

SYNTHIA™

逆合成解析ソフトウェアのご紹介

逆合成解析を支援するソフトウェアSYNTHIA™をご紹介します。

ドラッグライクな低分子化合物の合成経路探索の活用事例ならびにデモンストレーションを是非ご覧ください。

日時 10月26日(火) 15:00~16:30

講演者

Dong-Hwi Kim

Technical Application Scientist, Cheminformatics Technologies, Merck KGaA

田中紀子

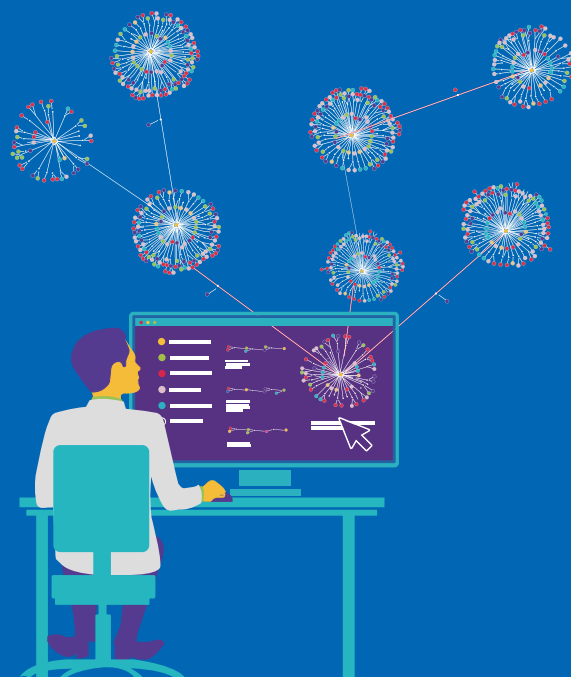
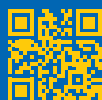
シグマアルドリッチ ジャパン合同会社 コマーシャルマーケティング部 ケミストリー担当

セミナー参加者様への特典

1. 導入を具体的にご検討のお客様に、SYNTHIA™を1週間無料で体験できるフリーアクセスプログラムをご用意しています。
2. アンケートにお答えいただいた方の中から抽選で3名の方に、「シグマアルドリッチ オリジナルモバイルチャージャー」をプレゼントします。

お問い合わせ・ご回答はこちら

<https://bit.ly/39pBkuX>



SYNTHIA™とは — 有機合成化学の支援ツール —

目的の化合物に至る合成ルートを設計する上で最大の課題は、膨大な文献や自身の経験・知見を元に、数多くの可能性の中から真に実用的な合成ルートを見出すことです。化学者が化学者のために精査した反応ルールを収載したSYNTHIA™は、有機化学とコンピュータ科学がタッグを組み15年以上かけて開発された逆合成解析ツールです。SYNTHIA™は迅速に多数の合成経路を提案し、化学者がより困難で高度な合成経路の設計にフォーカスできるよう支援します。

有機化学者が反応ルールをコード化

反応ルールに基づき、各ステップごとに、立体選択性、位置選択性を含めた反応の選択性、共存し得ない官能基の影響を分子全体で評価します。

- 報告例のない新規分子や新規ルートを提案
- 検索条件を指定可能
- 100,000以上の反応ルールを収載

1000万化合物のネットワーク

- 合成経路を迅速に多数提案
- 市販試薬を出発物質とする合成経路を提案
- 新たな気づき、見落としの防止
- 新規合成経路の創出と特許展開
- 研究の時間とコストを削減

シグマアルドリッチ ジャパン リサーチ事業部

〒153-8927 東京都目黒区下目黒 1-8-1 アルコタワー 5F

製品の最新情報はこちら www.sigmaaldrich.com/JP/ja

シグマアルドリッチ ジャパン合同会社はメルクのグループ会社です。

The life science
business of Merck
operates as
MilliporeSigma in
the U.S. and Canada.

Sigma-Aldrich®
Lab & Production Materials