

化学品网络营销平台—化学深层网检索引擎 ChemDB Portal

中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室

高性能计算与化学信息学课题组

网站: <http://chemport.ipe.ac.cn/IPE-ChINGroup/index.html>

概 况 : 化学深层网检索引擎系统 ChemDB Portal (<http://www.chemdb-portal.cn/>)是高性能计算与化学信息学课题组建立的网络化学化工信息资源集成检索平台的系列工具之一,它是一个利用深层网检索技术在线检索多来源数据库的化学检索引擎。目前的通用搜索引擎如 Google 等还不具备这一功能。利用 ChemDB Portal,用户仅需输入一次查询请求,该系统就可自动检索网络上的多个专业数据库(包括物化性质、化合物安全数据表 MSDS、供应商等),把从各库检索得到结果统一返回给用户。随着系统的不断扩展,有望逐步达到一次检索、遍搜各库的目标。该系统是一个独特的化学品、试剂的推广和营销平台。

技术特点: ChemDB Portal 建立在独特的化学深层网数据自动提取技术之上,还未见同类方法实现的系统。除了具备目前网络上的化学品推广平台功能如产品信息提交、多供应商信息检索外, ChemDB Portal 特色功能包括:国内外化合物各类数据的多库统一检索、多来源 MSDS 统一检索、相关数据的集成显示等。检索途径除常见的化合物 CAS 号、名称、分子式外,还包括化合物结构和子结构检索这一与国际主流化学数据库接轨的功能;并且,在系统的任意一个页面提供随处可用的化合物检索入口,也可以从一个化合物的检索结果通过点击其分子式、名称或别名的一部分得到更多化合物的信息;检索结果中给出化合物可操控的 3D 化学结构显示。

实际应用情况: 平台原型系统经过 5 年开发、2 年的内部测试已经完成,已上线试运行;应用情况将随着系统的运行逐步提供。

市场分析: 由于基于化学深层网技术, ChemDB Portal 除了具备目前网络上的化学品推广平台功能外,其从网络上自动收集化学品相关的物性数据、MSDS 化学品供应商信息、并提高通过化学结构和子结构统一检索的独特功能,为化学品企业提供了一个独特、更能吸引眼球、更具竞争力的产品推广平台。

合作方式: 我所提供技术支持、合作方负责平台营销。