

**АВТОНОМНАЯ СИСТЕМА ПОИСКА ДАННЫХ О
ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ.
РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ**

Содержание

1	Введение	3
2	Интерфейс АСП.....	3
3	Описание функций АСП.....	4
3.1	Работа с деревом структур.....	4
3.2	Панель инструментов.....	6
3.3	Поиск по молекулярной формуле.....	6
3.4	Поиск по точной структуре.....	7
3.5	Поиск по фрагменту структуры.....	8
3.6	Поиск по названию.....	8
3.7	Поиск по предметным характеристикам.....	9
3.8	Поиск выбранной структуры в Интернете.....	11
3.9	Просмотр актуальных данных из электронного каталога ВИНТИ РАН.....	13
4	Вспомогательные функции.....	14
4.1	Очистка результатов поиска.....	14
4.2	Последовательный поиск по нескольким параметрам.....	15
4.3	Увеличение масштаба изображения.....	15
5.	Приложение.....	17

1 ВВЕДЕНИЕ

В ВИНТИ РАН с 1975 года формируется База структурных данных по химии (База СД) на основе аналитико-синтетической обработки потока отечественной и зарубежной научной литературы по химии и химической технологии.

База структурных данных по химии ВИНТИ РАН содержит информацию о структурах химических соединений, их свойствах и реакциях, в которых они принимают участие.

Автономная система поиска (АСП) предназначена для обеспечения быстрого и эффективного поиска релевантной информации в массиве структурных данных по химии, формируемом из Базы СД по заданным критериям, и предоставления возможности доступа потребителя к данной информации в режиме off-line.

В данном руководстве приведено описание функций системы и правила, по которым пользователь АСП должен с ней работать.

2 ИНТЕРФЕЙС АСП

После входа в программу появляется главное окно интерфейса АСП (рис.1).

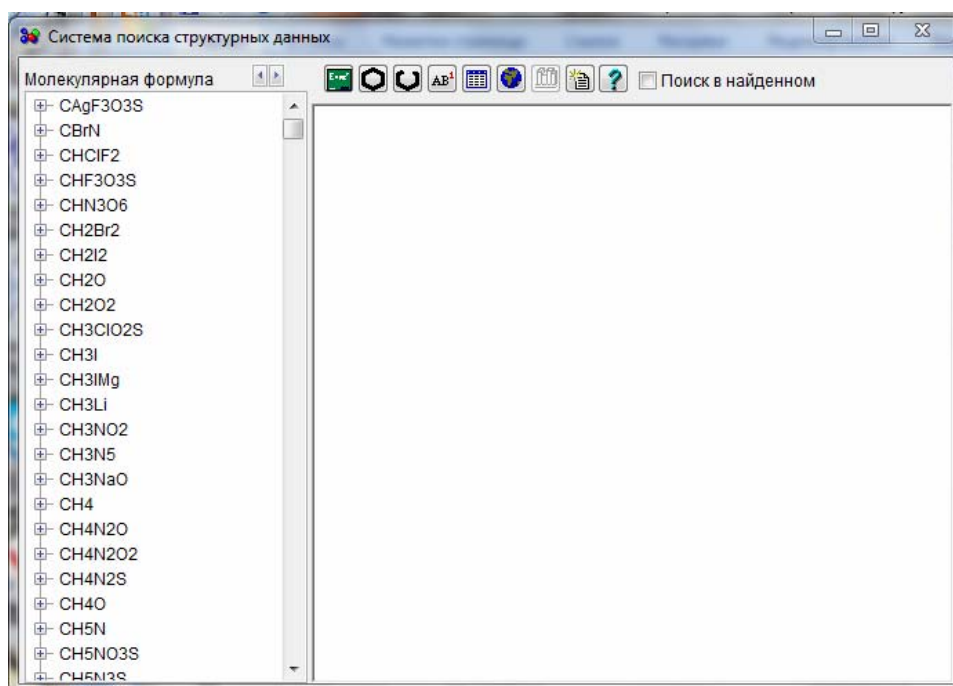


Рис. 1. Главное окно интерфейса АСП

В левой части окна располагается список, выполненный в виде дерева, который отображает набор молекулярных формул химических структур локальной базы данных. В верхней части окна находится панель инструментов для организации поиска.

3 ОПИСАНИЕ ФУНКЦИЙ АСП

3.1 Работа с деревом структур

Просмотр дерева структур (ДС) выполняется с помощью полос прокрутки или колёсиком мыши. Узлы ДС раскрываются или сворачиваются щелчком мыши. Дерево имеет до четырех уровней. Переход на уровни ниже первого сопровождается показом информации в правой части окна. На первом уровне ДС расположены молекулярные формулы химических соединений, упорядоченные по системе Хилла. На втором уровне – названия химических соединений и их структуры. На третьем уровне – библиография и предметная информация (рис. 2). Узлам третьего уровня присвоен номер реферата в Реферативной Базе данных «Химия» ВИНТИ РАН (БД «Химия»), в котором отражена информация о данном соединении и в скобках указан год создания реферата в БД «Химия». На четвертом уровне (если он есть) приведены уравнения химических реакций, в которых участвует данное соединение (рис.3). И, наконец, узлам пятого уровня соответствуют дополнительные сведения о реакции (рис.4).

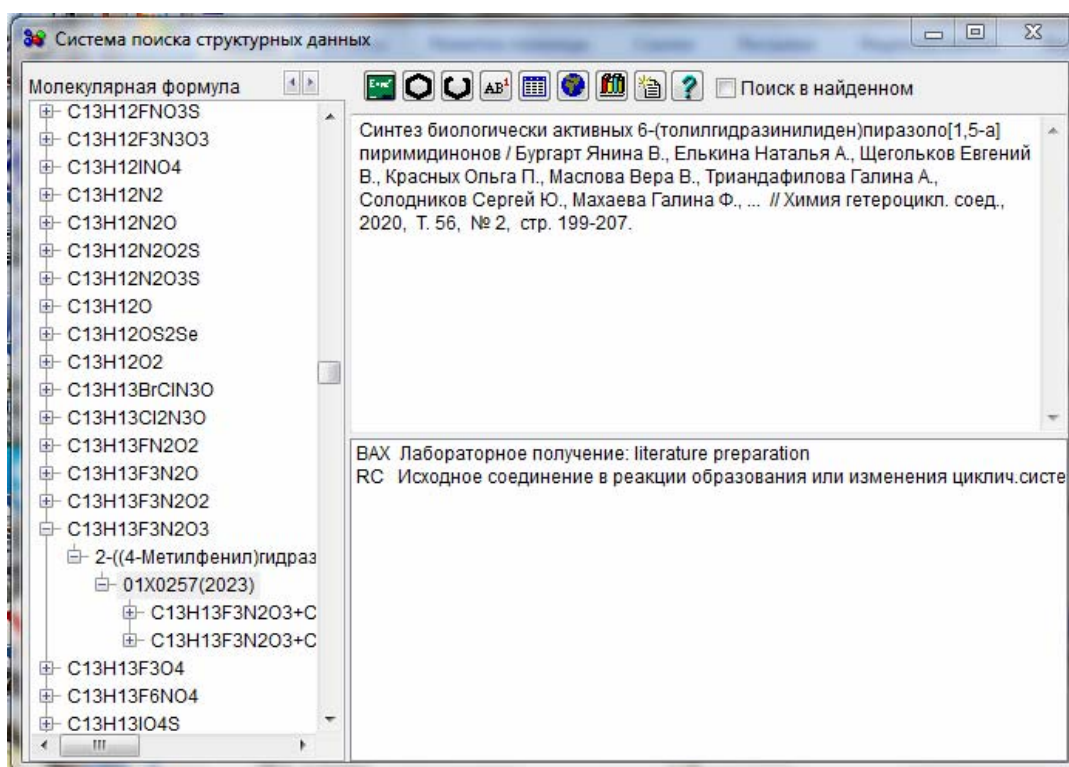


Рис.2. В правой части окна сверху – библиография, внизу – предметные характеристики.

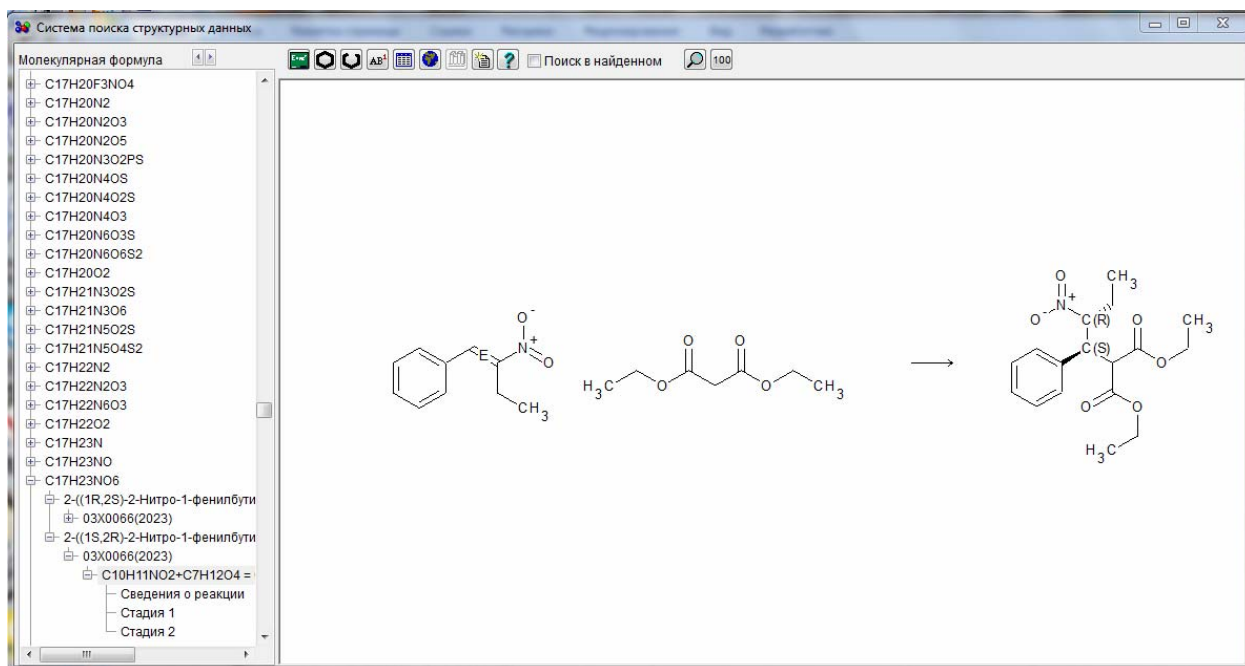


Рис. 3. Графическое изображение реакции.

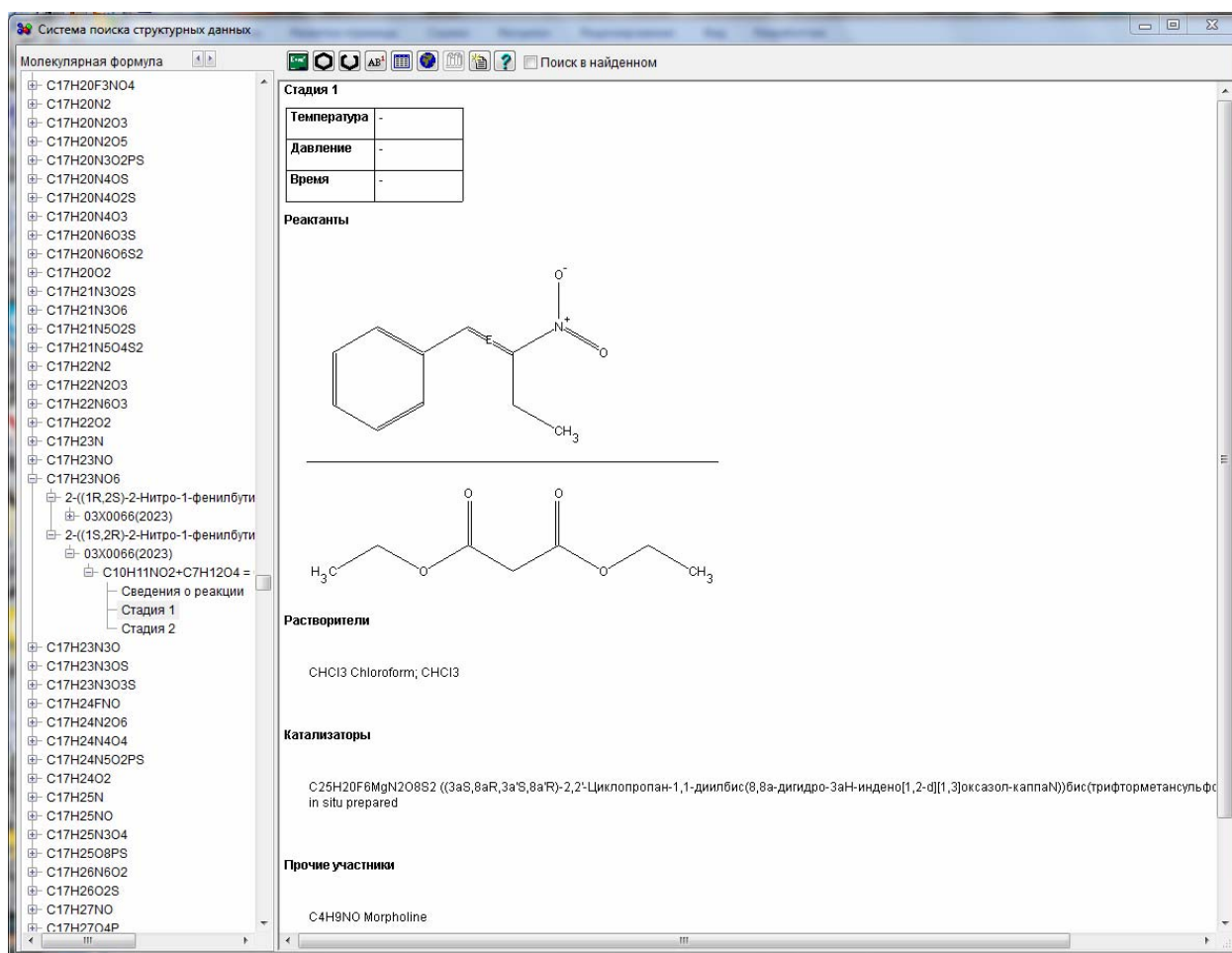


Рис. 4. Дополнительные сведения о реакции


3.2 Панель инструментов

Панель инструментов (рис.6) состоит из управляющих элементов для реализации различных видов поиска и выполнения вспомогательных действий.



Рис.5. Панель инструментов АСП

3.3 Поиск по молекулярной формуле

Этот вид поиска выполняется с помощью кнопки . При нажатии этой кнопки появляется окно «Поиск по молекулярной формуле» (рис.6), в текстовое поле которого необходимо ввести запись молекулярной формулы, либо ее фрагмента, либо указать диапазон изменения количества атомов элементов в искомом соединении и нажать ОК.

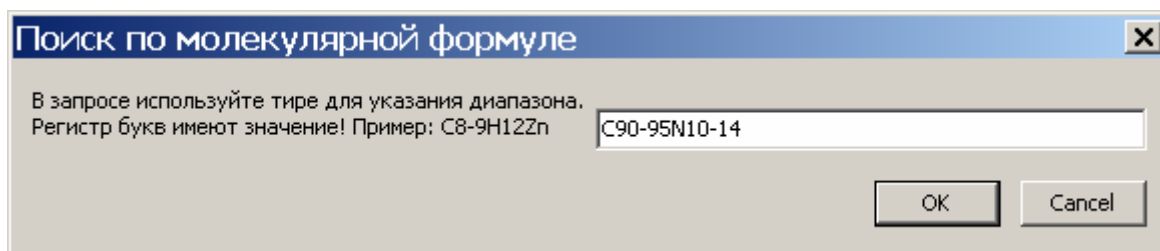
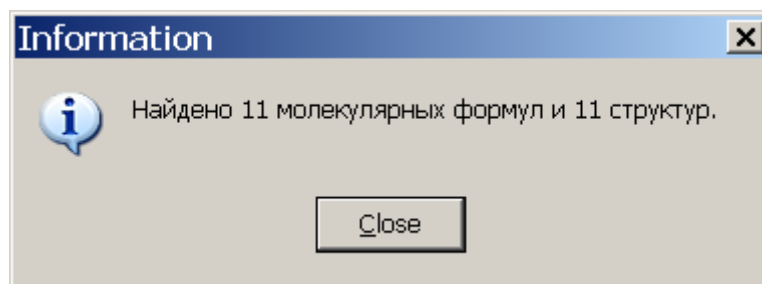


Рис.6. Окно запроса для поиска по молекулярной формуле

В указанном примере заданы диапазоны изменения числа атомов углерода от 90 до 95 и атомов азота от 10 до 14. Полученный результат поиска показан на рис.7. Найденные по данному запросу молекулярные формулы и соответствующие им соединения указываются в левой части интерфейса АСП.



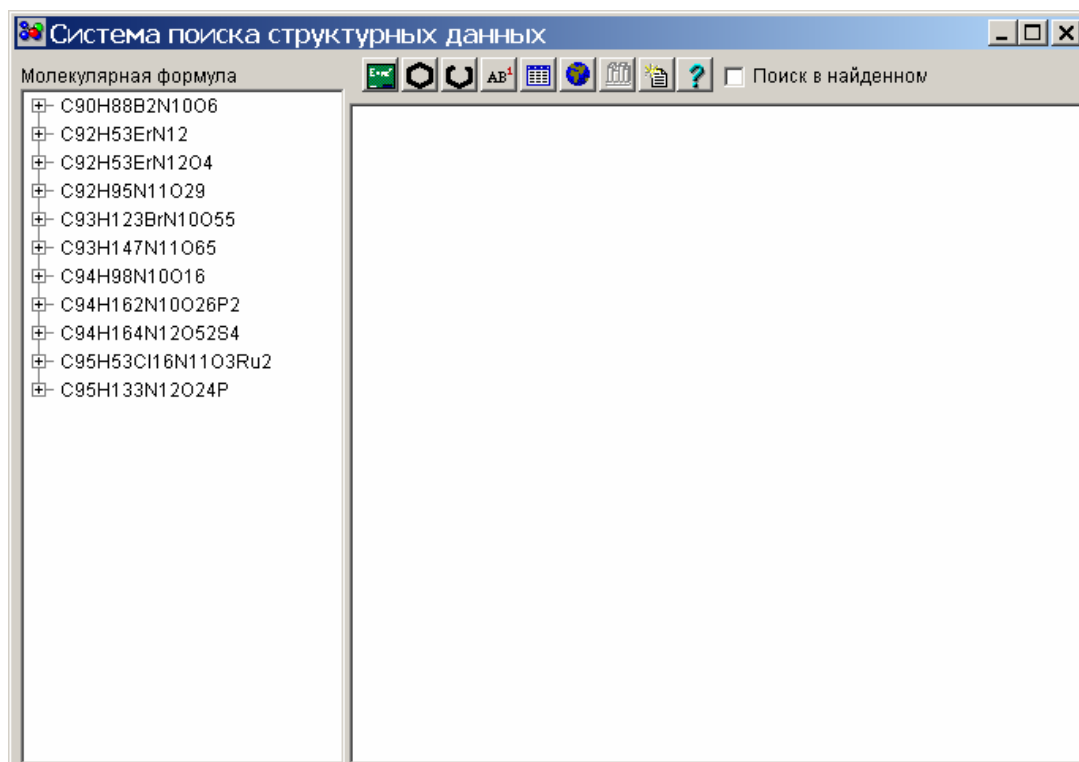



Рис.7. Пример результатов поиска по молекулярной формуле

Следует отметить, что в общем случае число найденных молекулярных формул будет равно или меньше количества найденных структур химических соединений, так как разные по структуре химические соединения могут иметь одинаковые молекулярные формулы. Это замечание может относиться не только к результату поиска по молекулярной формуле, но и к результатам других типов поиска.

3.4 Поиск по точной структуре

Этот вид поиска выполняется с помощью кнопки  панели инструментов. При щелчке на ней вызывается окно структурного редактора, в котором можно сформировать структурный запрос в виде рисунка химической структуры, как это показано на рис.8.

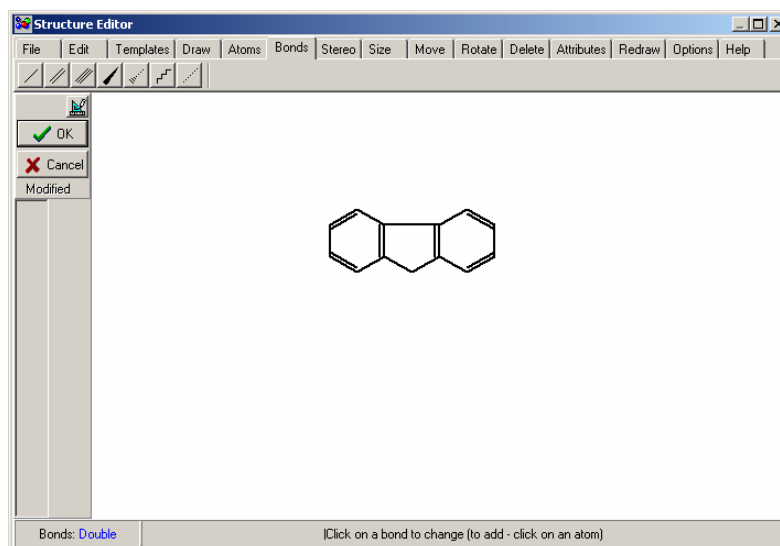



Рис.8. Окно «Структурный редактор». Пример структурного запроса поиска по точной структуре

Когда рисунок будет полностью сформирован, нужно нажать кнопку ОК, и программа выполнит поиск, результаты которого отобразятся в главном окне интерфейса АСП.

3.5 Поиск по фрагменту структуры

Поиск по фрагменту структуры выполняется кнопкой . Создание запроса выполняется так же, как и в случае поиска по точной структуре.

3.6 Поиск по названию


Кнопка  вызывает окно «Поиск по систематическому или тривиальному названию», в текстовое поле которого требуется ввести систематическое (или тривиальное) название химического соединения, либо его фрагмент, например, как это показано на рис. 9.

Рис.9. Окно запроса для поиска по названию

В данном случае поиск покажет результаты (рис.10):

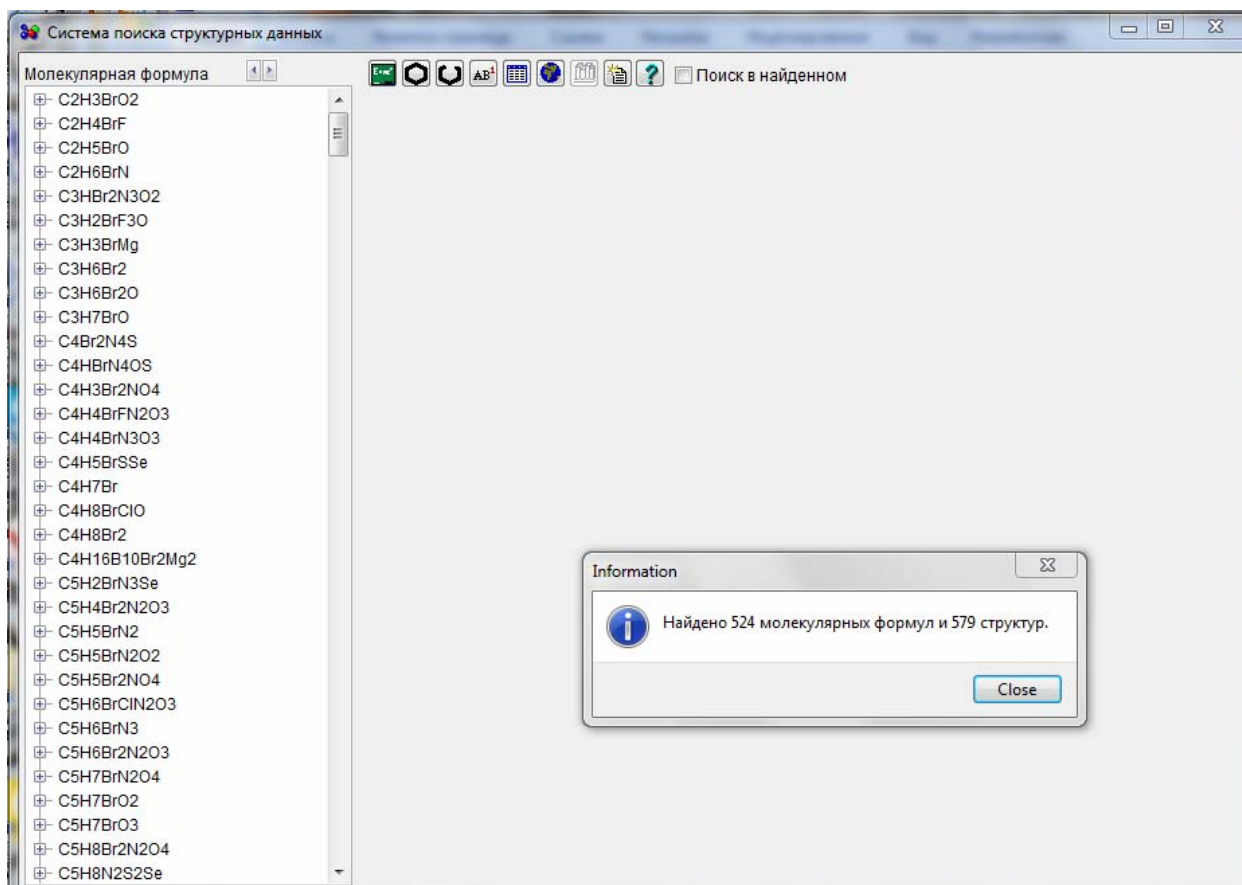



Рис.10. Пример результатов поиска по названию

3.7 Поиск по предметным характеристикам

Предметные характеристики (ПХ) представляют собой зашифрованный заглавными буквами латинского алфавита по иерархическому принципу список различных сведений о химических соединениях и их реакциях. ПХ обозначаются одним символом или последовательностью длиной до 4-х символов; ПХ отражают физико-химические свойства соединения, особенности его получения, проявляемую активность, области применения, и т.д. Многие ПХ могут иметь комментарий, который содержит дополнительную (уточняющую) информацию. Комментарии к ПХ даны на языке оригинала статей, используемых при создании Базы СД. ПХ представлены в левой части окна «Subject information» (рис.11), вызываемого кнопкой . В правой части окна приведена расшифровка ПХ.

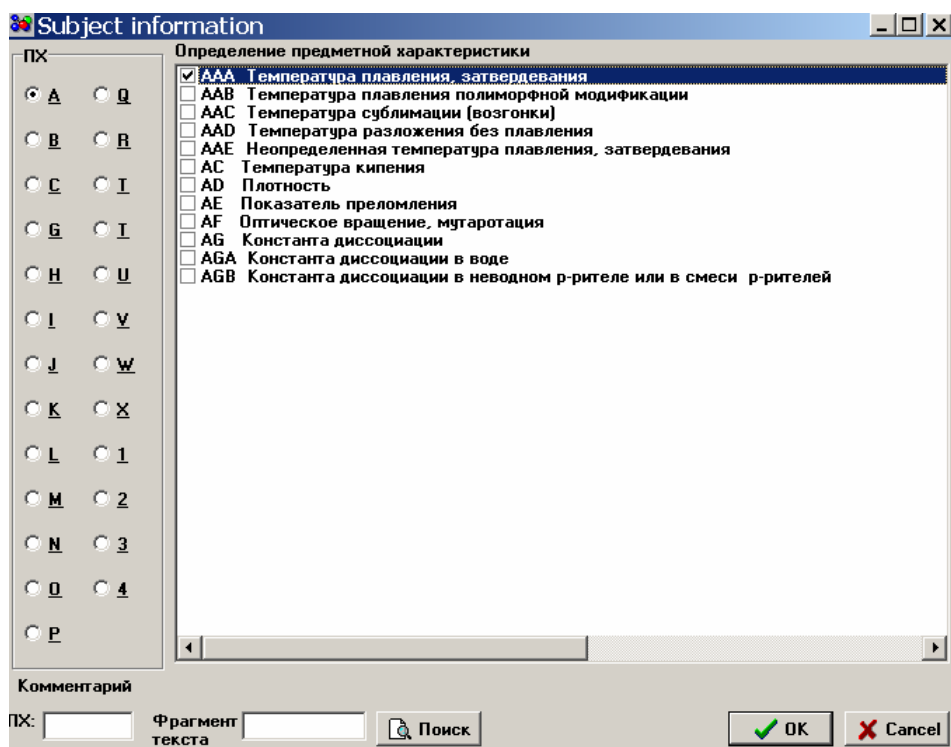


Рис.11. Окно выбора ПХ

В нижней части окна имеются инструменты для поиска ПХ в этом окне по заданному фрагменту текста. После того как ПХ выбран (установлена галочка), нажатие кнопки ОК запустит процедуру поиска, и будет выдано, например, сообщение (рис.12).

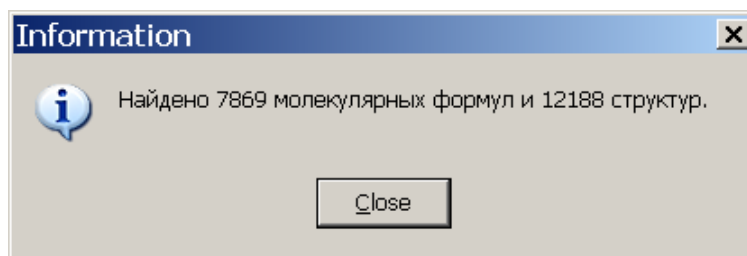


Рис.12. Информационное окно о результатах поиска по ПХ

В окне интерфейса АПС будут отображены все химические соединения, удовлетворяющие данному запросу (рис.13).

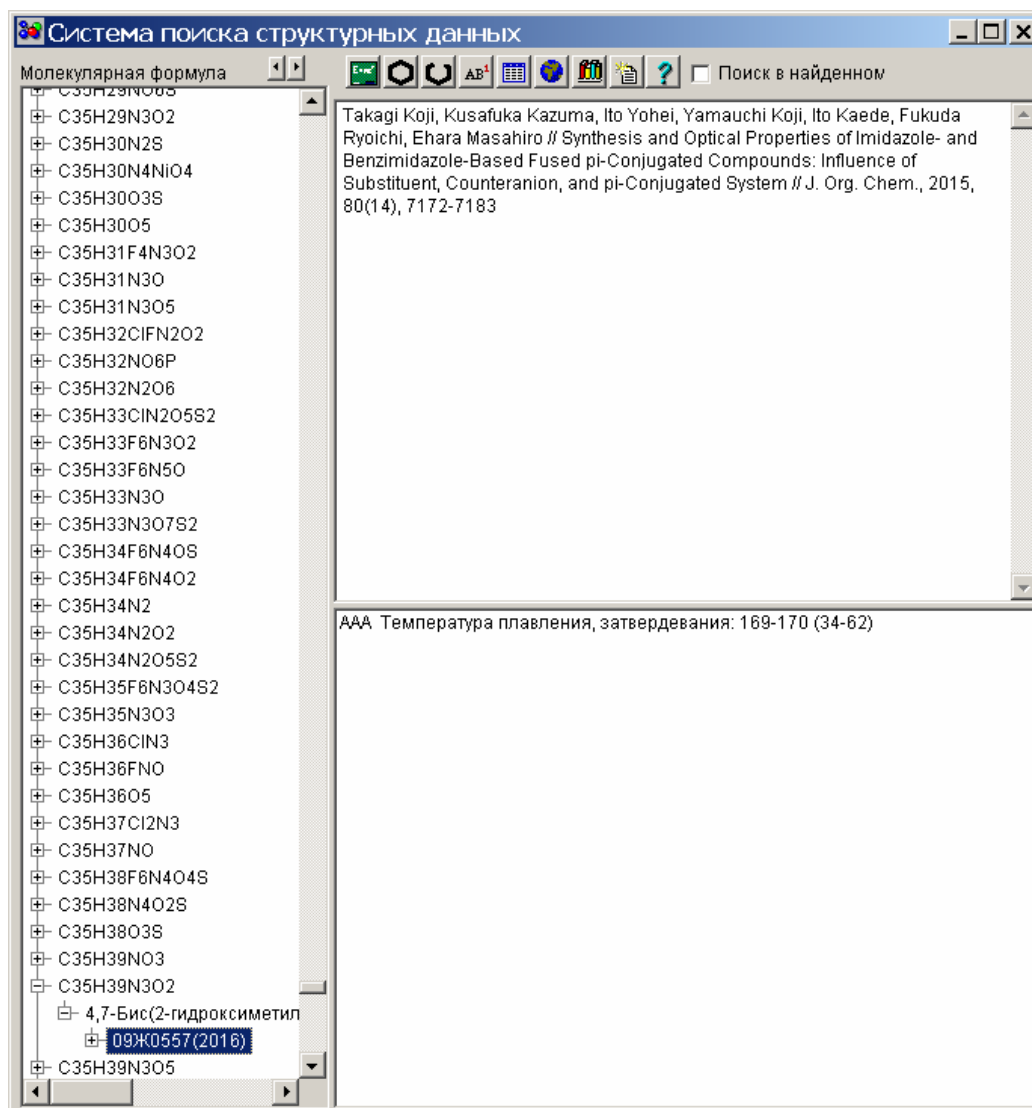


Рис. 13. Пример результатов поиска по ПХ.

В данном примере показано одно из найденных соединений с заданной ПХ: AAA Температура плавления, затвердевания. В нижнем правом окне приводятся значения температуры: 169-170 градусов по Цельсию и в скобках – **коды растворителей, используемых для перекристаллизации (34-62)**. Эти коды соответствуют хлороформу (код 34) и ацетонитрилу (код 62). Таблица **кодов растворителей, а также особых условий измерения и особых свойств** находится в Приложении. Для удобства работы пользователей эта таблица помещена в файл [Таблица кодов растворителей.doc](#), который находится в рабочем каталоге Автономной системы поиска.

3.8 Поиск выбранной структуры в Интернете

Для выполнения этого вида поиска необходимо сначала сделать выбор химического соединения, выделив соответствующий узел на втором уровне дерева, например, как это показано на рис.14.

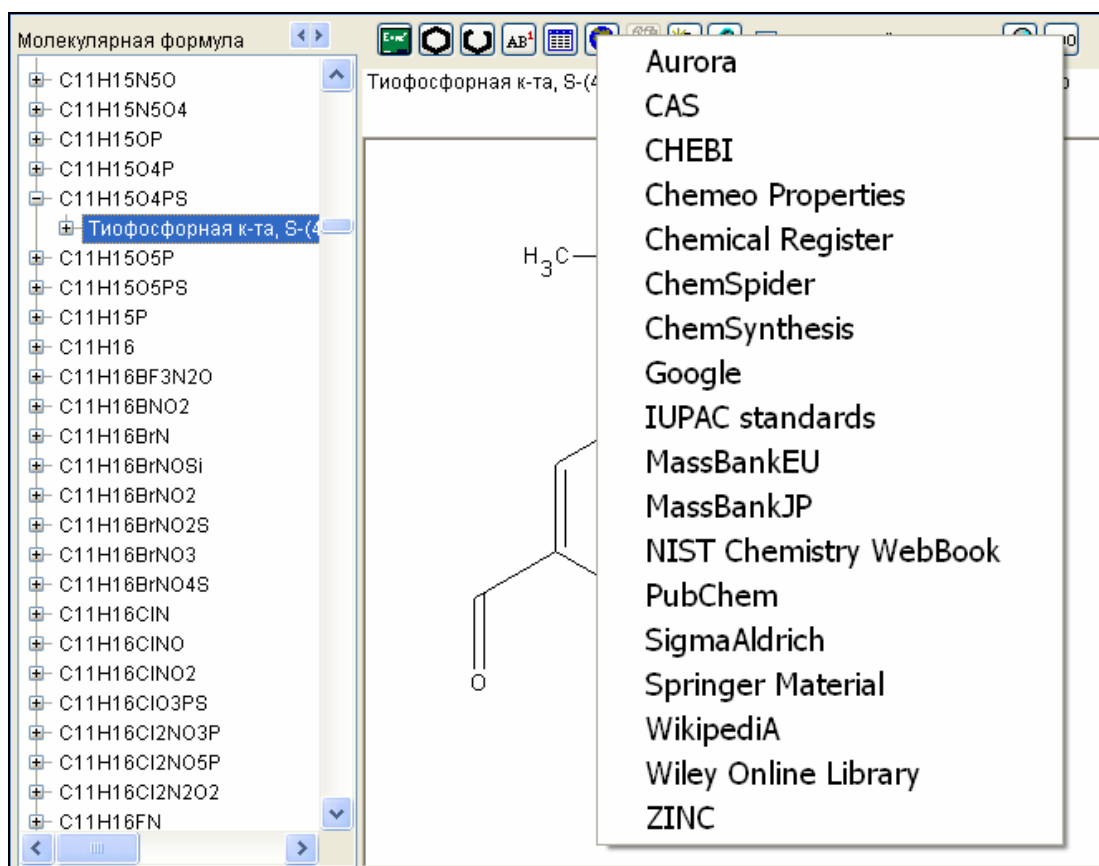



Рис.14. Выбор химического соединения для поиска в Интернете

После этого следует нажать кнопку . Откроется список для выбора доступной в Интернете химической базы данных, в которой будет выполнен поиск данного соединения. На рис. 16. показан результат такого поиска в базе PubChem. Следует отметить, что в современной ситуации некоторые базы данных могут быть недоступны.

PubChem About Posts Submit Contact

SEARCH FOR

AFIYOFNFFBAFIS-UHFFFAOYSA-N

Treating this as a text search.

Compounds (1)

Searching chemical names and synonyms including IUPAC names and InChIKeys across the compound collection. Note that annotations text from compound summary pages is not searched. [Read More...](#)

1 result

Download

Search in Entrez

ACTIONS ON RESULTS WITH ID TYPE:

Compounds

Push to Entrez

Save for Later

Linked Data Sets

Compound CID: 164684573

MF: C₁₁H₁₅O₄PS MW: 274.28g/mol

IUPAC Name: 4-diethoxyphosphorylsulfanylbenzaldehyde

Isomeric SMILES: CCOP(=O)(OCC)SC1=CC=C(C=C1)C=O

InChIKey: AFIYOFNFFBAFIS-UHFFFAOYSA-N


InChI: InChI=1S/C11H15O4PS/c1-3-14-16(13,15-4-2)17-11-7-5-10(9-12)6-8-11/h5-9H,3-4H2,1-2H3

Create Date: 2022-08-23

Summary Similar Structures Search Related Records

Рис.15. Отображение результатов поиска в базе PubChem.

3.9 Просмотр актуальных данных¹ из электронного каталога ВИНТИ РАН

Если выделен узел дерева с номером реферата в БД «Химия» (рис.16), то кнопка  становится активной. При нажатии на эту кнопку устанавливается связь с Электронным каталогом ВИНТИ РАН. В Интернет-браузере отображается библиографическая информация первоисточника и обеспечивается доступ к сервису Электронного каталога (рис.17).

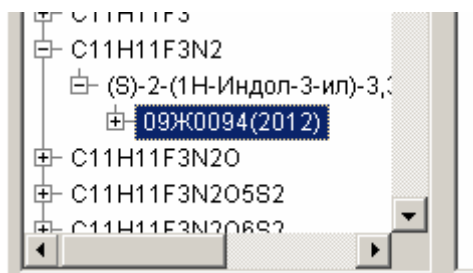


Рис.16. Выбор узла ДС с номером реферата в БД «Химия»

¹ В электронном каталоге ВИНТИ РАН отображаются данные только за последние 12 месяцев.

Статья где СИДЧ Точно соответствует 'J0972975268' - 1 объектов

Сортировать по Автор , Год , Название

Статьи

Поиск: 1 объектов

Статьи

Equilibrium Acidities of Superacids / Kutt Agnes, Rodima Toomas, Saame Jaan, Raamat Elin, Maemets Vahur, Kaljurand Ivare, Koppel Ilmar A., Garlyauskayte Romute Yu. Chem.— 2011 г. 76 № 2.— С. 391-395.— английский

Источник: - Выпуск сериального издания (1)

Автор: - Персоналии (13)

Название - перевод на рус. язык	Равновесная кислотность сверхильных кислот
Название	Equilibrium Acidities of Superacids
Автор	Kutt Agnes
Автор	Rodima Toomas
Автор	Saame Jaan
Автор	Raamat Elin
Автор	Maemets Vahur
Автор	Kaljurand Ivare
Автор	Koppel Ilmar A.
Автор	Garlyauskayte Romute Yu.
Автор	Yagupolskii Yuri L.
Автор	Yagupolskii Lev M.
Автор	Bernhardt Eduard
Автор	Wilner Helge
Автор	Leito Ivo

Рис. 17. Пример данных в Электронном каталоге

4 ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ

4.1 Очистка результатов поиска

Эта операция выполняется кнопкой . При использовании этой операции все результаты поиска удаляются.

Следует отметить, что перед новым поиском удаление результатов предыдущего поиска не является обязательным.


4.2 Последовательный поиск по нескольким параметрам

Последовательный поиск по нескольким параметрам предназначен для проведения уточняющего поиска информации о химическом соединении и осуществляется заданием опции «Поиск в найденном» справа от панели инструментов.

Для проведения такого поиска необходимо выполнить следующие операции:

- провести поиск информации о соединении по одному из параметру (см.разделы 3.3-3.8);
- выбрать опцию «Поиск в найденном» («поставить галочку»);
- применить к результатам первого поиска правила для проведения других типов поиска.

4.3 Увеличение масштаба изображения.

Если элементы изображения химической структуры плохо различимы, например, как на рис. 18, необходимо воспользоваться кнопкой  для увеличения масштаба рисунка (рис.19).

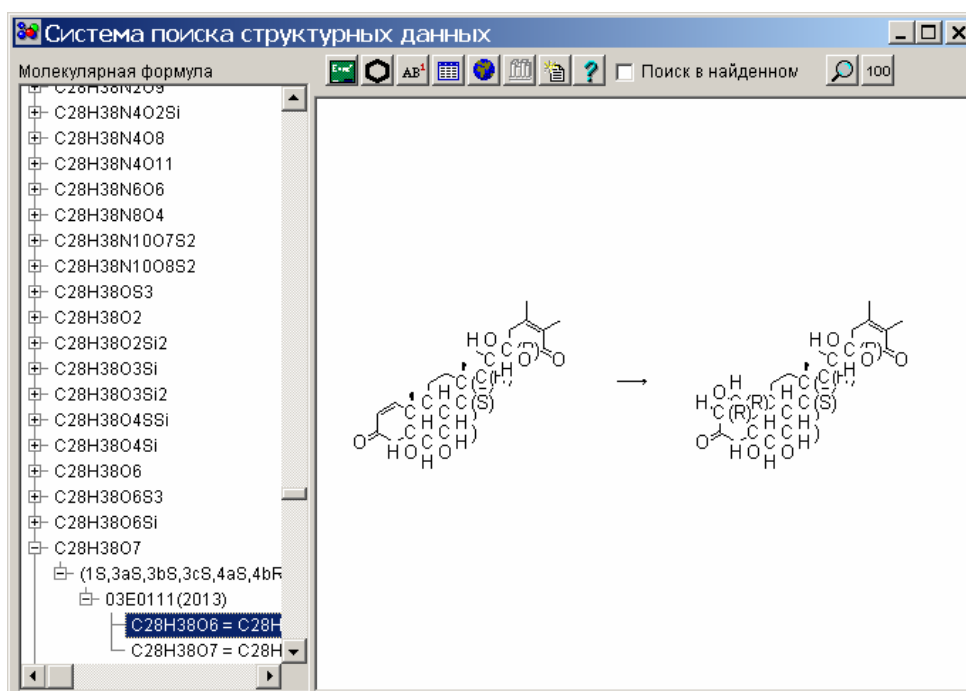


Рис.18. Пример рисунка, на котором элементы изображения сливаются

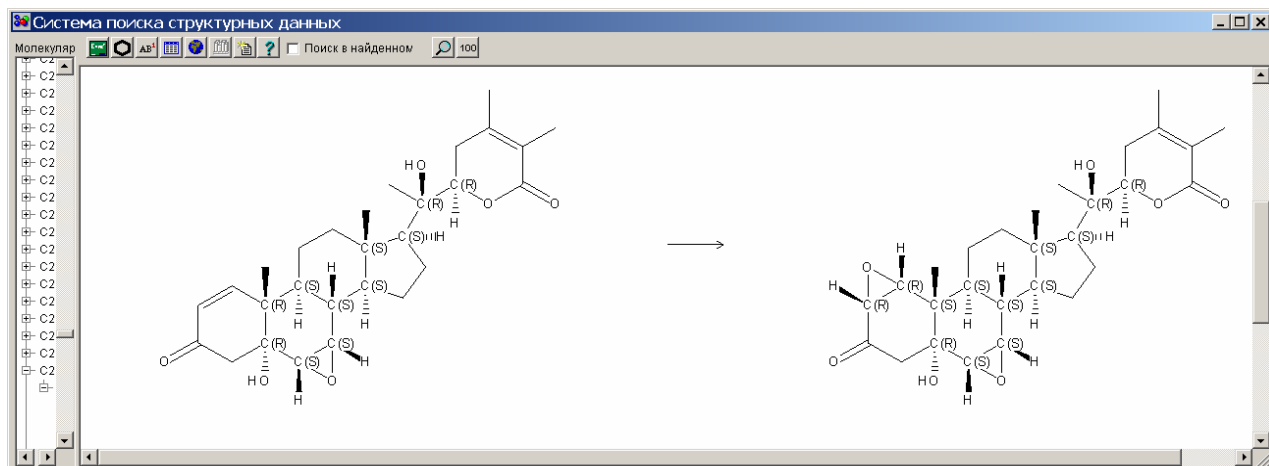



Рис.19. Увеличенное изображение структур

Привести его к исходному виду поможет кнопка .

4. Приложение

Таблица кодов растворителей, условий измерения и особых свойств

1	Плавление в запаянном капилляре
2	Плавление с разложением
3	Температура бани
4	Неразделенная смесь изомеров
5	Плавление со взрывом
6	Температура плавления с возгонкой
7	
8	Пентан
9	Изопентан
10	Гептан
11	
12	Гексан
13	Октан
14	Изооктан
15	Хлорбутан
16	Циклогексан
17	о-Дихлорбензол
18	Тetraгидрофуран (ТГФ)
19	Глим, моноглим, 1,2-диметоксиэтан
20	Диоксан
21	Диглим(2-метоксиэтиловый эфир)
22	Бензол
23	Хлорбензол
24	Толуол
25	Дифениловый эфир
26	Ксилол
27	Триэтиламин
28	Пиридин
29	Метилбутилкетон
30	Дихлорэтан
31	Метилизобутилкетон
32	Метиленхлорид, дихлорметан
33	Бромформ
34	Хлороформ
35	[H2]Хлороформ
36	Четыреххлористый углерод
37	1,1,1-Трифторэтан
38	Нитрометан
39	Нитроэтан
40	Метанол
41	Тетрадейтерометанол (CD3OD)

42	Этанол
43	2-Метоксиэтанол
44	Пропанол
46	Изопропанол
47	2-Метоксипропанол
48	Бутанол
50	Изобутанол
51	Дипропиловый эфир
52	Диэтиловый эфир
53	Диизопропиловый эфир
54	Ацетон
55	Метилэтилкетон
56	Уксусная кислота
57	Метилацетат
58	Этилацетат (ЭА)
59	Изопропилацетат
60	Ацетангидрид
61	Бутилацетат
62	Ацетонитрил
64	Диметилформаид (ДМФА)
65	Диметилацетамид
66	Диметилсульфоксид
68	Вода
70	Целлозольв
72	Лигроин
74	Петролейный эфир
76	Бензин
78	Гексаметилфосфотриамид (ГМФТА)
80	Трифторуксусная к-та
81	Хлористоводородная кислота, (HCL-кислота)
82	Гидроокись натрия (NaOH)
83	Бензол-d6, Дейтериобензол
99	Др.растворители, если растворителя нет в списке.