

第5章 合成計画ツール

Reaxys には独自の機能として、合成計画ツール (Synthesis Planner) が用意されています。合成計画ツールを利用すると、ある物質を最終生成物として合成ルートを逆合成的に計画することができます。複数の合成ルート候補を一画面で表示できるので、比較検討に便利です。化合物検索の結果からも合成計画ツールを利用することができます。

1. 合成ルートの作成

検索例：エソメプラゾール(Esomeprazole)の合成法を探す (第4章からの続き)

1. 反応検索結果から合成ルートの作成を行います。

合成計画ツールの基点としたい反応の下部に表示されている **Synthesize** をクリックします。

2. 合成計画画面です。

- ① 合成法を検討したい化合物の下部に表示されている **Synthesize** をクリックします。
- ② 合成法の候補一覧が表示されます。反応条を比較した後に、採用したい反応式に を入れ、**Add Selected** ボタンをクリックすると、合成ルート画面に追加されます。このステップを繰り返し、合成ルートを作成していきます。

3. 合成計画画面の続きです。

前画面で追加した合成ルートが表示されています。

- ① ルートの表示はデフォルトでは左→右ですが、 をクリックすると、上↓下の表示に変更可能です。
- ② 合成ルートの拡大・縮小、表示位置の移動が可能です。
 でドラッグすることでも、表示位置の移動が可能です。
- ③ **Add** をクリックすることにより、更に異なる合成ルートを追加することができます。

構造式下部の**Synthesize**をクリックすれば、更にさかのぼって合成ルートを検討することができます。

4. 合成計画画面の続きです。

追加したいルートの ボタンをクリックして、合成計画に追加します。

Note: This reaction is already added as a branch of the current synthesis step

既に合成ルートに含まれている反応式に表示されます。

Yield	Conditions	References
92%	With tert.-butylhydroperoxide; water; (-)-(R,R)-1,2-bis(2-bromophenyl)ethane-1,2-diol; titanium (IV) isopropoxide in toluene T=-20°C; 24 h; Inert atmosphere; optical yield given as percent ee enantioselective reaction;	Jiang, Biao; Zhao, Xiao-Long; Dong, Jia-Jia; Wang, Wan-Jun European Journal of Organic Chemistry, 2009, # 7 p. 987 - 991 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
92.7%	Stage #1: With D-tartaric acid di-n-propionamide in toluene T=70°C; 0.166667 h; Stage #2: With titanium(IV) isopropylate in toluene T=55 - 60°C; 1 h; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	CHENGDU LIKAI CHIRAL TECH CO., LTD; CHENGDU ORGANIC CHEMICALS CO., LTD, CHINESE ACADEMY OF SCIENCE Patent: WO2009/114981 A1, 2009; Location in patent: Page/Page column 38-39; Title/Abstract Full Text Show Details
90%	With tert.-butylhydroperoxide in water; toluene T=-20°C; 12 h; Show Experimental Procedure	RATIOPHARM GMBH Patent: US2008/319195 A1, 2008; Location in patent: Page/Page column 5; Title/Abstract Full Text Show Details
▼ Show All Remaining Details (7)		
99%	With sodium hydroxide in water; toluene pH=11.5 - 12.0; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	ESTEVE QUIMICA, S. A. Patent: WO2006/94904 A1, 2006; Location in patent: Page/Page column 11;

5. 合成計画画面の続きです。

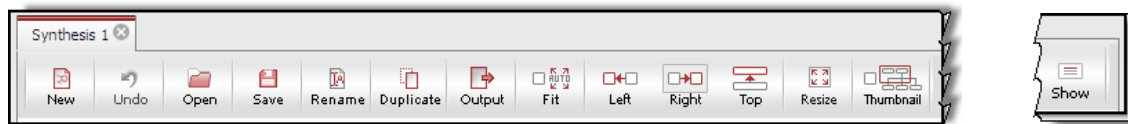
反応ルートの下部に、それぞれの反応の詳細情報が表示されます。

Step	Yield	Conditions	References
1a	92%	With tert-butylhydroperoxide in water; (-)-R)-1,2-dibromoethane-1,2-diol; titanium (IV) isopropoxide in toluene; T=20°C; 24 h; 3 bar; atmosphere: optical yield given as percent ee enantioselective reaction	Zhang, Biao; Zhao, Xiao-Long; Deng, Jia-Jia; Wang, Wan-Jun. <i>European Journal of Organic Chemistry</i> , 2009, # 7, p. 987-991. Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
	92.7%	Stage #1: With D-tartaric acid di-n-propionamide in toluene; T=20°C; 0.356667 h; Stage #2: With titanium(IV) isopropoxide in toluene; T=20°C; 1 h; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	CHENGDU LIKAI CHEMICAL TECH CO., LTD; CHENGDU ORGANIC CHEMICALS CO., LTD, CHINESE ACADEMY OF SCIENCE. Patent: WO2009/11981 A1, 2009. Title/Abstract Full Text Show Details
	90%	With tert-butylhydroperoxide in water; toluene; T=-20°C; 12 h; Show Experimental Procedure	BATIOPHARM GfH. Patent: US2003/012185 A1, 2008. Title/Abstract Full Text Show Details
▼ Show All Remaining Details (7)			
1b		With acetic acid in tetrahydrofuran; water; T=20°C; 2 h; 2.5 - 2.5 g; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	HETERO DRUGS LIMITED. Patent: WO2007/04951 A1, 2007. Title/Abstract Full Text Show Details
		With acetic acid; diethylamine in water; Show Experimental Procedure	ASTRAZENECA AB. Patent: WO2007/07128 A1, 2007. Title/Abstract Full Text Show Details
		With acetic acid; methylvamine in ethanol; water; T=20°C; Show Experimental Procedure	ASTRAZENECA AB. Patent: WO2007/07128 A1, 2007. Title/Abstract Full Text Show Details
▼ Show All Remaining Details (8)			
2a	85%	With sodium methylate in methanol; ethyl acetate; Show Experimental Procedure	Kuranyay Co., Ltd. Patent: US6197962 B1, 2001. Title/Abstract Full Text Show Details

II. 合成計画ツールの様々な機能

合成計画画面の上部には、様々な機能を有するツールバーが用意されています。

<ツールバーの各機能>




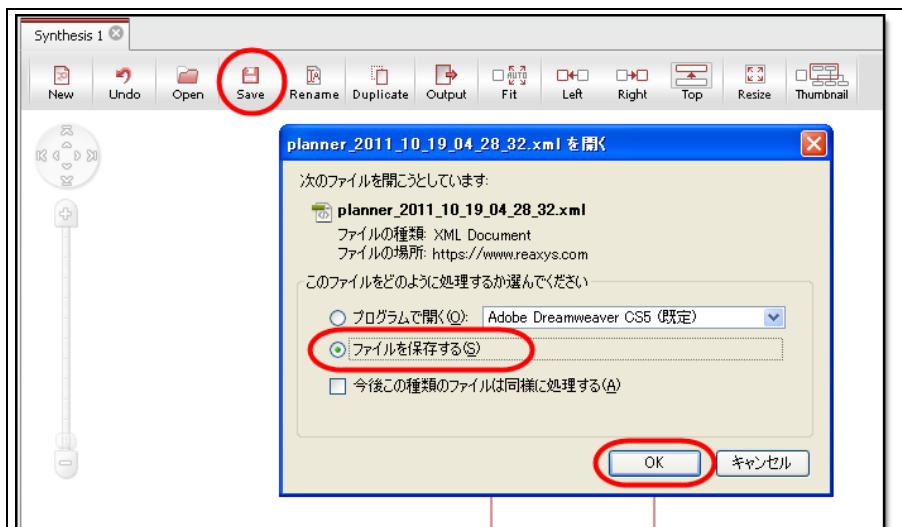
ボタン	機能	ボタン	機能
	新しい合成ルートを作成します。		サムネイルから表示エリアを選択します。
	保存してある合成ルートを開きます。		作成した合成ルートを保存します。
	合成ルートを複製します。		作成した合成ルートを PDF、Word などのファイルにアウトプットします。
	ルート全体が一画面に表示されるようにサイズ調整します。		ルート表示エリアサイズの変更。
	ヒントを非表示にします。		ヒントを表示します。

操作例：合成ルートの保存と読み込み




作成した合成ルートの出力と保存が可能です。他の利用者と合成ルート情報を共有し、ルートの検討・検証を行う際などに便利です。

6. 合成ルートのコピー

 ボタンをクリックして、合成ルートの保存を行います。
メッセージに従い、適切な場所にファイルを保存します。
保存したファイルはメールなどで他の利用者に送ることができます。



7. 合成ルートの読み込み

- ①  ボタンをクリックします。
- ②  をクリックして、読み込むファイルを指定します。
- ③  をクリックすると、保存した合成ルートが読み込まれます。

