

Название фрагмента	SMART
фенол	<chem>[cR1]1[cR1][cR1][cR1][cR1][cR1]1O[H]</chem>
фенокси	<chem>[cR1]1[cR1][cR1][cR1][cR1][cR1]1[OH0;!R]</chem>
COOH	<chem>C(=O)O[H]</chem>
COOH, связанная с ароматической группой	<chem>[\$(C(a)(=O)O[H])](=O)O[H]</chem>
COOH, связанная с алифатической группой	<chem>[\$(C(C)(=O)O[H])](=O)O[H]</chem>
CH ₃ O, связанная с алифатической группой	<chem>[\$([OX2]([CH3])[CX4])]C([H])([H])[H]</chem>
CH ₃ O, связанная с ароматической группой	<chem>[\$([OX2]([CH3])a)C([H])([H])[H]</chem>
NH ₂	<chem>[\$([NH2X3][CX4,a])]([H])[H]</chem>
нитрил	<chem>[CX4]#[NX3]</chem>
NO ₂	<chem>[\$([#7X3](~[#8X1])([!#8])(~[#8X1]))](~[#8X1])(~[#8X1])</chem>
нитрозамин	<chem>[\$([#7X2](-N)=O)]=O</chem>
эпоксид	<chem>[#8R1]1~[#6R1]~[#6R1]1</chem>
азиридин	<chem>[#7R1]1~[#6R1]~[#6R1]1</chem>
фуран	<chem>[oX2R1]1[cX3R1][cX3R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
пиррол	<chem>[nX3R1]1[cX3R1][cX3R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
тиофен	<chem>[sX2R1]1[cX3R1][cX3R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
диазол 1, 3	<chem>[nX3R1]1[cX3R1][nX2R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
тиазол 1,3	<chem>[sX2R1]1[cX3R1][nX2R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
триазол 1, 2, 4	<chem>[nR1]1[cX3R1][nR1][cX3R1][nR1]1</chem>
тетразол	<chem>[nR1]1[cX3R1][nR1][nR1][nR1]1</chem>
оксазол 1,3	<chem>[oX2R1]1[cX3R1][nX2R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
пиридин	<chem>[nX2R1]1[cX3R1][cX3R1][cX3R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
пиримидин	<chem>[nX2R1]1[cX3R1][nX2R1][cX3R1][cX3R1][cX3R1]1</chem>
морфолин	<chem>[NR1X3]1[CX4R1][CX4R1][OX2R1][CX4R1][CX4R1]1</chem>
пиперазин	<chem>[NR1X3]1[CX4R1][CX4R1][NX3R1][CX4R1][CX4R1]1</chem>
пиперидин	<chem>[NR1X3]1[CX4R1][CX4R1][CX4R1][CX4R1][CX4R1]1</chem>
F, связанный с алифатической группой	<chem>[\$(F[CX4])]</chem>
F, связанный с ароматической группой	<chem>[\$(Fa)]</chem>
Cl, связанный с алифатической группой	<chem>[\$(Cl[CX4])]</chem>
Cl, связанный с ароматической группой	<chem>[\$(Cla)]</chem>
Br, связанный с	<chem>[\$(Br[CX4])]</chem>

алифатической группой	
Br , связанный с ароматической группой	<chem>\$(Bra)</chem>
I, связанный с алифатической группой	<chem>\$(I[CX4])</chem>
I, связанный с ароматической группой	<chem>\$(Ia)</chem>
Hal, связанный с алифатической группой	<chem>\$([F,Cl,Br,I][CX4])</chem>
Hal, связанный с ароматической группой	<chem>\$([F,Cl,Br,I]a)</chem>
SO ₂ NH	<chem>\$([SX4]([C,a])(=[OX1])(=[OX1])[NH][#6])(=[OX1])(=[OX1])[NH][H]</chem>
ОН, связанная с ароматической группой	<chem>\$([OH1]a)[H]</chem>
Гексахлорнонборнен	<chem>[CH1]1[CH1]C2(Cl)C(Cl)=C(Cl)C1(Cl)C2(Cl)Cl</chem>
циано-(3-фенокси фенил)метокси	<chem>[H]c1c([H])c([H])c(Oc2c([H])c([H])c([H])c(c2[H])C([H])(O)C#N)c([H])c1[H]</chem>
Бис (4-хлорфенил) метил	<chem>[H]c1c([H])c(c([H])c([H])c1Cl)C([H])c1c([H])c([H])c(Cl)c([H])c1[H]</chem>
2-(2,4-дихлор фенокси)ацетил	<chem>[cH]1[cH]c(O[CH2][CX3]=O)c(Cl)[cH]c1Cl</chem>
Динитро фенокси	<chem>c1cc(O)c([#7X3])(~[#8X1])(~[#8X1]))cc1([#7X3])(~[#8X1])(~[#8X1])</chem>
2-трифтор метил бензимидазол	<chem>[H]n1c(nc2ccccc12)C(F)(F)F</chem>
2-фторацетил	<chem>F[CH2][CX3]=O</chem>
фосфорил	<chem>[PX4H0](=O)([OH0])([OH0])[OH0]</chem>
фосфоротионат	<chem>\$([OH0]P(=S)([OH0])[OH0])P(=S)([OH0])[OH0]</chem>
Фосфоро дитионат	<chem>\$([SX2H0]P(=S)([OH0])[OH0])P(=S)([OH0])[OH0]</chem>
дибензо-1,4-диоксины	<chem>[F,Cl,Br,I,#1]-c1c(-[F,Cl,Br,I,#1])c(-[F,Cl,Br,I,#1])c2[#8]c3c(-[F,Cl,Br,I,#1])c(-[F,Cl,Br,I,#1])c(-[F,Cl,Br,I,#1])c(-[F,Cl,Br,I,#1])c3[#8]c2c1-[F,Cl,Br,I,#1]</chem>
4-гидроксикумарин	<chem>[OH1]C1=CC(=O)Oc2[cH][cH][cH][cH]c12</chem>
1,3-Индан-1,3-дион	<chem>C1C(=O)c2ccccc2C1=O</chem>
Тиомочевина	<chem>[NX3;!R][CX3;!R](=[SX1])[NX3;!R]</chem>
1-карбоксимидоил пиперазин	<chem>[NR1X3]1[CX4R1][CX4R1][NX3R1]([CX3]=[NX2])[CX4R1][CX4R1]1</chem>

Фенил пиперазин	<chem>[NR1X3]1[CH4R1][CH4R1][NX3R1](c2ccccc2)[CH4R1][CH4R1]1</chem>
карбамат	<chem>[\$(N(!H))C(=O)[OH0])]C(=O)[OH0]</chem>
О- (метила минокарбонил) оксим	<chem>[CH4]NC(=O)ON=C</chem>
4-фенил пиперидин	<chem>[NR1X3]1[CH4R1][CH4R1][CH4R1](c2ccccc2)[CH4R1][CH4R1]1</chem>
4-фенил аминопипериди н	<chem>[NR1X3]1[CH4R1][CH4R1][CH4R1]([NX3]c2ccccc2)[CH4R1][CH4R1]1</chem>
О, О-диэтил фосфоро дитионат	<chem>CCOP(=S)(OCC)SC([*:1])</chem>
О-фенил фенил фосфортионат	<chem>S=P(O([*:1]))(Oc1ccc([*:1])cc1)c1ccccc1</chem>
О-фенил фосфортионат	<chem>S=P(O([*:1]))(O([*:1]))Oc1ccc([*:1])cc1</chem>
О,О-диэтил фосфортионат	<chem>CCOP(=S)(O([*:1]))OCC</chem>
О,О-диметил фосфорил	<chem>COP(=O)(O([*:1]))OC</chem>
2,2-диметил-2,3- дигидро-1- бензофуран-7- ил N- (амино сульфанил) -N- метилкарбамат	<chem>CN(SN([*:1])([*:1]))C(=O)Oc1cccc2CC(C)(C)Oc12</chem>
фенил карбамат	<chem>O=C(N([*:1]))Oc1cccc([*:1])1</chem>
метил (пропокси сульфанил) карбамат	<chem>CN(SOCCC([*:1]))C(=O)O([*:1])</chem>
Диметил карбамат	<chem>CN(C)C(=O)O([*:1])</chem>
2,4-дихлор- бензол-1,3- дикарбонитрил	<chem>N#Cc1c([*:1])c([*:1])c(Cl)c(C#N)c1Cl</chem>
циклопентан	<chem>[#6]-1-[#6]-[#6]-[#6]-[#6]-1</chem>
1-бензофуран	<chem>c1cc2ccccc2o1</chem>
фенотиазин	<chem>*-[#7]-1-c2ccccc2-[#16]-c2ccccc-12</chem>
1Н-индол	<chem>c1cc2ccccc2n1</chem>
4,5-дигидро-3Н- 2,3- бензодиазепин	<chem>[#6]-1-[#6]-c2ccccc2-[#6]=[#7]-[#7]-1</chem>
пиридазин	<chem>c1ccnnc1</chem>
Антрациклины	<chem>[H][C@@]1([*:1])C[C@@](O)(Cc2c1c(O)c1c(C(=O)c3cccc(O([*:1]))c3C1=O)c2O)C([*:1])=O</chem>

Аконитин	<chem>[*]1C2([C@H]3[C@@H]([C@@H]([C@H]([C@H]3C(=O)N)C(=O)N)C(=O)N)C(=O)N)C(=O)N</chem>
2,4,6(1H,3H,5H)- пиримидинтрион	<chem>*C1(=O)NC(=O)NC1=O</chem>