

反応作図ガイド

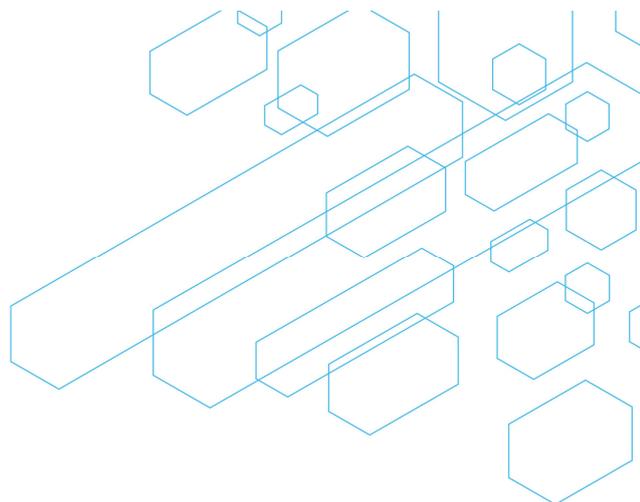
化学情報協会 情報事業部
202602

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



目次

- 構造作図画面
- 反応矢印ツール
- 反応ロールツール
- 反応サイトツール
- 原子マッピングツール



構造作図画面

Draw ボタンをクリックすると、構造作図ツールが開く

Good Afternoon

Proton nmr spectr

作図画面の切り替え
CAS Draw / ChemDoodle (タッチパネル対応)

CAS Draw

Select Search Type

Substances References Reactions Suppliers Patent Markush All

Enter a Systematic Name, CAS Registry Number

インポート

エクスポート

Undo (直前の操作の取り消し)

Redo (取り消した操作のやり直し)

CAS RN® 等からの構造呼び出し

Molecular Formula:

c 拡大 / 縮小 Zoom: 100%

Cancel OK

Draw

3 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



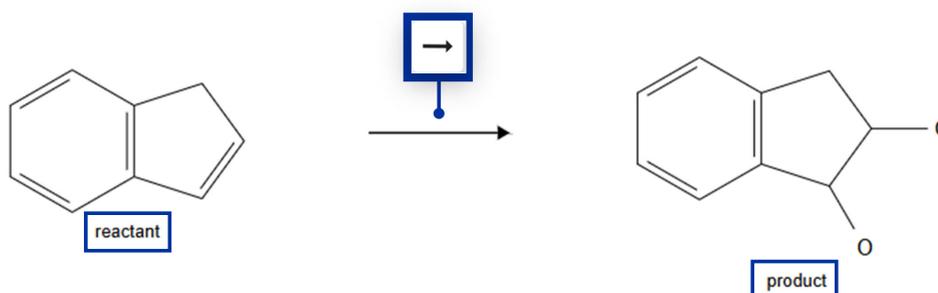
反応矢印ツール (1/2)

矢印を描くことで反応ロール (役割) が自動的に付与される



• 操作方法

反応矢印ツールで矢印を描くと、矢印の左側の構造が Reactant (反応物) に、右側の構造が Product (生成物) として割り当てられる

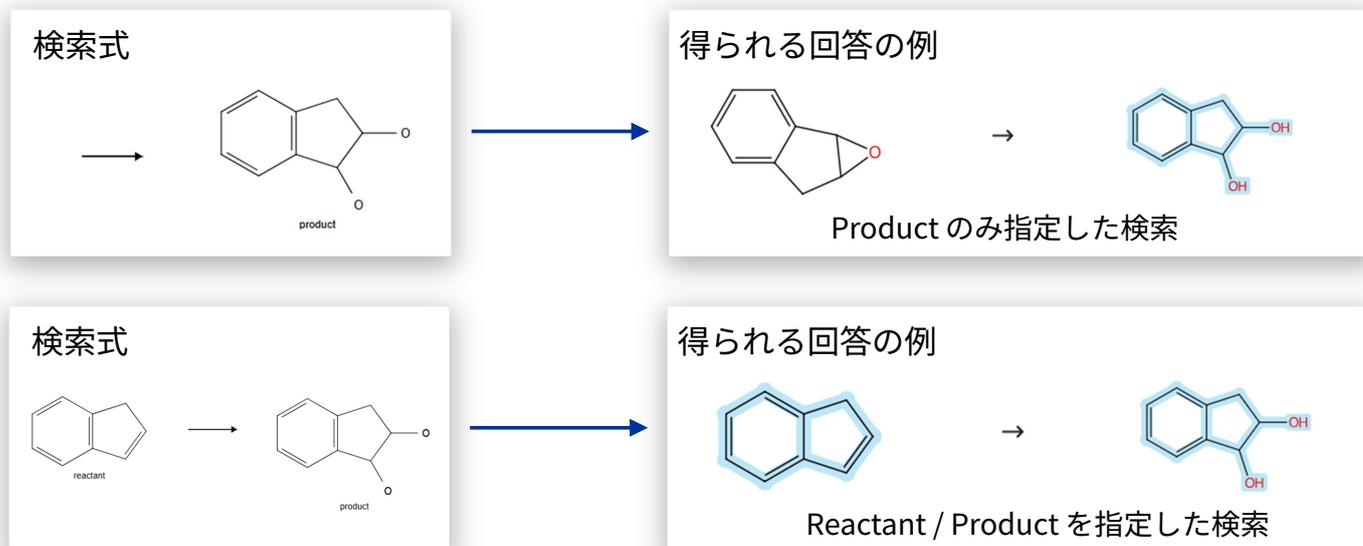


4 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



反応矢印ツール (2/2)

(例) 1,2-インダンジオールの合成



反応ロールツール (1/2)

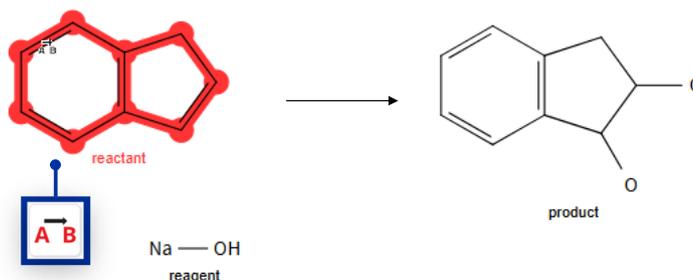
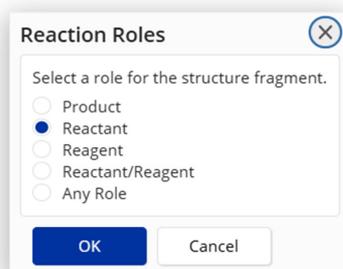
各構造の反応ロールを指定できる



• 操作方法

反応ロールツールを選択し、構造をクリックするとメニューが表示される。

Product (生成物)、Reactant (反応物)、Reagent (試薬)、Reactant or Reagent (反応物/試薬) または Any Role (任意) から反応ロールを指定する

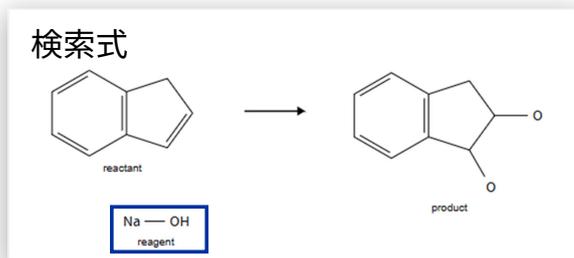


Reactant: 反応中で生成物に炭素を 1 個以上 (C 以外の元素を含んでもよい) 供給する化合物

Reagent: 反応中で生成物に炭素以外の元素を供給する化合物

反応ロールツール (2/2)

(例) Reactant / Reagent / Product を指定した検索



得られる回答の例

Suppliers (107)

Suppliers (68)

31-277-CAS-13634206 Steps: 1 Yield: 99%

Multifaceted palladium catalysts towards the tandem diboration-arylation reactions of alkenes
By: Penno, Dirk; et al
Chemistry - A European Journal (2008), 14(34), 10648-10655

Full Text

1.1 Reagents: Sodium acetate, 2,2'-Bi-1,3,2-benzodioxaborole
Catalysts: Palladium_tetra-μ-bromotetrakis[μ-(2-diphenylphosphino-κP)phenyl-κC]
tetra-μ
Solvents: Tetrahydrofuran; 5 min, 25 °C
1.2 4 h, 25 °C

1.3 Reagents: Sodium hydroxide, hydrogen peroxide
Solvents: Water; 2 h, 25 °C

1.4 Reagents: Sodium hydroxide, sodium thiosulfate
Solvents: Water; 25 °C

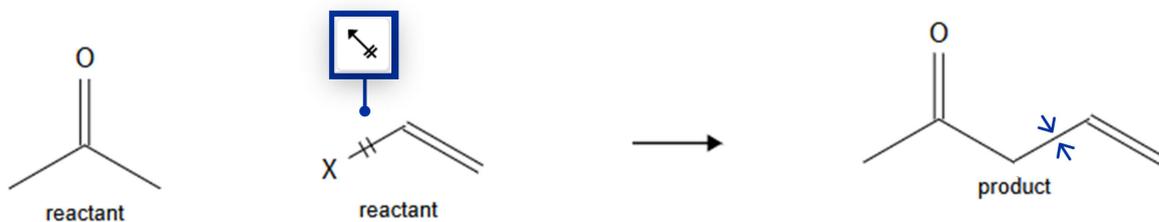
反応サイトツール (1/2)

反応によって変化する結合 (切断、形成、結合次数の変化) を指定できる



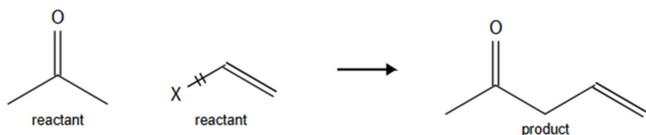
• 操作方法

反応サイトツールを選択し、反応によって変化する結合をクリックする。
指定された結合は二重線でマークされる。

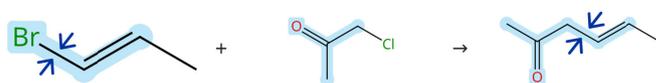


反応サイトツール(2/2)

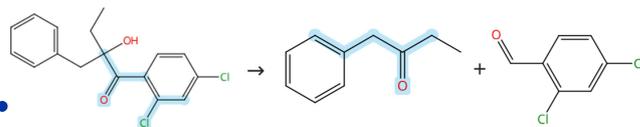
検索式



得られる回答の例



除かれる回答の例



複数の Reactant を描いた場合、その構造が同一成分に含まれるものもヒットする

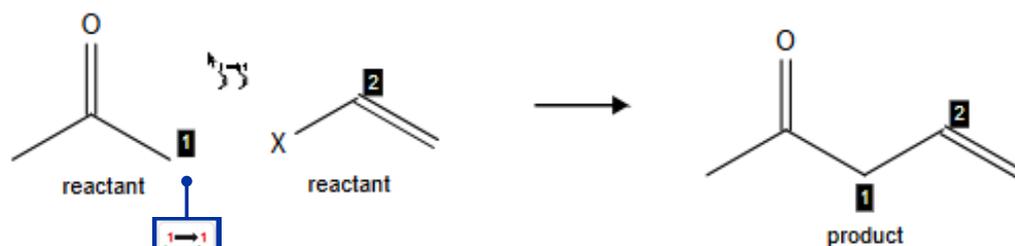
原子マッピングツール(1/2)

反応物と生成物中の対応する原子を指定できる



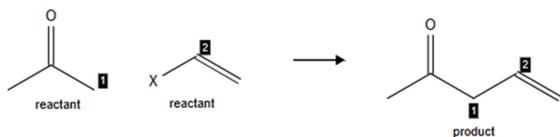
操作方法

原子マッピングツールを選択し、反応物と生成物中の対応する原子をクリックする。指定された原子に同じ番号が付与される。

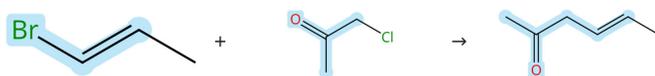


原子マッピングツール(2/2)

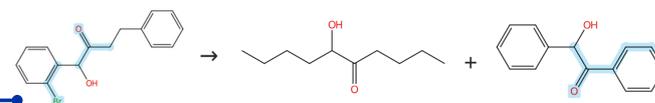
検索式



得られる回答の例



除かれる回答の例



複数の Reactant を描いた場合、その構造が同一成分に含まれるものもヒットする

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp