

# CAS SciFinder® CAS RETROSYNTHESIS

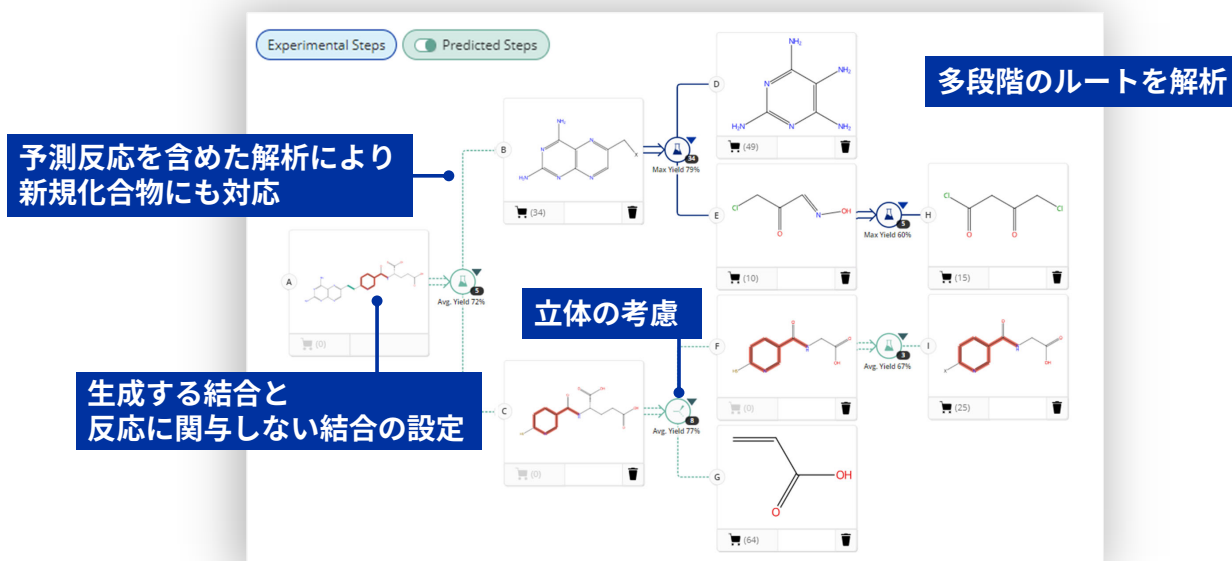
化学情報協会 情報事業部  
202412

© 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## CAS Retrosynthesis とは

CAS SciFinder が目的物質を合成する経路を自動で解析する機能



# 解析の流れ ①

ホーム画面の Retrosynthetic Analysis から目的物質の構造を作図する

Retrosynthetic Analysis  
Draw or import a structure.

Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI:

Formula: C<sub>33</sub>H<sub>46</sub>O<sub>6</sub> (562.75)

解析を開始する Start Retrosynthetic Analysis

3 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## 【参考】 検索した物質に対して解析を実行する場合

構造をクリックし、Start Retrosynthetic Analysis を選択する

Substances search for "217476-93-2"

Filter Behavior  
Filter by Exclude

Search Within Results  
Search for up to 3 structures within the result set.

Draw

Search

Reaction Role

Reference Role

Life Science Data

Commercial Availability

1 Result

217476-93-2

Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)  
Double bond geometry shown

C<sub>33</sub>H<sub>46</sub>O<sub>6</sub>  
(2S,3R,4aR,9aR)-7-[(1E)-2-[4-[(2E)-3,7-Dimethyl-2,6-octadienyl]-3,5-dihydroxypheno...]

22 References 35 Reactions 1 Supplier

CAS RN  
217476-93-2

CAS Name  
(2S,3R,4aR,9aR)-7-[(1E)-2-[4-[(2E)-3,7-Dimethyl-2,6-octadienyl]-3,5-dihydroxypheno...]

Get Substance Details

Get Life Science Data

Get Reactions (35)

Synthesize (35)

Start Retrosynthetic Analysis

Get References (22)

Get Suppliers (1)

View in CAS BioFinder

Edit Structure - Reset +

Start Retrosynthetic Analysis を選択する

4 © 2024 American Chemical Society. All rights reserved.



## 解析の流れ ②

Retrosynthesis Plan Options で解析条件を設定する

The screenshot shows the 'Retrosynthesis Plan Options for drawn structure' interface. It includes several sections with annotations:

- Set Rules Supporting Predicted Reactions:** Radio buttons for 'Common', 'Uncommon (includes common)', and 'Rare (includes common)'. An annotation points to the 'Common' option: **予測反応の解析に適用されるルール (p. 6)**.
- Break and Protect Bonds (Optional):** A section with 'Break Bond' and 'Protect Bond' buttons. An annotation points to this section: **保護する結合、最初のステップで切断する結合の指定**.
- Set Starting Materials Cost Limit:** A text input field with '1000' and a 'USD/mol' dropdown. An annotation points to this field: **出発物質のコスト上限**.
- Email me when my plan is complete:** A checked checkbox. An annotation points to it: **完了時にメールで通知する**.
- Continue to Retrosynthesis Plan:** A blue button. An annotation points to it: **解析を開始する**.

A chemical structure of a complex molecule is shown on the right side of the interface.

## Set Rules Supporting Predicted Reactions の内容

ルール名	内容
Common	<ul style="list-style-type: none"><li>- 多くの文献で報告されている汎用性が高い反応を採用する</li></ul>
Uncommon	<ul style="list-style-type: none"><li>- 文献で報告されている数が少ない反応も採用する</li><li>- Common より多様な合成経路を解析できる可能性がある</li></ul>
Rare	<ul style="list-style-type: none"><li>- 文献で報告されている数が Uncommon より少ない反応も採用する</li><li>- Uncommon より多様な合成経路を解析できる可能性がある</li></ul>

# 【参考】解析に時間がかかる場合

解析に時間がかかる場合、ホーム画面に戻る

Plan in progress...

It's taking a little longer than expected to generate your plan. Click the OK button to return to the Home page where you can check the status of your plan under Recent Search History.

OK

ホーム画面に戻った場合、Recent Search Historyで解析のステータスを確認できる

Search by Substance Name and/or CAS RN.

Retrosynthetic Analysis: Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.

Search CAS Lexicon: Build powerful searches using CAS concepts, chemical classes, and taxonomy.

Search CAS Sequences: Query BLAST, CDR, and Motif algorithms for nucleotide and protein based sequences.

Recent Search History

Date	Retrosynthesis	Predicted Rules	Break & Protect Bonds	Starting Material Cost Limit	Buttons
December 23, 2024	9:48 AM	Common	No	\$1,000.00/mol	Open Plan, Edit Search, Searching

Open Plan

Search

既知反応の解析が終わった時点で Open Plan が選択できるようになる

予測反応の解析が終わると Searching から Complete になる

# 解析の流れ ③

解析結果の表示

予測反応の ON/OFF | Plan Options の編集 | ダウンロード | 結果の保存と共有

Plan Information: Estimated Yield: 16%, Overall Price: \$3,868,403.15 (USD per 100 grams)

合成経路の概要

Experimental Steps | Predicted Steps | Edit Plan Options

View Excluded Options | Save

Step Evidence

Step	Evidence
A → B	1.1 Reagents: <i>p</i> -Toluenesulfonic acid Maximum Yield: 55% Solvents: Methanol; 46 h, rt Evidence Alternative steps (131) Experimental Protocols
B → C + D	1.1 Reagents: Sodium hydride, 15-Crown-5 Maximum Yield: 71% Solvents: Tetrahydrofuran; rt; 3.5 h, rt Evidence Alternative steps (112) Experimental Protocols
C → E	1.1 Reagents: 2,3-Dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone Maximum Yield: 100% Solvents: Dichloromethane, Water; 80 min, rt Evidence Alternative steps (41) Experimental Protocols
D → F + G	1.1 2 min, 170 °C Average Yield: 77% Evidence

Steps タブ (p.10)

解析結果の有効期限は 30 日間

# 解析の流れ ④

## Steps タブ

View Excluded Options Save

Step Evidence

**代替反応の一覧 (p.10)**

View all alternatives (130)

View evidence

Exclude this step

Step B:  $A \Rightarrow B + C$   
Stereoselective  
Maximum Yield: -  
Evidence  
Alternative steps (130)

Step C: Average Yield: 76%  
1.1 10 h, reflux  
Evidence

Reactions from Retrosynthesis Plan Evidence **出展反応の一覧**

1 Result

Scheme 1 (1 Reaction)

Absolute stereochemistry shown Double bond geometry shown

Scheme 2 (31-339-CAS-2740046)

No Data Available

Schweinfurthins and uses thereof

Assignees: United States Dept. of Health and Human Services; University of Iowa Research Foundation

World Intellectual Property Organization, WO2010127235 A1 2010-11-04

PatentPak Full Text

# Alternative steps 画面

A  $\Rightarrow$  B + C Alternative Steps (130)

Filter by

- Alternative Step Type
  - Experimental (1)
  - Predicted (129)
- Experimental Stereochemistry
  - Selective (1)
- Predicted Stereochemistry
  - Non-Selective (124)
  - Exact (4)
  - Enantiomeric (1)

**代替反応の絞り込み**

**代替反応のタイプ**

- 既知反応
- 予測反応

**既知反応の立体化学**

- 立体選択的
- 非立体選択的

**予測反応の立体化学**

- 非立体選択的
- 立体選択的 (一致)
- 立体選択的 (鏡像)

**類似の代替反応の一覧**

**選択した反応で合成経路を解析する**

1 of 64 Stereoselective

Experimental Step

View 5 similar Alternatives

View evidence

Maximum

**予測反応**

2 of 64 Stereoselective

**類似の代替反応の一覧**

Select

View evidence

Average yield: 79%

# 【参考】 ステップまたは物質の除外

選択したステップまたは物質を解析から除外できる

Options

View Excluded Options

Excluded Options for this Plan

Structures Steps

Recover

除外したステップまたは物質を戻す

Excluded Options for this Plan

Structures Steps

Recover

除外したステップまたは物質を戻す

このステップを除外する

この物質を除外する

JAICI ヘルプデスク

Tel : 0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

Mail : support@jaici.or.jp