iEI
for excerption process

Текущая версия iEI – 3.83.418.0

Установка:

а)MarvinSketchJChem_NET_API_18.8.0.exe

Copy license file license.cxl to C:\Users\<user>\chemaxon.

Copy AttachDataDialog.xml to the folder C:\Users\<user>\chemaxon

Copy file customization.xml into C:\Users\<user>\chemaxon\18.8.0

б) iEI.Setup.msi

На рабочем столе появится иконка

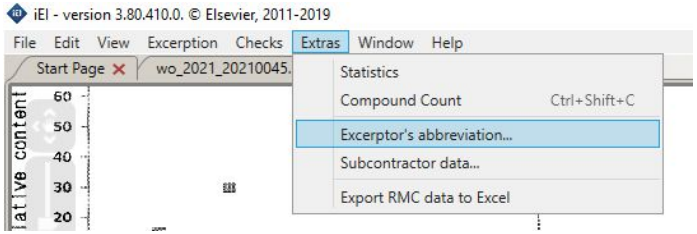
Рабочие файлы программы iEI – всегда архивы с расширением .zip

Исходный файл us_2021_10926246_b2.**rdm**.001.zip

после обработки программой us_2021_10926246_b2.**iei.002.internal**.zip и us_2021_10926246_b2.**iei.002**.zip

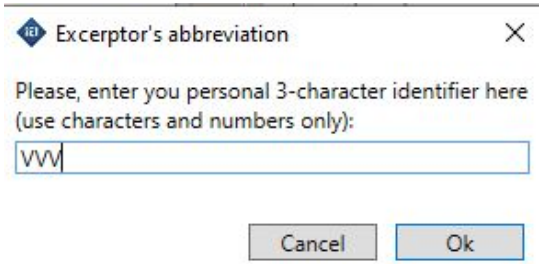
Начало работы.Введение личного и группового кода

Меню - Extras

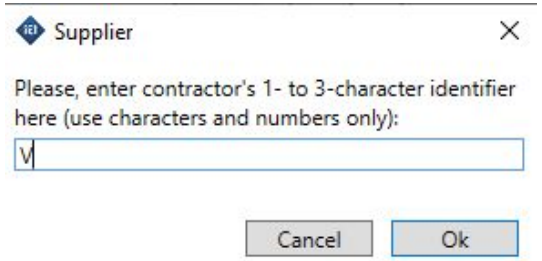


Статьи

Обязательно VVV

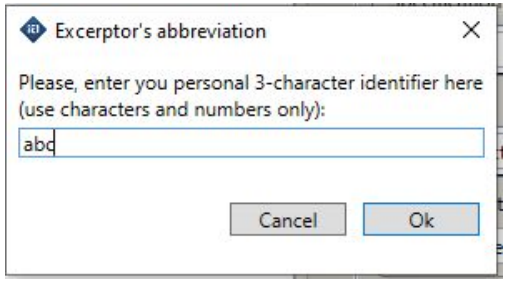


Обязательно V

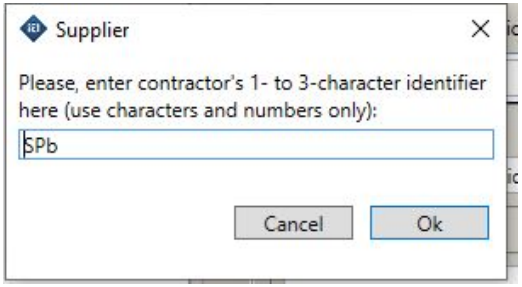


Патенты

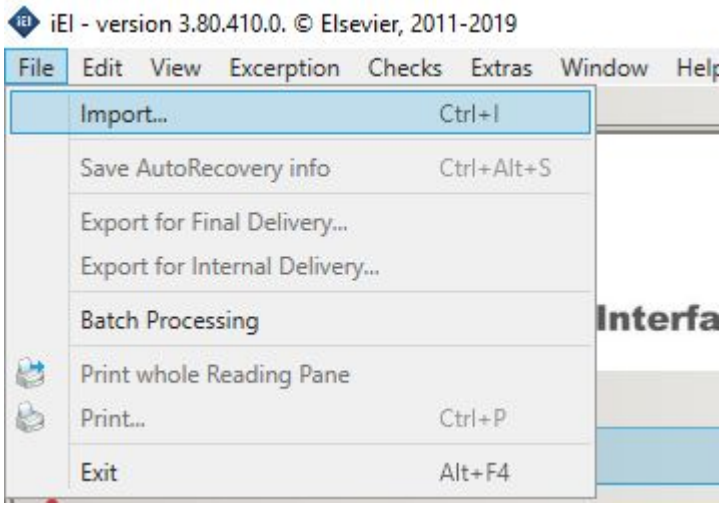
Любой трехзначный nickname



Обязательно SPb



Импорт файла.



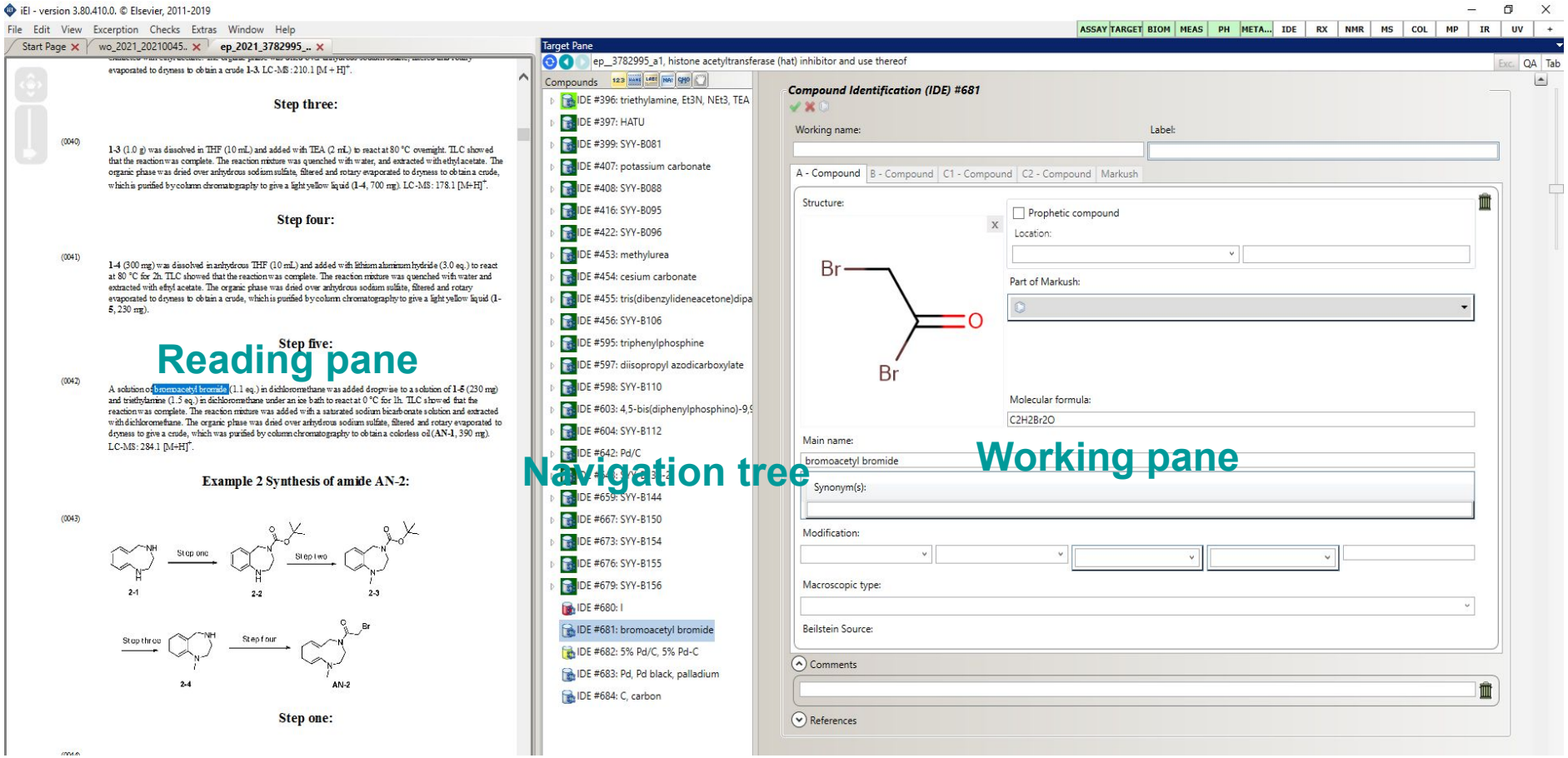
Используйте команду
Import

Одновременно можно открыть не более 2 файлов

Start page

секция Recent: содержатся ссылки на недавние работы в хронологическом порядке (сами файлы находятся в папке …My Documents\My iEI).

Окно программы и некоторые обозначения



Manually entered

Pre-excerpted

Pre-excerpted changed

A-compound

B-compound

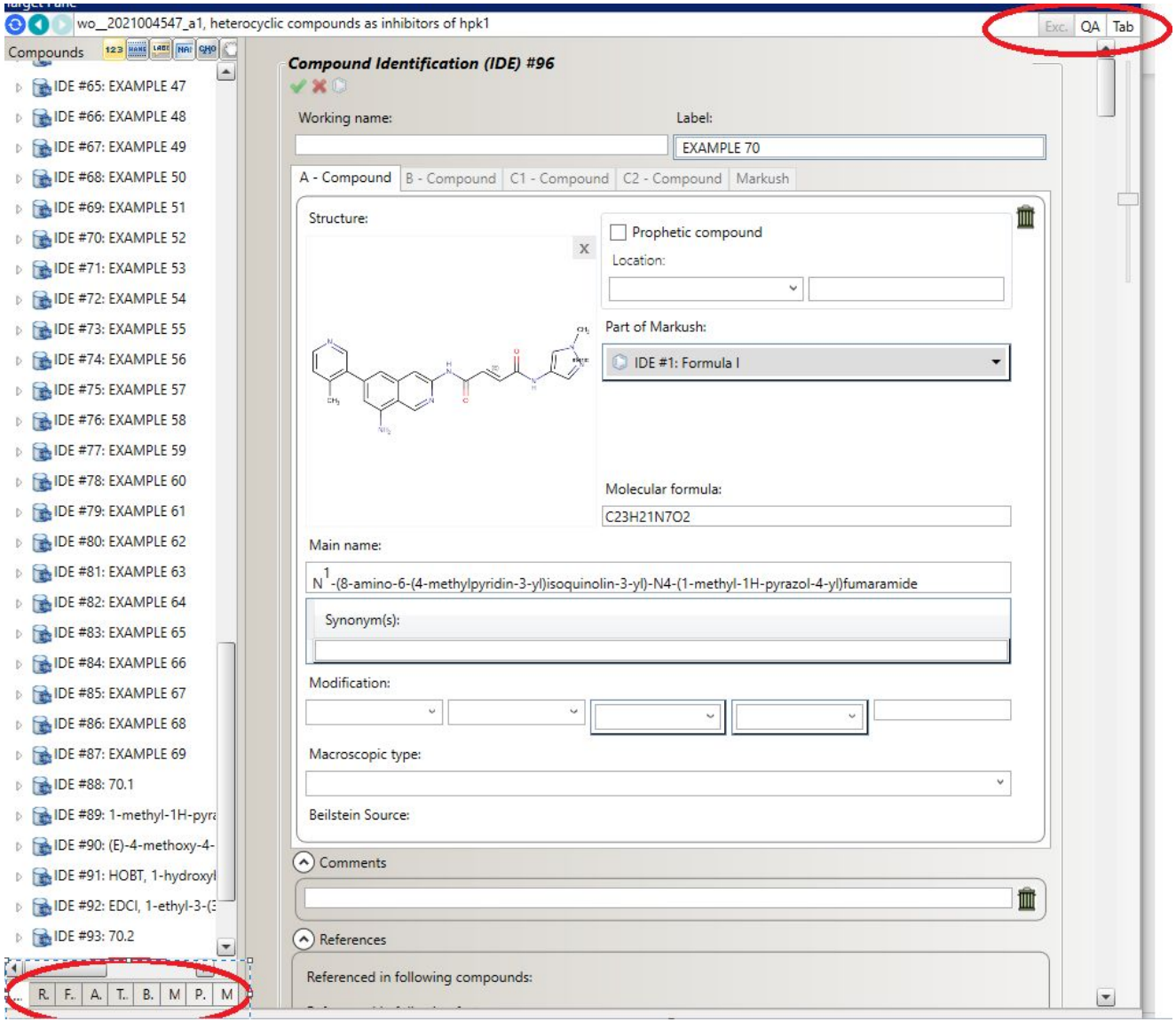
C1-compound

C2-compound

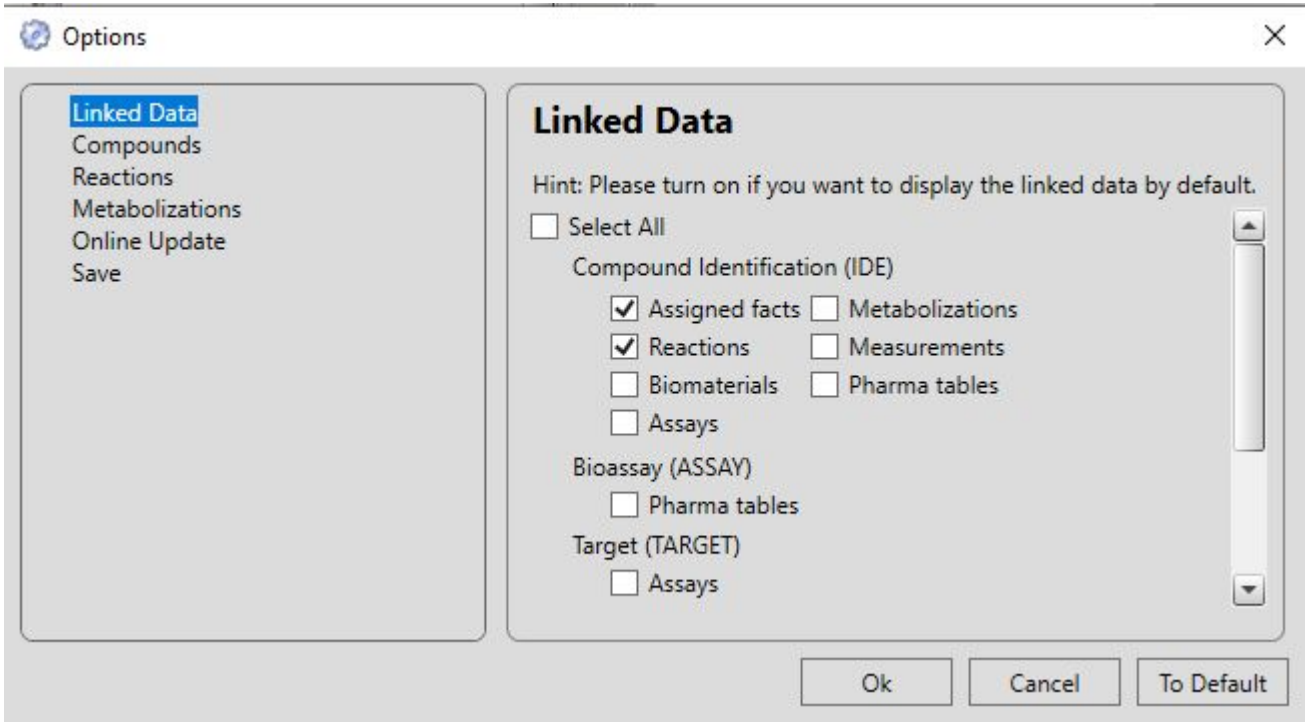
Prophetic compound

Markush compound

Вкладки и виды

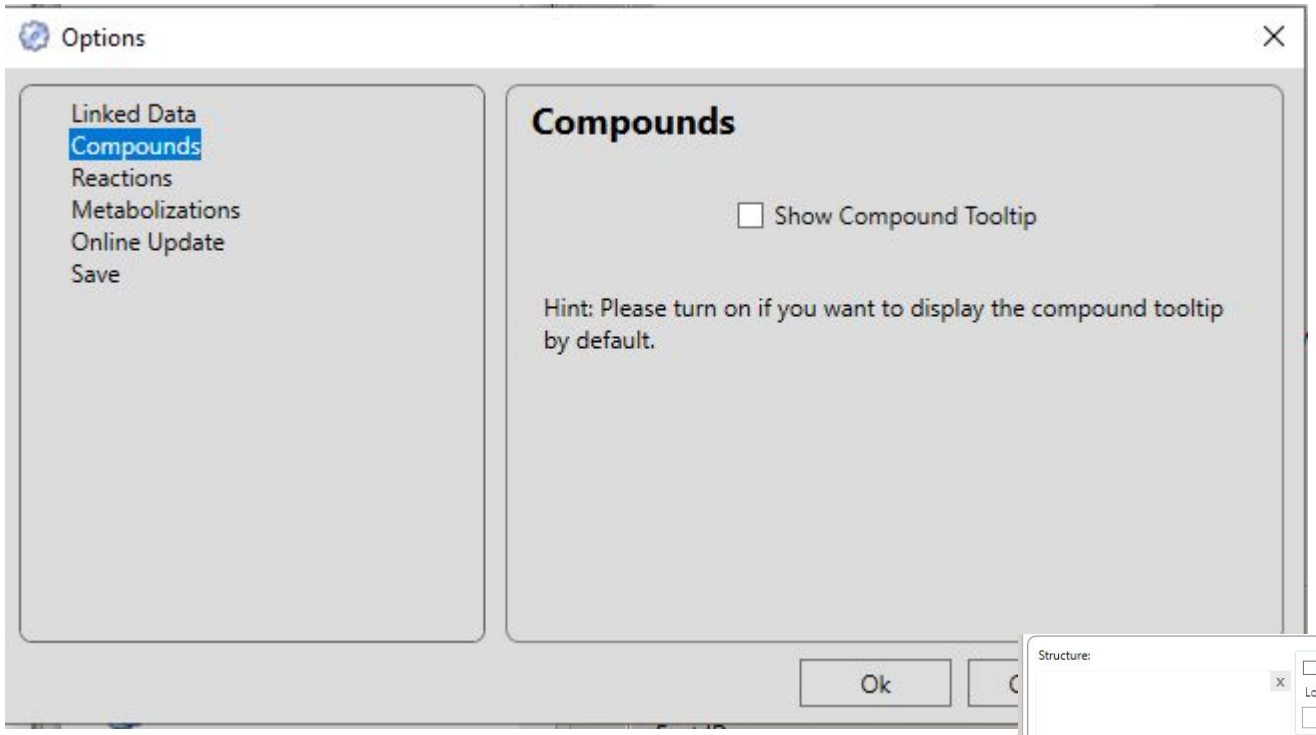


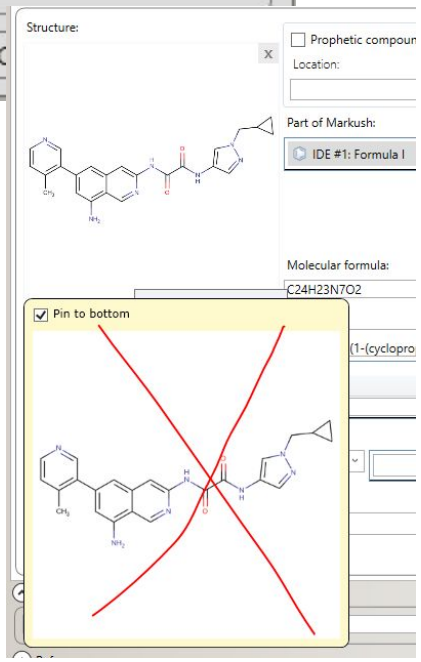
Меню Options
Linked data



1. Откройте Edit->Options->Linked data
2. Рекомендуется поставить галочки на Assigned facts and Reactions

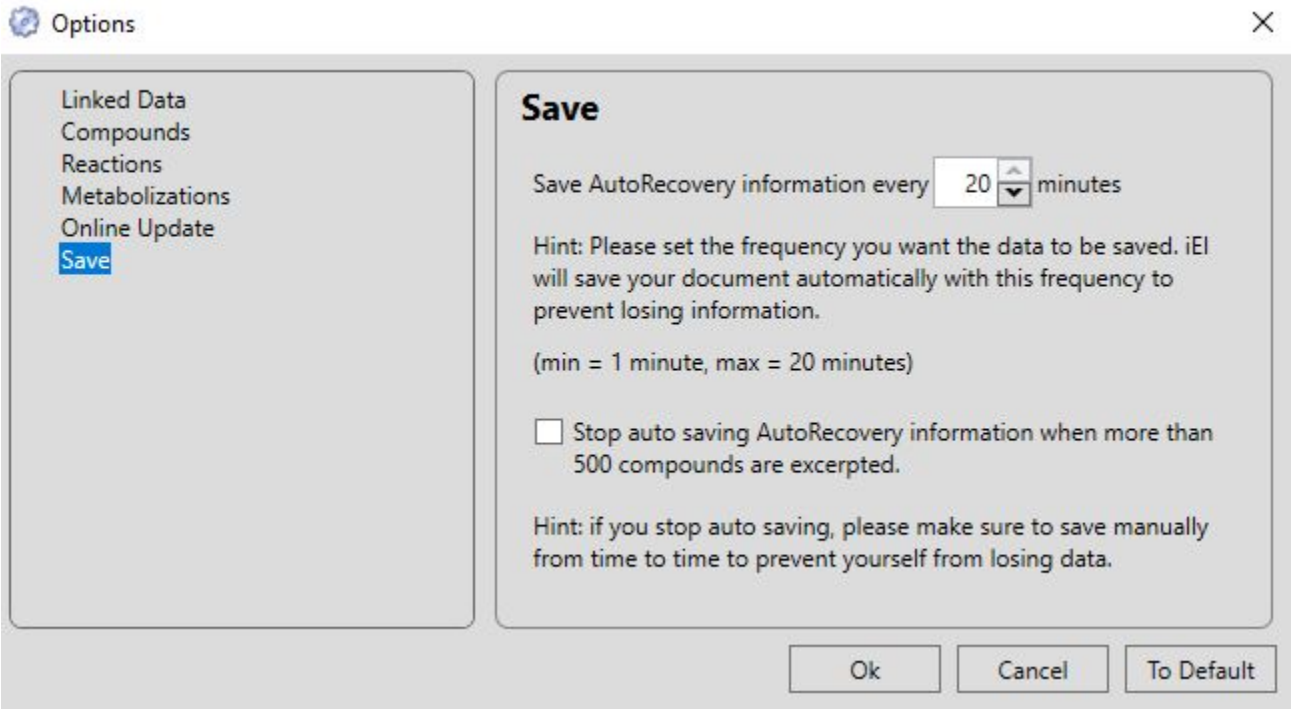
Меню Options





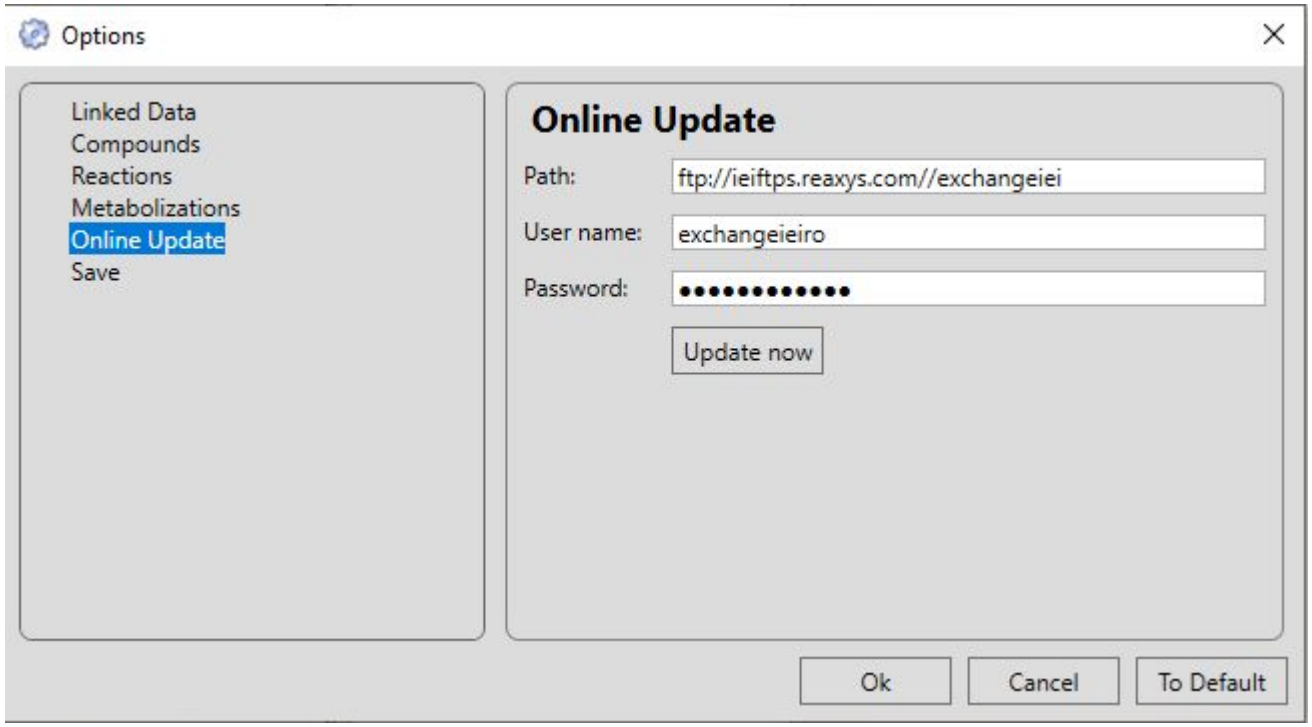
1. Edit->Options->Compounds and Edit->Options->Reactions можно включить/отключить всплывающие окна структур и реакций

Настройка времени автосохранения



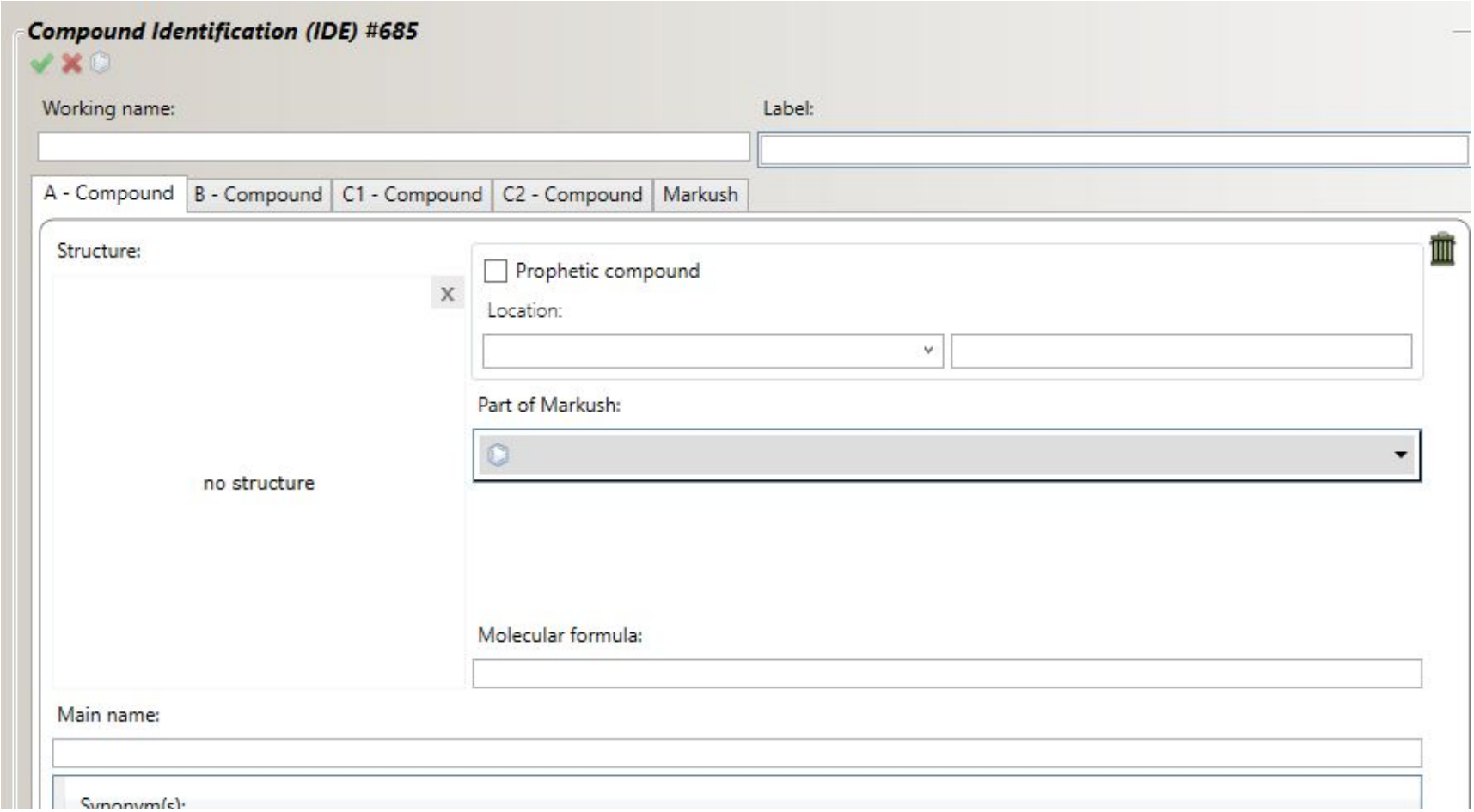
1. Откройте Edit->Options->Save
2. Выберите время автосохранения
3. Данные будут сохраняться через выбранный промежуток времени. На большом файле частое сохранение может тормозить работу.

Online update



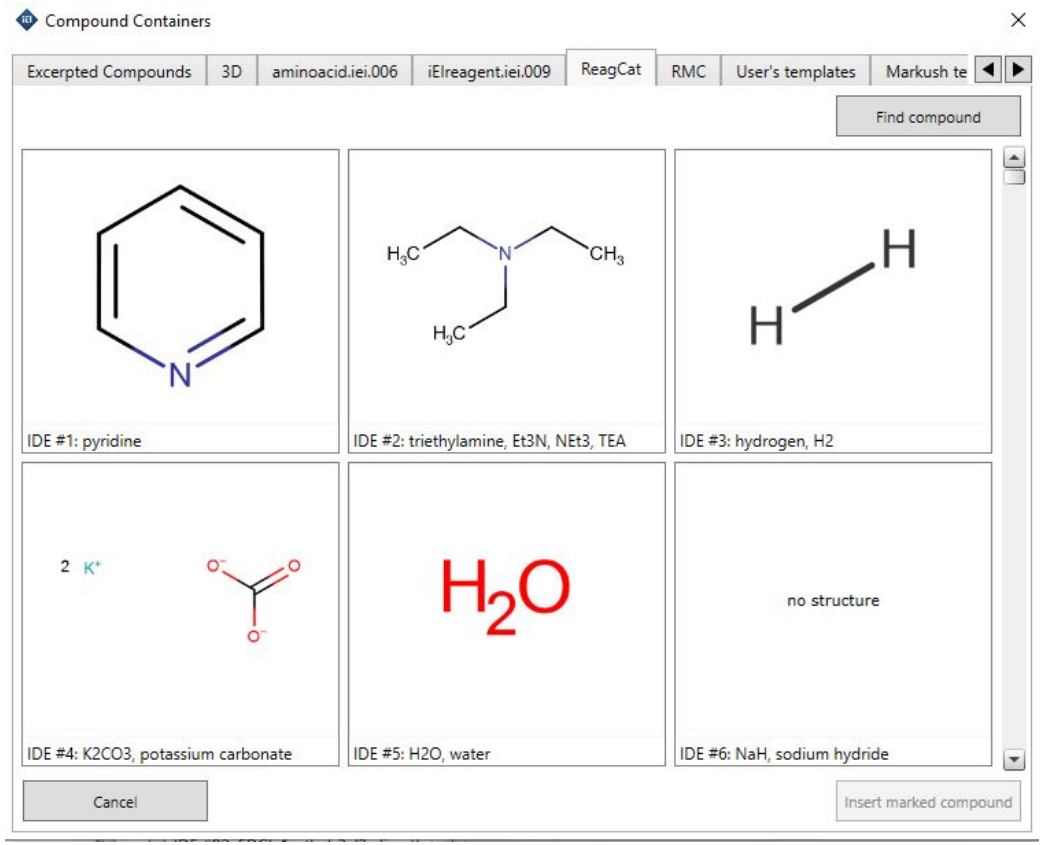
1. Edit->Options->**Online update**
2. Ничего не менять в настройках этой вкладки
3. Автоматический апдейт при запуске программы
4. Если не закрывали программу сутки, попросит сделать апдейт перед финальным экспортом. Нажать Update now and OK

Типы веществ. Реакции. Маски.



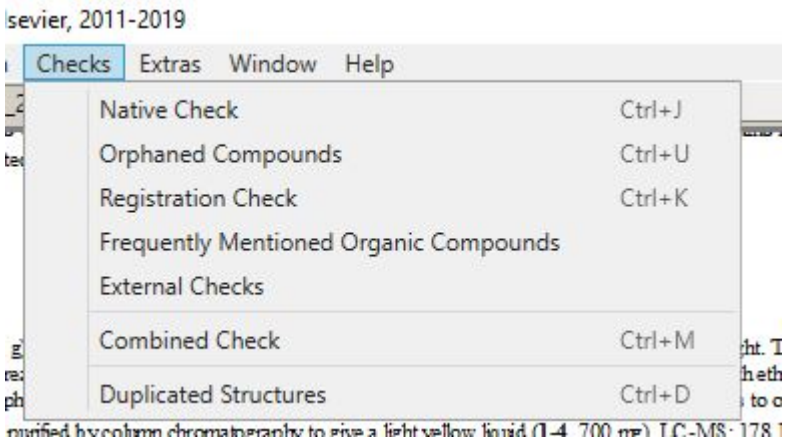
- Используйте вкладки для выбора типа вещества
- Используйте иконку контейнера для доступа в Compound Containers

Compound Containers



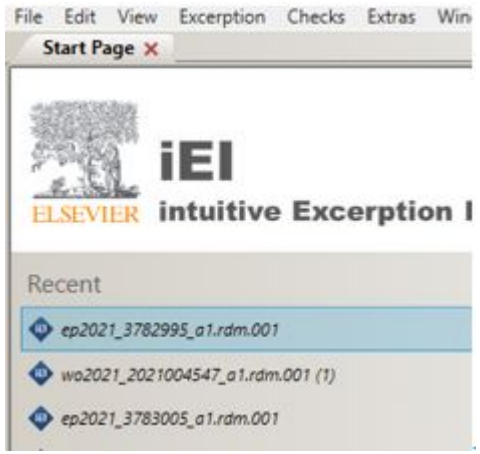
1. ReagCat, 3D, RMC – контейнеры Эльзивира, берем соединения и ничего не меняем.
2. Можно добавлять свои контейнеры.
3. Чтобы контейнер отображался надо положить файл контейнера на c:\Users\<User name>\AppData\Roaming\iEI\CompoundContainers\3.83.418.0

Проверки (Checks)



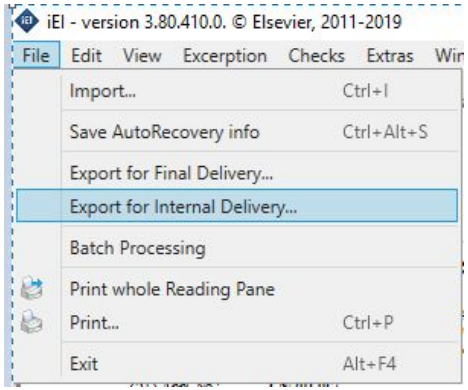
- Все обязательные проверки объединены в **Combined Check**
- Красные ошибки (error) должны быть исправлены, желтые (warning) – проверены на предмет необходимых изменений
- Дубликаты структур удобно проверять через **Duplicated structures** check

Сохранение сделанной работы



Работа сохраняется автоматически при закрытии файла или при закрытии iEI.

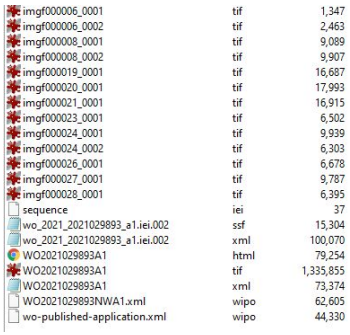
Открыть последний вариант можно со стартовой страницы дабл-кликом по имени файла



File -> Export for Internal delivery – функция экспорта для сохранения промежуточного этапа работы

Файл сохраняется в директорию, выбранную пользователем.

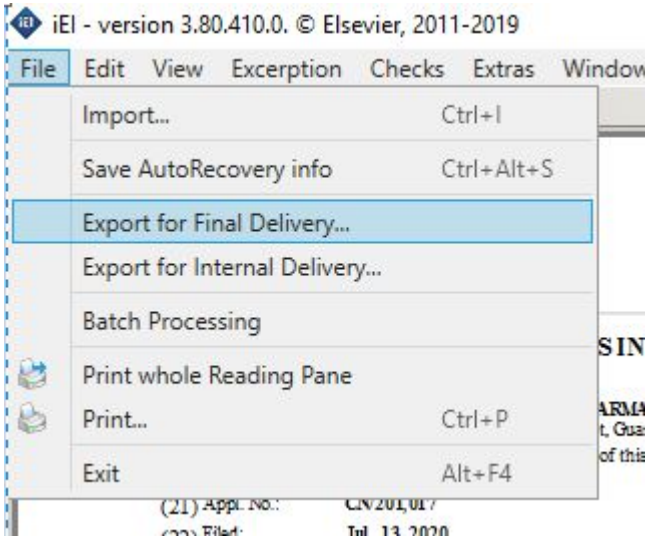
Формат имени файла – **выбранное_имя.iei.002.internal.zip**



imgf000006_0001	tif	1,347
imgf000006_0002	tif	2,463
imgf000008_0001	tif	9,089
imgf000008_0002	tif	9,907
imgf000019_0001	tif	16,687
imgf000020_0001	tif	17,993
imgf000021_0001	tif	16,915
imgf000023_0001	tif	6,502
imgf000024_0001	tif	9,939
imgf000024_0002	tif	6,303
imgf000026_0001	tif	6,678
imgf000027_0001	tif	9,787
imgf000028_0001	tif	6,395
sequence	iei	37
wo_2021_2021029893_a1.iei.002	ssf	15,304
wo_2021_2021029893_a1.iei.002	xml	100,070
WO2021029893A1	html	79,254
WO2021029893A1	tif	1,335,855
WO2021029893A1	xml	73,374
WO2021029893NWA1.xml	wipo	62,605
wo-published-application.xml	wipo	44,330

В получившемся zip файле содержится все исходные файлы. Этот файл можно **редактировать, закачав его снова в iEI.**

Завершение работы



File -> Export for final delivery – функция окончательного экспорта для отправки сделанной работы в Elsevier

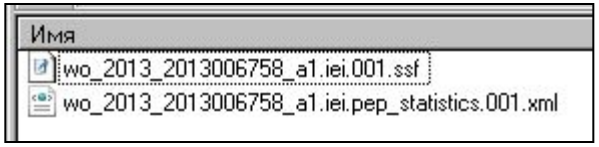
Перед окончательным экспортом обязательна проверка (**Combined Check**); если проверки не было, она предлагается автоматически

Zip файл получает правильное наименование автоматически. **Менять предлагаемое название на этой стадии нельзя**.

(корректный формат имени:

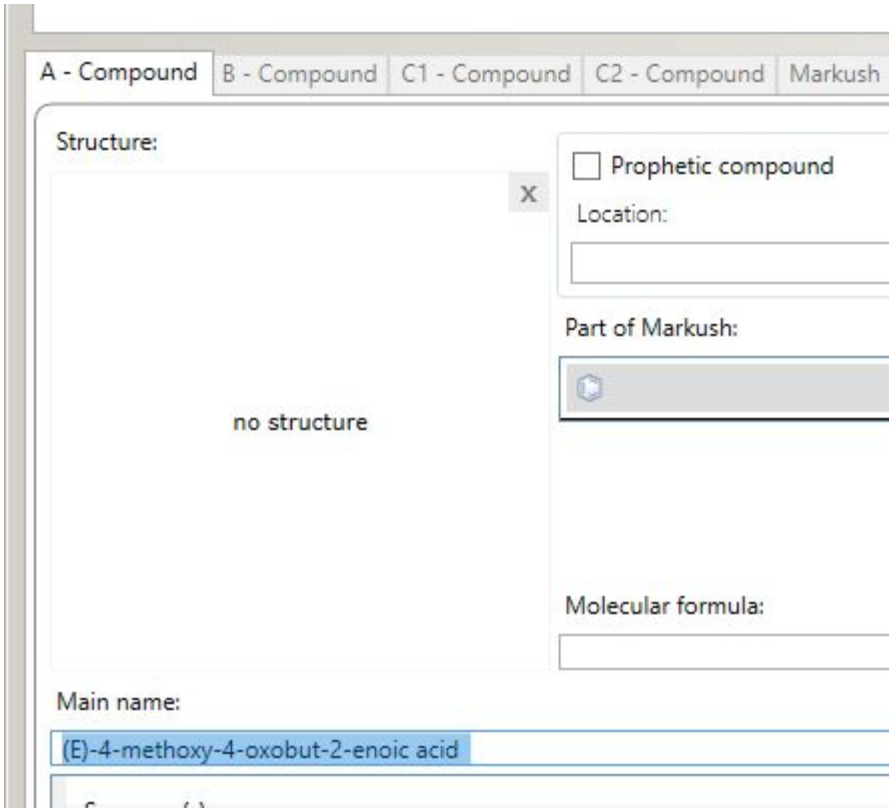
wo_2013_2013006758_a1.iei.002.zip

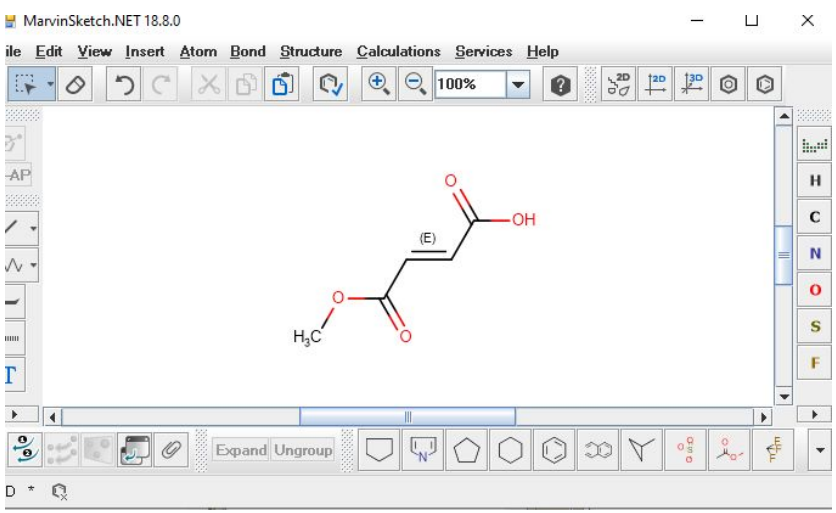
ap_21622531_2021_00023_---_000811_000820_00_00.iei.003.zip)



В получившемся zip файле содержится только конечный ssf файл и xml файл со статистикой. **Редактировать этот файл в iEI уже нельзя.**

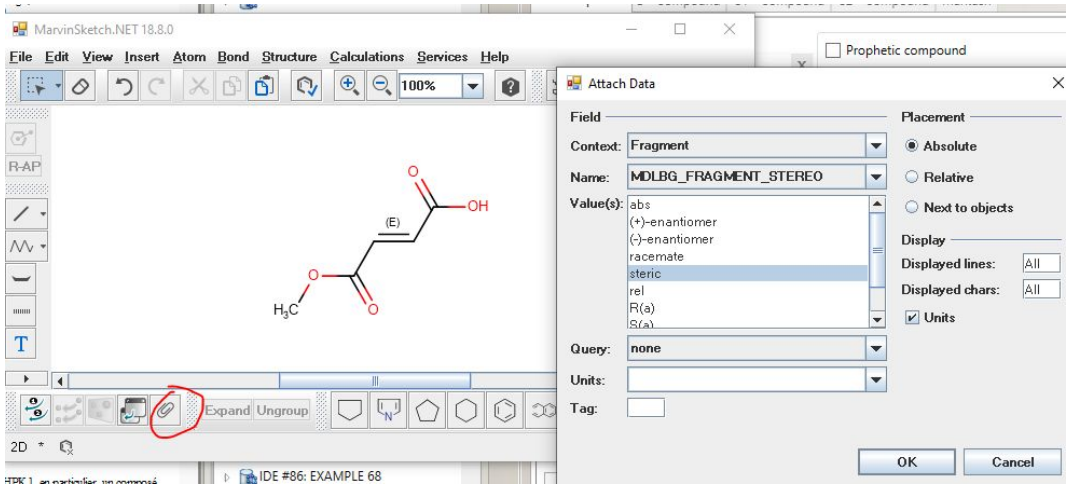
Рисование по имени



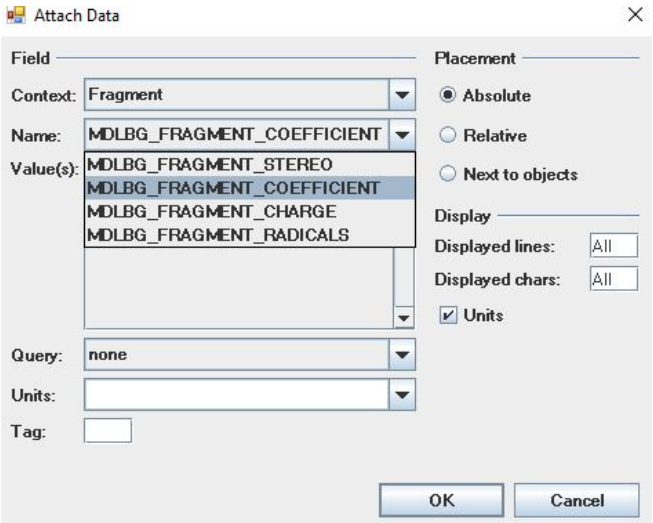


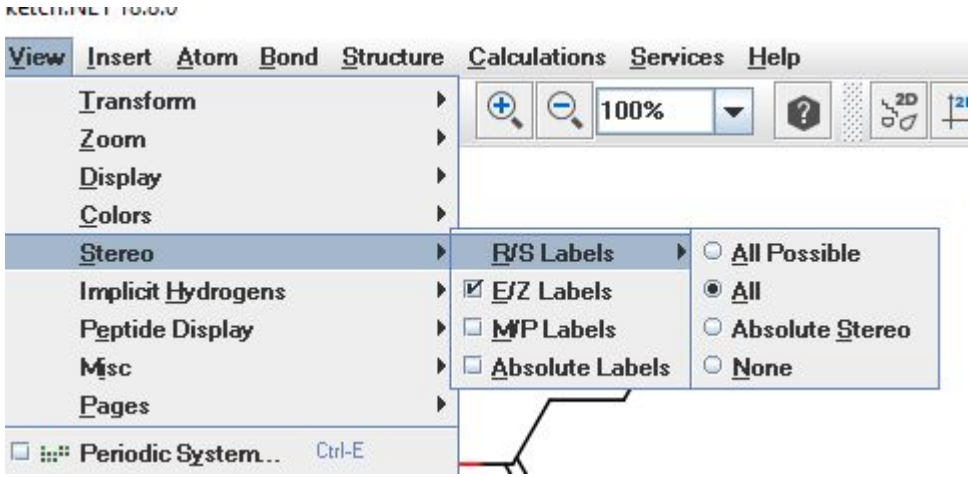
1. Скопировать имя
2. Открыть Марвин (дабл клик по полю структуры)
3. Вставить имя (ctrl+V)
4. Марвин нарисует структуру, если может
5. Проверить, иногда он ошибается
6. Если не нарисовал, то проверить имя на опечатки
7. Если не нарисовал, можно попробовать нарисовать в ChemDraw https://chemdrawdirect.perkinelmer.cloud/js/sample/index.html# и скопировать сруктуру в Марвин

Дескрипторы, коэффициенты в Марвине

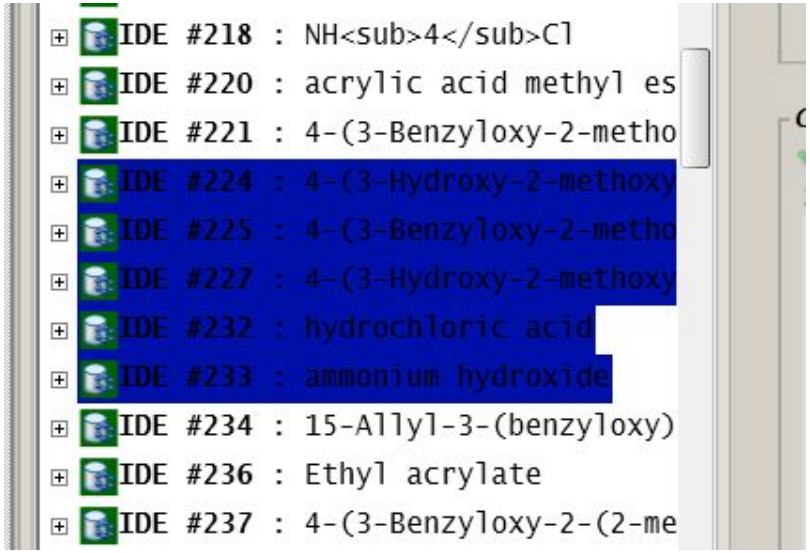


1. По кнопке со скрепкой или меню Structure->Add->Data вызывается окно со стерео дескрипторами
2. Там же коэффициенты
3. Надо выделть структуру (ctrl+A или кнопкой в левом верхнем углу), потом кнопка со скрепкой
4. Настроить Марвин, чтобы показывал конфигурацию View->Stereo->E/Z labels, R/S labels-All

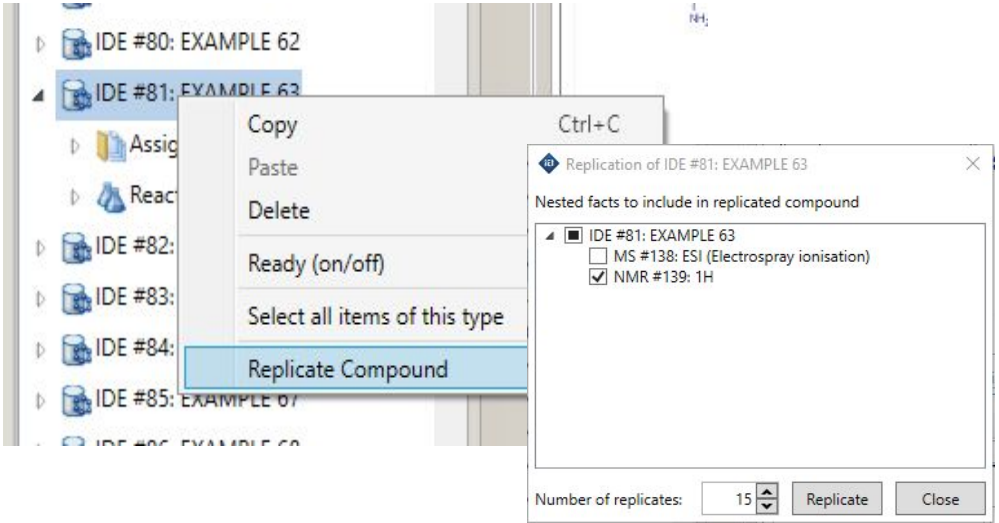




Возможность работы с несколькими выделенными объектами

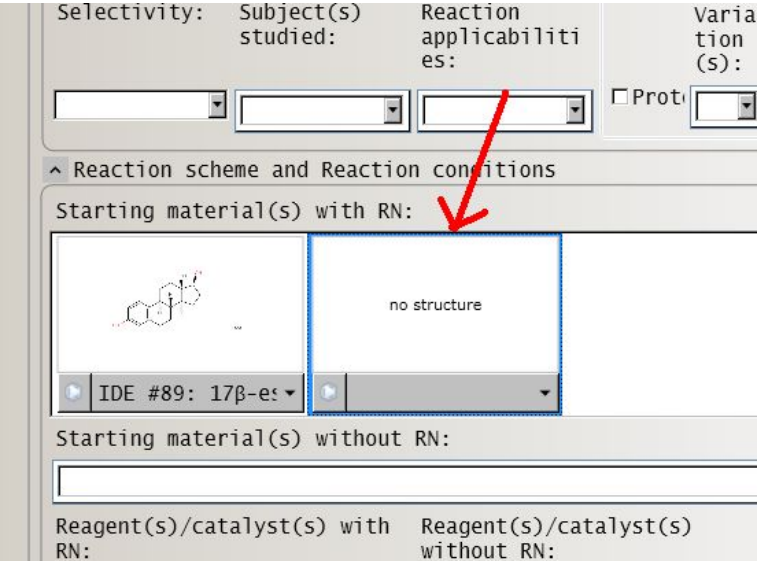


1. Выделить с использованием левого клика мыши+ Ctrl или Shift
2. При нажатии Delete – удалить все выбранные объекты
3. При использовании Copy/Paste – скопировать и вставить
4. Если предварительно скопировать в буфер группу масок – можно вставить эту группу целиком в каждое из выбранных IDE

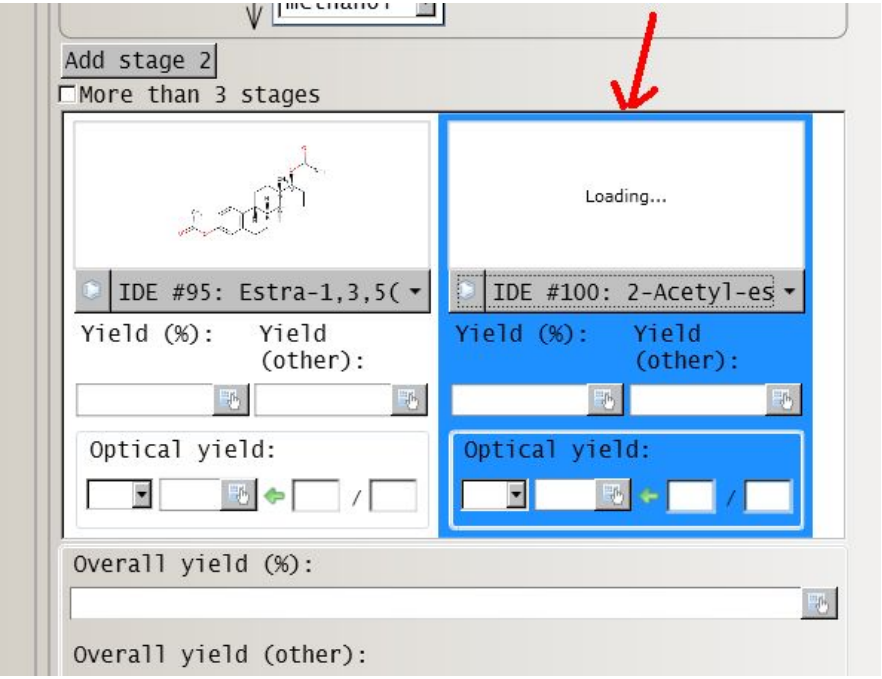


1. По правой кнопке мыши – Replicate compound
2. Можно реплицировать соединение нужное количество раз с нужными фактами

Особенности заведения/удаления стартовых веществ и продуктов RX

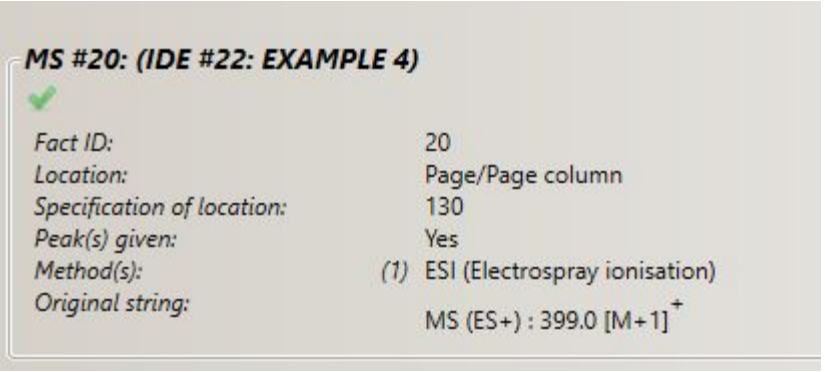


Чтобы **создать** новый compound control, используйте **Ctrl-Tab**

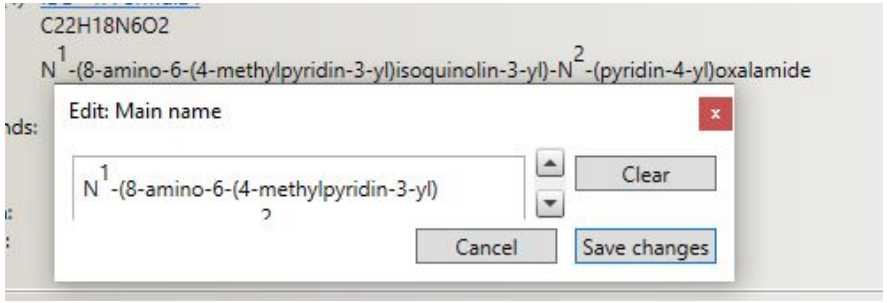


Чтобы **удалить** ненужный compound control, используйте **Ctrl-Delete**

Особенности QA View

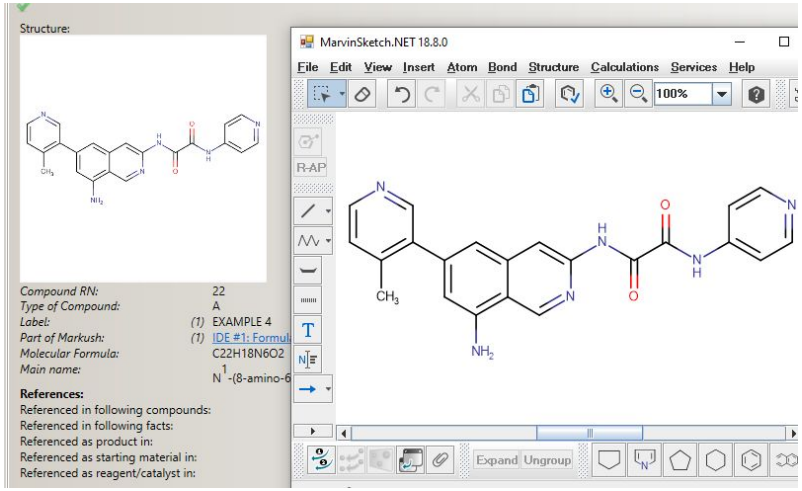


Отображает заполненные поля



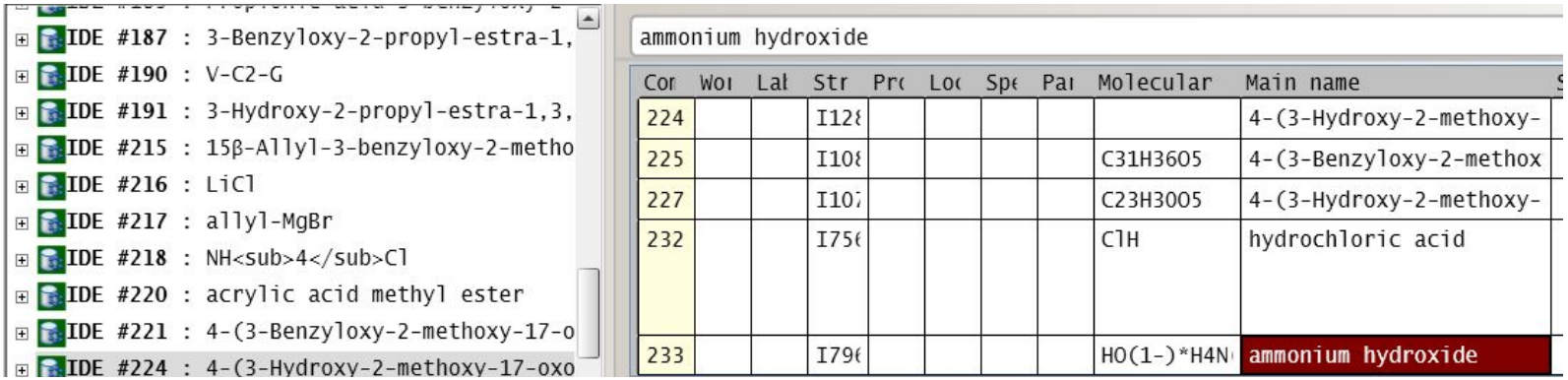
Возможность редактирования

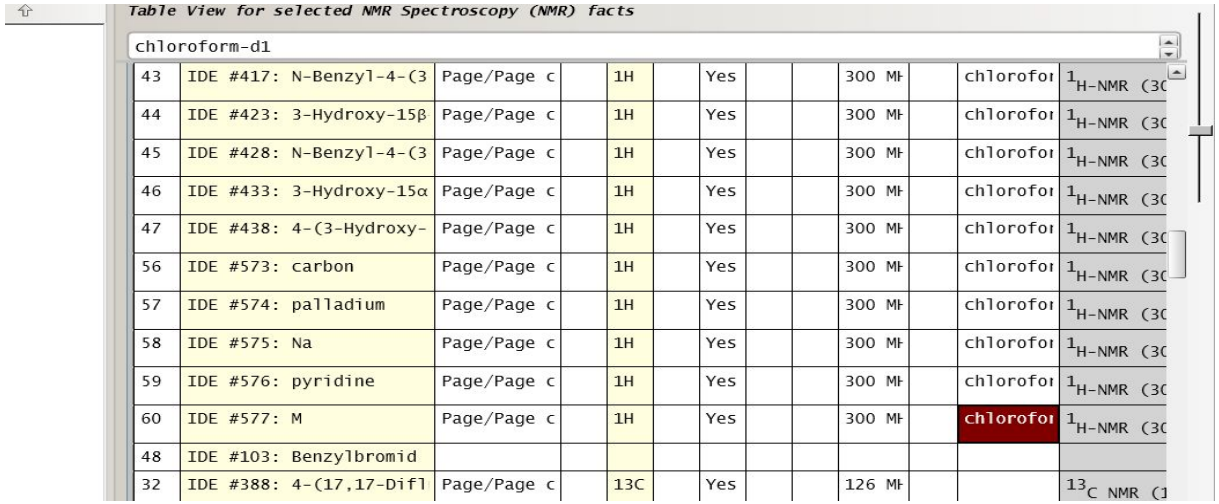
(по правой кнопке мыши)



Возможность вызова MarvinSketch, дабл-клик на структуру-откроется Марвин

Особенности Table View





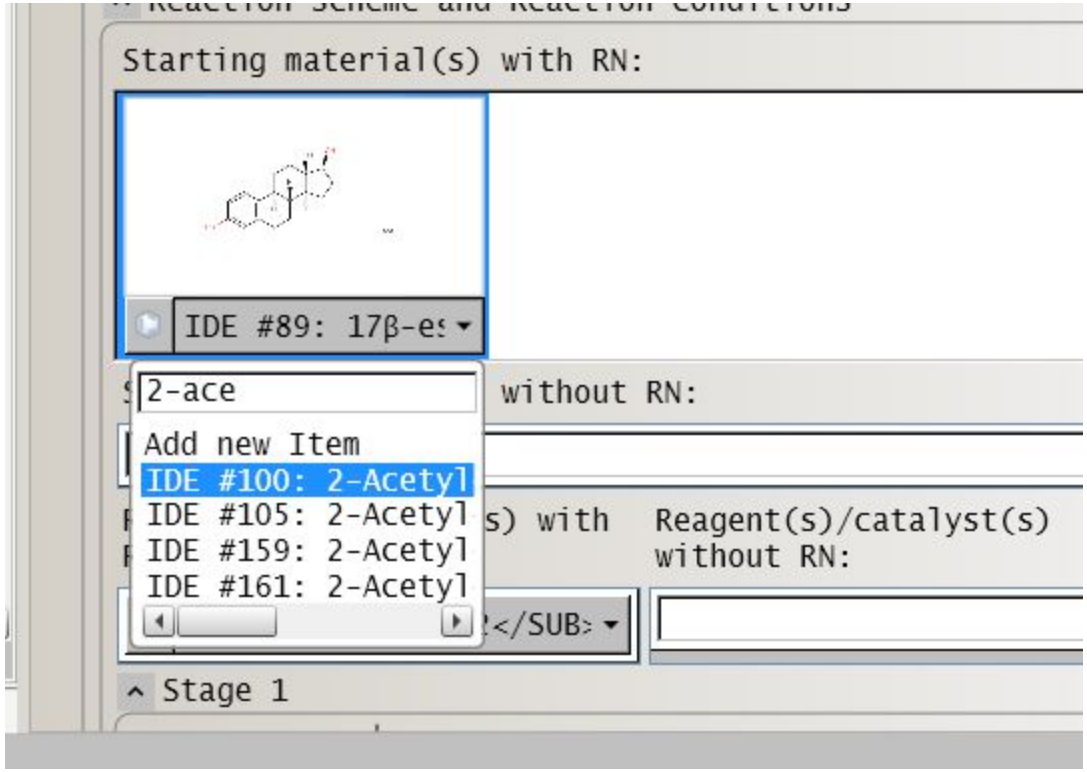
Выделенное содержимое ячейки (ammonium hydroxide или chloroform-d8) можно

a) **Удалить** клавишей Delete (не заходя в ячейку)

b) Скопировать (Ctrl-C) и затем **размножить** на всю колонку или на ее часть (выделив ячейки в колонке и нажав Ctrl-V)

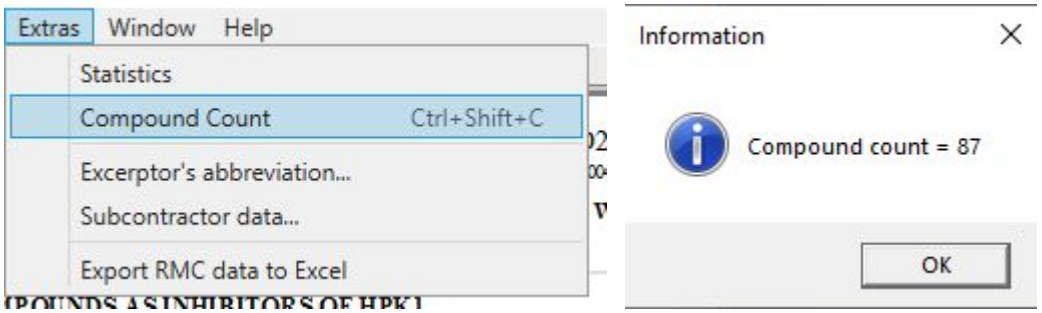
Можно экспортировать таблицу в эксель, там сделать изменения в текстовых полях и вставить столбцы с измененными данными обратно.

Поиск по списку веществ, стартинги, реагенты



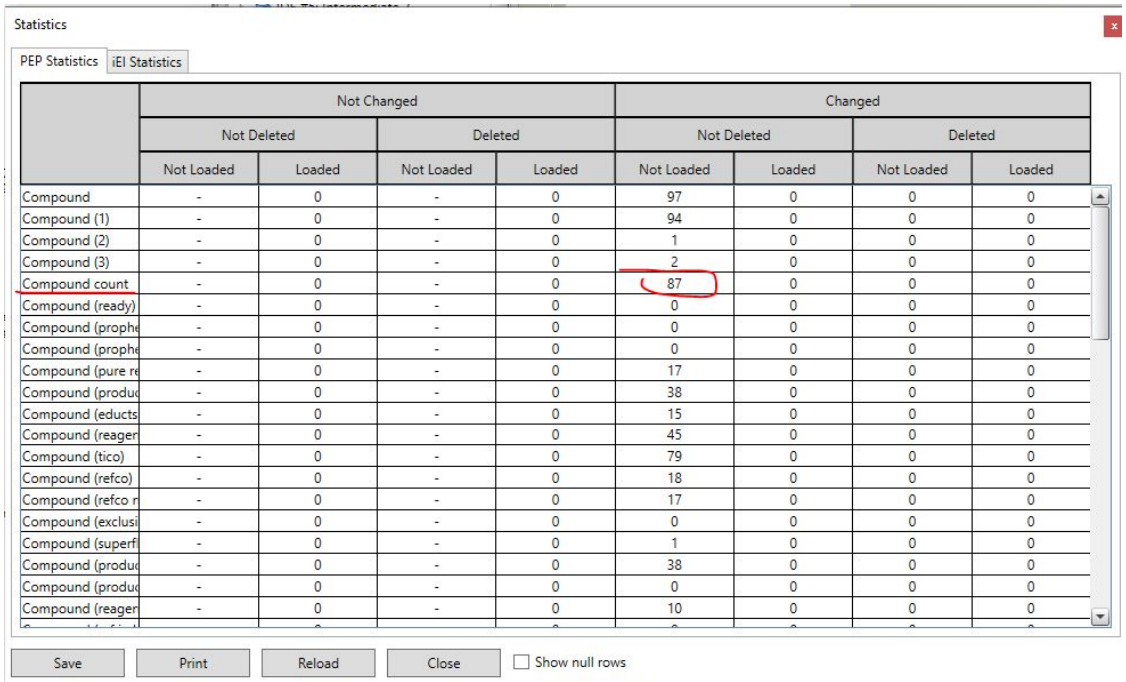
1. Откройте выпадающий список веществ
2. Начните печатать кусок имени или номера соединения
3. Список будет сокращаться

Статистика



1. Extras -> Compound count - упрощенный вариант статистики

Более детальная статистика



	Not Changed				Changed			
	Not Deleted		Deleted		Not Deleted		Deleted	
	Not Loaded	Loaded	Not Loaded	Loaded	Not Loaded	Loaded	Not Loaded	Loaded
Compound	-	0	-	0	97	0	0	0
Compound (1)	-	0	-	0	94	0	0	0
Compound (2)	-	0	-	0	1	0	0	0
Compound (3)	-	0	-	0	2	0	0	0
Compound count	-	0	-	0	87	0	0	0
Compound (ready)	-	0	-	0	0	0	0	0
Compound (prophe	-	0	-	0	0	0	0	0
Compound (prophe	-	0	-	0	0	0	0	0
Compound (pure re	-	0	-	0	17	0	0	0
Compound (produc	-	0	-	0	38	0	0	0
Compound (educts	-	0	-	0	15	0	0	0
Compound (reager	-	0	-	0	45	0	0	0
Compound (tico)	-	0	-	0	79	0	0	0
Compound (refco)	-	0	-	0	18	0	0	0
Compound (refco r	-	0	-	0	17	0	0	0
Compound (exclusi	-	0	-	0	0	0	0	0
Compound (superf	-	0	-	0	1	0	0	0
Compound (produc	-	0	-	0	38	0	0	0
Compound (produc	-	0	-	0	0	0	0	0
Compound (reager	-	0	-	0	10	0	0	0

1. Extras -> Statistic
2. Используйте информацию в строке **Compound count**