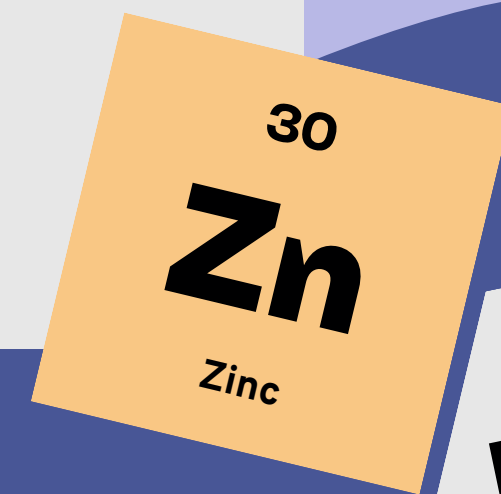
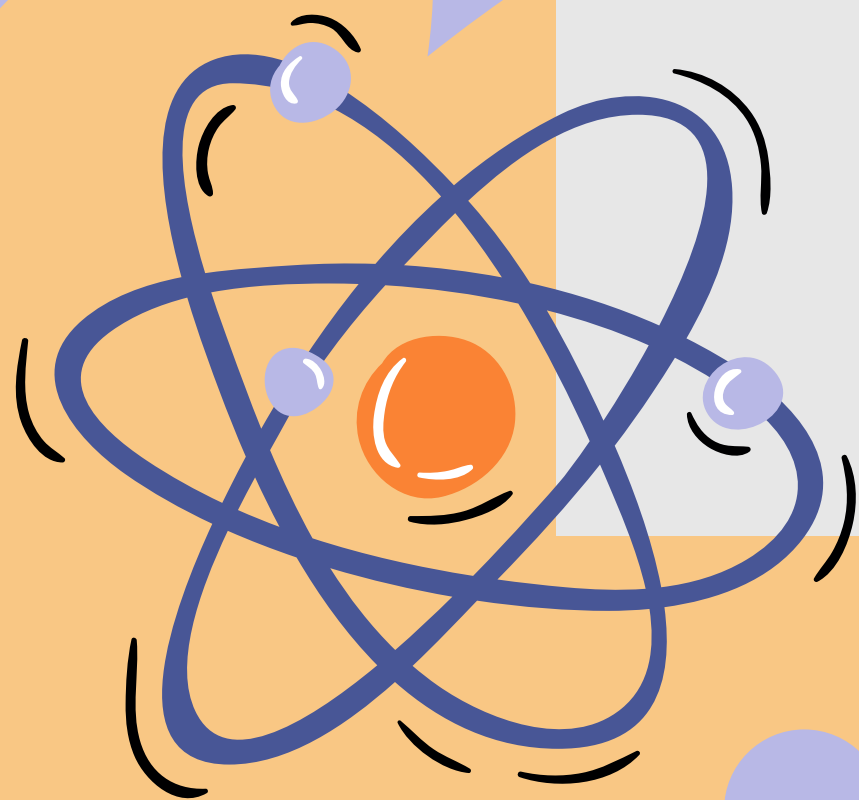




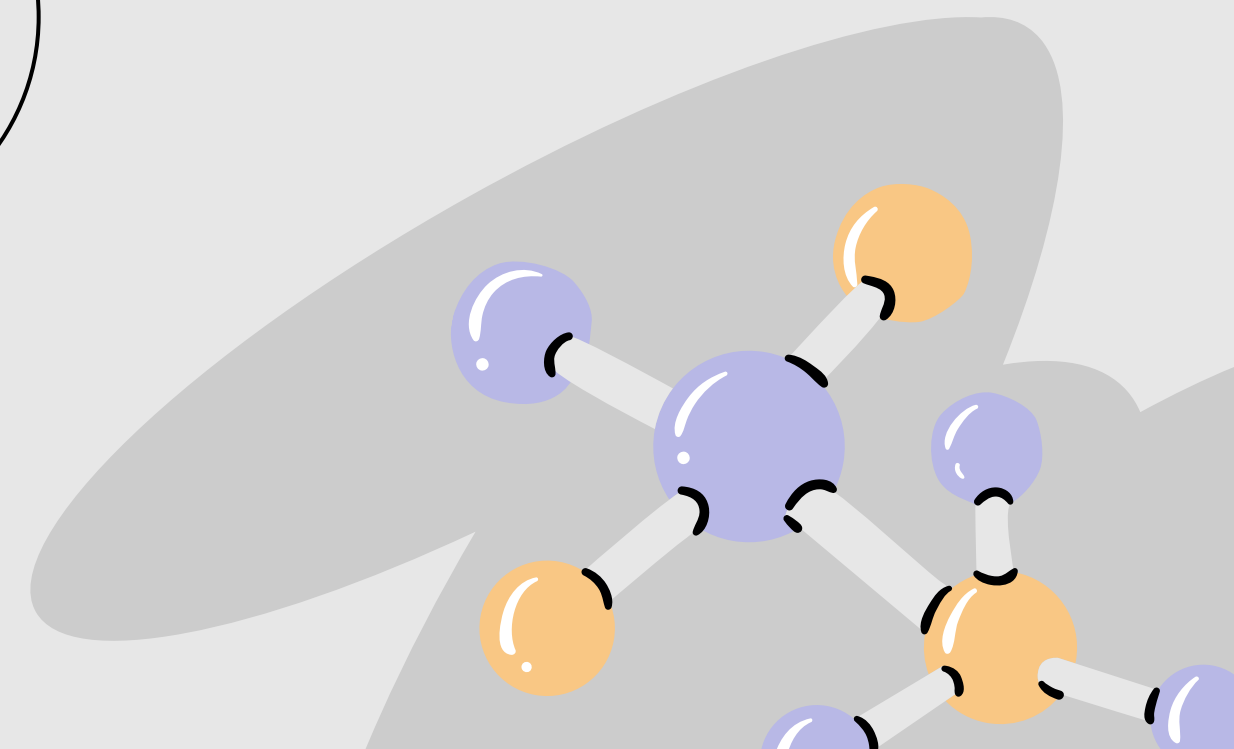
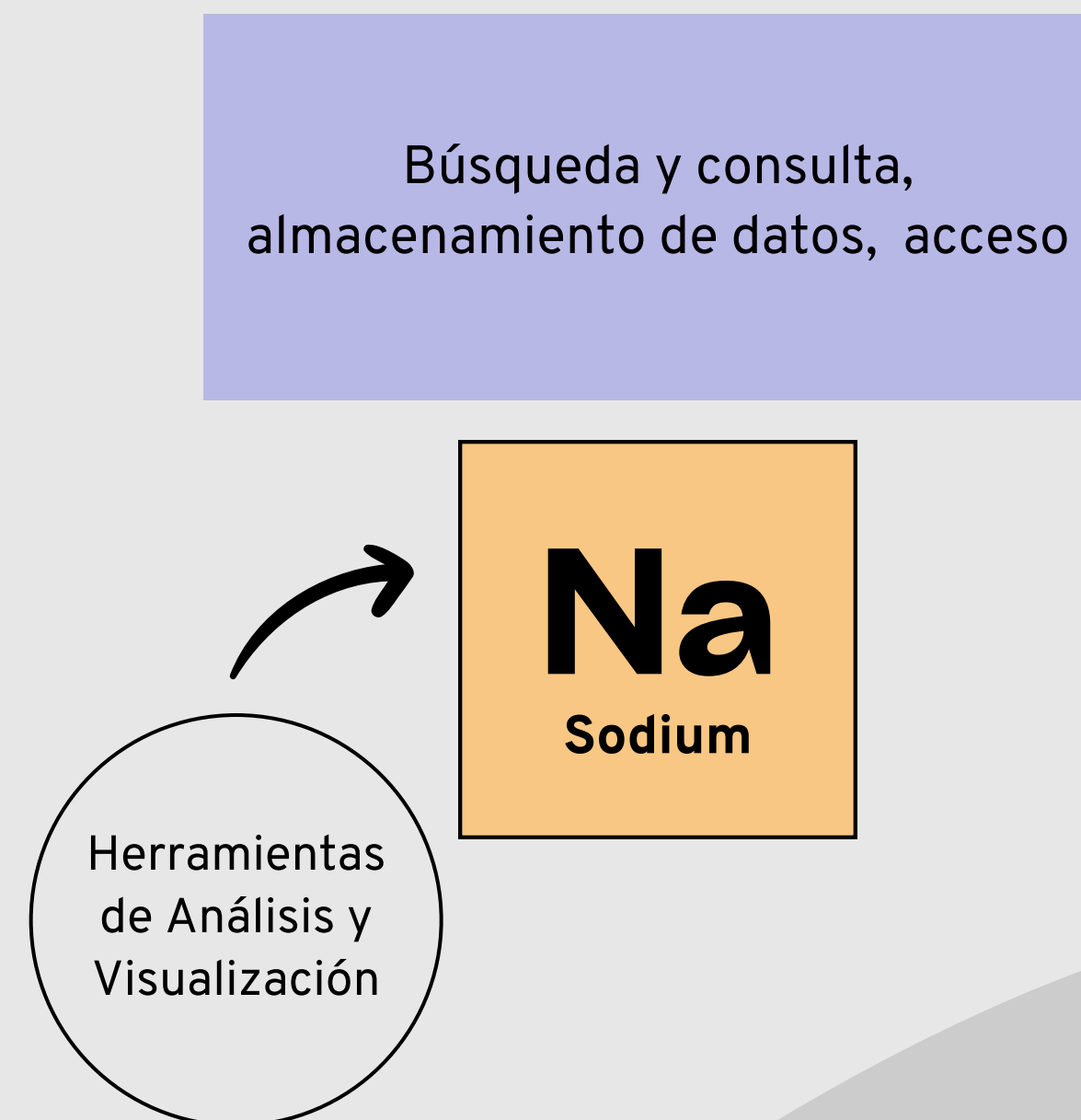
PUBCHEM Search

Una herramienta para consultar y analizar información sobre compuestos químicos utilizando la API de PubChem.



¿Qué es PubChem?

PubChem es una base de datos química mantenida por el National Center for Biotechnology Information (NCBI), que a su vez es parte de los National Institutes of Health (NIH) en los Estados Unidos. Es una de las mayores fuentes de información sobre sustancias químicas disponibles en línea de forma gratuita.



Sobre el script

1

- realizar consultas web
- acceder a registros de compuestos

2

- visualizar estadísticas

3

- generar gráficos sobre los datos obtenidos.

Nuestro proyecto aprovecha la API de PubChem para realizar consultas y análisis de información relacionada con compuestos químicos (propiedades, estructuras, identificadores únicos y más).



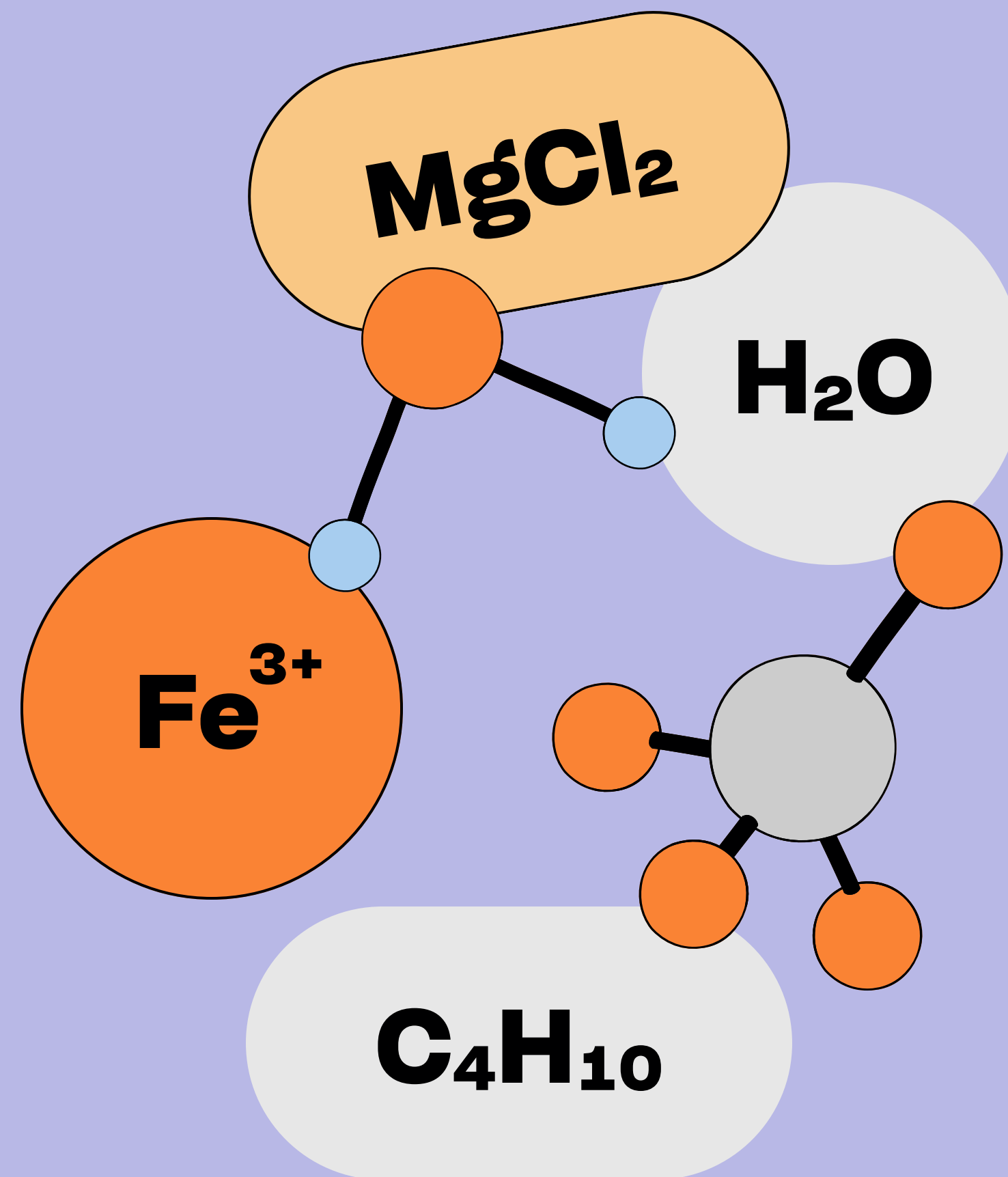
¿Cómo usarlo?

1. Solicita información sobre compuestos químicos de tu interés, el script lo traduce del español al inglés para una búsqueda efectiva.
2. Revisa la información que ya descargaste.
3. Consulta estadísticas relevantes sobre la relación entre los compuestos químicos que buscaste.
4. Visualiza gráficas sobre las estadísticas solicitadas.
5. Borra la información anteriormente visitada y poder realizar nuevas consultas.



Módulo de consulta

- Traduce el nombre del compuesto esp-ing
- Interactúa con la API para realizar las requests
- Si la consulta es exitosa -solicitando el nombre del compuesto-, devuelve el CID (Chemical Identifier) del compuesto consultado. Si no, maneja el error e imprime un mensaje adecuado.
- Construye la URL de consulta utilizando el CID y realiza una solicitud HTTP a la API de PubChem.
- Si la solicitud es exitosa (código de estado 200), devuelve los datos del compuesto en formato JSON para crear un txt por compuesto solicitado. Si existe un error, maneja el error e imprime un mensaje.



Módulo de estadísticas

- Procesa los datos de los compuestos consultados y los organiza para su posterior análisis.
- Calcula estadísticas como el promedio, la desviación estándar, los valores mínimo y máximo, y los percentiles para cada una de las variables de interés (masa molecular, LogP, protones que acepta, protones que cede, enlaces que rotan).



Módulo de gráficas



- Genera gráficos estadísticos basados en los datos proporcionados. El usuario puede elegir entre tres tipos de gráficos: de barras, de líneas o de dispersión. Estos gráficos muestran estadísticas como cantidad de datos, promedio, desviación estándar, valores mínimo y máximo, así como los cuartiles 1, 2 y 3.
- Se extraen las estadísticas relacionadas con la variable seleccionada. Dependiendo del tipo de gráfico elegido, se utilizan diferentes métodos de visualización: barras, líneas o puntos (para dispersión)
- Se muestra el gráfico generado utilizando la librería matplotlib. Esto permite una visualización clara y rápida de las estadísticas de la variable seleccionada.

Ingrese el número de la opción deseada: 1

Ingrese el nombre del compuesto a buscar. En caso ingresarlo en español, se traducirá por fines de búsqueda: isobutano

Archivo isobutane guardado con éxito!

1. Consultas web: Descarga información del compuesto que desees
2. Consultas de registros: Consulta la información descargada
3. Estadísticas
4. Gráficas
5. Borrar todo
6. Salir

Ingrese el número de la opción deseada: 1

Ingrese el nombre del compuesto a buscar. En caso ingresarlo en español, se traducirá por fines de búsqueda: hcl

Archivo hcl guardado con éxito!

1. Consultas web: Descarga información del compuesto que desees
2. Consultas de registros: Consulta la información descargada
3. Estadísticas
4. Gráficas
5. Borrar todo
6. Salir

Ingrese el número de la opción deseada: 1

Ingrese el nombre del compuesto a buscar. En caso ingresarlo en español, se traducirá por fines de búsqueda: fluoxetina

Archivo fluoxetine guardado con éxito!

1. Consultas web: Descarga información del compuesto que desees
2. Consultas de registros: Consulta la información descargada
3. Estadísticas
4. Gráficas
5. Borrar todo
6. Salir

Ingrese el número de la opción deseada: 1

Ingrese el nombre del compuesto a buscar. En caso ingresarlo en español, se traducirá por fines de búsqueda: lexapro

No se puede conectar a Internet. Por favor, verifica tu conexión y vuelve a intentarlo.

0 consulta tus archivos anteriormente guardados.

1. isobutane
2. hcl
3. fluoxetine

1. Consultas web: Descarga información del compuesto que desees
2. Consultas de registros: Consulta la información descargada
3. Estadísticas
4. Gráficas
5. Borrar todo
6. Salir

Ingresa el número de la opción deseada: 2

Consulta tus archivos anteriormente guardados.

1. isobutane
2. hcl
3. fluoxetine

seleccione un archivo: 3

ID del compuesto: 3386

Fórmula molecular: C17H18F3NO

Peso molecular: 309.13404868

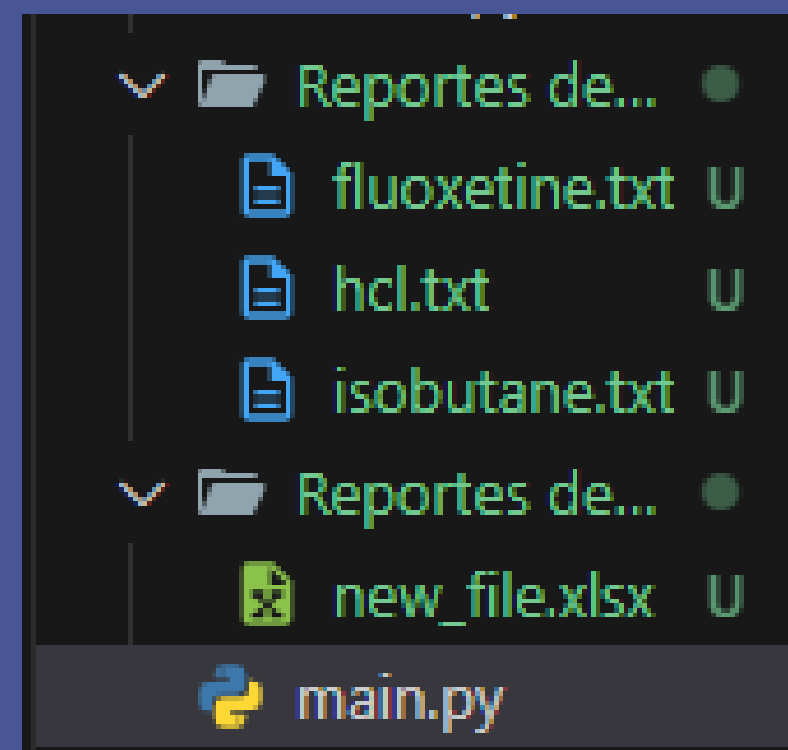
1. Consultas web: Descarga información del compuesto que desees
2. Consultas de registros: Consulta la información descargada
3. Estadísticas
4. Gráficas
5. Borrar todo
6. Salir

Ingrese el número de la opción deseada: 3

Ingrese cómo desea llamar el archivo: new_file

Datos del compuesto [{'Nombre': 'isobutane', 'Masa Molecular': 58.12, 'LogP': 2.1, 'Protones que Acepta': 0, 'Protones que Cede': 0, 'Enlaces que rotan': 0}, {'Nombre': 'hydrogen chloride', 'Masa Molecular': 36.46, 'LogP': 0.8, 'Protones que Acepta': 0, 'Protones que Cede': 1, 'Enlaces que rotan': 0}, {'Nombre': 'methyl-[3-phenyl-3-[4-(trifluoromethyl)phenoxy]propyl]amine', 'Masa Molecular': 309.33, 'LogP': 4.0, 'Protones que Acepta': 5, 'Protones que Cede': 1, 'Enlaces que rotan': 6}]

Los datos y cálculos se han guardado en el archivo Excel: 'new_file'



Seleccione qué tipo de grafica desea:

1. Grafico de pastel
2. Grafico de barras
3. grfico de dispersión

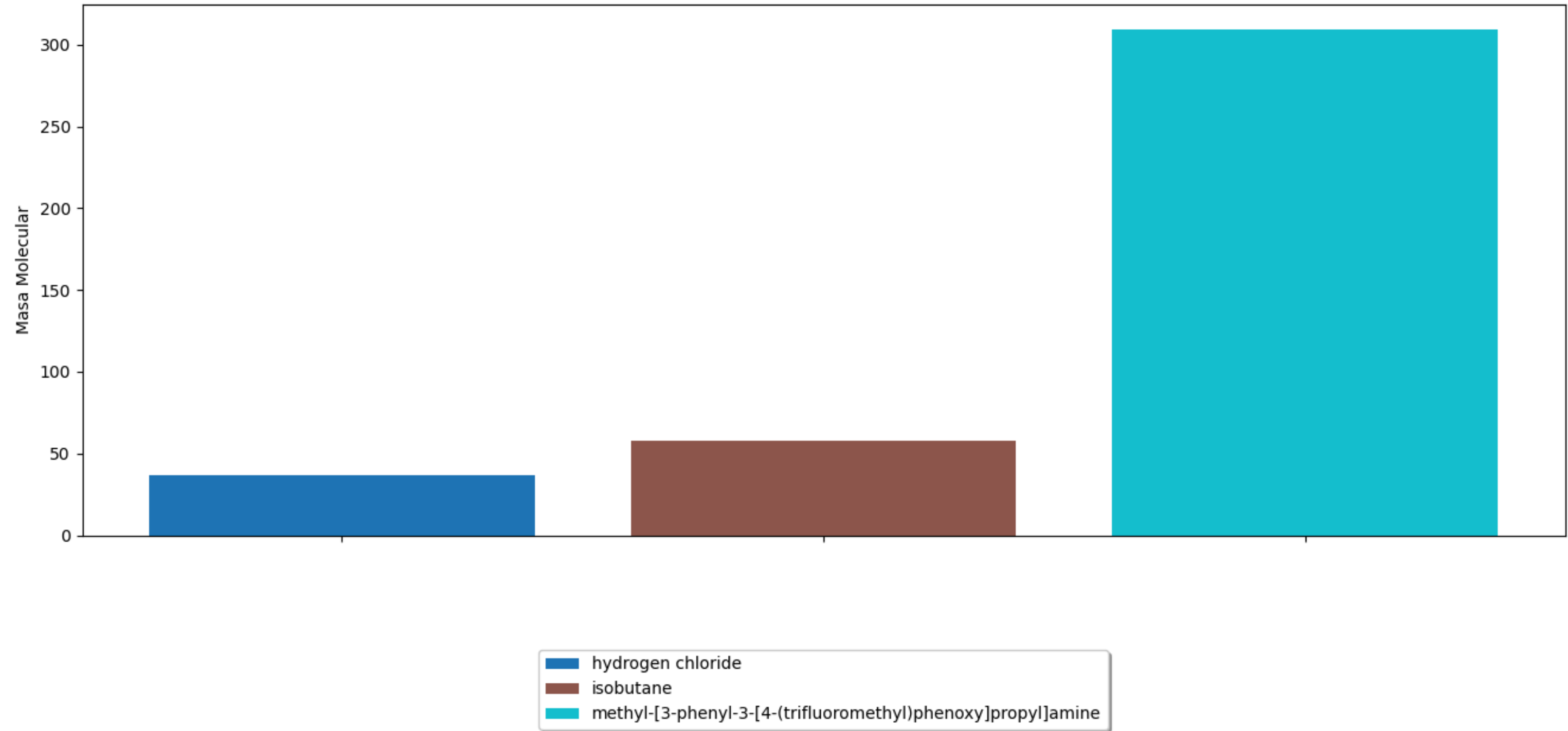
Ingrese el número de la opción deseada: 2

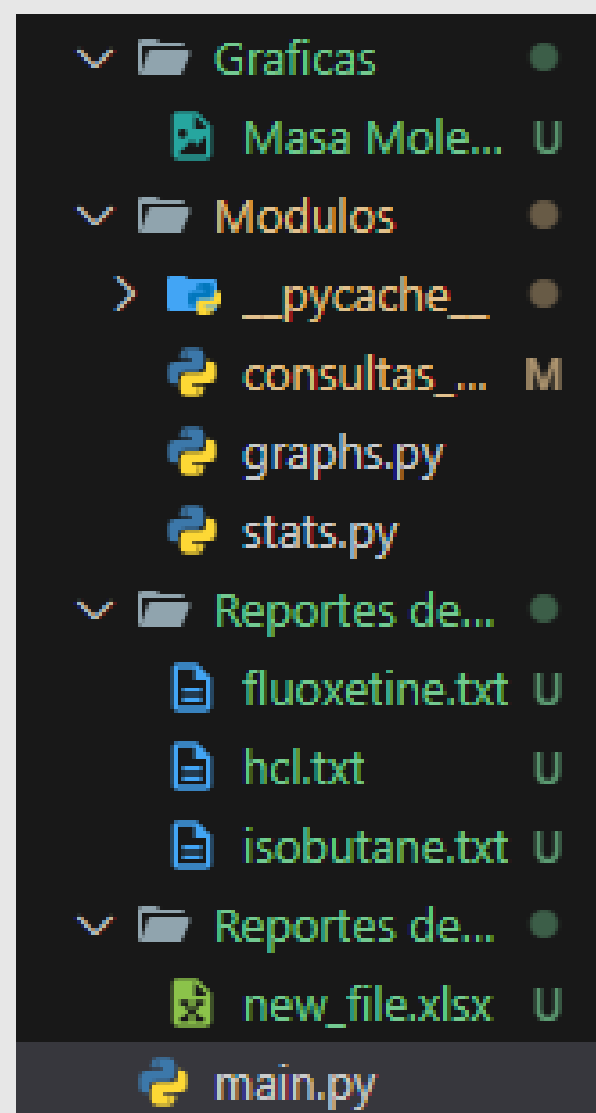
Seleccione qué propiedad de los compuestos desea graficar:

1. Masa Molecular
2. LogP
3. Protones que Acepta
4. Protones que Cede
5. Enlaces que rotan

Opción: 1

Masa Molecular de los Compuestos





```
1. Consultas web: Descarga información del compuesto que deseas
2. Consultas de registros: Consulta la información descargada
3. Estadísticas
4. Gráficas
5. Borrar todo
6. Salir
Ingrese el número de la opción deseada: 5
Archivos borrados exitosamente
```

