

InChI

InChI

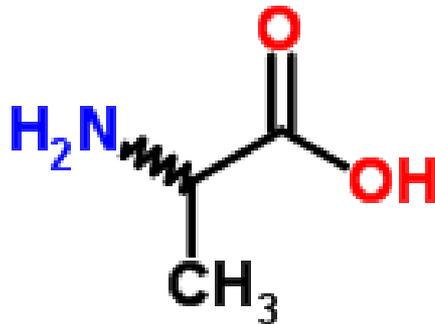
[інчи]

Systematic Name, Synonym, Trade Name,
Registry Number, SMILES or InChI

на поисковом бланке

Search

в результатах поиска



ChemSpider ID: 582
Empirical Formula: C₃H₇NO₂
Molecular Weight: 89.0932
Nominal Mass: 89 Da
Average Mass: 89.0932 Da
Monoisotopic Mass: 89.047678 Da

load save zoom

Systematic Name: 2-aminopropanoic acid

SMILES: O=C(O)C(N)C

InChI: InChI=1/C3H7NO2/c1-2(4)3(5)6/h2H,4H2,1H3,(H,5,6)

InChI - IUPAC International Chemical Identifier

InChI – международный текстовый идентификатор химического объекта; это компьютеризованный вариант систематического названия.

- Некоммерческий продукт.
- Использование разрешено без ограничений.
- Специалист может разобраться в строке InChI.

Пример: этанол $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

InChI=1/C2H6O/c1-2-3/h3H,2H2,1H3

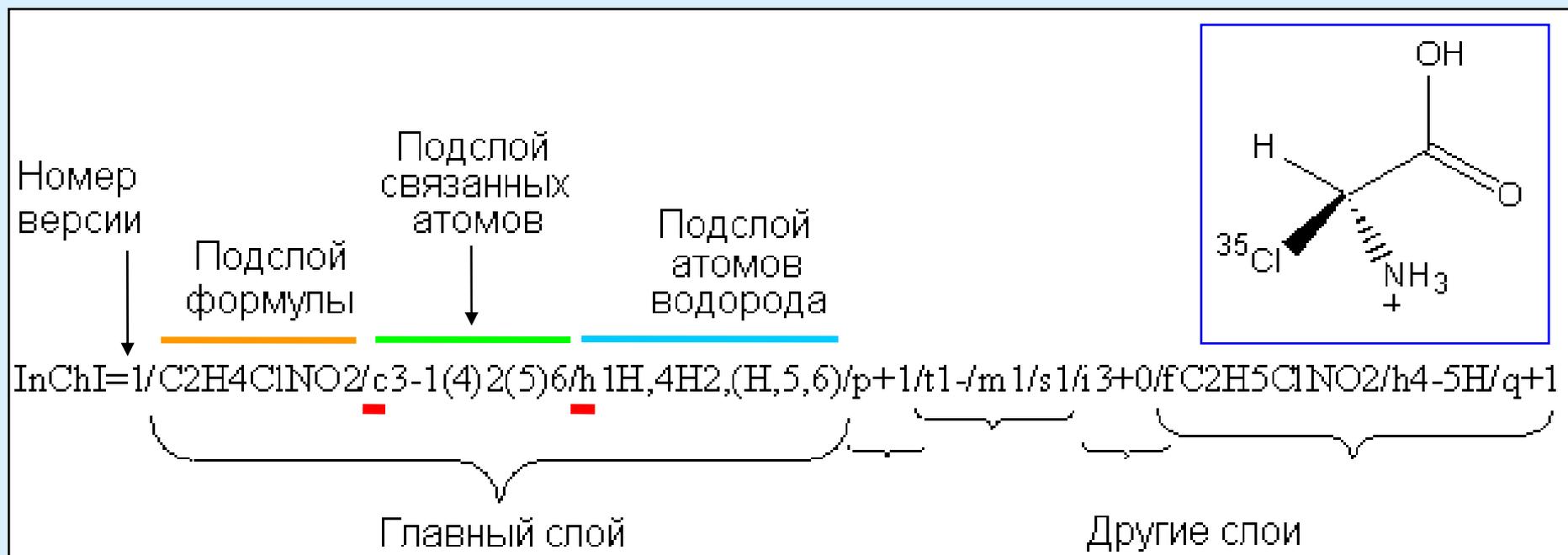
Но! Не человек, а компьютер должен генерировать код или из кода генерировать структурную формулу.

Модульная структура InChI

Код состоит из "слоев" и "подслоев".

6 слоев: главный; заряды; стереохимия; изотопный состав, ...

Подслои главного слоя: формула, перечень связанных атомов, распределение атомов водорода.

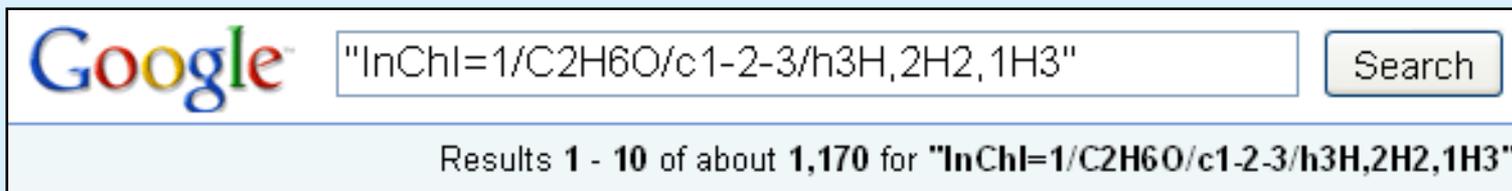


InChI

Модульная структура:

- гибко учитывает объем сведений о веществе,
- позволяет целенаправленно проводить поиск.
- Формула – единственный обязательный элемент кода.
- Новые данные о веществе дописывают в конце кода.

Текстовая строка – значит InChI можно использовать в запросе обычной поисковой системы:



InChIKey

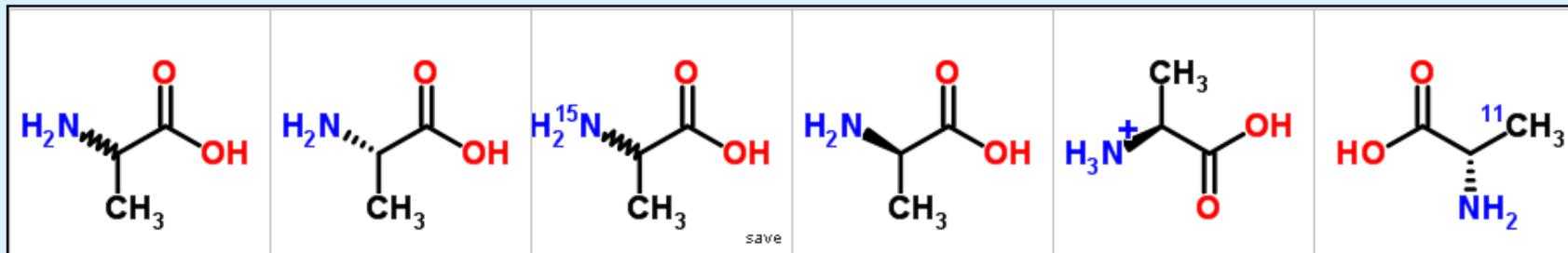
[инчи-ки]

Код InChI громоздок, занимает много места в базе данных. Для удобства компьютера его преобразовывают в InChIKey.



Растет самостоятельная ценность InChIKey:

- аналог DOI, но для молекулярных структур,
- уникальный поисковый термин для Google,
- первая часть кода – для поиска структур-аналогов.



Пример: InChIKey в запросе Google



The image shows a screenshot of a Google search interface. At the top left is the Google logo. To its right is a search input box containing the text "InChIKey=QNAYBMKLOCPYGJ". To the right of the input box is a "Search" button. Below the search bar, the text "Web" is followed by a plus sign icon and the text "Show options...". To the right of this is the text "Results 1 - 10 of about 162 for 'InChIKey=QNAYBMKLOCPYGJ'".

The first search result is for "L-alanine (CHEBI:16977)". It includes the date "17 Oct 2009 ...", the InChIKey "InChIKey=QNAYBMKLOCPYGJ-SNQCPAJUDI", the SMILES string "C[C@H](N)C(O)=O", and the text "Formula, Source ...". Below this is a green link "www.ebi.ac.uk/chebi/searchId.do?chebId=CHEBI:16977" followed by blue links "Cached" and "Similar".

The second search result is for "alanine (CHEBI:16449)". It includes the date "17 Oct 2009 ...", the InChIKey "InChIKey=QNAYBMKLOCPYGJ-JSWHHWTPCH", the SMILES string "CC(N)C(O)=O", and the text "Formula, Source ...". Below this is a green link "www.ebi.ac.uk/chebi/searchId.do?chebId=CHEBI:16449" followed by a blue link "Cached".

Below the second result is a blue link with a plus sign icon: "Show more results from www.ebi.ac.uk".

The third search result is for "Compound 3 : Natural amino acids do not require their native tRNAs ...". It includes the date "25 Oct 2009 ...", the InChIKey "InChIKey: QNAYBMKLOCPYGJ-REOHCLBHSA-N", the SMILES string "[C@H](C(=O)[OH])([NH2])C", and the text "Next compound | Previous compound | Compound index ...". Below this is a green link "www.nature.com/nchembio/journal/v5/n12/.../nchembio.255_comp3.html".