

Федеральная служба по интеллектуальной собственности  
(Роспатент)

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ

ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИНСТИТУТ ПРОМЫШЛЕННОЙ СОБСТВЕННОСТИ

(ФИПС)

**РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ:**

**ХИМИЧЕСКИЙ ПОИСК В СИСТЕМЕ PATENTSCOPE**

**НА САЙТЕ ВОИС**

Москва 2018

## СОДЕРЖАНИЕ

Начало работы .....	3
Поисковая страница .....	5
Страница результатов поиска .....	12
Страница информации о документе.....	14
Графический редактор системы PATENTSCOPE.....	17

## Начало работы

Функция химического поиска системы PATENTSCOPE позволяет бесплатно искать информацию о химических соединениях в патентной документации. Поиск может быть проведён по структуре химического вещества, его названию или идентификатору (InChI, SMILES).

Поиск химической информации проводится только в некоторых массивах: заявок РСТ на английском и немецком языках с 1978 г., патентных документов США с 1979 г. и документах из других коллекций в объёме рисунков, включённых в формулу или описание. При этом в область поиска включаются только документы, которым присвоен хотя бы один индекс МПК, относящийся к химии.

Поиск химических соединений работает только для индивидуальных веществ, т.е. не выполняется для групп веществ, выраженных формулой Маркуша. Не выполняется также поиск полимеров, содержащих повторяющиеся фрагменты в неопределённом количестве (обычно выражаемые в структурной формуле параметрами  $n$ ,  $m$ ). Структурный поиск не проводится для простых веществ (например,  $H_2O$ ), но такие вещества могут быть найдены по названиям.

Поиск химических реакций в PATENTSCOPE также не осуществляется.

Адрес поисковой страницы системы PATENTSCOPE: <https://patentscope.wipo.int/search/en/search.jsf>. Для выполнения поиска химических соединений рекомендуется использовать англоязычный интерфейс, в русскоязычном интерфейсе он не работает.

Химический поиск становится доступен после входа в систему под именем зарегистрированного пользователя, в качестве которого используется адрес электронной почты. Для бесплатной регистрации используют опцию “Account Sign Up” меню “Login” (см. рис. 1).



Рисунок 1 – Регистрация в поисковой системе PATENTSCOPE

При регистрации, кроме адреса электронной почты, пользователю следует указать своё имя и придумать пароль, который будет использоваться для входа в систему. После регистрации на указанный адрес электронной почты пользователя приходит письмо со ссылкой для подтверждения регистрации.

Для последующих вхождений в область химического поиска системы PATENTSCOPE используют опцию “Login” меню “Login” (см. рис. 1), где вводят адрес электронной почты и пароль. Чтобы функция химического поиска оставалась доступна на определённом компьютере при следующем входе на поисковую страницу PATENTSCOPE, ставят галочку на опции “Stay signed in”.

Наличие учетной записи в PATENTSCOPE позволяет также загружать списки результатов поисков до 10 000 документов, сохранять поисковые запросы и пользовательские настройки интерфейса.

Для поиска информации о химических соединениях выбирают опцию “Chemical compounds” меню “Search” (см. рис. 2). Эта опция становится доступной только после входа в систему под именем зарегистрированного пользователя.



Рисунок 2 – Вид главного окна PATENTSCOPE с опцией химического поиска

### Поисковая страница

Страница поиска химических соединений “Chemical compounds search” в PATENTSCOPE имеет вид, показанный на рис. 3. В PATENTSCOPE поддерживается 3 вида поиска химических соединений. Для выполнения каждого вида поиска предназначена отдельная опция меню:

1. **Structure editor** (открывается по умолчанию, см. рис. 3) – графический редактор, позволяющий рисовать и редактировать химические структуры. Принципы работы в графическом редакторе подробно описаны ниже;
2. **Convert structure.** В этом виде поиска исходными терминами могут быть название соединения (в т.ч. коммерческое, тривиальное, по номенклатуре CAS или IUPAC), международное непатентуемое наименование (INN), а также идентификаторы InChI, InChIkey или SMILES;
3. **Upload a structure** позволяет загружать химическую структуру в поддерживаемом формате (MOL, PNG, GIF, TIFF, JPEG) для дальнейшего преобразования в структурном редакторе.

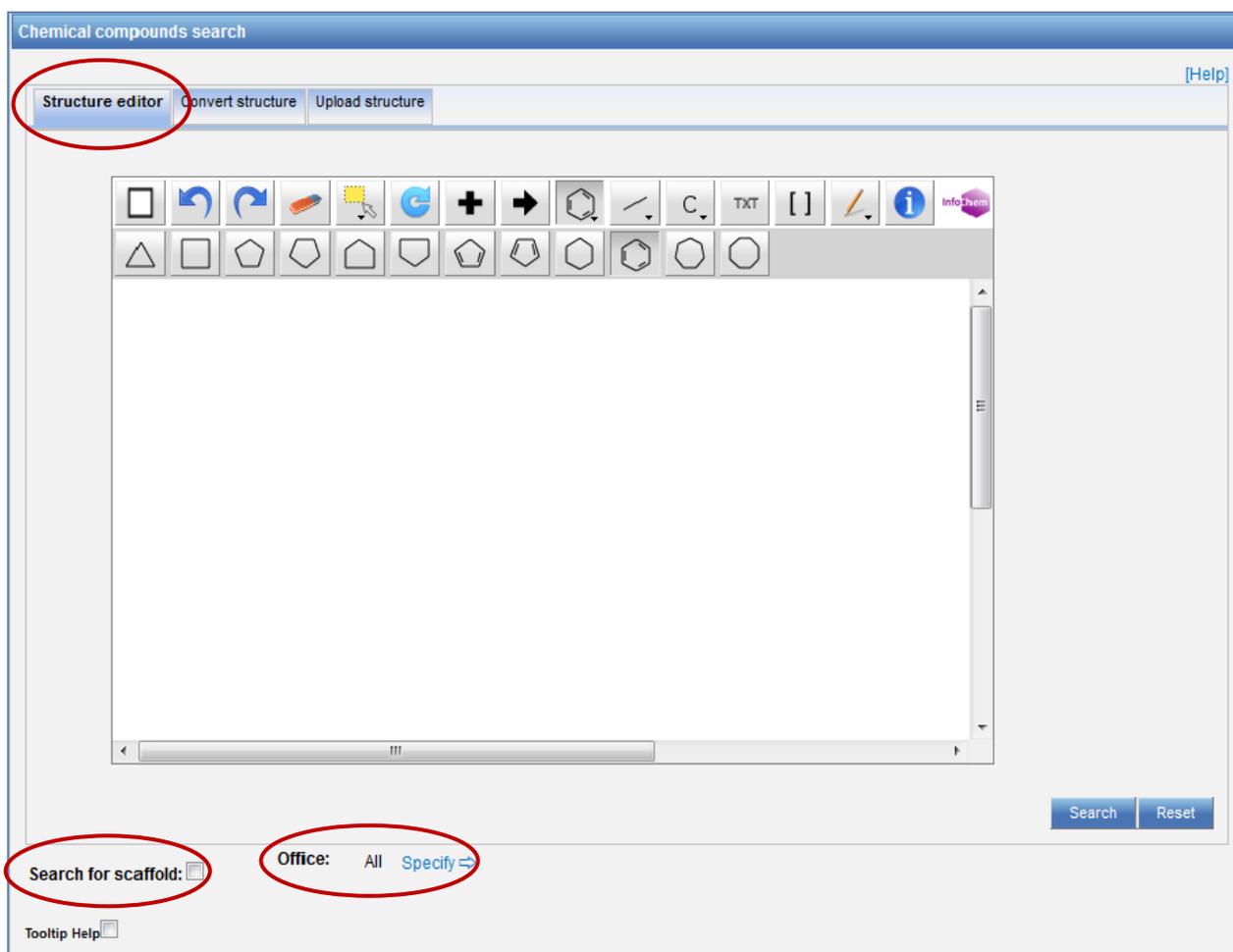


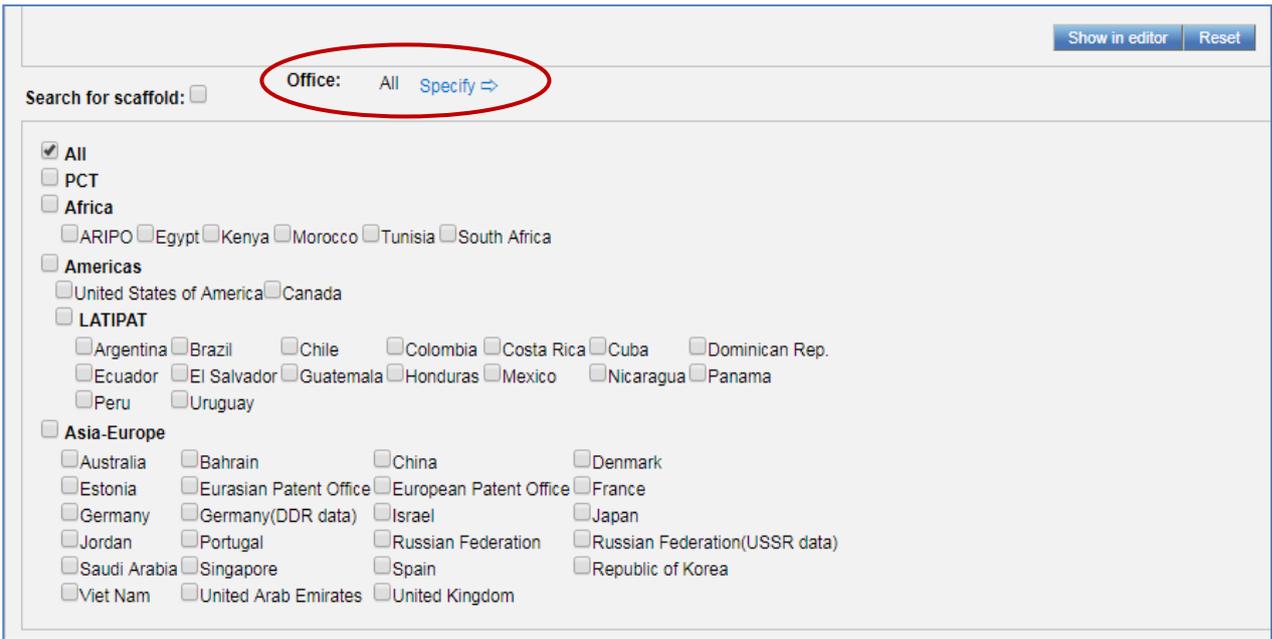
Рисунок 3 – Вид графического редактора на странице поиска химических соединений в PATENTSCOPE, с тремя видами химического поиска

В нижней части страницы любого из трех видов химического поиска имеется опция поиска по скелету химического соединения "Search for scaffold" (см. рис. 3). По умолчанию эта опция не отмечена, т.е. проводится поиск конкретного соединения в том виде, как оно задано. Отметив опцию "Search for scaffold", пользователь задаёт поиск по скелету химической структуры с возможно разными заместителями. Количество результатов поиска при этом может увеличиться.

На поисковой странице можно также с помощью ссылки "Office: Specify" отметить коллекции – массивы патентных документов разных стран мира, в которых будет проводиться поиск (см. рис. 3).

Перечень коллекций поисковых массивов в PATENTSCOPE приведён на

рис. 4. По умолчанию выбраны все коллекции (All). При выборе коллекций патентных документов следует учитывать, что в PATENTSCOPE не все они включены в область поиска химических соединений. Поиск проводится во всех коллекциях только в объёме рисунков, имеющих отношение к структурам химических соединений. Поиск по названиям химических веществ осуществляется только в двух коллекциях: массиве PCT на английском и немецком языках и массиве United States of America с 1979 г., см рис. 4.



The screenshot shows the PATENTSCOPE search interface. At the top right, there are two buttons: "Show in editor" and "Reset". Below them, the "Office:" filter is set to "All" and is circled in red. To the left of the "Office:" filter is a "Search for scaffold:" input field. Below the "Office:" filter, there is a list of checkboxes for various patent offices and regions. The "All" checkbox is checked. The list includes:

- All
- PCT
- Africa
  - ARIPO
  - Egypt
  - Kenya
  - Morocco
  - Tunisia
  - South Africa
- Americas
  - United States of America
  - Canada
- LATIPAT
  - Argentina
  - Brazil
  - Chile
  - Colombia
  - Costa Rica
  - Cuba
  - Dominican Rep.
  - Ecuador
  - El Salvador
  - Guatemala
  - Honduras
  - Mexico
  - Nicaragua
  - Panama
  - Peru
  - Uruguay
- Asia-Europe
  - Australia
  - Bahrain
  - China
  - Denmark
  - Estonia
  - Eurasian Patent Office
  - European Patent Office
  - France
  - Germany
  - Germany(DDR data)
  - Israel
  - Japan
  - Jordan
  - Portugal
  - Russian Federation
  - Russian Federation(USSR data)
  - Saudi Arabia
  - Singapore
  - Spain
  - Republic of Korea
  - Viet Nam
  - United Arab Emirates
  - United Kingdom

Рисунок 4 – Выбор поисковых коллекций в PATENTSCOPE

Страница вида поиска **“Convert structure”** (см. рис. 5) открывается при нажатии на соответствующую кнопку меню страницы химического поиска в PATENTSCOPE. На этой странице можно проводить поиск по названию или идентификатору химического соединения. По умолчанию поиск проводится по названию вещества (Compound name). В качестве названия можно вводить тривиальное, торговое название, систематическое название по номенклатуре IUPAC или название по номенклатуре CAS.

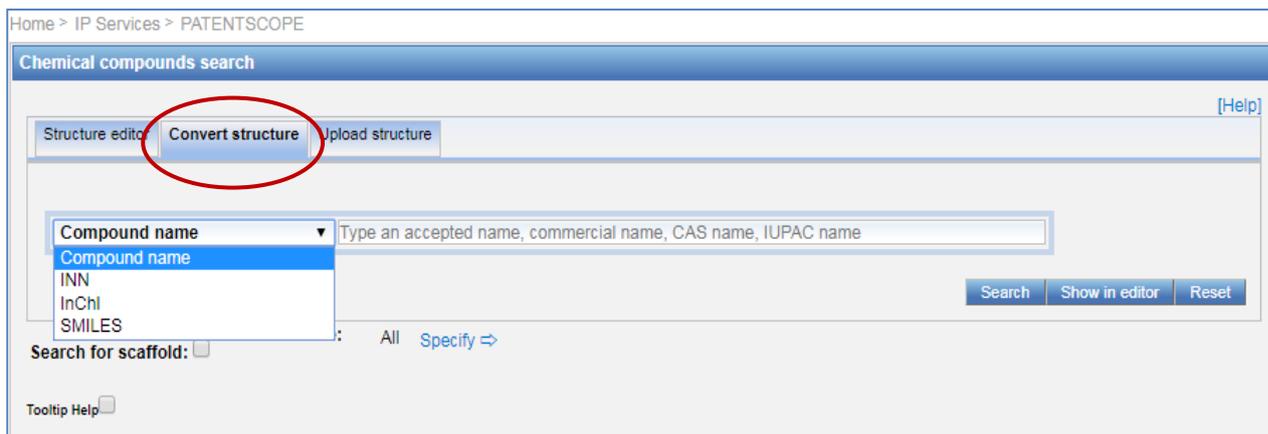


Рисунок 5 – Страница поиска по названиям и идентификаторам химических веществ в PATENTSCOPE

Выбрав в выпадающем списке слева опцию «INN», можно в качестве поискового термина ввести международное непатентуемое наименование. При выборе этой опции в поисковом окне справа отображается список существующих INN на английском языке. При вводе в поле «INN» начальных букв названия лекарственного средства на английском языке появляется список названий соединений в алфавитном порядке, начинающихся на введённые буквы. На рис. 6 в качестве примера приведён вид страницы «Convert structure» при вводе в поле «INN» последовательности букв «amp».

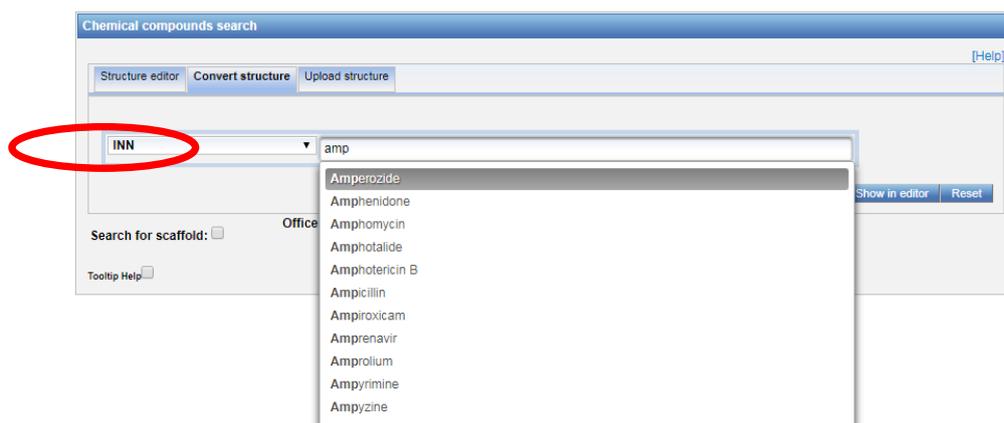


Рисунок 6 – Список в поле поиска «INN» при вводе начальных букв названия соединения

В виде поиска «Convert structure» можно также проводить поиск по идентификаторам химического соединения InChI или SMILES, выбрав

соответствующую опцию из выпадающего списка. Эти идентификаторы используются во многих базах данных химических соединений (например, PubChem и ChemSpider).

После введения названия или идентификатора химического соединения в поисковое окно можно сразу провести поиск информации о нём, нажав на кнопку “Search”, а можно предварительно просмотреть структурную формулу и другие идентификаторы, сгенерированные системой исходя из введённого термина. Для этого нажимают на кнопку “Show in editor”, после чего происходит переход на страницу графического редактора “Structure editor”. На открывшейся странице отображается структурная формула искомого соединения и соответствующие идентификаторы: InChI, InChiKey, брутто-формула (Molecular Formula) и молекулярный вес. На рисунке 7 показана страница графического редактора, соответствующая названию «aspirin».

Функция предварительного просмотра структуры химического соединения, сгенерированной исходя из названия или идентификатора, может быть полезна в том случае, когда нужно провести поиск соединения, являющегося производным какого-либо известного соединения (особенно, если это соединение имеет сложную структуру). В этом случае можно ввести название известного соединения в поисковое окно страницы “Convert structure”, получить его структуру и произвести необходимые изменения, пользуясь функциями графического редактора.

Убедившись, что отображаемая структура совпадает с искомой, проводят поиск обычным образом (используя кнопку “Search” в нижней части страницы).

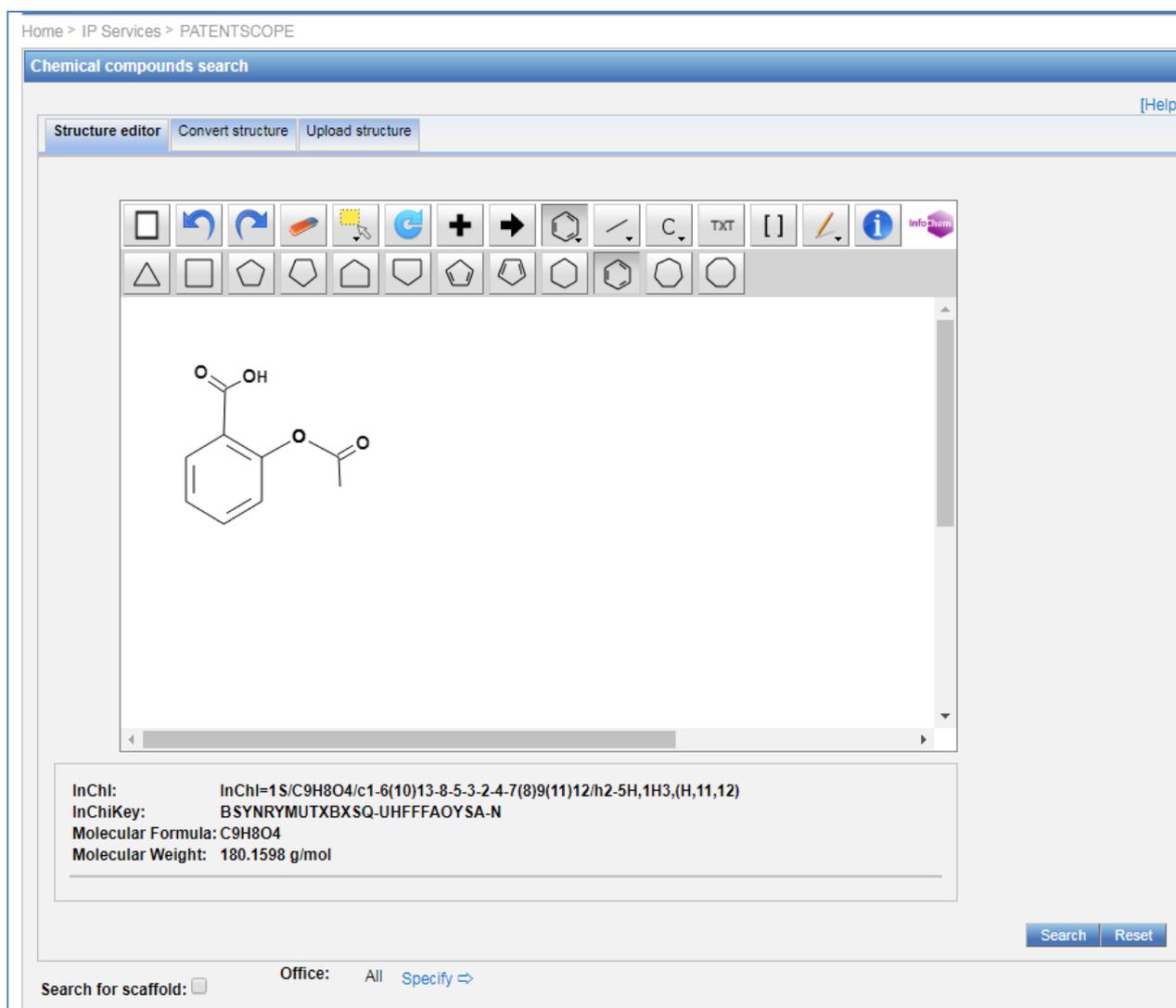


Рисунок 7 – Страница графического редактора в PATENTSCOPE с отображением структуры и идентификаторов химического соединения

Страница, открывающаяся при нажатии на опцию меню «**Upload a structure**», предназначена для загрузки структуры химического соединения, если эта структура уже имеется в виде изображения в любом поддерживаемом системой формате (TIFF, JPEG, GIF, MOL, PNG, SMILES). Вид страницы представлен на рисунке 8.

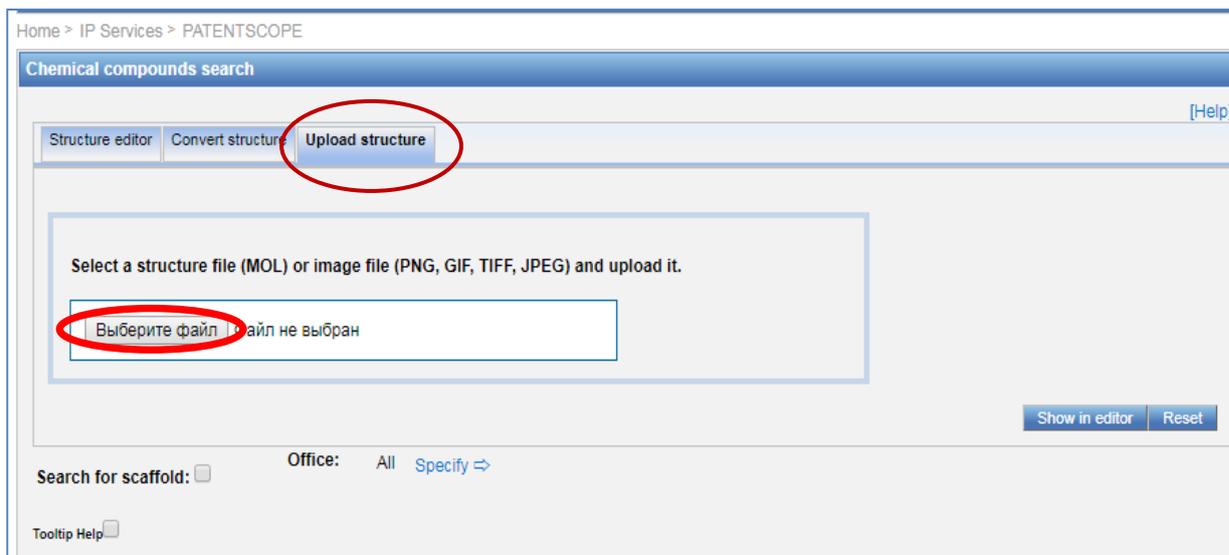


Рисунок 8 – Страница загрузки файла со структурой химического соединения

Для загрузки файла нажимают на кнопку «Выберите файл». Перед проведением поиска загруженный файл должен быть распознан системой и преобразован в формат, используемый в PATENTSCOPE. Поэтому кнопка “Search” на данной странице отсутствует, и после загрузки файла нужно перейти к отображению идентификаторов химического соединения в графическом редакторе “Structure editor” (для этого нажимают на кнопку “Show in editor”). Вид открывающейся страницы графического редактора представлен на рисунке 7. С этой страницы уже можно провести поиск по структуре соединения.

На любой из трех видов поисковых страниц описанных выше имеется возможность задать только 3 параметра для поиска: собственно искомое химическое соединение (в виде структуры, названия или идентификатора), отметить опцию поиска по конкретному соединению или его «скелету», а также выбрать поисковые коллекции. Ограничить область поиска другими параметрами (например, датой публикации) можно только после проведения поиска на странице результатов.

## Страница результатов поиска

На странице результатов поиска система выдаёт обычный для PATENTSCOPE список релевантных документов. В верхней части страницы отображается количество найденных документов и критерии выполненного запроса. Чуть ниже имеется окно “Refine Search”, в котором после проведения поиска по структуре или названию химического соединения отображается соответствующий идентификатор InchKey (поисковое поле - CHEM). На рисунке 9 показан вид страницы результатов поиска по названию «paracetamol».

Home > IP Services > PATENTSCOPE

Results 1-10 of 35,711 for Criteria:CHEM:(RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N) Office(s):all Language:EN Stemming: true

prev 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 next Page: 1 / 3572 Go >

Refine Search CHEM:(RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N) Search RSS

Instant Help

Analysis

Sort by: Pub Date Desc View Simple List Length 10 Machine translation

Int.Class	Appl.No	Title	Applicant	Ctr	PubDate
1. WO/2017/118911	A61K 31/202	PHARMACEUTICAL COMPOSITIONS COMPRISING DGLA AND USE OF SAME	DIGNITY SCIENCES LIMITED	WO	13.07.2017
The present disclosure provides orally deliverable pharmaceutical compositions comprising DGLA and methods of using same to treat a variety of conditions and disorders.					
2. WO/2017/120344	A61K 39/395	METHODS FOR INHIBITING FIBROSIS IN A SUBJECT IN NEED THEREOF	UNIVERSITY OF LEICESTER	WO	13.07.2017
In one aspect, the invention provides methods for treating, inhibiting, alleviating or preventing fibrosis in a mammalian subject suffering, or at risk of developing a disease or disorder caused or exacerbated by fibrosis and/or inflammation. In one embodiment, the invention provides methods of treating a subject suffering from renal fibrosis. In one embodiment, the invention provides methods of reducing proteinuria in a subject suffering from a renal disease or condition associated with proteinuria. The methods comprise the step of administering, to a subject in need thereof, an amount of a MASP-2 inhibitory agent effective to inhibit MASP-2-dependent complement activation.					
3. WO/2017/120601	A61K 39/395	METHODS AND DEVICES FOR TREATING POSTERIOR OCULAR DISORDERSWITH AFLIBERCEPT AND OTHER BIOLOGICS	CLEARSIDE BIOMEDICAL, INC.	WO	13.07.2017
The present invention relates to methods and devices for treating wet AMD, CNV, wet AMD associated with CNV and/or wet AMD associated with RVO in a human subject in need thereof. In certain aspects, devices provided herein include a medicament container defining a lumen configured to contain a medicament, a distal end portion of the medicament container including a coupling portion configured to be removably coupled to a needle assembly, a proximal end portion of the medicament					

Рисунок 9 – Страница списка результатов поиска системы PATENTSCOPE

В окне “Refine Search” можно комбинировать результаты проведённого поиска с другими параметрами. Например, можно вводить дополнительные термины, которые должны присутствовать в искомым документах, или ограничить область поиска датой публикации. Нужные параметры задаются с

использованием обычного поискового языка PATENTSCOPE. Например, чтобы ограничить список результатов только документами, опубликованными ранее определённой даты, к запросу добавляют выражение *AND DP:[19780101 TO YYYYMMDD]*, где YYYYMMDD – год, месяц и день соответствующей даты. Для получения списка документов, ограниченного введёнными параметрами, снова нажимают на кнопку “Search”.

По умолчанию в списке результатов отображается по 10 документов на странице. Если документы по введённому запросу не найдены, в верхней части страницы отображается фраза “Results 1-10 of 0”.

Под окном “Refine Search” находится панель “Analysis”, которую можно использовать для анализа и/или ограничения списка результатов некоторыми параметрами: страна публикации, индекс МПК, автор, заявитель и год публикации. С помощью этой же панели можно формировать графическое представление результатов анализа.

Над списком результатов имеются обычные для PATENTSCOPE опции для изменения вида списка:

- Сортировка (Sort by) возможна по дате публикации или дате подачи заявки (по возрастанию или по убыванию), по умолчанию выполняется сортировка по дате публикации по убыванию.
- Информация, отображаемая для каждого документа в списке (View). По умолчанию отображаются все сведения (All): библиографические данные (номер публикации, название, дата публикации, индекс МПК, номер заявки, заявитель и автор) и реферат. Можно выбрать из выпадающего списка другой формат: показывать только библиографию (Simple) или добавить к любому из представлений рисунок (Image).
- Количество результатов на странице (List Length). По умолчанию выдаётся по 10 документов; можно выбрать из выпадающего списка 50, 100 или 200.
- Машинный перевод информации в списке (“Machine translation”). При наведении курсора на эту опцию система предлагает на выбор 4



## Рисунок 10 – Текст документ с распознанными названиями химических соединений в системе PATENTSCOPE

Название химического соединения, которое найдено в результате поиска, в тексте документа выделяется цветом. Например, в результате поиска по названию «paracetamol» находим документ, в котором это соединение названо «acetaminophen» (см. рис. 10).

Отличительной чертой страницы информации о документе, полученном в результате химического поиска, является наличие вкладки в меню просмотра документа “Compounds”- “Химическое соединение” (см. рис. 11). При нажатии кнопки “Compounds”, отображаются структурные формулы (иногда с названиями) всех химических соединений, которые были распознаны в тексте данного патентного документа. Опция “Compounds”, в свою очередь, содержит вкладки подменю, соответствующие отдельным частям текста документа: Title, Abstract, Description и Claims.

1. (WO2017118911) PHARMACEUTICAL COMPOSITIONS COMPRISING DGLA AND USE OF SAME

PCT Biblio. Data Description Claims National Phase Notices **Compounds** Drawings Documents

Title Abstract **Description** Claims

Paracetamol

Phenylephrine

Methotrexate

Amide

Azathioprine

Loratadine

Fexofenadine

Carvedilol

Navigation: <<<< << < 1 2 > >> >>>>

Рисунок 11 – Вкладка “Compounds” – “Химические соединения” в главном меню просмотра документа системы PATENTSCOPE

Химические структуры отображаются в той части подменю патентного документа, в котором упомянуты данные соединения (см. рис. 11). На одной странице вкладки “Compounds” может отображаться по 24 химических соединения. В нижней части страницы находится линейка перемещения между страницами.

При наведении курсора на какую-либо структуру она увеличивается (на рис. 11 показано увеличение структуры циклоспорина). При нажатии на структуру открывается вкладка в той части текста документа, в которой упомянуто данное соединение. Во вкладках Description и Claims

соответствующее название химического вещества выделяется цветом.

## Графический редактор системы PATENTSCOPE

### Инструкция по работе в графическом редакторе системы PATENTSCOPE

Встроенный в систему PATENTSCOPE графический редактор «Structure editor» позволяет рисовать и редактировать химические структуры для последующего проведения поиска в патентных документах. Страница графического редактора открывается по умолчанию при переходе к поиску химических соединений “Chemical compounds” (см. рис. 2). На рис. 3 показано окно графического редактора.

Важно: Структурный редактор работает корректно, если на ПК пользователя установлена программа JavaScript версии 3.0.1 и выше.

Данный графический редактор создан сторонней компанией и предназначен для использования в различных поисковых системах с различной функциональностью. Некоторые предусмотренные в этом редакторе опции не поддерживаются в системе PATENTSCOPE в связи с её ограниченной функциональностью, например:

1. Несмотря на наличие в графическом редакторе опций для рисования соединений, содержащих R-группы (т.е. формул Маркуша), поиск осуществляется *только по конкретному* химическому соединению. *Поиск по формуле Маркуша не производится.*

2. В редакторе имеются опции для рисования химических реакций, но поиск химических реакций не осуществляется.

Имеются также другие опции графического редактора, не поддерживаемые системой PATENTSCOPE.

Ниже описаны только те опции графического редактора, которые используются для создания или редактирования химических структур с целью их дальнейшего поиска в PATENTSCOPE.

Вид меню структурного редактора показан на рисунке 12.



Рисунок 12 – Меню структурного редактора химического поиска в PATENTSCOPE

Верхняя часть меню представляет собой основную панель кнопок, а нижняя дополнительная панель открывается как подменю для кнопок из верхней части, содержащих черный треугольник в правой нижней части пиктограммы. Например, при нажатии на кнопку в виде бензольного кольца



открывается нижняя панель с шаблонами циклических структур (см. рис. 12).

Ниже описана функциональность кнопок основной панели.



- удаление всех объектов из области рисования;



- отмена последней операции (комбинация клавиш CTRL + Z);



- повтор последней операции (комбинация клавиш: CTRL + Y);



- удаление объекта. Удаляется объект(ы) (атом, связь, молекула, текст), который пользователь выделил мышью с помощью прямоугольника выделения (клавиша Delete);



- панель кнопок выделения. При нажатии на данную кнопку на нижней панели отображаются две кнопки с вариантами выделения области.

Первая кнопка  используется для выделения части объекта с помощью

прямоугольника, а вторая кнопка  - для выделения объекта целиком щелчком на нём. Выбранные объекты затем могут быть перемещены, удалены или скопированы с использованием контекстного меню, строки меню или соответствующих сочетаний клавиш;



- поворот выбранных объектов вокруг оси с помощью мыши;



- панель колец. На дополнительной панели отображаются варианты кольцевых структур, содержащих от 3 до 8 атомов:



. Чтобы нарисовать кольцо, нужно щелкнуть на соответствующей кнопке левой кнопкой мыши, а затем – в области рисования. Чтобы создать конденсированную структуру, выбирают присоединяемое кольцо в области рисования, нажимают на атом присоединения в исходном кольце и, удерживая кнопку мыши, тащат кольцо в нужном направлении.



- панель химических связей. На нижней панели отображаются кнопки разных видов химических связей, а также кнопка для рисования углеродных цепей и кнопка определения свойств выделенной связи:



Кнопка  - с её помощью добавляют на рисунок одинарную связь (прищелчке мышью в области рисования или при перетаскивании мышью связи между двумя атомами). Щёлкая несколько раз по связи, можно трансформировать её последовательно в двойную, тройную и вновь в одинарную связь;

Кнопки  и  - нарисовать двойную или тройную связь соответственно либо изменить существующую связь на двойную или тройную;

Кнопки  и  - нарисовать стереохимическую связь, направленную вверх или вниз от плана, либо изменить существующие связи на стерео-связи. Дополнительный щелчок на связи изменяет направление клина;

Кнопка  - нарисовать цепочку атомов углерода;

 - панель атомов. Нижняя панель содержит кнопки для рисования элементов C, N, O, S, кнопку диалогового окна для определения свойств выделенного атома, кнопку выбора элементов из периодической таблицы, и кнопку последнего выбранного элемента (кроме C, N, O, S):



Кнопка  открывает периодическую таблицу для выбора химического элемента, кроме C, N, O, S, показанную на рисунке 13. Для выбора элемента из таблицы щёлкают на нём мышью. Знак выбранного элемента отображается на последней кнопке панели атомов для его дальнейшего использования при рисовании химической структуры. Выбранный элемент будет активен до тех пор, пока пользователь не выберет другой элемент.

В нижней части диалогового окна «Периодическая таблица» находятся кнопки “Query atoms” для рисования обобщенных атомов A, Q и X, а также R-групп для формул Маркуша. Поскольку поиск в PATENTSCOPE проводится только по индивидуальным структурам, в этом руководстве данная функция не описана.

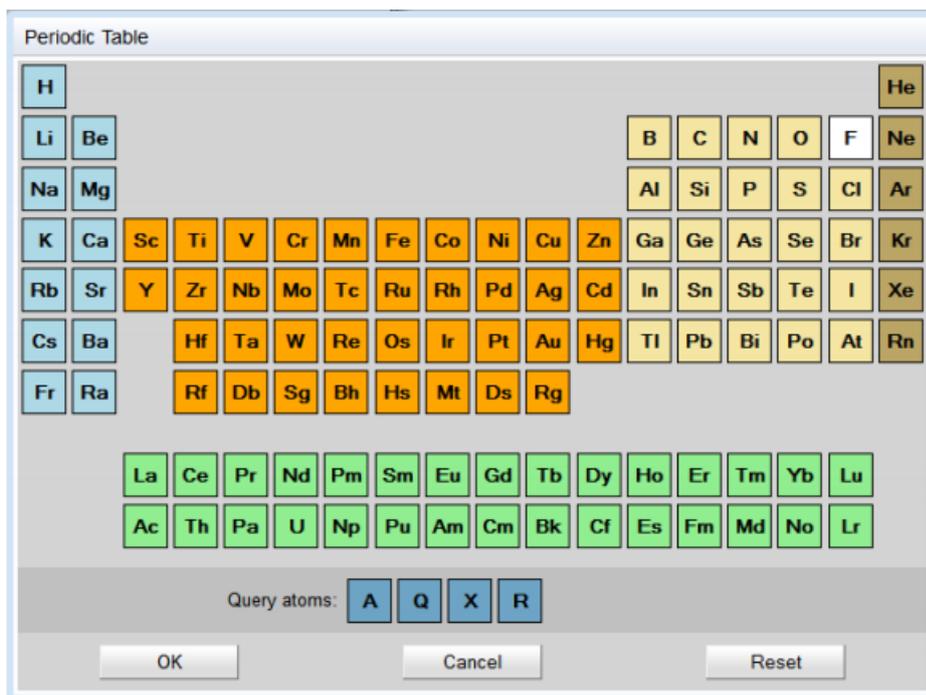


Рисунок 13 – Вид диалогового окна «Периодическая таблица» на панели «АТОМЫ»

Кнопка  открывает диалоговое окно редактирования свойств атомов (см. рис. 14). Диалоговое окно состоит из двух вкладок: для определения свойств атома (открывается по умолчанию) и функций атома.

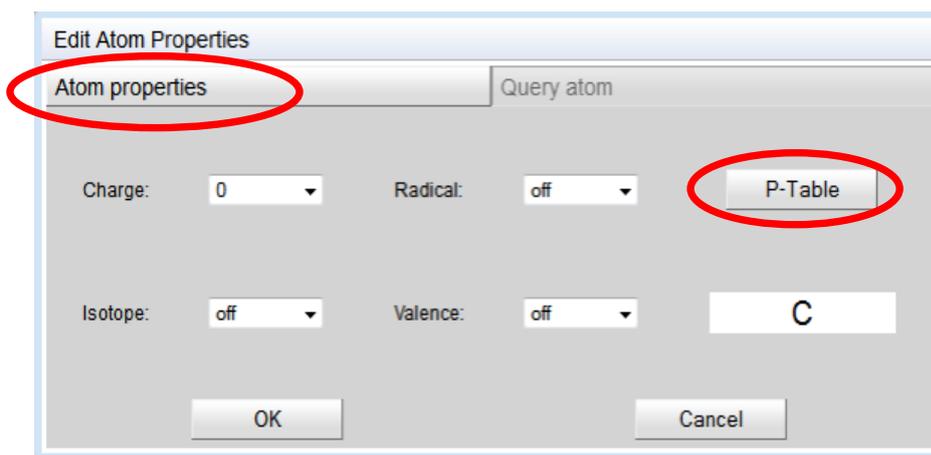


Рисунок 14 – Вид диалогового окна «Свойства атома» на панели кнопок «АТОМЫ»

Вкладка “Atom properties” (Свойства атома) служит для определения заряда, изотопа, радикала и валентности выделенного атома. Кнопка “P-Table” открывает диалог «Периодическая таблица».

Вкладка "Query atom" данного диалогового окна предназначена для определения функций, не поддерживаемых химическим поиском в PATENTSCOPE, и поэтому здесь не описана.

 - ввод текста. Активирует курсор ввода текста в области рисования в выбранной позиции. Наличие текста в области рисования не влияет на результаты поиска;

 - нарисовать скобки;

 - определить фрагменты в формуле Маркуша (данная функциональность в PATENTSCOPE не поддерживается);

 - информация о графическом редакторе.

В редакторе имеется также **контекстное меню**, которое открывается при щелчке правой кнопки мыши на области рисунка, связях, атомах или выбранных объектах. В контекстном меню доступны следующие функции:

- *Edit* (изменить): доступна при щелчке на связи или атоме «Edit Bond» или «Edit Atom» (изменить связь или атом соответственно). При выборе данной команды открывается диалоговое окно редактирования выбранной связи(зей) атома(ов). Данная функция описана ниже.
- *Copy*: копирование выбранного объекта во внутренний буфер памяти
- *Paste*: вставка объекта(ов) из внутреннего буфера
- *Duplicate Object(s)*: дублирует выделенный объект(ы):

Важно: три описанных выше опции «Копировать», «Вставить» и «Дублировать объекты» работают только в рамках редактора химических соединений. Пользователь не сможет копировать/вставлять и дублировать созданные объекты в другие приложения Windows.

- *Delete*: удаление выделенного атома(ов) или связи(ей). То же можно сделать с помощью клавиши Delete на клавиатуре.

Остальные функции контекстного меню в химическом поиске PATENTSCOPE не поддерживаются.

Кроме того, при работе в графическом редакторе PATENTSCOPE действуют следующие комбинации клавиш:

«Ctrl + A»: выбор всех объектов в области рисования;

«Ctrl + Z»: отмена последней операции;

«Ctrl + Y»: отмена последней отмененной операции.

## **Практические рекомендации по использованию некоторых опций графического редактора**

### *Рисование объектов*

Чтобы нарисовать атомы или связи, нажмите соответствующую кнопку, а потом на нужное место в области рисования. Можно изменить расположение атомов или связей, перетащив объект в нужное место при нажатой кнопке мыши.

Чтобы нарисовать одно кольцо, выберите соответствующую кнопку шаблона, и щелкните в области рисования. Для рисования конденсированного кольца нажмите на существующую кольцевую связь в месте конденсации.

Чтобы соединить кольца в спиро-молекулы, нажмите на атом имеющегося кольца в месте присоединения и при нажатой кнопке мыши перетащите присоединяемое кольцо в нужном направлении. Если просто щёлкнуть на месте присоединения, между кольцами по умолчанию появляется связь.

### *Выбор объектов*

Чтобы выбрать целый объект или его часть, нажмите на кнопку выбора (прямоугольник желтого цвета) и нарисуйте прямоугольник, охватывающий нужные связи и/или атомы.

Чтобы выбрать одну или несколько связей и/или атомов, щёлкните на этих атомах и/или связях при нажатой на клавиатуре кнопке «Shift».

Для выбора объекта целиком выберите правую кнопку на дополнительной панели и щёлкните на нужном объекте.

#### *Увеличение или уменьшение объектов*

Чтобы изменить размер объекта, сначала выберите объект с помощью кнопки выбора, а затем используйте двунаправленную стрелку в одном из четырех углов рамки выбора.

#### *Редактирование атомов*

Пользователь может изменить символ выбранного атома с помощью клавиатуры. Для этого выбирают атом, нажимают на соответствующую кнопку клавиатуры и затем - на клавишу ввода. Ввод символов атома не чувствителен к регистру (можно использовать как прописные, так и строчные символы).

Поддерживается также ввод с клавиатуры заряда атома и номера изотопа.

Для обозначения заряда выделяют нужный узел, вводят с клавиатуры последовательно символ атома, величину заряда и тип заряда (отрицательный или положительный). По окончании нажимают на клавишу ввода. Например, для рисования атома серы с зарядом минус два выделяют нужный узел, вводят с клавиатуры последовательность символов  $S^{2-}$  и нажимают на клавишу ввода на клавиатуре.

Для обозначения изотопной информации выделяют нужный узел, а затем вводят последовательно номер изотопа и символ атома. Например, для рисования изотопа углерода-14 вводят  $^{14}C$ .

Кроме того, символ, заряд и номер изотопа атома можно задать с помощью диалогового окна «Редактировать атом». Диалоговое окно открывается соответствующей кнопкой на панели атомов выбором опции “Edit atom” из контекстного меню (открывается нажатием правой кнопкой мыши на атом) или двойным щелчком левой кнопкой мыши на атоме.

#### *Редактирование связей*

Выберите одну или несколько связей и нажмите на них правой кнопкой мыши. Выберите «Edit Bond» в контекстном меню, чтобы открыть диалоговое окно «Редактировать связь», или дважды щелкните мышью по конкретной связи. С помощью этого диалогового окна (см. рис. 15) можно изменить тип связи (одинарная, двойная, тройная, ароматическая и др.) и добавить другие функции.

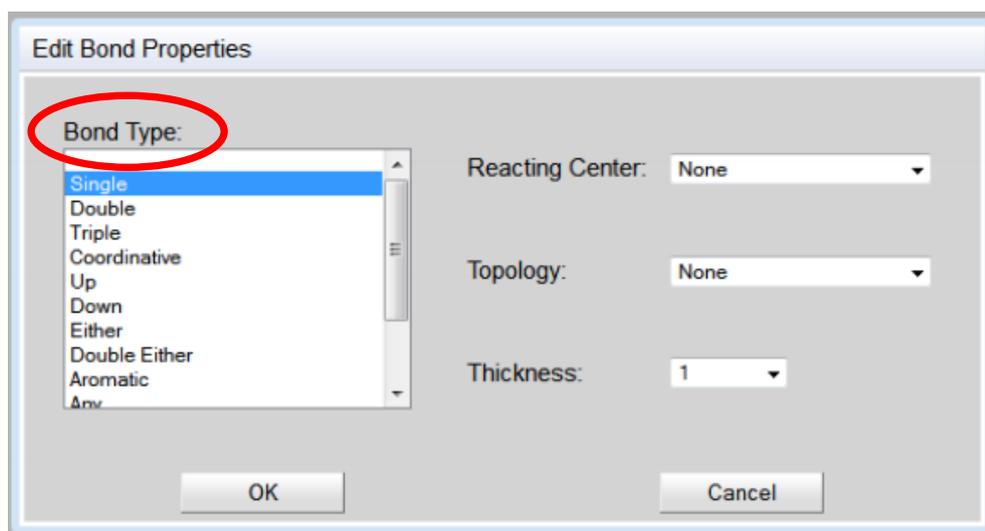


Рисунок 15 – Вид диалогового окна «Редактирование свойств химических связей»

На рисунке 16 показано представление разных типов химических связей в графическом редакторе.

—	Single	$\times$	Double Either
==	Double	====	Aromatic
===	Triple	-----	Any
▴	Up	= =	Single/Double
▾	Down	==	Single/Aromatic
↔	Either	==	Double/Aromatic

Рисунок 16 – Представление химических связей в графическом редакторе

*Добавление текста*

Пользователь может добавлять текст в область рисования. Наличие текста не влияет на результаты поиска.

Для вставки текста служит кнопка  в верхней строке меню.

Для редактирования текста сначала нажмите на кнопку выбора. Чтобы открыть диалоговое окно редактирования текста (см. рис. 17), можно дважды щелкнуть текстовую метку левой кнопкой мыши или щелкнуть текстовую метку правой кнопкой мыши и выбрать опцию «Edit Text» из контекстного меню.

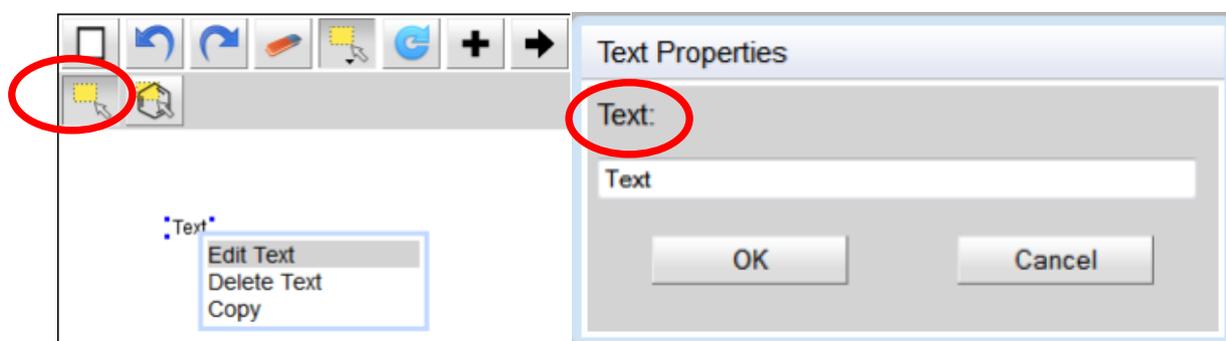


Рисунок 17 – Вид диалогового окна контекстного меню редактирования текста

Как видно из рисунка 17, с помощью контекстного меню редактирования текста можно редактировать, удалять или копировать текст.

#### *Проставление отметки о хиральности молекулы*

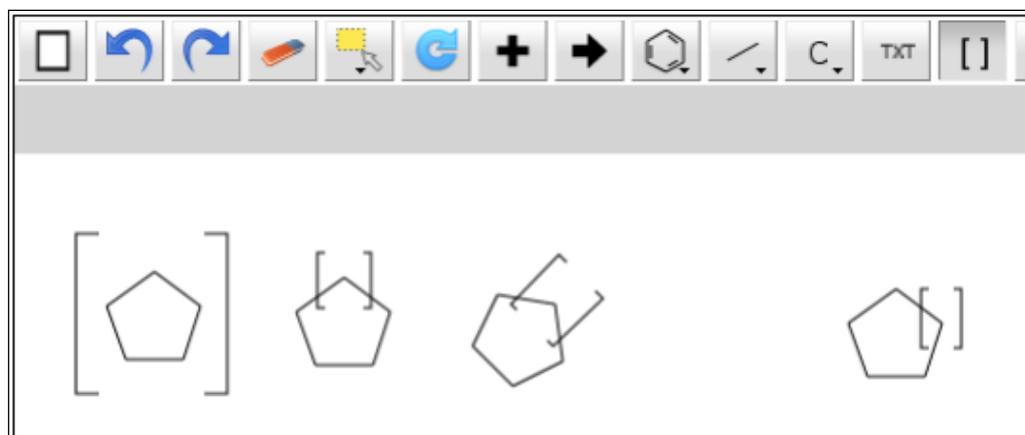
Отметка в виде текста “chiral” рядом с молекулой, имеющей стереосвязи, используется для обозначения абсолютности стереохимии данной молекулы. Чтобы добавить отметку, выберите молекулу, которую вы хотите пометить как хиральную, и используйте контекстное меню “Create Chiral Flag”.

При переводе системой названия химического соединения в его структуру при наличии хиральности молекулы данное соединение в редакторе автоматически отмечается текстом “chiral”.

Наличие или отсутствие отметки “chiral” не влияет на результаты поиска.

### Использование скобок (повторяющийся фрагмент)

Чтобы нарисовать скобки для обозначения области повторения в химической структуре, выберите кнопку «**[ ]**» в верхней строке меню и нарисуйте пару скобок в области рисунка на нужном вам месте с помощью курсора мыши. Обе скобки при рисовании *должны пересекать связи молекулы*. Перед отпусканием кнопки мыши убедитесь, что высота скобок установлена. Расстояние между скобками можно отрегулировать позже, выбрав и переместив одну из них. На рисунке 18 представлены примеры расположения скобок.



*разрешено*

*не разрешено*

Рисунок 18 – Примеры расположения скобок для задания повторения фрагмента химической структуры

При нажатии правой кнопки мыши на имеющихся скобках открывается контекстное меню (см. рисунок 19). С его помощью можно редактировать расстояние между скобками, удалять и копировать их.

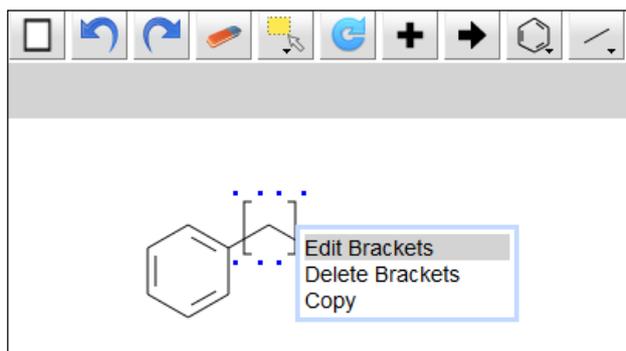


Рисунок 19 – Вид контекстного меню работы со скобками

При нажатии на опцию «Edit Brackets» открывается дополнительное меню редактирования скобок, представленное на рисунке 20. С помощью этого меню можно изменить тип скобок (Bracket Type), стиль скобок (Bracket Style: квадратные или круглые) и ввести текст для отображения рядом со скобками (Display).

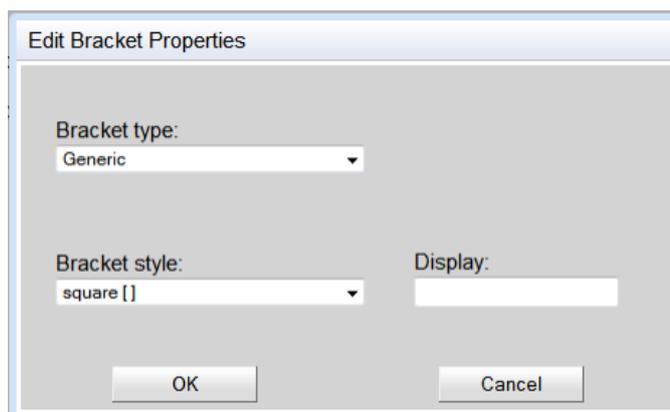


Рисунок 20 – Вид контекстного меню редактирования скобок

Тип скобки (**Bracket Type**) по умолчанию задан “Generic”, но при этом отсутствует коэффициент повторения, и поиск проводится по конкретному соединению. Для поиска соединения с заданным количеством повторений фрагмента в скобках тип скобки нужно заменить на “Multiple group” и задать нужное количество повторений в появившемся окне “Repeat count”. При выборе ещё одного вида скобок “SRU” в появляющееся окно “SRU label” можно ввести любое число, диапазон или свободный текст. Введенная таким образом информация отображается, но не будет интерпретироваться химически. Поиск проводится по изображённому соединению без учёта данных, введённых в поле “SRU label”.

На рисунке 21 представлены примеры контекстного меню при редактировании типа и стиля скобок.

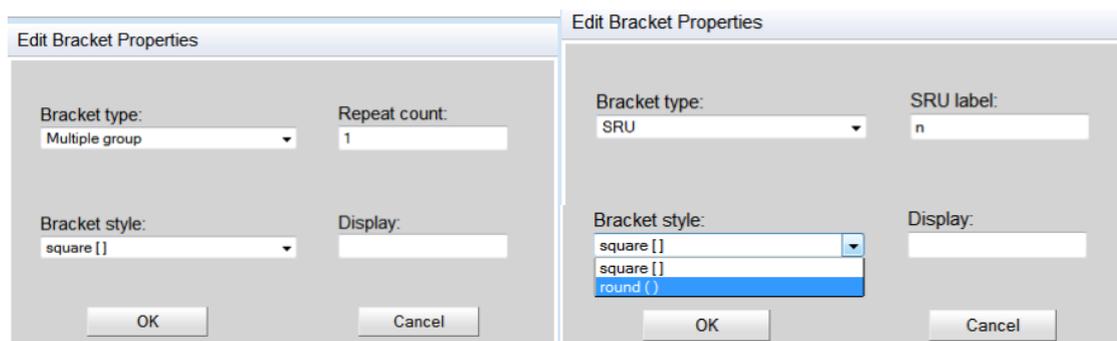


Рисунок 21 – Вид контекстного меню при редактировании типа и стиля скобок

В поле “Display” можно ввести дополнительную информацию, которая будет отображаться в верхней правой части скобок. Наличие или отсутствие этой информации не влияет на результаты поиска. На рисунке 22 показан пример отображения знака «#» в верхней правой части скобок.

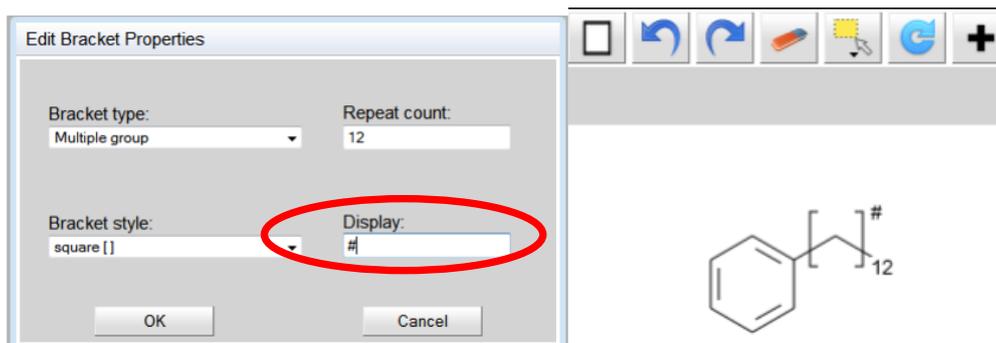


Рисунок 22 – Отображение дополнительной информации рядом со скобками