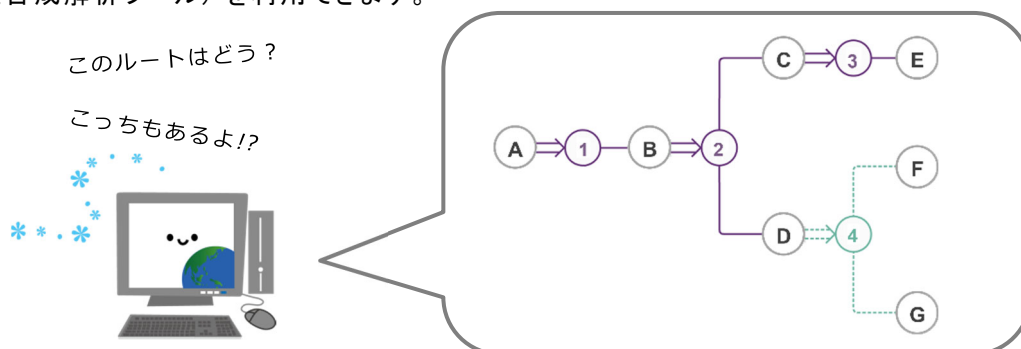


CAS SciFinder<sup>n</sup> ~ Retrosynthesis Planner 操作方法

CAS SciFinder<sup>n</sup> では、化学物質の合成ルートを自動的に提案する「Retrosynthesis Planner」(逆合成解析ツール)を利用できます。



1. 検索初期画面の「Retrosynthesis」を選択します
2. 構造を作図し、「Start Retrosynthesis Analysis」ボタンをクリックします



化学物質検索や反応検索結果の構造図をクリックするとポップアップ表示される Substance Window から「Start Retrosynthesis Analysis」をクリックできます

3. Plan Options 画面が表示されます。「Create Retrosynthesis Plan」 ボタンをクリックします。

Retrosynthesis Plan Options for drawn structure

Select Synthetic Depth: 1, 2, 3 (selected), 4

Set Rules Supporting Predicted Reactions: Common (selected), Uncommon (includes Common Rules), Rare (includes Common and Uncommon Rules)

Set Starting Materials Cost Limit: 1000

Email me when my plan is complete: ☒

Create Retrosynthesis Plan

Break and Protect Bonds: Break Bond, Protect Bond, Clear All Bond Selections

最初のステップで切断、あるいは保護する結合の指定

適用するルール

出発物質のコスト上限

完了したらメールで知らせる

4. Retrosynthesis 画面が表示されます

Retrosynthesis Plan for drawn structure

Generating...

Plan Information: Estimated Yield: - Overall Price: \$7,108.11 (USD per 100 grams) Commercially Available: A

Plan Options: Synthetic Depth: 3 Predicted Rules: Common Break & Protect Bonds: No Starting Material Cost Limit: \$1,000.00/mol Edit Plan Options

Scoring Profiles: Complexity Reduction, Convergence, Evidence, Cost, Yield, Atom Efficiency

Apply Reset Scoring

Retrosynthesis Step Key: Experimental Steps, Predicted Steps

Generating... 表示中は予測反応を含めたルートを探索中

前の画面に戻る

既知反応

予測反応

最初は既知反応（Experimental Steps）のみの合成ルートを表示します。しばらくすると、以下のようなポップアップが表示され、予測反応（Predicted Steps）を含めた最適な合成ルートを表示できます。

Predicted steps are ready.

Your predicted retrosynthesis steps are ready. If you wish to view them later, switch Predicted ON under the Step Key on the Overview tab.

View Now View Later

※ View Now をクリックすると、画面上部の Predicted Results が ON に変わります

※ 予測合成ルート（Predicted）の作成には時間がかかる場合もあります。それまでに次ページ以降の操作や、他の検索、ブラウザを閉じても合成ルート探索は続き、トップ画面から結果の画面に戻ることができます。

## Overview タブ

合成ルートの全体図とともに Plan Information 欄に反応全体の収率や入手可能な試薬とその概算が示されます。

Scoring Profiles では、合成ルートを表示する際の優先条件を設定できます。  
6 つの観点を 4 段階（Off、Low、Medium、High）でカスタマイズできます。

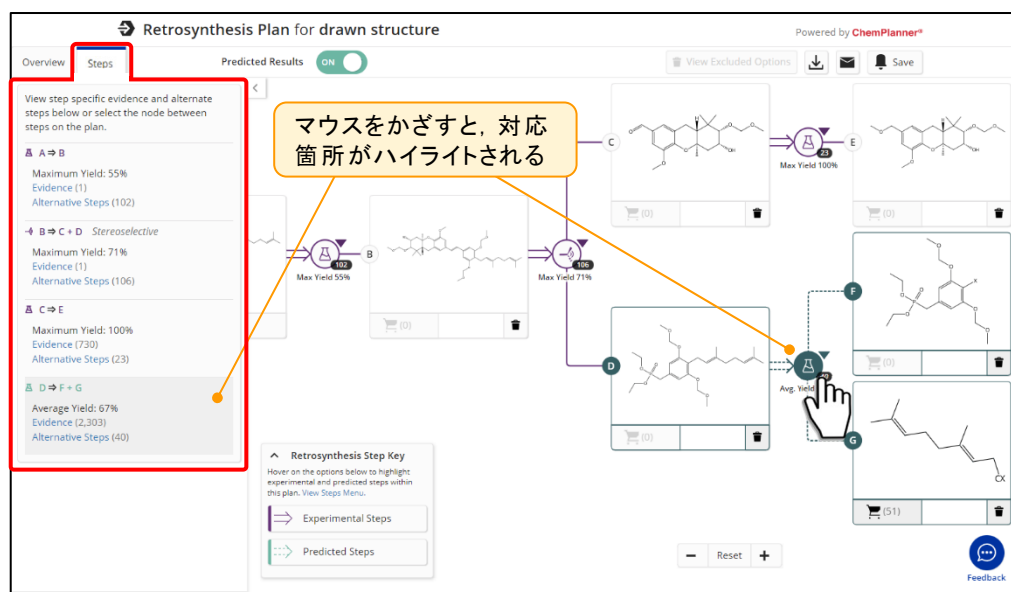
Scoring の観点	優先する反応（High>Medium>Low>Off）
Complexity Reduction	反応前後で分子に変化の大きいルート
Convergence	多くの出発物質から行われる反応ルート
Evidence	根拠となる反応例の多いルート
Cost	ターゲット物質を安価に得られる反応ルート
Yield	ターゲット物質を高い収率で得られる反応ルート
Atom Efficiency	反応により失われる原子の少ないルート

初期設定は、6 つすべてが Medium です。段階を調整し、「Apply」をクリックすると変更できます。  
設定は次に変更するまで、別の合成ルート作成の際にも適応されます。

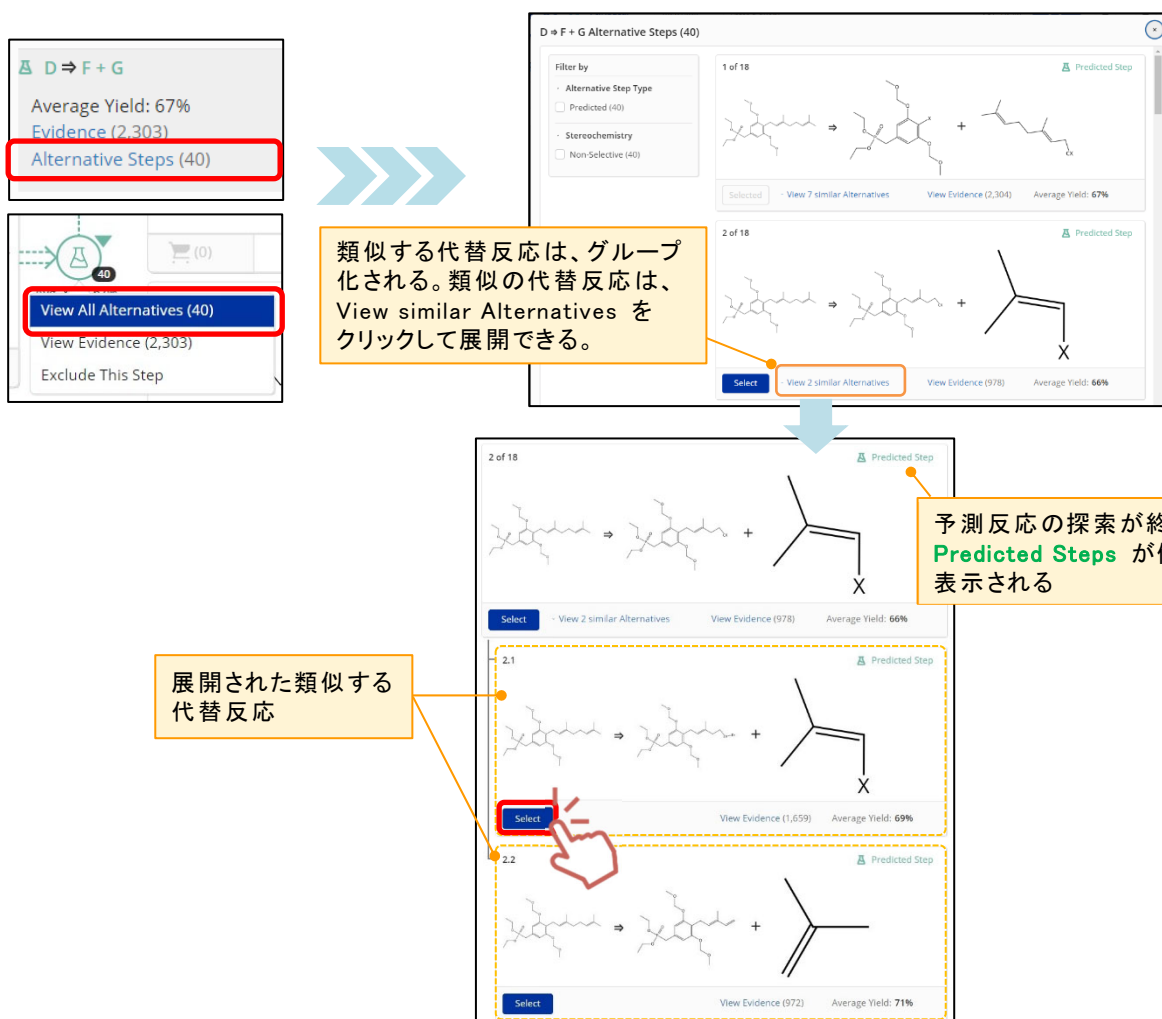
※ Scoring の変更は、予測合成ルート（Predicted）の作成が完了した後から可能となります

## Steps タブ

Steps タブには Overview で示された合成ルート各ステップの情報が表示されます。各ステップに関連する文献情報や、別の物質でのルートに変更したい場合も Steps タブで操作します。



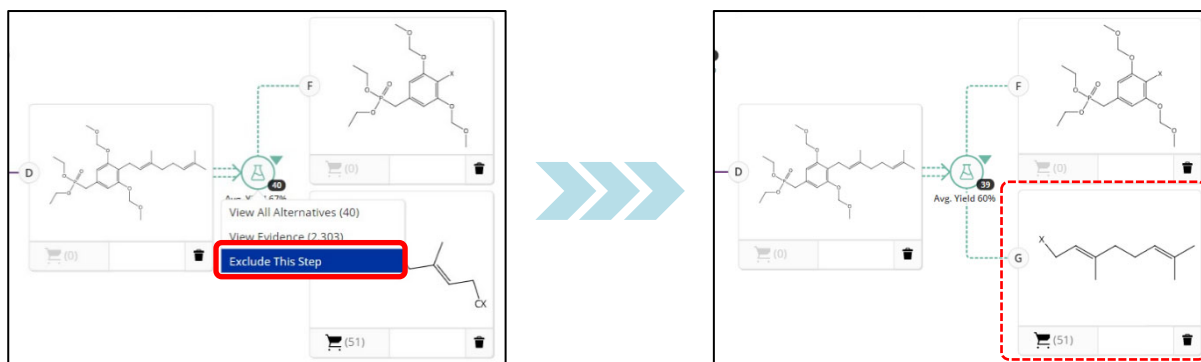
Steps タブの「Alternative Steps」、または合成ルートのアイコンをクリックし「View All Alternatives」を選択すると代替反応の候補が表示されます。変更したい反応の「Select」をクリックすると、選択したステップに変わります。



Steps タブの「Evidence」、または合成ルートアイコンの「View Evidence」をクリックすると、そのステップの出典情報や反応の詳細情報を確認できます。

The image shows two screenshots. The left screenshot shows the 'Evidence' tab in the 'Steps' view, with 'Evidence (2,303)' and 'Alternative Steps (40)' highlighted. The right screenshot shows the 'Reactions from Retrosynthesis Plan Evidence' window, displaying a reaction scheme and a list of reagents and conditions.

合成ルートアイコンの「Exclude This Step」をクリックすると、指定したステップを除外することができます。Alternative Steps から指定したステップが除かれ、表示される合成ルートが変わります。



Exclude This Step で除いたステップは、「View Excluded Options」で確認できます。「Recover」をクリックすると、Alternative Steps に復活します。

The image shows two screenshots. The left screenshot shows the 'View Excluded Options' button in the 'Steps' view, with 'View Evidence (2,303)' and 'Alternative Steps (40)' highlighted. The right screenshot shows the 'Excluded Options for this Plan' window, displaying a reaction scheme and a list of reagents and conditions, with the 'Recover' button highlighted.