

事業者ガイダンス

ーNITE MOLファイル作成システム (Marvin JS) の使い方ー

Marvin JSは、化審法の少量新規申出手続きの範囲での使用が認められています。

商業目的での利用にあたっては、Marvin JSのライセンス条項をご確認ください。

2018年9月
2018年10月改訂

独立行政法人製品評価技術基盤機構

(1) 利用方法

以下のURLにアクセスしてください。

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syouryou.html>

※Marvin JSは、基本的に上記のサイトに掲載されているものを利用してください。

(2) 利用マニュアル

別途、NITE MOLファイル作成システムの機能説明、注意事項、利用規約・免責事項が記載された「ユーザー向け利用マニュアル」を公開しています。NITE MOLファイル作成システムをご利用される場合には、必ず当該マニュアルをご一読ください。

https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syouryou/mol/NITE_MOLfile_system_user_manual.pdf

(3) MOLファイル作成に関するお問合せ

MOLファイル作成に関して、ご不明な点等がございましたら下記までお問合せください。

➤ 質問のお問合せ先:

化審法連絡システム(少量新規申出に関するお問合せ)

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/kashinrenraku.html>

(4) 推奨環境

NITE MOLファイル作成システムで使用しているMarvin JSはPCスペックに依存せず利用可能です。

インターネットを閲覧可能なウェブブラウザであれば基本的には利用可能ですが、特段以下の機能をキャンセルしている場合には、利用前に有効化してください。

- JavaScript
- HTML5 canvas

なお、Internet Explorer 8 以前は HTML5 canvas に対応していないため、Internet Explorer を利用する際には最新バージョンを使用してください。

はじめに —NITE MOLファイル作成システムの外観と主な機能(概要)—

ファイル出力(MOLファイル専用)

ファイル出力(形式選択あり)

キャンパスの高さ変更

ファイルを開く

位置の整形等

高さ変更

クリア

構造式整形

MOLファイル出力

一括消去(確認機能つき)

一括消去(確認機能なし)

消しゴム

結合鎖(線種を選択)

結合鎖の連続描画

電荷を増やす

電荷を減らす

領域の指定(四角領域・自在の選択)

領域の指定(ドラッグ)

環状化合物の選択

描画領域

回転

回転の中心

やり直し

コピー

拡大(縮小)

ビューの設定

元に戻す

切り取り

貼付

位置の整形等

About Marvin JS

Atom ツールバー

周期表表示
周期表から原子を選択したいときに使用

汎用の原子

- H: 水素
- C: 炭素
- N: 窒素
- O: 酸素
- S: 硫黄
- F: フッ素
- P: リン
- Cl: 塩素
- Br: 臭素
- I: ヨウ素
- *: アスタリスク←使用不可

マニュアル・注意事項

FAQ

経済産業省 ガイダンス

POWERED BY ChemAxon

ステップ1 骨格



(ア)鎖状構造の入力 (イ)環状構造の入力

ステップ2 結合様式の変更



ステップ3 元素の変更



(ア)元素の選択 (イ)元素プロパティの入力



ステップ4 画像処理(整形／拡大・縮小／コピー／移動・回転等)




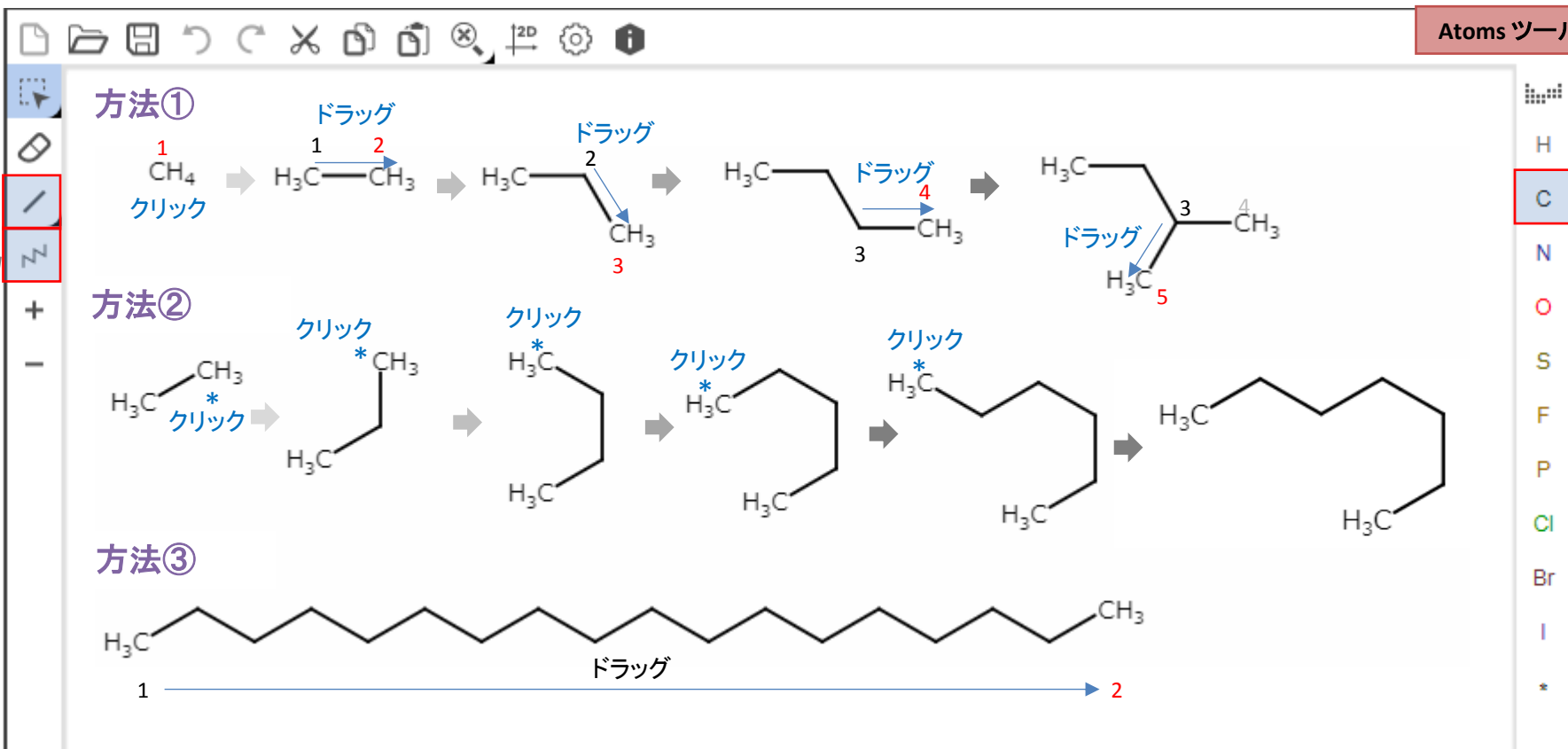
ステップ5 MOLファイル出力と確認(ファイルを開く)

ステップ1 骨格 (ア)鎖状構造の入力

● 鎖状構造の入力方法は主に以下の3つです。

- 方法①** Atoms ツールバーから炭素を表示 ⇒ 表示した炭素をクリック後、ドラッグすることで結合鎖(単結合)ができ、炭素数が1増加
- 方法②** 左側のツールバーから結合ボタン()を選択しキャンバス上でクリック ⇒ 表示した任意の炭素上でクリックすることで、結合(単結合)が1つ生成。
- 方法③** 左側ツールバーから結合鎖ボタン()を選択しキャンバス上でクリック&ドラッグすることにより、任意の数の炭素鎖を生成。

※ 上記の方法以外にも、元素を配置した後、左側ツールバーの結合差ボタン()を先に選択し、元素同士を結合鎖で連結する方法もあります。



Atoms ツールバー

②の時
クリック

③の時
クリック

①の時
クリック

方法①

ドラッグ

1 クリック

2

3

4

5

方法②

クリック

クリック

クリック

クリック

方法③

ドラッグ

1

2

H

C

N

O

S

F

P

Cl

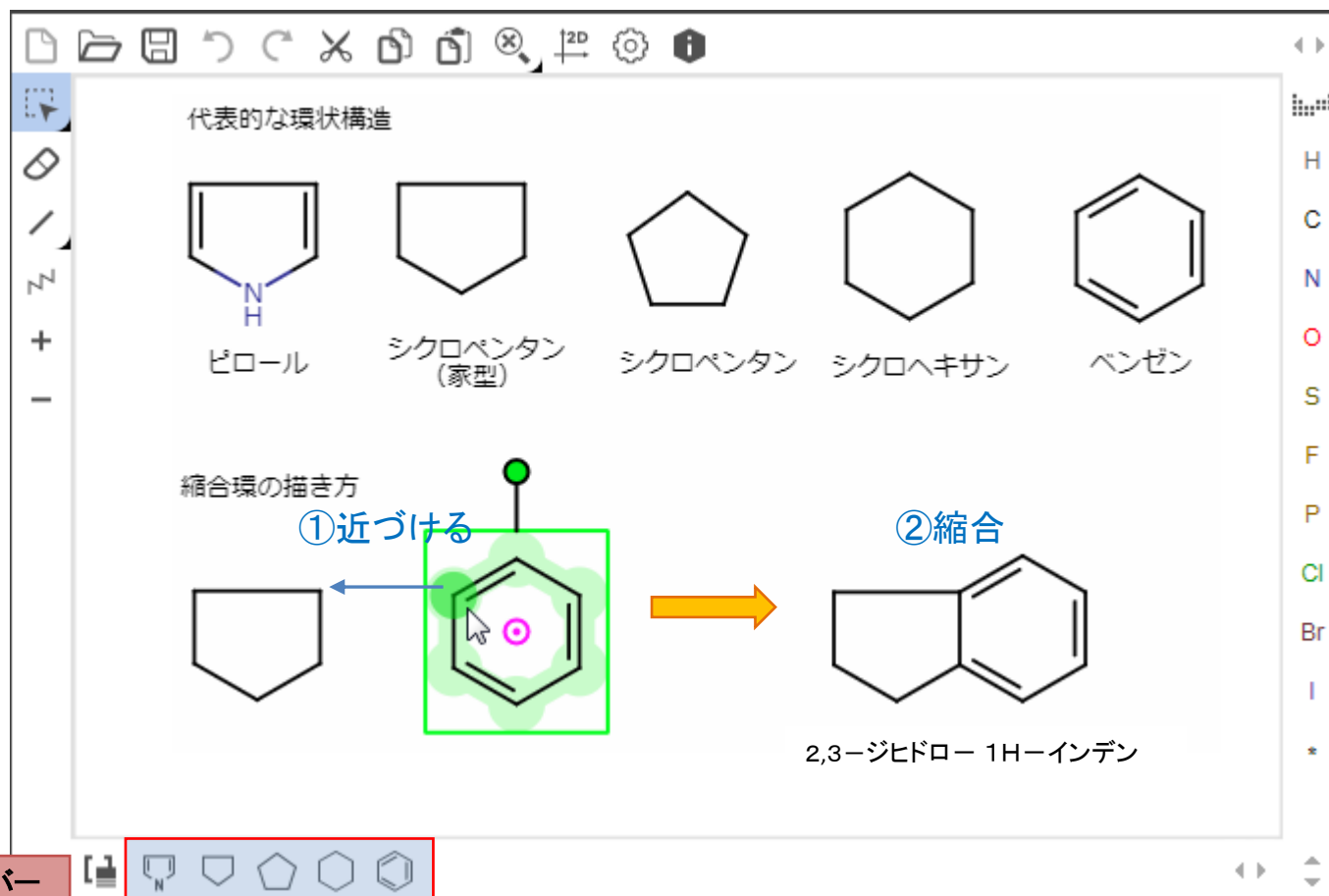
Br

I

*

ステップ1 骨格 (イ)環状構造の入力

- 代表的な環状構造は、Templateツールバーを利用して描画できます(下図上側)。
- 縮合環は辺又は点を重ねることで作成できます(下図下側)。




Template ツールバー

代表的環状構造のボタン

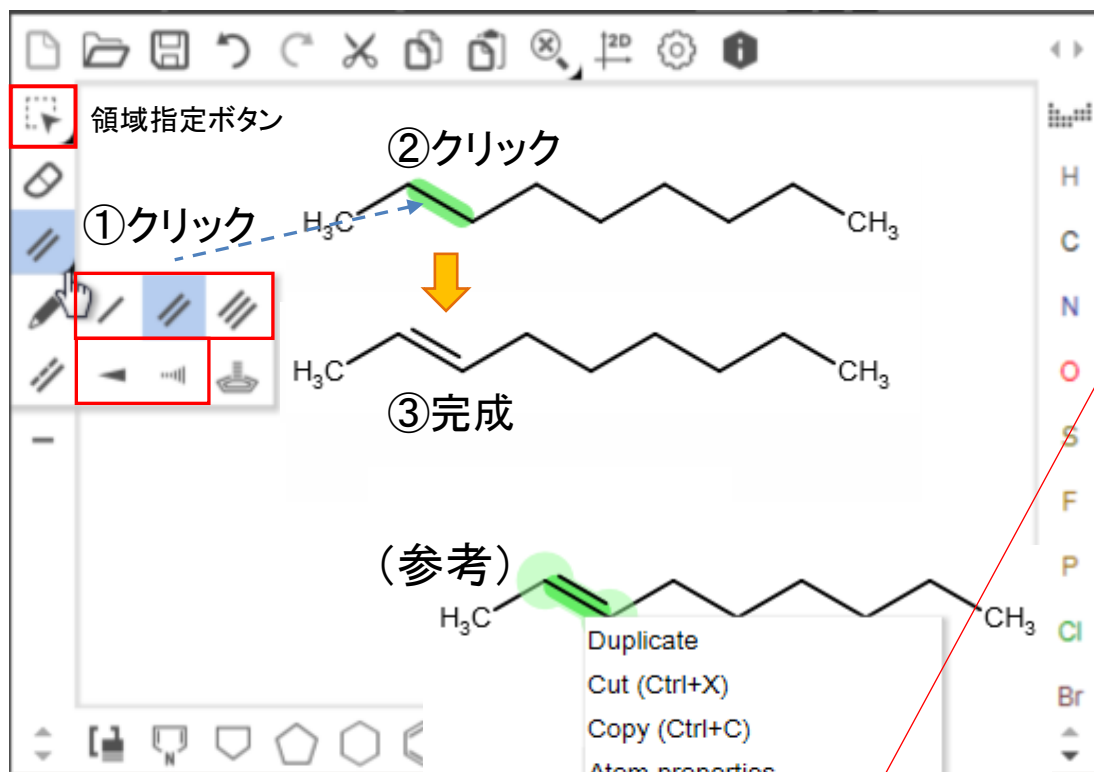
※ 選択・移動・回転の仕方は、ステップ4を参照してください。

ステップ2 結合様式の変更

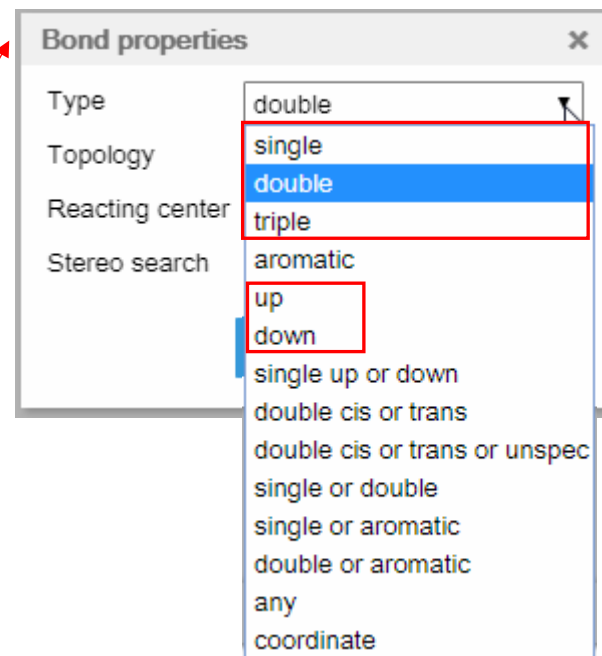
● 結合様式の変更方法は、下記のとおりです。

①結合ボタン()右下隅の三角形部分をクリックし、鎖の種類を選択 ⇒ ②変更したい結合をクリック ⇒ ③完成(例:単結合→二重結合)

● なお、①と②は順番を逆にすることもできます(その場合、領域指定アイコンを先にクリックしてください)。



(参考)結合プロパティで結合様式を変更することもできます。



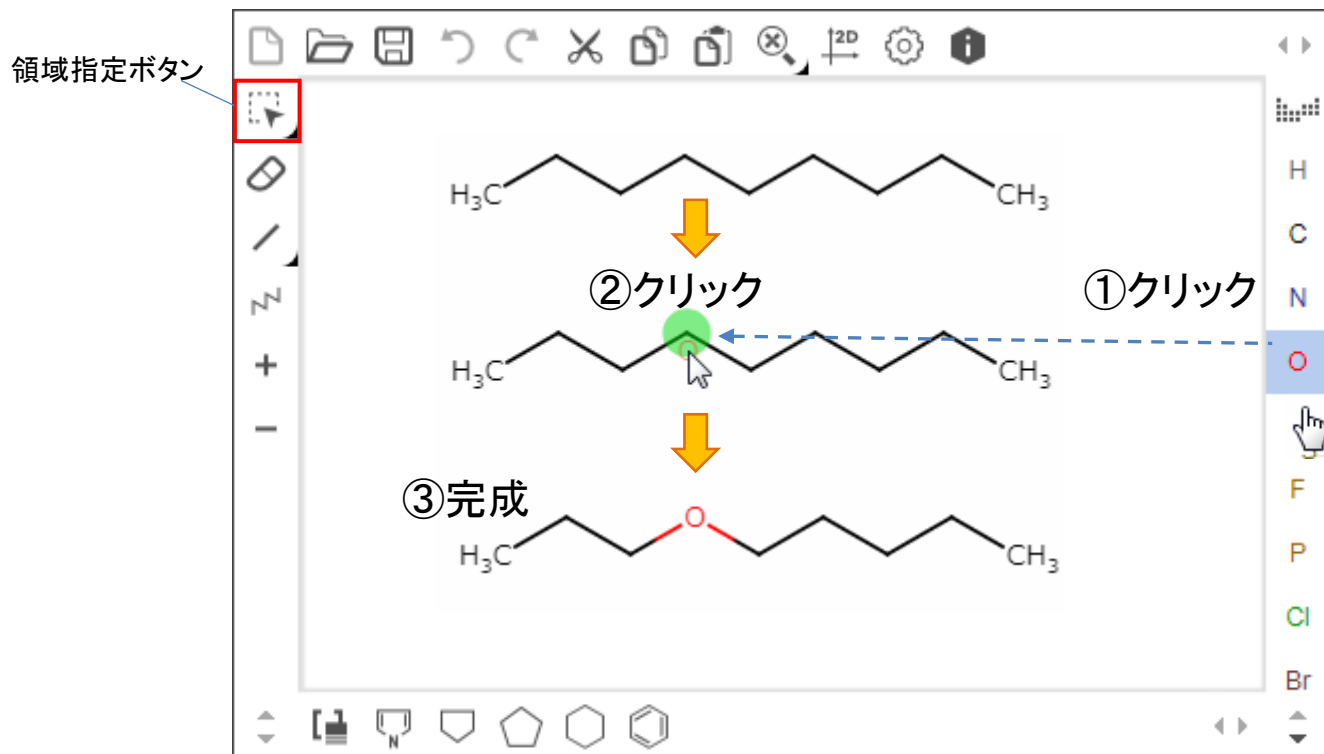
※①で鉛筆ボタンを選択すると、クリックごとに単結合→二重結合→三重結合(→単結合)と結合様式を変えることができます。

【注意】使用可能な結合様式は、以下の様式のみです。

単結合(single)、アップ(up)、ダウン(down)、二重結合(double)、三重結合(triple)

ステップ3 元素の変更

- 元素の変更方法は、下記のとおりです。
 - ①変更したい元素のアイコンをクリック ⇒
 - ②変更したい箇所をクリック ⇒
 - ③完成(例:C → O)。
- なお、①と②は順番を逆にすることもできます(その場合、領域指定アイコンを先にクリック)。



(参考)Atomプロパティ(3(イ)参照)
で種類を変更することも可能

Atom properties

Change to Element

Basic Advanced

Atom	O	8
Alias	O	🔒
Isotope	Os	🔒
Charge	0	
Radical	none	▼

ステップ3 元素の変更 (ア)元素の選択

- 元素の選択には、①Atomsツールバーを利用する方法と②周期表を利用する方法の2種類があります。
- なお、M、X、Me、Et等の省略表記は、使用できません。←注意

②周期表を利用する方法

①Atomsツールバーを利用する方法

描画したい元素のボタンをクリックし選択後、キャンバス上に描画された構造式の変更したい元素部分でクリックすると、選択した元素(及び水素※)に変更されます。

Periodic table

1	2																	18
1	H																	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	Fll	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		

🔍 ボタンをクリックして周期表を表示させ、描画したい元素をクリックし選択した後、キャンバス上に描画された構造式の変更したい元素部分でクリックすると、選択した元素(及び水素※)に変更されます。

※原子によって必要な水素の数が計算され自動的に表示されます(例えば窒素(N)では水素は3個)。

・表示を取り消す(前の状態に戻す)ときは、🔄 ボタンを押すか、キーボードから Ctrl + Z を入力する。

【注意】
使用する元素はこの中から選択してください。
※金属一般を表す「M」やハロゲン「X」、アルキル基(「Me」、「Et」、「CnH2n+1」)などは使用不可。

ステップ3 元素の変更 (イ) Atomプロパティの設定

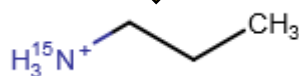
- 原子に関するプロパティ(電荷等)を入力したい場合、Atomプロパティを変更することで電荷、同位体、ラジカル等を設定することができます。

① 変更したい元素を右クリック

② Atomプロパティをクリック

③ (例) 赤字のように入力

(参考) 電荷(charge)は、左側ツールバーの「+」「-」ボタン(※)でも変更できます。



ステップ4 画像処理(整形)

● 構造式の整形は、以下の①～④の手順で行うことができます。

④

① 領域指定

②

③

④

図を揃える

① 領域指定ボタンをクリック

② 図形を囲むようにドラッグ

③ 領域が選択される

④ (構造式整形) ボタンをクリックすると図形が整形される

※(2D)アイコンでも同様に整形されます。

(1) 図形の整形

- ① 領域指定ボタンをクリック
- ② 図形を囲むようにドラッグ
- ③ 領域が選択される
- ④ (構造式整形) ボタンをクリックすると図形が整形される

※(2D)アイコンでも同様に整形されます。

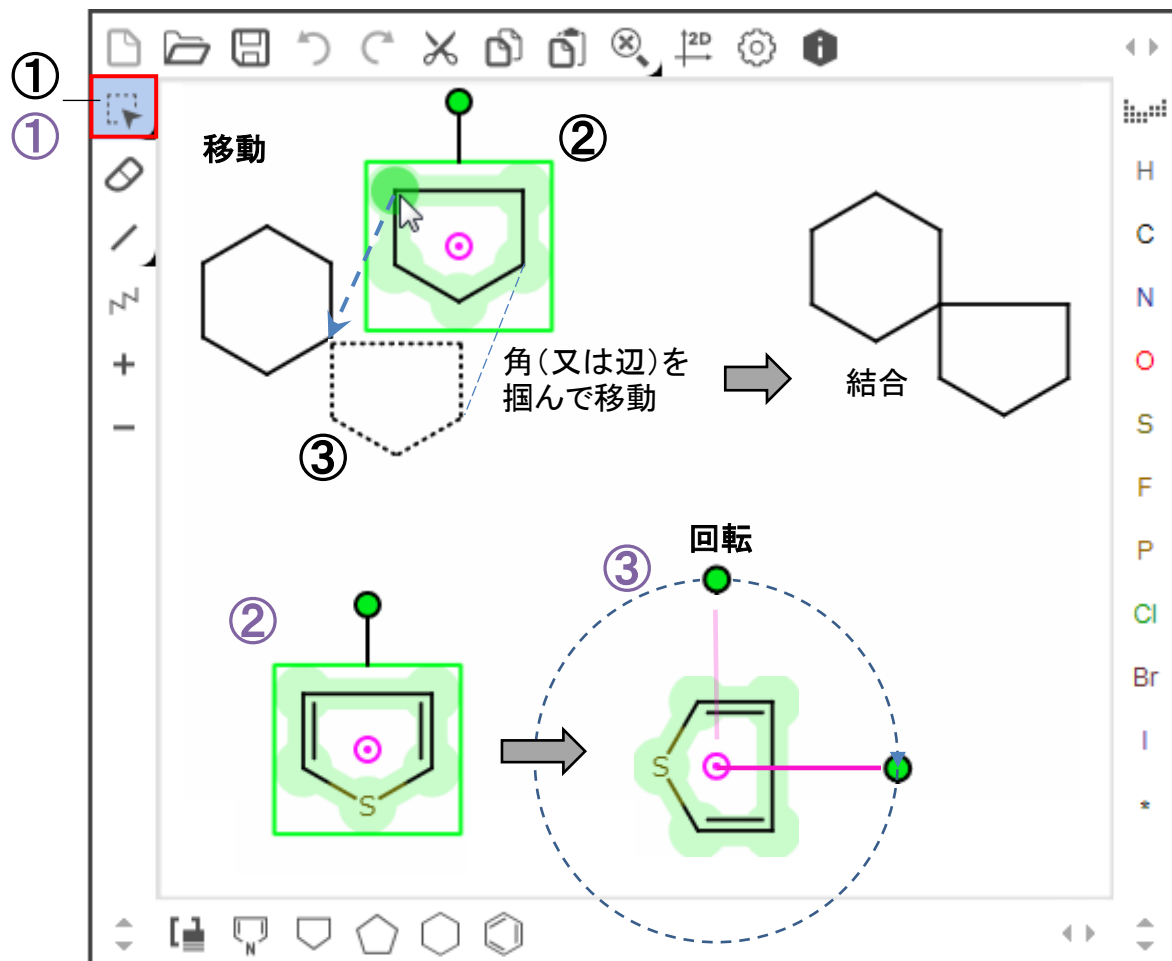
(2) 図形郡の整列

(1)の「図形の整形」機能を複数の図形に適用すると、図形を整列させることができます。

※ 移動と回転は次ページ参照

ステップ4 画像処理(移動・回転)

- 構造式の移動(1)及び回転(2)は以下のとおりです。



(1) 図形の移動

- ① 領域選択アイコンをクリック
- ② 図形を囲むようにドラッグ
- ③ 図形の角(元素)又は辺(結合鎖)をドラッグ&ドロップで移動

(2) 図形の回転

- ① 領域選択アイコンをクリック
- ② 図形を囲むようにドラッグ
- ③ 上部の緑色の丸(●)のクリック&ドラッグで図形を回転

ステップ4 画像処理(拡大・縮小、コピー)

- 構造式の拡大・縮小(1)及びコピー(2)は以下のとおりです。

左から「拡大」「縮小」「最大化」「選択部分の拡大」

① 拡大・縮小のオプション→

拡大①

縮小②

コピー (Cnt + C) → 貼付 (Cnt + V)

②

③

(1) 図形の拡大・縮小

☉ ボタンの右下隅の三角形部分をクリックすると、拡大・縮小などを選択することができます。

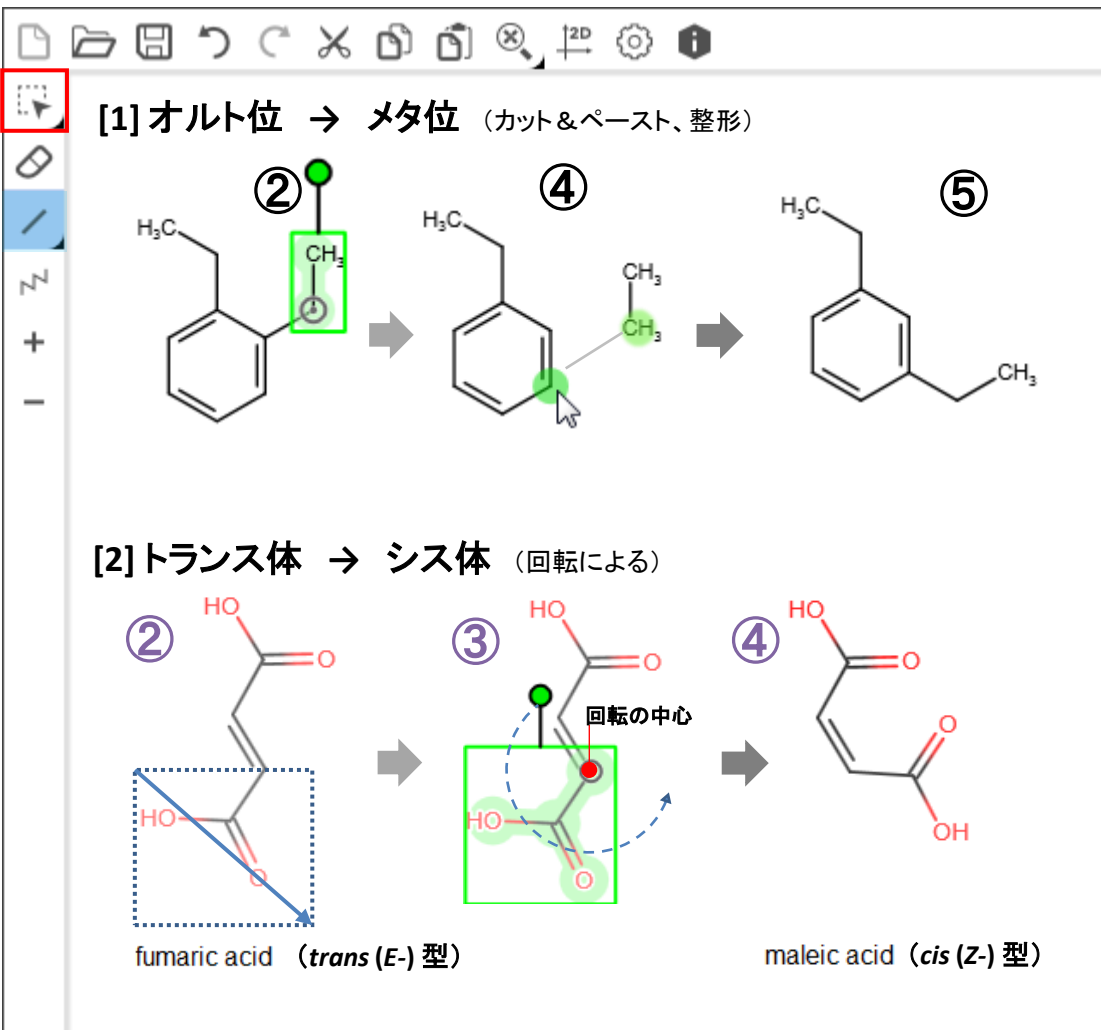
(2) 図形のコピー

- ① 領域選択アイコンをクリック※1
 - ② 図形を囲むようにドラッグし、キーボードで [Cnt] キー + [C] キーを同時押し※2
 - ③ キーボードで [Cnt] キー + [V] キーを同時押しすると、画面中央にコピー
- ※1 削除は①の後に [Delete]キー
※2 [Cnt] キー + [X] キーの同時押しで切り取り


ステップ4 画像処理(異性体の描画; その1)

● 画像処理の手法を使った異性体の描画方法は以下のとおりです。

①
①
③



(1) 官能基の移動

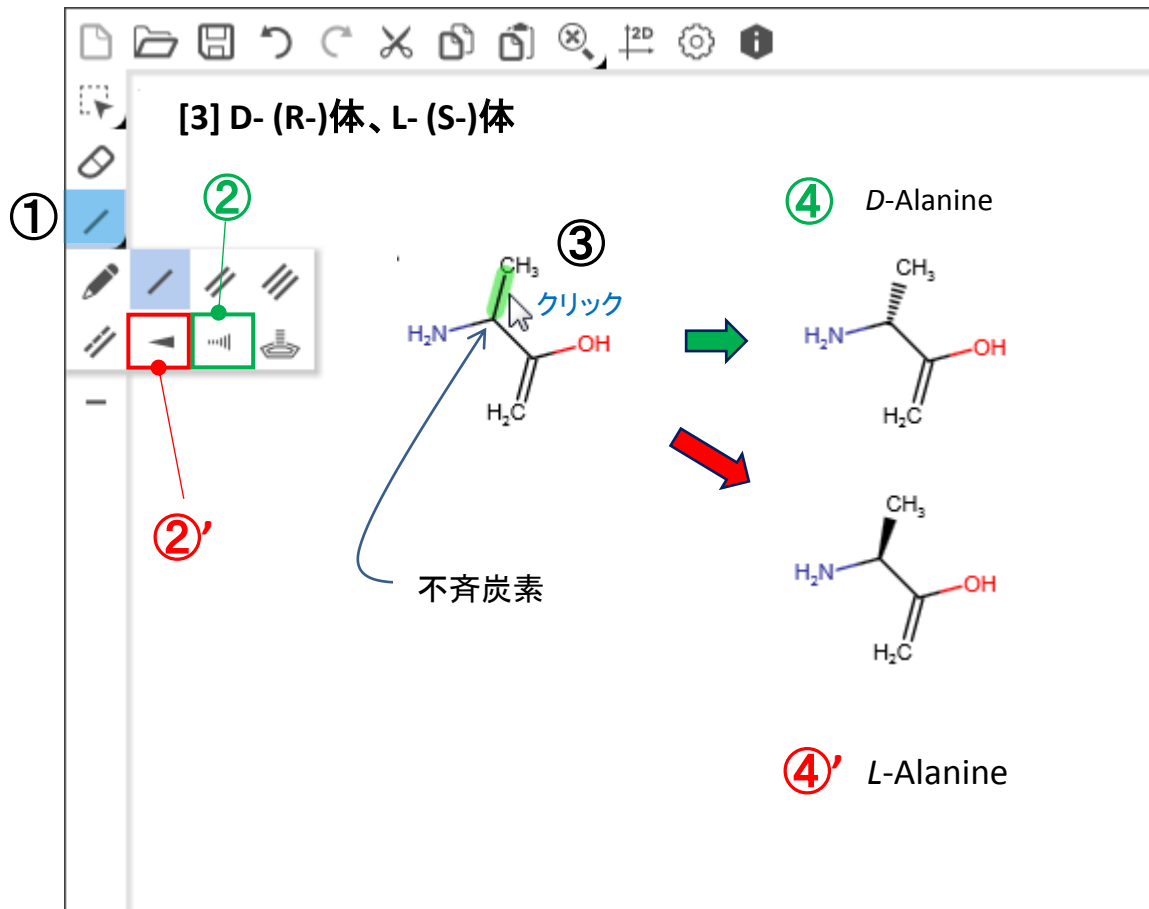
- ① 領域選択ボタンをクリック
- ② エチル基を囲むようにドラッグして、切取りと貼付
- ③ 結合 () ボタンをクリック
- ④ エチル基末端からベンゼン環のメタ位までドラッグして結合線を引く(逆からでもよい)
- ⑤ 整形して完成

(2) *trans*- から *cis*- への変更

- ① 領域選択ボタンをクリック
- ② カルボキシル基を囲むようにドラッグ
- ③ 上部の緑色の丸 (●) のクリック&ドラッグで図形をシス体になるように回転
- ④ 整形して完成

ステップ4 画像処理(異性体の描画; その2)

● 画像処理の手法を使った立体異性体の描画方法は以下のとおりです。



(3) 立体異性体の作成

- ① 領域選択ボタンをクリック
 - ② 楔形結合鎖Down(又はUp ②')を選択
 - ③ 図の結合線をクリック
 - ④ D- (R-)体、(又はL- (S-)体④')のアラニンが表現される
- ※(必要に応じて) 整形して完成

ステップ5 MOLファイル出力

- 構造式ファイル(MOLファイル)の出力方法は以下のとおりです。

The screenshot shows a chemical structure editor window. The main canvas displays a chemical structure consisting of a six-membered ring (cyclohexane) and a five-membered ring (cyclopentane) connected by a sulfur atom (S). The top menu bar includes 'クリア', '構造式整形', and 'MOLファイル出力'. The 'MOLファイル出力' button is highlighted with a red box and a circled '1'. Below the main window, a dialog box is open, asking 'nite.go.jp から 20180910-142308.mol (478 バイト) を開くか、または保存しますか?'. The dialog box has three buttons: 'ファイルを開く(O)', '保存(S)', and 'キャンセル(C)'. A circled '2' is placed next to the dialog box.

- ①MOLファイル出力ボタン
(**MOLファイル出力**)をクリック。
- ②MOLファイルをダウンロード※

※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。

ステップ5 確認(MOLファイルを開く; その1)

- 構造式の確認方法は以下のとおりです(インポート方式)。

The screenshot shows the software interface with a chemical structure of a bicyclic sulfide. The 'Import' window is open, and the '参照...' button is highlighted with a red circle and the number 2. The 'Import' button in the bottom right is highlighted with a yellow box and labeled 'Import ウィンドウ'.

構造式の確認

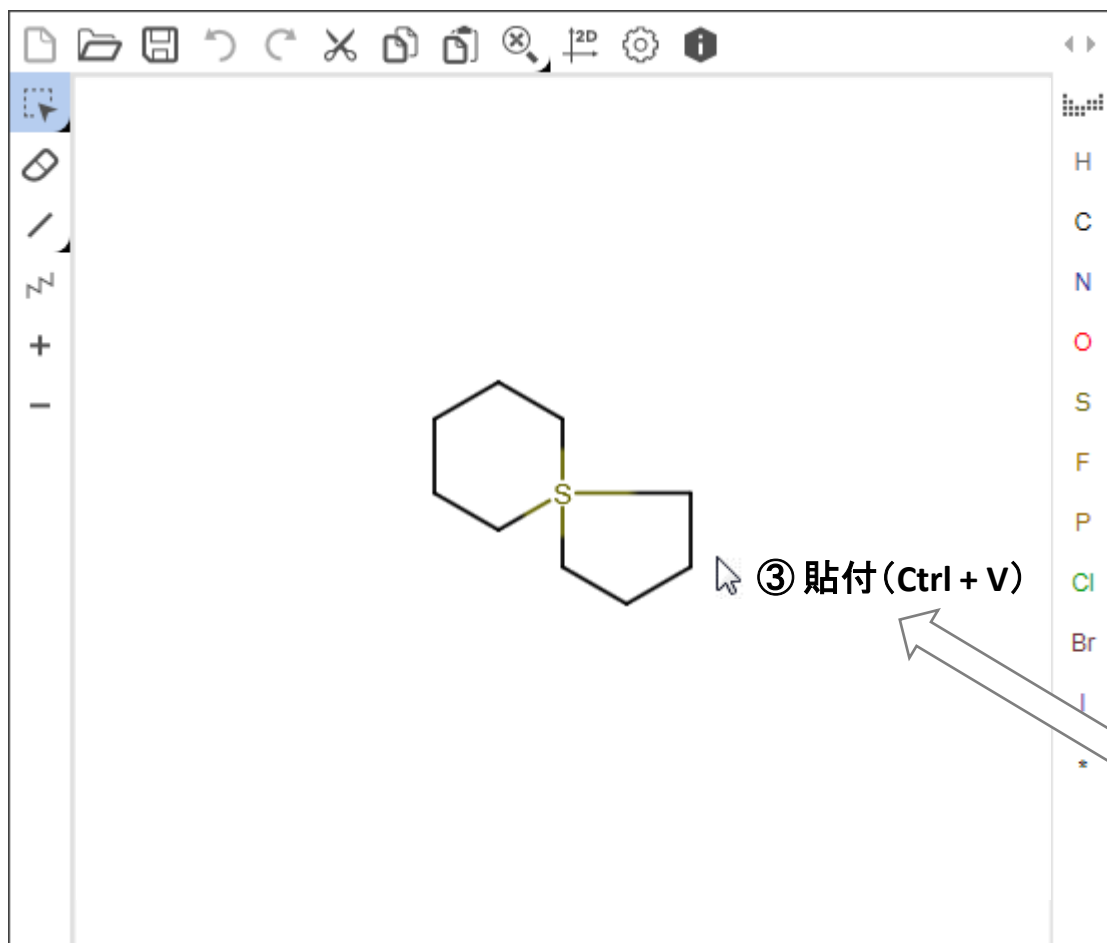
- ①インポート(📁)ボタンをクリック
→ Import ウィンドウが表示される
- ②「参照...」をクリック
→ ファイル選択画面が表示される
- ③ファイルを指定
→「ファイル名(N):」に指定したファイル名が表示される
- ④「開く(O)」をクリック
- ⑤指定したファイルの構造式が表示

The screenshot shows the file selection dialog with the file 'structure.smiles' selected. The '開く(O)' button is highlighted with a red box and the number 3. The 'ファイル名(N):' field shows 'structure.smiles'.

※ 注 ファイルを開く前にキャンバスに描画していた図(作りかけの構造式等)は、全て上書きされるため注意

ステップ5 確認 (MOLファイルを開く; その2)

- 構造式の確認方法は以下のとおりです (コピー & ペースト方式)。



構造式の確認

- ① MOLファイル (テキスト形式) をメモ帳等で開き、テキスト部分を全て選択 (Ctrl + A)
- ② コピー (Ctrl + C)
- ③ Marvin JS のキャンバスをクリックした後、貼付 (Ctrl + V)
- ④ 貼付した構造式が表示

① 全選択 (Ctrl + A)

```
Mrv1816 1015181 652D
0 0 0 0 0 999 V3000
M V30 BEGIN CTAB
M V30 COUNTS 10 11 0 0
M V30 BEGIN ATOM
M V30 1 C -0.5 3.8317 0.0
M V30 2 C -1.8337 3.4700 0.0
M V30 3 C -1.8337 1.5215 0.0
M V30 4 C -0.5 0.7517 0.0
M V30 5 S 0.8337 1.5215 0.0
M V30 6 C 0.8337 3.0617 0.0
M V30 7 C 2.1673 -0.7883 0.0
M V30 8 C 0.8337 -0.0183 0.0
M V30 9 C 3.501 1.5215 0.0
M V30 10 C 3.501 -0.0183 0.0
M V30 END ATOM
M V30 BEGIN BOND
M V30 1 1 2
M V30 2 1 6
M V30 3 1 2 3
M V30 4 1 3 4
M V30 5 1 7 8
M V30 6 1 7 10
M V30 7 1 9 10
M V30 8 1 4 5
M V30 9 1 5 6
M V30 10 1 8 5
M V30 11 1 5 9
M V30 END BOND
M V30 END CTAB
M END
```

MOL file

② コピー (Ctrl + C)

(参考) 表示設定について

- 表示設定は標準で以下のとおりとなっております。本設定は、特段の理由がない限り変更する必要はありません。

クリック

英語

View settings

- Show chiral flag
- Show valence errors
- Show lone pairs
- Index atoms
- Show atom maps
- Use CPK colors
- Show carbon labels

Implicit H: Hetero and Terminal

Display: wireframe

OK

日本語訳

表示設定 (標準の設定)

- 絶対立体配置設定の表示
- 異常な原子価の原子を明示
- 不対電子対を表示
- 原子のインデックス番号を表示
- 対応付けされた原子を表示
- Corey-Pauling-Koltun (CPK)配色を使う
- 炭素原子を表示

水素原子(H)の表示:

ヘテロ原子 及び 末端

表示:

ワイヤーフレーム

ワイヤーフレームモデル
棒球モデル
棒モデル
空間充填モデル

反応式に関する設定のため、表示上は使用しません。

※ 本設定は、特段の理由がない限り変更する必要はありません。

非表示
ヘテロ原子のみ表示
ヘテロ原子及び末端で表示
すべて表示