

Performance Heatmap: All Reactions vs Model Size

Reaction Name

OtherReaction (n=70)	0.043	0.085	0.186	0.394	0.388	0.364	0.418
N-alkylation of secondary amines with alkyl halides (n=5)	0.000	0.000	0.800	0.800	1.000	0.800	1.000
Carboxylic acid with primary amine to amide (n=5)	0.000	0.200	0.400	1.000	0.800	1.000	1.000
Williamson Ether Synthesis (n=5)	0.000	0.000	0.800	0.600	0.600	0.800	0.800
Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Carboxylic Acids (n=5)	0.000	0.200	0.400	1.000	0.800	1.000	0.800
Ester saponification (methyl deprotection) (n=5)	0.800	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Reduction of nitro groups to amines (n=5)	0.400	0.600	0.600	1.000	0.800	1.000	1.000
Suzuki coupling with boronic acids (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.400	0.400	1.000	0.800
Ester saponification (alkyl deprotection) (n=5)	0.800	0.600	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Acyl/Thioacyl/Carbamoyl Halides and Analogs_OS (n=5)	0.000	0.400	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Boc amine deprotection (n=4)	0.250	0.800	0.800	1.000	1.000	1.000	1.000
Suzuki coupling with boronic esters (n=5)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.200	0.600	0.800
Ullmann-Goldberg Substitution amine (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.800	0.800	1.000	1.000
Hydrogenolysis of amides/imides/carbamates (n=5)	0.000	0.750	0.800	1.000	1.000	0.600	1.000
Aminolysis of esters (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.400	0.600	0.600	0.600
N-arylation (Buchwald-Hartwig/Ullmann-Goldberg) (n=5)	0.200	0.000	1.000	1.000	1.000	0.750	1.000
Goldberg coupling aryl amine-aryl chloride (n=5)	0.000	0.400	0.800	0.600	1.000	0.750	1.000
Sulfonamide synthesis (Schotten-Baumann) primary amine (n=4)	0.000	0.000	0.800	0.800	1.000	1.000	1.000
Reductive amination with aldehyde (n=5)	0.000	0.200	0.600	0.800	0.600	0.800	0.600
reductive amination (n=5)	0.000	0.000	0.800	0.600	0.400	0.600	0.600
Hydrogenation (double to single) (n=5)	0.400	0.200	0.800	0.750	0.800	1.000	1.000
Oxidation or Dehydrogenation of Alcohols to Aldehydes and Ketones (n=5)	0.200	0.600	0.800	1.000	0.400	1.000	1.000
Reduction of ester to primary alcohol (n=5)	0.600	0.800	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Hydrogenolysis of tertiary amines (n=5)	0.400	0.000	0.600	0.750	0.600	0.000	1.000
Boc amine protection with Boc anhydride (n=4)	0.000	0.200	0.800	0.600	0.800	0.600	0.800
Mitsunobu aryl ether (n=4)	0.000	0.000	0.600	1.000	1.000	1.000	0.800
Reduction of ketone to secondary alcohol (n=5)	0.400	1.000	0.800	0.800	0.600	1.000	1.000
Sonogashira alkyne_aryl halide (n=5)	0.000	0.200	0.200	0.800	0.333	1.000	1.000
Schotten-Baumann to ester (n=5)	0.000	0.400	0.600	1.000	0.800	1.000	0.800
Cleavage of methoxy ethers to alcohols (n=4)	0.500	0.800	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Formation of Sulfonic Esters (n=5)	0.000	0.400	0.800	1.000	0.800	1.000	1.000
Hydrolysis or Hydrogenolysis of Carboxylic Esters or Thioesters (n=5)	0.600	0.400	0.800	0.600	0.800	0.800	0.800
Reduction of carboxylic acid to primary alcohol (n=5)	0.400	0.600	1.000	1.000	1.000	0.600	0.800
Buchwald-Hartwig/Ullmann-Goldberg/N-arylation secondary amine (n=5)	0.200	0.200	0.800	0.600	0.000	0.600	1.000
Aldol condensation (n=5)	0.000	0.000	0.800	0.600	0.400	0.800	0.800
N-alkylation of primary amines with alkyl halides (n=5)	0.000	0.200	0.800	1.000	1.000	0.750	0.750
Deprotection of carboxylic acid (n=3)	0.667	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Sulfonamide synthesis (Schotten-Baumann) secondary amine (n=5)	0.000	1.000	0.800	1.000	0.800	1.000	1.000
Esterification of Carboxylic Acids (n=5)	0.000	0.000	0.400	0.600	0.800	0.800	0.400
Hydroxyl benzyl deprotection (n=5)	0.000	0.800	0.600	0.750	0.600	1.000	1.000
Urea synthesis via isocyanate and primary amine (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.800	1.000	1.000	0.500
Reduction of nitrile to amine (n=5)	0.600	0.400	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Reductive amination with ketone (n=5)	0.000	0.600	0.800	1.000	0.800	1.000	1.000
Wittig with Phosphonium (n=5)	0.000	0.000	0.200	0.000	0.200	0.250	0.600
Alcohol deprotection from silyl ethers (n=5)	0.200	0.600	0.400	0.800	0.800	0.800	0.400
thioether_nucl_sub (n=5)	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Buchwald-Hartwig/Ullmann-Goldberg/N-arylation primary amine (n=5)	0.000	0.200	0.600	0.800	0.600	1.000	1.000
Phthalimide deprotection (n=5)	0.000	0.200	0.800	0.600	0.800	0.400	1.000
Stille reaction_aryl (n=5)	0.000	0.000	0.250	0.750	0.800	0.800	0.600
Wohl-Ziegler bromination benzyl primary (n=5)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.750	0.250	0.250
Alkylation of amines (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.800	1.000	0.800	1.000
thiourea (n=5)	0.000	0.400	0.250	0.600	0.200	1.000	1.000
Reduction of secondary amides to amines (n=5)	1.000	0.600	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Aromatic dehalogenation (n=5)	0.600	0.400	0.800	0.800	1.000	1.000	1.000
Bouveault aldehyde synthesis (n=5)	0.000	0.600	0.400	0.600	0.200	1.000	1.000
Reduction of aldehydes and ketones to alcohols (n=5)	0.800	0.600	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Azide to amine reduction (Staudinger) (n=5)	0.600	0.600	1.000	1.000	1.000	1.000	0.800
Negishi (n=5)	0.000	0.200	0.200	0.500	0.800	0.000	0.400
Reductive amination with alcohol (n=5)	0.000	0.000	0.800	0.600	0.800	1.000	1.000
Sulfanyl to sulfinyl_peroxide (n=4)	0.000	0.200	0.600	0.800	1.000	0.200	1.000
Urea synthesis via isocyanate and secondary amine (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.800	0.750	1.000	1.000
Ullmann-Goldberg Substitution thiol (n=5)	0.000	0.400	0.200	0.600	0.600	1.000	1.000
Carboxylic acid to amide conversion (n=5)	0.400	0.800	0.600	1.000	1.000	1.000	1.000
Goldberg coupling (n=4)	0.000	0.000	0.600	0.800	1.000	0.333	1.000
Heck terminal vinyl (n=5)	0.000	0.200	0.600	1.000	1.000	1.000	0.800
Protection of carboxylic acid (n=5)	0.200	0.800	0.800	0.800	1.000	1.000	0.800
Friedel-Crafts acylation (n=5)	0.000	0.600	1.000	0.800	0.750	1.000	1.000
Pyrazole formation (n=5)	0.000	0.000	0.667	0.000	0.800	0.600	0.800
Reduction of tertiary amides to amines (n=5)	0.000	1.000	0.800	1.000	0.800	1.000	1.000
Appel reaction (n=5)	0.000	0.000	0.000	0.800	0.600	0.000	0.400
Ketal hydrolysis to ketone (n=5)	0.200	0.800	0.500	1.000	1.000	0.800	1.000
Reduction of primary amides to amines (n=5)	0.000	0.000	0.800	0.400	0.333	0.333	1.000
TMS deprotection from alkyne (n=5)	0.800	0.400	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Mitsunobu esterification (n=5)	0.000	0.000	0.600	0.600	0.800	0.800	0.800
Suzuki coupling with boronic acids OTf (n=5)	0.000	0.200	0.400	0.400	0.600	0.600	0.800
Mitsunobu_imide (n=5)	0.000	0.200	0.200	1.000	0.800	1.000	1.000
Stille reaction_other (n=5)	0.000	0.000	1.000	0.800	0.800	0.750	0.600
oxa-Michael addition (n=5)	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Sulfanyl to sulfinyl (n=5)	0.000	0.000	0.600	1.000	1.000	0.000	0.400
thiazole (n=4)	0.000	0.000	1.000	0.200	0.600	0.200	0.800
Wittig reaction with triphenylphosphorane (n=5)	0.000	0.000	1.000	0.200	0.500	1.000	1.000
Addition of primary amines to aldehydes/thiocarbonyls (n=5)	0.000	0.400	0.800	1.000	0.667	0.333	1.000
Chan-Lam etherification (n=4)	0.000	0.000	0.500	0.250	0.750	1.000	0.750
Acetal hydrolysis to aldehyde (n=4)	0.000	0.750	0.500	0.750	1.000	1.000	1.000
Amine and thiophosgene to isothiocyanate (n=4)	0.000	0.750	0.750	0.750	1.000	0.750	1.000
Addition of primary amines to ketones/thiocarbonyls (n=4)	0.250	0.500	1.000	0.750	1.000	1.000	1.000
S-alkylation of thiols (n=4)	0.000	0.000	0.500	1.000	0.500	1.000	1.000
Dehalogenation (n=4)	0.750	0.250	0.750	1.000	0.750	1.000	1.000
Grignard_alcohol (n=3)	0.000	0.000	1.000	1.000	0.333	1.000	1.000
Suzuki coupling with boronic esters OTf (n=2)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.667	0.667	0.667
Huisgen alkyne-azide 1,3 dipolar cycloaddition (n=3)	0.000	0.000	1.000	0.333	0.667	1.000	1.000
Sonogashira alkyne_aryl OTf (n=3)	0.000	0.000	0.667	0.667	0.667	1.000	1.000
Suzuki (n=2)	0.000	0.000	0.500	0.000	0.000	0.500	0.500
Diels-Alder (n=2)	0.000	0.000	0.000	0.500	0.500	0.000	1.000
Wohl-Ziegler bromination carbonyl tertiary (n=2)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000
Urea synthesis via isocyanate and diazo (n=2)	0.000	0.500	1.000	1.000	0.500	0.500	1.000
Decarboxylation (n=2)	0.000	0.500	1.000	1.000	1.000	0.500	1.000
Stille reaction_allyl (n=2)	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Hydrogenation (triple to double) (n=2)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Boc amine protection of secondary amine (n=1)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Negishi coupling (n=1)	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Stille reaction_vinyl (n=1)	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	1.000	0.000
Schotten-Baumann_amide (n=1)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Stille reaction_vinyl OTf (n=1)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Paal-Knorr pyrrole synthesis (n=1)	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000
Ether cleavage to primary alcohol (n=1)	0.000	1.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Alcohol to ether (n=1)	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.000
Wohl-Ziegler bromination allyl primary (n=1)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Ester with secondary amine to amide (n=1)	0.000	1.000	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000
Boc amine protection (ethyl Boc) (n=1)	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Henry Reaction (n=1)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000
Wohl-Ziegler bromination benzyl tertiary (n=1)	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000
Sonogashira alkyne_alkenyl halide (n=1)	0.000	1.000	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000
Petasis reaction with amines and boronic acids (n=1)	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	0.000	1.000

Qwen3-4B

Qwen3-30B

Qwen3-235B

DeepSeek-R1-670B

Claude Sonnet 4

GPT-5

Gemini-2.5-Pro