PrLook_R.exe: инструкция пользователю

1. Запуск программы и работа с деревом реакций

После запуска программы открывается главное окно (рис.1).

🍞 Программа поиска химических реакций Базы СД ВИНИТИ	PAH S
Опрограмме Обазе Инструкция	
Читать базу	
	Число реактантов 💌 Число продуктов 💌 Число стадий 💌
	Реактанты Продукты
1	
	Предметные характеристики
	Поиск Reset

Рис.1.

Пункты меню главного окна «О программе» и «О Базе» позволяют получить информацию о текущей версии программы и о базе данных (рис. 2).

Пользовательская б в том числе: одностадийных - двухстадийных - трехстадийных - четырехстадийных	аза содержит данные о 7323 структур и 418 2941 974 195 - 73	3 химических реакций,

Рис.2.

Для просмотра базы данных следует нажать на кнопку «Читать базу».

В левой части окна отобразится дерево химических реакций, сгруппированных по количествам реактантов и продуктов (рис.3):

+	1	1	
÷ +…	1	2	
÷	2	1	
: +	2	2	
÷ +…	2	3	
÷ +…	3	1	
: +	3	2	

Рис. 3.

Первое число - количество реактантов, второе - количество продуктов.

Узлы дерева могут раскрываться и сворачиваться одинарным кликом на значках «+» и «-», соответственно (рис.4):





Узлам второго уровня приписаны формульные уравнения реакций.

Двойным щелчком по узлу второго уровня открывается окно с данными о реакции (рис. 5):

🐉 Сведения о реакции	23
Исходный файл: 9221B01X.rdf Номер реакции в файле: 15	
Уравнение реакции: C4H2Br2S1 + C21H21In1O3S3 = C11H9Br1O1S1 + C18H16O2S3	
$ \begin{array}{c} & & & & \\ & & & \\ Br \\ & & \\ S \end{array} \xrightarrow{Br} \\ & & \\ S \end{array} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S} \xrightarrow{S}$	
Продукты	
16% 3-Бром-4-(4-метоксифенилтио)тиофен	
77/03, т-Бис((т-метоксифения)1ио)тиофен	
Предметные характеристики	 _
EDS Реакции в одном сосуде ("one pot reaction) ZFA Проведение реакции в азоте	
Число стадий:2 Дополнительно по стадиям Библиография	

Рис.5.

Увеличенное изображение структуры продукта реакции можно увидеть, если щелкнуть на соответствующей строке поля «Продукты», например (рис. 6):





Дополнительную информацию о данной реакции можно получить, кликнув на строке <u>Дополнительно по стадиям</u>. Откроется окно (рис.7):

Темпер Стадия 1 rt	атура Время 10min			
Реактанты	Pa	створитепи	Катализаторы	Прочие участники
1H-Indole-2,3-dione; Isatin	Acetic ac	sid; AcOH S	ulfuric acid; H2SO4	Hydrogen peroxide; H2O2
Стадия 2 Темпер	ратура Время <mark> 1h</mark>			
Реактанты				
Methylamine; MeNH2 Trimethyl phosphite; (MeO)3F Dimethyl acetylenedicarboxy 1-(6-Гидрокси-2-(1-метилэтен	аte; DMAD ил)-1-бензоф			



Здесь для каждой стадии приводятся данные о параметрах реакции (температура, время, давление) и поля для отображения ее участников (реактантов, растворителей, катализаторов, прочих участников реакции).

В данном примере на первой стадии все поля содержат по одному элементу.

На второй стадии поле реактантов содержит 4 элемента. Структуру участника реакции и его полное название можно увидеть, если выбрать соответствующий элемент поля, например, если выбрать второй элемент, то появится окно (рис.8):



Рис.8.

В окне «Сведения о реакции» (рис. 5) справа внизу имеется строка <u>Библиография.</u> Одинарный щелчок на этой строке открывает окно с библиографическими сведениями (рис. 9).



Рис. 9.

Кнопка Киредназначена для перехода в Электронный каталог ВИНИТИ РАН с запросом по SID2 в целях получения подробной библиографической информации по данной публикации. На рис. 10 показан результат поиска в Электронном каталоге.

v.viniti.ru	Deshacemmerun and and a standard
Э	лектронный каталог научно-технической литературы
Главная П	оиск Настройки Запросы Помощь Контакты
Статья где СИД.	2 Точно соответствует 'J17585403131' - 1 объектов Уточнить запрос
Сортировать по	ывтор → д↓, Год → X↓, Название → д↓
Статьи	Обновить
Понск : 1 объектов	
!сточник: - <u>Выпус</u> !втор: - <u>Персо</u>	<u>к сериального издания (1)</u> залия (5)
Название	МНОГОКОМПОНЕНТНЫЕ СИНТЕЗЫ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА, СЕЛЕНАЗОЛА, ПИРАНА И ПИРИДИНА, ИНИЦИИРУЕМЫЕ РЕАКЦИЕЙ КНЕВЕНАГЕЛЯ
Автор	Дяченко И. В.
Автор	Дяченко В. Д
Автор	Дороватовский П. В.
Автор	Xpycraneb B. H.
Автор	Ненайденко В. Г.
Источник	Журнал органической химии
Страницы/Объём	
Сокращ. назв.	266-278
источника	266-278 Ж. орган. химии

Рис. 10.

2.Формирование запросов и поиск

В правой части главного окна находятся управляющие элементы для создания запросов (рис. 11).

Выпадающий список «Число стадий » предназначен для поиска по числу стадий реакций. В данной версии программы этот запрос выполняется, если все остальные параметры поиска не заданы.

Выпадающие списки «Число реактантов » и «Число продуктов» позволяют задать число реактантов и/или число продуктов в результатах поиска. После из задания появляются редактируемые поля для записи молекулярных формул (фрагментов формул) и названий (фрагментов названий) реактантов и продуктов. Заполнение этих полей не является обязательным.

Число реактантов 2 - Числ	ю продуктов 3 💌 Число стадий 📃
Реактанты	Продукты
Формулы (фрагменты формул) 1 СЗНЗN 2 СЗ5	Формулы (фрагменты формул) 1 2 3
Названия (фрагменты названий) 1 2	Названия (фрагменты названий) 1 (2Z)-2-((Зальфа,4альфа,5альфа,8альфа, 2 3

Рис. 11.

Если точное число реактантов и/или продуктов искомой реакции не известны или не интересуют пользователя, а важно найти реакции по заданным формулам или названиям, то нужно сделать двойной щелчок на элементах «Число реактантов » и «Число продуктов». Тогда ниже появятся поля для записи формул и названий реактантов и продуктов в максимальных количествах для данной пользовательской базы, но не более 5.

Кроме того, возможен поиск по Предметным характеристикам (ПХ). ПХ отражают аспекты изучения реакций, особенности проведения реакций, дополнительный данные об участниках реакций Для того чтобы задать поиск по предметным характеристикам реакций, необходимо нажать на строчку <u>Предметные характеристики.</u> Откроется окно «Выбор предметных характеристик» (первоначально пустое). Если нажать на первый символ кода ПХ в нижней части окна (например, на Z), то будет показан список предметных характеристик, в котором нужно будет отметить галочками те, которые интересуют пользователя (рис. 12).

ZAAA Агрегатное состояние реан	танта	
ZAAB Информация об изомернов	и составе реактанта	
ZAAC Неграфическая структурна	я информация о реактанте	
ZAAD Характерные особенности	реактанта	
ZAAE Специальная подготовка р	еактанта к реакции	
ZAAF Оптимизация по реактант		
ZAAX Дополнительная информа	ция о реактанте	
ZAB Дополнительная информаци	ия о продукте	
ZABB Информация об изомернов	и составе продукта	
ZABC Неграфическая структурна	я информация о продукте	
ZABD Характерные особенности	продукта	
ZABX Дополнительная информа	ция о продукте	
ZAC Дополнительная информаци	ия о прочем участнике реакции	
ZACВ Реакция в присутствии раз	вных прочих участников реакции	
ZAX Дополнительная информац	ия об участниках реакции	
ZCA Высокотемпературный син	Te3	
ZCD Реакция при различных тем	пературах	
ZCX Температурные условия пр	оведения реакции	
ZDF Реакция в расплаве		
ZDGB Реакция в разных раствори	ителях	
ZDGC Реакция в отсутствие раст	ворителя	
ZDH Реакция в суспензии		
ZDJ Реакция в эмульсии		
ZDKB Реакция на неорганическо	м носителе	
ZDM Реакция в присутствии мо.	пекулярных сит	
ZEA Реакция при определенном	значении pH среды	
ZFA Проведение реакции в азоте		
ZFB Проведение реакции в водо	роде	
ZFC Проведение реакции в возду	/xe	
ZFE Проведение реакции в инер-	гном газе	
ZFEC Проведение реакции в атм	осфере аргона (Ar)	
ZFG Проведение реакции в углек	ислом газе	
ZFX Атмосфера, в которой прово	одится реакция	
ZGA Реакция в вакууме		

Рис. 12.

После этого нужно нажать кнопку «ОК» - окно закроется, а в главном окне появится список выбранных предметных характеристик для поиска (рис.13).

Предметные характеристики
ZAAE Специальная подготовка реактанта к реакции
ZAAF Оптимизация по реактанту
ZFA Проведение реакции в азоте

Результат поиска будет содержать реакции, имеющие хотя бы одну из этих характеристик.

Когда все запросы сформированы, необходимо нажать кнопку «Поиск». Будет выдано сообщение о количестве найденных реакций, а в левой части главного окна отобразится дерево, узлы которого будут соответствовать данным только о найденных реакциях. Если по данному запросу ничего не найдется, то поле, содержащее дерево, будет пустым. Сведения о найденных реакциях можно получать двойным щелчком по узлам второго уровня, как это было указано выше в п.2.

Например, для запроса по предметным характеристикам (рис 13) один из результатов поиска показан на рис. 14:



Рис. 14.

Поле «Предметные характеристики» найденной реакции содержит ПХ ZAAE Специальная подготовка реактанта к реакции. После знака \$ приводится комментарий на языке оригинала статьи.

Кнопка «Reset» главного окна служит для сброса результатов поиска и повторной загрузки базы реакций.