

SYNTHIA™

逆合成分析软件提升您的合成技能



在有机化学领域，最大的挑战莫过于摸索可靠的合成路线，在设计各种复杂的逆合成方案的同时，还要兼顾已完成步骤、可完成步骤以及可用的起始原料。

SYNTHIA™由有机化学家和计算机科学家历经15年精心设计，采用基于强大的反应规则数据库的先进精细算法。该数据库目前已包含10万多种手动编码的反应规则，并且仍在不断扩大。

利用SYNTHIA™可以轻松自定义搜索条件，对已知或者全新分子进行合成路线设计。

针对每个分析步骤，SYNTHIA™不仅仅关注反应中的局部相互作用，还考虑整个分子以及潜在冲突和选择性问题，还会考虑反应的立体选择性和区域选择性。

SYNTHIA™探索创新和已知的解决方案，排除不可行选择，为用户提供最有前景的合成路线。

- 简化新路线的发现
- 节省时间和成本
- 催生新创意和知识产权
- 设计可反推至商用起始原料的路线

Sigma-Aldrich®

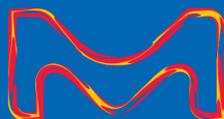
Lab & Production Materials

上海
上海市浦东新区东育路227弄3号
前滩世贸中心(二期)C栋15-18层
电话: (021)20338288
传真: (021)50803042
邮编: 200126

北京
北京市朝阳区将台路甲2号
诺金中心25层
电话: (010)59072688
传真: (010)59072699
邮编: 100016

广州
广州市天河区冼村路5号
凯华国际中心1201-1204
电话: (020)32255366
传真: (020)32255380
邮编: 510623

成都
成都市锦江区人民南路二段1号
仁恒置地广场1706室
电话: (028)80740222
传真: (028)80740227
邮编: 610016



www.sigmaaldrich.cn/CN/zh/services/software-and-digital-platforms/synthia-organic-retrosynthesis-software



默克生命科学公众号

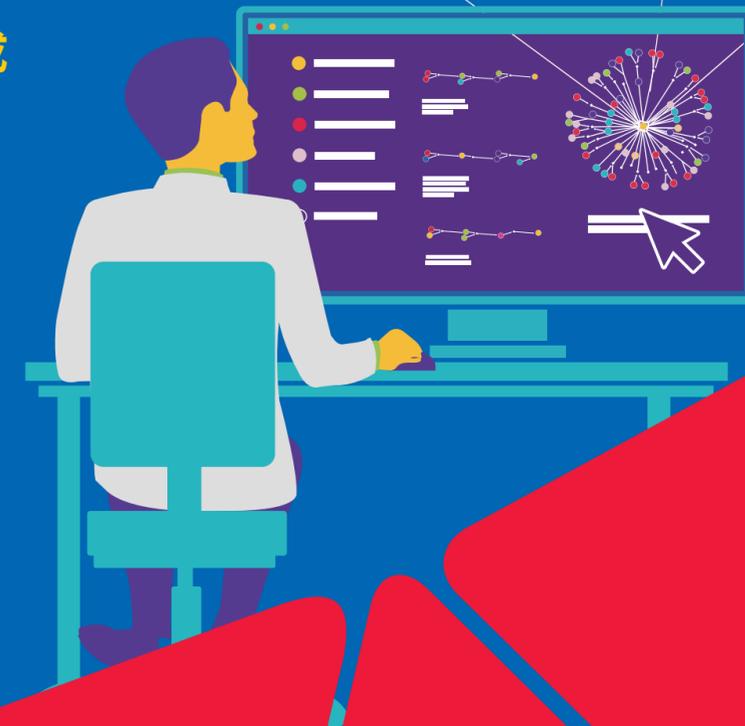
本资料中所有内容(包括但不限于产品图片、公司logo等)为德国默克集团所有，未经许可，任何人或实体不得擅自使用或转载。
默克生命科学技术服务热线: 400 620 3333 或400 889 1988转2号线
中国技术服务中心: tscn@merckgroup.com
更多详情，敬请登陆: www.merckmillipore.com
www.sigmaaldrich.cn

资料编号: 03/2021

SYNTHIA™

逆合成分析软件

由化学家编码而成



默克生命科学业务
在美国和加拿大地区
以MilliporeSigma
品牌运营。

Sigma-Aldrich®

Lab & Production Materials

MERCK 默克

从设想可能的路线 转变为实验可行的路线

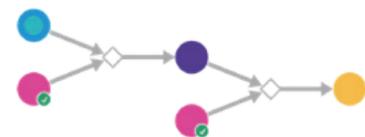
1



选择分析类型

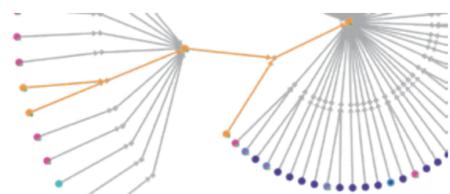
• 自动化逆合成分析

根据您的需求定制设计完整的逆合成路线



• 手动逆合成分析

使用手动方法逐步迭代反推，直至推至可行的起始材料



2

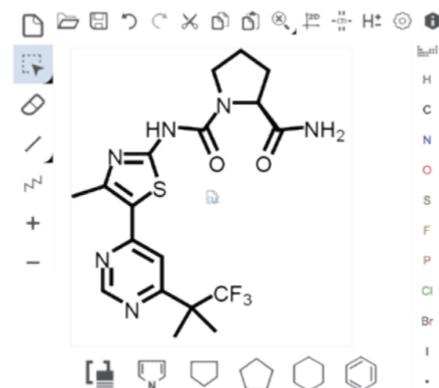


选择目标分子

• 从已知和未知化合物中选择

使用SYNTHIA™探索已知或新型目标分子的完整路线

- 绘制化学分子结构
- 检索SYNTHIA™数据库



3



自定义搜索参数

1. 选择您的起始材料

- 从不同的化合物数据库中选择：
 - 400万种商用化学合成砌块
 - 1,000万种已发表分子
 - 自定义你的起始原料清单
- 设定商用起始原料的价格区间

2. 路线评分排序

- 设置路线优先规则：
 - 反应步数
 - 起始原料成本
 - 保护基团偏好性

3. 反应路线精调结果

- 可根据以下条件调整路线：
 - 涉及特定起始原料或中间体
 - 是否包含某一类试剂或反应类型
 - 化学分子或子结构

开始搜索

4



探索结果

• 分析多达50条路线

- 查看具体反应信息，包括：
 - 典型反应条件
 - 参考文献链接
 - 保护基团要求
 - 相似的已发表反应
 - 副产物预测

• 根据以下条件筛选路线：

- 反应步数
- 反应相似性
- 保护基团

• 使用一张图表分析所有结果

- 寻找含有共同中间体和起始原料的路线
- 对反应进行分类：
 - 反应类型
 - 空间立体反应
 - 成环反应

• 可将路线另存为PDF

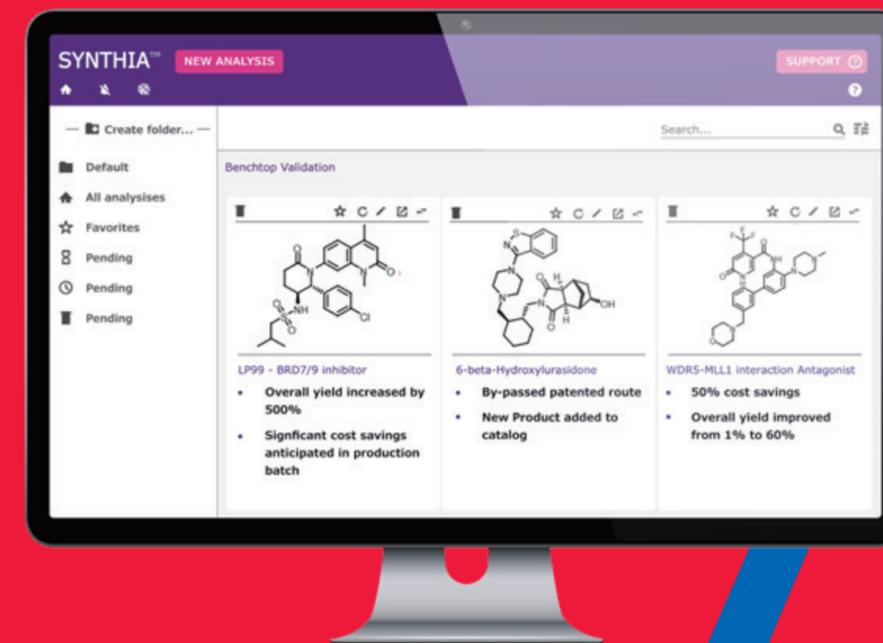
• 反应可直接复制粘贴到结构编辑器中

• 可直接点击合成原料，进入sigmaaldrich.com网站订购，并开始你的合成之旅



成熟可靠

在首次实验室合成验证实验中，逆合成软件SYNTHIA™就取得了成功，针对已知分子和全新分子SYNTHIA™都找到了可以精简合成步骤、提高产量并降低成本的可靠路线。



欢迎使用SYNTHIA™来提升您的专业合成技能，迅速从可能的路线转变为可靠的路线。您准备好投入到未来的逆合成领域了吗？

请立即联系我们：

www.sigmaaldrich.cn/CN/zh/services/software-and-digital-platforms/synthia-organic-retrosynthesis-software