

## PrLook\_R.exe: инструкция пользователю

### 1. Запуск программы и работа с деревом реакций

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

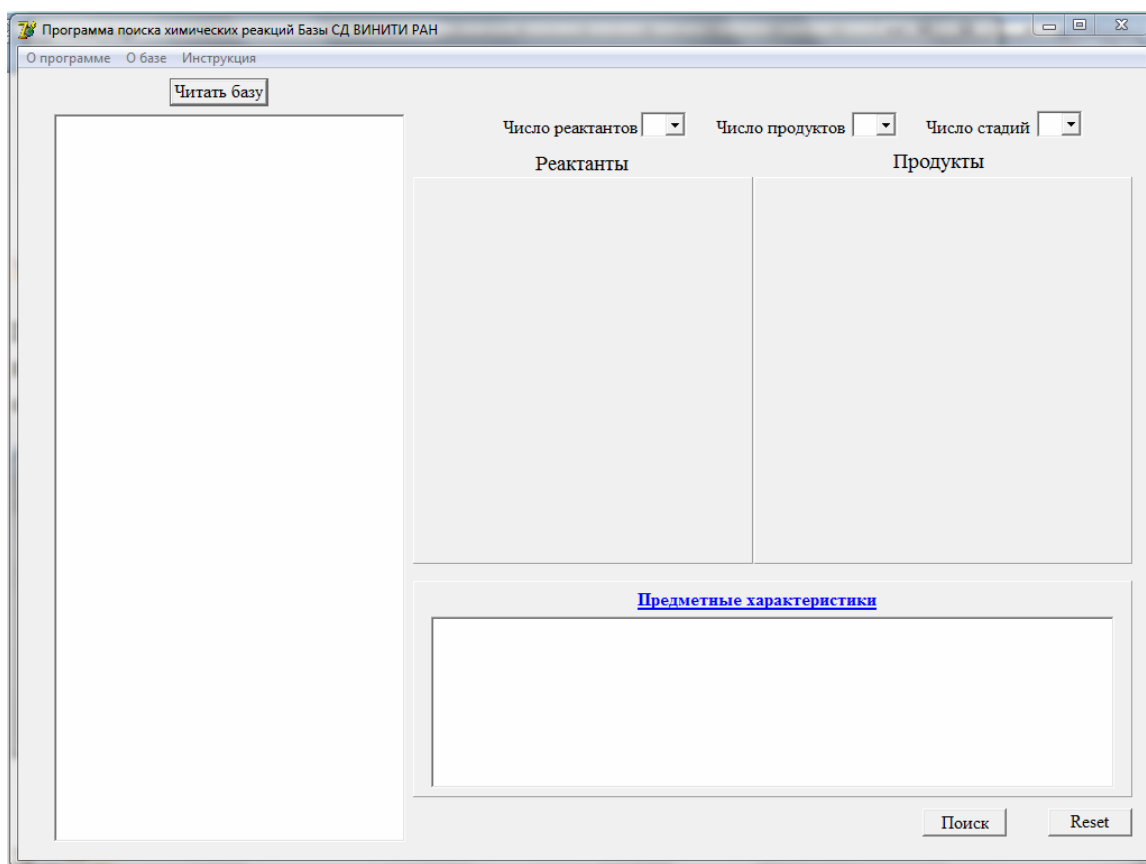


Рис.1.

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

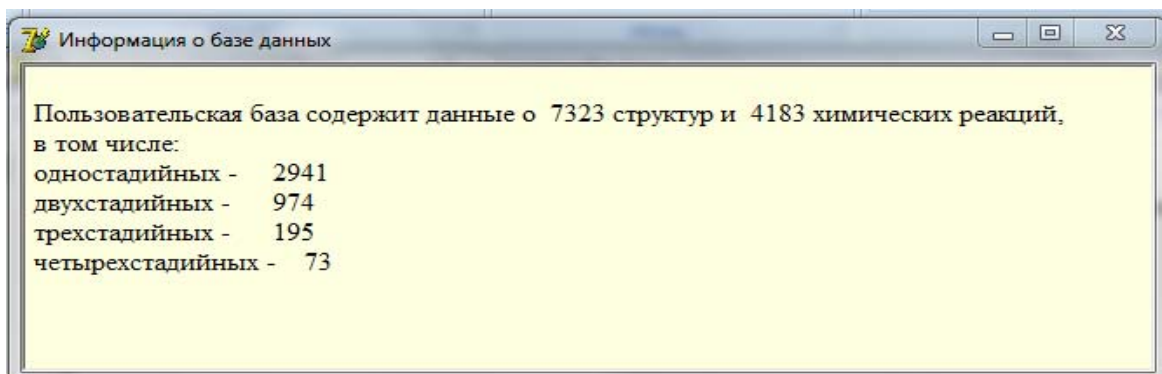


Рис.2.

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

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

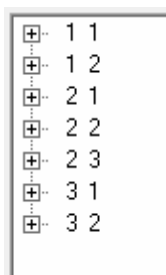


Рис. 3.

Первое число - количество реагентов, второе - количество продуктов.

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

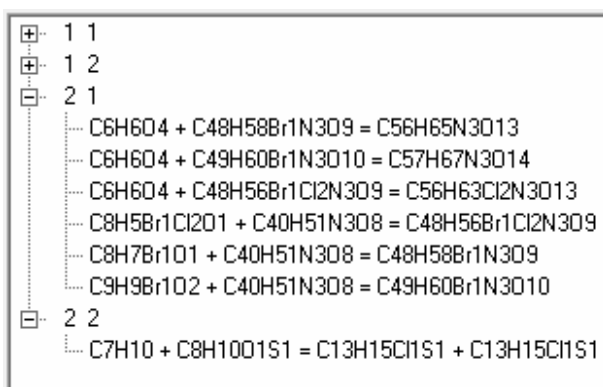


Рис.4.

Узлам второго уровня приписаны формульные уравнения реакций.

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

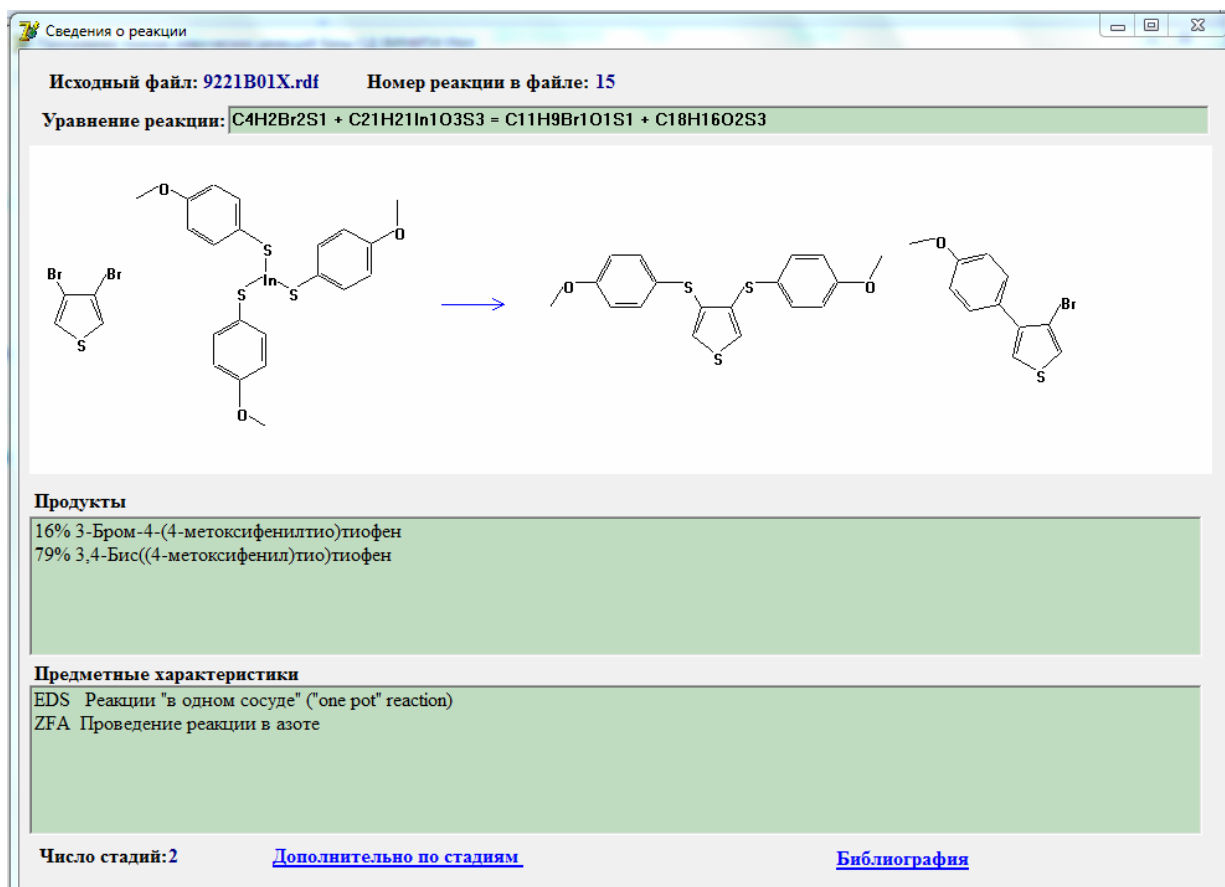


Рис.5.

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

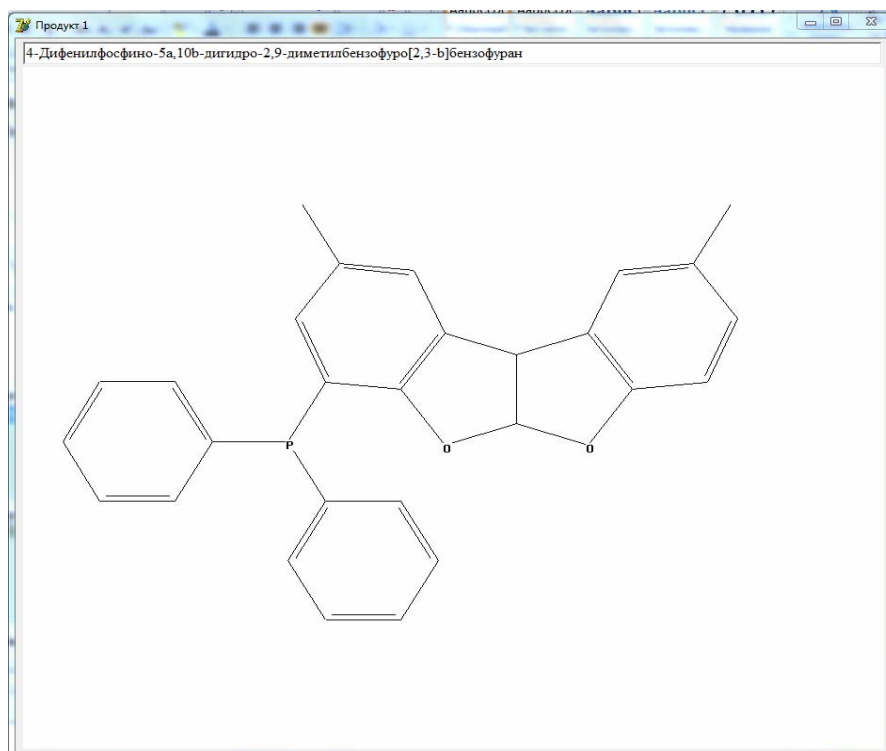


Рис.6.

Дополнительную информацию о данной реакции можно получить, кликнув на строке [Дополнительно по стадиям](#). Откроется окно (рис.7):

Стадия 1	Температура	Время	
	rt	10min	
Реактанты	Растворители	Катализаторы	Прочие участники
1H-Indole-2,3-dione; Isatin	Acetic acid; AcOH	Sulfuric acid; H2SO4	Hydrogen peroxide; H2O2

Стадия 2	Температура	Время
	rt	1h
Реактанты		
Methylamine; MeNH2 Trimethyl phosphite; (MeO)3P Dimethyl acetylenedicarboxylate; DMAD 1-(6-Гидрокси-2-(1-метилэтинил)-1-бензоф		

Рис.7.

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):

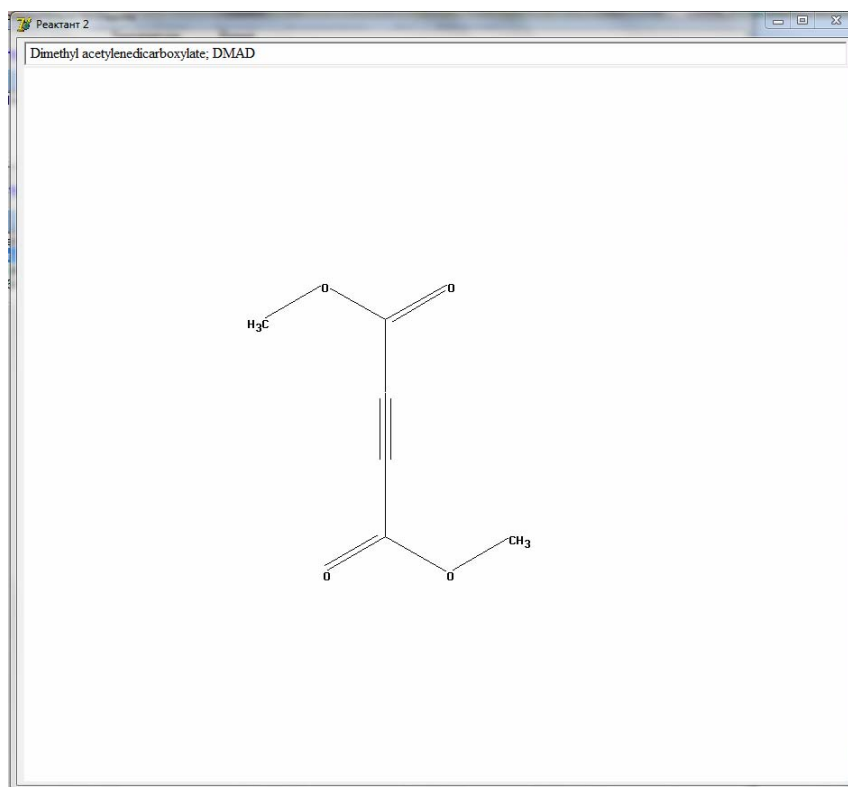


Рис.8.

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

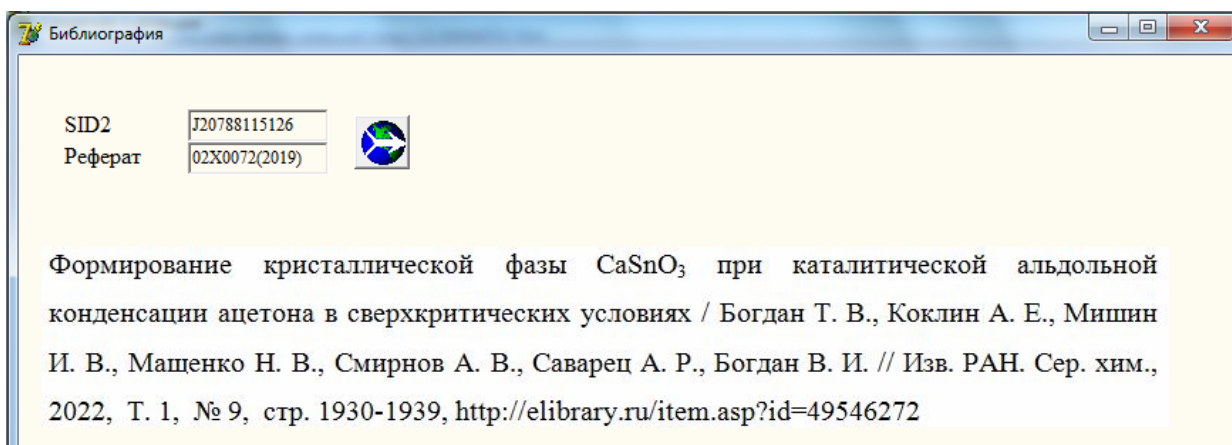



Рис. 9.

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

The screenshot shows the VINITI website interface. The search results for the article 'МНОГОКОМПОНЕНТНЫЕ СИНТЕЗЫ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА, СЕЛЕНАЗОЛА, ПИРАНА И ПИРИДИНА, ИНИЦИИРУЕМЫЕ РЕАКЦИЕЙ КНЕВЕНАГЕЛЯ' are displayed. The search criteria are SID2: J17585403131, resulting in 1 object.

**Статья**

**МНОГОКОМПОНЕНТНЫЕ СИНТЕЗЫ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА, СЕЛЕНАЗОЛА, ПИРАНА И ПИРИДИНА, ИНИЦИИРУЕМЫЕ РЕАКЦИЕЙ КНЕВЕНАГЕЛЯ / Дяченко И. В., Дяченко В. Д., Дороватовский П. В., Хрусталева В. Н., Ненайденко В. Г. // Ж. орган. химии.— 2019 г. 55 № 2.— С. 266-278.— русский; рез.: английский**

Источник: - Выпуск сериального издания (1)  
 Автор: - Персоналии (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	Хрусталева В. Н.
Автор	Ненайденко В. Г.
Источник	Журнал органической химии
Страницы/Объем	266-278
Сокращ. назв. источника	Ж. орган. химии
Год	2019

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		Число продуктов 3		Число стадий	
Реактанты		Продукты			
Формулы (фрагменты формул)		Формулы (фрагменты формул)			
1	C3H3N	1			
2	C35	2			
		3			
Названия (фрагменты названий)		Названия (фрагменты названий)			
1		1	(2Z)-2-((3альфа,4альфа,5альфа,8альфа,		
2		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, дополнительные данные об участниках реакций. Для того чтобы задать поиск по предметным характеристикам реакций, необходимо нажать на строчку [Предметные характеристики](#). 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).

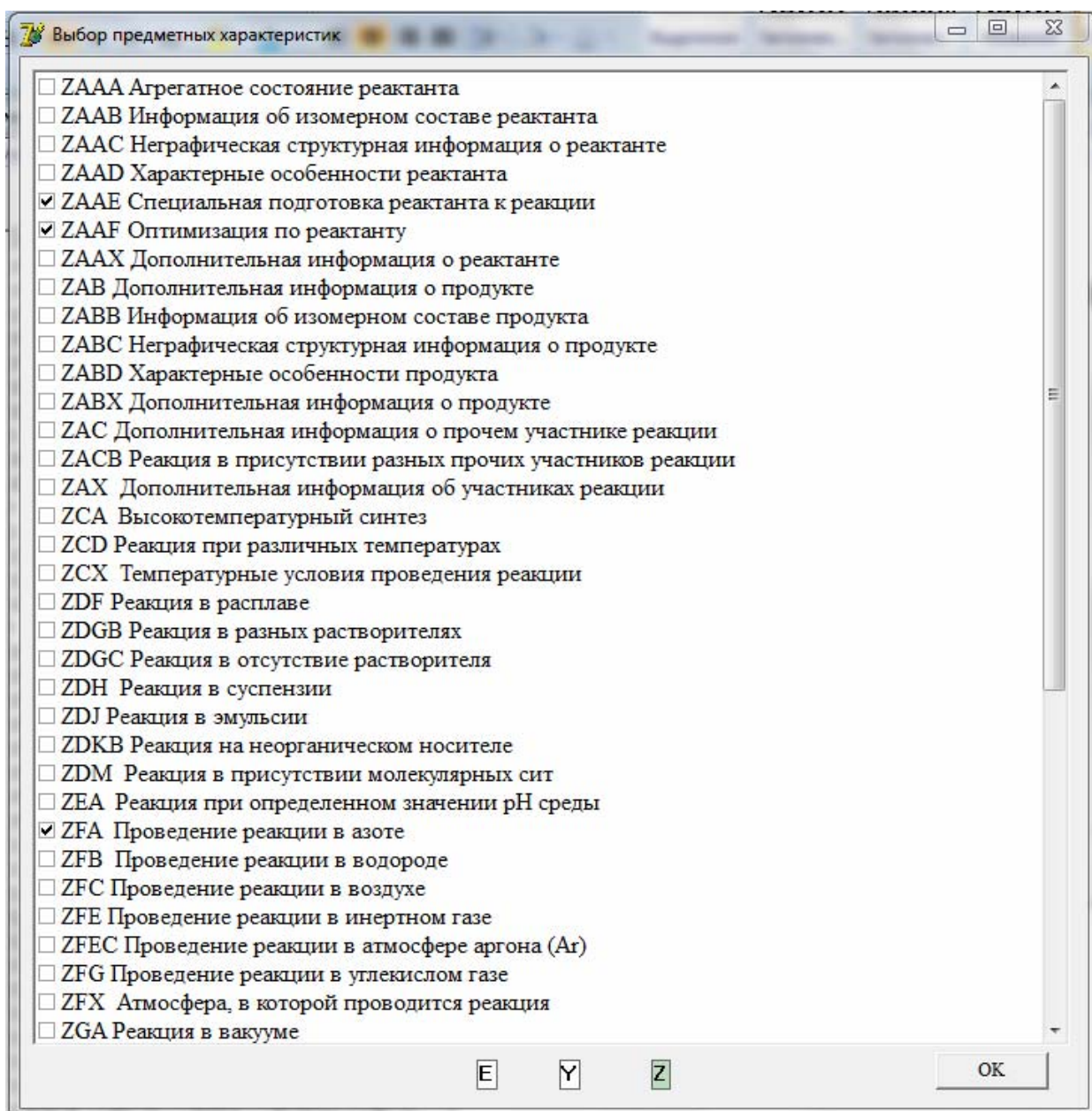


Рис. 12.

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

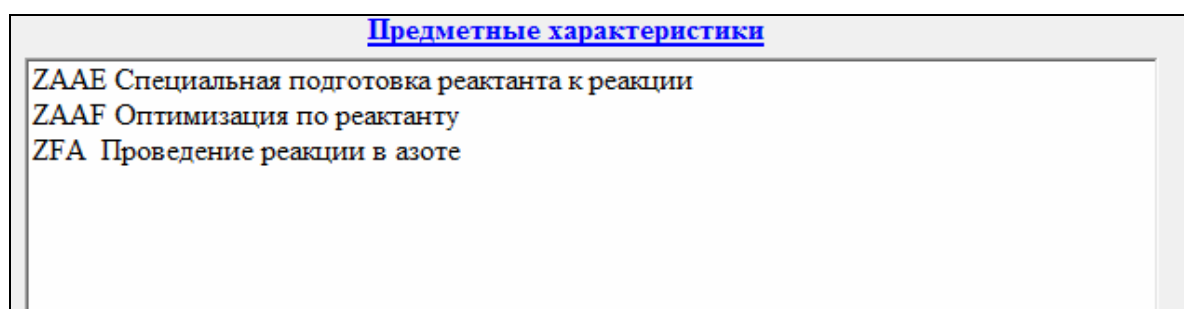


Рис. 13.

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:

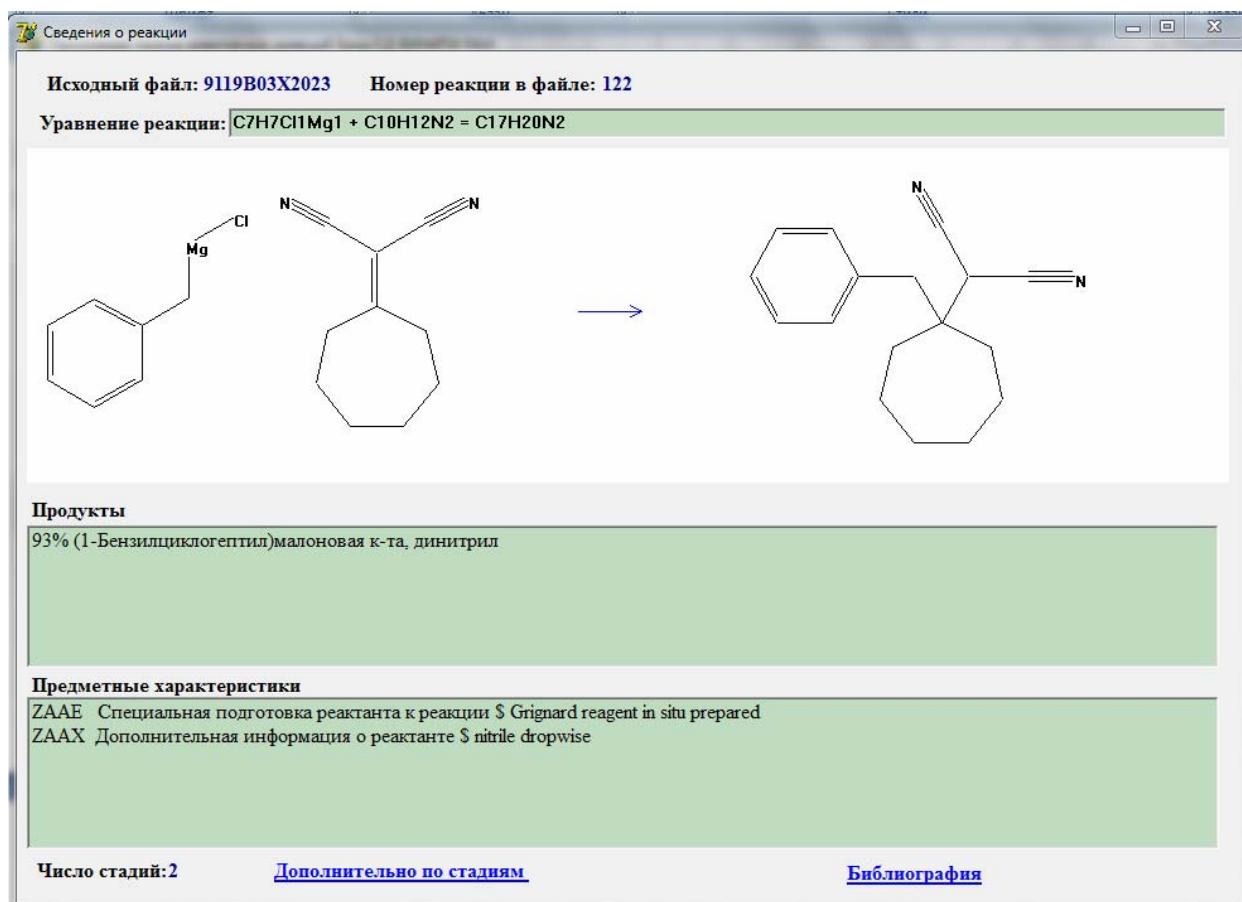


Рис. 14.

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.