

СИНТЕЛЛИ

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Редакция от февраля 2025 г.

Содержание

Регистрация в системе Синтелли.....	6
Шаг 1. Переход на сайт регистрации.....	6
Шаг 2. Ввод учетных данных.....	6
Шаг 3. Ввод ключа продукта (если доступен).....	7
Шаг 4. Заполнение анкеты для тестового доступа (если ключа нет).....	8
Шаг 5. Подтверждение регистрации.....	9
Завершение регистрации.....	11
Вход в систему Синтелли.....	12
Переход на страницу входа.....	12
Доступ к личному кабинету.....	13
Восстановление пароля.....	13
Проблемы со входом.....	14
Раздел «Поиск».....	16
Обзор.....	16
Поиск по структурам (молекулам).....	16
Работа с найденными молекулами.....	19
Рассчитываемые свойства молекул.....	22
Применимость моделей.....	36
Поиск по реакциям.....	37
Поиск по литературе.....	42
Раздел «Молекулярный редактор».....	48
Обзор.....	48
Способы ввода молекул.....	48
Работа с результатами.....	50
Раздел «Датасеты».....	53
Обзор.....	53
Доступ к разделу.....	53
Создание датасета.....	54
Добавление молекул в датасет.....	55
Просмотр данных о молекуле.....	56

Выделение датасета.....	57
Редактирование датасета.....	57
Просмотр истории.....	58
Удаление датасета.....	59
Копирование датасета.....	60
Объединение датасетов.....	60
Показ на SynMap.....	60
Экспорт датасета.....	61
Дополнительные функции.....	62
Табличный анализ.....	64
Работа с заметками к структурам.....	66
Корпоративные датасеты.....	69
Раздел «SynMap».....	72
Обзор.....	72
Просмотр групп химических соединений.....	72
Работа с картой.....	74
Работа с выделенными молекулами.....	75
Генерация соединений с заданными свойствами.....	77
Оптимизация соединений с заданными свойствами.....	81
Раздел «Предсказание реакции».....	83
Обзор.....	83
Синтез.....	83
Ретросинтез.....	86
Раздел «Спектры».....	90
Введение.....	90
Доступные модули.....	90
Ядерно-магнитный резонанс (ЯМР).....	91
Масс-спектрометрия.....	94
Инфракрасная спектрометрия.....	99
Раздел «Стоимость синтеза».....	104
Введение.....	104

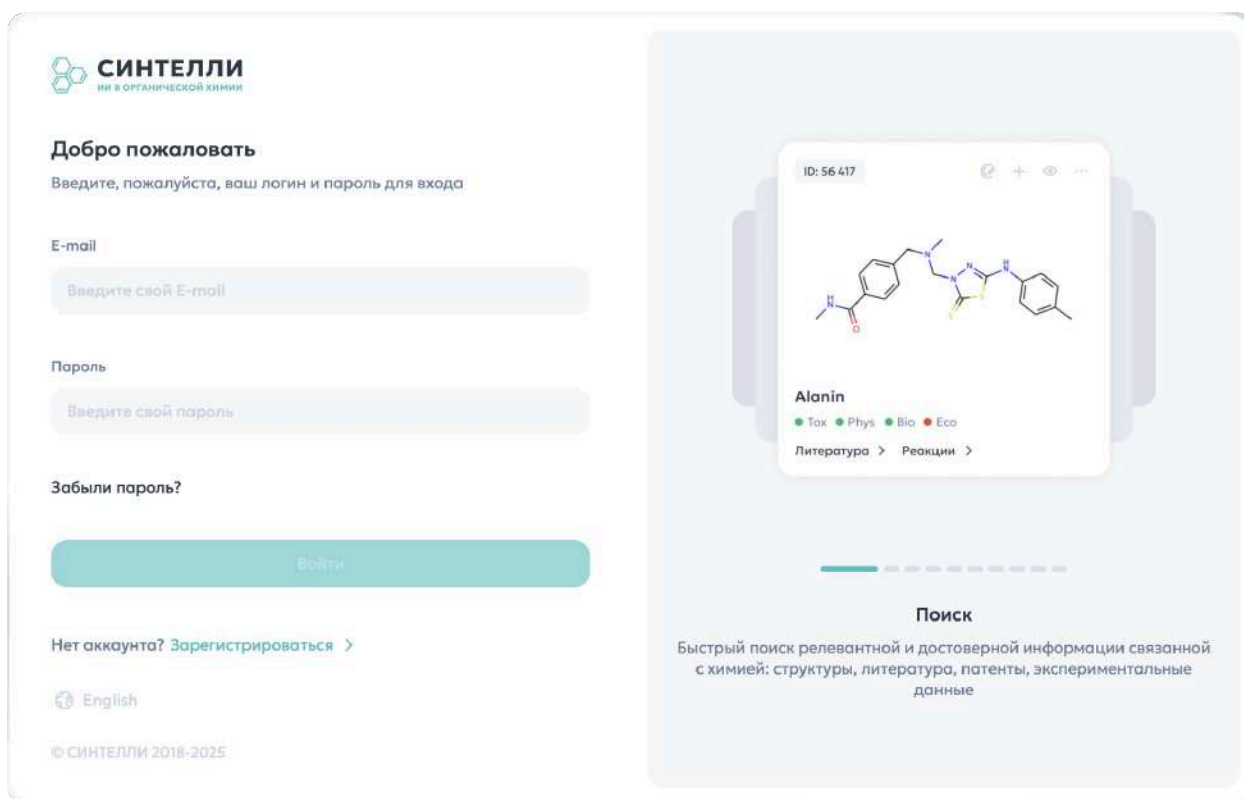
Подготовка расчета.....	104
Анализ результатов.....	106
Дополнительные возможности.....	107
Раздел «PDF в SMILES».....	110
Обзор.....	110
Процесс работы.....	111
Рекомендации по использованию.....	113
Раздел «SMILES в IUPAC».....	115
Принцип работы.....	115
Процесс конвертации.....	115
Раздел «Статистика».....	116
Обзор статистических метрик.....	116
Выбор языка.....	118
Настройка интерфейса.....	118
Нижнее меню управления профилем.....	119
Доступ к меню.....	119
Разделы меню.....	119

Регистрация в системе Синтелли

Шаг 1. Переход на сайт регистрации

Чтобы зарегистрироваться в системе, выполните следующие действия:

1. Перейдите на <https://app.syntelly.com>.
2. На главной странице нажмите кнопку «**Зарегистрироваться**».
3. В открывшемся окне нажмите «**Начать регистрацию**».



Шаг 2. Ввод учетных данных

На странице регистрации введите:

- **Email** – используйте рабочий адрес электронной почты.
- **Номер телефона** (необязательно).

- **Пароль** – создайте надежный пароль.

💡 **Совет:** Используйте пароль длиной не менее 8 символов с буквами разного регистра, цифрами и специальными символами.

The image shows two parts of the SINTELLI application. On the left is the registration form titled "Почта и пароль" (Email and password). It includes fields for "E-mail *", "Номер телефона *" (with a Russian flag and "+7" prefix), "Пароль *" (with a "Придумайте пароль" button), and "Повторите пароль *" (with a "Повторите пароль" button). There is also a "Ключ продукта" (Product key) toggle switch and a checkbox for agreeing to terms. At the bottom are navigation links: "< Назад" and "К личным данным >". The footer says "© СИНТЕЛЛИ 2018-2025".

On the right is a preview of the "Планирование синтеза органических соединений" (Organic synthesis planning) interface. It features a chemical structure, a "Синтез" (Synthesis) button, and a "Предсказание реакции" (Reaction prediction) section. Below this section, it says: "Прогнозирование возможных продуктов химических реакций и поиск реакций для синтеза искомой молекулы на основе нейросетевой модели" (Forecasting possible products of chemical reactions and searching for reactions for the synthesis of the target molecule based on a neural network model).

Шаг 3. Ввод ключа продукта (если доступен)

Если у вашей организации есть оплаченный доступ, введите **ключ продукта**:

1. Включите тумблер «**Ключ продукта**».
2. Введите ключ, полученный от администратора вашей организации.

Если ключ отсутствует, система предложит пройти регистрацию для тестового доступа.

⚠ **Важно!** Если ключ не введен, потребуется дополнительная проверка.

Почта и пароль
Введите вашу почту и придумайте надежный пароль

E-mail *

Номер телефона *

Пароль * ✓ Повторите пароль *

Ключ продукта

Ключ лицензии *
Введите ключ лицензии


Регистрируясь, вы соглашаетесь с [Условиями пользовательского соглашения](#) и [политикой обработки персональных данных](#)

[Назад](#) [К личным данным](#)

© СИНТЕЛЛИ 2018-2025

Прогнозирование спектров

Прогнозирование спектров: tandemная масс-спектрометрия (QToF-MS/MS), инфракрасная спектроскопия и ядерный магнитный резонанс по ядрам ¹H, ¹³C, ¹⁵N, ¹⁹F




Peak	Abundance	Mass (Da)
1	100	100.0
2	50	101.0
3	20	102.0
4	10	103.0
5	5	104.0
6	3	105.0
7	2	106.0
8	1	107.0
9	1	108.0
10	1	109.0
11	1	110.0

Шаг 4. Заполнение анкеты для тестового доступа (если ключа нет)

Если у вас нет ключа продукта, выполните следующие шаги:

1. Заполните анкету с дополнительными данными (ФИО, организация, область деятельности).
2. Отправьте заявку на тестовый доступ.
3. Дождитесь подтверждения активации.



СИНТЕЛЛИ
ИИ в ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Личные данные

Введите ваши личные данные, компанию и должность

Имя *

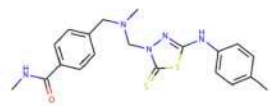
Фамилия *

Компания *

Должность *

[← Назад](#) [Заполнить анкету >](#)

© СИНТЕЛЛИ 2018-2025



ID: 56 417

Alanin

● Tox ● Phys ● Bio ● Eco

[Литература >](#) [Реакции >](#)

Поиск

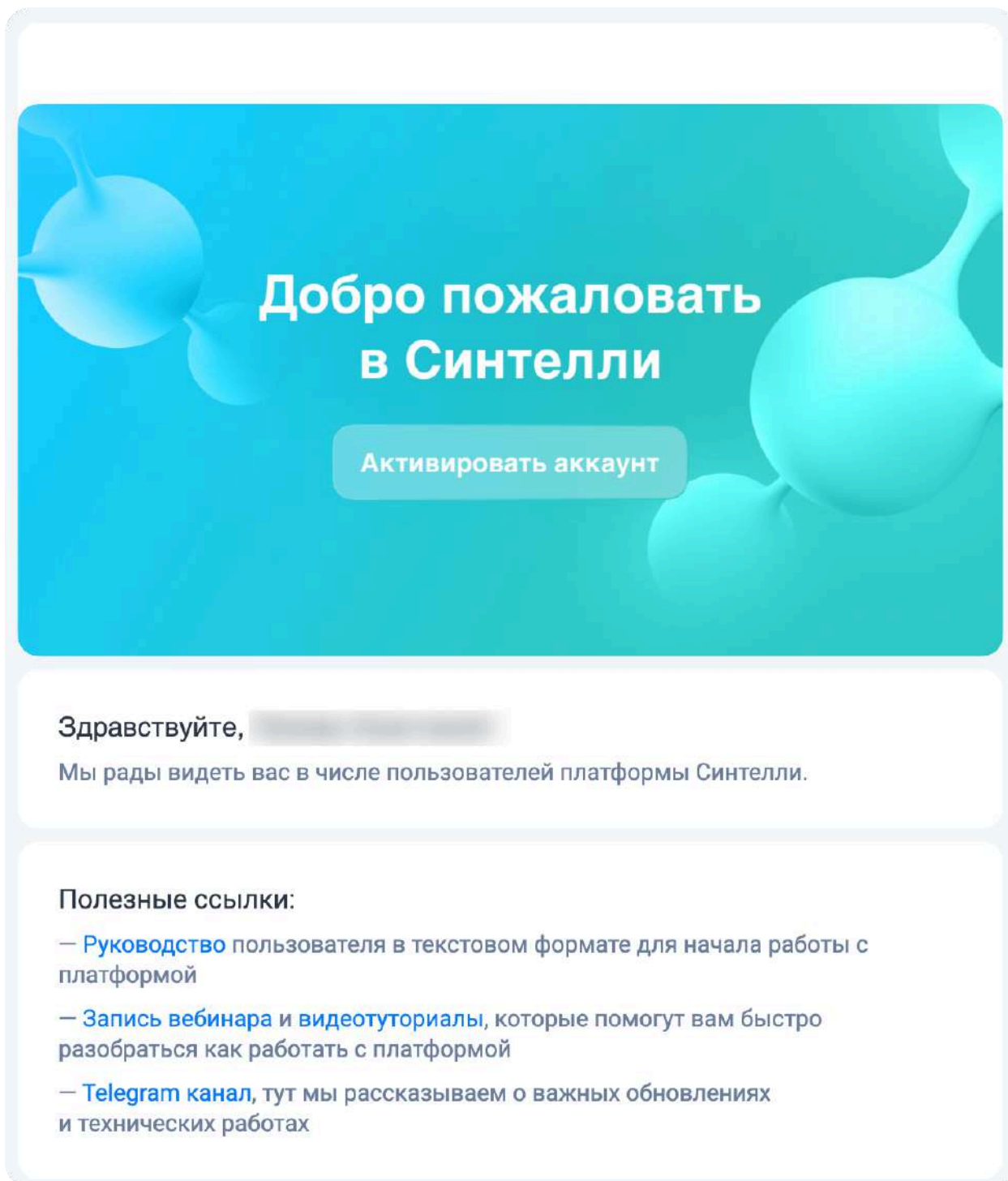
Быстрый поиск релевантной и достоверной информации связанной с химией: структуры, литература, патенты, экспериментальные данные


Подтверждение заявки

- Обработывается **в будние дни с 10:00 до 19:00 (МСК)**.
- Если заявка оставлена в рабочее время, активация займет **до 3 часов**.

Шаг 5. Подтверждение регистрации

1. После отправки заявки на email придет письмо с подтверждением.
2. Откройте письмо и нажмите **«Подтвердить email»**.
3. После подтверждения учетная запись активируется.



 **Примечание:** Если письмо не пришло:

- Проверьте папку «Спам».

- Убедитесь, что указали правильный email.
- Если письмо не найдено, попробуйте повторить регистрацию или обратитесь в поддержку.

Завершение регистрации


После успешной регистрации вы можете войти в систему, используя email и пароль.

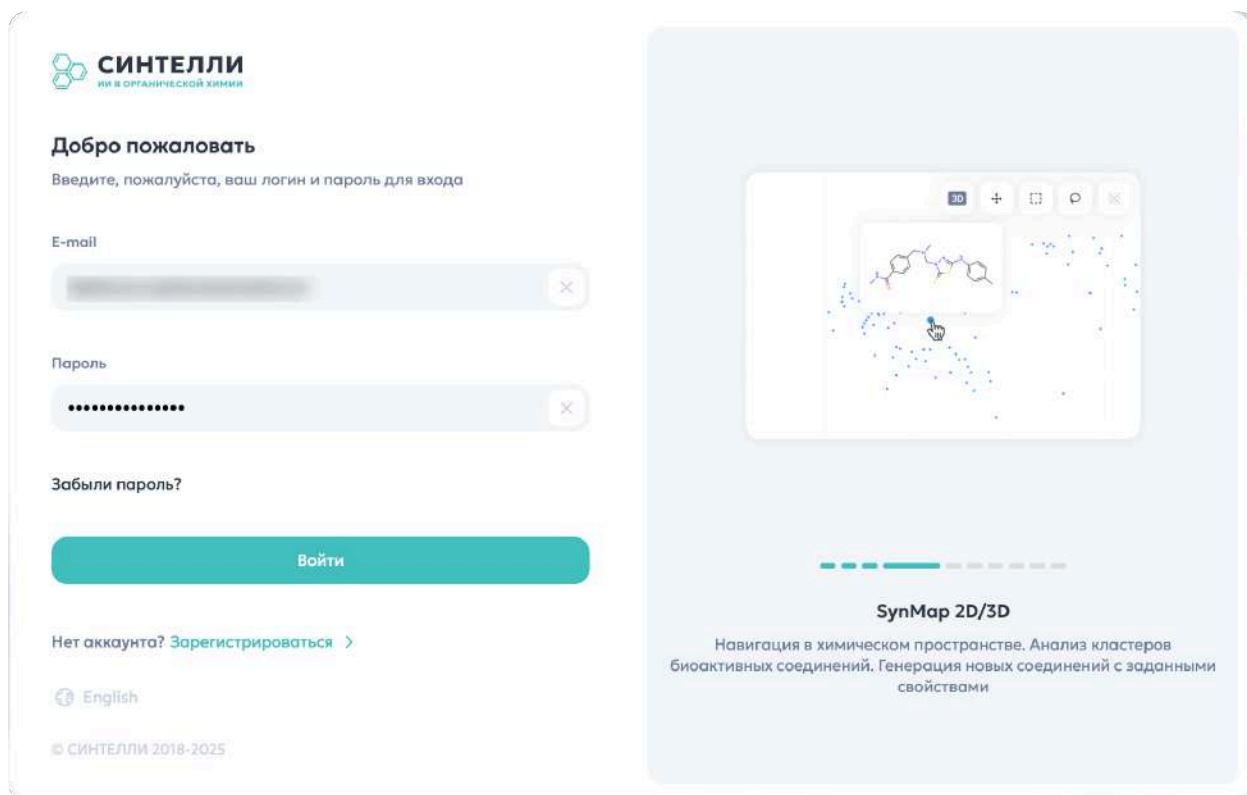
Вход в систему Синтелли

Переход на страницу входа

Чтобы войти в систему, выполните следующие действия:

1. Перейдите на <https://app.syntelly.com>.
2. В открывшемся окне введите **email** и **пароль**, указанные при регистрации.
3. Нажмите кнопку **«Войти»**.

 **Совет:** Если вход осуществляется с личного устройства, установите флажок **«Запомнить меня»**, чтобы не вводить данные при каждом входе.




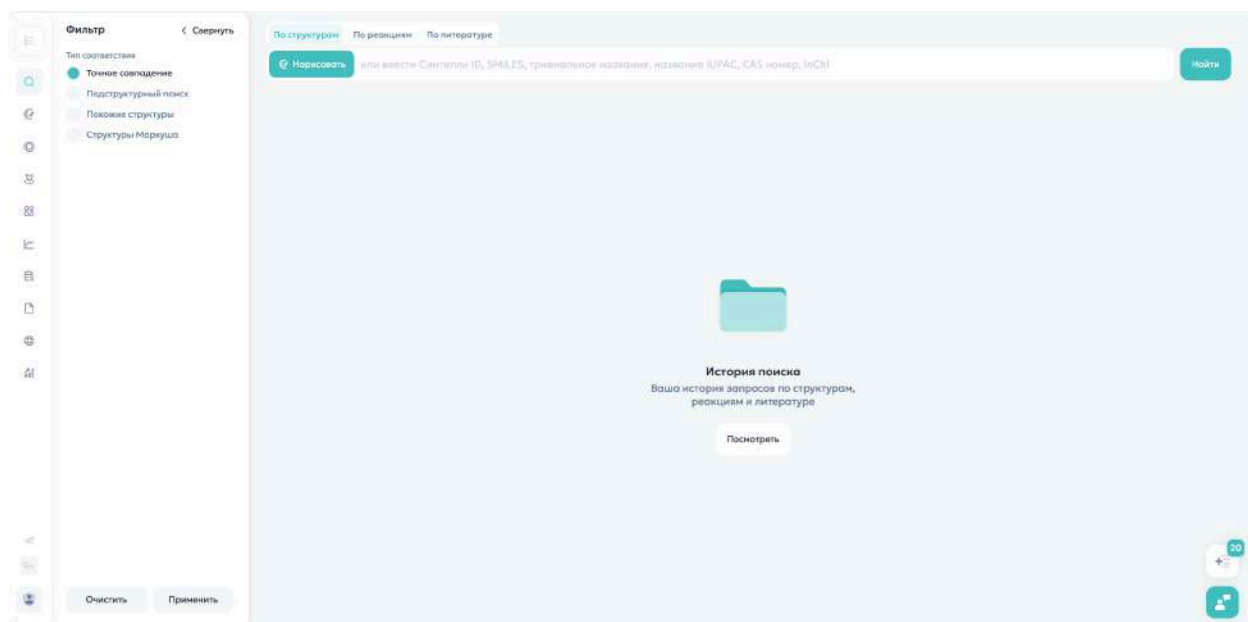
Доступ к личному кабинету

После успешного входа откроется **раздел «Поиск»**.

В интерфейсе доступны:

- **Левая панель** – навигация по разделам системы.
- **Верхнее меню** – выбор языка (русский/английский).
- **Правый нижний угол** – кнопка обратной связи с техподдержкой.

 **Совет:** Всплывающие подсказки помогают освоиться в интерфейсе. Их можно закрыть вручную или отключить в настройках профиля.



Восстановление пароля

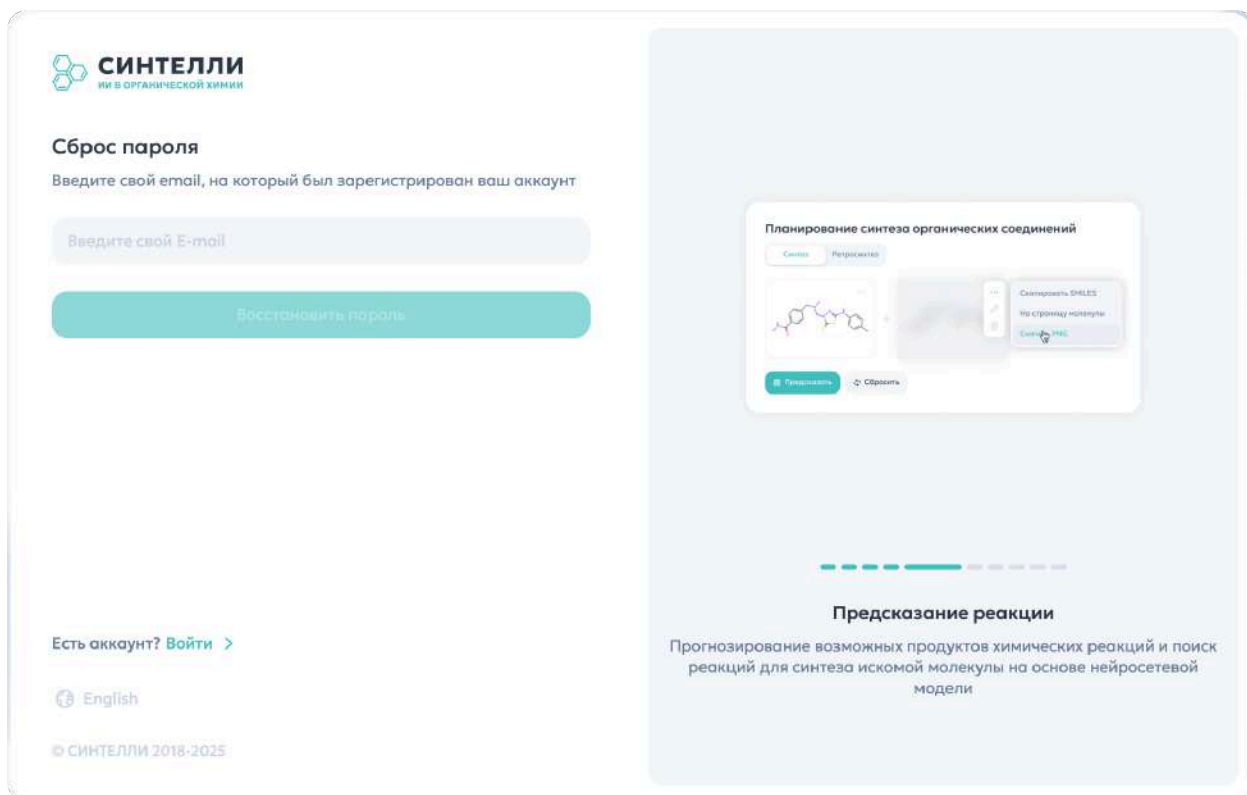
Если вы забыли пароль:

1. На странице входа нажмите **«Забыли пароль?»**.
2. Введите email, указанный при регистрации.

3. Нажмите «**Отправить**».
4. Откройте письмо с инструкцией и нажмите «**Сбросить пароль**».
5. Введите новый пароль и подтвердите его.

 **Примечание:** Если письмо не пришло:

- Проверьте папку «**Спам**».
- Убедитесь, что указали правильный email.
- Если письмо не найдено, попробуйте повторить запрос или обратитесь в поддержку.



The image shows two screenshots from the Синтелли website. The left screenshot is the password reset page, titled "Сброс пароля". It features the Синтелли logo (ИИ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ) and a form with a text input field labeled "Введите свой E-mail" and a teal button labeled "Восстановить пароль". At the bottom, there are links for "Есть аккаунт? Войти >", "English", and "© СИНТЕЛЛИ 2018-2025". The right screenshot shows a chemical synthesis planning interface titled "Планирование синтеза органических соединений". It includes a chemical structure, a "Сгенерировать SMILES" button, and a "Сгенерировать на основе SMILES" button. Below this is a section titled "Предсказание реакции" with a description: "Прогнозирование возможных продуктов химических реакций и поиск реакций для синтеза искомой молекулы на основе нейросетевой модели".

Проблемы со входом

Если не удается войти:

- **Ошибка «Неверный email или пароль»** – убедитесь, что вводите правильные учетные данные.
- **«Превышено количество попыток входа»** – подождите 15 минут и попробуйте снова.
- **«Аккаунт заблокирован»** – обратитесь в техподдержку.

 **Контакты поддержки:** admin@syntelly.com

Раздел «Поиск»

Обзор

Раздел «Поиск» предоставляет доступ к основной базе данных, которая содержит:

- Органические соединения
- Реакции
- Ссылки на химические публикации

Чтобы открыть раздел, нажмите «Поиск» в левой панели.

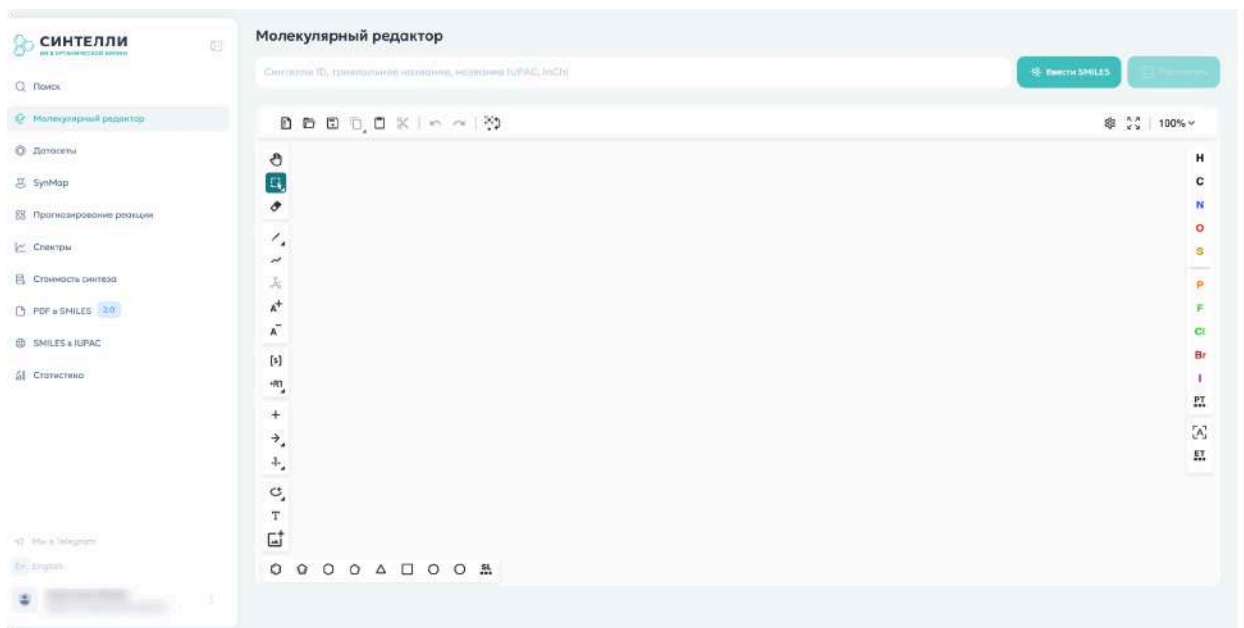
Поиск по структурам (молекулам)


Способы поиска

Доступно два способа поиска молекул:

1. Через молекулярный редактор:

- Нажмите кнопку «Нарисовать»
- В открывшемся редакторе нарисуйте молекулу
- Нажмите «Найти» или клавишу Enter



 **Примечание:** При таком способе поиска структурная формула автоматически преобразуется в SMILES-представление для поиска по базе данных

2. Через поисковую строку:

- Введите название молекулы на английском языке в одном из форматов:
 - SMILES
 - InChI
 - Синонимы
 - Название по номенклатуре IUPAC
 - Синтелли ID
 - CAS-номер
 - Кодовые обозначения из других баз данных

- Нажмите «Найти» или клавишу Enter

Дополнительные параметры поиска

В панели «Фильтры» (отображается автоматически, можно скрыть) доступны следующие настройки:

1. Тип соответствия:

- **Точное совпадение** – поиск полностью идентичных структур по синонимам
- **Подструктурный поиск** – поиск молекул, содержащих нарисованный фрагмент
- **Похожие структуры** – поиск по молекулярному подобию

2. Подобие, %

- Ползунок для установки порога молекулярного подобия
- Расчет выполняется по методу Танимото на основе отпечатков ECFP
- Значение определяет, насколько близко молекула должна соответствовать критериям

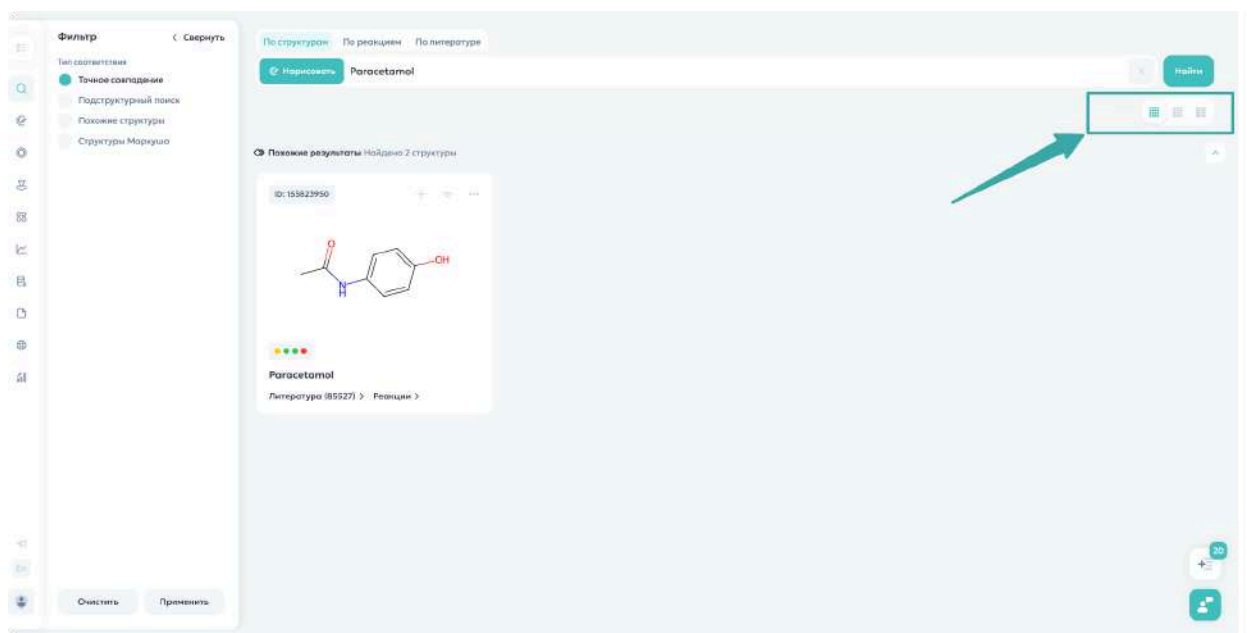
Подсказки:

- Для очистки поисковой строки нажмите крестик справа
- Для изменения молекулы используйте кнопку «Изменить»
- Для сброса всех параметров нажмите «Очистить все фильтры»

Работа с найденными молекулами

Настройка отображения

Масштаб карточек в списке найденных молекул можно настроить с помощью специальных кнопок.



Информация в карточке молекулы

Каждая карточка содержит:

1. Основные данные:





- ID молекулы в базе Синтелли
- Структурная формула

2. Параметры безопасности:

- Токсичность («Tox»)
- Физико-химические свойства («Phys»)
- Биологические свойства («Bio»)

- Экологические свойства («Есо»)

3. Цветовая индикация:

-  Красный – высокие показатели опасности
-  Зеленый – низкие показатели опасности
-  Желтый – средние показатели опасности
-  Серый – свойства не рассчитаны

4. Дополнительные ссылки:

- «Литература» – документы с упоминанием соединения
- «Реакции» – реакции с участием соединения

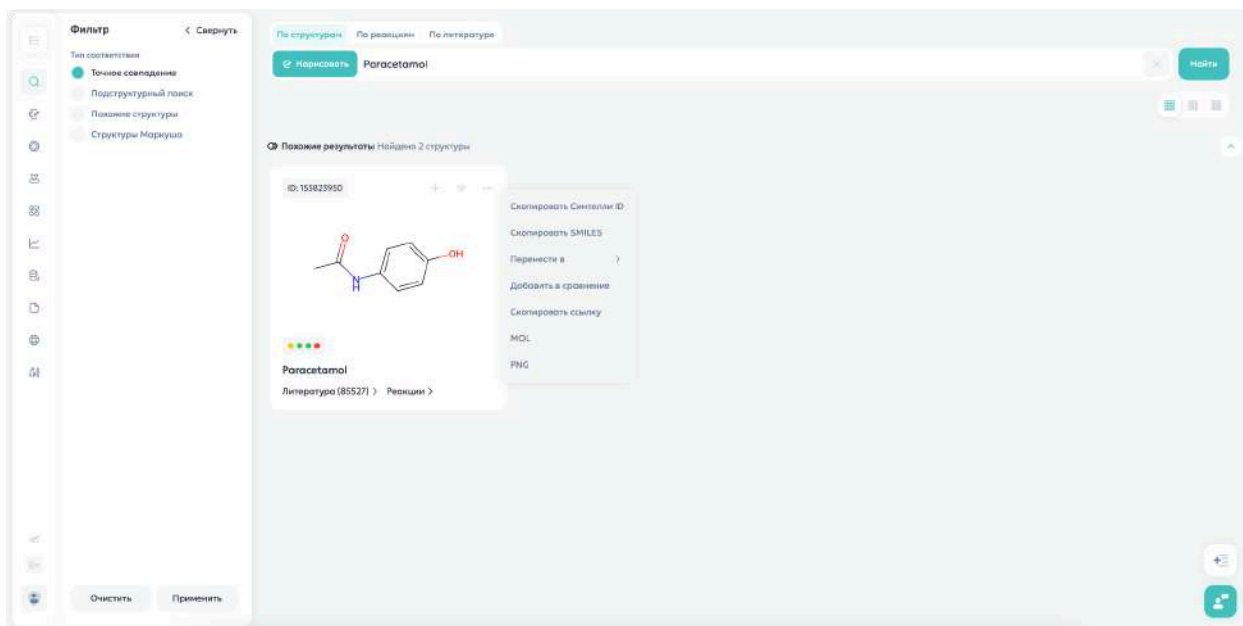
5. Функциональные кнопки:

- Добавление в личный датасет
- Предпросмотр карточки структуры

Контекстное меню

Доступно по кнопке в правом верхнем углу карточки:

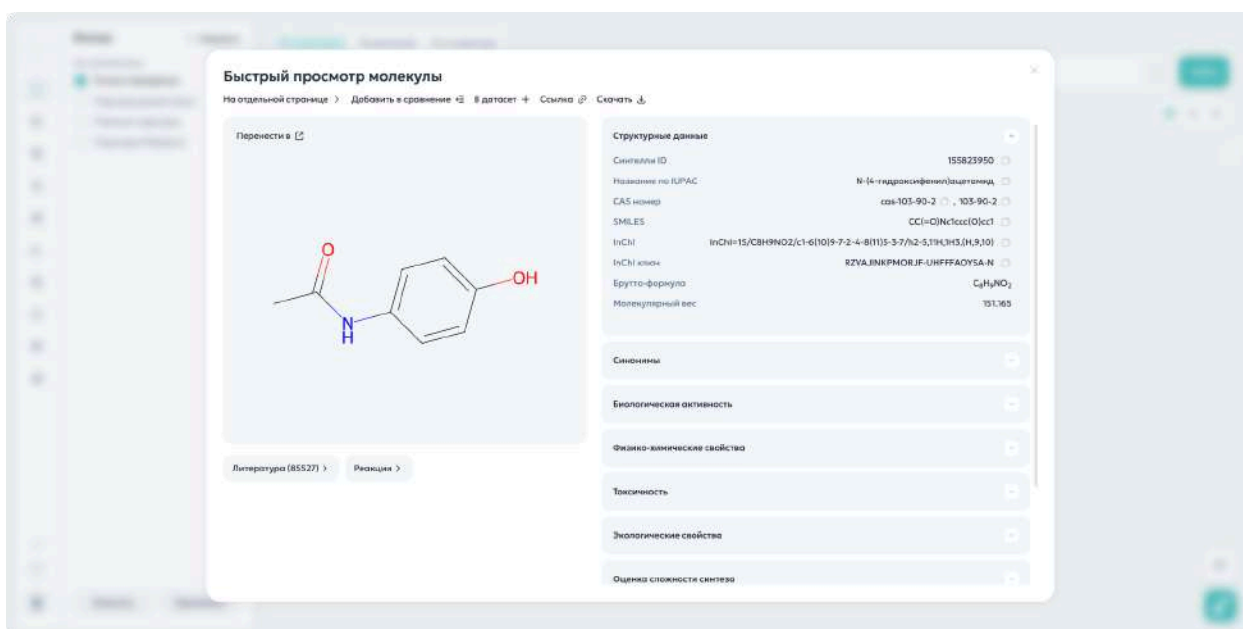
- Копирование SMILES
- Копирование Синтелли ID
- Копирование ссылки на карточку
- Перенос молекулы в другие модули
- Скачивание изображения структуры (PNG)
- Скачивание структуры (MOL)



Просмотр подробной информации

Быстрый просмотр:

- Нажмите кнопку «Быстрый просмотр» на карточке
- Отобразится карточка с предпросмотром информации



Полный просмотр:

- Кликните левой кнопкой мыши по карточке молекулы в поисковой выдаче
- Или нажмите «На отдельной странице» в окне предпросмотра

На новой странице будут доступны:

- Различные информационные блоки
- Возможность сохранения структуры в форматах PNG или MOL
- Экспорт всей информации в PDF
- Копирование ссылки на карточку молекулы

The screenshot shows the 'СИНТЕЛЛИ' web application interface. The main content area displays the chemical structure of N-(4-гидроксибензил)ацетамид. To the right, there is a table of structural data:

Структурные данные	
Синтелли ID	155823950
Название по IUPAC	N-(4-гидроксибензил)ацетамид
CAS номер	ами-103-90-2 , 103-90-2
SMILES	CC(=O)Nc1ccc(O)cc1
InChI	InChI=1S/C8H9NO2/c1-6)10)9-7-2-4-8)11)5-3-7/h2-5,11)1H3,(H,9,10)
InChI ключ	BZVALJNKPMOJRF-UHFFFAOYSA-N
Брутто-формула	C ₈ H ₉ NO ₂
Молекулярный вес	153.165

Below the structure, there are links for 'Литература (85527)' and 'Реакции'. On the right side, there is a sidebar with various tabs for additional information: 'Структурные данные', 'Синонимы', 'Биологическая активность', 'Физико-химические свойства', 'Токсичность', 'Экологические свойства', 'Оценка сложности синтеза', and 'Сходство с лекарственными препаратами'.


Рассчитываемые свойства молекул

Обзор

Для просмотра рассчитываемых свойств:

1. В левом меню нажмите «Поиск» или «Датасеты»

2. Выберите молекулу
3. Нажмите на нее левой кнопкой мыши

 **Важно:** Если в базе есть экспериментальные значения, система показывает их вместо прогнозных. Экспериментальные данные отмечены зеленым индикатором. При наведении на индикатор отображается источник информации.

Структурные данные

Блок включает основную информацию о молекуле:

- Синтези ID
- Канонические SMILES
- Международный химический идентификатор (InChI)
- InChI ключ
- Название по номенклатуре IUPAC
- Брутто-формула
- Молекулярный вес

Страница молекулы

Перенести в

Добавить в сравнение | В датасет | Ссылка | Скачать

Структурные данные

Синтез ID	155823950
Название по IUPAC	N-(4-гидроксифенил)ацетамид
CAS номер	cas-105-90-2 105-90-2
SMILES	CC(=O)Nc1ccc(O)cc1
InChI	InChI=1S/C8H9NO2/C1=610/9-7-2-4-81105-3-7/12-5111H3,(H,2,0)
InChI ключ	RZVAJINKRMOBJF-UHFFFAOYSA-N
Брутто-формула	C ₈ H ₉ NO ₂
Молекулярный вес	151165

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Синонимы

Содержит все известные синонимы молекулы из различных химических баз данных.

Физико-химические свойства

Включает следующие характеристики:

1. Растворимость в воде
2. Давление насыщенных паров
3. Температура кипения (°C)
4. Температура вспышки (°C)
5. Плотность
6. Вязкость
7. Температура плавления (°C)
8. Растворимость в ДМСО (качественный прогноз)

9. Время удерживания в стандартной хроматографической системе

10. Индекс преломления

Страница молекулы

Перенести в []

CC(=O)Nc1ccc(O)cc1

Литература (85527) > Реакции >

Добавить в сравнение + В датасет + Ссылка ? Скачать ↓

Физико-химические свойства	
Растворимость в воде	-1.51 Log(mol/L) 52%
Давление насыщенного пара	φ X
Температура кипения	500 °C 62P
Температура вспышки	170 °C
Плотность	1.274 g/cm3 62P
Вязкость	0.9 log(10/viscosity cP)
Температура плавления	168 °C 62P
Растворимость в ДМСО	0.995 (Soluble) 10%
Время удерживания	527 s 17%
Индекс преломления	1.56 42%

Токсичность >

Экологические свойства >

Оценка сложности синтеза >

Сходство с лекарственными препаратами >

Внешние БД >

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Биологическая активность

Ингибирование цитохромов

Доступны модели для расчёта эффективности ингибирования пяти цитохромов:

- CYP1A2
- CYP2C19
- CYP2C9
- CYP2D6
- CYP3A4

Страница молекулы

Перенести в

Структурные данные

Синтезы ID: 155823950

Название по IUPAC: N-(4-гидроксифенил)ацетамид

CAS номер: cas-103-90-2, 103-90-2

SMILES: CC(=O)Nc1ccc(O)cc1

InChI: InChI=1S/C8H9NO2/C1=6/0/9-2-4-8/105-3-7/12-5/1H,1H3,(H,2,0)

InChI ключ: RZVAJINJKRQCWJF-UHFFFAOYSA-N

Брутто-формула: C₈H₉NO₂

Молекулярный вес: 151.165

Связаны

Биологическая активность

CYP1A2	Noninhibitor	EOP
CYP2C19	Noninhibitor	EOP
CYP2C9	Noninhibitor	EOP
CYP2D6	Noninhibitor	EOP
CYP3A4	Noninhibitor	EOP
Проницаемость через ГЭБ	Permeable	EOP
Ароматаза	Noninhibitor	EOP
Рецептор эстрогена альфа	Noninhibitor	EOP
Андрогеновый рецептор	Noninhibitor	EOP

При наведении на название цитохрома отображаются:

- **Localization** – прогноз органа максимальной активности/концентрации
- **Estimate fraction of metabolized drugs** – процент метаболизации лекарства данным ферментом

Дополнительные параметры

1. Проницаемость через ГЭБ
2. Ароматаза
3. Рецептор эстрогена альфа
4. Андрогеновый рецептор
5. Ариловый углеводородный рецептор
6. PPAR-gamma
7. Лиганд-связывающий домен андрогенового рецептора
8. Лиганд-связывающий домен эстрогенового рецептора

9. p53

10. ATAD5

11. Потенциал митохондриальной мембраны

12. Элемент антиоксидантного ответа

13. Элемент ответа фактора теплового шока

The screenshot displays a molecular database entry for p53. On the left, the chemical structure of p53 is shown, consisting of a benzamide core with a hydroxyl group. The central panel lists various biological activities, with 'p53' and 'ATAD5' highlighted. On the right, a table provides specific activity data for these targets.

Биологическая активность	Статус
Проницаемость через ГЭБ	Permeable EXP
Ароматизация	Noninhibitor EXP
Рецептор эстрогена альфа	Noninhibitor EXP
Андрогеновый рецептор	Noninhibitor EXP
Ароматический углеводородный рецептор	Noninhibitor EXP
PPAR-Gamma	Noninhibitor EXP
Лиганд-связывающий домен эндригенного рецептора	Noninhibitor EXP
Лиганд-связывающий домен эстрогенного рецептора	Noninhibitor EXP
p53	Noninhibitor EXP
ATAD5	Noninhibitor EXP

Токсичность

Модели летальной дозы

Основные показатели

LD50 (median lethal dose) – средняя летальная доза, вызывающая гибель 50% животных (мг/кг)

LDLo (lowest lethal dose) – минимальная летальная доза, вызывающая смерть (мг/кг)

Параметры для разных видов животных:

Мышь:

- Перорально LD50
- Внутривенно LD50
- Интраперитонеально LD50 и LDLo
- Кожная LD50
- Подкожно LD50
- Внутримышечно LD50

Крыса:

- Перорально LD50 и LDLo
- Внутривенно LD50
- Интраперитонеально LD50 и LDLo
- Накожно LD50
- Подкожно LD50

Другие животные:

- Гвинейская свинья (перорально и интраперитонеально LD50)
- Кролик (перорально LD50, внутривенно LD50/LDLo, накожно LD50)
- Собака (перорально LD50, внутривенно LD50/LDLo)
- Кошка (внутривенно LD50)
- Птицы (перепел, дикая птица, курица - перорально LD50)

Страница молекулы

Перенести в []

Литература [85527] > Реакции >

Физико-химические свойства

Токсичность

Все Модели летальной дозы Модели общей токсичности

Мышь орально LD50	344.8 mg/kg	EXP
Мышь интравенно LD50	367 mg/kg	EXP
Мышь интравенно LD50	↑	X
Мышь интравенно LD50	194 mg/kg	82%
Мышь интравенно LDLo	385 mg/kg	84%
Ханга мышь LD50	1100 mg/kg	82%
Мышь подкожно LD50	310 mg/kg	EXP
Крыса орально LDLo	228 mg/kg	84%
Крыса орально LD50	2058.3 mg/kg	EXP

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Модели общей токсичности

1. Избирательная токсичность для органов/систем при однократном воздействии
2. Острая токсичность при проглатывании (ГОСТ-56957-2016)
3. Разъедание глаз
4. Раздражение глаз
5. Тератогенность
6. Репродуктивная токсичность
7. Кардиотоксичность
8. Гепатотоксичность
9. Канцерогенность
10. DILI (Drug-Induced Liver Injury)
11. Тест Эймса

Экологические свойства

Включает следующие параметры:

1. Биоконцентрационный фактор
2. *Tetrahymena pyriformis* IGC50 (40 часов) – концентрация, вызывающая 50% ингибирование роста
3. *Daphnia magna* LC50 (48 часов) – количественный прогноз в мг/л
4. Fathead Minnow LC50 (96 часов) – концентрация, вызывающая 50% гибель популяции
5. Острая токсичность для водной среды (ГОСТ 57455-2017)

Страница молекулы

Перенести в []

Литература [85527] > Реакции >

Добавить в сравнение [] В датасет + Ссылка [] Скачать []

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Биоконцентрационный фактор	33400 l/kg	10%
40 часовой Tetrahymina pyriformis IC50	0.00661 mmol/l	10%
Daphnia Magna LC50	0.0619 mmol/l	10%
96 часов Fathead Minnow LC50	5.382 mmol/l	10%
Острая токсичность для водной среды	Non-toxic LC50 > 100 mg/l (fish)	10%

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Оценка сложности синтеза

Включает две основные метрики:

- Complexity (SCScore)** – шкала Коннора Коли:
 - 1 = легко синтезируемое соединение
 - 5 = сложно синтезируемое соединение
- SYBA** – Байесовская оценка синтетической доступности:
 - 0 = легко синтезируемые
 - <0 = трудно синтезируемые

Страница молекулы

Перенести в []

Добавить в сравнение [] В датасет + Ссылка [] Скачать []

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Оценка сложности синтеза

Complexity (SCScore)	1.47
SYBA	48

Сходство с лекарственными препаратами

Включает следующие правила и фильтры:

1. **Правила Липински** (1999) – оценка биодоступности при пероральном введении
2. **Фильтр Гоце** (1999) – соответствие параметрам известных лекарств
3. **Правило Опреа** (1999) – разграничение лекарственных и нелекарственных молекул
4. **Правило Вебера** (2002) – оценка биодоступности на основе анализа 1100 кандидатов
5. **QED** – количественная оценка сходства с лекарствами
6. **PAINS** – фильтр структур, дающих ложноположительные результаты при скрининге

К результату

Страница молекулы

Добавить в сравнение В датасет Ссылка Скачать

Перенести в

Литература [85527] > Реакции >

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

CompleXity (SCScore) 1.47

SYBA 48

Сходство с лекарственными препаратами

Правило пяти Липински

Доноры водородной связи ≤ 5 2

Акцепторы водородной связи ≤ 10 3

Молекулярная масса ≤ 500 15116 г/моль

ΔLogP октанол-вода ≤ 5 1.35 logP

Фильтры Голе

ΔLogP октанол-вода [-0.4, 5.6] 1.35 logP

Молекулярная масса [160, 480] 15116 г/моль

Число атомов [20, 70] 11

Коэффициент преломления (молярный) [40, 150] 42.61 м³/моль

Правило Опрера

Доноры водородной связи ≤ 2 2

Акцепторы водородной связи [2, 9] 3

Внешние БД

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценки сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

Внешние БД

Примечание: Блок отображается только при наличии ссылок на внешние базы данных

- Содержит список внешних баз данных с молекулой
- Позволяет перейти на страницу первоисточника по ссылке

Страница молекулы

Добавить в сравнение В датасет Ссылка Скачать

Структурные данные

Синонимы

Биологическая активность

Физико-химические свойства

Токсичность

Экологические свойства

Оценка сложности синтеза

Сходство с лекарственными препаратами

Внешние БД

BindingDB	26197
ChEMBL	ChEMBL112
PubChem	DTXSID2020006
SureChEMBL	SCHEMBL3480

Личные данные

! **Важно:** Личные данные можно добавить только к молекулам, находящимся в Личных датасетах

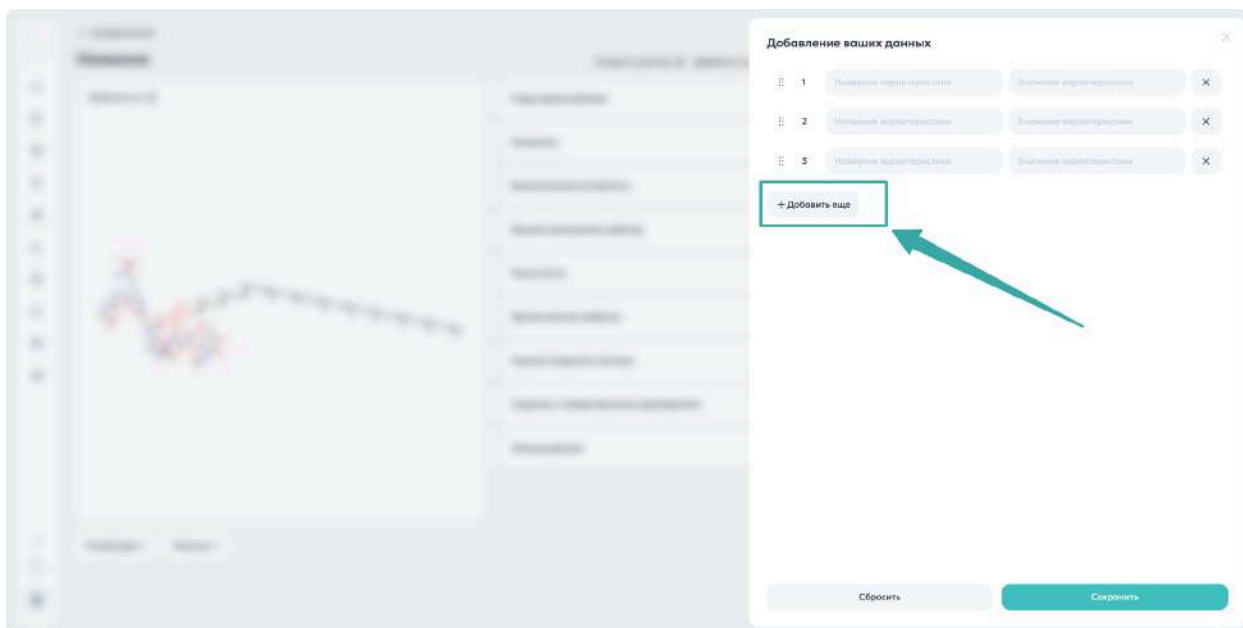
Добавление данных

1. Найдите раздел "Личные данные" внизу списка параметров
2. Нажмите кнопку "Добавить" справа
3. В появившемся окне:
 - Введите название характеристики
 - Введите значение характеристики
 - Используйте "+" для добавления полей
4. Нажмите "Сохранить"

The screenshot displays a web interface for chemical data. On the left, a 3D ball-and-stick model of a long-chain molecule is shown. The main area contains a list of properties, each with a dropdown menu: Структурные данные, Синонимы, Биологическая активность, Физико-химические свойства, Токсичность, Экологические свойства, Оценка сложности синтеза, and Сходство с лекарственными препаратами. The last item, 'Личные данные', is highlighted with a red box and a red arrow pointing to its 'Добавить' button. At the top right, there are options for 'Открыть заметку', 'Добавить в сравнение', 'В датасет', 'Ссылка', and 'Скачать'. A sidebar on the far right lists 'Структурные данные' and 'Личные данные'.

Возможности

- Хранение результатов экспериментов
- Неограниченное количество характеристик
- Поддержка числовых и текстовых значений
- Постоянное хранение данных



Управление данными


- Удаление: нажмите "x" справа от поля
- Редактирование: откройте окно добавления данных
- Очистка: нажмите "Сбросить"

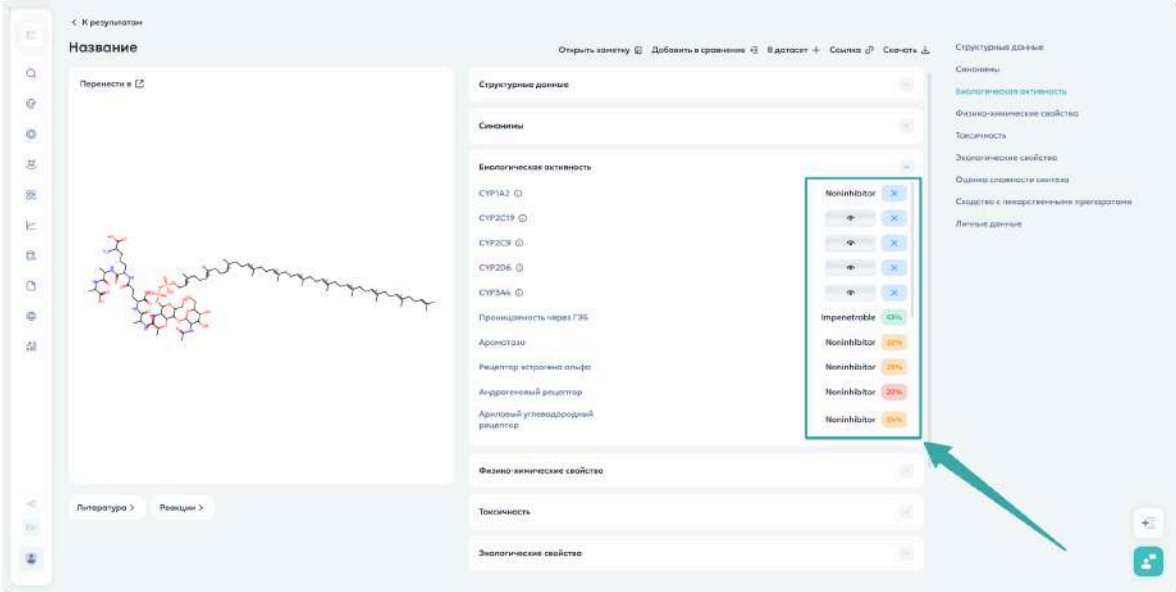
Применимость моделей

Оценка надежности прогнозирования

Для всех моделей, прогнозирующих свойства молекул (биологические, физико-химические, токсикологические, экологические), отображается процент применимости:

- **0-20%** – Низкая надежность (В тренировочных данных мало подобных молекул)
- **20-50%** – Средняя надежность
- **50-100%** – Высокая надежность
- **Not applicable** – Модель неприменима

 **Подсказка:** Если модель неприменима, значения скрыты по умолчанию. Нажмите на иконку "глаз", чтобы увидеть прогнозные значения.



The screenshot shows a software interface for chemical analysis. On the left, there is a molecular structure of a long-chain molecule. The main panel displays various properties and their predicted values. A red box highlights the 'Noninhibitor' status for several properties, with a red arrow pointing to it. The properties and their values are:

Property	Value
Noninhibitor	100%
Impenetrable	100%
Noninhibitor	100%
Noninhibitor	100%
Noninhibitor	100%
Noninhibitor	100%

Поиск по реакциям

Доступ к разделу

1. В меню слева выберите «Поиск»
2. Нажмите вкладку «По реакциям»

Способы поиска

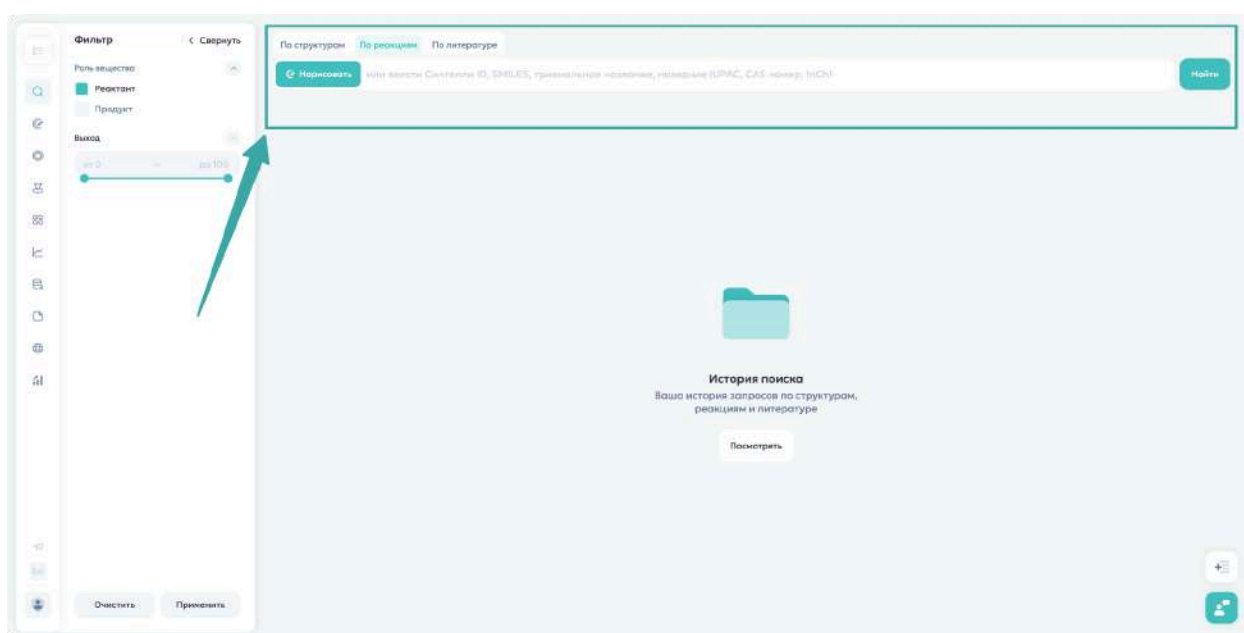
Поиск можно осуществлять по реактанту или продукту реакции двумя способами:

1. Через поисковую строку

Поддерживаемые форматы:

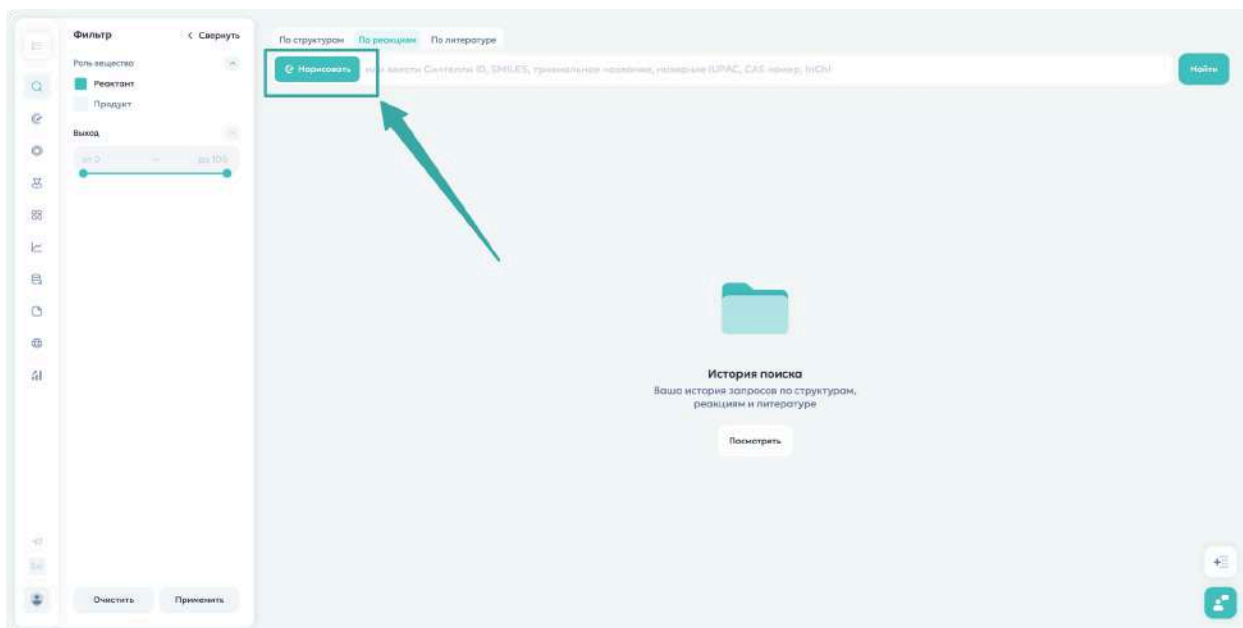
- SMILES

- Синонимы
- Торговое название
- Код вендора
- Название IUPAC
- CAS-номер
- Кодовые обозначения из других баз



2. Через молекулярный редактор

1. Нажмите «Нарисовать»
2. В открывшемся окне нарисуйте молекулу
3. Нажмите «Сохранить»



Параметры поиска

В панели «Фильтры» (появляется автоматически после первого поиска) доступны:

1. Тип соответствия

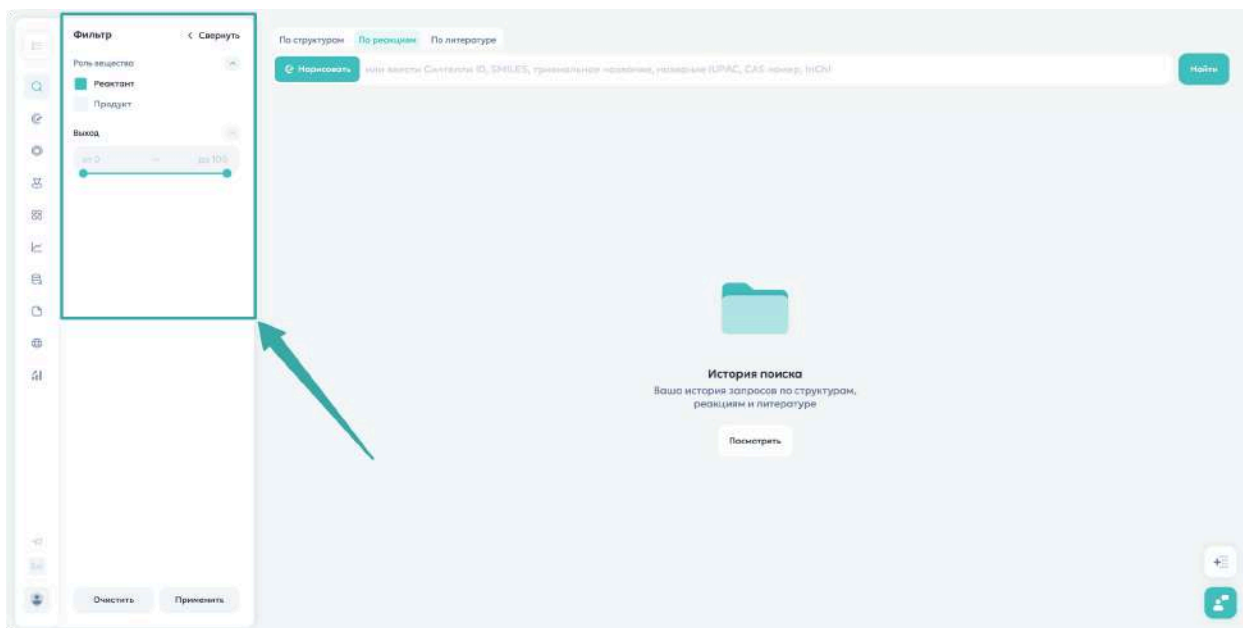
- Поиск точных совпадений
- Подструктурный поиск


2. Роль вещества

- Продукт
- Реактант

3. Выход, %

- Фильтрация по проценту выхода продукта



 **Подсказка:** Для сброса параметров используйте кнопку «Очистить все фильтры»

Результаты поиска

The screenshot displays a search interface for chemical reactions. At the top, there are tabs for 'По структурам', 'По реакциям', and 'По литературе'. A search bar contains 'indole' and a 'Найти' button. On the left, a 'Фильтр' sidebar is visible with options for 'Роль вещества' (Reactant/Product) and 'Выход' (Yield). The main area shows two reaction cards:

- Реакция 1** (1 способ): Shows the conversion of 5-methylindole (ID: 155785592) to indole (ID: 155784737).
- Реакция 2** (1 способ): Shows the conversion of 5-bromoindole (ID: 17583710) and a sulfonamide reagent (ID: 16089766) to indole (ID: 155784737).

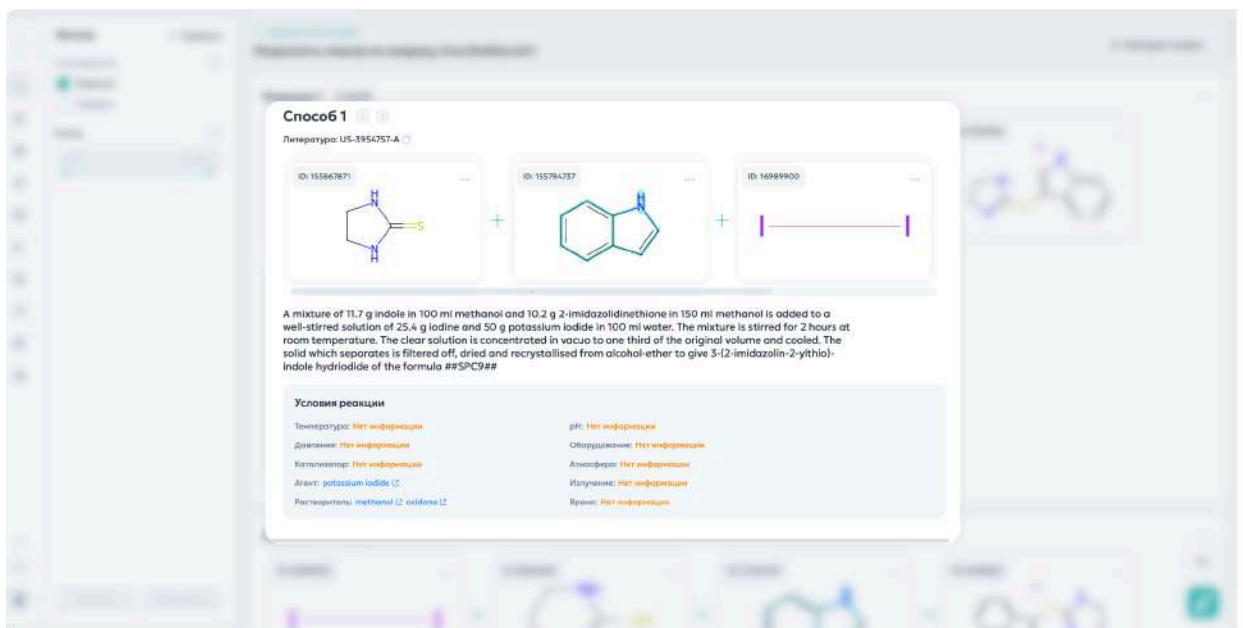
Each reaction card includes a 'Способ 1' section with a table of reaction conditions:

Условия реакции:	
Температура: Нет информации	pH: Нет информации
Давление: Нет информации	Оборудование: Нет информации
Катализатор: Нет информации	Атмосфера: Нет информации
Агент: 4-(chloromethyl)pyridine [2] Еще 6 >	Излучение: Нет информации
Растворители: Нет информации	Время: Нет информации

Below the conditions, there is a 'Литература: Нет информации' section and a 'Протокол реакции >' link.

Просмотр подробной информации

- Кликните на карточку реакции для открытия в отдельном окне
- Доступна детальная информация о реакции



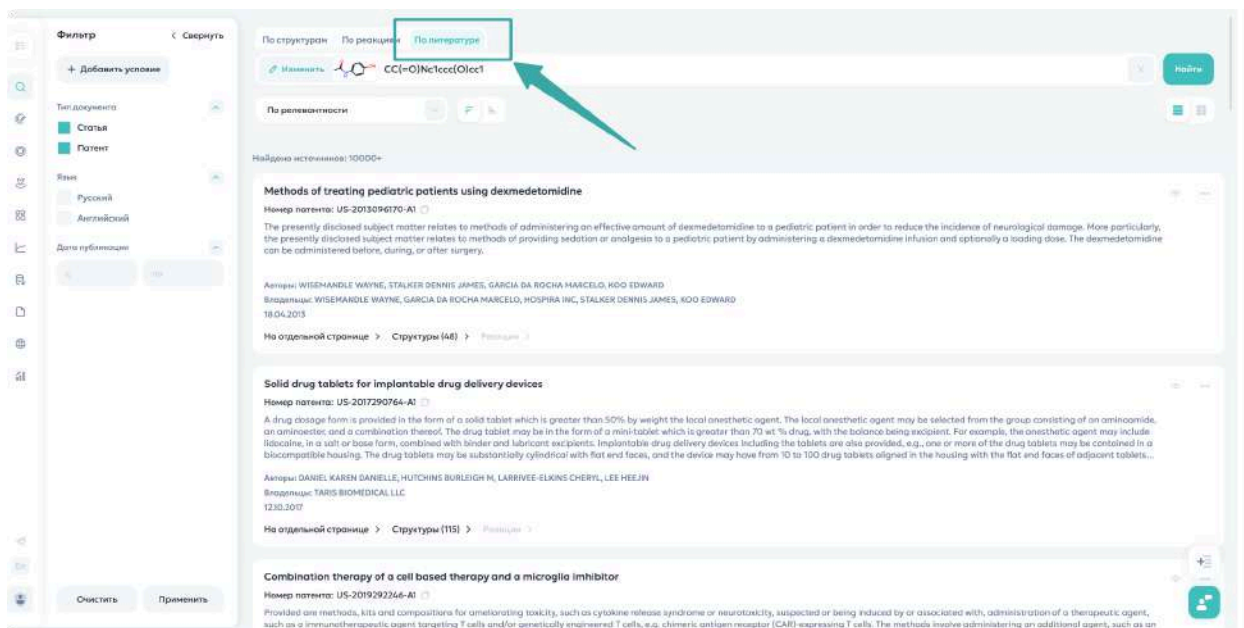
Поиск по литературе

Обзор

Раздел предназначен для поиска по научной химической литературе в базе данных Синтелли.

Доступ к разделу


1. В меню слева выберите «Поиск»
2. Откройте вкладку «По литературе»



Варианты поиска

1. Поиск по структуре

- Введите идентификатор молекулы в поисковую строку:
 - SMILES
 - IUPAC
 - CAS номер
- Или используйте молекулярный редактор

 **Подсказка:** Поиск по структуре даёт максимальное количество результатов, так как находит все документы с упоминанием заданной структуры

2. Текстовый поиск

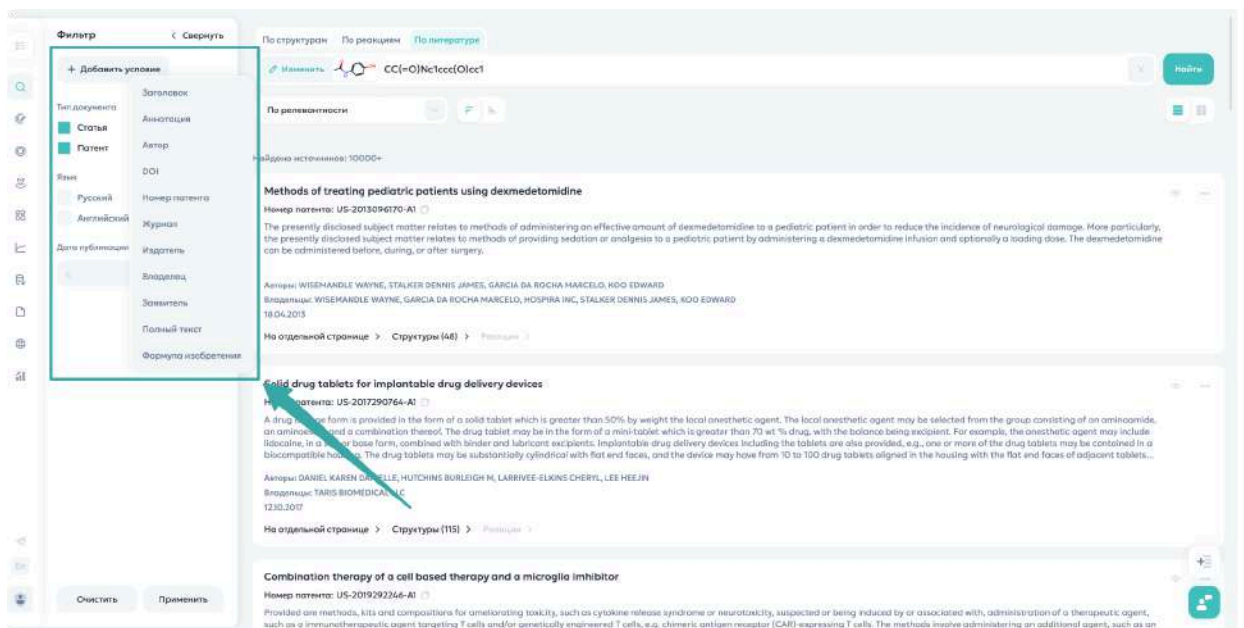
- Поддерживается русский и английский языки
- Поиск выполняется по заголовкам и аннотациям

- Доступен расширенный поиск через фильтры

Расширенный поиск

Добавление условий

1. Нажмите «Добавить условие» в области фильтров
2. Выберите тип условия:
 - Заголовок
 - Аннотация
 - Автор
 - DOI
 - Номер патента
 - Журнал
 - Издатель
 - Владелец (патента)
 - Заявитель
 - Полный текст
 - Язык
 - Дата публикации



Комбинирование условий

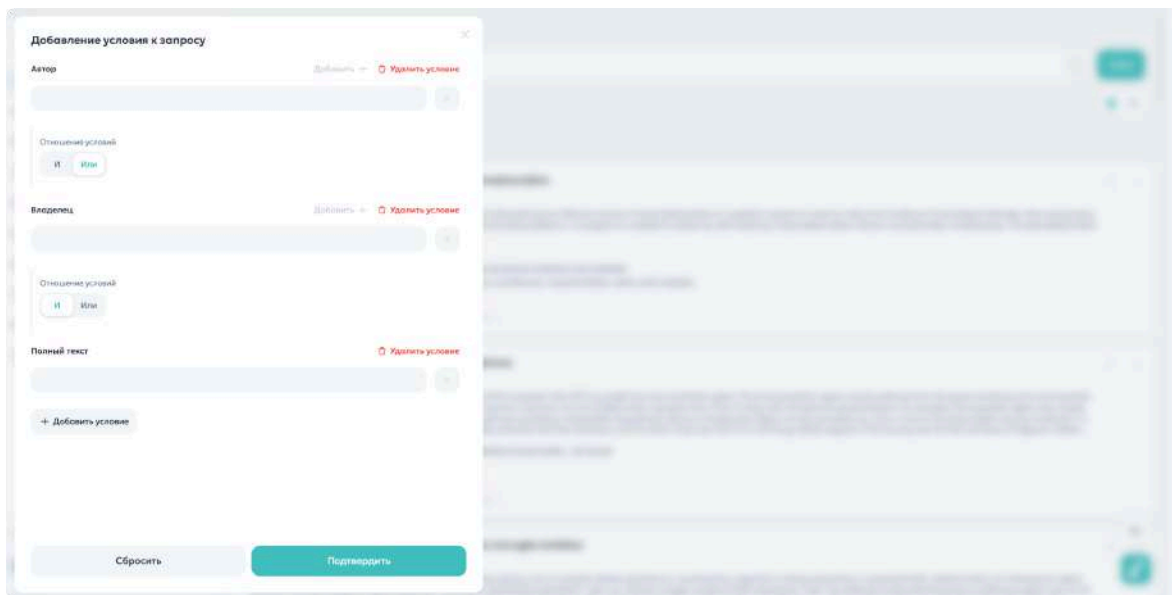
- Используйте логические операторы:
 - **И** – должны выполняться оба условия
 - **ИЛИ** – должно выполняться хотя бы одно условие
 - **НЕ** – исключает условие
- Нажмите «Подтвердить» после настройки

Дополнительные фильтры

- **Тип документа**
 - Статья в журнале
 - Патент
- **Язык**
 - Русский
 - Английский

- **Год публикации**

! Важно: Если год публикации задан в условиях поиска, соответствующий фильтр будет недоступен. Изменить год можно только в конструкторе запроса.



Работа с результатами

Управление результатами

- Для применения фильтров нажмите «Применить»
- Для сброса параметров используйте «Очистить все фильтры»

Действия с найденными статьями

Для каждой статьи или патента доступно:

- Копирование ссылки
- Копирование DOI или номера патента

- Добавление найденных структур в датасет (если структуры были распознаны)

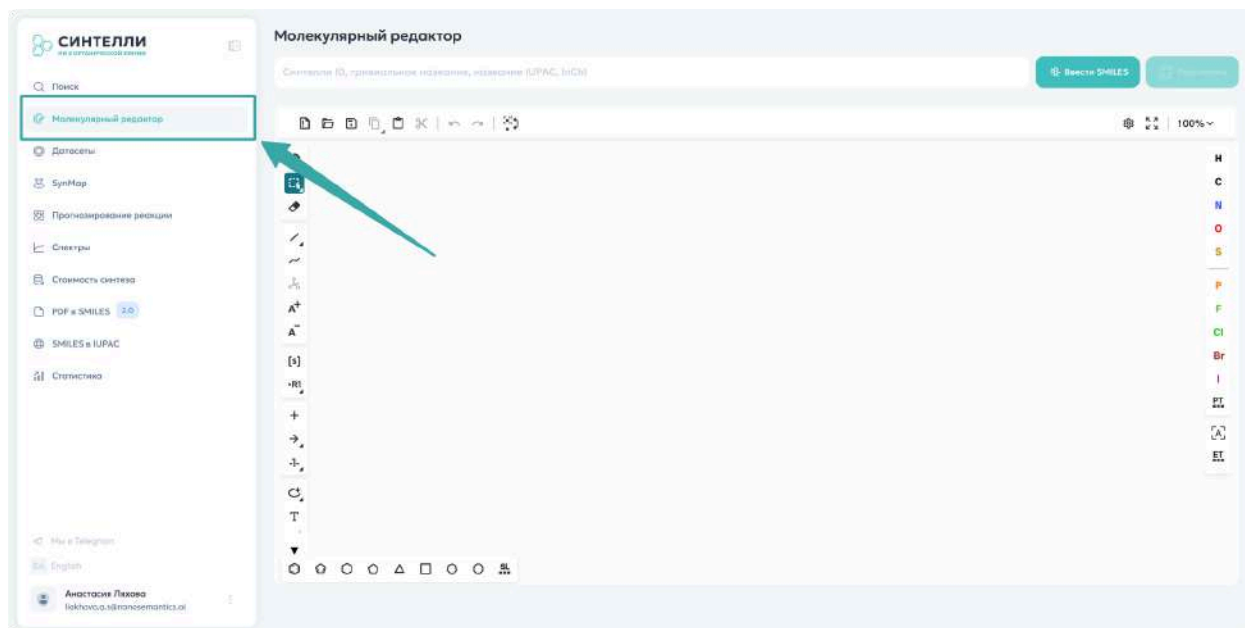
Детальный просмотр

Для просмотра полной информации кликните левой кнопкой мыши по карточке статьи.

Раздел «Молекулярный редактор»

Обзор


Раздел предназначен для прогнозирования свойств соединений, которых нет в базе данных Синтелли.

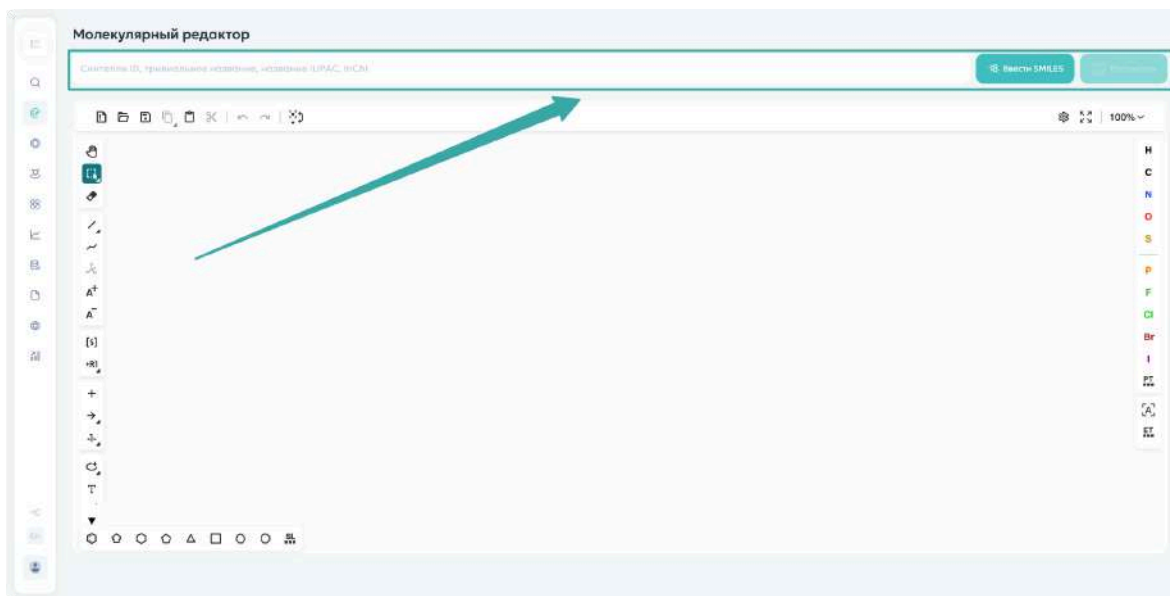


Способы ввода молекул

1. Через поисковую строку

- Введите один из идентификаторов:
 - Название бренда
 - Название IUPAC
 - Код поставщика
 - CAS номер
- Нажмите кнопку поиска

 **Подсказка:** Вы можете найти существующую молекулу, модифицировать её структуру под ваш эксперимент и получить прогноз свойств нового соединения



2. Через SMILES

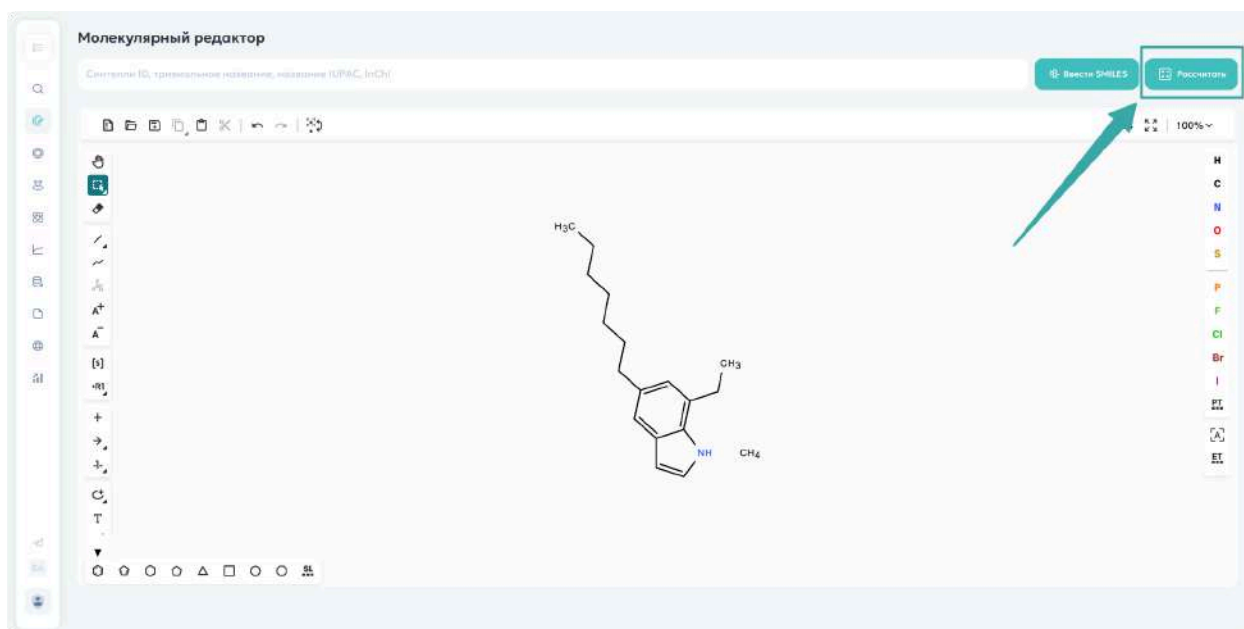
- Нажмите кнопку ввода SMILES
- Введите SMILES-представление молекулы

 **Подсказка:** Для очистки поисковой строки используйте кнопку удаления (x)

3. Через молекулярный редактор

- Нарисуйте структуру в редакторе

- Нажмите кнопку “Рассчитать” в правом верхнем углу для расчета СВОЙСТВ



Работа с результатами

Просмотр свойств

- После ввода молекулы отобразится карточка с рассчитанными свойствами

- Полный список свойств описан в разделе "Рассчитываемые свойства молекул"

The screenshot displays a web interface for a molecule's properties. On the left, a chemical structure of a substituted indole is shown. The central panel is titled "Страница молекулы" and contains a search bar and a "Перевести" button. On the right, there are two main sections: "Структурные данные" (Structural data) and "Биологическая активность" (Biological activity).

Структурные данные:

Название по IUPAC	Невозможно создать корректное имя IUPAC
CAS номер	Не найдено
SMILES	<chem>C.CCCCCc1cc(CCl2)nc2c1</chem>
InChI	InChI=1S/C17H25N.CH4/c1-3-5-6-7-8-9-44-12-15(-217-16(13-14)10-11-18-17)/N10-13,18...
InChI ключ	VDWCBAZCENSQOF-LHFFFAOYSA-N
Брутто-формула	$C_{17}H_{25}N$
Молекулярный вес	259.437

Биологическая активность:

Физико-химические свойства

Растворимость в воде	-6.32	85%
Давление насыщенного пара		
Температура кипения	310.0	24%
Температура вспышки	170.0 °C	
Плотность	0.985	81%
Вязкость	1.0 log ¹⁰ (viscosity cP)	
Температура плавления	54.5	77%
Растворимость в ДМСО		
Время удорожания	1020.0	51%
Индекс преломления	1.54	78%

Экспорт данных

Нажмите «Скачать» для сохранения структуры:

- PDF формат
- PNG формат
- MOL формат

Навигация

- Для возврата в редактор используйте кнопку в левом верхнем углу страницы “К результатам”

The screenshot displays a web interface for a molecule page. At the top left, a button labeled "К результатам" (Back to results) is highlighted with a red box and a red arrow. Below it, the page title "Страница молекулы" (Molecule page) is visible. The main content area shows the chemical structure of a molecule, which is a benzimidazole derivative with a propyl group and a heptyl group. The molecular formula $C_{12}H_{19}N$ and molecular weight 259.437 are displayed. To the right, there is a sidebar with various tabs and data fields, including "Структурные данные" (Structural data), "Биологическая активность" (Biological activity), "Физико-химические свойства" (Physicochemical properties), "Токсичность" (Toxicity), "Экологические свойства" (Ecological properties), "Оценка сложности синтеза" (Synthesis complexity assessment), and "Сходство с лекарственными препаратами" (Similarity to drugs). The "Структурные данные" tab is currently active, showing fields for IUPAC name, CAS number, SMILES, InChI, InChI key, Brutto-formula, and Молекулярный вес (Molecular weight).

Раздел «Датасеты»

Обзор

Раздел предназначен для работы с:

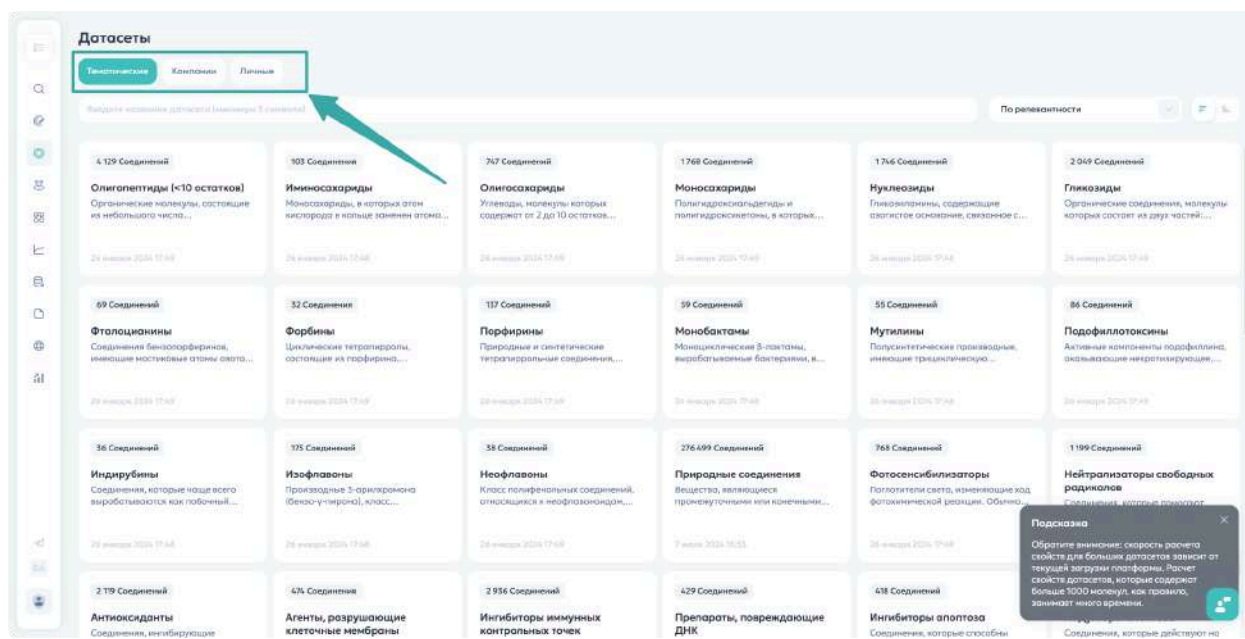
- Личными датасетами пользователя
- Корпоративными датасетами (датасетами компании)
- Тематическими датасетами

Доступ к разделу

1. В меню слева нажмите «Датасеты»

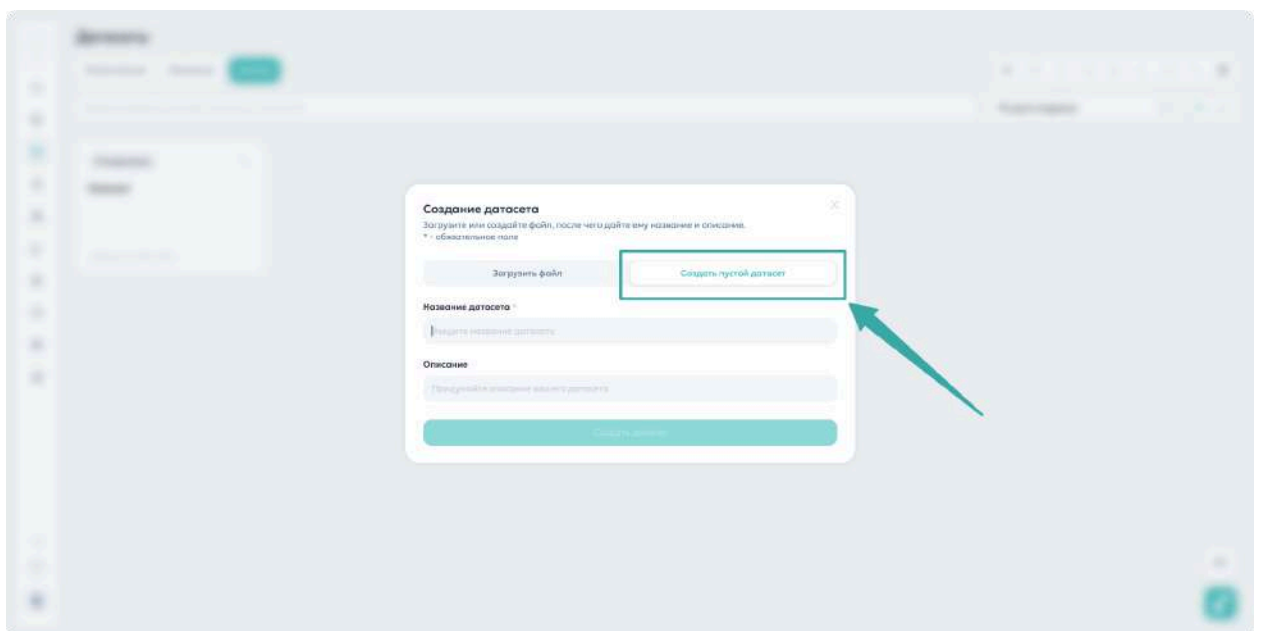
2. Выберите вкладку:

- «Тематические»
- «Компании»
- «Личные»

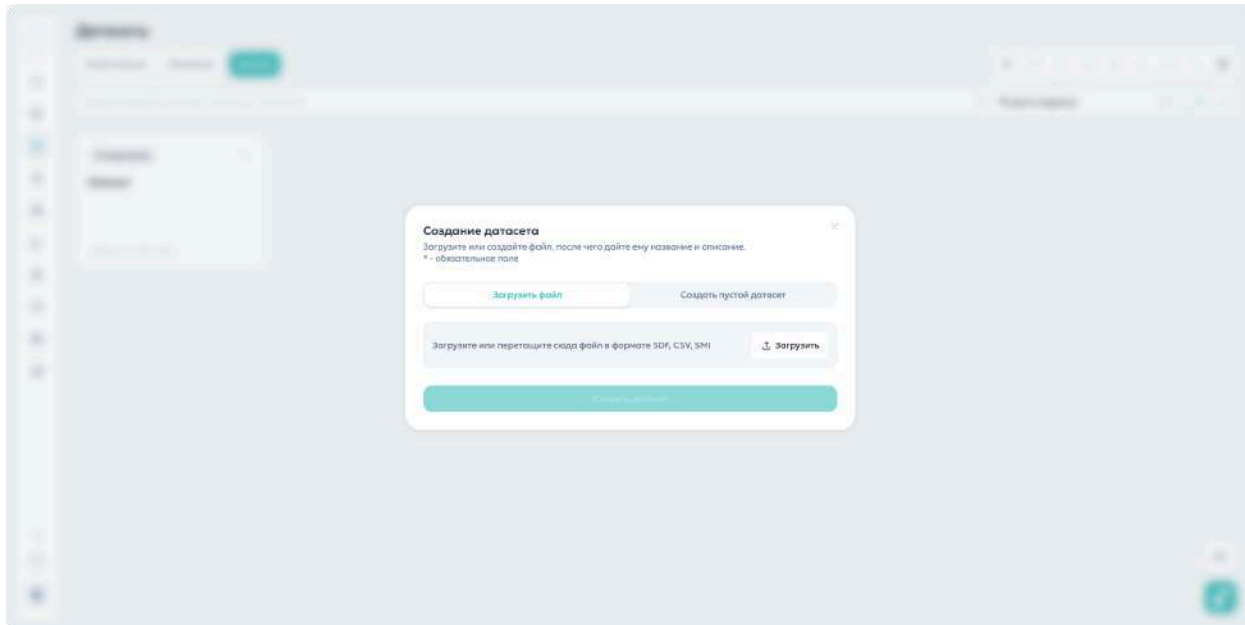


Создание датасета

1. В разделе "Датасеты" нажмите кнопку создания в правом верхнем углу
2. Введите:
 - Название датасета
 - Описание датасета
3. Нажмите «Создать»



Или загрузите готовый датасет в формате .sdf, .csv, .smi



Добавление молекул в датасет

Начало добавления

- Нажмите кнопку добавления вверху страницы
- Или кнопку «Добавить молекулу» в центре (для нового датасета)

Методы загрузки

1. SMILES

- Выберите опцию «SMILES»
- Введите SMILES в поле

2. Молекулярный редактор

- Выберите «Молекулярный редактор»
- Нарисуйте структуру

3. Загрузка из файла

- Выберите «Загрузить из файла»
- Нажмите «Выберите файл»
- Поддерживаемые форматы: .sdf, .csv, .smi

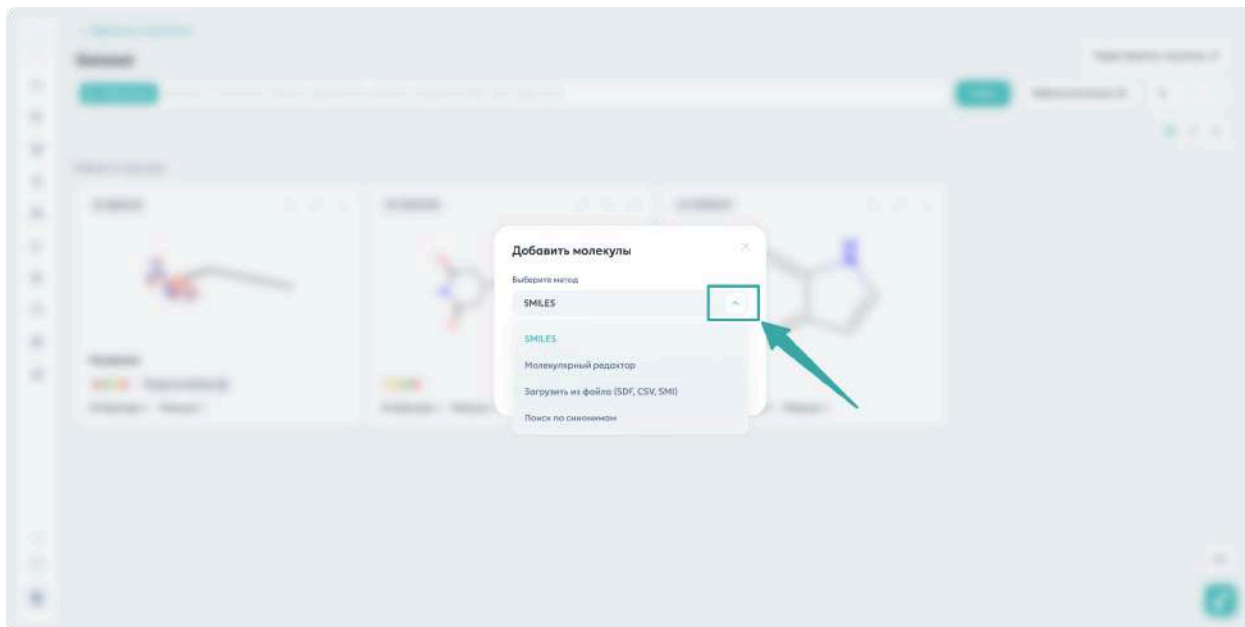
⚠ Важно: Файл должен содержать колонку со SMILES. При загрузке нужно будет указать нужную колонку.

4. Поиск по синонимам

- Выберите «Поиск по синонимам»
- Введите название молекулы

Завершение добавления

1. Проверьте молекулу в окне предпросмотра
2. Нажмите «Загрузить»



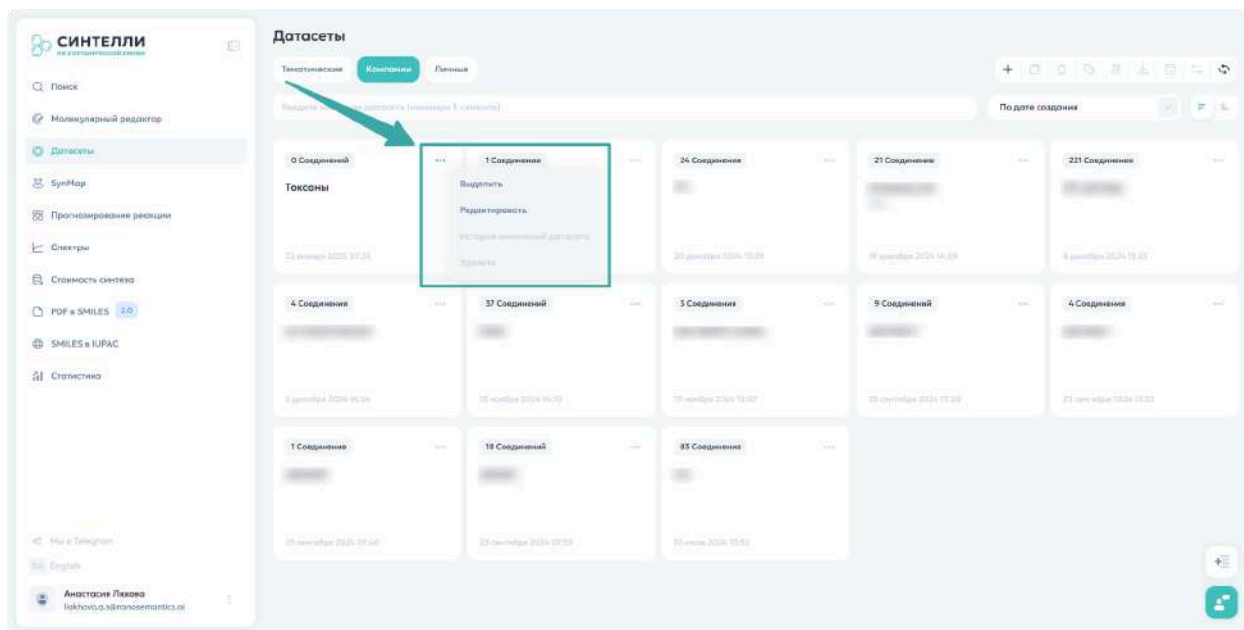
Просмотр данных о молекуле

- Нажмите левой кнопкой мыши на датасет

- Работа с молекулами аналогична работе в публичной базе данных

Выделение датасета

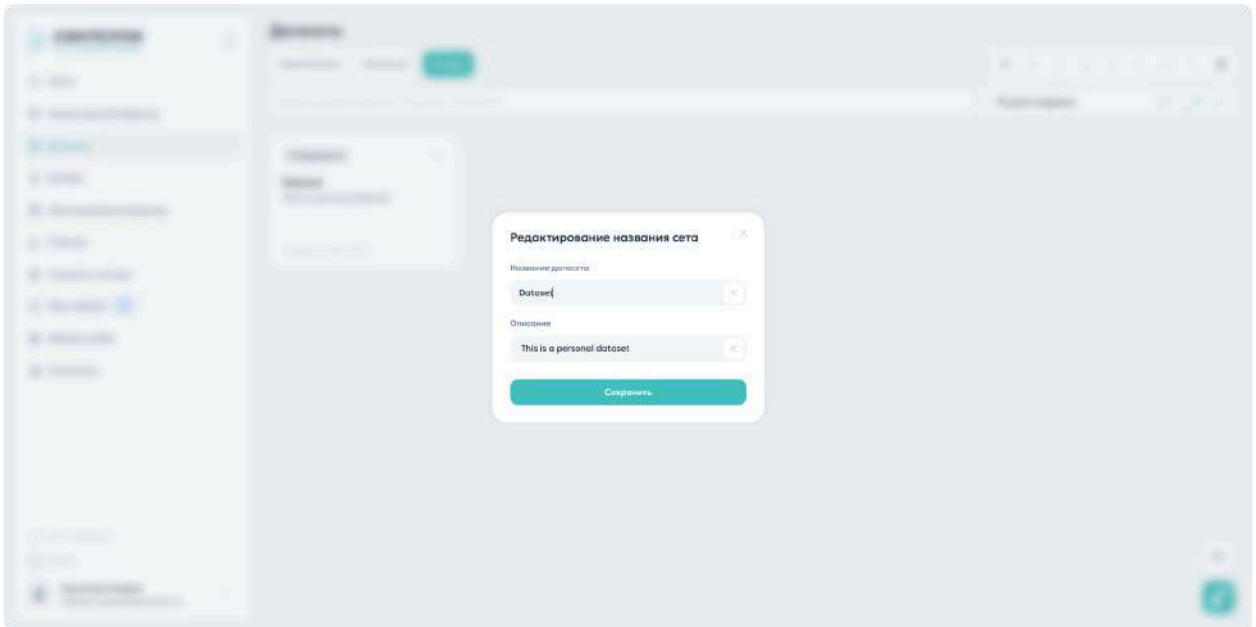
- Нажмите кнопку опций (три точки) и выберите «Выделить»
- Для снятия выделения кликните в пустой области экрана



Редактирование датасета

1. Нажмите кнопку опций (три точки)
2. Выберите «Редактировать»


3. Измените название и/или описание

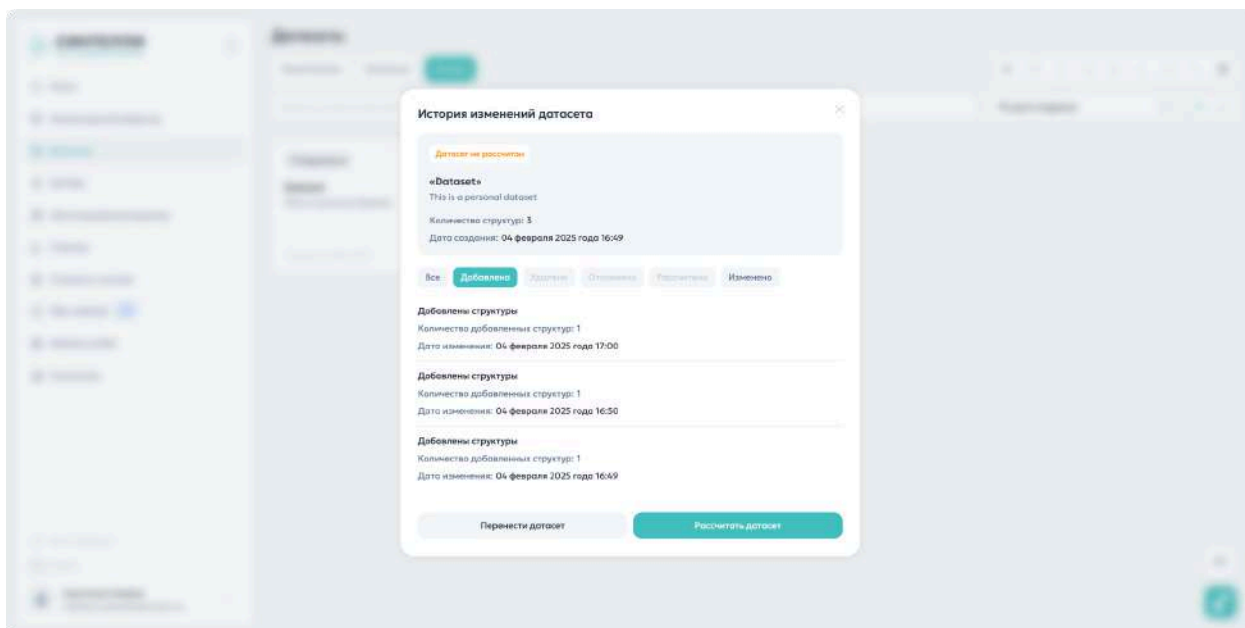


Просмотр истории

Чтобы открыть историю изменений датасета:

1. Нажмите кнопку опций (три точки)
2. Выберите "История изменений датасета"
 - В истории отображаются:
 - Дата и время каждого действия
 - Тип операции
 - Количество затронутых структур

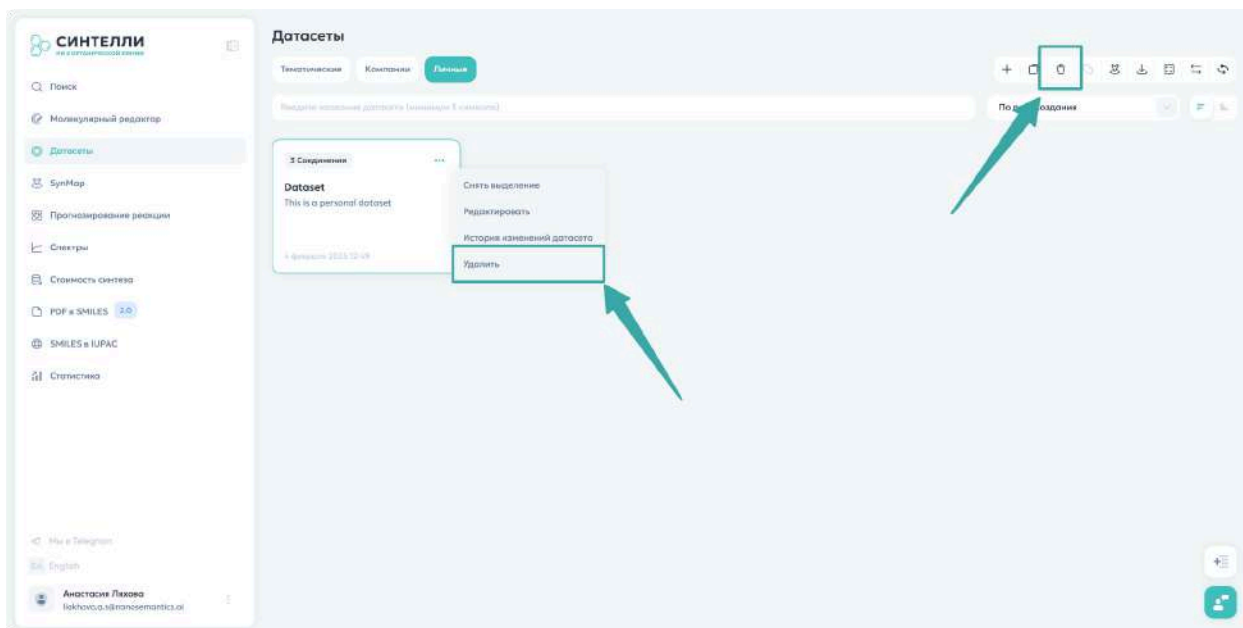
 **Подсказка:** Используйте фильтры в верхней части журнала для быстрого поиска нужных изменений. Это особенно полезно при работе с большими датасетами.



Удаление датасета

Два способа удаления:

1. Через меню:
 - Нажмите кнопку опций
 - Выберите «Удалить»
2. Через панель инструментов:
 - Выделите датасет
 - Нажмите кнопку удаления



Копирование датасета

1. Выделите датасет(ы):
 - Для одного: Ctrl + клик
 - Для группы: Shift + клик
2. Нажмите кнопку копирования

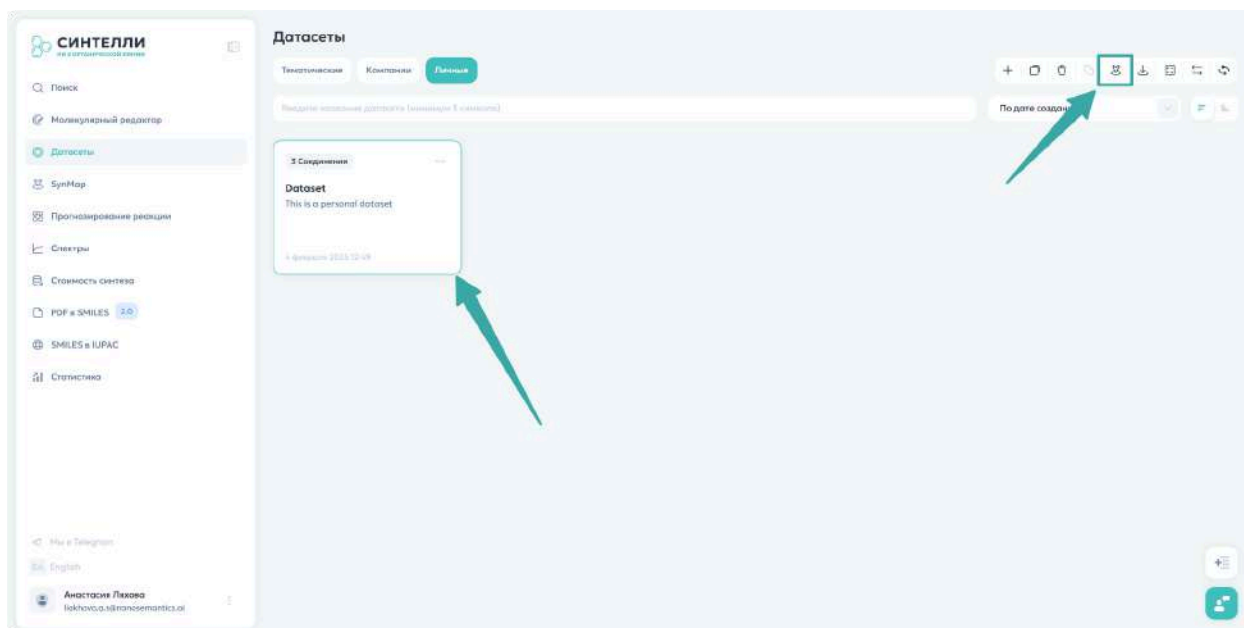
Объединение датасетов

1. Выделите два или более датасета
2. Нажмите кнопку объединения

Показ на SynMap

1. Выделите датасет

2. Нажмите кнопку отображения на SynMap

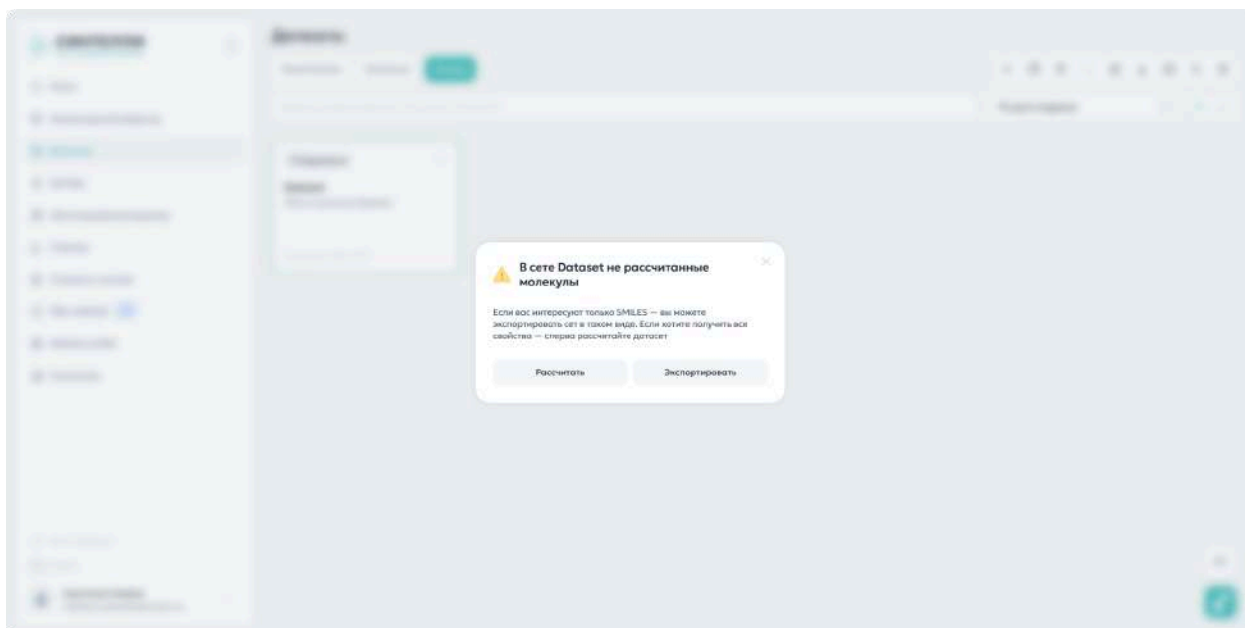


Экспорт датасета

1. Выделите датасет
2. Нажмите кнопку экспорта
3. Выберите опцию:
 - Рассчитать все свойства
 - Экспортировать только SMILES

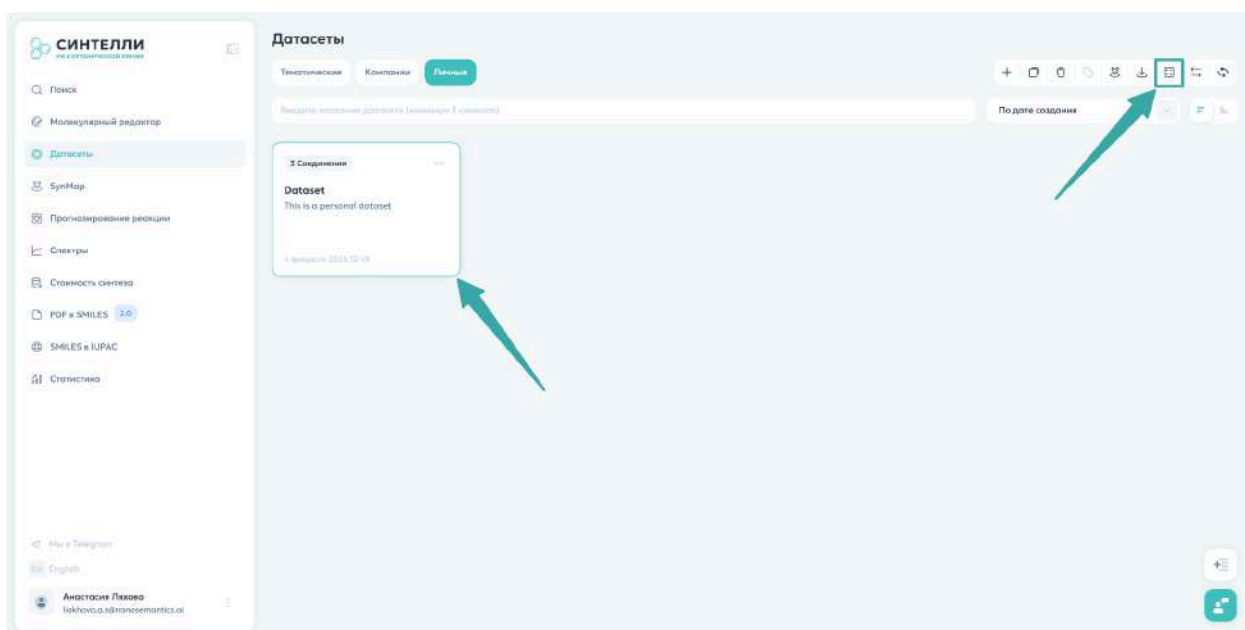
Форматы экспорта:

- CSV
- SDF
- XLSX



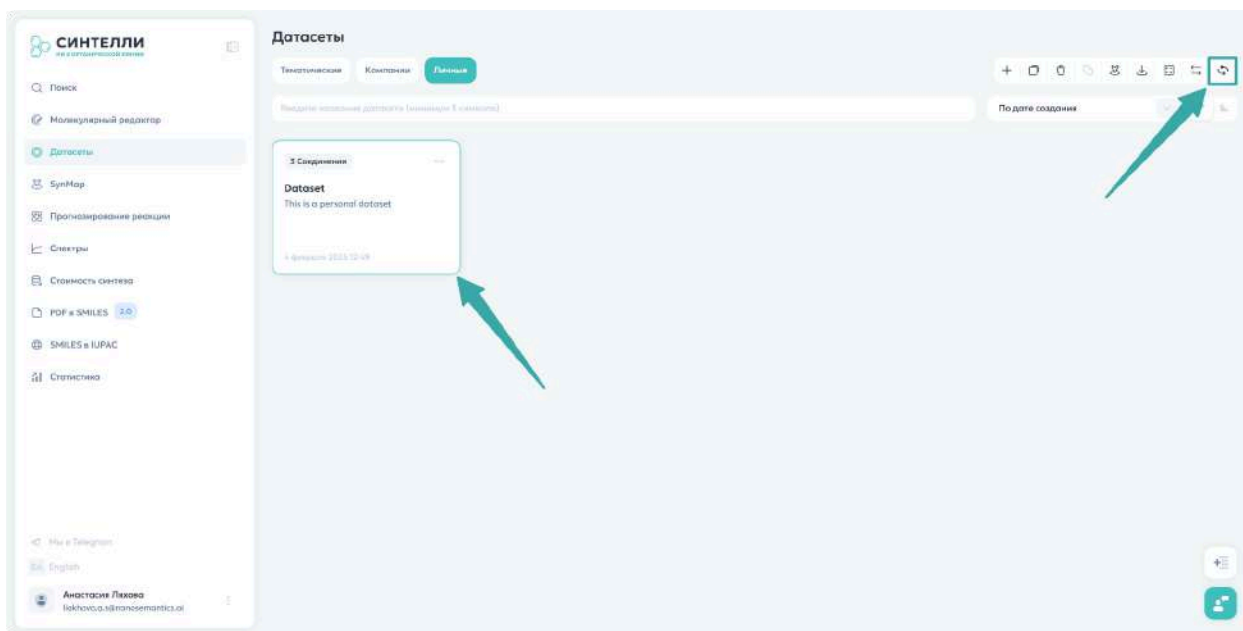
Дополнительные функции

- **Расчет свойств**
 - Выделите датасет
 - Нажмите кнопку расчета свойств



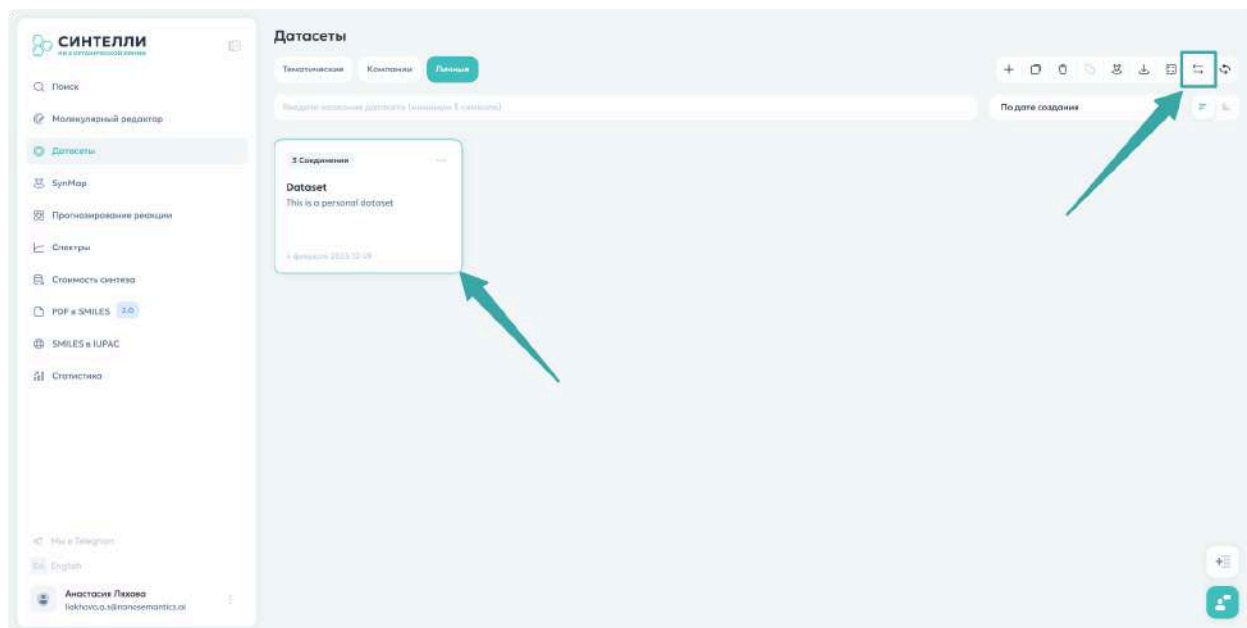
- **Обновление данных**

- Выделите датасет
- Нажмите кнопку обновления



- **Перенос в датасеты компании**

- Выделите датасет
- Нажмите кнопку “Перенести в датасеты компании”



Табличный анализ

Обзор функционала

- Быстрый анализ данных
- Поиск экстремальных значений
- Фильтрация и окрашивание по условиям

! Важно: Перед анализом необходимо рассчитать свойства всего датасета

The screenshot shows the SINTELLI web interface. On the left is a sidebar with navigation options: Поиск, Молекулярный редактор, Датасеты, УгугMap, Прогнозирование реакции, Спектры, Стоимость синтеза, PDF в SMILES 2.0, SMILES в IUPAC, and Статистика. The main area is titled 'Dataset' and shows a search bar with 'Найти' and 'Табличный анализ' buttons. Below the search bar, it says 'Найдено 3 структуры' and displays three chemical structure cards with IDs: 8862433, 15624570, and 155784737. A red arrow points to the 'Найти' button, which is highlighted with a red box.

Возможности анализа

- Выбор колонок для отображения
- Перестановка колонок
- Поиск по столбцам
- Фильтрация
- Сортировка

Работа с данными

1. Выбор колонок

- Нажмите "Все колонки" в левом верхнем углу
- Выберите необходимые для отображения параметры

2. Сортировка

- Первый клик - по убыванию

- Второй клик - по возрастанию
- Третий клик - отмена сортировки

3. Поиск

- Введите символы/цифры
- Система найдет все совпадающие значения

4. Фильтрация и покраска


- Нажмите кнопку настройки
- Выберите необходимые условия для фильтрации
- Укажите параметры для окраски ячеек (например, если значение ячейки совпадает с указанными условиями, ячейка окрасится в зеленый цвет)

Работа с заметками к структурам

Обзор функционала

Заметки предоставляют возможности:

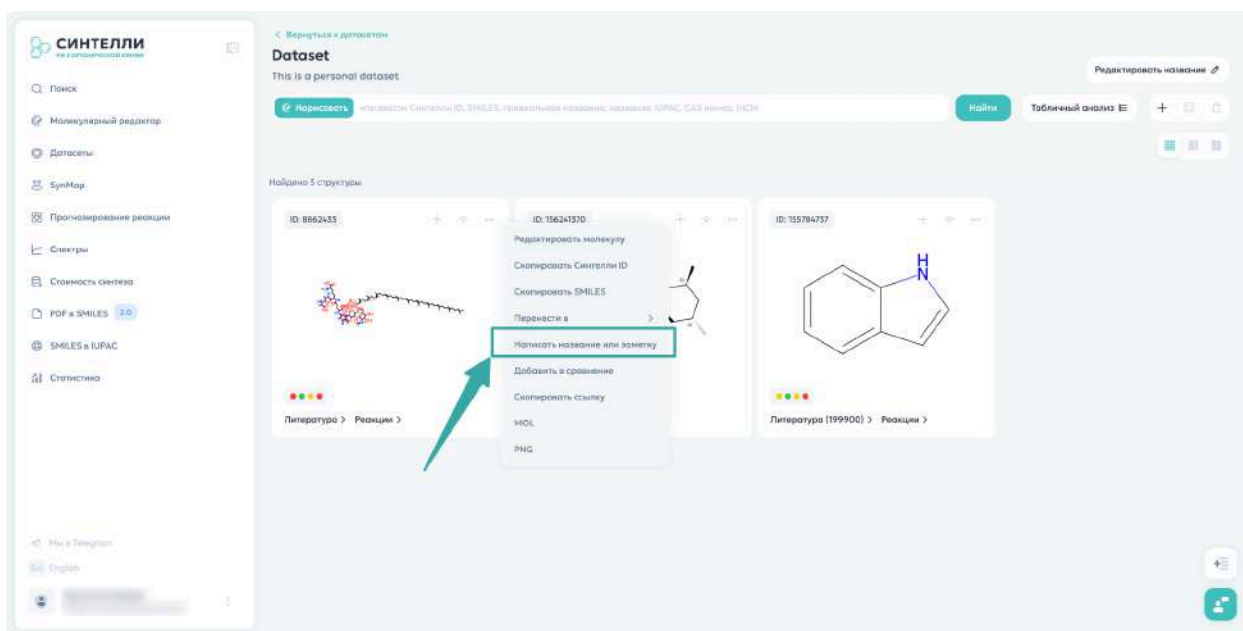
- Добавление собственных названий молекул
- Сохранение важных наблюдений
- Документирование результатов экспериментов
- Отметки особенностей использования

 **Важно:** Заметки доступны только для молекул в *Личных* датасетах и датасетах *Компании*

Добавление заметок

Способ 1: Через карточку в датасете

1. Откройте датасет
2. Найдите структуру
3. Откройте контекстное меню (правый верхний угол)
4. Выберите "Написать название или заметку"



Способ 2: На странице молекулы

1. Откройте детальную страницу молекулы
2. Нажмите "Написать заметку"
3. Заполните форму:
 - "Название" - краткий идентификатор
 - "Заметка" - подробное описание

The screenshot shows the 'СИНТЕЛЛИ' interface. On the left is a navigation sidebar with options like 'Поиск', 'Молекулярный редактор', 'Датасеты', 'SunMap', 'Прогнозирование реакции', 'Спектры', 'Стабильность синтеза', 'PDF в SMILES 2.0', 'SMILES в IUPAC', and 'Статистика'. The main area is titled 'Страница молекулы' and contains a molecule card with a 3D model and a 'Написать заметку' button highlighted by a red arrow. To the right of the card is a 'Структурные данные' panel with fields for 'Синтелли ID', 'Название по IUPAC', 'CAS номер', 'SMILES', 'InChI', 'InChI ключ', 'Брутто-формула', and 'Молекулярный вес'. Further right is a 'Структурные данные' sidebar with categories like 'Синонимы', 'Биологическая активность', 'Физико-химические свойства', 'Токсичность', 'Экологические свойства', 'Оценка сложности синтеза', 'Сходство с лекарственными препаратами', and 'Личные данные'.

Просмотр заметок

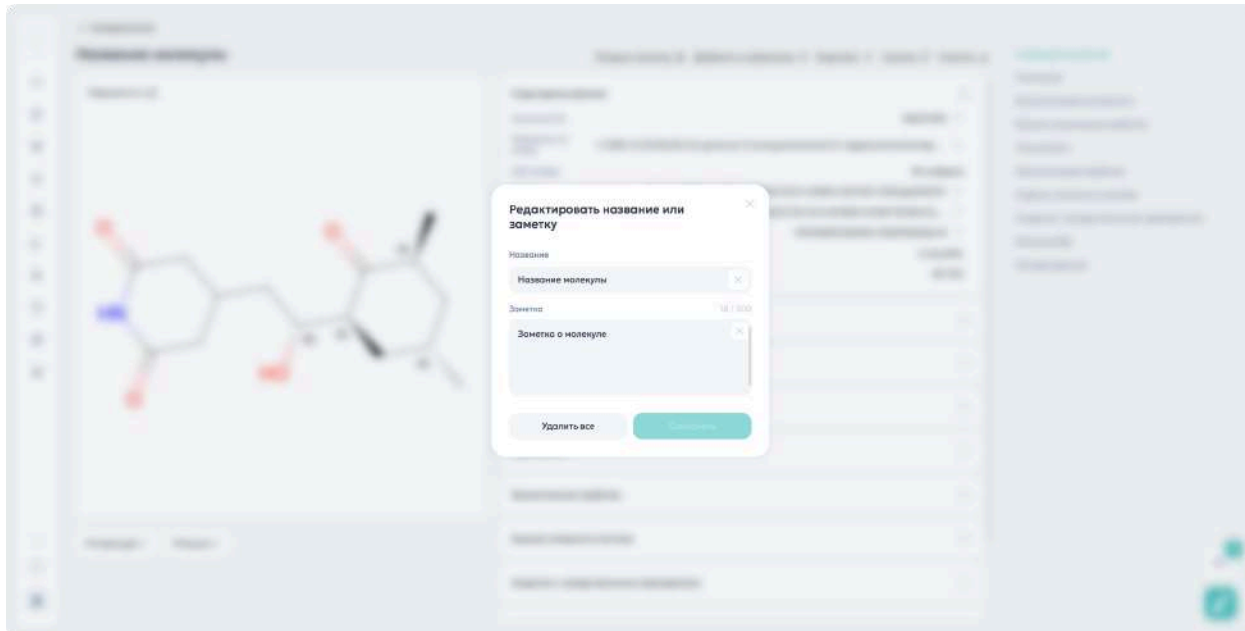
Заметки отображаются:

- В нижней части карточки структуры
- На детальной странице молекулы (кнопка "Открыть заметку")

Редактирование заметок

1. Найдите структуру с заметкой
2. Откройте заметку:
 - Через карточку датасета
 - С детальной страницы
3. Внесите изменения

4. Сохраните изменения



Корпоративные датасеты

Обзор

Корпоративные датасеты предоставляют:

- Общее пространство для совместной работы
- Прозрачность действий
- Доступность всем сотрудникам

Ключевые возможности

- Централизованное хранение данных
- Совместная работа над проектами
- Подробное протоколирование изменений
- Контроль доступа

Доступ к датасетам

1. Откройте раздел "Датасеты"
2. Перейдите на вкладку "Компании"
3. Выберите датасет

Стандартные операции

- Просмотр и поиск
- Дублирование
- Добавление молекул
- Экспорт данных
- Расчет свойств
- Отображение на SynMap
- Объединение датасетов
- Просмотр истории изменений

История изменений

1. Как открыть:
 - Нажмите меню возле названия
 - Выберите "История изменений датасета"
2. Отслеживаемая информация:
 - Даты действий
 - Типы операций
 - Количество измененных структур

 **Подсказка:** Используйте фильтры журнала для быстрого поиска изменений


Рекомендации по использованию


Организация данных:

- Создавайте понятную структуру
- Используйте информативные названия
- Добавляйте подробные описания

Совместная работа:

- Информировать о планируемых изменениях
- Проверяйте журнал перед работой
- Используйте заметки для коммуникации

 **Предупреждение:** Все действия необратимы и мгновенно видны всем пользователям

 **Совет:** Для экспериментов создавайте копии в личном разделе

Раздел «SynMap»

Обзор

SynMap позволяет:

- Визуализировать молекулы на 2D плоскости
- Группировать близкие по свойствам молекулы в кластеры
- Генерировать соединения с заданными свойствами

Поддерживаемые свойства для генерации:

- QED
- Boiling point
- Melting point
- Mouse oral LD50
- LogP
- LogS
- DMSO Solubility
- Brutto
- MMap

Просмотр групп химических соединений

Принцип работы

- Модель проецирует структуры в координаты X и Y
- Структурно близкие соединения располагаются рядом

- Формируются кластеры схожих молекул:
 - Линейные алифатические соединения
 - Стероиды
 - Бисфенилы
 - Психоактивные вещества
 - И другие



Доступ к разделу

Способ 1: Через датасеты

1. Откройте раздел «Датасеты»
2. Выберите датасет
3. Покажите его на SynMap

Способ 2: Напрямую

1. Откройте раздел «SynMap»

2. Нажмите «Добавить слой» в блоке «Слои»
3. Выберите датасет(ы)
4. Нажмите «Выбрать»

 **Подсказка:** Можно добавить несколько датасетов одновременно

Работа с картой


Загрузка данных:

- Процесс отображается в блоке «Слои»
- Каждый датасет показан своим цветом
- При наведении на точку появляется карточка молекулы

Выделение областей:

1. Выберите инструмент:
 - Прямоугольное выделение
 - Произвольное выделение
2. Выделите область мышью
3. При необходимости скорректируйте границы

 **Важно:** Максимальное количество молекул для выделения: 50 000

 **Подсказка:** Для отмены выделения дважды кликните вне выделенной области

Работа с выделенными молекулами

Просмотр информации:

- Список структур отображается на отдельной панели
- Доступные действия:
 - Просмотр информации
 - Копирование SMILES
 - Открытие в редакторе
 - Скачивание в PNG
 - Добавление в датасет

Сохранение в датасет:

1. Нажмите «Добавить подборку в датасет»
2. Выберите существующий датасет или создайте новый
3. Нажмите «Добавить в датасет»

The screenshot displays the Syntelli software interface. On the left is a navigation menu with options like 'Панель', 'Молекулярный редактор', 'Датасеты', 'SynMap', 'Прогнозирование реакции', 'Спектры', 'Свойства синтеза', 'PDF в SMILES 2.0', 'SMILES в IUPAC', and 'Статистика'. The main workspace shows three chemical structures with their coordinates: O=C1NC(=O)CC1 (X: 25.17, Y: -5.57), CN1CCCC1 (X: 25.07, Y: 4.13), and C1CCN1. A red box highlights the button '+ Добавить подборку в датасет' with a green arrow. On the right, a panel titled '+ Добавить слой' shows a list of datasets including 'Печень', 'synthely-7572', 'Gen 1', and 'Gen 2', each with a 'Прозрачность' slider. Below this is a '+ Добавить генератор' section with 'Gen 1' and 'Gen 2' and 'Сопоставление заданным параметрам' sliders. At the bottom right, there is a '+ Добавить генерацию в датасет' button.

Дополнительные функции

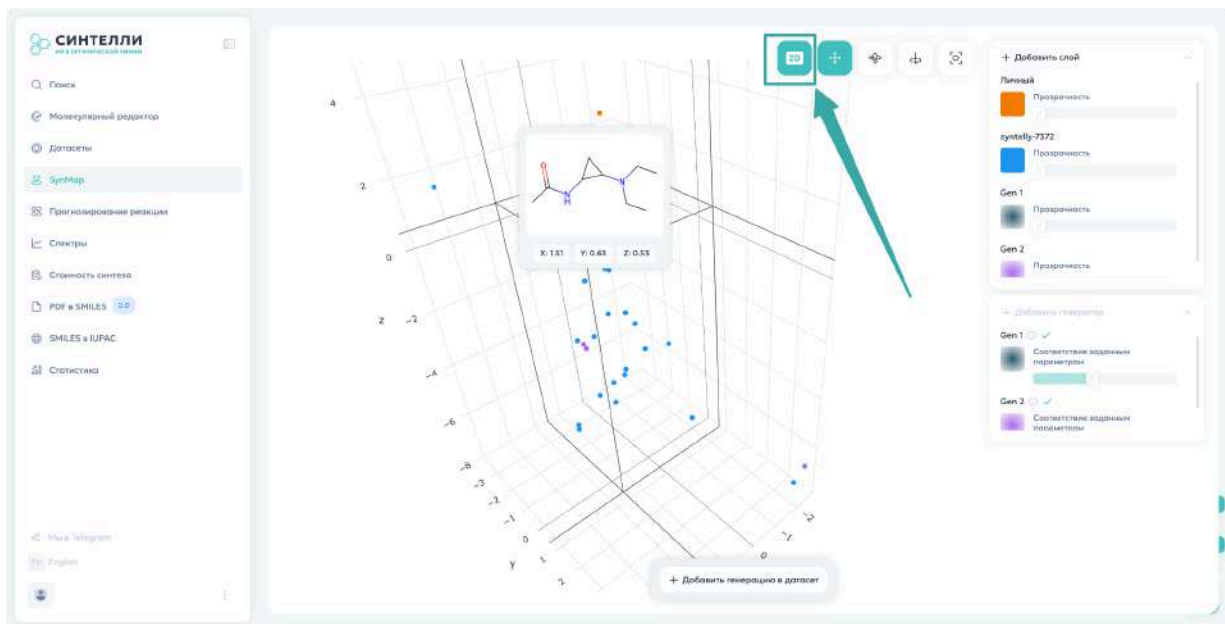
Управление отображением:

- Включение/выключение датасетов
- Регулировка прозрачности точек
- Масштабирование (колесо мыши или кнопки)
- Перемещение карты
- Автоматическое масштабирование

3D-визуализация:

- Доступна кнопка в правом верхнем углу
- Требуется дополнительных вычислений

⚠ Важно: Отображение больших датасетов в 3D может занять значительное время



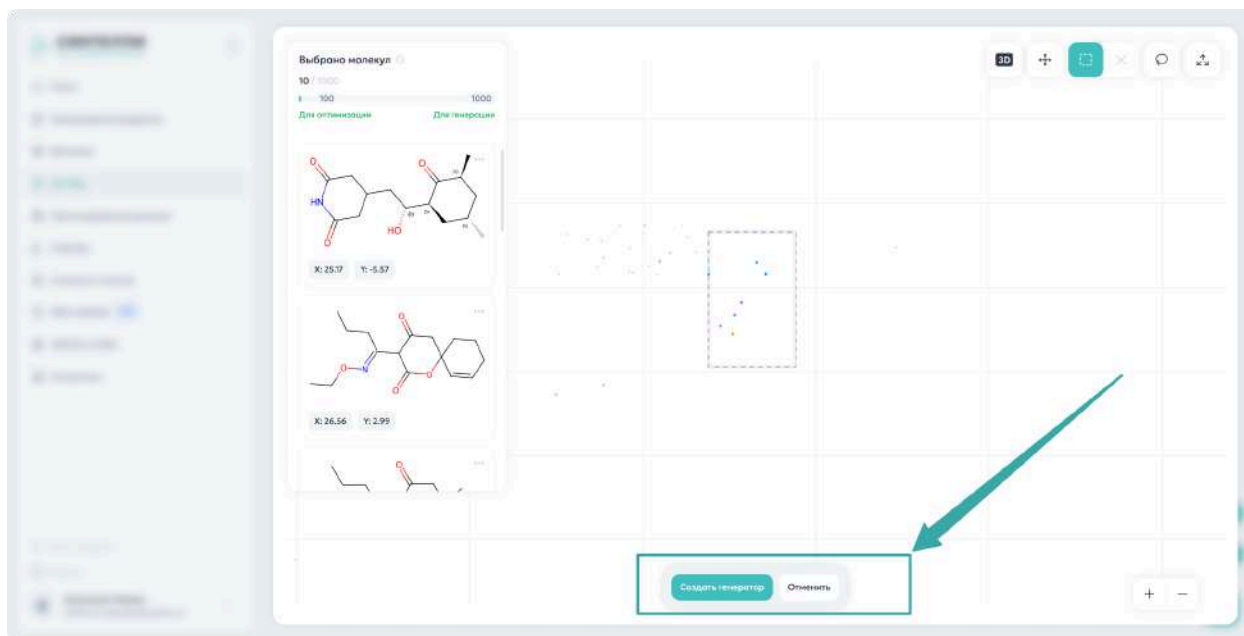
Генерация соединений с заданными свойствами

Ограничения

! **Важно:** Для запуска генерации в выбранной области должно быть не более 1000 структур

Запуск генерации

1. В разделе «SynMap» нажмите «Добавить генератор» в блоке «Генераторы»
2. Выделите молекулы и нажмите «Создать генератор»
3. Настройте параметры генерации




Параметры генерации

Основные настройки

- **Название** – произвольное имя для генерации
- **Родительская связь** – для повторных генераций

- **Эпохи** – количество попыток создания новых молекул
 - Больше эпох = больше вариантов
 - Время генерации увеличивается пропорционально

 **Важно:** Перед генерацией молекул из участка карты необходимо отобразить датасет на карте

Доступные свойства для генерации

1. QED (Quantitative Estimate of Drug-likeness)

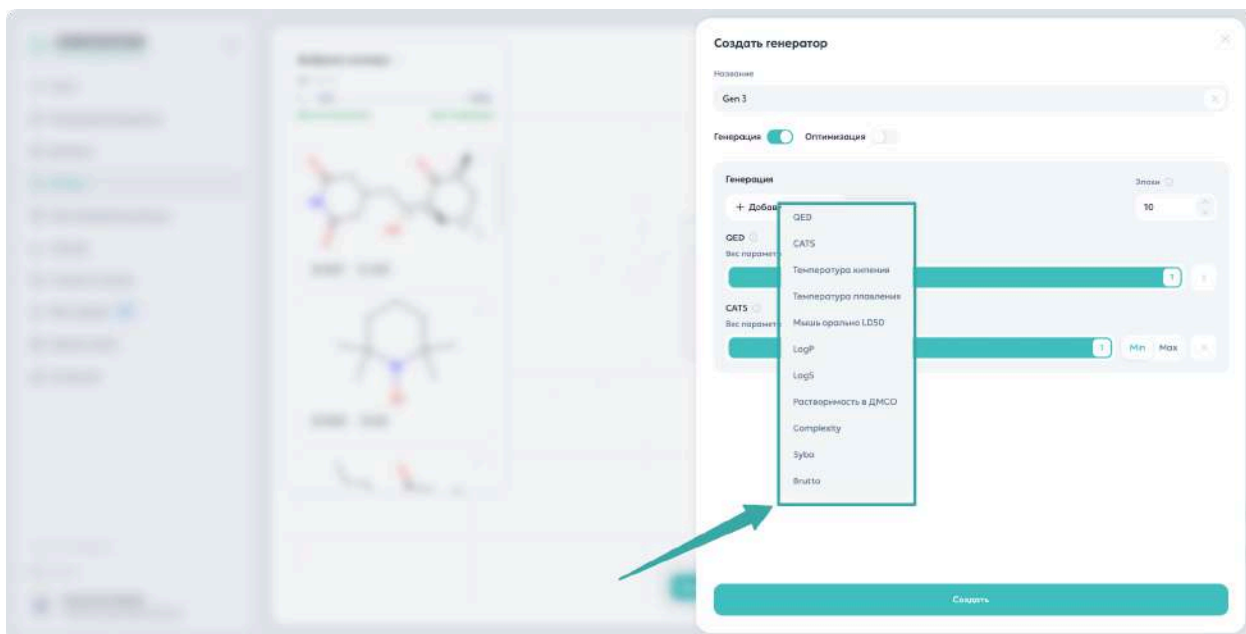
- Генерация потенциальных лекарственных средств
- Оценка соответствия характеристикам успешных лекарств

2. Физические свойства

- **Boiling point** – температура кипения
- **Melting point** – температура плавления
- **Mouse oral LD50** – токсичность при пероральном введении
- **LogP** – липофильность
- **LogS** – растворимость в воде
- **DMSO solubility** – растворимость в ДМСО

3. Структурные параметры

- **Brutto** – генерация по образцу химического состава
- **Complexity** – структурная сложность молекул
- **SYBA** – оценка синтезируемости
- **CATS** – несхожесть с исходными молекулами



Настройка точности

- Ползунок для каждого свойства
- Вправо = меньше молекул, выше точность
- Влево = больше молекул, ниже точность

Работа с результатами


Визуализация

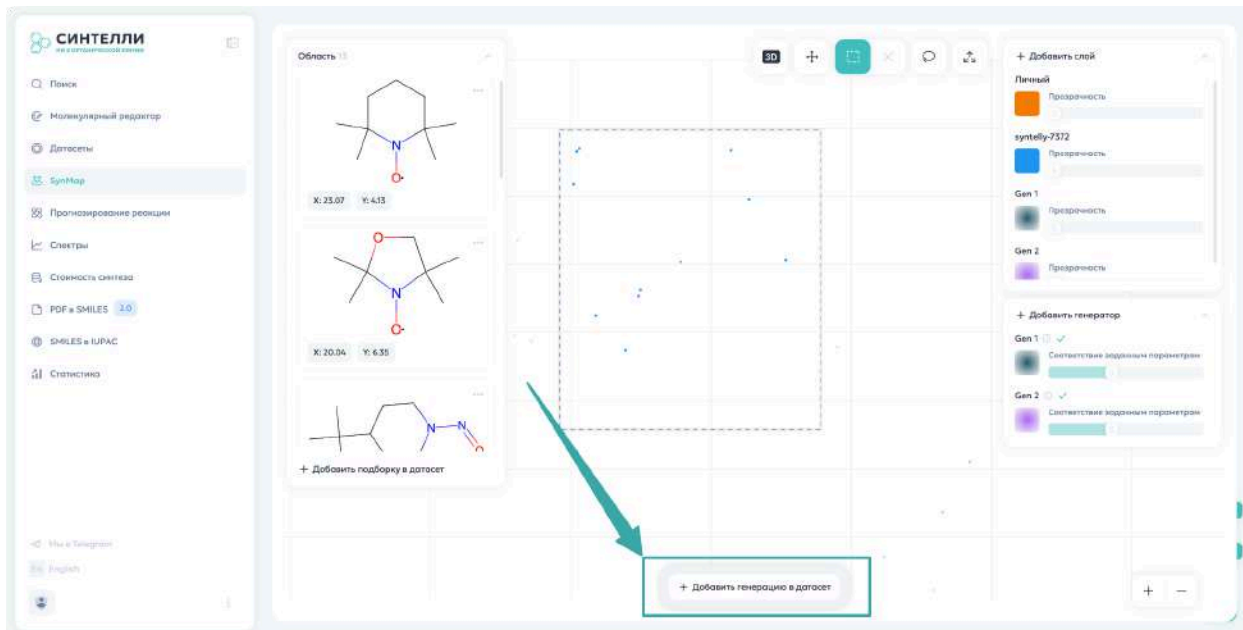
- Новые молекулы появляются на карте
- Отображаются другим цветом
- Цвет можно настроить

Экспорт результатов

1. Выделите область с новыми молекулами
2. Нажмите «Добавить генерацию в датасет»
3. Выберите:

- Создать новый датасет
- Добавить в существующий

 **Подсказка:** Если датасет создан, но пуст, нажмите кнопку обновления




Дальнейшая работа

- Управление датасетом описано в разделе «Датасеты»
- Доступны все стандартные операции:
 - Изменение названия
 - Выделение
 - Удаление
 - И другие

Оптимизация соединений с заданными свойствами

Ограничения


 **Важно:** Для запуска оптимизации в выбранной области должно быть не более 100 структур

Принцип работы

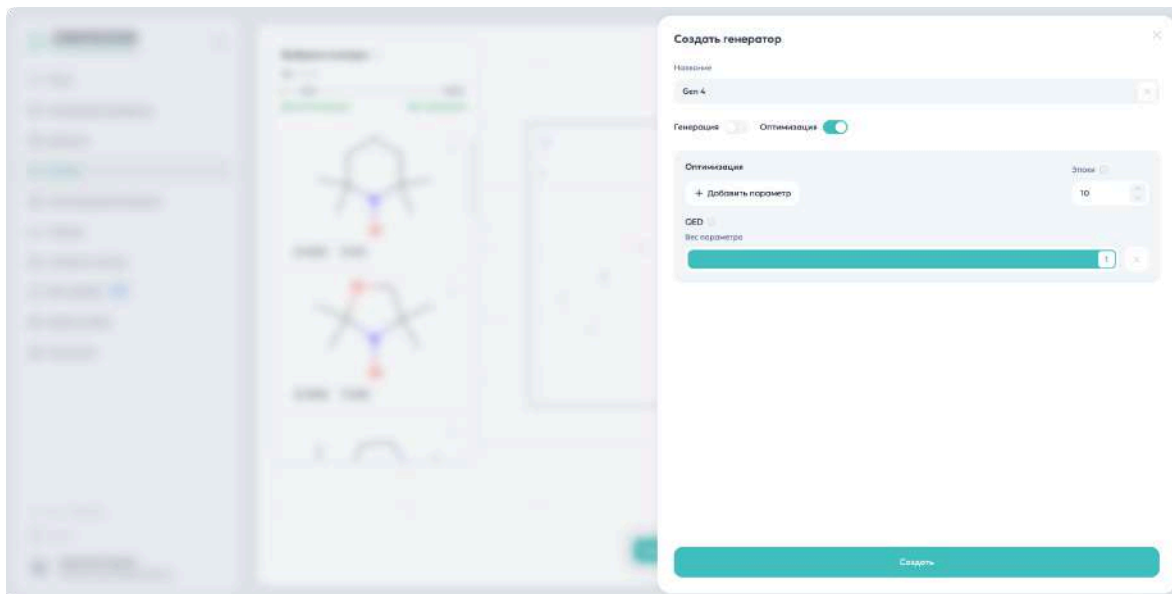
- Использует метод Обучения с подкреплением
- Исходная молекула ограничивает пространство генерации
- Создаются структурно близкие молекулы
- Возможно изменение скаффолда при соответствии ограничениям

Важная особенность:

- Возможна отдельная работа или комбинация:
 - Только генерация
 - Только оптимизация
 - Генерация + оптимизация

 **Подсказка:** При комбинированном подходе сначала выполняется генерация, затем заданный процент молекул с лучшими показателями передается на оптимизацию. В этом случае действует лимит генерации в

1000 структур.



Раздел «Предсказание реакции»

 Экспериментальный раздел

Обзор

Раздел предназначен для:

- Планирования синтеза соединений
- Предсказания путей химических превращений

Доступные виды прогнозирования:

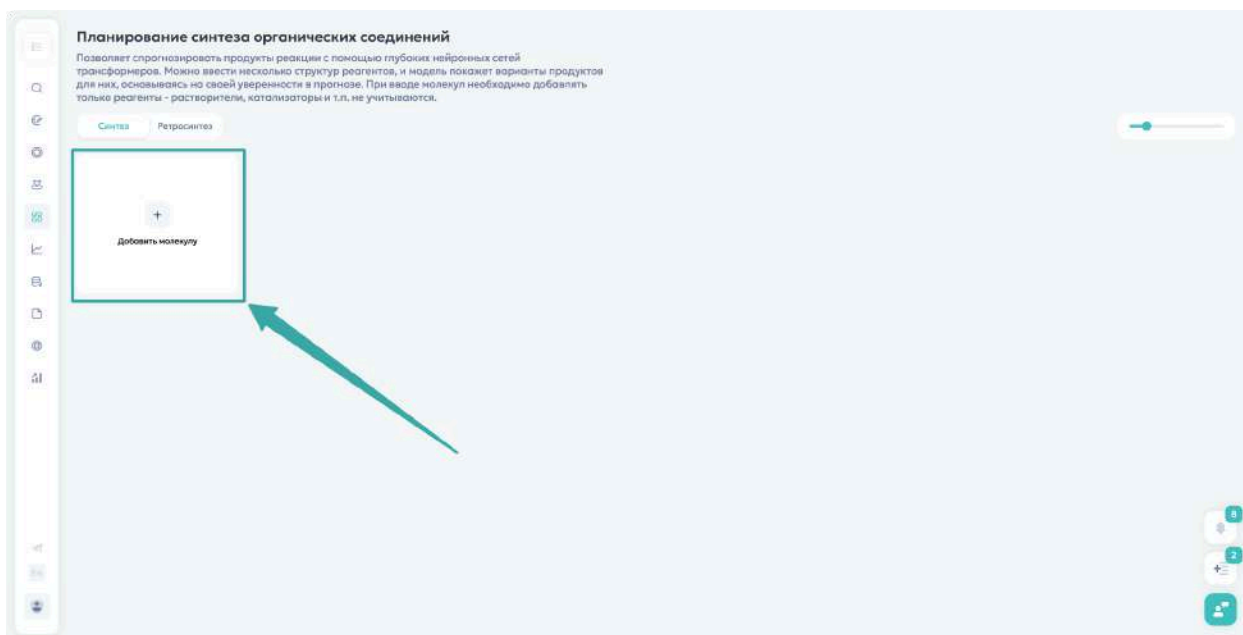
1. **Синтез** – прогноз продуктов реакции
2. **Ретросинтез** – прогноз реагентов (пока одностадийный)

Синтез

Начало работы

1. Откройте раздел «Предсказание реакции»
2. Выберите вкладку «Синтез»

3. Нажмите «Добавить молекулу»



Ввод молекул

Способы ввода

1. SMILES

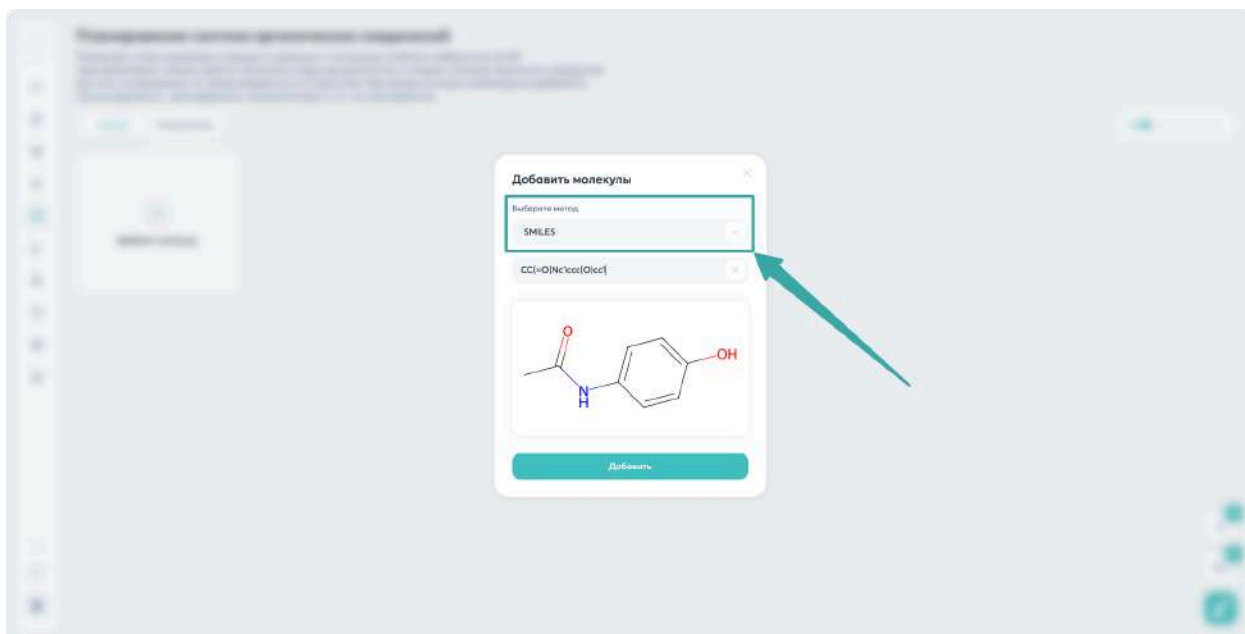
- Выберите опцию «SMILES»
- Введите формулу в поле

2. Молекулярный редактор

- Выберите «Молекулярный редактор»
- Нарисуйте структуру

3. Поиск по синонимам

- Выберите «Поиск в БД Синтелли»
- Введите название синонима



Моделирование реакции


- Минимум 2 молекулы для реакции
- Возможно добавление агентов
- Нажмите «Предсказать» для расчета

💡 Подсказки:

- Редактирование/удаление молекул через кнопки на карточке
- Кнопка «Сбросить» удаляет все молекулы

Результаты

- Надежность прогноза указана для каждого варианта
- Высокая надежность (>0.96) – наиболее вероятные продукты
- Низкая надежность (<0.96) – возможны неожиданные результаты

 **Примечание:** Необычные результаты при низкой надежности — особенность работы нейросети типа Transformer, а не ошибка системы

Планирование синтеза органических соединений
Позволяет спланировать продукты реакции с помощью глубоких нейронных сетей трансформеров. Можно ввести несколько структур реагентов, и модель покажет варианты продуктов для них, основываясь на своей уверенности в прогнозе. При вводе молекул необходимо добавлять только реагенты - растворители, катализаторы и т.д. не учитываются.

Синтез Ретросинтез

Добавить молекулу

Сбросить

Результаты

Уверенность модели 99%

Уверенность модели 99%

Уверенность модели 88%

Ретросинтез

Запуск ретросинтеза

1. Откройте раздел «Предсказание реакции»
2. Выберите вкладку «Ретросинтез»

3. Добавьте молекулу

Ввод целевой молекулы

Способы ввода

- SMILES
- Синтели ID
- Тривиальное название
- IUPAC
- InChI
- Молекулярный редактор

Завершение ввода

- Проверьте молекулу в окне предпросмотра
- Нажмите «Спрогнозировать»

Управление молекулами

💡 Подсказки:

- Для редактирования молекулы в молекулярном редакторе используйте кнопку «Изменить»
- Кнопка «X» очищает введенные данные

Планирование синтеза органических соединений
Позволяет спрогнозировать до 5 схем многостадийного синтеза малой органической молекулы с помощью нейронных сетей. Инструмент будет строить ретросинтетическое дерево до достижения коммерчески доступных молекул или до достижения лимита в 5 стадий. Прогнозируемые ретросинтетические пути также имеют оценку уверенности модели.

Синтез Ретросинтез

CC=Cc1ccc(cc1)O/C=C/C=C=C1CCCC(C@)2(C)C@H3(C)CCCC(C)CC(C@)H12

Схемы 1 2 3 4 5

Сохранить в датасет Скачать Решение не найдено Score 0.737

Получение результатов

1. Нажмите «Спрогнозировать»

2. Дождитесь расчета возможных путей ретросинтеза

Планирование синтеза органических соединений
Позволяет спланировать до 5 схем многостадийного синтеза малой органической молекулы с помощью нейронных сетей. Инструмент будет строить ретросинтетическое дерево до достижения коммерчески доступных молекул или до достижения лимита в 5 стадий. Прогнозируемые ретросинтетические пути также имеют оценку уверенности модели.

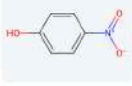
Синтез Ретросинтез

Изменить CC(=O)Nc1ccc(O)c1 Сгенерировать

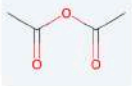
Схемы 1 2 3 4 5

Сохранить в датасет Скачать Решение кода Score 0.798

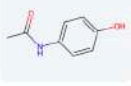
ID: 155864254 + -



ID: 30996630 + -



ID: 15582930 + -



The image shows a screenshot of a web-based retrosynthesis planning tool. At the top, there is a header with the title 'Планирование синтеза органических соединений' and a brief description of the tool's capabilities. Below the header, there are tabs for 'Синтез' and 'Ретросинтез', and a search bar containing the SMILES string CC(=O)Nc1ccc(O)c1. A 'Сгенерировать' button is located to the right of the search bar. The main area displays a retrosynthetic scheme with three starting materials on the left and one target molecule on the right. The starting materials are 4-hydroxyacetophenone (ID: 155864254) and acetic anhydride (ID: 30996630). The target molecule is N-(4-hydroxyphenyl)acetamide (ID: 15582930). The scheme is connected by lines, indicating the retrosynthetic path. On the right side of the interface, there are buttons for 'Сохранить в датасет', 'Скачать', 'Решение кода', and 'Score 0.798'. A vertical toolbar on the left contains various icons for editing and navigation. A small floating toolbar on the right shows a zoom-in icon and a score of 0.798.

Раздел «Спектры»

Введение

Система предоставляет три передовых модуля для прогнозирования различных типов спектральных данных, каждый из которых дает уникальную информацию о структуре и свойствах анализируемых молекул.

Доступные модули

1. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР)

- Анализирует спектральные данные различных ядер (^{13}C , ^1H и другие)
- Представляет результаты как соотношение интенсивности и химического сдвига
- Включает прогноз мультиплетности для протонных спектров

2. Масс-спектрометрия (QToF MS/MS)

- Работает с единичными ионами на трех уровнях энергии:
 - Низкий (10 эВ)
 - Средний (20 эВ)
 - Высокий (40 эВ)
- Выдает пары значений: точная масса – относительная интенсивность

3. ИК-спектроскопия

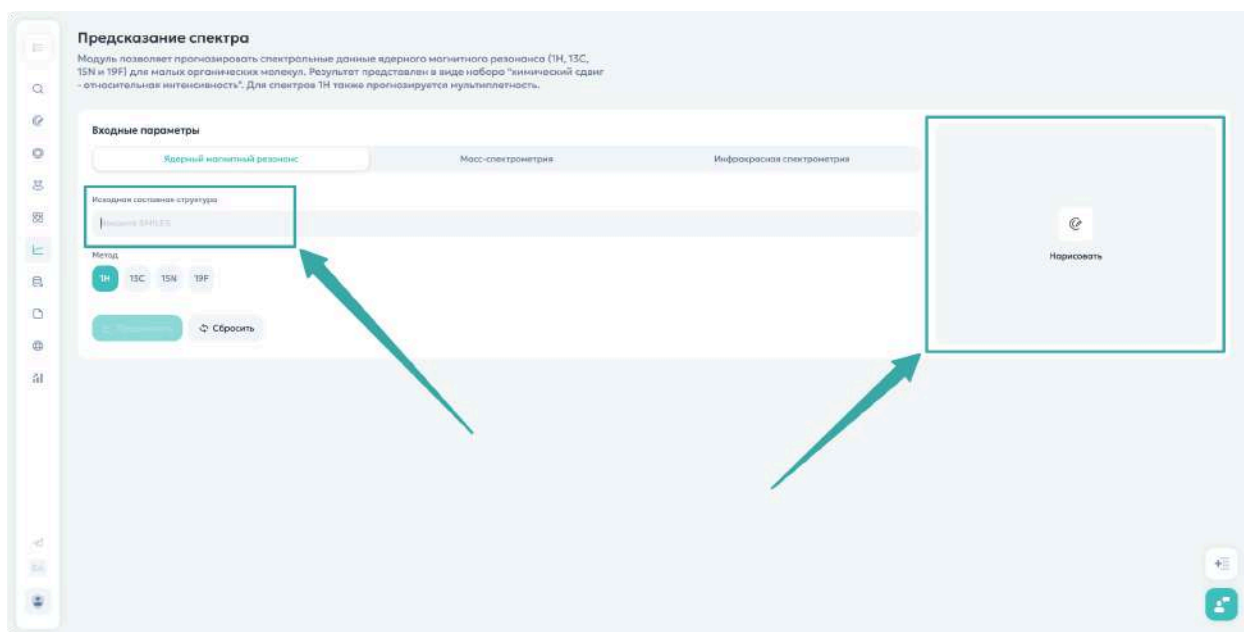
- Предсказывает спектры для малых органических молекул
- Поддерживает различные методы регистрации (газ, KBr)

- Создает графики зависимости интенсивности от длины волны

Ядерно-магнитный резонанс (ЯМР)

Начало работы

1. Перейдите в раздел «Спектры»
2. Выберите «Ядерно-магнитный резонанс»
3. Введите структуру одним из способов:
 - В поле «Исходная составная структура» впишите InChI или SMILES
 - Или нажмите «Нарисовать молекулу» и создайте структуру в редакторе



Выбор метода анализа

Система предлагает четыре типа ядер для анализа, каждый со своими особенностями:

1. Протонный ЯМР (^1H)

- Работает с наиболее распространенным изотопом водорода
- Позволяет изучить окружение водородных атомов
- Критически важен для определения структуры органических соединений

2. Углеродный ЯМР (^{13}C)

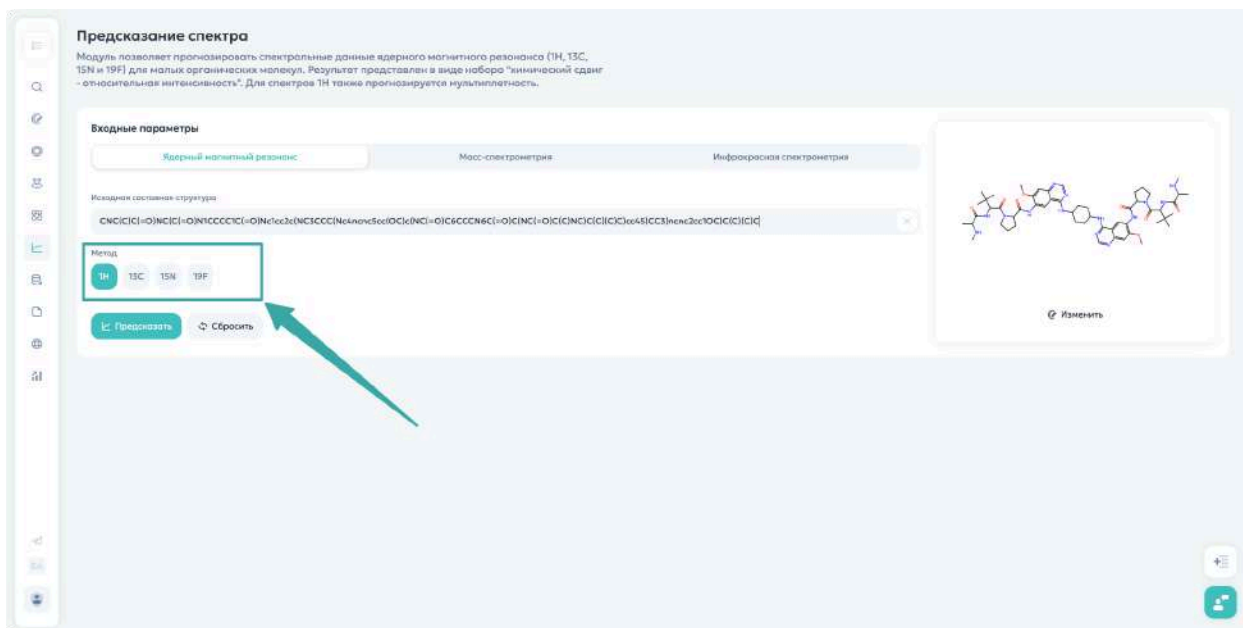
- Исследует углеродный скелет молекулы
- Дает информацию о строении и типах углеродных центров
- Помогает подтвердить структуру соединения

3. Азотный ЯМР (^{15}N)

- Специализируется на азотсодержащих соединениях
- Особенно полезен при работе с:
 - Аминокислотами
 - Белками
 - Гетероциклическими соединениями

4. Фторный ЯМР (^{19}F)

- Незаменим для анализа фторорганических соединений
- Широко применяется в:
 - Фармацевтических исследованиях
 - Органическом синтезе



Интерпретация результатов

После расчета система предоставляет:

1. Визуализацию молекулы

- Все атомы пронумерованы
- Четкая идентификация анализируемых центров

2. Спектральные данные

- График распределения сигналов
- Таблица с параметрами для каждого атома:
 - Мультиплетность (характер расщепления сигнала)
 - Химический сдвиг (положение сигнала в ppm)



Дополнительные функции

- Кнопка редактирования структуры для внесения изменений
- Возможность сброса всех параметров
- Экспорт данных для дальнейшего анализа

💡 Практические советы:

- Сравнивайте полученные значения с литературными данными
- Обращайте внимание на характерные области химических сдвигов
- Используйте мультиплетность для подтверждения структурных фрагментов

Масс-спектрометрия

Начало работы

1. Откройте раздел «Спектры»
2. Выберите вкладку «Масс-спектрометрия»

Ввод структуры

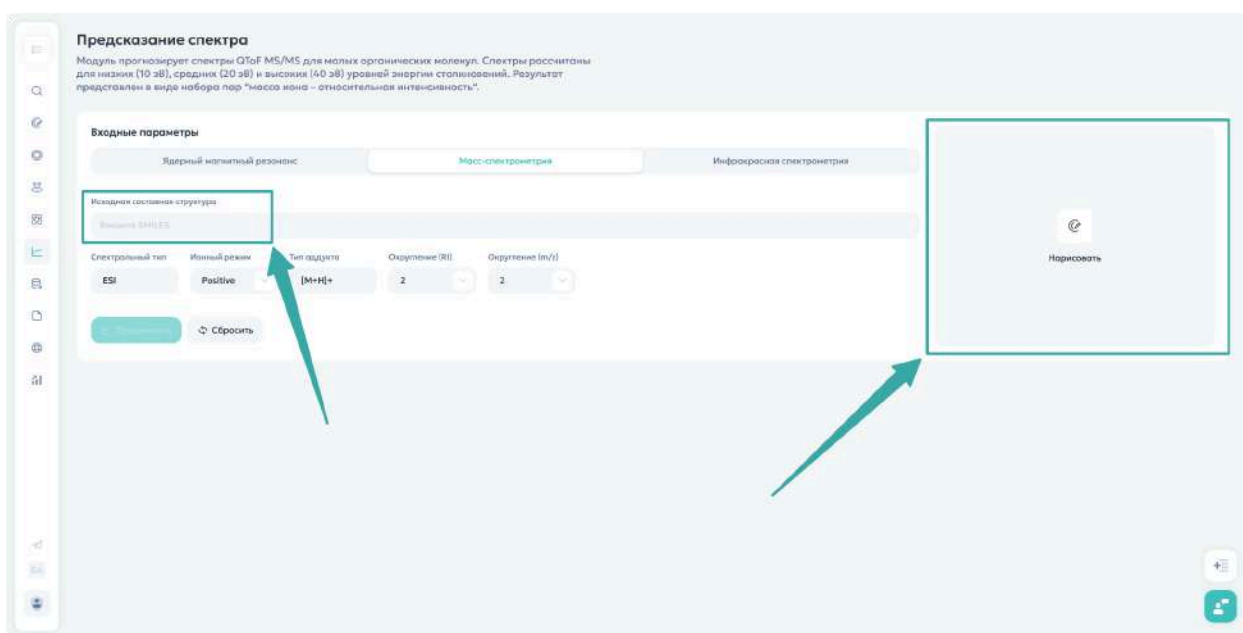
Доступны два способа:

1. Текстовый ввод:

- В поле «Исходная составная структура»
- Поддерживаются форматы InChI и SMILES

2. Графический ввод:

- Нажмите «Нарисовать молекулу»
- Используйте молекулярный редактор



Настройка параметров анализа

1. Спектральный тип

Определяет характер получаемой информации:

- Полный спектр
- Фрагментационный спектр

- Специализированные типы

2. Ионный режим

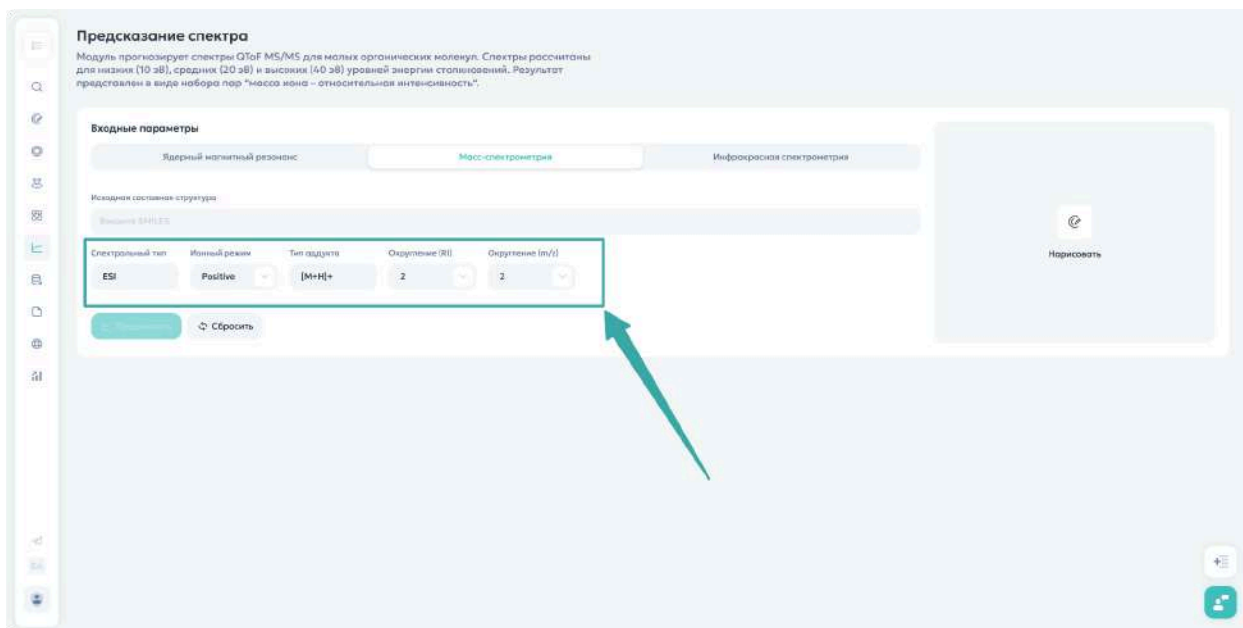
- **Positive** - для молекул, образующих катионы
- **Negative** - для молекул, образующих анионы

3. Тип аддукта

- Влияет на определение молекулярного веса
- Учитывает взаимодействие с:
 - Растворителями
 - Контрионами

4. Параметры округления

- **RI (Retention Index)**
 - Настройка индекса удерживания
 - Помогает в сравнении с известными стандартами
- **m/z (mass-to-charge ratio)**
 - Определяет точность массовых чисел
 - Важно для идентификации



Анализ результатов

Типы получаемых спектров

1. Изотопное распределение

- Показывает распределение изотопов в молекуле
- Критически важно для:
 - Точной идентификации
 - Определения элементного состава
 - Подтверждения структуры

2. Спектры фрагментации а) LE MS/MS (10V)

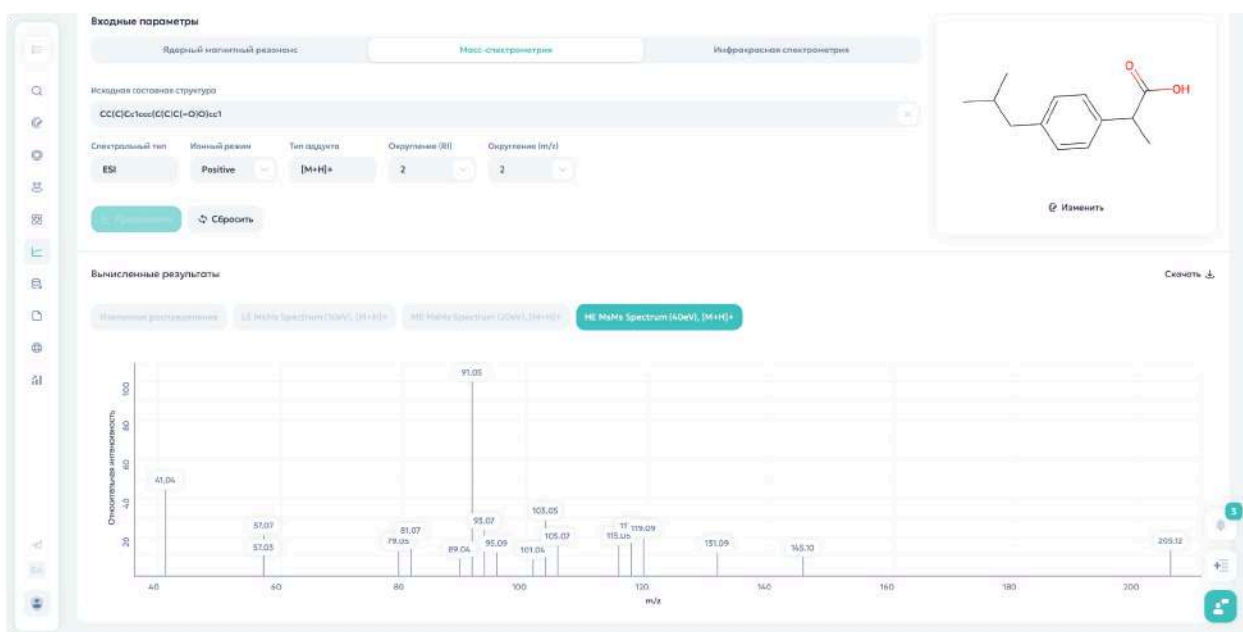
- Низкая энергия фрагментации
- Преимущественно молекулярный ион
- Минимальная фрагментация

3. б) ME MS/MS (20V)

- Средняя энергия фрагментации
- Умеренное расщепление
- Основные структурные фрагменты

4. в) HE MS/MS (40V)

- Высокая энергия фрагментации
- Интенсивное расщепление
- Детальная структурная информация



Управление анализом

💡 Подсказки:

- Используйте кнопку редактирования для изменения структуры
- Кнопка сброса очищает все параметры
- Сравнивайте спектры разных энергий для полной картины
- Обращайте внимание на характерные фрагменты

! **Важно:** Каждый уровень энергии предоставляет уникальную информацию о структуре молекулы. Для полного анализа рекомендуется рассматривать все три спектра в комплексе.

Инфракрасная спектроскопия

Начало работы

1. Откройте раздел «Спектры»
2. Выберите вкладку «Инфракрасная спектроскопия»

Ввод структуры

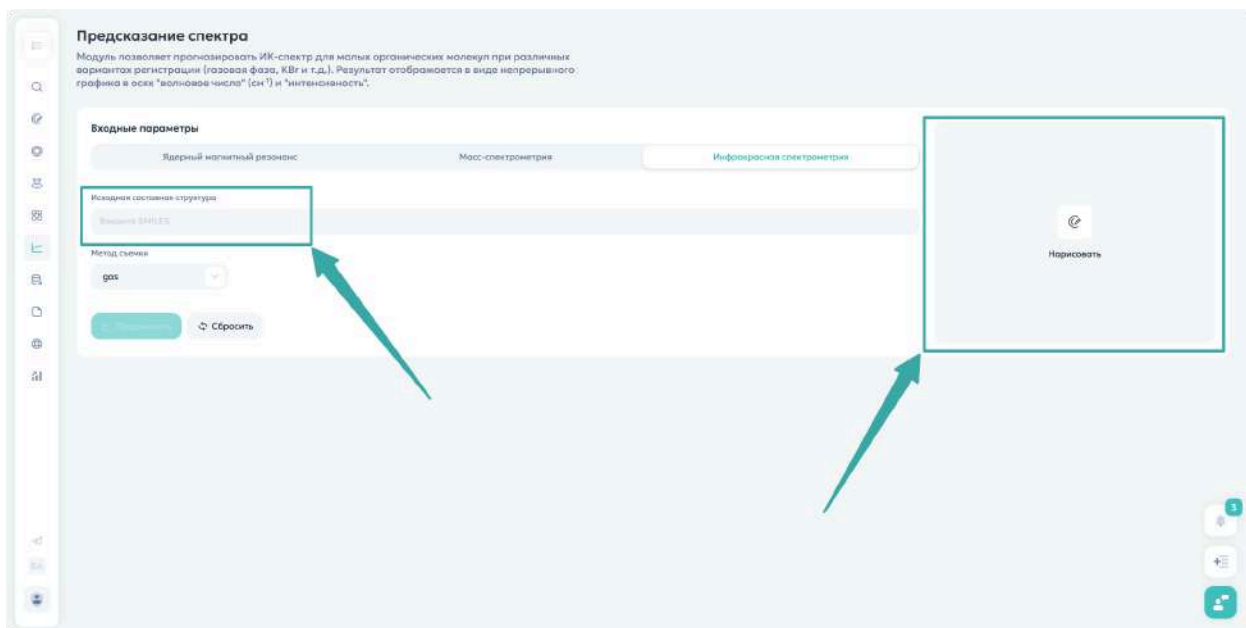
Доступно два способа:

1. Текстовый ввод в поле «Исходная составная структура»:

- Формат InChI
- Формат SMILES

2. Графический ввод:

- Нажмите «Нарисовать молекулу»
- Используйте молекулярный редактор



Методы регистрации спектров

1. Газовая фаза (gas)

Предназначена для анализа веществ в газообразном состоянии

- Преимущества:
 - Чистые спектральные линии
 - Минимальное перекрытие сигналов
- Применение:
 - Газообразные вещества
 - Соединения, испаряемые без разложения

2. Жидкая фаза (liquid)

Анализ веществ в жидком состоянии

- Подходит для:
 - Жидкостей при комнатной температуре

- Веществ с низкой температурой плавления
- Особенности:
 - Требуется специальных кювет
 - Учитывает межмолекулярные взаимодействия

3. Тетрахлорметан (CCl₄)

Анализ веществ в растворе CCl₄

- Преимущества:
 - Инертный растворитель
 - Широкое окно прозрачности
- Рекомендуется для:
 - Чувствительных соединений
 - Веществ, реагирующих с другими растворителями

4. Бромид калия (KBr)

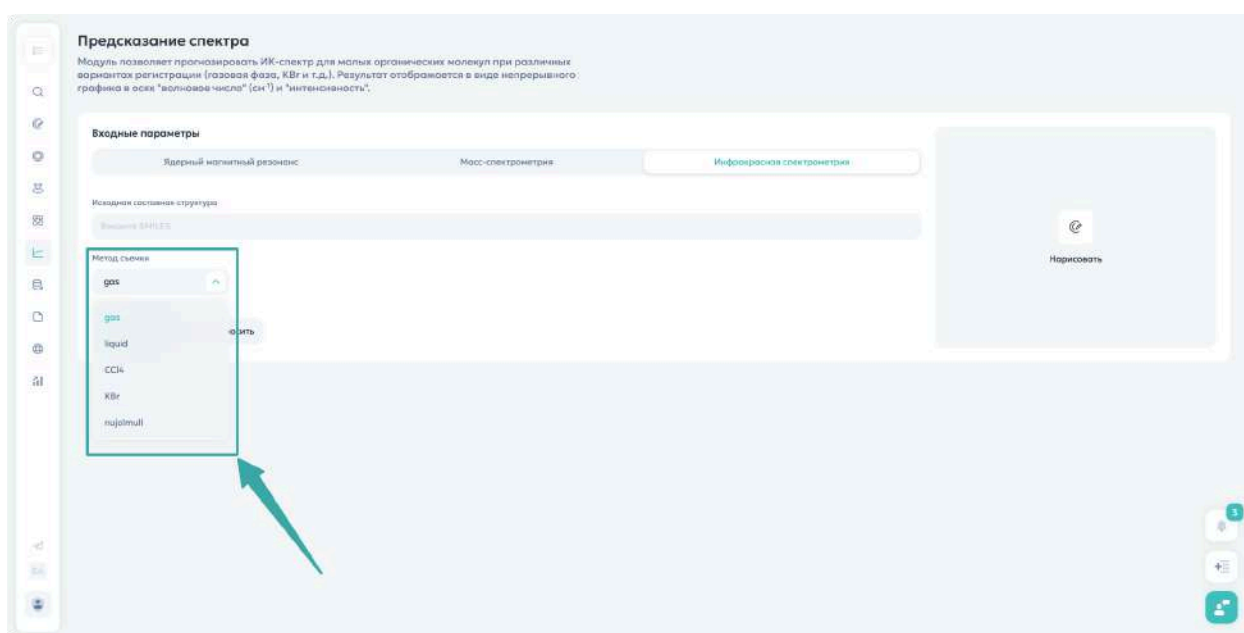
Метод прессования таблеток

- Применение:
 - Твердые вещества
 - Нерастворимые соединения
- Особенности:
 - Образец смешивается с KBr
 - Формируется прозрачная таблетка

5. Суспензия в вазелиновом масле (nujolmull)

Метод приготовления суспензий

- Подходит для:
 - Твердых веществ
 - Образцов, неподходящих для КВr
- Особенности:
 - Простота пробоподготовки
 - Защита чувствительных соединений




Получение результатов

1. Выберите подходящий метод съемки
2. Нажмите кнопку расчета
3. Получите:
 - Рассчитанный ИК-спектр
 - Нумерацию атомов в молекуле



 **Подсказки:**

- Используйте кнопку редактирования для изменения структуры
- Кнопка сброса очищает все параметры
- Сравнивайте спектры в разных условиях для полного анализа

 **Важно:** Выбор метода регистрации существенно влияет на вид получаемого спектра. Рекомендуется выбирать метод, наиболее

Раздел «Стоимость синтеза»

Введение

Данный раздел представляет собой мощный инструмент для прогнозирования стоимости синтетических соединений, учитывающий множество факторов, включая масштаб производства и сложность синтеза.

Подготовка расчета

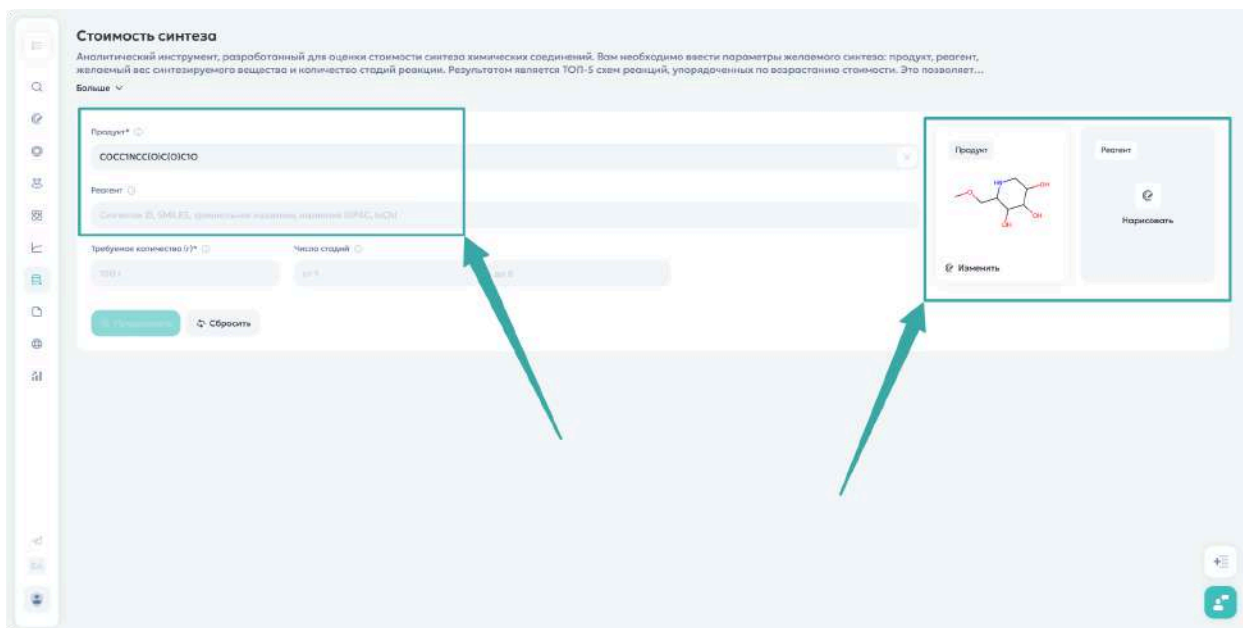
Ввод молекулярных структур

1. Целевой продукт:

- Откройте поле «Продукт»
- Введите структуру одним из способов:
 - InChI формат
 - SMILES нотация
 - Молекулярный редактор

2. Реагент (опционально):

- Используйте поле «Реагент»
- Поддерживаются те же форматы ввода



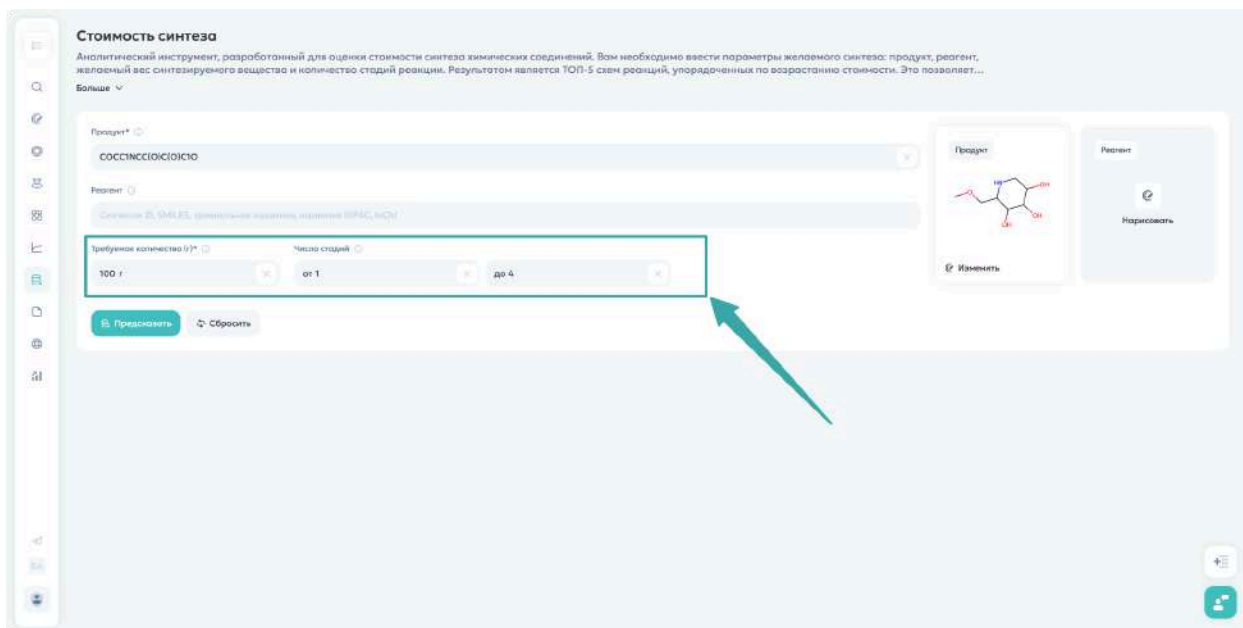
Параметры синтеза

1. Масштаб производства:

- Укажите желаемый вес в граммах
- Для промышленного синтеза рекомендуется от 100г

2. Сложность синтеза:

- Задайте диапазон количества стадий
- Максимум: 6 стадий
- Рекомендуемый первичный подход:
 - Минимум: 1 стадия
 - Максимум: 6 стадий



Анализ результатов

Представление данных

Система генерирует 5 альтернативных схем синтеза, каждая из которых включает:

- Пронумерованные структуры реагентов
- Промежуточные соединения
- Конечный продукт

Экономическая информация

Для каждого соединения предоставляется:

- Название вещества
- Расчетная стоимость (USD)
- Необходимое количество
- Информация о поставщиках

- Ссылки на источники цен

Стоимость синтеза
 Аналитический инструмент, разработанный для оценки стоимости синтеза химических соединений. Вам необходимо ввести параметры желаемого синтеза: продукт, реагент, желаемый вес синтезируемого вещества и количество стадий реакции. Результатом является ТОП-5 схем реакций, упорядоченных по возрастанию стоимости. Это позволяет...

Больше ▾

Продукт*

Реагент

Требуемое количество (г)*

Число стадий

Вычисленные результаты

Схема 1 | Схема 2 | Схема 3 | Схема 4 | Схема 5 Скачать все схемы ▾

История схем реакции > Всего 4 реагента


1 2 3

№	Название соединения	Стоимость	Количество	Источники	ID
Стадия 1 Выход: 100%					
1	OCc1ccc(O)cc1	3.58 \$	71.50 г	https://www.ambreed.com	A194236
Стадия 2 Выход: 100%					
2	CC(=O)O	0.31 \$	39.70 г	https://chem-ex.ru	8.06.07344
3	OCc1ccc(O)cc1	0.00 \$	synthesized earlier	1007 info@ambreed.com	
Стадия 3 Выход: 100%					
4	CC(=O)Nc1ccc(O)cc1	0.00 \$	90.30 г	synthesized earlier	1007 info@ambreed.com
Общая стоимость всех стадий:		3.89 \$			

Дополнительные возможности

Редактирование данных

- Доступно редактирование всех полей таблицы
- Возможность добавления новых стадий синтеза
- Автоматический пересчет общей стоимости

 **Важно:** Отредактированная таблица не сохраняется автоматически. Необходимо экспортировать данные для сохранения изменений.

Экспорт данных

Поддерживаемые форматы:

- PDF - для презентаций
- CSV - для анализа данных
- XLSX - для детальных расчетов

Практические рекомендации:

- Начинайте с широкого диапазона стадий для максимального охвата возможных путей синтеза
- Избегайте установки одинакового минимального и максимального числа стадий
- При проблемах с поиском путей синтеза для стереохимически сложных молекул попробуйте удалить стереохимию из SMILES
- Используйте функцию редактирования для оптимизации расчетов под конкретные условия производства

Вычисленные результаты

Схема 1 | Схема 2 | Схема 3 | Схема 4 | Схема 5

Источник схемы реакции >

1 2 3

Всего 4 реагента

№	Название соединения	Стоимость	Количество	Источник	ID
Стадия 1 Выход: 100%					
1	OCc1ccccc1	3.58 \$	71.50 r	https://www.ambreed.com	A194256
Стадия 2 Выход: 100%					
2	CC(=O)O	0.31 \$	39.70 r	https://chem-ex.ru	8.06.01164
3	Oc1ccccc1	0.00 \$	62.30 r	synthesized earlier	Нет информации
Стадия 3 Выход: 100%					
4	CC(=O)Oc1ccccc1	0.00 \$	90.10 r	synthesized earlier	Нет информации
Общая стоимость всех стадий:		3.89 \$			

Редактировать таблицу | Скачать схему 1

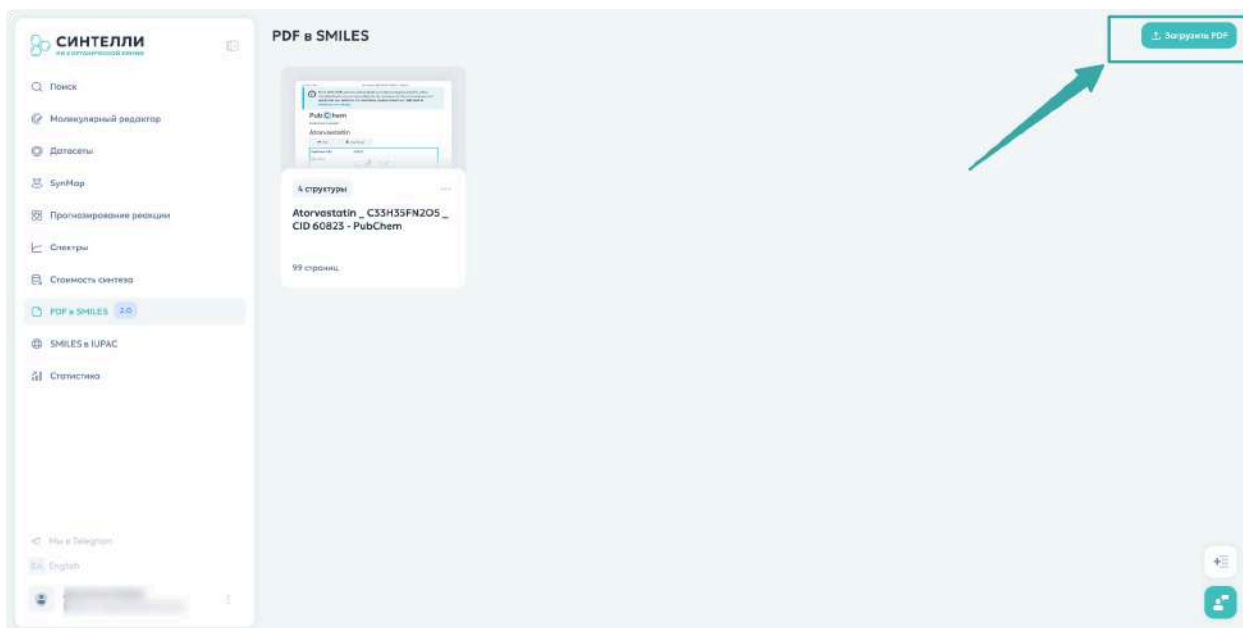
Раздел «PDF в SMILES»

Обзор

Данный раздел предоставляет мощный инструмент для автоматической обработки химической документации, способный извлекать и преобразовывать структурные формулы в машиночитаемый формат.

Возможности модуля

- Распознавание структурных формул из PDF-документов
- Обработка различных типов документации:
 - Патенты
 - Научные статьи
 - Протоколы испытаний
 - Диссертации
- Поддержка распознавания:
 - Стандартных химических структур
 - Структур Маркуша



Процесс работы

Загрузка документа

1. Нажмите кнопку загрузки документа
2. Выберите PDF-файл для обработки
3. Дождитесь завершения распознавания

⚠ Важно: Время обработки варьируется от 1 до 8 минут в зависимости от объема документа и количества структур

Работа с результатами

После завершения распознавания:

- Слева отображается исходный документ
- Справа показываются распознанные структуры

Управление структурами


Выделение структур:

- Одиночное выделение: клик левой кнопкой мыши
- Множественное выделение:
 - Ctrl + клик для отдельных структур
 - Shift + клик для диапазона структур

Действия с выделенными структурами:

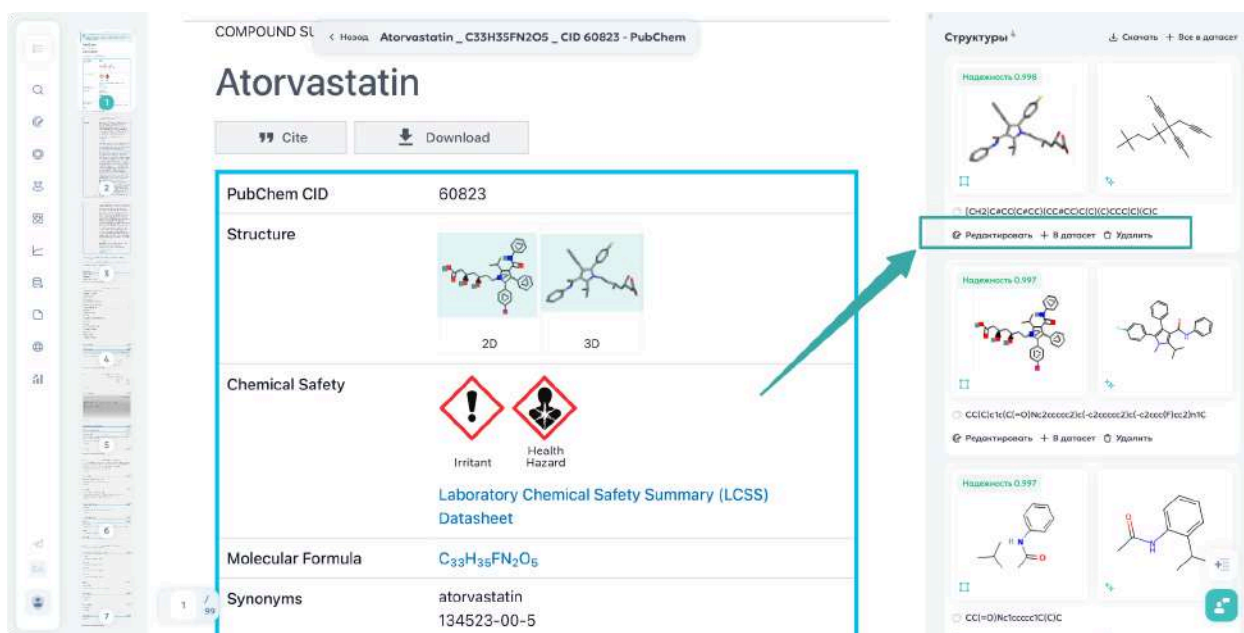
- Экспорт в файл
- Сохранение в датасет
- Редактирование в молекулярном редакторе

Корректировка результатов

 **Подсказка:** При обнаружении неточностей в распознавании структуры можно отредактировать в молекулярном редакторе

Процесс корректировки:

1. Выберите структуру
2. Нажмите кнопку редактирования
3. Внесите необходимые изменения
4. Сохраните исправленную версию



COMPOUND S₁ < Назад Atorvastatin_C33H35FN2O5_CID 60823 - PubChem

Atorvastatin

Cite Download

PubChem CID 60823

Structure

2D 3D

Chemical Safety

Irritant Health Hazard

Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet

Molecular Formula C₃₃H₃₅FN₂O₅

Synonyms atorvastatin 134523-00-5

Структуры

Надежность 0.998

Редактировать + В датасет Удалить

Надежность 0.997

Редактировать + В датасет Удалить

Надежность 0.997

Редактировать + В датасет Удалить

Рекомендации по использованию

- Убедитесь, что PDF имеет хорошее качество
- При работе с большими документами учитывайте время обработки
- Проверяйте критически важные структуры на точность распознавания

- Используйте множественное выделение для эффективной работы с группами структур

Раздел «SMILES в IUPAC»

Принцип работы

Этот раздел предоставляет автоматизированный инструмент конвертации химических структур из формата SMILES в систематическое наименование по номенклатуре IUPAC.

Процесс конвертации

1. Перейдите в раздел «SMILES в IUPAC» через левое меню
2. Введите SMILES-строку в поле ввода
3. Нажмите «Конвертировать»

Система анализирует структуру и предлагает пять возможных вариантов наименования IUPAC, каждый с указанием коэффициента достоверности прогноза.

Конвертер SMILES в IUPAC

Введите здесь молекулу в SMILES, например, C=CC1=O(N)CCCC1[NH]
(C1=NC2=C(N1)C=CC=C2N и нажмите enter.
Вы увидите 5 прогнозируемых результатов и указания на то, является ли имя правильным или нет.

сосстмссio(c)io(c)io

Модельные прогнозы

На русском На английском

- Score 0.198 2-(метоксиметил)пиперидин-3,4,5-триол
- Score 0.191 2-(метоксиметил)пиперидин-3,4,5-триолборбоновая кислота
- Score 0.188 2-(метоксиметил)пиперидин-3,4,5-триолсульфоновая кислота
- Score 0.159 2-(метоксиметил)пиперидин-3,4,5-триол
- Score 0.172 2-(метоксиметил)пиперидинтриол

Раздел «Статистика»

Обзор статистических метрик

В этом разделе представлена подробная информация о точности и надежности моделей, используемых в системе. Мы используем два основных типа метрик:

RMSE (Root Mean Square Error)

- Измеряет среднеквадратичную ошибку предсказаний
- Меньшие значения указывают на более точные прогнозы

Пример расчета для парацетамола

1. Прогноз Mouse Intraperitoneal LD50: 472 мг/кг
2. RMSE модели: 0.486
3. Расчет погрешности:
 - $10^{0.486} \approx 3.06$
 - Диапазон: $472/3.06$ до 472×3.06
 - Результат: 150-1500 мг/кг

Это позволяет надежно идентифицировать высокотоксичные соединения (менее 50 мг/кг).

ROC AUC (Receiver Operating Characteristic Area Under Curve)

- Измеряет качество бинарной классификации
- Значения:
 - 0.5: случайное угадывание
 - Ближе к 1: более точный прогноз

- 1.0: идеальная модель
- Учитывает как точность прогноза, так и уверенность модели

Статистика

Точность Биологические свойства Экологические свойства Физические свойства

Точность

Параметр	Средний показатель	Единицы измерения	Метрика	Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5
Раздражение глаз	0.98		ROC AUC	0.98	0.98	0.97	0.97	0.99
Мышь внутривенно LD50	0.41	Log10(мг/кг)	RMSE	0.42	0.41	0.41	0.42	0.42
Кошка внутривенно LD50	0.85	Log10(мг/кг)	RMSE	1.07	0.71	0.72	0.92	0.85
Эмбриотоксичность	0.88		ROC AUC	0.85	0.89	0.91	0.86	0.79
Мышь подкожно LD50	0.81	Log10(мг/кг)	RMSE	0.89	0.96	0.90	0.54	0.79
Гепатотоксичность	0.81		ROC AUC	0.80	0.82	0.81	0.80	0.82
Мышь внутривенно LDLo	0.43	Log10(ммоль/л)	RMSE	0.43	0.45	0.41	0.42	0.47
Крыса внутривенно LD50	0.85	Log10(мг/кг)	RMSE	0.81	0.89	0.84	0.84	0.89
Кардиотоксичность	0.93		ROC AUC	0.93	0.92	0.92	0.93	0.93
Крыса подкожно LD50	0.76	Log10(мг/кг)	RMSE	0.76	0.72	0.73	0.76	0.72
SR-p23	0.88		ROC AUC	0.77	0.95	0.83	0.92	0.93
Ароматизатор	0.88		ROC AUC	0.85	0.94	0.87	0.86	0.86
Морская свинка орально LD50	0.66	Log10(мг/кг)	RMSE	0.67	0.67	0.68	0.71	0.55
Ариловый углеводородный рецептор	0.87		ROC AUC	0.86	0.87	0.85	0.90	0.88
PPAR-gamma	0.81		ROC AUC	0.80	0.86	0.68	0.90	0.81
Крыса внутривенно LD50	0.62	Log10(мг/кг)	RMSE	0.66	0.61	0.61	0.61	0.60
Коричка внутривенно LDLo	0.75	Log10(ммоль/л)	RMSE	0.74	0.90	0.70	0.77	0.64
Рецептор эстрогена альфа	0.87		ROC AUC	0.90	0.87	0.89	0.85	0.82

Выбор языка

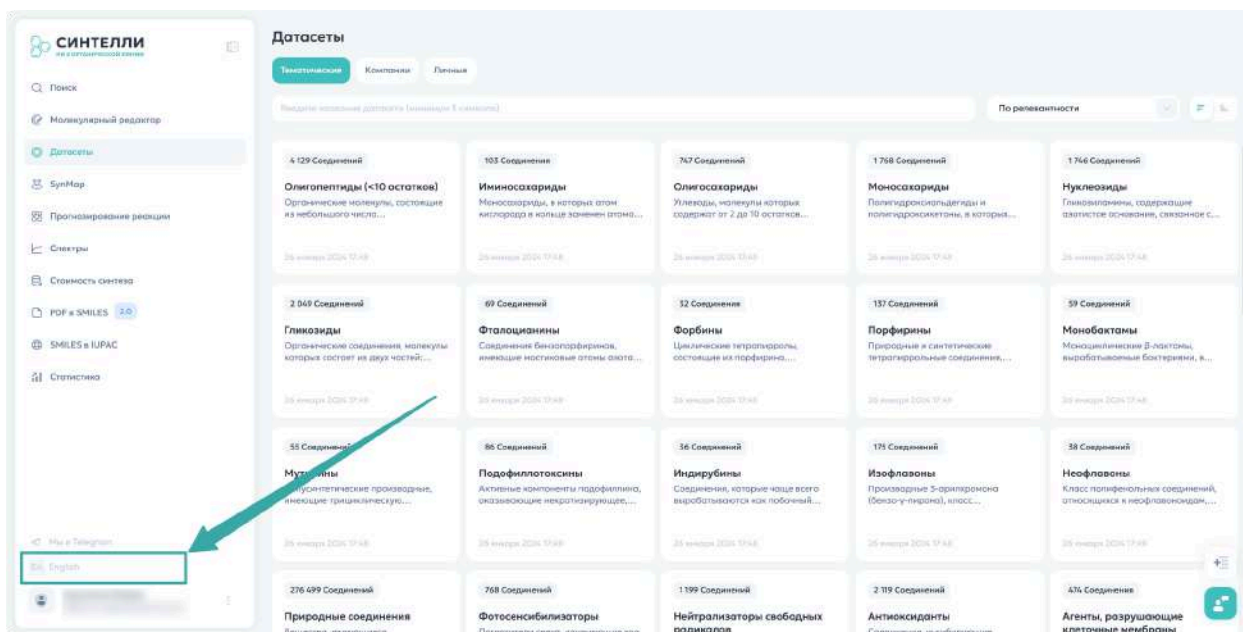
Настройка интерфейса

Система поддерживает два языка:

- Русский
- Английский

Для смены языка:

1. Нажмите на текущий язык в левом меню
2. Выберите желаемый язык из выпадающего списка



Нижнее меню управления профилем

Доступ к меню

Нажмите на кнопку рядом с именем пользователя для доступа к следующим функциям:

Разделы меню

- **О нас**
 - Переход на сайт syntelly.ru
 - Общая информация о системе
- **Мы в Telegram**
 - Канал: t.me/syntelly
 - Прямая связь с разработчиками
 - Техническая поддержка
- **Руководство пользователя**
 - Актуальная документация
 - Инструкции по работе
- **Профиль**
 - Редактирование личных данных:
 - Имя
 - Должность
 - Организация
 - Управление доступом:

- Смена пароля
- Выход из системы

