

iEI

for exception 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\\chemaxon.

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

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

б) iEI.Setup.msi

На рабочем столе появится иконка



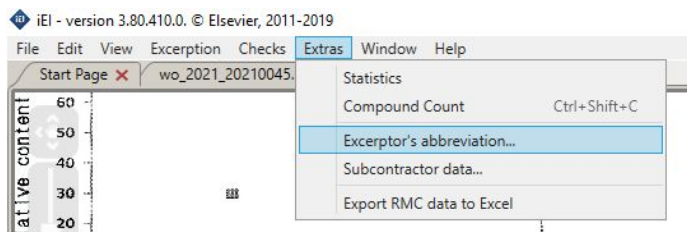
Рабочие файлы программы iEI – всегда архивы с расширением .zip

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

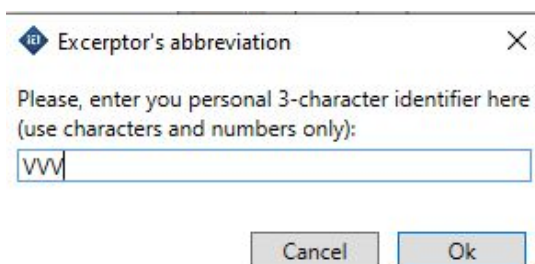
# Начало работы. Введение личного и группового кода

Меню - Extras

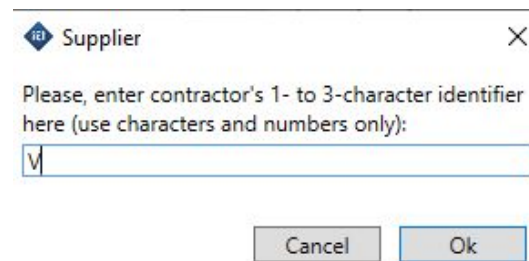


## Статьи

Обязательно VVV

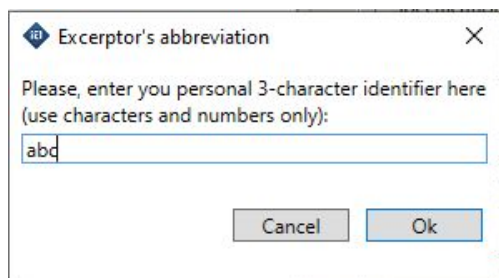


Обязательно V

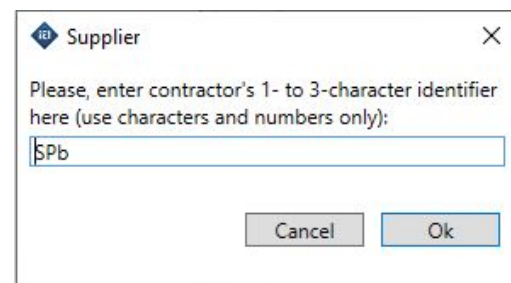


## Патенты

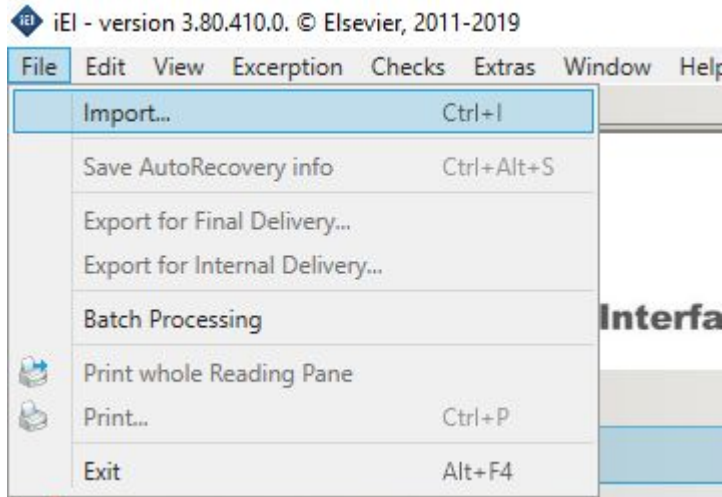
Любой трехзначный nickname



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




The screenshot displays a software interface for chemical synthesis. On the left, the **Reading pane** shows a multi-step synthesis protocol. **Step three:** 1-3 (1.0 g) was dissolved in THF (10 mL) and added with TEA (2 mL) to react at 80 °C overnight. **Step four:** 1-4 (300 mg) was dissolved in anhydrous THF (10 mL) and added with lithium aluminum hydride (3.0 eq.) to react at 80 °C for 2h. **Step five:** A solution of bromoacetyl bromide (1.1 eq.) in dichloromethane was added dropwise to a solution of 1-5 (230 mg) and triethylamine (1.5 eq.) in dichloromethane under an ice bath to react at 0 °C for 1h. Below the text is **Example 2 Synthesis of amide AN-2:** with a reaction scheme showing compounds 2-1, 2-2, 2-3, 2-4, and AN-2 connected by arrows labeled Step one, Step two, Step three, and Step four.

In the center, the **Navigation tree** lists compounds with icons: IDE #396: triethylamine, Et3N, NEt3, TEA; IDE #397: HATU; IDE #399: SY-BO81; IDE #407: potassium carbonate; IDE #408: SY-BO88; IDE #416: SY-BO95; IDE #422: SY-BO96; IDE #453: methyleneurea; IDE #454: cesium carbonate; IDE #455: tris(dibenzylideneacetone)dipalmitate; IDE #456: SY-B106; IDE #595: triphenylphosphine; IDE #597: diisopropyl azodicarboxylate; IDE #598: SY-B110; IDE #603: 4,5-bis(diphenylphosphino)-9-fluorenone; IDE #604: SY-B112; IDE #642: Pd/C; IDE #659: SY-B144; IDE #667: SY-B150; IDE #673: SY-B154; IDE #676: SY-B155; IDE #679: SY-B156; IDE #680: I; IDE #681: bromoacetyl bromide; IDE #682: 5% Pd/C, 5% Pd-C; IDE #683: Pd, Pd black, palladium; IDE #684: C, carbon.

On the right, the **Working pane** shows **Compound Identification (IDE) #681** for bromoacetyl bromide. It includes a chemical structure, a 'Prophetic compound' checkbox, a 'Location' dropdown, a 'Part of Markush' dropdown, and a 'Molecular formula' field containing C2H2Br2O. Below are fields for 'Main name' (bromoacetyl bromide), 'Synonym(s)', 'Modification', 'Macroscopic type', and 'Beilstein Source'. At the bottom are 'Comments' and 'References' sections.

-  Manually entered
-  Pre-excerpted
-  Pre-excerpted changed

-  A-compound
-  B-compound
-  C1-compound

-  C2-compound
-  Prophetic compound
-  Markush compound

# Вкладки и виды

wo\_2021004547\_a1, heterocyclic compounds as inhibitors of hpk1

Exc. QA Tab

### Compound Identification (IDE) #96

Working name:  Label:

A - Compound B - Compound C1 - Compound C2 - Compound Markush

Structure:  Prophetic compound

Location:

Part of Markush:

Molecular formula:

Main name:

Synonym(s):

Modification:

Macroscopic type:

Beilstein Source:

Comments:

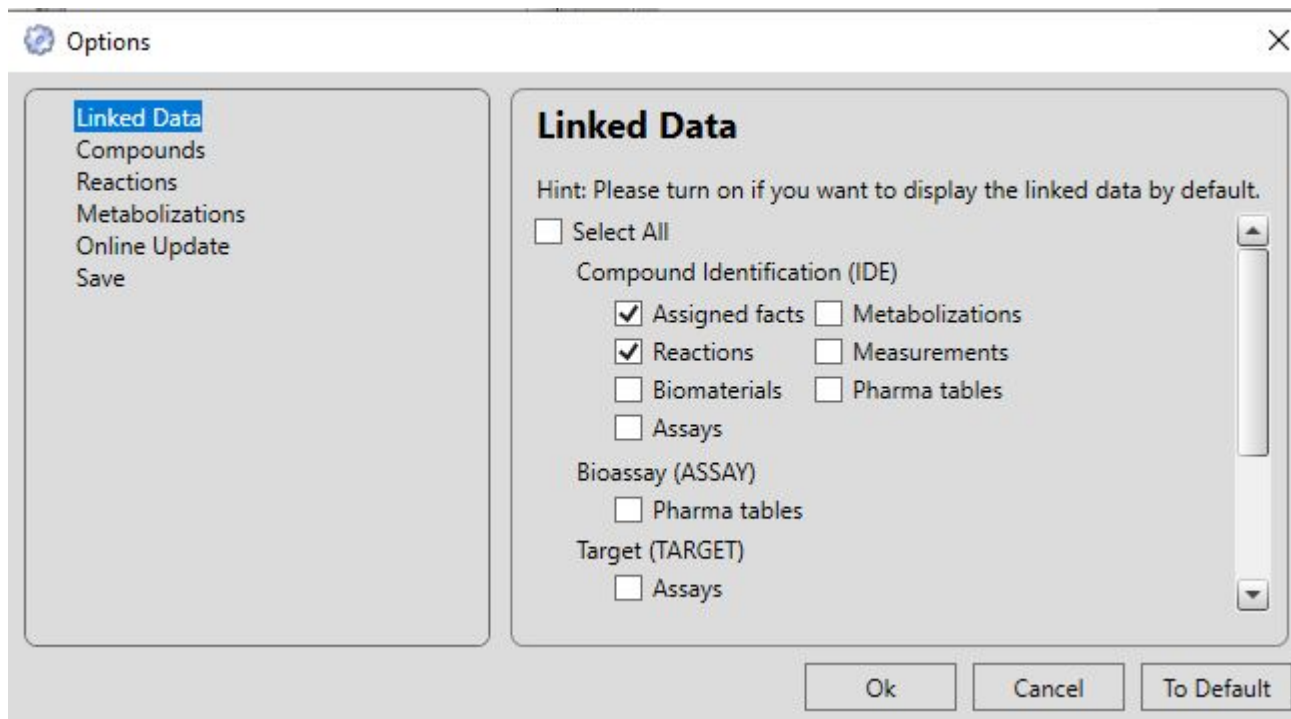
References:

Referenced in following compounds:

R. F. A. T. B. M. P. M

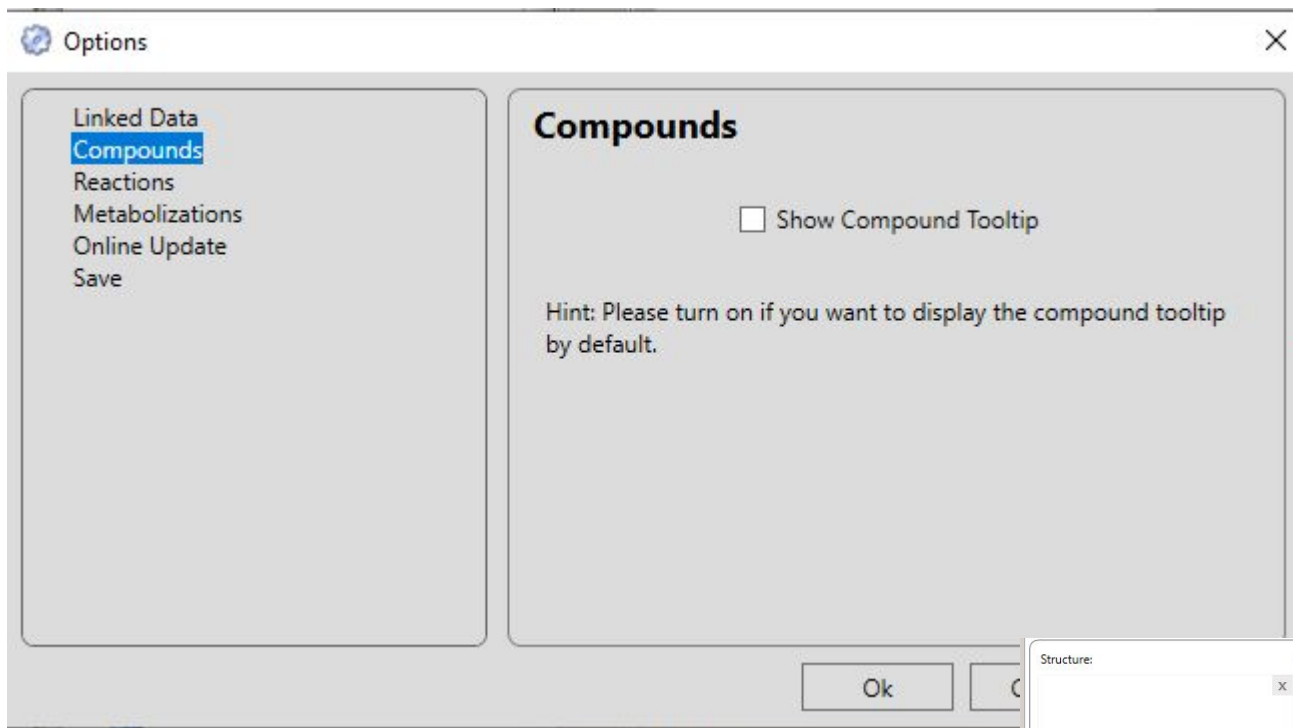
# Меню Options

## Linked data

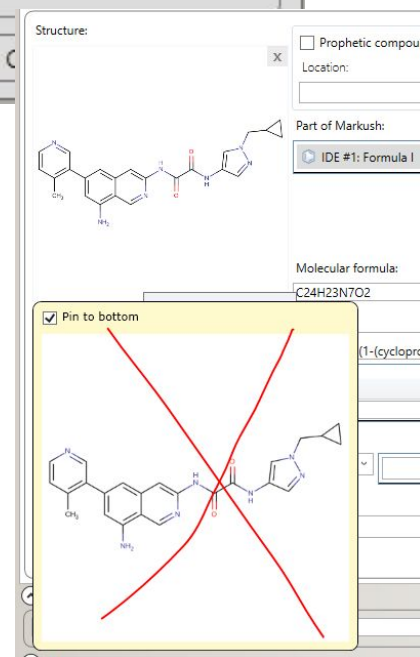


1. Откройте Edit->Options->Linked data
2. Рекомендуется поставить галочки на Assigned facts and Reactions

# Меню Options

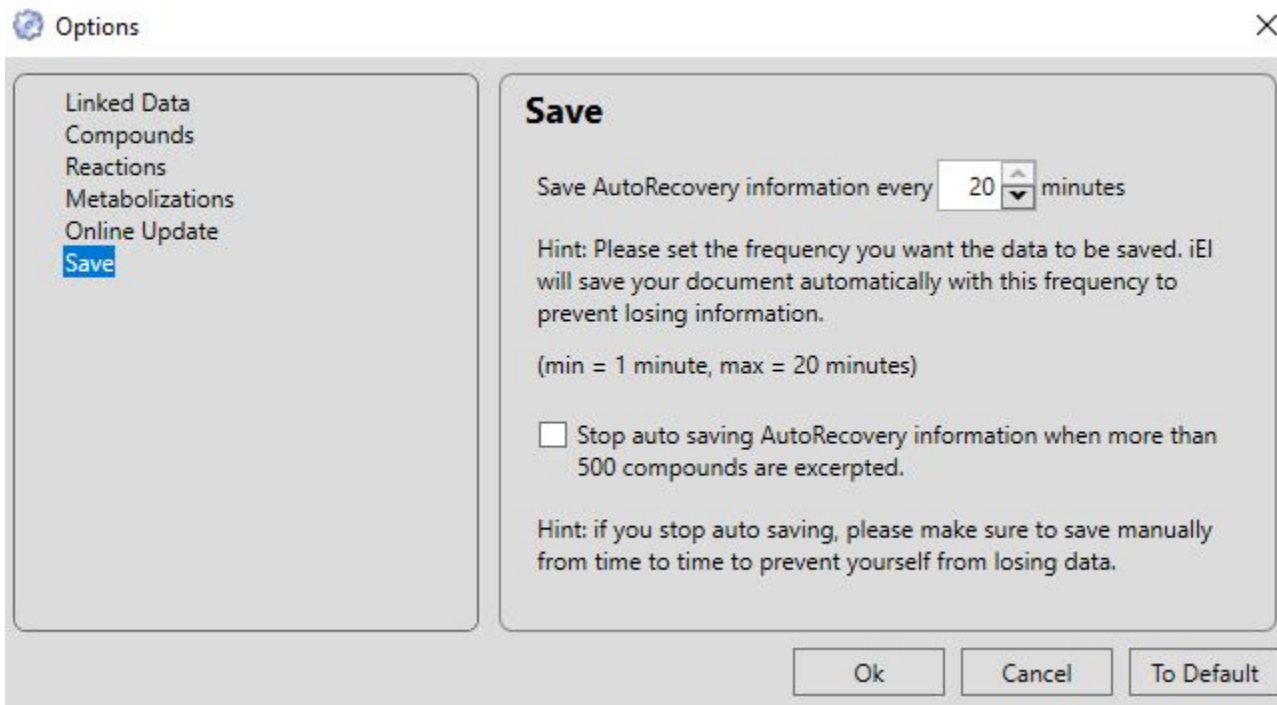


1. Edit->Options->Compounds and Edit->Options->Reactions можно включить/отключить всплывающие окна структур и реакций



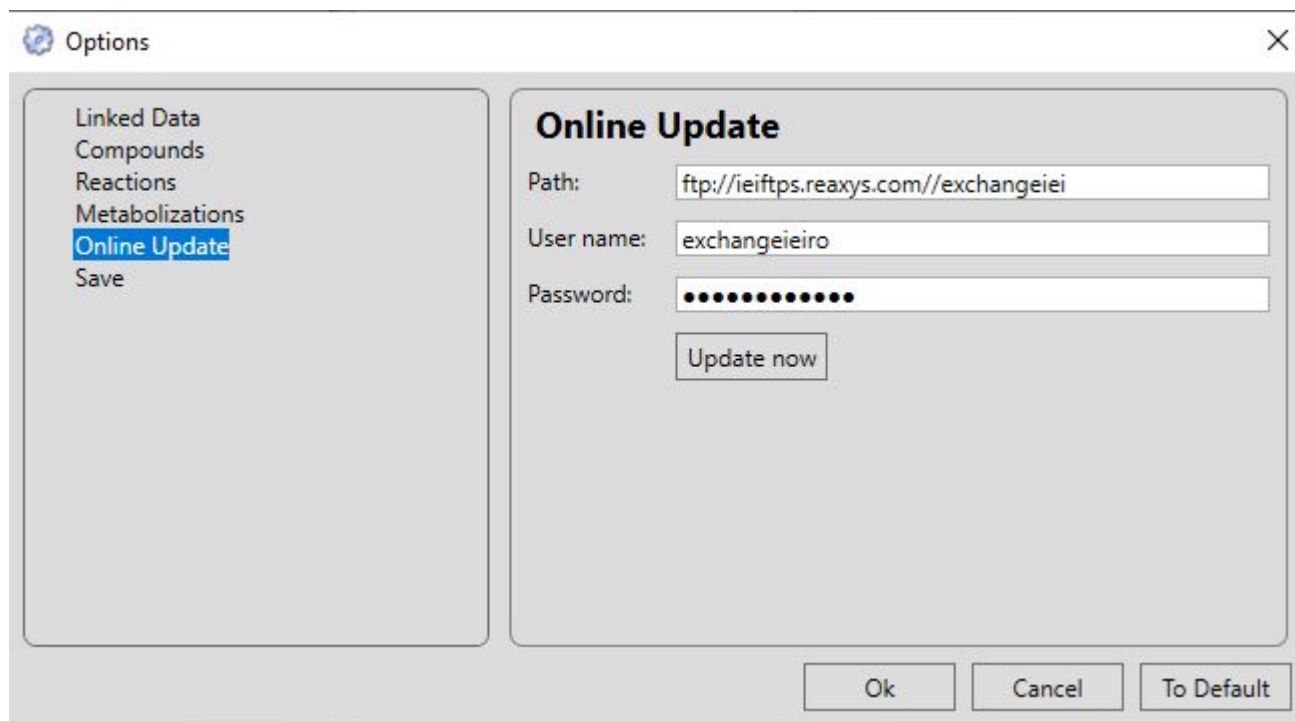


# Настройка времени автосохранения



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.

**Compound Identification (IDE) #685**

Working name:  Label:

A - Compound | B - Compound | C1 - Compound | C2 - Compound | Markush

Structure:  no structure

Prophetic compound


Location:

Part of Markush:

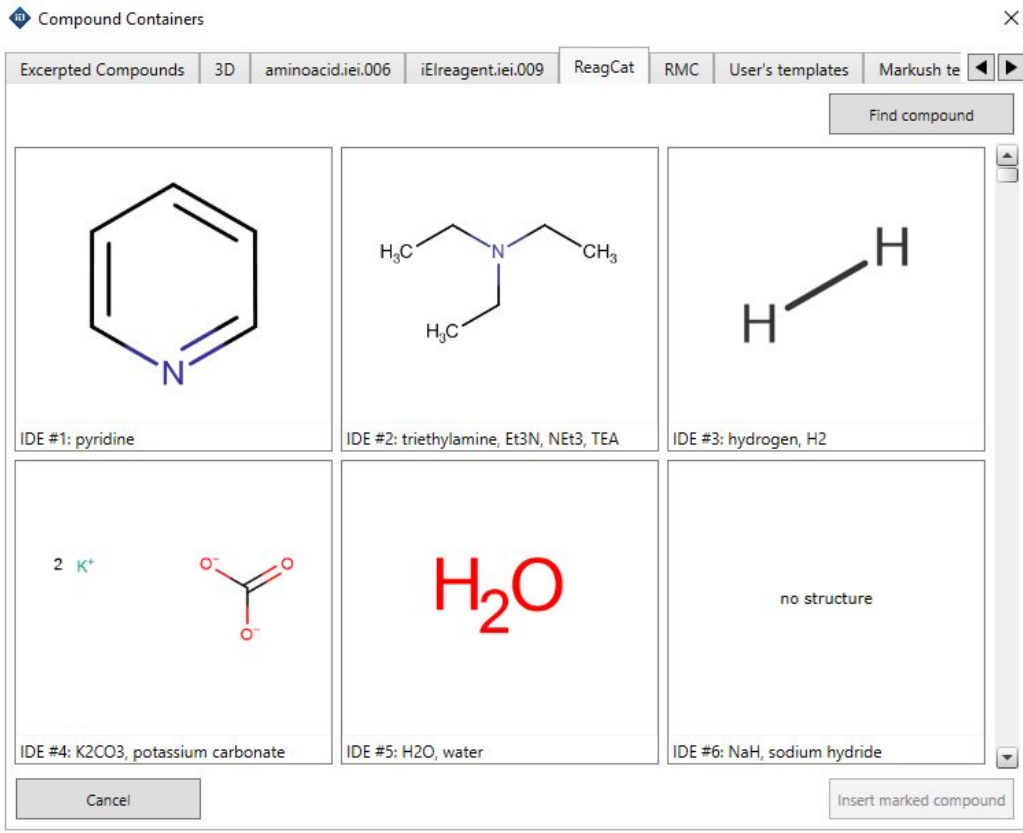
Molecular formula:

Main name:

Synonym(s):

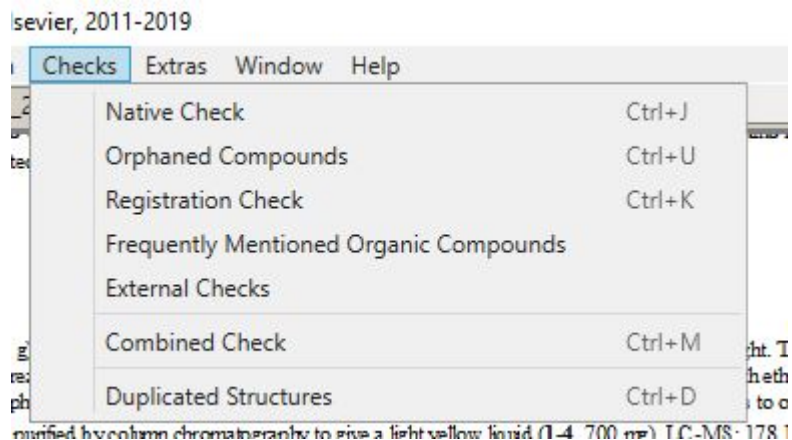
- Используйте вкладки для выбора типа вещества
- Используйте иконку контейнера  для доступа в Compound Containers

# 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\iE\CompoundContainers\3.83.418.0`

# Проверки (Checks)



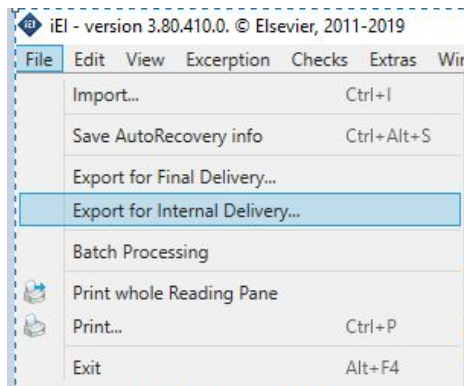
- Все обязательные проверки объединены в **Combined Check**
- Красные ошибки (error) должны быть исправлены, желтые (warning) – проверены на предмет необходимых изменений
- Дубликаты структур удобно проверять через **Duplicated structures check**

# 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

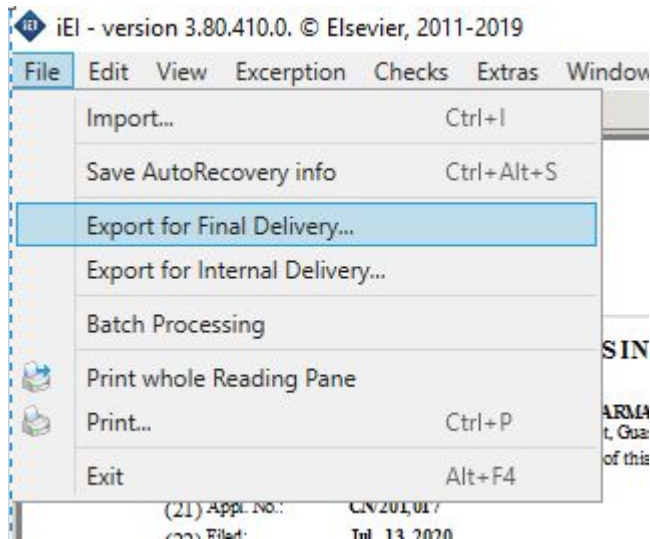
Файл сохраняется в директорию, выбранную пользователем.

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	6,302
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
WQ2021029893A1	html	79,254
WQ2021029893A1	tif	1,335,855
WQ2021029893A1	xml	73,374
WQ2021029893NWA1.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:

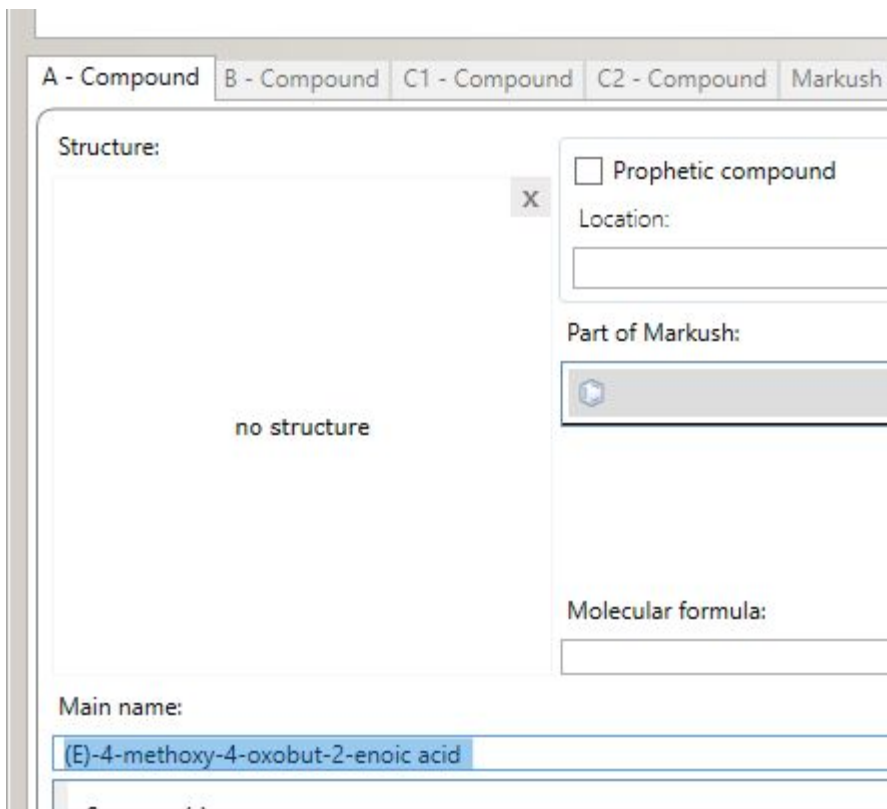
**wo\_2013\_2013006758\_a1.iei.002.zip**

**ap\_21622531\_2021\_00023\_---\_000811\_000820\_00\_00.iei.003.zip)**

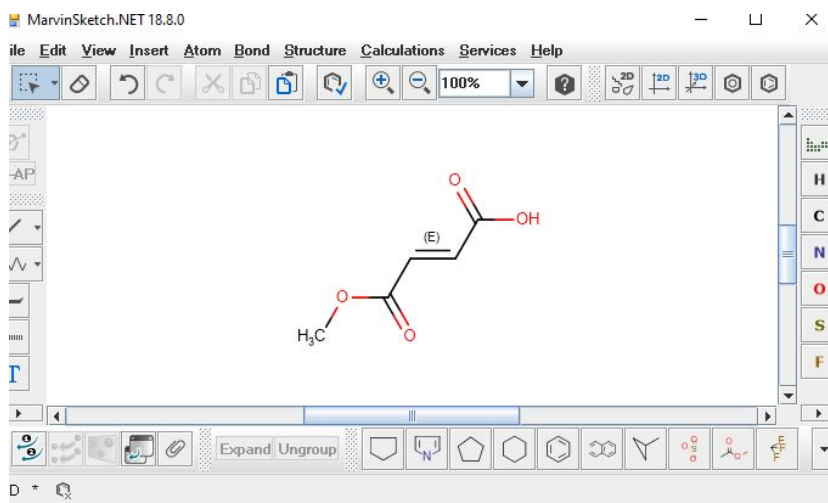


В получившемся zip файле содержится только конечный ssf файл и xml файл со статистикой. **Редактировать этот файл в iEI уже нельзя.**

# Рисование по имени

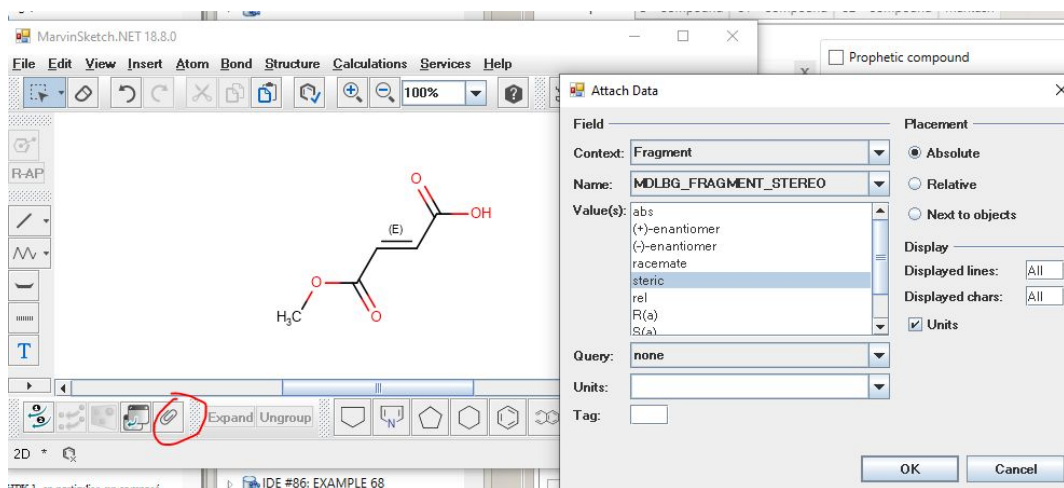


1. Скопировать имя
  2. Открыть Марвин (дабл клик по полю структуры)
  3. Вставить имя (ctrl+V)
  4. Марвин нарисует структуру, если может
  5. Проверить, иногда он ошибается
  6. Если не нарисовал, то проверить имя на опечатки
  7. Если не нарисовал, можно попробовать нарисовать в ChemDraw
- <https://chemdrawdirect.perkinelmer.cloud/js/sample/index.html>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

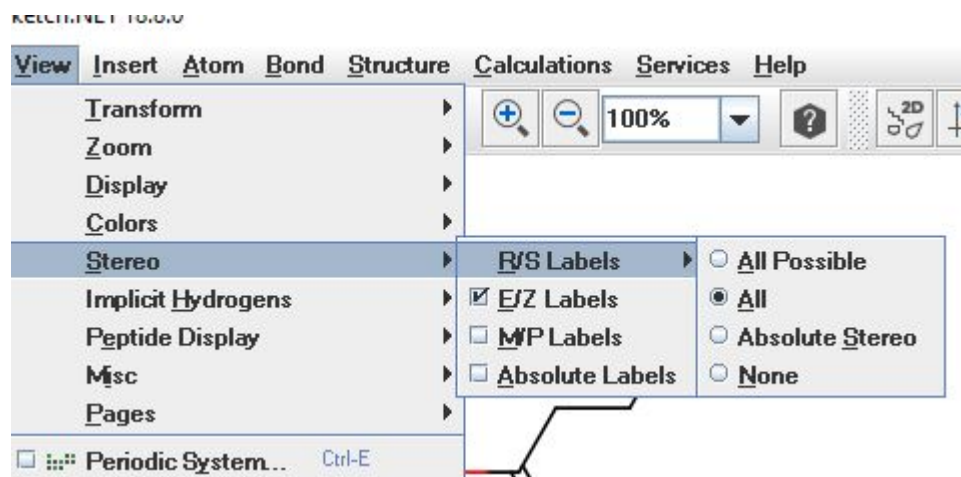
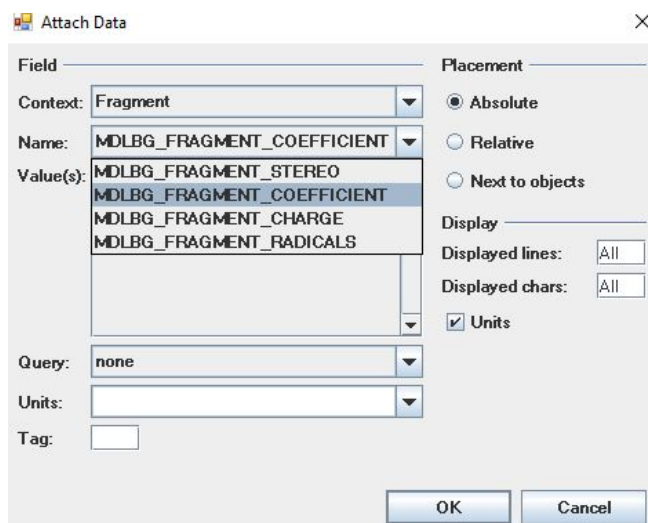




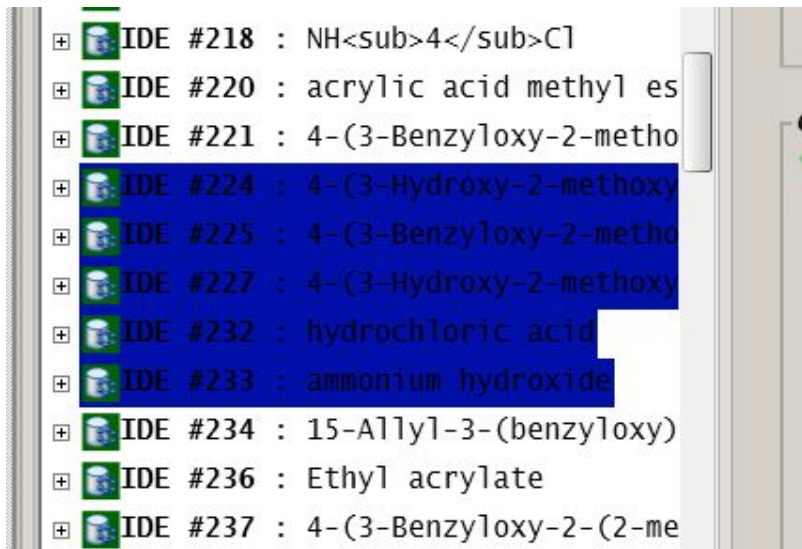
# Дескрипторы, коэффициенты в Марвине



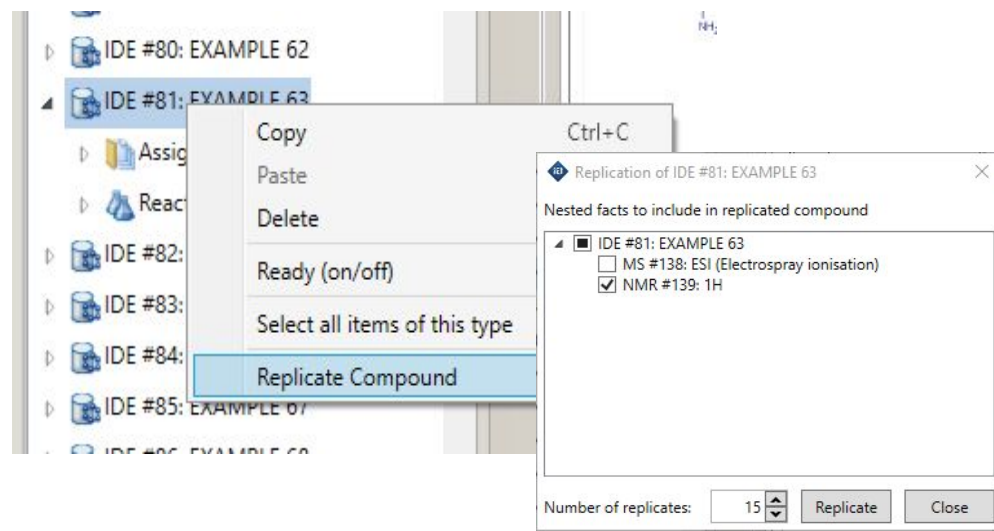
1. По кнопке со скрепкой или меню Structure->Add->Data вызывается окно со стерео дескрипторами
2. Там же коэффициенты
3. Надо выделить структуру (ctrl+A или кнопкой в левом верхнем углу), потом кнопка со скрепкой
4. Настроить Марвин, чтобы показывал конфигурацию View->Stereo->E/Z labels, R/S labels-All



## 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

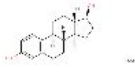
# Особенности заведения/удаления стартовых веществ и продуктов RX

Selectivity: Subject(s) studied: Reaction applicabilities: Variation(s):

Prot:

Reaction scheme and Reaction conditions

Starting material(s) with RN:

 no structure

IDE #89: 17β-es


Starting material(s) without RN:

Reagent(s)/catalyst(s) with RN: Reagent(s)/catalyst(s) without RN:

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

Add stage 2

More than 3 stages

 Loading...

IDE #95: Estra-1,3,5( IDE #100: 2-Acetyl-es

Yield (%): Yield (other): Yield (%): Yield (other):

Optical yield: Optical yield:

Overall yield (%):

Overall yield (other):

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

# Особенности QA View

## MS #20: (IDE #22: EXAMPLE 4)



Fact ID: 20  
Location: Page/Page column  
Specification of location: 130  
Peak(s) given: Yes  
Method(s): (1) ESI (Electrospray ionisation)  
Original string: MS (ES+) : 399.0 [M+1]<sup>+</sup>

Отображает заполненные поля

C22H18N6O2  
N<sup>1</sup>-(8-amino-6-(4-methylpyridin-3-yl)isoquinolin-3-yl)-N<sup>2</sup>-(pyridin-4-yl)oxalamide

nds: Edit: Main name

N<sup>1</sup>-(8-amino-6-(4-methylpyridin-3-yl)

Clear

Cancel Save changes

Возможность редактирования

(по правой кнопке мыши)

Structure:

Compound RN: 22  
Type of Compound: A  
Label: (1) EXAMPLE 4  
Part of Markush: (1) IDE #1: Formul  
Molecular Formula: C22H18N6O2  
Main name: N<sup>1</sup>-(8-amino-6

MarvinSketch.NET 18.8.0

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Expand Ungroup

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

# Особенности Table View

Cor	Woi	Lal	Str	Pr	Loc	Sp	Pa	Molecular	Main name
224			I128						4-(3-Hydroxy-2-methoxy-
225			I108					C31H36O5	4-(3-Benzoyloxy-2-methox
227			I107					C23H30O5	4-(3-Hydroxy-2-methoxy-
232			I756					ClH	hydrochloric acid
233			I796					HO(1-)*H4N	ammonium hydroxide

IDE #	Name	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
43	IDE #417: N-Benzyl-4-(3	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
44	IDE #423: 3-Hydroxy-15β	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
45	IDE #428: N-Benzyl-4-(3	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
46	IDE #433: 3-Hydroxy-15α	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
47	IDE #438: 4-(3-Hydroxy-	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
56	IDE #573: carbon	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
57	IDE #574: palladium	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
58	IDE #575: Na	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
59	IDE #576: pyridine	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
60	IDE #577: M	Page/Page c	1H	Yes	300 MHz	chloroform	<sup>1</sup> H-NMR (300 MHz)
48	IDE #103: Benzylbromid						
32	IDE #388: 4-(17,17-Difl	Page/Page c	13C	Yes	126 MHz		<sup>13</sup> C NMR (126 MHz)

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

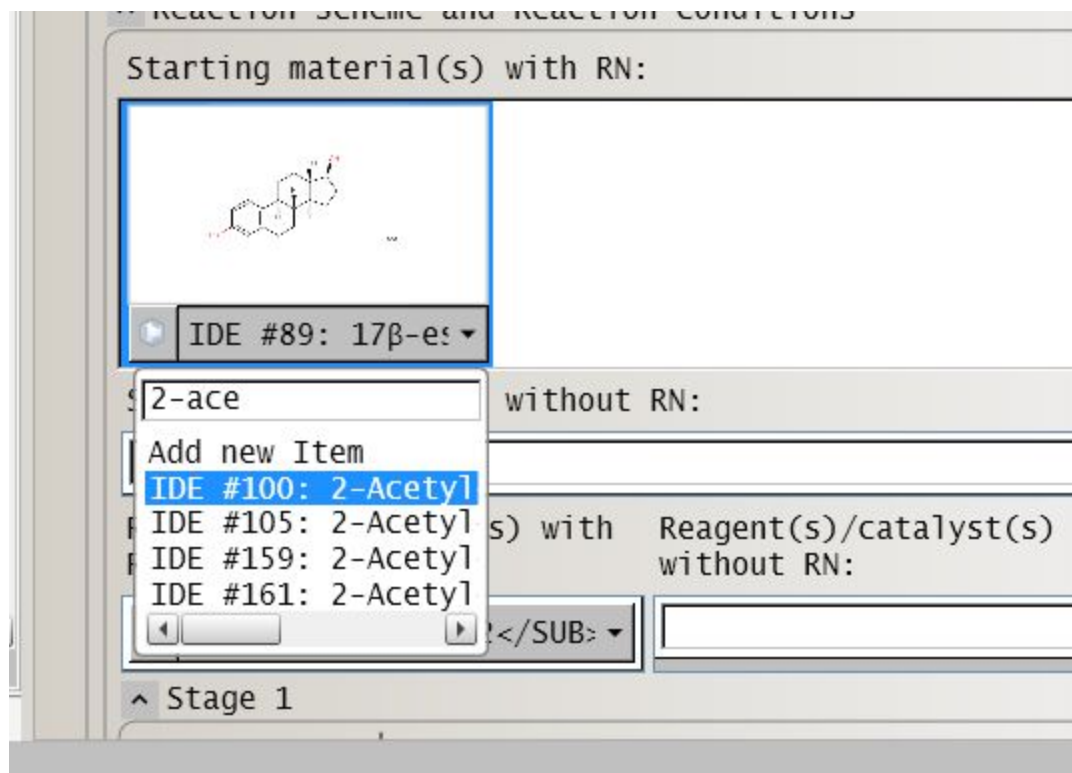
a) **Удалить** клавишей Delete (не заходя в ячейку)

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.

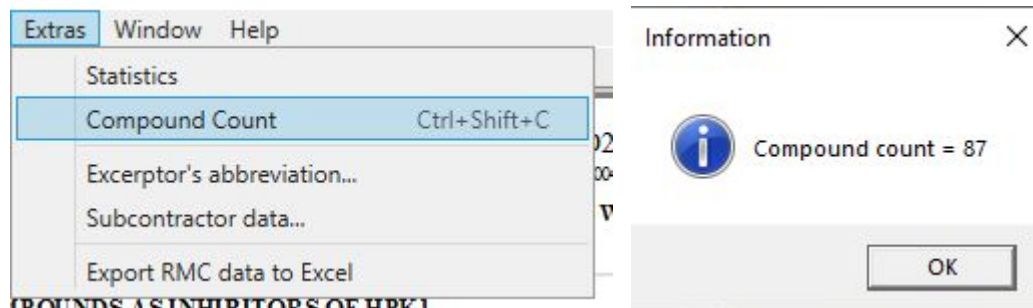


## Поиск по списку веществ, стартинги, реагенты



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

The image shows a 'Statistics' window with a detailed table. The table has a header with four main sections: 'Not Changed' and 'Changed', each subdivided into 'Not Deleted' and 'Deleted', and further into 'Not Loaded' and 'Loaded'. The data rows include various compound categories. The 'Compound count' row is highlighted with a red circle around the value 87 in the 'Not Deleted' column under 'Changed'.

	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 (proph)	-	0	-	0	0	0	0	0
Compound (proph)	-	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**