



ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

Descripción del estándar

La definición del presente esquema se realizó tomando como base el MANUAL DE PROCEDIMIENTOS QUÍMICOS (De la Rosa, García, Muñoz, Sánchez, & Solares) de la Unidad de Informática del Instituto de Química (UNIIQUIM), UNAM que es una unidad especializada en la recopilación y difusión de datos sobre el perfil químico de los seres vivos.

Justificación de su uso

El objetivo general del diseño del diccionario de datos (características) es proporcionar un vocabulario para describir las características de los compuestos químicos y su contexto, además de facilitar el intercambio de datos, proporcionando un vocabulario estándar básico bien definido en un marco flexible para minimizar las barreras de su adopción y maximizar la reutilización.

Diccionario

Término	Definición
id	Identificador único para cada registro, deberá formarse por el nombre de la tabla, seguido de guion bajo y el número consecutivo.
type	Tipo de registro.
license	Tipo de licencia.



ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

Término	Definición
dataset_id	Identificador del conjunto de datos conformado por el código de la institución y el código de la colección.
institution_code	Código de la institución en el catálogo de proyectos de la DGRU.
collection_code	Código del conjunto de datos, colección específica o subcolección.
dataset_name	Nombre del conjunto de datos, colección específica o subcolección.
owner_institution_code	Nombre de la institución propietaria del objeto o información referida en el registro.
cas	Número de registro o identificación del compuesto, proporcionado por "The Chemical Abstracts Service" (p. ej., 87-44-5, 156317-09-8).
compound_type	Indica el tipo de compuesto: "Aislado" o "Derivado".
compound_name	Nombre del compuesto químico.
systematic_name	Nombre sistemático, se genera por un sistema general establecido por la IUPAC, se refiere a la identificación y denominación de la estructura principal de un compuesto. En ocasiones los nombres aparecen con el término "(9CI)" o



ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

Término	Definición
	presentan asteriscos, estos deberán ser eliminados del nombre.
molecular_formula	Número real de átomos que forman una molécula, se utilizarán etiquetas html (p. ej., C ₂₀ H ₂₆ O ₇).
molecular_formula_without_format	Número real de átomos que forman una molécula sin etiquetas html (p. ej., C20H26O7).
molecular_mass	Se refiere a la masa de una molécula de un compuesto. El valor se expresará en números enteros y la unidad es g/mol.
sodium_lamp_optical_rotation	Se coloca la lectura de la sustancia que se realizó mediante el uso de la lámpara de sodio, en ocasiones incluye el disolvente, el cual se pondrá entre paréntesis (p. ej., -37 (CHCl ₃)).
mercury_lamp_optical_rotation	Se coloca la lectura de la sustancia que se realizó mediante el uso de la lámpara de mercurio, en ocasiones incluye el disolvente, el cual se pondrá entre paréntesis.
melting_point	Contiene el punto de fusión del compuesto en grados (°), en ocasiones se menciona el disolvente, el cual se pondrá entre paréntesis (p. ej., 199-203 (CHCl ₃ Et ₂ O), 197-199).
physical_characteristics	Se refiere al estado en el que fue aislado el compuesto químico, el cual puede ser sólido



ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

Término	Definición
	(cristalino, amorfo, agujas, etc.) o líquido (viscoso, aceite, goma, etc.). También puede indicar el color que presenta, etc.
spectroscopy	Contiene las técnicas con las cuales se elucidó la estructura del compuesto. Las técnicas espectroscópicas de UV (ultravioleta) e IR (infrarrojo) deben presentar el disolvente en el cual se realizaron; para el caso de RMN (resonancia magnética nuclear) de ^1H y de ^{13}C , se debe especificar el disolvente y los MHz a los cuales se realizó el estudio, así mismo se mencionarán los experimentos bidimensionales que se realizaron, por ejemplo: COSY, NOESY, HMQC, HMBC, etc. A la espectrometría de masas (EM) se le debe anexar la técnica de ionización utilizada como EMIE (impacto electrónico), FAB (bombardeo con átomos rápidos), IQ (ionización química), etc., y la energía del espectrómetro de Masas dada en eV (p. ej., IR (KBr), UV (MeOH), RMN ^1H (90 MHz; CDCl_3), RMN ^{13}C (15.03 MHz; CDCl_3), EM (70 eV), EMFAB ($\text{C}_7\text{H}_7\text{NO}_3$), EMIQ (200 eV; CH_4)).
x_ray	Indica si se presentan rayos X: "Existen Rayos X" o "No existen Rayos X".
biological_activity	Se refiere a la prueba de la actividad biológica del compuesto (p. ej., Efecto antiinflamatorio en oreja de ratón, Prueba de toxicidad con <i>Artemia salina</i>).



ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

Término	Definición
mixture	Nombre de la mezcla (p. ej., 19-O-Acil-ent-16,17,19-kauranetriol).
class	Se refiere al origen biosintético del producto natural (p. ej., derivados de acetilcoenzima A, derivados de la malonil coenzima A, derivados del metabolismo de aminoácidos, derivados del difosfato de isopentenilo, derivados del ácido shikimico y de biosíntesis mixta).
chemical_family	Grupo de compuestos con características estructurales relacionadas, aunque pueden tener diferente origen biosintético (p. ej., terpenoides, flavonoides, alcaloides, saponinas, péptidos, aminoácidos, fenil propanoides, policétidos (acetogeninas), etc.).
group	Subdivisión de una familia de productos naturales en función del número de átomos de carbono (terpenos: monoterpenos, sesquiterpenos, diterpenos, sesterterpenos, triterpenos, carotenoides, esteroides, etc.) o en función del estado de oxidación (flavonas, dihidroflavonas, flavonoles, ácidos grasos, etc.).
skeletal_formula	Subdivisión que indica la conectividad específica de los átomos de carbono del compuesto (p. ej., Esqueleto: Cariofilano).
synonyms	Diferentes nombres con los cuales se conoce al compuesto.



ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

Término	Definición
extract_type	Indica si se realizaron pruebas de actividad biológica en el extracto (p. ej., metanólico, acuoso, hexánico, clorofórmico, de diclorometano (cloruro de metileno), acetónico, de acetato de etilo, etanólico, etéreo, butanólico, bencénico).
notes	Anotaciones generales que sirven para comentar, aclarar o complementar algo relacionado con el registro.
modified	Fecha de la última modificación del registro en la base de datos de origen.
_creation	Fecha de creación del registro en la Plataforma de la DGRU.
_creation_user	Nombre de usuario que creó el registro en la plataforma, en caso de no contar con el dato se utilizará el código del datasetID.
_last_modified	Fecha de última modificación del registro dentro de la Plataforma.
_last_modified_user	Nombre de usuario que realizó la última modificación del registro dentro de la Plataforma de la DGRU.
responsible_quality_control	Nombre de usuario responsable del proceso de Control de Calidad Estructural en la DGRU.





ESTÁNDAR PARA DATOS DE COMPUESTOS QUÍMICOS

FECHA DE ACTUALIZACIÓN: ABRIL 2019

REFERENCIAS

- De la Rosa, N., García, M., Muñoz, F., Sánchez, A., & Solares, M. (s.f.). MANUAL DE PROCEDIMIENTOS QUÍMICOS. CDMX: Unidad de Informática del Instituto de Química, UNAM.

