



# ИК-ЭКСПЕРТ

Информационно-аналитическая система по ИК спектроскопии **ИК-ЭКСПЕРТ** предназначена для решения различных спектро-структурных задач

## Области применения



### Идентификация соединения по спектру

Задача часто решается в криминалистике, медицине, анализе объектов химической промышленности, фармацевтике, пищевой промышленности и т.п. База данных ИК-ЭКСПЕРТ включает около 45 тыс. структур органических соединений и их ИК спектров известных и широко распространенных веществ. Исходными данными для анализа служат либо спектральная кривая, либо список положений и интенсивностей полос поглощения.



### Установление строения органических соединений, спектры которых отсутствуют в базе данных

Особенность системы ИК-ЭКСПЕРТ состоит в том, что наряду с просмотром структурных формул, отобранных из БД соединений при поиске, возможен просмотр и анализ их фрагментного состава. В случае, если у химика (аналитика, спектроскописта) есть предварительная информация о строении соединения (например, химик занимается синтезом органического соединения), либо отсутствует гипотеза о строении соединения (такие задачи возникают для химии природных соединений, анализа загрязнений окружающей среды, криминалистики) система позволяет сопоставить гипотезу о строении соединения со структурными фрагментами, выдаваемыми в поисковом ответе.



### Проверка соответствия структуры спектру соединения

Задача возникает при установлении структуры известных и новых органических соединений. Система ИК-ЭКСПЕРТ позволяет находить ближайшие структурные аналоги заданных соединений и строить модельный спектр проверяемого соединения. Сопоставление модели с имеющимся спектром может быть использовано как для проверки гипотезы о строении соединения, так и для отсева неправдоподобных гипотез. Для быстрого нахождения структур заданного строения в системе реализован поиск по структурным фрагментам.



### Выяснение спектрального проявления структурного фрагмента в заданном окружении

Задача возникает как в прикладной практике, так и в исследовательской работе. Система ИК-ЭКСПЕРТ позволяет строить частные спектро-структурные корреляции при условии, что в БД достаточно много структур, содержащих интересующий структурный фрагмент.

## Технические характеристики

**Объём базы данных:** 44448 спектров и структур.

**О каждом соединении хранится информация:**

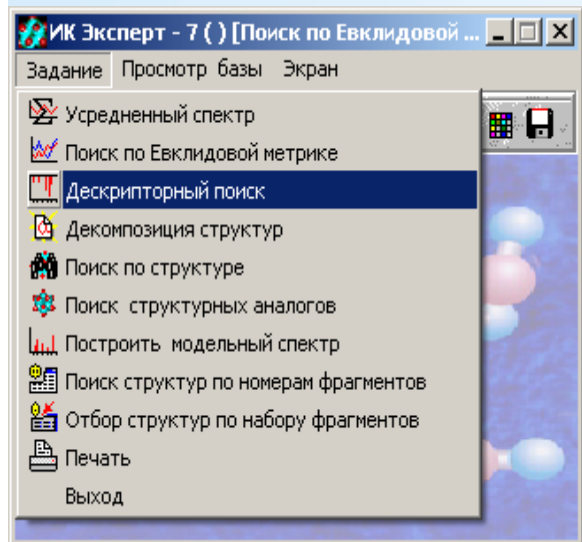
- ИК спектр, представленный полной спектральной кривой с шагом  $2 \text{ см}^{-1}$  в интервале  $400\text{-}2000 \text{ см}^{-1}$  и  $4 \text{ см}^{-1}$  в интервале  $2000\text{-}4000 \text{ см}^{-1}$
- ИК спектр, представленный дескрипторами – для каждой полосы поглощения хранится информация о её положении и интенсивности.
- Структурная формула соединения
- Полный фрагментный состав структуры для  $2\div 7$  вершинных фрагментов молекулярного графа (всего 118282 фрагмента)

**Программное обеспечение системы ИК-ЭКСПЕРТ** работает под MS Windows (XP, Vista, 7).

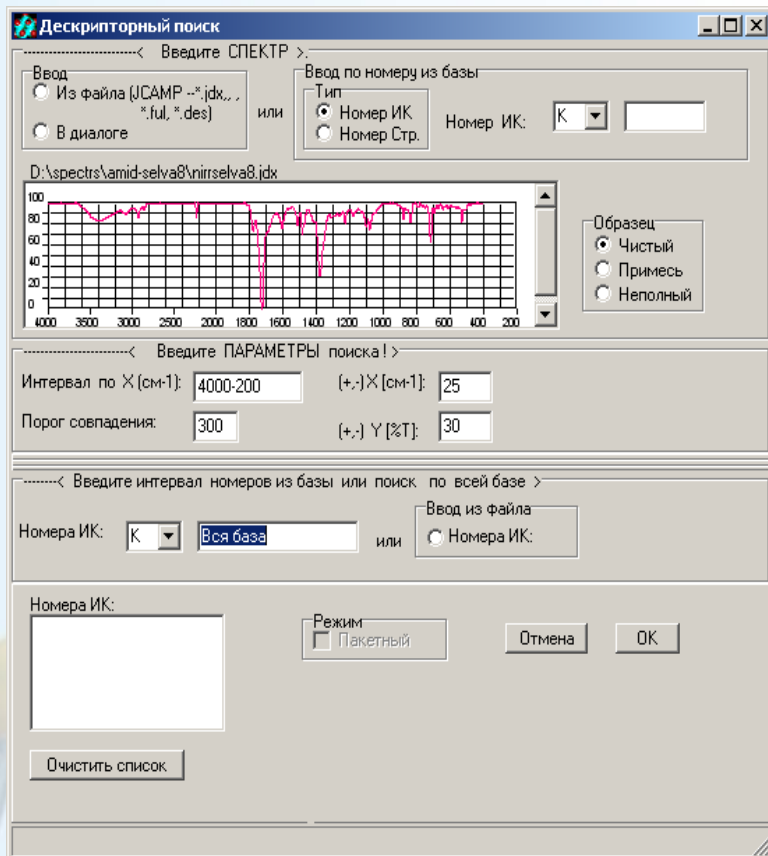
**Обращаться :** [ktaznsk@nioch.nsc.ru](mailto:ktaznsk@nioch.nsc.ru) 630090 г.Новосибирск, пр.Лаврентьева 9, тел. (383)330-82-51

## Пример работы системы ИК ЭКСПЕРТ:

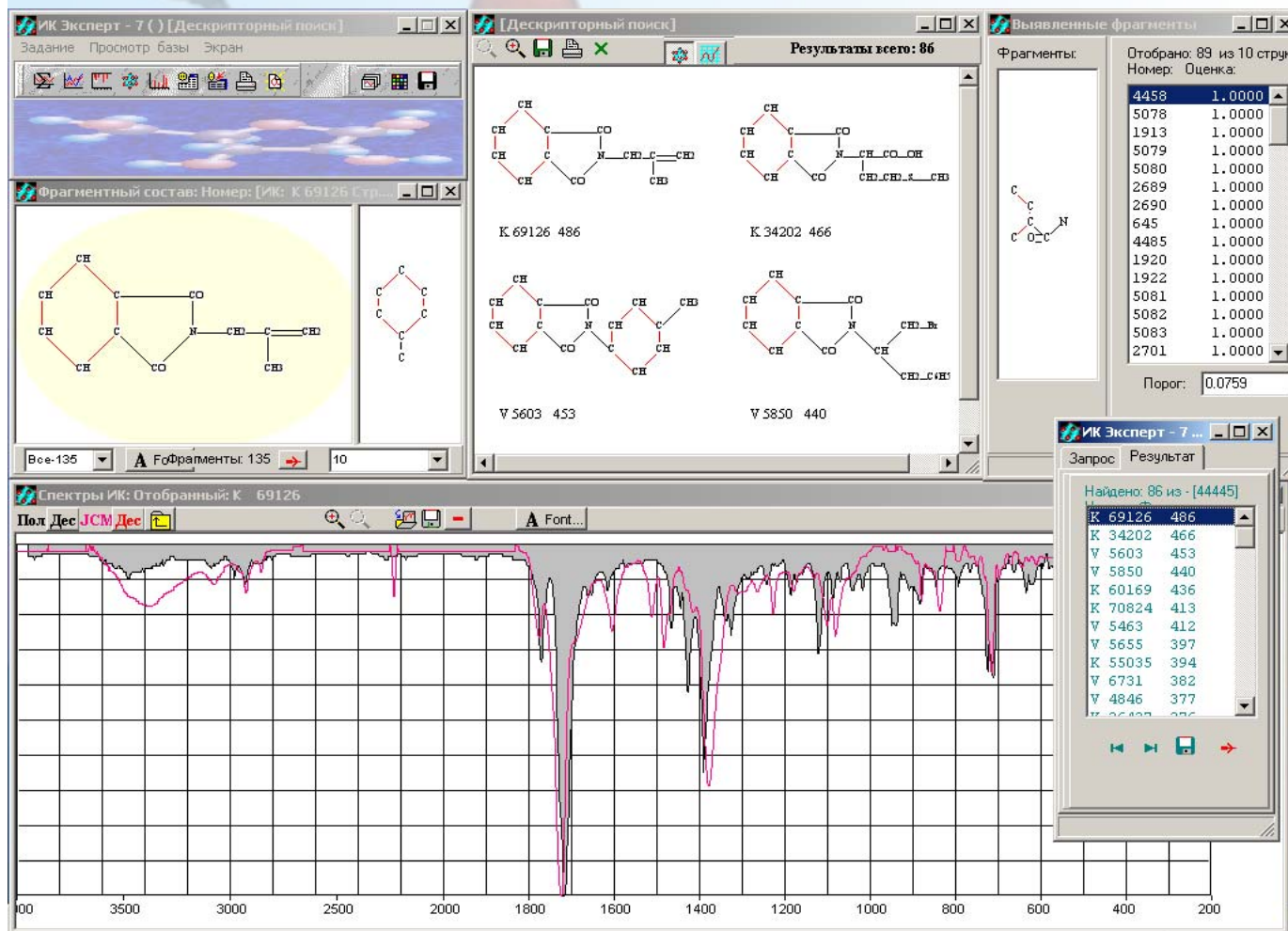
- Дескрипторный поиск
- Запрос на поиск
- Результаты поиска



Программные модули



Запрос на Дескрипторный поиск



Результаты поиска по дескрипторам системы ИК-ЭКСПЕРТ