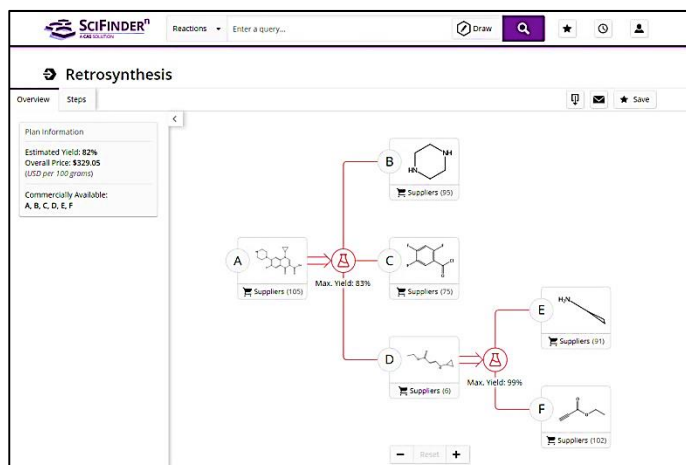


# SciFinder<sup>n</sup> ~ Retrosynthesis Planner 操作方法

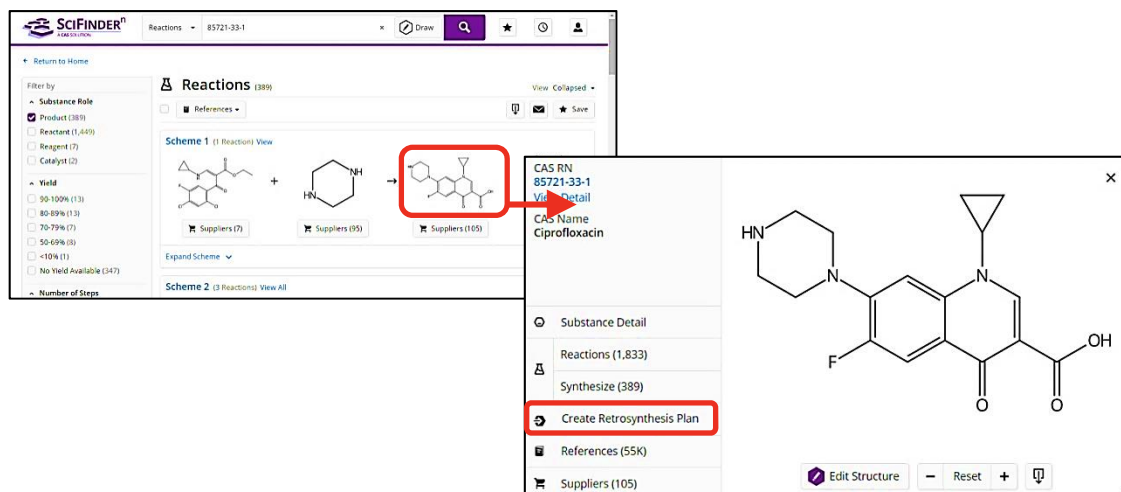
2019 年 6 月

- Retrosynthesis Planner は、CAS 独自の Computer-Aided Synthetic Design (CASD) に基づき、既知の化学物質に関する合成ルートを自動で検索する機能です。



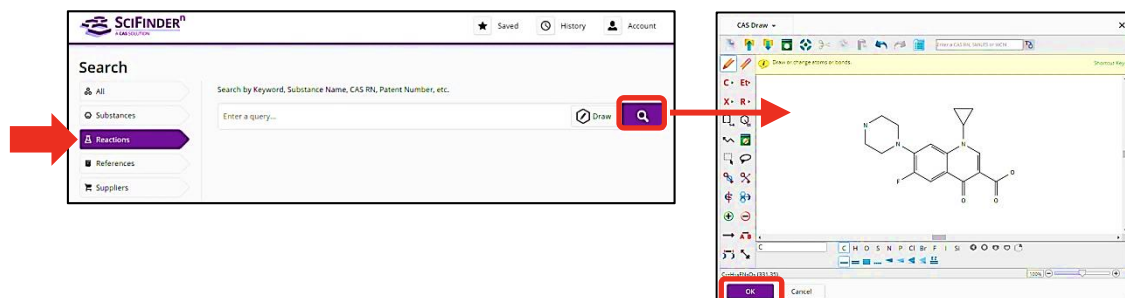
## ■ 検索方法 1 : Substance Window から検索

- ・ 検索結果中の構造図をクリックすると、Substance Window が表示されます。構造図の左側に表示される「Create Retrosynthesis Plan」ボタンをクリックします。

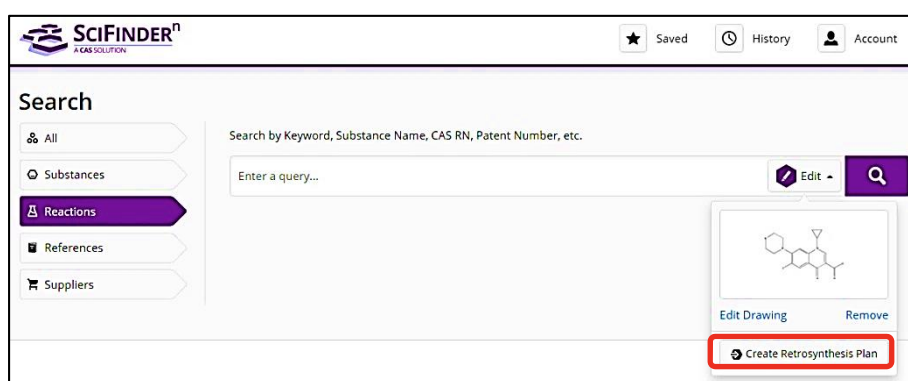


## ■ 検索方法 2 : Search 画面から構造を作図して検索

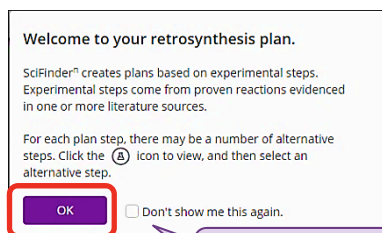
- Search 画面で、「Reactions」を選択し、構造作図ツールを起動して、構造を作図します。



- 構造図の下に表示される「Create Retrosynthesis Plan」ボタンをクリックします。

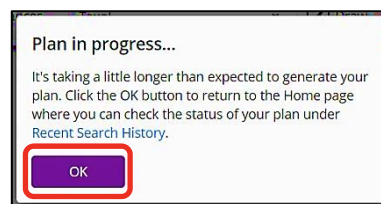


下記のメッセージの「OK」をクリックすると、Retrosynthesis Planner の検索結果ページに移動します。



✓を入れると、以後表示されない

検索の完了までに時間がかかる場合があります。下記のメッセージの「OK」をクリックすると、Search 画面に戻ります。



## Retrosynthesis Planner 検索結果画面

Retrosynthesis

Overview Steps

Plan Information

Estimated Yield: 82%  
Overall Price: \$329.05  
(USD per 100 grams)

Commercially Available:  
A, B, C, D, E, F

概要

ダウンロード メールで共有 保存

反応全体の収率, 使用した試薬の費用の目安を表示

Retrosynthesis

Overview Steps

マウスをかざすと, 対応箇所がハイライトされる

各ステップ

A ⇒ B + C + D  
Maximum Yield: 83%  
Evidence (2)  
Alternative Steps (27)

- 「Evidence」をクリックすると、該当する反応ステップの詳細情報が表示されます。

Retrosynthesis

Overview Steps

Evidence (2)

Reactions (2)

Filter by

- Yield
- 00-89% (2)
- Number of Steps
- 1 (2)
- Reaction Type
- Stereochemistry
- Reagent
- Solvent
- Commercial Availability
- Reaction Vessels
- Search Within Results
- Source Reference
- Publication Year
- Document Type
- Language


Scheme 1 (2 Reactions) View

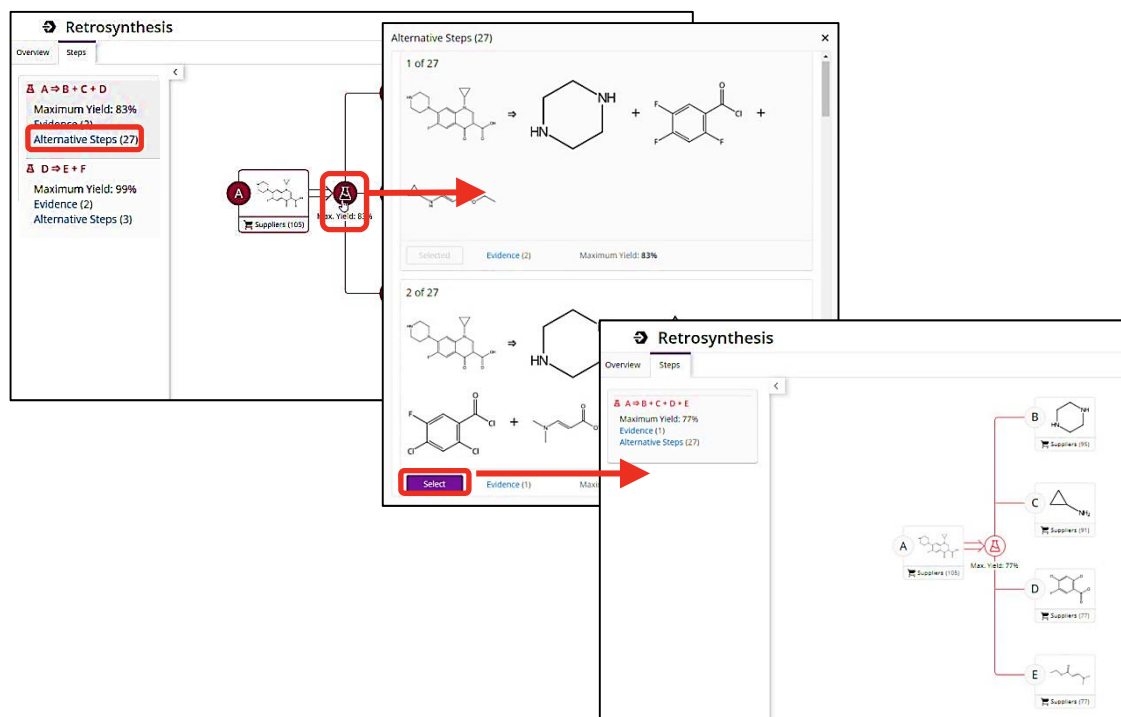
Double bond geometry shown

Step: 1  
Yield: 83%

Reaction Summary

Reagents	Lithium bis(trimethylsilyl)amide	Steps: 1	View Reference Detail
	Sodium hydroxide	Yield: 83%	By Tossa, N.; Penner, et al
	Hydrochloric acid		Journal of Organic Chemistry (2019), 84(6), 3370-3376
Catalysts	-		Full Text
Solvents	Toluene		
	Dimethyl sulfoxide		
	Water		
Conditions	5 stages		

- 「Alternative Steps」または  ボタンをクリックすると、代替の反応候補が表示されます。交換したい反応の「Select」をクリックすると、反応が入れ替わります。



## ■ 参考：検索履歴からの結果表示方法

- 検索結果を表示するには、検索履歴から「Open Plan」をクリックします。

