

# NITE MOL ファイル作成システム 利用者マニュアル

2019 年 9 月

独立行政法人製品評価技術基盤機構

## 目次

第1章	NITE MOL ファイル作成システムの操作説明	3
1.	概要	3
2.	画面構成	3
3.	構造式エディター「Marvin JS」の機能	3
	【キャンバス】	4
	【ツールバー】	5
	➤ General Toolbar	5
	➤ Tools Toolbar	7
	➤ Atoms Toolbar	8
	➤ Templates Toolbar	9
4.	特別なボタンの機能	11
第2章	NITE MOL ファイル作成システムの注意事項	12
1.	構造式の安全なクリア操作と復旧	12
2.	構造式情報処理時の NITE サーバ利用	12
3.	構造式情報の NITE サーバでの無記録	12
4.	故意に書き換えた構造式ファイルの読み込みの禁止	12
5.	V3000 形式の MOL ファイルに関する制限	12
第3章	利用規約・免責事項	14
1.	禁止事項・使用制限	14
2.	本システムを使って送受信する情報及びファイルの取扱い	14
3.	知的財産に関する表示	14
4.	免責事項	14
5.	個人情報の保護	15
6.	利用規約・免責事項の変更	15
	官能基略号一覧	16

# 第1章 NITE MOL ファイル作成システムの操作説明

## 1. 概要

NITE MOLファイル作成システムは、描画したまたはファイルから読み込んだ構造式を化審法で利用可能なV3000形式のMOLファイルに出力する機能を提供します。

次の特徴を備えています。

- ・インターネットに接続したウェブブラウザから利用可
- ・ウェブブラウザ上で動作する構造式エディターにより、マウス操作で構造式を描画
- ・各種構造式ファイルを構造式エディターにドラッグ&ドロップし、構造式を表示
- ・「構造式整形」ボタンで、構造式を標準的な体裁に整形
- ・「MOLファイル出力」ボタンで、構造式をV3000形式のMOLファイルに出力
- ・NITEサーバに構造式情報の記録が残らない

## 2. 画面構成

MOLファイル作成システムは、以下の画面で構成されます。



## 3. 構造式エディター「Marvin JS」の機能

構造式エディターとしてChemAxon社製のMarvin JSを使用しています。

構造式エディターは、構造式を描画する四角く白いキャンバスと、それを囲む以下の4つのツールバーから構成されています。

- General Toolbar

- Tools Toolbar
- Atoms Toolbar
- Templates Toolbar

以下にキャンバスと、各ツールバーの詳細を記載します。

## 【キャンバス】

キャンバスは構造式を描画・表示する領域です。

後述のAtomsツールバーで選んだ原子を貼り付け、Bondsボタンで選んだボンドで原子と原子をつなぐ操作で、キャンバスに構造式を描画することができます。

**便利な機能** ~mol 以外の構造式ファイルも開くことができます~

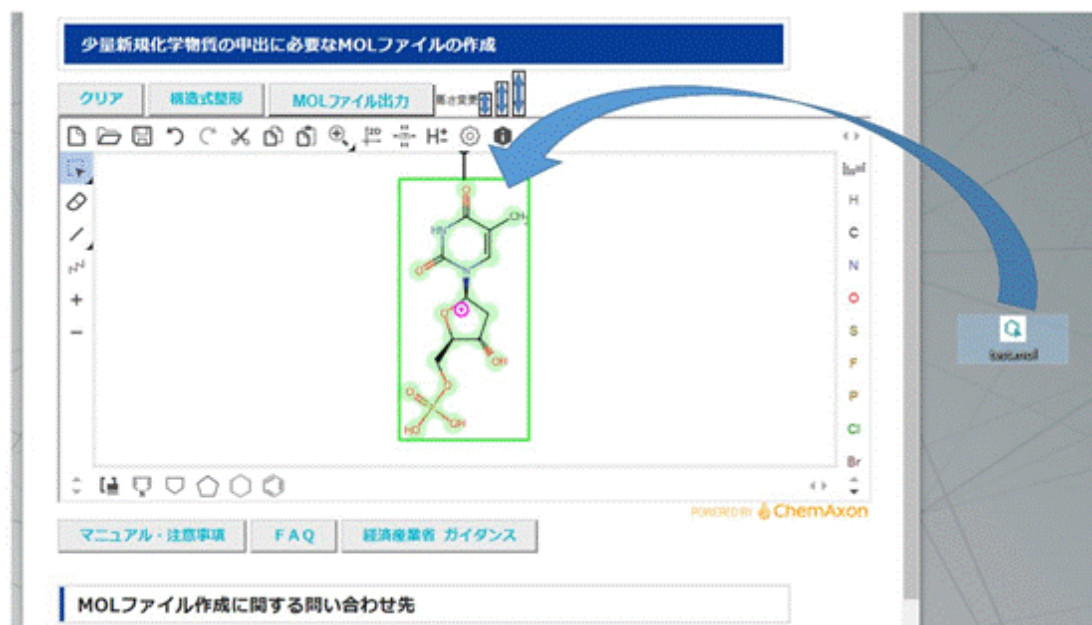
すでに ChemDraw や NITE MOL ファイル作成システム等で作成した構造式ファイルをお持ちの場合、キャンバスにファイルをドラッグ&ドロップする操作でファイルを開くことができます。読み込むことのできるファイル形式は、下表のとおりです。

構造式ファイルを読み込ませた後、「MDL Molfile V3000」形式で出力することにより、化審法で利用可能なファイル形式に変換することができます。

また、一度作成した「MDL Molfile V3000」形式のファイルを確認する際にも便利です。

表：読み込み可能なファイル形式一覧

MDL Molfiles V2000	MDL Molfile V3000 (.mol)	ChemAxon Marvin Documents	SMILES
ChemAxon SMILES	ChemAxon Extended SMARTS	InChI	CML
MDL SDFfile	ChemAxon Compressed Molfile	ChemAxon Compressed SDFfile	CDX
CDXML	SKC		








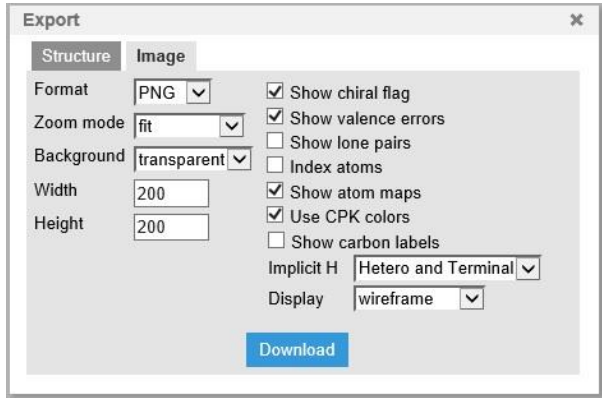












## 【ツールバー】

### ➤ General Toolbar

General ツールバーには、ファイル管理（インポート、エクスポート）、キャンバスコンテンツの一般的な編集/表示（クリア、元に戻す/やり直し、カット/コピー/ペースト、ズーム、クリーン、ナビゲート、表示設定）のボタンがあります。

表：General ツールバーのボタン機能一覧

形	名称	機能
	Clear	<p>内容を保存せずにキャンバス全体をクリアします。確認ダイアログは出ませんのでご注意ください。</p> <p>なお、 ボタンや、後述の <b>クリア</b> ボタンで、誤って構造を消してしまった場合でも、 ボタン（またはショートカット Ctrl+Z）により構造式を元に戻すことができます※。</p> <p>※) ショートカット Ctrl+Z を押す場合には、キャンバスをクリックし Ctrl+Z の操作対象とする必要がありますのでご注意ください。</p>
	Import	<p>既に存在する構造式ファイルを Marvin JS に読み込みます。次のファイル形式をサポートします。</p> <p>MDL Molfiles V2000, MDL Molfile V3000 (.mol), ChemAxon Marvin Documents, SMILES, ChemAxon SMILES, SMARTS, ChemAxon Extended SMARTS, InChI, CML, MDL Sdfile, ChemAxon Compressed Molfile, ChemAxon Compressed Sdfile, CDX, CDXML, SKC</p>
	Export	<p>選択したファイル形式で構造式を出力します。次のファイル形式をサポートします。</p> <p>MDL Molfiles V2000, MDL Molfile V3000 (.mol), ChemAxon Marvin Documents, SMILES, ChemAxon SMILES, SMARTS, ChemAxon Extended SMARTS, InChI, CML, MDL Sdfile, ChemAxon Compressed Molfile, ChemAxon Compressed Sdfile, CDX, SKC</p> <p>なお、後述の <b>MOLファイル出力</b> ボタンを用いることでも、V3000 形式の MOL ファイルで構造式を出力することができます。</p> <p><b>【重要】</b> 本システムで化審法の審査特例制度で用いるファイルを出力する際は、必ず「<b>MDL Molfile V3000</b>」を選択してください。</p>








		<p><b>便利な機能</b> ~書面申出書に貼付可能な画像ファイルの出力~</p> <p>以下のように、Export 画面の「Image」タブを選択することで、画像形式（PNG 形式、JPEG 形式）でのファイル出力もできます。</p> <p>書面による申出において、申出書に構造式を貼付する場合等にご活用ください。</p>  <p>※基本的には、設定を上図から変更する必要はありません。</p>
	Undo	最後に適用したコマンドを元に戻します。
	Redo	最後の“Undo”コマンドの効果を元に戻します。
	Cut	選択した構造式をキャンパスから削除しながら、クリップボードにコピーします。
	Copy	選択した構造式をクリップボードにコピーします。
	Paste	クリップボードの内容をキャンパスに貼り付けます。
	Zoom all	ズーム比を最適値に自動的に変更することで、キャンバス上のすべての構造式を表示します。 なお、Zoom all ボタン右下の黒い矢印部分をクリックすると、Zoom in, Zoom out, Zoom all, Zoom to selection の各ボタンをポップアップ表示します。
	Zoom in	ズームインします。
	Zoom out	ズームアウトします。
	Zoom to selection	選択した構造式がズームの中心になります。
	Clean 2D	原子座標を再計算することにより、キャンパスの構造式を整形します。
	View Settings	表示プロパティを設定するための View Settings ダイアログボックスを表示します。
	About Marvin JS	本システムで使用している Marvin JS に関する情報（名前、バージョン番号）および開発元である ChemAxon ホームページへのリンクを表示します。

## ➤ Tools Toolbar

Tools ツールバーには、構造を描画または編集するボタンがあります。

ツールバーには、右下隅に三角形を持つ「コンボ」型のボタンがあります。「コンボ」型ボタンの場合、右下隅の三角形部分をクリックすると機能を選択することができます。選択すると、選択した「コンボ」型ボタンが選択した機能を保持します。

表：Tools ツールバーのボタン機能一覧

形	名称	機能
	Rectangle Selection	構造式全体または一部を四角く囲んで選択します。
	Freehand Selection	構造式全体または一部を自由な曲線で囲んで選択します。
	Delete	1つまたは複数の構造式または一部を消去します。
	Bonds	結合を描画します。結合様式の選択方法は下記をご参照ください。
	Chain	任意の長さのアルキル鎖を描画します。
	Increase Charge	原子に正の電荷を加えます。
	Decrease Charge	原子に負の電荷を加えます。

### ・「Bonds」ボタンについて









Tools ツールバーの Bonds ボタンは「コンボ」型ボタンとなっており、右下隅の三角形部分をクリックすると、任意の種類の結合様式を選択できます。

また、キーボードショートカット※を使用して、結合様式の選択や、既存の結合様式の変更もできます。

下の表では、Marvin JS で使用可能な結合様式と、それぞれのキーボードショートカットを表しています。

※) キーボードショートカットは、キャンバスをクリックしてキャンバスが操作可能状態となっている必要がありますのでご注意ください。


表：Bonds ボタンで選択可能な結合様式一覧

形	結合様式	キーボードショートカット
	Drawing	Ctrl + D
	“Single” bond	1
	“Double” bond	2
	“Triple” bond	3
	<b>本ボタンは使用しないで下さい。</b>	
	“Single Up” wedge bond	5
	“Single Down” wedge bond	6
	<b>本ボタンは使用しないで下さい。</b>	

## ➤ Atoms Toolbar

Atoms ツールバーには、原子を描画、または変更するためのボタンがあります。これらのボタンで選択した原子がカーソルの先端に表示されます。キャンバス上でクリックすると、カーソルの先端に表示された原子がキャンバスに配置されます。ショートカットキー（原子記号に対応する英字キー）を使用して、周期表から任意の原子を選択することもできます。

表：Atoms ツールバーのボタン機能一覧

形	名称	説明
	Periodic table	周期表を開いて原子を選択します。詳細は下記をご参照ください。
<b>H C N O S F P Cl Br I</b>	Frequently used atoms	頻繁に使用される原子を、Atoms ツールバーから直接選択できます。
*	Star atom	<b>本ボタンは使用しないで下さい。</b>

- 「Periodic Table」ボタンについて

Periodic Table ボタンをクリックすると、周期表がポップアップウィンドウで開きます。周期表から任意の原子を選択すると、選択した原子がカーソルの先端に表示されます。キャンバス上でクリックすると、カーソルの先端に表示された原子がキャンバスに描画されます。なお、カーソルの先端に表示された原子は、クリックする毎にキャンバスに描画されます。

Periodic table																		×
1																	18	
1	H	2											13	14	15	16	17	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
Atom list	*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
NOT list	#	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

- 「Star (\*) atom」ボタンについて

**「Star (\*) atom」ボタンは使用しないで下さい。**

- 「Atom list」及び「NOT list」について

**「Atom list」及び「NOT list」は使用しないで下さい。**





## ➤ Templates Toolbar

Templates ツールバーには5つの汎用テンプレートが用意されています。これらのテンプレートから1つを選択後、キャンバス上でクリックすると選択したテンプレートがキャンバスに描画されます。

また、選択したテンプレートを他の原子と結合させるような形でキャンバス上に描画するとき、当該他原子と結合させた後、カーソルをドラッグすることでテンプレートを回転させることができます。

表：Templates ツールバーのテンプレート一覧

形	テンプレート
	Cyclohexane
	Cyclopentane
	Pyrrole
	Cyclopentane (house)
	Benzene
	Abbreviated groups

### ・「Abbreviated groups」ボタンについて

Templates ツールバーの左端に、Abbreviated groups ボタンがあります。このボタンはNITEが予め設定している官能基略語（別添参照）※によって構造式を描画する目的で使用しますが、使用する際には**必ず「Expand」にチェックを入れて官能基略語を構造式に展開**してご使用ください。

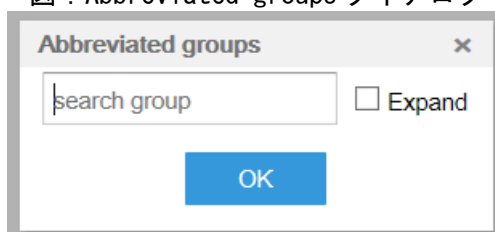
※) ユーザーが新規に官能基略語を追加することはできませんので、予めご了承ください。

表：Abbreviated groups ボタン

形	ボタン名
	Abbreviated groups

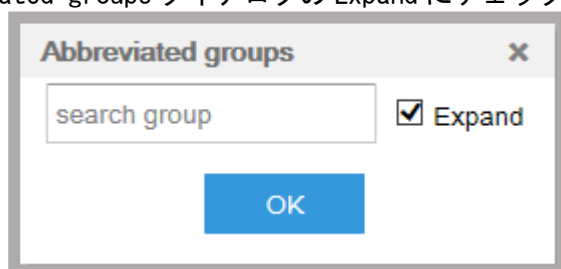
Abbreviated groups ボタンをクリックすると、Abbreviated groups ダイアログが表示されます。

図：Abbreviated groups ダイアログ



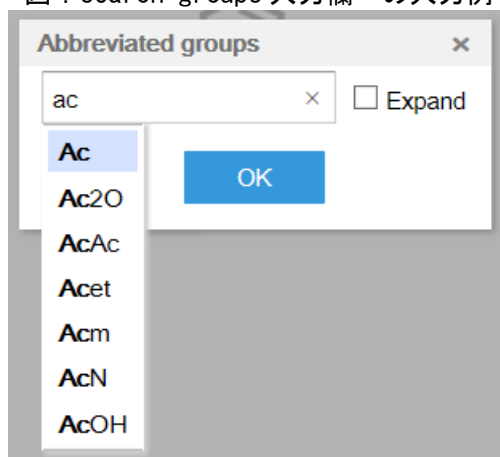
表示された Abbreviated groups ダイアログにある「Expand」にチェックを入れてください。

図：Abbreviated groups ダイアログの Expand にチェックを入れた状態

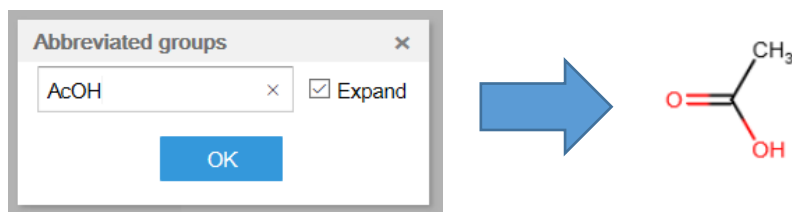


search groups 欄に文字列を入力すると事前定義済みの官能基略語の候補（例えば、Ac, AcOH など）が表示されます。表示された候補から一つを選び[OK]ボタンを押すと、官能基略語が構造式に展開された分子をドラッグした状態となりますので、そのまま構造式エディターに貼り付けることができます。なお、ドラッグ状態を解除するには[Esc]キーを押して下さい。

図：search groups 入力欄への入力例



図：Expand にチェックを入れて官能基略語を構造式に展開した例








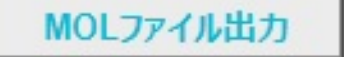
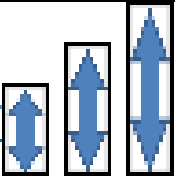





**【重要】** 経済産業省から公表されている「少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係る事業者ガイド」に基づき、構造式を描画する際には、官能基略語は使用しないでください。

#### 4. 特別なボタンの機能

NITE MOLファイル作成システムは特別なボタンを用意しています。


表：特別なボタンの機能一覧



ボタン	説明
	<p>「クリアしてよろしいですか？」の確認ダイアログを出し、「OK」を押すと、内容を保存せずにキャンバス全体をクリアします。</p> <p> クリアボタンと異なり、確認ダイアログを表示するのが特徴です。</p> <p>ただし、 ボタンや  ボタンで、誤って構造式を消してしまった場合でも  ボタン（またはショートカット Ctrl+Z）を押すと構造式を元に戻すことができます。</p>
	<p>原子座標を再計算することにより、キャンバスの構造式を整形します。</p> <p> ボタンと同じ機能です。</p>
	<p>キャンバスに表示している構造式を、V3000形式のMOLファイルとして保存します。</p> <p>本ボタンをクリックすると、Webブラウザでファイルのダウンロードが始まります。</p> <p>なお、ダウンロード方法はブラウザの種類により、ファイルダウンロードダイアログがポップアップ表示され、ファイルの保存先を確認されたり、ファイルダウンロードが自動的に開始されたりするなど、ダウンロード時の動作が異なりますのでご注意ください。</p> <p>また、ダウンロードされたファイルの名称は「西暦年月日-時分秒.mol」となります。</p>
<p>高さ変更</p> 	<p>キャンバスの高さを変更します。上下に矢印のついたアイコン3種類のいずれかをクリックすると、キャンバスの高さを変更することができます。</p> <p>ブラウザの表示領域の大きさに合わせてキャンバスの高さを変更して下さい。</p>
	<p>本マニュアルをPDF形式で表示します。</p>
	<p>よくある質問のページを表示します。</p>
	<p>経済産業省が公表している「少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係る事業者ガイダンス」が確認できるページ（経済産業省サイト）を表示します。</p>


## 第2章 NITE MOL ファイル作成システムの注意事項

この項では、NITE MOL ファイル作成システムの使用上の注意事項について説明します。

### 1. 構造式の安全なクリア操作と復旧

構造式エディターの  クリアボタンは、確認ダイアログを出さずに構造式を消去します。

一方、 ボタンは、「クリアしてよろしいですか？」の確認ダイアログを必ず表示し「OK」を押したときだけ構造式を消去します。そのため、より安全な、 ボタンのご利用を推奨します。





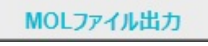
ただし、構造式を消去した場合でも、 Undo ボタン（またはショートカット Ctrl+Z）を押すと、変更直前の構造式を復活できますのでご利用ください。

なお、ショートカット Ctrl+Z を押す場合には、キャンバスをクリックし Ctrl+Z の操作対象とする必要がありますのでご注意ください。

### 2. 構造式情報処理時の NITE サーバ利用

NITE MOL ファイル作成システムは、ウェブブラウザ上で動作しますが、以下の操作の際は、構造式情報処理のため、ユーザーのウェブブラウザと NITE サーバ間で構造式情報の送受信が発生します。

なお、ウェブブラウザと NITE サーバ間の通信は暗号化されています。

- ・ 構造式ファイルをキャンバスにドラッグ&ドロップ（及び  Import ダイアログ操作時）
- ・ 構造式整形（ ボタンクリック時、 ボタンクリック時）
- ・ MOL ファイル保存（ Export ダイアログ操作時、 ボタンクリック時）

### 3. 構造式情報の NITE サーバでの無記録

NITE MOL ファイル作成システムでは、2. のとおり、構造式情報処理のため、ユーザーのウェブブラウザと NITE サーバ間で構造式情報の送受信が発生しますが、送受信された構造式情報は、NITE サーバ上には残らないようになっています。

ただし、サーバ障害発生時の原因究明解析や利用状況把握等のため、アクセス履歴のみ記録されますので、予めご了承ください。

### 4. 故意に書き換えた構造式ファイルの読み込みの禁止

MOL ファイル等の構造式ファイルの内容を故意に書き換え、NITE MOL ファイル作成システムに読み込ませることを一切禁止します。

なお、サーバ障害発生防止を目的として、NITE サーバにアクセス履歴が記録されますので、予めご了承ください。

### 5. V3000 形式の MOL ファイルに関する制限

V3000 形式の MOL ファイルの理論上のサイズ制限は最大 2GB までです。なお、炭素数に制限はありません。

<参考情報>

比較的に大きな分子の構造式を扱う場合の所要時間を下表に示します。

比較的に大きな分子の構造式を扱う場合、読み込みの所要時間が長くなる傾向があります。このため、読み込み完了まではブラウザが無反応になりますが、読み込み処理を実行中であることにご注意下さい。

表：比較的に大きな分子の構造式を扱う場合の所要時間

	$C_{315}H_{512}O_{189}$ の構造情報	$C_{630}H_{1024}O_{378}$ の構造情報
V3000 形式ファイルを読み込み	20 秒	185 秒
V3000 形式ファイルに保存	1 秒以下	1 秒以下
<利用環境>		
OS:	Windows 10 Pro 64 bit 版	
プロセッサ:	Intel Core i7-3537U CPU @ 2.00GHz	
メモリ:	8GB	
ブラウザ:	Internet Explorer 11	

## 第3章 利用規約・免責事項

この規約は独立行政法人製品評価技術基盤機構（以下、「機構」という。）が提供する「NITE MOL ファイル作成システム」（以下、「本システム」という。）を利用する際の注意事項について定めたものです。ご利用される場合は、以下の利用条件に同意の上ご利用いただきますようお願いいたします。ご同意いただけない場合は、申し訳ございませんがご利用をお控えください。ご利用いただく場合は、以下に示すご利用条件に全て同意していただいたものと解釈いたします。

### 1. 禁止事項・使用制限

本システムの利用にあたっては次に掲げる行為を禁止します。これらの禁止事項に該当する行為が確認された場合は、セキュリティ確保のため、アクセスの拒否などを行うことがあります。

- ① 本システムを化審法第3条第1項第5号に基づく少量新規化学物質の申出に関する以外の目的で利用すること。
- ② 本システムに対し、不正にアクセスすること。
- ③ 本システムの管理及び運営を故意に妨害すること。
- ④ 本システムに、ウィルスに感染したファイルを故意に読み込みますこと。
- ⑤ 法令又は公序良俗に違反する行為又はそのおそれのある行為をすること。
- ⑥ その他、本システムの運用に支障を及ぼす行為又はそのおそれのある行為をすること。

### 2. 本システムを使って送受信する情報及びファイルの取扱い

- ① 本システムの利用者（以下、「利用者」という。）がセキュリティを十分に確保できない状態で本システムを使った場合又は第三者が本システムを不正利用した場合には、送受信される情報及び読み込みファイルの機密性、完全性及び可用性の確保に関して、機構は一切の責任を負いません。
- ② 利用者が本システムに描画する情報及び読み込みファイルに誤り又は破損があったことによる、利用者又は第三者に与えた損害について、機構は一切の責任を負いません。
- ③ 利用者が本システムに描画する情報及び読み込みファイルにウィルスが混入していたことによる、利用者又は第三者に与えた損害について、機構は一切の責任を負いません。
- ④ 本システムに描画された情報、読み込みファイル及びログは、次のいずれかに該当する場合を除き、第三者に提供いたしません。
  - ・システムの改修・改良のために必要である場合
  - ・法令に基づき開示することが必要である場合
  - ・その他特別の理由のある場合

### 3. 知的財産に関する表示

本システム上に掲載される文章、デザイン、ロゴマーク、機能等に関する著作権、その他の知的財産権は機構及びChemAxon社に属します。利用者が著作権及びその他の知的財産権を侵害することは禁止されています。

Marvin JS

“Marvin JS was used for drawing, displaying and characterizing chemical structures, substructures and reactions, Marvin 18.16.0, 2018, [ChemAxon](#)”

POWERED BY  ChemAxon

### 4. 免責事項

- ① 機構は、利用者が本システムを使用したことにより発生した利用者の損害及び利用者が第三者に与えた損害について、一切の責任を負いません。
- ② 機構は、サーバの保守、停電等の理由により、予告なく本システムのサービスを一時停止する場合があります。なお、システムの停止に関して生じた損害について、機構は一切の責任を負いません。また、何らかの理由により本システムが利用できなかったことにより生じた損害について、機構は一切の責任を負いません。

## 5. 個人情報の保護

本システムでは個人情報を取り扱いません。

## 6. 利用規約・免責事項の変更

機構は、必要があると認めるときは、利用者への事前の通知を行うことなく、本利用規約・免責事項を変更する場合があります。本利用規約・免責事項の変更後に、利用者が本システムを利用したときは、利用者は、変更後の利用規約・免責事項に同意していただいたものと解釈します。

(別添)

## 官能基略号一覧

数字									
1-Naph	2-4DCZ	2-6Clb	2-6DCZ	2-Abz	2BrZ	2CIZ	2-Fur	2-Naph	2-OHEt
2OHPH	2Pip	3-Fur	3Py	4Abz	4BrZ	4CIZ	4-OMe-Bz	4Py	5-TAMRA
A									
Aac	Abu	Abz	Ac	Ac2O	AcAc	Acet	AcM	AcN	AcOH
Ad	ADAarabif	ADAllos	ADAltro	ADArabip	Ade	ADeryth	ADFruct	ADGalac	ADGlucO
ADIdose	ADLyxof	ADLyxop	ADManno	Adoc	ADPsico	ADRibof	ADRibop	ADSorbo	ADTagat
ADTalos	ADThreo	ADXylof	ADXylop	AlBN	Ala	AlCl3	All	Alloc	Allyl
Am	AMCA	Amoc	AMP	Amyl	Aoa	Arg	Asn	Asp	Asu
Asx									
B									
B2H6	Bam	BDAllos	BDAltro	BDArabif	BDArabip	BDEryth	BDFruct	BDGalac	BDGlucO
BDGulos	BDIdose	BDLyxof	BDLyxop	BDManno	BDPsico	BDRibof	BDRibop	BDSorbo	BDTalos
BDThreo	BDXylof	BDXylop	Benzoyl	Benzyl	Beoc	Bhoc	Bic	Biotinyl	Bmv
Bn	Boc	Bom	BOP	Bpoc	Br2	Brosyl	Bs	Bt	BTC
Btm	Bu	Bum	Bz	Bzh	Bzl				
C									
C10	C10H21	C11	C11H23	C12	C12H25	C13	C13H27	C14	C14H29
C15	C15H31	C16	C16H33	C17	C17H35	C18	C18H37	C19	C19H39
C2	C20	C20H41	C21	C21H43	C22	C22H45	C23	C23H47	C24
C24H49	C25	C25H51	C2H5	C3	C3H7	C4	C4H9	C5	C5H11
C6	C6H13	C6H5	C7	C7H15	C8	C8H17	C9	C9H19	CBR3
Cbz	c-C10H19	c-C11H21	c-C12H23	c-C13H25	c-C14H27	c-C15H29	c-C16H31	c-C17H33	c-C18H35
c-C19H37	c-C20H39	c-C21H41	c-C22H43	c-C23H45	c-C24H47	c-C25H49	c-C3H5	c-C4H7	c-C5H9
c-C6H11	c-C7H13	c-C8H15	c-C9H17	CCl3	CCl4	CDI	Ce	Ceoc	CF3
CH2CH2Ph	CH2CH3	cHex	CHL	CHO	chX	c-Hx	Cl2	CMP	CN
CO	CO2Am	CO2Bn	CO2Bu	CO2Et	CO2H	CO2iAm	CO2i-Am	CO2iBu	CO2i-Bu
CO2iPr	CO2i-Pr	CO2K	CO2Me	CO2Na	CO2n-Am	CO2n-Bu	CO2neoAm	CO2neo-Am	CO2n-Pr
CO2Ph	CO2Pr	CO2s-Am	CO2sBu	CO2s-Bu	CO2tAm	CO2t-Am	CO2tBu	CO2t-Bu	CoA
COBr	COBu	COCF3	COCl	COCO	COEt	COF	COiPr	COMe	COMU
CONEt2	CONH2	CONHEt	CONHMe	CONMe2	COOAm	COOBn	COOBu	COOEt	COOH
COOiAm	COOi-Am	COOiBu	COOi-Bu	COOiPr	COOi-Pr	COOK	COOMe	COONa	COOn-Am
COOn-Bu	COOneoAm	COOneo-Am	COOPh	COOPr	COOs-Am	COOsBu	COOs-Bu	COOtAm	COOt-Am
COOtBu	COOt-Bu	COPh	COPr	COsBu	COs-Bu	COSH	COtBu	COt-Bu	Cpe
CPh3	Cpm	CS2	Ct	Cy	cyclobutyl	cycloheptyl	cyclooctyl	cyclopentyl	cyclopropyl
Cys	Cyt								
D									
dA	DAllos	DAltro	Dan	Dansyl	DArabi	Dbpoc	dC	DCB	DCC
DCE	DCM	Dde	Ddiv	DDQ	Ddz	DEAD	DEAE	DEIPS	DEryth
DErythu	DFruct	dG	DGalac	DGlucO	DHP	DIAD	DIC	DIdose	DIEA
Dip	DIPEA	Dlyxos	DMA	Dmab	DManno	DMAP	Dmb	DME	DMF
DMIPS	Dmnb	Dmoc	DMPM	DMPS	DMS	DMSO	DMT	DMTr	DNBZ
Dnp	DNPS	Dns	Doc	DPIPS	Dpp	DPPA	DPsico	DPTBS	DRibos
DRibul	DSorbo	dT	DTagat	DTalos	DTBMS	DTBS	DThreo	DXylos	DXylul
E									
EDANS	EDC	EDCI	EE	Esc	Et	Et4N	Ethyl	EtOH	
F									
Farnesyl	Fmoc	For	Fpmp	Ft					
G									
Gln	Glp	Glu	Glx	Gly	GMP	Gua			
H									
H2	H2O	H2O2	H2PO4	H2SO4	H3PO4	HATU	HBTU	HCl	HClO4
Hcy	Hex	HFIP	Hippuryl	His	Hmb	HMPA	HNO2	HNO3	HOAt
HOBt	HPO4	Hse	HSO4						
I									
I2	iAm	i-Am	iBu	i-Bu	IBX	i-C3H7	i-C4H9	i-C5H11	Ile
Im	Indole	IPA	iPr	i-Pr	Ips				
J									
K									
KMnO4	KNO2	KNO3	KOH						
L									
Leu	Lev	Lys							
M									
Mal	Mbh	Mbs	m-C6H4	MCA	MDIPS	MDPS	Me	Me3N	Meb
MEM	Mes	Met	MgBr	MgCl	MMT	MMTr	MnO2	Mob	MOM
Moz	Mpc	m-Phenylene	MPM	Ms	Msc	MSM	MTBE	Mthp	MTM
m-Tol	m-Tolyl	Mtr	Mts	Mtt					



官能基略号一覧（続き）

N									
N+Et3	N+Et4	N+Me3	N2	N2+	N3	NaCl	n-Am	NaNO2	NaNO3
NaOH	Naph	NBoc	NBS	n-Bu	NBu4	NC	n-C3H7	n-C4H9	n-C5H11
n-C6H13	NCO	NCS	neoAm	neo-Am	neo-C5H11	NEt2	NEt3	NHAc	NHAm
NHBn	NHBoc	NHBu	NHCbz	NHEt	n-Hex	NHiAm	NHi-Am	NHiPr	NHi-Pr
NHMe	NHn-Am	NHn-Bu	NHneoAm	NHneo-Am	NHOH	NHPh	NHPr	NHs-Am	NHs-Bu
NHTAm	NHT-Am	NHTBu	NHT-Bu	NHTos	NHTs	NHZ	NIS	Nitroso	Nle
NMe2	NMP	NO	NO2	NO3	Nosyl	Np	Npe	Npeoc	Npes
n-Pr	Nps	Npys	Ns	Nva	Nvoc				
O									
O2	OAc	OAm	OBn	OBoc	OBu	OBz	o-C6H4	OCN	OEt
OH2+	OiAm	Oi-Am	OiPr	Oi-Pr	OK	Oleoyl	OLi	OMe	OMe3Si
OMs	ONa	On-Am	On-Bu	OneoAm	Oneo-Am	ONO2	o-Nos	ONp	OnPr
On-Pr	OPfp	OPh	o-Phenylene	OPMB	OPr	Orn	Os-Am	Os-Bu	OSiEt3
OSIME3	OSu	OtAm	Ot-Am	OTBDMS	OTBS	OtBu	Ot-Bu	OTES	OTf
OTHP	OTIPS	OTMS	o-Tol	o-Tolyl	OTos	OTre	OTs	Oxyma	
P									
P(OEt)2	P(OMe)2	P+Ph3	Pac	Pal	Pbf	Pbp	PBr3	p-C6H4	Pcb
PCC	PCI3	PCI5	PdCl2	PEG3	PEG4	PF6	Pfp	Ph	Phacm
Phe	Phenyl	PhF	PhOMe	Pht	PI3	Pic	PiP	Pipoc	Piv
PMB	PMBM	Pmc	PMP	PNB	PO(OEt)2	PO(OMe)2	PO3	PO3H	PO3H2
PO4	POBr3	Poc	POCl3	POI3	PPh2	PPh3	p-Phenylene	Pr	Pro
Prop	PtBu3	p-Tol	p-Tolyl	Pv	Py	PyBOP	Pyl	Pyrim	
Q									
Qxc									
R									
ring10	ring11	ring12	ring13	ring14	ring15	ring16	ring17	ring18	ring19
ring20	ring21	ring22	ring23	ring24	ring25	ring3	ring4	ring5	ring6
ring7	ring8	ring9							
S									
SAm	s-Am	Sar	SBu	s-Bu	s-Butyl	s-C4H9	s-C5H11	Scm	SCN
Sec	SEM	Ser	SES	SEt	SiAm	Si-Am	SiEt3	SiMe3	SiPr
Si-Pr	SK	SLi	SMCC	SMe	SMPT	SNa	Sn-Am	Sn-Bu	SnBu3
SneoAm	Sneo-Am	SnMe3	SO2	SO2Cl	SO2NH2	SO2Ph	SO3H	SO4	SPDP
SPh	SPr	SPy	Ss-Am	Ss-Bu	Sta	StAm	St-Am	StBu	St-Bu
ster	Su	Suc							
T									
Tacm	tAm	t-Am	TBAF	TBDMS	TBDPS	TBMPS	TBS	TBT	tBu
t-Bu	t-Butyl	t-C4H9	t-C5H11	t-C6H13	Tcboc	Tcp	TDS	TEA	Tec
TEMPO	Teoc	TES	Tf	Tfa	TFE	TFMSA	tHex	t-Hex	tHexyl
THF	THP	Thr	Thy	TIPDS	TIPS	TMAH	Tmb	Tmob	TMP
TMS	TMT	TNP	Tol	Tos	Tosyl	TPP	Tpt	trans-Cinnamyl	Tre
Trisyl	Trityl	Troc	Trp	Trt	Ts	Tyr			
U									
U	UMP	Ura							
V									
Val									
W									
X									
Xaa	Xan								
Y									
Z									
Z									

※ユーザーが新規に官能基略語を追加することはできませんので、予めご了承ください。