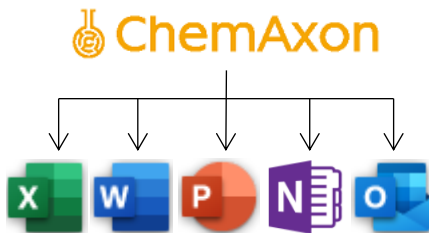


Microsoft Office 上に化学情報を組み込むアドイン？

パワフルで軽快な化学アドイン

ロングセラー化学アドイン JChem for Excel が、Excel のほかに Word、PowerPoint、OneNote、Outlook メールにも対応する JChem for Office としてリニューアルしました。これまでの EXCEL 化学アドインは、重く、安定性も不十分でしたが、JChem for Office を用いるとより軽快に大容量の化学データを便利に扱えます。Microsoft Office 2010、2013、2016 に対応しています。



機能

- 構造式の追加・編集・コピー＆ペースト
- SD ファイルなどの化学構造ファイル読み込みや書出し
 - sdf, rdf, IUPAC name, smiles, mrv 形式のファイルを読み込みます
- テキスト情報から構造式への変換 (Name to Structure

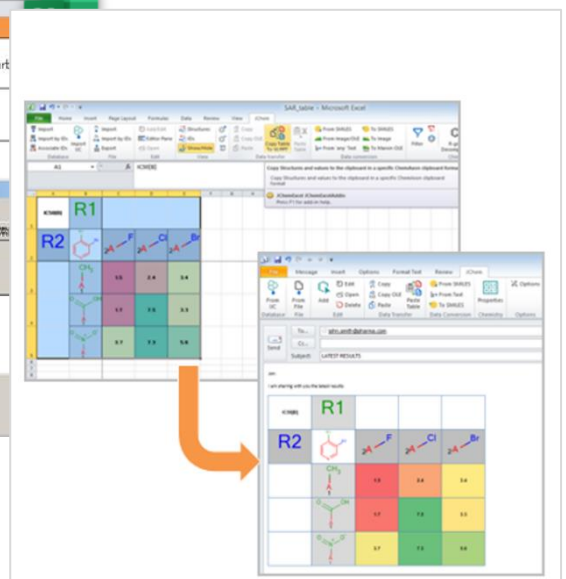
オプション)

- SMILES, InChi, SMARTS, IUPAC Name, CAS number を構造式に変換できます
- 中国語・日本語の化学名を構造式に変換するオプションもございます
- 構造式のセルを参照したプロパティ計算 (Calculator Plugins オプション)
- 構造検索、R グループ分解 (EXCEL)
- EXCEL に元々あるグラフ挿入やヒートマップ作成機能などでデータをビジュアル化
- MS-Office ソフト間でライブ構造を含む表組みをきれいにコピー＆ペーストできます
- 他製品との連携
 - Instant JChem で選択したプロジェクトデータの読み込み
 - Document to structure との連携で、特許文書等からの化学情報抽出にもご利用いただけます
 - Oracle や MySQL データベースからデータセットをインポートできます
 - バッチモードで JChem for EXCEL ワークブックをハンドリングするための KNIME ノードや PP コンポーネントもご用意しております

| Item | Structure | MW | IUPAC Name |
|---------------------------------------|-----------|--------|--|
| Cocain | | 303.15 | methyl (1R,2R,3S,5S)-3-(benzoyloxy)-8-methyl-8-azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylate |
| MDMA | | 193.11 | [1-(2H-1,3-benzodioxol-5-yl)propan-2-yl]methylamine |
| 91-59-8 | | 143.07 | naphthalen-2-amine |
| 4474-03-7 | | 254.14 | 3-ethyl |
| 2-(2,4,5-trichlorophenoxy)acetic acid | | 253.93 | 2-(2,4,5-trichlorophenoxy)acetic acid |
| ヒノキチオール | | 164.08 | 2-hydroxy-1-(2,4,6-trichlorophenyl)ethan-1-one |

JChem for EXCEL 関数を用いたデータ操作

例: テキスト→構造式に変換→分子量・pKa・LogP などの計算→IUPAC 名生成



MS-Office ソフト間のコピー＆ペースト

■動作環境

▶ ソフトウェア要件

| 項目 | 内容 |
|--------|---|
| OS | Windows8.1 (32bit/64bit) Windows10 (32bit/64bit) |
| Office | Microsoft Office 2013 Microsoft Office 2016 Microsoft Office 2019 Microsoft Office 365 Desktop |

※ご検討時にお問い合わせください。

Patcore, Inc.

〒100-0005 東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー26F

富士通株式会社

ソーシャルデザイン事業本部 デジタルラボ事業部
〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町 1 番地 5 JR 川崎タワー24 階

URL: <https://www.fujitsu.com/jp/patcore/>

Copyright © Patcore, Inc., All rights reserved.は Patcore, Inc.の登録商標です。
その他の会社名、商品名、製品名は、一般に各社の登録商標または商標です。
本ドキュメントの記載内容、製品およびサービスの仕様は予告なく変更されることがあります。

