



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 115295093 A

(43) 申请公布日 2022. 11. 04

(21) 申请号 202210780755.2

G06F 16/248 (2019.01)

(22) 申请日 2022.07.04

G06F 16/28 (2019.01)

(71) 申请人 广东省大湾区华南理工大学聚集诱导发光高等研究院

G06F 16/2458 (2019.01)

地址 510700 广东省广州市黄埔区开源大道11号科技企业加速器C3栋401室

(72) 发明人 唐本忠 龚隽一 王志明 刘勇
龚晚君 赵征 邱子杰 武波

(74) 专利代理机构 广州粤高专利商标代理有限公司 44102

专利代理人 江裕强

(51) Int.Cl.

G16C 60/00 (2019.01)

G16C 20/40 (2019.01)

G16C 20/70 (2019.01)

权利要求书2页 说明书6页 附图5页

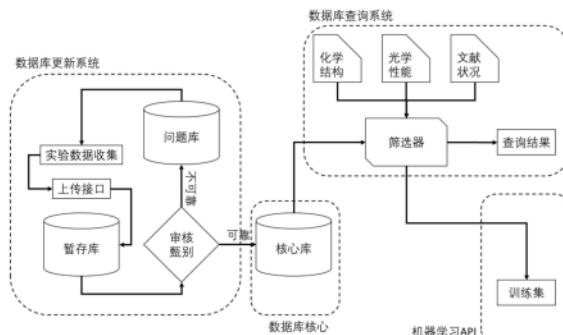
(54) 发明名称

一种聚集体材料功能信息的数据交互系统
和方法

(57) 摘要

本发明提供一种聚集体材料功能信息的数据交互系统和方法。所述系统包括核心数据库，用于临时储存新录入系统的材料条目、存储分子所处的不同聚集状态以及各聚集状态下的光物理性质；数据库查询系统，能够根据材料在应用中的不同聚集状态进行检索，用于根据字段值或分子的化学结构在核心数据库中进行检索，并将搜索字段和值返回数据库后端，经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页；数据更新系统，用于在核心数据库中录入新的材料条目；机器学习API系统，用于输出符合搜索条件的条目。本发明能够将材料归属于材料的不同聚集状态，能够克服传统材料和分子数据库中无法针对材料的不同状态储存、分类、索引和查询数据的不足。

A
CN 115295093



CN

1. 一种聚集体材料功能信息的数据交互系统,其特征在于,包括:

核心数据库,用于临时储存新录入系统的材料条目、存储分子所处的不同聚集状态以及各聚集状态下的光物理性质;

数据库查询系统,能够根据材料在应用中的不同聚集状态进行检索,用于根据字段值或分子的化学结构在核心数据库中进行检索,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页;

数据更新系统,用于在核心数据库中录入新的材料条目;

机器学习API系统,用于输出符合搜索条件的条目。

2. 根据权利要求1所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统,其特征在于,所述核心数据库为关系型数据库。

3. 根据权利要求1所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统,其特征在于,所述核心数据库中的储存列表包括材料的通用信息、材料的特征分类信息、材料的荧光或磷光机理分类信息、材料的特殊功能信息以及临时储存新录入的材料条目的临时列表。

4. 根据权利要求3所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统,其特征在于,在材料的通用信息列表中,至少包括以下一个或多个字段:数据库条目序号,化合物名称或缩写,聚集体材料编号,化合物的结构信息,化合物原文献的第一作者姓名,化合物原文献的通讯作者姓名,化合物原文献的发表年份,新制化合物粉末颜色,化合物专利号,首次报道该化合物聚集体科学相关性质的文献索引及DOI号,小分子化合物分子质量,在溶液中的吸收峰值波长、光谱,在特定溶液中的荧光或磷光发射峰值波长,在粉末状态下的荧光或磷光发射波长,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射波长,在溶液中的荧光或磷光发射量子效率,在粉末状态下的荧光或磷光发射量子效率,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射量子效率,在溶液中的荧光或磷光发射寿命,在粉末状态下的荧光或磷光发射寿命,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射寿命,在溶液中的摩尔消光系数,在粉末状态下的吸光度,在稳定晶形晶态下的吸光度,化合物的特征分类且此项与材料的特征分类信息列表链接,化合物荧光或磷光机理分类且此项与材料的荧光或磷光机理分类信息列表链接,化合物的光稳定性,化合物的热稳定性,化合物在不同体系溶剂中的溶解性,关于化合物所报道应用方向的关键词,化合物的实验pK_a值以及其它关于化合物的性能相关但未被列入到以上字段的信息;临时列表中包括材料的通用信息列表中的所有字段,并且还包括上传者字段。

5. 根据权利要求1所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统,其特征在于,所述聚集状态包括溶液态、聚集体、新制粉末和稳定晶态。

6. 根据权利要求1-5任一所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统,其特征在于,数据库查询系统中具备基础检索、高级检索和化学结构检索三种查询方式,其中,基础检索用于搜索核心数据库中特定单一字段值的数据条目,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页;高级检索用于同时以多个字段值搜索核心数据库,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回各个单一字段值搜索结果的交集,并生成搜索报告页;化学结构检索用于根据在搜索界面输入的化学结构生成化学结构的识别符,将识别符返回到后端,经后端与数据库中收录材料的识别符进行对比,返回子结构中带有所查询识别符所对应化学结构的所有数据库条目,并生成搜索报告页。

7.一种聚集体材料功能信息的数据交互方法,其特征在于,基于权利要求1-6任一所述的系统,所述方法包括:

核心数据库储存新录入系统的材料条目、存储分子所处的不同聚集状态以及各聚集状态下的光物理性质;

在数据库查询系统中根据材料在应用中的不同聚集状态进行检索,根据字段值或分子的化学结构在核心数据库中进行检索,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页,所述检索包括基础检索、高级检索和化学结构检索三种检索方法;

采用数据更新系统在核心数据库中录入需要的新的材料条目。

8.根据权利要求7所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互方法,其特征在于,所述基础检索的步骤包括:

用户确定需要搜索的内容,所述内容包括分子的聚集状态;

用户登录web界面的基础检索标签页,在对应的搜索框中输入相应信息并提交系统;

系统将用户的查询键值以GET请求返回后端;

后端将GET请求中的键值作为筛选器将数据库中符合要求的条目筛选出来并将其各自的信息输出到前端,生成搜索报告;

在搜索报告中用户可以查阅基础信息,并通过搜索报告进入各个条目的详细信息页面,查阅各个化合物的详细信息。

9.根据权利要求7所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互方法,其特征在于,所述高级检索的检索步骤包括:

用户确定需要搜索的内容,所述内容包括分子的聚集状态;

用户登录web界面的基础检索标签页,在对应的搜索框中输入相应信息,并可以同时输入多个筛选条件,并提交系统;

系统将用户的查询键值以GET请求返回后端;

后端将GET请求中的键值作为筛选器将数据库中符合每一项要求的条目筛选出来,并将其并集输出到前端,生成搜索报告;

在搜索报告中用户可以查阅基础信息,并通过搜索报告进入各个条目的详细信息页面,查阅各个化合物的详细信息。

10.根据权利要求7所述的一种聚集体材料功能信息的数据交互方法,其特征在于,数据更新系统的数据更新步骤包括:

用户获得实验数据,注册数据库用户名,获得认证;

进入新条目的录入web界面,录入实验数据;

web界面将对应的键值以POST请求返回后端;

后端将POST得到的键值录入核心数据库的临时列表中;

定期查看临时列表中的条目,判断临时数据的可靠性;

若数据可靠,则将该条目录入正式数据库,若不可靠,则将不可靠键值信息录入问题库,定期将问题库中数据返回各自上传用户,供其修改,直至数据被判断为可靠后录入正式数据库。

一种聚集体材料功能信息的数据交互系统和方法

技术领域

[0001] 本发明属于聚集体材料领域，尤其涉及一种聚集体材料功能信息的数据交互系统和方法。

背景技术

[0002] 聚集体材料相对传统有机小分子功能材料，在研究逻辑、设计思路、关注性质方面都有较大差异。传统有机小分子功能材料的性质筛选围绕分子的化学结构和所处的物理环境进行；但对聚集体材料而言，分子的化学结构和分子的组织、堆积形式对宏观材料性能，尤其是光物理学性能的影响同样重要。（Z.Zhao, H.Zhang, J.W.Y.Lam, B.Z.Tang, Angew.Chem.Int.Ed.2020, 59, 9888.）这使得现有的完全着眼于化学结构的分子数据库在聚集体材料研究中的应用产生了相当的瓶颈。

[0003] 例如，现有的大规模分子结构和文献数据库Scifinder (<https://scifinder.cas.org/scifinder>) 所收录的光谱信息大多数是分子在溶液中单分散状态下所测得，其在纳米聚集体、无定形粉末和晶体状态下的光谱信息则无法直接从数据库中获得。

[0004] 再如，现有的比较全面的光谱数据库PhotochemCAD (<https://www.photochemcad.com/database>) 亦仅收录了各种常用荧光染料分子在溶液态的吸收和荧光光谱，无法为聚集体材料研究提供可靠参考。

[0005] 现有的大规模凝聚态材料数据库Materials Project (<https://materialsproject.org/about#db-stats>) 尽管收录了部分材料在部分凝聚态的电子结构和理化信息，但着眼点在于无机电池材料和金属材料。对聚集体材料和有机小分子功能材料的信息收录非常不完整，没有多种状态下的理化性能，亦没有收录其光谱信息，对以聚集诱导发光材料为牵引的聚集体材料研究帮助不大。

[0006] 出现上述现象的根本原因是传统材料科学领域对有机小分子功能材料在不同状态、不同堆积模式下的宏观理化性质的变化重视不足，研究亦不够深入，数据积累有限，习惯于将有机功能材料的性质直接归属于化学结构。而这种设计数据库的习惯思路，又反作用于相关领域的数据收集，使得该领域的数据积累无法获得真正的突破。

发明内容

[0007] 本发明创造的目的即设计一种新的聚焦于聚集体材料研究和探索的有机小分子功能材料相关信息的储存和检索模式。该模式的核心思路是不再将材料的宏观理化性质直接归属于材料的分子结构，而是归属于材料的不同聚集状态，如：单分散溶液、纳米聚集体、无定形粉末、常见晶形，并针对每一种聚集状态下的性质进行收集、分类、索引和查询，建立一套完整的聚集体材料的数据交互系统，克服传统材料和分子数据库中无法针对材料的不同状态储存、分类、索引和查询数据的不足。

[0008] 为了实现本发明目的，本发明提供的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统，

包括：

- [0009] 核心数据库,用于临时储存新录入系统的材料条目、存储分子所处的不同聚集状态以及各聚集状态下的光物理性质;
- [0010] 数据库查询系统,能够根据材料在应用中的不同聚集状态进行检索,用于根据字段值或分子的化学结构在核心数据库中进行检索,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页;
- [0011] 数据更新系统,用于在核心数据库中录入新的材料条目;
- [0012] 机器学习API系统,用于输出符合搜索条件的条目。
- [0013] 进一步地,所述核心数据库为关系型数据库。
- [0014] 进一步地,所述核心数据库中的储存列表包括材料的通用信息、材料的特征分类信息、材料的荧光或磷光机理分类信息、材料的特殊功能信息以及临时储存新录入的材料条目的临时列表。
- [0015] 进一步地,在材料的通用信息列表中,至少包括以下一个或多个字段:数据库条目序号,化合物名称或缩写,聚集体材料编号,化合物的结构信息,化合物原文献的第一作者姓名,化合物原文献的通讯作者姓名,化合物原文献的发表年份,新制化合物粉末颜色,化合物专利号,首次报道该化合物聚集体科学相关性质的文献索引及DOI号,小分子化合物分子质量,在特定溶液中的吸收峰值波长、光谱,在特定溶液中的荧光或磷光发射峰值波长,在新制粉末状态下的荧光或磷光发射波长,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射波长,在特定溶液中的荧光或磷光发射量子效率,在新制粉末状态下的荧光或磷光发射量子效率,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射量子效率,在特定溶液中的荧光或磷光发射寿命,在新制粉末状态下的荧光或磷光发射寿命,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射寿命,在特定溶液中的摩尔消光系数,在新制粉末状态下的吸光度,在稳定晶形晶态下的吸光度,化合物的特征分类且此项与材料的特征分类信息列表链接,化合物荧光或磷光机理分类且此项与材料的荧光或磷光机理分类信息列表链接,化合物的光稳定性,化合物的热稳定性,化合物在不同体系溶剂中的溶解性,关于化合物所报道应用方向的关键词,化合物的实验pK_a值以及其它关于化合物的性能相关但未被列入到以上字段的信息;临时列表中包括材料的通用信息列表中的所有字段,并且还包括上传者字段。
- [0016] 进一步地,所述聚集状态包括溶液态、聚集体、新制粉末和稳定晶态。
- [0017] 进一步地,数据库查询系统中具备基础检索、高级检索和化学结构检索三种查询方式,其中,基础检索用于搜索核心数据库中特定单一字段值的数据条目,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页;高级检索用于同时以多个字段值搜索核心数据库,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回各个单一字段值搜索结果的交集,并生成搜索报告页;化学结构检索用于根据在搜索界面输入的化学结构生成化学结构的识别符,将识别符返回到后端,经后端与数据库中收录材料的识别符进行对比,返回子结构中带有所查询识别符所对应化学结构的所有数据库条目,并生成搜索报告页。
- [0018] 本发明还提供一种聚集体材料功能信息的数据交互方法,所述方法包括:
- [0019] 核心数据库储存新录入系统的材料条目、存储分子所处的不同聚集状态以及各聚集状态下的光物理性质;

- [0020] 在数据库查询系统中根据材料在应用中的不同聚集状态进行检索,根据字段值或分子的化学结构在核心数据库中进行检索,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页,所述检索包括基础检索、高级检索和化学结构检索三种检索方法;
- [0021] 采用数据更新系统在核心数据库中录入需要的新的材料条目。
- [0022] 进一步地,所述基础检索的步骤包括:
- [0023] 用户确定需要搜索的内容,所述内容包括分子的聚集状态;
- [0024] 用户登录web界面的基础检索标签页,在对应的搜索框中输入相应信息并提交系统;
- [0025] 系统将用户的查询键值以GET请求返回后端;
- [0026] 后端将GET请求中的键值作为筛选器将数据库中符合要求的条目筛选出来并将其各自的信息输出到前端,生成搜索报告;
- [0027] 在搜索报告中用户可以查阅基础信息,并通过搜索报告进入各个条目的详细信息页面,查阅各个化合物的详细信息。
- [0028] 进一步地,所述高级检索的检索步骤包括:
- [0029] 用户确定需要搜索的内容,所述内容包括分子的聚集状态;
- [0030] 用户登录web界面的基础检索标签页,在对应的搜索框中输入相应信息,并可以同时输入多个筛选条件,并提交系统;
- [0031] 系统将用户的查询键值以GET请求返回后端;
- [0032] 后端将GET请求中的键值作为筛选器将数据库中符合每一项要求的条目筛选出来,并将其并集输出到前端,生成搜索报告;
- [0033] 在搜索报告中用户可以查阅基础信息,并通过搜索报告进入各个条目的详细信息页面,查阅各个化合物的详细信息。
- [0034] 进一步地,数据更新系统的数据更新步骤包括:
- [0035] 用户获得实验数据,注册数据库用户名,获得认证;
- [0036] 进入新条目的录入web界面,录入实验数据;
- [0037] web界面将对应的键值以POST请求返回后端;
- [0038] 后端将POST得到的键值录入核心数据库的临时列表中;
- [0039] 定期查看临时列表中的条目,判断临时数据的可靠性;
- [0040] 若数据可靠,则将该条目录入正式数据库,若不可靠,则将不可靠键值信息录入问题库,定期将问题库中数据返回各自上传用户,供其修改,直至数据被判断为可靠后录入正式数据库。
- [0041] 与现有技术相比,本发明至少具备以下有益效果:
- [0042] 1、从数据结构设计上将有机小分子功能材料的宏观光物理和理化性质与其所处的聚集状态(如单分散溶液、纳米聚集体、无定形粉末、常见晶形等)结合起来,并针对不同状态下特定性质的检索功能;
- [0043] 2、对数据库系统进行模块化设计,以便未来按需调整、升级各个子模块的功能。本发明通过在数据收录和存储结构上的创新,用分子所处的不同聚集状态作为收录其光物理性质的前提,在每条光物理性质上都详细区分其测试时分子所处的聚集状态,并将其归为

溶液态、聚集体、新制粉末和稳定晶态四个大类,在四个大类下分别收录各自的各项光物理性质,克服了传统分子和材料数据库对不同状态下宏观光物理和理化性质信息收录的不足,为聚集体材料的设计、开发、产业化及数字化提供了基础平台。

附图说明

- [0044] 图1是本发明提供的一种聚集体材料功能信息的数据交互系统的结构示意图。
- [0045] 图2是本发明实施例提供的基础检索流程示意图。
- [0046] 图3是本发明实施例提供的高级检索流程示意图。
- [0047] 图4是本发明实施例提供的化学结构检索流程示意图。
- [0048] 图5是本发明实施例提供的数据更新流程示意图。

具体实施方式

[0049] 为使本发明实施例的目的、技术方案和优点更加清楚,下面将结合本发明实施例中的附图,对本发明实施例中的技术方案进行清楚、完整的描述,显然,所描述的实施例是本发明一部分实施例,而不是全部的实施例。基于本发明中的实施例,本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例,都是本发明保护的范围。

[0050] 实施例1

[0051] 如图1所示,该数据库系统包含核心数据库、基于web的数据更新系统、基于web的数据库查询系统及机器学习API系统四大部分。其中web系统包含数据库查询和更新功能,查询和更新信息的输入由web前端实现,而对数据库内容的检索以及更新则是将前端信息传递到后端后由后端程序处理实现。

[0052] 核心数据库为核心储存介质,可以是任意SQL (Structured Query Language) 关系型数据库,用以储存经过审查后被判断为可靠的聚集体材料数据。

[0053] 本实施例采用SQLite为核心数据库。建立以下5个列表:1) common_compound以储存材料的主要信息:包含化学结构及其识别符号(化学式, SMILES式等),不同聚集形态下的光物理信息,包含溶解性和稳定性的理化性质信息,化合物发表的文献索引和作者信息,化合物发表时报道的应用方向等;2) common_features以储存材料的特征分类信息:如化合物是否是聚集诱导发光体系或者是聚集导致淬灭体系,或是室温磷光体系,或者是热激活延迟荧光体系等;3) common_mechanism以储存材料的荧光或磷光机理分类信息;4) common_speciality以储存材料的特殊功能信息:如化合物能否活性氧释放,是否存在光热效应,是否存在光声成像能力等;5) common_temp_compound以临时储存新录入系统的材料条目。

[0054] 更具体地,本实施例中,common_compound列表包含下列字段:数据库条目序号,化合物名称或缩写,聚集体材料编号(每个收录化合物具有唯一性),化合物的结构信息(以SMILES结构式的形式录入),化合物原文献的第一作者姓名,化合物原文献的通讯作者姓名,化合物原文献的发表年份,新制化合物粉末颜色,化合物专利号,首次报道该化合物聚集体科学相关性质的文献索引及DOI号,小分子化合物分子质量,在特定溶液中的吸收峰值波长、光谱,在特定溶液中的荧光或磷光发射峰值波长,在新制粉末状态下的荧光或磷光发射波长,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射波长,在特定溶液中的荧光或磷光发射量子效率,在新制粉末状态下的荧光或磷光发射量子效率,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发

射量子效率,在特定溶液中的荧光或磷光发射寿命,在新制粉末状态下的荧光或磷光发射寿命,在稳定晶形晶态下的荧光或磷光发射寿命,在特定溶液中的摩尔消光系数,在新制粉末状态下的吸光度,在稳定晶形晶态下的吸光度,化合物的特征分类(此项与列表common_features链接),化合物荧光或磷光机理分类(此项与列表common_mechanism链接),化合物的光稳定性,化合物的热稳定性,化合物在不同体系溶剂中的溶解性,四条关于化合物所报道应用方向的关键词,化合物的实验pK_a(酸度系数)值,其它关于化合物的性能相关但未被列入到以上字段的信息。临时列表common_temp_compound含有common_compound列表中所有字段,并添加有上传者字段。

[0055] 本发明中,数据库查询系统提供基础检索、高级检索和化学结构检索三种查询功能。如图2所示,基础检索可以搜索核心数据库中特定单一字段值的数据条目,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回其相关的所有信息并生成搜索报告页。

[0056] 如图3所示,高级检索可以同时以多个字段值搜索核心数据库,并将搜索字段和值返回数据库后端,经后端处理后返回各个单一字段值搜索结果的交集,并生成搜索报告页。由于核心数据库设计中引入了不同状态下的理化性质信息,故数据库搜索功能可以根据材料在应用中的不同状态来针对性的进行检索。

[0057] 如图4所示,在化学结构检索时,查询者可以在web页面绘制有机分子的化学结构,并将化学结构的SMILES式返回到后端,经后端与数据库中收录材料的SMILES式进行对比,返回子结构中带有所查询SMILES式所对应化学结构的所有数据库条目,并生成搜索报告页。

[0058] 其中,搜索报告页单个条目包含搜索结果的基本信息(如化合物名称,序号)、结构信息(分子式,结构式,以及化合物分子结构的电脑识别符号,如SMILES式等)、应用信息(发表时所报道的应用方向)以及光物理信息(包含溶液态吸收峰波长和固态发射波长)。从搜索报告页可以访问各个搜索结果的详情页。搜索详情页包含搜索结果的所有收录信息,并以列表形式呈现。

[0059] 数据更新系统,用于在数据库中录入新的材料条目。具体地,本实施例中,Web页面提供注册和身份验证功能。如图5所示,在验证用户身份后,用户可以在数据库更新界面上填写新条目的相关信息并提交至临时列表common_temp_compound。由专业管理人员审查新提交项目的数据可靠性后,再录入正式列表common_compound,即可以被检索系统查询和访问。

[0060] 机器学习API系统,用于输出符合搜索条件的条目。机器学习API系统与索引系统类似。用户输入筛选条件后,将其返回到数据库后端。数据库将符合筛选条件的条目输出,并转换为csv(逗号分隔值文件)格式供用户调用或下载作为机器学习研究的训练集。用户可通过训练集中包含的信息开发对应的机器学习或者数据模型。

[0061] 实施例2

[0062] 如图5所示,数据库更新系统提交数据过程具体包括以下步骤:

[0063] (101) 用户获得实验数据,注册数据库用户名,获得认证;

[0064] (102) 进入新条目的录入web界面,将获得的实验数据填入对应的表格中;

[0065] (103) web界面将对应的键值以POST请求返回后端;

[0066] (104) 后端将POST得到的键值录入数据库中的临时列表common_temp_compound;

[0067] (105) 定期由专业管理人员查看临时列表中的条目,根据提交数据的合理性、文献是否存在等因素判断临时数据的可靠性;

[0068] (106) 若数据可靠,则将该条目录入正式数据库,若不可靠,则将不可靠键值信息录入问题库,定期将问题库中数据返回各自上传用户,供其修改,直至数据被判断为可靠后录入正式数据库。

[0069] 实施例3

[0070] 如图2所示,数据库基础检索过程包括以下步骤:

[0071] (201) 用户确定需要搜索的内容,如分别为:作者信息,文献所报道的分子特征分类,分子在特定溶剂中的吸收峰波长值,分子在不同状态(特定溶液、新制粉末和稳定晶型)下的荧光或磷光发射波长值、量子产率、寿命,及分子原文献中报道的应用方向关键词;

[0072] (202) 用户登录web界面的基础检索标签页,在对应的搜索框中输入相应信息,点击“提交”;

[0073] (203) 系统将用户的查询键值以GET请求返回后端;

[0074] (204) 后端将GET请求中的键值作为筛选器将数据库中符合要求的条目筛选出来并将其各自的信息输出到前端,生成搜索报告;

[0075] (205) 在搜索报告中用户可以查阅基础信息,并通过搜索报告进入各个条目的详细信息页面,查阅各个化合物的详细信息。

[0076] 实施例4

[0077] 如图3所示,数据库高级检索过程包括以下步骤:

[0078] (201) 用户确定需要搜索的内容,如分别为:作者信息,文献所报道的分子特征分类,分子在特定溶剂中的吸收峰波长值,分子在不同状态(特定溶液、新制粉末和稳定晶型)下的荧光或磷光发射波长值、量子产率、寿命,及分子原文献中报道的应用方向关键词;

[0079] (202) 用户登录web界面的基础检索标签页,在对应的搜索框中输入相应信息,并可以同时输入多个筛选条件,最终点击“提交”;

[0080] (203) 系统将用户的查询键值以GET请求返回后端;

[0081] (204) 后端将GET请求中的键值作为筛选器将数据库中符合每一项要求的条目筛选出来,并将其并集输出到前端,生成搜索报告;

[0082] (205) 在搜索报告中用户可以查阅基础信息,并通过搜索报告进入各个条目的详细信息页面,查阅各个化合物的详细信息。

[0083] 对所公开的实施例的上述说明,使本领域专业技术人员能够实现或使用本发明。对这些实施例的多种修改对本领域的专业技术人员来说将是显而易见的,本文中所定义的一般原理可以在不脱离本发明的精神或范围的情况下,在其他实施例中实现。因此,本发明将不会被限制于本文所示的这些实施例,而是要符合与本文所公开的原理和新颖特点相一致的最宽的范围。

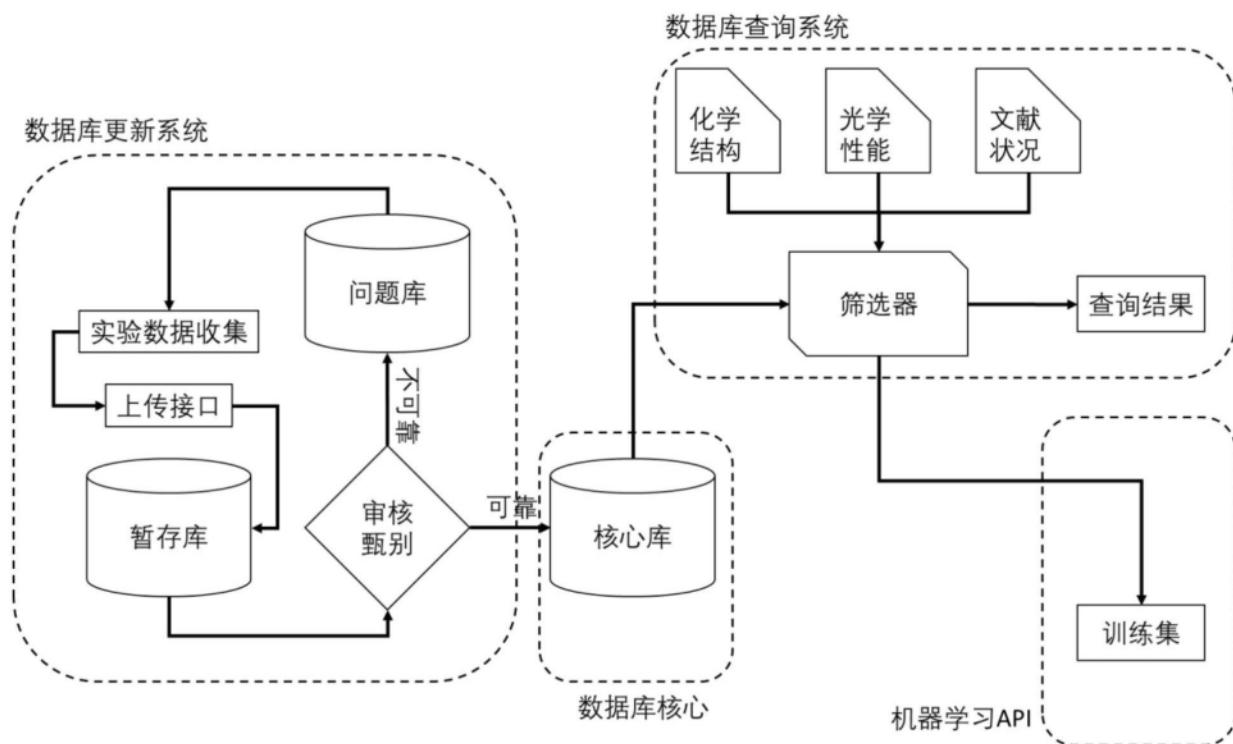


图1

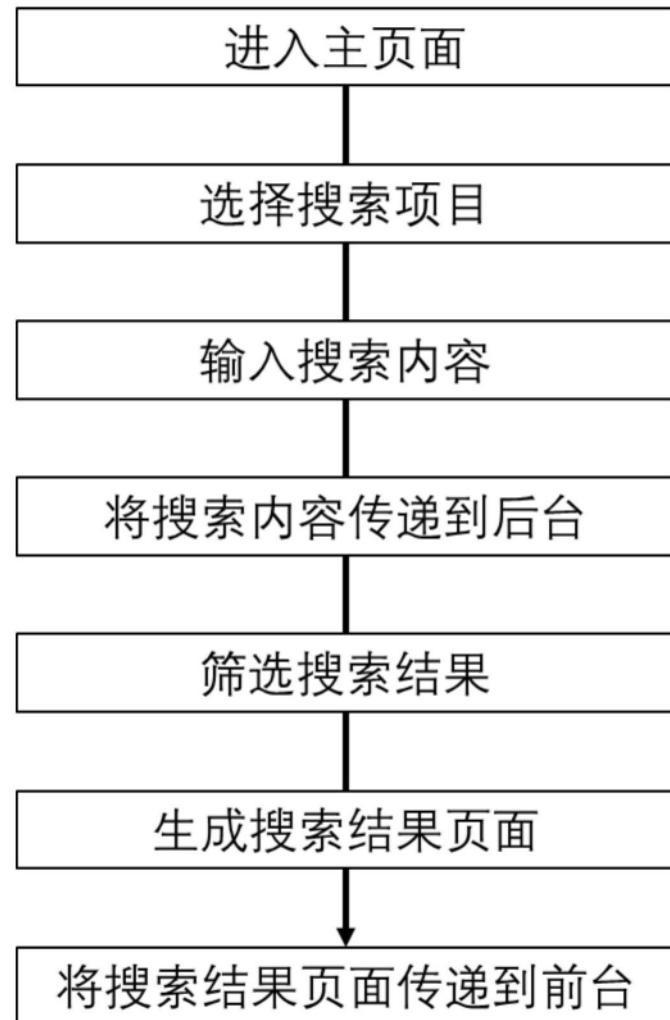


图2

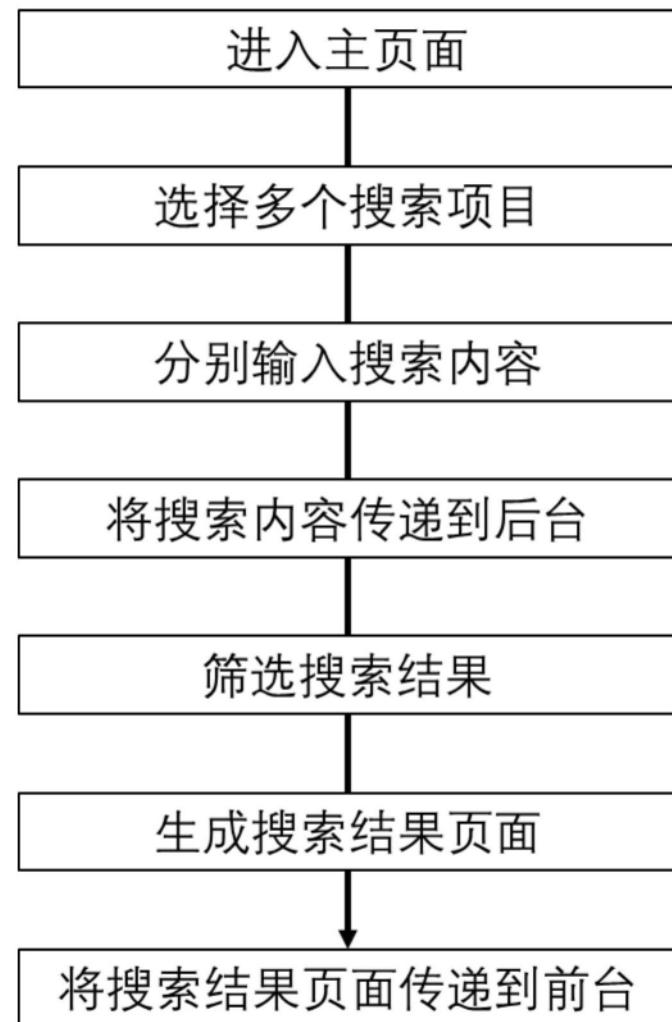


图3



图4

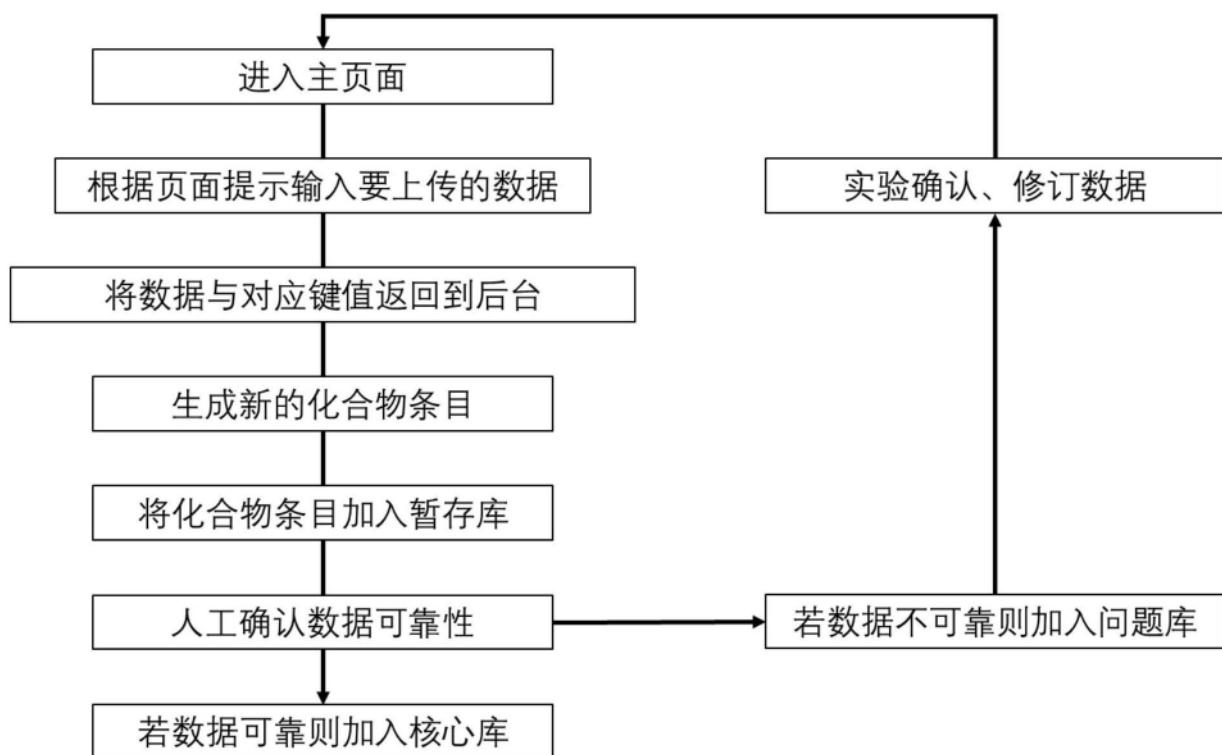


图5