

3.4.2.3 化合物结构登录

化合物结构登录服务用于通过化合物结构登录获得化合物参考数据库的系统登录号 (SRN)，登录服务支持批量化合物结构的登录处理。使用化合物登录的源数据必须是 F1 文件。

您可以选择 "单个 F1 格式文件的登录服务" 或者 "多个 F1 格式文件的批处理登录服务"。服务页面如图 3.4.2.9。

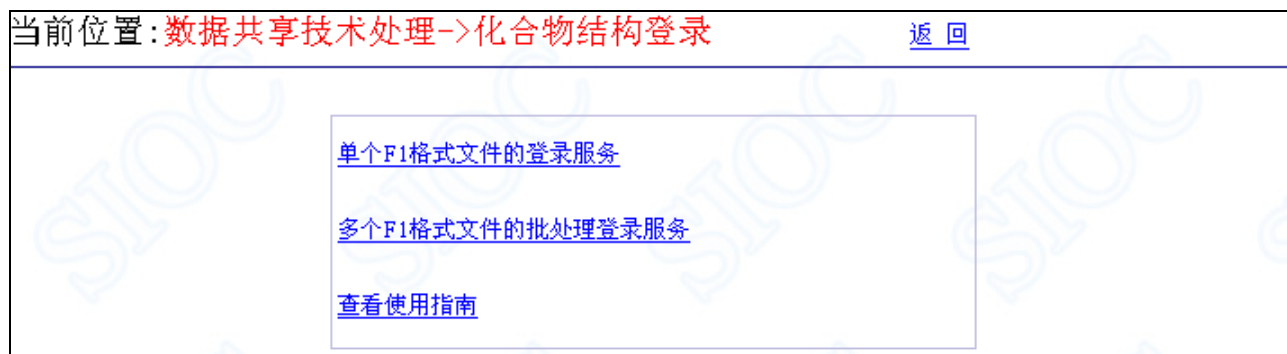


图 3.4.2.9 化合物结构登录的首页

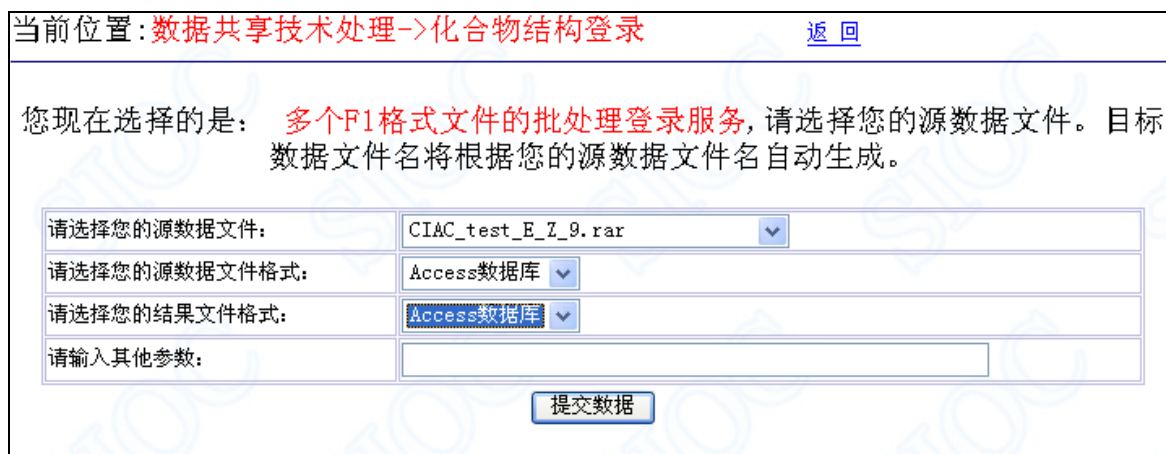
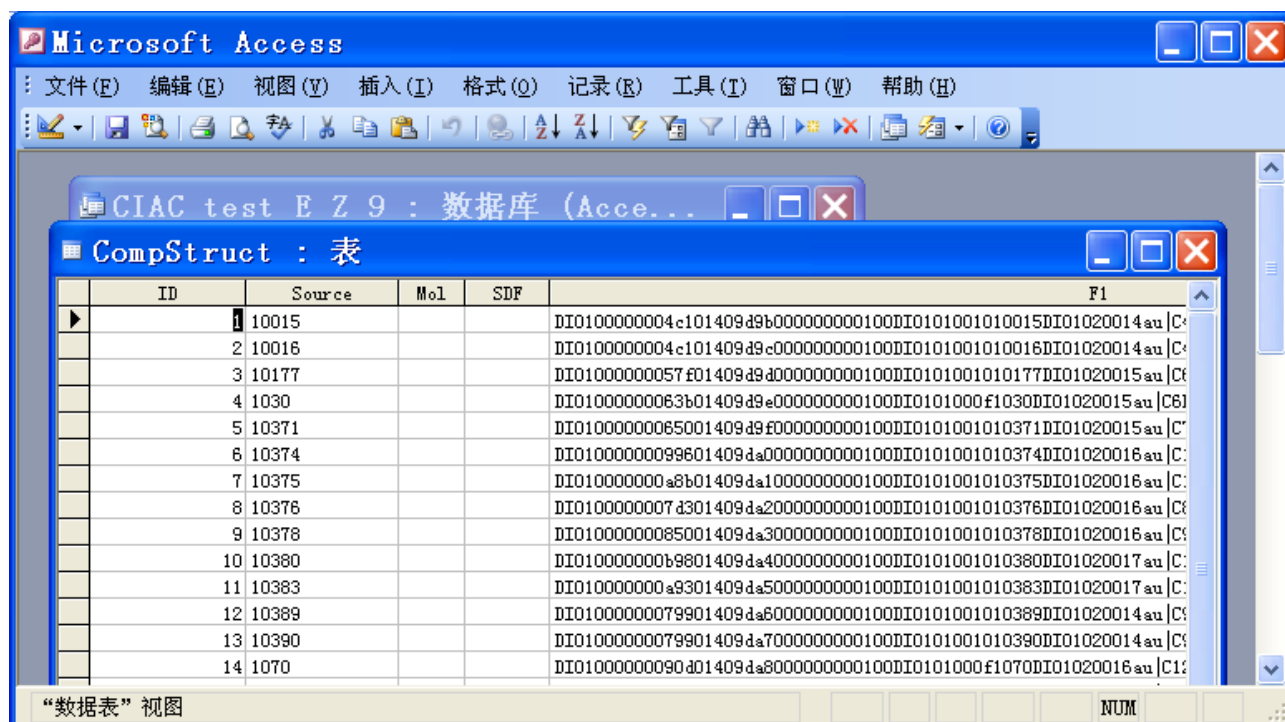


图 3.4.2.10 提交作业“多个化合物结构登录”



ID	Source	Mol	SDF	F1
1	10015			DIO100000004c101409d9b000000000100DIO101001010015DIO1020014au C
2	10016			DIO100000004c101409d9e000000000100DIO101001010016DIO1020014au C
3	10177			DIO1000000057f01409d9d000000000100DIO101001010177DIO1020015au C
4	1030			DIO1000000063b01409d9e000000000100DIO101000f1030DIO1020015au C
5	10371			DIO1000000065001409d9f000000000100DIO101001010371DIO1020015au C
6	10374			DIO1000000099601409da0000000000100DIO101001010374DIO1020016au C
7	10375			DIO10000000a8b01409da1000000000100DIO101001010375DIO1020016au C
8	10376			DIO100000007d301409da2000000000100DIO101001010376DIO1020016au C
9	10378			DIO1000000085001409da3000000000100DIO101001010378DIO1020016au C
10	10380			DIO10000000b9801409da4000000000100DIO101001010380DIO1020017au C
11	10383			DIO10000000a9301409da5000000000100DIO101001010383DIO1020017au C
12	10389			DIO1000000079901409da6000000000100DIO101001010389DIO1020014au C
13	10390			DIO1000000079901409da7000000000100DIO101001010390DIO1020014au C
14	1070			DIO1000000090d01409da8000000000100DIO101000f1070DIO1020016au C

图 3.4.2.11 提交作业“多个化合物结构登录”的源数据

化合物结构登录服务使用文件方式或 Access 数据库（表单）方式的 F1 格式化合物结构数据作为输入数据，输出文本文件、Excel 或 Access 数据库格式的化合物参考库系统登录号（SRN）。当输入文件和用户选择的输出文件均为 Access 文件格式时，输出不生成新的 Access 数据库，只在作为输入数据的 Access 数据库表单“CompStruct”中增加名为“SRN”列用于存储输出数据。

如果使用 Txt 文件作为输入，则必须每个结构保存一个 F1 文件。

如果用户在结构预处理模块选择了生成 Access 数据库，并已经成功获得结果文件(结果文件会储存在服务器上，被压缩成 rar 文件)，那么就可以直接选择此结果文件作为源文件，本例中就采用上一节 3.4.2.2 结构预处理中的结果 [CIAC_test_E_Z_9.rar](#) 中作为源数据文件，如图 3.4.2.10 和图 3.4.2.11。

编号	作业名	源数据文件	源数据格式	结果数据文件	结果数据格式	申请时间	完成时间	删除作业
74	多结构登录批处理服务	CIAC_test_E_Z_9.rar	F1	CIAC_test_E_Z_9_10.rar	F1	2010-4-14 10:03:01	2010-4-14 10:06:14	删除
75	多结构预处理与二维结构图形	CIAC_test_E_Z.rar	SDF	CIAC_test_E_Z_9.rar	F1	2010-4-14 10:02:05	2010-4-14 10:02:18	删除

图 3.4.2.12 化合物的作业

ID	Source	Mol	SDF	F1	SRN
1	10015			DI0100000004c10	148198042
2	10016			DI0100000004c10	148198051
3	10177			DI01000000057fd0	148198069
4	1030			DI01000000063b0	148198077
5	10371			DI0100000006500	148198085
6	10374			DI0100000009960	148198093
7	10375			DI010000000a8b0	148198106
8	10376			DI0100000007d30	148198114
9	10378			DI0100000008500	148198122
10	10380			DI010000000b980	148198131
11	10383			DI010000000a930	148198149
12	10389			DI0100000007990	148198157
13	10390			DI0100000007990	148198165

图 3.4.2.13 化合物的登录号 SRN

作业提交后，用户点击“我的作业”可查看作业完成情况。作业结束后，将会显示出结果数据文件 [CIAC_test_E_Z_9_10.rar](#) 的链接，用户可点击下载。如图 3.4.2.12。

作业完成后，CompStruct 表的内容如图 3.4.2.13。