**Instrukcja przekazywania związków do Krajowej Biblioteki Związków Chemicznych**

Osoba/Instytucja chcąca udostępnić i wysłać swoje związki do Krajowej Biblioteki Związków Chemicznych (KBZCh) określana jest jako: PRZEKAZUJĄCY.

Przed przekazaniem związków chemicznych do KBZCh podpisywana jest **UMOWA PRZEKAZANIA ZWIĄZKÓW** między KBZCh a instytucją przekazującą (przykład umowy dostępny jest na stronie www.pol-openscreen.pl).

**KROK 1:**

Osoba upoważniona przez instytucję przekazującą i wymieniona w Umowie Przekazania Związków pisze wiadomość z e-maila podanego w umowie lub zgłoszonego w aneksie do umowy lub w pisemnym pełnomocnictwie do Administratora KBZCh z informacją o chęci przekazania związków:

Agata Kraj

Compound Manager

POL-OPENSCREEN

Instytut Biologii Medycznej PAN

Tylna 3A, 90-364 Łódź

tel. (42) 209-33-70

http://pol-openscreen.pl/
akraj@pol-openscreen.pl

Dorota Borowiecka

Database Administrator

POL-OPENSCREEN

Instytut Biologii Medycznej PAN

Tylna 3A, 90-364 Łódź

tel. (42) 209-33-70

http://pol-openscreen.pl/
dborowiecka@pol-openscreen.pl

W mailu powinny się znajdować informacje o:

- liczbie związków, które chcemy przekazać

- tytuł naukowy, imię i nazwisko Przekazującego

- uczelnia/instytucja naukowa, wydział, zakład/komórka organizacyjna, adres, telefon do kontaktu

**KROK 2:**

Po zgłoszeniu mailowym chęci przekazania związków do KBZCh, Administrator rozpoczyna rejestrację, zakładając konto Przekazującemu poprzez interfejs znajdujący się pod adresem:

<https://test-kbzc.labomatica.com/>

Administrator nadaje Przekazującemu login, którym jest jego adres e-mail oraz generuje hasło.

Następnie Przekazujący otrzymuje dane do logowania poprzez e-mail, z którego wysłał informację o chęci przekazania związków.

Przekazujący może się już zalogować i używać interfejsu:



Jak wygląda sprawa poufności?

Przekazujący otrzymuje od nas nadane mu hasło na samym początku rejestracji. Dla zapewnienia bezpieczeństwa i poufności hasło to może być zmienione przez Przekazującego w ustawieniach konta po zalogowaniu. Aby to zrobić należy kliknąć ikonkę koła zębatego  przy nazwie użytkownika i wpisać stare oraz nowe hasło zapisując zmiany:



**KROK 3:**

Po zalogowaniu Przekazujący -> klika zakładkę **Rejestracja związków**



-> klika **Zamów rak** w prawym górnym rogu.



-> deklaruje ilość związków w okienku otwartym po kliknięciu okienka „Zamów rak”:



**KROK 4:**

Po wykonaniu tej czynności Administrator otrzymuje informacje o liczbie deklarowanych do przekazania związków, zamówieniu określonej liczby kodowanych kodami kreskowymi probówek firmy Micronic na zawiązki i liczbie raków (w jednym raku znajduje się 48 probówek). Minimalna liczba raków wynosi 1 choć nie wszystkie miejsca w nim muszą być wykorzystane.

Następnie Administrator przypisuje rak z charakterystycznym dla tego raka kodem kreskowym do zamówienia Przekazującego oraz umieszcza w raku liczbę probówek na związki, jaka została zadeklarowana.



Rys. Zdjęcie przykładowego raka wysyłanego przez Administratora do Przekazującego.

**KROK 5:**

Administrator wysyła pocztą rak z wytarowanymi probówkami do Przekazującego na podany przez niego adres informując go o tym mailowo. Administrator używa adresu podanego w mailu zgłaszającym chęć przekazania związków.

**KROK 6:**

Przekazujący po otrzymaniu fizycznie przesyłki, odważa wszystkie swoje związki do probówek z otrzymanego raka z KBZCh (15 - 20 mg związków lub większą ilość jeśli to możliwe).

!!!Należy pamiętać, który związek został umieszczony, w której probówce i miejscu w raku. Najlepiej sporządzić notatkę aby uniknąć pomyłek, miejsca w raku oznaczane są literą i cyfrą: A1, A2 ……B1, B2 itd.

**KROK 7:**

Po przygotowaniu próbek związków Przekazujący loguje się w interfejsie pod adresem podanym już wyżej: <https://test-kbzc.labomatica.com/>. Klika zakładkę **Rejestracja związków**, a następnie zakładkę **Zmień.** Wybiera opcję **Kompletowanie,** po czym klika widoczny na tym etapie przycisk **Kompletuj.**



W kolejnym kroku wybiera żółte okrągłe pole w wizualizacji raka odpowiadające danemu związkowi zgodnie z jego właściwym położeniem w raku (patrz krok 6), aby dodać substancje.

Następnie wypisuje zadane dane oznaczone gwiazdką i opcjonalnie dostępne dane dodatkowe.

Jeśli Przekazujący nie posiada jeszcze kodu SMILES dla danego związku, to w celu wygenerowania go, może narysować wzór strukturalny przekazywanego związku chemicznego w okienku (jeśli związek posiada atomy niepołączone kowalencyjnie, np. wodę w hydratach, to muszą zostać one również uwzględnione we wzorze). Po narysowaniu związku w polu SMILES automatycznie pojawia się kod.

 

W polu Kod związku Przekazującego można podać kod przekazywanego związku chemicznego, jeśli Przekazujący taki nadał wcześniej na własne potrzeby (np. w zeszycie laboratoryjnym) lub chce nadać.

Po uzupełnieniu danych Przekazujący zatwierdza wszystko przyciskiem -> **Zapisz** (żółte okrągłe pole w wizualizacji raka zmienia kolor na zielony).

Następnie, po wpisaniu wszystkich zadeklarowanych związków Przekazujący klika -> **Zakończ kompletowanie** na zielonym pasku poniżej wizualizacji raka i potwierdza kompletowanie w okienku – **OK**. Rak uzyskuje status **Gotowy do wysyłki**.

**KROK 8:**

Po przygotowaniu fizycznie raka z probówkami ze związkami oraz wypełnieniu wszystkich informacji w interfejsie, Przekazujący wysyła rak pocztą do KBZCh na wskazany wcześniej adres:

Agata Kraj

POL-OPENSCREEN

Instytut Biologii Medycznej PAN

Tylna 3A, 90-364 Łódź

Warunki wysyłania związków pozostawione są do uznania Przekazującego, warto jednak zwrócić uwagę na czas trwania przesyłki szczególnie jeśli związki mogą być wrażliwe na podwyższoną temperaturę latem.

**KROK 9:**

Po fizycznym wysłaniu raka należy ponownie zalogować się w interfejsie: <https://test-kbzc.labomatica.com/> i zmienić status raka klikając **Zmień** z **Gotowy do wysyłki** na **Wysłany do KBZCh**.

Administrator otrzyma informacje o wysłaniu raka przez Przekazującego i po fizycznym otrzymaniu przesyłki przekaże informację o tym fakcie Przekazującemu, a następnie przejdzie do dalszych kroków umieszczania związków Przekazującego w bazie KBZCh i udostępniania ich do badań skriningowych.