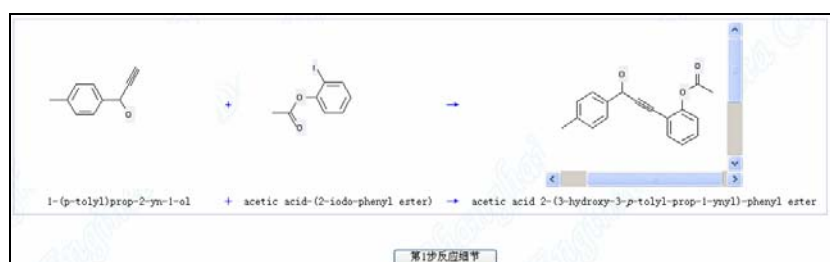


图 3.2.3.8 反应路线示意图（例 2）

点击图 3.2.3.8 中的反应细节，即可查看该反应的数据细节，如图 3.2.3.9 所示。

当前位置: 化学反应数据库-> 化学反应数据细节 [返回上一页](#) [查看详细](#)

反应物	acetic acid-(2-to-4o-phenyl ester)	<a href="#">相关反应</a>	<a href="#">化合物属性</a>
反应物	1-(p-tolyl)prop-2-yn-1-ol	<a href="#">相关反应</a>	<a href="#">化合物属性</a>
生成物	acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester	<a href="#">相关反应</a>	<a href="#">化合物属性</a>

[放大显示该反应](#)

**反应条件**

反应条件 1

反应类型	Substitution
试剂	Pd(PPh <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> CuI
溶剂	dimethylformamide
反应时间	24 hour (s)
反应温度	20 °C
产率	85 %

**参考文献**

文献 1 De, Mahuya; Majumdar, Dnyuti P.; Kundu, Nitya G.; *J. Indian Chem. Soc.*, BR-11-12, 1999, 76, 685 - 674.

图 3.2.3.9 化学反应数据细节(例 2)

## 2. 继续查询该化合物作为反应物的反应 (例 3)

如图 3.2.3.10, 表示继续查询化合物 acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester 作为反应物并以它开始的连续 2 步的反应 (例 3)。

**化合物名称** acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester

**化合物结构**

**反应查询** 该化合物在反应中的角色:  反应物  生成物

以该物质开始的反应步数: 连续  步

图 3.2.3.10 化合物相关反应继续查询 (例 3)

您检索的是连续 1 步反应, 结果如下:

**路线 1:** acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester  
→ benzofuran-2-yl-p-tolyl-methanol

**路线 2:** acetic acid 2-(3-hydroxy-3-p-tolyl-prop-1-ynyl)-phenyl ester  
→ 2'-hydroxy-4-methyl-frans-chalcone

该化合物的 1 步反应, 一共有 2 条反应路线

图 3.2.3.11 化合物作为反应物第一步反应的查询结果 (例 3)

**多步反应检索的基本原理** 系统首先以目标化合物为反应物找到反应集合 1(第一步反应), 再以集合 1 中的生成物作为反应物找到反应集合 2(第二步反应), 如此按反应链递进下去, 直到完成用户设定的反应步数, 或者某反应链终止.

图 3.2.3.11 就是该目标化合物的第一步反应结果, 从图中看仅有 2 条反应路线, 得到 2 种生成物.

然后系统以第一步的生成物作为反应物, 完成第二步反应的检索, 得 15 条反应路线, 部分路线如图 3.2.3.12. 从图中用户可以发现, 多步反应的反应路线的显示方式是 反应物——>生成物 1——>生成物 2.

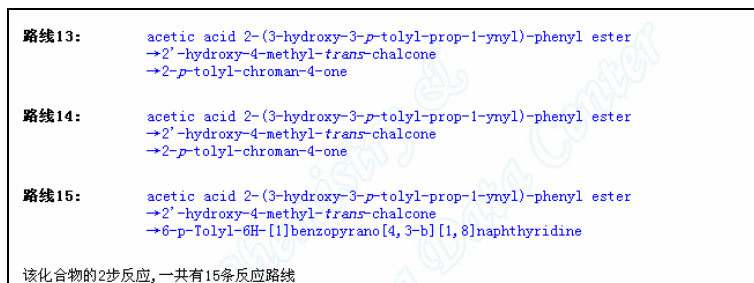


图 3.2.3.12 化合物作为反应物查询连续 2 步反应的部分结果 (例 3)

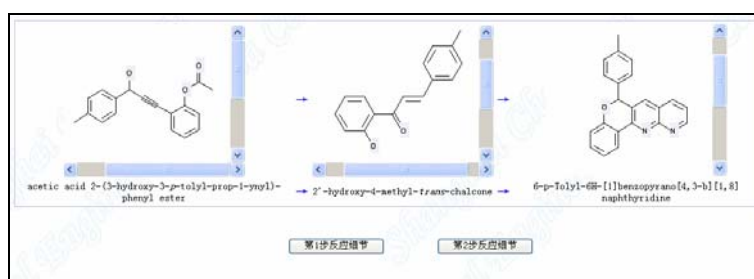


图 3.2.3.13 化合物作为反应物查询连续 2 步反应路线的示意图 (例 3)

点击 **第 1 步反应细节** 和 **第 2 步反应细节**, 即可查看对应的化学反应数据细节 (略)。

### 3.2.3.2 化合物结构检索

**基本原理** 用户在页面上输入化合物的二维结构, 或者上传化合物的 MOL 文件(可用 MDL 公司的 ISIS DRAW 软件绘制结构, 导出为 MOL 文件), 系统首先检索与之结构完全一致的化合物。然后在检索该化合物分别作为反应物和生成物的化学反应。找到化学反应后, 分别按照角色分类显示。

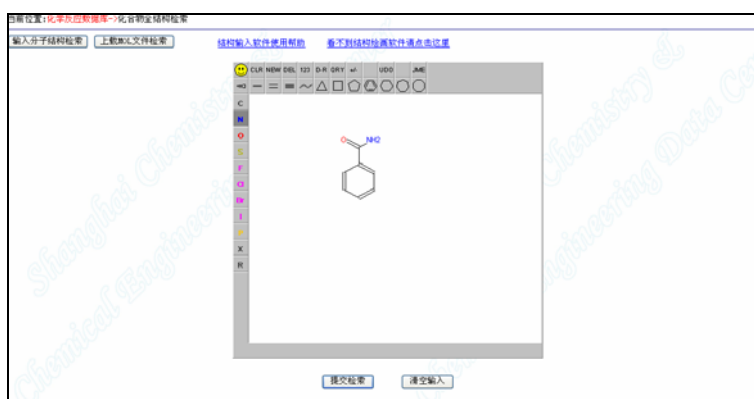


图 3.2.3.14 根据结构检索反应的输入界面

第一步: 输入化合物结构。如图 3.2.3.14 所示, 输入苯甲酰胺, 然后点 **提交检索**。(例 4)

第二步: 查看检索结果列表。系统首先找到苯甲酰胺的化合物记录号, 然后根据记录号找到该化合物参与的所有反应, 并按照化合物在反应中的角色分别显示。每条反应记录列出了反应物和产物。

苯甲酰胺作为反应物的反应共有 420 条, 作为产物的反应共有 137 条。图 3.2.3.15 列出了一部分苯甲酰胺作为反应物的反应, 而图 3.2.13.16 则列出了一部分苯甲酰胺作为产物的反应。

点击页面上端左端的 2 个按钮 **作为反应物** 和 **作为产物**, 可切换这 2 类结果显示。

当前位置: 化学反应数据库 - 化合物结构检索结果 [返回检索页](#)

作为反应物 作为产物

检索的化合物作为反应物的反应如下

编号	反应物	产物	反应细节
1.	benzamide +formaldehyde +piperidine	N-piperidin-1-ylmethylbenzamide	<a href="#">反应细节</a>
2.	benzamide +benzaldehyde +piperidine	N(phenylpiperidin-1-ylmethyl)benzamide	<a href="#">反应细节</a>
3.	benzamide +diketene	acetooctylbenzoylamine	<a href="#">反应细节</a>
4.	3-phenylpropionaldehyde +benzamide	N,N-(3-phenylpropylidene)-bis-benzamide	<a href="#">反应细节</a>
5.	benzamide +formaldehyde	benzoylamino-methanol	<a href="#">反应细节</a>
6.	benzamide +benzobenzene	N-phenylbenzamide	<a href="#">反应细节</a>
7.	ethanol +benzamide	benzoic acid ethyl ester	<a href="#">反应细节</a>
8.	benzamide +ethanol	phenylcarbamic acid ethyl ester	<a href="#">反应细节</a>
9.	methanol, sodium salt +benzamide	phenylcarbamic acid methyl ester	<a href="#">反应细节</a>
10.	1-chloro-4-isocyanato-benzene +benzamide	N-benzoyl-N-(4-chloro-phenyl)-urea	<a href="#">反应细节</a>
11.	4-nitro-benzaldehyde +benzamide	1-(bis-benzoylamino-methyl)-4-nitro-benzene	<a href="#">反应细节</a>
12.	benzaldehyde +benzamide	N,N-benzylidene-bis-benzamide	<a href="#">反应细节</a>

图 3.2.3.15 苯甲酰胺作为反应物的部分检索结果列表 (例 4)

当前位置: 化学反应数据库 - 化合物结构检索结果 [返回检索页](#)

作为反应物 作为产物

检索的化合物作为产物的反应如下

编号	反应物	产物	反应细节
1.	benzoic acid ethyl ester	benzamide	<a href="#">反应细节</a>
2.	benzoyl chloride	benzamide	<a href="#">反应细节</a>
3.	benzoyl chloride	di-benzamide +benzamide	<a href="#">反应细节</a>
4.	benzoic acid +urea	benzamide	<a href="#">反应细节</a>
5.	benzoic acid	benzamide	<a href="#">反应细节</a>
6.	benzylamine	benzamide	<a href="#">反应细节</a>
7.	N(morpholin-4-yl-phenyl)-methyl-benzamide	benzamide +benzaldehyde +N,N'-benzylidene-bis-benzamide	<a href="#">反应细节</a>
8.	4-ethoxy-quinoline +benzoyl chloride	benzamide +N-benzoyl-anthranilic acid ethyl ester	<a href="#">反应细节</a>
9.	1-benzoyl-1H-benzotriazole	benzoic acid +N-biphenyl-2-yl-benzamide +1H-benzotriazole +2,1-bis(benzotriazolyl) +benzamide	<a href="#">反应细节</a>
10.	N-hydroxy-benzamide	benzamide +benzaldehyde	<a href="#">反应细节</a>
11.	[a- <sup>13</sup> C]benzoyl chloride	[a- <sup>13</sup> C]benzamide	<a href="#">反应细节</a>

图 3.2.3.16 苯甲酰胺作为产物的部分检索结果列表 (例 4)

第三步: 查看反应细节。点击图 3.2.3.15 和图 3.2.3.16 中的反应细节的按钮, 可打开每个反应的数据细节。如图 3.2.3.17 所示。其他内容同上节。

反应物 benzamide [相关反应](#) [化合物属性](#)

反应物 ethanol [相关反应](#) [化合物属性](#)

生成物 phenylcarbamic acid ethyl ester [相关反应](#) [化合物属性](#)

放大显示该反应

反应条件

反应条件 1

试剂 bromine  
sodium ethylate

反应条件 2

试剂 PhI(OAc)<sub>2</sub>

图 3.2.3.17 化学反应数据细节(例 4)

## 用户常见问题与解答

问题 1) 看不到结构绘制软件怎么办?

答: 看不到结构绘制软件有多种情况, 请参照 [http://202.127.145.134/download/java\\_revs.htm](http://202.127.145.134/download/java_revs.htm) 解决:

问题 2) 只有化合物的中文名称怎么检索化合物的相关反应?

答: 有 3 种办法.

- ① 到化合物名称翻译页面 <http://202.127.145.134/scdb/translate/default.asp>, 把中文名称翻译成英文名称, 然后返回化学反应条件检索的页面 [http://202.127.145.134/scdb/crc/crc\\_query.asp](http://202.127.145.134/scdb/crc/crc_query.asp) 进行检索;
- ② 到 [http://202.127.145.134/scdb/str/name\\_change2.asp](http://202.127.145.134/scdb/str/name_change2.asp), 中文名称转换成化合物结构, 然后到化合物结构检索页面 [http://202.127.145.134/scdb/crc/str\\_full\\_query.asp](http://202.127.145.134/scdb/crc/str_full_query.asp) 输入结构进行检索;
- ③ 根据上面①和②的结果, 到化合物结构数据库中, 选择化合物检索, 或者化合物结构检索, 通过化合物属性页面查看化合物的相关反应。

