

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	
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	
Раздел «Предсказание реакции»	83
Обзор	83
Синтез	
Ретросинтез	
Раздел «Спектры»	
Введение	90
Доступные модули	90
Ядерно-магнитный резонанс (ЯМР)	91
Масс-спектрометрия	
Инфракрасная спектрометрия	
Раздел «Стоимость синтеза»	104
Введение	104

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

Регистрация в системе Синтелли

Шаг 1. Переход на сайт регистрации

Чтобы зарегистрироваться в системе, выполните следующие действия:

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

Добро пожаловать	
Введите, пожалуйста, ваш логин и пароль для входа	10:56 417 Q + @ ++
E-mail	
Вледите свой E-moll	A L' D'
Пароль	
Введите свой пароль	Alanin • Tax • Phys • Bio • Eco
	Литература > Реакции >
Забыли пароль?	
Boltra	
	Поиск
Нет аккаунта? Зарегистрироваться 🗦	Быстрый поиск релевантной и достоверной информации связанной с химией: структуры, литература, патенты, экспериментальные
	данные

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.

Почта и пароль		
Введите вашу почту и придум	иайте надежный пароль	
E-mail *		Планирование синтеза органических соединений
Введите email		Composits SMLES
Номер телефона *		Comp mic
+7		Chapters
Пароль *	Повторите пароль *	
Придунайте пароль	Повторите пароль	
Ключ продукта 🕕 🔵		
Регистрируясь, вы соглашаетес	ъс	
Условиями пользователься персональных данных	кого соглашения <mark>и</mark> политикой обработки	Предсказание реакции Прогнозирование возможных продуктов химических реакций и поиг реакций для синтеза искомой молекулы на основе нейросетевой
/ Hasan	К личным понным	модели

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.

Зведите вашу почту и приду	майте надежный пароль		
E-mail *			
		1	ment the last
			8 90a
1омер телефона *			a 1050
(ma)			4 044
+7			8 10.6
			1 10.4
Тароль * 🗸	Повторите параль *	. 6	4 444
5			a 10.4
	X Повторите пароль		a 40.5
слюч продукта			
Ключ лицензии *			
an an an an Anna an An			
Введите ключ лицензии			
Регистрируясь, вы соглашаетес	Cb C		-
Условиями пользователься	кого соглашения и политикой обработки	Прогнозирование спектро	3
персональных данных		Прогнозирование спектров: тандемная масс-спе	ктрометрия (QToF
		MS/MS), инфракрасная спектроскопия и ядер	ный магнитный
< Назад	К личным данным >	резонанс по ядрам 1H, 13C, 15N, 1	9F

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.

Пичные данные		(man a state of the state of th
Зведите воши личные р	данные, компанию и должность	ID: 56 417
1мя *	Фамилия *	
Ваше имя	Ваша фамилия	P F Q
Компания *		0
Ваша компания		Alanin
		• Tox • Phys • Bio • Eco
Цолжность *		Литература У Реакции У
Ваша должность		
< Назад	Заполнить анкету >	
		Поиск
		Быстрый поиск релевантной и достоверной информации связанно с химией: структуры, литература, патенты, экспериментальные данные

Подтверждение заявки

- Обрабатывается в будние дни с 10:00 до 19:00 (МСК).
- Если заявка оставлена в рабочее время, активация займет до З 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.

Добро пожаловать в Синтелли

Активировать аккаунт

Здравствуйте,

Мы рады видеть вас в числе пользователей платформы Синтелли.

Полезные ссылки:

— Руководство пользователя в текстовом формате для начала работы с платформой

— Запись вебинара и видеотуториалы, которые помогут вам быстро разобраться как работать с платформой

— Telegram канал, тут мы рассказываем о важных обновлениях и технических работах

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 <u>https://app.syntelly.com</u>.
- 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.

введите, пожалуиста, ваш логин и пароль для входа	🔟 4 🗔 O 帐
E-mail	and the second se
	prina in its
Пароль	
••••••	×
Забыли пароль?	
Войти	
	SynMap 2D/3D
Нет аккаунта? Зарегистрироваться >	Навигация в химическом пространстве. Анализ кластеров биоактивных соединений. Генерация новых соединений с заданные
② English	свойствами
English	своиствами
D СИНТЕЛЛИ 2018-2025	

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.

	Фильтр (Соеренуть	По структурам По реакциям. По питературе	
	Тип соответствия	(Нариссвать или воести Синтелли ID, SPALES, тривиальное нозвания, название IUPAC, CAS комер, InChi	Найти
Q	Подструктурный понск		
0	Похожие структуры		
0	Структуры Маркуша		
g			
88			
Ľ			
8			
D			
0			
ŝł		История поиско Вашо история запросов по структурач, реакция и литеротуре	
		Понатрель	
140			+ 20
3	Очистить Применить		

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.

Сброс пароля	
Введите свой email, на который был зарегистрирован ваш аккаунт	
Введите свой E-moll	Планирование синтеза органических соединений Сентя Реприсения
Восслановить пороть	Composition SHLES the opposition retrieves the opposition of the o
	COpperns
	Предсказание реакции
Err outonur? Prime >	Прогнозирование возможных продуктов химических реакций и поих реакций для синтеза искомой молекулы на основе нейросетевой
() English	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:
 - о Нажмите кнопку «Нарисовать»
 - В открывшемся редакторе нарисуйте молекулу
 - Нажмите «Найти» или клавишу Enter

СИНТЕЛЛИ	Молекулярный редактор	
Rowen	Concentration, reproductions of second constraints of 1994C, InChi	S Descris 246LES
Молекулярный редактор	0000,0×1~~100	\$ <u>*</u> 100%~
Датосеты	ð	
SynMap		
Прагназирование реакции	ð	
Слектры	4	
Стонность синтеза		
PDF & SHILES 20	A ⁺	
	Ā	
SMILES & IGPAC	[3]	8
Статистико	+e1	
		2
	÷	2
	4	E
	0° =	
	F	
	0000000	

Гримечание: 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
 - InChl
 - Синонимы
 - Название по номенклатуре IUPAC
 - Синтелли ID
 - CAS-номер
 - Кодовые обозначения из других баз данных

о 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 фингерпринтов 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.

	Фильтр (Свернуть	По структурон По реокцием По литеротуре	
	Тип соотвитствия	C Hapircours Paracetamol	Paint
Q	Тачное совпадение Полоточнотивний понум		
8	Похожне структуры		
0	Структуры Моркушо	С Похожие резулятиты Нойдено 2 структуры	-
B		p 15827950	
88			
2		8	
民		L JOH	
C		H.	
-			
-		****	
64		Paracetamol	
		Concellent March 1990/001 5. Concernance 5	
1			(B)
			10 C
ψ	Очистить Применить		

Информация в карточке молекулы

Каждая карточка содержит:

- 1. Основные данные:
 - о ID молекулы в базе Синтелли
 - Структурная формула

2. Параметры безопасности:

- о Токсичность («Тох»)
- о Физико-химические свойства («Phys»)
- Биологические свойства («Віо»)

• Экологические свойства («Есо»)

3. Цветовая индикация:

- 🔴 Красный высокие показатели опасности
- Эеленый низкие показатели опасности
- 🔴 Желтый средние показатели опасности
- Серый свойства не рассчитаны

4. Дополнительные ссылки:

- о «Литература» документы с упоминанием соединения
- о «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)

Proceedings Peroaction Registry Peroaction Registry Peroaction Composition Statistics Reprocertion MQL Procention Prod Arreprupe (85527) Peroaction Arreprupe (85527) Peroaction		states are presented in the second		
Reasonance crypyrypue CP (Reasonance pergypergravation Heiniganen 2 Crypyrypue C (Reasonance pergypergravation Heiniganen 2 Crypyrypue D (SSS2057) Convergeourse Conve		Точное ссаладение Подстауктурный поиск	C Hapincoultre Poracetarnol	
Crppertype Mapeyua Crppertype Mapeyua Crppertype Mapeyua Crppertype Mapeyua Distribution Crppertype Mapeyua Distribution Crppertype Mapeyua Distribution Cropepoatris Contractioner Distribution Distribution Cropepoatris Contractioner Distribution Distribution Cropepoatris Contractioner Distribution Distribution Cropepoatris Contractioner Distribution Distribution Cropepoatris Contractioner Contractione		Покание структуры		E 1
D. 155825950 Catringood75 Chirtratian ID Catringood75 SMILE5 Lipervectria :) Lobostria espainemine Catringood75 cChirtratian Dotostria espainemine Catringood75 cChirtratian Dotostria espainemine Catringood75 cChirtratian Dotostria espainemine Catringood75 cChirtratian Dotostria espainemine Procectamol PPid		Структуры Маркуша	Ф Похоние результаты Найдана 2 структури	
Силтероного Синтероного Синтероного Синтероного Синтероного Синтероного Синтероного SMILES Систероного SMILES Реренности в) Доболить в сроинение Систероного сонту Систероного сонту Питерогора (85527) Ревниция > Титерогора (85527) Ревниция >			ID: 155823950	
Composition SMILES Fepereor N = > Account a sequencies Composition SMILES Pereor N = > Account a sequencies Composition SMILES Pereor N = > Account a sequencies Composition SMILES Pereor N = > Account a sequencies MOS. Prod Prod Account a sequencies Prod Account a sequencies Prod			Снотировоть Синтелли Ю	
Image: State of the state o			Circrimposith SMILES	
Apeloants & cpowneiwe Cweningoeons cowing MDL Poracetamol Pirig Autopartia (25527) > Presidues >			ОН Перенестия >	
Cikiningpeens coliving MDL Paracetamol PNG Jurepariyaa (85527) > Peesuus >			Добовить в сровнение	
MDL Paracetamol Inheparyon (85527) > Peckuan >			Сколировать ссылку	
Paracetamol PNG Jumeparyon (85527) > Peakuus >	83		MOL	
Литература (85527)) Рекним >	E.		Poracetamol	
			Литература (85527)) Реакции >	

Просмотр подробной информации

Быстрый просмотр:

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

 Быстрый просмотр молекулы На отдельной странице > Дабавить в сравжение 🗉 🛙 датася	er + Ссылка в Скачать у	*	
Перенести в 2	Структурные дожные Синятили ID. Навалини ID. Калини ID. САБ ножер SMLES InChi II. II. II. II. II. II. II. III. III.	155823950 N-(4-11400000-000000000000000000000000000	
	Сановляна Биологическая активность		
Burnenword (855271) Benevius)	Физико-жинческие свойство		
	Тоясичность		
	Экологические свойства		
	Оценица спожности синтеза		

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

	Страница молекулы	Добавить в сравнение 🗉 В датасет 🕂 Ссылка 🔗 Скачать 🕁	Структурные донные
 Данск Малекулярный редоктор Далесены Залесены Бропксанрование резкции Пропксанрование резкции Спактры 	Перечески в С	Crpyerrypeace goeware Image: Community of the commu	Синонини Билополическая активности Фазино элинические скойство Тексонности Экополическая базбетка Оценко сложности синтево Сказаство с покостраниция препоратания
은 Crownees annes 이 POF = SMILES 30 한 SMILES = IUPAC 위 Crownerma		Monesymposis sec 133365 Constants Escontrivercial activation of the	Знашно 5Д
		Физико-жинические свойство	
	Литеротура (85527) > Реакции >	Такончность -	
<2 Place Entropyment		Оцинке слажности синтеза	
		Сходство с лекарственными препаротами	

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:

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

страница молекулы		Дабазить в сравнение 🗉 8 датасет 🕂 Ссылка 🖉 Скачать 👃	CibberMoren Worner
Перенести в [2]	CTIVATIVITIES ADDITION		Саноналы
			Биологическая активность
	Caerrenne ID	15:823950	Физико жинические свойство
	Hubbone to IUPAC	N-14-пидроксифенил]оцетомид	Такелиность
	САЗ монер	cos-103-90-2 (), 103-90-2 ()	Экологические гвойство
	SMILES		Оценко сложности синтеза
1001	InChi InChi=	S/C8H9NO2/C1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,J0)	
	Inclutiones	RZVAJINKI MORJE-UHEEFAOYSA-N	store in a manufacture mean interruption
	Бругте-формула	C ₄ H ₉ NO ₂	Bisturie 60,
	Молекулярный вес	151365	
N	Chestoneseta		
H	1.3 M REPORT FOR THE REPORT OF		
	Contraction of the second s		
	вислогическая активность		
	Физико-химические свойство		
	Токсичность		
Литература (85527) > Реакции >			
	Экологические свойство		
	Оценна стоиности синтеза		

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 (°С)
- 4. Температура вспышки (°С)
- 5. Плотность
- 6. Вязкость
- 7. Температура плавления (°С)
- 8. Растворимость в ДМСО (качественный прогноз)

9. Время удерживания в стандартной хроматографической системе

10. Индекс преломления



Биологическая активность

Ингибирование цитохромов

Доступны модели для расчёта эффективности ингибирования пяти цитохромов:

- CYP1A2
- CYP2C19
- CYP2C9
- CYP2D6
- CYP3A4



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



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 LDLо
- 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)



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

Страница молекулы	Добамть в сравне	яне 🗟 Вдатасет 🕂 Ссылка 🖉 Скачать 🛓 Структурные данные	
Перенести в [2	Физика-химические свойство	Слиснитие Биологическоя ектиеность	
	Тонсичность	- Физико хининоские свейство	
	Все Модели летольной дозы Модели общей токон	ности	
	Репродуктивнов токончность		
0	Гелатотоксичность	Техіс Сходство с лекарственными пр	enoperos
	OH	Nortoxic 486 Bistument 50	
	Tecr Bilson	Nontoxic (XC	
N	Раздранение лан	Nontoxic CRP	
H	Энбриатексичность	• 🗙	
	Кордиотокончность	Nontoxic EXP	
	Корровня таз	Nontoxic (11)	
	Канцерогенность	Nontoxic IXP	
	Экололические свойство	-	
Литература (85527) > Реакции >	Оценка сложности синтеза		
	Скодство с лекарственными препоратами		

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	Добами	ь в сравнение 🗟 В датасет 🕂 Ссылка 🖉 Скачать 🛓 Структурные донные	
Перенести в 🖒	Структурные донные	Сличнице Биологическая активность	
	Синистична	Физико клиниески свейство Текстиность	ē.
	Биополическая активность	Воллогические свойство Оценко сложности синтеза	
?	Физико-химические свойства	Схорство с лекарственными т Влешине БД	ipenoparas
	-ОН Таксиченасть		
	Экопотические свойство		
	Бисконцентрациснный фактор 60 изгоред Техторитеро полбогова	33400 [/kg	
	IGC50	0.00661 mmo/1	
	Telephrite Magna LC50	5.382 mmol/1 [200	
Литература (85527) > Реакции >	Остроя такончность для водной 💿 предм	Non-toxic: LCSO > 100 mg/l (fish)	
	Оценна слокности синтеза		
	Скодство с лекарственными препаратами		

Оценка сложности синтеза

Включает две основные метрики:

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

страница молекулы	Добамть в сравнение 🕫	Вдотосет + Ссылка P Скочать 4 Структурные донные Спорядует
Перенести в 🖸	Структурные данные	Биологическое ектиеность
	Синсьенны	Физико-хининована свойство Такелиность
	Бикологическая активность	Змолотические гиойство Оценно сложности свотеми
9	Физико-хиномеские свойства	Сходство с лекарственными препарат Вледание БД
	ОН Таксичность	
H -	Экологические свойство	
	Оценка соожности синтеза	181
	Complexity (SCScore) ()	1.47
	SYEA 🔘	48
Литература (85527) > Реакции >	Схадство с лекарственными препаратами	10.0
	Внешние БД	

Сходство с лекарственными препаратами

Включает следующие правила и фильтры:

- 1. **Правила Липински** (1999) оценка биодоступности при пероральном введении
- 2. Фильтр Гозе (1999) соответствие параметрам известных лекарств
- 3. **Правило Опреа** (1999) разграничение лекарственных и нелекарственных молекул
- 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



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	Добозить в сровнени	е 🗟 Відотасет + Ссылка 🖉 Скачать 🛓 Структурные донные	
Перенести в 🕑	Структурные донные	Слизначение Бикологическое витикичесть	
	Сенциализа	Физико жининоские свойство Таксичность	ě.
	Биологическан активность	Экологические гвойство Оценко сложчасти свотеза	
9	Физико-химические свойства	Сходство с лекарственными т	tpenaparas
	ОН Тексочають		
H -	Экологические свойство		
	Оценка сориности синтеза		
	Скедство с лекарственными препаратами		
	Внешние БД	-	
Литература (85527) > Реакции >	EindingDB	26197 🕑	
	ChEMBL	CHEMBL112	
	DSSTOX	DTXSID2020006 (2	
	SureChEMBL	SCHEMBL3480 [2]	

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"



Возможности

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



Управление данными

- Удаление: нажмите "×" 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.



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
- САЅ-номер
- Кодовые обозначения из других баз

	Фильтр Свернуть	По структуром По режизани По литеротуре
	Рользещество	C Honstooth July Avera Conterna D. 20125 managing entering strategies (DAC 23) space (ICM)
Q	Реактант	
e	Прадукт	
	Выход	
Ŭ	aro - ins106	
R		
88		
k		
8		
	/	
0		
0		
ál		История поиска
		реакциян и литературе ваши история запросой по структурам.
		and the second se
		Transformer
(a)		
	Duscrary Downsors	

- 2. Через молекулярный редактор
 - 1. Нажмите «Нарисовать»
 - 2. В открывшемся окне нарисуйте молекулу
 - 3. Нажмите «Сохранить»

	Фильтр (Свернуть	По структуром По реклиции: По литературе
0	Роль вещество	C Hopmowers and America Constantial D, SHUES, Typesenantistry regulatione, youngplace (UPAC, CAS represe, IsCh)
	Предунт	
e	Выход	
0	ar 0 1	
8		
88		
k		
8		
0		
0		
61		История поиска
		Ваша история запросов по струнтурам, реакциям и литературе
		Пометрить
-41		
		•
	Очистить Применить	E Contraction of the Contraction

Параметры поиска

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

1. Тип соответствия

- Поиск точных совпадений
- Подструктурный поиск

2. Роль вещества

- о Продукт
- Реактант

3. Выход, %

о Фильтрация по проценту выхода продукта

	Фильтр Свернут	По структуром По рескциям По литературе	
~	Pons selaporte	C Hopercours	Holim
a	Продукт		
e	Выход		
0	140 - Jas 106		
8			
88			
ĸ			
6			
0			
0			
4I		История поиска	
		реакциям и литературе	
		Посмотрить	
-8			
			+
	Durante Development		

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

Результаты поиска

	Фильтр (Свернуть	Па структурам По равкими По литературе	
	Роль вещиство	@ Hapaceans Indole	Нойти
Q	Продикт		
Q	lance	Personal trend	
0		Peukuns 1 Conces	
E.	• •	(b-155785592 ub-155784737	
88			
ter.			
-			
8			
		Способ1 Виход: неизенство Ресурси	
1			
40		леловии роскции: Тингеротура: Нет ниформации рИ, Нет информации	
		Длялонние так информация Оброудовсяние так информациия Патализастир, Нес информациия Аликофорациия	
		Armit: 4-(chlocomethylipyridine I2 Eage 6.) Honyvenve: Het andpointume	
		Aniregozype: Net indeplemente Destavati econumi it	
1			
En.		Реакция 2 1способ	
٠	Очистить Применить	ID: 17583710 ID: 16989786 07: 155764737	
		P Q A	
		Способ 1 Викер неизвестно Ресурси	
		Условив реакции:	
		Тамитратура: Нат инфармации рР1 Нат онфармации Данловии: Нат инфармации Оборудокоми: Нат информации	
		Katalansaragi Her engagenaan Areodepa: fin engagenaan	
		Растиритель: Нат инфармация Растиритель: Нат инфармация Врами: Нат инфармация	
		Литература: Нат информации	
		Пратаная реводна 3	

Просмотр подробной информации

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

Способ 1			
ID 155647871	ID 155784327 ID 19989900	100	
well-stirred solution of 25.4 g iodine and 50 y room temperature. The clear solution is conc solid which separates is filtered off, dried an indole hydriodide of the formula ##\$PC9##	potassium iodide in 100 ml water. The mixture is stirred for 2 entrated in vacue to one third of the original volume and coo f recrystallised from alcohol-ether to give 3-(2-imidazolin-2-y	hours at led. The ithio)-	
Эсловия реакции Температура: Илт информации	pH: Her emposences		
Kommunanter: Her undogennung	Альнаоферан Нег инфармации Излучания: Нат инфармации		

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»

Фильтр	(Свернуть	По структурам По реакция По потеротуре		
+ Добанить услови		@ Hammers 40 CC(=O)NeTece(O)ect	H	
Титідокунента		Паралининности		
Патент		Hallooso arteraamoo 100000+		
Ятын Русский Английосий		Methods of treating pediatric patients using dexmedetomidine Hence narrens: US-200306/07-41 () The presently discosed subject matter relates to methods of administering on effective anount of desmedetomidine to a pediatric patient in order to reduce the incidence of neurological damage. Kore particularly, the presently discosed subject matter relates to methods of poviding vedation or analgesis to a pediatric patient by administering a desmedetomidine inhuina and spteraily a loading doks. The desmedetomidine	3	
		Антуры: WISEMANDLE WAYNE, STALKTR DENNIS JANETE, GARCIA DA ROCIA MAACELO, NOO EDWARD Влединые: WISEMANDLE WAYNE, GARCIA DA ROCHA MARCELO, HODPIRA INC, STALKER DENNIS JAMES, KOO EDWARD 1804-2013 На отдельной странице > Структуры (44) >		
		Solid drug tablets for implantable drug delivery devices Hewep nations: US 2017290764-81		
		A drug closge form is provided in the form of a policit tablet reflect is present than 30% by weight the lineal methodic agent. The local methodic agent may be deleted form the group conditions of an aminomide, an anninequence and a combination thereof. The days tablet news is in the form of a methodic adeletic there is the solution set of the days of the boloco basies agent may be deleted to the solution and the form of a methodic adeletic term of the solution and the boloco basies agent agent be addressed and a solution the form of a policy and many bolacity days and the bolaco basies agent may be deleted with the solution and the bolaco basies agent agent be addressed and agent may be deleted and agent may be deleted and the bolaco basies agent agent agent be addressed agent may be deleted and agent may be deleted agent may be deleted and agent may be deleted and agent may be deleted agent may be deleted and agent agent be based and agent a		
		На отдельной странице > Структуры (115) > Разлиции >		
		Combination therapy of a cell based therapy and a microglia imhibitor		
Очистить	Применить	Howep nameno: US-2019/29/264-AI 🗆		

Варианты поиска

1. Поиск по структуре

- Введите идентификатор молекулы в поисковую строку:
 - SMILES
 - \circ IUPAC
 - \circ CAS homep
- 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
 - \circ DOI
 - Номер патента
 - Журнал
 - Издатель
 - Владелец (патента)
 - Заявитель
 - о Полный текст
 - о 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
 - о Патент
- Язык
 - Русский
 - Английский

• Год публикации

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

обавление условия к запросу			-
rop	Политически с Удолити условие		
Transport of dani			
W How			
		NUMBER OF THE OWNER	
аделец	Полонить — 🗇 Удолить условие		
Ліноциенне условий			
in and			
лный текст	🖸 Удалить условие		
		-	
+ Добовить условие			
		and the second se	
		and the second se	
Chargen	Transformation (

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.

СИНТЕЛЛИ		
О, Понск	Committee IX, reproductioned independent, estationale (or No., Ince)	E INCLUSION D
Развидулирный редактор	D & D D D X ~ ~ %	● ^{★★} / _★ 100%~
О Датесеты		н
B SynMap		c
Протнозирование реакции	•	N
Стептры	4.	0
B Crowners courses		
		P
POP & SMILES	Ä	CI
SMILES & IUPAC	[3]	Br
il Статистика	-RE	1
	+	51
	÷.	24
	+,	ET
	c'	
	Т	
C. Marie Telesphere	★	
in English	000000	

Способы ввода молекул

- 1. Через поисковую строку
 - Введите один из идентификаторов:
 - Название бренда
 - о Название IUPAC
 - Код поставщика
 - \circ CAS homep
 - 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 (×)

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"



Экспорт данных

Нажмите «Скачать» для сохранения структуры:

- PDF формат
- РNG формат
- МОL формат

Навигация

• Для возврата в редактор используйте кнопку в левом верхнем углу страницы "К результатам"



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:
 - о «Тематические»
 - о «Компании»
 - о «Личные»



Создание датасета

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

Arrest .	
Создание датасета За прумпе или создай п фойт, после чего дойте вну название и описание. • с обязативние пое	
Sarganis éalar Ciagani nycróli darson	
Hossawe garacero	
Описоние	
	0

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

Coggative garacera Urgapers was coggatire doils, nocce vero gatire exy roassowe is concession; Sorgative garacera Sorgative garacera Sorgative garacera Sorgative garacera Sorgative garacera Sorgative exerce quad doils is dopevore 307, CDV, SMI Sorgative exerce quad doils is dopevore 307, CDV, SMI	
Cogganie garacera * Droganie mini coggine doui, noces vero gaine doui necesies. * *-obsciriumen non * Bargysen- doui Cougens- nycrok garacera Cougens- nycrok garacera * Bargysen- doui Cougens- nycrok garacera Bargysen- box * Bargysen- box * <	
Cospanne garacero Bryparte Min cospañte galar, nocre vero galine eny nezacione a concense. *- descritemente com Sorpparte Mont Cospanne galine eny nezacione a concense. *- descritemente com Sorpparte Mont Sorpparte Mont Sorpparte Mont Cospanne Galine environ Sorpparte Mont Cospanne Galine environ Sorpparte Mont Cospanne Sorpparte Mont Cospanne Sorpparte Mont Cospanne	
Cozgotivie goracera Image: Cozgotivie goracera Sorgusiris www.cozgotirie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Cozgotivie golin, nocze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wzasowe w omicawie. Image: Coze vero goline ewy wza	
Coaganine garacera M Dorganine doaln, nocce-wro galine eky vasasiwe e ir discoves.	
Создания дотодства Дотрудате ими создание фой, после чего дойте ену название и списание. *-обхадательное поле Затрумить фойт Создеть пустой дотвоет Затрумить ими перетоците сода фой в формоте SDF, CSV, SMI Д. Вотружить	
Заруулять фойл Соцарть пустой дотясят Зарууляте ини перетоците сода фойл в формоте 30/, СЗУ, ЗМІ 🖈 Заруулять	
Загрупате мех перетощите соди фойл в формоте 3D/, CSV, SMI 🕹 Загрузить.	
Загруляте имя перетощите скард фойл в формоте 307, С3У, SMI 🏦 Загрузить	
Contractment	

Добавление молекул в датасет

Начало добавления

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

Методы загрузки

- 1. SMILES
 - о Выберите опцию «SMILES»
 - Введите SMILES в поле

2. Молекулярный редактор

- Выберите «Молекулярный редактор»
- Нарисуйте структуру
- 3. Загрузка из файла

- Выберите «Загрузить из файла»
- о 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

	Танатонаская Контон	na Derman			+ 0		
а понск	Respected to the particular				По дате са	адания	
Иолинулирный редактор							
2 Daracetu	O Cosperand	1Сокранения	 24 Совцинития	21 Совдинение		223 Сонденными	
SynMap	Токсаны	Подделать		and the second second		(Constraint)	
Прогназиравание реакции		Радинтербацть					
Снектры		Construction and a second particular					
Стокность синтеза		- Tablerie					
POF & SMILES 20	4 Соединения	37 Соединений	3 Среденение	9 Соединений	100	4 Создинение	
SMILES . IUPAC		1000	the second second	and the second s		and the second s	
Статистика							
	3 generation 2020 (0.29)					21 per vipe 1834 1828	
	1 Соедниение	18 Соеданияний	83 Coegonenne				
	-	-					
7. Mare Telegram		23 microlips 2204-07.59	10 werne 2004 10:53				
Englan							
- Анастасия Ляхова							

Редактирование датасета

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

3. Измените название и/или описание

A CANTERNA (dereses.			
	terms .			
		Редактирование названия сета		
		Roadowe pordeero		
		Описания		
		This is a personal dataset		
		Companients		
				-
· ····				0

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

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

История изменений датасета	
 Antraser ve pocceare • Dotasets Trifs is a personal dutavet Kanneectea cappergal 3	
Дата сладения: 04 февроля 2025 года 16:49 Вся <mark>Дебовления</mark> Залатира Отланания Талатира Изменено Дебовления структури Количества дебовления структур: 1	
Дата изнанитися: Об февраля 2025 года 17:00 Добавлении структуры Количества дабавленных структуря: 1 Дата изненения: Об февраля 2025 года 16:50	
Дабеелени страктурии Коликастра орболениных структур: 1 Дато измолении: 04 февраля 2025 года 16:49	
Перенести дотокит Расснитоть дотоки	
	_

Удаление датасета

Два способа удаления:

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

О СИНТЕЛЛИ	Датасеты	
С. Понск	Тиметичискани Компении	+ 0 0 8 7 8 2 4
🖉 Молекулярный редактар	Backgotte immessure généreses (annuinque l'exteriore)	По регоздония
O Renocerta	3 Energanstruit	
📇 SynMap	Dataset Снять виделение	
🕅 Прогнамираеание реакции	This is a personal dotaset Peggarapolicity	
Спектры	История изненений датосята	
🖯 Стоямость синтева	Уданить	
G SMILES IN IUPAC		
а] Сталястика		
< the entringener		
En Englan		1
Анастасия Ляхова Іюкраура, чіпарекетраціга он		

Копирование датасета

- 1. Выделите датасет(ы):
 - о Для одного: Ctrl + клик
 - о 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

Синтелли	Датасеты	
С. Поиск	Темерцияская Констриния	+ 0 0 8 7 8 4 4
Поликулирный редактор	Biografite emmessed generative (commander 1 continues)	По дате создани
O Renocetus	3 Congression	
📇 SynMap	Dataset	
Протналиравание реакции	This is a personal dataset	
Споктры	4 demants 2011 12 49	
😤 Стокность синтева		
POP & SMILES 20		
SMILES IN IUPAC		
А Статистика		
	N N	
at the statement		
En English		+
AHOCTOCHE //INXOBO Ilakhovco.slimonsemantica.ol		C

Экспорт датасета

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

Форматы экспорта:

- CSV
- SDF
- XLSX

A CONTRACTOR OF	deresers.	
	And a second sec	
	В сете Dataset не рассчитанные	
	Econ Boc Hyrobochot tonako SMEES – Bie Howate	
	зислюртироваль сет в тахом виде. Если котите получить вся свойства — слярна рассчитойте датосят	
	Рассинтать Энспортировати	
*		0

Дополнительные функции

- Расчет свойств
 - Выделите датасет
 - Нажмите кнопку расчета свойств

В СИНТЕЛЛИ	Датасеты	
С. Пониск	Телетичиские Компании Линные	+00086050
Поликулирный редактор	Redgette immesser geheberes (innuinger Folgeninge)	По дате создания
О Датосети	3 Congression	
甚 SynMap	Dataset This is a personal dataset	
Прогнолирование реакции		
В. Стонность синтера	A despaces 2015/12-09	
SMILES & IUPAC		
АІ Статистика		
-Q. Hore Talegram		
August		**************************************
Bakhave, a. di manésemantika. al		3

• Обновление данных

- Выделите датасет
- Нажмите кнопку обновления

В СИНТЕЛЛИ	Датасеты	
С. Поиск	Тансточноския Компонии Панныя	+ 0 0 0 8 7 8 4 4
🕼 Моликулярный редактор	Redgette immanier gateborry (viewiniers)	По дате создання
O Amorena	3 Следочитови	
SynMap	Dataset	
Прогназирование реакции	men di ci pur deme metalori.	
🗠 Снитры	A designed 2013/12-09	
🛱 Стокность синтеза		
D POP & SMILES 20		
SMILES & IUPAC		
А Статистика		
 One in Tablegraph 		
Ed Chystern		*
AHOCTOCHE Ляхова Idkhovc.o.s@montics.ol		

• Перенос в датасеты компании

- Выделите датасет
- Нажмите кнопку "Перенести в датасеты компании"

О СИНТЕЛЛИ	Датасеты	
	Тенетъчнаская Комплини Геневан	+00085854
Q. Понск	(Receptive immediately participants (investigate Containing))	По дате создания
Моликулирный редактор		
O Baracetu	3 Сандонични	
🔠 SynMap	Dataset This is a personal dataset	
Прогнамиранание реакцим		
🗠 Сниктры	4 (prepared 2023-12-49	
😫 Стонность синаеза		
POF & SMILES 20		
SMILES IN IUPAC		
А. Статистика		
 the entropy of 		
En England		+1
Anacracius Лихова Ilakhovo.o.s@inanesemantics.ol		

Табличный анализ

Обзор функционала

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

🕂 Важно: Перед анализом необходимо рассчитать свойства всего датасета

K ¹⁰ 1. He i Oscine (Cook serves	This is a personal dataset			Редоктиро	вать название 🖉
Q. Понск (Р. Молекулярный редактор (Ф. Аатасеты	C Haperceans are even to Contraction (D. SH10.13. 1)	needen of the second	n (noin	Табличный анализ Е	+ 0 0
호 SymMap	Найдана 3 структуры				
10 Прогнозирование резиции	(0: 8862433	10: 156241570	10: 155784737		
🔄 Спектры			H		
🛱 Стоимость синтеза		the set			
D PDF & SMILES 20	the manual				
T SMILES & IUPAC		8			
<u>А</u> І Статистика	100	110	1.1.1		
	Литература > Реакции >	Литература У Реакции У	Литература (199900) > Реакции >		
NC Missa Telegount					
					+3
в Анастасия Ляхова					

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"

налы Маликульрыні редактар) Дапасени : SymMap Прогналирование рескцика	 Изрисскота иму выясан Снителом (О, Набрано 5 структуры) 	LBULES, spanotowia oradowi, wizatowa MMAC, CAS obom. IV	28 Mailin	Табличный анализ 🗷	+ 0 0
) Датаселы ; SynMap ! Прагналирование реакция	Набдана 5 структуры				
. SynMap Протналирование реакции	Найдана 5 структуры				
Прогналирование реакции					
	ID: 8862433	10: 156241370 + 0 144	ID: 155784737		
Спектры		Редактировать молекулу			
Стонмость синтеза		Charangearth SMILES			
PDF & SMILES 20	2 Martinet and a start of the s	Перенести в			
SMILES IN IUPAC		Молисоть название или зометку			
Статинстика		Добавить в сровнение			
		Скоперсиать ссылку			
	Литература > Реанции >	MOL	Литература (199900) > Реакции >		
		PNG			
	1				
Mare Transport					
English					

Способ 2: На странице молекулы

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

1 on a urraner mucch menne	Страница молекулы	Малисать заметку 🏐 Добавить в сравнение 🗄	🗄 В датасет 🕂 Ссылка 🖉 Скачать 🛓	Структурные донные
Понск	Перенести в Г2	CONSTRUMENT ADDRESS	lw1	Синоничны
Моликулярный редактар	1000 72	Certanal D	8862433	Биогогическая активность
Датесены	/	Название по IUPAC 6-[(4- 2- 3-одикиндо-5-[3- (5ом	кетокси)-2-{12E,26E,30E,34E,38E} ()	физикс-хоничасние своиство Токомчность
SunMan	/	САЅ номер	Не нойдено	Экологические свойства
		SMILES CCI-OINCIC(OC2C(CO)OC(OP(-O)	(D)0P(-0)(0)0C/C-C[\C)CC/C-C[Оценка сложности синтеза
Пропназирование реакции		InChi InChi=15/C95H156N8028P2/c1-580	2)30-19-31-59(3)32-20-33-60(4)34	Скодство с ленарственными
Снектры	·	InChi Kreek	OXJNZXDFVLDLEI-UHAYLJQBSA-N	препаратани
Стояность синтева	the system	молекулярный нес	C ₉₂ H ₁₉₆ N ₈ O ₂₈ P ₂ 1920.269	Densian gennan
PDF # SMILES 20	स्कर्म	Синонимы		
SMILES IN IUPAC				
Статистика		Биологическая активность		
		Физико-химические свойство		
		Токсичность		
	литеротура у теонции у	Экологические свойство		
Maxie Tonicgram		Оценка сложнасти синтеза		
		Сходство с лекорственными препоратоми		

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:

- Информируйте 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
- ММар

Просмотр групп химических соединений

Принцип работы

- Модель проецирует структуры в координаты Х и Ү
- 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
 - о 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»



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
- Требует 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

	Выбрано молекул	
	в 190 1000 Для отножащие Для генероция	
	H0	e e
		-
	X: 26.56 Y: 2.99	
a manufacture of	Coadarts remported	Опоннить + -

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
- САТЅ 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

2 Down	Облость	···]		+ Добавить слой Личный
🤄 Молинулярный редоктор				Прарачность
Э Датосеты	N	e		Syntelly-7372
5. SynMap	¢.			Gen 1
В Прогназирование реанции	X: 23.07 Y: 4.13			Презранисть
🖞 Слектры	2			Gen 2
3 Стояность сняткао	XX			Призрачности
PDF & SMILES 10				+ Добавить генератор
) SHELES & IUPAC	X: 20.04 11 6.35			Gen 1 1 V
Статистика				
				Gen 2 🔘 🗸 Свотнятствие ходонным поронетром
	+ Добазить подборку в датосет		<u>.</u>	
			×.	
		+ Добавить генерацию в дагасет		+ -

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
 - о Выберите опцию «SMILES»
 - Введите формулу в поле

2. Молекулярный редактор

- Выберите «Молекулярный редактор»
- Нарисуйте структуру

3. Поиск по синонимам

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

international in	Добавить молехулы	
-	Rufighter Heritigh SMLES CC(=0)Nc/coclOlect	
	Achievent:	:
		0

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



Ретросинтез

Запуск ретросинтеза

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

3. Добавьте молекулу



Ввод целевой молекулы

Способы ввода

- SMILES
- Синтелли ID
- Тривиальное название
- IUPAC
- InChl
- Молекулярный редактор

Завершение ввода

- Проверьте молекулу в окне предпросмотра
- Нажмите «Спрогнозировать»

Управление молекулами

💡 Подсказки:

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



Получение результатов

1. Нажмите «Спрогнозировать»

2. Дождитесь расчета возможных путей ретросинтеза



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 (13С, 1Н 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 InChl 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 (1Н)

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

2. Углеродный ЯМР (13С)

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

3. Азотный ЯМР (15N)

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

4. Фторный ЯМР (19F)

- 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 InChl и SMILES

2. Графический ввод:

- о Нажмите «Нарисовать молекулу»
- Используйте молекулярный редактор

Модуль прогнозиру	ет спектры QToF (MS/MS для малых	оргонических моленул	. Споктры расснитаны		
представлен в виде	набора пар *мас	со нона – относити	льноя интенсивность'	in the system of		
Бходные параме	атры					
Rad	трный наснитный ре	2040HC	Mo	сс-слентронитрия	Инфракрасная стентронетрня	
Residuent contrasters	ertosanstan.	1				
Breast Strikes	- i pyroddou					e
Спектрольный тип	Ионный режим	Ten audiyana	Oxpyratewie (RI)	Orpyttenee (m/z)		Нарисовать
ESI	Positive	(M+H +	2	2		
	Ф Сбросить					
		1				

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

3	CHOCKED MAINTERN HALFOOD	145		Mace-Childroom	10() Y 214430		Madporpation	R CTIERTOGHETERS		
										0
Искодная состоян	пя структура								1 -	_ >
CC(C)Cc1ccc(C)	C)C(=D)O)cc1									\searrow
Спектральный тел	Ионный револи	Тип аддунта	Oxpyrnessee (RI)	Округлен	unu (m/z)					_/ \
ESI	Positive	[M+H]+	2	2						
									11.2	
(Ф Сбросить								6	Изменить
D										-
Вычисленные р										CW
	зезультаты									
	зезультаты									
	зезультаты				-		an neuro			~~~
	hendermoner (LE broke by					E MaMa Spectrum (AD	ev), (M+H)+			
	headenness (1) Hilferty					E NaMe Spectrum (40	KV), [M+H]+			
(Harrowspie	teranning CE Mohr 1			Spective (2544)		E MsMs Spectrum (40	eV), [M+H]+			
8	Seaynuratuu			Specifier (2000) 91.05	366-004 (14	l NoMs Spectrum (40	eV), (M+H]+			
9 6	Seaynuronu			91.05		E NaMa Spectrum (40)	ev), (MeH)+			
	tessenner Ef Höhr (s			spectrum (2004) 91.05	Januar H	E NaMs Spectrum (40)	2V), [M+H]+			
timeseeth b fo too	Segurinoma Spectrum			VI.05	Jaaran P	E MaMa Spectrum (40)	ev), [M-H]+			
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 1	transminer (frida)			VLUS	allerend for	E MaMa Spectrum (AD	eV), [56+H] e			
di si	Name			VILOS		E Matta Spectrum (AD	eV), [54-14]+			
Oncorrense ammediated	DA: 5107			91.05 92.07	103.05 I	I MaM's Spectrum (AD	eV), [54+H]+			
20 4.0 80 100 20 4.0 80 100	результоты туралтороты D4: 5107 5125		53,07 79.05	91.05 91.05 91.05 91.05 91.05 91.05 91.05	105.05 L 105.05 L 105.07	t Make Spectrum (AD	W), (M+H)+	345-50		1081
Discontruction for the second se	DA:		81.07 79.05	91.05 91.05 91.05 91.05 91.07 90.04 95.07 90.04 95.09 1	103.05 1 105.07 01.04	Timos	VV), [Mi+H]4	365.10		2051
Unservence big Proprietation 100 00 00 101 101 101 101 101 10	D4:		81.07 721.07	91.05 91.05 93.05 93.07 93.07 93.07 93.07 93.05	103.05 105.07 105.07	Make Spectrum (AD	VV, (M+H)+	363.00		2051

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 спектрометрия

Начало работы

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

Ввод структуры

Доступно два способа:

- 1. Текстовый ввод в поле «Исходная составная структура»:
 - о Формат InChl
 - 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 перекрывание 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:
 - Требует специальных кювет
 - Учитывает межмолекулярные взаимодействия

3. Тетрахлорметан (ССІ4)

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 KBr
- 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, наибол

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:
 - InChl формат
 - SMILES нотация
 - Молекулярный редактор
- 2. Реагент (опционально):
 - о 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

Стоимость синтеза		
Аналитический инструмент, разроботанный для оценки стоимости синтера химических соединений. Вам необходимо влести параметры желаемого синтера: желоемый вес синтерночего решества и количество стадий воещими. Рерультотом желеется ТОП-5 слем воещими, упорядоченных по возрастанию стоимости	родуят, реасент, Это позволяет	
Eonue V		
Ppenger* 🗇		
COCCINCCIOICIO	Продунт	Реднент
Peocest ()	att	6
	J. an	Нариссвать
Τρινόχισκοι κατισταστικο (ε/)* 🗇 Νικτικο σταχιού 💿		
100 / 😿 or 1 😨 go 4	В наменить	

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

Больше 😒	очнтваируемого вещество и количество стодий р	реакции. Результатом является ТОП-5 схем ра	ванций, упорядоченных по возраст	анию станмости. Это позваляет	
Продит* 🔘					
CC(=O)Nc1coc	c(O)cc1			Продукт	Реслент
Рескент ()				1 500	0
				20	Нарисовать
Требуеное колич	ecros (r)* (i) Hecos crusteli (i)				
100 r	× or 1	A0 4		2 Изменять	
(1 million	ф Сбрасить				
вычисленные ра	езультаты				_
Lensio I C	ration is created a created a				CRONATA BCE CREMA
Источник схемы	ы реанции 🔾				Всего 4 реагента
2 3					
	HO		>	ОН	
. H*	Название соединения	Crossectry (1)	Koninecteix ())	Источник	10
н» Стадия 1	Название соединзии Выжер: 100% -	Crossesters ①	Nanivected (D)	Источник	10
N° Craque 1	Hupdonet Criggenteen Burren: 100 %	Crummetra ()) 3.58 \$	Каленистик ()) 71.50 г	Kroweek	10 A194236
№ Стадия 1 1 Стадия 2	Processes Congresses	Crussetty () 3.581	Resonances D	Https://www.ambeet.com	10 A194236
h* Craquen 1 1 Craques 2 2	Риззвание сидуантиния Вичест: 180% OCctococ1 Вихода; 100% CC(~O)O	Crometry: [] 3.585 0.335	Калинески D 71.50 г 39.70 г	https://www.ombred.com	. 13 A194236 8.06.01%4
N° Craque 1 1 Craque 2 2 3	Ризование Сидинатиния Винеска: 100.% OCc1ccccc1 Винеска: 100.% Cc(+o)o Oclesccc1	Cruestitre ① 3.58 \$ 0.37 \$ 0.05	Raomestes () 71.50r 39.30r 62.30r	Kopuese Kopuese https://www.ombeed.com	15 4194236 8.06.07944
h" Cragen 1 1 Cragen 2 2 3 Cragen 3	Processment Conguernationer Bourter: 100.% DCC-Loccect Bourter: 100.% CC(-O)O Driteccet1 Bourter: Bourter:	Crossettys () 5.585 0.335 0.005	Resources () 71.50 r 39.70 r 62.30 r	https://www.ombeed.com https://www.ombeed.com https://chem-ex.nu synthecized earlier	0. 494235 8.06.0514
N" Craques 1 1 Craques 2 2 3 Craques 5 4	Processment Collegementment Bioverget: 100 % OCCLeccccc1 Bioverget: 00 % OCfleccccc1 Bioverget: 100 % OCfleccccc1 00 % Cc(f=O)Checccc1(Opect) 00 %	Cronnitive () .	Resentestes D 71.50r 39.70r 62.30r 9030r	https://www.ombeed.com https://www.ombeed.com	0. A194255 8.06.07944 1001 Independent

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

	1. The second				
Caerwa 1 C	хема 2 Слема 3 Схема 4 Слема 5				Скачать все схемы 3
1сточник схемы 1 2 3	греанцик)				Beero 4 pearenra
	HO		3	ОН	*
Nation	Нозвание совдинения	Стояносты 🗇	Коничество (())	Метачник	ID
Стадия 1	Becog: 100%				
1	OCelecceel	3.58\$	71.50 r	https://www.ambeed.com	A194236
Стадия 2	Выход: 100 %				
2	cci-olo	0.31 \$	39.70 r	https://diem-exau	8.06.01144
3	Ocfeeeec1	0.00\$	62.30 r	synthesized earlier	
Стадия 3	Выход. 100%	/			
	ant at a	0.00\$	90.10 r	synthesized earlier	start temperature 8
4	CLI=OICIERCIOIECI				
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:
 - о Патенты
 - Научные статьи
 - Протоколы испытаний
 - Диссертации
- Поддержка распознавания:
 - Стандартных химических структур
 - Структур Маркуша

В СИНТЕЛЛИ	PDF 8 SMILES	ے. Sor pyramic PDF.
С. Понкк		
Моликулирный редактар	Pub (Cherry Announcement)	
© Дотесеты	Annual Annua	
😸 SynMap	4 структуры ——	·
Прогназиранание реакции	Atorvastatin_C33H35FN2O5_ CID 60823 - PubChem	
Е Снектры		
🗒 Стокмость синтеза	99 сэроннц	
C) POP & SMILES (2.9)		
SMILES & IUPAC		
а) Статистика		
 More Tangeners 		
E. Degtan		*
•		C

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 структуру можно отредактировать в молекулярном редакторе

Процесс корректировки:

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

COM	OUND SL < Hosea Atorvastatin_C33H35FN2O5_CID 60823 - PubChem	Стр	уктуры ⁴ & Сконать + Все в с
A1	orvastatin		angeomeers 0.998
	🕫 Cite 上 Download		the who
2 Jan	Chem CID 60823		
Street	noture	•	наритировать + В дотасет © Удалить
Ch	emical Safety		ECICIC:1:(CI-0)N:2ceccc2):(-2cecc)?(c-2cecc)?(c-2cecc?):(-2cecc?):(-2cecc?):(c-2ceccc?):(c-2cecc?):(c-2ceccc?):(c-2cecc?):(c-2cecc?):(c-2cecc?):(c-2cecc?):(c-2ceccc
	Irritant Hazard Laboratory Chemical Safety Summa Datasheet	ry (LCSS)	адеместь 0.397
Mc	ecular Formula C ₃₃ H ₃₅ FN ₂ O ₅		~~~ /~ /
1 / Sy	onyms atorvastatin 134523-00-5	0	CC(=D)Ne1ococe1C(C)C

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.



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 ≈ 3.06
 - о 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								
Тиноничноти Биалигические свойство	Экологические с	войства Физические свей	төз					
Токсичность								
Параметр	Средний нашингаль	Единницы натералия	Метрина	Faid 1	Fad 2	Fold 1	Fold 4	Fol
Раздражение глоз	0.90		ROC AUC	0.98	0.90	0.97	0.97	0.
Мышь внугревенно LD50	0.61	Log10(wr/kr)	RMSE	0.42	0.41	0.41	0.42	0.
Кошко внутривенно LD50	0.85	Log10(wr/kr)	RMSE	1.07	0.71	0.72	0.92	0.
Эмбриотоксичность	0.55		ROC AUC	003	0.89	0.91	0.86	0.
Мышь накожно LDS0	0.8T	Log10(wr/wr)	RMSE	0.89	0.96	0.90	0.54	α.
Гепататаксичность	0.61		ROCAUC	0.80	0.82	0.81	0.80	0.
Мышь внутрибрюшинно LDLo	0.43	Log10(ммоль/л)	RMSE	0.43	0.45	0.41	0.42	۵.
Крыса кнутривенно 1.050	0.85	Lag10[ser/sr]	RMSE	0.81	0.89	0.84	0.84	0.
Корднотояснююсть	0.93		ROC AUC	0.93	0.92	0.92	0.93	0.
Крыса подножно LDS0	0.76	Log10(mr/hr)	RMSE	0.76	0.72	0,73	0.76	0.
SR-p53	0.68		ROC AUC	0.77	0.95	0.83	0.92	0.
Аронатаза	0,88		ROC AUC	0.85	0.94	0.87	0.86	0.
Морская свинко орально LDS0	0.66	Log10(mr/kr)	RMSE	0.67	0,67	0.68	0.71	0.
Ариловый углеводородный рецептор	0.87		ROC AUC	0.86	0.87	0.85	0.90	0.
PPAR-gamma	(D.81		ROC AUC	0.80	0.86	0.68	0.90	С.
Крыса внутрибрюшинне LD50	0.62	Log10[mr/kr]	RMSE	0.66	0.61	0.61	0.61	0,
Кролия внутривенно LDLo	0.75	Log10(мноль/л)	RMSE	0.74	0.90	0.70	0.77	0.
Рецептар эсториена ольба	0.67		ROC AUC	0.90	0.87	0.89	0.85	0

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

В СИНТЕЛЛИ	Датасеты						
С. Понск	Тенецтонносони Компания Литина						
Моликулярный редактар	Bacaster emission and antisparts (emission to	Badgetin immessen ginterers (imminger Comming)					
O Rerocetui	4 129 Соединений	103 Соодносния	747 Coegunemia	1768 Соединений	1746 Создинений		
SynMap	Олигопептиды (<10 остотков)	Иминосахариды	Олигосахариды	Моносахариды	Нуклеозиды		
Протназиравание реакции	Органические моленули, составщие из небольшого числа	Меносалариды, в которых атом кислорода в кольце замежен атома	Улеводы, молекулы которых ходержат ат 2 да 10 остатков	Полигидроксиольдегяды и полигидроксикетони, в которыя	Глиновиланиеми, содержащие авотистсе основание, саквонное с		
Спектры	Incomparation View	25 million 2020 17 4.8	In some stars that	26 semigrad DER VAR	24 minute 2020-17-04		
🕄 Стоимость синтеза							
PDF & SMILES 2.0	2 049 Ссединений	69 Ссединений	32 Соединения	137 Соединений	59 Соединений		
	Гликозиды	Фталоцианины	Форбины	Порфирины	Монобактамы		
SMILES & IUPAC	Органические соединения, налекулы которых состоят из двух частий;	Совдинник биноспорфиринов, имеющие ностиховые отоны олото	Циклические тепратирролы, состоящие их порфирина	Природные в сантетические тетрогаррольные соединения,	Монацииличногом В-лактоны, вырабатываемые бактерияни, в		
Статистика	la imaga kan 1948	20 empr 200: Date	24 sesans 2008 12-65		30 maps 200 Vint.		
	35 Compresent	86 Соядинений	36 Соедниений	175 Совденение	38 Совреняний		
	Муталны	Подофиллотоксины	Индирубины	Изофлавоны	Неофловоны		
	инеющие трициклическую	Активные контоненты падофиллина, оказывающие некратизирующее,	Срединении, которые чаще всего вырабатываются нак побочный,	Произвадные 3-арилкромона (бекзо-у-лирана), класс	Класс полифекольних соединений, атноснщиках к неофлавонондам,		
C. Hu a Telegram	It's compt 2018 19-58	25 sources 2205, 19 kits	25 seems 2010 Visit	26 years 2010, 99 A.B.	Distances (Cite 1948)		
Logisti -	276 499 Соединений	768 Соединений	1 199 Соединений	2 119 Соединений	474 Соединения		
•	Природные соединения	Фотосенсибилизаторы	Нейтрализаторы свободных радикалов	Антиоксиданты	Агенты, разрушающие		

Нижнее меню управления профилем

Доступ к меню

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

Разделы меню

- О нас
 - о 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

6 - CARCELON (1)	deres .				
		Личный ка	бинет		
	Summer Street			Second Second	1000 A
		Dearenters			
		G Contraster &	Product		
		Данные для вкода	\$		
		Понта и параль Персональные данные	×		Andrew
		Ключ продукта Планиј сополна и должносте	>		
		Настройки уведомлений	\$		
		The Degline			
	The second secon	Выйти из анкаунта 🕒			Statement Street, Stre
		6-319(12:11/3010-302E			
A					
	Statement responses	Reasonable and a second	And in case of the local division of the loc	and the second s	Contraction of the local division of the loc