ELSEVIER

Reaxys®

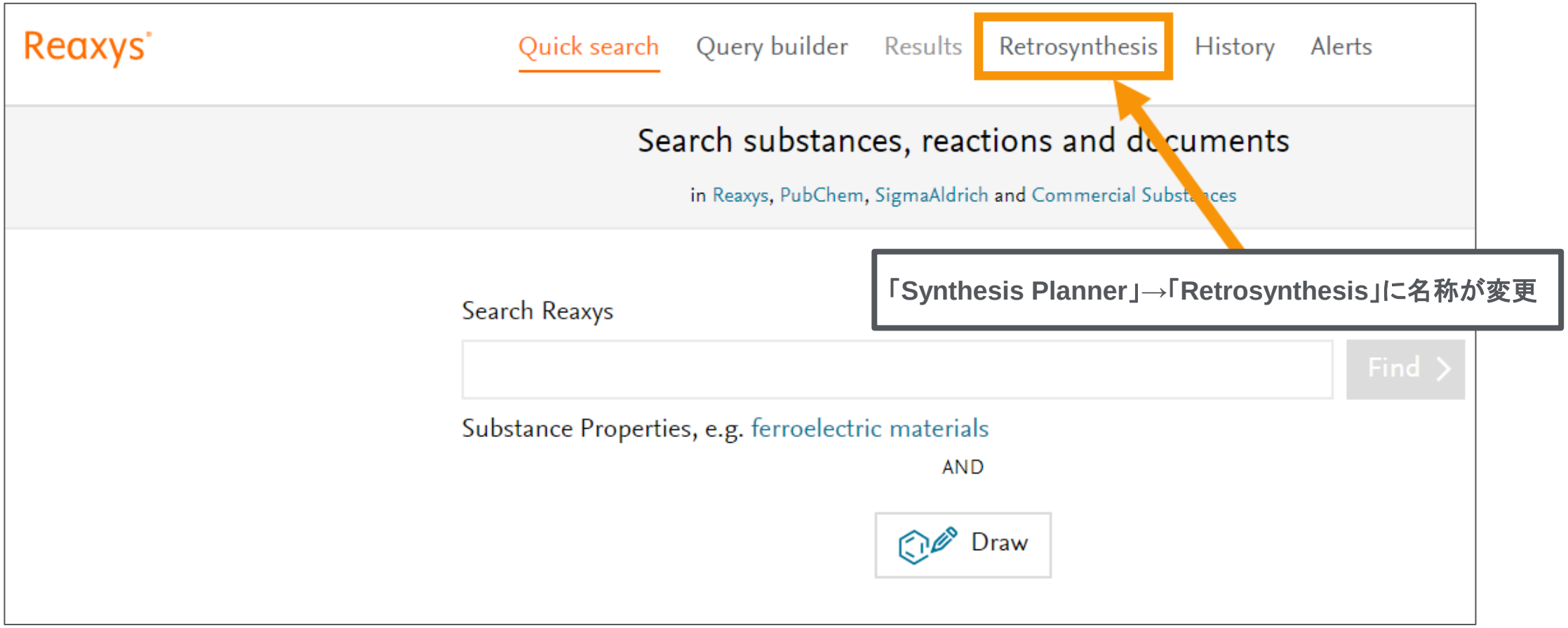
新しいRetrosynthesisの使い方

カスタマーコンサルタント
今田泰史, PhD
y.Imada@elsevier.com

October 2021

Retrosynthesisによる合成経路の策定 ～その1～①

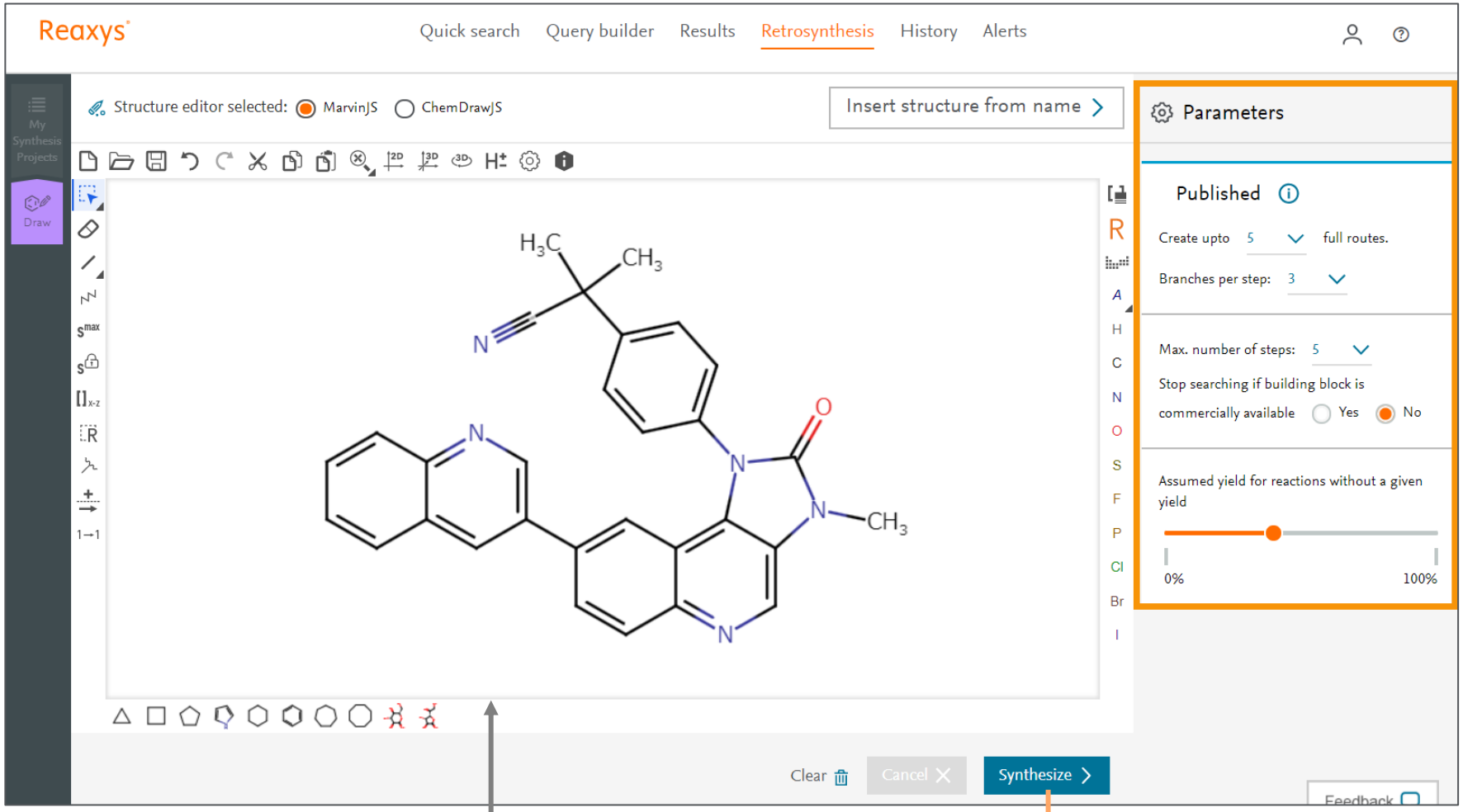
～「Retrosynthesis」画面から自分で構造描画して経路策定をする方法～



※通常契約の範囲内ではReaxysに収録のある化合物のみ解析可能（得られる経路もReaxysに収録のある反応を組み合わせたもの）
新規化合物の解析も可能なAIによる逆合成予測ツールの利用はオプション契約となります。

ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定 ～その1～②



構造描画は通常のReaxysでの描画と同じ

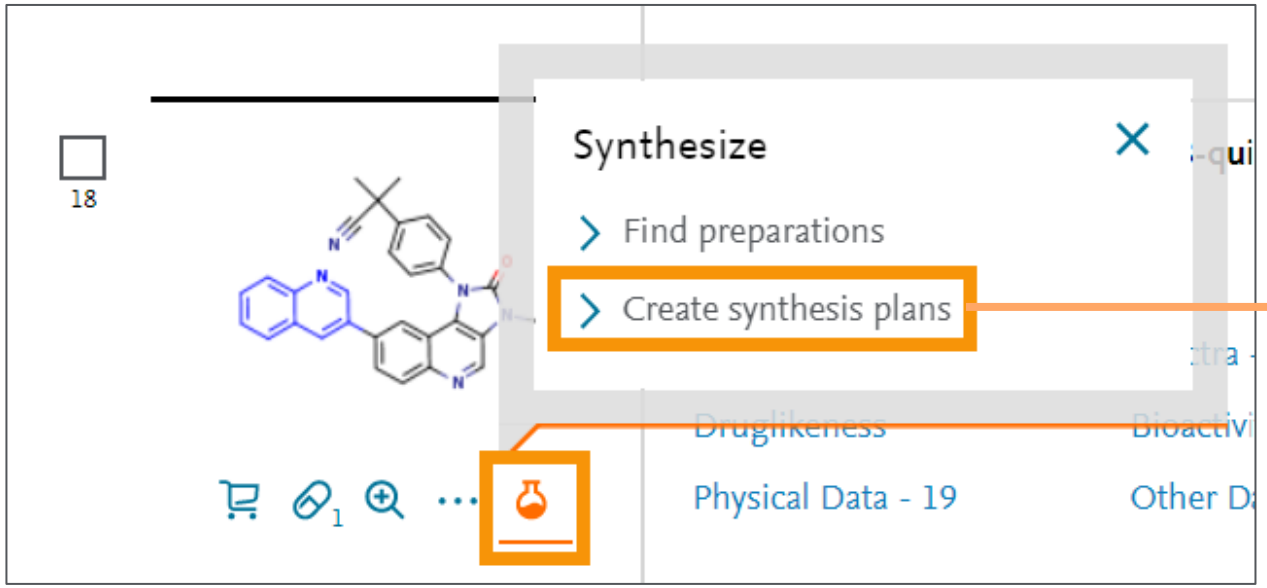
解析

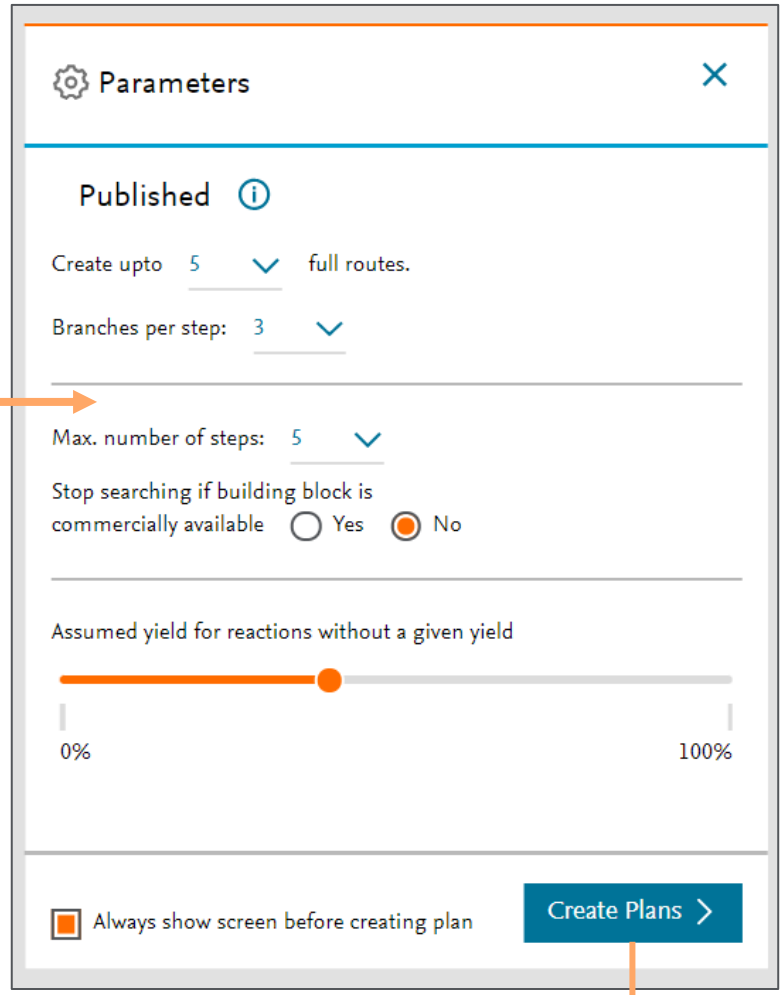
- 生成する最大経路数
- 経路中の最大分岐数
- 最大ステップ数
- 市販化合物に帰着した時点で解析を止める
→「No」を推奨
（大きな分子も販売されているため）
- 各反応の許容収率の設定

ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定 ～その2～

～化合物検索結果の中から気になる化合物の経路策定をする方法～



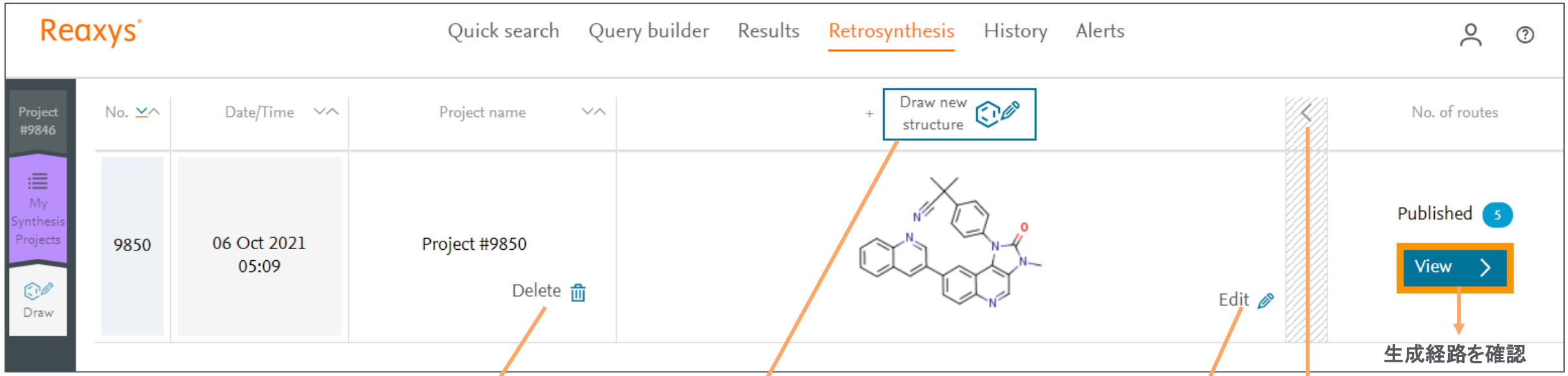


解析

ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定

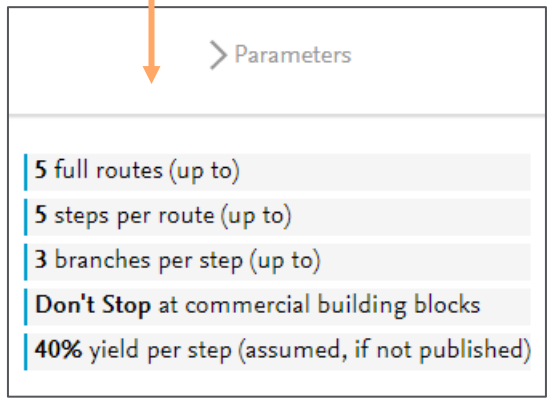
～合成経路策定のプロジェクト管理画面～



削除

新たに構造を描画して解析したい場合

この構造を基に構造を
編集して解析したい場合



ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定

～生成された合成経路の一覧表示画面～

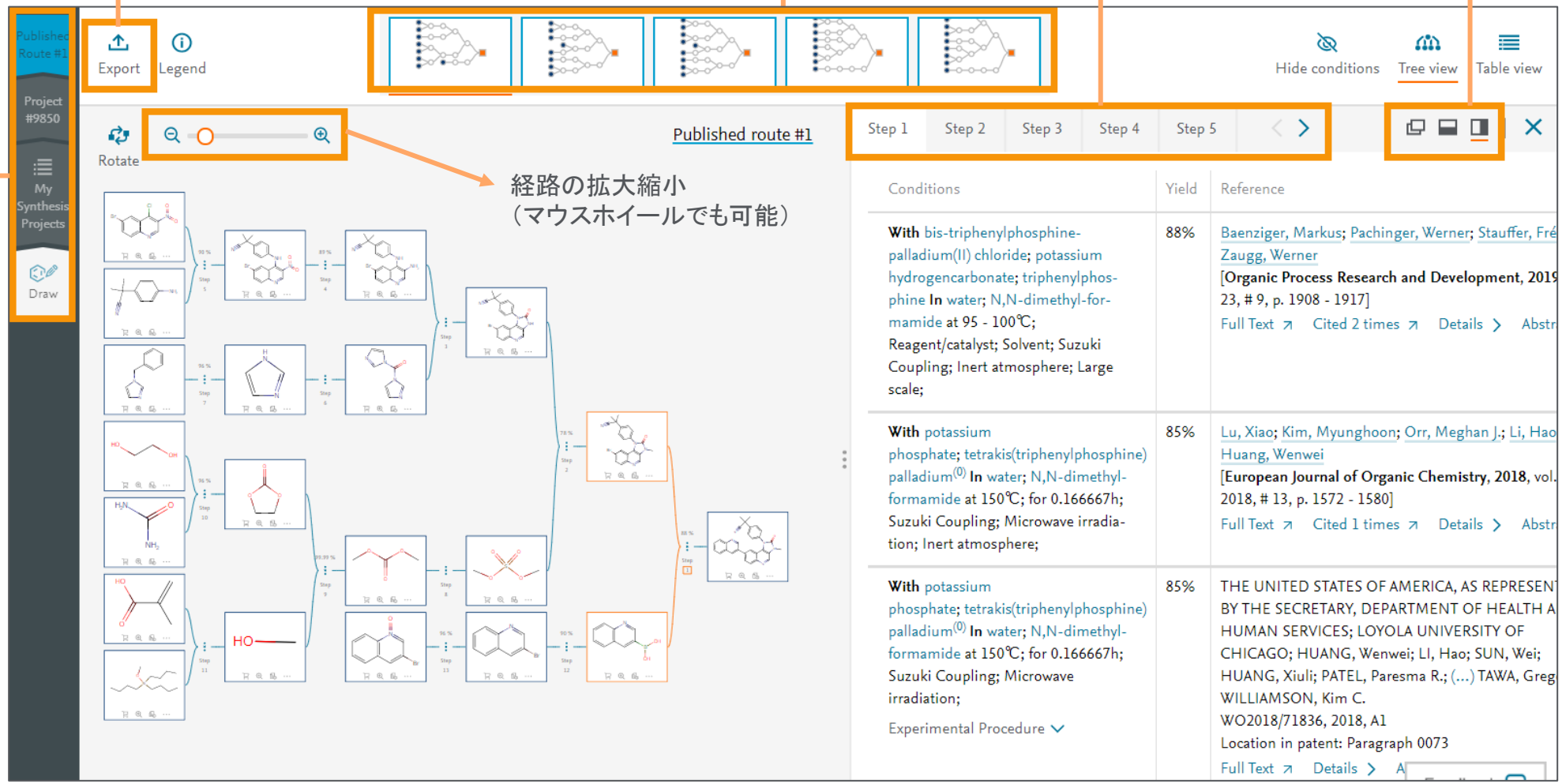
各径路のステップ数で並び替えが可能

経路の詳細
「Tree View」:枝分かれの形で表示
「Table View」:経路中の各反応を表の形で表示

ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定

～合成経路のTree View画面～

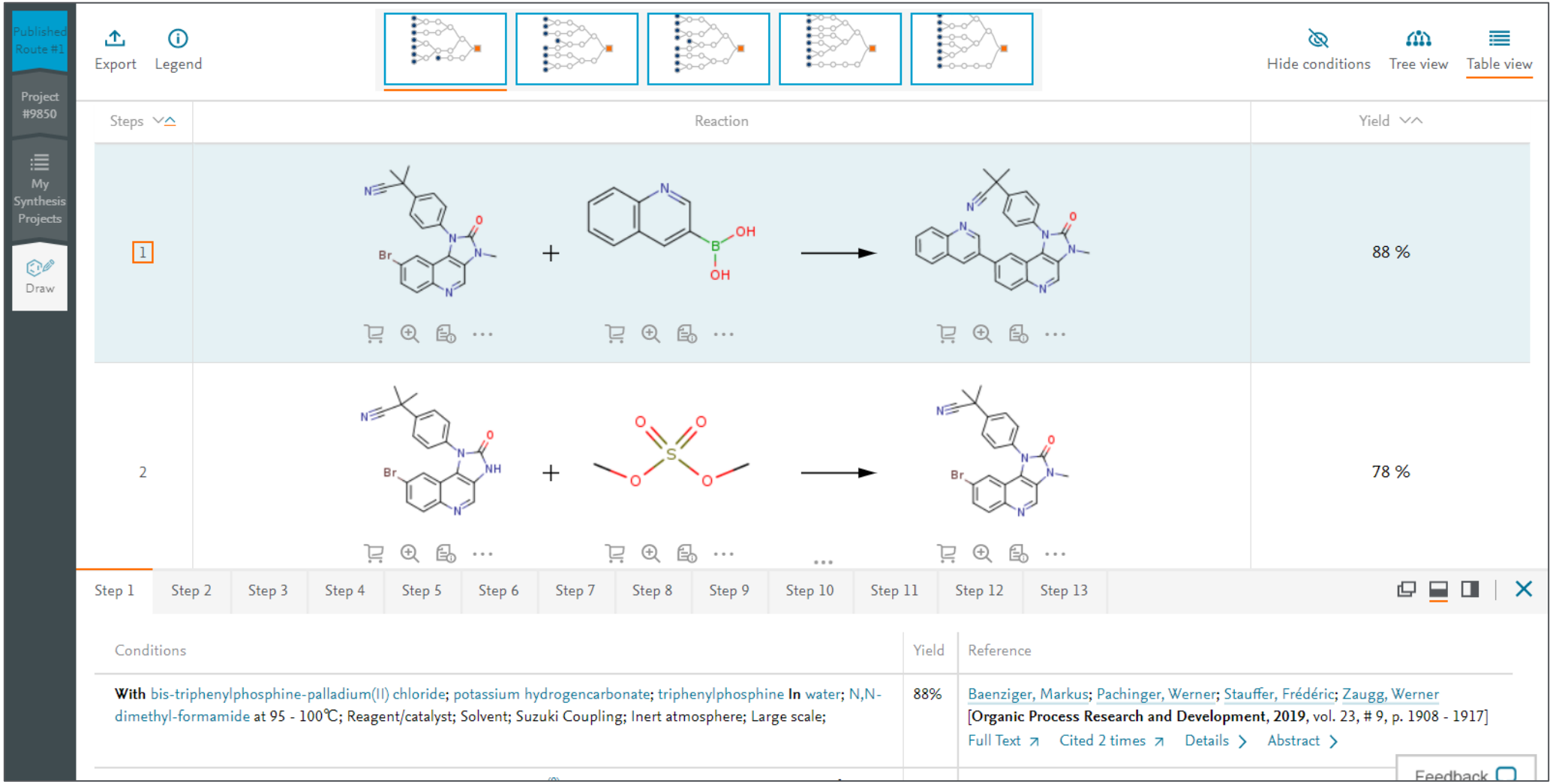


ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定

～合成経路のTable View画面～

Table中の各行に各ステップの反応が表示される

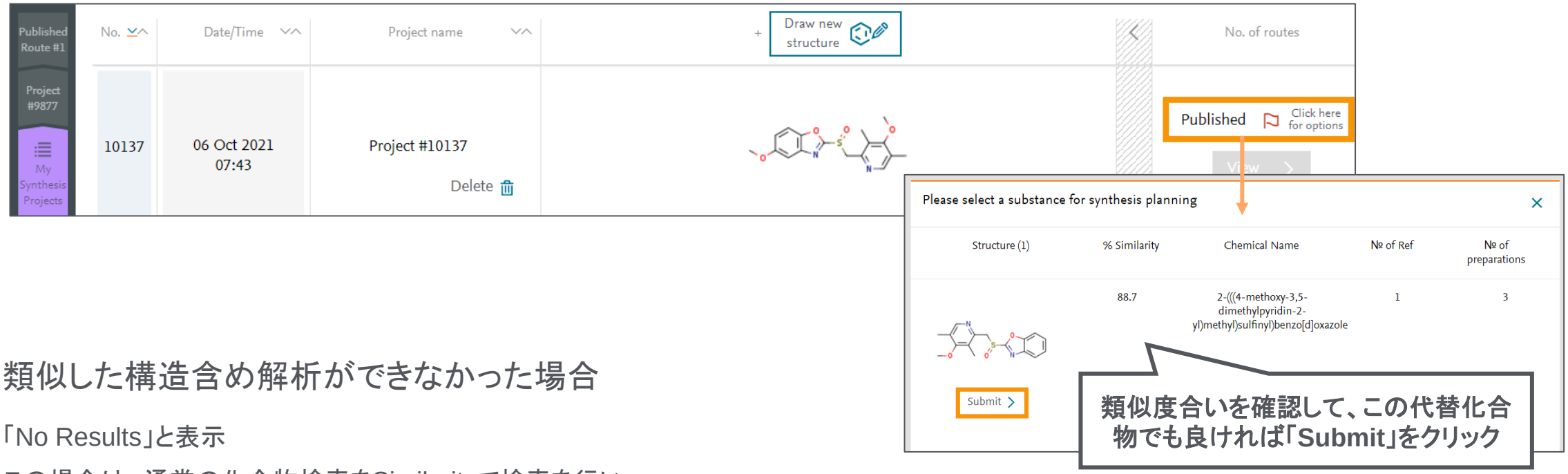


ELSEVIER

Retrosynthesisによる合成経路の策定

～合成経路が得られなかった場合～

① 解析対象の化合物に類似した構造の化合物で経路が出せる場合



② 類似した構造含め解析ができなかった場合

→「No Results」と表示

→ この場合は、通常の化合物検索をSimilarityで検索を行い、
検索結果から自分の目的に近い化合物を探してページ4の方法で解析することを推奨

ELSEVIER