**国家化合物样品库上海药物所卫星库**

**样品结构录入和管理操作规程**

上海药物所卫星库是国家化合物样品库（核心库（国家化合物样品库）+ 卫星库（中科院上海药物所、医科院药物所、军科院药物毒物所、北京大学医学部、中国药科大学、杭州高通量药物筛选中心）的组成部分之一。上海药物所卫星库以天然资源来源样品为特色，样品主要分为三类，天然化合物样品，天然化合物衍生物样品，相关的全合成化合物样品。商业购置的化合物除外。

上海药物所卫星库采用数据统一标准，样品分散存放的管理方式，化合物结构统一登记录入，样品由每个课题组各自保管存放。

**一、登记录入结构信息的样品需要达到的标准**

1. 天然化合物样品，每个2毫克以上，天然化合物衍生物样品，每个10毫克以上，全合成化合物样品，每个10毫克以上；
2. 化合物样品要求结构明确,纯度在90%以上，并提供相应的LC/MS（也可为MS和HPLC）和核磁共振谱图。录入的样品将不定期的接受第三方抽检；
3. 课题组之间化合物结构重复，仅在排序上产生影响，即A组与B组某个化合物结构重复，A组先送，排序上A组排在前，B组排在后，但A组与B组均能录入。

**二、登记录入的化合物结构需要提供的信息**

1）化合物结构、名称、来源（天然，衍生，全合成）、存量；

2）课题组编号、谱图信息、纯度；

3）其他需要提供的信息。

**三、化合物结构登记录入流程**

1）化合物结构送交前，请认真阅读此管理操作规程；

2）参与的课题组按照化合物来源 (天然，衍生，全合成)不同，对化合物结构进行归类，并与相关信息一起输入到数据库（如ISISBASE，CHEMOFFICE）软件中；

3）化合物结构信息数据库统一交至卫星库结构信息管理员处，并填写“国家化合物样品库上海卫星库结构入库登记表”。根据化合物来源(天然，衍生，全合成)不同，分别填写表格。入库登记表一式两份，并注明相关结构已接收，分别由送交结构课题组和信息管理员保存；

4）课题组送交的化合物结构信息录入上海卫星库结构数据库之后，信息管理员将进行结构查重，并以邮件形式通知相关课题组，并告知排序情况；

5）结构录入后，对应的样品及相关的资料将不定期的接受第三方抽检（国家化合物样品库指派的）。

**四、化合物管理及安全**

1）根据上海药物所卫星库采用统一标准，分散存放的管理方式，化合物结构等信息统一登记录入，并只限送交结构的课题组查询，样品和对应的谱图报告由参与的课题组各自保管存放；

2）录入的化合物结构等信息应确保正确、完整、及时；

3）参与的课题组送交的结构数据库将由信息管理员倒入IDBS软件库，并保存在独立的服务器上，设置密码。倒入后的结构数据库只用于和国家化合物样品核心库以及其他兄弟卫星库的结构查重和第三方抽检。如有其他用途，需得到送交结构的课题组的同意后方能进行。