

3.4.2.4 化合物建库

化合物结构建库服务用于生成化合物结构的全结构索引。化合物全结构索引使用了结构的原子组成、键(型)组成、节点连接特征、环系和最小环最小集、立体化学计数、重复单元计数等信息¹，可以对化合物结构进行有效索引。方便对数据库进行检索服务。

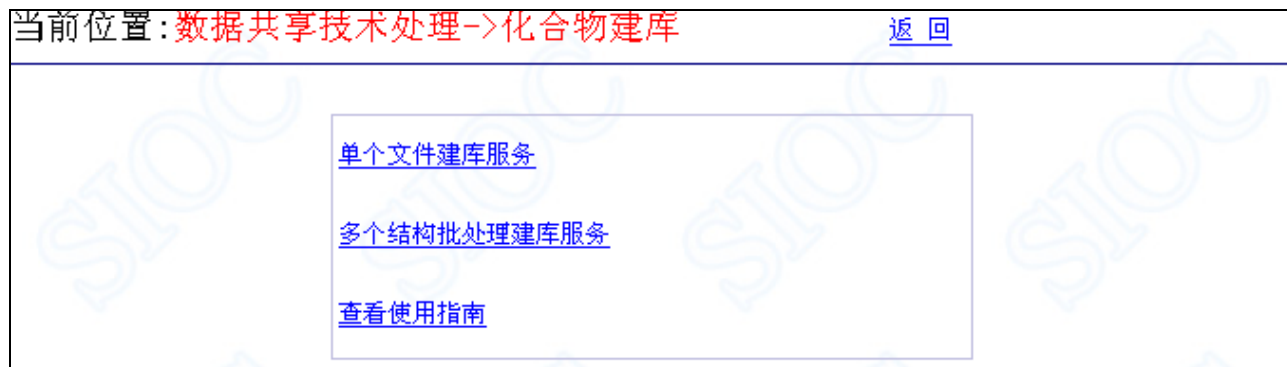


图 3.4.2.13 化合物建库

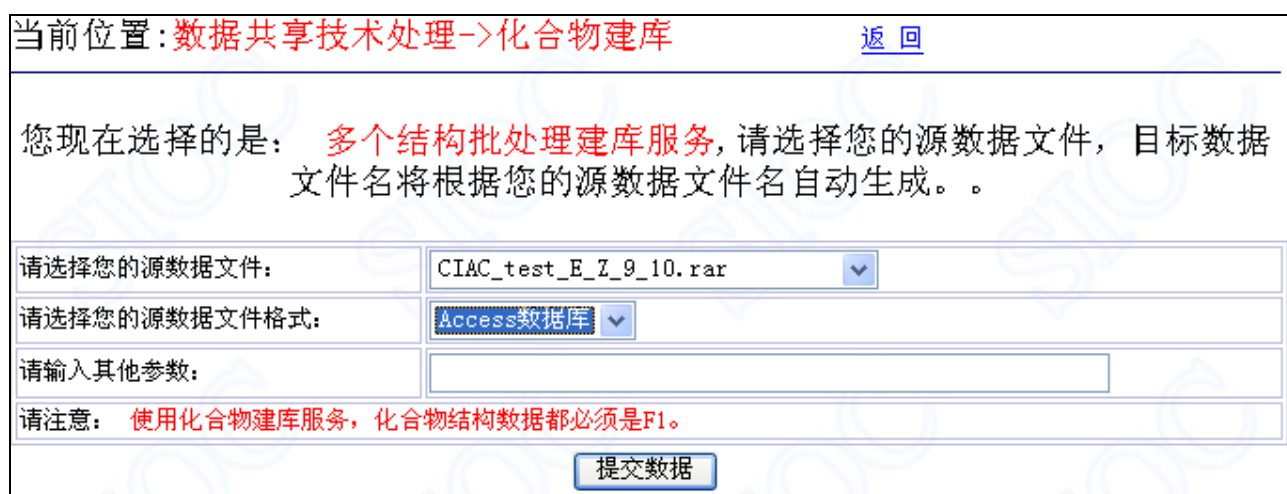
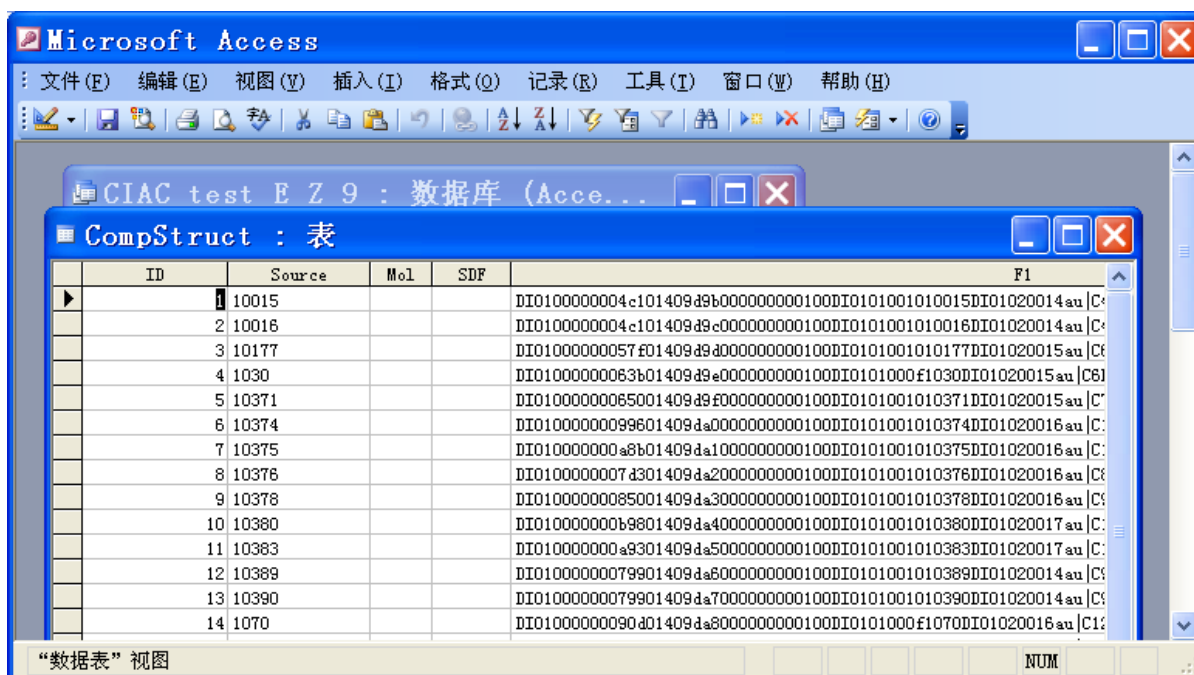


图 3.4.2.14 提交作业“多个化合物建库”



ID	Source	Mol	SDF	F1
1	10015			DI0100000004c101409d9b000000000100DI0101001010015DI01020014au C
2	10016			DI0100000004c101409d9c000000000100DI0101001010016DI01020014au C
3	10177			DI01000000057f01409d9d000000000100DI0101001010177DI01020015au C
4	1030			DI01000000063b01409d9e000000000100DI0101000f1030DI01020015au C
5	10371			DI01000000065001409d9f000000000100DI0101001010371DI01020015au C
6	10374			DI01000000099601409da000000000100DI0101001010374DI01020016au C
7	10375			DI010000000a8b01409da1000000000100DI0101001010375DI01020016au C
8	10376			DI0100000007d301409da2000000000100DI0101001010376DI01020016au C
9	10378			DI01000000085001409da3000000000100DI0101001010378DI01020016au C
10	10380			DI010000000b9801409da4000000000100DI0101001010380DI01020017au C
11	10383			DI010000000a9301409da5000000000100DI0101001010383DI01020017au C
12	10389			DI01000000079901409da6000000000100DI0101001010389DI01020014au C
13	10390			DI01000000079901409da7000000000100DI0101001010390DI01020014au C
14	1070			DI01000000090d01409da8000000000100DI0101000f1070DI01020016au C

图 3.4.2.15 提交作业“多个化合物建库”的源数据

¹ 孙传涛, 朱翠娣, 陈维明, 郑崇直. 确定化学结构索引码的构造. 计算机与应用化学, 19 (3), 237-238, 2002

化合物建库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，生成的化合物全结构索引数据和其他化合物结构数据一起以Access数据库格式的化合物结构库输出。

当输入文件为 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 数据库中增加 *Cmp_CheckList*、*STR_Attributes*、*STR_Comp2Frag*、*STR_Compound*、*STR_Frag* 五个表单用于存储输出数据。如果用户在化合物登录模块选择了生成 Access 数据库，并已获得结果，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 3.4.2.3 结构登录的结果 CIAC_test_E_Z_9_10.rar 中作为源数据文件，如图 3.4.2.14 和图 3.4.2.15。

化合物建库服务都是生成 Access 数据库，如用户源数据文件就是 Access 数据库，则程序处理结果自动添加到原 Access 数据库中，否则会生成一个新的 Access 数据库。程序会将结果数据文件压缩成一个新的 rar 文件，如 CIAC_test_E_Z_9_10_11.rar。

化合物建库服务填充 *STR_Compound* 表，里面记录了可用于全结构检索的各种索引。如图 3.2.4.17。

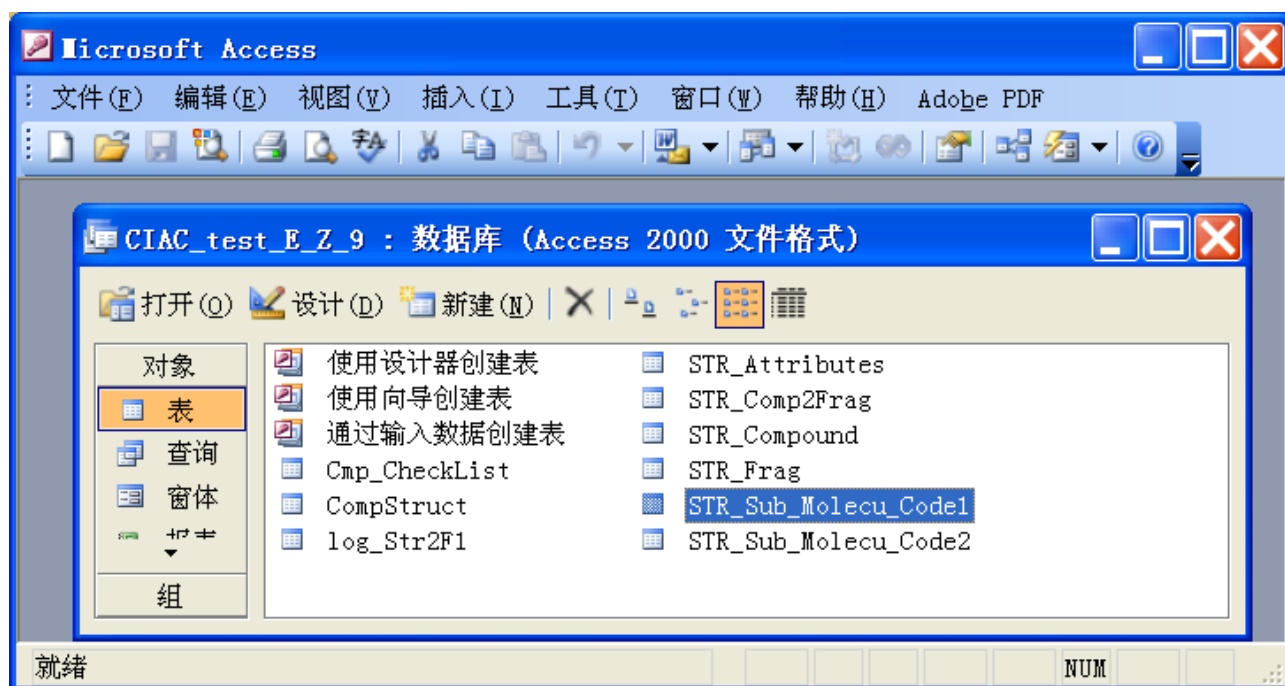


图 3.4.2.16 化合物建库后的 Access 数据库结构

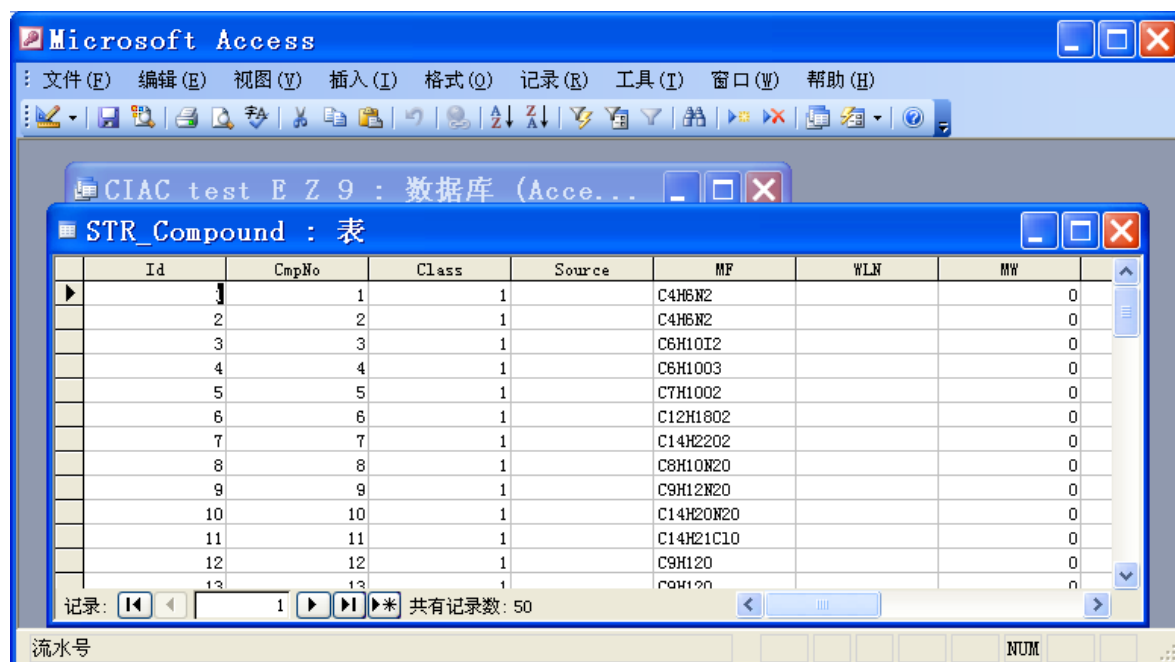


图 3.4.2.17 化合物建库后填充 STR_Compound 表

