

3.4.2.2 结构预处理和生成二维结构图形

化合物结构预处理服务用于生成化合物二维结构图、计算原子价态和原子附着的隐含氢原子数目、识别化学结构中的互变异构和立体化学等信息。

此服务的功能是对化合物结构进行数据和结构分析，并将二维 MOL 文件转换成 F1 格式的文件。

化合物登录、生成化合物结构索引和建库都需要使用化合物的 F1 格式文件。

结构预处理页面，如图 3.4.1.7 所示。您可以选择 "单个 MOL 文件的转换服务" 或者 "多个 MOL 文件的批处理转换服务"。

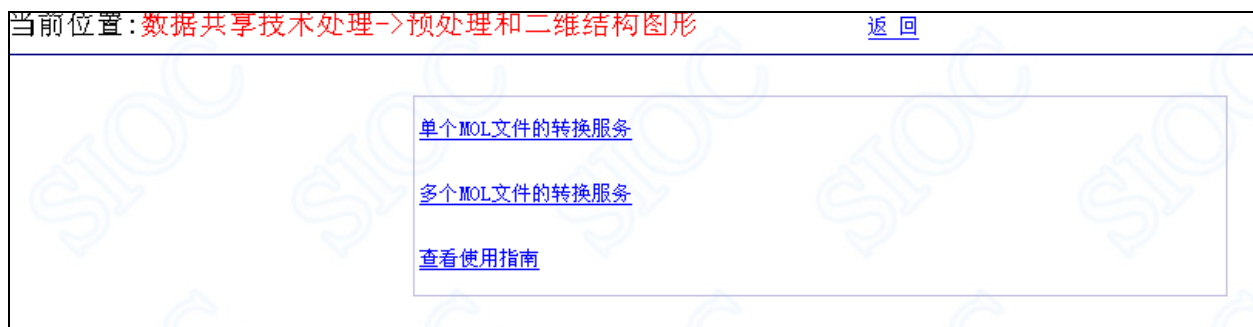


图 3.4.2.4 结构预处理页面

使用方法与示例:

多个化合物mol文件的批处理转换服务 用户在图 3.4.2.4 中点击[多个MOL文件的转换服务](#)，打开转换页面，如图 3.4.2.5。

单个化合物mol文件的转换服务 用户在图 3.4.2.4 中点击[单个MOL文件的转换服务](#)，打开转换页面，页面设置与图 3.4.2.5 相同。



图 3.4.2.5 提交作业“多个 MOL 文件转换 F1”

立体化学匹配参数的选择 立体异构体有很多种类型。用户可以选择是否需要区分立体异构体，以及区

分何种立体化学特征的异构体。

如果用户选择“清空立体参数”，则表示不区分任何立体异构体，化合物及其所有立体异构体都被视为是同一种物质，忽略一切立体化学特征的差异。

如果用户选择了至少一项立体化学特征，则系统将会把拥有不同此类特征的化合物视为不同的物质。用户未选择的立体化学特征，将被忽略。默认参数包括常见的 5 种立体化学特征，如果用户选择“使用默认参数”，则化合物及其立体异构体将为被区分开，只有拥有完全相同的立体化学特征的化合物才会被视为同一个化合物。



图 3.4.2.6 源数据的 MOL 文件

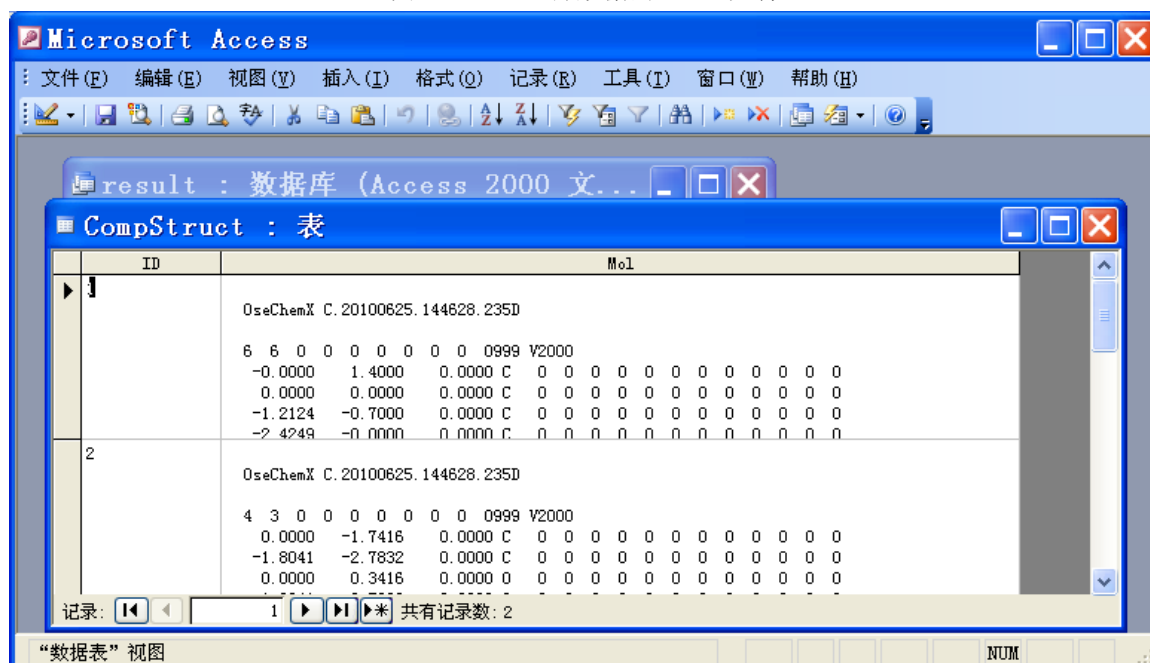


图 3.4.2.7 存储了 mol 源数据的 Access 文件

如果用户选择了结果保存为 Access 数据库，则程序完成后，将自动生成一个 Access 文件(文件将根据原压缩文件名“CIAC_test_E_Z.rar”生成一个文件名“CIAC_test_E_Z_9.mdb”，被压缩后文件名“CIAC_test_E_Z_9.rar”)，文件名后增加的_9是作业号。

生成的 Access 数据库包括了 9 张表，其中：

CompStruct 记录结构预处理生成的 F1 数据，每个化合物一条记录；

STR_Attributes 表记录了每个化合物的多项拓扑属性，包括环系统属性与计数、键属性与计数、原子属性与计数等，这些属性可用来作为全结构检索的索引；

STR_Comp2Frag 表记录了化合物与结构片断的关系；

STR_Compound 表记录化合物的基本情况，包括分子式、F1 格式、结点连接表等；

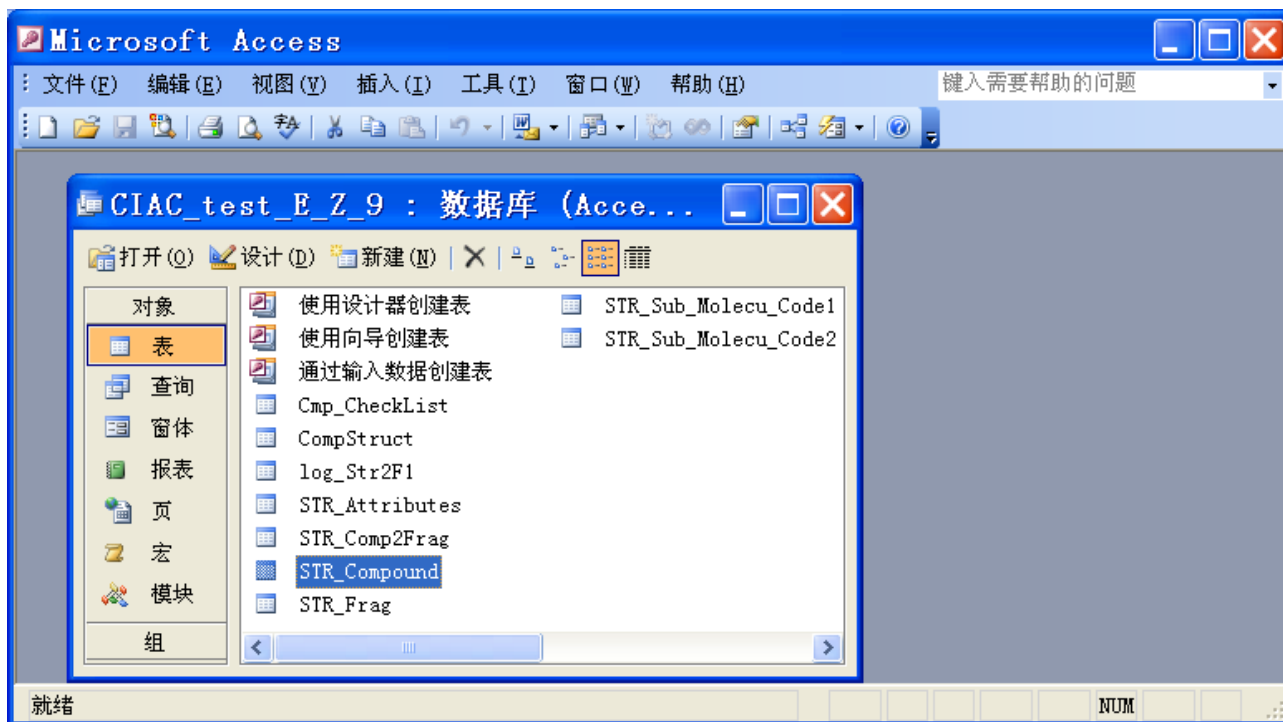


图 3.4.2.8 生成的 Access 数据库的结构

STR_Frag 表记录了化合物片断的基本情况，包括分子式、F1 格式等；

STR_Sub_Molecu_Code1 和 *STR_Sub_Molecu_Code1* 表记录了化合物的子结构索引码。

当使用 Access 数据库作为化合物结构建库服务的输入数据时，作为输出数据的化合物结构库表单将直接插入作为输入数据的 Access 数据库中，不另建化合物结构库。

Mol 文件批量转换成 F1，结果如图 3.4.2.9 所示。

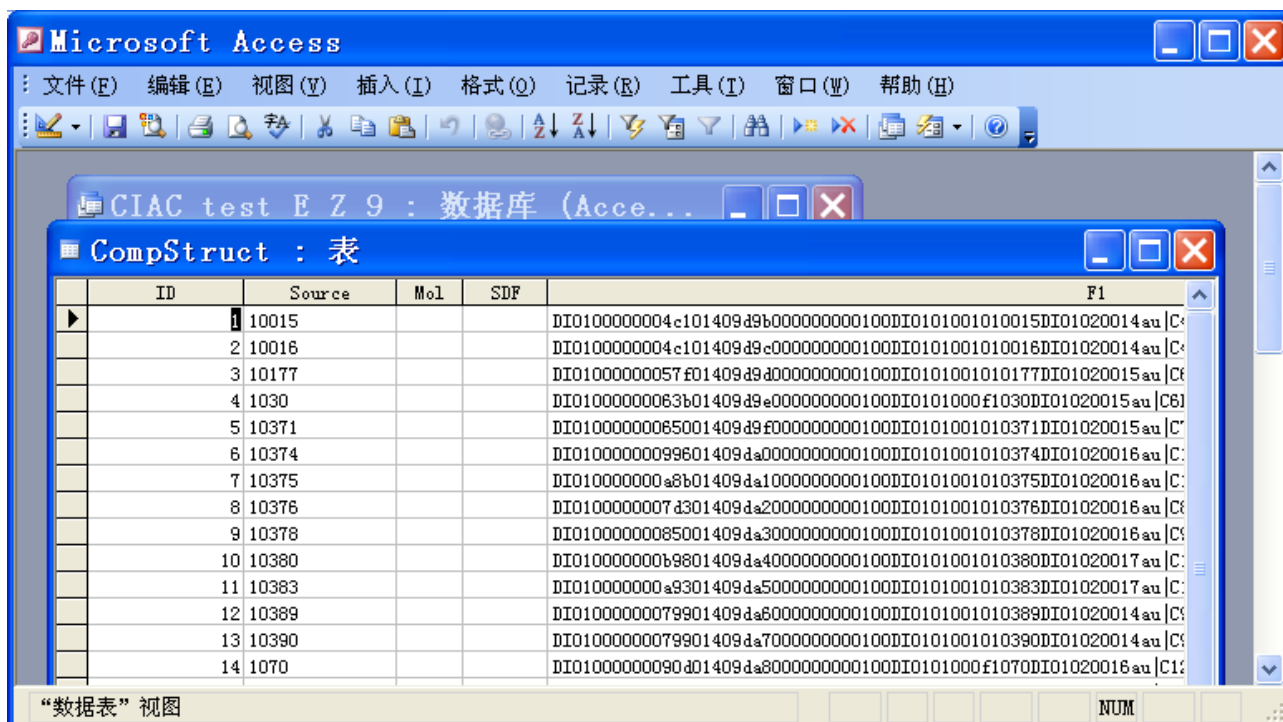


图 3.4.2.9 储存在 Access 表里的 F1

用户可用通过软件显示结构http://202.127.145.134/download/ViewF1_1.1/ViewF1.html。