

## Как использовать Skoal

В поисковой системе используется известный редактор химических структур Ketcher (<http://ggasoftware.com/opensource/ketcher>). Кто знаком с этим редактором могут сразу перейти к следующему параграфу. Для тех, кто видит панель Ketcher впервые, ниже изложены простые правила.

### Как представить химическую структуру?

В панели инструментов выбираете различные структуры и виды связей.



Из панели основных атомов выбираете нужные вам атомы. Некоторые виды атомов введены в структуры по умолчанию (например, в бензольном кольце), но они могут быть заменены при редактировании.

Если нужного атома нет в списке, то вы можете вставить его вручную, для этого нужно два раза щелкнуть мышью на той позиции, где этот элемент должен появиться и прописать его название в графе.

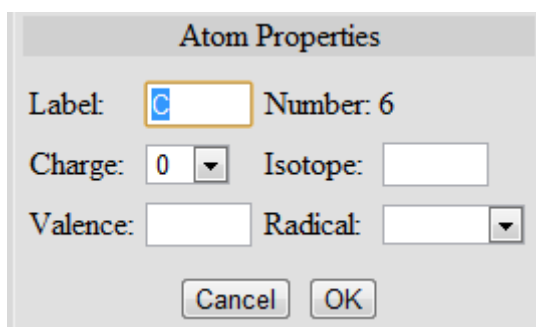
Если включен режим выбора (simple selection mode), вы можете производить редактирование атомов на их позициях кликнув на атом и удерживая кнопку мыши. Данный режим поддерживает прямой ввод обозначения атома и его заряда, например: N-, C2+, Na.

Чтобы изменить обозначение атома введите новое обозначение, выделив атом курсором мыши.

При двойном щелчке мышью на атоме, появится диалоговое окно его свойств.

При двойном щелчке мышью на химической связи, появится диалоговое окно её свойств.

Если вы кликните на связи “up bond” при выбранном инструменте “up bond”, связь изменит свое направление. То же самое верно для связей типа “down bond”.





## Как искать похожие вещества по фрагментам формул?

Поисковая система Skoal позволяет находить среди известных такие химические соединения, формулы которых включают в себя задаваемые в редакторе молекулярные структуры или максимально похожи на них.

Вы можете искать похожие вещества по двум критериям:

Max Common Subgraph

Fingerprint Tanimoto

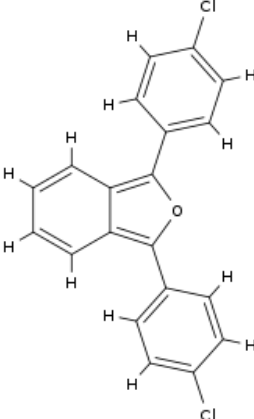
Первый способ ищет по принципу схожести непосредственно по структуре веществ, заданных как графы, а второй сигнатурный метод (fingerprint) основан на предварительном составлении описаний признаков и кодирования их в виде строки двоичных символов.

После того, как вы составили формулу, которую хотите иметь в качестве

составной части формулы искомого вещества нажимаете кнопку

В результатах вы увидите сколько таких веществ найдено, их формулу, структуру, название и значение метрики, определяющей схожесть найденного вещества с заданным в редакторе фрагментом структуры.

20 elements found

Formula	Molecular Structure	Metric Value	Name
C <sub>20</sub> H <sub>12</sub> Cl <sub>2</sub> O		0.5737	1,3-bis(4-chlorophenyl)-2-benzofuran

Различные запросы на поиск при одинаковых поисковых фрагментах могут возвращать отличающиеся результаты, что связано с тем, что поиск содержит рандомизированные алгоритмы, а представляются только первые 20 результатов.