

## Система поиска структурных данных. Руководство пользователя

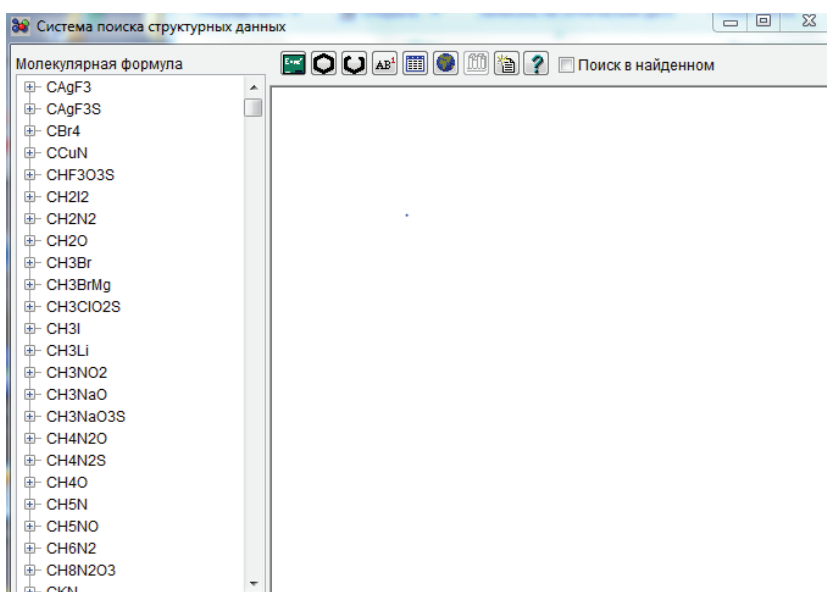
- Введение

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 СД содержит информацию о более чем 7,5 млн. химических структур, около 4,2 млн. химических реакций и 15 млн. свойств химических соединений и является одной из крупнейших в мире.

За годы эксплуатации Базы СД сформировался программно-технологический комплекс с развитым математическим, лингвистическим и информационным обеспечением. Система поиска структурных данных, входящая в этот комплекс, позволяет выполнять поиск информации в режиме off-line в пользовательских базах данных, сформированных из Базы СД. Предлагаемая демо-версия пользовательской базы данных содержит информацию о более чем 9000 химических соединениях (включая сопутствующие сведения), накопленную в Базе СД из научных публикаций по химии за декабрь 2017 года.

- Интерфейс

После входа в программу появляется окно:

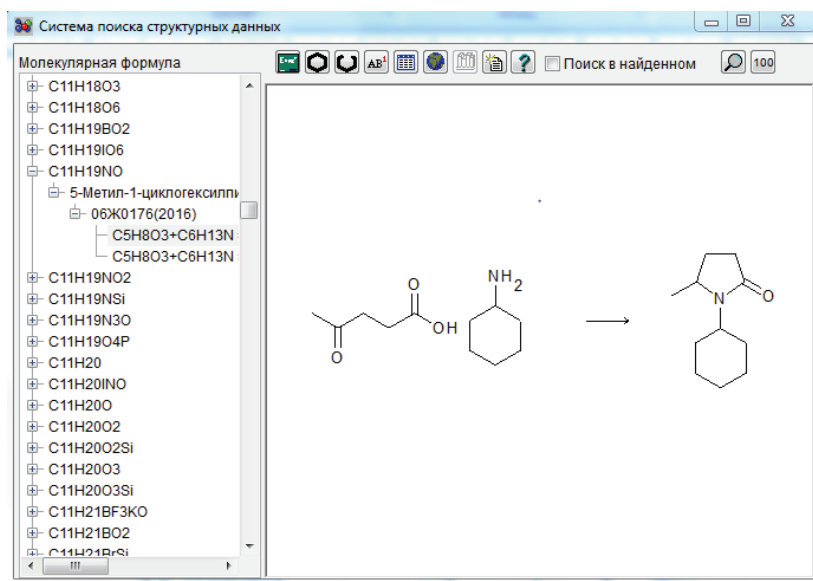


В левой части окна располагается список, выполненный в виде дерева, отображающий набор химических структур локальной базы данных. В верхней части окна находится панель инструментов для организации поиска.

- Поиск химических структур

- Работа с деревом

Просмотр дерева выполняется с помощью полос прокрутки или колёсиком мыши. Узлы дерева 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 дерева – молекулярные формулы, упорядоченные по правилу Хилла. На втором уровне – названия химических соединений. На третьем уровне – библиография и предметная информация. Узлам третьего уровня приписан номер реферата в РЖ «Химия» и в скобках – год издания. На четвертом уровне (если он есть) – уравнения химических реакций, в которых участвует данное соединение:




- Панель инструментов

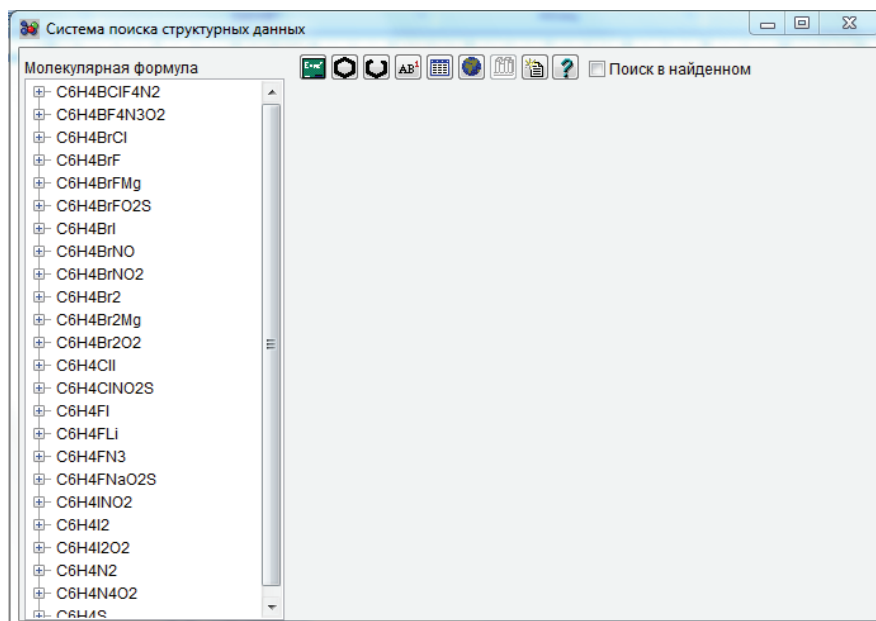
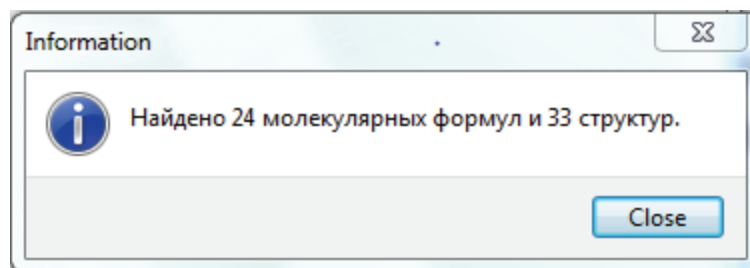
Панель инструментов состоит из управляющих элементов для реализации различных видов поиска и выполнения вспомогательных действий.




- Поиск по молекулярной формуле

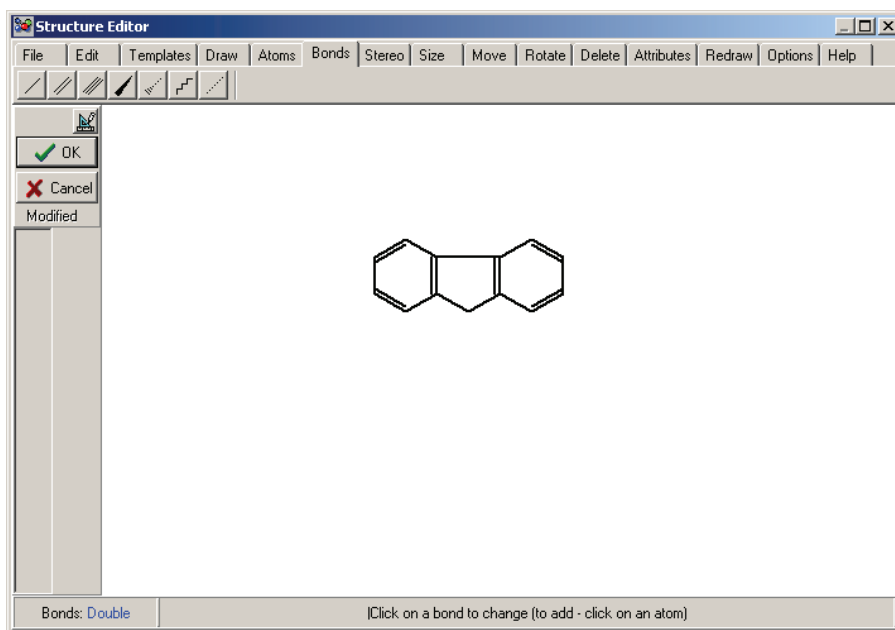
Этот вид поиска выполняется с помощью кнопки . В окне:

необходимо в текстовое поле ввести запись молекулярной формулы, либо ее фрагмента, либо указать диапазон изменения символов и нажать ОК. Для указанного здесь примера будет получен результат:




- Поиск по точной структуре

Этот вид поиска выполняется с помощью кнопки  панели инструментов. При щелчке на ней вызывается окно графического редактора, в котором можно сформировать структурный запрос в виде рисунка химической структуры, например:




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

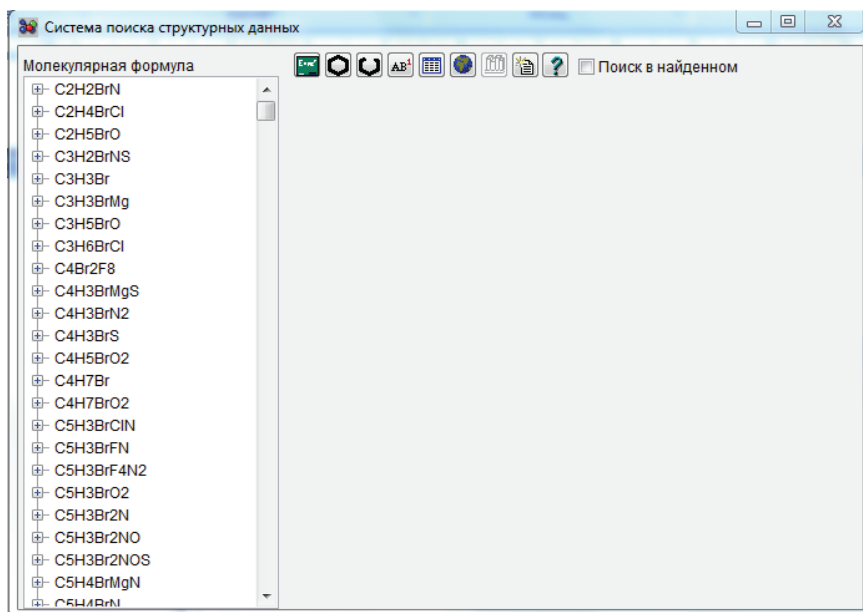
- Поиск по фрагменту структуры

Поиск по фрагменту структуры выполняется кнопкой . Данный вид поиска имеет большое значение при определении связи структуры и активности химических соединений. Создание запроса выполняется так же, как и в случае поиска по точной структуре.


- Поиск по названию

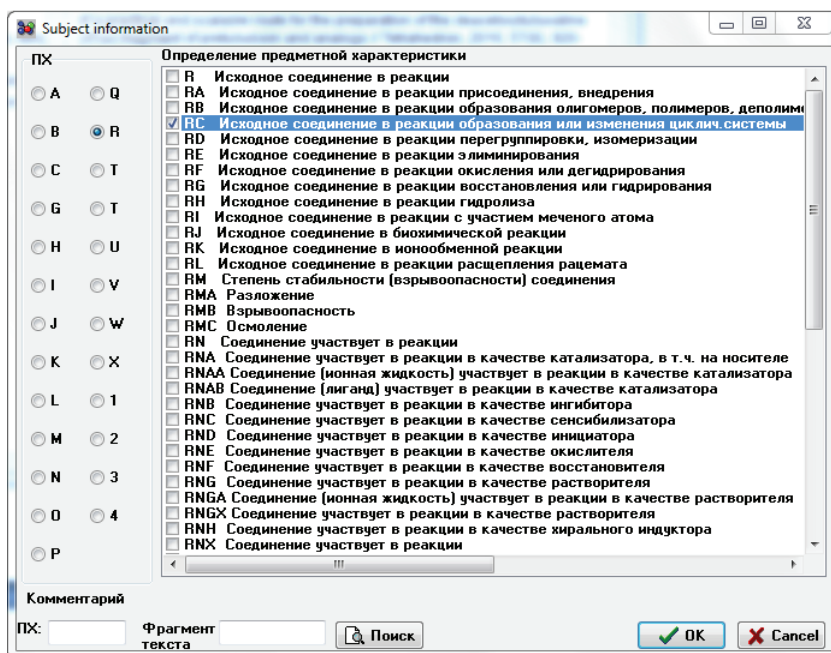
Кнопка  вызывает окно, в текстовое поле которого требуется ввести систематическое (или тривиальное) название, либо фрагмент названия химического соединения, например:

В данном случае поиск покажет:

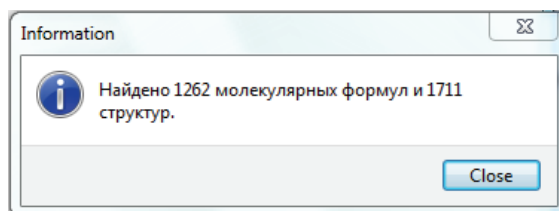


- Поиск по предметным характеристикам

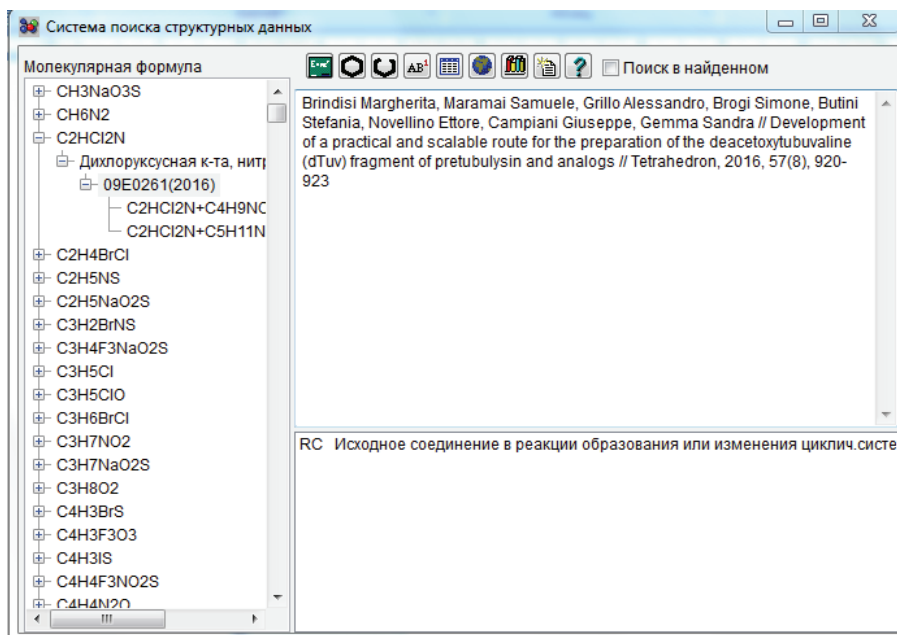
Предметная характеристика (терм) выражает физико-химические свойства соединения, особенности его получения, проявляемую активность, области применения, и т.д. Термы обозначаются одним символом или последовательностью, длиной до 4-х символов, представленных в левой части окна, вызываемого кнопкой :



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

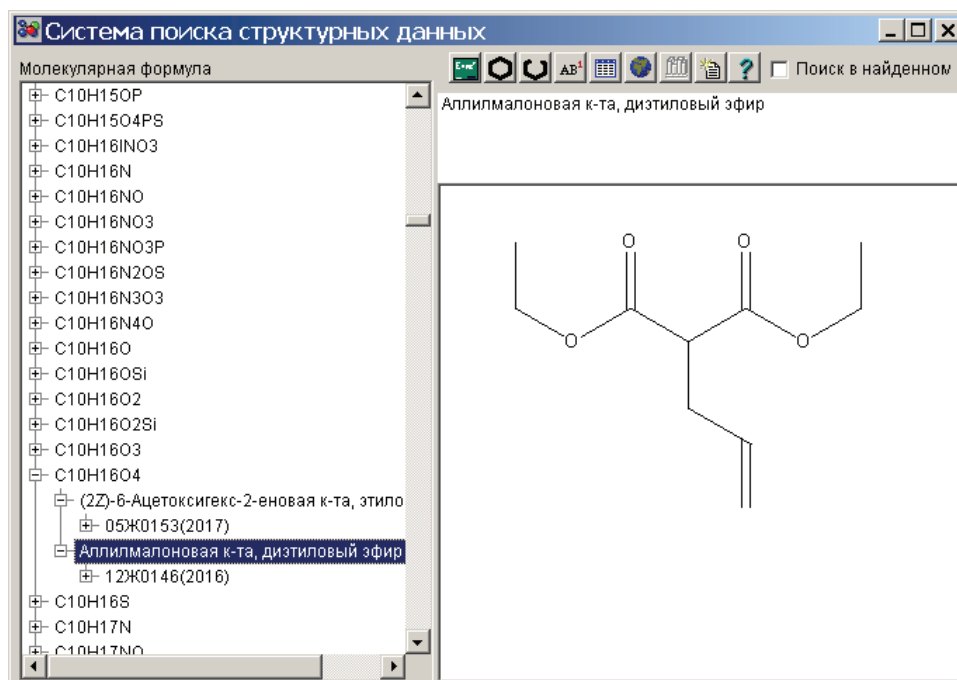



В окне интерфейса будут отображены все химические соединения, удовлетворяющие данному запросу:

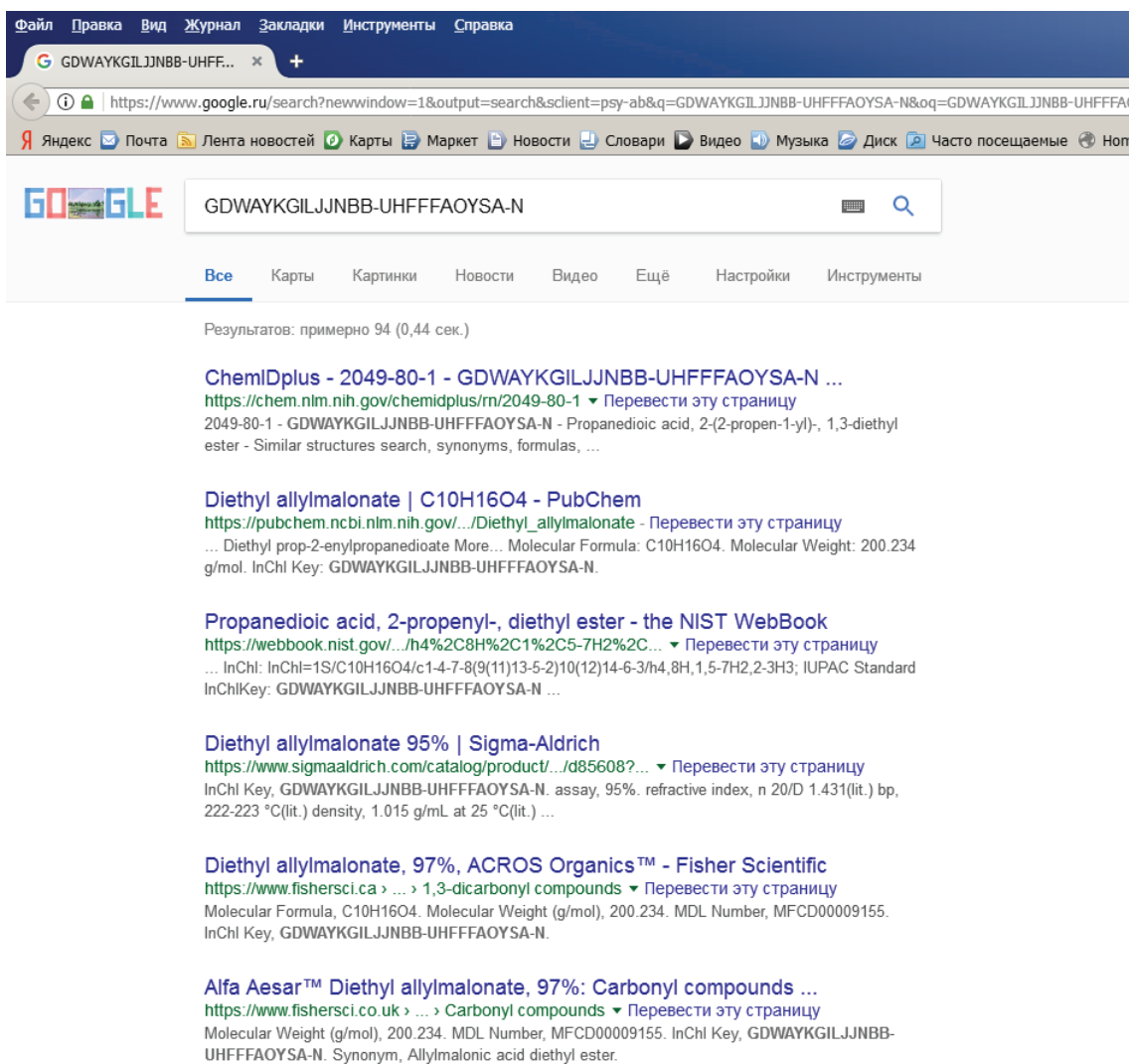


- Поиск выбранной структуры в Интернете

Для выполнения этого вида поиска необходимо сначала сделать выбор химического соединения, выделив соответствующий узел на втором уровне дерева, например:



После этого следует нажать кнопку . Будет сформирована символьная строка Inchi Key для данного химического соединения, по которой автоматически выполнится поиск статей в Интернете посредством имеющегося на компьютере пользователя Интернет-браузера:



Файл Правка Вид Журнал Закладки Инструменты Справка

GDWAYKGILJJNBB-UHFF... x +

https://www.google.ru/search?newwindow=1&output=search&scient=psy-ab&q=GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N&oq=GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N

Яндекс Почта Лента новостей Карты Маркет Новости Словари Видео Музыка Диск Часто посещаемые

GOOGLE GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N

Все Карты Картинки Новости Видео Ещё Настройки Инструменты

Результатов: примерно 94 (0,44 сек.)

**ChemIDplus - 2049-80-1 - GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N ...**  
<https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/m/2049-80-1> Перевести эту страницу  
2049-80-1 - GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N - Propanedioic acid, 2-(2-propen-1-yl)-, 1,3-diethyl ester - Similar structures search, synonyms, formulas, ...

**Diethyl allylmalonate | C10H16O4 - PubChem**  
[https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/.../Diethyl\\_allylmalonate](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/.../Diethyl_allylmalonate) - Перевести эту страницу  
... Diethyl prop-2-enylpropanedioate More... Molecular Formula: C10H16O4. Molecular Weight: 200.234 g/mol. InChI Key: GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N.

**Propanedioic acid, 2-propenyl-, diethyl ester - the NIST WebBook**  
<https://webbook.nist.gov/.../h4%2C8H%2C1%2C5-7H%2C...> Перевести эту страницу  
... InChI: InChI=1S/C10H16O4/c1-4-7-8(9(11)13-5-2)10(12)14-6-3/h4,8H,1,5-7H2,2-3H3; IUPAC Standard InChIKey: GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N ...

**Diethyl allylmalonate 95% | Sigma-Aldrich**  
<https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/.../d85608?> Перевести эту страницу  
InChI Key, GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N. assay, 95%. refractive index, n 20/D 1.431(lit.) bp, 222-223 °C(lit.) density, 1.015 g/mL at 25 °C(lit.) ...

**Diethyl allylmalonate, 97%, ACROS Organics™ - Fisher Scientific**  
<https://www.fishersci.ca> > ... > 1,3-dicarbonyl compounds Перевести эту страницу  
Molecular Formula, C10H16O4. Molecular Weight (g/mol), 200.234. MDL Number, MFCD00009155. InChI Key, GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N.

**Alfa Aesar™ Diethyl allylmalonate, 97%: Carbonyl compounds ...**  
<https://www.fishersci.co.uk> > ... > Carbonyl compounds Перевести эту страницу  
Molecular Weight (g/mol), 200.234. MDL Number, MFCD00009155. InChI Key, GDWAYKGILJJNBB-UHFFFAOYSA-N. Synonym, Allylmalonic acid diethyl ester.

По найденным ссылкам можно получить разнообразную информацию, касающуюся выбранного химического соединения:

Инструменты Справка

ethyl allylmalonate | C... x

70%

Поиск

Карты Маркет Новости Словари Видео Музыка Диск Часто посещаемые Home - Xerox WorkCe... Начальная страница

NIH U.S. National Library of Medicine National Center for Biotechnology Information

PubChem OPEN CHEMISTRY DATABASE

Search Compounds

Compound Summary for CID 74900

Download Share Help

## Diethyl Allylmalonate

Cite this Record

STRUCTURE VENDORS LITERATURE PATENTS BIOACTIVITIES

PubChem CID: 74900

Chemical Names: Diethyl allylmalonate; 2049-80-1; Ethyl allylmalonate; Diethyl 2-allylmalonate; Allylmalonic acid diethyl ester; Diethyl prop-2-enylpropanoate More...

Molecular Formula:  $C_{12}H_{16}O_4$

Molecular Weight: 200.234 g/mol

InChI Key: GDWAWYKGLJJNBB-UHFFFAOYSA-N

Safety Summary: Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS)

PUBCHEM > COMPOUND > DIETHYL ALLYLMALONATE

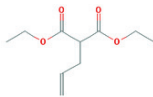
Modify Date: 2018-08-26; Create Date: 2005-03-26

### Contents

- 1 2D Structure
- 2 3D Conformer
- 3 Names and Identifiers
- 4 Chemical and Physical Properties
- 5 Related Records
- 6 Chemical Vendors
- 7 Safety and Hazards
- 8 Literature
- 9 Patents
- 10 Biological Test Results
- 11 Classification
- 12 Information Sources

#### 1 2D Structure

Search Download Get Image



Magnify

from PubChem

#### 2 3D Conformer

Search Download Get Image

- Просмотр данных из электронного каталога ВИНТИ РАН

Если выделен узел дерева с номером реферата в РЖ «Химия»,

Система поиска структурных данных

Молекулярная формула


- C19H29IO8
- C19H29NO4SSi
- C19H29N3O6
- C19H30BrNO7
- C19H30N2O5
- C19H30N3OP
- C19H30O
- C19H30OSi
- C19H30O3
- C19H31IO4
- C19H31NOSi
- C19H31NO4
- C19H31NO4SSi
- C19H31NO5
- C19H32N2O6
- C19H32N2O7
- C19H32N4O3S
- 4-(5-(1-(2-Гидроксиэтил)C
  - 11Ж0282(2016)
    - C6H14OS+C13H15
    - C8H7BrO+C19H32
    - C8H7BrO2+C19H3

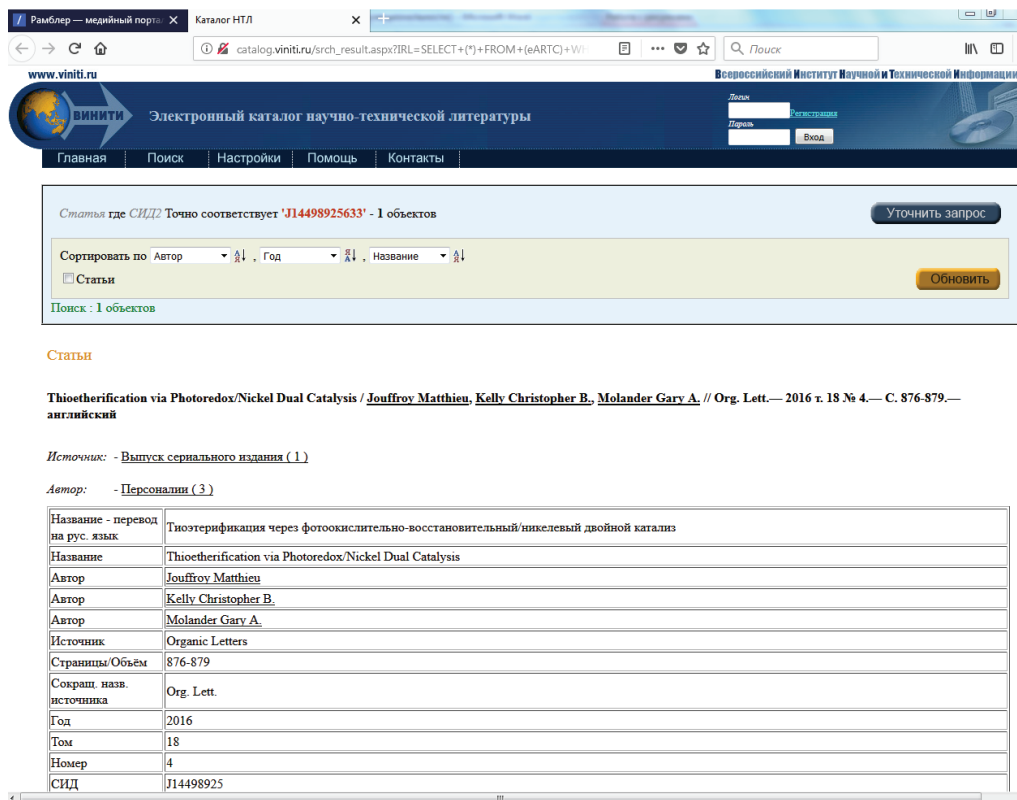
Поиск в найденном

Jouffroy Matthieu, Kelly Christopher B., Molander Gary A. // Thioetherification via Photoredox/Nickel Dual Catalysis // Org. Lett., 2016, 18(4), 876-879

ВАЗ Синтез  
ВАЗ Получение фотохимическим способом



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:



Статья где СИД? Точно соответствует 'J14498925633' - 1 объектов Уточнить запрос

Сортировать по Автор   Год   Название

Статьи Обновить

Поиск : 1 объектов

**Статьи**

**Thioetherification via Photoredox/Nickel Dual Catalysis / Jouffroy Matthieu, Kelly Christopher B., Molander Gary A. // Org. Lett.— 2016 т. 18 № 4.— С. 876-879.— английский**

Источник: - Выпуск сериального издания ( 1 )

Автор: - Персонали ( 3 )

Название - перевод на рус. язык	Тиоэтерификация через фотоокислительно-восстановительный/никелевый двойной катализ
Название	Thioetherification via Photoredox/Nickel Dual Catalysis
Автор	Jouffroy Matthieu
Автор	Kelly Christopher B.
Автор	Molander Gary A.
Источник	Organic Letters
Страницы/Объем	876-879
Сокращ. назв. источника	Org. Lett.
Год	2016
Том	18
Номер	4
СИД	J14498925

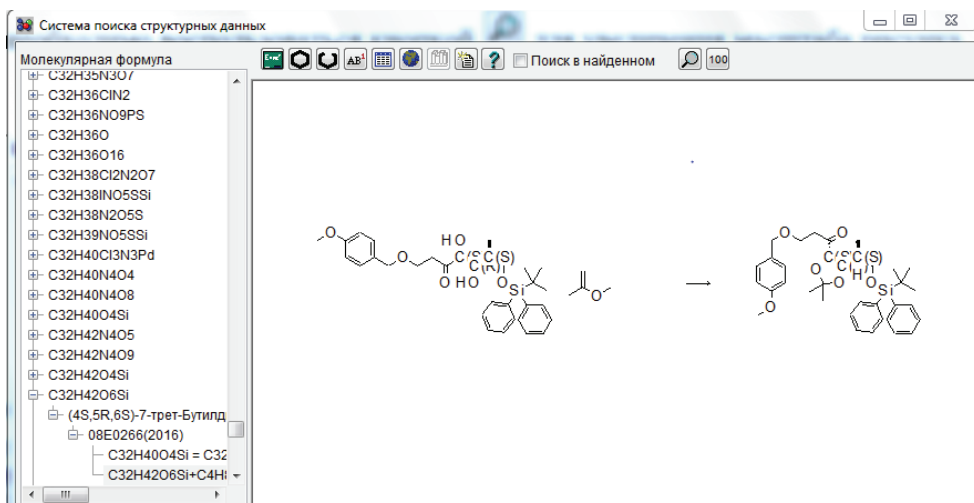
- Очистка результатов поиска выполняется кнопкой 

- Поиск в найденном

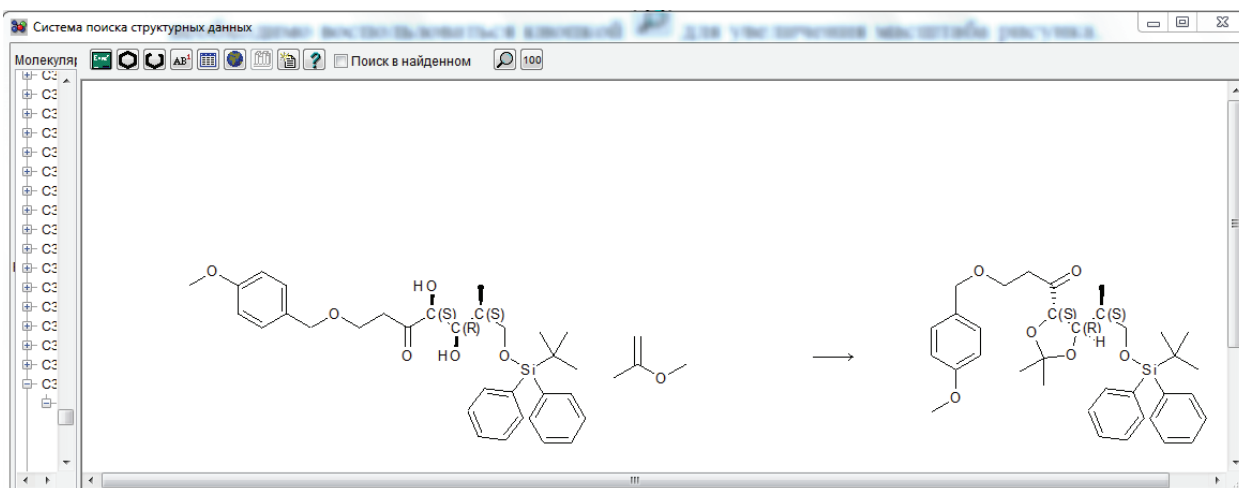
Если объем найденной информации слишком велик, следует включить данную опцию и далее применять к результатам поиска описанные выше правила.


- Увеличение масштаба изображения

Если элементы изображения химической структуры плохо различимы, например, как на рисунке, приведенном, ниже,



необходимо воспользоваться кнопкой  для увеличения масштаба рисунка:



Привести его к исходному виду поможет кнопка .