

# Navodila za uporabo MolDB6

## Uvod

Knjižnica spojin na UL-FKKT temelji na podatkovni zbirki MolDB6, ki jo je zasnoval prof. Norbert Heider iz Univerze na Dunaju.

MolDB6 je primer relacijske podatkovne baze, ki je osnovana na prosti programski kodi:

- **LAMP** (**L**inux – operacijski sistem, **A**pache – web server, **M**ySQL – relacijske baze, **P**HP – skriptni jezik)
- **checkmol** (fingerprinti) & **matchmol** (atom by atom) – programa za generacijo fingerprintov in primerjanje molekul
- **JME, JSME**; vizualizacija struktur; grafični vmesnik

Prednost te podatkovne baze je dostopnost programske kode, ki jo lahko po potrebi prosto nadgrajujemo, spreminjamo, itd . Vse potrebne informacije za izgradnjo MolDB6:

<http://merian.pch.univie.ac.at/~nhaider/cheminf/molddb6.html>

Predstavitev podatkovne zbirke MolDB6:

<http://merian.pch.univie.ac.at/~nhaider/cheminf/molddb.pdf>

## Začetna stran

Na začetni strani (index.php) lahko uporabnik na seznamu izbere zbirko podatkov in klikne gumb »Uporabi izbiro«. S pritiskom na tipko <Ctrl> med klikom na element seznama lahko naredite več izbir (če je to omogočeno v konfiguracijski datoteki). Vse možnosti iskanja so na voljo prek navigacijske vrstice na vrhu strani. Povezava do "Preferences" (če je omogočena) in do

skrbniške strani je prikazana na desni strani menija (morda je priporočljivo to povezavo odstraniti ...).

## **Brskanje**

Vse izbrane zbirke podatkov so na voljo na tej strani z uporabo standardnih navigacijskih elementov. Sestavljene strukture so prikazane grafično (z uporabo SVG ali bitnih slik, če so na voljo), skupaj z imeni spojin ali reakcij in številko ID (mol\_id ali rxn\_id). Slednja predstavlja hiperpovezavo do podrobnega pogleda tega določenega vnosa (ki ga zagotavlja skript "details.php"). Vrsta uporabljene grafike (SVG ali bitne slike) je odvisna od nastavitev v moldb6uiconf.php in od zmožnosti brskalnika stranke.

## **Iskanje besedila**

Obstaja preprosto orodje za iskanje besedila, ki privzeto išče samo polje "mol\_name" (in / ali "rxn\_name"). Iskalni izrazi ne razlikujejo med velikimi in malimi črkami, kot nadomestni znak lahko uporabite simbol "%" ali "\*". Z izbiro možnosti "vključi druga polja, ki jih je mogoče iskati", lahko razširite iskanje na vsa besedilna polja, ki jih je skrbnik določil kot "iskalna" (glejte spodaj). Na voljo je tudi napredna možnost iskanja besedila, ki omogoča vnos iskalnih izrazov za vsako posamezno podatkovno polje, ki ga je mogoče iskati (te izraze lahko kombinirate z logičnimi operatorji AND ali OR). Funkcijo naprednega iskanja besedila je po naravi mogoče uporabiti le, če uporabnik izbere eno zbirko podatkov.

## **Iskanje po funkcionalnih skupinah**

Ta možnost iskanja uporablja funkcije checkmola za prepoznavanje približno 200 različnih funkcionalnih skupin. Kategorizacija spojin se izvede že ob vnosu v bazo podatkov. Lastnosti so shranjene v binarni obliki v posebni tabeli (molfgb), iskanje pa je izjemno hitro. S pritiskom na tipko <Ctrl> med klikom na zelene elemente lahko iz seznama izberete več funkcijskih skupin.

Takoj, ko je izbrano zbiranje podatkov o reakcijah, so na voljo razširjene možnosti iskanja: uporabnik lahko določi, ali naj bodo izbrane funkcionalne skupine v katerem koli reaktantu ali katerem koli izdelku ali jih je treba ustvariti ali izgubiti med reakcijo.

## **Kombinirana struktura**

S klikom na svetlo sivo sliko "nobena struktura ni definirana" se odpre pojavno okno. Vsebuje urejevalnik struktur (v skladu z nastavitvami v pogovornem oknu »Nastavitve«) in omogoča uporabniku, da nariše vhodno strukturo ali reakcijo. S klikom na "Pošlji v obrazec za iskanje" se ta struktura (ali reakcija) kopira v obrazec za iskanje in pojavno okno se zapre. Glede na vrsto elementa iskanja (struktura) iskalni obrazec prikaže nekoliko drugačne možnosti.

## **Iskanje po strukturi**

To je osrednji iskalni obrazec, ki omogoča natančno iskanje, iskanje podstrukture in iskanje podobnosti. Vhodna struktura mora vsebovati vsaj tri atome. Če dobimo pri iskanju preveč zadetkov, so na voljo potrditvena polja za natančnejše načine iskanja (stroga primerjava vrste atom / vez,

preverjanje geometrije). Iskanje struktur deluje tudi za zbiranje podatkov o reakcijah. Namesto risanja strukture poizvedbe jo je mogoče vnesti kot besedilo v pojavno okno (v obliki datoteke MDL molfile).

## **LICENCA**

Copyright © 2014-2021 Norbert Haider, University of Vienna

Ta program je brezplačna programska oprema: lahko ga znova distribuirate in / ali spremenite pod pogoji splošne javne licence GNU, kot jo je objavila Fundacija za prosto programsko opremo; različica 3 licence.

Ta program se distribuira v upanju, da bo koristen, vendar **BREZ KAKRŠNEGA JAMSTVA**. Za več podrobnosti glejte splošno javno licenco GNU: <http://www.gnu.org/licenses/>.