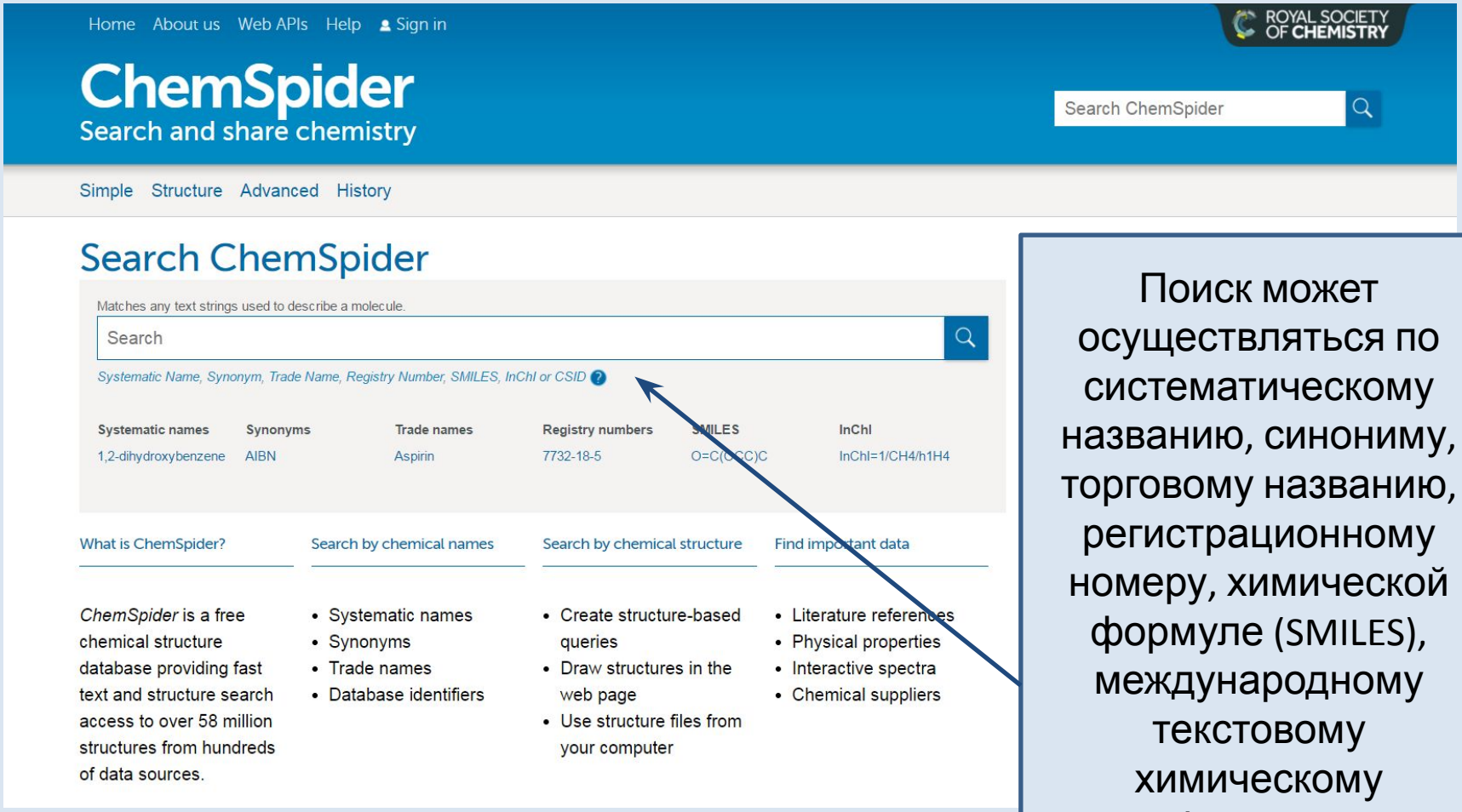
ChemSpider

Search and share chemistry

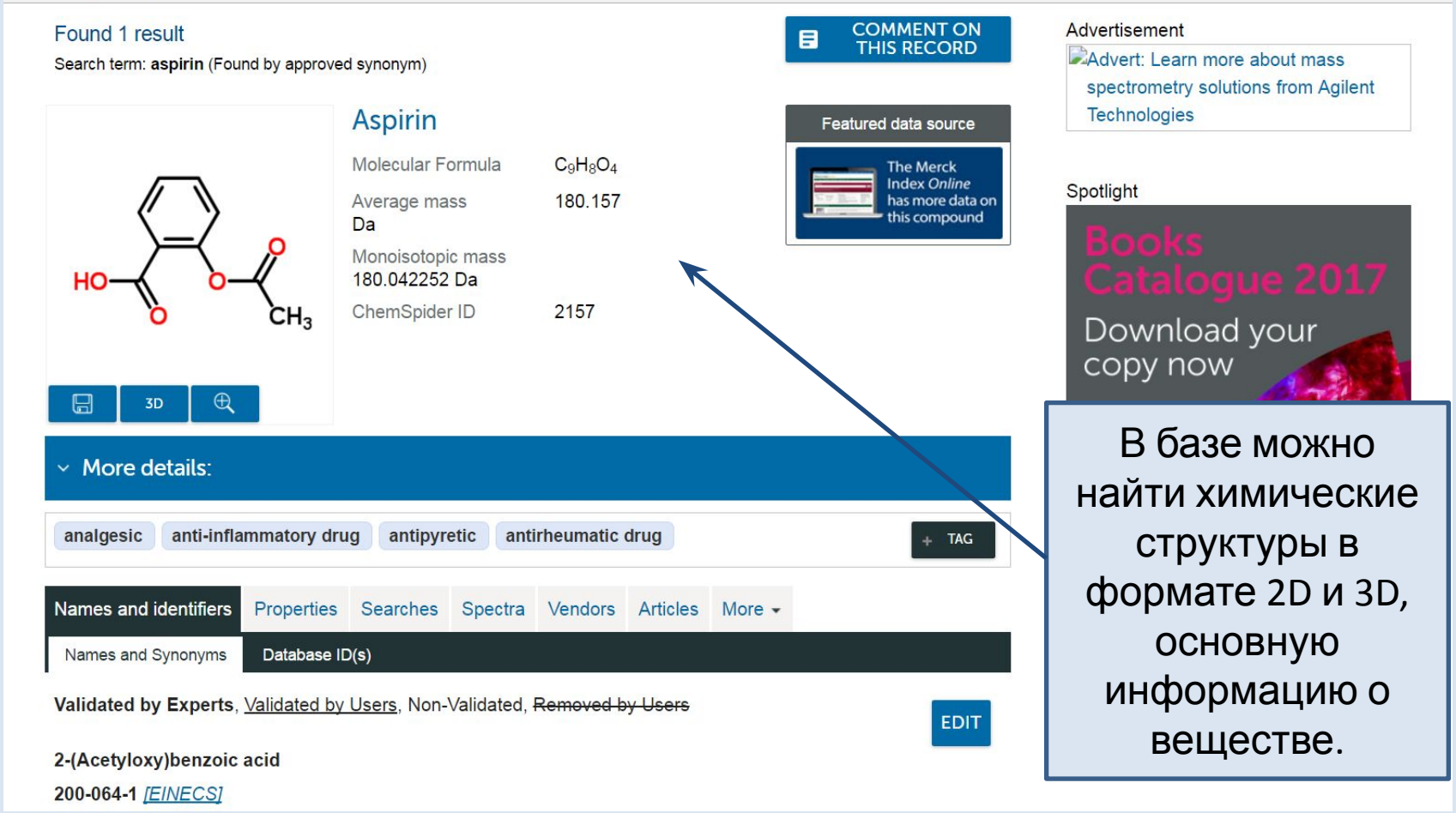
Краткая инструкция

Поисковый запрос



Поиск может осуществляться по систематическому названию, синониму, торговому названию, регистрационному номеру, химической формуле (SMILES), международному текстовому химическому идентификатору (InChI).

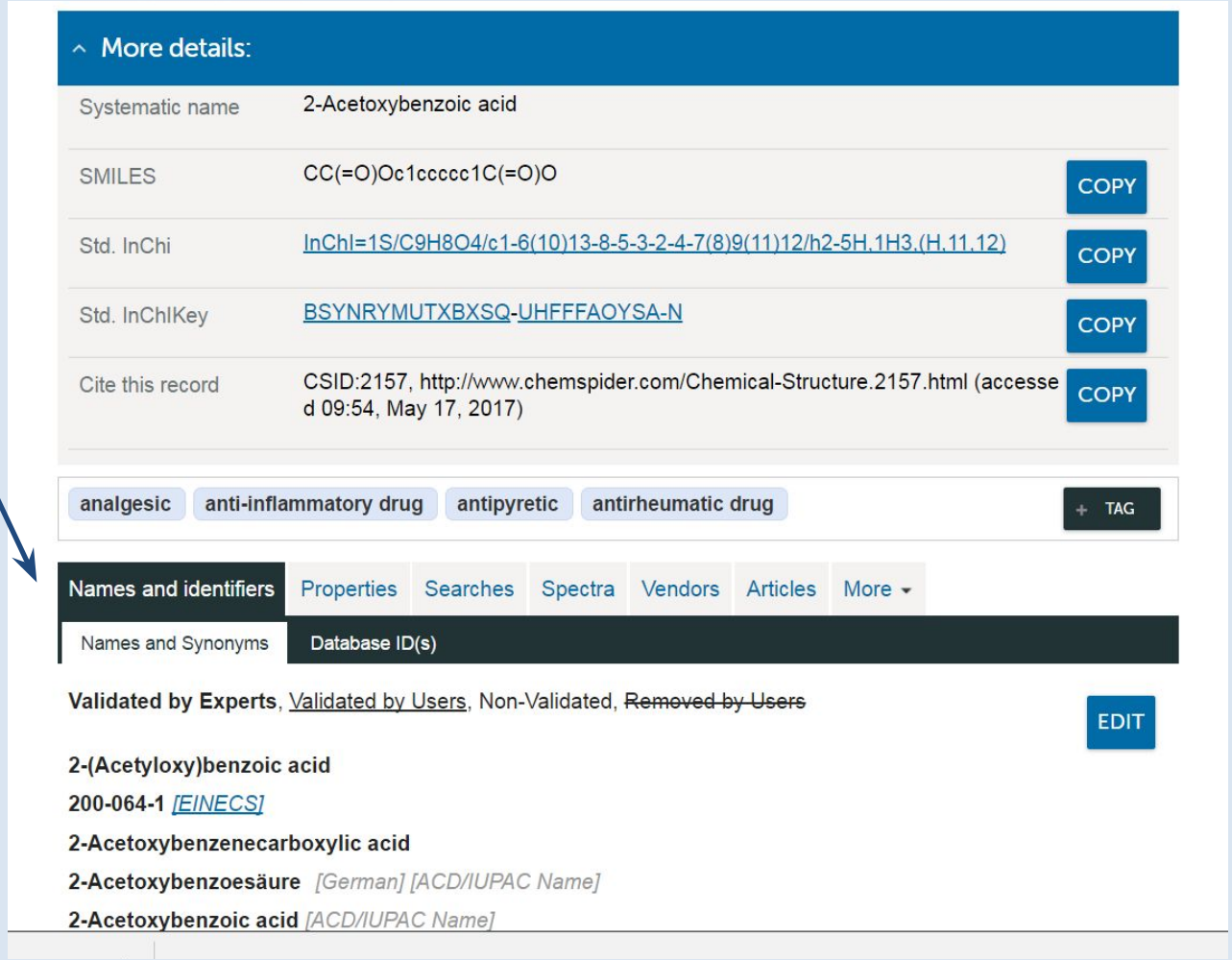
Результаты поиска



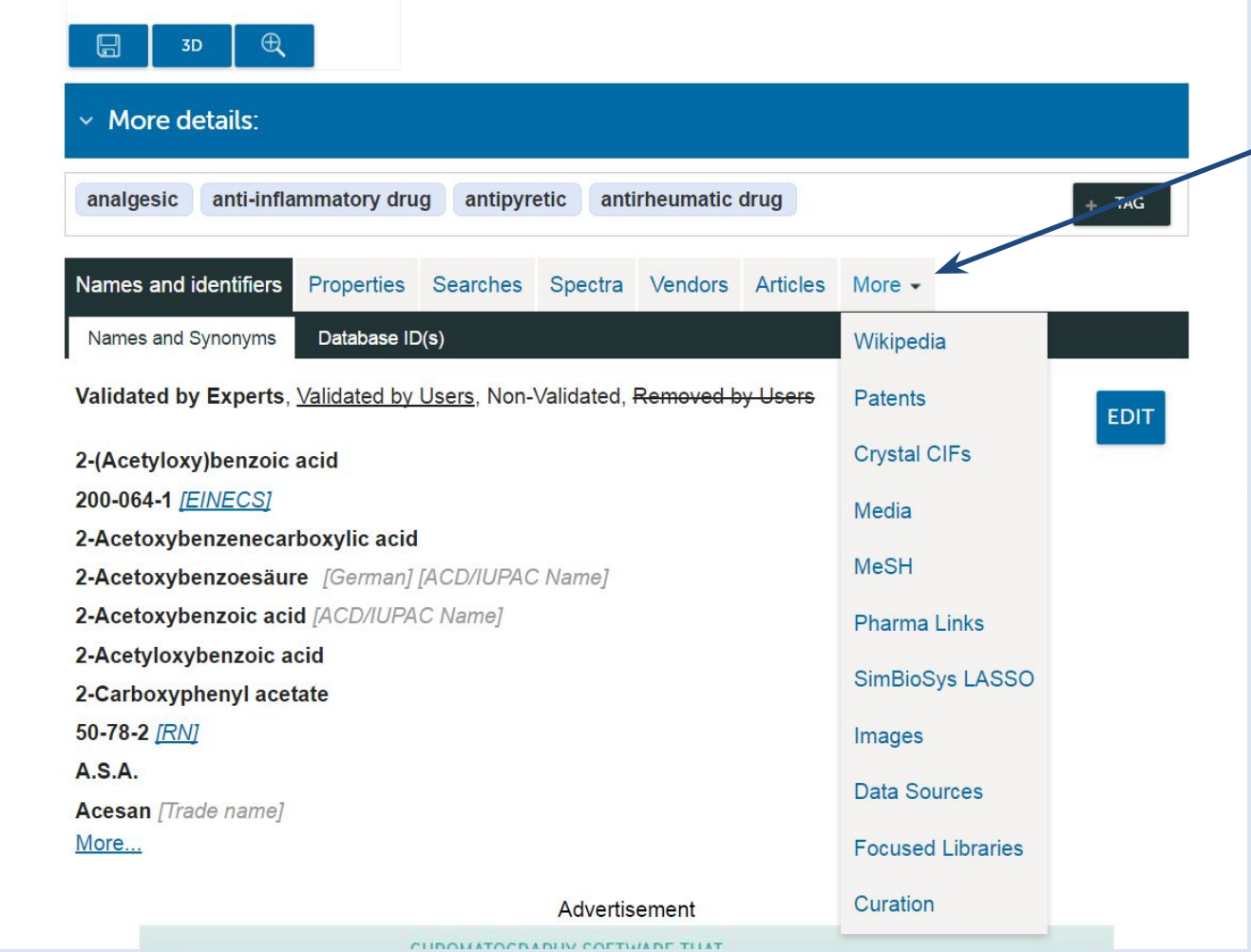
В базе можно найти химические структуры в формате 2D и 3D, основную информацию о веществе.

Результаты поиска

Подробная информация о веществе, названия и идентификаторы (Names and identifiers), свойства (Properties), ссылки на поисковые запросы (Searches), спектры (Spektra), производители (Vendors), статьи (Articles).

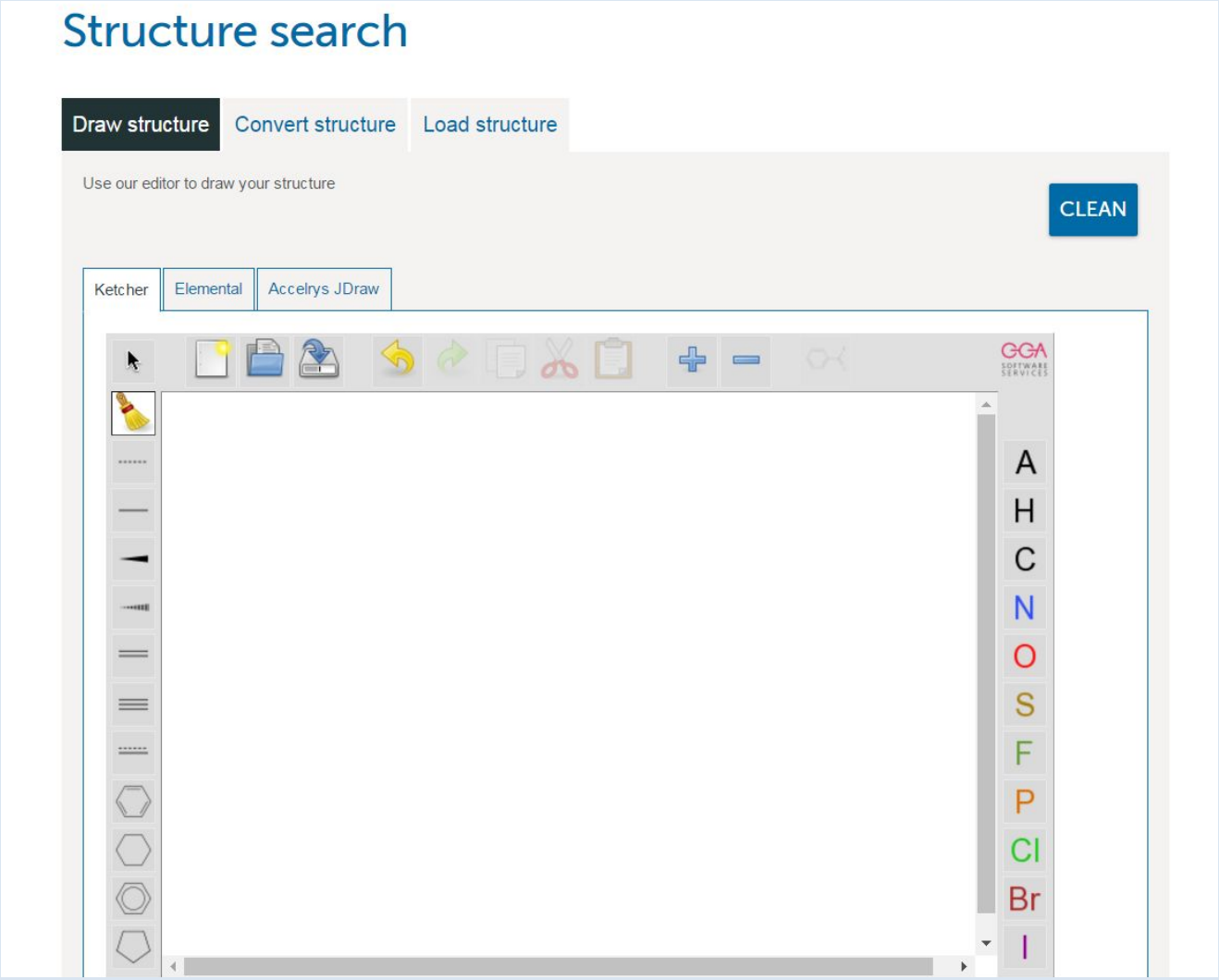


Результаты поиска



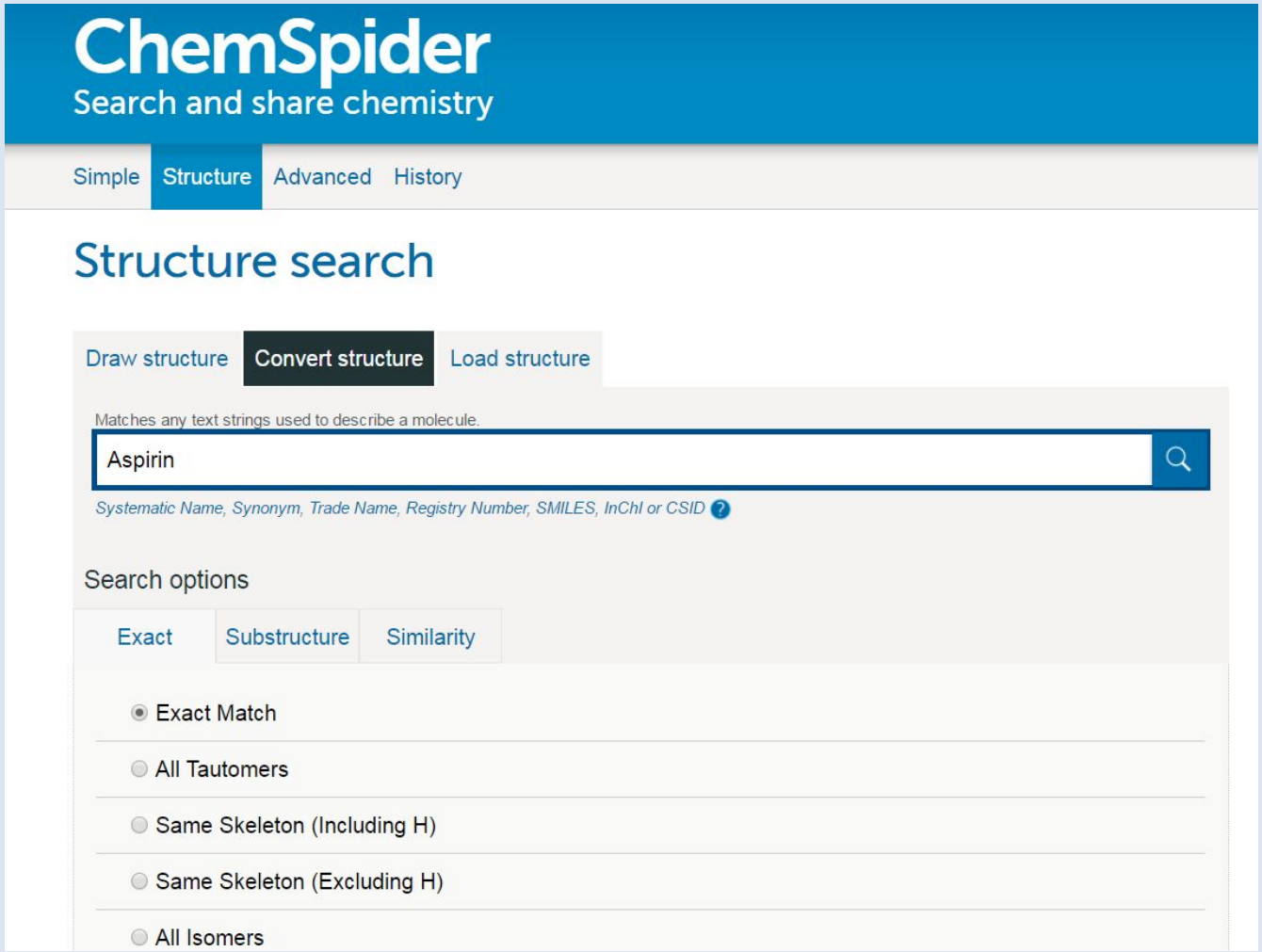
По ссылке “More” открываются дополнительные параметры: патенты, аудиовизуальные материалы и многое другое.

Поиск по химической структуре



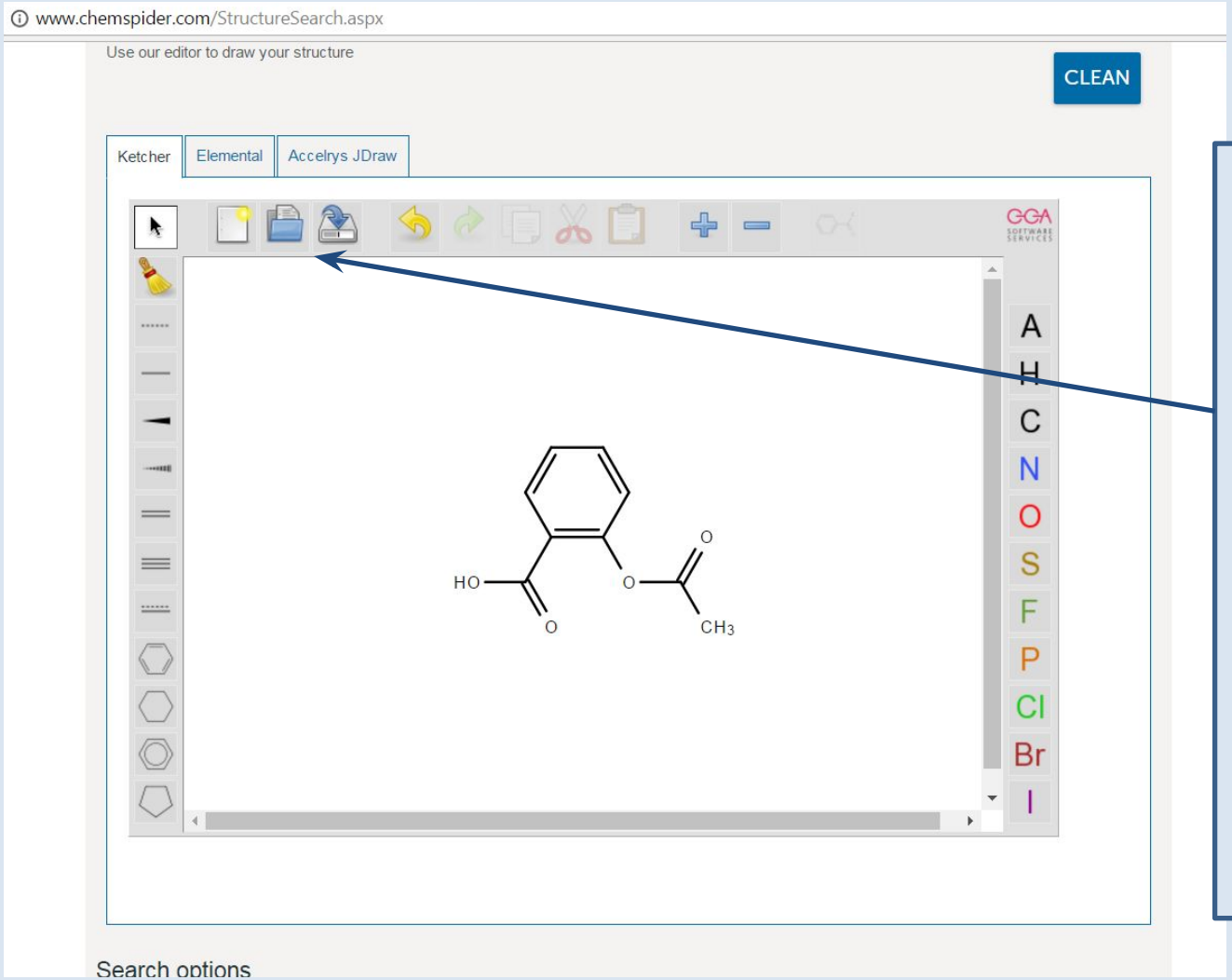
Химическую структуру можно нарисовать, выбрав раздел “Structure search”, подраздел “Draw structure”. Затем запустить поиск - “Search”.

Поиск химической структуры



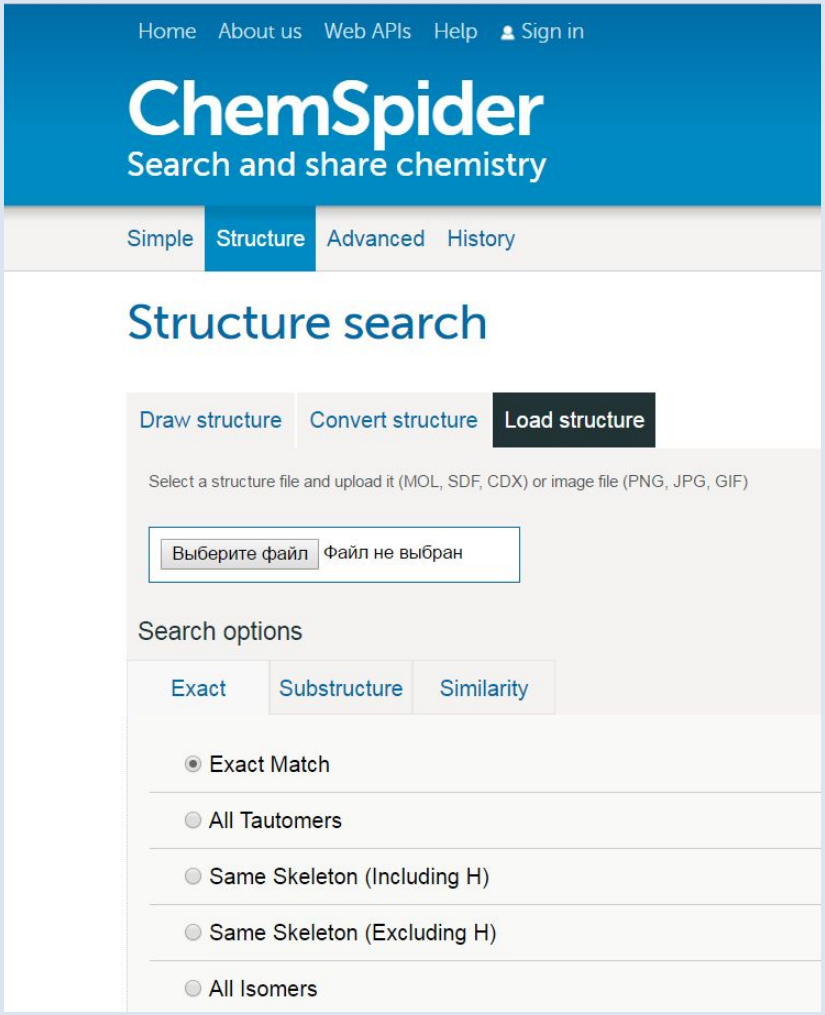
Для поиска химической структуры по названию вещества выберите раздел “Structure”, подраздел “Convert structure”, введите название вещества и запустите поиск.

Результат поиска химической структуры



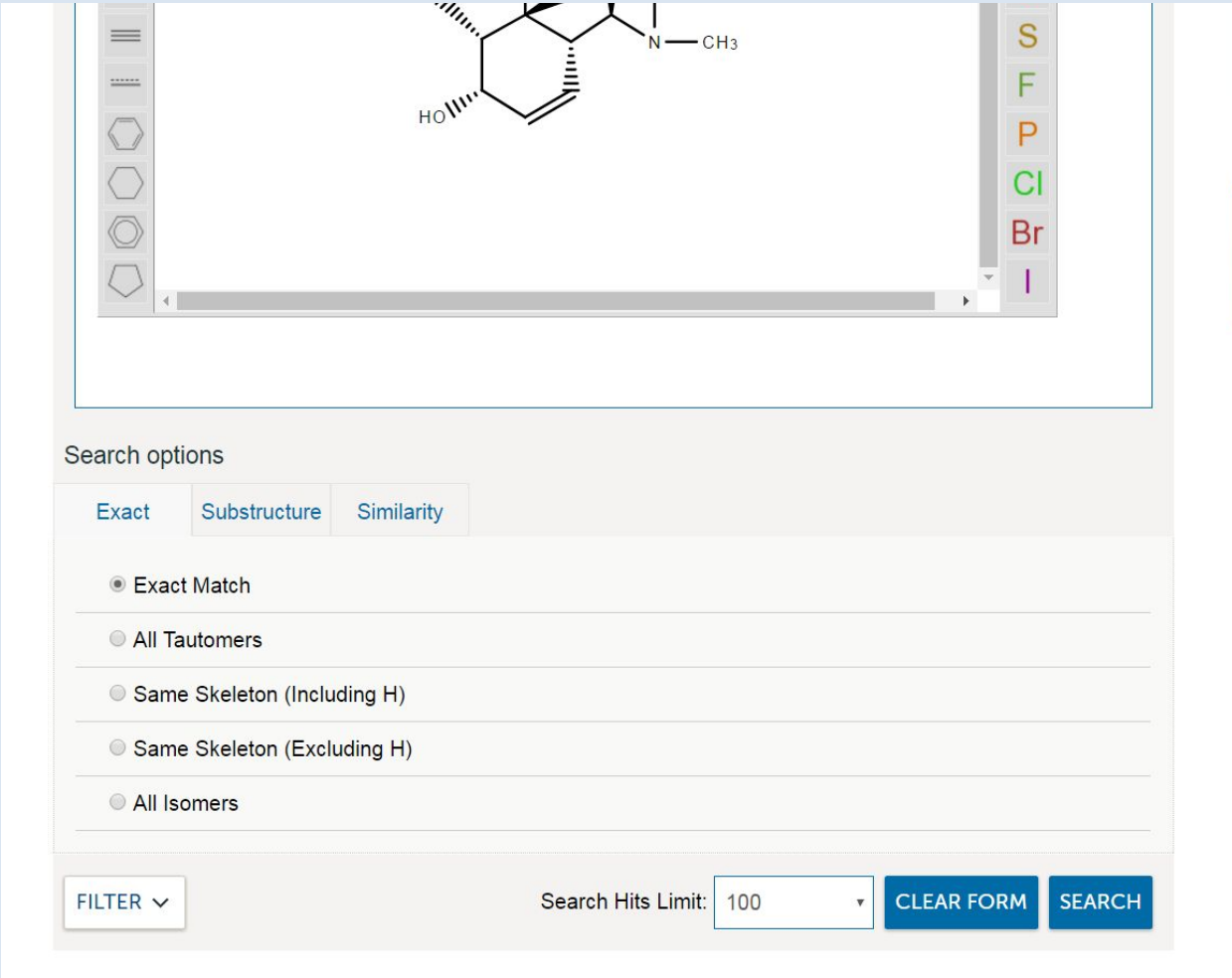
Структуру можно сохранить на свой компьютер в файле формата mol, sdf, cdx or skc. Кроме того, структуру можно редактировать, используя инструменты слева, справа и вверху поля.

Поиск по химической структуре



Для поиска информации по химической формуле выберите раздел “Structure”, подраздел “Load structure”, загрузите структуру в одном из следующих форматов: mol, sdf, cdx or skc, jpeg, gif.

Настройки поиска по структуре



Можно выбрать несколько настроек поиска по структуре: Exact – поиск точного совпадения, Substructure – поиск всех структур, включающих данную структуру, Similarity – поиск схожих структур (процент схожести не рекомендуется ставить более 90 %.)