



PharmaMind

# 软件用户指南

软件版本 3.2.0  
发布日期 2022 年 05 月 19 日

版权所有 ©北京英飞智药科技有限公司 2019-2022。保留一切权利。

非经北京英飞智药科技有限公司（以下简称“本公司”）书面许可，任何单位和个人不得擅自摘抄、复制本文档内容的部分或全部，并不得以任何形式传播。

#### 商标声明



**和 英飞智药** 为北京英飞智药科技有限公司的商标。本文档提及的其他所有商标或注册商标，由各自的所有人拥有。

#### 服务声明

您购买的产品、服务或特性等应受本公司商业合同和条款的约束，本文档中描述的全部或部分产品、服务或特性可能不在您的购买或使用范围之内。除非合同另有约定，本公司对本文档内容不做任何明示或默示的声明或保证。由于产品版本升级或其他原因，本文档内容会不定期进行更新。除非另有约定，本文档仅作为使用指导，本文档中的所有陈述、信息和建议不构成任何明示或暗示的担保。

## 前言

### 概述

本文档主要介绍 PharmaMind 软件的功能、基本概念、典型操作流程以及样例等，以便您使用 PharmaMind。

### 产品版本

与本文档相对应的产品版本如下。

产品名称	产品版本
PharmaMind	1.1.2.0

### 读者对象

- 本文档主要适用于使用 PharmaMind 的软件用户。

## 修订记录

修订记录累积了每次文档更新的说明。最新版本的文档包括以前所有文档版本的更新内容。

修订日期	版本	修订说明
2022-05-19	V3.2.0	

## 目录

前言 .....	II
目录 .....	IV
图目录 .....	VI
表目录 .....	VII
1 简要说明 .....	1
2 运行环境及要求 .....	2
3 操作说明 .....	3
3.1 账户注册与登录 .....	3
3.1.1 普通账户注册 .....	3
3.1.2 企业账户注册 .....	4
3.1.3 普通账户登录 .....	4
3.1.4 企业主账户登录 .....	5
3.1.5 企业子账户登录 .....	5
3.2 账户管理 .....	7
3.2.1 账户信息管理与修改 .....	7
3.2.2 企业子账户管理 .....	8
3.3 识别结构 .....	9
3.3.1 项目管理 .....	9
3.3.2 文件管理 .....	10
3.3.3 文件详情 .....	12
3.3.4 分子编辑 .....	14
3.3.5 截图识别 .....	17
3.3.6 收藏分子 .....	19

---

3.4 设置 .....	20
3.4.1 设置功能 .....	20

## 图目录

图 1	普通账户注册 .....	3
图 2	普通账号登录 .....	4
图 3	企业主账号登录 .....	5
图 4	企业子账号登录 .....	6
图 5	账户信息管理与修改 .....	7
图 6	企业子账户管理 1 .....	8
图 7	企业子账号管理 2 .....	9
图 8	项目管理 .....	10
图 9	文件管理 .....	11
图 10	文件详情 1 .....	12
图 11	文件详情 2 .....	13
图 12	文件详情 3 .....	14
图 13	分子编辑 1 .....	15
图 14	分子编辑 2 .....	16
图 15	分子编辑 3 .....	16
图 16	分子编辑 4 .....	17
图 17	截图识别 1 .....	18
图 18	截图识别 2 .....	18
图 19	收藏分子 .....	19
图 20	设置 .....	20

## 表目录

表 1 普通账户注册 .....	4
------------------	---



## 1 简要说明

PharmaMind 主要包含以下模块：

编号	功能名称	功能描述
1	账户登录	包括个人账户与企业账户的登录与注册
2	账户管理	包括账户个人信息的展示以及修改以及企业子账户的管理等
3	识别结构	包括化学期刊、专利等文献的 AI 自动识别以及化学结构式的编辑、下载等

## 2 运行环境与要求

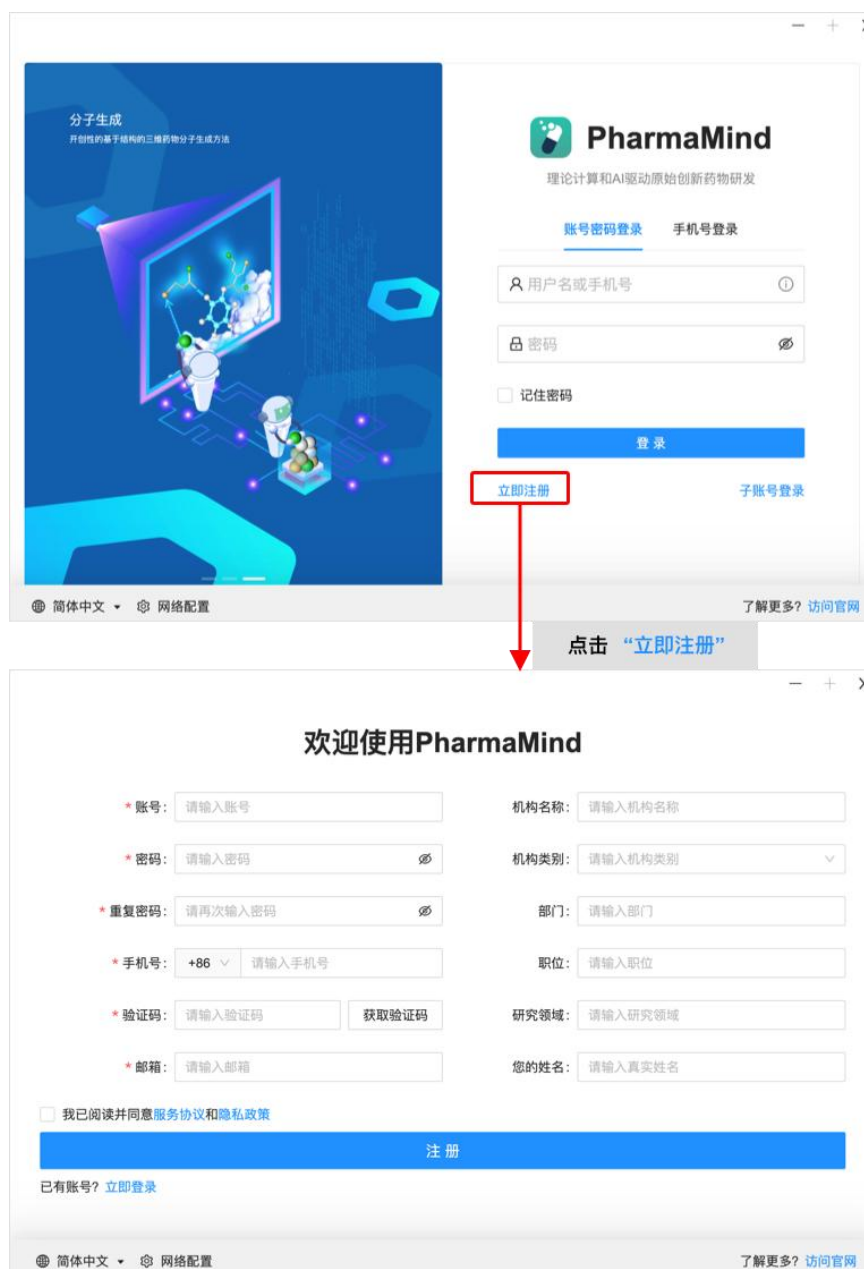
编号	环境	环境要求
1	操作系统	支持 Windows10 与 Mac 操作系统。
2	显示分辨率	最小分辨率支持 1920*1080，该分辨率不支持字体放大。

## 3 操作说明

### 3.1 账户注册与登录

#### 3.1.1 普通账户注册

在登录页面点击立即注册，如图 1 所示。



**分子生成**  
开创性的基于结构的三维药物分子生成方法

**PharmaMind**  
理论计算和AI驱动原始创新药物研发

账号密码登录 手机号登录

用户名或手机号

密码

☐ 记住密码

登录

立即注册 子账号登录

了解更多? 访问官网

点击“立即注册”

**欢迎使用PharmaMind**

\* 账号: 请输入账号

\* 密码: 请输入密码

\* 重复密码: 请再次输入密码

\* 手机号: +86 请输入手机号

\* 验证码: 请输入验证码 获取验证码

\* 邮箱: 请输入邮箱

机构名称: 请输入机构名称

机构类别: 请输入机构类别

部门: 请输入部门

职位: 请输入职位

研究领域: 请输入研究领域

您的姓名: 请输入真实姓名

☐ 我已阅读并同意服务协议和隐私政策

注册

已有账号? 立即登录

简体中文 网络配置 了解更多? 访问官网

图 1 普通账户注册

按如下要求填写注册表单，如表 1。

编号	表单项	填写要求
1	账号	支持中文、英文、-、_，不超过 128 个字符
2	密码	填写密码需包含数字,英文,字符中的两种以上，长度 6-32
3	重复密码	同上
4	手机号	11 位中国大陆注册的手机号
5	验证码	点击获取验证码，并填写

表 1 普通账户注册

阅读服务协议与隐私政策，并勾选。

点击注册。

### 3.1.2 企业账户注册

企业账户注册请联系北京英飞智药科技有限公司：[service@iipharma.cn](mailto:service@iipharma.cn)。

### 3.1.3 普通账户登录

普通账号登录可通过账号密码或手机号两种方式登录。如图 2 普通账号登录所示。

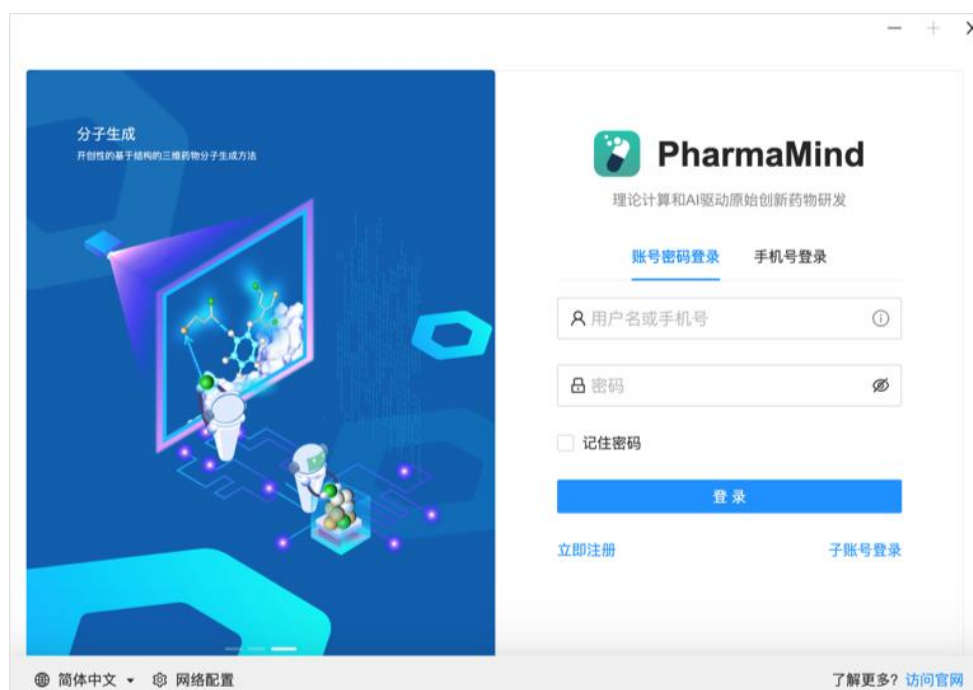


图 2 普通账号登录

### 3.1.4 企业主账户登录

企业主账户登录方式与普通账号相同，可通过账号密码或注册手机号登录。如图 3 企业主账号登录所示。

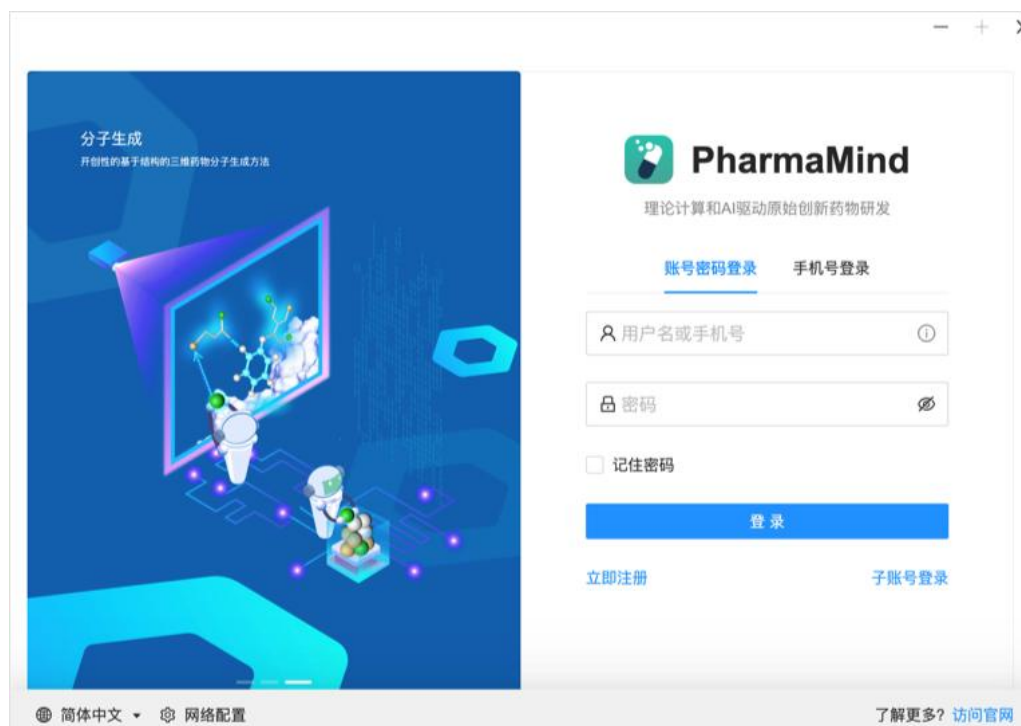


图 3 企业主账号登录

### 3.1.5 企业子账户登录

企业子账号登录，点击子账号登录，输入子账号名、企业 ID、密码，点击登录。如图 4 企业子账号登录所示。

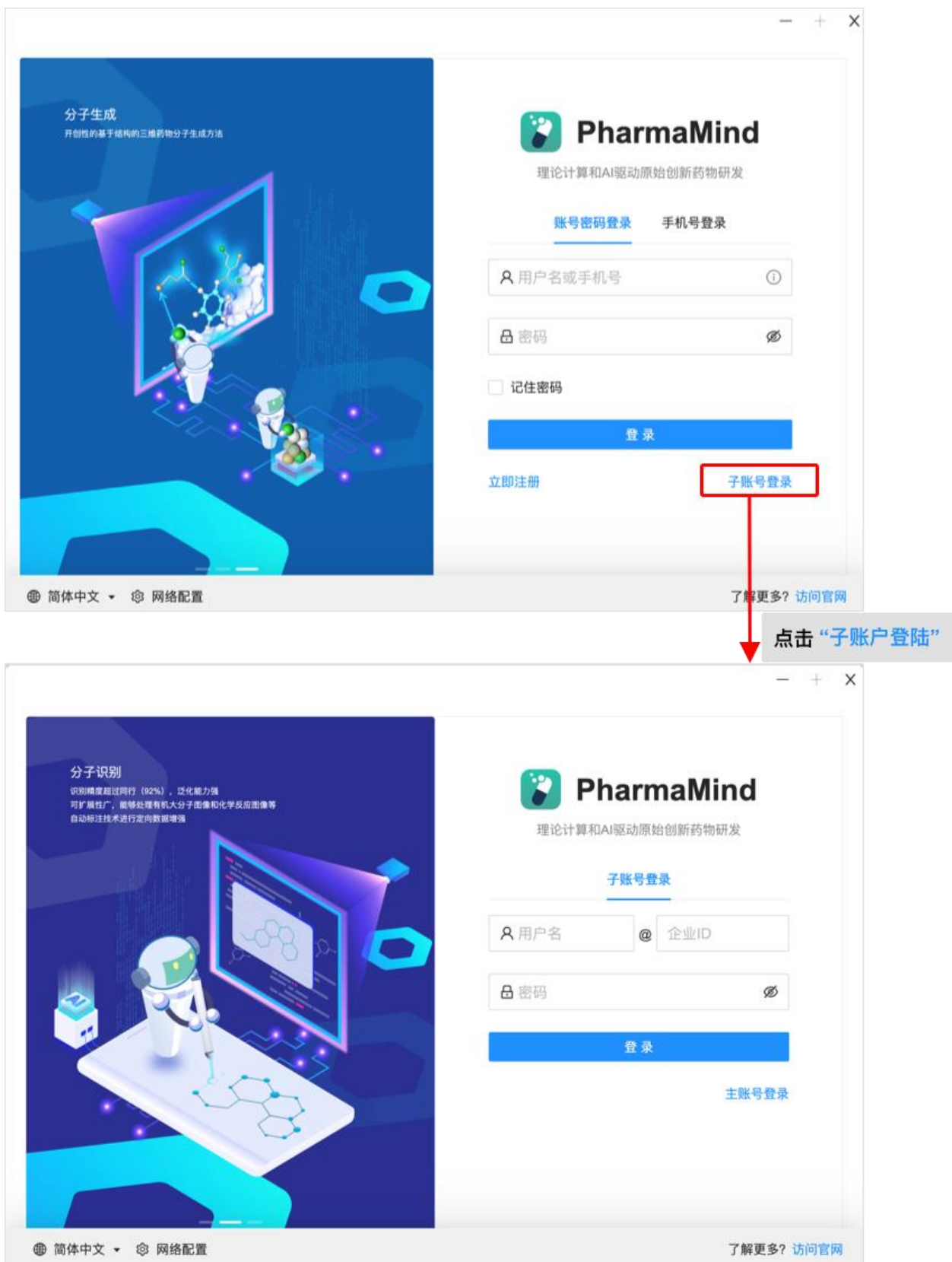


图 4 企业子账号登录

## 3.2 账户管理

### 3.2.1 账户信息管理与修改

登录之后，点击左上角账户图标，在个人中心中可查看和修改个人账户信息。如图 5 账户信息管理与修改所示。

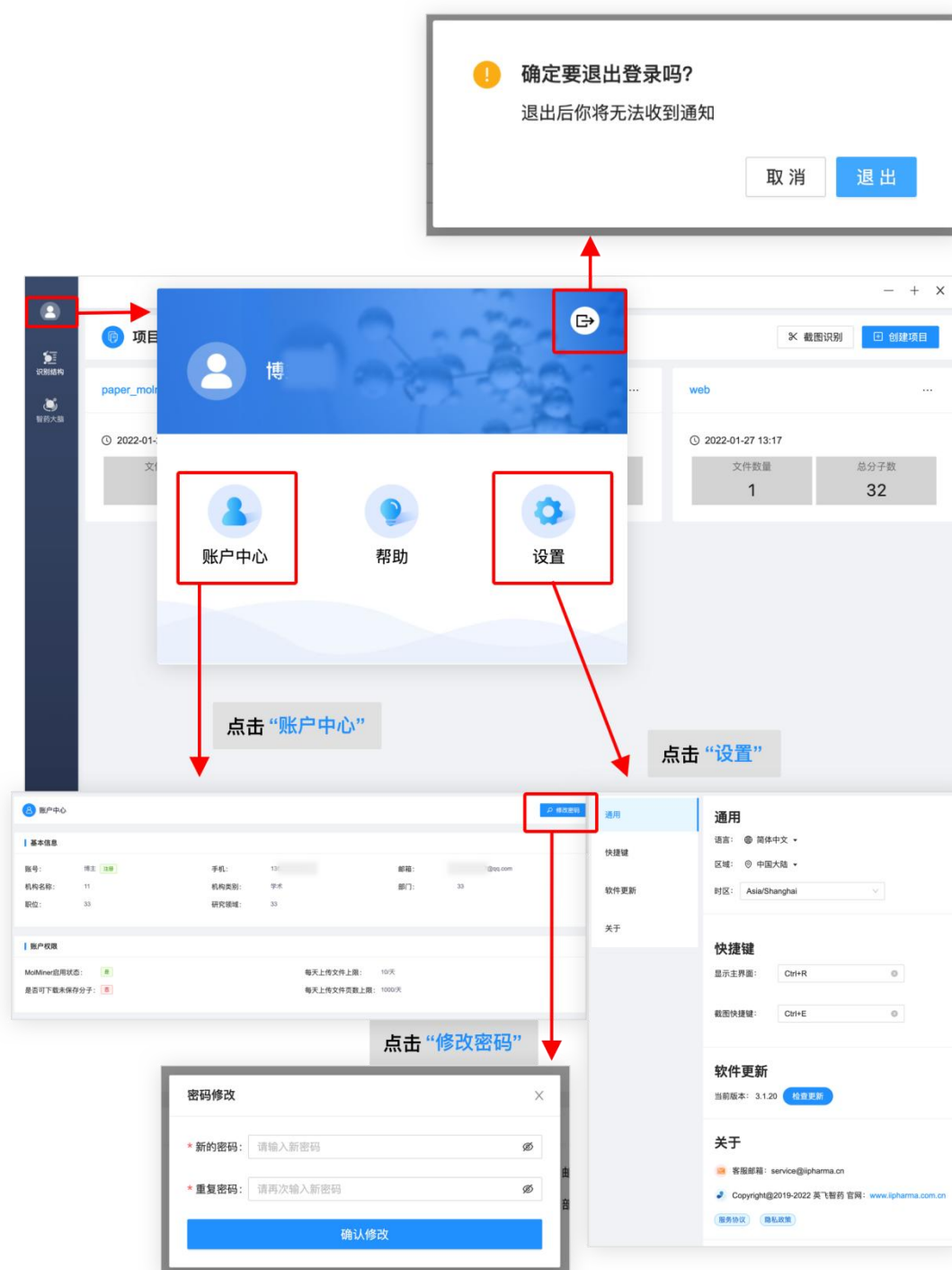


图 5 账户信息管理与修改

### 3.2.2 企业子账户管理

在登录企业主账号后，点击左上角账户图标，可进入企业子账户管理页面。在企业子账户管理页面进行企业子账号的创建、删除和修改操作。如图 6 企业子账户管理 1 和图 7 企业子账户管理 2 所示。

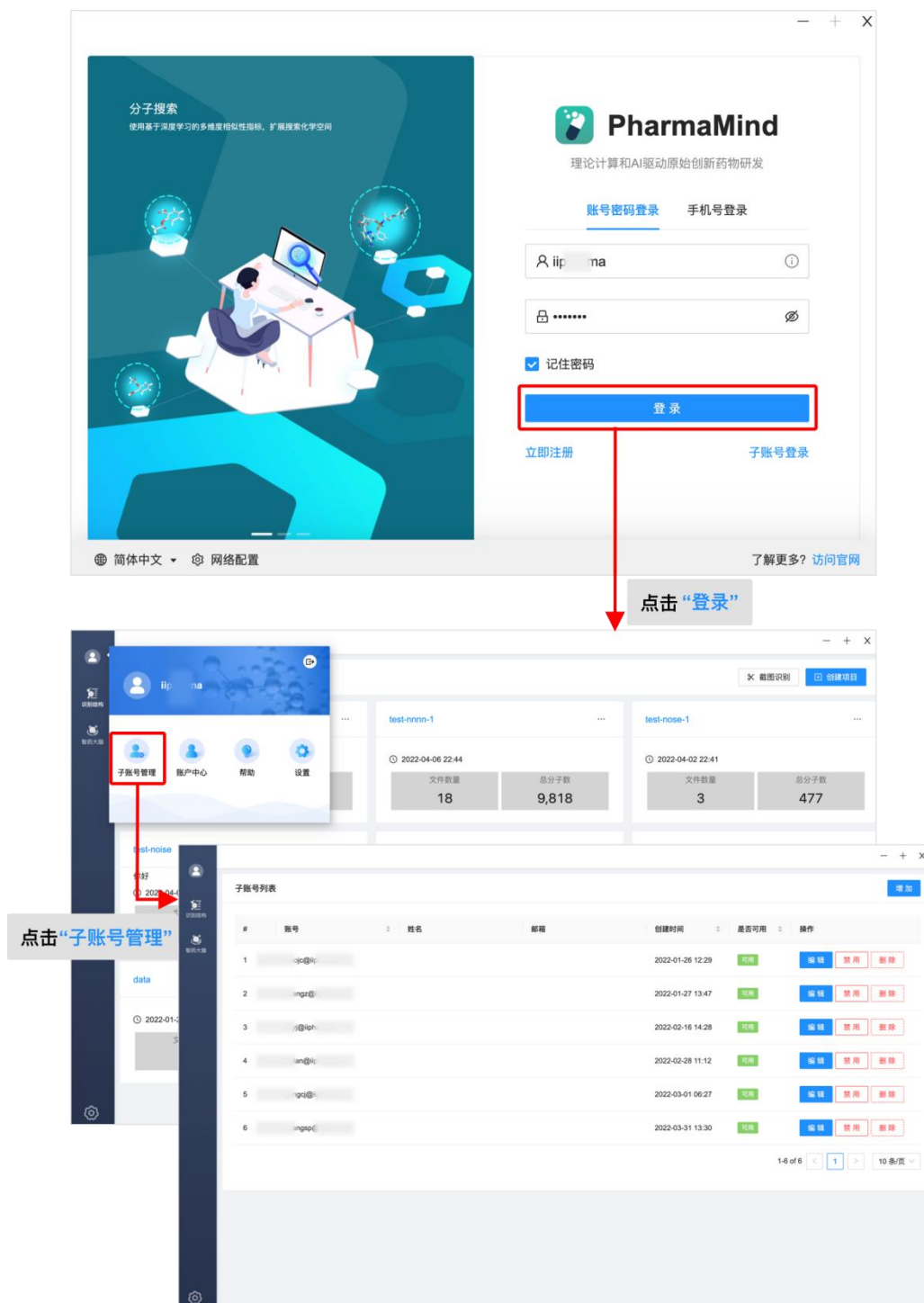


图 6 企业子账户管理 1



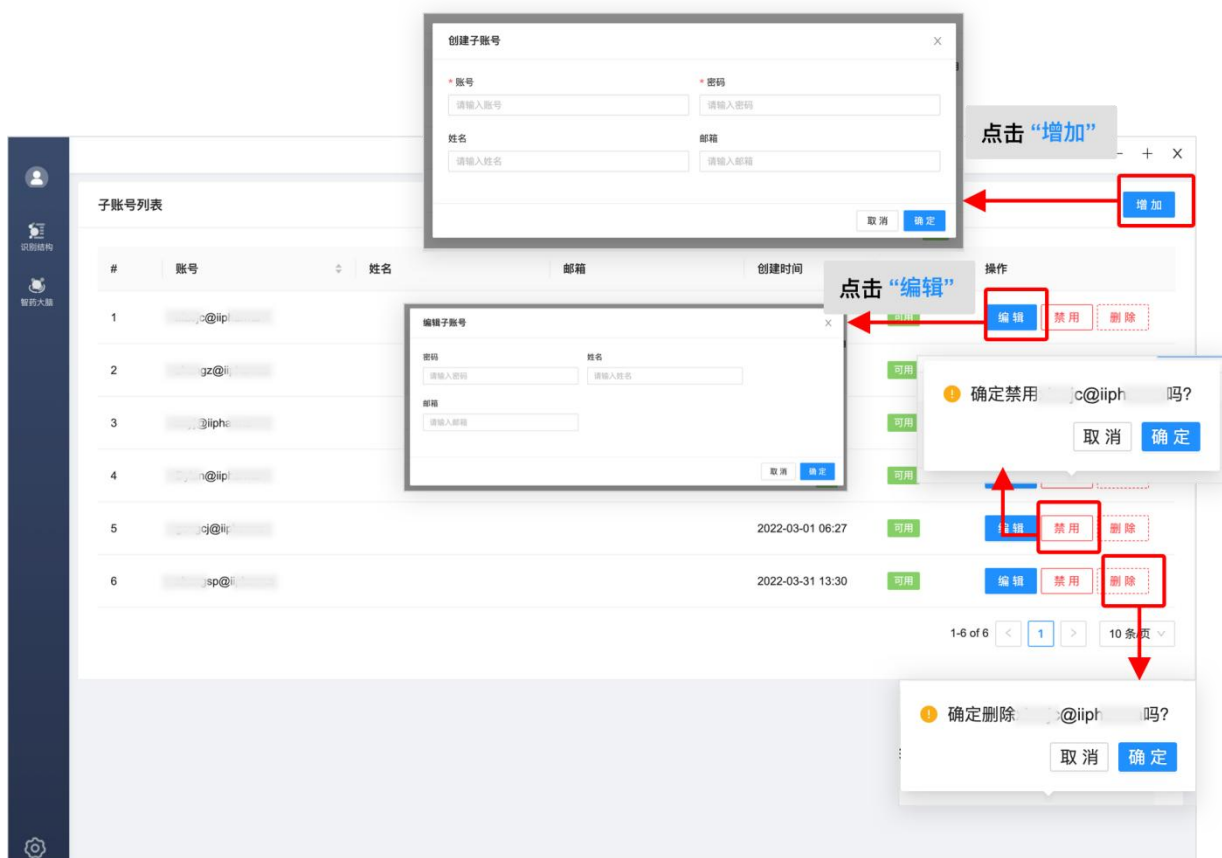


图 7 企业子账号管理 2

## 3.3 识别结构

### 3.3.1 项目管理

在项目管理页面，可以创建新项目，查看、编辑和删除已有项目。如图 8 项目管理所示。

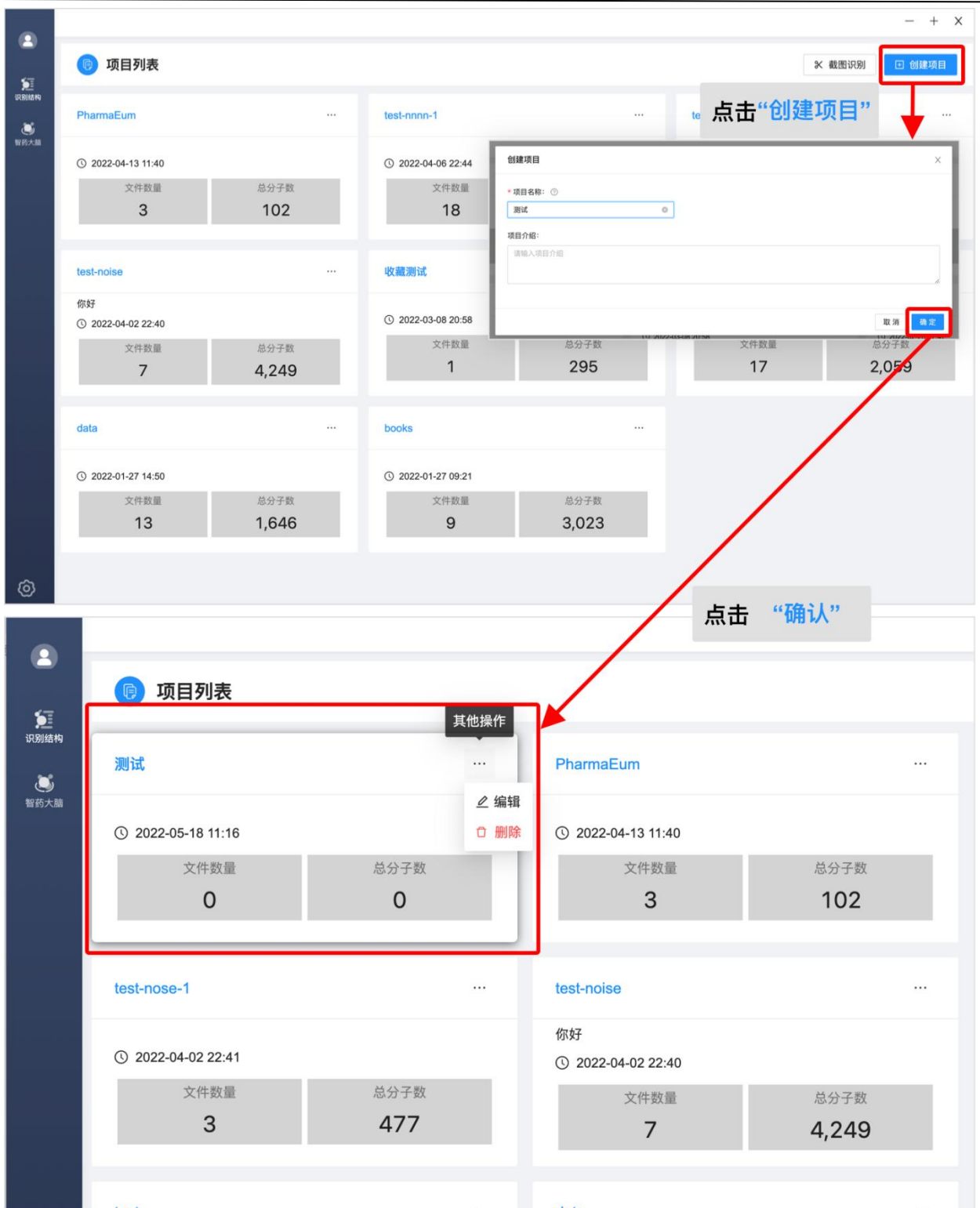


图 8 项目管理

### 3.3.2 文件管理

点击已有项目，进入文件管理页面。在文件管理页面，点击上传文件，上传要识别的 PDF 文件。如图 9 文件管理所示。

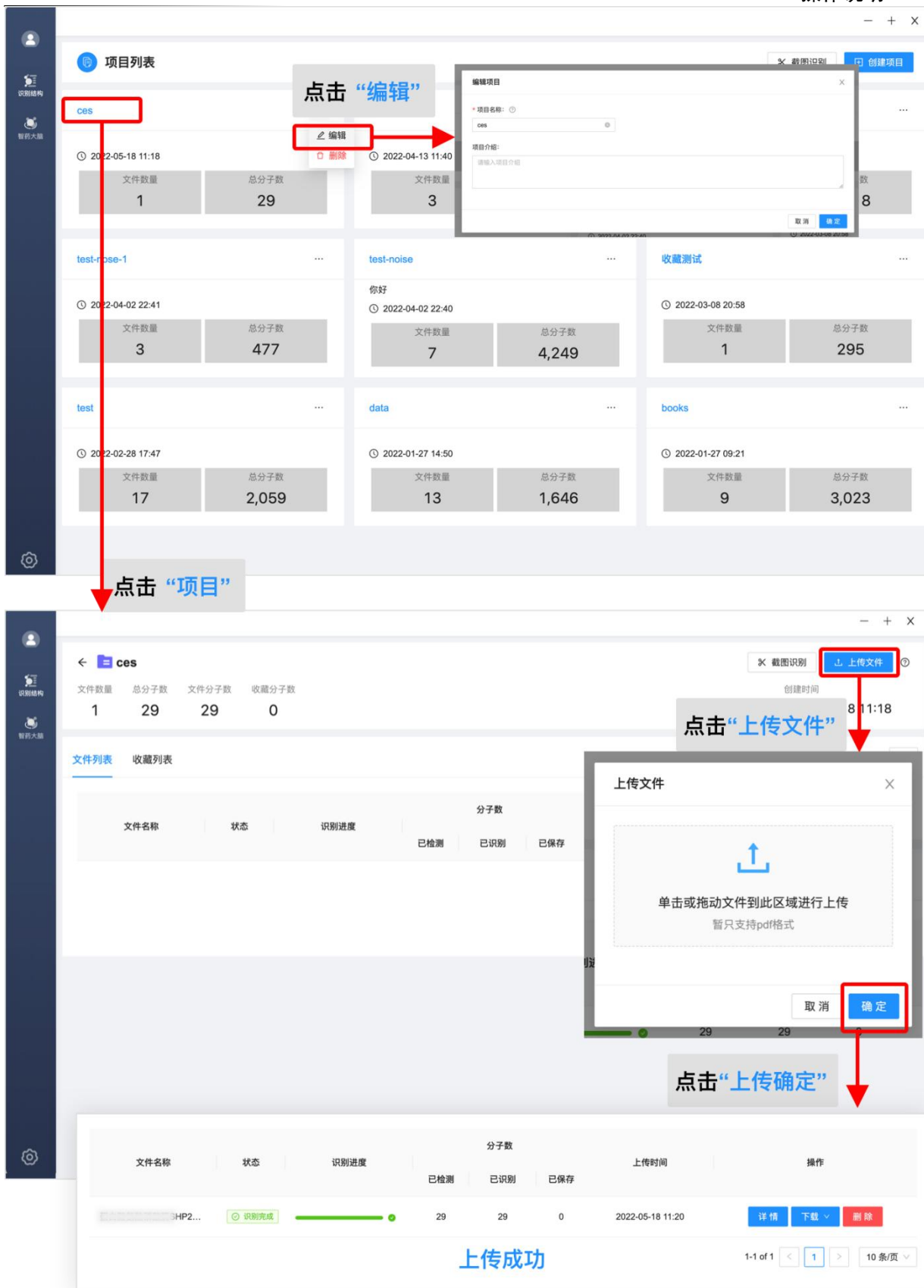


图 9 文件管理

### 3.3.3 文件详情

点击查看详情按钮，进入文件详情页面。在文件详情页面，查看当前 PDF 文件的识别情况。左侧可预览当前的 PDF 文件，以及识别的框选分子。右侧是识别出的分子列表。如图 10 文件详情 1 所示。

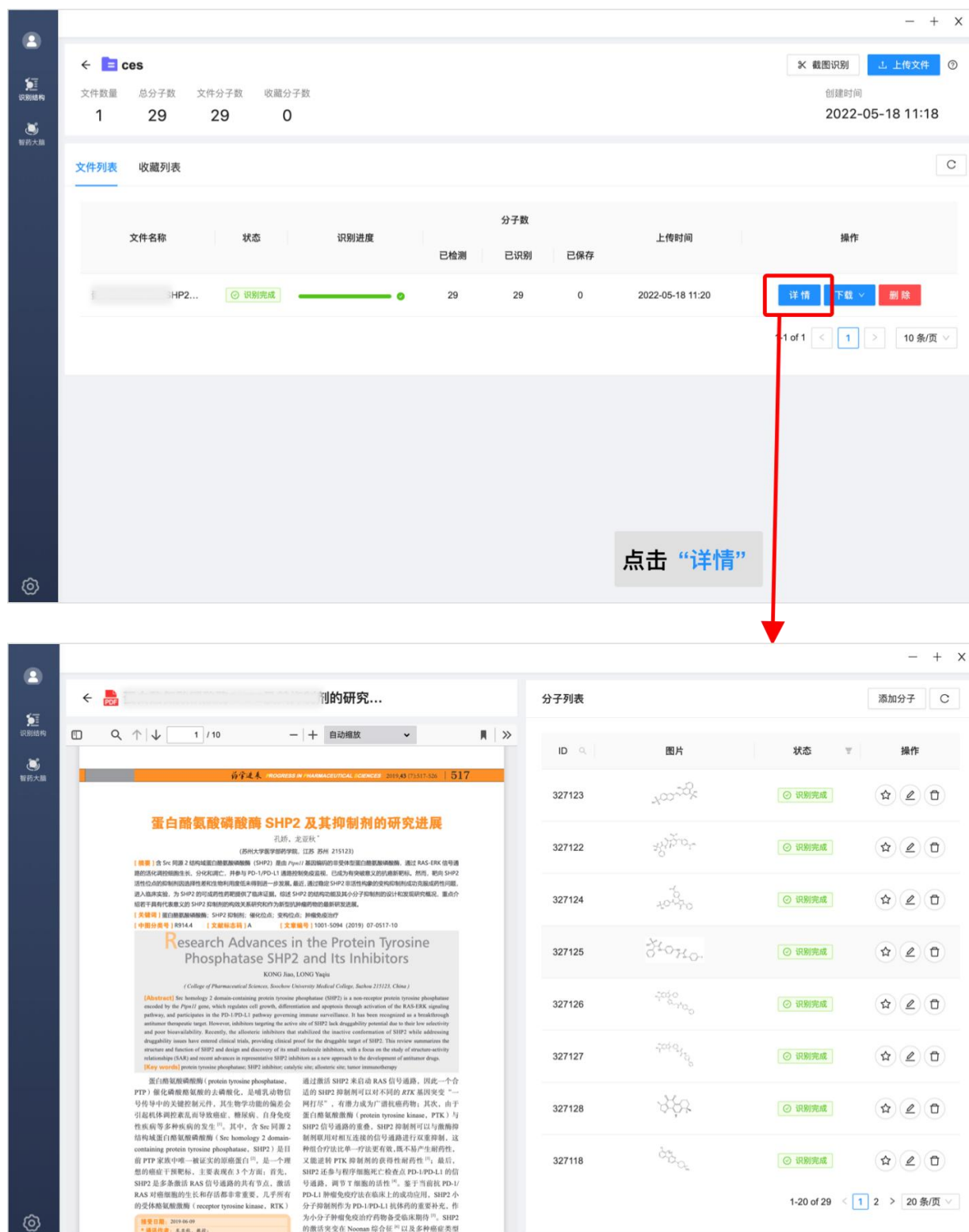


Figure 10 illustrates the 'File Details' page in the PharmaMind system. The top screenshot shows the 'File List' table with a 'Details' button highlighted for the file 'HP2...'. A red arrow points from this button to the bottom screenshot, which shows the 'File Details' page. The left side of the bottom screenshot displays a PDF preview of a research paper titled 'Research Advances in the Protein Tyrosine Phosphatase SHP2 and Its Inhibitors'. The right side shows a 'Molecule List' with 11 entries, each with a chemical structure, ID, and status 'Identified'.

文件名称	状态	识别进度	已检测	已识别	已保存	上传时间	操作
HP2...	识别完成	100%	29	29	0	2022-05-18 11:20	详情 下载 删除









ID	图片	状态	操作
327123		识别完成	☆ 编辑 删除
327122		识别完成	☆ 编辑 删除
327124		识别完成	☆ 编辑 删除
327125		识别完成	☆ 编辑 删除
327126		识别完成	☆ 编辑 删除
327127		识别完成	☆ 编辑 删除
327128		识别完成	☆ 编辑 删除
327118		识别完成	☆ 编辑 删除

图 10 文件详情 1

如果有未框选分子，可点击右上角添加分子添加框选，框选完成后会自动识别分子。如果框选的位置不准确，可点击相关分子，点击修改按钮，调整框选位置，修改框选位置后，会自动重新识别分子。

点击分子列表相关分子，或点击左侧框选分子，都可以进入相关分子编辑页面。

如图 11 文件详情 2 所示。

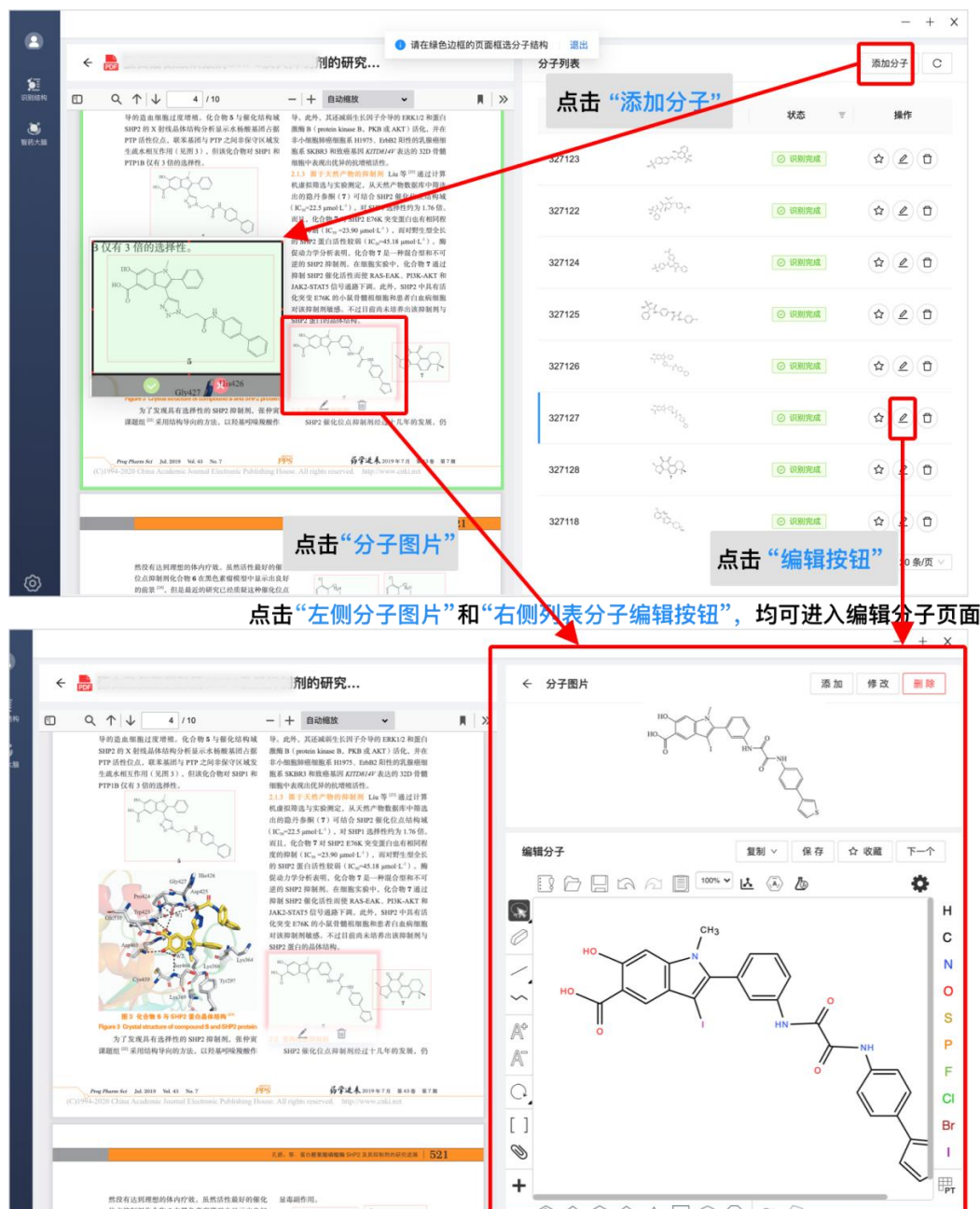


图 11 文件详情 2

进入分子编辑页面后，关闭编辑分子按钮可以返回分子列表。

在分子编辑页面，点击复制按钮，可支持复制分子，包括 SDF 格式和 SMILES 格式。在编辑分子后，点击保存按钮可保存编辑结果，点击下一个按钮可进入下一个未保存分子的编辑页面。

如图 12 文件详情 3 所示。



图 12 文件详情 3

### 3.3.4 分子编辑

在分子编辑页面右下角可以进行分子编辑操作，包含一个画布和四周的功能按钮。其中画布上方的按钮依次为：

1. 清空画布：可清空画布内所有结构
2. 载入与保存：可以载入本地文件或将画布内容保存至本地
3. 剪切、复制、粘贴：其中复制按钮有次级按钮，可以复制不同类型的内容
4. 调节画布缩放百分比
5. 页面布局：将画布调整为最佳视角
6. 结构整理：使画布中的结构变为统一的键长与键角
7. 芳香化与去芳香化：将芳香性的环以芳香型或凯库勒型展示
8. 计算 CIP：标记画布中的立体化学，如 R/S、E/Z



9. 结构检查：检测结构的各项属性是否有误
10. 计算值：展示结构的部分属性，如分子式、摩尔质量等

如图 13 分子编辑 1 所示。

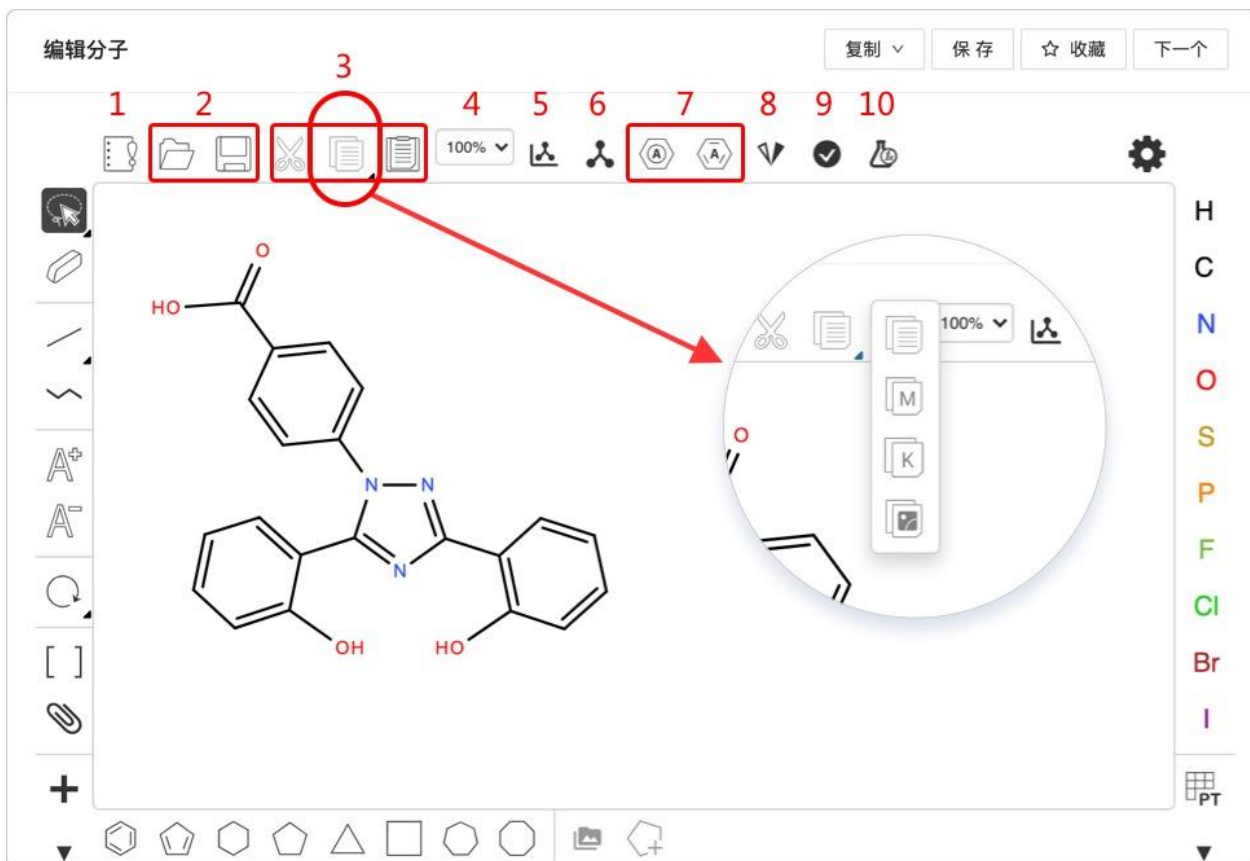


图 13 分子编辑 1

其中画布左侧的按钮依次为：

1. 选择工具：有次级按钮，分别可以以套索形式、方框形式、结构片段形式选择；
2. 擦除工具：可以擦除选择的区域；
3. 单键：有次级按钮，可以点选画出不同类型的单键；
4. 链：可以画出任意长度的碳链；
5. 电性：可以对原子标记正电或负电性；
6. 旋转工具：有次级按钮，可以对画布进行任意角度旋转、水平翻转、垂直翻转；
7. S-Group 工具：可以将框选结构标记为 S-Group 并进行编辑。使用此工具可将重复结构、聚合物或一些保护基团进行缩写，如图 14 分子编辑 2 所示。

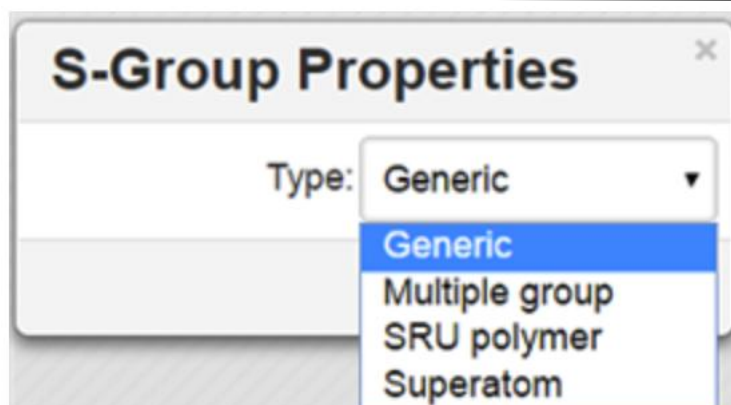


图 14 分子编辑 2

8. 加号工具：用于编辑反应式；
9. 箭头工具：具有次级按钮，可以与加号工具共同使用编辑反应式；
10. 映射工具：具有次级按钮，使用此工具可以映射出反应物和产物中的共同原子；
11. R 基工具：具有次级按钮，可以某一个或多个标记为 R 基，使用此工具可使结构成为马库什结构；
12. 绘图工具：具有次级按钮，可以分别绘制椭圆、矩形及直线；
13. 文本工具：可以添加可编辑的文本内容；

如图 15 分子编辑 3 所示。

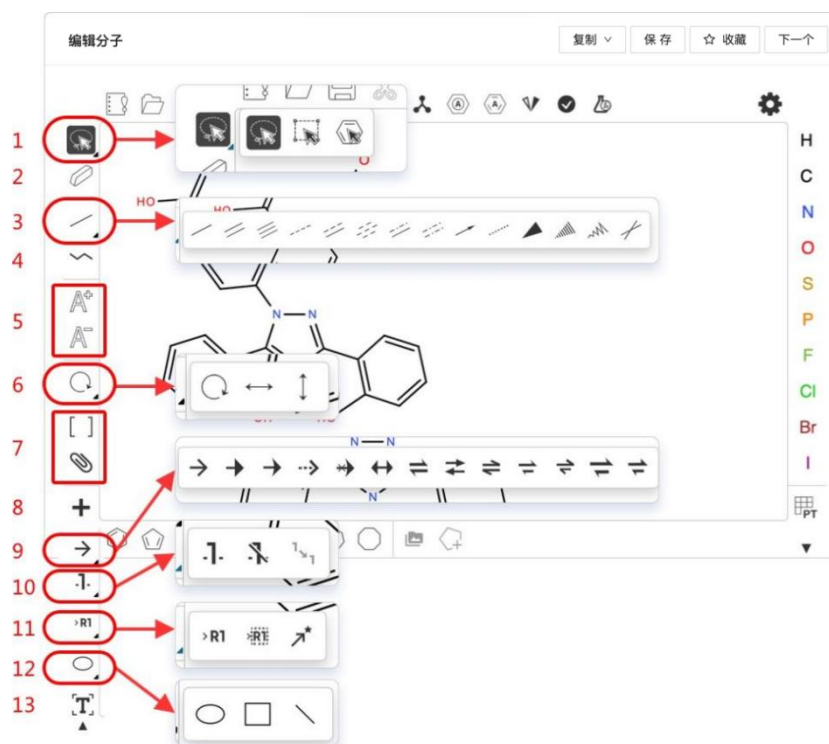


图 15 分子编辑 3



其中画布下方的按钮为环系选项，可以在画布添加所选择的环结构。画布右侧的按钮为原子选项，可以对画布中任意点选原子进行替换。如图 16 分子编辑 4 所示。

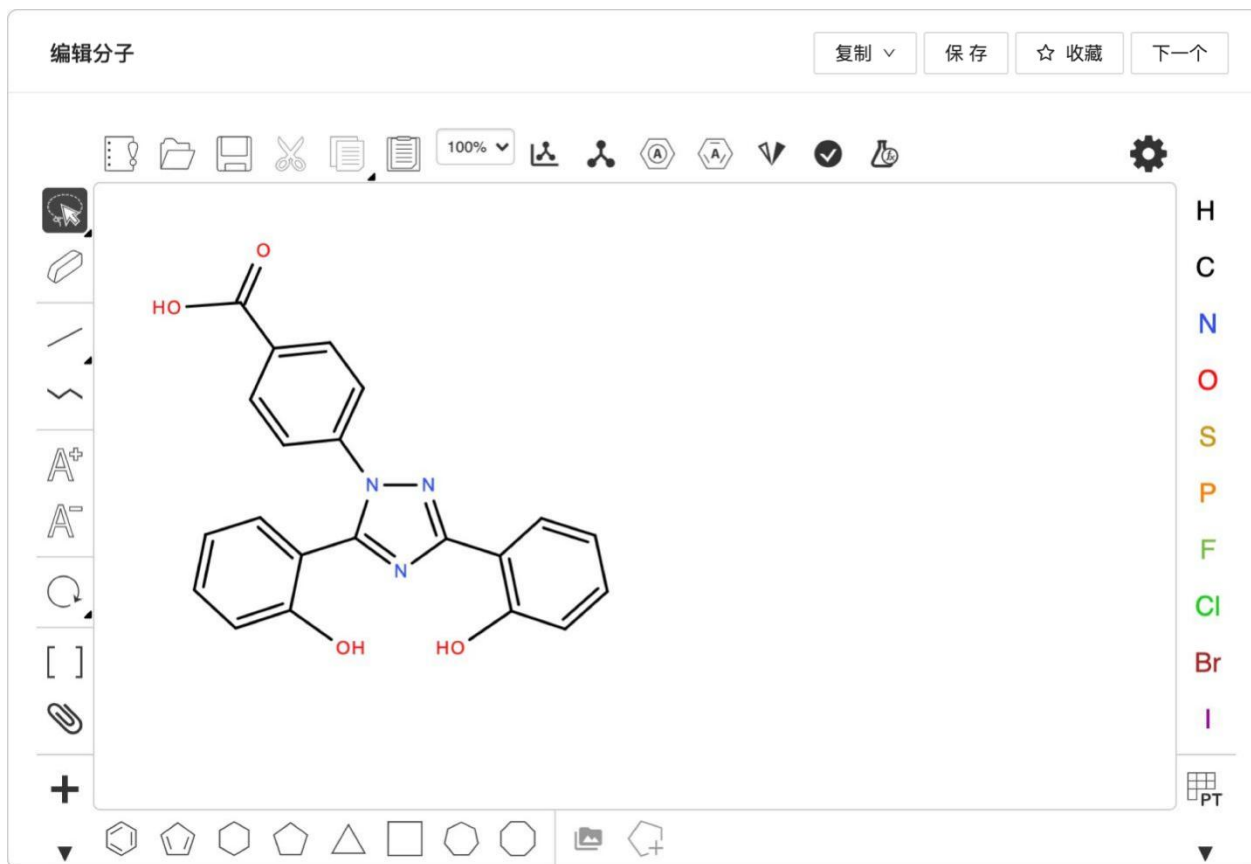


图 16 分子编辑 4

### 3.3.5 截图识别

点击“截图识别”按钮，或使用截图快捷键（默认 CTRL+U），截取需要识别的分子结构。如图 17 截图识别 1 所示。识别出的分子，支持复制“sdf”和“smiles”格式。可收藏到文件夹中。如图 18 截图识别 2 所示。

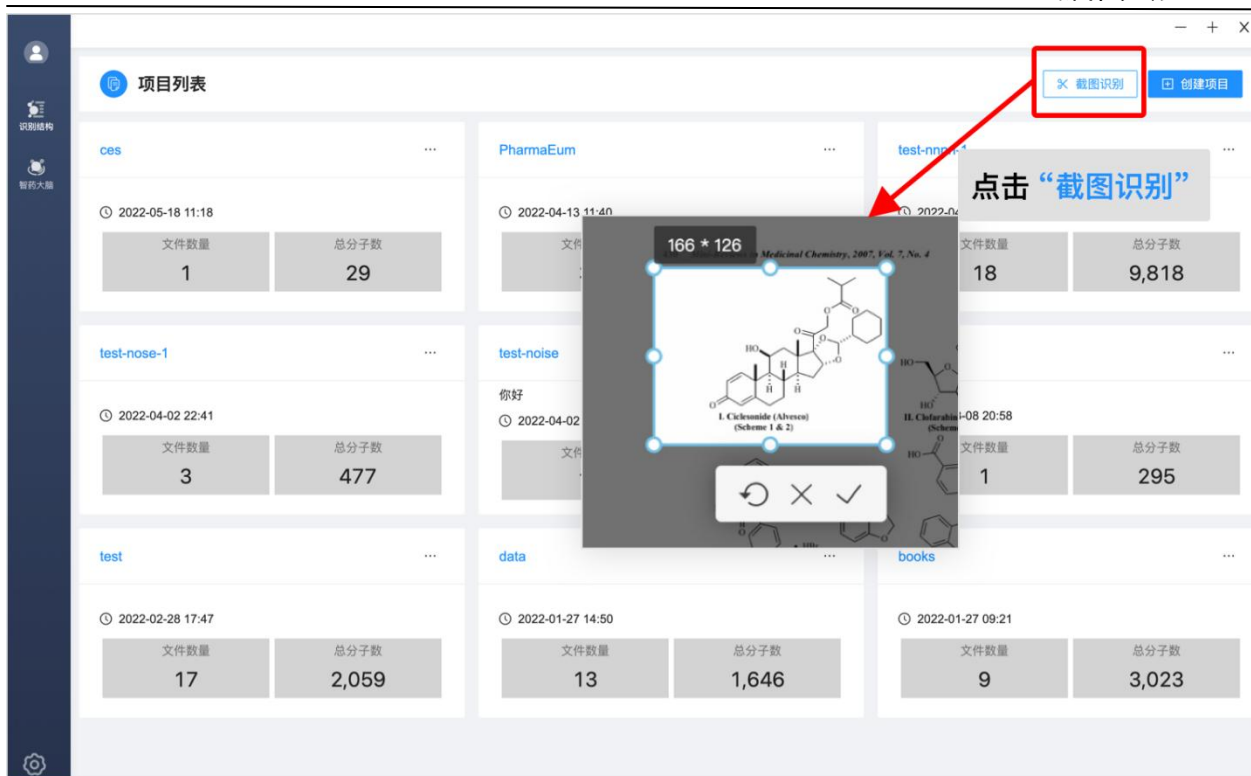


图 17 截图识别 1

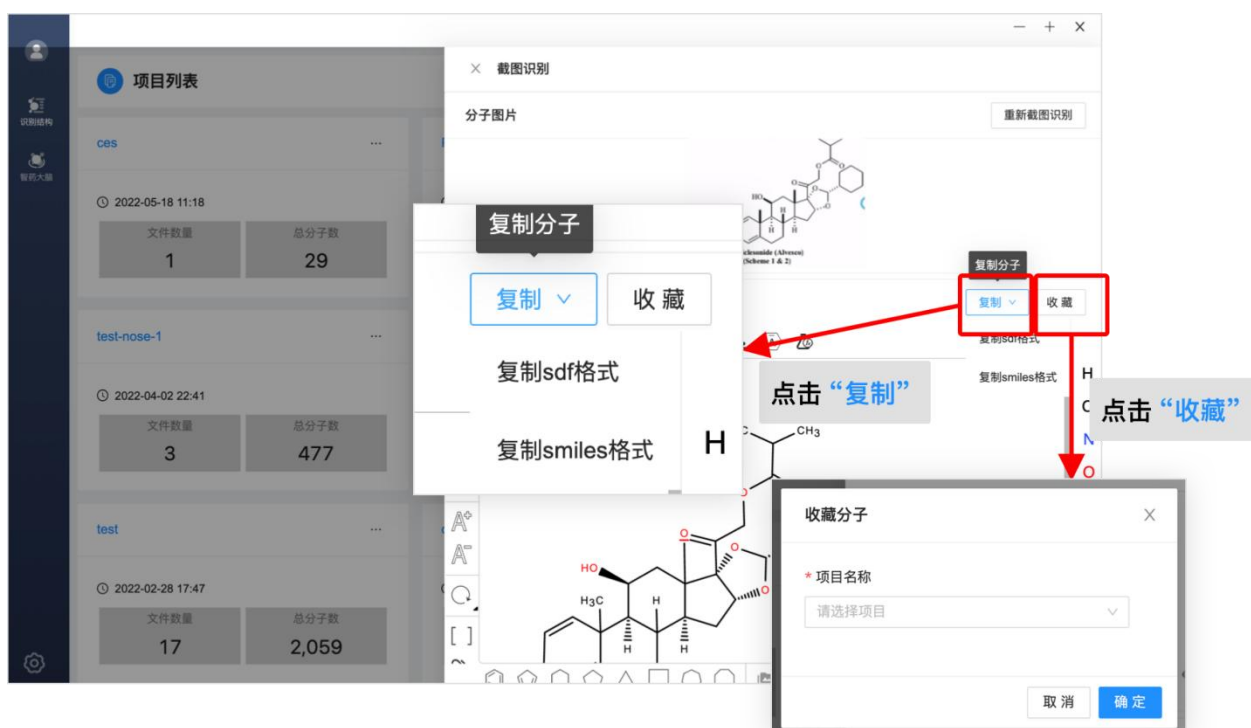


图 18 截图识别 2

### 3.3.6 收藏分子

分子收藏功能可以收藏上传文件中的分子，也可以收藏截图的分子。如图 19 收藏分子所示。

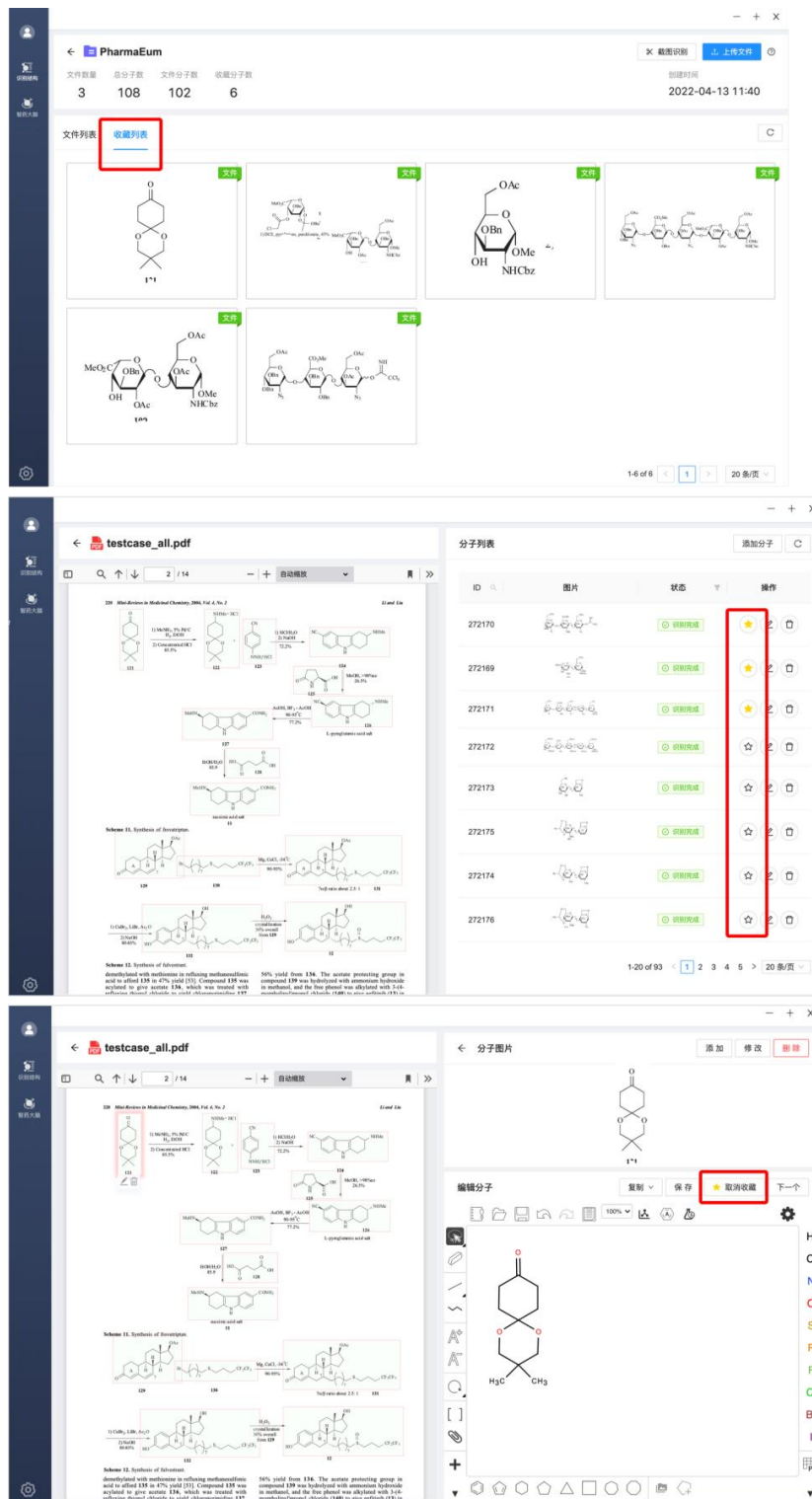


图 19 收藏分子

## 3.4 设置

### 3.4.1 设置功能

点击头像进入“设置页面”，可查看或设置快捷键。如图 20 设置所示。



图 20 设置