

CAS SciFinder® CAS RETROSYNTHESIS

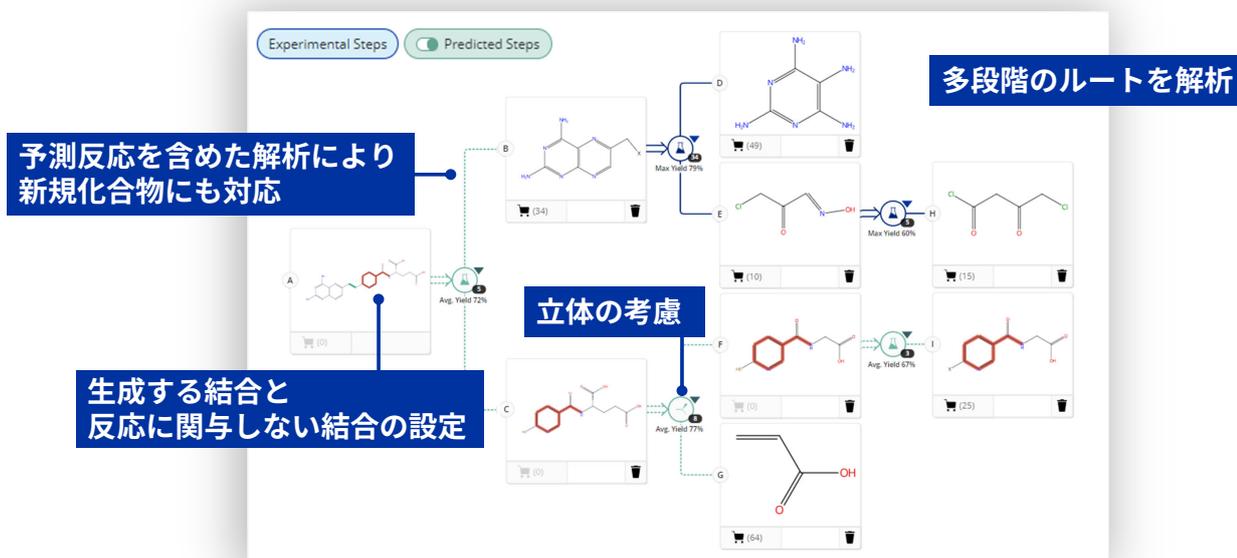
化学情報協会 情報事業部
202412

© 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:

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

Search by CAS Reaction Number, Substance Name, CAS RN, Patent

Build your CAS conc classes, a

Formula: C₃₃H₄₆O₆ (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"

References - Reactions - Suppliers -

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

C₃₃H₄₆O₆
(2S,3R,4aR,9aR)-7-[(1E)-2-[4-[(2E)-3,7-Dimethyl-2,6-octadienyl]-3,5-dihydroxyphe...]

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-dihydroxyphe...]

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

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

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 Japanese callouts:

- Set Rules Supporting Predicted Reactions:** Callout: 予測反応の解析に適用されるルール (p. 6)
- Break and Protect Bonds (Optional):** Callout: 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:** Callout: 出発物質のコスト上限
- Email me when my plan is complete:** Callout: 完了時にメールで通知する
- Continue to Retrosynthesis Plan:** Callout: 解析を開始する

The interface also features a chemical structure of a complex molecule and buttons for 'Break Bond', 'Protect Bond', and 'Clear All Bond Selections'.

Set Rules Supporting Predicted Reactions の内容

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

【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

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.

Search by Substance Name and/or CAS RN.

Retrosynthesis
9:48 AM

Predicted Rules: Common
Break & Protect Bonds: No
Starting Material Cost Limit: \$1,000.00/mol

Open Plan
Edit Search
Searching

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

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

A $A \Rightarrow B + C$
Stereoselective
Maximum Yield: -
Evidence
Alternative steps (130)
View all alternatives (130)
View evidence
Exclude this step

B $A \Rightarrow B + C$
Stereoselective
Predicted Step Only
No reaction summary

C $A \Rightarrow B + C$
Average Yield: 80%
Experimental Protocols
Average Yield: 76%
1.1 10 h, reflux
Experimental Protocols

代替反応の一覧 (p.10)

Reactions from Retrosynthesis Plan Evidence 出展反応の一覧

1 Result
Scheme 1 (1 Reaction)
Steps: 1

Absolute stereochemistry shown
Double bond geometry shown
Supplier (1)

31-339-CAS-2740046
Steps: 1
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)

既知反応
Experimental Step

1 of 64 Stereoselective
View evidence
Maximum Yield
予測反応
Predicted Step

類似の代替反応の一覧
View 5 similar Alternatives

代替反応の絞り込み

選択した反応で合成経路を解析する
Select

【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

このステップを除外する

この物質を除外する

除外したステップまたは物質を戻す

JAICI ヘルプデスク

Tel : 0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

Mail : support@jaici.or.jp