

InChI

IUPAC International Chemical Identifier

Информационный поиск по запросу, состоящему из кода InChI или кода InChIKey, пока что не обладает какими-то особыми преимуществами по сравнению с другими методами. Причина кроется в том, что эти коды — явление достаточно новое и, хотя горячо рекламируемое своими сторонниками, не получившее повсеместного распространения. Тем не менее, есть все основания полагать, что такая ситуация временна. Научному сообществу необходима стандартная линейная нотация химической структуры, и InChI для этой роли вполне годится.

В WWW растет количество мест, где можно узнать код InChI для химического вещества. Например, графа с кодом InChI есть даже в таблицах свойств веществ на страницах Википедии.

Насколько правильны коды InChI, встречающиеся в Интернете — вопрос открытый, но не такой сложный, как с регистрационными номерами CAS RN.

Нам доступны три **первоисточника** — это генераторы кодов InChI, рекомендованные ИЮПАК.

1. ChemSketch

ChemSketch — молекулярный редактор фирмы *ACD/Labs*. Он является частью свободно распространяемого пакета программ *ACDLabs Freeware*; генерирование InChI — одна из функций редактора.

ChemSketch — предмет нашего рассмотрения на одном из последующих занятий.

2. ChemSpider

Информационный центр, с которым мы уже работали.

На этом сайте, с одной стороны, InChI можно использовать в качестве запроса; с другой стороны, в результатах поиска, проведенного любым иным методом, всегда можно видеть коды InChI и InChIKey для извлеченных веществ, например:

▼ SMILES and InChIs

SMILES:

COC(=O)[C@H](Cc1ccccc1)NC(=O)[C@H](CC(=O)O)N [Copy](#)

Std. InChI:

InChI=1S/C14H18N2O5/c1-21-14(20)11(7-9-5-3-2-4-6-9)16-13(19)10(15)8-12(17)18/h2-6,10-11H,7-8,15H2,1H3,(H,16,19)(H,17,18)/t10-,11-/m0/s1 [Copy](#)

Std. InChIKey:

IAOZJIPTCAWIRG-QWRGUYRKSA-N [Copy](#)

3. PubChem Sketcher

Этот апплет, расположенный на сайте *PubChem*, позволяет генерировать коды InChI и SMILES по структурной формуле и, наоборот, по кодам InChI и SMILES генерировать структурную формулу.

Внешне *PubChem Sketcher* выглядит несколько иначе по сравнению с теми апплетами, с которыми мы работали ранее.

Функциональные его особенности в области простейших задач незначительны:

- Перед вводом очередной структуры обязательно следует убрать прежнюю информацию — нажать кнопку *New*.
- Отсутствуют и кнопка "выделить", и отдельная операция "выделить", но в неявной форме "выделение" функционирует.

Хотя при наведении курсора на атом или связь в структуре ничего не подсвечивается, смело можно в этом месте впечатывать новый химический символ или изменять порядок связи.

- На панели активная кнопка окрашена в оранжевый цвет, неактивные — в голубой.

Перейти к новой структуре

Список типов нотаций

Текст нотации

Шаблоны

Export SDF Done

Hydrogen Keep AsIs Help

Import Browse...

Упражнение 1. По известному коду *InChI* сформируйте структурную формулу.

Найдите в Википедии код *InChI* для подсластителя *аспартама* (*aspartame*), скопируйте код в графу апплета, нажмите клавишу "Ввод".

Апплет сгенерирует структурную формулу.

Сравните ее с той структурной формулой, которая приведена в Википедии.

Упражнение 2. По известной структурной формуле сгенерируйте код *InChI*.

Рисуйте в окне апплета структурную формулу простейшей аминокислоты и наблюдайте, что происходит в графе, предназначенной для кода *InChI*.

Контрольное задание 6. Информационный поиск по коду *InChI*.

Скопируйте код аминокислоты, сгенерированный вами в *Упражнении 2*, и проведите по нему поиск в *Google*.

Сколько обнаружено документов, какова их информативность?

Результаты поиска предъявите преподавателю.